(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2015 年 9 月 17 日(17.09.2015)

WIPO | PCT

(10) 国際公開番号
WO 2015/137472 A1

(51) 国際特許分類:
C07D 403/14 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2015/057392

(22) 国際出願日: 2015 年 3 月 12 日(12.03.2015)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

(30) 優先権データ:
特願 2014-049545 2014 年 3 月 12 日(12.03.2014) JP
特願 2014-049546 2014 年 3 月 12 日(12.03.2014) JP
特願 2014-049547 2014 年 3 月 12 日(12.03.2014) JP
特願 2014-049548 2014 年 3 月 12 日(12.03.2014) JP
特願 2014-064788 2014 年 3 月 26 日(26.03.2014) JP

(71) 出願人: 出光興産株式会社 **(IDEMITSU KOSAN CO., LTD.)** [JP/JP]; 〒1008321 東京都千代田区丸の内三丁目１番１号 Tokyo (JP).

(72) 発明者: 八巻　太郎 **(YAMAKI, Taro)**; 〒2990293 千葉県袖ケ浦市上泉１２８０番地 Chiba (JP). 池田潔 **(IKEDA, Kiyoshi)**; 〒2990293 千葉県袖ケ浦市上泉１２８０番地 Chiba (JP). 川上　宏典 **(KAWAKAMI, Hironori)**; 〒2990293 千葉県袖ケ浦市上泉１２８０番地 Chiba (JP).

(74) 代理人: 大谷　保 **(OHTANI, Tamotsu)**; 〒1050001 東京都港区虎ノ門三丁目２５番２号　虎ノ門ＥＳビル７階　特許業務法人大谷特許事務所 Tokyo (JP).

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

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

添付公開書類:

— 国際調査報告（条約第 21 条(3)）

WO 2015/137472 A1

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

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

(57) **Abstract**: Provided are: a composition or a compound suitable for an organic EL element that forms layers by an application method; a material for an organic electroluminescence element comprising the composition or the compound; an ink composition including the composition or the compound; an organic EL element using the composition or the compound; and an electronic device equipped with the organic EL element. The compound comprises a nitrogen-containing heteroaromatic hydrocarbon group substituted with a substituent having a specific structure, and the composition comprises the compound.

(57) 要約:　塗布法により層形成する有機ＥＬ素子に好適な組成物又は化合物、当該組成物又は化合物からなる有機エレクトロルミネッセンス素子用材料、当該組成物又は化合物を含むインク組成物、及び当該組成物又は化合物を用いた有機ＥＬ素子、並びに当該有機ＥＬ素子を搭載した電子機器を提供する。前記化合物は、特定構造を有する置換基により置換された窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基を有する化合物であり、前記組成物は当該化合物を含有する組成物である。

明　細　書

発明の名称 ：

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

技術分野

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

背景技術

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

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

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

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

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

材料とは異なる特性が求められる。したがって、蒸着法で有用な材料が塗布法においても有用であるとは限らない。更に、塗布法での層形成が可能な上で、有機ＥＬ素子として求められる多様な性能要求に応える必要がある。

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

先行技術文献

特許文献

[0006] 特許文献1：国際公開第２０１２／０８６１７０号

発明の概要

発明が解決しようとする課題

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

課題を解決するための手段

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

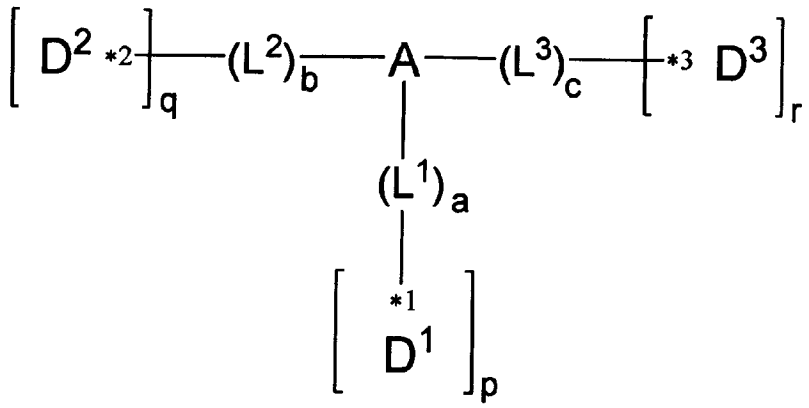
[0009] すなわち、本発明の一態様によれば、下記［１］～［６］が提供される。

［１］下記一般式（１）で表される化合物と、

下記一般式（ＣＨ１）、（ＣＨ３）、（ＣＨ４）、（ＣＨ５）、（ＣＨ６）、（ＣＨ１４）及び（ＣＨ１５）のいずれかで表される化合物から選択される少なくとも１種

とを含有する組成物。

[0010] [化1]



(1)

[0011] [一般式（１）中、Ａは、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基を表す。

Ｌ[1]～Ｌ[3]は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の複素環基、又はこれらの基が２～４個結合してなる基である。

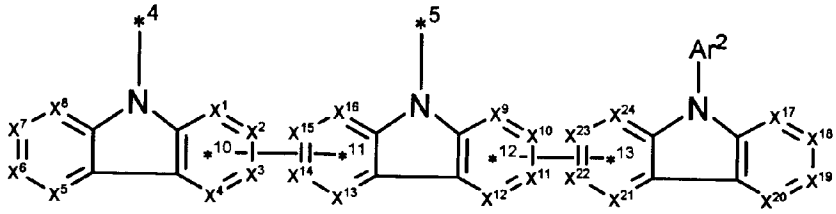
ａ～ｃは、それぞれ独立に、０又は１である。

ｐ～ｒは、それぞれ独立に、０～３の整数であり、ｐ＋ｑ＋ｒ＝３である。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在するＤ[1]、Ｄ[2]及びＤ[3]は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。

＊１～＊３は、それぞれＤ[1]～Ｄ[3]と結合している。該Ｄ[1]～Ｄ[3]は、それぞれ独立に、下記一般式（Ｄ[A]）～（Ｄ[D]）で表される４つの基群であるＡ群～Ｄ群から選択される基である。

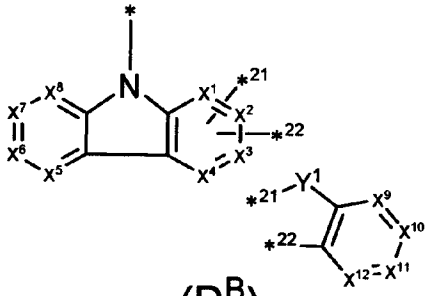
[化2]

A群



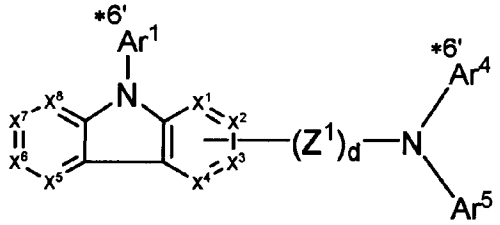
(D^A)

B群



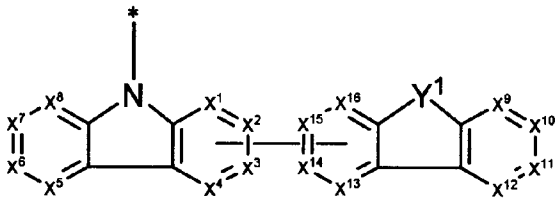
(D^B)

C群



(D^C)

D群



(D^D)

[0012] （Ａ群に属する基を表す一般式（D^A）中、＊^{4}及び＊^{5}のうち、一方は式（１）中の＊１～＊３のいずれかと結合し、他方はＡｒ^{1}と結合する。Ａｒ^{1}及びＡｒ^{2}は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数は６～３０のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数は５～３０のヘテロア

リール基である。X^1～X^4のうちの１つ及びX^{13}～X^{16}のうちの１つは、それぞれ＊^{10}及び＊^{11}に結合する炭素原子であり、それ以外の６つは、それぞれ独立にＣ（Ｒ）又は窒素原子であり、また、X^9～X^{12}のうちの１つ及びX^{21}～X^{24}のうちの１つは、それぞれ＊^{12}及び＊^{13}に結合する炭素原子であり、それ以外の６つは、それぞれ独立にＣ（Ｒ）又は窒素原子である。X^5～X^8及びX^{17}～X^{20}は、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子である。該Ｒは、水素原子又は置換基であって、複数存在するＲは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲ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。）

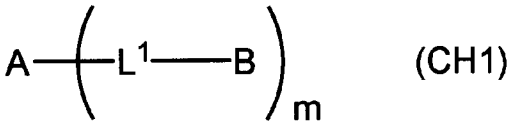
（Ｂ群に属する基を表す一般式（D^B）中、X^1～X^4のうちの２つは、それぞれ＊^{21}及び＊^{22}に結合する炭素原子であり、それ以外の２つは、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子であり、X^5～X^{12}は、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子である。該Ｒは、水素原子又は置換基であって、複数存在するＲは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲから選ばれる２つは、互いに結合して環を形成していてもよい。Y^1は、酸素原子、硫黄原子、－Ｃ（R^A）（R^B）－、－Ｓｉ（R^C）（R^D）－、－Ｐ（R^E）－、－Ｐ（＝Ｏ）（R^F）－、－Ｓ（＝Ｏ）$_2$－、－Ｐ（＝Ｓ）（R^G）－、又は－Ｎ（R^H）－である。該R^A～R^Hは、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、R^AとR^B、及びR^CとR^Dは、互いに結合して環を形成していてもよい。＊は式（１）中の＊１～＊３のいずれかと結合する。）

（Ｃ群に属する基を表す一般式（D^C）中、X^1～X^8は、それぞれＣ（R^1）～Ｃ（R^8）又は窒素原子を表す。R^1～R^8は、それぞれ独立に、水素原子または置換基である。但し、X^1～X^4のうちの１つは、Z^1もしくはAr^4及びAr^5が結合する窒素原子と直接結合する炭素原子である。また、その直接結合に関与していないR^1～R^8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。Ar^1、Ar^4及びAr^5は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０のアリール基、又は置換もしくは無置換の環

形成原子数５～３０のヘテロアリール基を表す。Z^1は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の複素環基、又はこれらの基が２～４個結合してなる基である。ｄは、０又は１である。一般式（D^C）中、＊６’が記されているAr^1及びAr^4のうちのいずれか一方が脱離して、その代わりに一般式（１）中の＊１～３のいずれかが窒素原子と直接結合している。）

（Ｄ群に属する基を表す一般式（D^D）中、X^1～X^{16}は、それぞれ$C(R^1)$～$C(R^{16})$又は窒素原子を表す。R^1～R^{16}は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。但し、X^1～X^4のうちのいずれか１つは炭素原子であり、X^{13}～X^{16}のうちのいずれか１つの炭素原子と直接結合をしている。また、その直接結合に関与していない、R^1～R^8から選ばれる２つ、及びR^9～R^{16}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。Y^1は、酸素原子、硫黄原子、$C(R^A)(R^B)$、$Si(R^C)(R^D)$、$P(R^E)$、$P(=O)(R^F)$、$S(=O)_2$、$P(=S)(R^G)$、又は$-N(R^H)-$である。該R^A～R^Hは、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。R^AとR^B、及びR^CとR^Dは、互いに結合して環を形成していてもよい。＊は式（１）中の＊１～＊３のいずれかと結合する。）］

[0013] [化3]



(CH1)

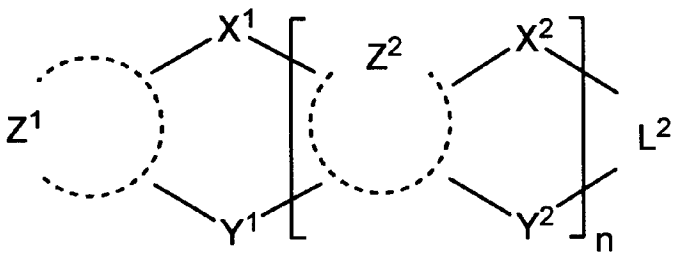
［式（ＣＨ１）中、Ａは、置換若しくは無置換の芳香族複素環基であり、

L^1は、単結合、置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基であり、

Ｂは、下記式（ＣＨ２）で表される構造の残基であり、

ｍは、２以上の整数であり、複数のL^1は互いに同一であっても異なっていてもよく、複数のＢは互いに同一であっても異なっていてもよい。］

[化4]



(CH2)

[式（ＣＨ２）中、Ｘ[1]及びＹ[1]の一方は単結合、－ＣＲ$_2$－、－ＮＲ－、－Ｏ－、－Ｓ－又は－ＳｉＲ$_2$－であり、他方は－ＮＲ－、－Ｏ－、－Ｓ－又は－ＳｉＲ$_2$－であり、

Ｘ[2]及びＹ[2]の一方は単結合、－ＣＲ$_2$－、－ＮＲ－、－Ｏ－、－Ｓ－又は－ＳｉＲ$_2$－であり、他方は－ＮＲ－、－Ｏ－、－Ｓ－又は－ＳｉＲ$_2$－であり、

Ｒは、水素原子、置換若しくは無置換のアルキル基、置換若しくは無置換のシクロアルキル基、置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基であり、

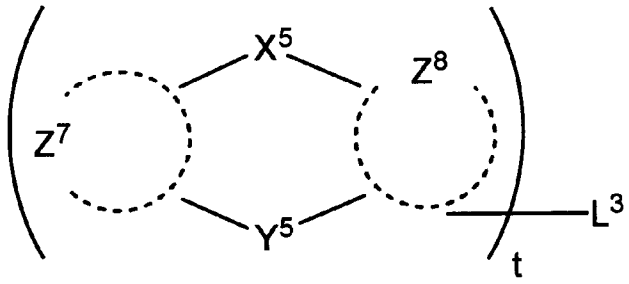
Ｚ[1]及びＺ[2]は、それぞれ独立に、置換若しくは無置換の脂肪族炭化水素環基、置換若しくは無置換の脂肪族複素環基、置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基であり、

Ｌ[2]は、連結基であり、

ｎは０～５の整数であり、ｎが２以上の場合、複数のＺ[2]は互いに同一であっても異なっていてもよく、複数のＸ[2]は互いに同一であっても異なっていてもよく、複数のＹ[2]は互いに同一であっても異なっていてもよい。]

[0014]

[化5]



(CH3)

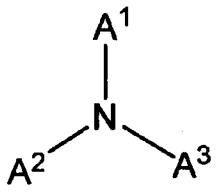
[式（ＣＨ３）中、Ｘ[5]、Ｙ[5]は、単結合、－ＣＲ$_2$－、－ＮＲ－、－Ｏ－、－Ｓ－又は－ＳｉＲ$_2$－であり、全てが単結合になることはない。Ｒは、前記と同じである。

Ｚ[7]、Ｚ[8]は、前記Ｚ[1]、Ｚ[2]と同じであるが、３環以上が縮環した脂肪族炭化水素環基、３環以上が縮環した脂肪族複素環基、３環以上が縮環した芳香族炭化水素環基、又は３環以上が縮環した芳香族複素環基である場合はない。

ｔは、１以上の整数である。

Ｌ[3]は、単結合、置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基又はこれらの組合せである。ただし、ｔが１の場合、Ｌ[3]は単結合ではない。]

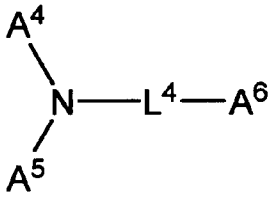
[0015] [化6]



(CH4)

[式（ＣＨ４）中、Ａ[1]～Ａ[3]は、それぞれ置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基である。]

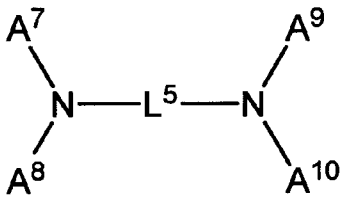
[化7]



(CH5)

[式（ＣＨ５）中、Ｌ[4]は１～４個の置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環が連結（又は含有）した２価の基、又は１～４個の置換若しくは無置換の芳香族複素環が連結した２価の基である。Ａ[4]～Ａ[6]は、それぞれ置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基である。Ａ[4]及びＡ[5]は互いに結合して環状構造を形成してもよい。]

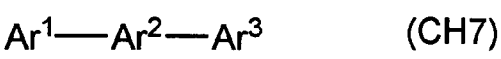
[化8]



(CH6)

[式（ＣＨ６）中、Ｌ[5]は１～６個の置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環が連結（又は含有）した２価の基、又は１～６個の置換若しくは無置換の芳香族複素環が連結した２価の基である。Ａ[7]～Ａ[10]は、それぞれ置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環が１～１０個結合した基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環が１～１０個結合した基である。]

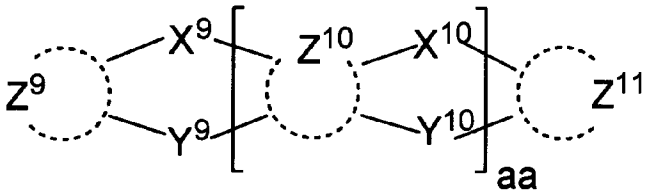
[0016] [化9]



(CH7)

[式（ＣＨ７）中、Ａｒ[1]及びＡｒ[3]は、置換若しくは無置換の１価の芳香族炭化水素環基、置換若しくは無置換の１価の芳香族複素環基、Ａｒ[2]は、置換若しくは無置換の２価の芳香族炭化水素環が１～１０個結合した基、置換若しくは無置換の２価の芳香族複素環が１～１０個結合した基である。]

[0017] [化10]



(CH14)

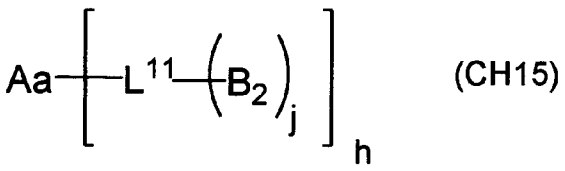
[式（ＣＨ１４）中、Ｘ[9]、Ｘ[10]、Ｙ[9]、Ｙ[10]は、単結合、－ＣＲ$_2$－、－ＮＲ－、－Ｏ－、－Ｓ－、－ＰＲ－、又は－ＳｉＲ$_2$－で表される基であり、全てが単結合になることはない。

Ｒは、式（ＣＨ２）のＸ[1]、Ｘ[2]、Ｙ[1]及びＹ[2]におけるＲと同義であり、

Ｚ[9]、Ｚ[10]、Ｚ[11]は、式（ＣＨ２）のＺ[1]、Ｚ[2]と同義であり、

ａａは１～５の整数であり、ａａが２以上の場合、複数のＺ[10]は互いに同一であっても異なっていてもよく、複数のＸ[10]は互いに同一であっても異なっていてもよく、複数のＹ[10]は互いに同一であっても異なっていてもよい。]

[0018] [化11]



(CH15)

[式（ＣＨ１５）中、Ａａは、式（ＣＨ１）のＡと同義であり、Ｌ[11]は式（ＣＨ１）のＬ[1]と同義であり、Ｂ$_2$は、前記式（ＣＨ２）で表される構造の残基である。

ｈは、１以上の整数であり、ｈの上限はＡａの構造に依存して決定され、

特に限定されるわけではないが、好ましくは１～１０程度の範囲から選ばれるのが好ましい。より好ましくは、１～３であり、更に好ましくは、１又は２である。

ｊは、１以上の整数であり、ｊの上限はL^{11}の構造に依存して決定され、特に限定されるわけではないが、好ましくは２又は３である。

ただし、ｈ＋ｊは３以上の整数である。

複数のL^{11}は互いに同一であっても異なっていてもよく、複数のB_2は互いに同一であっても異なっていてもよい。］

[0019] ［２］前記一般式（１）で表される化合物。

［３］上記［１］に記載の組成物又は上記［２］に記載の化合物からなる、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

［４］溶媒、並びに、上記［１］に記載の組成物又は上記［２］に記載の化合物を含む、インク組成物。

［５］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、上記［１］に記載の組成物又は上記［２］に記載の化合物を含む層である、有機エレクトロルミネッセンス素子。

［６］上記［５］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。

発明の効果

[0020] 本発明によれば、塗布法により層形成する有機ＥＬ素子に好適な組成物又は化合物を提供できる。

図面の簡単な説明

[0021] [図1]本発明の一態様に係る有機ＥＬ素子の概略構成を示す図である。

発明を実施するための形態

[0022] 本明細書において、「置換もしくは無置換の炭素数ＸＸ～ＹＹのＺＺ基」という表現における「炭素数ＸＸ～ＹＹ」は、ＺＺ基が無置換である場合の

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

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

[0023] 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。

[0024] また、本明細書において、環形成原子数とは、原子が環状に結合した構造（例えば単環、縮合環、環集合）の化合物（例えば単環化合物、縮合環化合物、架橋化合物、炭素環化合物、複素環化合物）の当該環自体を構成する原子の数を表す。環を構成しない原子（例えば環を構成する原子の結合手を終端する水素原子）や、当該環が置換基によって置換される場合の置換基に含まれる原子は環形成原子数には含まない。以下で記される「環形成原子数」については、特筆しない限り同様とする。例えば、ピリジン環の環形成原子数は６であり、キナゾリン環の環形成原子数は１０であり、フラン環の環形

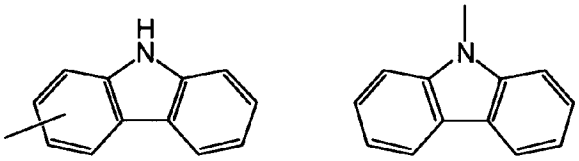
成原子数は５である。ピリジン環やキナゾリン環の炭素原子にそれぞれ結合している水素原子や置換基を構成する原子については、環形成原子数の数に含めない。また、フルオレン環に置換基として例えばフルオレン環が結合している場合（スピロフルオレン環を含む）、置換基としてのフルオレン環の原子数は環形成原子数の数に含めない。

[0025] また、本明細書において、「水素原子」とは、中性子数が異なる同位体、すなわち、軽水素（ｐｒｏｔｉｕｍ）、重水素（ｄｅｕｔｅｒｉｕｍ）及び三重水素（ｔｒｉｔｉｕｍ）を包含する。

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

[0026] 本明細書中において、「置換もしくは無置換のカルバゾリル基」は、下記のカルバゾリル基、

[化12]

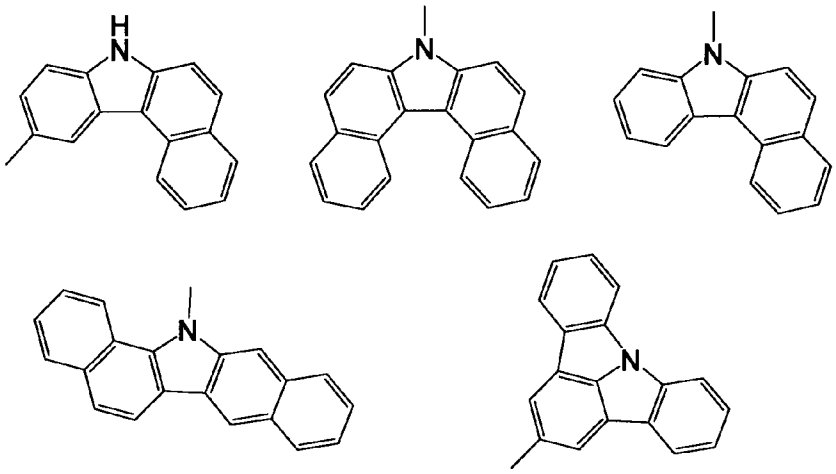


及び上記の基に対して、さらに任意の置換基を有する置換カルバゾリル基を表す。

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

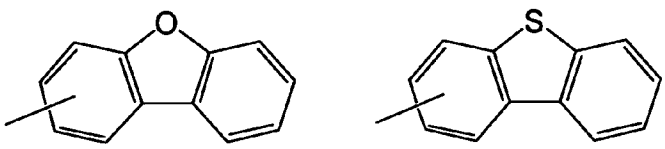
[0027]

[化13]



[0028] 本明細書において、「置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基」及び「置換もしくは無置換のジベンゾチオフェニル基」は、下記のジベンゾフラニル基及びジベンゾチオフェニル基、

[化14]



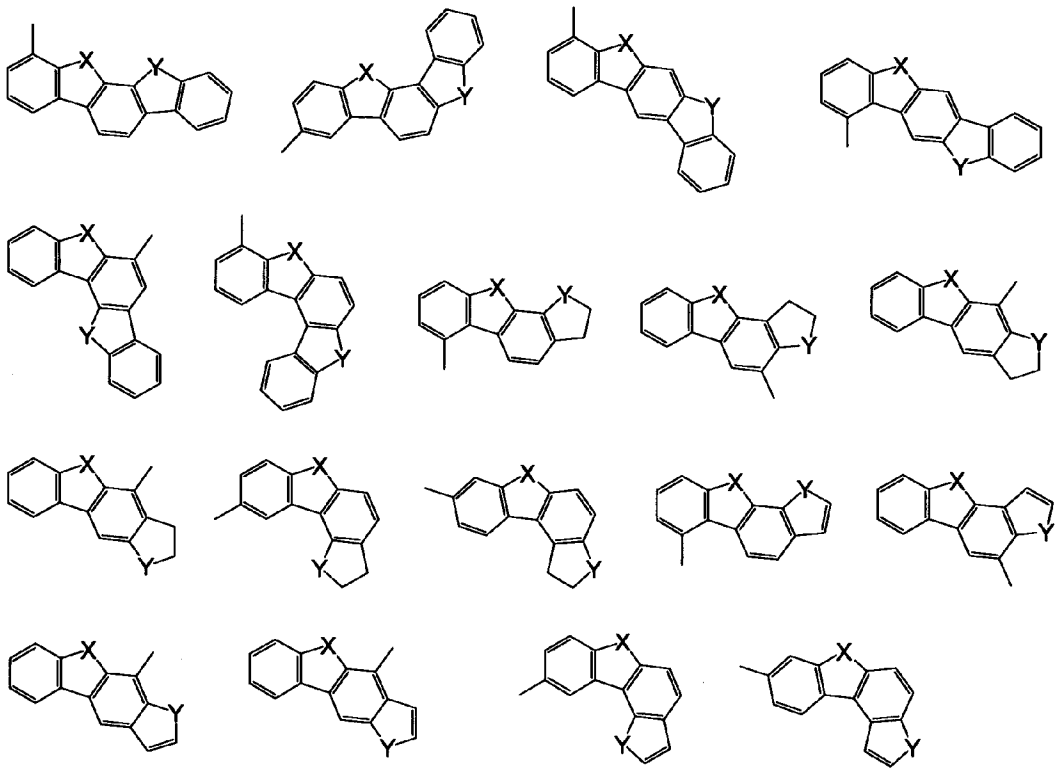
及び上記の基に対して、さらに任意の置換基を有する置換ジベンゾフラニル基及び置換ジベンゾチオフェニル基を表す。

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

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

[0029]

[化15]



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

[0030] また、「置換基」、又は「置換もしくは無置換」との記載における置換基としては、炭素数１～５０（好ましくは１～１８、より好ましくは１～８）のアルキル基；環形成炭素数３～５０（好ましくは３～１０、より好ましくは３～８、更に好ましくは５又は６）のシクロアルキル基；環形成炭素数６～５０（好ましくは６～２５、より好ましくは６～１８）のアリール基；環形成炭素数６～５０（好ましくは６～２５、より好ましくは６～１８）のアリール基を有する炭素数７～５１（好ましくは７～３０、より好ましくは７～２０）のアラルキル基；アミノ基；炭素数１～５０（好ましくは１～１８、より好ましくは１～８）のアルキル基及び環形成炭素数６～５０（好まし

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

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

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

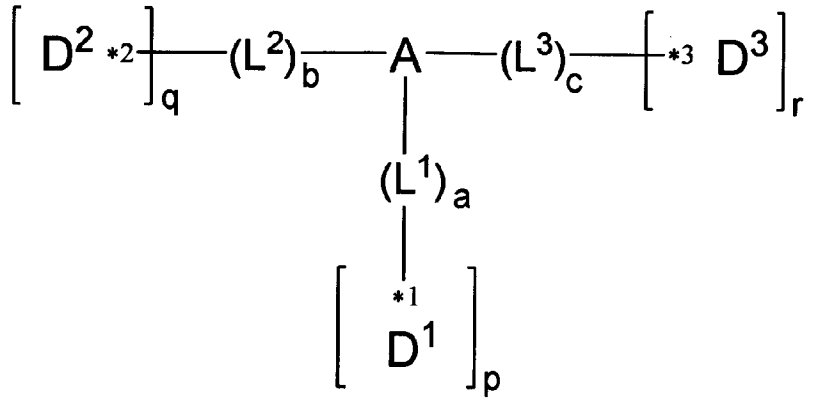
[0031] 上記置換基の中でも、より好ましくは、置換もしくは無置換の炭素数１～５０（好ましくは１～１８、より好ましくは１～８）のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０（好ましくは３～１０、より好ましくは３～８、更に好ましくは５又は６）のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０（好ましくは６～２５、より好ましくは６～１８）のアリール基、置換もしくは無置換の炭素数１～５０（好ましくは１～１８、より好ましくは１～８）のアルキル基及び置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０（好ましくは６～２５、より好ましくは６～１８）のアリール基から選ばれる置換基を有するモノ置換又はジ置換アミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０（好ましくは５～２４、より好ましくは５～１３）のヘテロアリール基、ハロゲン原子、シアノ基である。

[0032] 本明細書中、好ましいとする規定は任意に選択することができ、また、好ましいとする規定の組み合わせはより好ましいと言える。

[0033] ［組成物］

本発明の一態様において、下記一般式（１）で表される化合物と、後述する一般式（ＣＨ１）、（ＣＨ３）、（ＣＨ４）、（ＣＨ５）、（ＣＨ６）、（ＣＨ１４）及び（ＣＨ１５）のいずれかで表される化合物から選択される少なくとも１種とを含有する組成物が提供される。当該組成物は、塗布法により層形成する有機ＥＬ素子に好適な化合物であり、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料として有用である。

[化16]



(1)

[0034] [一般式（１）中、Ａは、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基を表す。

Ｌ[1]～Ｌ[3]は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の複素環基、又はこれらの基が２～４個結合してなる基である。

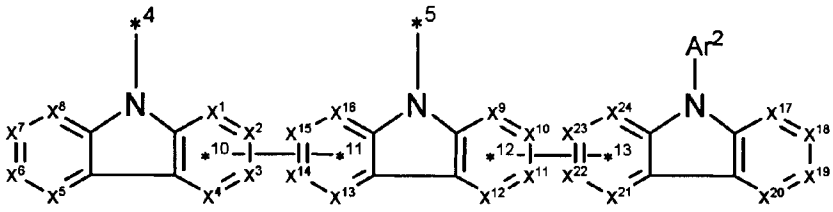
ａ～ｃは、それぞれ独立に、０又は１である。

ｐ～ｒは、それぞれ独立に、０～３の整数であり、ｐ＋ｑ＋ｒ＝３である。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在するＤ[1]、Ｄ[2]及びＤ[3]は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。

＊１～＊３は、それぞれＤ[1]～Ｄ[3]と結合している。該Ｄ[1]～Ｄ[3]は、それぞれ独立に、下記一般式（Ｄ[A]）～（Ｄ[D]）で表される４つの基群であるＡ群～Ｄ群から選択される基である。

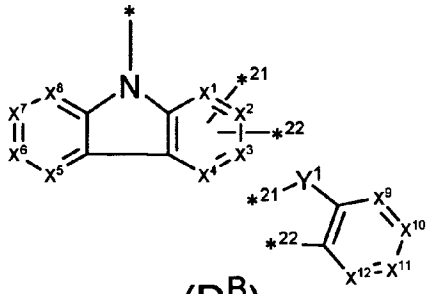
[化17]

A群



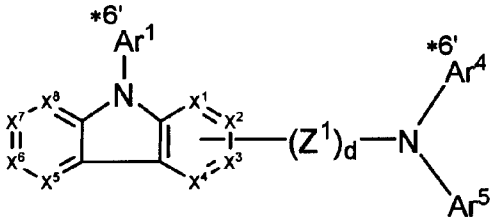
(D^A)

B群



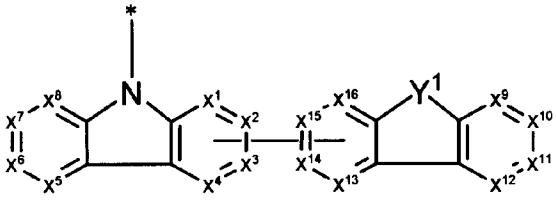
(D^B)

C群



(D^C)

D群



(D^D)

[0035] （Ａ群に属する基を表す一般式（D^A）中、＊^{4}及び＊^{5}のうち、一方は式（１）中の＊１～＊３のいずれかと結合し、他方はＡｒ^{1}と結合する。Ａｒ^{1}及びＡｒ^{2}は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数は６～３０のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数は５～３０のヘテロア

リール基である。X^1～X^4のうちの１つ及びX^{13}～X^{16}のうちの１つは、それぞれ＊^{10}及び＊^{11}に結合する炭素原子であり、それ以外の６つは、それぞれ独立にＣ（Ｒ）又は窒素原子であり、また、X^9～X^{12}のうちの１つ及びX^{21}～X^{24}のうちの１つは、それぞれ＊^{12}及び＊^{13}に結合する炭素原子であり、それ以外の６つは、それぞれ独立にＣ（Ｒ）又は窒素原子である。X^5～X^8及びX^{17}～X^{20}は、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子である。該Ｒは、水素原子又は置換基であって、複数存在するＲは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲ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。）

（Ｂ群に属する基を表す一般式（D^B）中、X^1～X^4のうちの２つは、それぞれ＊^{21}及び＊^{22}に結合する炭素原子であり、それ以外の２つは、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子であり、X^5～X^{12}は、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子である。該Ｒは、水素原子又は置換基であって、複数存在するＲは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲ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。Y^1は、酸素原子、硫黄原子、－Ｃ（R^A）（R^B）－、－Ｓｉ（R^C）（R^D）－、－Ｐ（R^E）－、－Ｐ（＝Ｏ）（R^F）－、－Ｓ（＝Ｏ）$_2$－、－Ｐ（＝Ｓ）（R^G）－、又は－Ｎ（R^H）－である。該R^A～R^Hは、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、R^AとR^B、及びR^CとR^Dは、互いに結合して環を形成していてもよい。＊は式（１）中の＊１～＊３のいずれかと結合する。）

（Ｃ群に属する基を表す一般式（D^C）中、X^1～X^8は、それぞれＣ（R^1）～Ｃ（R^8）又は窒素原子を表す。R^1～R^8は、それぞれ独立に、水素原子または置換基である。但し、X^1～X^4のうちの１つは、Z^1もしくはAr^4及びAr^5が結合する窒素原子と直接結合する炭素原子である。また、その直接結合に関与していないR^1～R^8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。Ar^1、Ar^4及びAr^5は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０のアリール基、又は置換もしくは無置換の環

形成原子数５～３０のヘテロアリール基を表す。Z^1は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の複素環基、又はこれらの基が２～４個結合してなる基である。ｄは、０又は１である。一般式（D^C）中、＊６’が記されているAr^1及びAr^4のうちのいずれか一方が脱離して、その代わりに一般式（１）中の＊１～３のいずれかが窒素原子と直接結合している。）

（Ｄ群に属する基を表す一般式（D^D）中、X^1～X^{16}は、それぞれＣ（R^1）～Ｃ（R^{16}）又は窒素原子を表す。R^1～R^{16}は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。但し、X^1～X^4のうちのいずれか１つは炭素原子であり、X^{13}～X^{16}のうちのいずれか１つの炭素原子と直接結合をしている。また、その直接結合に関与していない、R^1～R^8から選ばれる２つ、及びR^9～R^{16}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。Y^1は、酸素原子、硫黄原子、Ｃ（R^A）（R^B）、Ｓｉ（R^C）（R^D）、Ｐ（R^E）、Ｐ（＝Ｏ）（R^F）、$S(=O)_2$、Ｐ（＝Ｓ）（R^G）、又は－Ｎ（R^H）－である。該R^A～R^Hは、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。R^AとR^B、及びR^CとR^Dは、互いに結合して環を形成していてもよい。＊は式（１）中の＊１～＊３のいずれかと結合する。）］

[0036] 上記一般式（１）中の各基のより具体的な説明は、後述する一般式（１［Ｖ］）中の同じ記号の基と同じように説明され、好ましいものも同じである。

[0037] 本発明の一態様においては、後述する一般式（１［Ｉ］）で表される化合物と、後述する一般式（ＣＨ１）、（ＣＨ３）、（ＣＨ４）、（ＣＨ５）、（ＣＨ６）、（ＣＨ１４）及び（ＣＨ１５）のいずれかで表される化合物から選択される少なくとも１種とを含有する組成物も提供される。但し、化合物（ＣＨ１）、化合物（ＣＨ３）、化合物（ＣＨ４）、化合物（ＣＨ５）、化合物（ＣＨ６）、化合物（ＣＨ１４）及び化合物（ＣＨ１５）は、一般式（１［Ｉ］）で表される化合物と同じではない。つまり、各一般式（ＣＨ１）、（ＣＨ３）、（ＣＨ４）、（ＣＨ５）、（ＣＨ６）、（ＣＨ１４）及び

（ＣＨ１５）中に一般式（１［Ｉ］）で表される化合物が含まれ得る場合には、一般式（１［Ｉ］）で表される化合物に相当するその重複部分は除かれる。

本発明の一態様においては、後述する一般式（１［II］）で表される化合物と、後述する一般式（ＣＨ１）、（ＣＨ３）、（ＣＨ４）、（ＣＨ５）、（ＣＨ６）、（ＣＨ１４）及び（ＣＨ１５）のいずれかで表される化合物から選択される少なくとも１種とを含有する組成物も提供される。但し、化合物（ＣＨ１）、化合物（ＣＨ３）、化合物（ＣＨ４）、化合物（ＣＨ５）、化合物（ＣＨ６）、化合物（ＣＨ１４）及び化合物（ＣＨ１５）は、一般式（１［II］）で表される化合物と同じではない。つまり、各一般式（ＣＨ１）、（ＣＨ３）、（ＣＨ４）、（ＣＨ５）、（ＣＨ６）、（ＣＨ１４）及び（ＣＨ１５）中に一般式（１［II］）で表される化合物が含まれ得る場合には、一般式（１［II］）で表される化合物に相当するその重複部分は除かれる。

[0038] 本発明の一態様においては、後述する一般式（１［III］）で表される化合物と、後述する一般式（ＣＨ１）、（ＣＨ３）、（ＣＨ４）、（ＣＨ５）、（ＣＨ６）、（ＣＨ１４）及び（ＣＨ１５）のいずれかで表される化合物から選択される少なくとも１種とを含有する組成物も提供される。但し、化合物（ＣＨ１）、化合物（ＣＨ３）、化合物（ＣＨ４）、化合物（ＣＨ５）、化合物（ＣＨ６）、化合物（ＣＨ１４）及び化合物（ＣＨ１５）は、一般式（１［III］）で表される化合物と同じではない。つまり、各一般式（ＣＨ１）、（ＣＨ３）、（ＣＨ４）、（ＣＨ５）、（ＣＨ６）、（ＣＨ１４）及び（ＣＨ１５）中に一般式（１［III］）で表される化合物が含まれ得る場合には、一般式（１［III］）で表される化合物に相当するその重複部分は除かれる。

本発明の一態様においては、後述する一般式（１［IV］）で表される化合物と、後述する一般式（ＣＨ１）、（ＣＨ３）、（ＣＨ４）、（ＣＨ５）、（ＣＨ６）、（ＣＨ１４）及び（ＣＨ１５）のいずれかで表される化合物か

ら選択される少なくとも１種とを含有する組成物も提供される。但し、化合物（ＣＨ１）、化合物（ＣＨ３）、化合物（ＣＨ４）、化合物（ＣＨ５）、化合物（ＣＨ６）、化合物（ＣＨ１４）及び化合物（ＣＨ１５）は、一般式（１［IV］）で表される化合物と同じではない。つまり、各一般式（ＣＨ１）、（ＣＨ３）、（ＣＨ４）、（ＣＨ５）、（ＣＨ６）、（ＣＨ１４）及び（ＣＨ１５）中に一般式（１［IV］）で表される化合物が含まれ得る場合には、一般式（１［IV］）で表される化合物に相当するその重複部分は除かれる。

本発明の一態様においては、後述する一般式（１［Ｖ］）で表される化合物と、後述する一般式（ＣＨ１）、（ＣＨ３）、（ＣＨ４）、（ＣＨ５）、（ＣＨ６）、（ＣＨ１４）及び（ＣＨ１５）のいずれかで表される化合物から選択される少なくとも１種とを含有する組成物も提供される。但し、化合物（ＣＨ１）、化合物（ＣＨ３）、化合物（ＣＨ４）、化合物（ＣＨ５）、化合物（ＣＨ６）、化合物（ＣＨ１４）及び化合物（ＣＨ１５）は、一般式（１［Ｖ］）で表される化合物と同じではない。つまり、各一般式（ＣＨ１）、（ＣＨ３）、（ＣＨ４）、（ＣＨ５）、（ＣＨ６）、（ＣＨ１４）及び（ＣＨ１５）中に一般式（１［Ｖ］）で表される化合物が含まれ得る場合には、一般式（１［Ｖ］）で表される化合物に相当するその重複部分は除かれる。

これらの組成物は、塗布法により層形成する有機ＥＬ素子に好適な化合物であり、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料として有用である。

[0039] ［一般式（１）で表される化合物］

本発明の一態様においては、前記一般式（１）で表される化合物も提供される。当該化合物は、塗布法により層形成する有機ＥＬ素子に好適な化合物であり、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料として有用である。

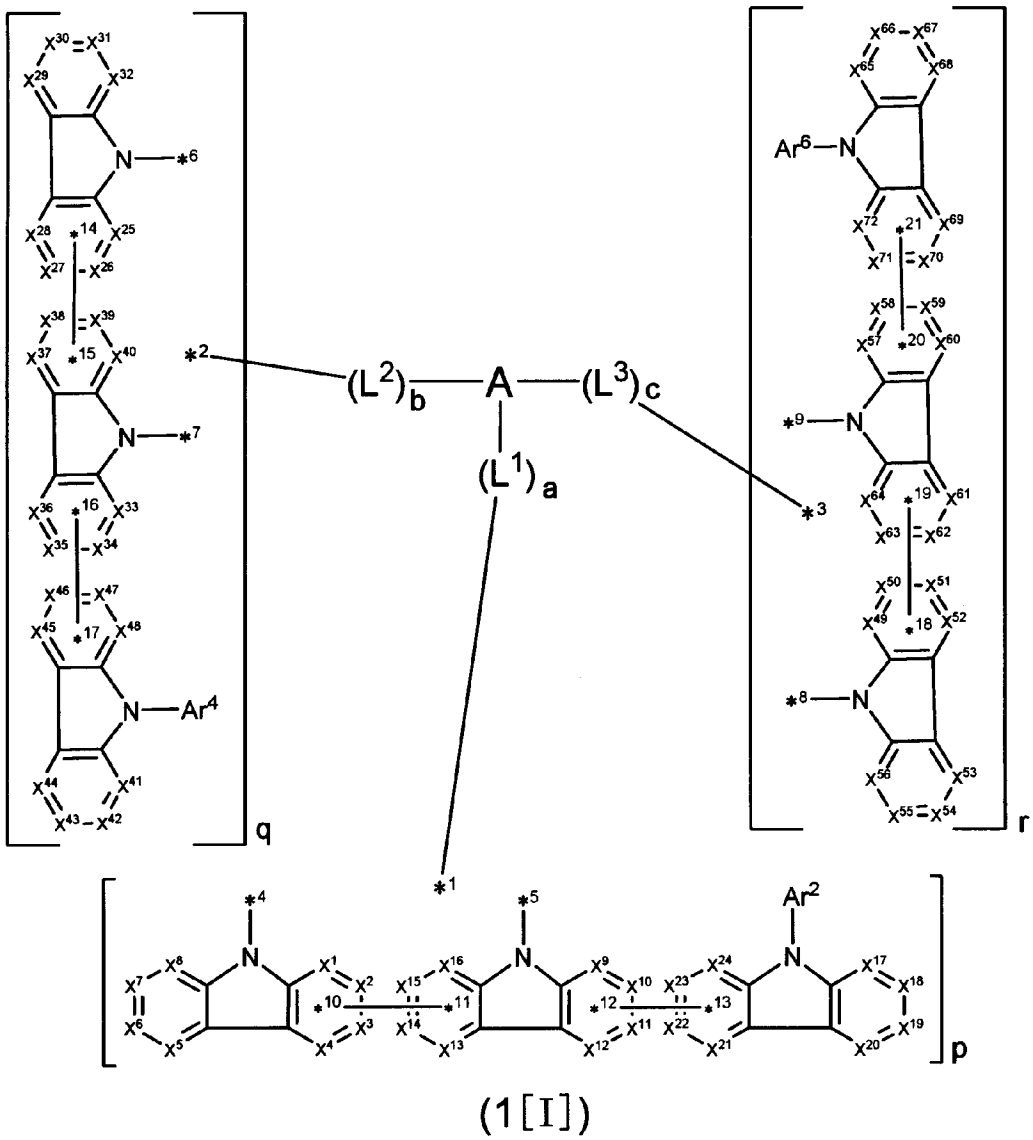
一般式（１）で表される化合物としては、好ましくは、後述の一般式（１［Ｉ］）で表される化合物、後述の一般式（１［II］）で表される化合物、後述の一般式（１［III］）で表される化合物、後述の一般式（１［IV］）で

表される化合物、後述の一般式（１［Ｖ］）で表される化合物である。

[0040] ［一般式（１［Ｉ］）で表される化合物］

本発明の一態様において、下記一般式（１［Ｉ］）で表される化合物（以下、「化合物（１［Ｉ］）」ともいう）が提供される。当該化合物（１［Ｉ］）は、塗布法により層形成する有機ＥＬ素子に好適な化合物であり、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料として有用である。

[0041] [化18]



(1[I])

[0042] （一般式（１［Ｉ］）中、Ａは、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３

０の窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基を表す。

Ｌ^{1}～Ｌ^{3}は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の複素環基、又はこれらの基が２～４個結合してなる基である。

ａ～ｃは、それぞれ独立に、０又は１である。

＊^{4}及び＊^{5}のうち、一方は＊^{1}と結合し、他方はＡｒ^{1}と結合し、

＊^{6}及び＊^{7}のうち、一方は＊^{2}と結合し、他方はＡｒ^{3}と結合し、

＊^{8}及び＊^{9}のうち、一方は＊^{3}と結合し、他方はＡｒ^{5}と結合する。

Ａｒ^{1}～Ａｒ^{6}は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数は６～３０のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数は５～３０のヘテロアリール基である。

Ｘ^{1}～Ｘ^{4}のうちの１つ及びＸ^{13}～Ｘ^{16}のうちの１つは、それぞれ＊^{10}及び＊^{11}に結合する炭素原子であり、それ以外の６つは、それぞれ独立にＣ（Ｒ）又は窒素原子であり、

Ｘ^{9}～Ｘ^{12}のうちの１つ及びＸ^{21}～Ｘ^{24}のうちの１つは、それぞれ＊^{12}及び＊^{13}に結合する炭素原子であり、それ以外の６つは、それぞれ独立にＣ（Ｒ）又は窒素原子であり、

Ｘ^{25}～Ｘ^{28}のうちの１つ及びＸ^{37}～Ｘ^{40}のうちの１つは、それぞれ＊^{14}及び＊^{15}に結合する炭素原子であり、それ以外の６つは、それぞれ独立にＣ（Ｒ）又は窒素原子であり、

Ｘ^{33}～Ｘ^{36}のうちの１つ及びＸ^{45}～Ｘ^{48}のうちの１つは、それぞれ＊^{16}及び＊^{17}に結合する炭素原子であり、それ以外の６つは、それぞれ独立にＣ（Ｒ）又は窒素原子であり、

Ｘ^{49}～Ｘ^{52}のうちの１つ及びＸ^{61}～Ｘ^{64}のうちの１つは、それぞれ＊^{18}及び＊^{19}に結合する炭素原子であり、それ以外の６つは、それぞれ独立にＣ（Ｒ）又は窒素原子であり、

Ｘ^{57}～Ｘ^{60}のうちの１つ及びＸ^{69}～Ｘ^{72}のうちの１つは、それぞれ＊^{20}及び＊^{21}に結合する炭素原子であり、それ以外の６つは、それぞれ独立にＣ（

Ｒ）又は窒素原子であり、

X^5～X^8、X^{17}～X^{20}、X^{29}～X^{32}、X^{41}～X^{44}、X^{53}～X^{56}、及びX^{65}～X^{68}は、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子である。

Ｒは、水素原子又は置換基であって、複数存在するＲは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲ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。

ｐ～ｒは、それぞれ独立に、０～３の整数であり、ｐ＋ｑ＋ｒ＝３である。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。）

[0043] （一般式（１［Ｉ］）中の各基についての説明）

一般式（１［Ｉ］）中のＡが表す窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基の環形成原子数は５～３０であり、好ましくは６～２０、より好ましくは６～１４である。

当該窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基は、好ましくは、単環、２環から構成される縮合環、３環から構成される縮合環のいずれかであることが好ましい。

当該窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基が含有する窒素原子の数は、好ましくは１～３個、より好ましくは２個又は３個である。特に、窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基が単環の場合には、含有する窒素原子の数は好ましくは２個又は３個、より好ましくは３個であり、窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基が２環又は３環から構成される縮合環の場合には、含有する窒素原子の数は好ましくは２個である。

なお、当該窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基は、窒素原子以外のヘテロ原子（例えば、酸素原子、硫黄原子、ケイ素原子、及びセレン原子等）を含有していてもよいが、ヘテロ原子として窒素原子のみを含有していることが好ましい。

[0044] 一般式（１［Ｉ］）中のＡが表す窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基の具体例としては、ピロール、ピリジン、ピリダジン、ピリミジン、ピラジン、ト

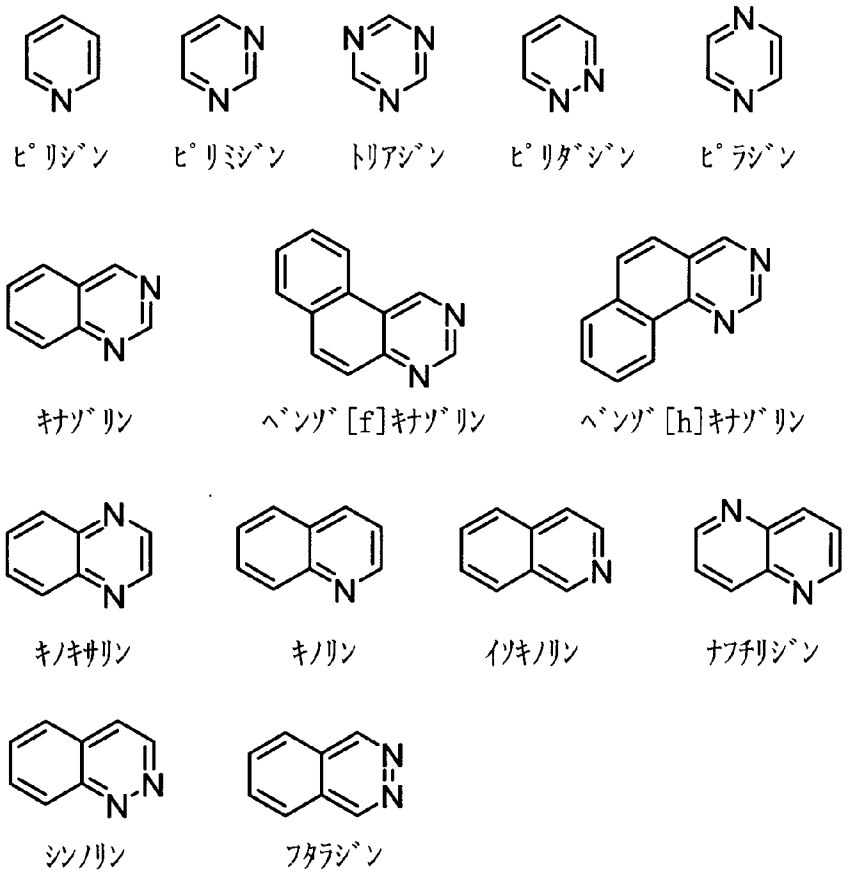
リアジン、イミダゾール、ピラゾール、オキサジアゾール、チアジアゾール、トリアゾール、テトラゾール、インドール、イソインドール、インドリジン、キノリジン、キノリン、イソキノリン、ナフチリジン、シンノリン、フタラジン、キナゾリン、ベンゾ［ｆ］キナゾリン、ベンゾ［ｈ］キナゾリン、キノキサリン、ベンゾイミダゾール、インダゾール、カルバゾール、ビスカルバゾール、フェナントリジン、アクリジン、フェナントロリン、フェナジン、アザトリフェニレン、ジアザトリフェニレン、ヘキサアザトリフェニレン、アザカルバゾール、アザジベンゾフラン、アザジベンゾチオフェン及びジナフト［2’,3’:2,3:2’,3’:6,7］カルバゾールから選択される化合物の残基などが挙げられる。

ここで、残基とは、化合物から水素原子が１つ以上脱離して得られる１価以上の基である。なお、前記窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基の価数、つまり「Ａ」の価数は、一般式（１［Ｉ］）中の「ａ＋ｂ＋ｃ」の値に相当する。

[0045] 前記窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基としては、上記の中でも、下記の群から選択される化合物の残基が好ましい。

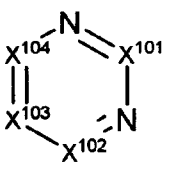
[0046]

[化19]



[0047] また、本発明の一態様においては、Ａが表す窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基が、下記一般式（Ａ１）で表される窒素含有複素環の残基であることが好ましい。

[0048] [化20]



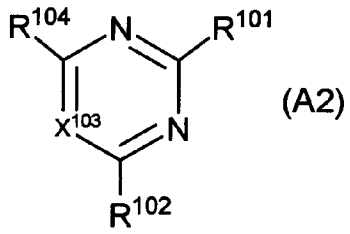
(A1)

（一般式（Ａ１）中、X^{101}～X^{104}は、それぞれＣ（R^{101}）～Ｃ（R^{104}）又は窒素原子を示す。R^{101}～R^{104}は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、R^{102}～R^{104}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。）

[0049] 本発明の一態様においては、Ａが表す窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基が、下記一般式（Ａ２）～（Ａ４）のいずれかで表される窒素含有複素環の残基であることがより好ましい。

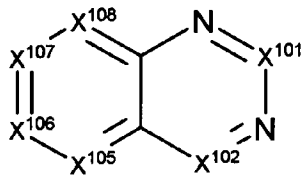
[0050] [化21]



(A2)

（一般式（Ａ２）中、X^{103}は、Ｃ（R^{103}）又は窒素原子を示す。R^{101}～R^{104}は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。R^{102}～R^{104}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。）

[0051] [化22]

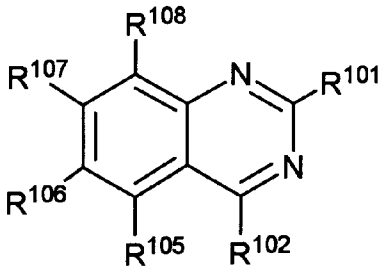


(A3)

（一般式（Ａ３）中、X^{101}、X^{102}、X^{105}～X^{108}は、それぞれＣ（R^{101}）、Ｃ（R^{102}）、Ｃ（R^{105}）～Ｃ（R^{108}）又は窒素原子を示す。R^{101}、R^{102}及びR^{105}～R^{108}、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、R^{102}及びR^{105}～R^{108}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。）

[0052]

[化23]



(A4)

（一般式（Ａ４）中、Ｒ[101]、Ｒ[102]及びＲ[105]～Ｒ[108]は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、Ｒ[102]及びＲ[105]～Ｒ[108]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。）

[0053] なお、一般式（１［Ｉ］）中のＡが表す窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基は、任意に置換基を有していてもよい。

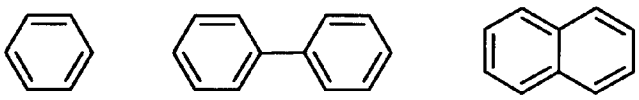
窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基に置換し得る置換基としては、具体的には上述の置換基が挙げられ、「２つの（アザ）カルバゾリル基で置換された（アザ）カルバゾリル基」（例えば、後述の一般式（Ｄ１）で表される基など）や、「２つの（アザ）カルバゾリル基で置換された（アザ）カルバゾリル基で更に置換されたアリール基及びヘテロアリール基」（例えば、後述の一般式（Ｄ１）で表される基等で置換されたアリール基及びヘテロアリール基など）も含まれる。

[0054] 前記一般式（１［Ｉ］）において、Ｌ[1]～Ｌ[3]が表す芳香族炭化水素基の環形成炭素数は６～３０であり、好ましくは６～１８、より好ましくは６～１３、さらに好ましくは６～１２、特に好ましくは６～１０である。

本発明の一態様においては、Ｌ[1]～Ｌ[3]が表す芳香族炭化水素基としては、Ｌ[1]～Ｌ[3]の少なくとも一つが下記式で表されるいずれかの化合物の２～４価の残基であることが好ましく、Ｌ[1]～Ｌ[3]のすべてが下記式で表されるいずれかの化合物の２～４価の残基であることがより好ましい。

[0055]

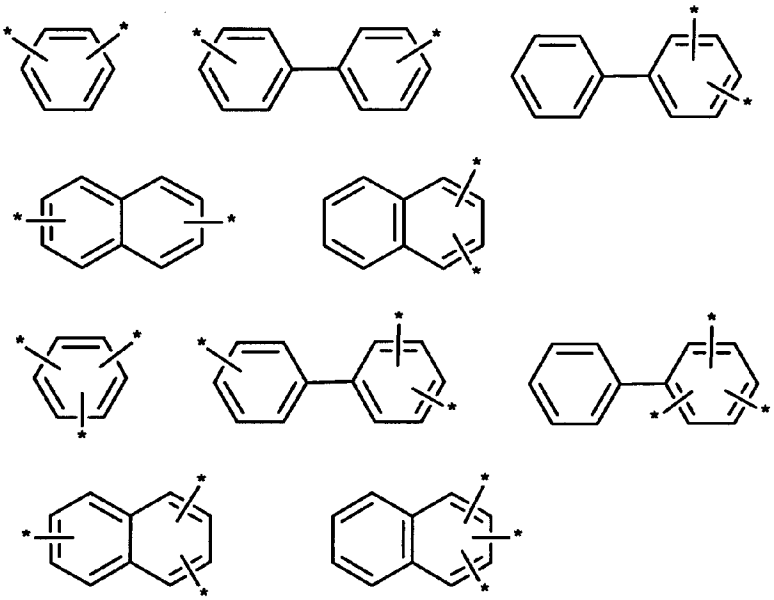
[化24]



（上記化合物中の炭素原子は置換基と結合していてもよい。）

[0056] さらに、本発明の一態様においては、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}が表す芳香族炭化水素基としては、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}の少なくとも一つが下記式で表されるいずれかの基であることが好ましく、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}のすべてが下記式で表されるいずれかの化合物の２～４価の残基であることがより好ましい。

[0057] [化25]

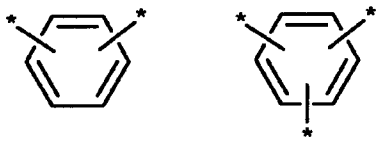


（上記式中、＊は結合位置を表す。また、上記式中の結合位置以外の炭素原子は、置換基と結合していてもよい。）

[0058] 上記の中でも、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}が表す芳香族炭化水素基としては、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}の少なくとも一つが下記式で表されるいずれかの基であることがより好ましく、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}のすべてが下記式で表されるいずれかの基であることが更に好まし

い。

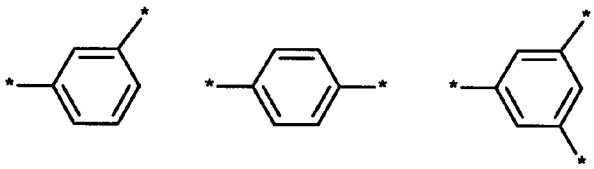
[0059] [化26]



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

[0060] 上記の中でも、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}が表す芳香族炭化水素基としては、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}の少なくとも一つが下記式で表されるいずれかの基であることがより好ましく、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}のすべてが下記式で表されるいずれかの基であることが更に好ましい。

[0061] [化27]

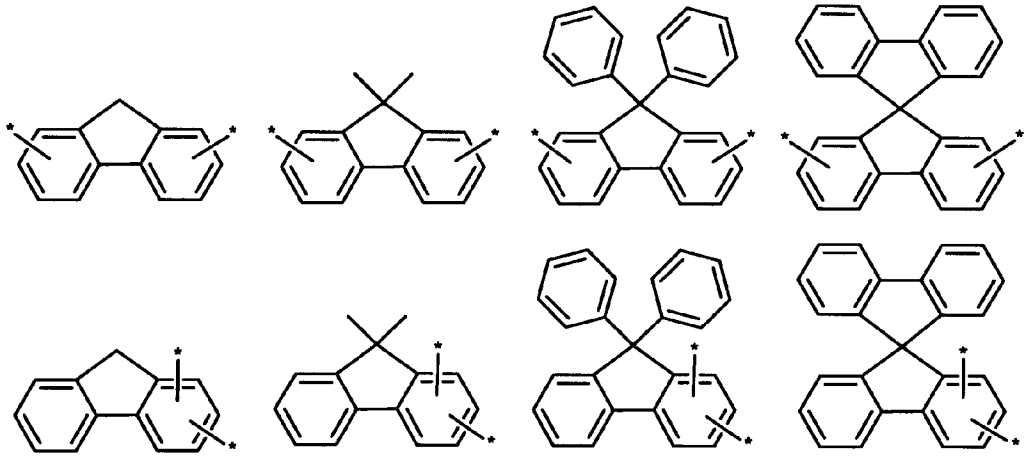


（上記式中、＊は結合位置を表す。また、上記式中の結合位置以外の炭素原子は、置換基と結合していてもよい。）

[0062] Ｌ^{1}～Ｌ^{3}が表す芳香族炭化水素基としては、上記以外にも、下記式で表される基が挙げられる。

[0063]

[化28]

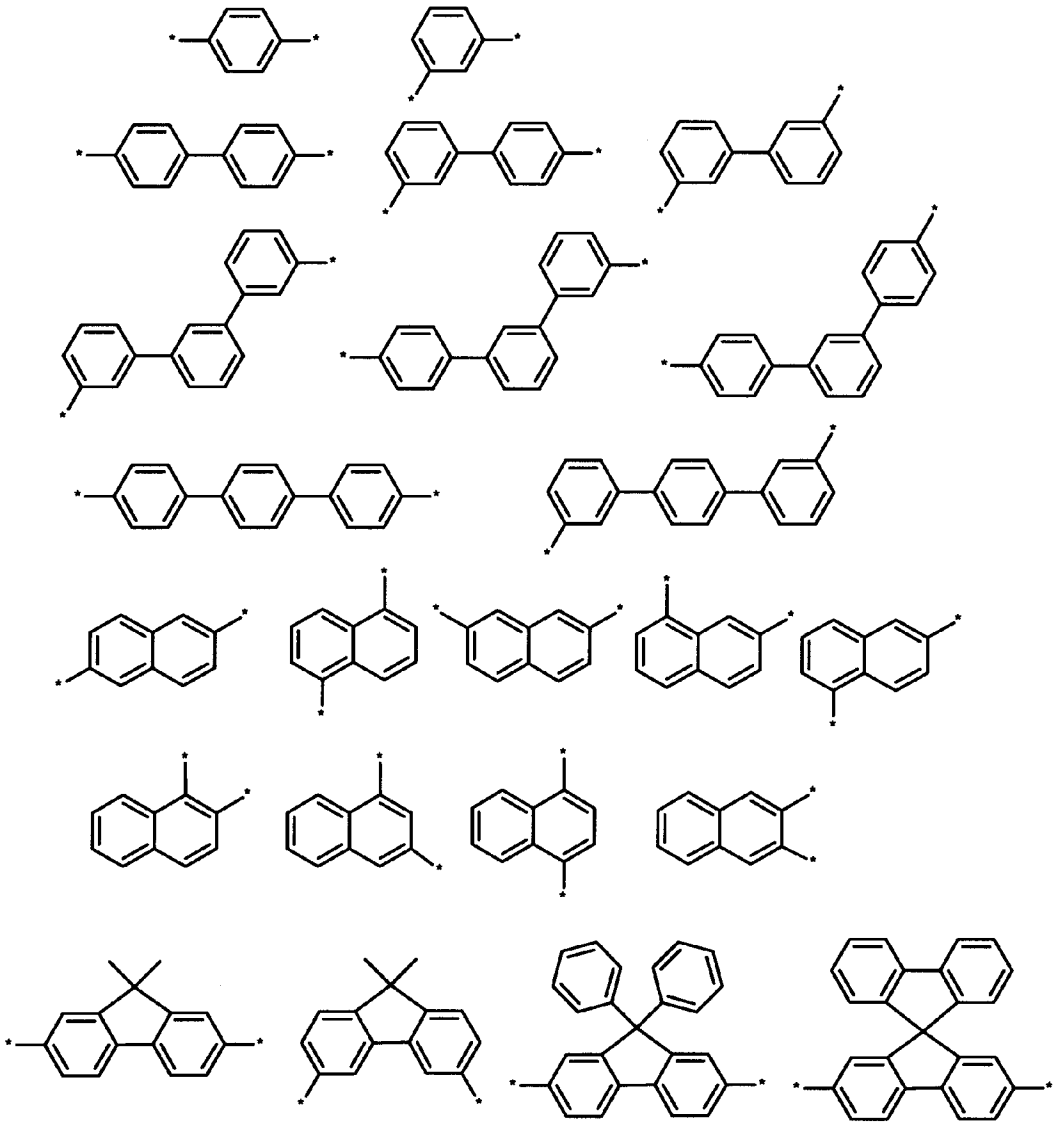


（上記式中、＊は結合位置を表す。また、上記式中の結合位置以外の炭素原子は、置換基と結合していてもよい。）

[0064] Ｌ[1]～Ｌ[3]が表す芳香族炭化水素基が二価の場合の具体例としては、下記式で表される基が挙げられる。

[0065]

[化29]



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

[0066] また、前記一般式（１［Ｉ］）において、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}が表す複素環基の環形成原子数は５～３０であり、好ましくは５～１８、より好ましくは５～１３、特に好ましくは５～１０である。

このような複素環基としては、例えば、ピロール、ピリジン、イミダゾピリジン、ピラゾール、トリアゾール、テトラゾール、インドール、イソイン

ドール及びカルバゾール等の含窒素複素環化合物の残基；フラン、ベンゾフラン、イソベンゾフラン、ジベンゾフラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ベンゾオキサゾール、ベンゾナフトフラン及びジナフトフラン等の含酸素複素環化合物の残基；チオフェン、ベンゾチオフェン、ジベンゾチオフェン、チアゾール、チアジアゾール、ベンゾチアゾール、ベンゾナフトチオフェン及びジナフトチオフェン等の含硫黄複素環化合物の残基などが挙げられる。

[0067] Ｌ[1]～Ｌ[3]が表す、「これらの基が２～４個結合してなる基」は、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基及び置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の複素環基から選ばれる２～４個の基が結合してなる基である。なお、選ばれる２～４個の基が互いに結合して環構造を形成してもよい。また、当該芳香族炭化水素基及び複素環基から選ばれる基の結合順序に特に制限はない。

[0068] 以上の中でも、Ｌ[1]～Ｌ[3]としては、いずれも、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基が好ましい。該芳香族炭化水素基としてより好ましいものは、前述の通りである。

[0069] また、前記一般式（１［Ｉ］）中のａ～ｃは、それぞれ独立に、０又は１である。

前記一般式（１［Ｉ］）において、例えば、ａ＝０の場合、Ｌ[1]は存在しないことを意味し、Ａが直接［　］内の基と結合する。一方、ａ＝１の場合には、ＡはＬ[1]を介して［　］内の基と結合する。なお、ｂ、ｃについても同様である。

[0070] 前記一般式（１［Ｉ］）において、＊[4]及び＊[5]のうち、一方は＊[1]と結合し、他方はＡｒ[1]と結合し、＊[6]及び＊[7]のうち、一方は＊[2]と結合し、他方はＡｒ[3]と結合し、＊[8]及び＊[9]のうち、一方は＊[3]と結合し、他方はＡｒ[5]と結合する。

本発明の一態様の化合物としては、前記一般式（１［Ｉ］）において、＊[5]は＊[1]と結合し、＊[4]はＡｒ[1]と結合し、＊[7]は＊[2]と結合し、＊[6]はＡｒ[3]と結

合し、＊[9]は＊[3]と結合し、＊[8]はＡｒ[5]と結合した化合物が好ましい。

[0071] Ａｒ[1]～Ａｒ[6]は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０のヘテロアリール基である。

Ａｒ[1]～Ａｒ[6]が表すアリール基の環形成炭素数は６～３０であり、好ましくは６～１８、より好ましくは６～１５、さらに好ましくは６～１２、特に好ましくは６～１０である。

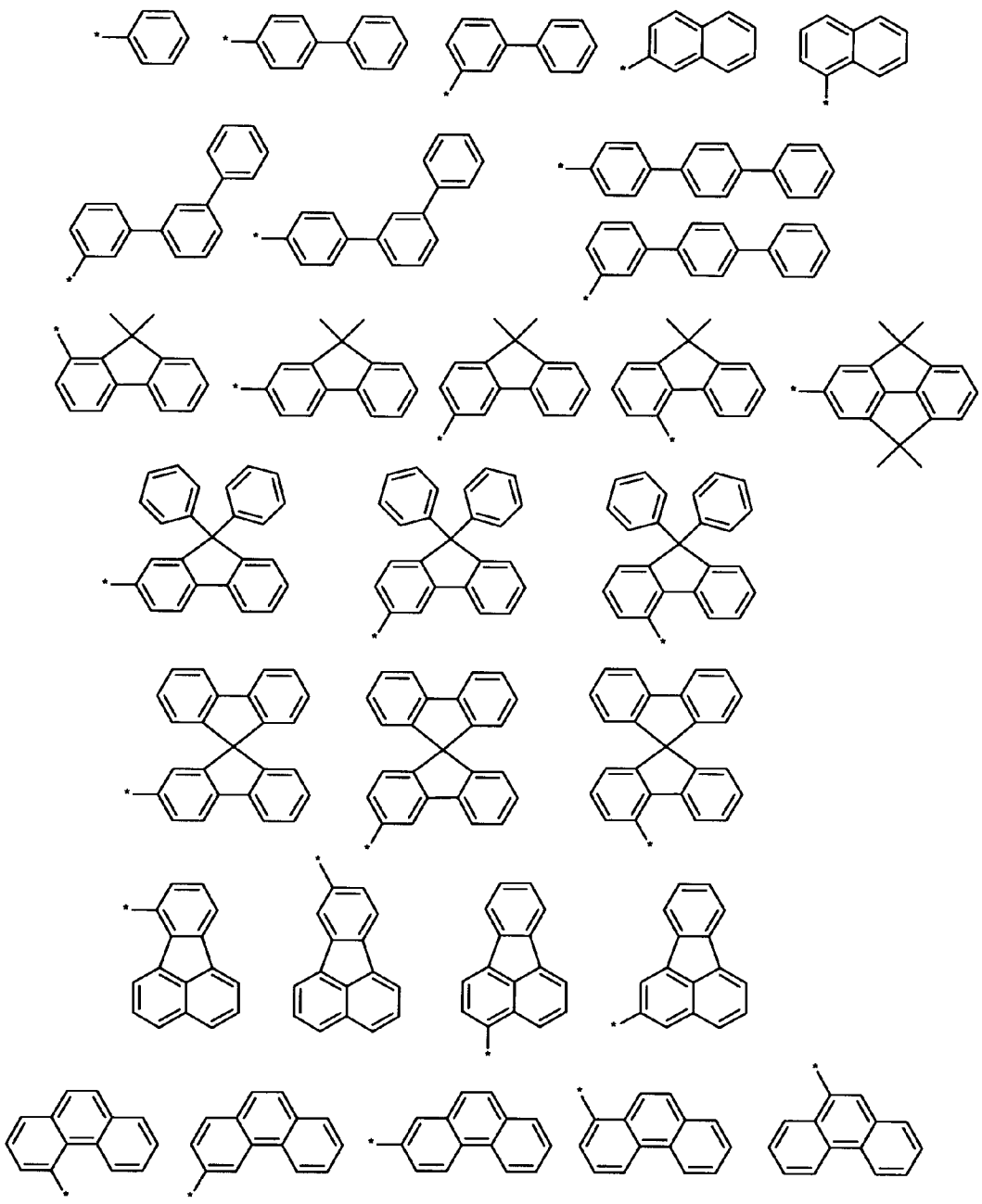
なお、該アリール基は、非縮合アリール基、縮合アリール基、及びこれらの組み合わせのいずれであってもよい。

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

[0072] Ａｒ[1]～Ａｒ[6]が表すアリール基としては、より具体的には、下記群から選択されるアリール基が好ましい。

[0073]

[化30]



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

[0074] Ａｒ[1]～Ａｒ[6]が表すヘテロアリール基の環形成原子数は、５～３０であり、好ましくは５～２０、より好ましくは５～１４、更に好ましくは５～１０

である。

該ヘテロアリール基は、少なくとも１個、好ましくは１～５個、より好ましくは１～３個、さらに好ましくは１～２個の同一又は異なるヘテロ原子を含む。

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

[0075] Ａｒ^{1}～Ａｒ^{6}としては、いずれも、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０のアリール基が好ましい。該アリール基としてより好ましいものは、前述の通りである。

[0076] 前記一般式（１［Ｉ］）において、Ｘ^{1}～Ｘ^{4}のうちの１つ及びＸ^{13}～Ｘ^{16}のうちの１つは、それぞれ＊^{10}及び＊^{11}に結合する炭素原子であり、それ以

外の６つは、それぞれ独立にＣ（Ｒ）又は窒素原子である。

Ｘ^{9}～Ｘ^{12}のうちの１つ及びＸ^{21}～Ｘ^{24}のうちの１つは、それぞれ＊^{12}及び＊^{13}に結合する炭素原子であり、それ以外の６つは、それぞれ独立にＣ（Ｒ）又は窒素原子である。

Ｘ^{25}～Ｘ^{28}のうちの１つ及びＸ^{37}～Ｘ^{40}のうちの１つは、それぞれ＊^{14}及び＊^{15}に結合する炭素原子であり、それ以外の６つは、それぞれ独立にＣ（Ｒ）又は窒素原子である。

Ｘ^{33}～Ｘ^{36}のうちの１つ及びＸ^{45}～Ｘ^{48}のうちの１つは、それぞれ＊^{16}及び＊^{17}に結合する炭素原子であり、それ以外の６つは、それぞれ独立にＣ（Ｒ）又は窒素原子である。

Ｘ^{49}～Ｘ^{52}のうちの１つ及びＸ^{61}～Ｘ^{64}のうちの１つは、それぞれ＊^{18}及び＊^{19}に結合する炭素原子であり、それ以外の６つは、それぞれ独立にＣ（Ｒ）又は窒素原子である。

Ｘ^{57}～Ｘ^{60}のうちの１つ及びＸ^{69}～Ｘ^{72}のうちの１つは、それぞれ＊^{20}及び＊^{21}に結合する炭素原子であり、それ以外の６つは、それぞれ独立にＣ（Ｒ）又は窒素原子である。

上記規定の意味するところについて、「Ｘ^{1}～Ｘ^{4}及びＸ^{13}～Ｘ^{16}」に関する規定を例に説明すると、仮に、Ｘ^{1}が＊^{10}に結合する炭素原子であり、Ｘ^{13}が＊^{11}に結合する炭素原子である場合を考える。この場合、Ｘ^{1}及びＸ^{13}は、炭素原子となり当該２つの炭素原子は互いに直接結合して、２つの（アザ）カルバゾリル基を結合する。また、それ以外のＸ^{2}～Ｘ^{4}及びＸ^{14}～Ｘ^{16}の６つは、それぞれ独立にＣ（Ｒ）又は窒素原子となる。他の規定についても、上記と同じ事項を意味する。

[0077] つまり、前記一般式（１［Ｉ］）において、＊^{10}、＊^{12}、＊^{14}、＊^{16}、＊^{18}、及び＊^{20}は、それぞれ所定の（アザ）カルバゾリル基の１位、２位、３位、又は４位（Ｘ^{1}～Ｘ^{4}のうちの１つ、Ｘ^{9}～Ｘ^{12}のうちの１つ、Ｘ^{25}～Ｘ^{28}のうちの１つ、Ｘ^{49}～Ｘ^{52}のうちの１つ、Ｘ^{57}～Ｘ^{60}のうちの１つ、Ｘ^{57}～Ｘ^{60}のうちの１つ）の炭素原子と結合する。

一方、前記一般式（１［Ｉ］）において、＊^{10}、＊^{12}、＊^{14}、＊^{16}、＊^{18}、及び＊^{20}は、それぞれ所定の（アザ）カルバゾリル基の５位、６位、７位、又は８位（Ｘ^{13}～Ｘ^{16}のうちの１つ、Ｘ^{21}～Ｘ^{24}のうちの１つ、Ｘ^{37}～Ｘ^{40}のうちの１つ、Ｘ^{45}～Ｘ^{48}のうちの１つ、Ｘ^{61}～Ｘ６４のうちの１つ、Ｘ^{69}～Ｘ^{72}のうちの１つ）の炭素原子と結合する。

その結果、＊^{10}－＊^{11}、＊^{12}－＊^{13}、＊^{14}－＊^{15}、＊^{16}－＊^{17}、＊^{18}－＊^{19}、及び＊^{20}－＊^{21}により、２つの（アザ）カルバゾリル基が結合される。

[0078] また、前記一般式（１［Ｉ］）において、Ｘ^{5}～Ｘ^{8}、Ｘ^{17}～Ｘ^{20}、Ｘ^{29}～Ｘ^{32}、Ｘ^{41}～Ｘ^{44}、Ｘ^{53}～Ｘ^{56}、及びＸ^{65}～Ｘ^{68}は、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子である。

つまり、前記一般式（１［Ｉ］）において、（アザ）カルバゾリル基同士の結合に関与しないＸ^{1}～Ｘ^{72}は、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子であり、本発明の一態様においては、いずれもＣ（Ｒ）であることが好ましい。

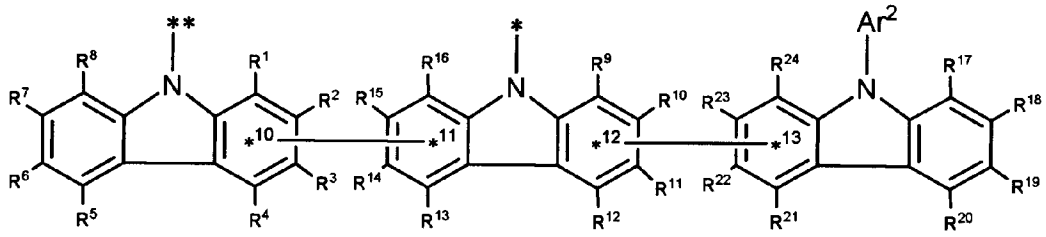
ここで、Ｒは水素原子又は置換基であって、複数存在するＲは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲから選ばれる２つは、互いに結合して環を形成していてもよい。

ただし、本発明の一態様の化合物において、複数存在するＲから選ばれる２つが互いに結合して環を形成していることがないことが好ましい。

[0079] 本発明の一態様の化合物において、前記一般式（１［Ｉ］）中の［　］内の基が、下記一般式（Ｄ１）で表される基であることが好ましい。

[0080]

[化31]



(D1)

[0081] 一般式（Ｄ１）中、Ｒ[1]～Ｒ[24]は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であって、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、Ｒ[1]～Ｒ[24]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。

＊及び＊＊のうち、一方は前記一般式（１［Ｉ］）中の＊[1]～＊[3]のいずれかと結合し、他方はＡｒ[1]と結合する。Ａｒ[1]は、前記一般式（１［Ｉ］）に関する記載と同じである。

[0082] ＊[10]－＊[11]は、Ｒ[1]～Ｒ[4]のうちの１つ及びＲ[13]～Ｒ[16]のうちの１つがそれぞれ脱離し、当該基と結合していた炭素原子同士の結合を示し、＊[12]－＊[13]は、Ｒ[9]～Ｒ[12]のうちの１つ及びＲ[21]～Ｒ[24]のうちの１つがそれぞれ脱離し、当該基と結合していた炭素原子同士の結合を示す。

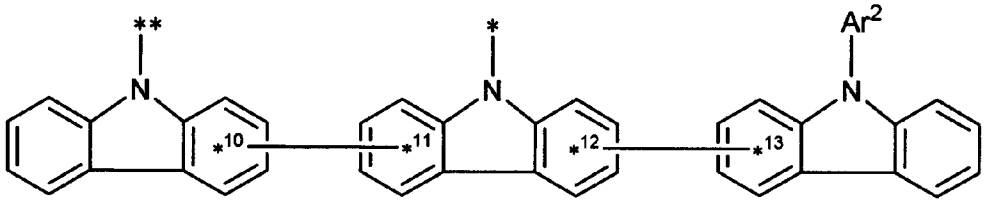
つまり、＊[10]及び＊[12]は、一つのカルバゾリル基の１位、２位、３位、又は４位の炭素原子と結合し、＊[11]及び＊[13]は、別のカルバゾリル基の５位、６位、７位、又は８位の炭素原子と結合し、＊[10]－＊[11]及び＊[12]－＊[13]により、２つのカルバゾリル基が結合される。

[0083] なお、前記一般式（Ｄ１）中のＲ[1]～Ｒ[24]から選ばれる２つが互いに結合して環を形成する場合には、Ｒ[5]とＲ[6]、Ｒ[6]とＲ[7]、Ｒ[7]とＲ[8]、Ｒ[17]とＲ[18]、Ｒ[18]とＲ[19]、及びＲ[19]とＲ[20]から選ばれる１組以上で、互いに結合して環を形成する構成が好ましい。

ただし、本発明の一態様の化合物において、前記一般式（Ｄ１）中のＲ[1]～Ｒ[24]から選ばれる２つが互いに結合して環を形成していることがないことが

好ましく、前記一般式（１［Ｉ］）中の［　］内の基が、下記一般式（Ｄ２）で表される基であることがより好ましい。

[0084] [化32]

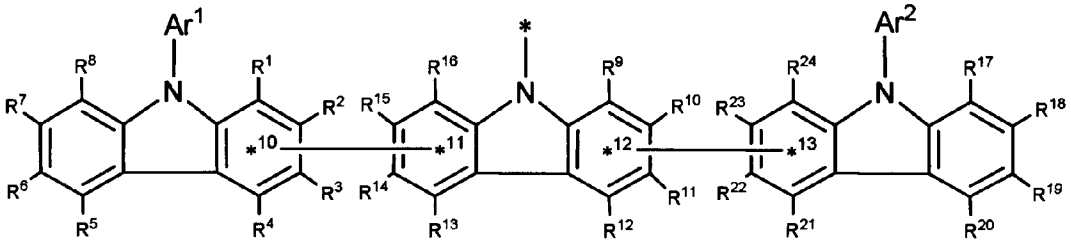


(D2)

（一般式（Ｄ２）中、＊^{10}－＊^{11}、及び＊^{12}－＊^{13}は、ベンゼン環中の水素原子がそれぞれ脱離した炭素原子同士の結合を示す。＊及び＊＊は、前記一般式（Ｄ１）に関する記載と同じである。）

[0085] また、本発明の一態様の化合物において、前記一般式（１［Ｉ］）中の［　］内の基が、前記一般式（Ｄ１）で表される基の中でも、下記一般式（Ｄ３）で表される基が好ましい。

[0086] [化33]

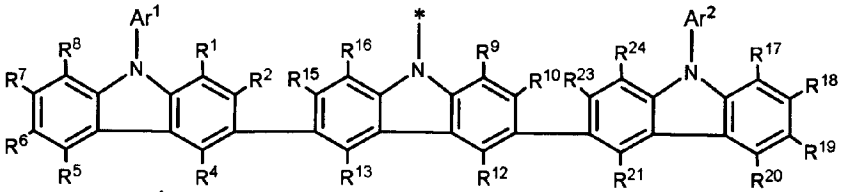


(D3)

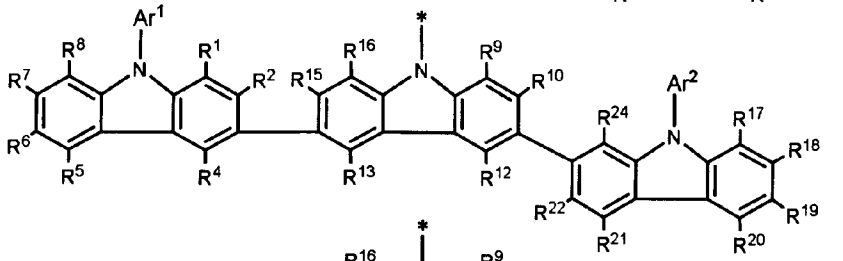
（一般式（Ｄ３）中、Ｒ^{1}～Ｒ^{24}、Ａｒ^{1}、＊^{10}－＊^{11}、及び＊^{12}－＊^{13}は、前記一般式（Ｄ１）に関する記載と同じである。＊は、前記一般式（１［Ｉ］）中の＊^{1}～＊^{3}のいずれかと結合する。）

[0087] また、前記一般式（Ｄ３）で表される基の中でも、下記一般式（Ｄ３－ｉ）～（Ｄ３－ｖｉ）のいずれかで表される基がより好ましい。

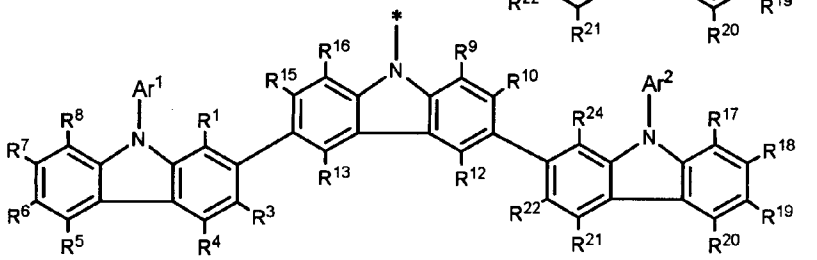
[化34]



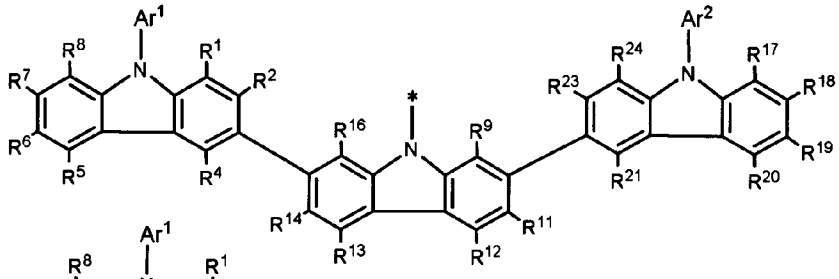
(D3-i)



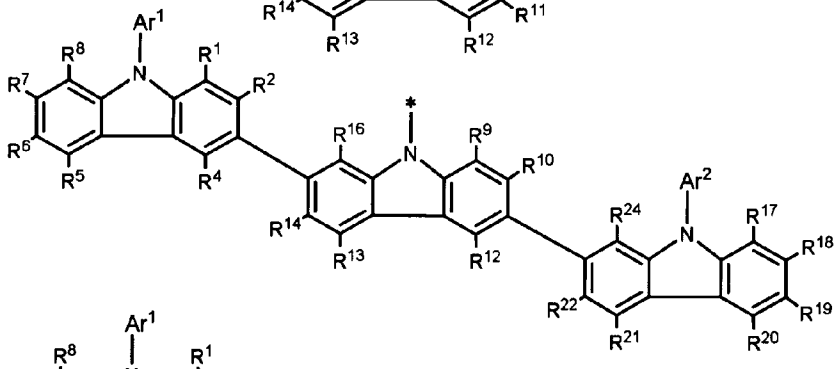
(D3-ii)



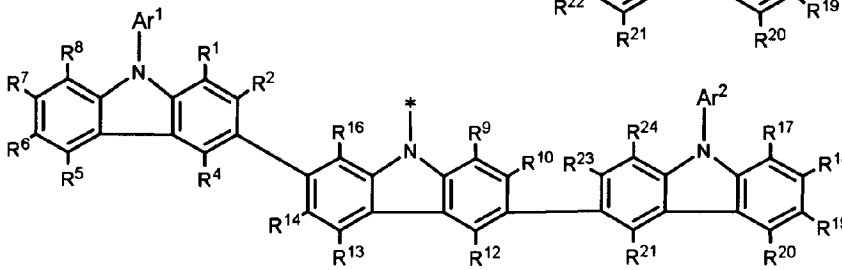
(D3-iii)



(D3-iv)



(D3-v)

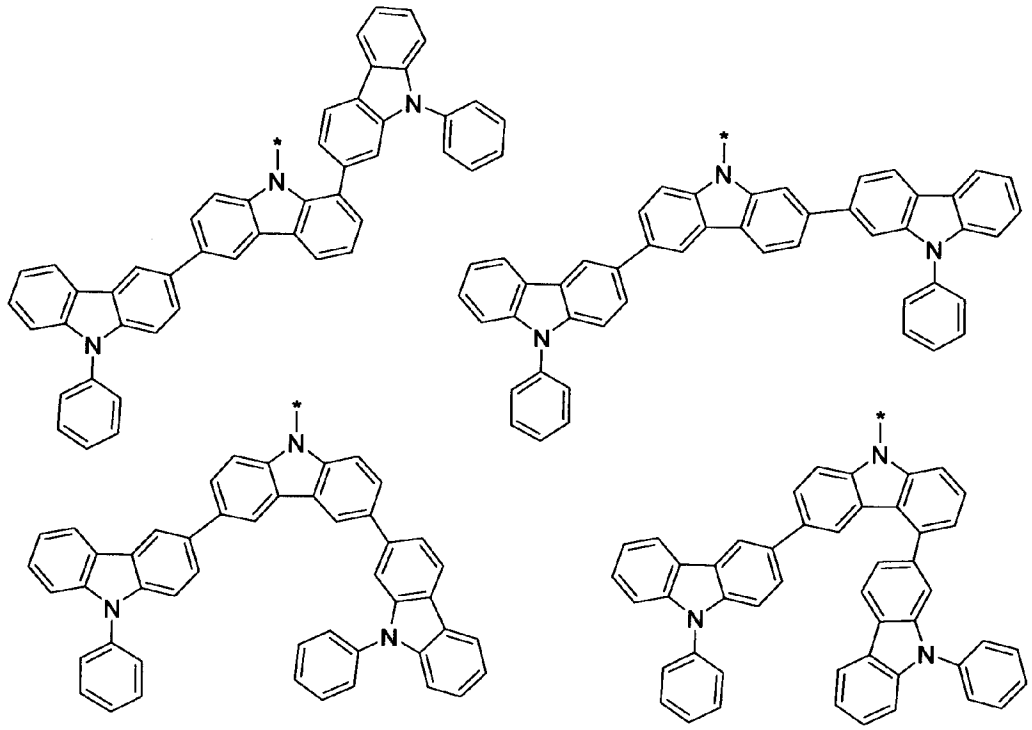


(D3-vi)

（一般式（Ｄ３－ｉ）～（Ｄ３－vi）中、Ｒ[1]～Ｒ[24]、Ａｒ[1]、＊[10]－＊[11]、＊[12]－＊[13]、及び＊は、前記一般式（Ｄ３）に関する記載と同じである。）

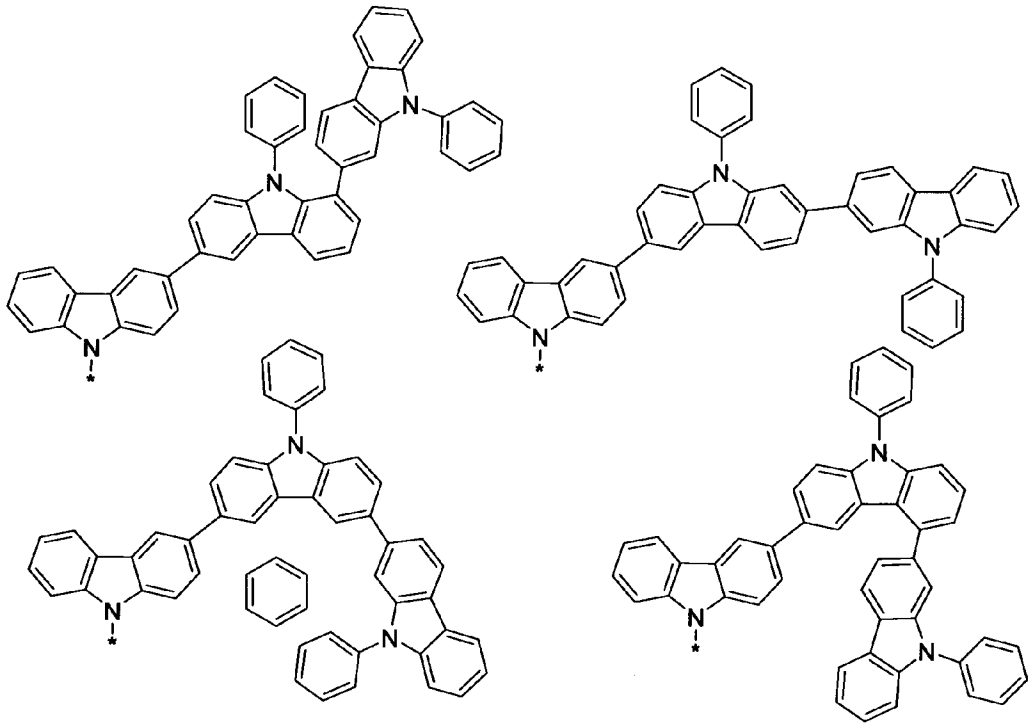
[0088] 前記一般式（１［Ｉ］）中の［ ］内の基として、より具体的には、下記群から選択される基が好ましい。なお、下記の基において、＊は、前記一般式（１［Ｉ］）中の＊[1]～＊[3]のいずれかと結合位置を示す。加えて、下記の基において、水素原子と結合している炭素原子は、当該水素原子に代えて、上述の置換基と結合してもよい。

[0089] [化35]

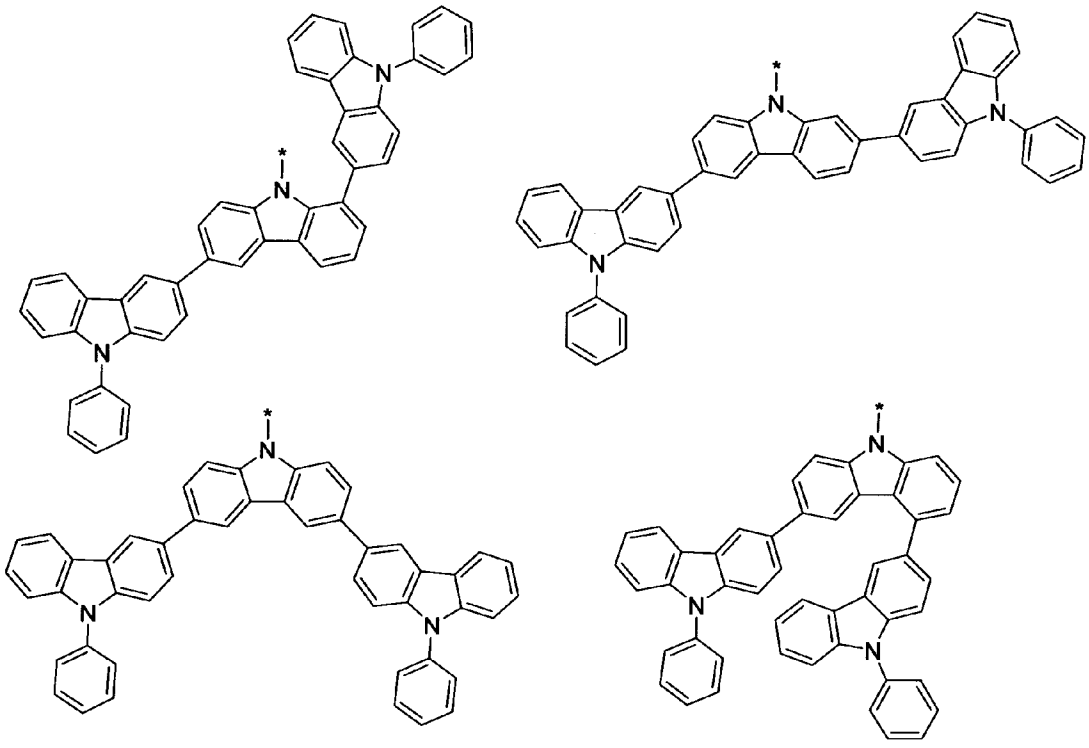


[0090]

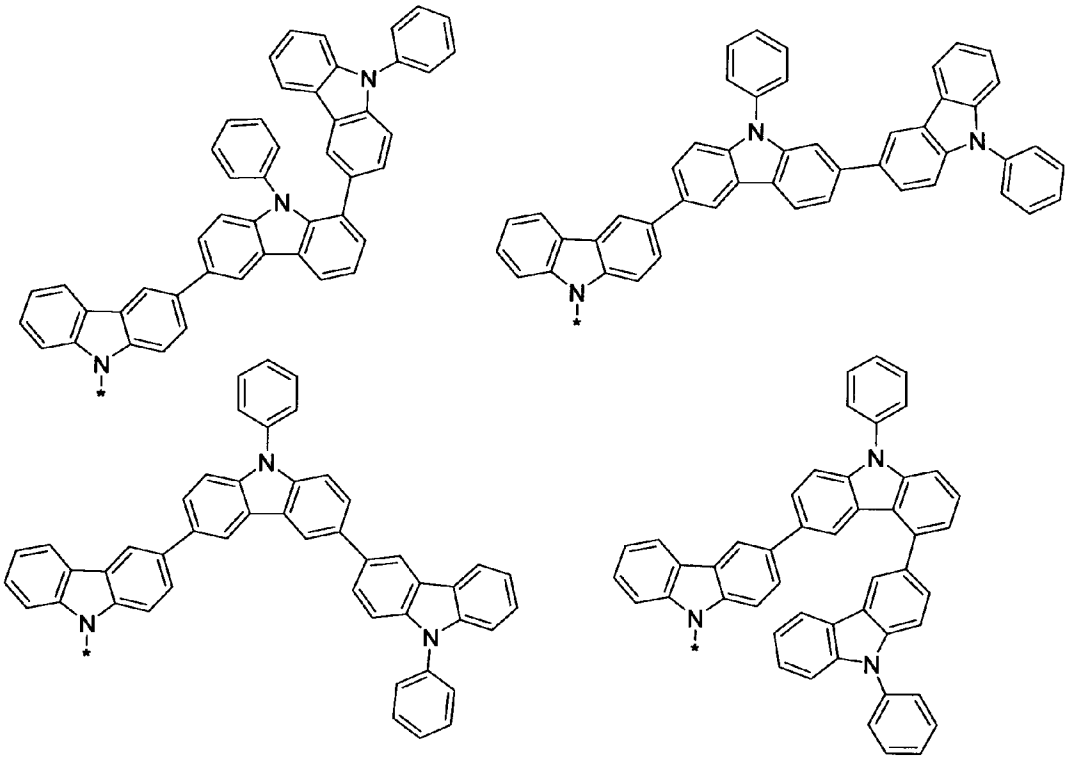
[化36]



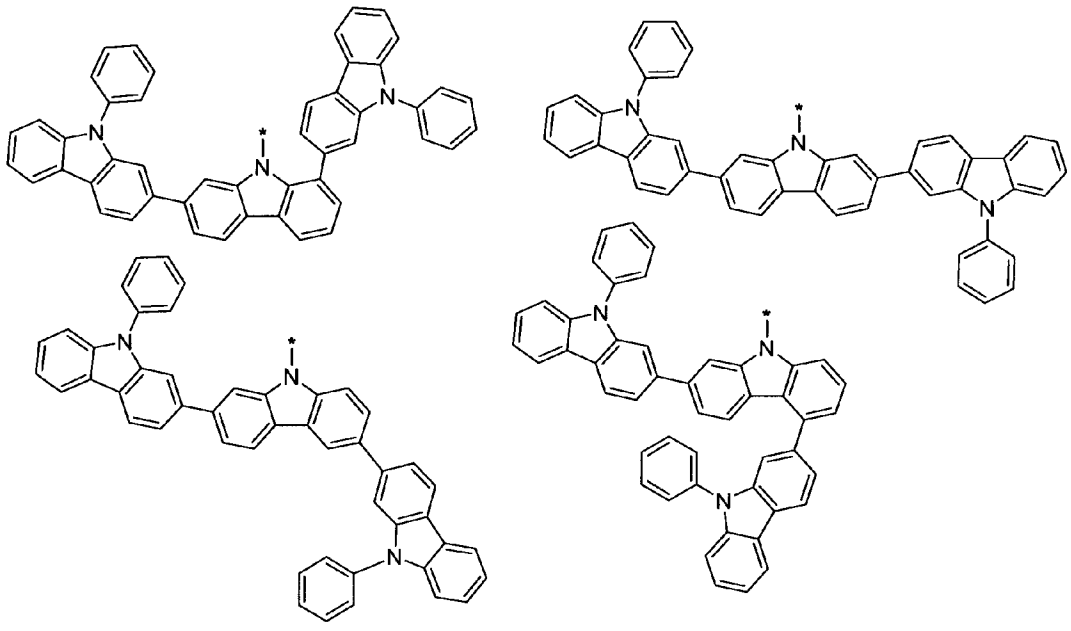
[0091] [化37]



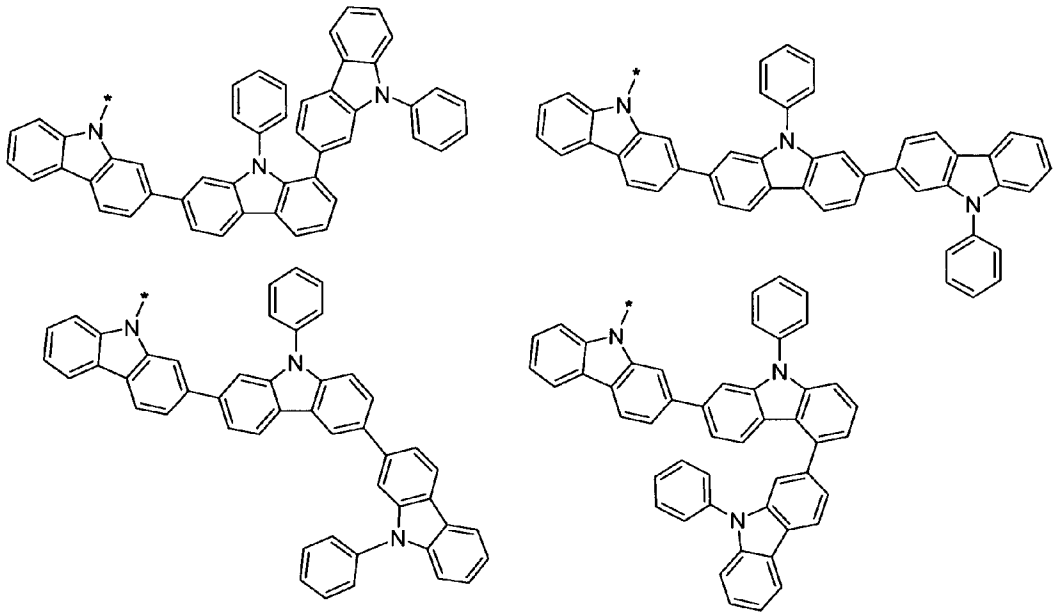
[0092] [化38]



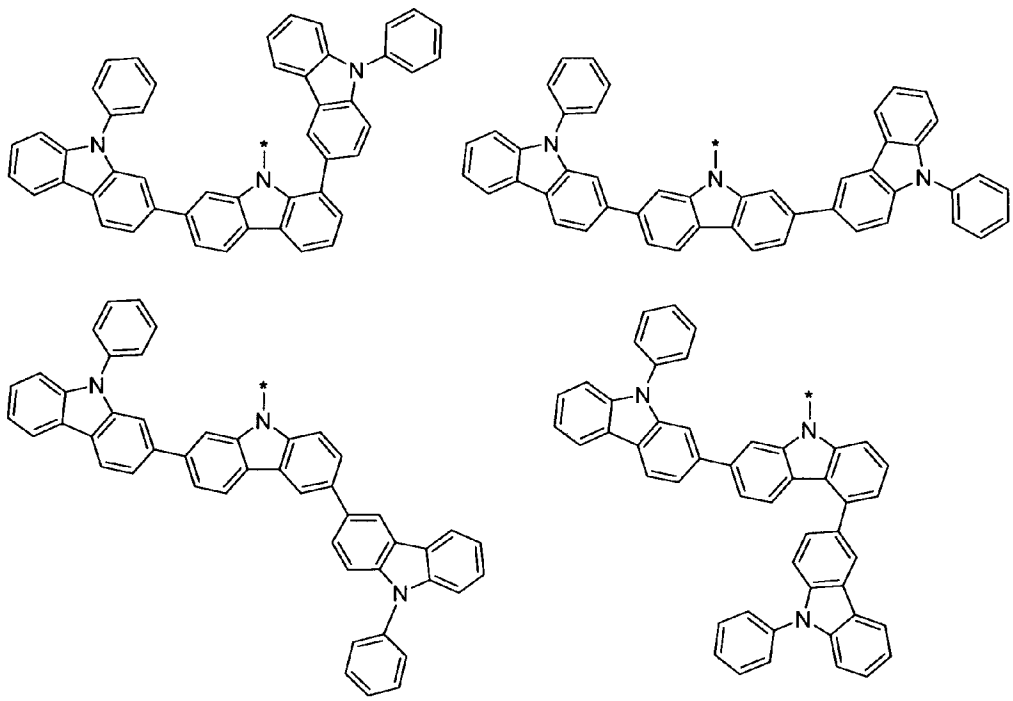
[0093] [化39]



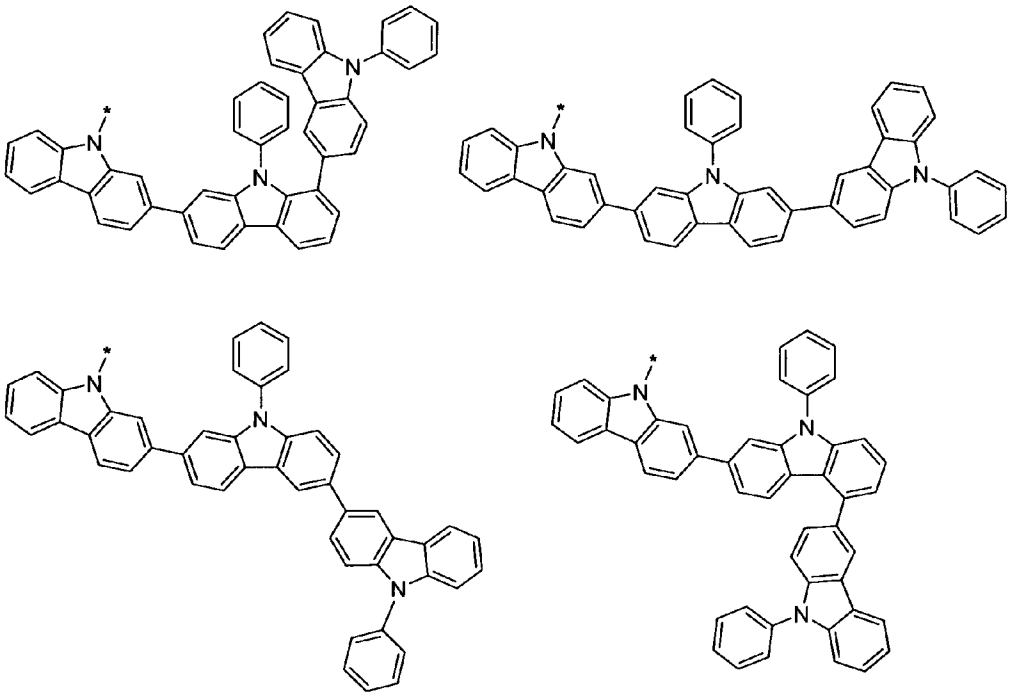
[0094] [化40]



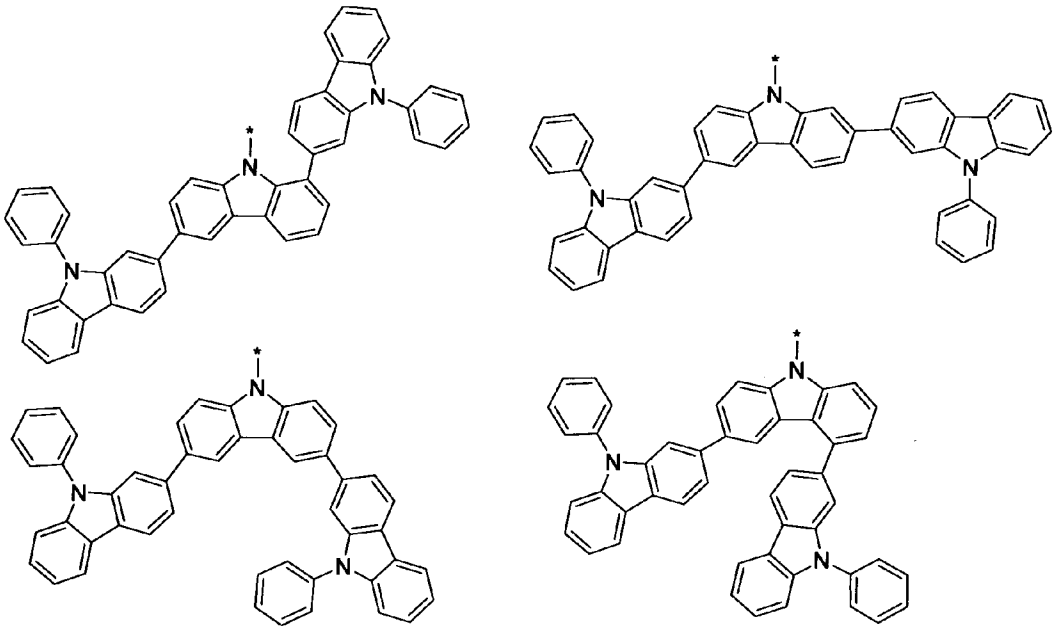
[0095] [化41]



[0096] [化42]

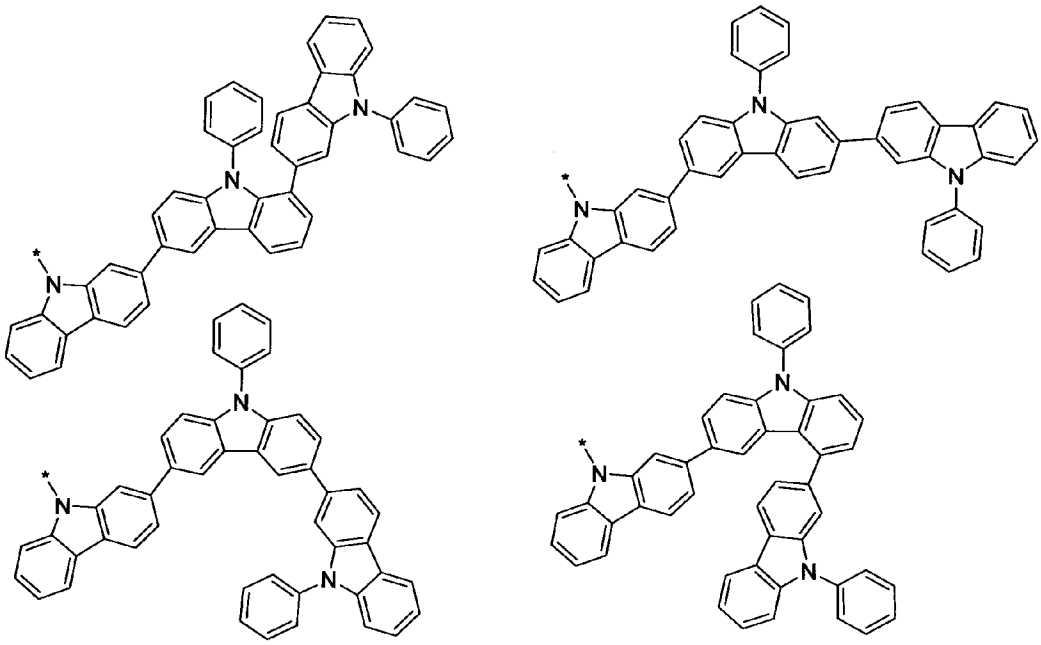


[0097] [化43]

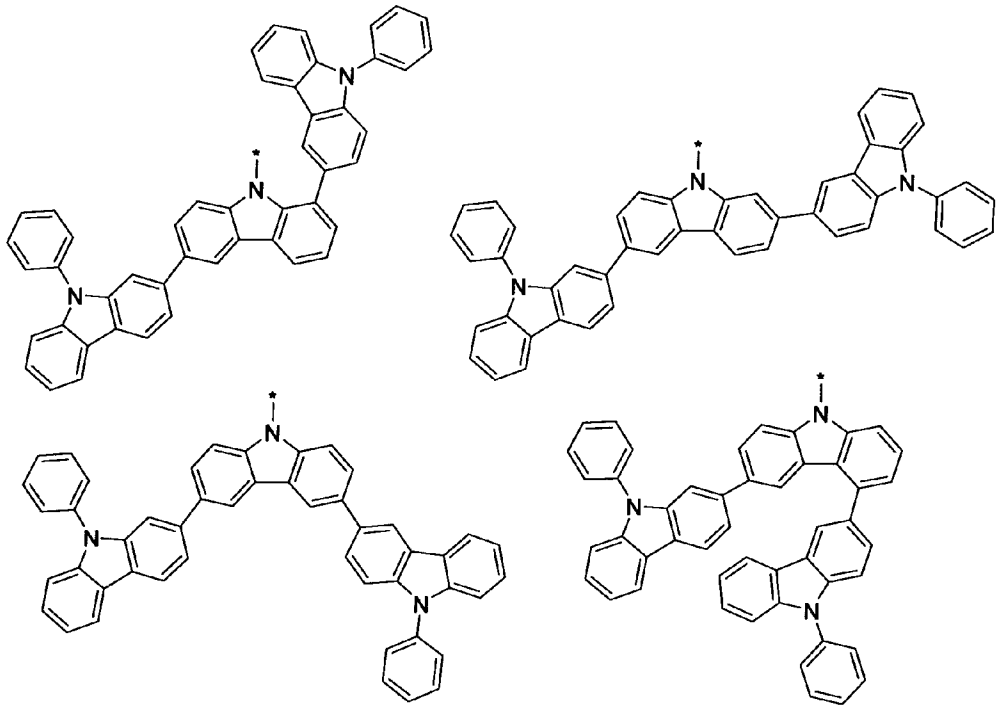


[0098]

[化44]

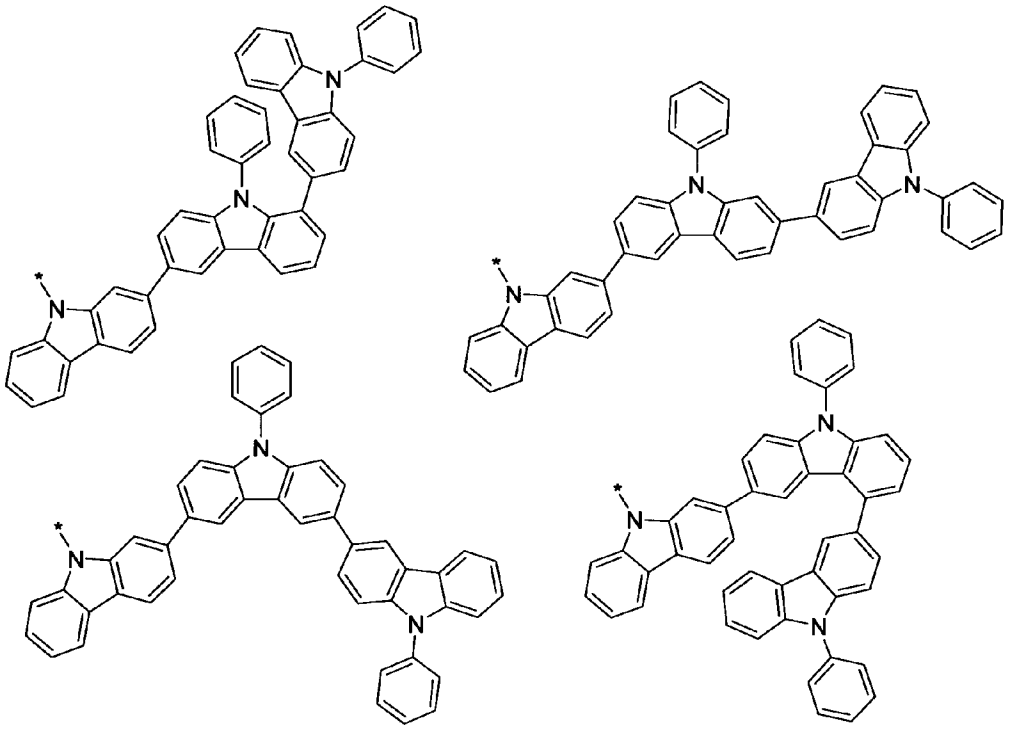


[0099] [化45]

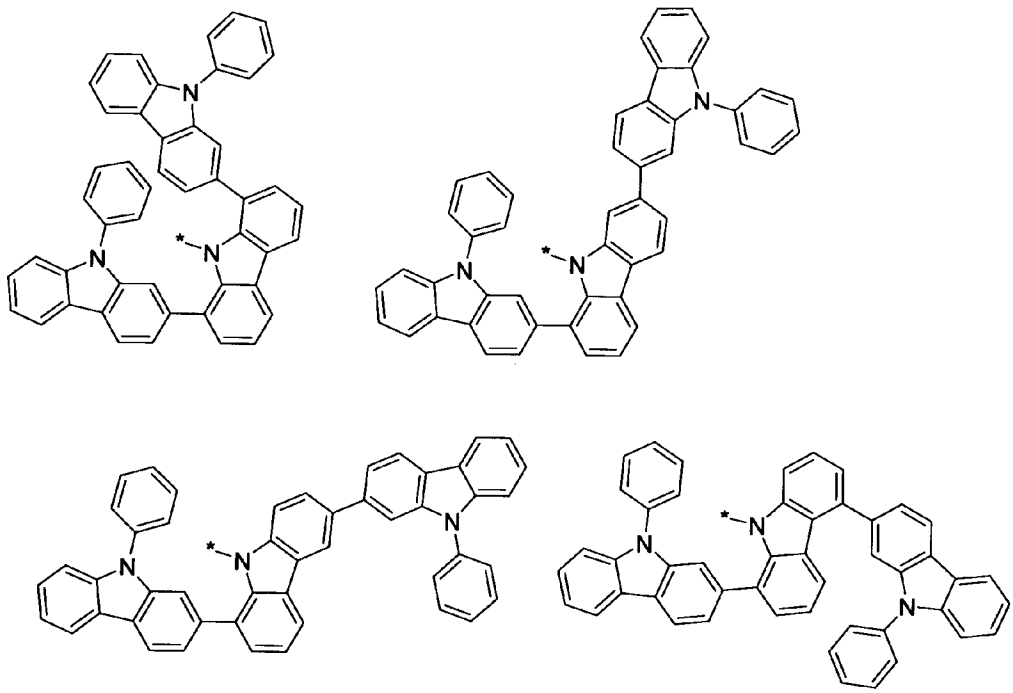


[0100]

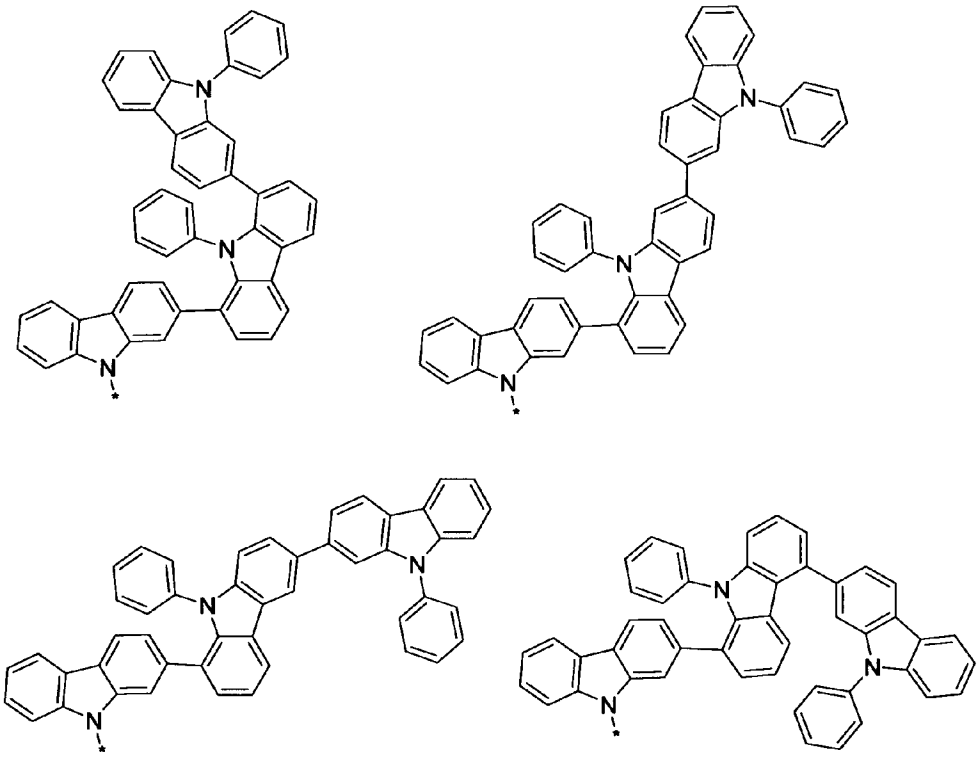
[化46]



[0101] [化47]

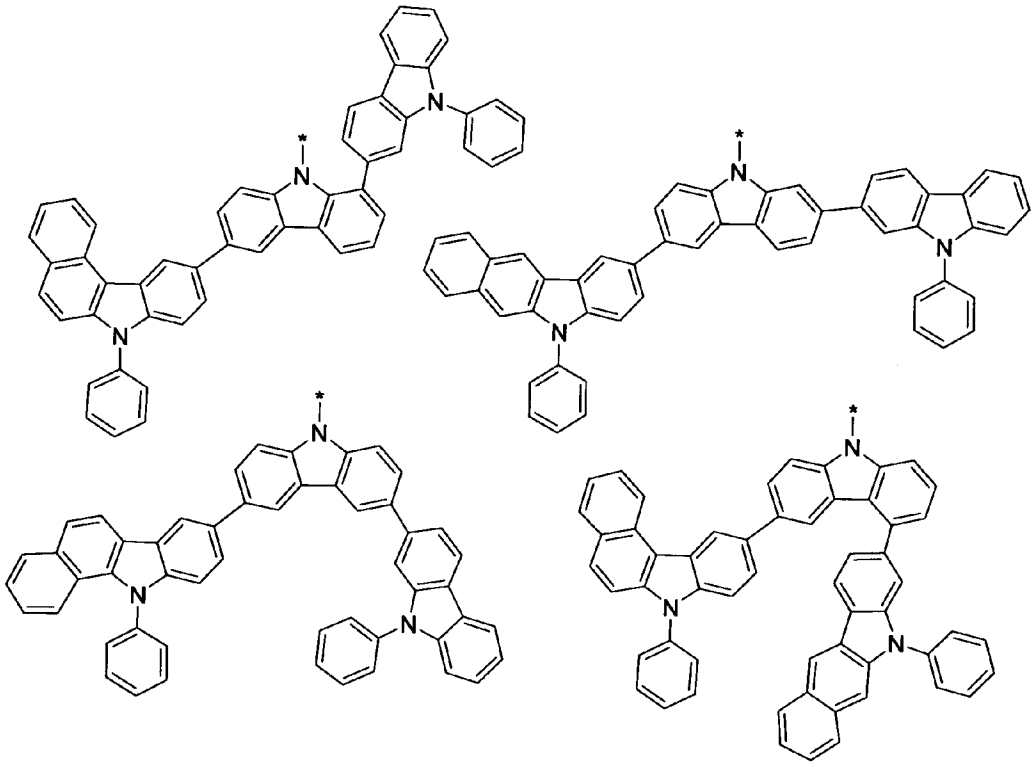


[0102] [化48]



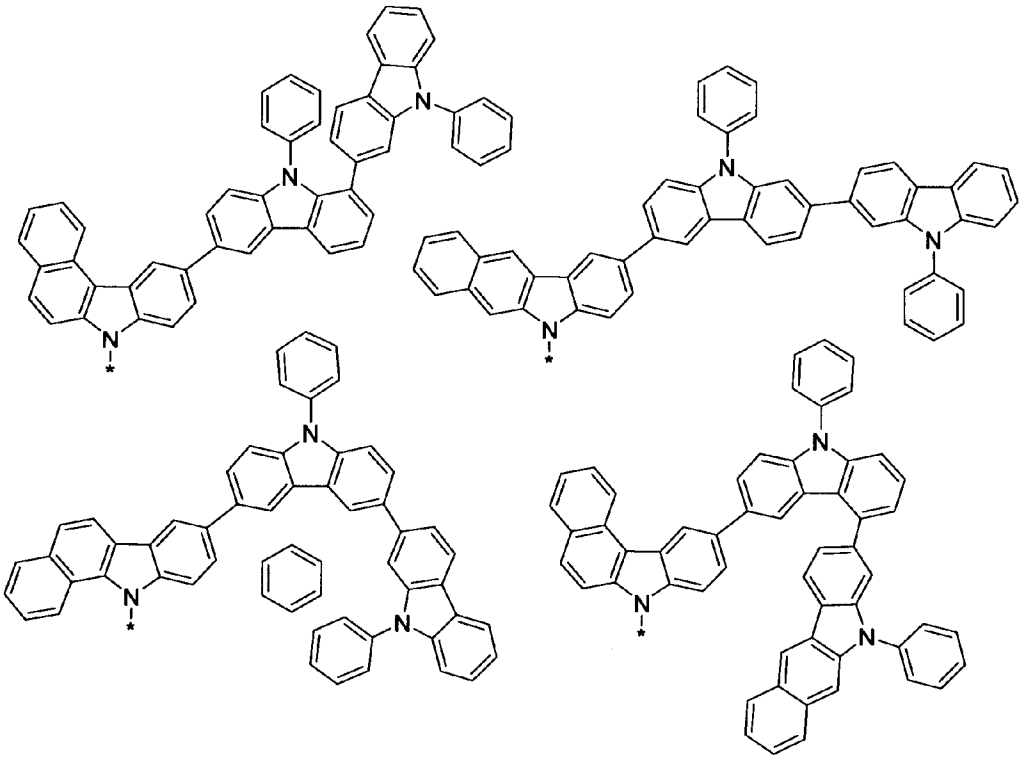
[0103]

[化49]



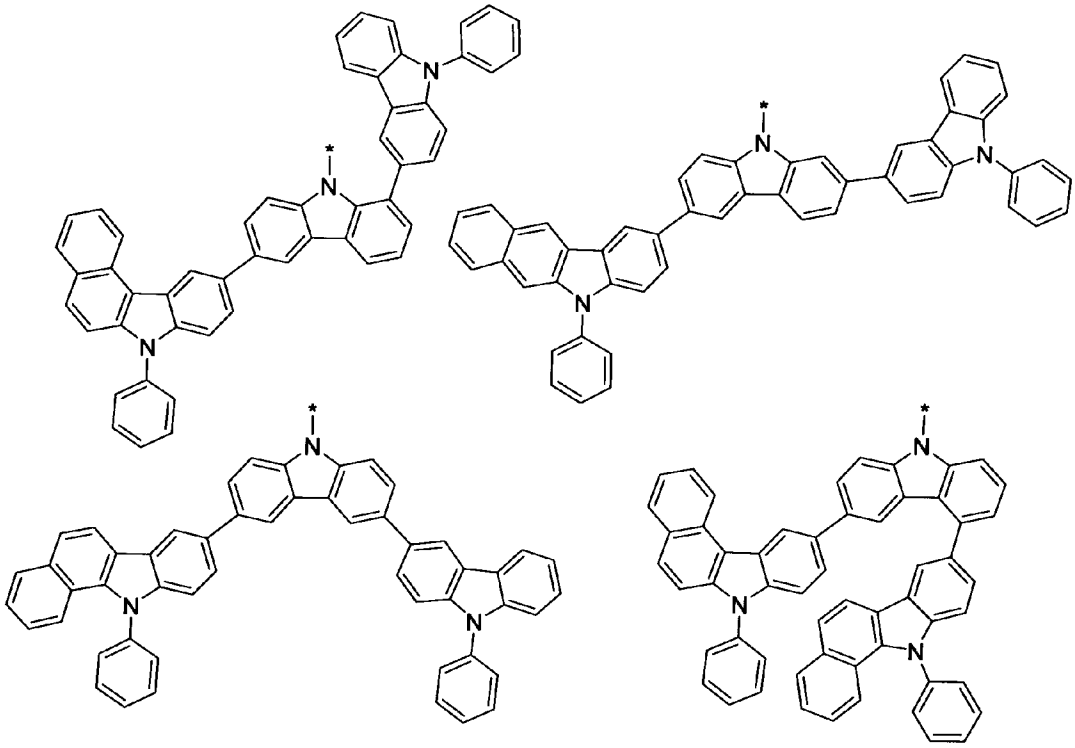
[0104]

[化50]



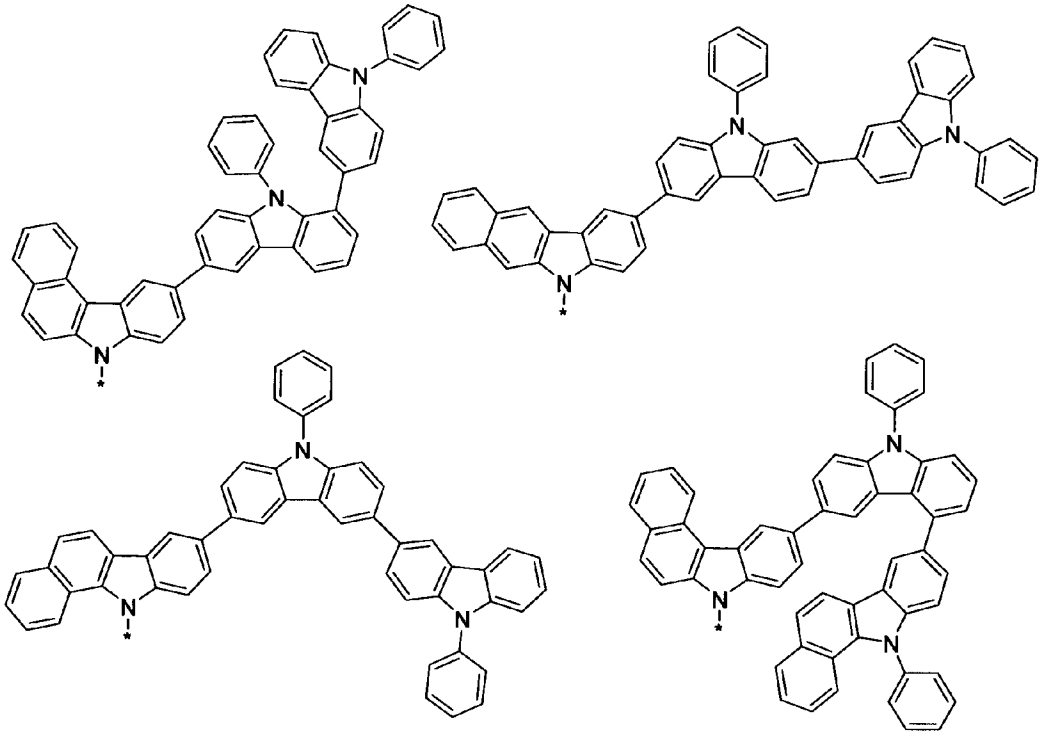
[0105]

[化51]



[0106]

[化52]



[0107] 前記一般式（１［Ｉ］）中、ｐ～ｒは、前述の通り、それぞれ独立に０～３の整数であり、ｐ＋ｑ＋ｒ＝３となる。ｐ～ｒは、特に制限されるものではないが、ｐ～ｒのうちの２つが同時に０ではないことが好ましい。

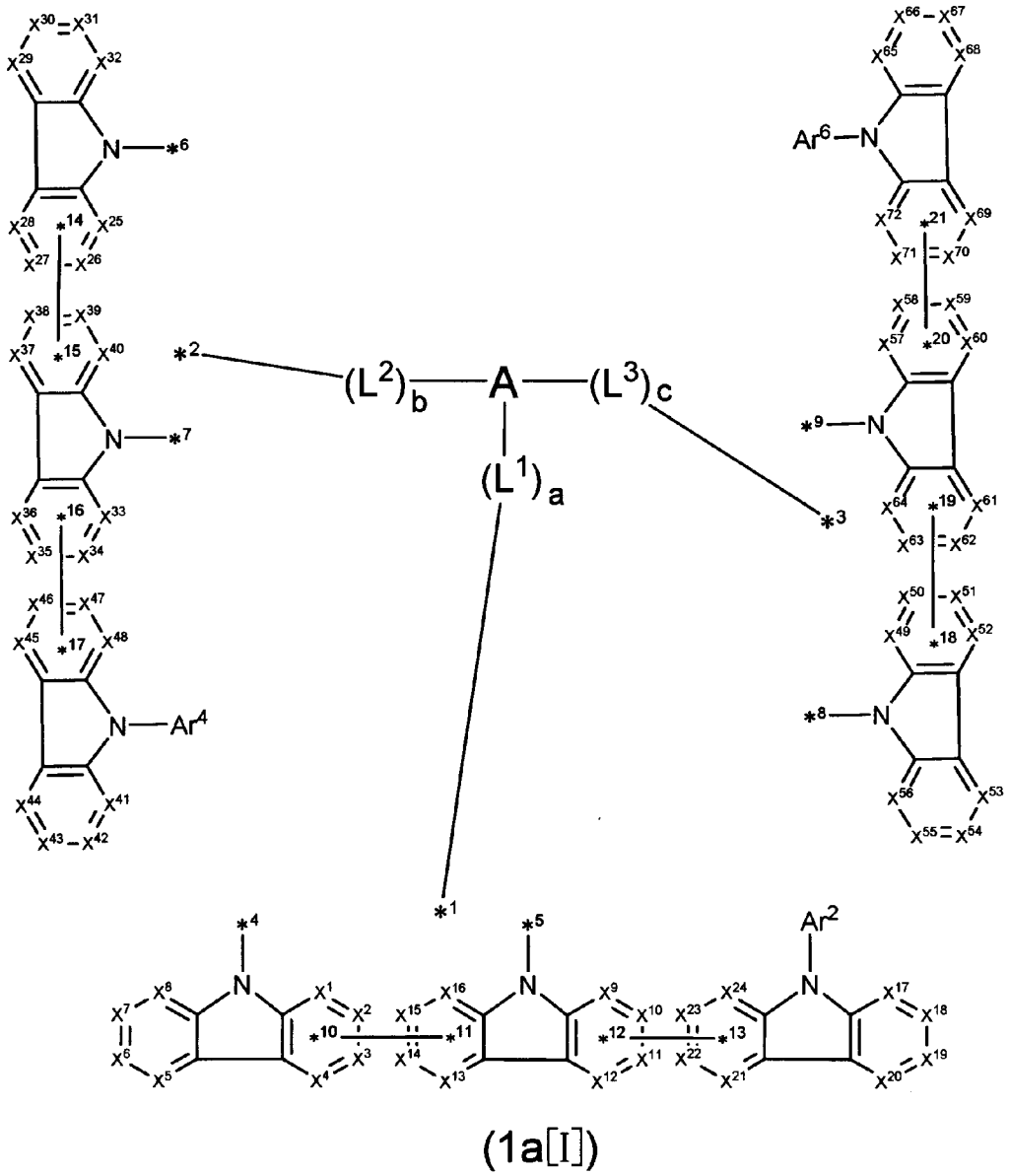
なお、ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。

[0108] （本発明の一態様の化合物）

本発明の一態様の化合物として、下記一般式（１ａ［Ｉ］）で表される化合物（以下、「化合物（１ａ［Ｉ］）」ともいう）が好ましい。

[0109]

[化53]

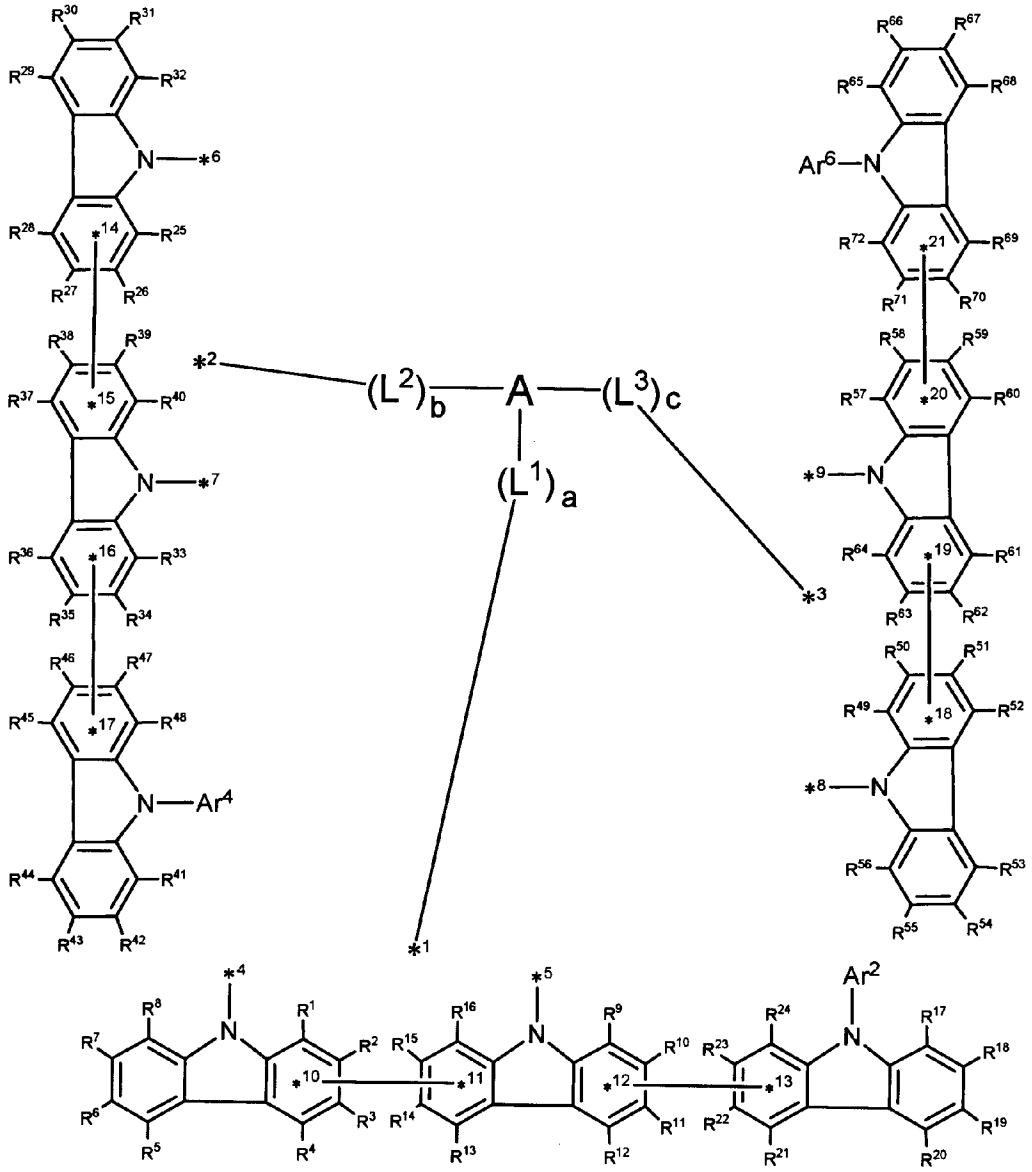


(1a[I])

[0110] 前記一般式（１ａ）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｃ、Ｘ[1]～Ｘ[72]、＊[1]～＊[21]、Ａｒ[2]、Ａｒ[4]、及びＡｒ[6]は、前記一般式（１［Ｉ］）に関する記載と同じである。

また、本発明の一態様である化合物（１ａ［Ｉ］）の中でも、下記一般式（１ａ－ｉ［Ｉ］）で表される化合物（以下、「化合物（１ａ－ｉ［Ｉ］）」ともいう）がより好ましい。

[0111] [化54]



(1a-i[I])

[0112] 前記一般式（１ａ－ｉ［Ｉ］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｃ、＊[1]～＊[9]、Ａｒ[2]、Ａｒ[4]、及びＡｒ[6]は、前記一般式（１［Ｉ］）に関する記載と同じである。Ｒ[1]～Ｒ[72]は、前記一般式（１［Ｉ］）に関する記載のＲと同じである。つまり、Ｒ[1]～Ｒ[72]は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であって、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、Ｒ[1]～Ｒ[72]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。

[0113] また、＊^{10}－＊^{11}は、Ｒ^{1}～Ｒ^{4}のうちの１つ及びＲ^{13}～Ｒ^{16}のうちの１つがそれぞれ脱離し、当該基と結合していた炭素原子同士の結合を示す。

＊^{12}－＊^{13}は、Ｒ^{9}～Ｒ^{12}のうちの１つ及びＲ^{21}～Ｒ^{24}のうちの１つがそれぞれ脱離し、当該基と結合していた炭素原子同士の結合を示す。

＊^{14}－＊^{15}は、Ｒ^{25}～Ｒ^{28}のうちの１つ及びＲ^{37}～Ｒ^{40}のうちの１つがそれぞれ脱離し、当該基と結合していた炭素原子同士の結合を示す。

＊^{16}－＊^{17}は、Ｒ^{33}～Ｒ^{36}のうちの１つ及びＲ^{45}～Ｒ^{48}のうちの１つがそれぞれ脱離し、当該基と結合していた炭素原子同士の結合を示す。

＊^{18}－＊^{19}は、Ｒ^{49}～Ｒ^{52}のうちの１つ及びＲ^{61}～Ｒ^{64}のうちの１つがそれぞれ脱離し、当該基と結合していた炭素原子同士の結合を示す。

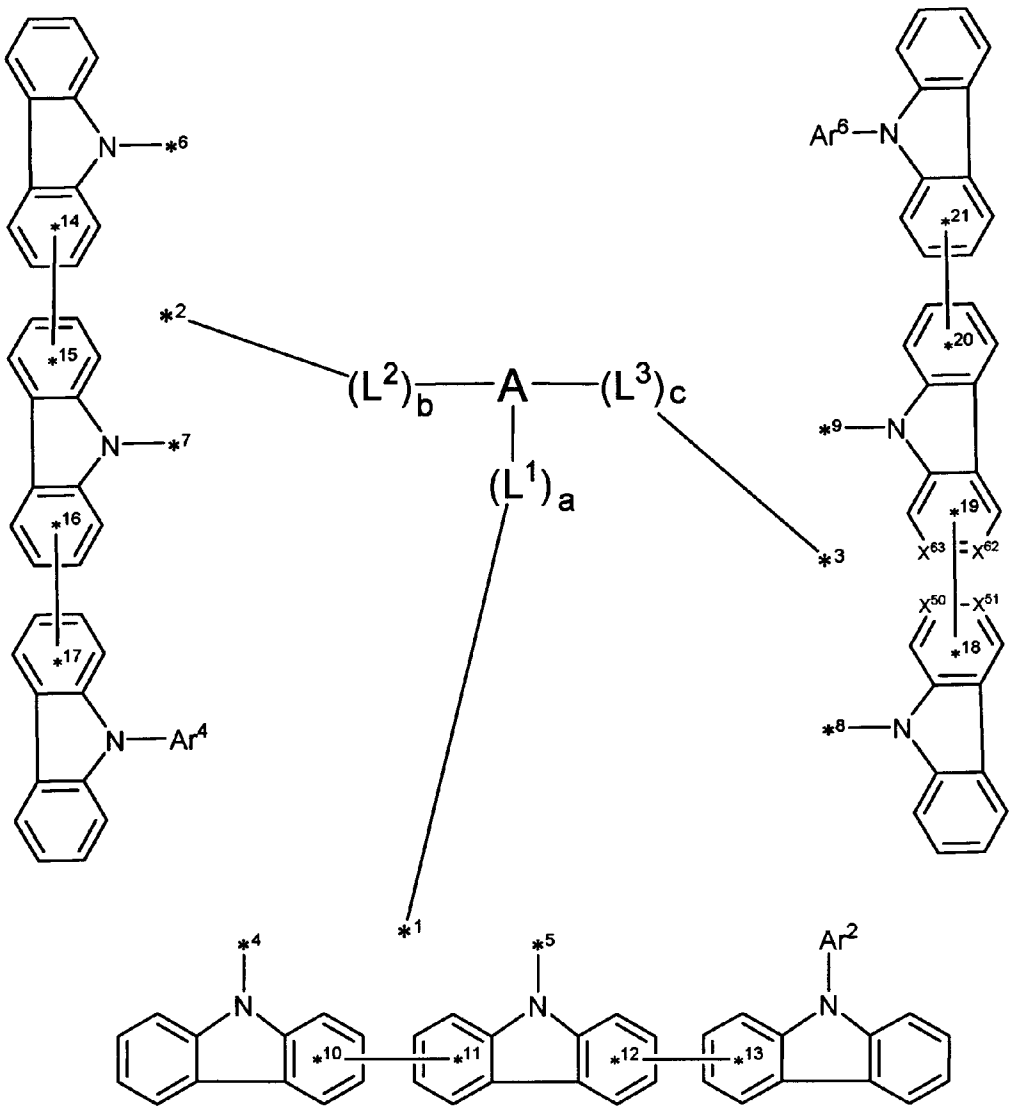
＊^{20}－＊^{21}は、Ｒ^{57}～Ｒ^{60}のうちの１つ及びＲ^{69}～Ｒ^{72}のうちの１つがそれぞれ脱離し、当該基と結合していた炭素原子同士の結合を示す。

つまり、＊^{10}、＊^{12}、＊^{14}、＊^{16}、＊^{18}及び＊^{20}は、一つのカルバゾリル基の１位、２位、３位、又は４位の炭素原子と結合し、＊^{11}、＊^{13}、＊^{15}、＊^{17}、＊^{19}、及び＊^{21}は、別のカルバゾリル基の５位、６位、７位、又は８位の炭素原子と結合し、＊^{10}－＊^{11}、＊^{12}－＊^{13}、＊^{14}－＊^{15}、＊^{16}－＊^{17}、＊^{18}－＊^{19}、及び＊^{20}－＊^{21}により、２つのカルバゾリル基が結合される。

[0114] なお、本発明の一態様である化合物（１ａ－ｉ［Ｉ］）としては、Ｒ^{1}～Ｒ^{72}から選ばれる２つが互いに結合して環を形成することがない化合物であることが好ましく、下記一般式（１ａ－ｖｉ［Ｉ］）で表される化合物であることがより好ましい。

[0115]

[化55]



(1a-vi[I])

[0116] 一般式（１ａ－ｖｉ［Ｉ］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｃ、＊[1]～＊[9]、Ａｒ[2]、Ａｒ[4]、及びＡｒ[6]は、前記一般式（１［Ｉ］）に関する記載と同じである。

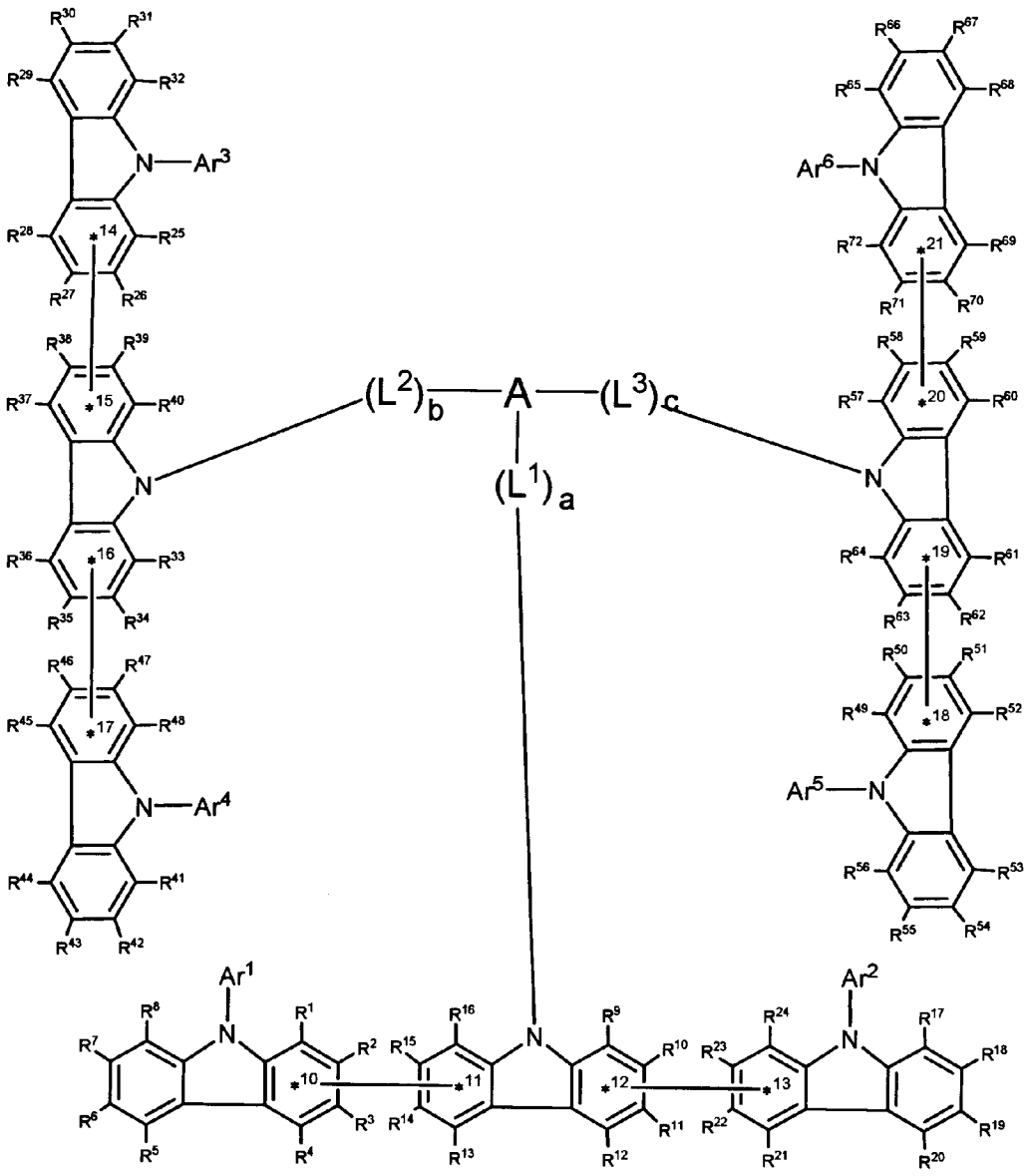
＊[10]－＊[11]、＊[12]－＊[13]、＊[14]－＊[15]、＊[16]－＊[17]、＊[18]－＊[19]、＊[20]－＊[21]は、ベンゼン環中の水素原子がそれぞれ脱離した炭素原子同士の結合を示す。

つまり、＊[10]、＊[12]、＊[14]、＊[16]、＊[18]、及び＊[20]は、一つのカルバゾ

リル基の１位、２位、３位、又は４位の炭素原子と結合し、＊[11]、＊[13]、＊[15]、＊[17]、＊[19]、及び＊[21]は、別のカルバゾリル基の５位、６位、７位、又は８位の炭素原子と結合し、＊[10]－＊[11]、＊[12]－＊[13]、＊[14]－＊[15]、＊[16]－＊[17]、＊[18]－＊[19]、及び＊[20]－＊[21]により、２つのカルバゾリル基が結合される。

[0117] また、本発明の一態様である化合物（１ａ－ｉ［Ｉ］）に含まれる別の態様として、下記一般式（１ａ－ii［Ｉ］）で表される化合物（以下、「化合物（１ａ－ii［Ｉ］）」ともいう）がより好ましい。

[化56]



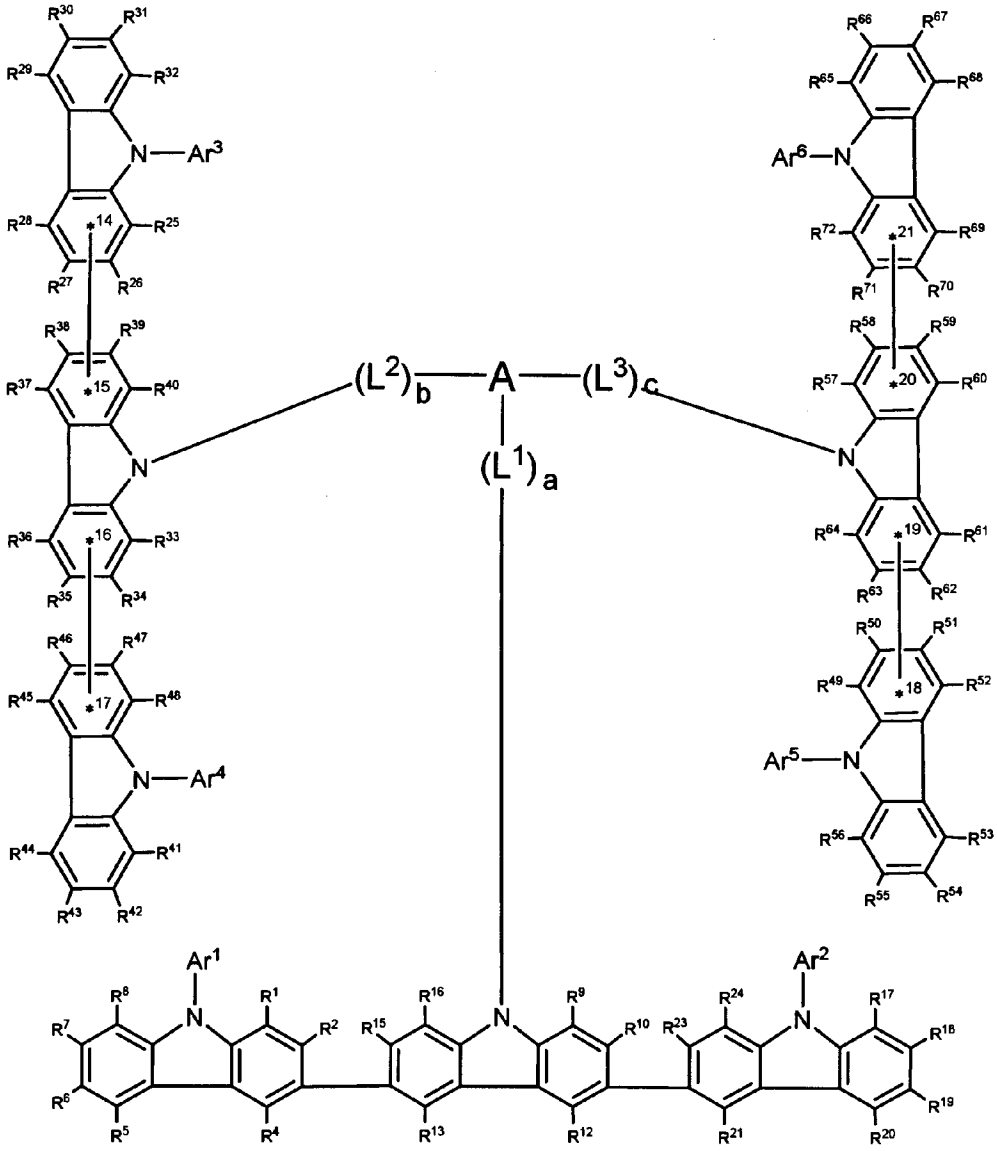
(1a-ii[I])

[0118] 一般式（１ａ－ｉｉ［Ｉ］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｃ、Ａｒ[1]～Ａｒ[6]は、前記一般式（１［Ｉ］）に関する記載と同じである。Ｒ[1]～Ｒ[72]、及び＊[10]～＊[21]は、前記一般式（１ａ－ｉ［Ｉ］）に関する記載と同じである。

さらに、本発明の一態様である化合物（１ａ－ｉｉ［Ｉ］）の中でも、下記一般式（１ａ－ｉｉ－１［Ｉ］）～（１ａ－ｉｉ－６［Ｉ］）のいずれかで表される化合物（以下、「化合物（１ａ－ｉｉ－１［Ｉ］）～（１ａ－ｉｉ－６［Ｉ

]））」ともいう）がより好ましい。

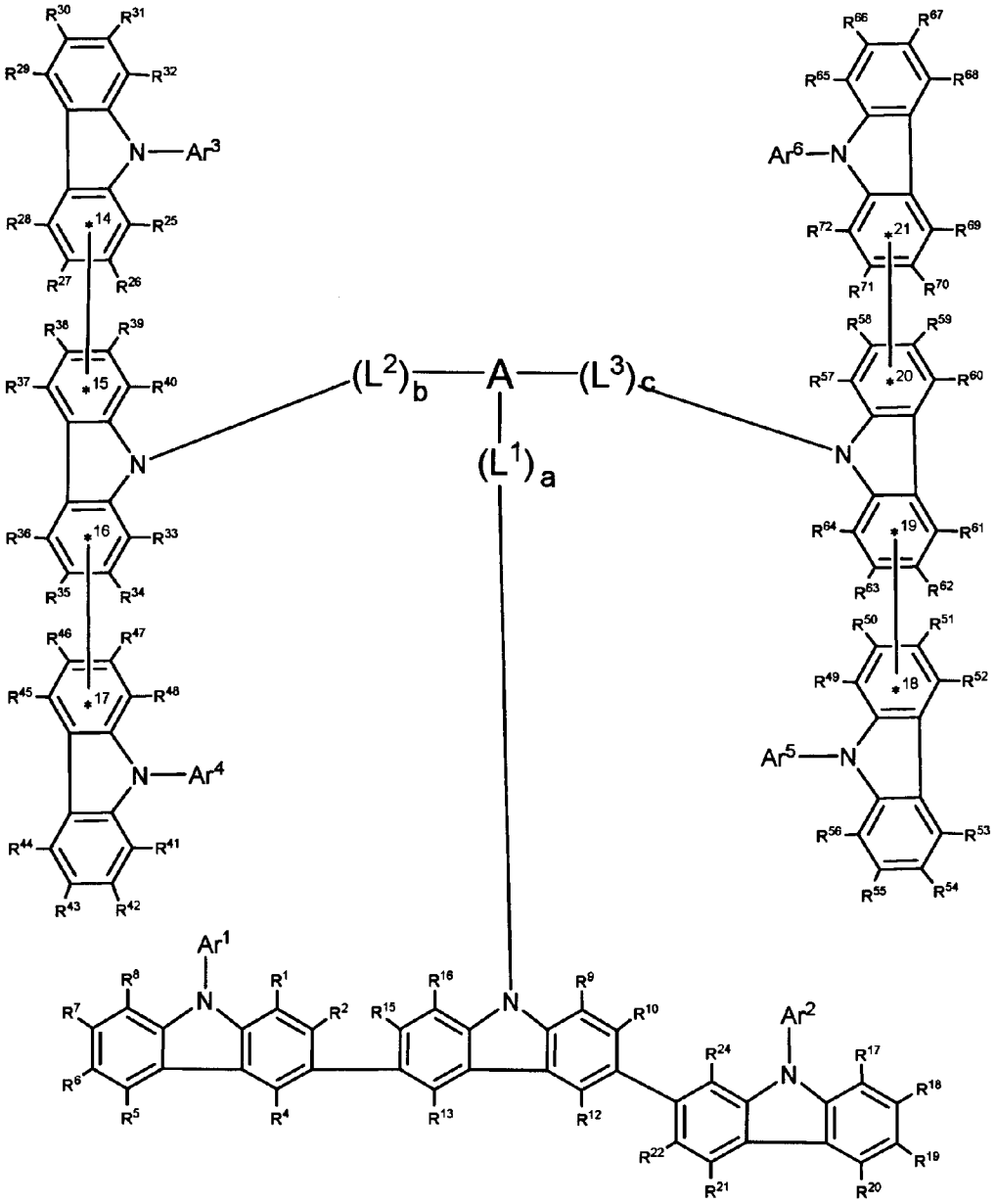
[0119] [化57]



(1a-ii-1[I])

[0120]

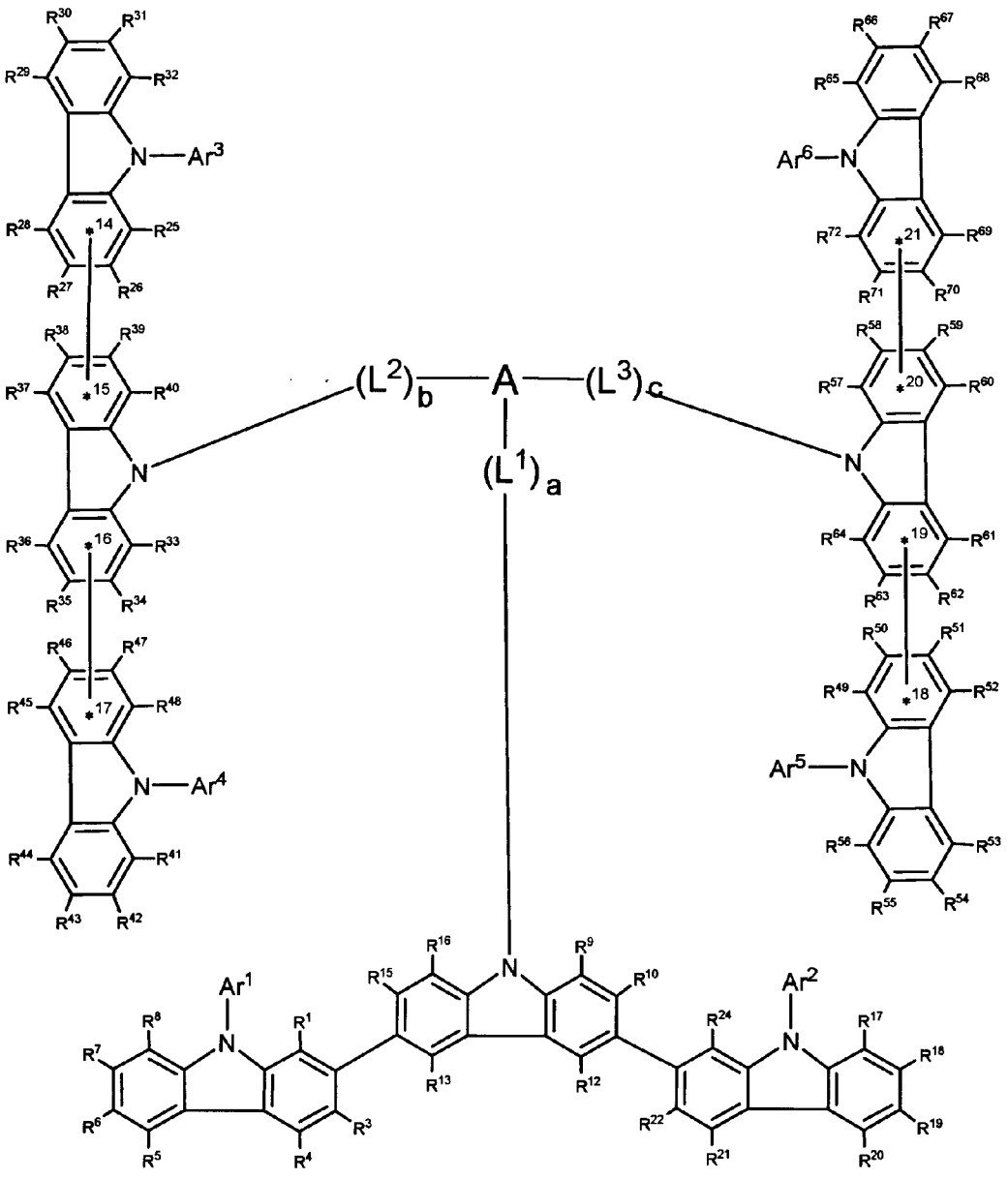
[化58]



(1a-ii-2[I])

[0121]

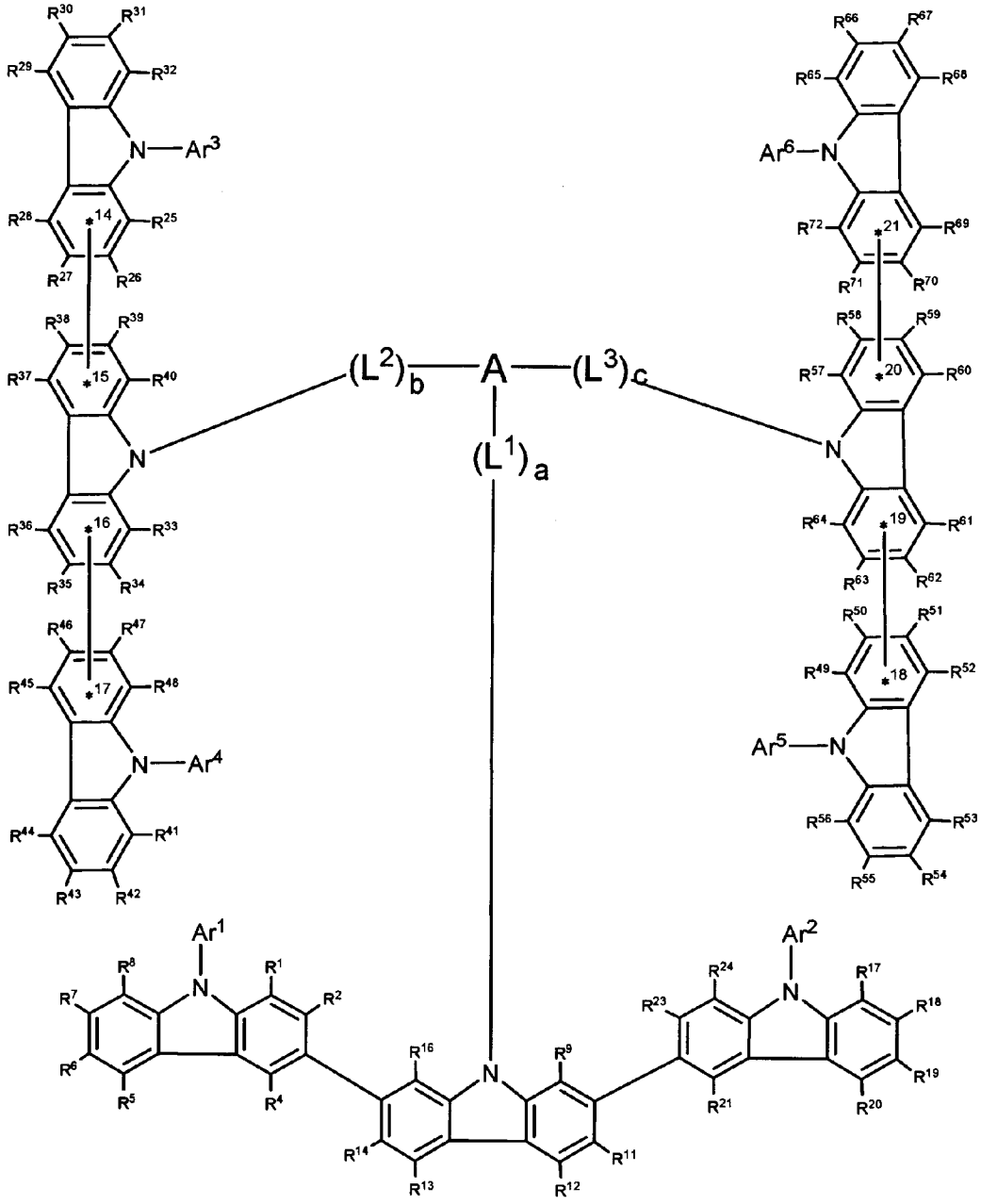
[化59]



(1a-ii-3[I])

[0122]

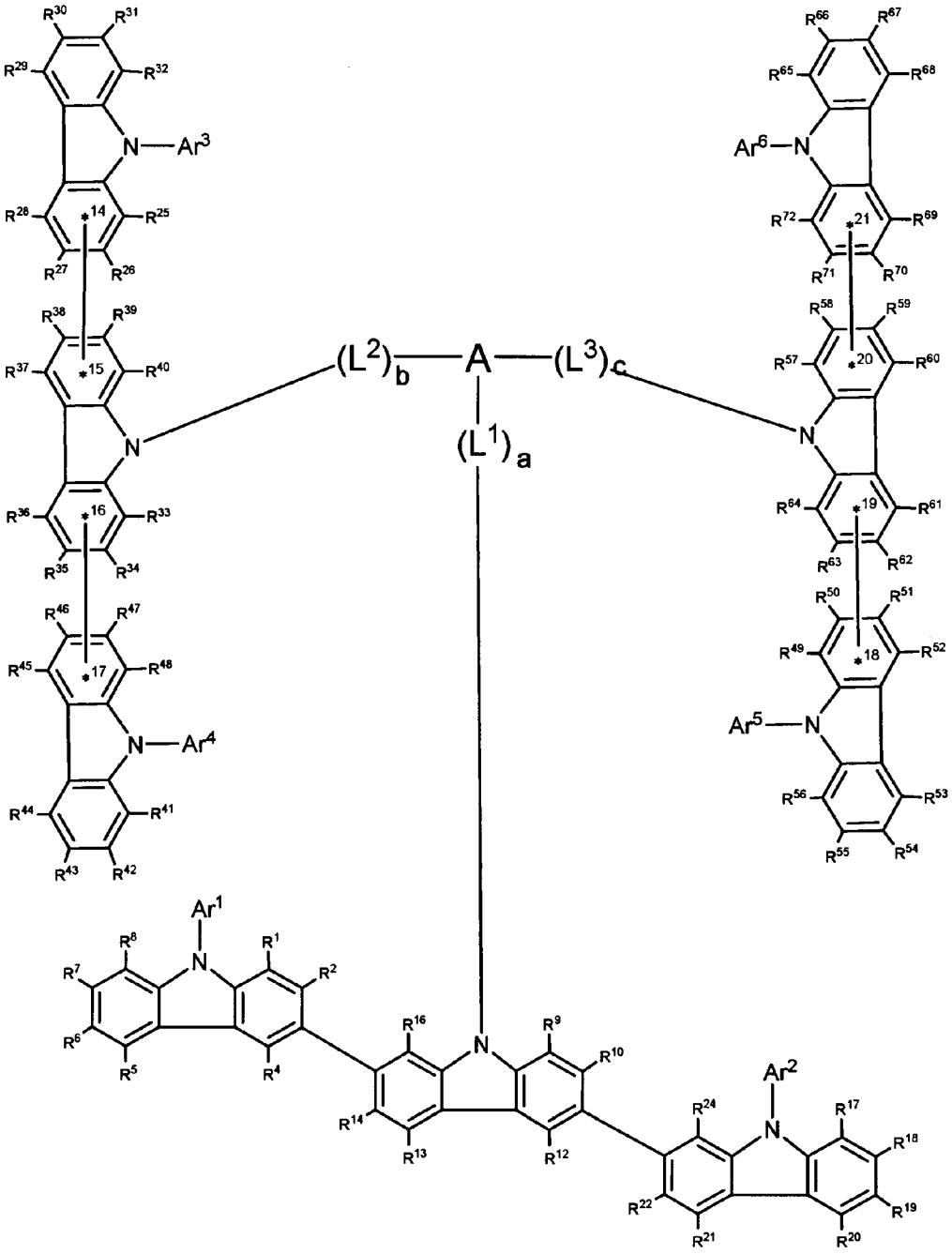
[化60]



(1a-ii-4[I])

[0123]

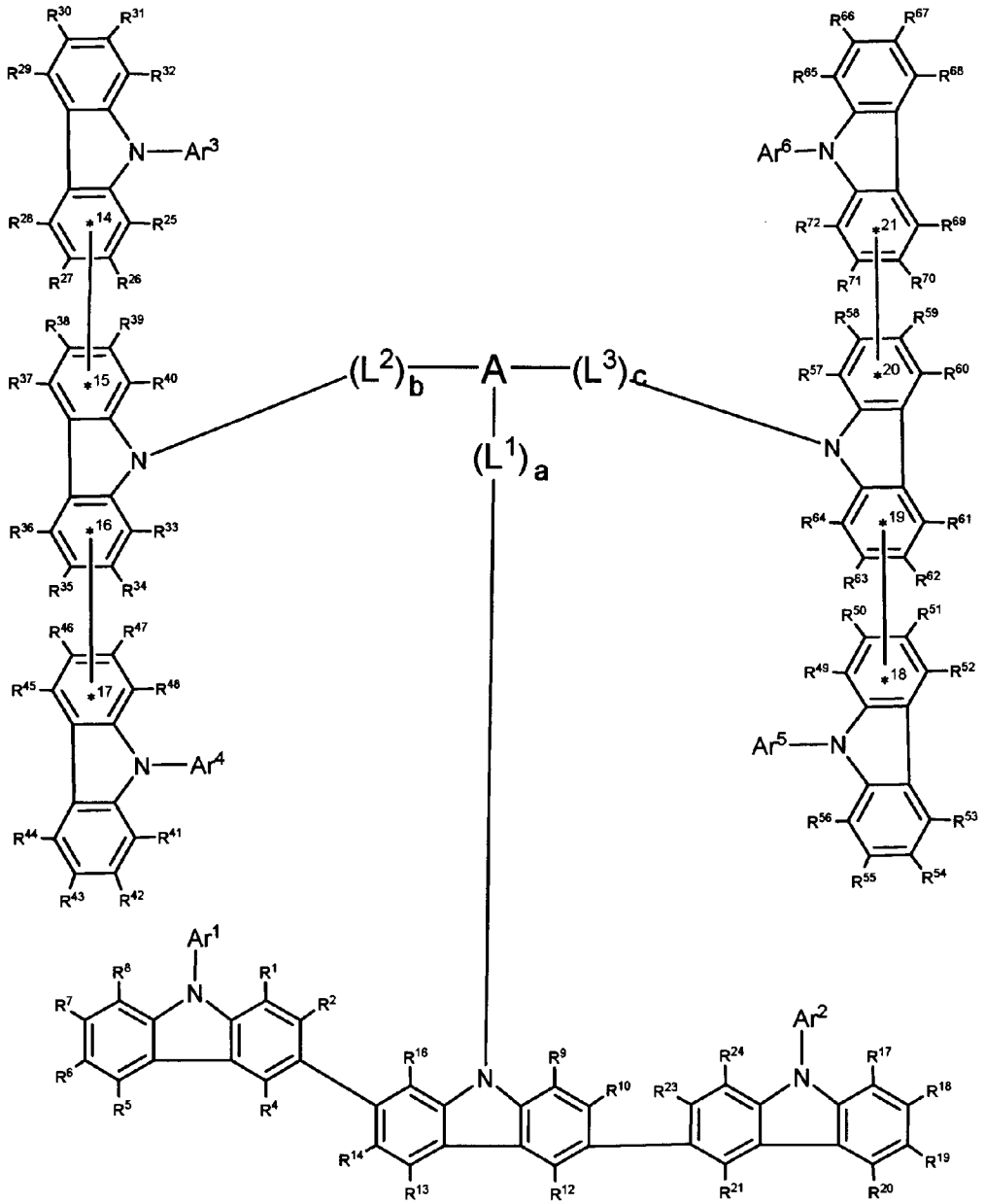
[化61]



(1a-ii-5[I])

[0124]

[化62]

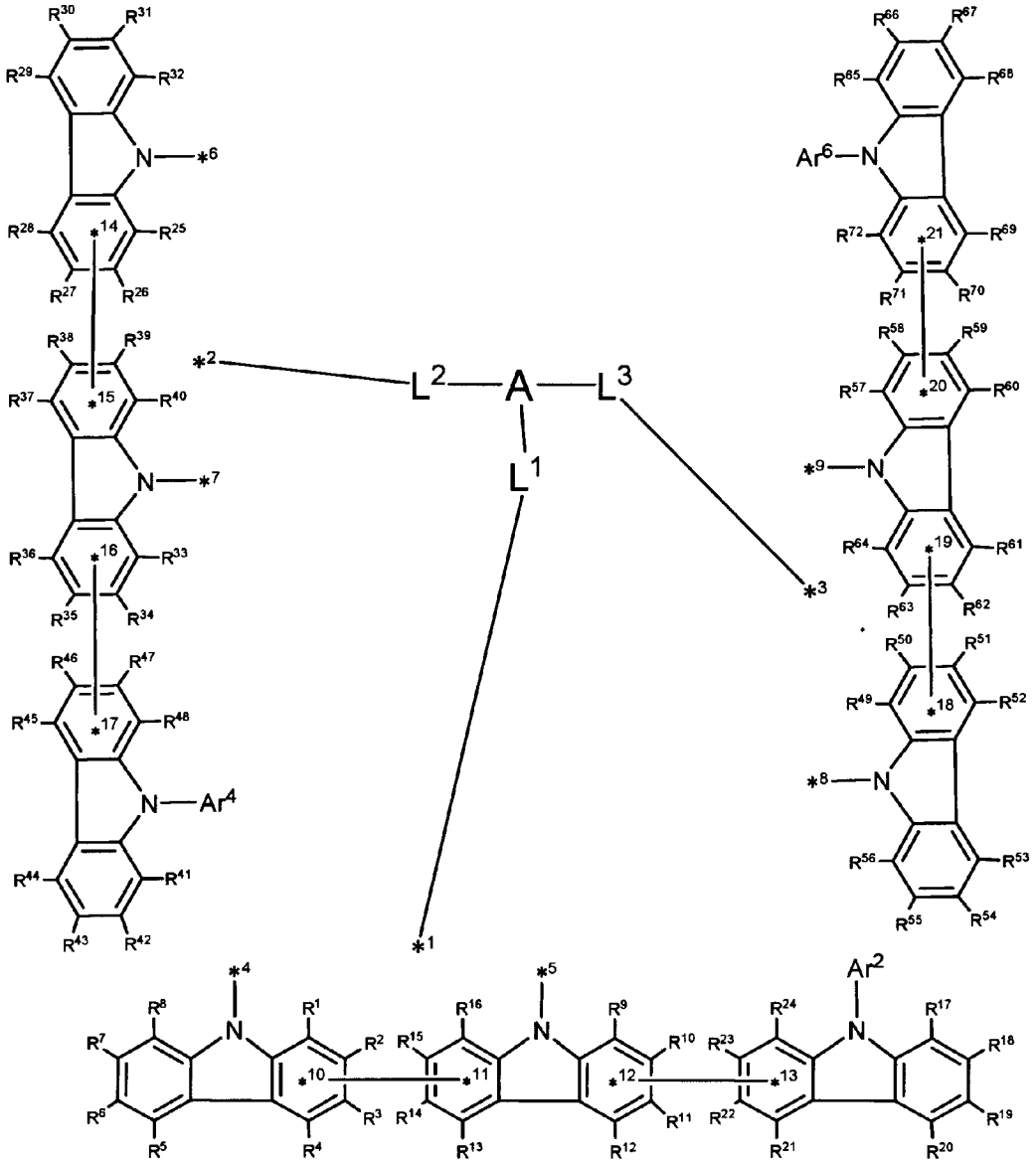


(1a-ii-6[I])

[0125] 一般式（１ａ－ｉｉ－１［Ｉ］）～（１ａ－ｉｉ－６［Ｉ］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｃ、Ａｒ[1]～Ａｒ[6]は、前記一般式（１［Ｉ］）に関する記載と同じである。Ｒ[1]～Ｒ[72]、及び＊[10]～＊[21]は、前記一般式（１ａ－ｉ［Ｉ］）に関する記載と同じである。

[0126] また、本発明の一態様である化合物（１ａ－ｉ［Ｉ］）に含まれる別の態様として、下記一般式（１ａ－ｉｉｉ［Ｉ］）で表される化合物（以下、「化合物（１ａ－ｉｉｉ［Ｉ］）」ともいう）がより好ましい。

[0127] [化63]



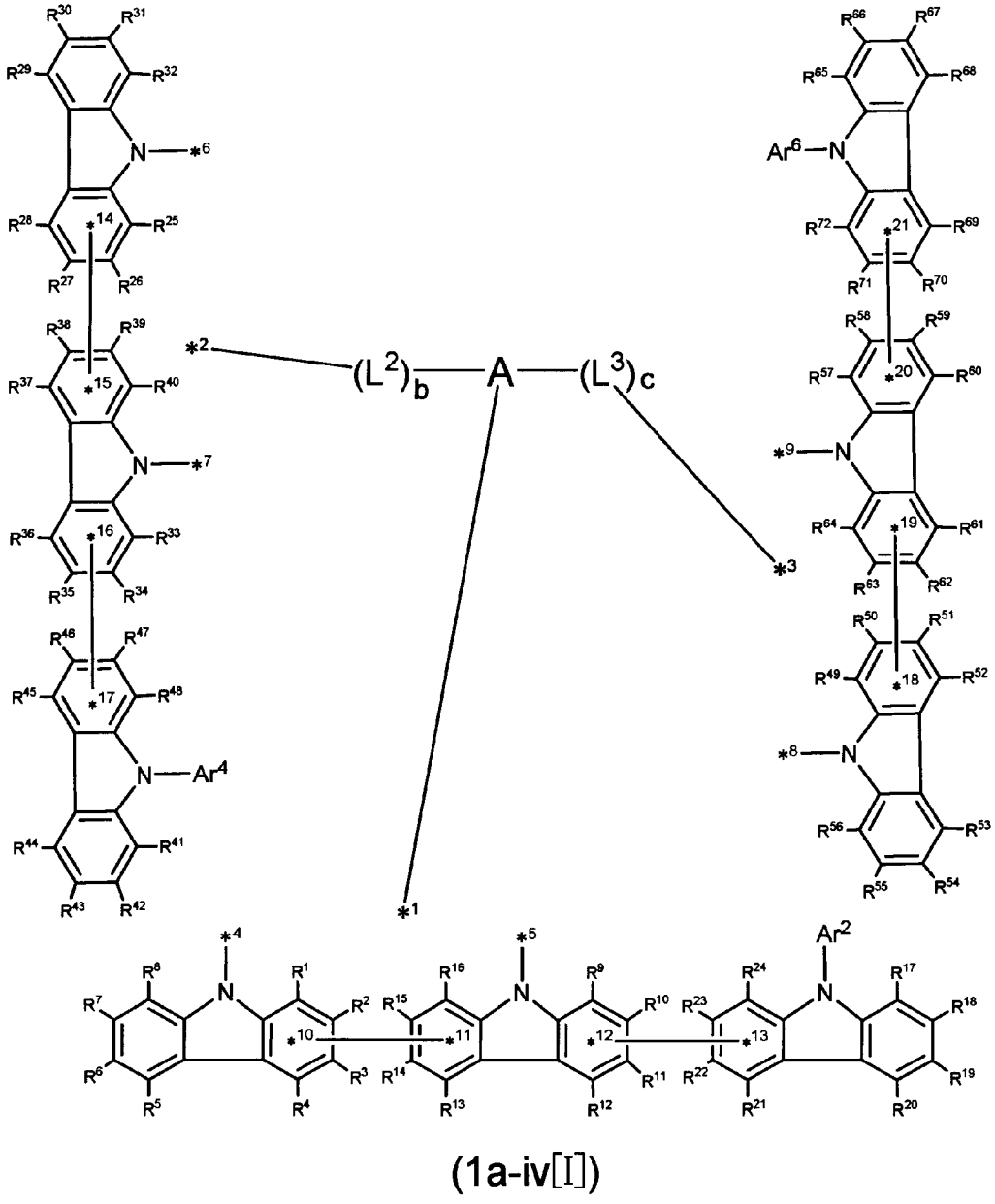
(1a-iii[I])

[0128] 一般式（１ａ－ｉｉｉ［Ｉ］）中、Ａ、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}、＊^{1}～＊^{9}、Ａｒ^{2}、Ａｒ^{4}、及びＡｒ^{6}は、前記一般式（１［Ｉ］）に関する記載と同じである。Ｒ^{1}～

R^{72}、及び$*^{10}$～$*^{21}$は、前記一般式（１ａ－ｉ［Ｉ］）に関する記載と同じである。

[0129] また、本発明の一態様である化合物（１ａ－ｉ［Ｉ］）に含まれる別の態様として、下記一般式（１ａ－ｉｖ［Ｉ］）で表される化合物（以下、「化合物（１ａ－ｉｖ［Ｉ］）」ともいう）がより好ましい。

[0130] [化64]

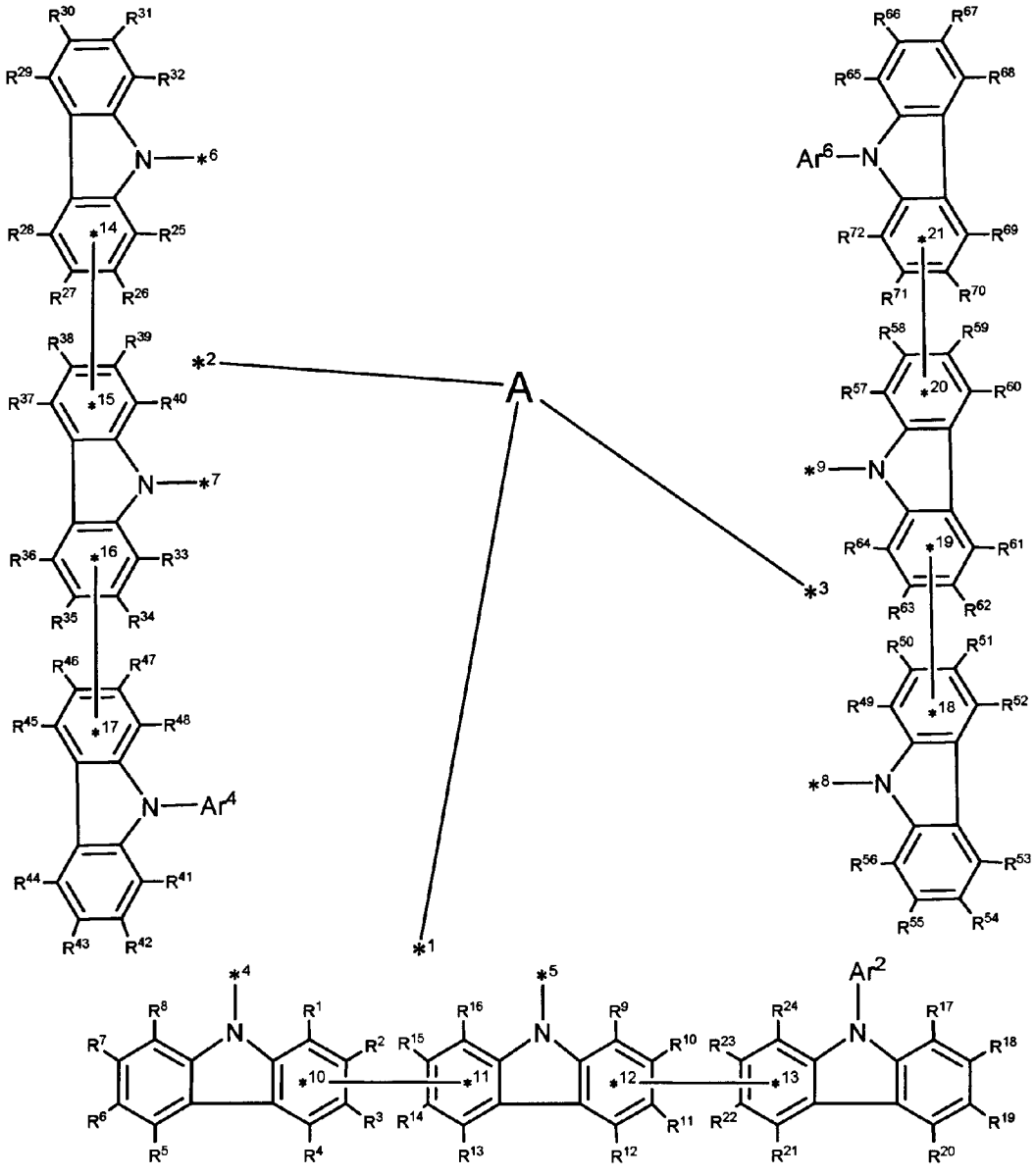


(1a-iv[I])

[0131] 一般式（１ａ－ｉｖ［Ｉ］）中、Ａ、Ｌ^{2}、Ｌ^{3}、ｂ、ｃ、＊^{1}～＊^{9}、Ａｒ^{2}、Ａｒ^{4}、及びＡｒ^{6}は、前記一般式（１［Ｉ］）に関する記載と同じである。Ｒ^{1}～Ｒ^{72}、及び＊^{10}～＊^{21}は、前記一般式（１ａ－ｉ［Ｉ］）に関する記載と同じである。

[0132] また、本発明の一態様である化合物（１ａ－ｉ［Ｉ］）に含まれる別の態様として、下記一般式（１ａ－ｉｖ［Ｉ］）で表される化合物（以下、「化合物（１ａ－ｖ［Ｉ］）」ともいう）がより好ましい。

[0133] [化65]

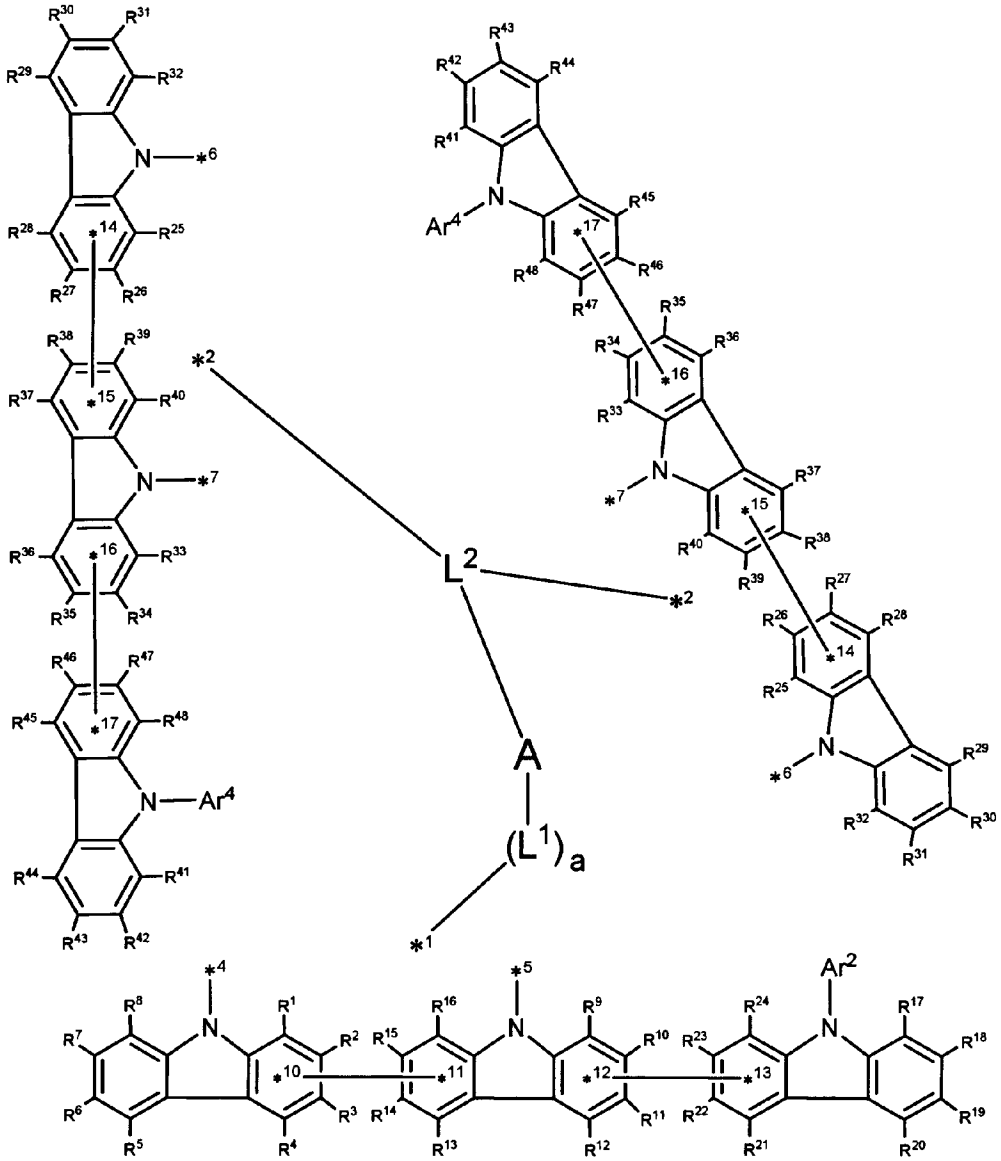


(1a-v[I])

[0134] 一般式（１ａ－ｖ［Ｉ］）中、Ａ、＊[1]～＊[9]、Ａｒ[2]、Ａｒ[4]、及びＡｒ[6]は、前記一般式（１［Ｉ］）に関する記載と同じである。Ｒ[1]～Ｒ[72]、及び＊[10]～＊[21]は、前記一般式（１ａ－ｉ［Ｉ］）に関する記載と同じである。

[0135] また、本発明の一態様の化合物として、下記一般式（１ｂ［Ｉ］）で表される化合物（以下、「化合物（１ｂ［Ｉ］）」ともいう）が好ましい。

[0136] [化66]



(1b[I])

[0137] 一般式（１ｂ［Ｉ］）中、Ａ、Ｌ^{1}、Ｌ^{2}、ａ、＊^{1}～＊^{7}、Ａｒ^{2}、及びＡｒ^{4}は、前記一般式（１［Ｉ］）に関する記載と同じである。Ｒ^{1}～Ｒ^{48}は、前記一般式（１［Ｉ］）に関する記載のＲと同じである。

[0138] ＊^{10}－＊^{11}は、Ｒ^{1}～Ｒ^{4}のうちの１つ及びＲ^{13}～Ｒ^{16}のうちの１つがそれぞれ脱離し、当該基と結合していた炭素原子同士の結合を示す。

＊^{12}－＊^{13}は、Ｒ^{9}～Ｒ^{12}のうちの１つ及びＲ^{21}～Ｒ^{24}のうちの１つがそれぞれ脱離し、当該基と結合していた炭素原子同士の結合を示す。

＊^{14}－＊^{15}は、Ｒ^{25}～Ｒ^{28}のうちの１つ及びＲ^{37}～Ｒ^{40}のうちの１つがそれぞれ脱離し、当該基と結合していた炭素原子同士の結合を示す。

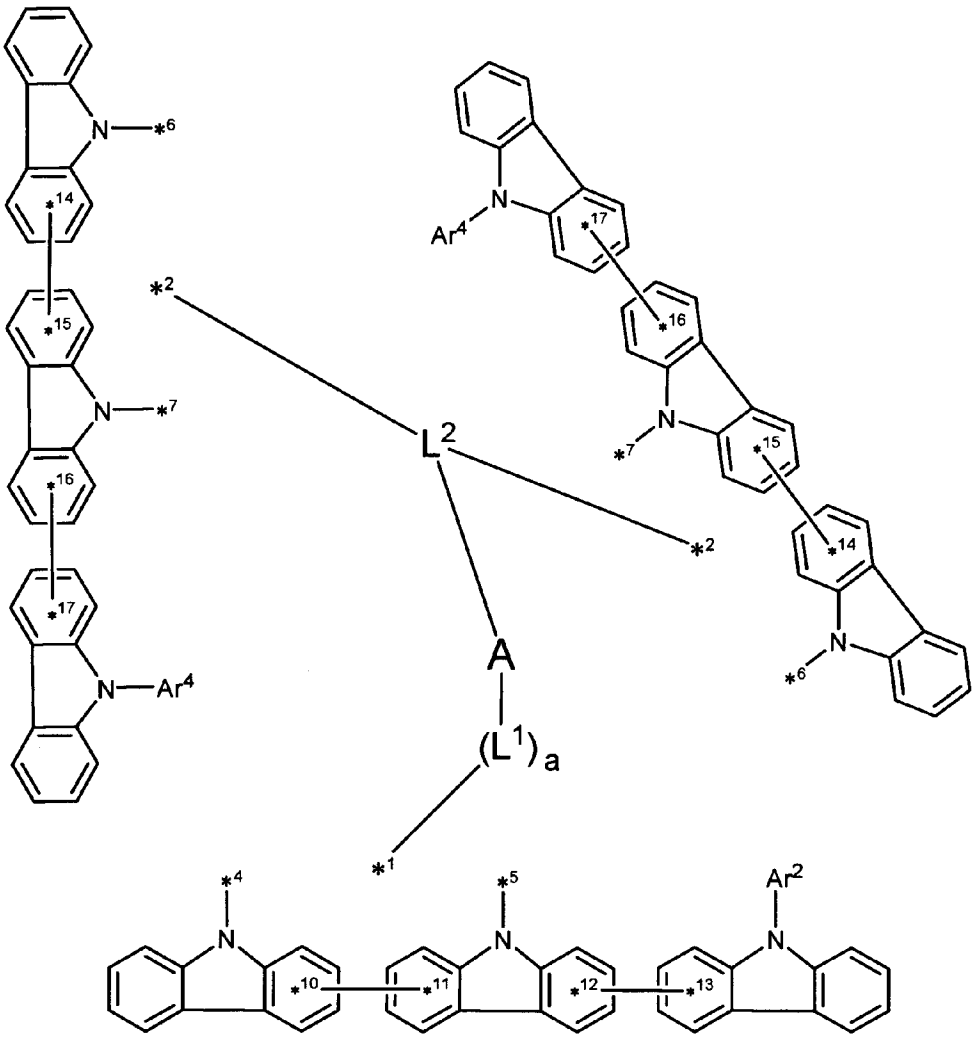
＊^{16}－＊^{17}は、Ｒ^{33}～Ｒ^{36}のうちの１つ及びＲ^{45}～Ｒ^{48}のうちの１つがそれぞれ脱離し、当該基と結合していた炭素原子同士の結合を示す。

つまり、＊^{10}、＊^{12}、＊^{14}、及び＊^{16}は、一つのカルバゾリル基の１位、２位、３位、又は４位の炭素原子と結合し、＊^{11}、＊^{13}、＊^{15}、及び＊^{17}は、別のカルバゾリル基の５位、６位、７位、又は８位の炭素原子と結合し、＊^{10}－＊^{11}、＊^{12}－＊^{13}、＊^{14}－＊^{15}、及び＊^{16}－＊^{17}により、２つのカルバゾリル基が結合される。

[0139] なお、本発明の一態様である化合物（１ｂ［Ｉ］）としては、Ｒ^{1}～Ｒ^{48}から選ばれる２つが互いに結合して環を形成することがない化合物であることが好ましく、下記一般式（１ｂ－ｉ［Ｉ］）で表される化合物であることがより好ましい。

[0140]

[化67]



(1b-i[I])

[0141] 上記一般式（１ｂ－ｉ［Ｉ］）中、Ａ、Ｌ[1]、Ｌ[2]、ａ、＊[1]～＊[7]、Ａｒ[2]、Ａｒ[4]は、前記一般式（１［Ｉ］）に関する記載と同じである。

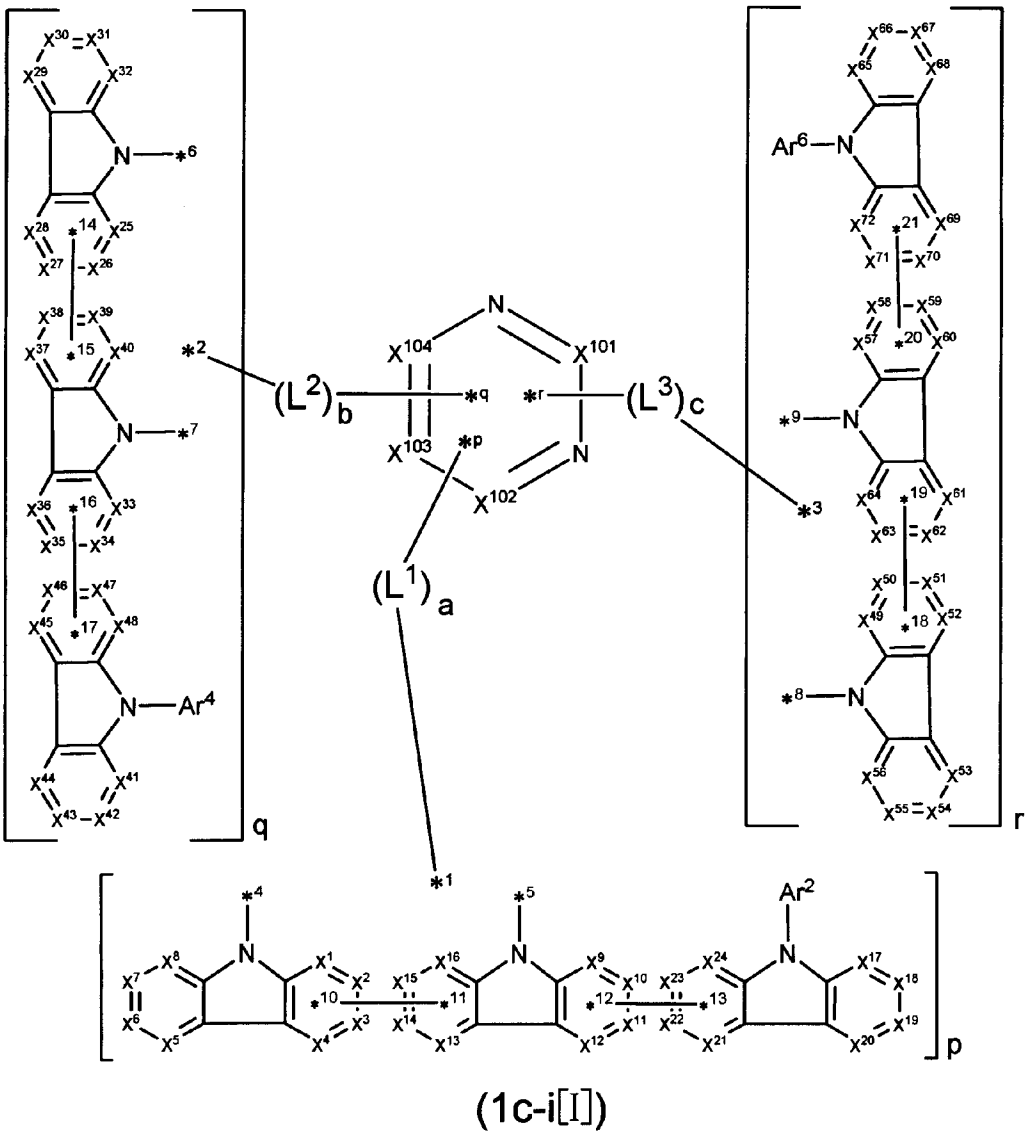
＊[10]－＊[11]、＊[12]－＊[13]、＊[14]－＊[15]、＊[16]－＊[17]は、ベンゼン環中の水素原子がそれぞれ脱離した炭素原子同士の結合を示す。

つまり、＊[10]、＊[12]、＊[14]、及び＊[16]は、一つのカルバゾリル基の１位、２位、３位、又は４位の炭素原子と結合し、＊[11]、＊[13]、＊[15]、及び＊[17]は、別のカルバゾリル基の５位、６位、７位、又は８位の炭素原子と結合し、

＊10－＊11、＊12－＊13、＊14－＊15、及び＊16－＊17により、２つのカルバゾリル基が結合される。

[0142] また、本発明の一態様である化合物として、下記一般式（１ｃ－ｉ［Ｉ］）～（１ｃ－ｉｖ［Ｉ］）で表される化合物（以下、「化合物（１ｃ－ｉ［Ｉ］）～（１ｃ－ｉｖ［Ｉ］）」ともいう）が好ましい。

[0143] [化68]



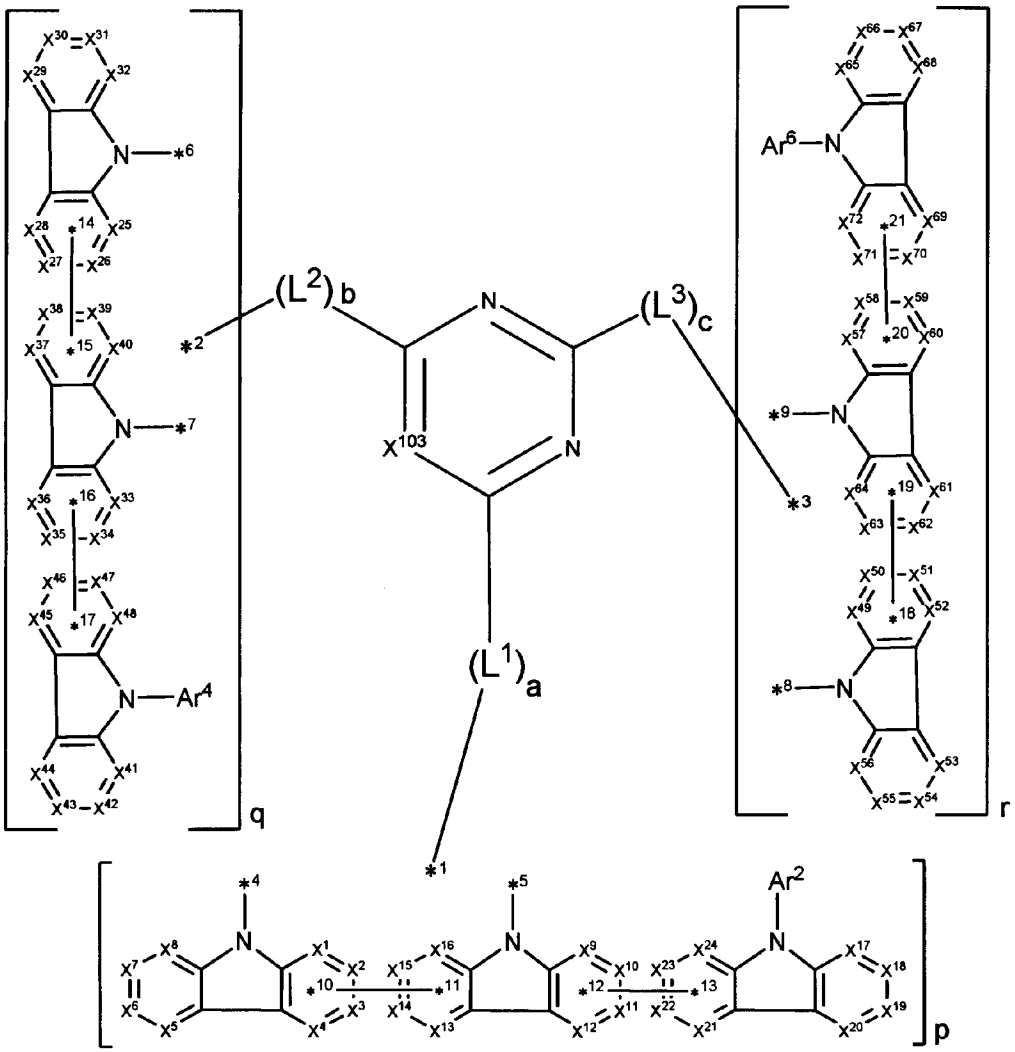
(1c-i[I])

[0144] 一般式（１ｃ－ｉ［Ｉ］）中、Ｌ1～Ｌ3、ａ～ｃ、Ｘ1～Ｘ72、＊1～＊21、Ａｒ2、Ａｒ4、及びＡｒ6は、前記一般式（１［Ｉ］）に関する記載と同じ

である。

X^{101}～X^{104}は、それぞれ$*^{p}$～$*^{r}$のいずれかと結合する炭素原子、C（Rx）、又は窒素原子であり、Rxは水素原子又は置換基であって、複数存在するRxは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するRx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。

[0145] [化69]

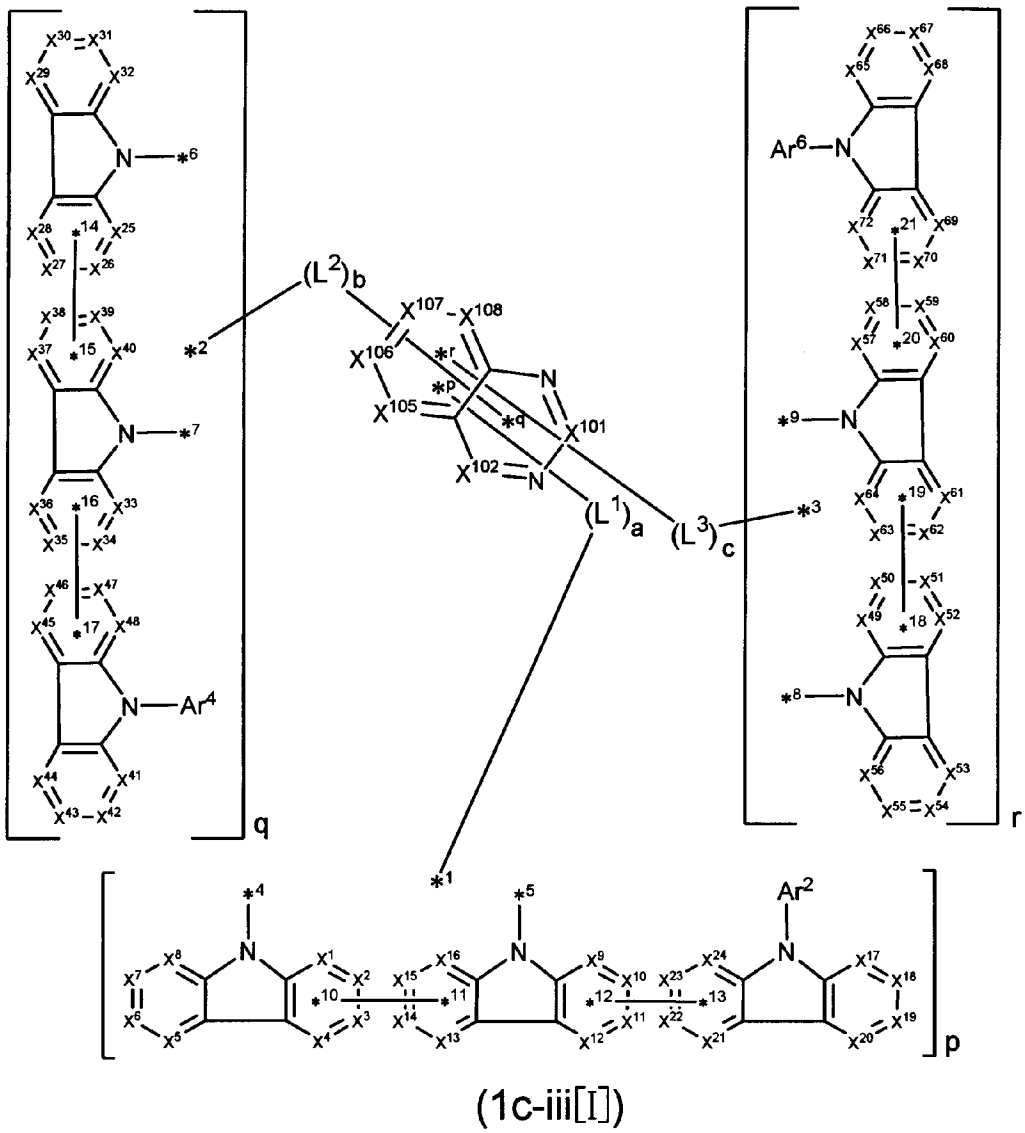


(1c-ii[I])

[0146] 一般式（1c－ii［I］）中、L^{1}～L^{3}、a～c、X^{1}～X^{72}、$*^{1}$～$*^{21}$、Ar^{2}、Ar^{4}、及びAr^{6}は、前記一般式（1［I］）に関する記載と同じ

である。X^{103}は、C（Rx）又は窒素原子であり、Rxは水素原子又は置換基である。

[0147] [化70]



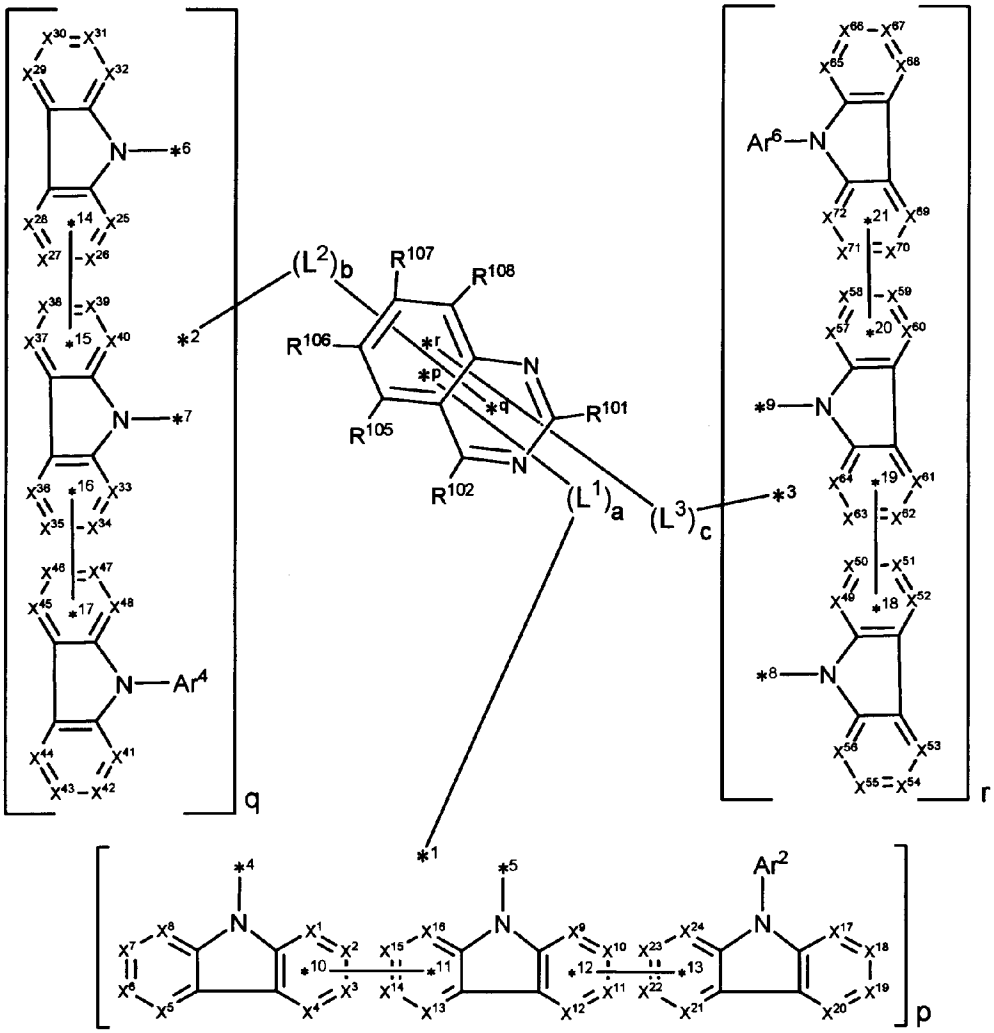
(1c-iii[I])

[0148] 一般式（1c－iii［I］）中、L^1～L^3、a～c、X^1～X^{72}、$*^1$～$*^{21}$、Ar^2、Ar^4、及びAr^6は、前記一般式（1［I］）に関する記載と同じである。

X^{101}、X^{102}、X^{105}～X^{108}は、それぞれ$*^p$～$*^r$のいずれかと結合する炭素原子、C（Rx）、又は窒素原子であり、Rxは水素原子又は置換基

であって、複数存在するＲｘは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲｘ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。

[0149] [化71]



(1c-iv[I])

[0150] 一般式（１ｃ－ｉｖ［Ｉ］）中、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｃ、Ｘ[1]～Ｘ[72]、＊[1]～＊[21]、Ａｒ[2]、Ａｒ[4]、及びＡｒ[6]は、前記一般式（１［Ｉ］）に関する記載と同じである。

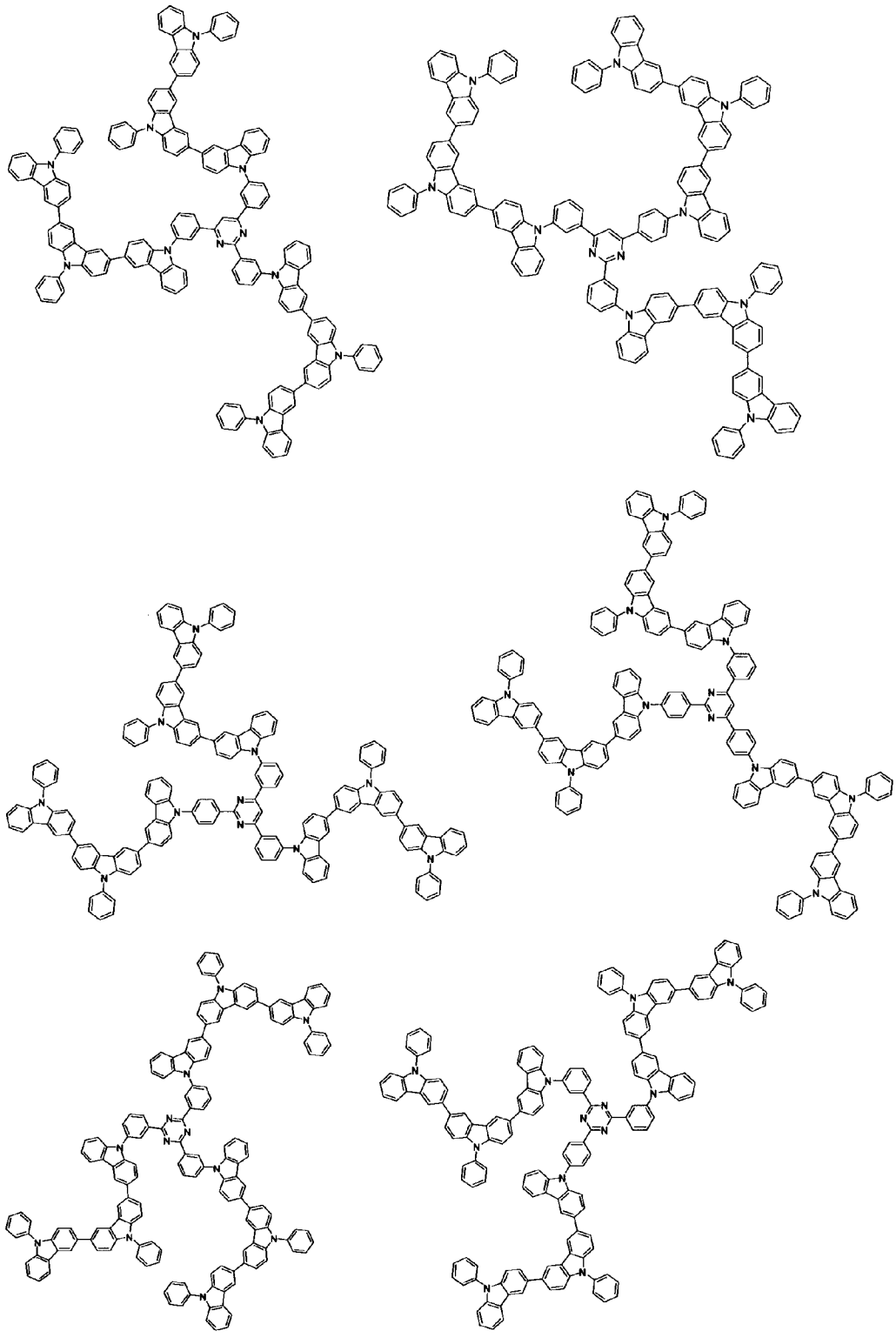
Ｒ[101]、Ｒ[102]、及びＲ[105]～Ｒ[108]のうちの１～３つの基は、脱離して、

当該基と結合していた炭素原子が＊^{p}～＊^{r}のいずれかと結合し、それ以外は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。なお、Ｒ^{102}及びＲ^{105}～Ｒ^{108}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。

[0151] 以下に本発明の一態様である化合物（１［Ｉ］）の具体例を示すが、これらに限定されるものではない。

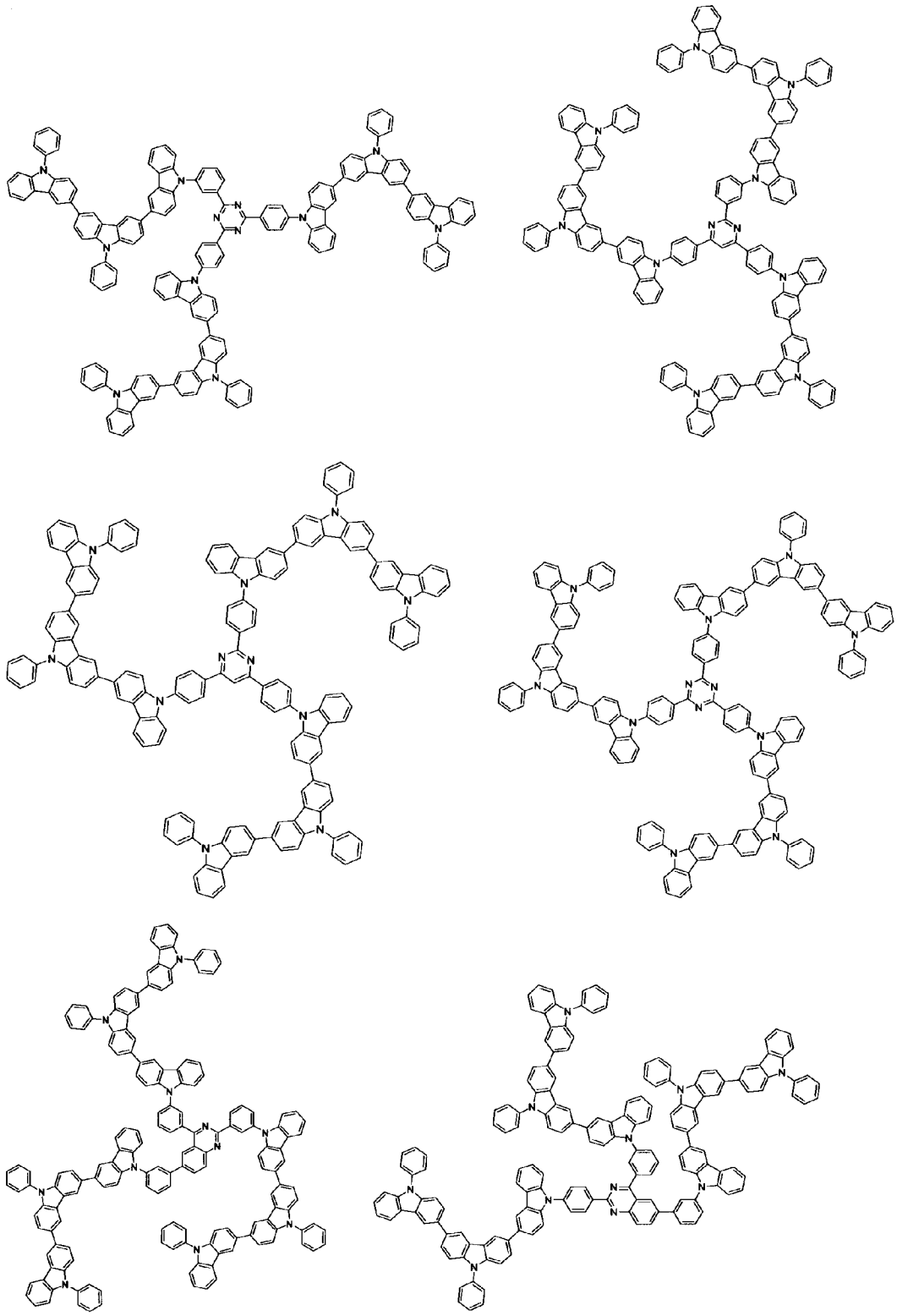
[0152]

[化72]



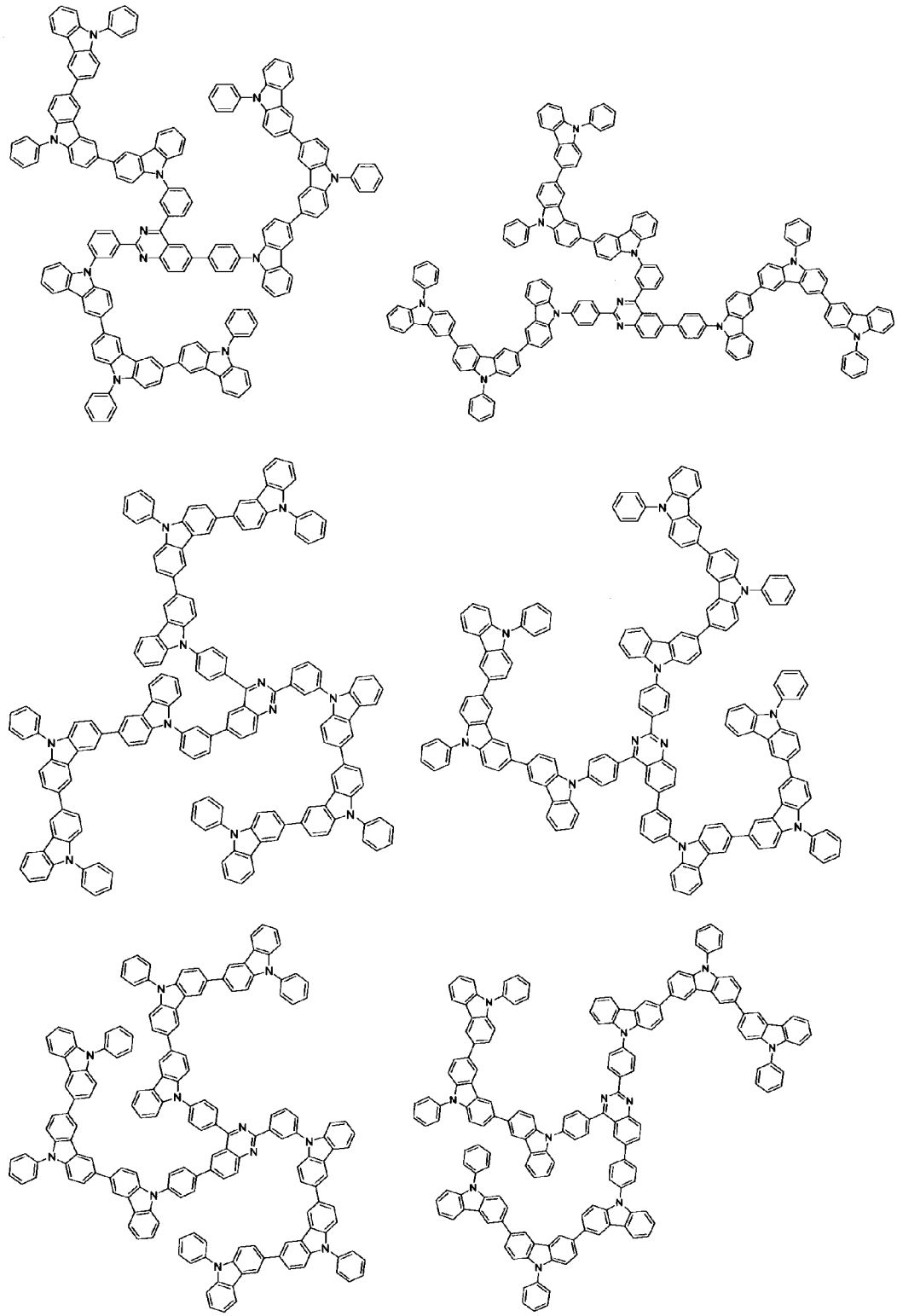
[0153]

[化73]



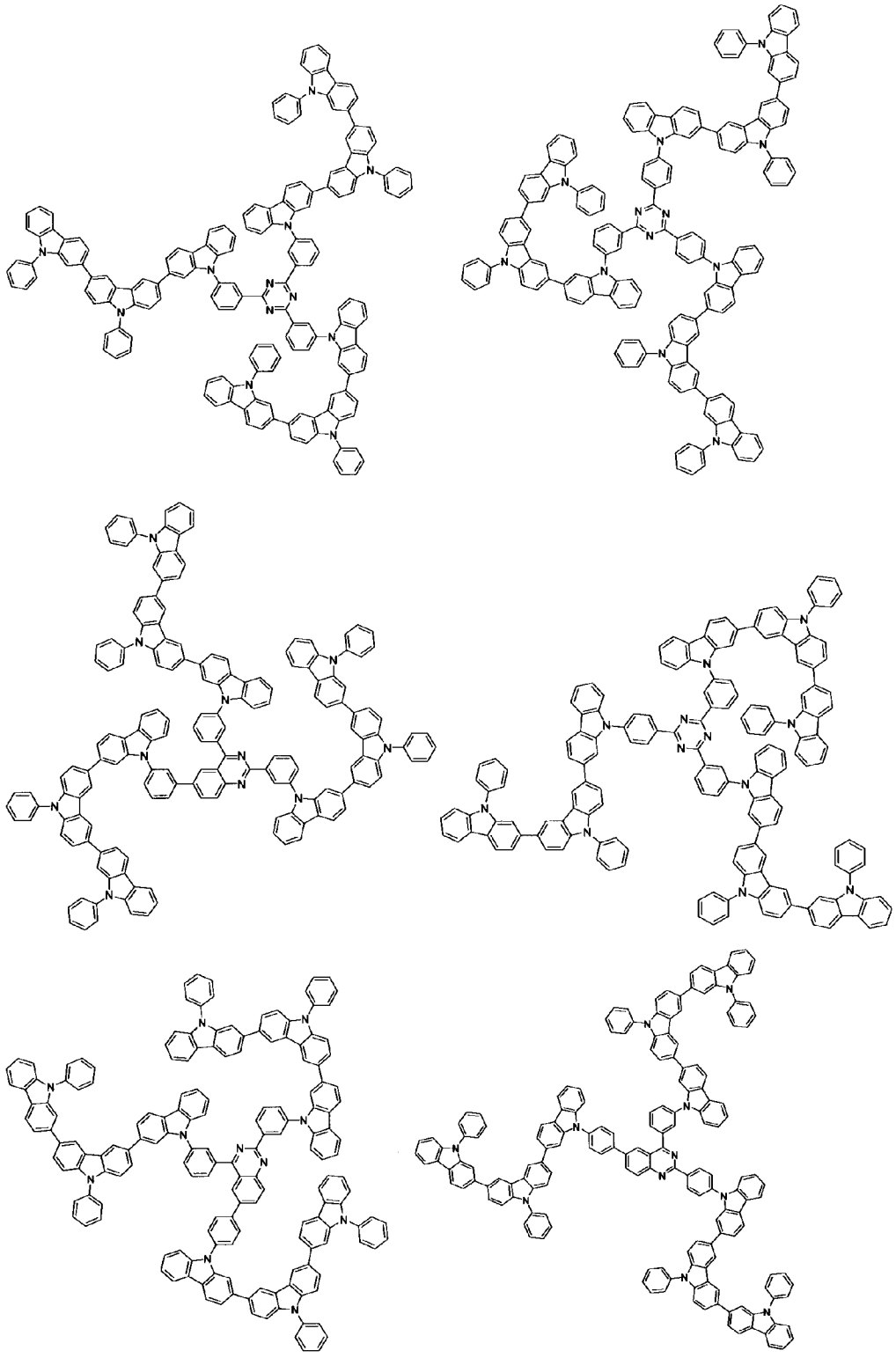
[0154]

[化74]



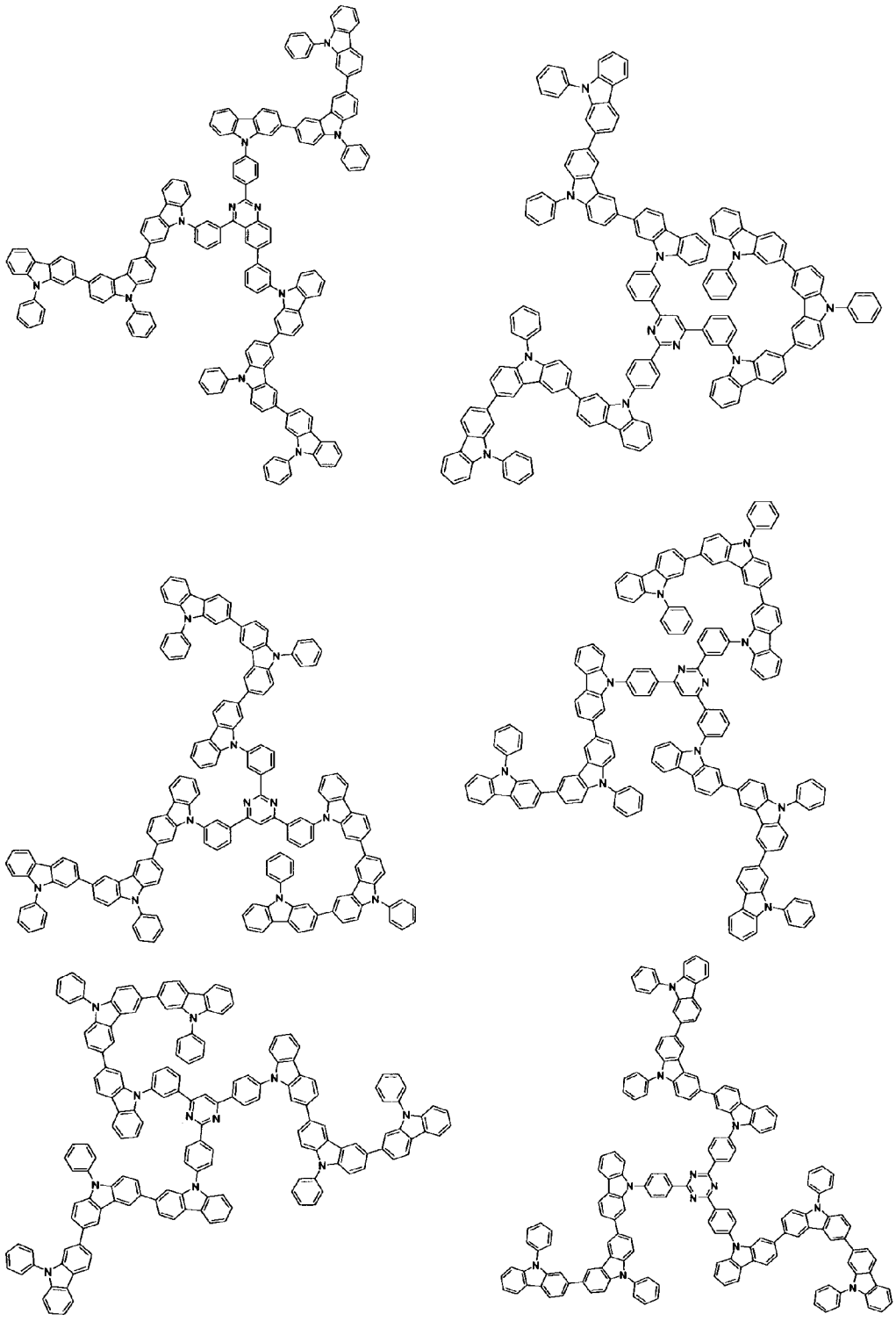
[0155]

[化75]



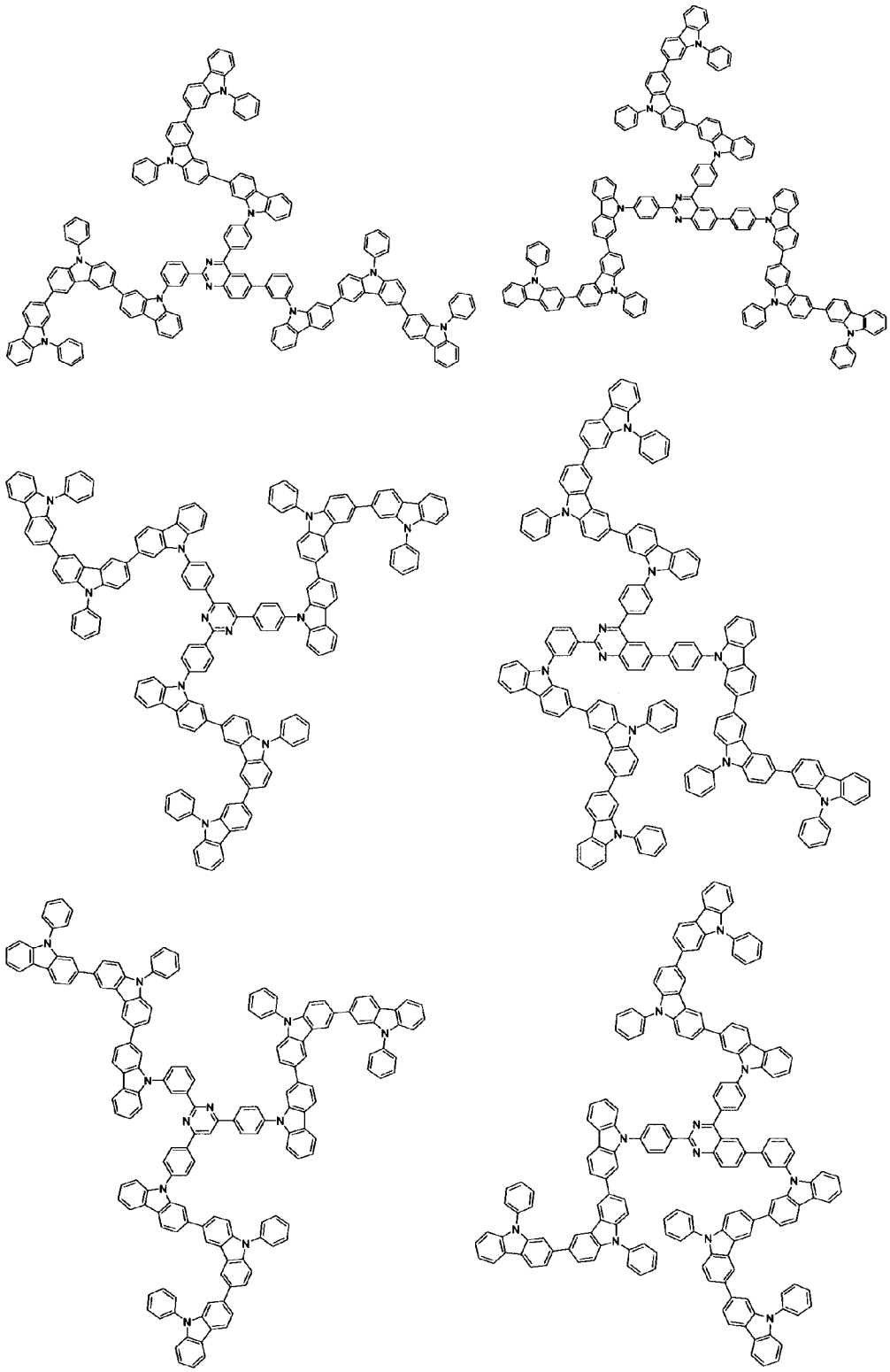
[0156]

[化76]



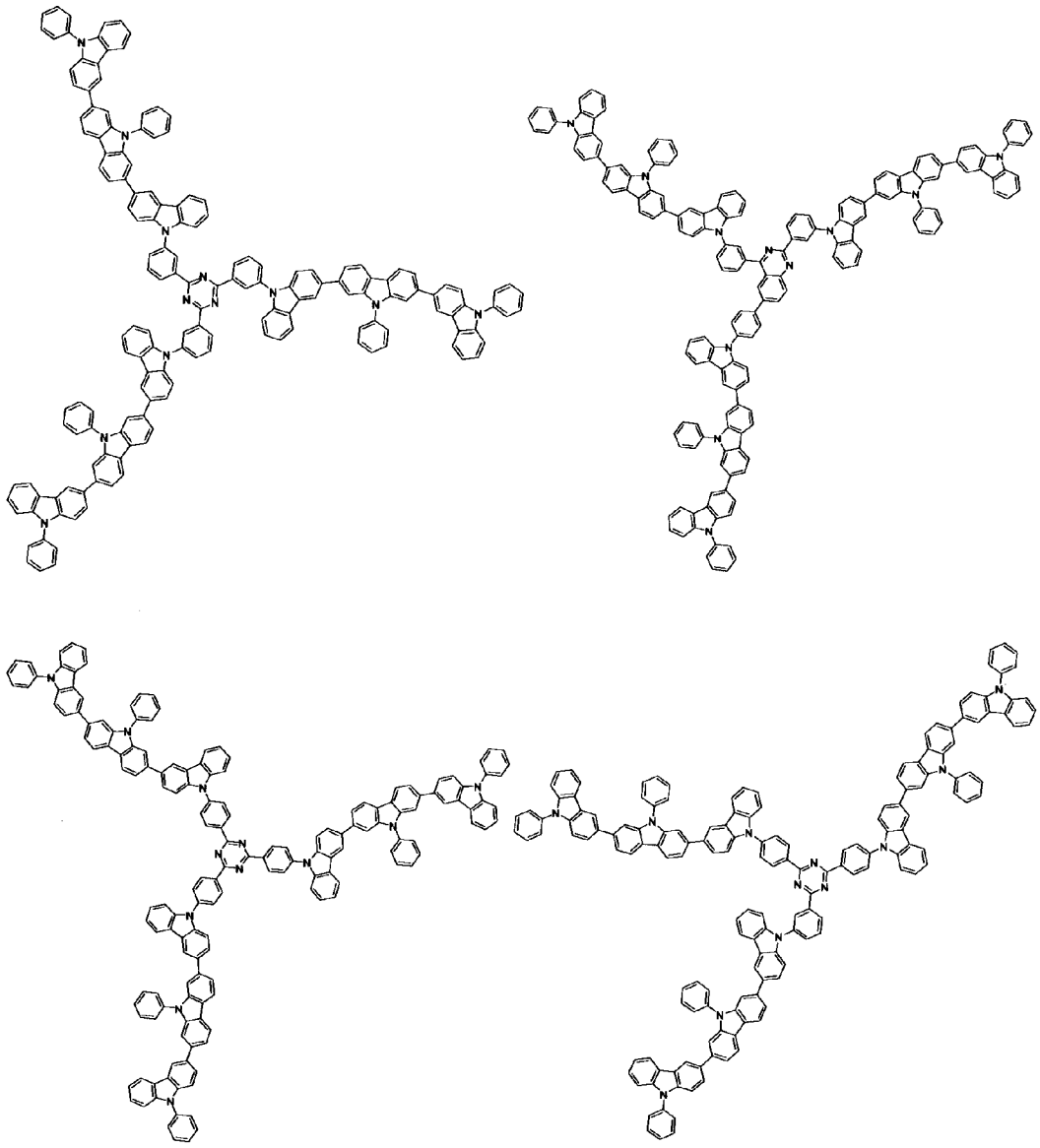
[0157]

[化77]



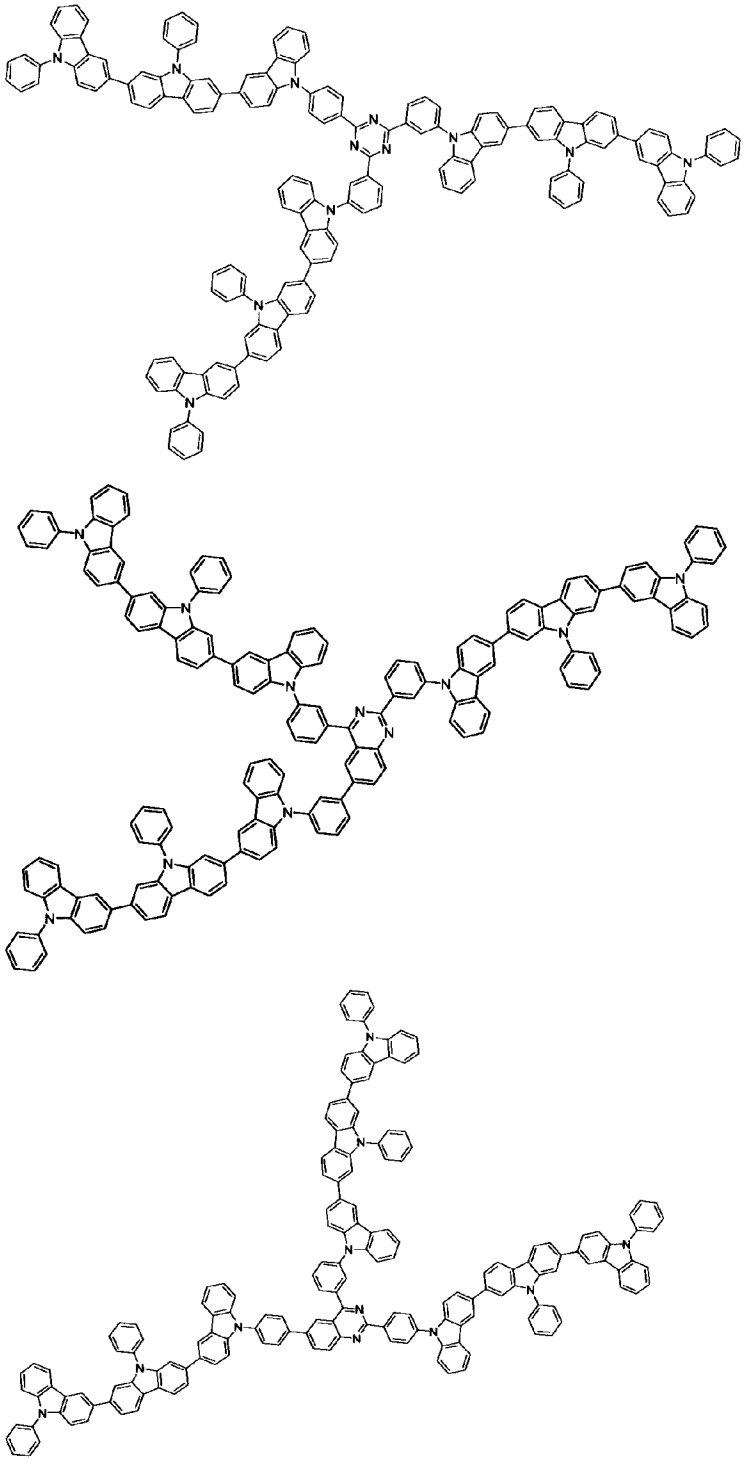
[0158]

[化78]



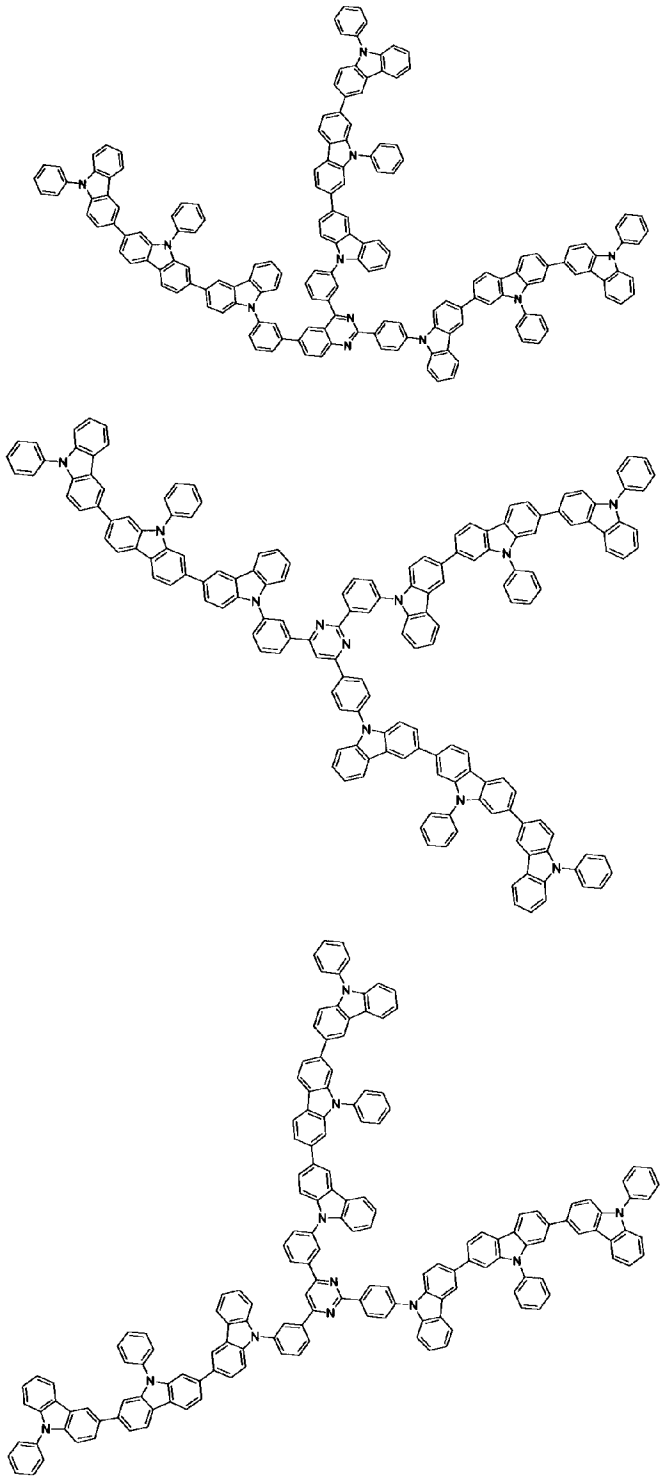
[0159]

[化79]



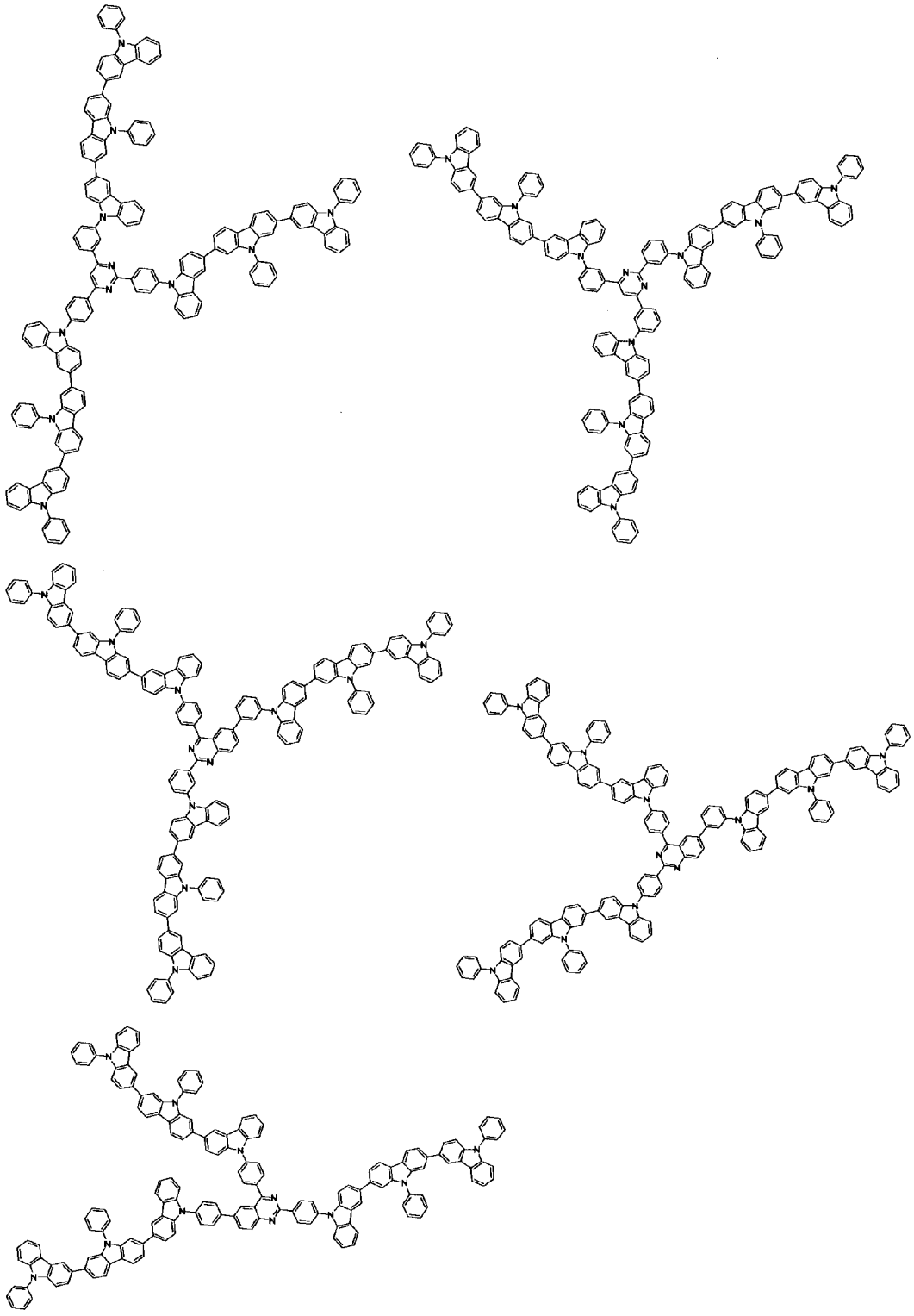
[0160]

[化80]



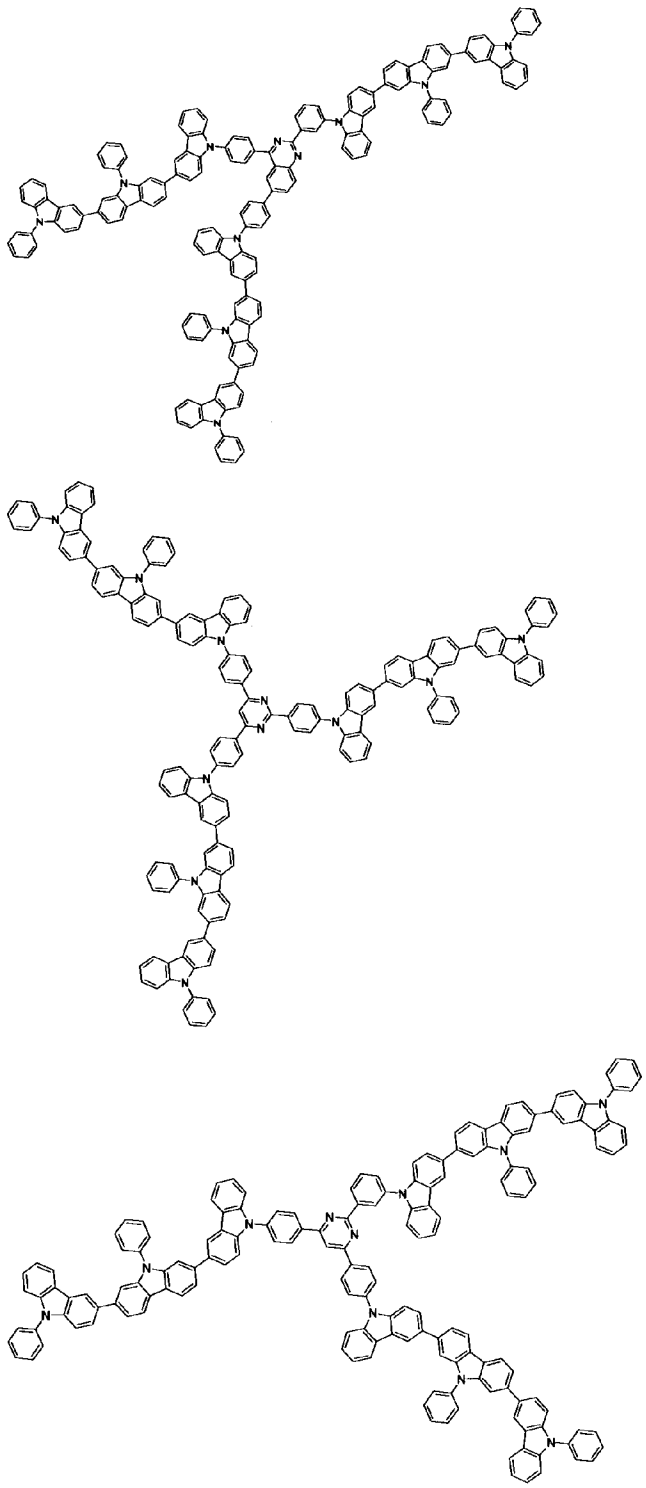
[0161]

[化81]



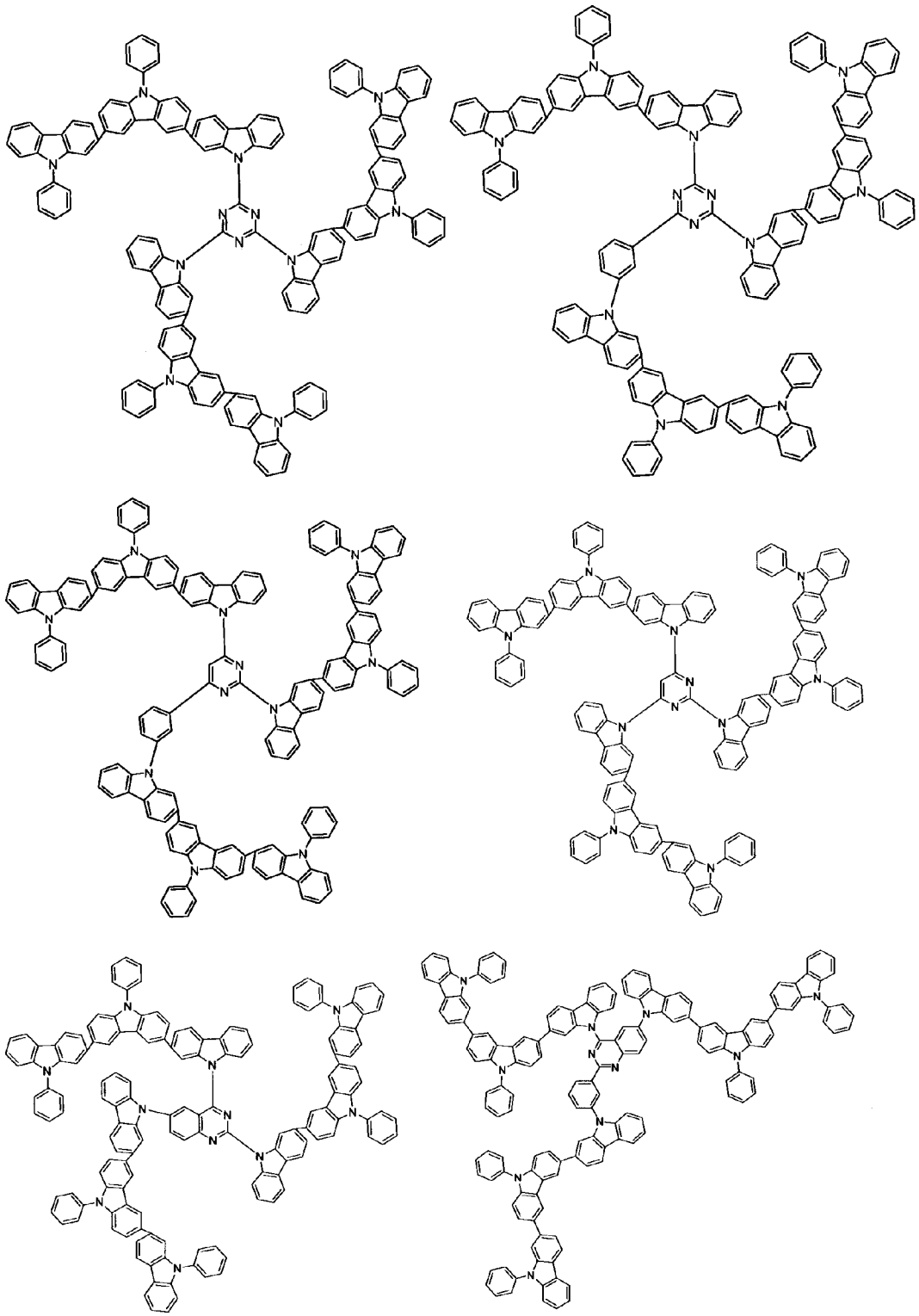
[0162]

[化82]



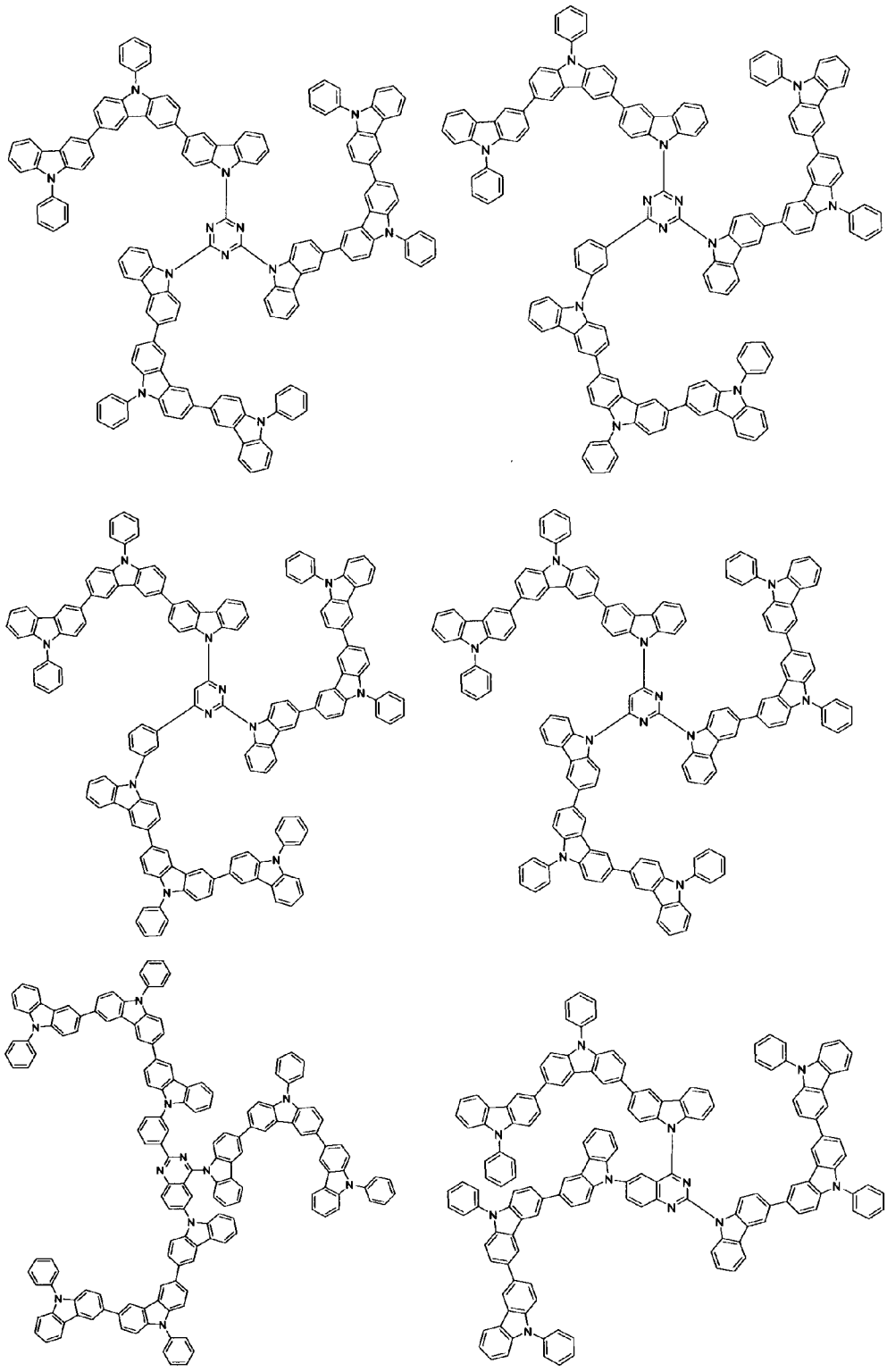
[0163]

[化83]



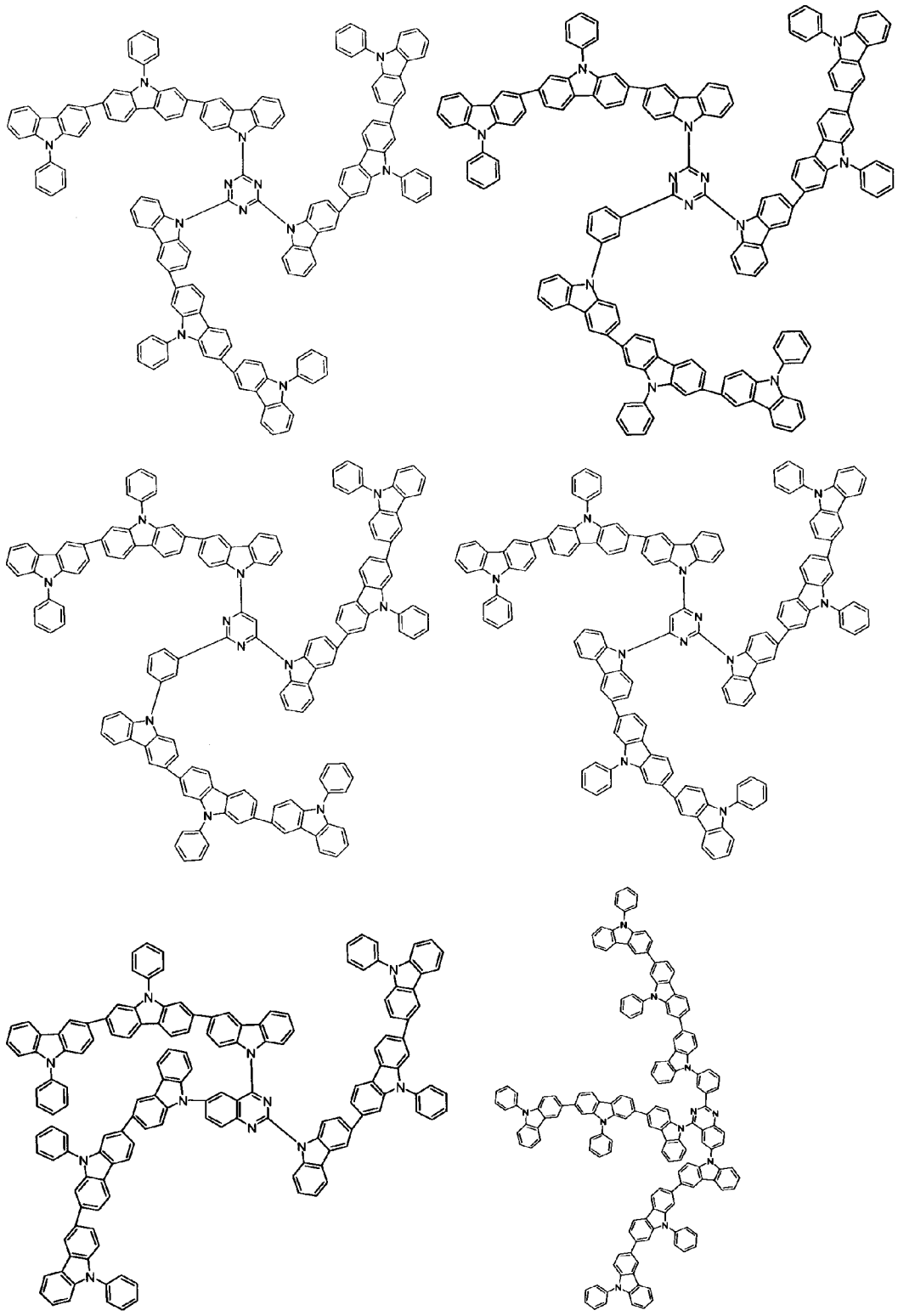
[0164]

[化84]



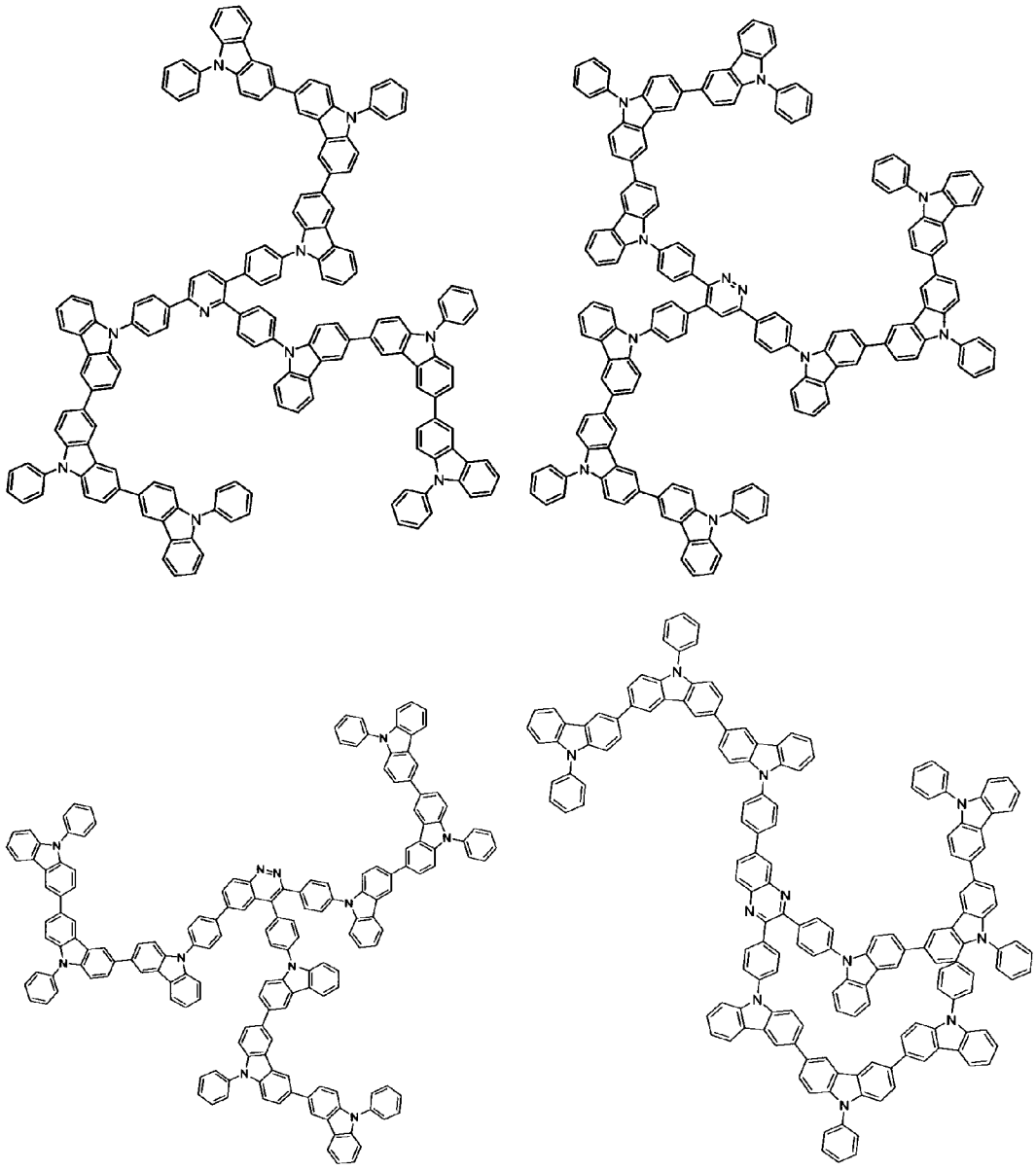
[0165]

[化85]



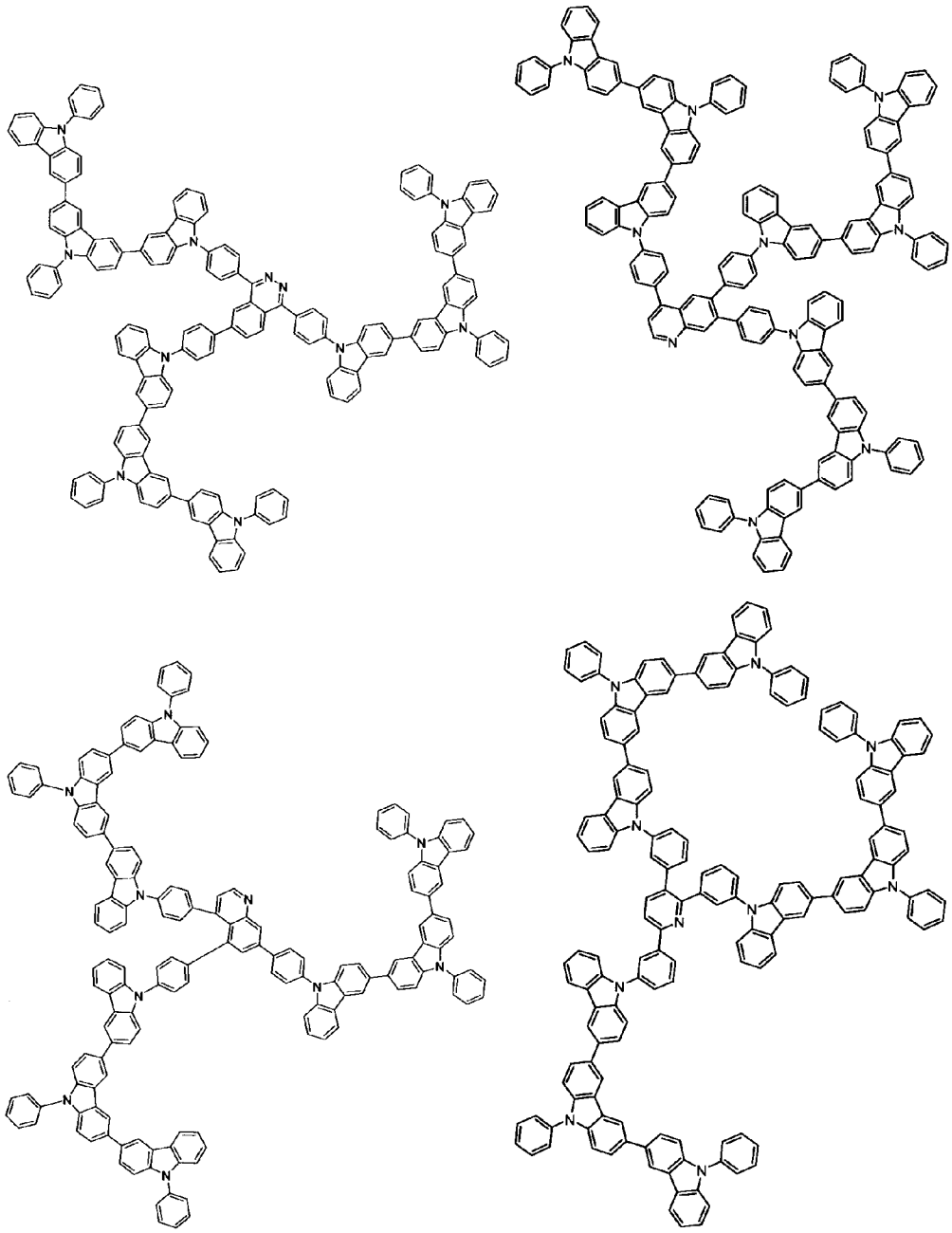
[0166]

[化86]



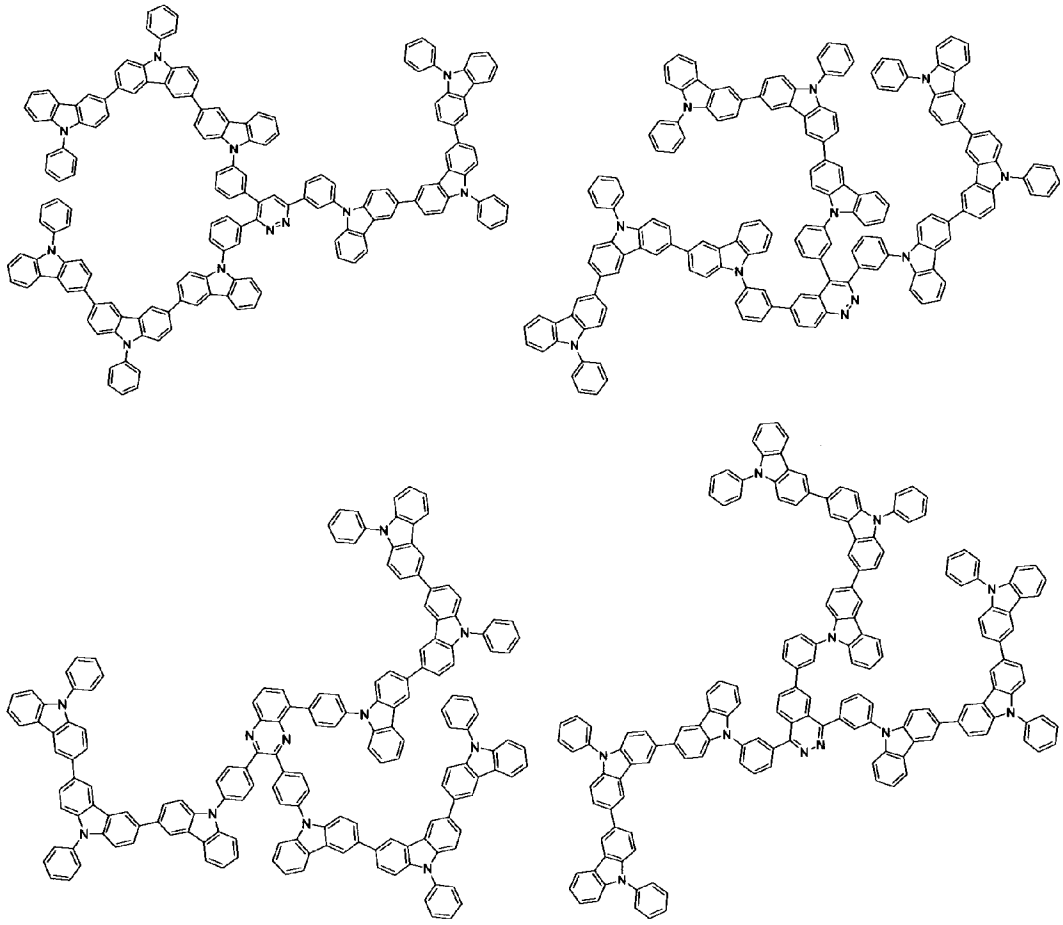
[0167]

[化87]



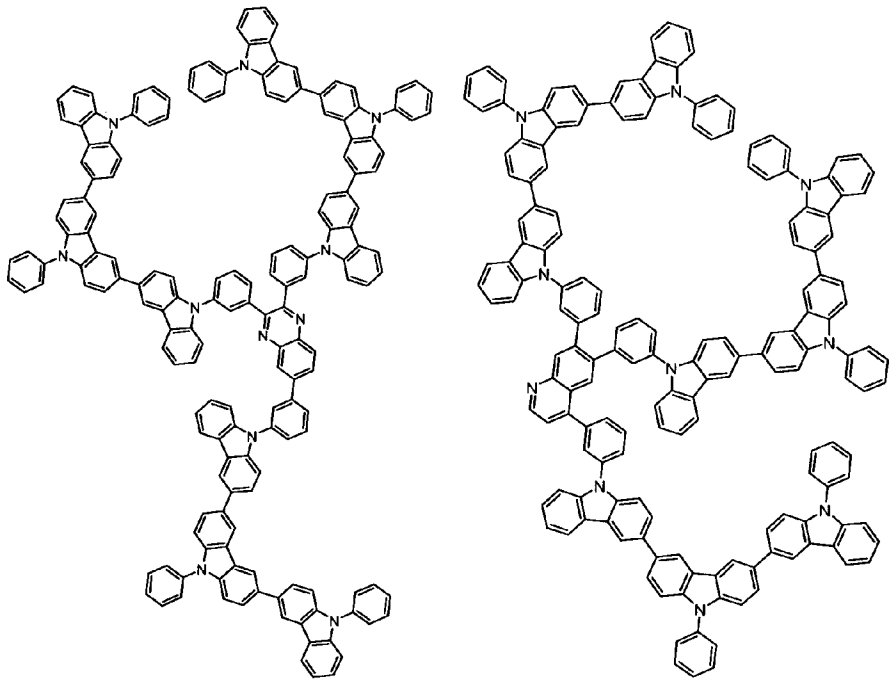
[0168]

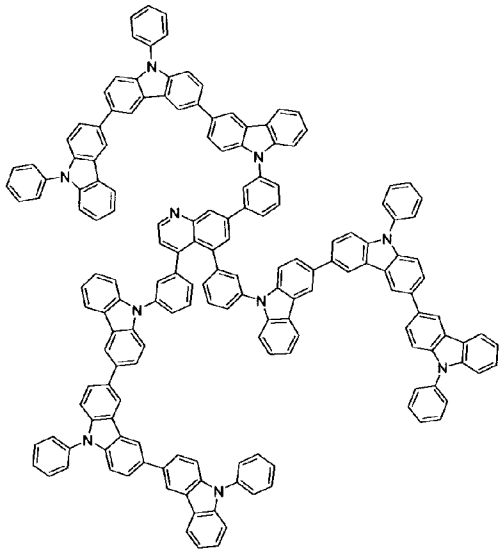
[化88]

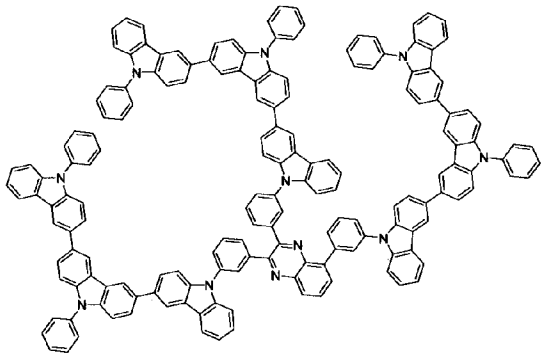


[0169]

[化89]

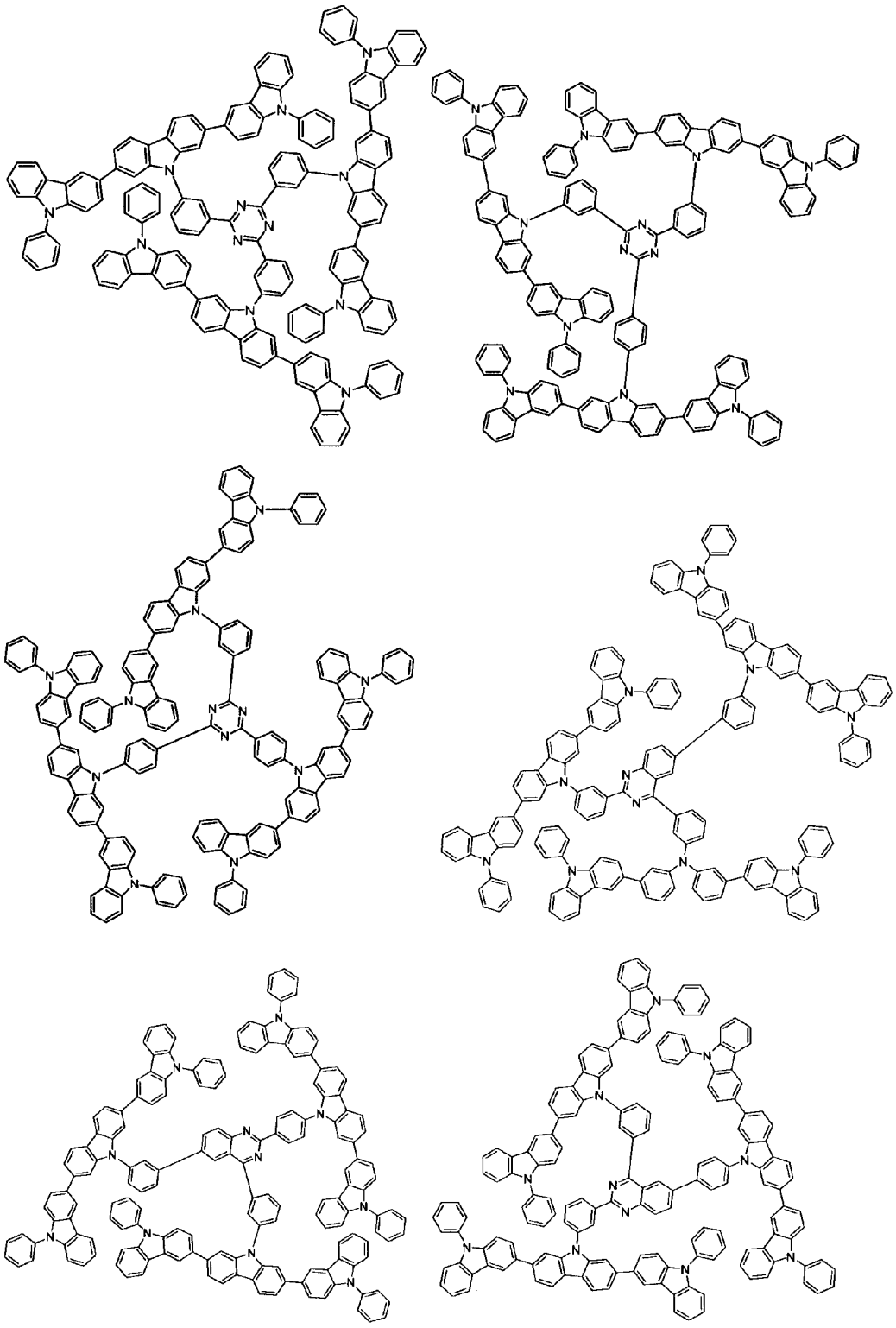






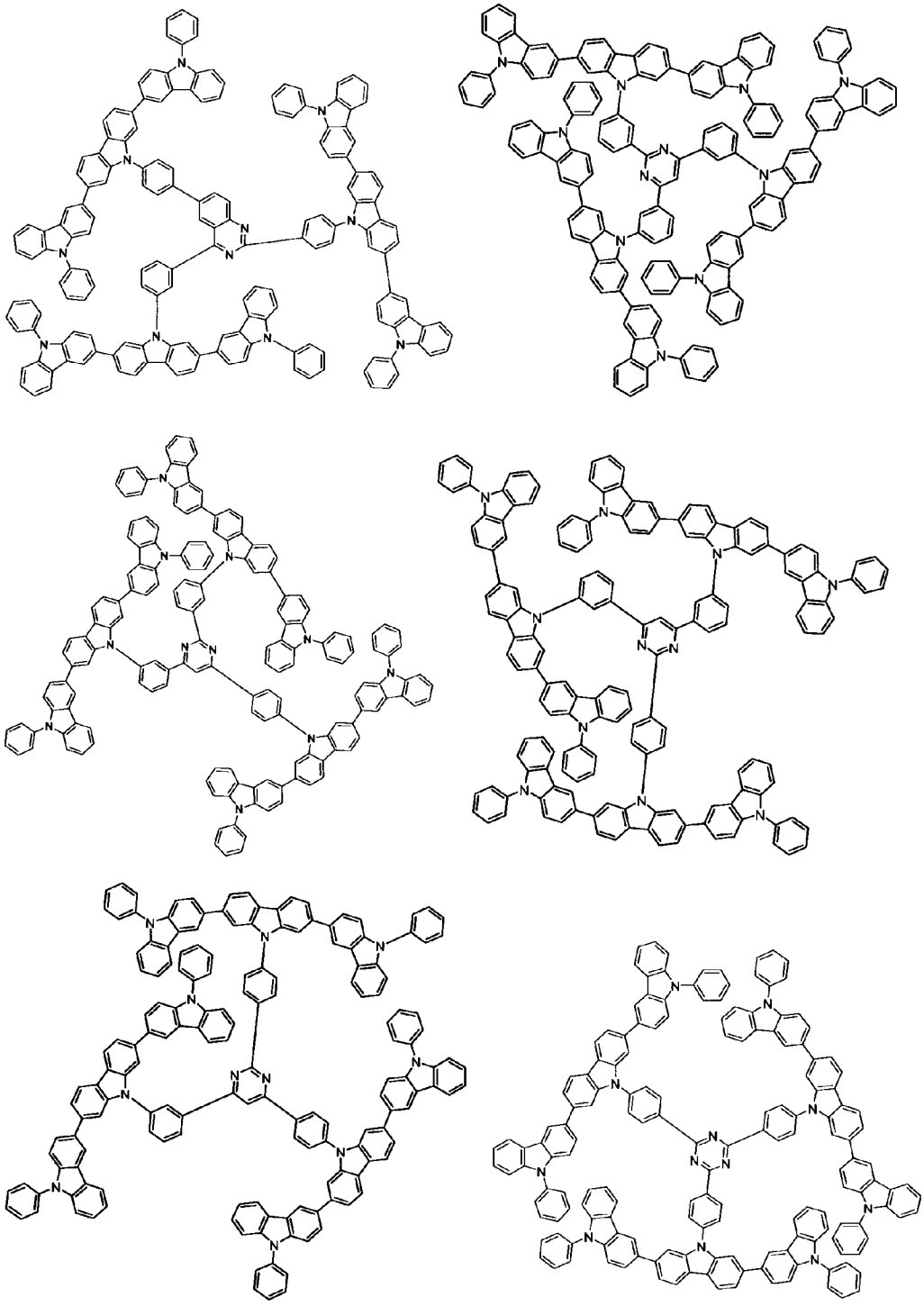
[0170]

[化90]



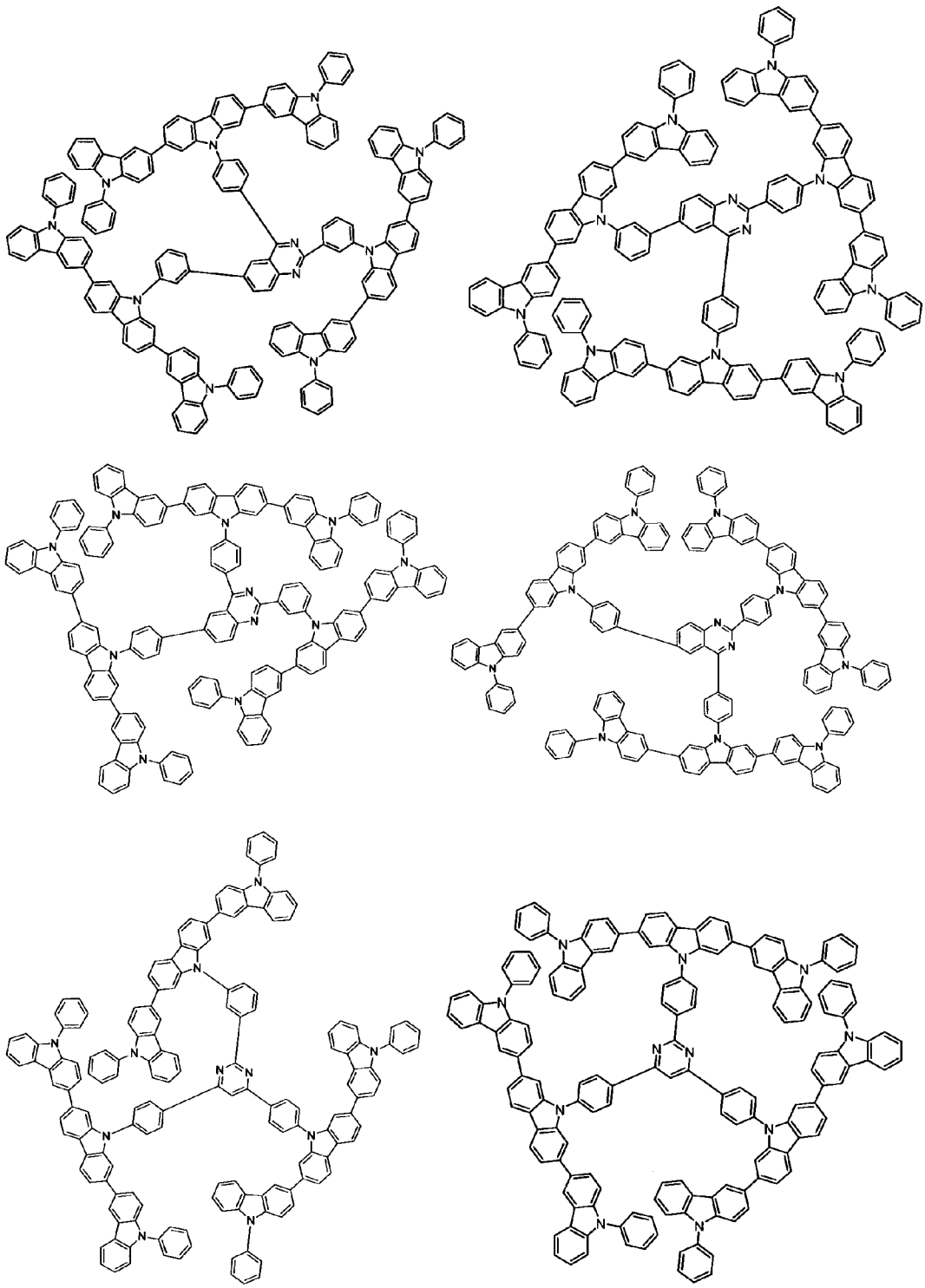
[0171]

[化91]



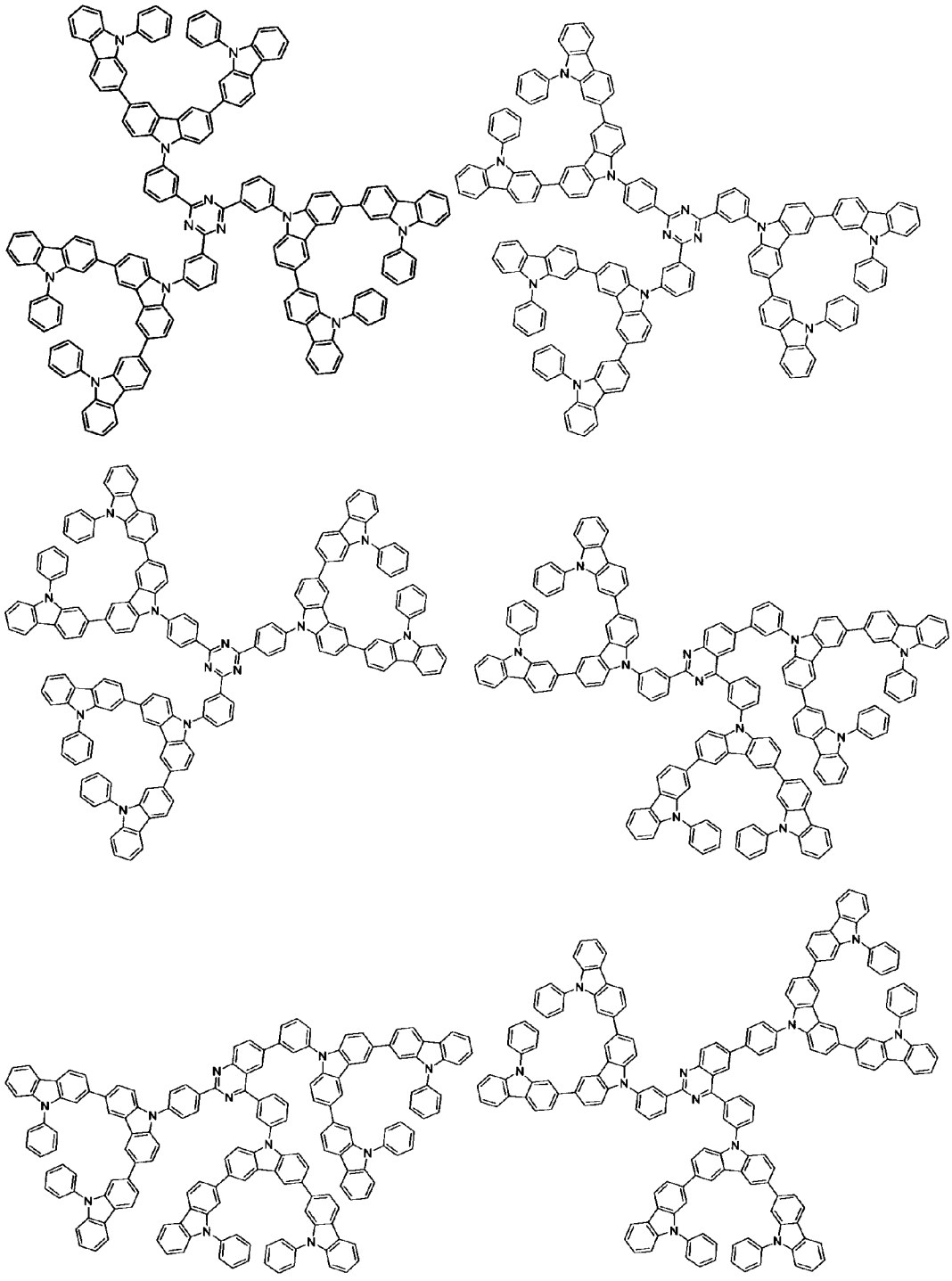
[0172]

[化92]



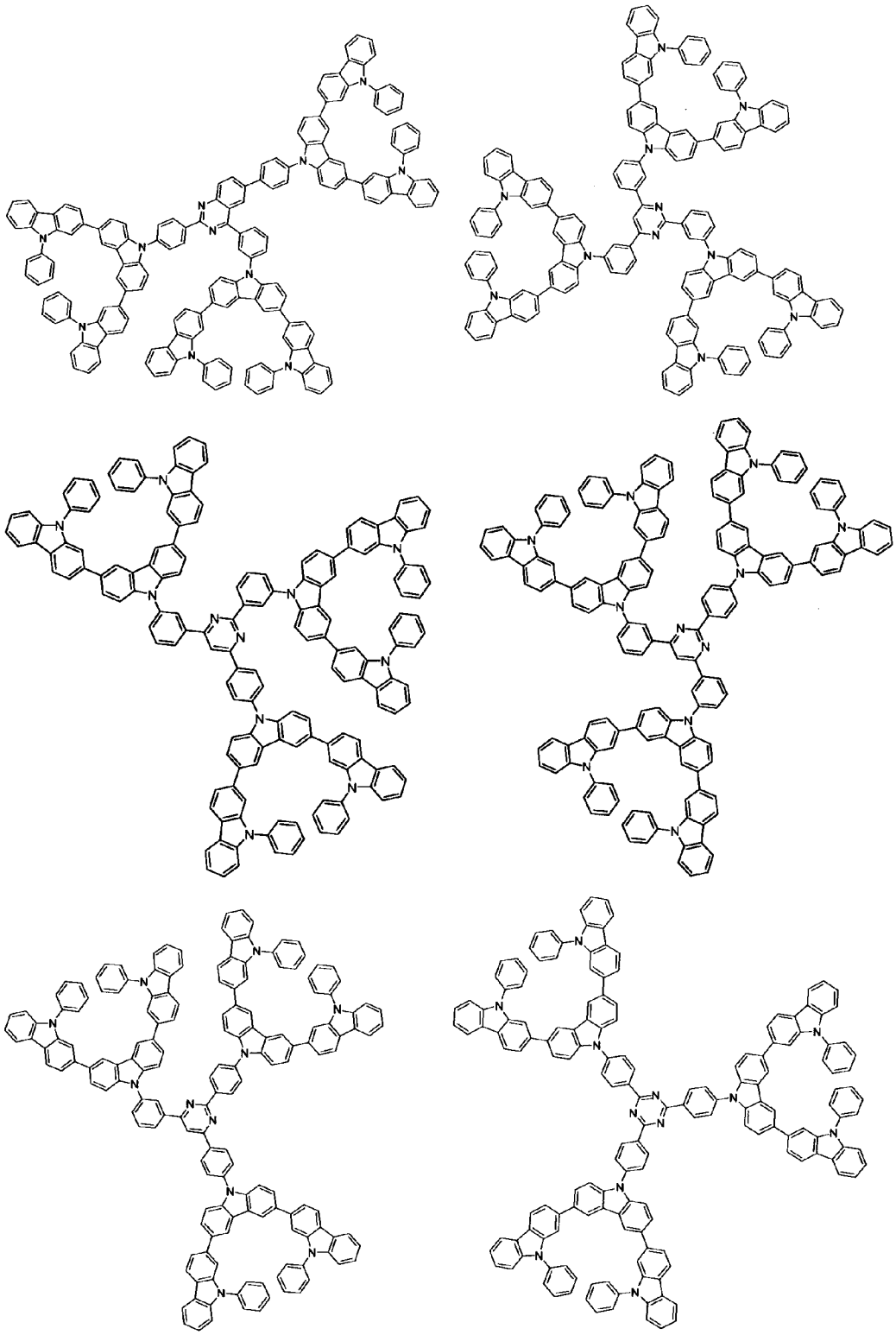
[0173]

[化93]



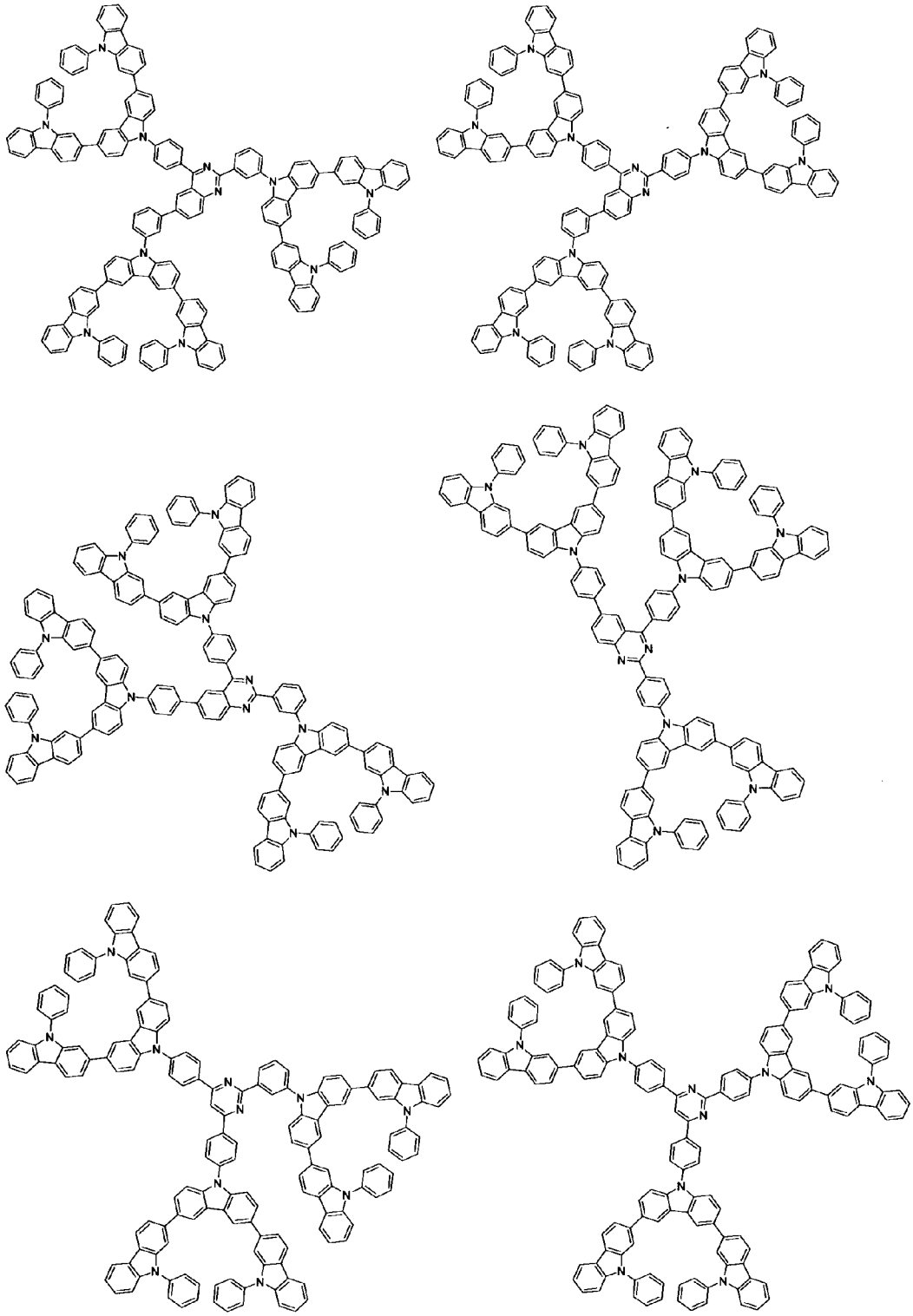
[0174]

[化94]



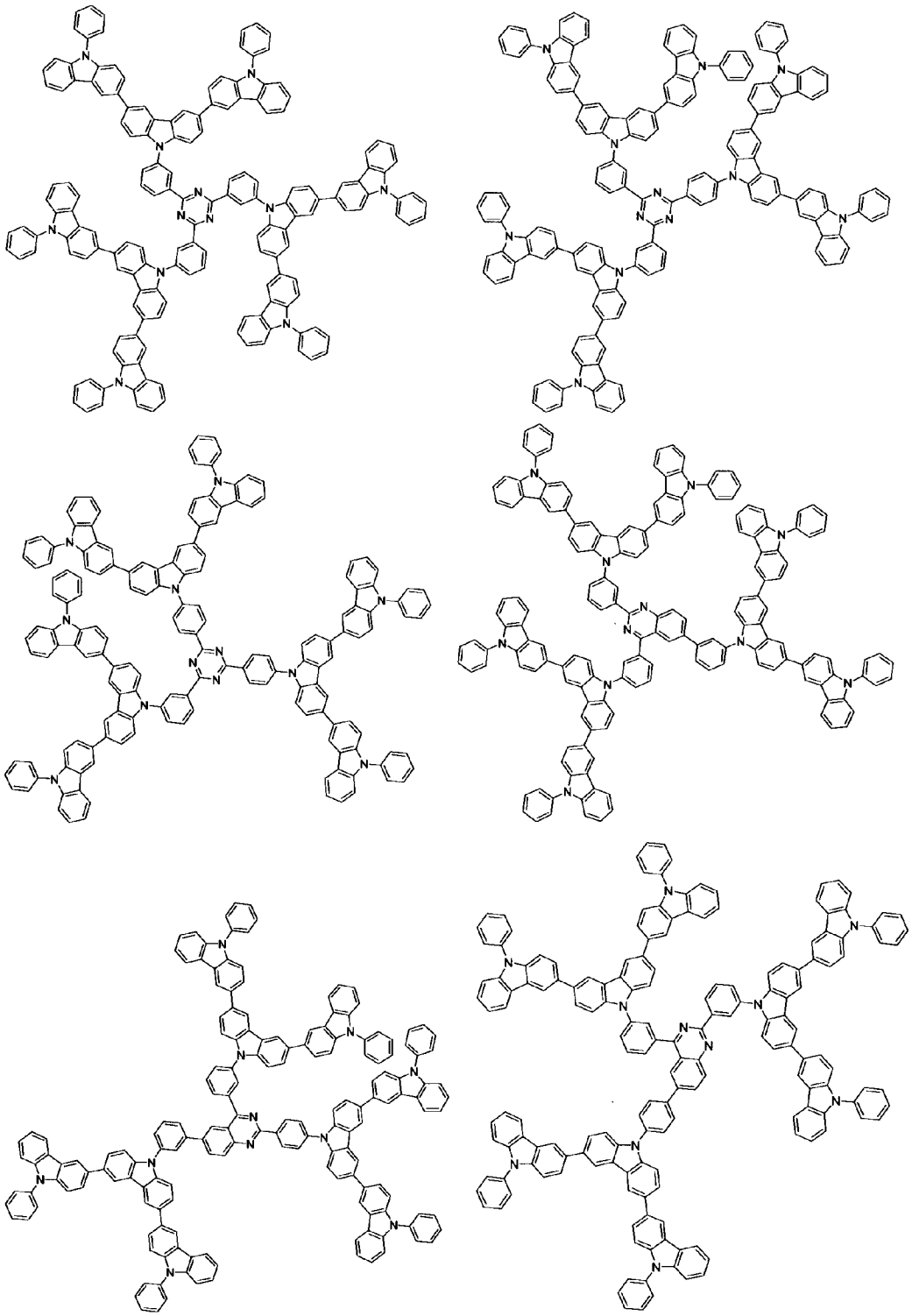
[0175]

[化95]



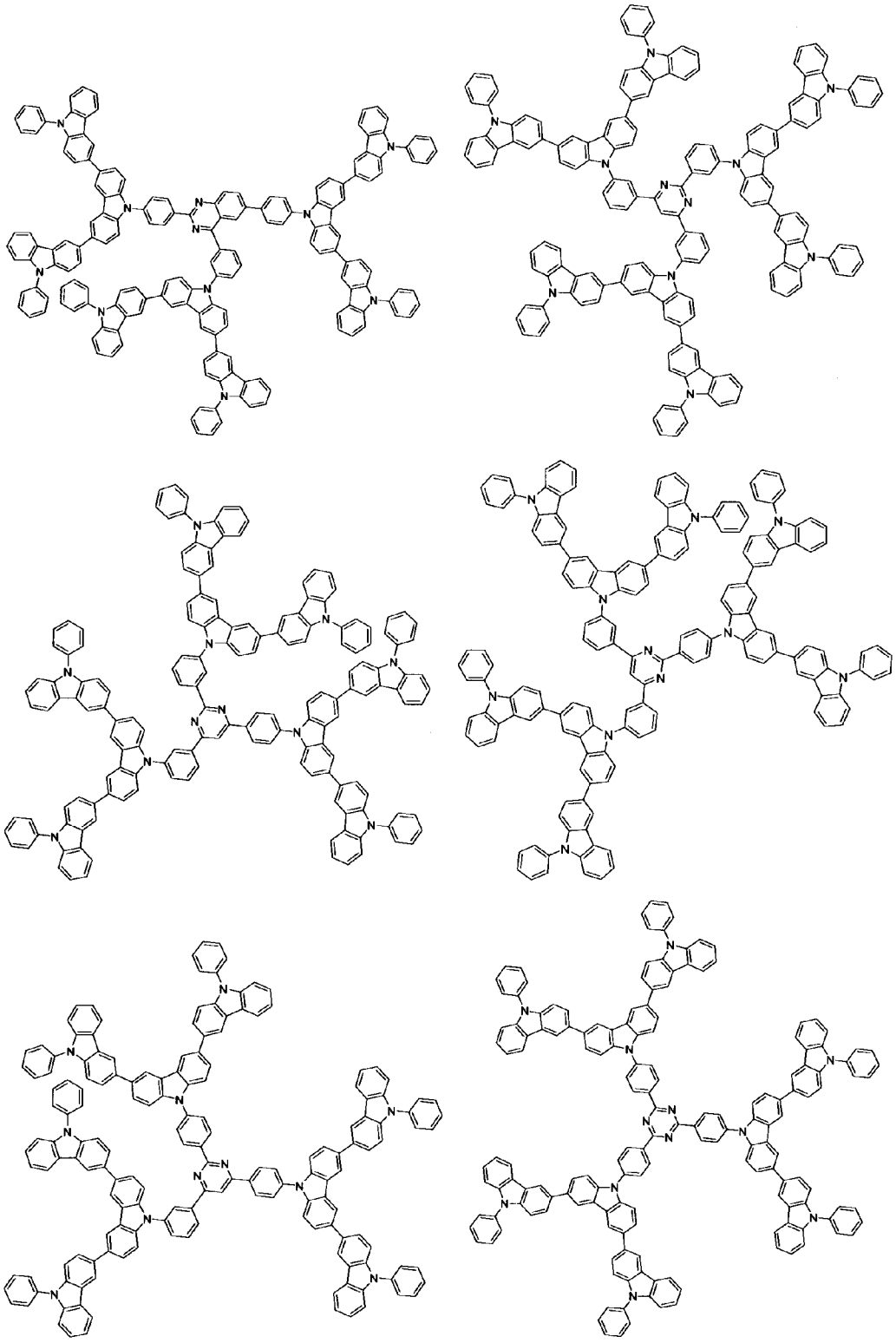
[0176]

[化96]



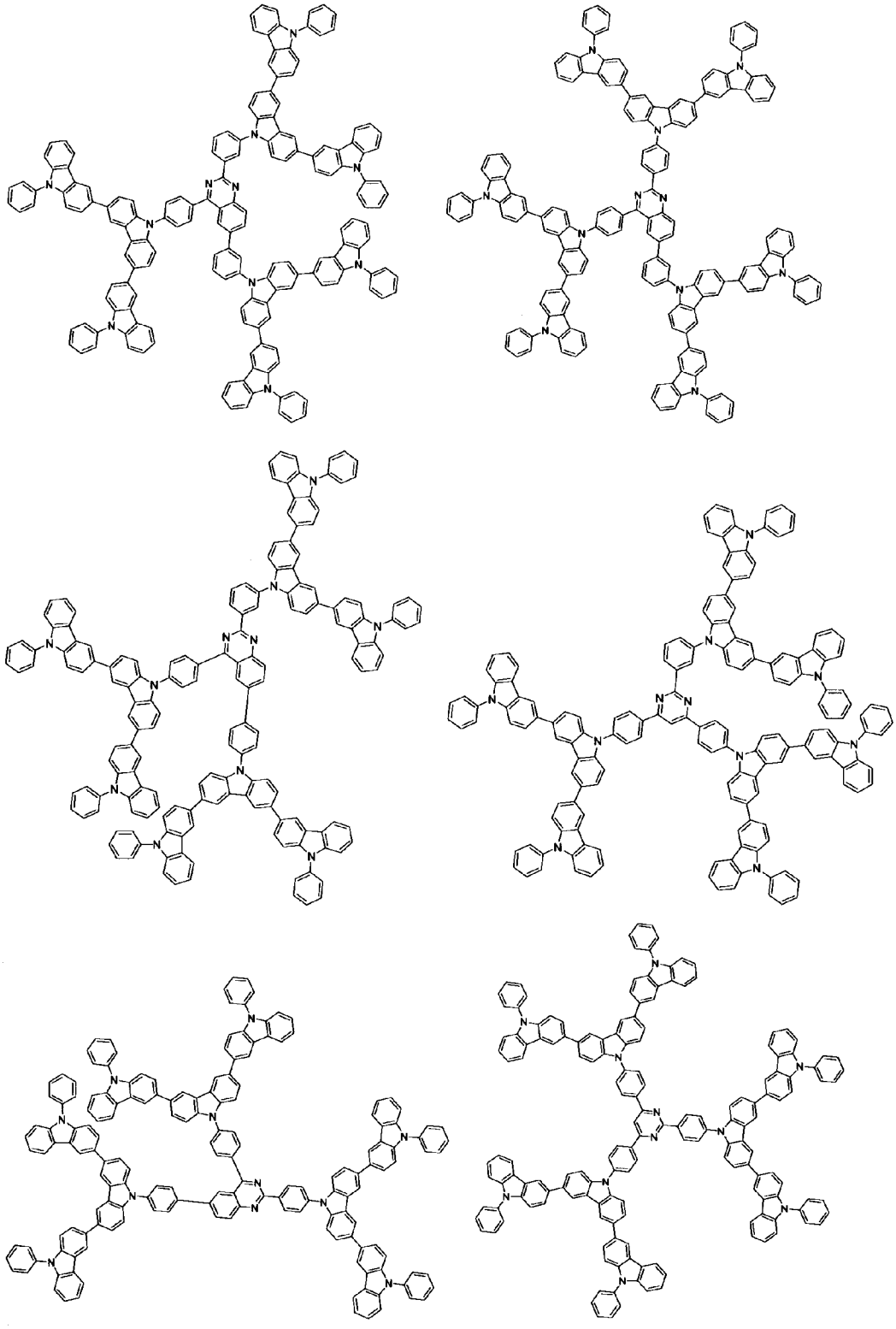
[0177]

[化97]



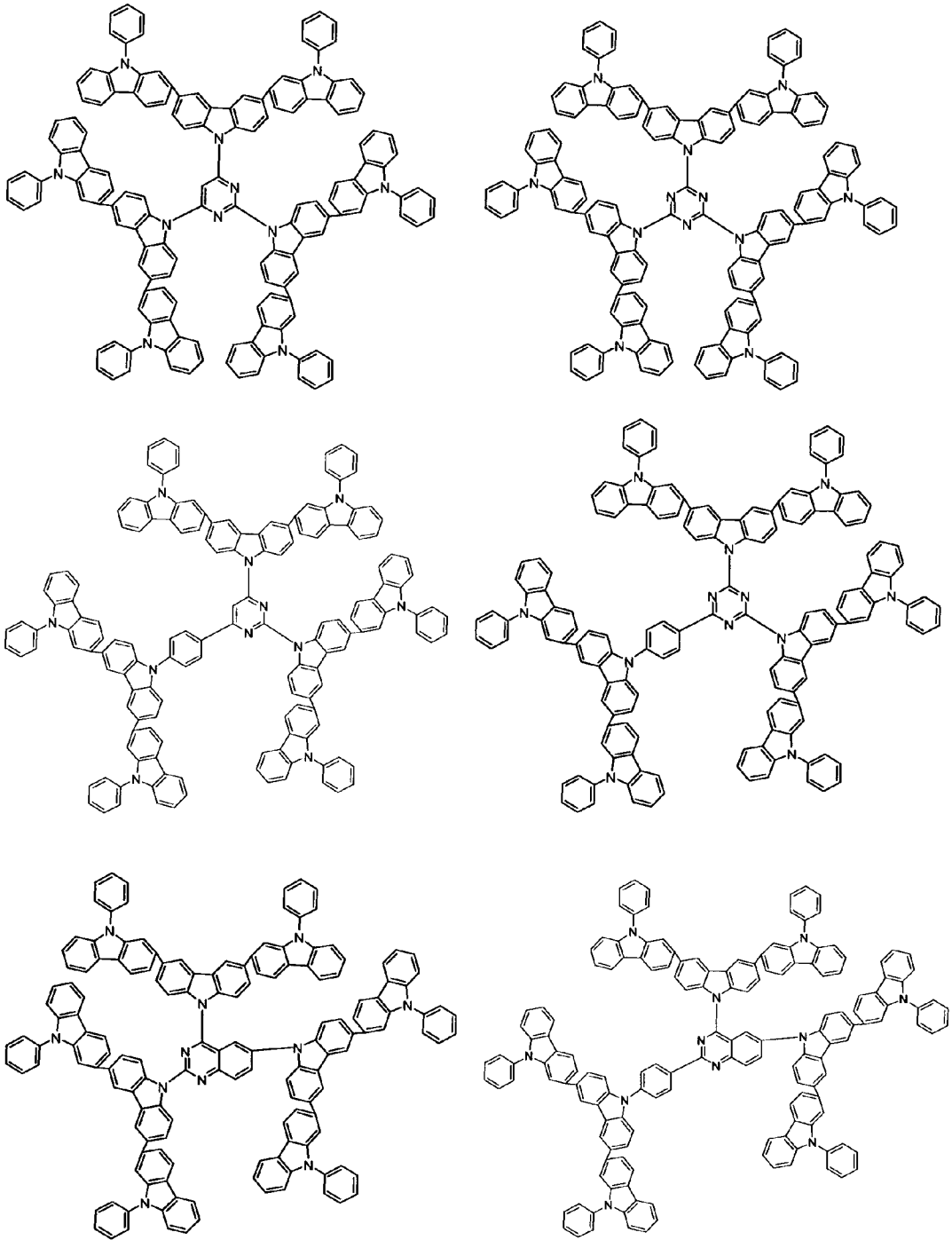
[0178]

[化98]



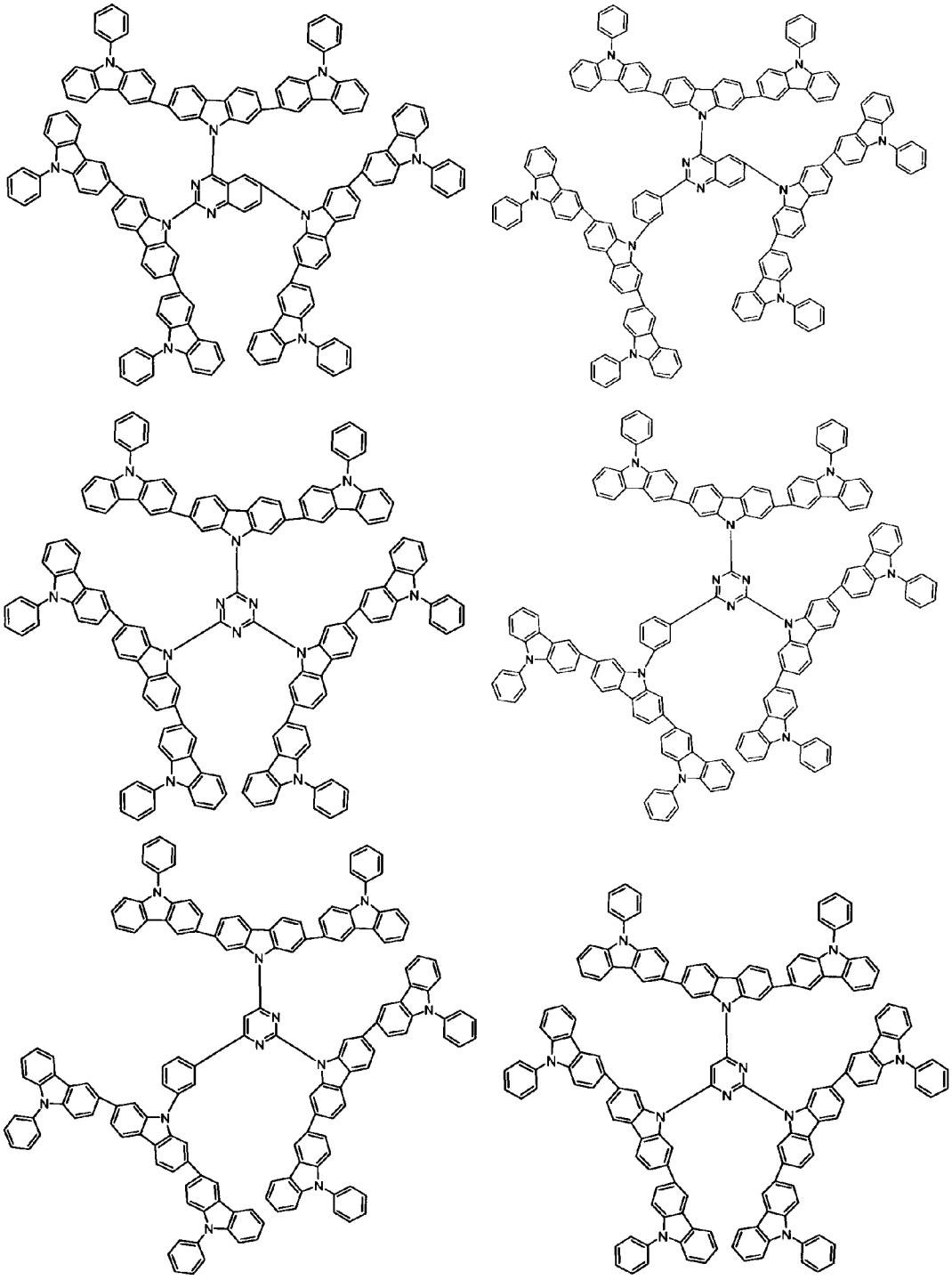
[0179]

[化99]



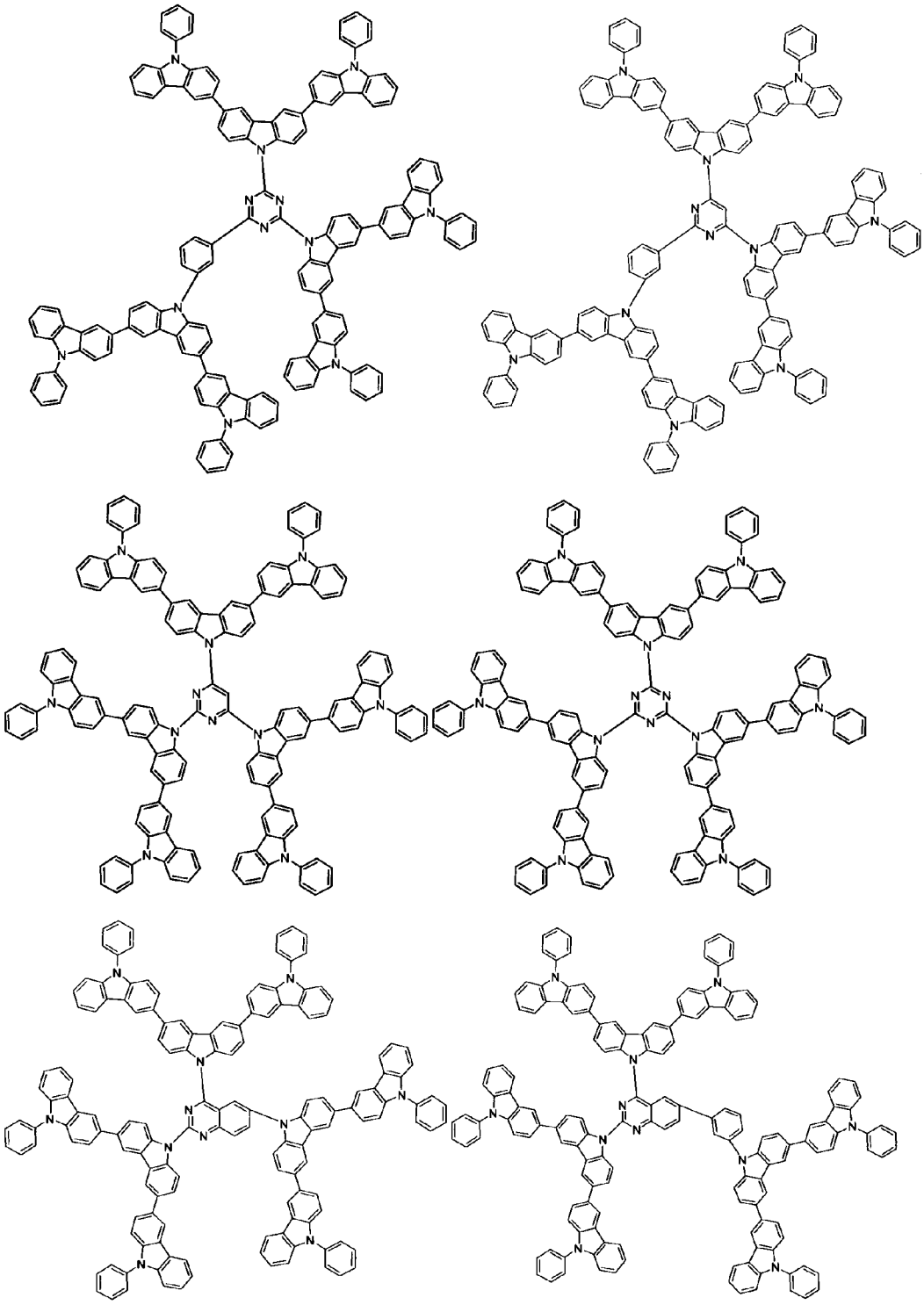
[0180]

[化100]



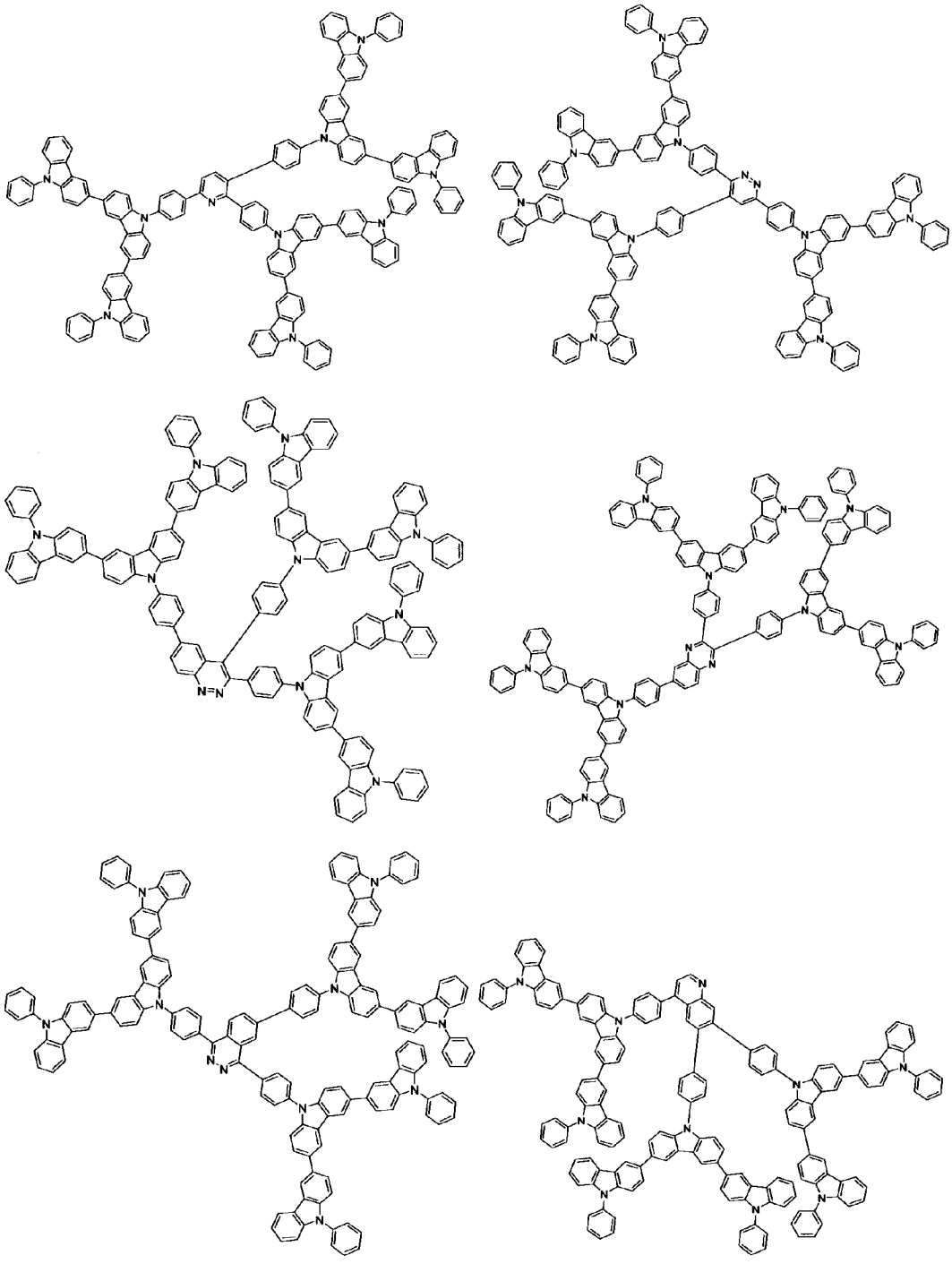
[0181]

[化101]



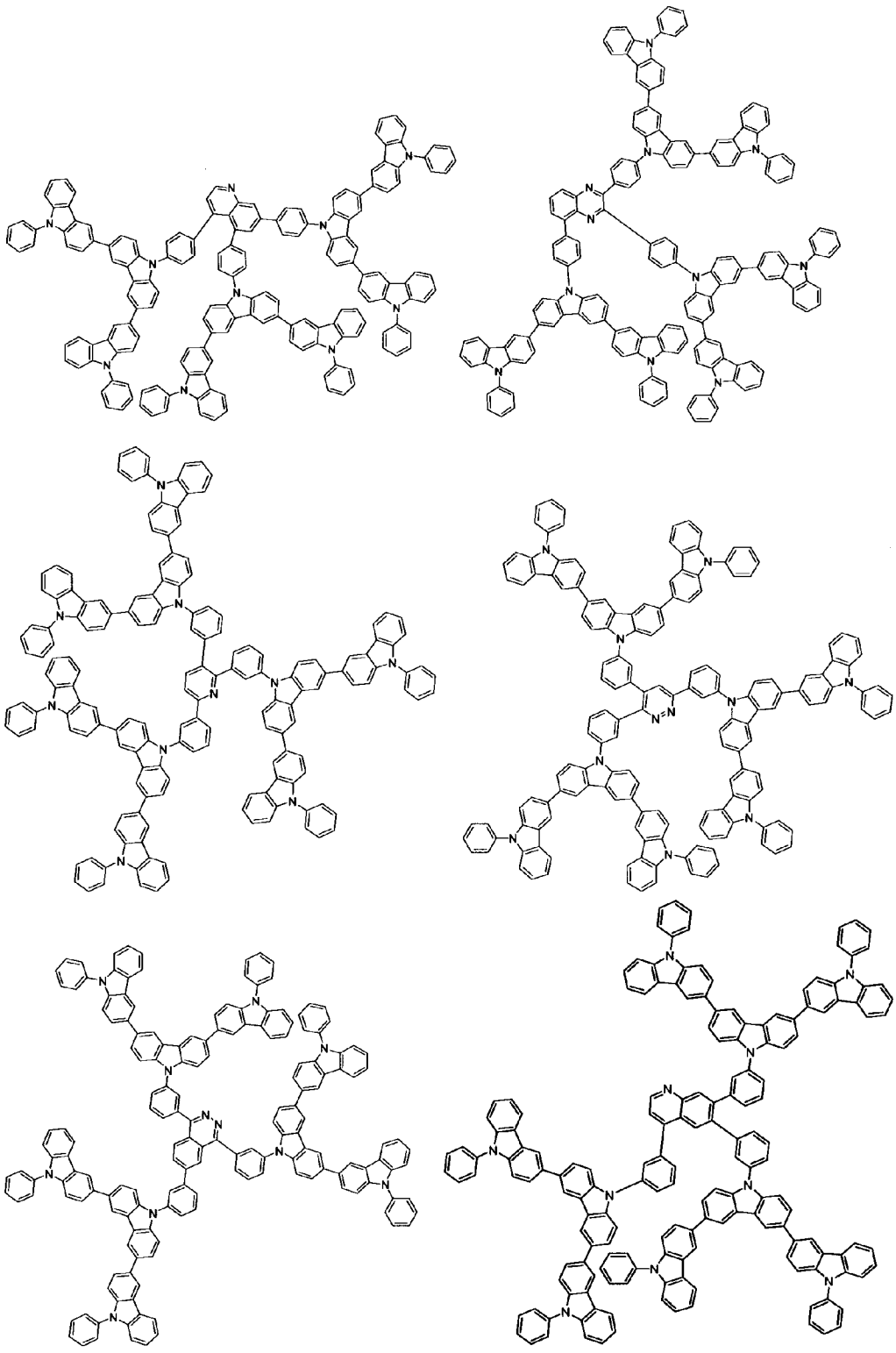
[0182]

[化102]



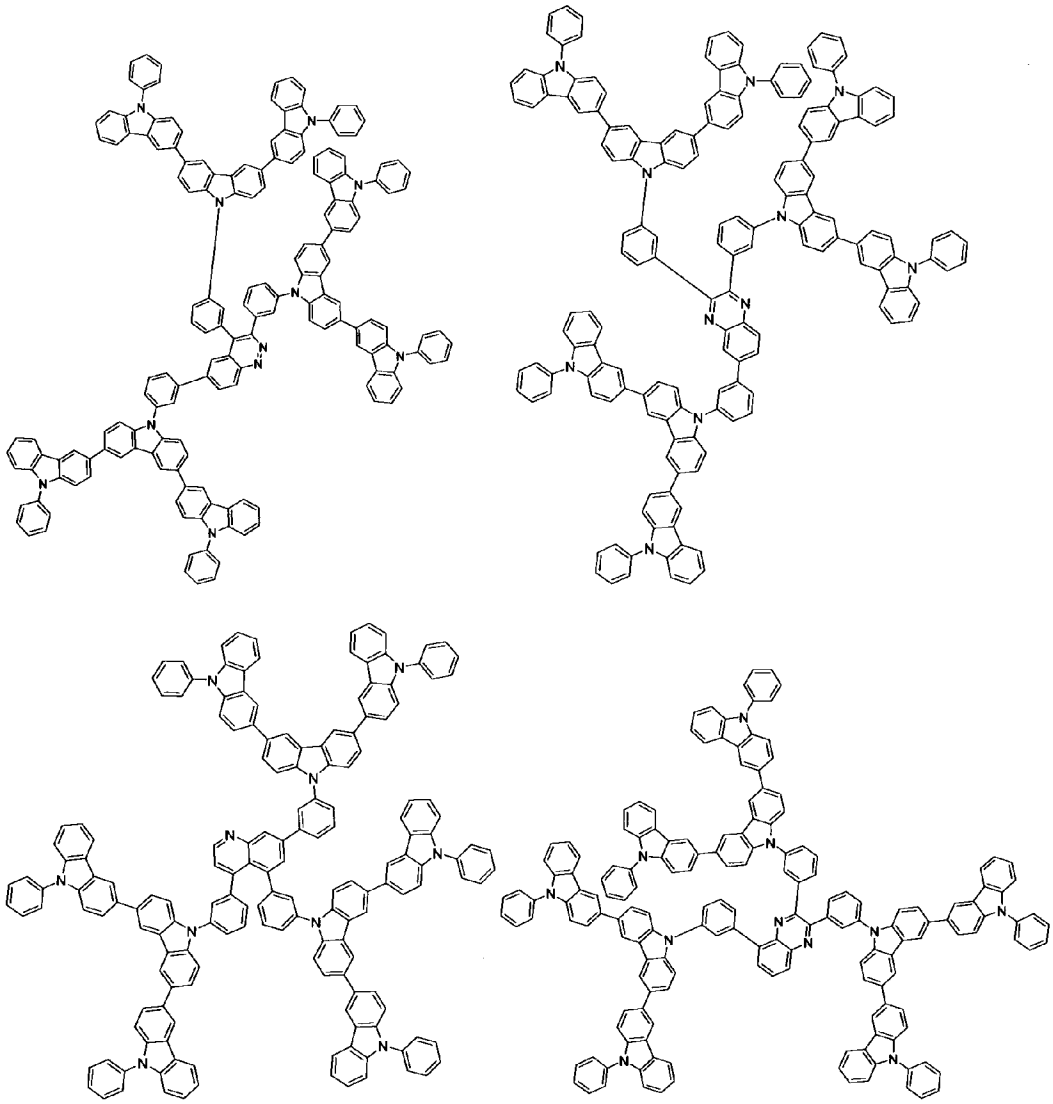
[0183]

[化103]



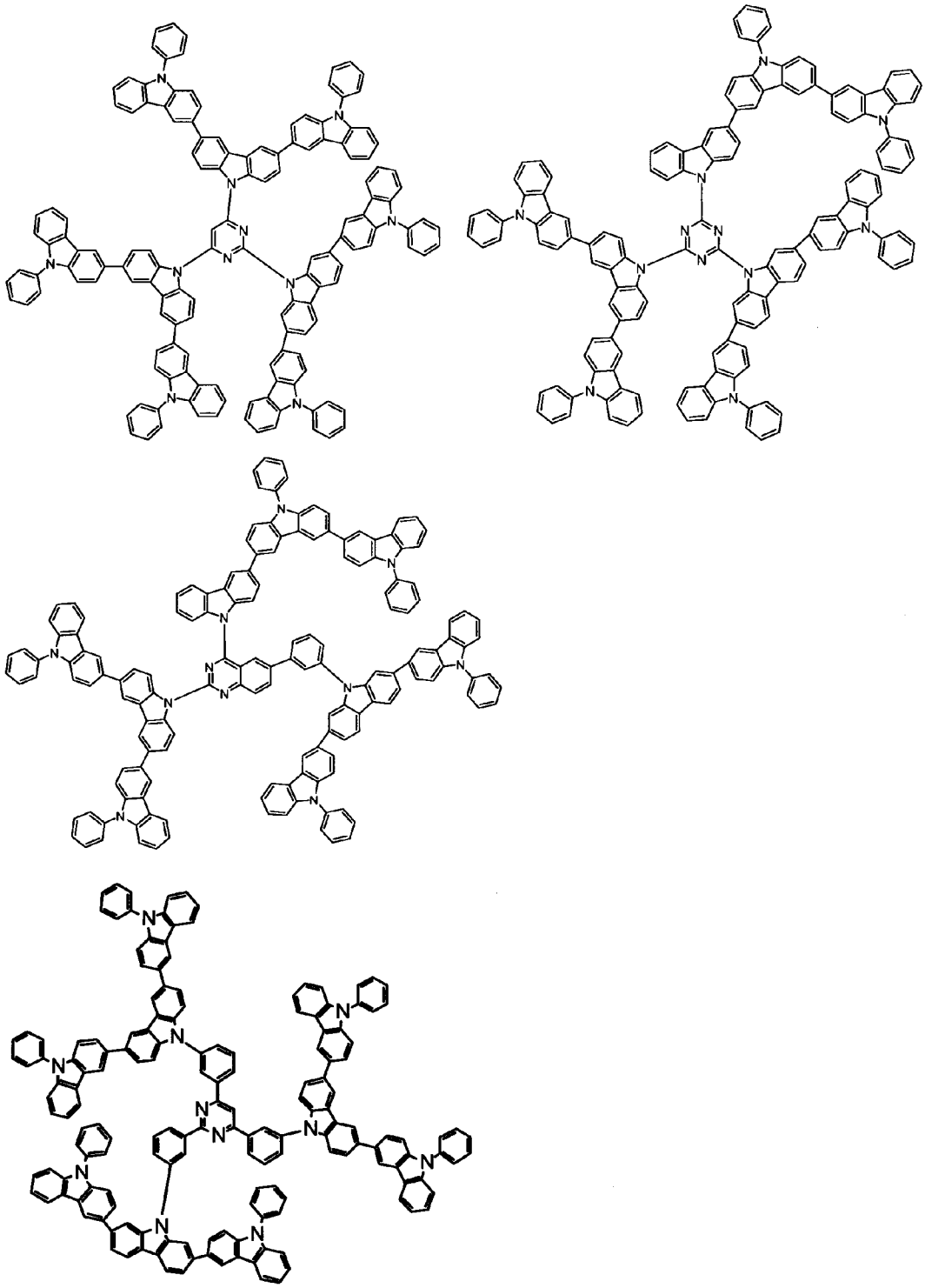
[0184]

[化104]



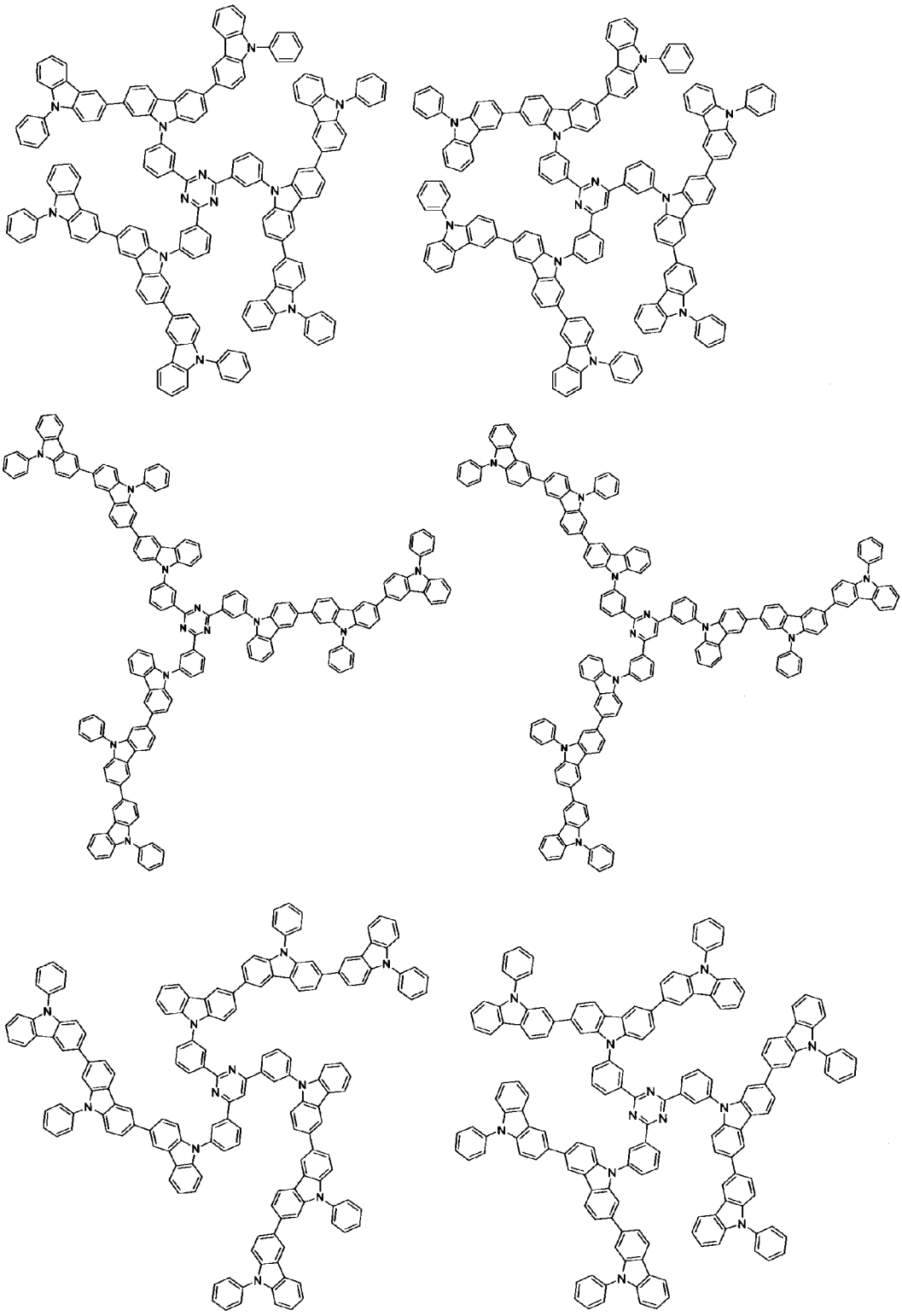
[0185]

[化105]



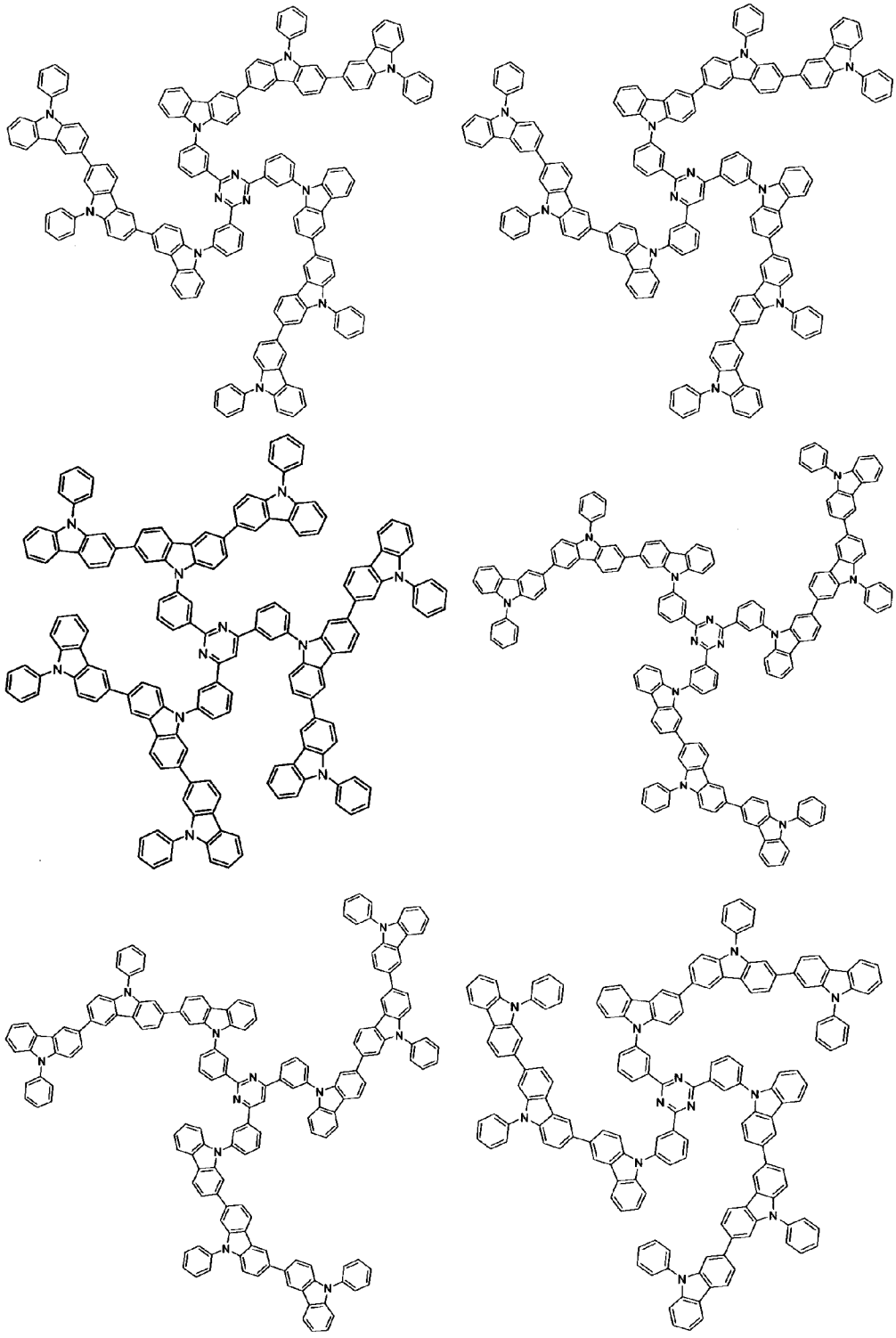
[0186]

[化106]



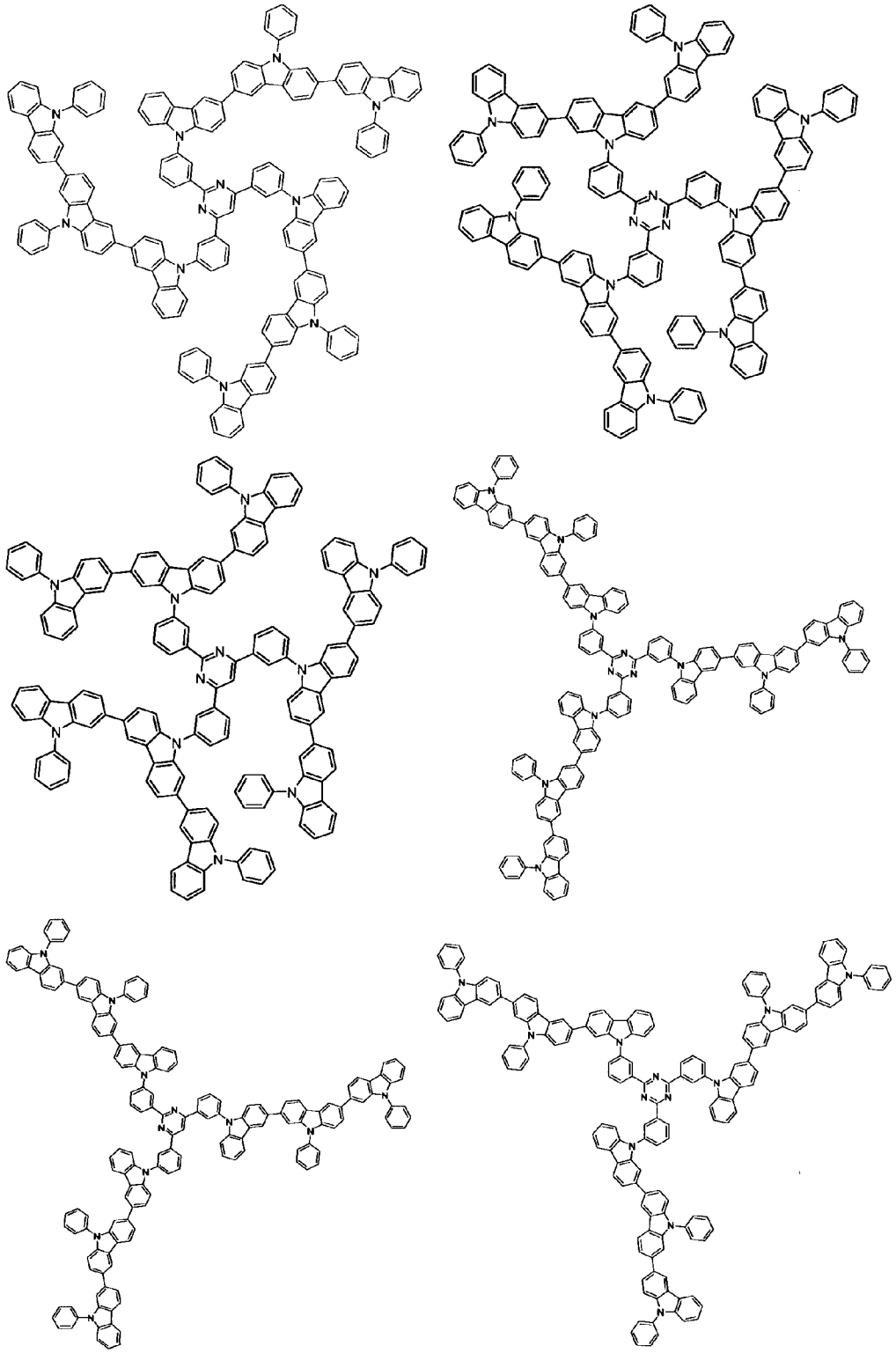
[0187]

[化107]



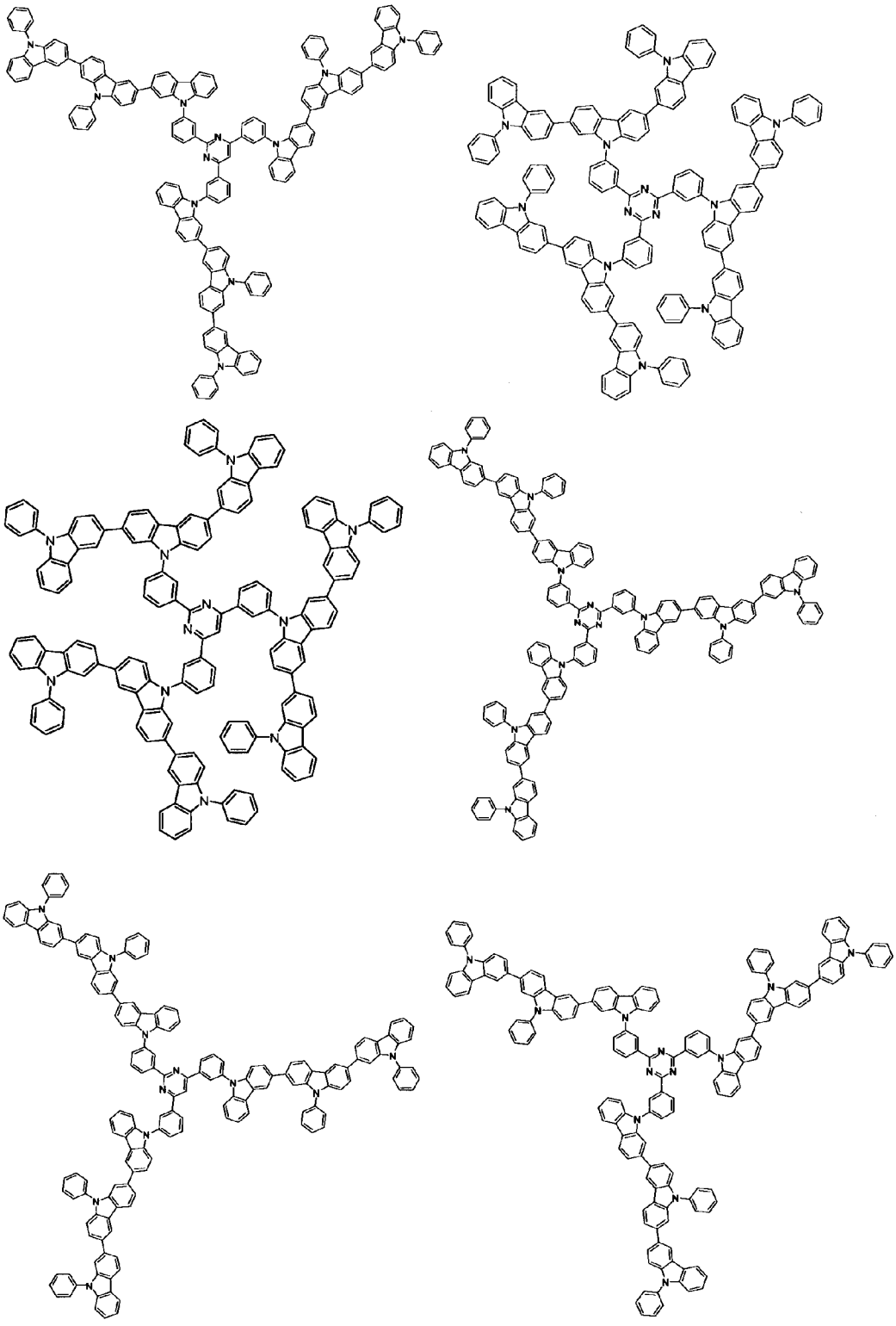
[0188]

[化108]



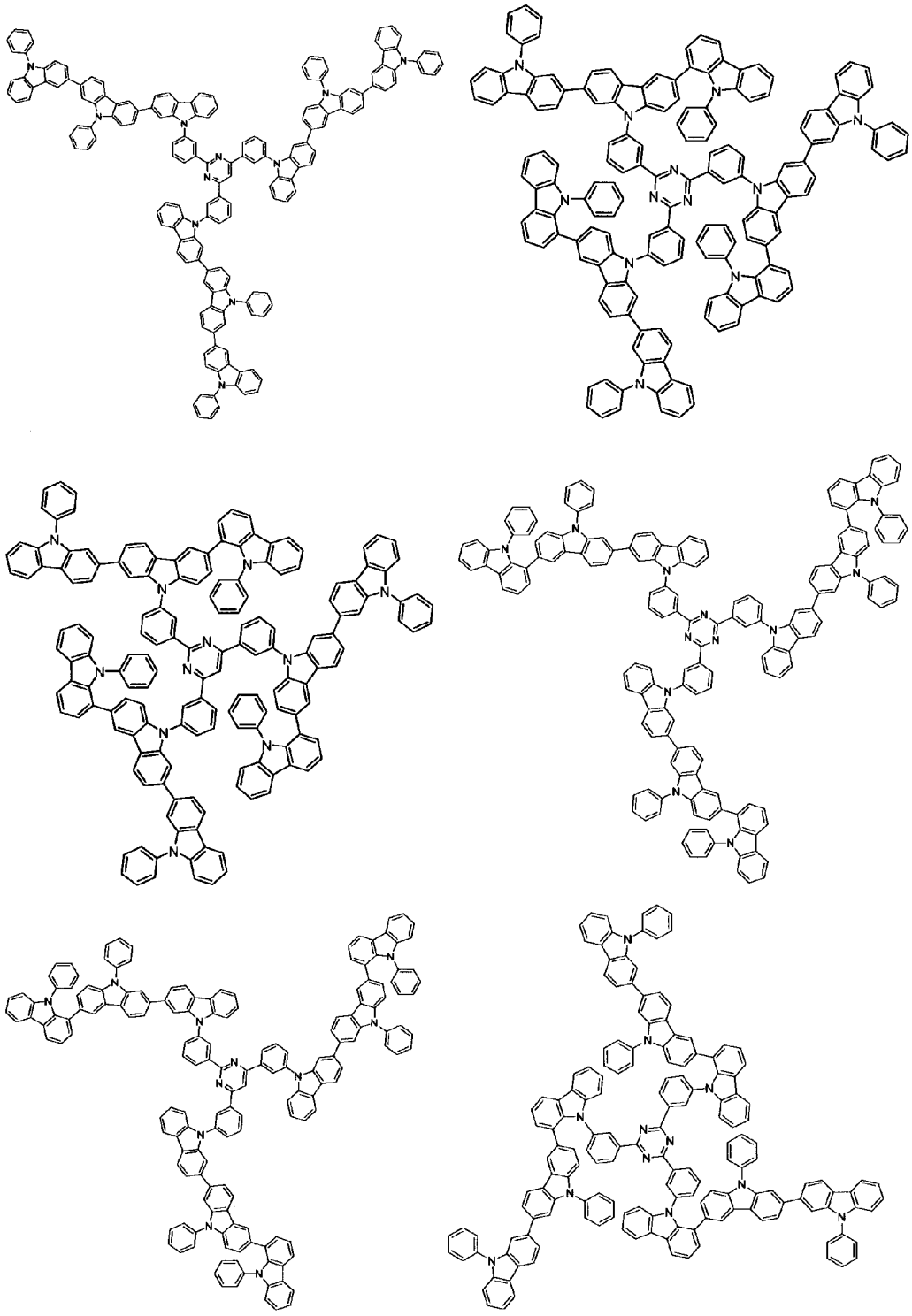
[0189]

[化109]



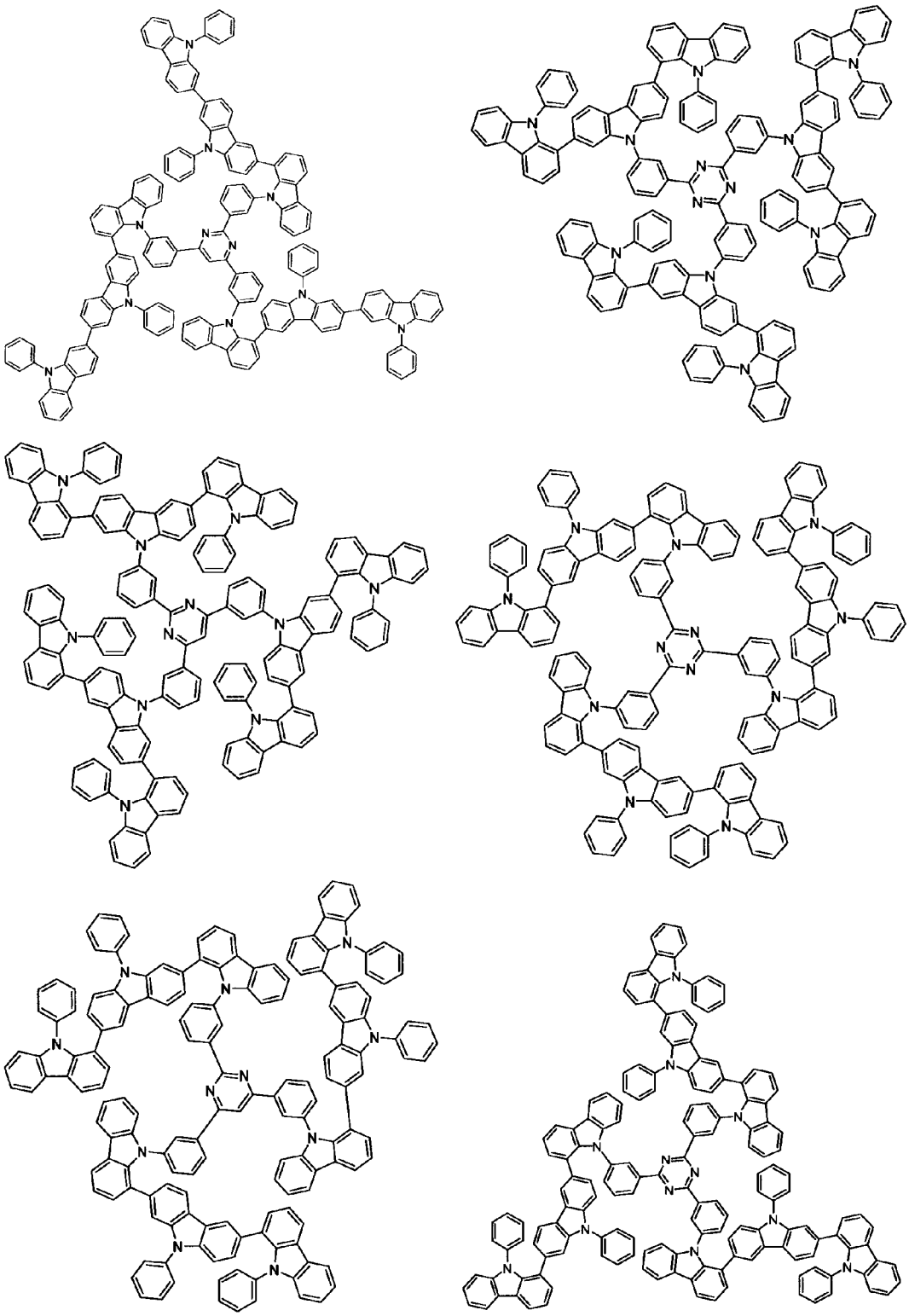
[0190]

[化110]



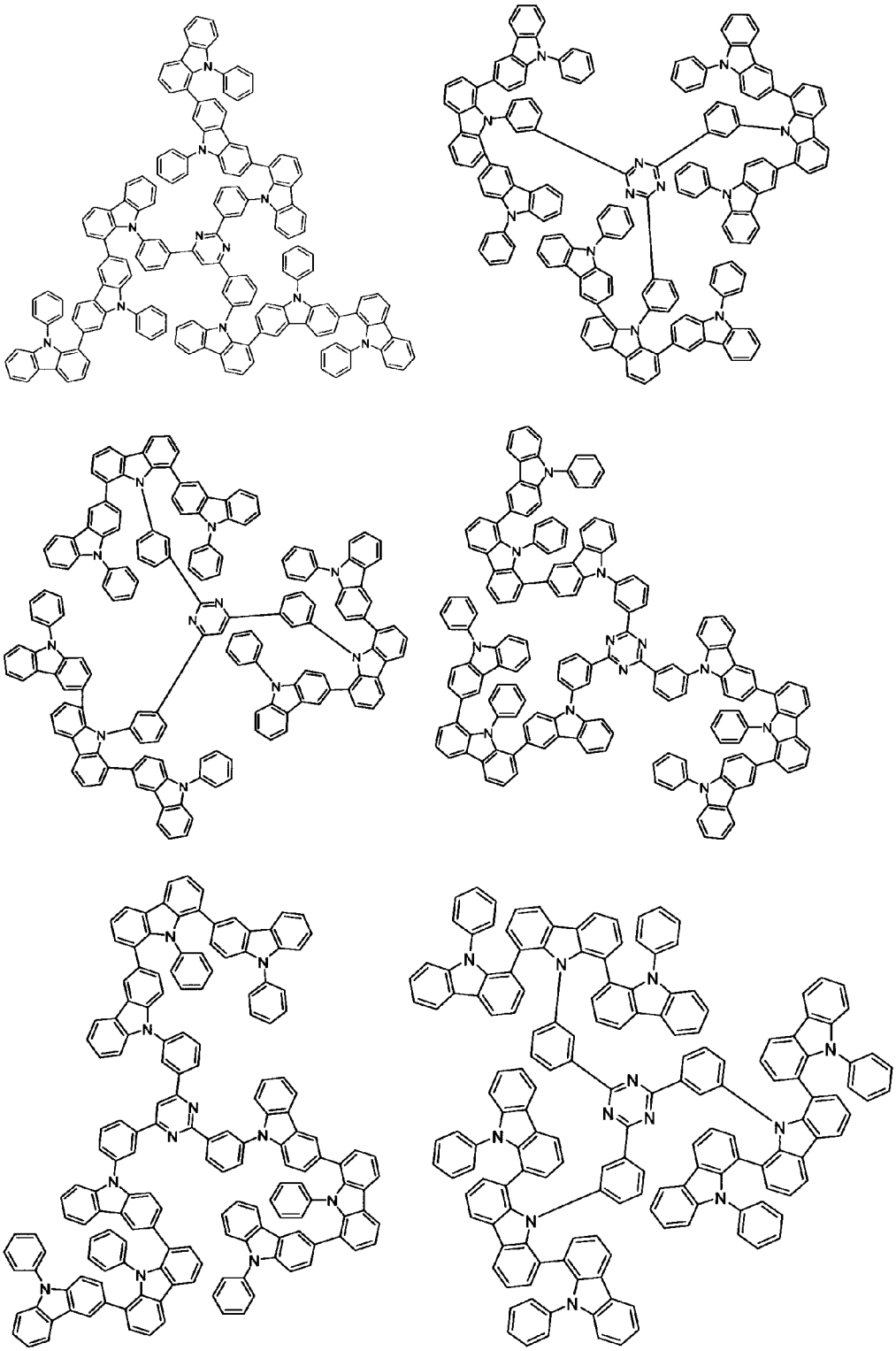
[0191]

[化111]



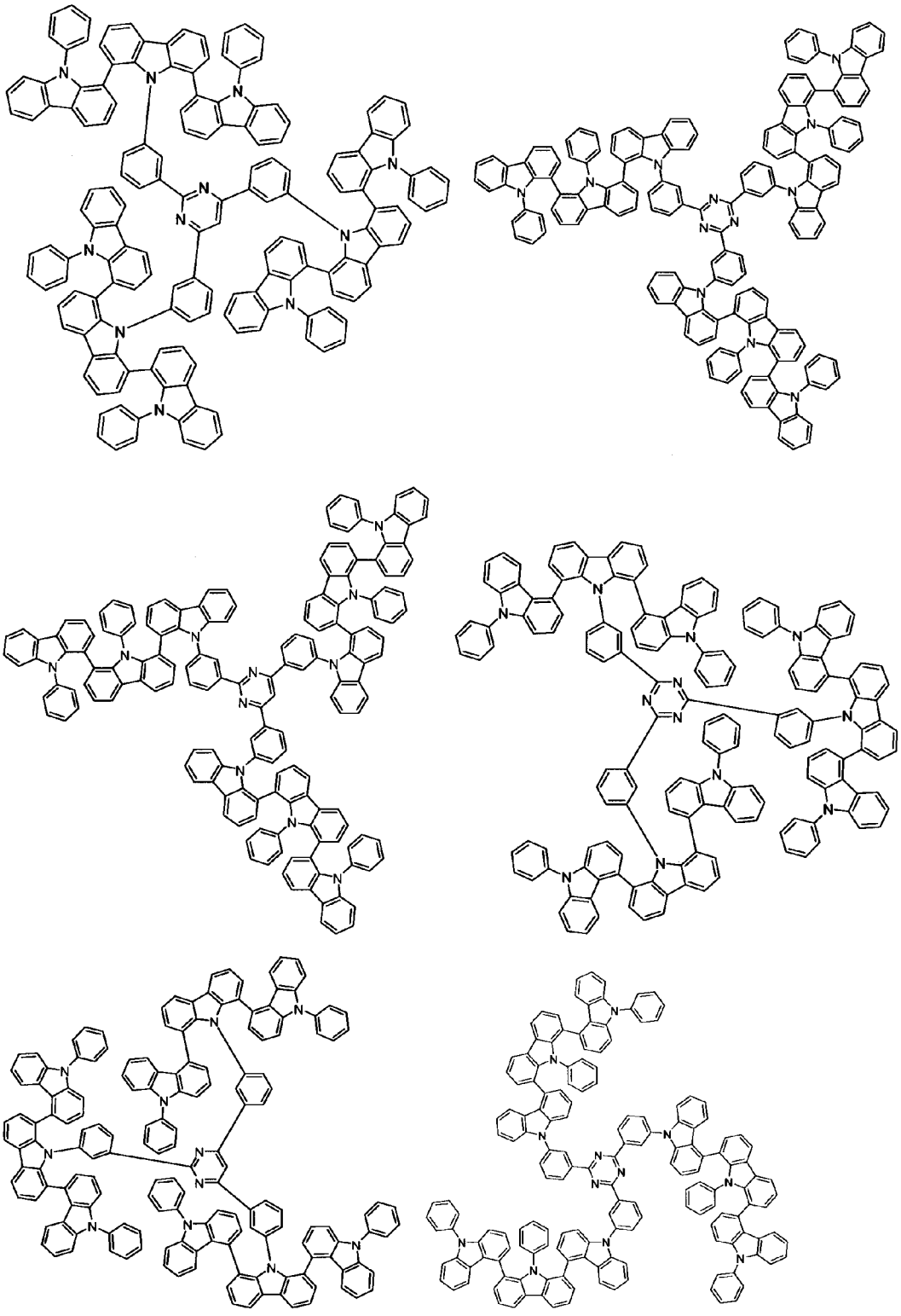
[0192]

[化112]



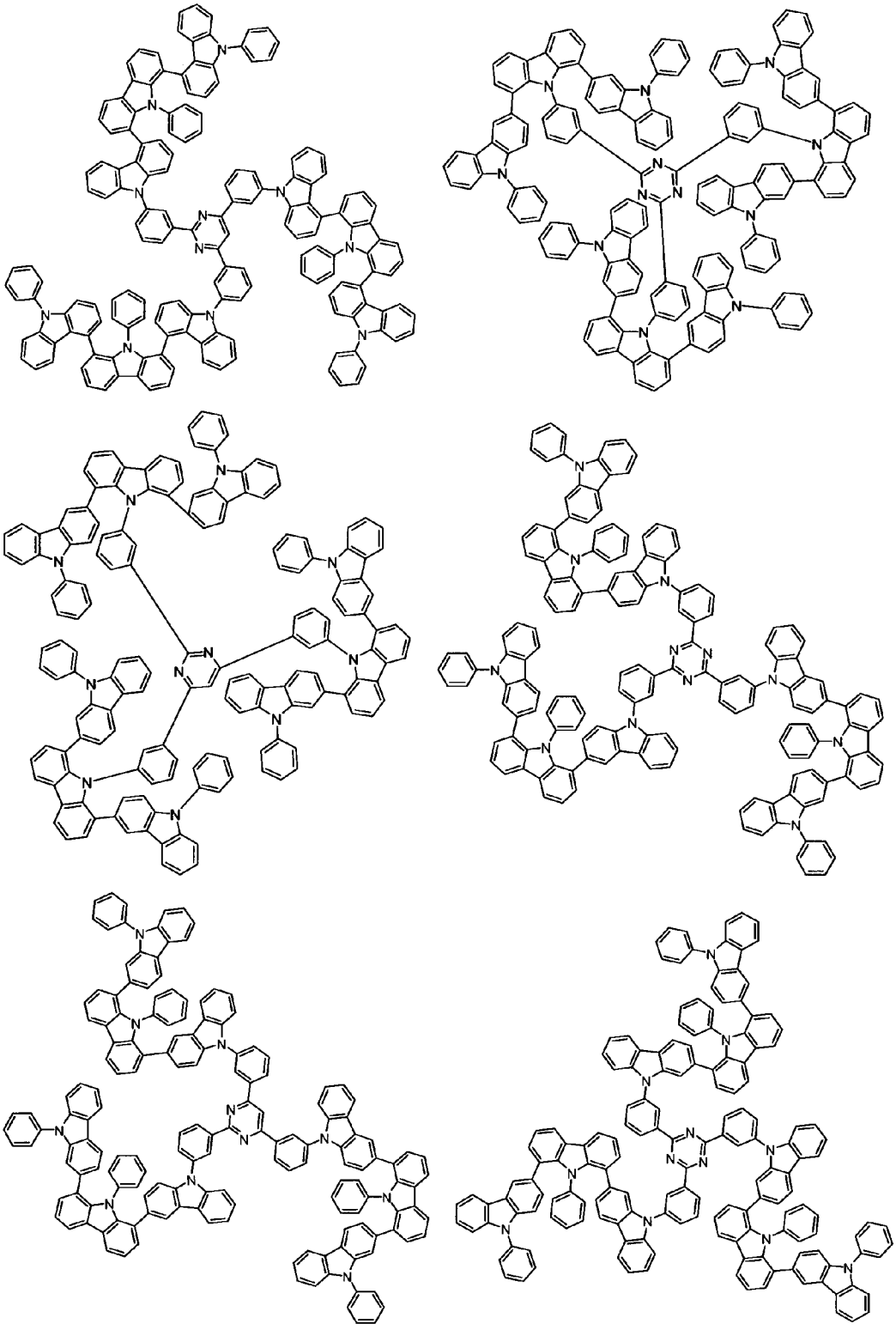
[0193]

[化113]



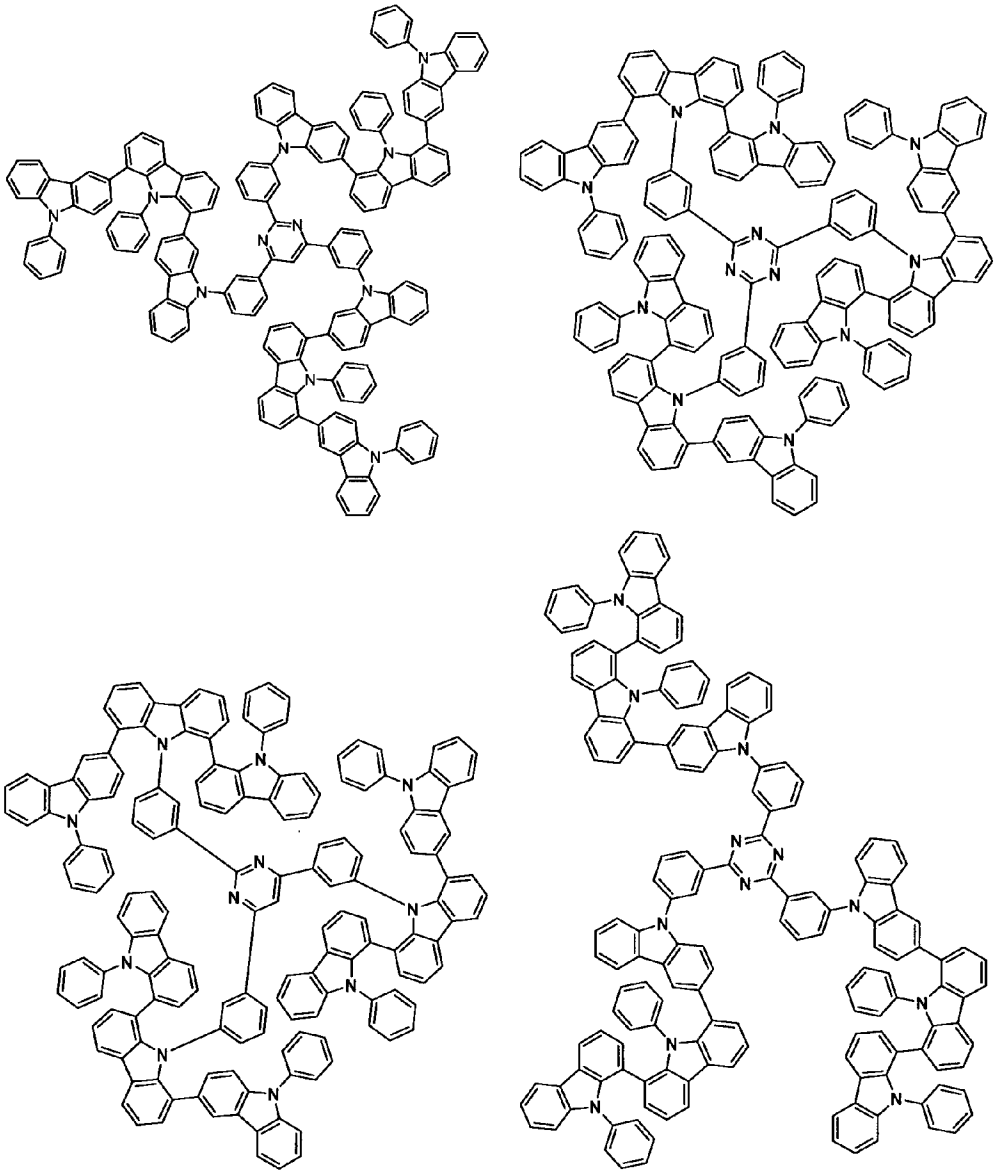
[0194]

[化114]



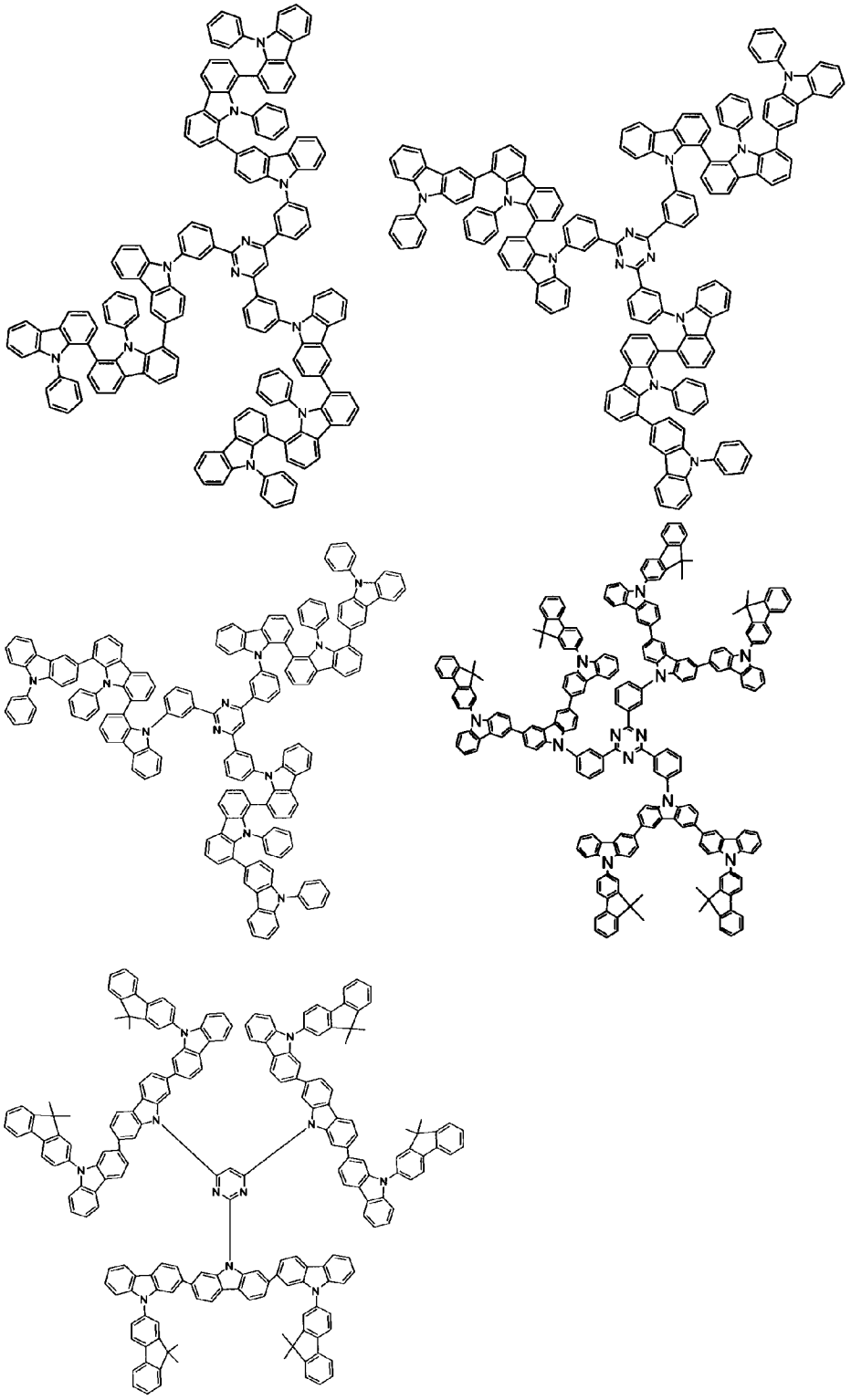
[0195]

[化115]



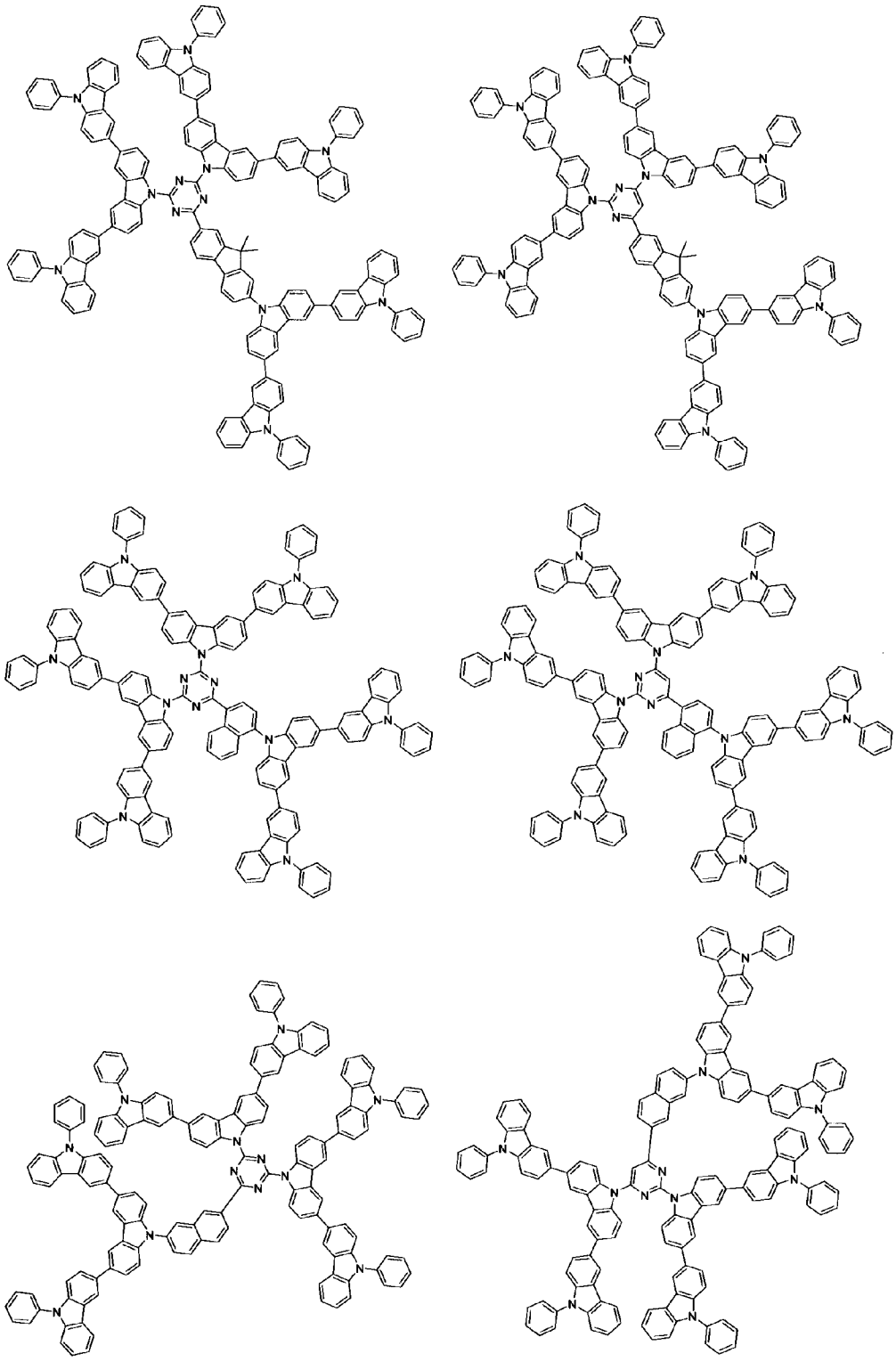
[0196]

[化116]



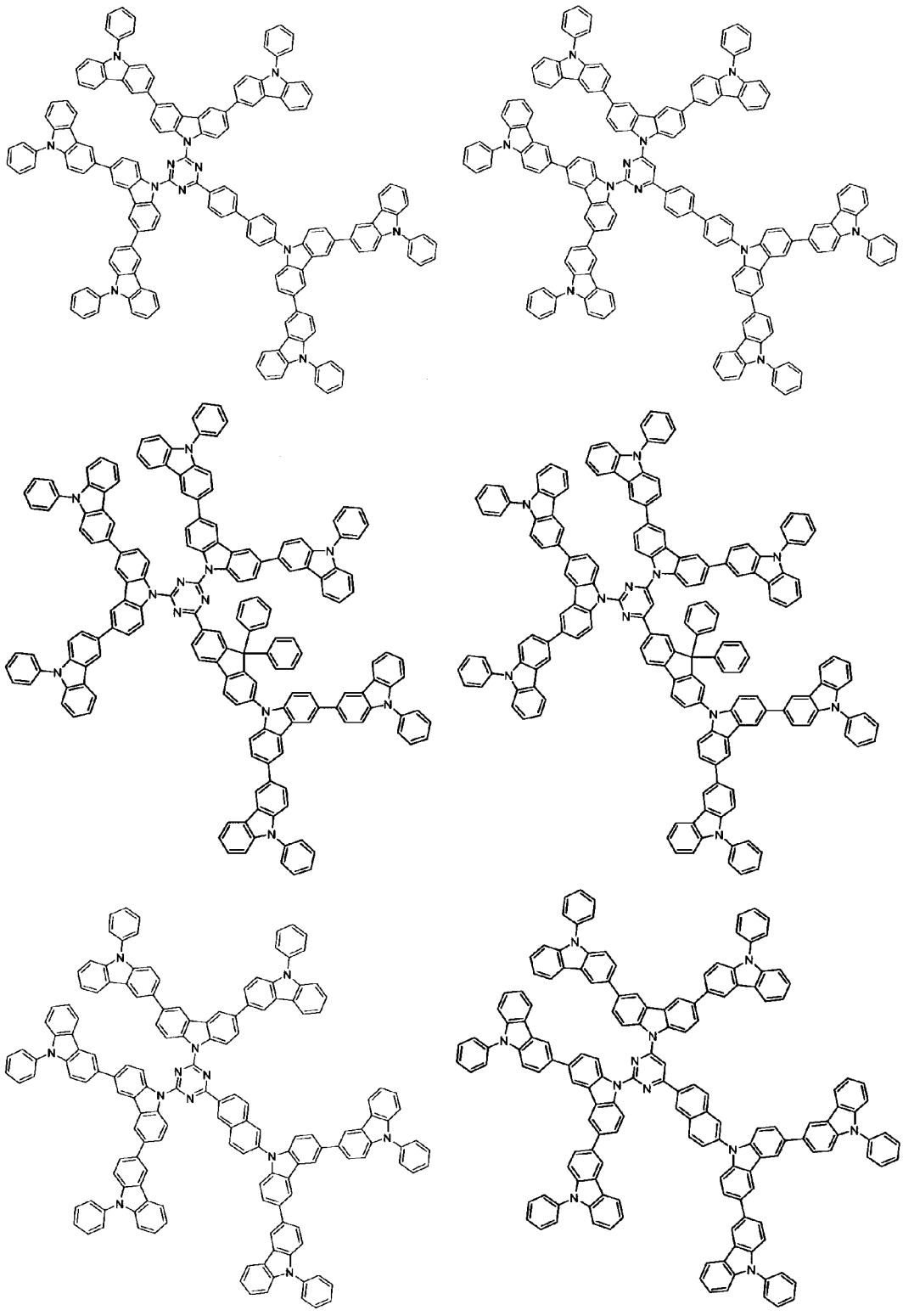
[0197]

[化117]



[0198]

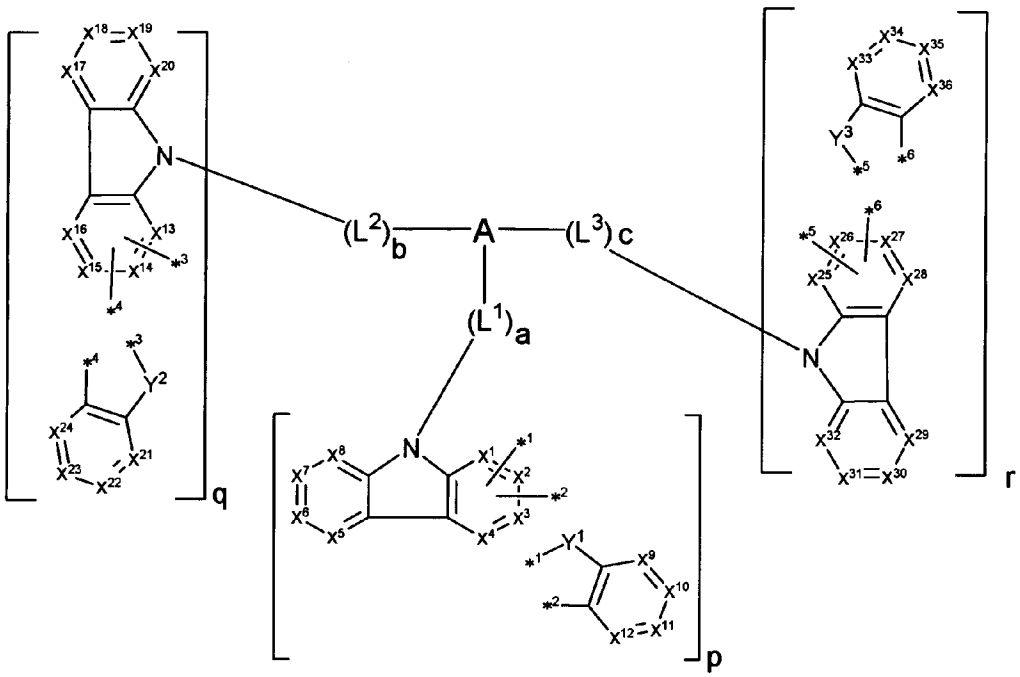
[化118]



[0199] [一般式（1［II］）で表される化合物]

本発明の一態様において、下記一般式（１［II］）で表される化合物（以下、「化合物（１［II］）」ともいう）が提供される。当該化合物（１［II］）は、塗布法により層形成する有機ＥＬ素子に好適な化合物であり、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料として有用である。

[0200] [化119]



(1[II])

[0201] （一般式（１［II］）中、Ａは、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の窒素含有複素環基を表す。

Ｌ[1]～Ｌ[3]は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の複素環基、又はこれらの基が２～４個結合してなる基である。

ａ～ｃは、それぞれ独立に、０又は１である。

Ｘ[1]～Ｘ[4]のうちの２つは、それぞれ＊[1]及び＊[2]に結合する炭素原子であり、それ以外の２つは、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子であり、

Ｘ[13]～Ｘ[16]のうちの２つは、それぞれ＊[3]及び＊[4]に結合する炭素原子であり、それ以外の２つは、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子であり、

X^{25}～X^{28}のうちの２つは、それぞれ＊^{5}及び＊^{6}に結合する炭素原子であり、それ以外の２つは、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子であり、

X^{5}～X^{12}、X^{17}～X^{24}、及びX^{29}～X^{36}は、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子であり、

Ｒは、水素原子又は置換基であって、複数存在するＲは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲ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。

Y^{1}～Y^{3}は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、－Ｃ（R^{A}）（R^{B}）－、－Ｓｉ（R^{C}）（R^{D}）－、－Ｐ（R^{E}）－、－Ｐ（＝Ｏ）（R^{F}）－、－Ｓ（＝Ｏ）$_{2}$－、又は－Ｐ（＝Ｓ）（R^{G}）－である。

R^{A}～R^{G}は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、R^{A}～R^{G}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。

ｐ～ｒは、それぞれ独立に、０～３の整数であり、ｐ＋ｑ＋ｒ＝３である。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。）

[0202] （一般式（１［II］）中の各基についての説明）

一般式（１［II］）中のＡが表す窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基の環形成原子数は５～３０であり、好ましくは６～２０、より好ましくは６～１４である。

当該窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基は、好ましくは、単環、２環から構成される縮合環、３環から構成される縮合環のいずれかであることが好ましい。

当該窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基が含有する窒素原子の数は、好ましくは１～３個、より好ましくは２個又は３個である。特に、窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基が単環の場合には、含有する窒素原子の数は好ましくは２個又は３個、より好ましくは３個であり、窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基が２環又は３環から構成される縮合環の場合には、含有する窒素原子の数は好ましくは２個である。

なお、当該窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基は、窒素原子以外のヘテロ原子（例えば、酸素原子、硫黄原子、ケイ素原子、及びセレン原子等）を含有していてもよいが、ヘテロ原子として窒素原子のみを含有していることが好ましい。

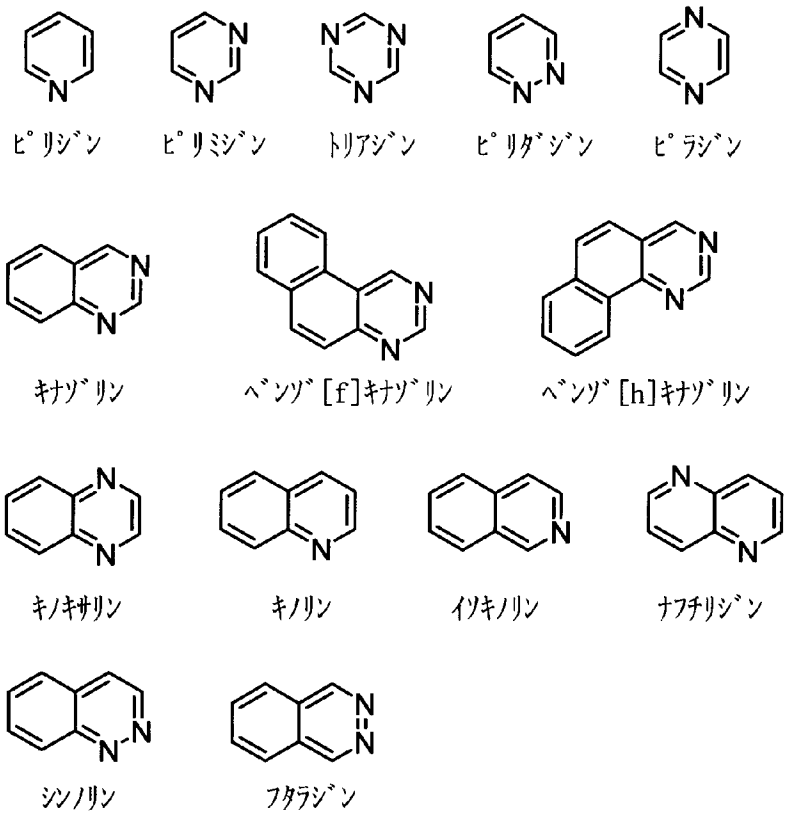
[0203] 一般式（１［II］）中のＡが表す窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基の具体例としては、ピロール、ピリジン、ピリダジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン、イミダゾール、ピラゾール、オキサジアゾール、チアジアゾール、トリアゾール、テトラゾール、インドール、イソインドール、インドリジン、キノリジン、キノリン、イソキノリン、ナフチリジン、シンノリン、フタラジン、キナゾリン、ベンゾ［ｆ］キナゾリン、ベンゾ［ｈ］キナゾリン、キノキサリン、ベンゾイミダゾール、インダゾール、カルバゾール、ビスカルバゾール、フェナントリジン、アクリジン、フェナントロリン、フェナジン、アザトリフェニレン、ジアザトリフェニレン、ヘキサアザトリフェニレン、アザカルバゾール、アザジベンゾフラン、アザジベンゾチオフェン及びジナフト［2’,3’:2,3:2’,3’:6,7］カルバゾールから選択される化合物の残基などが挙げられる。

ここで、残基とは、化合物から水素原子が１つ以上脱離して得られる１価以上の基である。なお、前記窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基の価数、つまり「Ａ」の価数は、一般式（１［II］）中の「ａ＋ｂ＋ｃ」の値に相当する。

[0204] 前記窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基としては、上記の中でも、下記の群から選択される化合物の残基が好ましい。

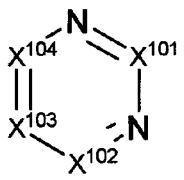
[0205]

[化120]



[0206] また、本発明の一態様においては、Ａが表す窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基が、下記一般式（Ａ１）で表される窒素含有複素環の残基であることが好ましい。

[0207] [化121]

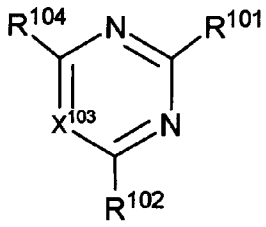


(A1)

（一般式（Ａ１）中、X^{101}～X^{104}は、それぞれＣ（R^{101}）～Ｃ（R^{104}）又は窒素原子を示す。R^{101}～R^{104}は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、R^{102}～R^{104}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。）

[0208] 本発明の一態様においては、Ａが表す窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基が、下記一般式（Ａ２）～（Ａ４）のいずれかで表される窒素含有複素環の残基であることがより好ましい。

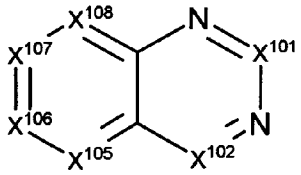
[0209] [化122]



(A2)

（一般式（Ａ２）中、X^{103}は、Ｃ（R^{103}）又は窒素原子を示す。R^{101}～R^{104}は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。R^{102}～R^{104}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。）

[0210] [化123]

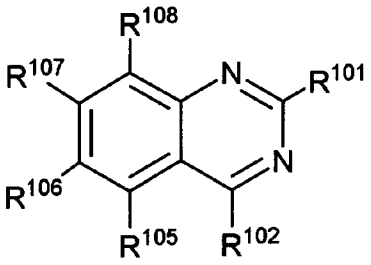


(A3)

（一般式（Ａ３）中、X^{101}、X^{102}、X^{105}～X^{108}は、それぞれＣ（R^{101}）、Ｃ（R^{102}）、Ｃ（R^{105}）～Ｃ（R^{108}）又は窒素原子を示す。R^{101}、R^{102}及びR^{105}～R^{108}、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、R^{102}及びR^{105}～R^{108}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。）

[0211]

[化124]



(A4)

（一般式（Ａ４）中、Ｒ[101]、Ｒ[102]及びＲ[105]～Ｒ[108]は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、Ｒ[102]及びＲ[105]～Ｒ[108]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。）

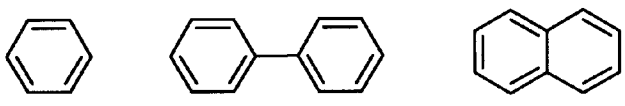
[0212] なお、一般式（１［II］）中のＡが表す窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基は、任意に置換基を有していてもよい。

窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基に置換し得る置換基としては、具体的には上述の置換基が挙げられ、例えば、２つの置換基が互いに結合して形成した環を有する（アザ）カルバゾリル基や、当該２つの置換基が互いに結合して形成した環を有する（アザ）カルバゾリル基で更に置換されたアリール基及びヘテロアリール基も含まれる。

[0213] 前記一般式（１［II］）において、Ｌ[1]～Ｌ[3]が表す芳香族炭化水素基の環形成炭素数は６～３０であり、好ましくは６～１８、より好ましくは６～１３、さらに好ましくは６～１２、特に好ましくは６～１０である。

本発明の一態様においては、Ｌ[1]～Ｌ[3]が表す芳香族炭化水素基としては、Ｌ[1]～Ｌ[3]の少なくとも一つが下記式で表されるいずれかの化合物の２～４価の残基であることが好ましく、Ｌ[1]～Ｌ[3]のすべてが下記式で表されるいずれかの化合物の２～４価の残基であることがより好ましい。

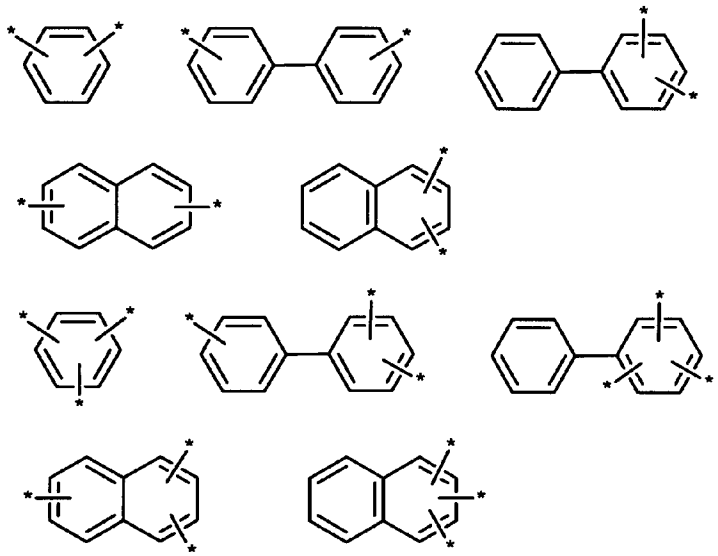
[0214] [化125]



（上記化合物中の炭素原子は置換基と結合していてもよい。）

[0215] さらに、本発明の一態様においては、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}が表す芳香族炭化水素基としては、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}の少なくとも一つが下記式で表されるいずれかの基であることが好ましく、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}のすべてが下記式で表されるいずれかの化合物の２～４価の残基であることがより好ましい。

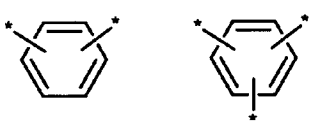
[0216] [化126]



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

[0217] 上記の中でも、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}が表す芳香族炭化水素基としては、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}の少なくとも一つが下記式で表されるいずれかの基であることがより好ましく、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}のすべてが下記式で表されるいずれかの基であることが更に好ましい。

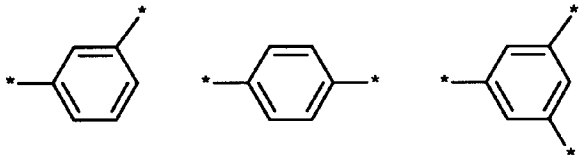
[0218] [化127]



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

[0219] 上記の中でも、Ｌ[1]～Ｌ[3]が表す芳香族炭化水素基としては、Ｌ[1]～Ｌ[3]の少なくとも一つが下記式で表されるいずれかの基であることがより好ましく、Ｌ[1]～Ｌ[3]のすべてが下記式で表されるいずれかの基であることが更に好ましい。

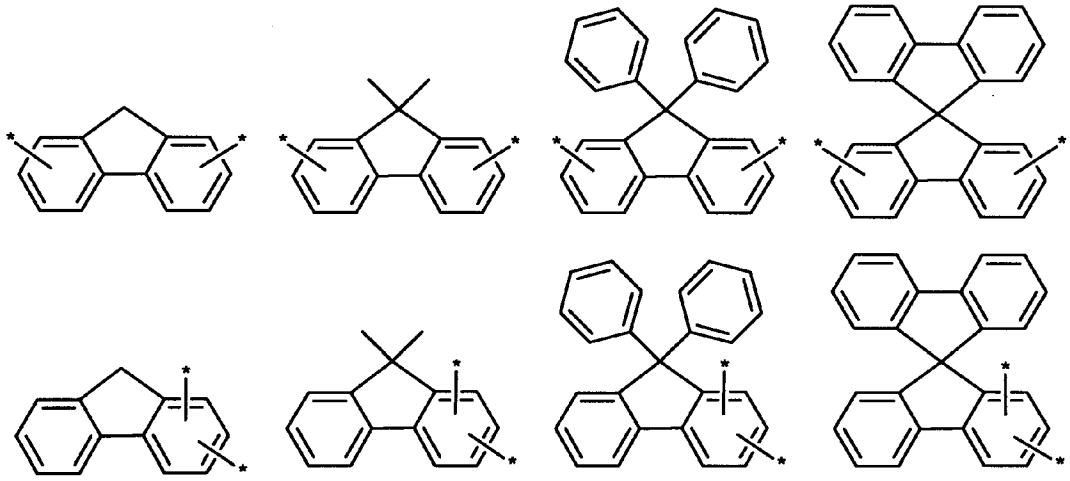
[0220] [化128]



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

[0221] Ｌ[1]～Ｌ[3]が表す芳香族炭化水素基としては、上記以外にも、下記式で表される基が挙げられる。

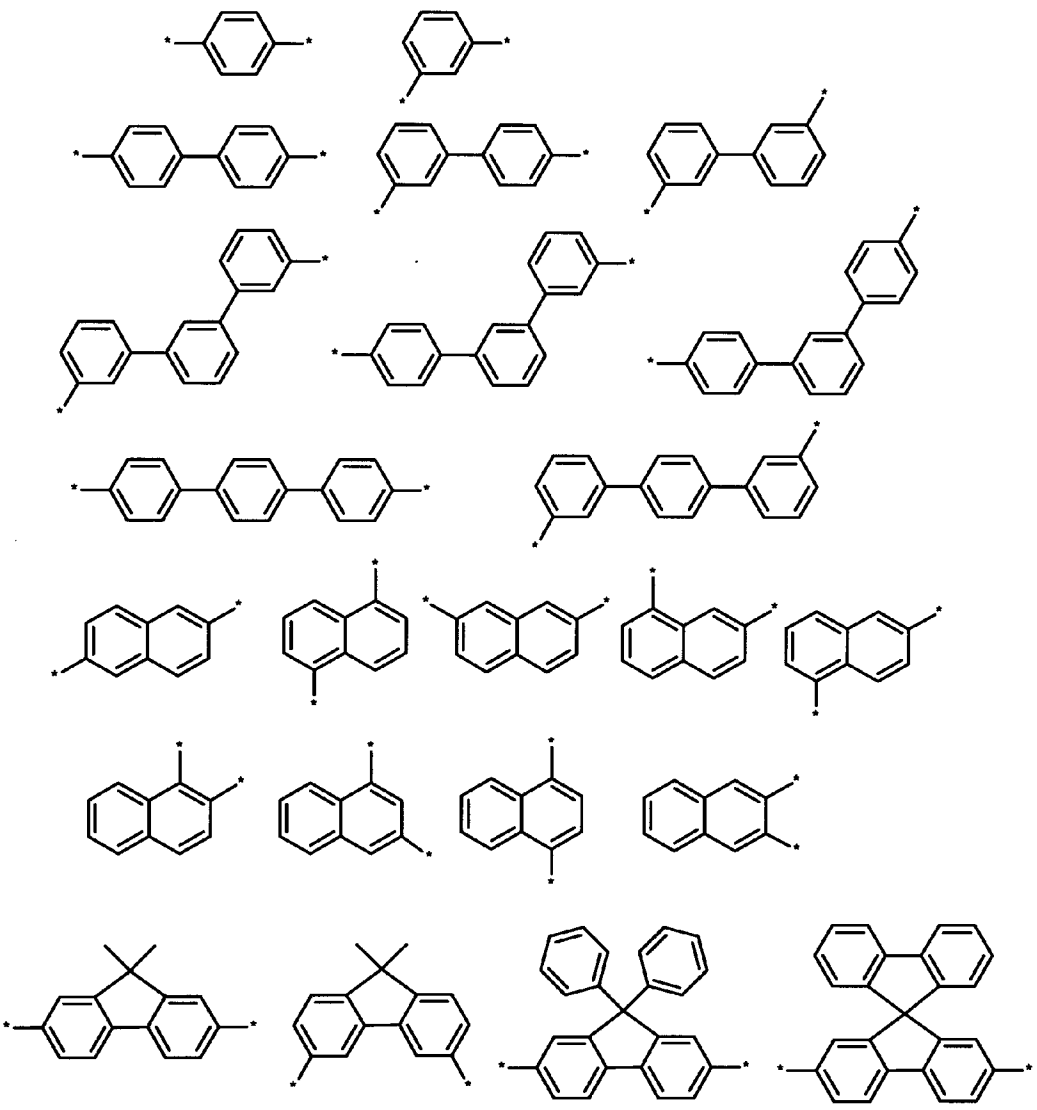
[化129]



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

[0222] Ｌ[1]～Ｌ[3]が表す芳香族炭化水素基が二価の場合の具体例としては、下記式で表される基が挙げられる。

[0223] [化130]



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

[0224] また、前記一般式（１［II］）において、Ｌ[1]～Ｌ[3]が表す複素環基の環形成原子数は５～３０であり、好ましくは５～１８、より好ましくは５～１３

、特に好ましくは５～１０である。

このような複素環基としては、例えば、ピロール、ピリジン、イミダゾピリジン、ピラゾール、トリアゾール、テトラゾール、インドール、イソインドール及びカルバゾール等の含窒素複素環化合物の残基；フラン、ベンゾフラン、イソベンゾフラン、ジベンゾフラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ベンゾオキサゾール、ベンゾナフトフラン及びジナフトフラン等の含酸素複素環化合物の残基；チオフェン、ベンゾチオフェン、ジベンゾチオフェン、チアゾール、チアジアゾール、ベンゾチアゾール、ベンゾナフトチオフェン及びジナフトチオフェン等の含硫黄複素環化合物の残基などが挙げられる。

[0225] Ｌ[1]～Ｌ[3]が表す、「これらの基が２～４個結合してなる基」は、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基及び置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の複素環基から選ばれる２～４個の基が結合してなる基である。なお、選ばれる２～４個の基が互いに結合して環構造を形成してもよい。また、当該芳香族炭化水素基及び複素環基から選ばれる基の結合順序に特に制限はない。

[0226] 以上の中でも、Ｌ[1]～Ｌ[3]としては、いずれも、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基が好ましい。該芳香族炭化水素基としてより好ましいものは、前述の通りである。

[0227] また、前記一般式（１［II］）中のａ～ｃは、それぞれ独立に、０又は１である。

前記一般式（１［II］）において、例えば、ａ＝０の場合、Ｌ[1]は存在しないことを意味し、Ａが直接［　］内の基と結合する。一方、ａ＝１の場合には、ＡはＬ[1]を介して［　］内の基と結合する。なお、ｂ、ｃについても同様である。

[0228] 前記一般式（１［II］）において、Ｘ[1]～Ｘ[4]のうちの２つは、それぞれ＊[1]及び＊[2]に結合する炭素原子であり、それ以外の２つは、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子である。

X^{13}～X^{16}のうちの２つは、それぞれ＊^{3}及び＊^{4}に結合する炭素原子であり、それ以外の２つは、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子である。

X^{25}～X^{28}のうちの２つは、それぞれ＊^{5}及び＊^{6}に結合する炭素原子であり、それ以外の２つは、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子である。

本発明の一態様において、＊^{1}及び＊^{2}に結合する炭素原子となるX^{1}～X^{4}から選ばれる２つの組み合わせとしては、X^{1}とX^{2}、X^{2}とX^{3}、及びX^{3}とX^{4}から選ばれる１組が好ましい。

同様に、＊^{3}及び＊^{4}に結合する炭素原子となるX^{13}～X^{16}から選ばれる２つの組み合わせとしては、X^{13}とX^{14}、X^{14}とX^{15}、及びX^{15}とX^{16}から選ばれる１組が好ましい。

さらに、＊^{5}及び＊^{6}に結合する炭素原子となるX^{25}～X^{28}から選ばれる２つの組み合わせとしては、X^{25}とX^{26}、X^{26}とX^{27}、及びX^{27}とX^{28}から選ばれる１組が好ましい。

[0229] また、X^{5}～X^{12}、X^{17}～X^{24}、及びX^{29}～X^{36}は、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子である。

つまり、前記一般式（１［II］）において、一般式（１［II］）中に示される所定の環構造の形成に関与しないX^{1}～X^{36}は、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子であり、本発明の一態様においては、いずれもＣ（Ｒ）であることが好ましい。

ここで、Ｒは水素原子又は置換基であって、複数存在するＲは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲ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。

ただし、本発明の一態様の化合物において、複数存在するＲから選ばれる２つが互いに結合して環を形成していることがないことが好ましい。

[0230] 前記一般式（１［II］）中のY^{1}～Y^{3}は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、－Ｃ（R^{A}）（R^{B}）－、－Ｓｉ（R^{C}）（R^{D}）－、－Ｐ（R^{E}）－、－Ｐ（＝Ｏ）（R^{F}）－、－Ｓ（＝Ｏ）$_{2}$－、又は－Ｐ（＝Ｓ）（R^{G}）－である。

R^A～R^Gは、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、R^A～R^G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。

なお、R^A～R^Gとして選択し得る置換基としては、上記に記載の基が挙げられるが、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０のヘテロアリール基が好ましく、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０のアリール基がより好ましい。

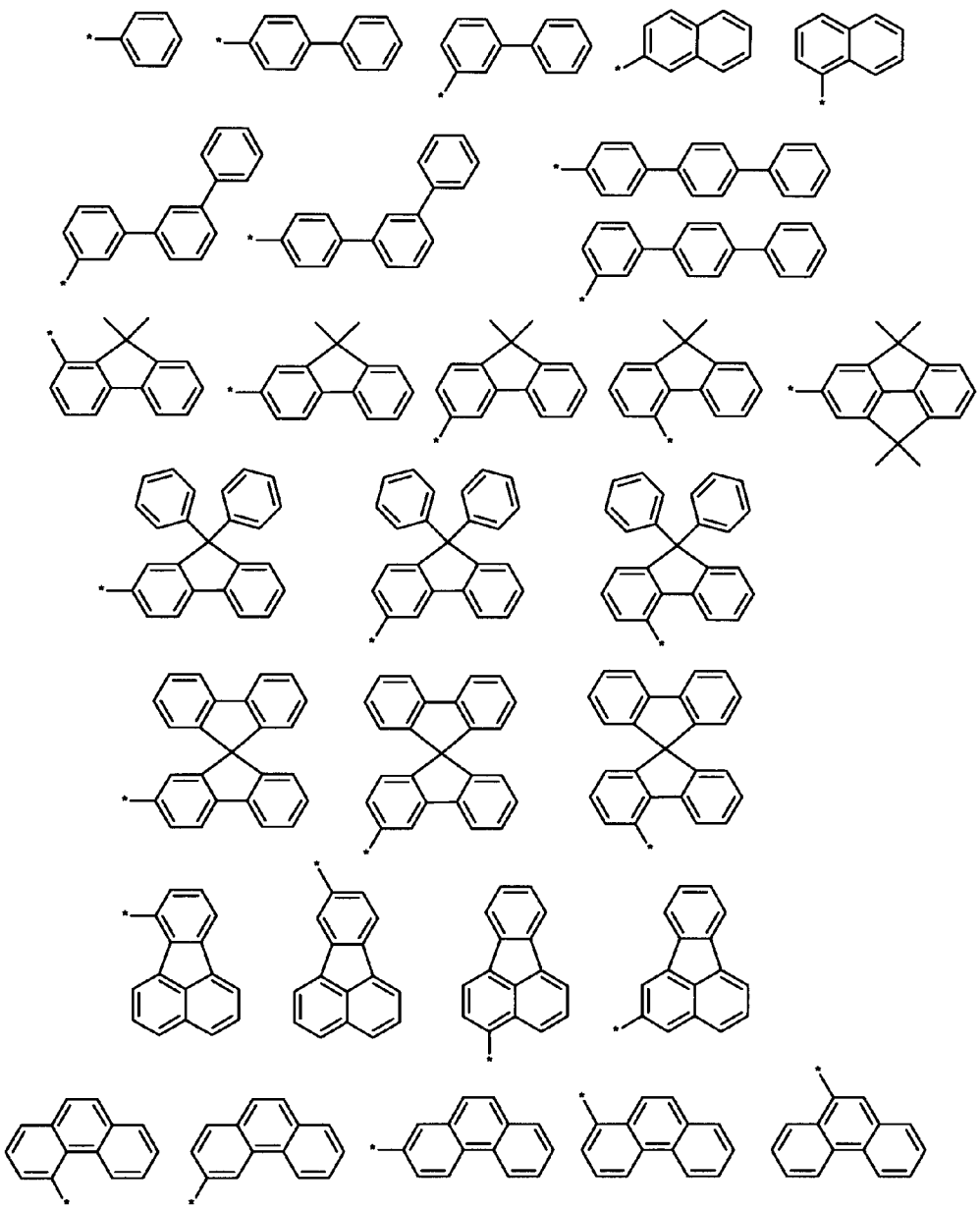
[0231] R^A～R^Gとして選択し得るアリール基の環形成炭素数は、６～３０であり、好ましくは６～１８、より好ましくは６～１３、さらに好ましくは６～１２、特に好ましくは６～１０である。なお、該アリール基は、非縮合アリール基、縮合アリール基、及びこれらの組み合わせのいずれであってもよい。

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

[0232] R^A～R^Gとして選択し得るアリール基としては、より具体的には、下記群から選択されるアリール基が好ましい。

[0233]

[化131]



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

[0234] R^A～R^Gとして選択し得るヘテロアリール基の環形成原子数は、５～３０であり、好ましくは５～２０、より好ましくは５～１４、更に好ましくは５～１０である。

該ヘテロアリール基は、少なくとも１個、好ましくは１～５個、より好ま

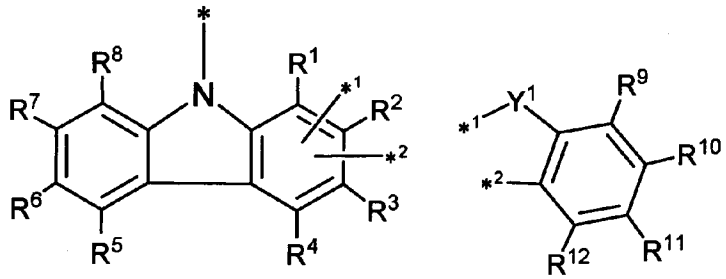
しくは１～３個、さらに好ましくは１～２個の同一又は異なるヘテロ原子を含む。

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

[0235] 本発明の一態様の化合物において、前記一般式（１［II］）中の［ ］内の基が、下記一般式（Ｄ１）で表される基であることが好ましい。

[0236]

[化132]



(D1)

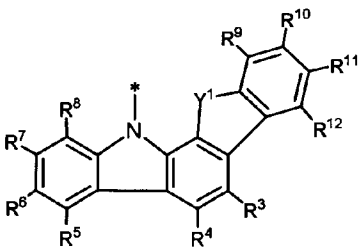
[0237] 一般式（Ｄ１）中、Ｒ[1]～Ｒ[12]は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であって、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、Ｒ[1]～Ｒ[12]から選ばれる２つは、互いに結合して環を形成していてもよい。ただし、Ｒ[1]～Ｒ[4]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[1]及び＊[2]と結合する。

Ｙ[1]は、前記一般式（１［II］）に関する記載と同じであり、＊は、前記一般式（１［II］）中のＬ[1]～Ｌ[3]及びＡのいずれかと結合する位置を示す。

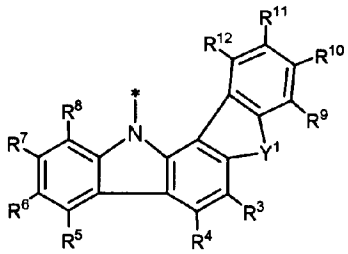
[0238] 本発明の一態様において、前記一般式（Ｄ１）で表される基の中でも、下記一般式（Ｄ１－ｉ）～（Ｄ１－vi）のいずれかで表される基がより好ましい。

[0239]

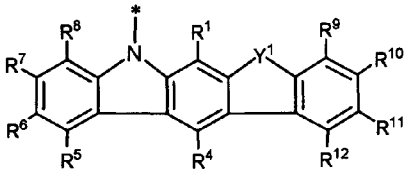
[化133]



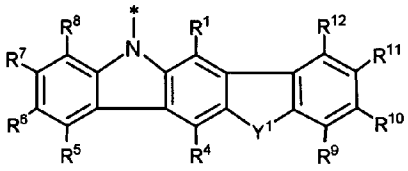
(D1-i)



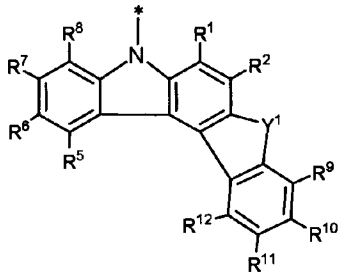
(D1-ii)



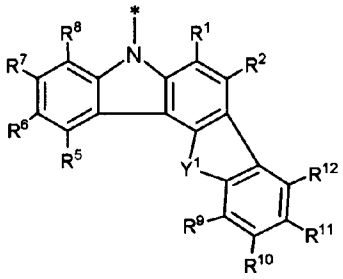
(D1-iii)



(D1-iv)



(D1-v)



(D1-vi)

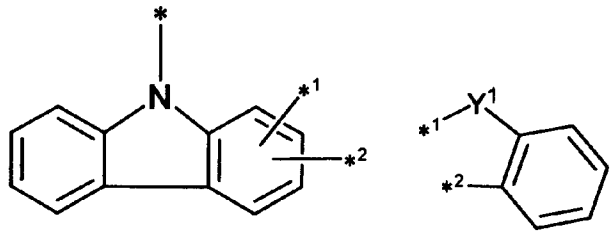
（上記一般式（Ｄ１－ｉ）～（Ｄ１－ｖｉ）中、Ｒ[1]～Ｒ[12]、Ｙ[1]、及び＊は、前記一般式（Ｄ１）に関する記載と同じである。）

[0240] なお、前記一般式（Ｄ１）中のＲ[1]～Ｒ[24]から選ばれる２つが互いに結合して環を形成する場合には、Ｒ[5]とＲ[6]、Ｒ[6]とＲ[7]、及びＲ[7]とＲ[8]から選ばれる１組以上で、互いに結合して環を形成する構成が好ましい。

ただし、本発明の一態様の化合物において、前記一般式（Ｄ１）中のＲ[1]～Ｒ[24]から選ばれる２つが互いに結合して環を形成していることがないことが好ましく、前記一般式（１［II］）中の［　］内の基が、下記一般式（Ｄ２）で表される基であることがより好ましい。

[0241]

[化134]

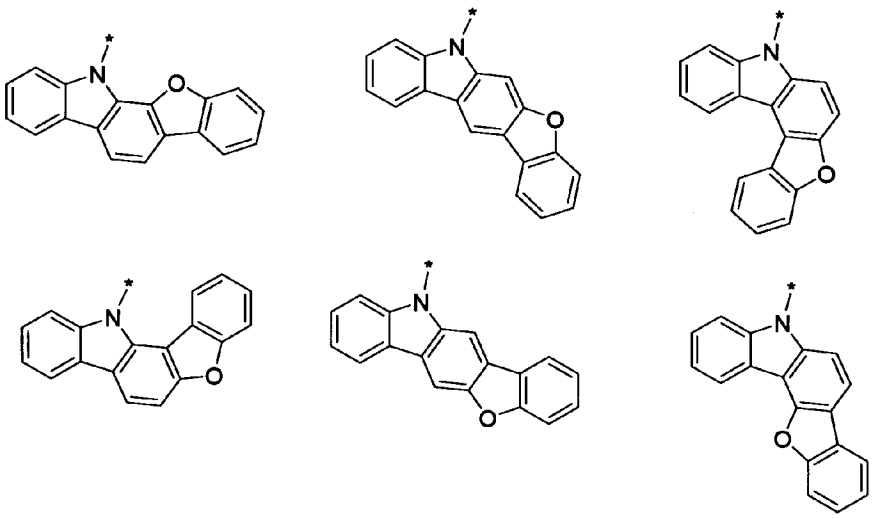


(D2)

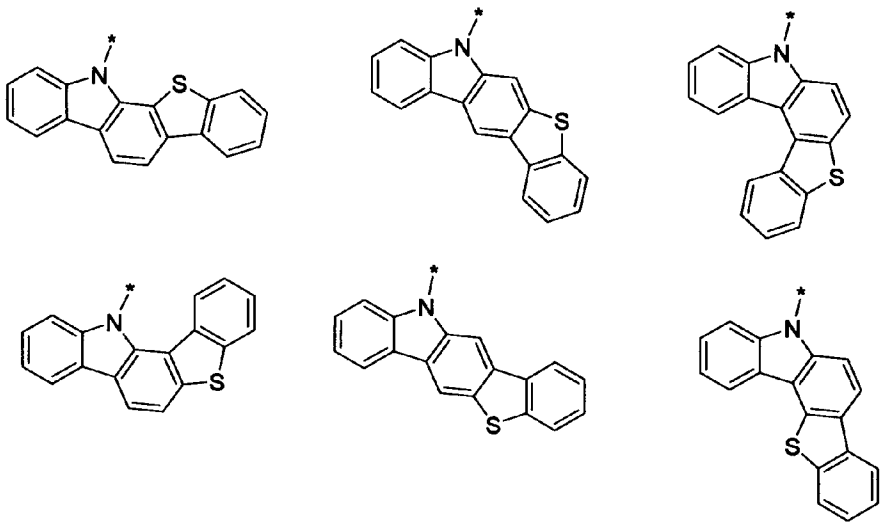
（上記一般式（Ｄ２）中、カルルバゾリル基の１位、２位、３位及び４位に有する４つの水素原子のうち２つが脱離して、脱離した水素原子と結合していた炭素原子が、＊[1]及び＊[2]と結合する。また、上記一般式（Ｄ２）中、Ｙ[1]及び＊は、前記一般式（Ｄ１）に関する記載と同じである。）

[0242] 前記一般式（１［II］）中の［ ］内の基として、より具体的には、下記群から選択される基が好ましい。なお、下記の基において、＊は、前記一般式（１［II］）中のＬ[1]～Ｌ[3]及びＡのいずれかと結合する位置を示す。加えて、下記の基において、水素原子と結合している炭素原子は、当該水素原子に代えて、上述の置換基と結合してもよい。

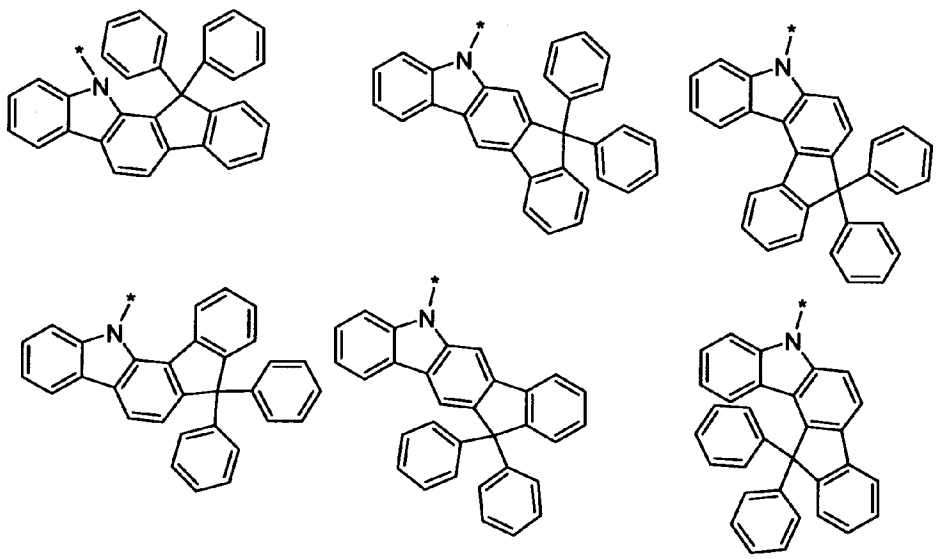
[0243] [化135]



[0244] [化136]

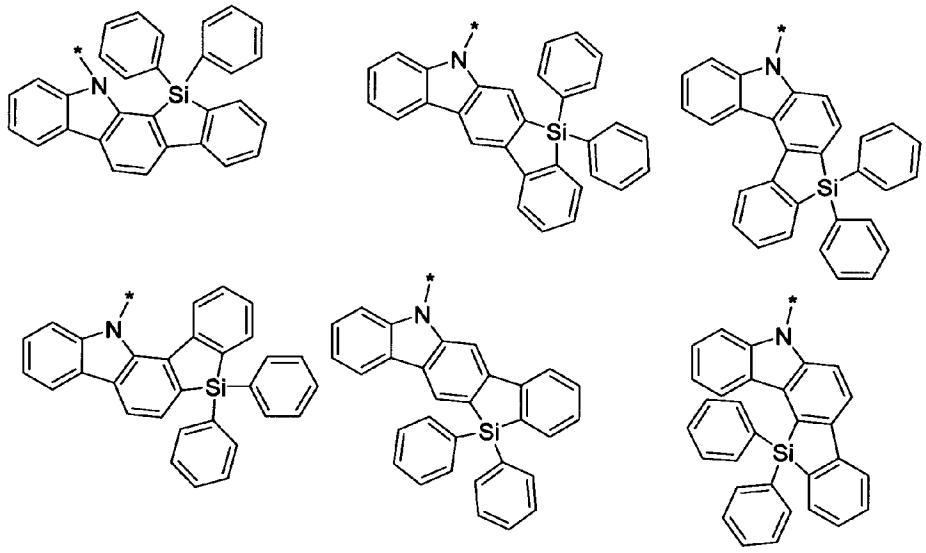


[0245] [化137]

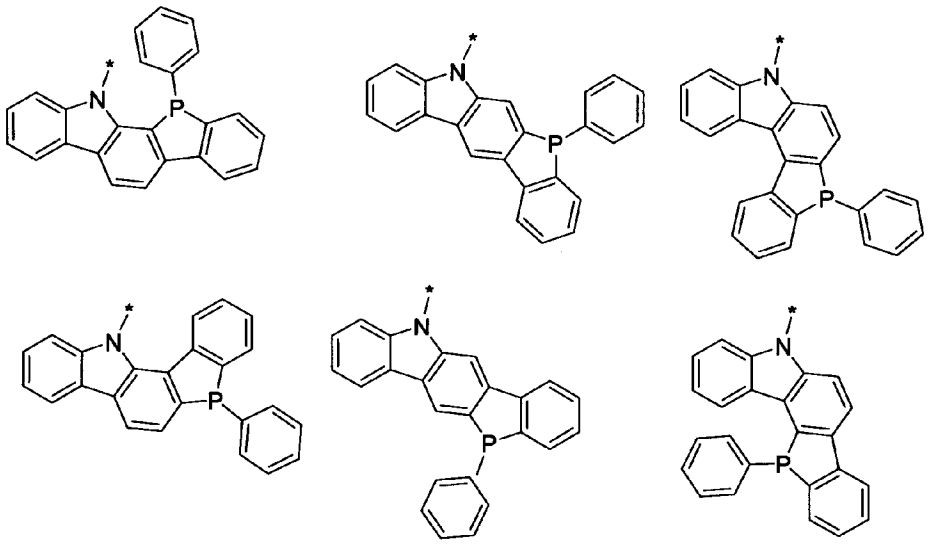


[0246]

[化138]

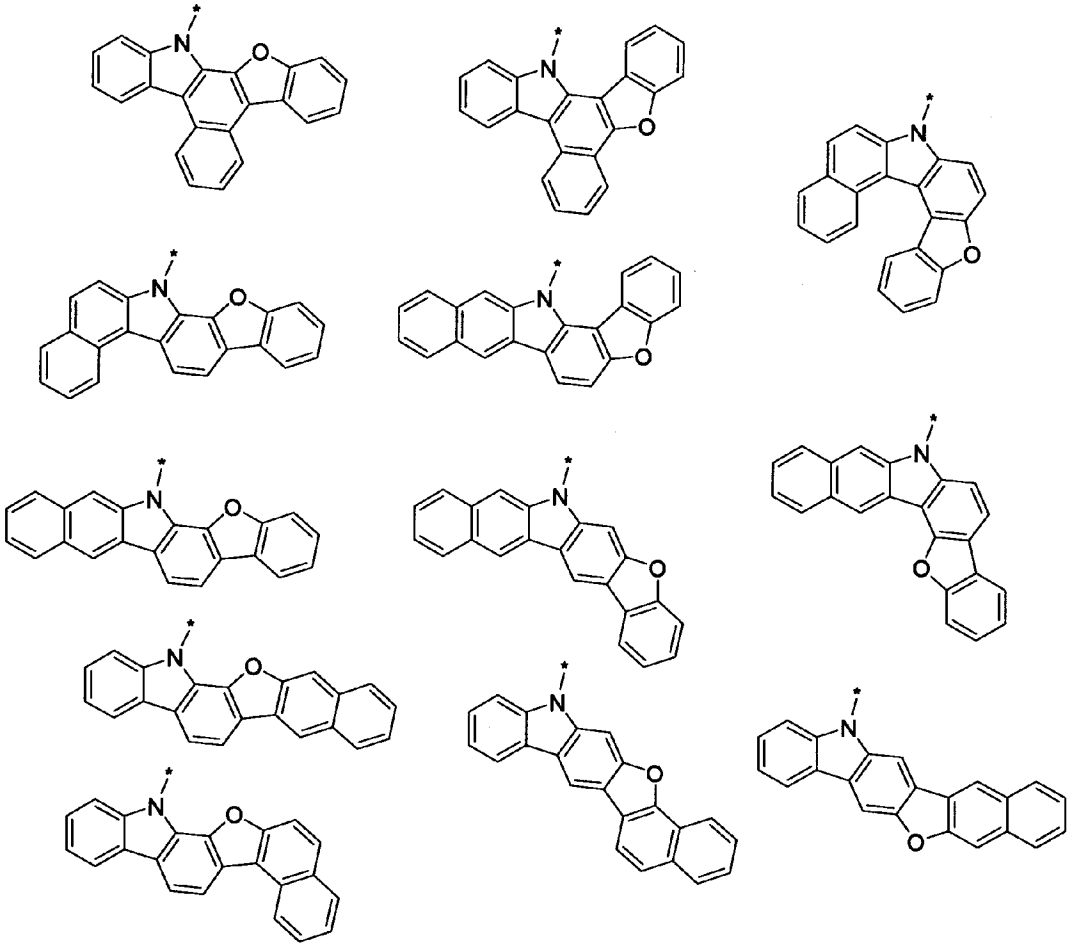


[0247] [化139]



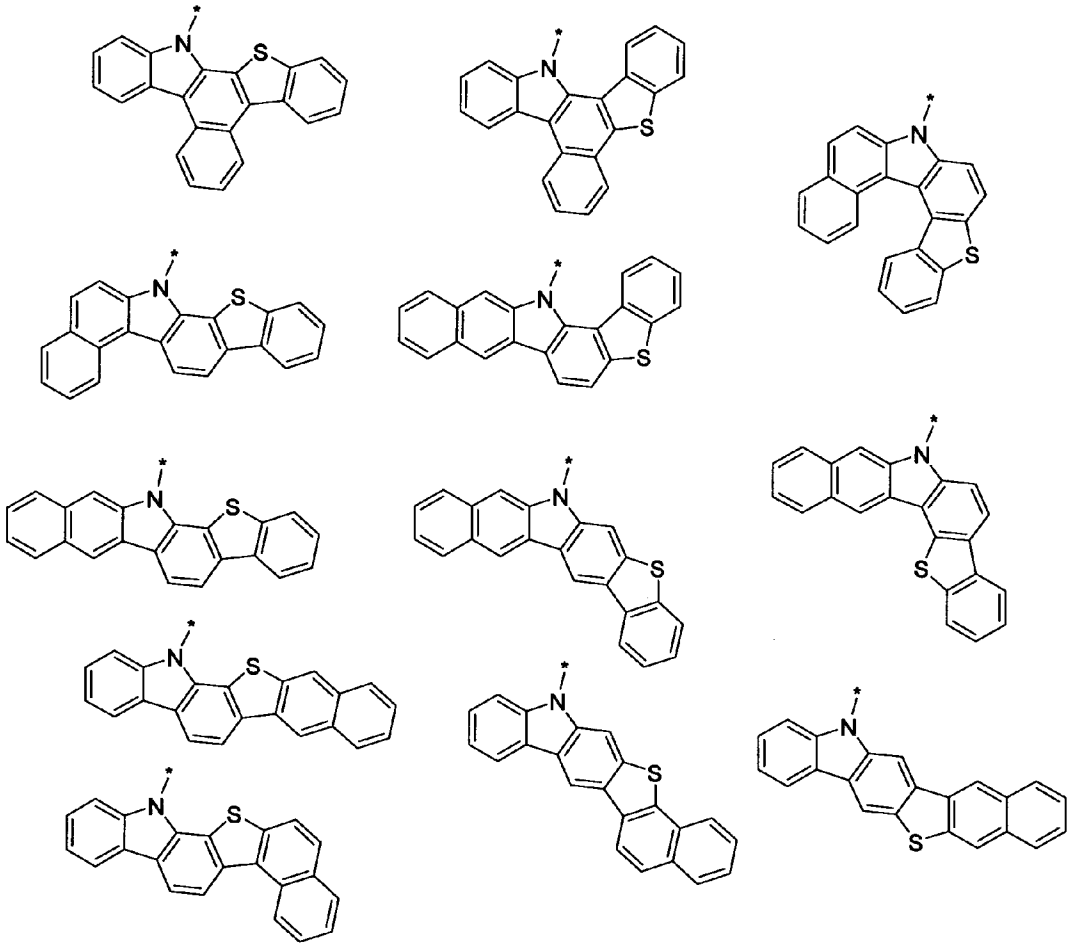
[0248]

[化140]



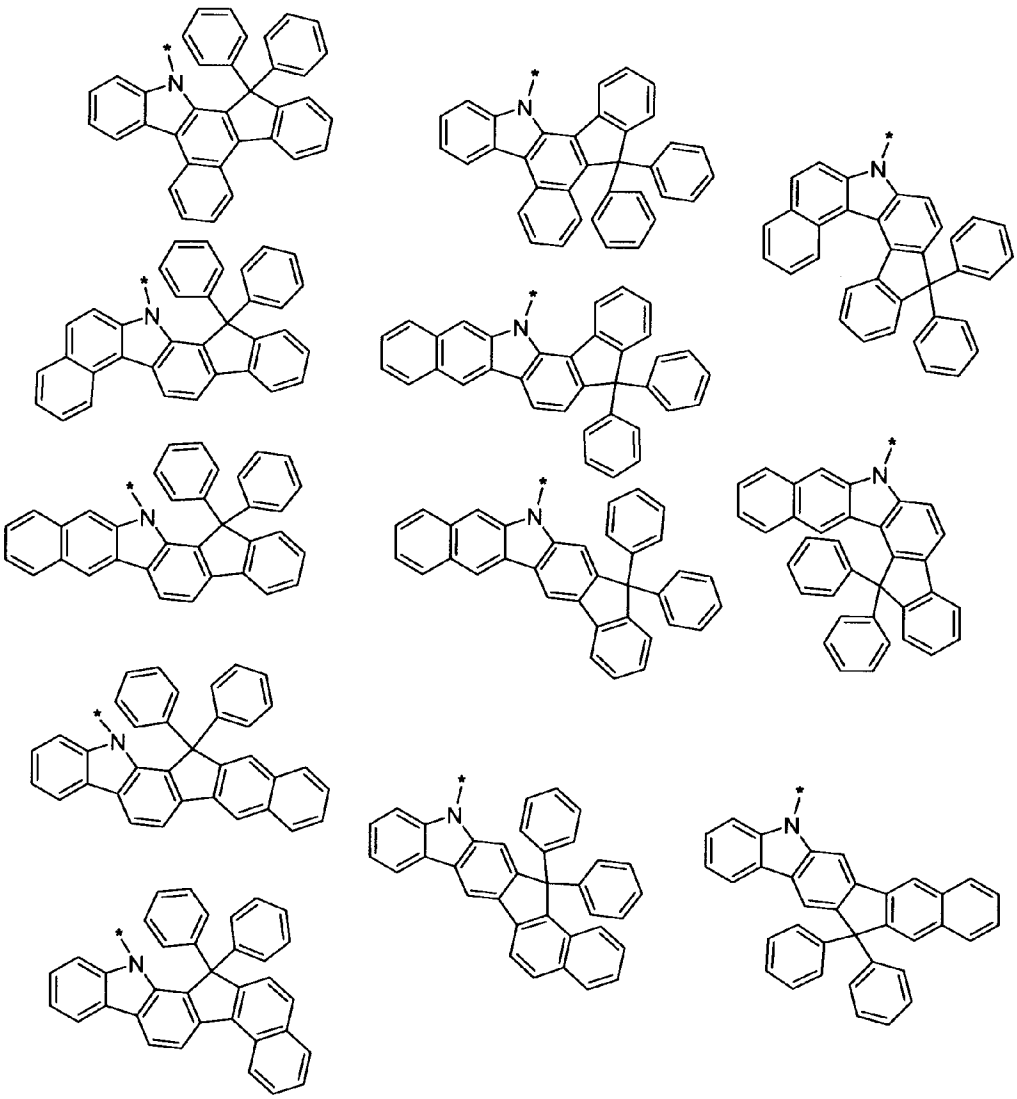
[0249]

[化141]



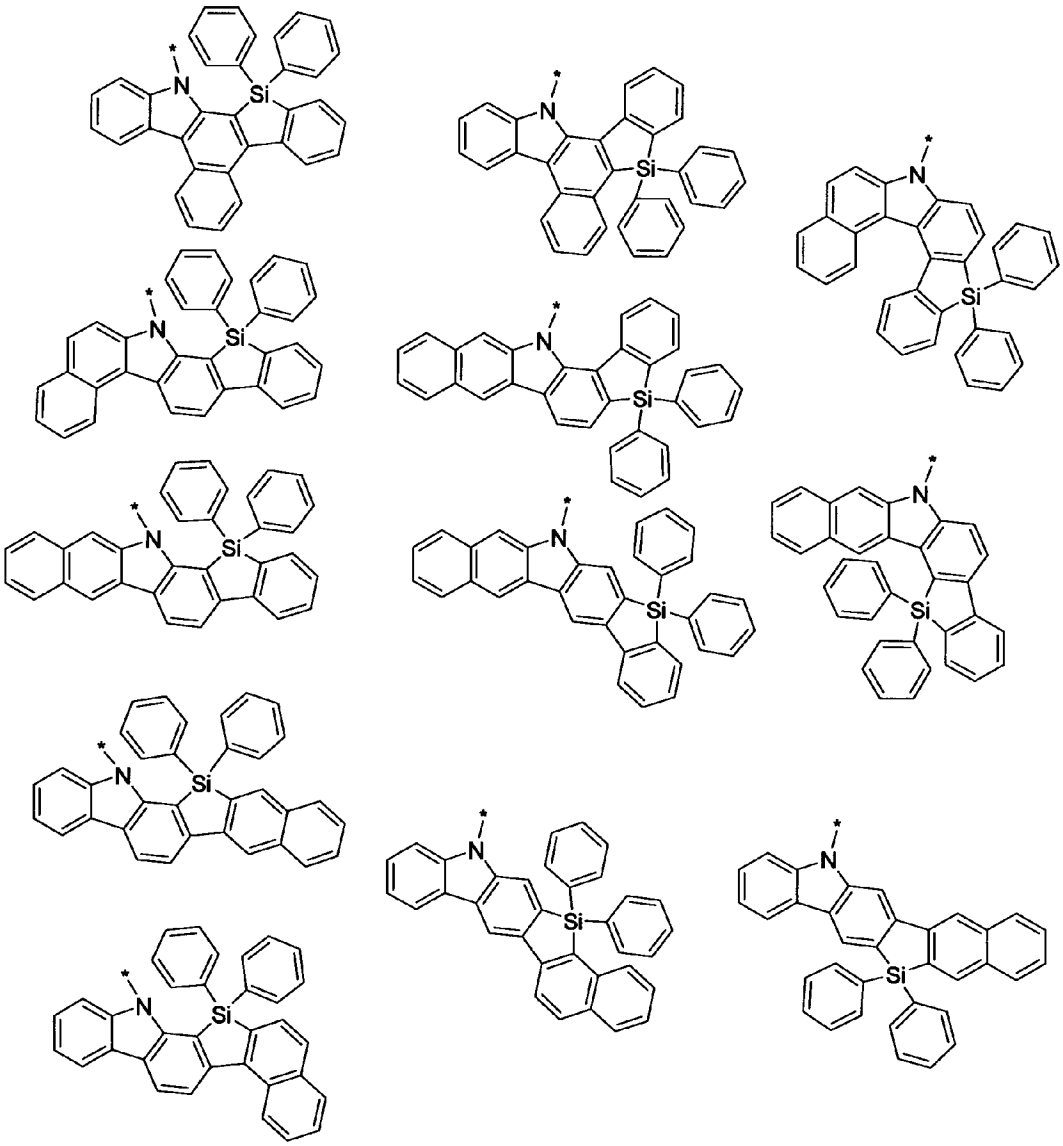
[0250]

[化142]



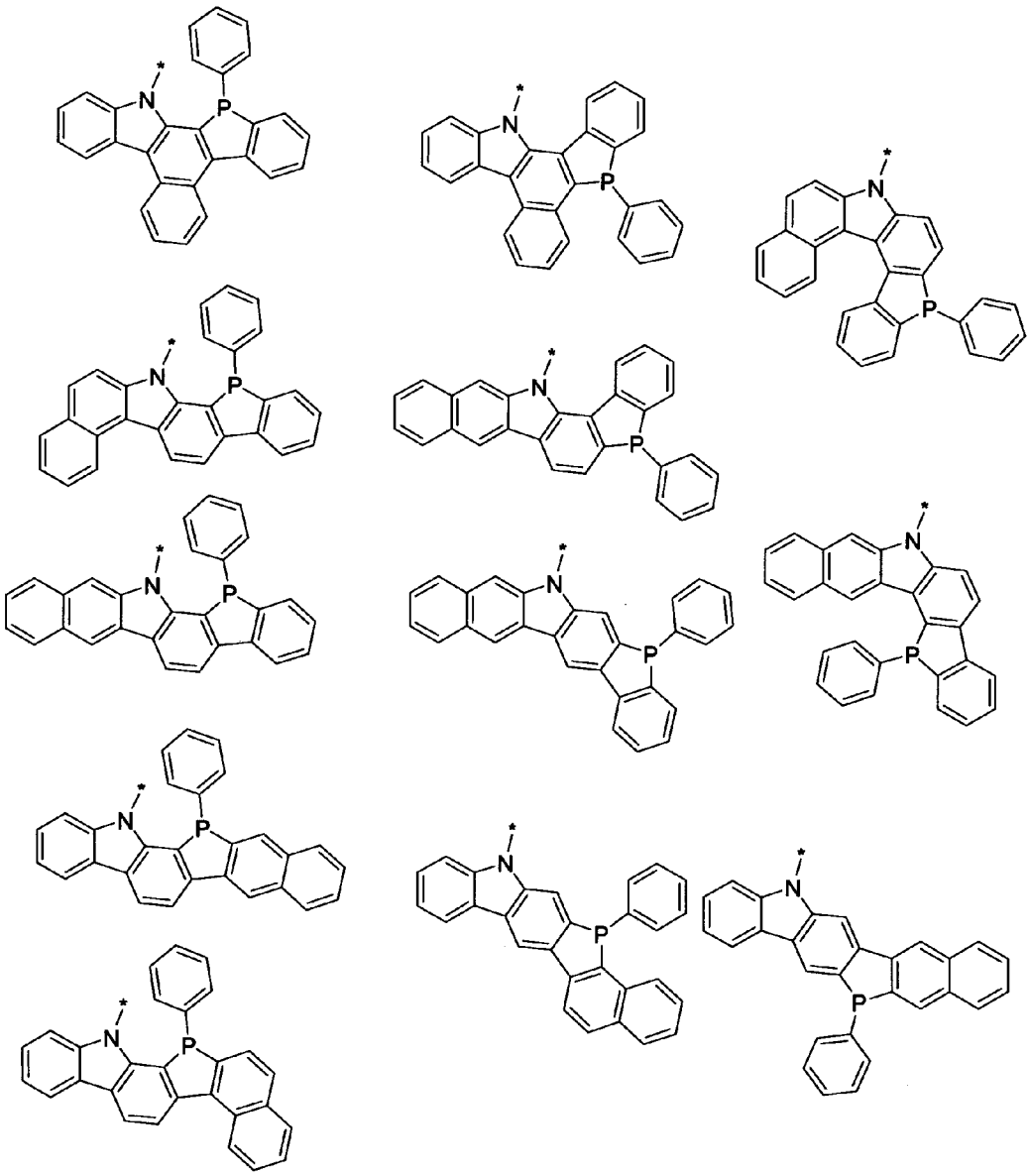
[0251]

[化143]



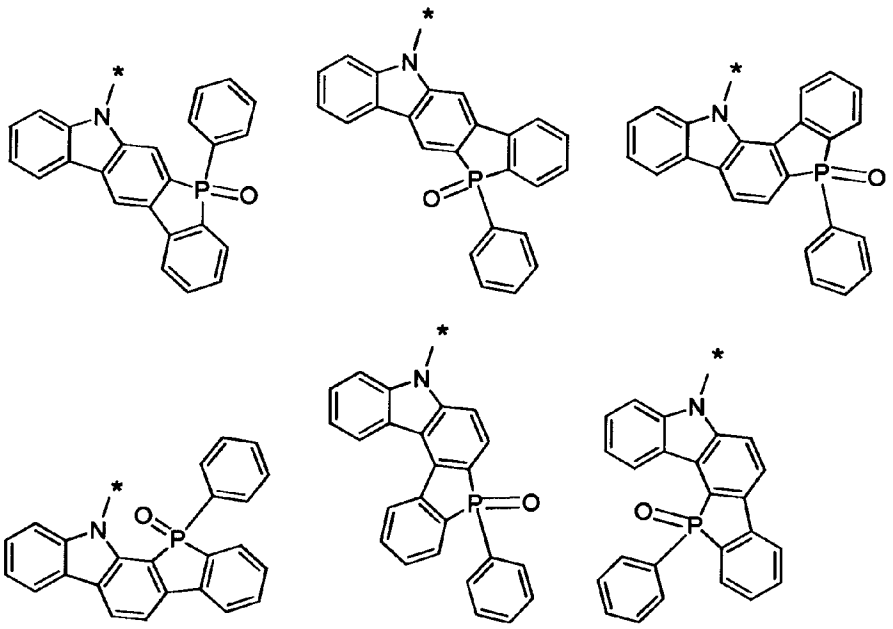
[0252]

[化144]

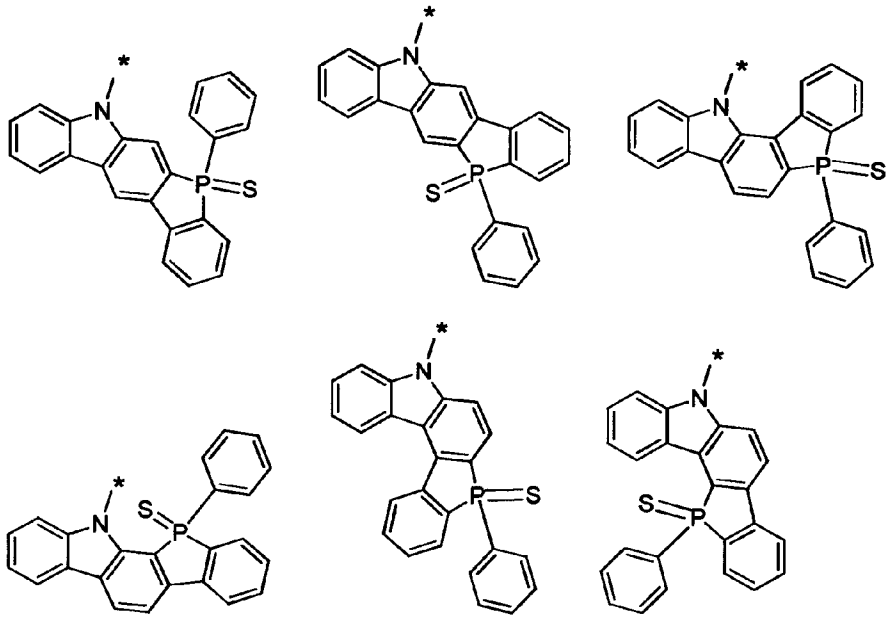


[0253]

[化145]

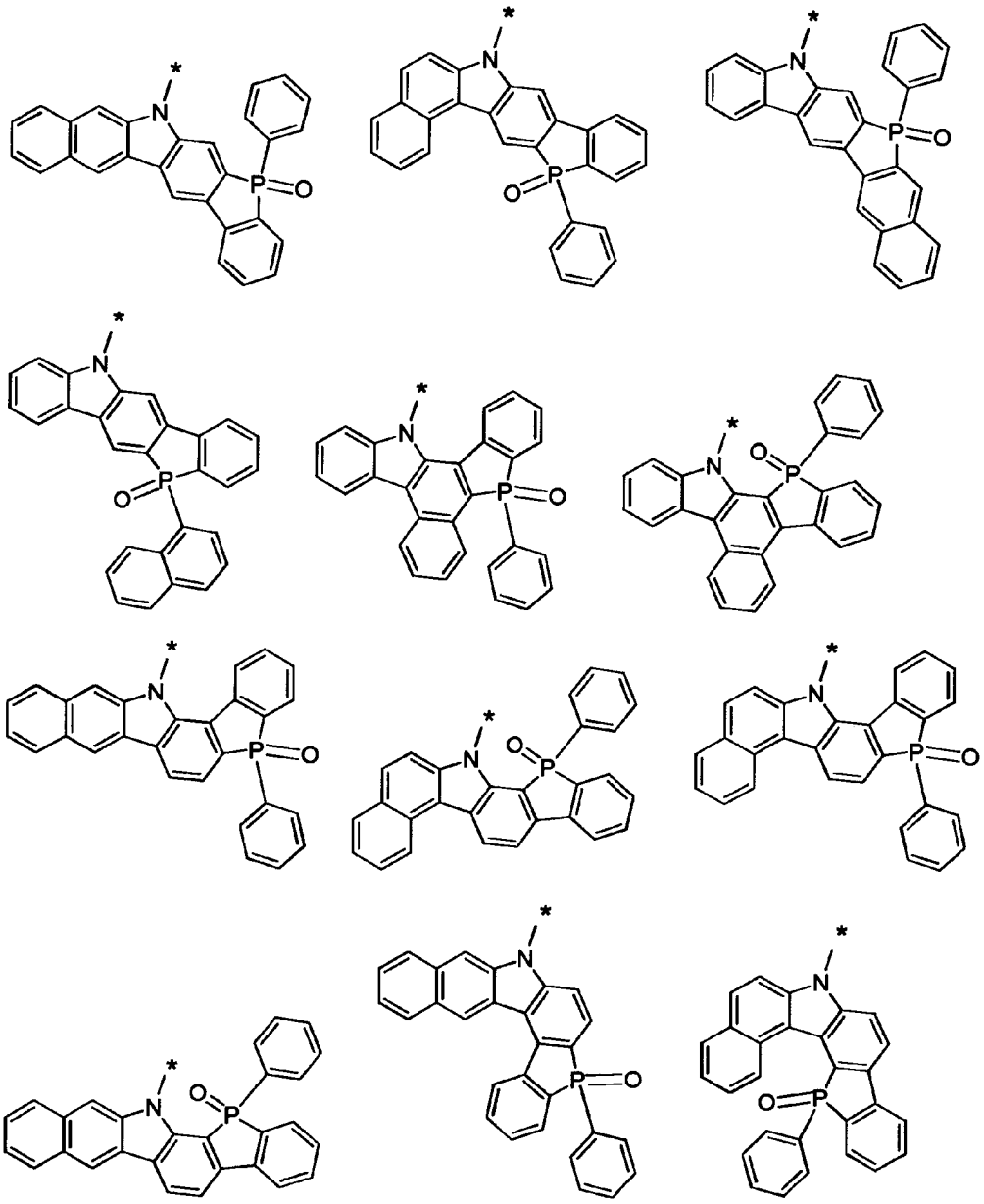


[0254] [化146]



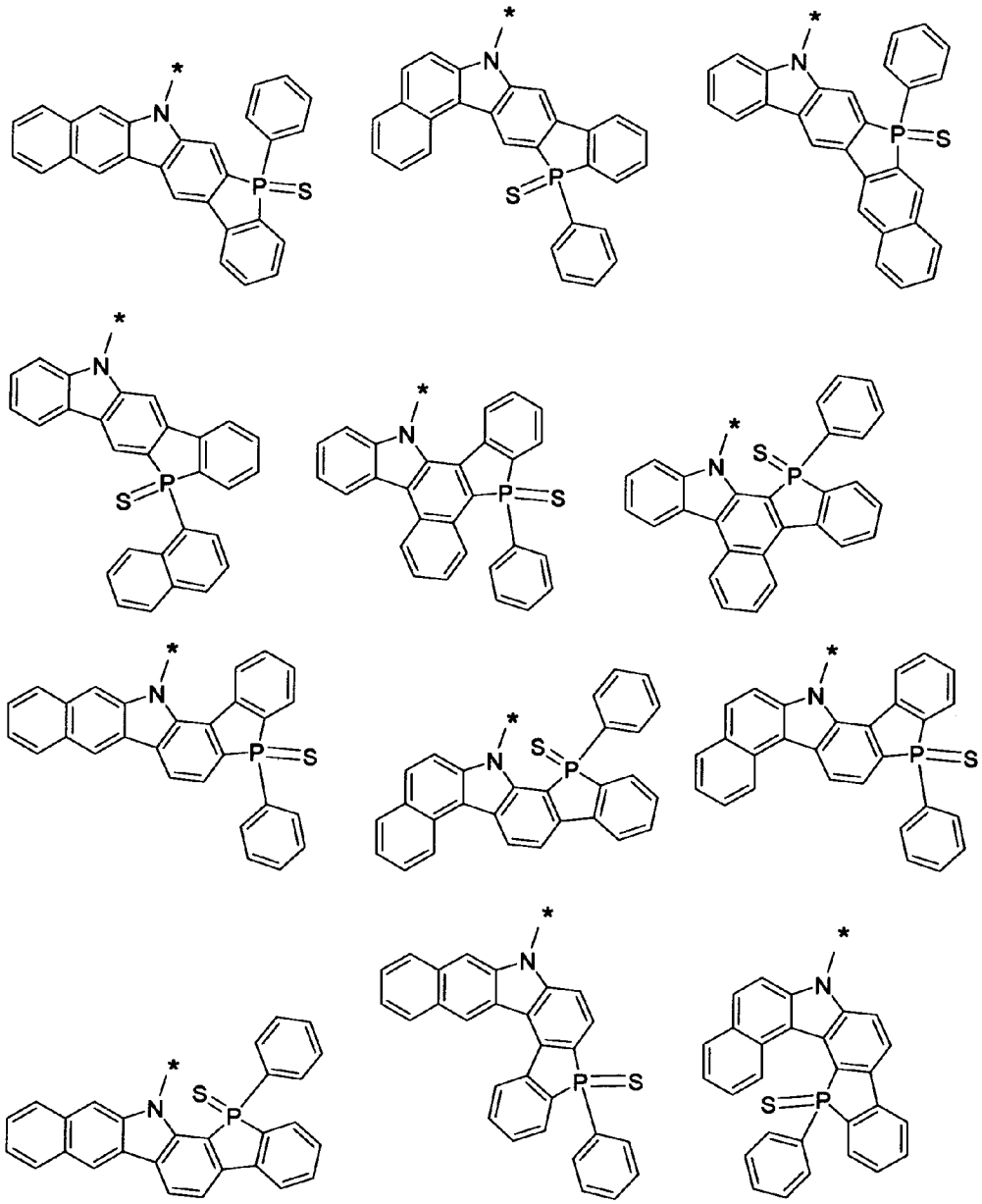
[0255]

[化147]



[0256]

[化148]



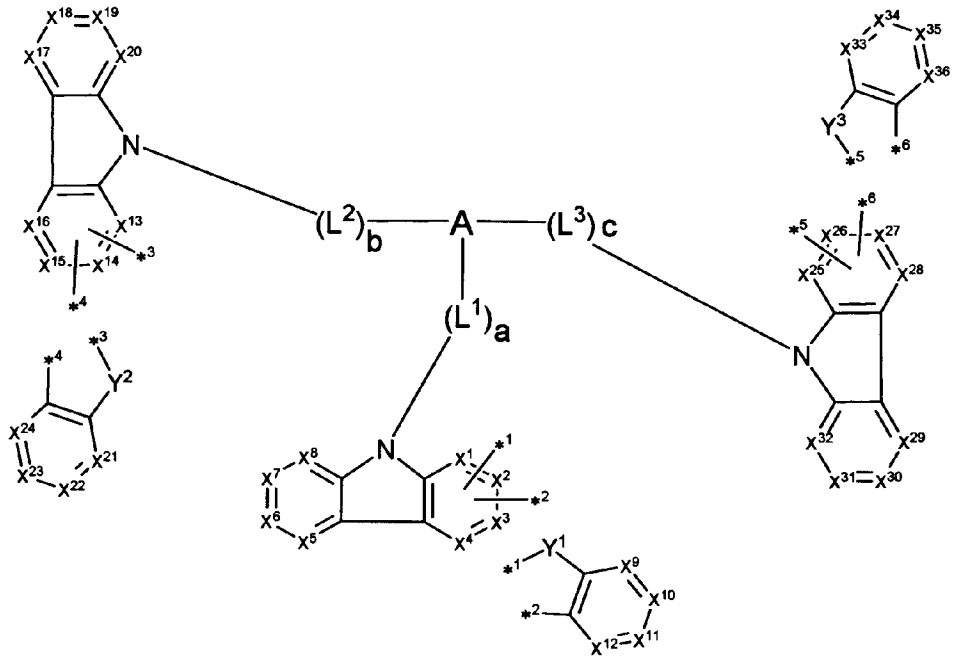
[0257] 前記一般式（１［II］）中、ｐ～ｒは、前述の通り、それぞれ独立に０～３の整数であり、ｐ＋ｑ＋ｒ＝３となる。ｐ～ｒは、特に制限されるものではないが、ｐ～ｒのうちの２つが同時に０ではないことが好ましい。

なお、ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［ ］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。

[0258] （本発明の一態様の化合物）

本発明の一態様の化合物として、下記一般式（１ａ［II］）で表される化合物（以下、「化合物（１ａ［II］）」ともいう）が好ましい。

[0259] [化149]



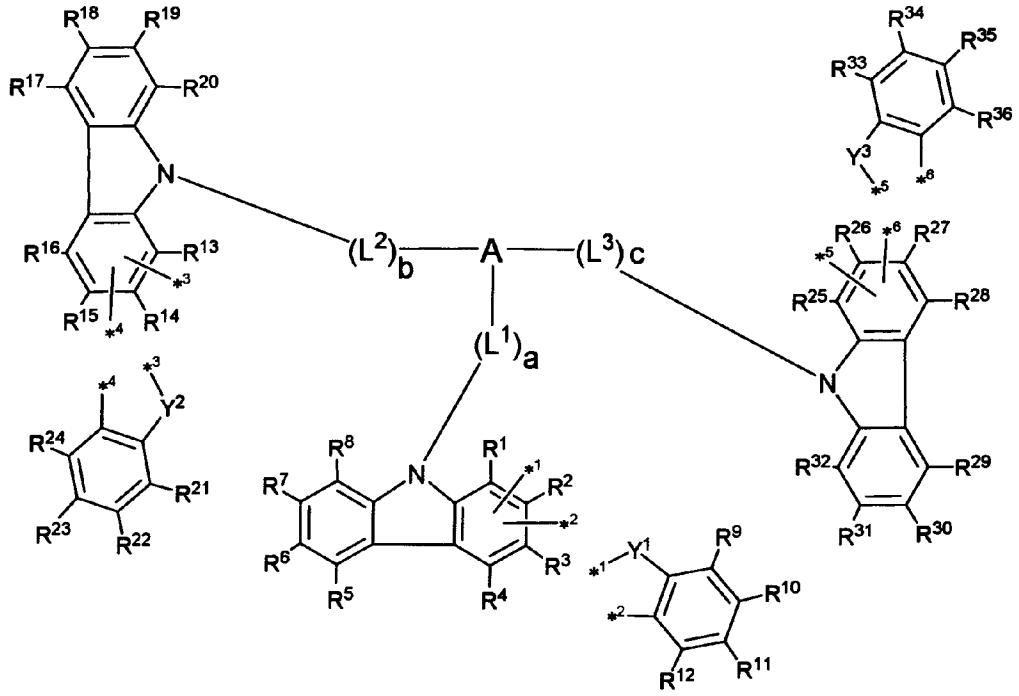
(1a[II])

[0260] 前記一般式（１ａ［II］）中、Ａ、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}、ａ～ｃ、Ｘ^{1}～Ｘ^{36}、及びＹ^{1}～Ｙ^{3}は、前記一般式（１［II］）に関する記載と同じである。

また、本発明の一態様である化合物（１ａ［II］）の中でも、下記一般式（１ａ－ｉ［II］）で表される化合物（以下、「化合物（１ａ－ｉ［II］）」ともいう）がより好ましい。

[0261]

[化150]



(1a-i[II])

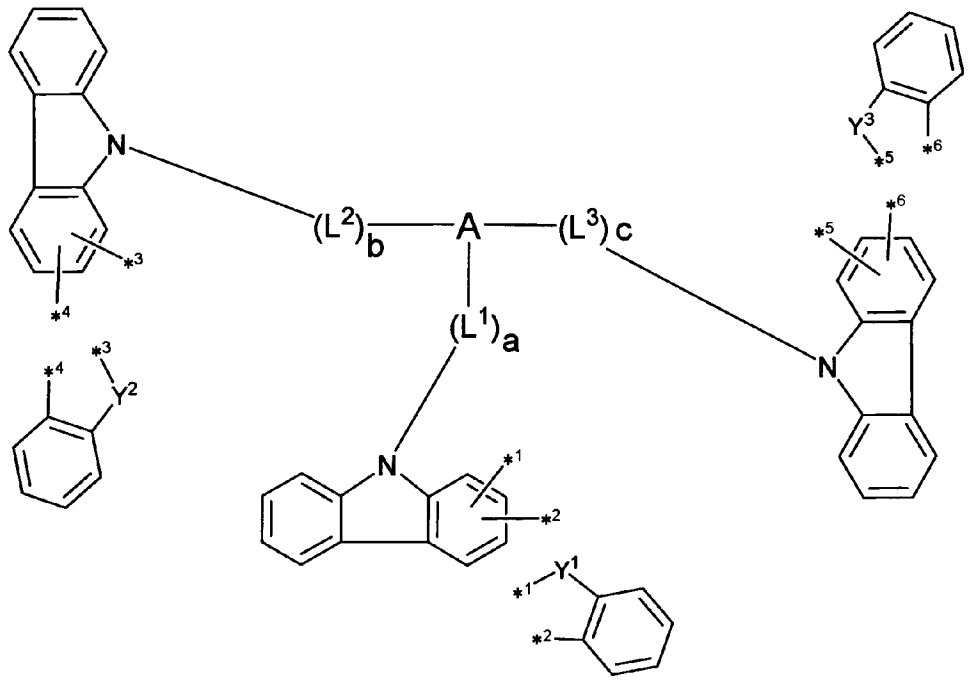
[0262] 前記一般式（１ａ－ｉ［II］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｃ、及びＹ[1]～Ｙ[3]は、前記一般式（１［II］）に関する記載と同じである。Ｒ[1]～Ｒ[36]は、前記一般式（１［II］）に関する記載のＲと同じである。つまり、Ｒ[1]～Ｒ[36]は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であって、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、Ｒ[1]～Ｒ[36]から選ばれる２つは、互いに結合して環を形成していてもよい。

前記一般式（１ａ－ｉ［II］）中、Ｒ[1]～Ｒ[4]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[1]及び＊[2]と結合し、Ｒ[13]～Ｒ[16]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[3]及び＊[4]と結合し、Ｒ[25]～Ｒ[28]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[5]及び＊[6]と結合する。

[0263] なお、本発明の一態様である化合物（１ａ－ｉ［II］）としては、Ｒ[1]～Ｒ[36]から選ばれる２つが互いに結合して環を形成することがない化合物であることが好ましく、下記一般式（１ａ－ｖ［II］）で表される化合物であるこ

とがより好ましい。

[0264] [化151]



(1a-v[II])

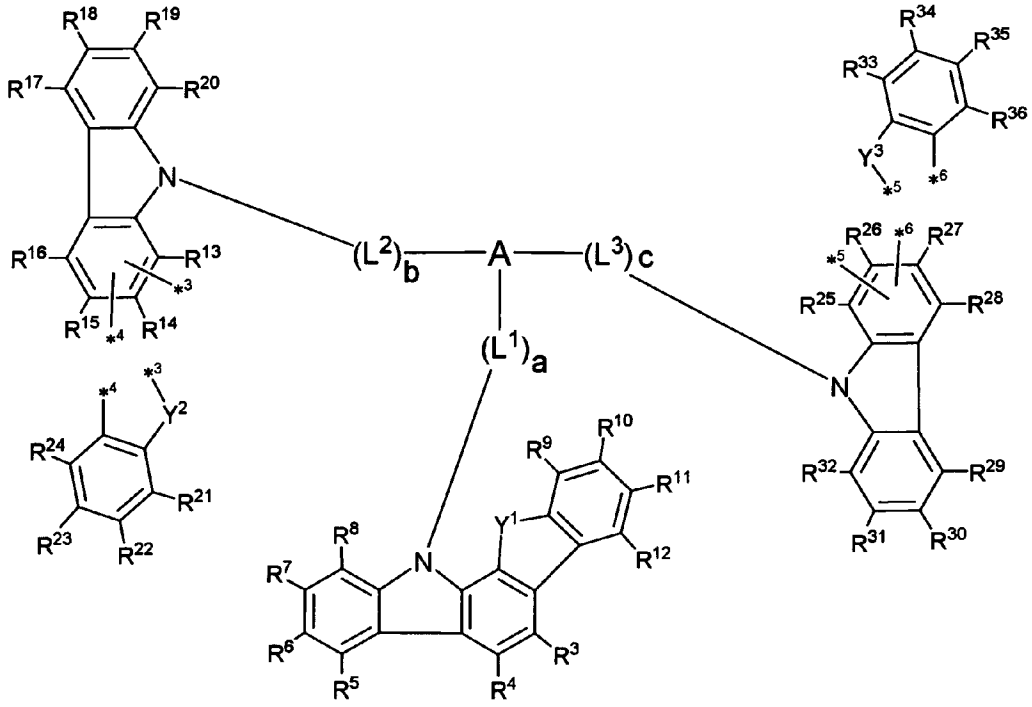
[0265] 一般式（１ａ－ｖ［II］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｃ、及びＹ[1]～Ｙ[3]は、前記一般式（１［II］）に関する記載と同じである。

カルルバゾリル基の１位、２位、３位及び４位に有する４つの水素原子のうち２つが脱離して、脱離した水素原子と結合していた炭素原子が、＊[1]及び＊[2]、＊[3]及び＊[4]、もしくは、＊[5]及び＊[6]と結合する。

[0266] さらに、本発明の一態様である化合物（１ａ－ｉ［II］）のより具体的な化合物として、下記一般式（１ａ－ｉ－１［II］）～（１ａ－ｉ－６［II］）のいずれかで表される化合物（以下、「化合物（１ａ－ｉ－１［II］）～（１ａ－ｉ－６［II］）」ともいう）がより好ましい。

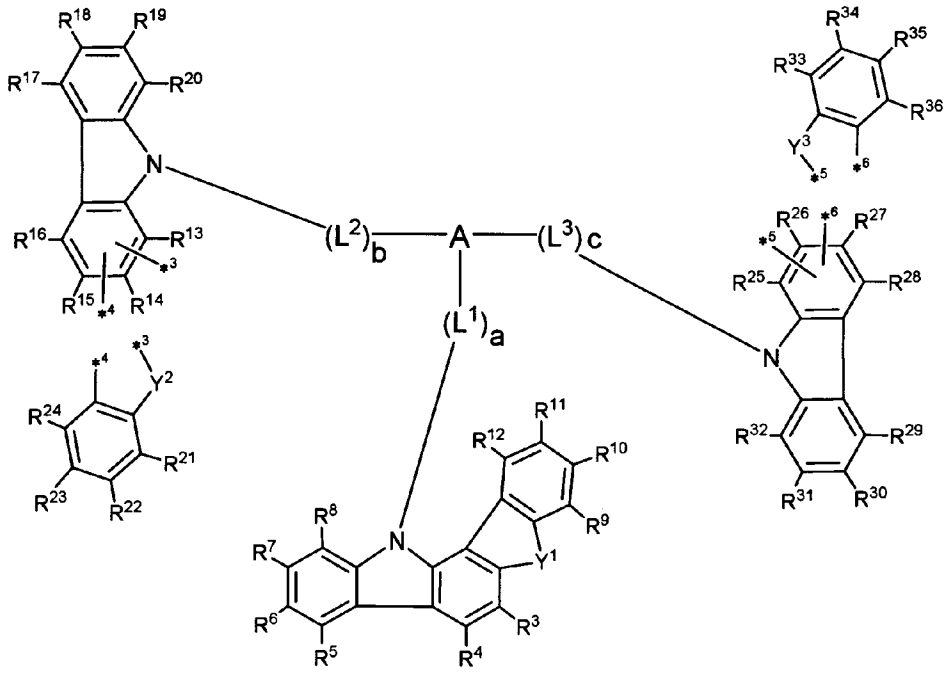
[0267]

[化152]



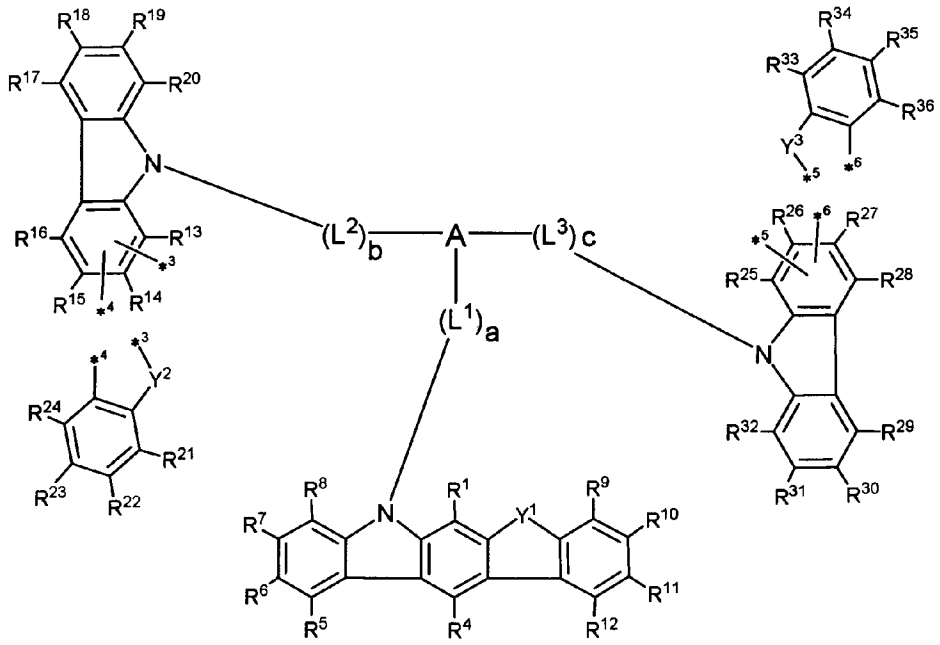
(1a-i-1[II])

[0268] [化153]



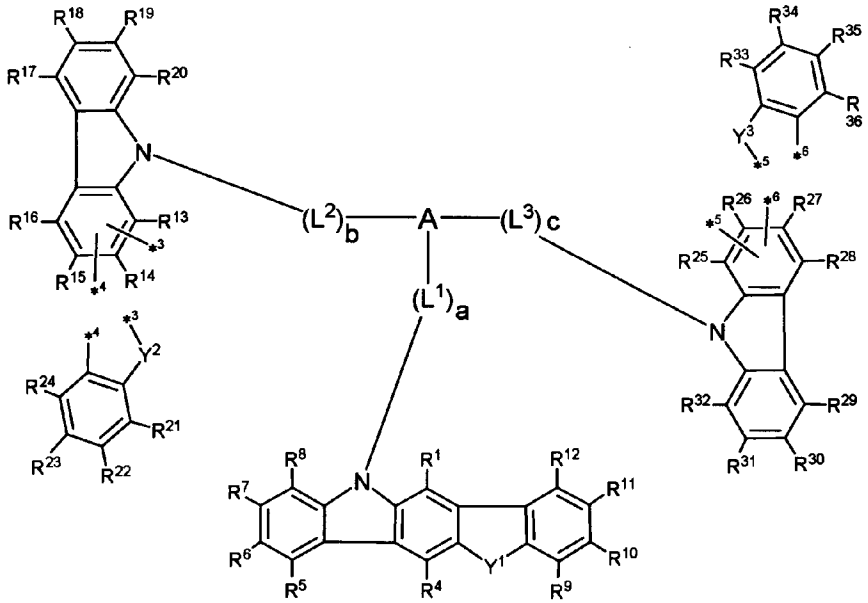
(1a-i-2[II])

[0269] [化154]



(1a-i-3[II])

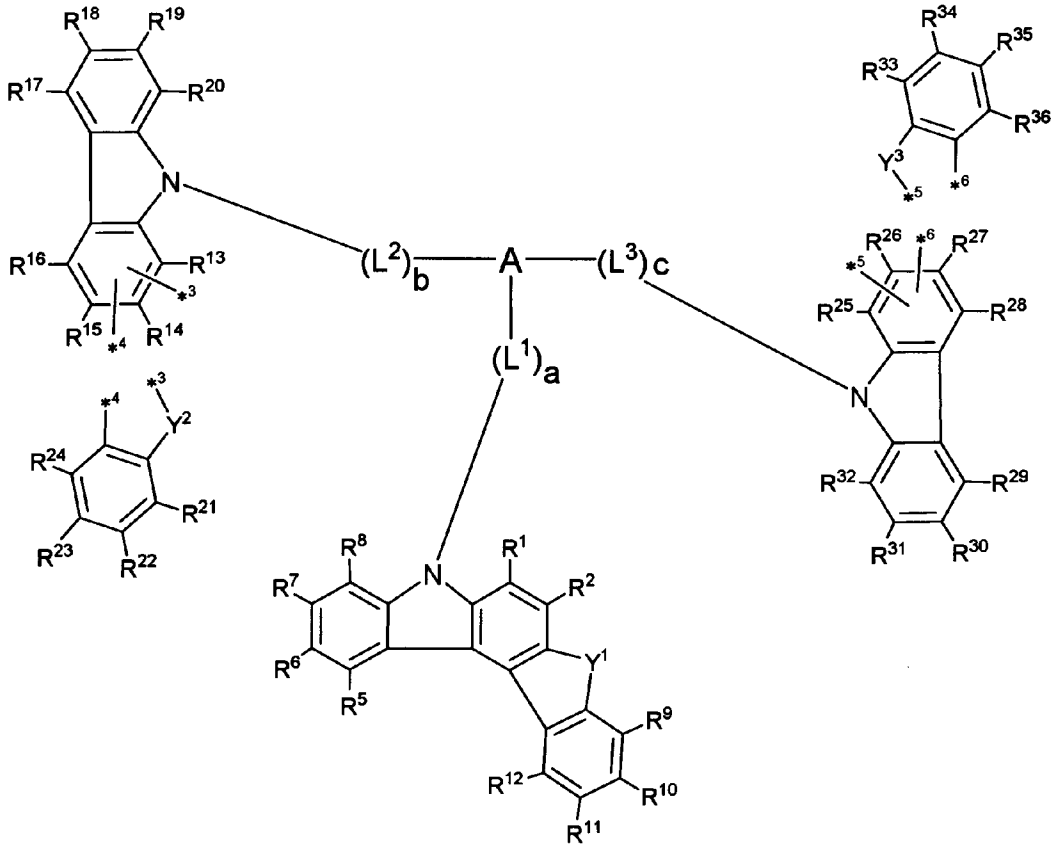
[0270] [化155]



(1a-i-4[II])

[0271]

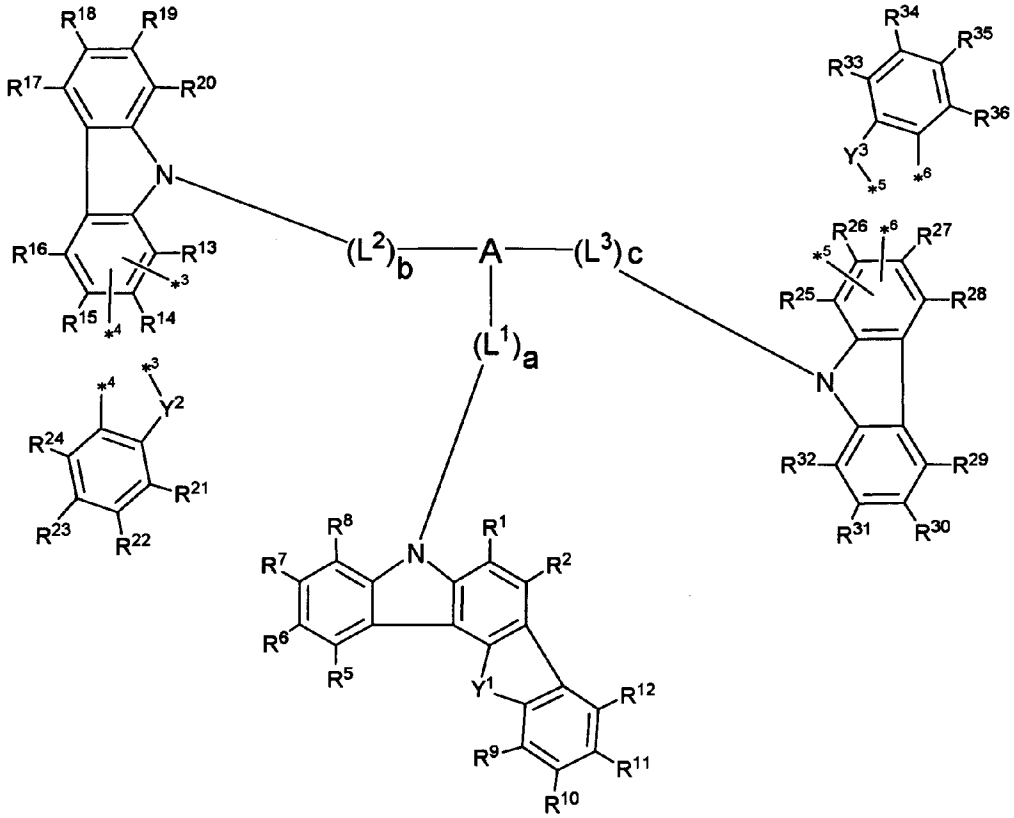
[化156]



(1a-i-5[II])

[0272]

[化157]



(1a-i-6[II])

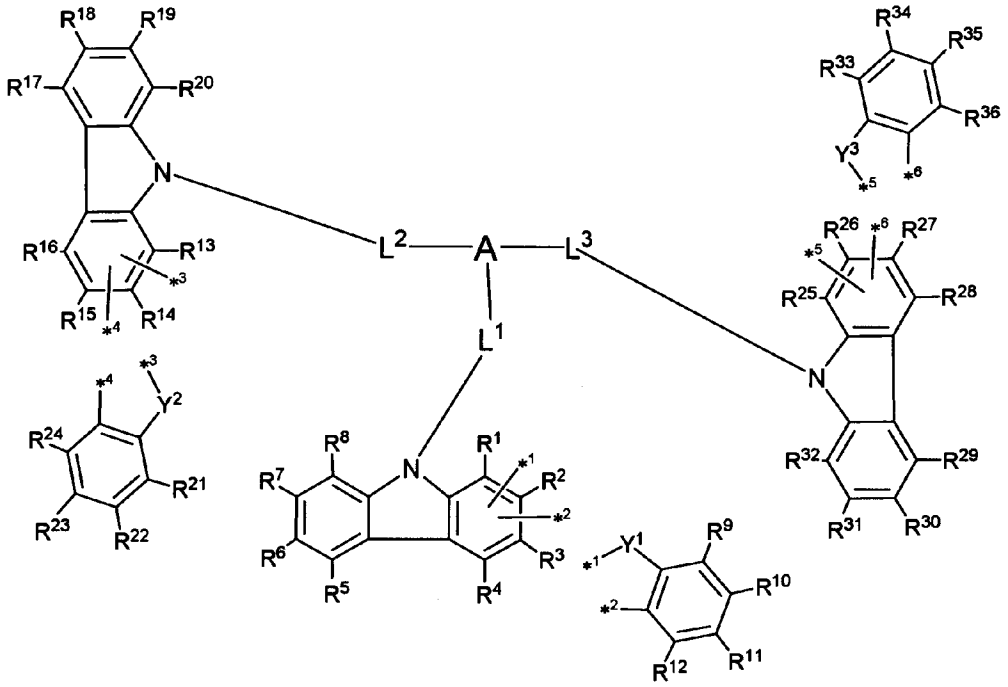
[0273] 一般式（１ａ－ｉ－１［II］）～（１ａ－ｉ－６［II］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｃ、及びＹ[1]～Ｙ[3]は、前記一般式（１［II］）に関する記載と同じである。Ｒ[1]～Ｒ[36]は、前記一般式（１［II］）に記載のＲと同じである。

Ｒ[13]～Ｒ[16]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[3]及び＊[4]と結合し、Ｒ[25]～Ｒ[28]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[5]及び＊[6]と結合する。

[0274] また、本発明の一態様である化合物として、下記一般式（１ａ－ii［II］）で表される化合物（以下、「化合物（１ａ－ii［II］）」ともいう）がより好ましい。

[0275]

[化158]



(1a-ii[II])

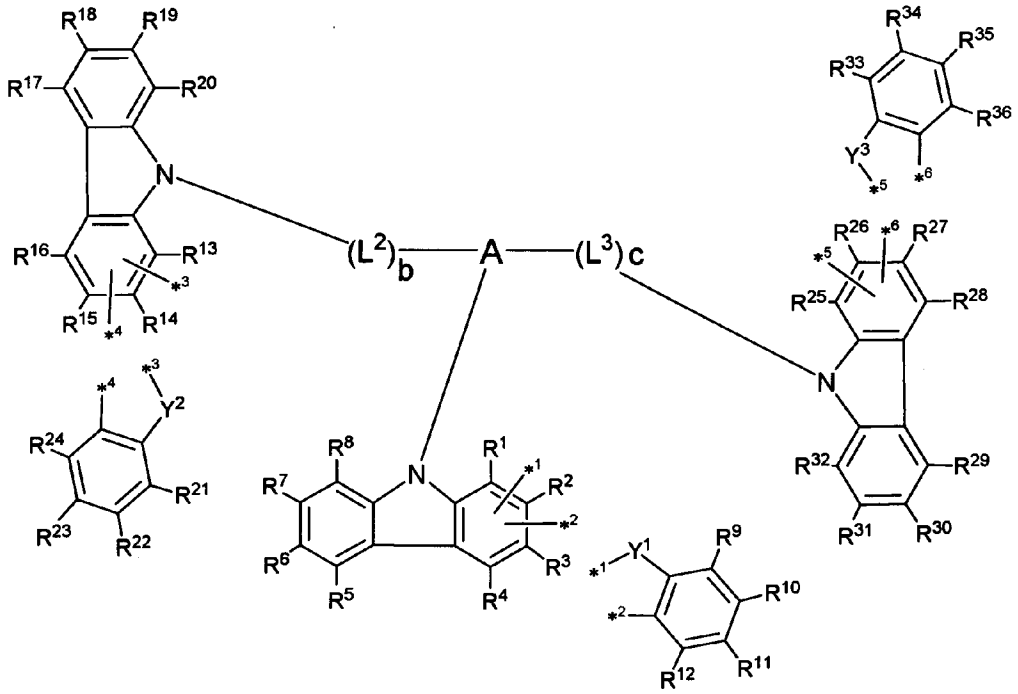
[0276] 一般式（１ａ－ｉｉ［II］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、及びＹ[1]～Ｙ[3]は、前記一般式（１［II］）に関する記載と同じである。Ｒ[1]～Ｒ[36]は、前記一般式（１［II］）に記載のＲと同じである。

Ｒ[1]～Ｒ[4]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[1]及び＊[2]と結合し、Ｒ[13]～Ｒ[16]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[3]及び＊[4]と結合し、Ｒ[25]～Ｒ[28]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[5]及び＊[6]と結合する。

[0277] また、本発明の一態様である化合物として、下記一般式（１ａ－ｉｉｉ［II］）で表される化合物（以下、「化合物（１ａ－ｉｉｉ［II］）」ともいう）がより好ましい。

[0278]

[化159]



(1a-iii[II])

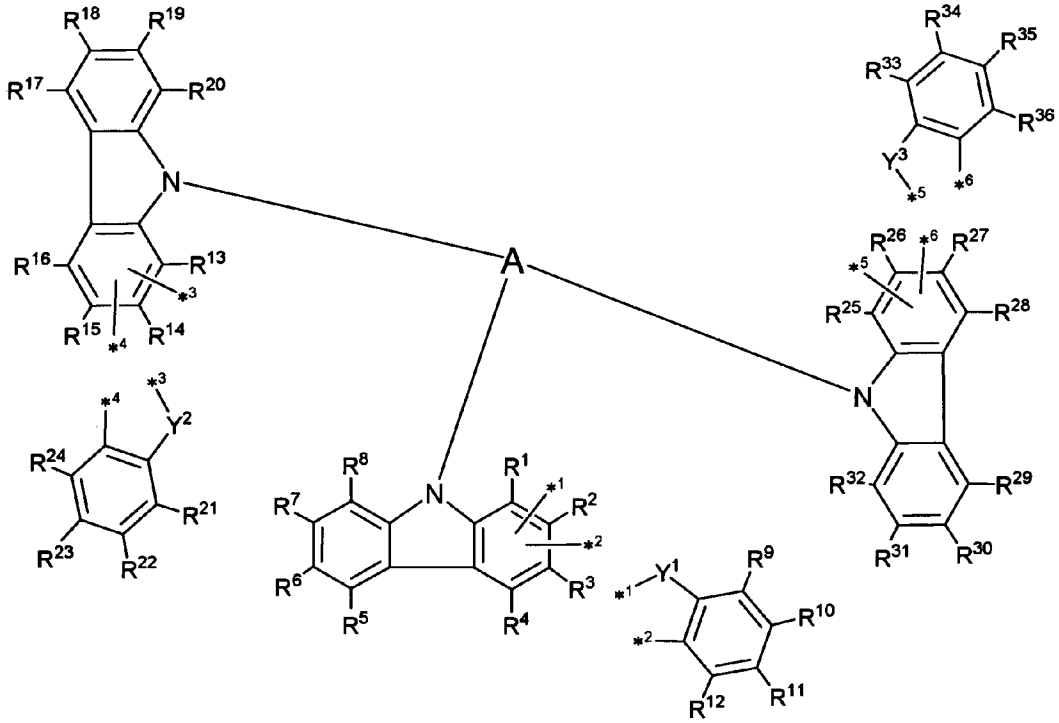
[0279] 一般式（１ａ－ｉｉｉ［II］）中、Ａ、Ｌ[2]～Ｌ[3]、ｂ～ｃ、及びＹ[1]～Ｙ[3]は、前記一般式（１［II］）に関する記載と同じである。Ｒ[1]～Ｒ[36]は、前記一般式（１［II］）に記載のＲと同じである。

Ｒ[1]～Ｒ[4]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[1]及び＊[2]と結合し、Ｒ[13]～Ｒ[16]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[3]及び＊[4]と結合し、Ｒ[25]～Ｒ[28]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[5]及び＊[6]と結合する。

[0280] また、本発明の一態様である化合物として、下記一般式（１ａ－ｉｖ［II］）で表される化合物（以下、「化合物（１ａ－ｉｖ［II］）」ともいう）がより好ましい。

[0281]

[化160]



(1a-iv[II])

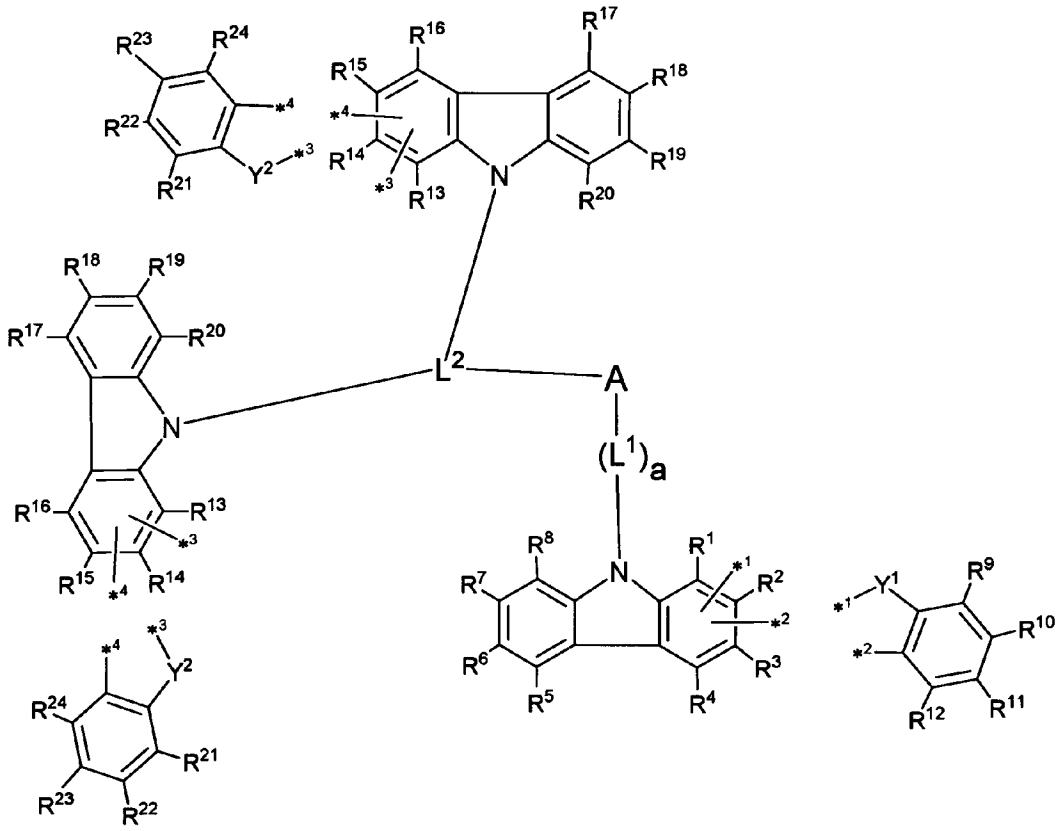
[0282] 一般式（１ａ－ｉｖ［II］）中、Ａ、及びＹ[1]～Ｙ[3]は、前記一般式（１［II］）に関する記載と同じである。Ｒ[1]～Ｒ[36]は、前記一般式（１［II］）に記載のＲと同じである。

Ｒ[1]～Ｒ[4]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[1]及び＊[2]と結合し、Ｒ[13]～Ｒ[16]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[3]及び＊[4]と結合し、Ｒ[25]～Ｒ[28]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[5]及び＊[6]と結合する。

[0283] また、本発明の一態様の化合物として、下記一般式（１ｂ［II］）で表される化合物（以下、「化合物（１ｂ［II］）」ともいう）が好ましい。

[0284]

[化161]



(1b[II])

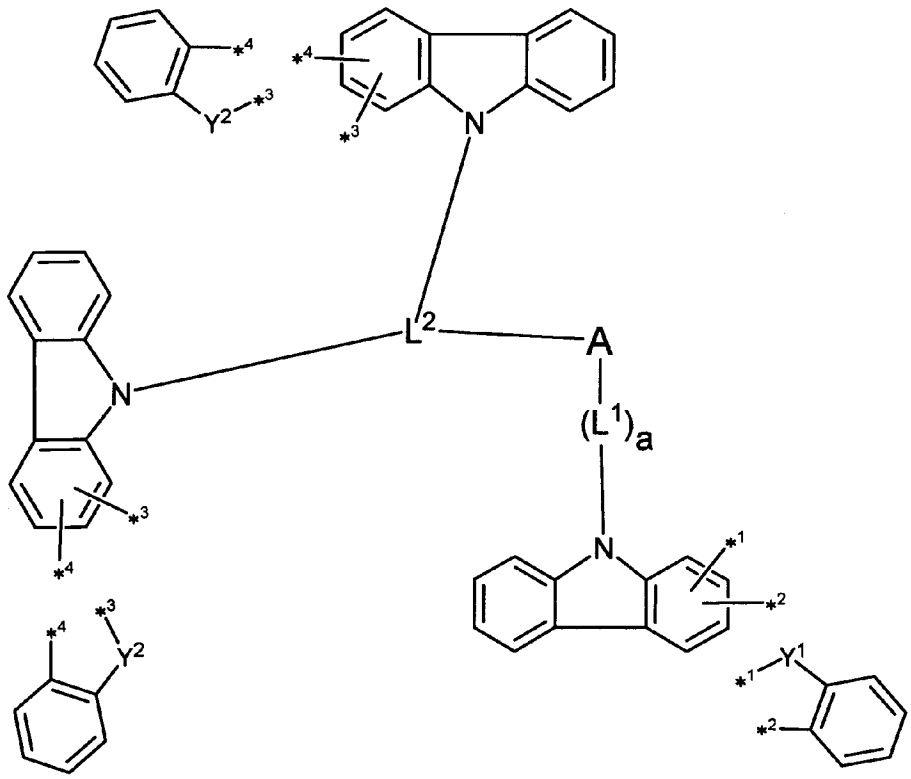
[0285] 一般式（１ｂ［II］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[2]、ａ、及びＹ[1]～Ｙ[2]は、前記一般式（１［II］）に関する記載と同じである。Ｒ[1]～Ｒ[24]は、前記一般式（１［II］）に記載のＲと同じである。

Ｒ[1]～Ｒ[4]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[1]及び＊[2]と結合し、Ｒ[13]～Ｒ[16]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[3]及び＊[4]と結合する。

[0286] なお、本発明の一態様である化合物（１ｂ［II］）としては、Ｒ[1]～Ｒ[24]から選ばれる２つが互いに結合して環を形成することがない化合物であることが好ましく、下記一般式（１ｂ－ｉ［II］）で表される化合物であることがより好ましい。

[0287]

[化162]



(1b-i[II])

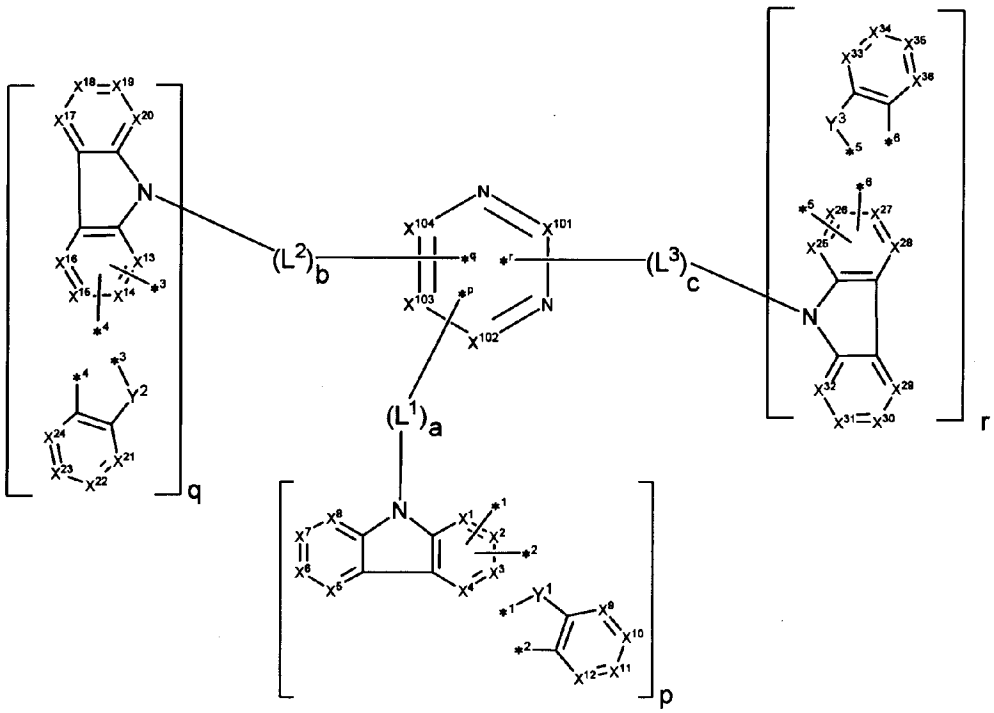
[0288] 一般式（１ｂ－ｉ［II］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[2]、ａ、及びＹ[1]～Ｙ[2]は、前記一般式（１［II］）に関する記載と同じである。

カルルバゾリル基の１位、２位、３位及び４位に有する４つの水素原子のうち２つが脱離して、脱離した水素原子と結合していた炭素原子が、＊[1]及び＊[2]、＊[3]及び＊[4]、もしくは、＊[5]及び＊[6]と結合する。

[0289] また、本発明の一態様である化合物として、下記一般式（１ｃ－ｉ［II］）～（１ｃ－ｉｖ［II］）で表される化合物（以下、「化合物（１ｃ－ｉ［II］）～（１ｃ－ｉｖ［II］）」ともいう）が好ましい。

[0290]

[化163]



(1c-i[II])

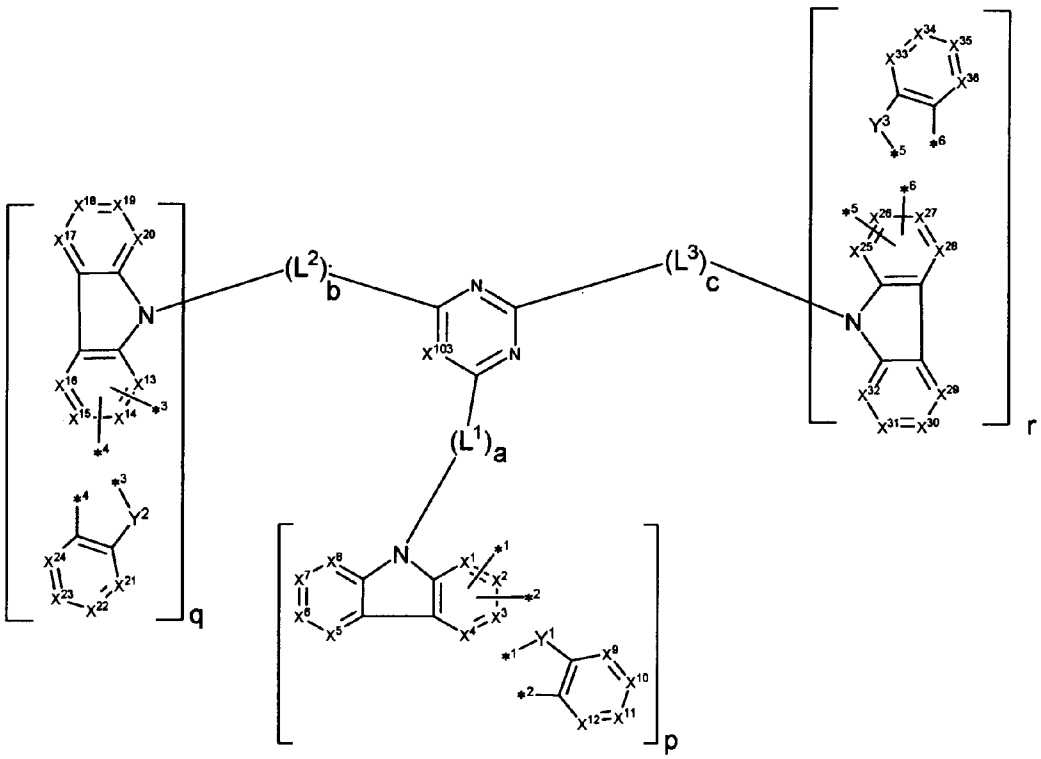
[0291] 一般式（１ｃ－ｉ［II］）中、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｃ、ｐ～ｒ、Ｘ[1]～Ｘ[36]、及びＹ[1]～Ｙ[3]は、前記一般式（１［II］）に関する記載と同じである。

Ｘ[101]～Ｘ[104]は、それぞれ＊[p]～＊[r]のいずれかと結合する炭素原子、Ｃ（Ｒｘ）、又は窒素原子であり、Ｒｘは水素原子又は置換基であって、複数存在するＲｘは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲｘ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。

[0292]

[化164]

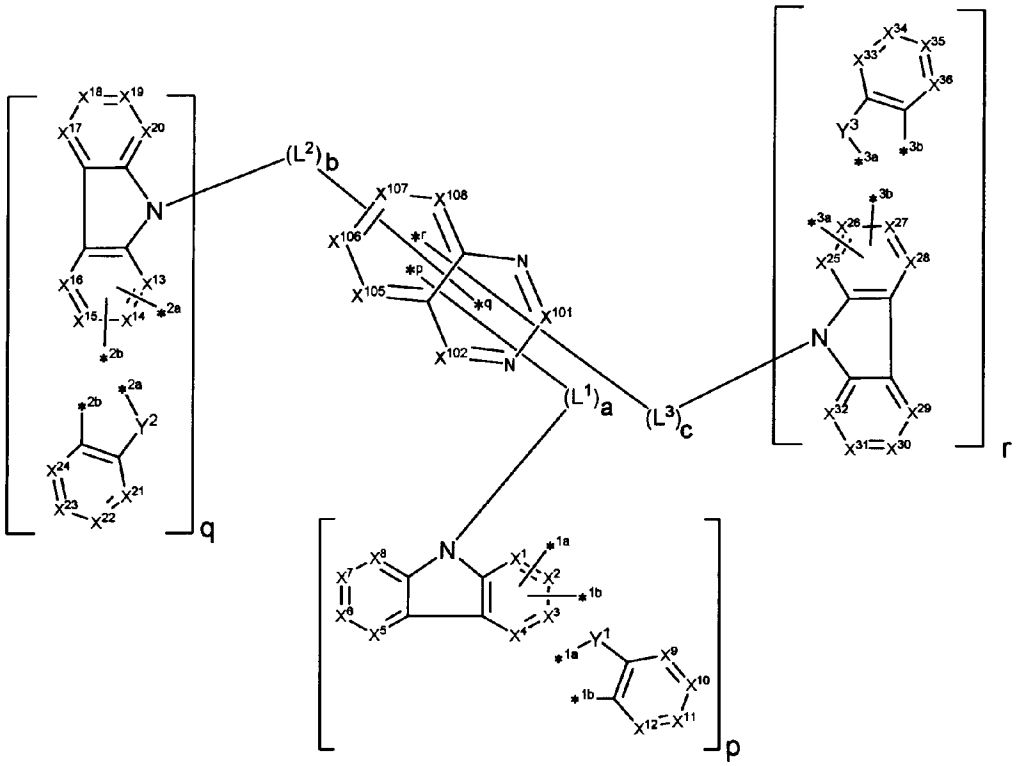


(1c-ii[II])

[0293] 一般式（１ｃ－ｉｉ［II］）中、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｃ、ｐ～ｒ、Ｘ[1]～Ｘ[36]、及びＹ[1]～Ｙ[3]は、前記一般式（１［II］）に関する記載と同じである。Ｘ[103]は、Ｃ（Ｒｘ）、又は窒素原子であり、Ｒｘは水素原子又は置換基である。

[0294]

[化165]



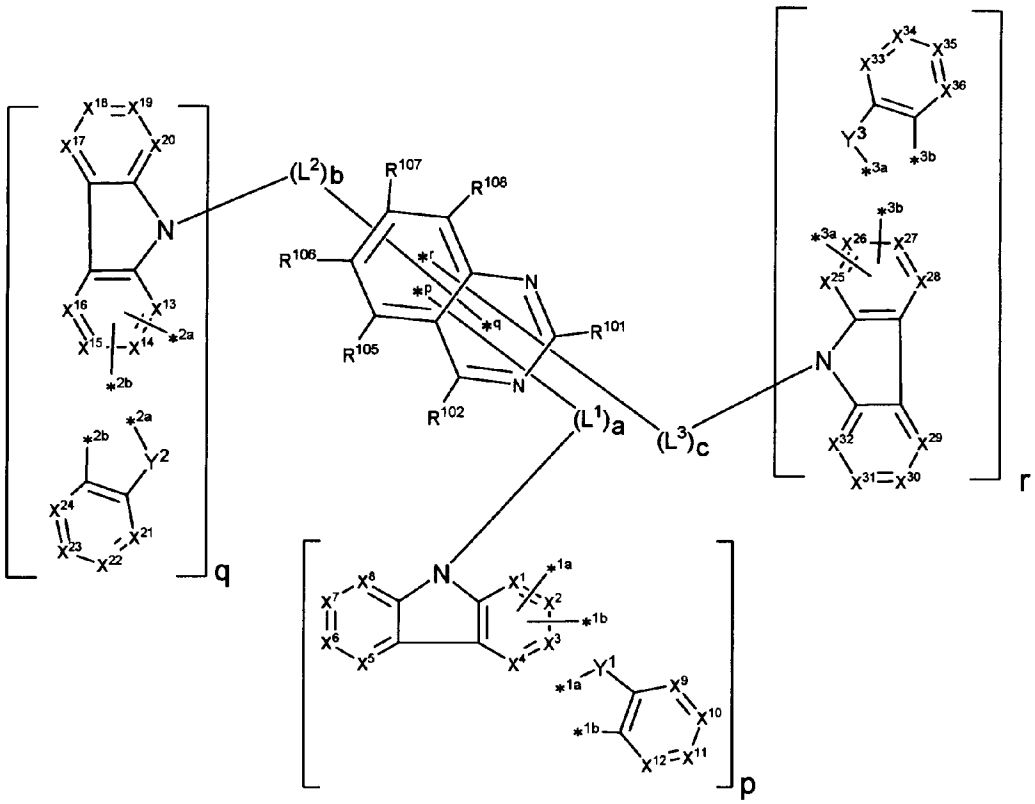
(1c-iii[II])

[0295] 一般式（１ｃ－ｉｉｉ［II］）中、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｃ、ｐ～ｒ、Ｘ[1]～Ｘ[36]、及びＹ[1]～Ｙ[3]は、前記一般式（１［II］）に関する記載と同じである。

Ｘ[101]、Ｘ[102]、Ｘ[105]～Ｘ[108]は、それぞれ＊[p]～＊[r]のいずれかと結合する炭素原子、Ｃ（Ｒｘ）、又は窒素原子であり、Ｒｘは水素原子又は置換基であって、複数存在するＲｘは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲｘ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。

[0296]

[化166]



(1c-iv[II])

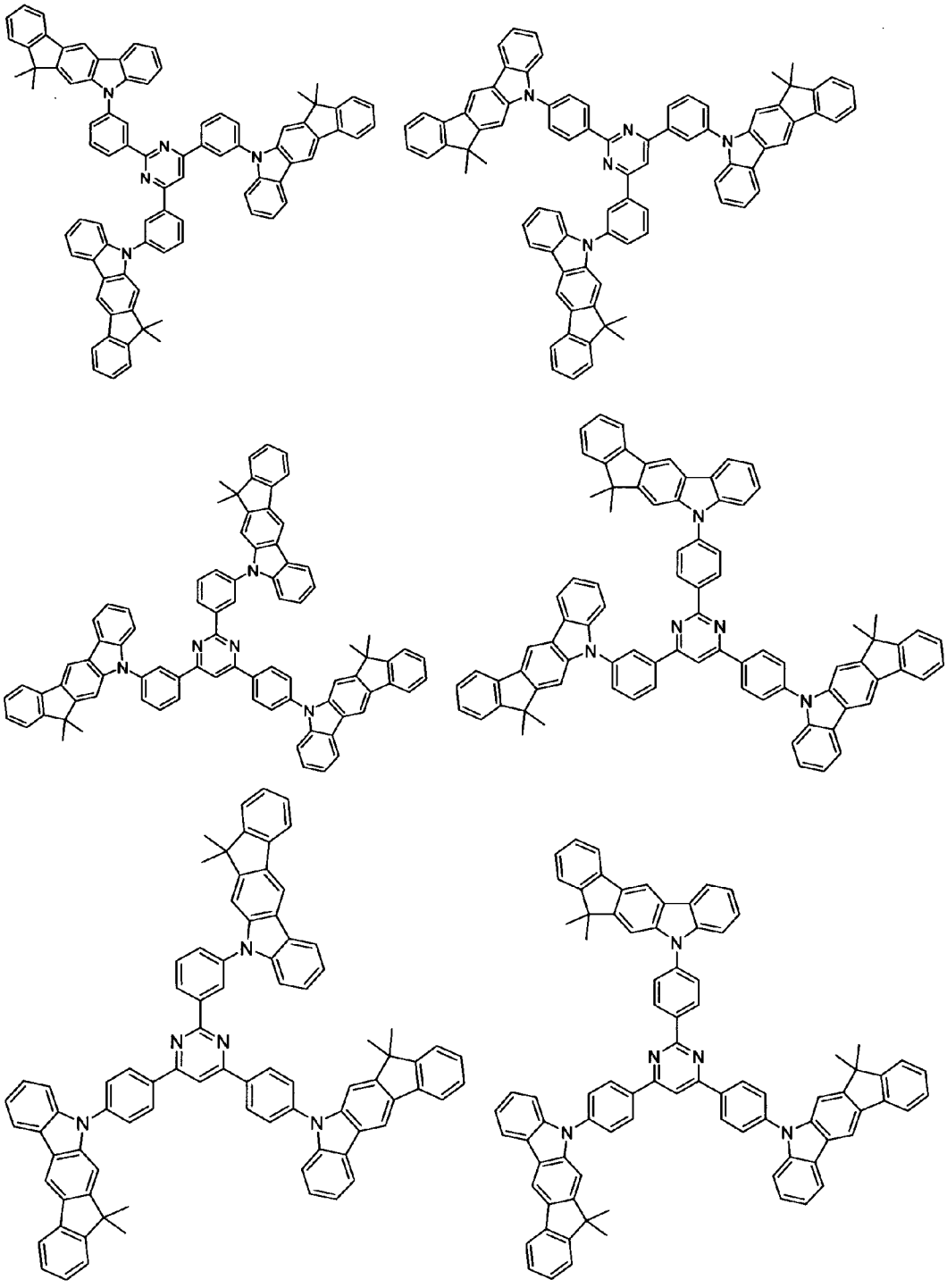
[0297] 一般式（１ｃ－ｉｖ［II］）中、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｃ、ｐ～ｒ、Ｘ[1]～Ｘ[36]、及びＹ[1]～Ｙ[3]は、前記一般式（１［II］）に関する記載と同じである。

Ｒ[101]、Ｒ[102]、及びＲ[105]～Ｒ[108]のうちの１～３つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子が＊[p]～＊[r]のいずれかと結合し、それ以外は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。なお、Ｒ[102]及びＲ[105]～Ｒ[108]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。

[0298] 以下に本発明の一態様である化合物（１［II］）の具体例を示すが、これらに限定されるものではない。

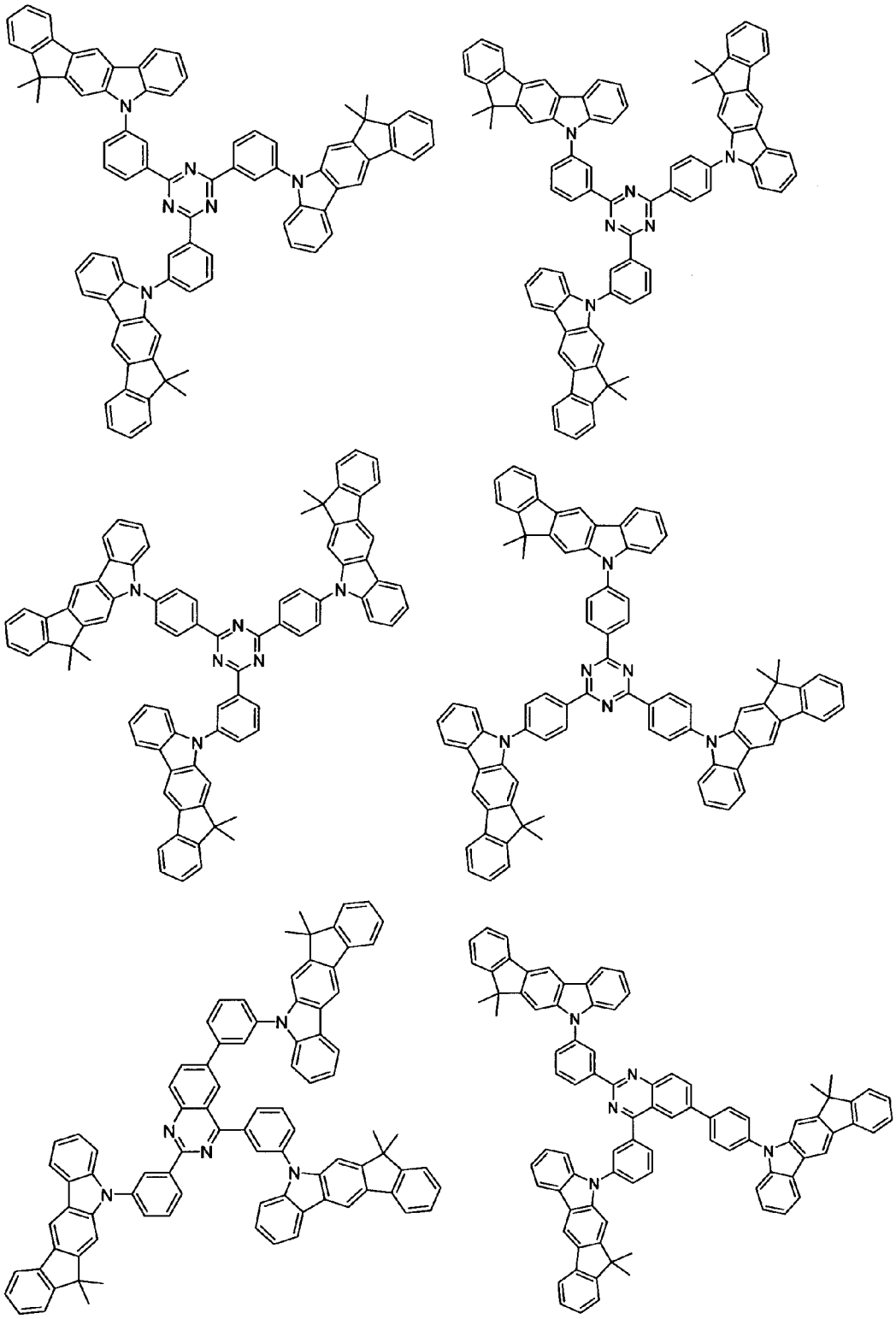
[0299]

[化167]



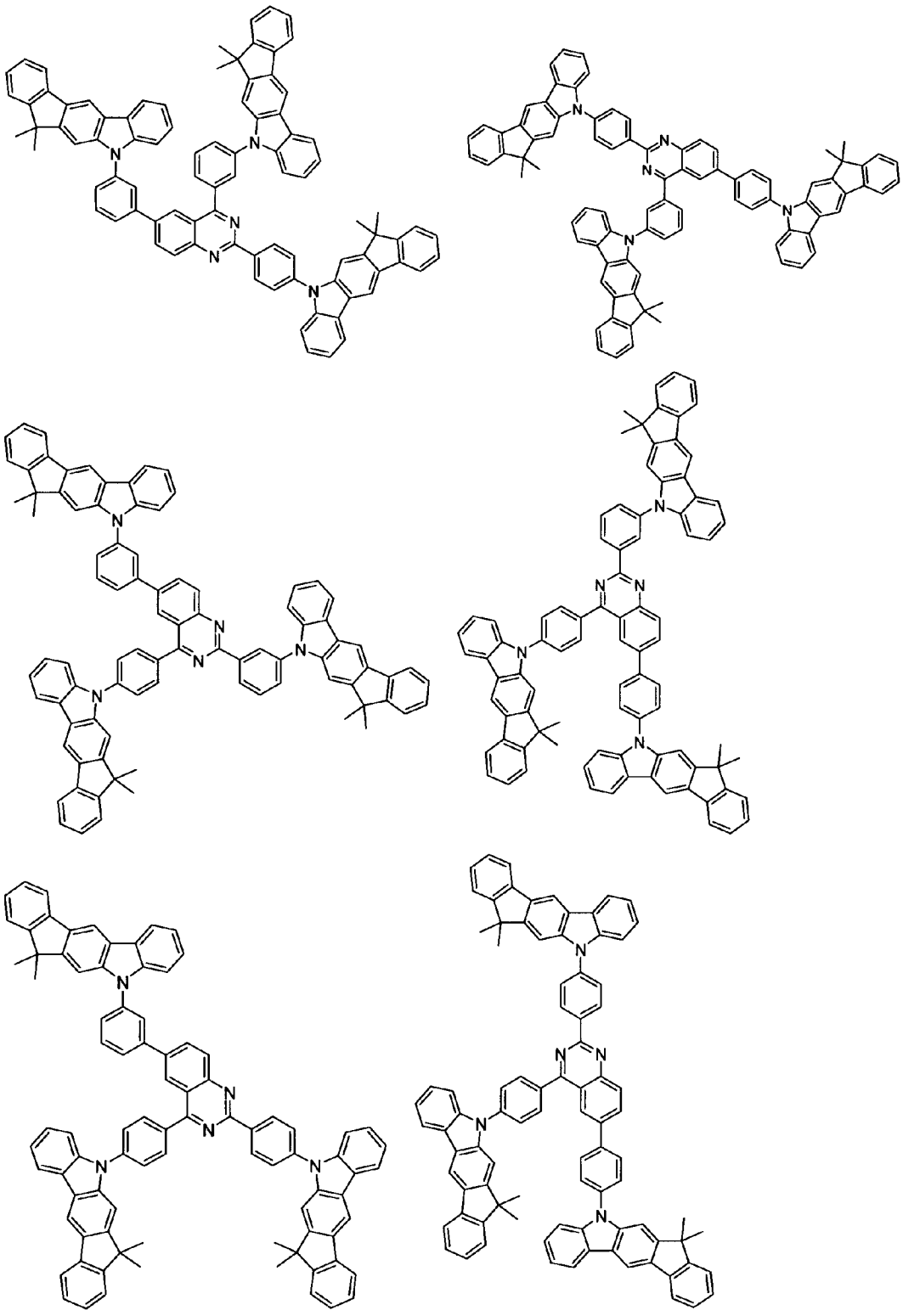
[0300]

[化168]



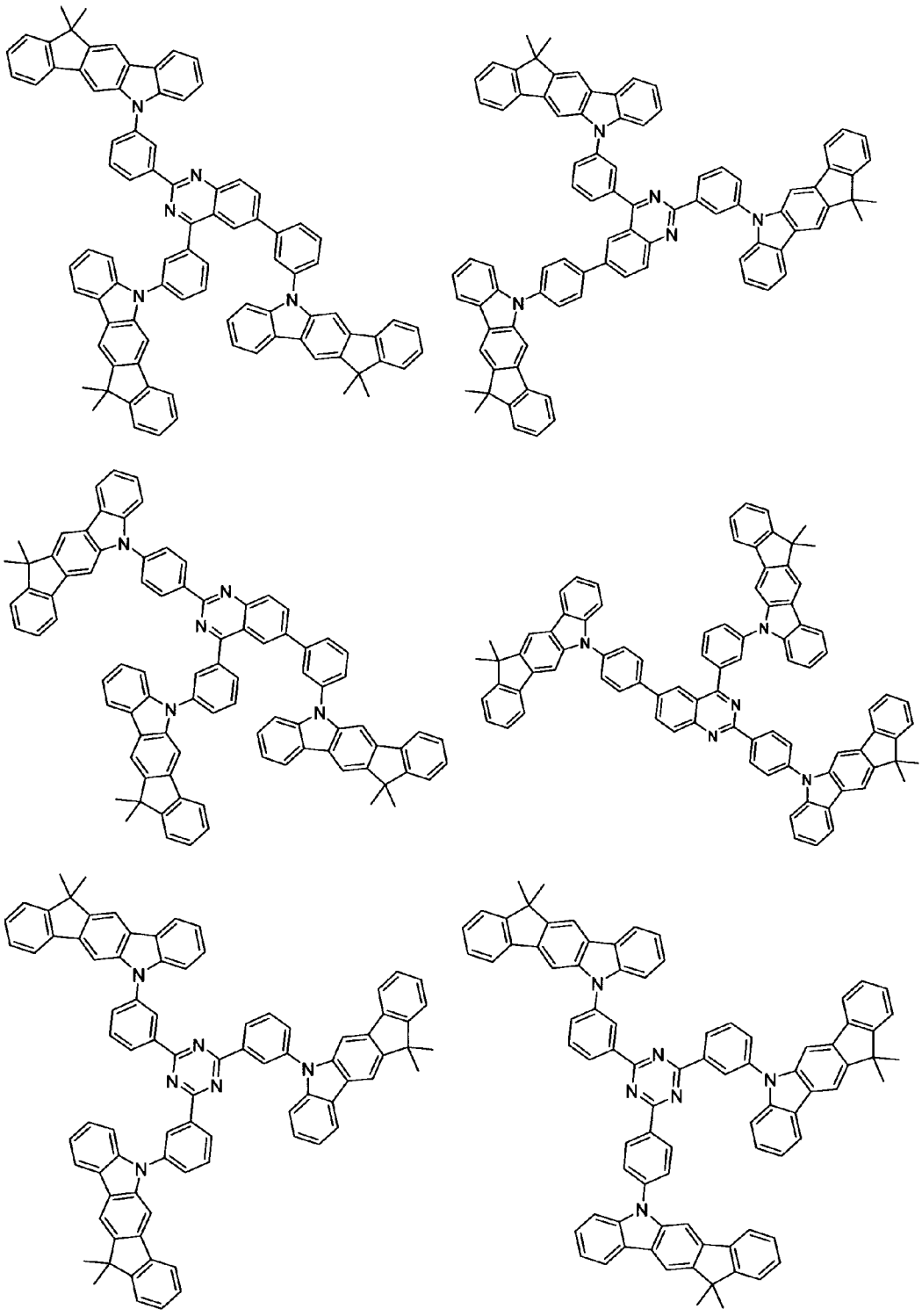
[0301]

[化169]



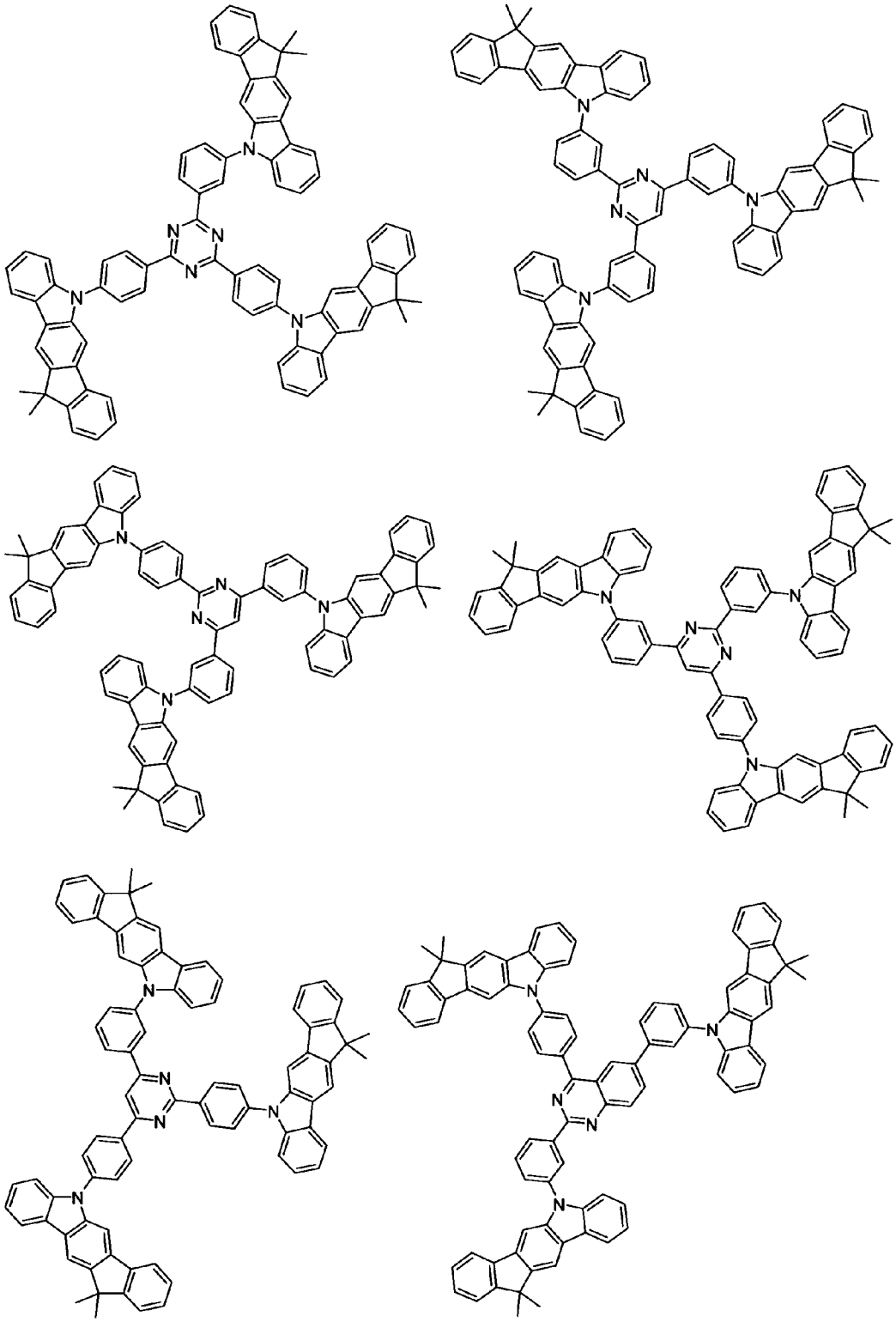
[0302]

[化170]



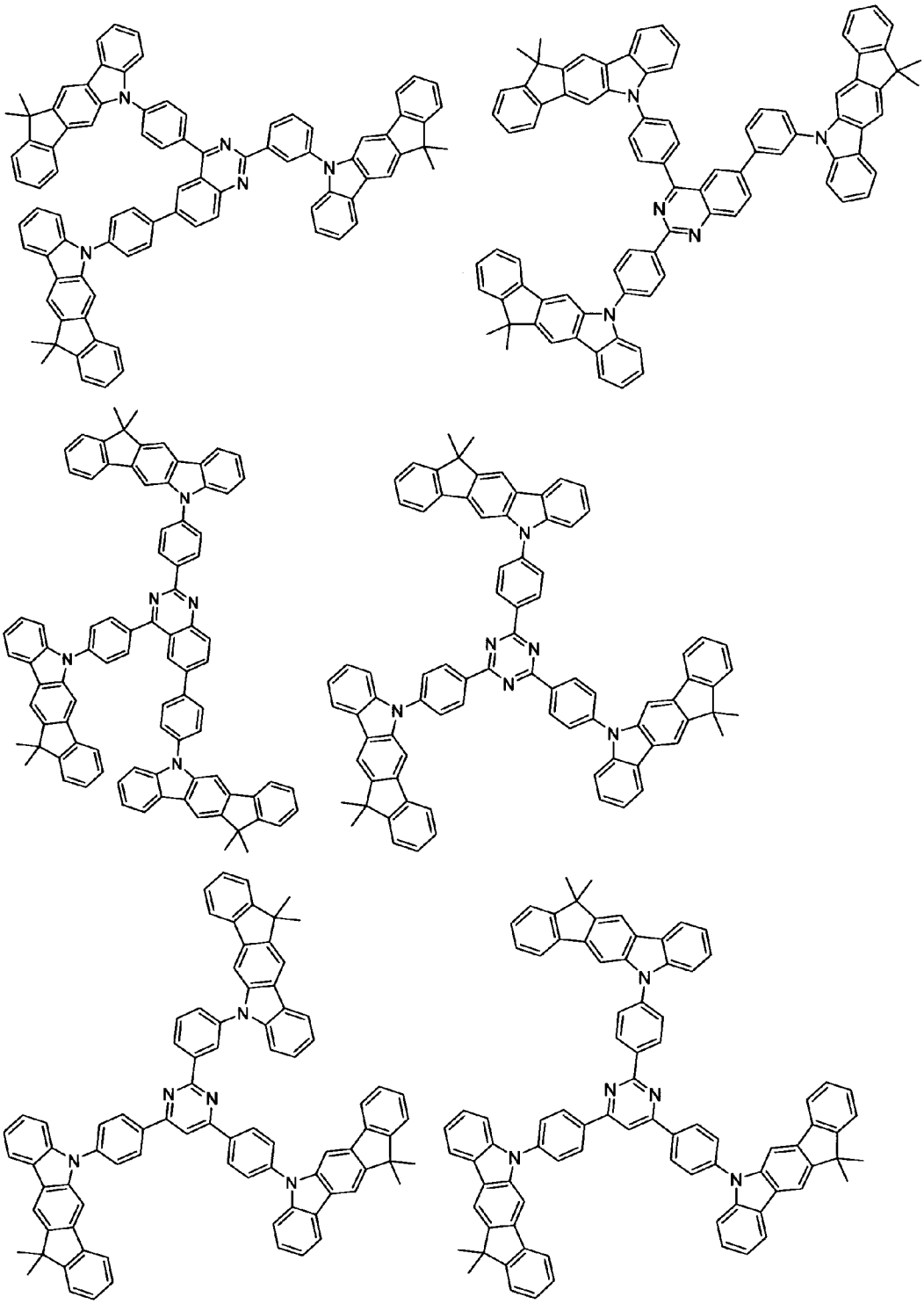
[0303]

[化171]



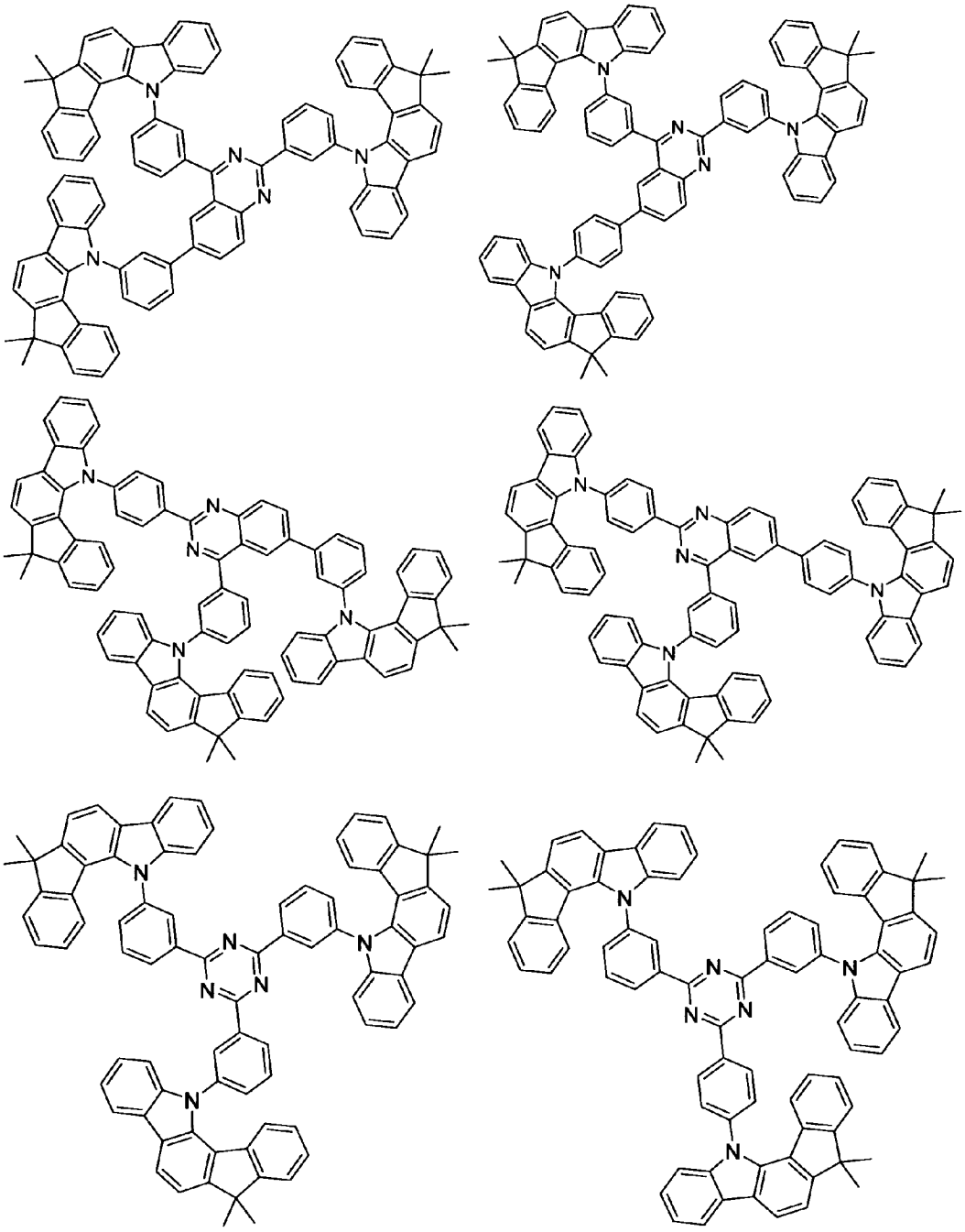
[0304]

[化172]



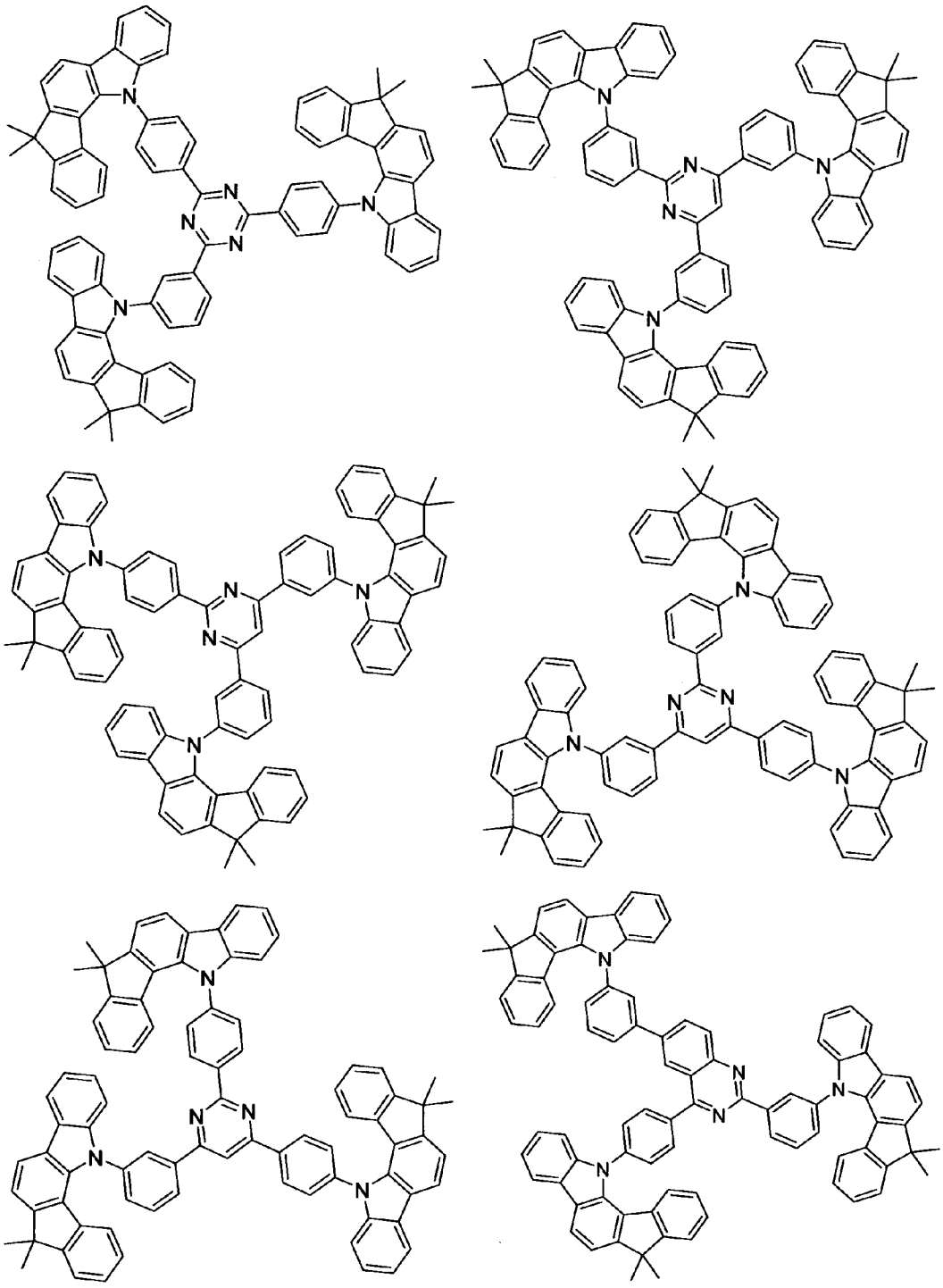
[0305]

[化173]



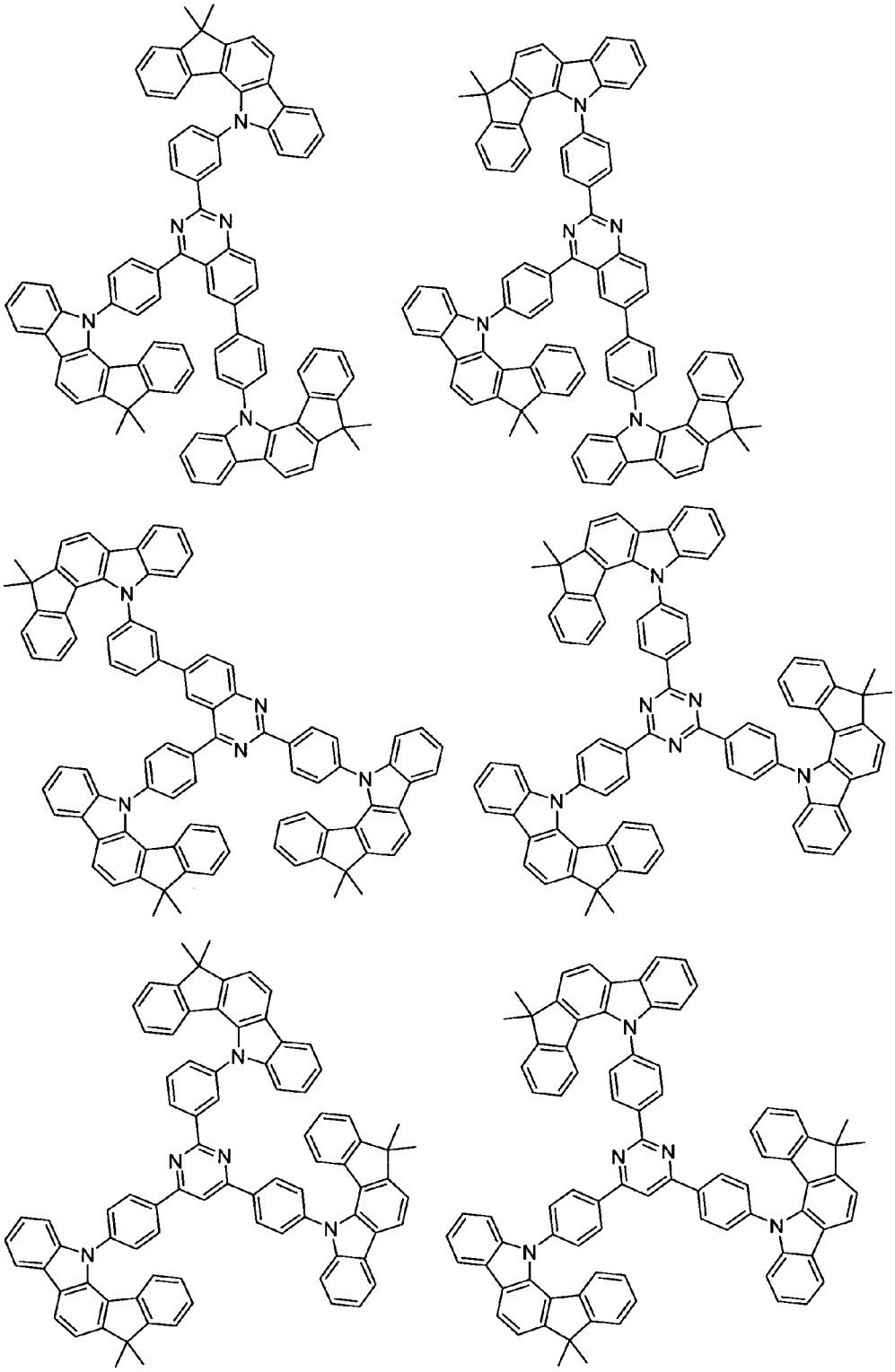
[0306]

[化174]



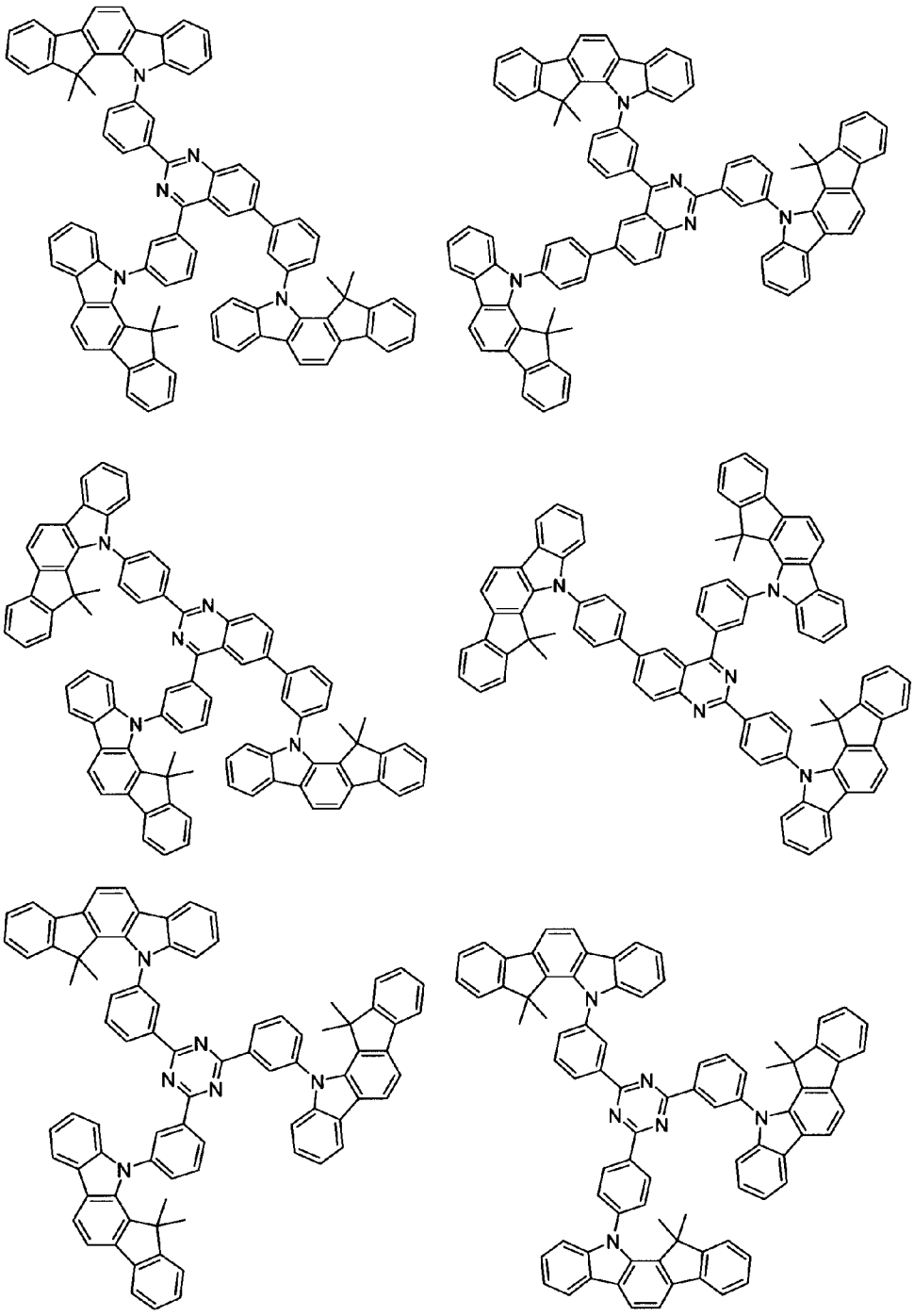
[0307]

[化175]



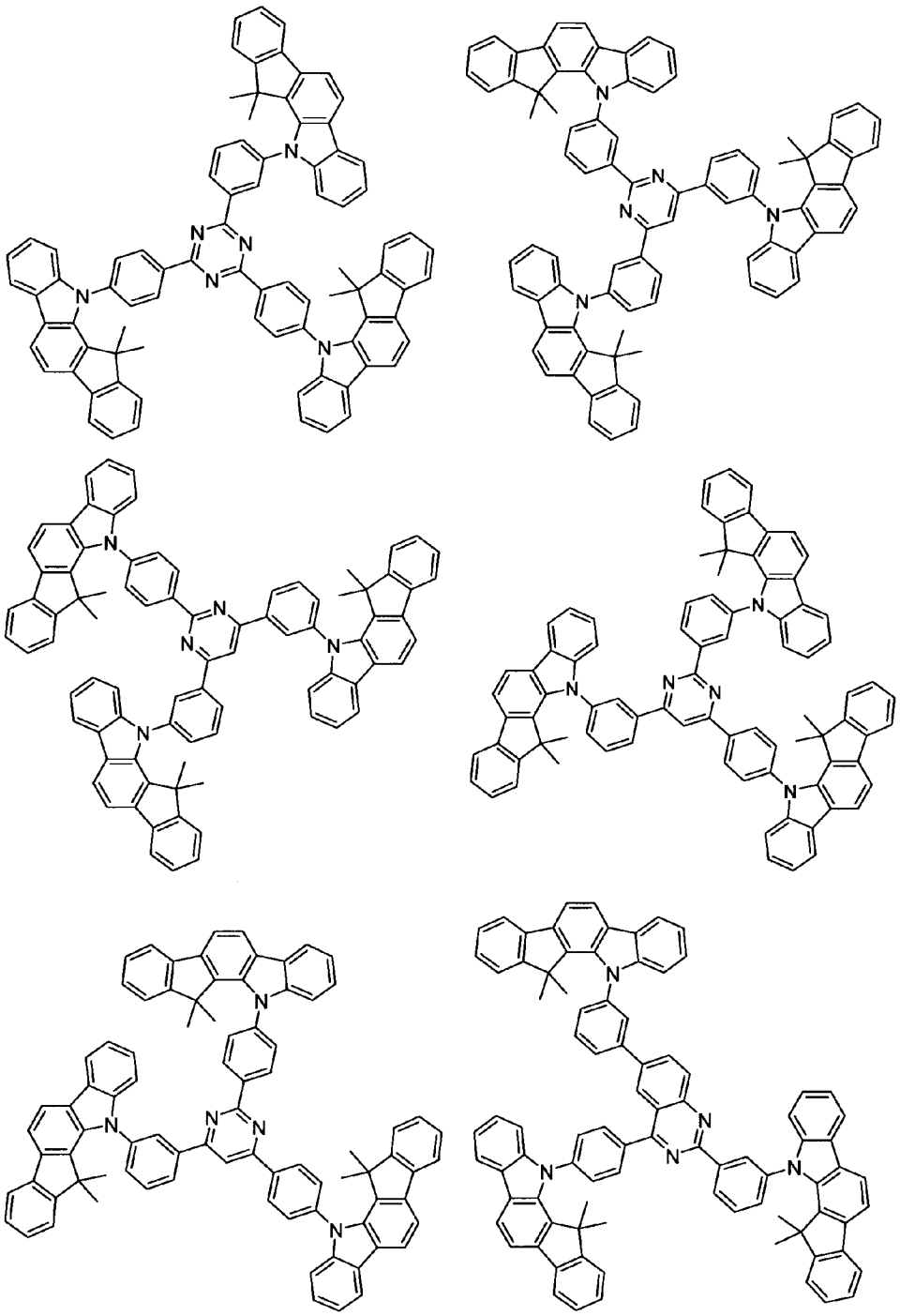
[0308]

[化176]



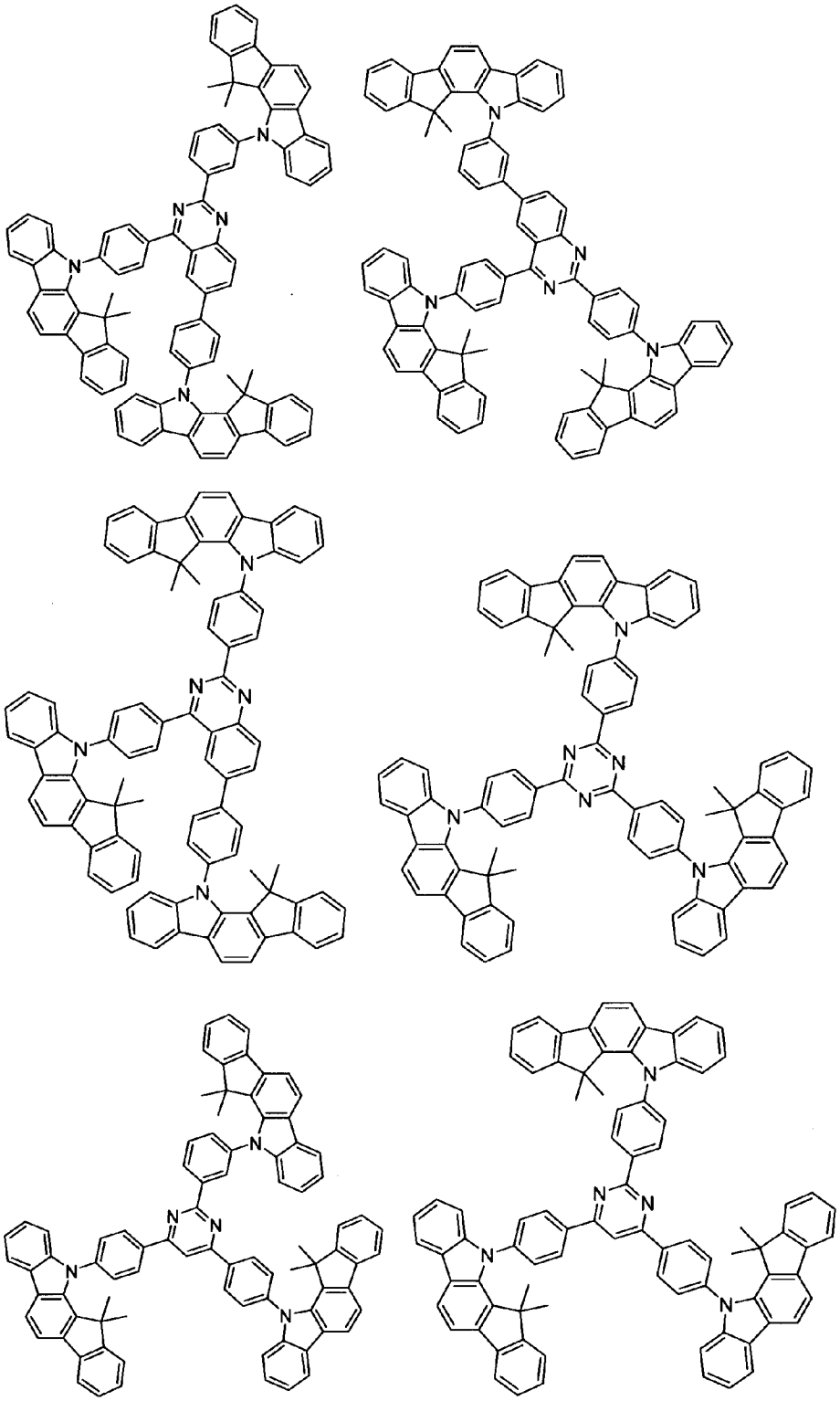
[0309]

[化177]



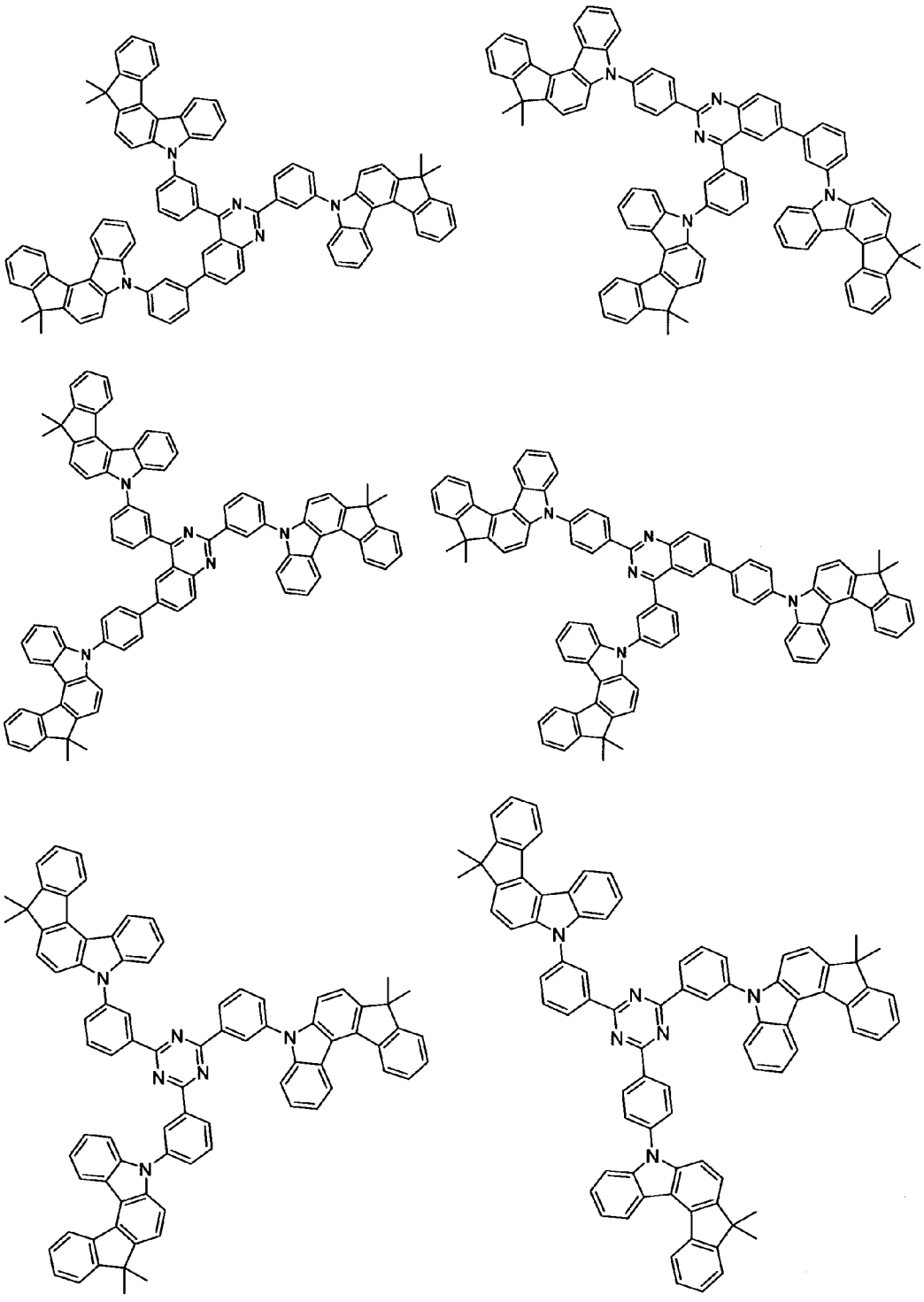
[0310]

[化178]



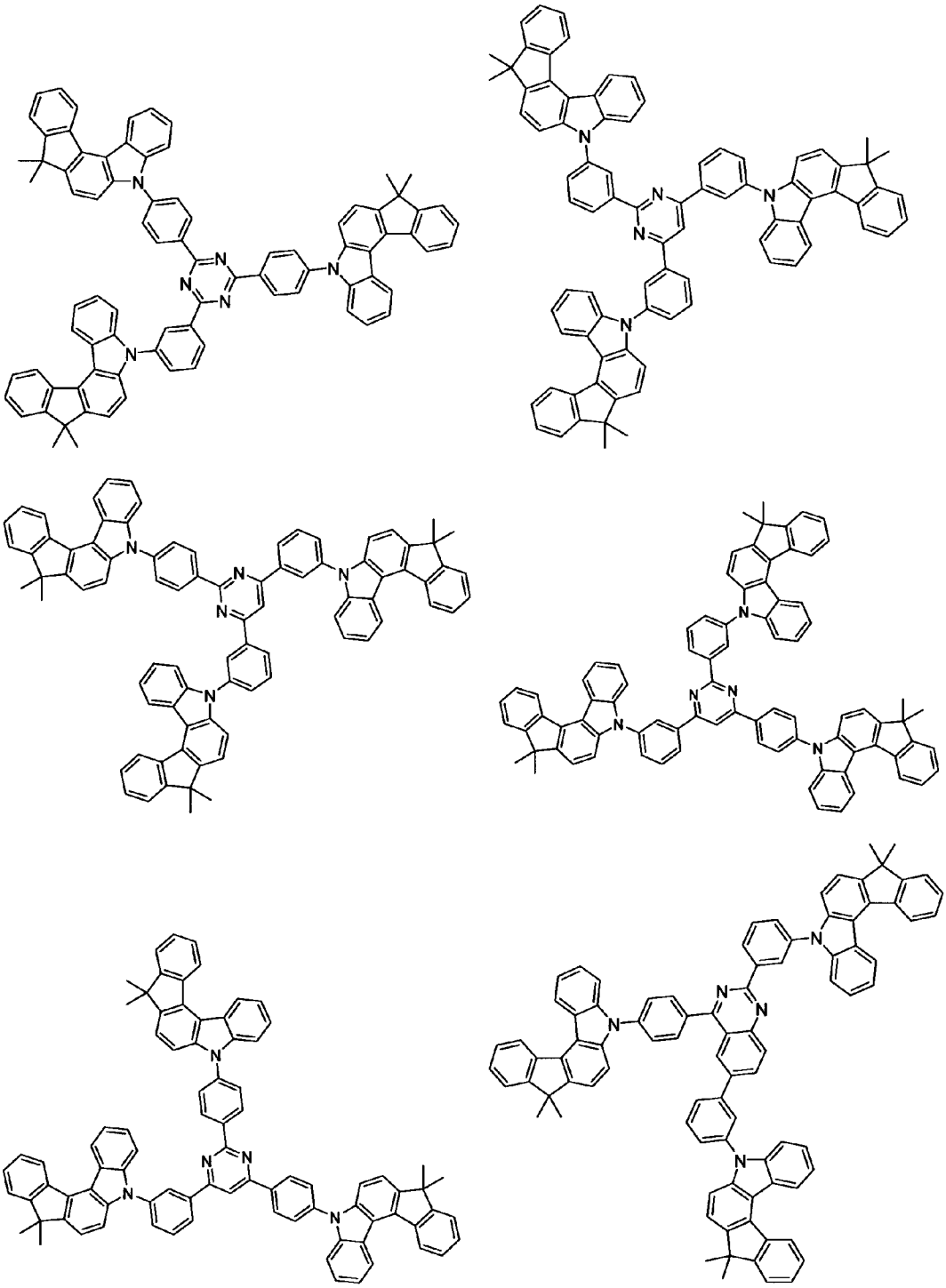
[0311]

[化179]



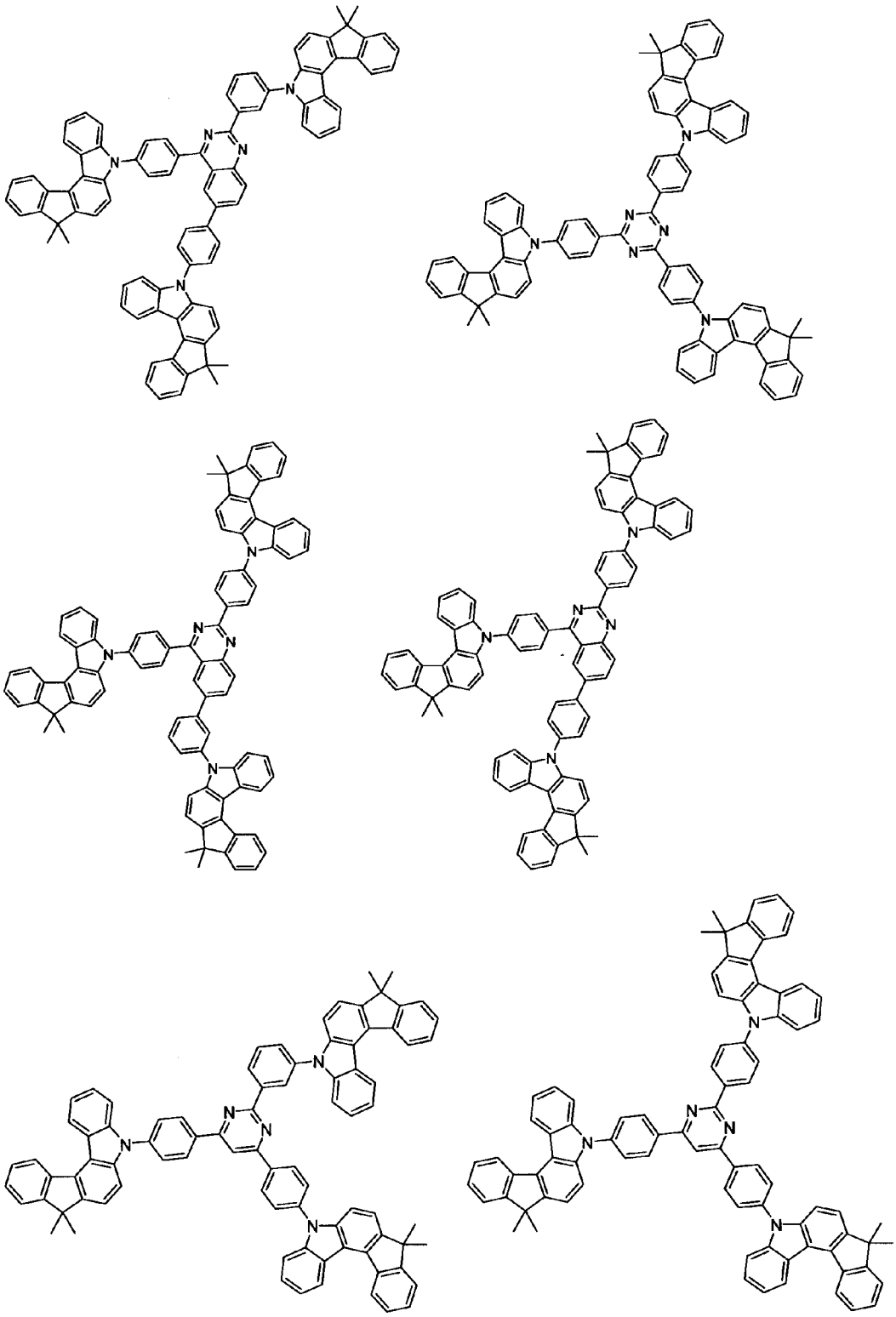
[0312]

[化180]



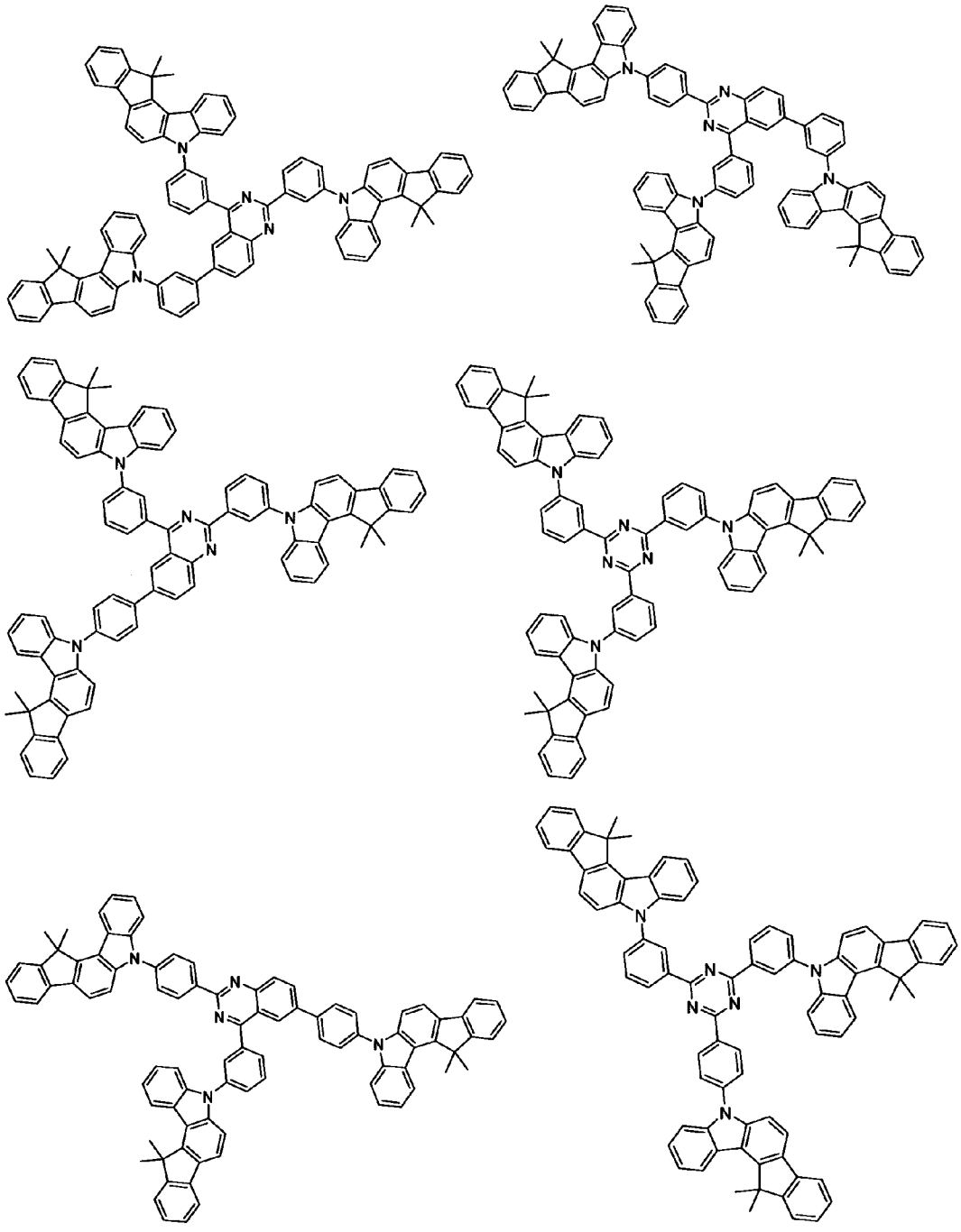
[0313]

[化181]



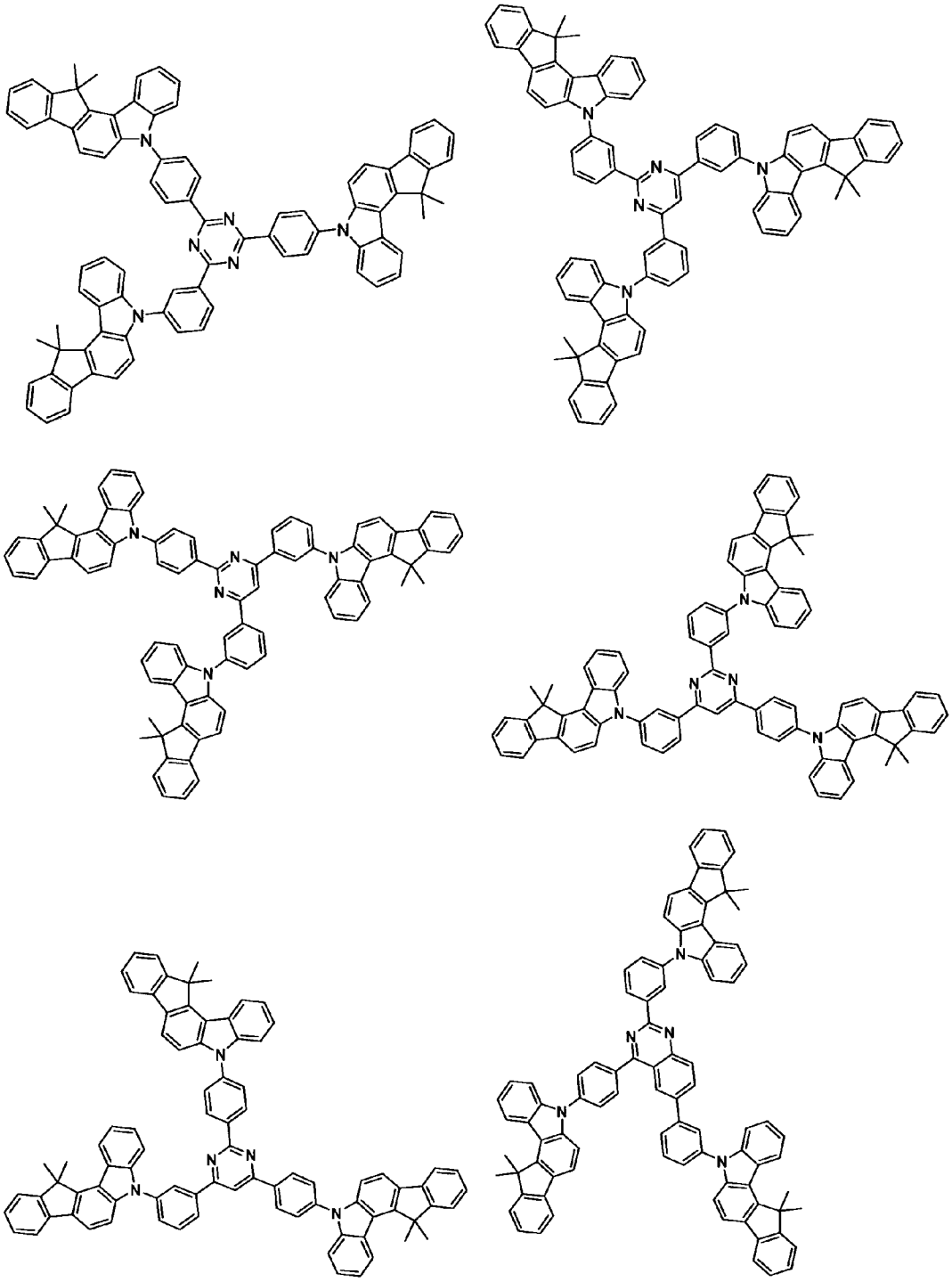
[0314]

[化182]



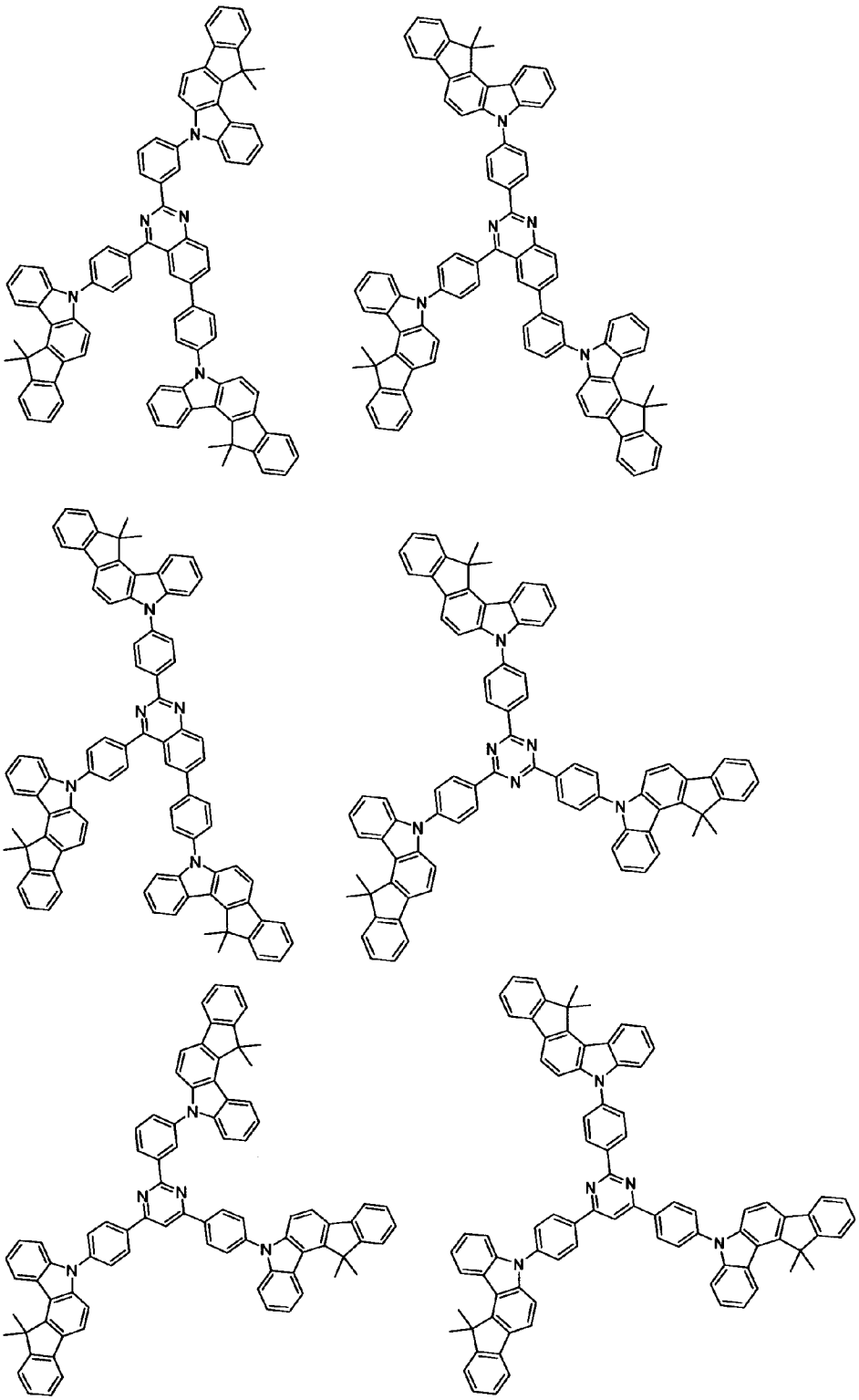
[0315]

[化183]



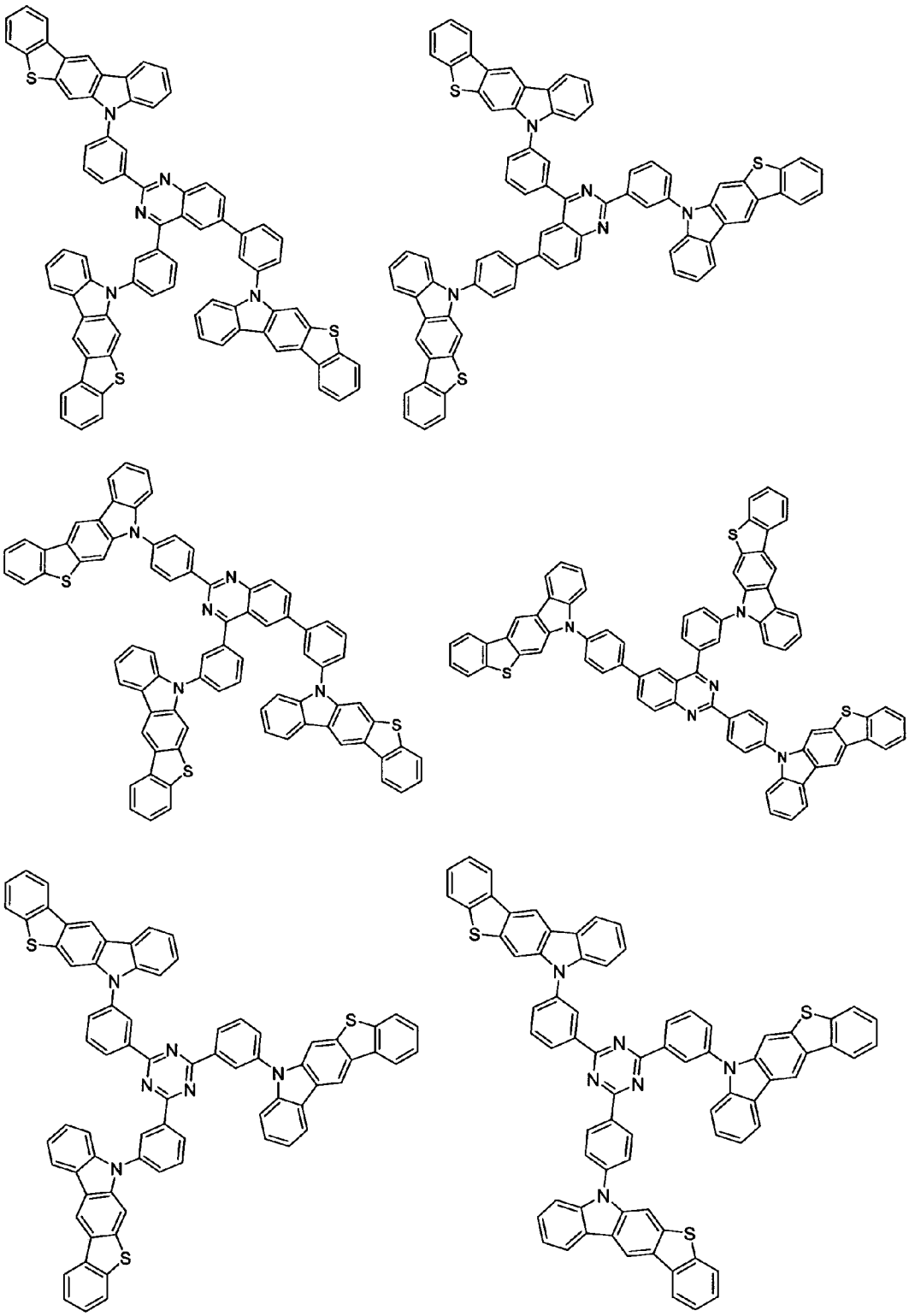
[0316]

[化184]



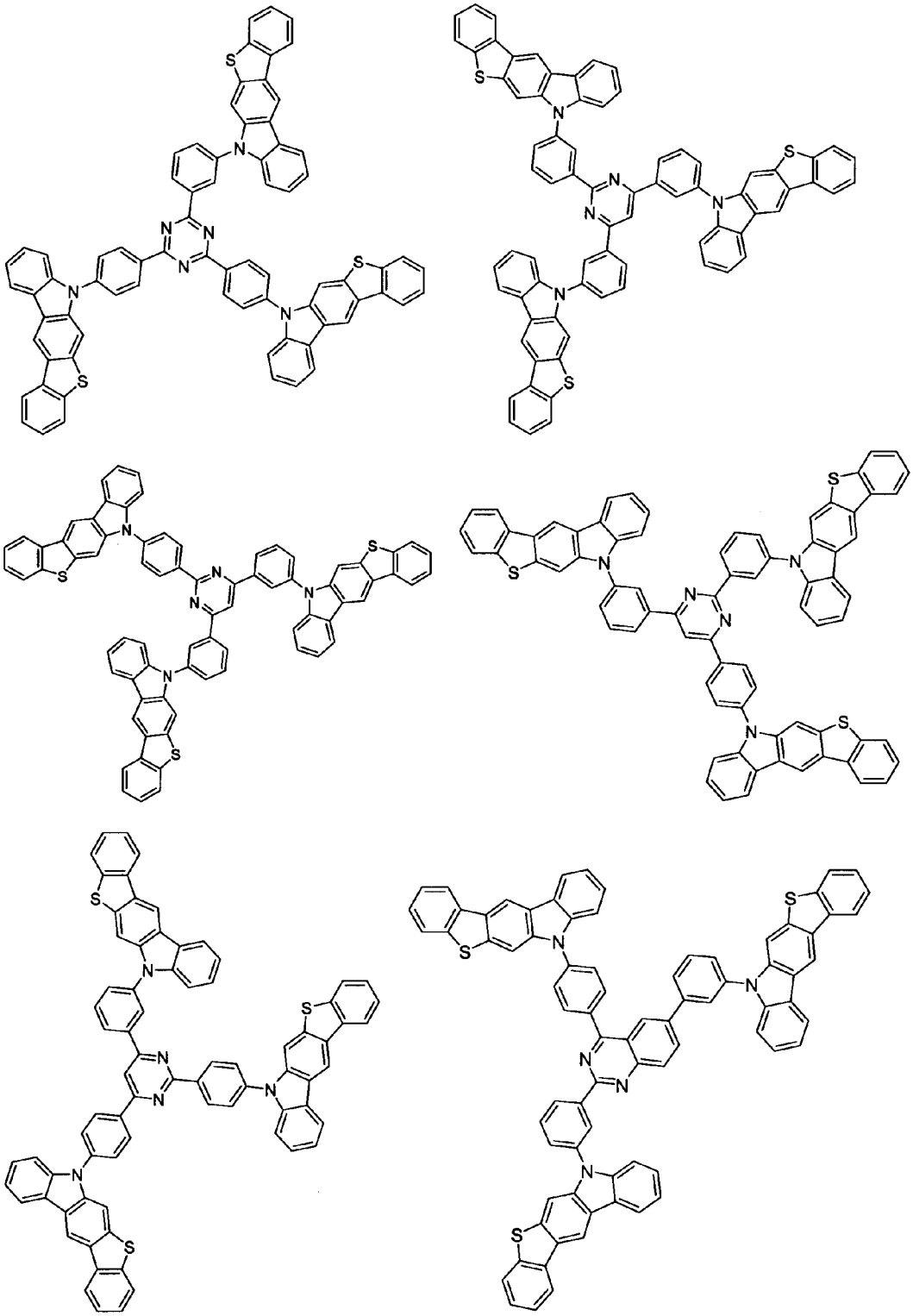
[0317]

[化185]



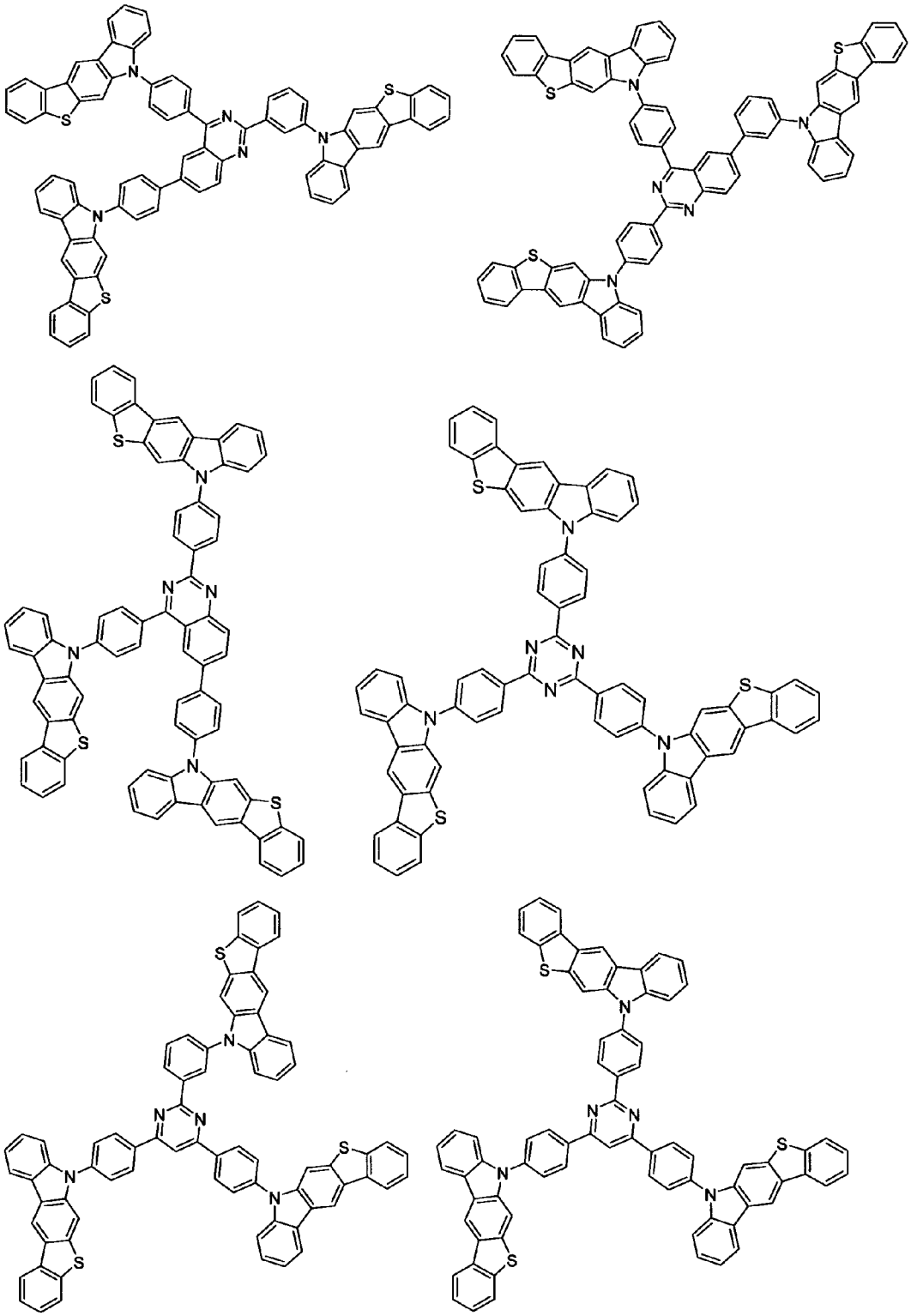
[0318]

[化186]



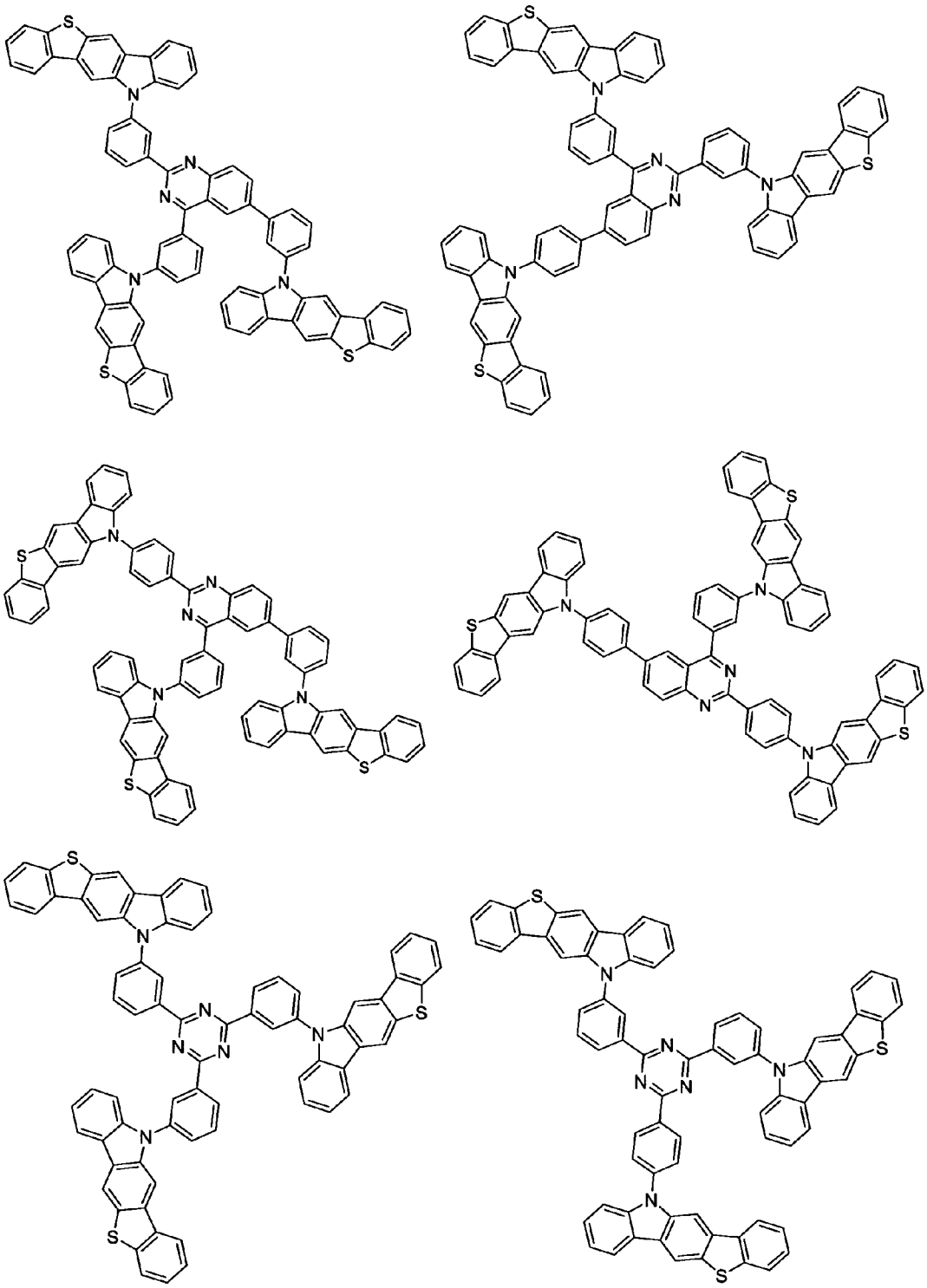
[0319]

[化187]



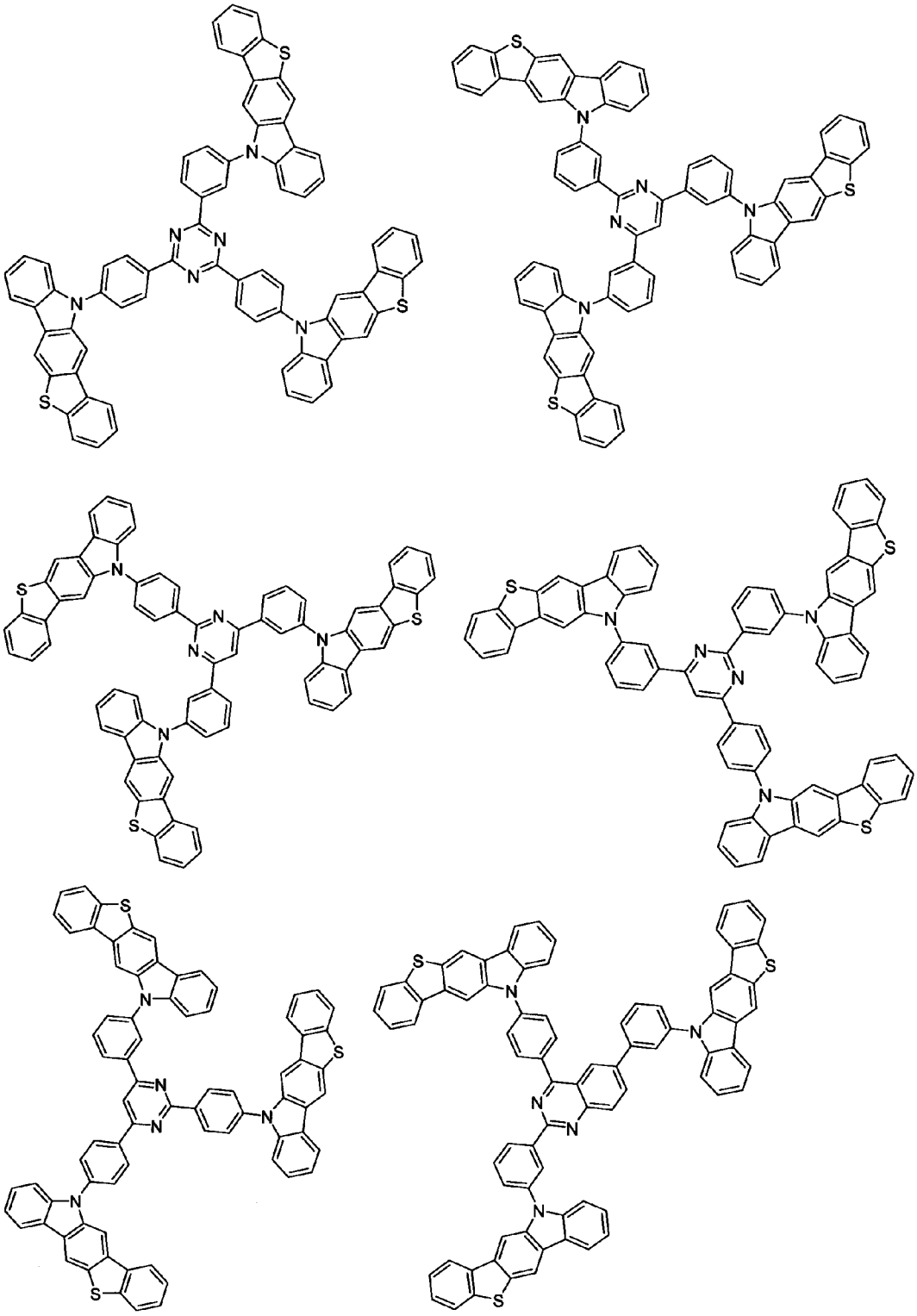
[0320]

[化188]



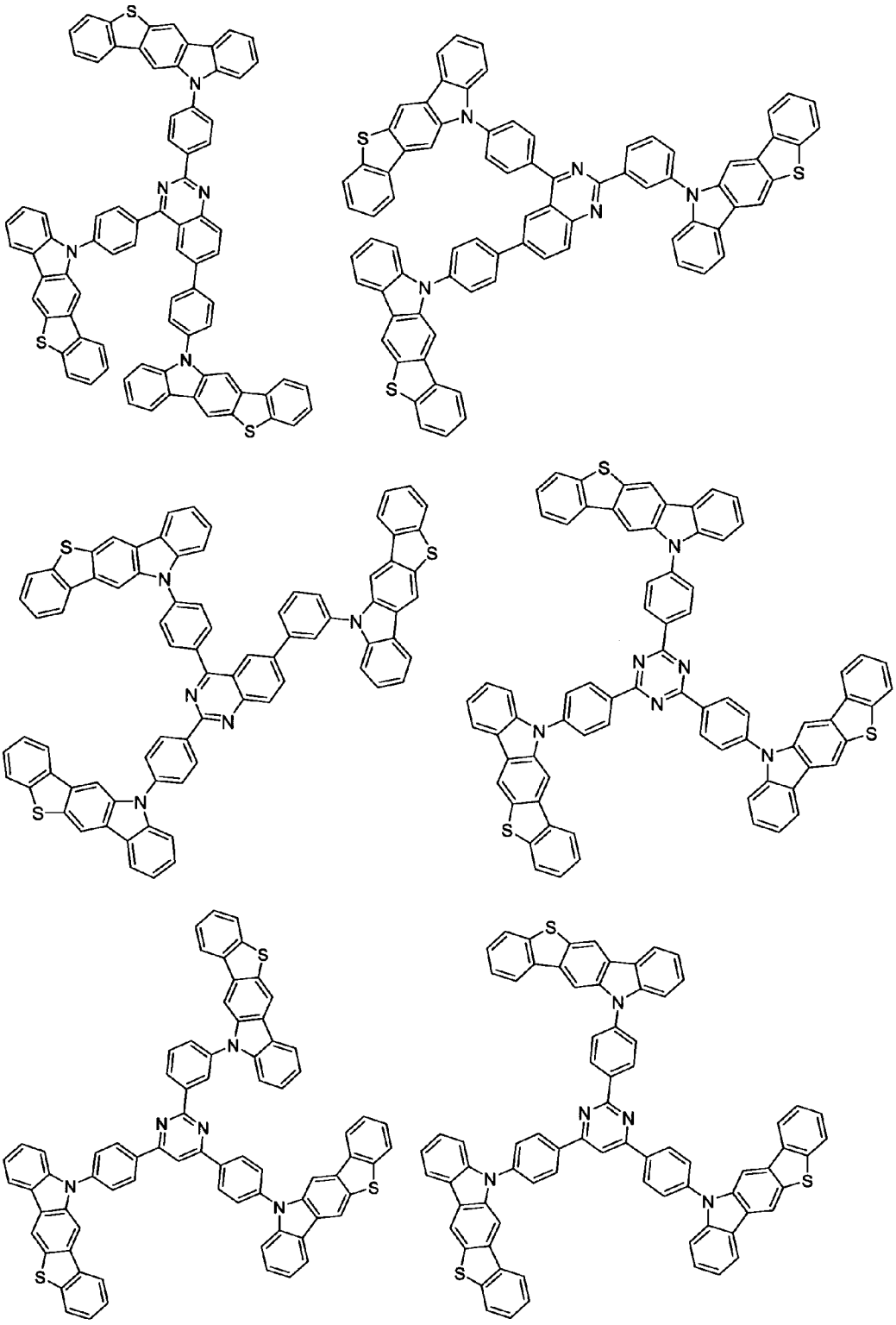
[0321]

[化189]



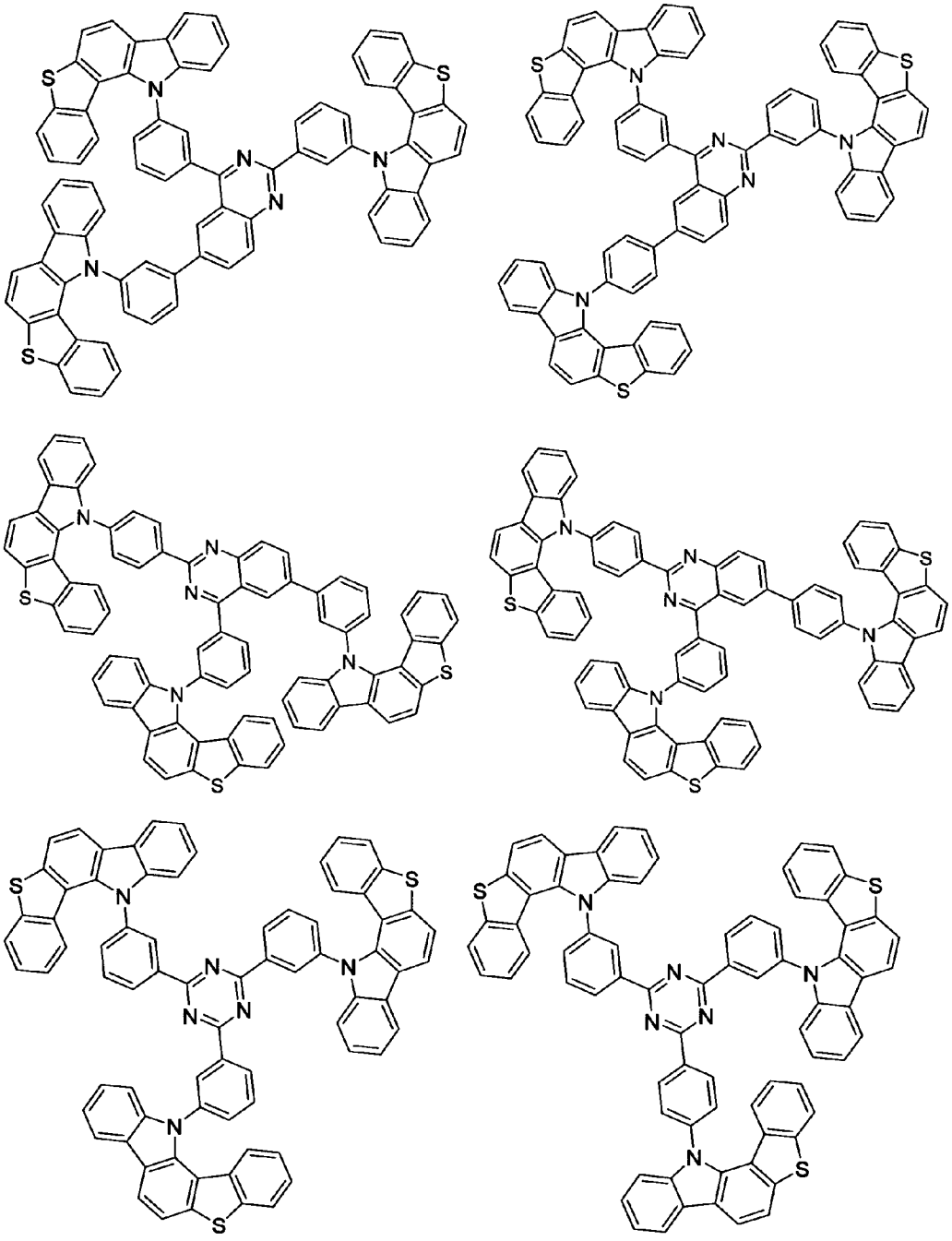
[0322]

[化190]



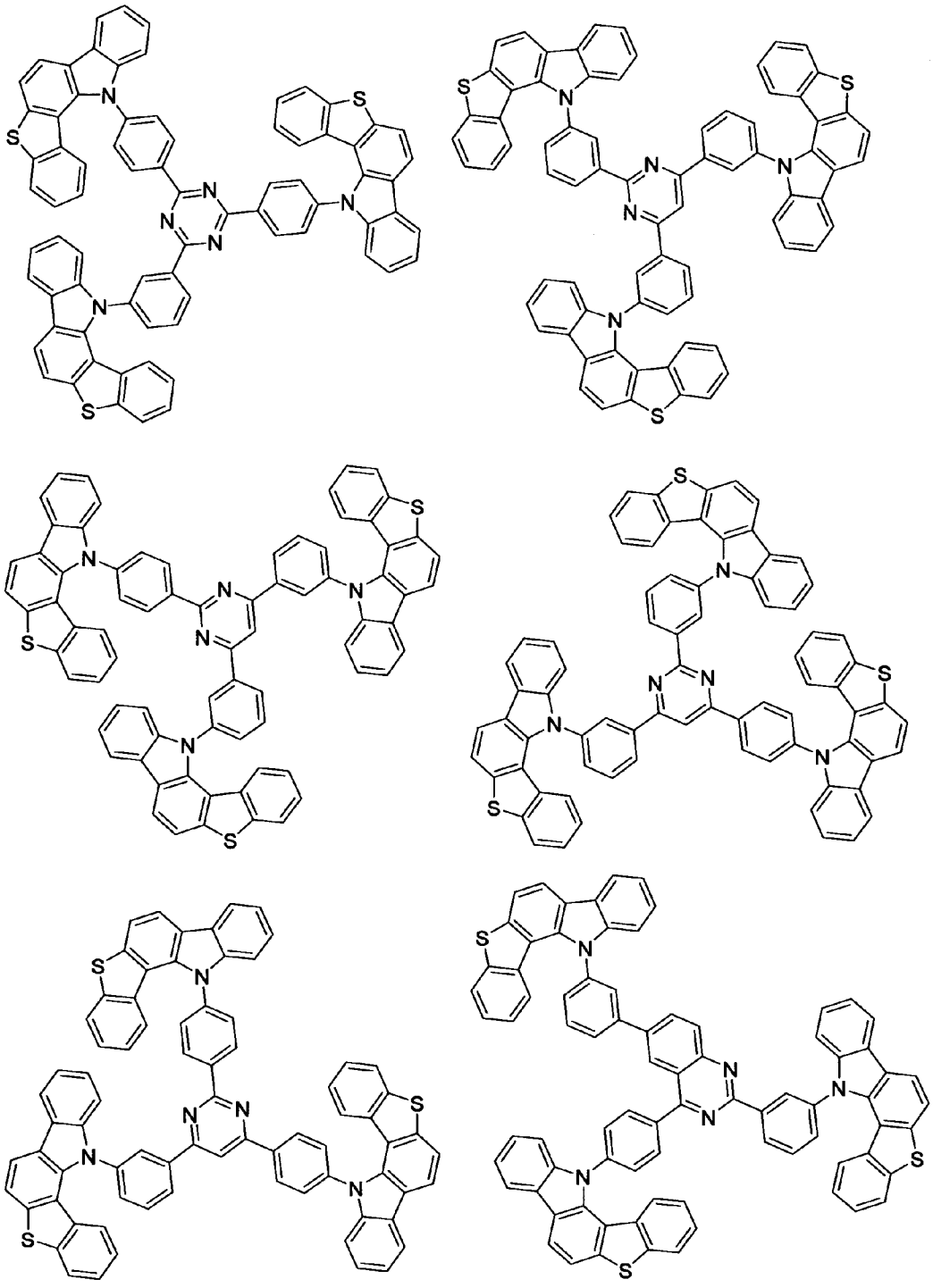
[0323]

[化191]



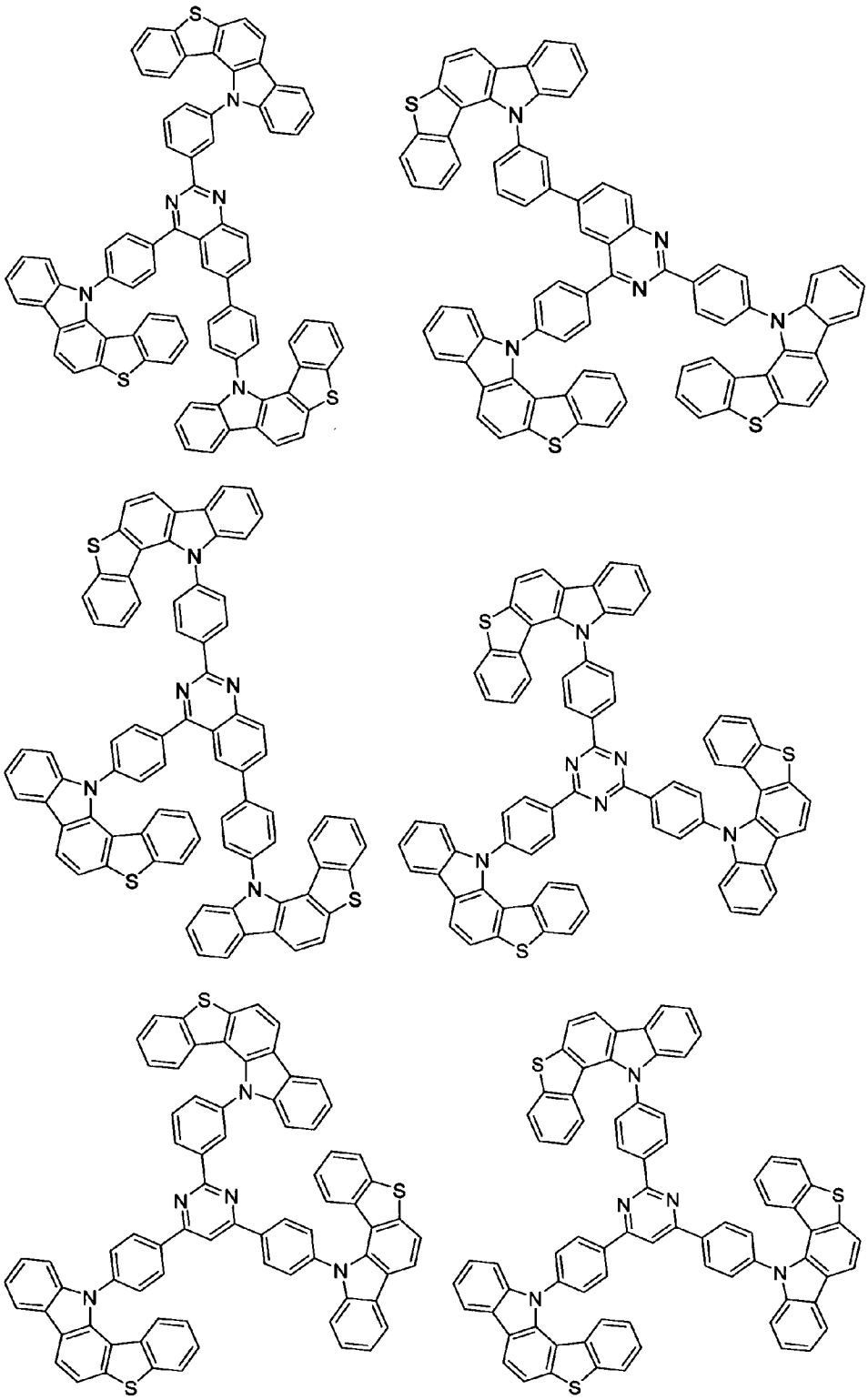
[0324]

[化192]



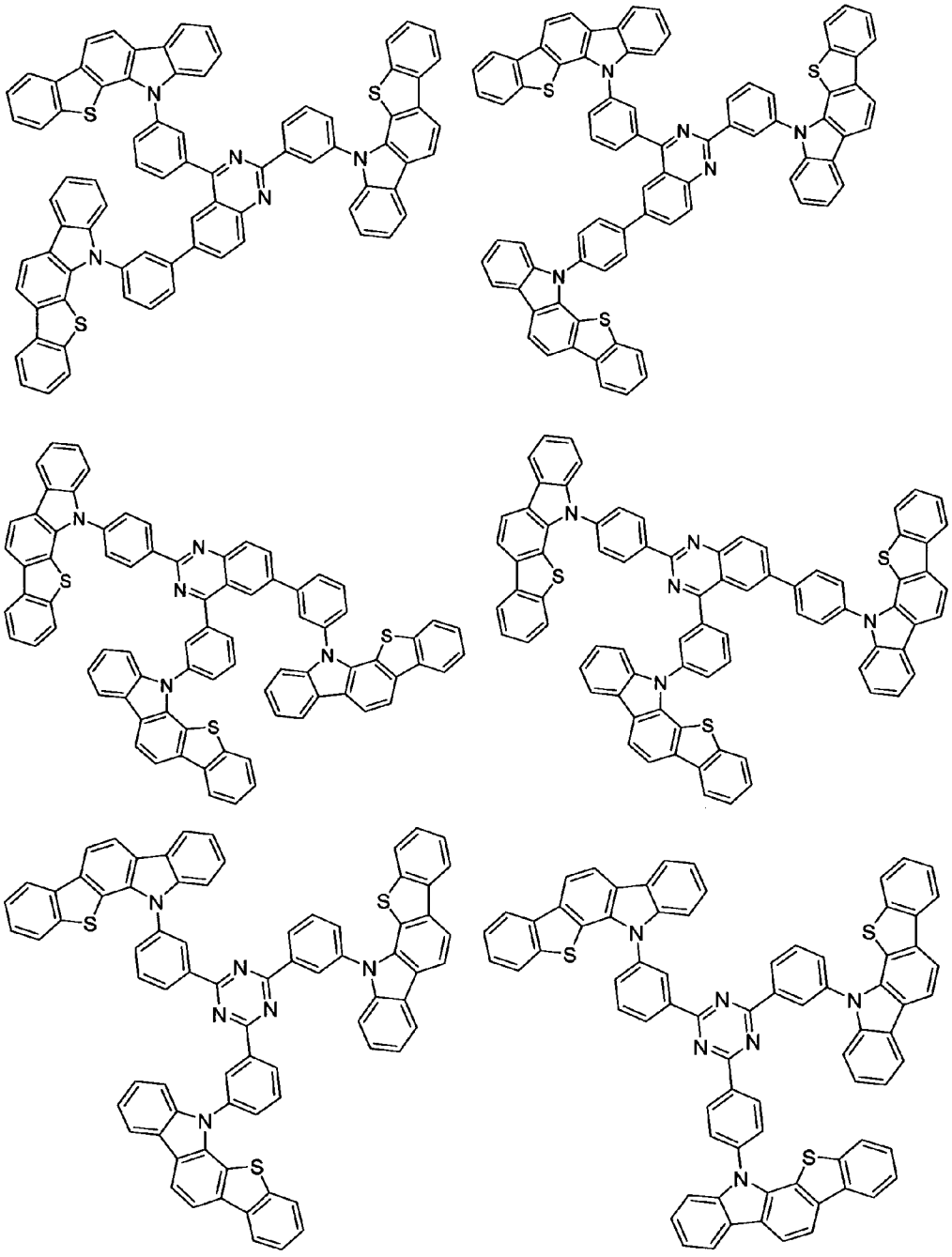
[0325]

[化193]



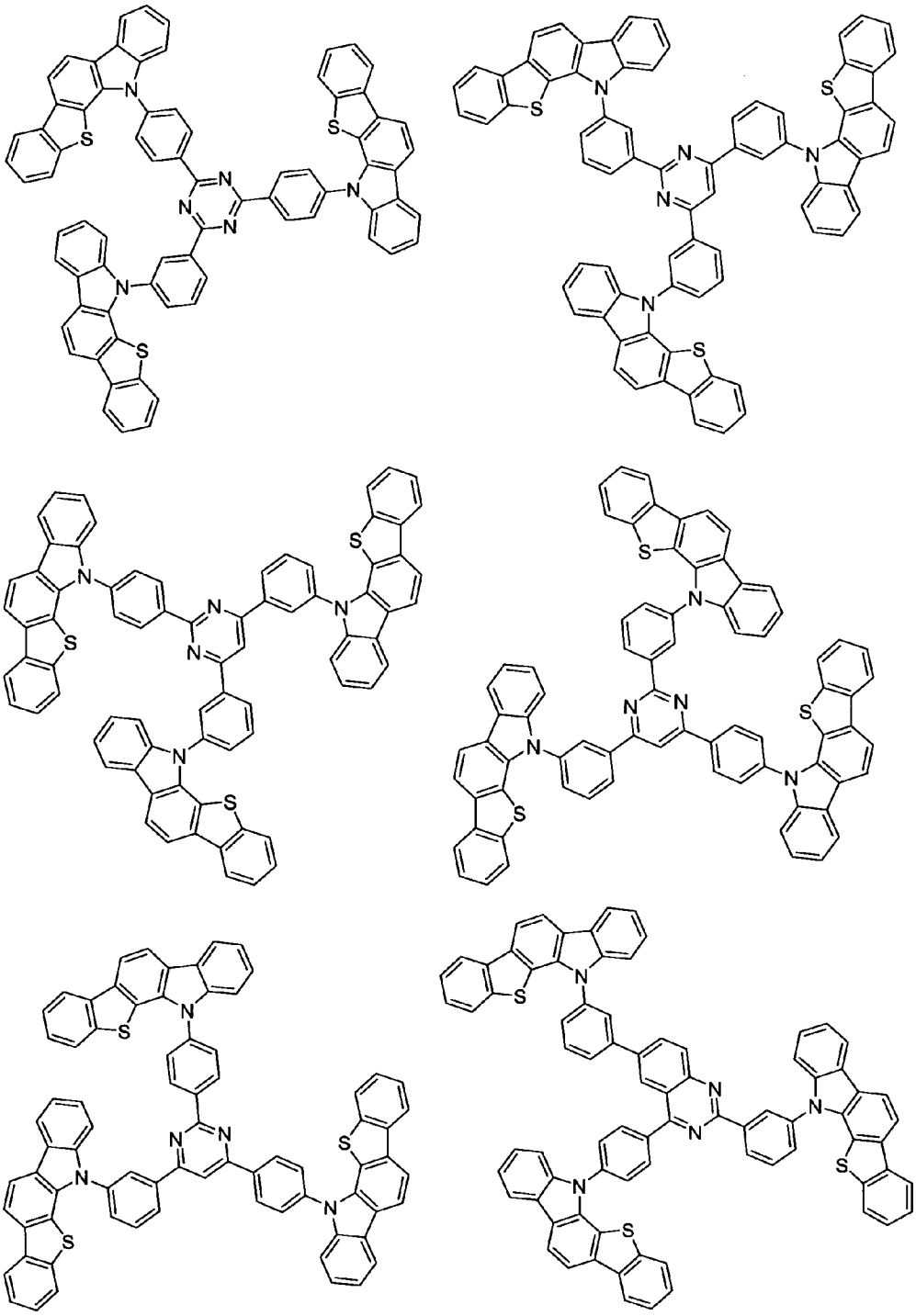
[0326]

[化194]



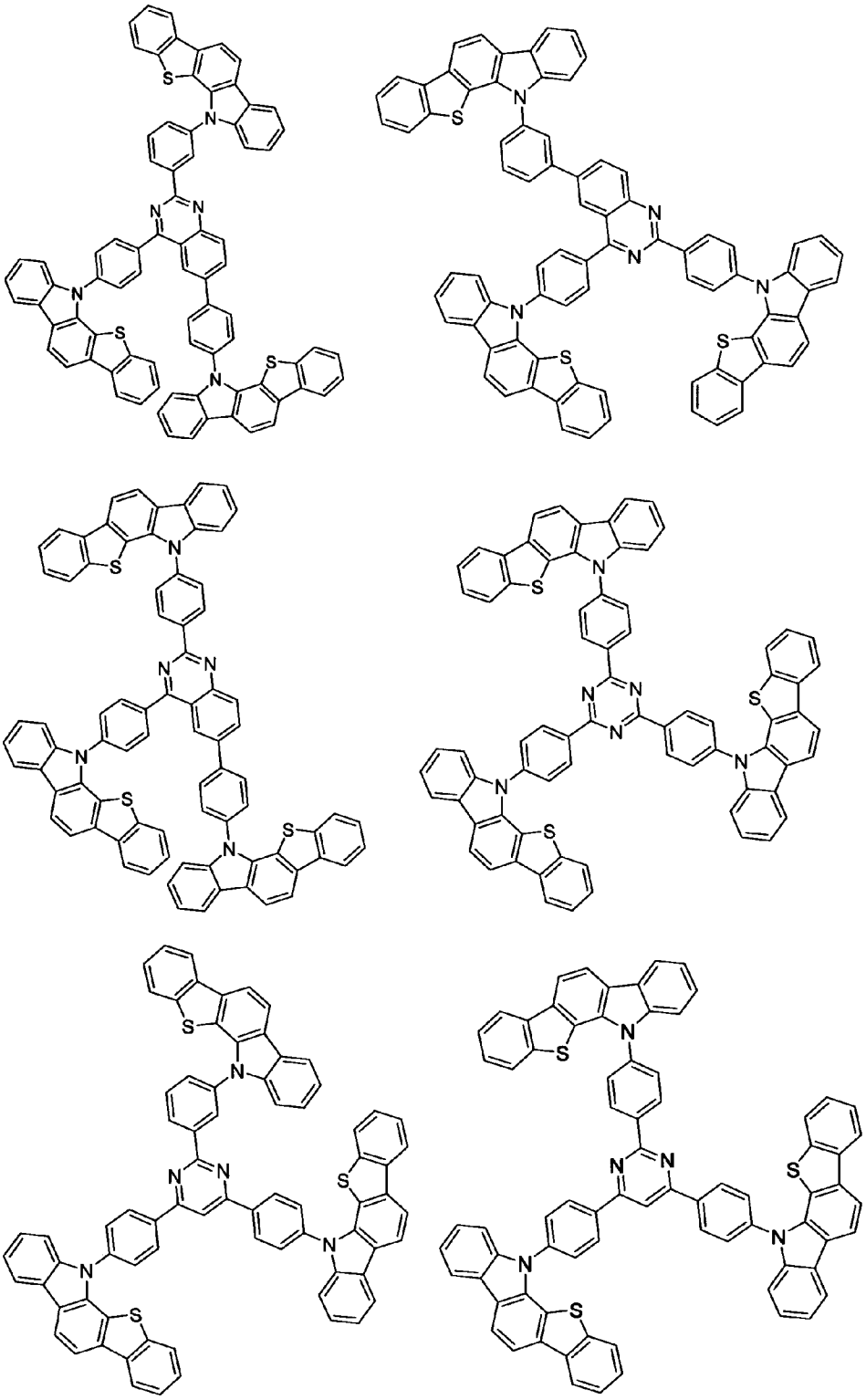
[0327]

[化195]



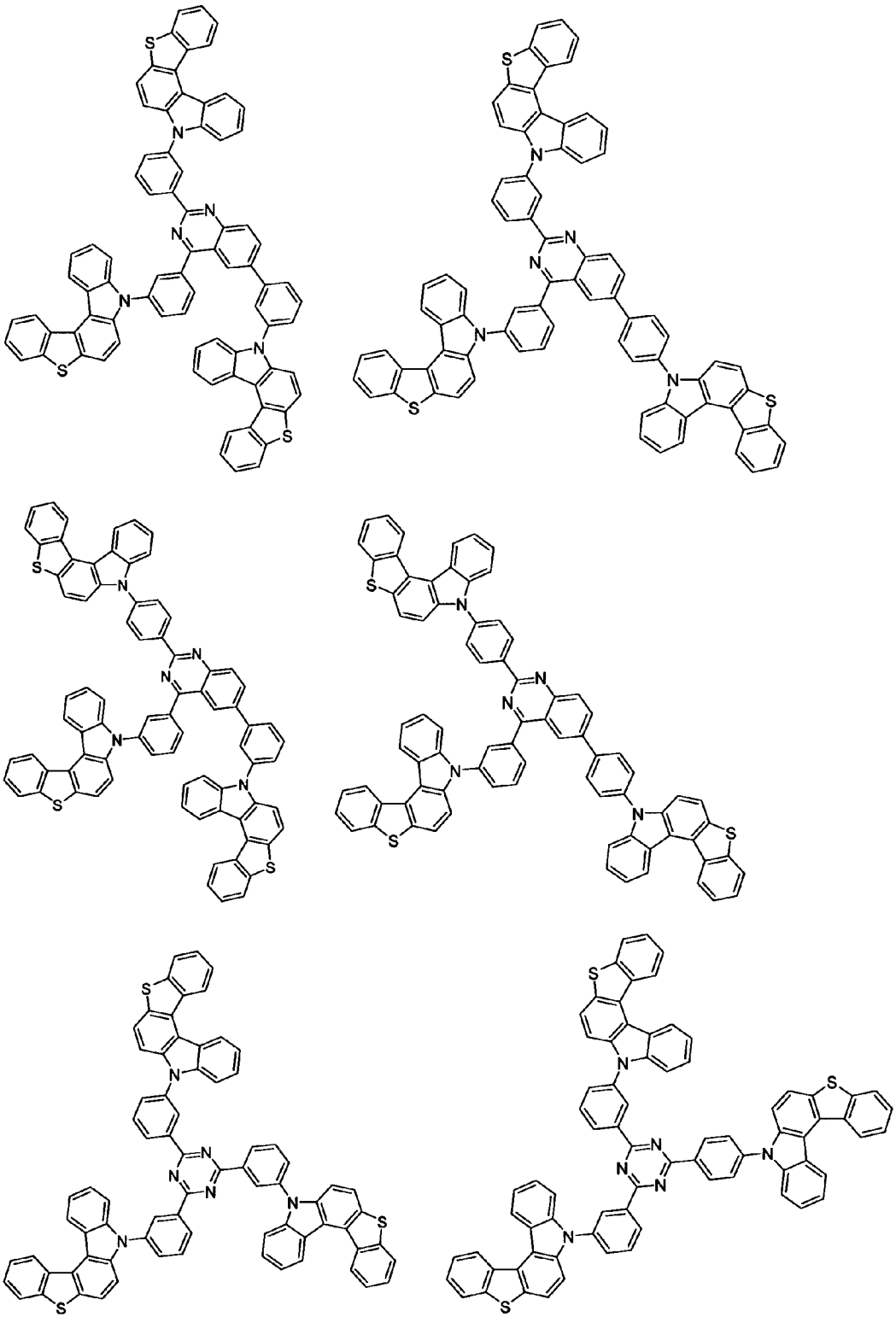
[0328]

[化196]



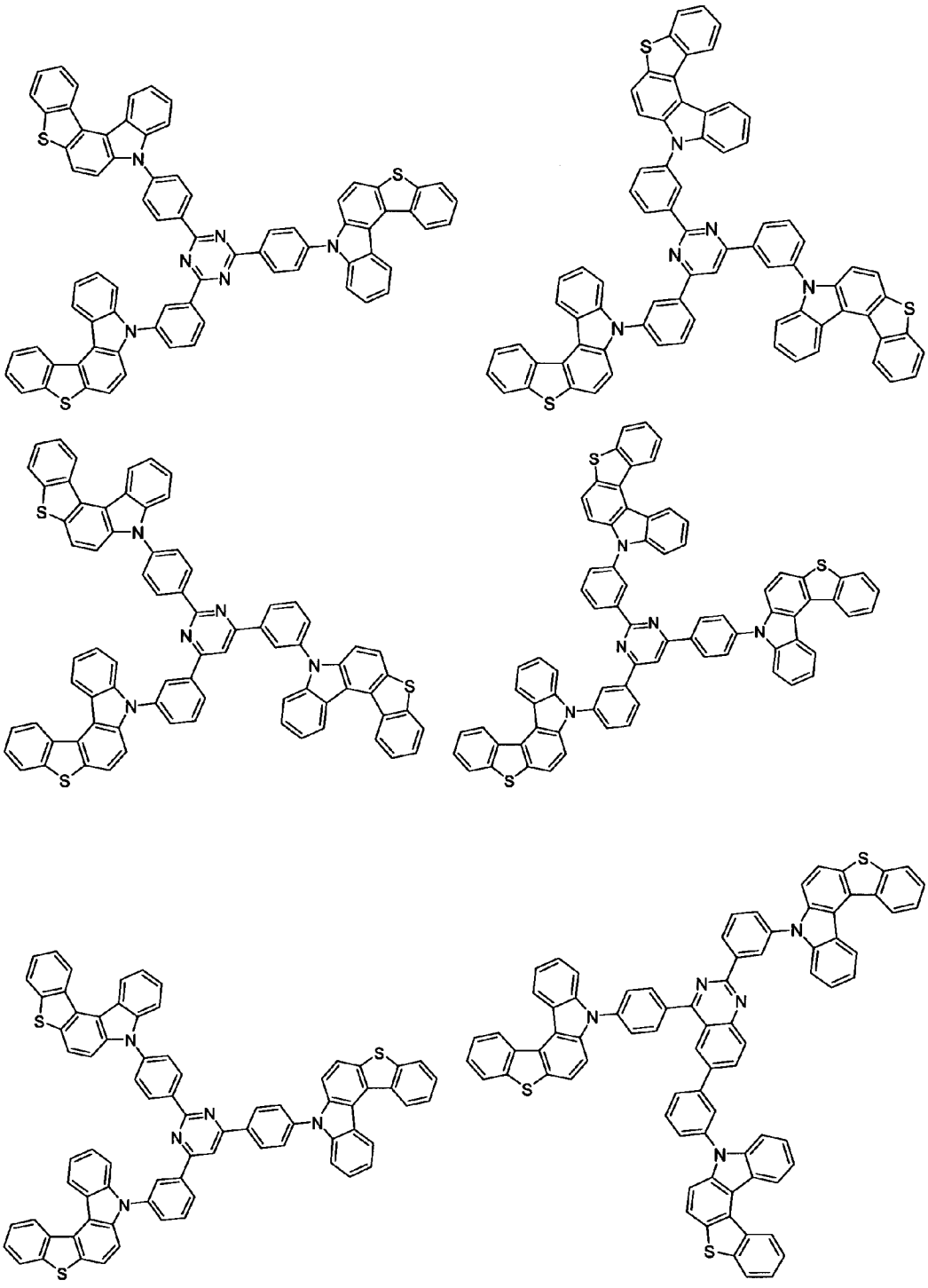
[0329]

[化197]



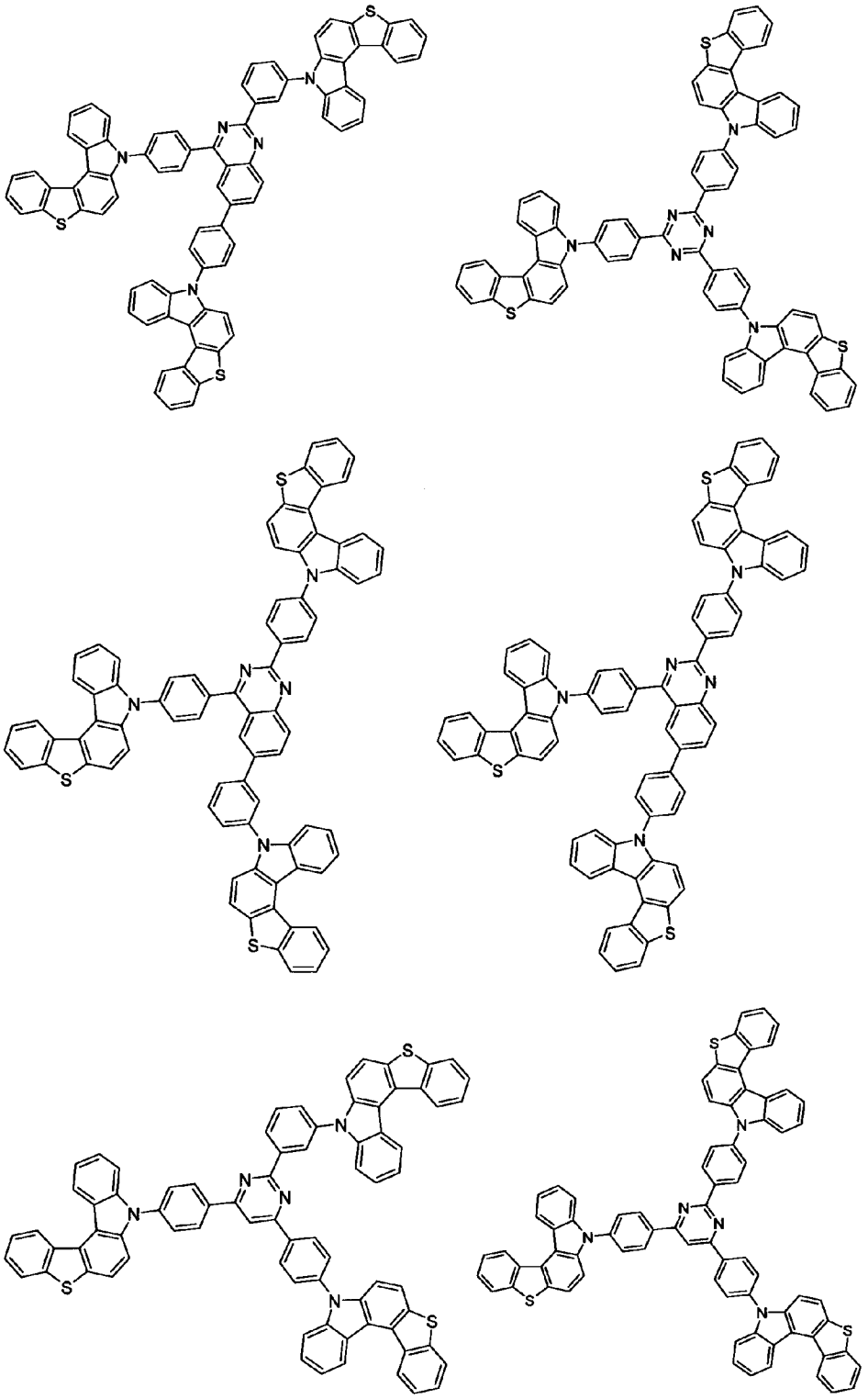
[0330]

[化198]



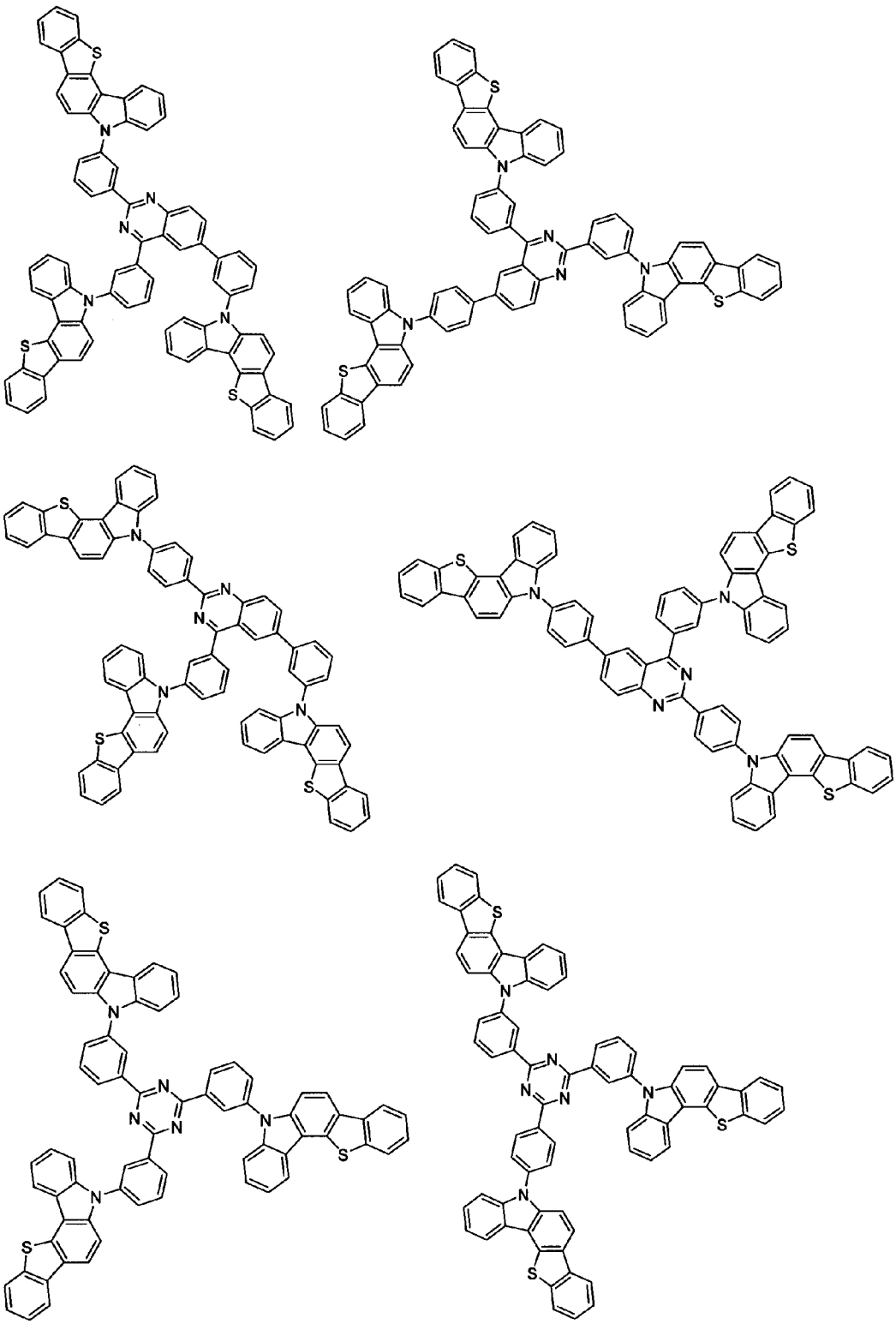
[0331]

[化199]



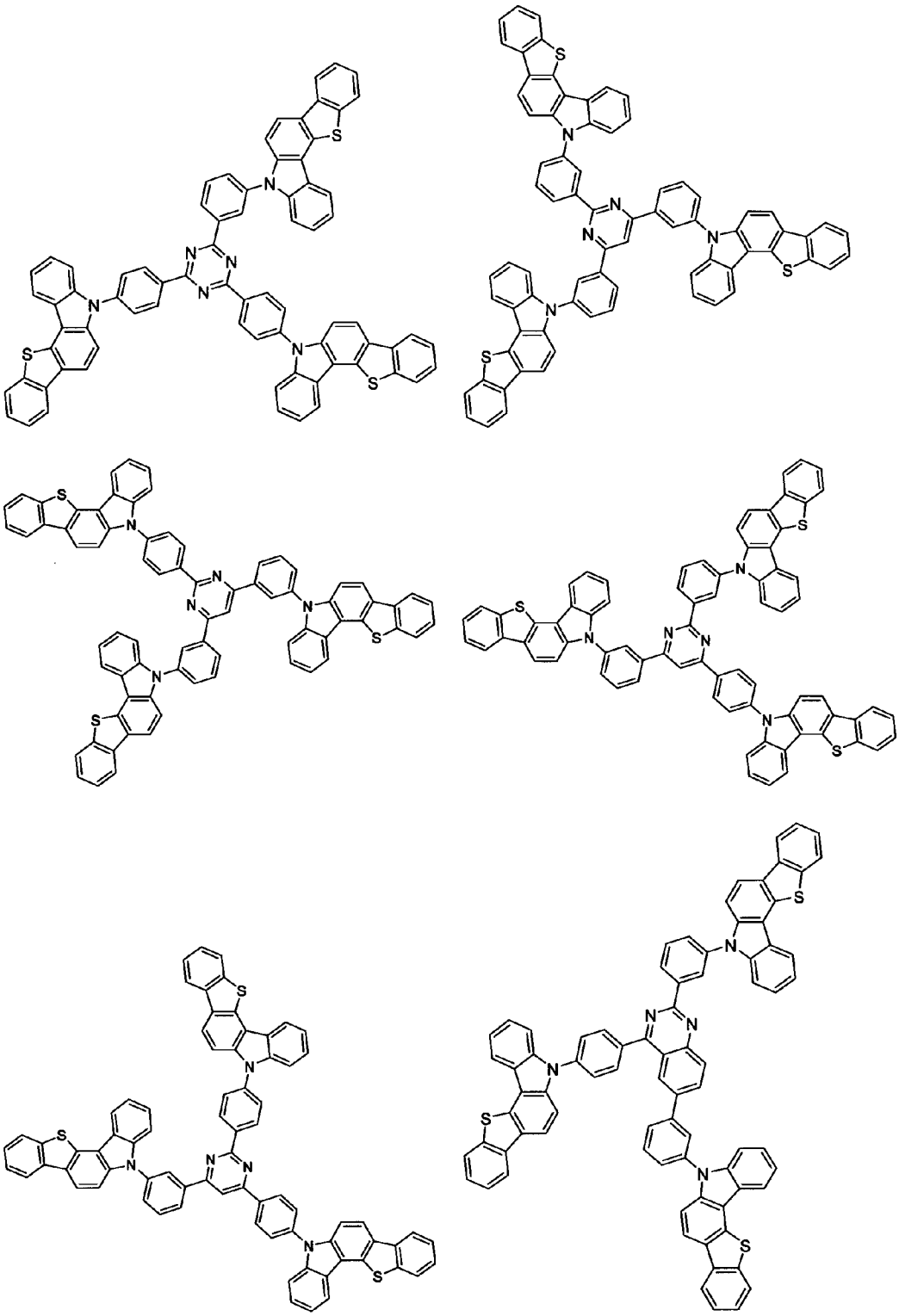
[0332]

[化200]



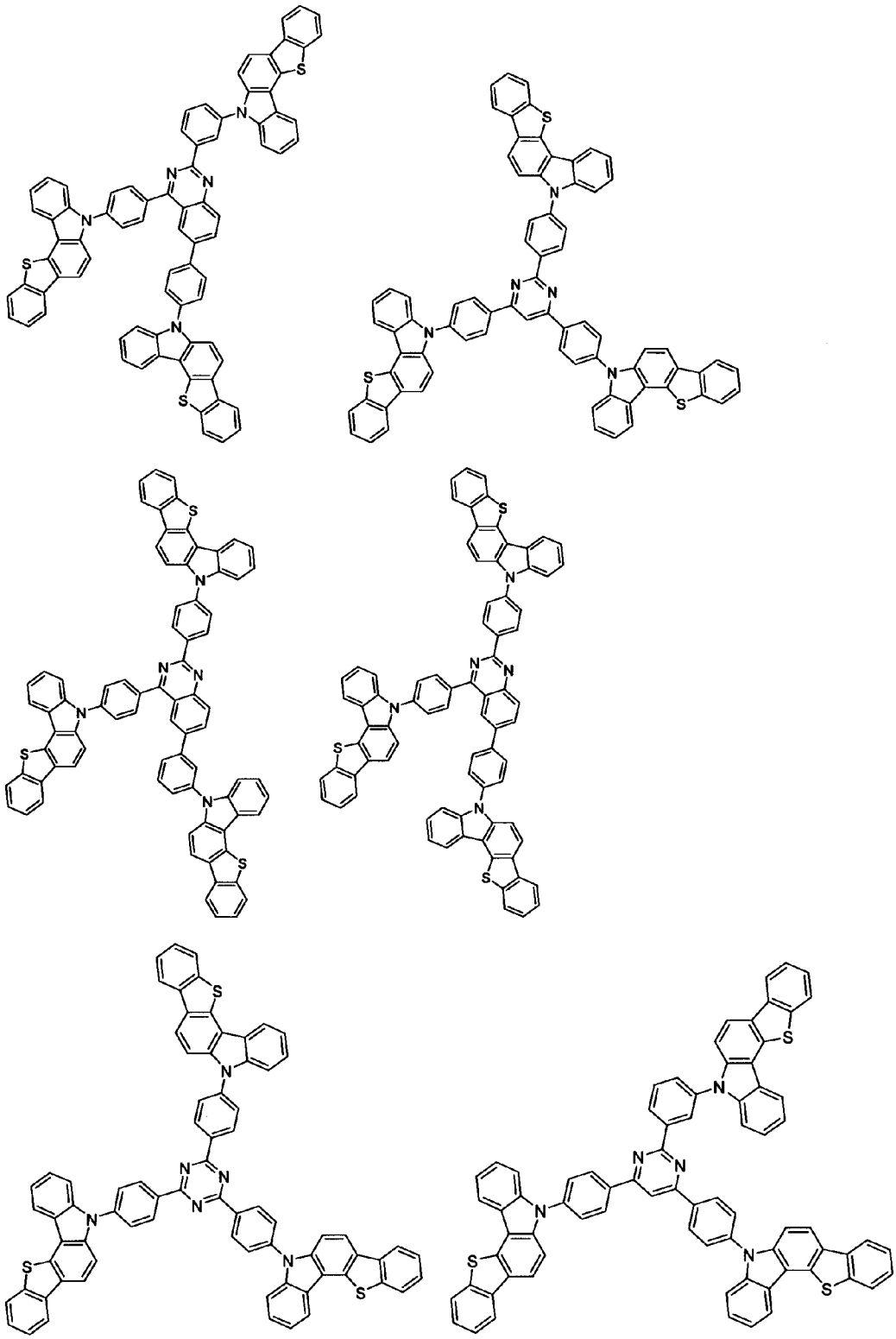
[0333]

[化201]



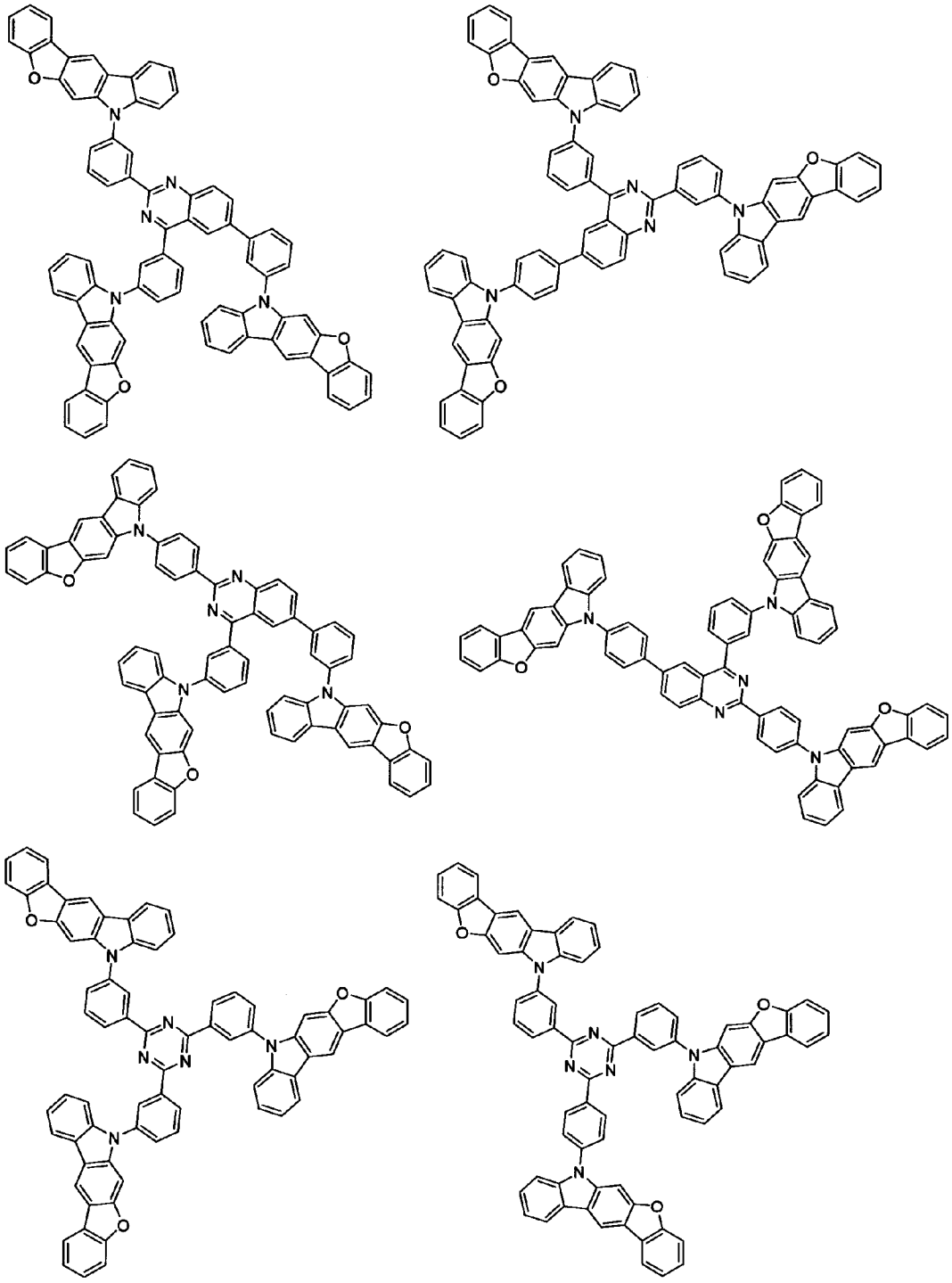
[0334]

[化202]



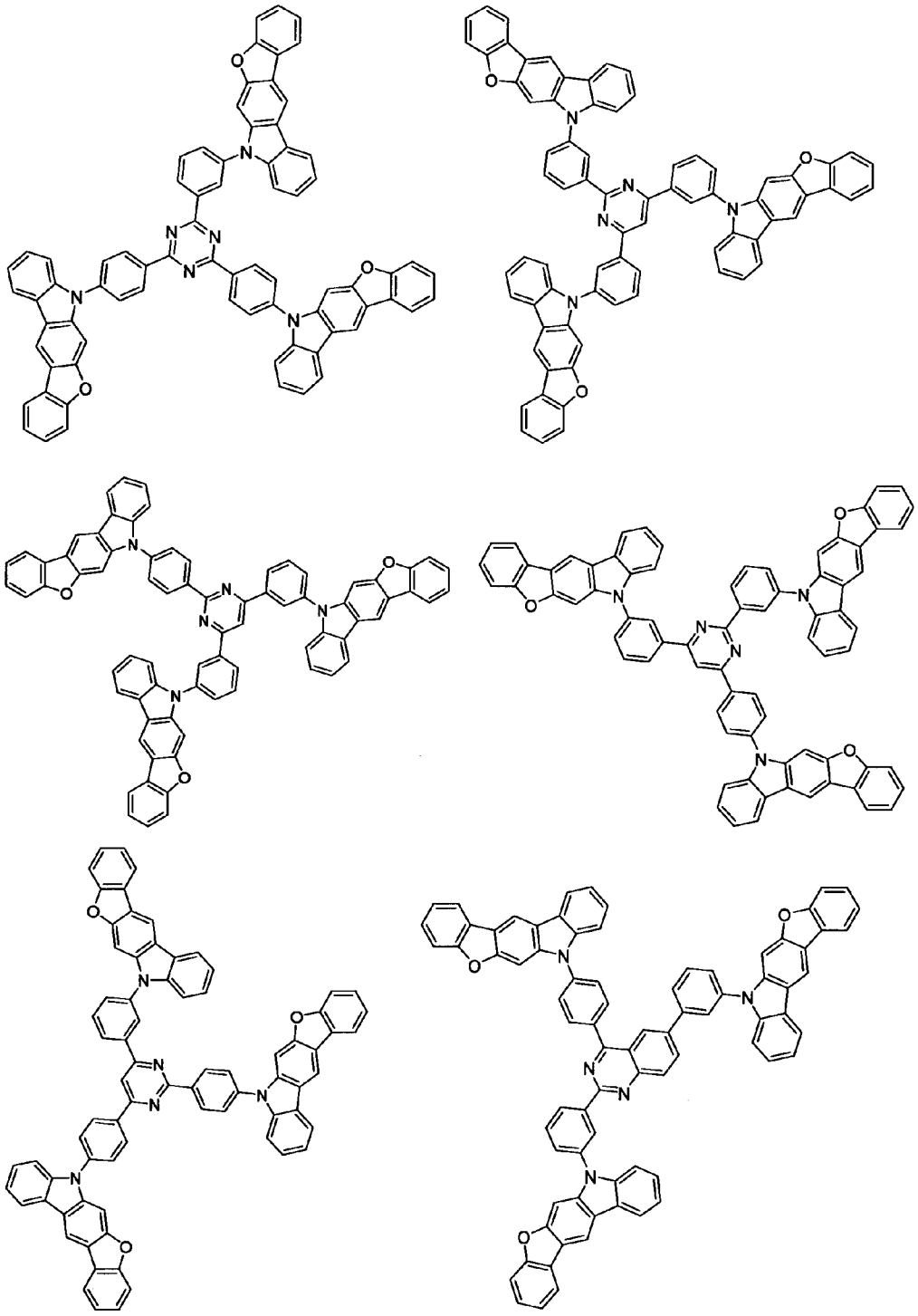
[0335]

[化203]



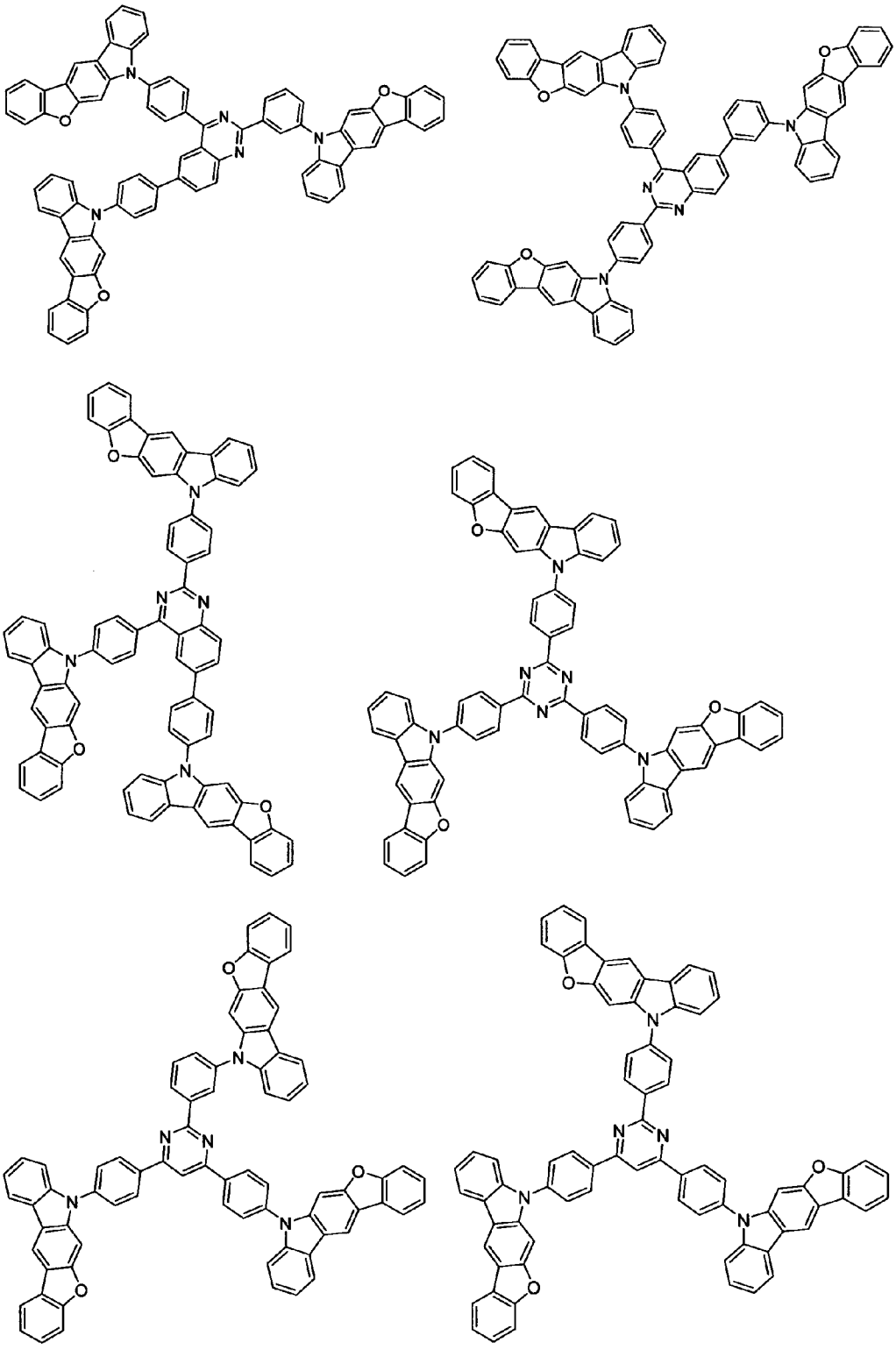
[0336]

[化204]



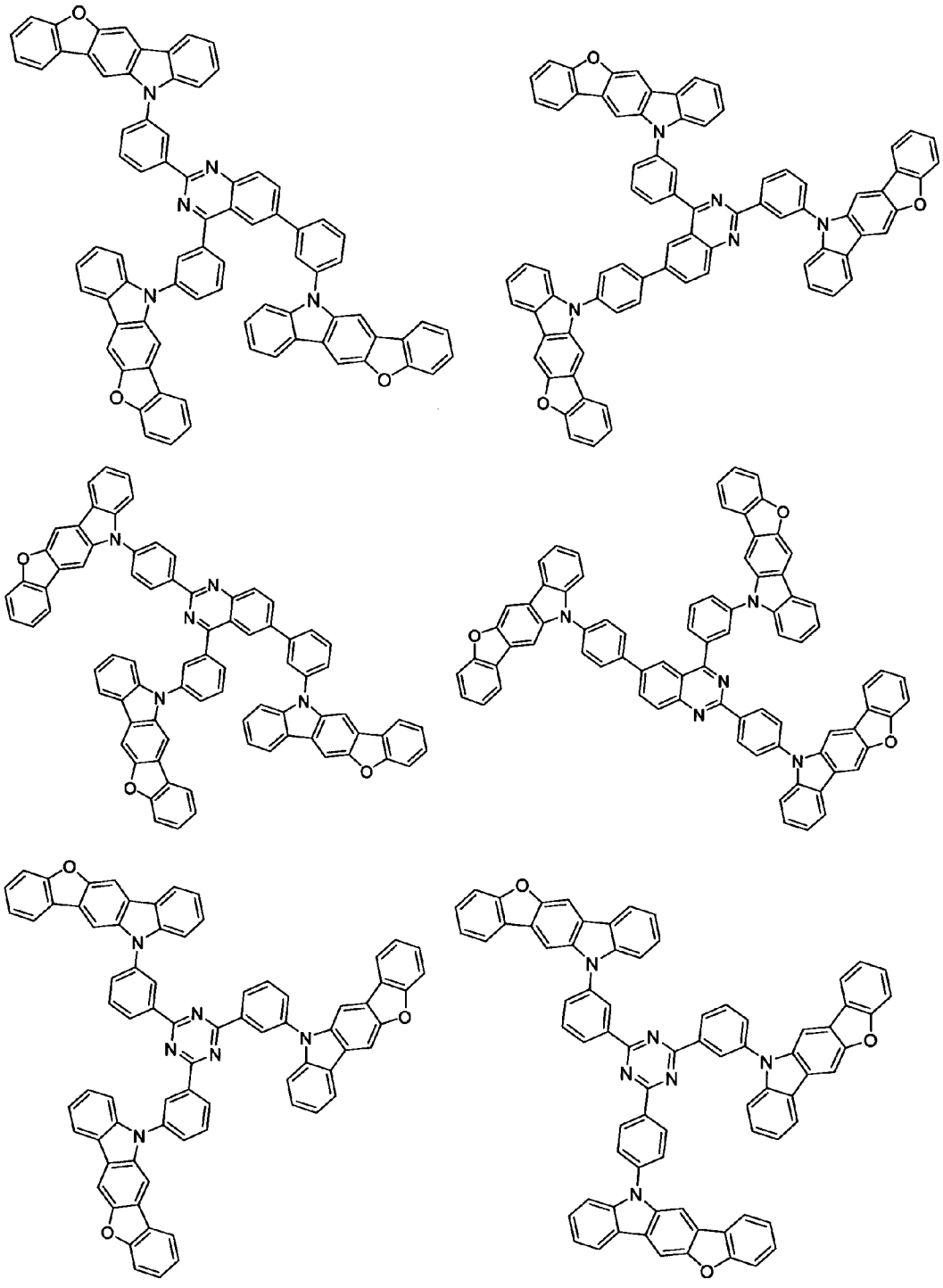
[0337]

[化205]



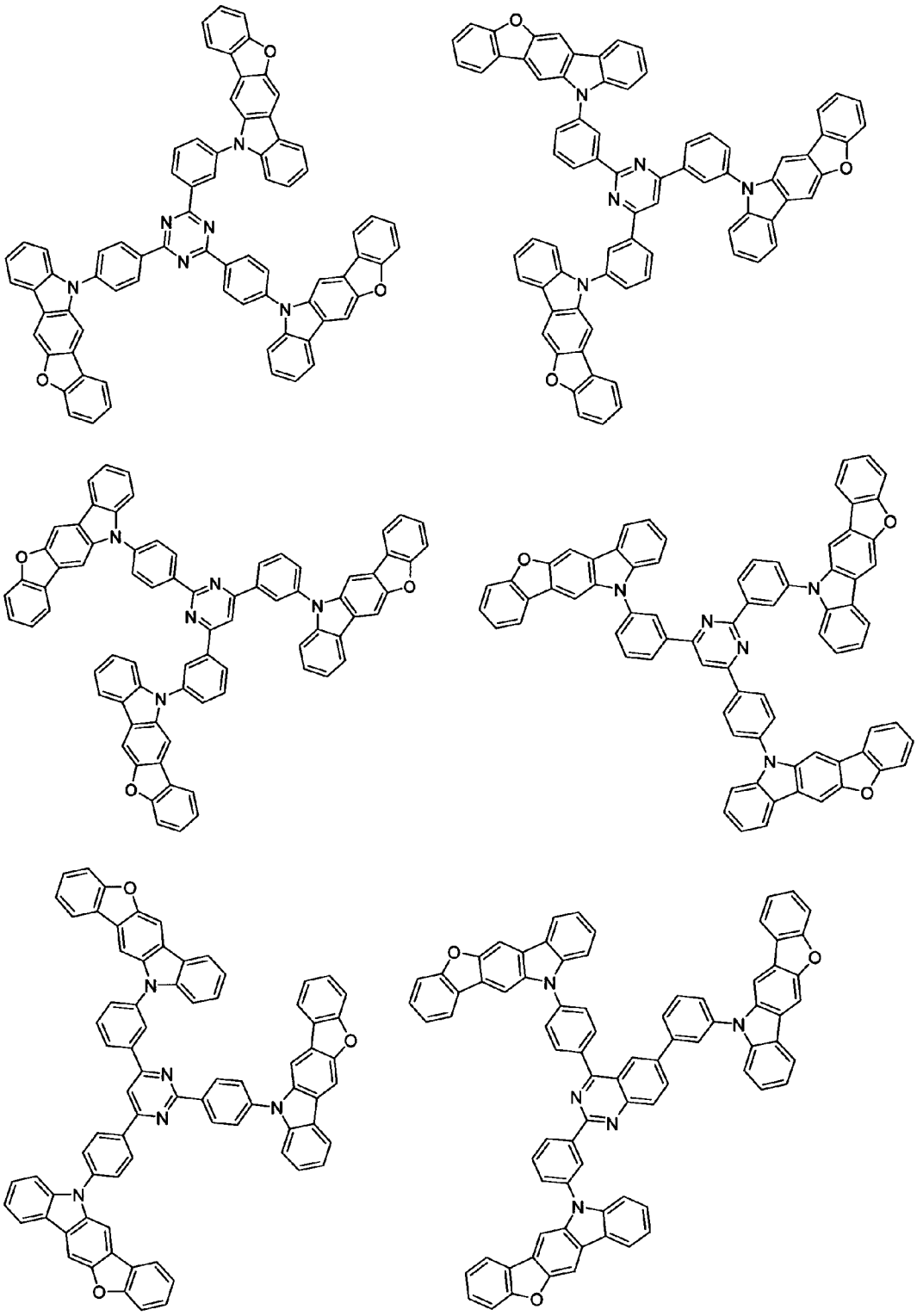
[0338]

[化206]



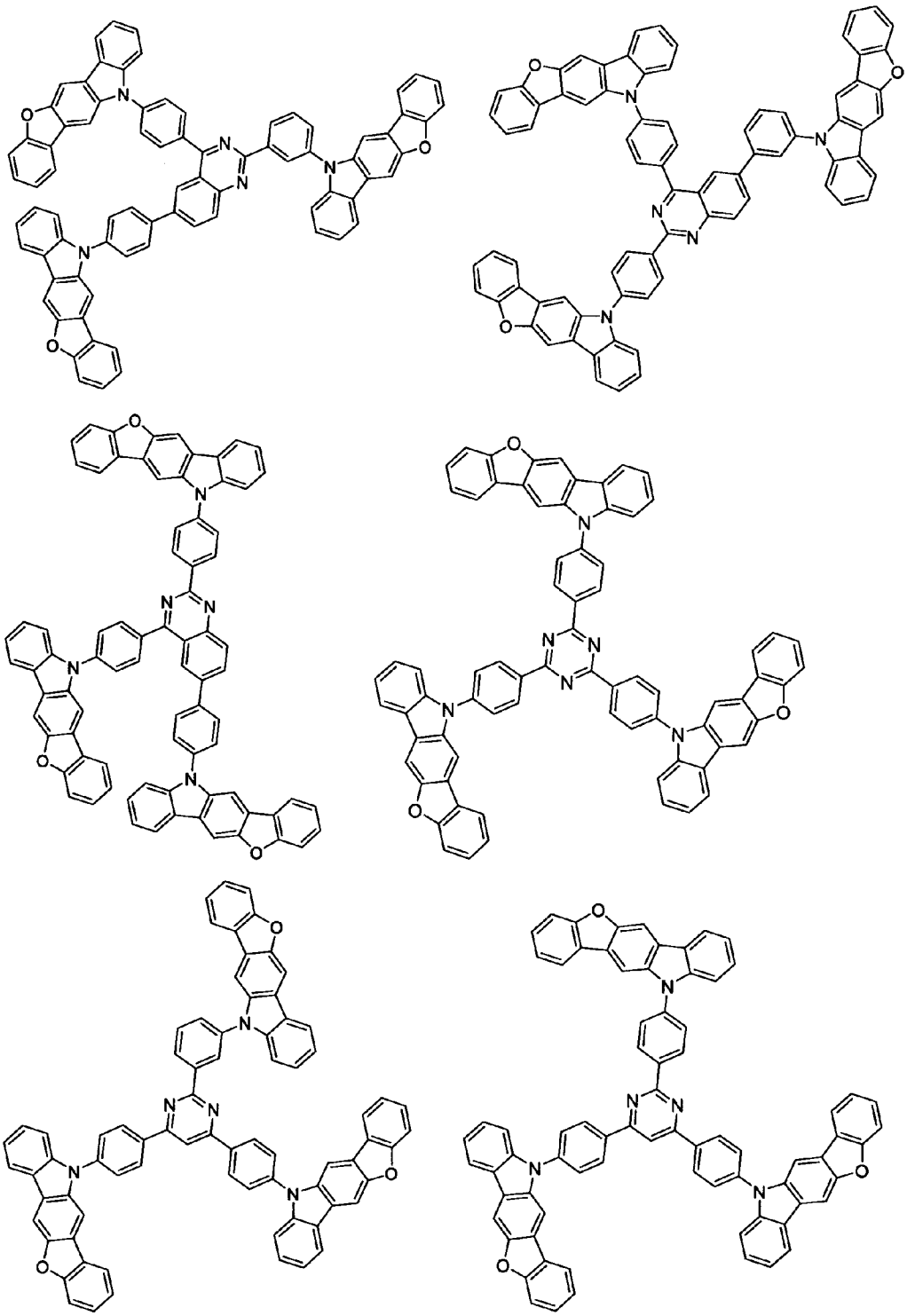
[0339]

[化207]



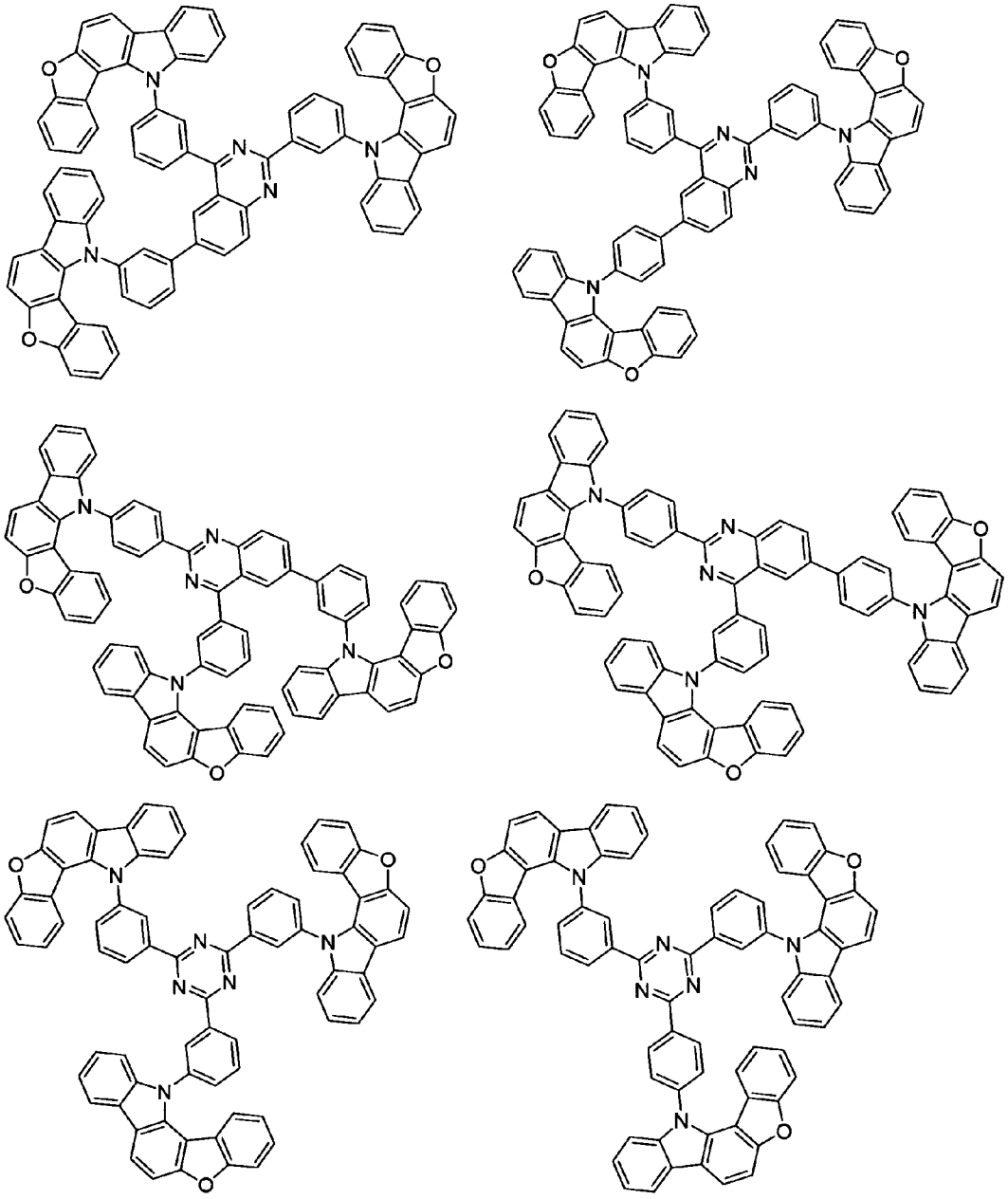
[0340]

[化208]



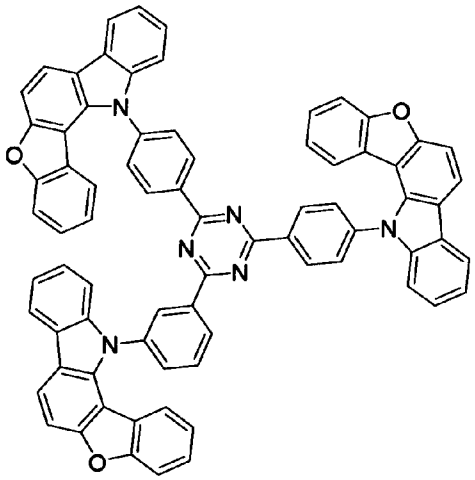
[0341]

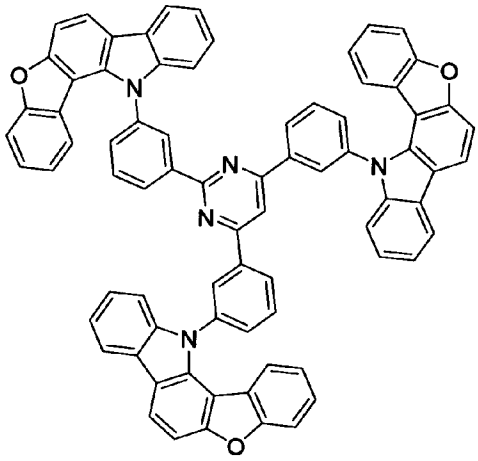
[化209]

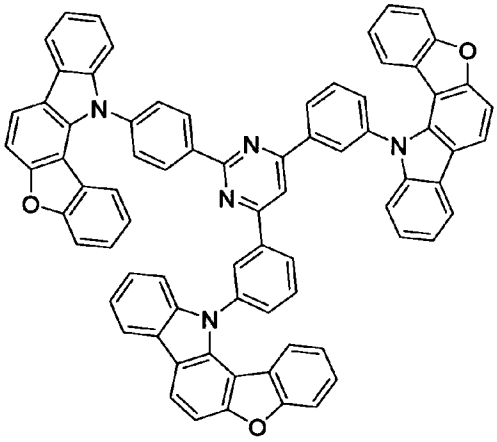


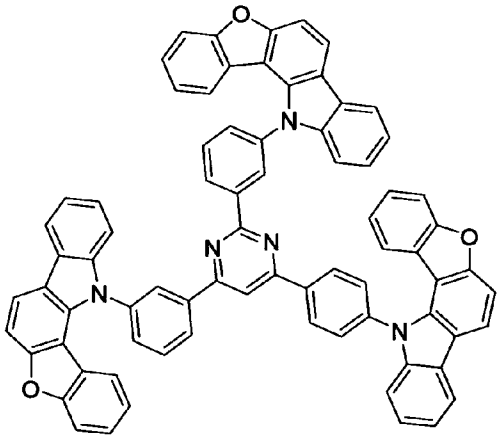
[0342]

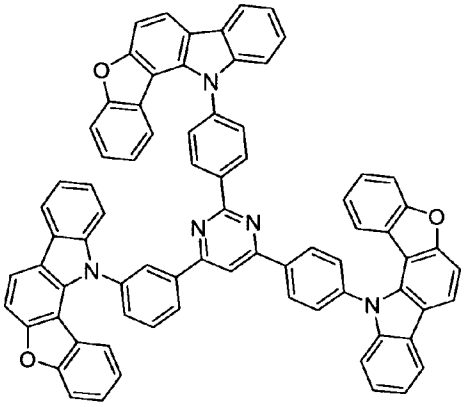
[化210]

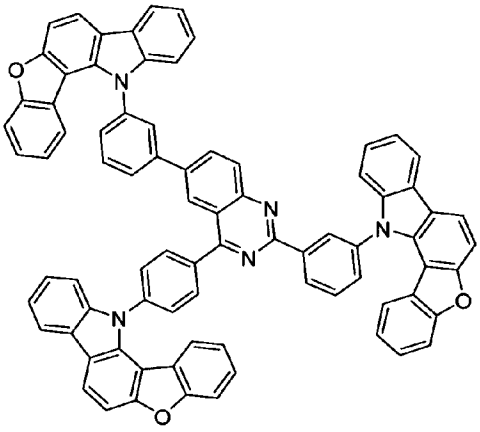






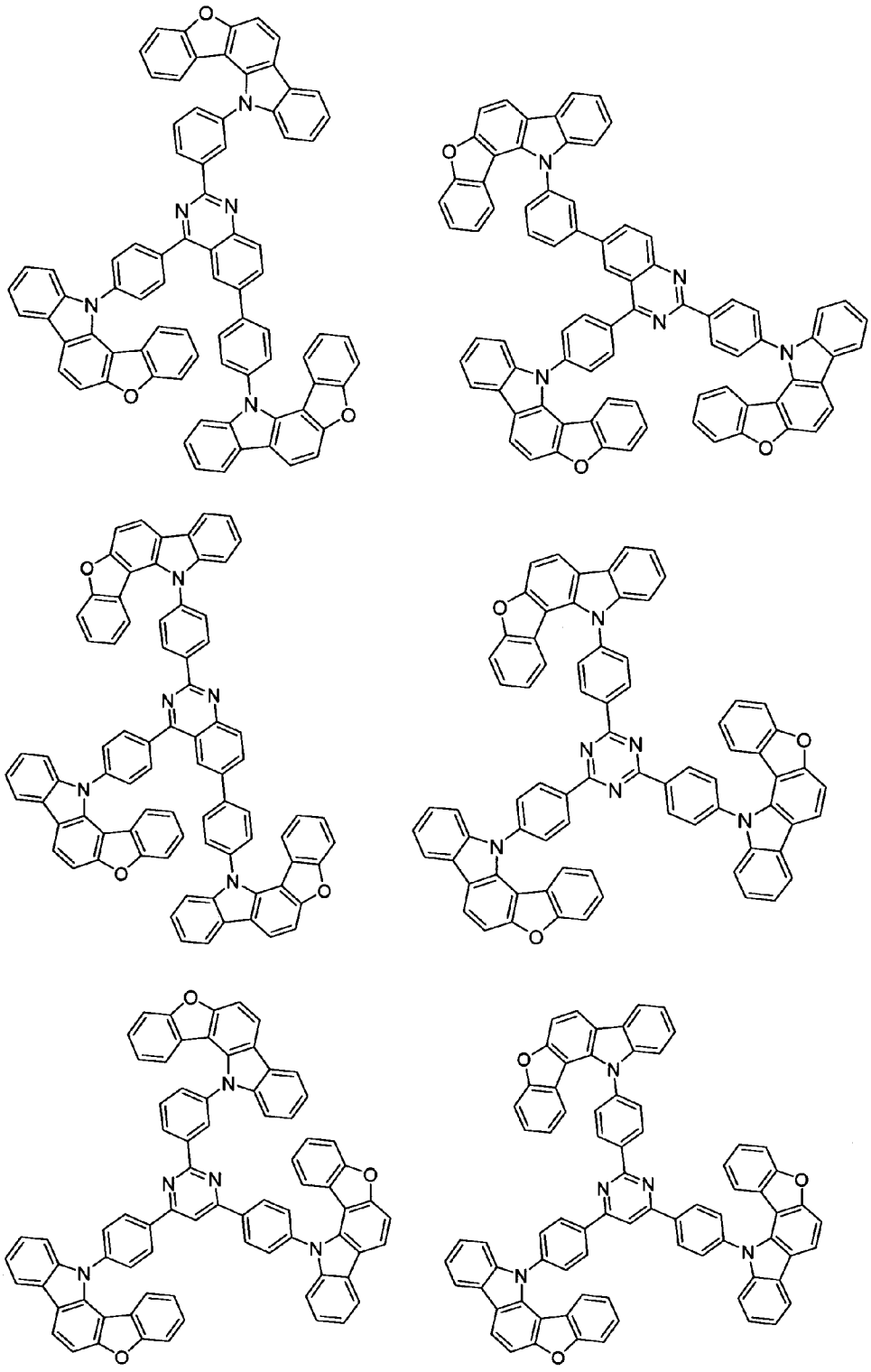






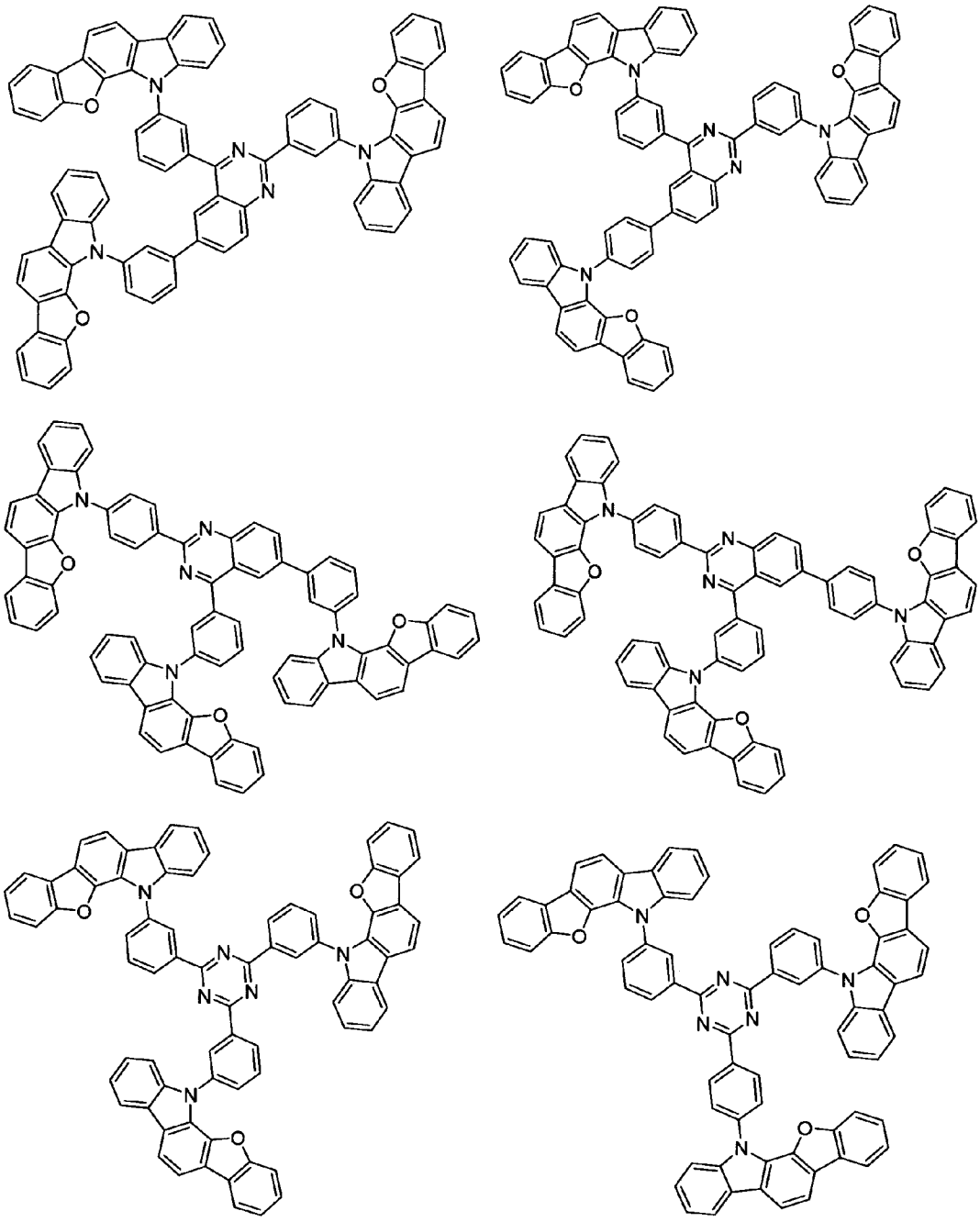
[0343]

[化211]



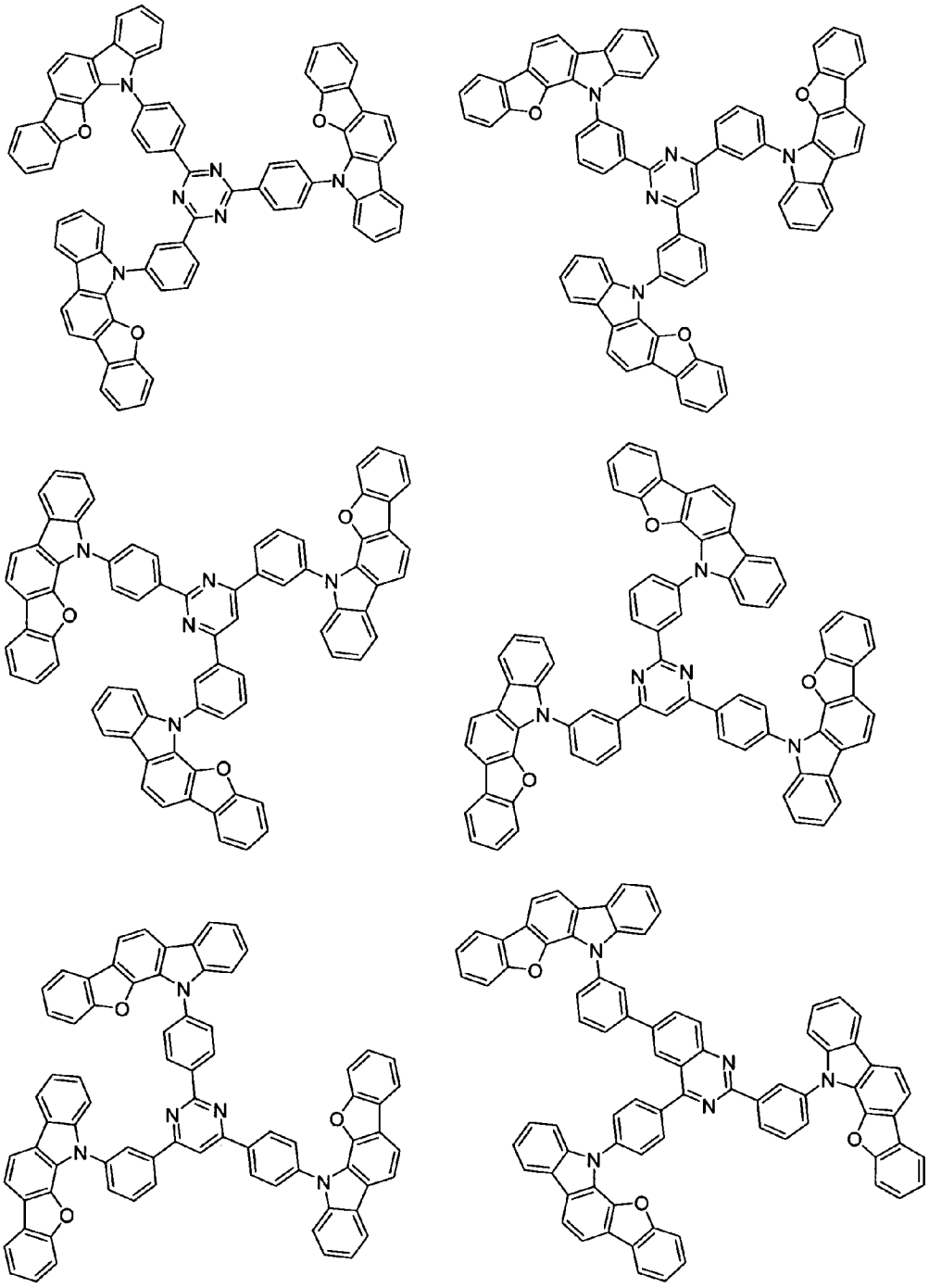
[0344]

[化212]



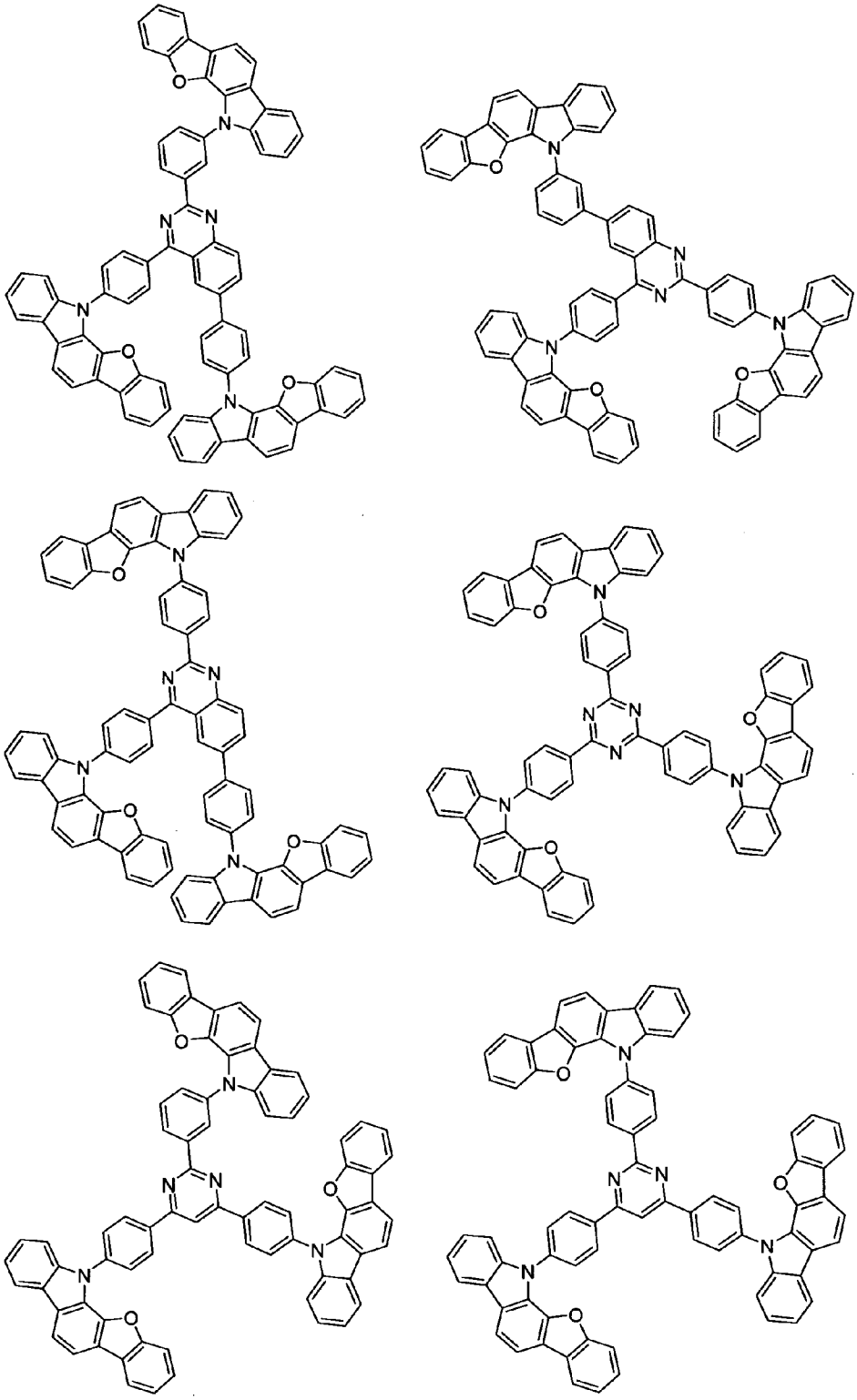
[0345]

[化213]



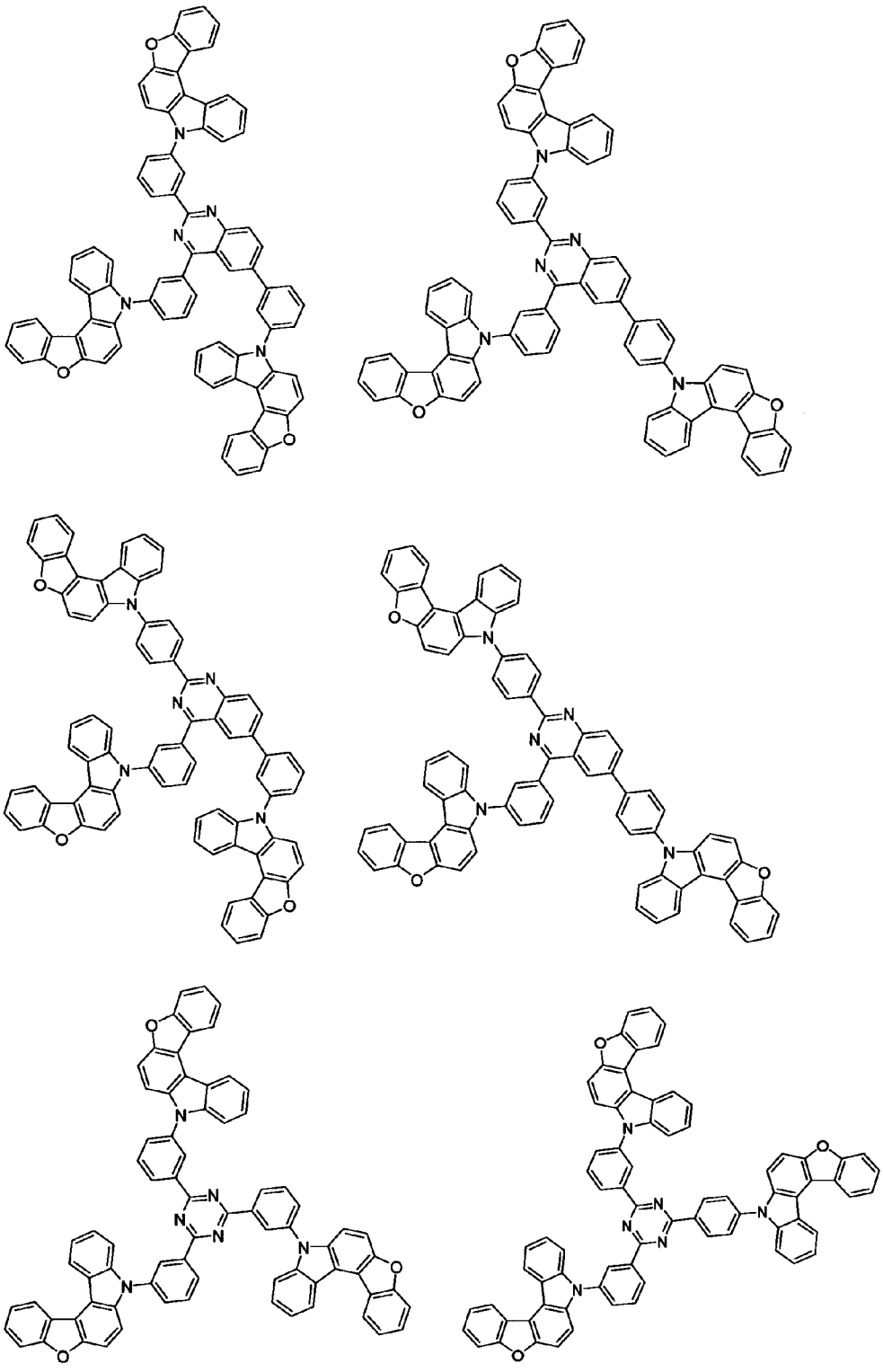
[0346]

[化214]



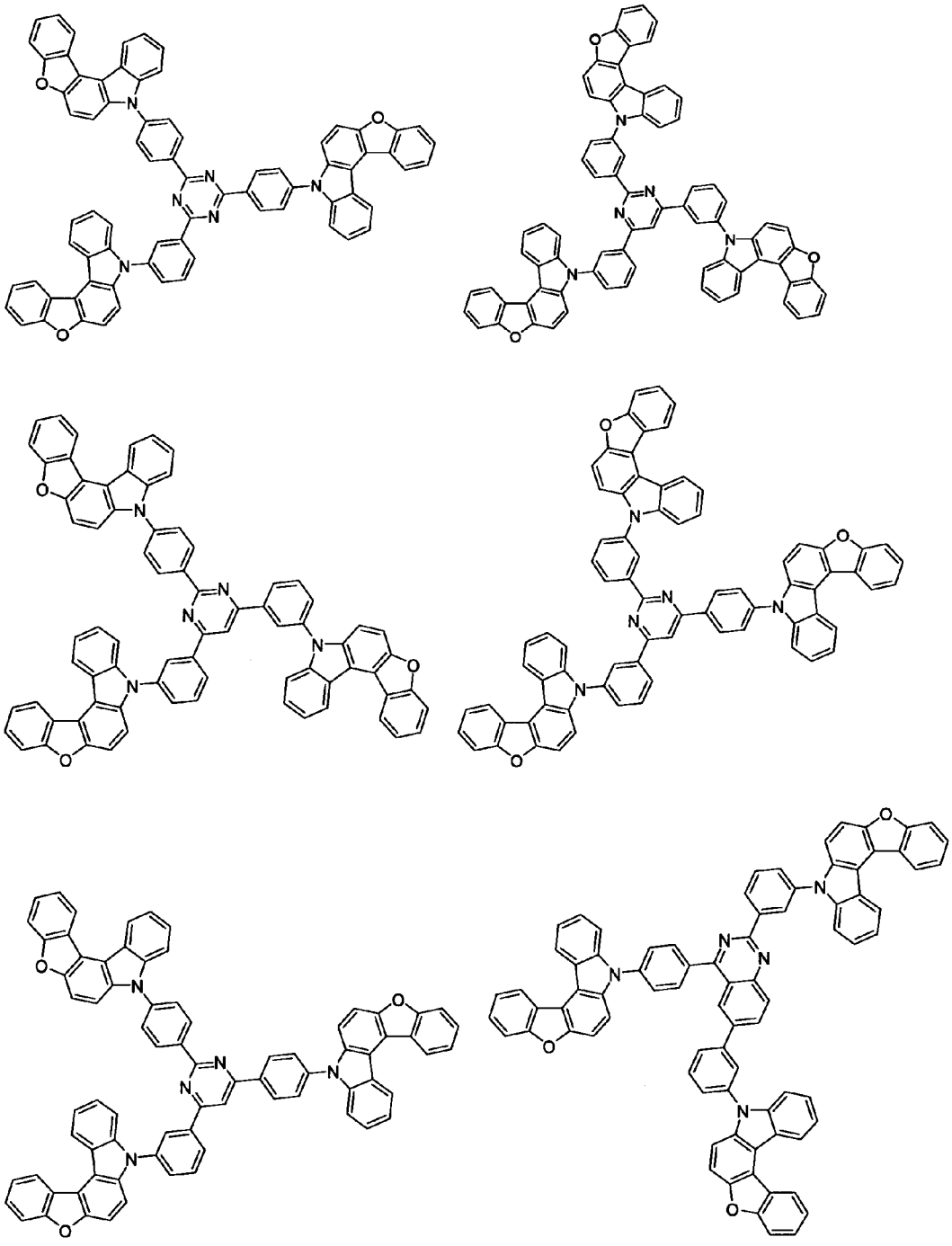
[0347]

[化215]



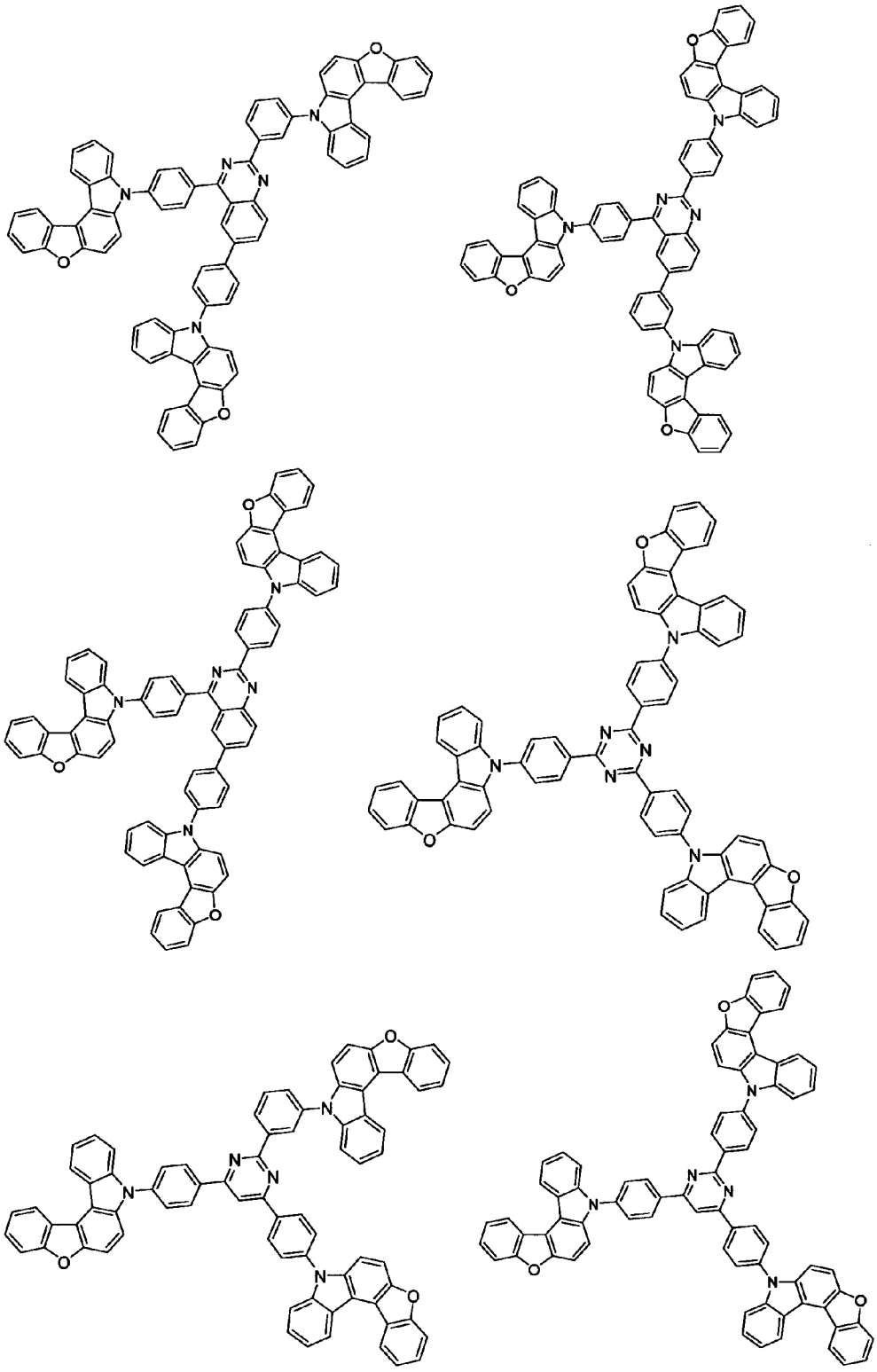
[0348]

[化216]



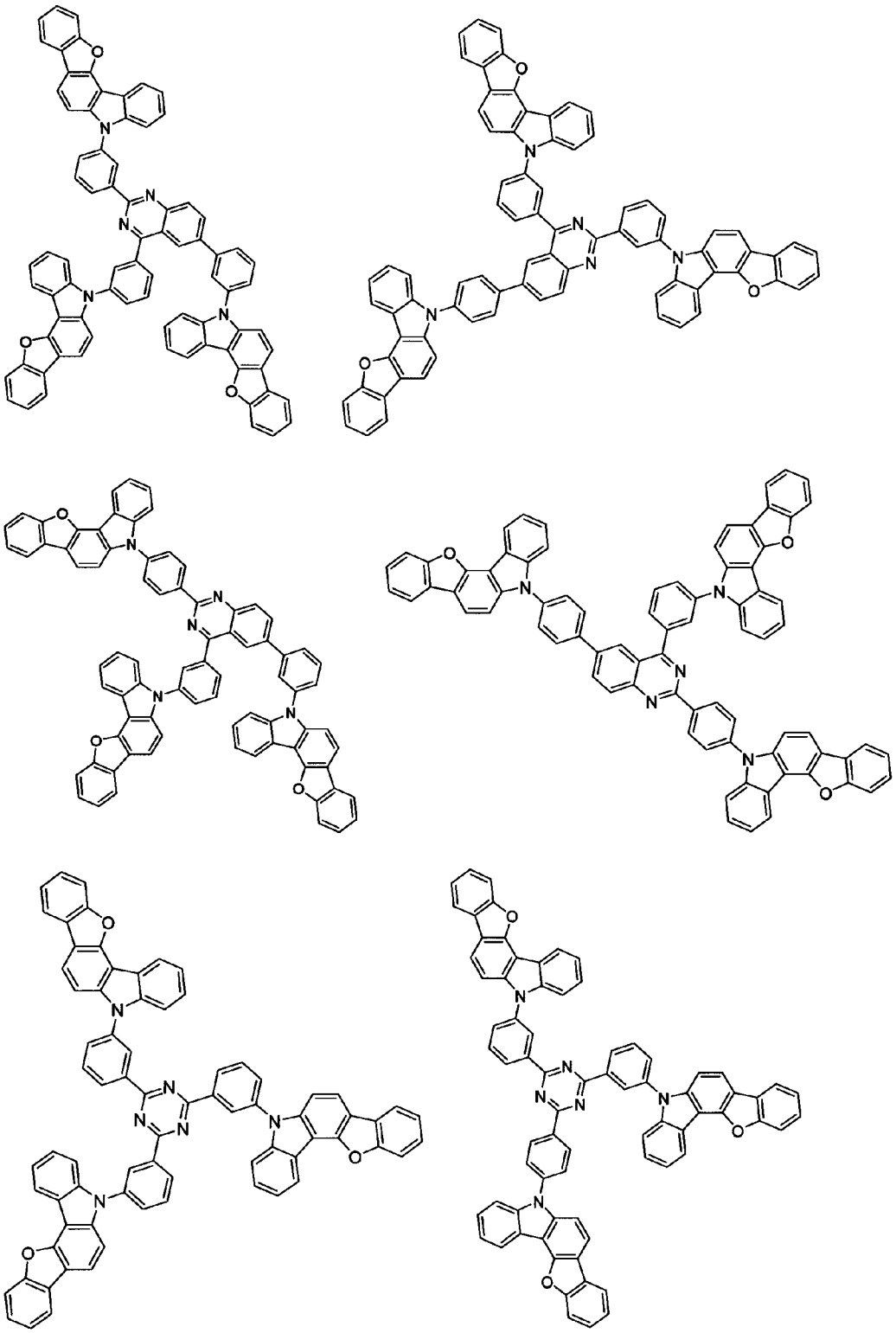
[0349]

[化217]



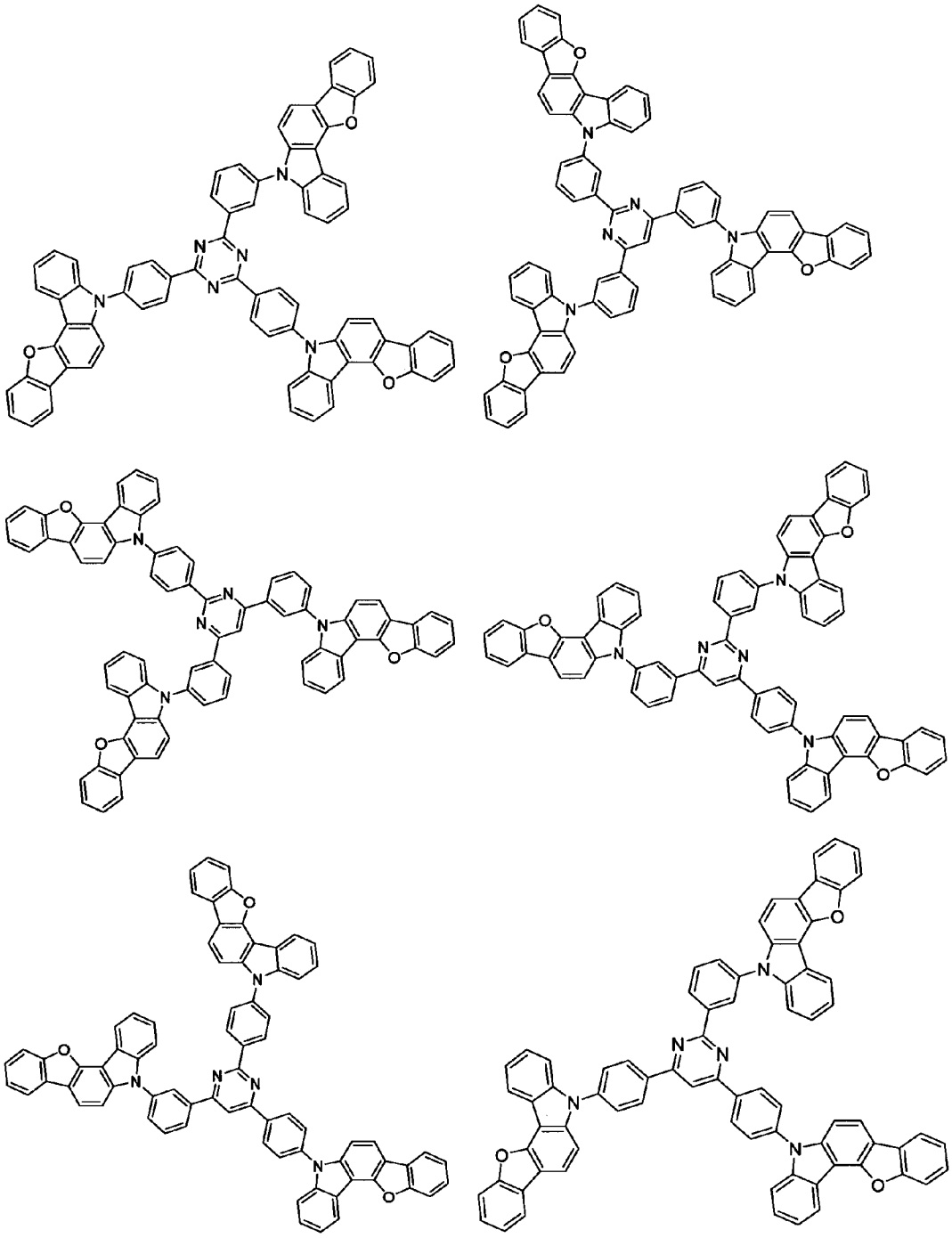
[0350]

[化218]



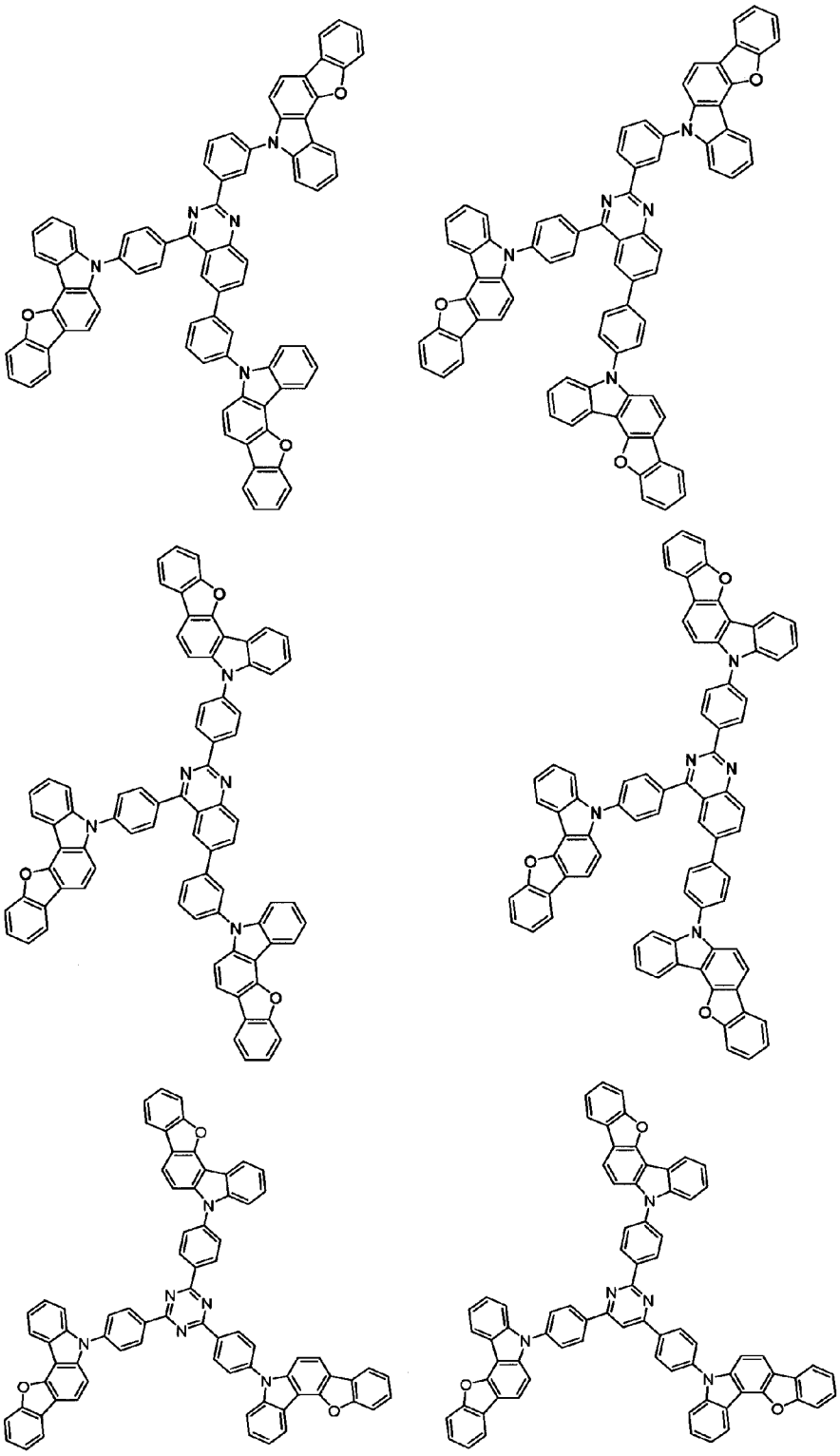
[0351]

[化219]



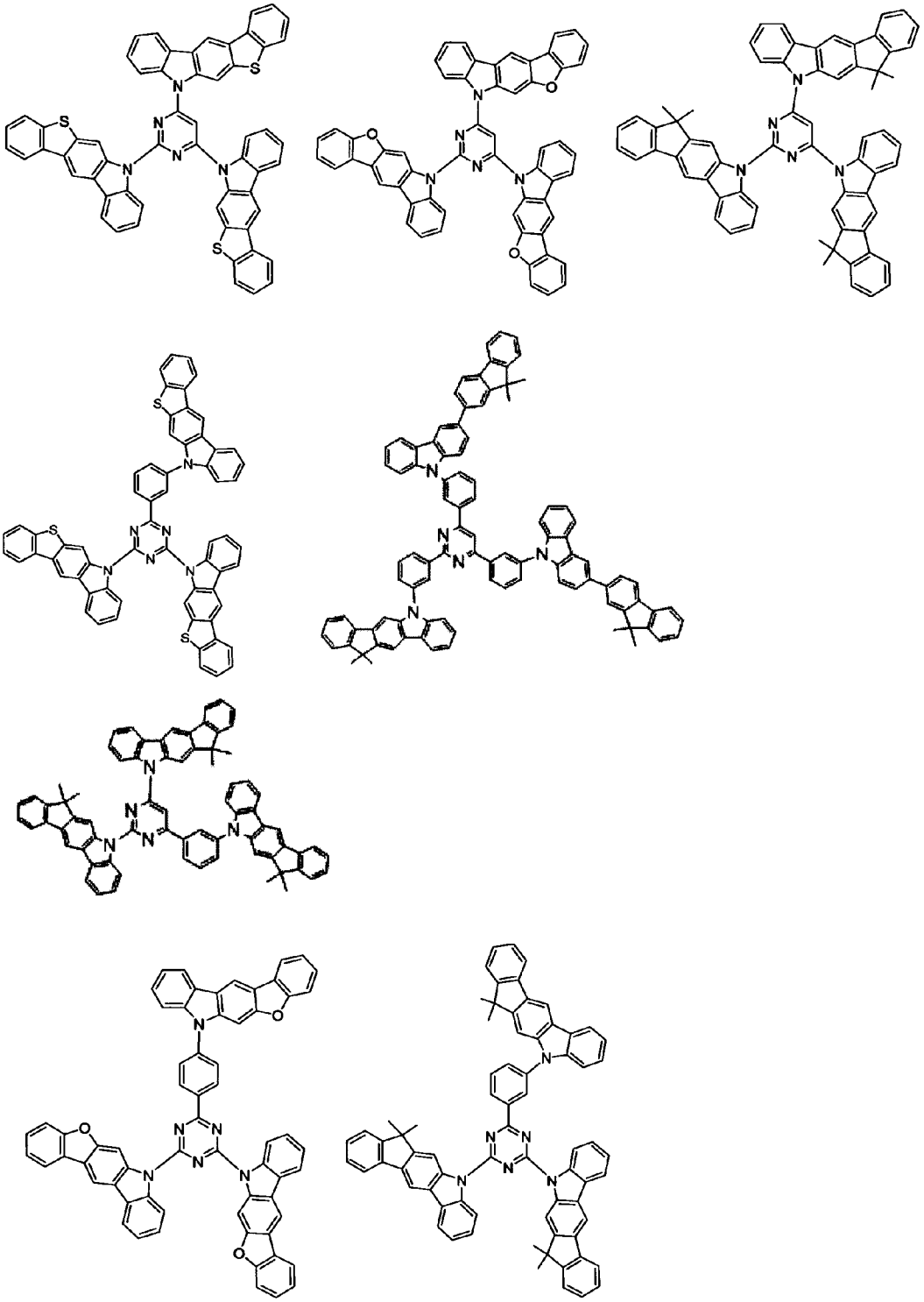
[0352]

[化220]



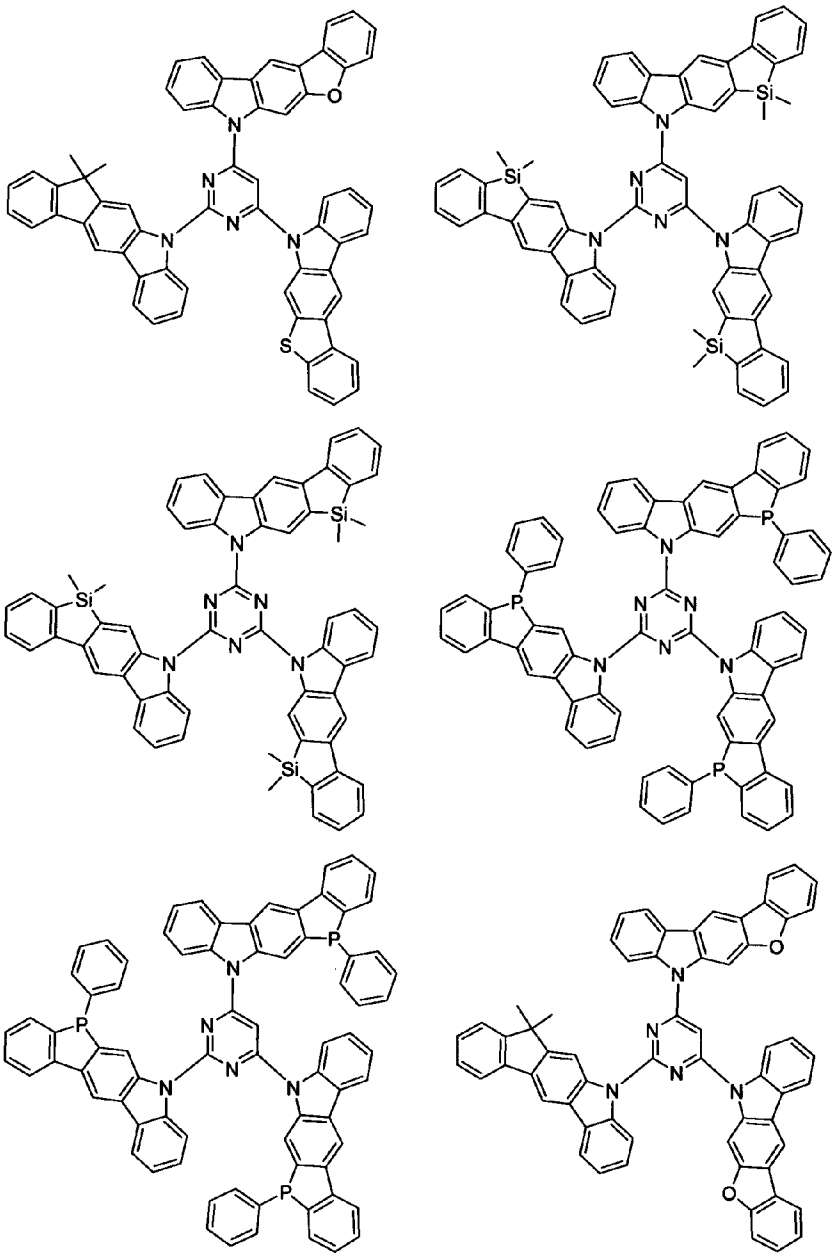
[0353]

[化221]



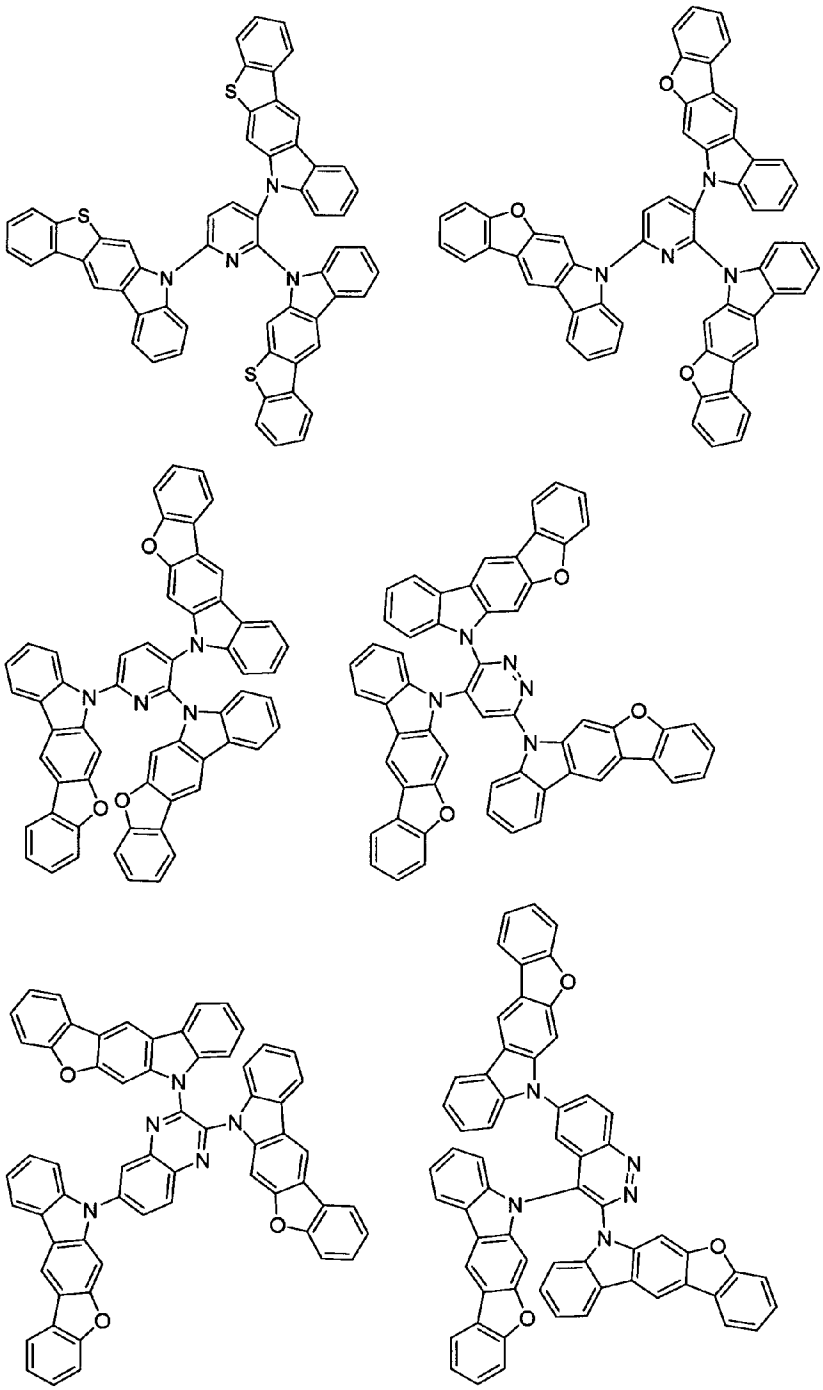
[0354]

[化222]



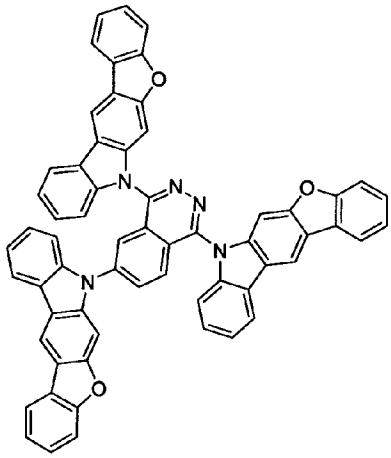
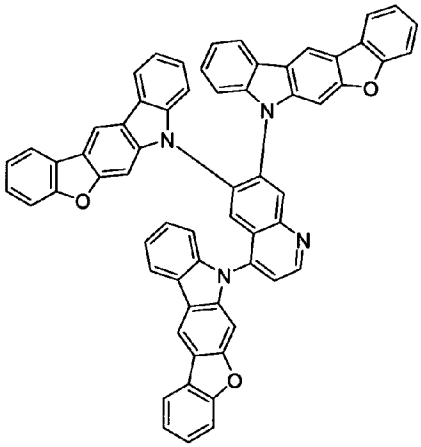
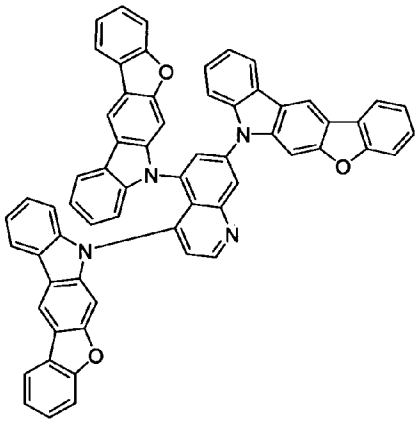
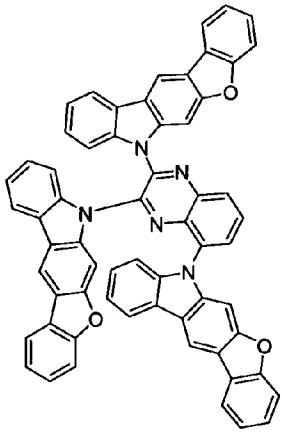
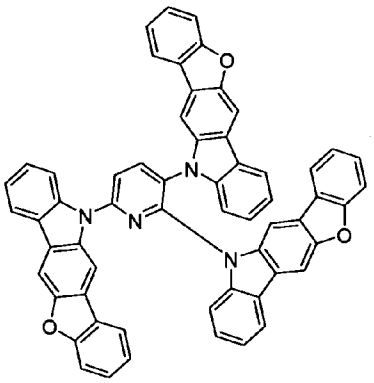
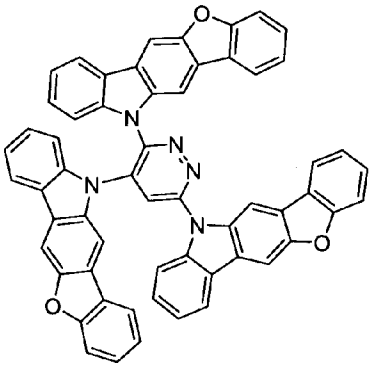
[0355]

[化223]



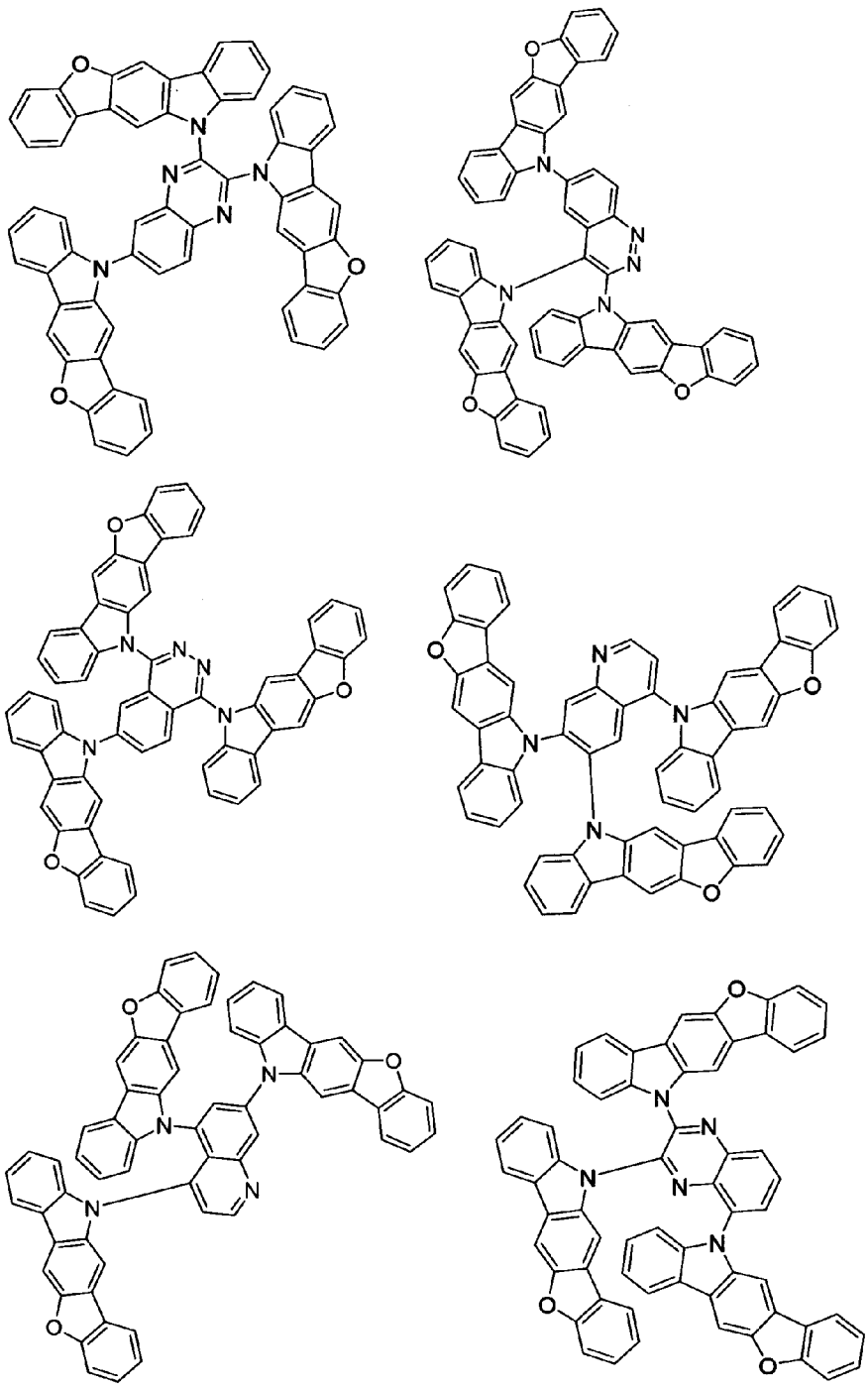
[0356]

[化224]

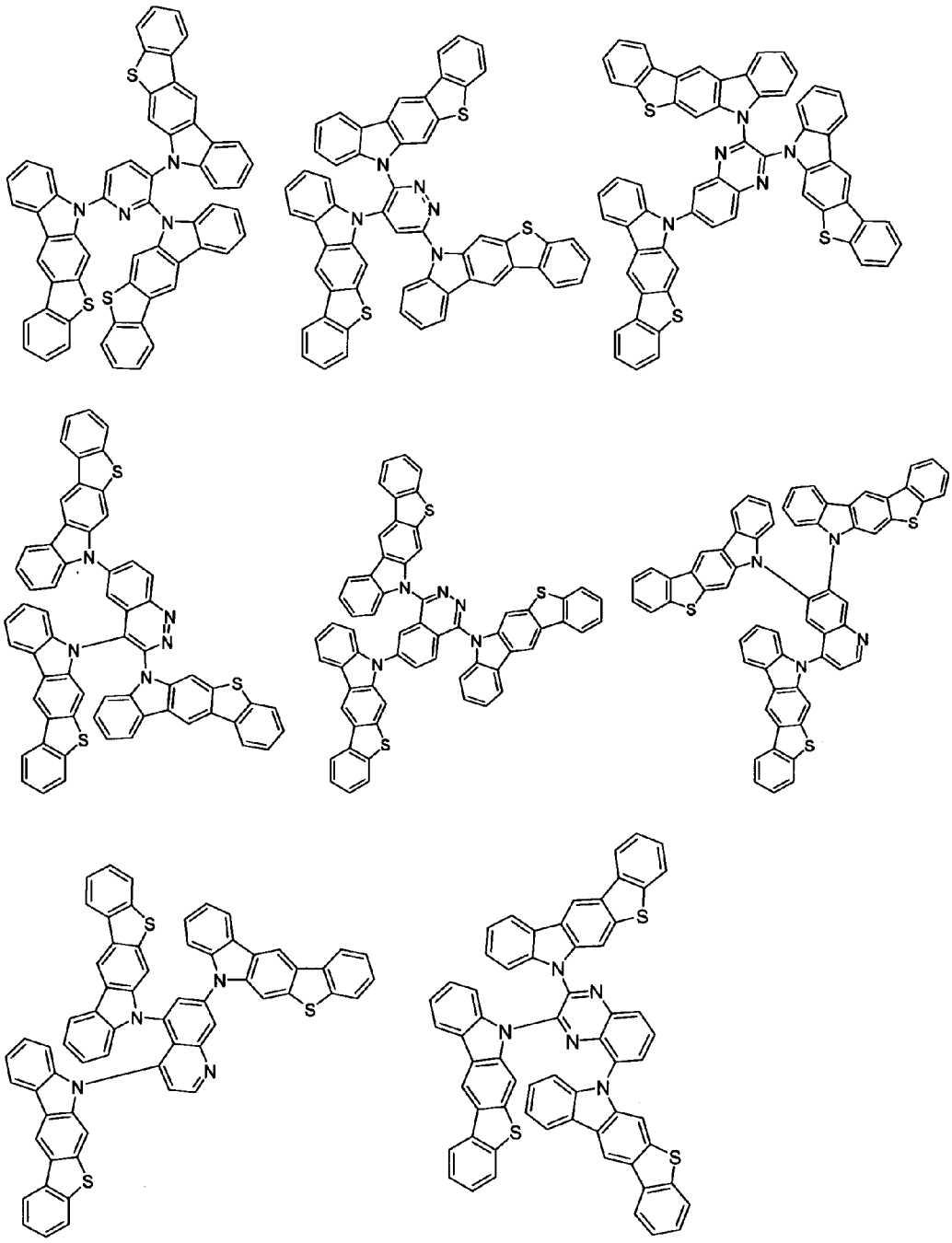
[0357]

[化225]



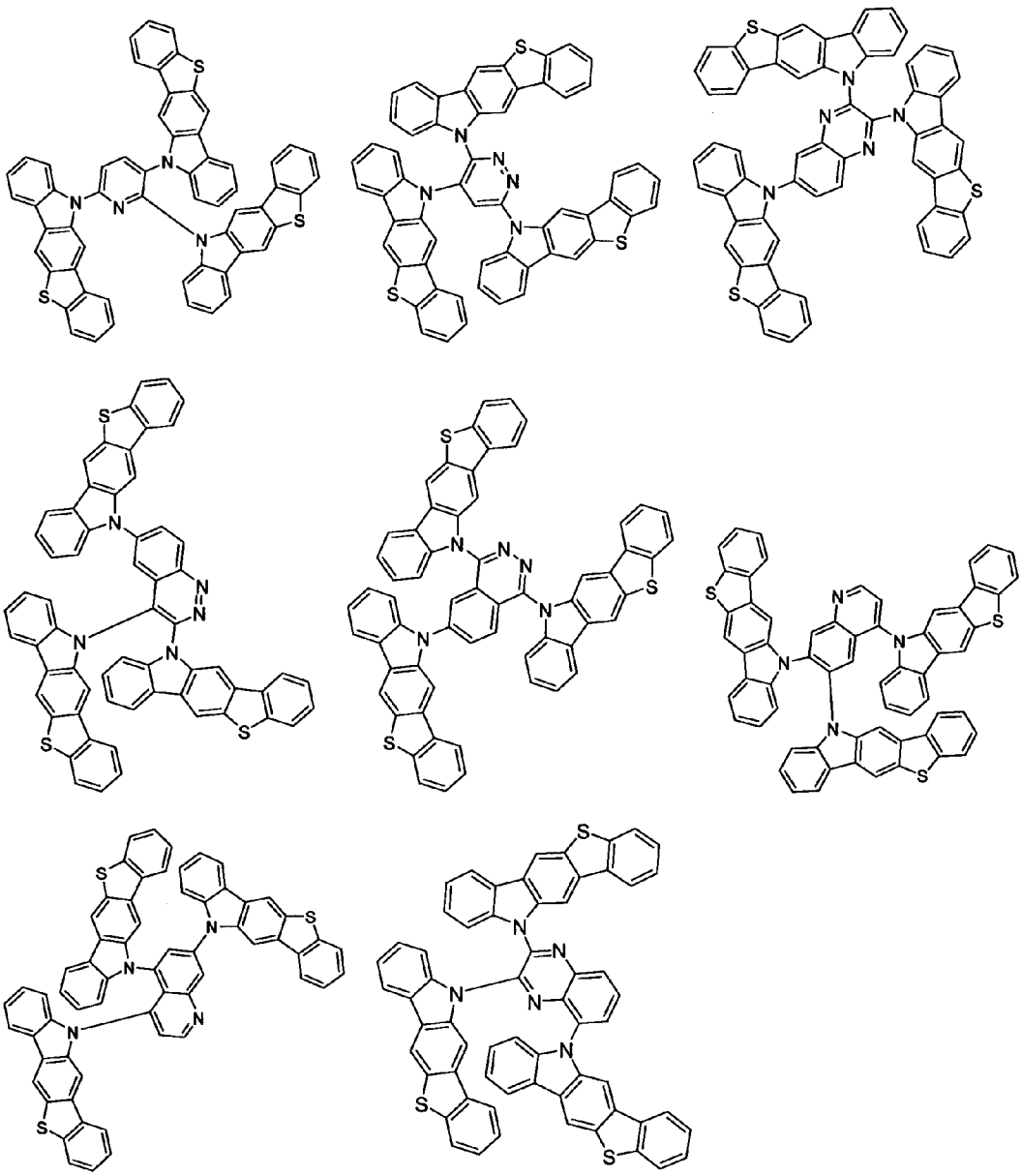
[0358]

[化226]



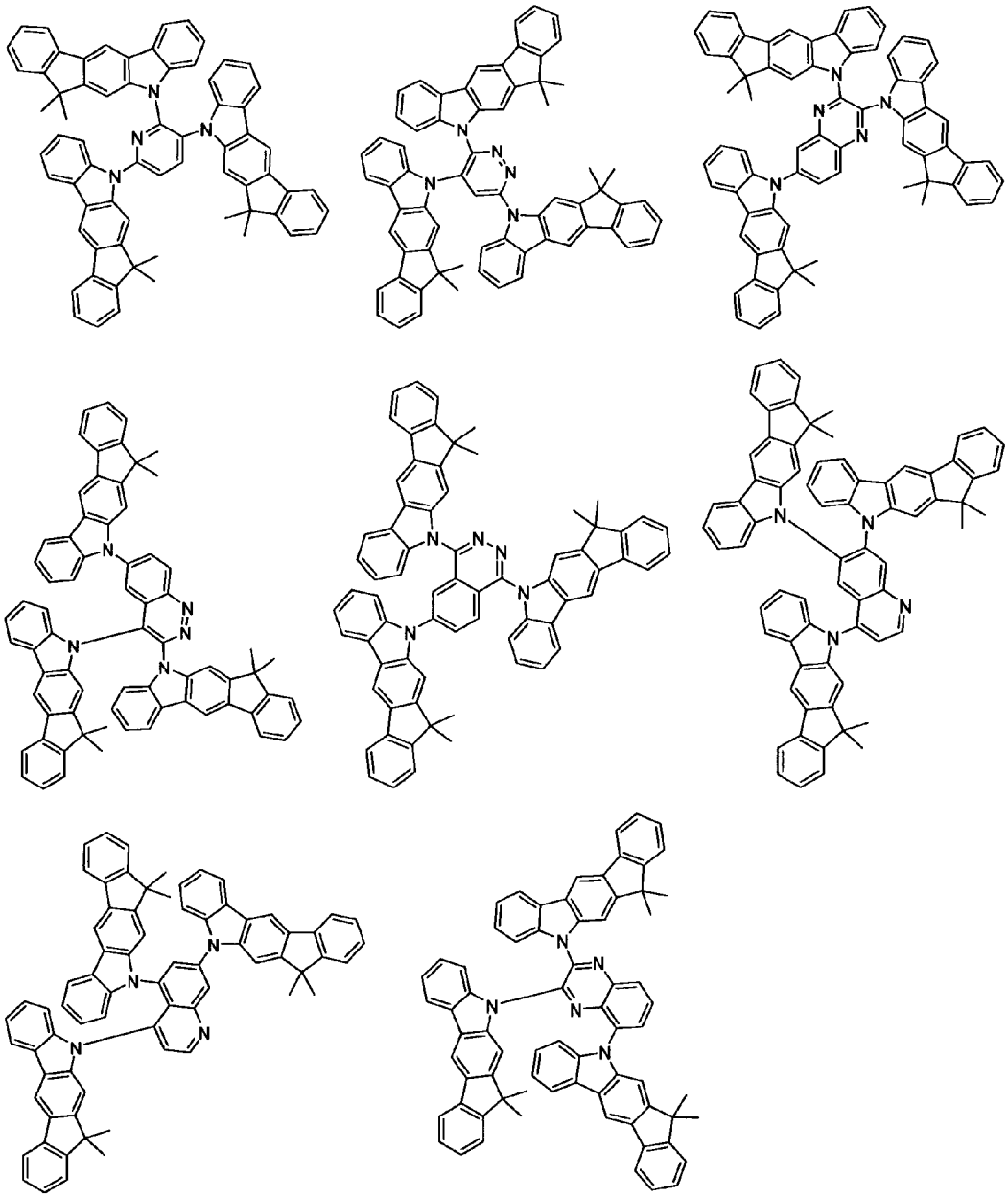
[0359]

[化227]



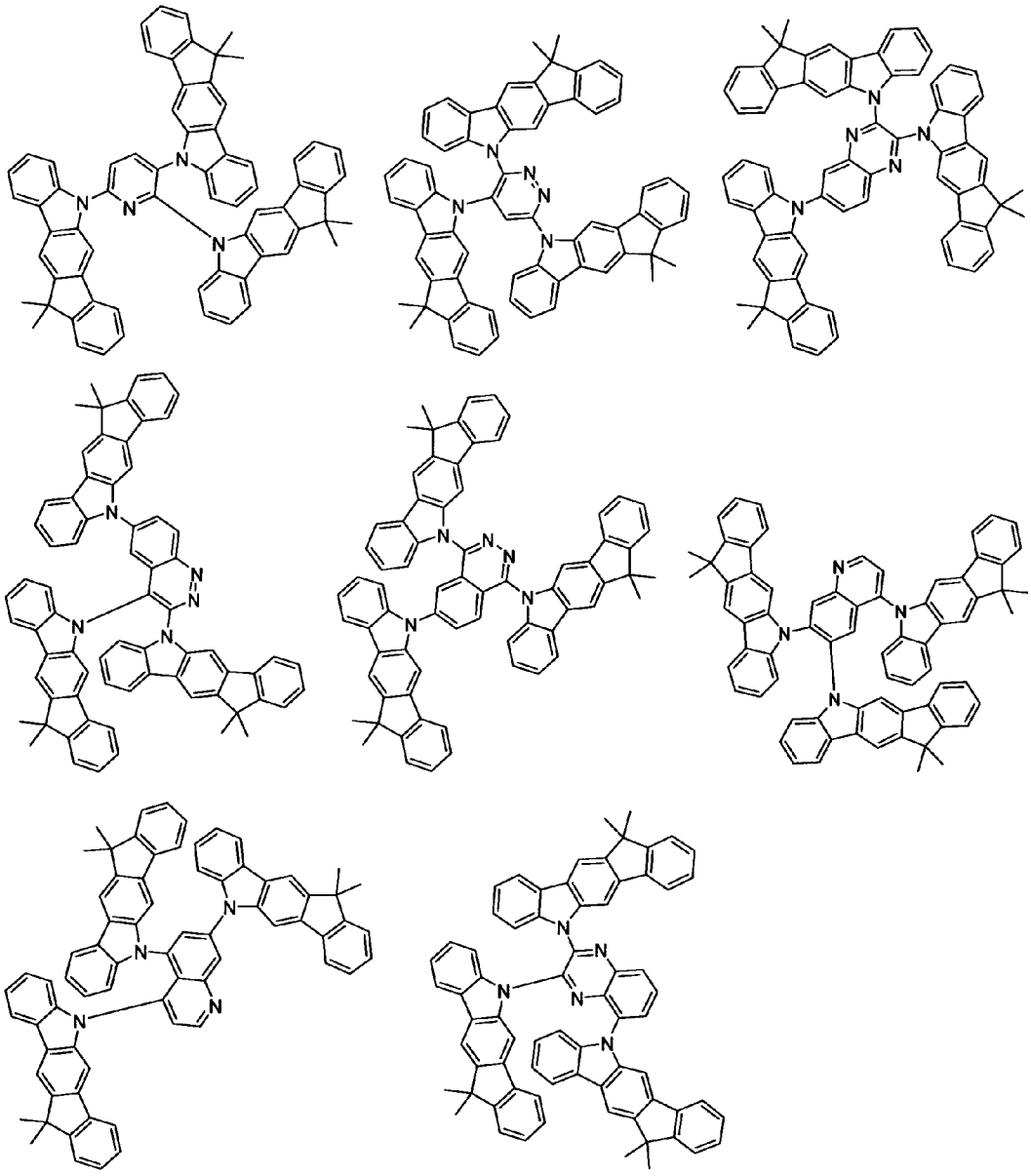
[0360]

[化228]



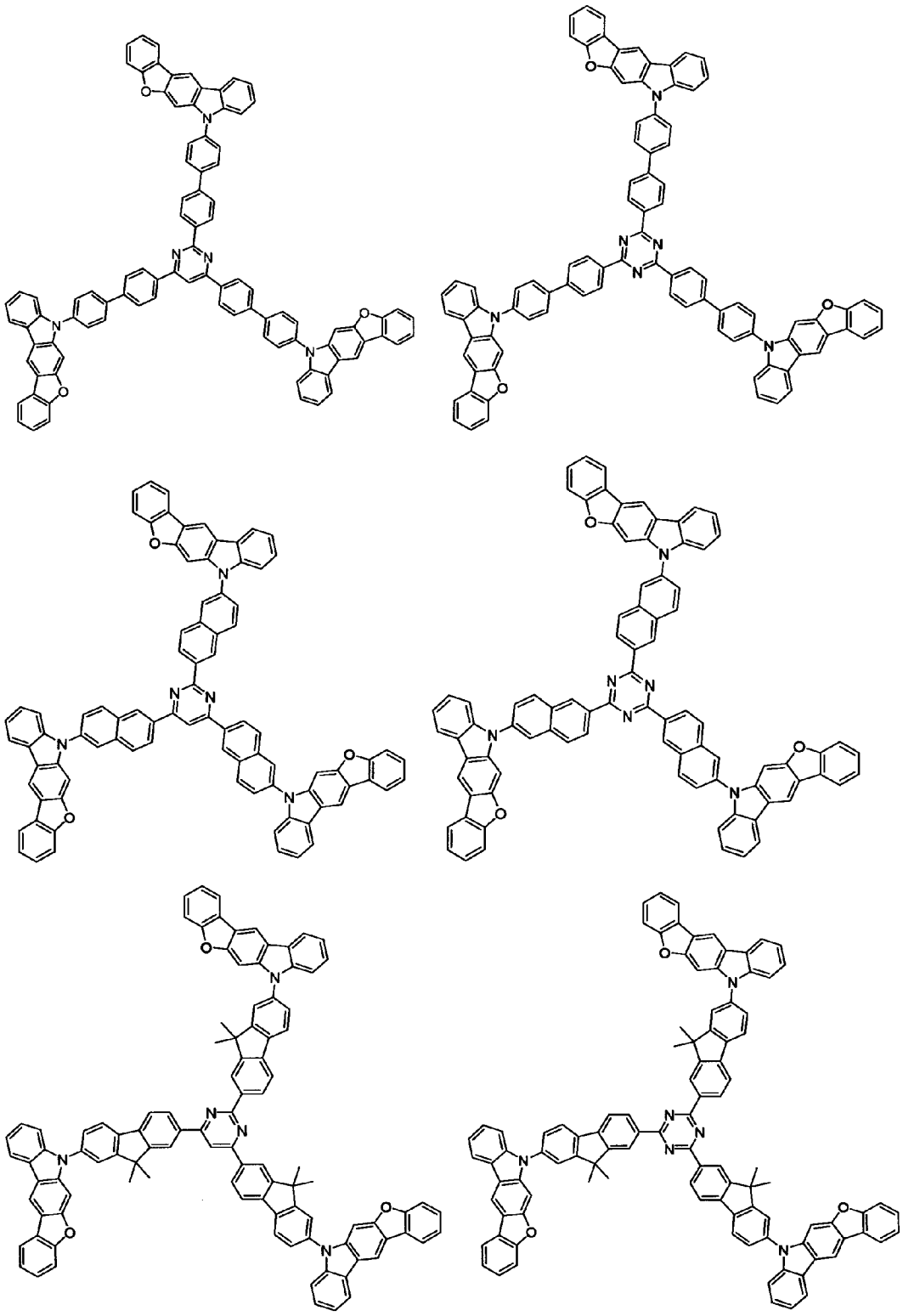
[0361]

[化229]



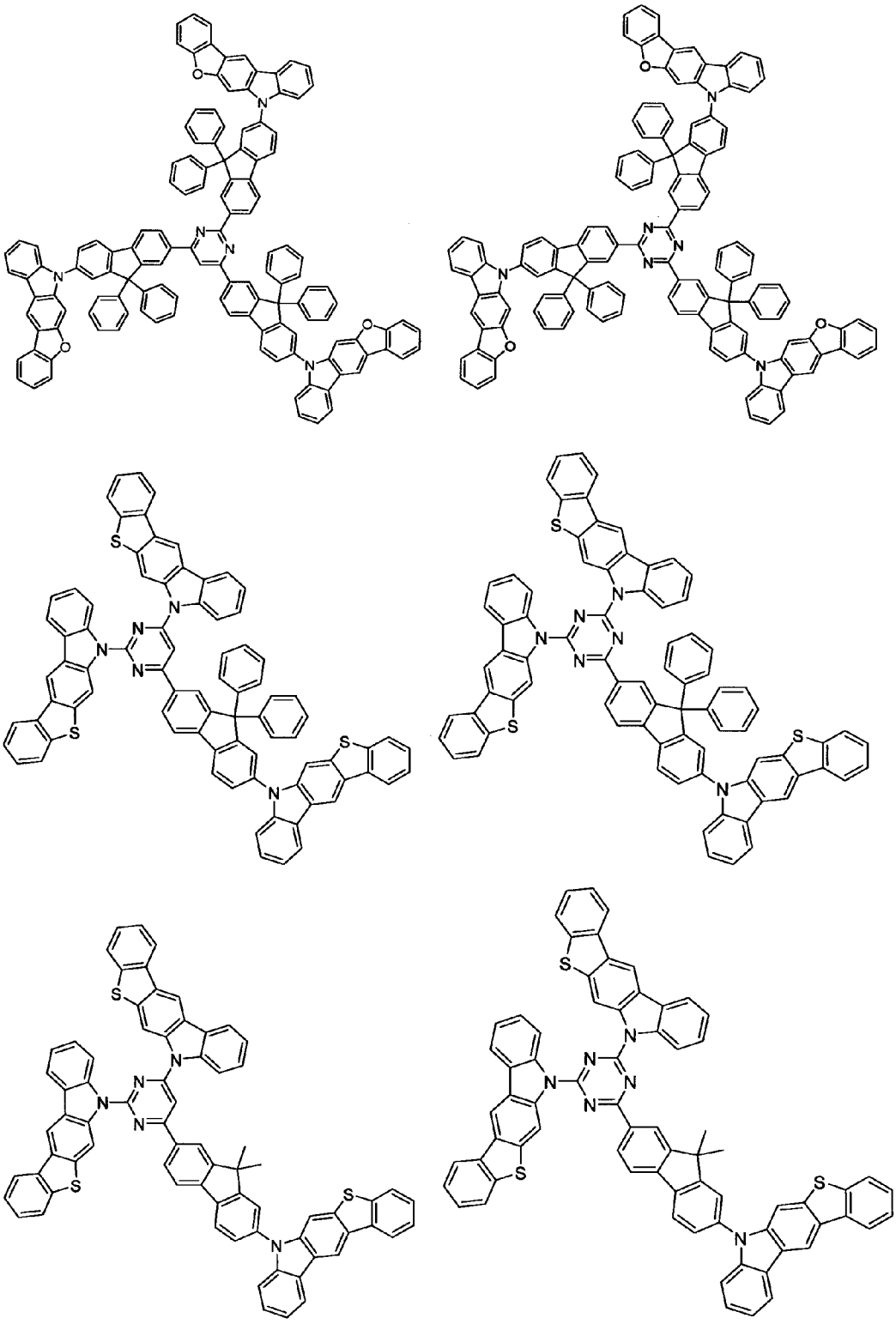
[0362]

[化230]



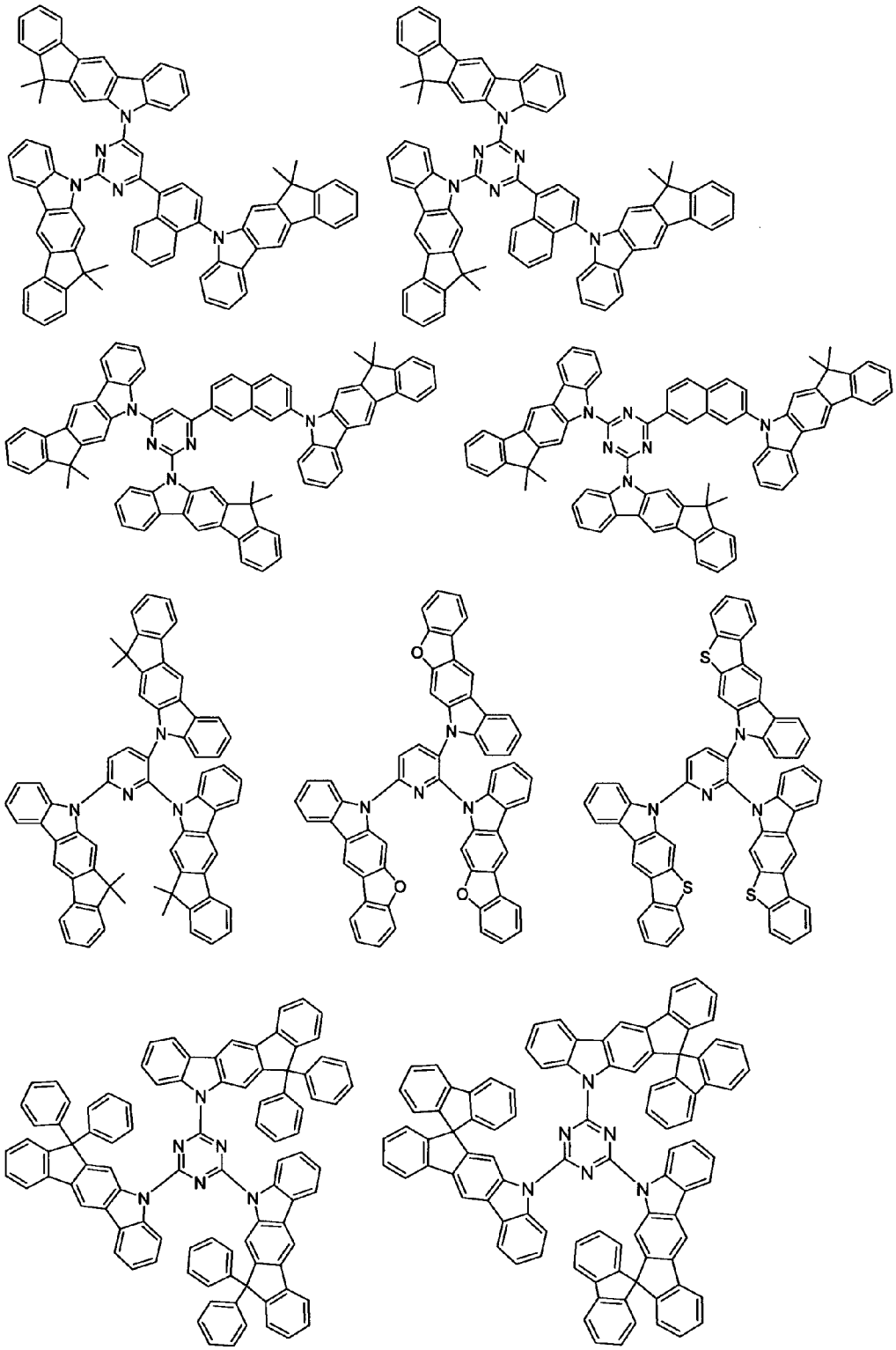
[0363]

[化231]



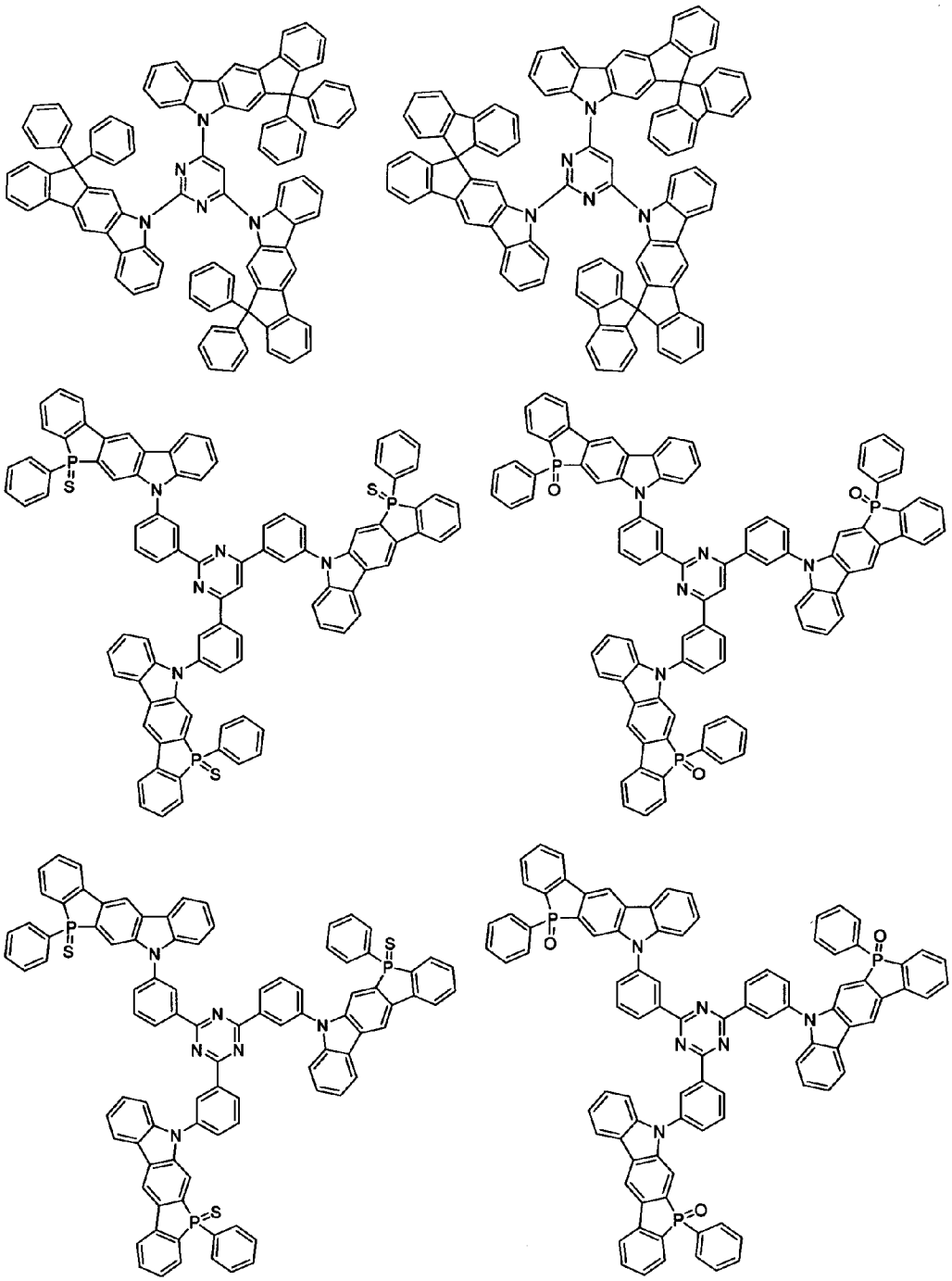
[0364]

[化232]



[0365]

[化233]

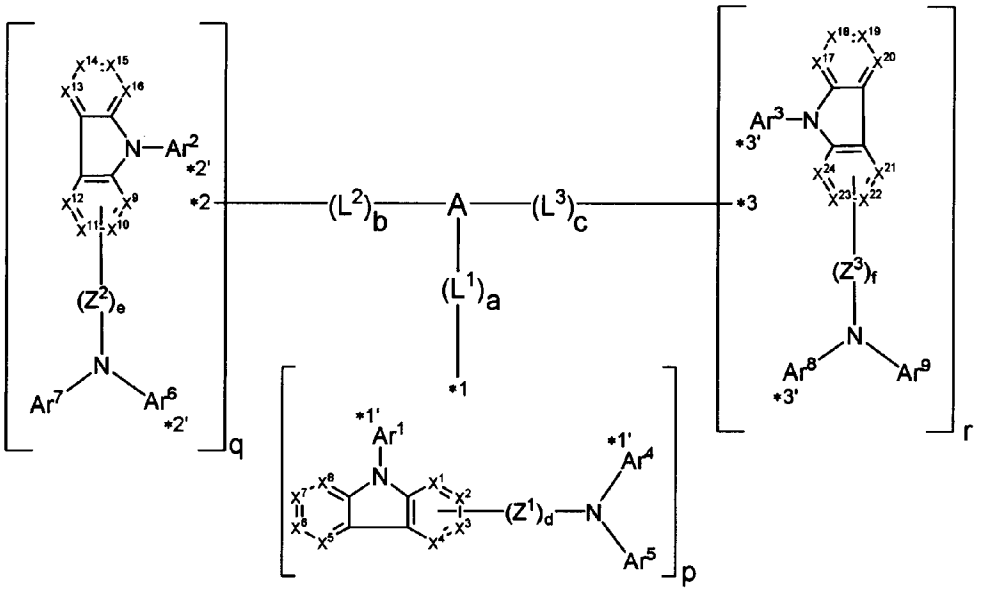


[0366] [一般式（1［III］）で表される化合物]

本発明の一態様において、下記一般式（1［III］）で表される化合物［化合物（1［III］）と略称することがある。］が提供される。当該化合物（1

［III］）は、塗布法により層形成する有機ＥＬ素子に好適な化合物であり、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料として有用である。

[0367] [化234]



(1[III])

[0368] （一般式（１［III］）中、Ａは、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基を表す。

Ｌ[1]～Ｌ[3]は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の複素環基、又はこれらの基が２～４個結合してなる基である。

ａ～ｃは、それぞれ独立に、０又は１である。

Ｘ[1]～Ｘ[24]は、それぞれＣ（Ｒ[1]）～Ｃ（Ｒ[24]）又は窒素原子を表す。Ｒ[1]～Ｒ[24]は、それぞれ独立に、水素原子または置換基である。但し、Ｘ[1]～Ｘ[4]のうちの１つは、Ｚ[1]もしくはＡｒ[4]及びＡｒ[5]が結合する窒素原子と直接結合する炭素原子であり、Ｘ[9]～Ｘ[12]のうちの１つは、Ｚ[2]もしくはＡｒ[6]及びＡｒ[7]が結合する窒素原子と直接結合する炭素原子であり、Ｘ[21]～Ｘ[24]のうちの１つは、Ｚ[3]もしくはＡｒ[8]及びＡｒ[9]が結合する窒素原子と直接結合する炭素原子である。また、その直接結合に関与していないＲ[1]～Ｒ[8]から選ばれる２つ

、R^9～R^{16}から選ばれる２つ、及びR^{17}～R^{24}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。

Ar^1～Ar^3は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０のヘテロアリール基を表す。

Ar^4～Ar^9は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０のヘテロアリール基を表す。

Z^1～Z^3は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の複素環基、又はこれらの基が２～４個結合してなる基である。

ｄ～ｆは、それぞれ独立に、０又は１である。

ｐ～ｒは、それぞれ独立に、０～３の整数であり、ｐ＋ｑ＋ｒ＝３である。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。

一般式（１［III］）中、＊１は、＊１’が記されているAr^1及びAr^4のうちのいずれか一方が脱離して窒素原子と直接結合している。＊２は、＊２’が記されているAr^2及びAr^6のうちのいずれか一方が脱離して窒素原子と直接結合している。＊３は、＊３’が記されているAr^3及びAr^8のうちのいずれか一方が脱離して窒素原子と直接結合している。）

[0369] （一般式（１［III］）中の各基についての説明）

Ａが表す窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基の環形成原子数は５～３０であり、好ましくは６～２０、より好ましくは６～１４である。窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基は、好ましくは、単環、２環から構成される縮合環、３環から構成される縮合環のいずれかである。

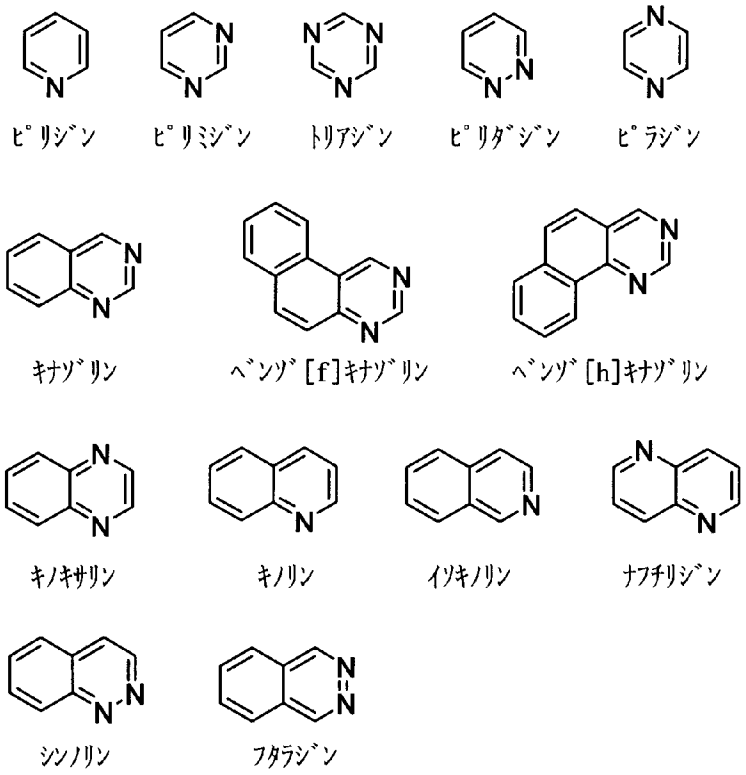
窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基が含有する窒素原子の数は、好ましくは１～３個、より好ましくは２個又は３個である。特に、窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基が単環の場合には、含有する窒素原子の数は好ましくは２個又

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

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

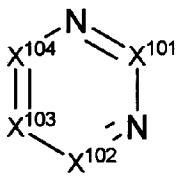
前記窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基としては、上記の中でも、下記の群から選択される化合物の残基が好ましい。

[化235]



[0370] また、本発明の一態様においては、Ａが表す窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基が、下記一般式（Ａ１）で表される窒素含有複素環の残基であることが好ましい。

[化236]



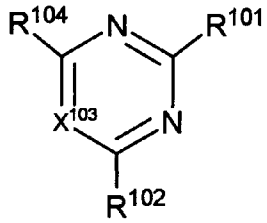
(A1)

（一般式（Ａ１）中、X^{101}～X^{104}は、それぞれＣ（R^{101}）～Ｃ（R^{104}）又は窒素原子を示す。R^{101}～R^{104}は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、R^{102}～R^{104}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。）

[0371] 本発明の一態様においては、Ａが表す窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基が、下記一般式（Ａ２）～（Ａ４）のいずれかで表される窒素含有複素環の残

基であることがより好ましい。

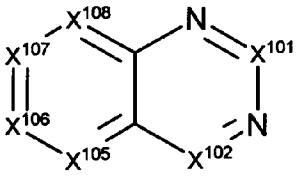
[化237]



(A2)

（一般式（Ａ２）中、Ｘ^{103}は、Ｃ（Ｒ^{103}）又は窒素原子を示す。Ｒ^{101}～Ｒ^{104}は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。Ｒ^{102}～Ｒ^{104}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。）

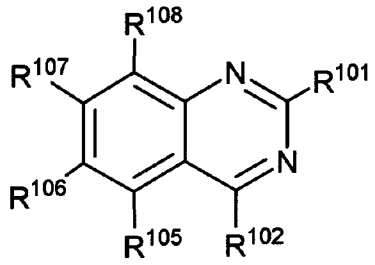
[0372] [化238]



(A3)

（一般式（Ａ３）中、Ｘ^{101}、Ｘ^{102}、Ｘ^{105}～Ｘ^{108}は、それぞれＣ（Ｒ^{101}）、Ｃ（Ｒ^{102}）、Ｃ（Ｒ^{105}）～Ｃ（Ｒ^{108}）又は窒素原子を示す。Ｒ^{101}、Ｒ^{102}及びＲ^{105}～Ｒ^{108}、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、Ｒ^{102}及びＲ^{105}～Ｒ^{108}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。）

[0373] [化239]



(A4)

（一般式（Ａ４）中、Ｒ^{101}、Ｒ^{102}及びＲ^{105}～Ｒ^{108}は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、Ｒ^{102}及びＲ^{105}～Ｒ^{108}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。）

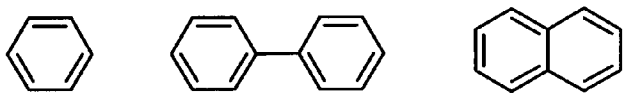
[0374] なお、一般式（１［III］）中のＡが表す窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基は、任意に置換基を有していてもよい。

窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基に置換し得る置換基としては、具体的には上述の置換基が挙げられ、該置換基としては、例えば、置換アミノ基が置換した９－カルバゾリル基や、カルバゾリル基が置換した置換アミノ基や、置換アミノ基が置換したアリール基又はヘテロアリール基で置換された９－カルバゾリル基や、カルバゾリル基が置換したアリール基又はヘテロアリール基で置換された置換アミノ基も含まれる。

[0375] 前記一般式（１［III］）において、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}が表す芳香族炭化水素基の環形成炭素数は６～３０であり、好ましくは６～１８、より好ましくは６～１３、さらに好ましくは６～１２、特に好ましくは６～１０である。

Ｌ^{1}～Ｌ^{3}が表す芳香族炭化水素基としては、下記式で表されるいずれかの化合物の２～４価の残基であることが好ましく、本発明の一態様においては、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}の少なくとも一つ（好ましくは全て）が下記式で表されるいずれかの化合物の２～４価の残基であることが好ましい。

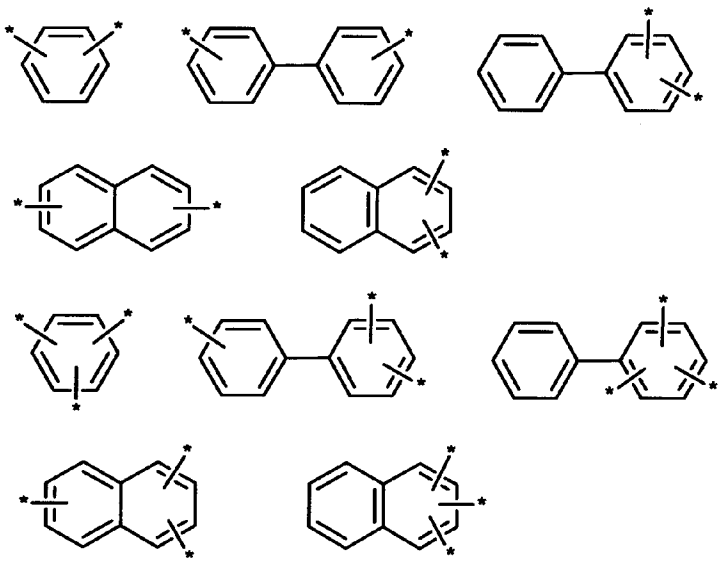
[化240]



（上記化合物中の炭素原子は置換基を有していてもよい。）

[0376] さらに、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}が表す芳香族炭化水素基としては、下記式で表されるいずれかの基であることがより好ましく、本発明の一態様においては、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}の少なくとも一つ（好ましくは全て）が下記式で表されるいずれかの基であることがより好ましい。

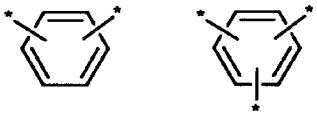
[化241]



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

[0377] 上記の中でも、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}が表す芳香族炭化水素基としては、下記式で表される基のいずれかであることがより好ましく、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}の少なくとも一つ（好ましくは全て）が下記式で表されるいずれかの基であることがより好ましい。

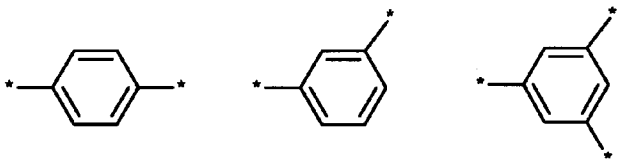
[化242]



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

[0378] 上記の中でも、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}が表す芳香族炭化水素基としては、下記式で表される基のいずれかであることが更に好ましく、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}の少なくとも一つ（好ましくは全て）が下記式で表されるいずれかの基であることが更に好ましい。

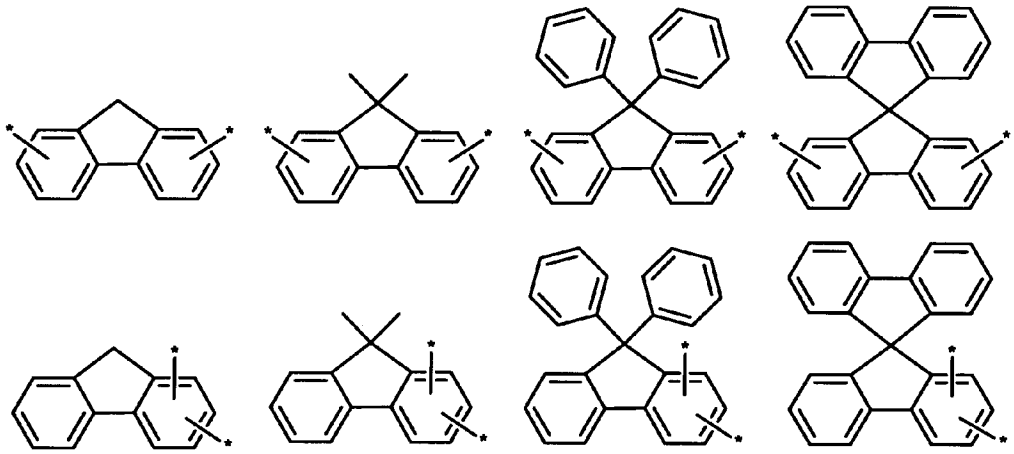
[化243]



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

[0379] Ｌ^{1}～Ｌ^{3}が表す芳香族炭化水素基としては、上記以外にも、下記式で表される基が挙げられる。

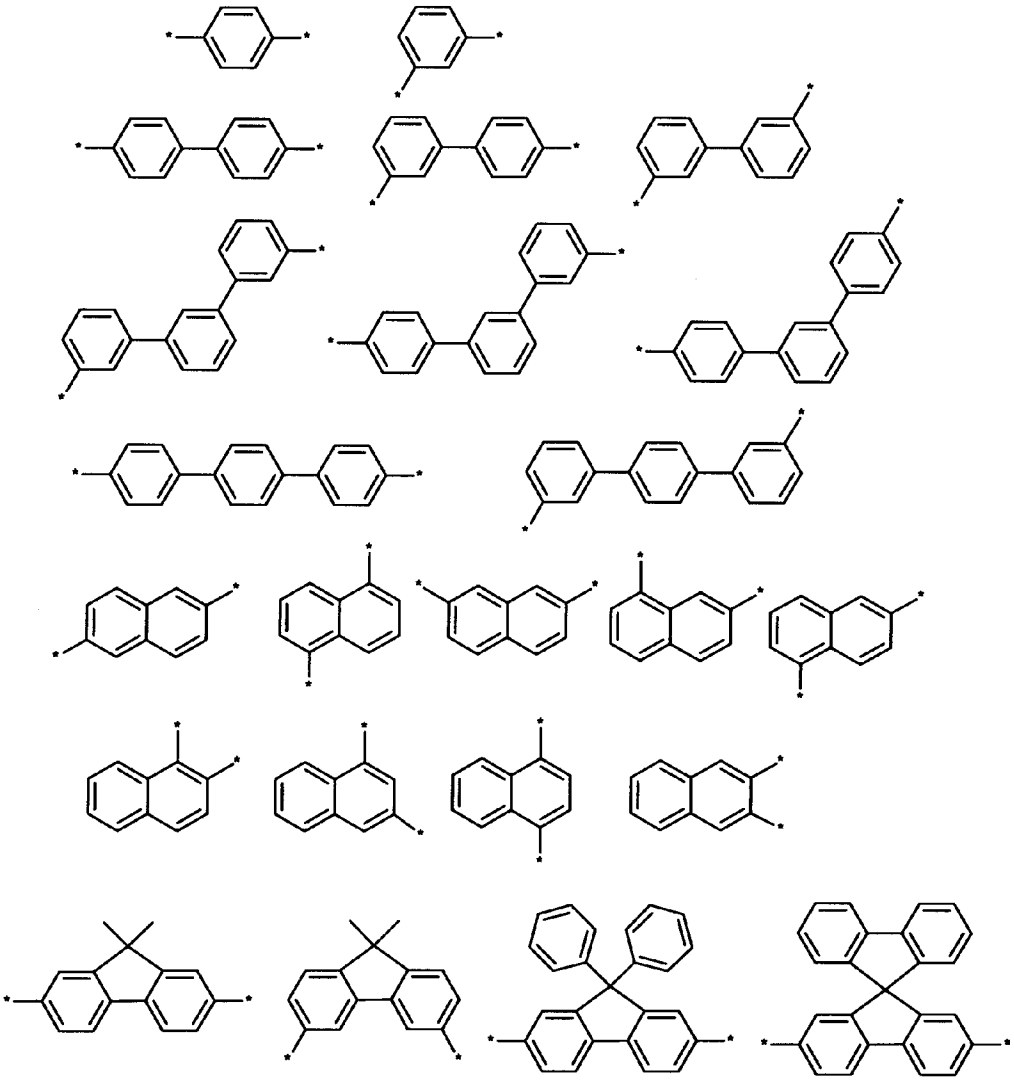
[化244]



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

[0380] Ｌ^{1}～Ｌ^{3}が表す芳香族炭化水素基が二価の場合の具体例としては、下記式で表される基が挙げられる。

[化245]



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

[0381] また、L^1～L^3が表す複素環基の環形成原子数は５～３０であり、好ましくは５～１８、より好ましくは５～１３、特に好ましくは５～１０である。複素環基としては、例えば、ピロール、ピリジン、イミダゾピリジン、ピラゾール、トリアゾール、テトラゾール、インドール、イソインドール及びカルバゾール等の含窒素複素環化合物の残基；フラン、ベンゾフラン、イソベンゾフラン、ジベンゾフラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ベンゾオキサゾール、ベンゾナフトフラン及びジナフトフラン等の含酸素複素環化合

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

Ｌ[1]～Ｌ[3]が表す、「これらの基が２～４個結合してなる基」は、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基と置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の複素環基とが２～４個結合してなる基である。この場合の結合順序に特に制限はない。

以上の中でも、Ｌ[1]～Ｌ[3]としては、いずれも、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基が好ましい。該芳香族炭化水素基としてより好ましいものは、前述の通りである。

[0382] Ｘ[1]～Ｘ[24]は、それぞれＣ（Ｒ[1]）～Ｃ（Ｒ[24]）又は窒素原子を表す。該Ｒ[1]～Ｒ[24]は、それぞれ独立に、水素原子または置換基である。

但し、Ｘ[1]～Ｘ[4]のうちの１つは、Ｚ[1]もしくはＡｒ[4]及びＡｒ[5]が結合する窒素原子と直接結合する炭素原子である。より詳細に説明すると、Ｘ[1]～Ｘ[4]のうちの１つは、ｄ＝０の場合、Ａｒ[4]及びＡｒ[5]が結合する窒素原子と直接結合する炭素原子であり、ｄ＝１の場合、Ｚ[1]と直接結合する炭素原子である。

また、Ｘ[9]～Ｘ[12]のうちの１つは、Ｚ[2]もしくはＡｒ[6]及びＡｒ[7]が結合する窒素原子（Ｎ）と直接結合する炭素原子であり、Ｘ[21]～Ｘ[24]のうちの１つは、Ｚ[3]もしくはＡｒ[8]及びＡｒ[9]が結合する窒素原子と直接結合する炭素原子である。より詳細に説明すると、Ｘ[9]～Ｘ[12]のうちの１つは、ｅ＝０の場合、Ａｒ[6]及びＡｒ[7]が結合する窒素原子（Ｎ）と直接結合する炭素原子であり、ｅ＝１の場合、Ｚ[2]と直接結合する炭素原子である。Ｘ[21]～Ｘ[24]のうちの１つは、ｆ＝０の場合、Ａｒ[8]及びＡｒ[9]が結合する窒素原子（Ｎ）と直接結合する炭素原子であり、ｆ＝１の場合、Ｚ[3]と直接結合する炭素原子である。

また、その直接結合に関与していない、Ｒ[1]～Ｒ[8]から選ばれる２つ、Ｒ[9]～Ｒ[16]から選ばれる２つ、及びＲ[17]～Ｒ[24]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。本発明の一態様では、その直接結合に関与していない、Ｒ[1]～Ｒ[8]から選ばれる２つ、Ｒ[9]～Ｒ[16]から選ばれる２つ、及びＲ[1]

^{7}～Ｒ^{24}から選ばれる２つは、いずれも、互いに結合して環を形成していないことが好ましい。

なお、「直接結合」は、他の文言では、一般的には「単結合」と言われることもある。

Ｘ^{1}～Ｘ^{24}としては、好ましくはいずれもＣ（Ｒ^{1}）～Ｃ（Ｒ^{24}）であり、該Ｒ^{1}～Ｒ^{24}がいずれも水素原子であることがより好ましい。

[0383] Ａｒ^{1}～Ａｒ^{3}は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０のヘテロアリール基を表す。

また、Ａｒ^{4}～Ａｒ^{9}は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０のヘテロアリール基を表す。

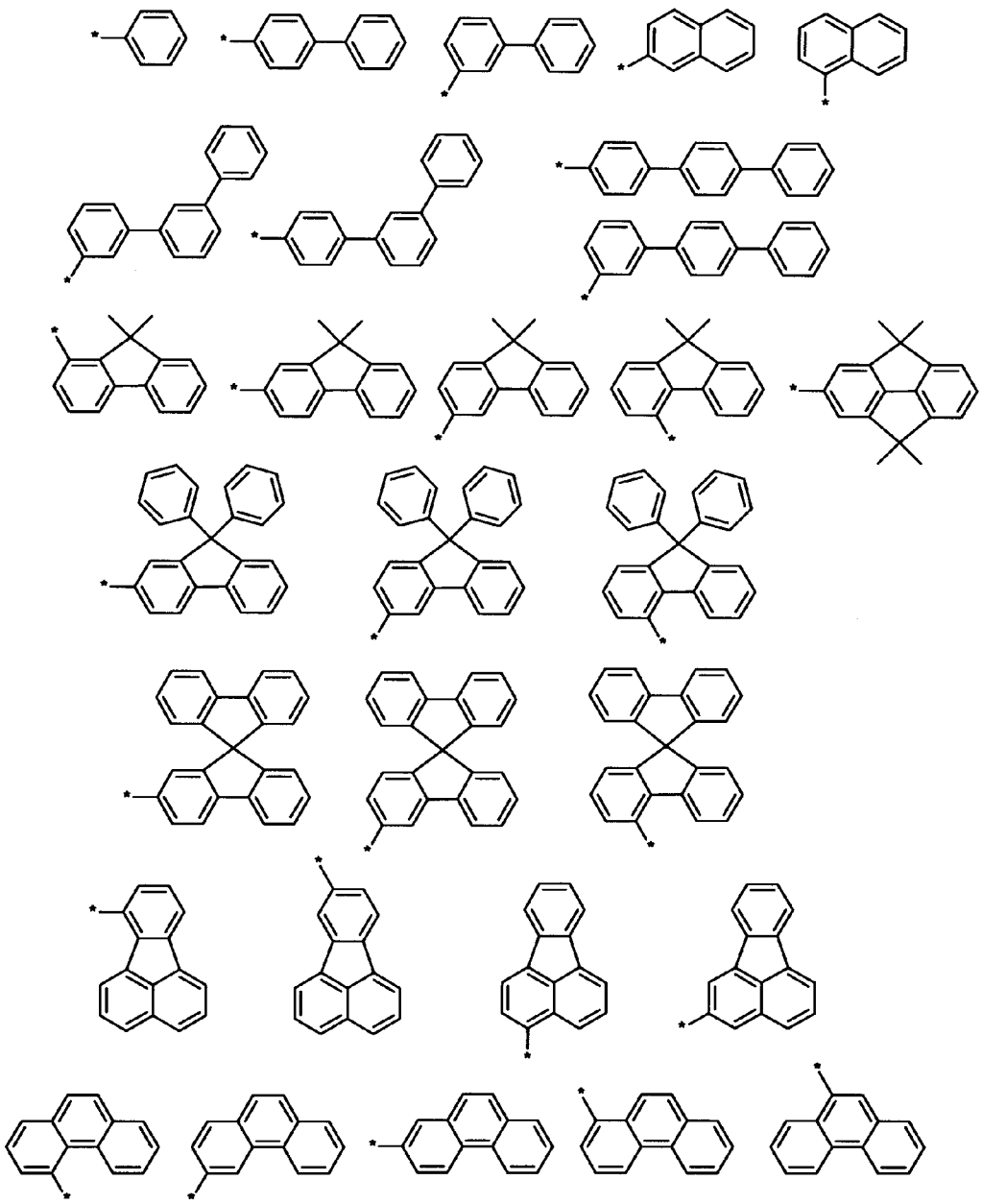
Ａｒ^{1}～Ａｒ^{3}、及びＡｒ^{4}～Ａｒ^{9}が表すアリール基の環形成炭素数は６～３０であり、いずれも、好ましくは６～１８、より好ましくは６～１３、さらに好ましくは６～１２、特に好ましくは６～１０である。

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

Ａｒ^{4}～Ａｒ^{9}としては、本発明の一態様においては、前記アリール基の中でも、環形成炭素数１０～３０（好ましくは１０～２０、より好ましくは１０～１４）の縮合環基であることも好ましい。該縮合環基としては、ナフチル基（１－ナフチル基、２－ナフチル基）、アセナフチレニル基、アントリル基、ベンゾアントリル基、アセアントリル基、フェナントリル基、ベンゾフェナントリル基、フェナレニル基、フルオレニル基（９，９－ジメチルフルオレニル基、９，９－ジフェニルフルオレニル基、９，９’－スピロビフルオレニル基を含む。）、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、ピセニル基、ペンタセニル基、ピレニル基、クリセニル基、ベンゾクリセニル基、フルオランテニル基、ベンゾフルオランテニル基、テトラセニル基、ペリレニル基、コロニル基、ジベンゾアントリル基等が挙げられる。

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

[化246]



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

[0384] Ａｒ[1]～Ａｒ[3]、及びＡｒ[4]～Ａｒ[9]が表すヘテロアリール基の環形成原子数は５～３０であり、好ましくは５～２０、より好ましくは５～１４、更に好ましくは５～１０である。

該ヘテロアリール基は、少なくとも１個、好ましくは１～５個、より好ま

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

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

Ａｒ^{1}～Ａｒ^{3}及びＡｒ^{4}～Ａｒ^{9}としては、いずれも置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０のアリール基が好ましい。該アリール基としてより好ましいものは、前述の通りである。

[0385] 一般式（１［III］）中、Ｚ^{1}～Ｚ^{3}が表す芳香族炭化水素基、複素環基又はこれらの基が２～４個結合してなる基の説明は、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}の場合と同じであり、好ましいものも同じである。その中でも、Ｚ^{1}～Ｚ^{3}が表す芳香族炭化水

素基としては、フェニレン基、ナフチレン基が好ましく、フェニレン基がより好ましい。

また、Z^1～Z^3としては、以上の中でも、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基が好ましい。該芳香族炭化水素基としてより好ましいものは、前述の通りである。

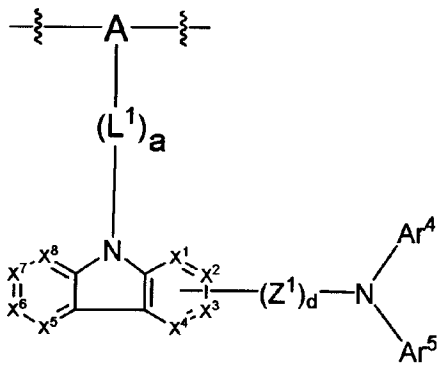
一般式（１［III］）中、ｄ～ｆは、いずれも０であることも好ましく、いずれも１であることも好ましい。また、ｄ～ｆは、いずれか一つが０であり、残りの二つが１であることも好ましい。

[0386] 一般式（１［III］）中、ｐ～ｒは、前述の通り、それぞれ独立に０～３の整数であり、ｐ＋ｑ＋ｒ＝３となる。特に制限されるものではないが、ｐ～ｒのうちの２つが同時に０ではないことが好ましい。

また、一般式（１［III］）中、＊１’が記されているAr^1及びAr^4のうちのいずれか一方が脱離して、その代わりに＊１が窒素原子と直接結合している。＊２’が記されているAr^2及びAr^6のうちのいずれか一方が脱離して、その代わりに＊２が窒素原子と直接結合している。＊３’が記されているAr^3及びAr^8のうちのいずれか一方が脱離して、その代わりに＊３が窒素原子と直接結合している。

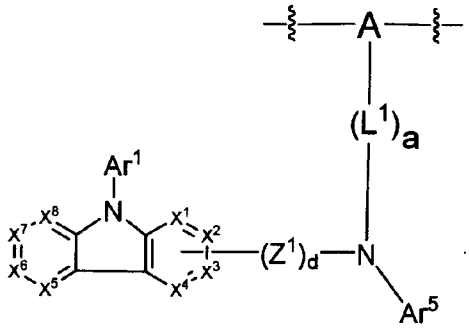
例えば、＊１’が記されているAr^1及びAr^4のうち、Ar^1の方が脱離して、その代わりに＊１が窒素原子と直接結合している場合、以下の状態（部分構造のみを示す。）となる。

[化247]



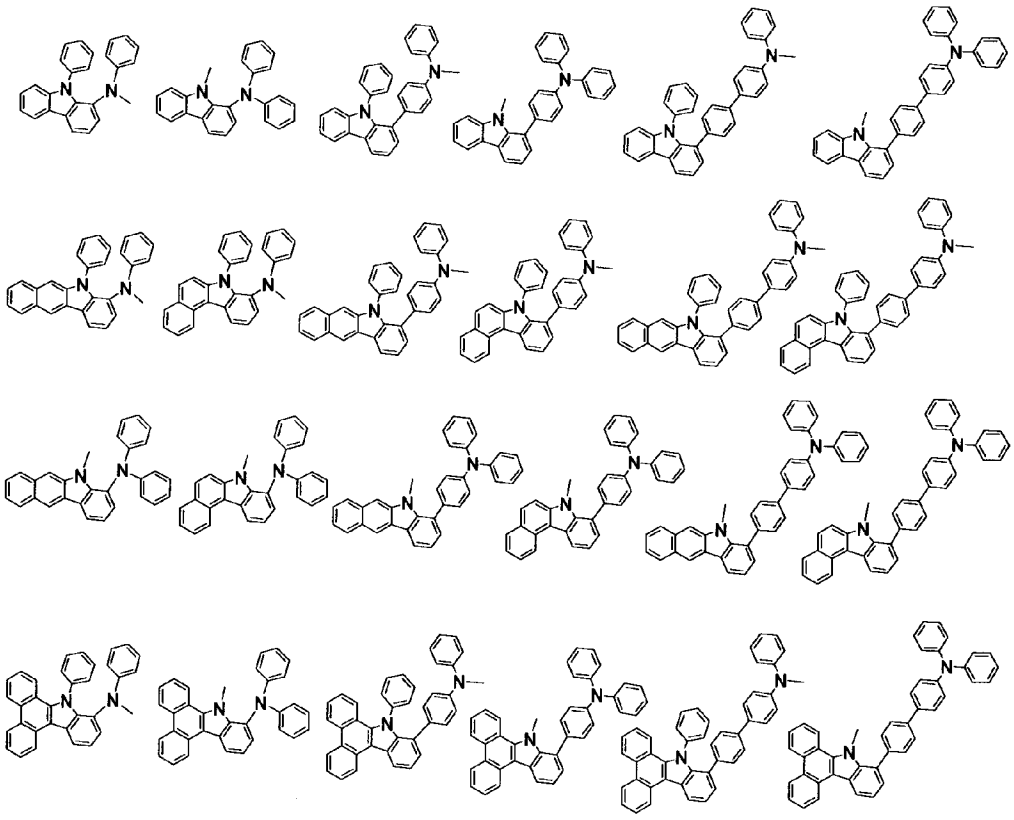
[0387] 一方、＊1’が記されているＡｒ[1]及びＡｒ[4]のうち、Ａｒ[4]の方が脱離して、その代わりに＊1が窒素原子と直接結合している場合、以下の状態（部分構造のみを示す。）となる。

[化248]

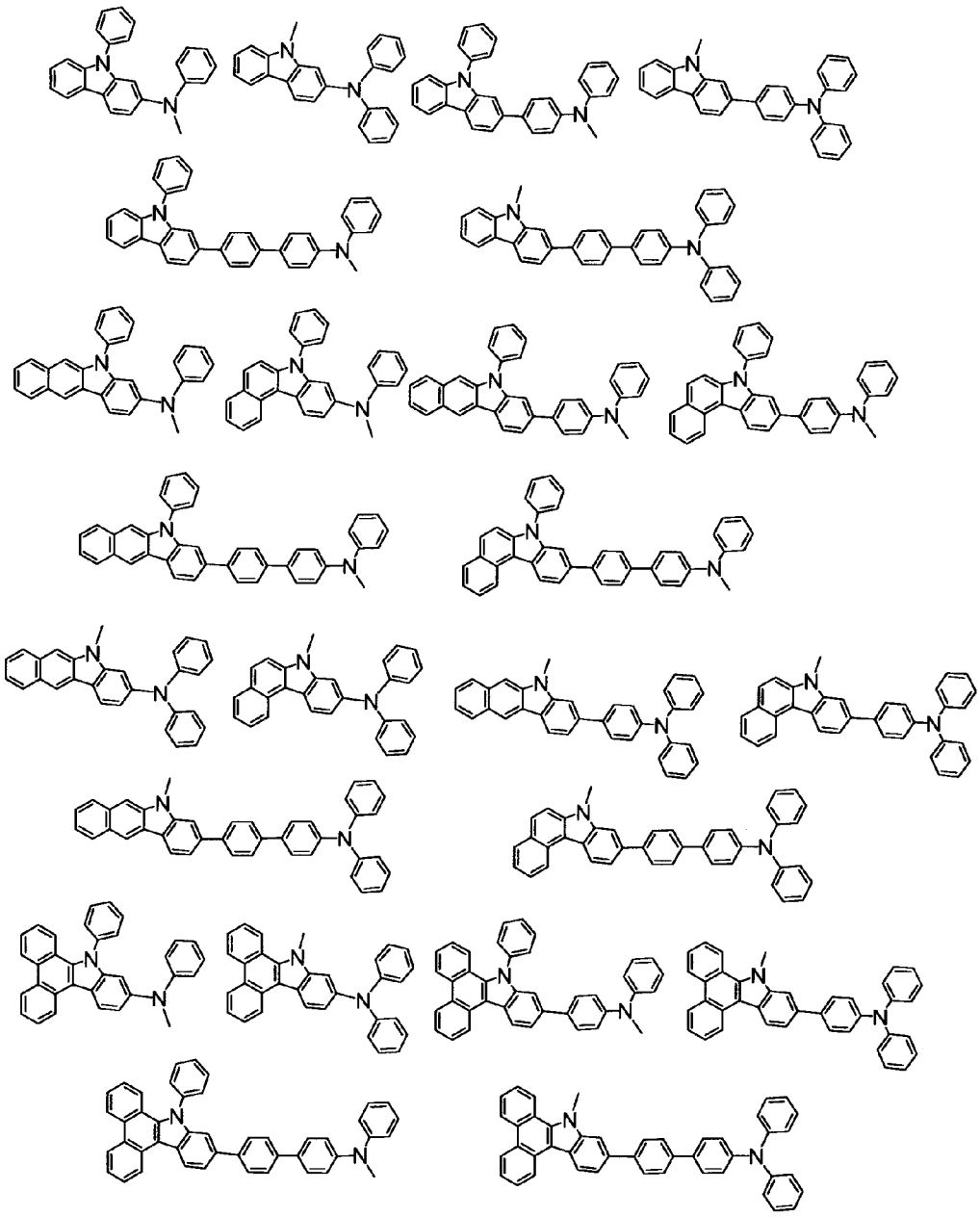


[0388] 一般式（1［III］）において、［ ］内の基としては、具体的には以下の基が例示され、以下の基から任意に選択することができる。

[化249]

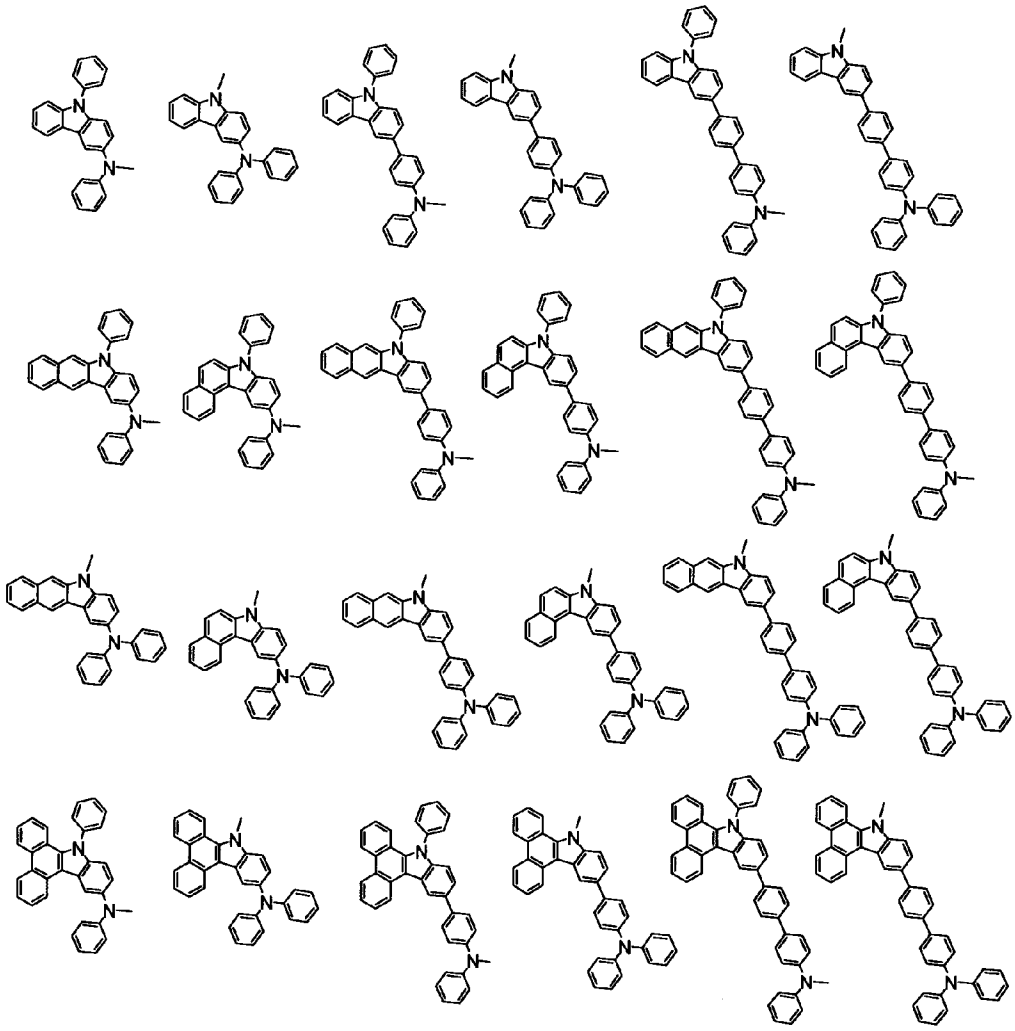


[0389] [化250]



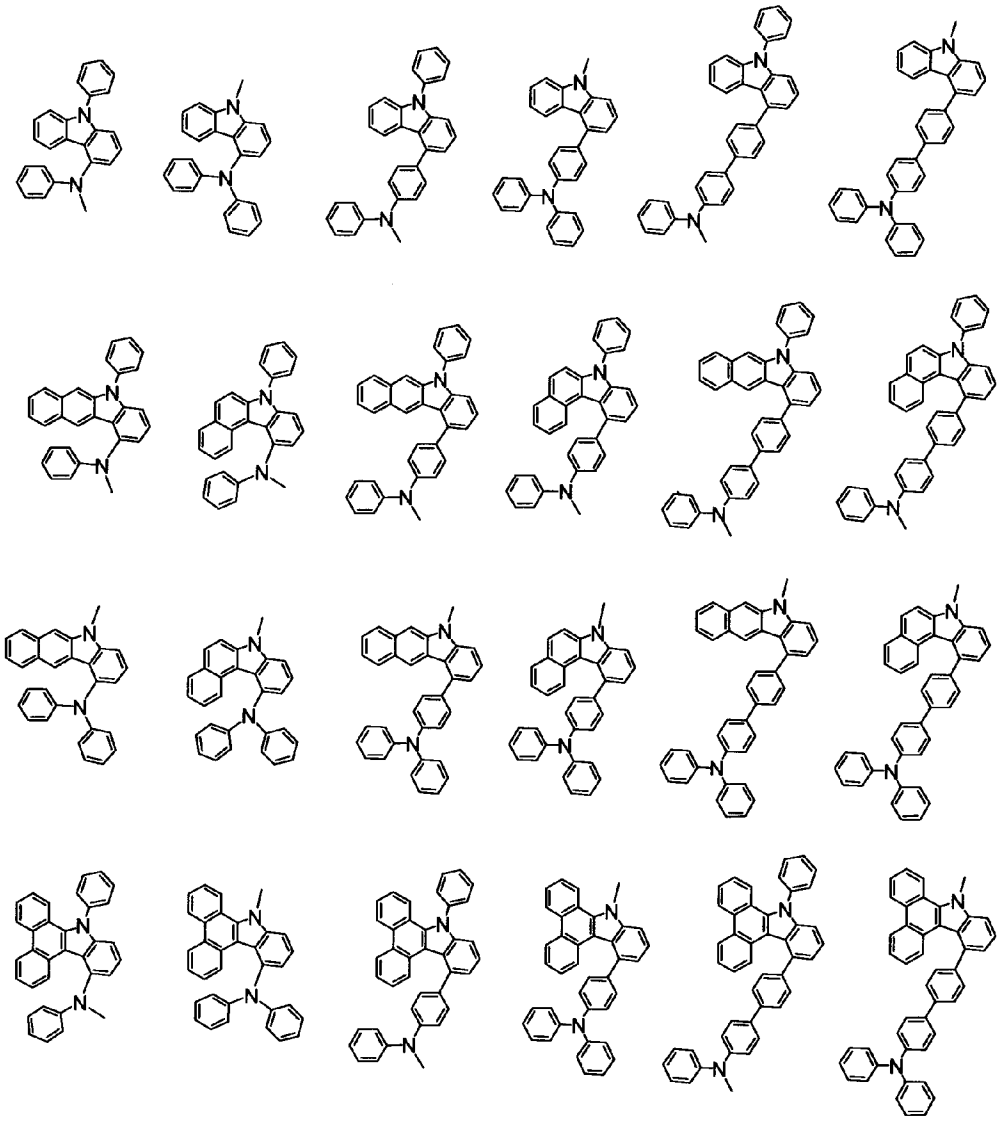
[0390]

[化251]



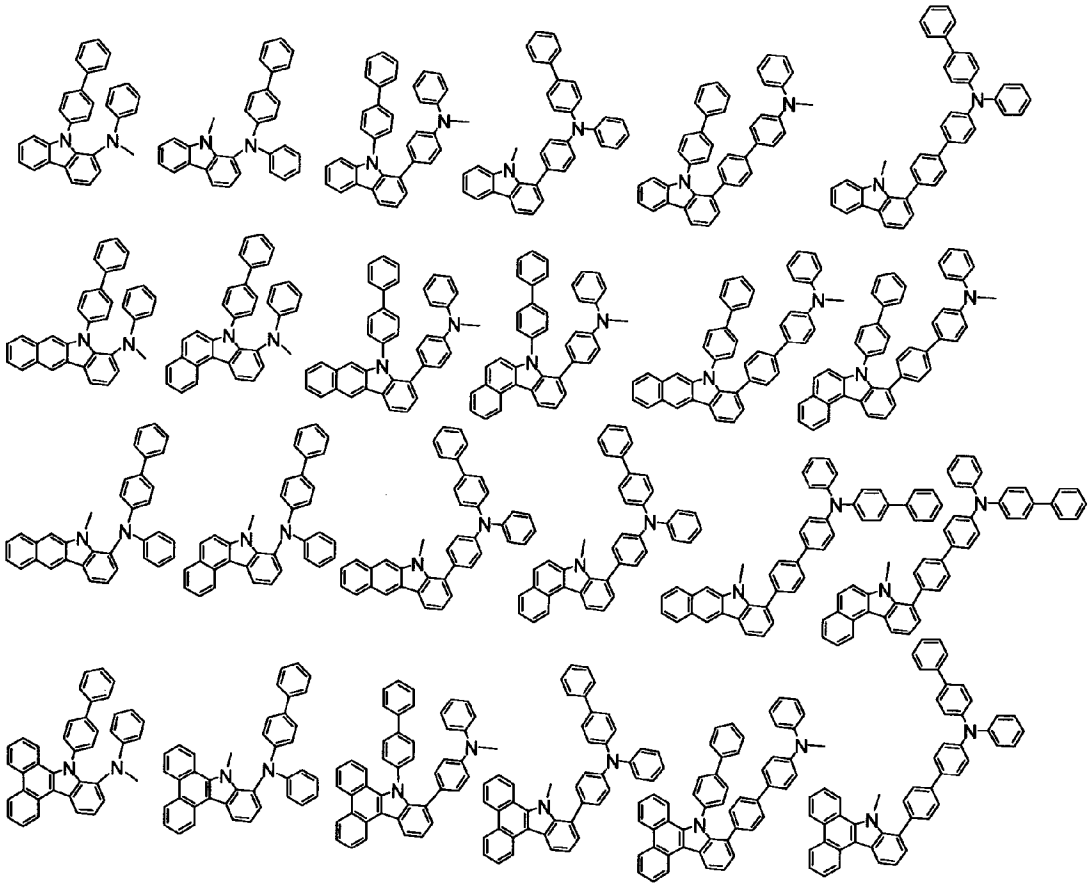
[0391]

[化252]



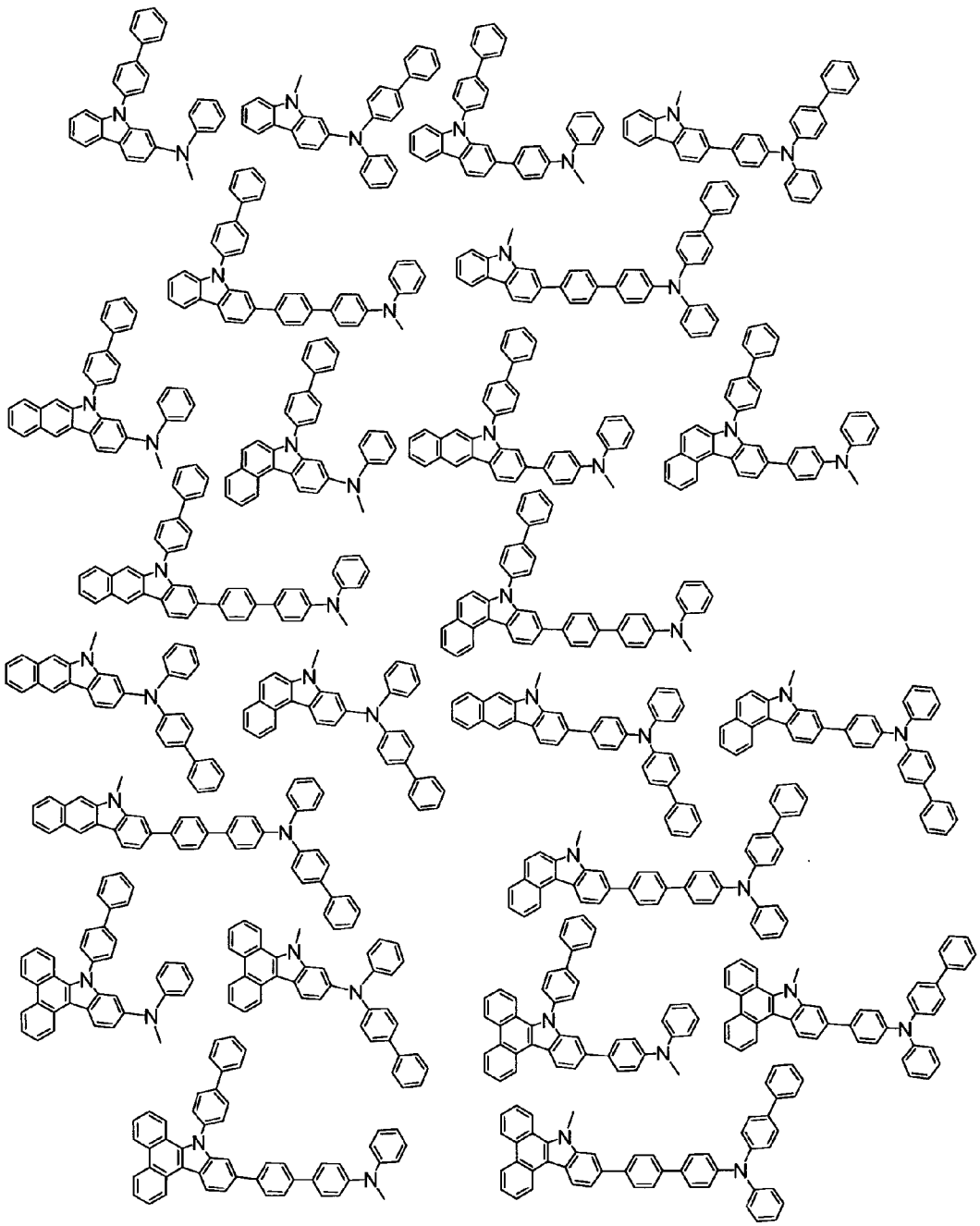
[0392]

[化253]



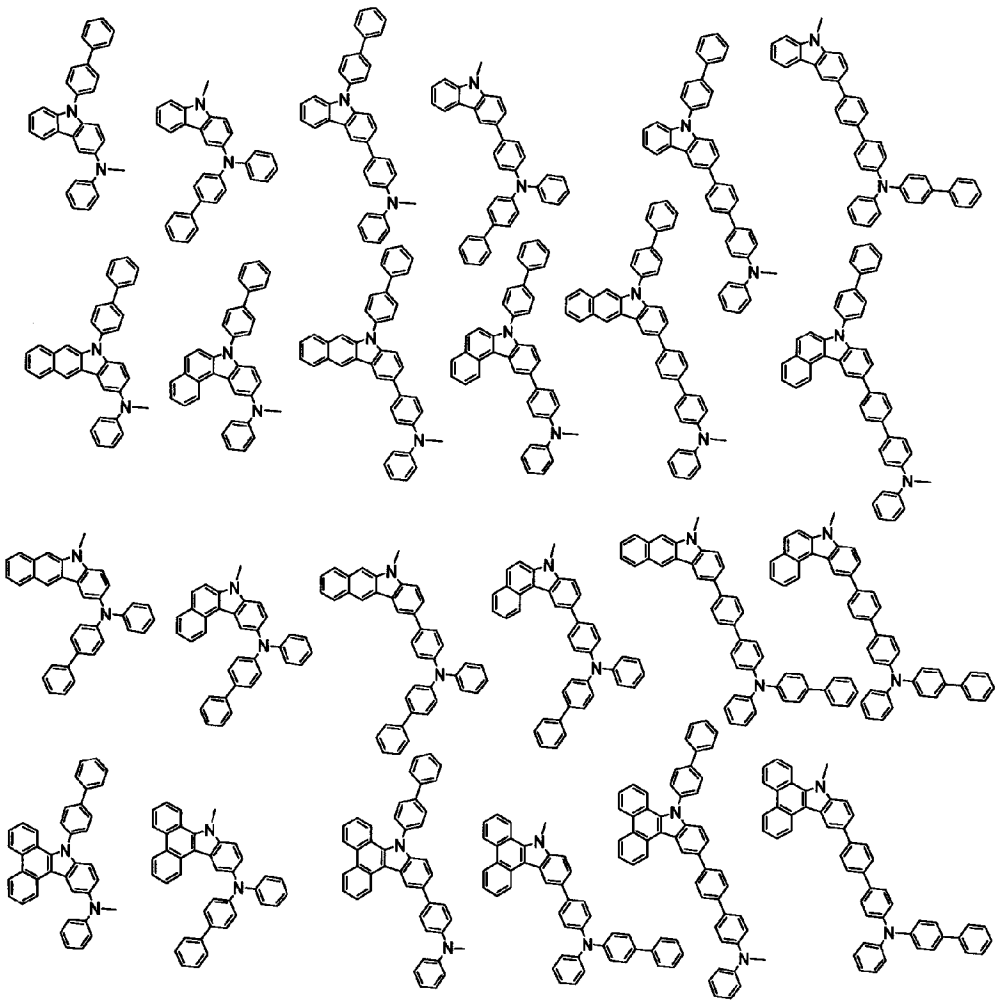
[0393]

[化254]



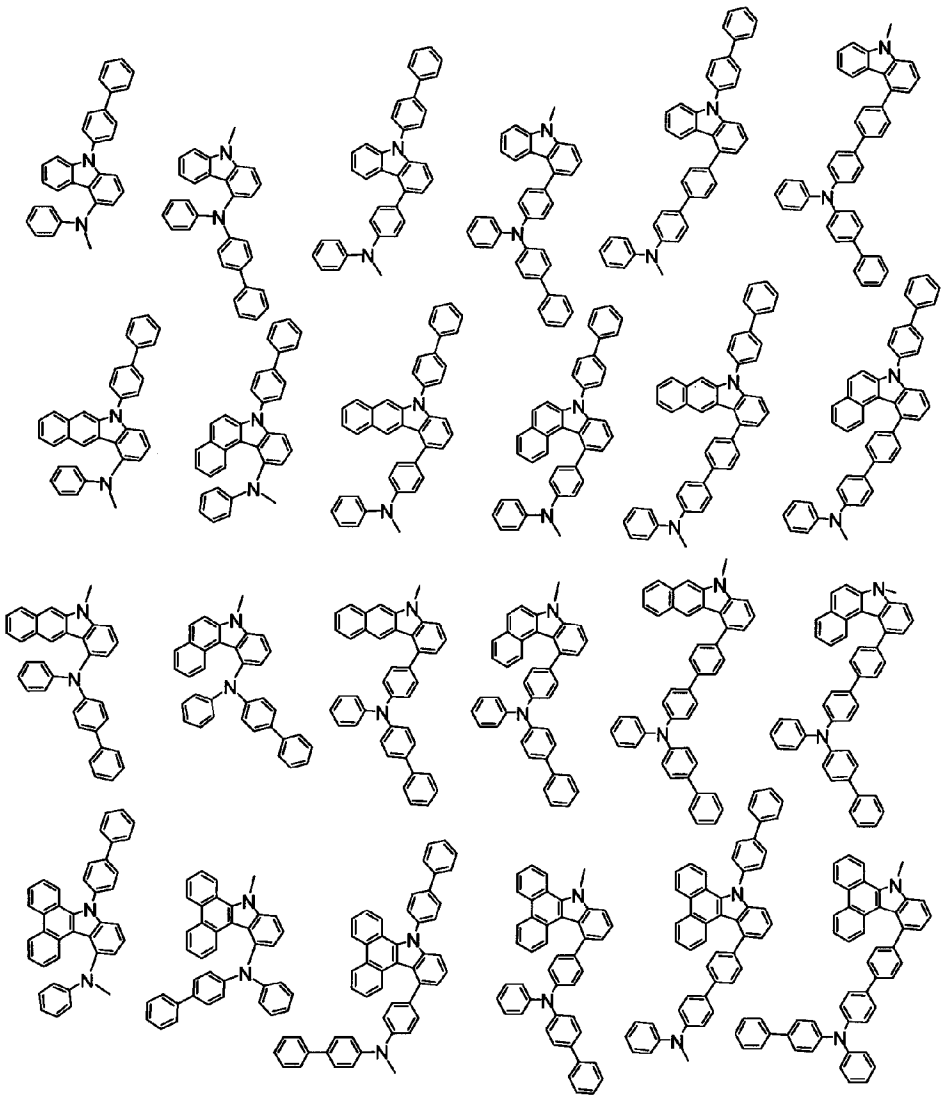
[0394]

[化255]



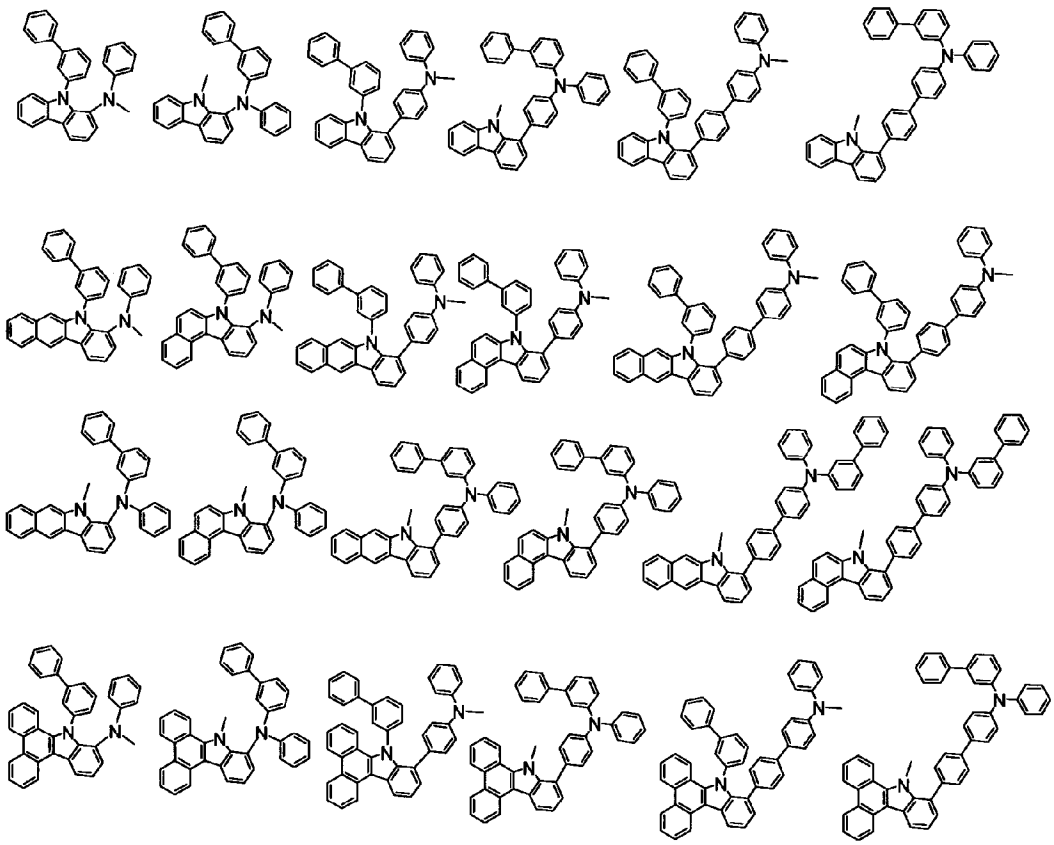
[0395]

[化256]



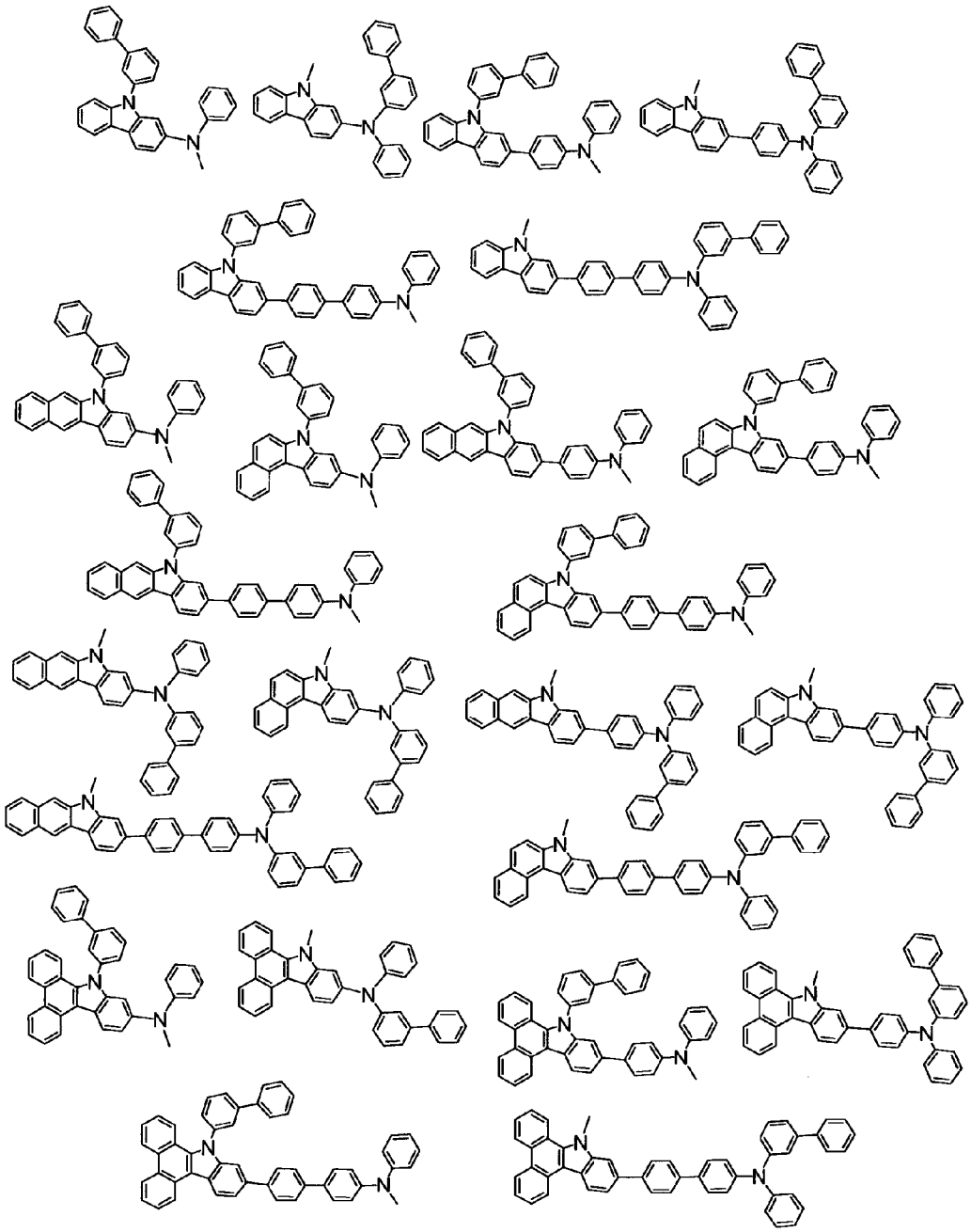
[0396]

[化257]



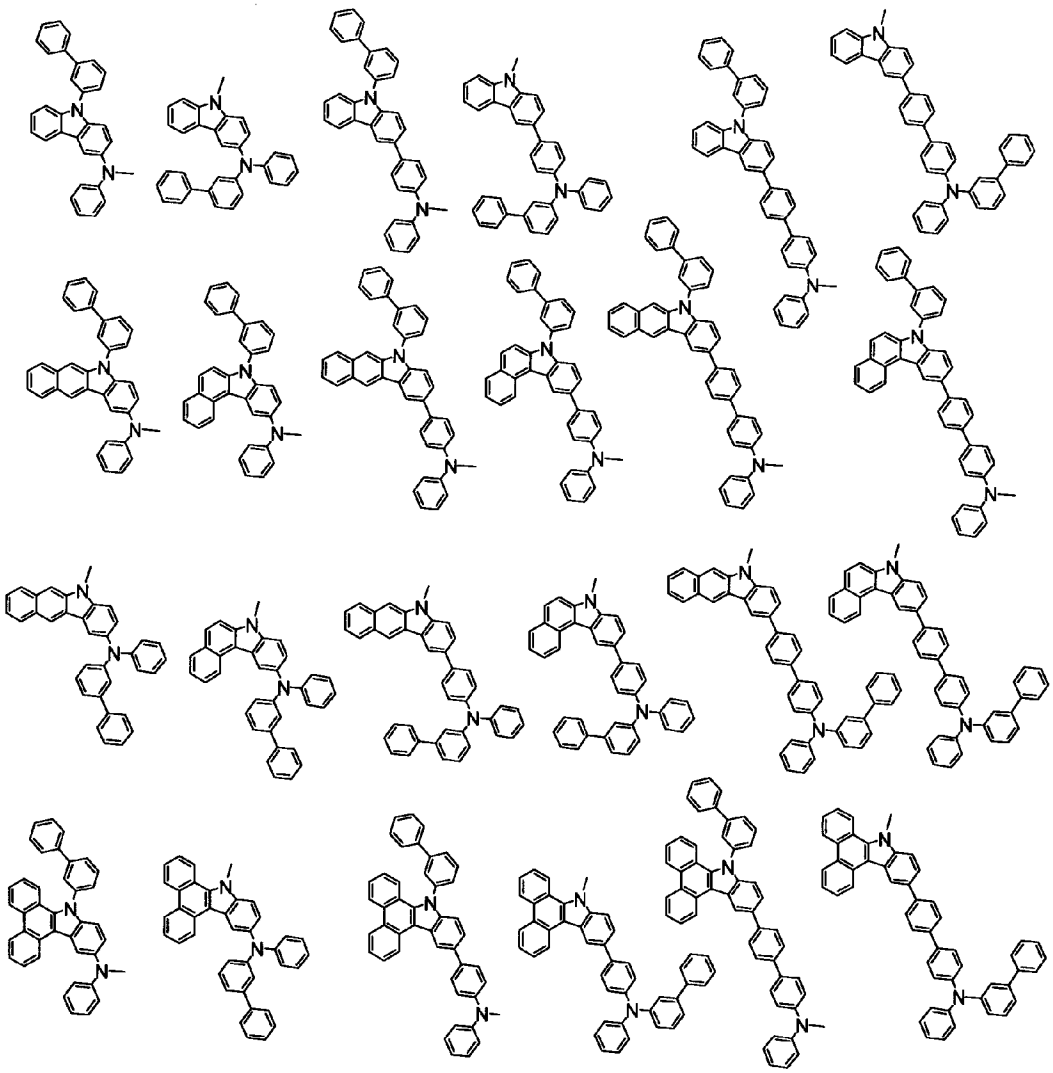
[0397]

[化258]



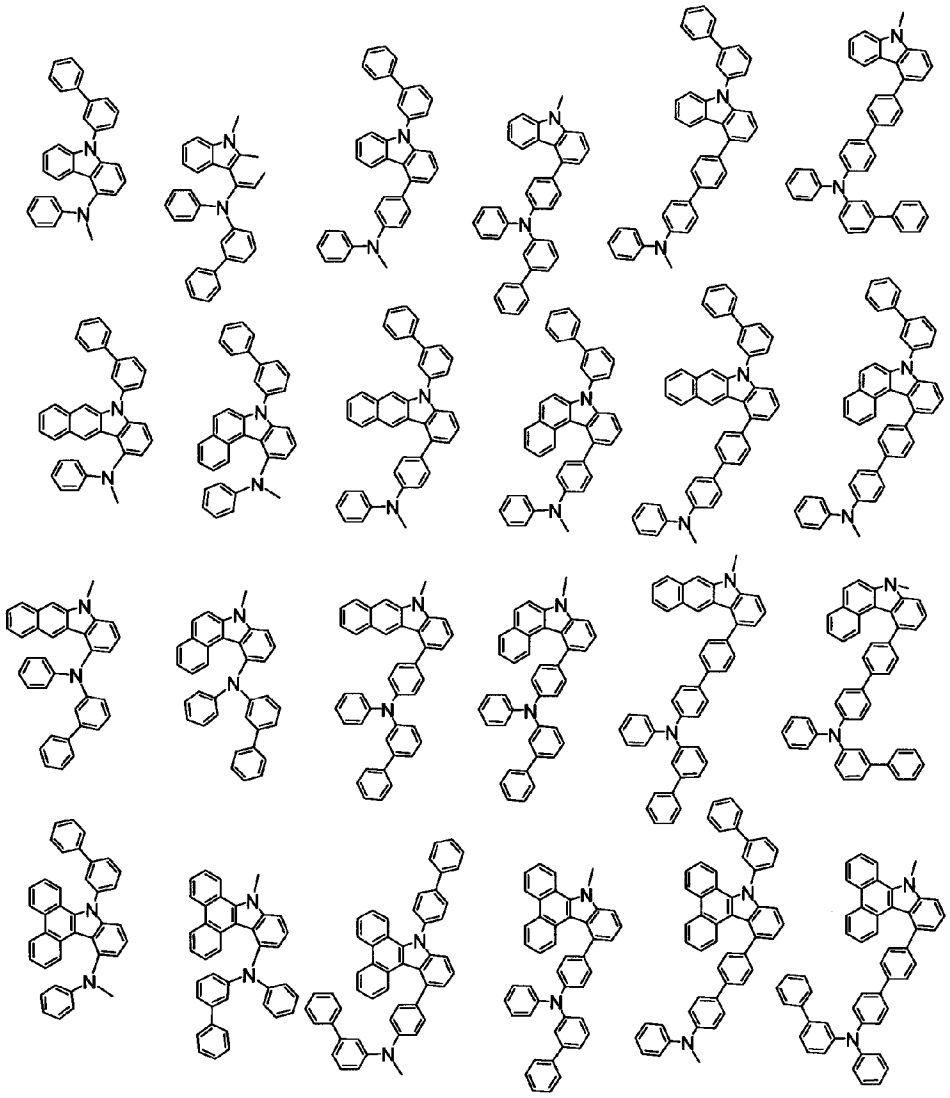
[0398]

[化259]



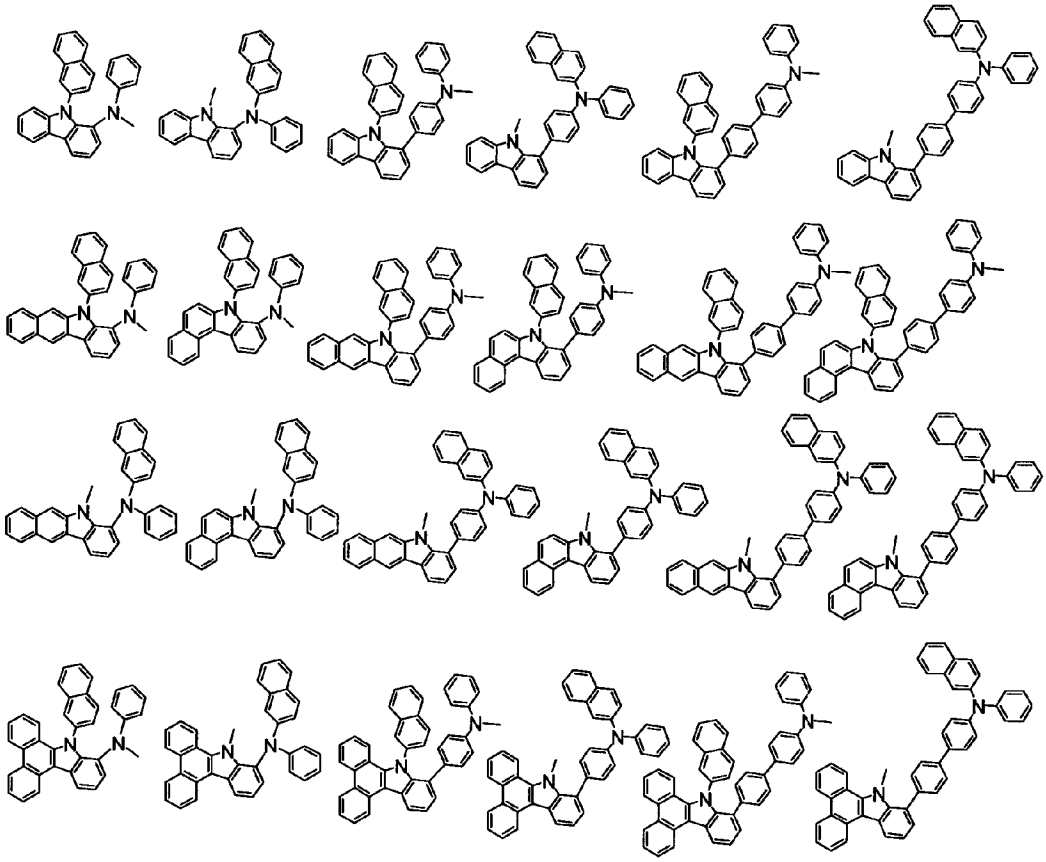
[0399]

[化260]



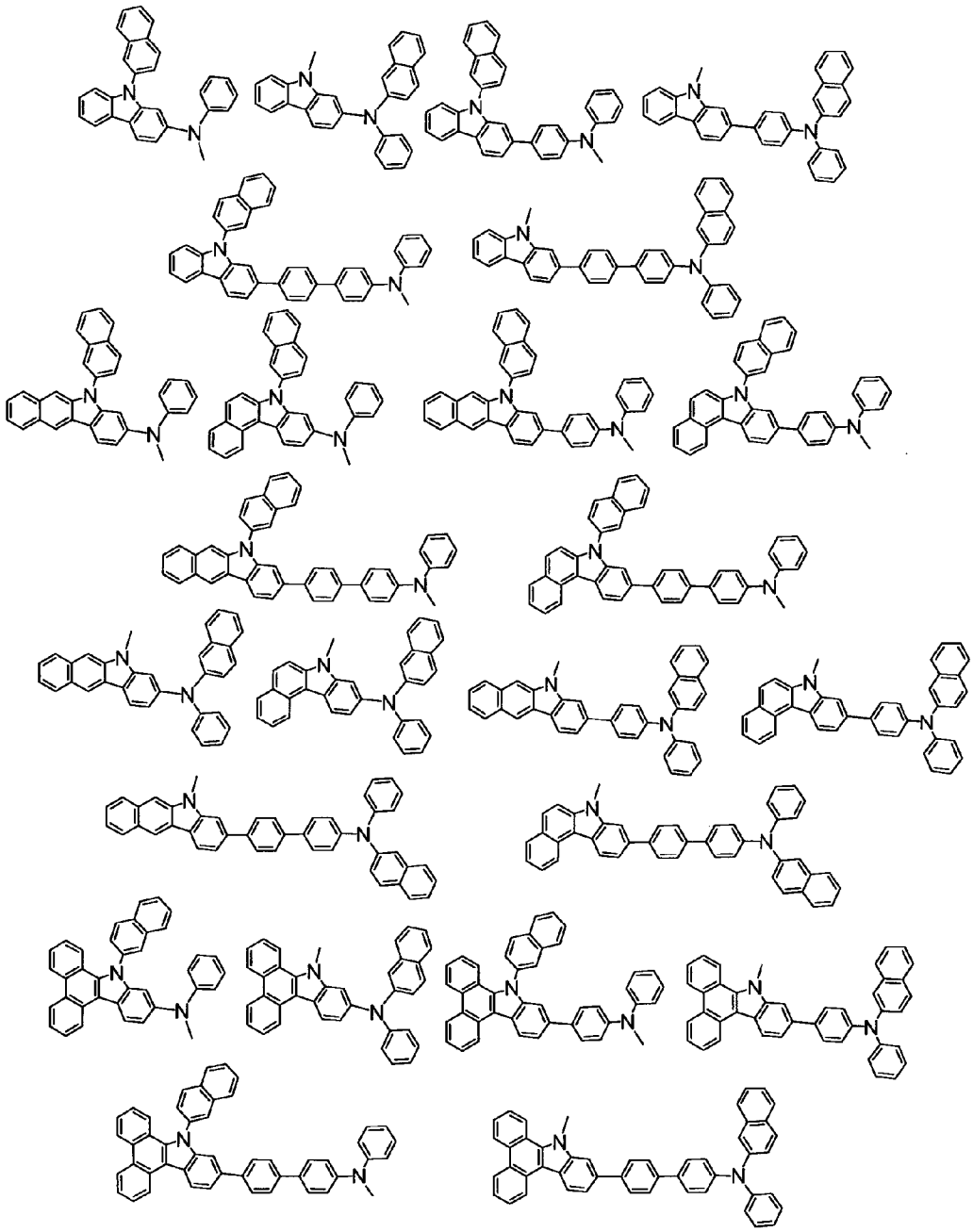
[0400]

[化261]



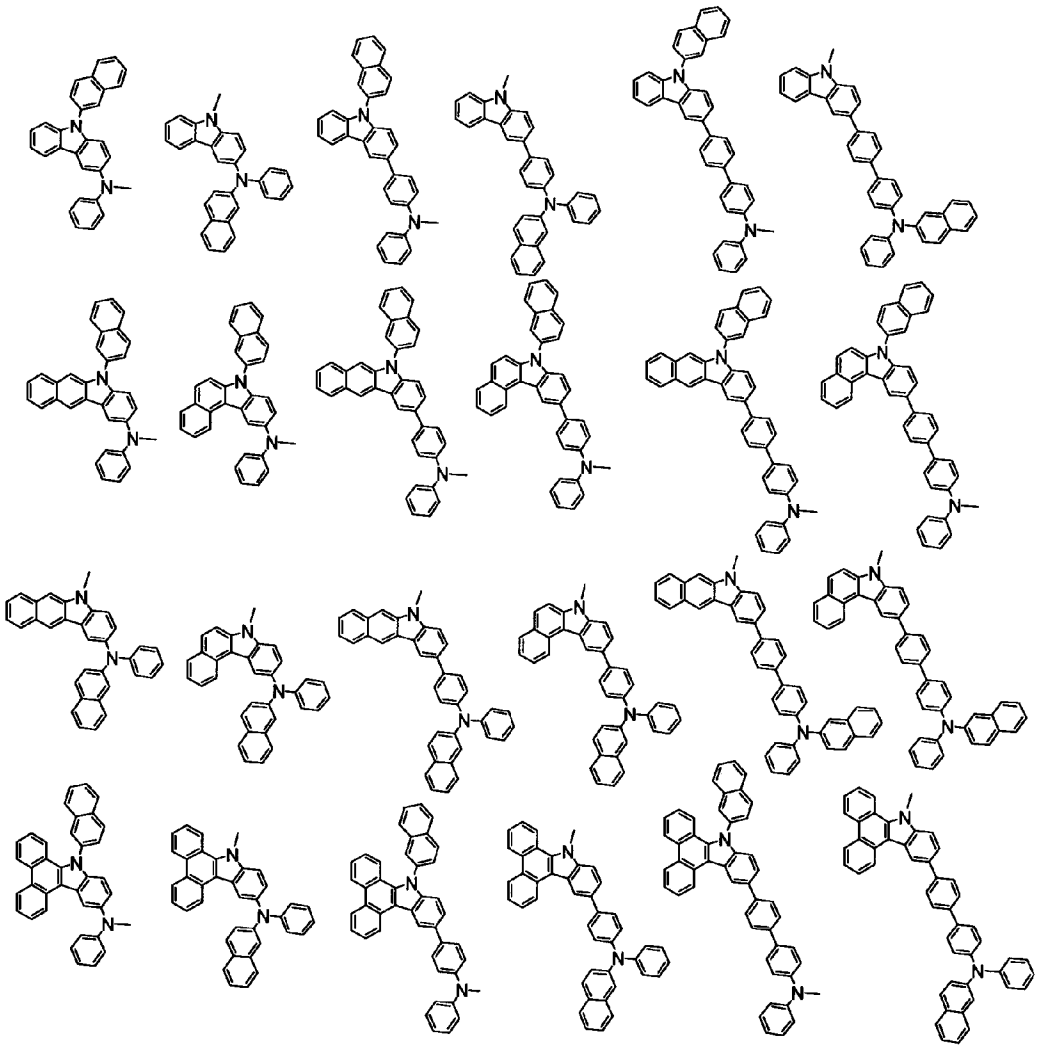
[0401]

[化262]



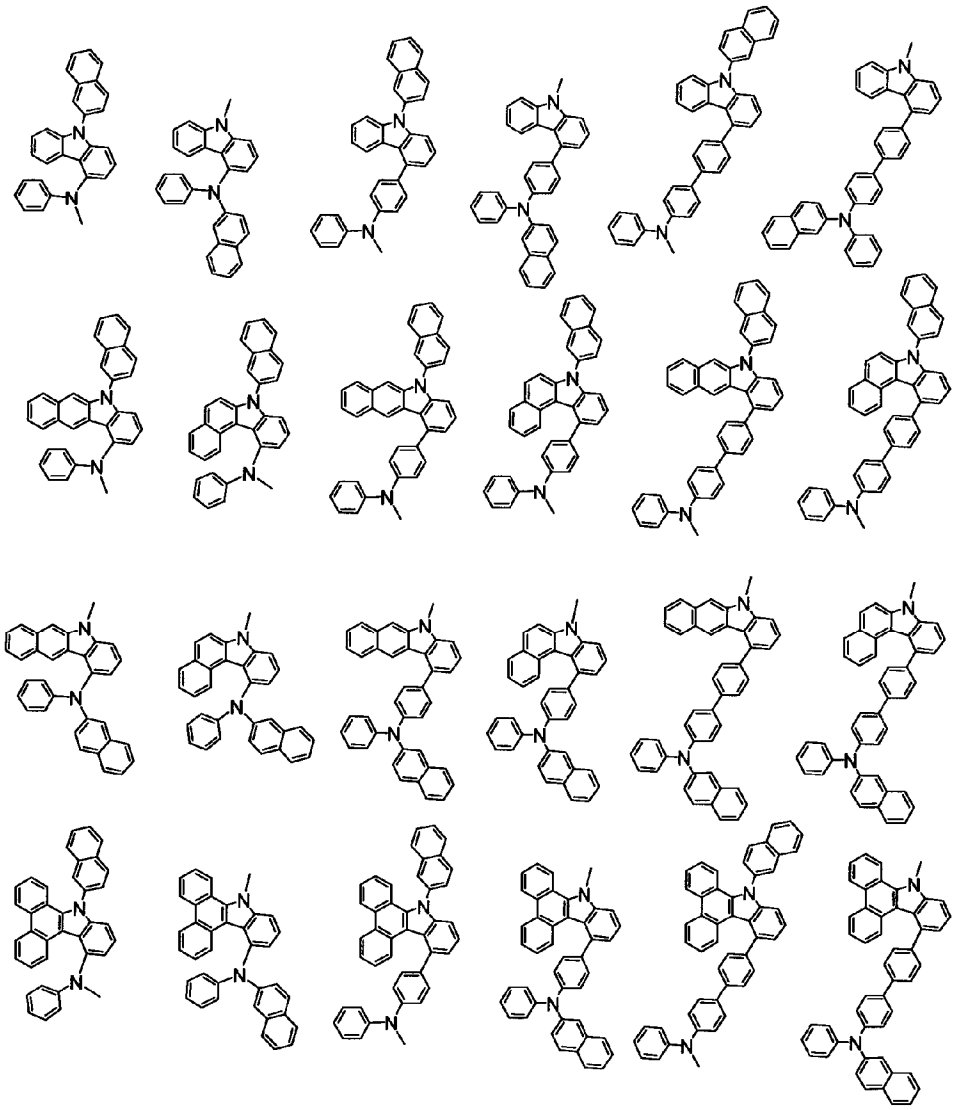
[0402]

[化263]



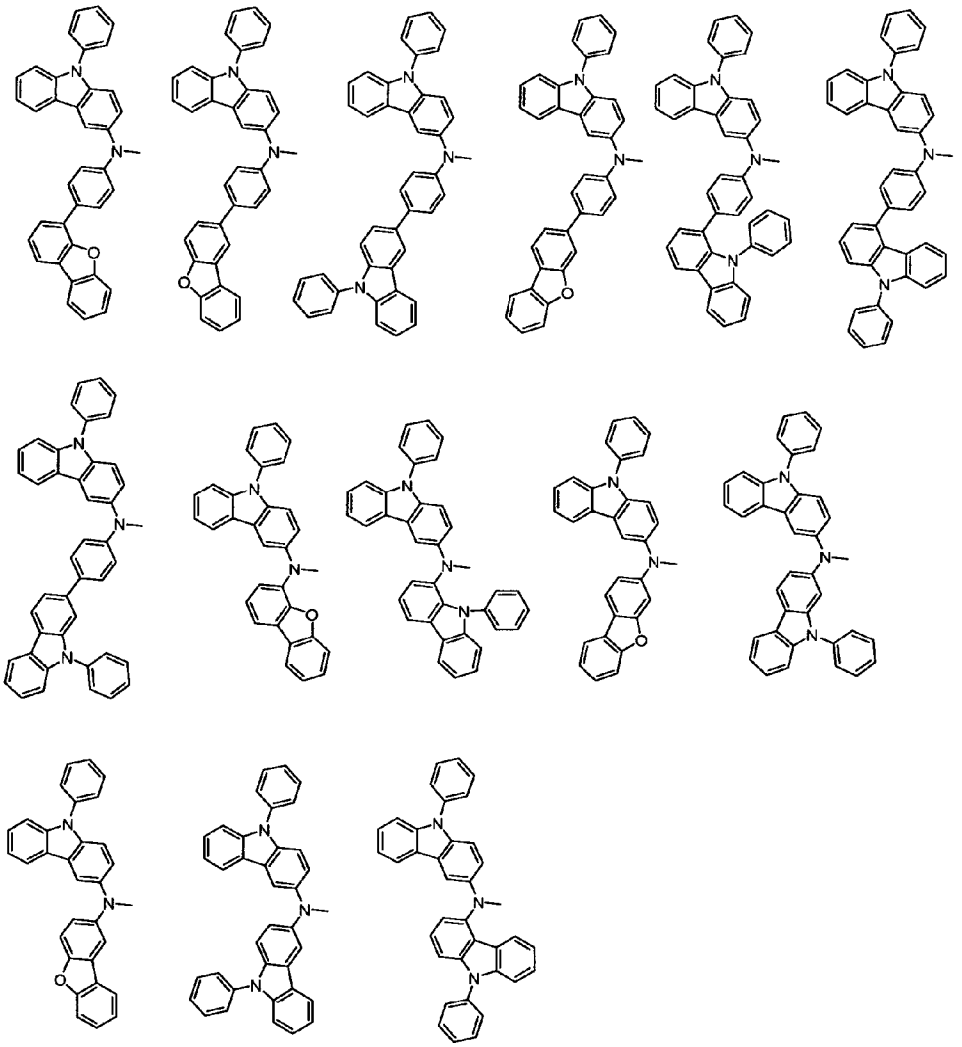
[0403]

[化264]



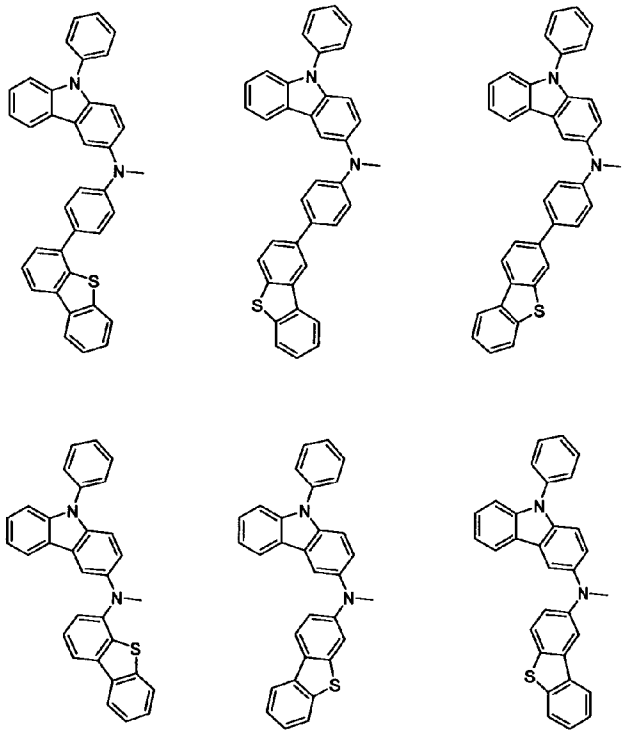
[0404]

[化265]



[0405]

[化266]

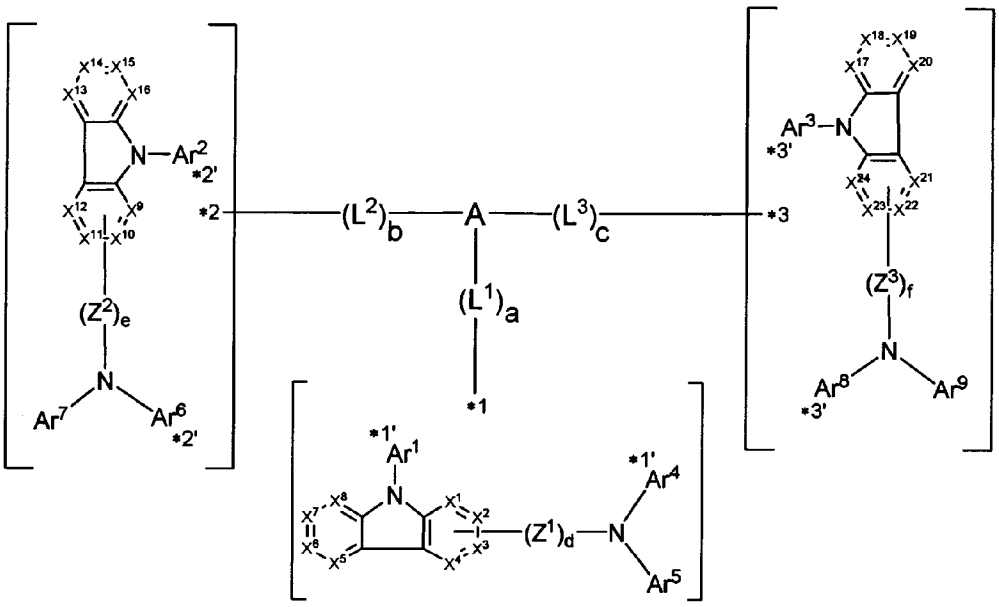


[0406] （化合物（１［III］）の中でも好ましい化合物の一般式）

本発明の化合物（１［III］）の中でも好ましい化合物の一般式を以下に列挙する。なお、各基の定義は一般式（１［III］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。

[0407]

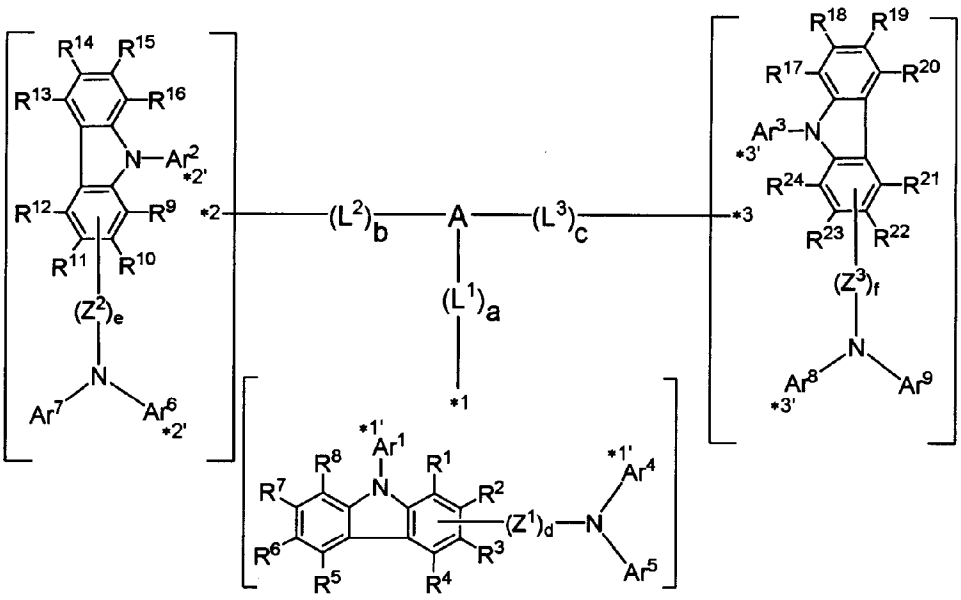
[化267]



(1a[III])

（一般式（１ａ［III］）中、Ａ、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}、ａ～ｆ、Ｘ^{1}～Ｘ^{24}、Ａｒ^{1}～Ａｒ^{9}、Ｚ^{1}～Ｚ^{3}、＊１～＊３、＊１’～＊３’は、一般式（１［III］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。）

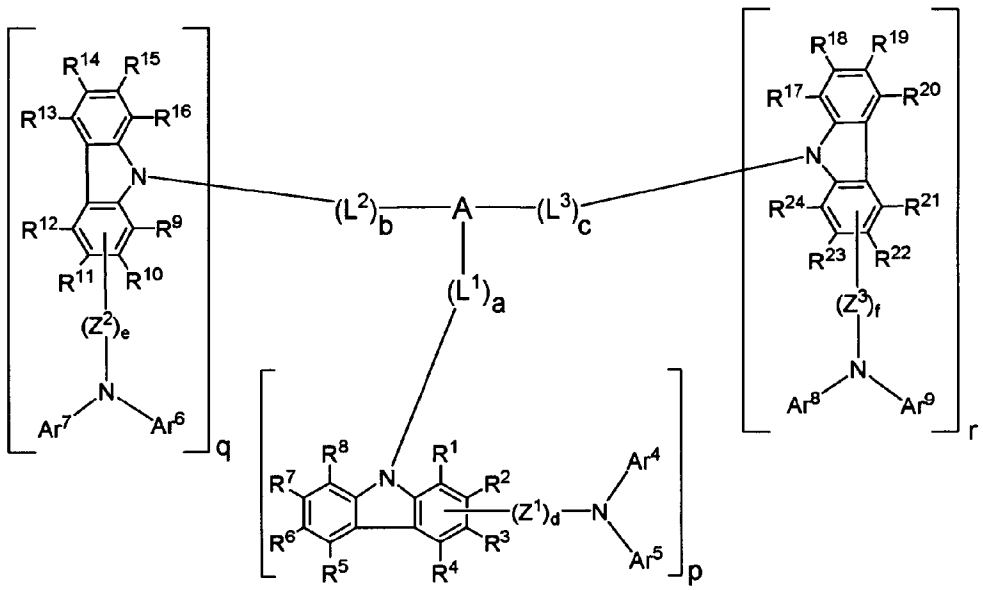
[0408] [化268]



(1a'[III])

（一般式（１ａ’［III］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｆ、Ｒ[1]～Ｒ[24]、Ａｒ[1]～Ａｒ[9]、Ｚ[1]～Ｚ[3]、＊１～＊３、＊１’～＊３’は、一般式（１［III］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。）

[0409] [化269]

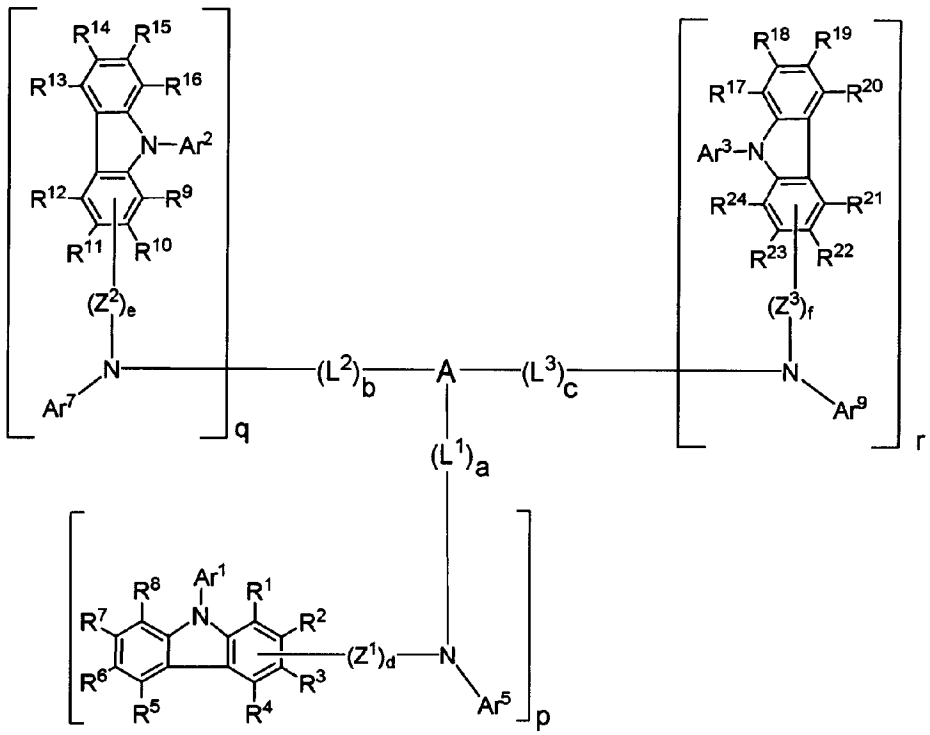


(2'[III])

（一般式（２’［III］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｆ、ｐ～ｒ、Ｒ[1]～Ｒ[24]、Ａｒ[4]～Ａｒ[9]、Ｚ[1]～Ｚ[3]は、一般式（１［III］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。）

[0410]

[化270]

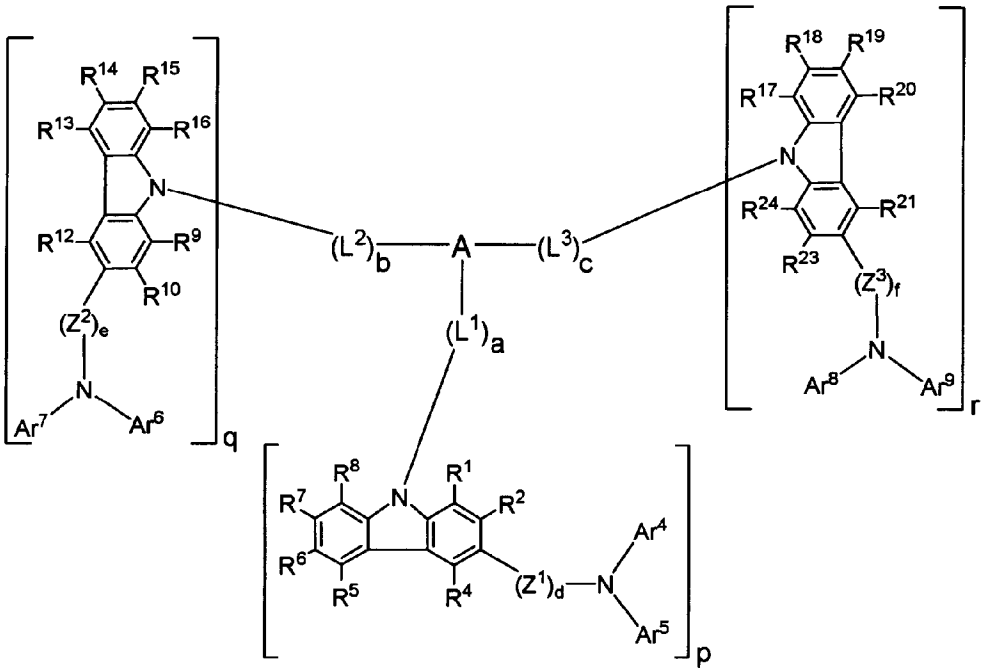


(3'[III])

（一般式（３’［III］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｆ、ｐ～ｒ、Ｒ[1]～Ｒ[24]、Ａｒ[1]～Ａｒ[3]、Ａｒ[5]、Ａｒ[7]、Ａｒ[9]、Ｚ[1]～Ｚ[3]は、一般式（１［III］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。）

[0411]

[化271]

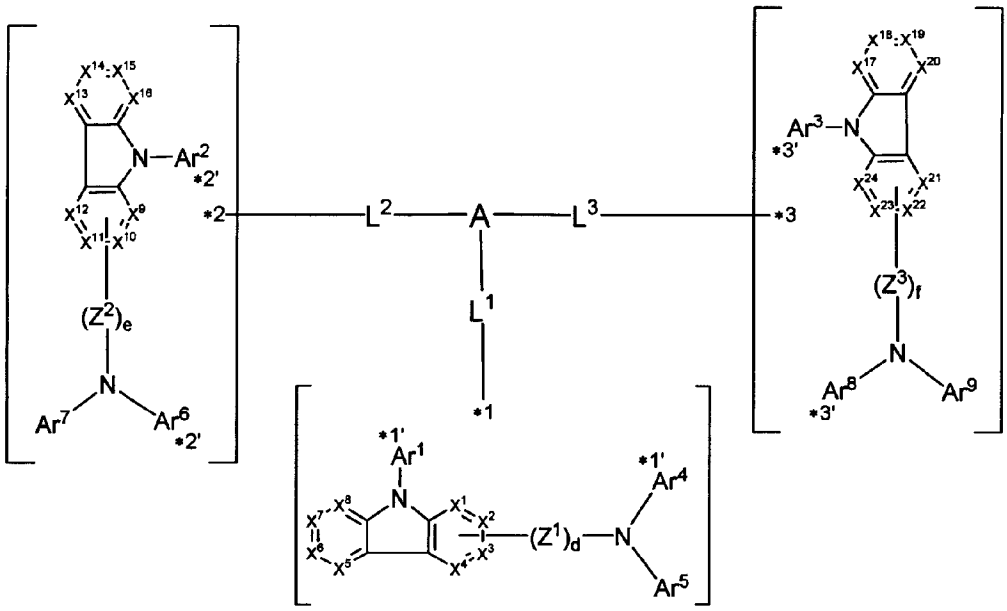


(2-1[III])

（一般式（２－１［III］）中、Ａ、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}、ａ～ｆ、ｐ～ｒ、Ｒ^{1}、Ｒ^{2}、Ｒ^{4}～Ｒ^{10}、Ｒ^{12}～Ｒ^{21}、Ｒ^{23}、Ｒ^{24}、Ａｒ^{4}～Ａｒ^{9}、Ｚ^{1}～Ｚ^{3}は、一般式（１［III］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。）

[0412]

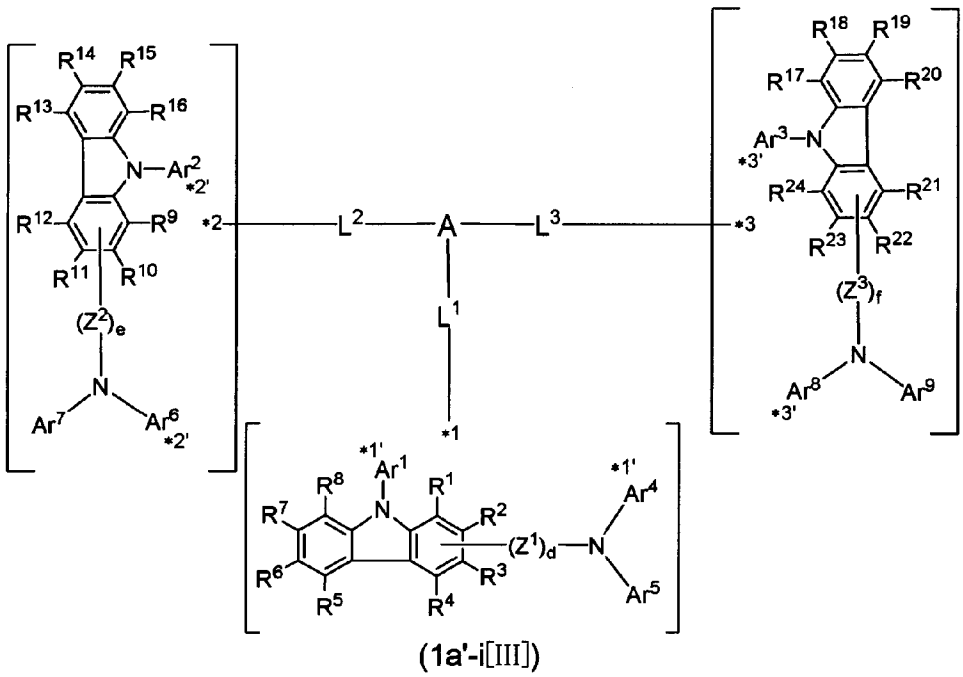
[化272]



(1a-i[III])

（一般式（１ａ－ｉ［III］）中、Ａ、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}、ｄ～ｆ、Ｘ^{1}～Ｘ^{24}、Ａｒ^{1}～Ａｒ^{9}、Ｚ^{1}～Ｚ^{3}、＊１～＊３、＊１’～＊３’は、一般式（１［III］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。）

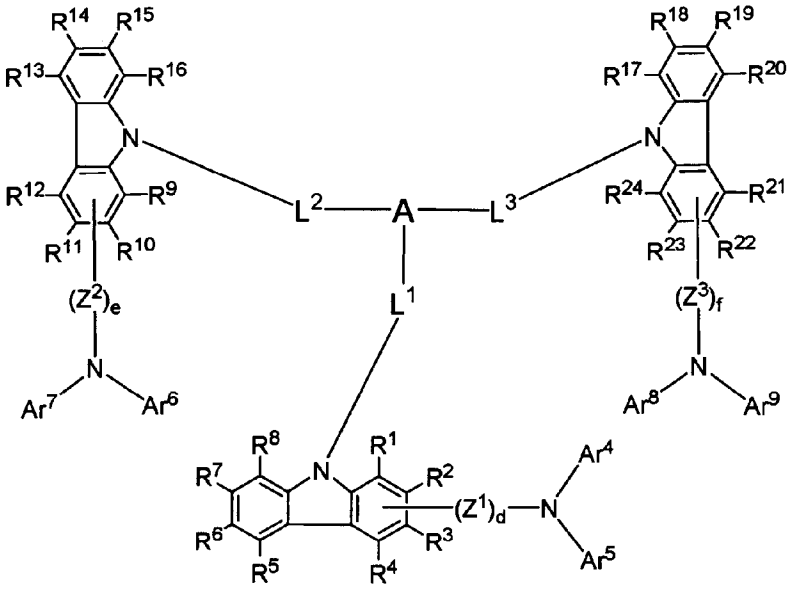
[0413] [化273]



(1a'-i[III])

（一般式（１ａ’－ｉ［III］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ｄ～ｆ、Ｒ[1]～Ｒ[24]、Ａｒ[1]～Ａｒ[9]、Ｚ[1]～Ｚ[3]、＊１～＊３、＊１’～＊３’は、一般式（１［III］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。）

[0414] [化274]

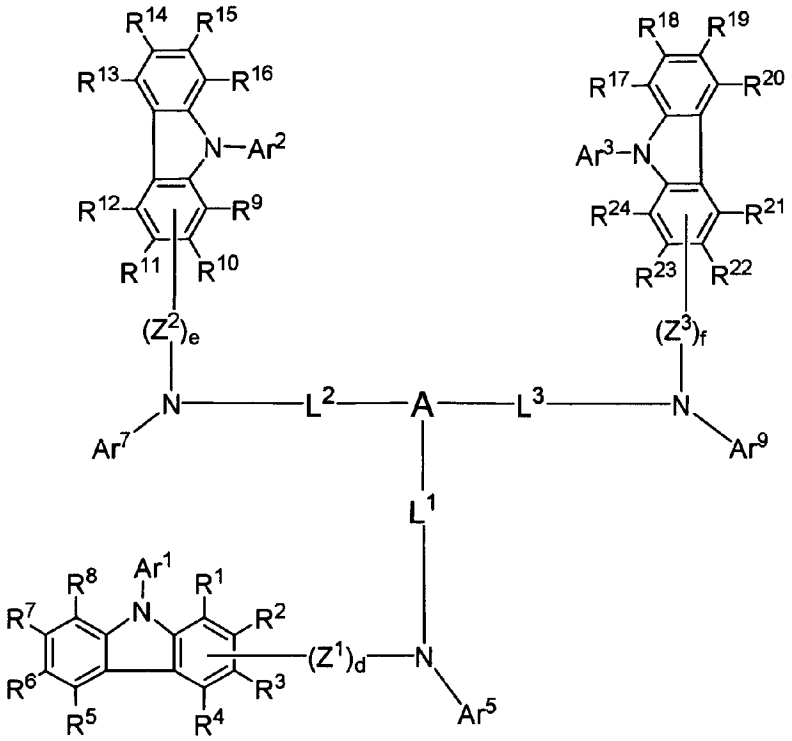


(2a'-i[III])

（一般式（２ａ’－ｉ［III］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ｄ～ｆ、Ｒ[1]～Ｒ[24]、Ａｒ[4]～Ａｒ[9]、Ｚ[1]～Ｚ[3]は、一般式（１［III］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。）

[0415]

[化275]

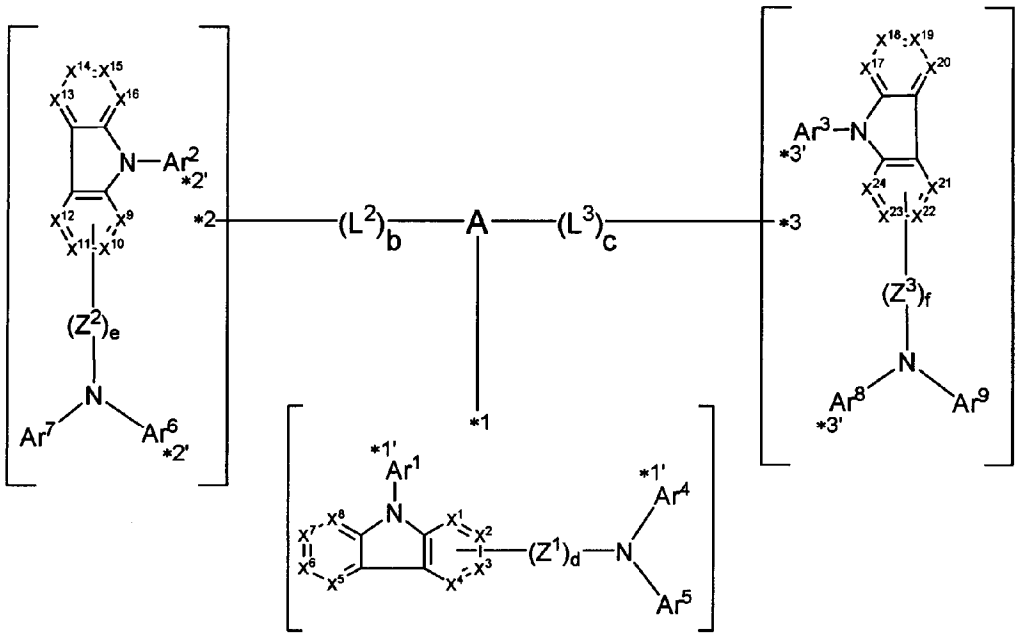


(3a'-i[III])

（一般式（３ａ’－ｉ［III］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ｄ～ｆ、Ｒ[1]～Ｒ[24]、Ａｒ[1]～Ａｒ[3]、Ａｒ[5]、Ａｒ[7]、Ａｒ[9]、Ｚ[1]～Ｚ[3]は、一般式（１［III］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。）

[0416]

[化276]

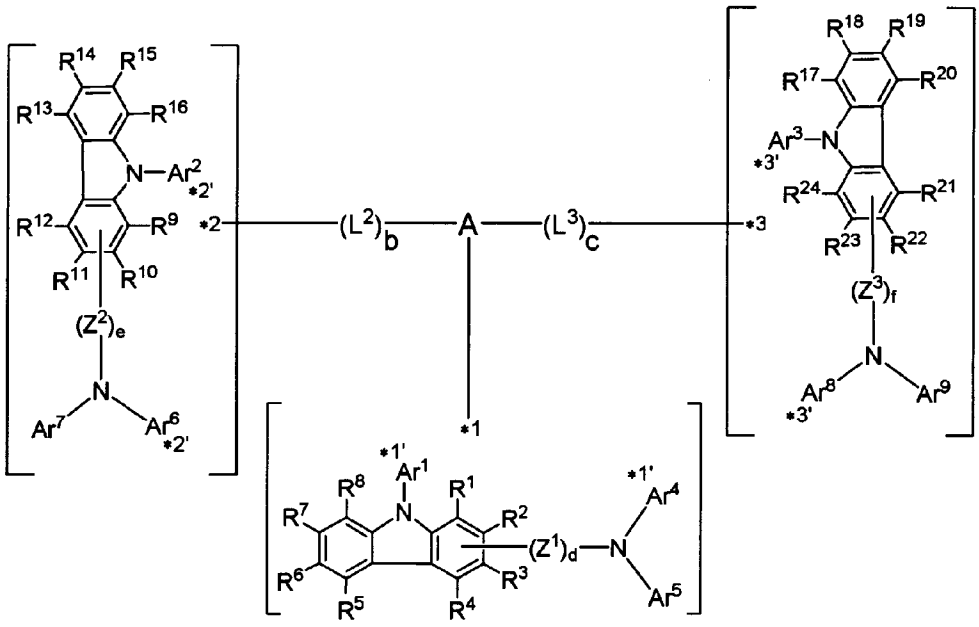


(1a-ii[III])

（一般式（１ａ－ｉｉ［III］）中、Ａ、Ｌ^{2}、Ｌ^{3}、ｂ～ｆ、Ｘ^{1}～Ｘ^{24}、Ａｒ^{1}～Ａｒ^{9}、Ｚ^{1}～Ｚ^{3}、＊１～＊３、＊１’～＊３’は、一般式（１［III］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。）

[0417]

[化277]

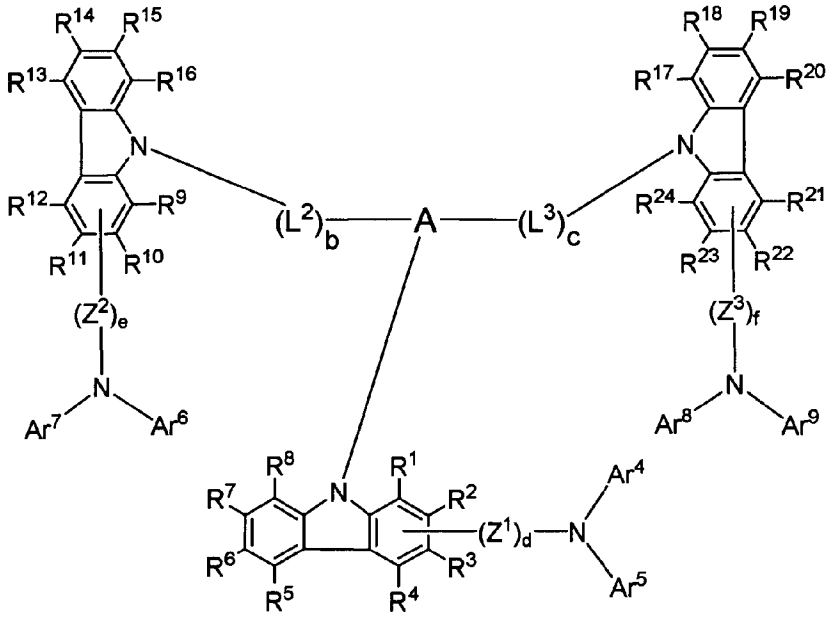


(1a'-ii[III])

（一般式（１ａ’－ｉｉ［III］）中、Ａ、Ｌ^{2}、Ｌ^{3}、ｂ～ｆ、Ｒ^{1}～Ｒ^{24}、Ａｒ^{1}～Ａｒ^{9}、Ｚ^{1}～Ｚ^{3}、＊１～＊３、＊１’～＊３’は、一般式（１［III］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。）

[0418]

[化278]

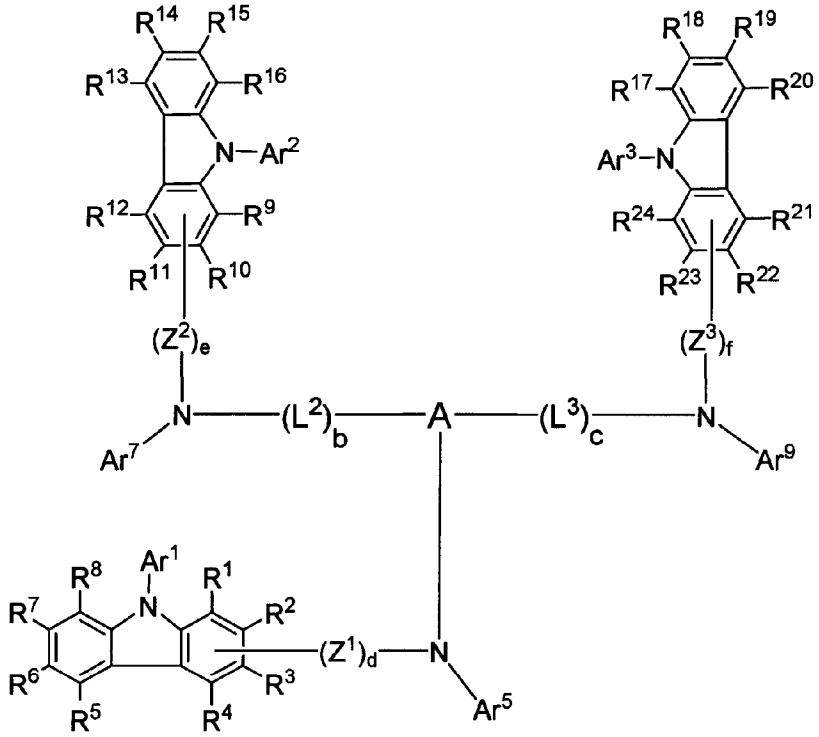


(2a'-ii[III])

（一般式（２ａ’－ｉｉ［III］）中、Ａ、Ｌ^{2}、Ｌ^{3}、ｂ～ｆ、Ｒ^{1}～Ｒ^{24}、Ａｒ^{4}～Ａｒ^{9}、Ｚ^{1}～Ｚ^{3}は、一般式（１［III］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。）

[0419]

[化279]

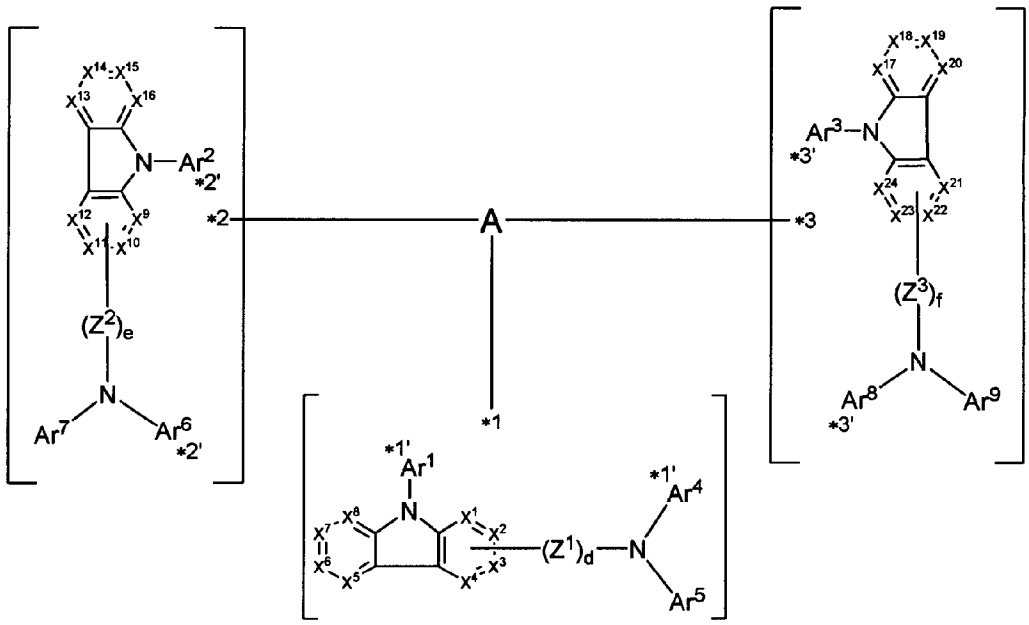


(3a'-ii[III])

（一般式（３ａ’－ｉｉ［III］）中、Ａ、Ｌ^{2}、Ｌ^{3}、ｂ～ｆ、Ｒ^{1}～Ｒ^{24}、Ａｒ^{1}～Ａｒ^{3}、Ａｒ^{5}、Ａｒ^{7}、Ａｒ^{9}、Ｚ^{1}～Ｚ^{3}は、一般式（１［III］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。）

[0420]

[化280]

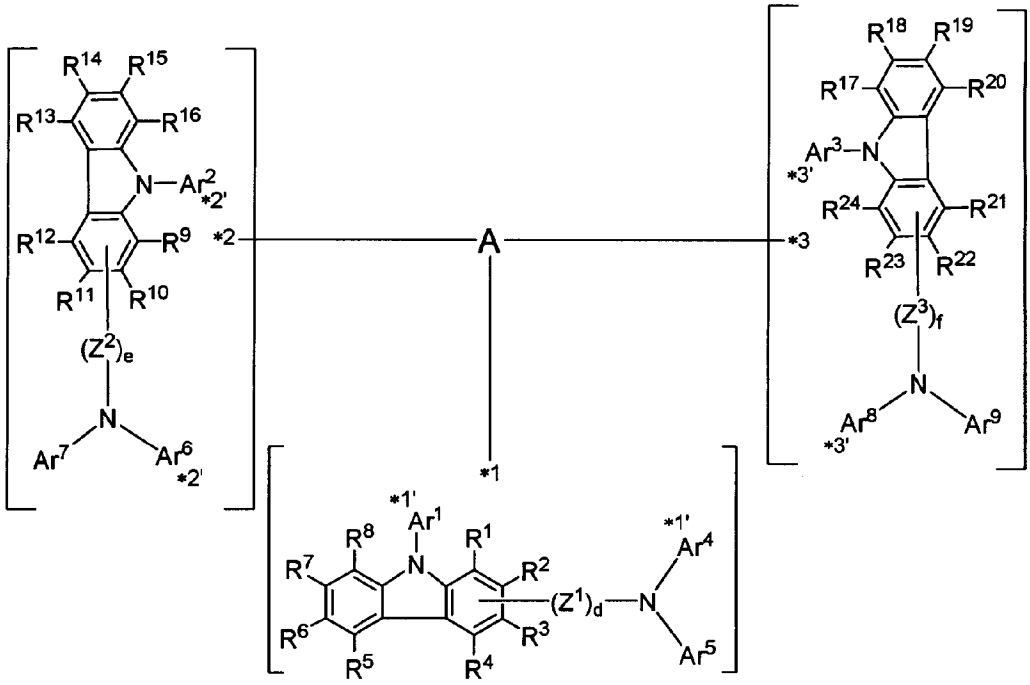


(1a-iii[III])

（一般式（１ａ－ｉｉｉ［III］）中、Ａ、ｄ～ｆ、Ｘ^{1}～Ｘ^{24}、Ａｒ^{1}～Ａｒ^{9}、Ｚ^{1}～Ｚ^{3}、＊１～＊３、＊１’～＊３’は、一般式（１［III］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。）

[0421]

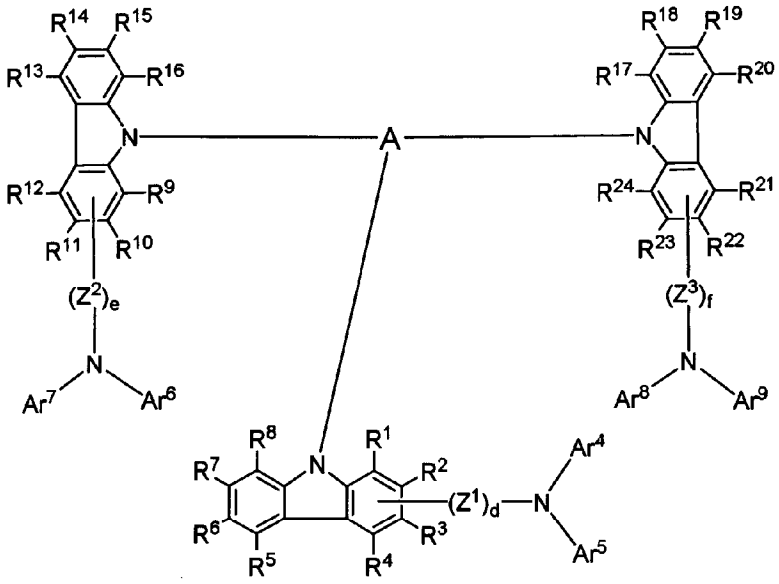
[化281]



(1a'-iii[III])

（一般式（１ａ’－ｉｉｉ［III］）中、Ａ、ｄ～ｆ、Ｒ１～Ｒ２４、Ａｒ１～Ａｒ９、Ｚ１～Ｚ３、＊１～＊３、＊１’～＊３’は、一般式（１［III］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。）

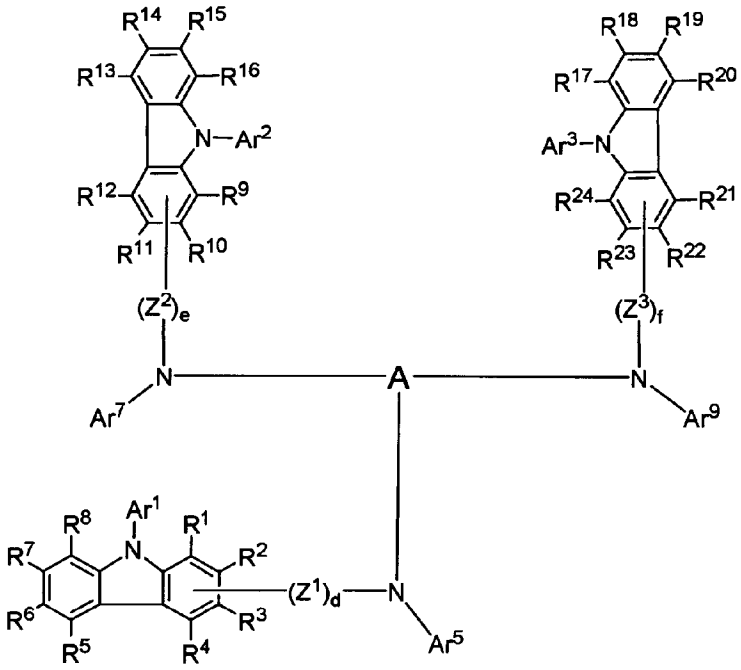
[0422] [化282]



(2a'-iii[III])

（一般式（２ａ’－ｉｉｉ［III］）中、Ａ、ｄ～ｆ、Ｒ[1]～Ｒ[24]、Ａｒ[4]～Ａｒ[9]、Ｚ[1]～Ｚ[3]は、一般式（１［III］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。）

[0423] [化283]

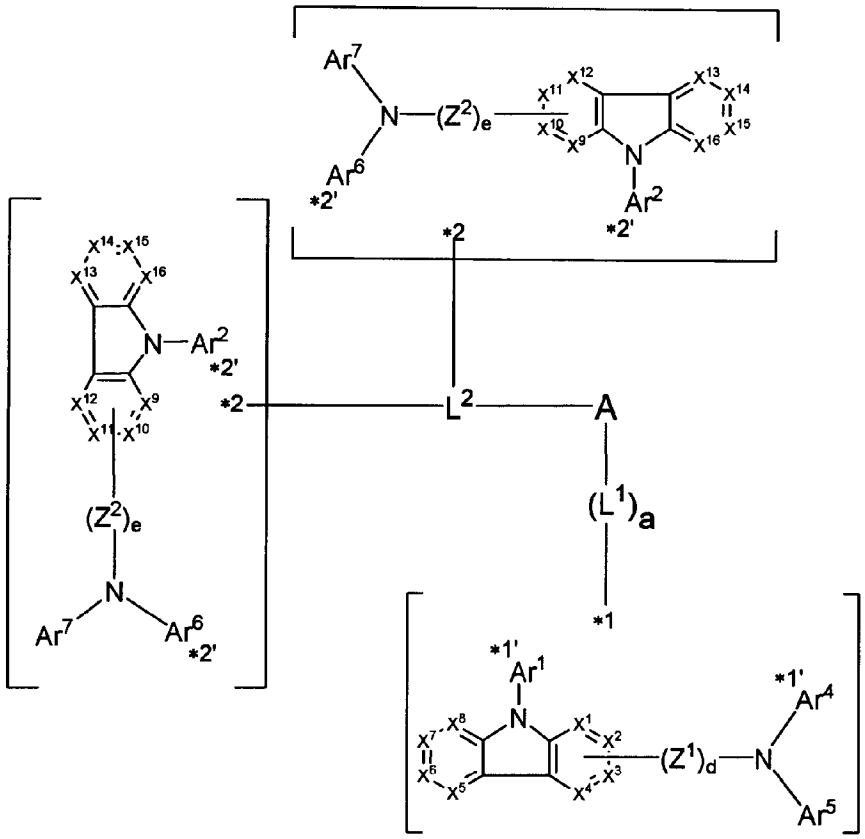


(3a'-iii[III])

（一般式（３ａ’－ｉｉｉ［III］）中、Ａ、ｄ～ｆ、Ｒ[1]～Ｒ[24]、Ａｒ[1]～Ａｒ[3]、Ａｒ[5]、Ａｒ[7]、Ａｒ[9]、Ｚ[1]～Ｚ[3]は、一般式（１［III］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。）

[0424]

[化284]

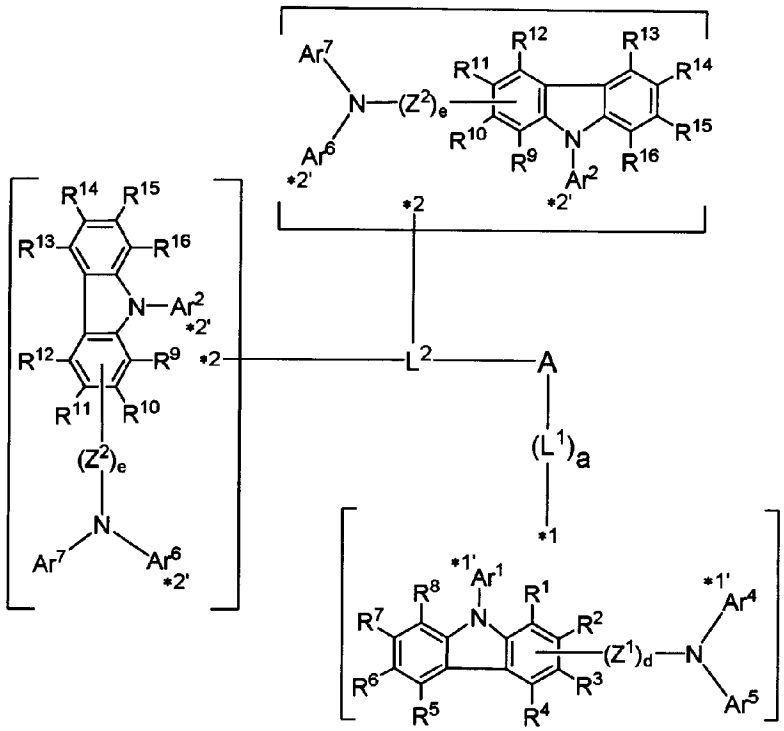


(1a-iv[III])

（一般式（１ａ－ｉｖ［III］）中、Ａ、Ｌ[1]、Ｌ[2]、ａ、ｄ、ｅ、Ｘ[1]～Ｘ[16]、Ａｒ[1]、Ａｒ[2]、Ａｒ[4]～Ａｒ[7]、Ｚ[1]、Ｚ[2]、＊１、＊２、＊１’、＊２’は、一般式（１［III］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。一般式（１ａ－ｉｖ［III］）中の各基において、同一の記号は、それぞれ同じであってもよいし、異なっていてもよい。）

[0425]

[化285]

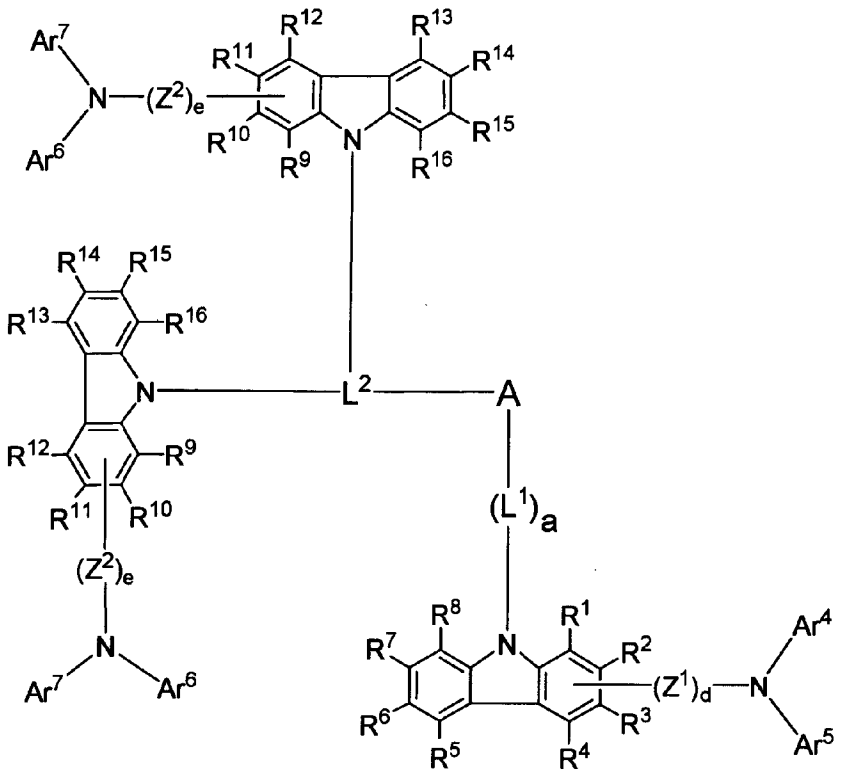


(1a'-iv[III])

（一般式（１ａ’－ｉｖ［III］）中、Ａ、Ｌ[1]、Ｌ[2]、ａ、ｄ、ｅ、Ｒ[1]～Ｒ[16]、Ａｒ[1]、Ａｒ[2]、Ａｒ[4]～Ａｒ[7]、Ｚ[1]、Ｚ[2]、＊１、＊２、＊１’、＊２’は、一般式（１［III］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。一般式（１ａ’－ｉｖ［III］）中の各基において、同一の記号は、それぞれ同じであってもよいし、異なっていてもよい。）

[0426]

[化286]

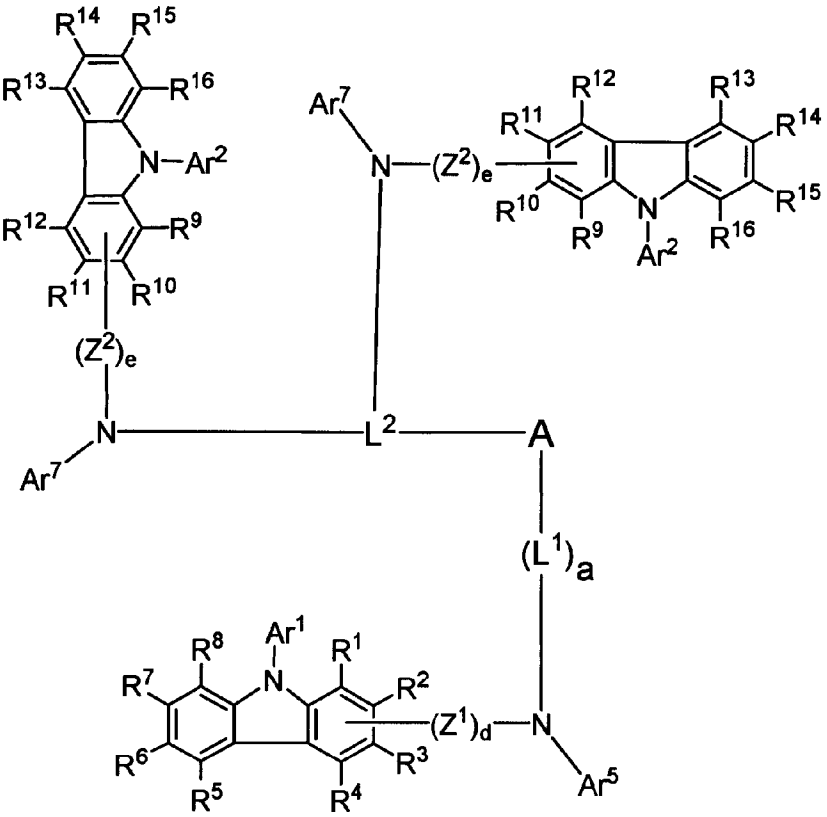


(2a'-iv[III])

（一般式（２ａ’－ｉｖ［III］）中、Ａ、Ｌ[1]、Ｌ[2]、ａ、ｄ、ｅ、Ｒ[1]～Ｒ[16]、Ａｒ[4]～Ａｒ[7]、Ｚ[1]、Ｚ[2]は、一般式（１［III］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。一般式（２ａ’－ｉｖ［III］）中の各基において、同一の記号は、それぞれ同じであってもよいし、異なっていてもよい。）

[0427]

[化287]

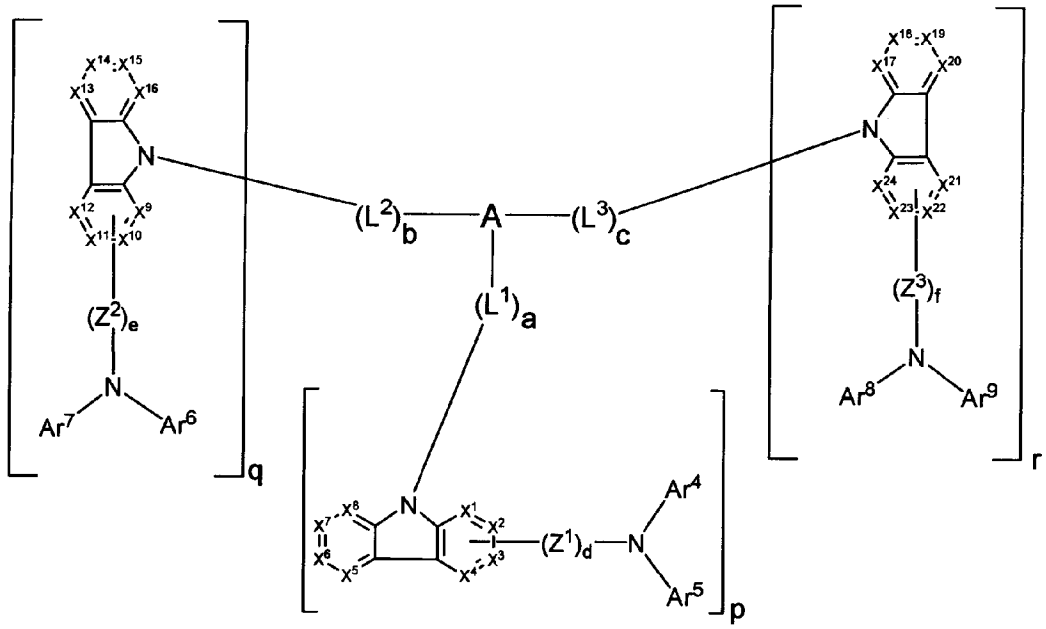


(3a'-iv[III])

（一般式（３ａ’－ｉｖ［III］）中、Ａ、Ｌ[1]、Ｌ[2]、ａ、ｄ、ｅ、Ｒ[1]～Ｒ[16]、Ａｒ[1]、Ａｒ[2]、Ａｒ[5]、Ａｒ[7]、Ｚ[1]、Ｚ[2]は、一般式（１［III］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。一般式（３ａ’－ｉｖ［III］）中の各基において、同一の記号は、それぞれ同じであってもよいし、異なっていてもよい。）

[0428]

[化288]

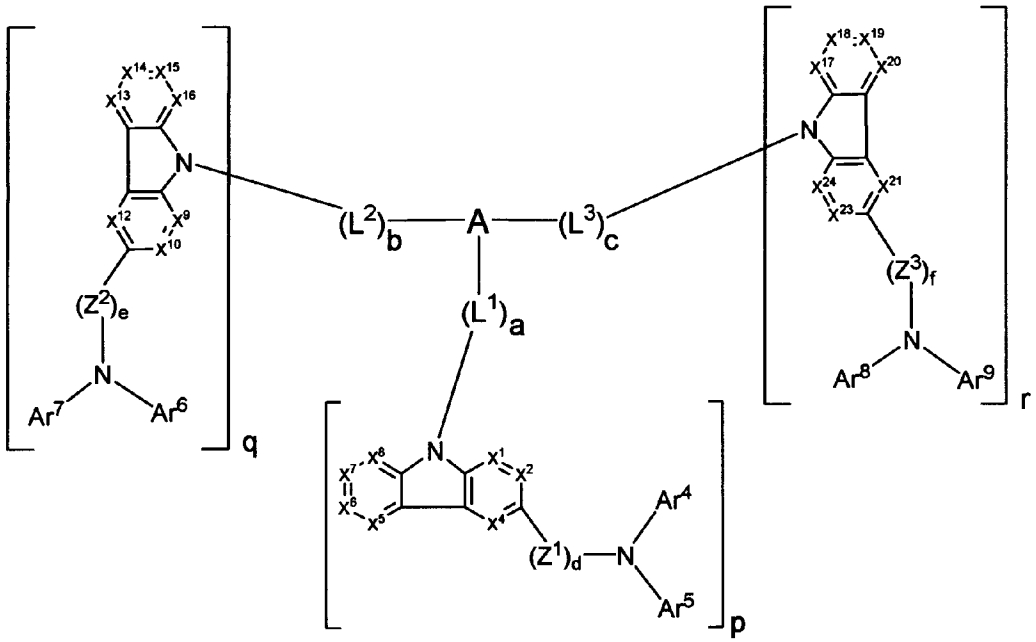


(2[III])

（一般式（２［III］）中、Ａ、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}、ａ～ｆ、ｐ～ｒ、Ｘ^{1}～Ｘ^{24}、Ａｒ^{4}～Ａｒ^{9}、Ｚ^{1}～Ｚ^{3}は、一般式（１［III］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。）

[0429]

[化289]

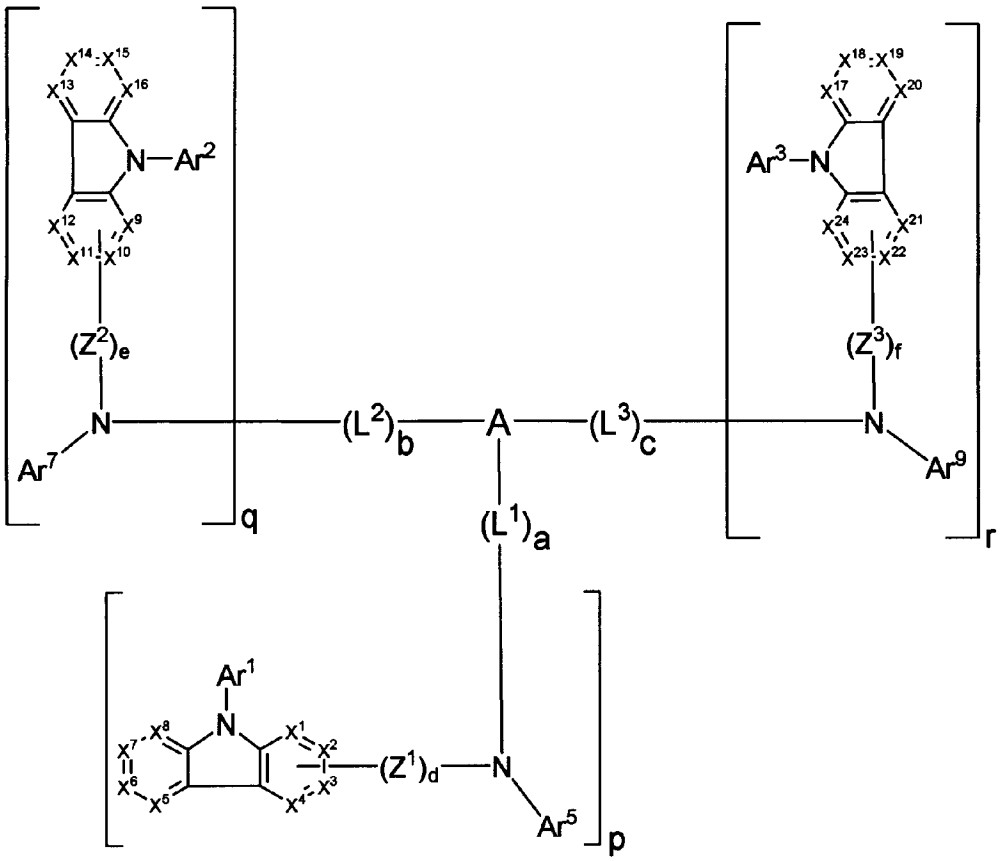


(2-1[III])

（一般式（２－１［III］）中、Ａ、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}、ａ～ｆ、ｐ～ｒ、Ｘ^{1}、Ｘ^{2}、Ｘ^{4}～Ｘ^{10}、Ｘ^{12}～Ｘ^{21}、Ｘ^{23}、Ｘ^{24}、Ａｒ^{4}～Ａｒ^{9}、Ｚ^{1}～Ｚ^{3}は、一般式（１［III］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。）

[0430]

[化290]

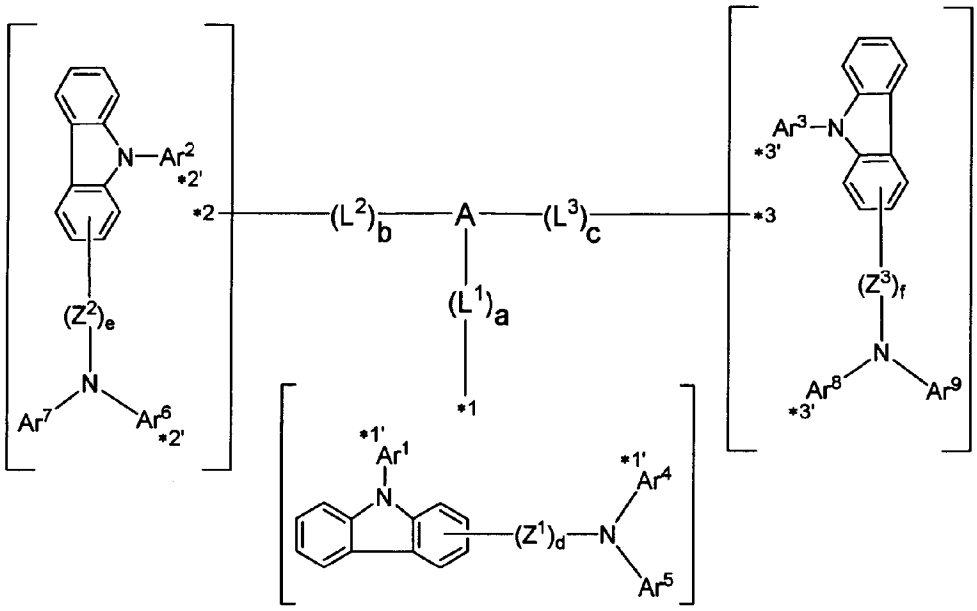


(3[III])

（一般式（３［III］）中、Ａ、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}、ａ～ｆ、ｐ～ｒ、Ｘ^{1}～Ｘ^{24}、Ａｒ^{1}～Ａｒ^{3}、Ａｒ^{5}、Ａｒ^{7}、Ａｒ^{9}、Ｚ^{1}～Ｚ^{3}は、一般式（１［III］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。）

[0431]

[化291]



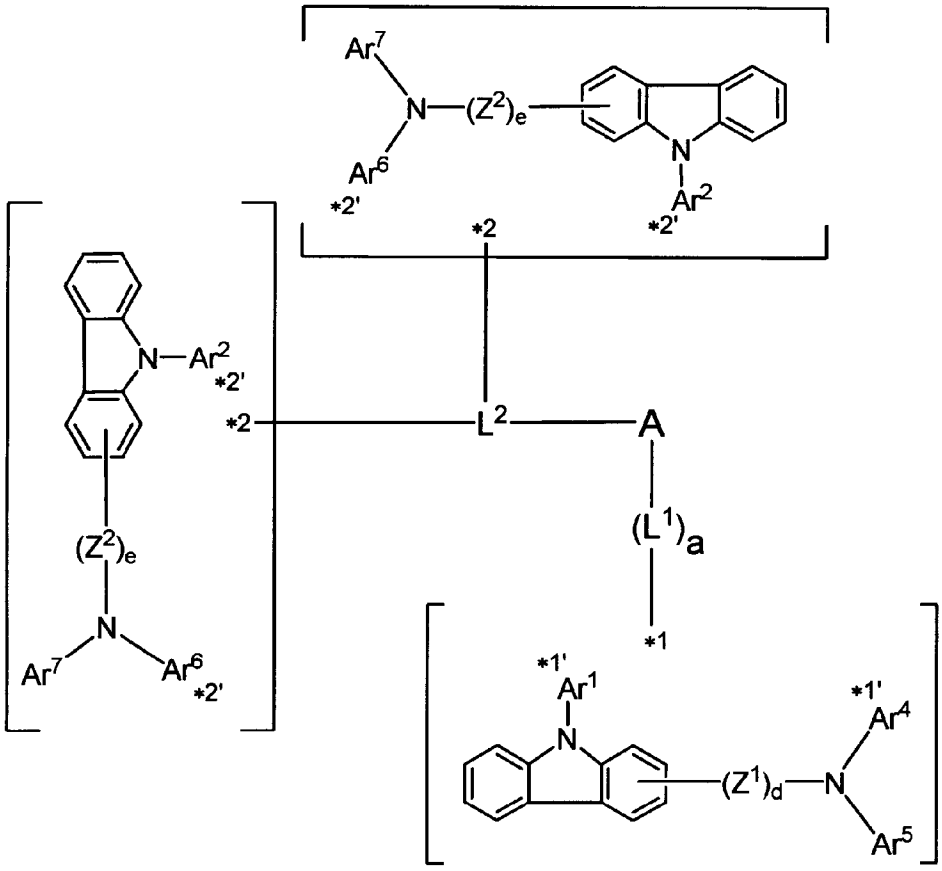
(1a'-H[III])

（一般式（１ａ’－Ｈ［III］）中、Ａ、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}、ａ～ｆ、Ａｒ^{1}～Ａｒ^{9}、Ｚ^{1}～Ｚ^{3}、＊１～＊３、＊１’～＊３’は、一般式（１［III］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。）

なお、上記一般式（１ａ’－Ｈ［III］）中、Ｚ^{1}～Ｚ^{3}のそれぞれからベンゼン環へ伸びている結合手は、先端が位置するベンゼン環上の４つの水素原子のいずれかが脱離して、そこで結合していることを示す。

[0432]

[化292]



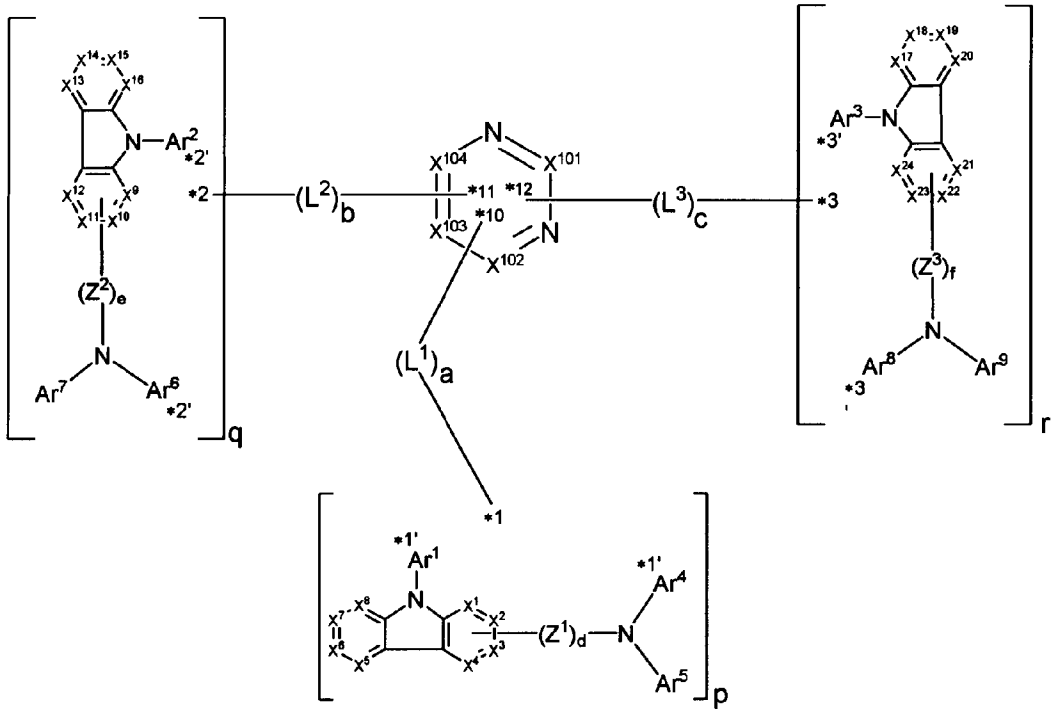
(1a'-iv-H[III])

（一般式（１ａ’－ｉｖ－Ｈ［III］）中、Ａ、Ｌ[1]、Ｌ[2]、ａ、ｄ、ｅ、Ａｒ[1]、Ａｒ[2]、Ａｒ[4]～Ａｒ[7]、Ｚ[1]、Ｚ[2]、＊１、＊２、＊１’、＊２’は、一般式（１［III］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。一般式（１ａ’－ｉｖ－Ｈ［III］）中の各基において、同一の記号は、それぞれ同じであってもよいし、異なっていてもよい。）

なお、上記一般式（１ａ’－ｉｖ－Ｈ［III］）中、Ｚ[1]～Ｚ[3]のそれぞれからベンゼン環へ伸びている結合手は、先端が位置するベンゼン環上の４つの水素原子のいずれかが脱離して、そこで結合していることを示す。

[0433]

[化293]



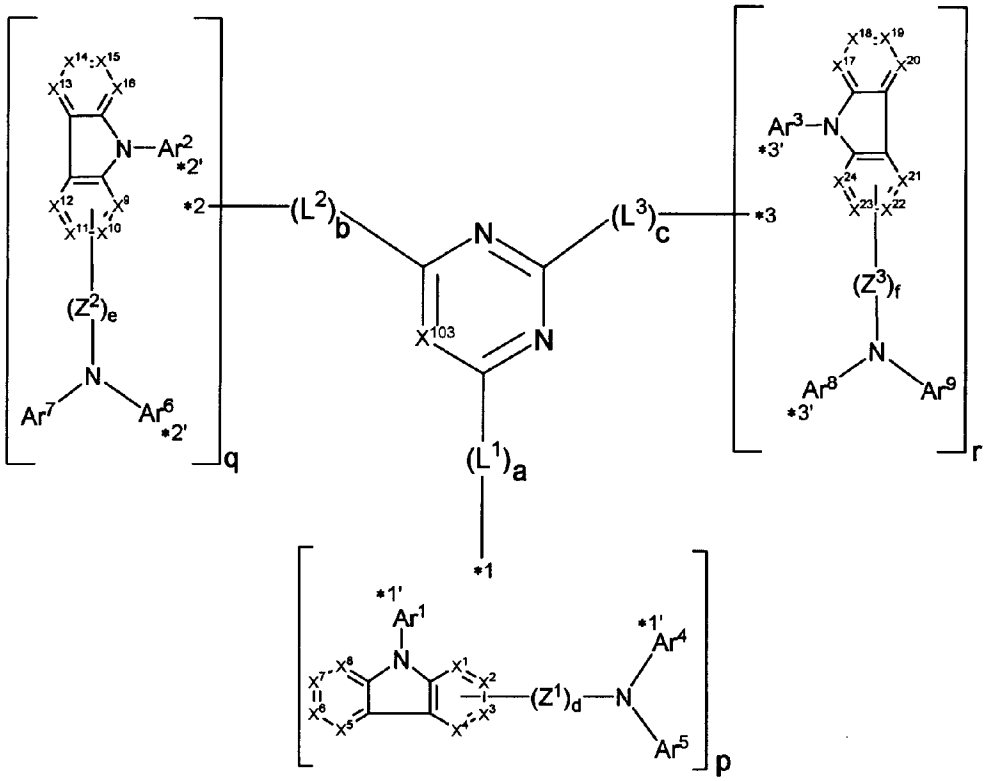
(1b-i[III])

（一般式（１ｂ－ｉ［III］）中、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｆ、ｐ～ｒ、Ｘ[1]～Ｘ[24]、Ａｒ[1]～Ａｒ[3]、Ａｒ[4]～Ａｒ[9]、＊１～＊３、＊１’～＊３’は、一般式（１［III］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。

Ｘ[101]～Ｘ[104]は、それぞれ＊１０～＊１２のいずれかと結合する炭素原子、Ｃ（Ｒｘ）、又は窒素原子である。該Ｒｘは水素原子又は置換基であって、複数存在するＲｘは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲｘ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。）

[0434]

[化294]



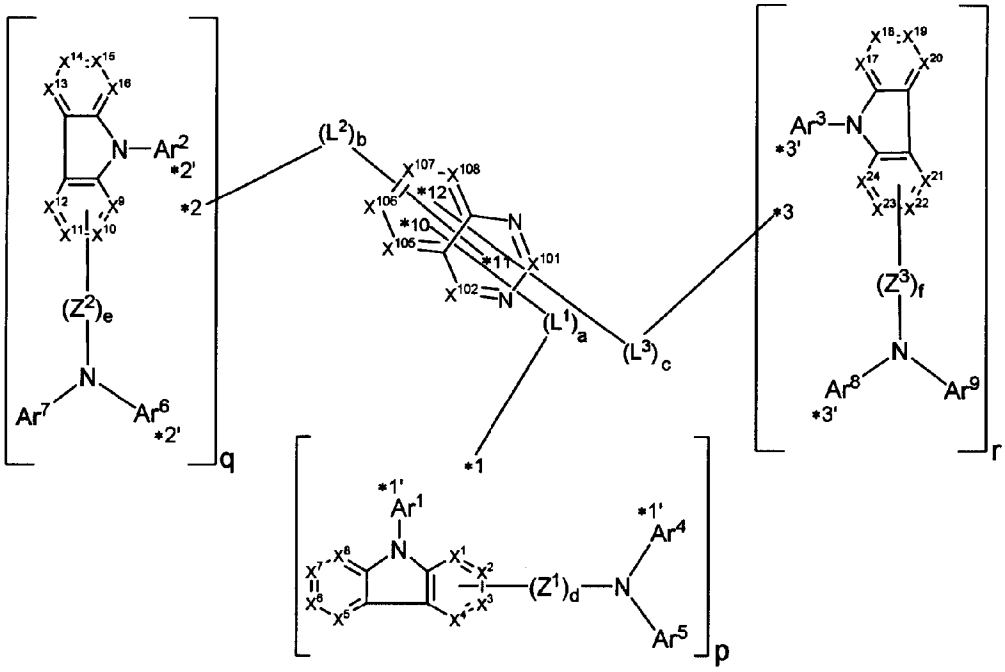
(1b-ii[III])

（一般式（１ｂ－ｉｉ［III］）中、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}、ａ～ｆ、ｐ～ｒ、Ｘ^{1}～Ｘ^{24}、Ａｒ^{1}～Ａｒ^{3}、Ａｒ^{4}～Ａｒ^{9}、＊１～＊３、＊１’～＊３’は、一般式（１［III］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。

Ｘ^{103}は、Ｃ（Ｒｘ）又は窒素原子であり、Ｒｘは水素原子又は置換基である。）

[0435]

[化295]



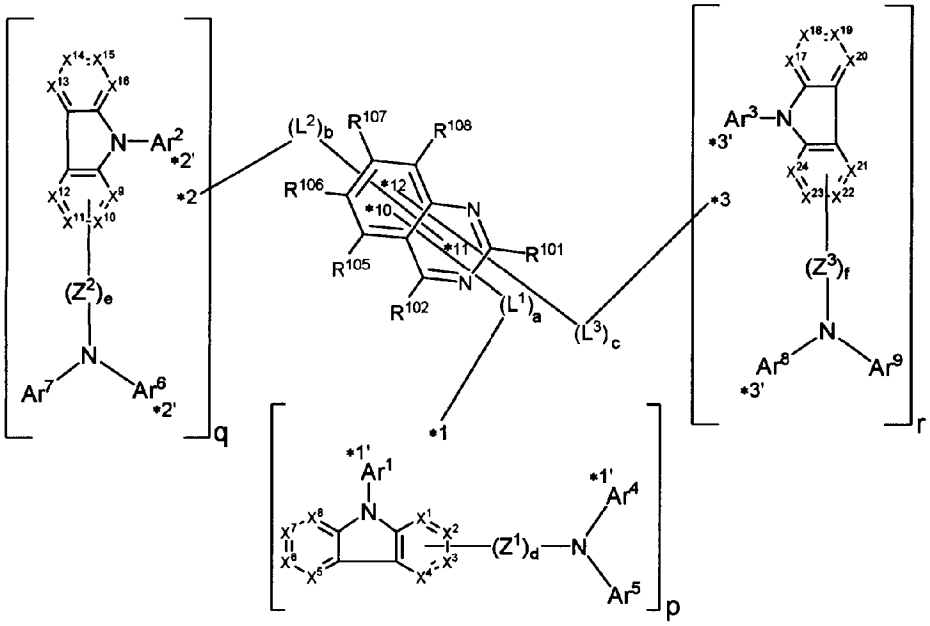
(1b-iii[III])

（一般式（１ｂ－ｉｉｉ［III］）中、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｆ、ｐ～ｒ、Ｘ[1]～Ｘ[24]、Ａｒ[1]～Ａｒ[3]、Ａｒ[4]～Ａｒ[9]、＊１～＊３、＊１’～＊３’は、一般式（１［III］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。

Ｘ[101]、Ｘ[102]、Ｘ[105]～Ｘ[108]は、それぞれ＊１０～＊１２のいずれかと結合する炭素原子、Ｃ（Ｒｘ）、又は窒素原子である。該Ｒｘは水素原子又は置換基であって、複数存在するＲｘは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲｘ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。）

[0436]

[化296]



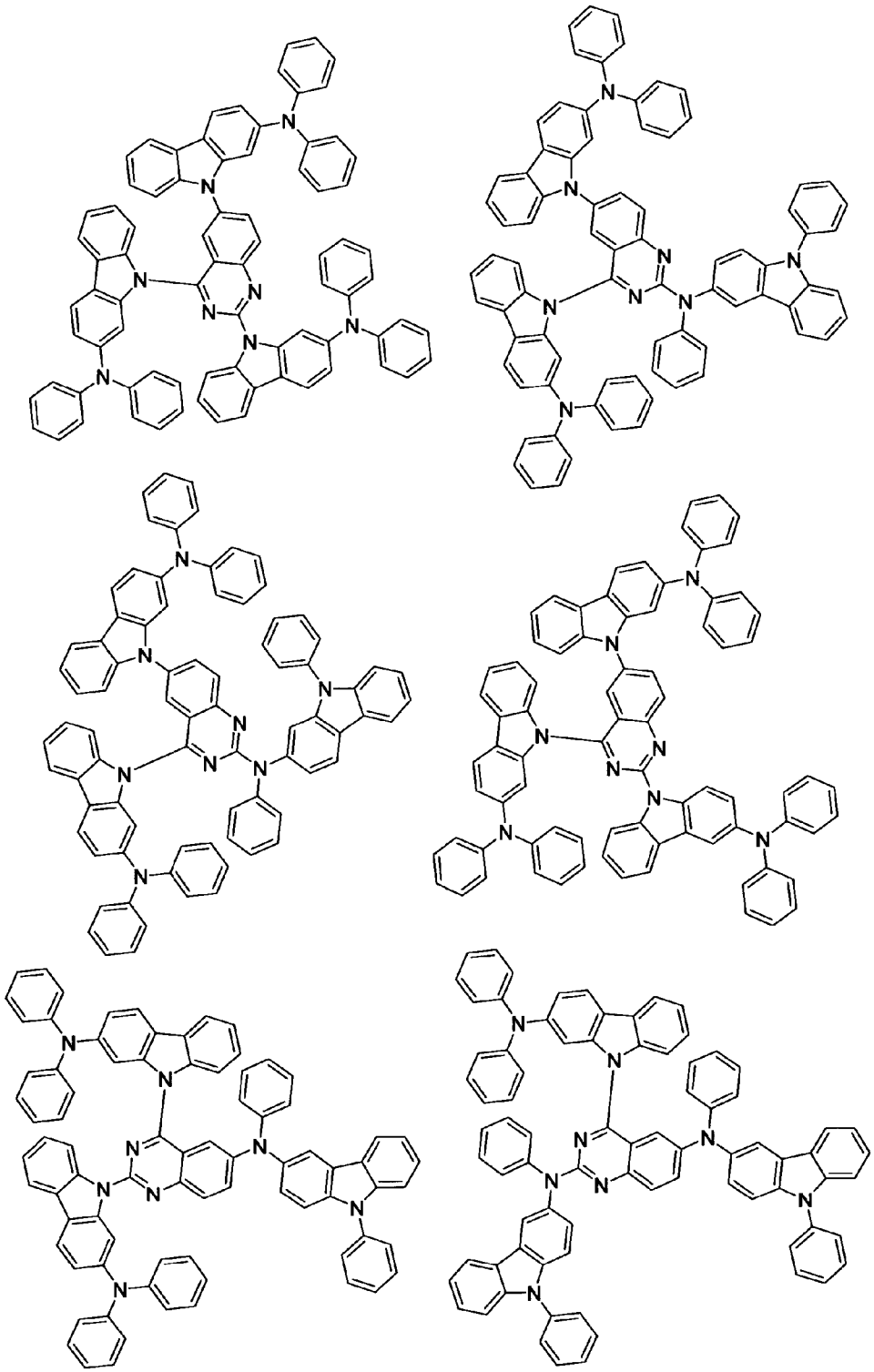
(1b-iv[III])

（一般式（１ｂ－ｉｖ［III］）中、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}、ａ～ｆ、ｐ～ｒ、Ｘ^{1}～Ｘ^{24}、Ａｒ^{1}～Ａｒ^{3}、Ａｒ^{4}～Ａｒ^{9}、＊１～＊３、＊１’～＊３’は、一般式（１［III］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。

Ｒ^{101}、Ｒ^{102}及びＲ^{105}～Ｒ^{108}のうちの１～３つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子が＊１０～＊１２のいずれかと結合し、それ以外は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。なお、Ｒ^{102}及びＲ^{105}～Ｒ^{108}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。）

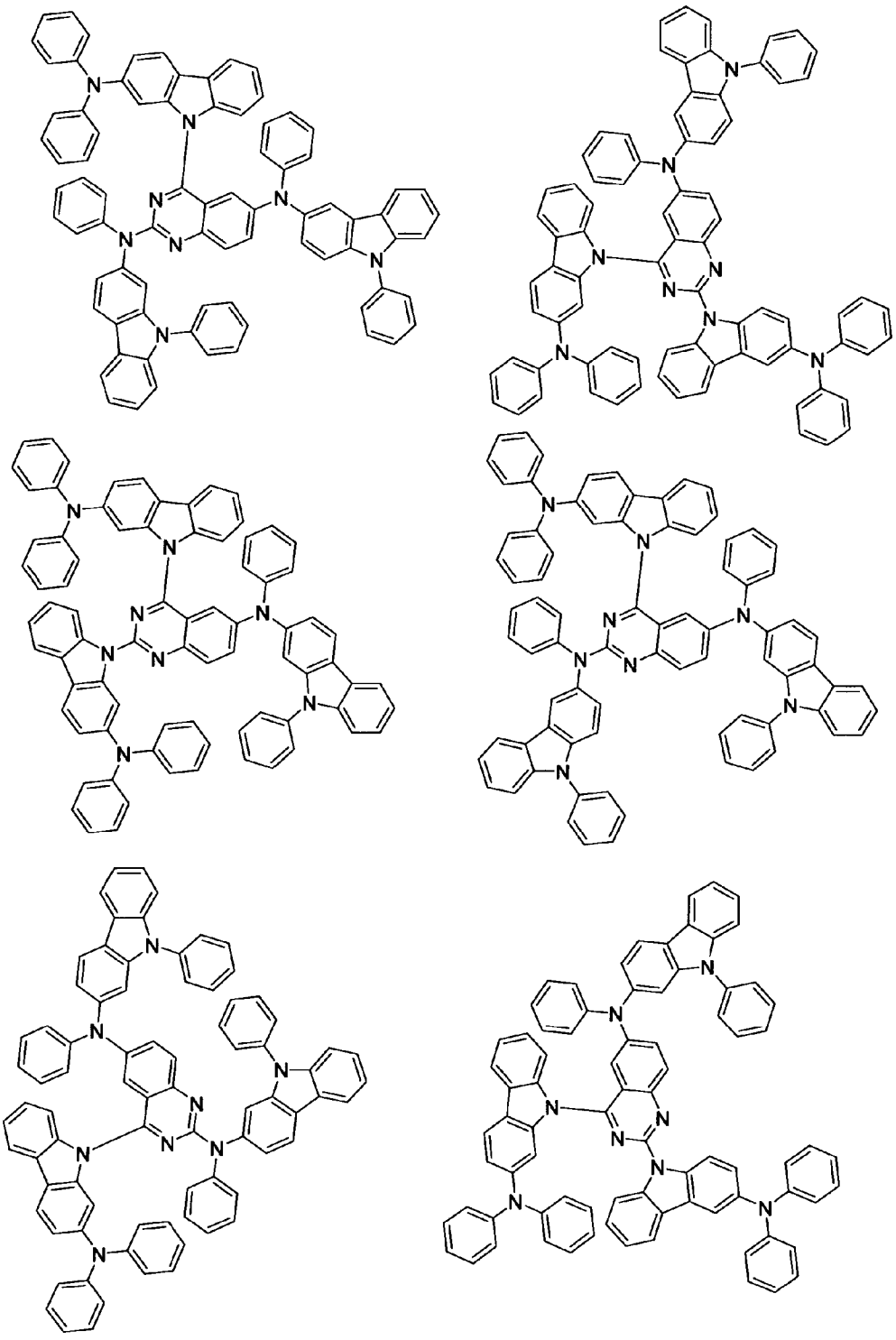
[0437] 以下に本発明の一態様である化合物（１［III］）の具体例を示すが、これらに限定されるものではない。

[化297]



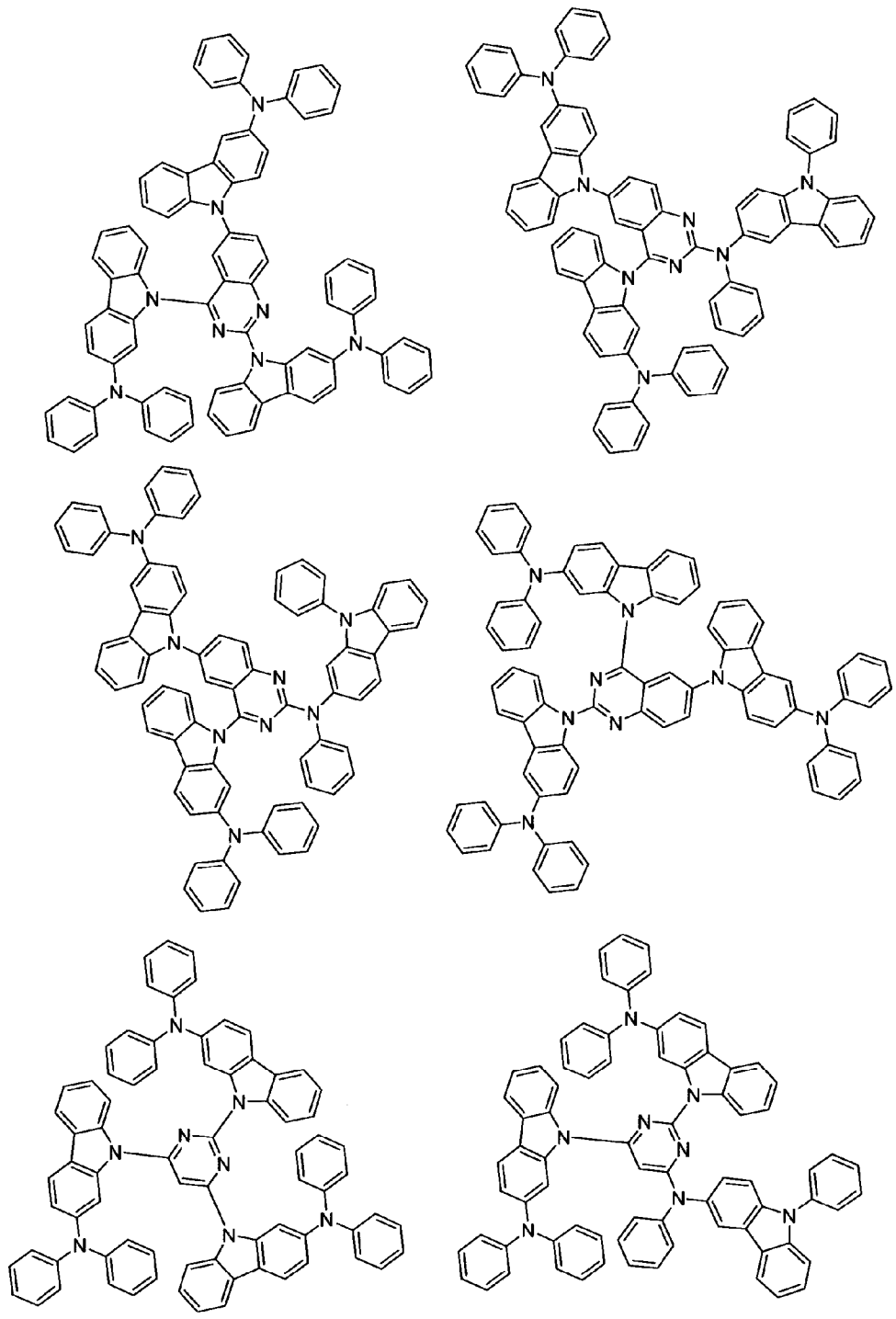
[0438]

[化298]



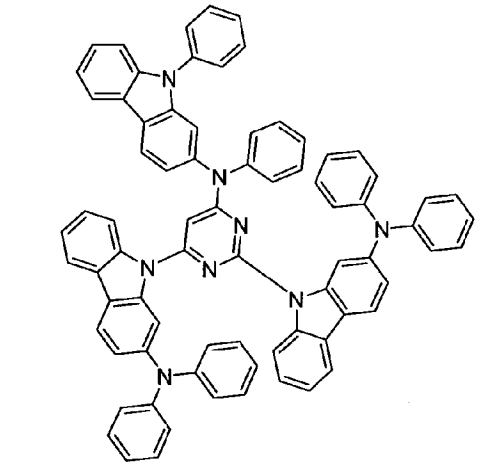
[0439]

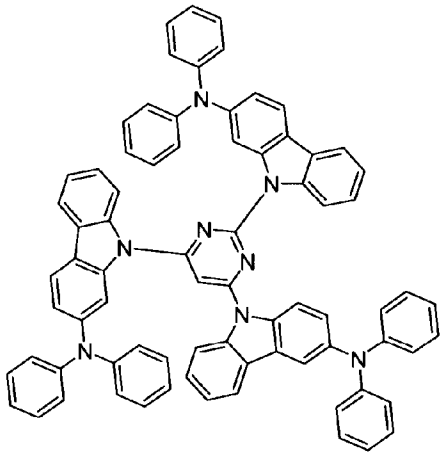
[化299]

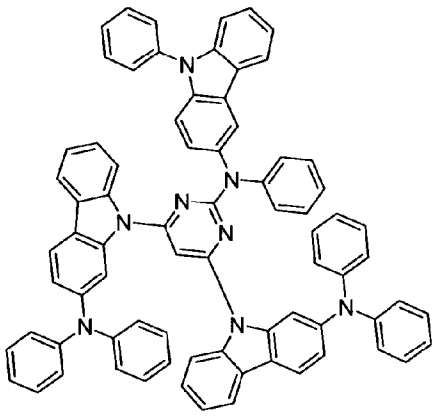


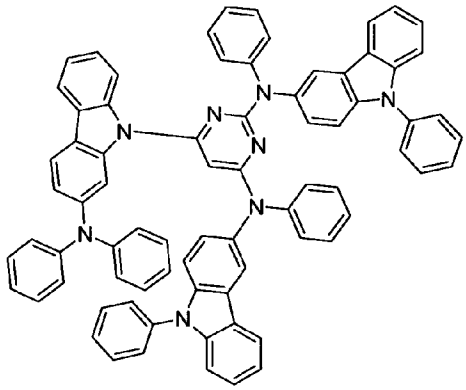
[0440]

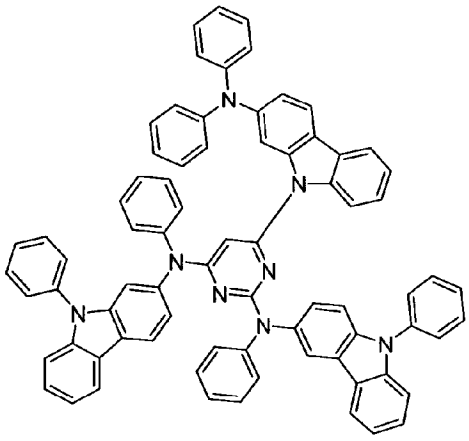
[化300]

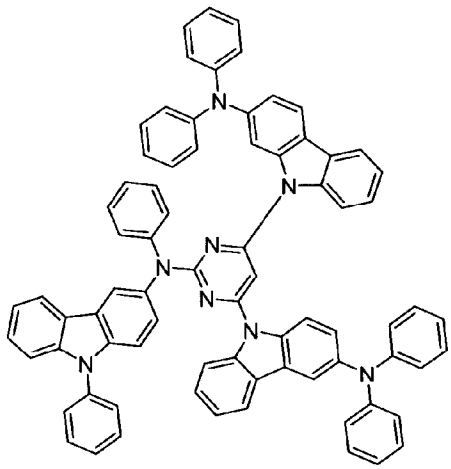






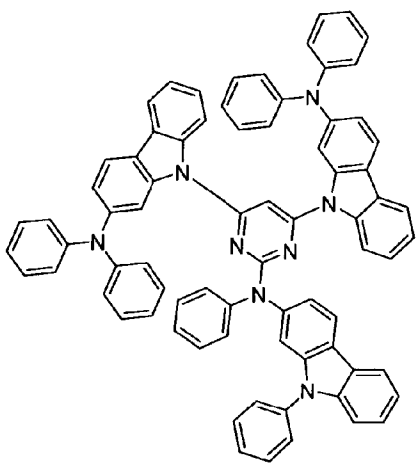
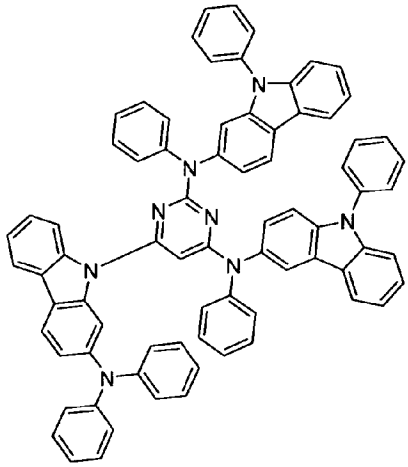
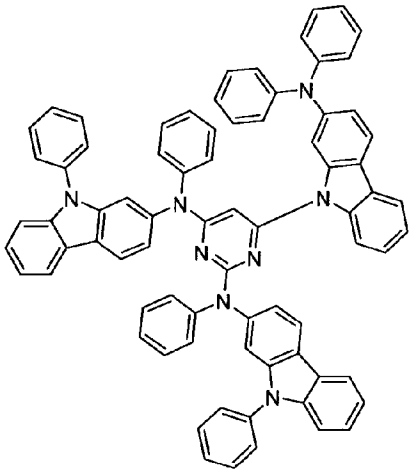
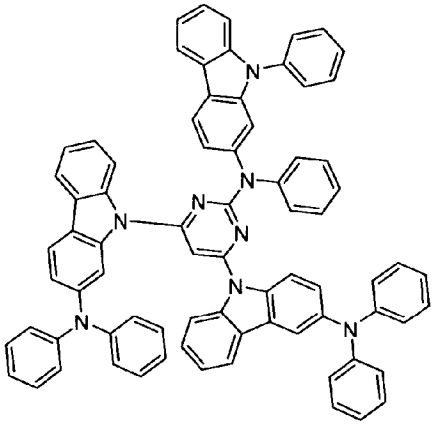
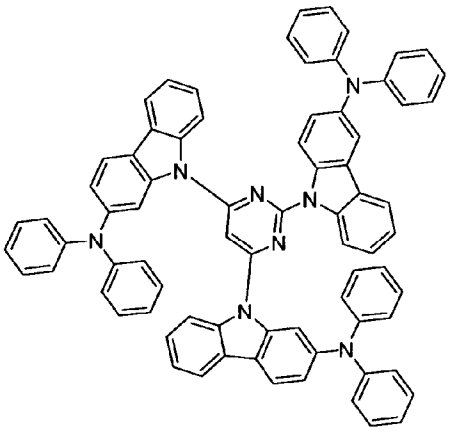
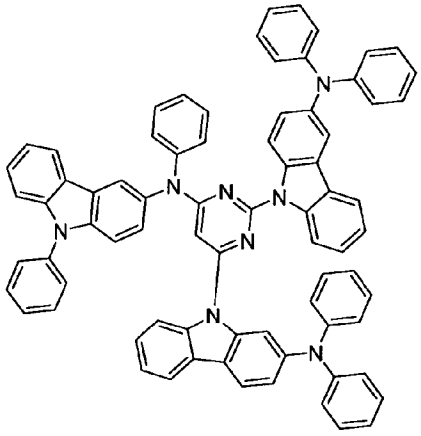






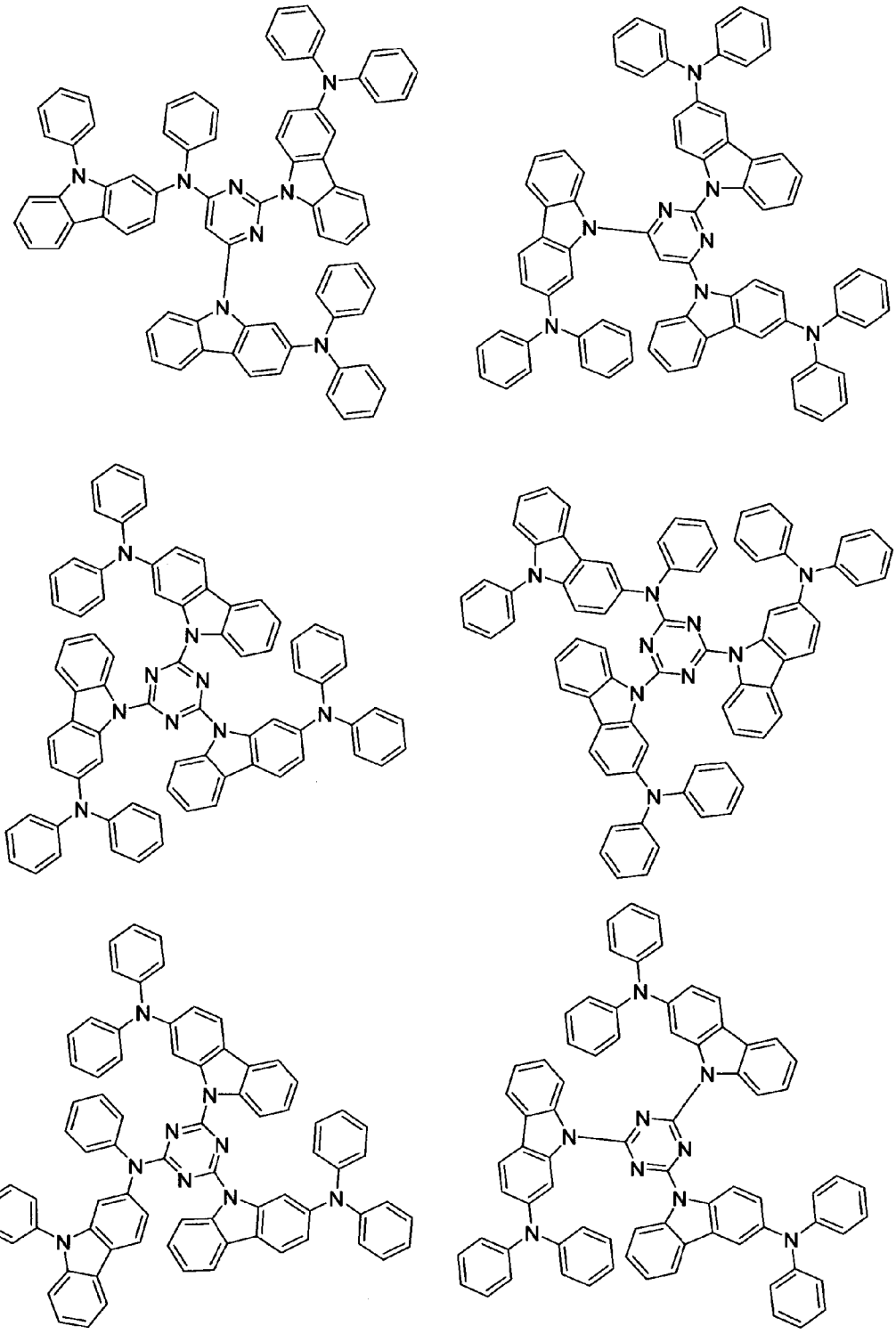
[0441]

[化301]

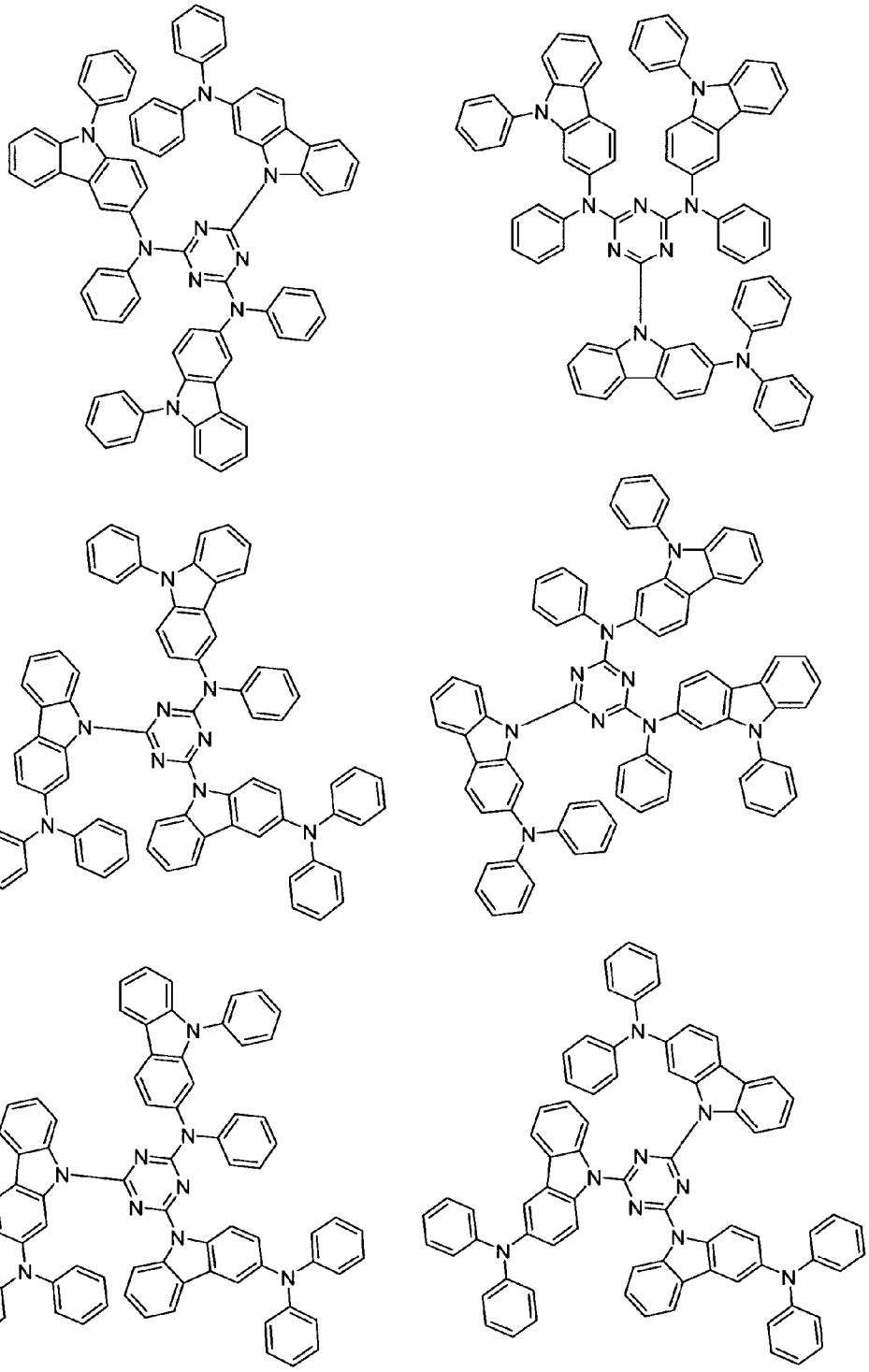
[0442]

[化302]



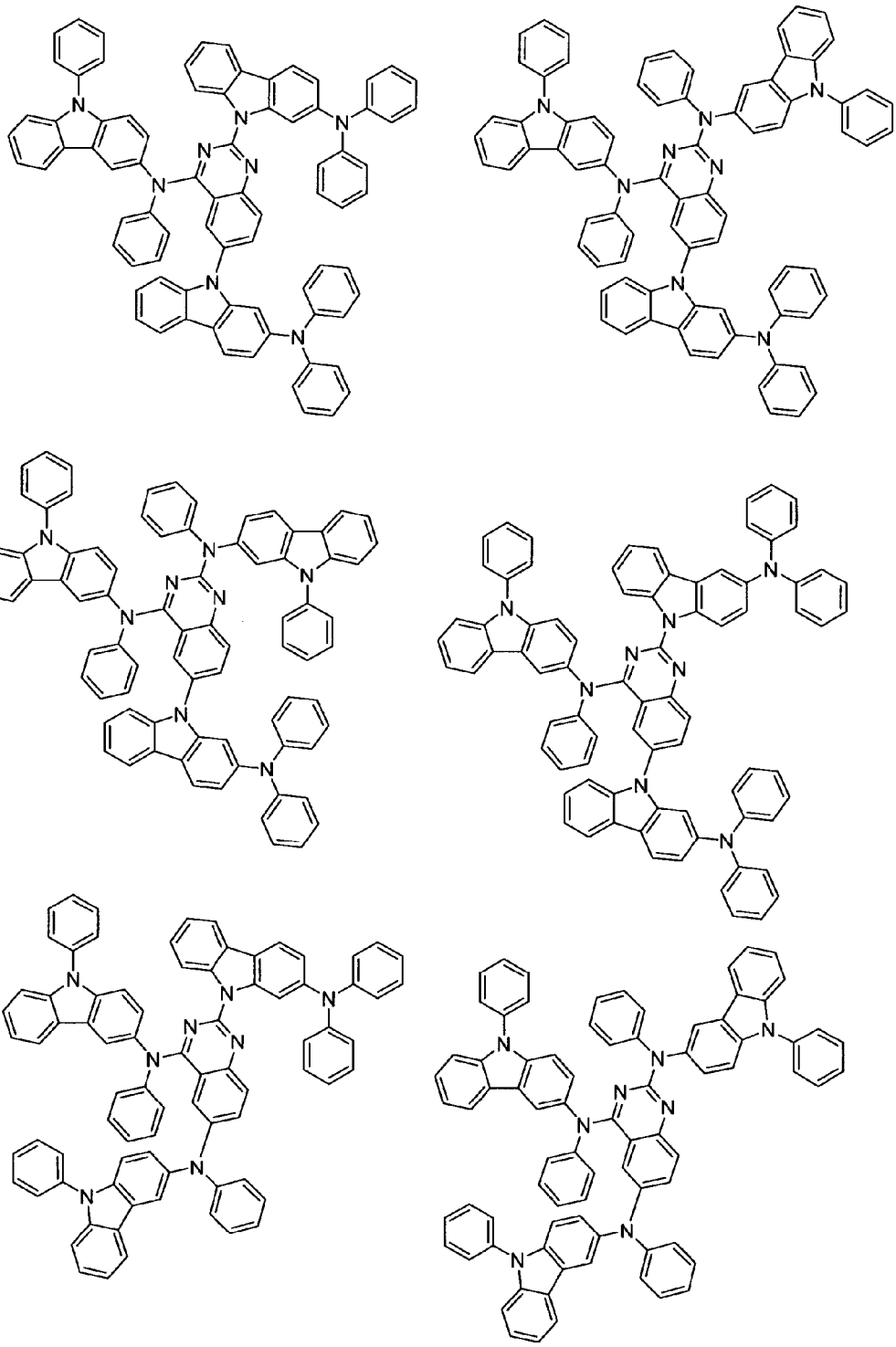
[0443]

[化303]



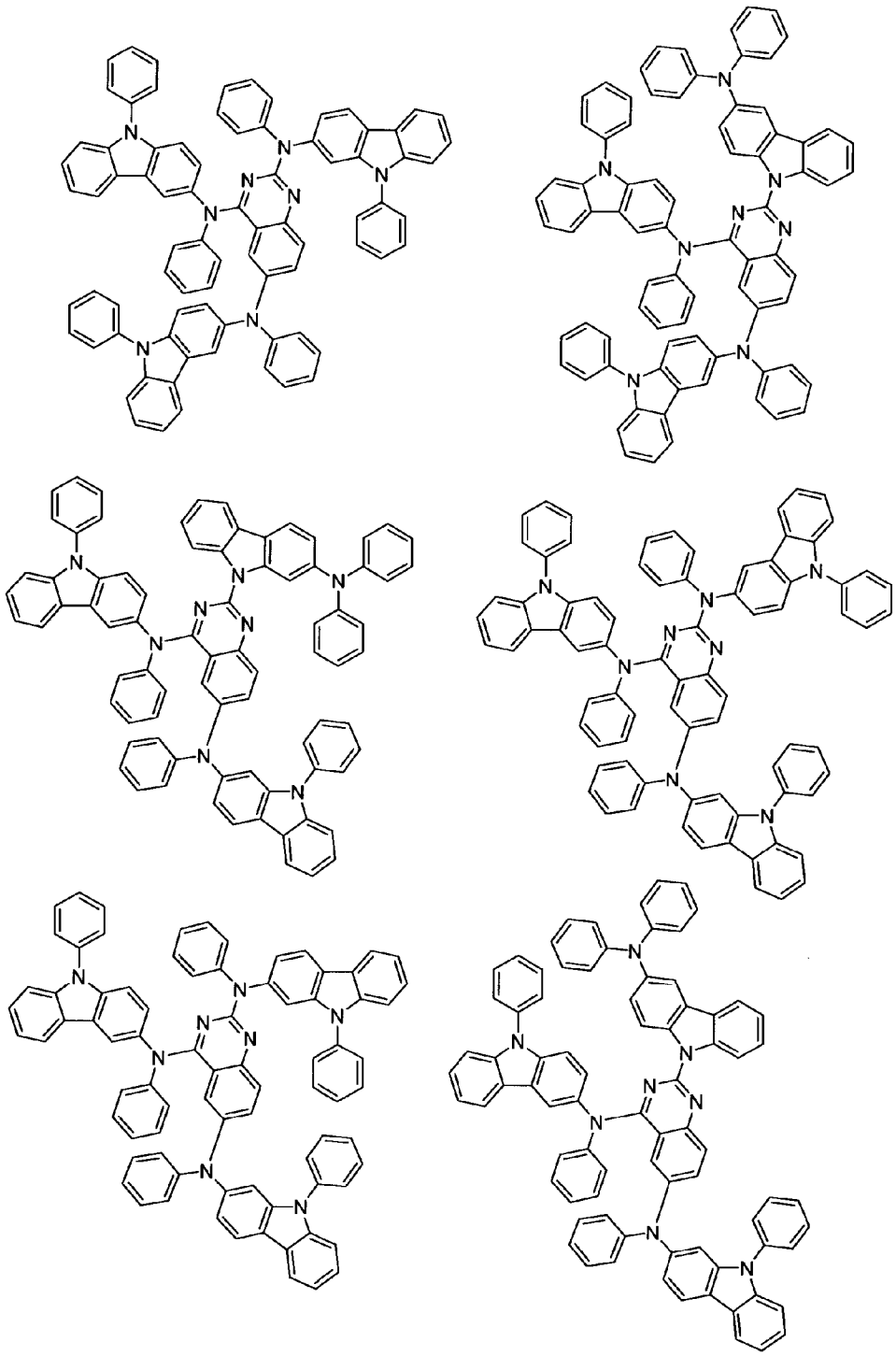
[0444]

[化304]



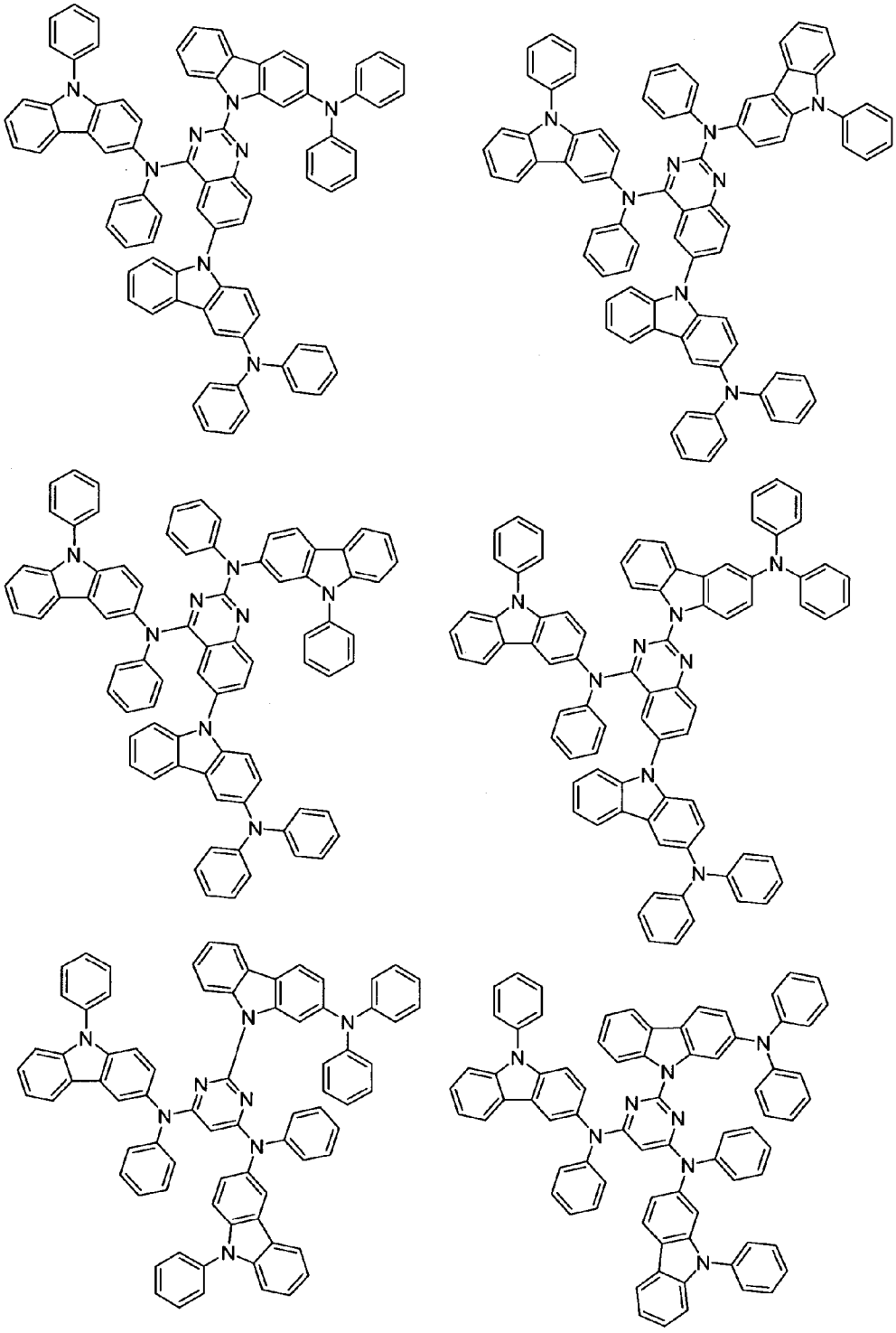
[0445]

[化305]



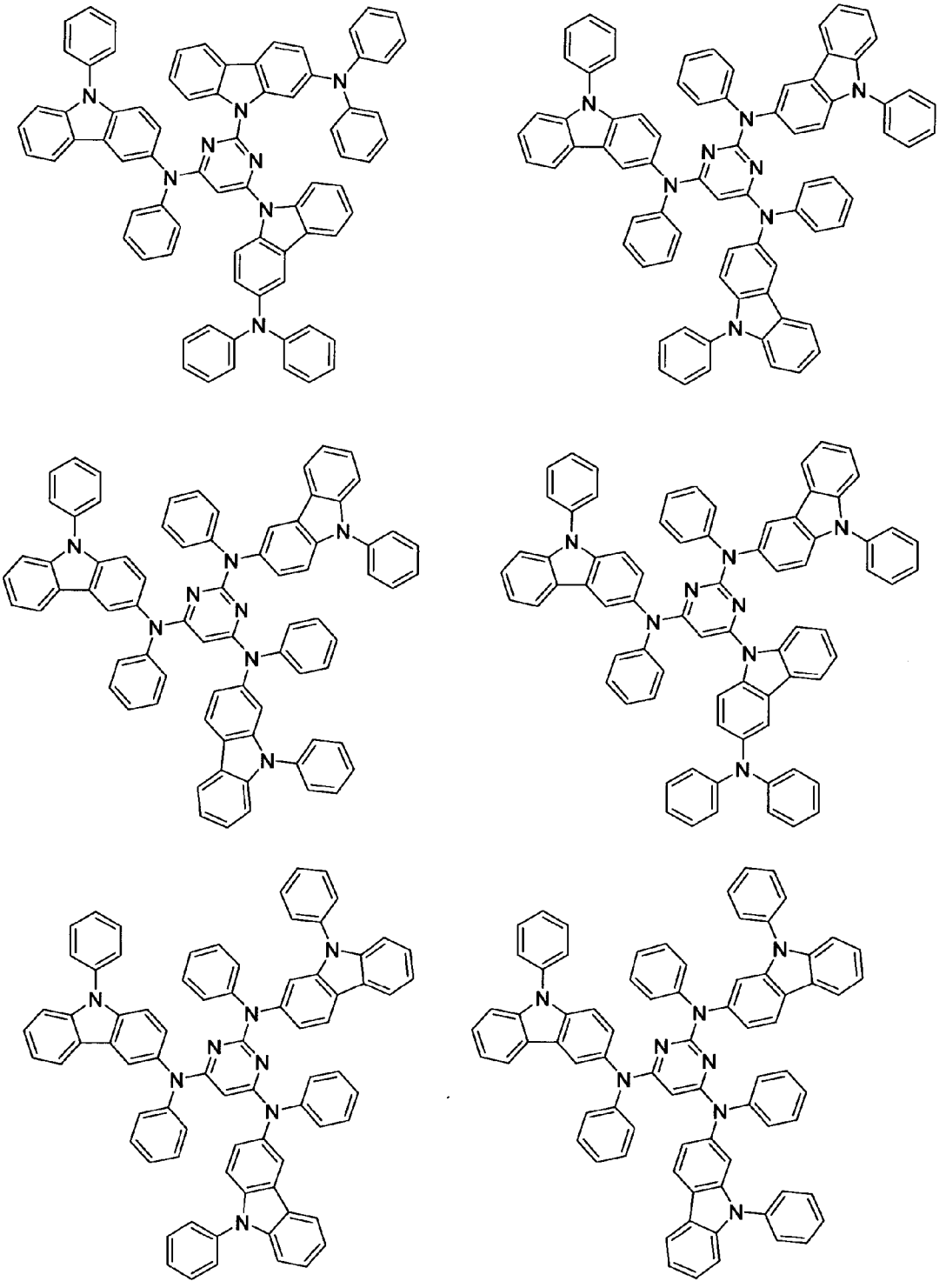
[0446]

[化306]



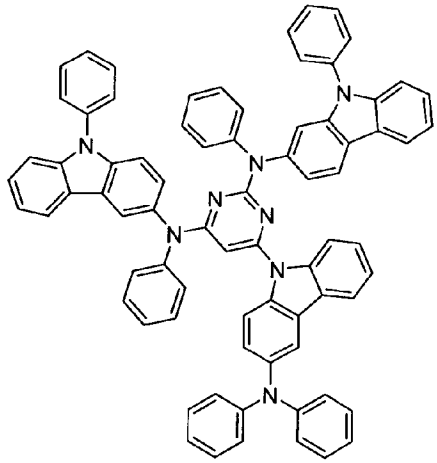
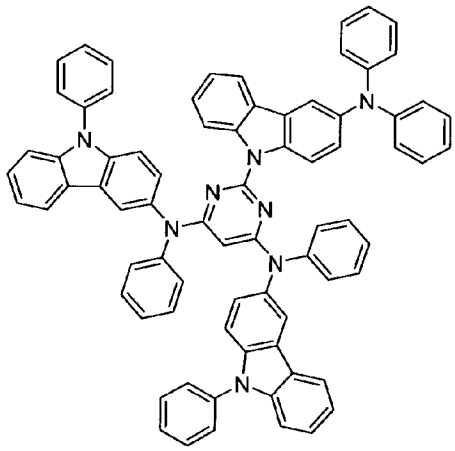
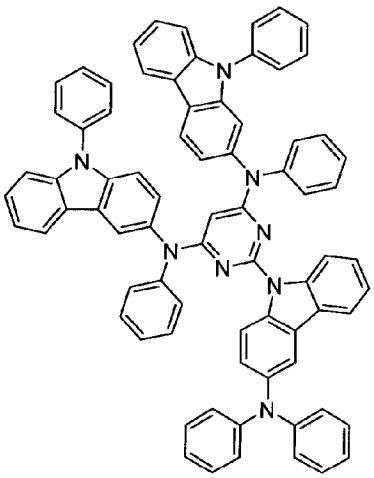
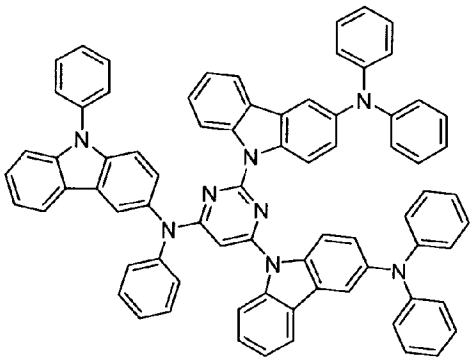
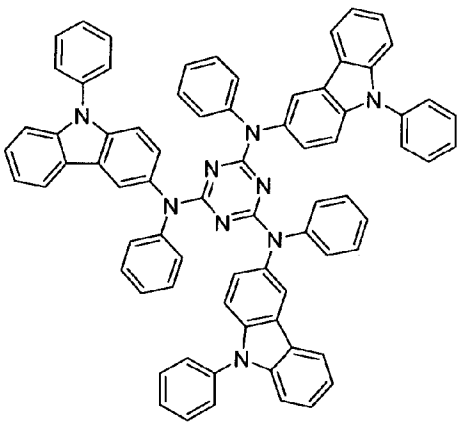
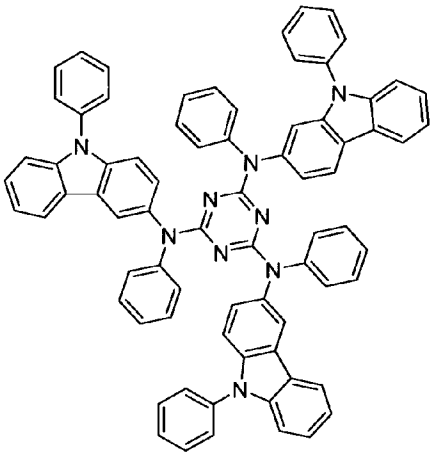
[0447]

[化307]



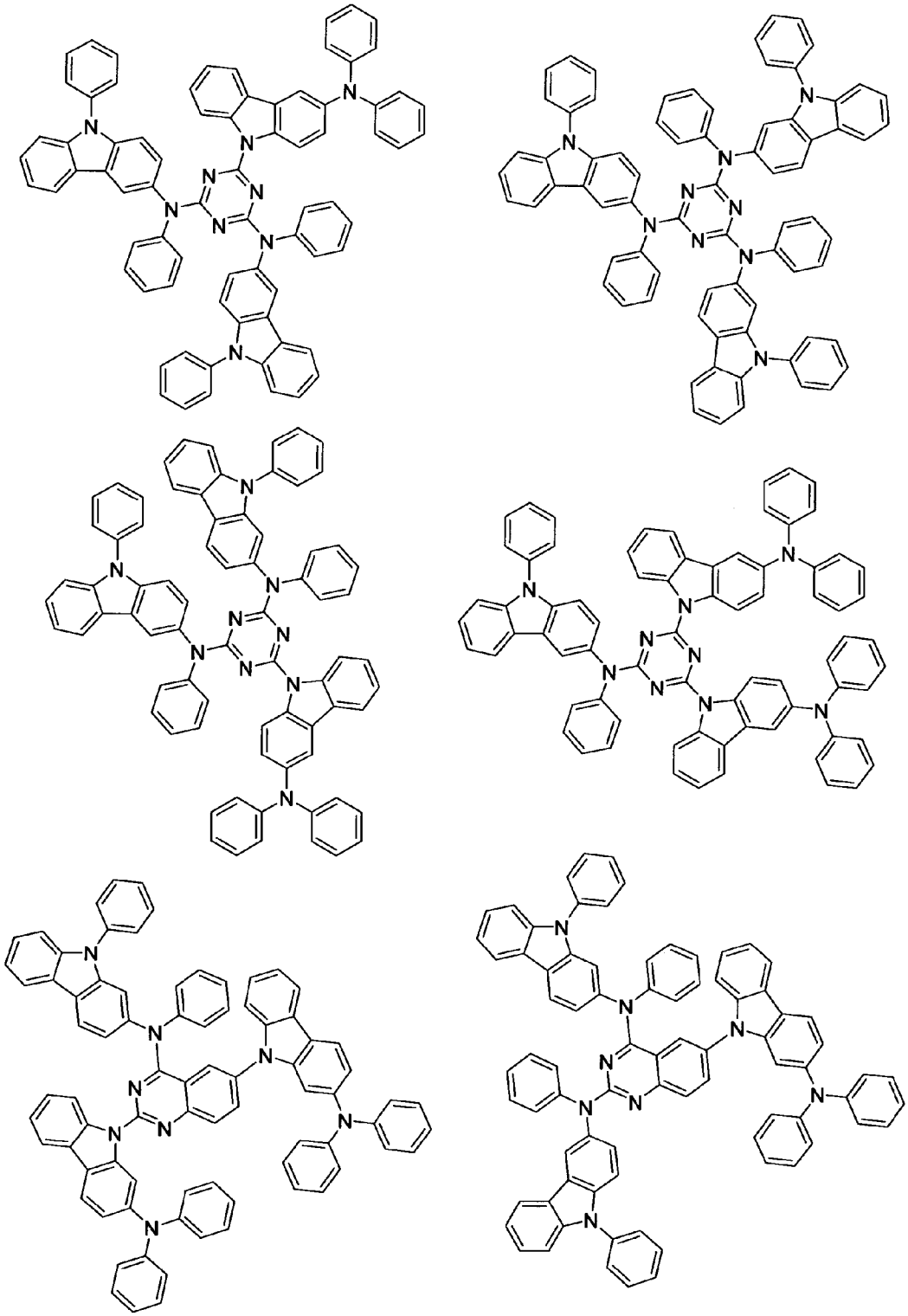
[0448]

[化308]

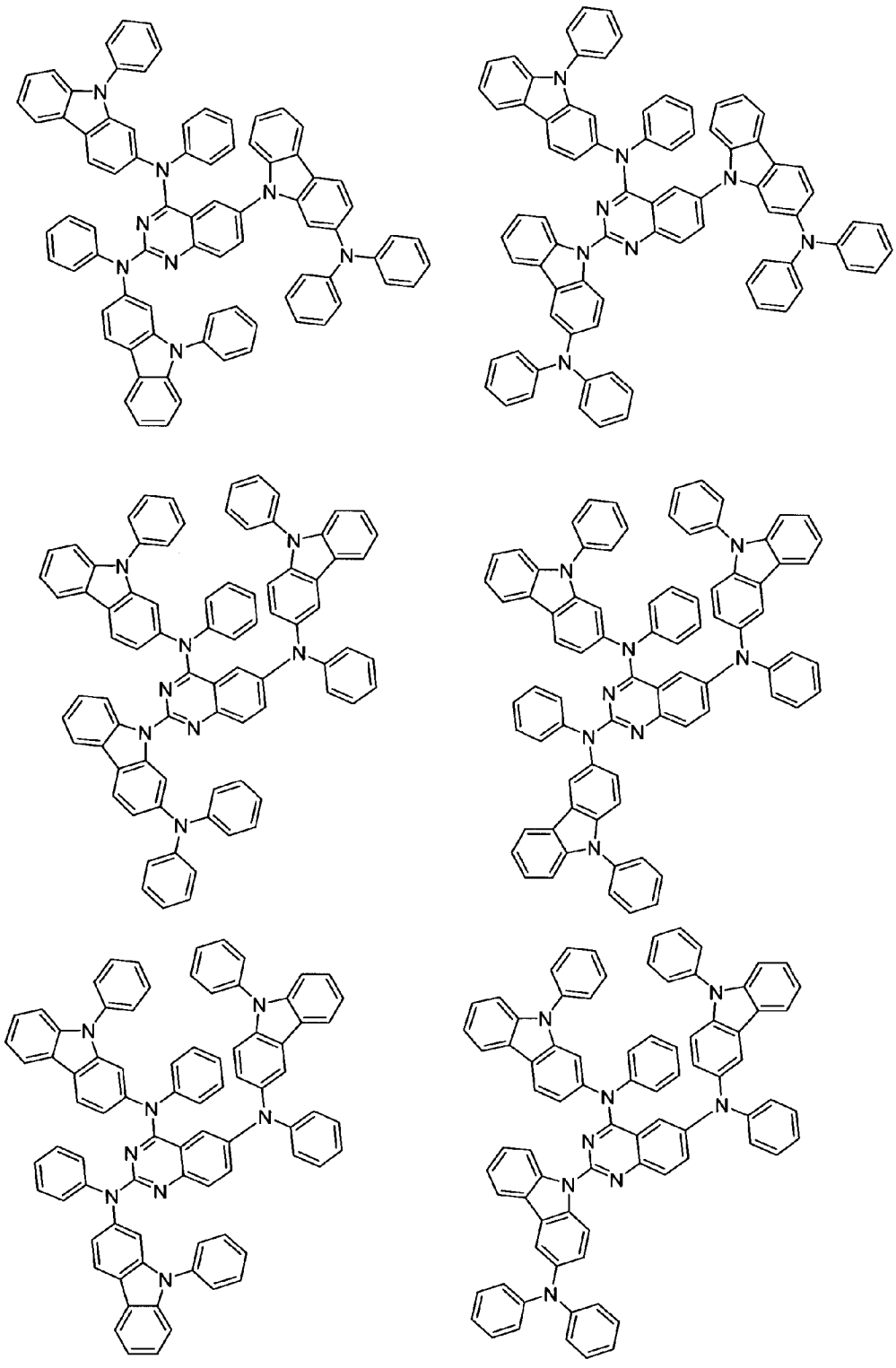
[0449]

[化309]



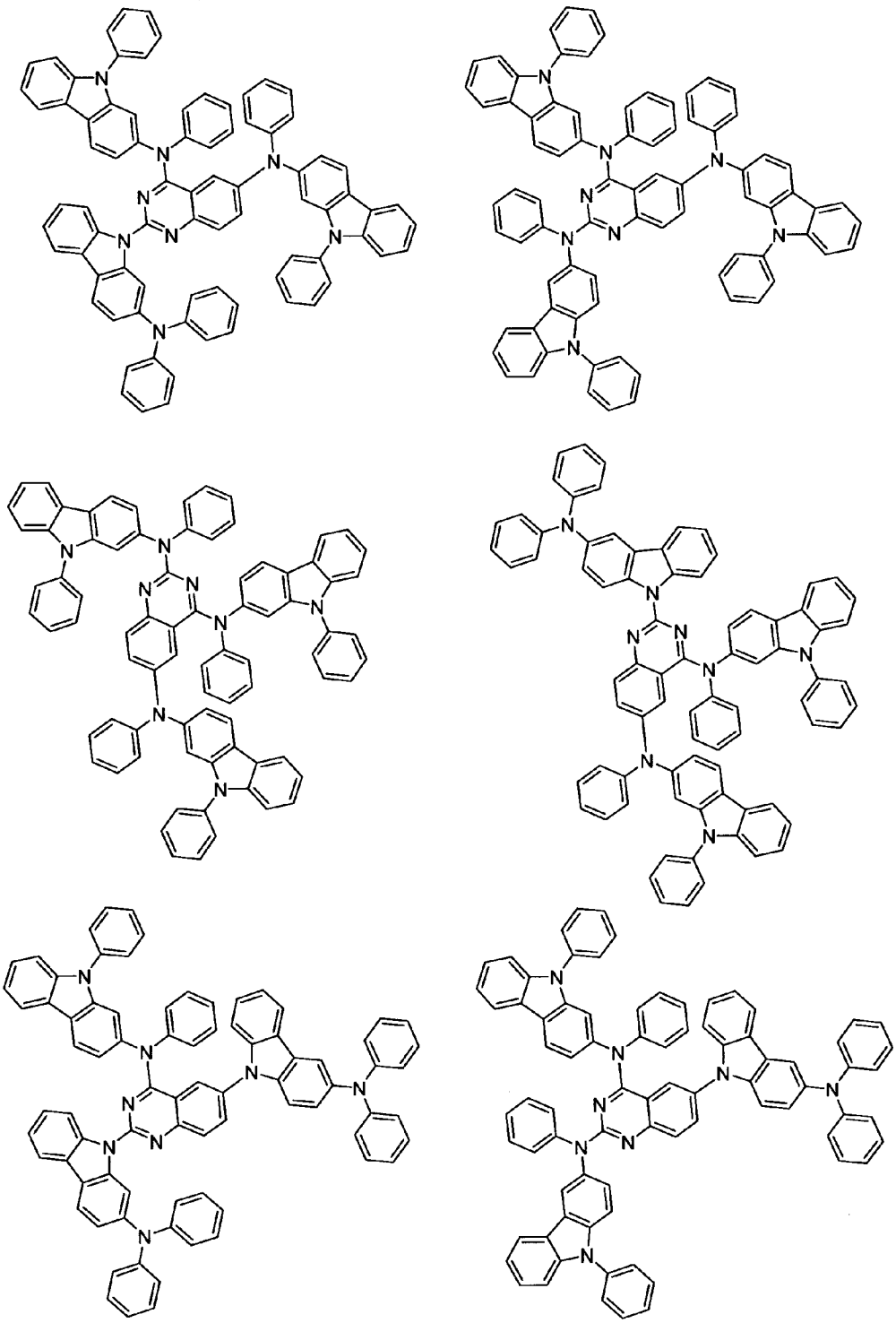
[0450]

[化310]



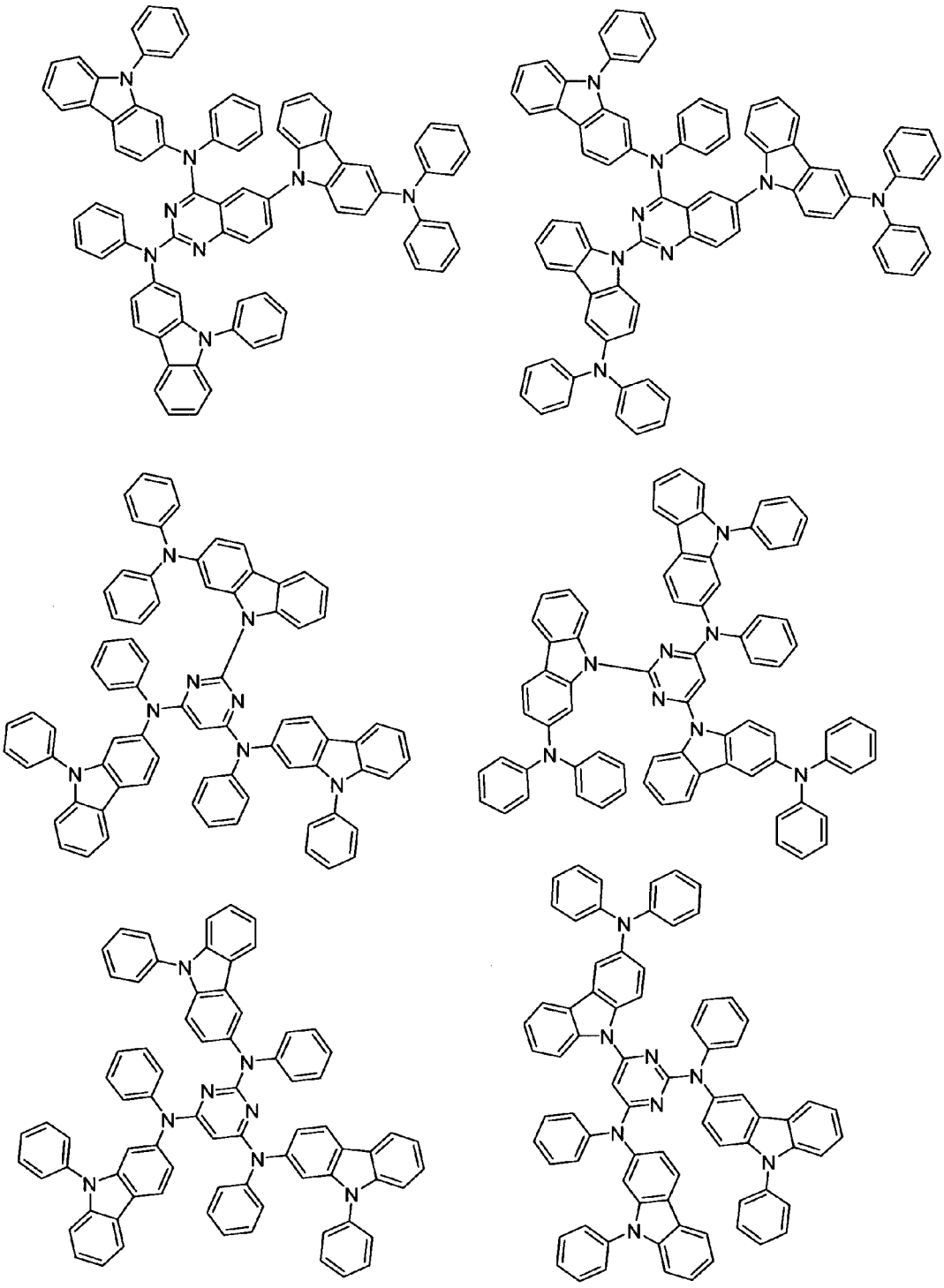
[0451]

[化311]



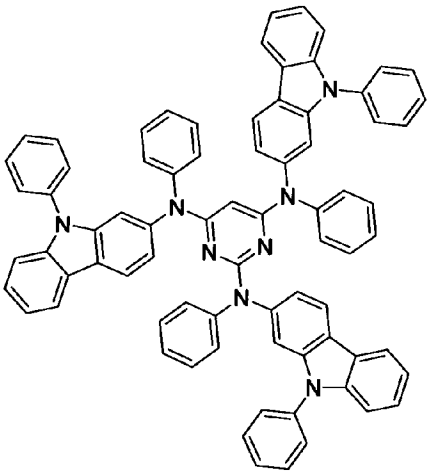
[0452]

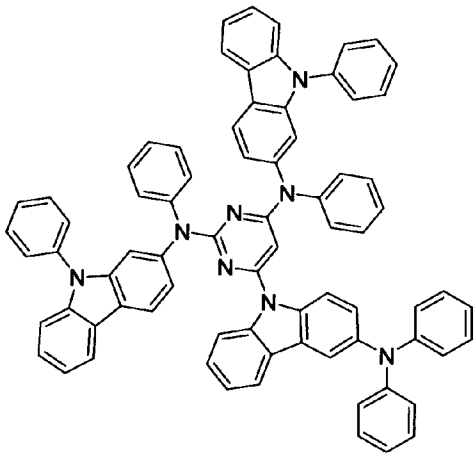
[化312]

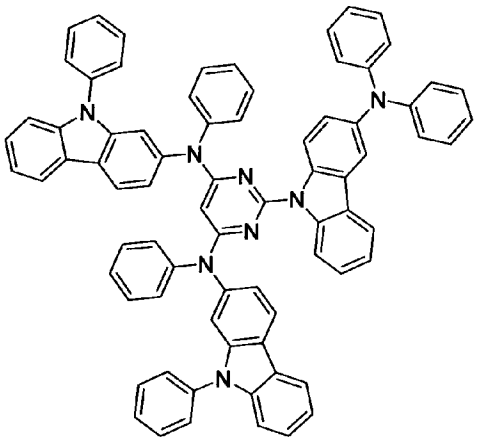


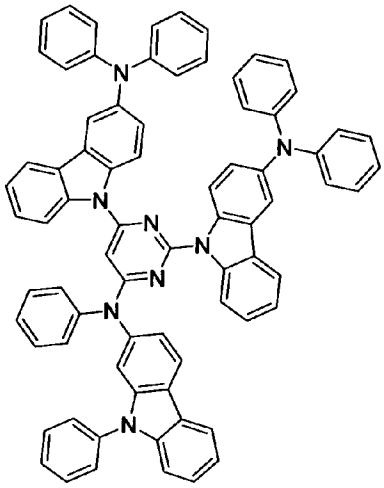
[0453]

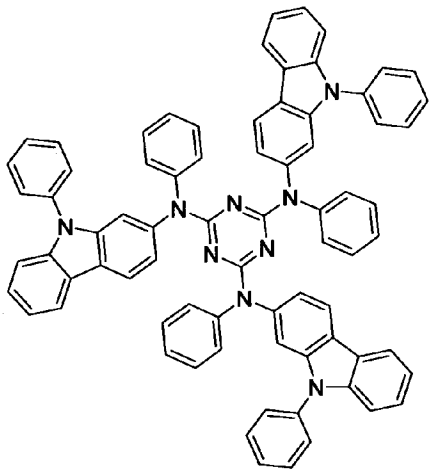
[化313]

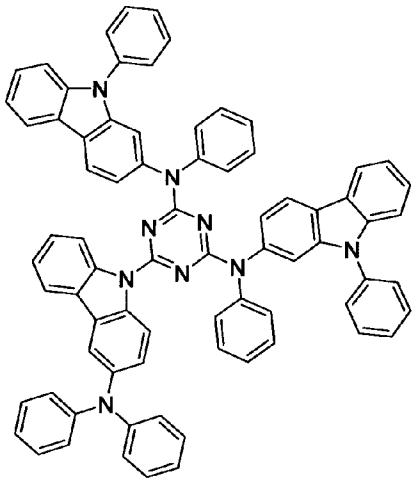






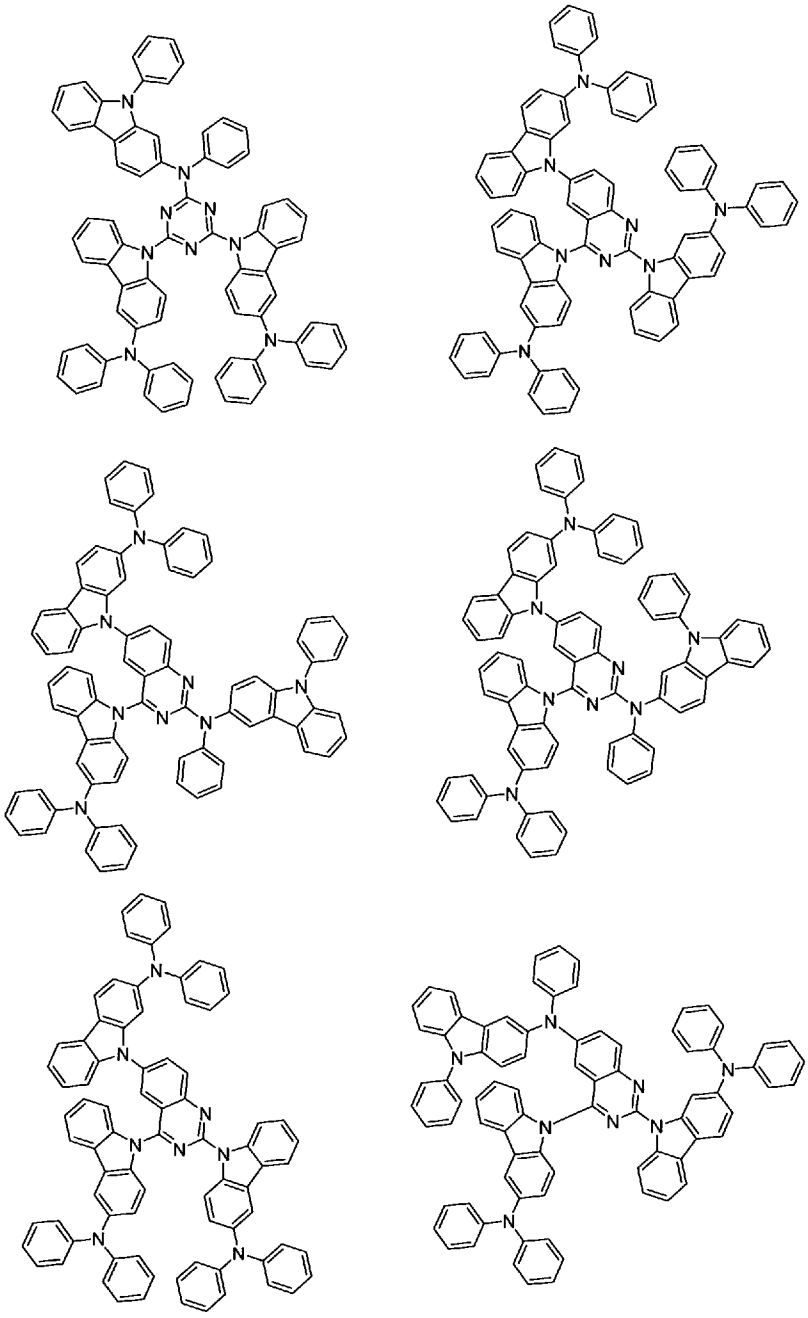






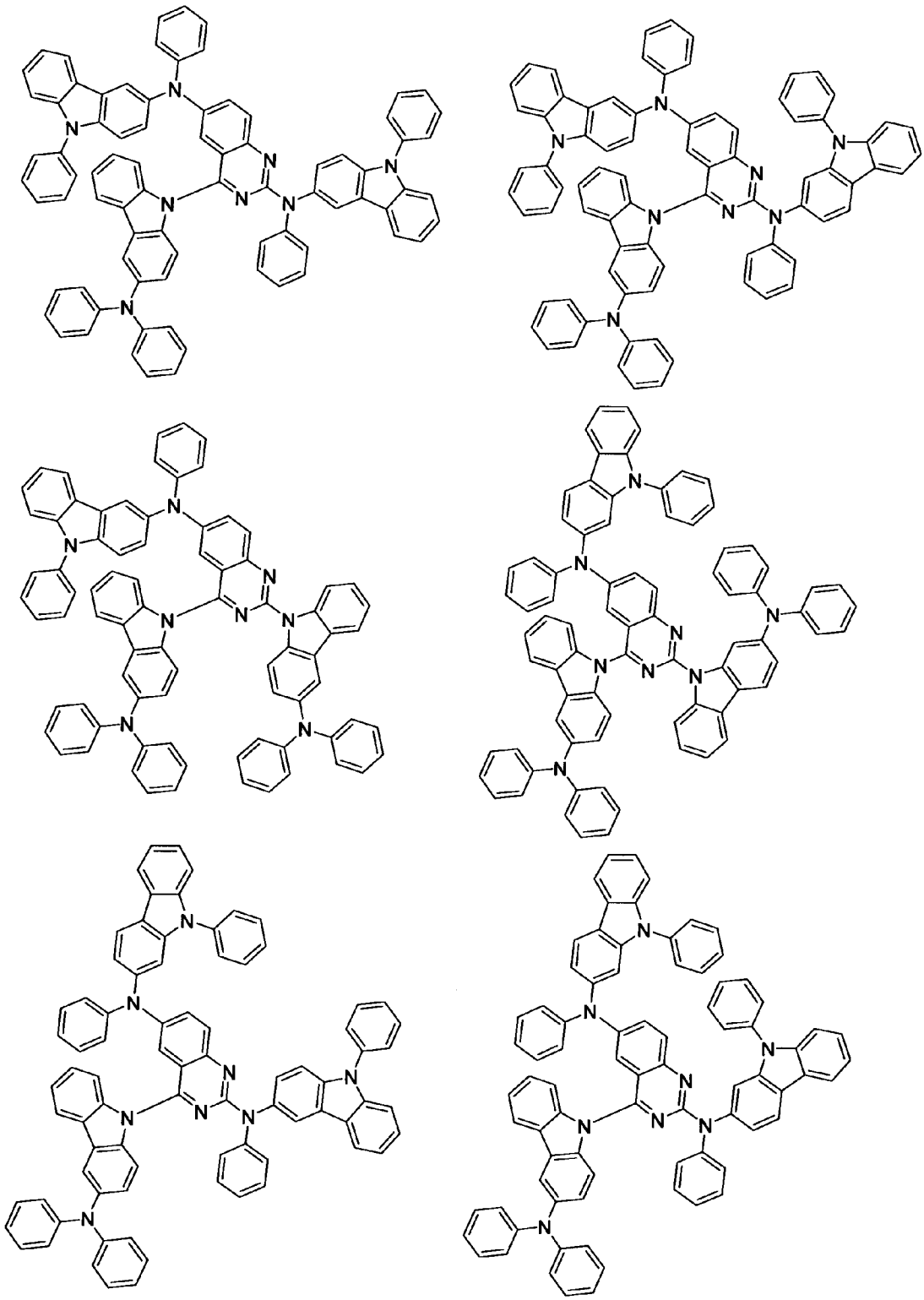
[0454]

[化314]



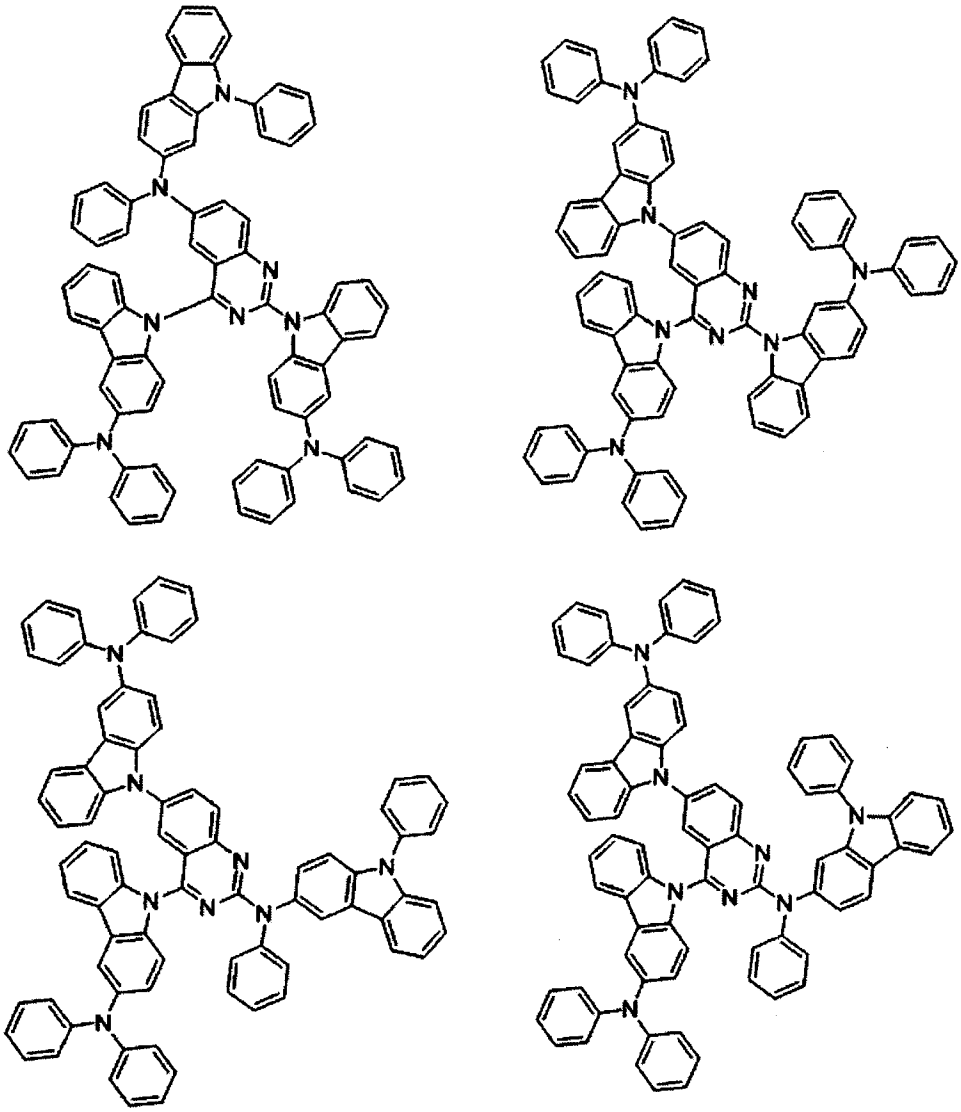
[0455]

[化315]



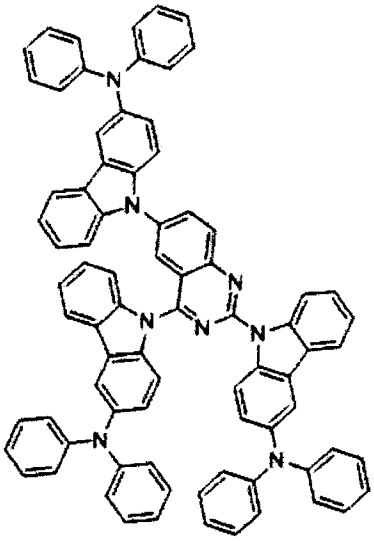
[0456]

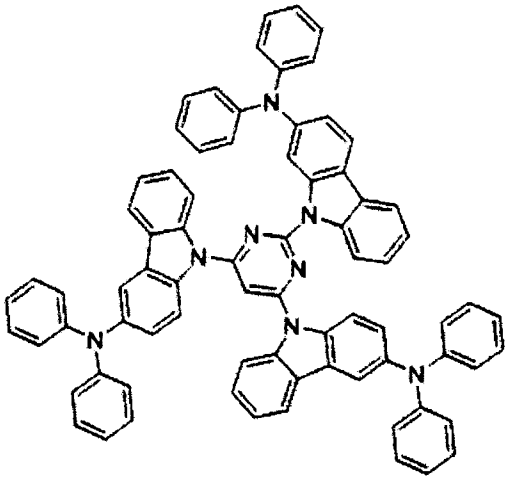
[化316]

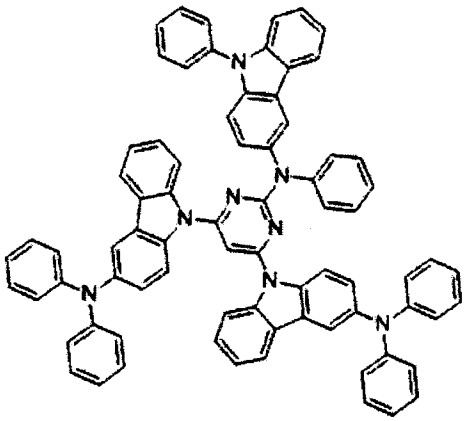


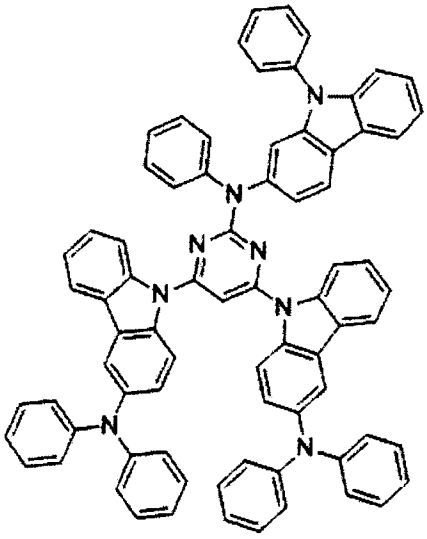
[0457]

[化317]



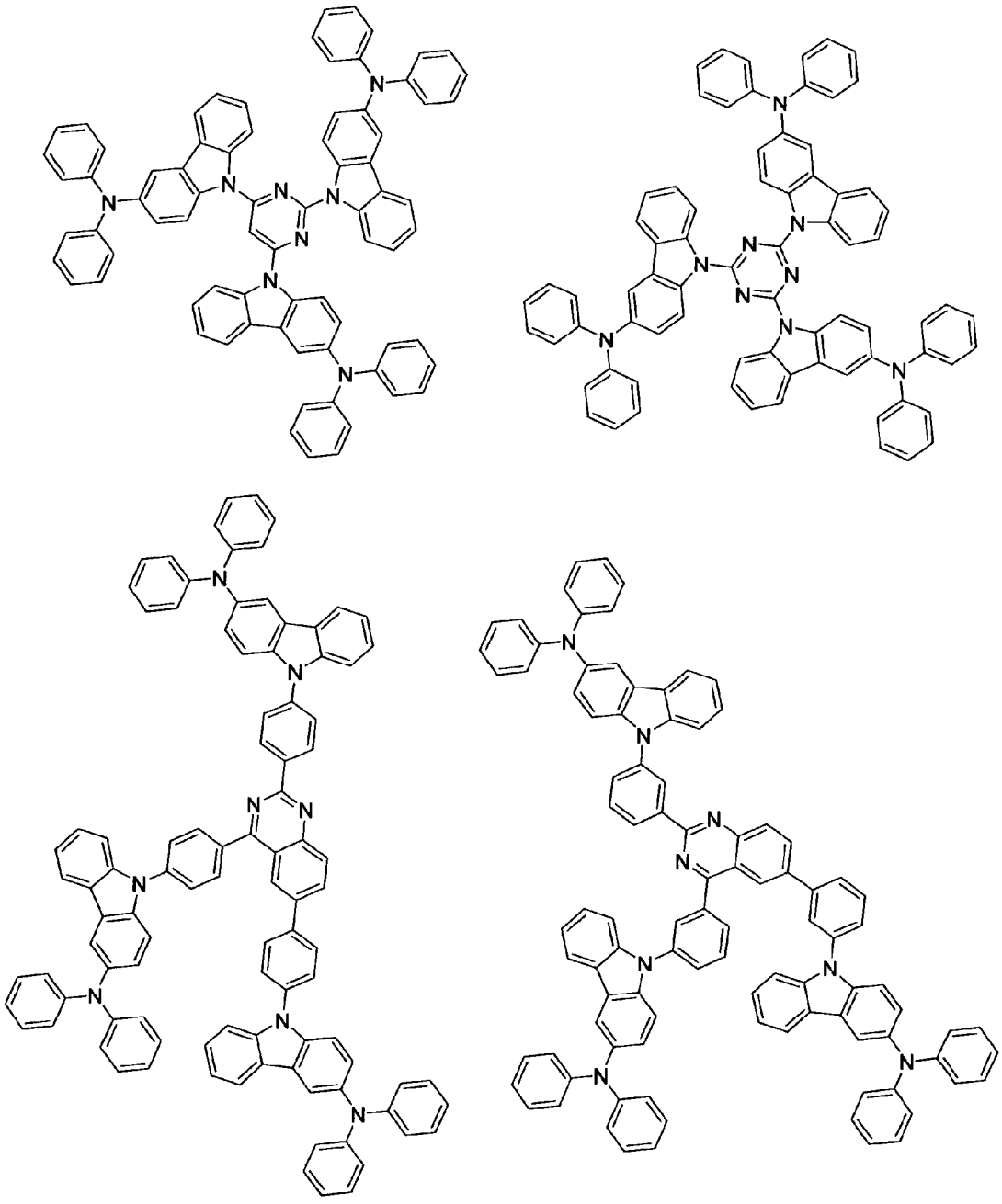






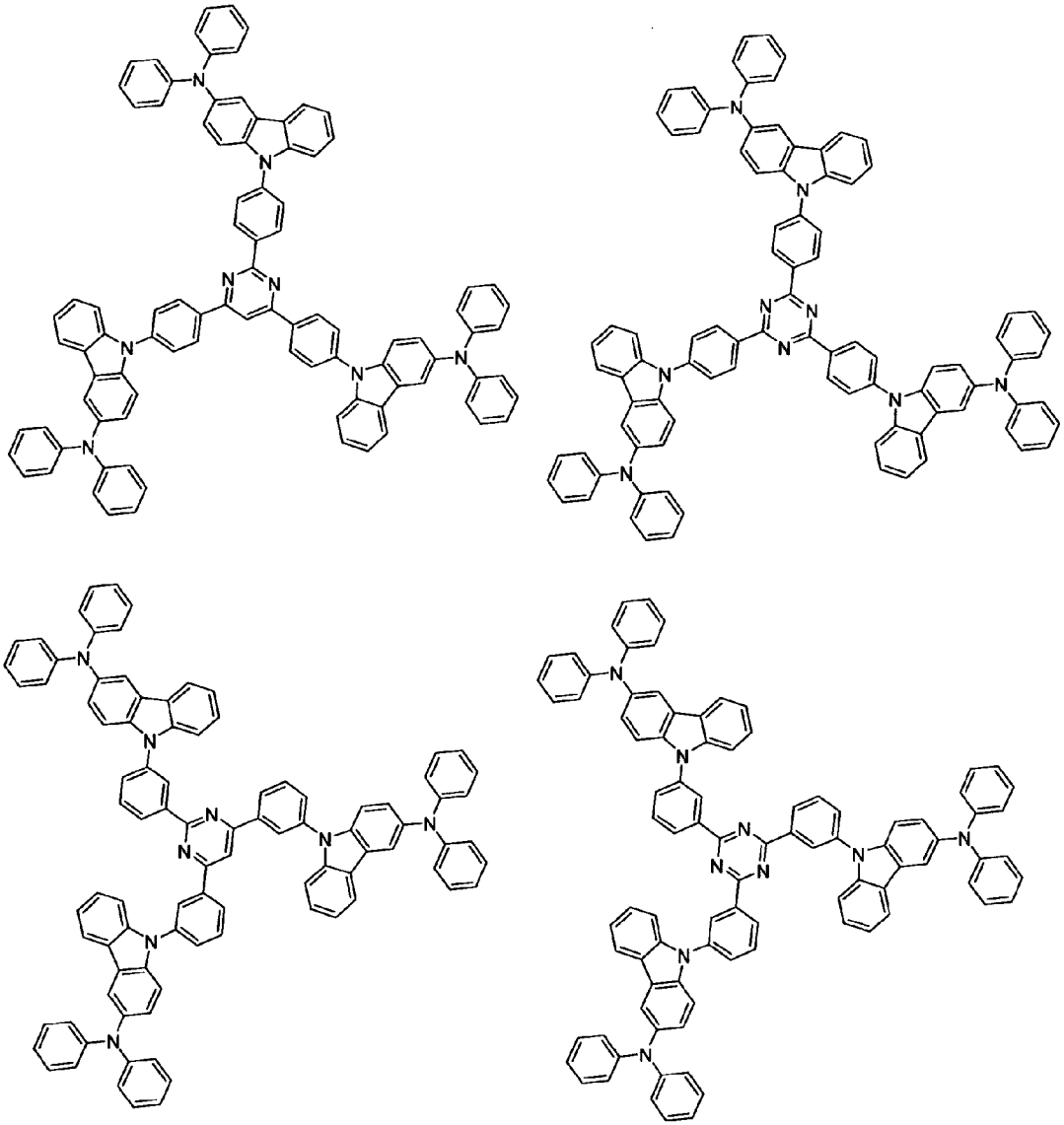
[0458]

[化318]



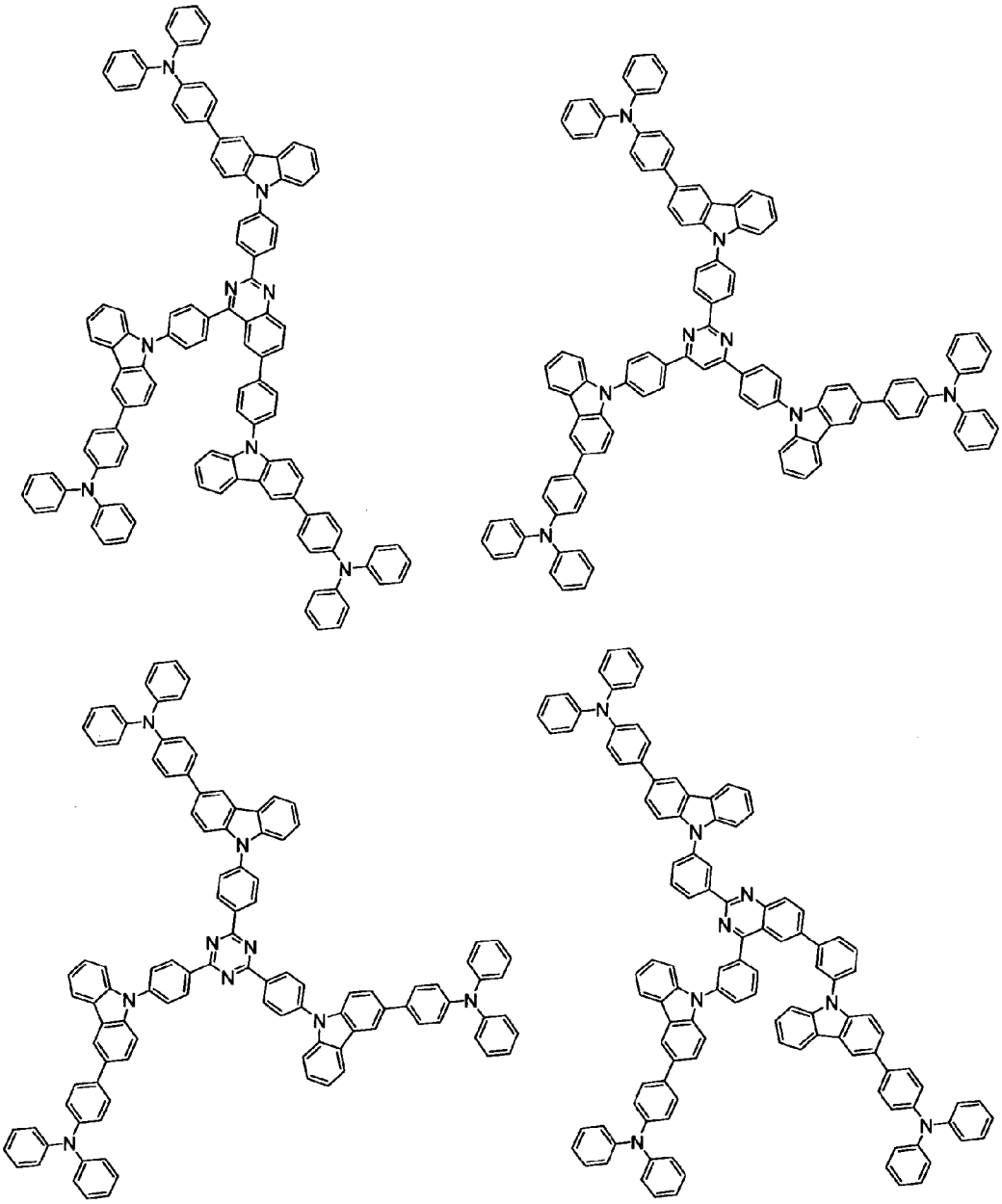
[0459]

[化319]



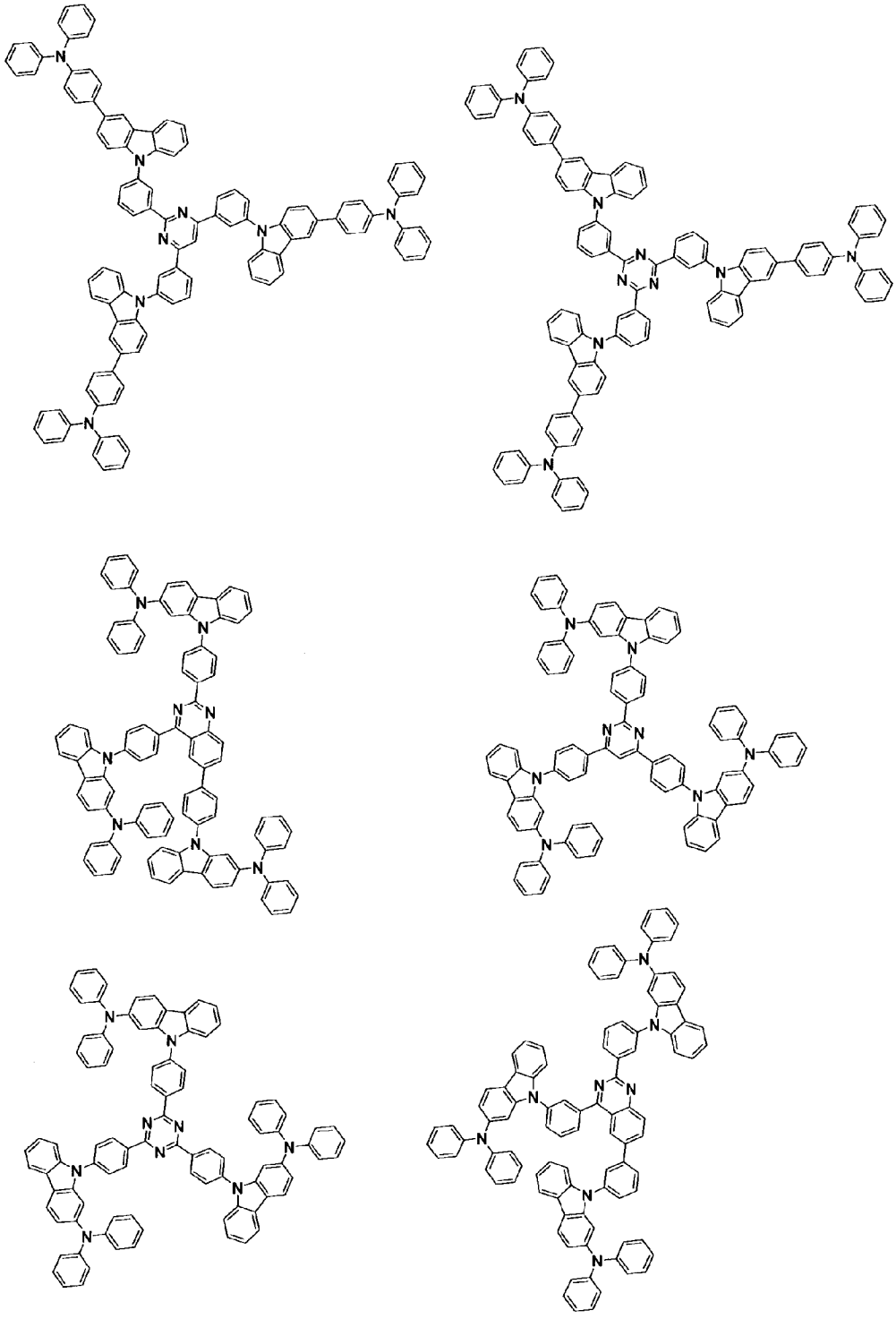
[0460]

[化320]



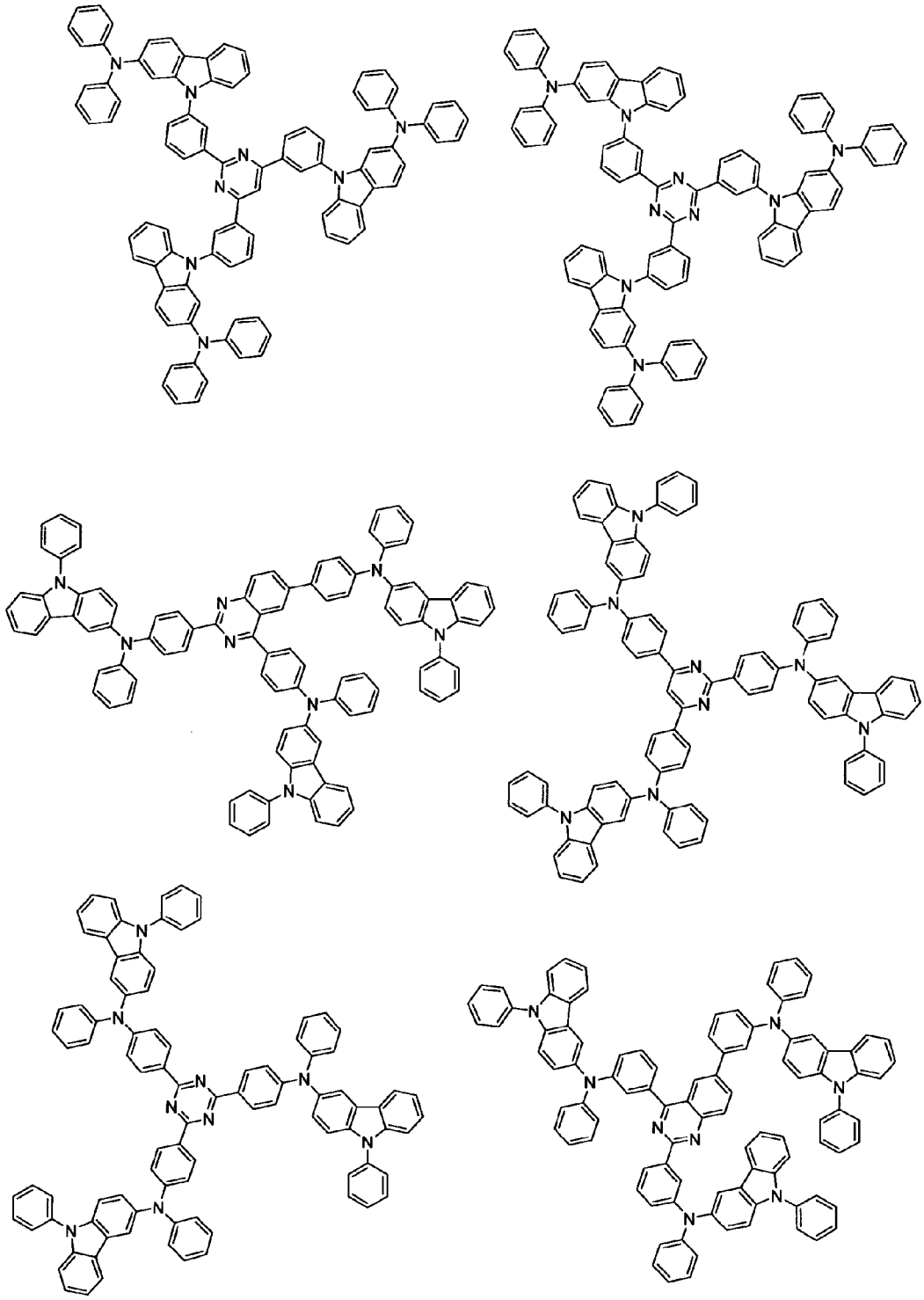
[0461]

[化321]



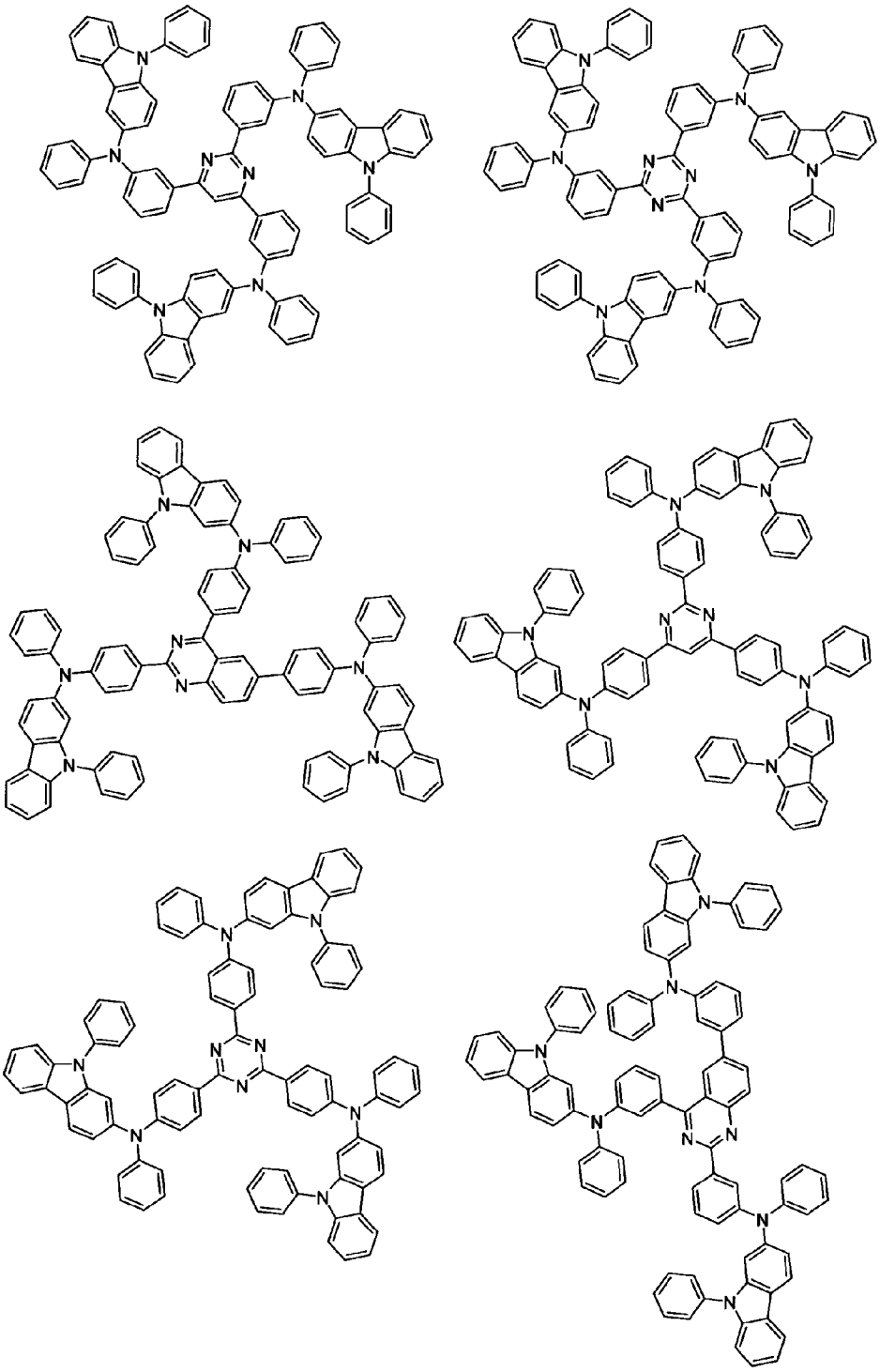
[0462]

[化322]



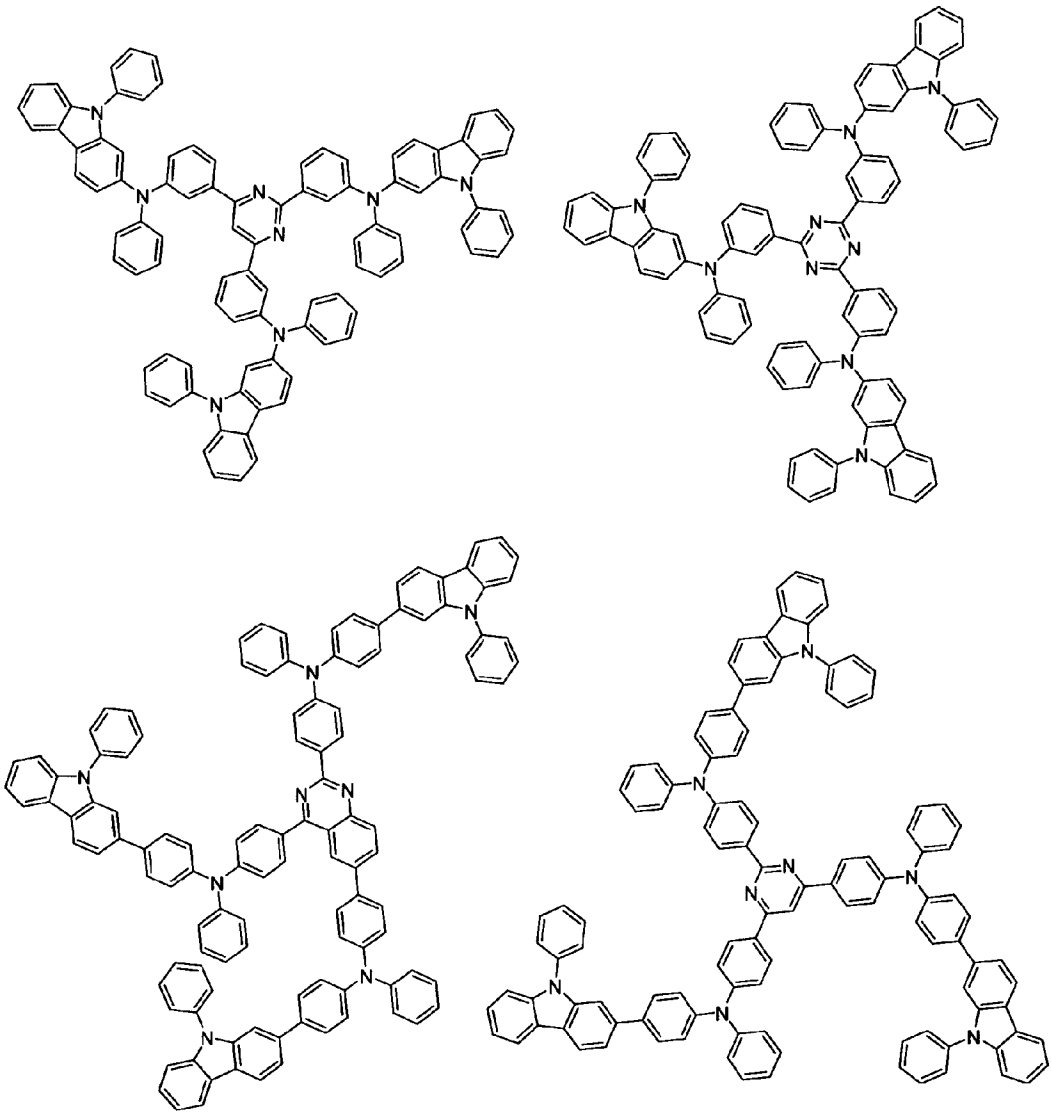
[0463]

[化323]



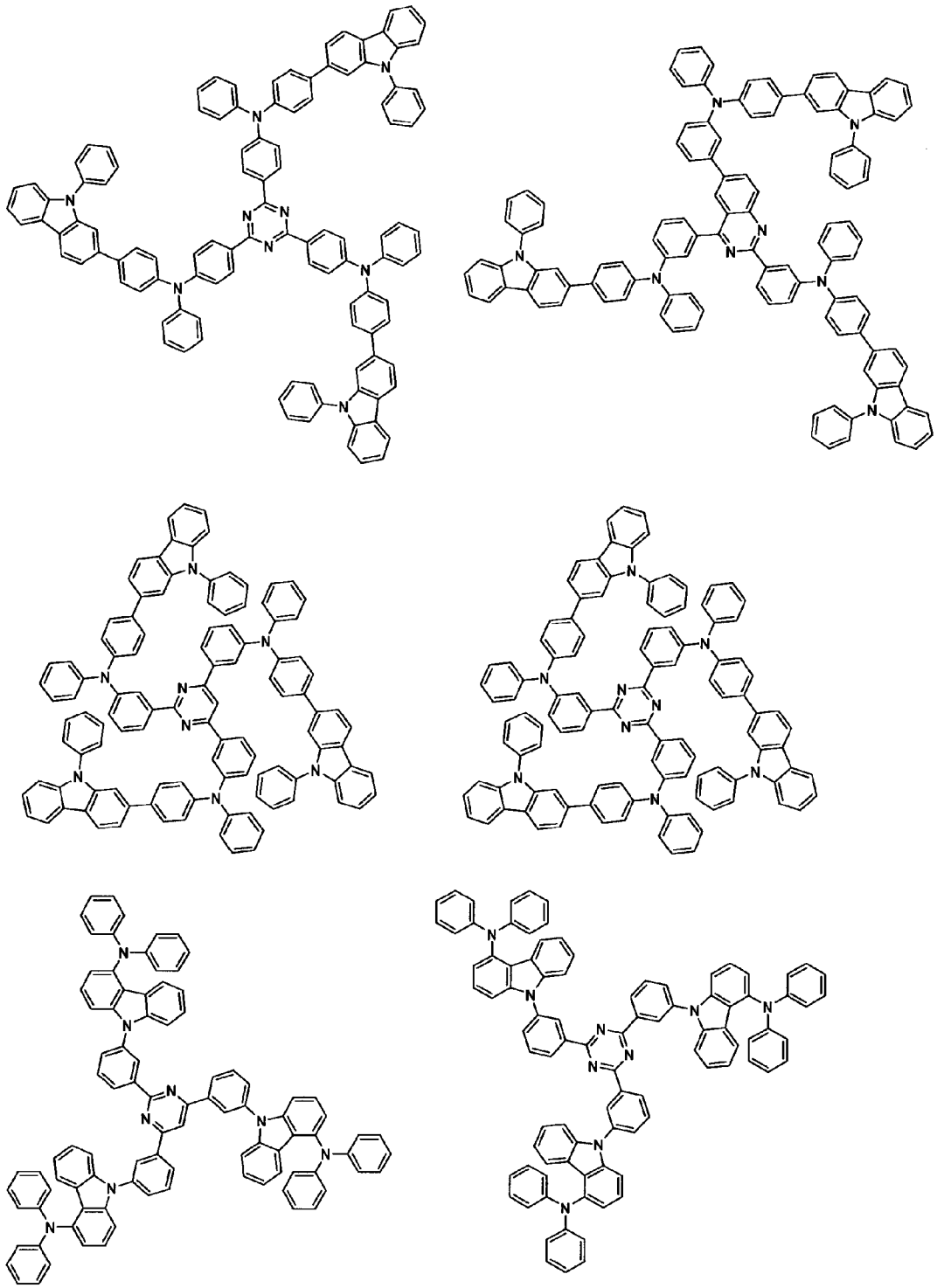
[0464]

[化324]



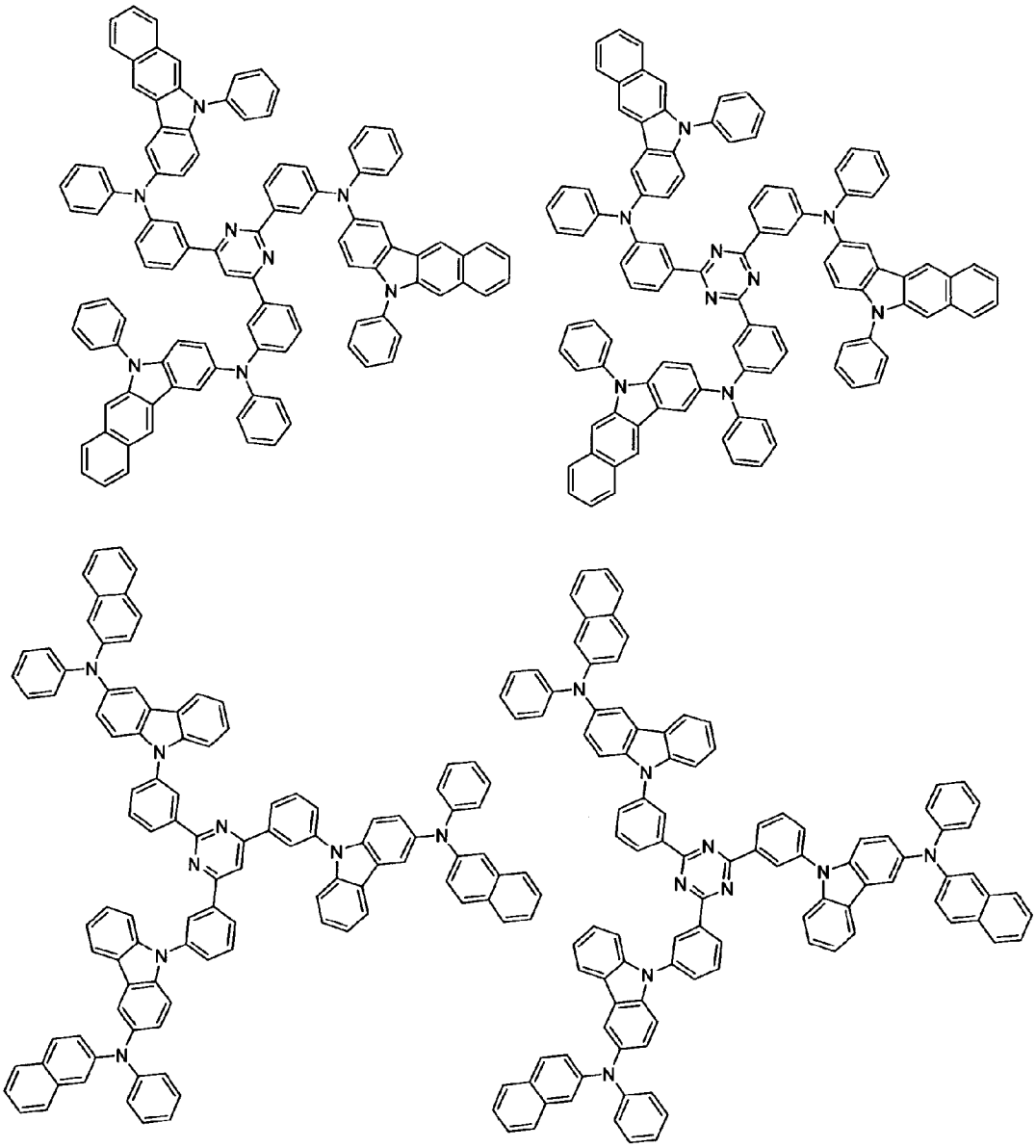
[0465]

[化325]



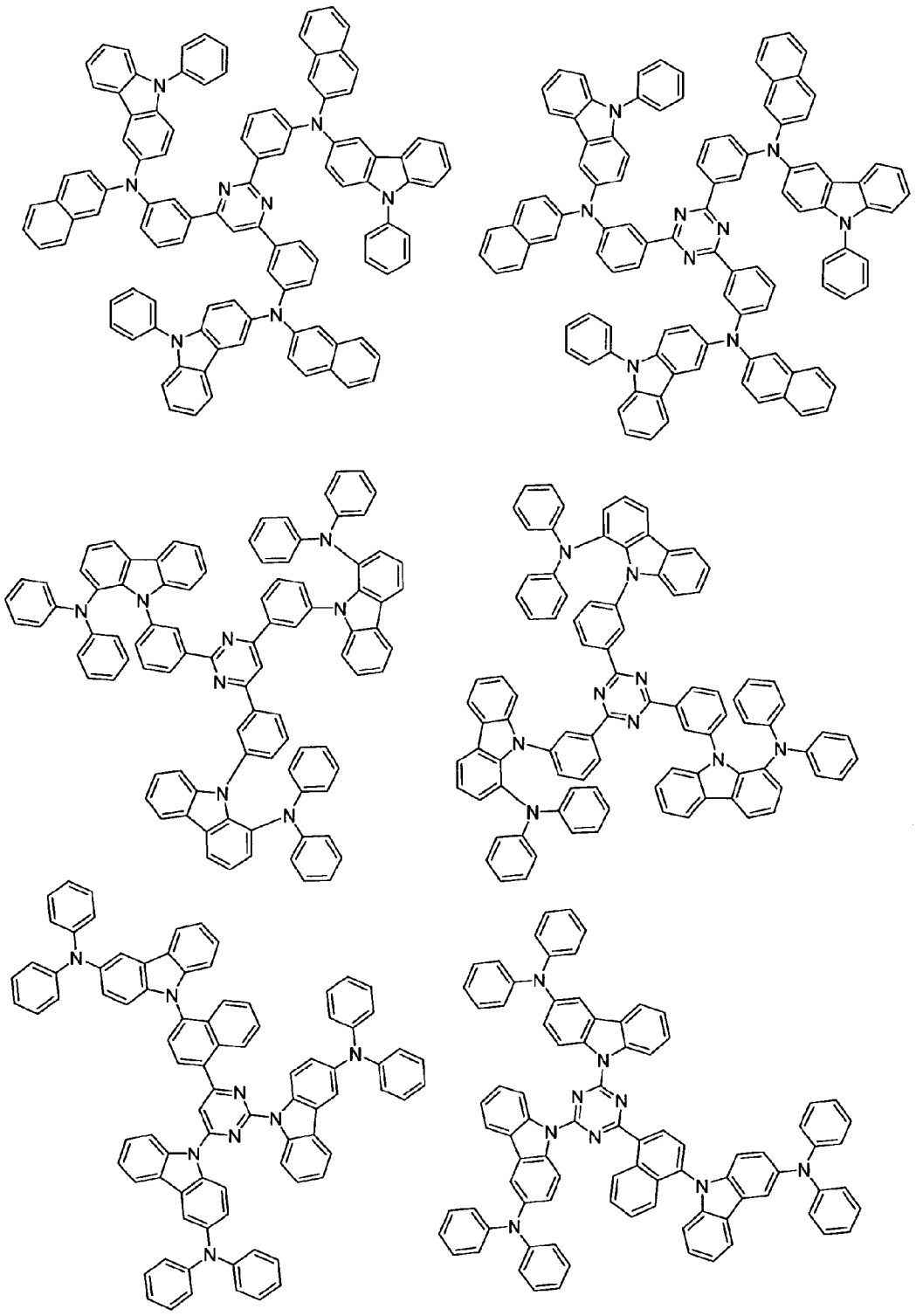
[0466]

[化326]



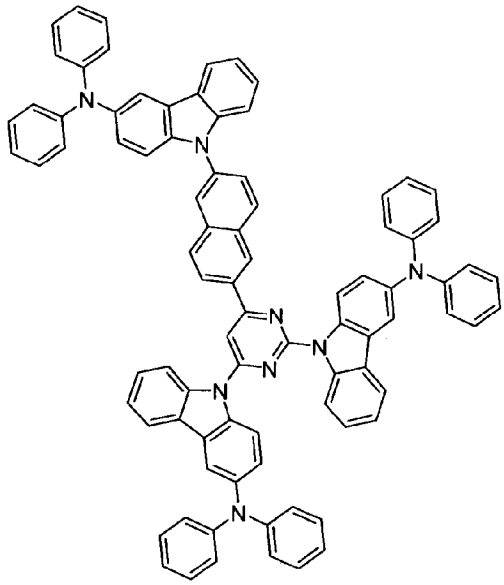
[0467]

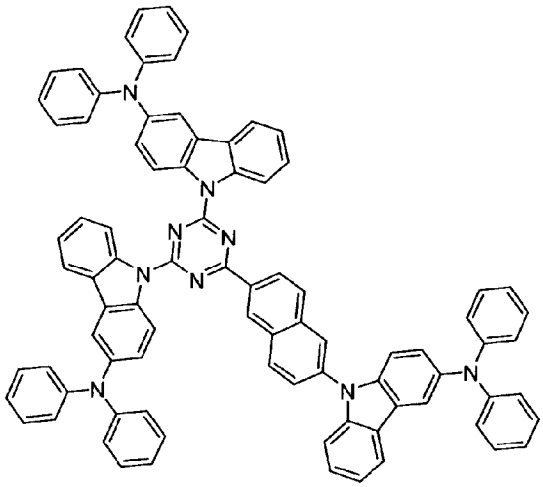
[化327]

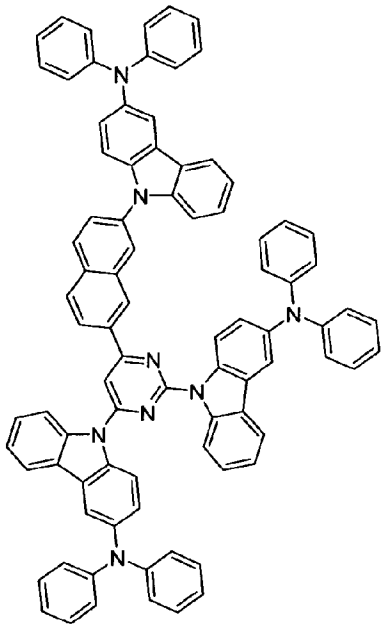


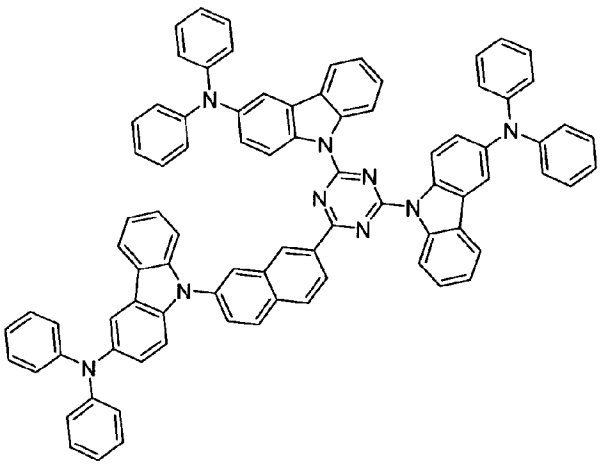
[0468]

[化328]



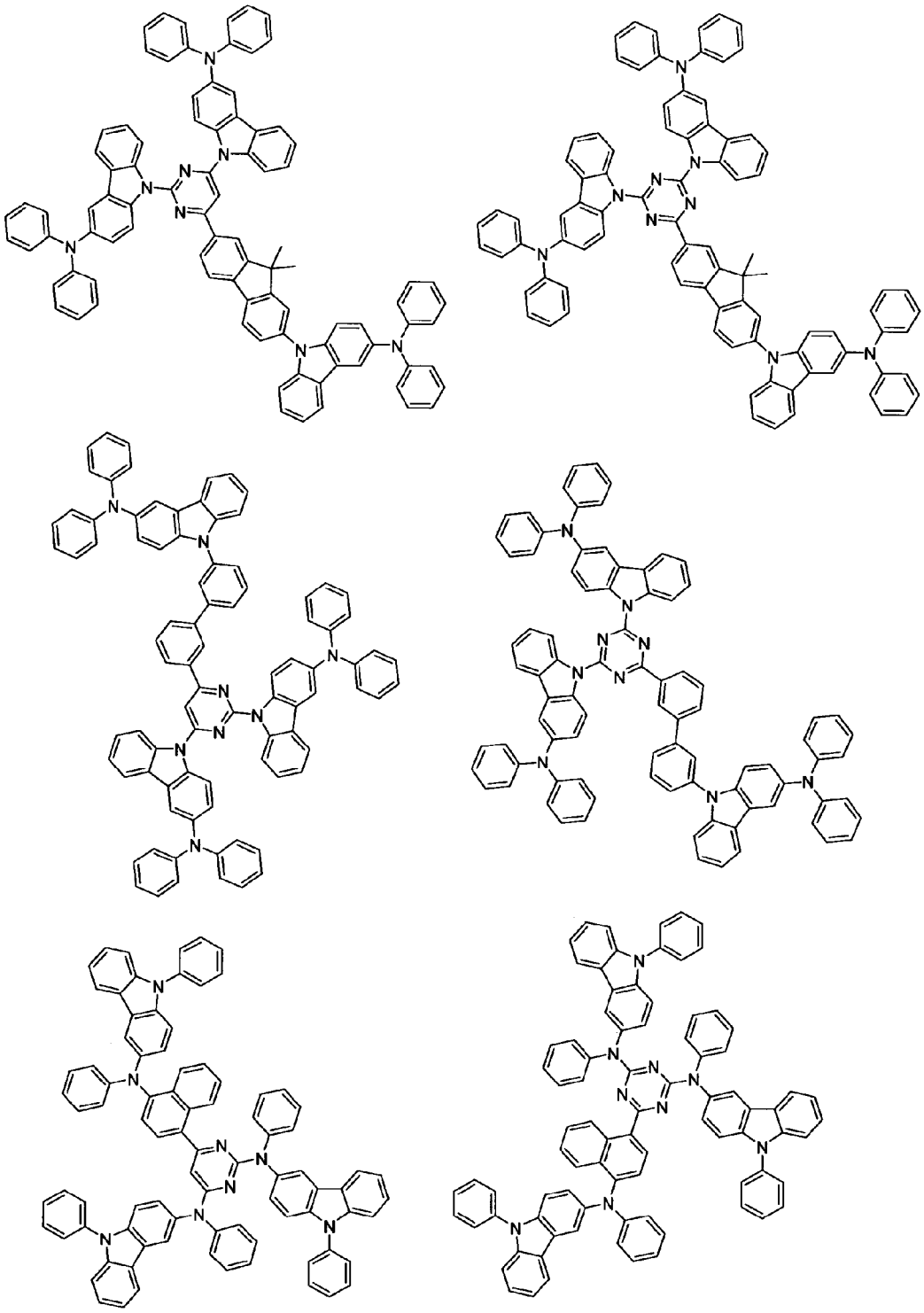






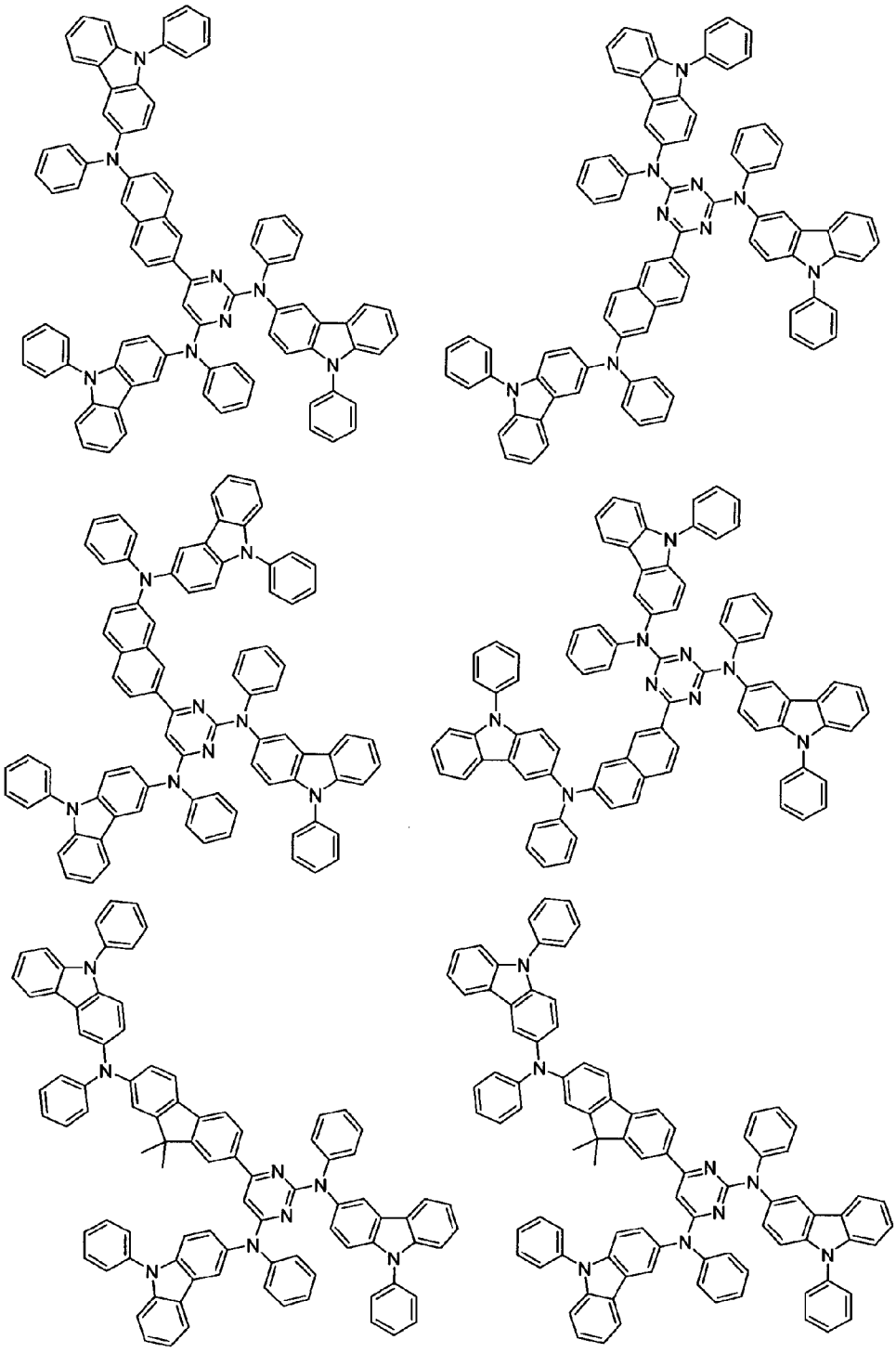
[0469]

[化329]



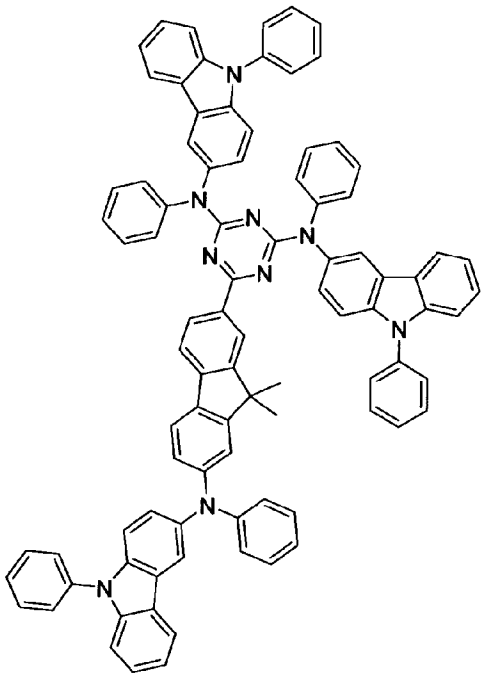
[0470]

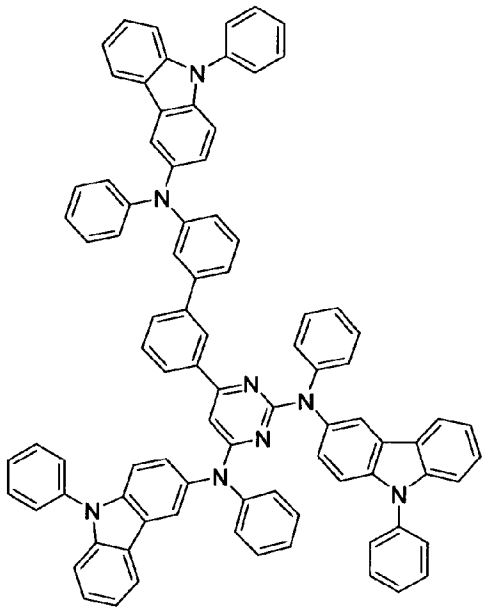
[化330]

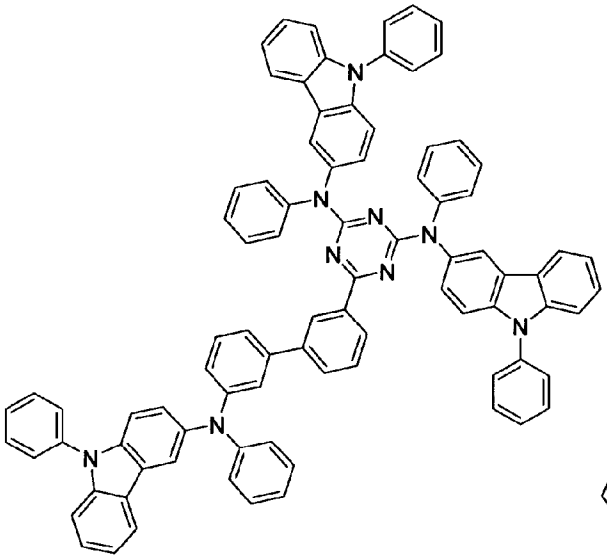


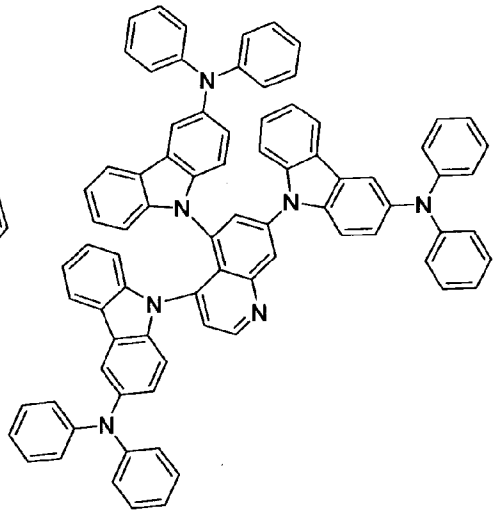
[0471]

[化331]



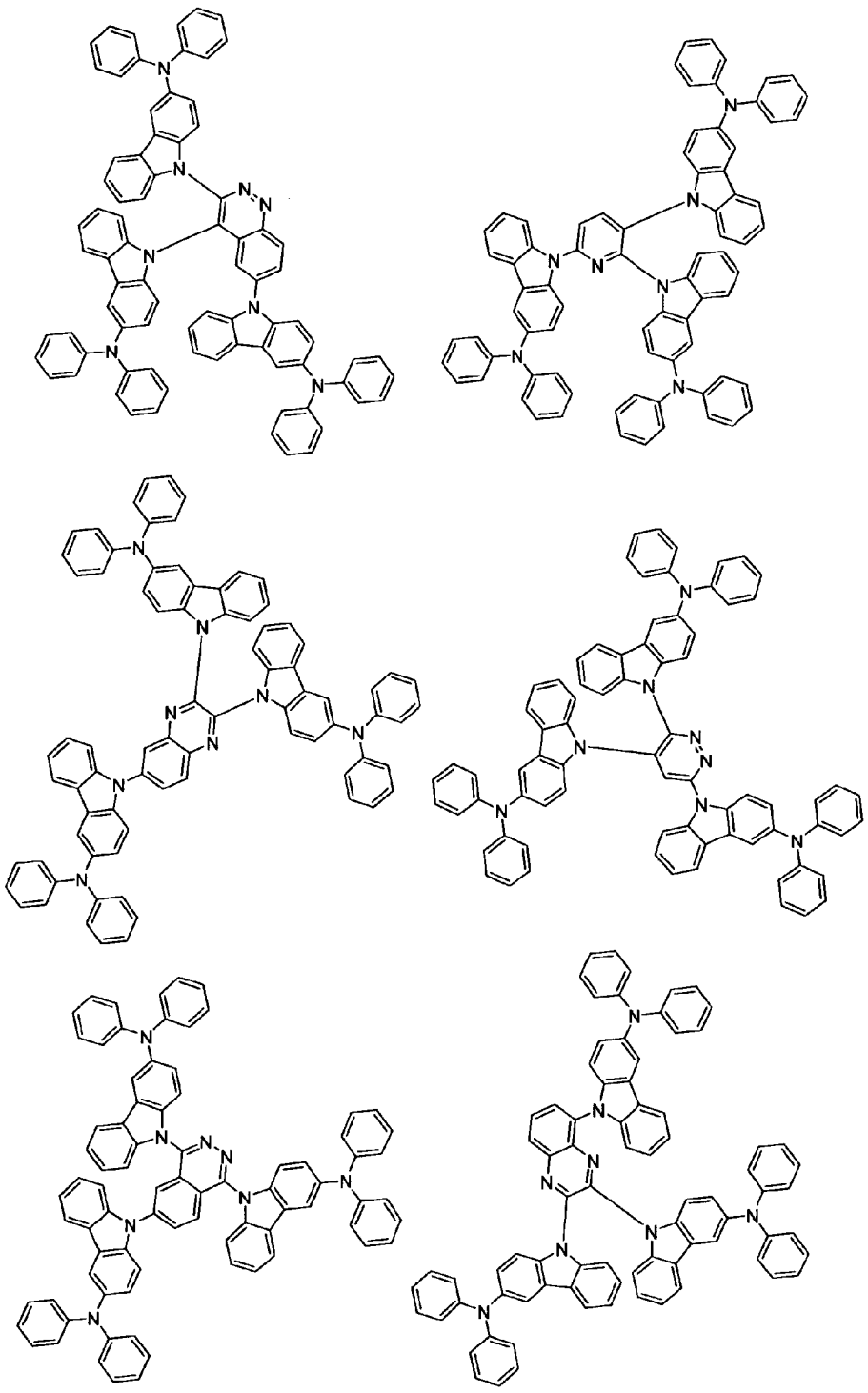






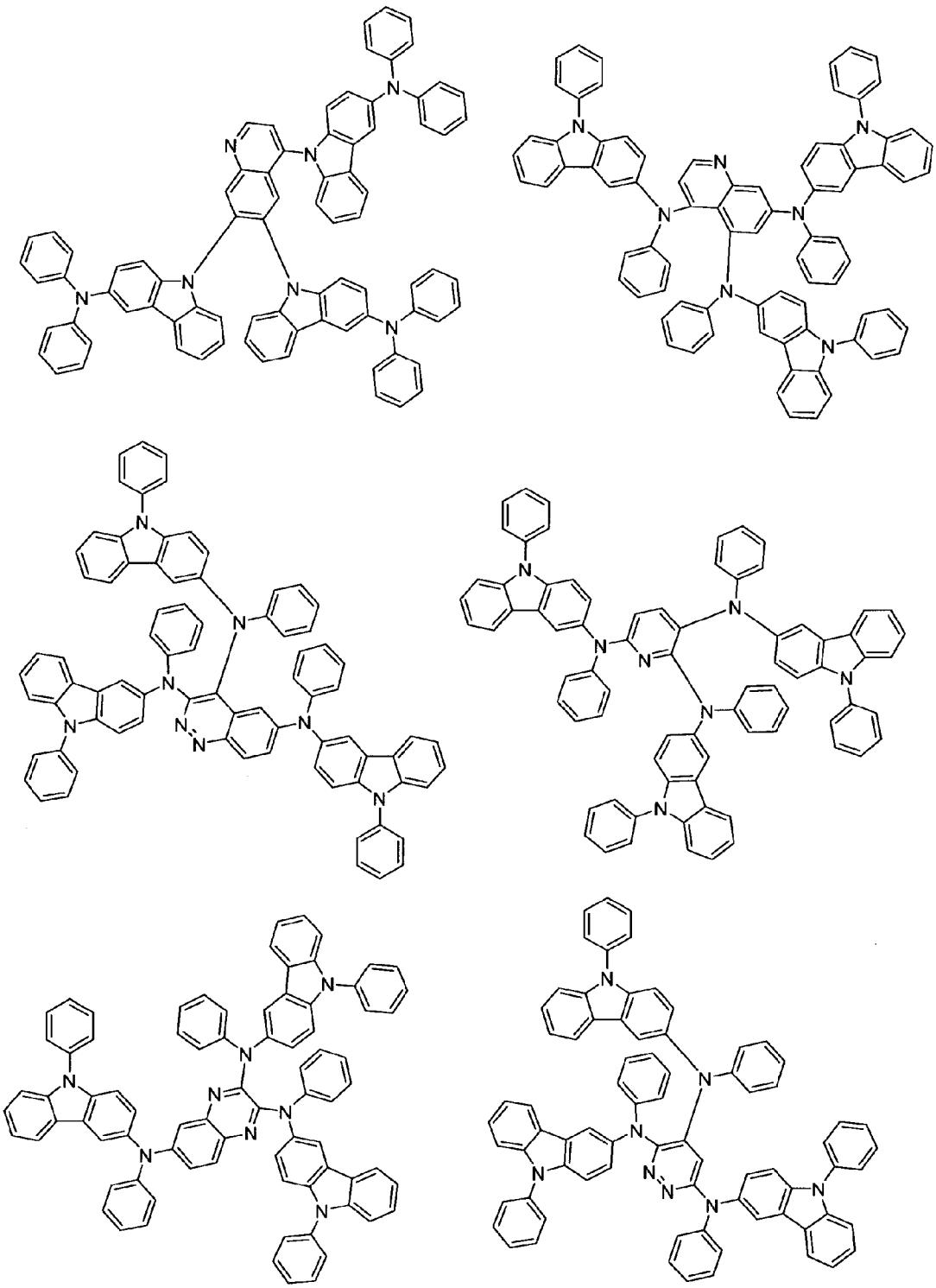
[0472]

[化332]



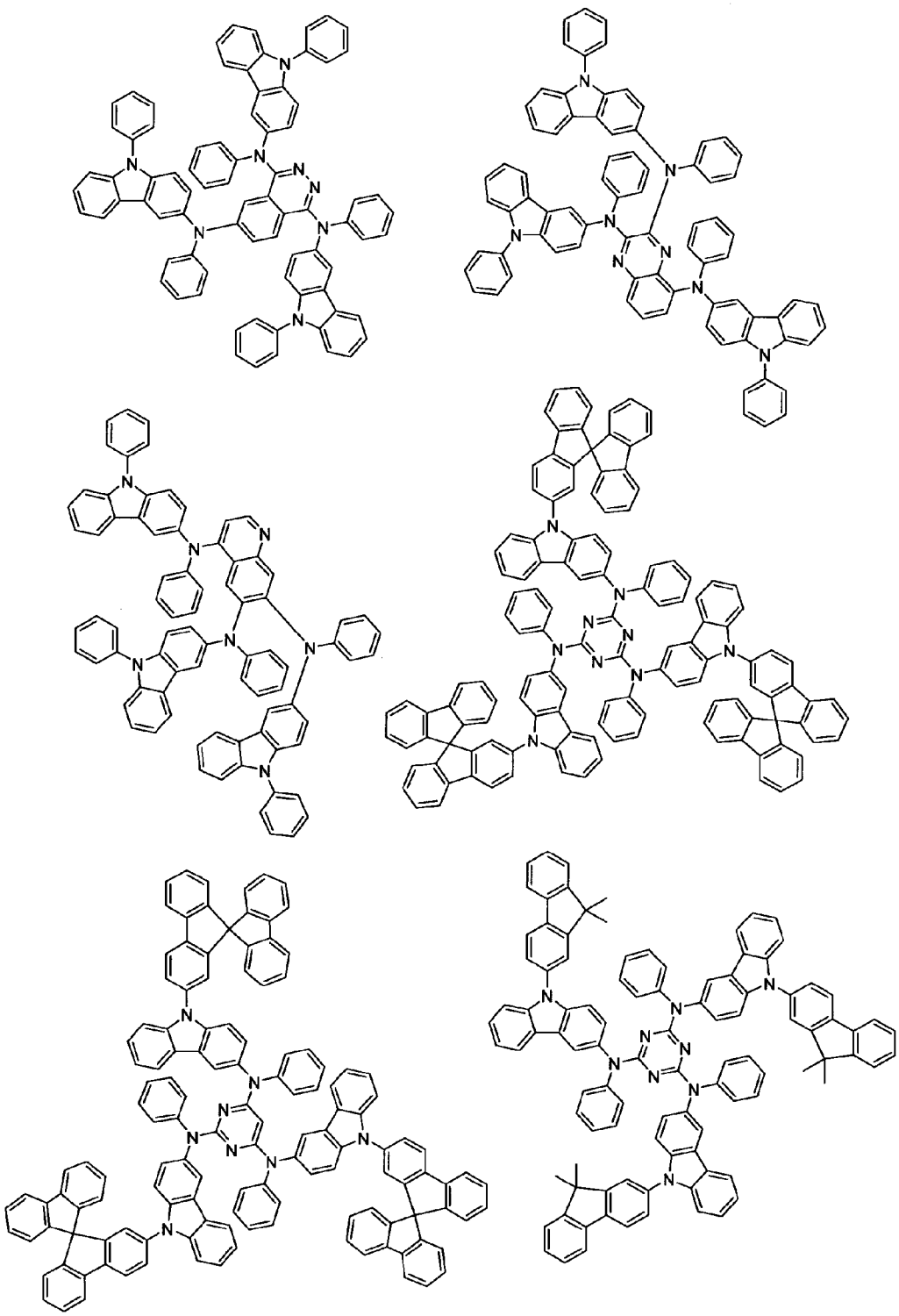
[0473]

[化333]



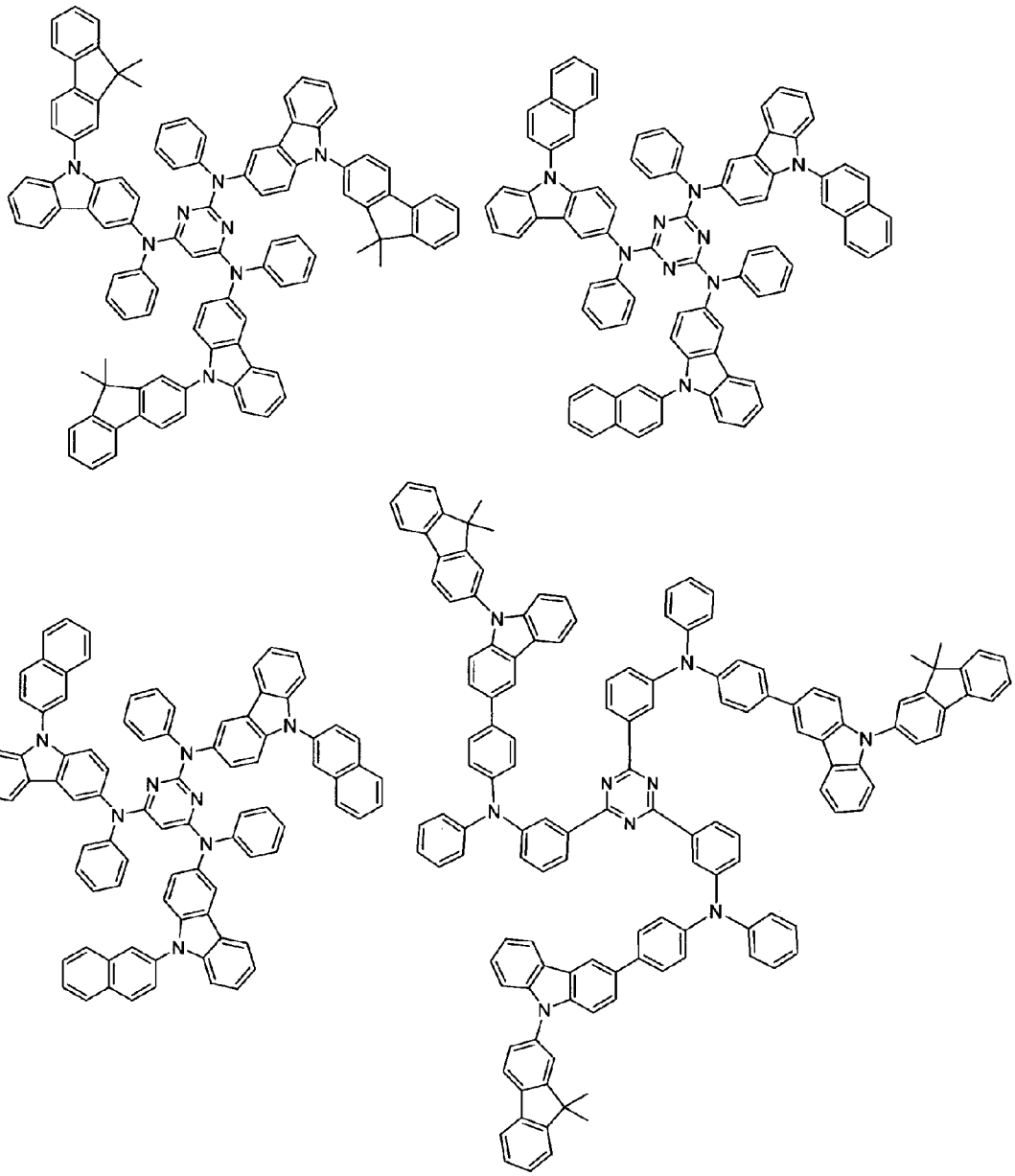
[0474]

[化334]



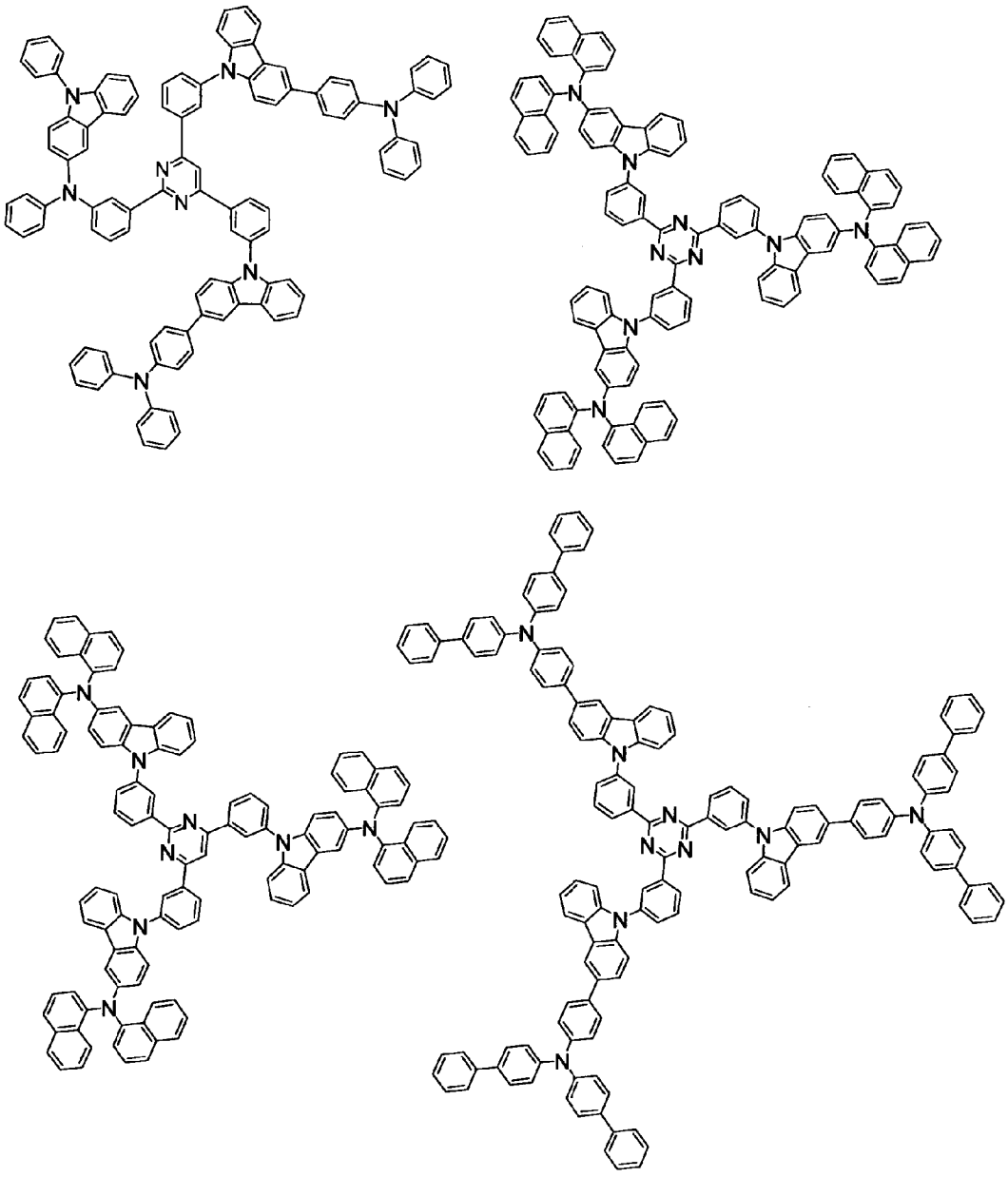
[0475]

[化335]



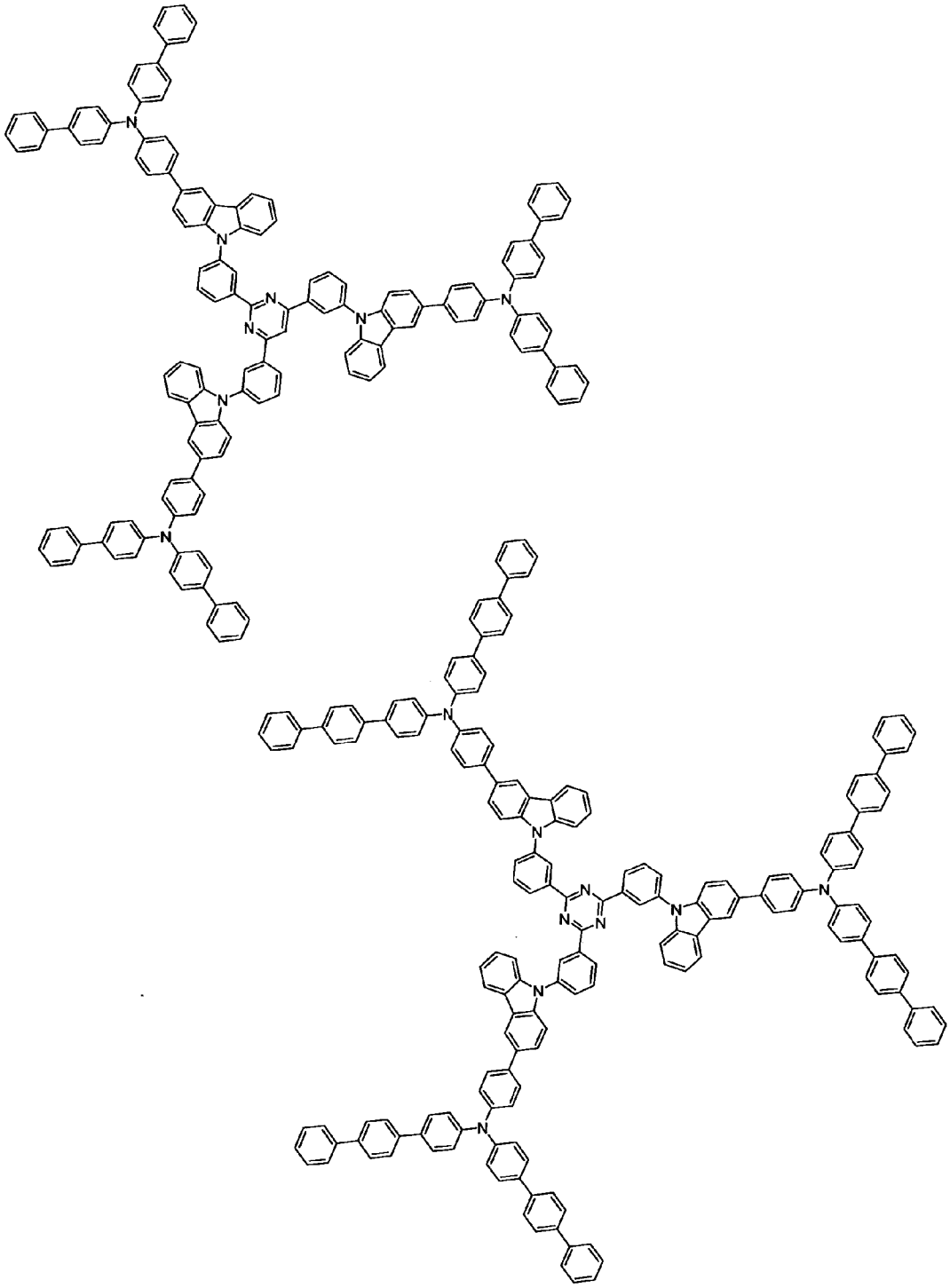
[0476]

[化336]



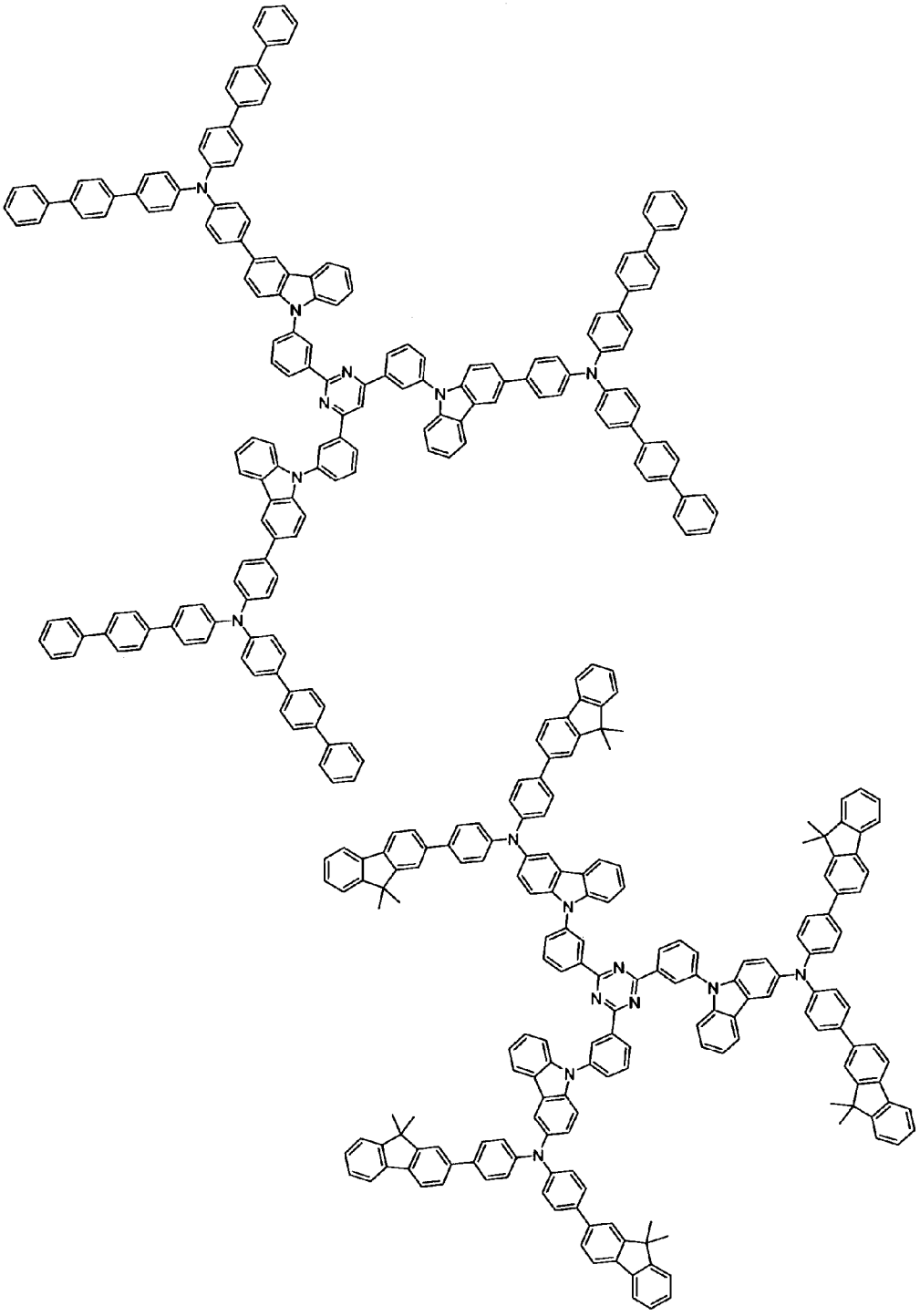
[0477]

[化337]



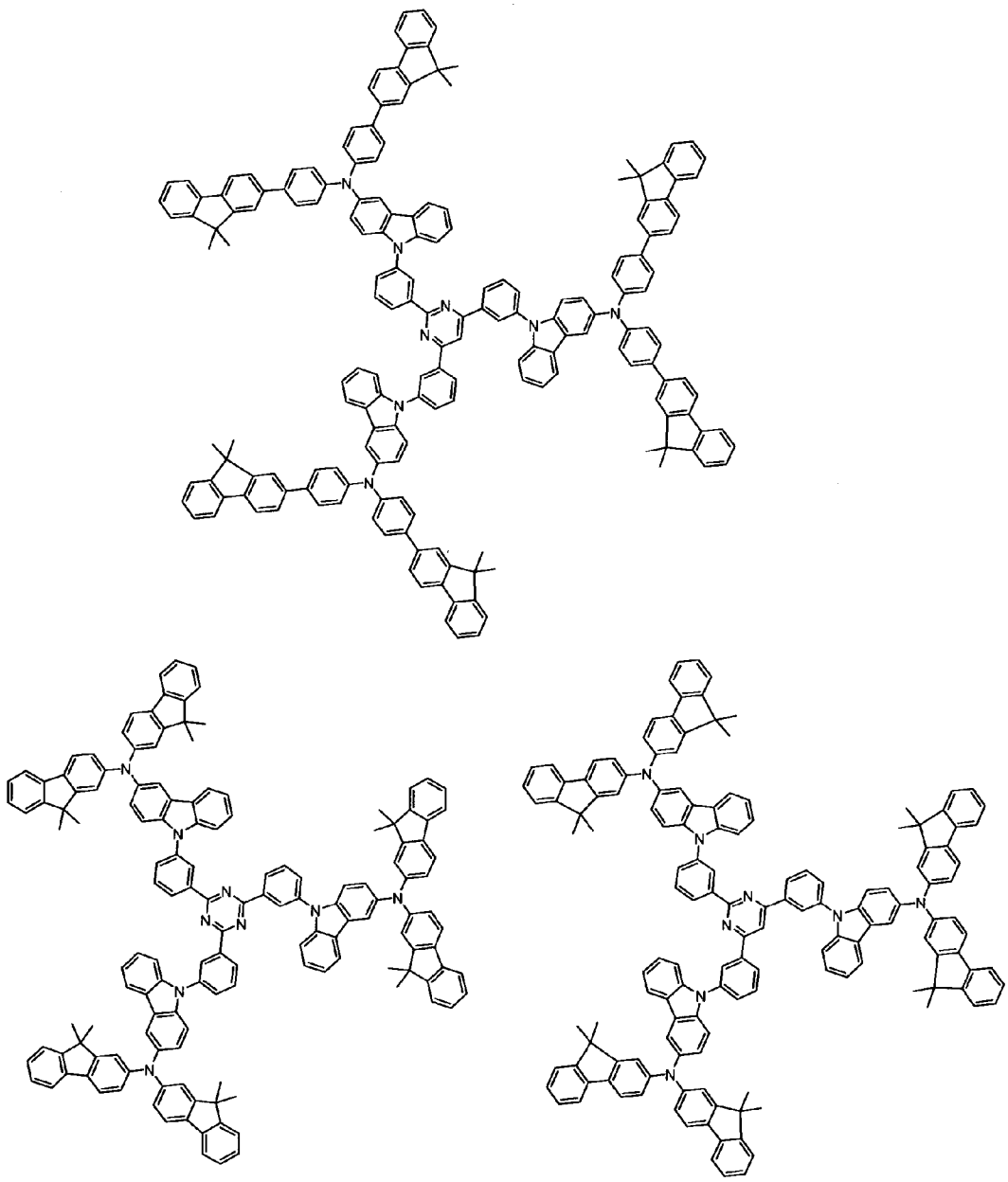
[0478]

[化338]



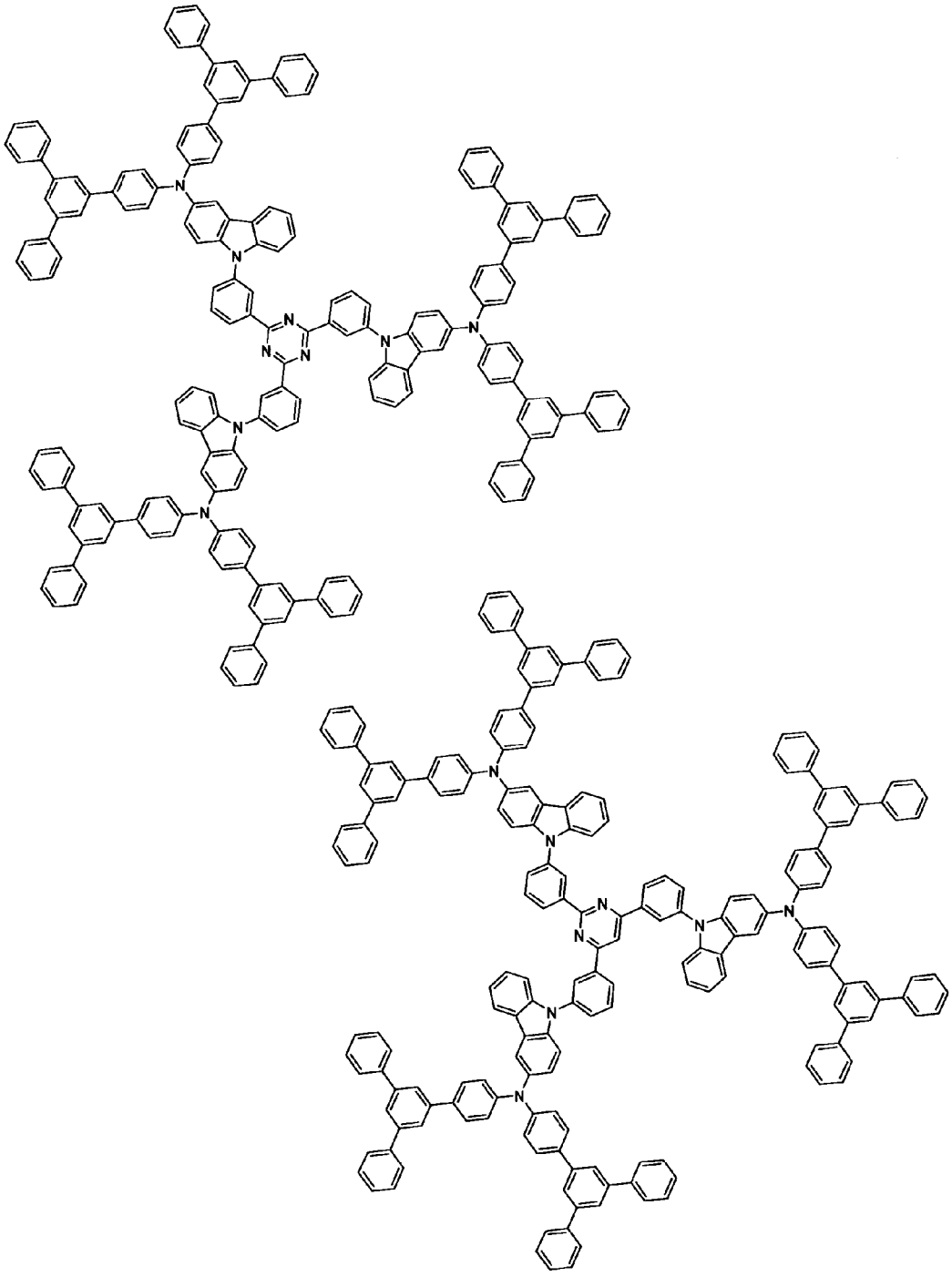
[0479]

[化339]



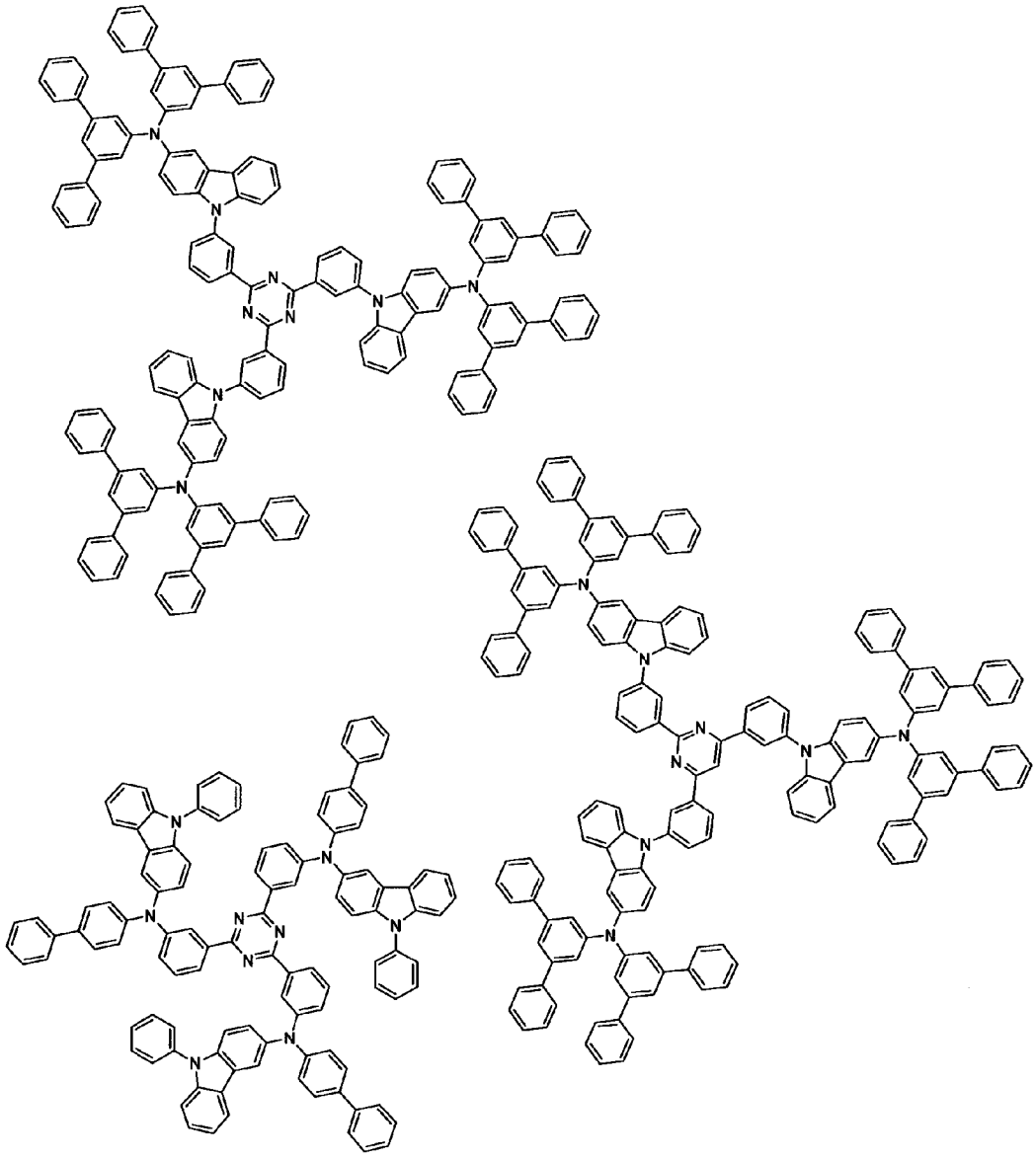
[0480]

[化340]



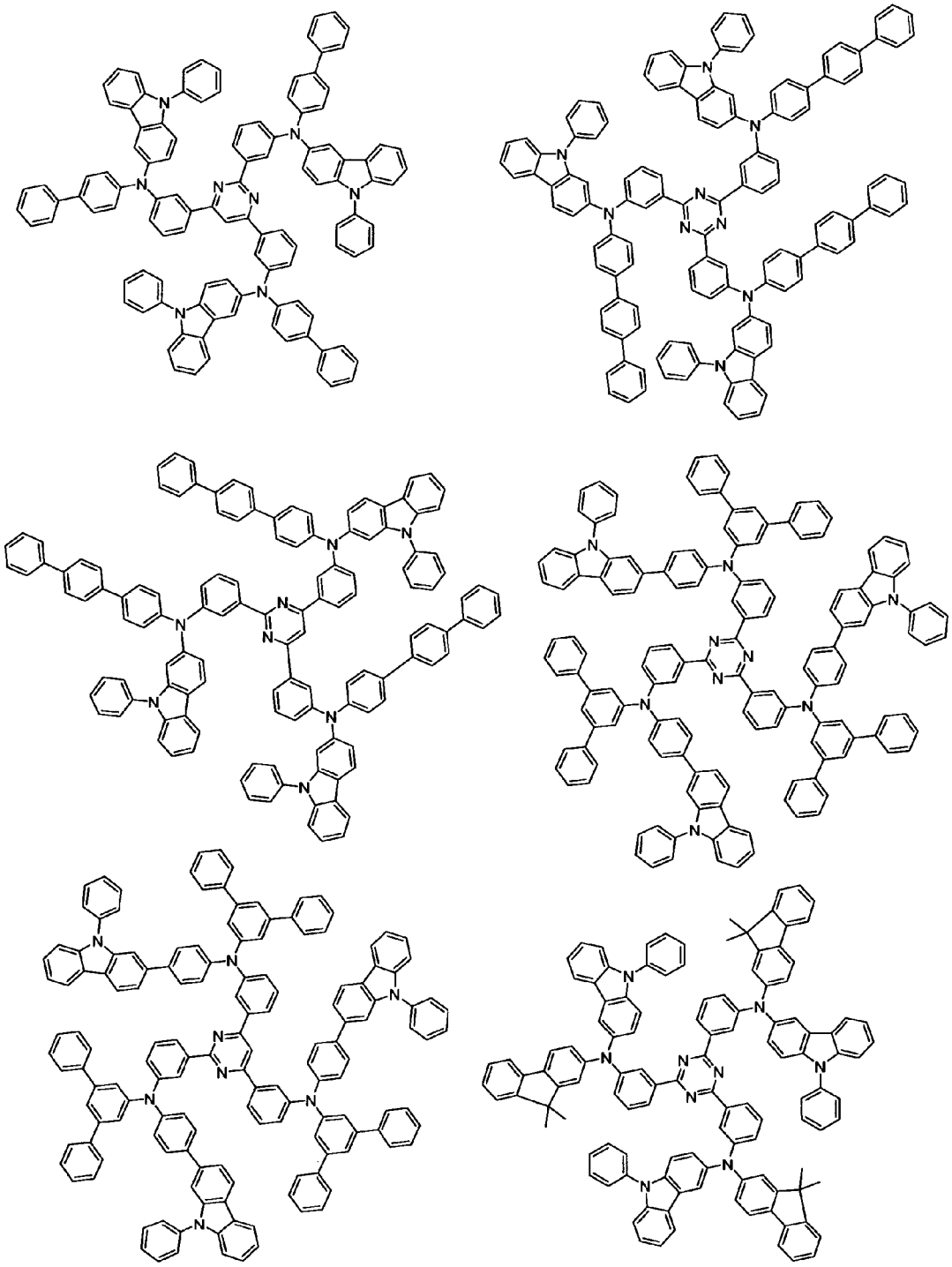
[0481]

[化341]



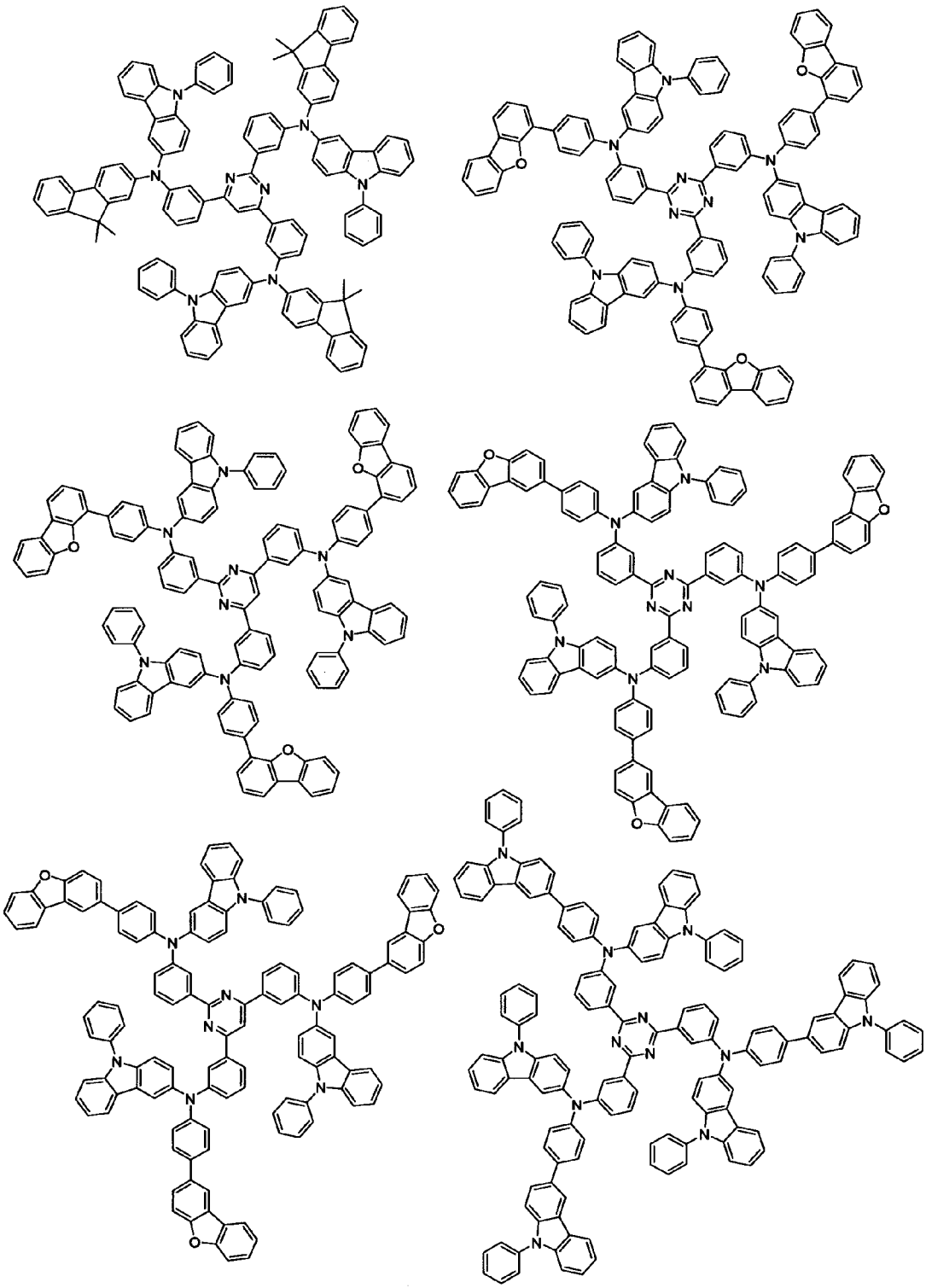
[0482]

[化342]



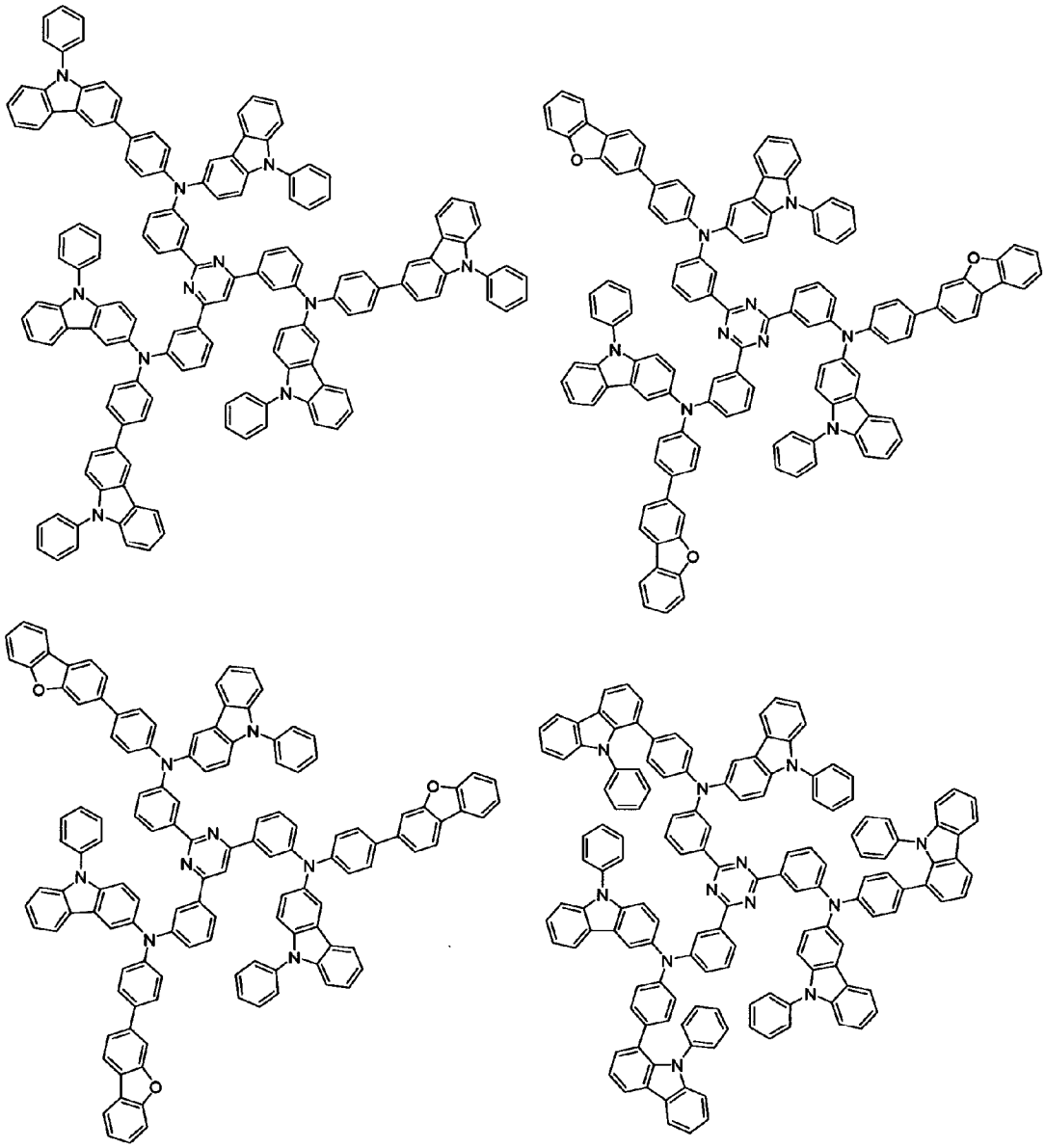
[0483]

[化343]



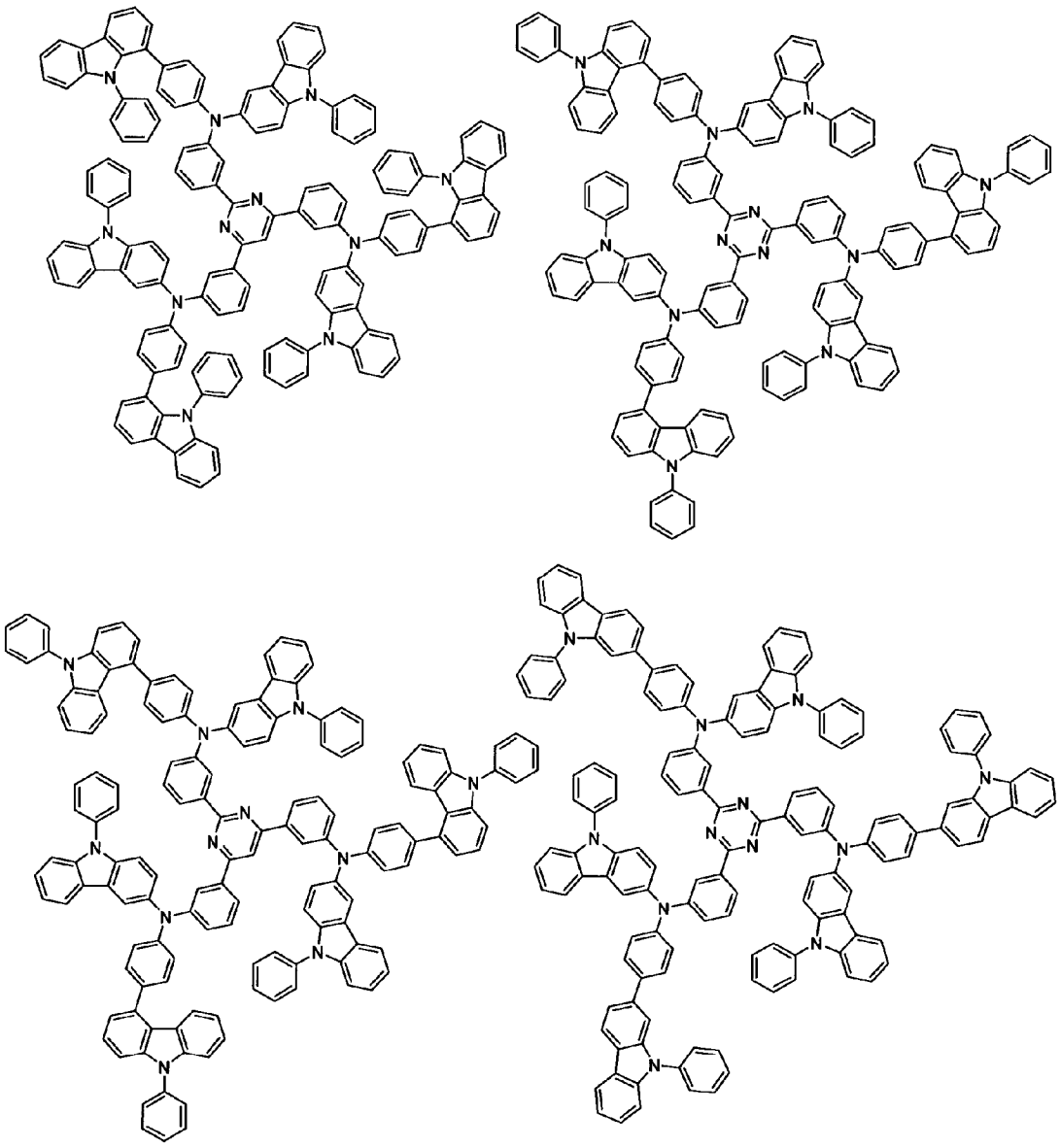
[0484]

[化344]



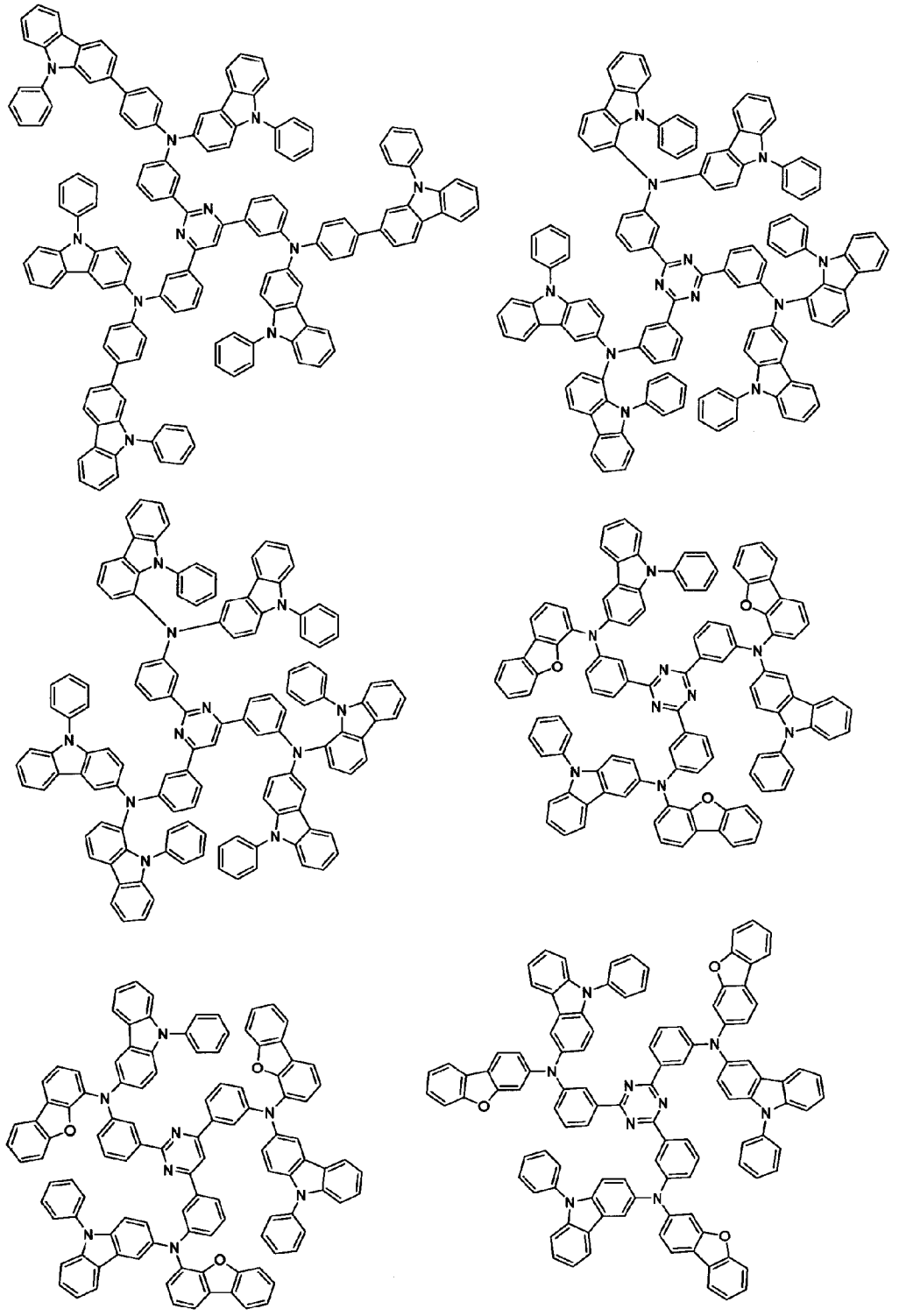
[0485]

[化345]



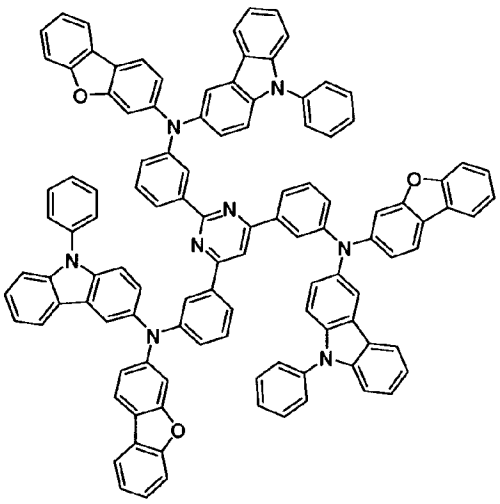
[0486]

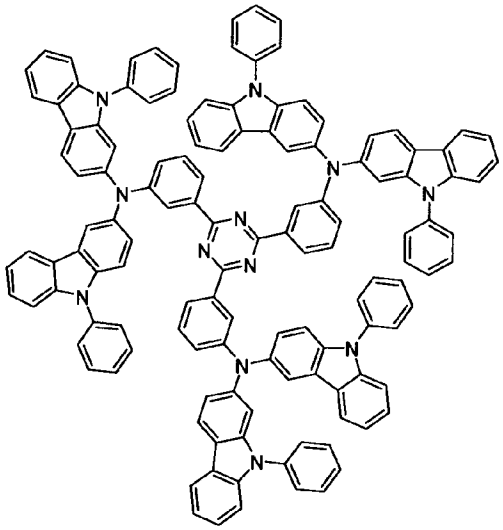
[化346]

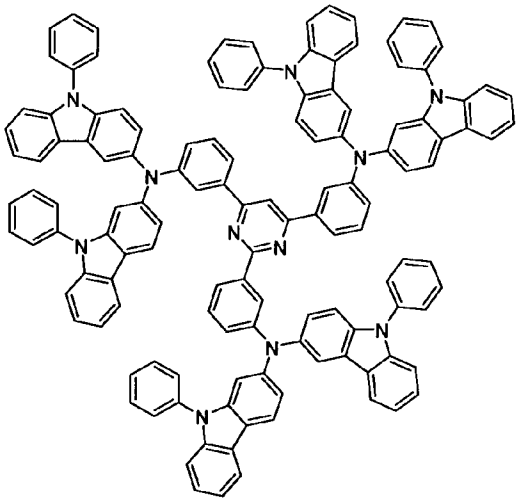


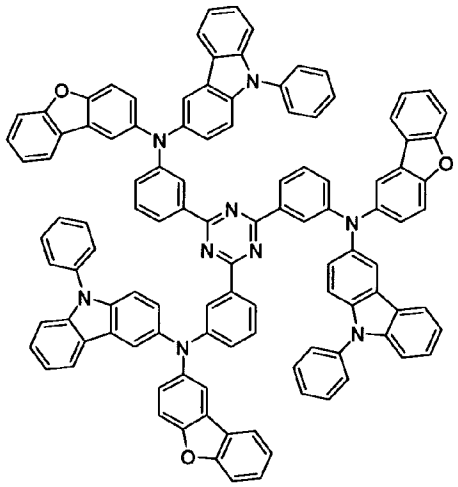
[0487]

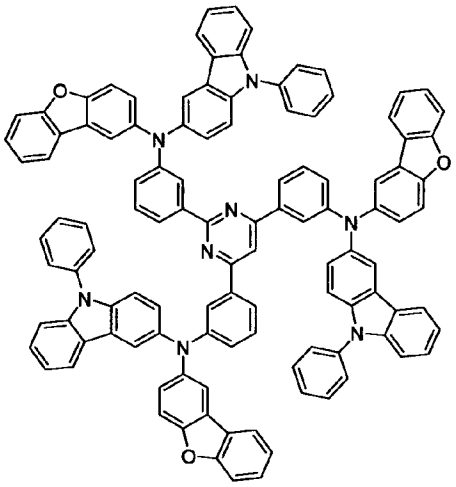
[化347]

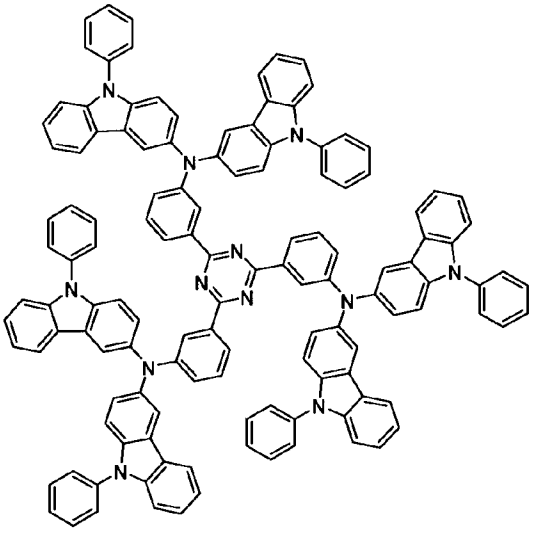




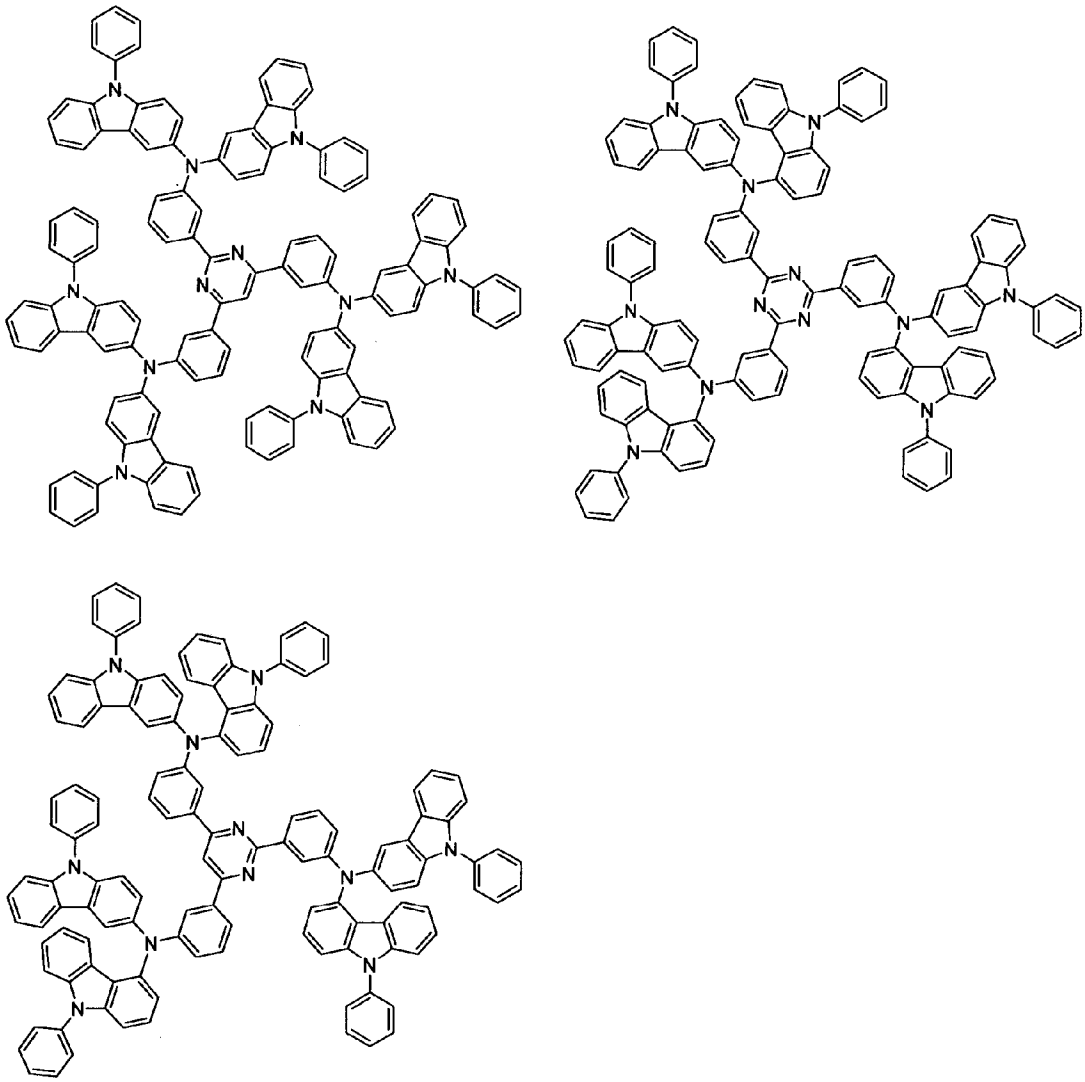








[0488] [化348]

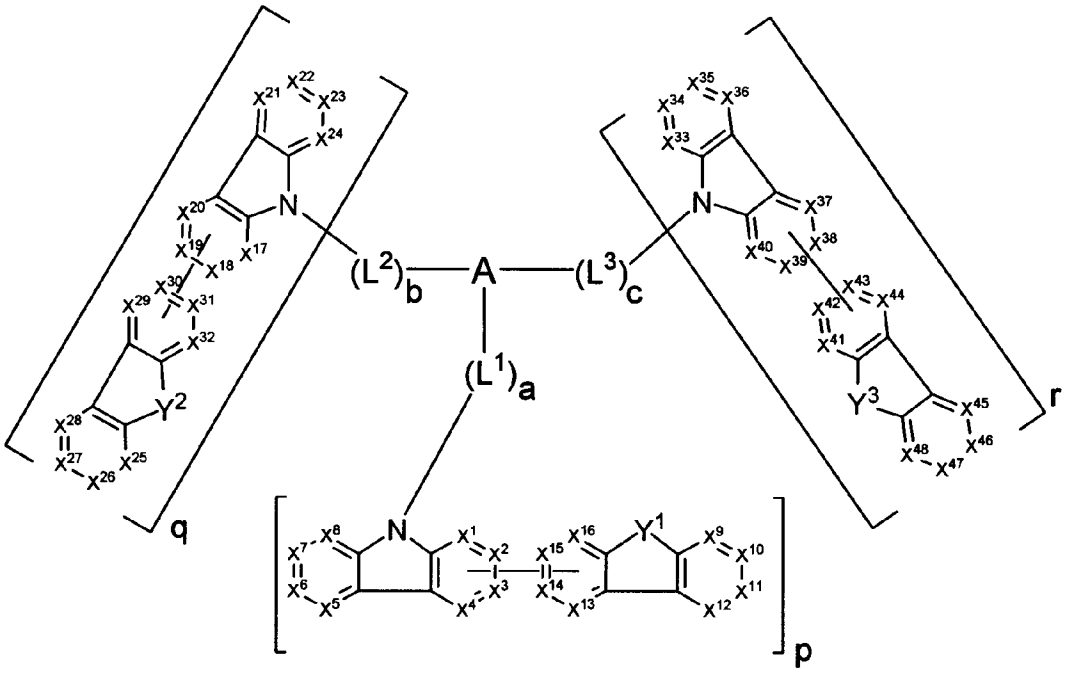


[0489] [一般式（１［IV］）で表される化合物]

本発明の一態様においては、下記一般式（１［IV］）で表される化合物［化合物（１［IV］）と略称することがある。］を有機エレクトロルミネッセンス素子の材料として用いる。当該化合物は、塗布法により層形成する有機ＥＬ素子に好適な化合物であり、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料として有用である。

[0490]

[化349]



(1[IV])

[0491] （一般式（１［IV］）中、Ａは、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基を表す。

Ｌ[1]～Ｌ[3]は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の複素環基、又はこれらの基が２～４個結合してなる基である。

ａ～ｃは、それぞれ独立に、０又は１である。

Ｘ[1]～Ｘ[48]は、それぞれＣ（Ｒ[1]）～Ｃ（Ｒ[48]）又は窒素原子を表す。Ｒ[1]～Ｒ[48]は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。但し、Ｘ[1]～Ｘ[4]のうちのいずれか１つは炭素原子であり、Ｘ[13]～Ｘ[16]のうちのいずれか１つの炭素原子と直接結合をしており、Ｘ[17]～Ｘ[20]のうちのいずれか１つは炭素原子であり、Ｘ[29]～Ｘ[32]のうちのいずれか１つの炭素原子と直接結合をしており、Ｘ[37]～Ｘ[40]のうちのいずれか１つは炭素原子であり、Ｘ[41]～Ｘ[44]のうちのいずれか１つの炭素原子と直接結合をしている。また、その直接結合に関与していないＲ[1]～Ｒ[48]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。

Y^1～Y^3は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、C（R^A）（R^B）、Si（R^C）（R^D）、P（R^E）、P（＝O）（R^F）、S（＝O）$_2$又はP（＝S）（R^G）である。R^A、R^B、R^C、R^D、R^E、R^F及びR^Gは、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。R^AとR^B、及びR^CとR^Dは、互いに結合して環を形成していてもよい。

p～rは、それぞれ独立に、0～3の整数であり、p＋q＋r＝3である。p、q又はrが2又は3である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。）

[0492]（一般式（1［IV］）中の各基についての説明）

Aが表す窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基の環形成原子数は5～30であり、好ましくは6～20、より好ましくは6～14である。窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基は、好ましくは、単環、2環から構成される縮合環、3環から構成される縮合環のいずれかである。

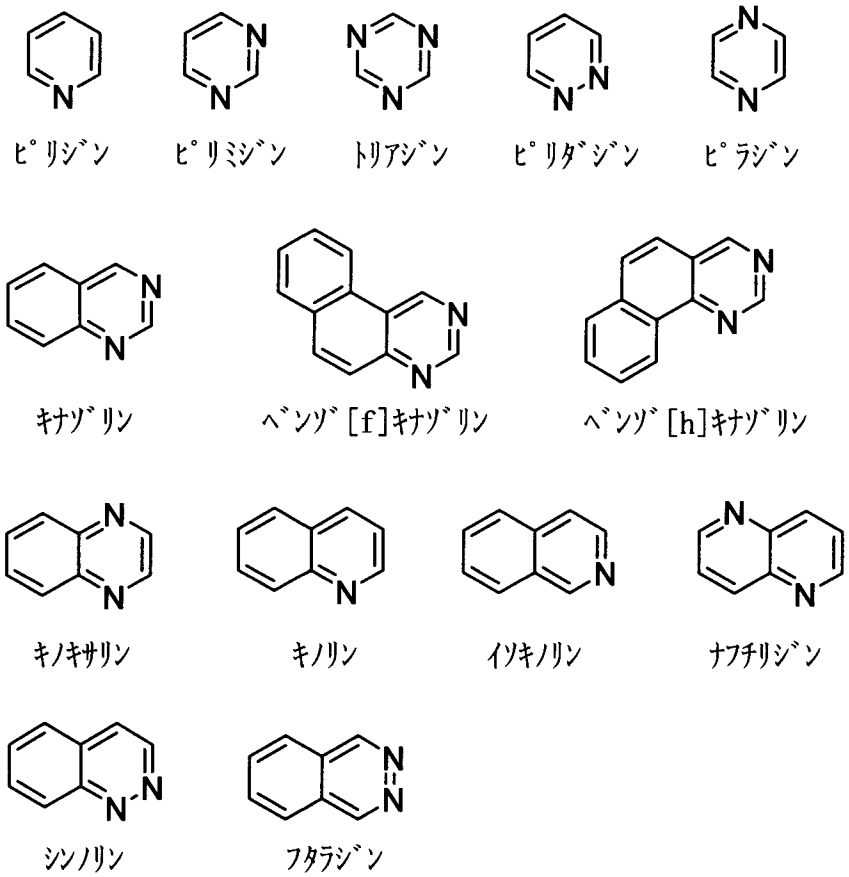
窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基が含有する窒素原子の数は、好ましくは1～3個、より好ましくは2個又は3個である。特に、窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基が単環の場合には、含有する窒素原子の数は好ましくは2個又は3個、より好ましくは3個であり、窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基が2環又は3環から構成される縮合環の場合には、含有する窒素原子の数は好ましくは2個である。なお、窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基は、窒素原子以外のヘテロ原子、例えば、酸素原子、硫黄原子、ケイ素原子、セレン原子等を含有していてもよく、一方、ヘテロ原子として窒素原子のみを含有していることも好ましい。

Aが表す窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基の具体例としては、ピロール、ピリジン、ピリダジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン、イミダゾール、ピラゾール、オキサジアゾール、チアジアゾール、トリアゾール、テトラゾール、インドール、イソインドール、インドリジン、キノリジン、キノリン、イソキノリン、ナフチリジン、シンノリン、フタラジン、キナゾリン、

ベンゾ［ｆ］キナゾリン、ベンゾ［ｈ］キナゾリン、キノキサリン、ベンゾイミダゾール、インダゾール、カルバゾール、ビスカルバゾール、フェナントリジン、アクリジン、フェナントロリン、フェナジン、アザトリフェニレン、ジアザトリフェニレン、ヘキサアザトリフェニレン、アザカルバゾール、アザジベンゾフラン、アザジベンゾチオフェン及びジナフト［2’,3’:2,3:2’,3’:6,7］カルバゾールから選択される化合物の残基などが挙げられる。ここで、残基とは、化合物から水素原子が１つ以上脱離して得られる１価以上の基である。なお、前記窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基の価数、つまり「Ａ」の価数は、「ａ＋ｂ＋ｃ」の値に相当する。

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

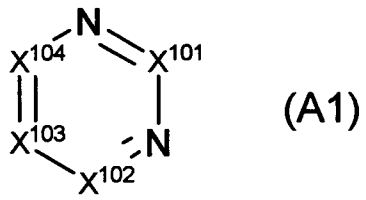
[化350]



[0493] また、本発明の一態様においては、Ａが表す窒素含有ヘテロ芳香族炭化水

素基が、下記一般式（Ａ１）で表される窒素含有複素環の残基であることが好ましい。

[化351]

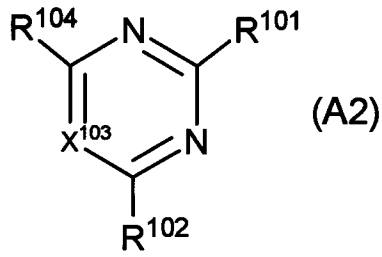


(A1)

（一般式（Ａ１）中、Ｘ^{101}～Ｘ^{104}は、それぞれＣ（Ｒ^{101}）～Ｃ（Ｒ^{104}）又は窒素原子を示す。Ｒ^{101}～Ｒ^{104}は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、Ｒ^{102}～Ｒ^{104}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。）

[0494] 本発明の一態様においては、Ａが表す窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基が、下記一般式（Ａ２）～（Ａ４）のいずれかで表される窒素含有複素環の残基であることがより好ましい。

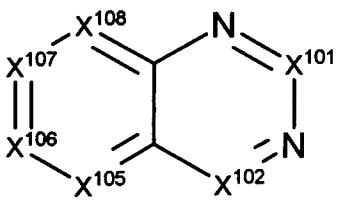
[化352]



(A2)

（一般式（Ａ２）中、Ｘ^{103}は、Ｃ（Ｒ^{103}）又は窒素原子を示す。Ｒ^{101}～Ｒ^{104}は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。Ｒ^{102}～Ｒ^{104}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。）

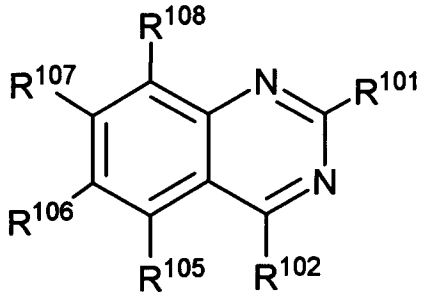
[0495] [化353]



(A3)

（一般式（Ａ３）中、Ｘ^{101}、Ｘ^{102}、Ｘ^{105}～Ｘ^{108}は、それぞれＣ（Ｒ^{101}）、Ｃ（Ｒ^{102}）、Ｃ（Ｒ^{105}）～Ｃ（Ｒ^{108}）又は窒素原子を示す。Ｒ^{101}、Ｒ^{102}及びＲ^{105}～Ｒ^{108}、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、Ｒ^{102}及びＲ^{105}～Ｒ^{108}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。）

[0496] [化354]



(A4)

（一般式（Ａ４）中、Ｒ^{101}、Ｒ^{102}及びＲ^{105}～Ｒ^{108}は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、Ｒ^{102}及びＲ^{105}～Ｒ^{108}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。）

[0497] なお、一般式（１［IV］）中のＡが表す窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基は、任意に置換基を有していてもよい。

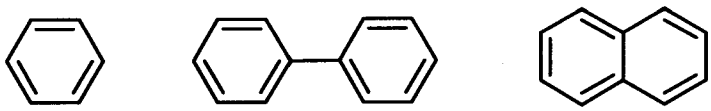
窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基に置換し得る置換基としては、具体的には上述の置換基が挙げられ、該置換基としては、例えば、アリール基又はヘテロアリール基が置換した９－カルバゾリル基や、アリール基又はヘテロアリール基が置換した９－カルバゾリル基で置換されたアリール基又はヘテロアリール基も含まれる。

[0498] 前記一般式（１［IV］）において、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}が表す芳香族炭化水素基の環形成炭素数は６～３０であり、好ましくは６～１８、より好ましくは６～１３、さらに好ましくは６～１２、特に好ましくは６～１０である。

Ｌ^{1}～Ｌ^{3}が表す芳香族炭化水素基としては、下記式で表されるいずれかの化合物の２～４価の残基であることが好ましく、本発明の一態様においては、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}の少なくとも一つ（好ましくは全て）が下記式で表されるいずれ

かの化合物の２～４価の残基であることが好ましい。

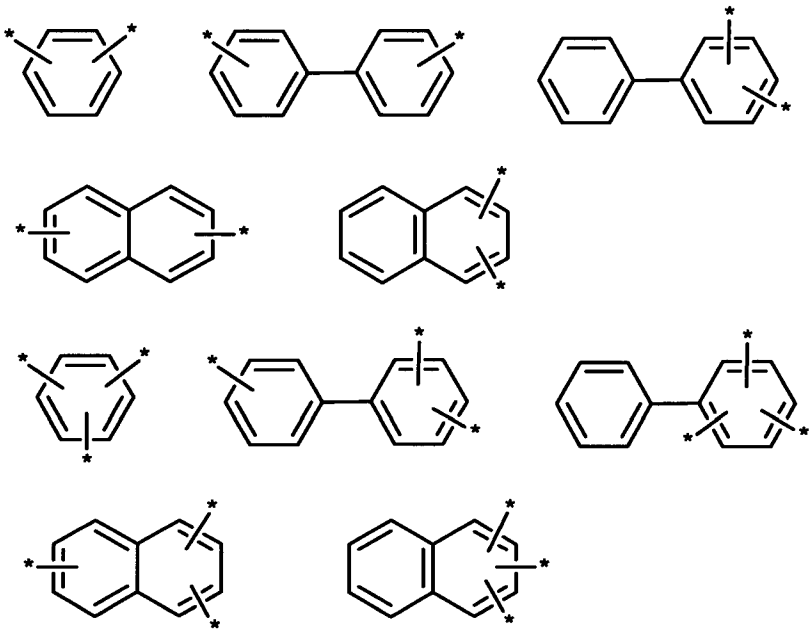
[化355]



（上記化合物中の炭素原子は置換基を有していてもよい。）

[0499] さらに、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}が表す芳香族炭化水素基としては、下記式で表されるいずれかの基であることがより好ましく、本発明の一態様においては、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}の少なくとも一つ（好ましくは全て）が下記式で表されるいずれかの基であることがより好ましい。

[化356]



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

[0500] 上記の中でも、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}が表す芳香族炭化水素基としては、下記式で表される基のいずれかであることがより好ましく、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}の少なくとも一つ（好ましくは全て）が下記式で表されるいずれかの基であることがより好ましい。

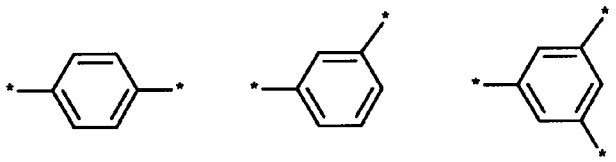
[化357]



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

[0501] 上記の中でも、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}が表す芳香族炭化水素基としては、下記式で表される基のいずれかであることが更に好ましく、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}の少なくとも一つ（好ましくは全て）が下記式で表されるいずれかの基であることが更に好ましい。

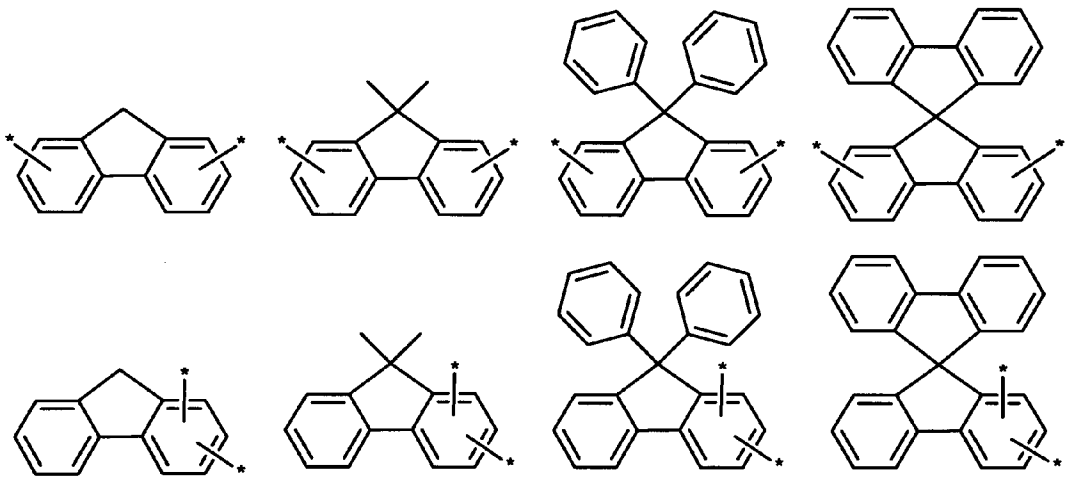
[化358]



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

[0502] Ｌ^{1}～Ｌ^{3}が表す芳香族炭化水素基としては、上記以外にも、下記式で表される基が挙げられる。

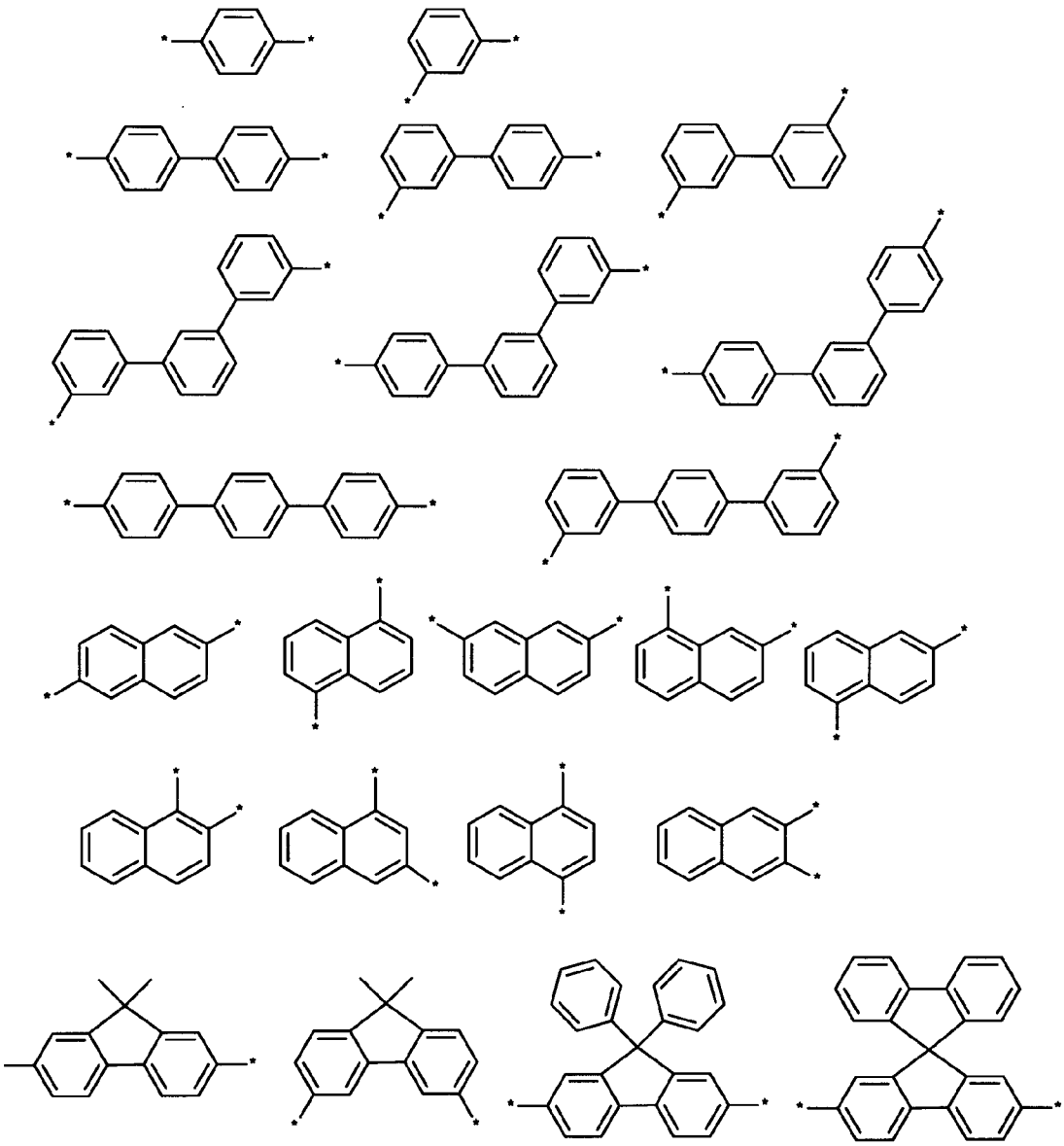
[化359]



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

[0503] Ｌ[1]～Ｌ[3]が表す芳香族炭化水素基が二価の場合の具体例としては、下記式で表される基が挙げられる。

[化360]



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

[0504] また、Ｌ[1]～Ｌ[3]が表す複素環基の環形成原子数は５～３０であり、好まし

くは５～１８、より好ましくは５～１３、特に好ましくは５～１０である。複素環基としては、例えば、ピロール、ピリジン、イミダゾピリジン、ピラゾール、トリアゾール、テトラゾール、インドール、イソインドール及びカルバゾール等の含窒素複素環化合物の残基；フラン、ベンゾフラン、イソベンゾフラン、ジベンゾフラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ベンゾオキサゾール、ベンゾナフトフラン及びジナフトフラン等の含酸素複素環化合物の残基；チオフェン、ベンゾチオフェン、ジベンゾチオフェン、チアゾール、チアジアゾール、ベンゾチアゾール、ベンゾナフトチオフェン及びジナフトチオフェン等の含硫黄複素環化合物の残基などが挙げられる。

Ｌ^{1}～Ｌ^{3}が表す、「これらの基が２～４個結合してなる基」は、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基と置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の複素環基とが２～４個結合してなる基である。この場合の結合順序に特に制限はない。

以上の中でも、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}としては、いずれも、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基が好ましい。該芳香族炭化水素基としてより好ましいものは、前述の通りである。

[0505] Ｘ^{1}～Ｘ^{48}は、それぞれＣ（Ｒ^{1}）～Ｃ（Ｒ^{48}）又は窒素原子を表す。該Ｒ^{1}～Ｒ^{48}は、それぞれ独立に、水素原子または置換基である。

但し、Ｘ^{1}～Ｘ^{4}のうちのいずれか１つは炭素原子であり、Ｘ^{13}～Ｘ^{16}のうちのいずれか１つの炭素原子と直接結合をしており、Ｘ^{17}～Ｘ^{20}のうちのいずれか１つは炭素原子であり、Ｘ^{29}～Ｘ^{32}のうちのいずれか１つの炭素原子と直接結合をしており、Ｘ^{37}～Ｘ^{40}のうちのいずれか１つは炭素原子であり、Ｘ^{41}～Ｘ^{44}のうちのいずれか１つの炭素原子と直接結合をしている。

また、その直接結合に関与していない、Ｒ^{1}～Ｒ^{8}から選ばれる２つ、Ｒ^{9}～Ｒ^{16}から選ばれる２つ、Ｒ^{17}～Ｒ^{24}から選ばれる２つ、Ｒ^{25}～Ｒ^{32}から選ばれる２つ、Ｒ^{33}～Ｒ^{40}から選ばれる２つ、及びＲ^{41}～Ｒ^{48}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。本発明の一態様では、その直接結合に関与していない、Ｒ^{1}～Ｒ^{8}から選ばれる２つ、Ｒ^{9}～Ｒ^{16}から選ばれ

る２つ、R^{17}～R^{24}から選ばれる２つ、R^{25}～R^{32}から選ばれる２つ、R^{33}～R^{40}から選ばれる２つ、及びR^{41}～R^{48}から選ばれる２つは、いずれも、互いに結合して環を形成していないことが好ましい。

なお、「直接結合」は、他の文言では、一般的には「単結合」と言われることもある。

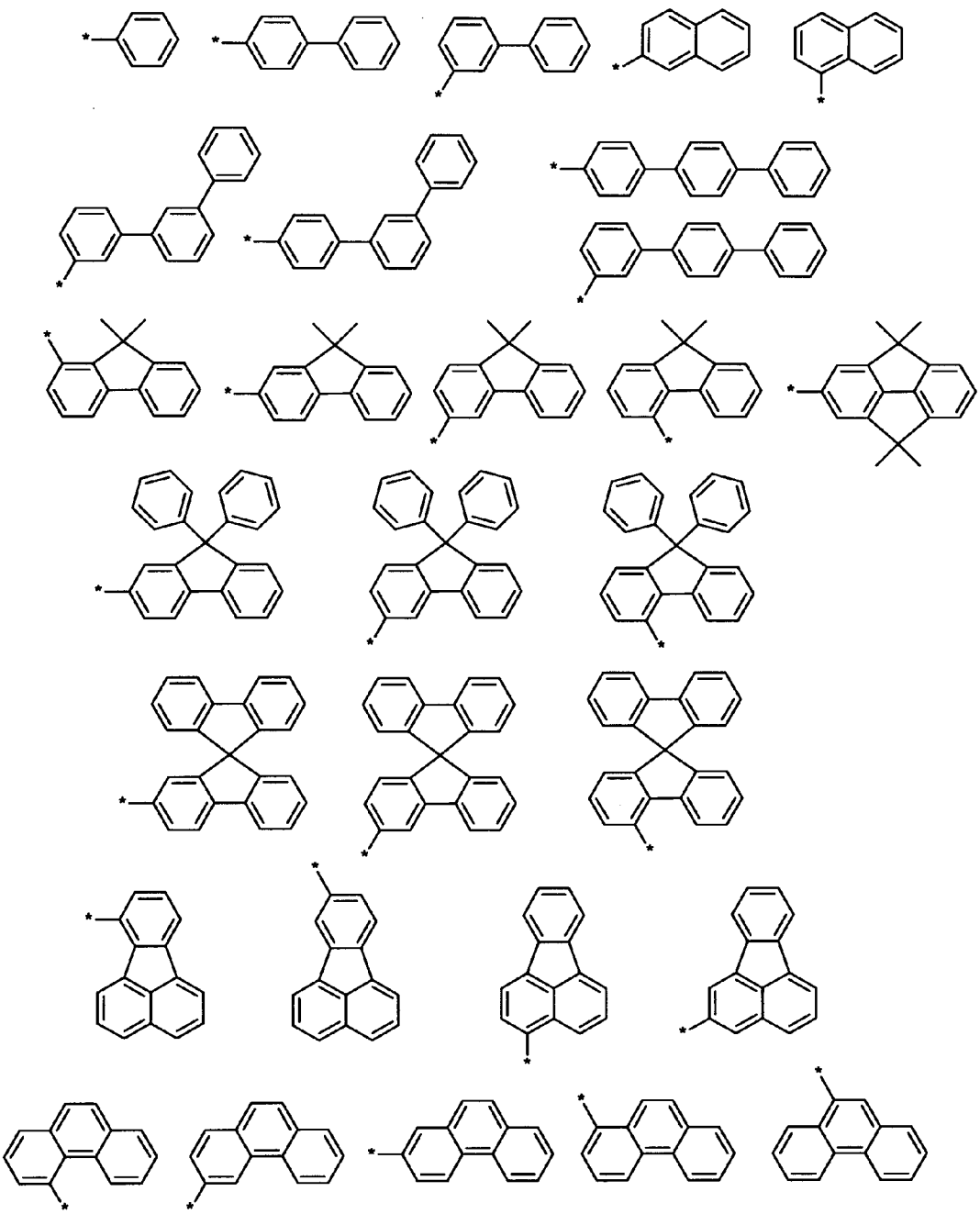
X^1～X^{48}としては、好ましくはいずれもC（R^1）～C（R^{48}）であり、該R^1～R^{48}がいずれも水素原子であることがより好ましい。

[0506] Y^1～Y^3は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、C（R^A）（R^B）、Si（R^C）（R^D）、P（R^E）、P（＝O）（R^F）、S（＝O）$_2$又はP（＝S）（R^G）である。Y^1～Y^3としては、いずれも、好ましくは酸素原子又は硫黄原子であり、Y^1～Y^3の全てが酸素原子又は硫黄原子であることがより好ましく、Y^1～Y^3の全てが酸素原子である、もしくはY^1～Y^3の全てが硫黄原子であることが更に好ましい。

該R^A、R^B、R^C、R^D、R^E、R^F及びR^Gは、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。R^AとR^B、及びR^CとR^Dは、互いに結合して環を形成していてもよい。

R^A、R^B、R^C、R^D、R^E、R^F及びR^Gは、いずれもアリール基であることも好ましく、該アリール基としては、下記群から選択されるアリール基がより好ましい。

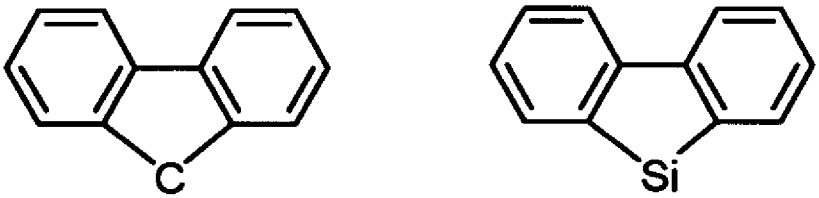
[化361]



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

[0507] また、C（R^A）（R^B）のR^AとR^B、並びにSi（R^C）（R^D）のR^CとR^Dとが互いに結合して環を形成している場合、具体的には、以下のような構造が挙げられる。

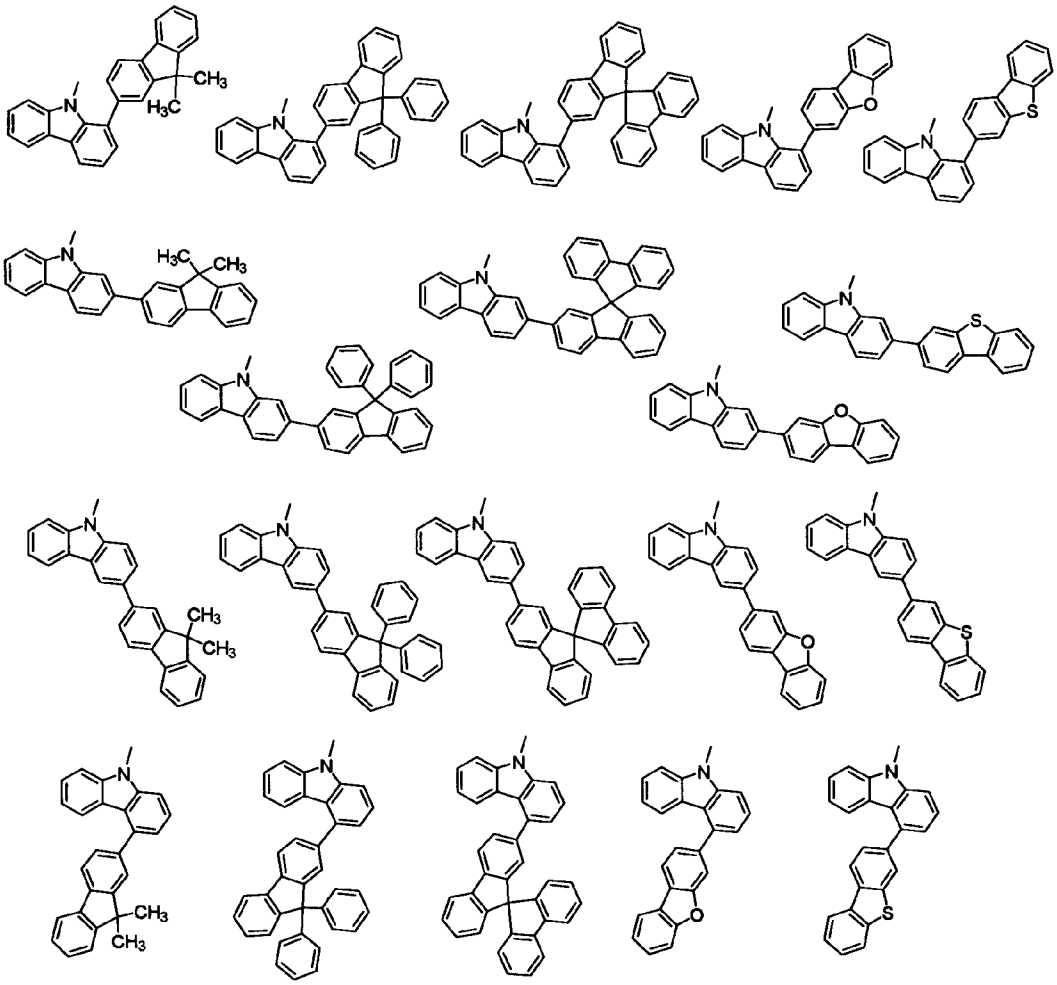
[化362]



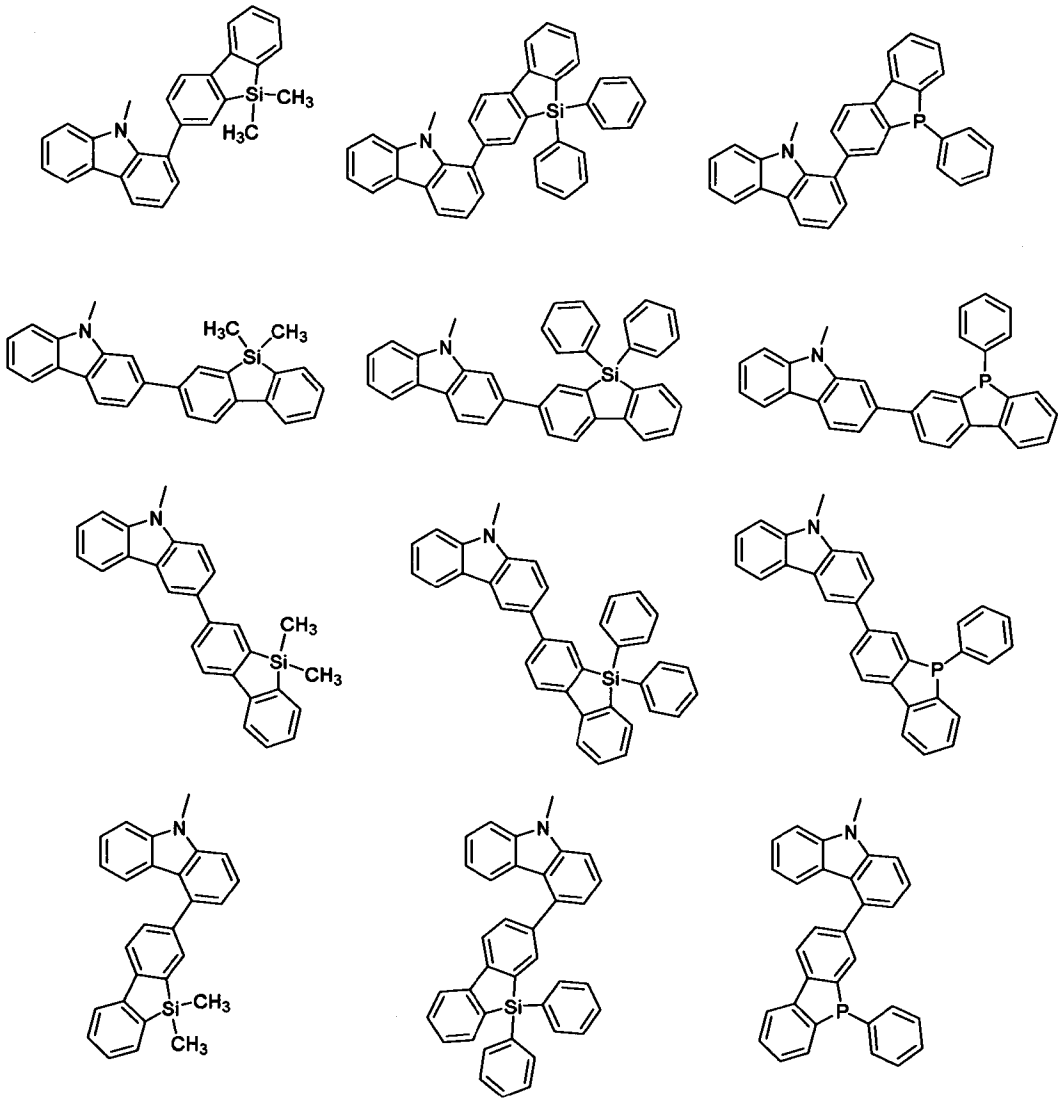
[0508] 一般式（１［IV］）中、ｐ～ｒは、前述の通り、それぞれ独立に０～３の整数であり、ｐ＋ｑ＋ｒ＝３となる。特に制限されるものではないが、ｐ～ｒのうちの２つが同時に０ではないことが好ましい。

[0509] 一般式（１［IV］）において、［ ］内の基としては、具体的には以下の基が例示され、以下の基から任意に選択することができる。

[化363]

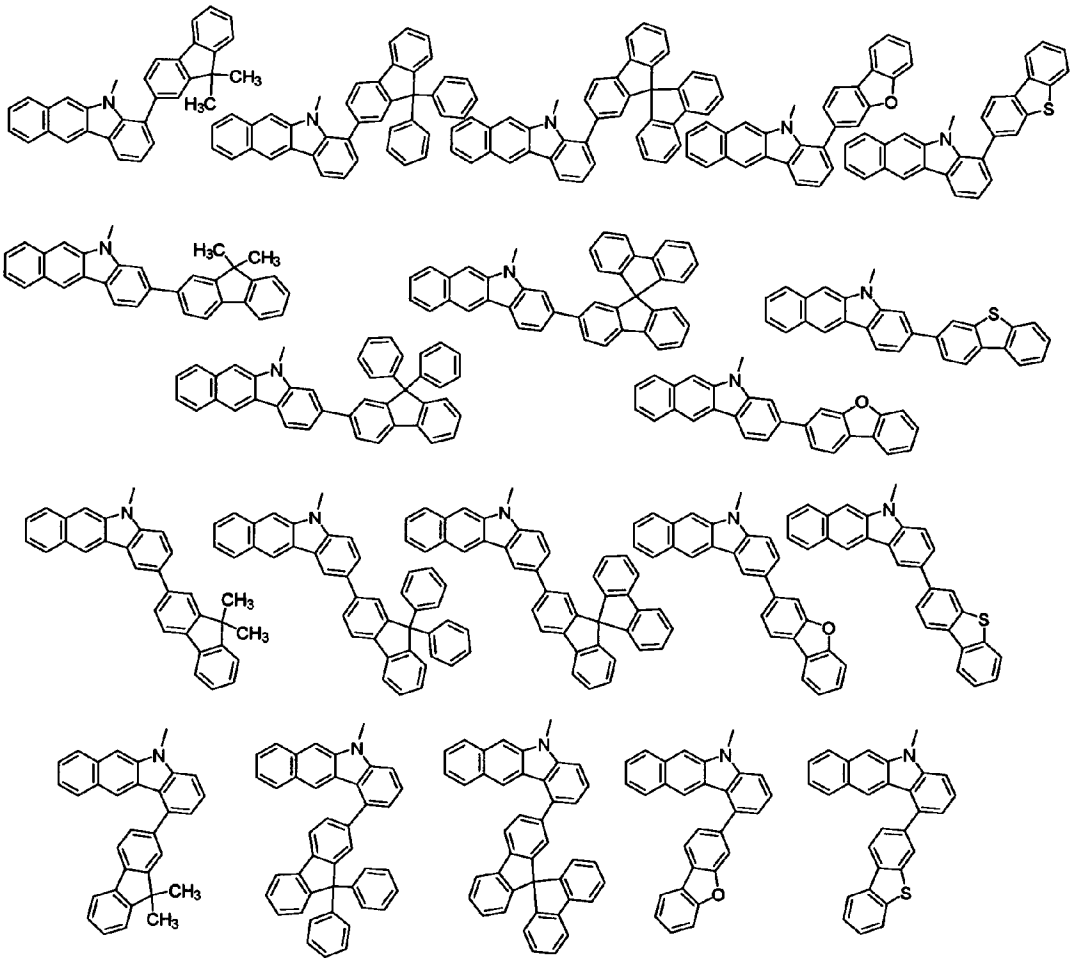


[0510] [化364]



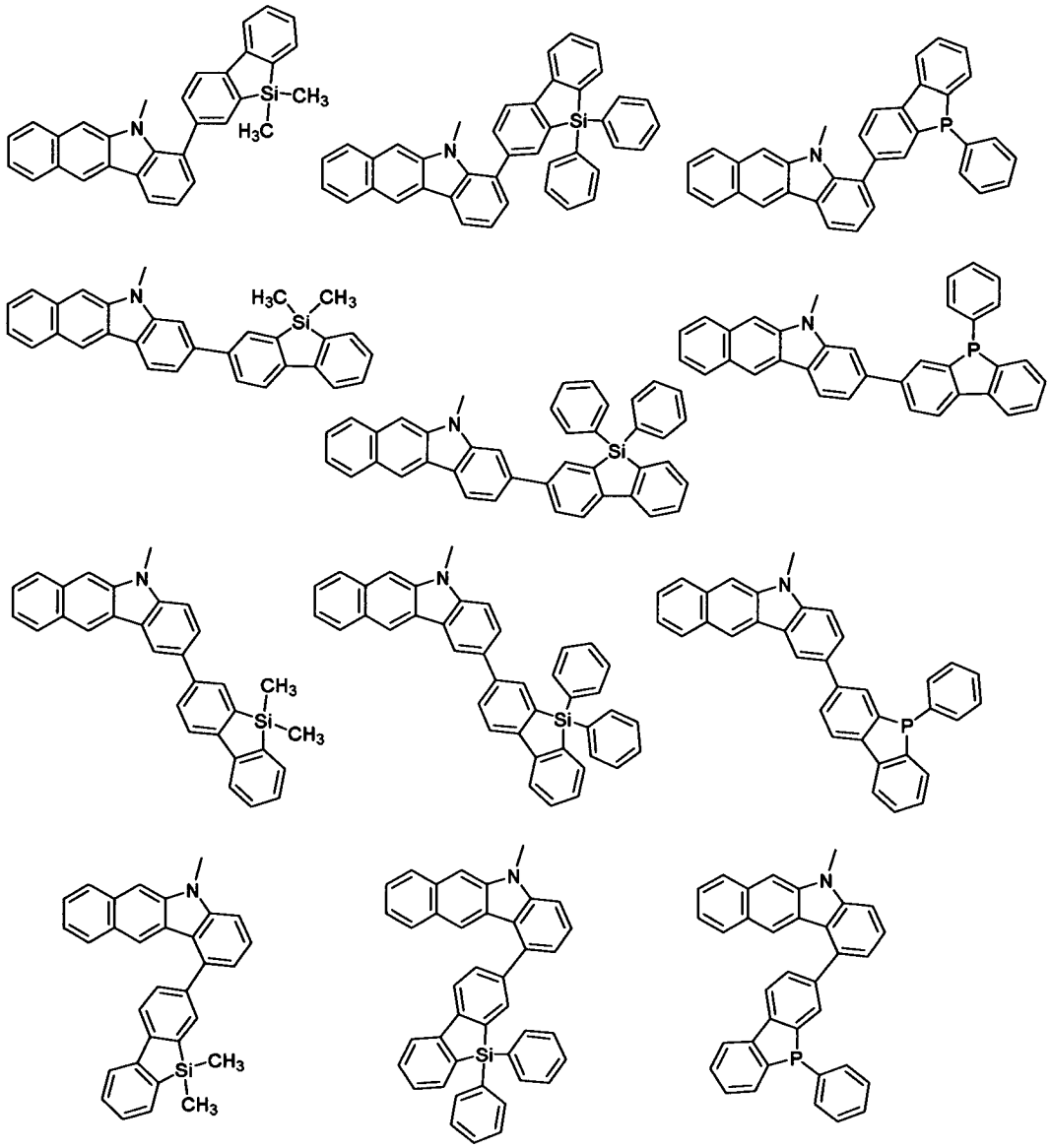
[0511]

[化365]



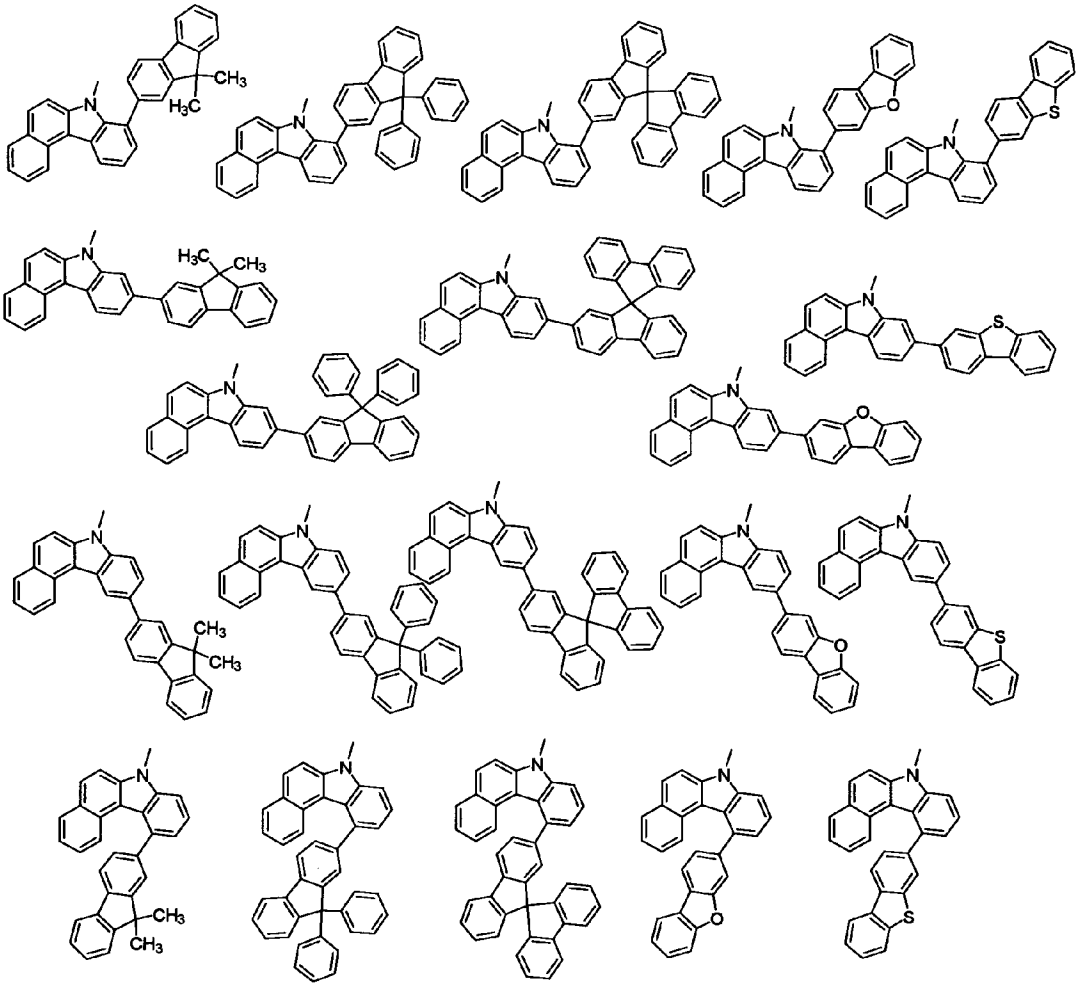
[0512]

[化366]



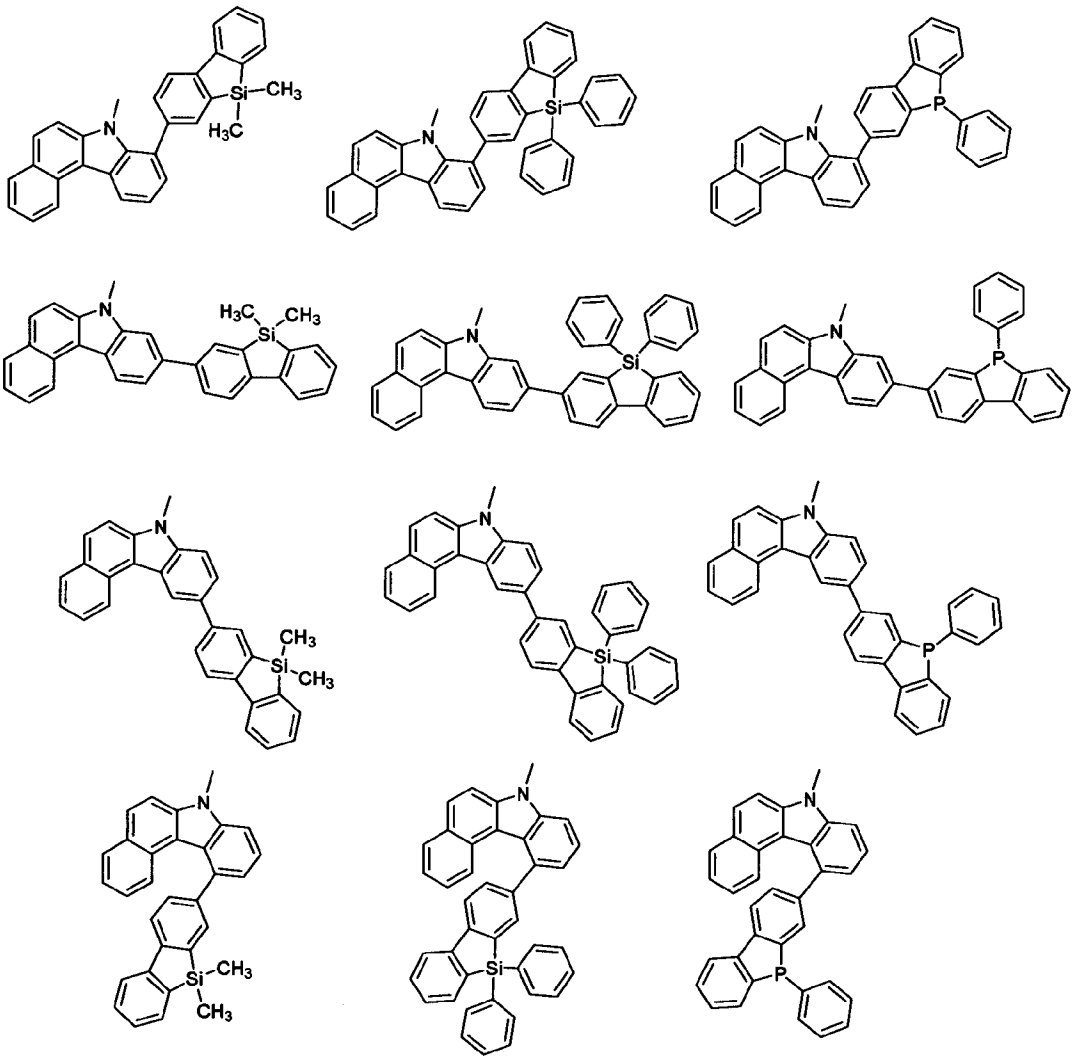
[0513]

[化367]



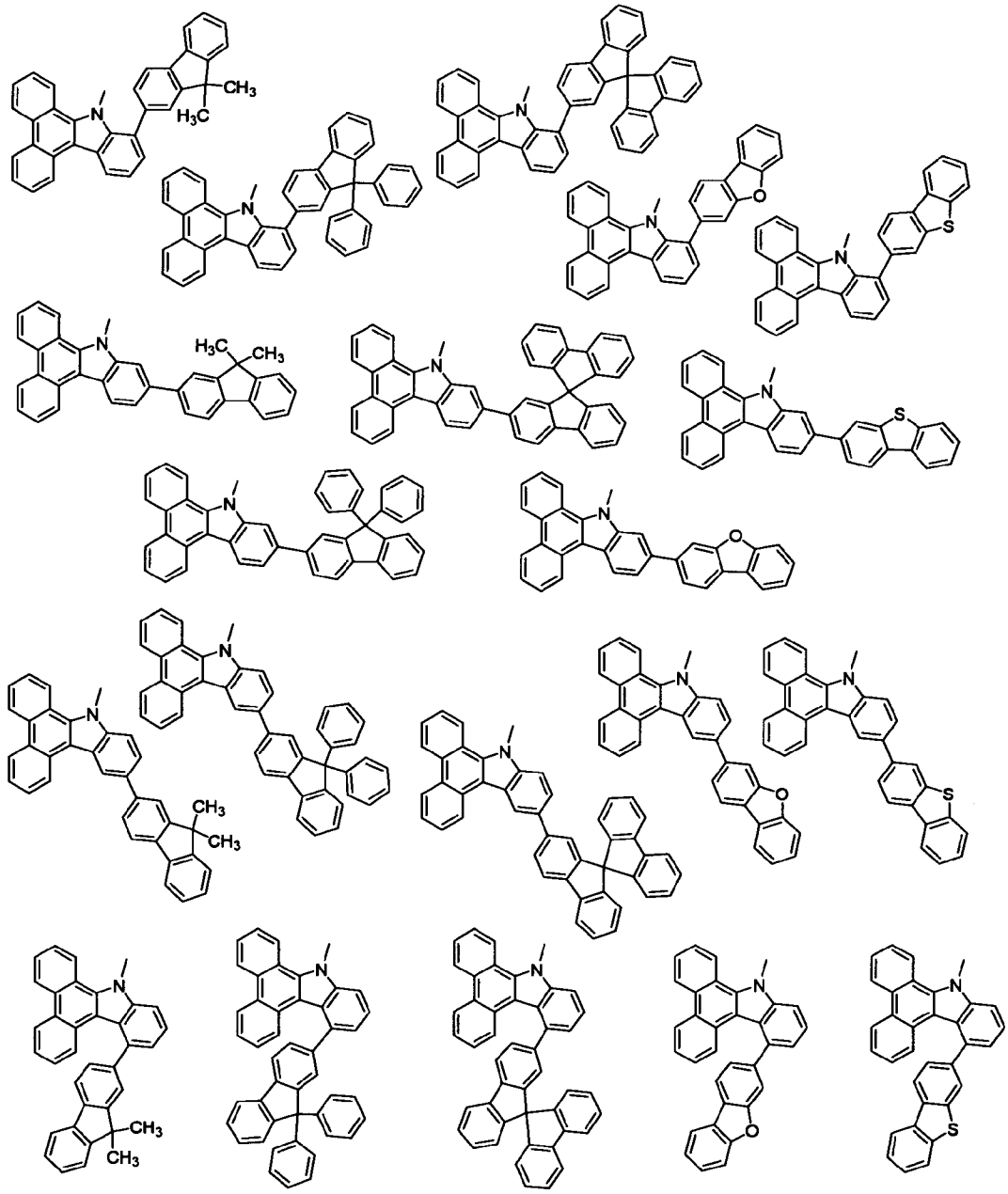
[0514]

[化368]



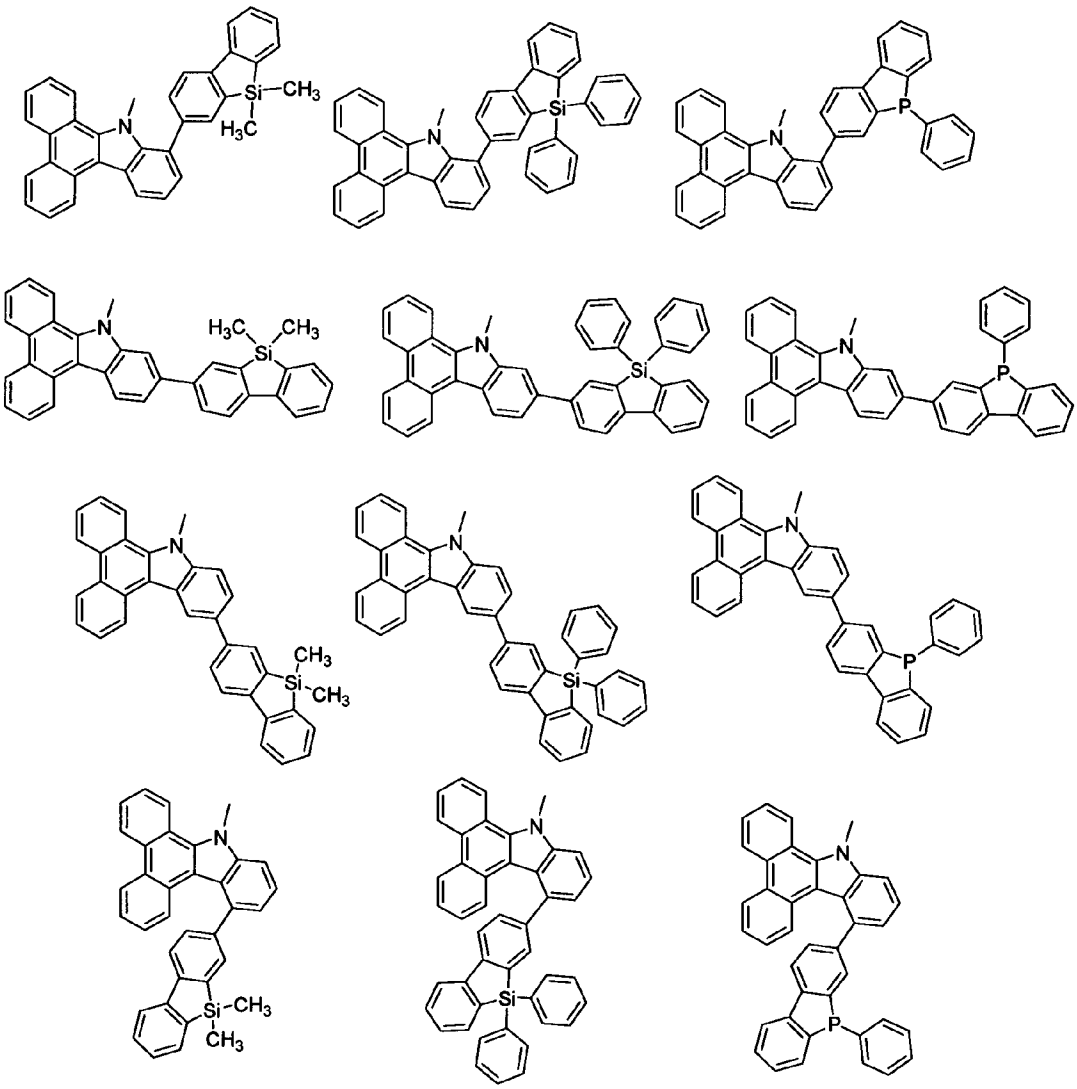
[0515]

[化369]



[0516]

[化370]

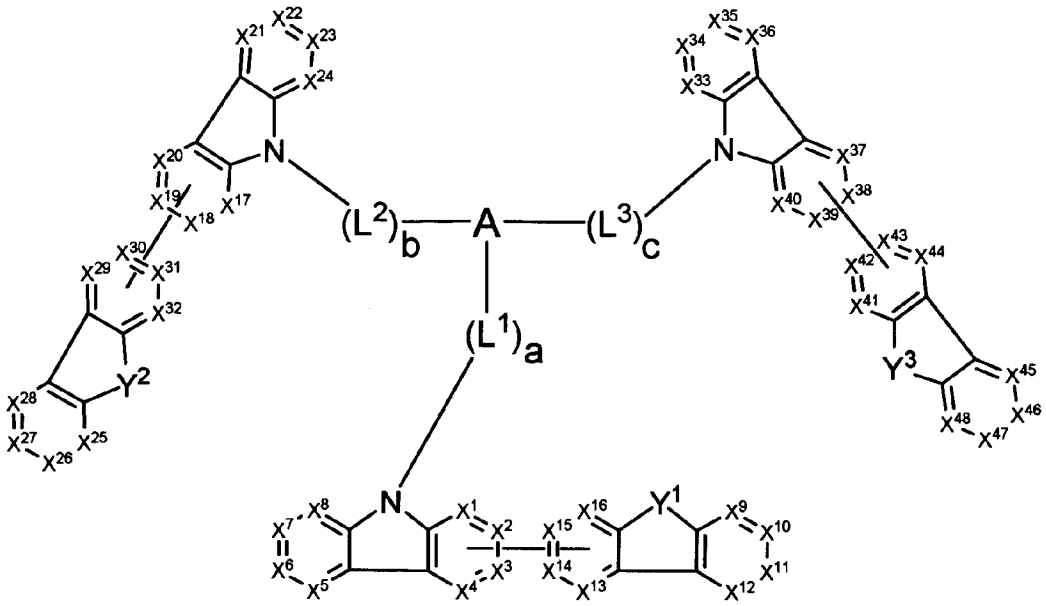


[0517] （化合物（１［IV］）の中でも好ましい化合物の一般式）

化合物（１［IV］）の中でも好ましい化合物の一般式を以下に列挙する。なお、各基の定義は一般式（１［IV］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。

[0518]

[化371]

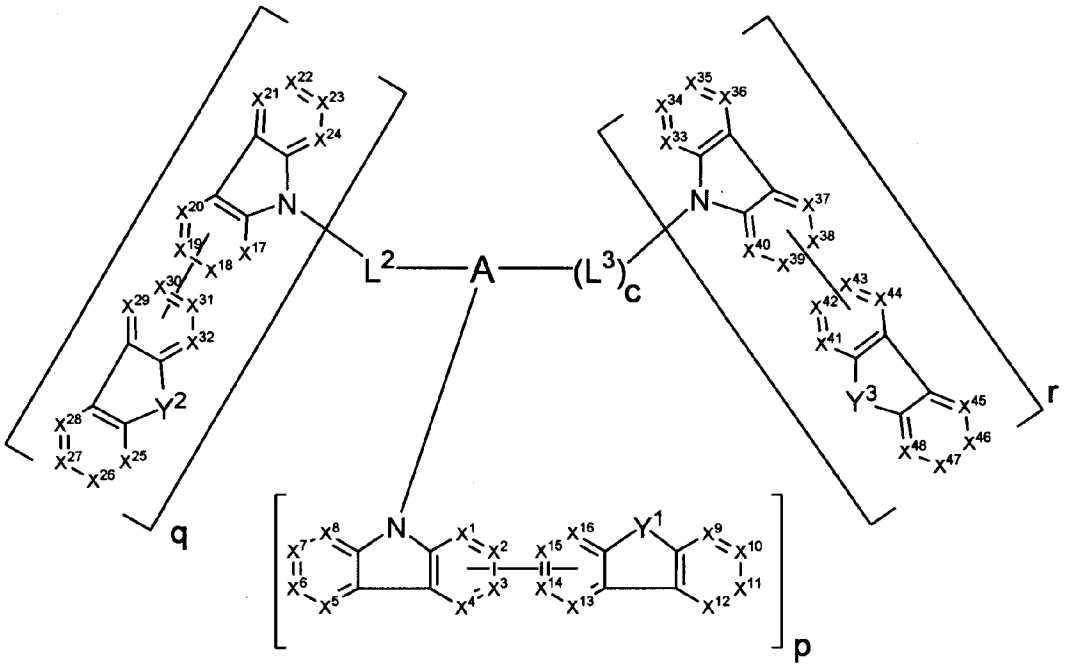


(1a[IV])

（一般式（１ａ［IV］）中、Ａ、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}、ａ～ｃ、Ｘ^{1}～Ｘ^{48}、及びＹ^{1}～Ｙ^{3}は、一般式（１［IV］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。）

[0519]

[化372]

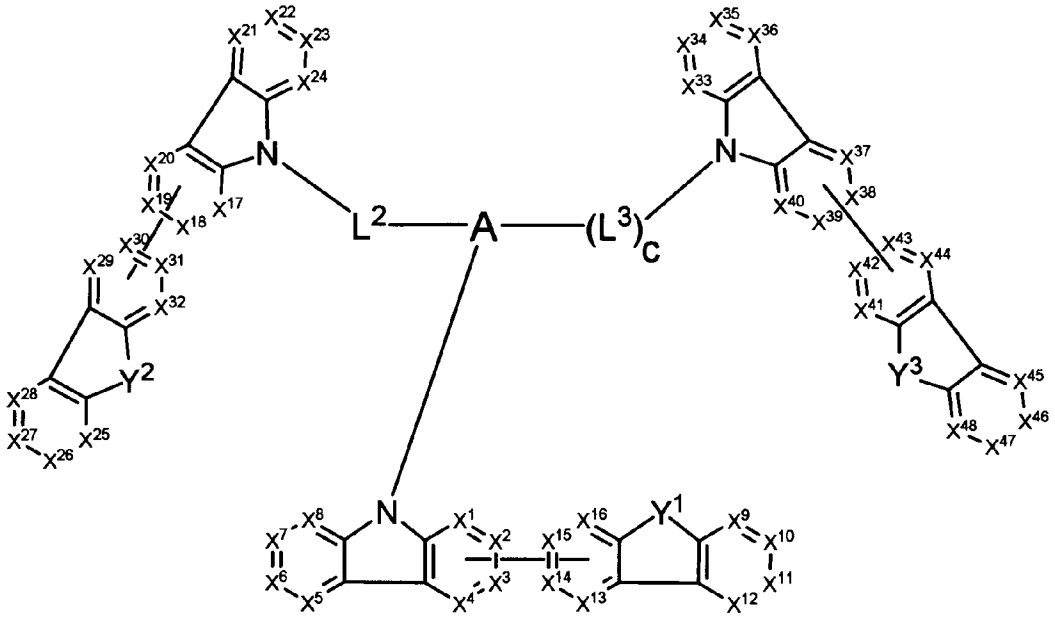


(1-ii-1[IV])

（一般式（１－ｉｉ－１［IV］）中、Ａ、Ｌ^{2}、Ｌ^{3}、ｃ、ｐ～ｒ、Ｘ^{1}～Ｘ^{48}、及びＹ^{1}～Ｙ^{3}は、一般式（１［IV］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。）

[0520]

[化373]

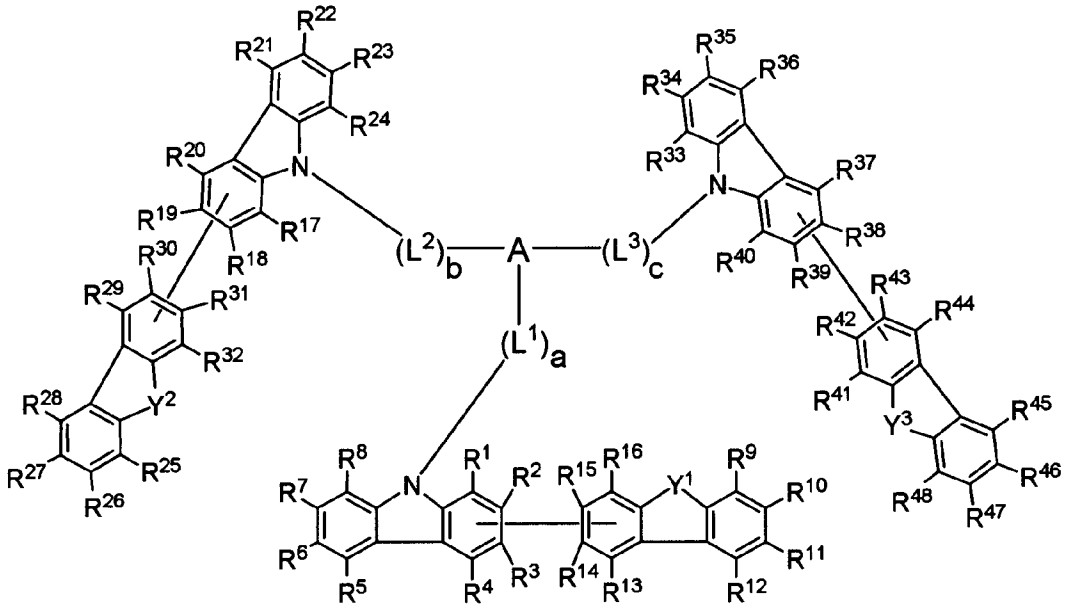


(1a-ii-1[IV])

（一般式（１ａ－ｉｉ－１［IV］）中、Ａ、Ｌ^{2}、Ｌ^{3}、ｃ、Ｘ^{1}～Ｘ^{48}、Ｙ^{1}～Ｙ^{3}は、一般式（１［IV］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。）

[0521]

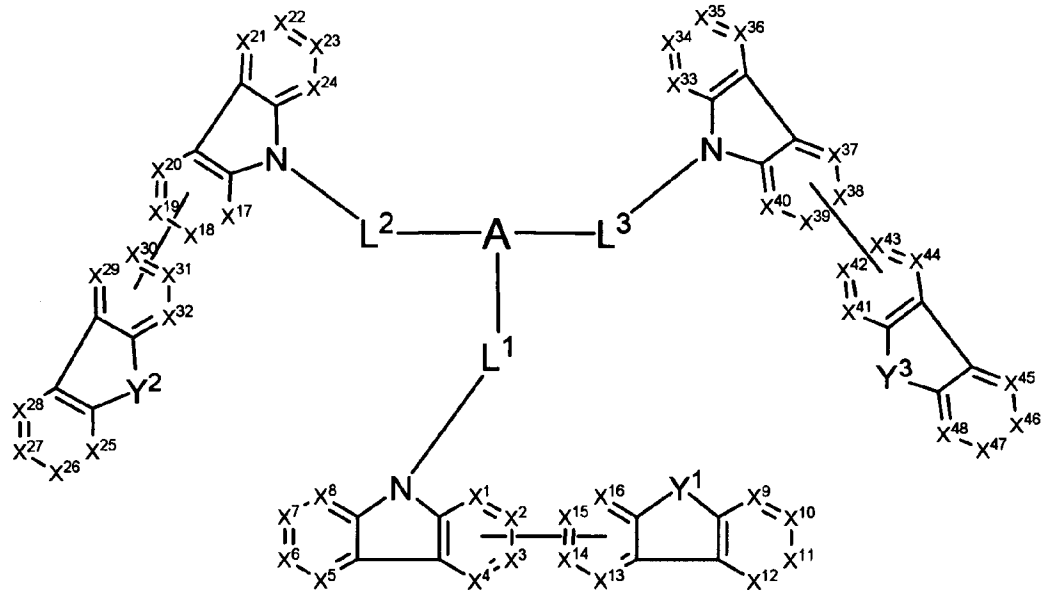
[化374]



(1a'[IV])

（一般式（１ａ’［IV］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｃ、Ｒ[1]～Ｒ[48]、及びＹ[1]～Ｙ[3]は、一般式（１［IV］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。）

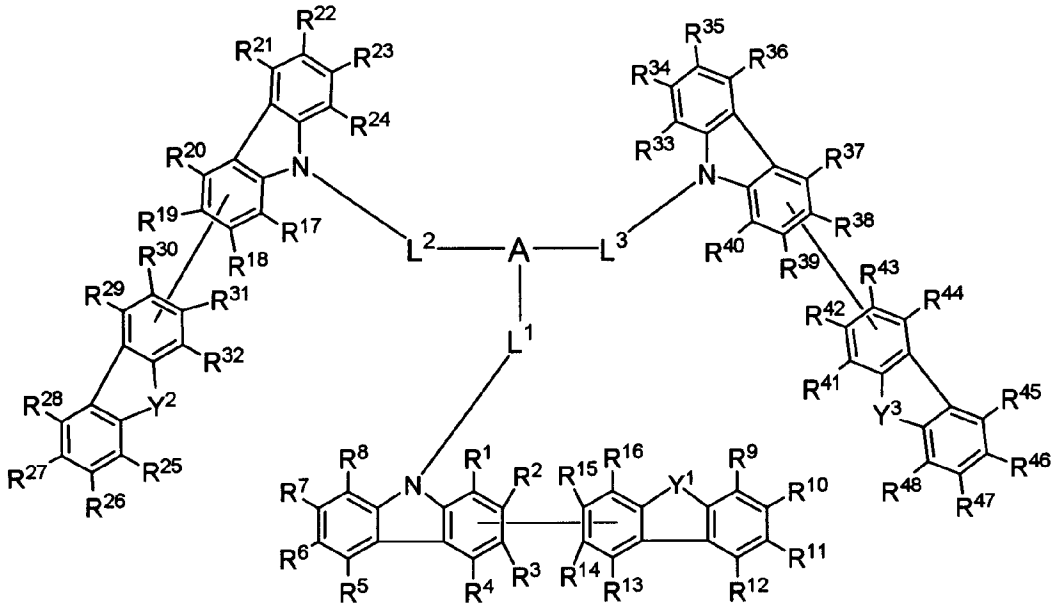
[0522] [化375]



(1a-i[IV])

（一般式（１ａ－ｉ［IV］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、Ｘ[1]～Ｘ[48]、Ｙ[1]～Ｙ[3]は、一般式（１［IV］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。）

[0523] [化376]

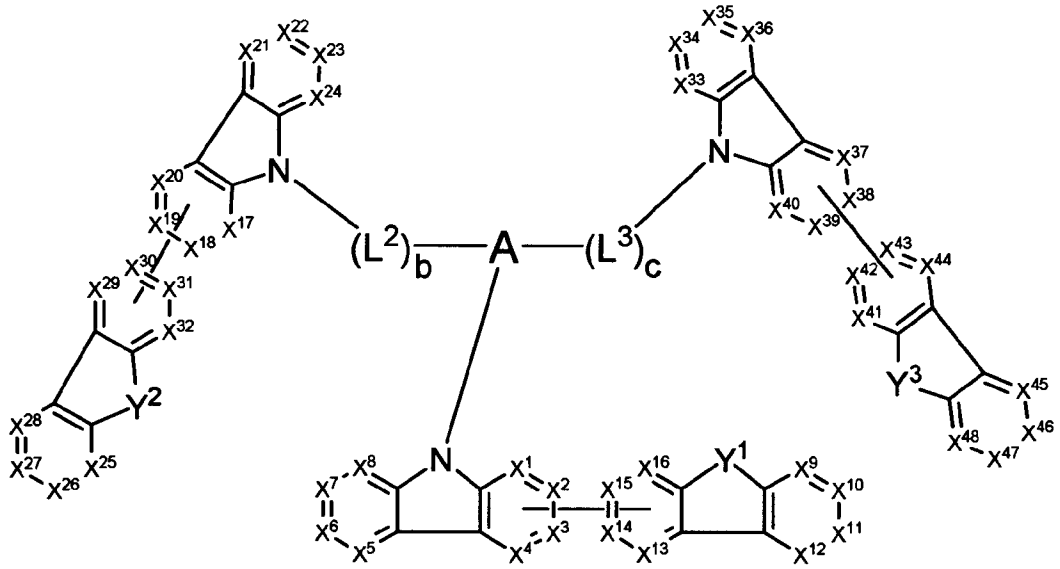


(1a'-i[IV])

（一般式（１ａ’－ｉ［IV］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、Ｒ[1]～Ｒ[48]、及びＹ[1]～Ｙ[3]は、一般式（１［IV］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。）

[0524]

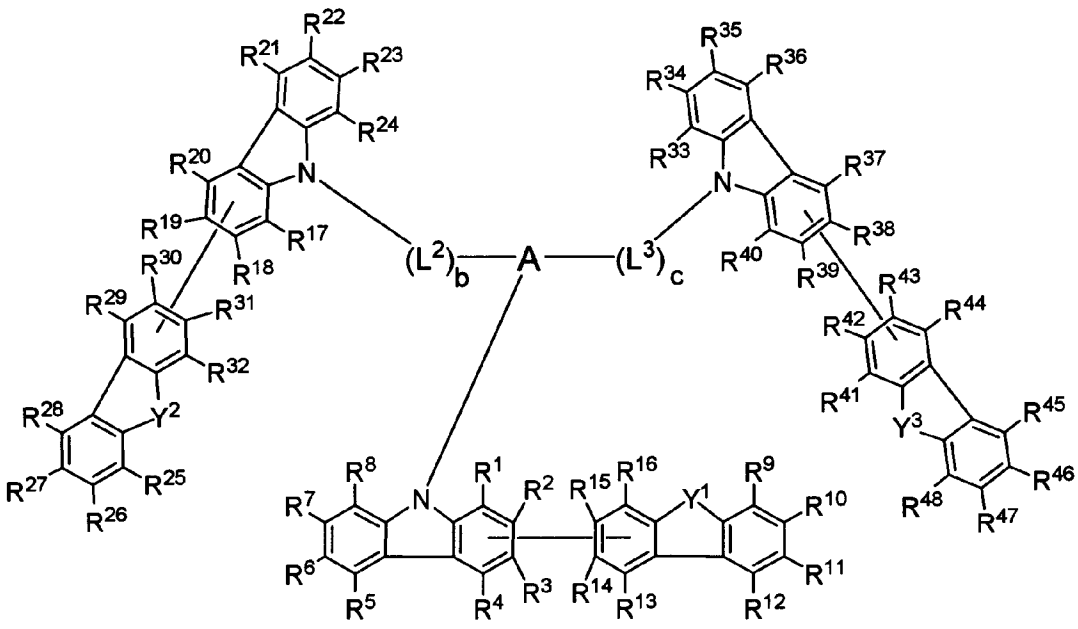
[化377]



(1a-ii[IV])

（一般式（１ａ－ｉｉ［IV］）中、Ａ、Ｌ^{2}、Ｌ^{3}、ｂ、ｃ、Ｘ^{1}～Ｘ^{48}、Ｙ^{1}～Ｙ^{3}は、一般式（１［IV］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。）

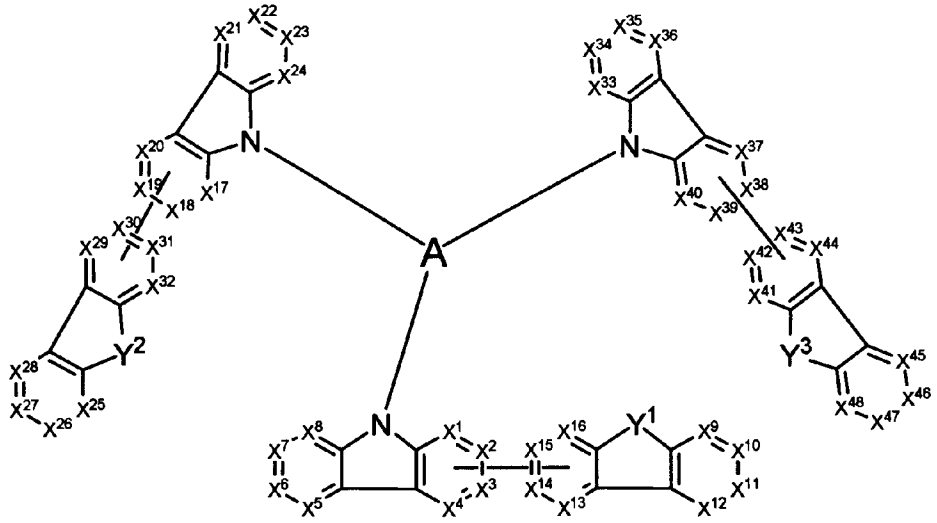
[0525] [化378]



(1a'-ii[IV])

（一般式（１ａ’－ｉｉ［IV］）中、Ａ、Ｌ[2]、Ｌ[3]、ｂ、ｃ、Ｒ[1]～Ｒ[48]、及びＹ[1]～Ｙ[3]は、一般式（１［IV］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。）

[0526] [化379]

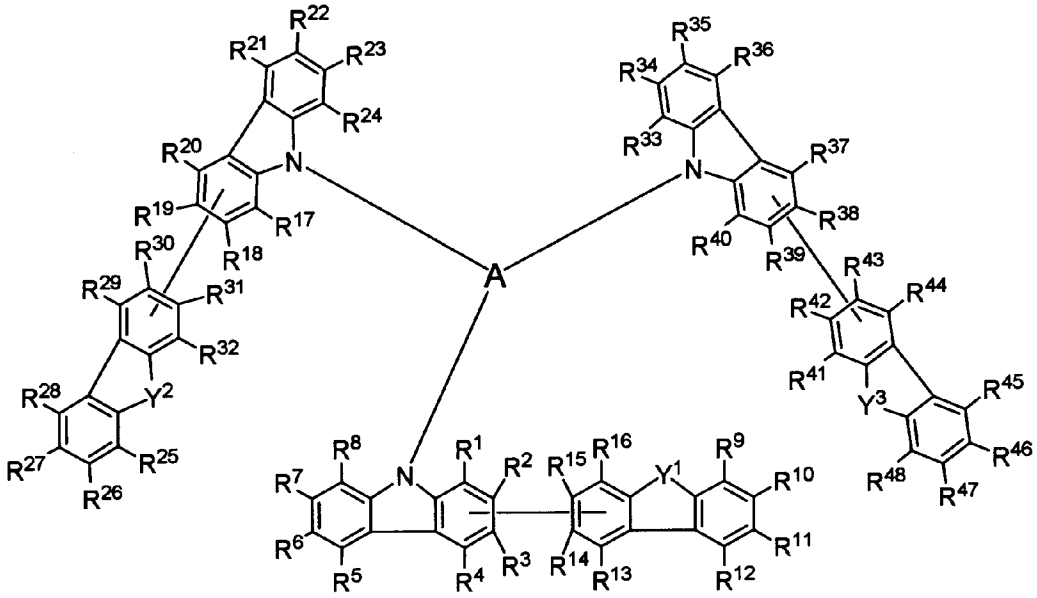


(1a-iii[IV])

（一般式（１ａ－ｉｉｉ［IV］）中、Ａ、Ｘ[1]～Ｘ[48]、Ｙ[1]～Ｙ[3]は、一般式（１［IV］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。）

[0527]

[化380]

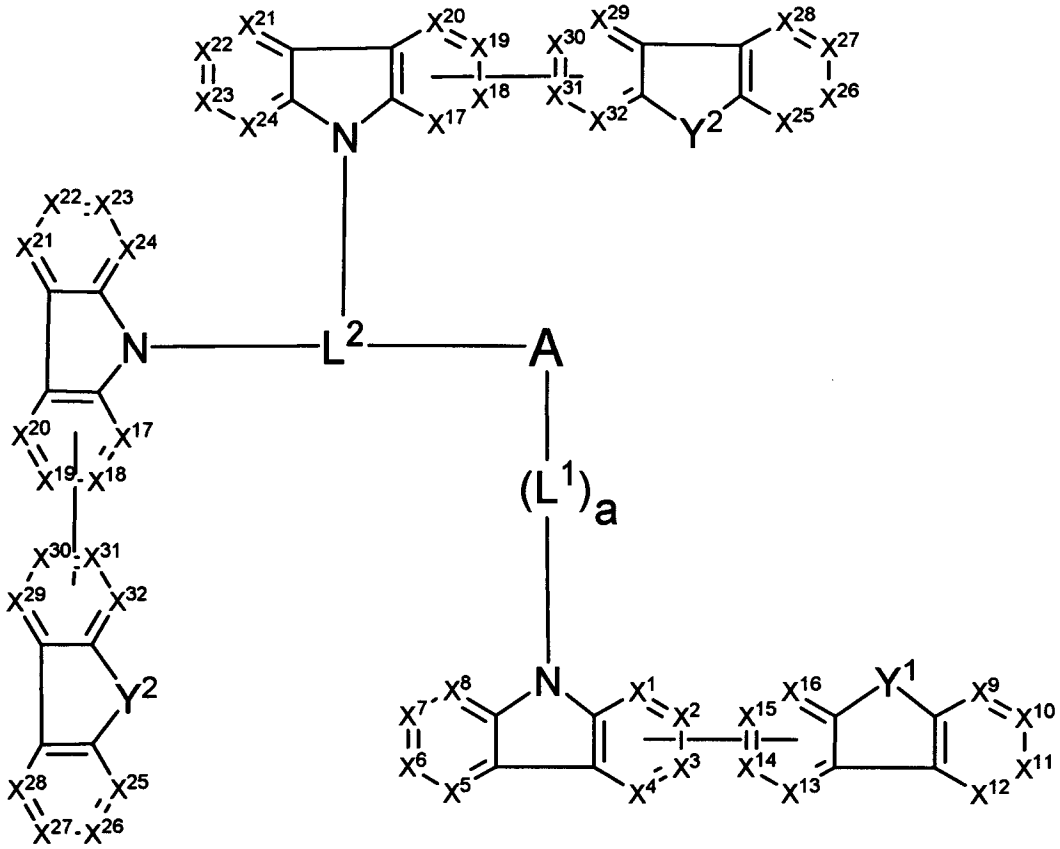


(1a'-iii[IV])

（一般式（１ａ’－ｉｉｉ［IV］）中、Ａ、Ｒ１～Ｒ４８、及びＹ１～Ｙ３は、一般式（１［IV］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。）

[0528]

[化381]

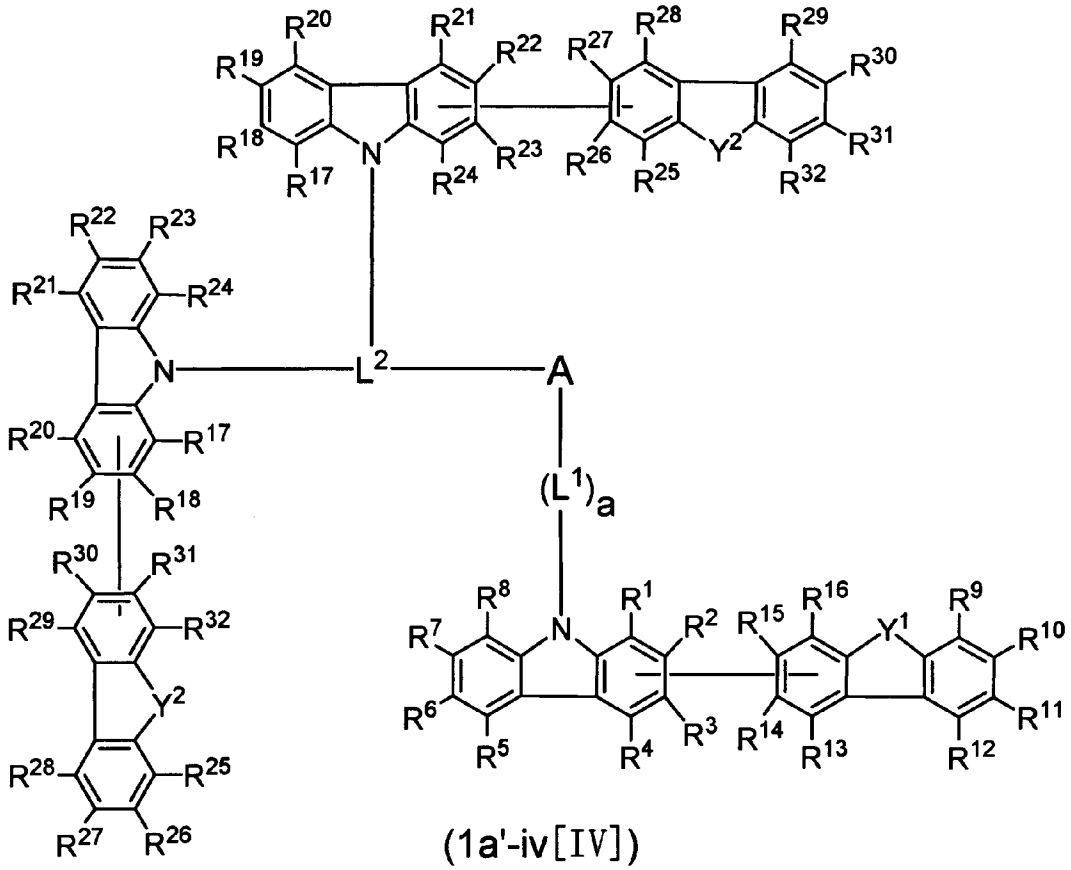


(1a-iv[IV])

（一般式（１ａ－ｉｖ［IV］）中、Ａ、Ｌ[1]、Ｌ[2]、ａ、Ｘ[1]～Ｘ[32]、Ｙ[1]～Ｙ[3]は、一般式（１［IV］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。一般式（１ａ－ｉｖ［IV］）中の各基において、同一の記号は、それぞれ同じであってもよいし、異なっていてもよい。）

[0529]

[化382]

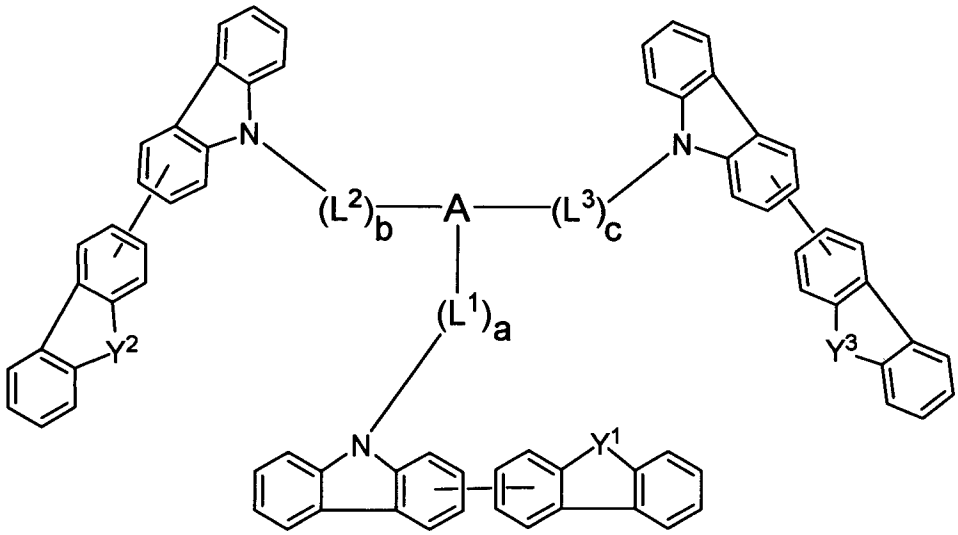


(1a'-iv[IV])

（一般式（１ａ’－ｉｖ［IV］）中、Ａ、Ｌ[1]、Ｌ[2]、ａ、Ｒ[1]～Ｒ[32]、Ｙ[1]及びＹ[2]は、一般式（１［IV］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。一般式（１ａ’－ｉｖ［IV］）中の各基において、同一の記号は、それぞれ同じであってもよいし、異なっていてもよい。）

[0530]

[化383]



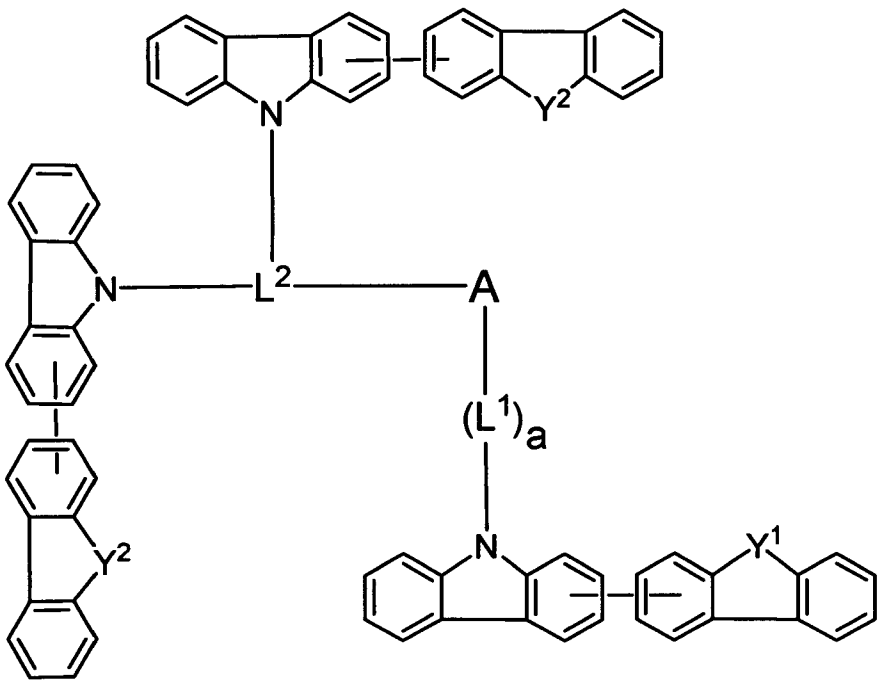
(1a'-H[IV])

（一般式（１ａ’－Ｈ［IV］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｃ、及びＹ[1]～Ｙ[3]は、一般式（１［IV］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。）

なお、上記一般式（１ａ’－Ｈ［IV］）中、カルバゾリル基が有するベンゼン環から伸びている結合手は、その結合手の２つの先端が位置するそれぞれのベンゼン環上の４つの水素原子のいずれかが脱離して、そこで結合していることを示す。

[0531]

[化384]



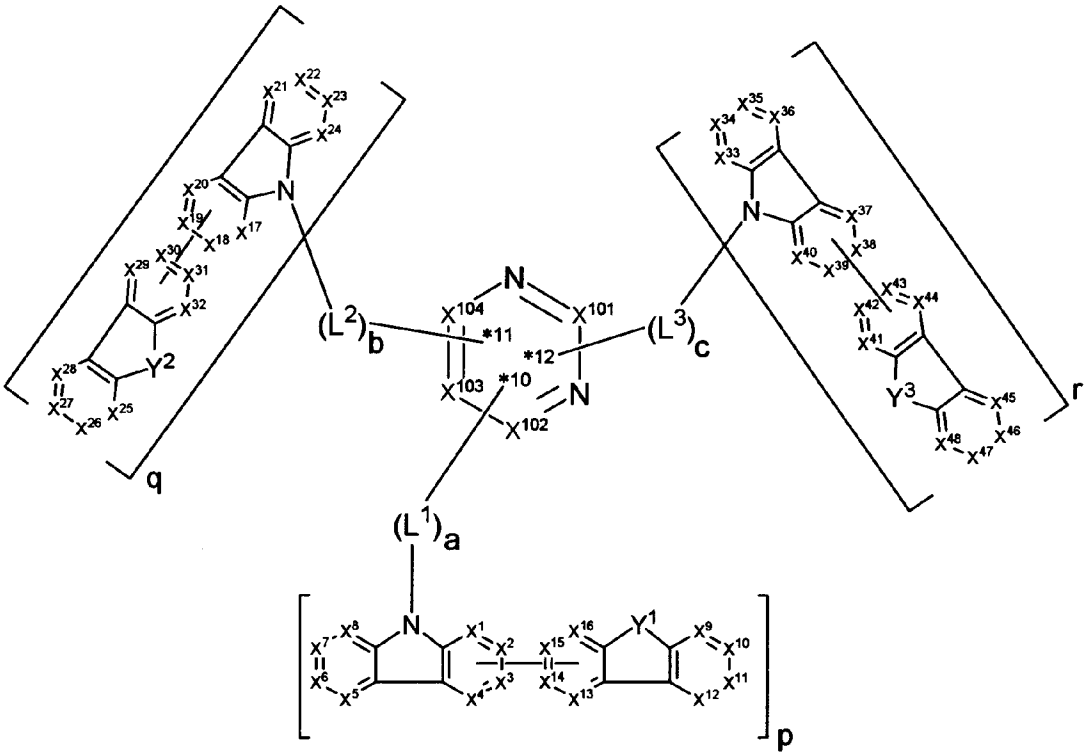
(1a'-iv-H[IV])

（一般式（１ａ’－ｉｖ－Ｈ［IV］）中、Ａ、Ｌ[1]、Ｌ[2]、ａ、Ｙ[1]及びＹ[2]は、一般式（１［IV］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。一般式（１ａ’－ｉｖ－Ｈ［IV］）中の各基において、同一の記号は、それぞれ同じであってもよいし、異なっていてもよい。）

なお、上記一般式（１ａ’－ｉｖ－Ｈ［IV］）中、カルバゾリル基が有するベンゼン環から伸びている結合手は、その結合手の２つの先端が位置するそれぞれのベンゼン環上の４つの水素原子のいずれかが脱離して、そこで結合していることを示す。

[0532]

[化385]



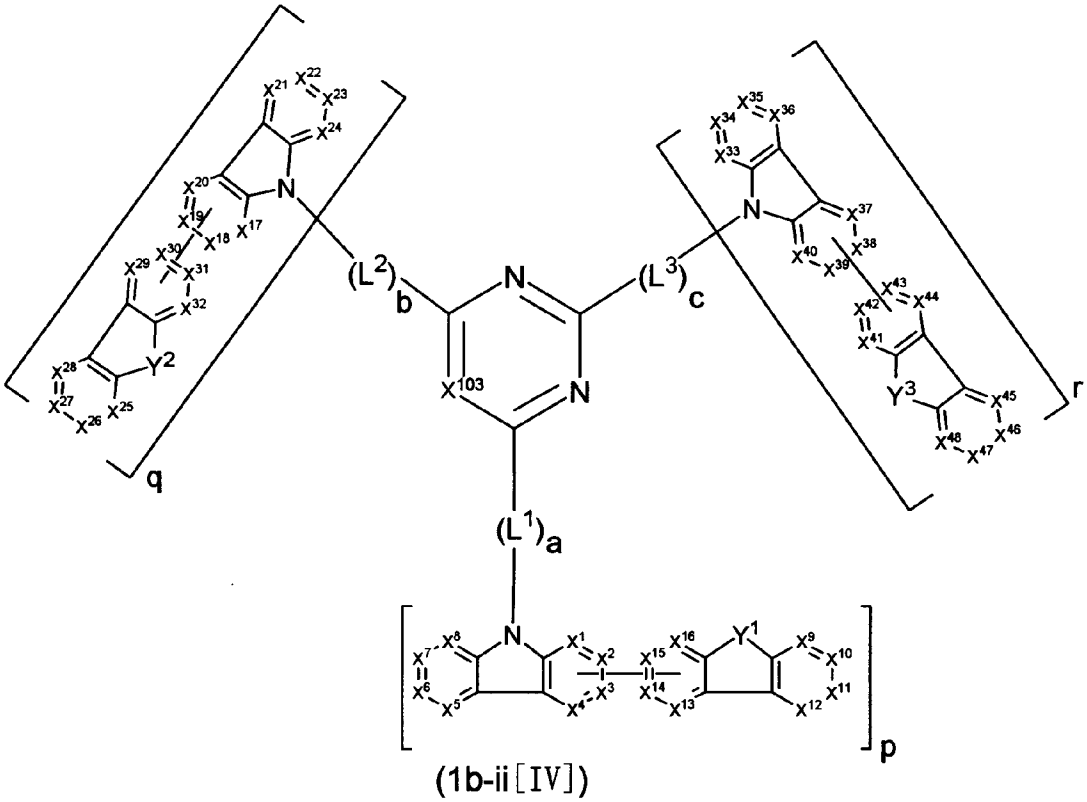
(1b-i[IV])

（一般式（１ｂ－ｉ［IV］）中、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｃ、ｐ～ｒ、Ｘ[1]～Ｘ[48]、及びＹ[1]～Ｙ[3]は、一般式（１［IV］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。

Ｘ[101]～Ｘ[104]は、それぞれ＊１０～＊１２のいずれかと結合する炭素原子、Ｃ（Ｒｘ）、又は窒素原子である。該Ｒｘは水素原子又は置換基であって、複数存在するＲｘは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲｘ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。）

[0533]

[化386]



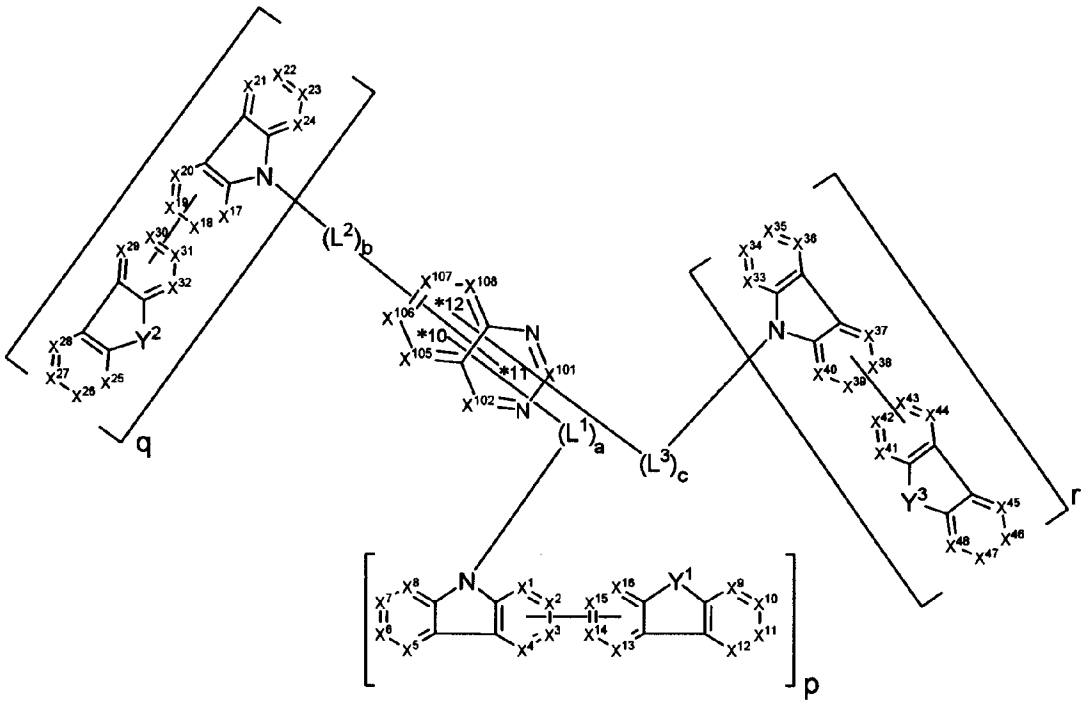
(1b-ii[IV])

（一般式（１ｂ－ｉｉ［IV］）中、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}、ａ～ｃ、ｐ～ｒ、Ｘ^{1}～Ｘ^{48}、及びＹ^{1}～Ｙ^{3}は、一般式（１［IV］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。

Ｘ^{103}は、Ｃ（Ｒｘ）又は窒素原子であり、Ｒｘは水素原子又は置換基である。）

[0534]

[化387]



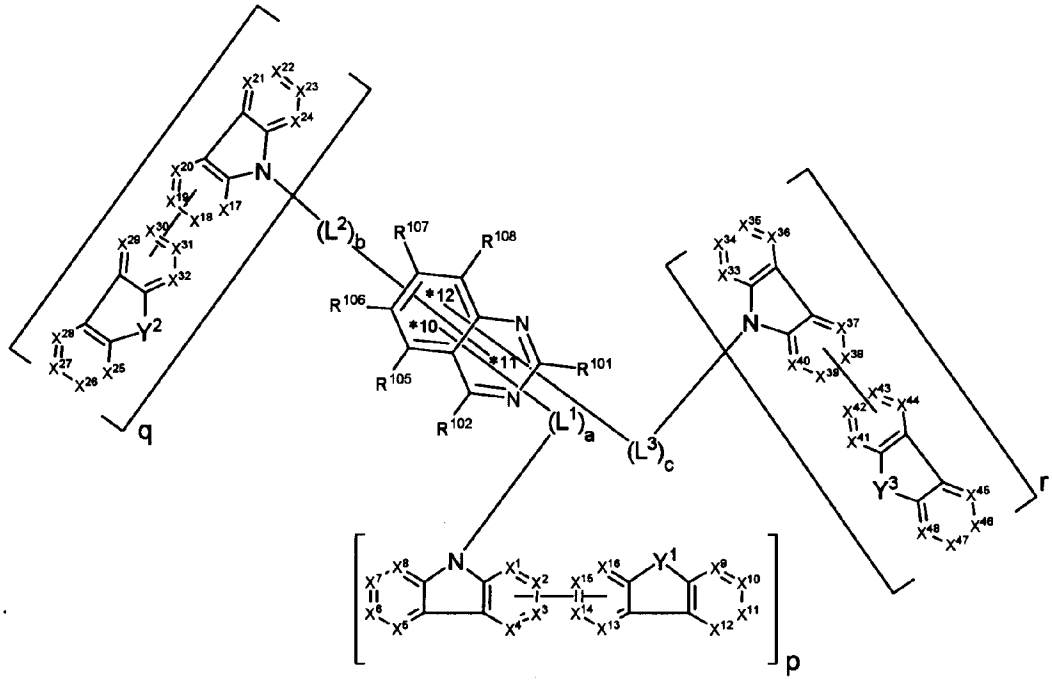
(1b-iii[IV])

（一般式（１ｂ－ｉｉｉ［IV］）中、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｃ、ｐ～ｒ、Ｘ[1]～Ｘ[48]、及びＹ[1]～Ｙ[3]は、一般式（１［IV］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。

Ｘ[101]、Ｘ[102]、Ｘ[105]～Ｘ[108]は、それぞれ＊１０～＊１２のいずれかと結合する炭素原子、Ｃ（Ｒｘ）、又は窒素原子である。該Ｒｘは水素原子又は置換基であって、複数存在するＲｘは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲｘ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。）

[0535]

[化388]



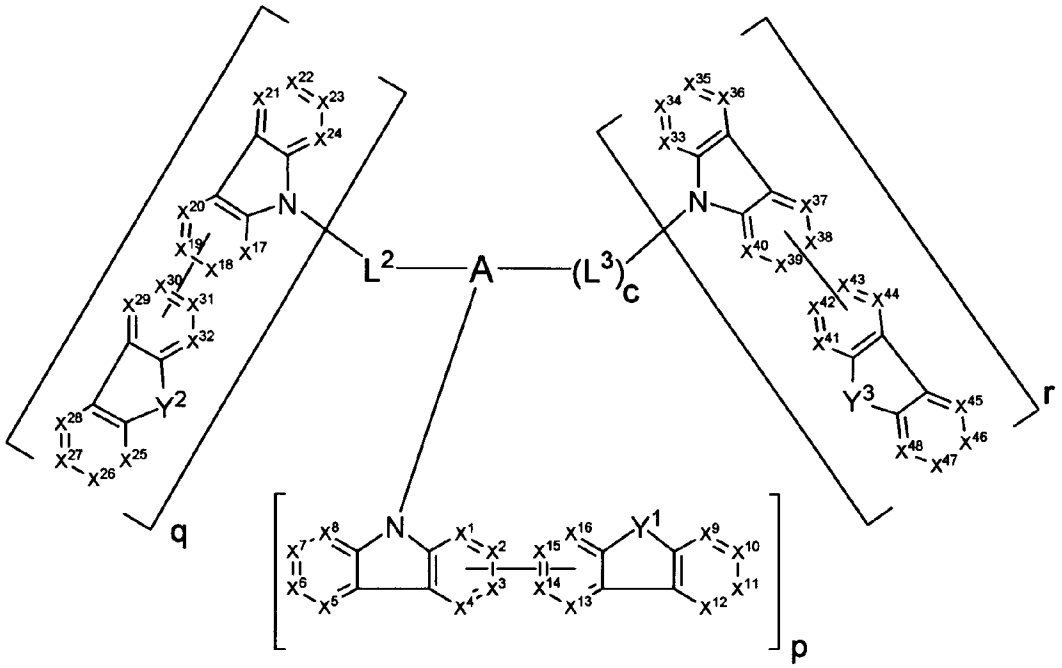
(1b-iv[IV])

（一般式（１ｂ－ｉｖ［IV］）中、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}、ａ～ｃ、ｐ～ｒ、Ｘ^{1}～Ｘ^{48}、及びＹ^{1}～Ｙ^{3}は、一般式（１［IV］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。

Ｒ^{101}、Ｒ^{102}及びＲ^{105}～Ｒ^{108}のうちの１～３つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子が＊１０～＊１２のいずれかと結合し、それ以外は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。なお、Ｒ^{102}及びＲ^{105}～Ｒ^{108}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。）

[0536] また、化合物（１［IV］）の中でも、特に、下記一般式で表される化合物を用いることが好ましい。

[化389]



(1-ii-1[IV])

（一般式（１－ｉｉ－１［IV］）中、Ａは、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基を表す。

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

ｃは、０又は１である。

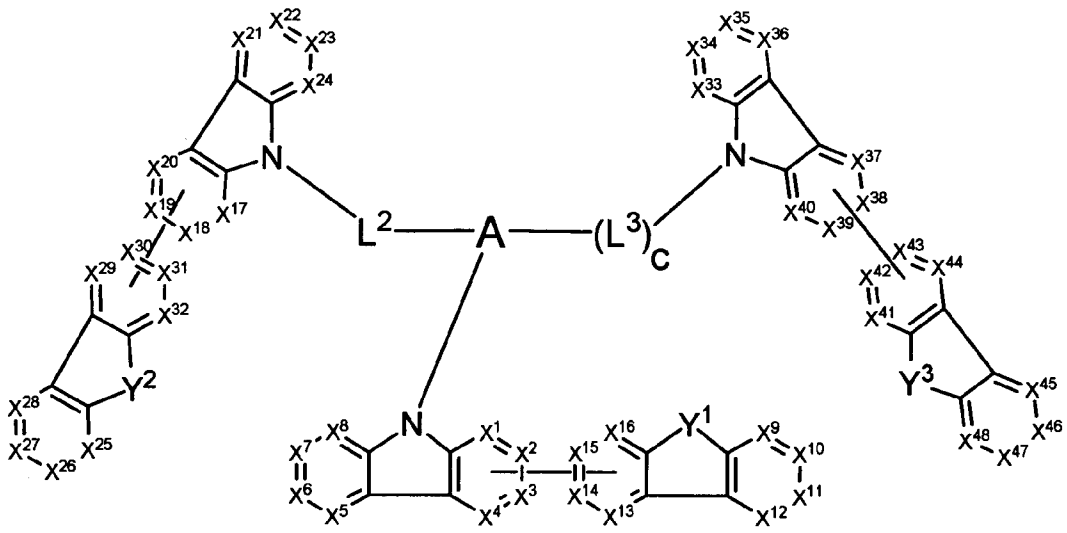
Ｘ[1]～Ｘ[48]は、それぞれＣ（Ｒ[1]）～Ｃ（Ｒ[48]）又は窒素原子を表す。Ｒ[1]～Ｒ[48]は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。但し、Ｘ[1]～Ｘ[4]のうちのいずれか１つは炭素原子であり、Ｘ[13]～Ｘ[16]のうちのいずれか１つの炭素原子と直接結合をしており、Ｘ[17]～Ｘ[20]のうちのいずれか１つは炭素原子であり、Ｘ[29]～Ｘ[32]のうちのいずれか１つの炭素原子と直接結合をしており、Ｘ[37]～Ｘ[40]のうちのいずれか１つは炭素原子であり、Ｘ[41]～Ｘ[4]のうちのいずれか１つの炭素原子と直接結合をしている。また、その直接結合に関与していない、Ｒ[1]～Ｒ[8]から選ばれる２つ、Ｒ[9]～Ｒ[16]から選ばれる２つ、Ｒ

^{17}～R^{24}から選ばれる２つ、R^{25}～R^{32}から選ばれる２つ、R^{33}～R^{40}から選ばれる２つ、及びR^{41}～R^{48}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。

Y^{1}～Y^{3}は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、C（R^{A}）（R^{B}）、Si（R^{C}）（R^{D}）、P（R^{E}）、P（＝O）（R^{F}）、S（＝O）$_2$又はP（＝S）（R^{G}）である。R^{A}、R^{B}、R^{C}、R^{D}、R^{E}、R^{F}及びR^{G}は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。R^{A}とR^{B}、及びR^{C}とR^{D}は、互いに結合して環を形成していてもよい。

ｐ～ｒは、それぞれ独立に、０～３の整数であり、ｐ＋ｑ＋ｒ＝３である。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。）

[0537] [化390]

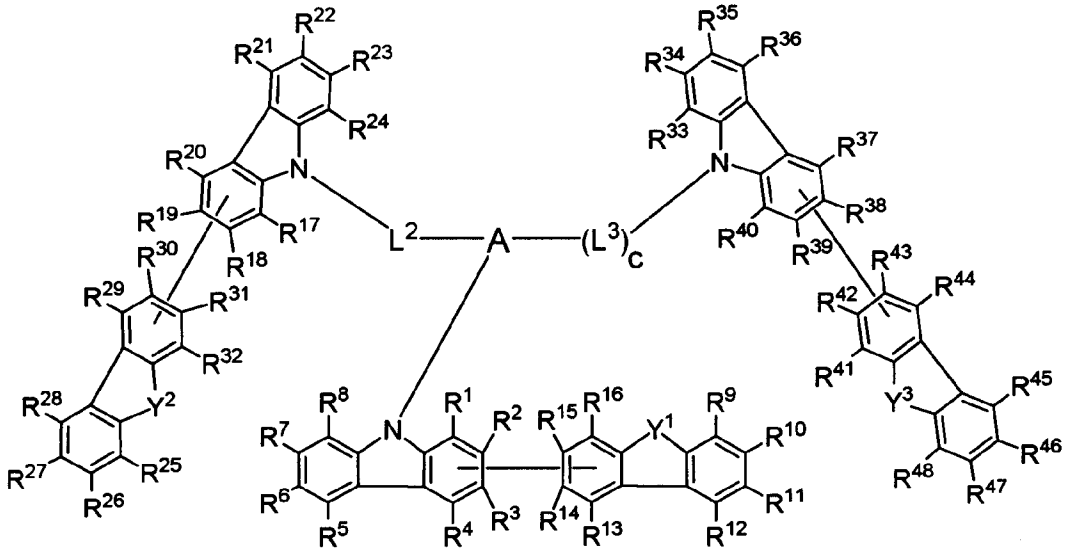


(1a-ii-1[IV])

（一般式（１ａ－ｉｉ－１［IV］）中、A、L^{2}、L^{3}、ｃ、X^{1}～X^{48}、及びY^{1}～Y^{3}は、一般式（１－ｉｉ－１［IV］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。）

[0538]

[化391]

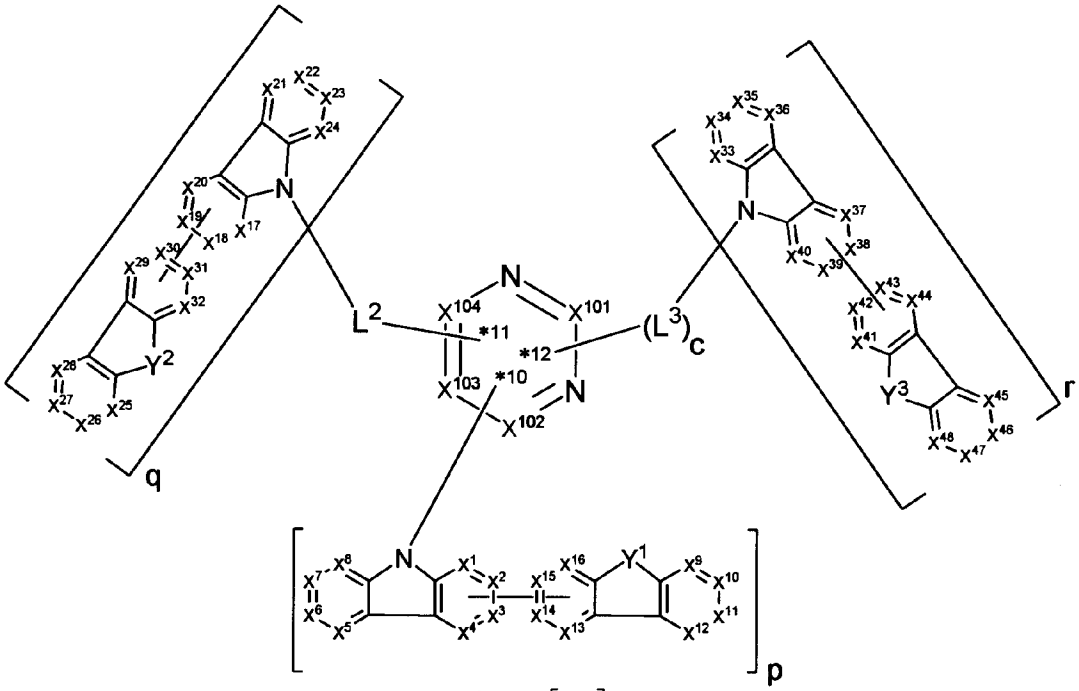


(1a'-ii-1[IV])

（一般式（１ａ’－ｉｉ－１［IV］）中、Ａ、Ｌ^{2}、Ｌ^{3}、ｃ、Ｒ^{1}～Ｒ^{48}、及びＹ^{1}～Ｙ^{3}は、一般式（１－ｉｉ－１［IV］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。）

[0539]

[化392]



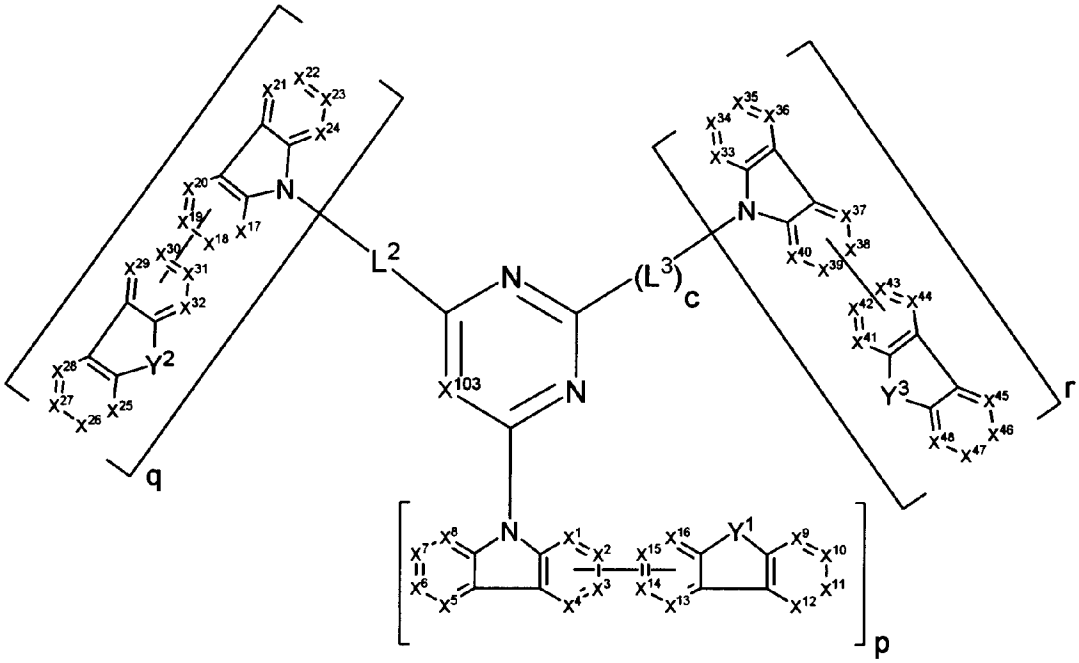
(1b-i-1[IV])

（一般式（１ｂ－ｉ－１［IV］）中、Ｌ[2]、Ｌ[3]、ｃ、ｐ～ｒ、Ｘ[1]～Ｘ[48]、及びＹ[1]～Ｙ[3]は、一般式（１－ｉｉ－１［IV］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。

Ｘ[101]～Ｘ[104]は、それぞれ＊１０～＊１２のいずれかと結合する炭素原子、Ｃ（Ｒｘ）、又は窒素原子である。該Ｒｘは水素原子又は置換基であって、複数存在するＲｘは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲｘ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。）

[0540]

[化393]



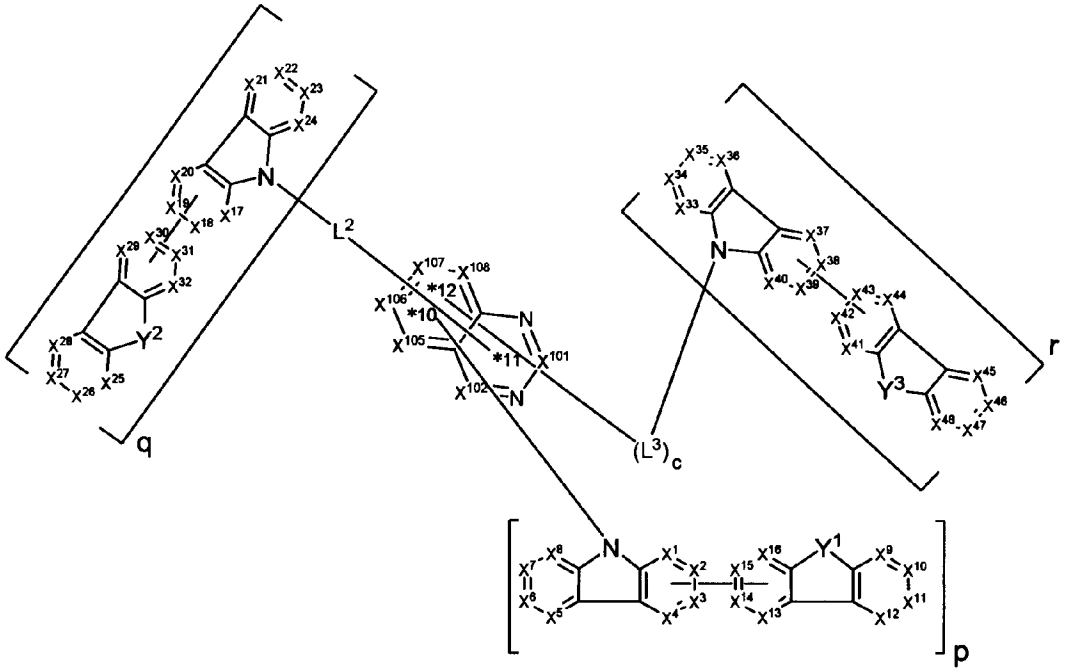
(1b-ii-1[IV])

（一般式（１ｂ－ｉｉ－１［IV］）中、Ｌ[2]、Ｌ[3]、ｃ、ｐ～ｒ、Ｘ[1]～Ｘ[48]、及びＹ[1]～Ｙ[3]は、一般式（１－ｉｉ－１［IV］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。

Ｘ[103]は、Ｃ（Ｒｘ）又は窒素原子であり、Ｒｘは水素原子又は置換基である。）

[0541]

[化394]



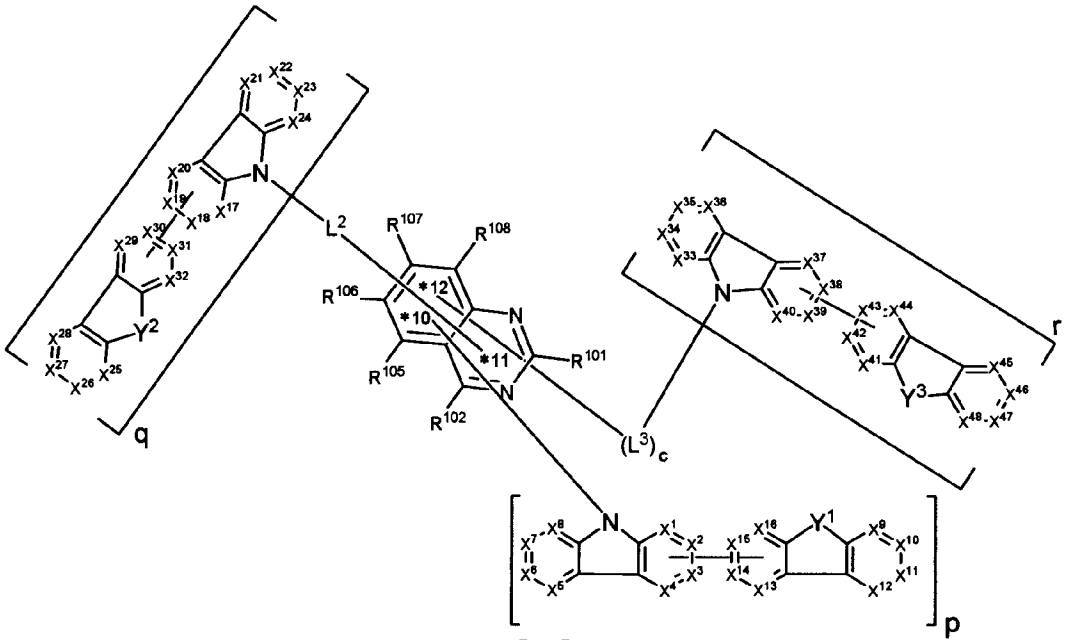
(1b-iii-1[IV])

（一般式（１ｂ－ｉｉｉ－１［IV］）中、Ｌ[2]、Ｌ[3]、ｃ、ｐ～ｒ、Ｘ[1]～Ｘ[48]、及びＹ[1]～Ｙ[3]は、一般式（１－ｉｉ－１［IV］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。

Ｘ[101]、Ｘ[102]、Ｘ[105]～Ｘ[108]は、それぞれ＊１０～＊１２のいずれかと結合する炭素原子、Ｃ（Ｒｘ）、又は窒素原子である。該Ｒｘは水素原子又は置換基であって、複数存在するＲｘは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲｘ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。）

[0542]

[化395]



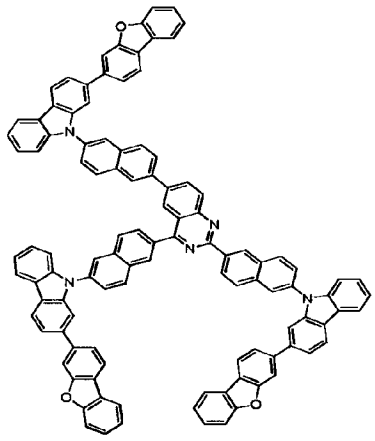
(1b-iv-1[IV])

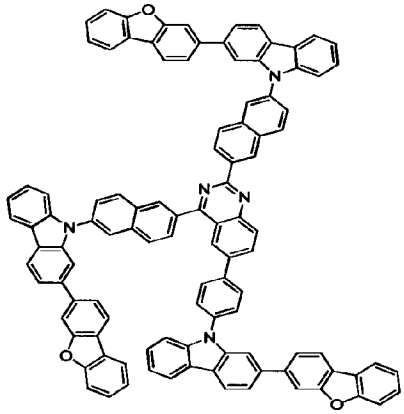
（一般式（１ｂ－ｉｖ－１［IV］）中、Ｌ[2]、Ｌ[3]、ｃ、ｐ～ｒ、Ｘ[1]～Ｘ[48]、及びＹ[1]～Ｙ[3]は、一般式（１－ｉｉ－１［IV］）中のものと同じであり、好ましいものも同じである。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。

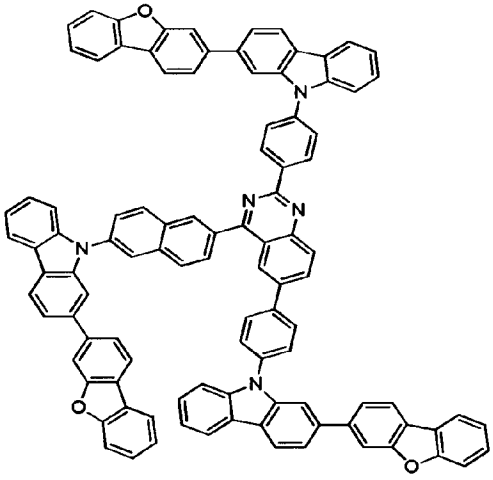
Ｒ[101]、Ｒ[102]、及びＲ[105]～Ｒ[108]のうちの１～３つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子が＊１０～＊１２のいずれかと結合し、それ以外は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。なお、Ｒ[102]及びＲ[105]～Ｒ[108]から選ばれる２つは、互いに結合して、環を形成していてもよい。）

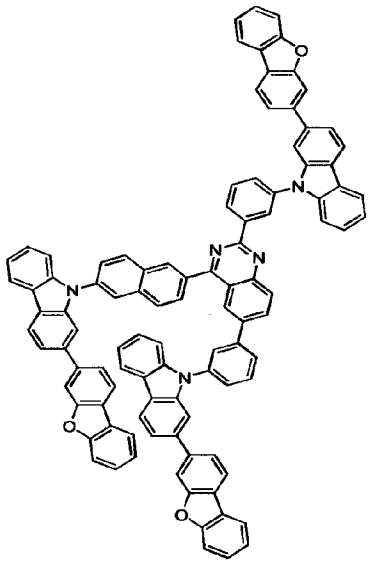
[0543] 以下に本発明の一態様である化合物（１［IV］）の具体例を示すが、これらに限定されるものではない。

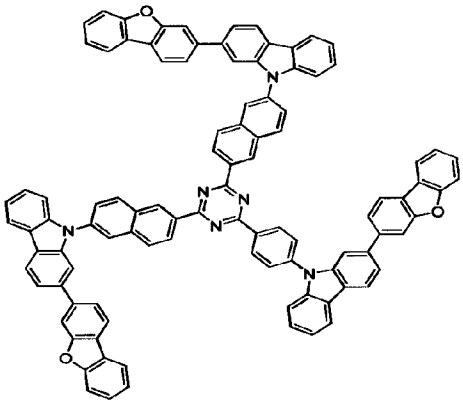
[化396]

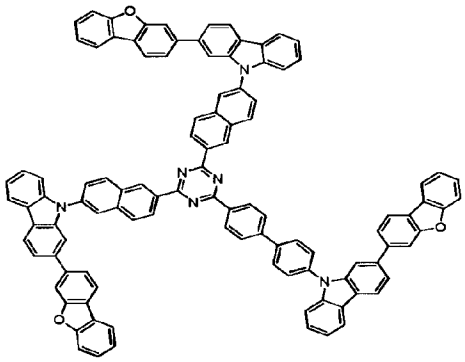






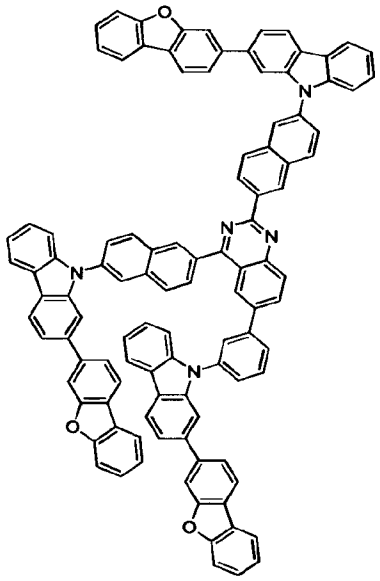


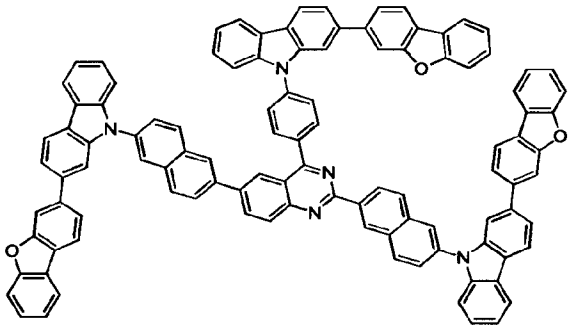


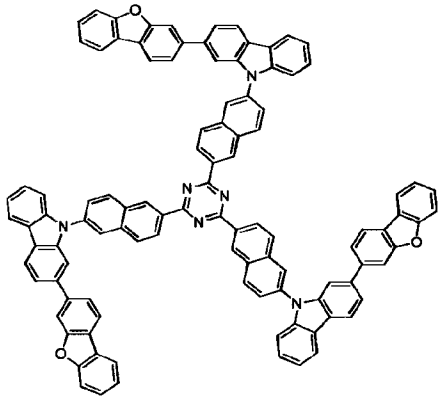


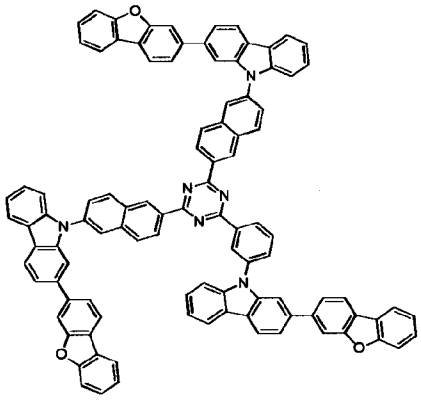
[0544]

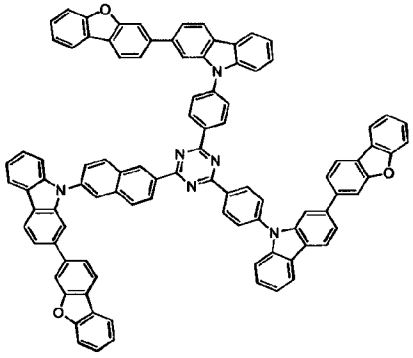
[化397]





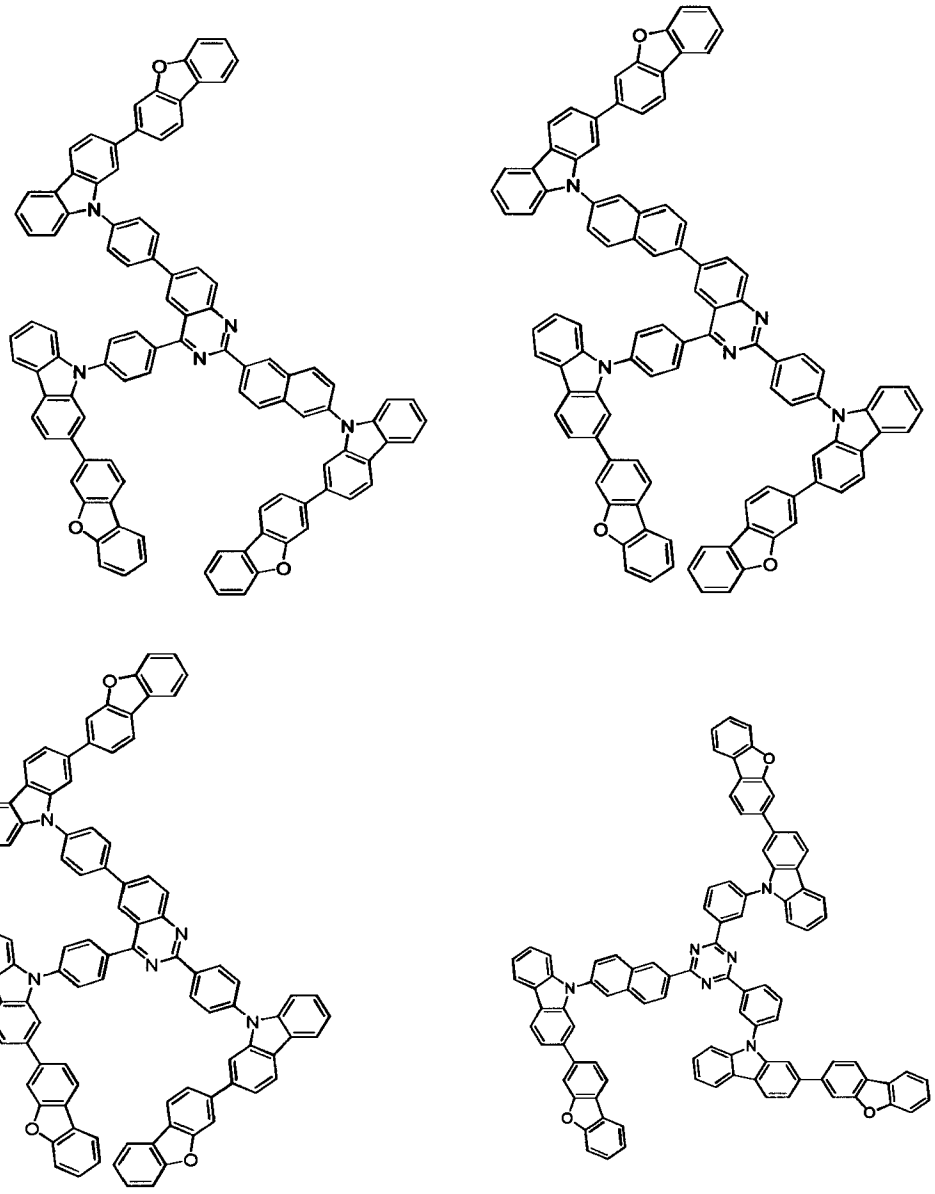






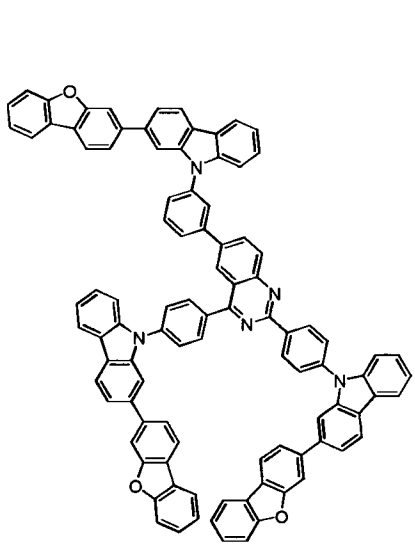
[0545]

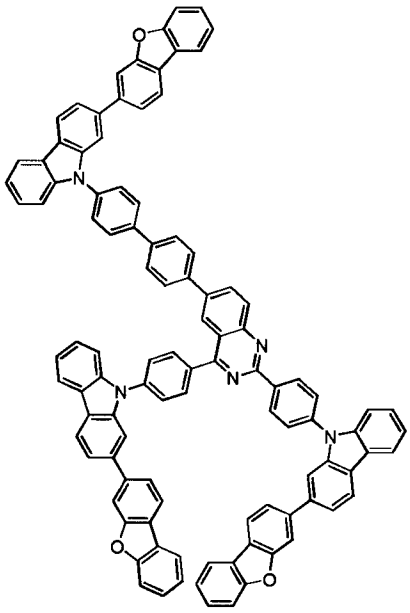
[化398]

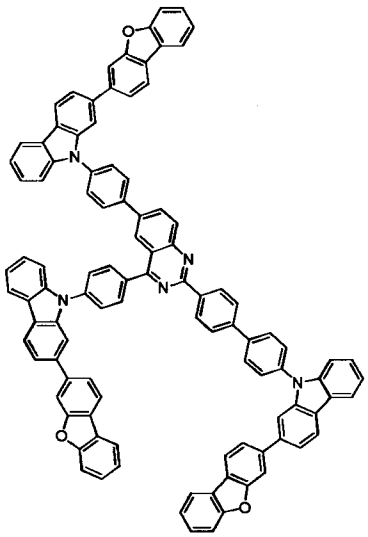


[0546]

[化399]

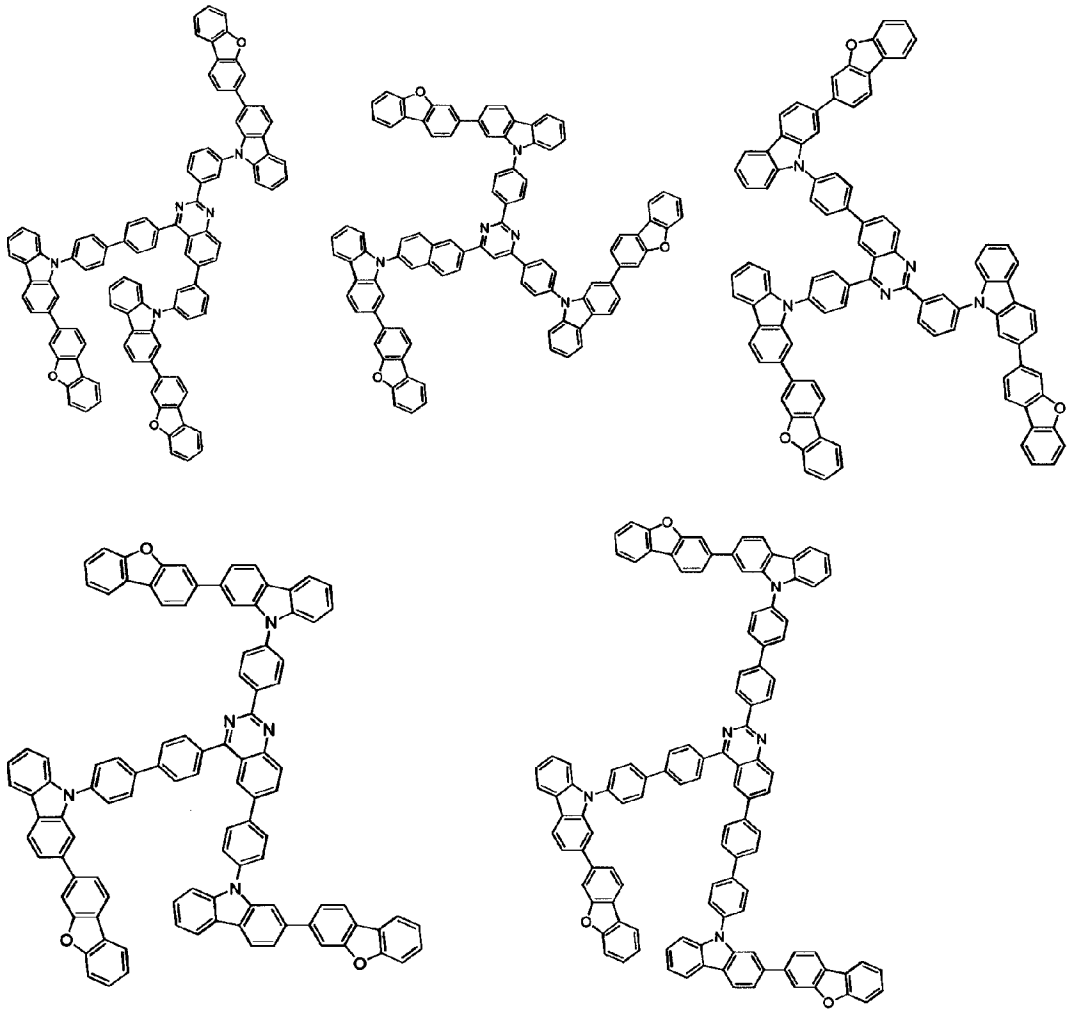






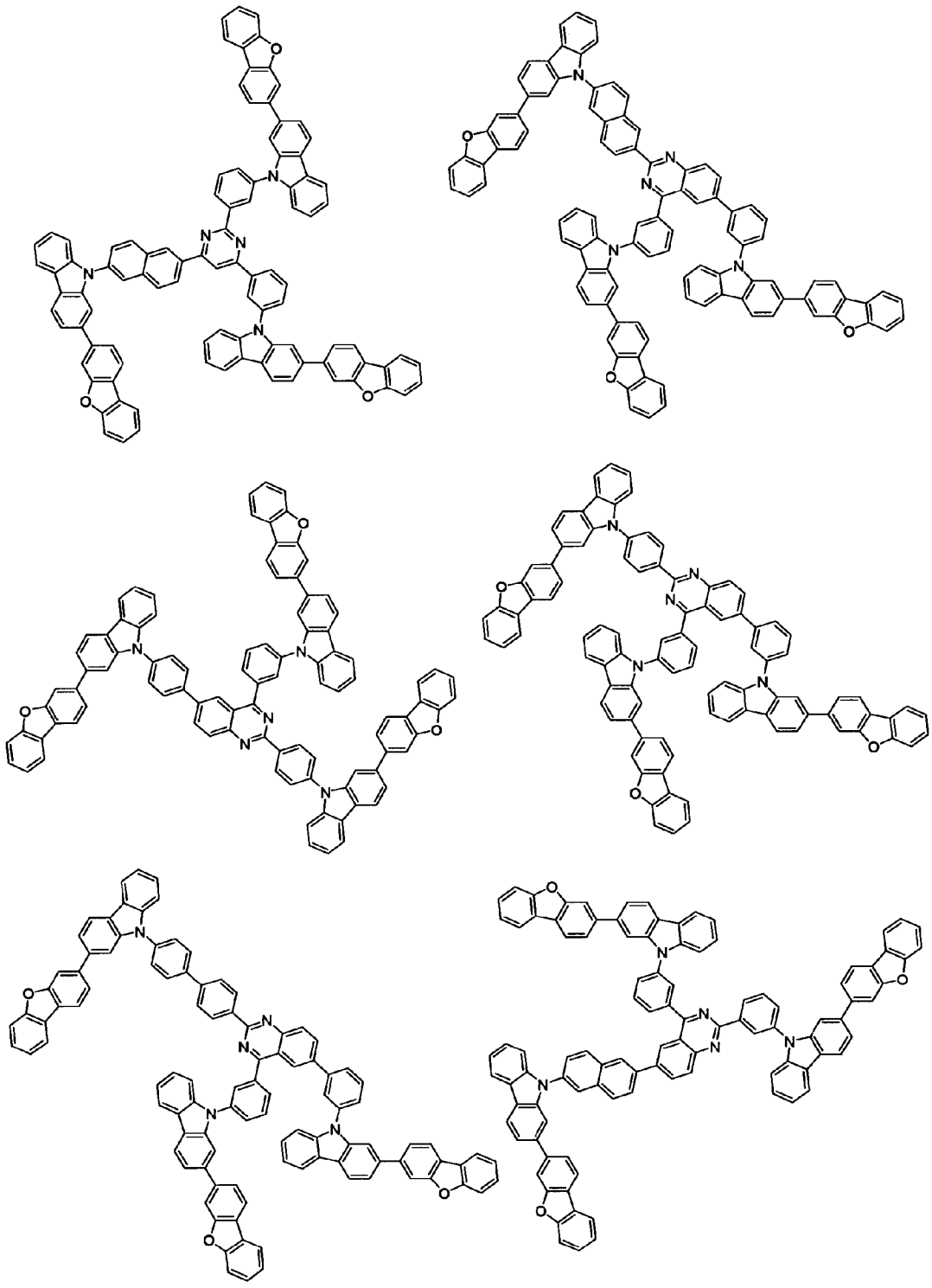
[0547]

[化400]



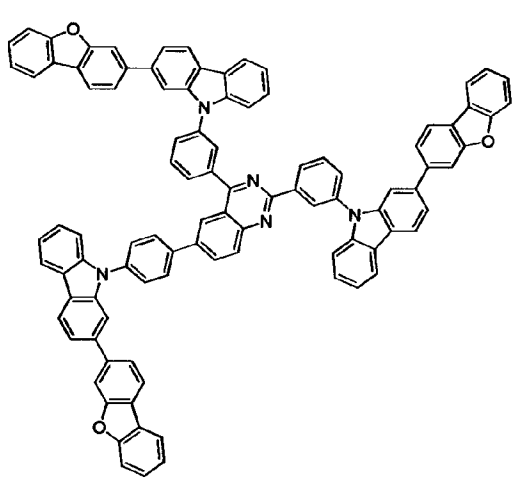
[0548]

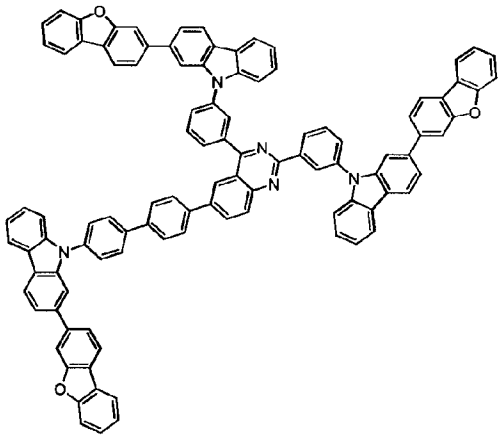
[化401]

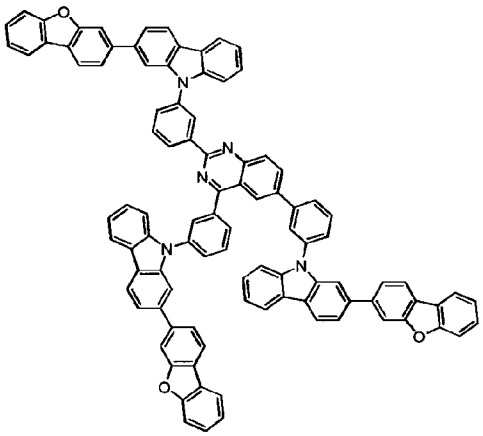


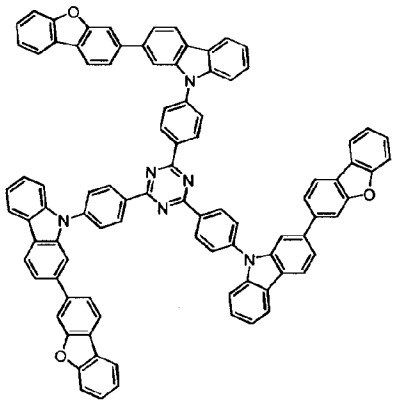
[0549]

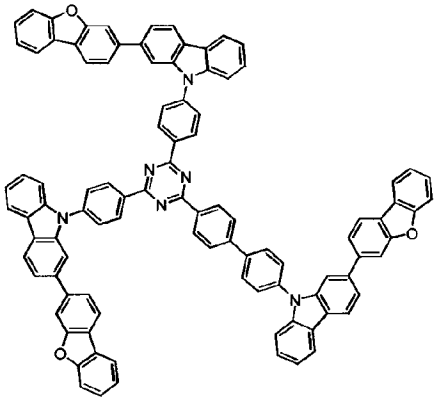
[化402]

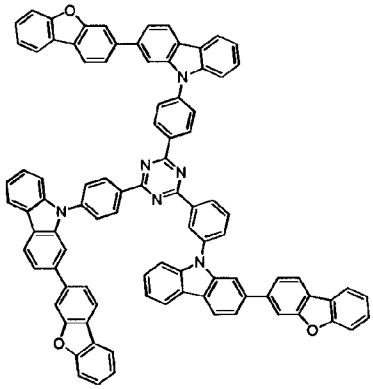






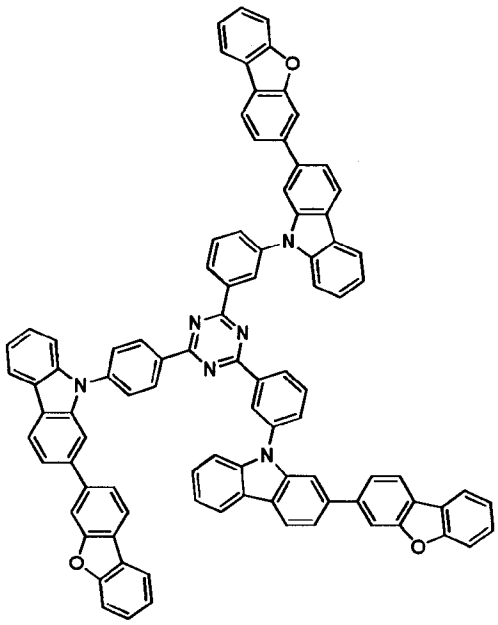


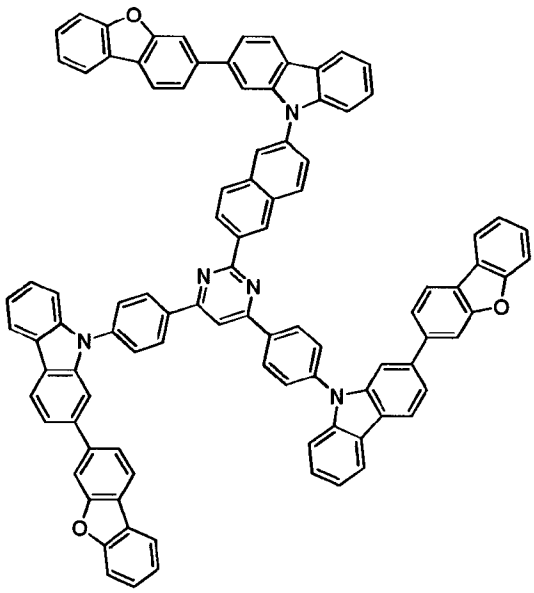


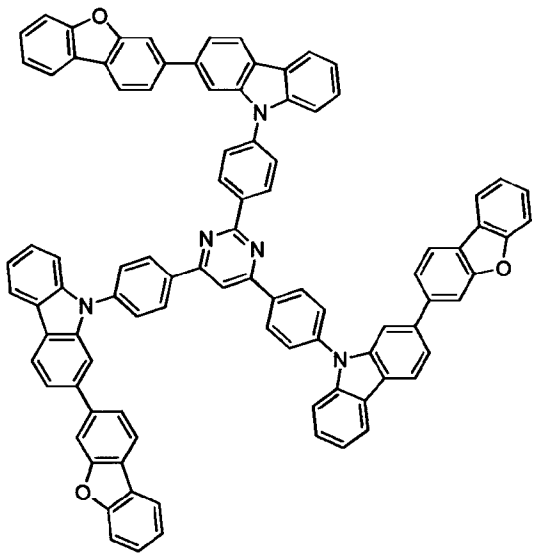


[0550]

[化403]

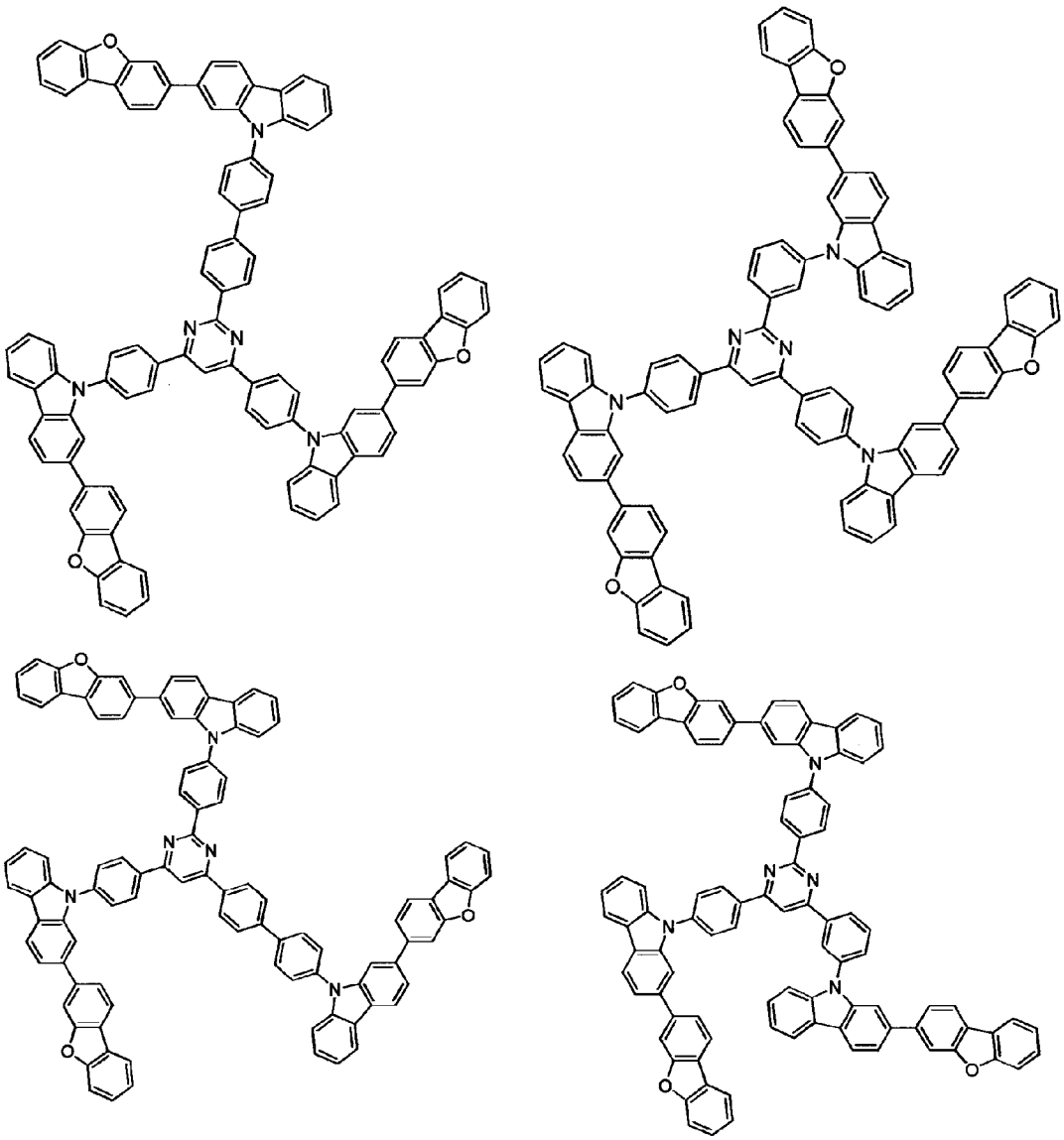






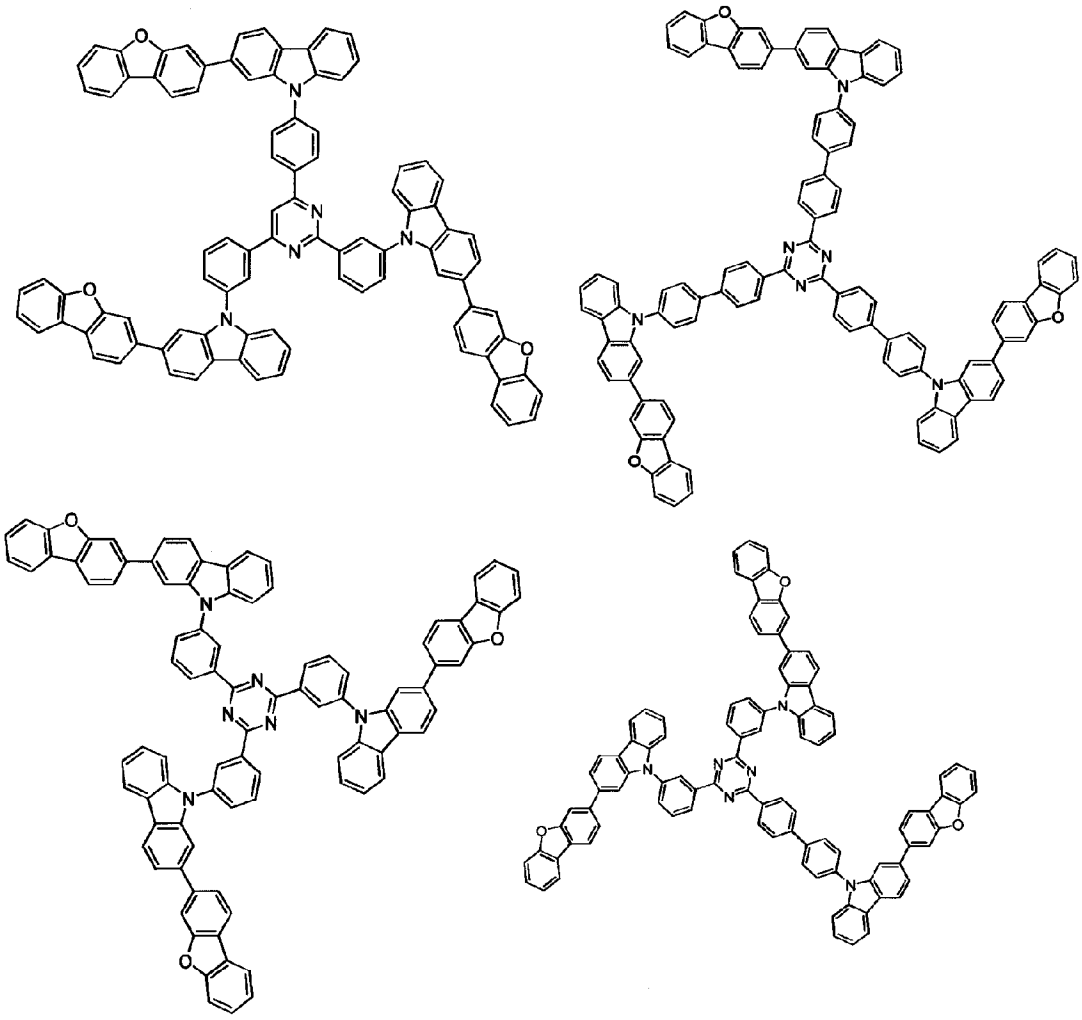
[0551]

[化404]



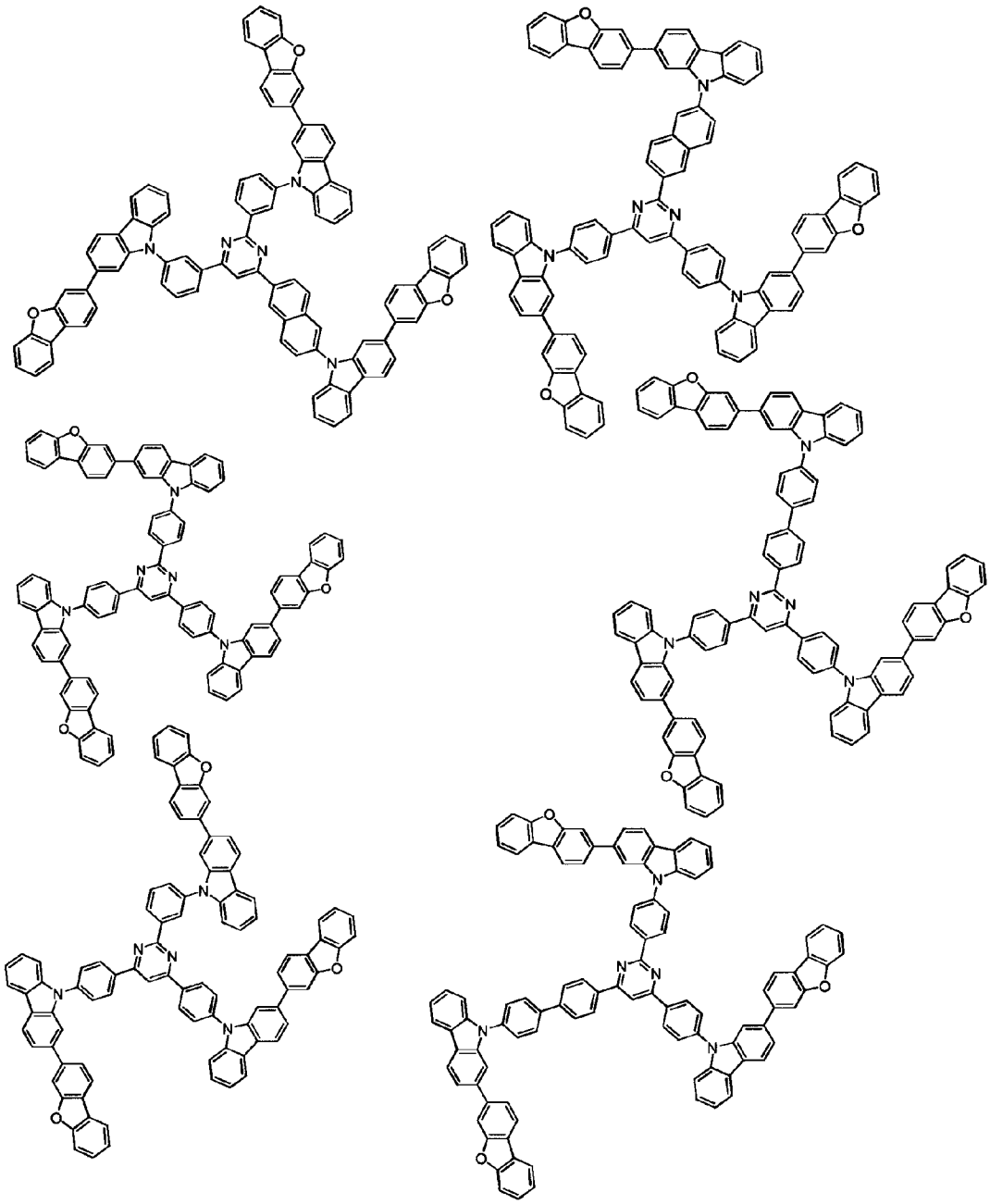
[0552]

[化405]



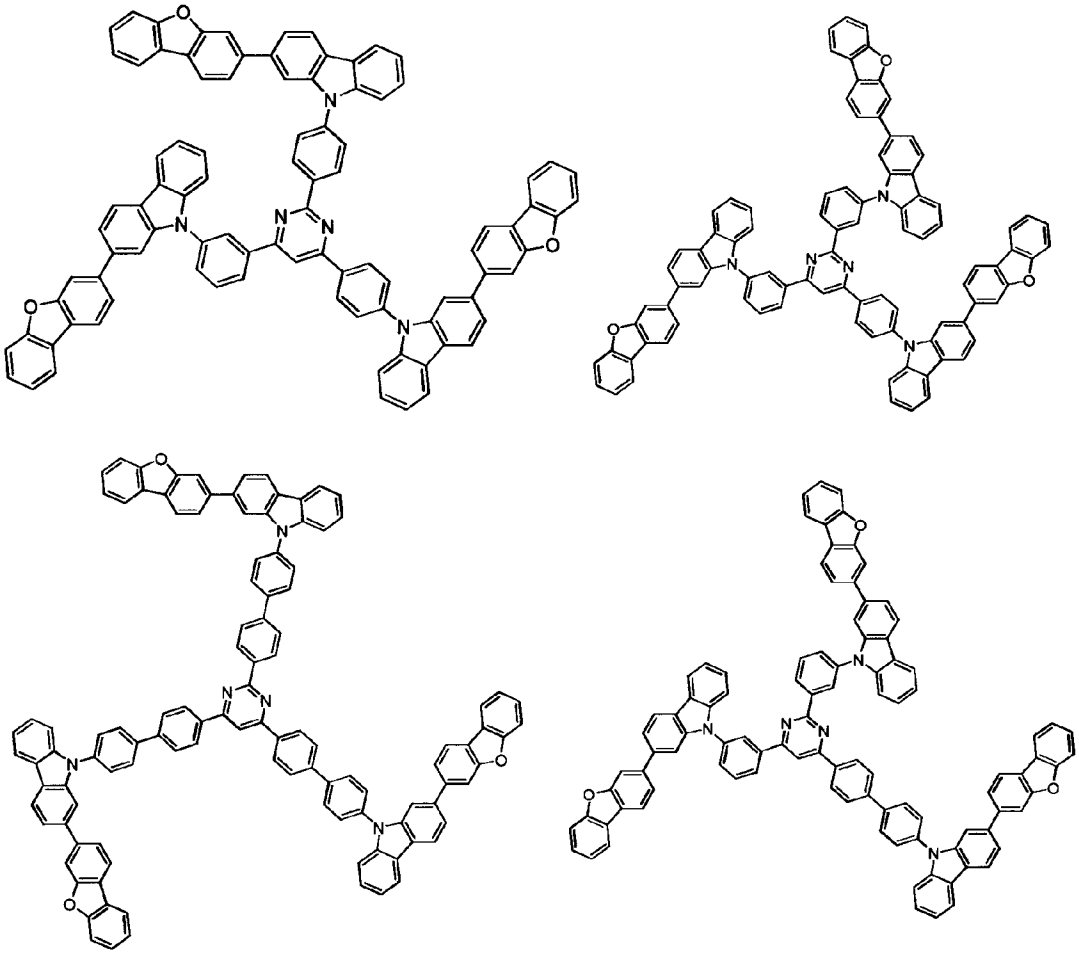
[0553]

[化406]



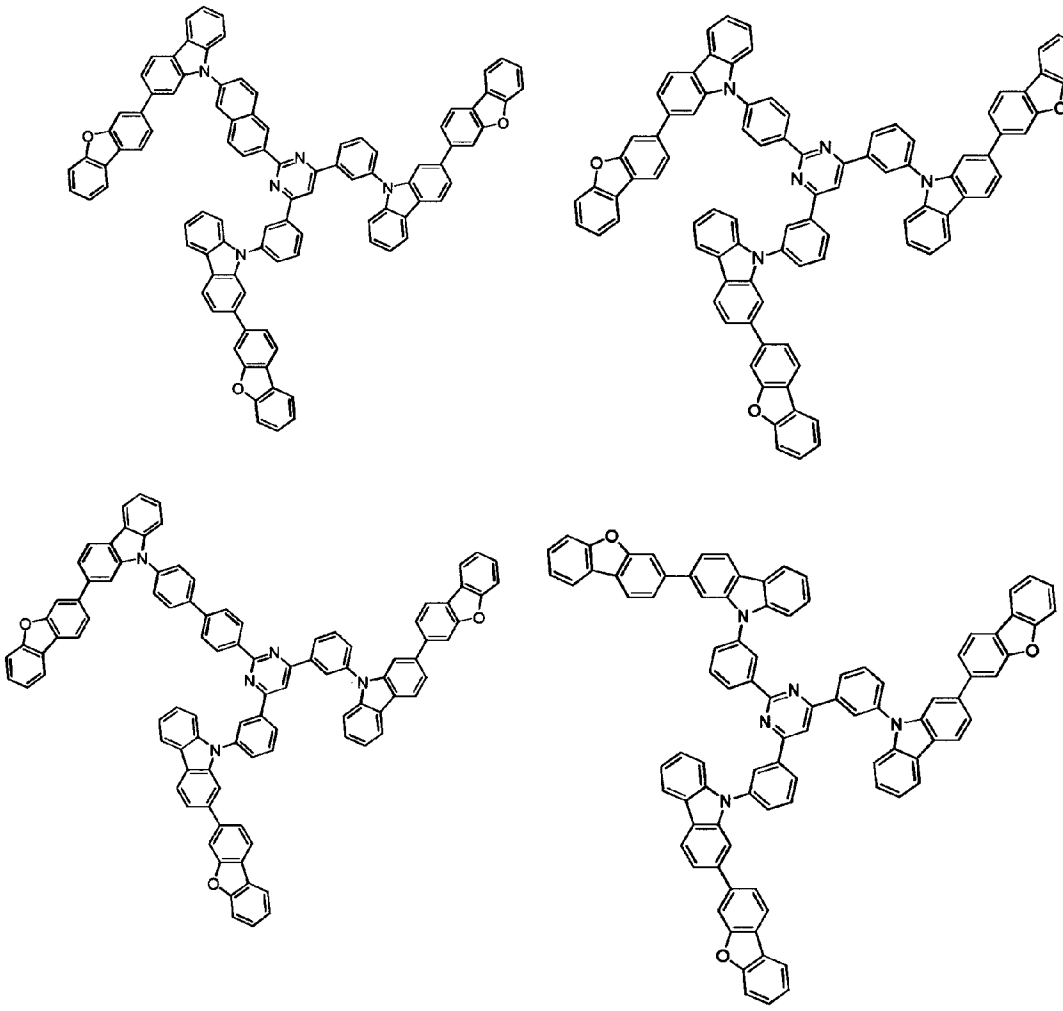
[0554]

[化407]



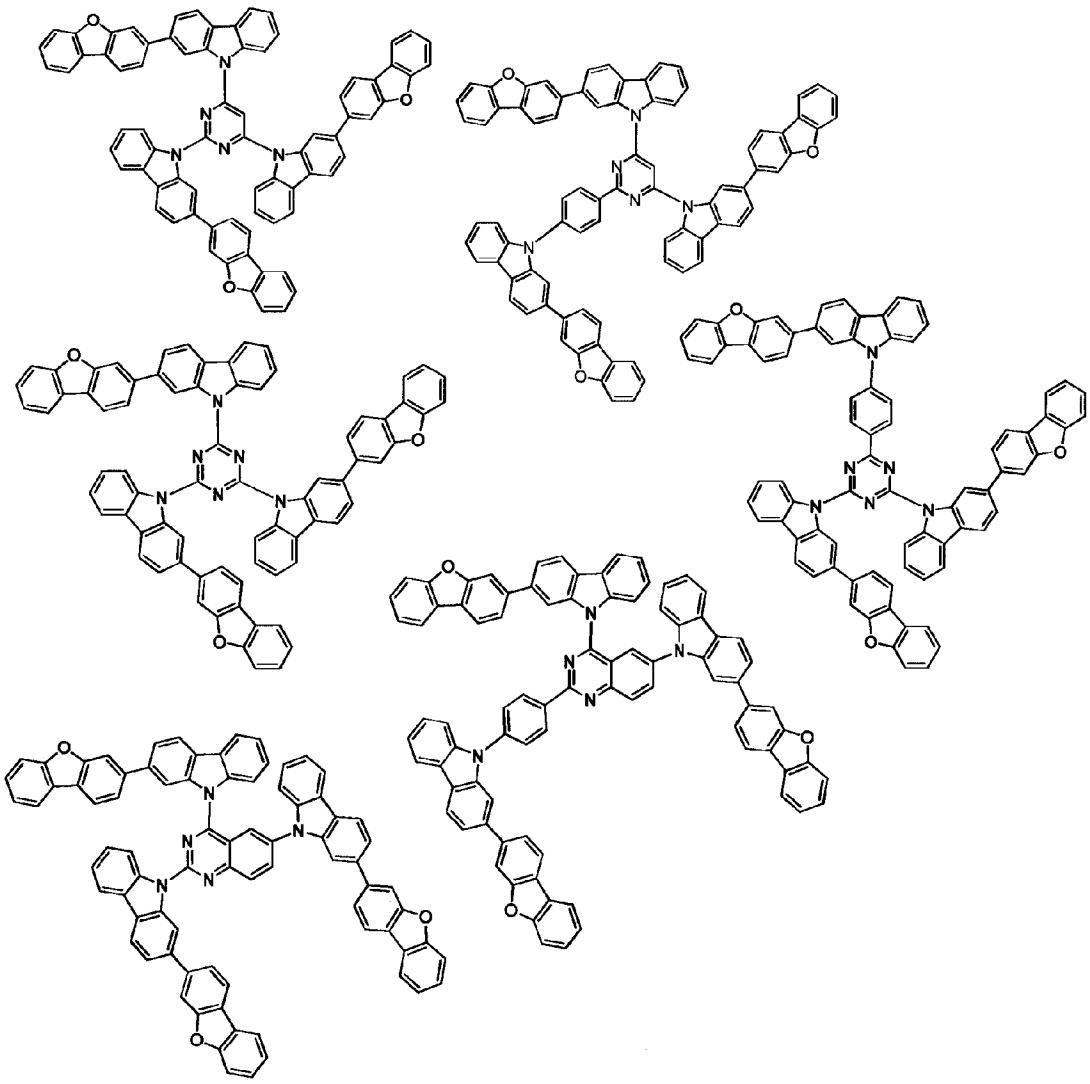
[0555]

[化408]



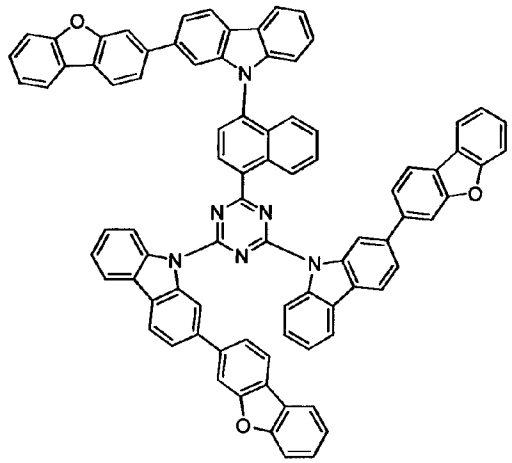
[0556]

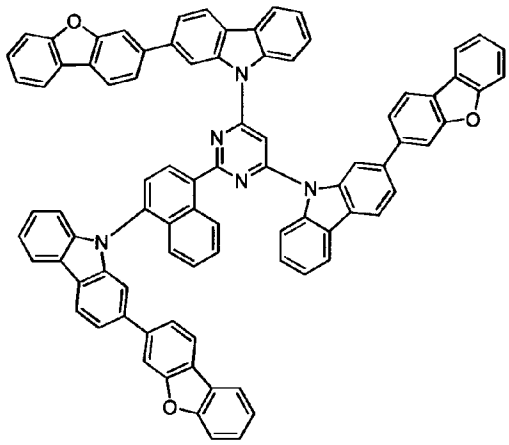
[化409]

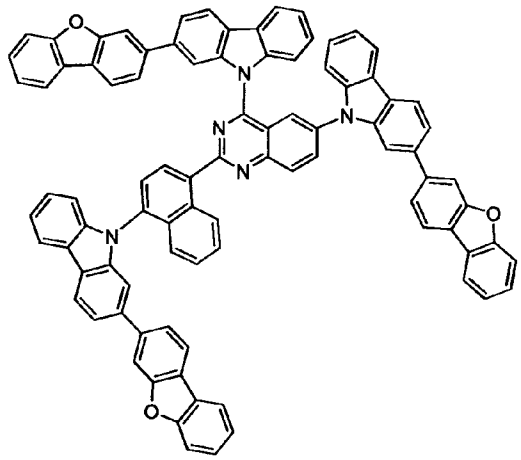


[0557]

[化410]

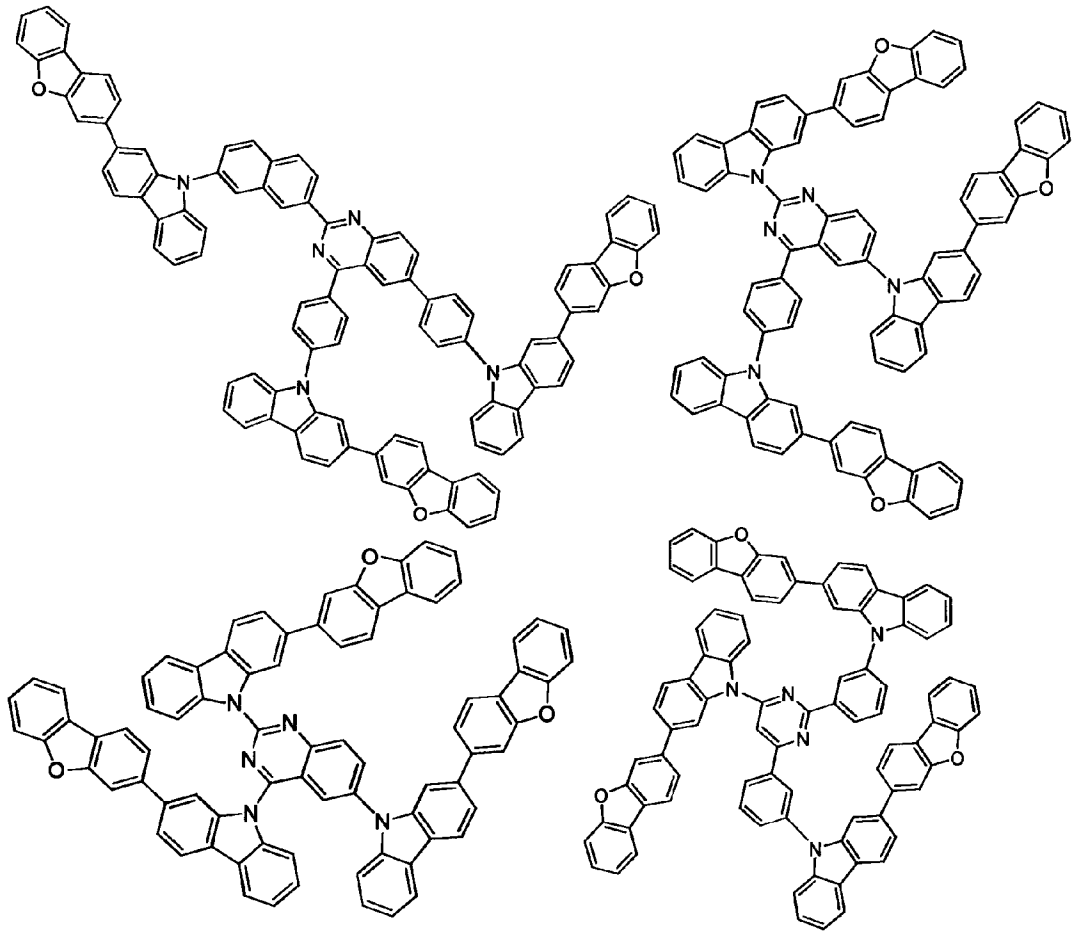






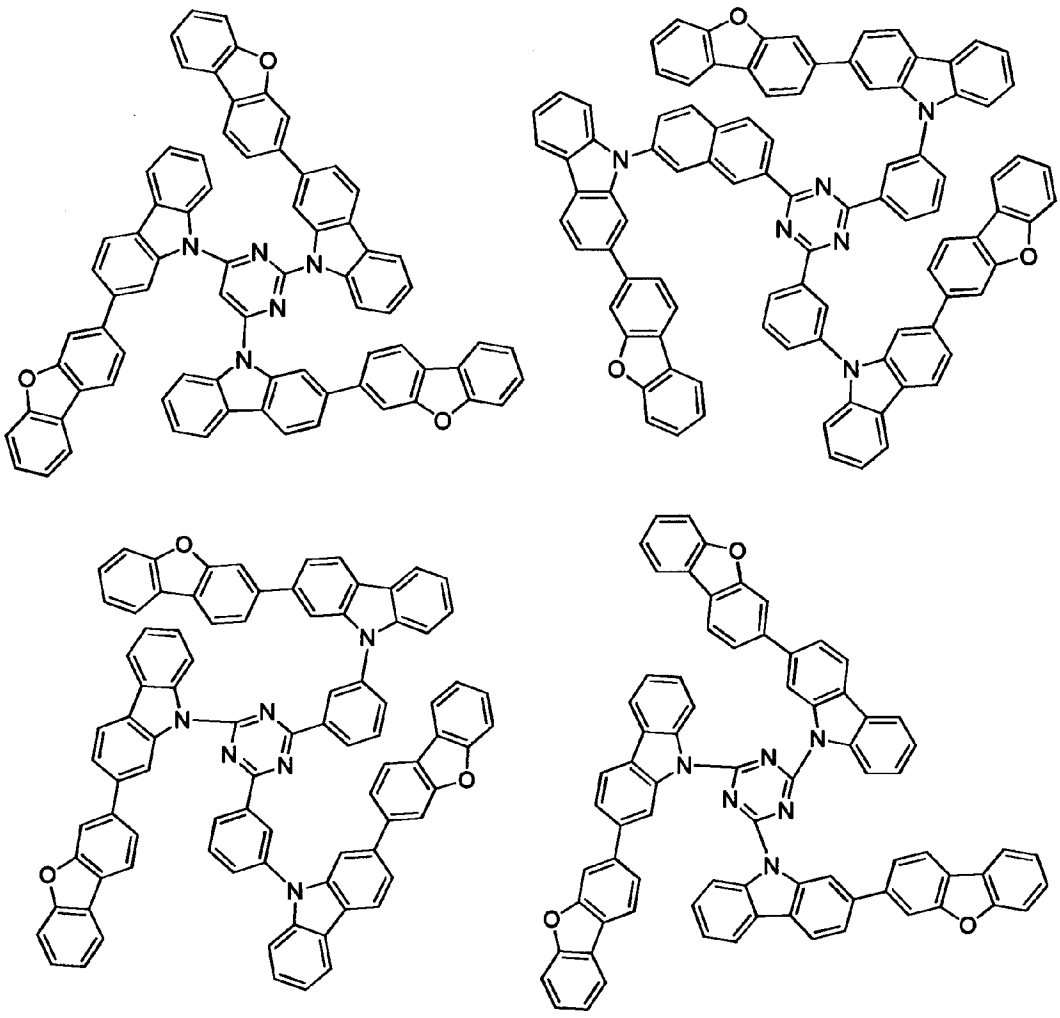
[0558]

[化411]



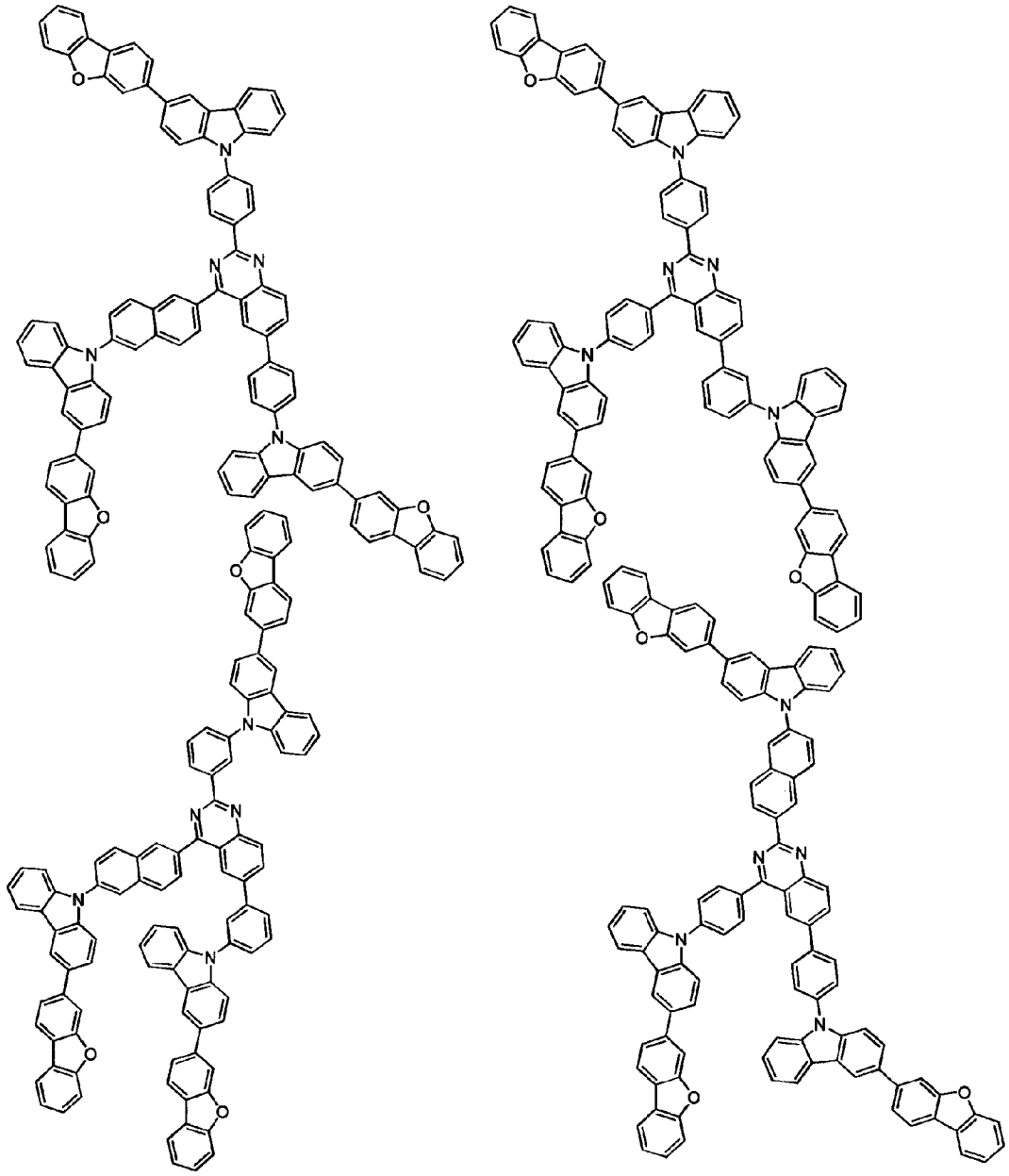
[0559]

[化412]



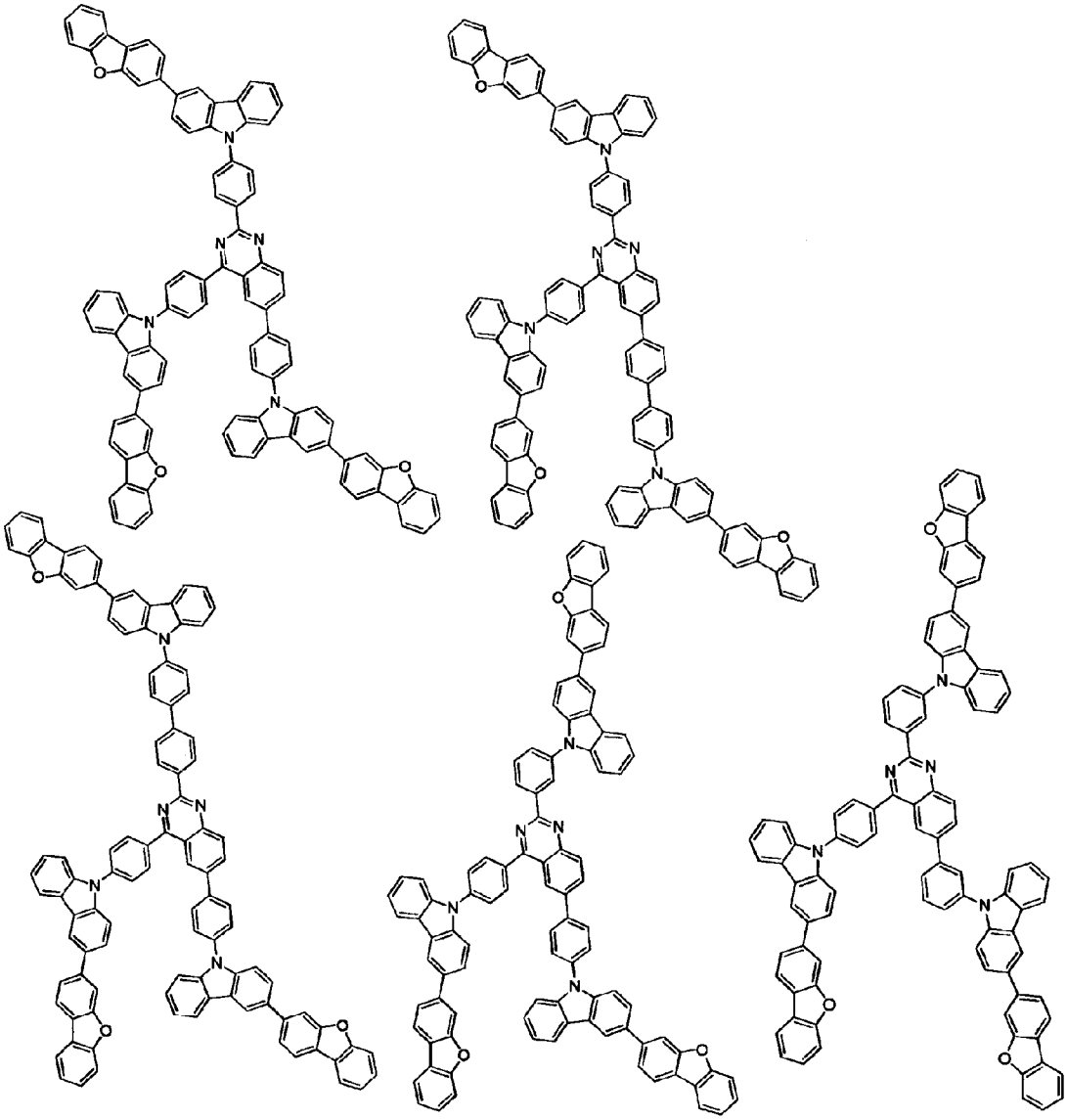
[0560]

[化413]



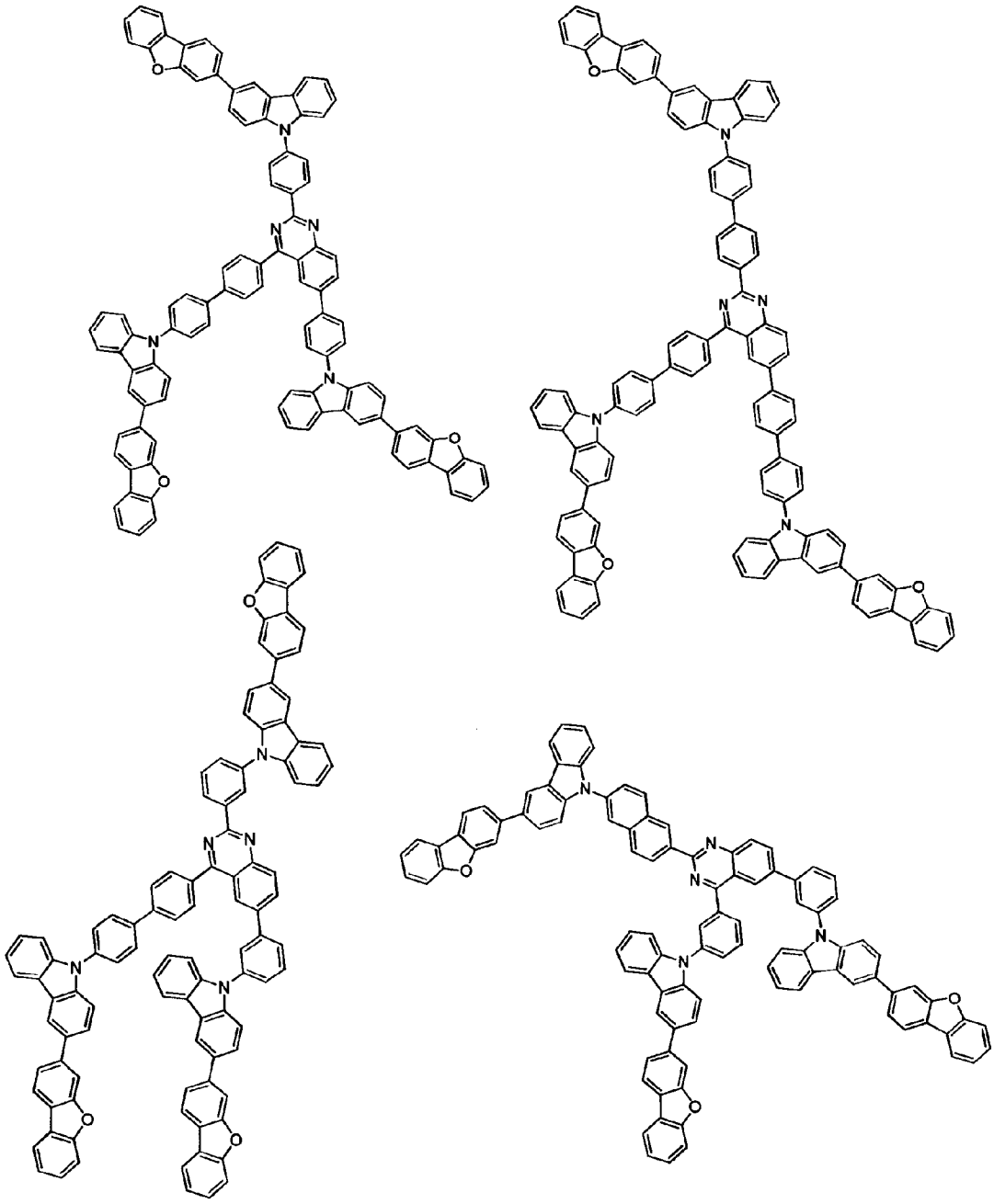
[0561]

[化414]



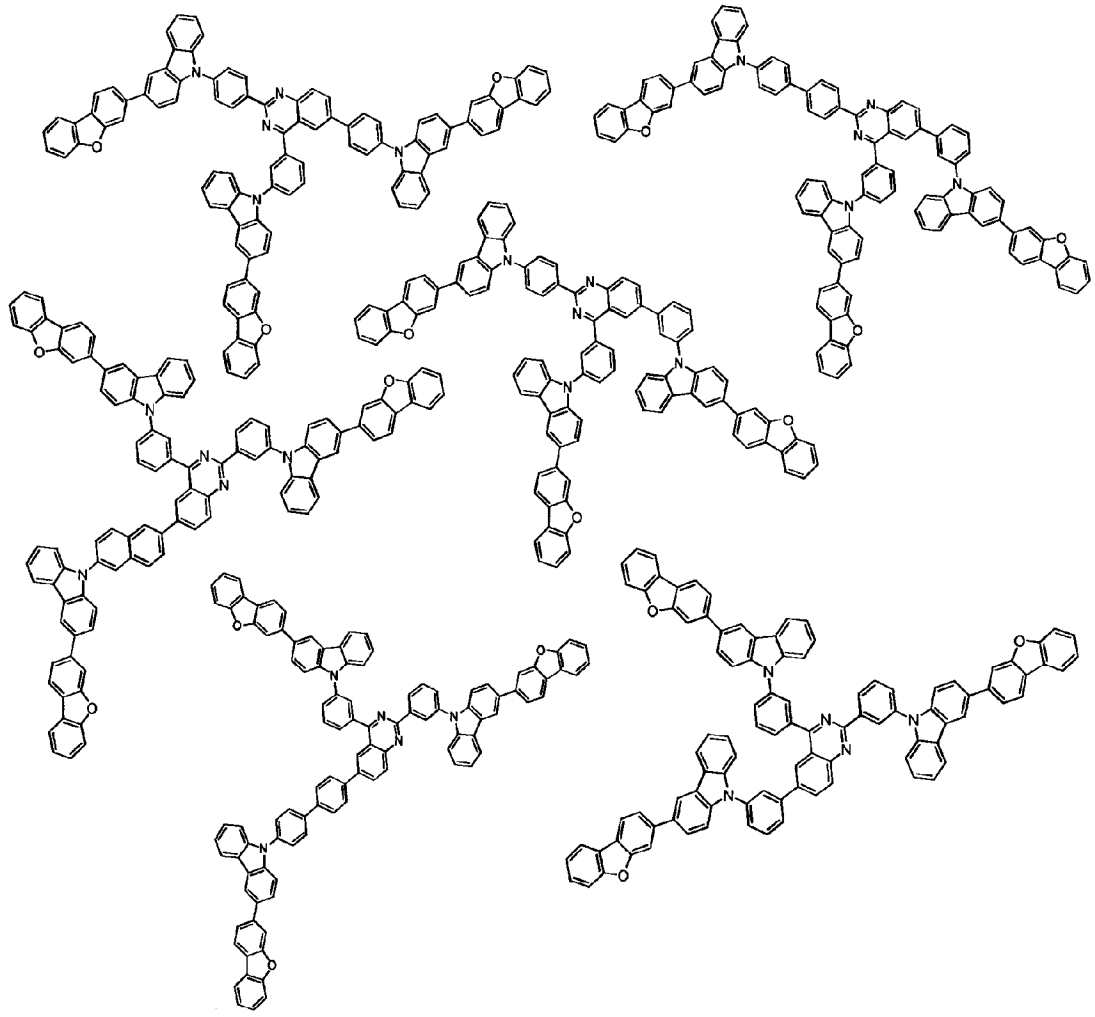
[0562]

[化415]



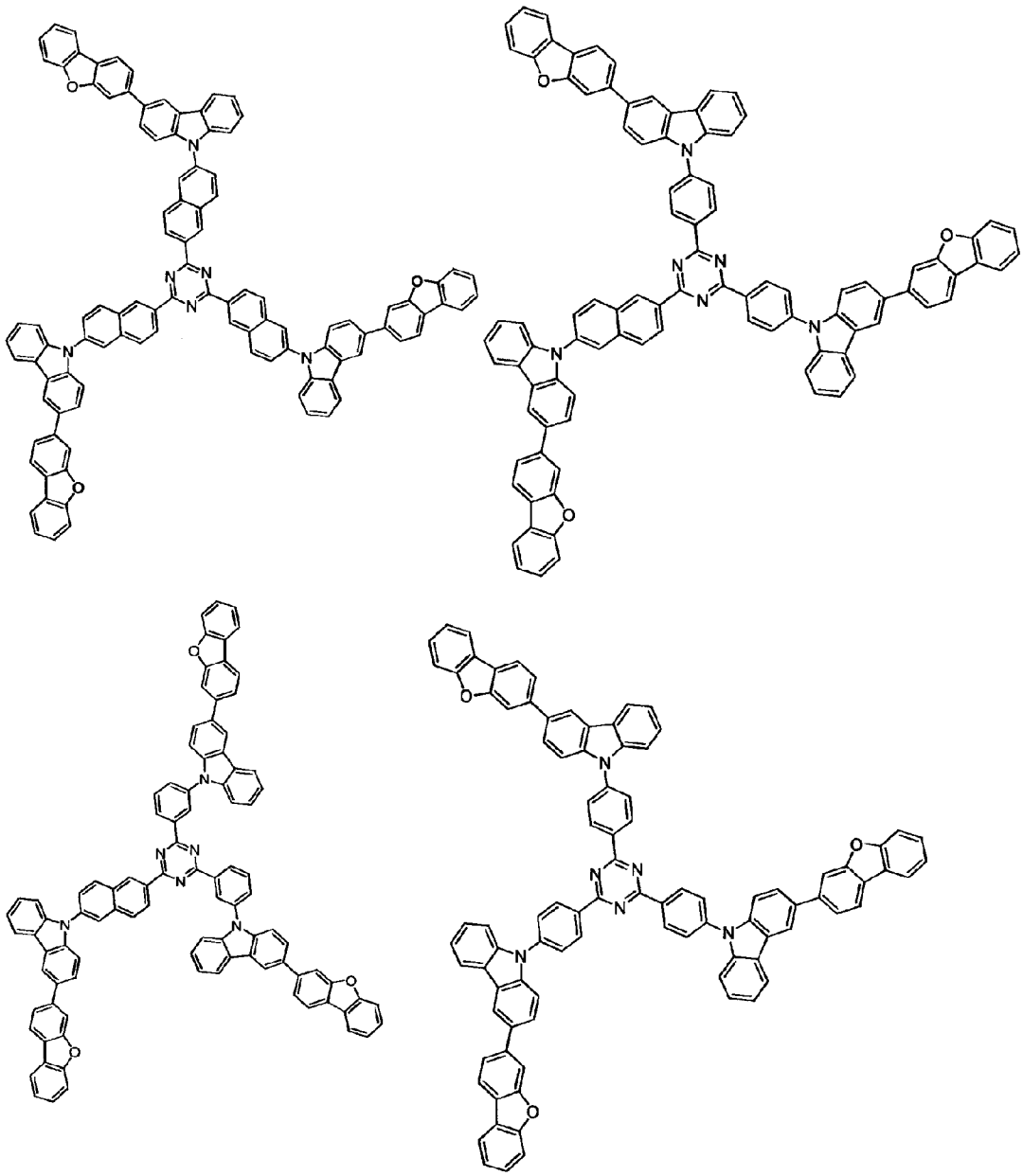
[0563]

[化416]



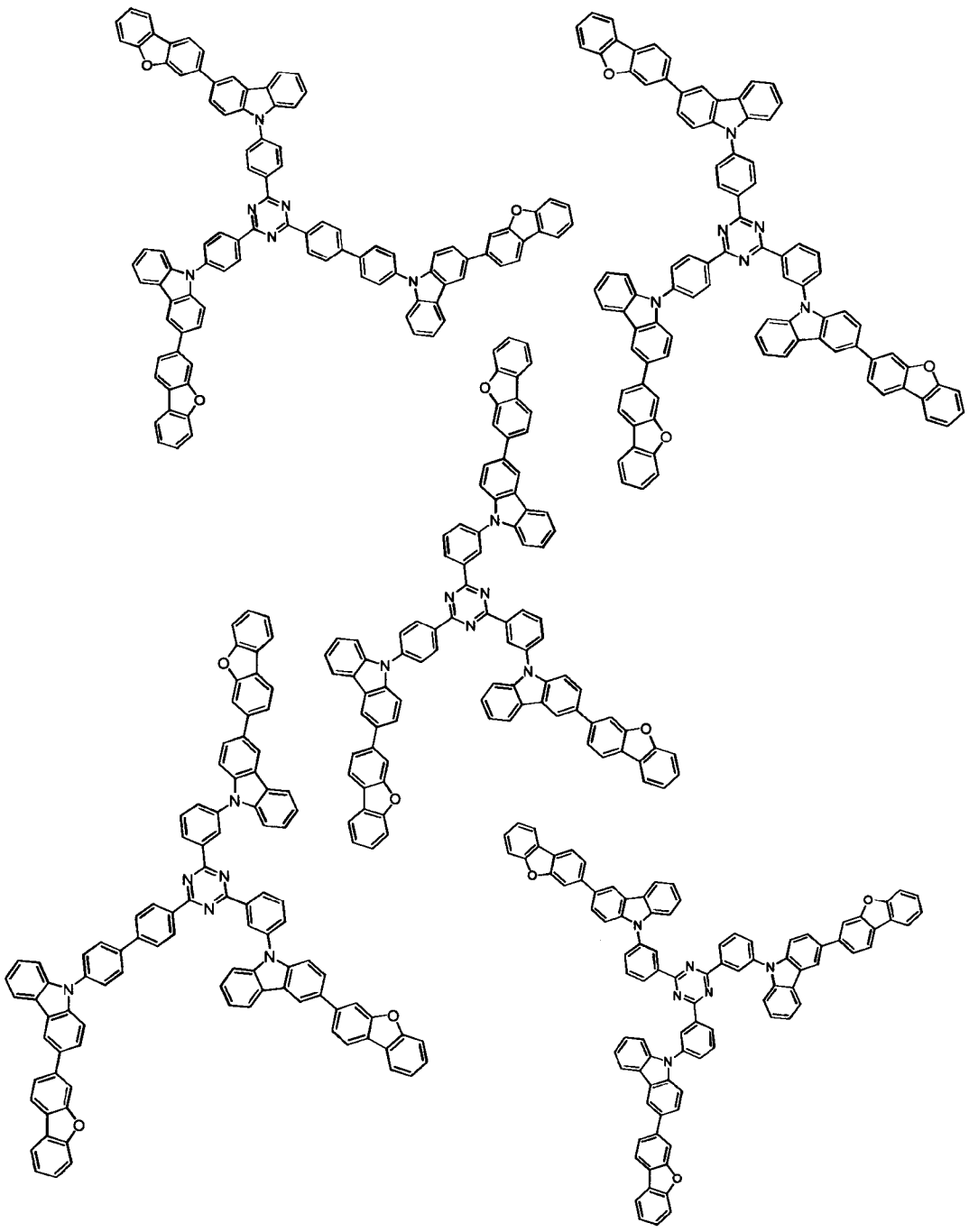
[0564]

[化417]



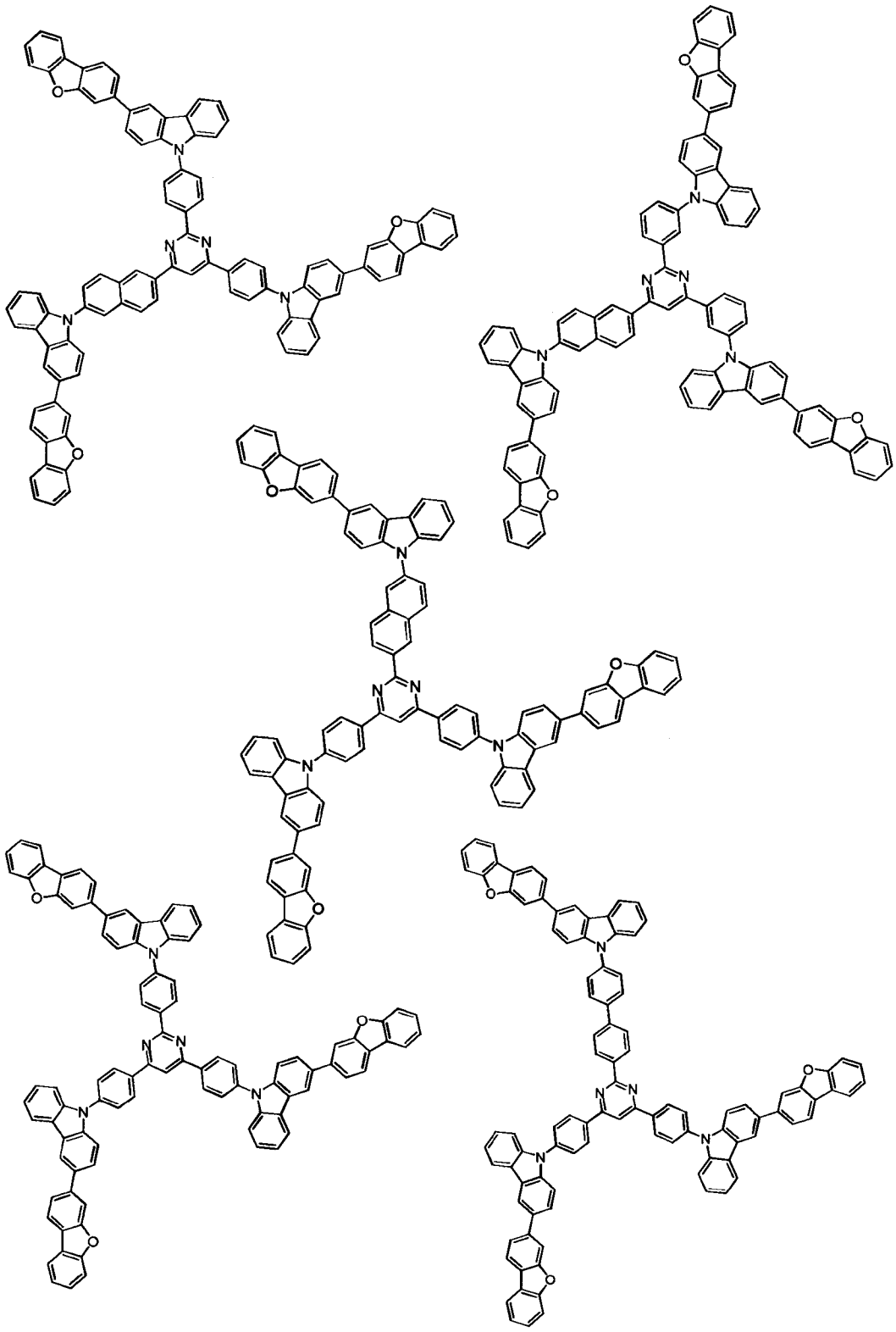
[0565]

[化418]

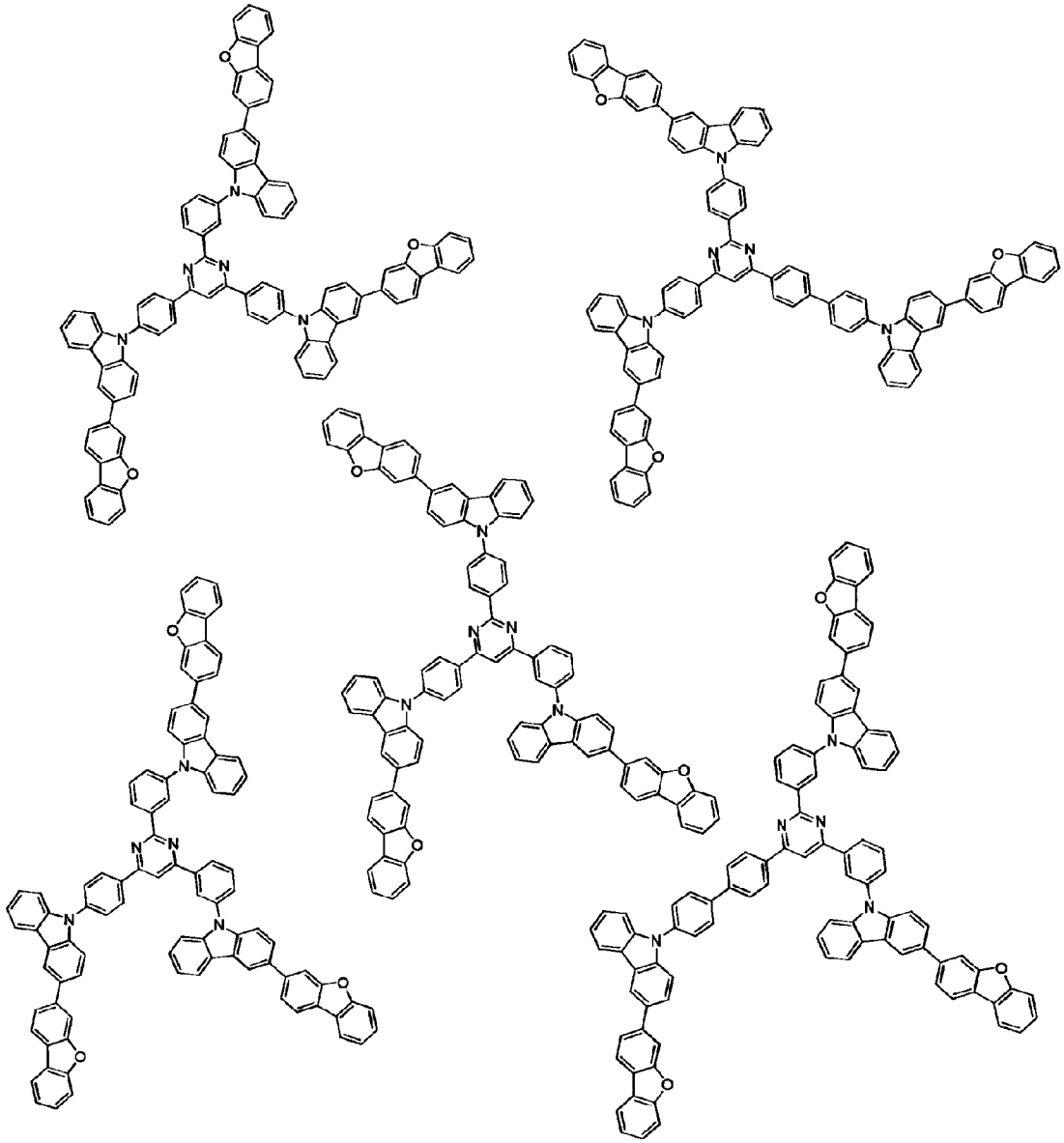


[0566]

[化419]

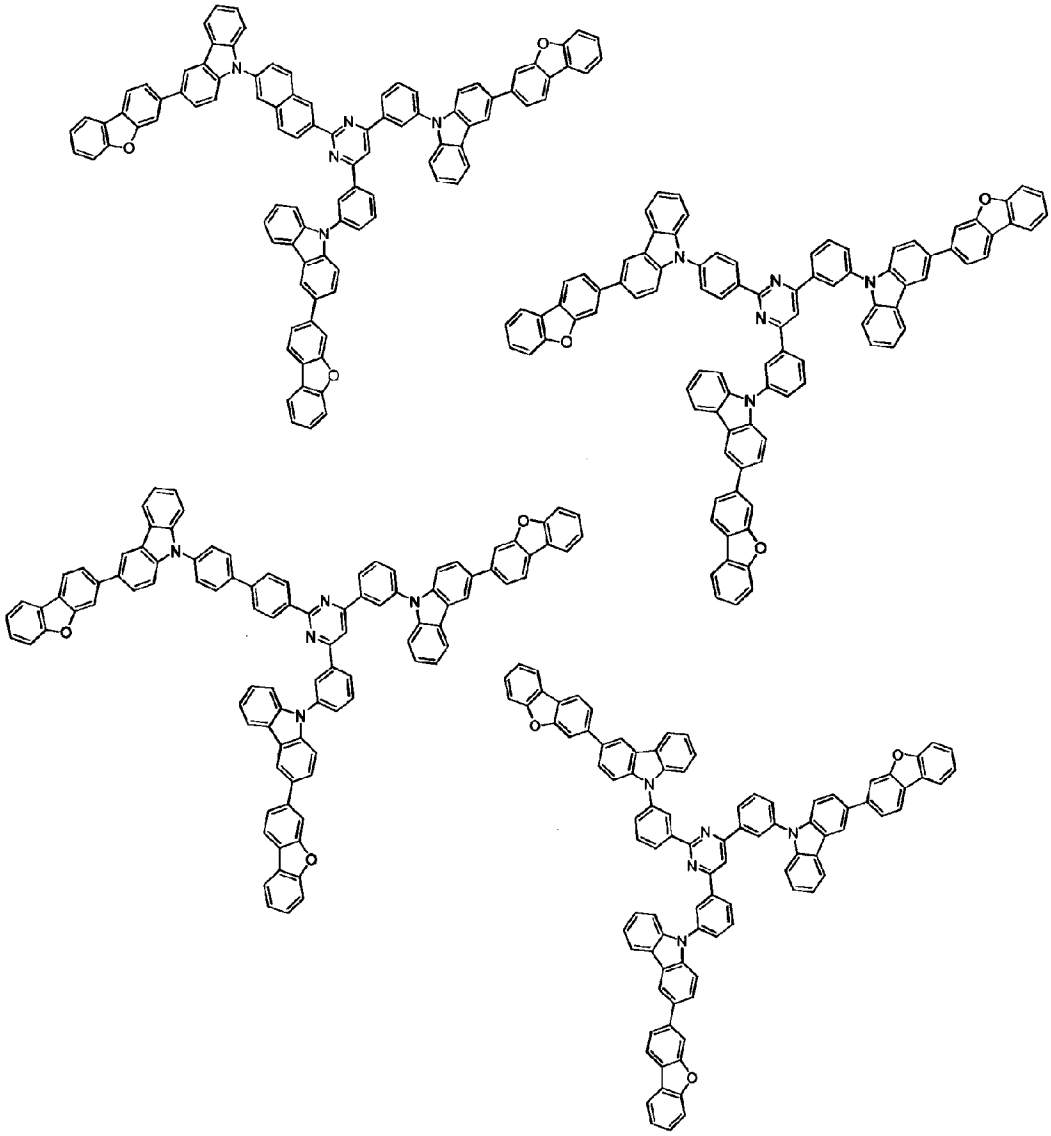


[0567] [化420]



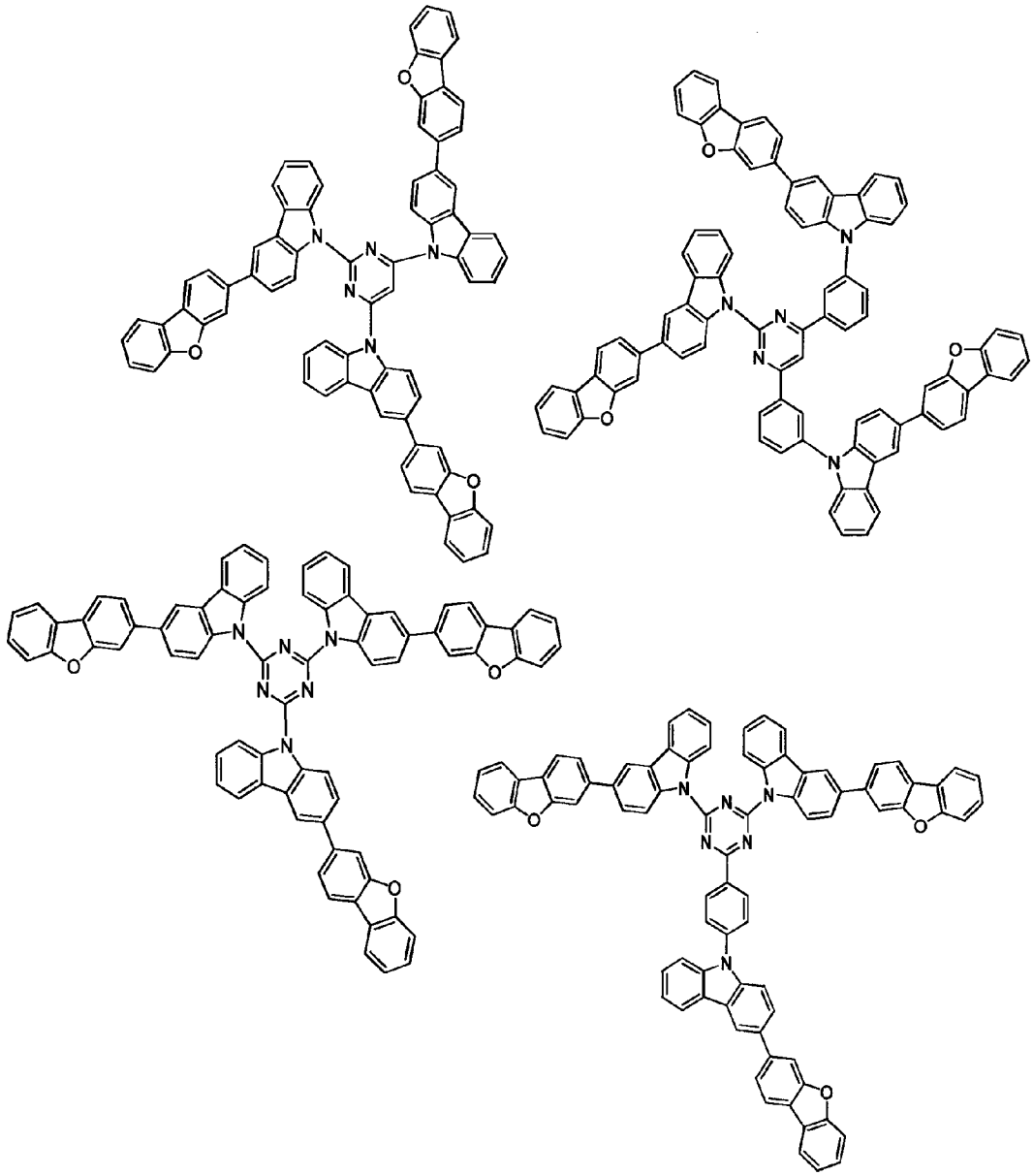
[0568]

[化421]



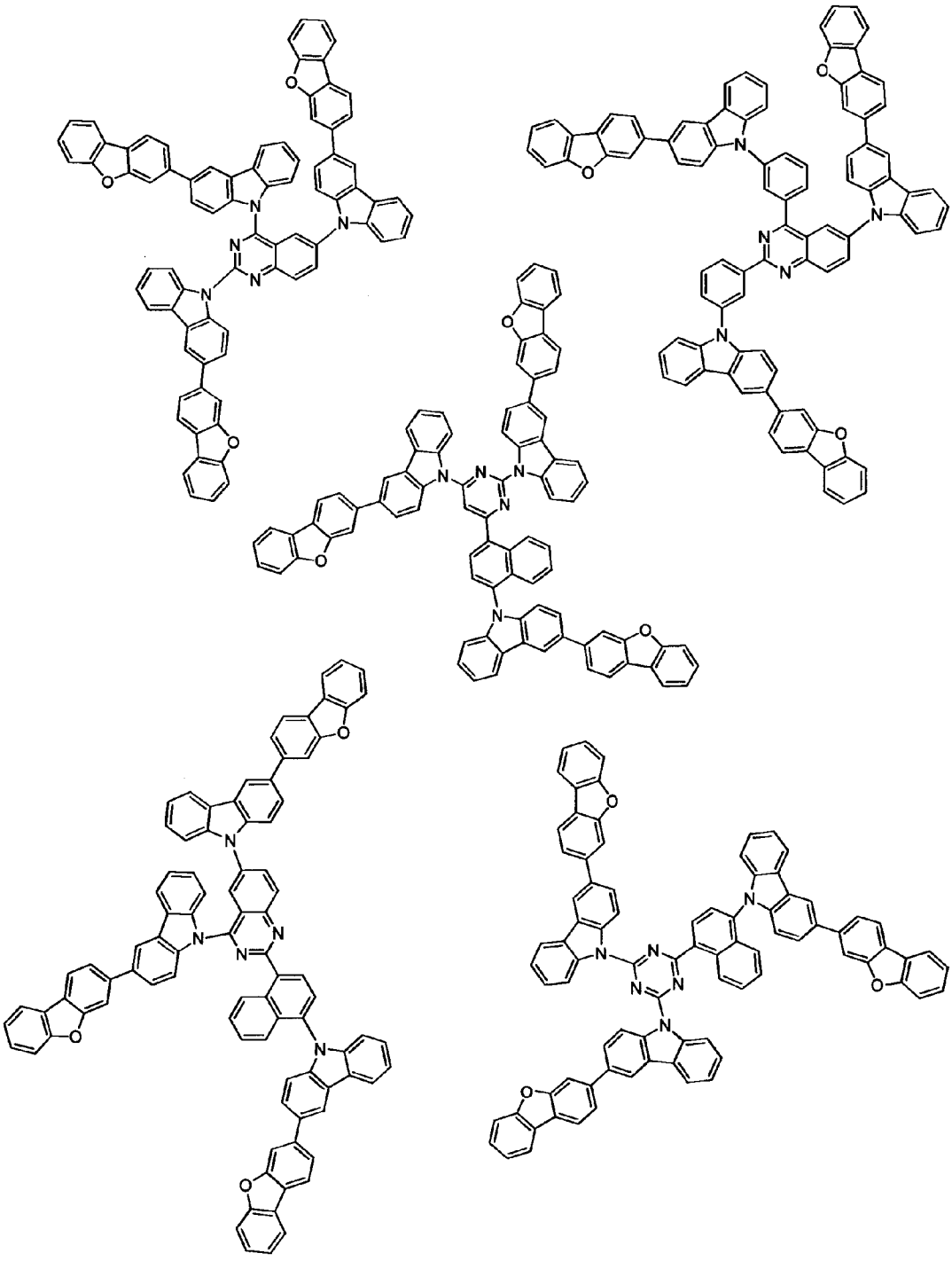
[0569]

[化422]



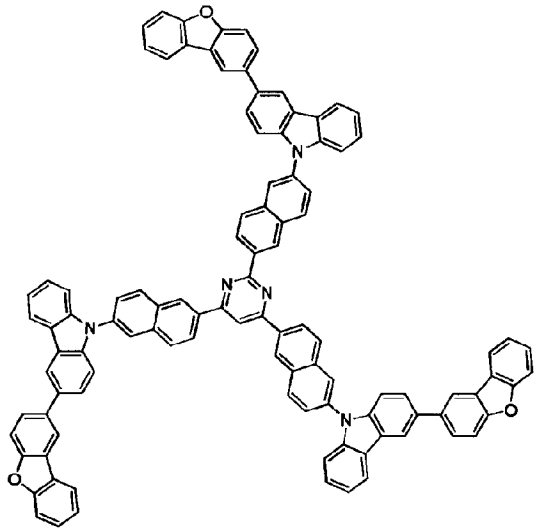
[0570]

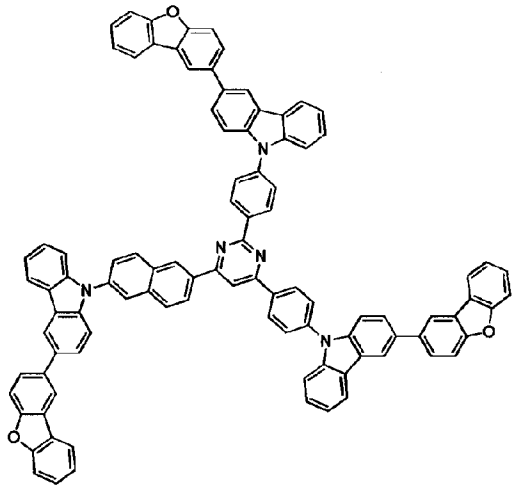
[化423]

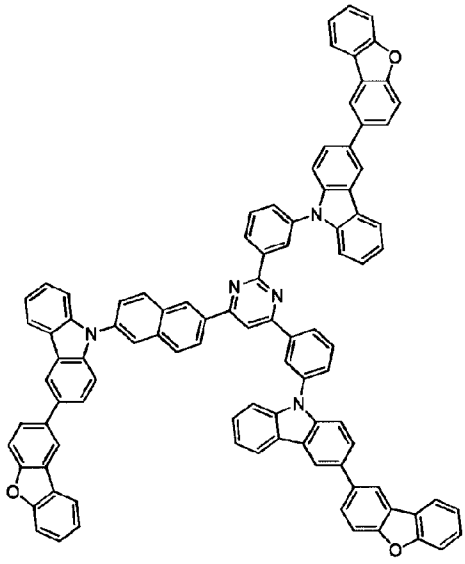


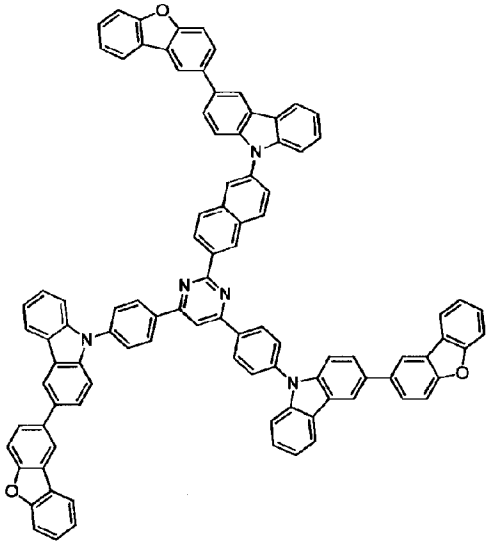
[0571]

[化424]



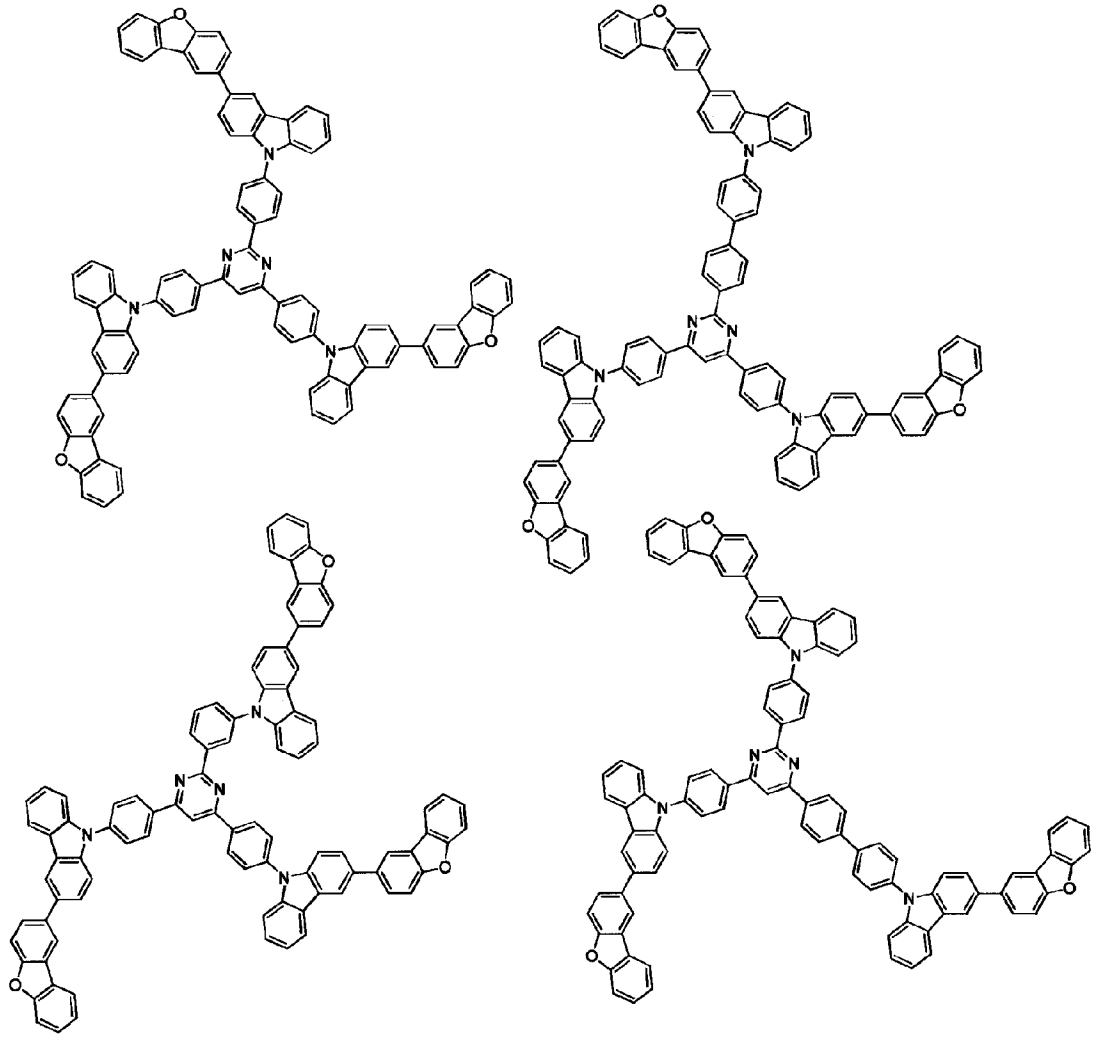






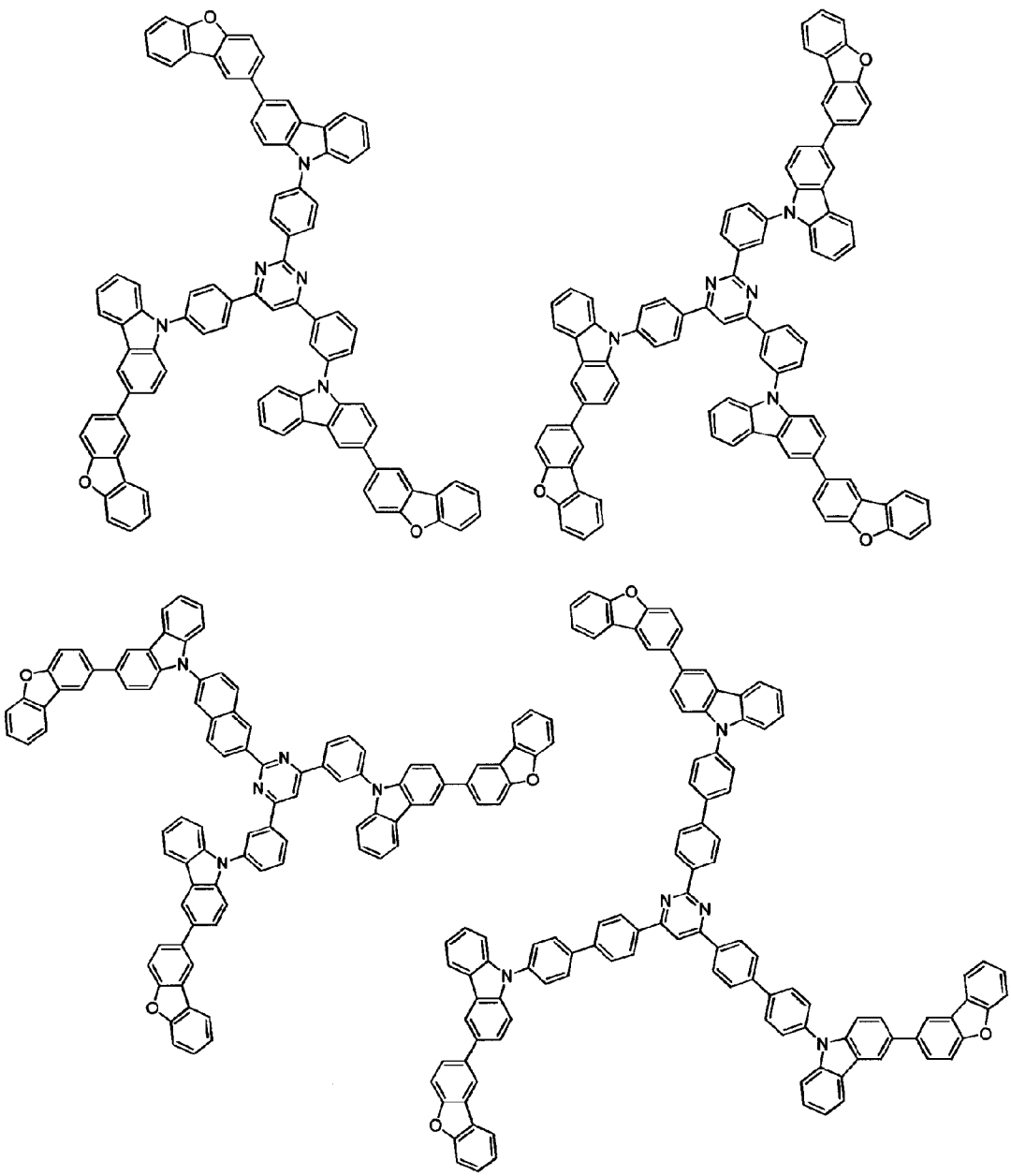
[0572]

[化425]



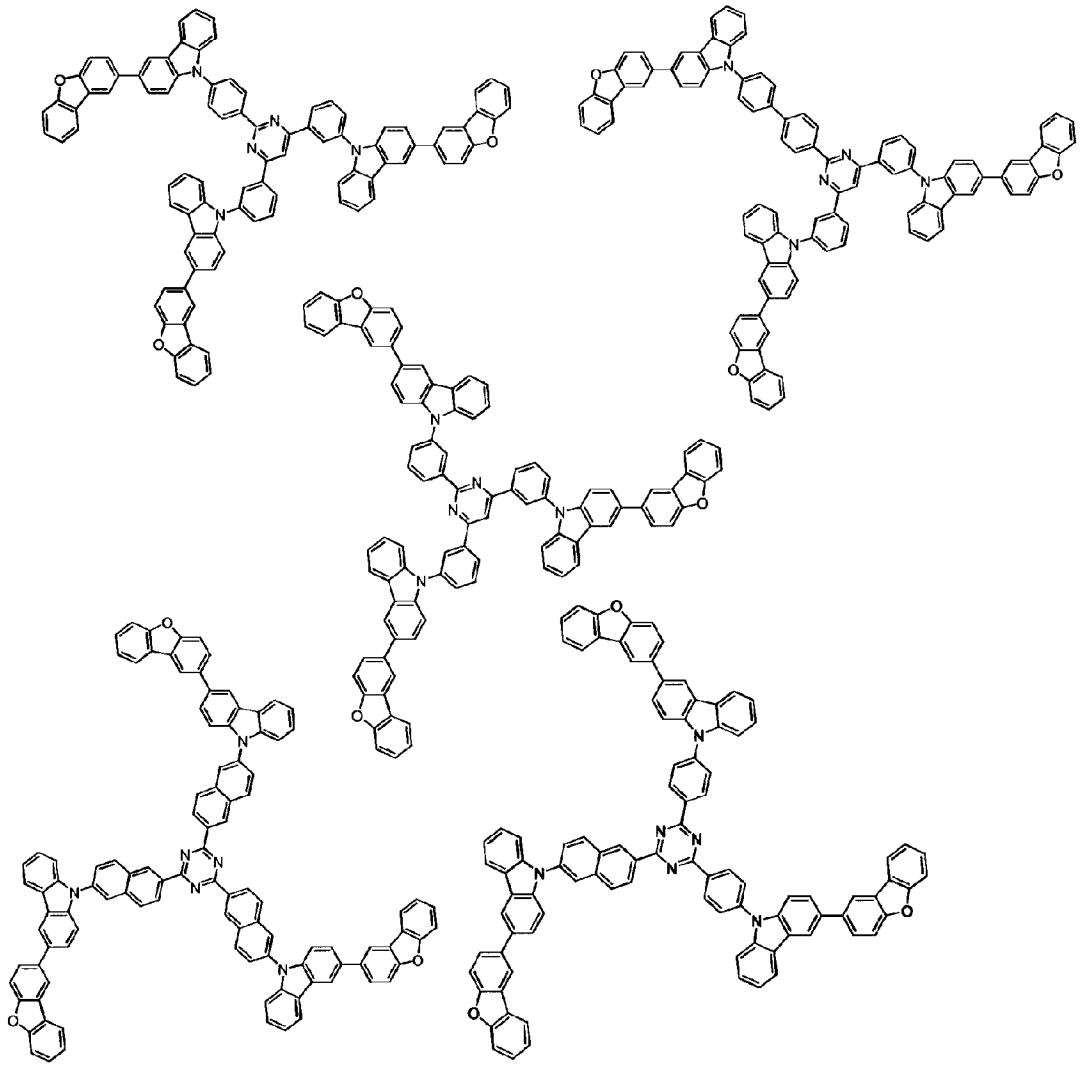
[0573]

[化426]



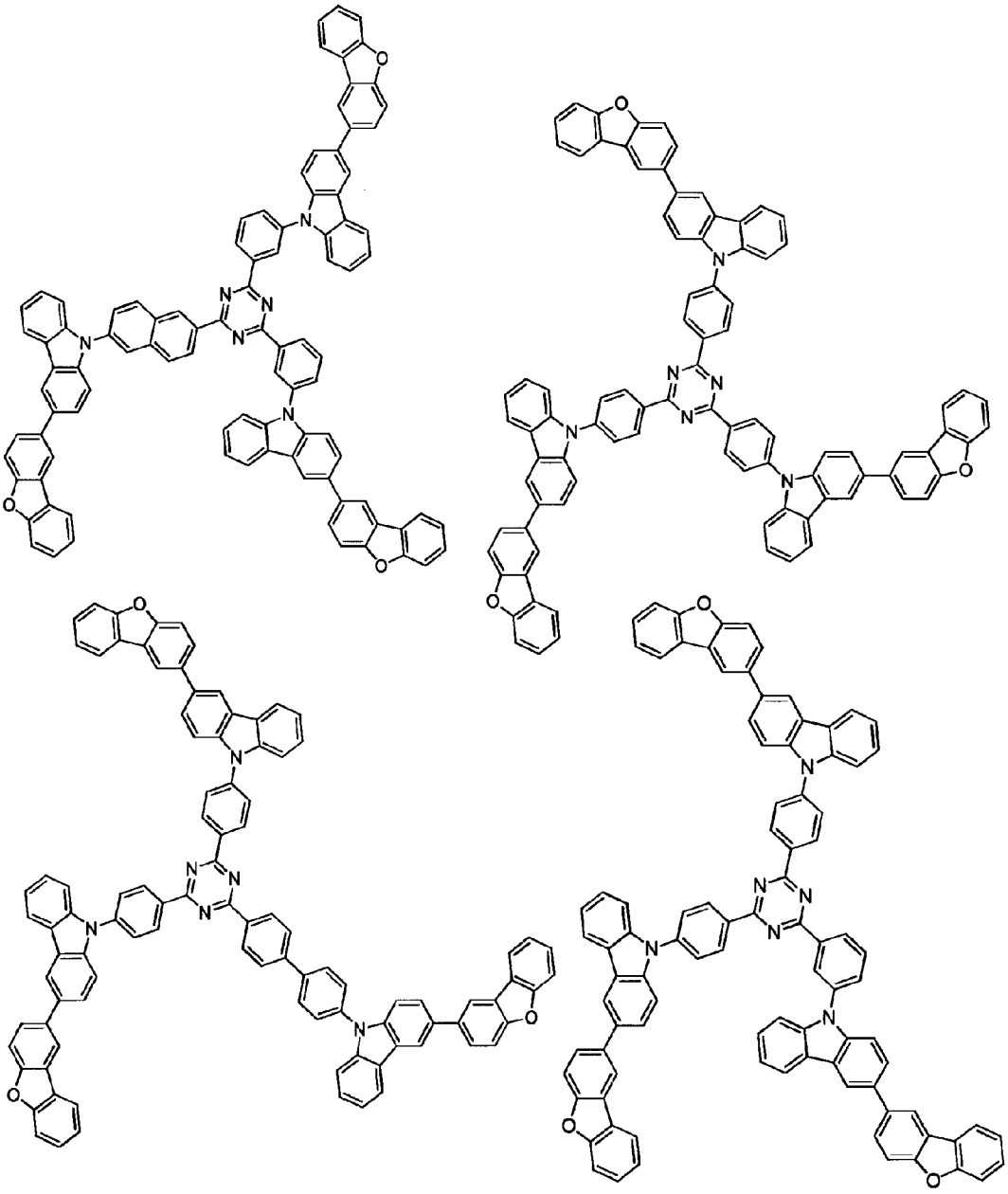
[0574]

[化427]



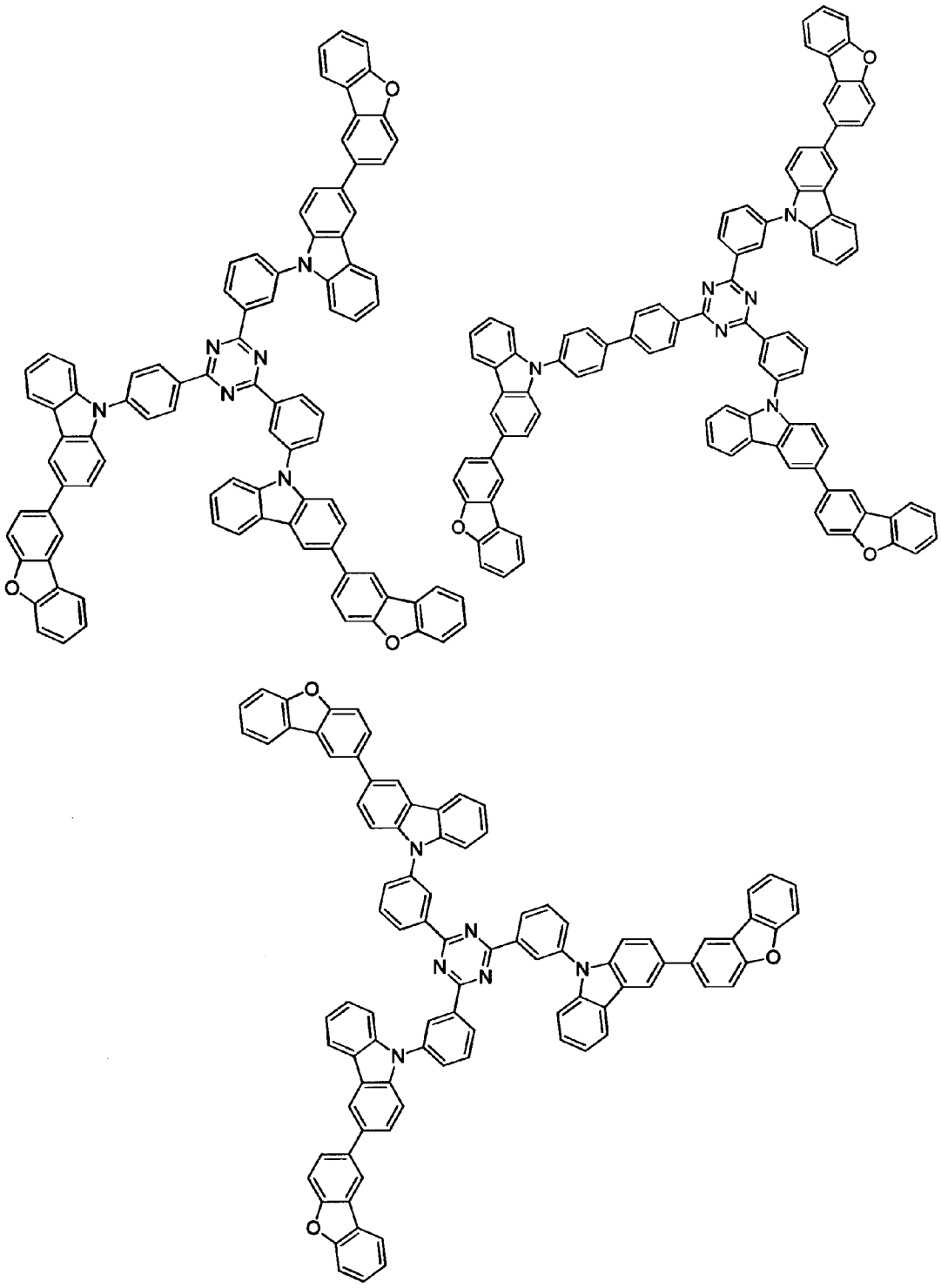
[0575]

[化428]



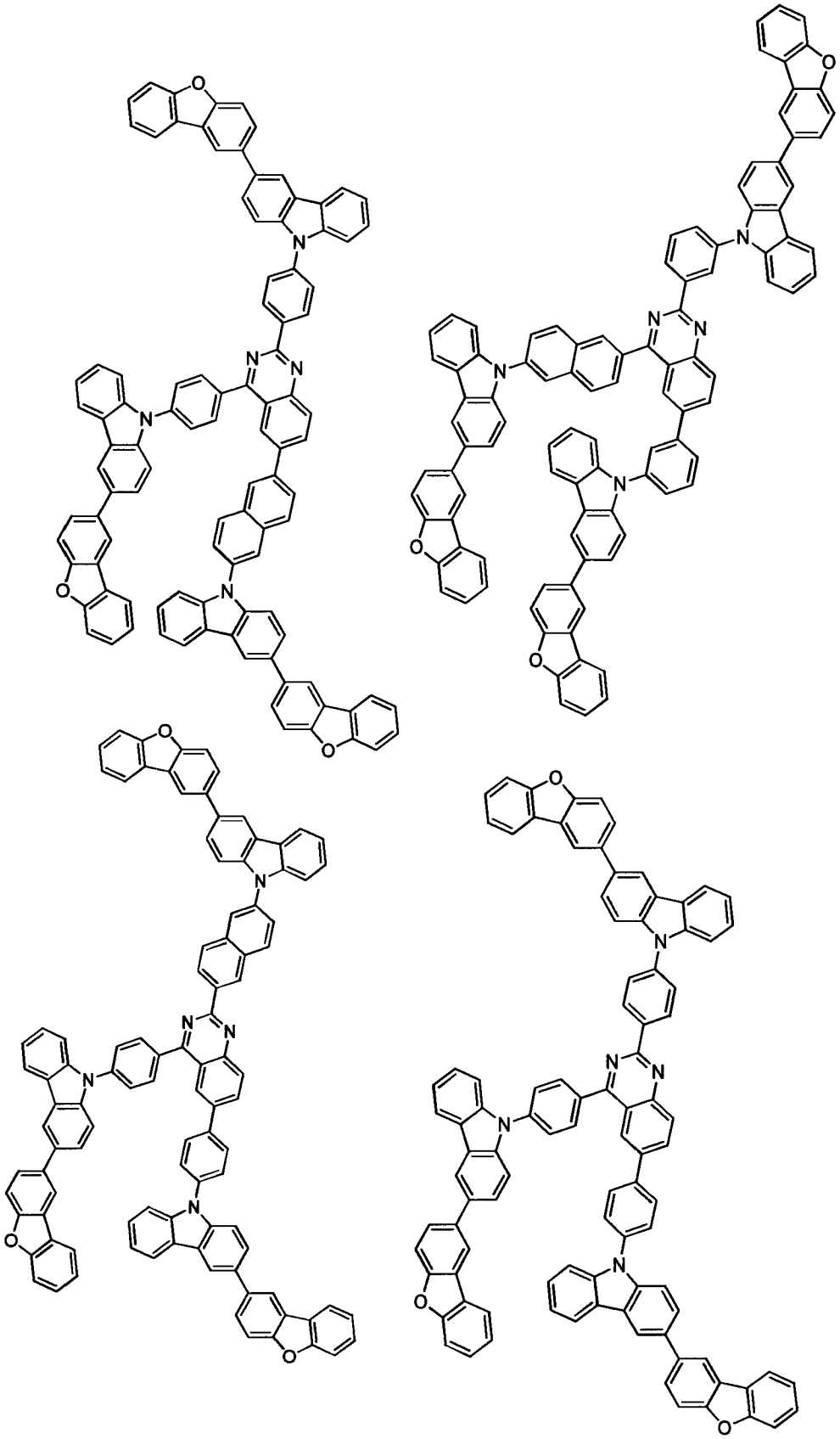
[0576]

[化429]

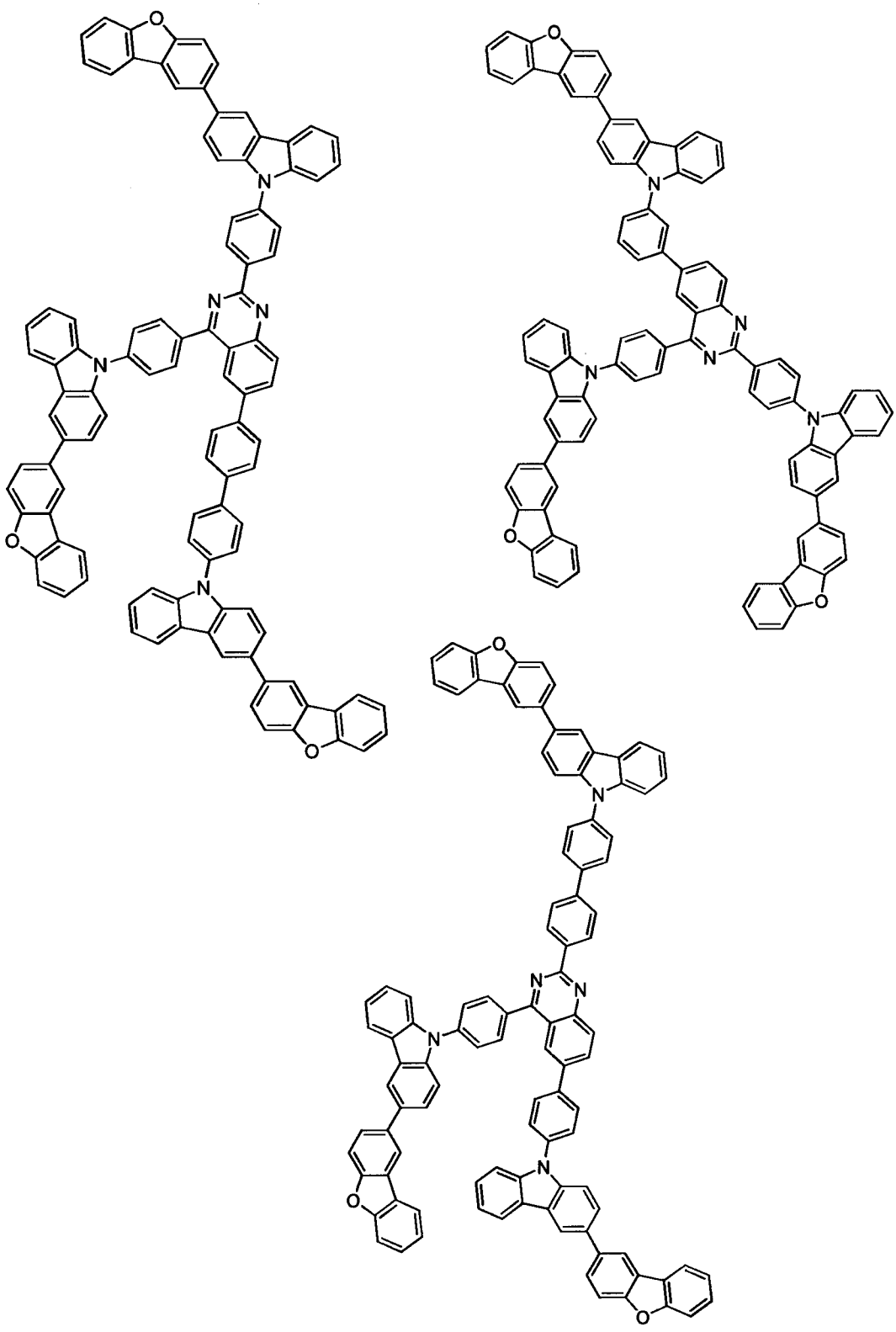


[0577]

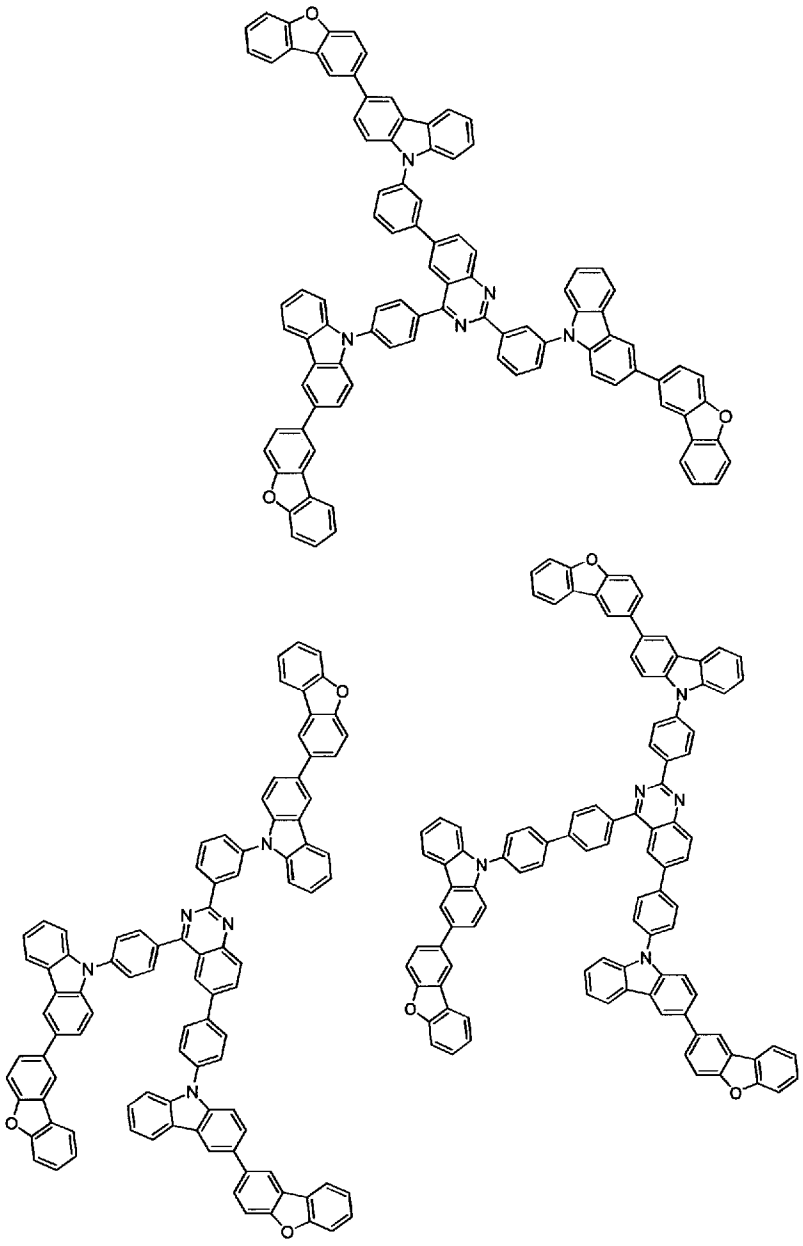
[化430]



[0578] [化431]

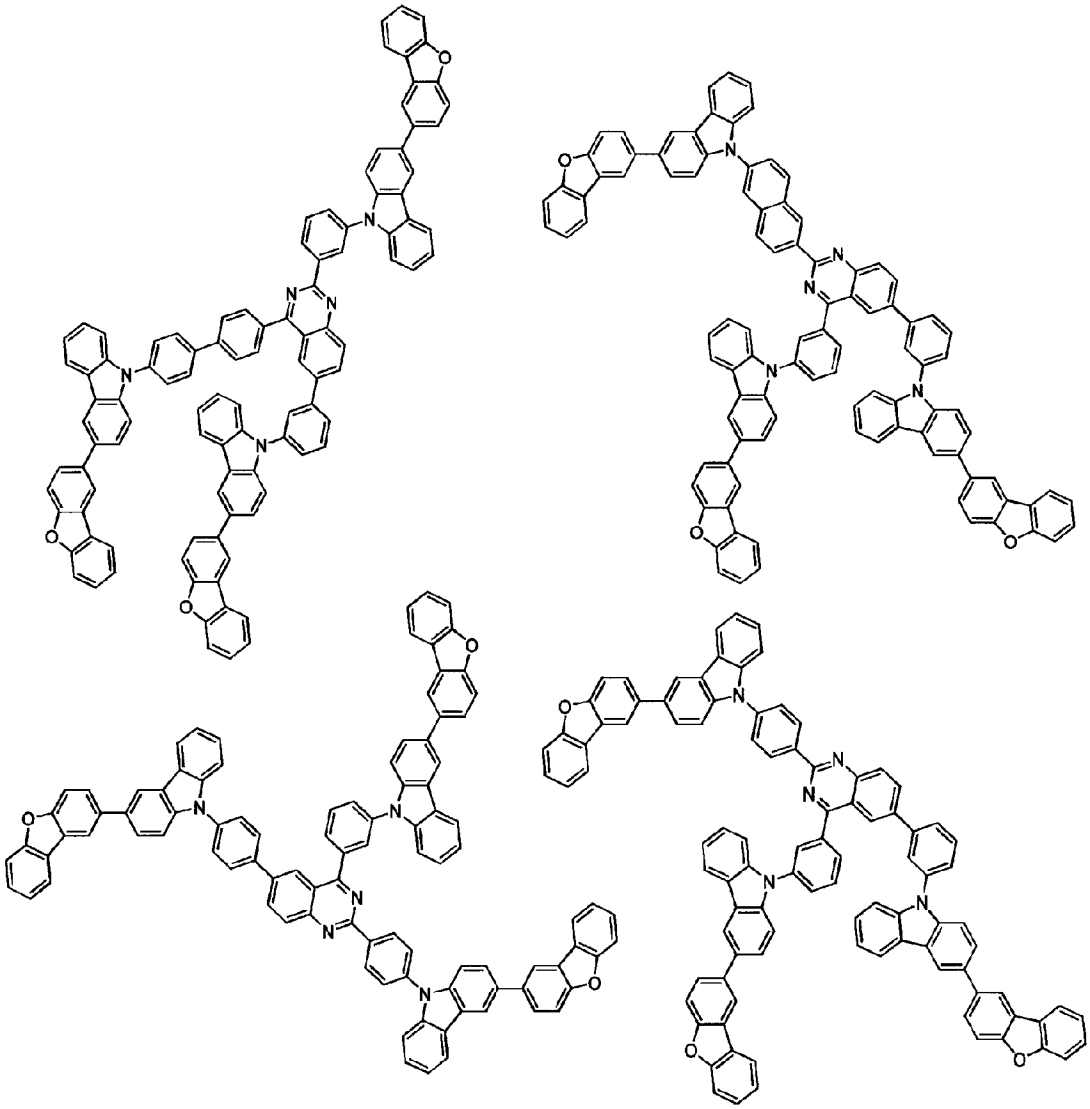


[0579] [化432]



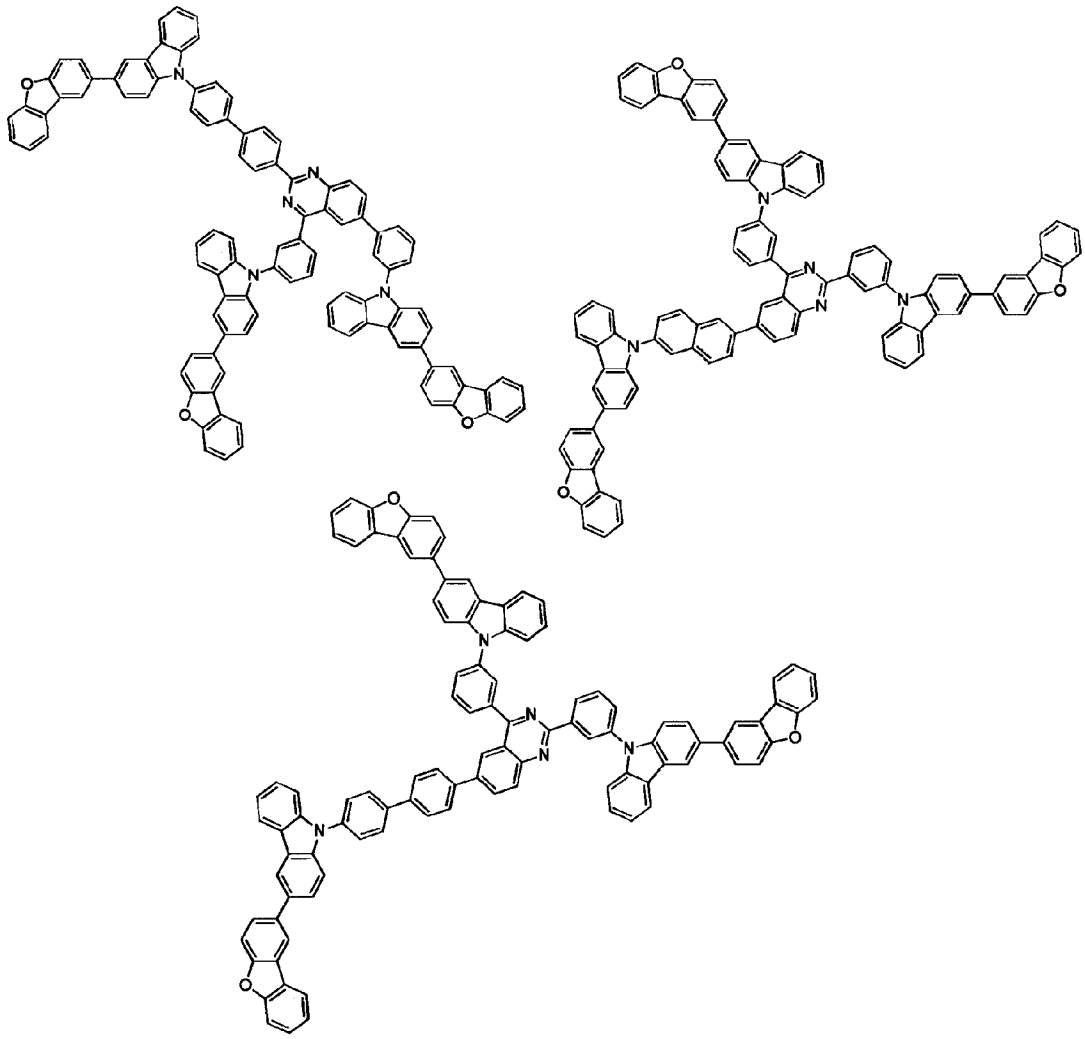
[0580]

[化433]



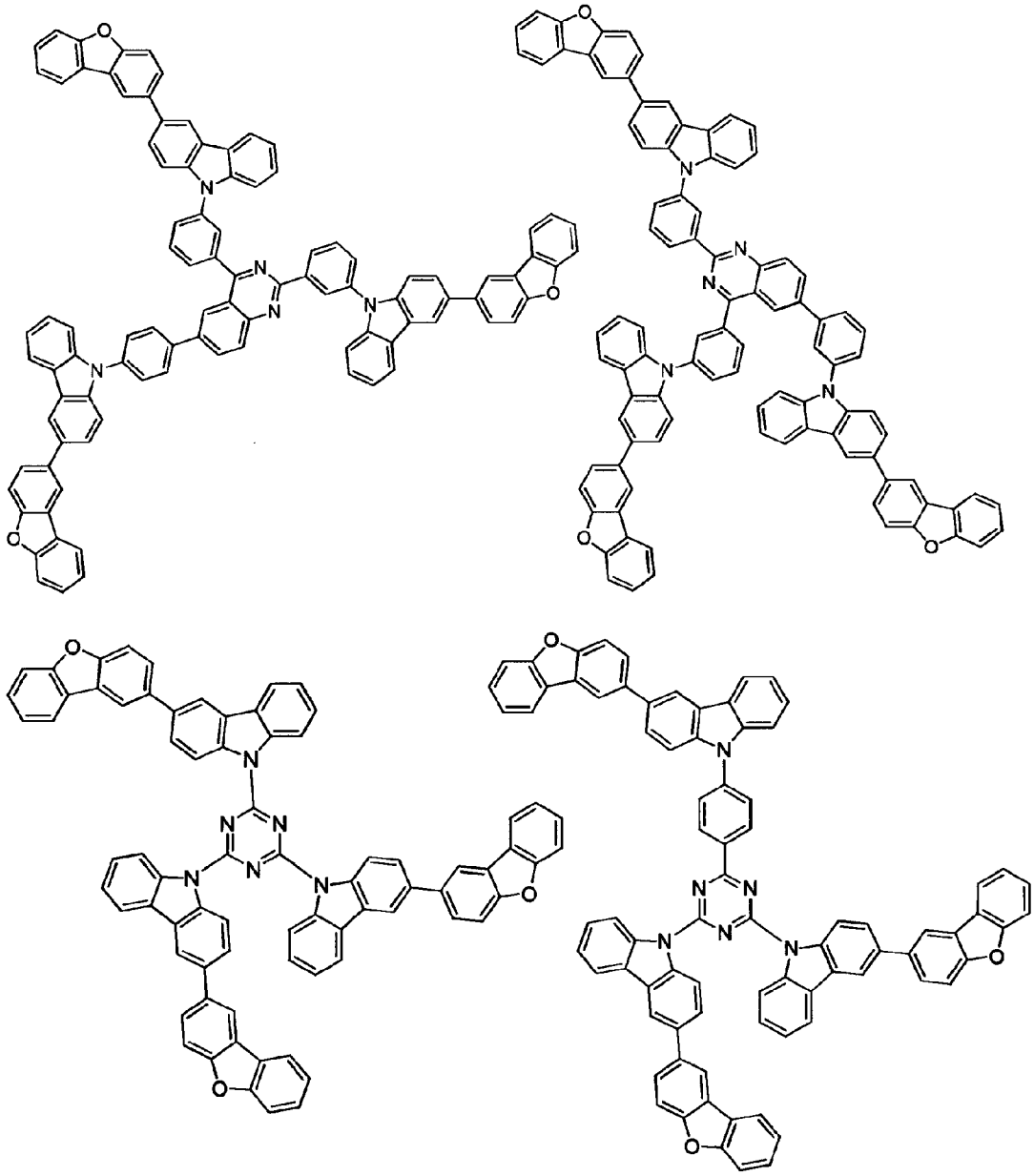
[0581]

[化434]



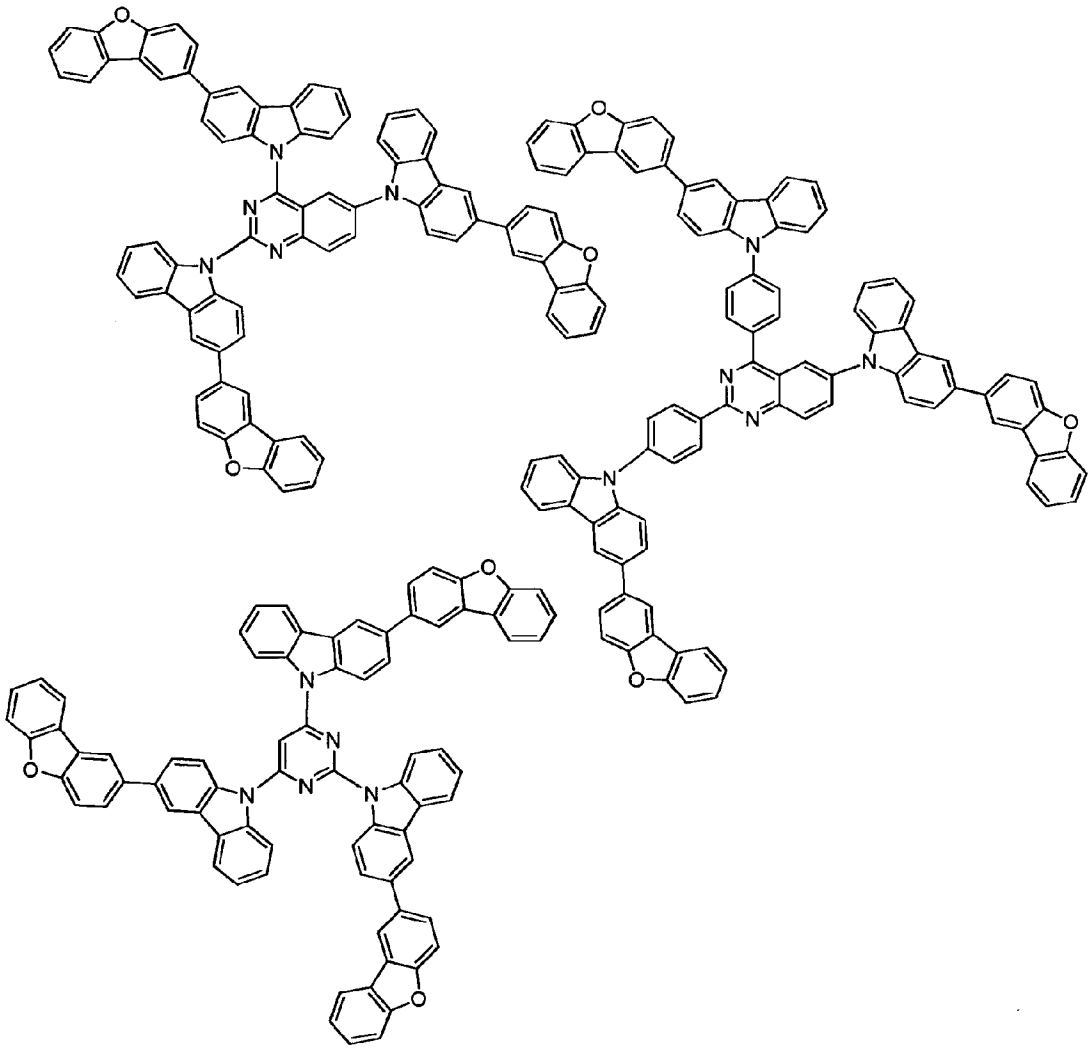
[0582]

[化435]



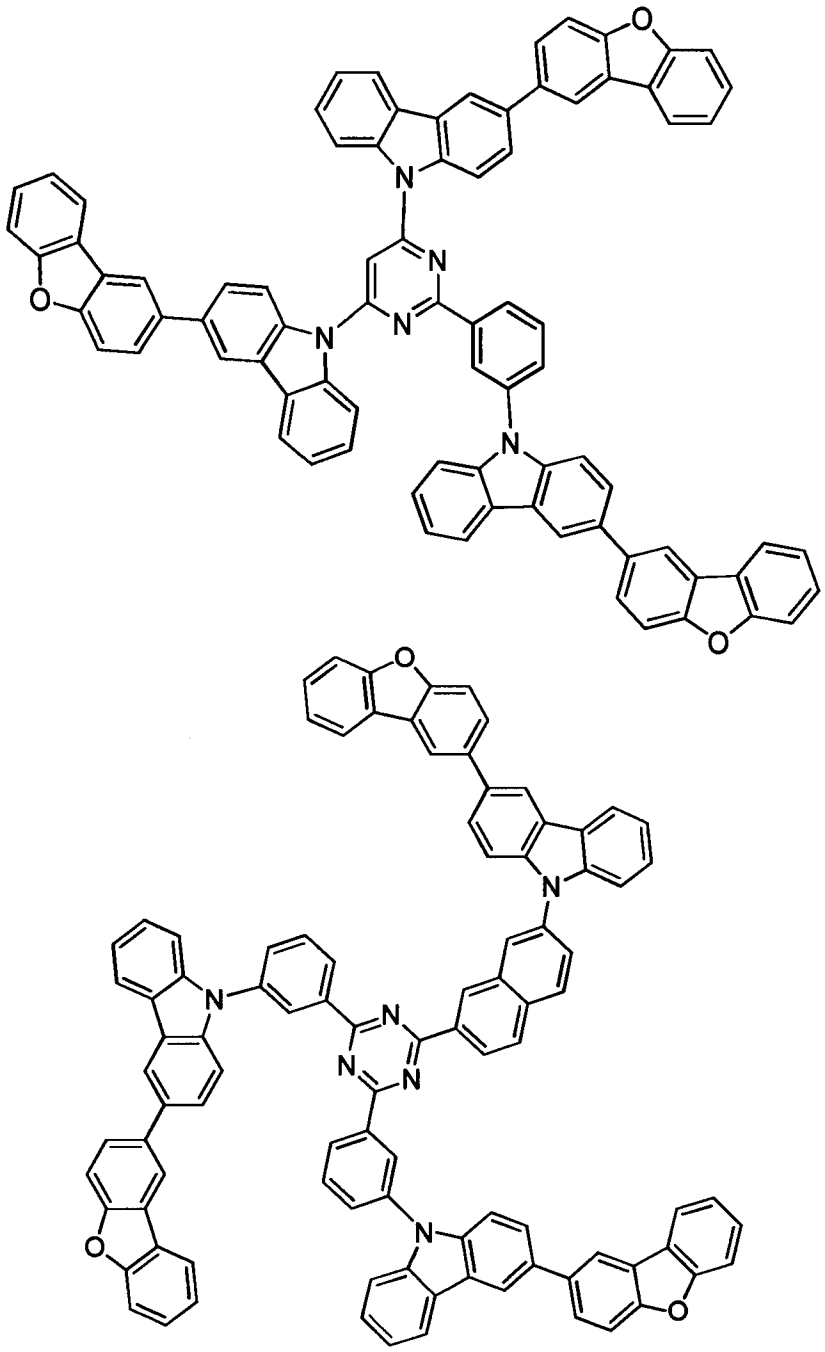
[0583]

[化436]



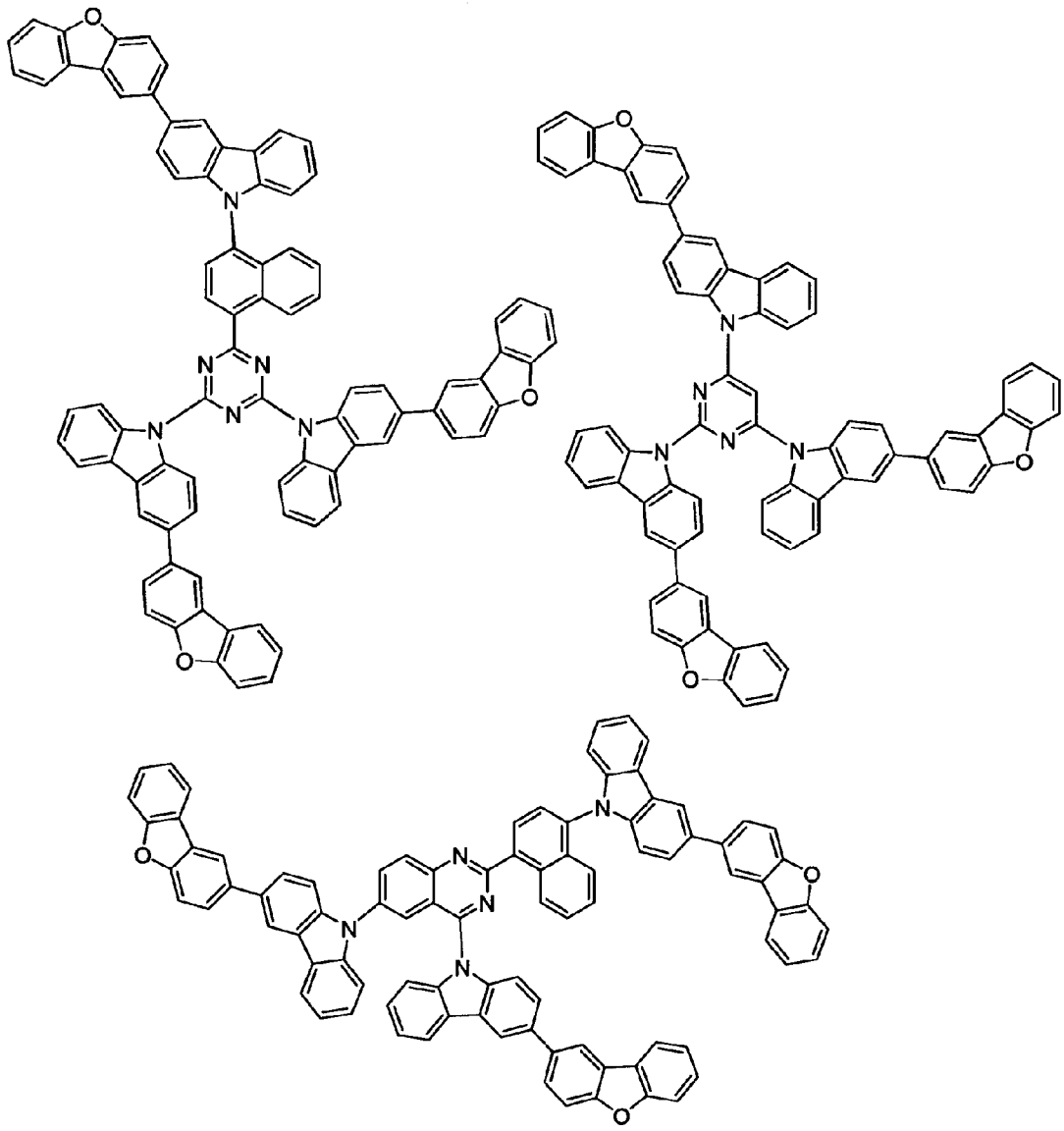
[0584]

[化437]



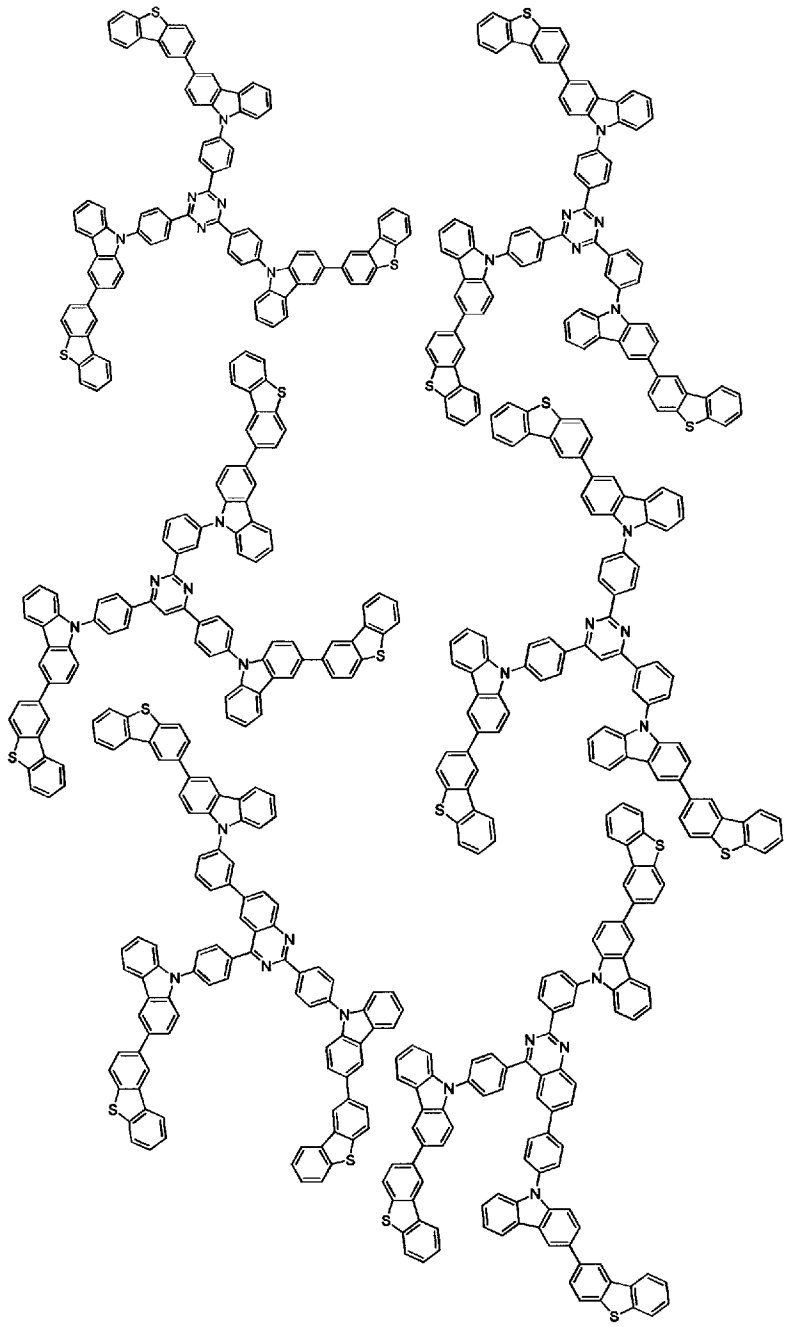
[0585]

[化438]



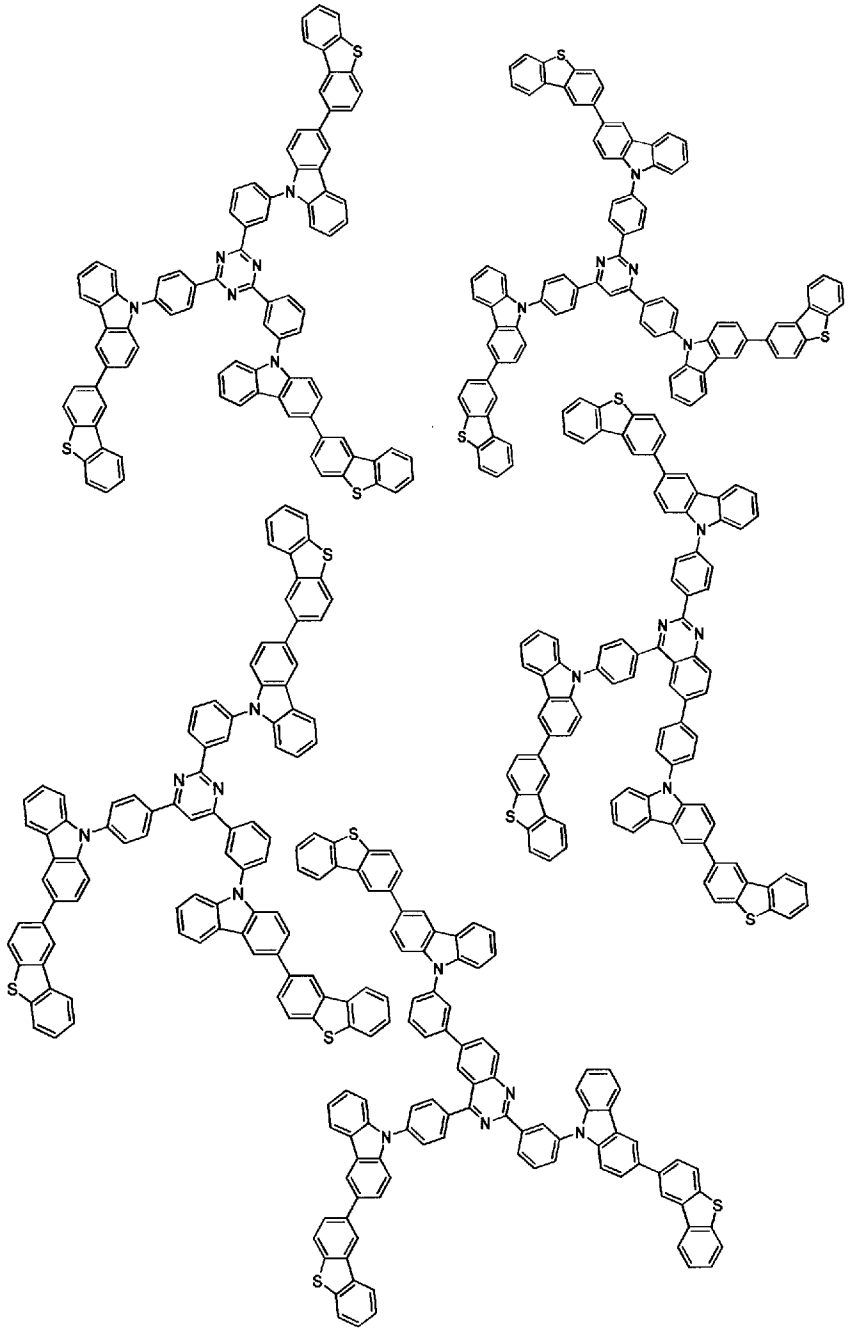
[0586]

[化439]



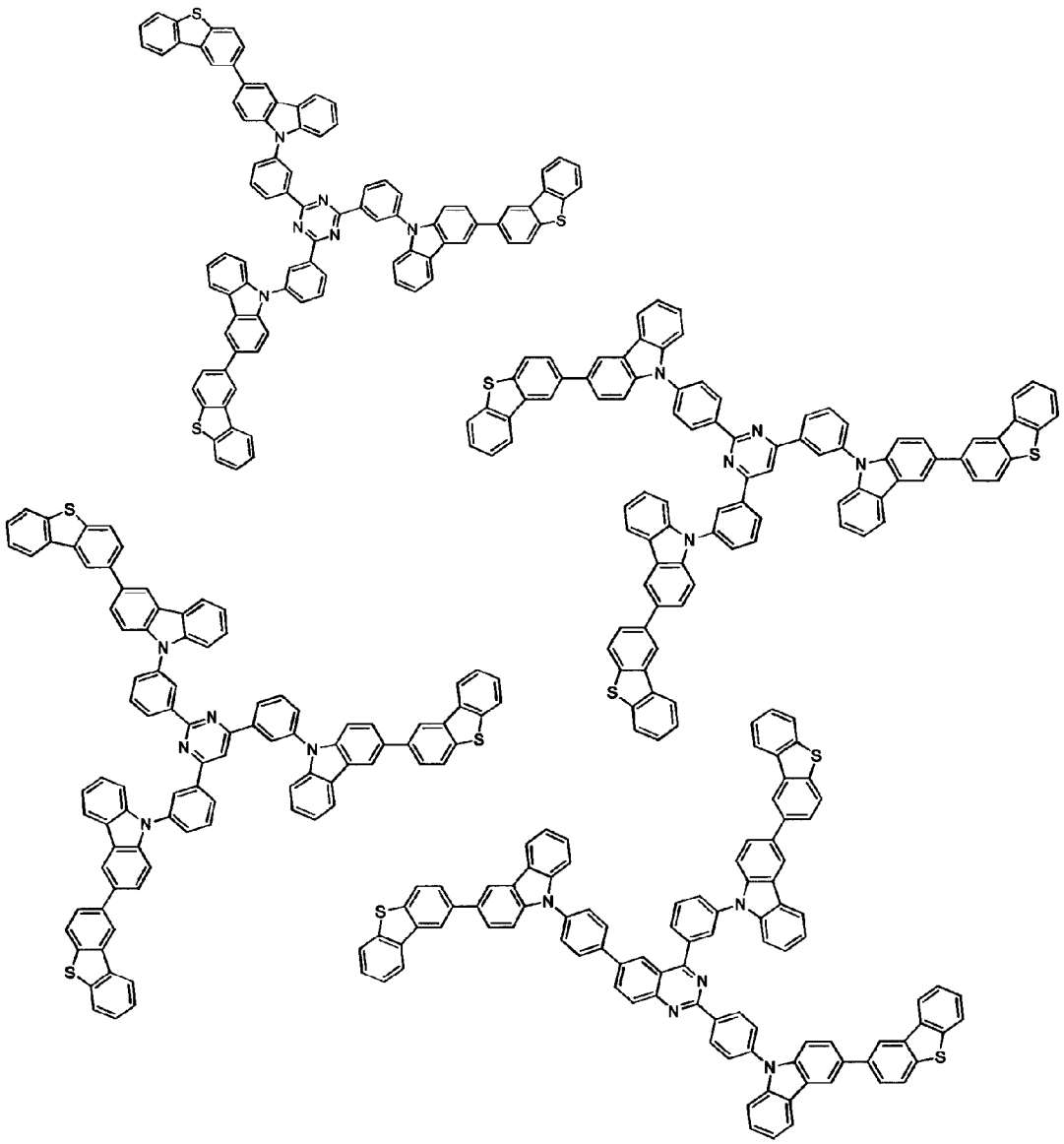
[0587]

[化440]



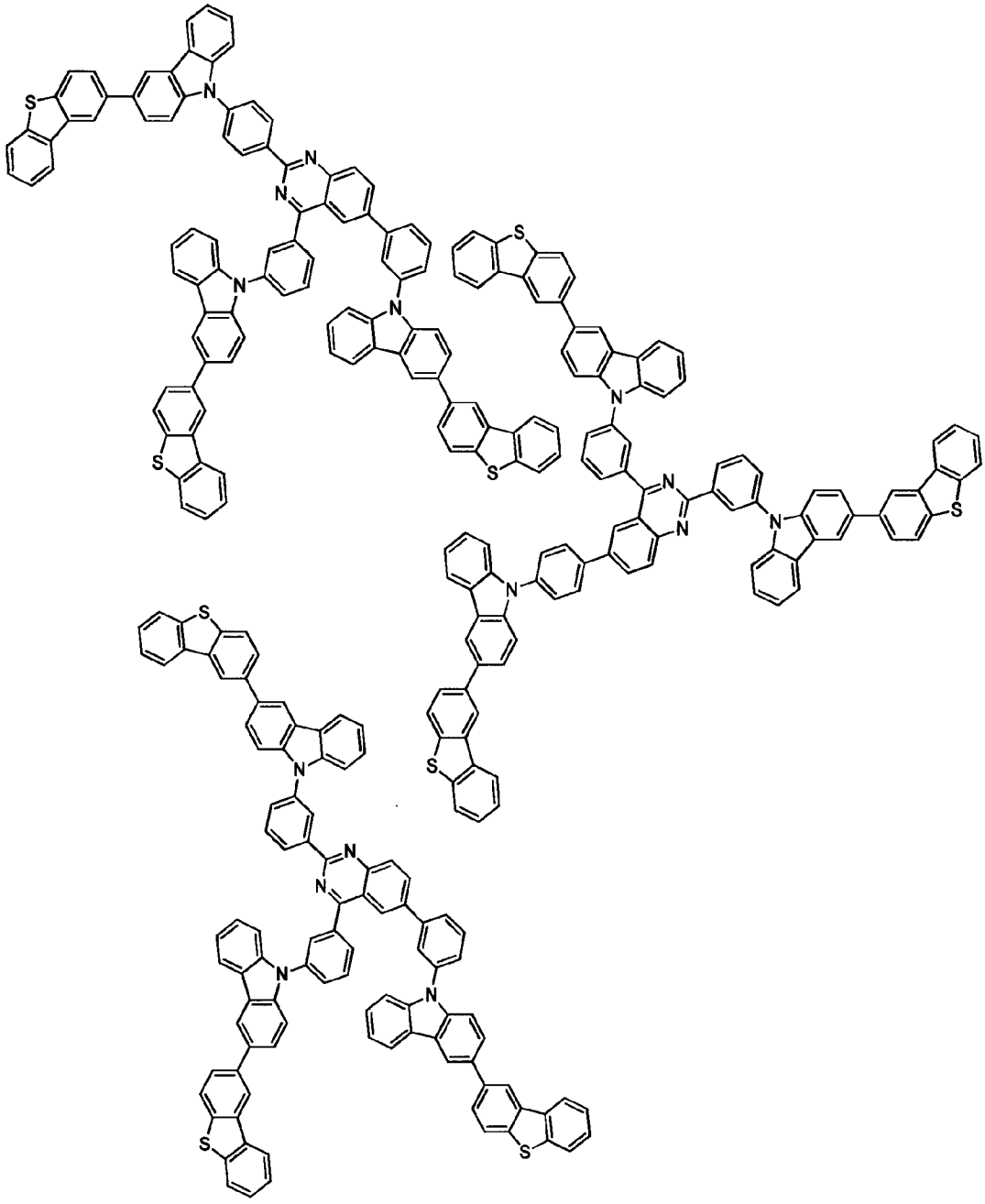
[0588]

[化441]



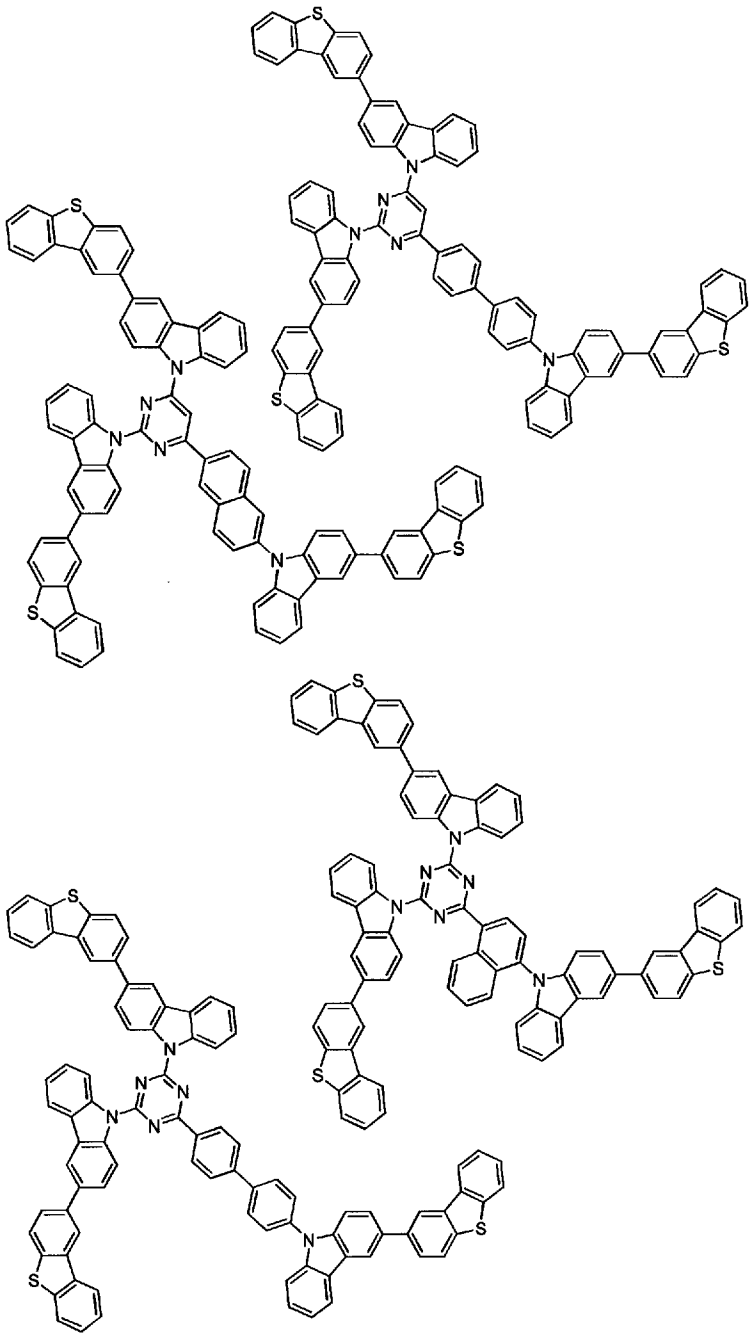
[0589]

[化442]



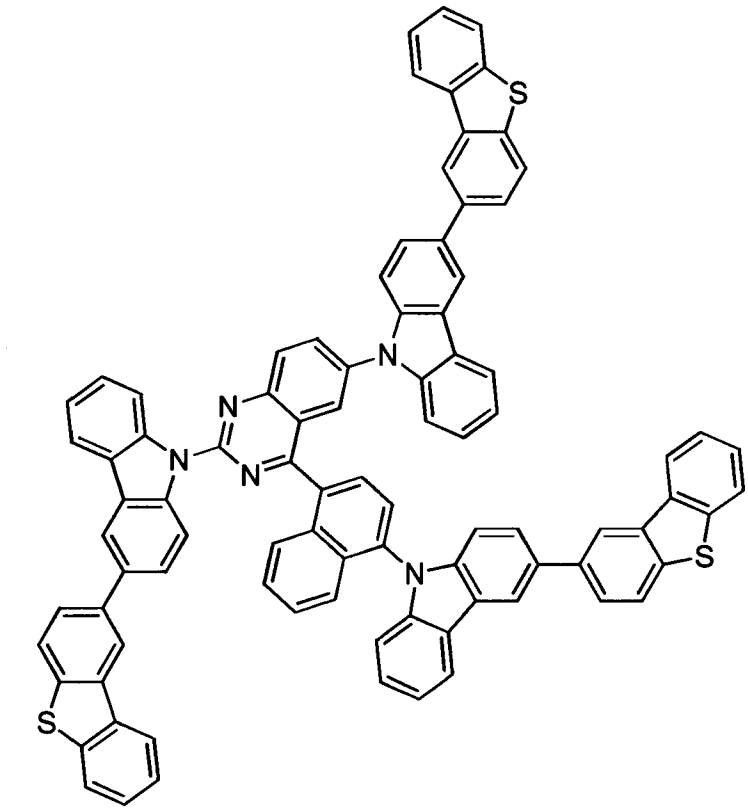
[0590]

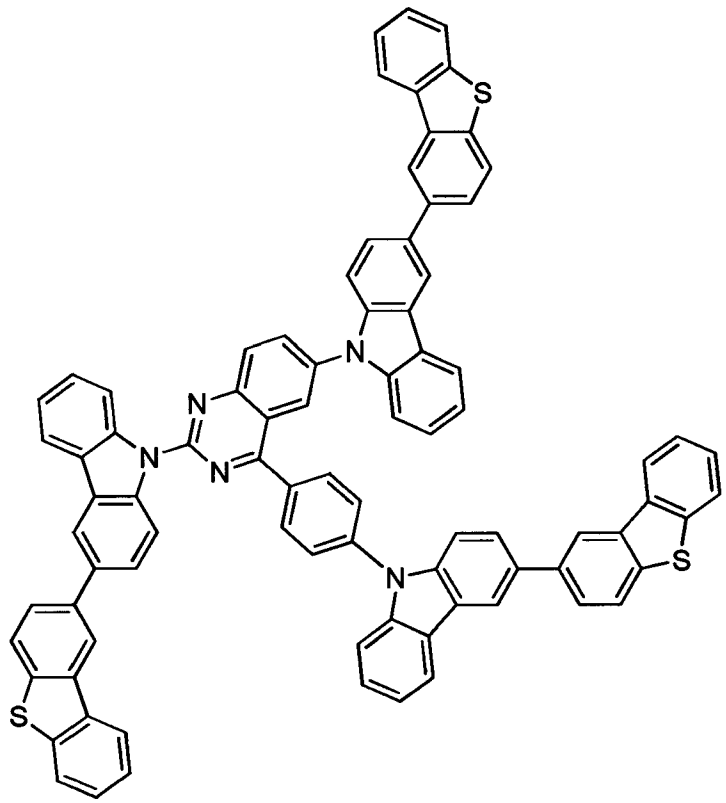
[化443]



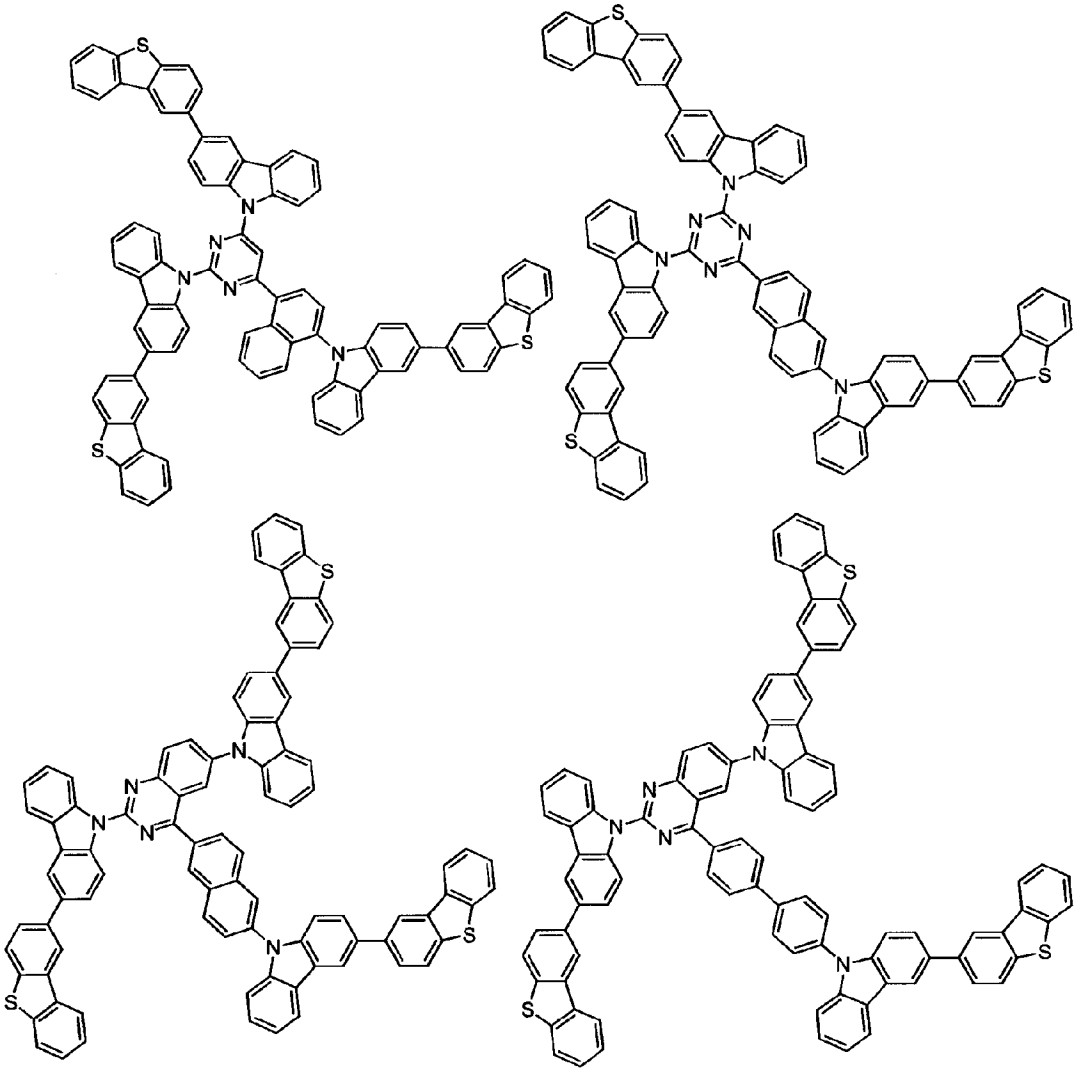
[0591]

[化444]



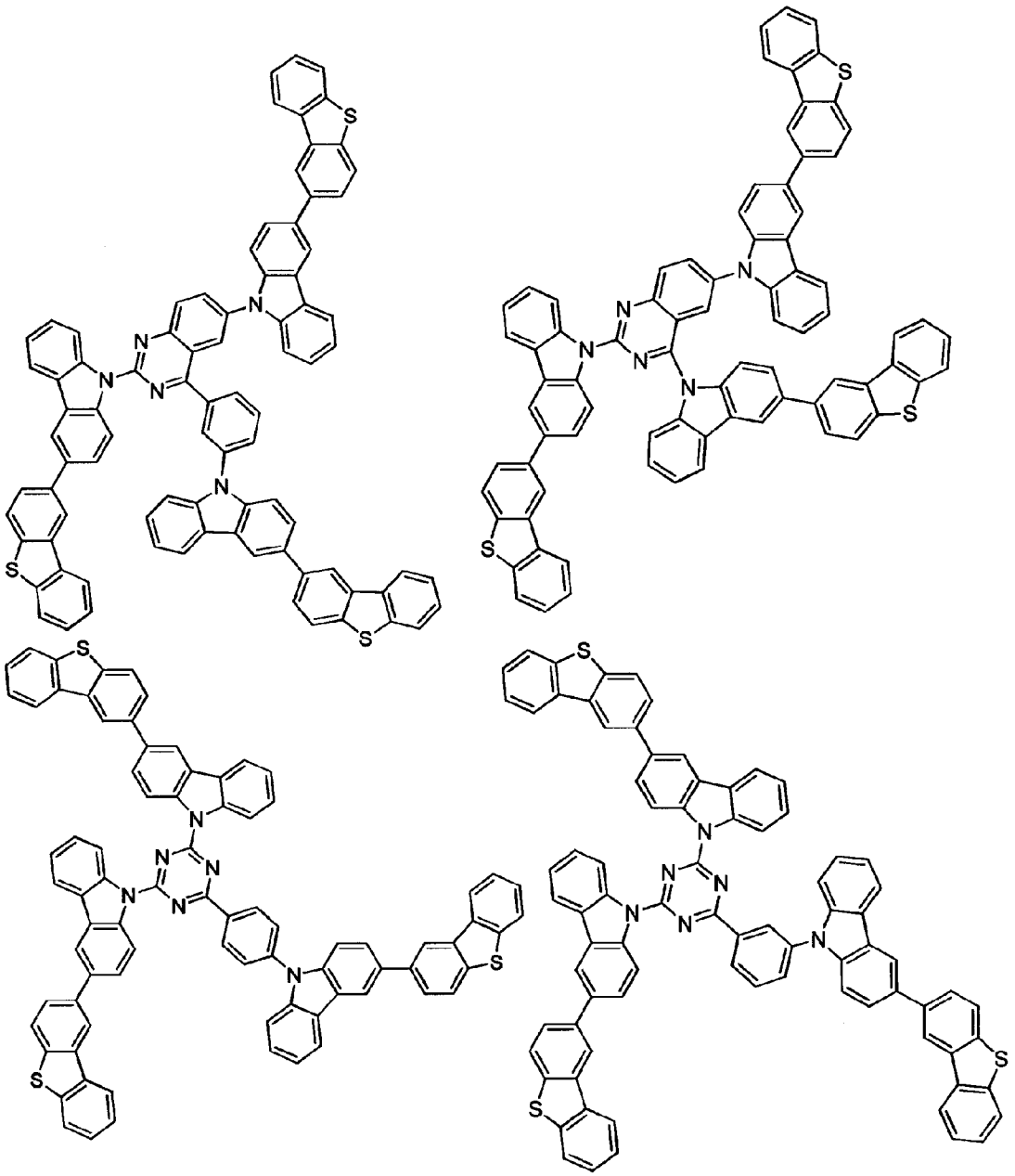


[0592] [化445]



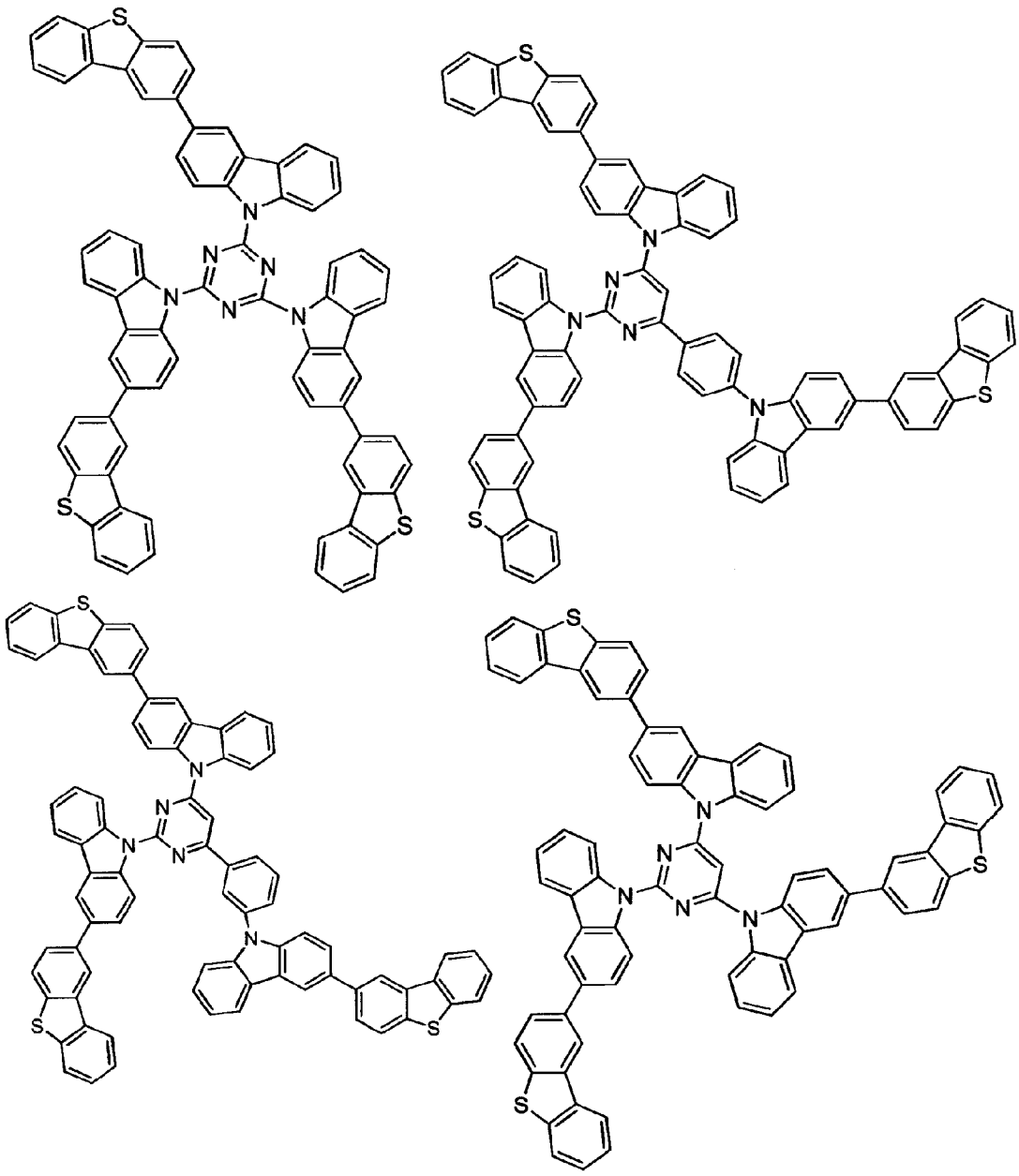
[0593]

[化446]



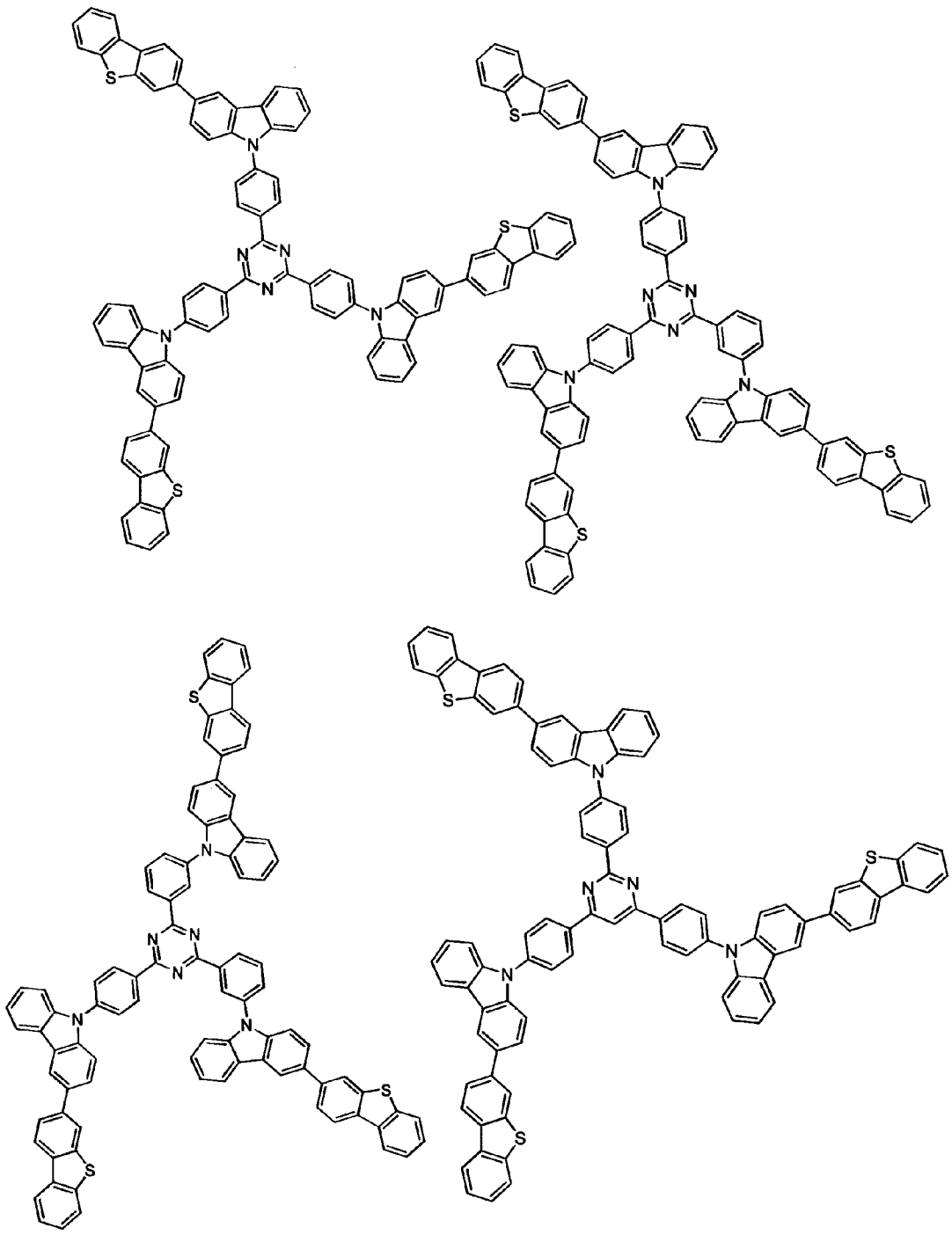
[0594]

[化447]



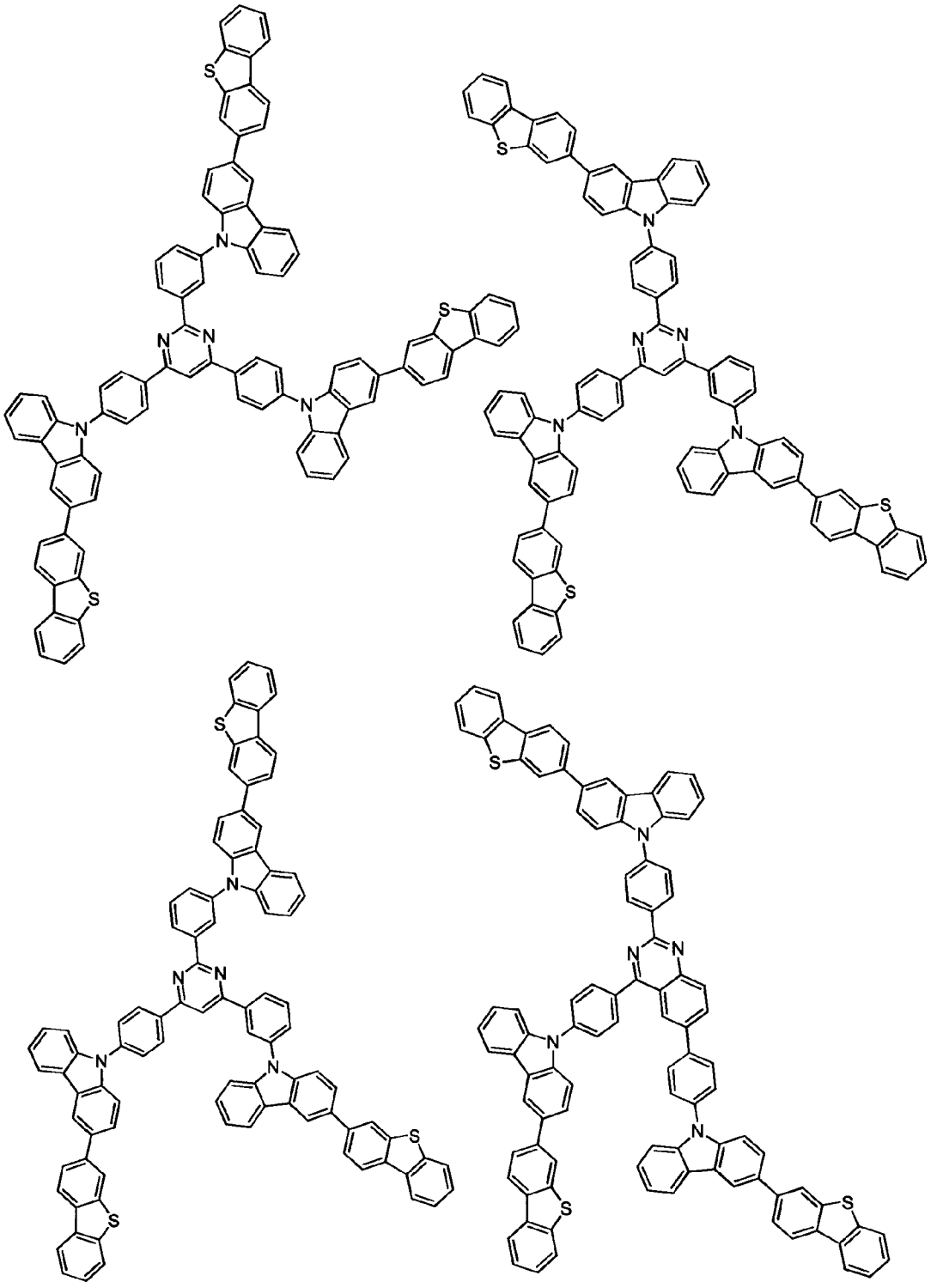
[0595]

[化448]



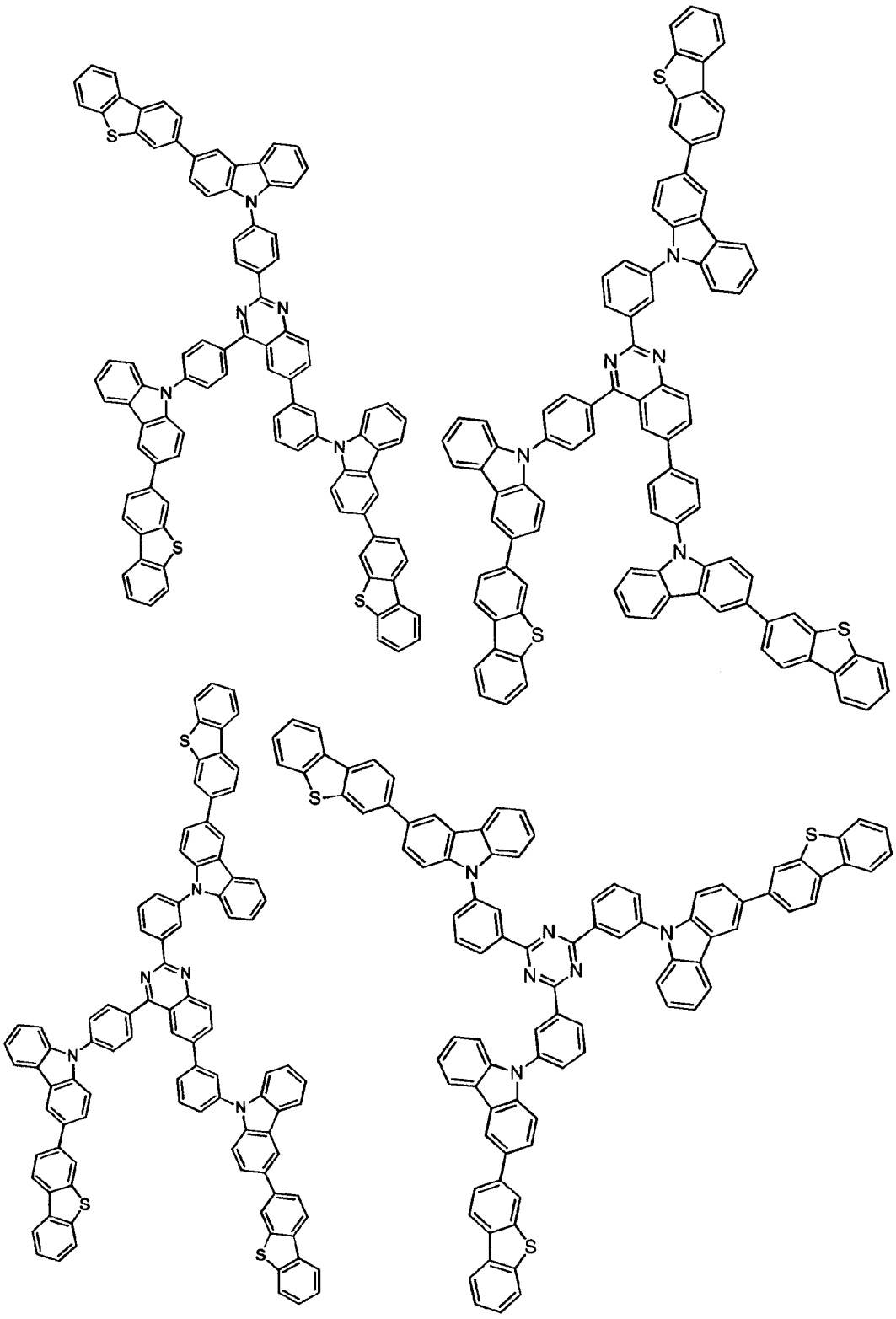
[0596]

[化449]



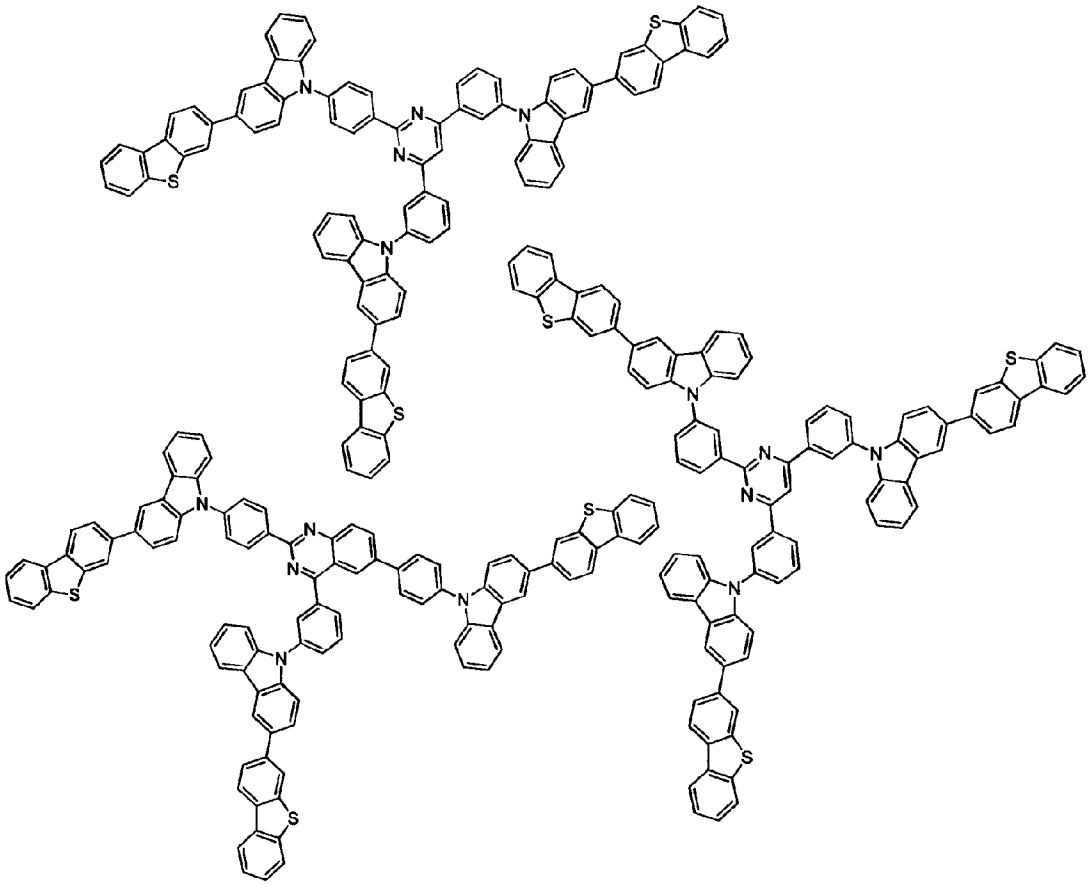
[0597]

[化450]



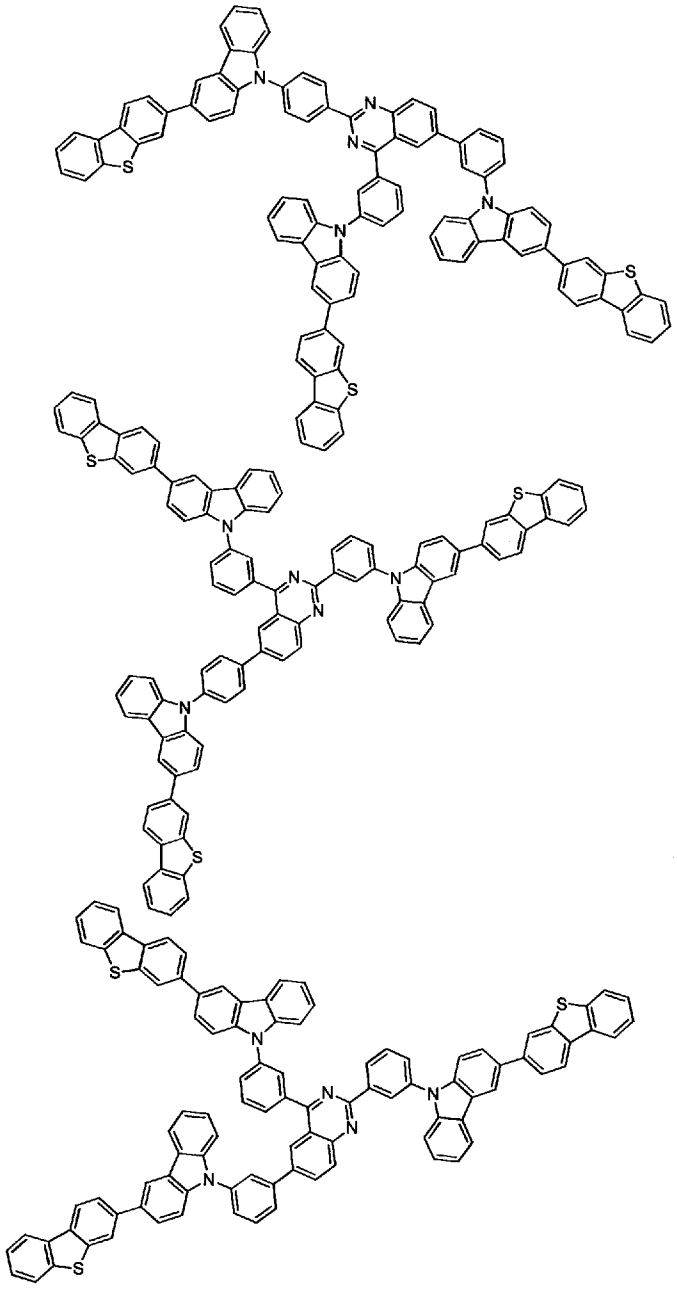
[0598]

[化451]



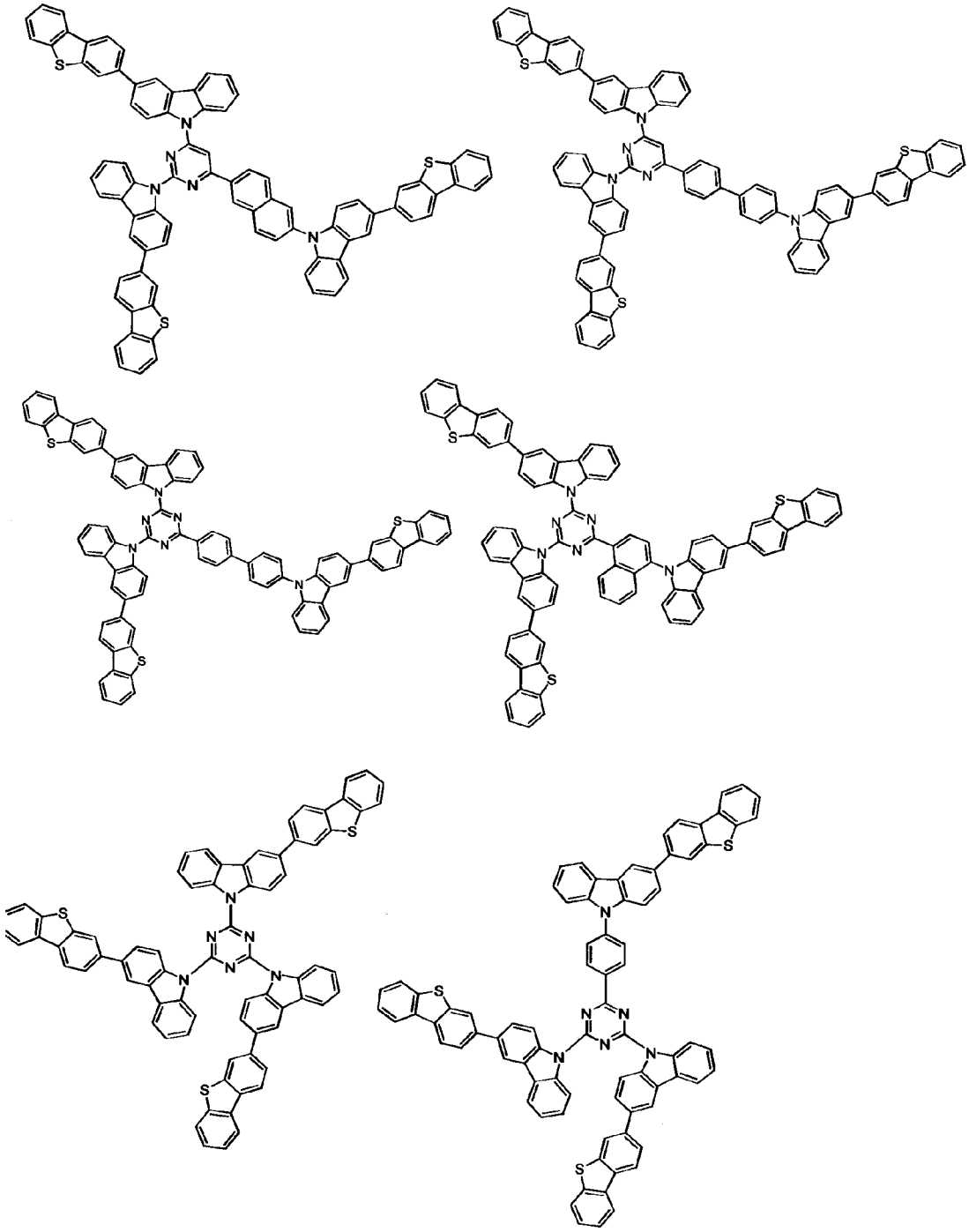
[0599]

[化452]



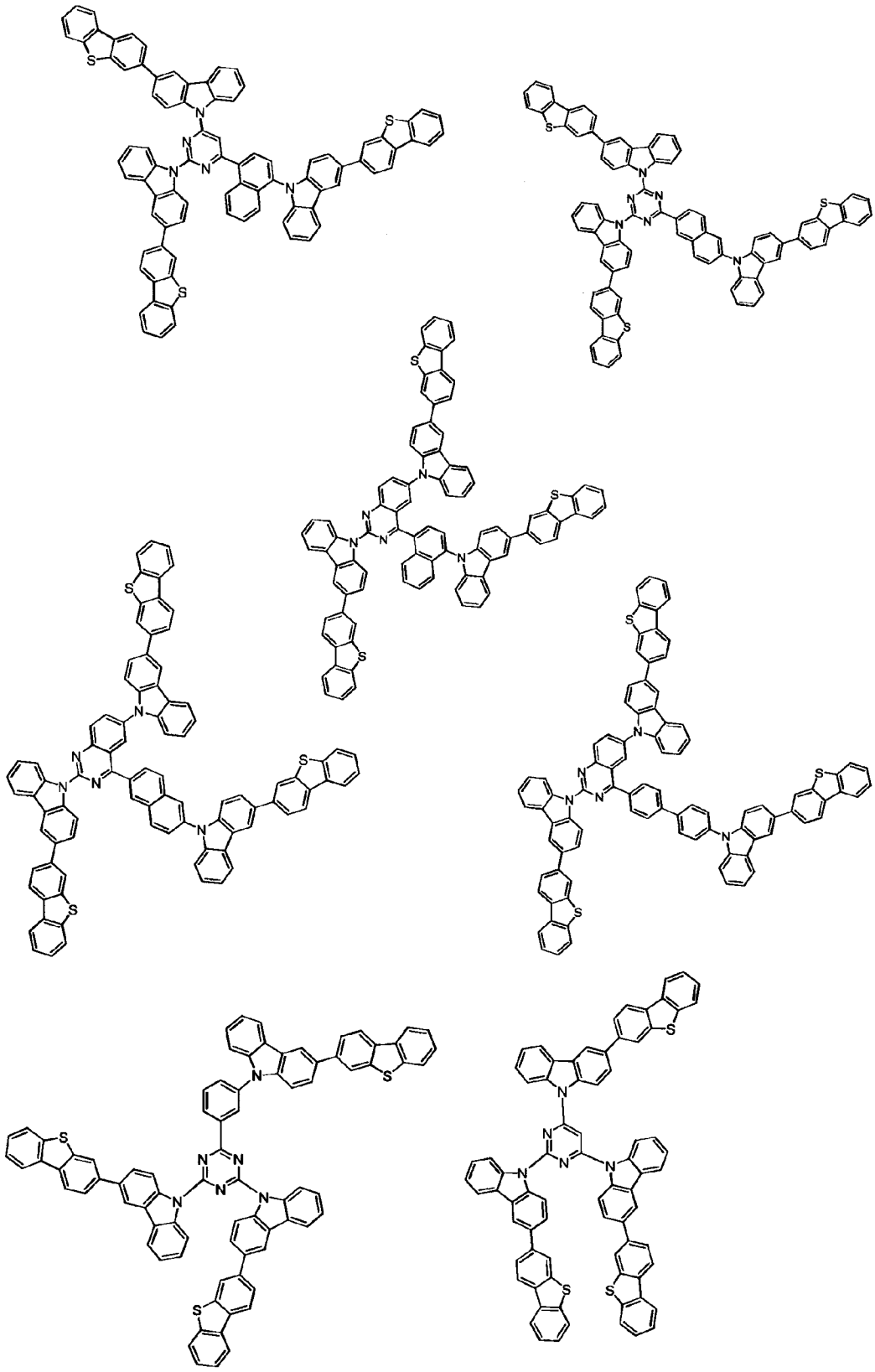
[0600]

[化453]

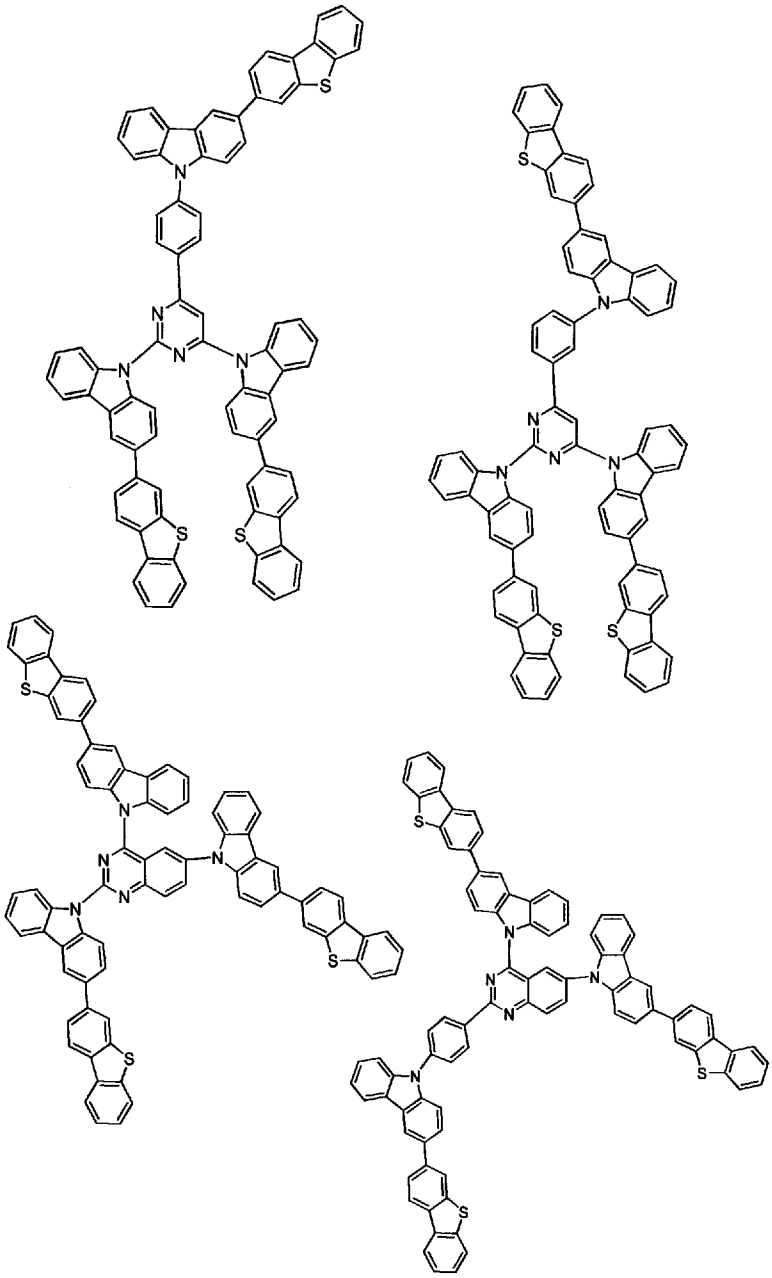


[0601]

[化454]

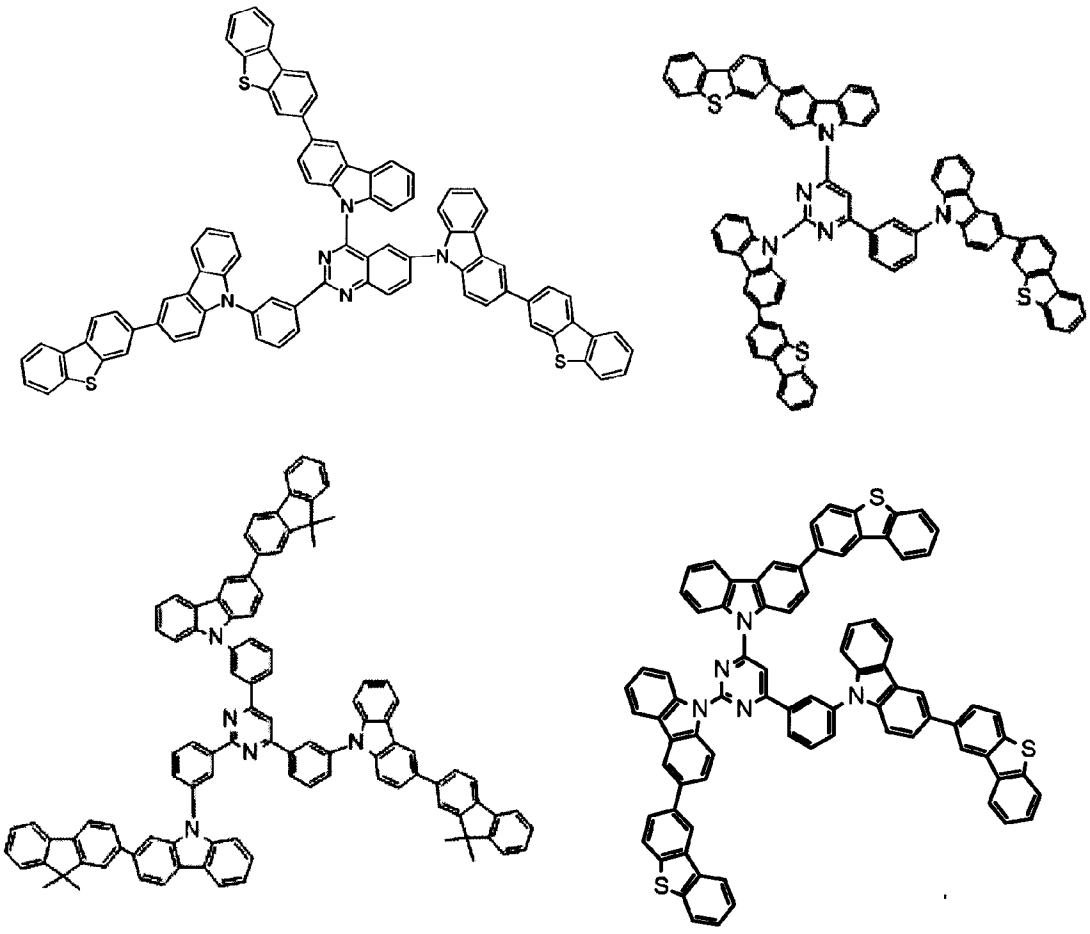


[0602] [化455]



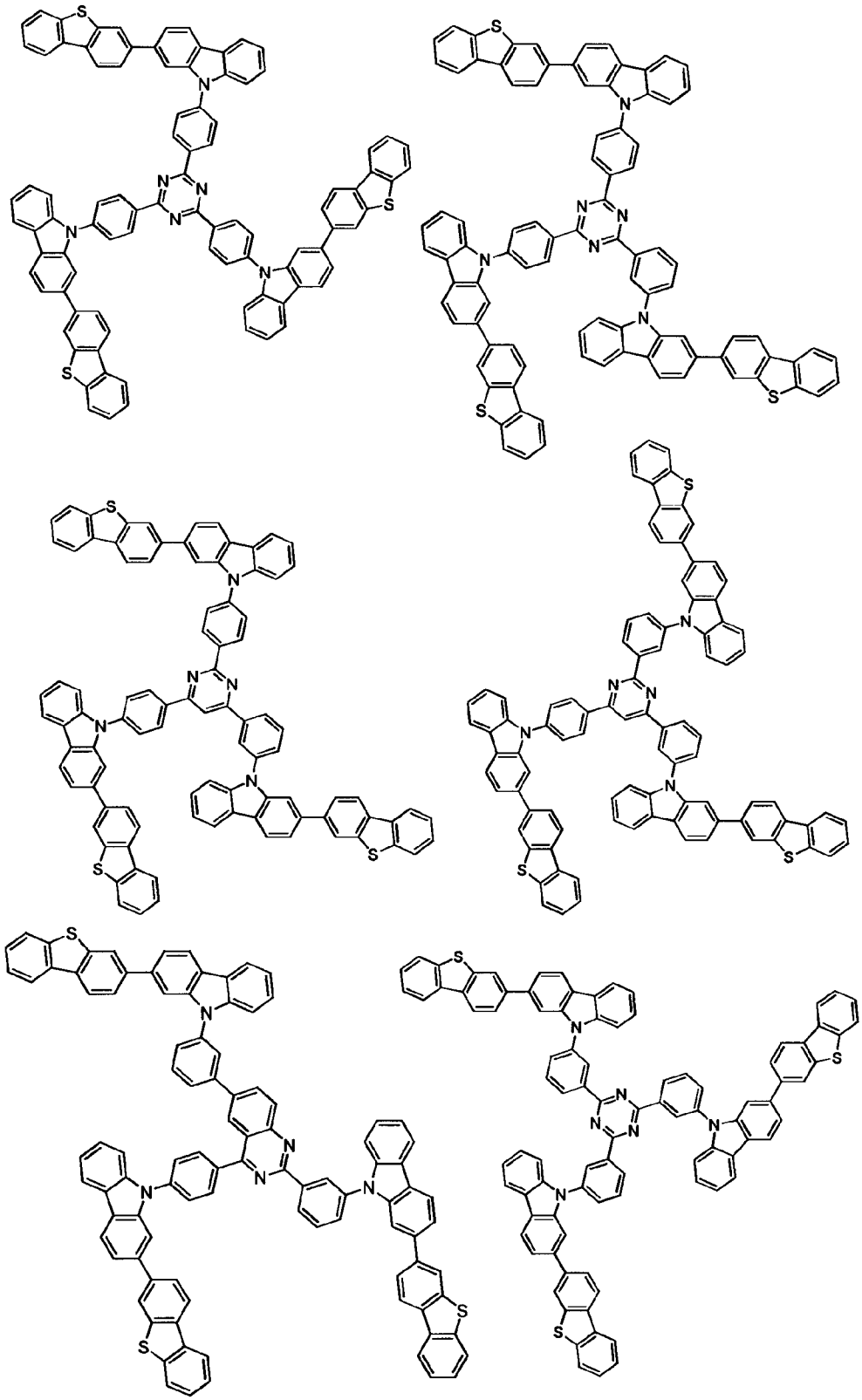
[0603]

[化456]

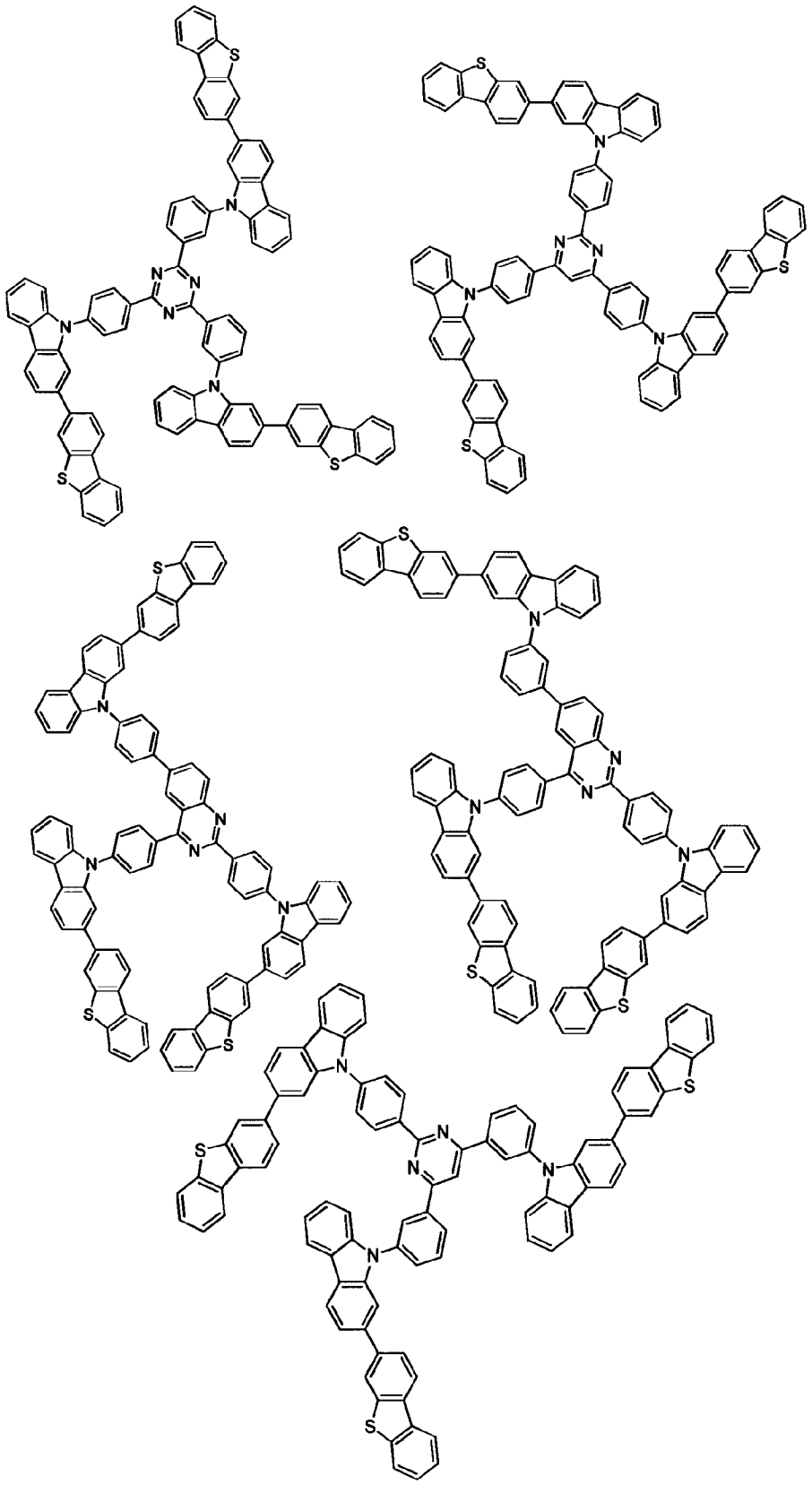


[0604]

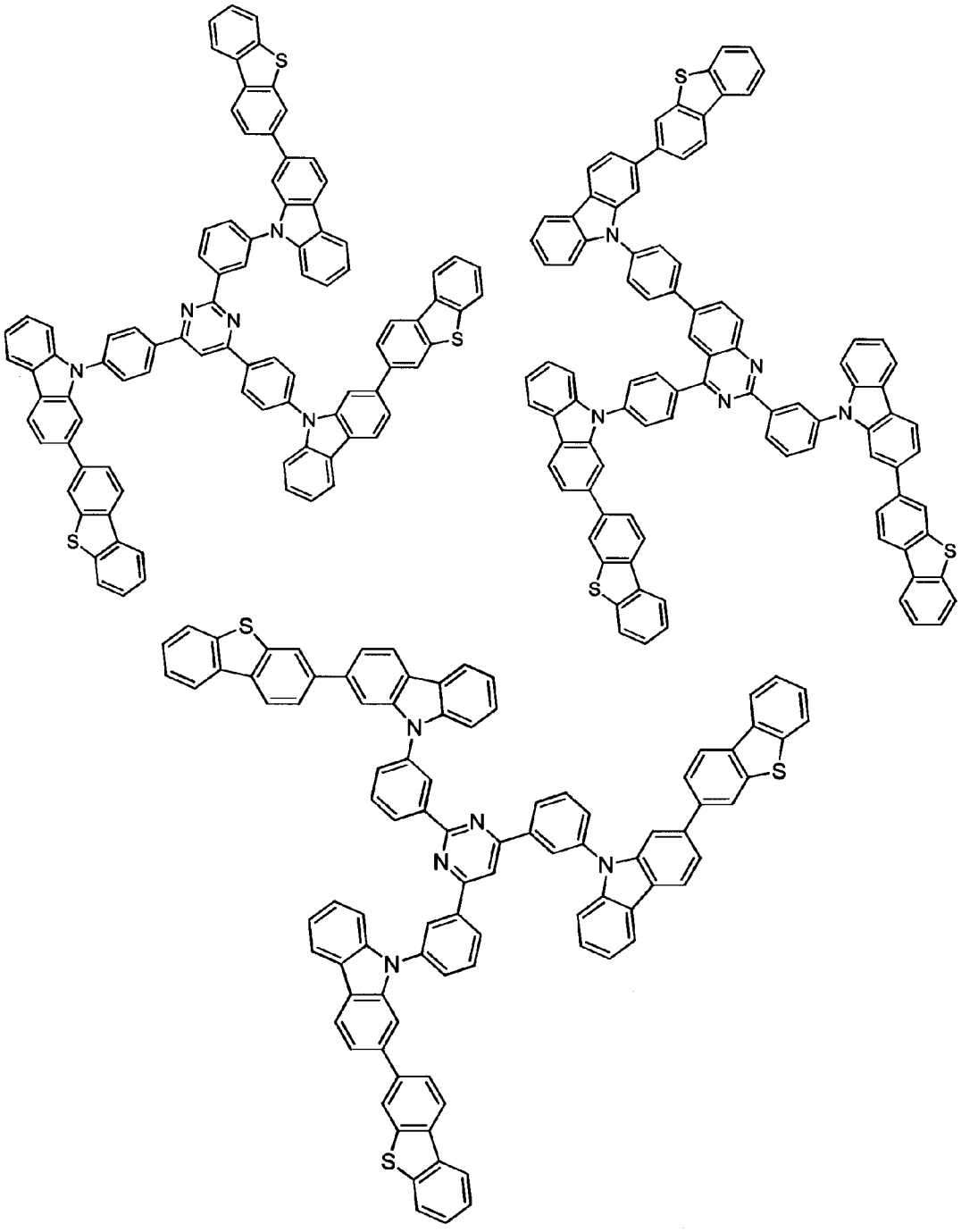
[化457]



[0605] [化458]

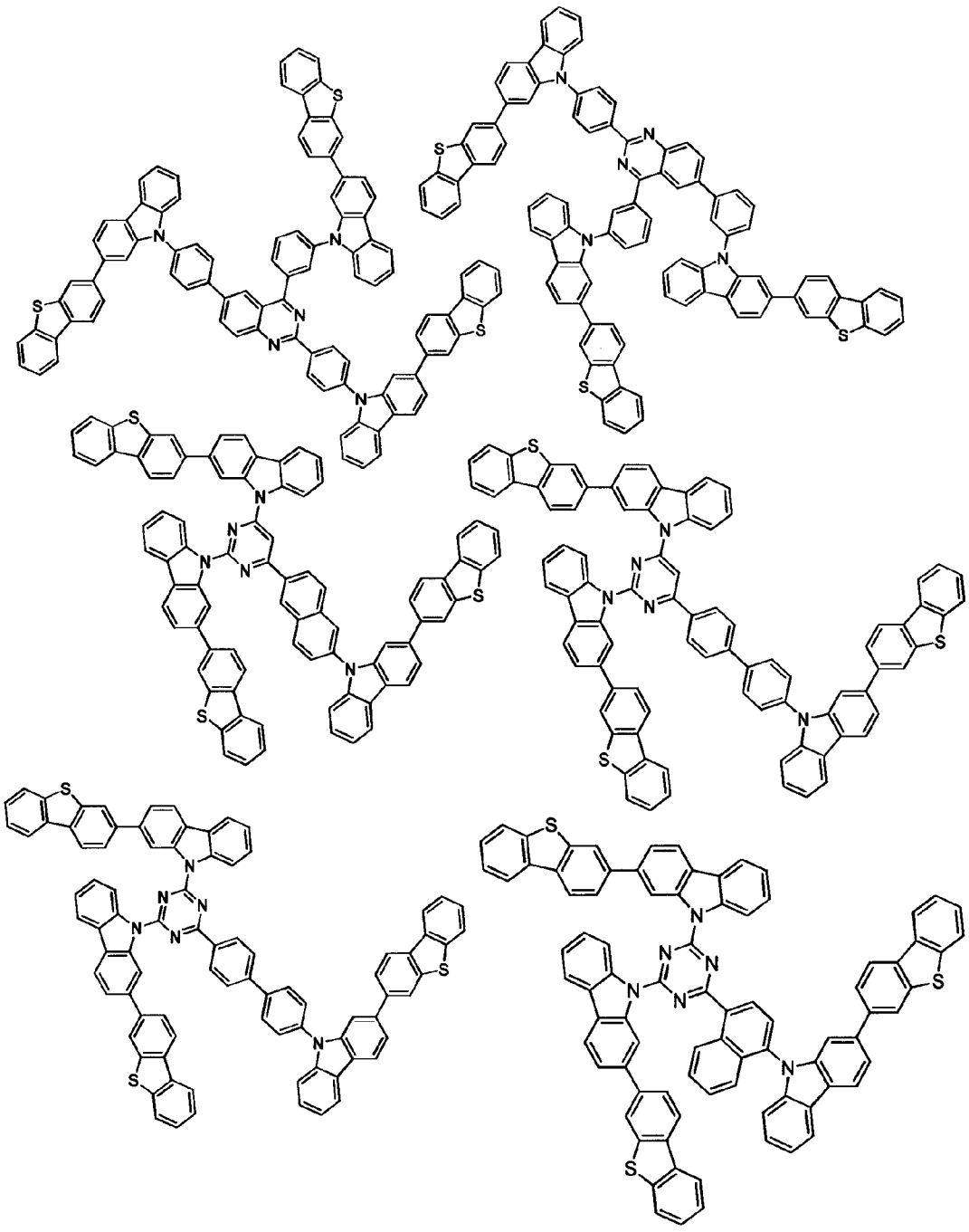


[0606] [化459]



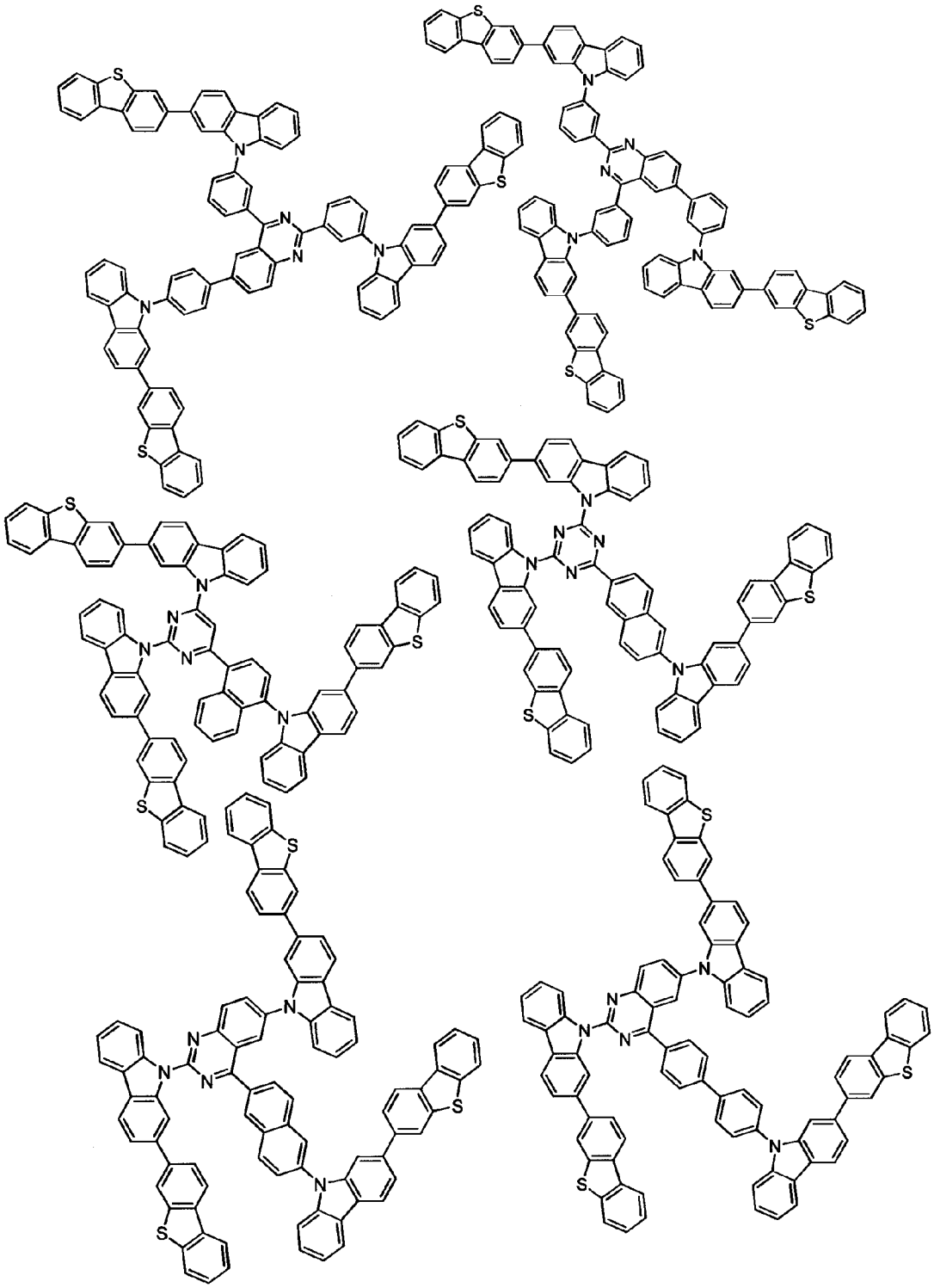
[0607]

[化460]



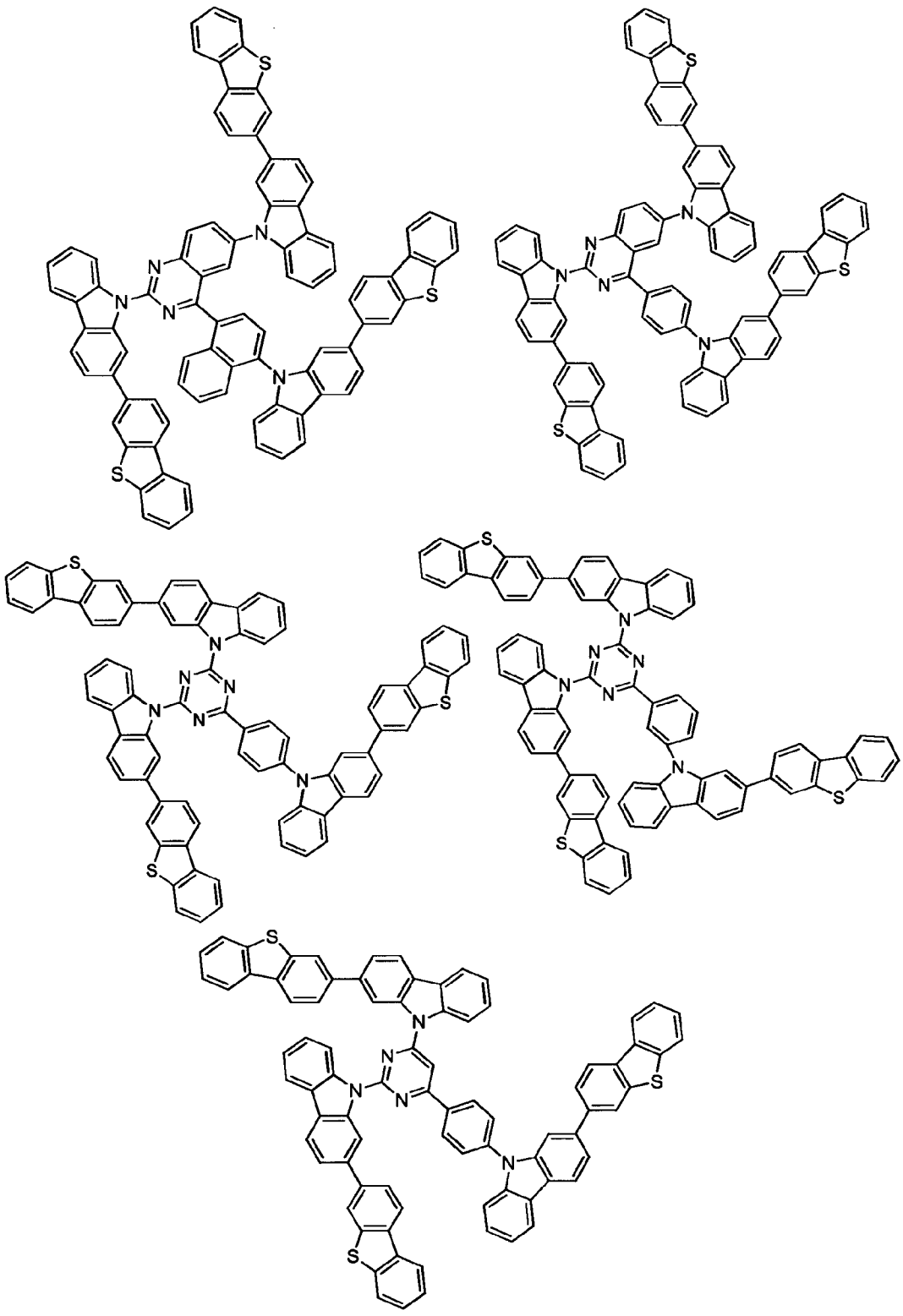
[0608]

[化461]



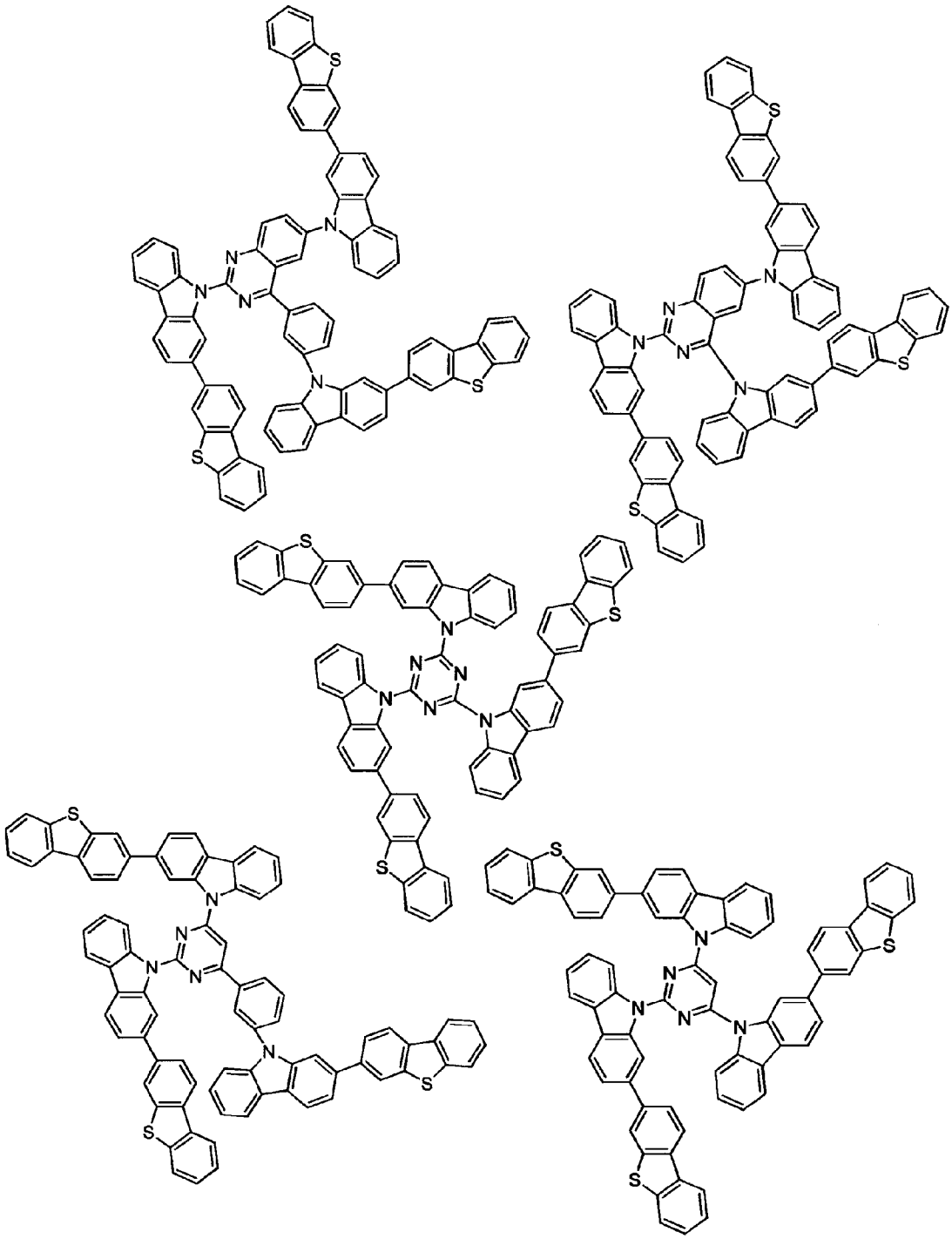
[0609]

[化462]



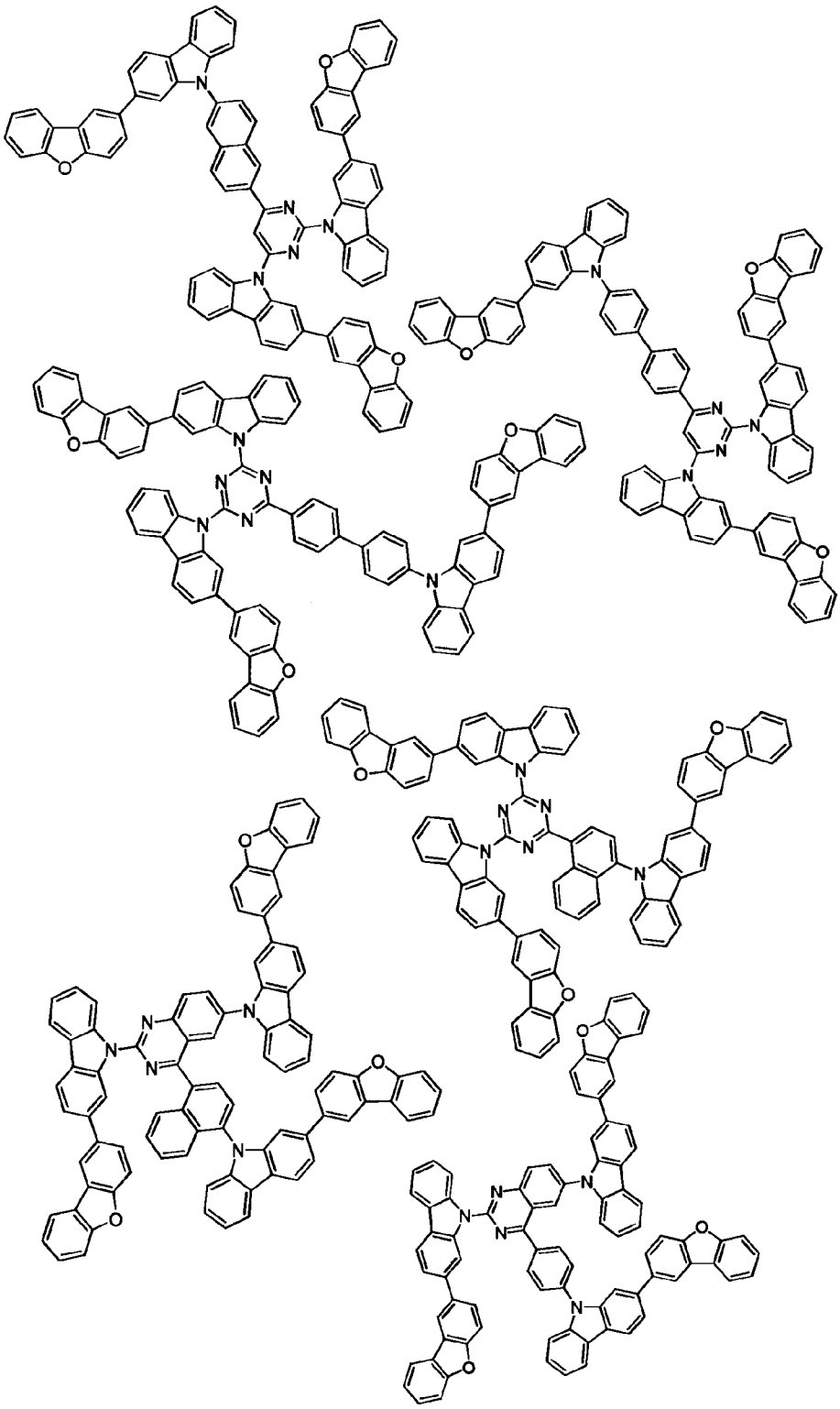
[0610]

[化463]



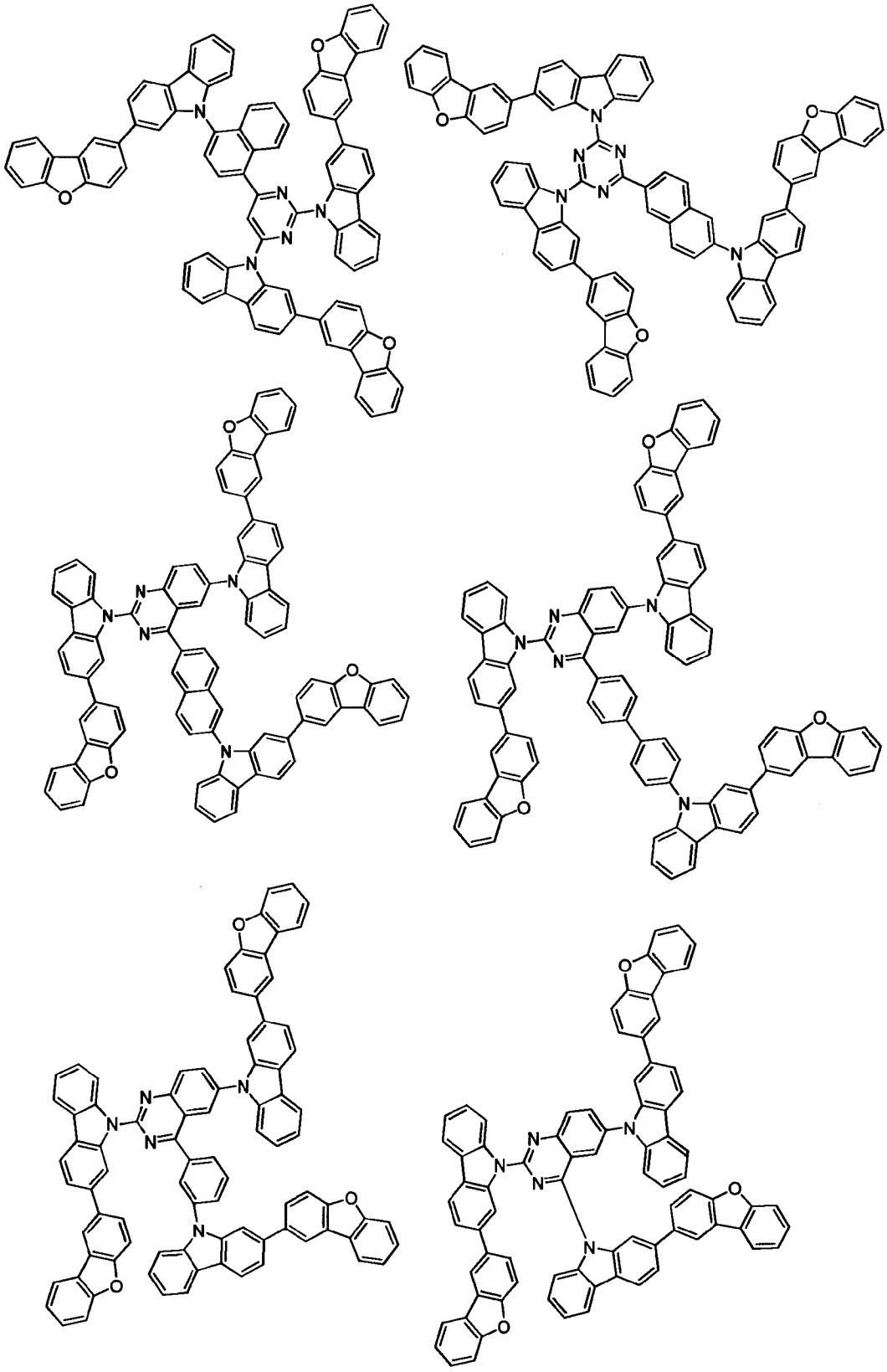
[0611]

[化464]

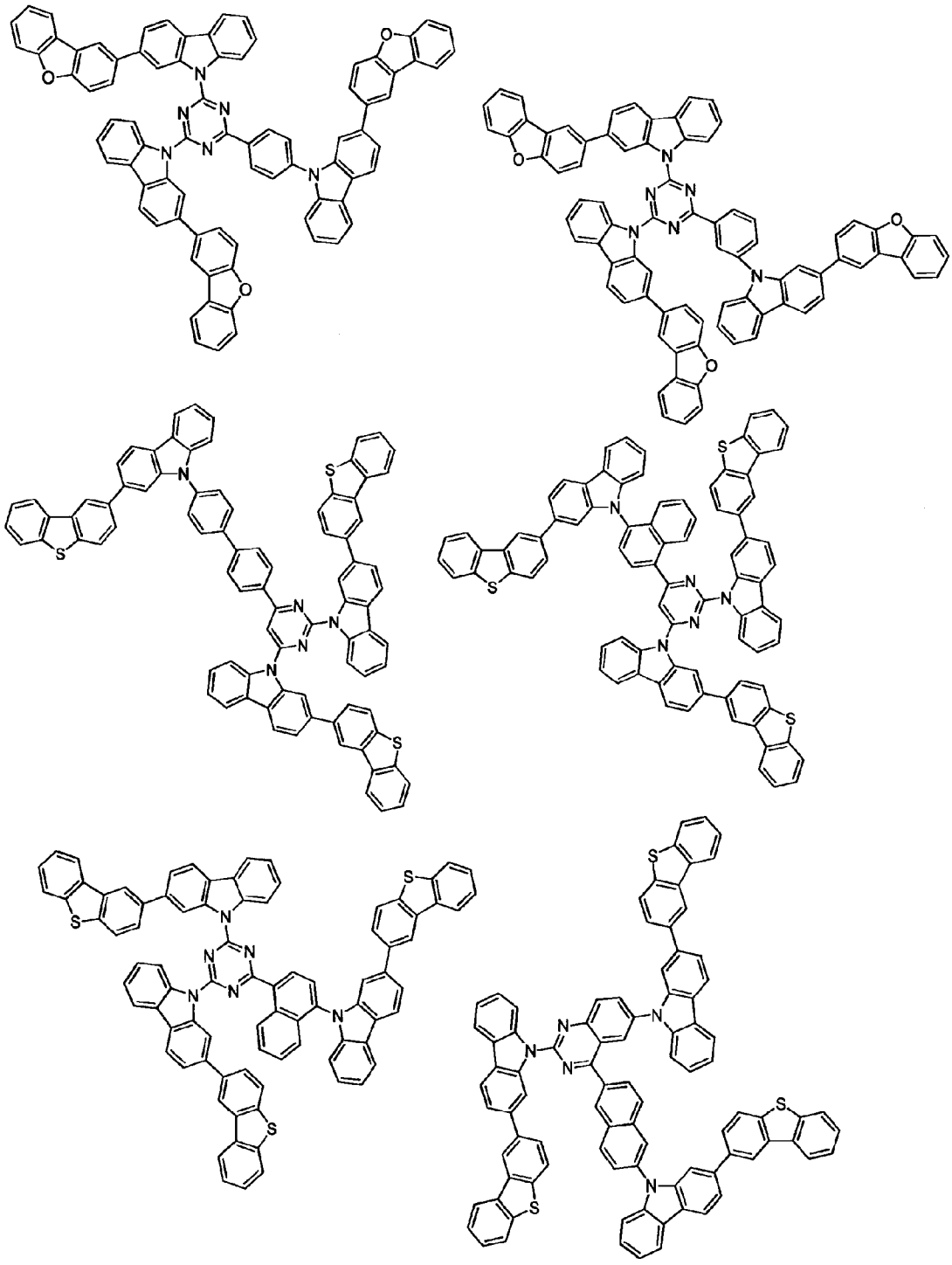


[0612]

[化465]

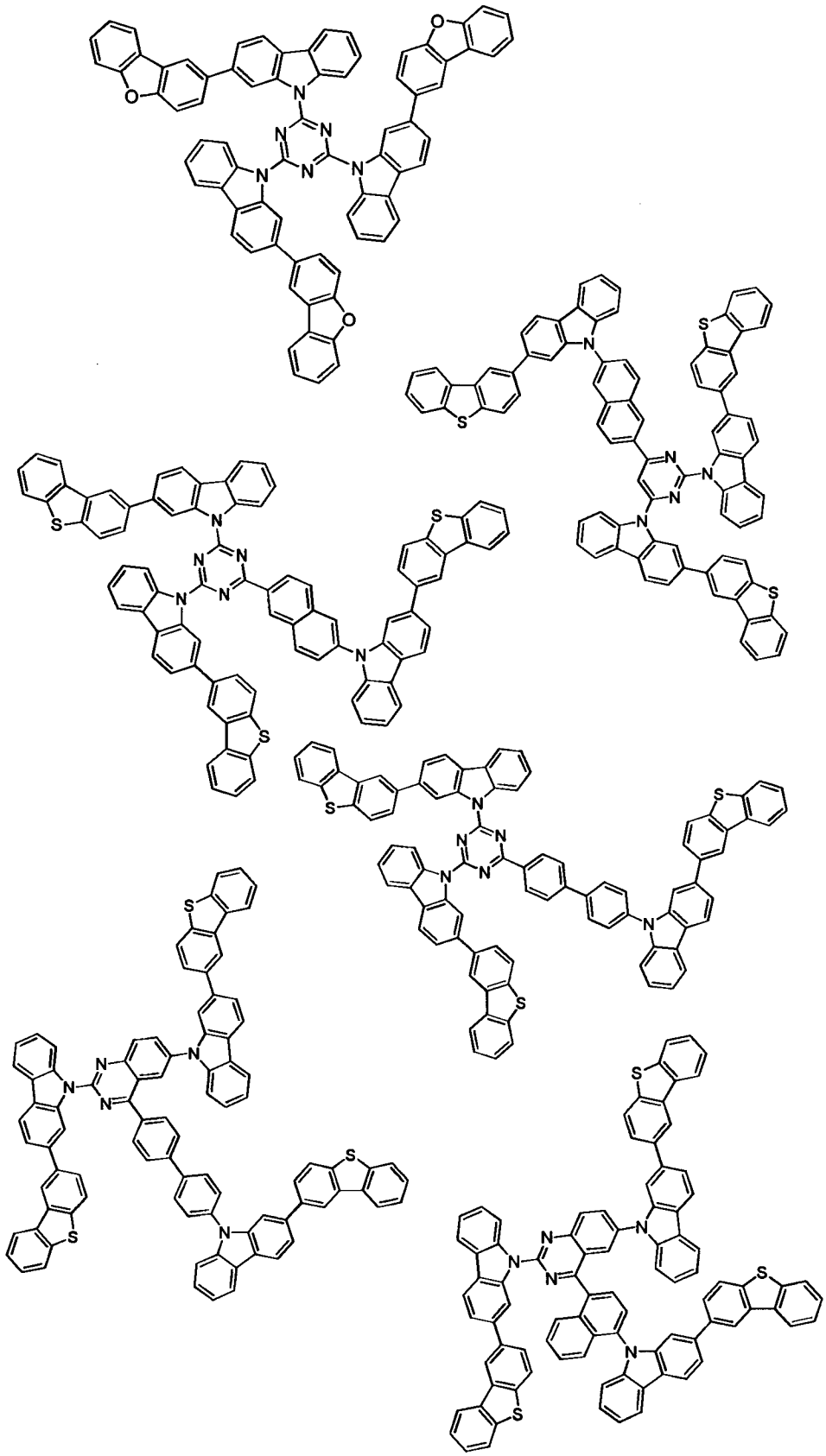


[0613] [化466]

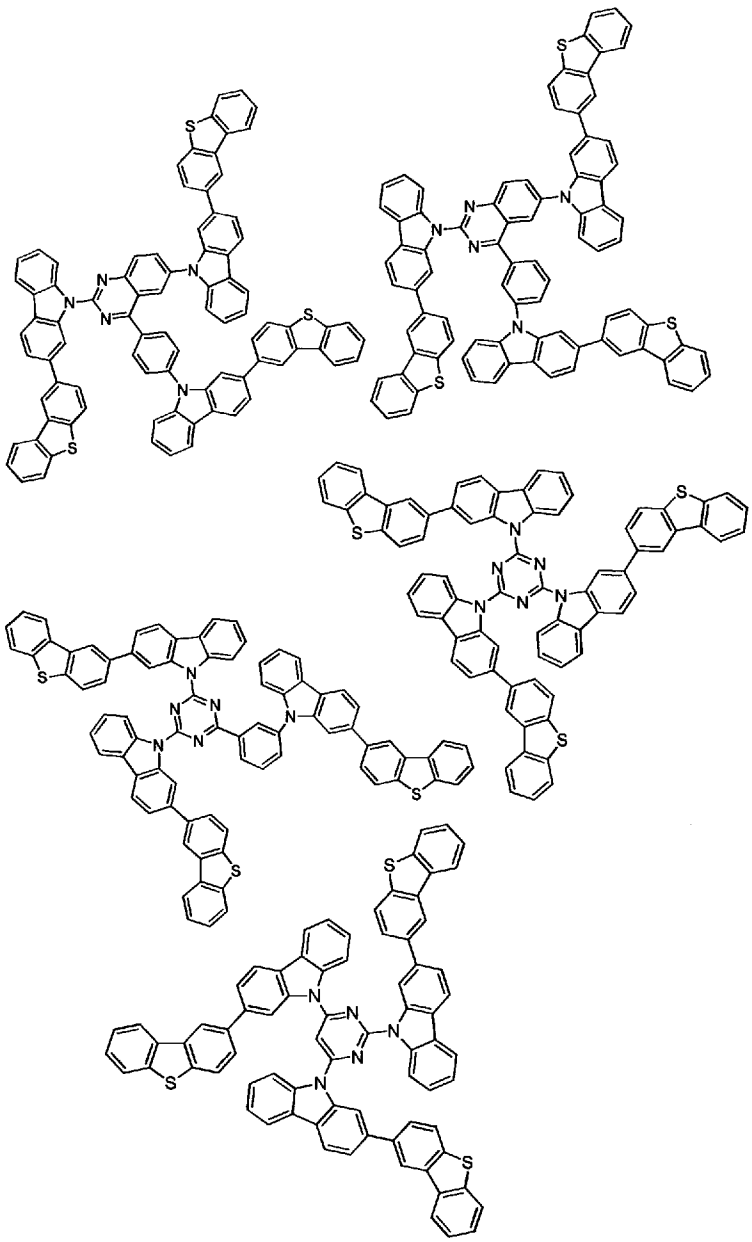


[0614]

[化467]

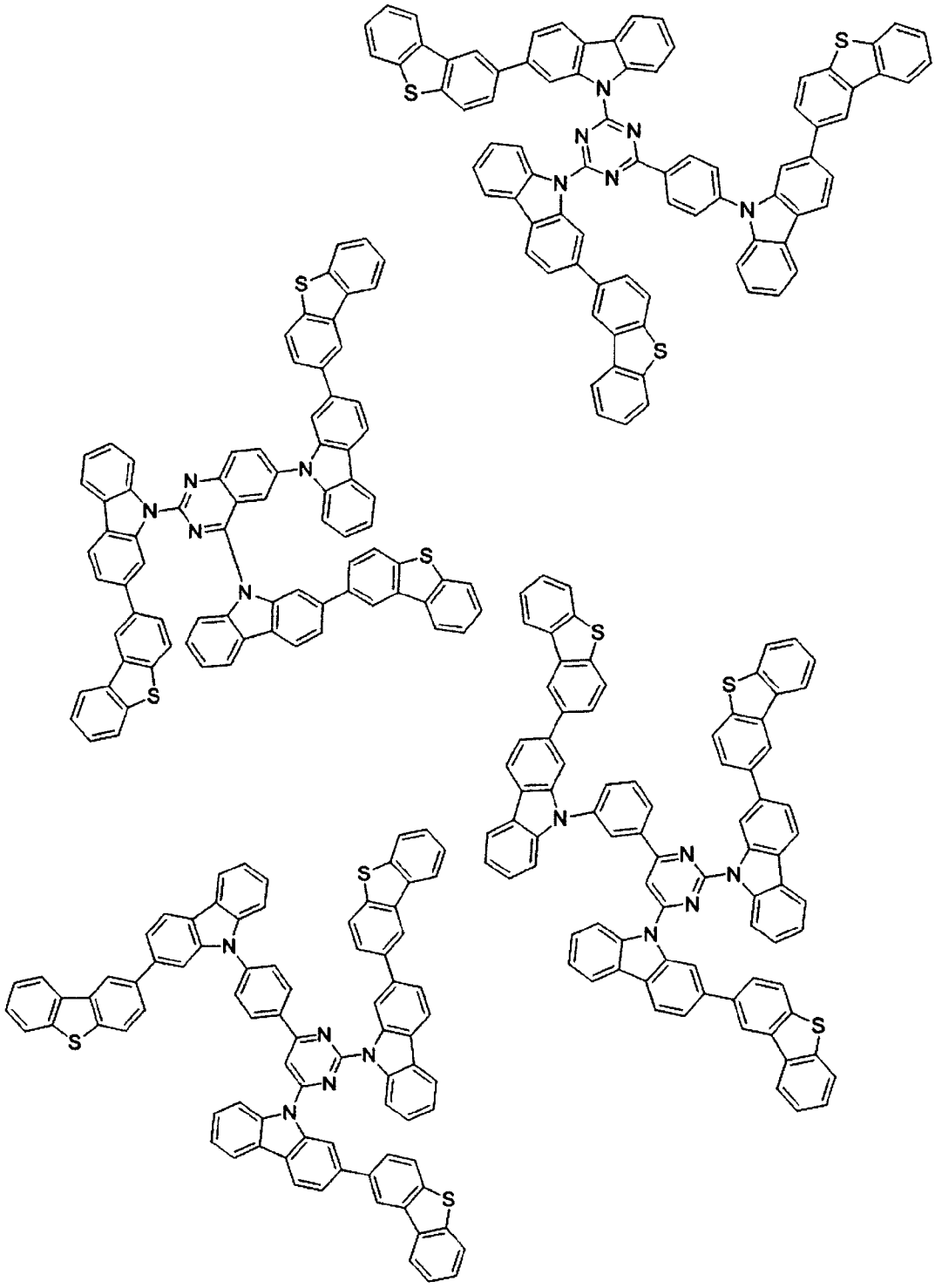


[0615] [化468]



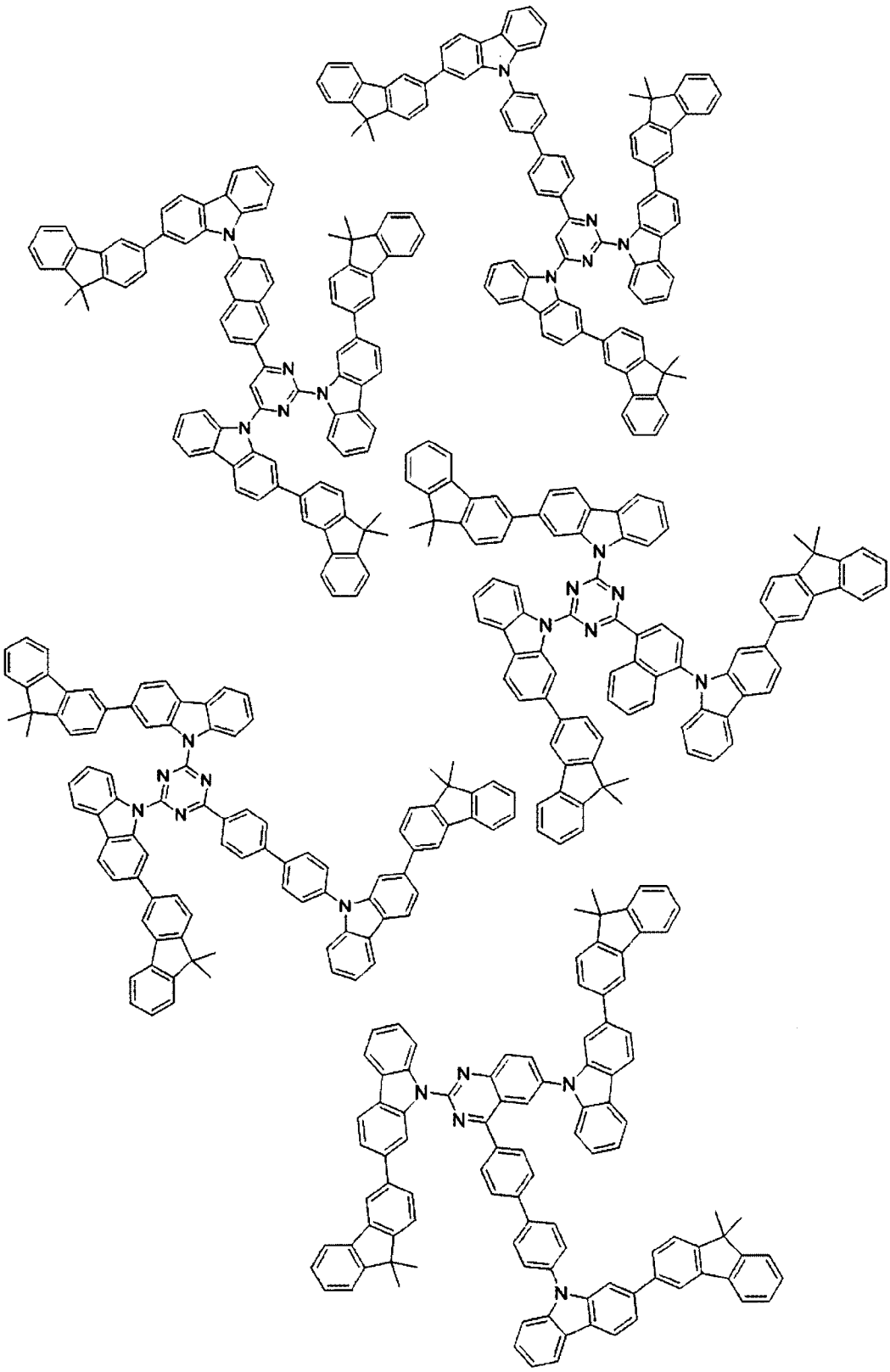
[0616]

[化469]

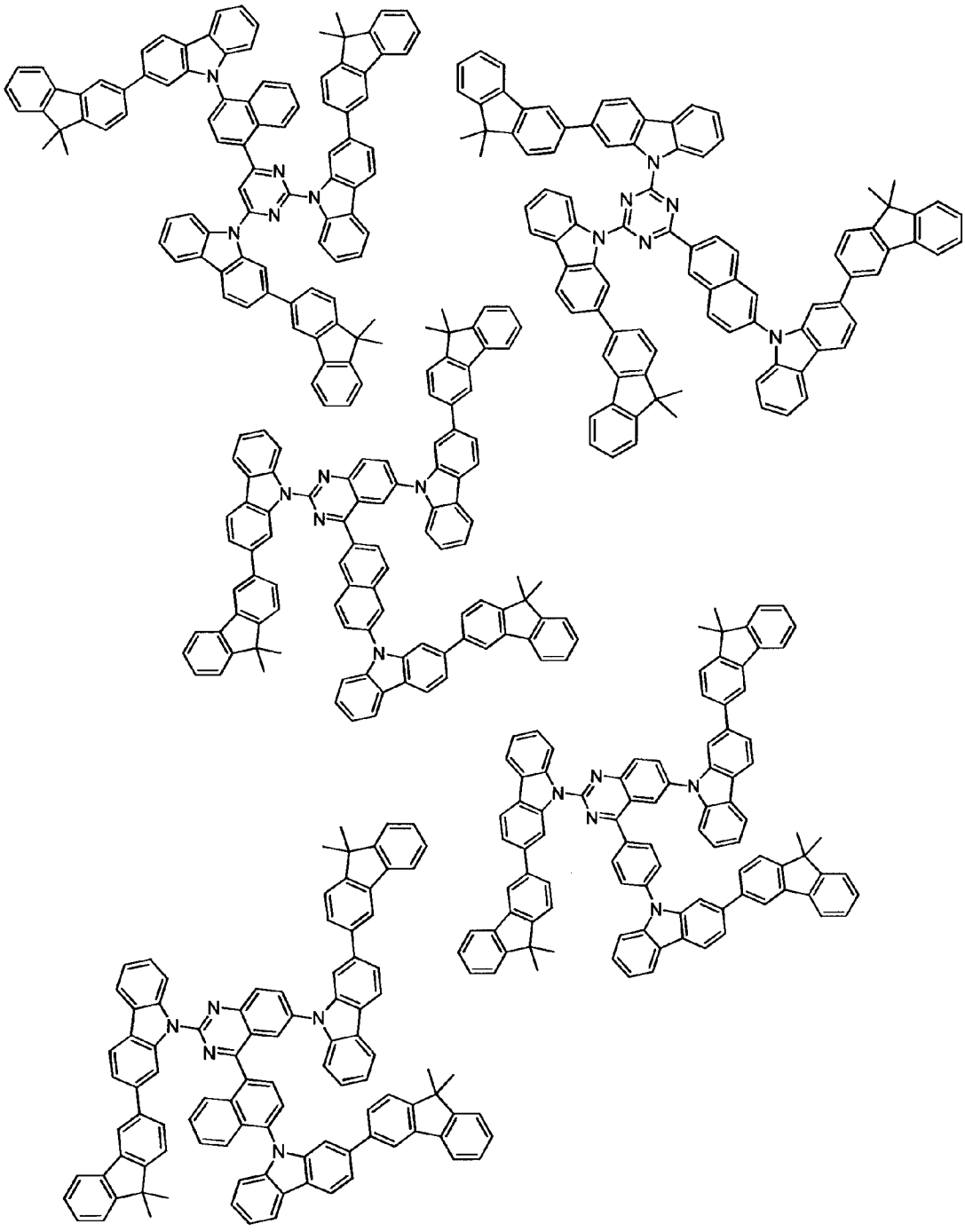


[0617]

[化470]

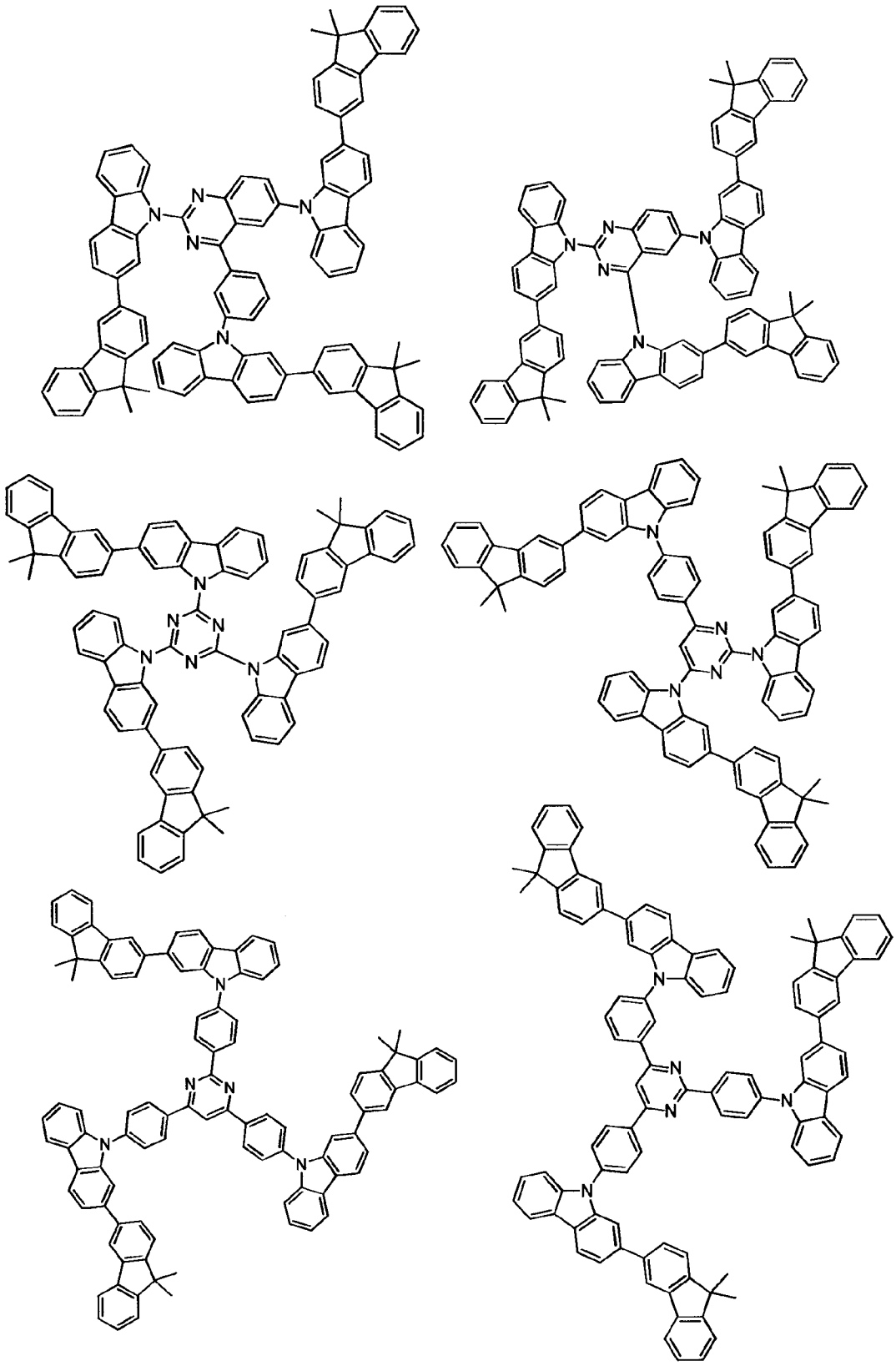


[0618] [化471]

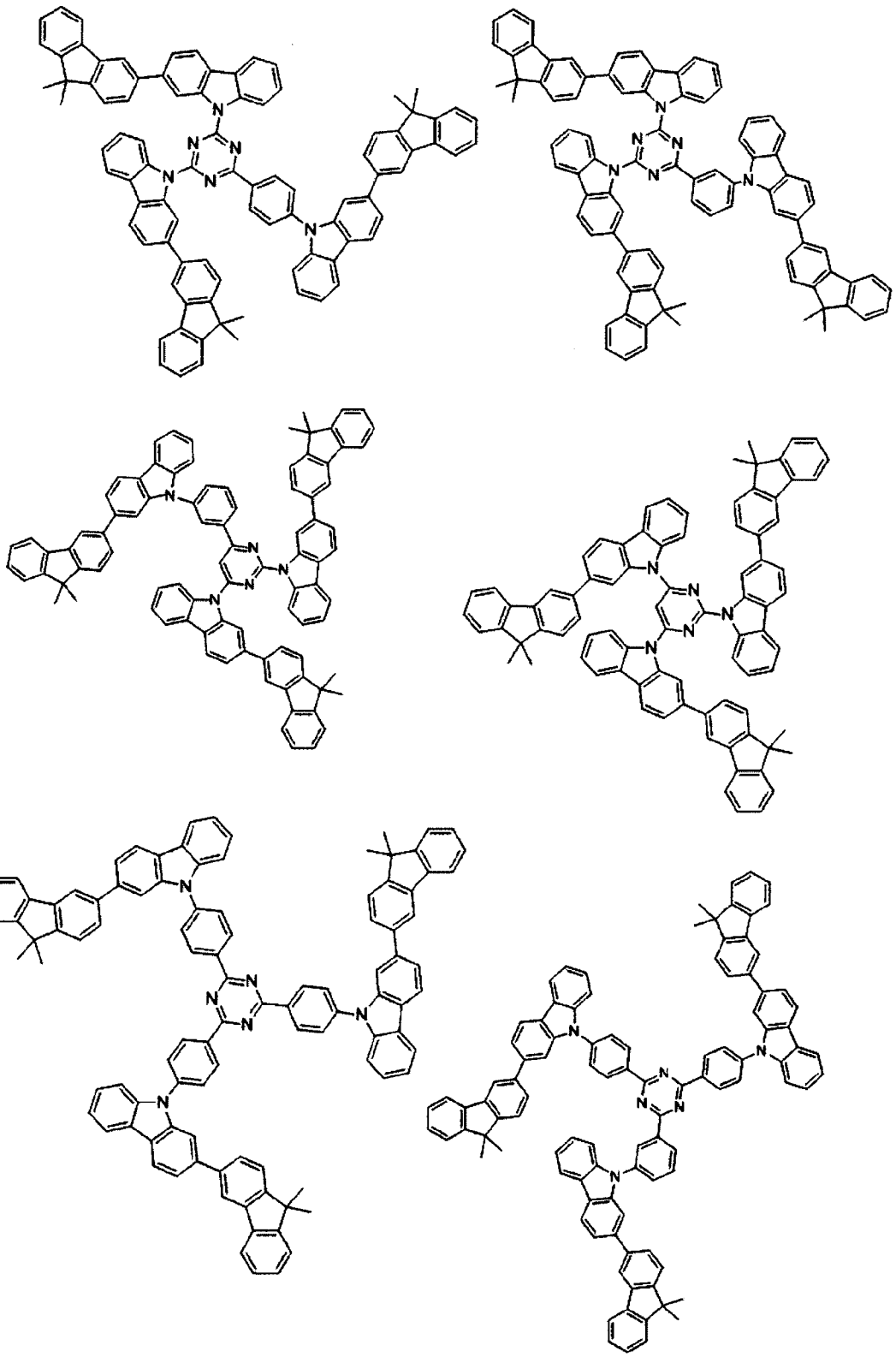


[0619]

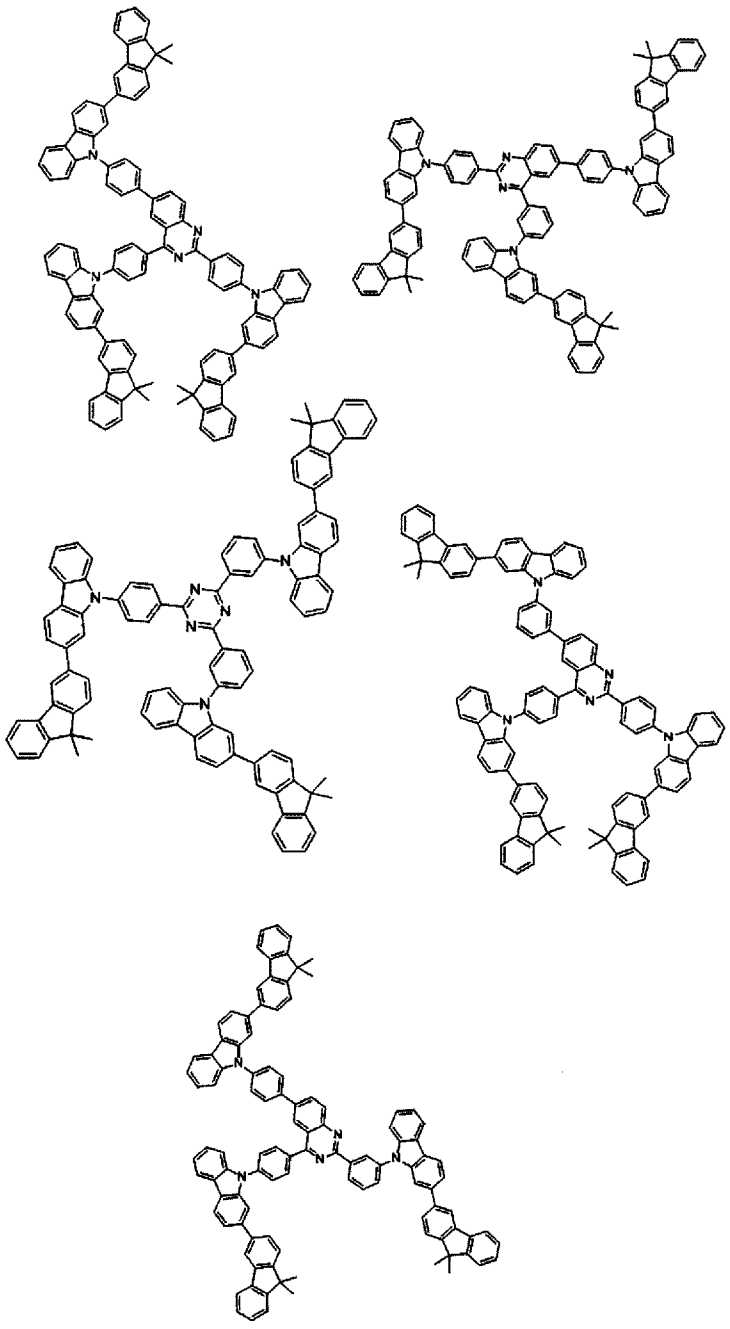
[化472]



[0620] [化473]

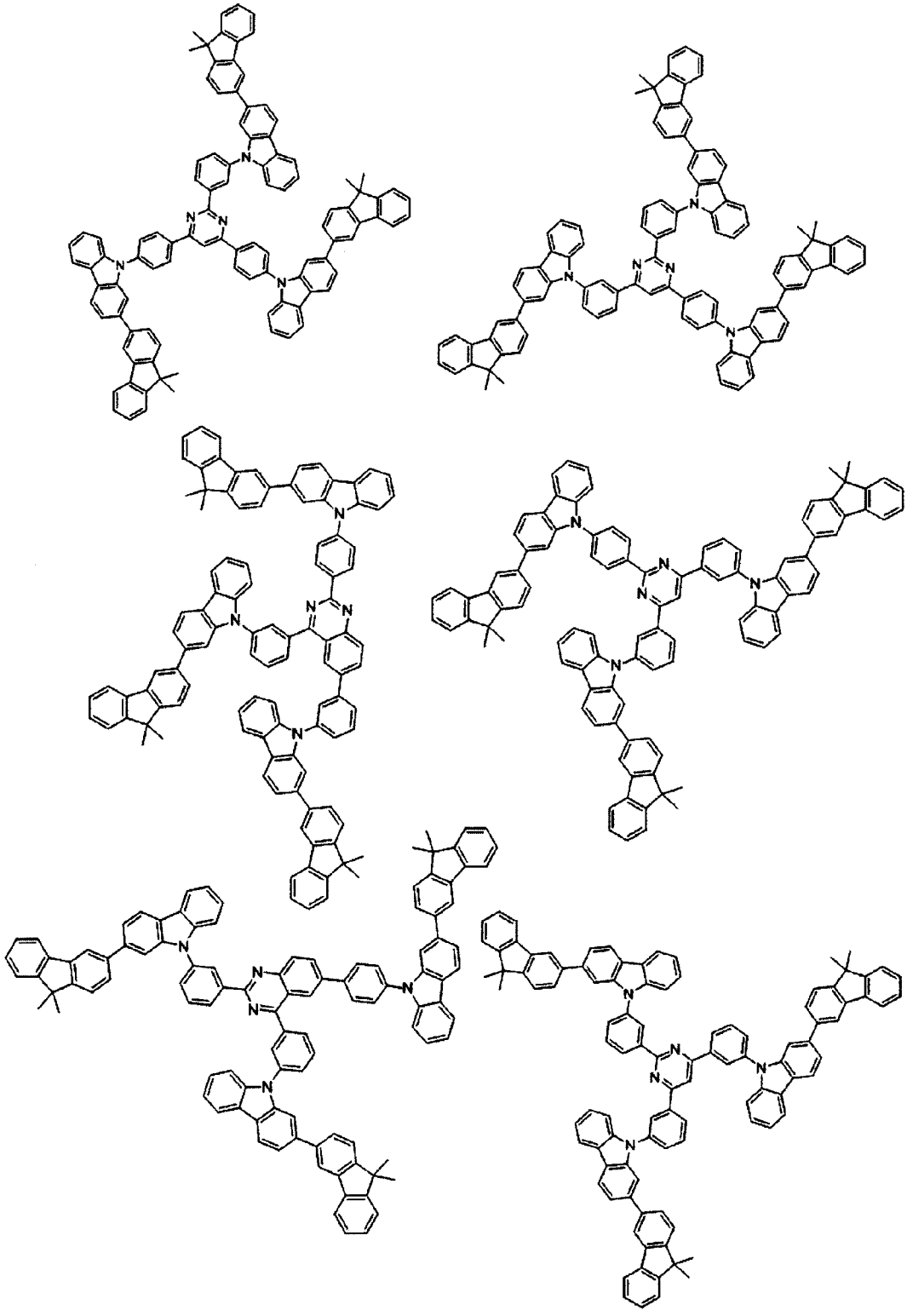


[0621] [化474]



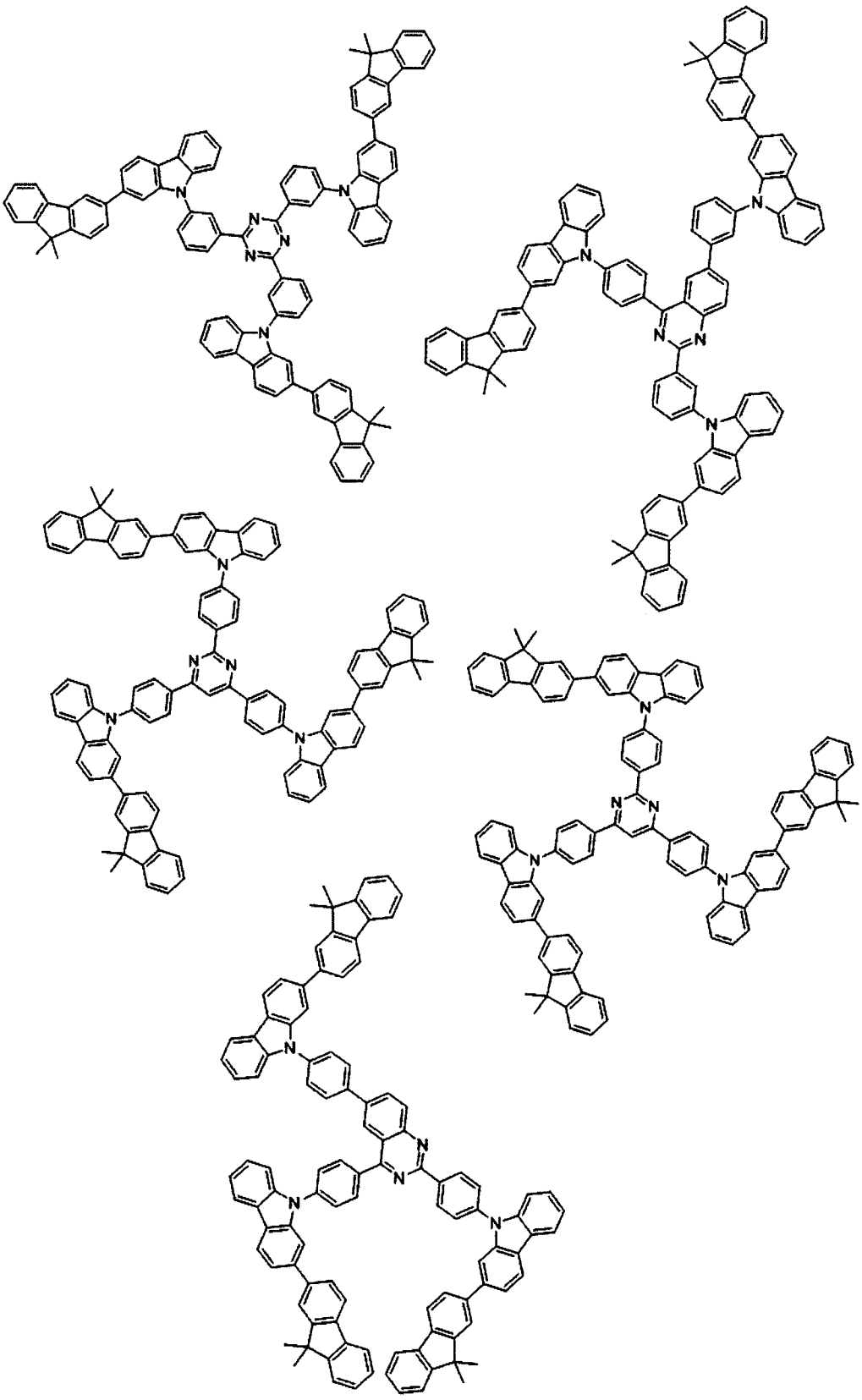
[0622]

[化475]

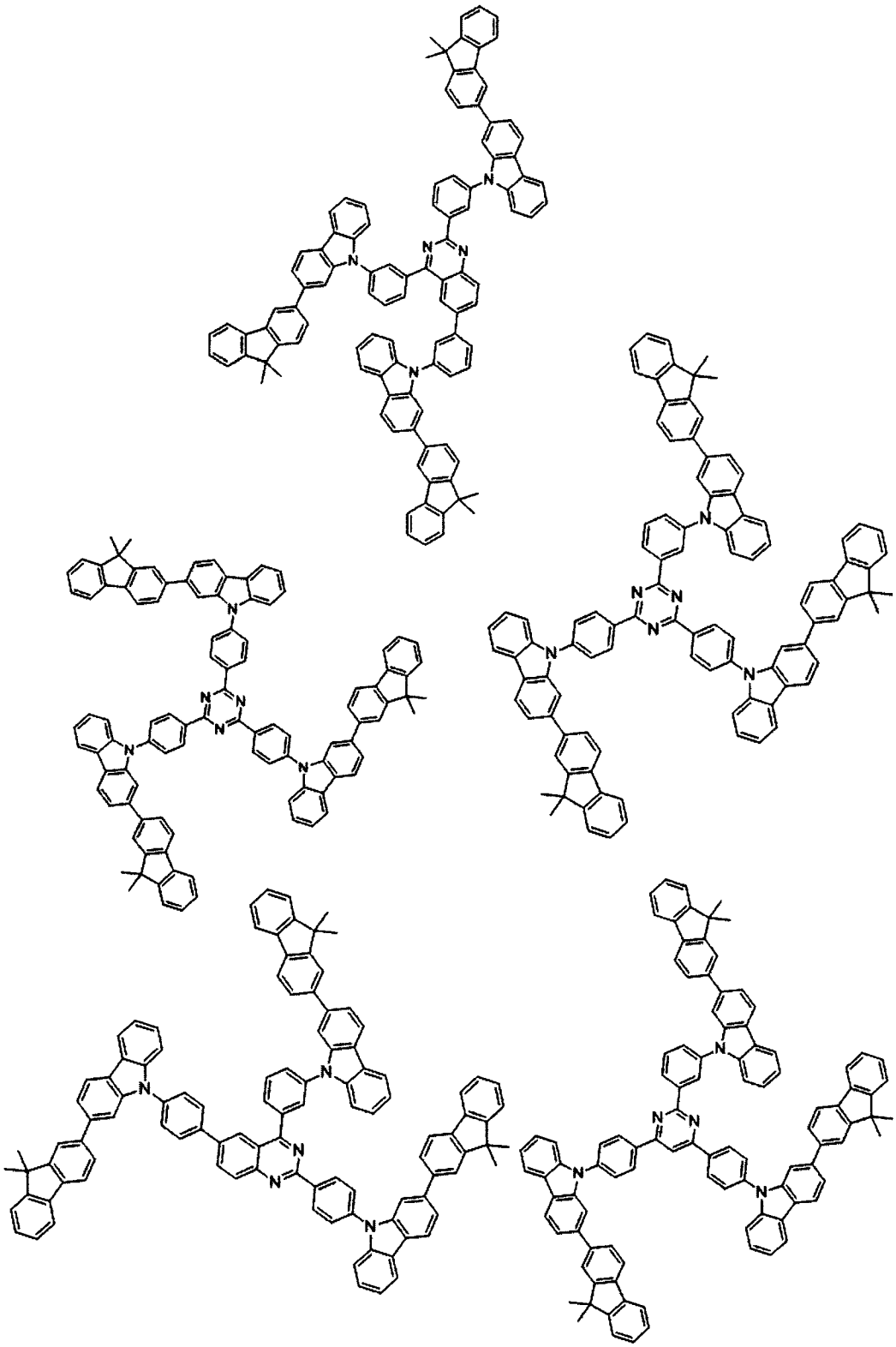


[0623]

[化476]

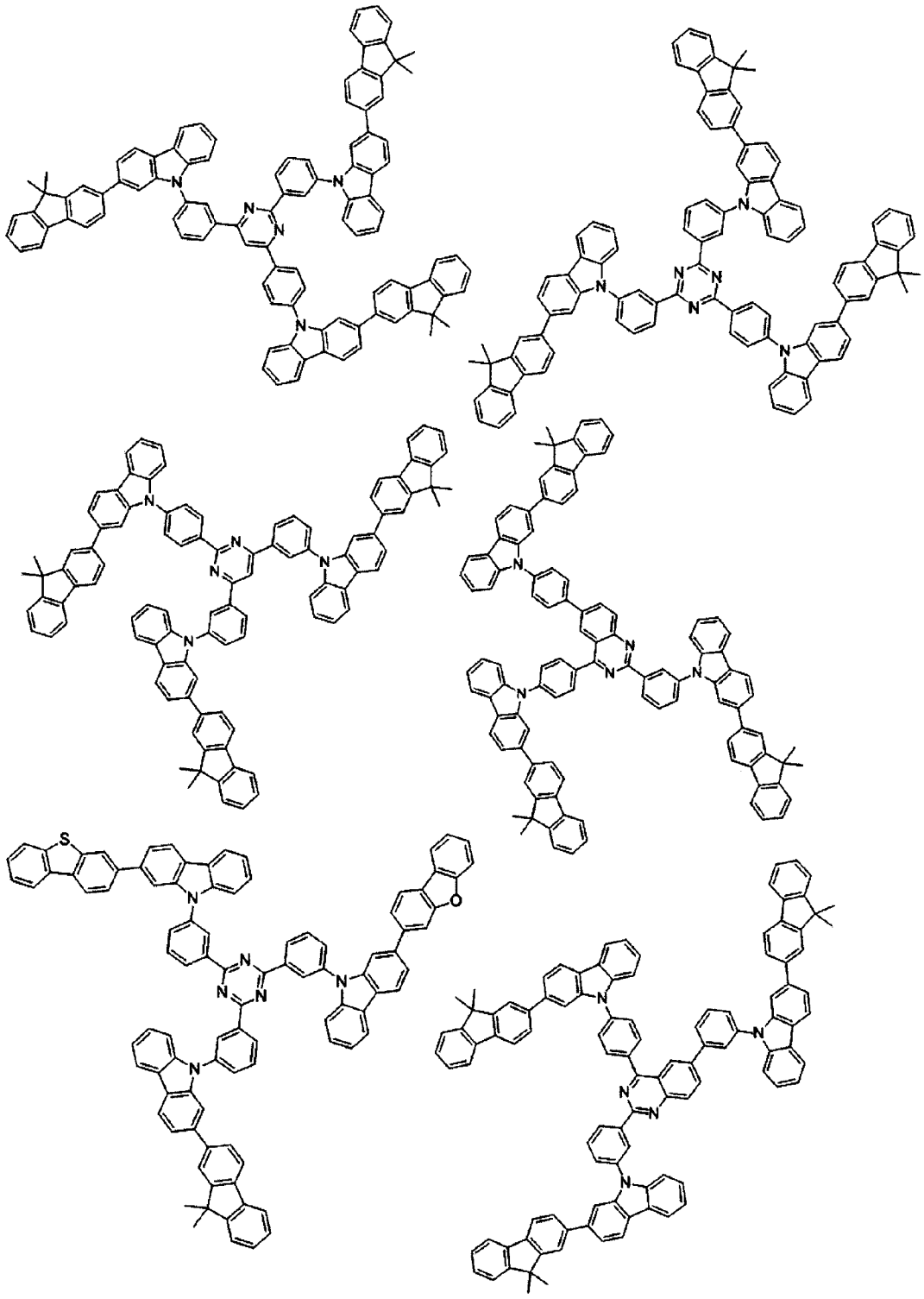


[0624] [化477]



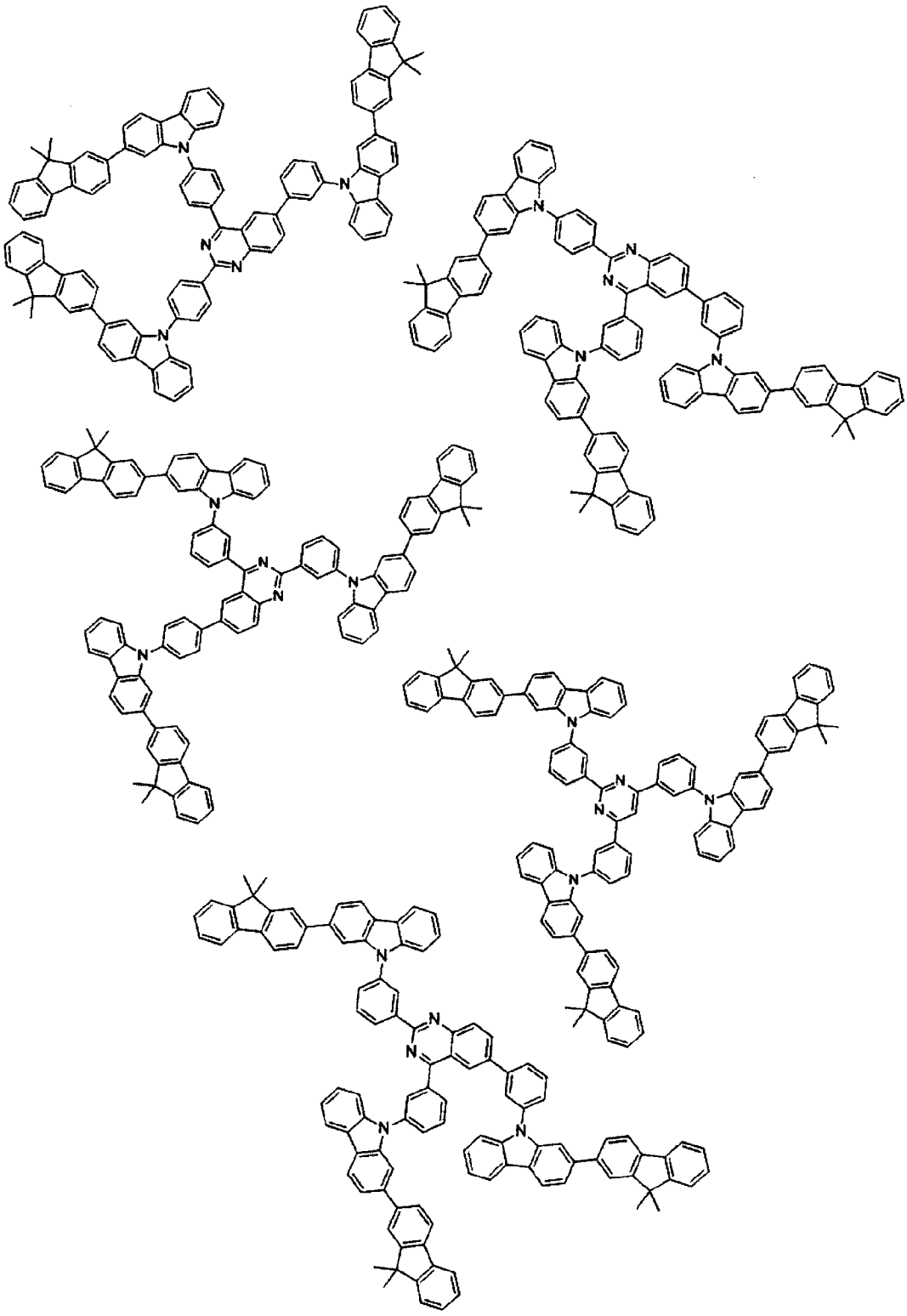
[0625]

[化478]



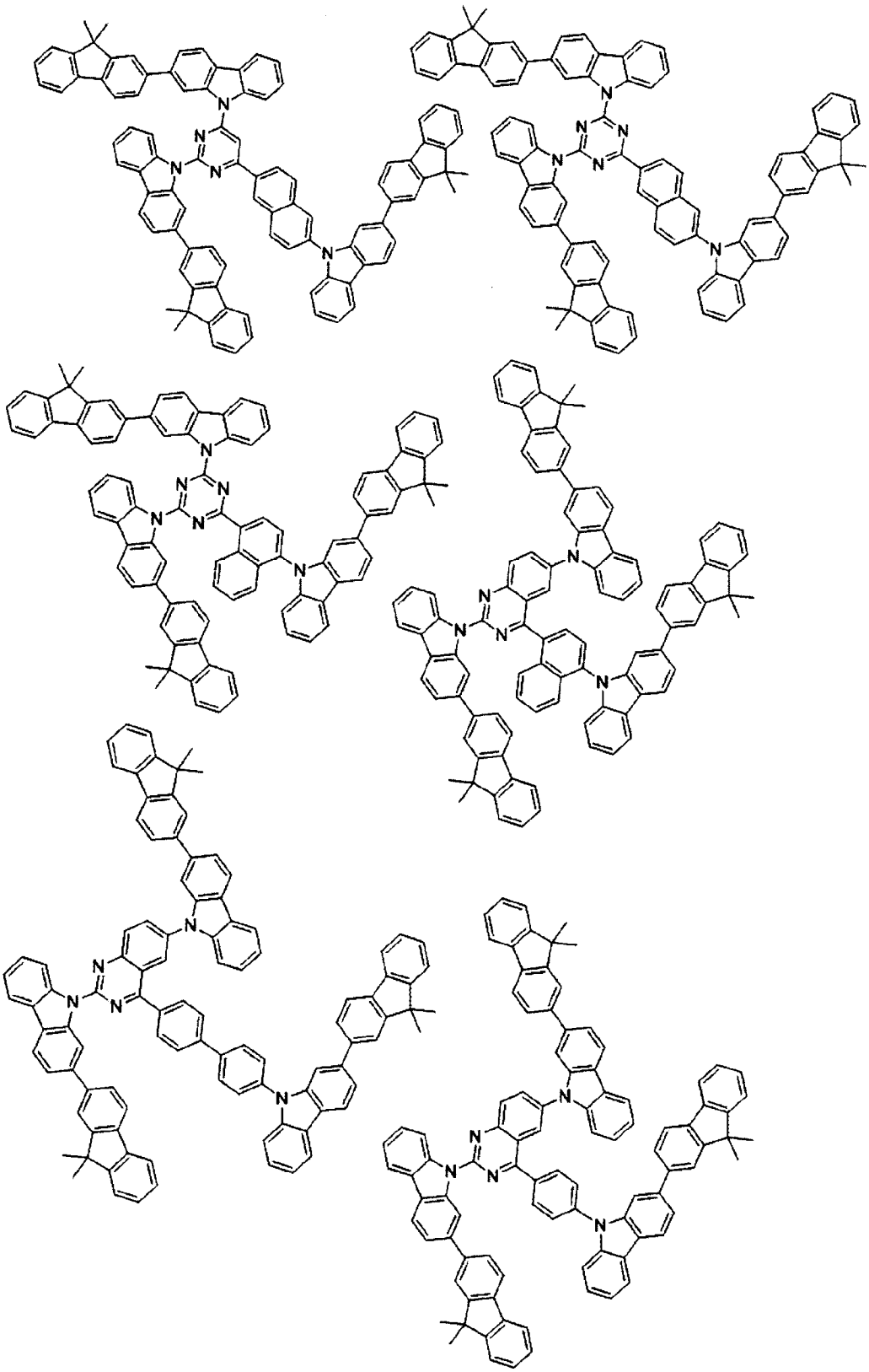
[0626]

[化479]



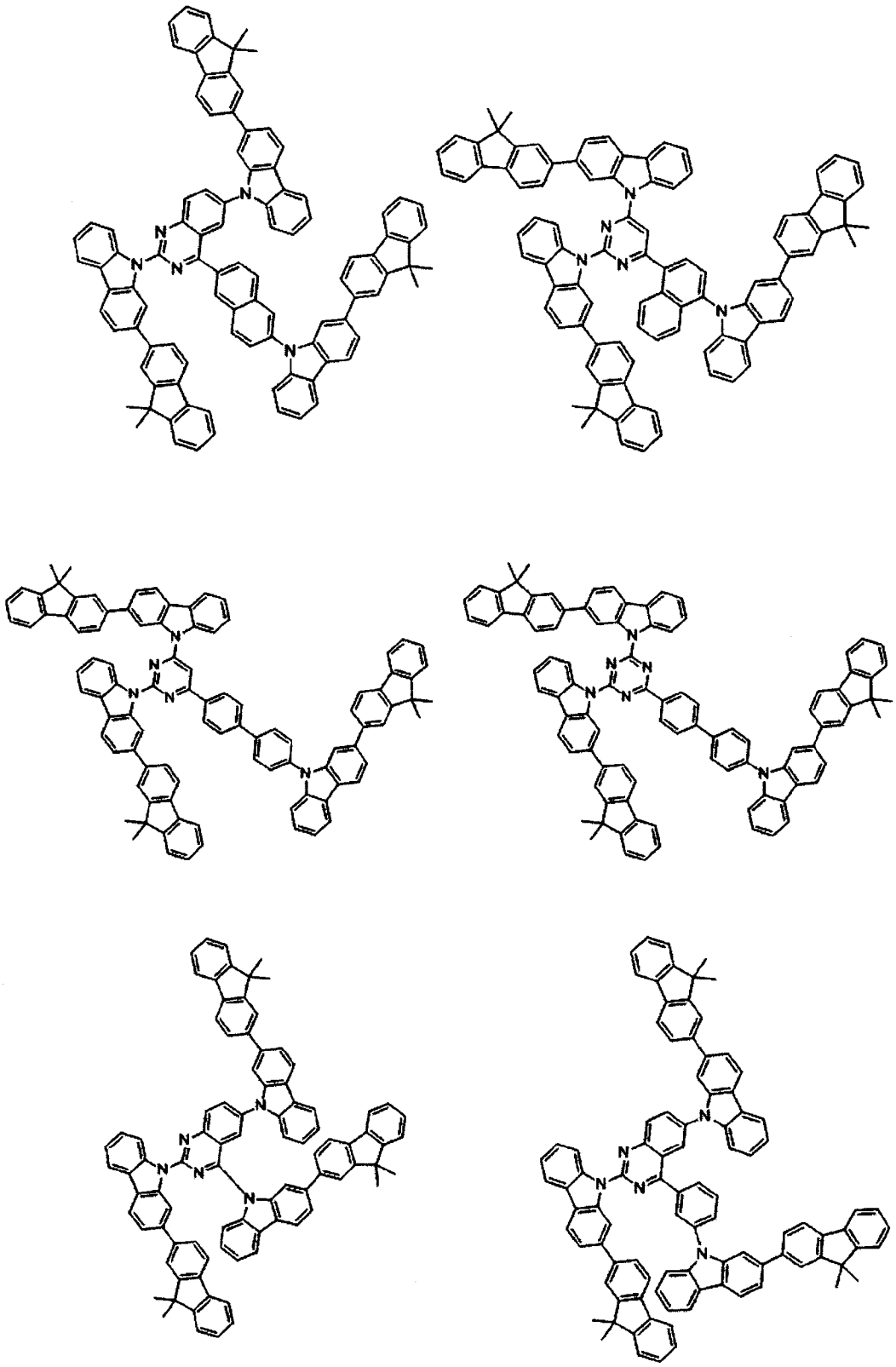
[0627]

[化480]



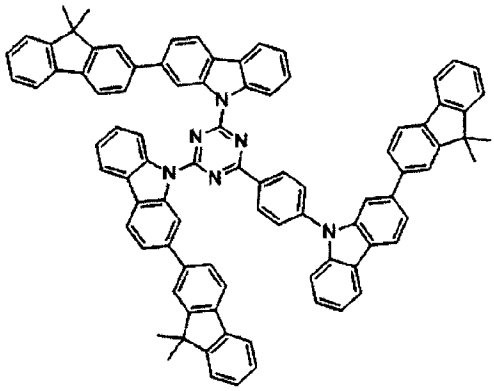
[0628]

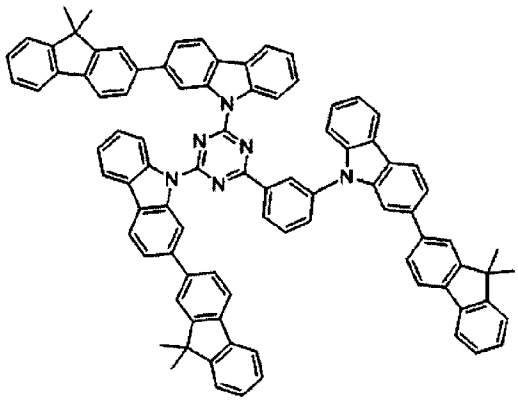
[化481]

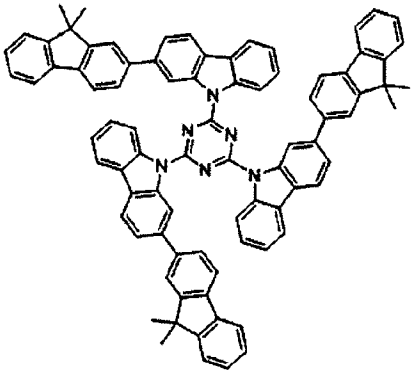


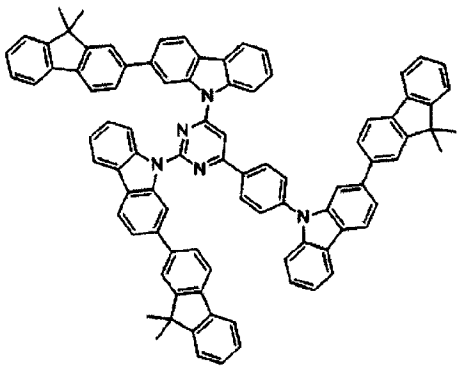
[0629]

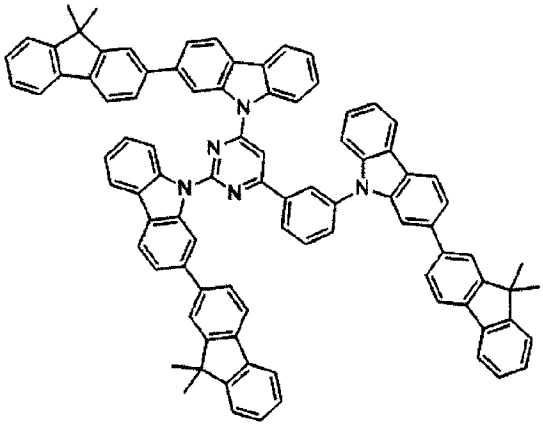
[化482]

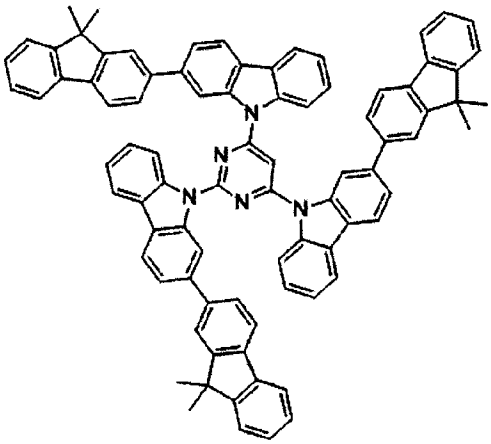






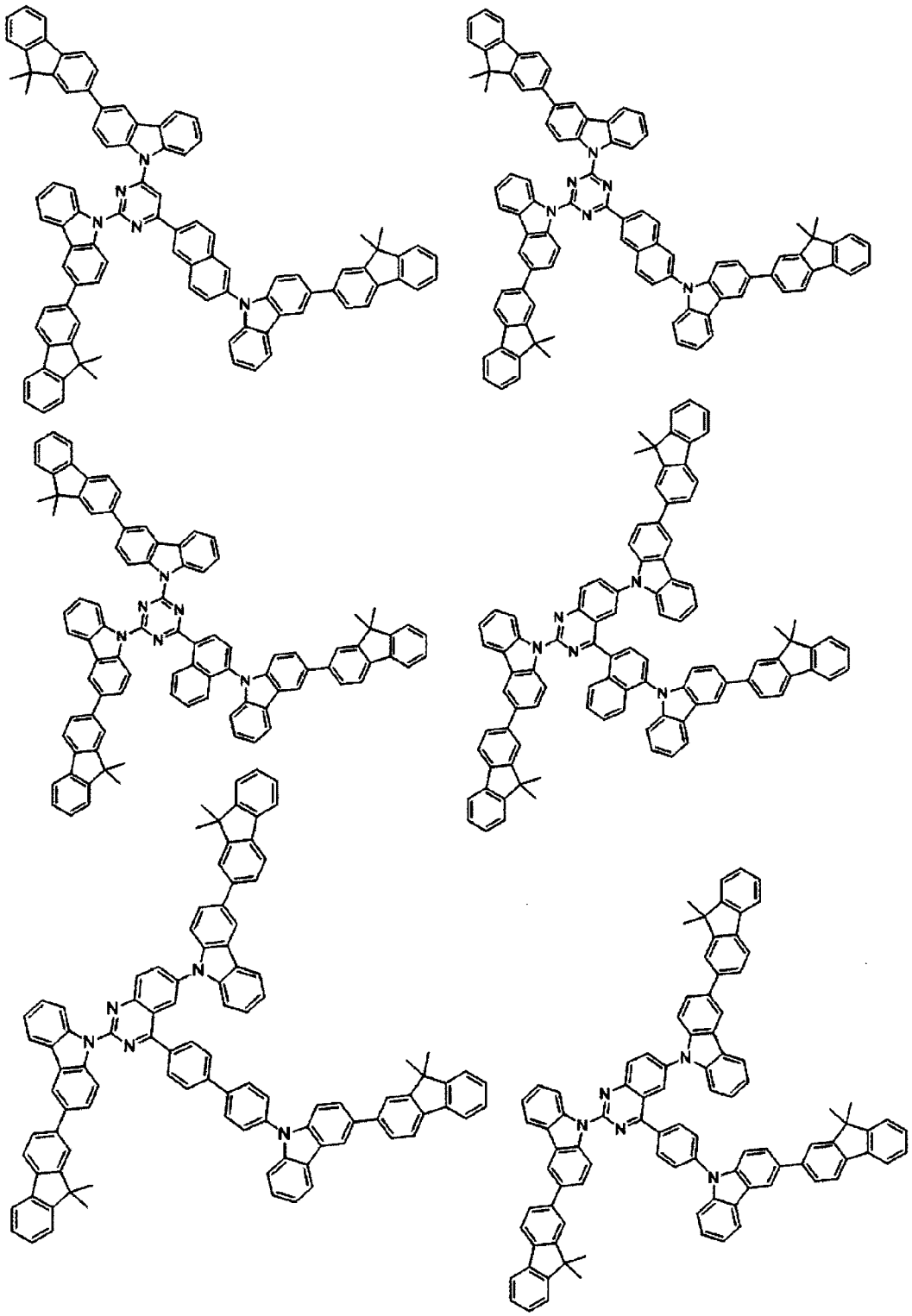






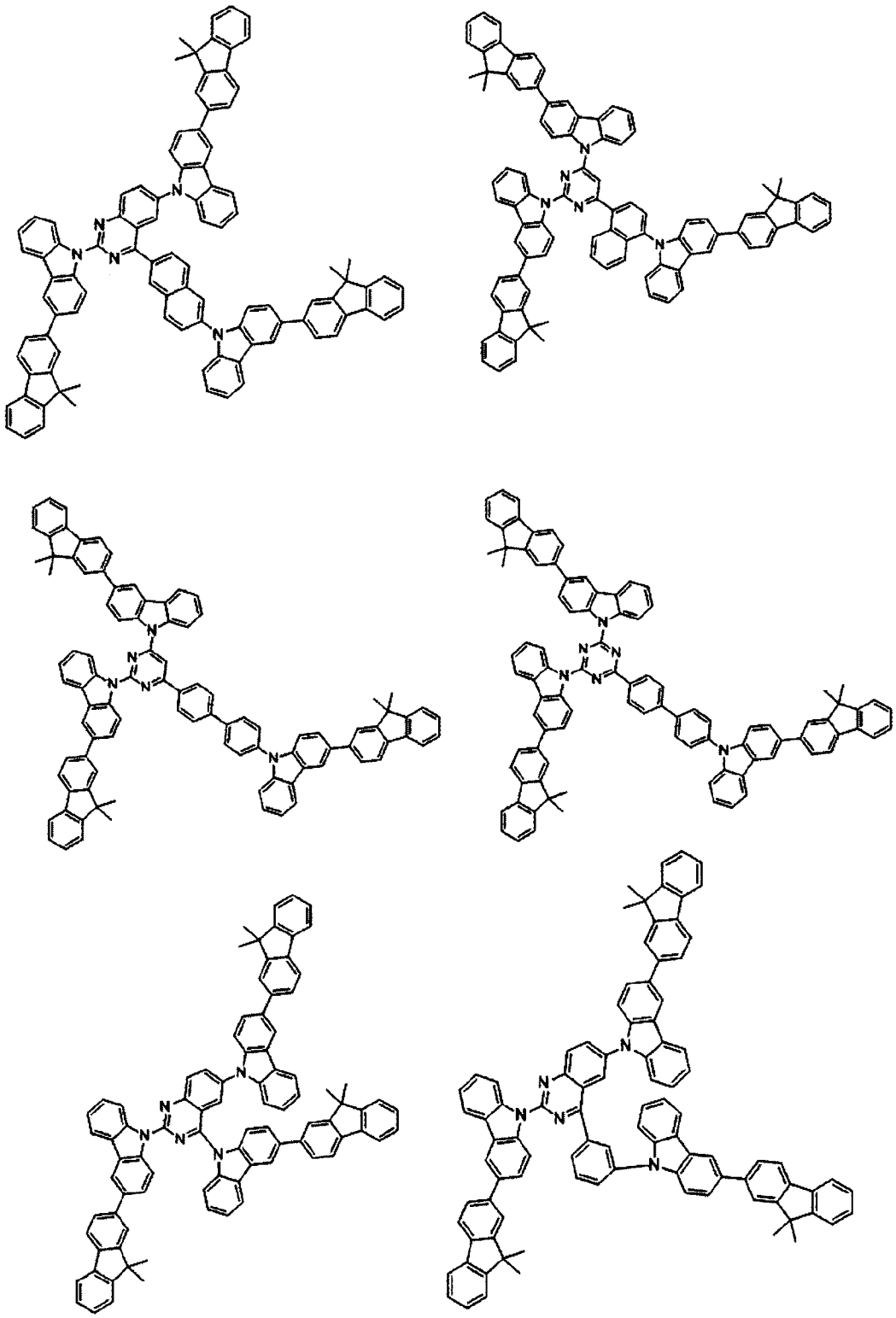
[0630]

[化483]



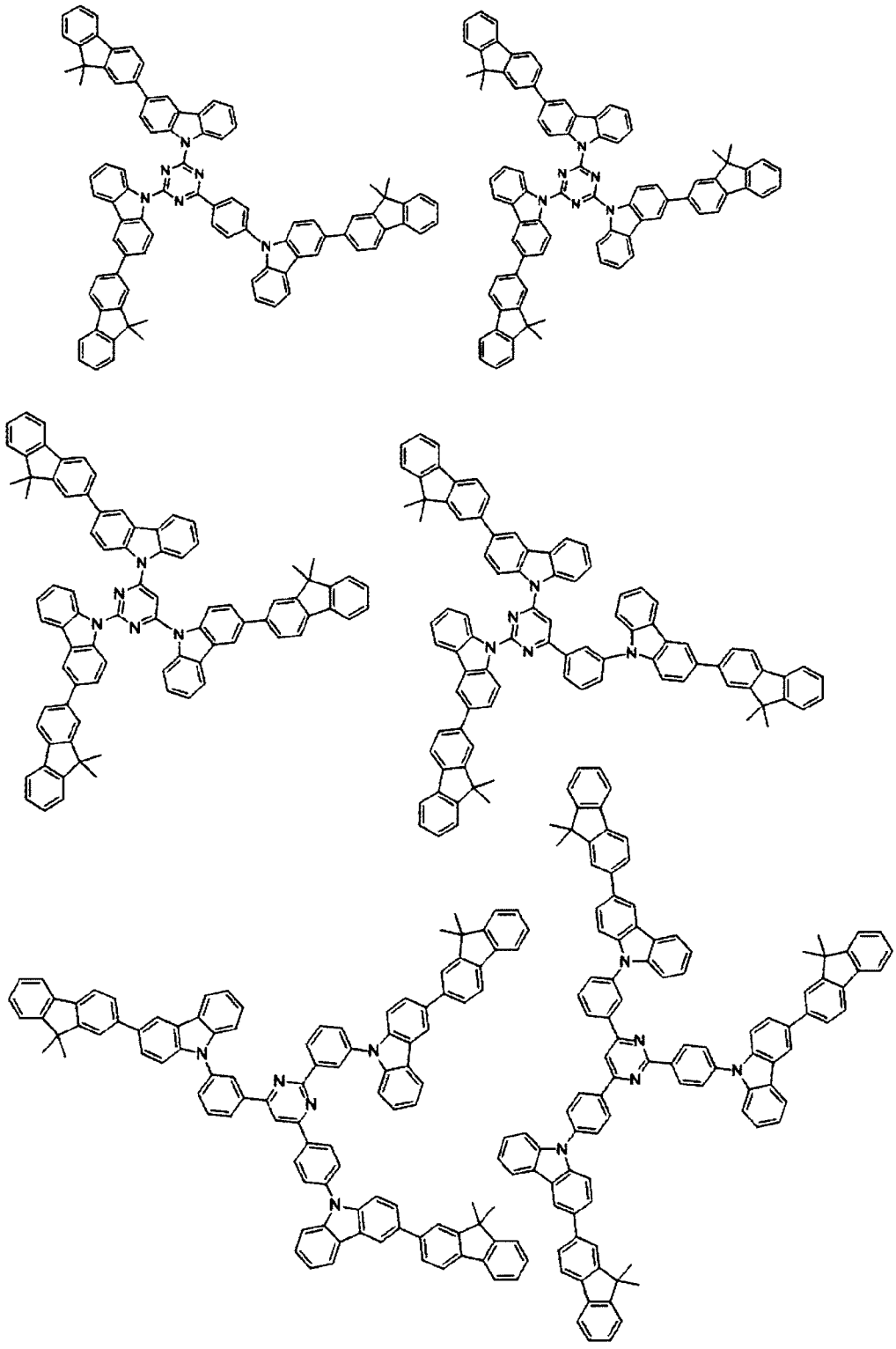
[0631]

[化484]



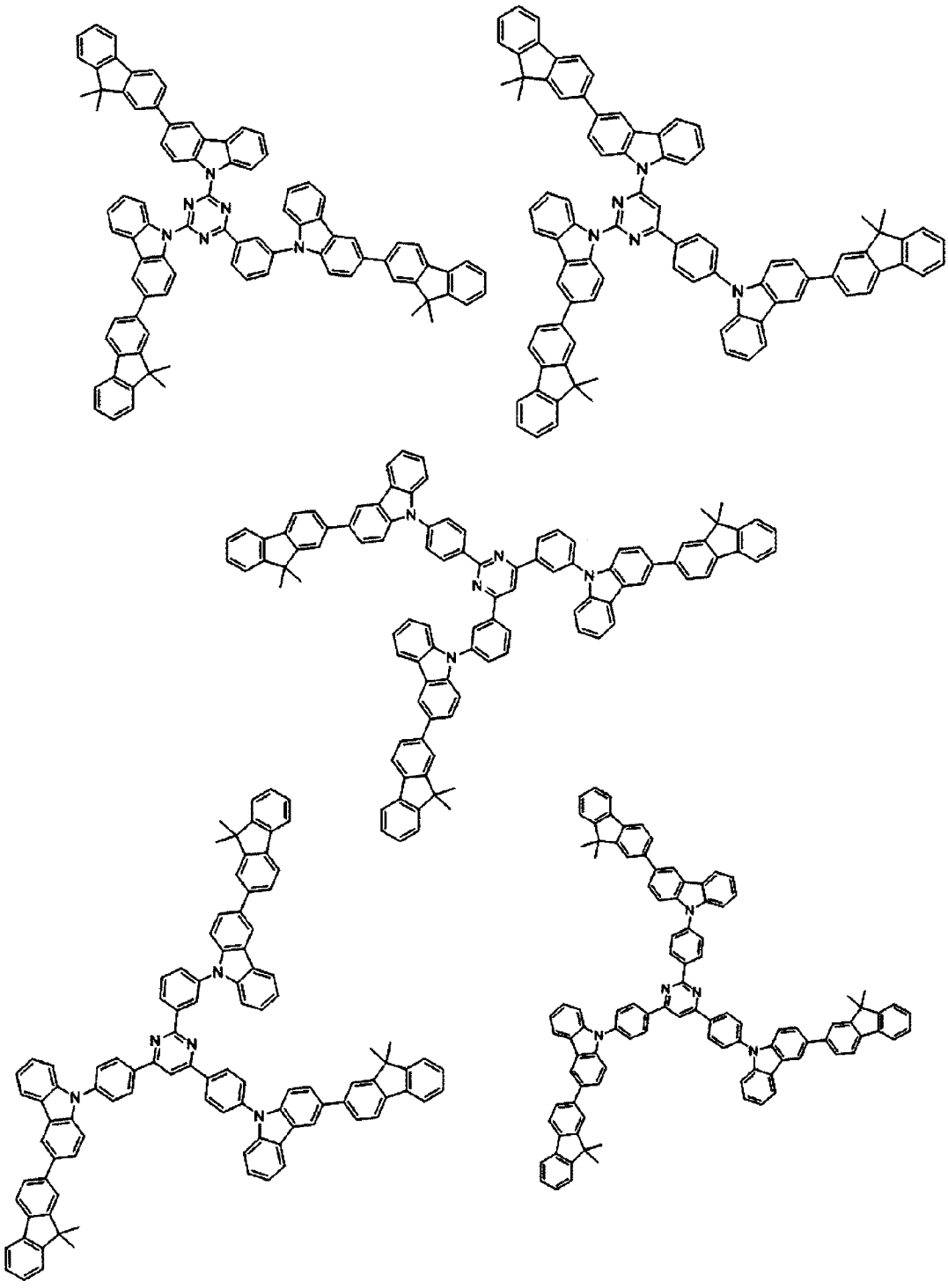
[0632]

[化485]



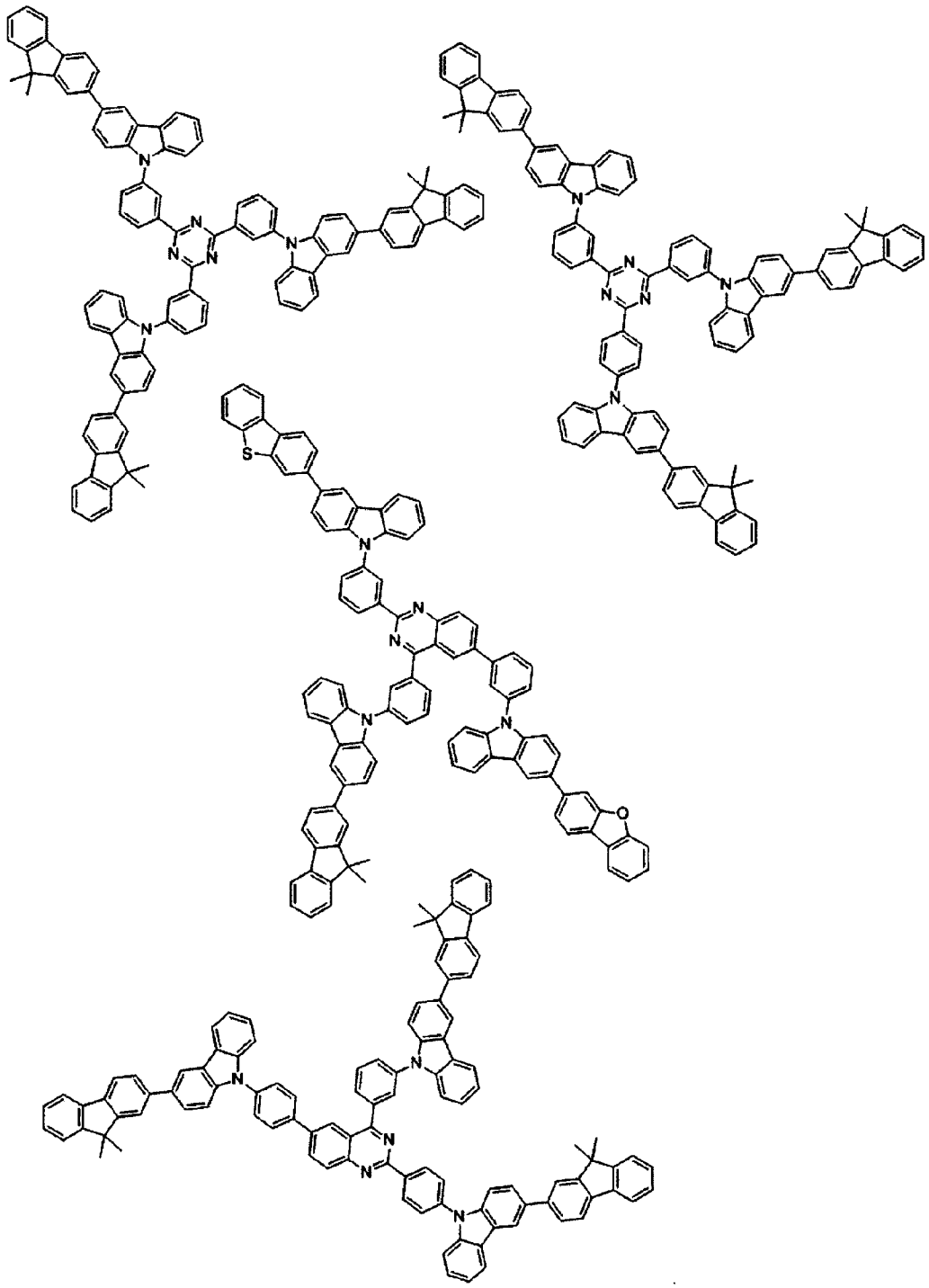
[0633]

[化486]



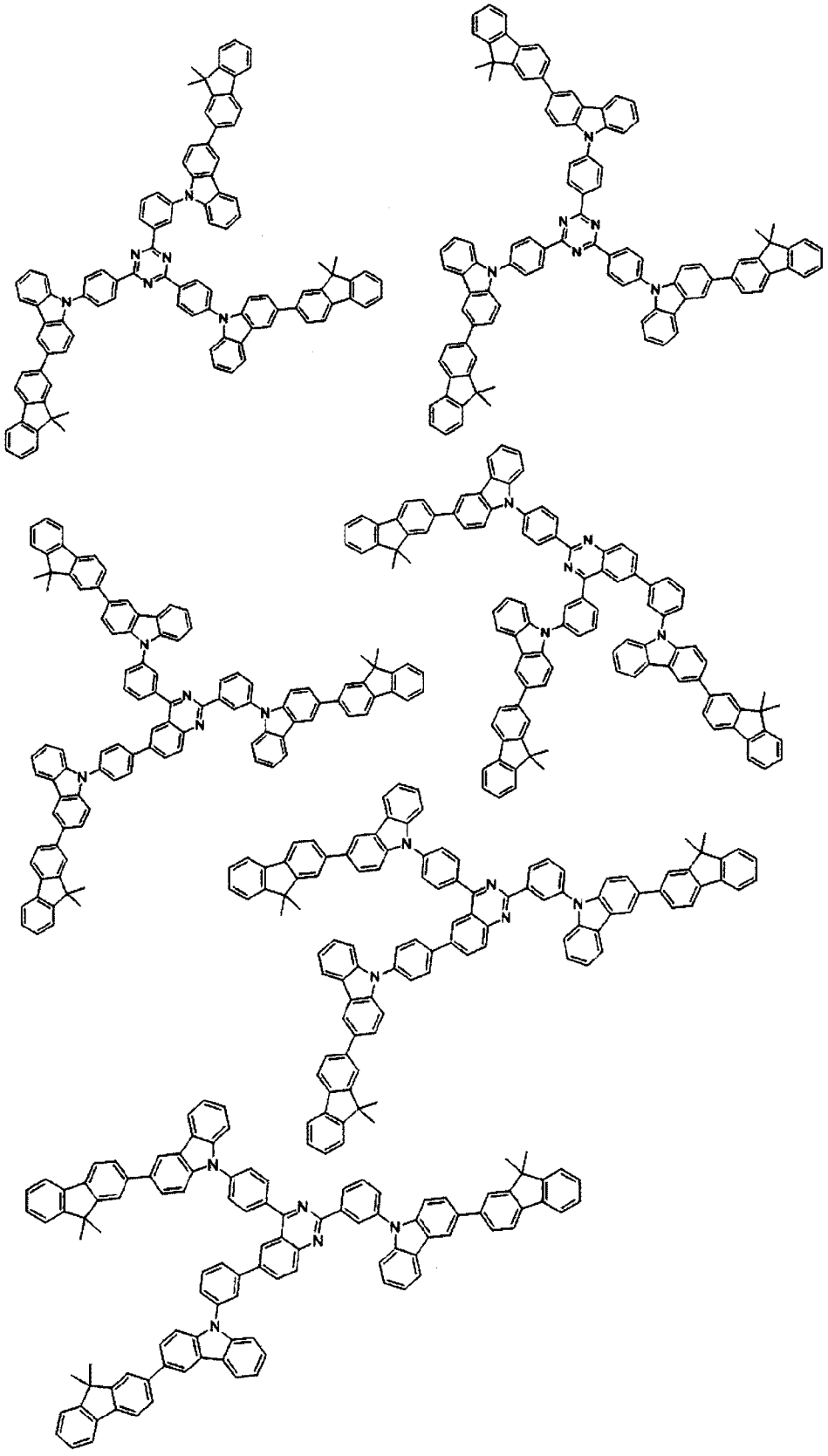
[0634]

[化487]

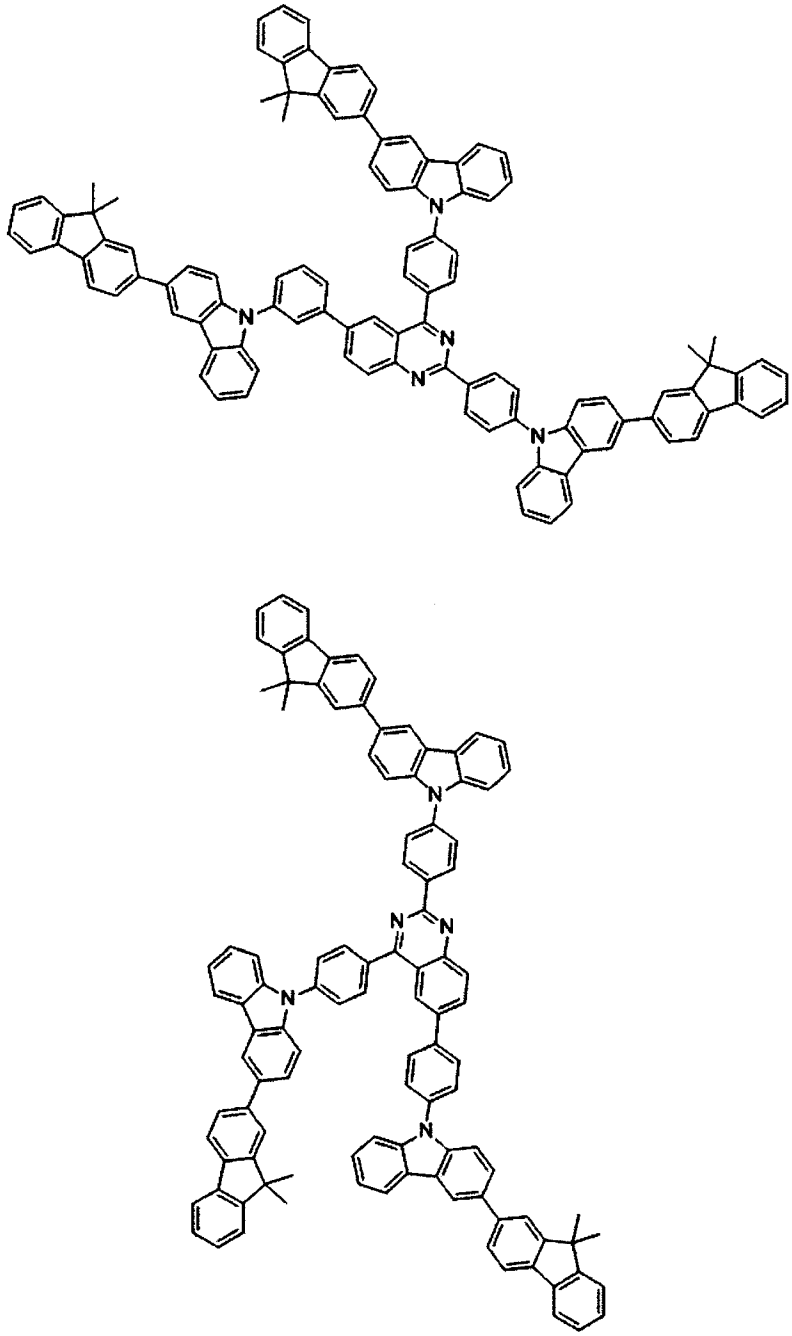


[0635]

[化488]

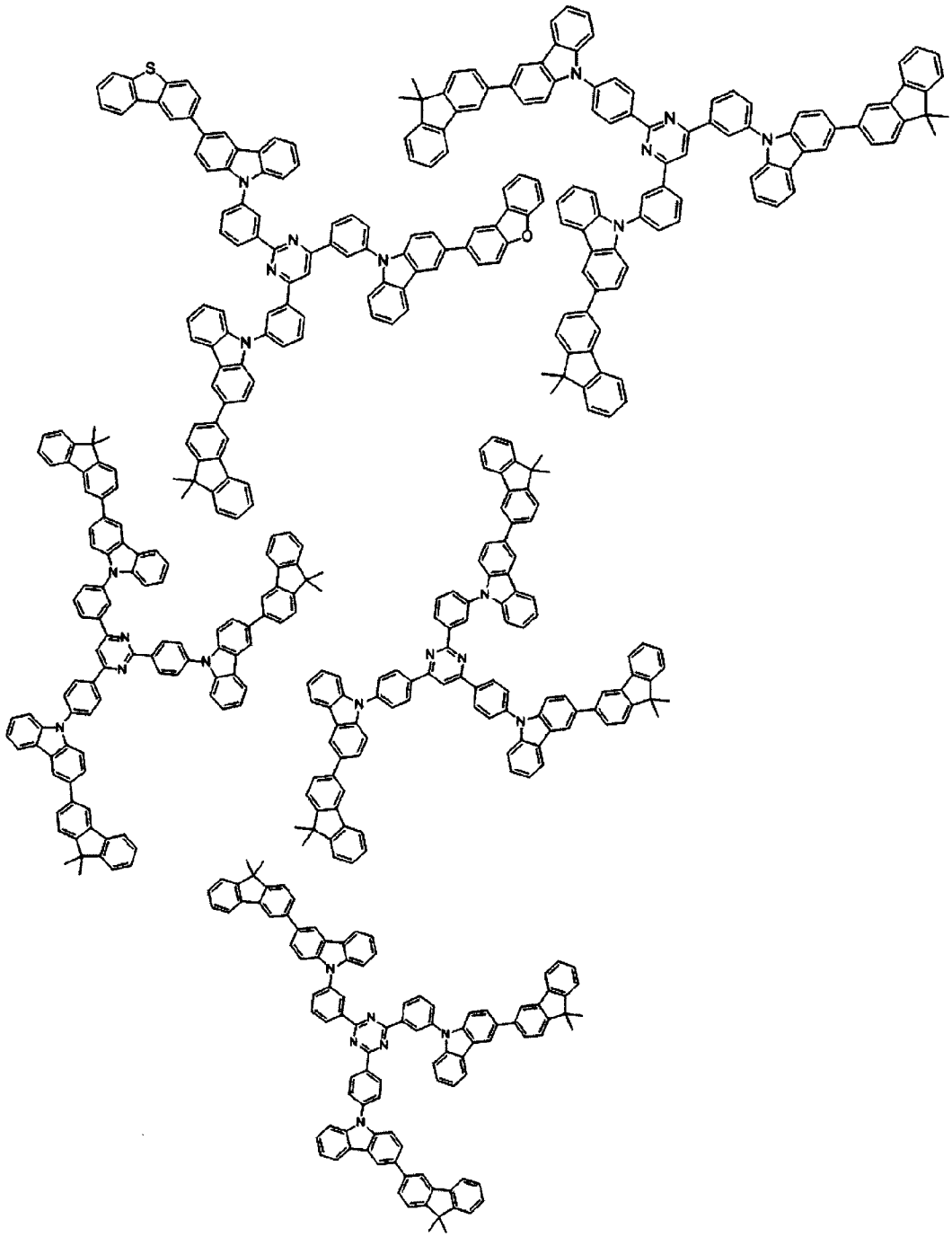


[0636] [化489]



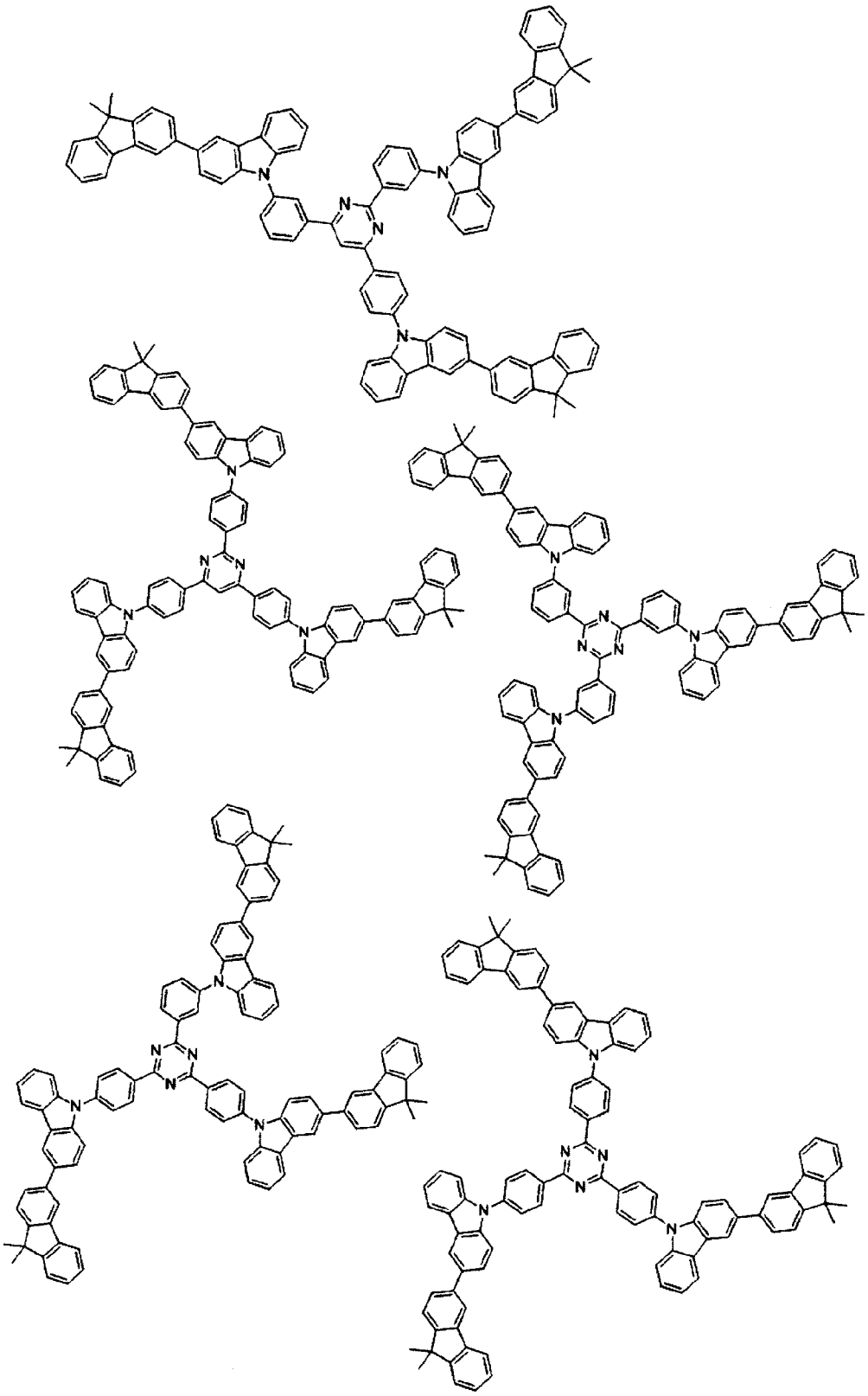
[0637]

[化490]



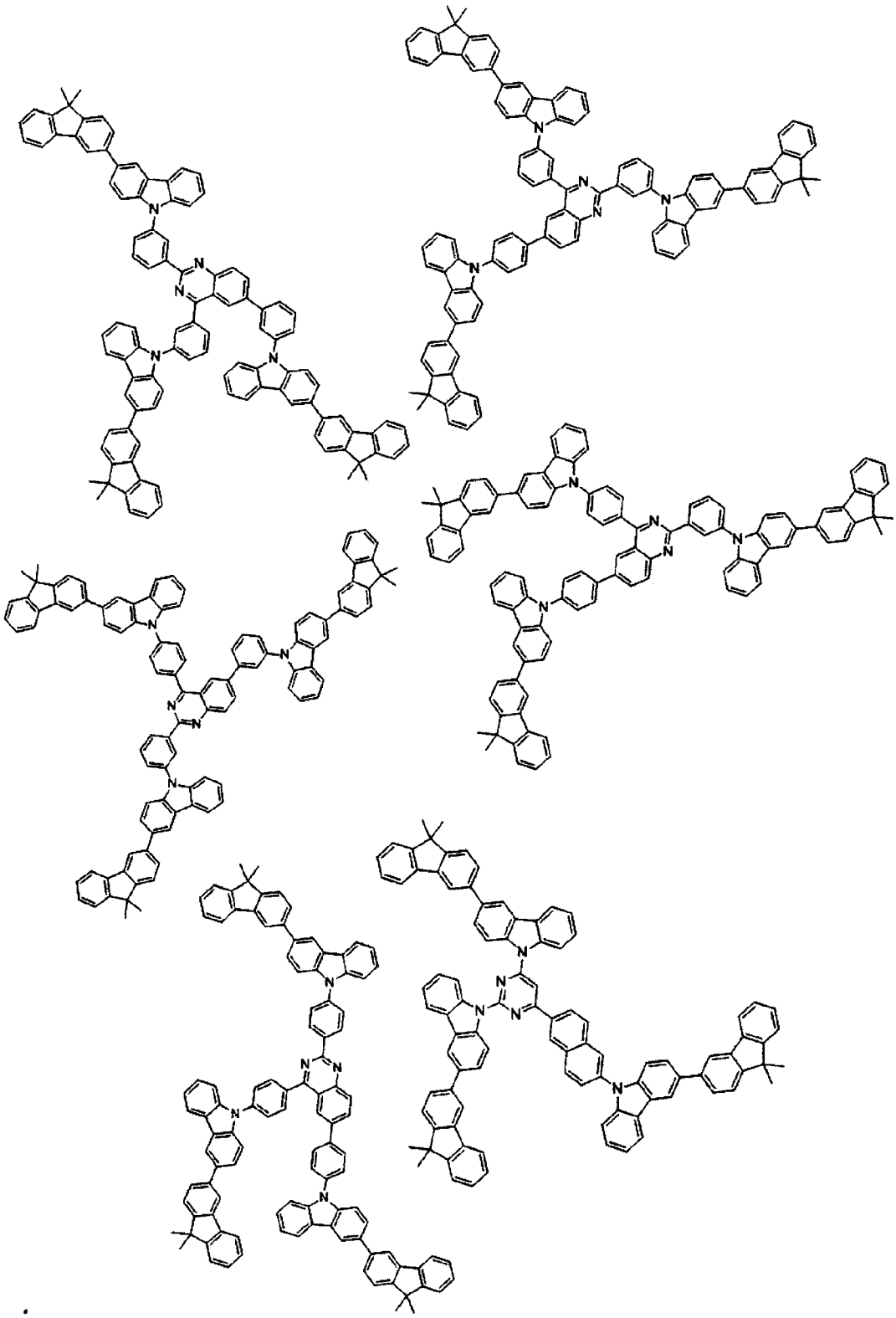
[0638]

[化491]



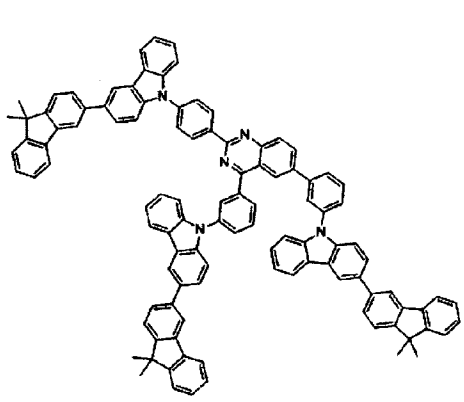
[0639]

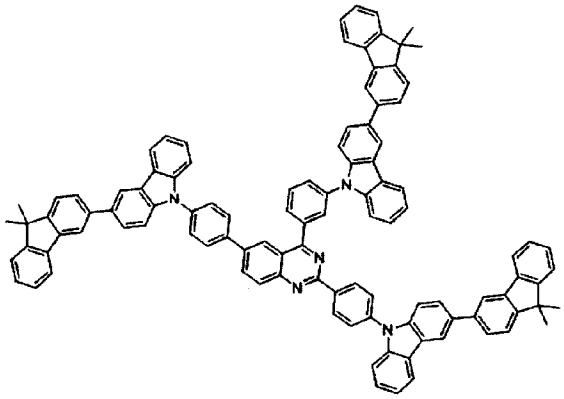
[化492]

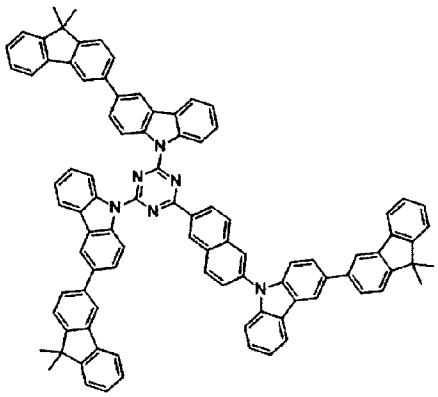


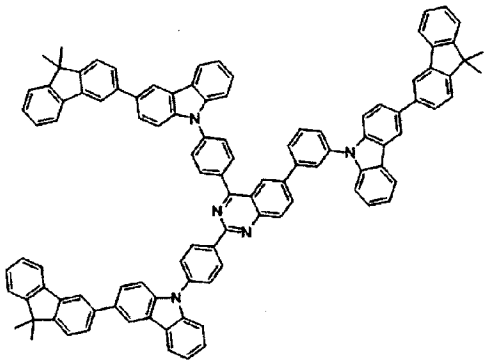
[0640]

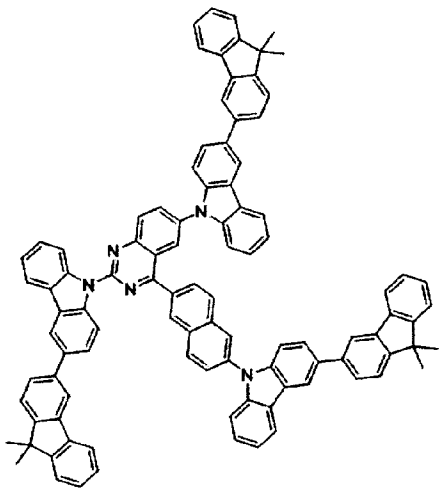
[化493]





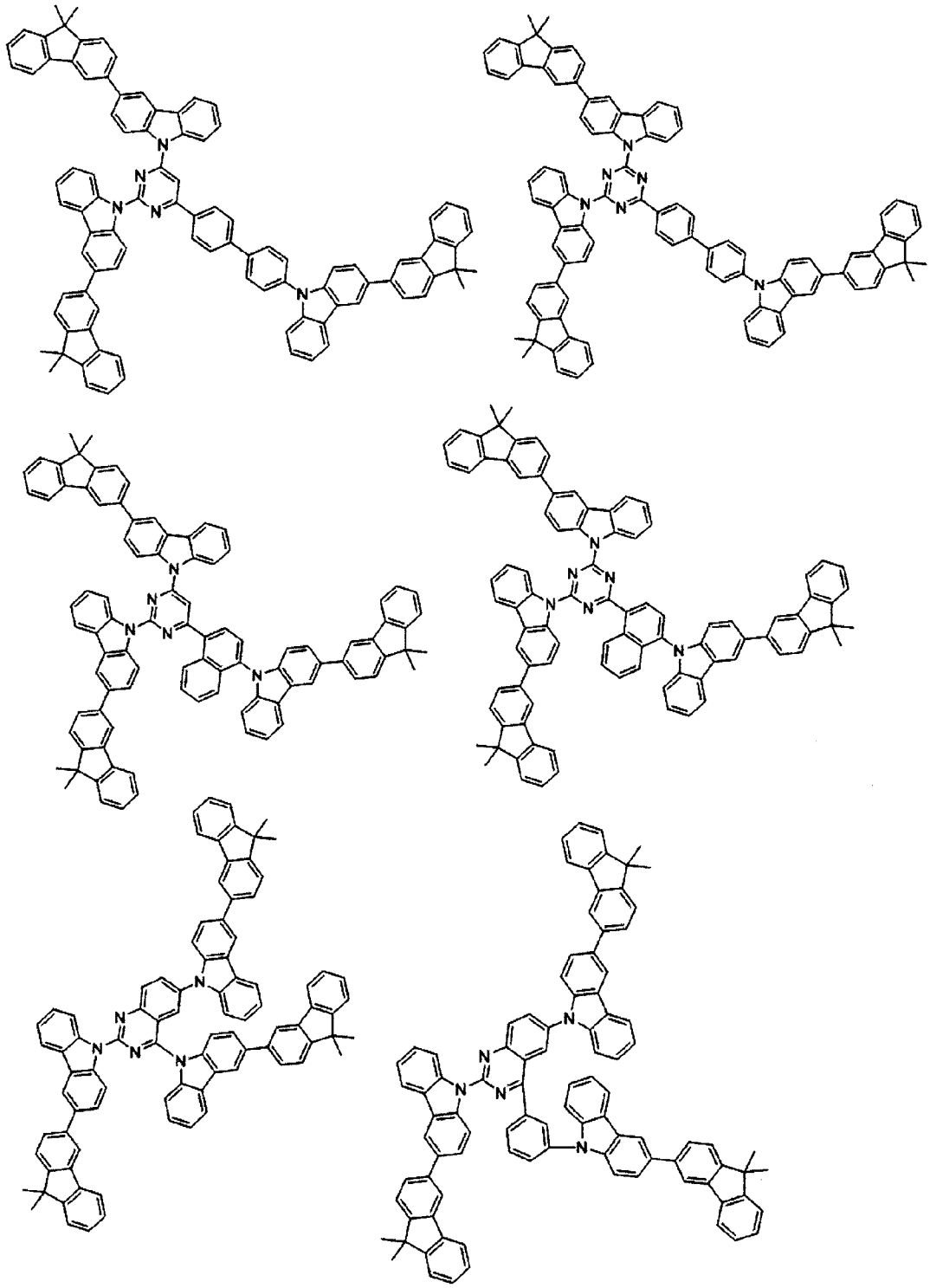






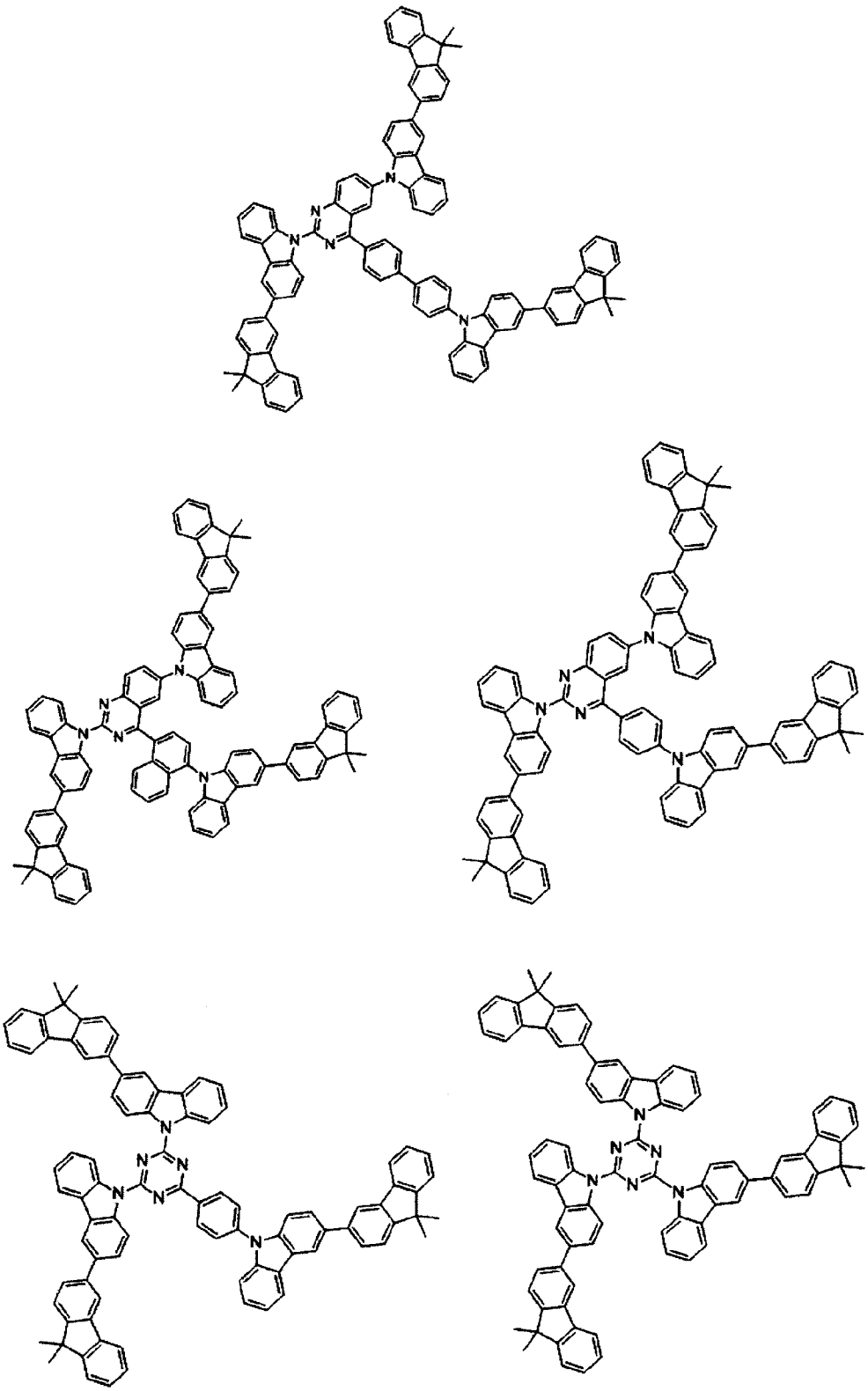
[0641]

[化494]



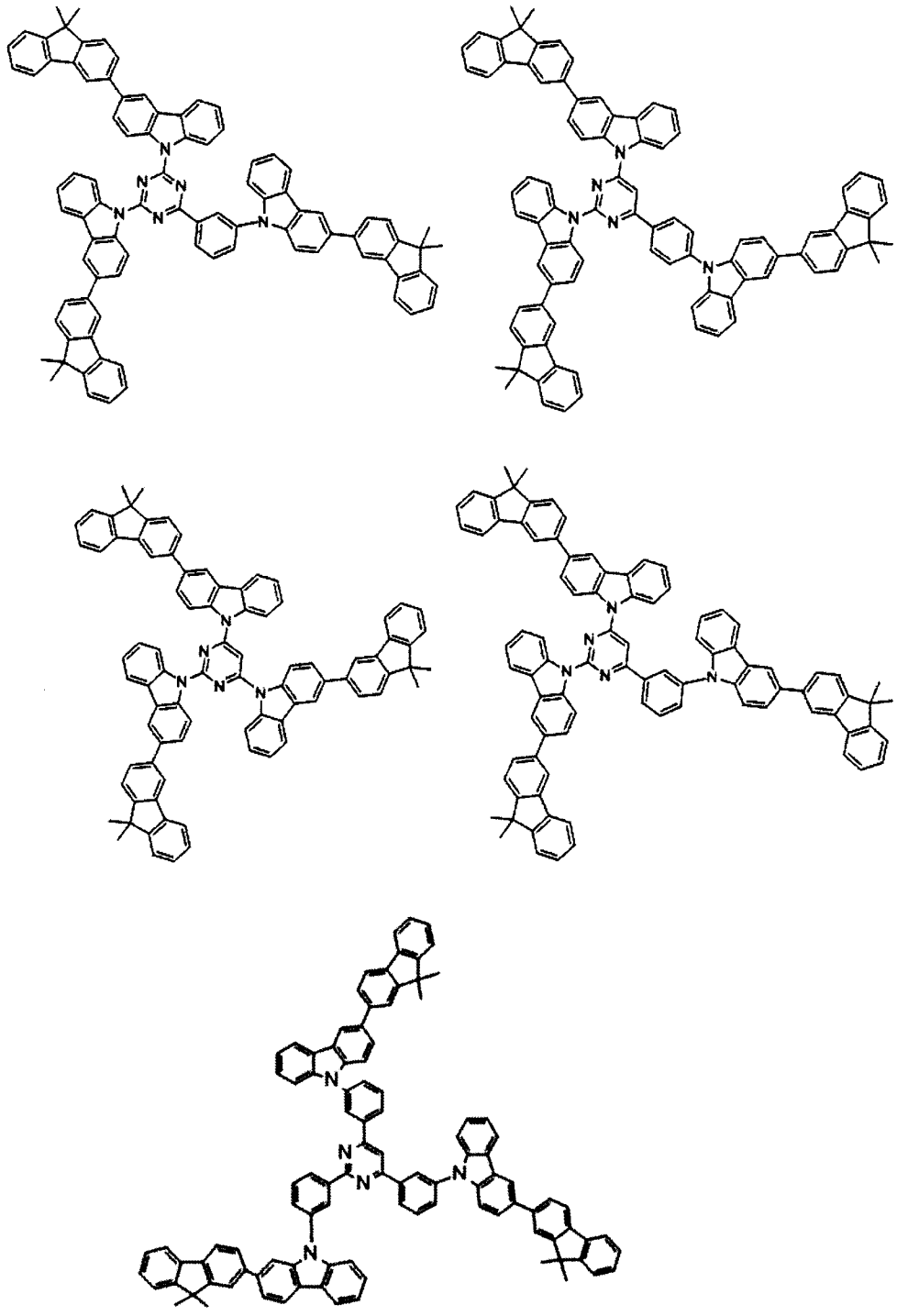
[0642]

[化495]



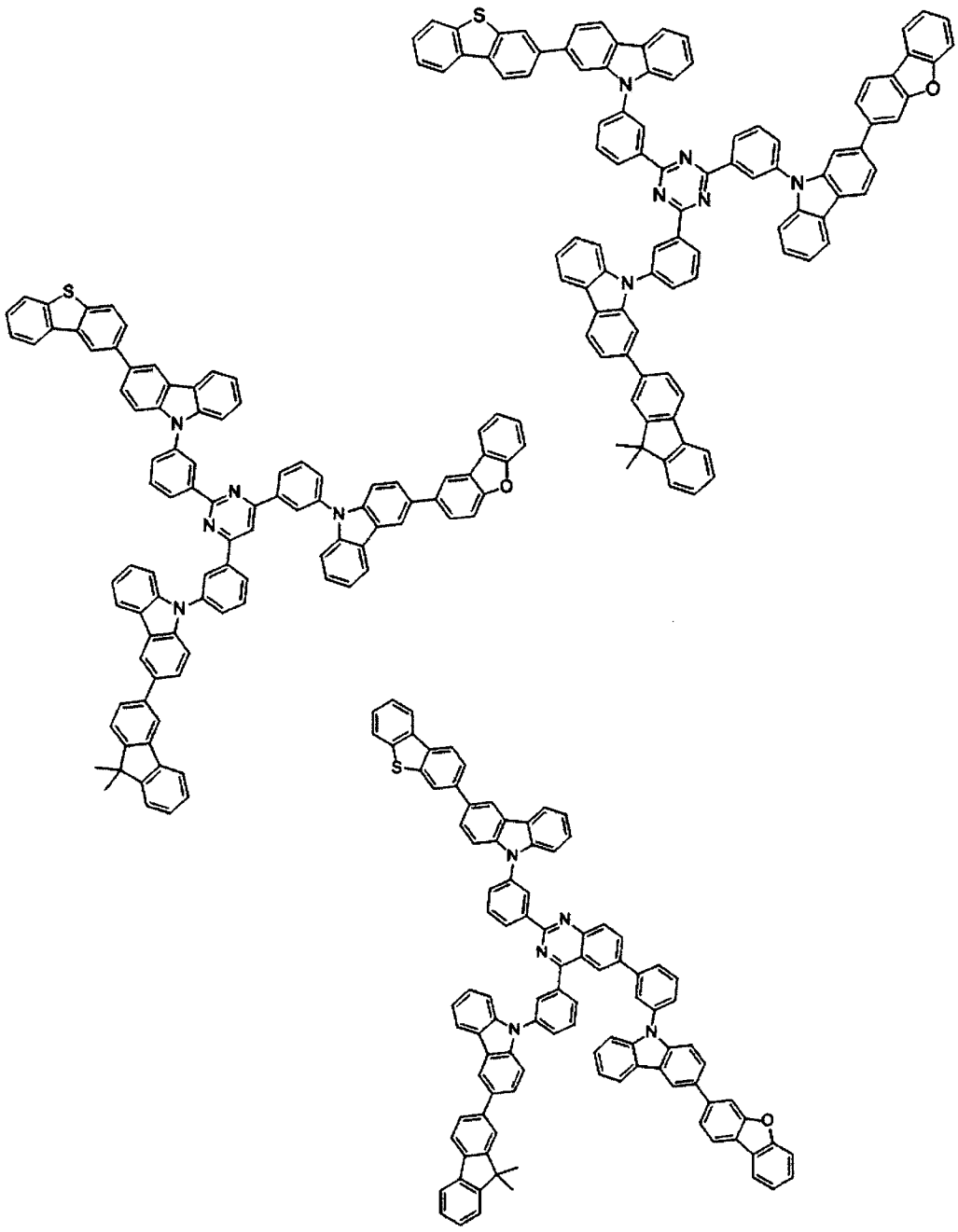
[0643]

[化496]



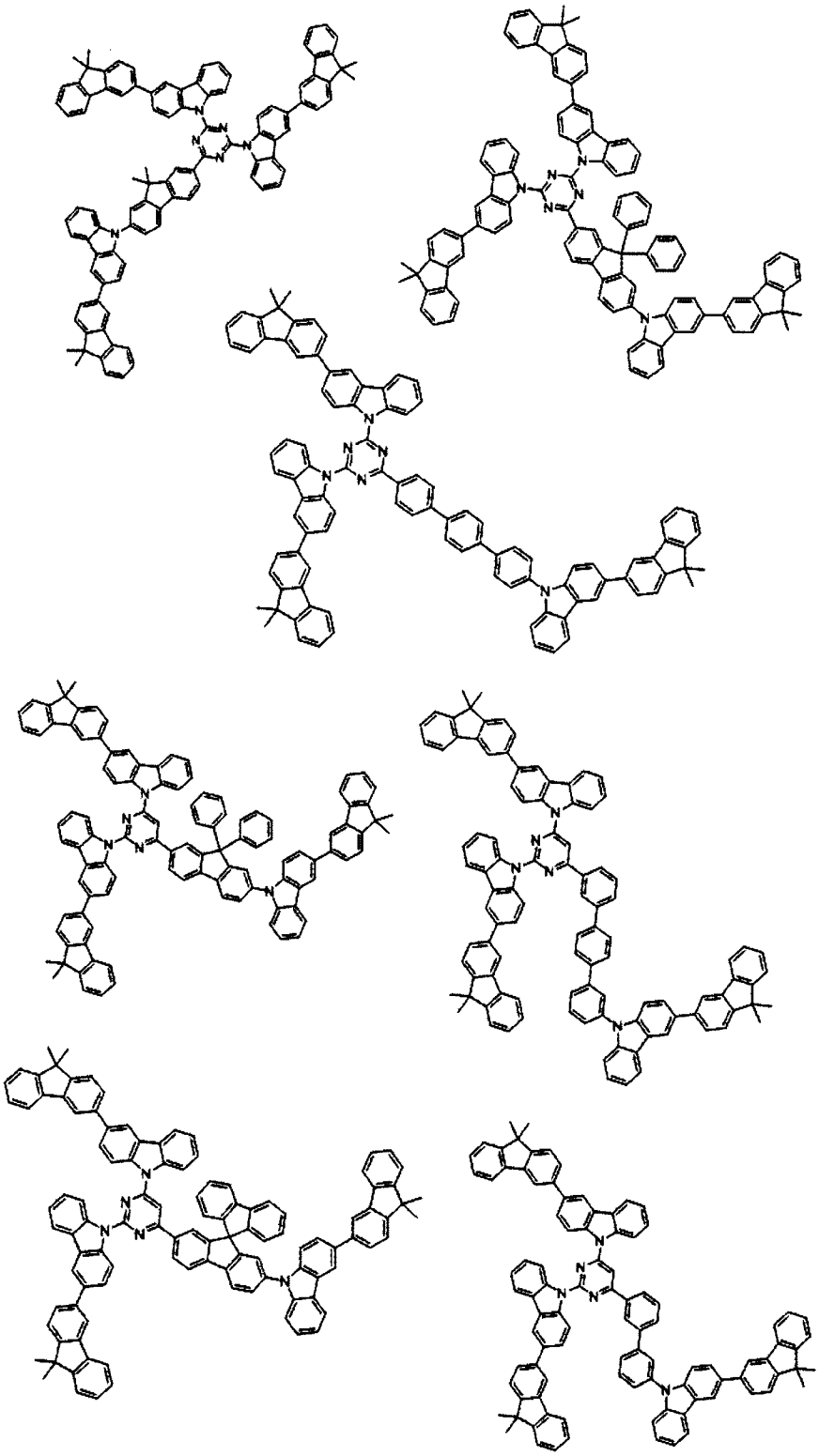
[0644]

[化497]



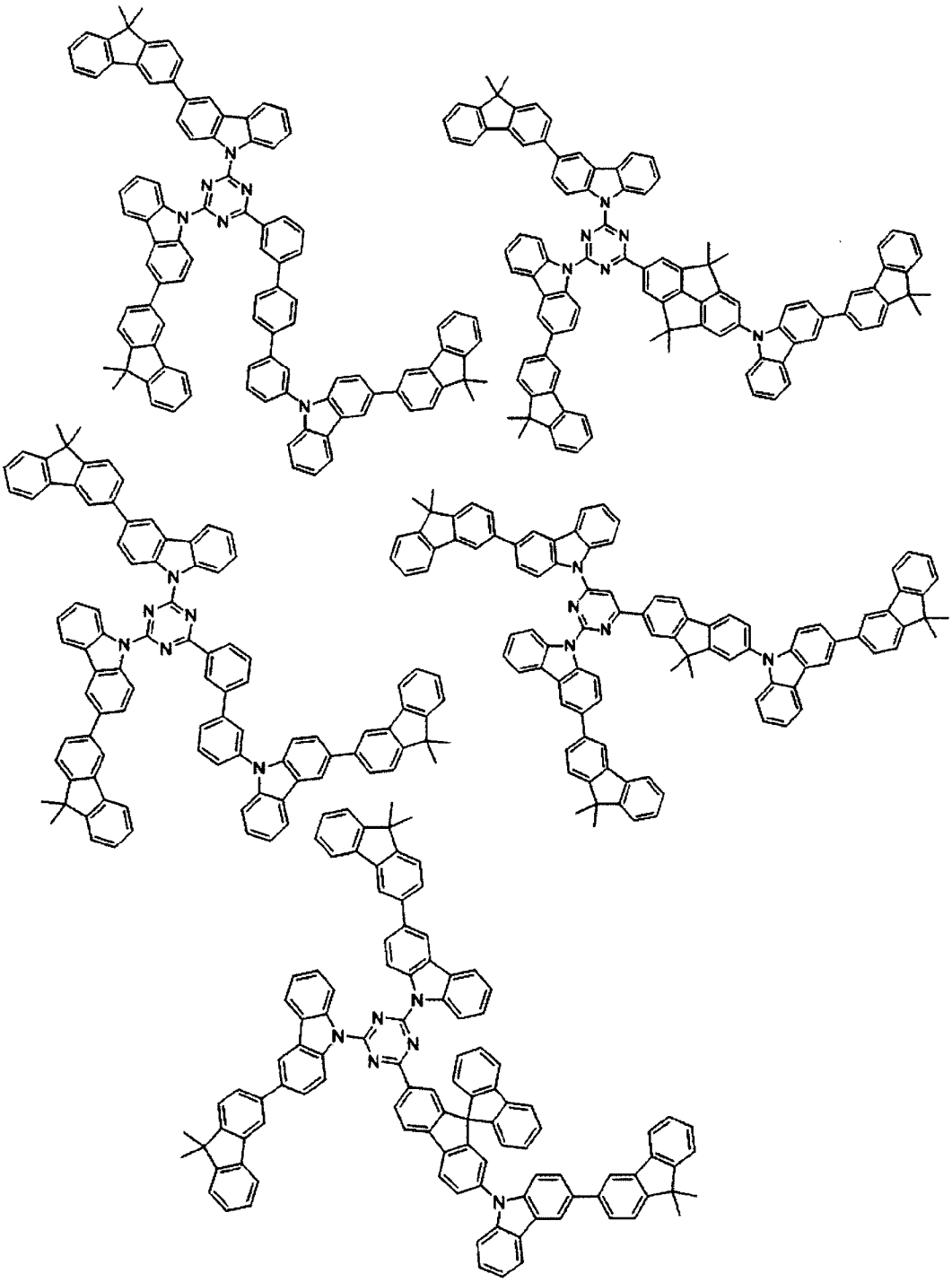
[0645]

[化498]



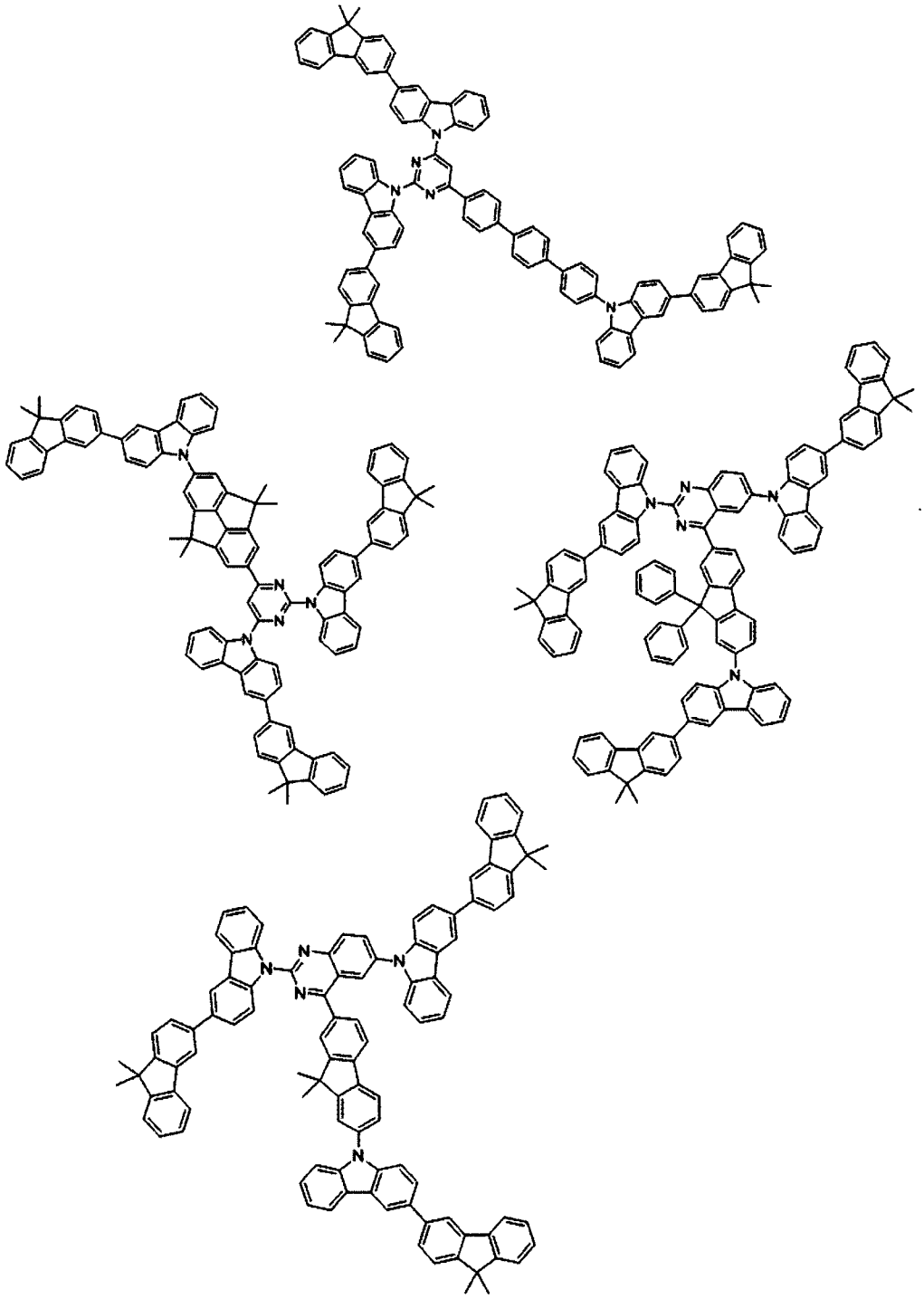
[0646]

[化499]



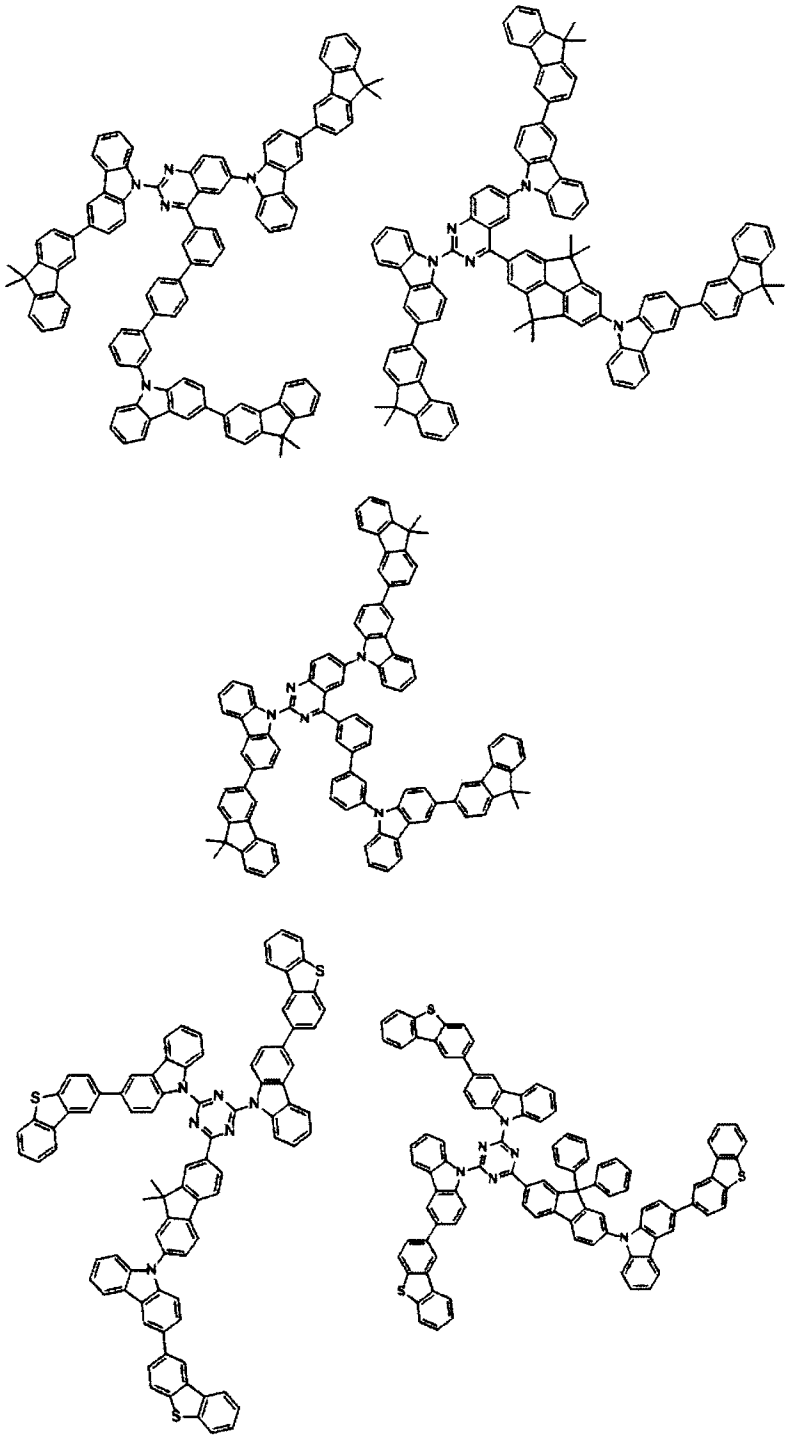
[0647]

[化500]



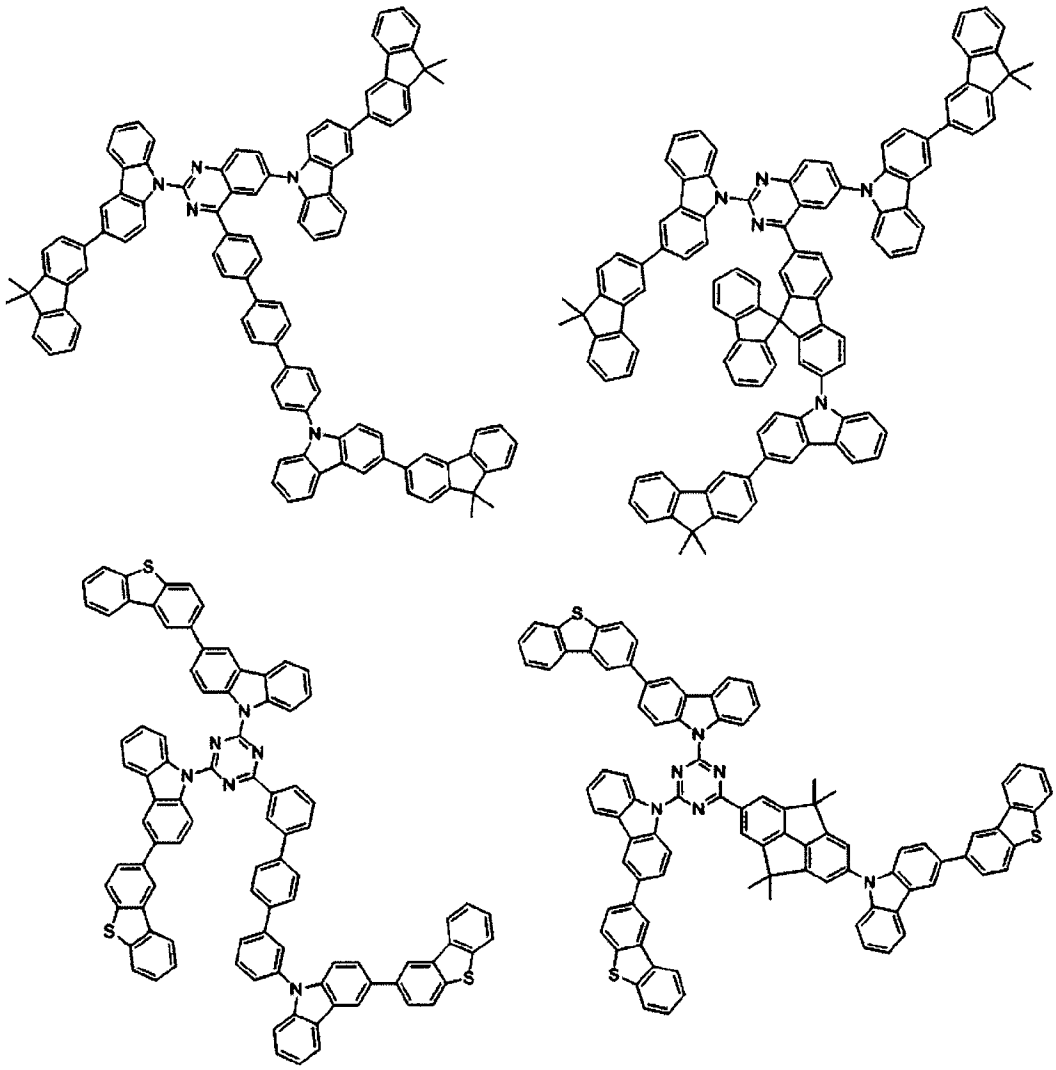
[0648]

[化501]



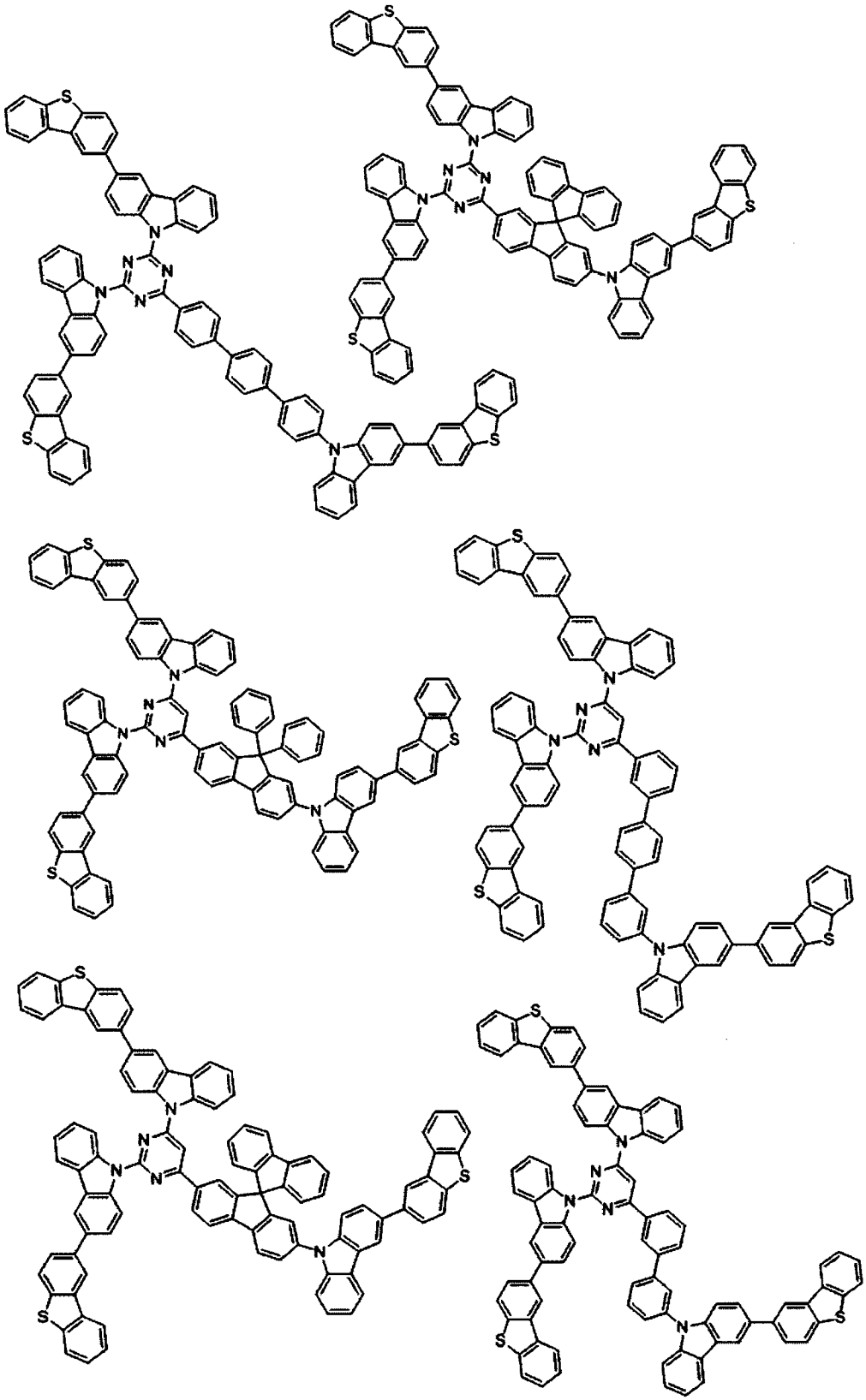
[0649]

[化502]

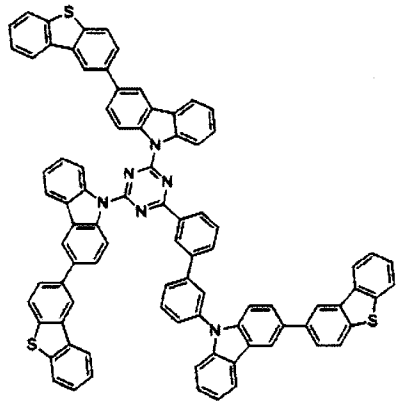


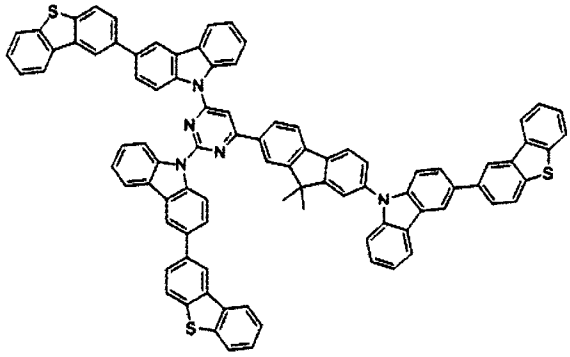
[0650]

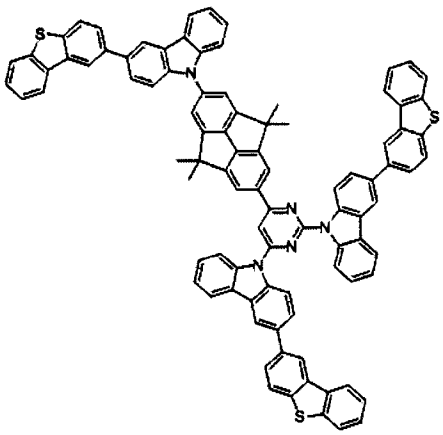
[化503]

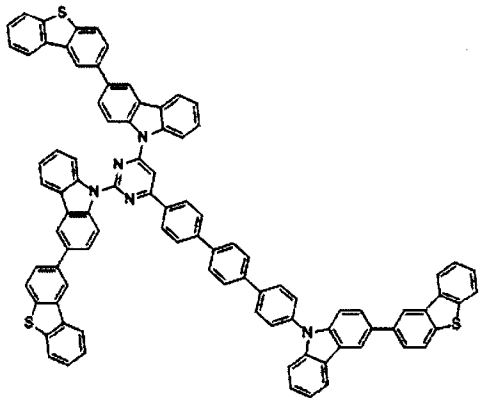


[0651] [化504]



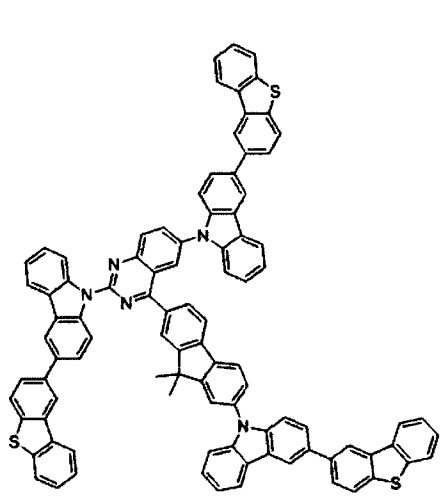


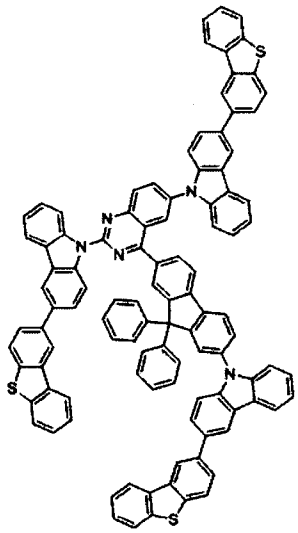


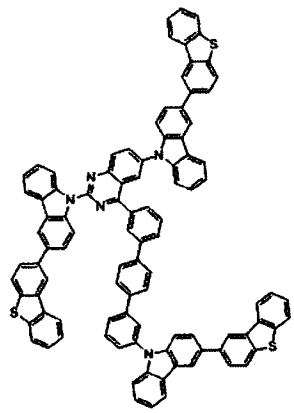


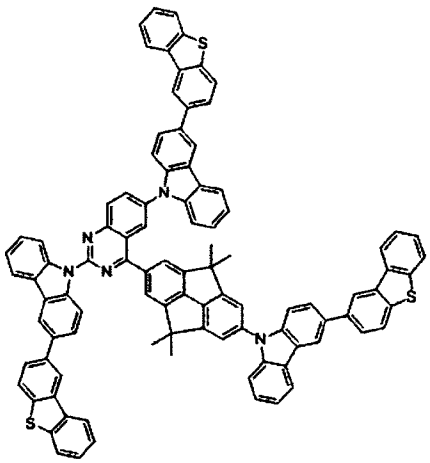
[0652]

[化505]



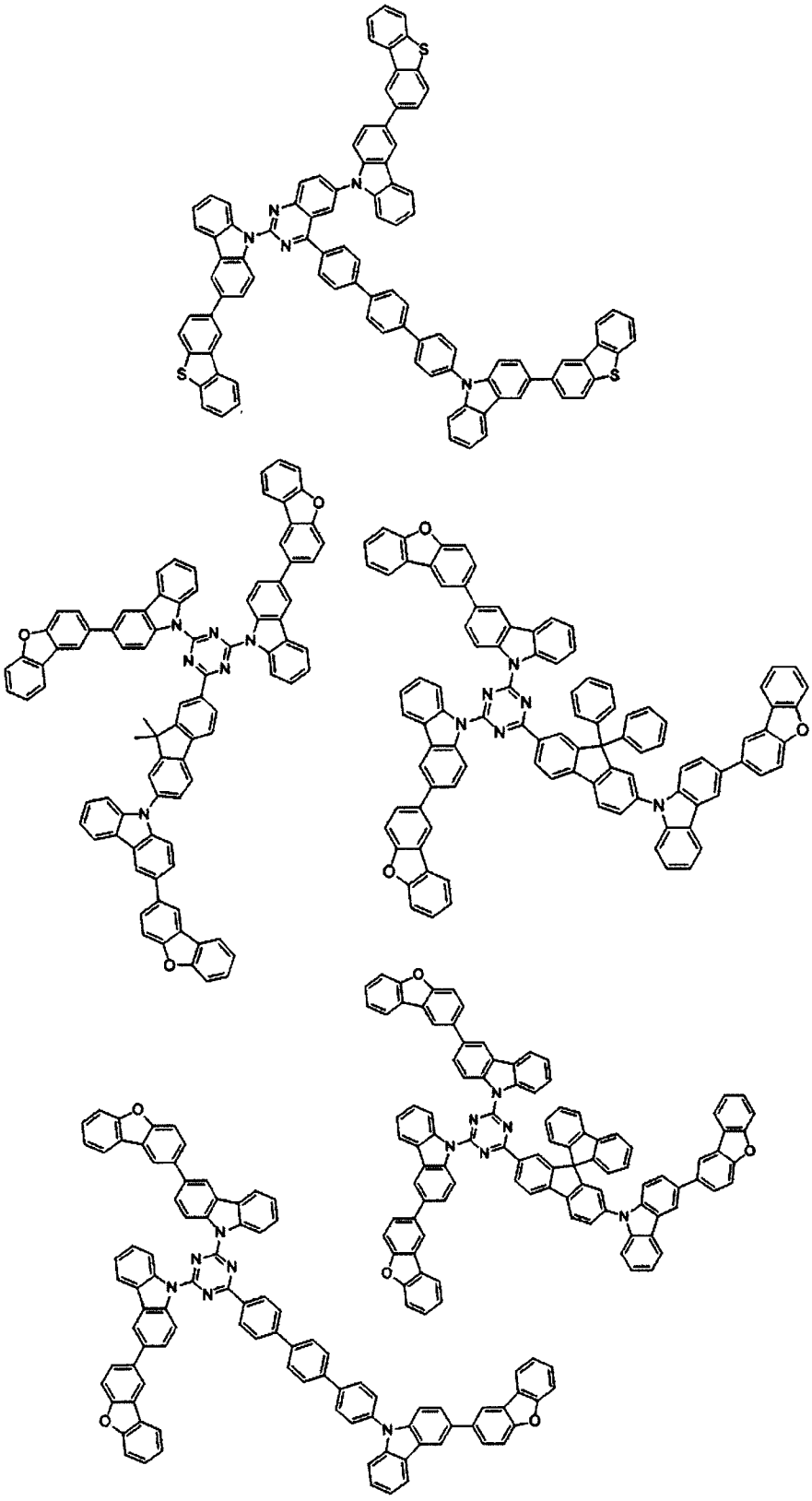




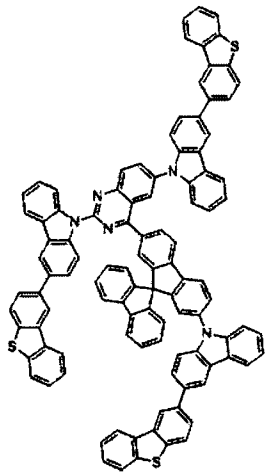


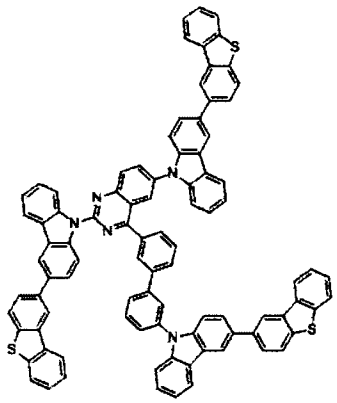
[0653]

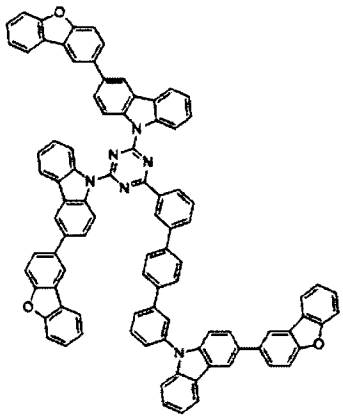
[化506]

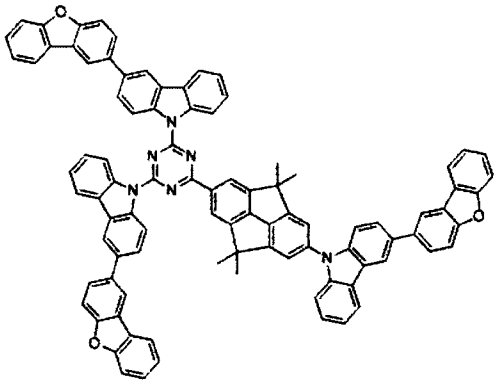


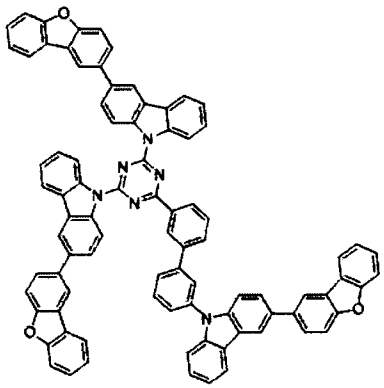
[0654] [化507]

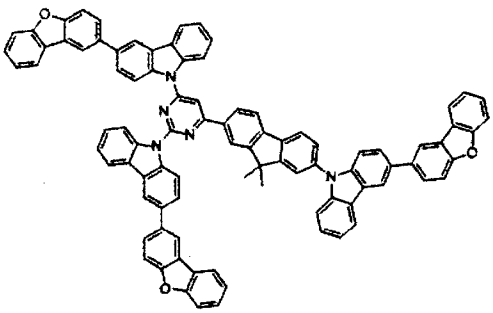






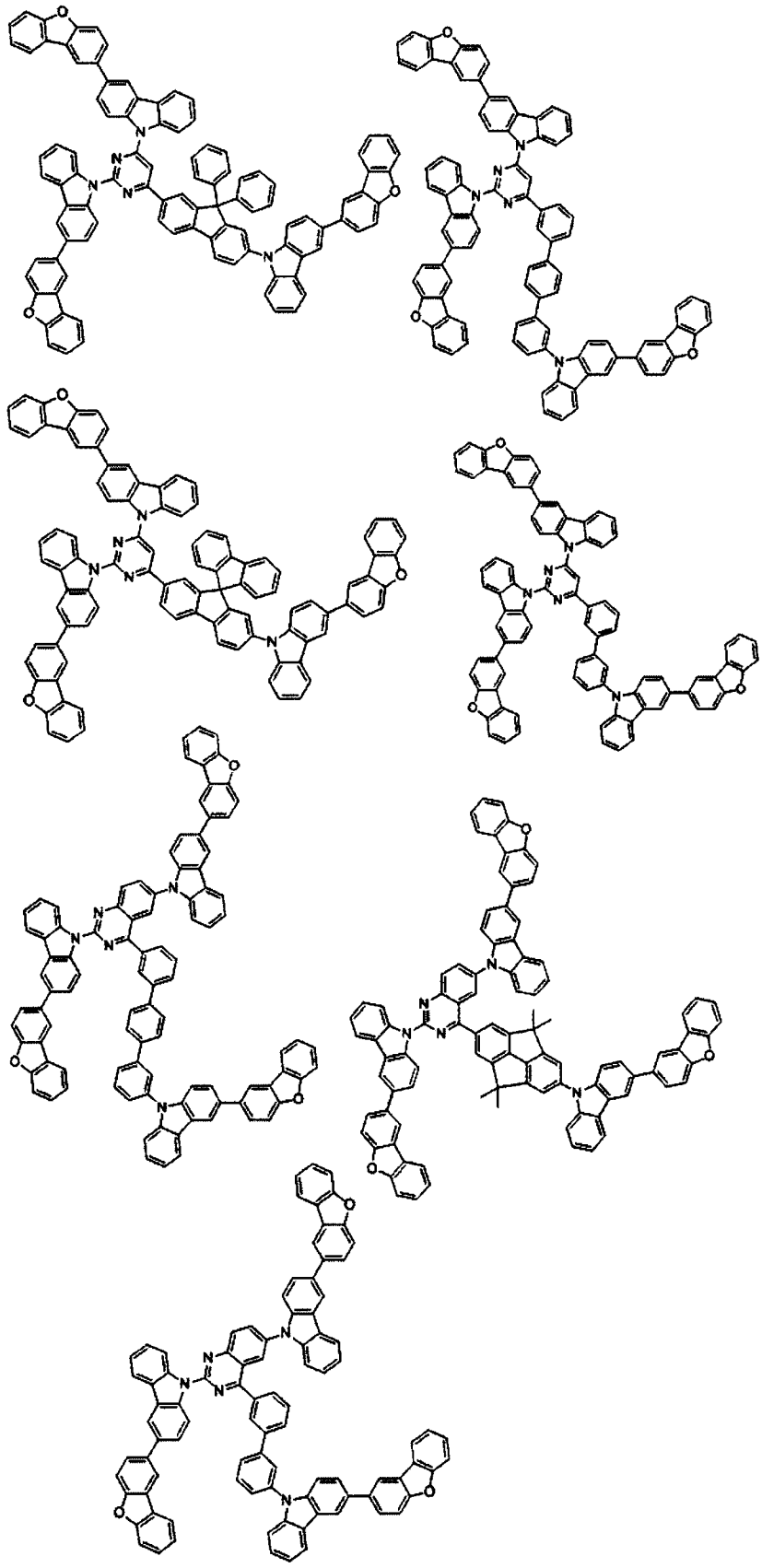




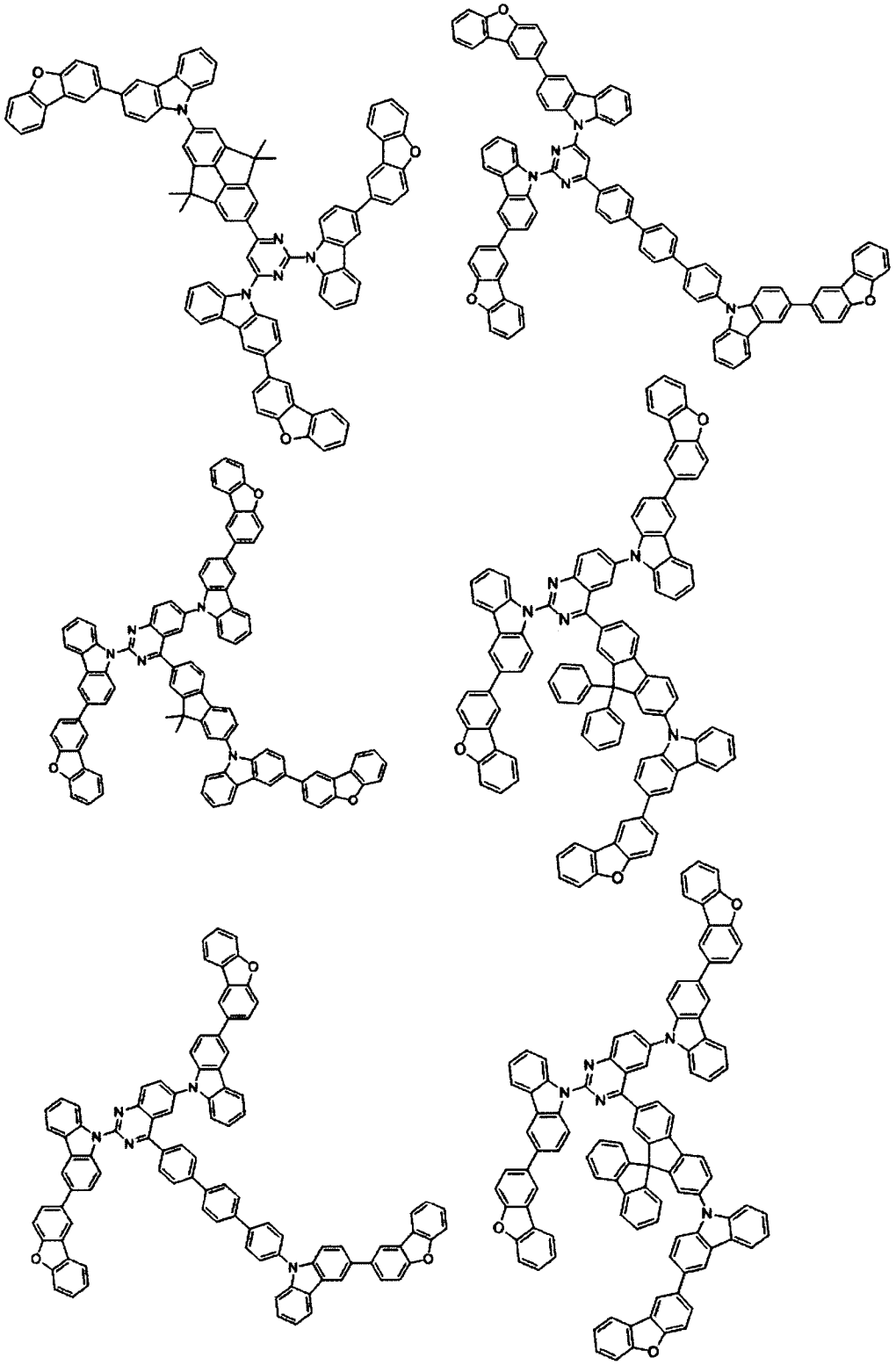


[0655]

[化508]

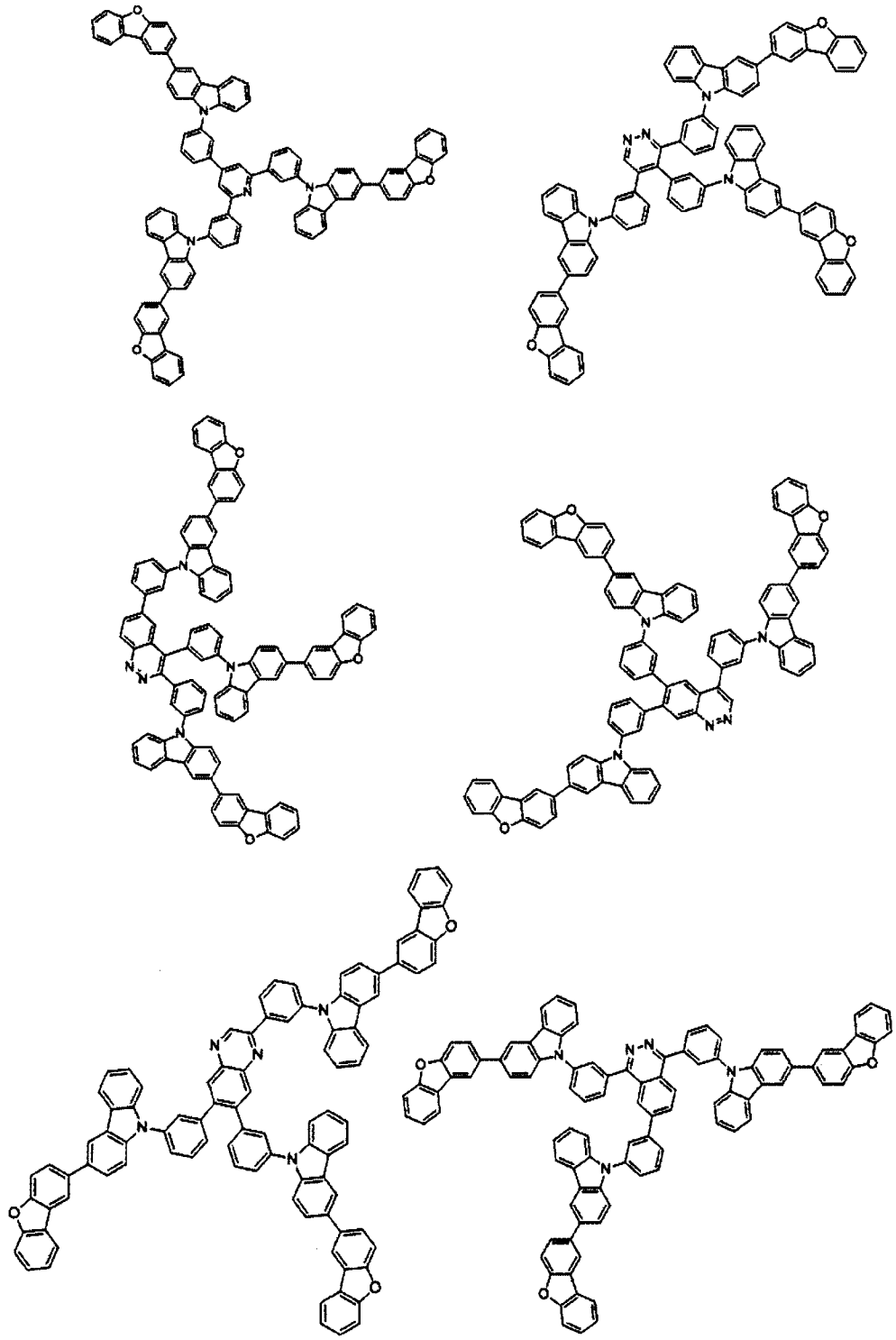


[0656] [化509]



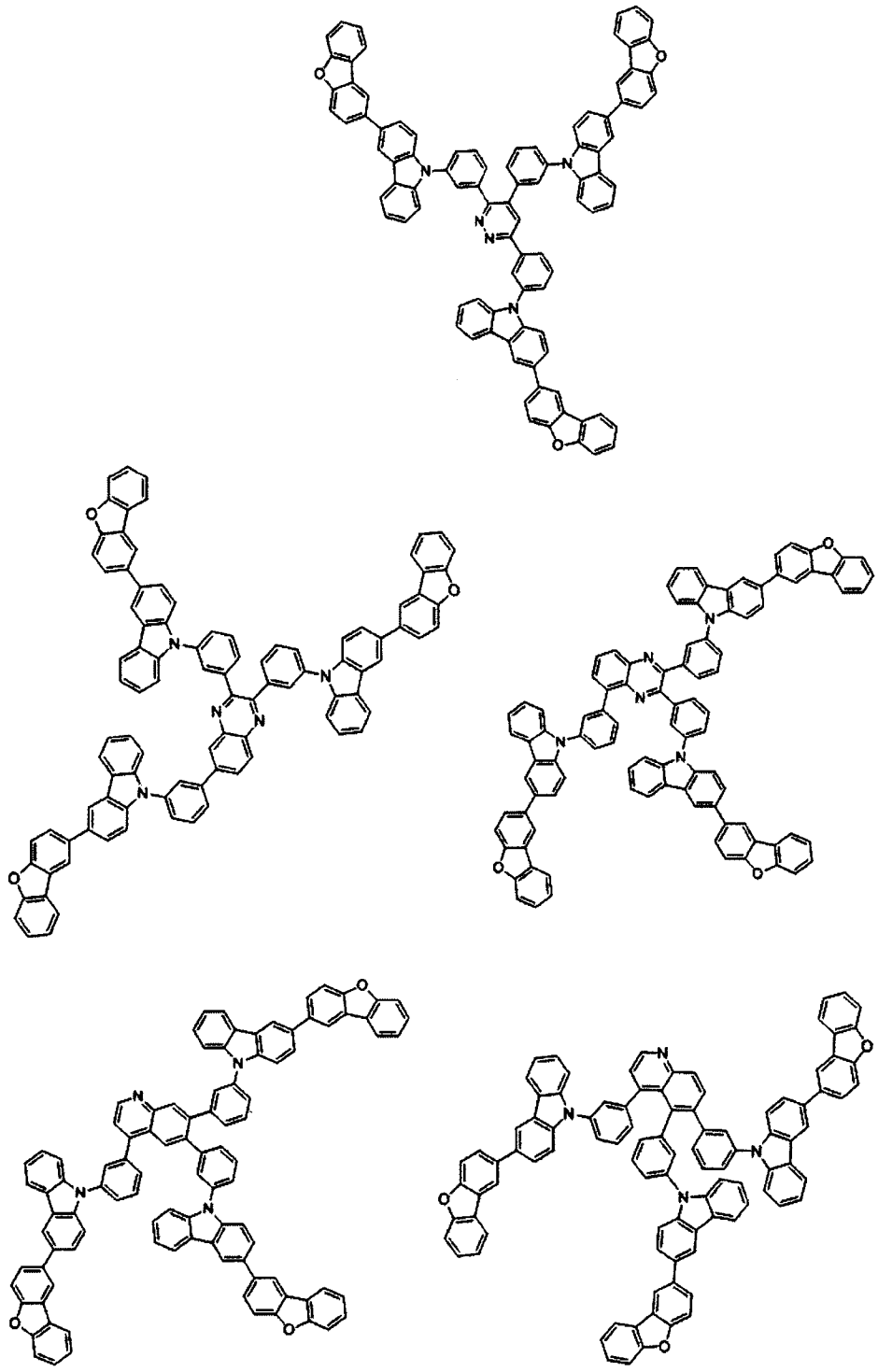
[0657]

[化510]



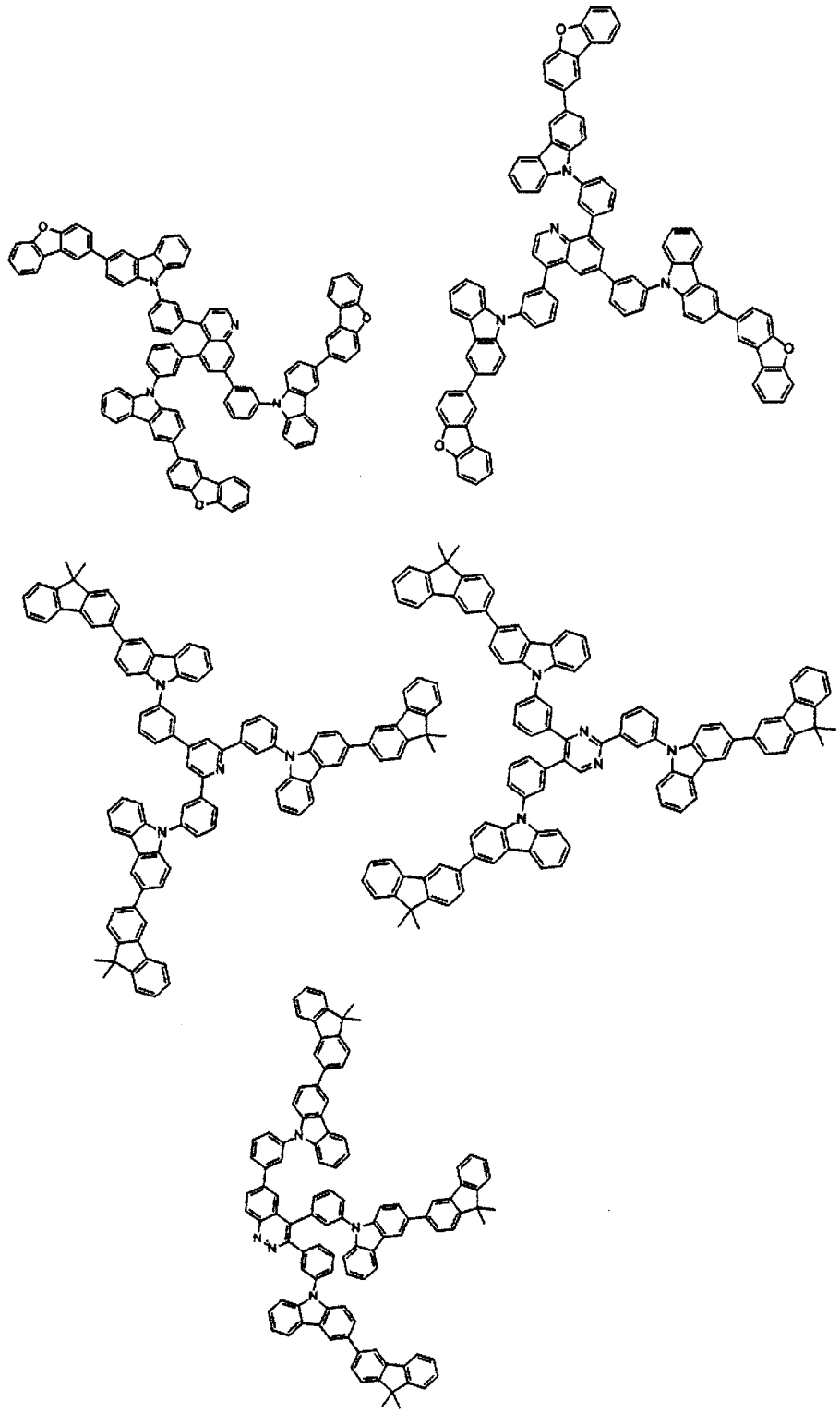
[0658]

[化511]



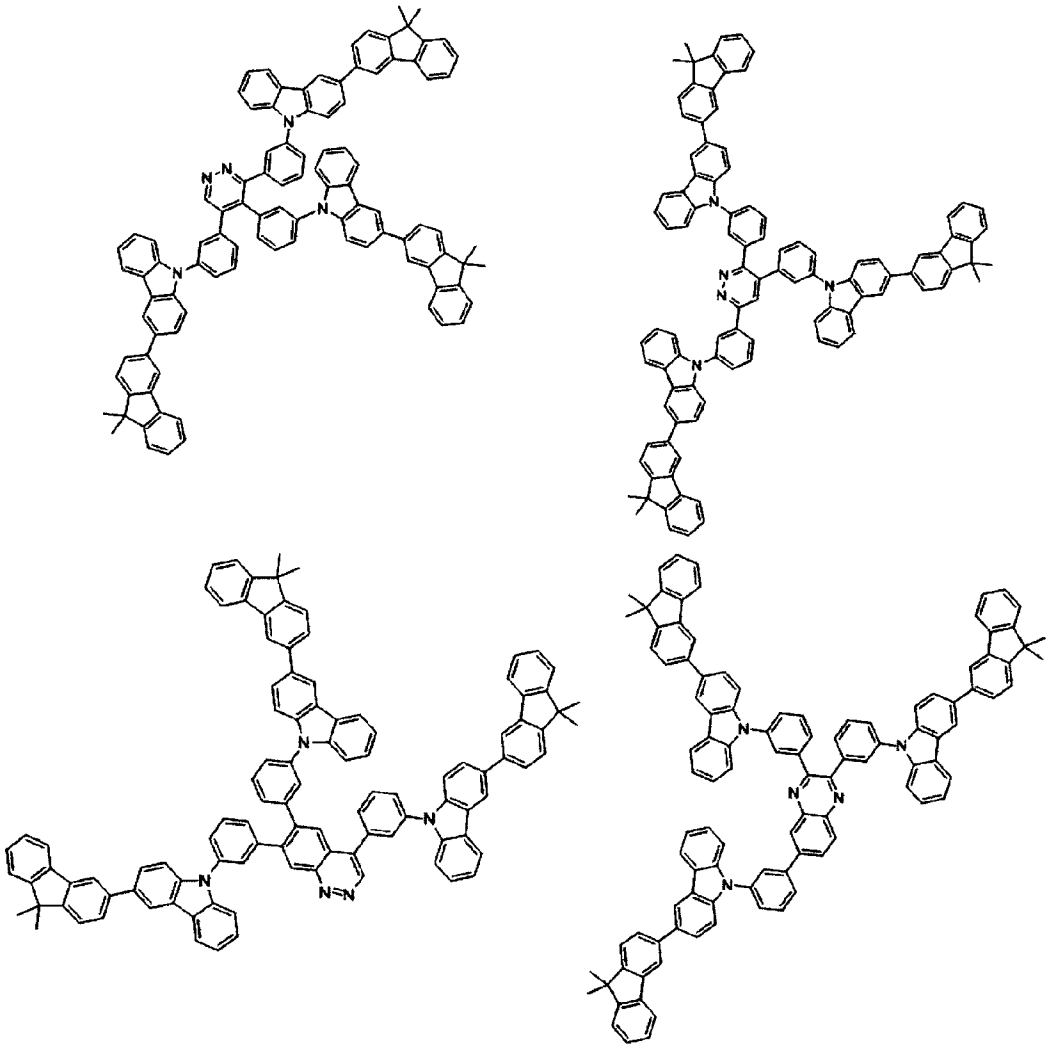
[0659]

[化512]



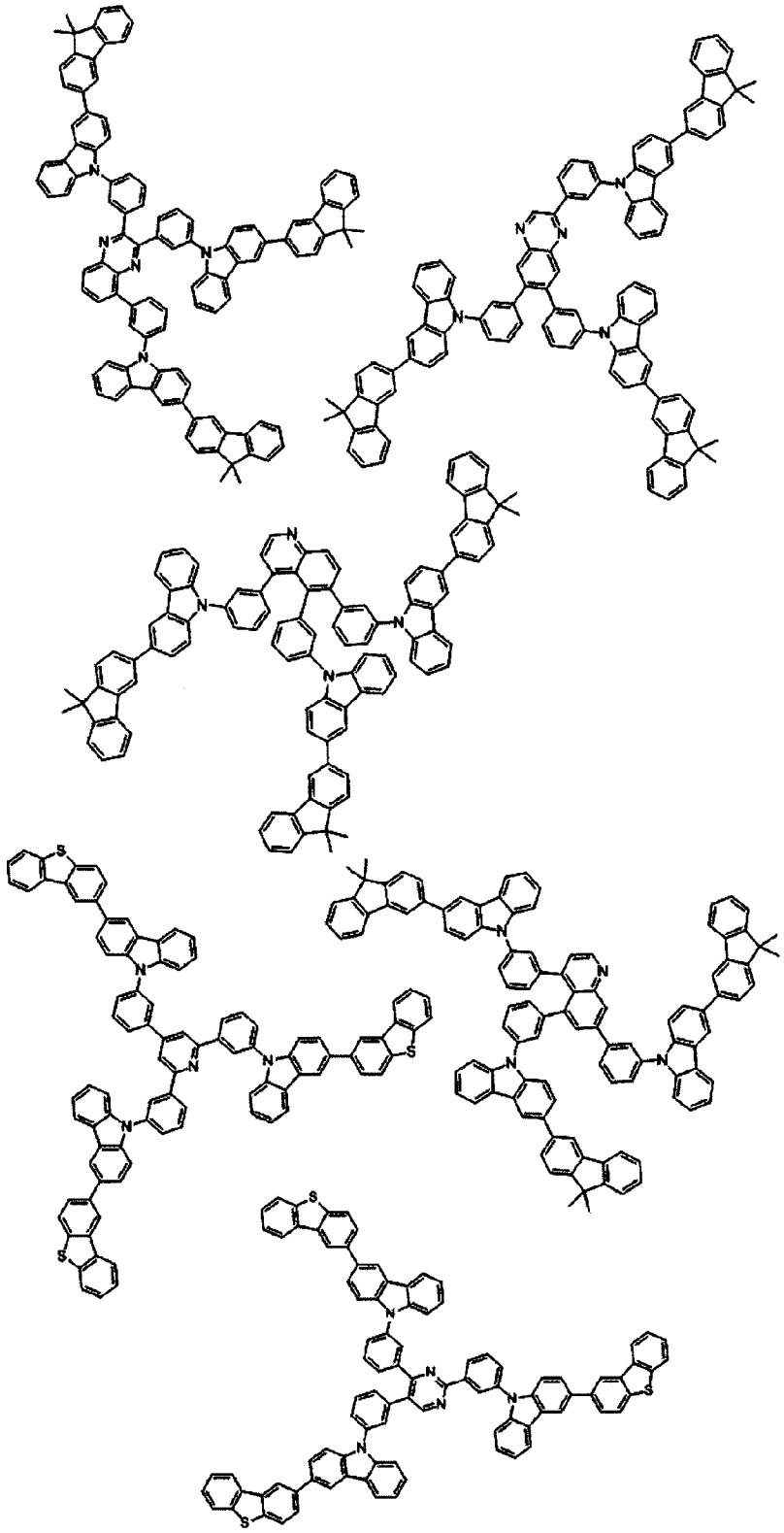
[0660]

[化513]



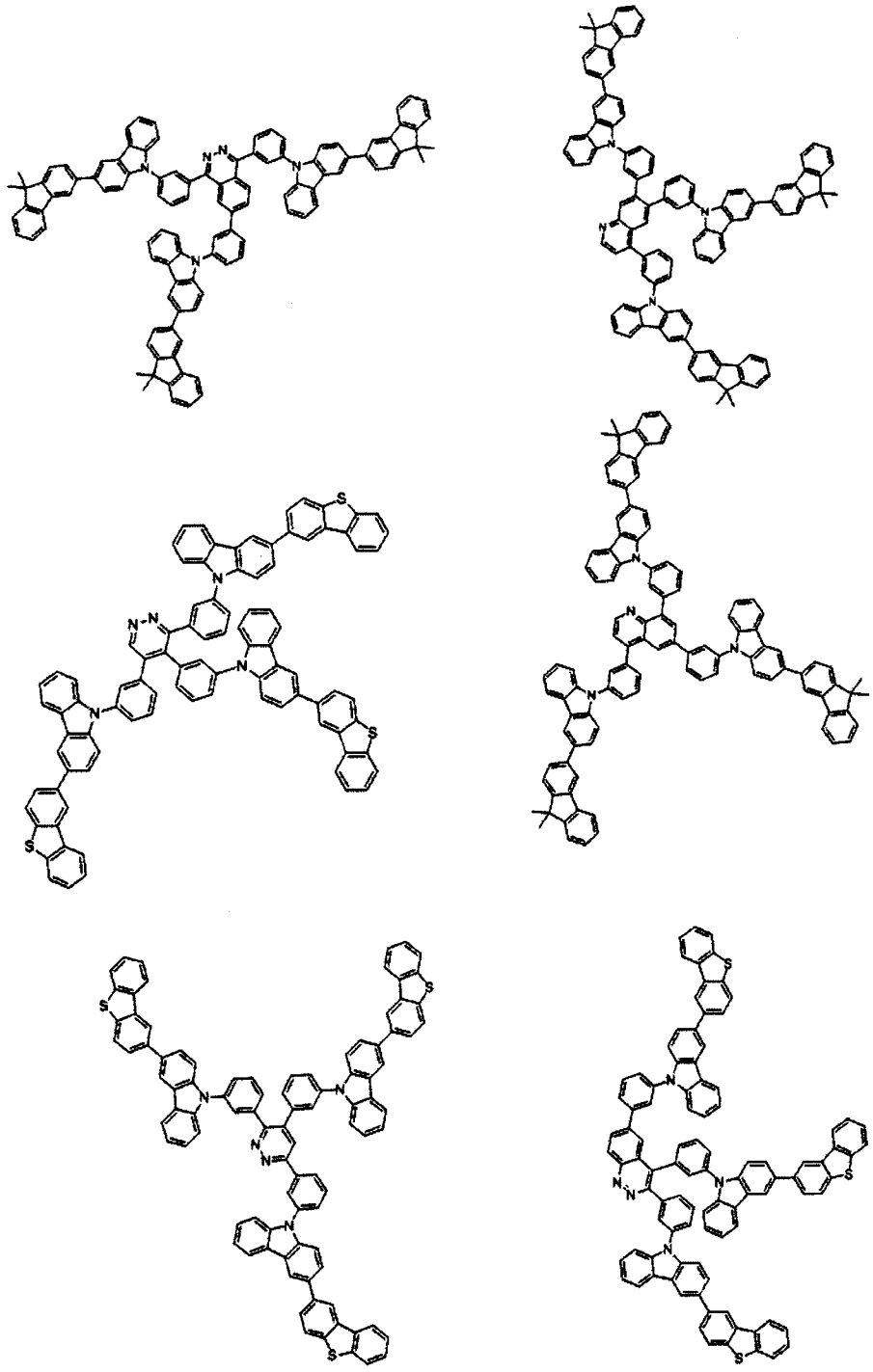
[0661]

[化514]



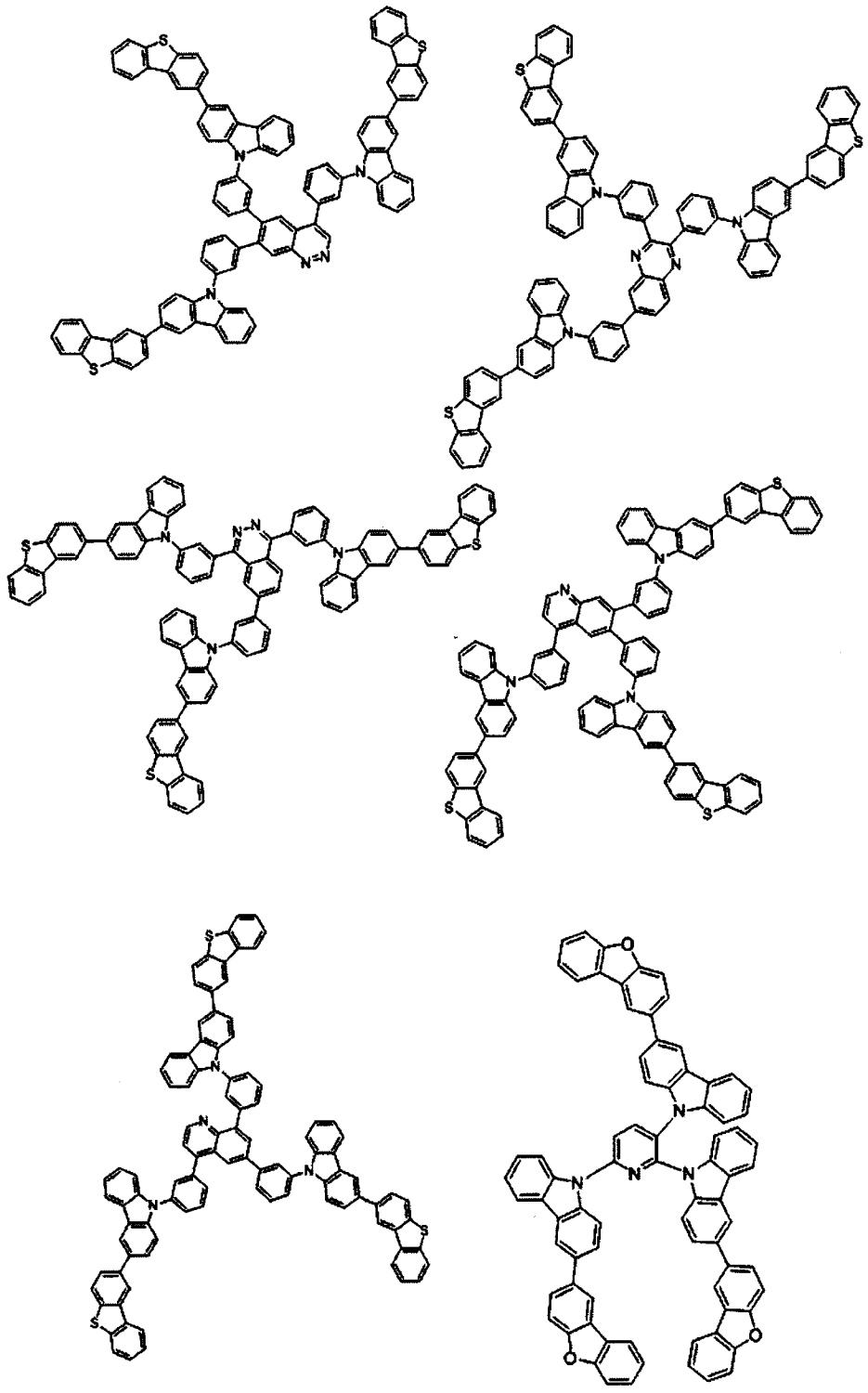
[0662]

[化515]



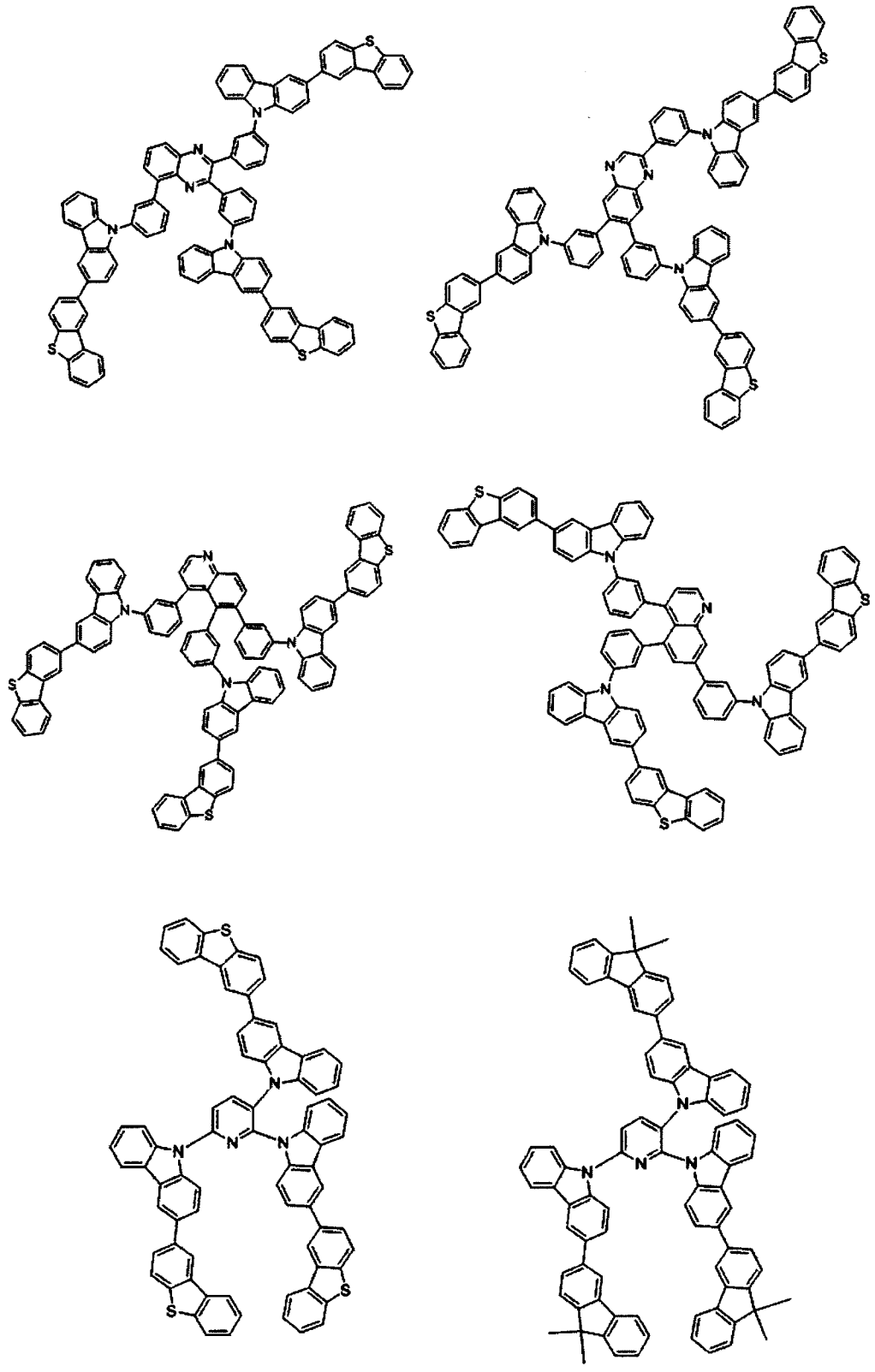
[0663]

[化516]



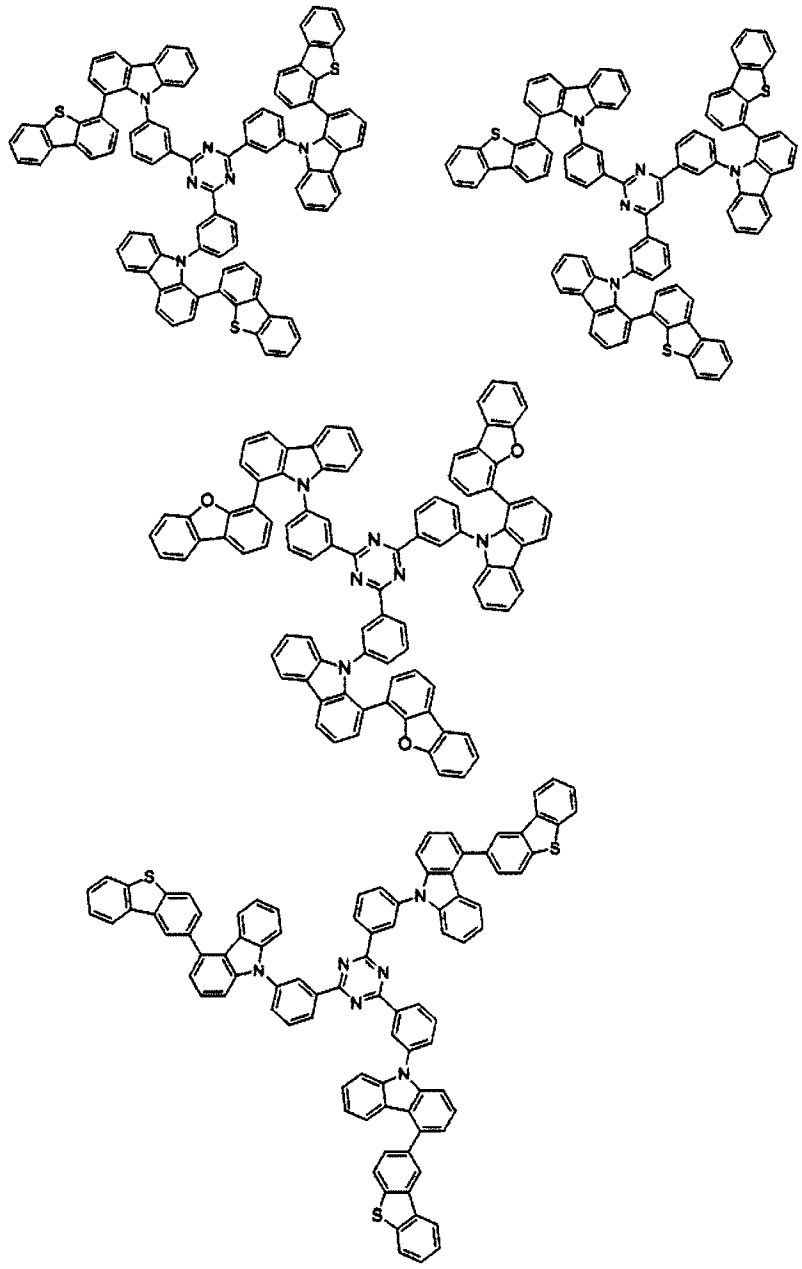
[0664]

[化517]



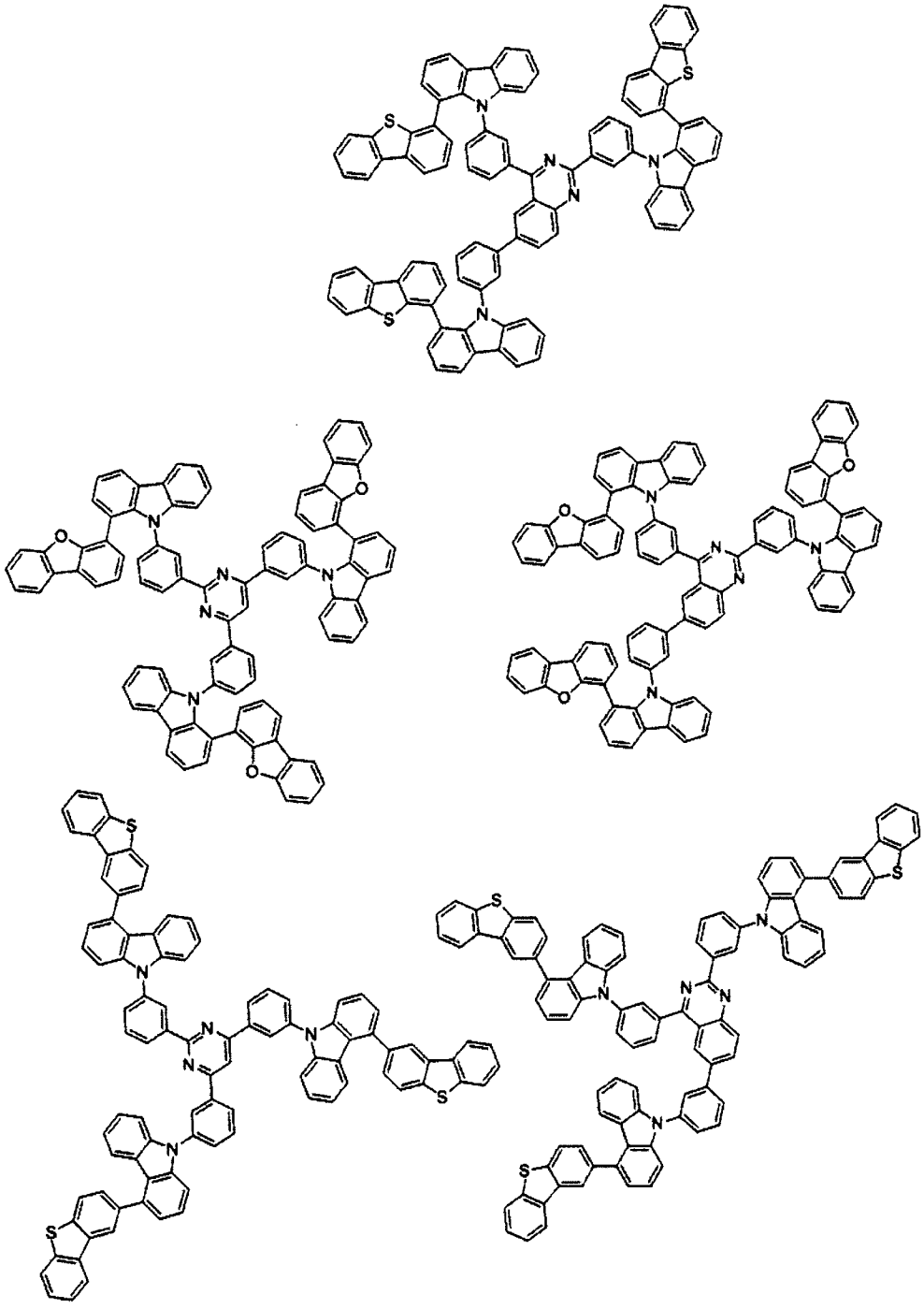
[0665]

[化518]



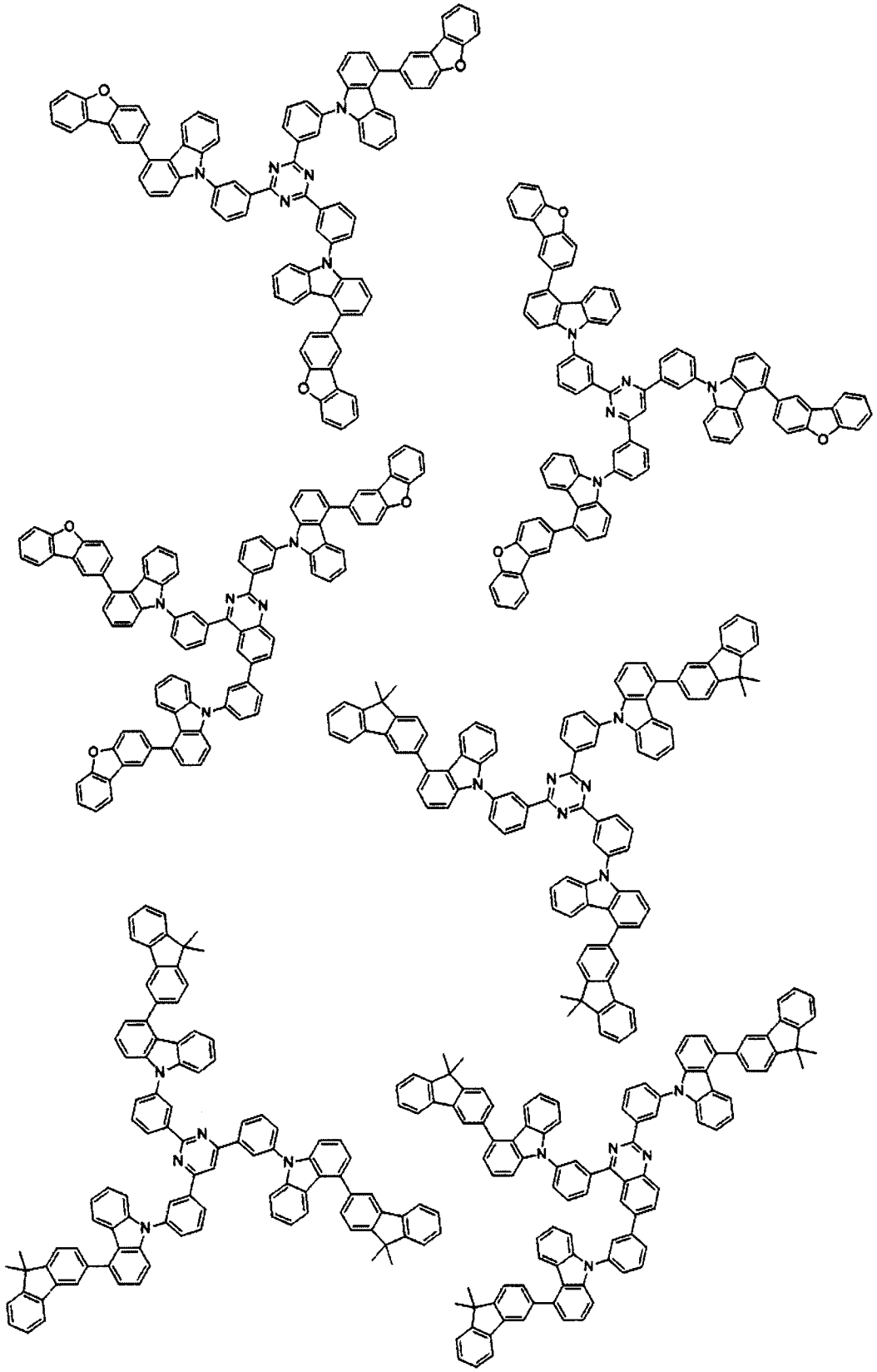
[0666]

[化519]

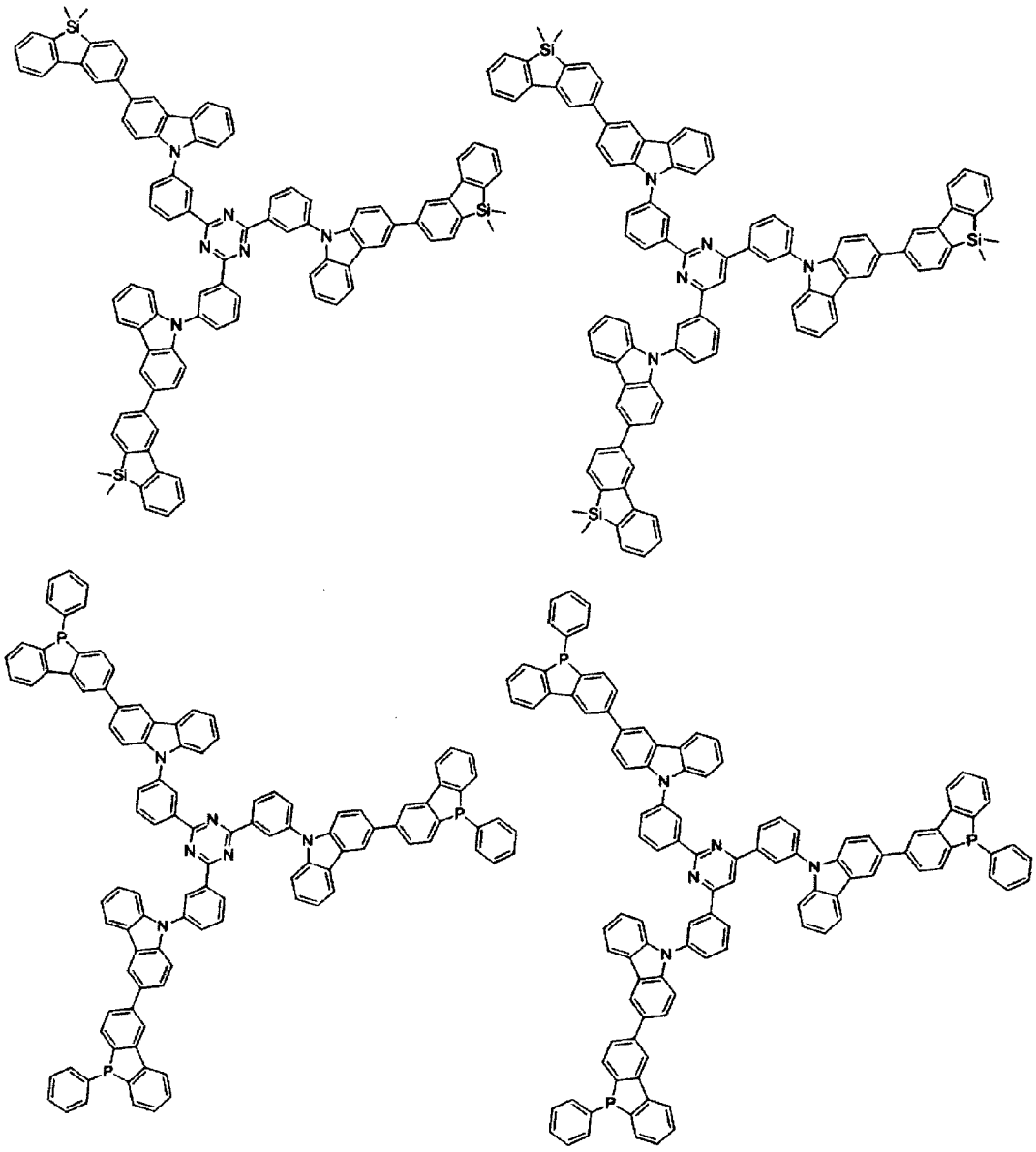


[0667]

[化520]

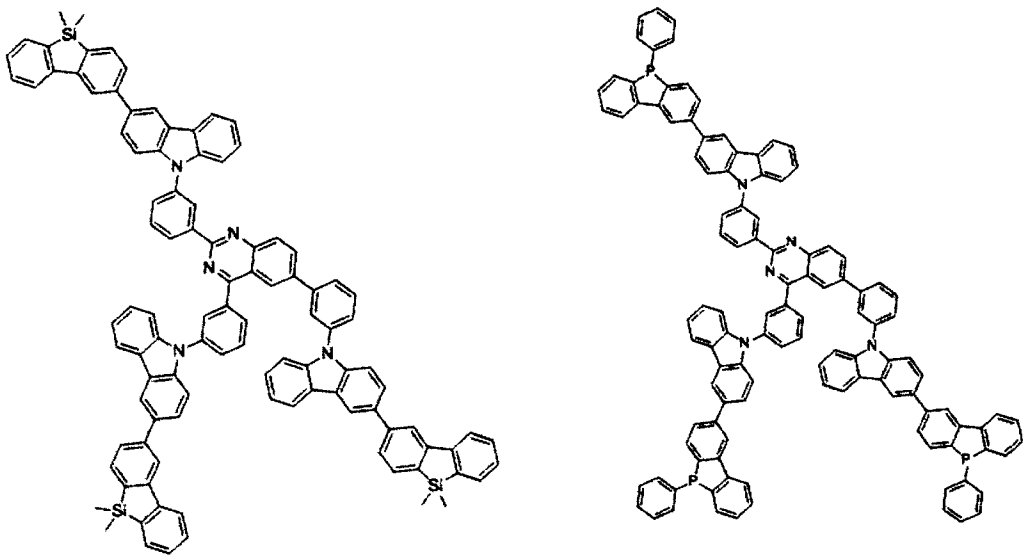


[0668] [化521]



[0669]

[化522]



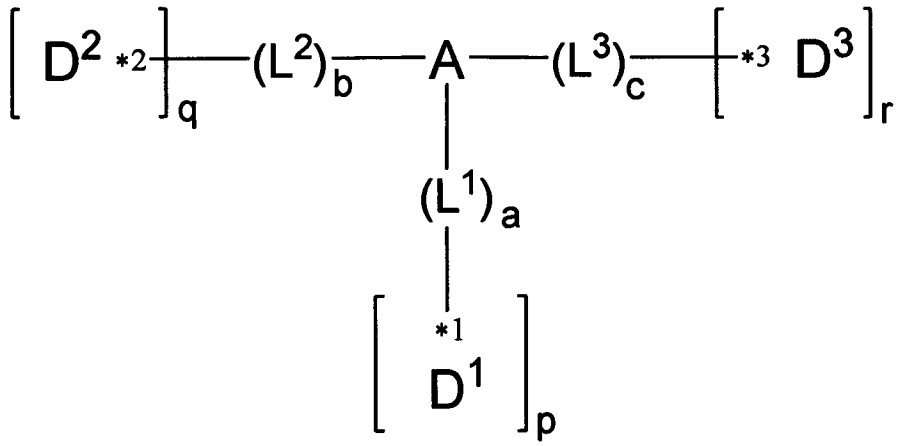
[0670] ［一般式（１［Ｖ］）で表される化合物］

本発明の一態様において、下記一般式（１［Ｖ］）で表される化合物（以下、「化合物（１［Ｖ］）」ともいう）が提供される。当該化合物は、塗布法により層形成する有機ＥＬ素子に好適な化合物であり、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料として有用である。

なお、当該化合物（１［Ｖ］）は、前記化合物（１）において、D^1～D^3の基のうちの少なくとも２つが、互いに異なる基群（Ａ群～Ｄ群）から選択されたものに相当する。

[0671]

[化523]



(1[V])

[0672] ［一般式（１［Ｖ］）中、Ａは、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基を表す。

Ｌ[1]～Ｌ[3]は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の複素環基、又はこれらの基が２～４個結合してなる基である。

ａ～ｃは、それぞれ独立に、０又は１である。

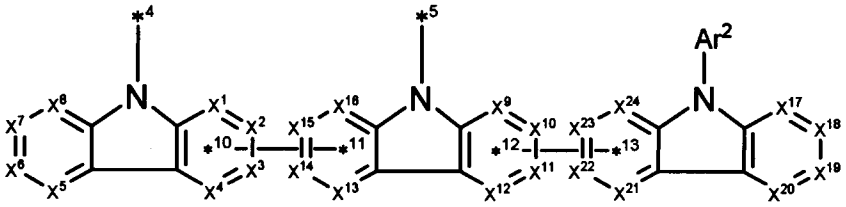
ｐ～ｒは、それぞれ独立に、０～３の整数であり、ｐ＋ｑ＋ｒ＝３である。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在するＤ[1]、Ｄ[2]及びＤ[3]は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。

＊１～＊３は、それぞれＤ[1]～Ｄ[3]と結合している。該Ｄ[1]～Ｄ[3]は、それぞれ独立に、下記一般式（Ｄ[A]）～（Ｄ[D]）で表される４つの基群であるＡ群～Ｄ群から選択される基であって、これらの基の少なくとも２つは、互いに異なる基群から選択される。

[0673]

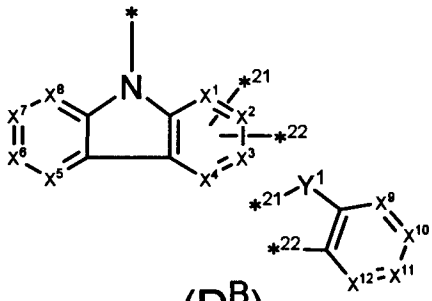
[化524]

A群



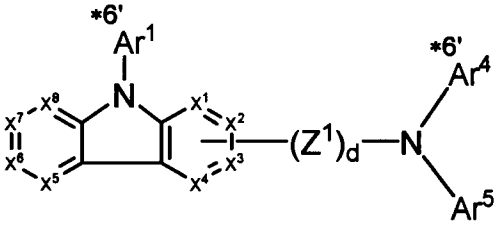
(D^A)

B群



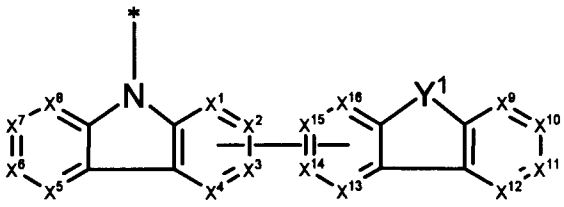
(D^B)

C群



(D^C)

D群



(D^D)

[0674] （Ａ群に属する基を表す一般式（Ｄ^A）中、＊^{4}及び＊^{5}のうち、一方は式（１［Ｖ］）中の＊１～＊３のいずれかと結合し、他方はＡｒ^{1}と結合する。Ａｒ^{1}及びＡｒ^{2}は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数は６～３０のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数は５～３０のヘテロアリール基である。Ｘ^1～Ｘ^{4}のうちの１つ及びＸ^{13}～Ｘ^{16}のうちの１つ

は、それぞれ＊^{10}及び＊^{11}に結合する炭素原子であり、それ以外の６つは、それぞれ独立にＣ（Ｒ）又は窒素原子であり、また、Ｘ^{9}～Ｘ^{12}のうちの１つ及びＸ^{21}～Ｘ^{24}のうちの１つは、それぞれ＊^{12}及び＊^{13}に結合する炭素原子であり、それ以外の６つは、それぞれ独立にＣ（Ｒ）又は窒素原子である。Ｘ^{5}～Ｘ^{8}及びＸ^{17}～Ｘ^{20}は、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子である。該Ｒは、水素原子又は置換基であって、複数存在するＲは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲ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。）

（Ｂ群に属する基を表す一般式（Ｄ^{B}）中、Ｘ^{1}～Ｘ^{4}のうちの２つは、それぞれ＊^{21}及び＊^{22}に結合する炭素原子であり、それ以外の２つは、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子であり、Ｘ^{5}～Ｘ^{12}は、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子である。該Ｒは、水素原子又は置換基であって、複数存在するＲは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲ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。Ｙ^{1}は、酸素原子、硫黄原子、－Ｃ（Ｒ^{A}）（Ｒ^{B}）－、－Ｓｉ（Ｒ^{C}）（Ｒ^{D}）－、－Ｐ（Ｒ^{E}）－、－Ｐ（＝Ｏ）（Ｒ^{F}）－、－Ｓ（＝Ｏ）$_{2}$－、－Ｐ（＝Ｓ）（Ｒ^{G}）－、又は－Ｎ（Ｒ^{H}）－である。該Ｒ^{A}～Ｒ^{H}は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、Ｒ^{A}とＲ^{B}、及びＲ^{C}とＲ^{D}は、互いに結合して環を形成していてもよい。＊は式（１［Ｖ］）中の＊１～＊３のいずれかと結合する。）

（Ｃ群に属する基を表す一般式（Ｄ^{C}）中、Ｘ^{1}～Ｘ^{8}は、それぞれＣ（Ｒ^{1}）～Ｃ（Ｒ^{8}）又は窒素原子を表す。Ｒ^{1}～Ｒ^{8}は、それぞれ独立に、水素原子または置換基である。但し、Ｘ^{1}～Ｘ^{4}のうちの１つは、Ｚ^{1}もしくはＡｒ^{4}及びＡｒ^{5}が結合する窒素原子と直接結合する炭素原子である。また、その直接結合に関与していないＲ^{1}～Ｒ^{8}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。Ａｒ^{1}、Ａｒ^{4}及びＡｒ^{5}は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０のヘテロアリール基を表す。Ｚ^{1}は、それぞれ独立に、置

換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の複素環基、又はこれらの基が２～４個結合してなる基である。ｄは、０又は１である。一般式（D^C）中、＊６’が記されているAr^1及びAr^4のうちのいずれか一方が脱離して、その代わりに一般式（１［Ｖ］）中の＊１～３のいずれかが窒素原子と直接結合している。）

（Ｄ群に属する基を表す一般式（D^D）中、X^1～X^{16}は、それぞれ$C(R^1)$～$C(R^{16})$又は窒素原子を表す。R^1～R^{16}は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。但し、X^1～X^4のうちのいずれか１つは炭素原子であり、X^{13}～X^{16}のうちのいずれか１つの炭素原子と直接結合をしている。また、その直接結合に関与していない、R^1～R^8から選ばれる２つ、及びR^9～R^{16}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。Y^1は、酸素原子、硫黄原子、$C(R^A)(R^B)$、$Si(R^C)(R^D)$、$P(R^E)$、$P(=O)(R^F)$、$S(=O)_2$、$P(=S)(R^G)$、又は$-N(R^H)-$である。該R^A～R^Hは、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。R^AとR^B、及びR^CとR^Dは、互いに結合して環を形成していてもよい。＊は式（１［Ｖ］）中の＊１～＊３のいずれかと結合する。）］

[0675] （前記一般式（１［Ｖ］）中の「Ａ」についての説明）

一般式（１［Ｖ］）中のＡが表す窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基の環形成原子数は５～３０であり、好ましくは６～２０、より好ましくは６～１４である。

当該窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基は、好ましくは、単環、２環から構成される縮合環、３環から構成される縮合環のいずれかであることが好ましい。

当該窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基が含有する窒素原子の数は、好ましくは１～３個、より好ましくは２個又は３個である。特に、窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基が単環の場合には、含有する窒素原子の数は好ましくは２個又は３個、より好ましくは３個であり、窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基

が２環又は３環から構成される縮合環の場合には、含有する窒素原子の数は好ましくは２個である。

なお、当該窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基は、窒素原子以外のヘテロ原子（例えば、酸素原子、硫黄原子、ケイ素原子、及びセレン原子等）を含有していてもよいが、ヘテロ原子として窒素原子のみを含有していることが好ましい。

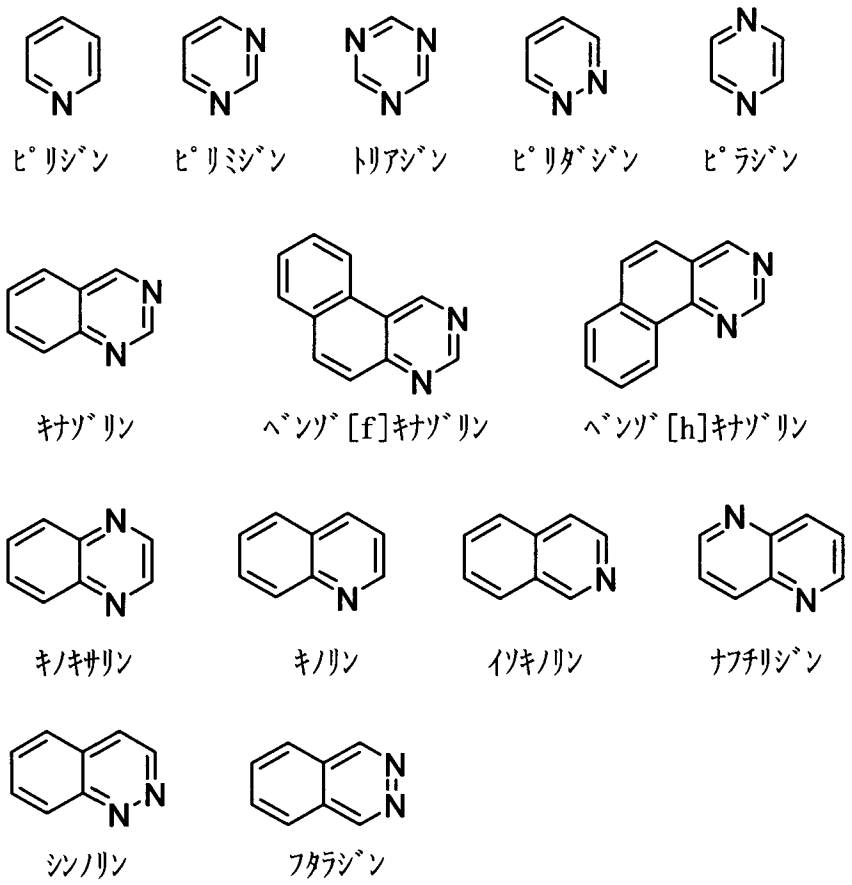
[0676] 一般式（１［Ｖ］）中のＡが表す窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基の具体例としては、ピロール、ピリジン、ピリダジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン、イミダゾール、ピラゾール、オキサジアゾール、チアジアゾール、トリアゾール、テトラゾール、インドール、イソインドール、インドリジン、キノリジン、キノリン、イソキノリン、ナフチリジン、シンノリン、フタラジン、キナゾリン、ベンゾ［ｆ］キナゾリン、ベンゾ［ｈ］キナゾリン、キノキサリン、ベンゾイミダゾール、インダゾール、カルバゾール、ビスカルバゾール、フェナントリジン、アクリジン、フェナントロリン、フェナジン、アザトリフェニレン、ジアザトリフェニレン、ヘキサアザトリフェニレン、アザカルバゾール、アザジベンゾフラン、アザジベンゾチオフェン及びジナフト［2’,3’:2,3:2’,3’:6,7］カルバゾールから選択される化合物の残基などが挙げられる。

ここで、残基とは、化合物から水素原子が１つ以上脱離して得られる１価以上の基である。なお、前記窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基の価数、つまり「Ａ」の価数は、一般式（１［Ｖ］）中の「ａ＋ｂ＋ｃ」の値に相当する。

[0677] 前記窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基としては、上記の中でも、下記の群から選択される化合物の残基が好ましい。

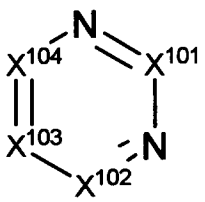
[0678]

[化525]



[0679] また、本発明の一態様においては、Ａが表す窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基が、下記一般式（Ａ１）で表される窒素含有複素環の残基であることが好ましい。

[0680] [化526]



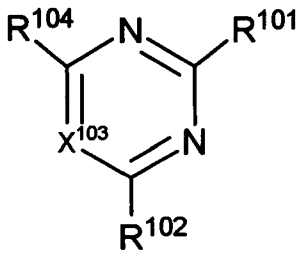
(A1)

（一般式（Ａ１）中、X^{101}～X^{104}は、それぞれＣ（R^{101}）～Ｃ（R^{104}）又は窒素原子を示す。R^{101}～R^{104}は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、R^{102}～R^{104}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。）

[0681] 本発明の一態様においては、Ａが表す窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基が、下記一般式（Ａ２）～（Ａ４）のいずれかで表される窒素含有複素環の残基であることがより好ましい。

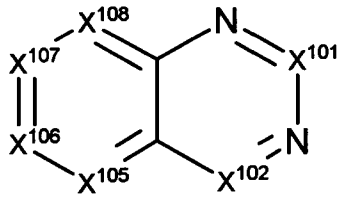
[0682] [化527]



(A2)

（一般式（Ａ２）中、X^{103}は、Ｃ（R^{103}）又は窒素原子を示す。R^{101}～R^{104}は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。R^{102}～R^{104}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。）

[0683] [化528]

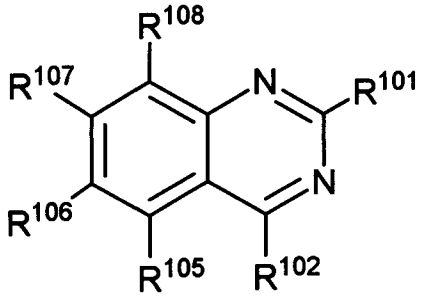


(A3)

（一般式（Ａ３）中、X^{101}、X^{102}、X^{105}～X^{108}は、それぞれＣ（R^{101}）、Ｃ（R^{102}）、Ｃ（R^{105}）～Ｃ（R^{108}）又は窒素原子を示す。R^{101}、R^{102}及びR^{105}～R^{108}、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、R^{102}及びR^{105}～R^{108}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。）

[0684]

[化529]



(A4)

（一般式（Ａ４）中、Ｒ^{101}、Ｒ^{102}及びＲ^{105}～Ｒ^{108}は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、Ｒ^{102}及びＲ^{105}～Ｒ^{108}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。）

[0685] なお、一般式（１［Ｖ］）中のＡが表す窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基は、任意に置換基を有していてもよい。

窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基に置換し得る置換基としては、具体的には上述の置換基が挙げられるが、以下の（ａ）～（ｄ）で示される置換基も含まれる。

（ａ）：２つの（アザ）カルバゾリル基で置換された（アザ）カルバゾリル基および当該２つの（アザ）カルバゾリル基で置換された（アザ）カルバゾリル基で更に置換されたアリール基及びヘテロアリール基。

（ｂ）：２つの置換基が互いに結合して形成した環を有する（アザ）カルバゾリル基および当該２つの置換基が互いに結合して形成した環を有する（アザ）カルバゾリル基で更に置換されたアリール基及びヘテロアリール基。

（ｃ）：置換アミノ基が置換した９－カルバゾリル基、カルバゾリル基が置換した置換アミノ基、置換アミノ基が置換したアリール基又はヘテロアリール基で置換された９－カルバゾリル基、カルバゾリル基が置換したアリール基又はヘテロアリール基で置換された置換アミノ基、及びこれらの置換９－カルバゾリル基又は置換アミノ基で更に置換されたアリール基又はヘテロアリール基。

（ｄ）：アリール基又はヘテロアリール基が置換した９－カルバゾリル基、

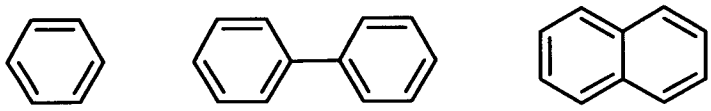
アリール基又はヘテロアリール基が置換した９－カルバゾリル基で置換されたアリール基又はヘテロアリール基。

[0686] （前記一般式（１［Ｖ］）中の「Ｌ^{1}～Ｌ^{3}」についての説明）

前記一般式（１［Ｖ］）において、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}が表す芳香族炭化水素基の環形成炭素数は６～３０であり、好ましくは６～１８、より好ましくは６～１３、さらに好ましくは６～１２、特に好ましくは６～１０である。

本発明の一態様においては、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}が表す芳香族炭化水素基としては、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}の少なくとも一つが下記式で表されるいずれかの化合物の２～４価の残基であることが好ましく、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}のすべてが下記式で表されるいずれかの化合物の２～４価の残基であることがより好ましい。

[0687] [化530]

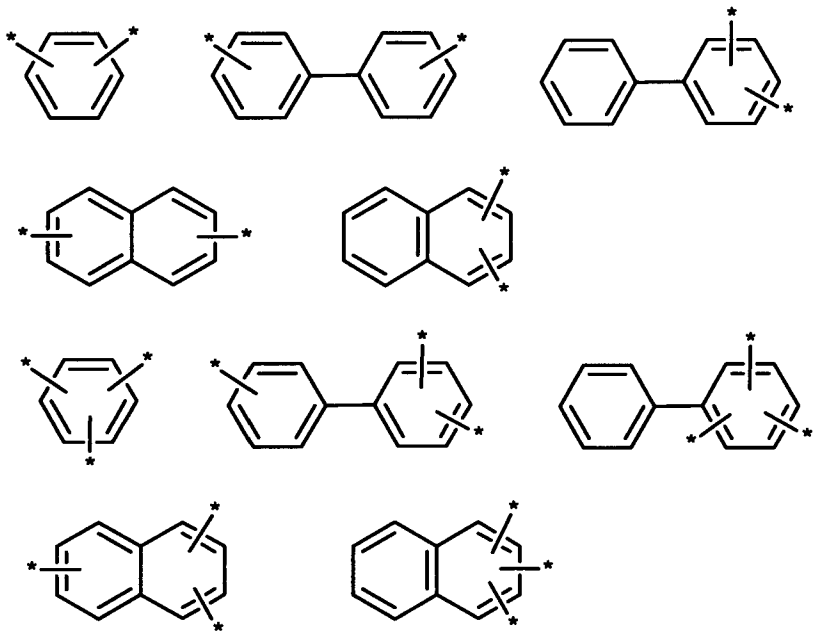


（上記化合物中の炭素原子は置換基と結合していてもよい。）

[0688] さらに、本発明の一態様においては、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}が表す芳香族炭化水素基としては、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}の少なくとも一つが下記式で表されるいずれかの基であることが好ましく、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}のすべてが下記式で表されるいずれかの化合物の２～４価の残基であることがより好ましい。

[0689]

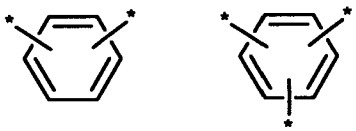
[化531]



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

[0690] 上記の中でも、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}が表す芳香族炭化水素基としては、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}の少なくとも一つが下記式で表されるいずれかの基であることがより好ましく、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}のすべてが下記式で表されるいずれかの基であることが更に好ましい。

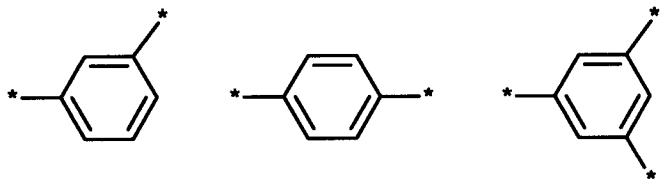
[0691] [化532]



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

[0692] 上記の中でも、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}が表す芳香族炭化水素基としては、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}の少なくとも一つが下記式で表されるいずれかの基であることがより好ましく、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}のすべてが下記式で表されるいずれかの基であることが更に好ましい。

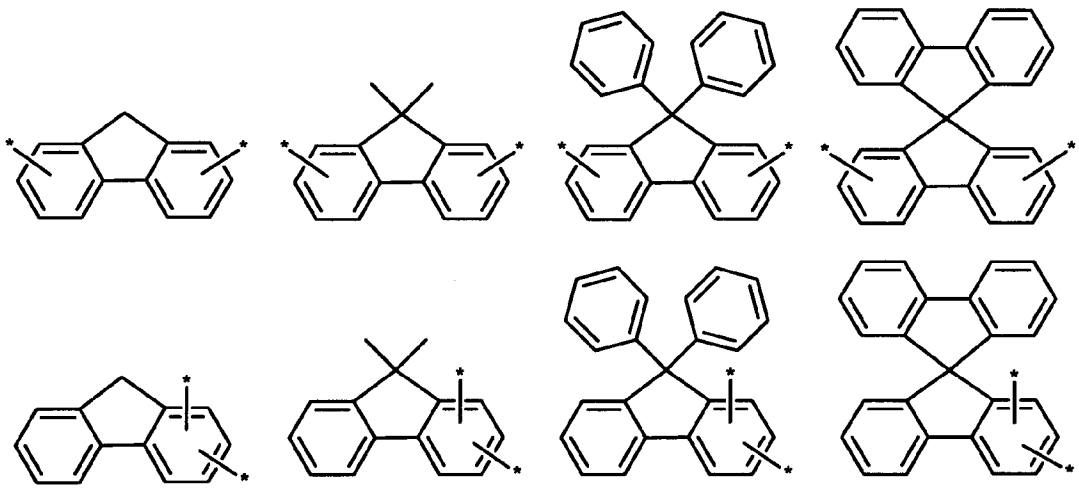
[0693] [化533]



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

[0694] Ｌ[1]～Ｌ[3]が表す芳香族炭化水素基としては、上記以外にも、下記式で表される基が挙げられる。

[0695] [化534]

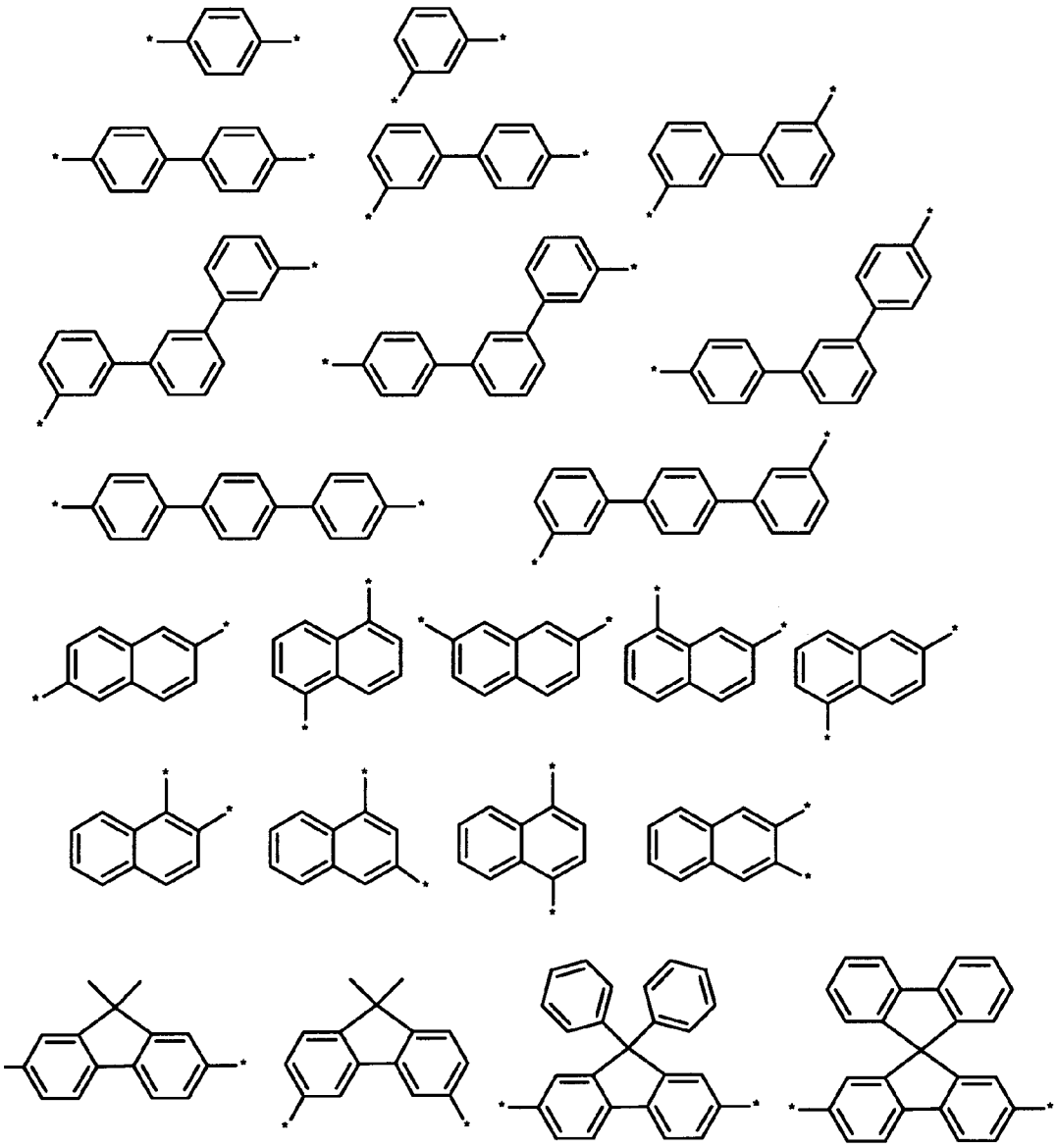


（上記式中、＊は結合位置を表す。また、上記式中の結合位置以外の炭素原子は、置換基と結合していてもよい。）

[0696] Ｌ[1]～Ｌ[3]が表す芳香族炭化水素基が二価の場合の具体例としては、下記式で表される基が挙げられる。

[0697]

[化535]



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

[0698] また、前記一般式（１［Ｖ］）において、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}が表す複素環基の環形成原子数は５～３０であり、好ましくは５～１８、より好ましくは５～１３、特に好ましくは５～１０である。

このような複素環基としては、例えば、ピロール、ピリジン、イミダゾピリジン、ピラゾール、トリアゾール、テトラゾール、インドール、イソインドール及びカルバゾール等の含窒素複素環化合物の残基；フラン、ベンゾフ

ラン、イソベンゾフラン、ジベンゾフラン、オキサゾール、オキサジアゾール、ベンゾオキサゾール、ベンゾナフトフラン及びジナフトフラン等の含酸素複素環化合物の残基；チオフェン、ベンゾチオフェン、ジベンゾチオフェン、チアゾール、チアジアゾール、ベンゾチアゾール、ベンゾナフトチオフェン及びジナフトチオフェン等の含硫黄複素環化合物の残基などが挙げられる。

[0699] Ｌ[1]～Ｌ[3]が表す、「これらの基が２～４個結合してなる基」は、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基及び置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の複素環基から選ばれる２～４個の基が結合してなる基である。なお、選ばれる２～４個の基が互いに結合して環構造を形成してもよい。また、当該芳香族炭化水素基及び複素環基から選ばれる基の結合順序に特に制限はない。

[0700] 以上の中でも、Ｌ[1]～Ｌ[3]としては、いずれも、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基が好ましい。該芳香族炭化水素基としてより好ましいものは、前述の通りである。

[0701] （前記一般式（１［Ｖ］）中の「ａ～ｃ」についての説明）

また、前記一般式（１［Ｖ］）中のａ～ｃは、それぞれ独立に、０又は１である。

前記一般式（１［Ｖ］）において、例えば、ａ＝０の場合、Ｌ[1]は存在しないことを意味し、Ａが直接［ ］内の基と結合する。一方、ａ＝１の場合には、ＡはＬ[1]を介して［ ］内の基と結合する。なお、ｂ、ｃについても同様である。

[0702] （前記一般式（１［Ｖ］）中の「ｐ～ｒ」についての説明）

前記一般式（１［Ｖ］）中、ｐ～ｒは、前述の通り、それぞれ独立に０～３の整数であり、ｐ＋ｑ＋ｒ＝３となる。ｐ～ｒは、特に制限されるものではないが、ｐ～ｒのうちの２つが同時に０ではないことが好ましい。

なお、ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［ ］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。

[0703] （前記一般式（１［Ｖ］）中の「D^1～D^3」についての説明）

前記一般式（１［Ｖ］）中、＊１～＊３は、それぞれD^1～D^3と結合している。

D^1～D^3は、それぞれ独立に、前記一般式（D^A）～（D^D）で表される４つの基群であるＡ群～Ｄ群から選択される基であって、これらの基の少なくとも２つは、互いに異なる基群から選択される。

上記の「これらの基の少なくとも２つは、互いに異なる基群から選択される」とは、D^1～D^3のすべてが同じ基群から選択されることはない、ということを示している。そのため、D^1～D^3は、少なくとも２つの基群に属する基から構成される。

[0704] なお、本発明の一態様としては、D^1～D^3のうちの２つが同じ基群に属する基であり、残りの１つが当該基群とは別の基群に属する基であることが好ましい。

また、本発明の別の一態様としては、D^1～D^3が、それぞれ互いに異なる基群に属する基であることが好ましい。

さらに、本発明の別の一態様としては、D^1～D^3の少なくとも一つが、Ａ群に属する基であることが好ましい。

以下、D^1～D^3として選択し得る、前記一般式（D^A）～（D^D）で表される４つの基群（Ａ群～Ｄ群）について説明する。

[0705] （前記一般式（D^A）で表されるＡ群に属する基についての説明）

前記一般式（D^A）において、＊^{4}及び＊^{5}のうち、一方は前記一般式（１［Ｖ］）中の＊１～＊３のいずれかと結合し、他方はAr^1と結合する。

本発明の一態様としては、前記一般式（D^A）において、＊^{5}は＊１～＊３のいずれかと結合し、＊^{4}はAr^1と結合することが好ましい。

[0706] Ar^1及びAr^2は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数は６～３０のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数は５～３０のヘテロアリール基である。

Ar^1及びAr^2が表すアリール基の環形成炭素数は６～３０であり、好ま

しくは６～１８、より好ましくは６～１５、さらに好ましくは６～１２、特に好ましくは６～１０である。

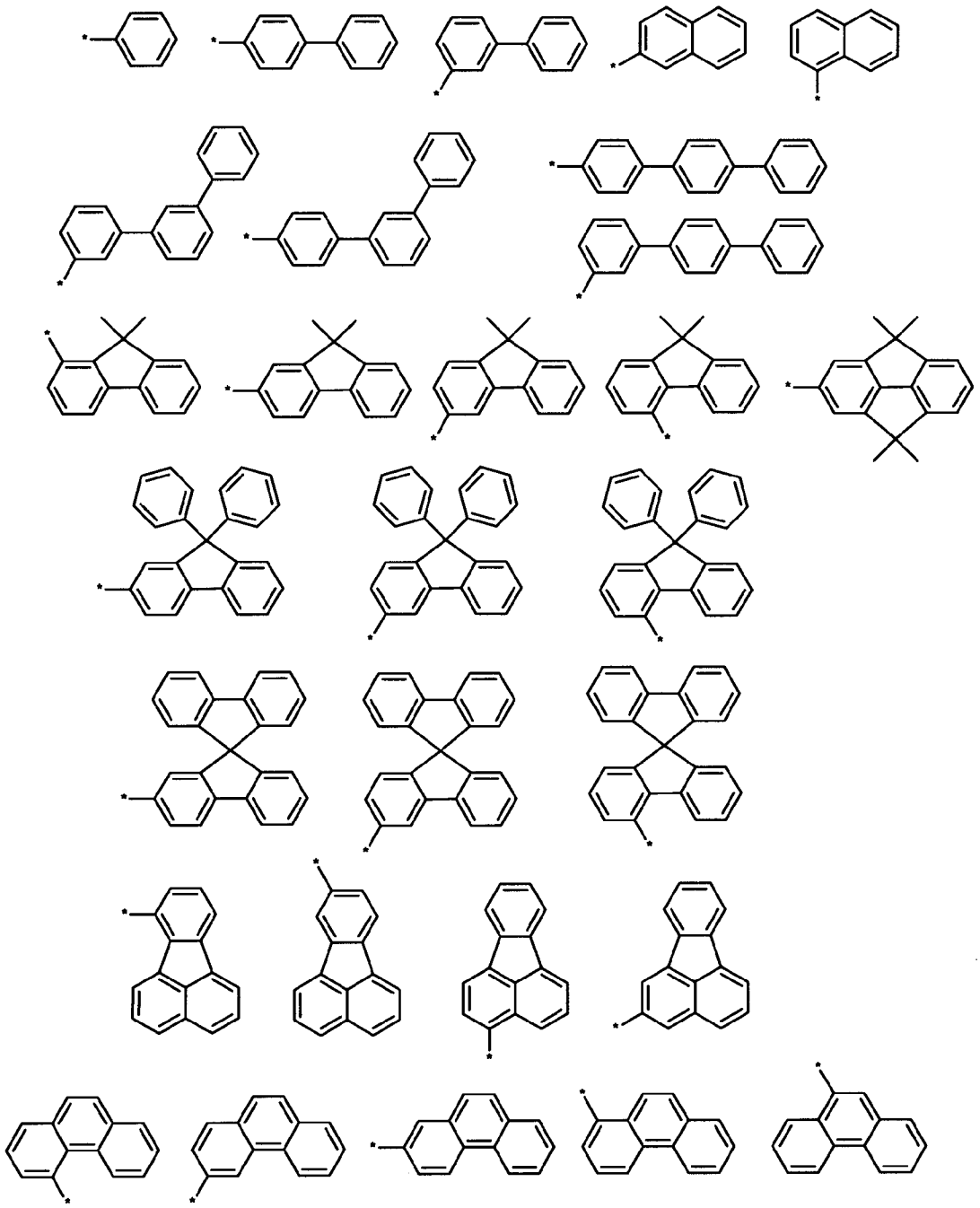
なお、該アリール基は、非縮合アリール基、縮合アリール基、及びこれらの組み合わせのいずれであってもよい。

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

[0707] Ａｒ[1]及びＡｒ[2]が表すアリール基としては、より具体的には、下記群から選択されるアリール基が好ましい。

[0708]

[化536]



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

[0709] Ａｒ[1]及びＡｒ[2]が表すヘテロアリール基の環形成原子数は、５～３０であり、好ましくは５～２０、より好ましくは５～１４、更に好ましくは５～１０である。

該ヘテロアリール基は、少なくとも１個、好ましくは１～５個、より好ましくは１～３個、さらに好ましくは１～２個の同一又は異なるヘテロ原子を含む。

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

[0710] Ａｒ[1]及びＡｒ[2]としては、いずれも、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０のアリール基が好ましい。該アリール基としてより好ましいものは、前述の通りである。

[0711] 前記一般式（Ｄ[A]）において、Ｘ[1]～Ｘ[4]のうちの１つ及びＸ[13]～Ｘ[16]のうちの１つは、それぞれ＊[10]及び＊[11]に結合する炭素原子であり、それ以外の６つは、それぞれ独立にＣ（Ｒ）又は窒素原子である。

また、X^{9}～X^{12}のうちの１つ及びX^{21}～X^{24}のうちの１つは、それぞれ$*^{12}$及び$*^{13}$に結合する炭素原子であり、それ以外の６つは、それぞれ独立にＣ（Ｒ）又は窒素原子である。

上記規定の意味するところについて、「X^{1}～X^{4}及びX^{13}～X^{16}」に関する規定を例に説明すると、仮に、X^{1}が$*^{10}$に結合する炭素原子であり、X^{13}が$*^{11}$に結合する炭素原子である場合を考える。この場合、X^{1}及びX^{13}は、炭素原子となり当該２つの炭素原子は互いに直接結合して、２つの（アザ）カルバゾリル基を結合する。また、それ以外のX^{2}～X^{4}及びX^{14}～X^{16}の６つは、それぞれ独立にＣ（Ｒ）又は窒素原子となる。他の規定についても、上記と同じ事項を意味する。

[0712] つまり、前記一般式（D^{A}）において、$*^{10}$及び$*^{12}$は、それぞれ所定の（アザ）カルバゾリル基の１位、２位、３位、又は４位（X^{1}～X^{4}のうちの１つ、X^{9}～X^{12}のうちの１つ）の炭素原子と結合する。

一方、前記一般式（D^{A}）において、$*^{11}$及び$*^{13}$は、それぞれ所定の（アザ）カルバゾリル基の５位、６位、７位、又は８位（X^{13}～X^{16}のうちの１つ、X^{21}～X^{24}のうちの１つ）の炭素原子と結合する。

その結果、$*^{10}$－$*^{11}$及び$*^{12}$－$*^{13}$により、２つの（アザ）カルバゾリル基が結合される。

[0713] また、前記一般式（D^{A}）において、X^{5}～X^{8}及びX^{17}～X^{20}は、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子である。

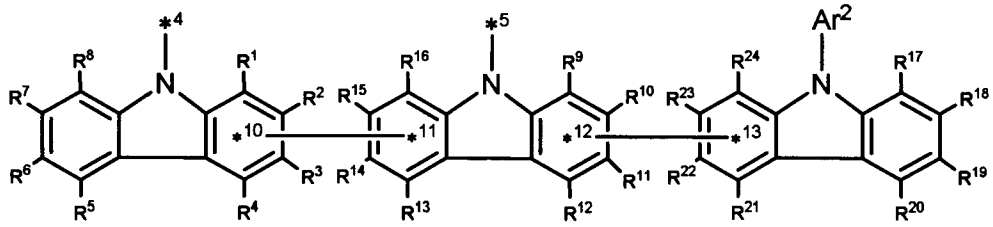
つまり、前記一般式（D^{A}）において、（アザ）カルバゾリル基同士の結合に関与しないX^{1}～X^{24}は、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子であり、本発明の一態様においては、いずれもＣ（Ｒ）であることが好ましい。

ここで、Ｒは水素原子又は置換基であって、複数存在するＲは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲ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。

ただし、本発明の一態様の化合物において、複数存在するＲから選ばれる２つが互いに結合して環を形成していることがないことが好ましい。

[0714] 本発明の一態様において、前記一般式（D^A）で表される基が、下記一般式（D^{A1}）で表される基であることが好ましい。

[0715] [化537]



(D^{A1})

[0716] 一般式（D^{A1}）中、R^1～R^{24}は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表し、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、R^1～R^{24}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。それ以外の各記号の定義は、前記一般式（D^A）に関する記載と同じである。

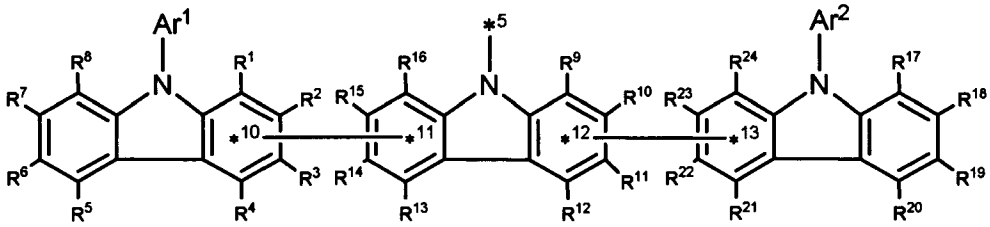
[0717] ＊^{10}－＊^{11}は、R^1～R^4のうちの１つ及びR^{13}～R^{16}のうちの１つがそれぞれ脱離し、当該基と結合していた炭素原子同士の結合を示し、＊^{12}－＊^{13}は、R^9～R^{12}のうちの１つ及びR^{21}～R^{24}のうちの１つがそれぞれ脱離し、当該基と結合していた炭素原子同士の結合を示す。

つまり、＊^{10}及び＊^{12}は、一つのカルバゾリル基の１位、２位、３位、又は４位の炭素原子と結合し、＊^{11}及び＊^{13}は、別のカルバゾリル基の５位、６位、７位、又は８位の炭素原子と結合し、＊^{10}－＊^{11}及び＊^{12}－＊^{13}により、２つのカルバゾリル基が結合される。

[0718] また、本発明の一態様において、前記一般式（D^{A1}）で表される基が、下記一般式（D^{A1}－１）で表される基がより好ましく、（D^{A1}－１－１）～（D^{A1}－１－６）のいずれかで表される基であることが更に好ましい。

[0719]

[化538]

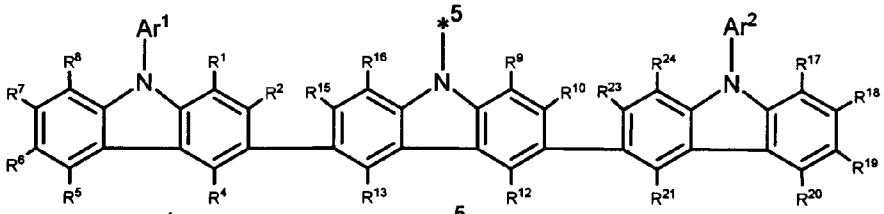


(D^{A1}-1)

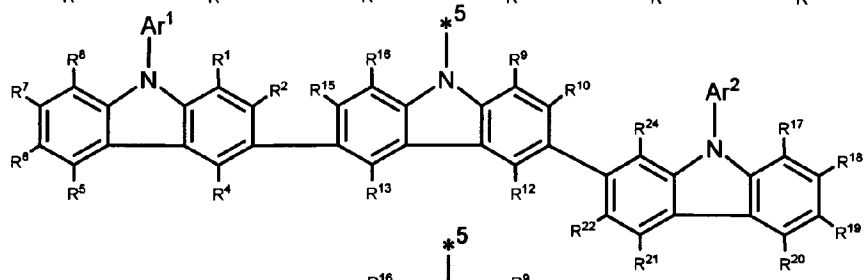
（一般式（ＤＡ１－１）中、各記号の定義は、前記一般式（ＤＡ１）に関する記載と同じである。）

[0720]

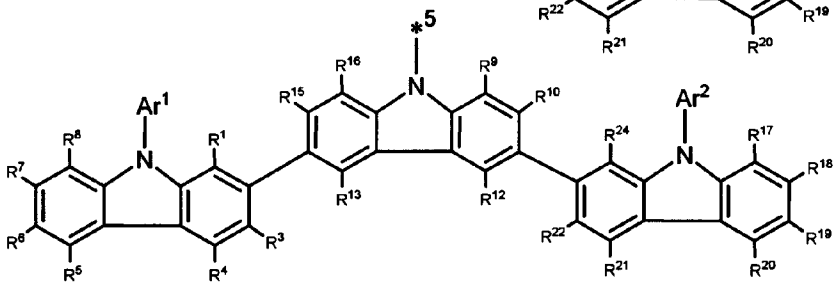
[化539]



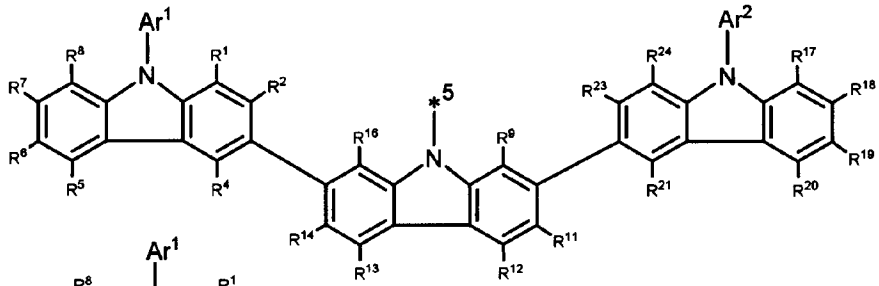
(D^{A1}-1-1)



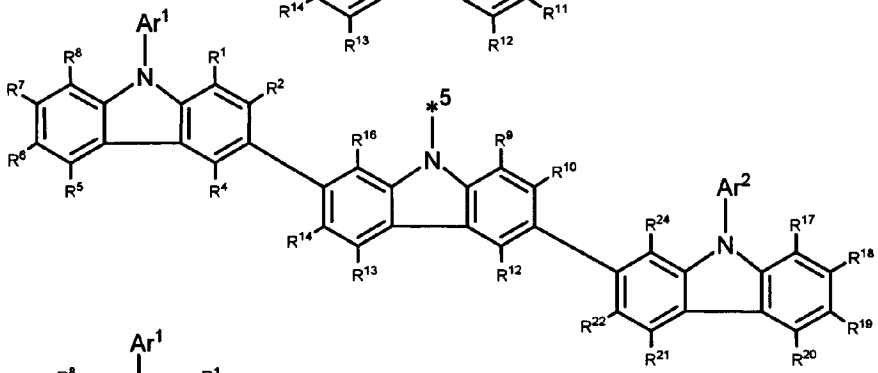
(D^{A1}-1-2)



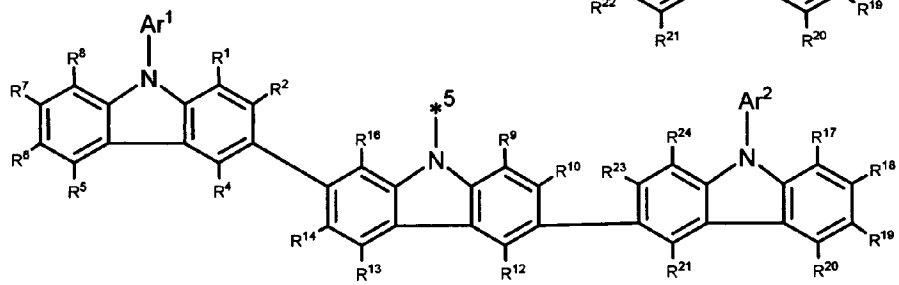
(D^{A1}-1-3)



(D^{A1}-1-4)



(D^{A1}-1-5)



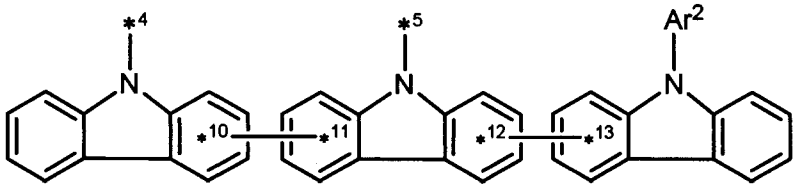
(D^{A1}-1-6)

（一般式（D^{A1}－１－１）～（D^{A1}－１－６）中、各記号の定義は、前記一般式（D^{A1}）に関する記載と同じである。

[0721] なお、前記一般式（D^A）中のR^1～R^{24}から選ばれる２つが互いに結合して環を形成する場合には、R^5とR^6、R^6とR^7、R^7とR^8、R^{17}とR^{18}、R^{18}とR^{19}、及びR^{19}とR^{20}から選ばれる１組以上で、互いに結合して環を形成する構成が好ましい。

ただし、本発明の一態様の化合物において、前記一般式（D^A）中のR^1～R^{24}から選ばれる２つが互いに結合して環を形成していることがないことが好ましく、前記一般式（D^A）で表される基が、下記一般式（D^{A2}）で表される基であることがより好ましい。

[0722] [化540]



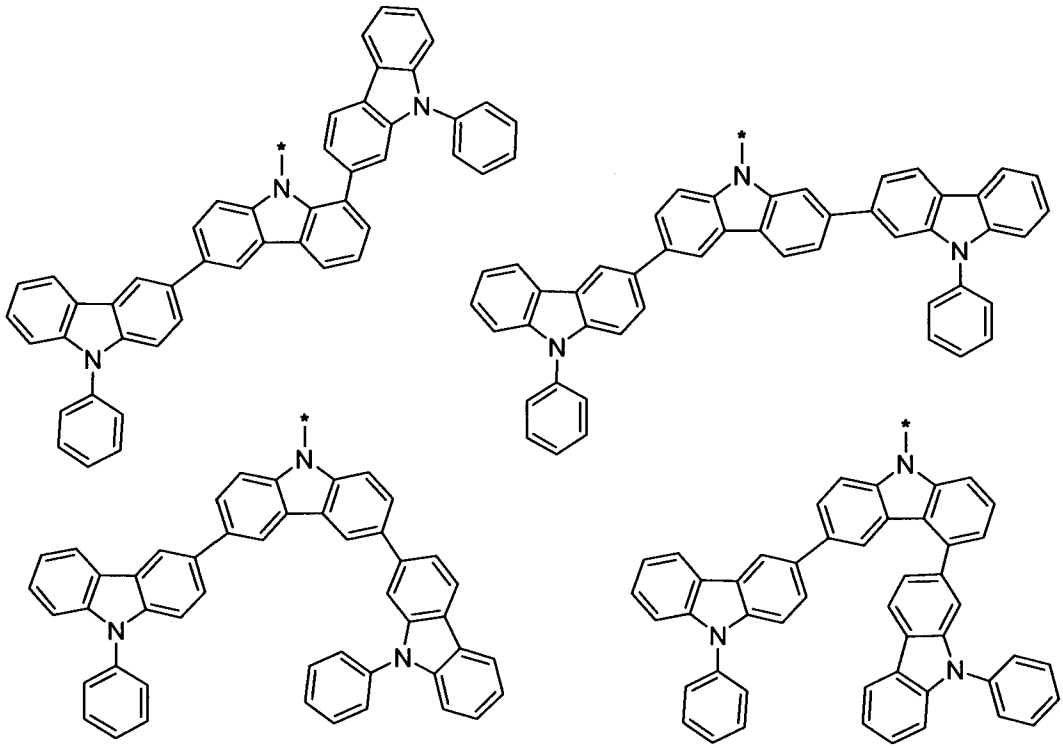
(D^{A2})

[0723] 前記一般式（D^{A2}）中、$*^{10}-*^{11}$、及び$*^{12}-*^{13}$は、ベンゼン環中の水素原子がそれぞれ脱離した炭素原子同士の結合を示す。それ以外の各記号の定義は、前記一般式（D^A）に関する記載と同じである。

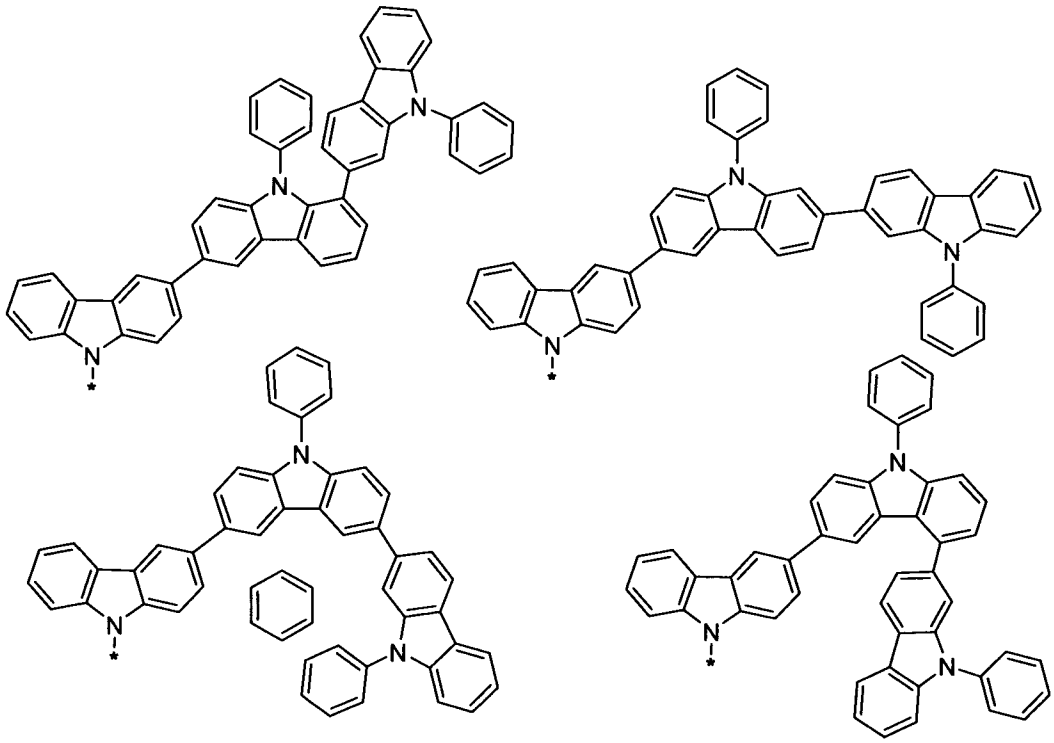
[0724] 前記一般式（D^{A1}）で表される基として、より具体的には、下記から選択される基が好ましい。なお、下記の基において、＊は、前記一般式（１［Ｖ］）中の＊１～＊３のいずれかとの結合位置を示す。加えて、下記の基において、水素原子と結合している炭素原子は、当該水素原子に代えて、上述の置換基と結合してもよい。

[0725]

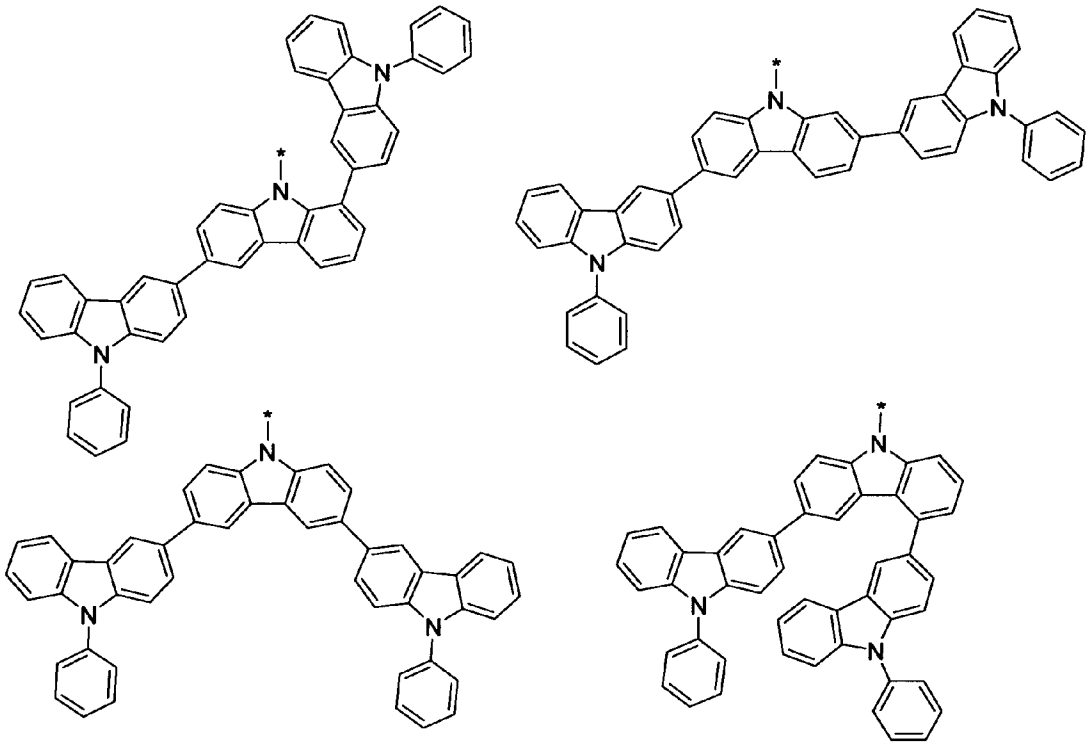
[化541]



[0726] [化542]

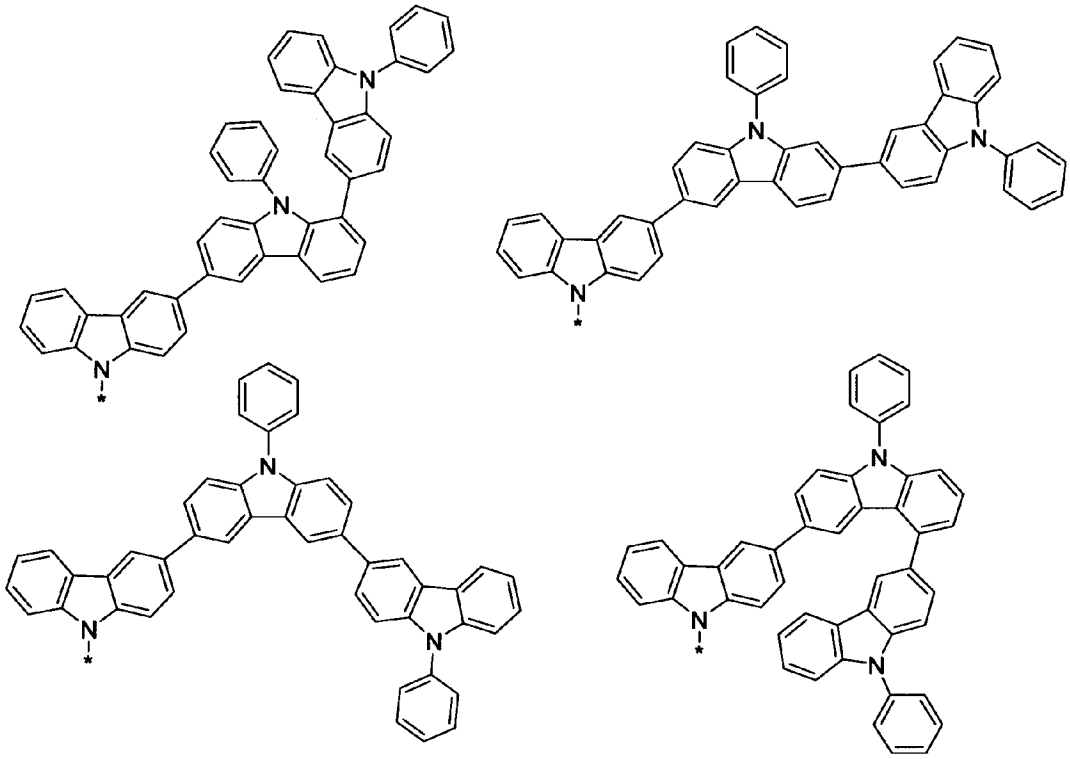


[0727] [化543]

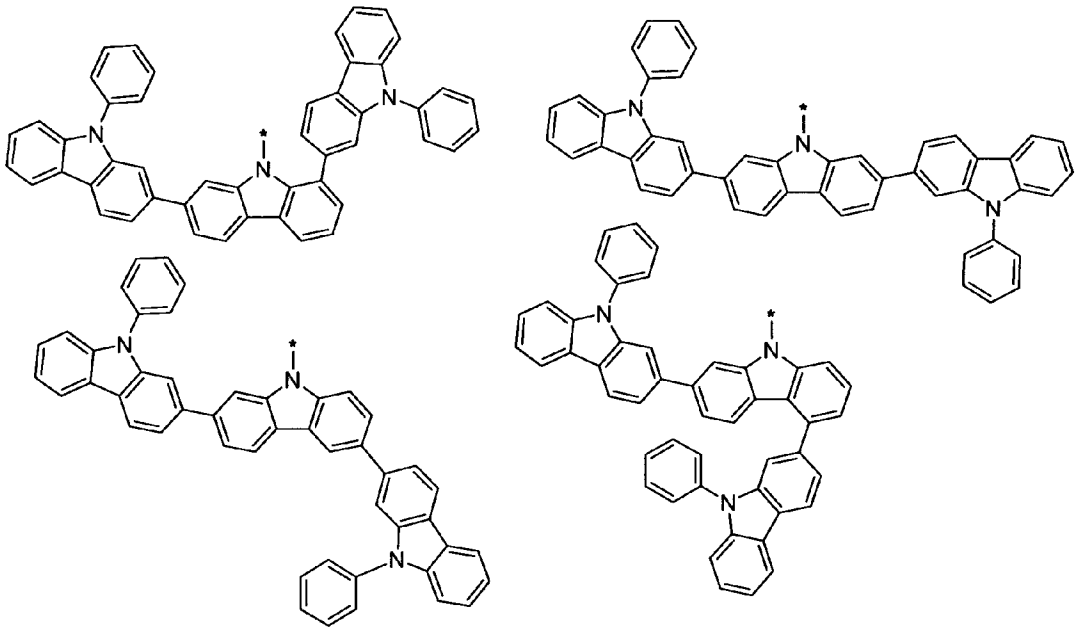


[0728]

[化544]

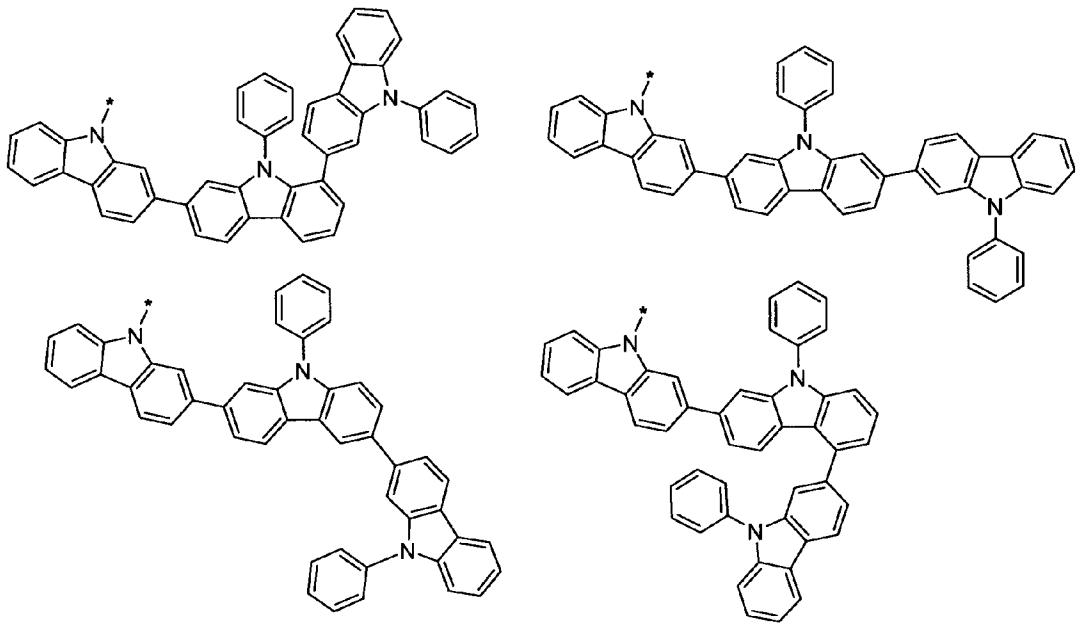


[0729] [化545]

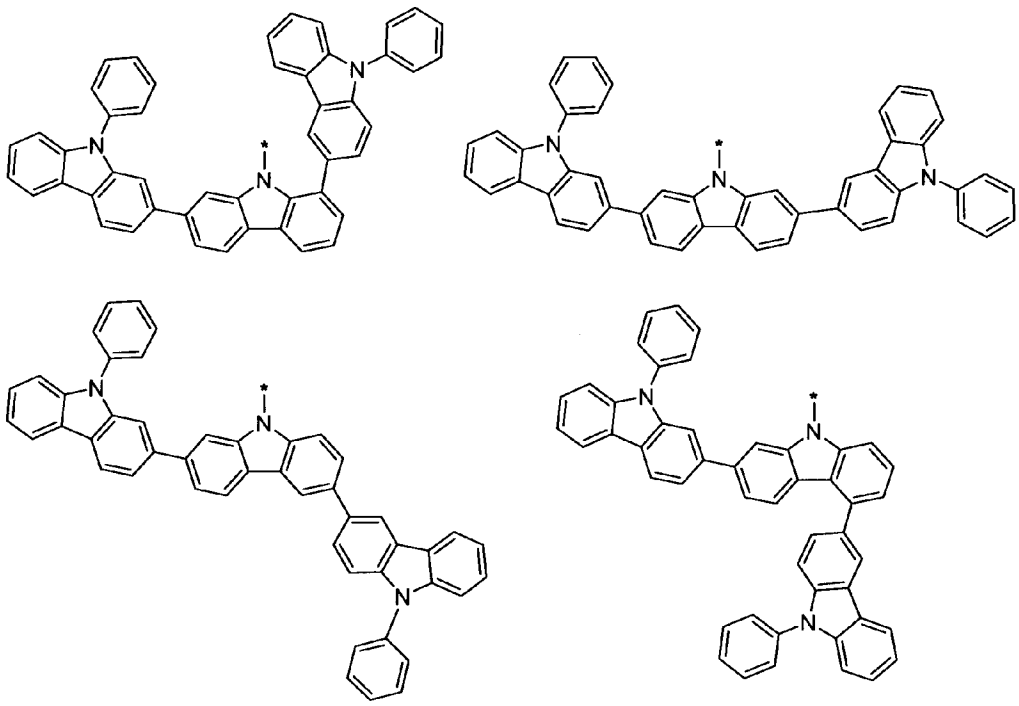


[0730]

[化546]

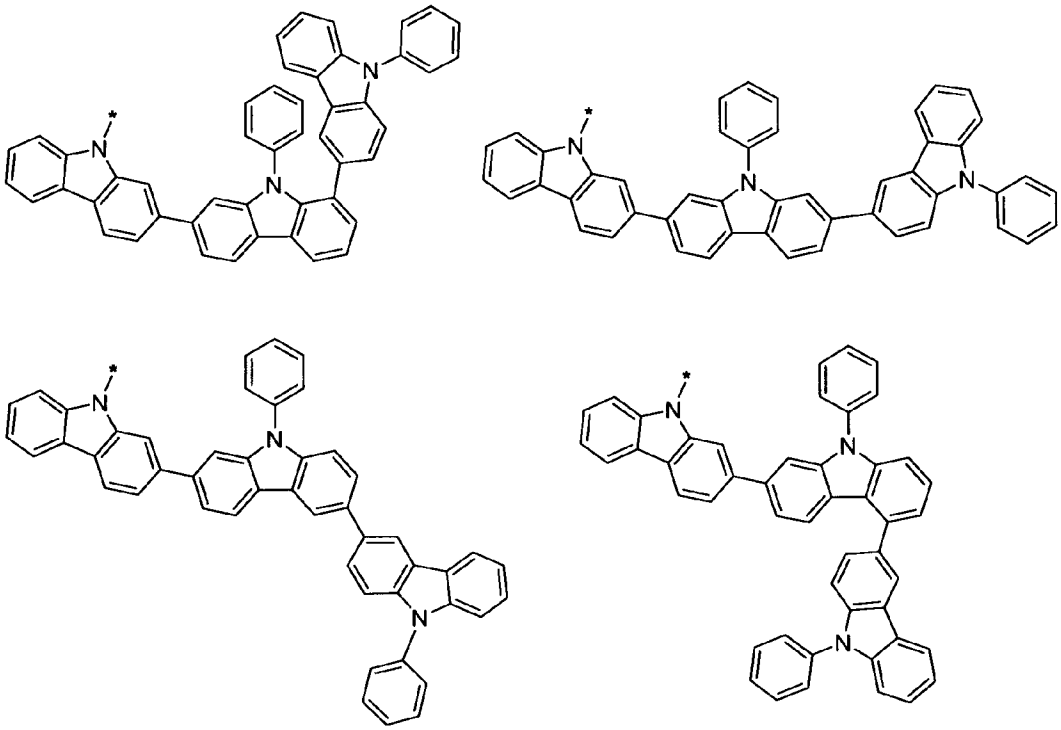


[0731] [化547]

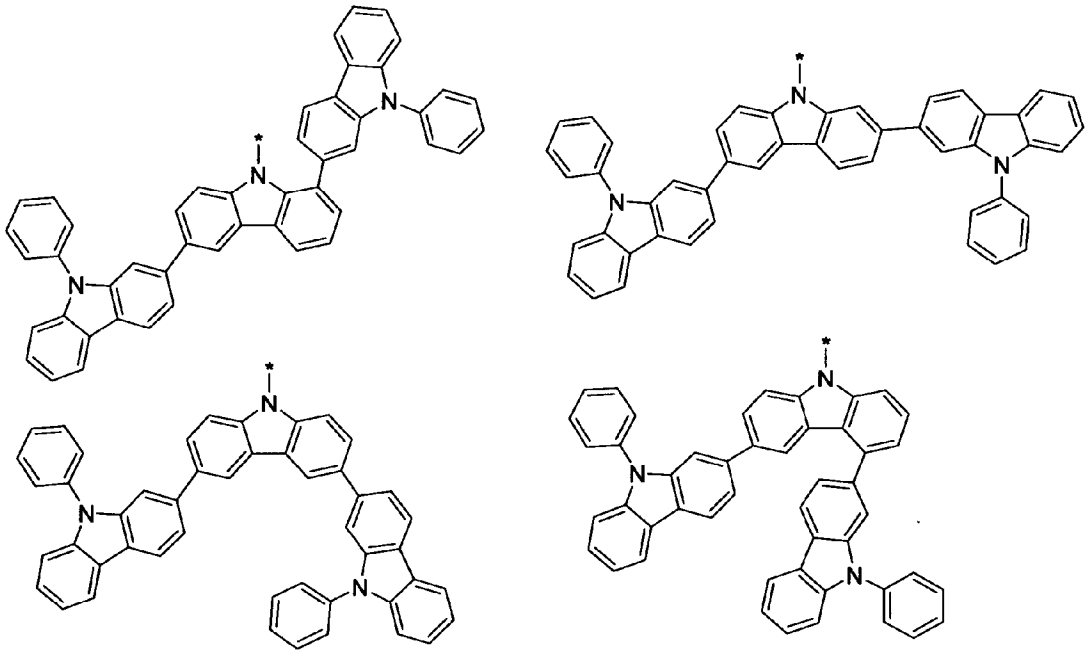


[0732]

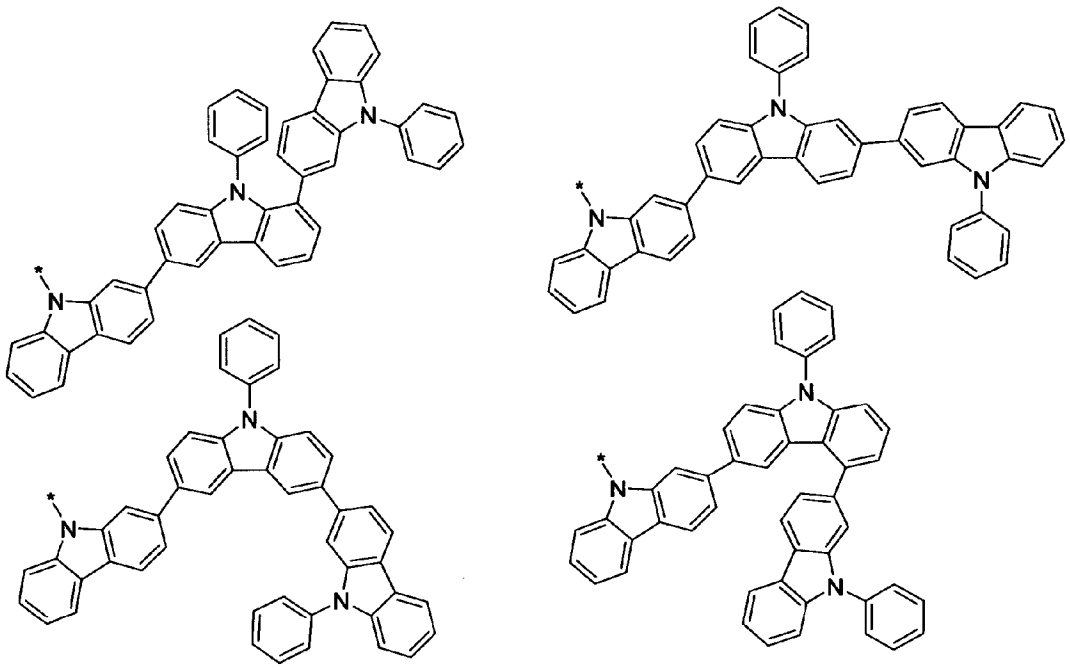
[化548]



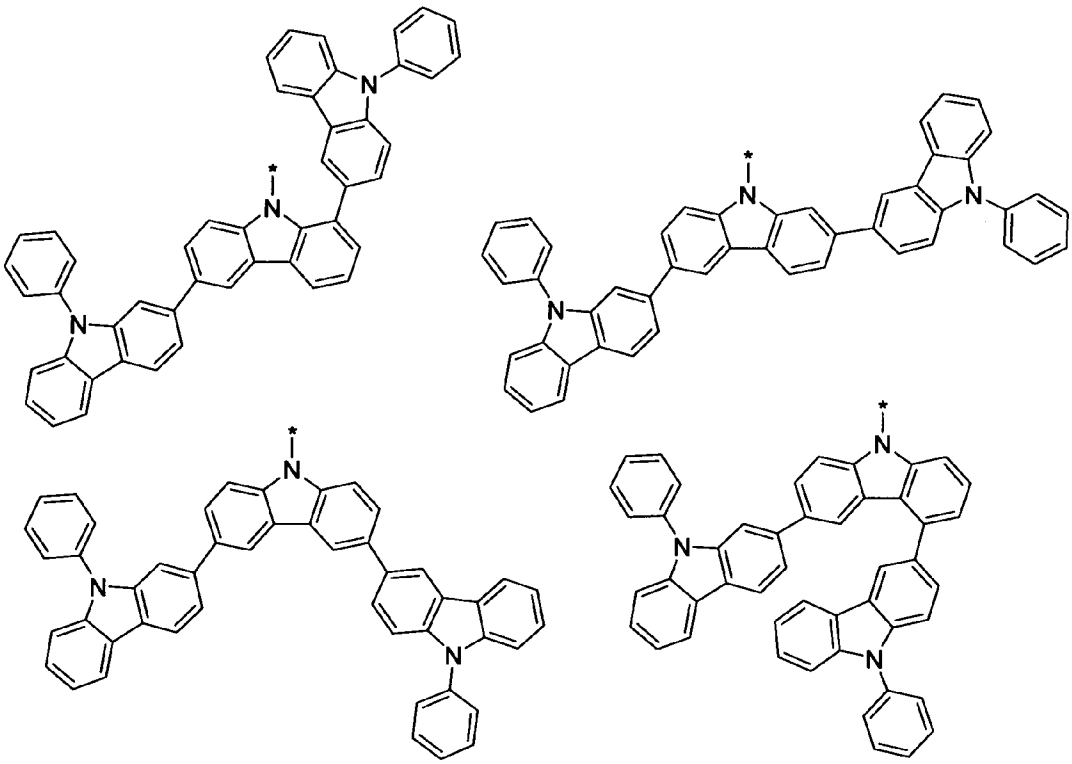
[0733] [化549]



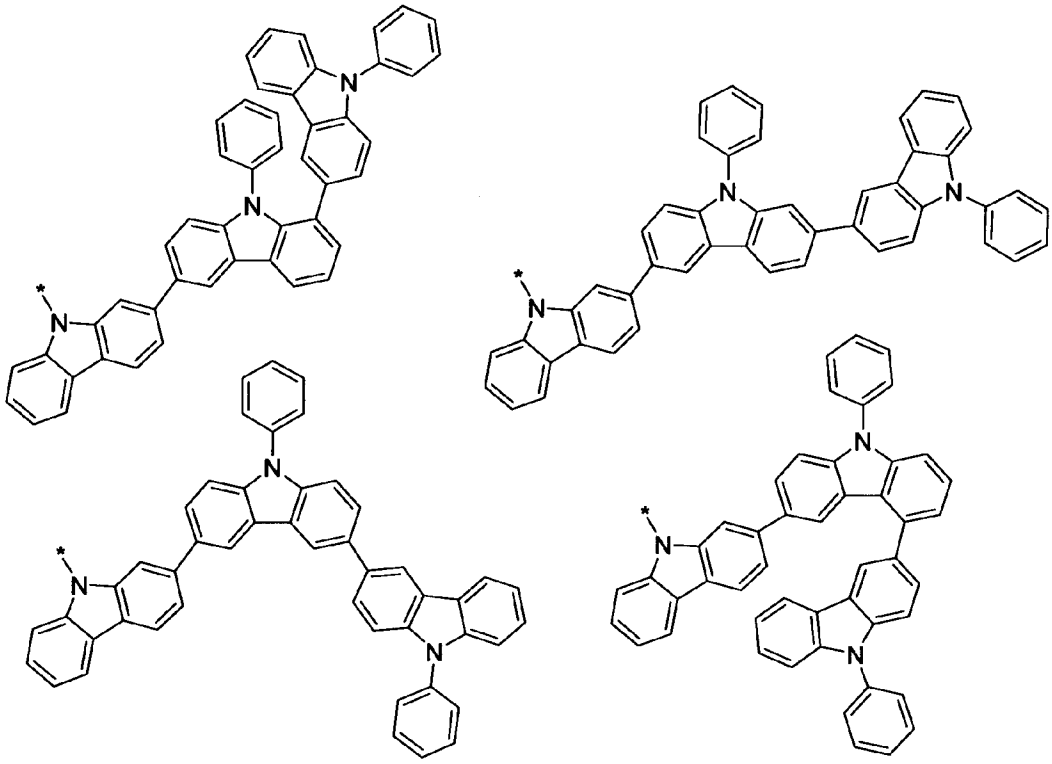
[0734] [化550]



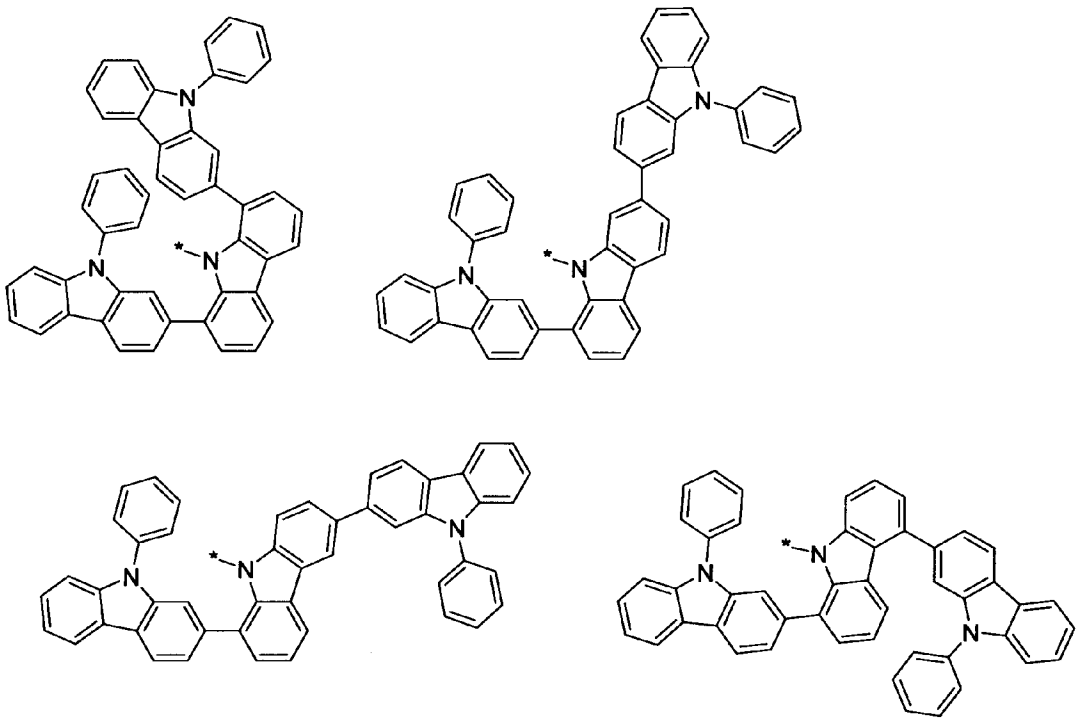
[0735] [化551]



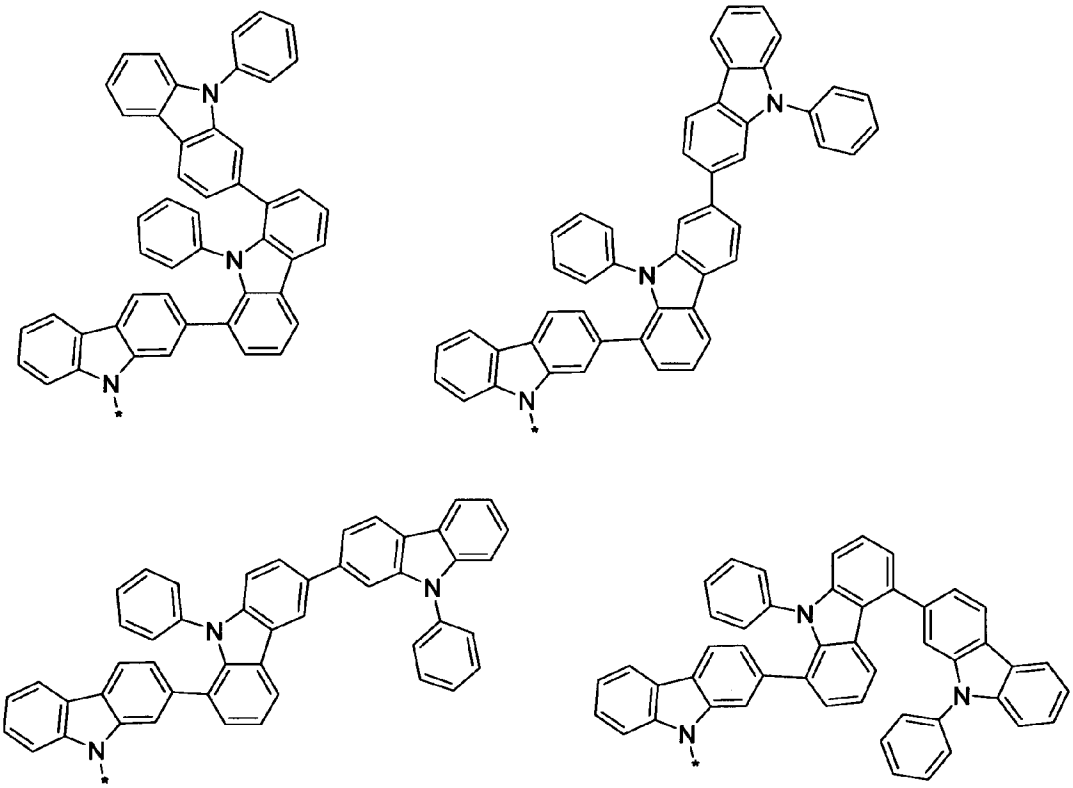
[0736] [化552]



[0737] [化553]

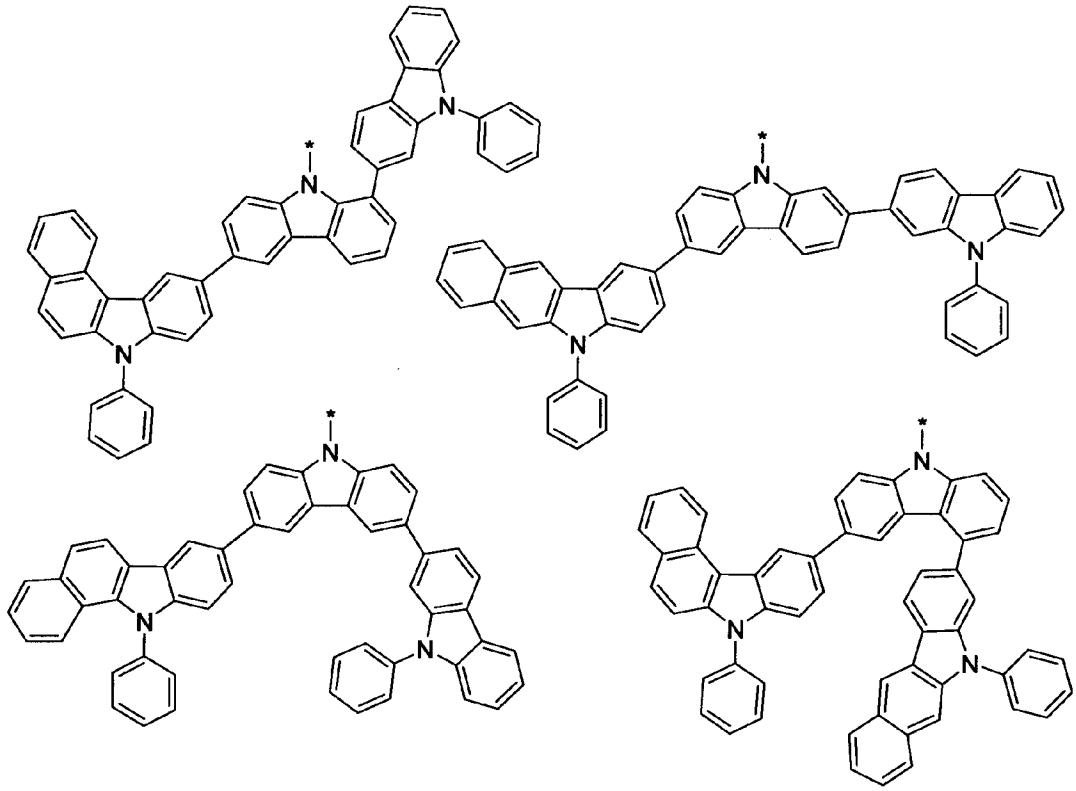


[0738] [化554]

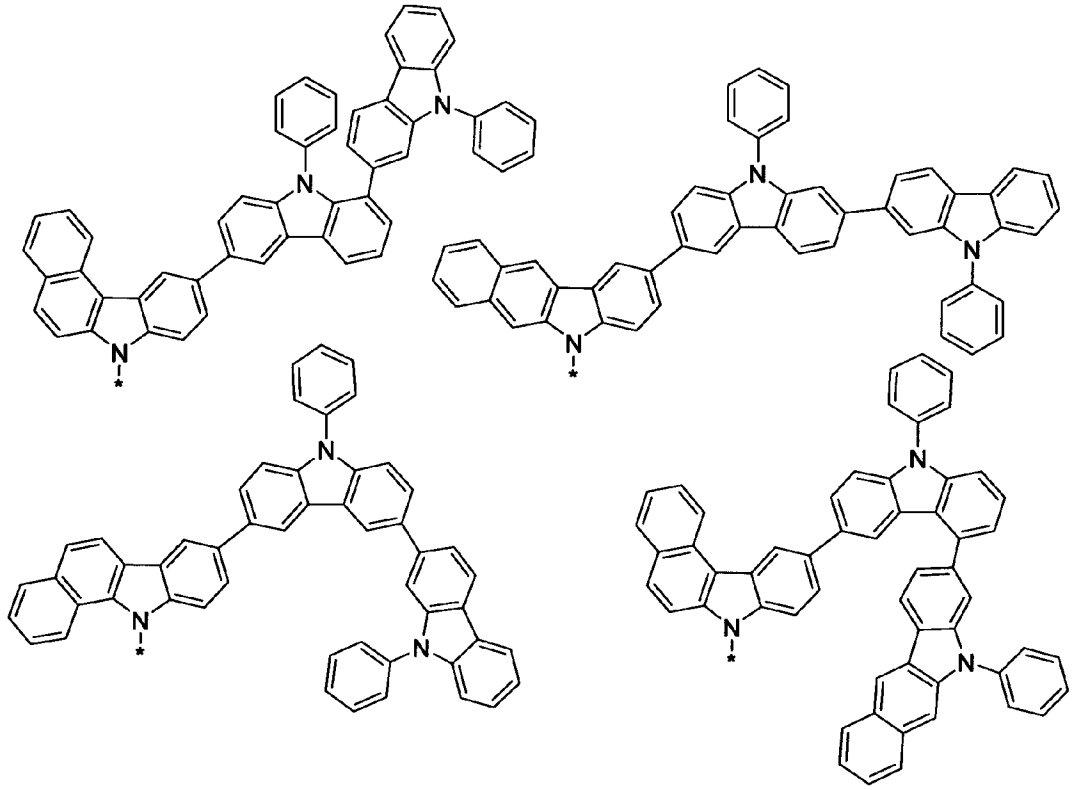


[0739]

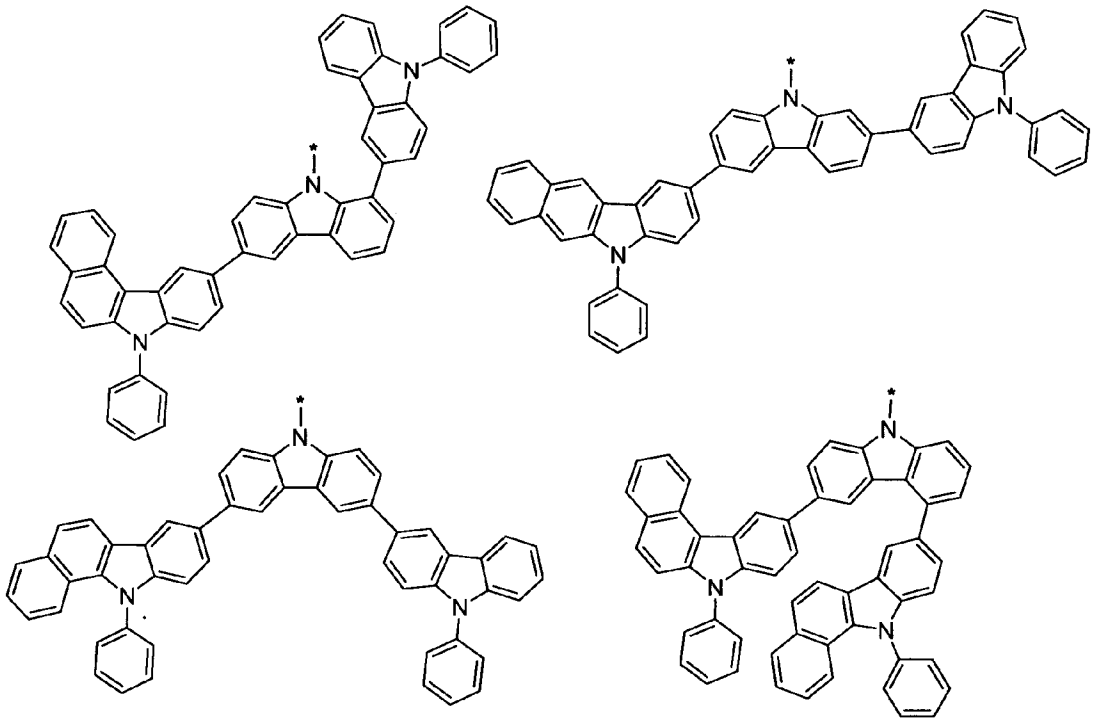
[化555]



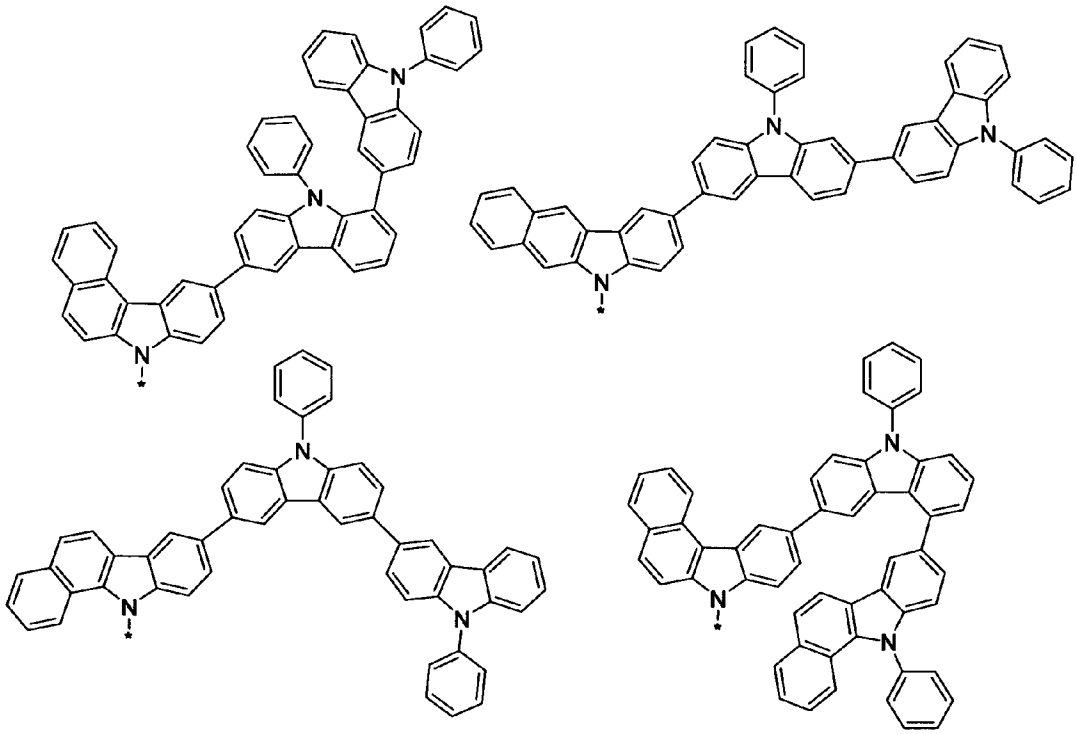
[0740] [化556]



[0741] [化557]



[0742] [化558]



[0743] （前記一般式（D^B）で表されるＢ群に属する基についての説明）

前記一般式（D^B）において、X^1～X^4のうちの２つは、それぞれ＊^{21}及び＊^{22}に結合する炭素原子であり、それ以外の２つは、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子である。

本発明の一態様において、＊^{21}及び＊^{22}に結合する炭素原子となるX^1～X^4から選ばれる２つの組み合わせとしては、X^1とX^2、X^2とX^3、及びX^3とX^4から選ばれる１組が好ましい。

[0744] また、X^5～X^{12}は、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子である。

つまり、前記一般式（D^B）において、一般式（D^B）中に示される所定の環構造の形成に関与しないX^1～X^{12}は、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子であり、本発明の一態様においては、いずれもＣ（Ｒ）であることが好ましい。

ここで、Ｒは水素原子又は置換基であって、複数存在するＲは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲ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。

ただし、本発明の一態様の化合物において、複数存在するＲから選ばれる２つが互いに結合して環を形成していることがないことが好ましい。

[0745] 前記一般式（D^B）中のY^1は、酸素原子、硫黄原子、－Ｃ（R^A）（R^B）－、－Ｓｉ（R^C）（R^D）－、－Ｐ（R^E）－、－Ｐ（＝Ｏ）（R^F）－、－Ｓ（＝Ｏ）$_2$－、又は－Ｐ（＝Ｓ）（R^G）－、又は－Ｎ（R^H）－である。

R^A～R^Hは、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、R^AとR^B、及びR^CとR^Dは、互いに結合して環を形成していてもよい。

＊は一般式（１［Ｖ］）中の＊１～＊３のいずれかと結合する。

[0746] なお、R^A～R^Gとして選択し得る置換基としては、上記に記載の置換基が挙げられるが、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０のヘテロアリール基が好ましく、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０のアリール基がより好ましい。

[0747] R^A～R^Gとして選択し得るアリール基の環形成炭素数は、６～３０であり、好ましくは６～１８、より好ましくは６～１３、さらに好ましくは６～１２、特に好ましくは６～１０である。なお、該アリール基は、非縮合アリール基、縮合アリール基、及びこれらの組み合わせのいずれであってもよい。

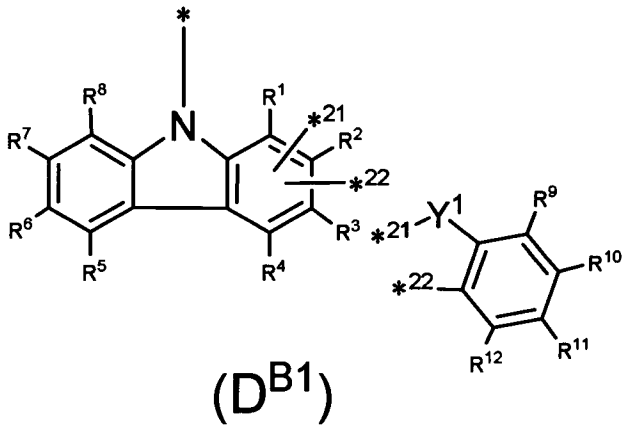
また、R^A～R^Gとして選択し得るヘテロアリール基の環形成原子数は、５～３０であり、好ましくは５～２０、より好ましくは５～１４、更に好ましくは５～１０である。

該ヘテロアリール基は、少なくとも１個、好ましくは１～５個、より好ましくは１～３個、さらに好ましくは１～２個の同一又は異なるヘテロ原子を含む。

前記R^A～R^Gとして選択し得るアリール基及びヘテロアリール基について、具体的な基及び好適な基としては、前記一般式（D^A）中のAr^1及びAr^2として選択し得るアリール基及びヘテロアリール基として記載したものが挙げられる。

[0748] 本発明の一態様において、前記一般式（D^B）で表される基が、下記一般式（D^{B1}）で表される基であることが好ましい。

[0749] [化559]



(D^{B1})

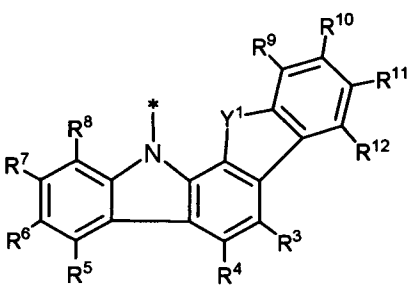
[0750] 一般式（D^{B1}）中、R^1～R^{12}は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表し、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、R^1～R^{12}から選ばれる２つは、互いに結合して環を形成していてもよい。それ以外の

各記号の定義は、前記一般式（D^B）に関する記載と同じである。

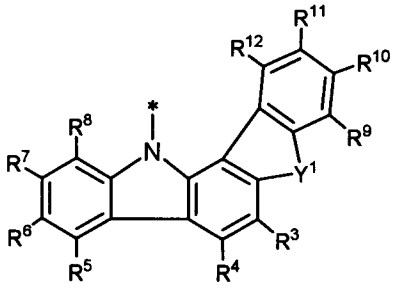
なお、R^1～R^4のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は$*^1$及び$*^2$と結合する。

[0751] 本発明の一態様において、前記一般式（D^{B1}）で表される基の中でも、下記一般式（D^{B1}－１）～（D^{B1}－６）のいずれかで表される基がより好ましい。

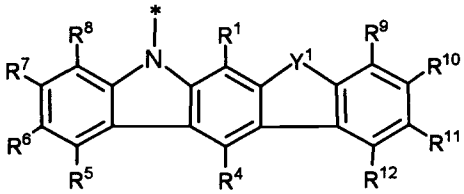
[0752] [化560]



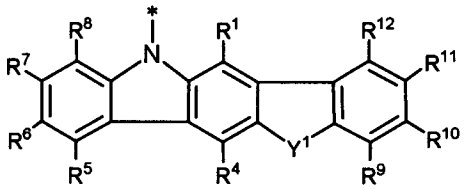
(D^{B1}-1)



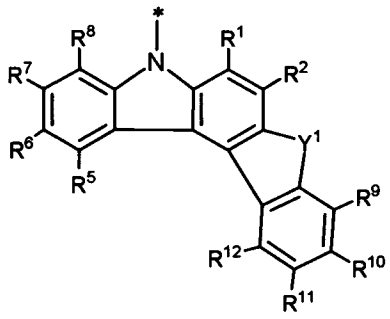
(D^{B1}-2)



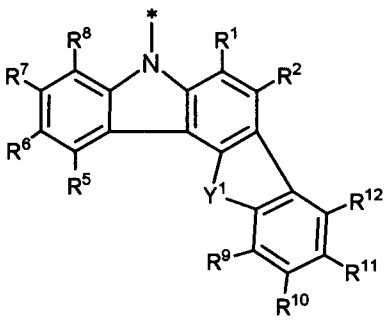
(D^{B1}-3)



(D^{B1}-4)



(D^{B1}-5)



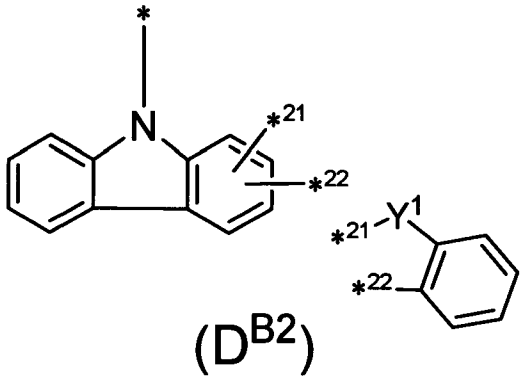
(D^{B1}-6)

（上記一般式（D^{B1}－１）～（D^{B1}－６）中、各記号の定義は、前記一般式（D^{B1}）に関する記載と同じである。）

[0753] なお、前記一般式（D^B）中のR^1～R^{24}から選ばれる２つが互いに結合して環を形成する場合には、R^5とR^6、R^6とR^7、及びR^7とR^8から選ばれる１組以上で、互いに結合して環を形成する構成が好ましい。

ただし、本発明の一態様の化合物において、前記一般式（D^B）中のR^1～R^{24}から選ばれる２つが互いに結合して環を形成していることがないことが好ましく、前記一般式（D^B）で表される基が、下記一般式（D^{B2}）で表される基であることがより好ましい。

[0754] [化561]



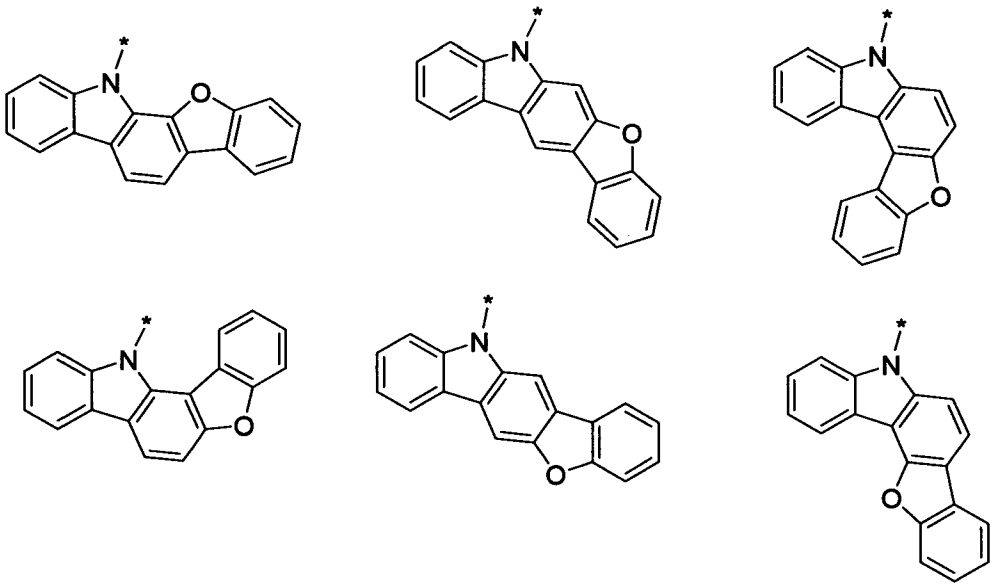
(D^{B2})

[0755] 前記一般式（D^{B2}）中、カルルバゾリル基の１位、２位、３位及び４位に有する４つの水素原子のうち２つが脱離して、脱離した水素原子と結合していた炭素原子が、$*^1$及び$*^2$と結合する。それ以外の各記号の適宜は、前記一般式（D^B）に関する記載と同じである。

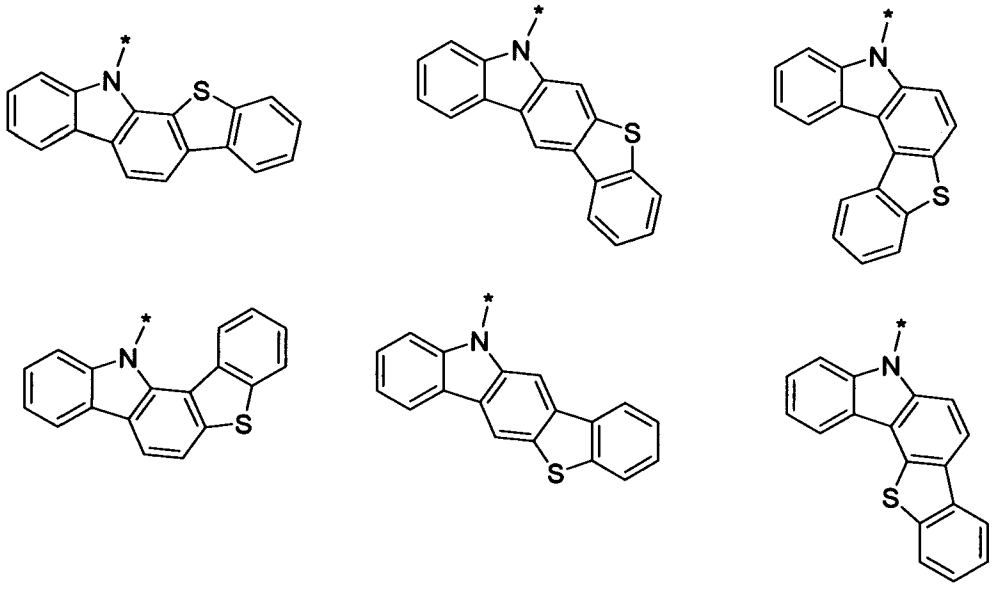
[0756] 前記一般式（D^B）で表される基として、より具体的には、下記群から選択される基が好ましい。なお、下記の基において、＊は、前記一般式（１［Ｖ］）中の＊１～＊３のいずれかとの結合する位置を示す。加えて、下記の基において、水素原子と結合している炭素原子は、当該水素原子に代えて、上述の置換基と結合してもよい。

[0757]

[化562]

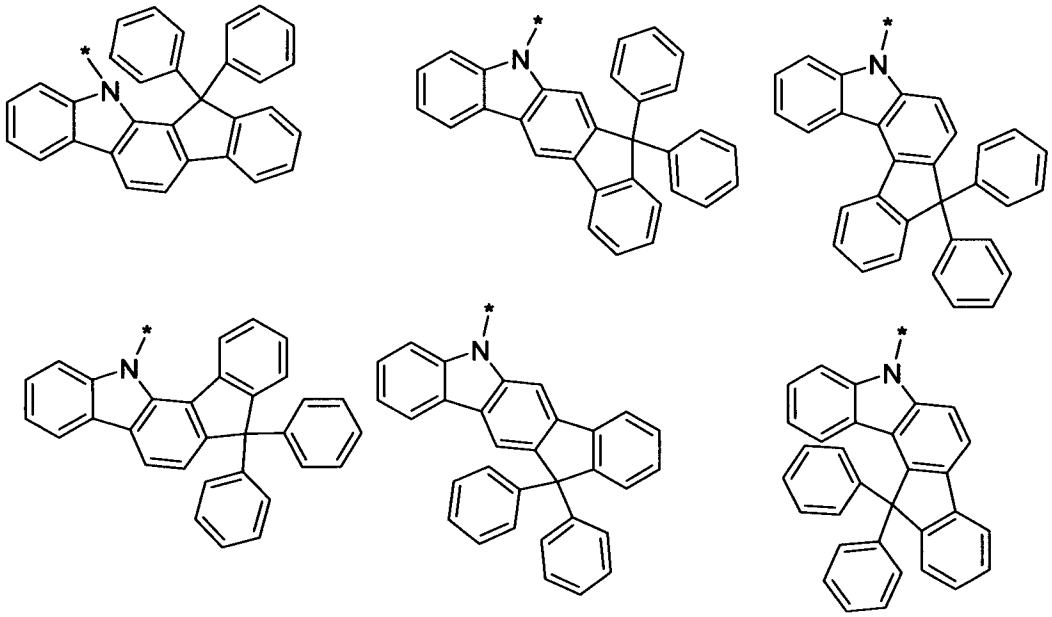


[0758] [化563]

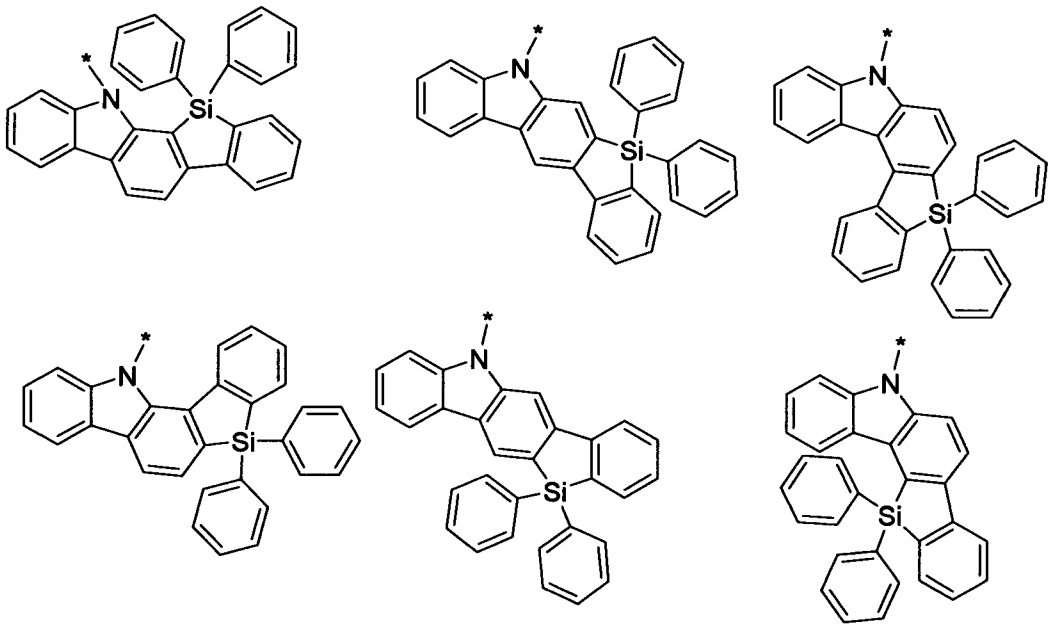


[0759]

[化564]

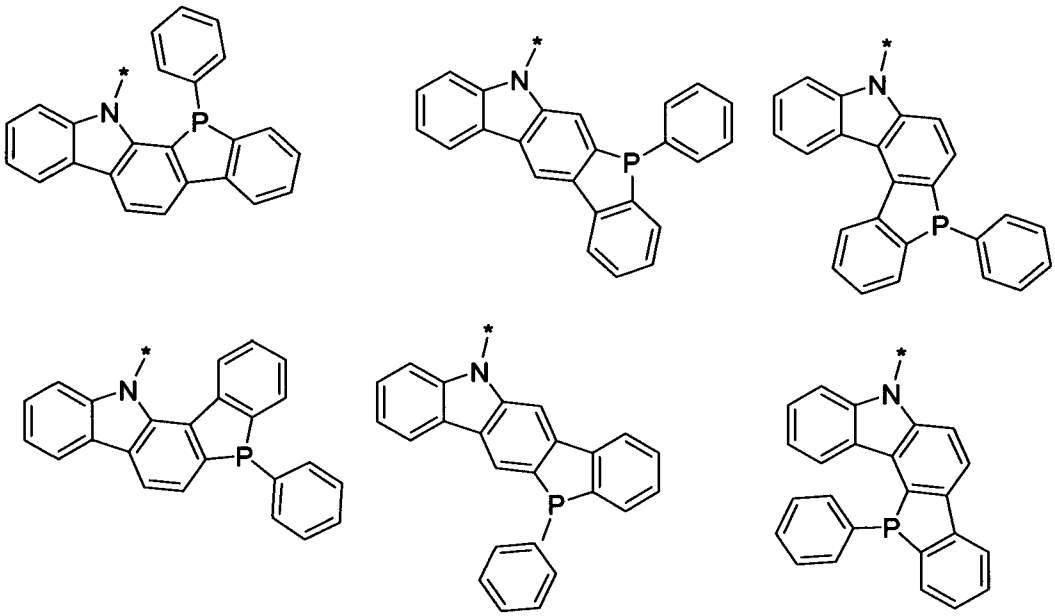


[0760] [化565]

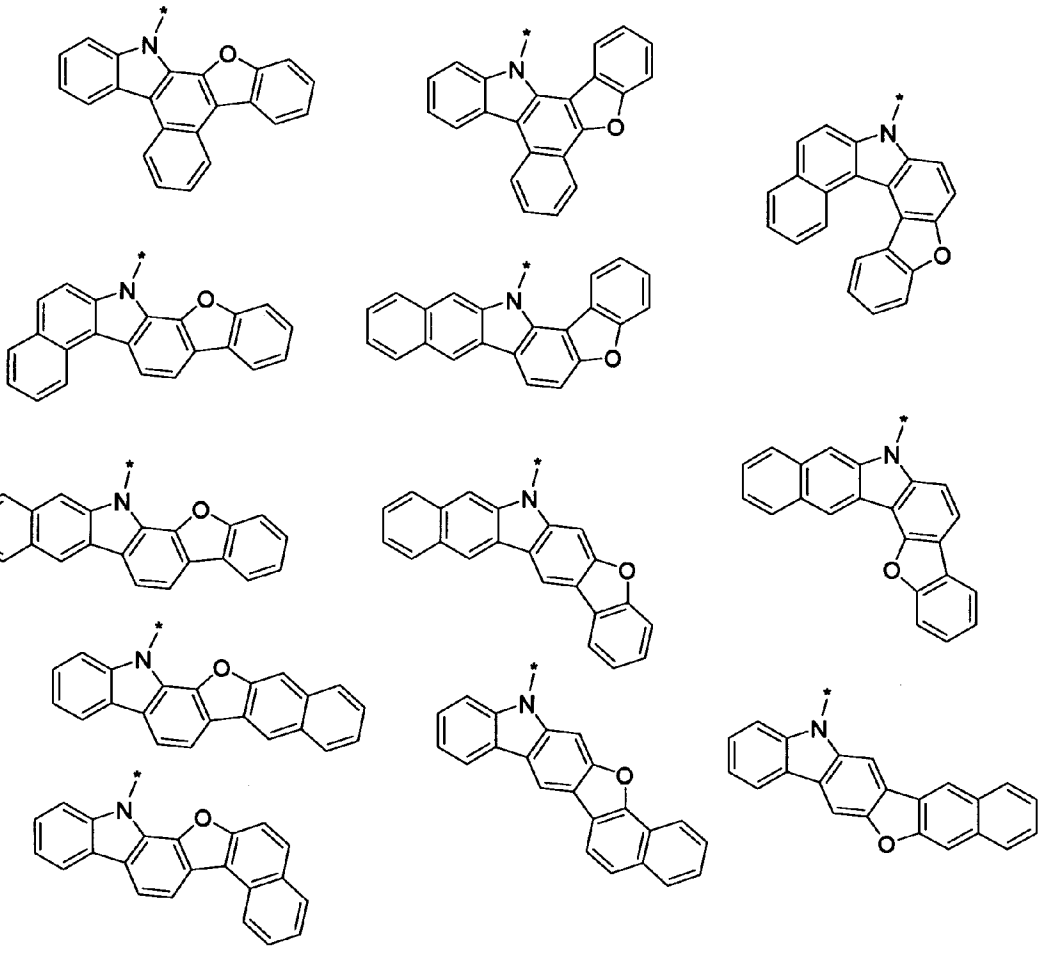


[0761]

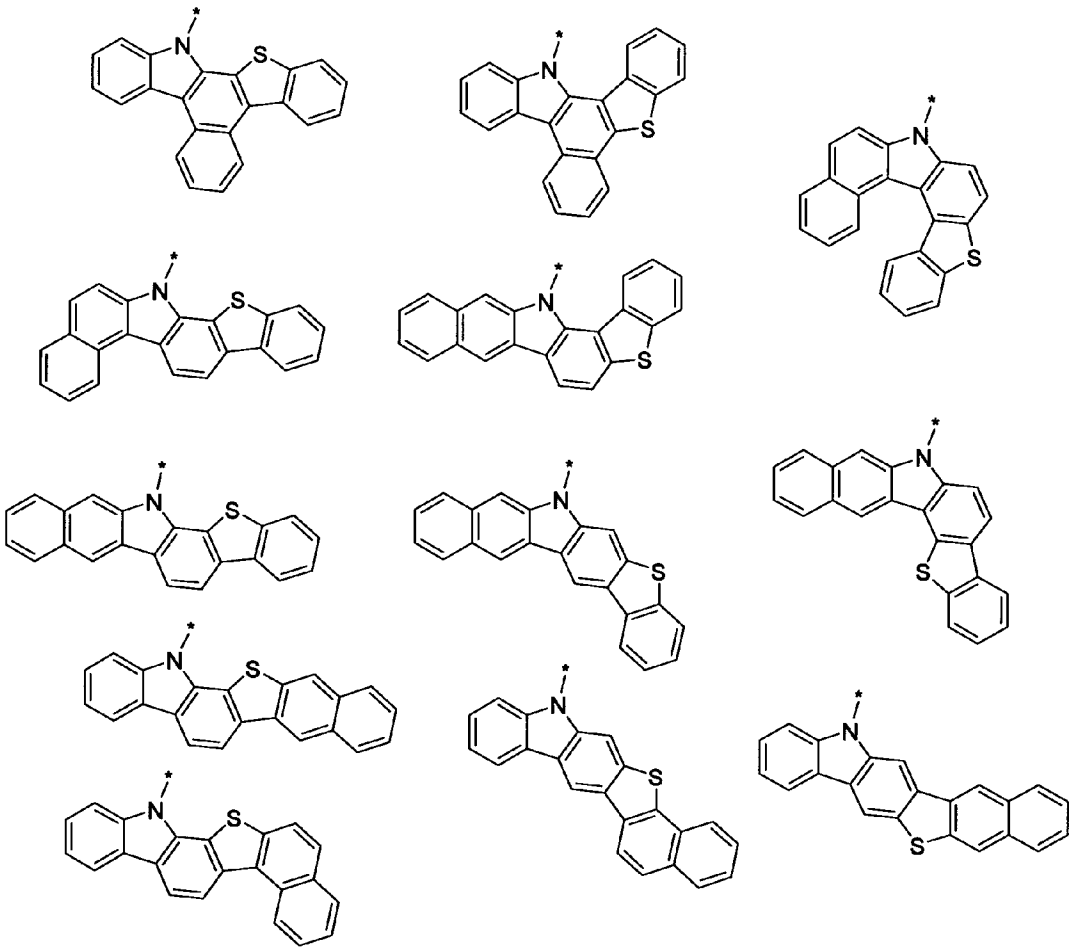
[化566]



[0762] [化567]

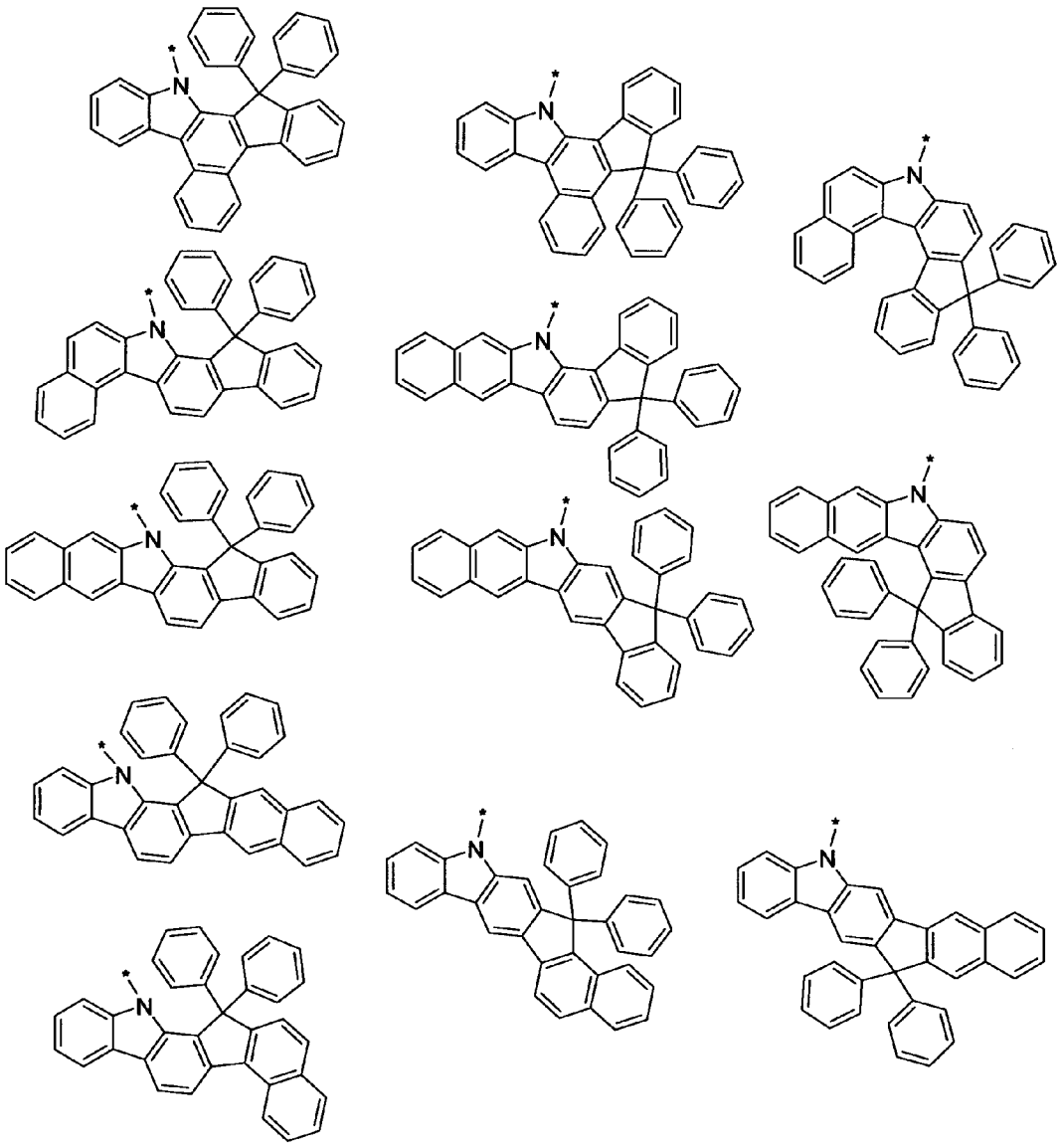


[0763] [化568]



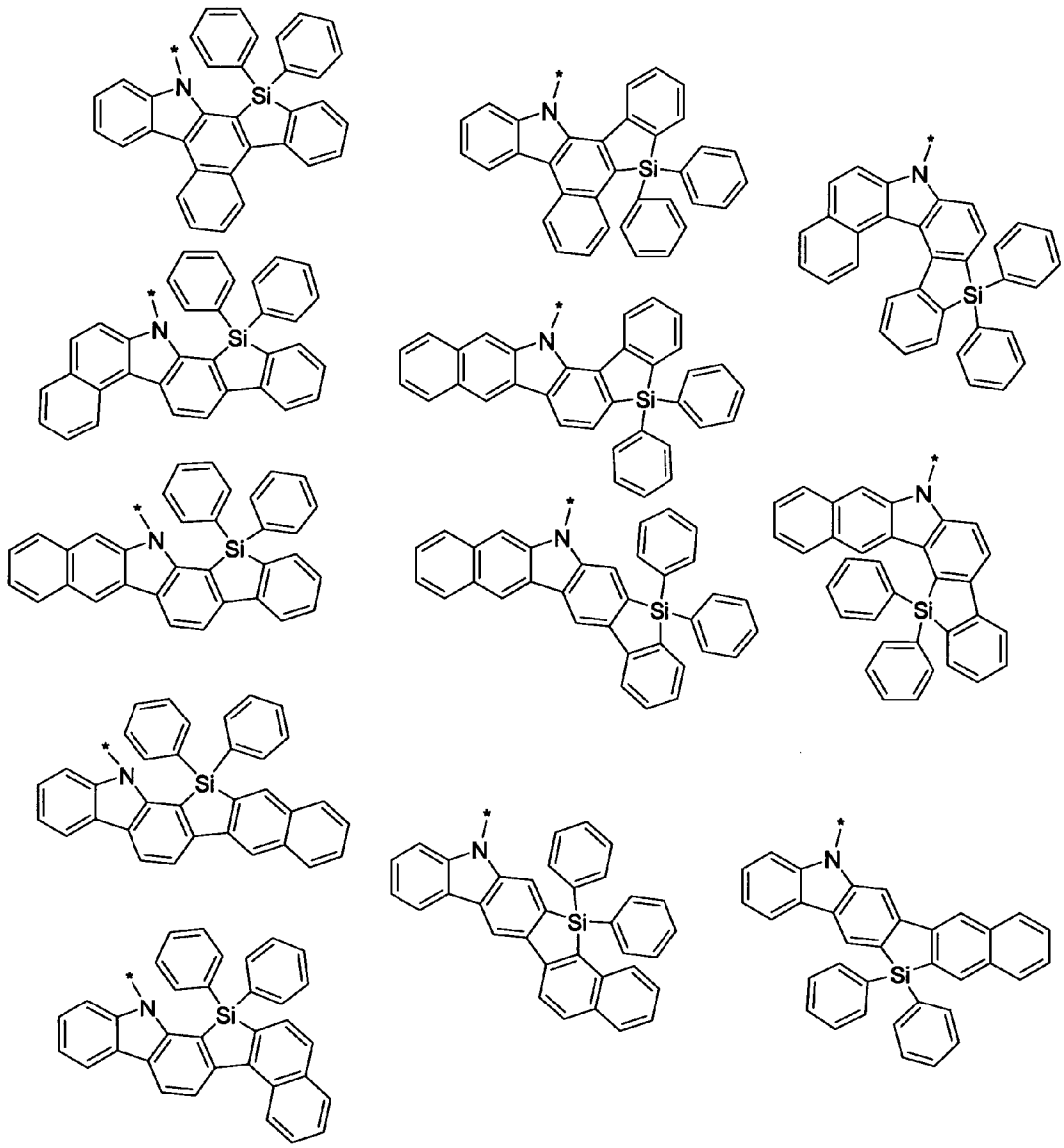
[0764]

[化569]



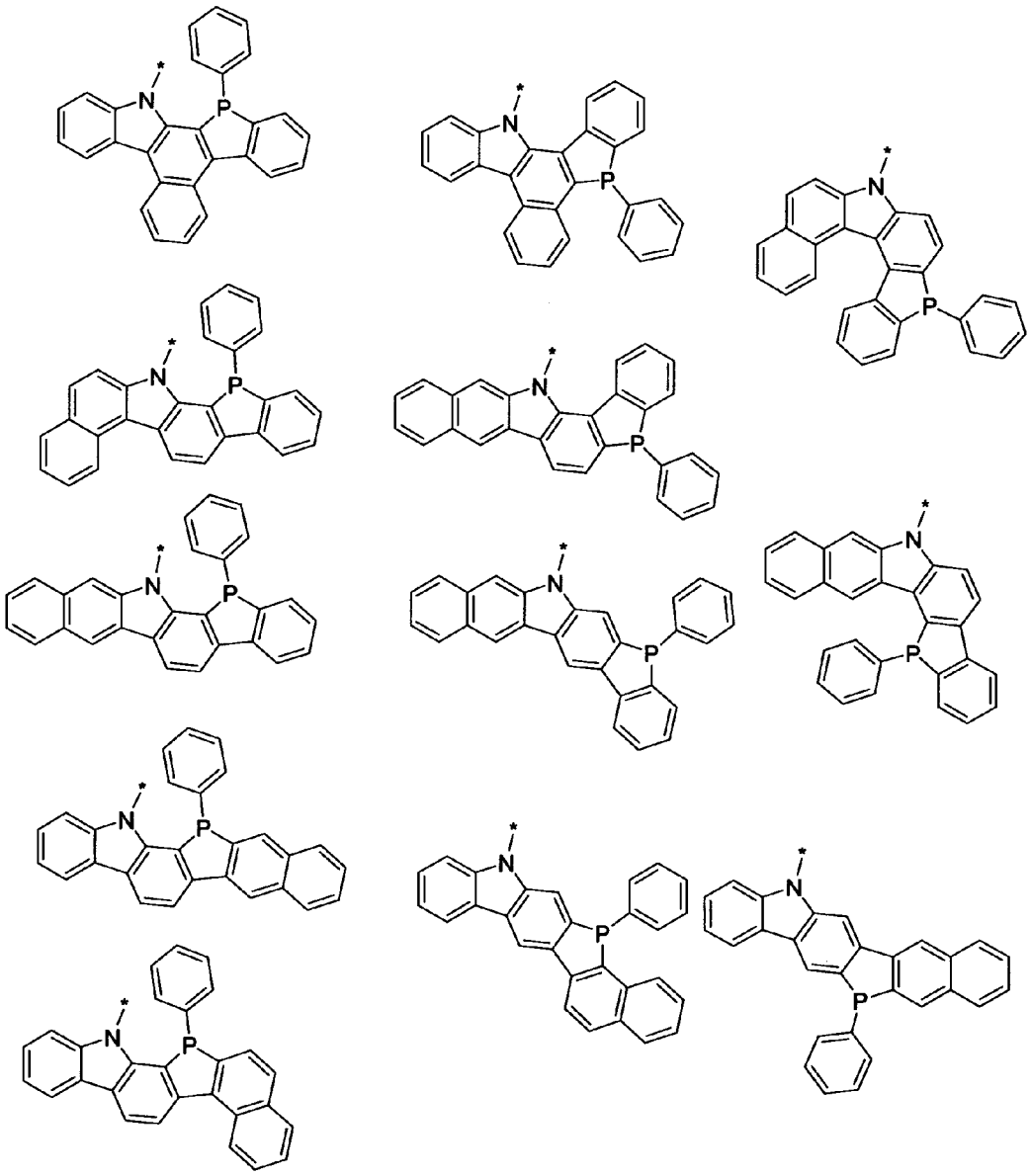
[0765]

[化570]



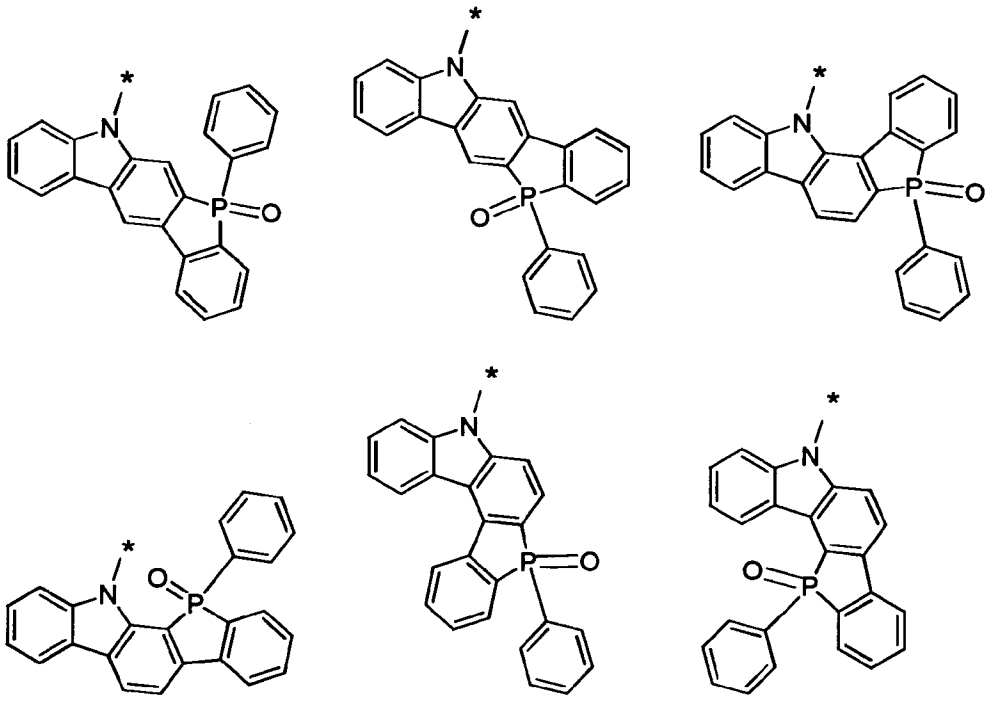
[0766]

[化571]

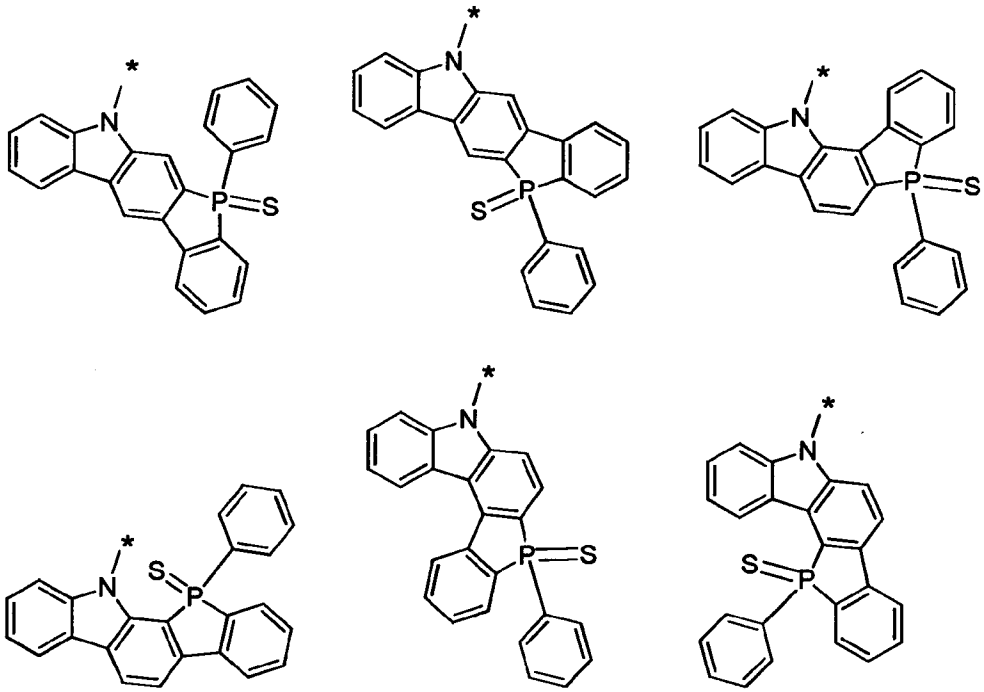


[0767]

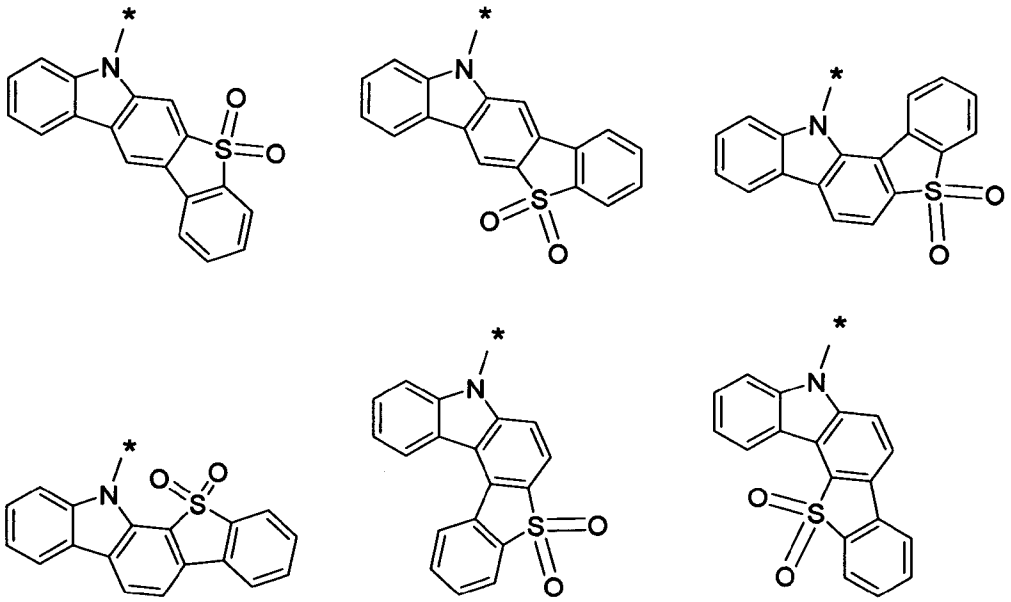
[化572]



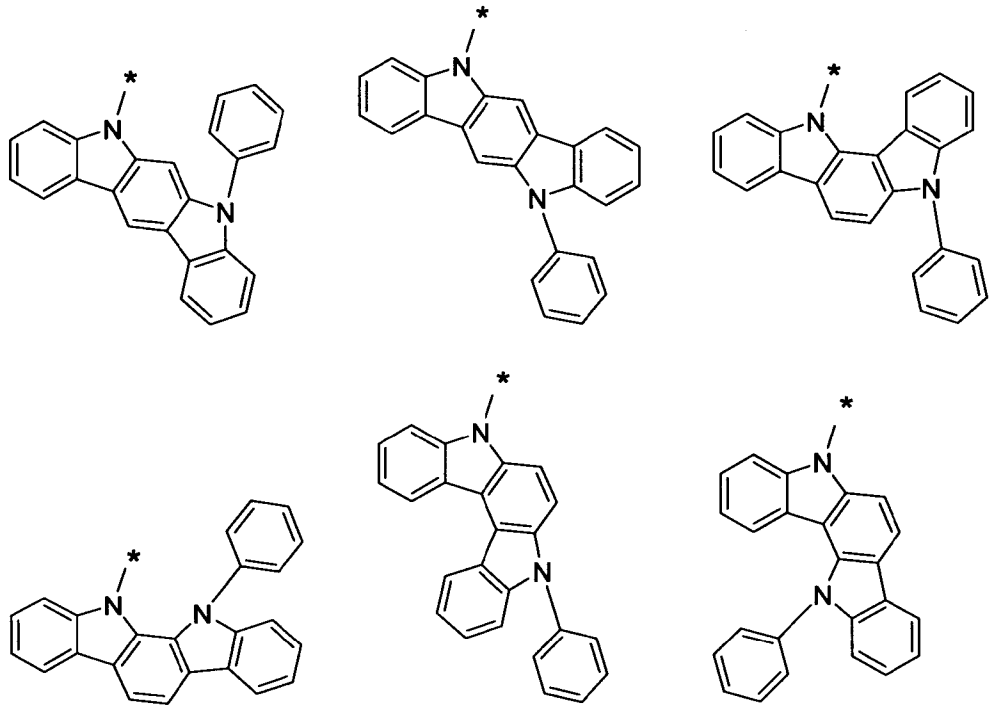
[0768] [化573]



[0769] [化574]

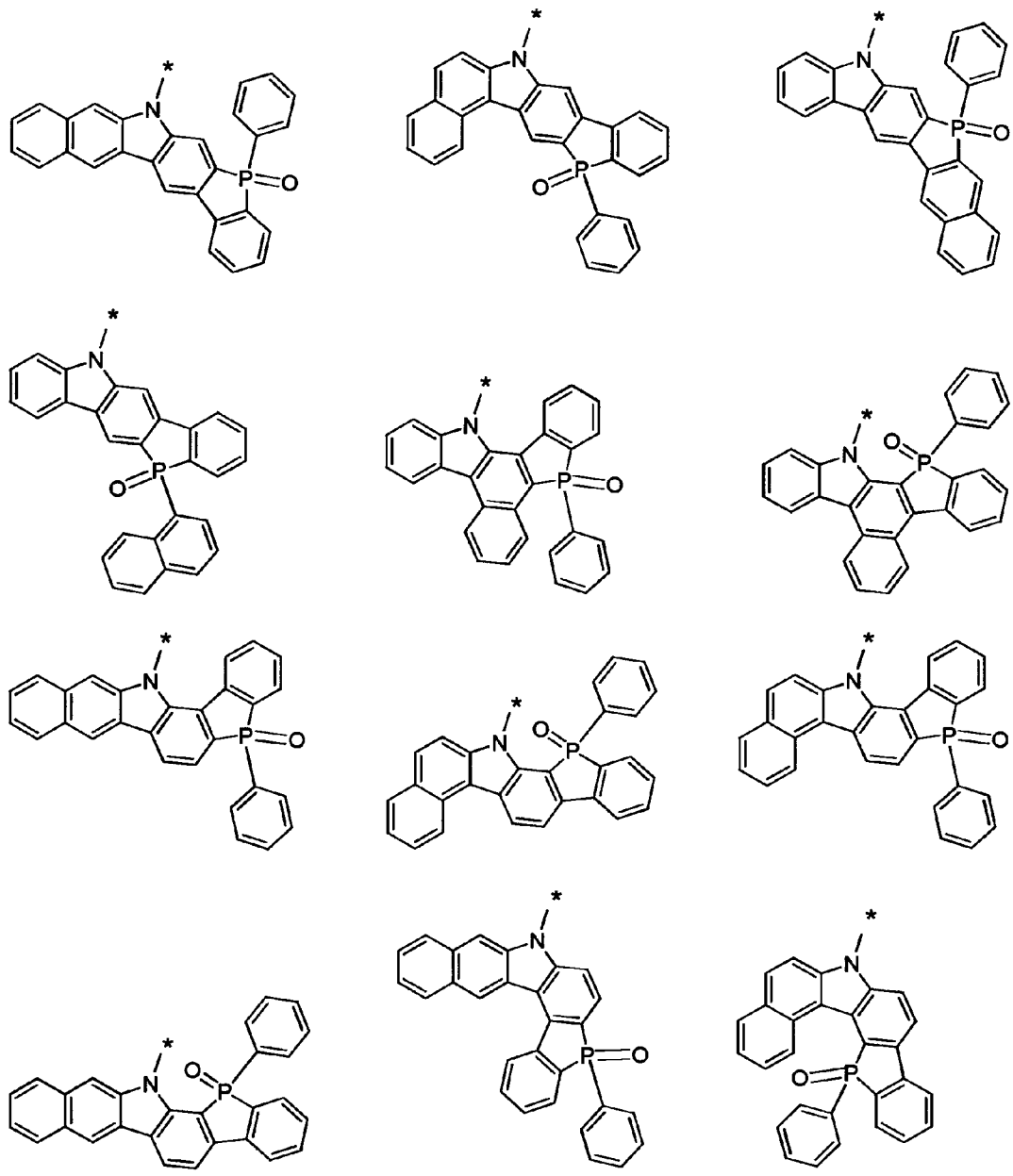


[0770] [化575]



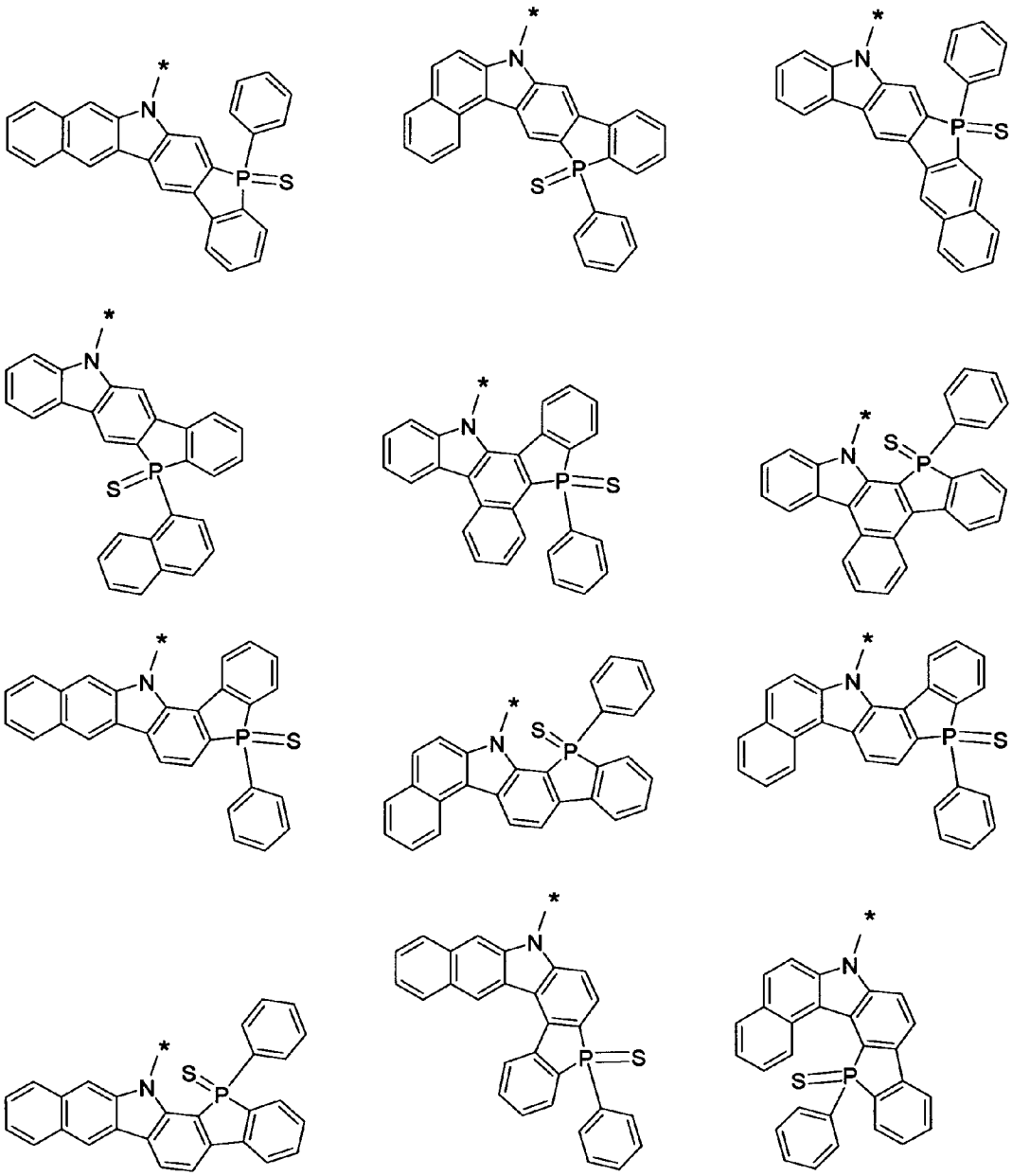
[0771]

[化576]



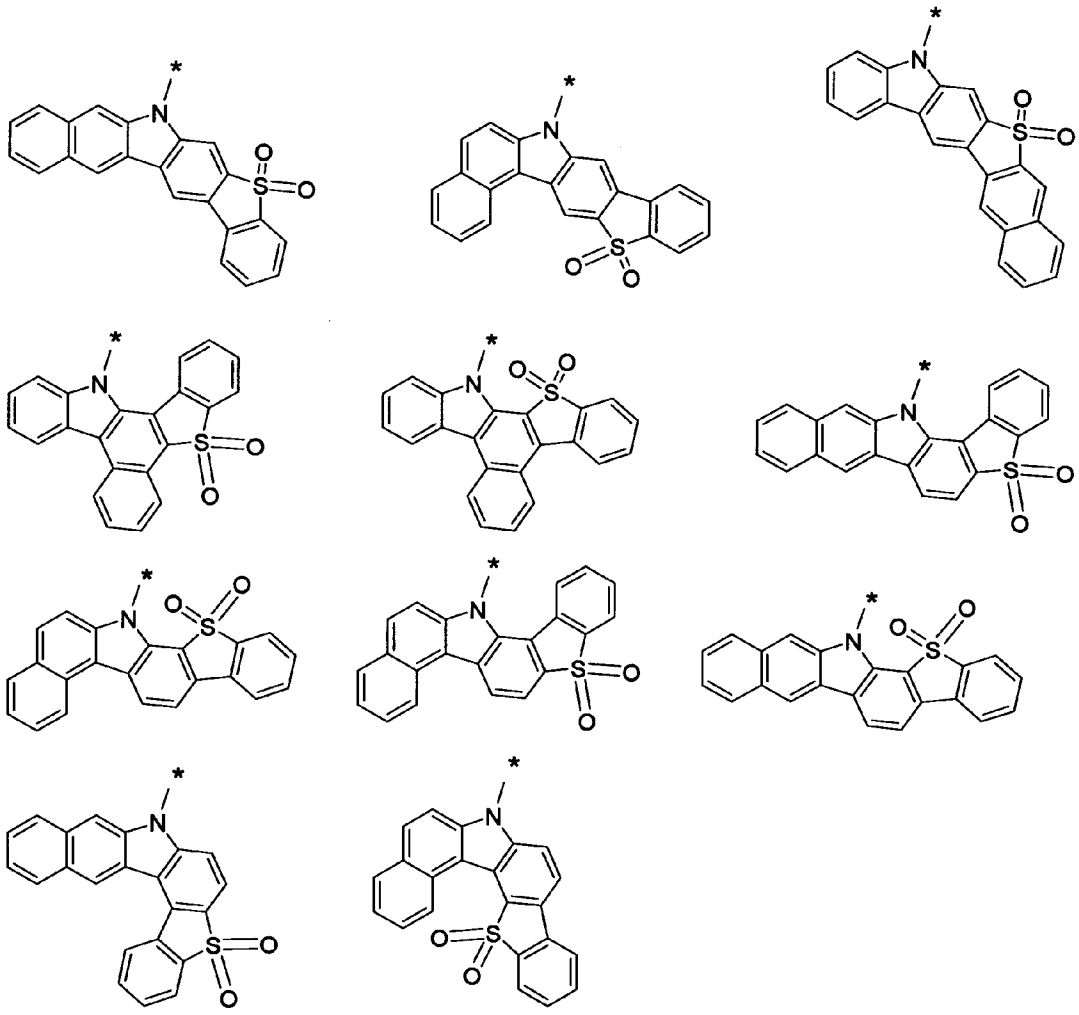
[0772]

[化577]



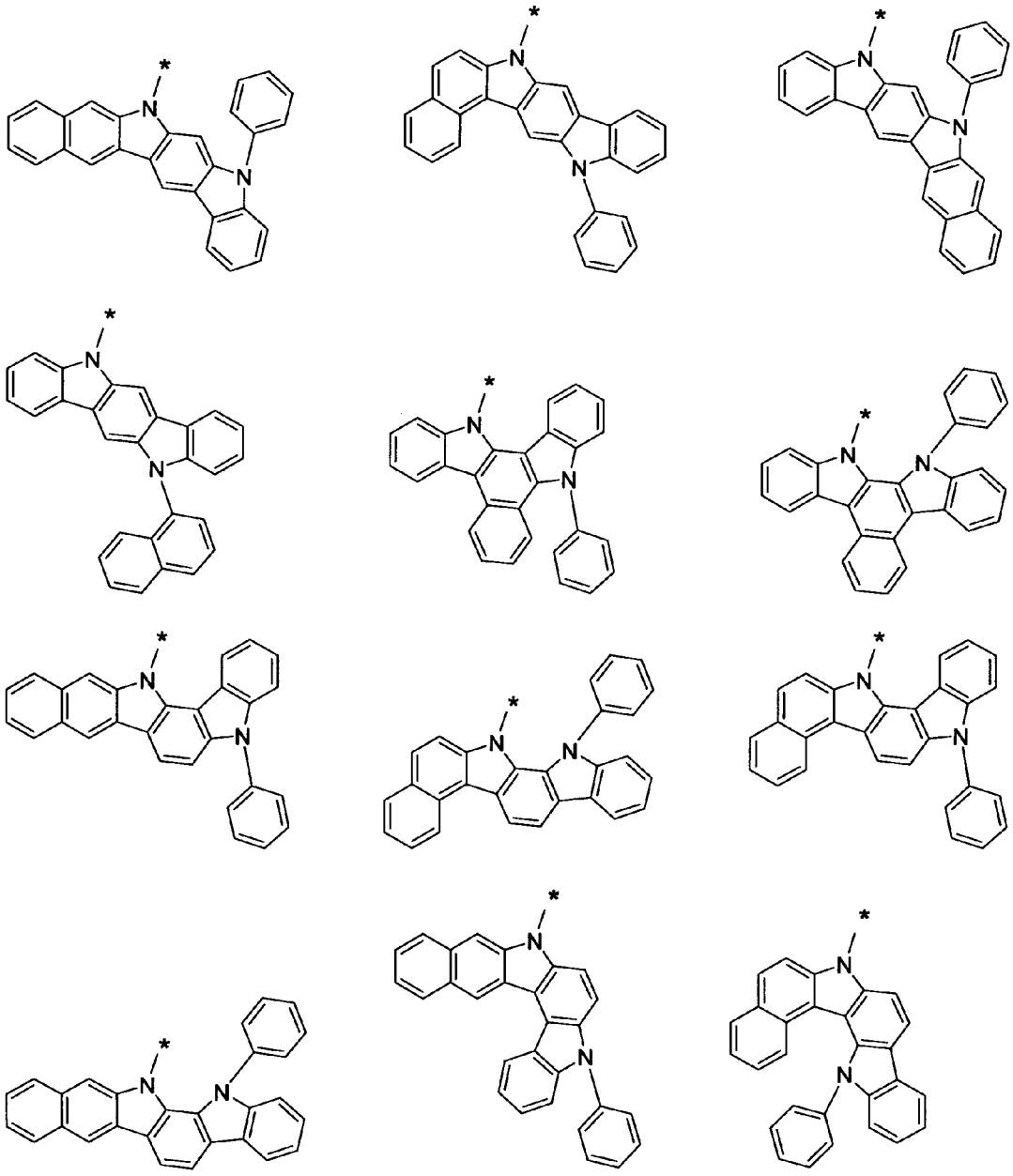
[0773]

[化578]



[0774]

[化579]



[0775] （前記一般式（Ｄ^{C}）で表されるＣ群に属する基についての説明）

前記一般式（Ｄ^{C}）において、Ｘ^{1}～Ｘ^{8}は、それぞれＣ（Ｒ^{1}）～Ｃ（Ｒ^{8}）又は窒素原子を表す。Ｒ^{1}～Ｒ^{8}は、それぞれ独立に、水素原子または置換基である。

但し、Ｘ^{1}～Ｘ^{4}のうちの１つは、Ｚ^{1}もしくはＡｒ^{4}及びＡｒ^{5}が結合する窒

素原子と直接結合する炭素原子である。より詳細に説明すると、X^1～X^4のうちの１つは、ｄ＝０の場合、Ar^4及びAr^5が結合する窒素原子と直接結合する炭素原子であり、ｄ＝１の場合、Z^1と直接結合する炭素原子である。

[0776] また、その直接結合に関与していないR^1～R^8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。本発明の一態様では、その直接結合に関与していない、R^1～R^8から選ばれる２つは、いずれも、互いに結合して環を形成していないことが好ましい。

なお、「直接結合」は、他の文言では、一般的には「単結合」と言われることもある。

X^1～X^8としては、好ましくはいずれもＣ（R^1）～Ｃ（R^8）であり、該R^1～R^8がいずれも水素原子であることがより好ましい。

[0777] 前記一般式（D^C）において、Ar^1、Ar^4及びAr^5は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０のヘテロアリール基を表す。

[0778] Ar^1、Ar^4及びAr^5として選択し得るアリール基の環形成炭素数は６～３０であり、いずれも、好ましくは６～１８、より好ましくは６～１３、さらに好ましくは６～１２、特に好ましくは６～１０である。なお、該アリール基は、非縮合アリール基、縮合アリール基、及びこれらの組み合わせのいずれであってもよい。

また、Ar^1、Ar^4及びAr^5として選択し得るヘテロアリール基の環形成原子数は５～３０であり、好ましくは５～２０、より好ましくは５～１４、更に好ましくは５～１０である。

該ヘテロアリール基は、少なくとも１個、好ましくは１～５個、より好ましくは１～３個、さらに好ましくは１～２個の同一又は異なるヘテロ原子を含む。該ヘテロ原子としては、例えば、窒素原子、硫黄原子、酸素原子及びリン原子が挙げられ、好ましくはこれらから選択される。

前記Ar^1、Ar^4及びAr^5として選択し得るアリール基及びヘテロアリール基について、具体的な基及び好適な基としては、前記一般式（D^A）中のＡ

r^1及びAr^2として選択し得るアリール基及びヘテロアリール基として記載したものが挙げられる。

[0779] 前記一般式（D^C）において、Z^1は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の複素環基、又はこれらの基が２～４個結合してなる基である。

一般式（D^C）中、Z^1が表す芳香族炭化水素基、複素環基又はこれらの基が２～４個結合してなる基の説明は、L^1～L^3の場合と同じであり、好ましいものも同じである。その中でも、Z^1～Z^3が表す芳香族炭化水素基としては、フェニレン基、ナフチレン基が好ましく、フェニレン基がより好ましい。

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

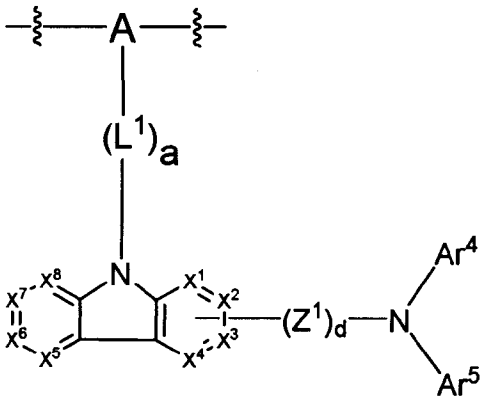
[0780] 前記一般式（D^C）において、ｄは、０又は１である。

また、前記一般式（D^C）中、＊６’が記されているAr^1及びAr^4のうちのいずれか一方が脱離して、その代わりに一般式（１［Ｖ］）中の＊１～３のいずれかが窒素原子と直接結合している。

＊６’が記されているAr^1及びAr^4のうち、Ar^1の方が脱離して、その代わりに＊６が窒素原子と直接結合している場合、以下の状態（部分構造のみを示す。）となる。

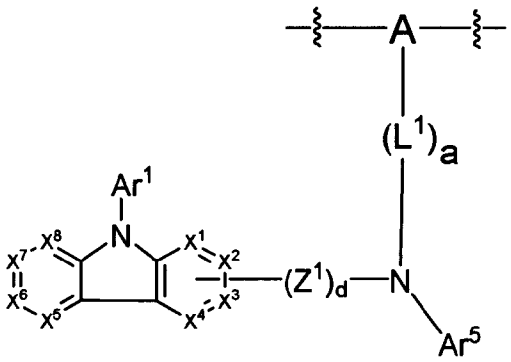
[0781]

[化580]



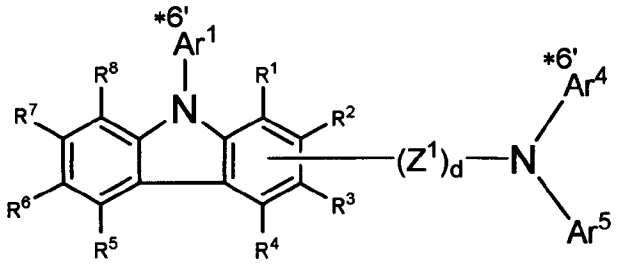
[0782] 一方、＊６’が記されているＡｒ[1]及びＡｒ[4]のうち、Ａｒ[4]の方が脱離して、その代わりに＊６が窒素原子と直接結合している場合、以下の状態（部分構造のみを示す。）となる。

[0783] [化581]



[0784] 本発明の一態様において、前記一般式（Ｄ[C]）で表される基が、下記一般式（Ｄ[C1]）で表される基であることが好ましい。

[化582]

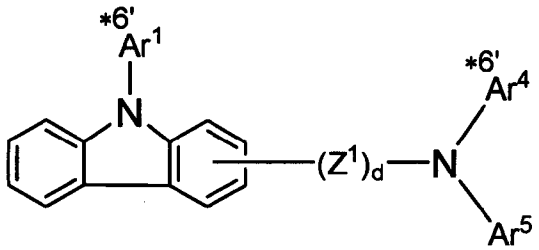


(D^{C1})

（一般式（D^{C1}）中の各記号の定義は、前記一般式（D^{C}）に関する記載と同じである。）

[0785] また、本発明の一態様において、前記一般式（D^{C}）で表される基が、下記一般式（D^{C2}）で表される基であることが好ましい。

[化583]



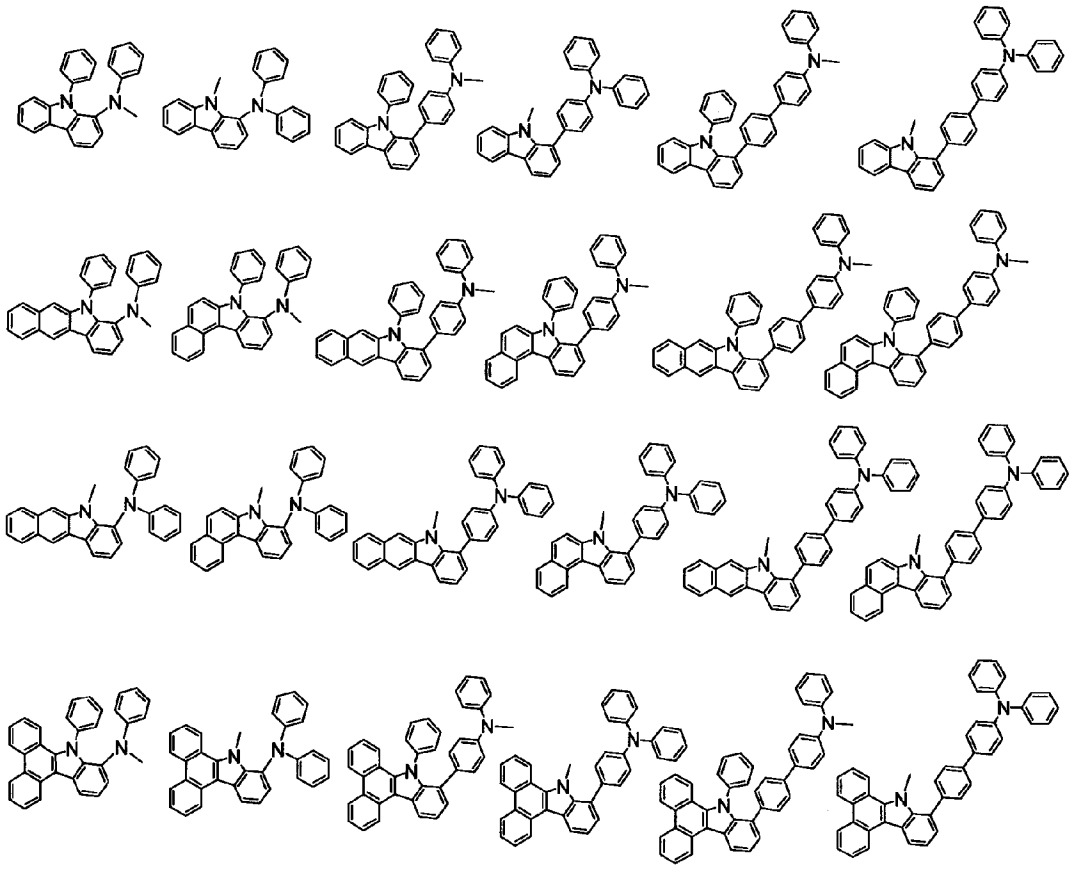
(D^{C2})

（一般式（D^{C2}）中の各記号の定義は、前記一般式（D^{C}）に関する記載と同じである。）

[0786] 前記一般式（D^{C}）で表される基として、より具体的には、下記群から選択される基が好ましい。なお、下記の基において、水素原子と結合している炭素原子は、当該水素原子に代えて、上述の置換基と結合してもよい。

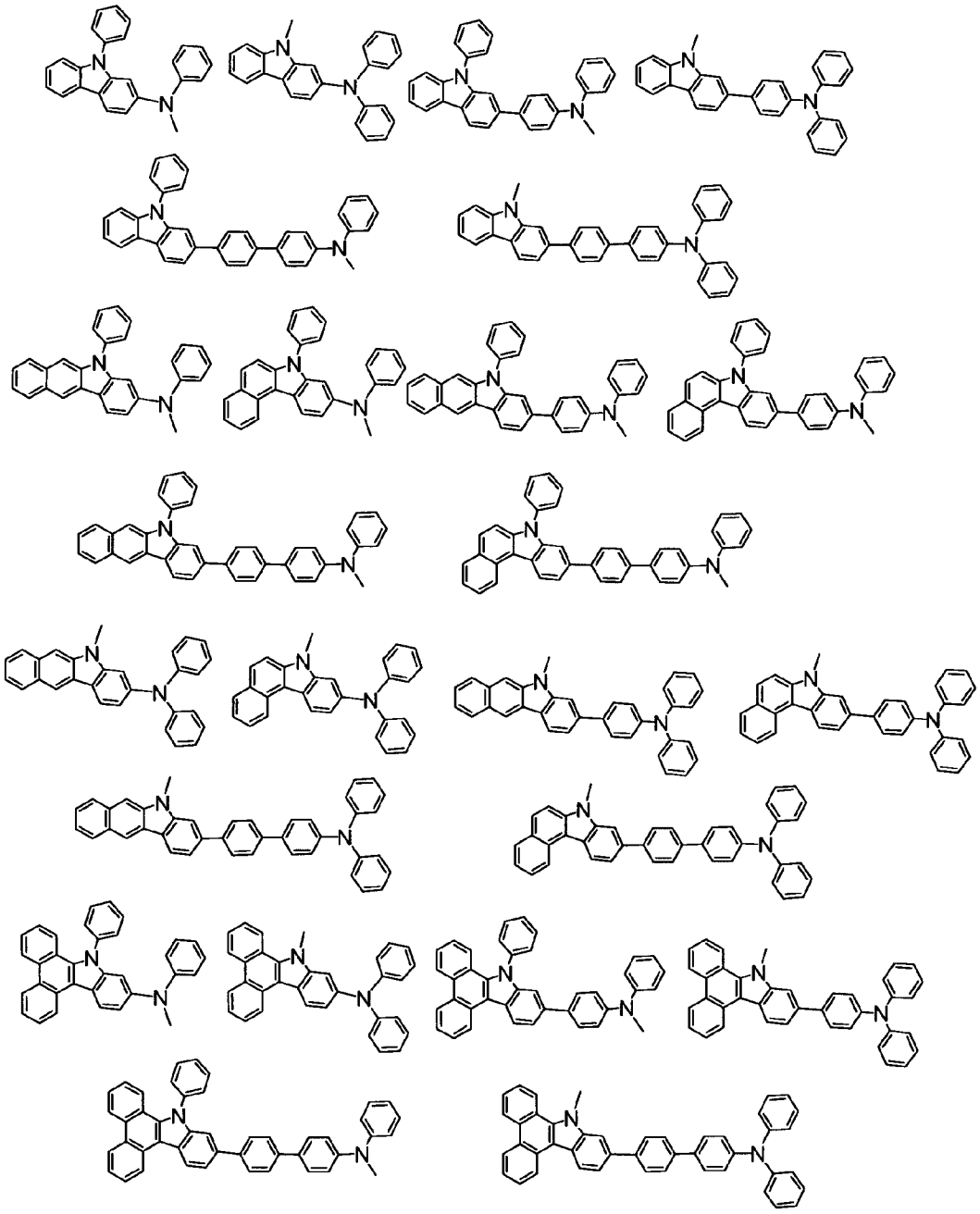
[0787]

[化584]



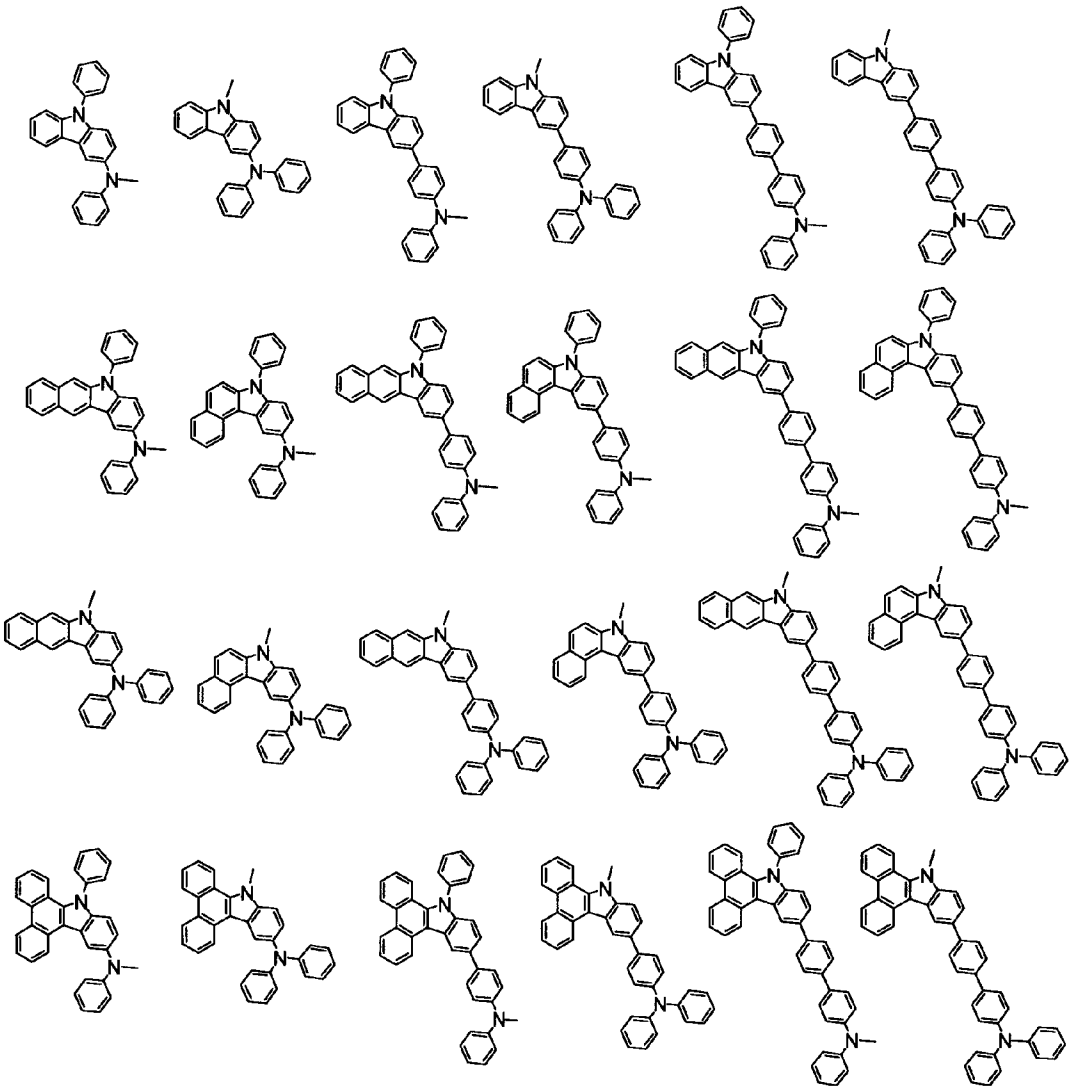
[0788]

[化585]



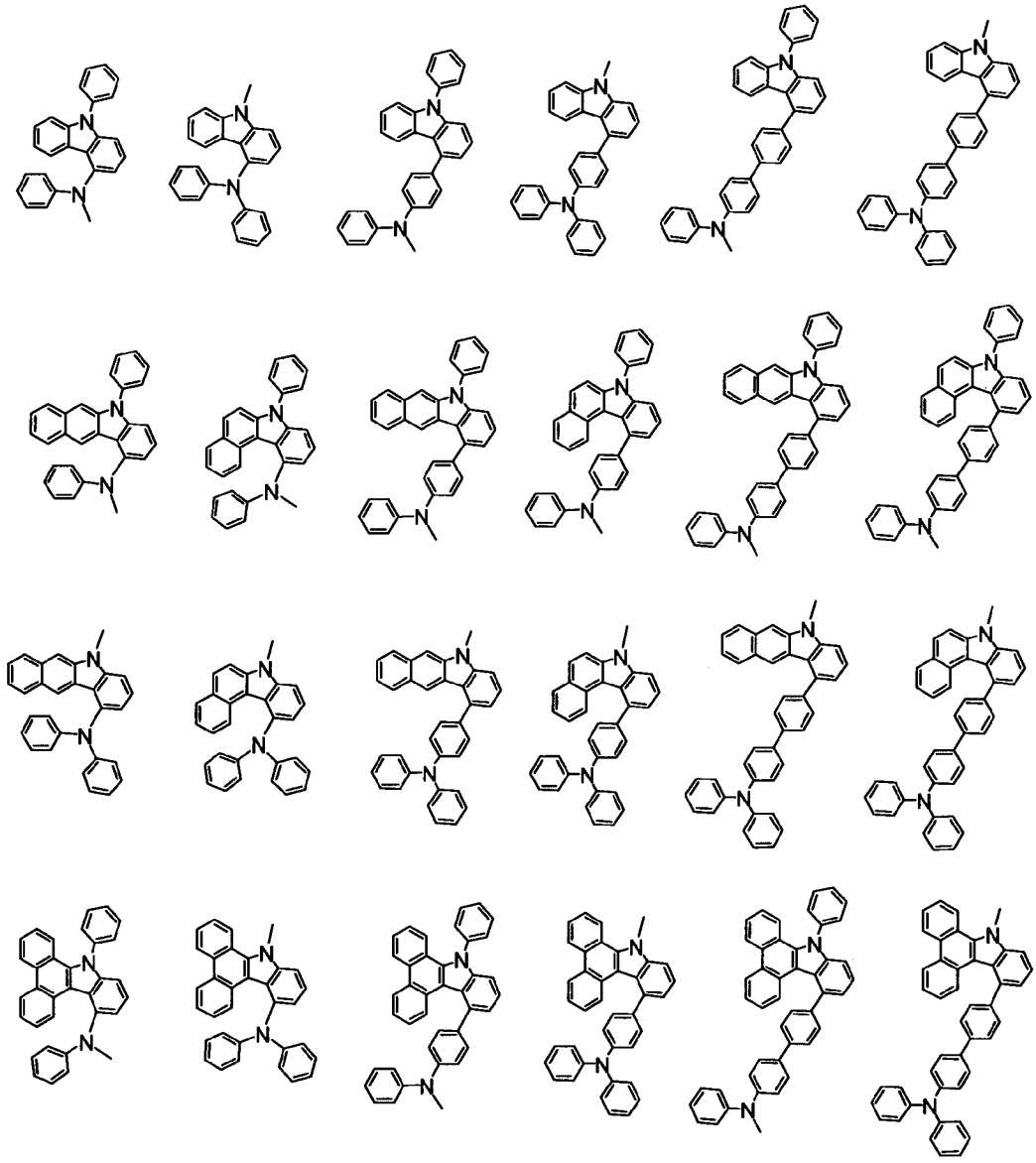
[0789]

[化586]



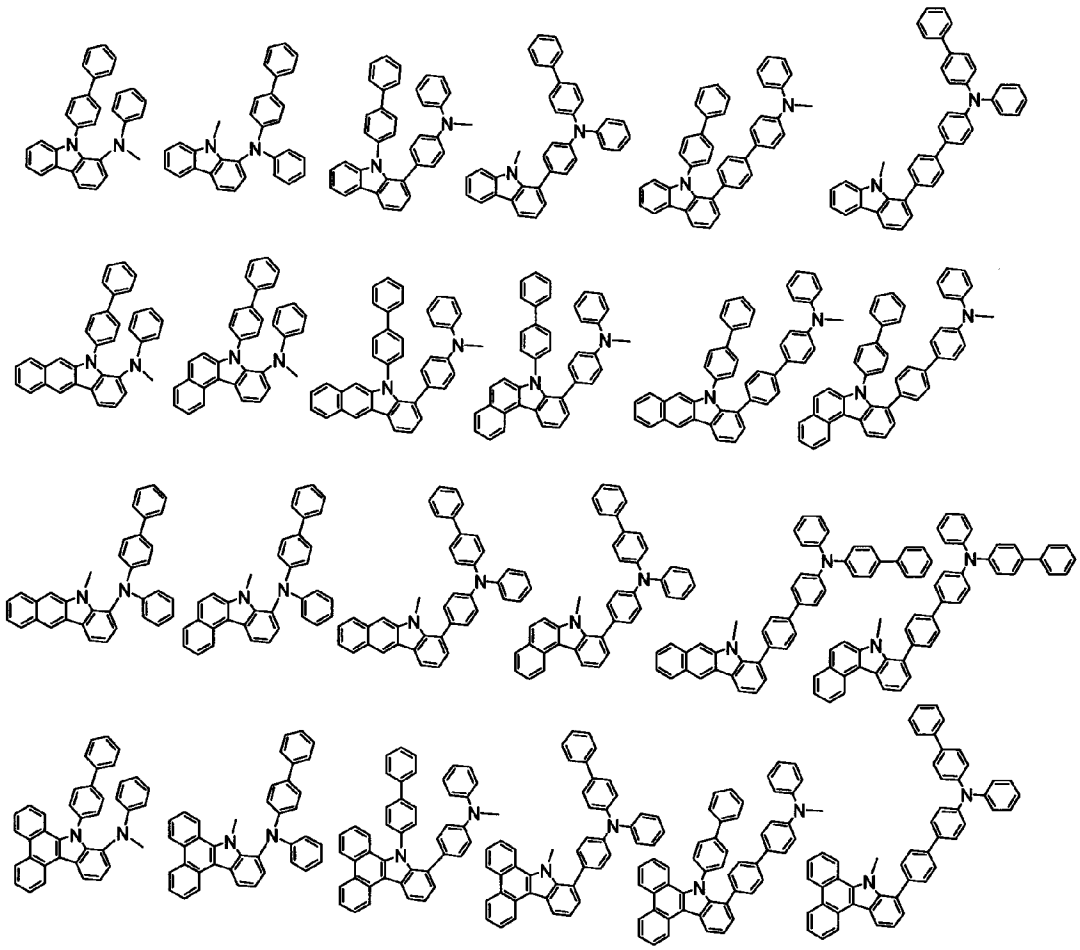
[0790]

[化587]



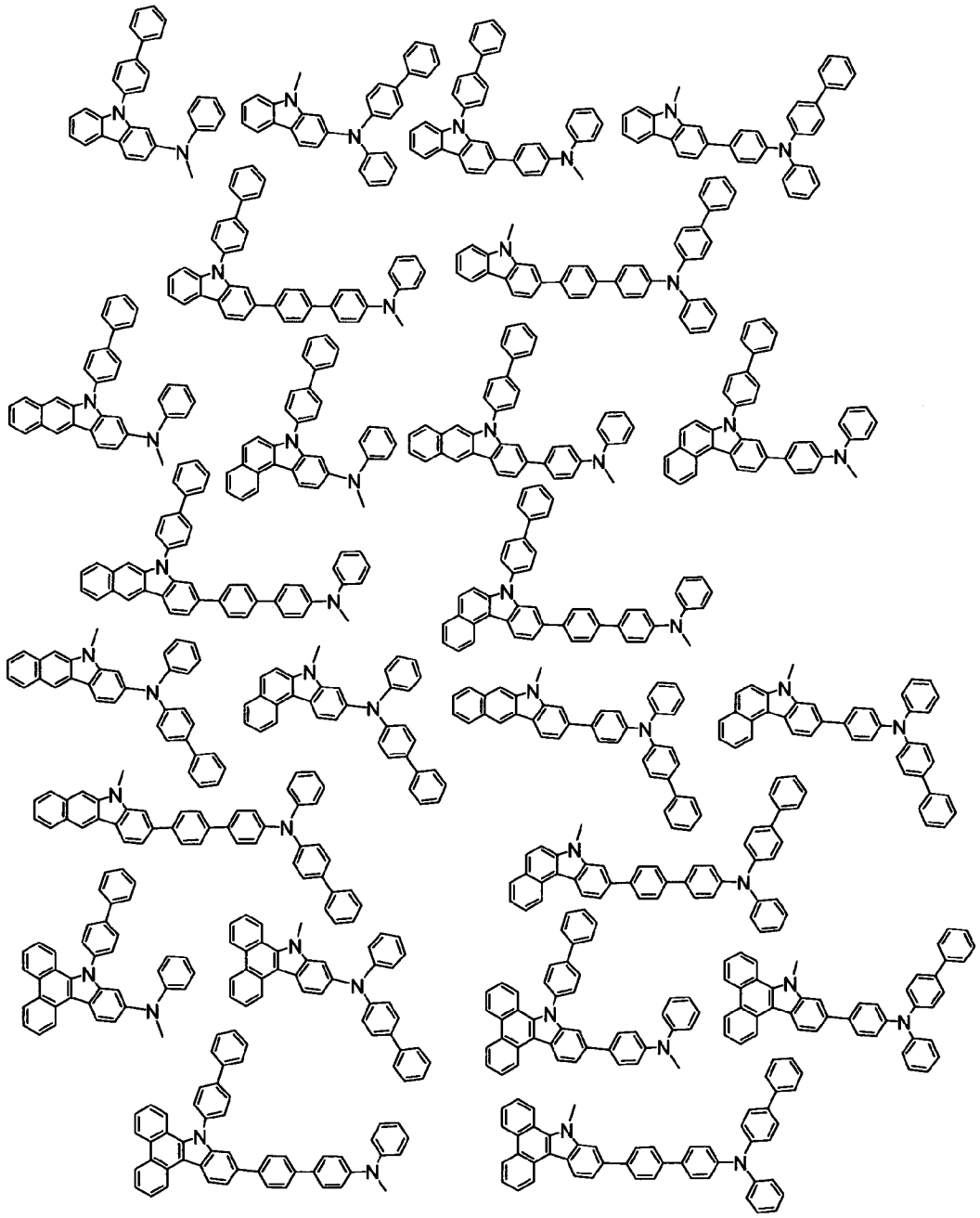
[0791]

[化588]



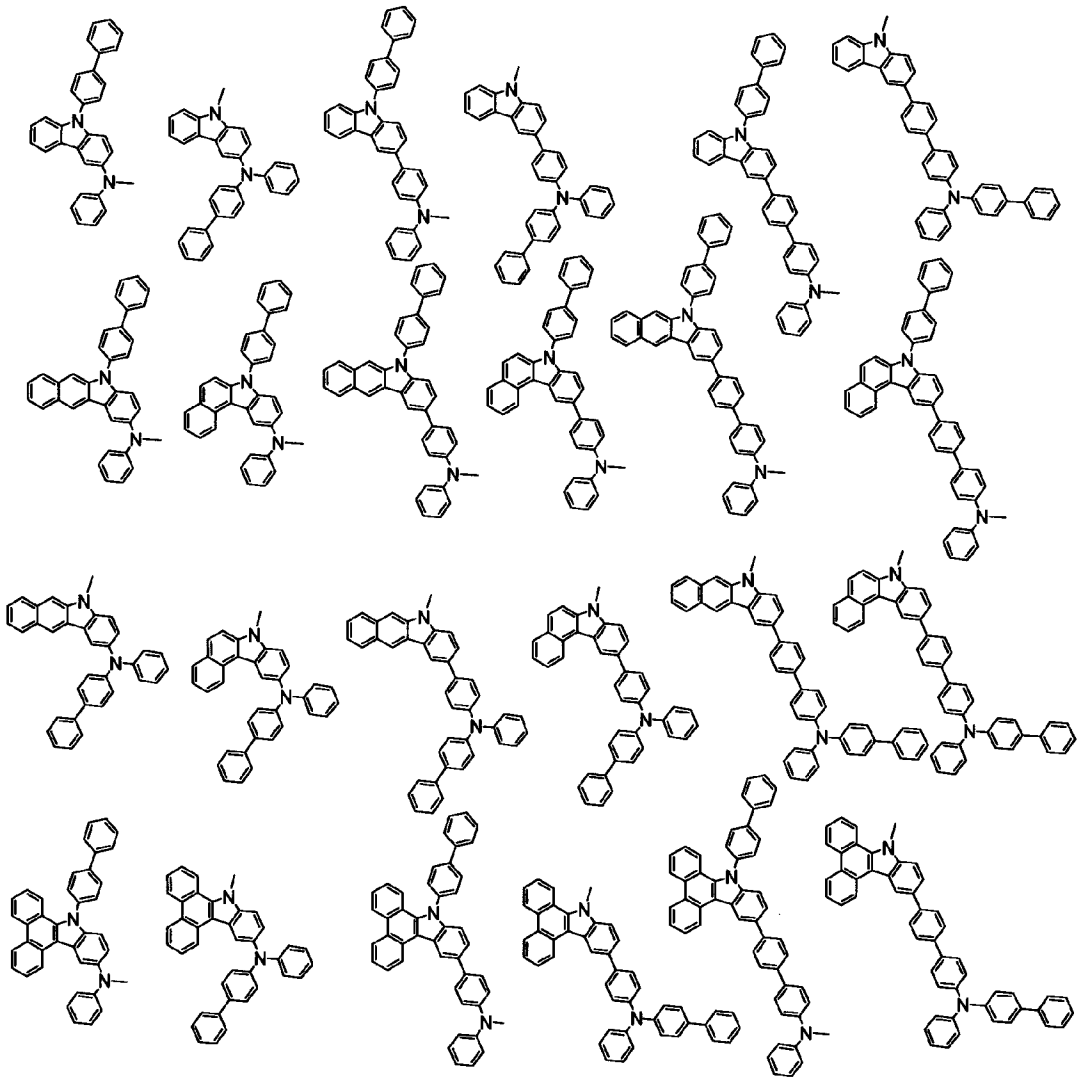
[0792]

[化589]



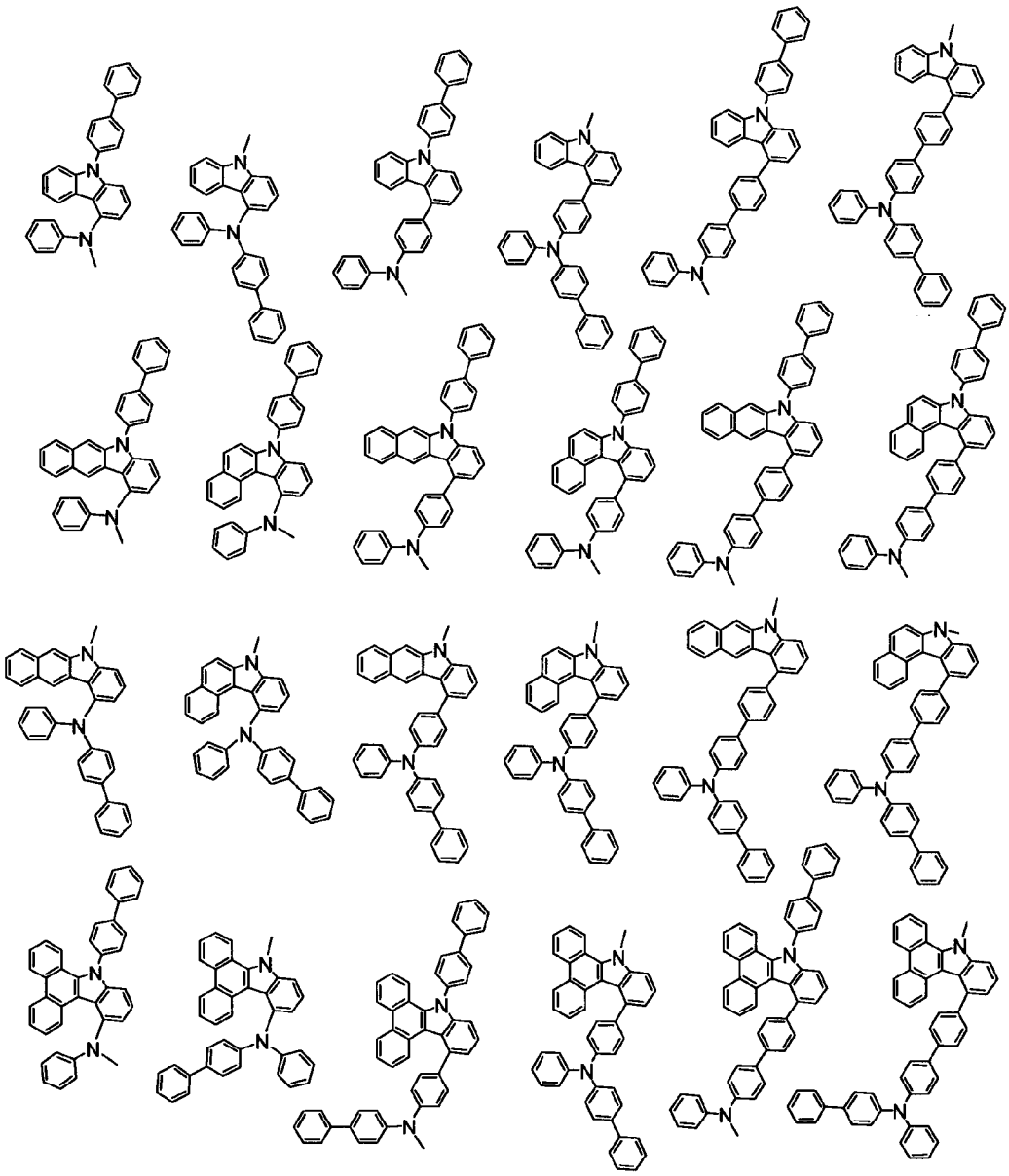
[0793]

[化590]



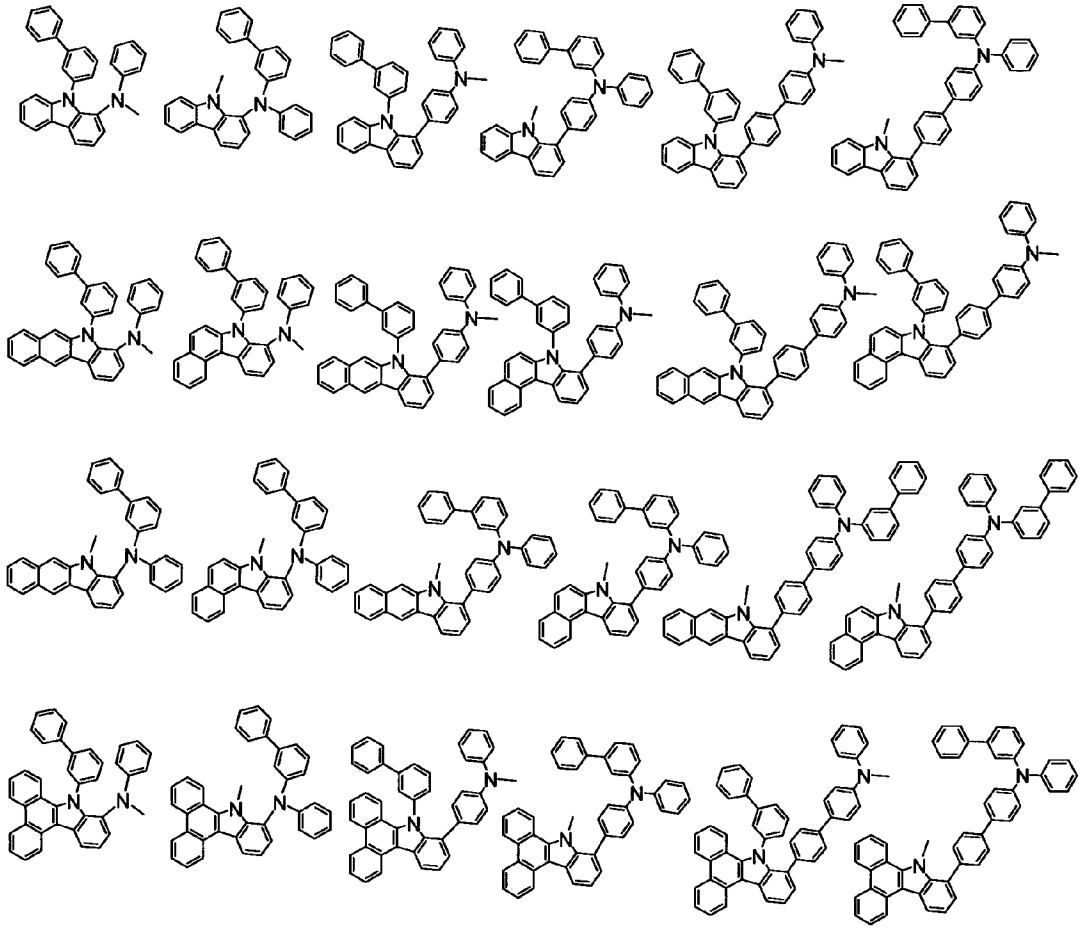
[0794]

[化591]



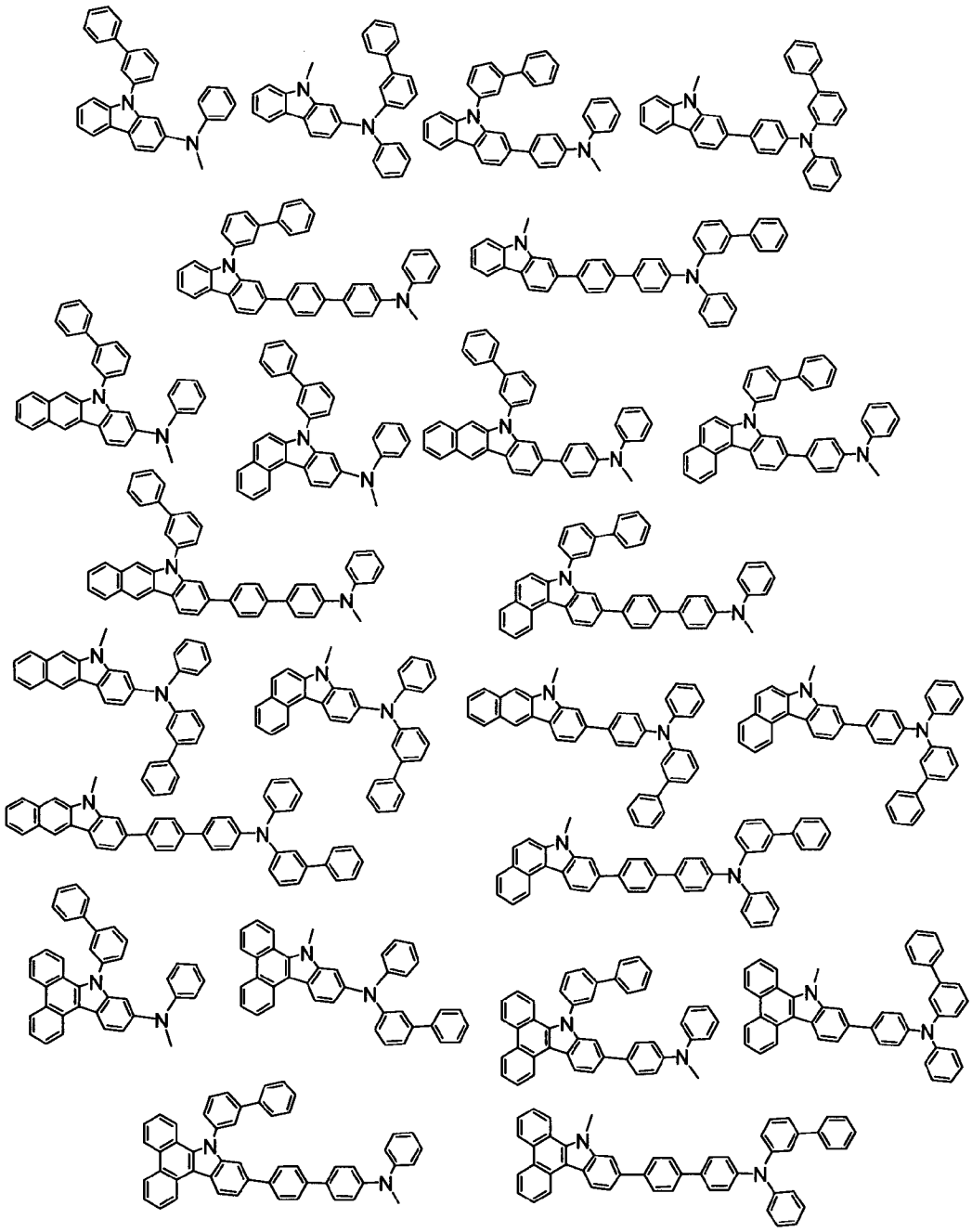
[0795]

[化592]



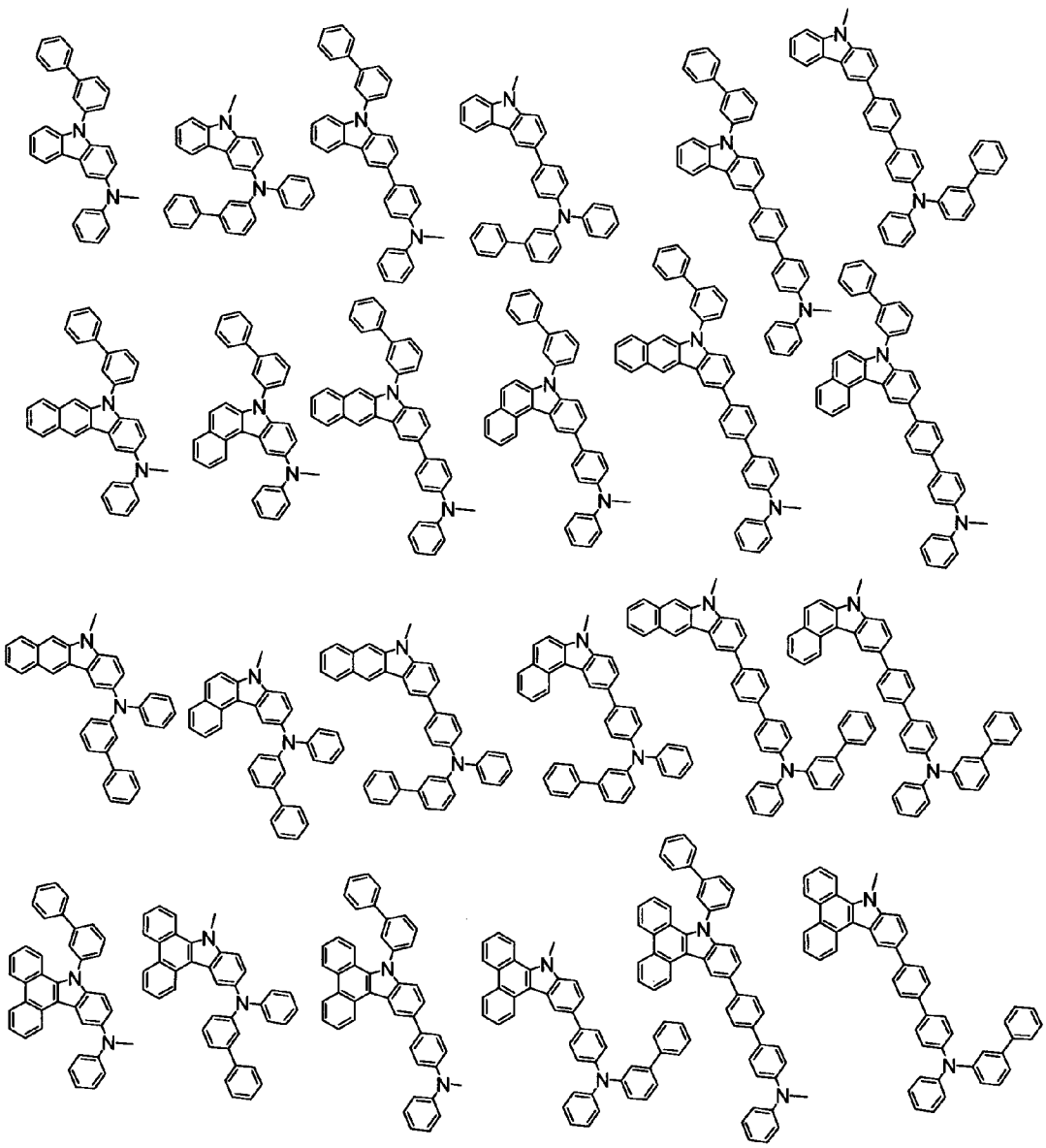
[0796]

[化593]



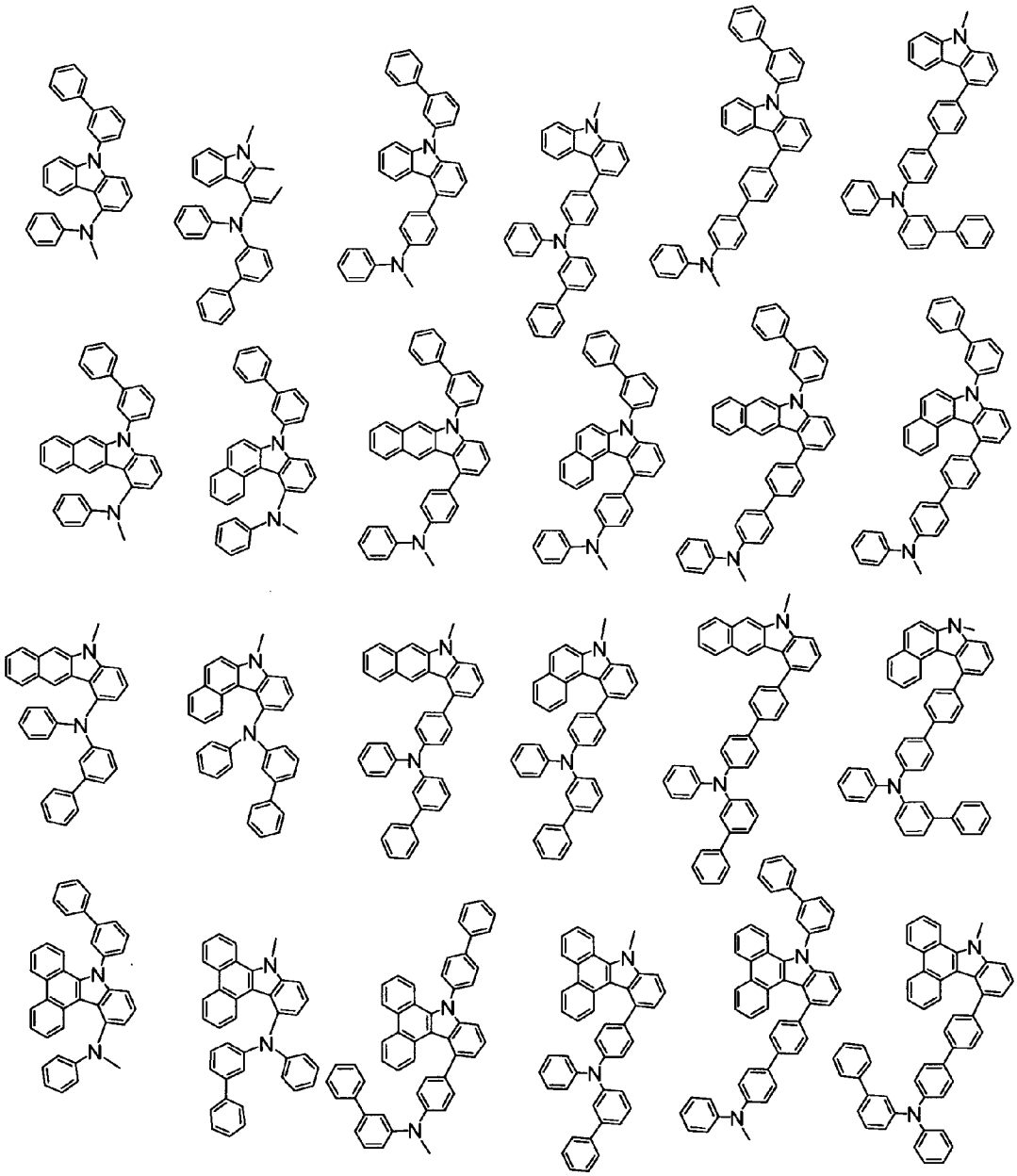
[0797]

[化594]



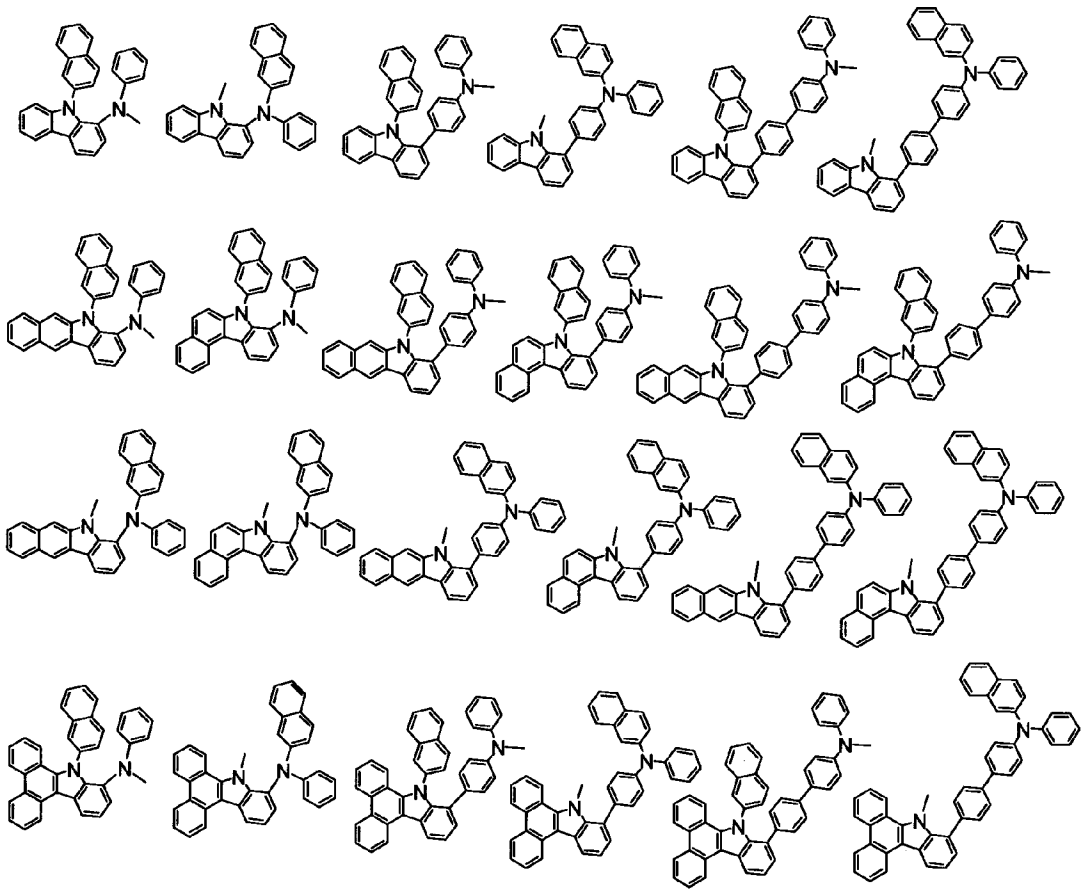
[0798]

[化595]



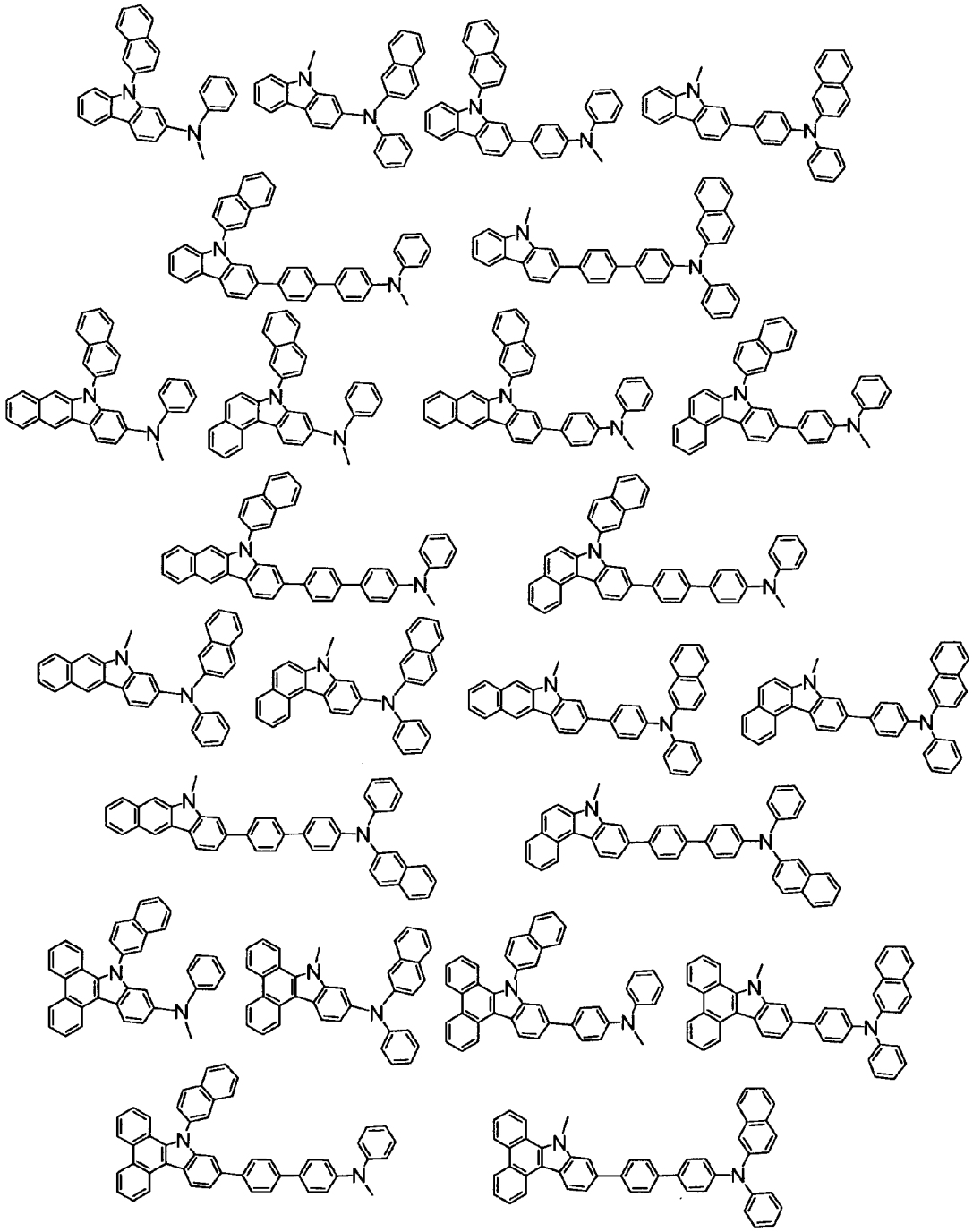
[0799]

[化596]



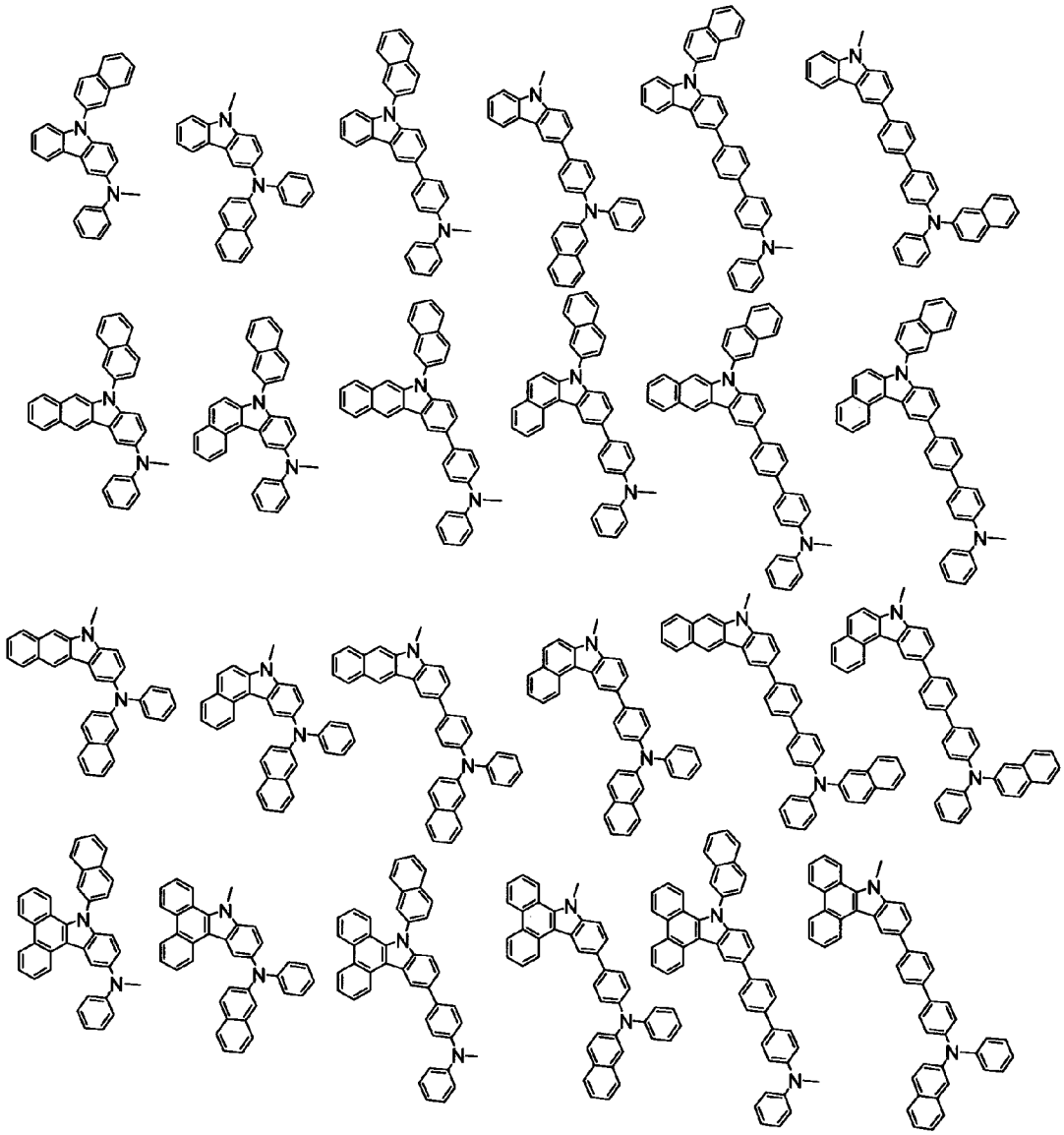
[0800]

[化597]



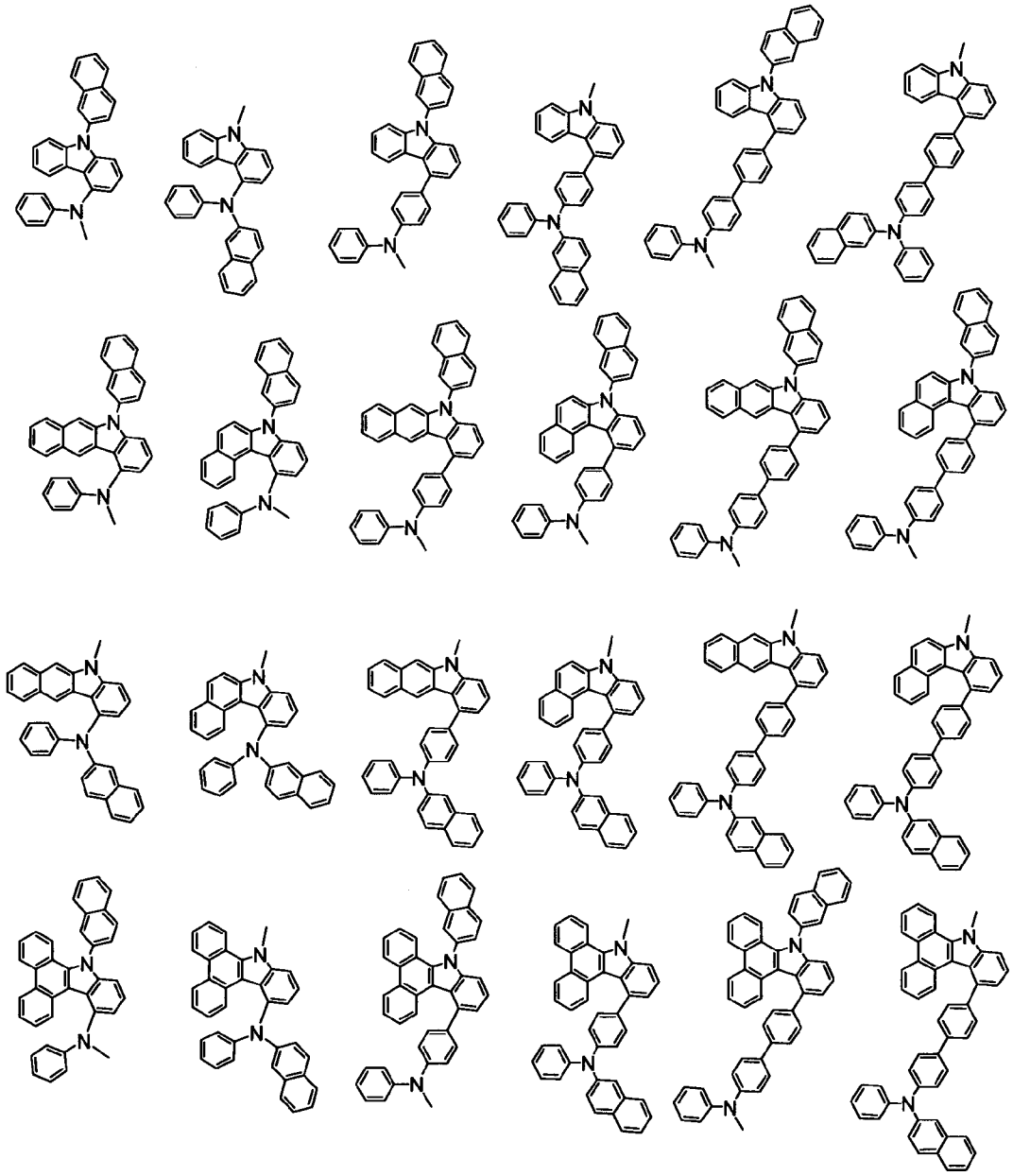
[0801]

[化598]



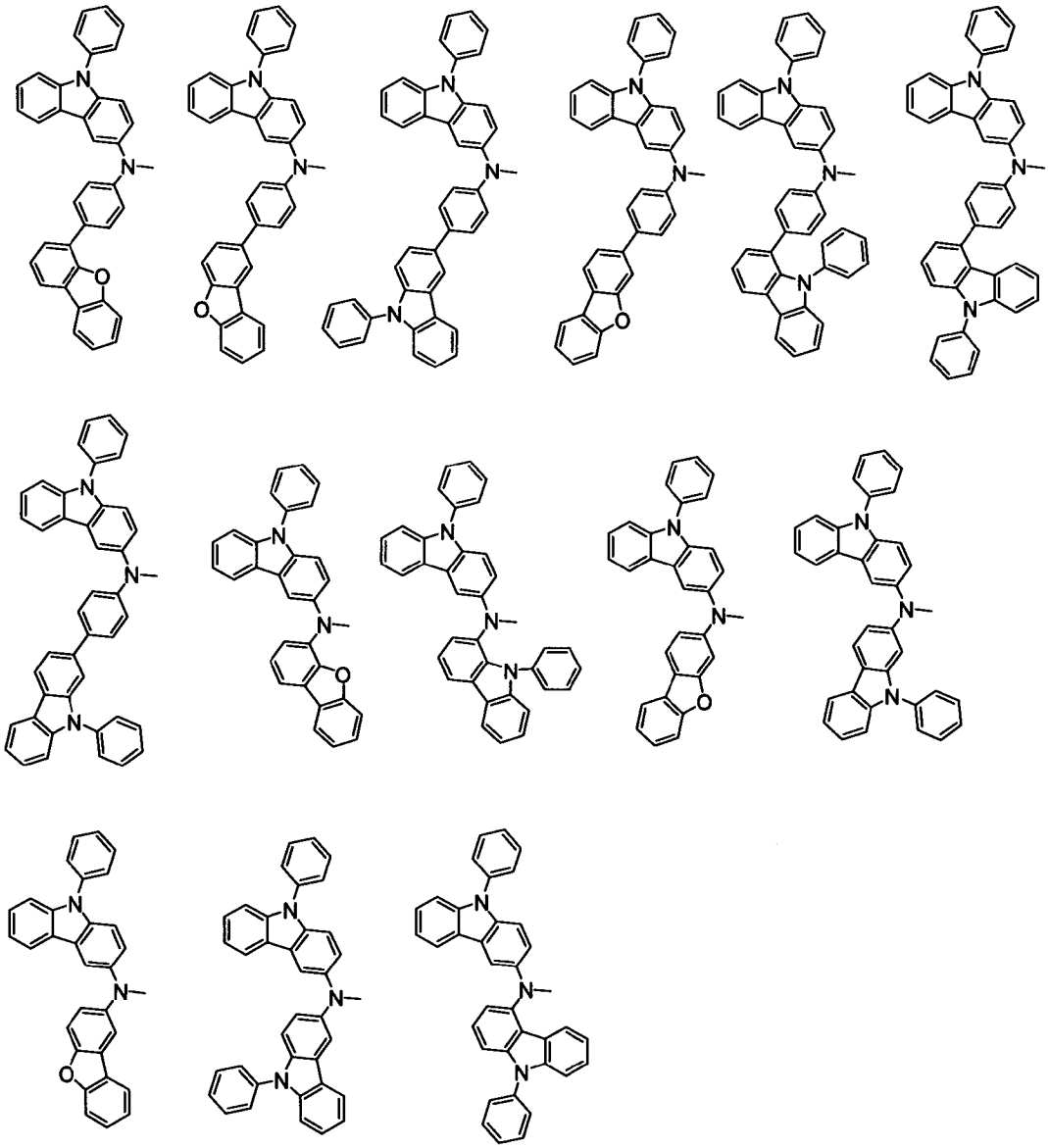
[0802]

[化599]



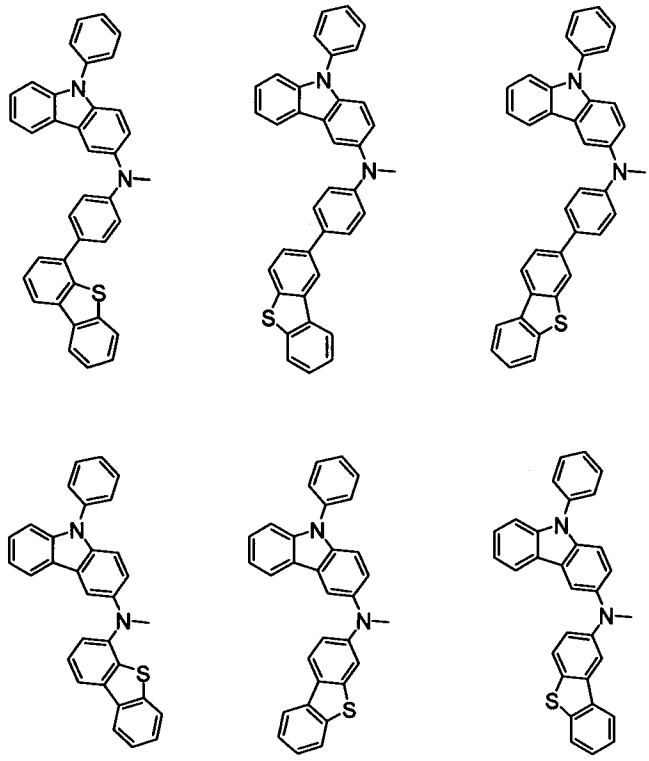
[0803]

[化600]



[0804]

[化601]



[0805] （前記一般式（D^D）で表されるＤ群に属する基についての説明）

前記一般式（D^D）において、X^1～X^{16}は、それぞれＣ（R^1）～Ｃ（R^{16}）又は窒素原子を表す。R^1～R^{16}は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。

但し、X^1～X^4のうちのいずれか１つは炭素原子であり、X^{13}～X^{16}のうちのいずれか１つの炭素原子と直接結合をしている。

また、その直接結合に関与していない、R^1～R^8から選ばれる２つ、及びR^9～R^{16}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。

本発明の一態様では、その直接結合に関与していない、R^1～R^8から選ばれる２つ、及びR^9～R^{16}から選ばれる２つは、いずれも、互いに結合して環を形成していないことが好ましい。

なお、「直接結合」は、他の文言では、一般的には「単結合」と言われることもある。

X^1～X^{16}としては、好ましくはいずれもC（R^1）～C（R^{16}）であり、該R^1～R^{16}がいずれも水素原子であることがより好ましい。

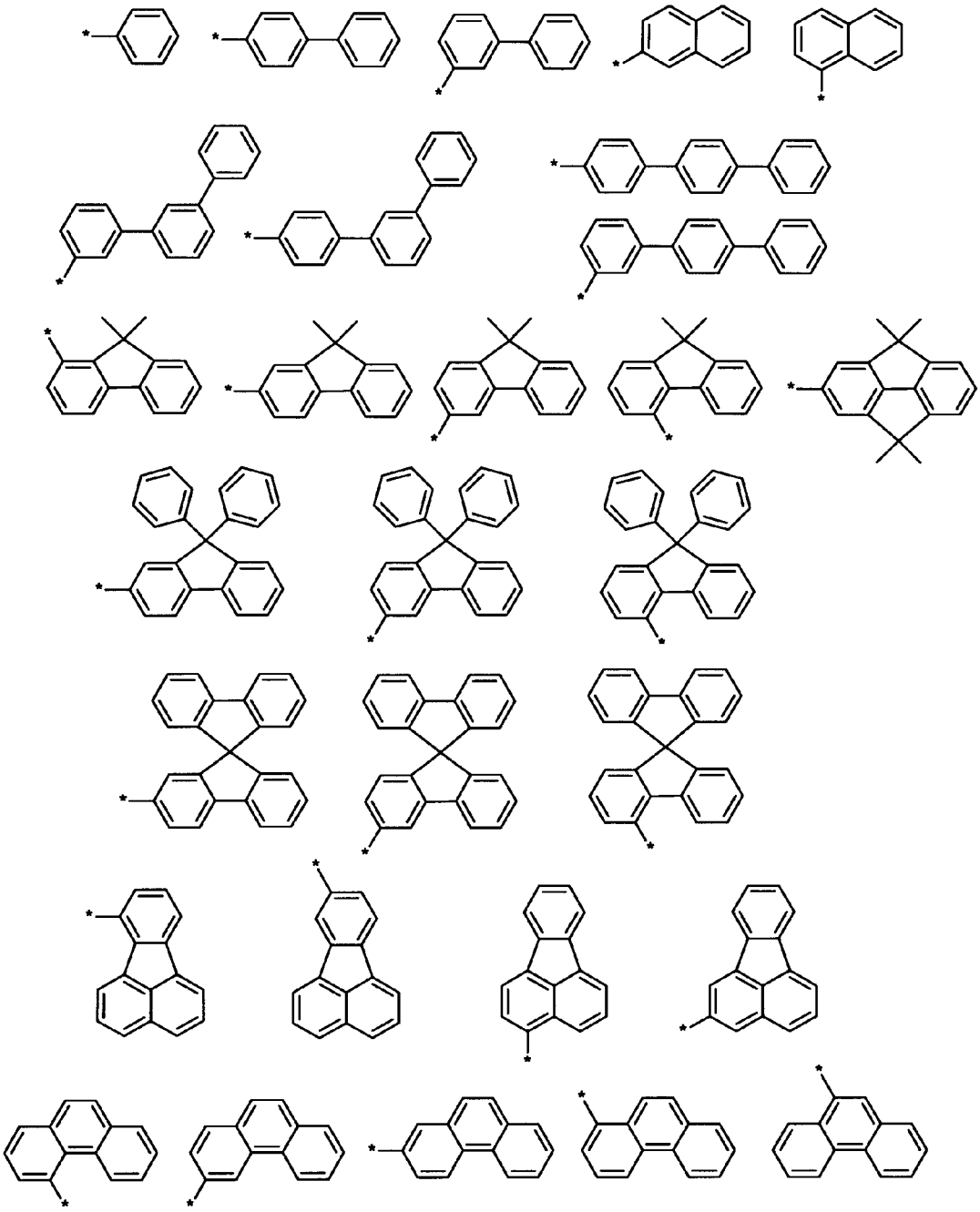
[0806] 前記一般式（D^D）において、Y^1は、酸素原子、硫黄原子、C（R^A）（R^B）、Si（R^C）（R^D）、P（R^E）、P（＝O）（R^F）、$S(=O)_2$、P（＝S）（R^G）、又は－N（R^H）－である。Y^1としては、酸素原子又は硫黄原子であることが好ましい。

該R^A～R^Hは、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。R^AとR^B、及びR^CとR^Dは、互いに結合して環を形成していてもよい。＊は式（1［V］）中の＊1～＊3のいずれかと結合する。

R^A～R^Hは、いずれもアリール基であることも好ましく、該アリール基としては、下記群から選択されるアリール基がより好ましい。

[0807]

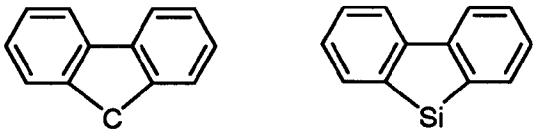
[化602]



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

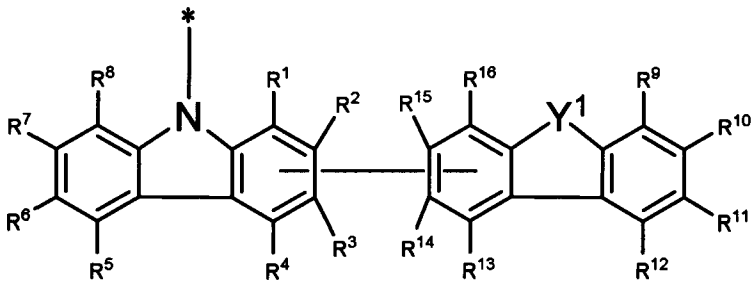
[0808] また、C（R^A）（R^B）のR^AとR^B、並びにSi（R^C）（R^D）のR^CとR^Dとが互いに結合して環を形成している場合、具体的には、以下のような構造が挙げられる。

[0809] [化603]



[0810] 本発明の一態様において、前記一般式（D^D）で表される基が、下記一般式（D^{D1}）で表される基であることが好ましい。

[化604]

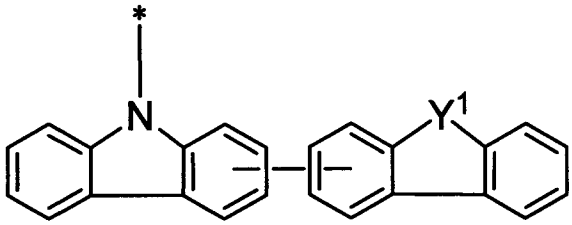


(D^{D1})

（一般式（D^{D1}）中の各記号の定義は、前記一般式（D^D）に関する記載と同じである。）

[0811] また、本発明の一態様において、前記一般式（D^D）で表される基が、下記一般式（D^{D2}）で表される基であることが好ましい。

[化605]



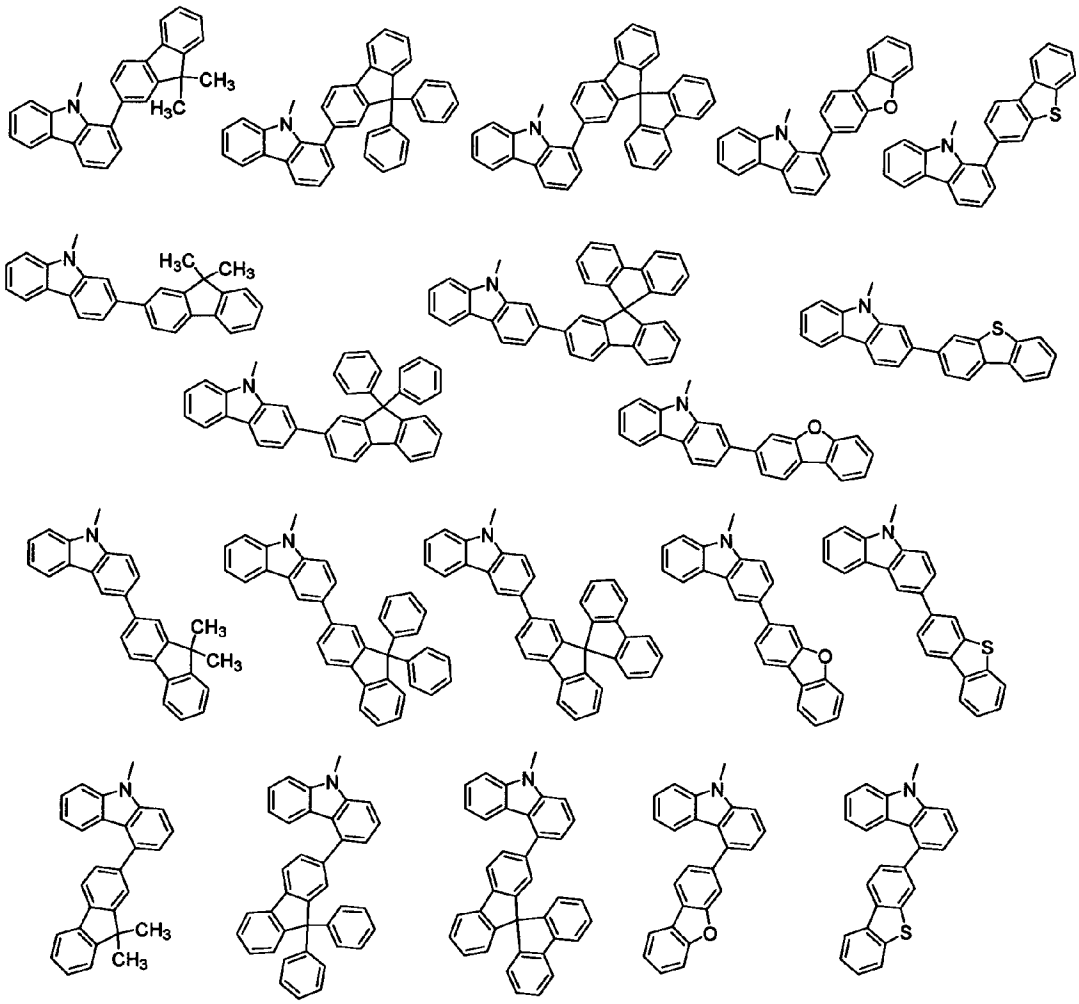
(D^{D2})

（一般式（D^{D2}）中の各記号の定義は、前記一般式（D^D）に関する記載と同じである。）

[0812] 前記一般式（D^D）で表される基として、より具体的には、下記群から選択

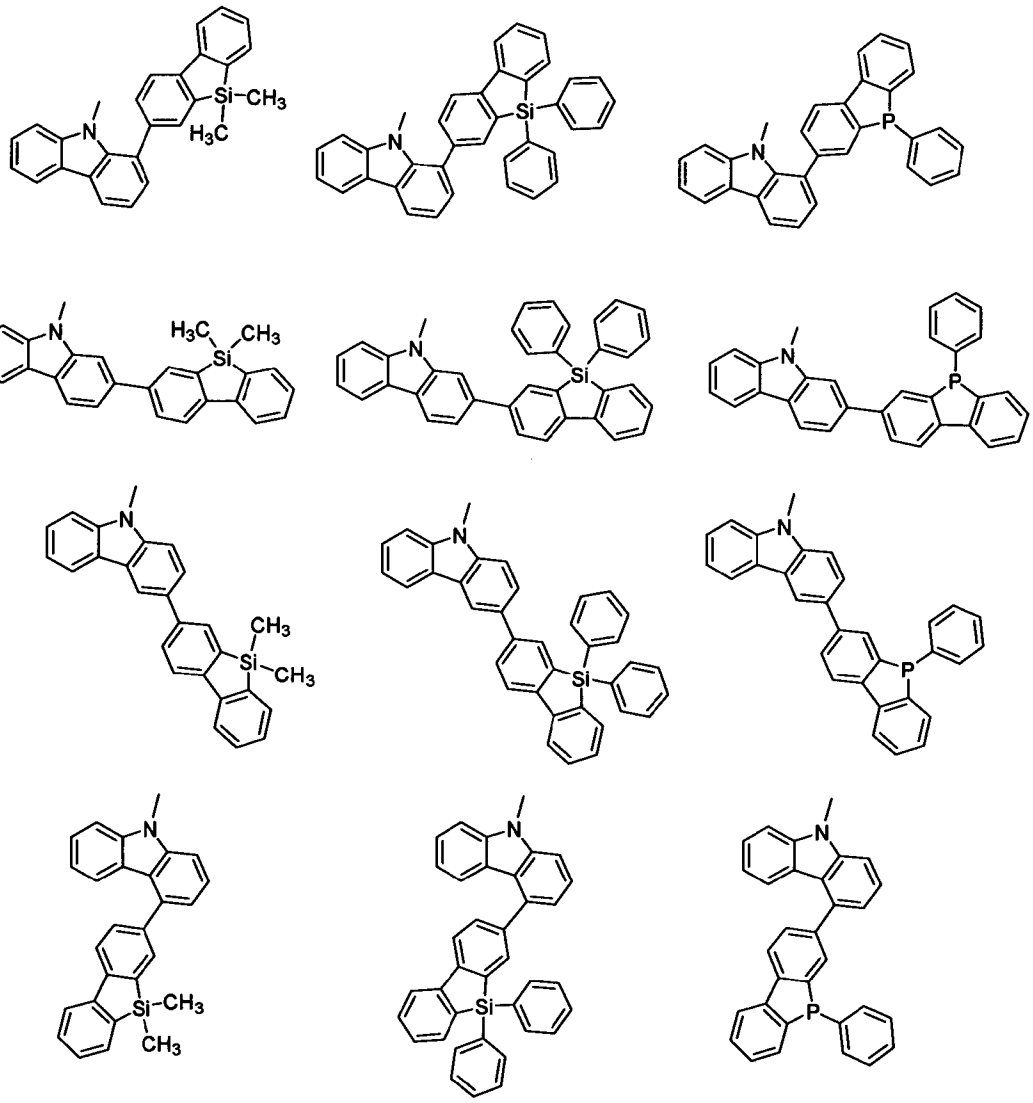
される基が好ましい。なお、下記の基において、水素原子と結合している炭素原子は、当該水素原子に代えて、上述の置換基と結合してもよい。

[0813] [化606]



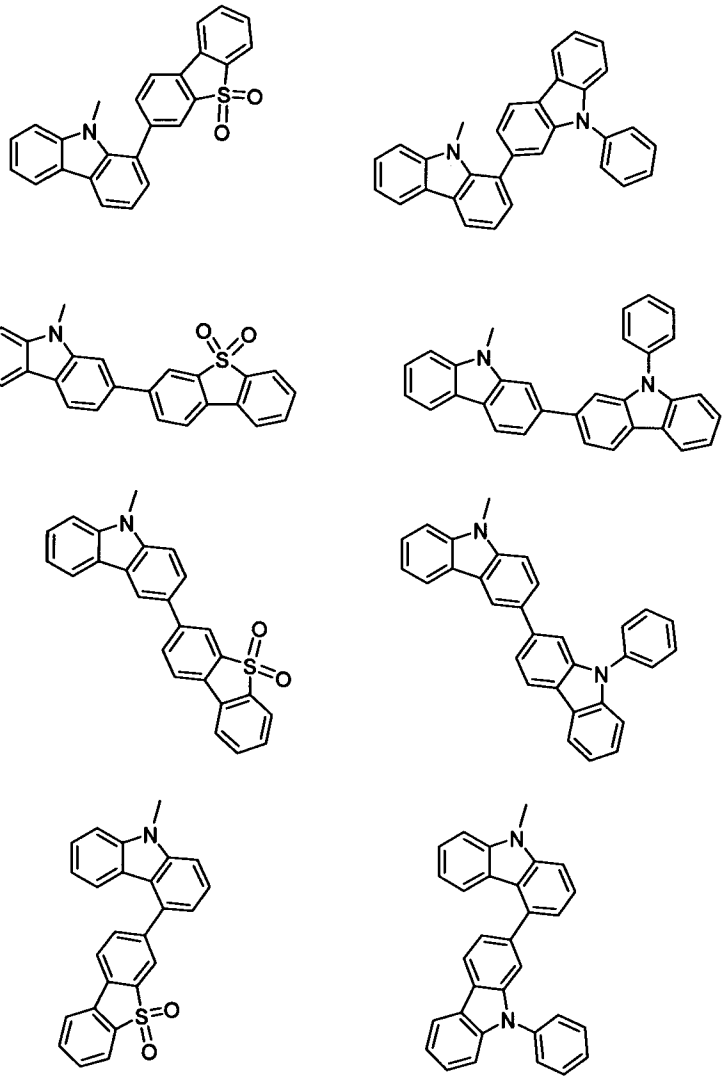
[0814]

[化607]



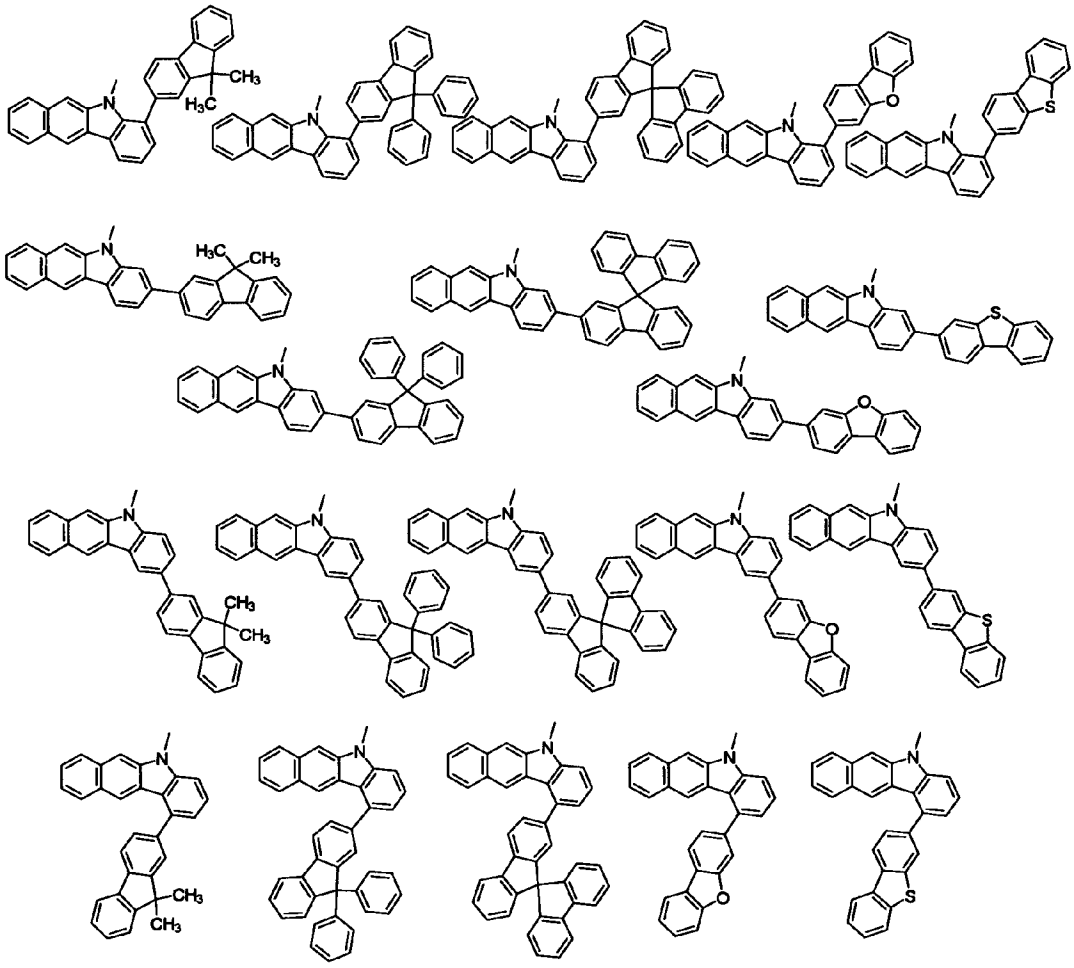
[0815]

[化608]



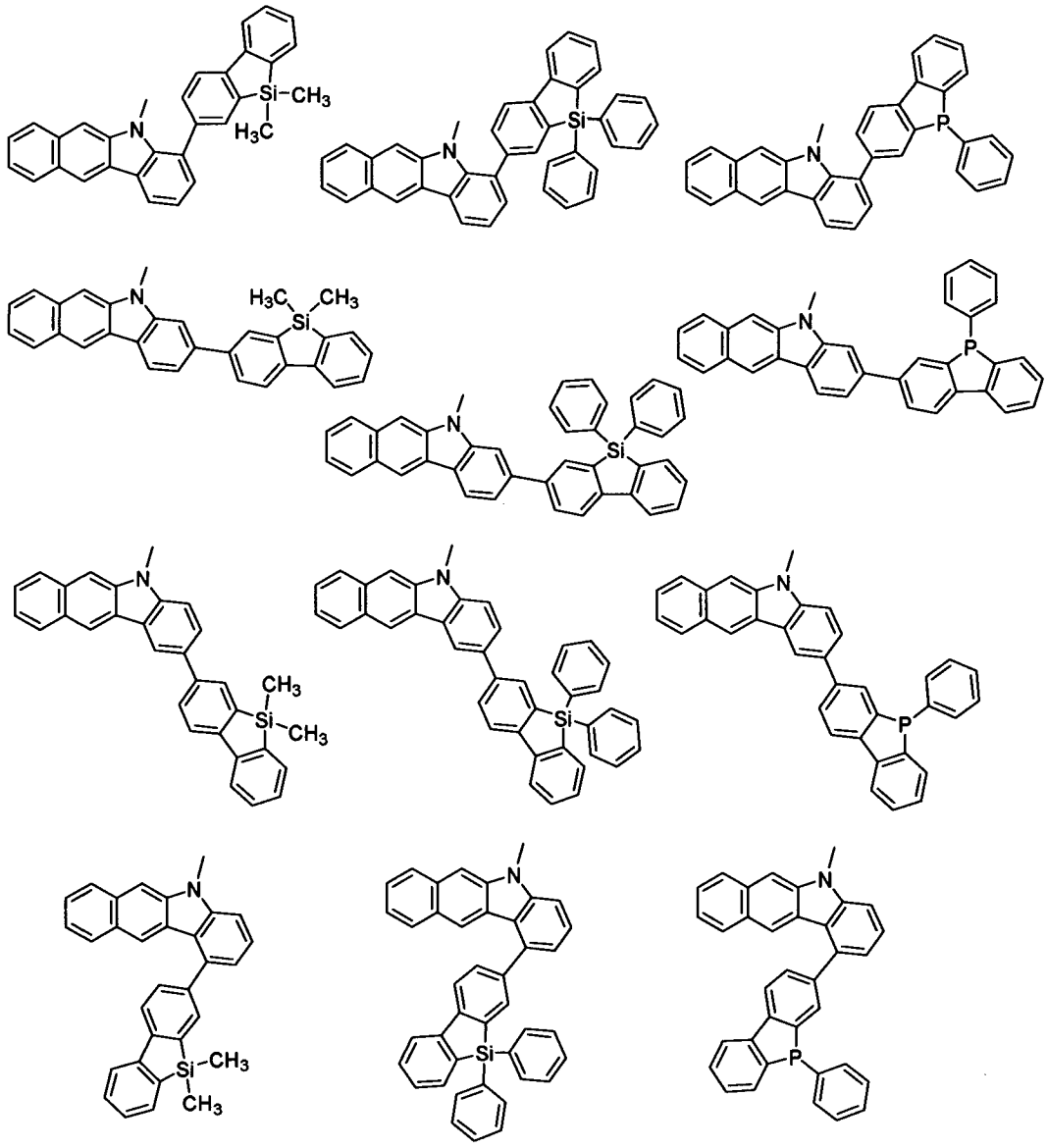
[0816]

[化609]



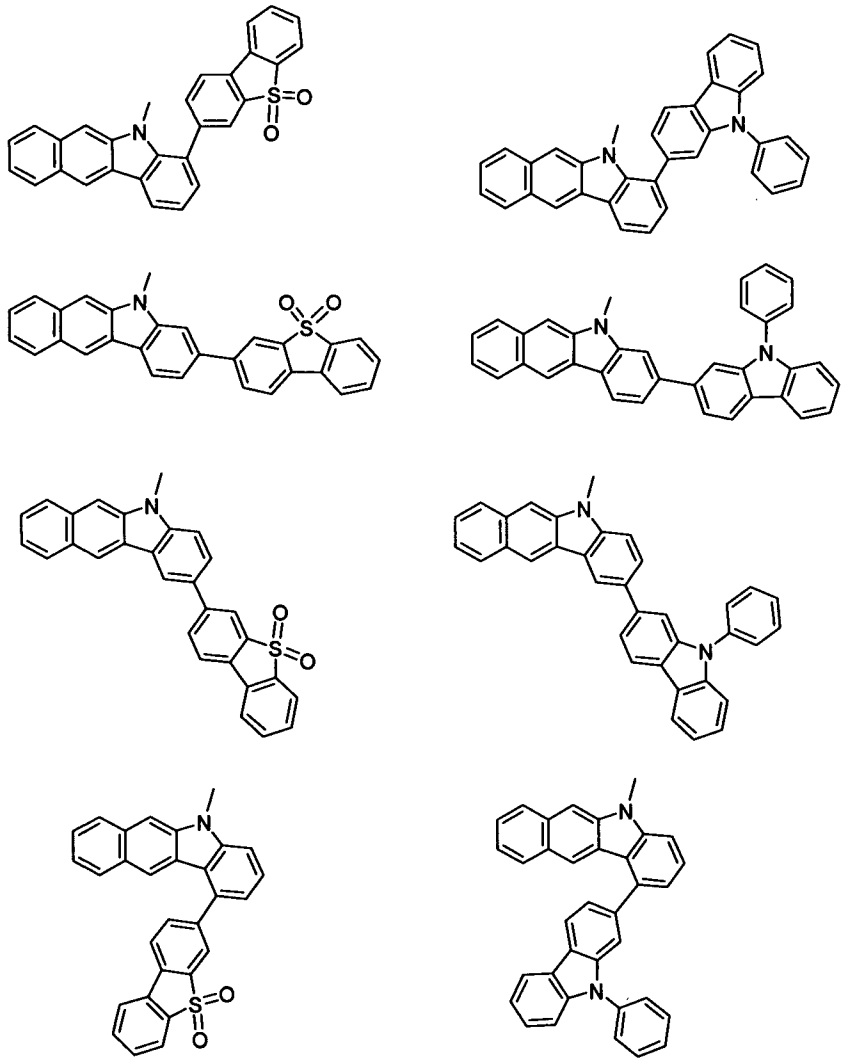
[0817]

[化610]



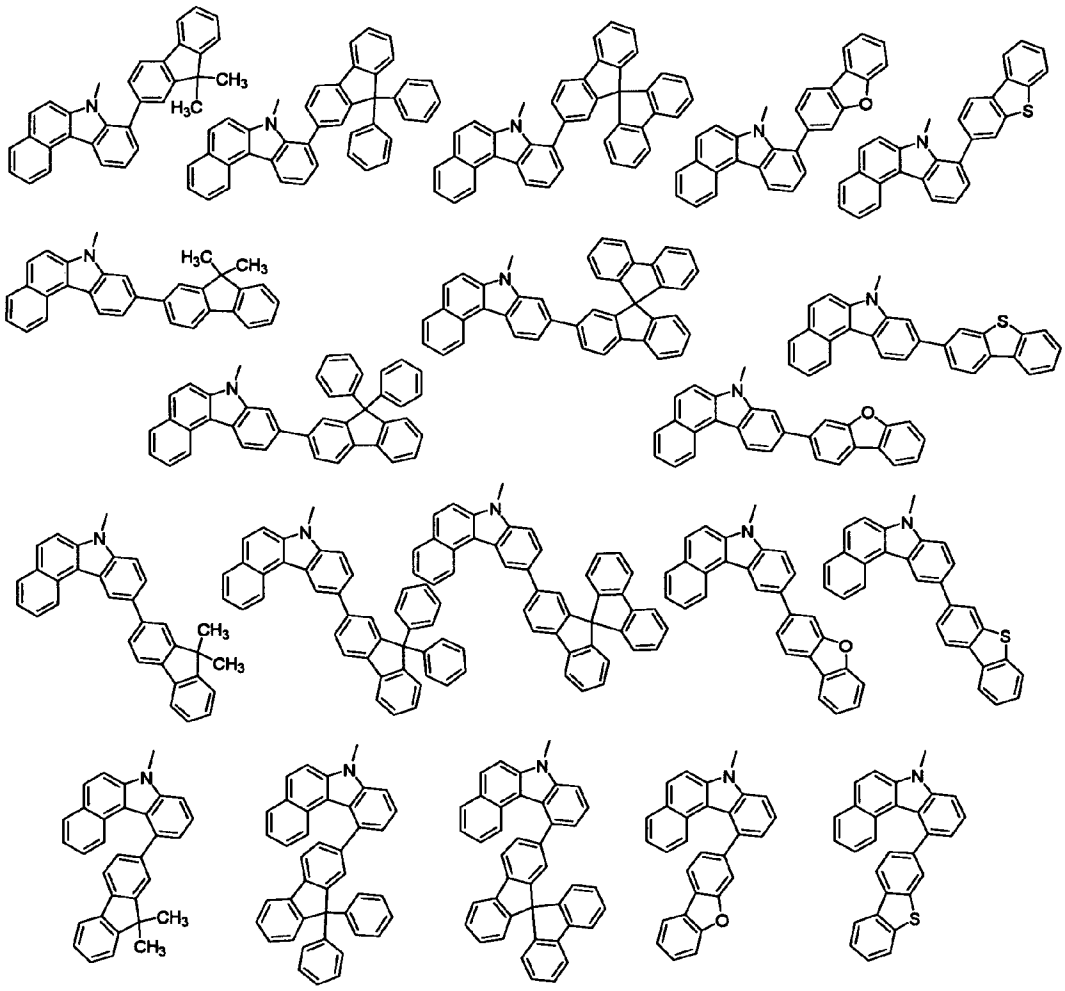
[0818]

[化611]



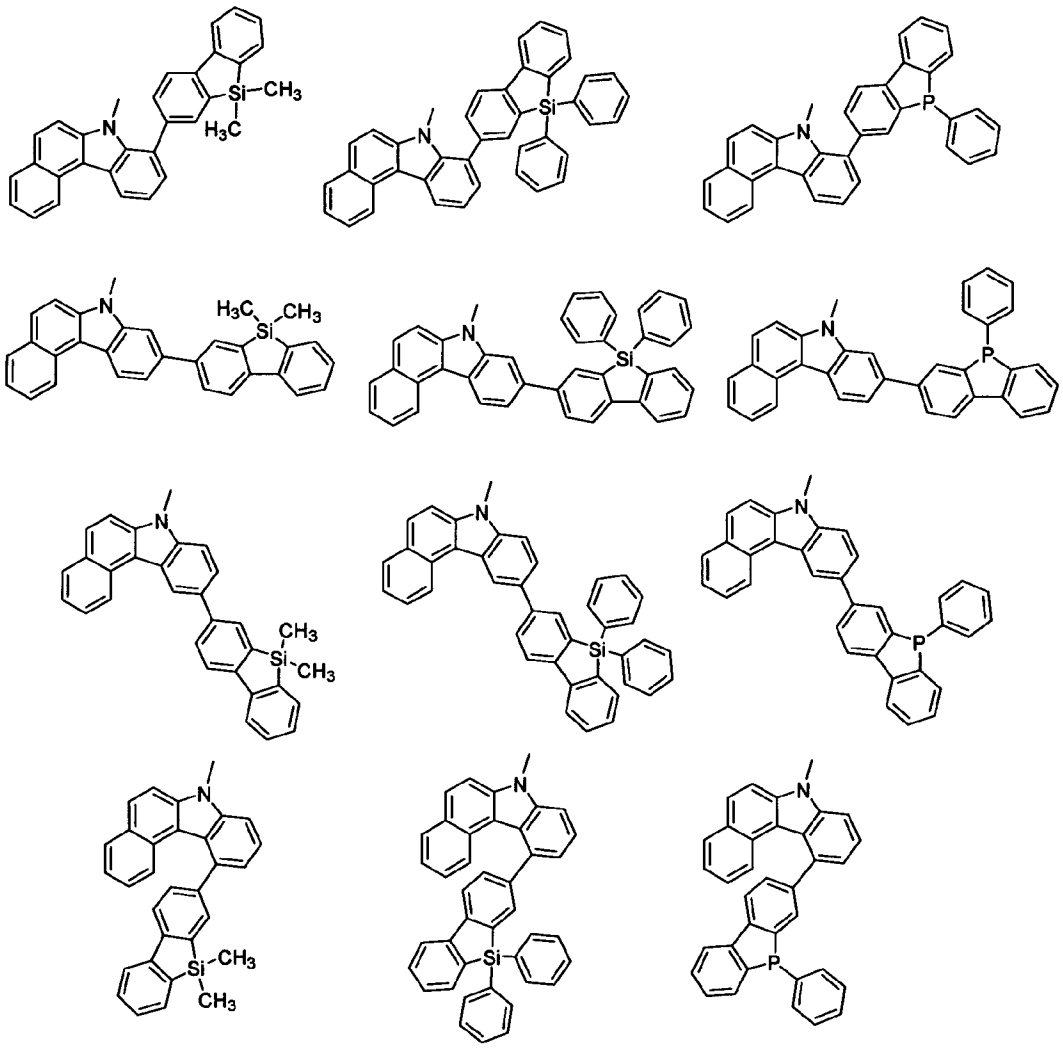
[0819]

[化612]



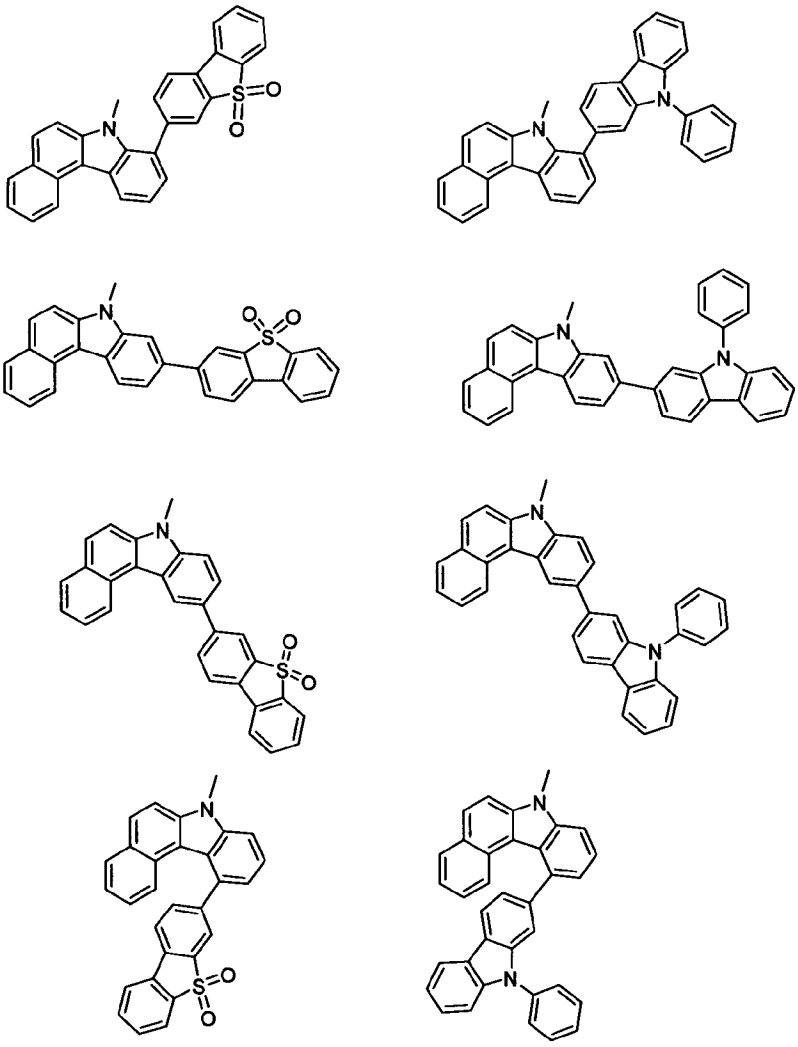
[0820]

[化613]



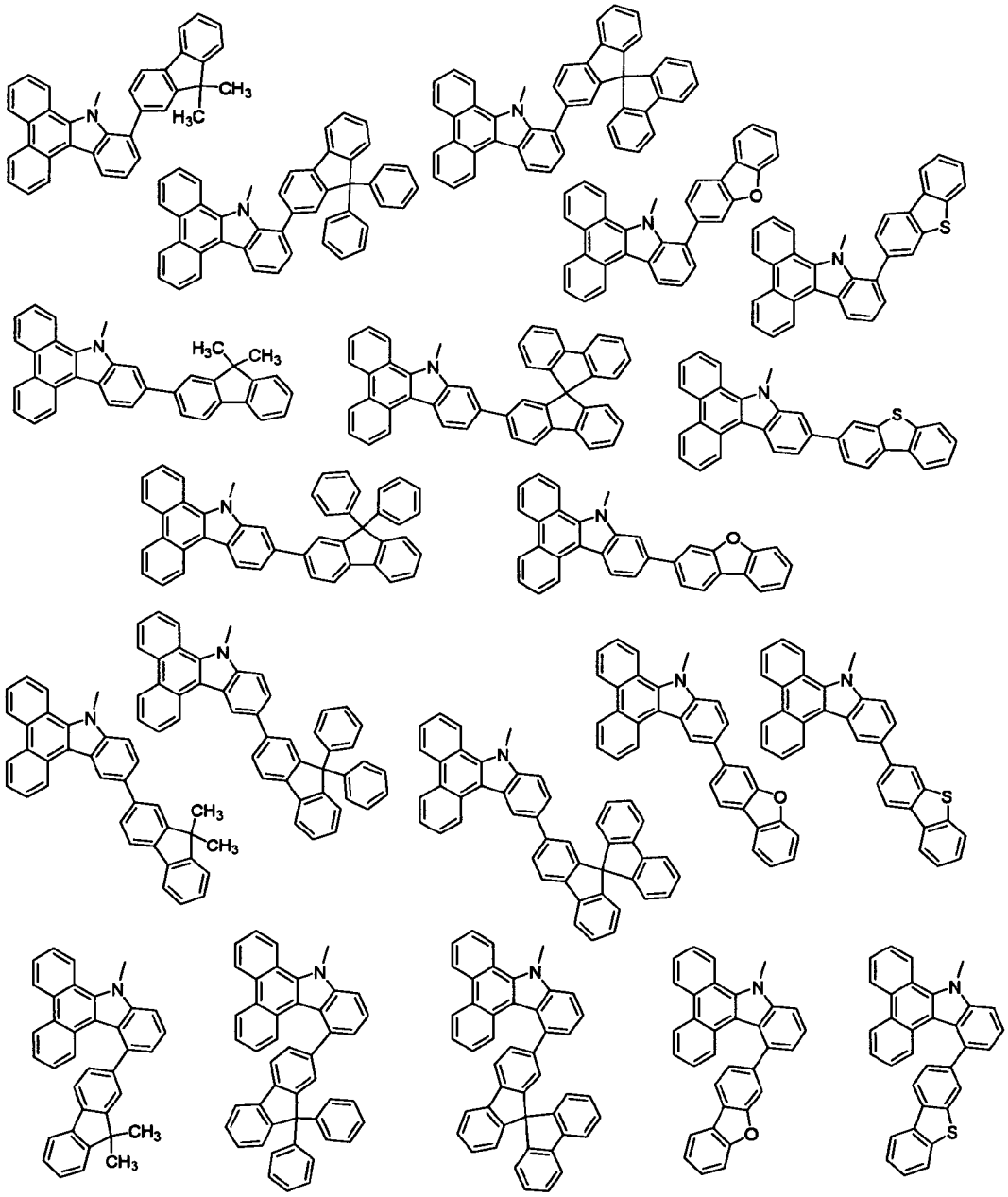
[0821]

[化614]



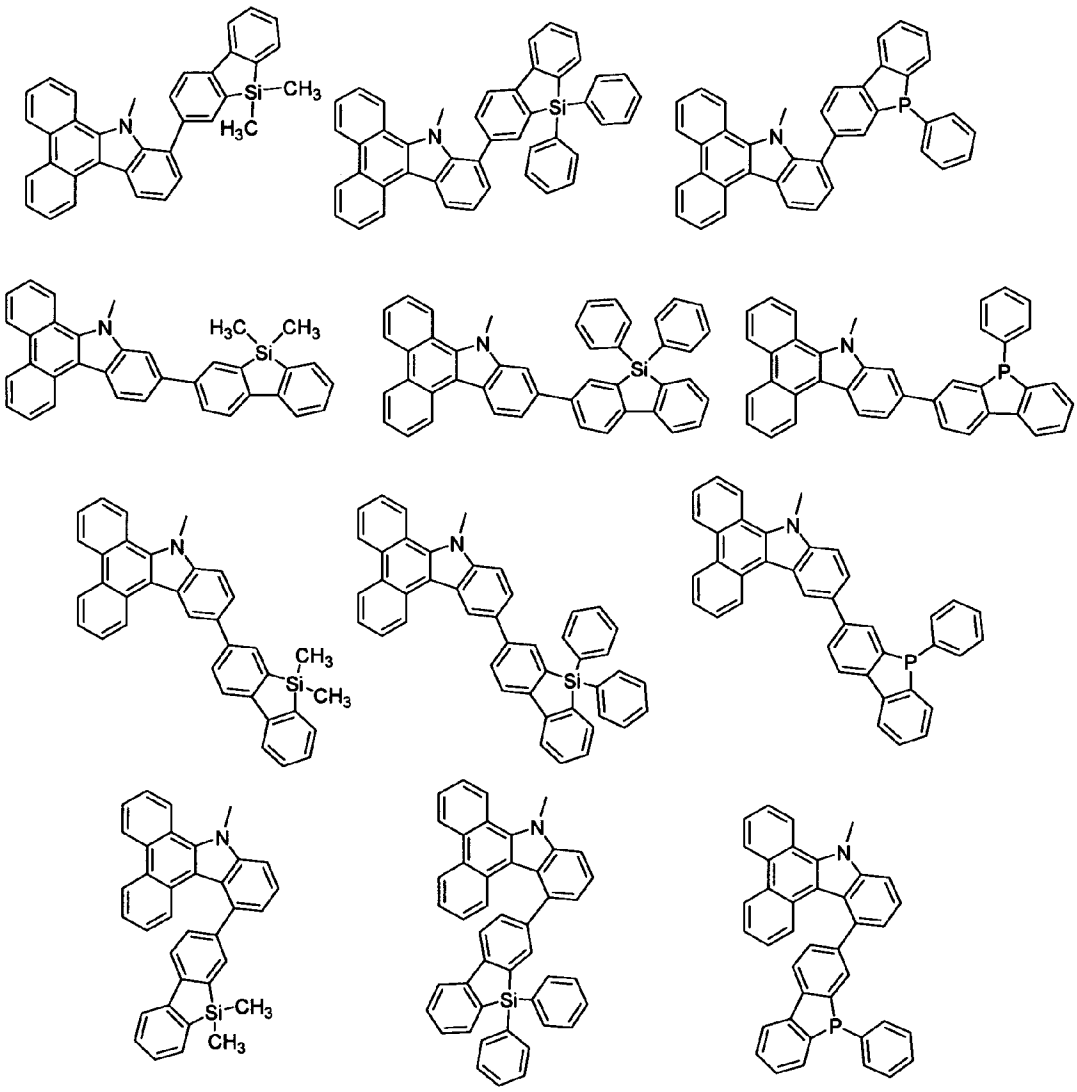
[0822]

[化615]



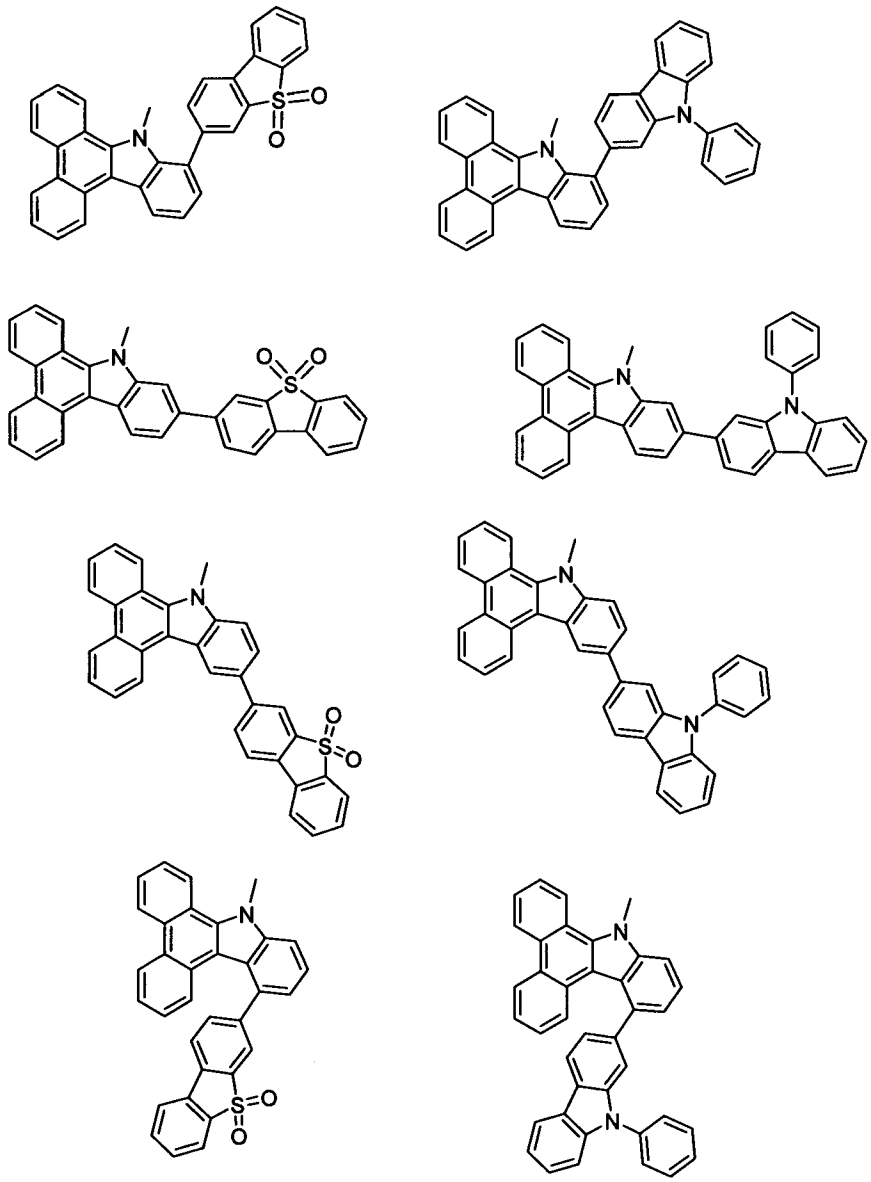
[0823]

[化616]



[0824]

[化617]

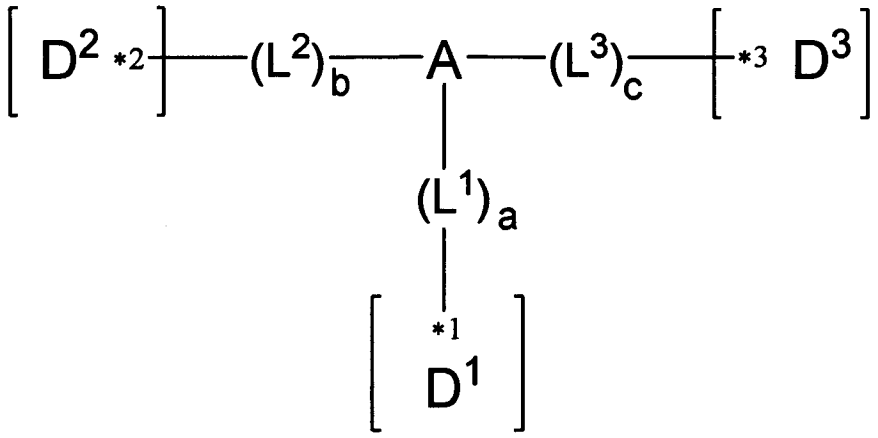


[0825] （本発明の一態様の化合物）

本発明の一態様の化合物として、下記一般式（１ａ［Ｖ］）で表される化合物（以下、「化合物（１ａ［Ｖ］）」ともいう）が好ましい。

[0826]

[化618]

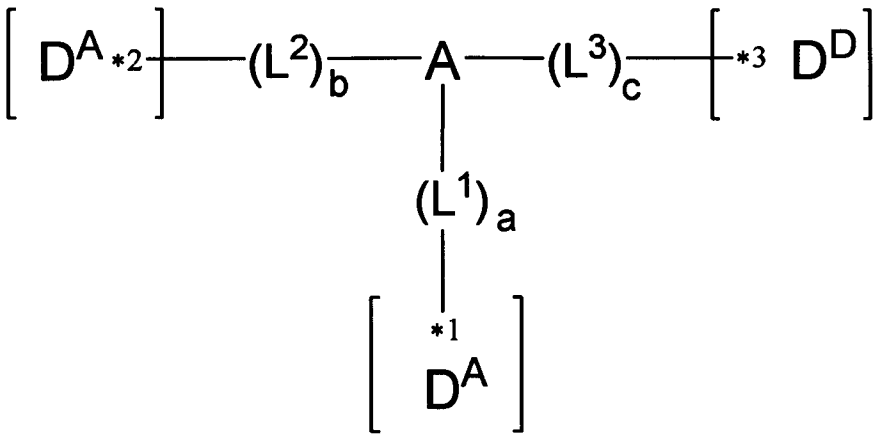


(1a[V])

[0827] 前記一般式（１ａ［Ｖ］）中、各記号の定義は、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載と同じである。

また、本発明の一態様である化合物（１ａ）の中でも、下記一般式（１ａ－１［Ｖ］）～（１ａ－４［Ｖ］）のいずれかで表される化合物（以下、「化合物（１ａ－１［Ｖ］）～（１ａ－４［Ｖ］）」ともいう）がより好ましい。

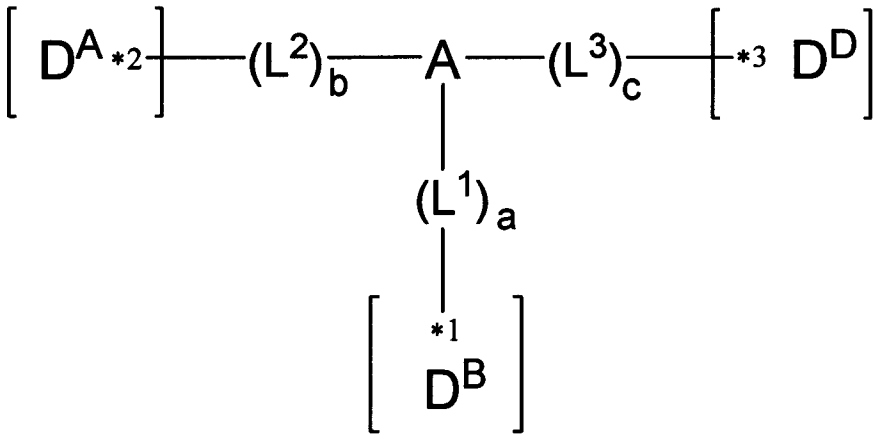
[0828] [化619]



(1a-1[V])

[0829] 前記一般式（１ａ－１［Ｖ］）中、D^Aは、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載中のＡ群に属する前記一般式（D^A）で表される基を表し、D^Dは、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載中のＤ群に属する前記一般式（D^D）で表される基を表す。それ以外の各記号の定義は、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載と同じである。

[0830] [化620]

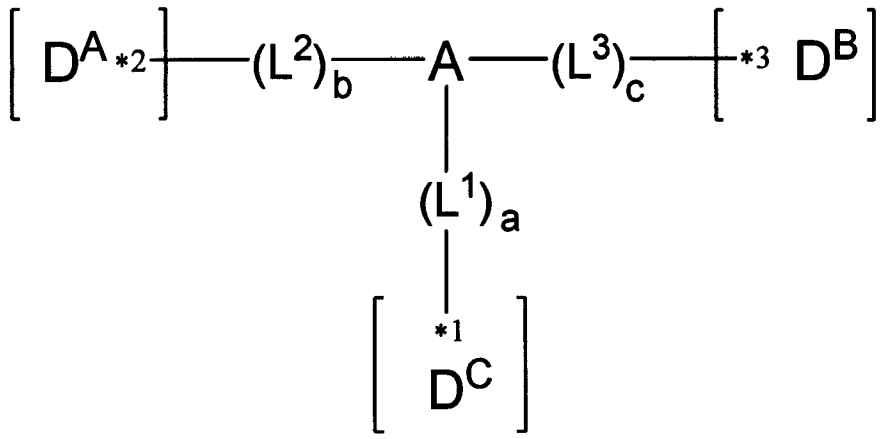


(1a-2[V])

[0831] 前記一般式（１ａ－２［Ｖ］）中、D^Aは、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載中のＡ群に属する前記一般式（D^A）で表される基を表し、D^Bは、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載中のＢ群に属する前記一般式（D^B）で表される基を表し、D^Dは、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載中のＤ群に属する前記一般式（D^D）で表される基を表す。それ以外の各記号の定義は、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載と同じである。

[0832]

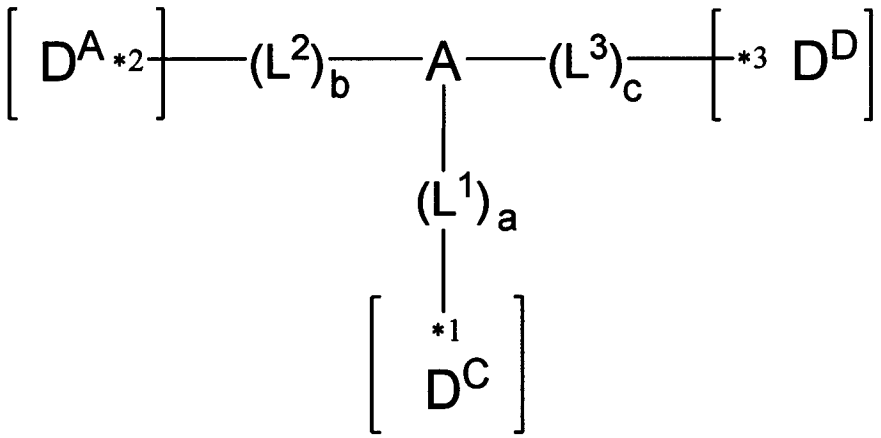
[化621]



(1a-3[V])

[0833] 前記一般式（１ａ－３［Ｖ］）中、D^Aは、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載中のＡ群に属する前記一般式（D^A）で表される基を表し、D^Bは、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載中のＢ群に属する前記一般式（D^B）で表される基を表し、D^Cは、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載中のＣ群に属する前記一般式（D^C）で表される基を表す。それ以外の各記号の定義は、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載と同じである。

[0834] [化622]

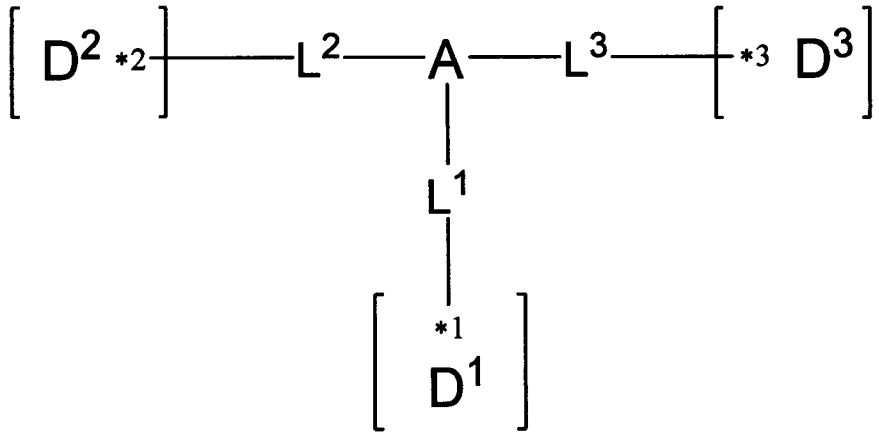


(1a-4[V])

[0835] 前記一般式（１ａ－４［Ｖ］）中、D^Aは、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載中のＡ群に属する前記一般式（D^A）で表される基を表し、D^Cは、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載中のＣ群に属する前記一般式（D^C）で表される基を表し、D^Dは、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載中のＤ群に属する前記一般式（D^D）で表される基を表す。それ以外の各記号の定義は、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載と同じである。

[0836] また、本発明の一態様である化合物（１［Ｖ］）又は化合物（１ａ［Ｖ］）に含まれる別の態様として、下記一般式（１ａ－ｉ［Ｖ］）で表される化合物（以下、「化合物（１ａ－ｉ［Ｖ］）」ともいう）がより好ましい。

[0837] [化623]



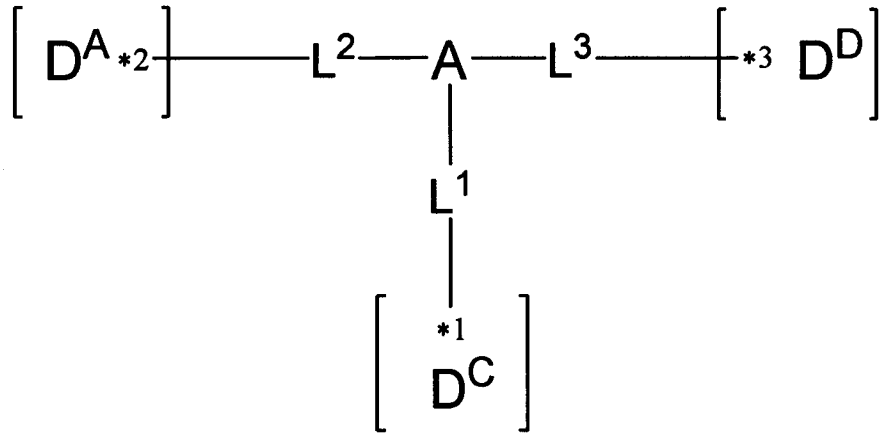
(1a-i[V])

[0838] 前記一般式（１ａ－ｉ［Ｖ］）中、各記号の定義は、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載と同じである。

さらに、本発明の一態様である化合物（１ａ－ｉ［Ｖ］）の中でも、下記一般式（１ａ－４－ｉ［Ｖ］）で表される化合物（以下、「化合物（１ａ－４－ｉ［Ｖ］）」ともいう）がより好ましい。

[0839]

[化624]



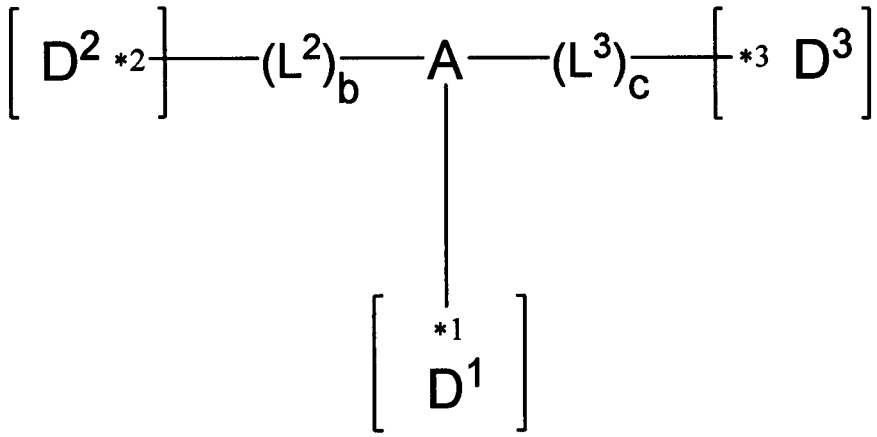
(1a-4-i[V])

[0840] 前記一般式（１ａ－４－ｉ［Ｖ］）中、D^Aは、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載中のＡ群に属する前記一般式（D^A）で表される基を表し、D^Cは、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載中のＣ群に属する前記一般式（D^C）で表される基を表し、D^Dは、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載中のＤ群に属する前記一般式（D^D）で表される基を表す。それ以外の各記号の定義は、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載と同じである。

[0841] また、本発明の一態様である化合物（１［Ｖ］）又は化合物（１ａ［Ｖ］）に含まれる別の態様として、下記一般式（１ａ－ｉｉ［Ｖ］）で表される化合物（以下、「化合物（１ａ－ｉｉ［Ｖ］）」ともいう）がより好ましい。

[0842]

[化625]

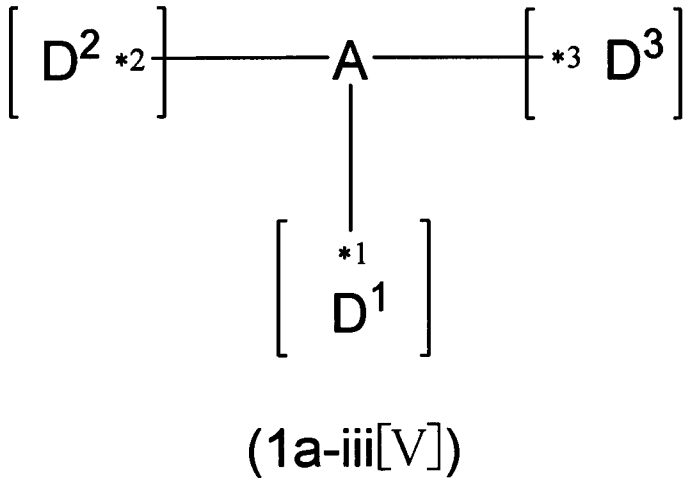


(1a-ii[V])

[0843] 前記一般式（１ａ－ｉｉ［Ｖ］）中、各記号の定義は、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載と同じである。

また、本発明の一態様である化合物（１［Ｖ］）又は化合物（１ａ［Ｖ］）に含まれる別の態様として、下記一般式（１ａ－ｉｉｉ［Ｖ］）で表される化合物（以下、「化合物（１ａ－ｉｉｉ［Ｖ］）」ともいう）がより好ましい。

[0844] [化626]

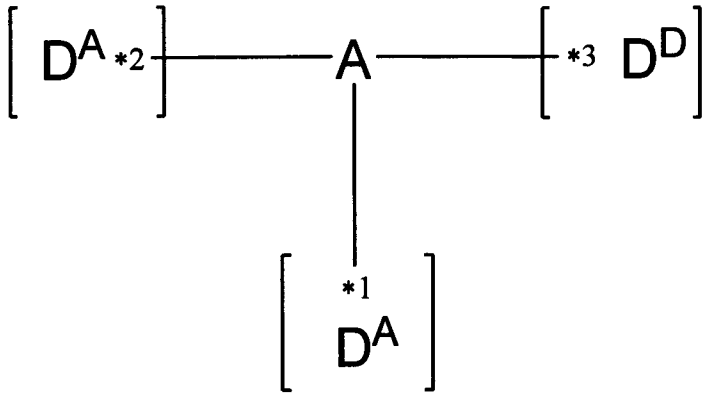


(1a-iii[V])

[0845] 前記一般式（１ａ－ｉｉｉ［Ｖ］）中、各記号の定義は、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載と同じである。

また、本発明の一態様である化合物（１ａ－ｉｉｉ［Ｖ］）の中でも、下記一般式（１ａ－１－ｉｉｉ［Ｖ］）～（１ａ－３－ｉｉｉ［Ｖ］）のいずれかで表される化合物（以下、「化合物（１ａ－１－ｉｉｉ［Ｖ］）～（１ａ－３－ｉｉｉ［Ｖ］）」ともいう）がより好ましい。

[0846] [化627]

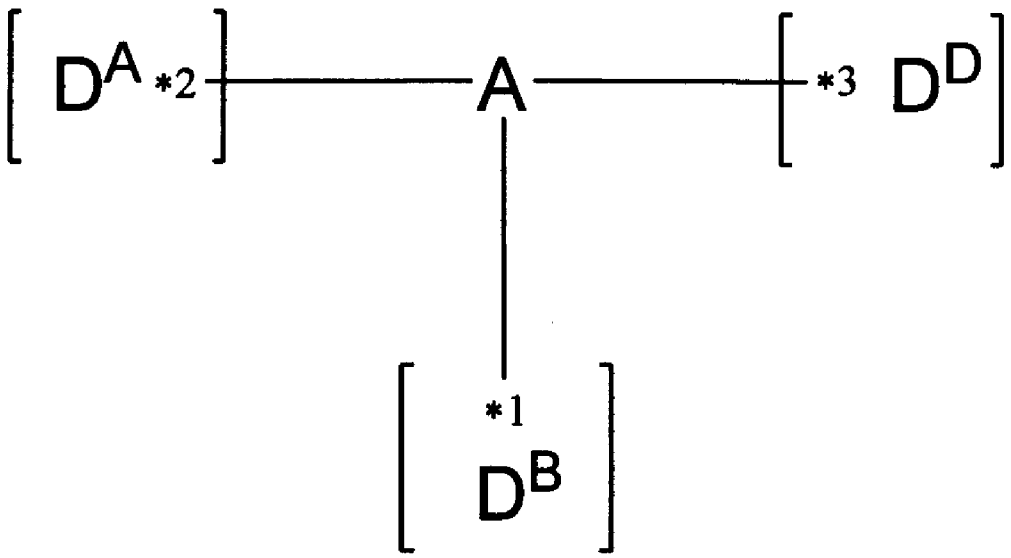


(1a-1-iii[V])

[0847] 前記一般式（１ａ－１－ｉｉｉ［Ｖ］）中、D^Aは、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載中のＡ群に属する前記一般式（D^A）で表される基を表し、D^Dは、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載中のＤ群に属する前記一般式（D^D）で表される基を表す。それ以外の各記号の定義は、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載と同じである。

[0848]

[化628]

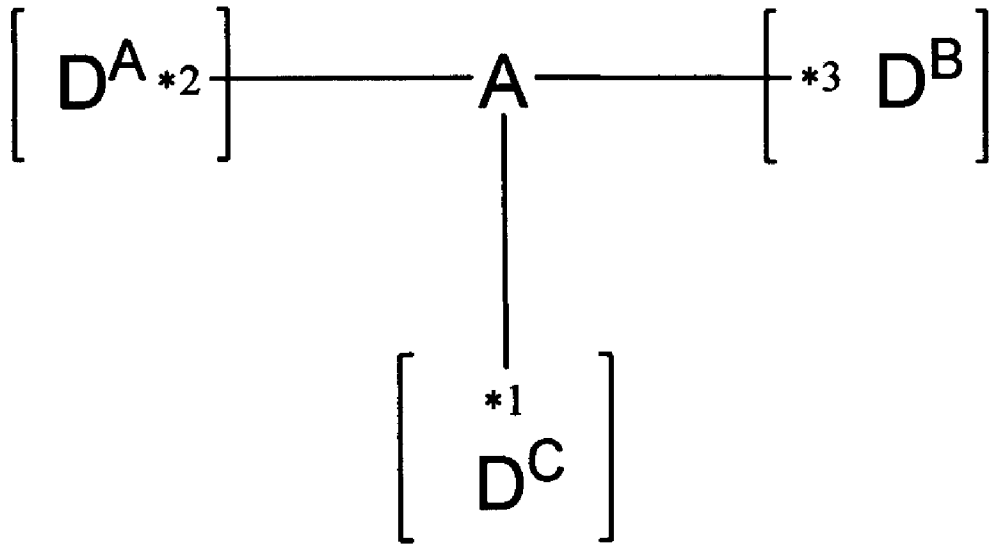


(1a-2-iii[V])

[0849] 前記一般式（１ａ－２－ｉｉｉ［Ｖ］）中、D^Aは、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載中のＡ群に属する前記一般式（D^A）で表される基を表し、D^Bは、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載中のＢ群に属する前記一般式（D^B）で表される基を表し、D^Dは、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載中のＤ群に属する前記一般式（D^D）で表される基を表す。それ以外の各記号の定義は、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載と同じである。

[0850]

[化629]



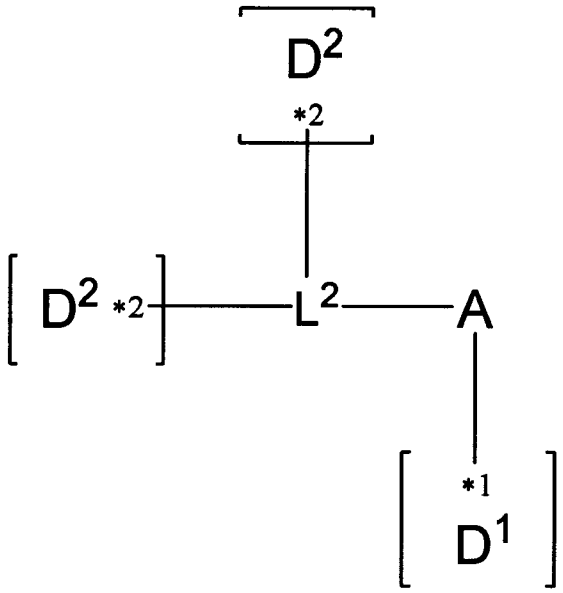
(1a-3-iii[V])

[0851] 前記一般式（１ａ－３－ｉｉｉ［Ｖ］）中、D^Aは、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載中のＡ群に属する前記一般式（D^A）で表される基を表し、D^Bは、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載中のＢ群に属する前記一般式（D^B）で表される基を表し、D^Cは、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載中のＣ群に属する前記一般式（D^C）で表される基を表す。それ以外の各記号の定義は、前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載と同じである。

[0852] また、本発明の一態様である化合物（１［Ｖ］）又は化合物（１ａ［Ｖ］）に含まれる別の態様として、下記一般式（１ａ－ｉｖ［Ｖ］）で表される化合物（以下、「化合物（１ａ－ｉｖ［Ｖ］）」ともいう）がより好ましい。

[0853]

[化630]



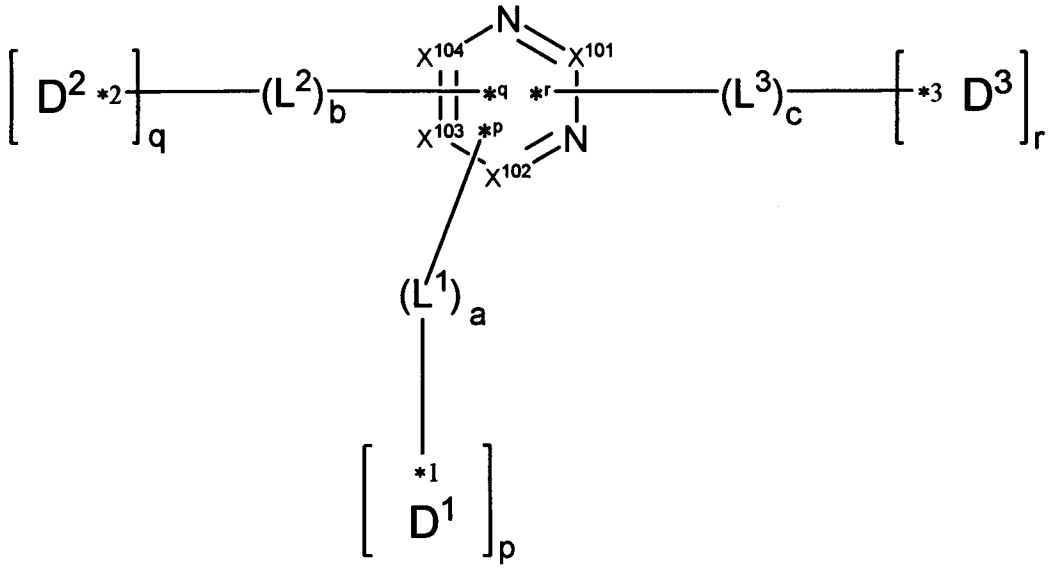
(1a-iv[V])

[0854] 前記一般式（１ａ－ｉｖ［Ｖ］）中、各記号の定義は、それぞれ前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載と同じである。

また、本発明の一態様である化合物（１［Ｖ］）に含まれる別の態様として、下記一般式（１ｂ－ｉ［Ｖ］）～（１ｂ－ｉｖ［Ｖ］）で表される化合物（以下、「化合物（１ｂ－ｉ［Ｖ］）～（１ｂ－ｉｖ［Ｖ］）」ともいう）がより好ましい。

[0855]

[化631]



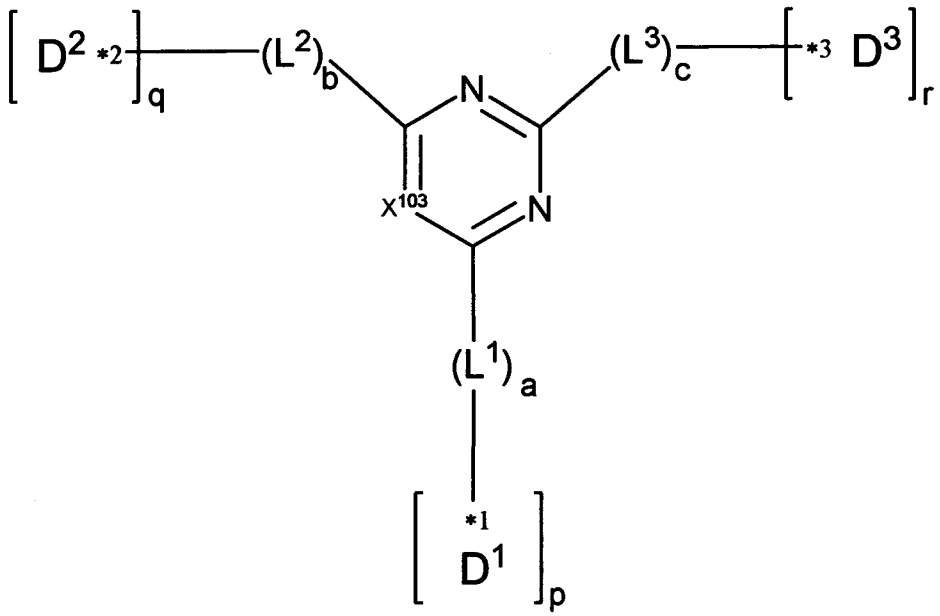
(1b-i[V])

[0856] 前記一般式（１ｂ－ｉ［Ｖ］）中、各記号の定義は、それぞれ前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載の定義と同じである。

Ｘ^{101}～Ｘ^{104}は、それぞれ＊^{p}～＊^{r}のいずれかと結合する炭素原子、Ｃ（Ｒｘ）、又は窒素原子であり、Ｒｘは水素原子又は置換基であって、複数存在するＲｘは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲｘ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。

[0857]

[化632]

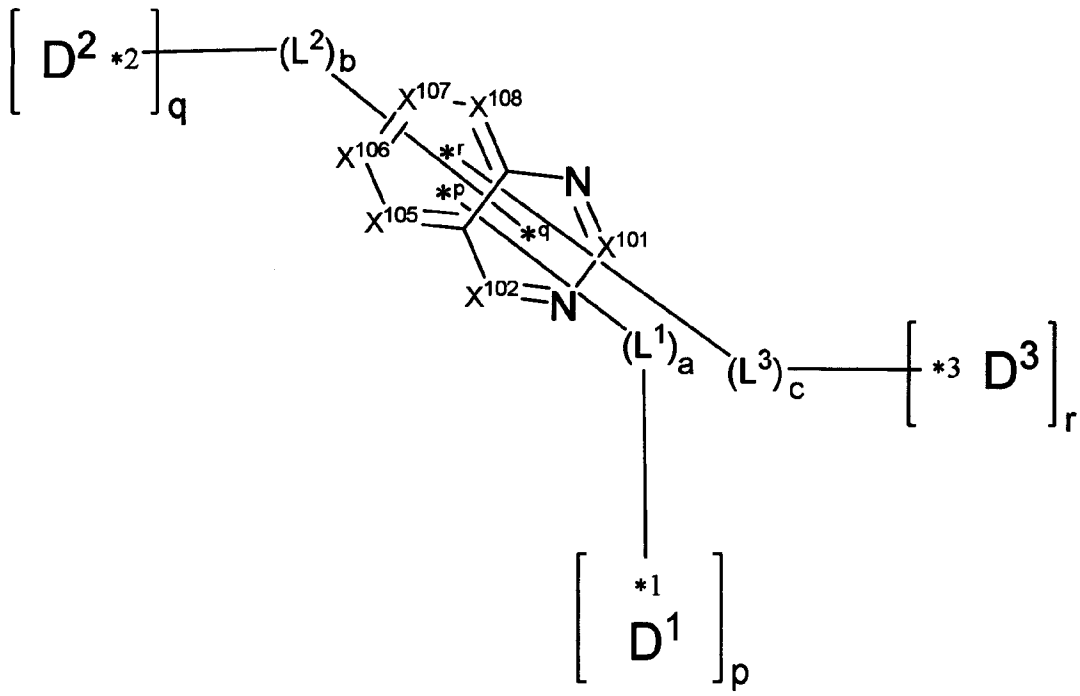


(1b-ii[V])

[0858] 前記一般式（１ｂ－ｉｉ［Ｖ］）中、各記号の定義は、それぞれ前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載の定義と同じである。X^{103}は、Ｃ（Ｒｘ）又は窒素原子であり、Ｒｘは水素原子又は置換基である。

[0859]

[化633]



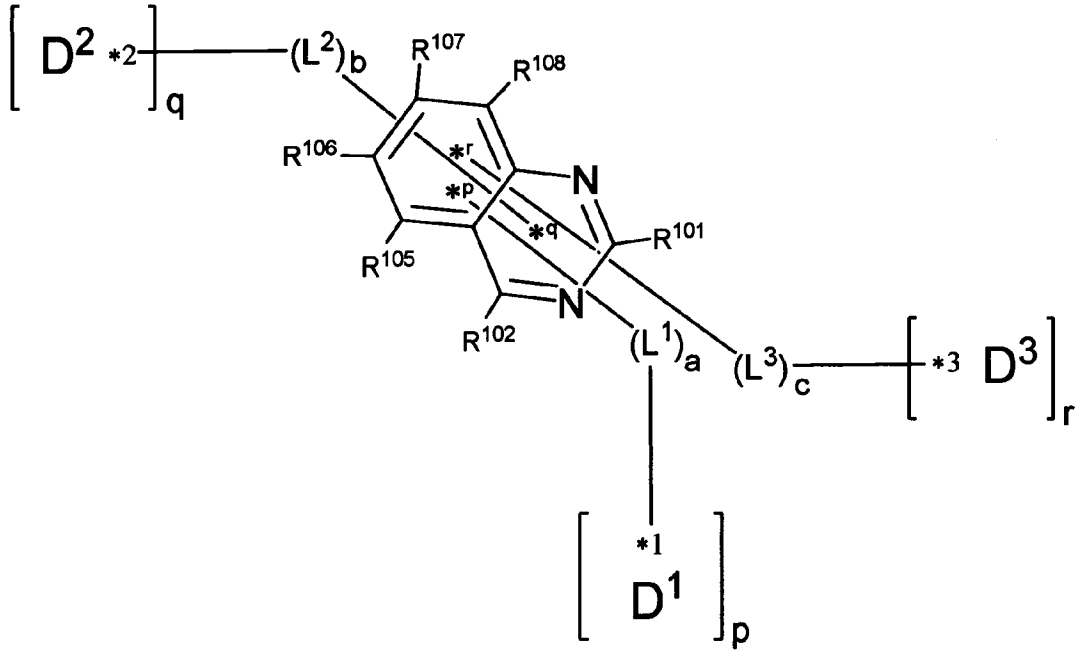
(1b-iii[V])

[0860] 前記一般式（１ｂ－ｉｉｉ［Ｖ］）中、各記号の定義は、それぞれ前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載の定義と同じである。

Ｘ^{101}、Ｘ^{102}、Ｘ^{105}～Ｘ^{108}は、それぞれ＊^{p}～＊^{r}のいずれかと結合する炭素原子、Ｃ（Ｒｘ）、又は窒素原子であり、Ｒｘは水素原子又は置換基であって、複数存在するＲｘは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲｘ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。

[0861]

[化634]



(1b-iv[V])

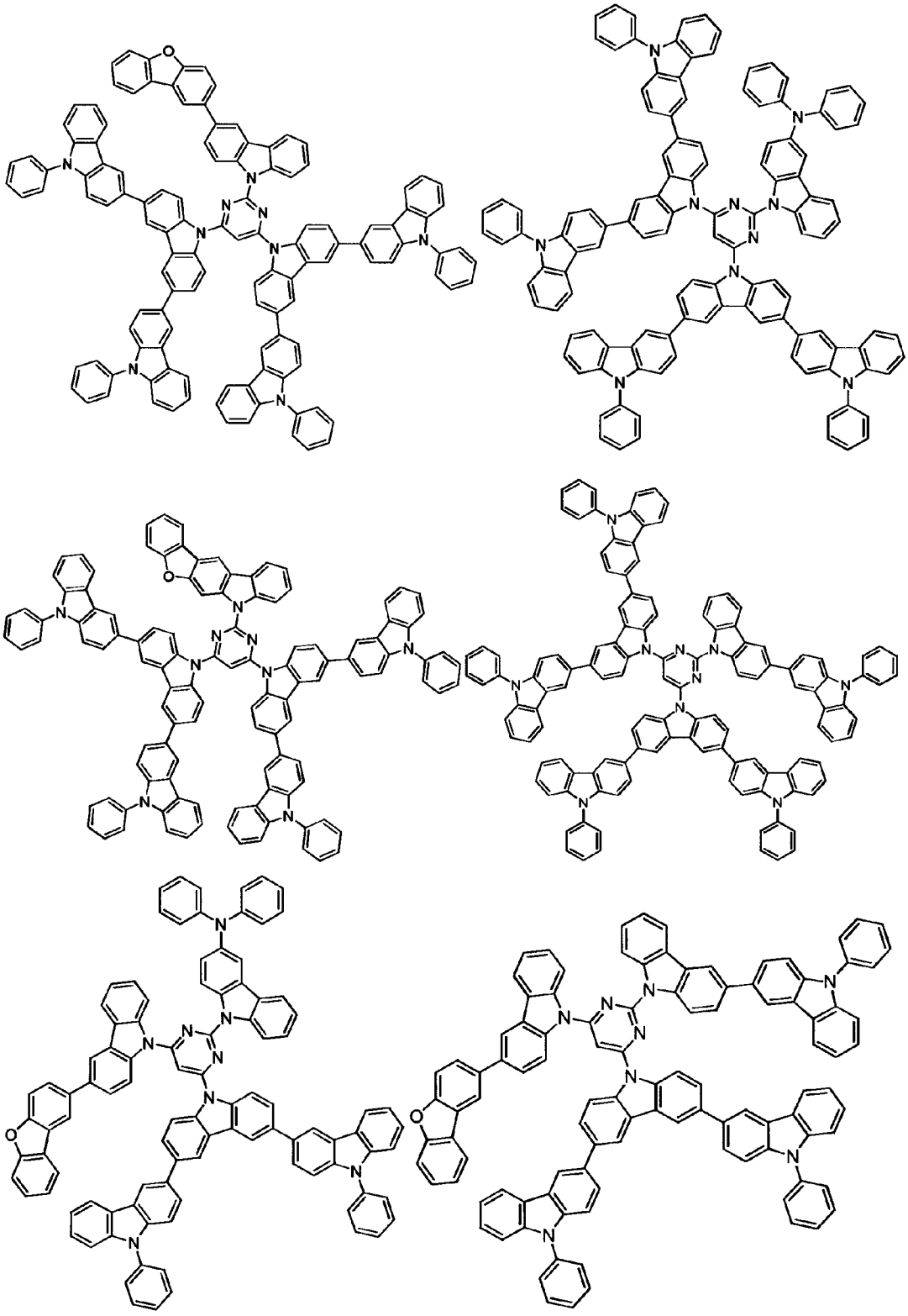
[0862] 一般式（１ｂ－ｉｖ［Ｖ］）中、各記号の定義は、それぞれ前記一般式（１［Ｖ］）に関する記載の定義と同じである。

Ｒ^{101}、Ｒ^{102}、及びＲ^{105}～Ｒ^{108}のうちの１～３つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子が＊^{p}～＊^{r}のいずれかと結合し、それ以外は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。なお、Ｒ^{102}及びＲ^{105}～Ｒ^{108}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。

[0863] 以下に本発明の一態様である化合物（１［Ｖ］）の具体例を示すが、これらに限定されるものではない。

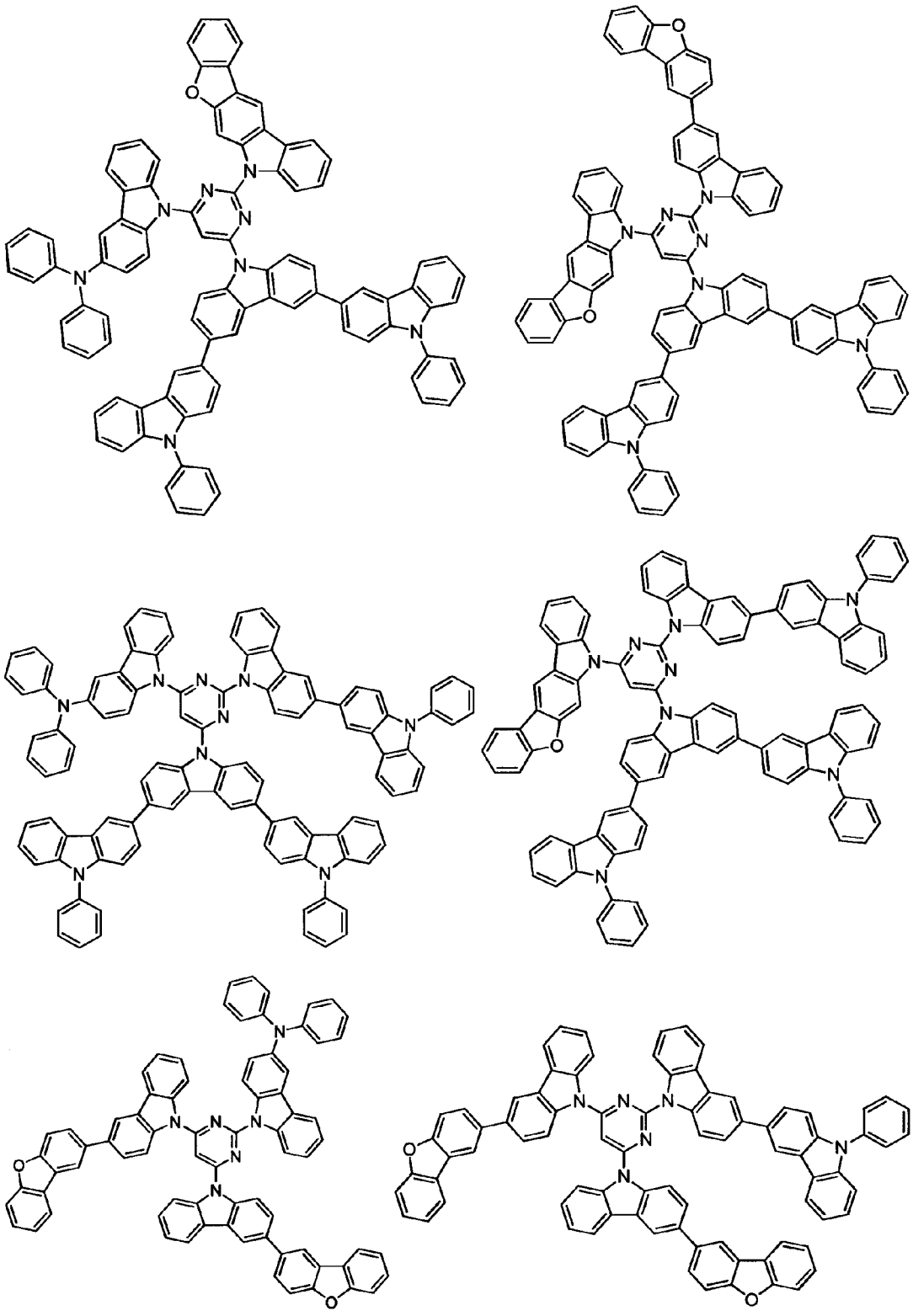
[0864]

[化635]



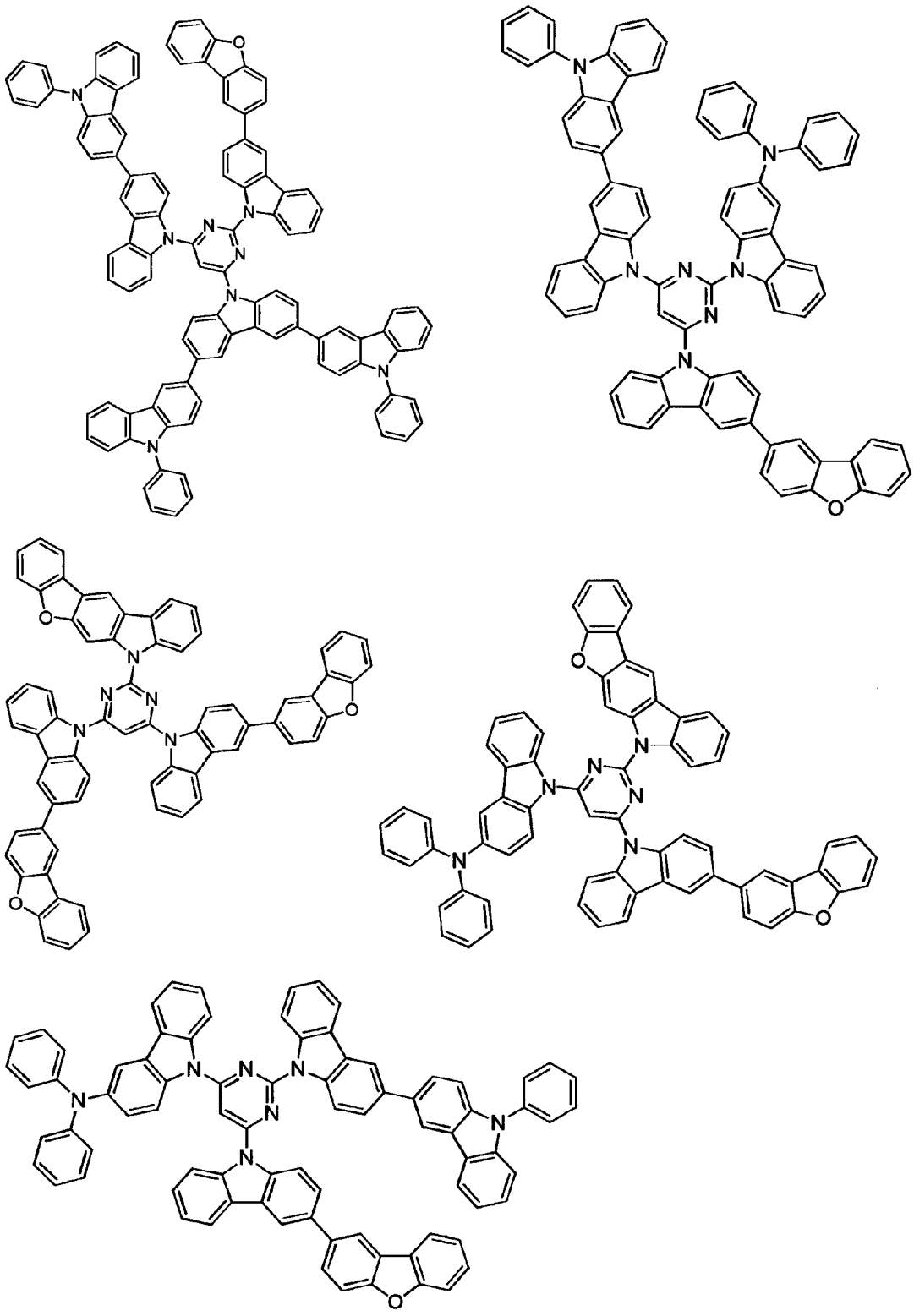
[0865]

[化636]



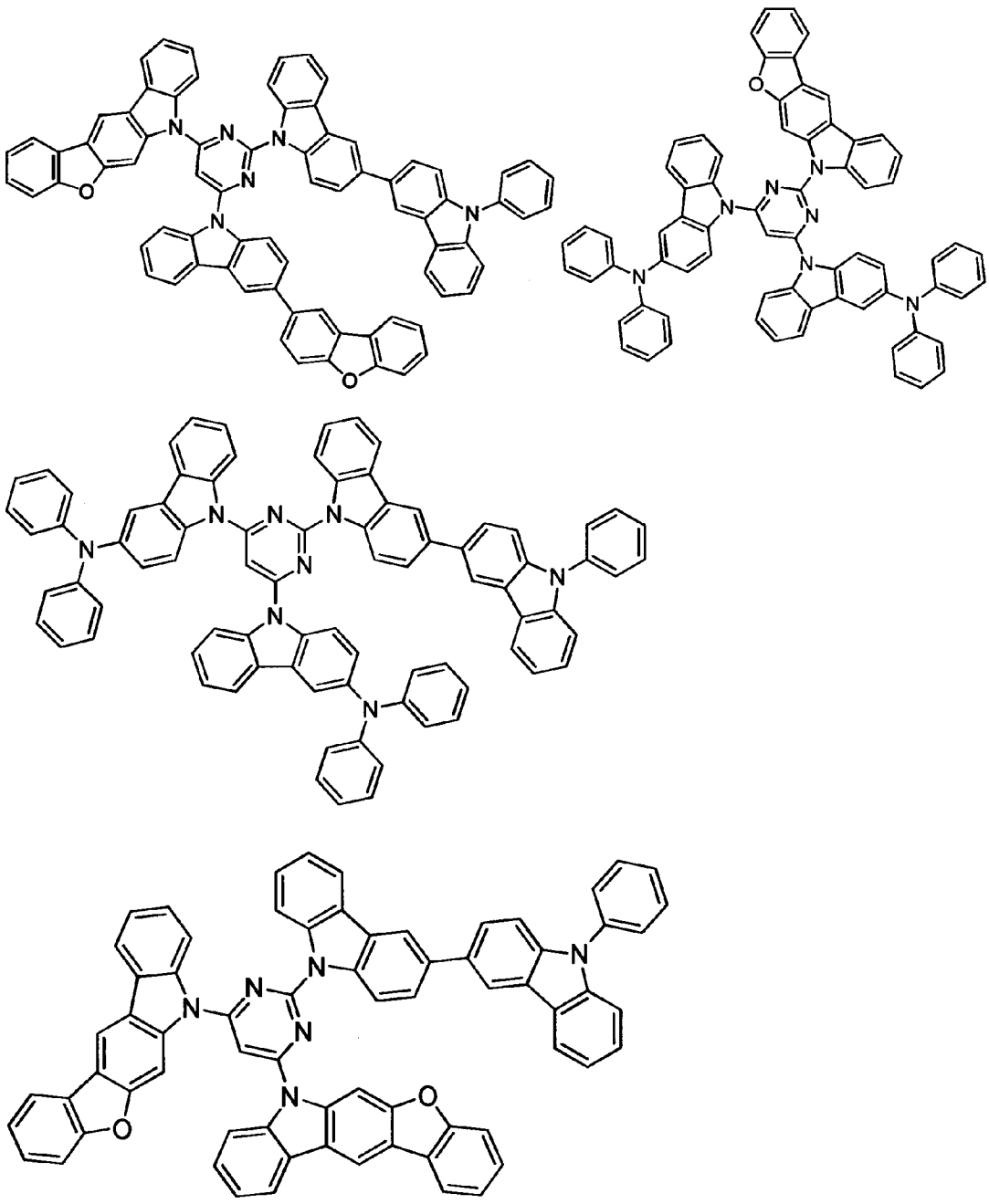
[0866]

[化637]



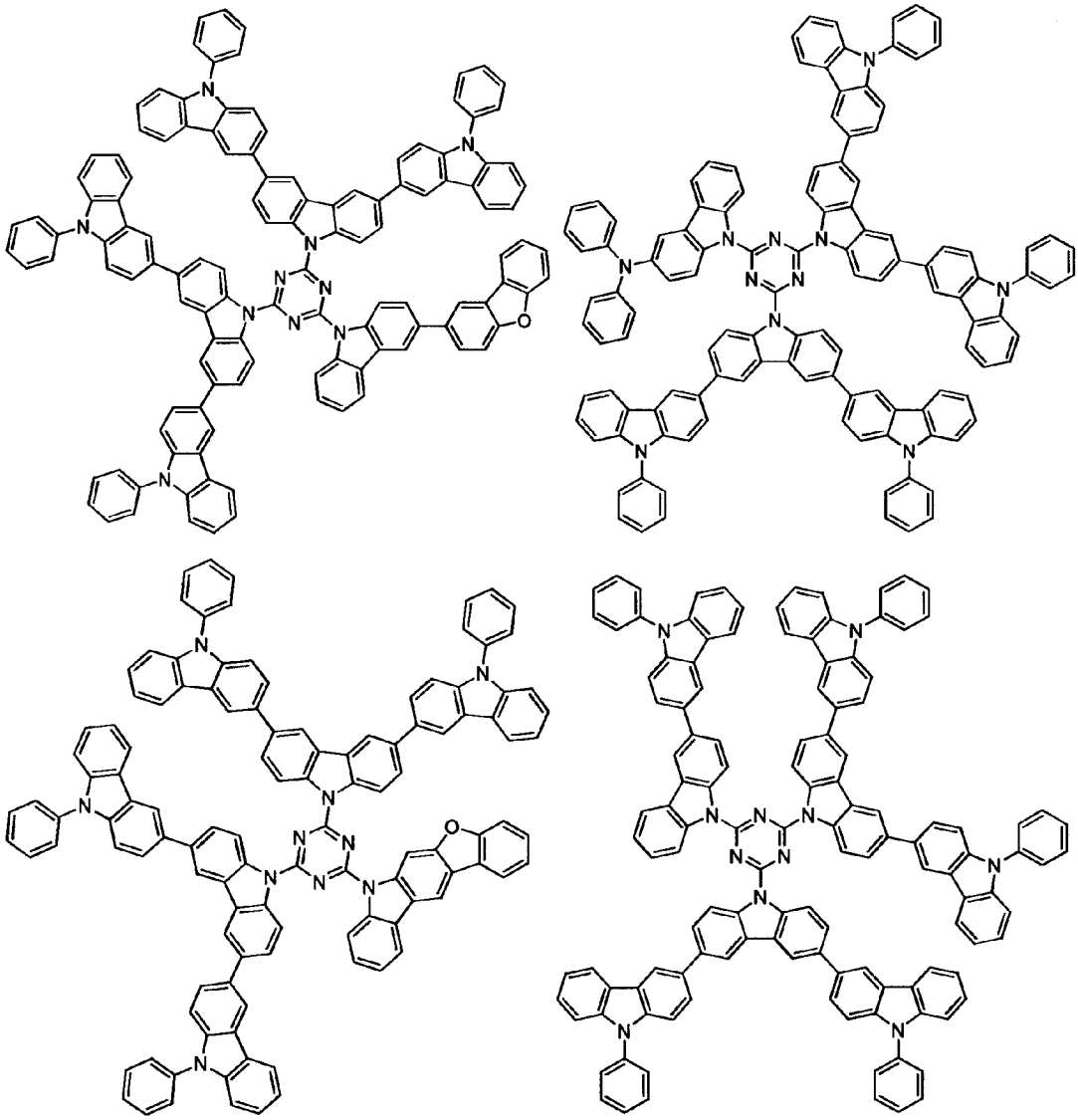
[0867]

[化638]



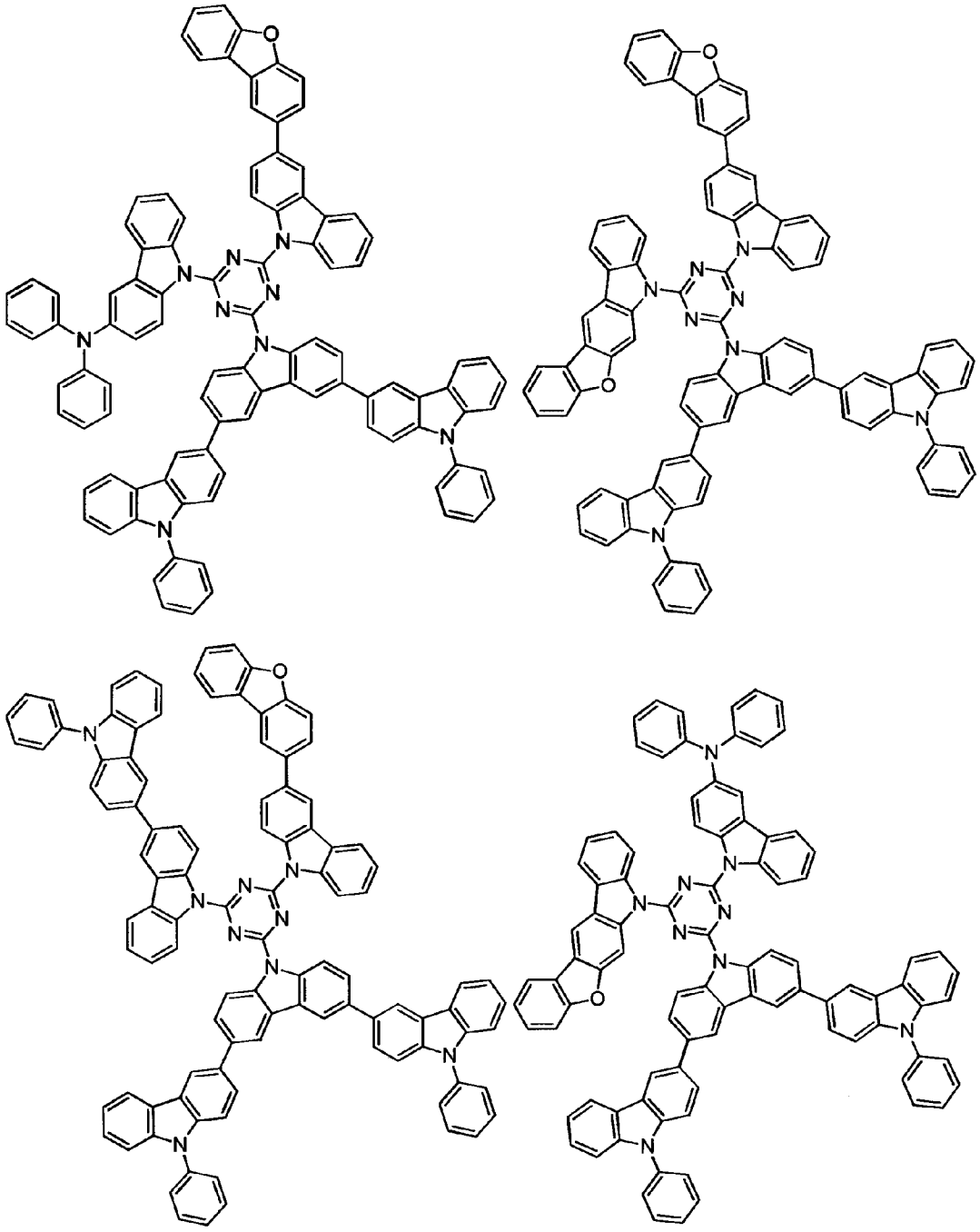
[0868]

[化639]



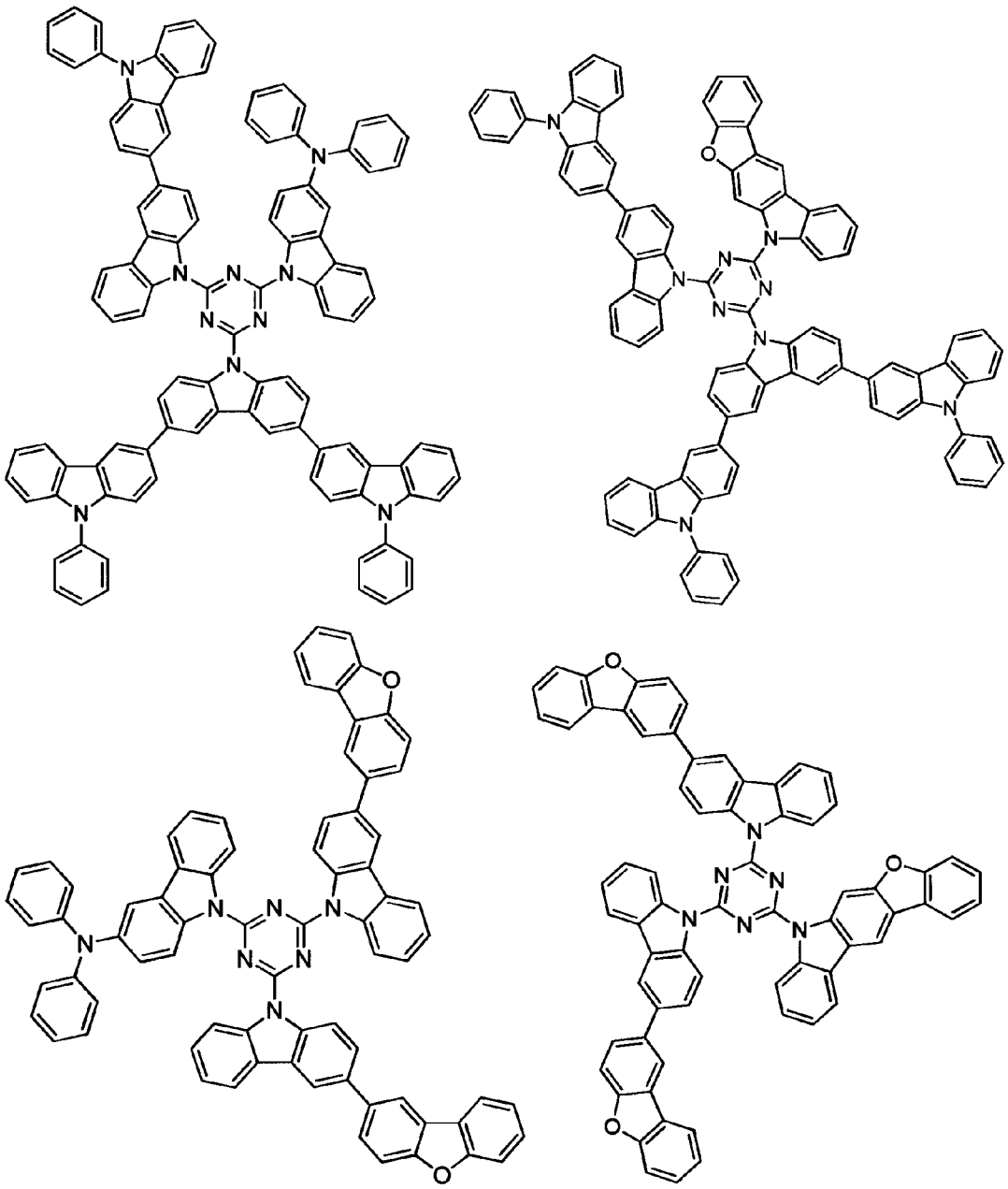
[0869]

[化640]



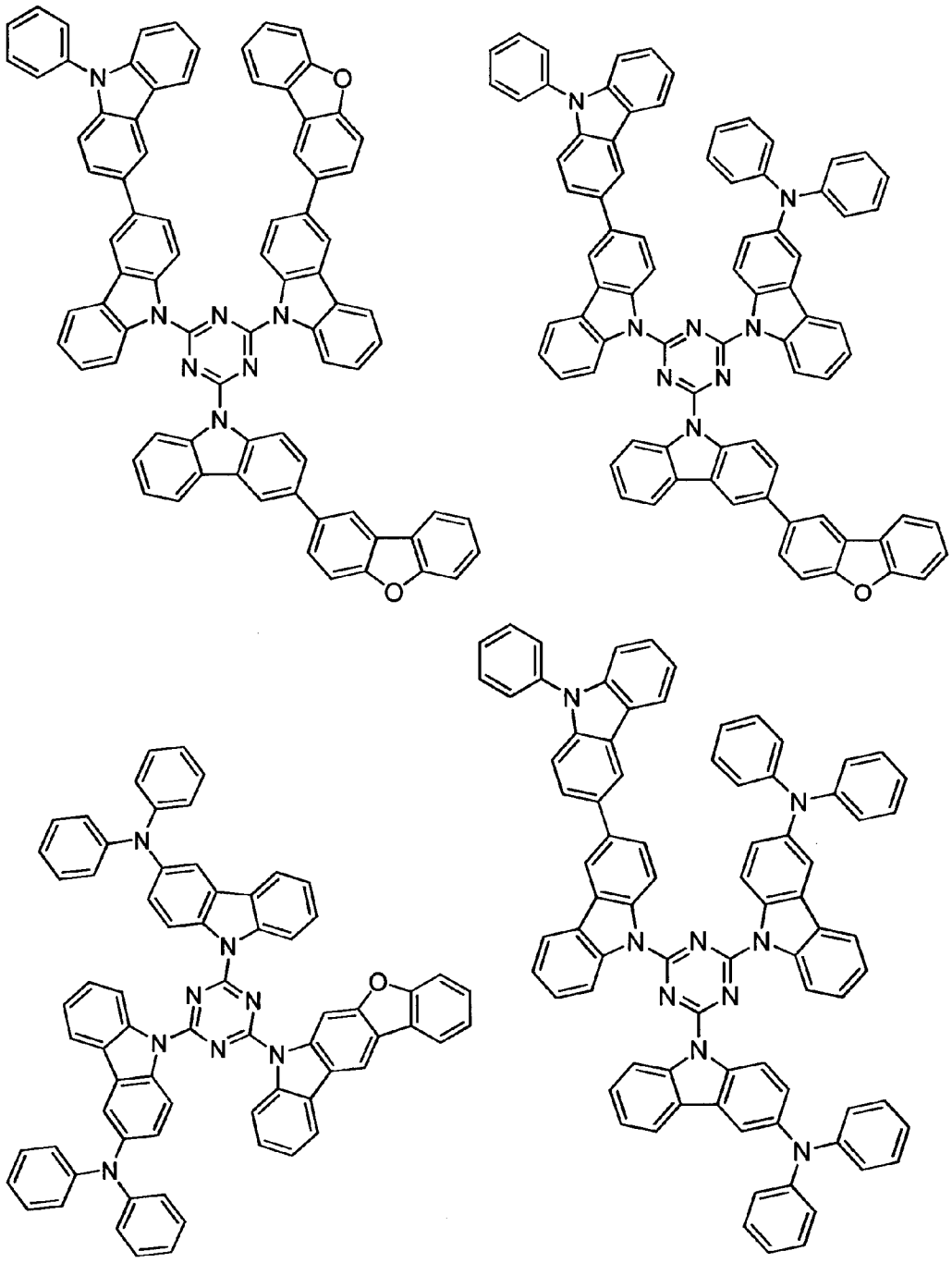
[0870]

[化641]



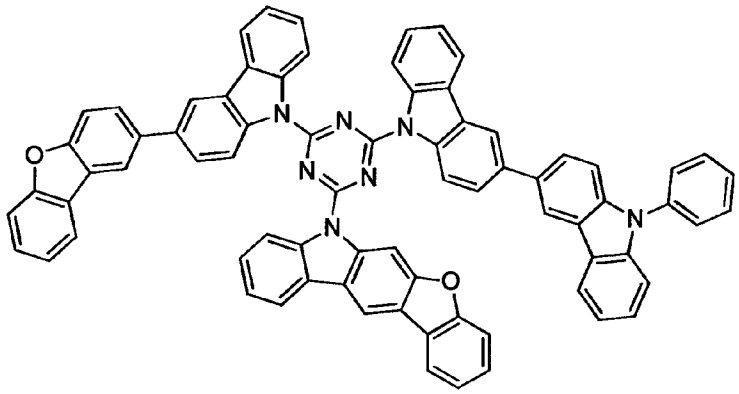
[0871]

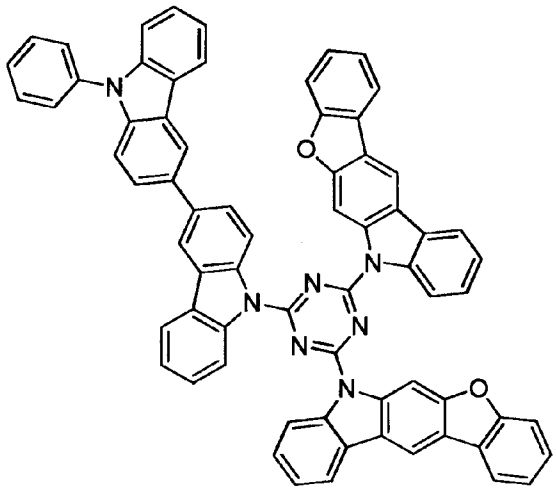
[化642]

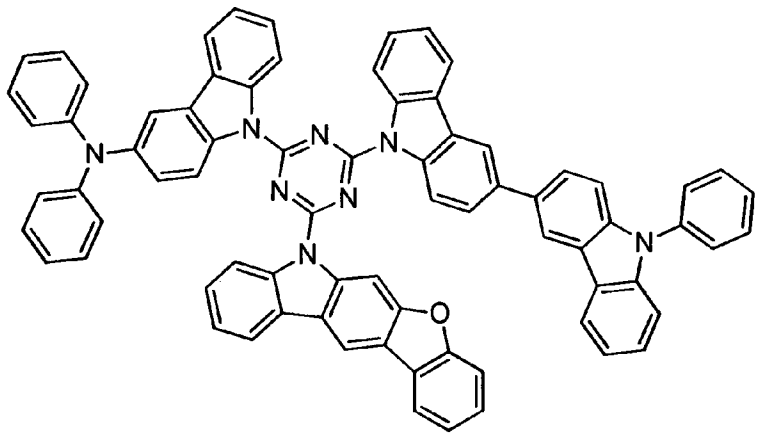


[0872]

[化643]

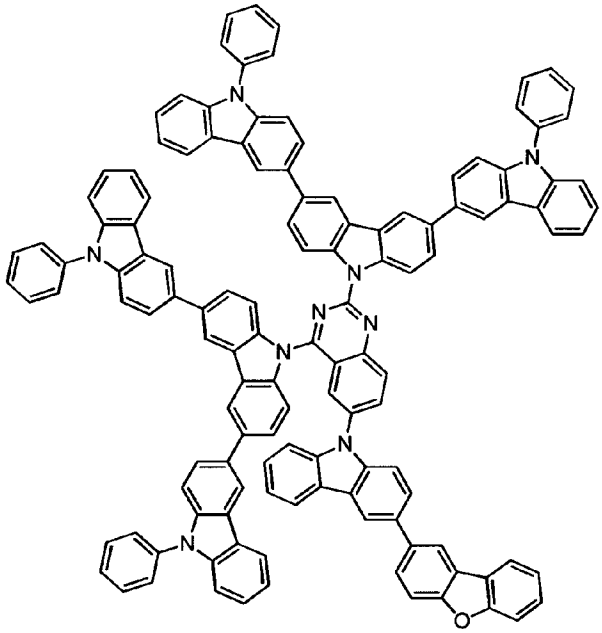


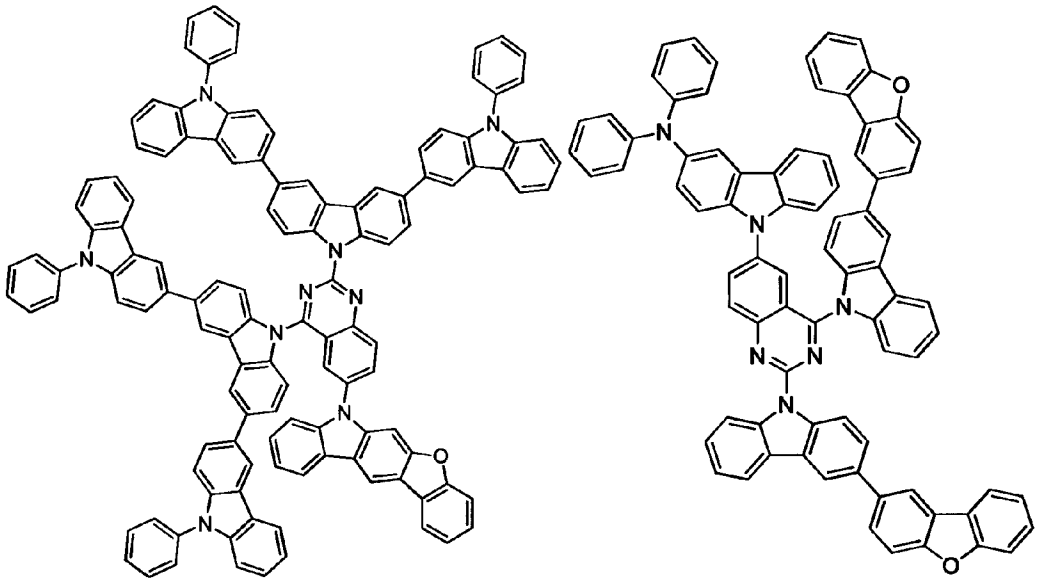




[0873]

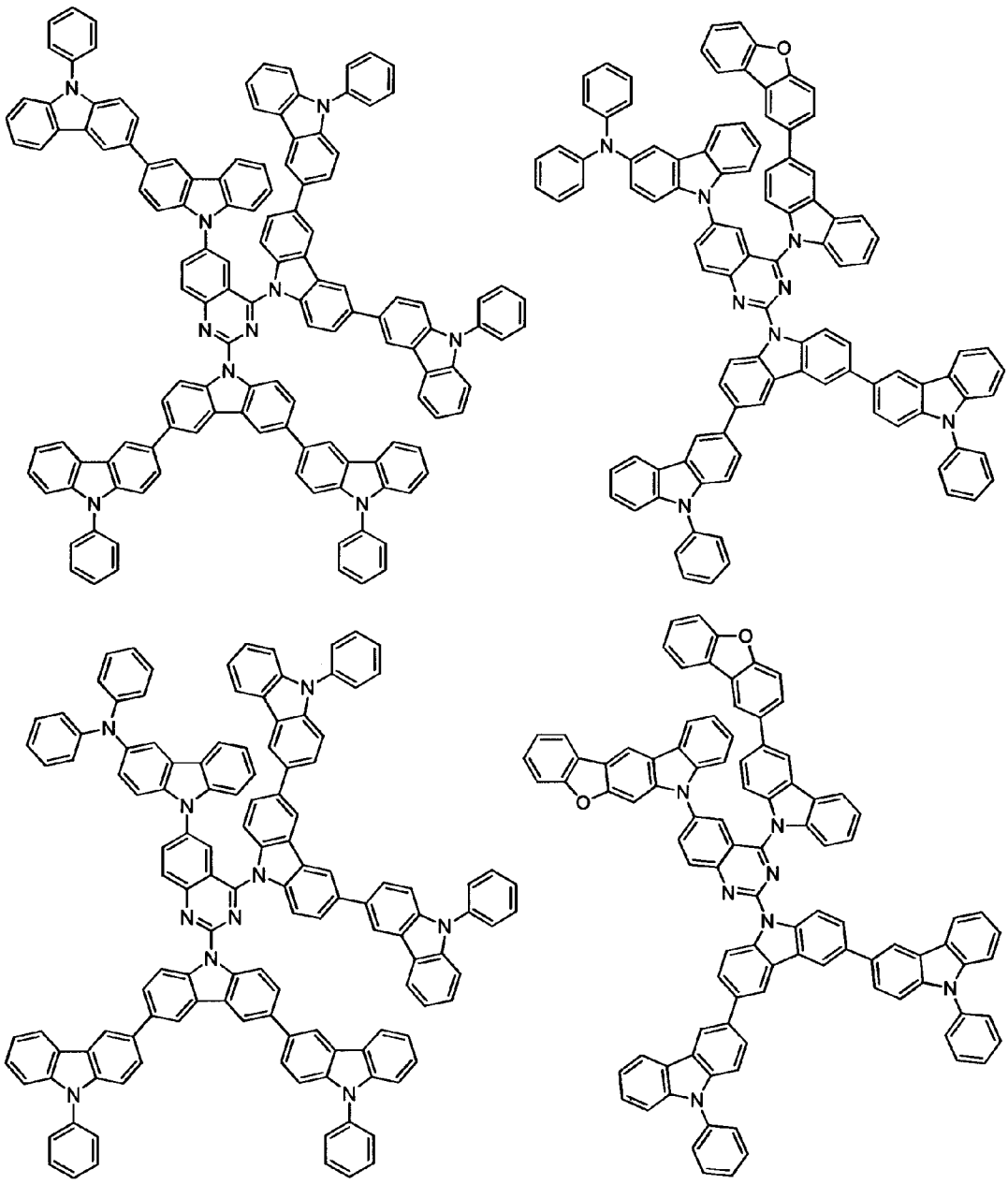
[化644]





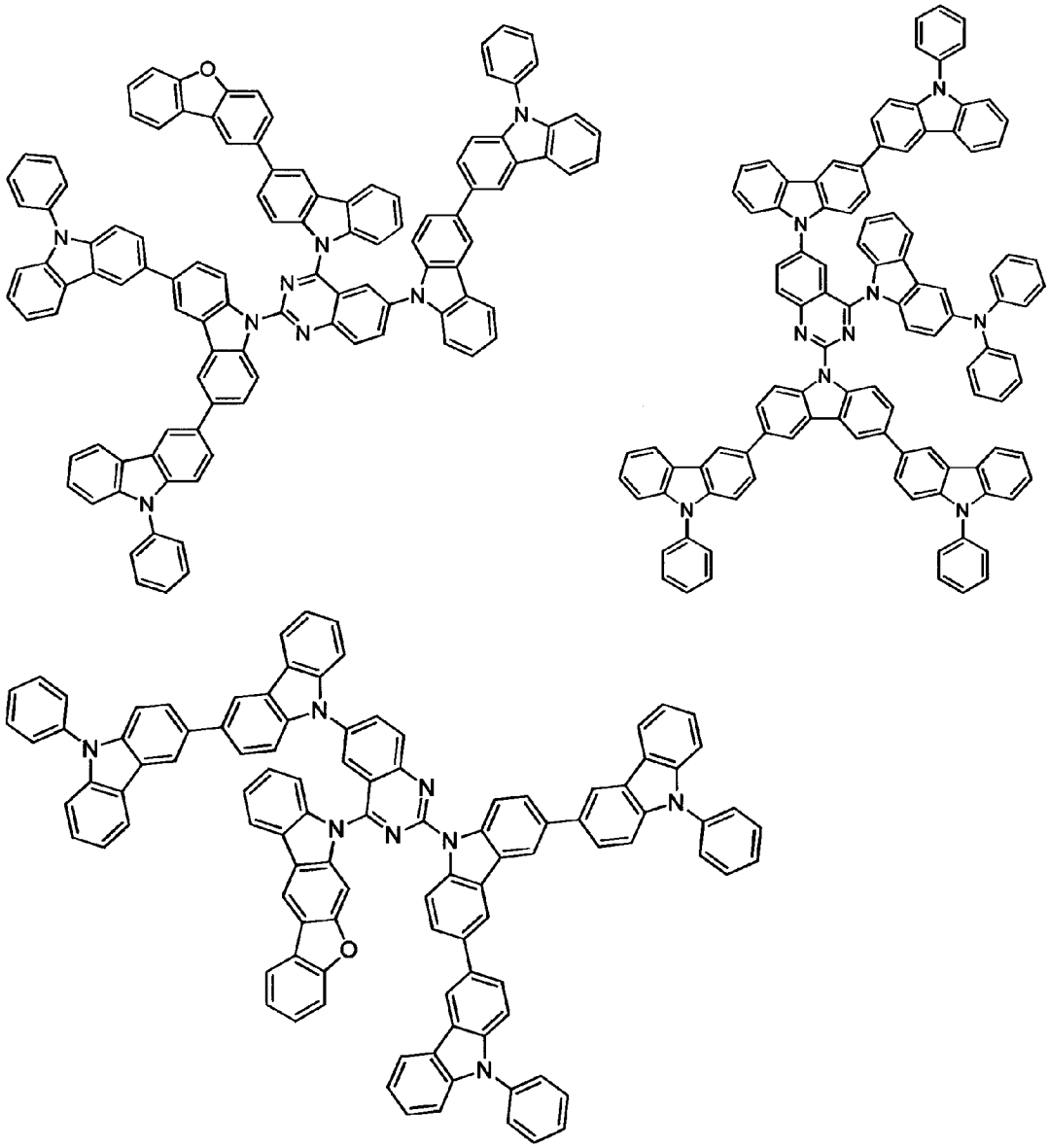
[0874]

[化645]



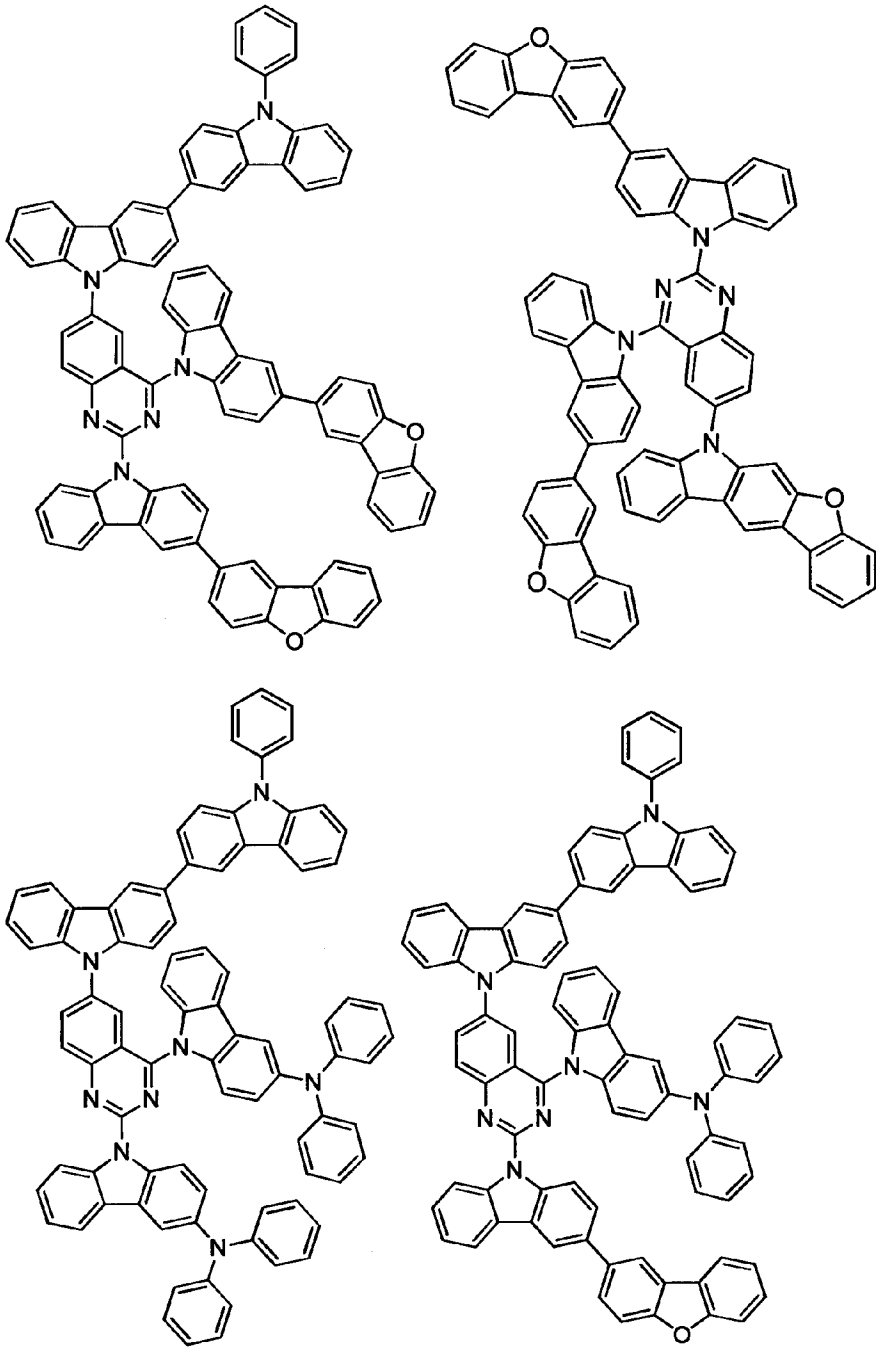
[0875]

[化646]



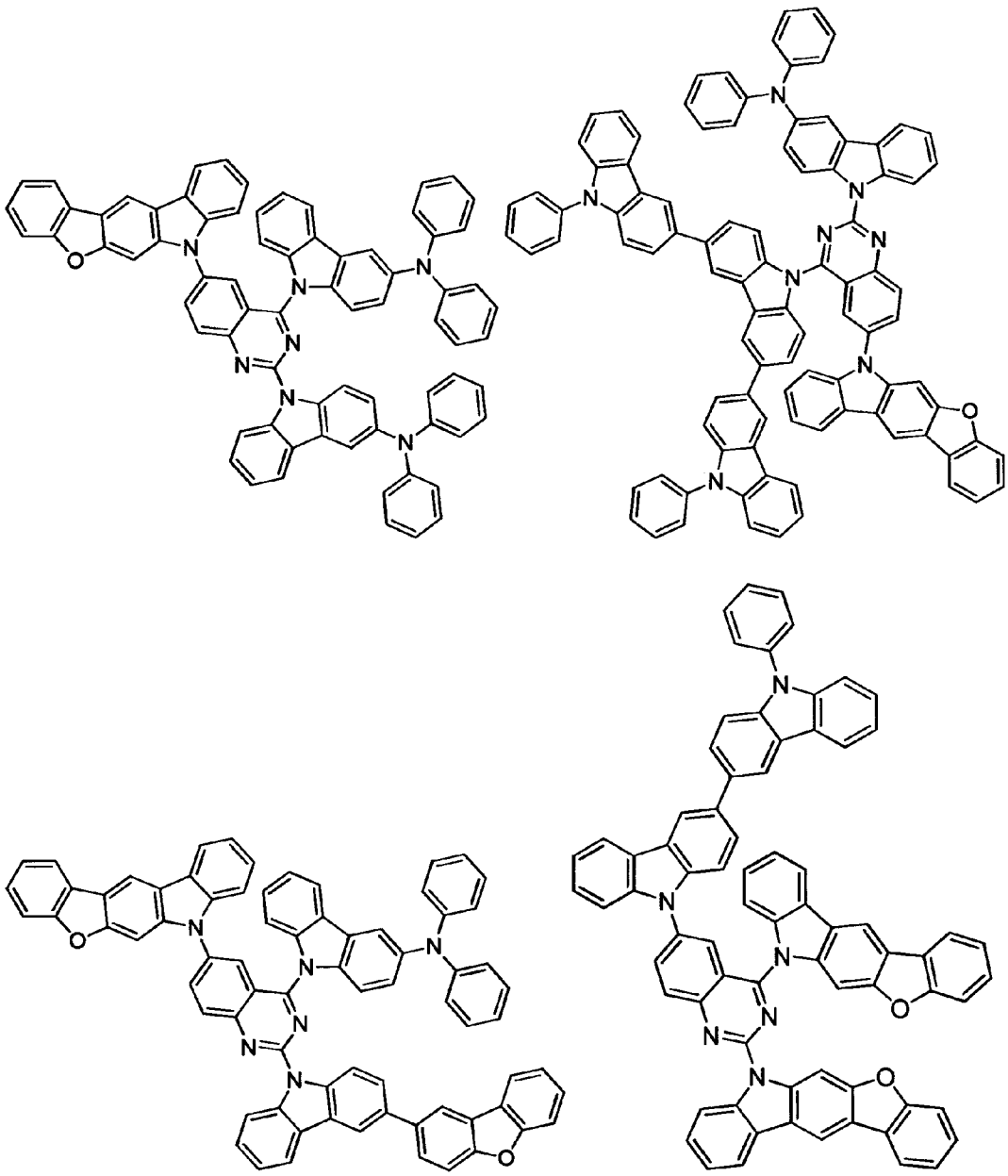
[0876]

[化647]



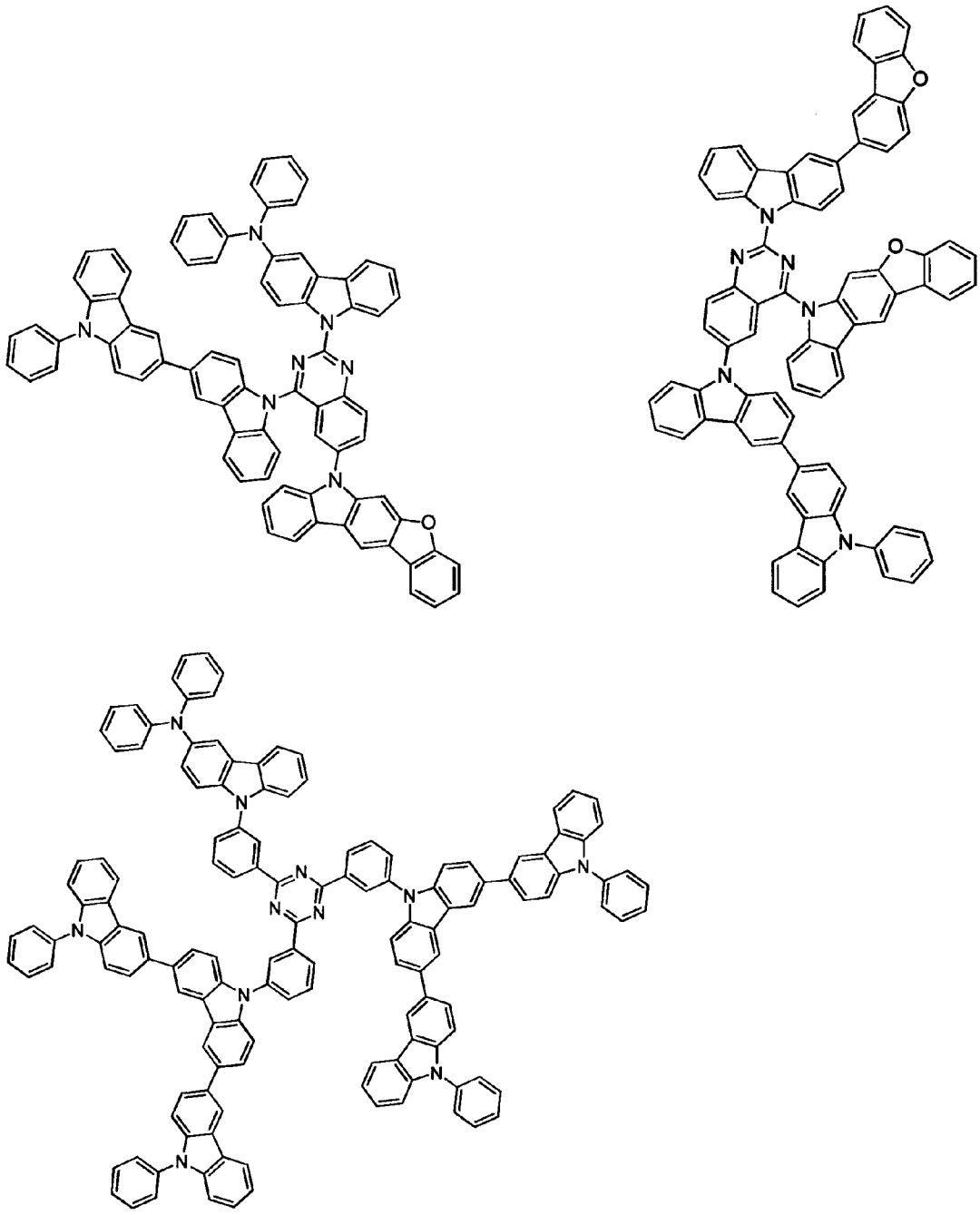
[0877]

[化648]



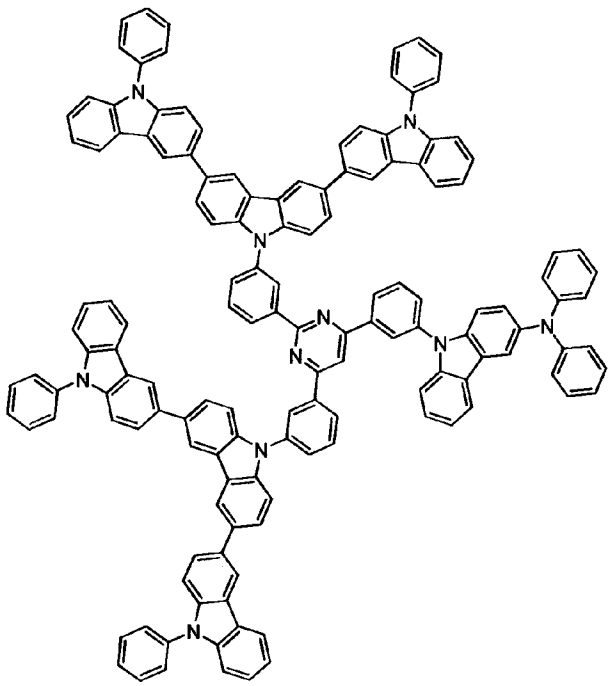
[0878]

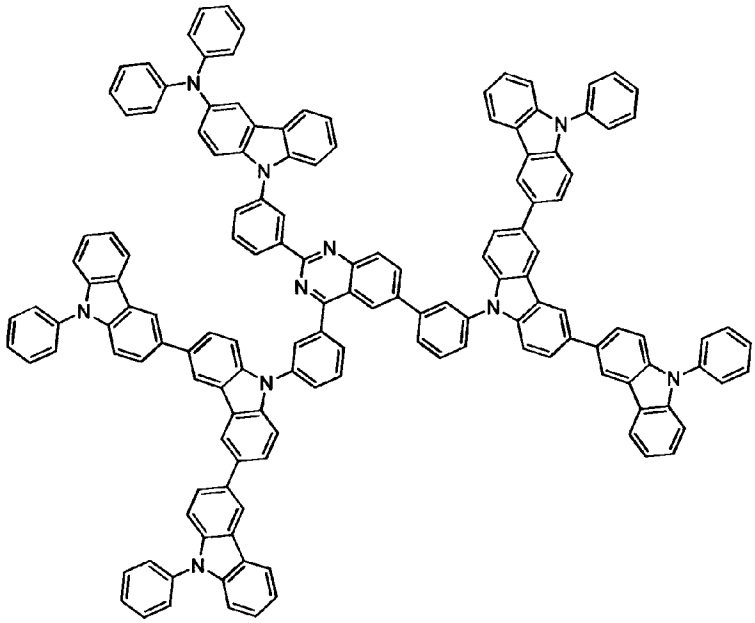
[化649]



[0879]

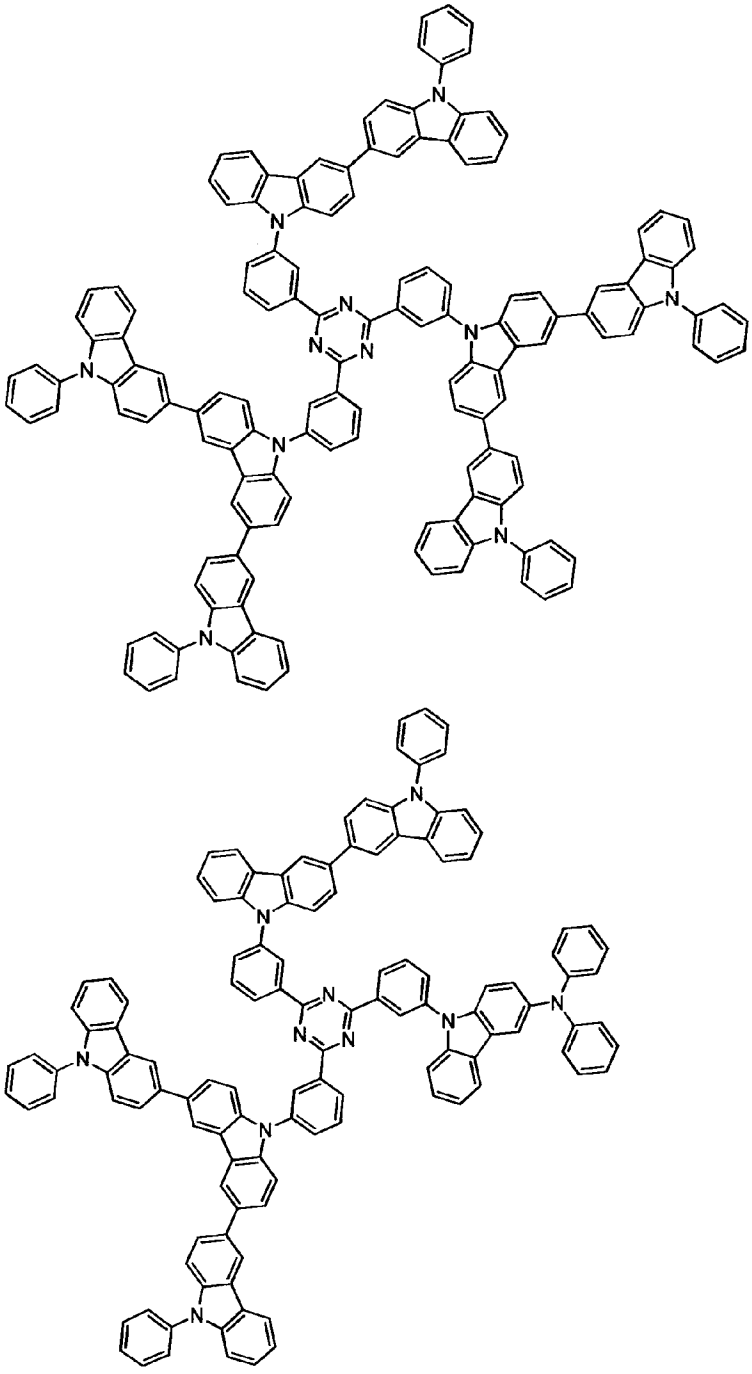
[化650]





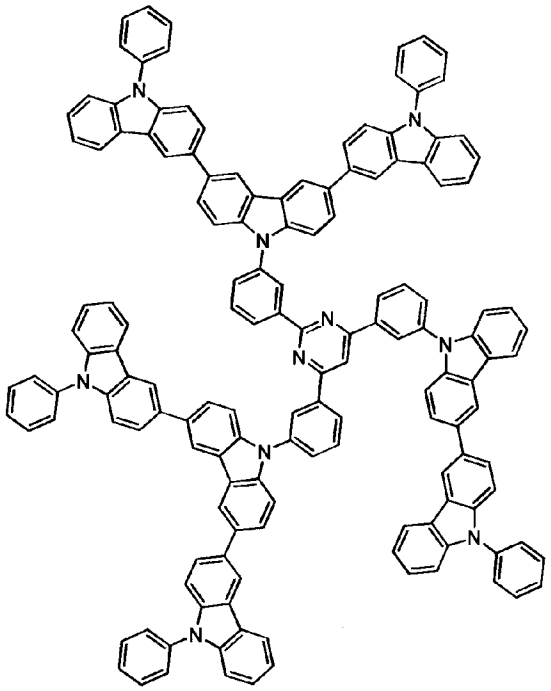
[0880]

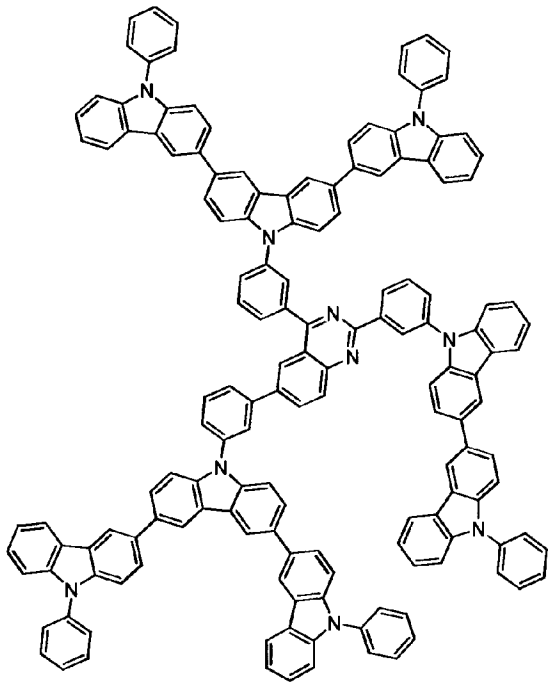
[化651]



[0881]

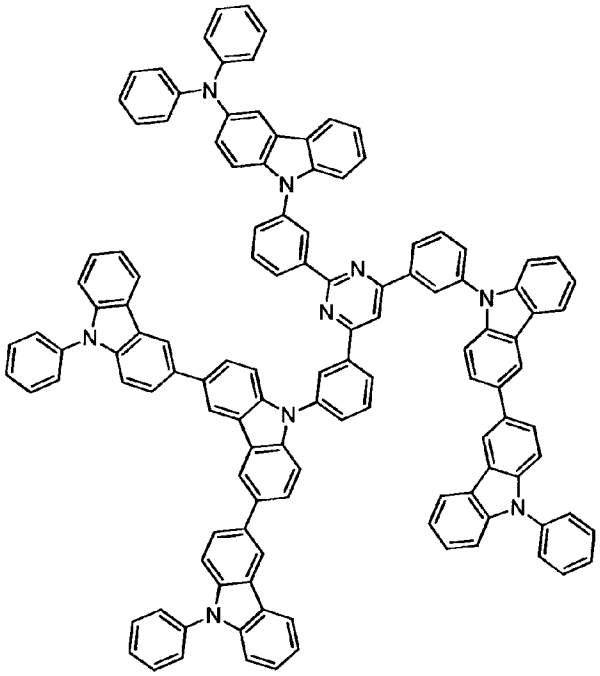
[化652]

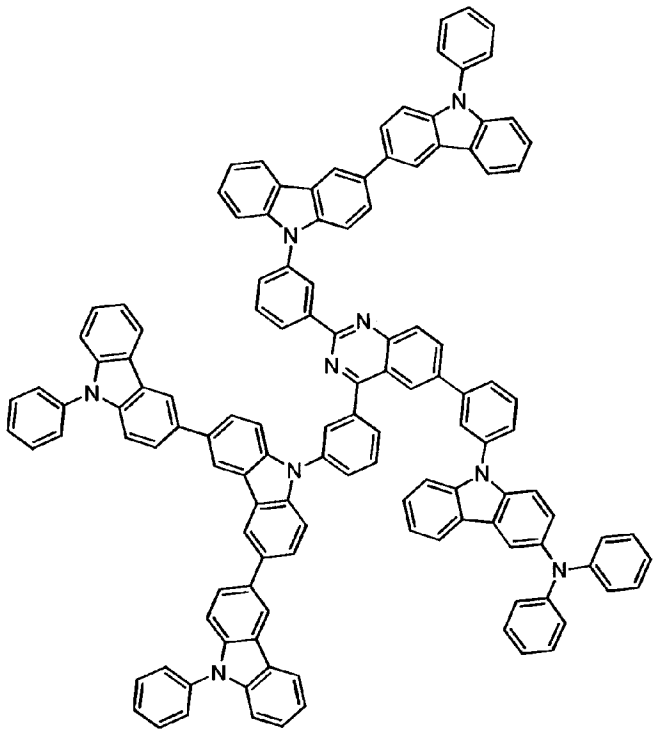




[0882]

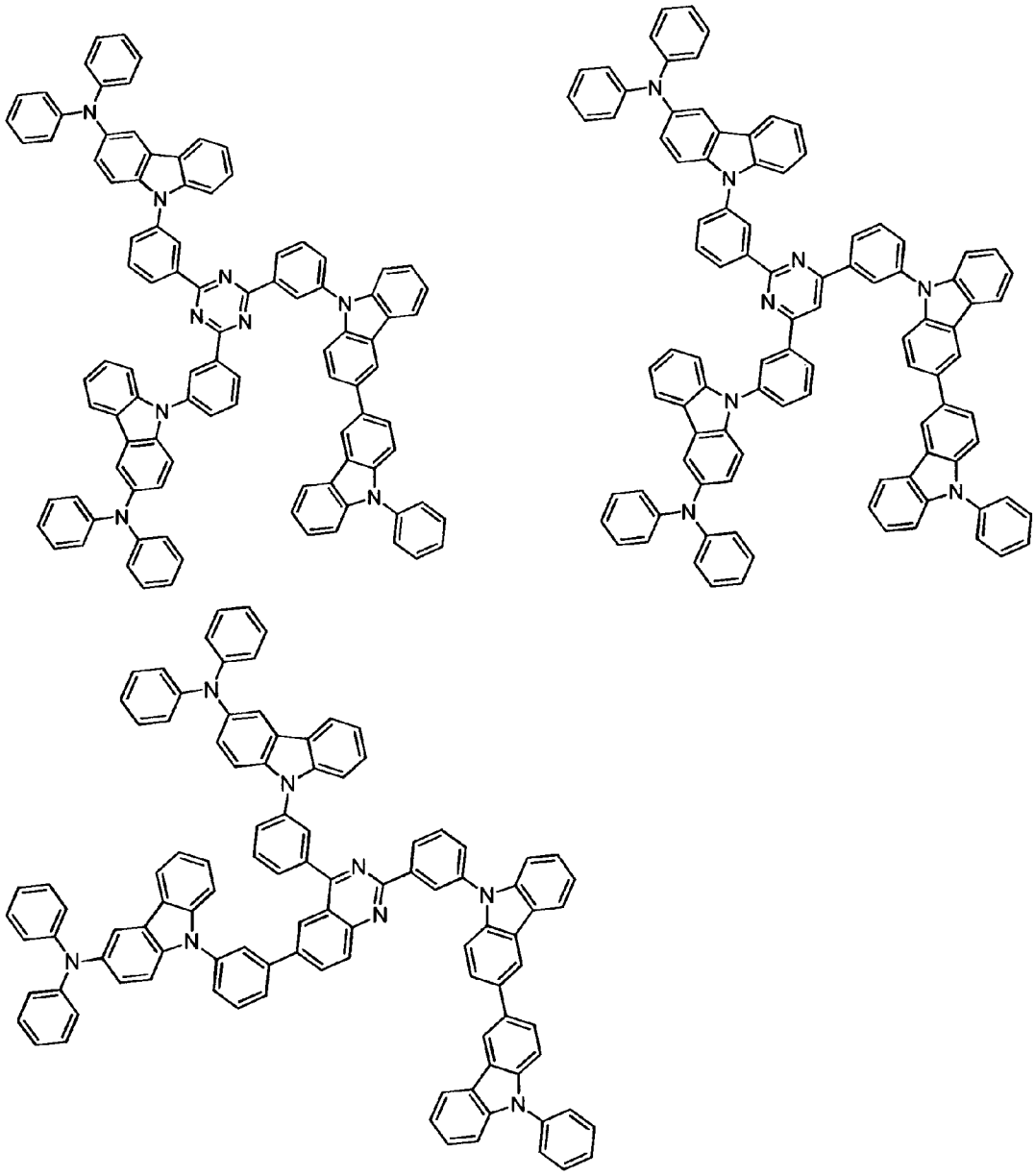
[化653]





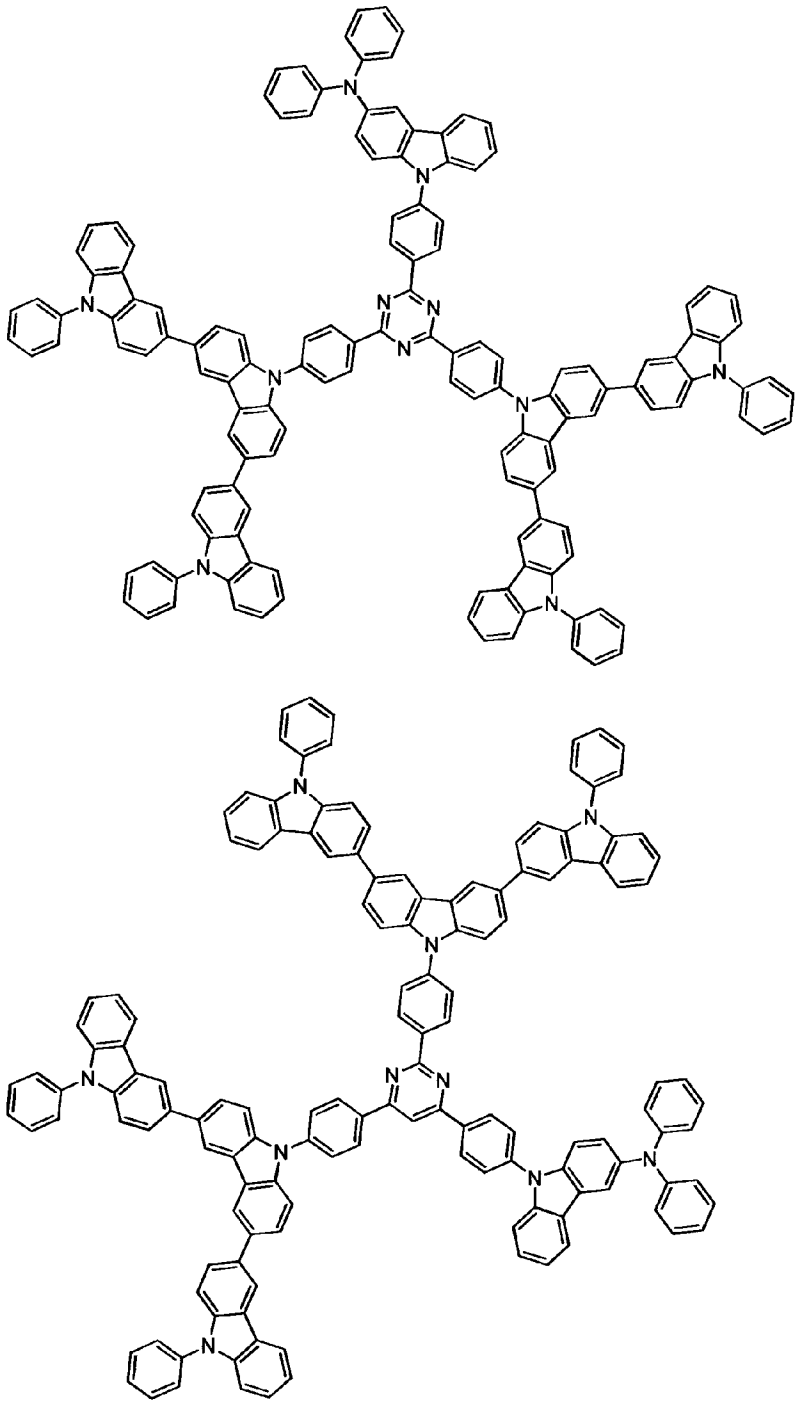
[0883]

[化654]



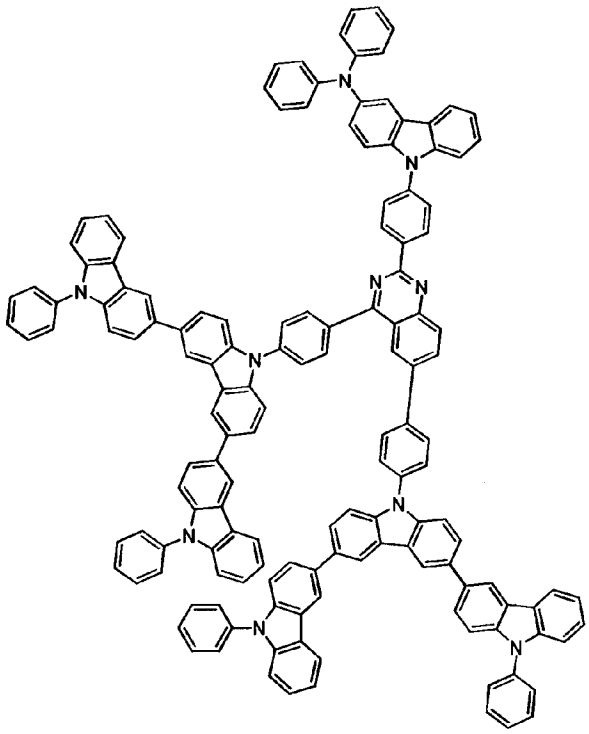
[0884]

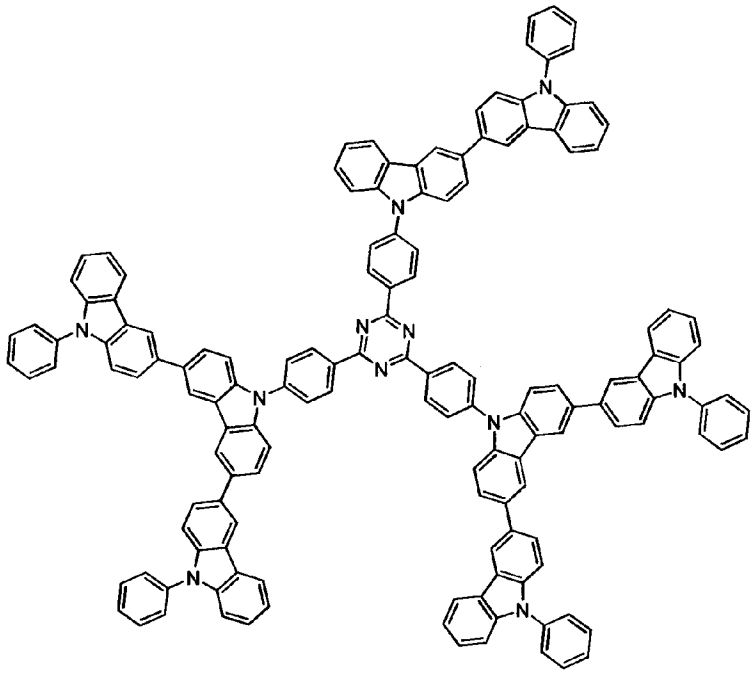
[化655]



[0885]

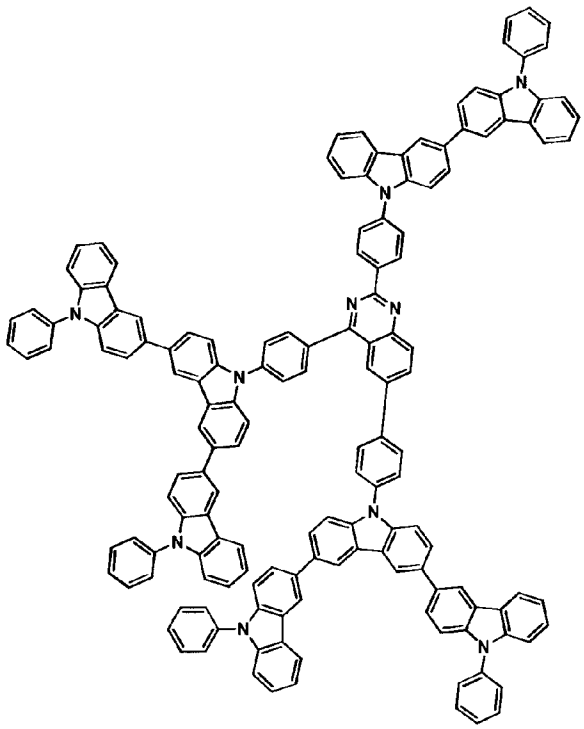
[化656]

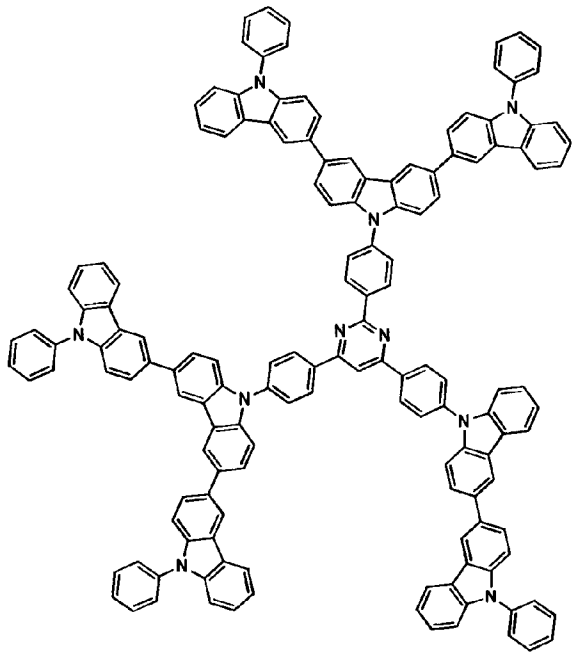




[0886]

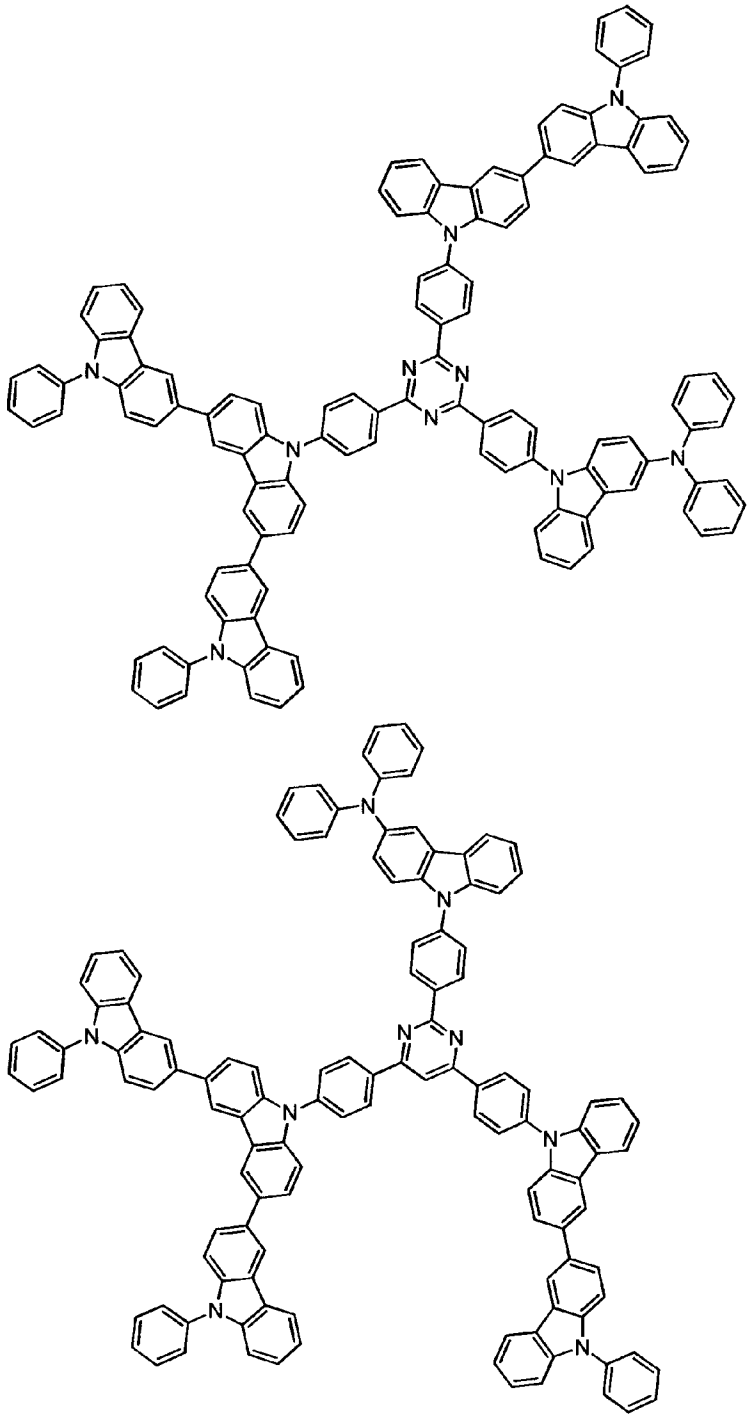
[化657]





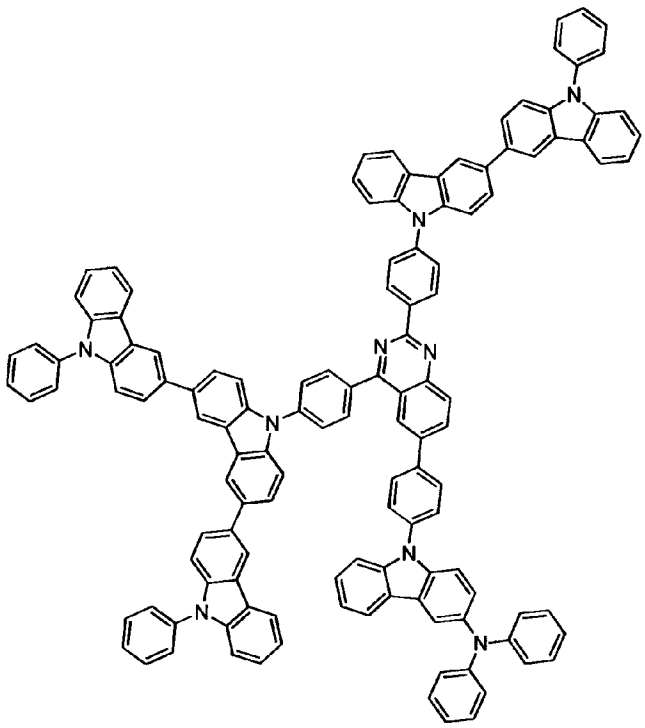
[0887]

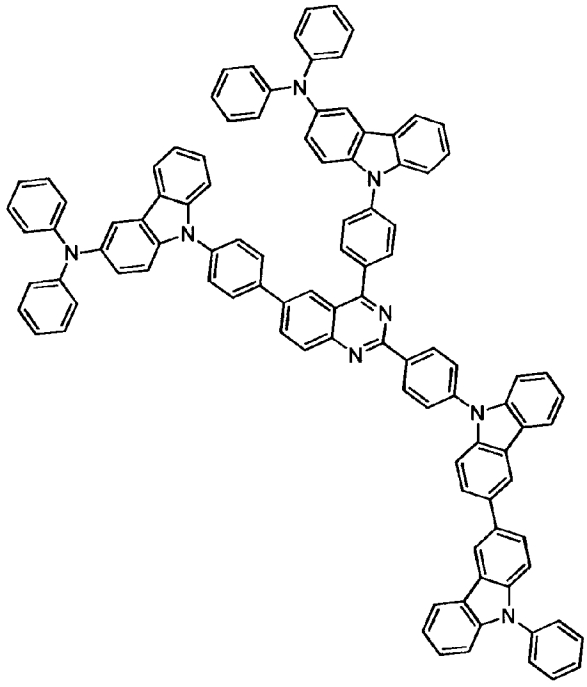
[化658]



[0888]

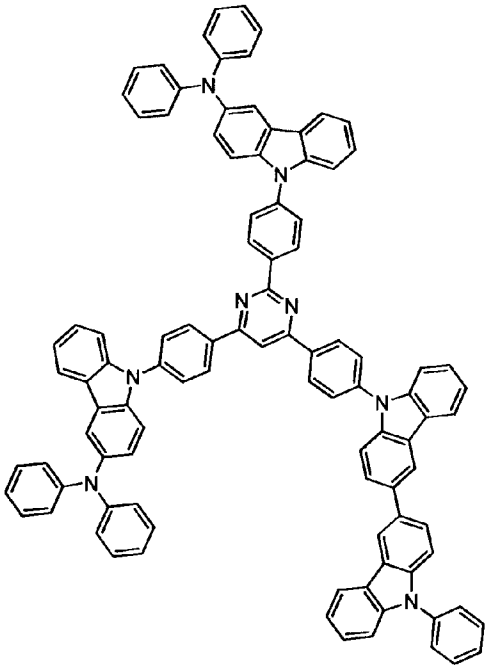
[化659]

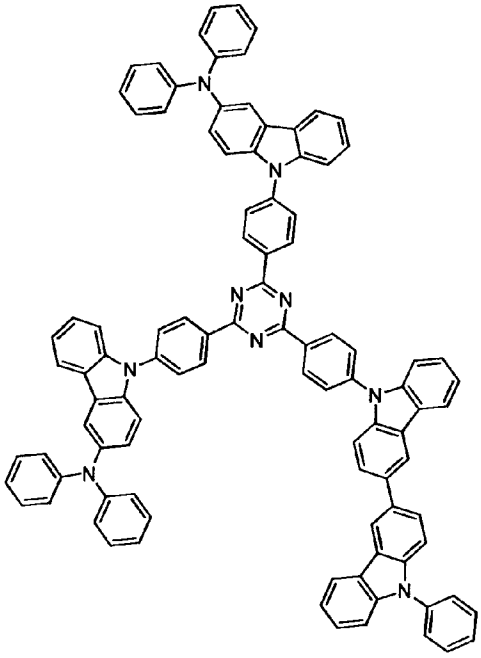


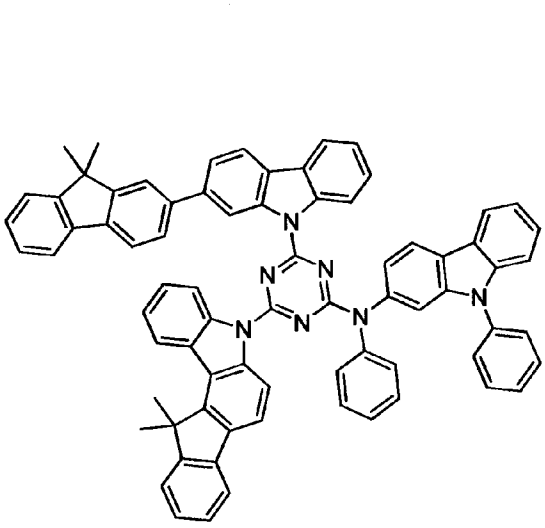


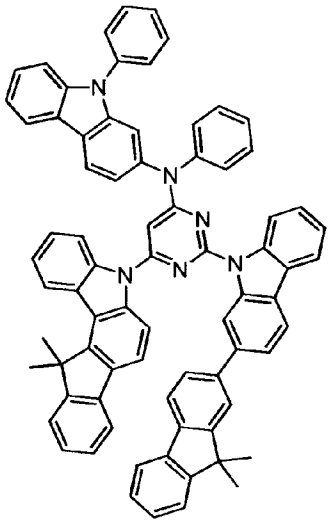
[0889]

[化660]



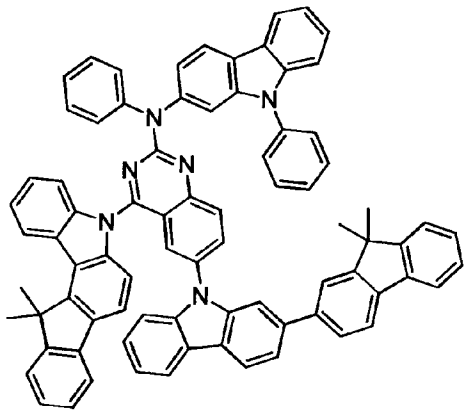


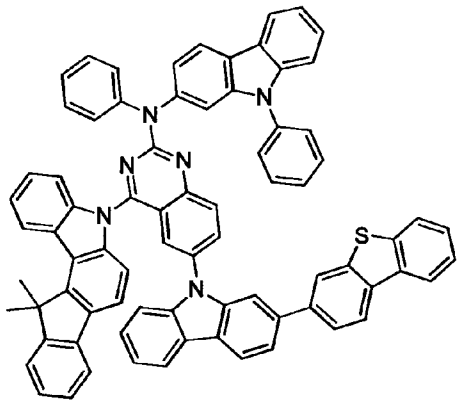


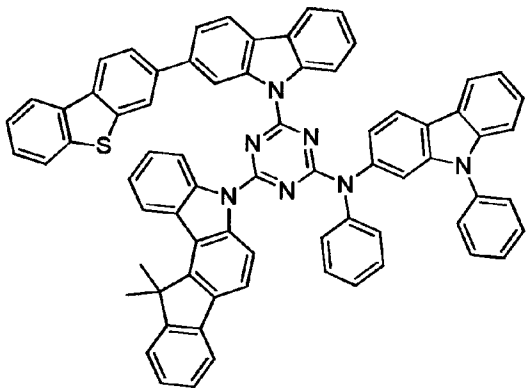


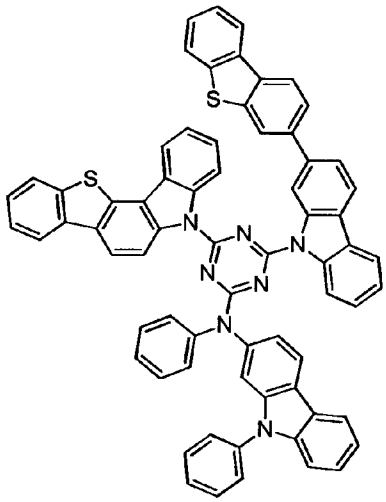
[0890]

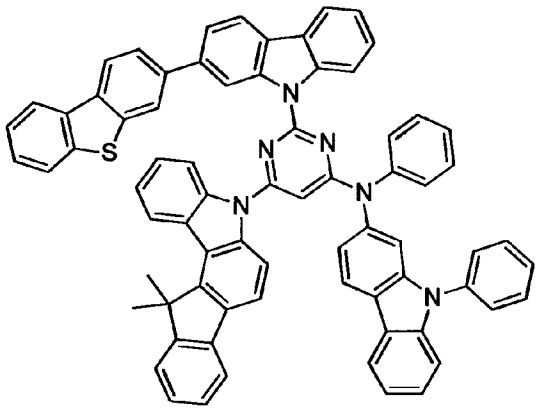
[化661]





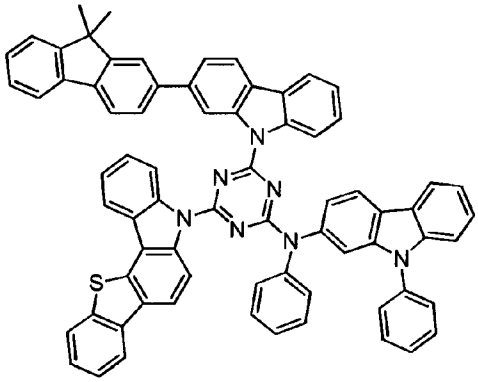


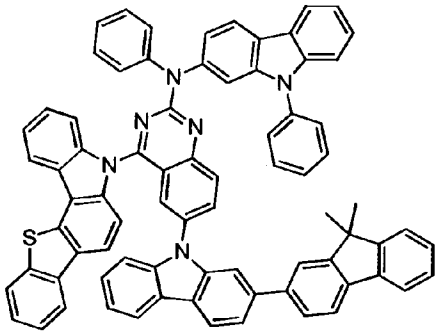


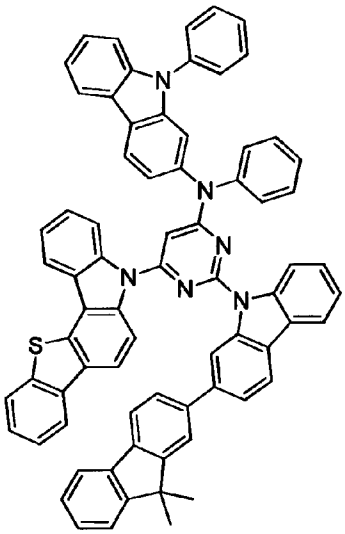


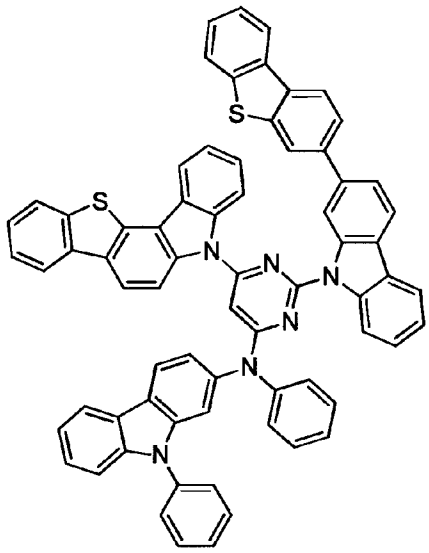
[0891]

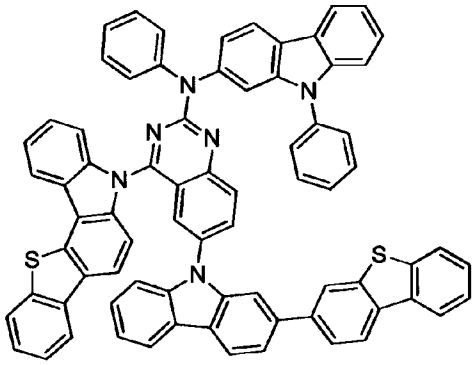
[化662]





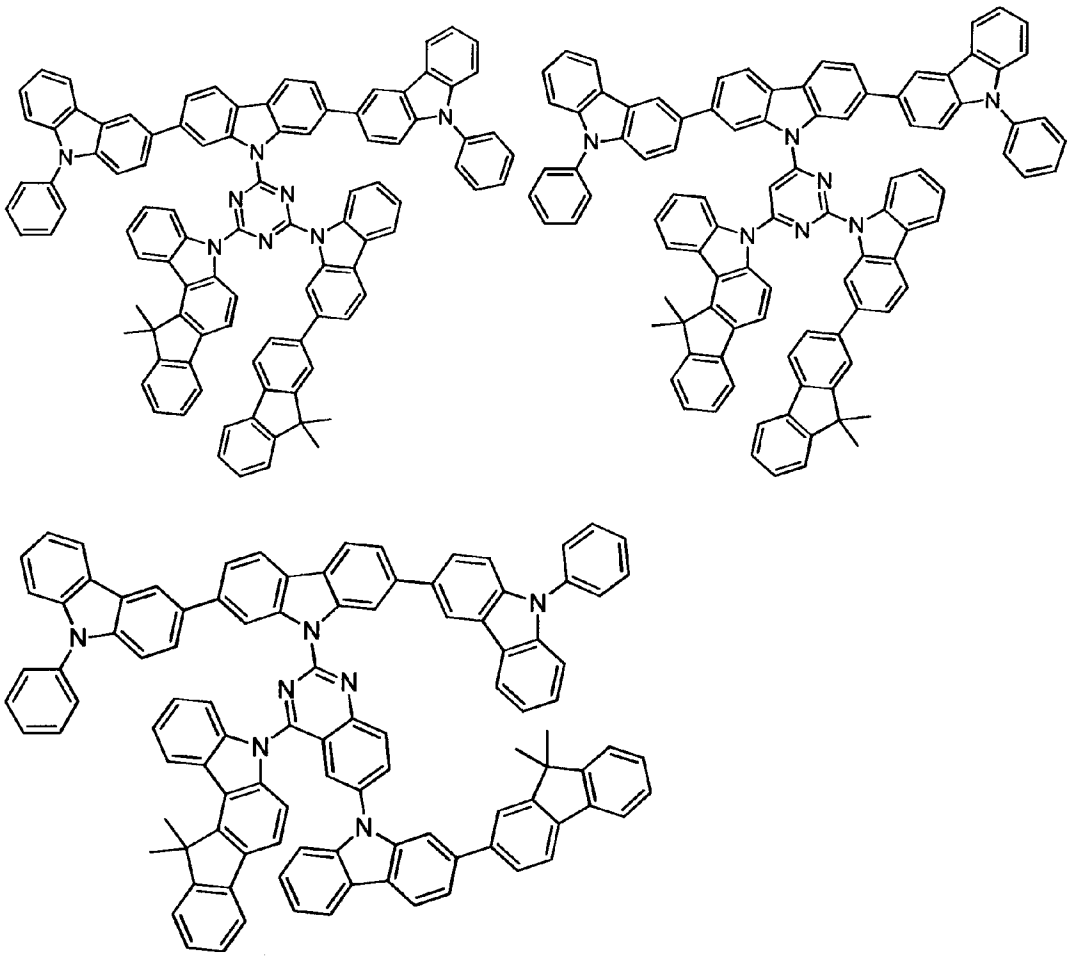






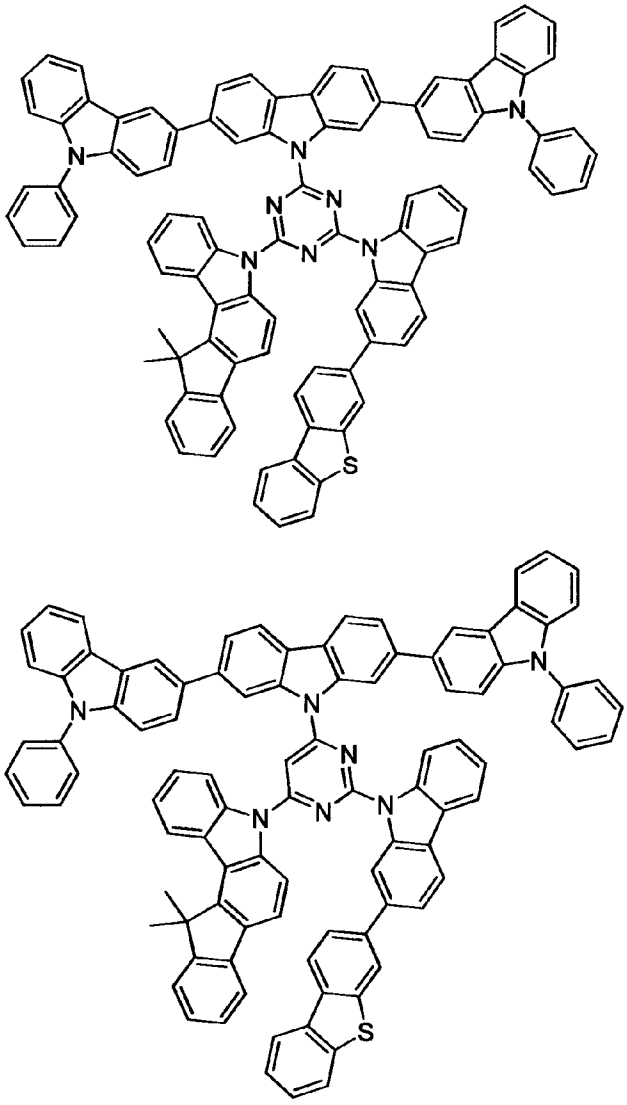
[0892]

[化663]



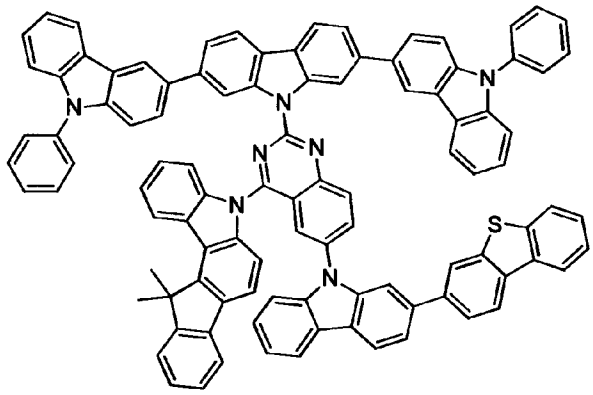
[0893]

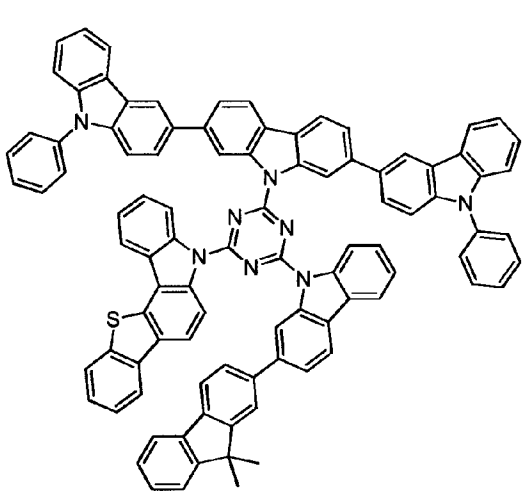
[化664]

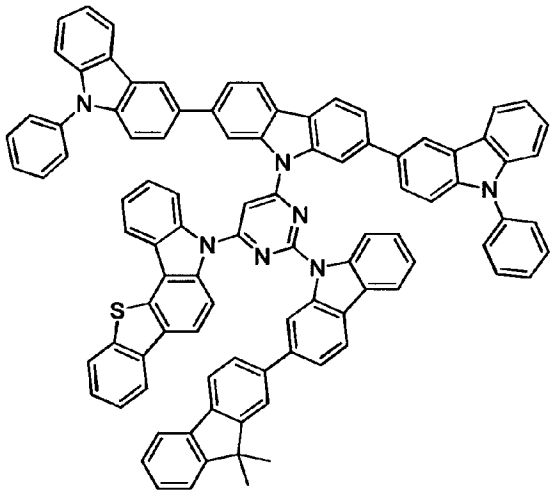


[0894]

[化665]

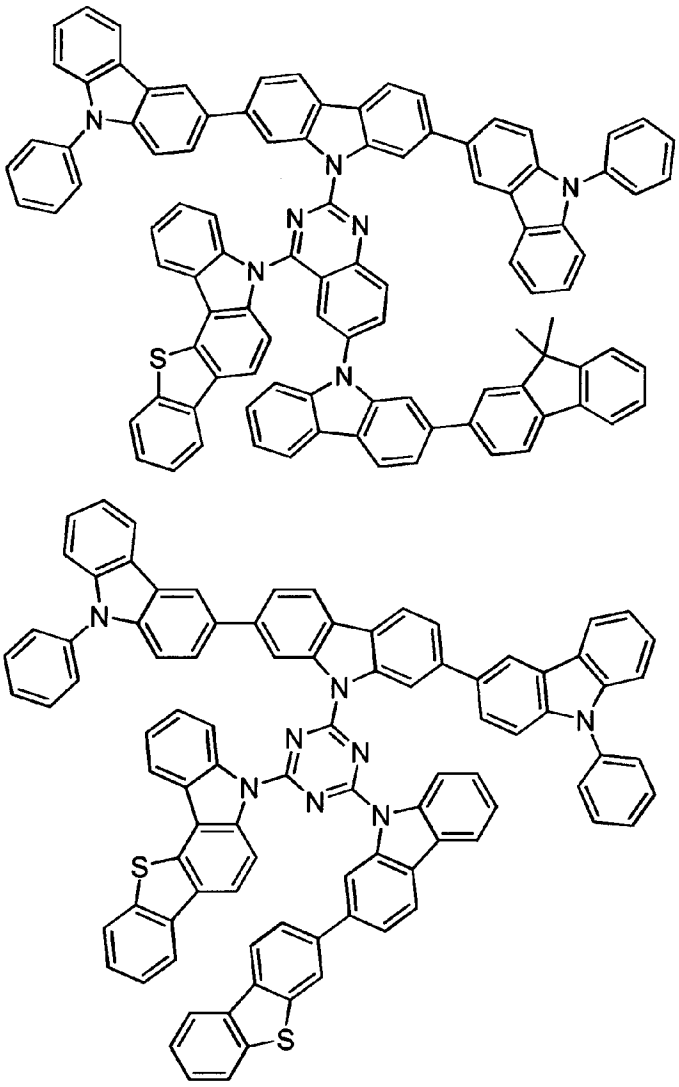






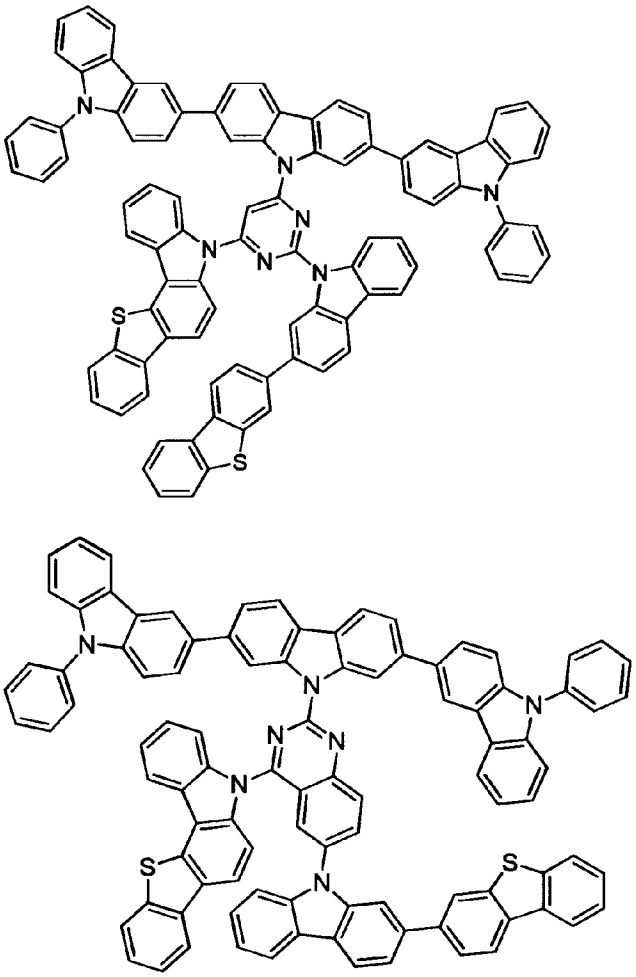
[0895]

[化666]



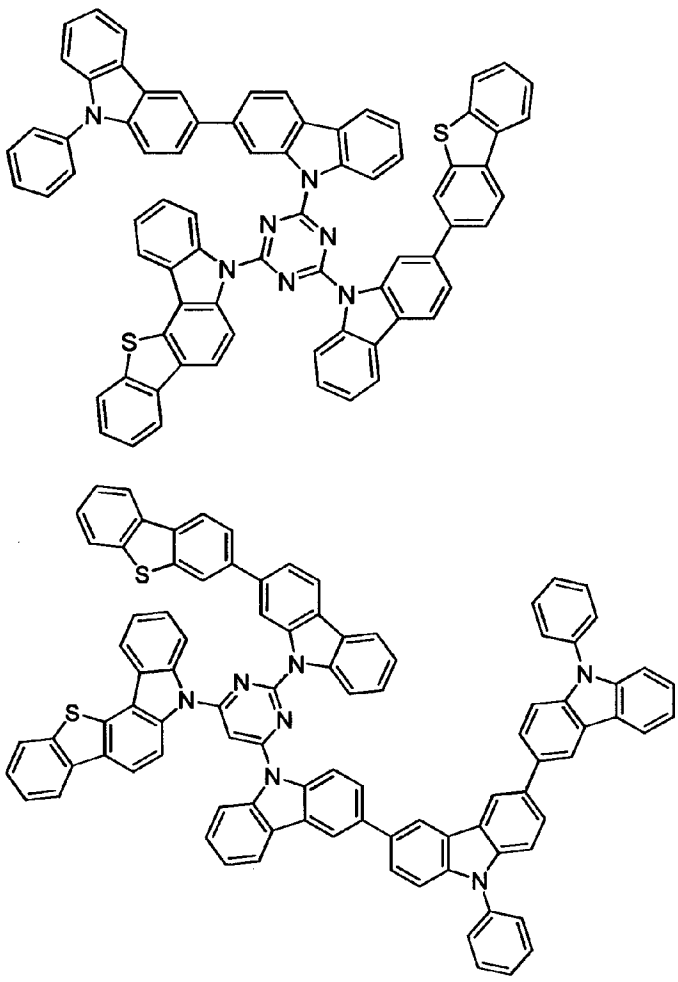
[0896]

[化667]



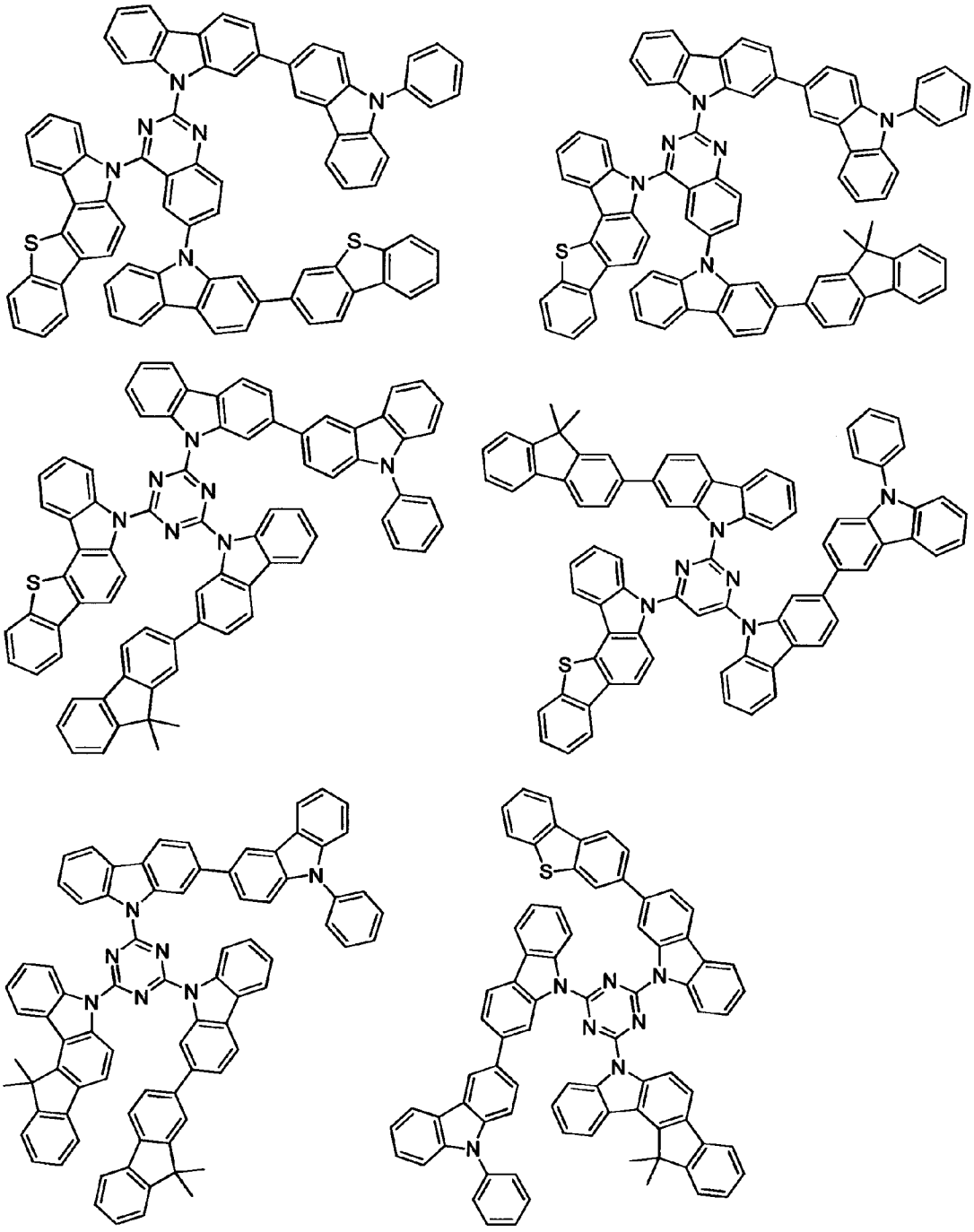
[0897]

[化668]



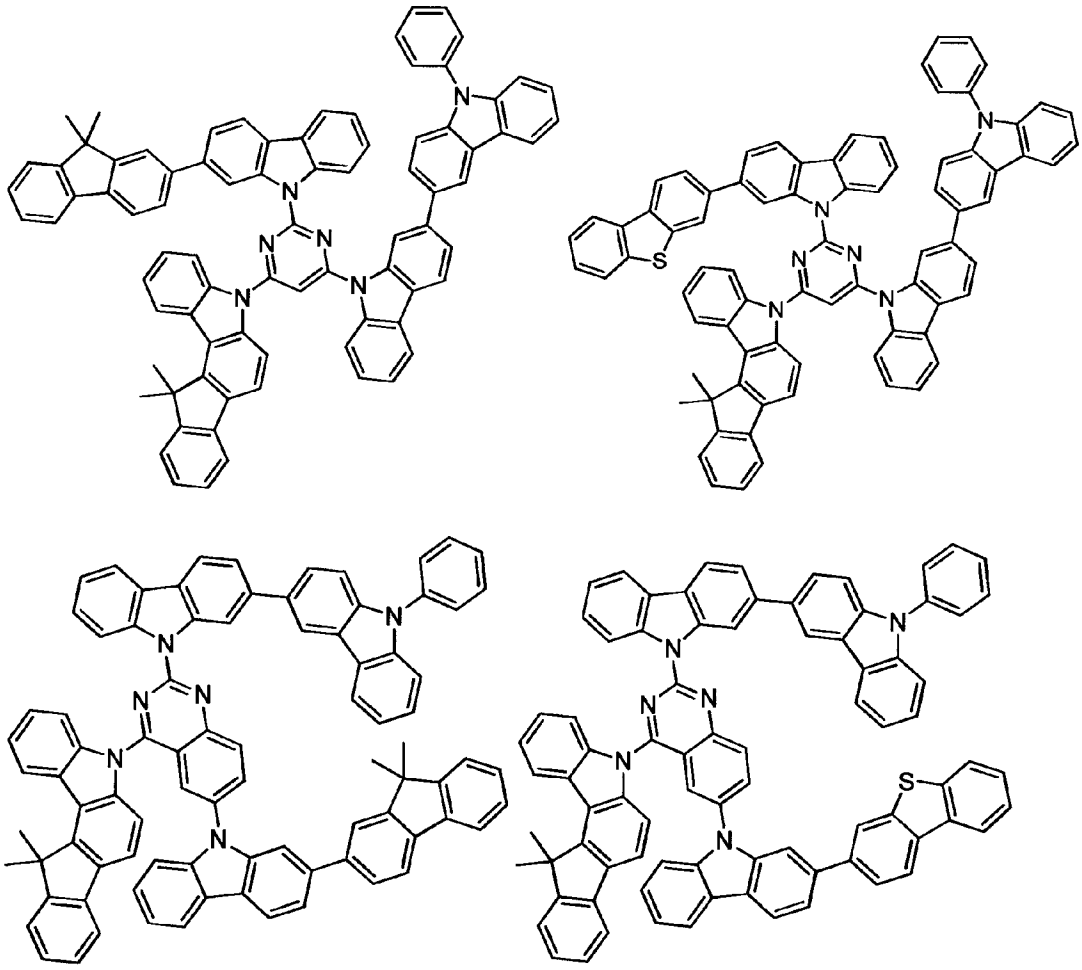
[0898]

[化669]



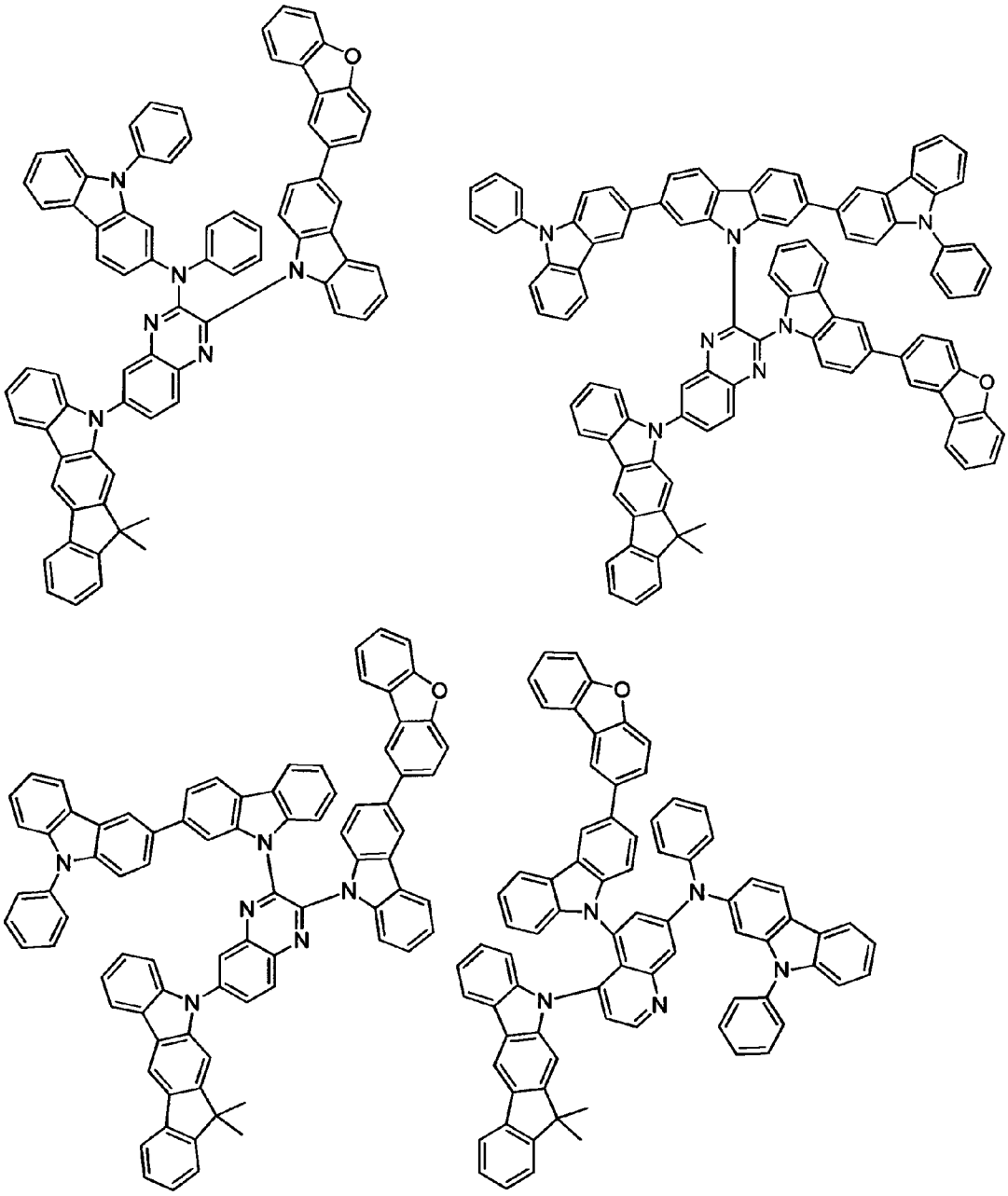
[0899]

[化670]



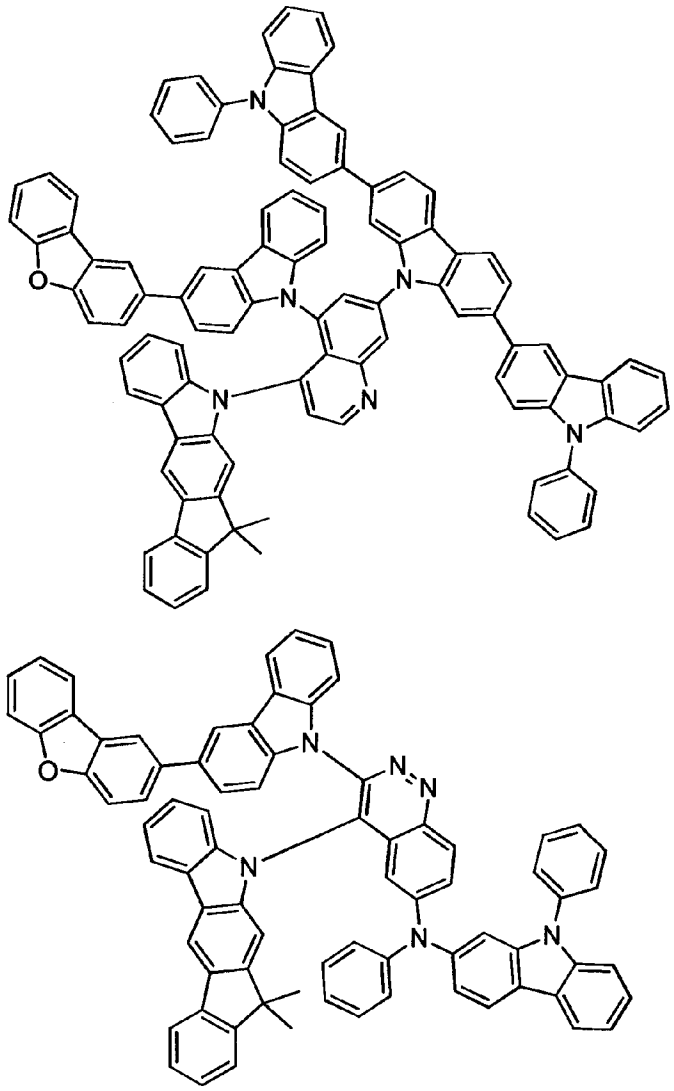
[0900]

[化671]



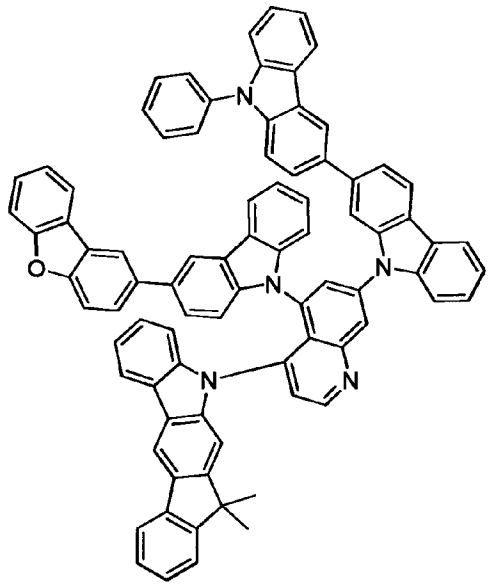
[0901]

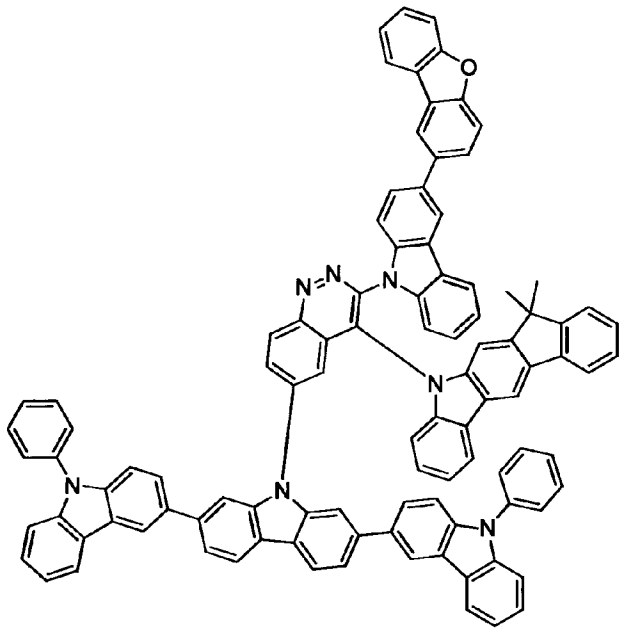
[化672]



[0902]

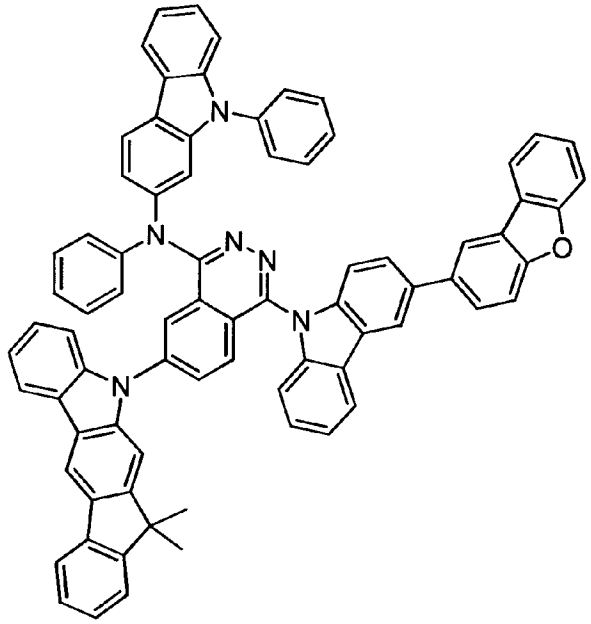
[化673]

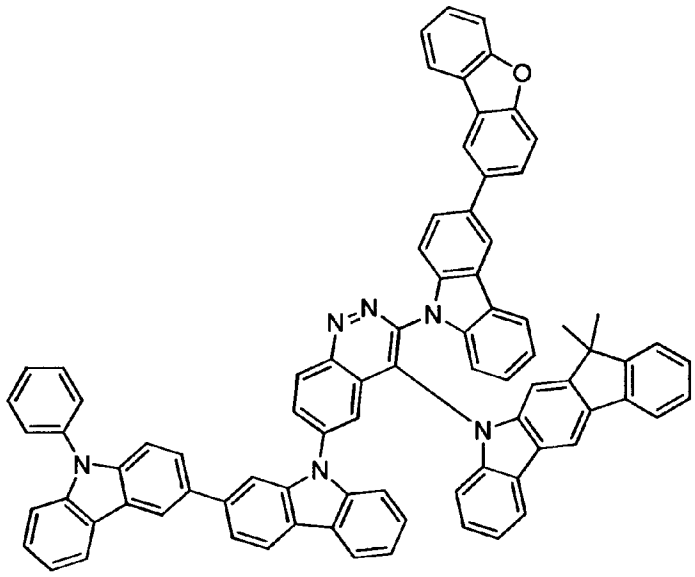




[0903]

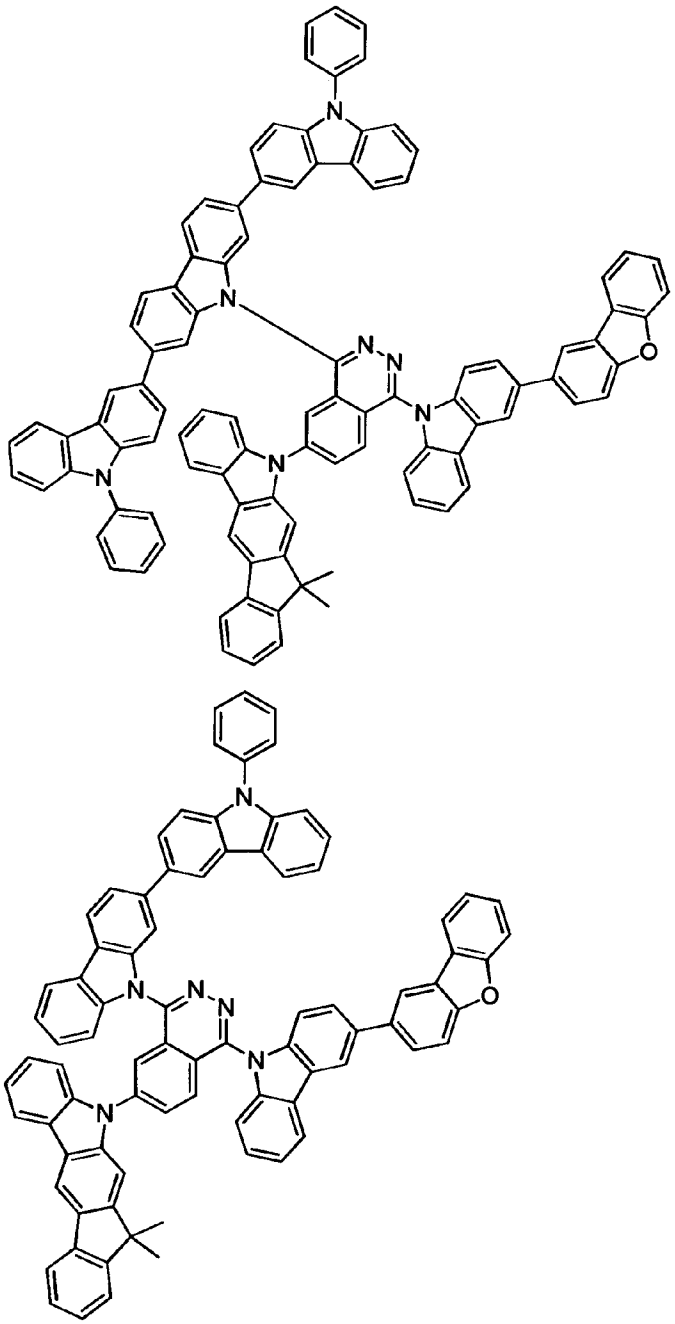
[化674]





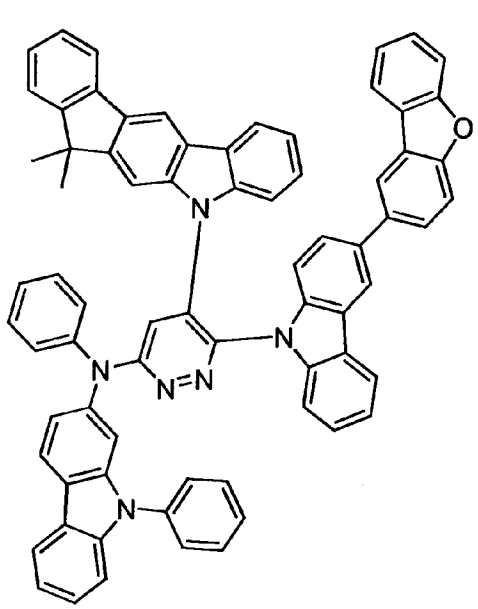
[0904]

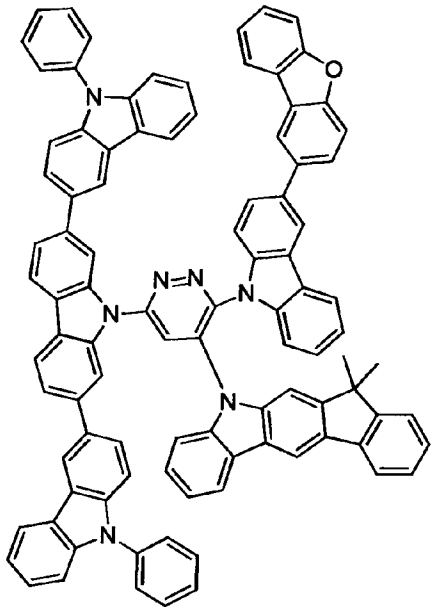
[化675]

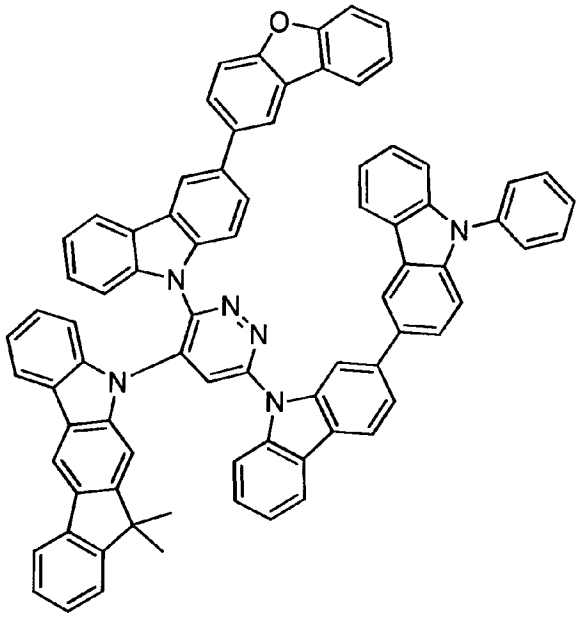


[0905]

[化676]

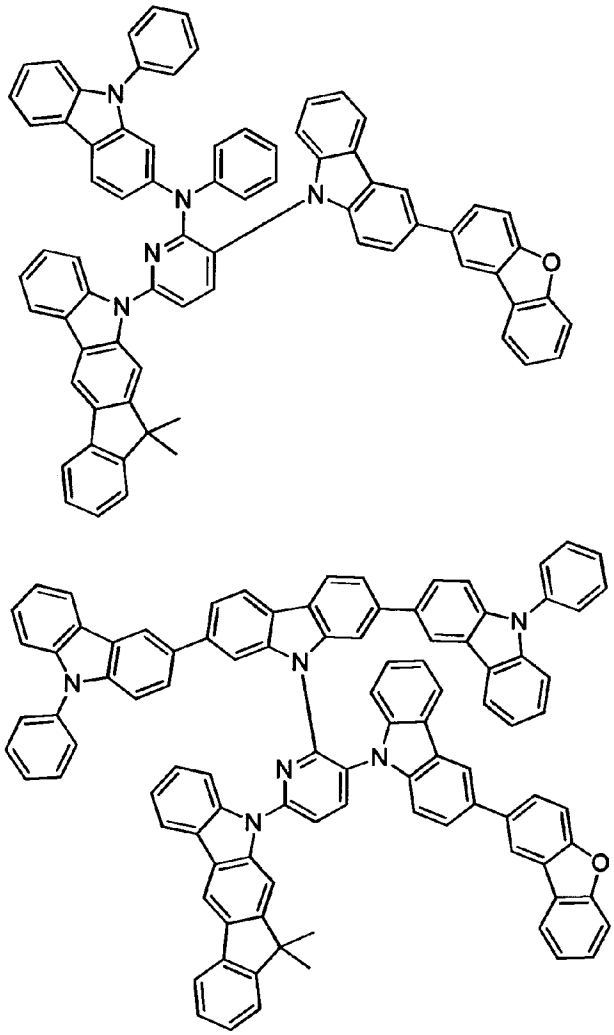






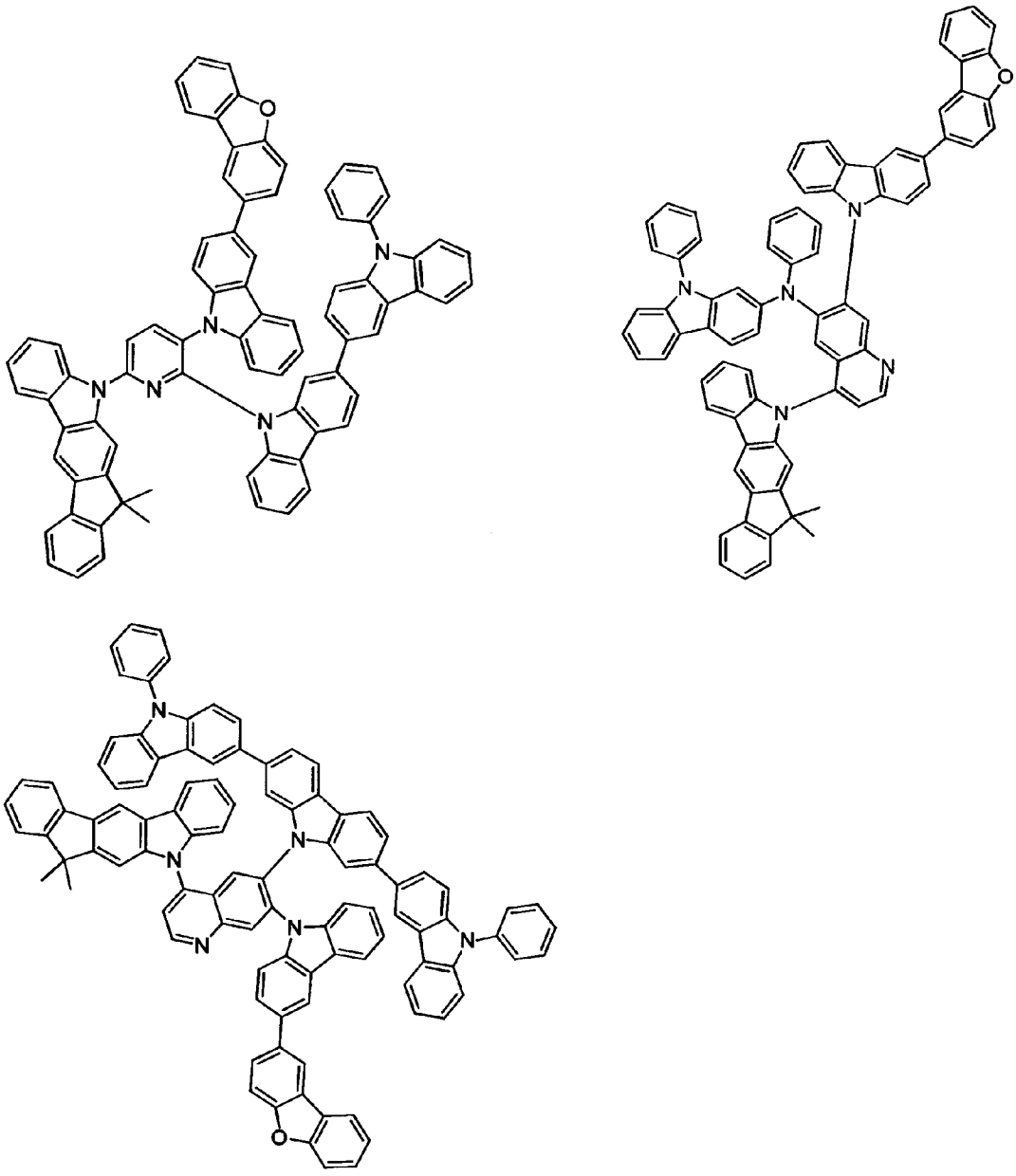
[0906]

[化677]



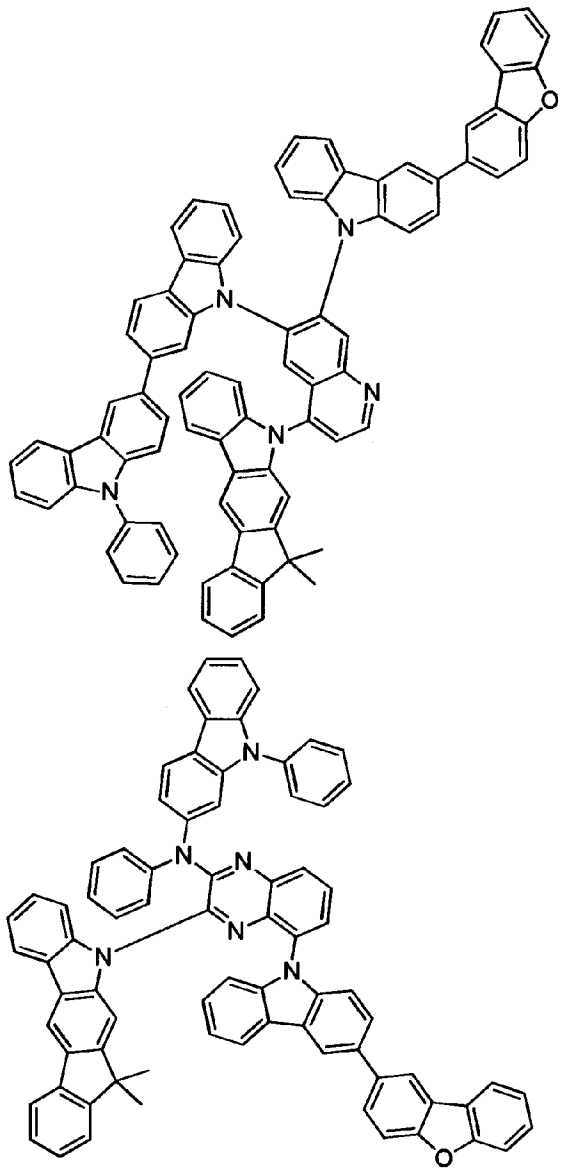
[0907]

[化678]



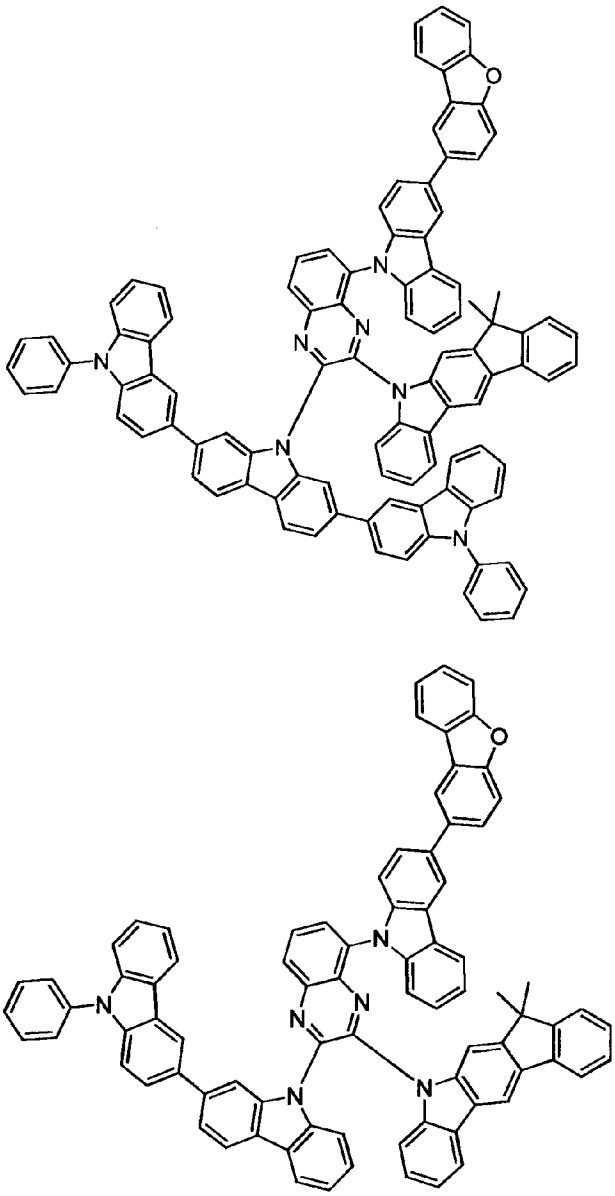
[0908]

[化679]



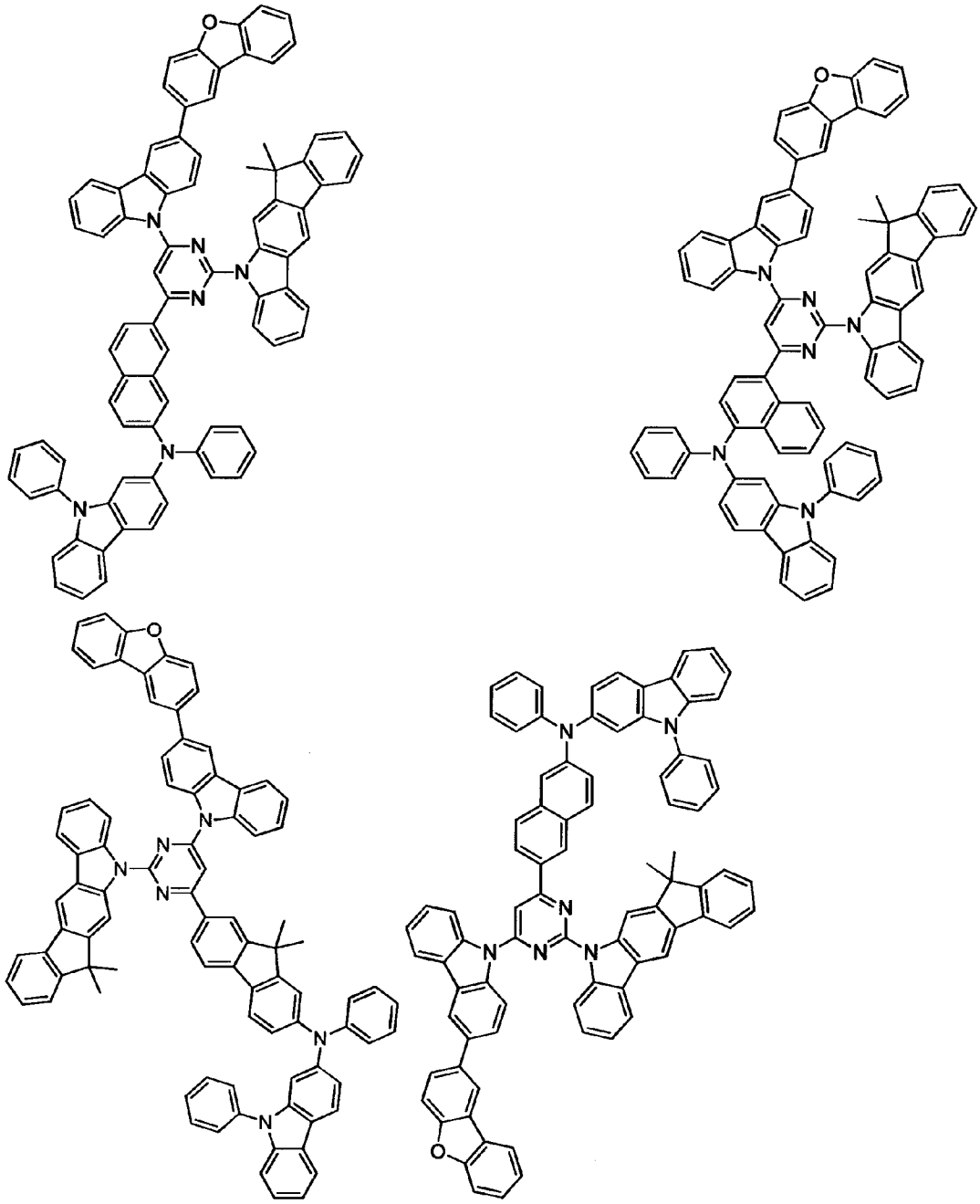
[0909]

[化680]



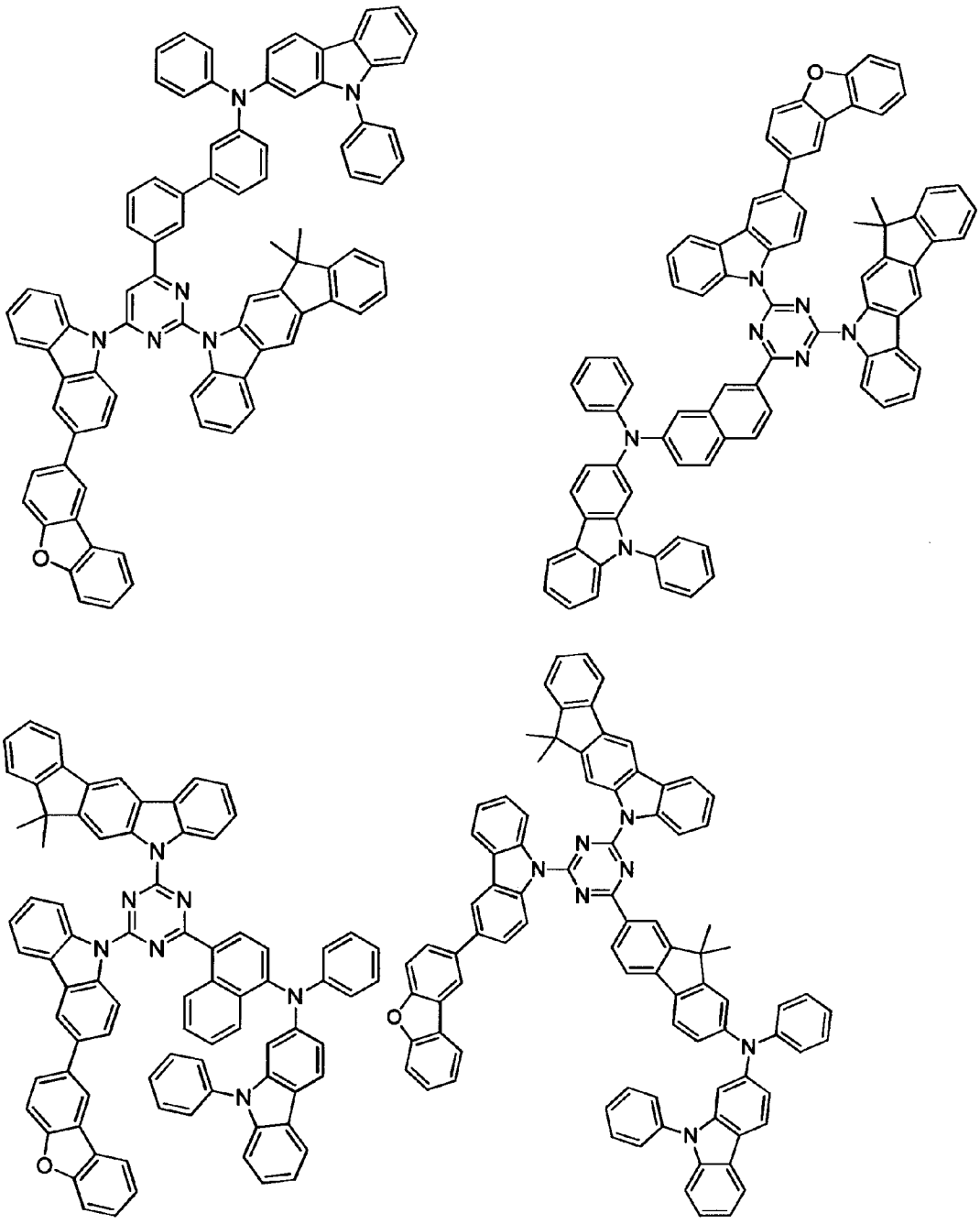
[0910]

[化681]



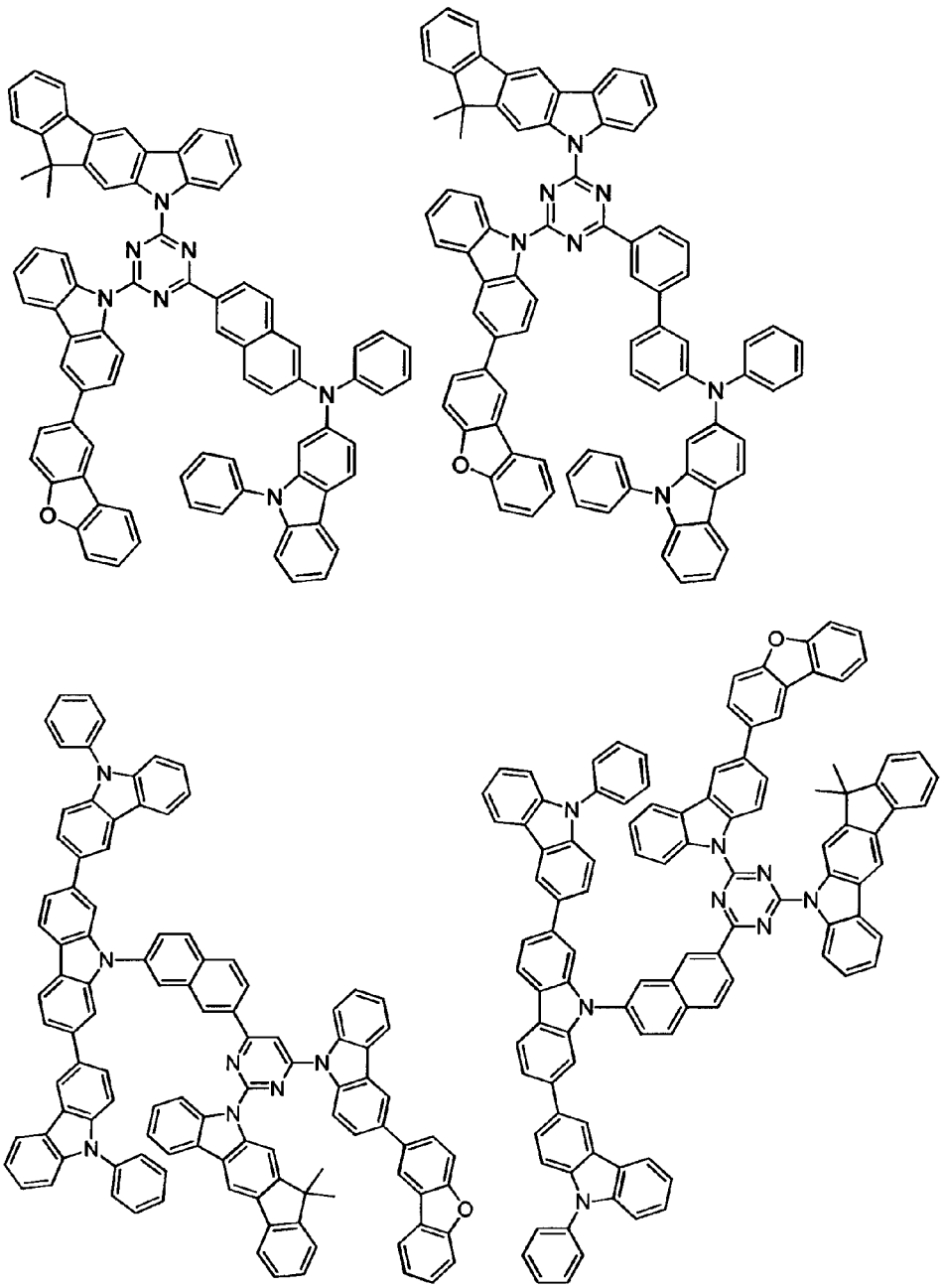
[0911]

[化682]



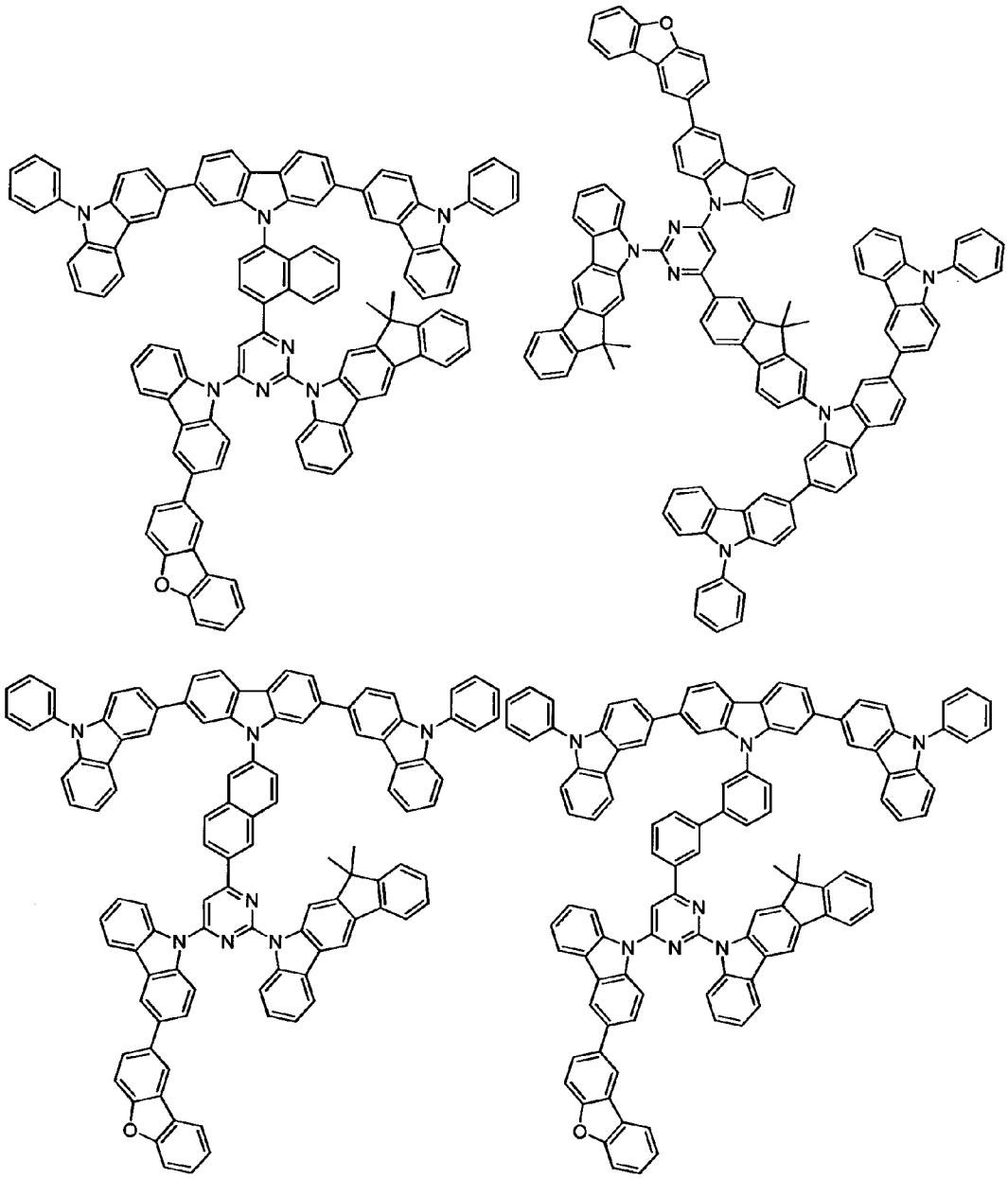
[0912]

[化683]



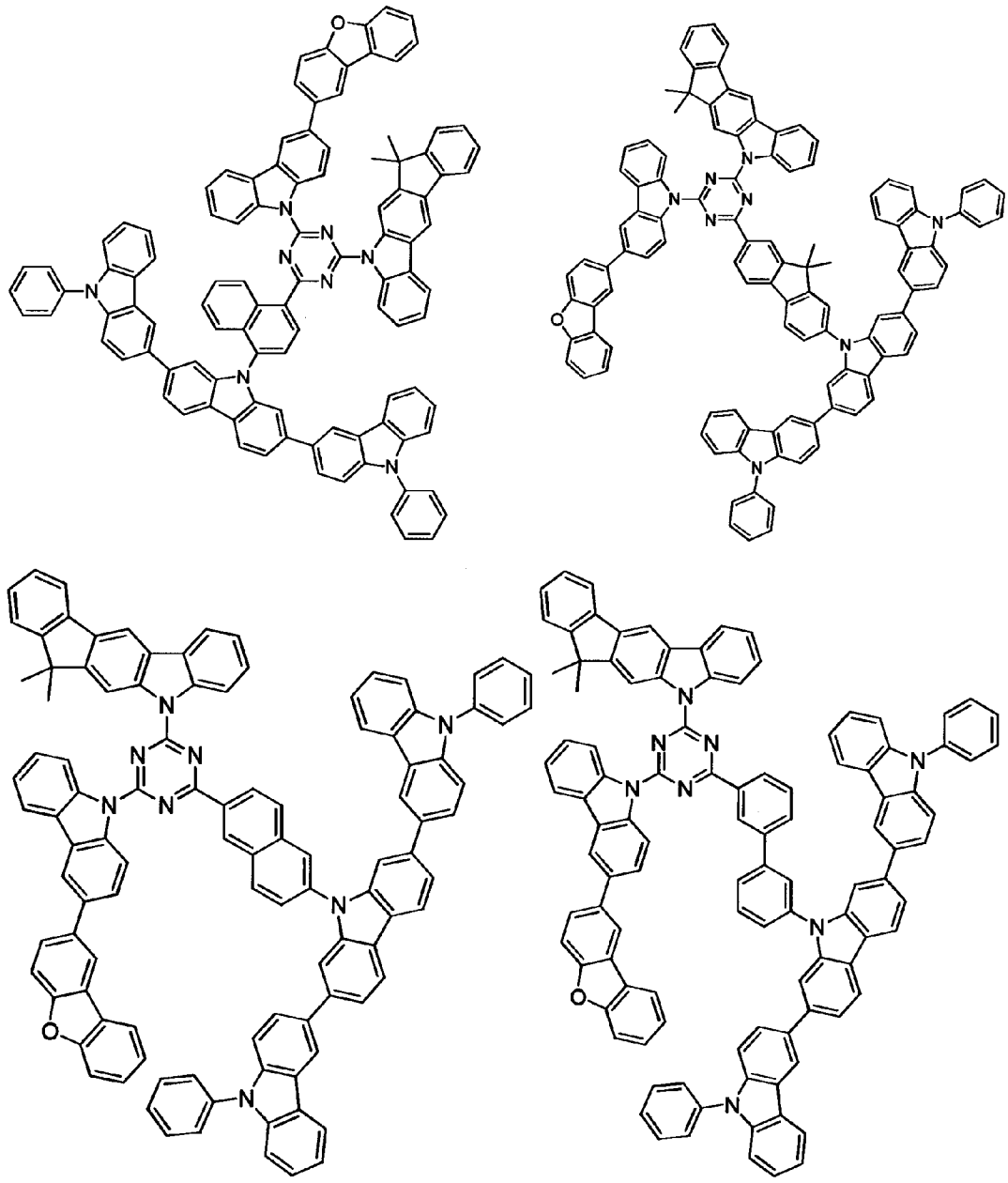
[0913]

[化684]



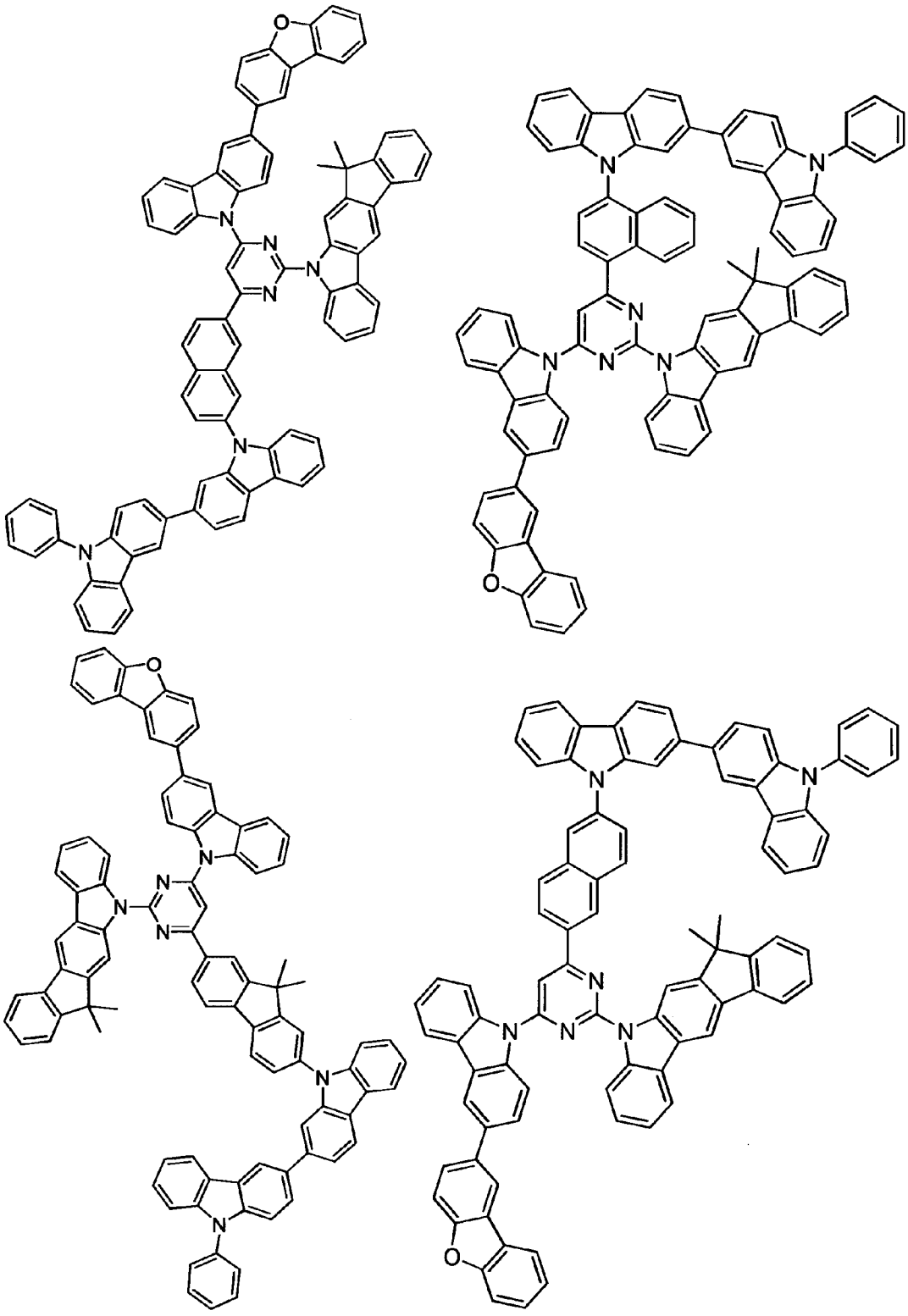
[0914]

[化685]



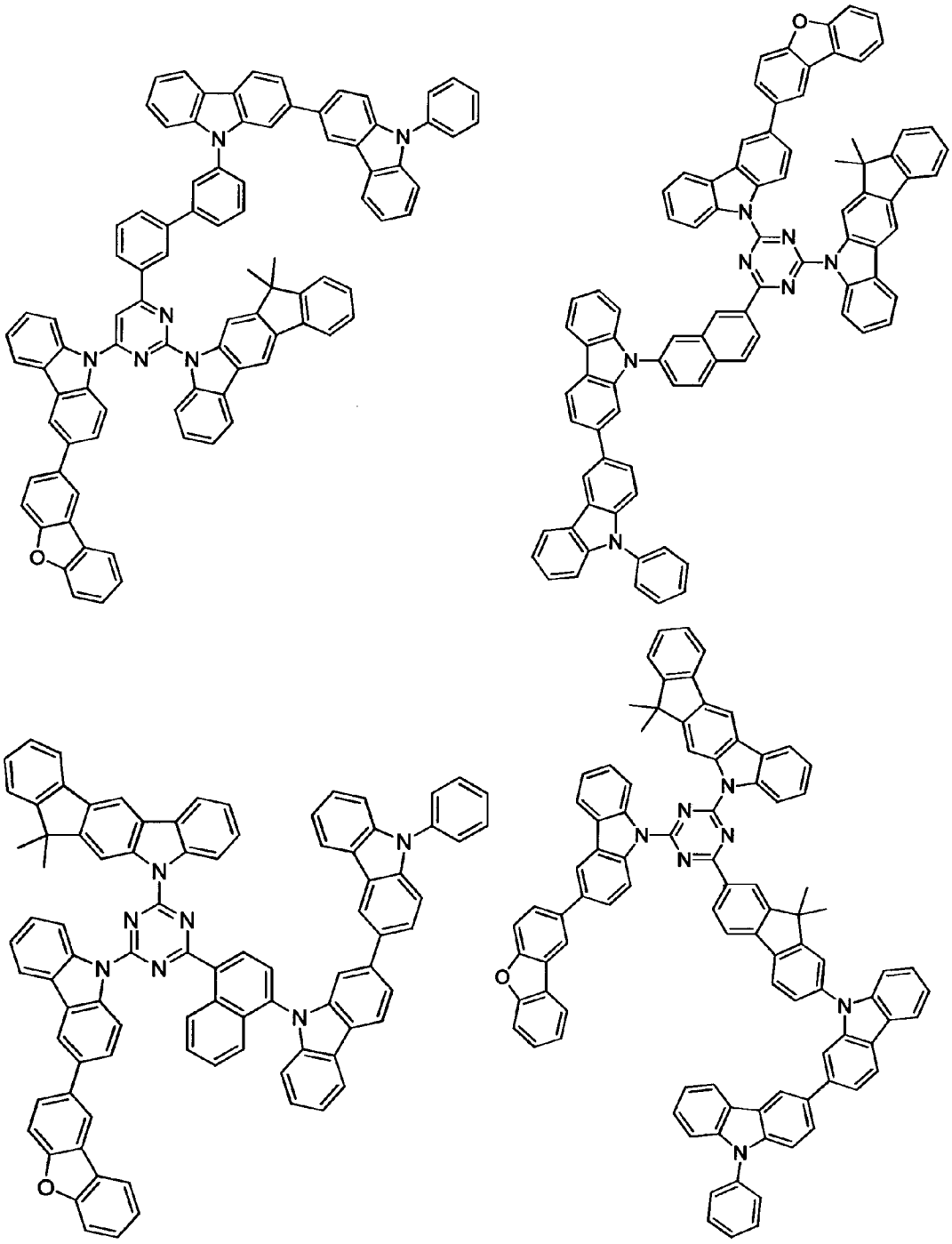
[0915]

[化686]



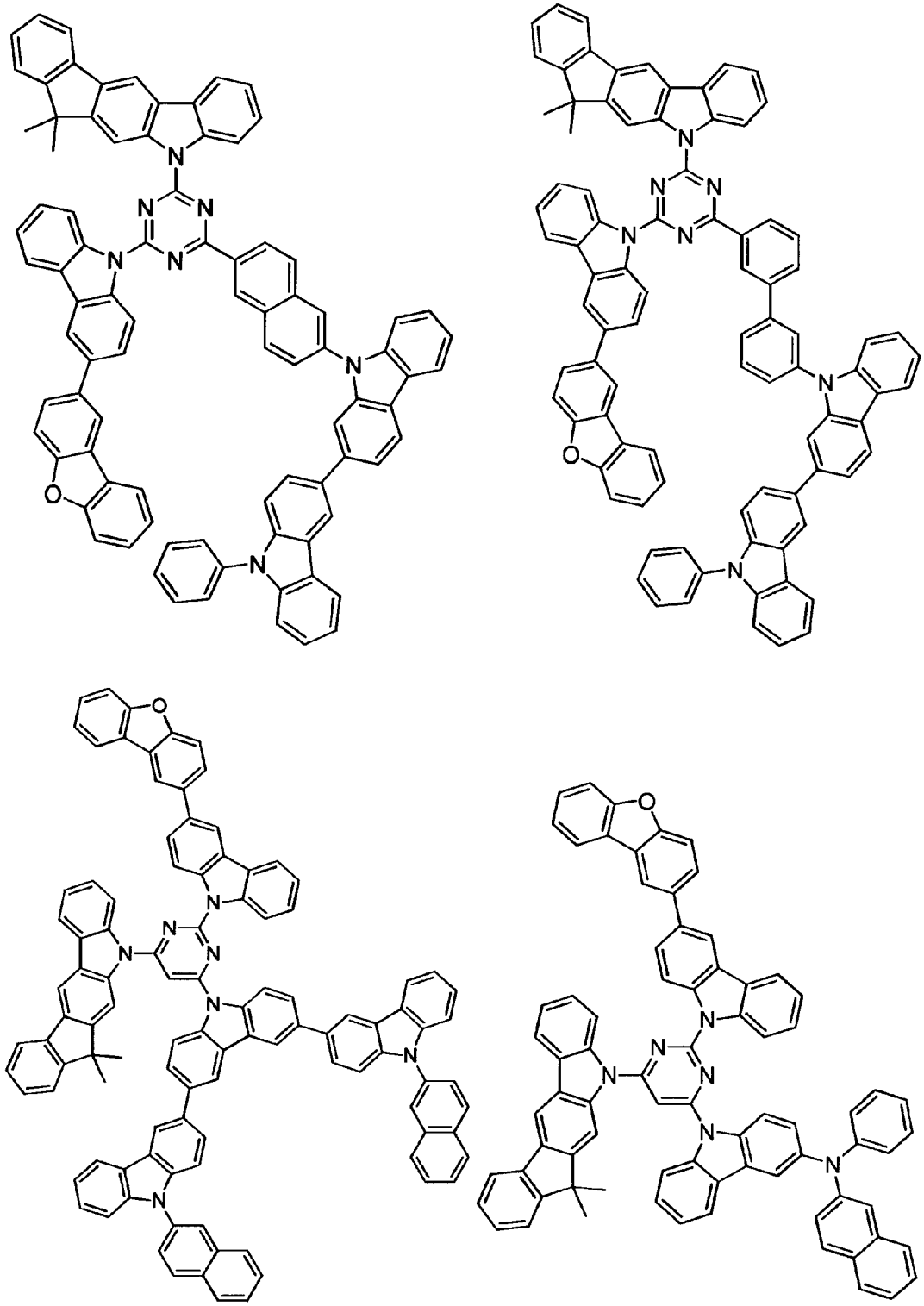
[0916]

[化687]



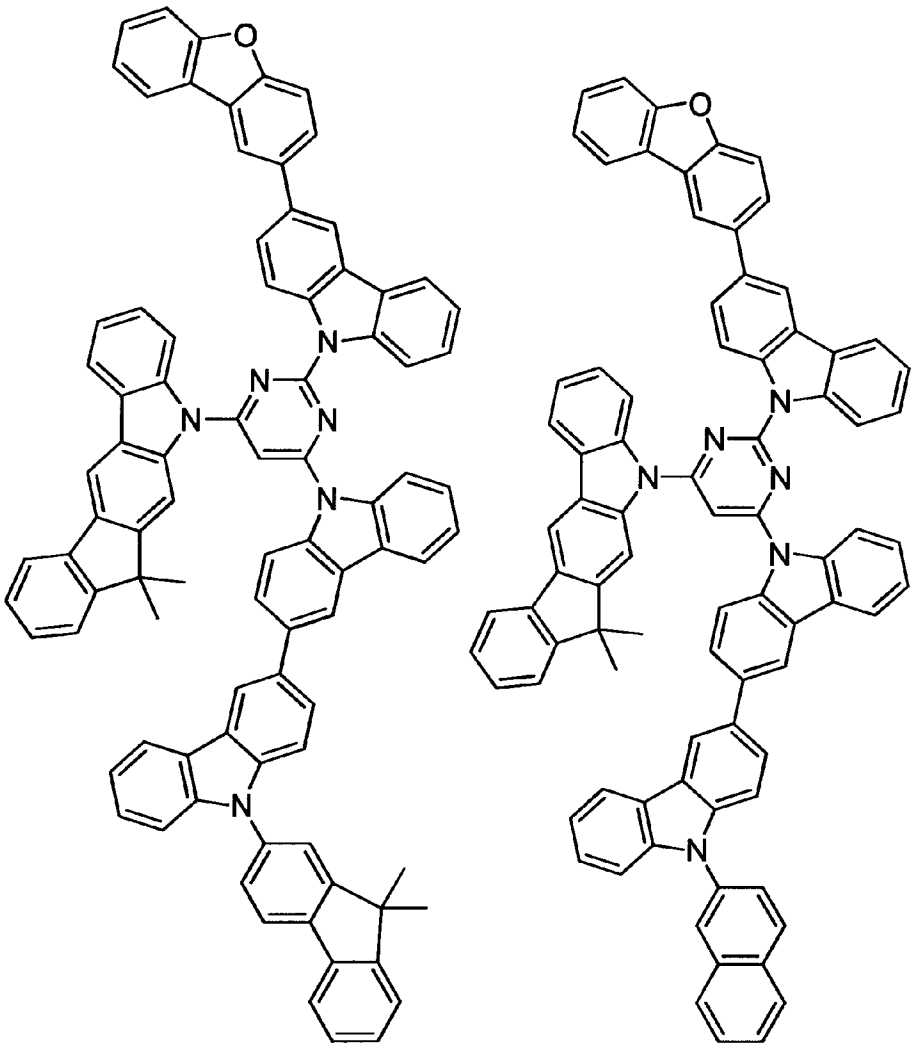
[0917]

[化688]



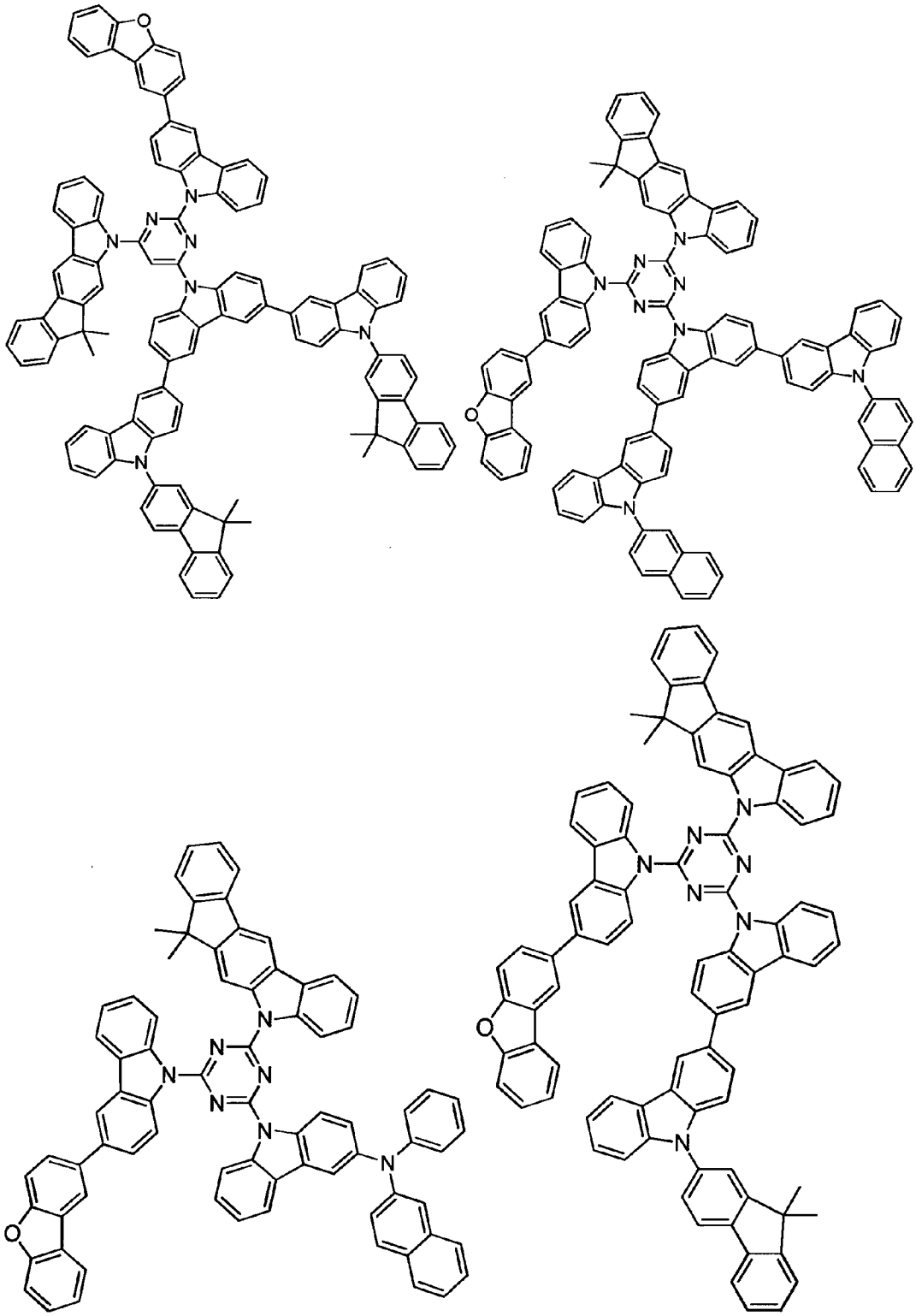
[0918]

[化689]



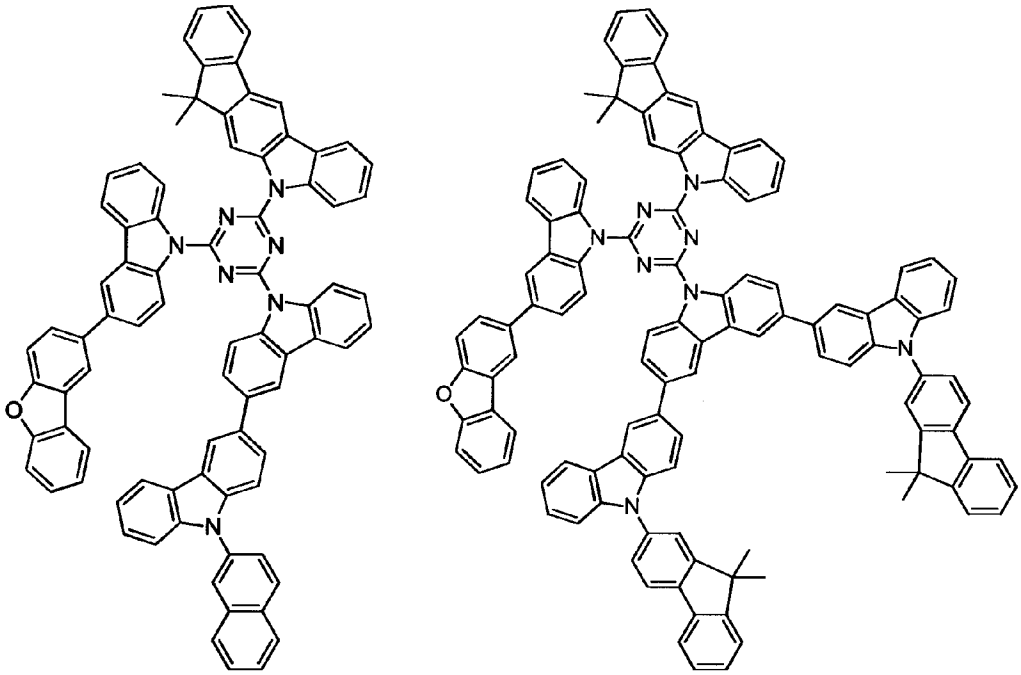
[0919]

[化690]



[0920]

[化691]



[0921] 前述の通り、本発明の一態様は、前記本発明の化合物と、下記一般式（ＣＨ１）、（ＣＨ３）、（ＣＨ４）、（ＣＨ５）、（ＣＨ６）、（ＣＨ１４）及び（ＣＨ１５）のいずれかで表される化合物［それぞれ、化合物（ＣＨ１）、化合物（ＣＨ３）、化合物（ＣＨ４）、化合物（ＣＨ５）、化合物（ＣＨ６）、化合物（ＣＨ１４）、化合物（ＣＨ１５）と称することがある。］から選択される少なくとも１種とを含有する組成物である。

但し、化合物（ＣＨ１）、化合物（ＣＨ３）、化合物（ＣＨ４）、化合物（ＣＨ５）、化合物（ＣＨ６）、化合物（ＣＨ１４）及び化合物（ＣＨ１５）は、本発明の前記化合物と同じではない。つまり、各一般式（ＣＨ１）、（ＣＨ３）、（ＣＨ４）、（ＣＨ５）、（ＣＨ６）、（ＣＨ１４）及び（ＣＨ１５）中に本発明の化合物が含まれ得る場合には、本発明の化合物に相当するその重複部分は除かれる。

当該組成物において、本発明の化合物と、化合物（ＣＨ１）、化合物（ＣＨ３）、化合物（ＣＨ４）、化合物（ＣＨ５）、化合物（ＣＨ６）、化合物

（ＣＨ１４）及び化合物（ＣＨ１５）から選択される少なくとも１種の化合物との含有比率に特に制限はない。例えば、１つの態様として、「本発明の化合物」：「化合物（ＣＨ１）、化合物（ＣＨ３）、化合物（ＣＨ４）、化合物（ＣＨ５）、化合物（ＣＨ６）、化合物（ＣＨ１４）及び化合物（ＣＨ１５）から選択される少なくとも１種の化合物」＝５：９５～９５：５が好ましく、１０：９０～９０：１０がより好ましく、２０：８０～８０：２０がさらに好ましく、４０：６０～６０：４０が特に好ましい。該含有比率は、質量比である。

また、他の態様として「本発明の化合物」：「化合物（ＣＨ１）、化合物（ＣＨ３）、化合物（ＣＨ４）、化合物（ＣＨ５）、化合物（ＣＨ６）、化合物（ＣＨ１４）及び化合物（ＣＨ１５）から選択される少なくとも１種の化合物」＝５：９５～９０：１０が好ましく、１０：９０～６０：４０がより好ましく、２０：８０～４０：６０がさらに好ましい。該含有比率は、質量比である。

さらに他の態様として「本発明の化合物」：「化合物（ＣＨ１）、化合物（ＣＨ３）、化合物（ＣＨ４）、化合物（ＣＨ５）、化合物（ＣＨ６）、化合物（ＣＨ１４）及び化合物（ＣＨ１５）から選択される少なくとも１種の化合物」＝１０：９０～９５：５が好ましく、４０：６０～９０：１０がより好ましく、６０：４０～８０：２０がさらに好ましい。該含有比率は、質量比である。

なお、当該組成物において、本発明の化合物と、化合物（ＣＨ１）、化合物（ＣＨ３）、化合物（ＣＨ４）、化合物（ＣＨ５）、化合物（ＣＨ６）、化合物（ＣＨ１４）及び化合物（ＣＨ１５）から選択される少なくとも１種の化合物との合計含有比率は、好ましくは２０質量％以上、より好ましくは５０質量％以上、さらに好ましくは７０質量％以上、よりさらに好ましくは８０質量％以上、特に好ましくは９０質量％以上、最も好ましくは、実質的に１００質量％である。

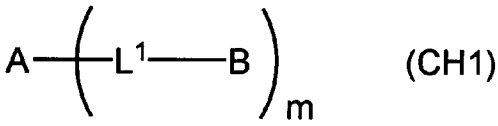
[0922] 以下、化合物（ＣＨ１）、化合物（ＣＨ３）、化合物（ＣＨ４）、化合物

（ＣＨ５）、化合物（ＣＨ６）、化合物（ＣＨ１４）及び化合物（ＣＨ１５）について詳細に説明する。

[0923] ［化合物（ＣＨ１）］

化合物（ＣＨ１）は、正孔輸送能を有する正孔輸送性骨格と電子輸送能を有する電子輸送性骨格を分子内に併せ持つことが好ましい。更に好適には、Ｂの構造部分が正孔輸送性骨格有し、Ａの構造部分が電子輸送性骨格を有する。

[化692]



(CH1)

[0924] 式（ＣＨ１）中、Ａは、置換若しくは無置換の芳香族複素環基であり、

Ｌ[1]は、単結合、置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基であり、

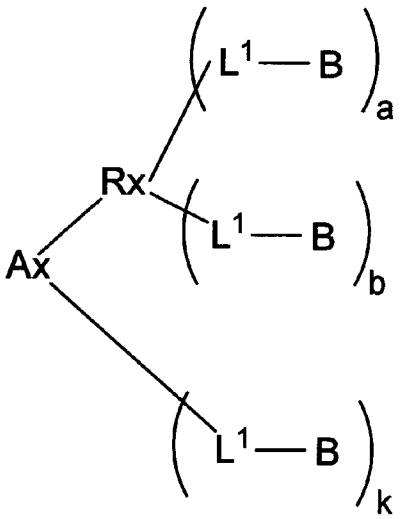
Ｂは、下記式（ＣＨ２）で表される構造の残基である。式（ＣＨ２）については、後述する。

[0925] ｍは、２以上の整数である。ｍの上限はＡの構造に依存して決定され、特に限定されるわけではないが、ガラス転移温度を高める観点からｍは２～１０程度の範囲から選ばれるのが好ましい。更に好ましくは２又は３である。本発明の組成物は塗布法で有機ＥＬ素子の層を形成することができることが好ましい。この場合、通常は塗布膜を形成後、加熱により溶媒を蒸発させることで有機薄膜が形成される。ガラス転移温度が高い材料は、非晶質の有機薄膜の形成に有利である。

複数のＬ[1]は互いに同一であっても異なっていてもよく、複数のＢは互いに同一であっても異なっていてもよい。溶解性の観点では、Ｌ[1]とＢで形成される構造が互いに異なり、Ａに対して非対称となる構造の化合物が好ましい。

[0926] 前記化合物（ＣＨ１）は、下記式（ＣＨｉ）又は下記式（ＣＨ１－Ａ）で表される化合物であることが好ましい。

[0927] [化693]

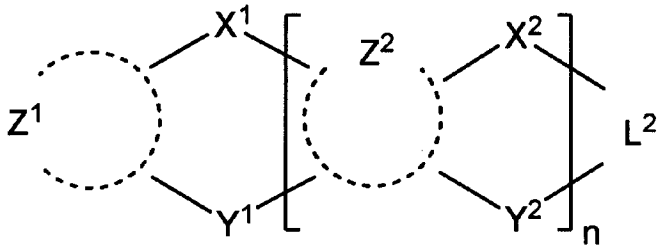


(CH1-A')

式（ＣＨ１－Ａ’）中、ａは、１以上の整数であり、ｂは、１以上の整数であり、ａ＋ｂは、式（ＣＨ１－Ａ）のｍ－ｋを表す。Ａｘ、Ｒｘ、Ｌ[1]、Ｂ及びｋは、式（ＣＨ１－Ａ）中のそれらの記号と同義である。複数のＬ[1]は互いに同一であっても異なっていてもよく、複数のＢは互いに同一であっても異なっていてもよい。

[0928] 以下、式（ＣＨ２）について説明する。式（ＣＨ２）を構成する、Ｚ[1]，Ｘ[1]，Ｙ[1]，Ｚ[2]，Ｘ[2]，Ｙ[2]又はＬ[2]と、Ｌ[1]が結合して、Ｌ[1]が単結合の場合はＡと結合して、式（ＣＨ１）の化合物が形成される。

[化694]



(CH2)

[0929] 式（ＣＨ２）中、Ｘ[1]及びＹ[1]の一方は単結合、－ＣＲ$_2$－、－ＮＲ－、－Ｏ－、－Ｓ－又は－ＳｉＲ$_2$－であり、他方は－ＮＲ－、－Ｏ－、－Ｓ－又は－ＳｉＲ$_2$－であり、

Ｘ[2]及びＹ[2]の一方は単結合、－ＣＲ$_2$－、－ＮＲ－、－Ｏ－、－Ｓ－又は－

ＳｉＲ$_2$－であり、他方は－ＮＲ－、－Ｏ－、－Ｓ－又は－ＳｉＲ$_2$－である。

ここでＲは、水素原子、置換若しくは無置換のアルキル基、置換若しくは無置換のシクロアルキル基、置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基である。

Ｚ^{1}及びＺ^{2}は、それぞれ独立に、置換若しくは無置換の脂肪族炭化水素環基、置換若しくは無置換の脂肪族複素環基、置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基である。

Ｌ^{2}は、連結基である。前記連結基としては、－ＣＲ$_2$－、－ＣＲ$_2$ＣＲ$_2$－、－ＣＲ＝ＣＲ－、－ＮＲ－、－Ｎ＝ＣＲ－、置換若しくは無置換の脂肪族炭化水素環基、置換若しくは無置換の脂肪族複素環基、置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基が挙げられる。

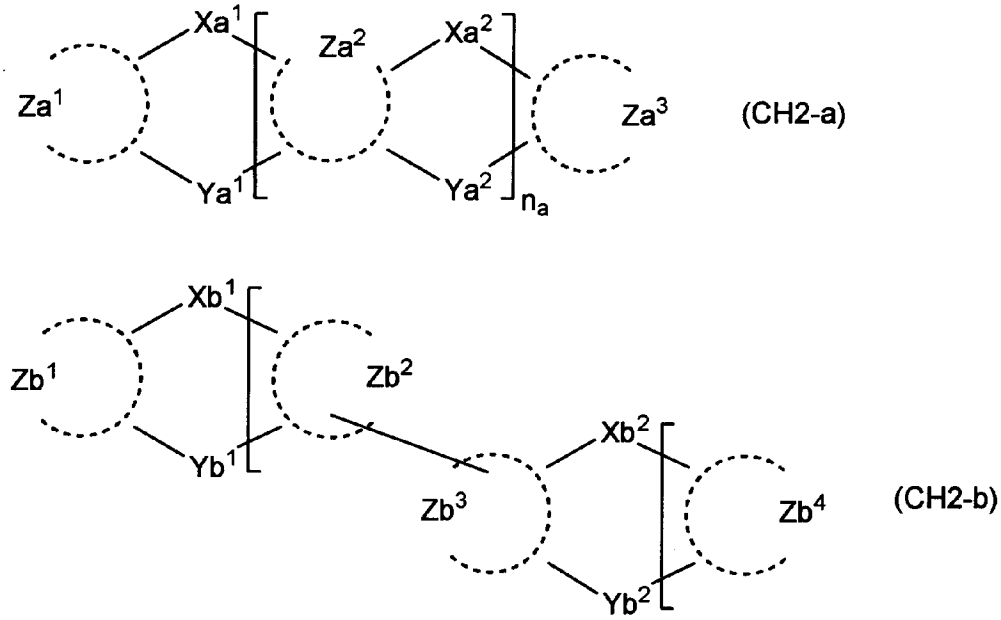
Ｌ^{2}におけるＲは、Ｘ^1、Ｘ^2、Ｙ^{1}及びＹ^{2}におけるＲと同義である。

[0930] ｎは０～５の整数である。好ましくは、０～２の整数であり、特に好ましくは０又は１である。ｎが２以上の場合、Ｚ^2、Ｘ^{2}及びＹ^{2}はそれぞれ複数存在するが、複数のＺ^{2}は互いに同一であっても異なっていてもよく、複数のＸ^{2}は互いに同一であっても異なっていてもよく、複数のＹ^{2}は互いに同一であっても異なっていてもよい。

[0931] 式（ＣＨ２）で表される構造は、下記式（ＣＨ２－ａ）で表される構造又は下記式（ＣＨ２－ｂ）で表される構造であることが好ましい。式（ＣＨ１）は、式（ＣＨ２－ａ）で表される構造と下記式（ＣＨ２－ｂ）で表される構造の両方を有する化合物であってもよい。

[0932]

[化695]



[0933] 式（ＣＨ２－ａ）について説明する。式（ＣＨ２－ａ）は式（ＣＨ２）を構成するＬ^{2}がＺａ^{3}である構造である。式（ＣＨ２－ａ）を構成するＺａ^{1}、Ｘａ^{1}、Ｙａ^{1}、Ｚａ^{2}、Ｘａ^{2}、Ｙａ^{2}又はＺａ^{3}のいずれかと、Ｌ^{1}が結合して、Ｌ^{1}が単結合の場合はＡと結合して、式（ＣＨ１）の化合物が形成される。

Ｘａ^{1}及びＹａ^{1}の一方は単結合、－ＣＲ$_{2}$－、－ＮＲ－、－Ｏ－、－Ｓ－又は－ＳｉＲ$_{2}$－であり、他方は－ＮＲ－、－Ｏ－、－Ｓ－又は－ＳｉＲ$_{2}$－である。

Ｘａ^{2}及びＹａ^{2}の一方は単結合、－ＣＲ$_{2}$－、－ＮＲ－、－Ｏ－、－Ｓ－又は－ＳｉＲ$_{2}$－であり、他方は－ＮＲ－、－Ｏ－、－Ｓ－又は－ＳｉＲ$_{2}$－である。

Ｘａ^{1}、Ｘａ^{2}、Ｙａ^{1}及びＹａ^{2}におけるＲは、式（ＣＨ２）のＸ^{1}、Ｘ^{2}、Ｙ^{1}及びＹ^{2}におけるＲと同義である。

[0934] Ｚａ^{1}、Ｚａ^{2}及びＺａ^{3}は、それぞれ独立に、置換若しくは無置換の脂肪族炭化水素環基、置換若しくは無置換の脂肪族複素環基、置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基である。

[0935] n_aは０～５の整数であり、好ましくは０～２の整数であり、特に好ましくは０又は１である。n_aが２以上の場合、Za^2、Xa^2及びYa^2はそれぞれ複数存在するが、複数のZa^2は互いに同一であっても異なっていてもよく、複数のXa^2は互いに同一であっても異なっていてもよく、複数のYa^2は互いに同一であっても異なっていてもよい。

[0936] 式（ＣＨ２－ｂ）について説明する。式（ＣＨ２－ｂ）は式（ＣＨ２）を構成するｎが０で、L^2が３環以上の縮環構造の置換基を有する芳香族炭化水素環基、又は芳香族複素環基である構造である。式（ＣＨ２－ｂ）を構成する、Zb^1，Xb^1，Yb^1，Zb^2，Zb^3、Xb^2，Yb^2又はZb^4のいずれかと、L^1が結合して、L^1が単結合の場合はＡと結合して式（ＣＨ１）の化合物が形成される。式（ＣＨ２－ｂ）の環Zb^2と環Zb^3は単結合で結合している。溶解性向上の観点では、式（ＣＨ２－ｂ）が好ましい。

Xb^1及びYb^1の一方は単結合、－CR_2－、－ＮＲ－、－Ｏ－、－Ｓ－又は－SiR_2－、で表される基であり、他方は－ＮＲ－、－Ｏ－、－Ｓ－又は－SiR_2－である。

Xb^2及びYb^2の一方は単結合、－CR_2－、－ＮＲ－、－Ｏ－、－Ｓ－又は－SiR_2－であり、他方は－ＮＲ－、－Ｏ－、－Ｓ－又は－SiR_2－である。

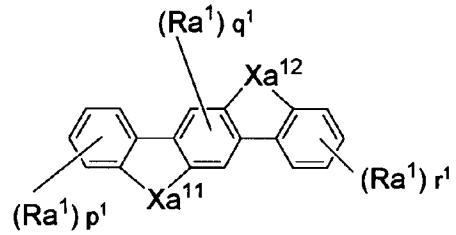
Xb^1、Xb^2、Yb^1及びYb^2におけるＲは、式（ＣＨ２）のX^1、X^2、Y^1及びY^2におけるＲと同義である。

[0937] Zb^1、Zb^2、Zb^3及びZb^4は、それぞれ独立に、置換若しくは無置換の脂肪族炭化水素環基、置換若しくは無置換の脂肪族複素環基、置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基である。

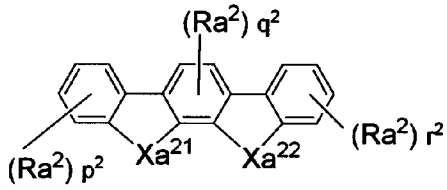
[0938] 式（ＣＨ２－ａ）で表される構造において、n_aが１の場合、下記式（ＣＨ２－ａ－１）～式（ＣＨ２－ａ－６）で表される構造のいずれかであることがより好ましい。式（ＣＨ２－ａ）で表される構造においてｎ$_a$が１であり、Za^1，Za^2，Za^3がベンゼン環であり、Xa^1とYa^1の一方が単結合であ

り、Ｘａ^{2}とＹａ^{2}の一方が単結合である構造が、式（ＣＨ２－ａ－１）～式（ＣＨ２－ａ－６）で表される構造である。

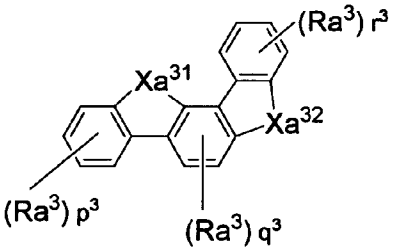
[0939] [化696]



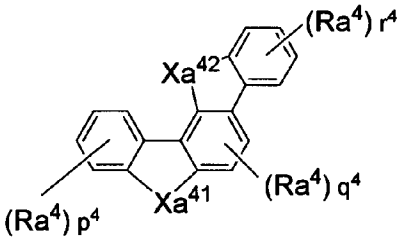
(CH2-a-1)



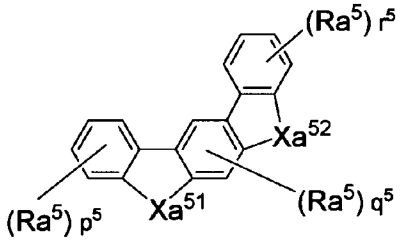
(CH2-a-2)



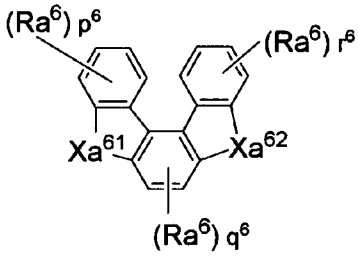
(CH2-a-3)



(CH2-a-4)



(CH2-a-5)



(CH2-a-6)

[0940] 式（ＣＨ２－ａ－１）中のＸａ^{11}及びＸａ^{12}、式（ＣＨ２－ａ－２）中のＸａ^{21}及びＸａ^{22}、式（ＣＨ２－ａ－３）中のＸａ^{31}及びＸａ^{32}、式（ＣＨ２－ａ－４）中のＸａ^{41}及びＸａ^{42}、式（ＣＨ２－ａ－５）中のＸａ^{51}及びＸａ^{52}、並びに式（ＣＨ２－ａ－６）中のＸａ^{61}及びＸａ^{62}は、それぞれ独立に、－ＣＲ$_{2}$－、－ＮＲ－、－Ｏ－、－Ｓ－又は－ＳｉＲ$_{2}$－である。

Ｘａ^{11}、Ｘａ^{12}、Ｘａ^{21}、Ｘａ^{22}、Ｘａ^{31}、Ｘａ^{32}、Ｘａ^{41}、Ｘａ^{42}、Ｘａ^{51}、Ｘａ^{52}、Ｘａ^{61}及びＸａ^{62}におけるＲは、式（ＣＨ２）のＸ^{1}、Ｘ^{2}

、Y^1及びY^2におけるＲと同義である。

[0941] 式（ＣＨ２－ａ－１）中のRa^1、式（ＣＨ２－ａ－２）中のRa^2、式（ＣＨ２－ａ－３）中のRa^3、式（ＣＨ２－ａ－４）中のRa^4、式（ＣＨ２－ａ－５）中のRa^5、及び式（ＣＨ２－ａ－６）中のRa^6は、それぞれ独立に、置換若しくは無置換の炭素数１～２０のアルキル基、置換若しくは無置換の環形成炭素数３～２０のシクロアルキル基、置換若しくは無置換の炭素数１～２０のアルコキシ基、置換若しくは無置換の炭素数７～２４のアラルキル基、置換若しくは無置換のシリル基、置換若しくは無置換の環形成炭素数６～２４の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の環形成炭素数２～２４の芳香族複素環基である。

Ra^1が複数存在する場合に複数のRa^1は互いに同一であっても異なっていてもよく、Ra^2が複数存在する場合に複数のRa^2は互いに同一であっても異なっていてもよく、Ra^3が複数存在する場合に複数のRa^3は互いに同一であっても異なっていてもよく、Ra^4が複数存在する場合に複数のRa^4は互いに同一であっても異なっていてもよく、Ra^5が複数存在する場合に複数のRa^5は互いに同一であっても異なっていてもよく、Ra^6が複数存在する場合に複数のRa^6は互いに同一であっても異なっていてもよい。

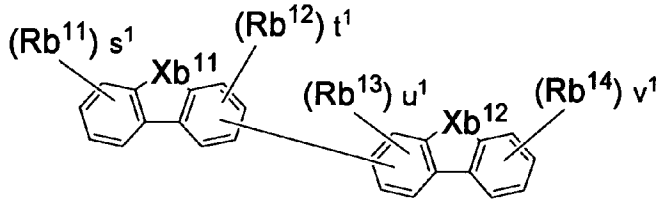
[0942] 式（ＣＨ２－ａ－１）中のp^1、式（ＣＨ２－ａ－２）中のp^2、式（ＣＨ２－ａ－３）中のp^3、式（ＣＨ２－ａ－４）中のp^4、式（ＣＨ２－ａ－５）中のp^5、及び式（ＣＨ２－ａ－６）中のp^6は、それぞれ独立に、０～４の整数である。

式（ＣＨ２－ａ－１）中のq^1、式（ＣＨ２－ａ－２）中のq^2、式（ＣＨ２－ａ－３）中のq^3、式（ＣＨ２－ａ－４）中のq^4、式（ＣＨ２－ａ－５）中のq^5、及び式（ＣＨ２－ａ－６）中のq^6は、それぞれ独立に、０～２の整数である。

式（ＣＨ２－ａ－１）中のr^1、式（ＣＨ２－ａ－２）中のr^2、式（ＣＨ２－ａ－３）中のr^3、式（ＣＨ２－ａ－４）中のr^4、式（ＣＨ２－ａ－５）中のr^5、及び式（ＣＨ２－ａ－１）中のr^6、は０～４の整数である。

[0943] 式（ＣＨ２－ｂ）で表される構造は、下記式（ＣＨ２－ｂ－１）で表される構造であることが、溶解性向上の観点で、より好ましい。式（ＣＨ２－ｂ）で表される構造において、Ｚｂ^{1}、Ｚｂ^{2}、Ｚｂ^{3}、Ｚｂ^{4}がベンゼン環であり、Ｘｂ^{1}とＹｂ^{1}の一方が単結合であり、Ｘｂ^{2}とＹｂ^{2}の一方が単結合である構造が、式（ＣＨ２－ｂ－１）である。

[0944] [化697]



(CH2-b-1)

[0945] 式（ＣＨ２－ｂ－１）中、Ｘｂ^{11}及びＸｂ^{12}は、それぞれ独立に、－ＮＲ－、－Ｏ－、－Ｓ－又は－ＳｉＲ$_{2}$－である。該Ｒは、式（ＣＨ２）のＸ^{1}、Ｘ^{2}、Ｙ^{1}及びＹ^{2}におけるＲと同義である。

Ｒｂ^{11}、Ｒｂ^{12}、Ｒｂ^{13}及びＲｂ^{14}は、それぞれ独立に、置換若しくは無置換の炭素数１～２０のアルキル基、置換若しくは無置換の環形成炭素数３～２０のシクロアルキル基、置換若しくは無置換の炭素数１～２０のアルコキシ基、置換若しくは無置換の炭素数７～２４のアラルキル基、置換若しくは無置換のシリル基、置換若しくは無置換の環形成炭素数６～２４の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の環形成炭素数２～２４の芳香族複素環基である。

[0946] ｓ^{1}は０～４の整数である。ｓ^{1}が２以上の場合、Ｒｂ^{11}は複数存在するが、複数のＲｂ^{11}は互いに同一であっても異なっていてもよく、

ｔ^{1}は０～３の整数であり、ｔ^{1}が２以上の場合、Ｒｂ^{12}は複数存在するが、複数のＲｂ^{12}は互いに同一であっても異なっていてもよく、

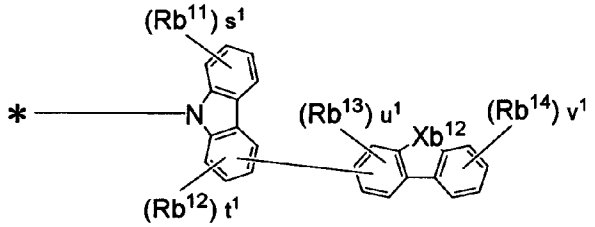
ｕ^{1}は０～３の整数であり、ｕ^{1}が２以上の場合、Ｒｂ^{13}は複数存在するが、複数のＲｂ^{13}は互いに同一であっても異なっていてもよく、

ｖ^{1}は０～４の整数であり、ｖ^{1}が２以上の場合、Ｒｂ^{14}は複数存在するが

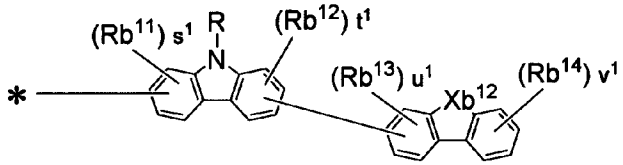
、複数のＲｂ^{14}は互いに同一であっても異なっていてもよい。

[0947] 式（ＣＨ１）におけるＢは、下記式（ＣＨ２－Ａ）で表される基又は下記式（ＣＨ２－Ｂ）で表される基であることが好ましい。

[0948] [化698]



(CH2-A)



(CH2-B)

[0949] 式（ＣＨ２－Ａ）について説明する。

Ｘｂ^{12}、Ｒｂ^{11}、Ｒｂ^{12}、Ｒｂ^{13}、Ｒｂ^{14}、ｓ^{1}、ｔ^{1}、ｕ^{1}及びｖ^{1}は、式（ＣＨ２－ｂ－１）中のそれら記号と同義である。

＊は、式（ＣＨ１）のＬ^{1}との結合手を表す。

[0950] 式（ＣＨ２－Ｂ）について説明する。

ｓ^{1}は０～３の整数である。

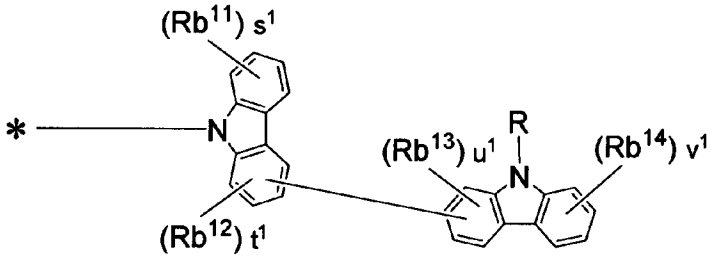
Ｘｂ^{12}、Ｒ、Ｒｂ^{11}、Ｒｂ^{12}、Ｒｂ^{13}、Ｒｂ^{14}、ｔ^{1}、ｕ^{1}及びｖ^{1}は、式（ＣＨ２－ｂ－１）中のそれらと記号と同義である。溶解性向上の観点でＸｂ^{12}はＮＲであることが好ましい。

＊は、式（ＣＨ１）のＬ^{1}との結合手を表す。

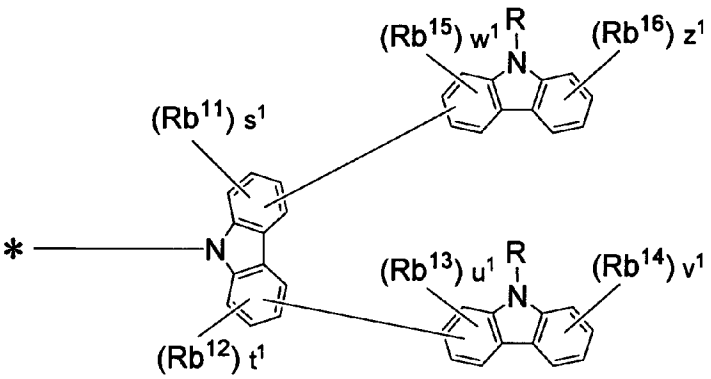
式（ＣＨ２－Ｂ）中のＲは、置換若しくは無置換のアルキル基、置換若しくは無置換のシクロアルキル基、置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基であることが好ましい。

[0951] 式（ＣＨ２－Ａ）で表される基は、下記式（ＣＨ２－Ａ－ｉ）又は下記式（ＣＨ２－Ａ－ｉｉ）で表される基であることが好ましい。

[0952] [化699]



(CH2-A-i)



(CH2-A-ii)

[0953] 式（ＣＨ２－Ａ－ｉ）について説明する。

Ｒｂ^{11}、Ｒｂ^{12}、Ｒｂ^{13}、Ｒｂ^{14}、ｓ^{1}、ｔ^{1}、ｕ^{1}及びｖ^{1}は、式（ＣＨ２－Ａ）中のそれらの記号と同義である。

Ｒは、式（ＣＨ２）のＸ^{1}、Ｘ^{2}、Ｙ^{1}及びＹ^{2}におけるＲと同義である。

＊は、式（ＣＨ１）のＬ^{1}との結合手を表す。

式（ＣＨ２－Ａ－ｉ）中のＲは、置換若しくは無置換のアルキル基、置換若しくは無置換のシクロアルキル基、置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基であることが好ましい。

[0954] 式（ＣＨ２－Ａ－ｉｉ）について説明する。

ｓ^{1}は０～３の整数であり、Ｒｂ^{11}、Ｒｂ^{12}、Ｒｂ^{13}、Ｒｂ^{14}、ｔ^{1}、ｕ^{1}及びｖ^{1}は、式（ＣＨ２－Ａ）中のそれらの記号と同義である。

Ｒｂ^{15}及びＲｂ^{16}は、それぞれ独立に、置換若しくは無置換の炭素数１～２０のアルキル基、置換若しくは無置換の環形成炭素数３～２０のシクロアルキル基、置換若しくは無置換の炭素数１～２０のアルコキシ基、置換若し

くは無置換の炭素数７～２４のアラルキル基、置換若しくは無置換のシリル基、置換若しくは無置換の環形成炭素数６～２４の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の環形成炭素数２～２４の芳香族複素環基である。

Ｒは、式（ＣＨ２）のX^1、X^2、Y^1及びY^2におけるＲと同義であり、置換若しくは無置換のアルキル基、置換若しくは無置換のシクロアルキル基、置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基であることが好ましい。

w^1は０～３の整数であり、w^1が２以上の場合、複数のRb^{15}は互いに同一であっても異なっていてもよい。

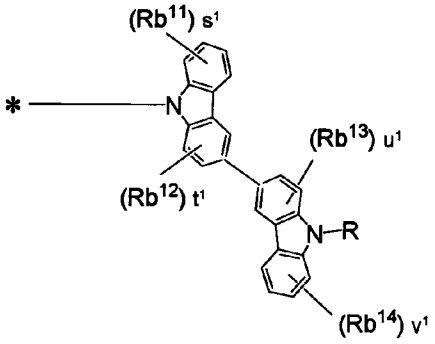
z^1は０～４の整数であり、z^1が２以上の場合、複数のRb^{16}は互いに同一であっても異なっていてもよい。

＊は、式（ＣＨ１）のL^1との結合手を表す。

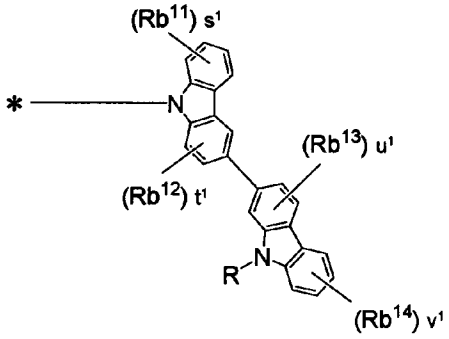
[0955] 式（ＣＨ２－Ａ－ｉ）で表される基は、下記式（ＣＨ２－Ａ－１）～式（ＣＨ２－Ａ－３）で表される基のいずれかであることが好ましい。

[0956]

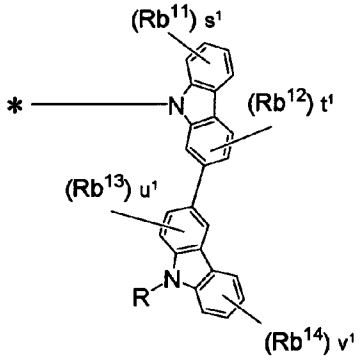
[化700]



(CH2-A-1)



(CH2-A-2)



(CH2-A-3)

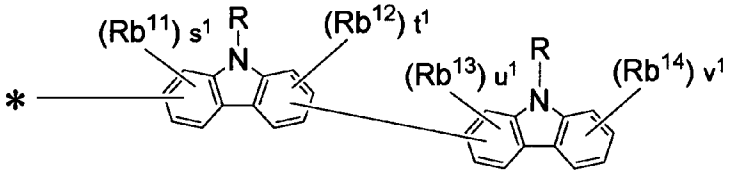
[0957] 式（ＣＨ２－Ａ－１）～式（ＣＨ２－Ａ－３）中のＲ、Ｒｂ^{11}、Ｒｂ^{12}、Ｒｂ^{13}、Ｒｂ^{14}、ｓ^{1}、ｔ^{1}、ｕ^{1}及びｖ^{1}は、式（ＣＨ２－ｂ－１）中のそれら記号と同義である。

式（ＣＨ２－Ａ－１）～式（ＣＨ２－Ａ－３）中の＊は、式（ＣＨ１）のＬ^{1}との結合手を表す。

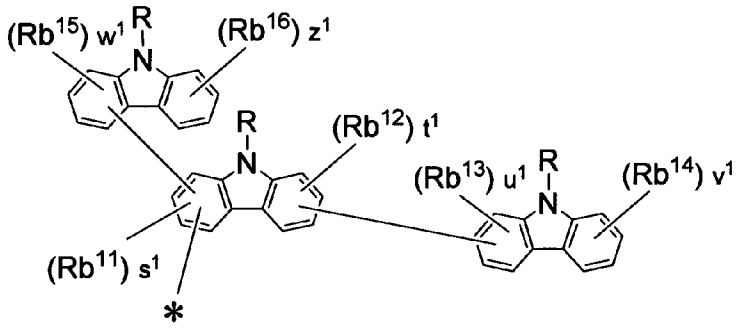
式（ＣＨ２－Ａ－１）～式（ＣＨ２－Ａ－３）中のＲは、置換若しくは無置換のアルキル基、置換若しくは無置換のシクロアルキル基、置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基であることが好ましい。

[0958] 式（ＣＨ２－Ｂ）で表される基は、下記式（ＣＨ２－Ｂ－ｉ）又は下記式（ＣＨ２－Ｂ－ｉｉ）で表される基であることが好ましい。

[0959] [化701]



(CH2-B-i)



(CH2-B-ii)

[0960] 式（ＣＨ２－Ｂ－ｉ）について説明する。

Ｒ、Ｒｂ^{11}、Ｒｂ^{12}、Ｒｂ^{13}、Ｒｂ^{14}、ｓ^{1}、ｔ^{1}、ｕ^{1}及びｖ^{1}は、式（ＣＨ２－Ｂ）中のそれらの記号と同義である。

＊は、式（ＣＨ１）のＬ^{1}との結合手を表す。

式（ＣＨ２－Ｂ－ｉ）中のＲは、置換若しくは無置換のアルキル基、置換若しくは無置換のシクロアルキル基、置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基であることが好ましい。

[0961] 式（ＣＨ２－Ｂ－ｉｉ）について説明する。

ｓ^{1}は０～２の整数であり、Ｒ、Ｒｂ^{11}、Ｒｂ^{12}、Ｒｂ^{13}、Ｒｂ^{14}、ｔ^{1}、ｕ^{1}及びｖ^{1}は、式（ＣＨ２－Ｂ）中のそれらの記号と同義である。

Ｒｂ^{15}及びＲｂ^{16}は、それぞれ独立に、置換若しくは無置換の炭素数１～２０のアルキル基、置換若しくは無置換の環形成炭素数３～２０のシクロアルキル基、置換若しくは無置換の炭素数１～２０のアルコキシ基、置換若しくは無置換の炭素数７～２４のアラルキル基、置換若しくは無置換のシリル

基、置換若しくは無置換の環形成炭素数６～２４の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の環形成炭素数２～２４の芳香族複素環基である。

w^1は０～３の整数であり、w^1が２以上の場合、複数のRb^{15}は互いに同一であっても異なっていてもよい。

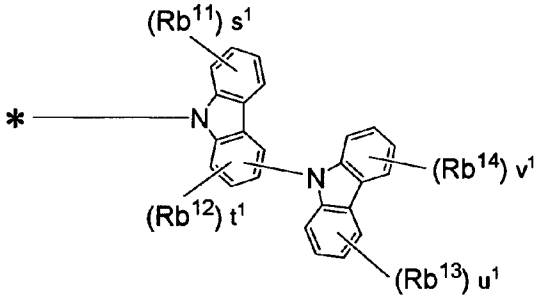
z^1は０～４の整数であり、z^1が２以上の場合、複数のRb^{16}は互いに同一であっても異なっていてもよい。

＊は、式（ＣＨ１）のL^1との結合手を表す。

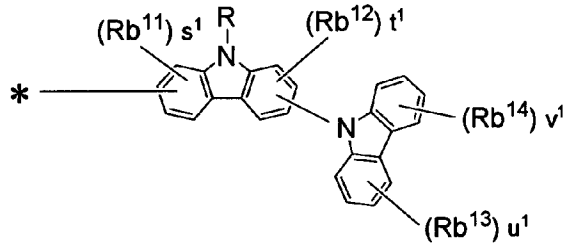
式（ＣＨ２－Ｂ－ｉｉ）中のＲは、置換若しくは無置換のアルキル基、置換若しくは無置換のシクロアルキル基、置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基であることが好ましい。

[0962] また、式（ＣＨ１）におけるＢは、下記式（ＣＨ２－Ｃ）で表される基又は下記式（ＣＨ２－Ｄ）で表される基であることがより好ましい。

[0963] [化702]



(CH2-C)



(CH2-D)

[0964] 式（ＣＨ２－Ｃ）について説明する。

u^1は０～４の整数である。

Rb^{11}、Rb^{12}、Rb^{13}、Rb^{14}、s^1、t^1及びv^1は、式（ＣＨ２－ｂ

－１）中のそれら記号と同義である。

＊は、式（ＣＨ１）のＬ^{1}との結合手を表す。

[0965] 式（ＣＨ２－Ｄ）について説明する。

ｓ^{1}は０～３の整数であり、ｕ^{1}は０～４の整数である。

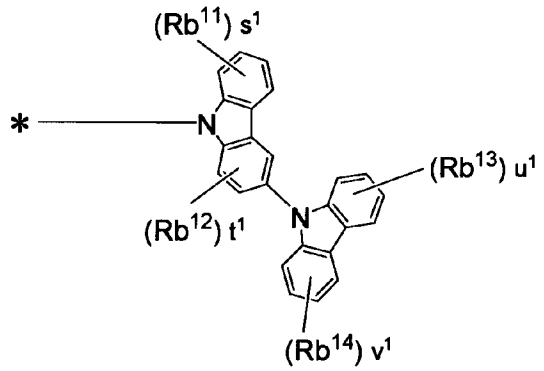
Ｒ、Ｒｂ^{11}、Ｒｂ^{12}、Ｒｂ^{13}、Ｒｂ^{14}、ｔ^{1}及びｖ^{1}は、式（ＣＨ２－ｂ－１）中のそれらの記号と同義である。

＊は、式（ＣＨ１）のＬ^{1}との結合手を表す。

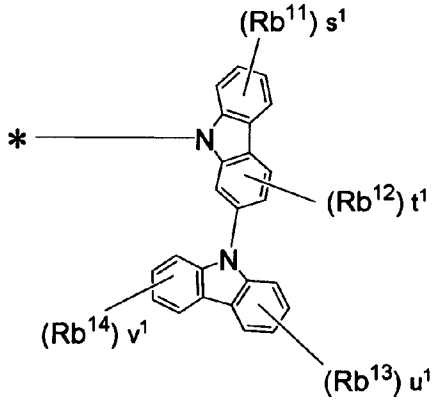
式（ＣＨ２－Ｄ）中のＲは、置換若しくは無置換のアルキル基、置換若しくは無置換のシクロアルキル基、置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基であることが好ましい。

[0966] 式（ＣＨ２－Ｃ）で表される基は、下記式（ＣＨ２－Ｃ－１）又は下記式（ＣＨ２－Ｃ－２）で表される基であることがより好ましい。

[0967] [化703]



(CH2-C-1)



(CH2-C-2)

[0968] 式（ＣＨ２－Ｃ－１）について説明する。

Ｒ、Ｒｂ^{11}、Ｒｂ^{12}、Ｒｂ^{13}、Ｒｂ^{14}、ｓ^{1}、ｔ^{1}及びｖ^{1}は、式（ＣＨ２－ｂ－１）中のそれら記号と同義である。

ｕ^{1}は、０～４の整数を表す。

＊は、式（ＣＨ１）のＬ^{1}との結合手を表す。

式（ＣＨ２－Ｃ－１）中のＲは、置換若しくは無置換のアルキル基、置換若しくは無置換のシクロアルキル基、置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基であることが好ましい。

[0969] 式（ＣＨ２－Ｃ－２）について説明する。

Ｒ、Ｒｂ^{11}、Ｒｂ^{12}、Ｒｂ^{13}、Ｒｂ^{14}、ｓ^{1}、ｔ^{1}及びｖ^{1}は、式（ＣＨ２－ｂ－１）中のそれら記号と同義である。

ｕ^{1}は、０～４の整数を表す。

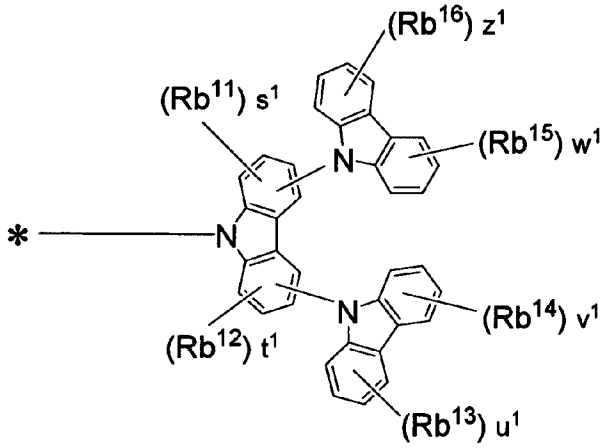
＊は、式（ＣＨ１）のＬ^{1}との結合手を表す。

式（ＣＨ２－Ｃ－２）中のＲは、置換若しくは無置換のアルキル基、置換若しくは無置換のシクロアルキル基、置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基であることが好ましい。

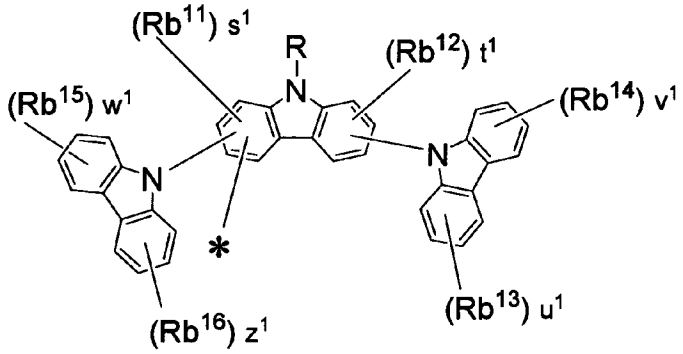
[0970] また、式（ＣＨ１）におけるＢは、下記式（ＣＨ２－Ｅ）で表される基又は下記式（ＣＨ２－Ｆ）で表される基であることがより好ましい。

[0971]

[化704]



(CH2-E)



(CH2-F)

[0972] 式（ＣＨ２－Ｅ）について説明する。

ｓ1は０～３の整数であり、ｕ1は０～４の整数であり、ｗ1は０～４の整数であり、Ｒｂ11、Ｒｂ12、Ｒｂ13、Ｒｂ14、ｔ1及びｖ1は、式（ＣＨ２－ｂ－１）中のそれらの記号と同義である。

Ｒｂ15及びＲｂ16は、それぞれ独立に、置換若しくは無置換の炭素数１～２０のアルキル基、置換若しくは無置換の環形成炭素数３～２０のシクロアルキル基、置換若しくは無置換の炭素数１～２０のアルコキシ基、置換若しくは無置換の炭素数７～２４のアラルキル基、置換若しくは無置換のシリル基、置換若しくは無置換の環形成炭素数６～２４の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の環形成炭素数２～２４の芳香族複素環基である。

Ｒは、式（ＣＨ２）のＸ1、Ｘ2、Ｙ1及びＹ2におけるＲと同義であり、置換若しくは無置換のアルキル基、置換若しくは無置換のシクロアルキル基、置

換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基であることが好ましい。

w^1は０～３の整数であり、w^1が２以上の場合、複数のRb^{15}は互いに同一であっても異なっていてもよい。

z^1は０～４の整数であり、z^1が２以上の場合、複数のRb^{16}は互いに同一であっても異なっていてもよい。

＊は、式（ＣＨ１）のL^1との結合手を表す。

[0973] 式（ＣＨ２－Ｆ）について説明する。

s^1は０～２の整数であり、u^1は０～４の整数であり、Rb^{11}、Rb^{12}、Rb^{13}、Rb^{14}、t^1及びv^1は、式（ＣＨ２－ｂ－１）中のそれらの記号と同義である。

Rb^{15}及びRb^{16}は、式（ＣＨ２－Ｅ）中のそれらの記号と同義である。

Ｒは、式（ＣＨ２）のX^1、X^2、Y^1及びY^2におけるＲと同義であり、置換若しくは無置換のアルキル基、置換若しくは無置換のシクロアルキル基、置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基であることが好ましい。

w^1は０～４の整数であり、w^1が２以上の場合、複数のRb^{15}は互いに同一であっても異なっていてもよい。

z^1は０～４の整数であり、z^1が２以上の場合、複数のRb^{16}は互いに同一であっても異なっていてもよい。

＊は、式（ＣＨ１）のL^1との結合手を表す。

[0974] 以下に、前記式における記号が表す各基の詳細について説明する。

式（ＣＨ１）中のL^1、式（ＣＨｉ）中のL^1、式（ＣＨ１－Ａ）中のL^1、式（ＣＨ１－Ａ’）中のL^1、式（ＣＨ２）中のＲ、Z^1、Z^2及びL^2、式（ＣＨ２－ａ）中のＲ及びZa^1～Za^3、式（ＣＨ２－ｂ）中のＲ及びZb^1～Zb^4、式（ＣＨ２－ａ－１）～式（ＣＨ２－ａ－６）中のＲ、式（ＣＨ２－ｂ－１）中のＲ、式（ＣＨ２－Ａ）中のＲ、式（ＣＨ２－Ｂ）中のＲ、式（ＣＨ２－Ｄ）中のＲ、式（ＣＨ２－Ｆ）中のＲ、式（ＣＨ２－Ａ－ｉ）中の

Ｒ、式（ＣＨ２－Ａ－ii）中のＲ、式（ＣＨ２－Ｂ－ｉ）中のＲ、式（ＣＨ２－Ｂ－ii）中のＲ、式（ＣＨ２－Ａ－１）～式（ＣＨ２－Ａ－３）中のＲが表す置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基は、それぞれ独立に、置換若しくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素環の残基であることが好ましい。

環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素環の具体例としては、ベンゼン、ナフタレン、ビフェニル、ターフェニル、フルオレン、フェナントレン、トリフェニレン、ペリレン、クリセン、フルオランテン、ベンゾフルオレン、ベンゾトリフェニレン、ベンゾクリセン、及びアントラセン、並びにそれらのベンツ体及び架橋体が挙げられ、ベンゼン、ナフタレン、ビフェニル、ターフェニル、フルオレン及びフェナントレンが好ましい。

式（ＣＨ１）のＬ[1]、式（ＣＨｉ）中のＬ[1]、式（ＣＨ１－Ａ）中のＬ[1]、式（ＣＨ１－Ａ’）中のＬ[1]が表す環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基としては、メタフェニレン基、パラフェニレン基、４，４’－ビフェニレン基、４，３’－ビフェニレン基、１，４－ナフチレン基、２，６－ナフチレン基が好ましく例示される。

式（ＣＨ２）中のＲ、式（ＣＨ２－ａ）中又は式（ＣＨ２－ｂ）中のＲ、式（ＣＨ２－ａ－１）～式（ＣＨ２－ａ－６）中のＲ、式（ＣＨ２－ｂ－１）中のＲ、式（ＣＨ２－Ａ）中又は式（ＣＨ２－Ｂ）中のＲ、式（ＣＨ２－Ｄ）中のＲ、式（ＣＨ２－Ｆ）中のＲ、式（ＣＨ２－Ａ－ｉ）中のＲ、式（ＣＨ２－Ａ－ii）中のＲ、式（ＣＨ２－Ｂ－ｉ）中のＲ、式（ＣＨ２－Ｂ－ii）中のＲ、式（ＣＨ２－Ａ－１）～式（ＣＨ２－Ａ－３）中のＲが表す環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素環としては、ベンゼンが好ましく例示される。この場合、電子輸送能を有する置換基を有するベンゼンであってもよい。電子輸送能を有する置換基としては、シアノ基が挙げられる。

式（ＣＨ２）中のＺ[1]、Ｚ[2]、式（ＣＨ２－ａ）中のＺａ[1]～Ｚａ[3]、式（ＣＨ２－ｂ）中のＺｂ[1]～Ｚｂ[4]、が表す環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素環としては、ベンゼンが好ましく例示される。

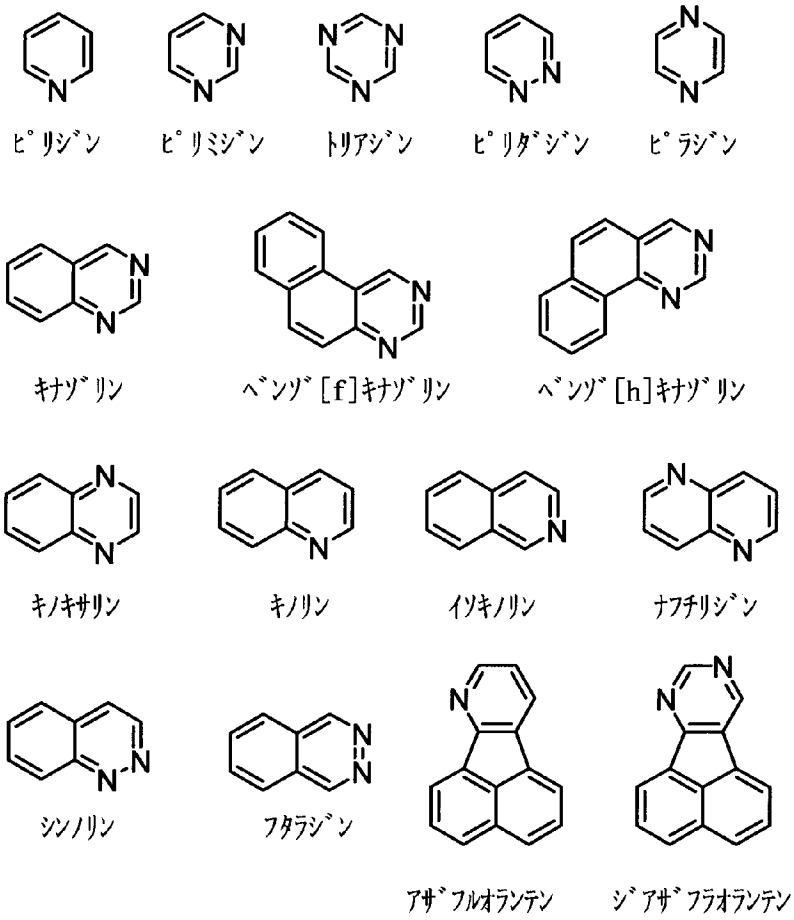
[0975] 式（ＣＨ１）中のＡ及びＬ[1]、式（ＣＨｉ）中のＡ及びＬ[1]、式（ＣＨ１－Ａ）中のＡｘ及びＬ[1]、式（ＣＨ１－Ａ’）中のＡｘ及びＬ[1]、式（ＣＨ２）中のＲ、Ｚ[1]、Ｚ[2]及びＬ[2]、式（ＣＨ２－ａ）中のＲ及びＺａ[1]～Ｚａ[3]、式（ＣＨ２－ｂ）中のＲ及びＺｂ[1]～Ｚｂ[4]、式（ＣＨ２－ａ－１）～式（ＣＨ２－ａ－６）中のＲ、式（ＣＨ２－ｂ－１）中のＲ、式（ＣＨ２－Ａ）中のＲ、式（ＣＨ２－Ｂ）中のＲ、式（ＣＨ２－Ｄ）中のＲ、式（ＣＨ２－Ｆ）中のＲ、式（ＣＨ２－Ａ－ｉ）中のＲ、式（ＣＨ２－Ａ－ii）中のＲ、式（ＣＨ２－Ｂ－ｉ）中のＲ、式（ＣＨ２－Ｂ－ii）中のＲ、式（ＣＨ２－Ａ－１）～式（ＣＨ２－Ａ－３）中のＲが表す置換若しくは無置換の芳香族複素環基は、それぞれ独立に、置換若しくは無置換の環形成炭素数２～３０の芳香族複素環の残基であることが好ましい。

環形成炭素数２～３０の芳香族複素環としては、ピロール、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、トリアジン、インドール、イソインドール、キノリン、イソキノリン、キノキサリン、アクリジン、ピロリジン、ジオキサン、ピペリジン、モルフォリン、ピペラジン、カルバゾール、フェナントリジン、フェナントロリン、フラン、ベンゾフラン、イソベンゾフラン、チオフェン、オキサゾール、オキサジアゾール、ベンゾオキサゾール、チアゾール、チアジアゾール、ベンゾチアゾール、トリアゾール、イミダゾール、ベンゾイミダゾール、ピラン、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、アザフルオレン、ベンゾ［ｆ］キナゾリン、ベンゾ［ｈ］キナゾリン、アザフルオランテン、ジアザフルオランテン、及びアザカルバゾール、並びにそれらのベンツ体及び架橋体が挙げられる。

式（ＣＨ１）のＡ、式（ＣＨｉ）中のＡ、式（ＣＨ１－Ａ）中のＡｘ、式（ＣＨ１－Ａ’）中のＡｘが示す環形成炭素数２～３０の芳香族複素環としては、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、トリアジン、キノリン、イソキノリン、キノキサリン、キナゾリン、アジリジン、アザインドリジン、インドリジン、イミダゾール、インドール、イソインドール、インダゾール、プリン、プテリジン、β－カルボリン、ナフチリジン、ベンゾ［ｆ

］キナゾリン、ベンゾ［ｈ］キナゾリン、アザフルオランテン、ジアザフルオランテン、ピラゾール、テトラゾール、キノリジン、シンノリン、フタラジン、ビスカルバゾール、フェナジン、アザトリフェニレン、ジアザトリフェニレン、ヘキサアザトリフェニレン、アザカルバゾール、アザジベンゾフラン、アザジベンゾチオフェン及びジナフト［2’,3’:2,3:2’,3’:6,7］カルバゾールが好ましく挙げられる。上記の中でも、下記の群から選択される化合物の残基が好ましい。

[0976] [化705]



中でも、ピリジン、ピリミジン、トリアジン、キノリン、イソキノリン、キノキサリン、キナゾリンが好ましい。特に好ましくは、ピリミジン、トリアジンである。

[0977] 式（ＣＨ２）中のＲ、式（ＣＨ２－ａ）中のＲ、式（ＣＨ２－ｂ）中のＲ、式（ＣＨ２－ａ－１）～式（ＣＨ２－ａ－６）中のＲ、式（ＣＨ２－ｂ－

１）中のＲ、式（ＣＨ２－Ａ）中のＲ、式（ＣＨ２－Ｂ）中のＲ、式（ＣＨ２－Ｄ）中のＲ、式（ＣＨ２－Ｆ）中のＲ、式（ＣＨ２－Ａ－ｉ）中のＲ、式（ＣＨ２－Ａ－ii）中のＲ、式（ＣＨ２－Ｂ－ｉ）中のＲ、式（ＣＨ２－Ｂ－ii）中のＲ、式（ＣＨ２－Ａ－１）～式（ＣＨ２－Ａ－３）中のＲが表す置換若しくは無置換のアルキル基は、それぞれ独立に、置換若しくは無置換の炭素数１～３０のアルキル基であることが好ましい。

炭素数１～３０のアルキル基の具体例としては、メチル基、エチル基、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、ｎ－ノニル基、ｎ－デシル基、ｎ－ウンデシル基、ｎ－ドデシル基、ｎ－トリデシル基、ｎ－テトラデシル基、ｎ－ペンタデシル基、ｎ－ヘキサデシル基、ｎ－ヘプタデシル基、ｎ－オクタデシル基、ネオペンチル基、１－メチルペンチル基、２－メチルペンチル基、１－ペンチルヘキシル基、１－ブチルペンチル基、１－ヘプチルオクチル基、３－メチルペンチル基等が挙げられ、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ｎ－ブチル基、ｓ－ブチル基、イソブチル基及びｔ－ブチル基が好ましい。

[0978] 式（ＣＨ２）中のＲ、式（ＣＨ２－ａ）中のＲ、式（ＣＨ２－ｂ）中のＲ、式（ＣＨ２－ａ－１）～式（ＣＨ２－ａ－６）中のＲ、式（ＣＨ２－ｂ－１）中のＲ、式（ＣＨ２－Ａ）中のＲ、式（ＣＨ２－Ｂ）中のＲ、式（ＣＨ２－Ｄ）中のＲ、式（ＣＨ２－Ｆ）中のＲ、式（ＣＨ２－Ａ－ｉ）中のＲ、式（ＣＨ２－Ａ－ii）中のＲ、式（ＣＨ２－Ｂ－ｉ）中のＲ、式（ＣＨ２－Ｂ－ii）中のＲ、式（ＣＨ２－Ａ－１）～式（ＣＨ２－Ａ－３）中のＲが表す置換若しくは無置換のシクロアルキル基は、それぞれ独立に、置換若しくは無置換の環形成炭素数３～３０のシクロアルキル基である。

環形成炭素数３～３０のシクロアルキル基の具体例としては、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、シクロオクチル基、アダマンチル基等が挙げられ、シクロペンチル基及びシクロヘキシル基が好ましい。

[0979] 式（ＣＨ２）中のＺ^{1}、Ｚ^{2}及びＬ^{2}、式（ＣＨ２－ａ）中のＺａ^{1}～Ｚａ^{3}、並びに式（ＣＨ２－ｂ）中のＺｂ^{1}～Ｚｂ^{4}が表す置換若しくは無置換の脂肪族炭化水素環基は、それぞれ独立に、置換若しくは無置換の環形成炭素数３～３０のシクロアルカンの残基又は置換若しくは無置換の環形成炭素数３～３０のシクロアルケンの残基であることが好ましい。

環形成炭素数３～３０のシクロアルカンの具体例としては、シクロプロパン、シクロブタン、シクロペンタン、シクロヘキサン、シクロオクタン、アダマンタン等が挙げられ、シクロペンタン及びシクロヘキサンが好ましい。

環形成炭素数３～３０のシクロアルケンの具体例としては、シクロプロペン、シクロブテン、シクロペンテン、シクロヘキセン、シクロオクテン等が挙げられ、シクロペンテン及びシクロヘキセンが好ましい。

[0980] 式（ＣＨ２）中のＺ^{1}、Ｚ^{2}及びＬ^{2}、式（ＣＨ２－ａ）中のＺａ^{1}～Ｚａ^{3}、並びに式（ＣＨ２－ｂ）中のＺｂ^{1}～Ｚｂ^{4}が表す置換若しくは無置換の脂肪族複素環基は、それぞれ独立に、前述の置換若しくは無置換の脂肪族炭化水素環基の環形成炭素原子の一つ以上を、酸素、窒素、硫黄等のヘテロ原子で置き換えたものであることが好ましい。

[0981] 式（ＣＨ２－ａ－１）中のＲａ^{1}、式（ＣＨ２－ａ－２）中のＲａ^{2}、式（ＣＨ２－ａ－３）中のＲａ^{3}、式（ＣＨ２－ａ－４）中のＲａ^{4}、式（ＣＨ２－ａ－５）中のＲａ^{5}、式（ＣＨ２－ａ－６）中のＲａ^{6}、式（ＣＨ２－ｂ－１）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、式（ＣＨ２－Ａ）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、式（ＣＨ２－Ｂ）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、式（ＣＨ２－Ｃ）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、式（ＣＨ２－Ｄ）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、式（ＣＨ２－Ｅ）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{16}、式（ＣＨ２－Ｆ）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{16}、式（ＣＨ２－Ａ－ｉ）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、式（ＣＨ２－Ａ－ｉｉ）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{16}、式（ＣＨ２－Ｂ－ｉ）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、式（ＣＨ２－Ｂ－ｉｉ）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{16}、式（ＣＨ２－Ａ－１）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、式（ＣＨ２－Ａ－２）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、式（ＣＨ２－Ａ－３）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、式（ＣＨ２－Ｃ－１）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、及び式（ＣＨ２－Ｃ－２）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}が表す置換

若しくは無置換の炭素数１～２０のアルキル基における、その炭素数１～２０のアルキル基の具体例としては、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ｎ－ブチル基、ｓ－ブチル基、ｔ－ブチル基、イソブチル基、ｎ－ペンチル基、ｎ－ヘキシル基、ｎ－ヘプチル基、ｎ－オクチル基、ｎ－ノニル基、ｎ－デシル基、ｎ－ウンデシル基、ｎ－ドデシル基、ｎ－トリデシル基、ｎ－テトラデシル基、ｎ－ペンタデシル基、ｎ－ヘキサデシル基、ｎ－ヘプタデシル基、ｎ－オクタデシル基、ネオペンチル基、１－メチルペンチル基、２－メチルペンチル基、１－ペンチルヘキシル基、１－ブチルペンチル基、１－ヘプチルオクチル基、３－メチルペンチル基等が挙げられ、メチル基、エチル基、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、ｎ－ノニル基、ｎ－デシル基、ｎ－ウンデシル基、ｎ－ドデシル基、ｎ－トリデシル基、ｎ－テトラデシル基、ｎ－ペンタデシル基、ｎ－ヘキサデシル基、ｎ－ヘプタデシル基、ｎ－オクタデシル基、ネオペンチル基、１－メチルペンチル基、１－ペンチルヘキシル基、１－ブチルペンチル基及び１－ヘプチルオクチル基が好ましい。

[0982] 式（ＣＨ２－ａ－１）中のRa^1、式（ＣＨ２－ａ－２）中のRa^2、式（ＣＨ２－ａ－３）中のRa^3、式（ＣＨ２－ａ－４）中のRa^4、式（ＣＨ２－ａ－５）中のRa^5、式（ＣＨ２－ａ－６）中のRa^6、式（ＣＨ２－ｂ－１）中のRb^{11}～Rb^{14}、式（ＣＨ２－Ａ）中のRb^{11}～Rb^{14}、式（ＣＨ２－Ｂ）中のRb^{11}～Rb^{14}、式（ＣＨ２－Ｃ）中のRb^{11}～Rb^{14}、式（ＣＨ２－Ｄ）中のRb^{11}～Rb^{14}、式（ＣＨ２－Ｅ）中のRb^{11}～Rb^{16}、式（ＣＨ２－Ｆ）中のRb^{11}～Rb^{16}、式（ＣＨ２－Ａ－ｉ）中のRb^{11}～Rb^{14}、式（ＣＨ２－Ａ－ｉｉ）中のRb^{11}～Rb^{16}、式（ＣＨ２－Ｂ－ｉ）中のRb^{11}～Rb^{14}、式（ＣＨ２－Ｂ－ｉｉ）中のRb^{11}～Rb^{16}、式（ＣＨ２－Ａ－１）中のRb^{11}～Rb^{14}、式（ＣＨ２－Ａ－２）中のRb^{11}～Rb^{14}、式（ＣＨ２－Ａ－３）中のRb^{11}～Rb^{14}、式（ＣＨ２－Ｃ－１）中のRb^{11}～Rb^{14}、及び式（ＣＨ２－Ｃ－２）中のRb^{11}～Rb^{14}が表す置換

若しくは無置換の環形成炭素数３～２０のシクロアルキル基における、その環形成炭素数３～２０のシクロアルキル基としては、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基等が挙げられ、シクロブチル基、シクロペンチル基及びシクロヘキシル基が好ましい。

[0983] 式（ＣＨ２－ａ－１）中のＲａ[1]、式（ＣＨ２－ａ－２）中のＲａ[2]、式（ＣＨ２－ａ－３）中のＲａ[3]、式（ＣＨ２－ａ－４）中のＲａ[4]、式（ＣＨ２－ａ－５）中のＲａ[5]、式（ＣＨ２－ａ－６）中のＲａ[6]、式（ＣＨ２－ｂ－１）中のＲｂ[11]～Ｒｂ[14]、式（ＣＨ２－Ａ）中のＲｂ[11]～Ｒｂ[14]、式（ＣＨ２－Ｂ）中のＲｂ[11]～Ｒｂ[14]、式（ＣＨ２－Ｃ）中のＲｂ[11]～Ｒｂ[14]、式（ＣＨ２－Ｄ）中のＲｂ[11]～Ｒｂ[14]、式（ＣＨ２－Ｅ）中のＲｂ[11]～Ｒｂ[16]、式（ＣＨ２－Ｆ）中のＲｂ[11]～Ｒｂ[16]、式（ＣＨ２－Ａ－ｉ）中のＲｂ[11]～Ｒｂ[14]、式（ＣＨ２－Ａ－ii）中のＲｂ[11]～Ｒｂ[16]、式（ＣＨ２－Ｂ－ｉ）中のＲｂ[11]～Ｒｂ[14]、式（ＣＨ２－Ｂ－ii）中のＲｂ[11]～Ｒｂ[16]、式（ＣＨ２－Ａ－１）中のＲｂ[11]～Ｒｂ[14]、式（ＣＨ２－Ａ－２）中のＲｂ[11]～Ｒｂ[14]、式（ＣＨ２－Ａ－３）中のＲｂ[11]～Ｒｂ[14]、式（ＣＨ２－Ｃ－１）中のＲｂ[11]～Ｒｂ[14]、及び式（ＣＨ２－Ｃ－２）中のＲｂ[11]～Ｒｂ[14]が表す置換若しくは無置換の炭素数１～２０のアルコキシ基における、その炭素数１～２０のアルコキシ基の具体例としては、メトキシ基、エトキシ基、メトキシ基、ｉ－プロポキシ基、ｎ－プロポキシ基、ｎ－ブトキシ基、ｓ－ブトキシ基、ｔ－ブトキシ基等が挙げられ、メトキシ基、エトキシ基、メトキシ基、ｉ－プロポキシ基及びｎ－プロポキシ基が好ましい。

[0984] 式（ＣＨ２－ａ－１）中のＲａ[1]、式（ＣＨ２－ａ－２）中のＲａ[2]、式（ＣＨ２－ａ－３）中のＲａ[3]、式（ＣＨ２－ａ－４）中のＲａ[4]、式（ＣＨ２－ａ－５）中のＲａ[5]、式（ＣＨ２－ａ－６）中のＲａ[6]、式（ＣＨ２－ｂ－１）中のＲｂ[11]～Ｒｂ[14]、式（ＣＨ２－Ａ）中のＲｂ[11]～Ｒｂ[14]、式（ＣＨ２－Ｂ）中のＲｂ[11]～Ｒｂ[14]、式（ＣＨ２－Ｃ）中のＲｂ[11]～Ｒｂ[14]、式（ＣＨ２－Ｄ）中のＲｂ[11]～Ｒｂ[14]、式（ＣＨ２－Ｅ）中のＲｂ[11]～Ｒｂ[16]、式（ＣＨ２－Ｆ）中のＲｂ[11]～Ｒｂ[16]、式（ＣＨ２－Ａ－ｉ）中のＲｂ[11]～

Rb^{14}、式（ＣＨ２－Ａ－ii）中のRb^{11}～Rb^{16}、式（ＣＨ２－Ｂ－ｉ）中のRb^{11}～Rb^{14}、式（ＣＨ２－Ｂ－ii）中のRb^{11}～Rb^{16}、式（ＣＨ２－Ａ－１）中のRb^{11}～Rb^{14}、式（ＣＨ２－Ａ－２）中のRb^{11}～Rb^{14}、式（ＣＨ２－Ａ－３）中のRb^{11}～Rb^{14}、式（ＣＨ２－Ｃ－１）中のRb^{11}～Rb^{14}、及び式（ＣＨ２－Ｃ－２）中のRb^{11}～Rb^{14}が表す置換若しくは無置換の炭素数７～２４のアラルキル基における、その炭素数７～２４のアラルキル基としてはベンジル基、フェネチル基、フェニルプロピル基等が挙げられ、ベンジル基が好ましい。

[0985] 式（ＣＨ２－ａ－１）中のRa^{1}、式（ＣＨ２－ａ－２）中のRa^{2}、式（ＣＨ２－ａ－３）中のRa^{3}、式（ＣＨ２－ａ－４）中のRa^{4}、式（ＣＨ２－ａ－５）中のRa^{5}、式（ＣＨ２－ａ－６）中のRa^{6}、式（ＣＨ２－ｂ－１）中のRb^{11}～Rb^{14}、式（ＣＨ２－Ａ）中のRb^{11}～Rb^{14}、式（ＣＨ２－Ｂ）中のRb^{11}～Rb^{14}、式（ＣＨ２－Ｃ）中のRb^{11}～Rb^{14}、式（ＣＨ２－Ｄ）中のRb^{11}～Rb^{14}、式（ＣＨ２－Ｅ）中のRb^{11}～Rb^{16}、式（ＣＨ２－Ｆ）中のRb^{11}～Rb^{16}、式（ＣＨ２－Ａ－ｉ）中のRb^{11}～Rb^{14}、式（ＣＨ２－Ａ－ii）中のRb^{11}～Rb^{16}、式（ＣＨ２－Ｂ－ｉ）中のRb^{11}～Rb^{14}、式（ＣＨ２－Ｂ－ii）中のRb^{11}～Rb^{16}、式（ＣＨ２－Ａ－１）中のRb^{11}～Rb^{14}、式（ＣＨ２－Ａ－２）中のRb^{11}～Rb^{14}、式（ＣＨ２－Ａ－３）中のRb^{11}～Rb^{14}、式（ＣＨ２－Ｃ－１）中のRb^{11}～Rb^{14}、及び式（ＣＨ２－Ｃ－２）中のRb^{11}～Rb^{14}が表す置換若しくは無置換のシリル基としては、炭素数１～１０（好ましくは１～５）のアルキルシリル基や環形成炭素数６～３０（好ましくは６～１８）のアリールシリル基が挙げられる。炭素数１～１０のアルキルシリル基としては、例えば、トリメチルシリル基やトリエチルシリルが挙げられる。環形成炭素数６～３０のアリールシリル基としては、例えば、トリフェニルシリル基が挙げられる。

式（ＣＨ２－ａ－１）中のRa^{1}、式（ＣＨ２－ａ－２）中のRa^{2}、式（ＣＨ２－ａ－３）中のRa^{3}、式（ＣＨ２－ａ－４）中のRa^{4}、式（ＣＨ２

－ａ－５）中のＲａ^{5}、式（ＣＨ２－ａ－６）中のＲａ^{6}、式（ＣＨ２－ｂ－１）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、式（ＣＨ２－Ａ）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、式（ＣＨ２－Ｂ）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、式（ＣＨ２－Ｃ）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、式（ＣＨ２－Ｄ）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、式（ＣＨ２－Ｅ）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{16}、式（ＣＨ２－Ｆ）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{16}、式（ＣＨ２－Ａ－ｉ）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、式（ＣＨ２－Ａ－ii）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{16}、式（ＣＨ２－Ｂ－ｉ）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、式（ＣＨ２－Ｂ－ii）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{16}、式（ＣＨ２－Ａ－１）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、式（ＣＨ２－Ａ－２）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、式（ＣＨ２－Ａ－３）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、式（ＣＨ２－Ｃ－１）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、及び式（ＣＨ２－Ｃ－２）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}が表す環形成炭素数６～２４の芳香族炭化水素環基としては、ベンゼン、ナフタレン、ビフェニル、ターフェニル、フルオレン、フェナントレン、トリフェニレン、ペリレン、クリセン、フルオランテン、ベンゾフルオレン、ベンゾトリフェニレン、ベンゾクリセン、アントラセン等の芳香族炭化水素環の残基が挙げられ、ベンゼン、ナフタレン、ビフェニル、ターフェニル、フルオレン及びフェナントレンの残基が好ましい。

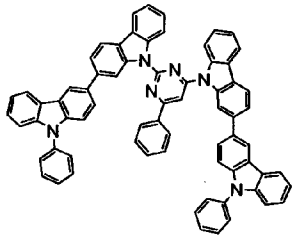
式（ＣＨ２－ａ－１）中のＲａ^{1}、式（ＣＨ２－ａ－２）中のＲａ^{2}、式（ＣＨ２－ａ－３）中のＲａ^{3}、式（ＣＨ２－ａ－４）中のＲａ^{4}、式（ＣＨ２－ａ－５）中のＲａ^{5}、式（ＣＨ２－ａ－６）中のＲａ^{6}、式（ＣＨ２－ｂ－１）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、式（ＣＨ２－Ａ）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、式（ＣＨ２－Ｂ）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、式（ＣＨ２－Ｃ）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、式（ＣＨ２－Ｄ）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、式（ＣＨ２－Ｅ）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{16}、式（ＣＨ２－Ｆ）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{16}、式（ＣＨ２－Ａ－ｉ）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、式（ＣＨ２－Ａ－ii）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{16}、式（ＣＨ２－Ｂ－ｉ）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、式（ＣＨ２－Ｂ－ii）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{16}、式（ＣＨ２－Ａ－１）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、式（ＣＨ２－Ａ－２）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、式（ＣＨ２－Ａ－３）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、式（ＣＨ２－Ｃ－１）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}、及び式（ＣＨ２－Ｃ－２）中のＲｂ^{11}～Ｒｂ^{14}が表す環形

成炭素数２～２４の芳香族複素環基としては、ピリジン、ピリダジン、ピリミジン、ピラジン、１，３，５－トリアジン、カルバゾール、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、フェノキサジン、フェノチアジン及びジヒドロアクリジン等の芳香族複素環の残基が挙げられ、ピリジン、ピリダジン、ピリミジン、ピラジン、カルバゾール、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、フェノキサジン及びジヒドロアクリジンの残基が好ましい。

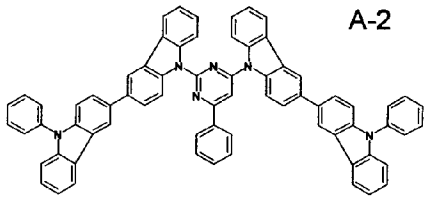
[0986] 以下に、化合物（ＣＨ１）の具体例を記載するが、それら具体例に限定されない。

[化706]

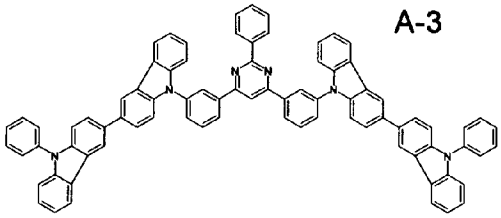
A-1



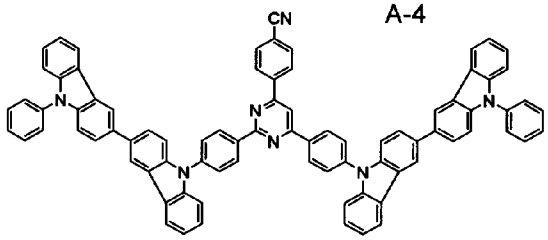
A-2



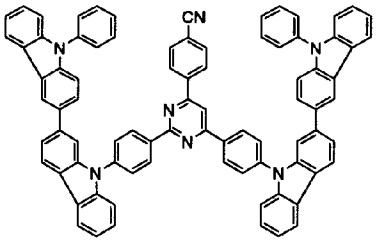
A-3



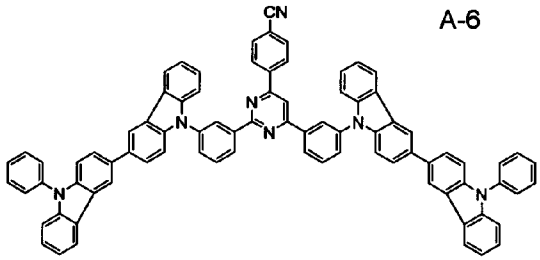
A-4



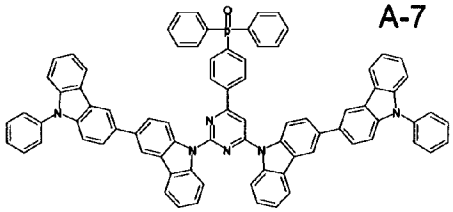
A-5



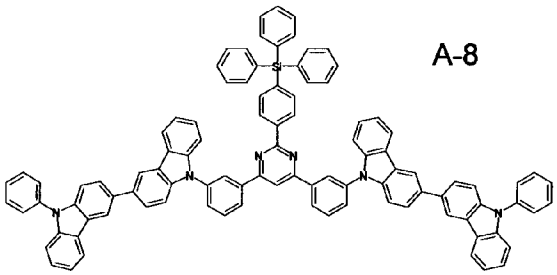
A-6



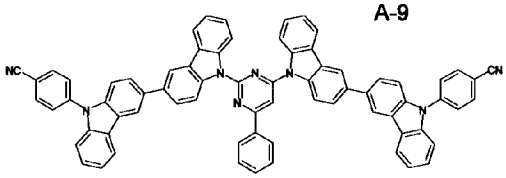
A-7



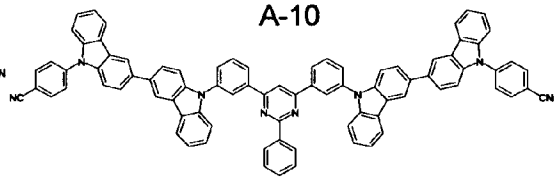
A-8



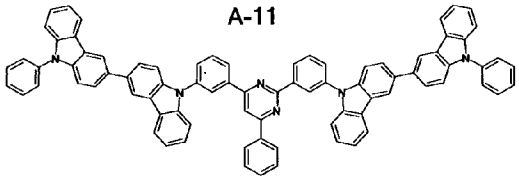
A-9



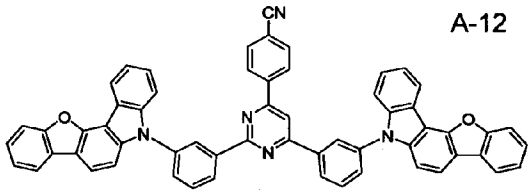
A-10



A-11



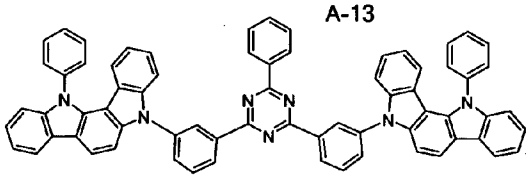
A-12



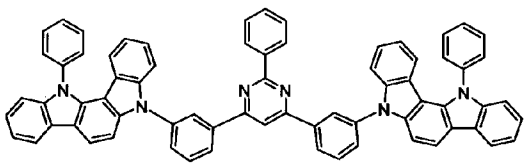
[0987]

[化707]

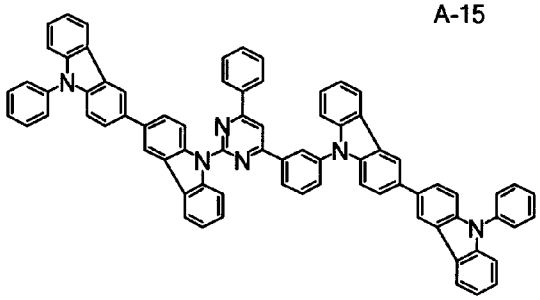
A-13



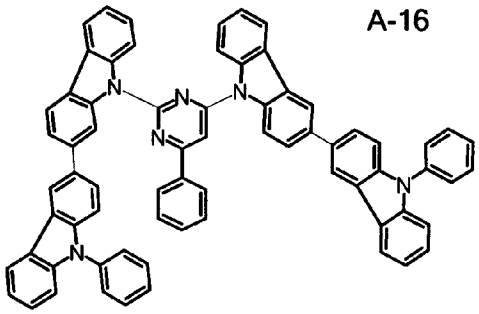
A-14



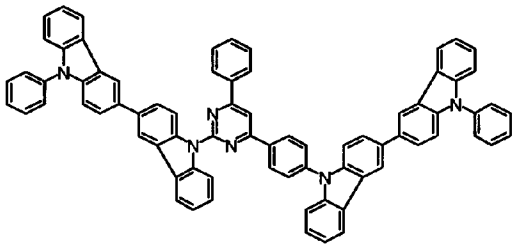
A-15



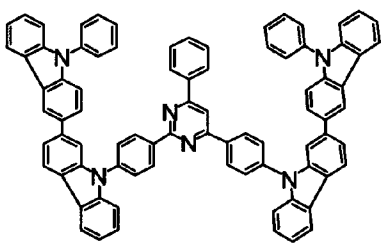
A-16



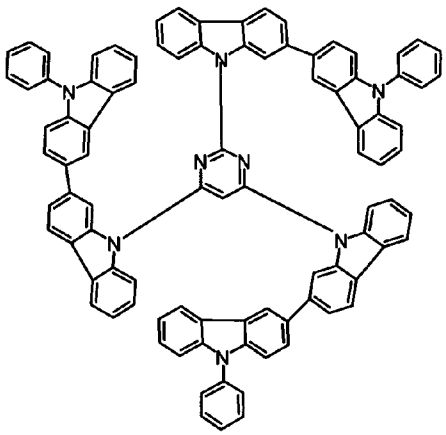
A-17



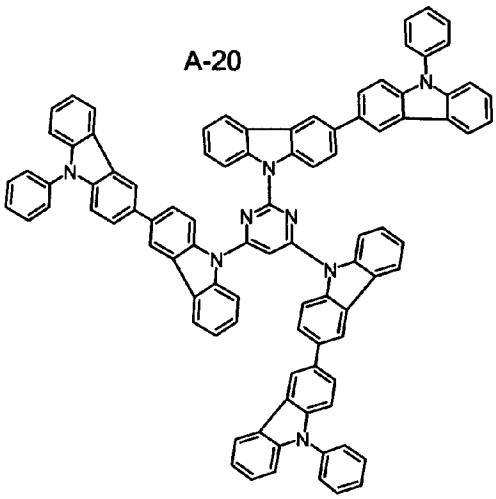
A-18



A-19



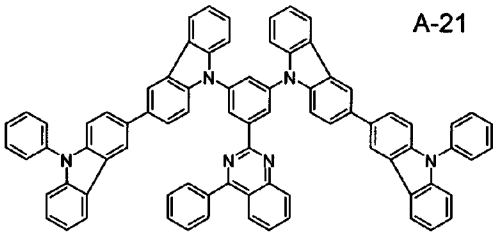
A-20



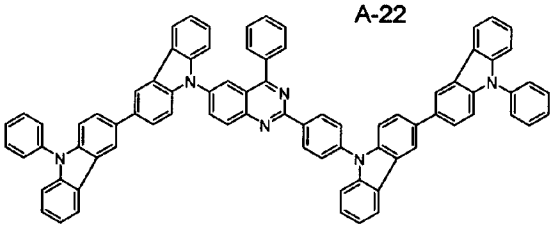
[0988]

[化708]

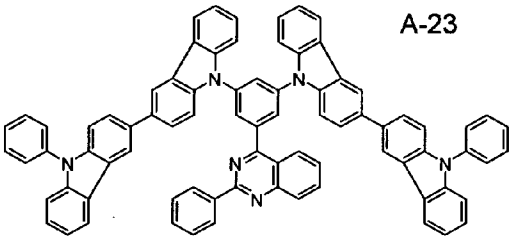
A-21



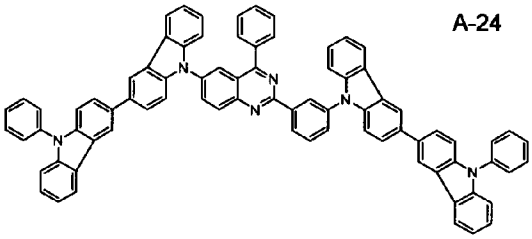
A-22



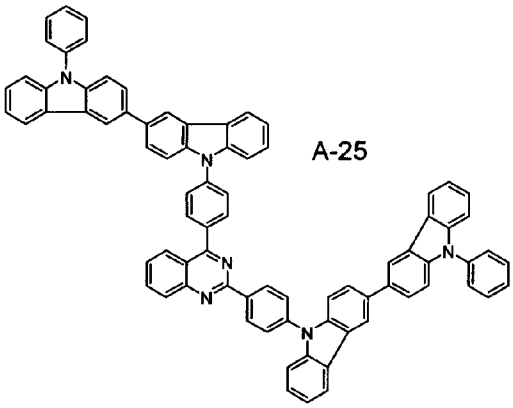
A-23



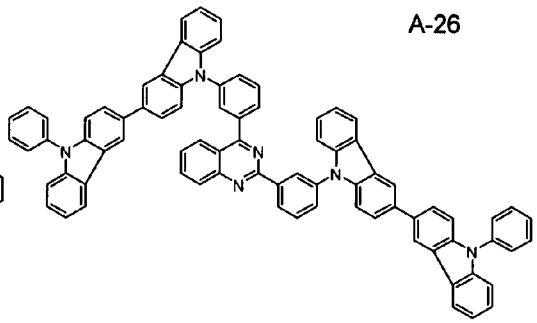
A-24



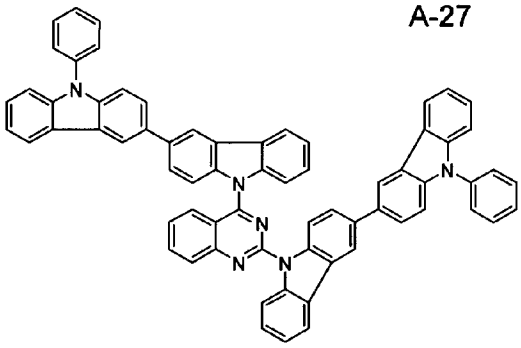
A-25



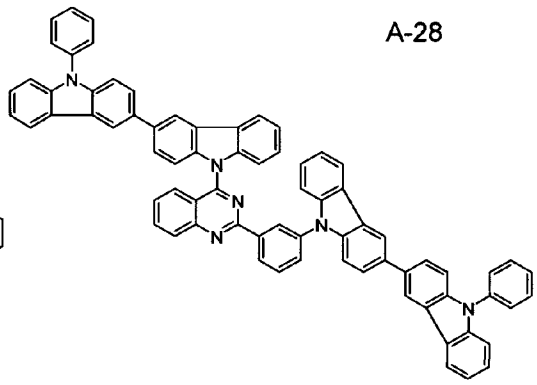
A-26



A-27



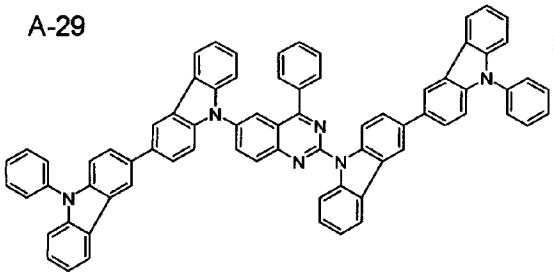
A-28



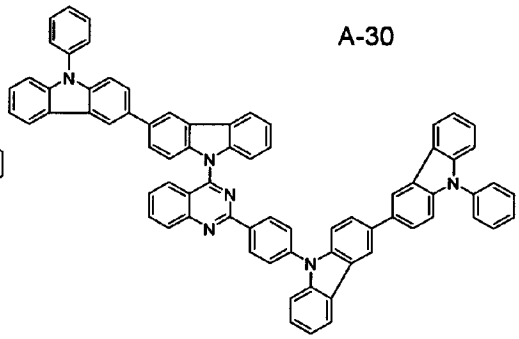
[0989]

[化709]

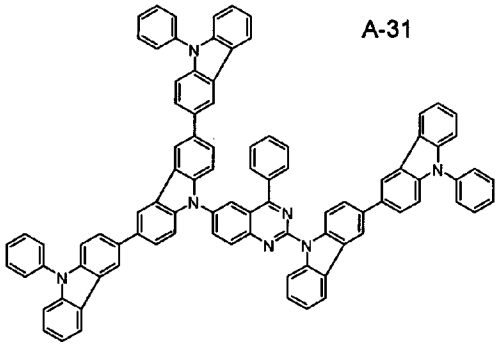
A-29



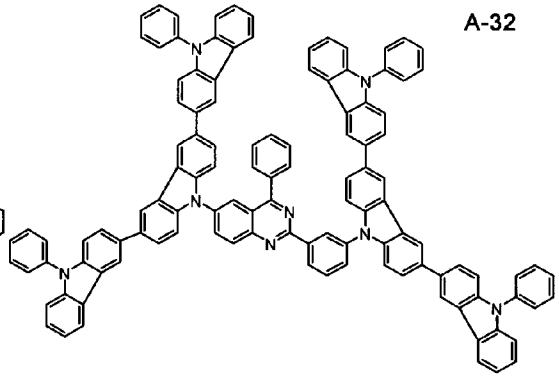
A-30



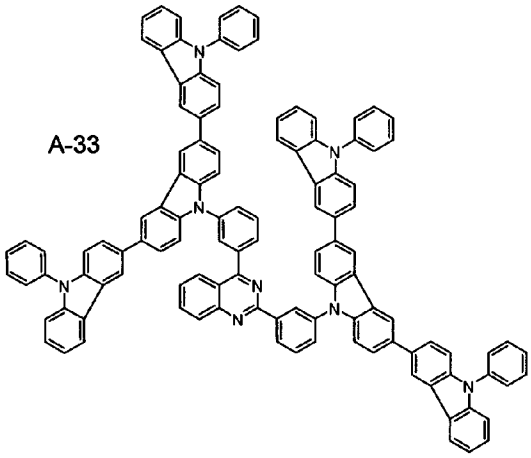
A-31



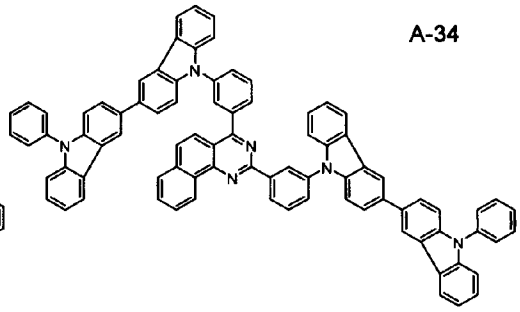
A-32



A-33

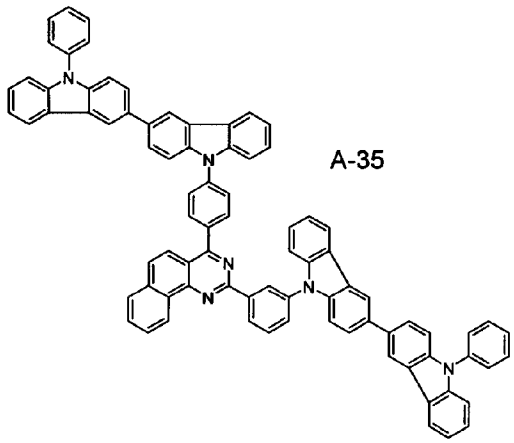


A-34

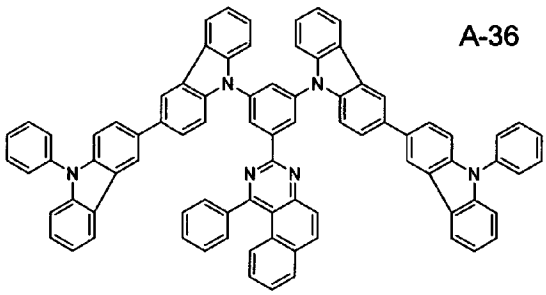


[0990]

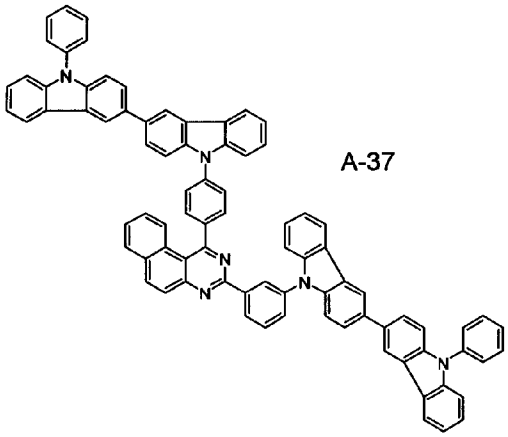
[化710]



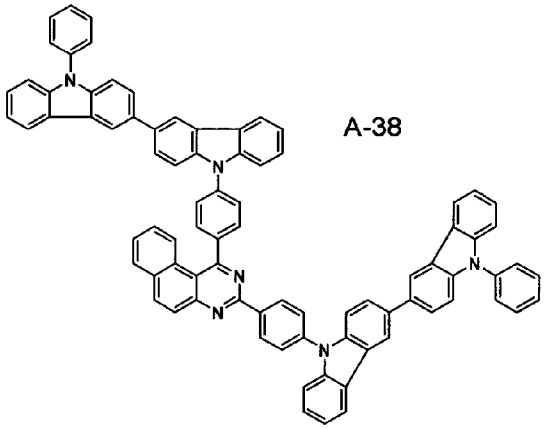
A-35



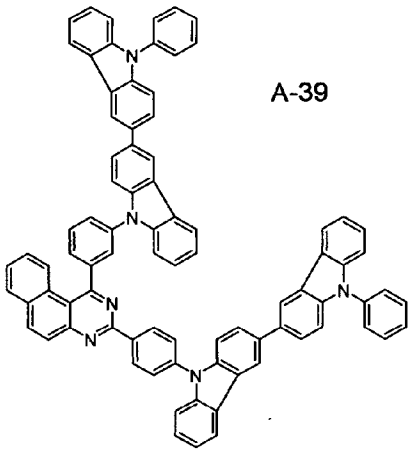
A-36



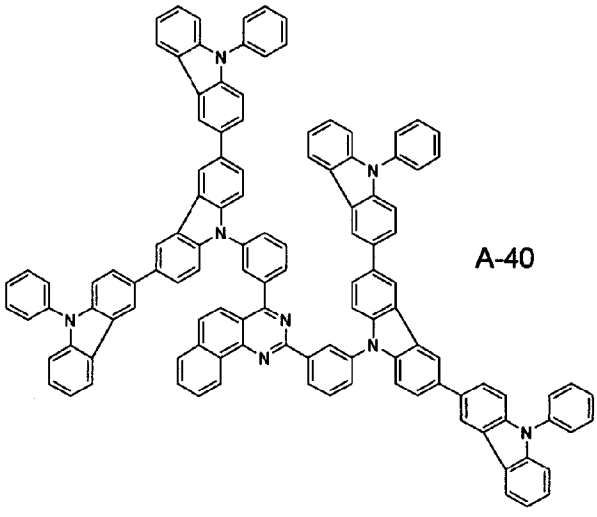
A-37



A-38



A-39

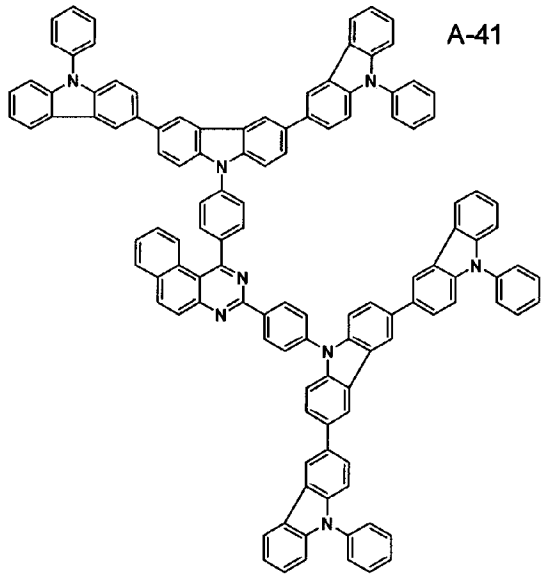


A-40

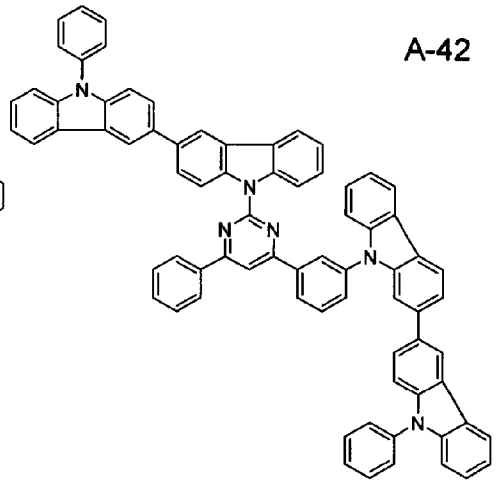
[0991]

[化711]

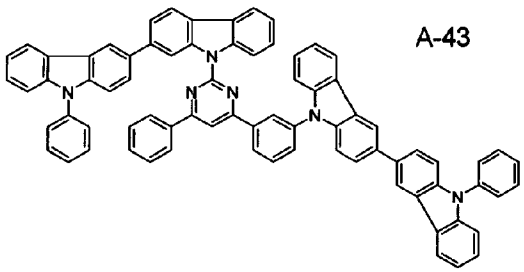
A-41



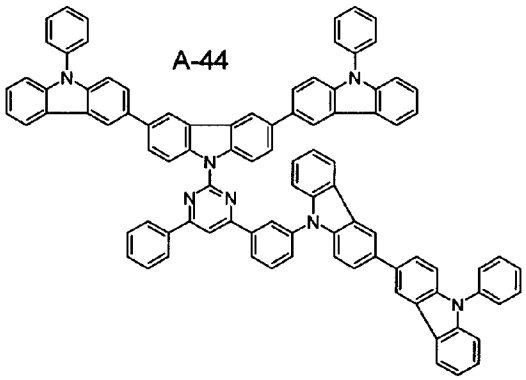
A-42



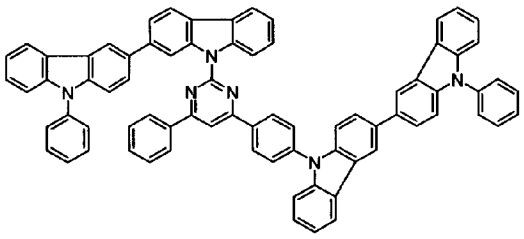
A-43



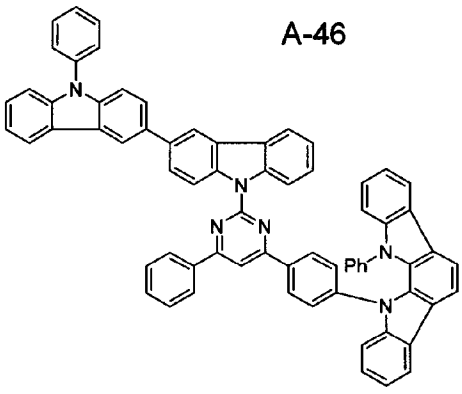
A-44



A-45



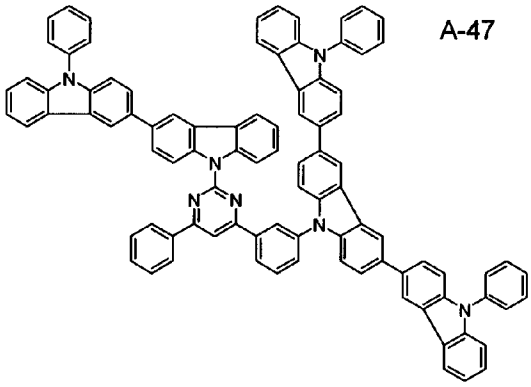
A-46



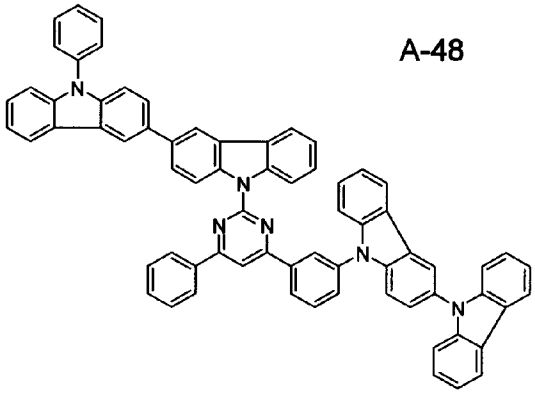
[0992]

[化712]

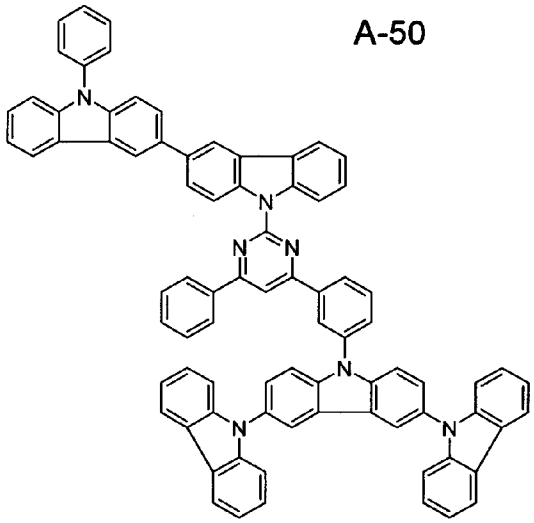
A-47



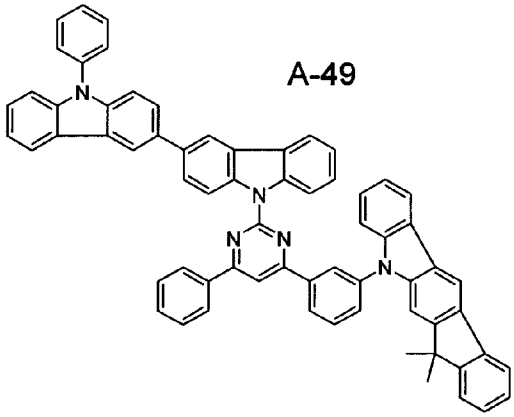
A-48



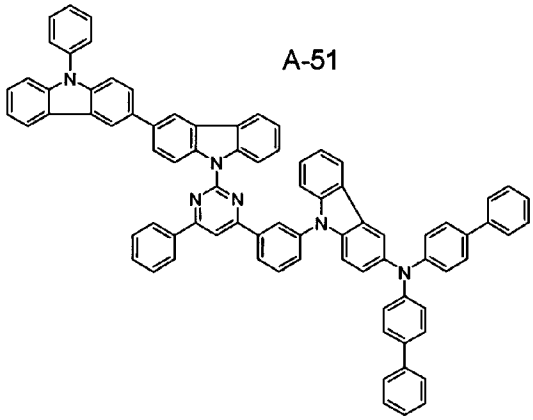
A-50



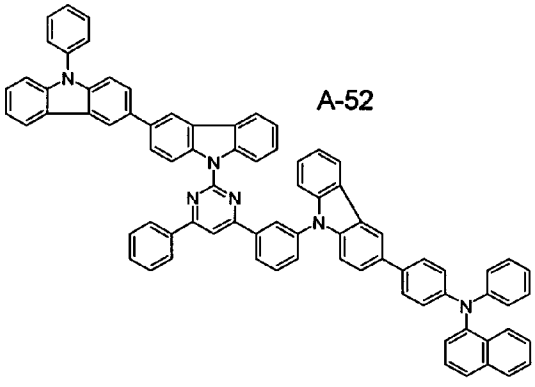
A-49



A-51



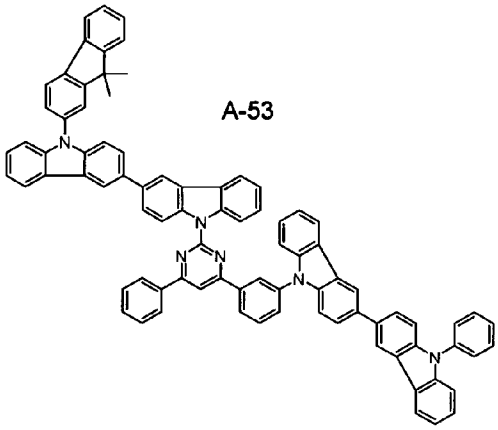
A-52



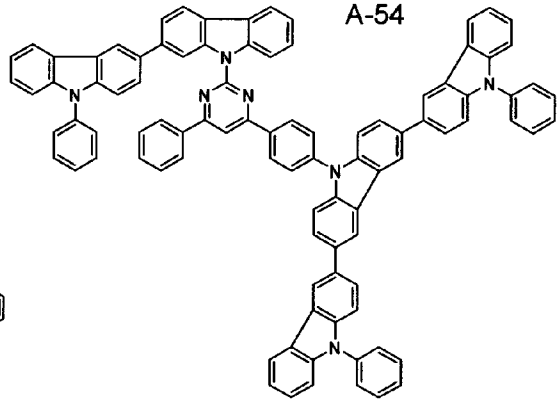
[0993]

[化713]

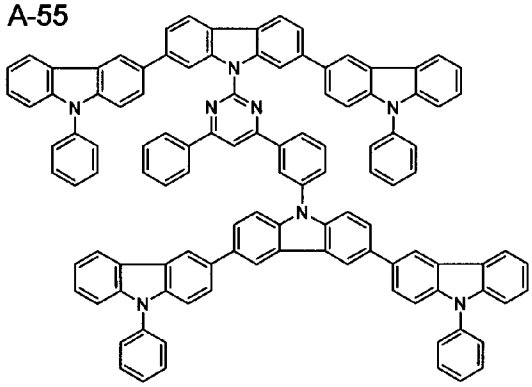
A-53



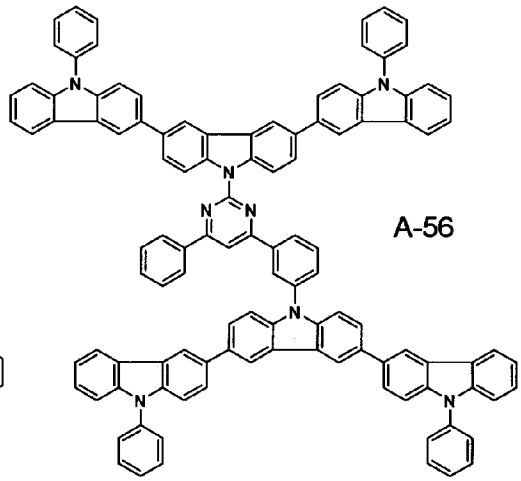
A-54



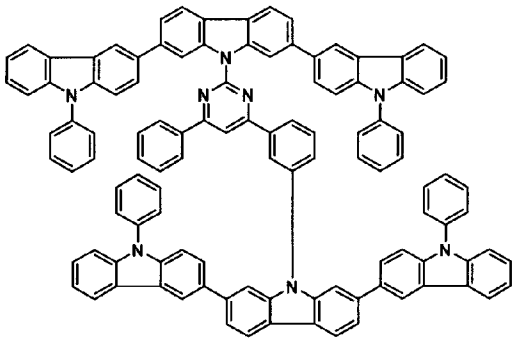
A-55



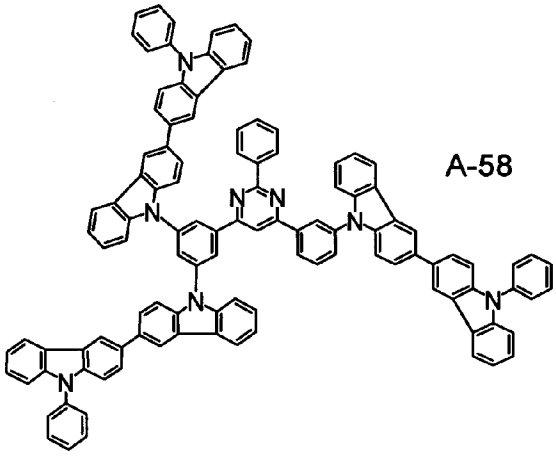
A-56



A-57



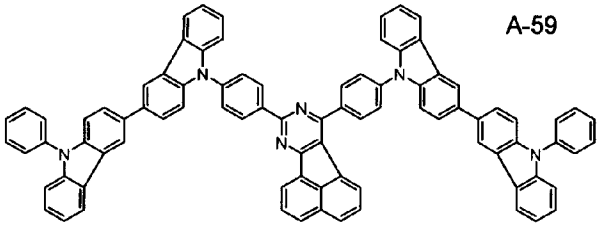
A-58



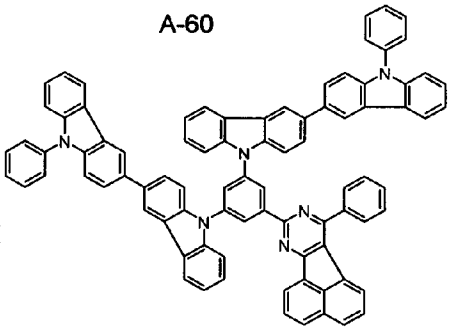
[0994]

[化714]

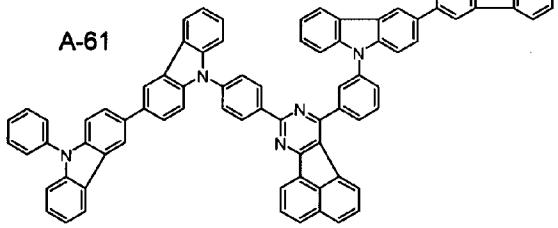
A-59



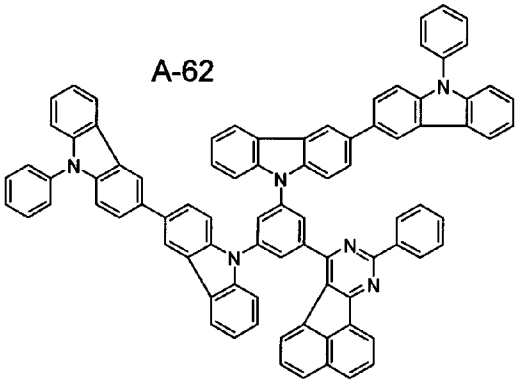
A-60



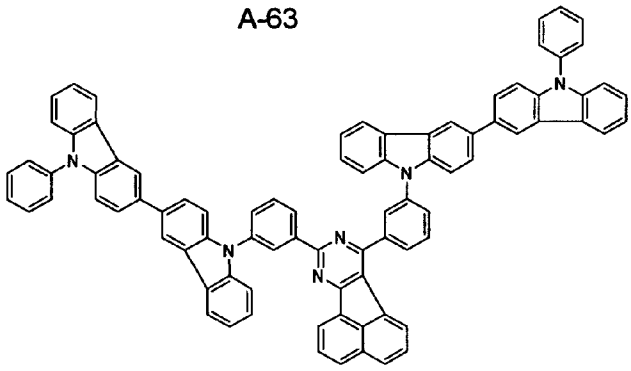
A-61



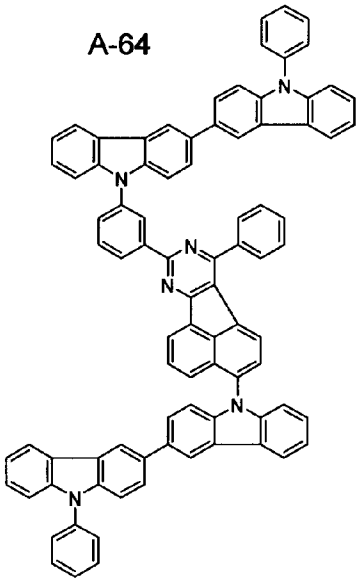
A-62



A-63

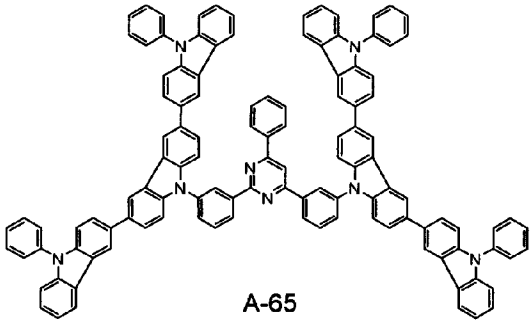


A-64

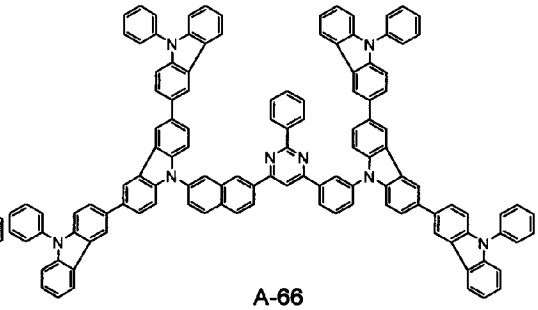


[0995]

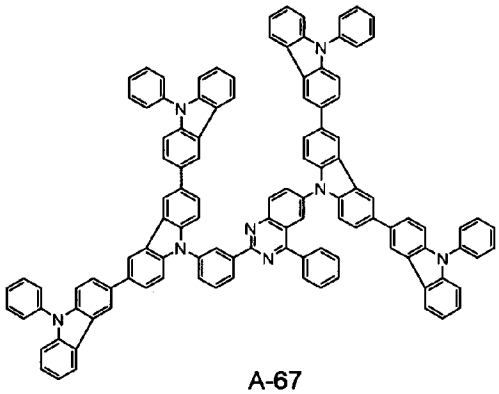
[化715]



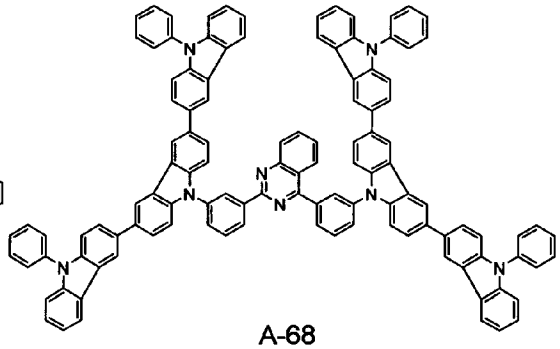
A-65



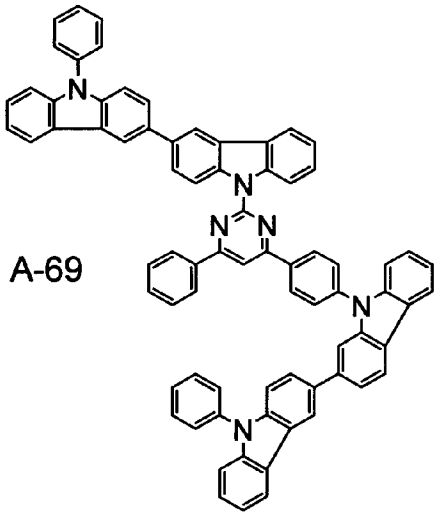
A-66



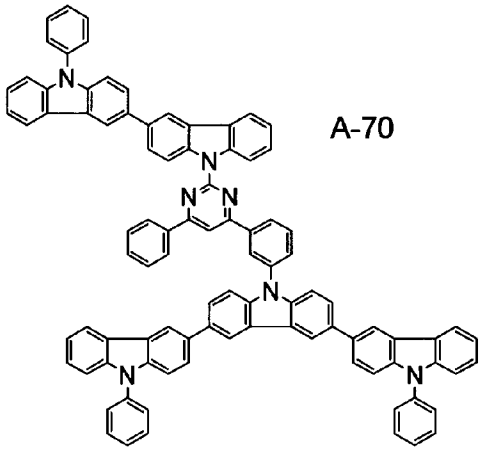
A-67



A-68



A-69

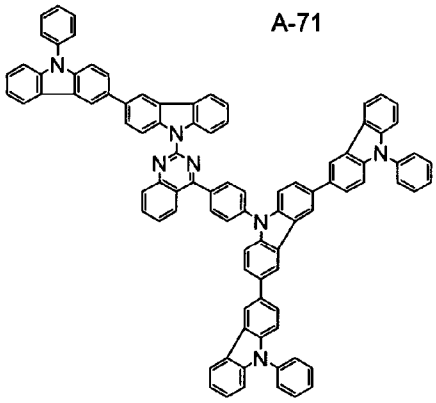


A-70

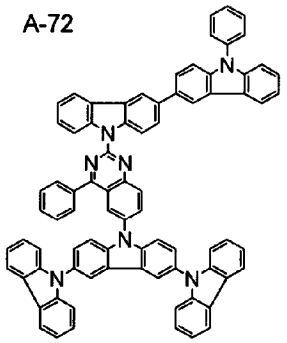
[0996]

[化716]

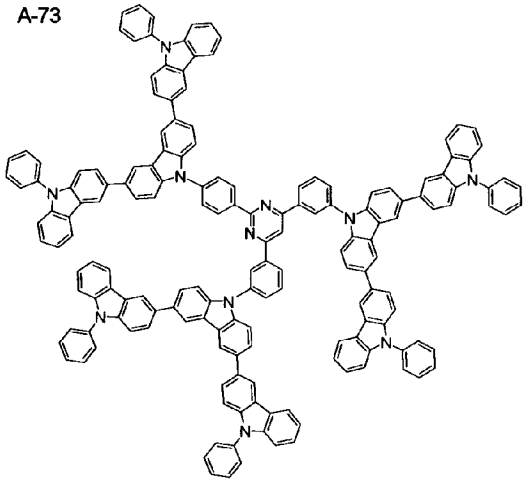
A-71



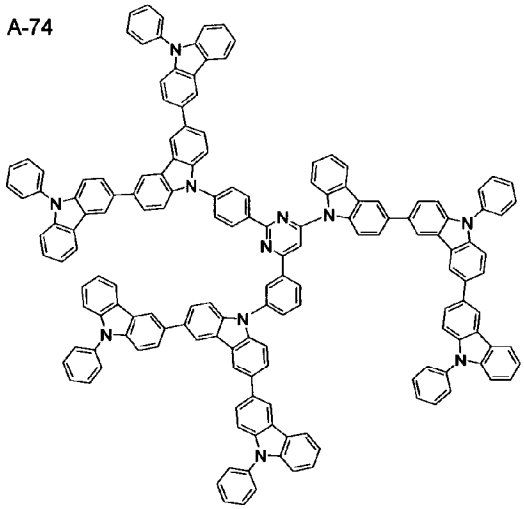
A-72



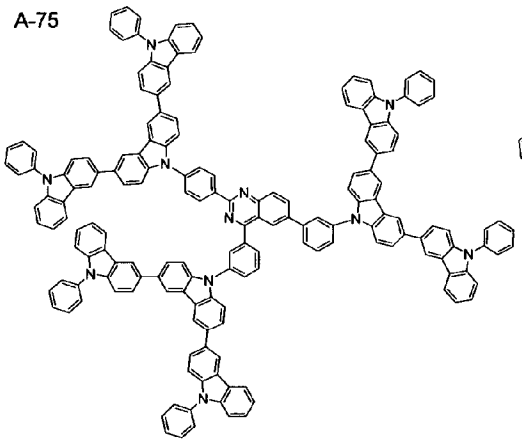
A-73



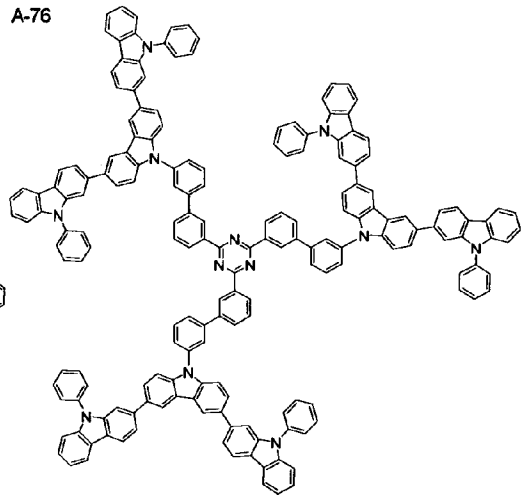
A-74



A-75



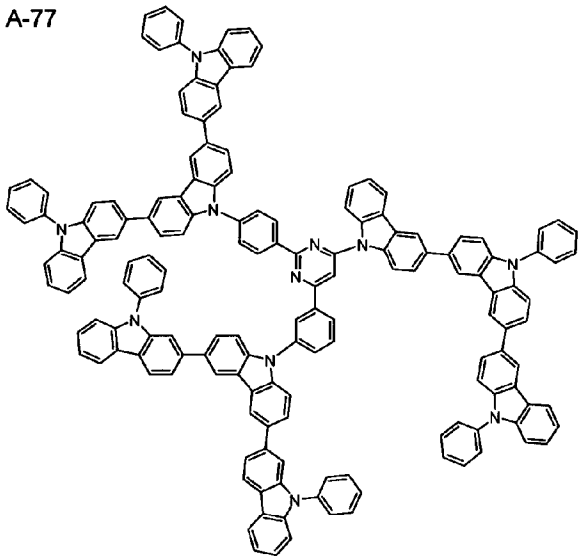
A-76



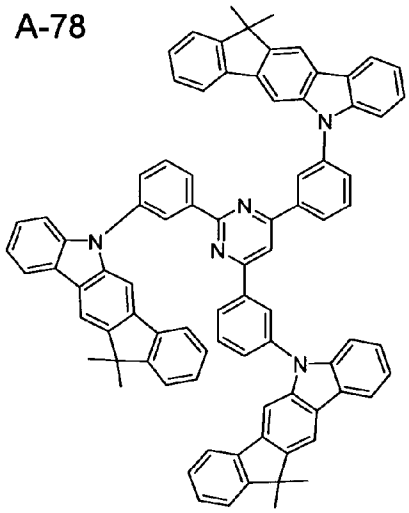
[0997]

[化717]

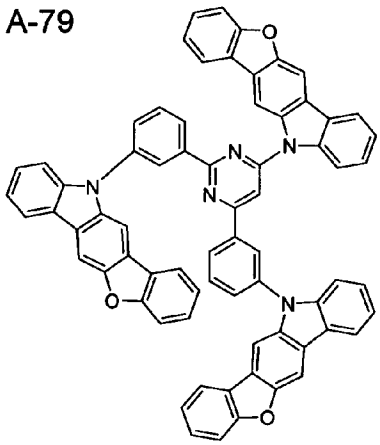
A-77



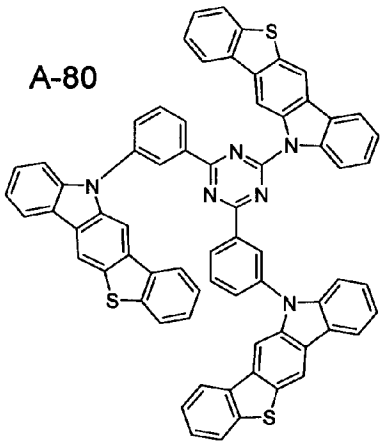
A-78



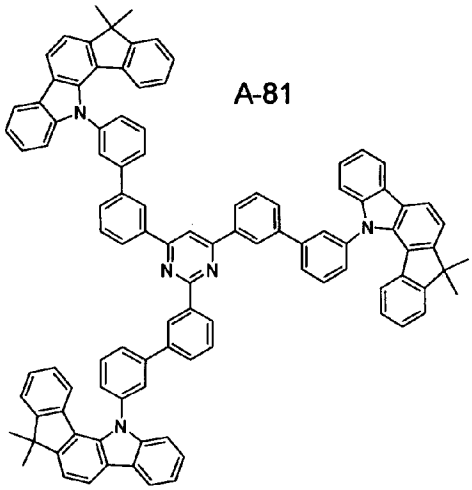
A-79



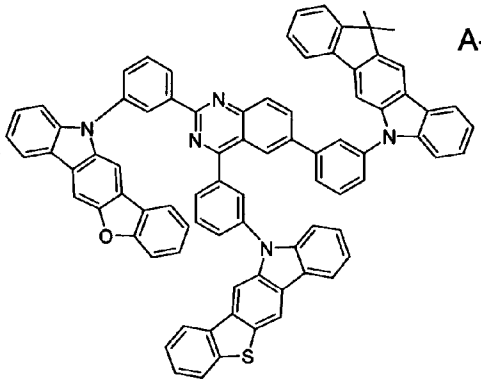
A-80



A-81



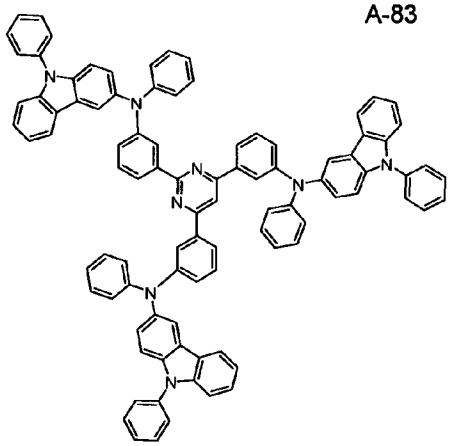
A-82



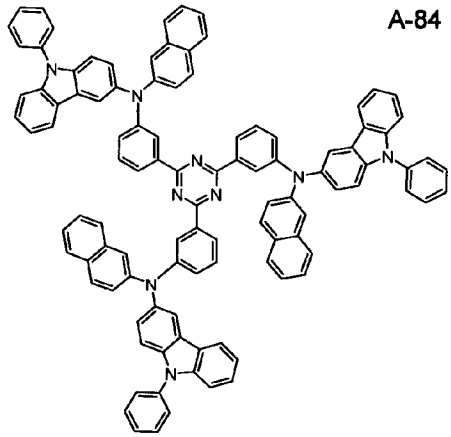
[0998]

[化718]

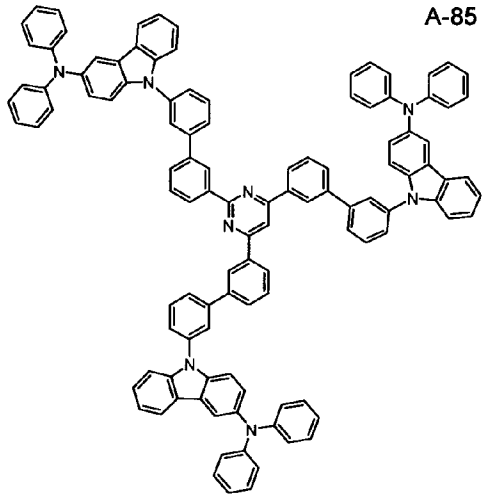
A-83



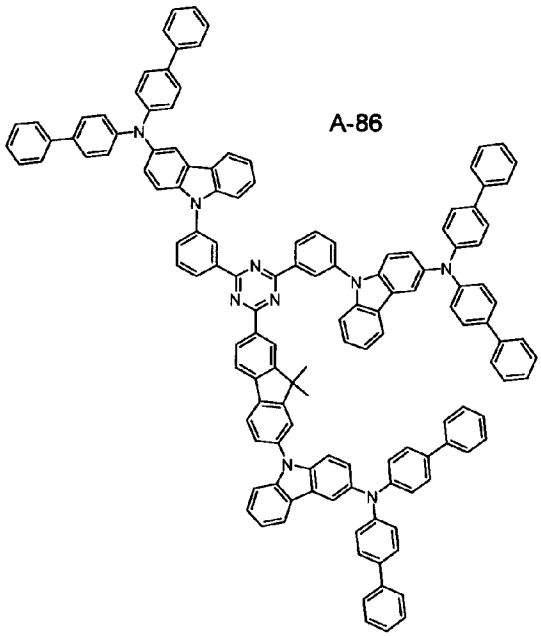
A-84



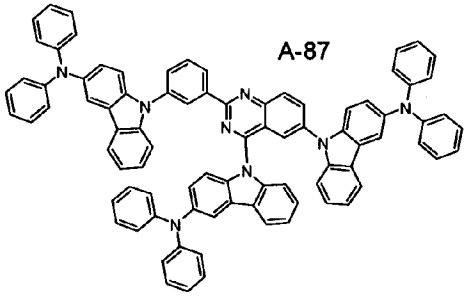
A-85



A-86



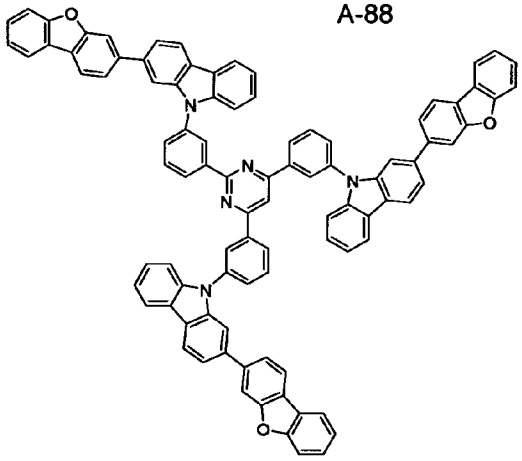
A-87



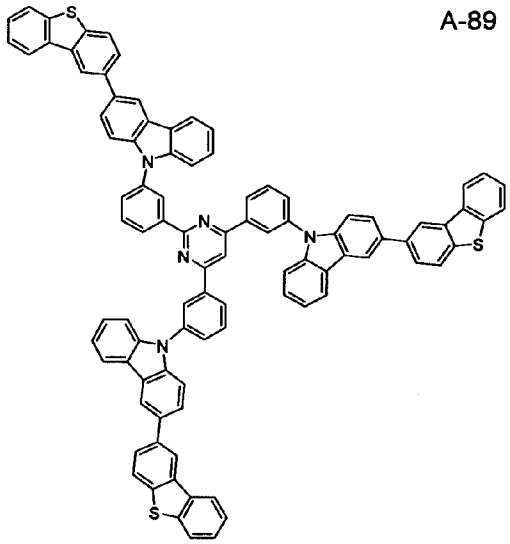
[0999]

[化719]

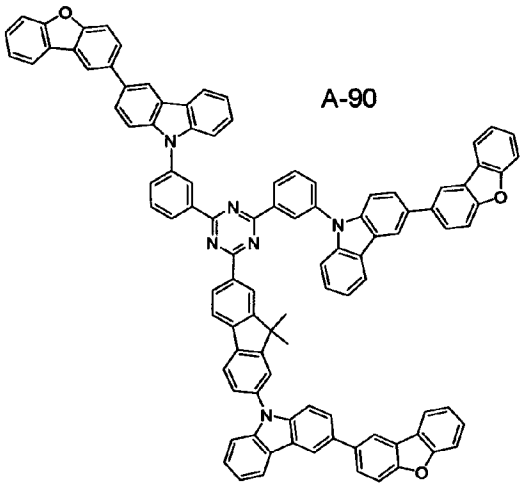
A-88



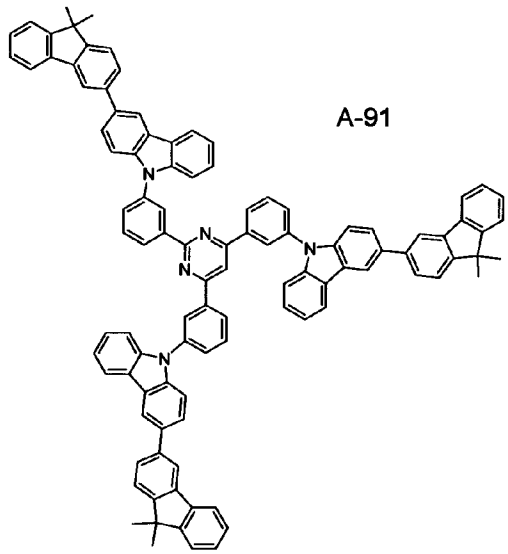
A-89



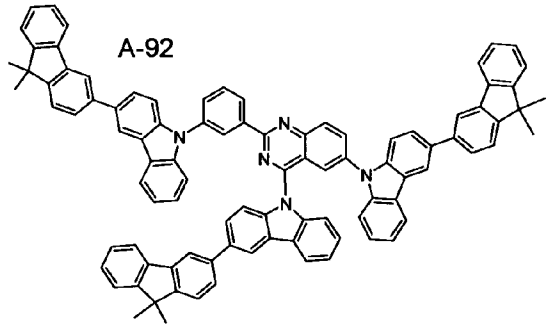
A-90



A-91



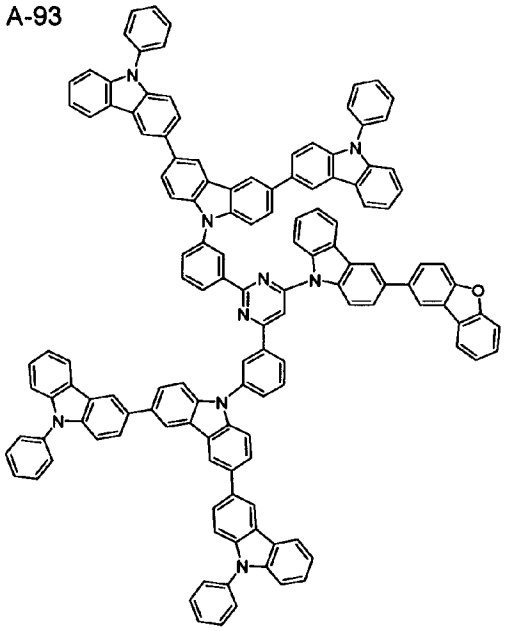
A-92



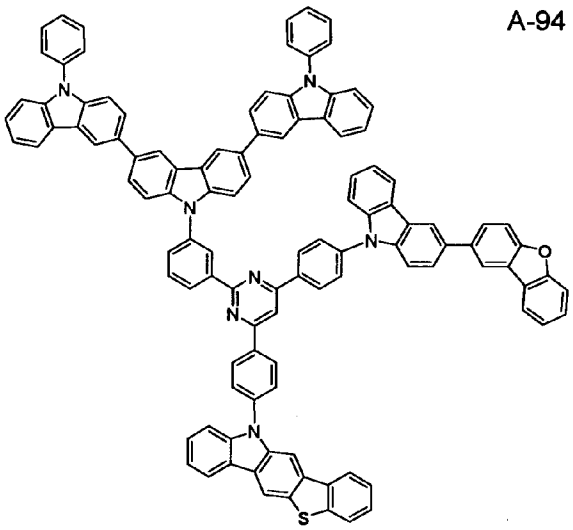
[1000]

[化720]

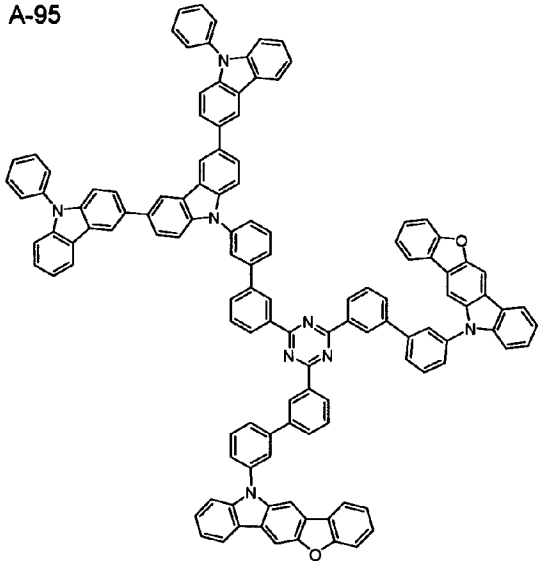
A-93



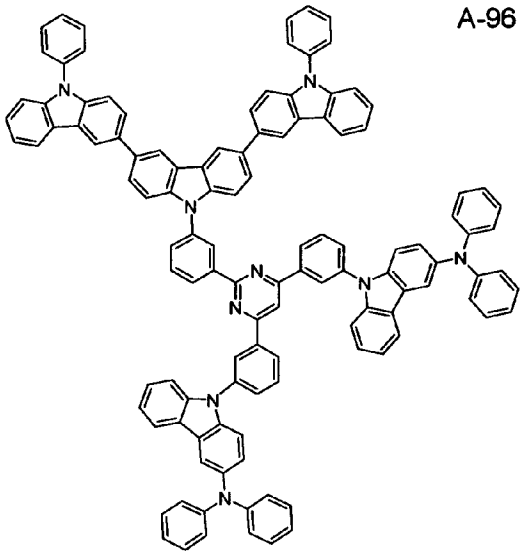
A-94



A-95



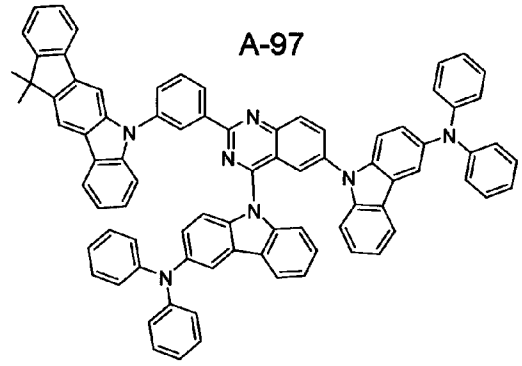
A-96



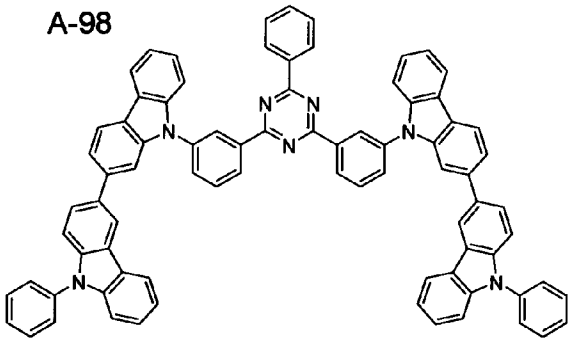
[1001]

[化721]

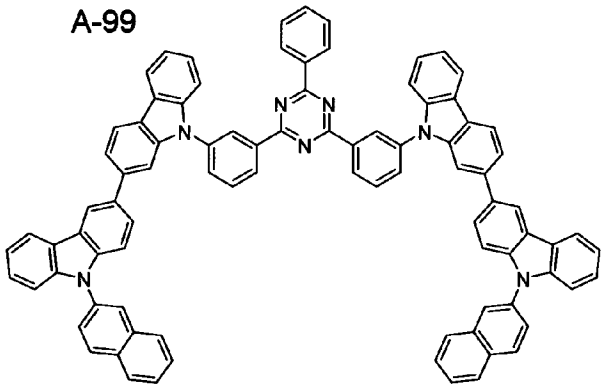
A-97



A-98



A-99



[1002] 化合物（ＣＨ１）の製造方法は、特に限定されず、公知の方法を用いることができる。例えば、一般的に行われるハロゲン化合物とカルバゾールのウルマン反応やブッフバルト反応、さらには、カルバゾールの水素を水素化ナトリウムや炭酸カリウムなどの塩基で引き抜き、塩を生成させてから、ハロゲン化合物を反応させる方法等を用いることができる。

具体的には、例えば、ＷＯ２０１２／０８６１７０号公報に記載の方法を採用することができる。

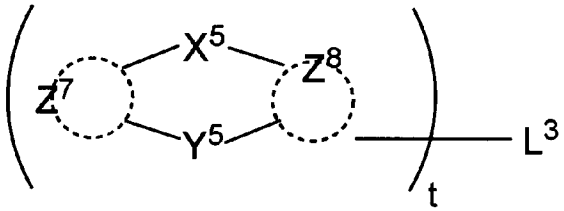
[1003] ［化合物（ＣＨ３）］

以下、化合物（ＣＨ３）について説明する。化合物（ＣＨ３）は、励起子の生成を高め、有機ＥＬの発光効率を向上させる効果を有する。

化合物（ＣＨ３）の一態様としては、電子輸送性骨格を有するものであることも好ましい。また、化合物（ＣＨ３）の一態様としては、トリアリールアミノ基などのアミノ基を有しないものであることも好ましい。

電子輸送性骨格とは、正孔輸送能よりも電子輸送能を多く有する骨格で、具体的には、含窒素芳香族複素環やシアノ基が挙げられる。

[1004] [化722]



(CH3)

[1005] 式（ＣＨ３）中のＺ^{7}，Ｘ^{5}，Ｙ^{5}，又はＺ^{8}のいずれかと、Ｌ^{3}が結合して化合物が形成される。

式（ＣＨ３）中、Ｘ^{5}、Ｙ^{5}は、単結合、－ＣＲ$_{2}$－、－ＮＲ－、－Ｏ－、－Ｓ－又は－ＳｉＲ$_{2}$－であり、全てが単結合になることはない。Ｒは、前記と同じであり、式（ＣＨ２）で説明したものと同様の例が挙げられる。

励起状態と基底状態のエネルギーギャップを高める観点から、Ｘ^{5}、Ｙ^{5}の１以上は－ＮＲ－であることが好ましい。この場合、正孔輸送能が高まるため、Ｒはピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン及びトリアジン等の電子輸送性骨格の残基であることが好ましい。これらの基は、フェニル基、ビフェニル基、フルオレニル基等の置換基を有していてもよい。フェニレン基等の連結基を介して電子輸送性骨格の残基が結合する構造であってもよい。また、フェニル基や、シアノ基で置換されたフェニル基も好ましい。

Ｚ^{7}、Ｚ^{8}は、前記Ｚ^{1}、Ｚ^{2}と同じであるが、３環以上が縮環した脂肪族炭化水素環基、３環以上が縮環した脂肪族複素環基、３環以上が縮環した芳香族炭化水素環基、又は３環以上が縮環した芳香族複素環基である場合はない

。具体的には、式（ＣＨ２）で説明したものと同様の例が挙げられるが、カルバゾール、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェンなどの３環が縮環した芳香族複素環等は除外される。

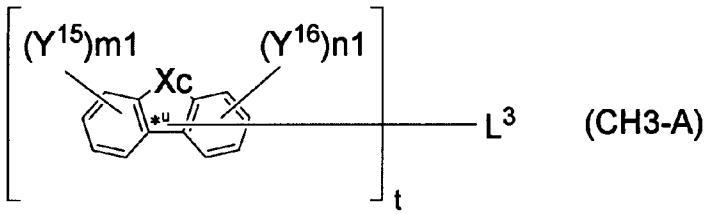
ｔは、１以上の整数である。ｔの上限はＬ[3]の構造に依存して決定され、特に限定されるわけではないが、ｔは１～４程度の範囲から選ばれるのが好ましい。更に好ましくは１～３である。

Ｌ[3]は、単結合、置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基であり、式（ＣＨ１）のＬ[1]で説明した芳香族炭化水素環基、無置換の芳香族複素環基と同様の例が挙げられる。ｔが１のとき、Ｌ[3]は、単結合ではない。

Ｌ[3]が、置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基の場合の置換基としては、前述した環形成炭素数２～３０の（好ましくは２～１８）ヘテロアリール基に更に環形成炭素数６～２０（好ましくは６～１８）の芳香族炭化水素が結合していてもよい。この場合の芳香族炭化水素基としては、フェニル基、ビフェニル基、９，９－ジメチルフルオレニル基等のほか、９，９－ジメチルフルオレニル基が結合したフェニル基が挙げられる。

[1006] 前記式（ＣＨ３）で表される化合物は、下記式（ＣＨ３－Ａ）で表される化合物であることが好ましい。

[1007] [化723]



(CH3-A)

[1008] 式（ＣＨ３－Ａ）について説明する。

ｔ及びＬ[3]は、式（ＣＨ３）中のそれらの記号と同義である。

Ｘｃは、－ＣＲ$_2$－、－ＮＲ－、－Ｏ－、－Ｓ－又は－ＳｉＲ$_2$－であり、Ｒは、＊[u]の位置でＬ[3]に直接結合する単結合、水素原子、置換若しくは無置

換のアルキル基、置換若しくは無置換のシクロアルキル基、置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基である。

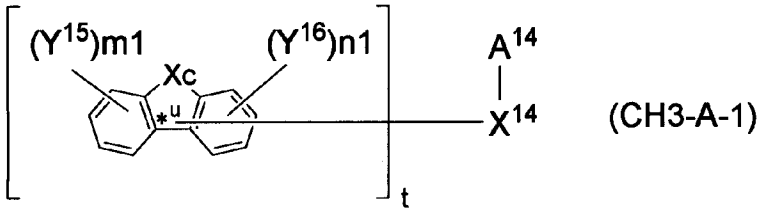
Ｙ[15]及びＹ[16]は、それぞれ独立に、＊[u]の位置でＬ[3]に直接結合する単結合、水素原子、フッ素原子、シアノ基、炭素数１～２０の置換若しくは無置換のアルキル基、炭素数１～２０の置換若しくは無置換のアルコキシ基、炭素数１～２０の置換若しくは無置換のハロアルキル基、炭素数１～２０の置換若しくは無置換のハロアルコキシ基、炭素数１～２０の置換若しくは無置換のアルキルシリル基、炭素数６～３０の置換若しくは無置換のアリールシリル基、環形成炭素数６～３０の置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、環形成炭素数６～３０の置換若しくは無置換の縮合芳香族炭化水素環基、環形成炭素数２～３０の置換若しくは無置換の芳香族複素環基、又は環形成炭素数２～３０の置換若しくは無置換の縮合芳香族複素環基を表す。

なお、隣接するＹ[15]及びＹ[16]同士が互いに結合して、連結基を形成してもよいが、２環以上が縮環した脂肪族炭化水素環基、２環以上が縮環した脂肪族複素環基、２環以上が縮環した芳香族炭化水素環基、又は２環以上が縮環した芳香族複素環基を形成する場合はない。

ｍ１は１～４の整数を表す。ｎ１は、Ｒが＊[u]の位置でＬ[3]に直接結合する単結合を表す場合、１～３の整数を表し、Ｒが＊[u]の位置でＬ[3]に直接結合する単結合以外の場合、１～４の整数を表す。なお、ｍ１、ｎ１が２以上の場合、複数のＹ[15]及びＹ[16]は、互いに同一であっても異なっていてもよい。

[1009] 前記式（ＣＨ３－Ａ）で表される化合物は、下記式（ＣＨ３－Ａ－１）で表される化合物であることが好ましい。

[1010] [化724]



(CH3-A-1)

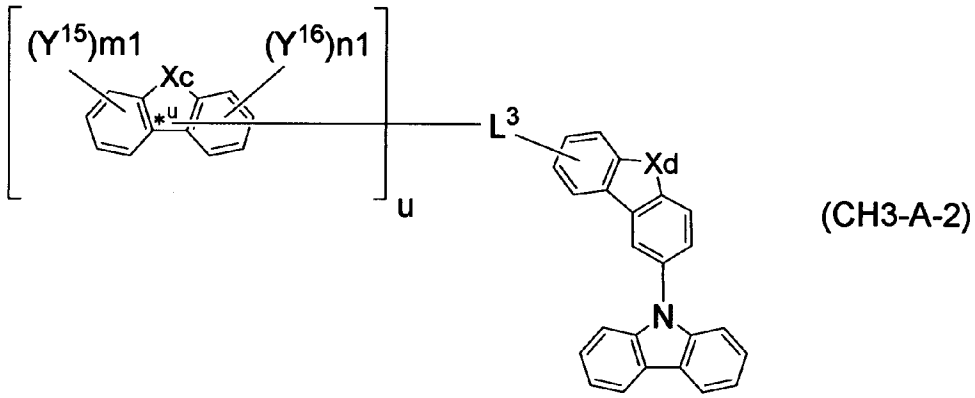
[1011] 式（ＣＨ３－Ａ－１）について説明する。

ｔ、Ｘｃ、Y^{15}、Y^{16}、ｍ１及びｎ１は、式（ＣＨ３－Ａ）中のそれらの記号と同義である。

A^{14}は、環形成炭素数１～３０の置換若しくは無置換の含窒素複素環基を表し、X^{14}は、単結合、環形成炭素数６～３０の置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環、環形成炭素数６～３０の置換若しくは無置換の縮合芳香族炭化水素環、環形成炭素数２～３０の置換若しくは無置換の芳香族複素環、又は環形成炭素数２～３０の置換若しくは無置換の縮合芳香族複素環の残基を表す。

[1012] また、前記式（ＣＨ３－Ａ）で表される化合物は、下記式（ＣＨ３－Ａ－２）で表される化合物であることが好ましい。

[1013] [化725]



(CH3-A-2)

[1014] 式（ＣＨ３－Ａ－２）について説明する。

L^{3}、Ｘｃ、Y^{15}、Y^{16}、ｍ１及びｎ１は、式（ＣＨ３－Ａ）中のそれらの記号と同義である。

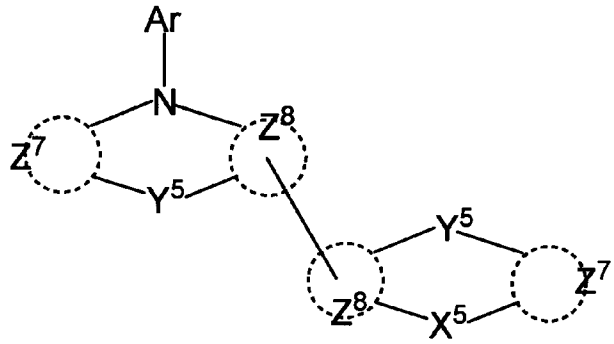
ｕは、１以上の整数である。

Ｘｄは、－CR_2－、－ＮＲ－、－Ｏ－、－Ｓ－又は－SiR_2－であり、Ｒは、水素原子、置換若しくは無置換のアルキル基、置換若しくは無置換のシクロアルキル基、置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基である。

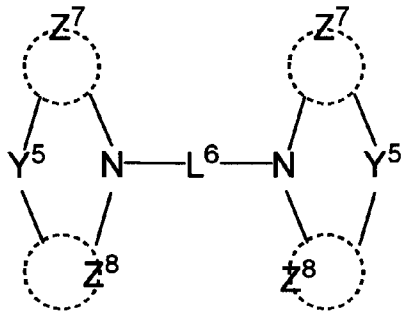
[1015] 前記式（ＣＨ３）で表される化合物は、下記式（ＣＨ８）～（ＣＨ９）の

いずれかで表される化合物であることが好ましい。式（ＣＨ３）で表される化合物において、ｔが２、Ｌ[3]が単結合、Ｘ[5]の一方がＮＡｒの化合物が式（ＣＨ８）であり、ｔが２、Ｘ[5]がＮの化合物が式（ＣＨ９）である。

[1016] [化726]



(CH8)



(CH9)

[1017] 式（ＣＨ８）及び（ＣＨ９）中、Ｘ[5]、Ｙ[5]、Ｚ[7]、Ｚ[8]は、前記式（ＣＨ３）中のそれらの記号と同じであり、具体例も同様のものが挙げられる。複数のＹ[5]、Ｚ[7]、Ｚ[8]は互いに同一であっても異なっていてもよい。

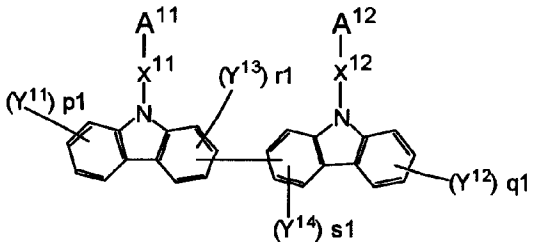
Ｌ[6]は、置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基又はこれらの組合せである。具体的には、式（ＣＨ１）のＬ[1]で説明した芳香族炭化水素環基、芳香族複素環基と同様の例が挙げられる。

Ａｒは、置換若しくは無置換の脂肪族炭化水素環基、置換若しくは無置換の脂肪族複素環基、置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基であり、式（ＣＨ２）のＲやＺ[1]で説明したも

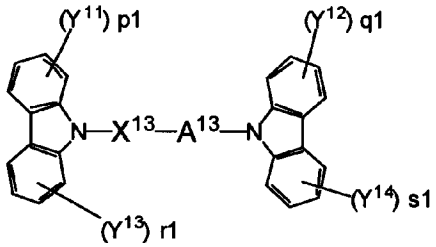
のと同様の例で１価のものが挙げられる。

[1018] また、前記式（ＣＨ３）で表される化合物は、下記式（ＣＨ１０）～（ＣＨ１１）のいずれかで表される化合物であることが好ましい。

[1019] [化727]



(CH10)



(CH11)

[1020] ［式（ＣＨ１０）及び（ＣＨ１１）中、A^{11}は、環形成炭素数１～３０の置換若しくは無置換の含窒素複素環基を表し、A^{13}は、環形成炭素数１～３０の置換若しくは無置換の２価の含窒素複素環基、又は環形成炭素数２～３０の置換若しくは無置換の２価の含酸素複素環基を表す。

A^{12}は、環形成炭素数６～３０の置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は環形成炭素数２～３０の置換若しくは無置換の含窒素複素環基を表す。

X^{11}、X^{12}及びX^{13}は、連結基であり、それぞれ独立に、単結合、環形成炭素数６～３０の置換若しくは無置換の２価の芳香族炭化水素環基、環形成炭素数６～３０の置換若しくは無置換の２価の縮合芳香族炭化水素環基、環形成炭素数２～３０の置換若しくは無置換の２価の芳香族複素環基、又は環形成炭素数２～３０の置換若しくは無置換の２価の縮合芳香族複素環基を表す。

式（ＣＨ１１）において、X^{13}は、環形成炭素数６～３０の置換若しくは

無置換の２価の芳香族炭化水素環基であることが好ましい。

Y^{11}～Y^{14}は、それぞれ独立に、水素原子、フッ素原子、シアノ基、炭素数１～２０の置換若しくは無置換のアルキル基、炭素数１～２０の置換若しくは無置換のアルコキシ基、炭素数１～２０の置換若しくは無置換のハロアルキル基、炭素数１～２０の置換若しくは無置換のハロアルコキシ基、炭素数１～２０の置換若しくは無置換のアルキルシリル基、炭素数６～３０の置換若しくは無置換のアリールシリル基、環形成炭素数６～３０の置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、環形成炭素数６～３０の置換若しくは無置換の縮合芳香族炭化水素環基、環形成炭素数２～３０の置換若しくは無置換の芳香族複素環基、又は環形成炭素数２～３０の置換若しくは無置換の縮合芳香族複素環基を表す。

なお、隣接するY^{11}～Y^{14}同士が互いに結合して、連結基を形成してもよい。

ｐ１、ｑ１は１～４の整数を表し、ｒ１、ｓ１は１～３の整数を表す。なお、ｐ１、ｑ１、ｒ１、ｓ１が２以上の場合、複数のY^{11}～Y^{14}は、同一でも異なっていてもよい。]

[1021] A^{12}の示す芳香族炭化水素環基としては、式（ＣＨ２）のＲやZ^{1}で説明した芳香族炭化水素環基と同様の例が挙げられる。

A^{11}及びA^{12}の示す含窒素複素環基としては、ピロール、ピリジン、ピラジン、ピリジン、ピリミジン、ピリダジン、トリアジン、インドール、イソインドール、インダゾール、プリン、プテリジン、β－カルボリン、ナフチリジン、キノリン、イソキノリン、キノキサリン、キナゾリン、アジリジン、アザインドリジン、インドリジン、アクリジン、ピロリジン、ピペリジン、モルフォリン、ピペラジン、カルバゾール、フェナントリジン、フェナントロリン、オキサゾール、オキサジアゾール、ベンゾオキサゾール、チアゾール、チアジアゾール、ベンゾチアゾール、トリアゾール、イミダゾール、ベンゾイミダゾール、アザフルオレン、及びアザカルバゾール、並びにそれらのベンツ体及び架橋体の１価の残基が挙げられる。

これらの中では、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、トリアジン、キノリン、イソキノリン、キノキサリン、キナゾリン、アジリジン、アザインドリジン、インドリジン、イミダゾール、インドール、イソインドール、インダゾール、プリン、プテリジン、β－カルボリン、ナフチリジンが好ましい。中でも、ピリジン、ピリミジン、トリアジン、キノリン、イソキノリン、キノキサリン、キナゾリンが更に好ましい。特に好ましくは、ピリミジン、トリアジンである。

[1022] A^{13}の示す２価の含窒素複素環基の具体例及び好ましい例としては、A^{11}及びA^{12}の示す含窒素複素環基の例の２価の残基が挙げられる。また、A^{13}の示す２価の含酸素複素環基の具体例及び好ましい例としては、ジベンゾフラニレン基が挙げられる。

X^{11}、X^{12}及びX^{13}の示す芳香族炭化水素環基、縮合芳香族炭化水素環基としては、式（ＣＨ２）のＲやZ^{1}で説明した芳香族炭化水素環基と同様の例の２価のものが挙げられ、X^{11}、X^{12}及びX^{13}の示す芳香族複素環基、縮合芳香族複素環基としては、式（ＣＨ２）のＲやZ^{1}で説明した芳香族複素環基と同様の例の２価のものが挙げられる。X^{11}及びX^{12}として具体的には、メタフェニレン基、パラフェニレン基、４，４’－ビフェニレン基、４，３’－ビフェニレン基、１，４－ナフチレン基、２，６－ナフチレン基が好ましく例示される。

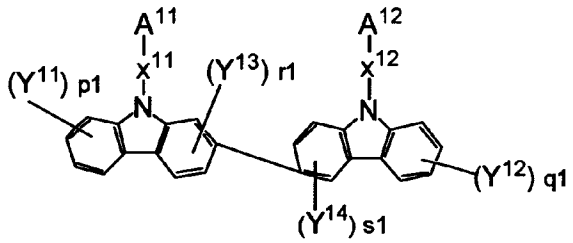
Y^{11}～Y^{14}の示すアルキル基の例としては、前記式（ＣＨ２）で説明したものと同様の例が挙げられる。また、アルコキシ基、及びチオアルコキシ基の例としては、前記アルキル基に、酸素原子、硫黄原子が結合した基が挙げられる。また、ハロアルキル基、ハロアルコキシ基としては、前記アルキル基、アルコキシ基の水素原子がハロゲン原子で置換された基が挙げられ、アルキルシリル基としては、例えば、トリメチルシリル基、トリエチルシリル基、トリブチルシリル基、ジメチルエチルシリル基、ジメチルイソプロピルシリル基、ジメチルプロピルシリル基、ジメチルブチルシリル基、ジメチルターシャリーブチルシリル基、ジエチルイソプロピルシリル基などが挙げら

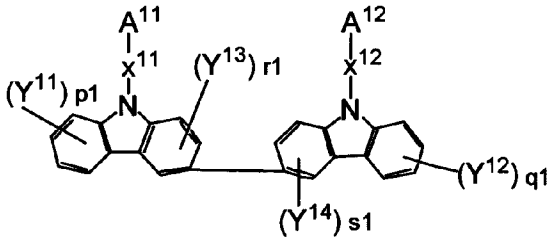
れる。アリールシリル基としては、フェニルジメチルシリル基、ジフェニルメチルシリル基、ジフェニルターシャリーブチルシリル基、トリフェニルシリルなどが挙げられる。

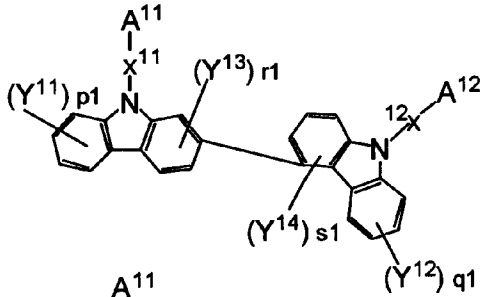
Ｙ^{11}～Ｙ^{14}の示す芳香族炭化水素環基、縮合芳香族炭化水素環基としては、式（ＣＨ２）のＲやＺ^{1}で説明した芳香族炭化水素環基と同様の例が挙げられ、Ｘ^{11}及びＸ^{12}の示す芳香族複素環基、縮合芳香族複素環基としては、式（ＣＨ２）のＲやＺ^{1}で説明した芳香族複素環基と同様の例が挙げられる。

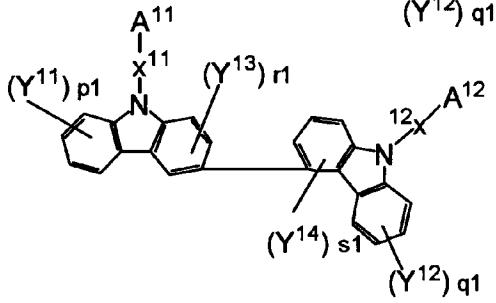
[1023] 式（ＣＨ１０）としては、以下の（ＣＨ１０－１）～（ＣＨ１０－４）で表される構造が好ましく挙げられる。

[化728]


(CH10-1)


(CH10-2)

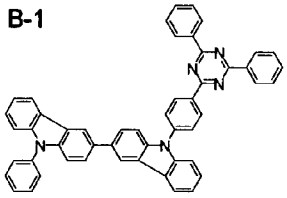

(CH10-3)


(CH10-4)

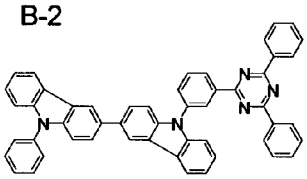
[1024] 以下に、式（ＣＨ３）の化合物の具体例を記載するが、それら具体例に限定されない。

[化729]

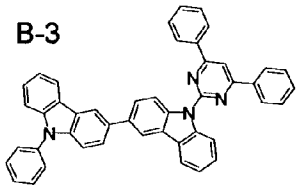
B-1



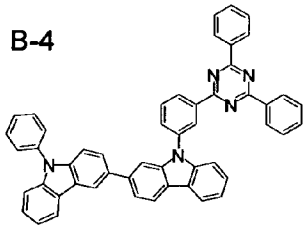
B-2



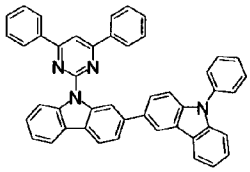
B-3



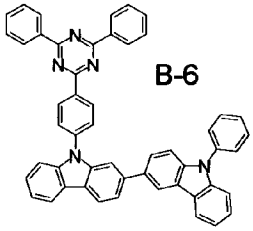
B-4



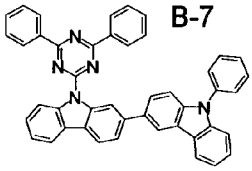
B-5



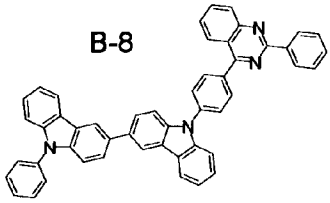
B-6



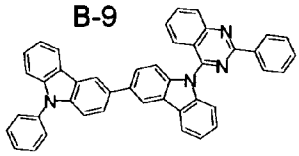
B-7



B-8

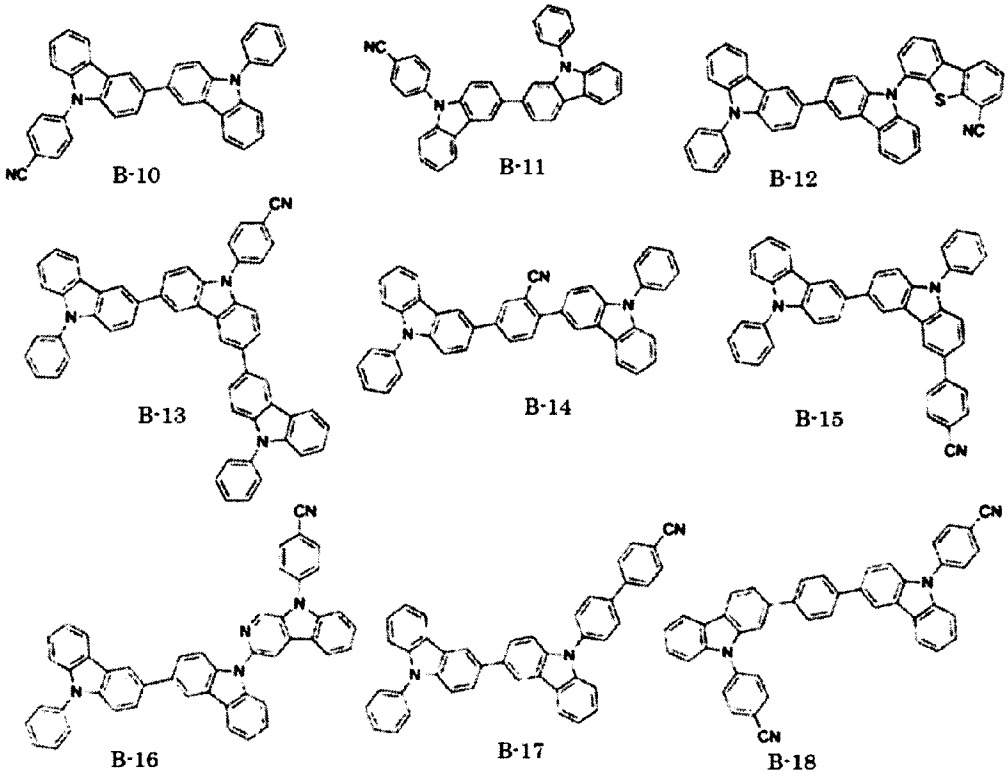


B-9



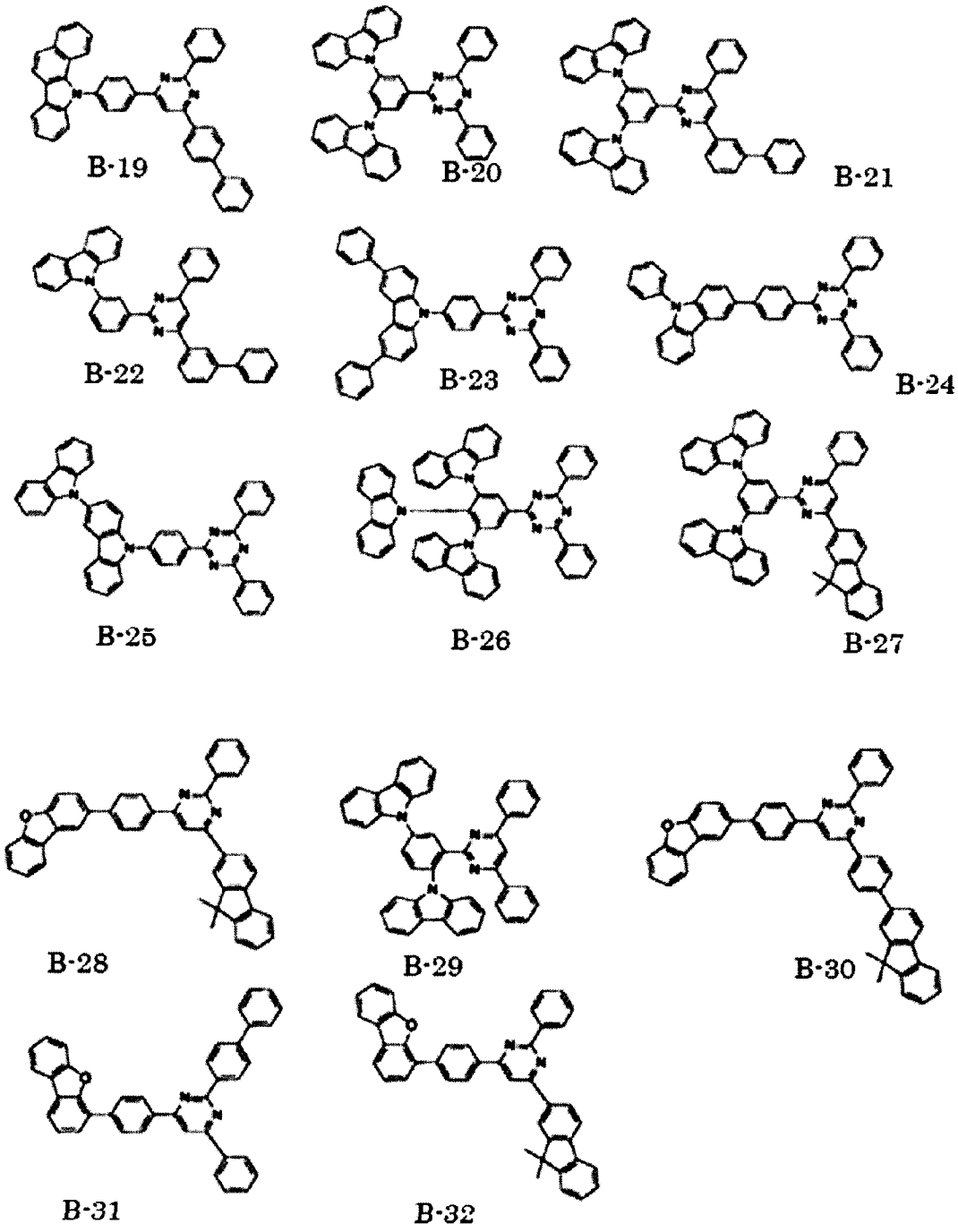
[1025]

[化730]



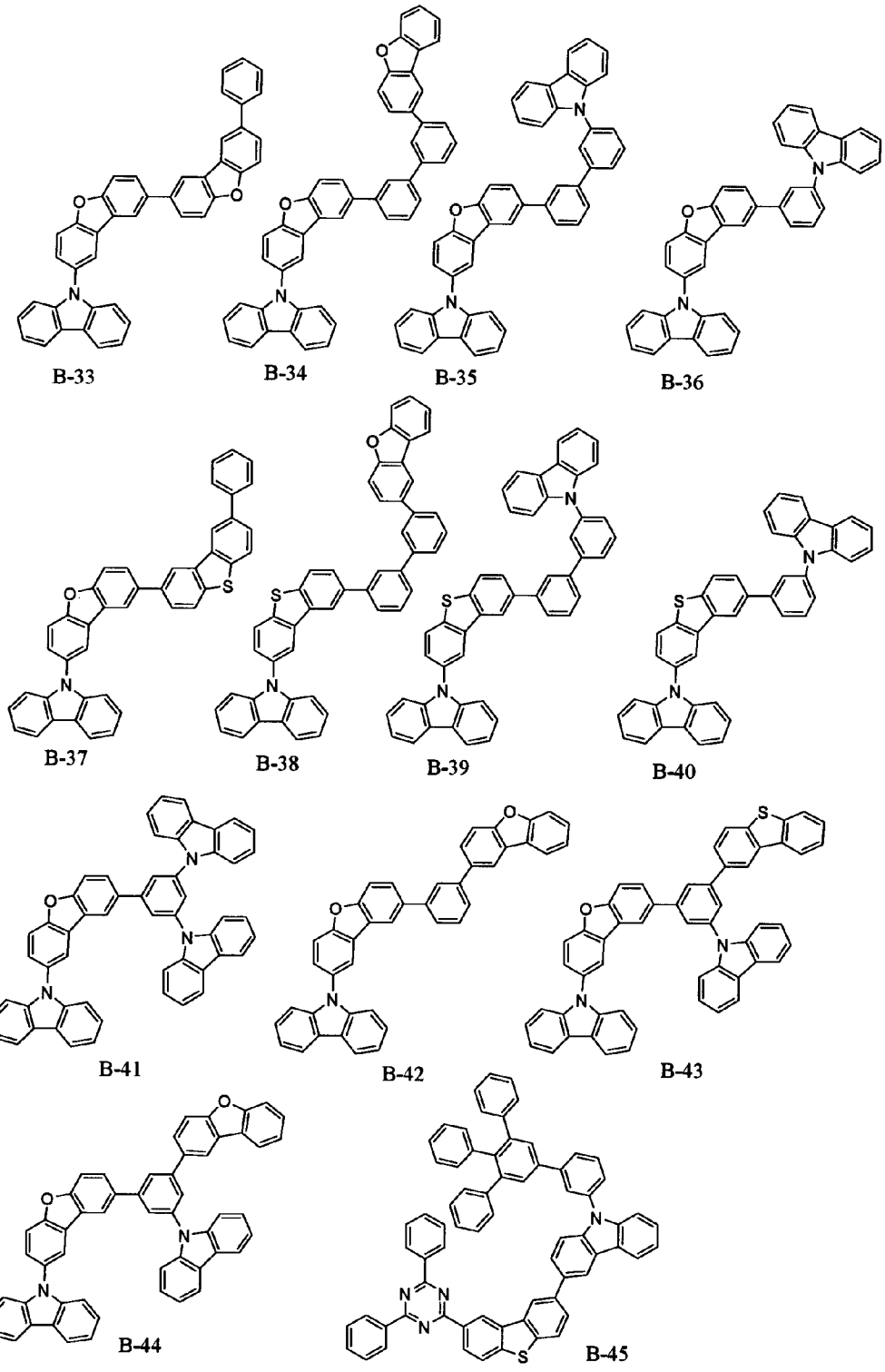
[1026]

[化731]



[1027]

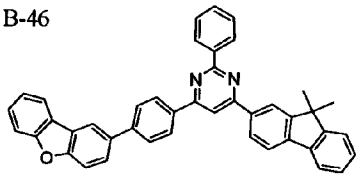
[化732]



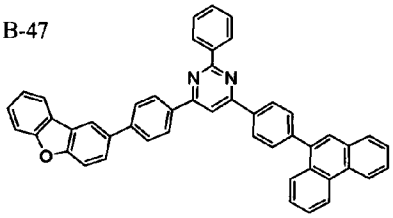
[1028]

[化733]

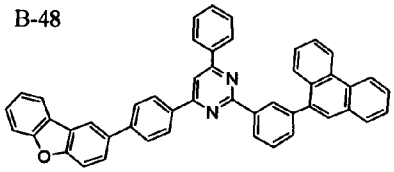
B-46



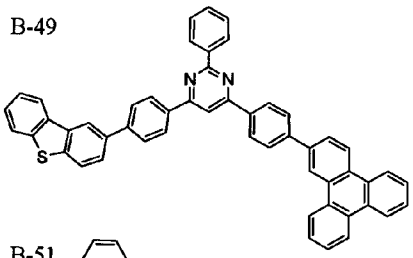
B-47



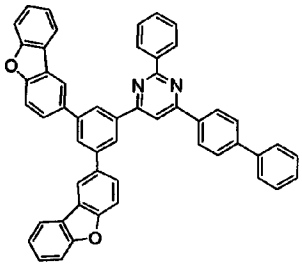
B-48



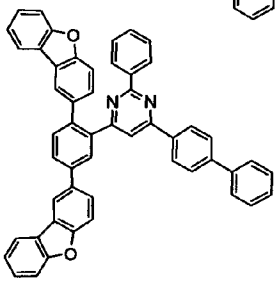
B-49



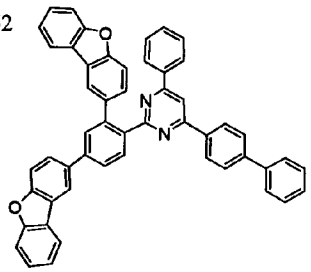
B-50



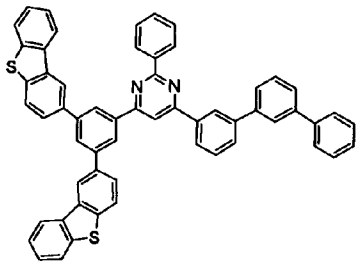
B-51



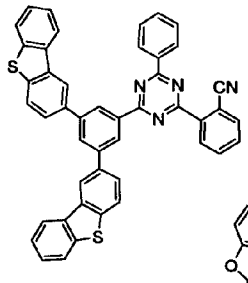
B-52



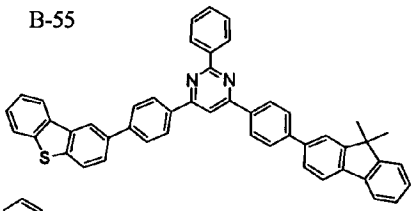
B-53



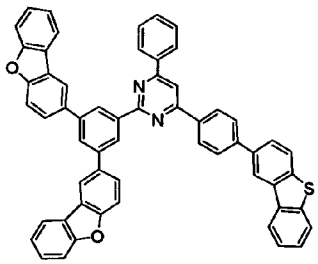
B-54



B-55



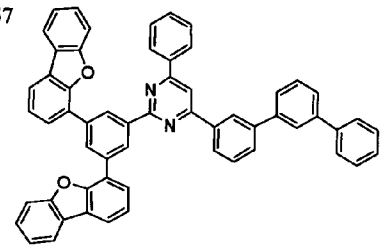
B-56



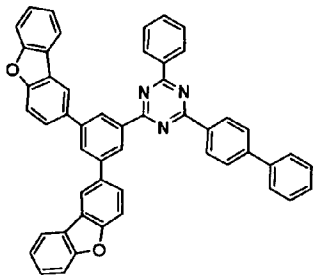
[1029]

[化734]

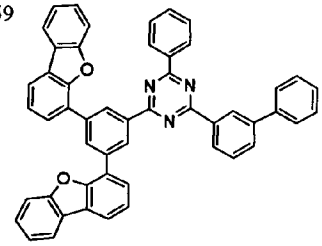
B-57



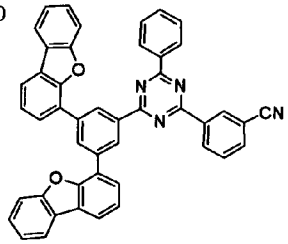
B-58



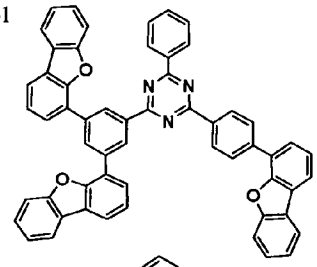
B-59



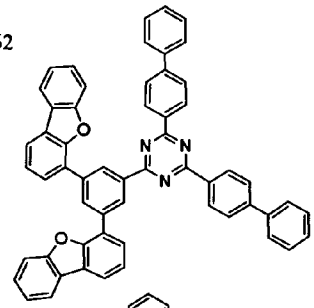
B-60



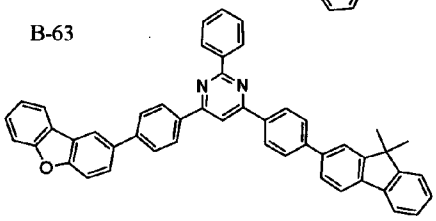
B-61



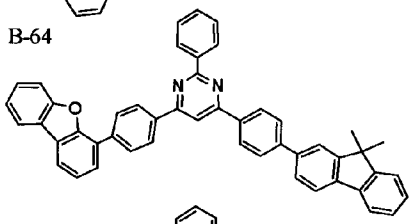
B-62



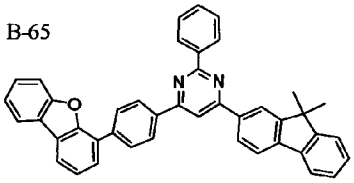
B-63



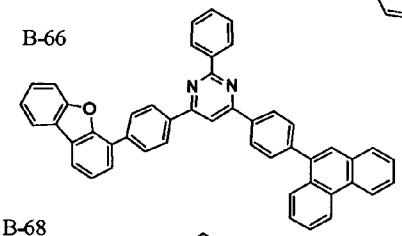
B-64



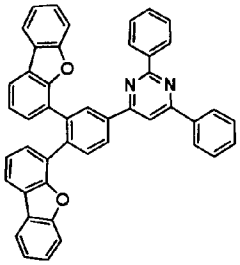
B-65



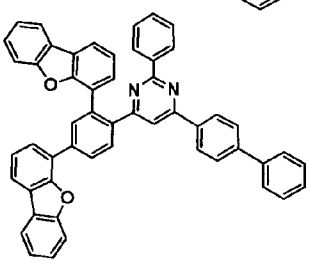
B-66



B-67



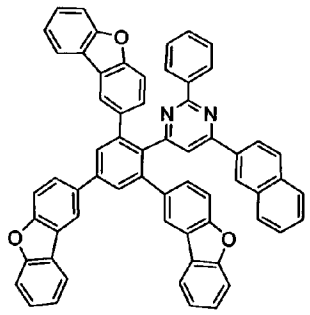
B-68



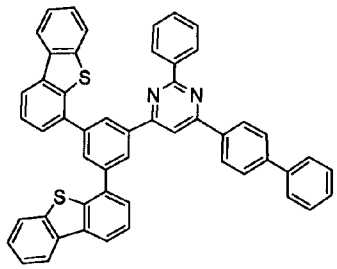
[1030]

[化735]

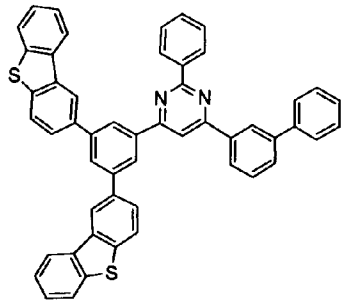
B-69



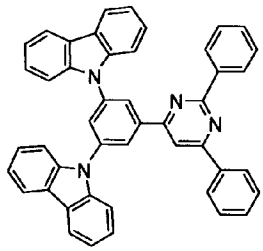
B-70



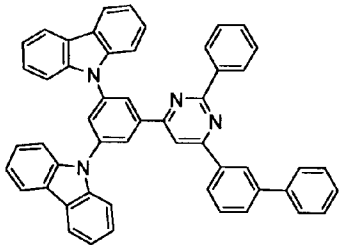
B-71



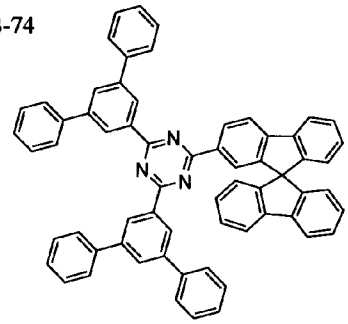
B-72



B-73



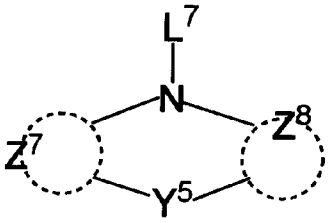
B-74



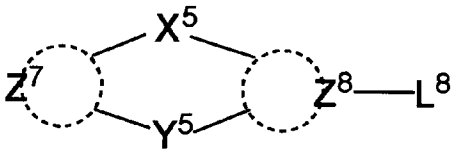
[1031] 更に、化合物（ＣＨ３）は、式（ＣＨ３）で表現される部分構造を有する高分子化合物でもよいが、正孔輸送に寄与する構造と電子輸送に寄与する構造のバランスを微調整できるという観点からは、低分子化合物の方が好ましい。

[1032] 式（ＣＨ３）で表される化合物が、下記式（ＣＨ１２）～（ＣＨ１３）のいずれかで表される化合物であることも好ましい。

[化736]



(CH12)



(CH13)

[1033] 式（ＣＨ１２）～（ＣＨ１３）中、Ｘ[5]，Ｙ[5]、Ｚ[7]、Ｚ[8]は、前記式（ＣＨ３）中のそれらの記号と同じであり、Ｘ[5]，Ｙ[5]、Ｚ[7]、Ｚ[8]の具体例としては、式（ＣＨ２）で説明したものと同様の例が挙げられる。

Ｌ[7]，Ｌ[8]は、置換若しくは無置換の脂肪族炭化水素環基、置換若しくは無置換の脂肪族複素環基、置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基であり、式（ＣＨ２）のＲやＺ[1]で説明したものと同様の例が挙げられる。

[1034] 式（ＣＨ３）の化合物の製造方法としては、前記した化合物（ＣＨ１）の製造方法と同様の方法を採用することができる。また、例えば、カルバゾール化合物と芳香族ハロゲン化化合物に対し、テトラヘドロン，４０（１９８４），ｐ．１４３３～１４５６に記載された銅触媒、又はジャーナル　オブ　アメリカン　ケミカル　ソアイアティ，１２３（２００１），ｐ．７７２７～７７２９に記載の銅触媒を用いたカップリング反応で製造することもできる。

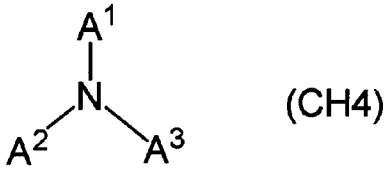
[1035] 以下、化合物（ＣＨ４）～（ＣＨ６）について説明する。これらの化合物は、アリールアミノ基やカルバゾリル基を化学構造中に有する点に特徴がある。本発明の組成物を、その使用態様の一つである塗布法に使用して有機ＥＬ素子を形成する場合、発光層中の正孔輸送層から離れた位置で発光させるのが好適な場合がある。このような場合、正孔輸送性に寄与する基を有する化合物が有効であり、式（ＣＨ４）～式（ＣＨ６）の化合物を含む組成物が

好ましい。

［化合物（ＣＨ４）］

以下、式（ＣＨ４）の化合物について説明する。

[1036] [化737]



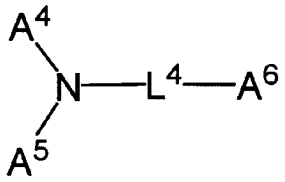
(CH4)

[1037] 式（ＣＨ４）中、Ａ[1]～Ａ[3]は、それぞれ置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基であり、好ましくは、置換若しくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素環基である。具体的には、式（ＣＨ２）中のＺ[1]、Ｚ[2]で説明したものと同様のものの１価の残基の例が挙げられる。好ましくは、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、クォーターフェニル基、ナフチル基、フェナントリル基、フルオレニル基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。置換基としては、前記式（ＣＨ１）の説明で挙げられた基が挙げられるが、環形成炭素数２～３０のヘテロアリール基が好ましく、更に好ましくは環形成炭素数２～１８のヘテロアリール基である。このような置換基としては、カルバゾリル基やジベンゾフラニル基が挙げられる。

[1038] ［化合物（ＣＨ５）］

以下、化合物（ＣＨ５）について説明する。

[化738]



(CH5)

[1039] 式（ＣＨ５）中、Ｌ[4]は１～４個の置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環が連結（又は含有）した２価の基、又は１～４個の置換若しくは無置換の芳香族複素環が連結した２価の基である。Ｌ[4]は芳香族炭化水素環と芳香族複素環の組合せでもよい。Ａ[4]～Ａ[6]は、それぞれ置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基である。Ａ[4]及びＡ[5]は互いに結合して環状構造を形成してもよい。

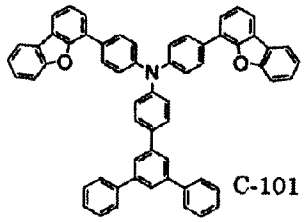
Ｌ[4]の具体例としては、式（ＣＨ２）中のＺ[1]、Ｚ[2]で説明した芳香族炭化水素環基、芳香族複素環基が連結した例が挙げられる。例えば、ベンゼン、ナフタレン、ビフェニル、ターフェニル、フルオレン、フェナントレン、トリフェニレン、ビナフタレン、ビアントラセン、ペリレン、クリセン、フルオランテン、ベンゾフルオレン、ベンゾトリフェニレン、ベンゾクリセン、アントラセン、ピロール、ピリジン、ピラジン、ピリジン、ピリミジン、ピリダジン、トリアジン、インドール、イソインドール、キノリン、イソキノリン、キノキサリン、アクリジン、ピロリジン、ジオキサン、ピペリジン、モルフォリン、ピペラジン、カルバゾール、フェナントリジン、フェナントロリン、フラン、ベンゾフラン、イソベンゾフラン、チオフェン、オキサゾール、オキサジアゾール、ベンゾオキサゾール、チアゾール、チアジアゾール、ベンゾチアゾール、トリアゾール、イミダゾール、ベンゾイミダゾール、ピラン、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、アザフルオレン、及びアザカルバゾール、並びにそれらのベンツ体及び架橋体等の２価の残基が挙げられる。好ましくは、フェニレン基、ビフェニレン基、フルオレニレン基である。

Ａ[4]～Ａ[6]の具体例としては、式（ＣＨ２）中のＺ[1]、Ｚ[2]で説明したものと同様のものの１価の残基の例が挙げられる。好適な基は、式（ＣＨ４）中のＡ[1]～Ａ[3]と同様である。

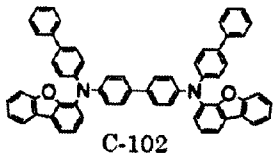
以下に、化合物（ＣＨ４）、化合物（ＣＨ５）の具体例を記載するが、それら具体例に限定されない。

[1040]

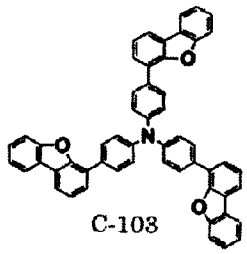
[化739]



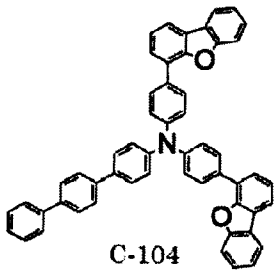
C-101



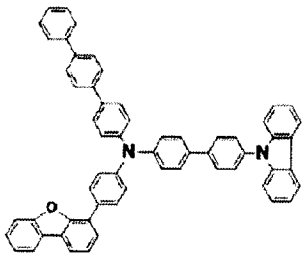
C-102



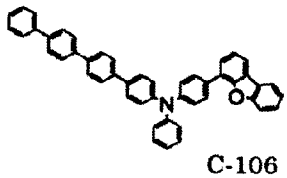
C-103



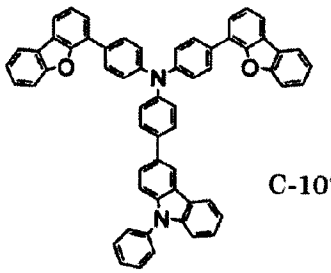
C-104



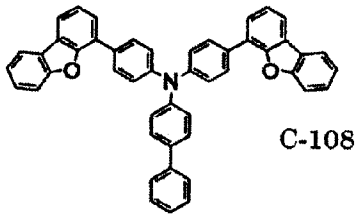
C-105



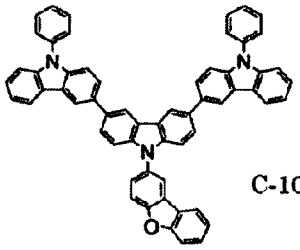
C-106



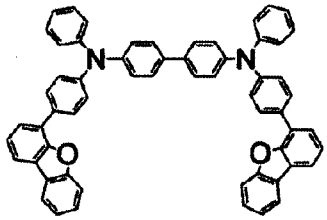
C-107



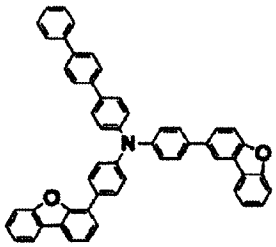
C-108



C-109



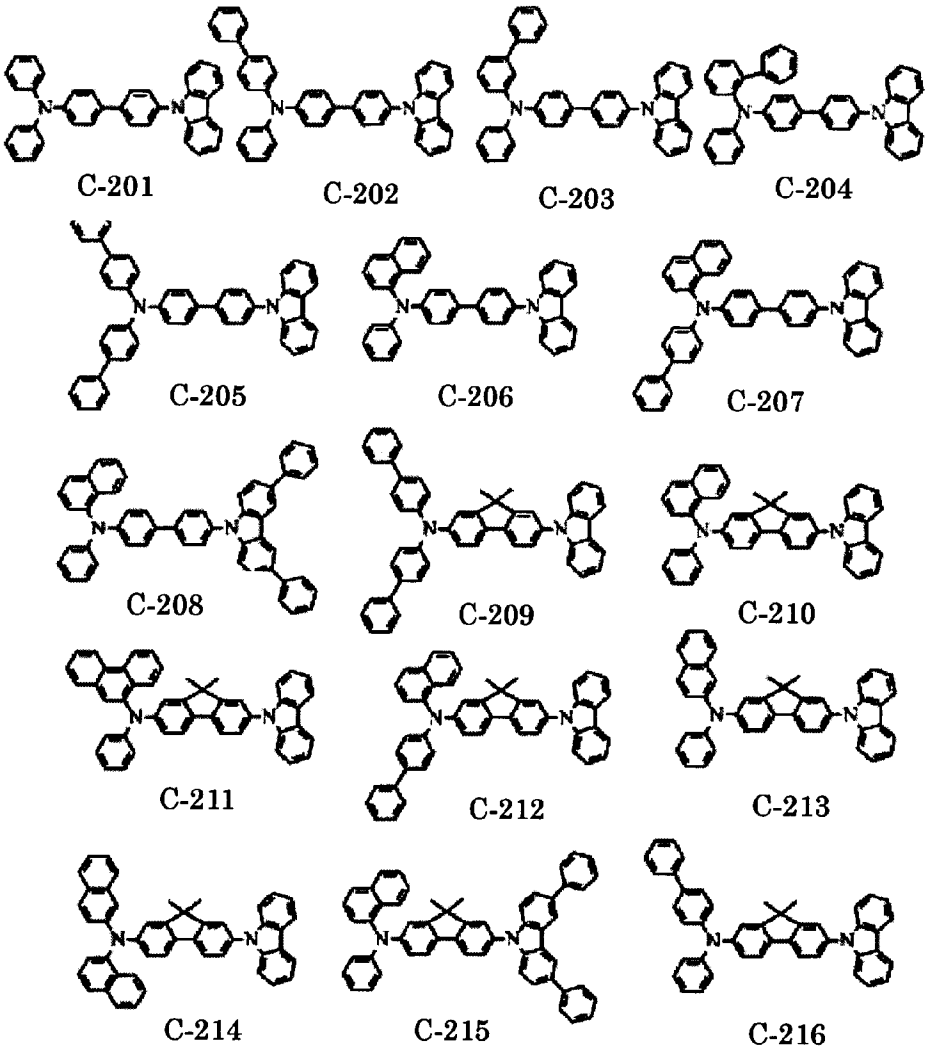
C-110



C-111

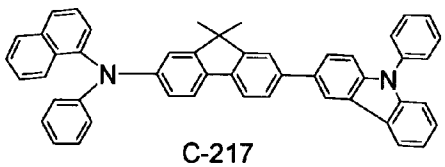
[1041]

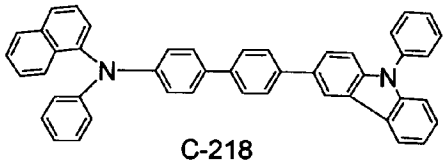
[化740]

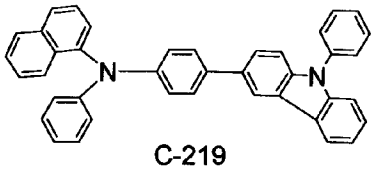

C-201
C-202
C-203
C-204
C-205
C-206
C-207
C-208
C-209
C-210
C-211
C-212
C-213
C-214
C-215
C-216

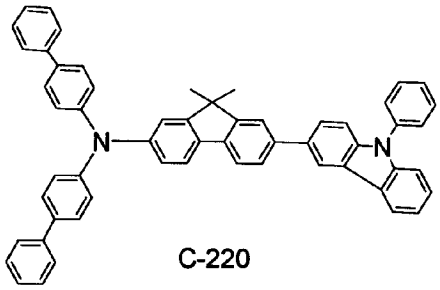
[1042]

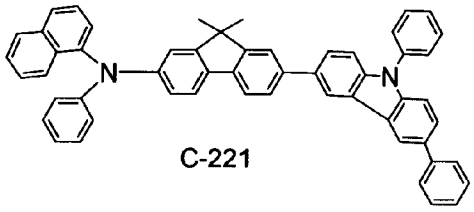
[化741]

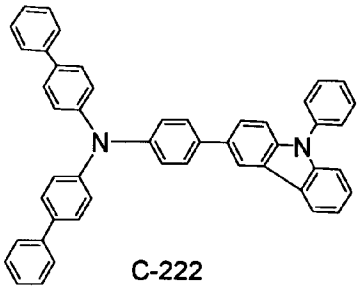

C-217

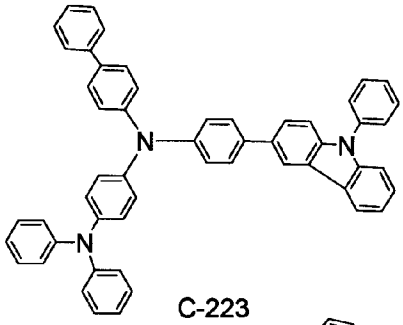

C-218

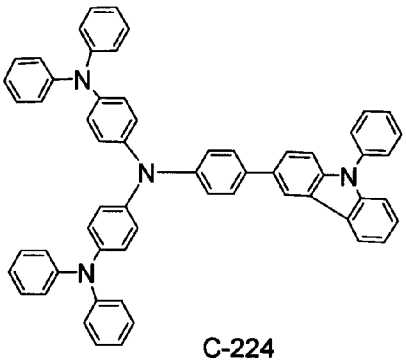

C-219

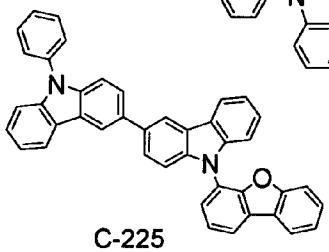

C-220


C-221


C-222


C-223

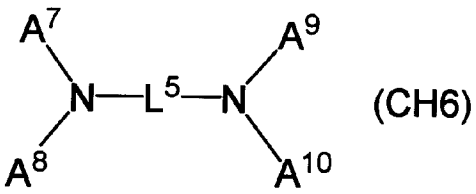

C-224


C-225

[1043] [化合物（ＣＨ６）]

以下、化合物（ＣＨ６）について説明する。

[化742]



(CH6)

[1044] 式（ＣＨ６）中、Ｌ[5]は１～６個の置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環が連結（又は含有）した２価の基、又は１～６個の置換若しくは無置換の芳香族複素環が連結した２価の基である。Ｌ[5]は芳香族炭化水素環と芳香族複素環の組合せであってもよい。Ａ[7]～Ａ[10]は、それぞれ置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環が１～１０個結合した基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環が１～１０個結合した基である。

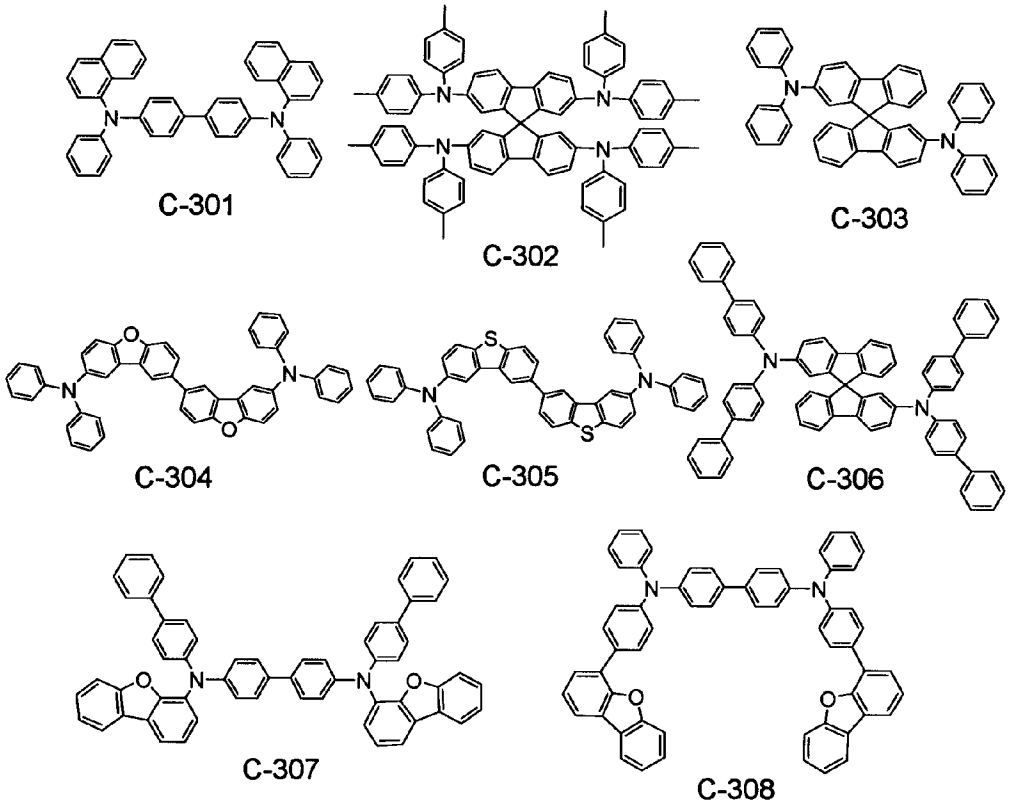
Ｌ[5]の具体例としては、式（ＣＨ２）中のＺ[1]、Ｚ[2]で説明した芳香族炭化水素環基、芳香族複素環基が連結した例が挙げられ、例えば、ベンゼン、ナフタレン、ビフェニル、ターフェニル、フルオレン、フェナントレン、トリフェニレン、ビナフタレン、ビアントラセン、ペリレン、クリセン、フルオランテン、ベンゾフルオレン、ベンゾトリフェニレン、ベンゾクリセン、アントラセン、ピロール、ピリジン、ピラジン、ピリジン、ピリミジン、ピリダジン、トリアジン、インドール、イソインドール、キノリン、イソキノリン、キノキサリン、アクリジン、ピロリジン、ジオキサン、ピペリジン、モルフォリン、ピペラジン、カルバゾール、フェナントリジン、フェナントロリン、フラン、ベンゾフラン、イソベンゾフラン、チオフェン、オキサゾール、オキサジアゾール、ベンゾオキサゾール、チアゾール、チアジアゾール、ベンゾチアゾール、トリアゾール、イミダゾール、ベンゾイミダゾール、ピラン、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、アザフルオレン、及びアザカルバゾール、並びにそれらのベンツ体及び架橋体等の２価の残基が挙げられる。好ましくは、ベンゼン、ビフェニル、スピロフルオレン、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェンの２価の残基である。

同様に、A^7～A^{10}の具体例としては、式（ＣＨ２）中のZ^1、Z^2で説明した芳香族炭化水素環、芳香族複素環が１～１０個結合した１価の基が挙げられ、例えば、ベンゼン、ナフタレン、ビフェニル、ターフェニル、フルオレン、フェナントレン、トリフェニレン、ビナフタレン、ビアントラセン、ペリレン、クリセン、フルオランテン、ベンゾフルオレン、ベンゾトリフェニレン、ベンゾクリセン、アントラセン、ピロール、ピリジン、ピラジン、ピリジン、ピリミジン、ピリダジン、トリアジン、インドール、イソインドール、キノリン、イソキノリン、キノキサリン、アクリジン、ピロリジン、ジオキサン、ピペリジン、モルフォリン、ピペラジン、カルバゾール、フェナントリジン、フェナントロリン、フラン、ベンゾフラン、イソベンゾフラン、チオフェン、オキサゾール、オキサジアゾール、ベンゾオキサゾール、チアゾール、チアジアゾール、ベンゾチアゾール、トリアゾール、イミダゾール、ベンゾイミダゾール、ピラン、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、アザフルオレン、及びアザカルバゾール、並びにそれらのベンツ体及び架橋体等の１価の残基が挙げられる。好適な基は、式（ＣＨ５）中のA^1～A^3と同様である。また、ジベンゾフラニル基等であってもよい。

以下に、式（ＣＨ６）の化合物の具体例を記載するが、それら具体例に限定されない。

[1045]

[化743]



[1046] 式（ＣＨ４）～式（ＣＨ６）の化合物は、公知の製造方法を利用して製造することができる。例えば、ＷＯ２０１０／０６１８２４号公報に記載の製造方法を参考にして製造できる。

[1047] ［化合物（ＣＨ７）］

以下、式（ＣＨ７）について説明する。式（ＣＨ７）の化合物は安定性に優れるため、耐久性向上に寄与する。

[化744]

$$Ar^1—Ar^2—Ar^3 \qquad (CH7)$$

[1048] 式（ＣＨ７）中、Ａｒ^{1}及びＡｒ^{3}は、置換若しくは無置換の１価の芳香族炭化水素環基、置換若しくは無置換の１価の芳香族複素環基、Ａｒ^{2}は、置換

若しくは無置換の２価の芳香族炭化水素環が１～１０個結合した基、置換若しくは無置換の２価の芳香族複素環が１～１０個結合した基である。安定性の観点より、Ａｒ^{1}，Ａｒ^{2}，Ａｒ^{3}の全てが芳香族炭化水素基であることが好ましい。

Ａｒ^{1}及びＡｒ^{3}の具体例としては、式（ＣＨ２）中のＺ^{1}、Ｚ^{2}で説明したものと同様のものの１価の残基の例が挙げられ、Ａｒ^{2}の具体例としては、式（ＣＨ２）中のＺ^{1}、Ｚ^{2}で説明したものと同様のものが１～１０個結合した２価の残基の例が挙げられる。Ａｒ^{2}は好適には芳香族炭化水素基が１個又は２個結合した２価の残基である。Ａｒ^{1}～Ａｒ^{3}がベンゼン環、ナフタレン環、ベンゾフェナントレン環、ジベンゾフェナントレン環、クリセン環、ベンゾクリセン環、ジベンゾクリセン環、フルオランテン環、ベンゾフルオランテン環、トリフェニレン環、ベンゾトリフェニレン環、ジベンゾトリフェニレン環、ピセン環、ベンゾピセン環、及びジベンゾピセン環の残基であると、燐光発光材料と組合せた有機ＥＬ素子の発光効率の点で好ましい。

[1049] 式（ＣＨ７）の化合物は、鈴木－宮浦クロスカップリング反応等を用いて合成することができる。例えば、以下の化学反応式に示すように合成される。

（Ｒａ－Ｂ（ＯＨ）$_{2}$）＋（Ｉ－Ａｒ^{1}－Ｂｒ）　→　（Ｒａ－Ａｒ^{1}－Ｂｒ）

（Ｒａ－Ａｒ^{1}－Ｂｒ）＋（（ＯＨ）$_{2}$－Ａｒ^{2}－Ｒｂ）

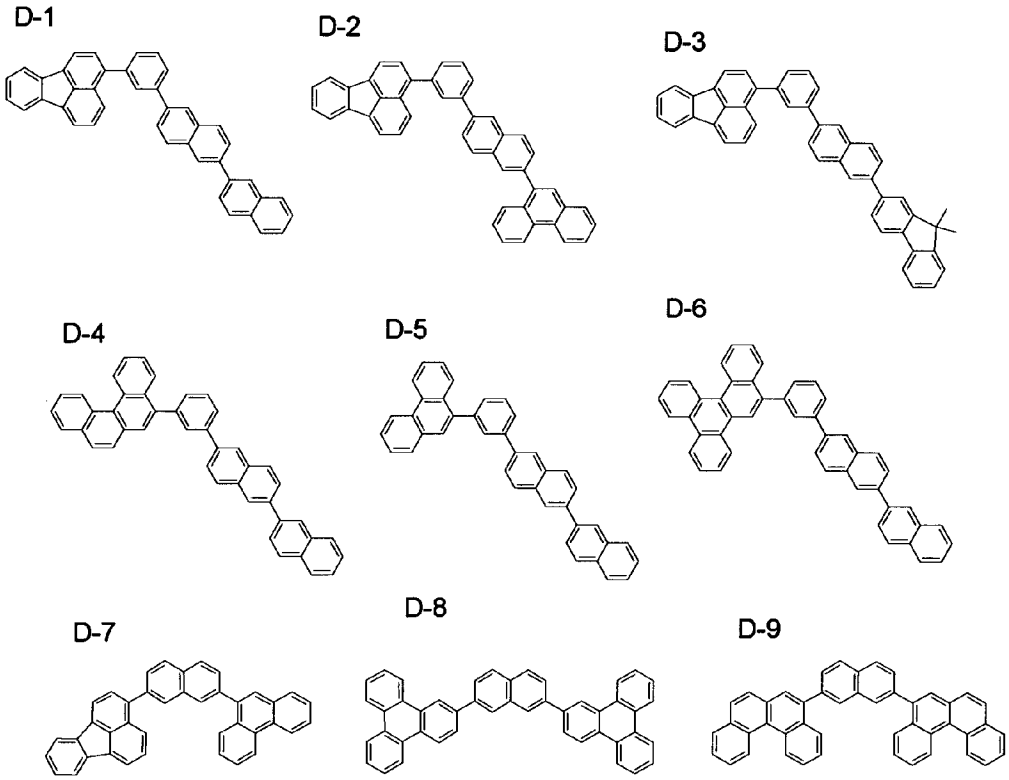
→　Ｒａ－Ａｒ^{1}－Ａｒ^{2}－Ｒｂ

具体的には、ＷＯ２００９／００８２１５号公報に記載の方法により製造することができる。

以下に、式（ＣＨ７）の化合物の具体例を記載するが、それら具体例に限定されない。

[1050]

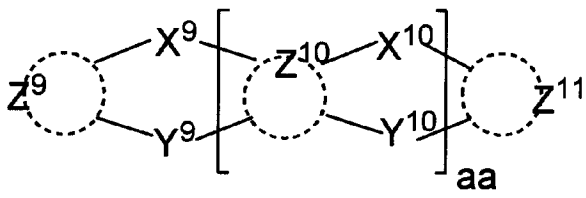
[化745]



[1051] [化合物（ＣＨ１４）]

以下、化合物（ＣＨ１４）について説明する。

[化746]



(CH14)

[1052] 式（ＣＨ１４）中、X^9、X^{10}、Y^9、Y^{10}は、単結合、－CR_2－、－NR－、－Ｏ－、－Ｓ－、－ＰＲ－、又は－SiR_2－で表される基であり、全てが単結合になることはない。Ｒは、式（ＣＨ２）と同じであり、式（ＣＨ２）で説明したものと同様の例が挙げられる。

Z^9、Z^{10}、Z^{11}は、式（ＣＨ２）Z^1、Z^2と同じであり、式（ＣＨ２）

で説明したものと同様の例が挙げられる。

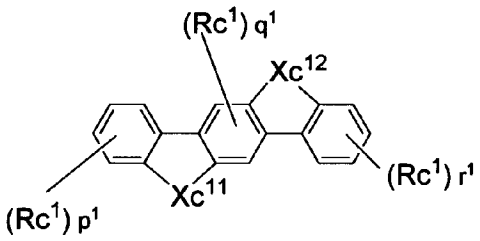
ａａは１～５の整数である。好ましくは、１～２の整数であり、特に好ましくは１である。ａａが２以上の場合、Z^{10}、X^{10}及びY^{10}はそれぞれ複数存在するが、複数のZ^{10}は互いに同一であっても異なっていてもよく、複数のX^{10}は互いに同一であっても異なっていてもよく、複数のY^{10}は互いに同一であっても異なっていてもよい。

また、式（ＣＨ１４）は、式（ＣＨ１）で表される化合物以外の化合物を表す。

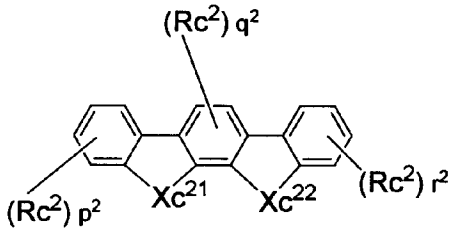
[1053] 前記式（ＣＨ１４）で表される化合物は、下記式（ＣＨ１４－ａ－１）～式（ＣＨ１４－ａ－６）で表される構造のいずれかであることがより好ましい。式（ＣＨ１４）で表される構造においてａａが１であり、Z^{9}、Z^{10}、Z^{11}がベンゼン環であり、X^{9}とY^{9}の一方が単結合であり、X^{10}とY^{10}の一方が単結合である構造が、式（ＣＨ１４－ａ－１）～式（ＣＨ１４－ａ－６）で表される構造である。

[1054]

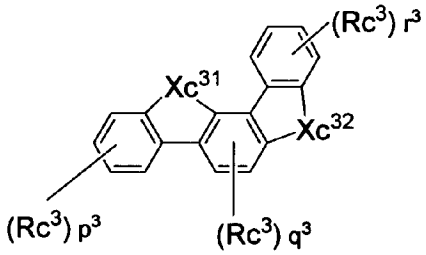
[化747]



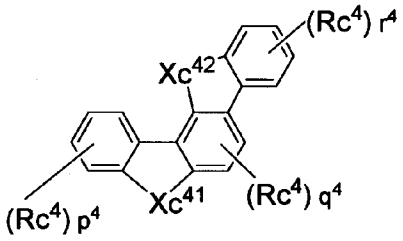
(CH14-a-1)



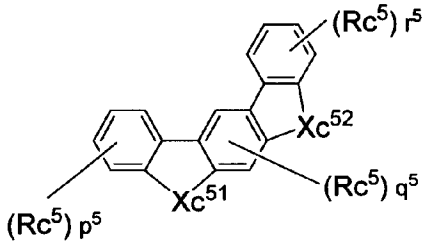
(CH14-a-2)



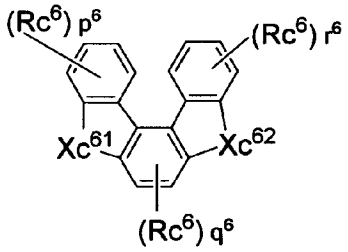
(CH14-a-3)



(CH14-a-4)



(CH14-a-5)



(CH14-a-6)

[1055] 式（ＣＨ１４－ａ－１）中のＸｃ^{11}及びＸｃ^{12}、式（ＣＨ１４－ａ－２）中のＸｃ^{21}及びＸｃ^{22}、式（ＣＨ１４－ａ－３）中のＸｃ^{31}及びＸｃ^{32}、式（ＣＨ１４－ａ－４）中のＸｃ^{41}及びＸｃ^{42}、式（ＣＨ１４－ａ－５）中のＸｃ^{51}及びＸｃ^{52}、並びに式（ＣＨ１４－ａ－６）中のＸｃ^{61}及びＸｃ^{62}は、それぞれ独立に、－ＣＲ$_2$－、－ＮＲ－、－Ｏ－、－Ｓ－、－ＰＲ－、又は－ＳｉＲ$_2$－である。

Ｘｃ^{11}、Ｘｃ^{12}、Ｘｃ^{21}、Ｘｃ^{22}、Ｘｃ^{31}、Ｘｃ^{32}、Ｘｃ^{41}、Ｘｃ^{42}、Ｘｃ^{51}、Ｘｃ^{52}、Ｘｃ^{61}及びＸｃ^{62}におけるＲは、式（ＣＨ２）のＸ^1、Ｘ^2

、Y^1及びY^2におけるＲと同義である。

[1056] 式（ＣＨ１４－ａ－１）中のRc^1、式（ＣＨ１４－ａ－２）中のRc^2、式（ＣＨ１４－ａ－３）中のRc^3、式（ＣＨ１４－ａ－４）中のRc^4、式（ＣＨ１４－ａ－５）中のRc^5、及び式（ＣＨ１４－ａ－６）中のRc^6は、それぞれ独立に、置換若しくは無置換の炭素数１～２０のアルキル基、置換若しくは無置換の環形成炭素数３～２０のシクロアルキル基、置換若しくは無置換の炭素数１～２０のアルコキシ基、置換若しくは無置換の炭素数７～２４のアラルキル基、置換若しくは無置換のアミノ基、置換若しくは無置換のシリル基、置換若しくは無置換の環形成炭素数６～２４の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の環形成炭素数２～２４の芳香族複素環基である。

Ra^1が複数存在する場合に複数のRc^1は互いに同一であっても異なっていてもよく、Rc^2が複数存在する場合に複数のRc^2は互いに同一であっても異なっていてもよく、Rc^3が複数存在する場合に複数のRc^3は互いに同一であっても異なっていてもよく、Rc^4が複数存在する場合に複数のRc^4は互いに同一であっても異なっていてもよく、Rc^5が複数存在する場合に複数のRc^5は互いに同一であっても異なっていてもよく、Rc^6が複数存在する場合に複数のRc^6は互いに同一であっても異なっていてもよい。

式（ＣＨ１４－ａ－１）中のp^1、式（ＣＨ１４－ａ－２）中のp^2、式（ＣＨ１４－ａ－３）中のp^3、式（ＣＨ１４－ａ－４）中のp^4、式（ＣＨ１４－ａ－５）中のp^5、及び式（ＣＨ１４－ａ－６）中のp^6は、それぞれ独立に、０～４の整数である。

式（ＣＨ１４－ａ－１）中のq^1、式（ＣＨ１４－ａ－２）中のq^2、式（ＣＨ１４－ａ－３）中のq^3、式（ＣＨ１４－ａ－４）中のq^4、式（ＣＨ１４－ａ－５）中のq^5、及び式（ＣＨ１４－ａ－６）中のq^6は、それぞれ独立に、０～２の整数である。

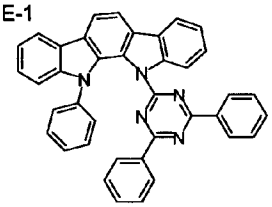
式（ＣＨ１４－ａ－１）中のr^1、式（ＣＨ１４－ａ－２）中のr^2、式（ＣＨ１４－ａ－３）中のr^3、式（ＣＨ１４－ａ－４）中のr^4、式（ＣＨ１

４－ａ－５）中のｒ^{5}、及び式（ＣＨ１４－ａ－１）中のｒ^{6}、は０～４の整数である。

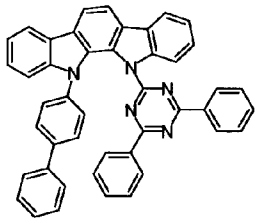
[1057] 以下に、化合物（ＣＨ１４）の具体例を記載するが、これらの具体例に限定されない。

[化748]

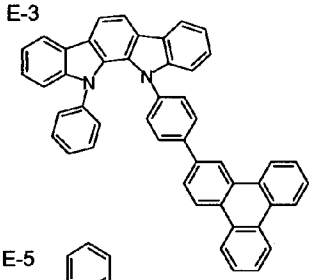
E-1



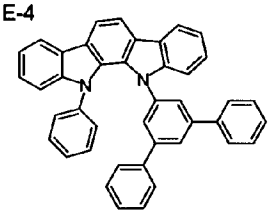
E-2



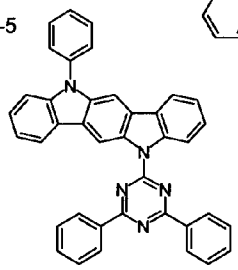
E-3



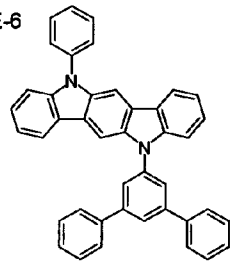
E-4



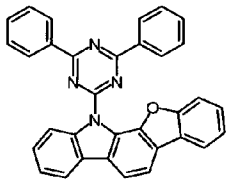
E-5



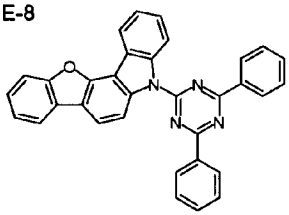
E-6



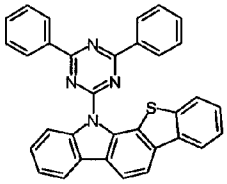
E-7



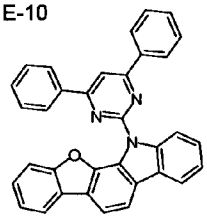
E-8



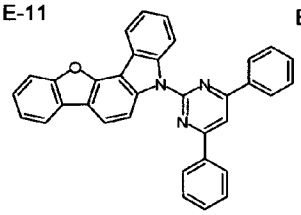
E-9



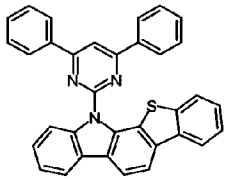
E-10



E-11



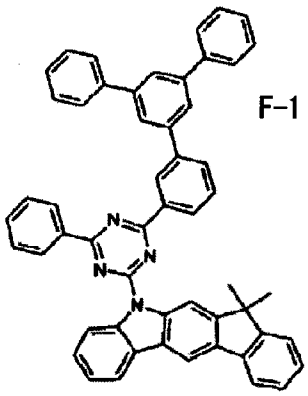
E-12



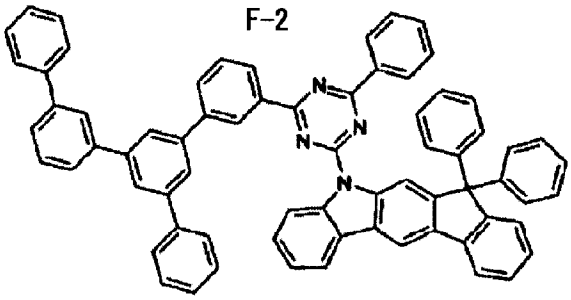
[1058]

[化749]

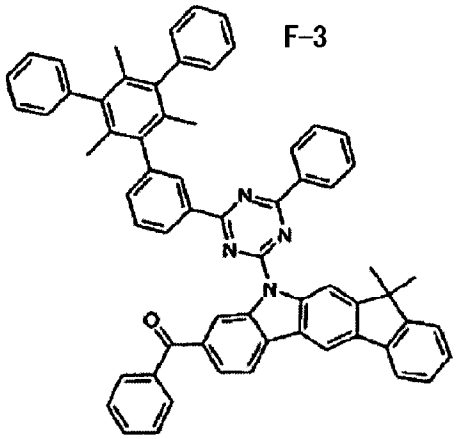
F-1



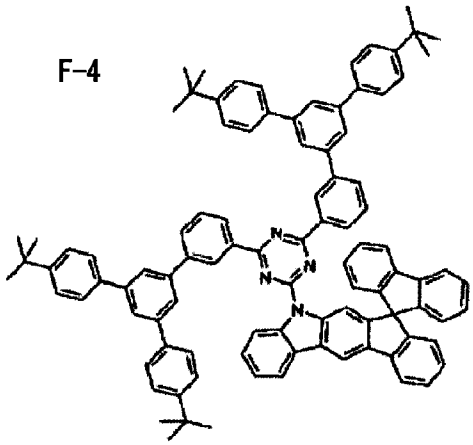
F-2



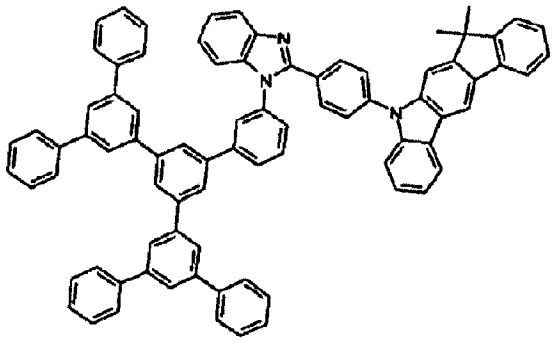
F-3



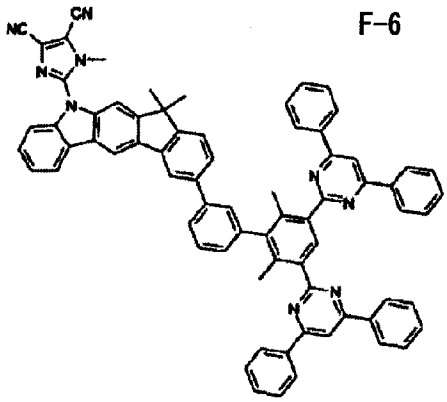
F-4



F-5



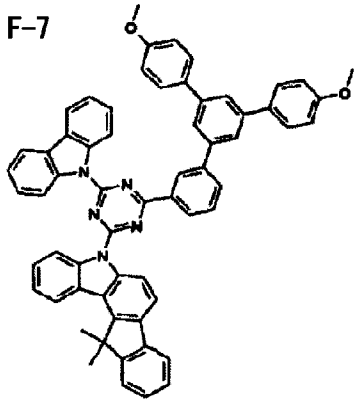
F-6



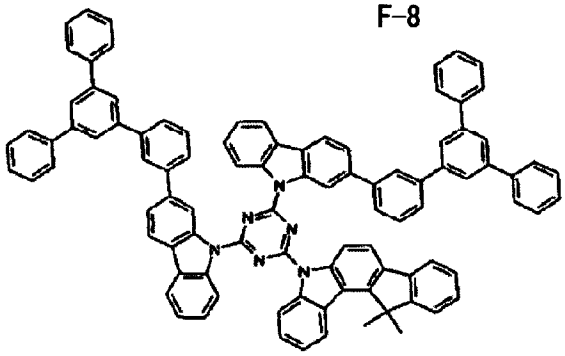
[1059]

[化750]

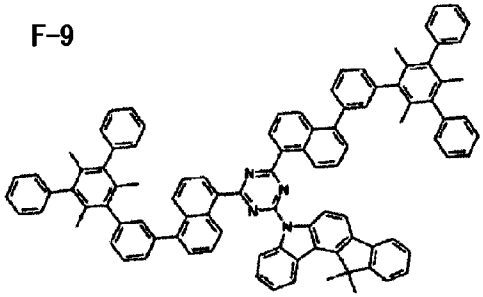
F-7



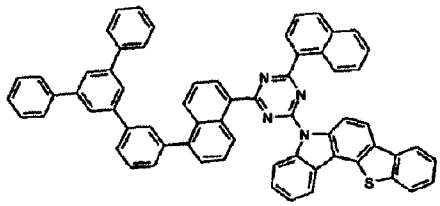
F-8



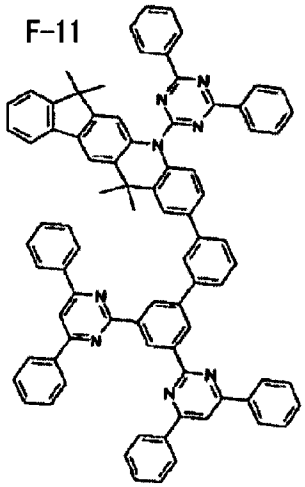
F-9



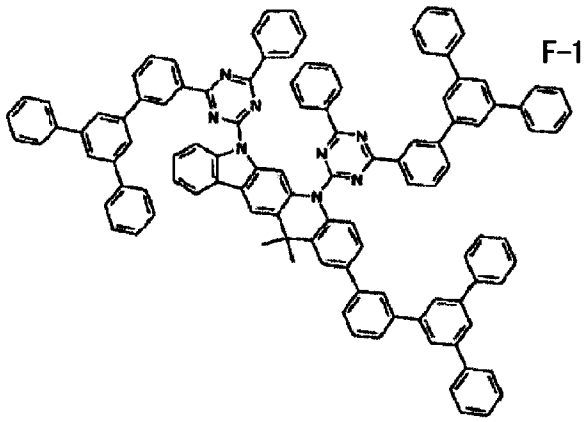
F-10



F-11



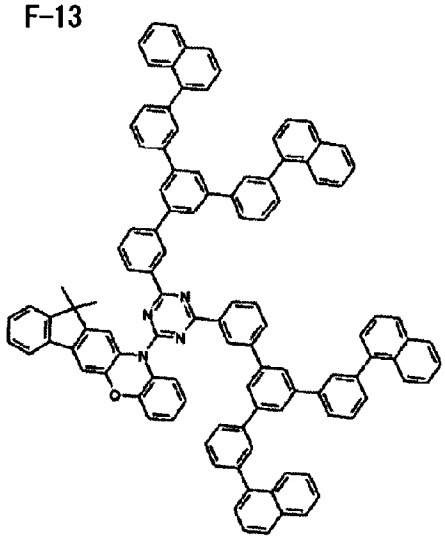
F-12



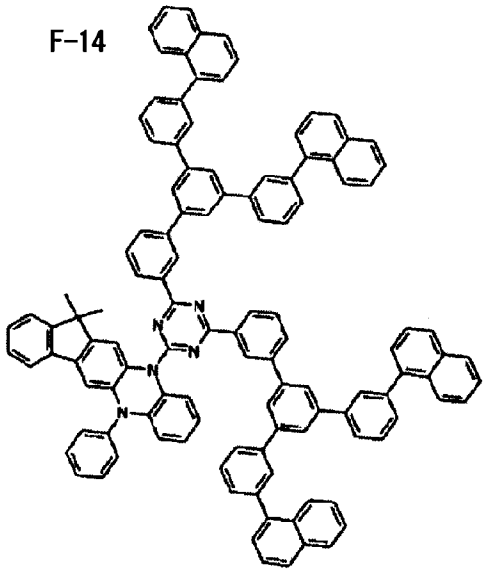
[1060]

[化751]

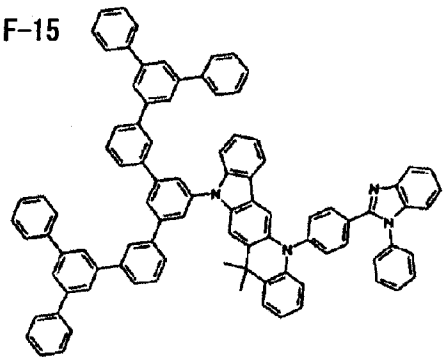
F-13



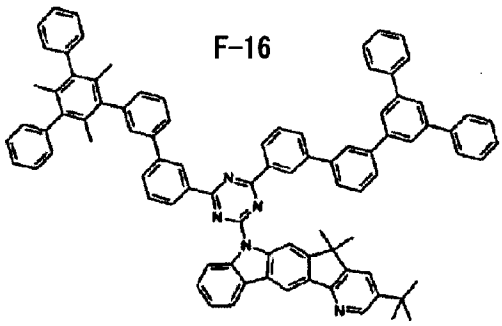
F-14



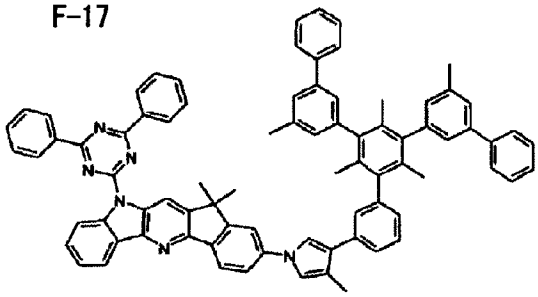
F-15



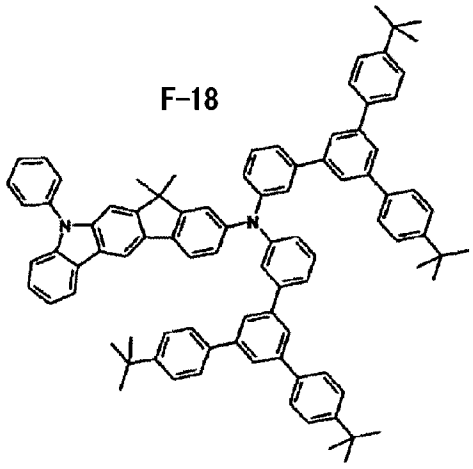
F-16



F-17



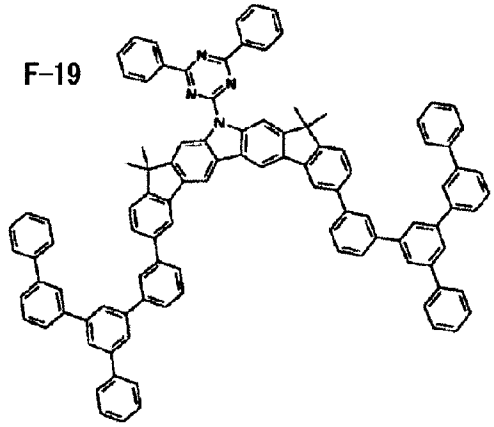
F-18



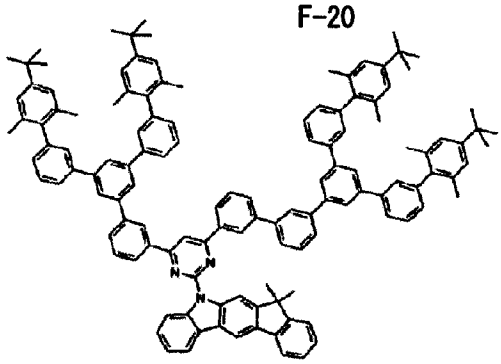
[1061]

[化752]

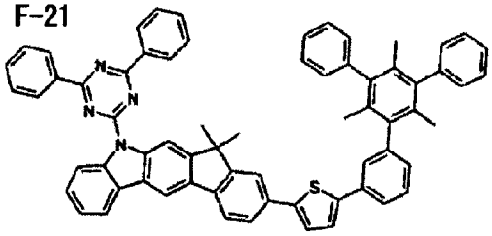
F-19



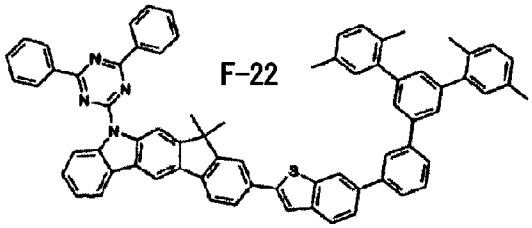
F-20



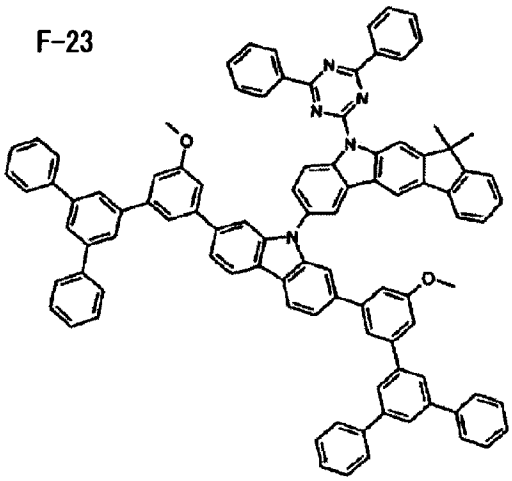
F-21



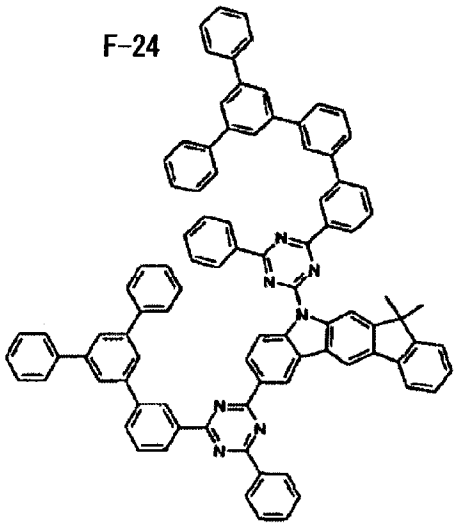
F-22



F-23



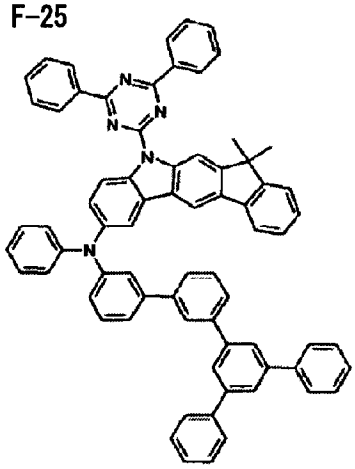
F-24



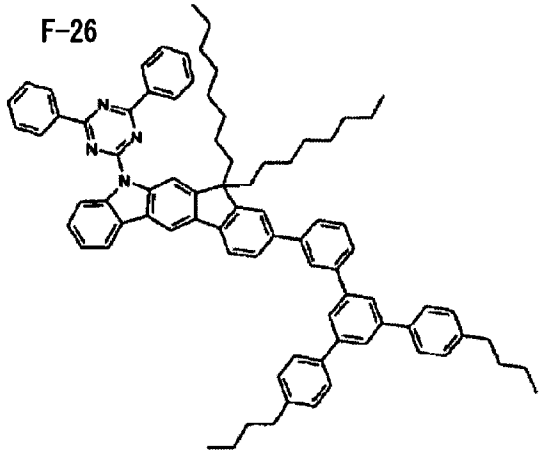
[1062]

[化753]

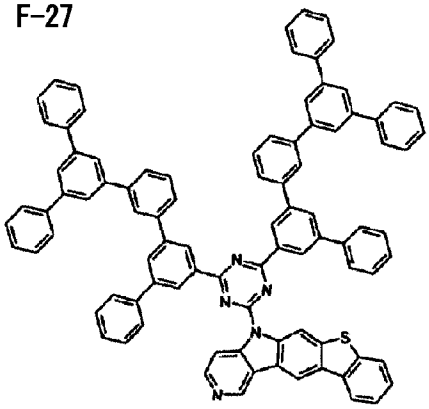
F-25



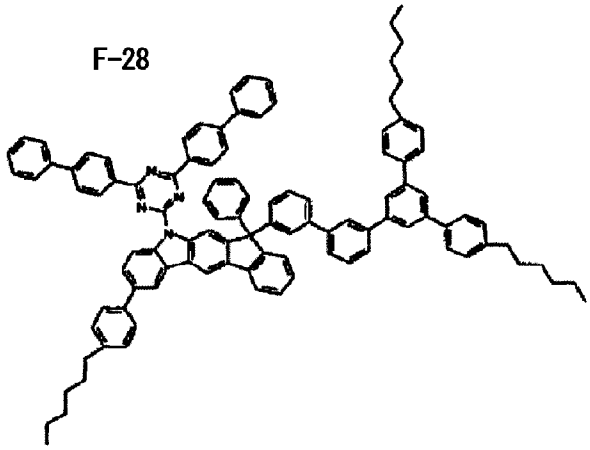
F-26



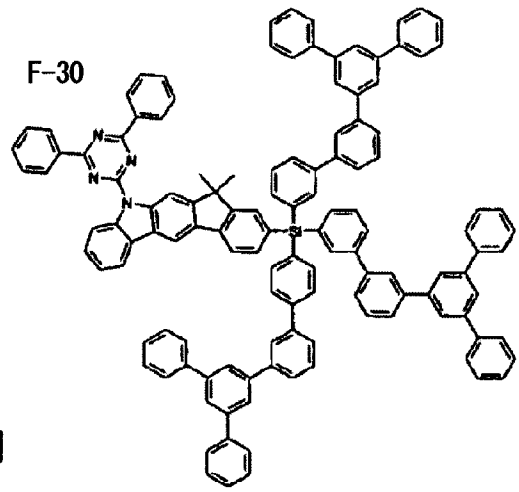
F-27



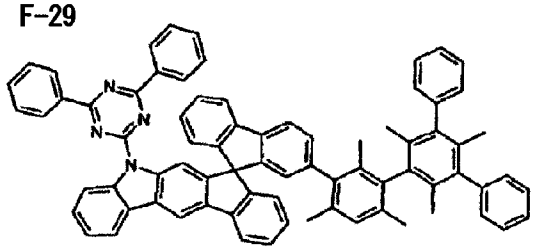
F-28



F-30



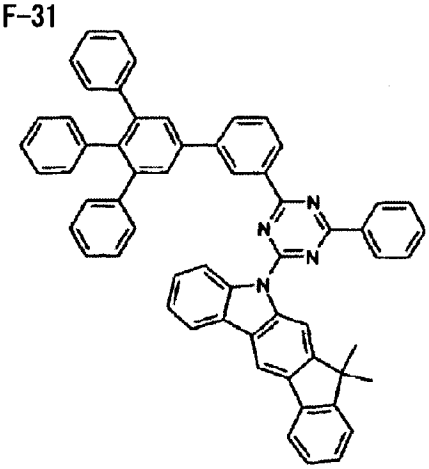
F-29



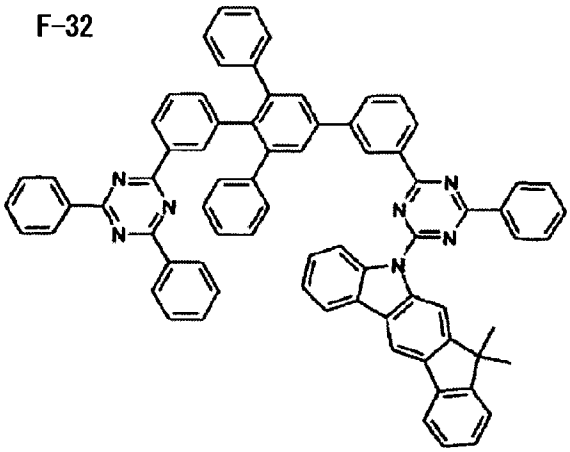
[1063]

[化754]

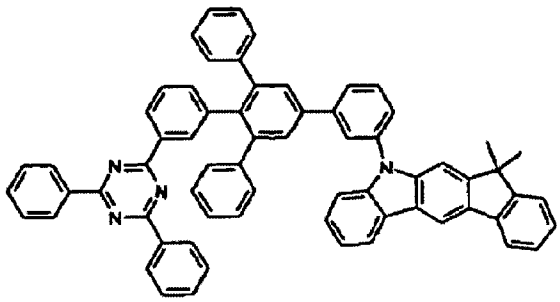
F-31



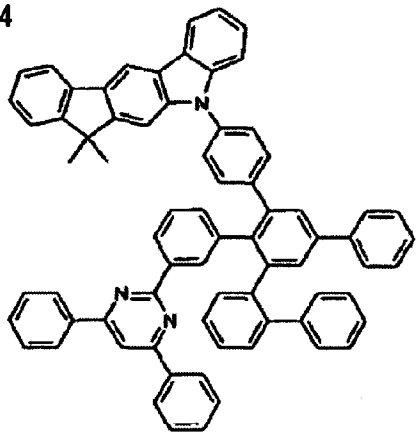
F-32



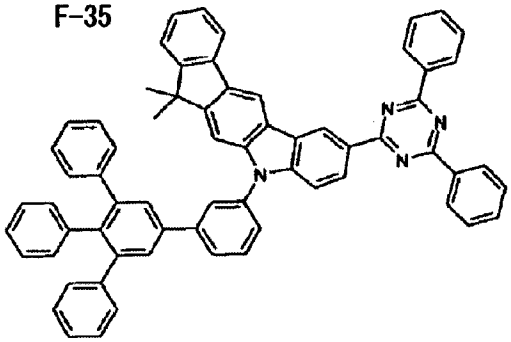
F-33



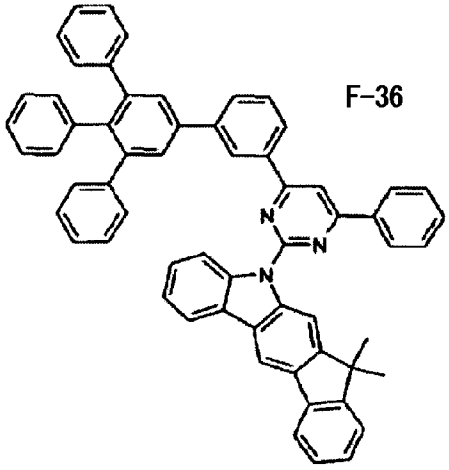
F-34



F-35



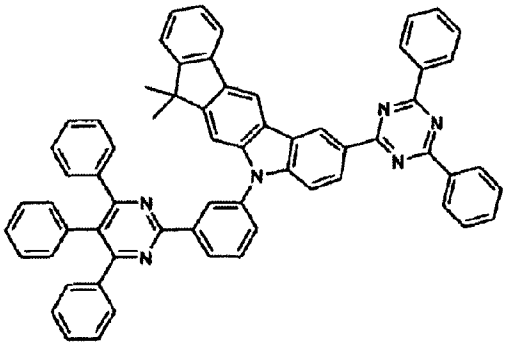
F-36



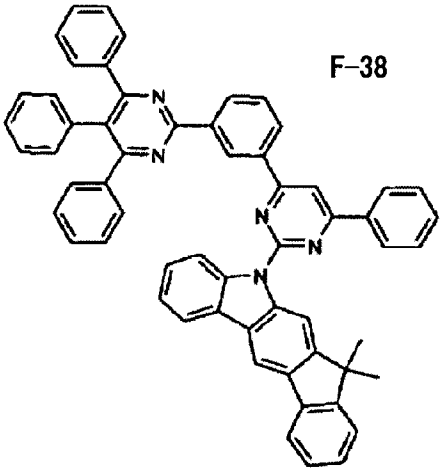
[1064]

[化755]

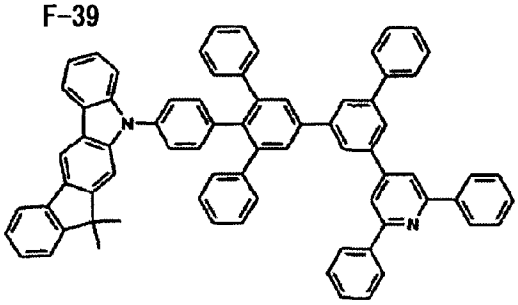
F-37



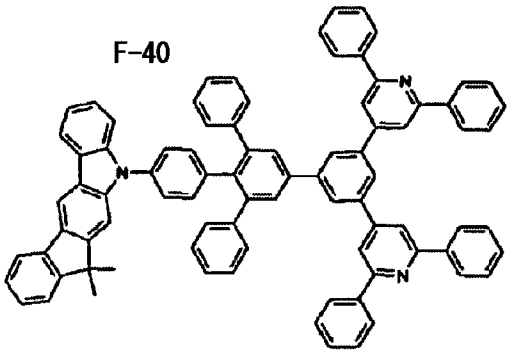
F-38



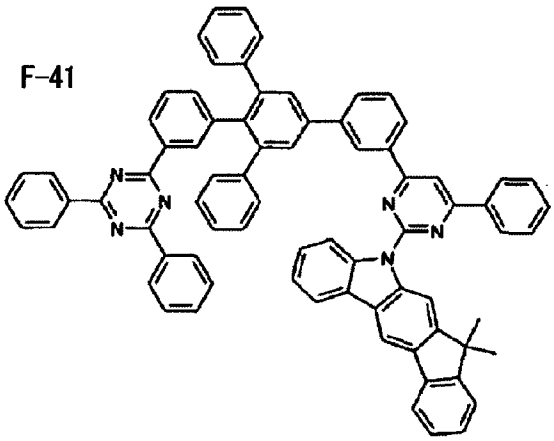
F-39



F-40



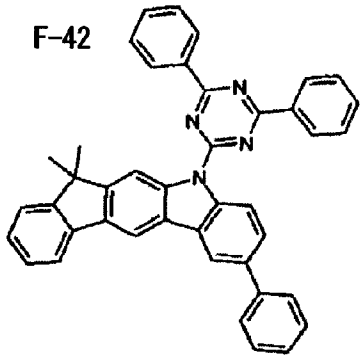
F-41



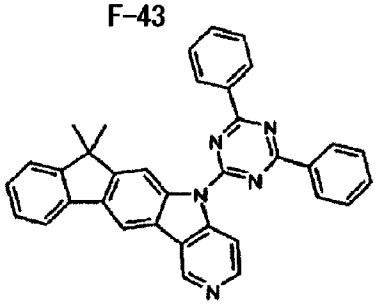
[1065]

[化756]

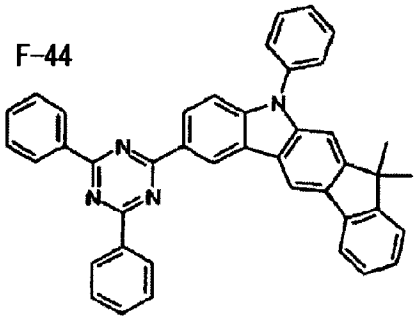
F-42



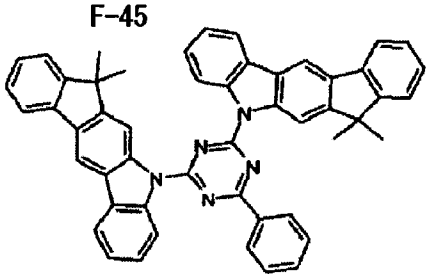
F-43



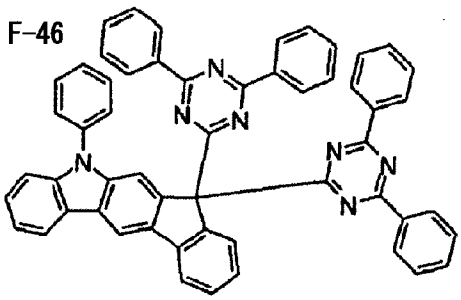
F-44



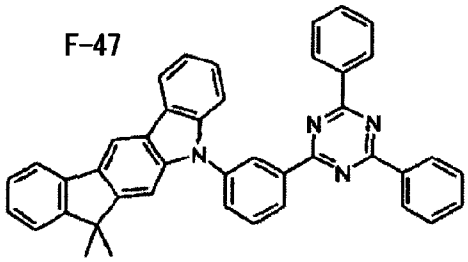
F-45



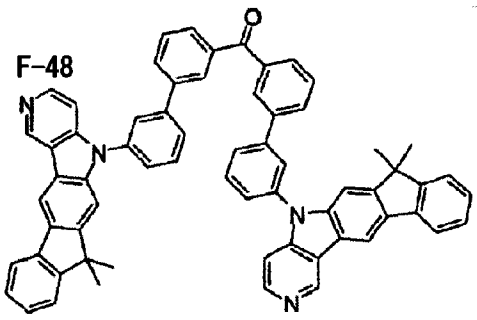
F-46



F-47



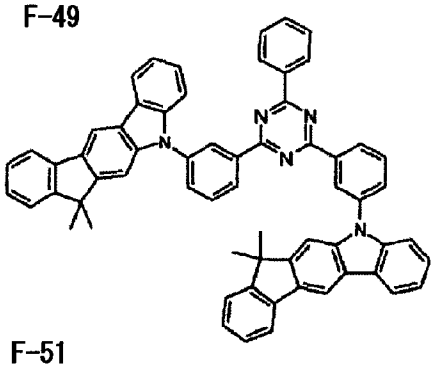
F-48



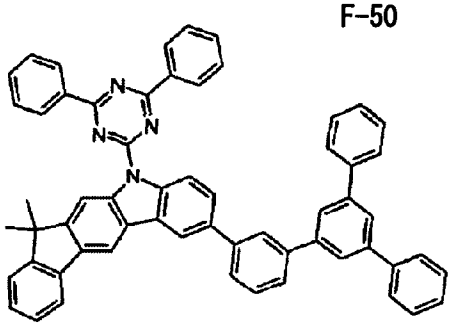
[1066]

[化757]

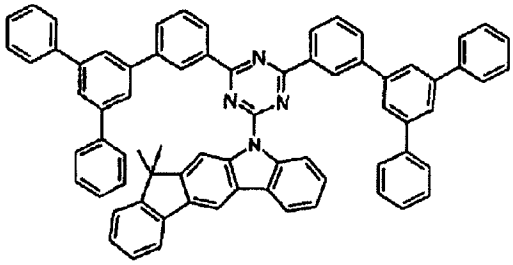
F-49



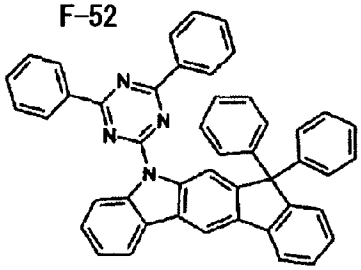
F-50



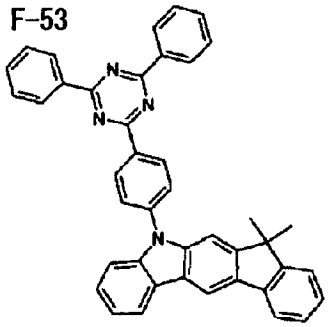
F-51



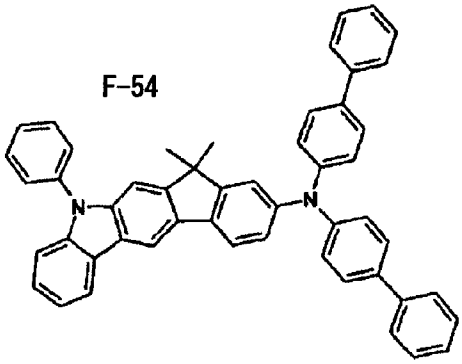
F-52



F-53



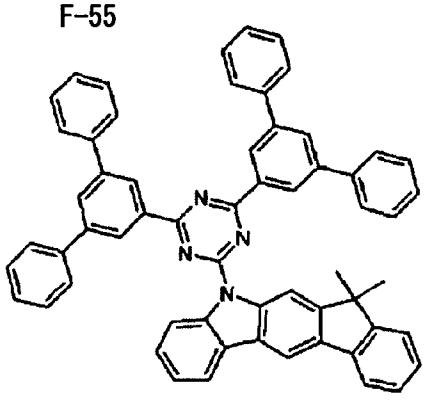
F-54



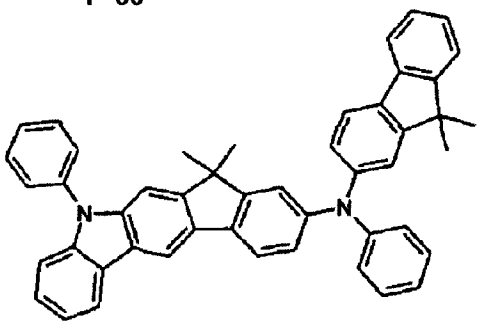
[1067]

[化758]

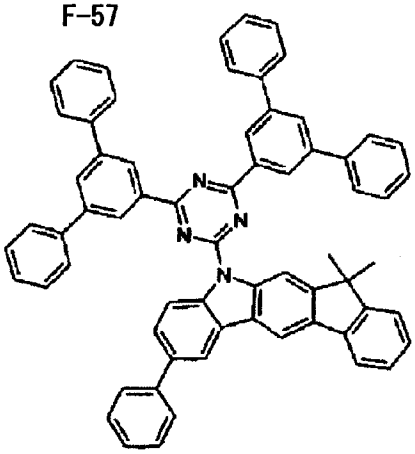
F-55



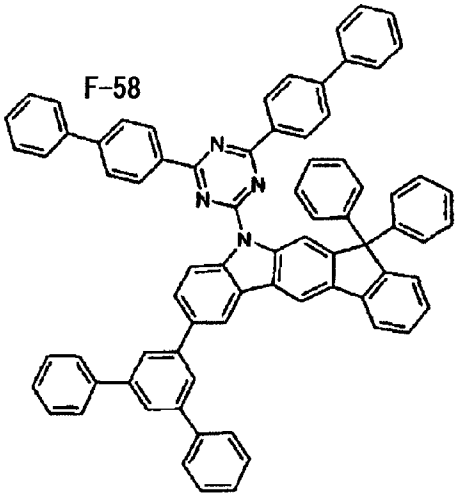
F-56



F-57



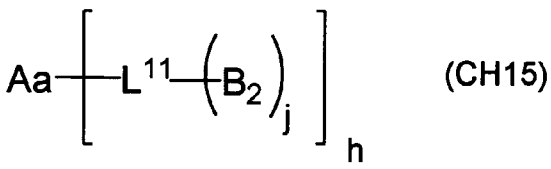
F-58



[1068] [化合物（ＣＨ１５）]

式（ＣＨ１５）の化合物は、正孔輸送能を有する正孔輸送性骨格と電子輸送能を有する電子輸送性骨格を分子内に併せ持つことが好ましい。更に好適には、B_2の構造部分が正孔輸送性骨格有し、Ａａの構造部分が電子輸送性骨格を有する。

[化759]



(CH15)

[1069] 以下、式（ＣＨ１５）について説明する。

Ａａは、式（ＣＨ１）のＡと同義であり、Ｌ^{11}は式（ＣＨ１）のＬ^{1}と同義であり、Ｂ$_2$は、前記式（ＣＨ２）で表される構造の残基である。

ｈは、１以上の整数であり、ｈの上限はＡａの構造に依存して決定され、特に限定されるわけではないが、好ましくは１～１０程度の範囲から選ばれるのが好ましい。より好ましくは、１～３であり、更に好ましくは、１又は２である。

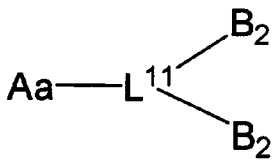
ｊは、１以上の整数であり、ｊの上限はＬ^{11}の構造に依存して決定され、特に限定されるわけではないが、好ましくは２又は３である。

ただし、ｈ＋ｊは３以上の整数である。

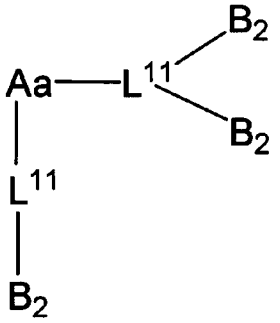
複数のＬ^{11}は互いに同一であっても異なっていてもよく、複数のＢ$_2$は互いに同一であっても異なっていてもよい。溶解性の観点では、Ｌ^{11}とＢ$_2$で形成される構造が互いに異なり、Ａａに対して非対称となる構造の化合物が好ましい。

[1070] 式（ＣＨ１５）で表される化合物は、下記式（ＣＨ１５－ｉ）又は下記式（ＣＨ１５－ｉｉ）で表される化合物であることが好ましい。

[1071] [化760]



(CH15-i)



(CH15-ii)

[1072] 式（ＣＨ１５－ｉ）中、Ａａ、Ｌ^{11}、Ｂ$_2$は、式（ＣＨ１５）中のそれらの記号と同義であり、複数のＬ^{11}は互いに同一であっても異なっていてもよく

、複数のB_2は互いに同一であっても異なっていてもよい。

式（ＣＨ１５－ii）中、Ａａ、L^{11}、B_2は、式（ＣＨ１５）中のそれらの記号と同義であり、複数のL^{11}は互いに同一であっても異なっていてもよく、複数のB_2は互いに同一であっても異なっていてもよい。

[1073] （有機ＥＬ素子）

次に、本発明の一態様の有機ＥＬ素子について説明する。

本発明の一態様の有機ＥＬ素子は、陰極、陽極、及び該陰極と該陽極の間に一層以上の有機薄膜層を有する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、前記本発明の組成物又は前記本発明の化合物を含む層である、有機エレクトロルミネッセンス素子である。

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

[1074] 本発明の一態様において、有機ＥＬ素子は、蛍光又は燐光発光型の単色発光素子であっても、蛍光／燐光ハイブリッド型の白色発光素子であってもよいし、単独の発光ユニットを有するシンプル型であっても、複数の発光ユニットを有するタンデム型であってもよく、中でも、燐光発光型であることが好ましい。ここで、「発光ユニット」とは、一層以上の有機層を含み、そのうちの一層が発光層であり、注入された正孔と電子が再結合することにより発光することができる最小単位をいう。

[1075] 従って、シンプル型有機ＥＬ素子の代表的な素子構成としては、以下の素子構成を挙げることができる。

（１）陽極／発光ユニット／陰極

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

（ａ）正孔輸送層／発光層（／電子輸送層）

（ｂ）正孔輸送層／第一燐光発光層／第二燐光発光層（／電子輸送層）

（ｃ）正孔輸送層／燐光発光層／スペース層／蛍光発光層（／電子輸送層）

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

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

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

（ｇ）正孔輸送層／電子障壁層／発光層（／電子輸送層）

（ｈ）正孔輸送層／発光層／正孔障壁層（／電子輸送層）

（ｉ）正孔輸送層／蛍光発光層／トリプレット障壁層（／電子輸送層）

[1076] 上記各燐光又は蛍光発光層は、それぞれ互いに異なる発光色を示すものとすることができる。具体的には、上記積層発光ユニット（ｄ）において、正孔輸送層／第一燐光発光層（赤色発光）／第二燐光発光層（緑色発光）／スペース層／蛍光発光層（青色発光）／電子輸送層といった層構成等が挙げられる。

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

[1077] タンデム型有機ＥＬ素子の代表的な素子構成としては、以下の素子構成を

挙げることができる。

（２）陽極／第一発光ユニット／中間層／第二発光ユニット／陰極

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

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

[1078] 図１に、前記有機ＥＬ素子の一例の概略構成を示す。有機ＥＬ素子１は、基板２、陽極３、陰極４、及び該陽極３と陰極４との間に配置された発光ユニット１０とを有する。発光ユニット１０は、燐光ホスト材料と燐光ドーパント（燐光発光材料）を含む少なくとも１つの燐光発光層を含む発光層５を有する。発光層５と陽極３との間に正孔注入・輸送層（陽極側有機薄膜層）６等、発光層５と陰極４との間に電子注入・輸送層（陰極側有機薄膜層）７等を形成してもよい。また、発光層５の陽極３側に電子障壁層（図示せず）を、発光層５の陰極４側に正孔障壁層（図示せず）を、それぞれ設けてもよい。これにより、電子や正孔を発光層５に閉じ込めて、発光層５における励起子の生成確率をさらに高めることができる。

[1079] なお、本発明において、蛍光ドーパント（蛍光発光材料）と組み合わされたホストを蛍光ホストと称し、燐光ドーパントと組み合わされたホストを燐光ホストと称する。蛍光ホストと燐光ホストは分子構造のみにより区分されるものではない。すなわち、燐光ホストとは、燐光ドーパントを含有する燐光発光層を形成する材料を意味し、蛍光発光層を形成する材料として利用できないことを意味しているわけではない。蛍光ホストについても同様である。

[1080] （基板）

基板は、発光素子の支持体として用いられる。基板としては、例えば、ガラス、石英、プラスチックなどを用いることができる。また、可撓性基板を用いてもよい。可撓性基板とは、折り曲げることができる（フレキシブル）

基板のことであり、例えば、ポリカーボネート、ポリ塩化ビニルからなるプラスチック基板等が挙げられる。

[1081]（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、およびこれらの混合物などを用いることが好ましい。具体的には、例えば、酸化インジウム－酸化スズ（ＩＴＯ：Ｉｎｄｉｕｍ　Ｔｉｎ　Ｏｘｉｄｅ）、珪素若しくは酸化珪素を含有した酸化インジウム－酸化スズ、酸化インジウム－酸化亜鉛、酸化タングステン、およ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）、または金属材料の窒化物（例えば、窒化チタン）等が挙げられる。

[1082]（陰極）

陰極には、仕事関数の小さい（具体的には３．８ｅＶ以下）金属、合金、電気伝導性化合物、およびこれらの混合物などを用いることが好ましい。このような陰極材料の具体例としては、元素周期表の第１族または第２族に属する元素、すなわちリチウム（Ｌｉ）やセシウム（Ｃｓ）等のアルカリ金属、およびマグネシウム（Ｍｇ）等のアルカリ土類金属、およびこれらを含む合金（例えば、ＭｇＡｇ、ＡｌＬｉ）等の希土類金属およびこれらを含む合金等が挙げられる。

[1083]（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。

[1084] 発光層に用いることができる青色系の蛍光発光材料として、ピレン誘導体、スチリルアミン誘導体、クリセン誘導体、フルオランテン誘導体、フルオレン誘導体、ジアミン誘導体、トリアリールアミン誘導体等が使用できる。

具体的には、Ｎ，Ｎ’－ビス［４－（９Ｈ－カルバゾール－９－イル）フェニル］－Ｎ，Ｎ’－ジフェニルスチルベン－４，４’－ジアミン（略称：ＹＧＡ２Ｓ）、４－（９Ｈ－カルバゾール－９－イル）－４’－（１０－フェニル－９－アントリル）トリフェニルアミン（略称：ＹＧＡＰＡ）、４－（１０－フェニル－９－アントリル）－４’－（９－フェニル－９Ｈ－カルバゾール－３－イル）トリフェニルアミン（略称：ＰＣＢＡＰＡ）などが挙げられる。

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

発光層に用いることができる赤色系の蛍光発光材料として、テトラセン誘導体、ジアミン誘導体等が使用できる。具体的には、Ｎ，Ｎ，Ｎ’，Ｎ’－テトラキス（４－メチルフェニル）テトラセン－５，１１－ジアミン（略称：ｐ－ｍＰｈＴＤ）、７，１４－ジフェニル－Ｎ，Ｎ，Ｎ’，Ｎ’－テトラキス（４－メチルフェニル）アセナフト［１，２－ａ］フルオランテン－３，１０－ジアミン（略称：ｐ－ｍＰｈＡＦＤ）などが挙げられる。

[1085] 発光層に用いることができる青色系の燐光発光材料として、イリジウム錯体、オスミウム錯体、白金錯体等の金属錯体、好ましくはイリジウム、オス

ミウム又は白金金属のオルトメタル化錯体が使用される。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’ビストリフルオロメチルフェニル）ピリジナト－Ｎ，Ｃ２’］イリジウム（ＩＩＩ）ピコリナート（略称：Ｉｒ（ＣＦ３ｐｐｙ）２（ｐｉｃ））、ビス［２－（４’，６’－ジフルオロフェニル）ピリジナト－Ｎ，Ｃ２’］イリジウム（III）アセチルアセトナート（略称：ＦＩｒａｃａｃ）などが挙げられる。

発光層に用いることができる緑色系の燐光発光材料として、イリジウム錯体等が使用される。トリス（２－フェニルピリジナト－Ｎ，Ｃ２’）イリジウム（III）（略称：Ｉｒ（ｐｐｙ）３）、ビス（２－フェニルピリジナト－Ｎ，Ｃ２’）イリジウム（III）アセチルアセトナート（略称：Ｉｒ（ｐｐｙ）２（ａｃａｃ））、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（ａｃａｃ））、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（ａｃａｃ））などが挙げられる。

発光層に用いることができる赤色系の燐光発光材料として、イリジウム錯体、白金錯体、テルビウム錯体、ユーロピウム錯体等の金属錯体が使用される。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，Ｃ３’］イリジウム（III）アセチルアセトナート（略称：Ｉｒ（ｂｔｐ）２（ａｃａｃ））、ビス（１－フェニルイソキノリナト－Ｎ，Ｃ２’）イリジウム（III）アセチルアセトナート（略称：Ｉｒ（ｐｉｑ）２（ａｃａｃ））、（アセチルアセトナト）ビス［２，３－ビス（４－フルオロフェニル）キノキサリナト］イリジウム（III）（略称：Ｉｒ（Ｆｄｐｑ）２（ａｃａｃ））、２，３，７，８，１２，１３，１７，１８－オクタエチル－２１Ｈ，２３Ｈ－ポルフィリン白金（II）（略称：ＰｔＯＥＰ）等の有機金属錯体が挙げられる。

また、トリス（アセチルアセトナト）（モノフェナントロリン）テルビウム（III）（略称：Ｔｂ（ａｃａｃ）３（Ｐｈｅｎ））、トリス（１，３－ジフェニル－１，３－プロパンジオナト）（モノフェナントロリン）ユーロピウム（III）（略称：Ｅｕ（ＤＢＭ）３（Ｐｈｅｎ））、トリス［１－（２－テノイル）－３，３，３－トリフルオロアセトナト］（モノフェナントロリン）ユーロピウム（III）（略称：Ｅｕ（ＴＴＡ）３（Ｐｈｅｎ））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。

[1086]（発光層のホスト材料）

発光層としては、上述した発光性の高い物質（ゲスト材料）を他の物質（ホスト材料）に分散させた構成としてもよい。発光性の高い物質を分散させるための物質としては、各種のものを用いることができ、発光性の高い物質よりも最低空軌道準位（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、本発明の前記組成物又は本発明の前記化合物が好ましい。

本発明の一態様である化合物以外にも、例えば、１）アルミニウム錯体、ベリリウム錯体、若しくは亜鉛錯体等の金属錯体、２）オキサジアゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、若しくはフェナントロリン誘導体等の複素環化合物、３）カルバゾール誘導体、アントラセン誘導体、フェナントレン誘導体、ピレン誘導体、若しくはクリセン誘導体等の縮合芳香族化合物、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を使用できる。より具体的には、トリス（８－キノリノラト）アルミニウム（III）（略称：Ａｌｑ）、トリス（４－メチル－８－キノリノラト）アルミニウム（III）（略称：Ａｌｍｑ３）、ビス（１０－ヒドロキシベンゾ［ｈ］キノリナト）ベリリウム（ＩＩ）（略称：ＢｅＢｑ２）、ビス（２－メチル－８－キノリノラト）（４－フェニルフェノラト）アルミニウム（III）（略称：ＢＡｌｑ）、ビス（８－キノリノラト）亜鉛（II）

（略称：Ｚｎｑ）、ビス［２－（２－ベンゾオキサゾリル）フェノラト］亜鉛（II）（略称：ＺｎＰＢＯ）、ビス［２－（２－ベンゾチアゾリル）フェノラト］亜鉛（II）（略称：ＺｎＢＴＺ）などの金属錯体、２－（４－ビフェニリル）－５－（４－ｔｅｒｔ－ブチルフェニル）－１，３，４－オキサジアゾール（略称：ＰＢＤ）、１，３－ビス［５－（ｐ－ｔｅｒｔ－ブチルフェニル）－１，３，４－オキサジアゾール－２－イル］ベンゼン（略称：ＯＸＤ－７）、３－（４－ビフェニリル）－４－フェニル－５－（４－ｔｅｒｔ－ブチルフェニル）－１，２，４－トリアゾール（略称：ＴＡＺ）、２，２’，２’’－（１，３，５－ベンゼントリイル）トリス（１－フェニル－１Ｈ－ベンゾイミダゾール）（略称：ＴＰＢＩ）、バソフェナントロリン（略称：ＢＰｈｅｎ）、バソキュプロイン（略称：ＢＣＰ）などの複素環化合物や、９－［４－（１０－フェニル－９－アントリル）フェニル］－９Ｈ－カルバゾール（略称：ＣｚＰＡ）、３，６－ジフェニル－９－［４－（１０－フェニル－９－アントリル）フェニル］－９Ｈ－カルバゾール（略称：ＤＰＣｚＰＡ）、９，１０－ビス（３，５－ジフェニルフェニル）アントラセン（略称：ＤＰＰＡ）、９，１０－ジ（２－ナフチル）アントラセン（略称：ＤＮＡ）、２－ｔｅｒｔ－ブチル－９，１０－ジ（２－ナフチル）アントラセン（略称：ｔ－ＢｕＤＮＡ）、９，９’－ビアントリル（略称：ＢＡＮＴ）、９，９’－（スチルベン－３，３’－ジイル）ジフェナントレン（略称：ＤＰＮＳ）、９，９’－（スチルベン－４，４’－ジイル）ジフェナントレン（略称：ＤＰＮＳ２）、３，３’，３’’－（ベンゼン－１，３，５－トリイル）トリピレン（略称：ＴＰＢ３）、９，１０－ジフェニルアントラセン（略称：ＤＰＡｎｔｈ）、６，１２－ジメトキシ－５，１１－ジフェニルクリセンなどの縮合芳香族化合物、Ｎ，Ｎ－ジフェニル－９－［４－（１０－フェニル－９－アントリル）フェニル］－９Ｈ－カルバゾール－３－アミン（略称：ＣｚＡ１ＰＡ）、４－（１０－フェニル－９－アントリル）トリフェニルアミン（略称：ＤＰｈＰＡ）、Ｎ，９－ジフェニル－Ｎ－［４－（１０－フェニル－９－アントリル）フェニル］－９Ｈ－カルバゾール－３－アミン（

略称：ＰＣＡＰＡ）、Ｎ，９－ジフェニル－Ｎ－｛４－［４－（１０－フェニル－９－アントリル）フェニル］フェニル｝－９Ｈ－カルバゾール－３－アミン（略称：ＰＣＡＰＢＡ）、Ｎ－（９，１０－ジフェニル－２－アントリル）－Ｎ，９－ジフェニル－９Ｈ－カルバゾール－３－アミン（略称：２ＰＣＡＰＡ）、ＮＰＢ（またはα－ＮＰＤ）、ＴＰＤ、ＤＦＬＤＰＢｉ、ＢＳＰＢなどの芳香族アミン化合物などをホスト材料として用いることができる。また、発光性の高い物質（ゲスト材料）を分散させるための物質（ホスト材料）は複数種用いることができる。

[1087]（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。

[1088]（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（ＬｉＯｘ）等のようなアルカリ金属、アルカリ土類金属、またはそれらの化合物を用いることができる。

[1089]（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。

[1090]（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事ができる。ポリ（Ｎ－ビニルカルバゾール）（略称：ＰＶＫ）やポリ（４－ビニルトリフェニルアミン）（略称：ＰＶＴＰＡ）等の高分子化合物を用いることもできる。但し、電子よりも正孔の輸送性の高い物質であれば、これら以外のものを用いてもよい。なお、正孔輸送性の高い物質を含む層は、単層のものだけでなく、上記物質からなる層が二層以上積層したものとしてもよい。

[1091] 本発明の一態様において、有機ＥＬ素子の各層は従来公知の真空蒸着法、スピンコーティング法等により形成することができる。例えば、真空蒸着法、分子線蒸着法（ＭＢＥ法）、あるいは、層を形成する化合物の溶液を用いた、ディッピング法、スピンコーティング法、キャスティング法、バーコート法、ロールコート法等の塗布法による公知の方法で形成することができる。

[1092] 各有機層の膜厚は特に制限されないが、一般に膜厚が薄すぎるとピンホール等の欠陥が生じやすく、逆に厚すぎると高い駆動電圧が必要となり効率が悪くなるため、通常は数ｎｍから１μｍの範囲が好ましい。

[1093] 前記本発明の組成物又は化合物を含有する層（発光層、正孔輸送層、電子輸送層）は、溶媒及び前記本発明の組成物又は化合物を含む溶液（インク組成物）を用いて上記塗布法により成膜することが好ましい。なお、当該溶液には、必要に応じて、ドーパント等の他の材料を含んでもよい。

[1094] 塗布法としては、湿式成膜法が好適に用いられ、凸版印刷法、凹版印刷法、平版印刷法、孔版印刷法、及び、それらとオフセット印刷法を組み合わせた印刷法、インクジェット印刷法、ディスペンサー塗布スピンコート法、バーコート法、ディップコート法、スプレーコート法、スリットコート法、ロールコート法、キャップコート法、グラビアロールコート法、メニスカスコート法等が適用できる。特に微細なパターニングを要する場合、凸版印刷法、凹版印刷法、平版印刷法、孔版印刷法、及び、それらとオフセット印刷法

を組み合わせた印刷法、インクジェット印刷法、ディスペンサー塗布等が好ましい。また、転写前駆基板へ本重合体を前記の湿式成膜法により成膜した後、レーザー光や熱プレスなどで対象とする電極を有する配線基板上へ転写する方法を用いることもできる。

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

[1095] 塗布法に使用する塗布液（インク組成物）は、少なくとも１種類の前記本発明の組成物又は化合物を含有していればよく、溶媒に溶解していても、分散していてもよい。

上記塗布液（インク組成物）中の前記本発明の組成物又は化合物の含有量は、成膜用溶液全体に対して０．１～１５質量％が好ましく、０．１～１０質量％がより好ましく、０．３～５質量％がさらに好ましく、０．３～３質量％が特に好ましい。

溶媒は好ましくは有機溶媒であり、当該有機溶媒としては、例えばクロロホルム、クロロベンゼン、クロロトルエン、クロロキシレン、クロロアニソール、ジクロロメタン、ジクロロベンゼン、ジクロロトルエン、ジクロロエタン、トリクロロエタン、トリクロロベンゼン、トリクロロメチルベンゼン、ブロモベンゼン、ジブロモベンゼン、ブロモアニソール等の塩素系溶媒、テトラヒドロフラン、ジオキサン、ジオキソラン、オキサゾール、メチルベンゾオキサゾール、ベンゾイソオキサゾール、フラン、フラザン、ベンゾフラン、ジヒドロベンゾフラン等のエーテル系溶媒、エチルベンゼン、ジエチルベンゼン、トリエチルベンゼン、トリメチルベンゼン、トリメトキシベンゼン、プロピルベンゼン、イソプロピルベンゼン、ジイソプロピルベンゼン、ジブチルベンゼン、アミルベンゼン、ジヘキシルベンゼン、シクロヘキシルベンゼン、テトラメチルベンゼン、ドデシルベンゼン、ベンゾニトリル、アセトフェノン、メチルアセトフェノン、メトキシアセトフェノン、トルイル酸エチルエステル、トルエン、エチルトルエン、メトキシトルエン、ジメトキシトルエン、トリメトキシトルエン、イソプロピルトルエン、キシレン

、ブチルキシレン、イソプロピルキシレン、アニソール、エチルアニソール、ジメチルアニソール、トリメチルアニソール、プロピルアニソール、イソプロピルアニソール、ブチルアニソール、メチルエチルアニソール、アネトールアニシルアルコール、安息香酸メチル、安息香酸エチル、安息香酸プロピル、安息香酸ブチル、ジフェニルエーテル、ブチルフェニルエーテル、ベンジルメチルエーテル、ベンジルエチルエーテル、メチレンジオキシベンゼン、メチルナフタレン、テトラヒドロナフタレン、アニリン、メチルアニリン、エチルアニリン、ブチルアニリン、ビフェニル、メチルビフェニル、イソプロピルビフェニル等の芳香族炭化水素系溶媒、シクロヘキサン、メチルシクロヘキサン、ｎ－ペンタン、ｎ－ヘキサン、ｎ－ヘプタン、ｎ－オクタン、ｎ－ノナン、ｎ－デカン、テトラデカン、デカリン、イソプロピルシクロヘキサン等の脂肪族炭化水素系溶媒、アセトン、メチルエチルケトン、シクロヘキサノン、アセトフェノン等のケトン系溶媒、酢酸エチル、酢酸ブチル、エチルセロソルブアセテート、安息香酸メチル、酢酸フェニル等のエステル系溶媒、エチレングリコール、エチレングリコールモノブチルエーテル、エチレングリコールモノエチルエーテル、エチレングリコールモノメチルエーテル、ジメトキシエタン、プロピレングリコール、ジエトキシメタン、トリエチレングリコールモノエチルエーテル、グリセリン、１，２－ヘキサンジオール等の多価アルコール及びその誘導体、メタノール、エタノール、プロパノール、イソプロパノール、シクロヘキサノール等のアルコール系溶媒、ジメチルスルホキシド等のスルホキシド系溶媒、Ｎ－メチル－２－ピロリドン、Ｎ，Ｎ－ジメチルホルムアミド等のアミド系溶媒が例示される。また、これらの有機溶媒は、単独で、又は複数組み合わせて用いることができる。

[1096] 上記の溶媒のうち、溶解性、成膜の均一性、粘度特性等の観点から、少なくともトルエン、キシレン、エチルベンゼン、アミルベンゼン、アニソール、４－メトキシトルエン、２－メトキシトルエン、１，２－ジメトキシベンゼン、メシチレン、テトラヒドロナフタレン、シクロヘキシルベンゼン、２

，３－ジヒドロベンゾフラン、シクロヘキサノン、メチルシクロヘキサノンのいずれか１種以上を含むことが好ましい。

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

[1097] 本発明の一態様において、有機エレクトロルミネッセンス素子は、有機ＥＬパネルモジュール等の表示部品、テレビ、携帯電話、パーソナルコンピュータ等の表示装置、及び、照明、車両用灯具の発光装置等の電子機器に使用できる。

実施例

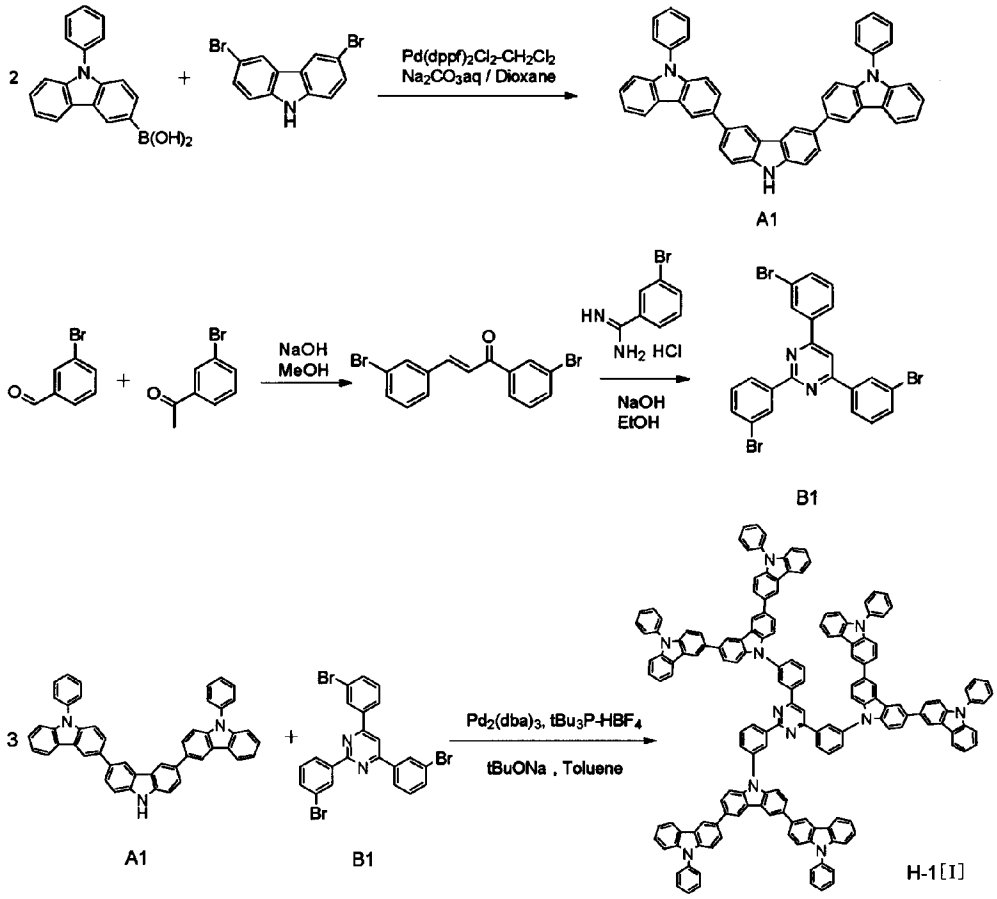
[1098] 次に、実施例および比較例を挙げて本発明をさらに詳しく説明するが、本発明はこれらの実施例の記載内容になんら制限されるものではない。

[1099] （１）まず、化合物（１［Ｉ］）の合成方法、及び該化合物（１［Ｉ］）を用いた有機ＥＬ素子の製造方法及びその評価結果を示す。

[1100] ＜＜化合物（１［Ｉ］）＞＞

合成例１［Ｉ］（化合物Ｈ－１［Ｉ］の合成）

[化761]



[1101] アルゴン雰囲気下、９－フェニルカルバゾール－３－ボロン酸（１２．０６ｇ、４２ｍｍｏｌ）、３，６－ジブロモカルバゾール（５．６０ｇ、２０ｍｍｏｌ）、ジクロロ（ジフェニルホスフィノフェロセン）パラジウム－塩化メチレン錯体（０．３２ｇ、０．４ｍｍｏｌ）、１，４－ジオキサン（６０ｍＬ）、２Ｍ炭酸ナトリウム水溶液（６０ｍＬ）を順次加えて７時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、析出した固体を濾取し、１，４－ジオキサン及び水で洗浄し、減圧乾燥した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製した後、１，４－ジオキサンから再結晶し、トリカルバゾリル中間体Ａ１（１１．０５ｇ，収率８５％）を得た。

[1102] ３－ブロモベンズアルデヒド（１７．０ｍＬ、１４６ｍｍｏｌ）、３－ブ

ロモアセトフェノン（１９．３ｍＬ、１４６ｍｍｏｌ）をメタノール(３００ｍＬ）に溶解し、水酸化ナトリウム（０．５８４ｇ、１４．６ｍｍｏｌ）を加え、室温で１０．５時間攪拌した。

析出した固体を濾取し、メタノールで洗浄したのち真空乾燥し、クリーム色の粉末（４７．８ｇ、収率９０％）を得た。

続いて、得られたその粉末（１２．４ｇ、３３．９ｍｍｏｌ）に、３－ブロモベンズアミジン塩酸塩（４．００ｇ、１６．９ｍｍｏｌ）、水酸化ナトリウム（０．７４５ｇ、１８．６ｍｍｏｌ）を加えエタノール(３５ｍＬ）を追加し、加熱還流下１２．５時間反応させた。生成した白色粉末を濾取し、液の着色が無くなるまでエタノールで洗浄し、さらに水、エタノールで洗浄したのち真空乾燥し、目的とするピリミジン中間体Ｂ１（５．７５ｇ、収率６２％）を得た。

[1103] アルゴン雰囲気下、トリカルバゾリル中間体Ａ１（３．５８ｇ、５．５０ｍｍｏｌ）、ピリミジン中間体Ｂ１（１．００ｇ、１．８３ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．０３３６ｇ、０．０７３２ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．２６９ｇ、０．２９３ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．５２８ｇ、９．０ｍｍｏｌ）、無水トルエン（３６ｍＬ）を順次加えて１１時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｈ－１［Ｉ］（２．２５ｇ，収率５５％）を得た。

[1104] 化合物Ｈ－１［Ｉ］について、ＨＰＬＣ（Ｈｉｇｈ Ｐｅｒｆｏｒｍａｎｃｅ Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ）及びＬＣ－ＭＳ（Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ－Ｍａｓｓ Ｓｐｅｃｔｒｏｍｅｔｒｙ）の分析結果を以下に示す。

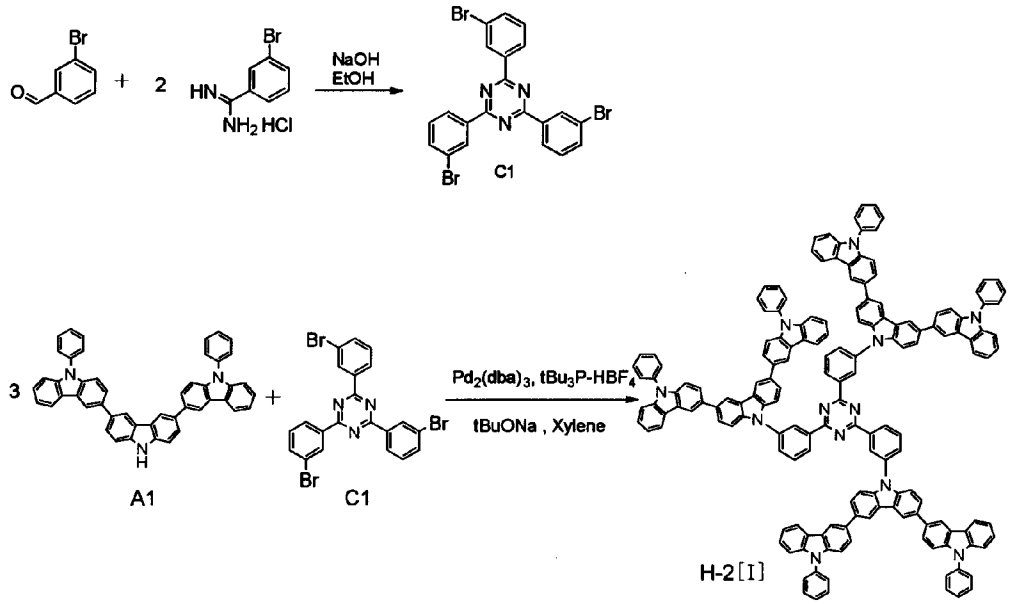
ＨＰＬＣ：純度９９．０％

ＬＣ－ＭＳ：ｃａｌｃｄ ｆｏｒ Ｃ１６６Ｈ１０３Ｎ１１＝２２４９、

ｆｏｕｎｄ　ｍ／ｚ＝２２４９（Ｍ＋，１００）

[1105] 合成例２［Ｉ］（化合物Ｈ－２［Ｉ］の合成）

[化762]



[1106] ３－ブロモベンズアルデヒド（１．８５ｇ、１０．０ｍｍｏｌ）、３－ブロモベンズアミジン塩酸塩（４．７１ｇ、２０．０ｍｍｏｌ）、水酸化ナトリウム（１．２０ｇ、３０．０ｍｍｏｌ）を加えエタノール(２００ｍＬ）を追加し、加熱還流下７時間反応させた。生成した固体を濾取した。濾液を減圧下留去し、得られた固体に、クロラニル（０．７７６ｇ、３．１６ｍｍｏｌ）、ジクロロメタン（１２０ｍＬ）を加え室温で１時間攪拌した。生成した固体を濾取し、先の固体と混ぜ、ジクロロメタンとエタノールで再結晶を２回繰り返した。析出した白色固体を濾取し、真空乾燥し、目的とするトリアジン中間体Ｃ１（４．４４ｇ、収率８１％）を得た。

[1107] アルゴン雰囲気下、トリカルバゾリル中間体Ａ１（５．３０ｇ、８．１３ｍｍｏｌ）、トリアジン中間体Ｃ１（１．４８ｇ、２．７１ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．０９９３ｇ、０．１０８ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１２６ｇ、０．４３３ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．７８ｇ

、８．１３ｍｍｏｌ）、無水キシレン（５０ｍＬ）を順次加えて８時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｈ－２［Ｉ］（４．２７ｇ，収率７０％）を得た。

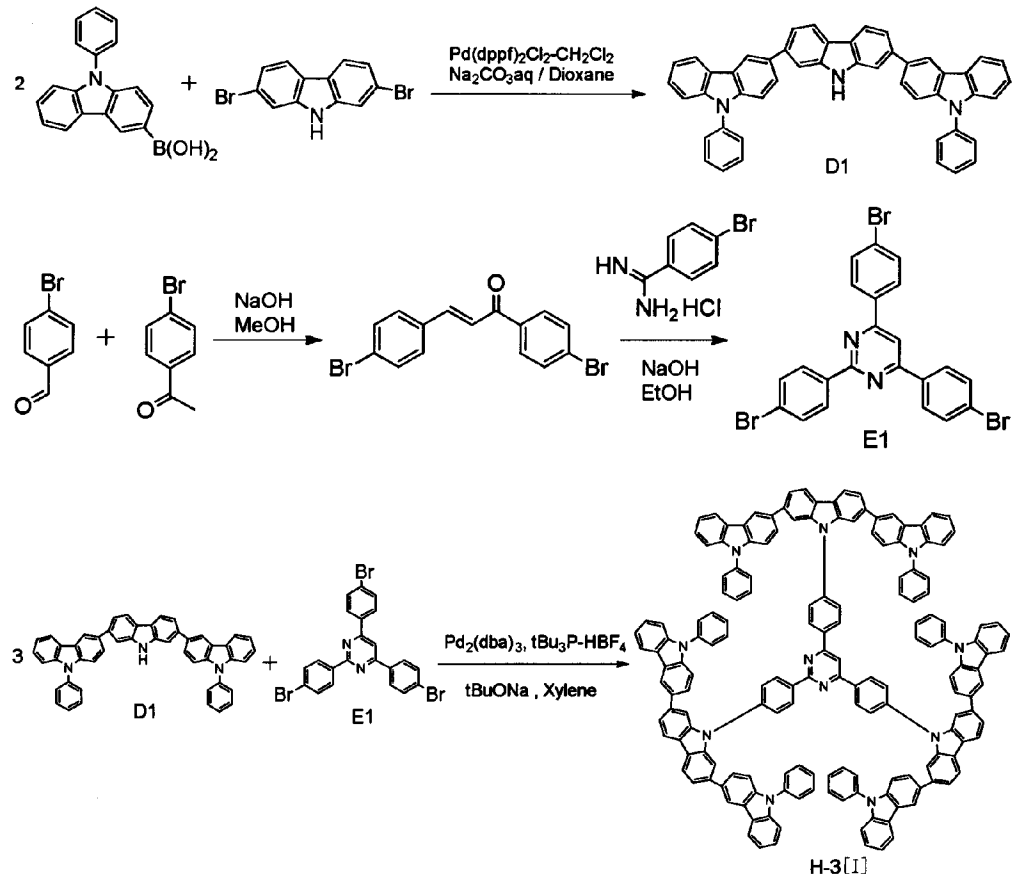
[1108] 化合物Ｈ－２［Ｉ］について、ＨＰＬＣ（Ｈｉｇｈ Ｐｅｒｆｏｒｍａｎｃｅ Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ）及びＬＣ－ＭＳ（Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ－Ｍａｓｓ Ｓｐｅｃｔｒｏｍｅｔｒｙ）の分析結果を以下に示す。

ＨＰＬＣ：純度９９．０％

ＬＣ－ＭＳ：ｃａｌｃｄ ｆｏｒ Ｃ１６５Ｈ１０２Ｎ１２＝２２５０、
ｆｏｕｎｄ ｍ／ｚ＝２２５０（Ｍ＋，１００）

[1109] 合成例３［Ｉ］（化合物Ｈ－３［Ｉ］の合成）

[化763]



[1110] アルゴン雰囲気下、９－フェニルカルバゾール－３－ボロン酸（１２．０６ｇ、４２ｍｍｏｌ），２，７－ジブロモカルバゾール（５．６０ｇ、２０ｍｍｏｌ）、ジクロロ（ジフェニルホスフィノフェロセン）パラジウム－塩化メチレン錯体（０．３２０ｇ、０．４ｍｍｏｌ）、１，４－ジオキサン（６０ｍＬ）、２Ｍ炭酸ナトリウム水溶液（６０ｍＬ）を順次加えて７時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、析出した固体を濾取し、１，４－ジオキサン及び水で洗浄し、減圧乾燥した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、トリカルバゾリル中間体Ｄ１（９．００ｇ，収率６９％）を得た。

[1111] ４－ブロモベンズアルデヒド（１７．０ｍＬ、１４６ｍｍｏｌ）、４－ブロモアセトフェノン（１９．３ｍＬ、１４６ｍｍｏｌ）をメタノール(３００ｍＬ）に溶解し、水酸化ナトリウム（０．５８４ｇ、１４．６ｍｍｏｌ）を加え、室温で１０．５時間攪拌した。

析出した固体を濾取し、メタノールで洗浄したのち真空乾燥し、粉末（４７．８ｇ、収率９０％）を得た。

続いて、得られたその粉末（１２．４ｇ、３３．９ｍｍｏｌ）に、４－ブロモベンズアミジン塩酸塩（４．００ｇ、１６．９ｍｍｏｌ）、水酸化ナトリウム（０．７４５ｇ、１８．６ｍｍｏｌ）を加えエタノール(３５ｍＬ）を追加し、加熱還流下１２．５時間反応させた。生成した白色粉末を濾取し、液の着色が無くなるまでエタノールで洗浄し、さらに水、エタノールで洗浄したのち真空乾燥し、目的とするピリミジン中間体Ｅ１（７．４２ｇ、収率８０％）を得た。

[1112] アルゴン雰囲気下、トリカルバゾリル中間体Ｄ１（３．５８ｇ、５．５０ｍｍｏｌ）、ピリミジン中間体Ｅ１（１．００ｇ、１．８３ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．０３３６ｇ、０．０７３２ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（

０．２６９ｇ、０．２９３ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．５２８ｇ、９．０ｍｍｏｌ）、無水トルエン（３６ｍＬ）を順次加えて１１時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｈ－３［Ｉ］（２．８６ｇ，収率７０％）を得た。

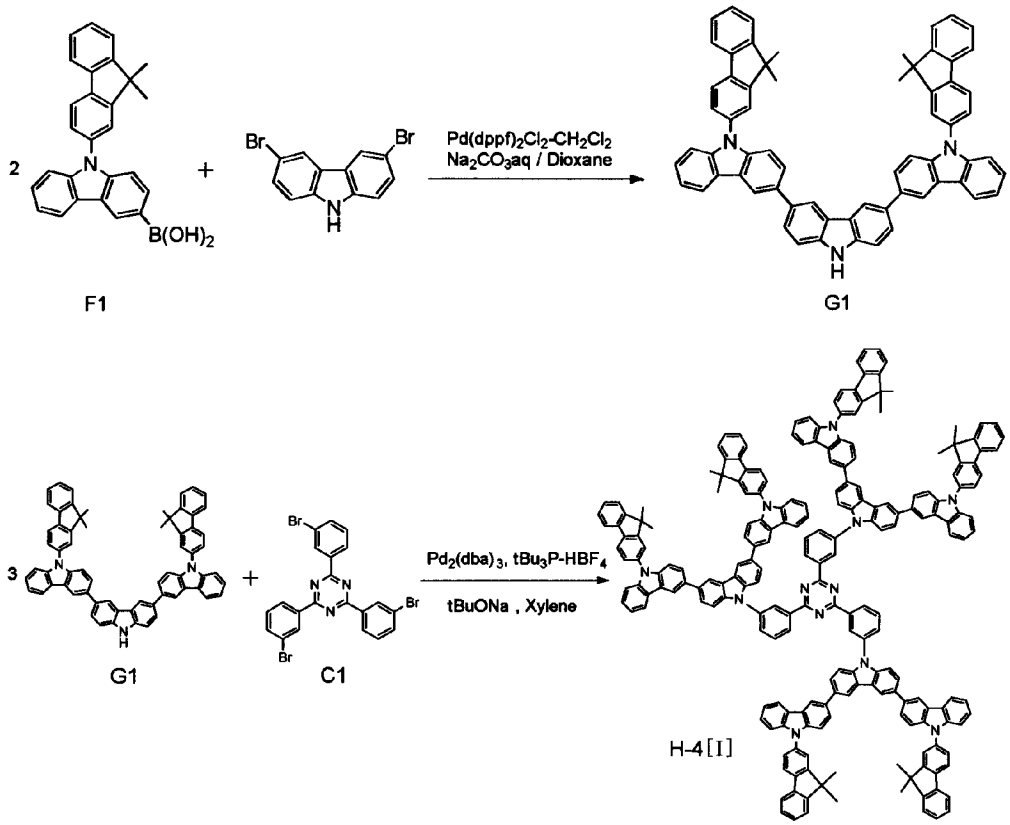
[1113] 化合物Ｈ－３［Ｉ］について、ＨＰＬＣ（Ｈｉｇｈ Ｐｅｒｆｏｒｍａｎｃｅ Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ）及びＬＣ－ＭＳ（Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ－Ｍａｓｓ Ｓｐｅｃｔｒｏｍｅｔｒｙ）の分析結果を以下に示す。

ＨＰＬＣ：純度９９．０％

ＬＣ－ＭＳ：ｃａｌｃｄ ｆｏｒ Ｃ１６６Ｈ１０３Ｎ１１＝２２４９、ｆｏｕｎｄ ｍ／ｚ＝２２４９（Ｍ＋，１００）

[1114] 合成例４［Ｉ］（化合物Ｈ－４［Ｉ］の合成）

[化764]



[1115] アルゴン雰囲気下、ボロン酸Ｆ１（１４．００ｇ、３７．３ｍｍｏｌ）、３，６－ジブロモカルバゾール（５．７７ｇ、１７．８ｍｍｏｌ）、ジクロロ（ジフェニルホスフィノフェロセン）パラジウム－塩化メチレン錯体（０．２９０ｇ、０．３５５ｍｍｏｌ）、１，４－ジオキサン（９０ｍＬ）、２Ｍ炭酸ナトリウム水溶液（５５ｍＬ）を順次加えて１０時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、析出した固体を濾取し、１，４－ジオキサン及び水で洗浄し、減圧乾燥した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し，トリカルバゾリル中間体Ｇ１（１２．１ｇ，収率７７％）を得た。

[1116] アルゴン雰囲気下、トリカルバゾリル体Ｇ１（５．２９ｇ、６．００ｍｍｏｌ）、トリアジン中間体Ｃ１（１．０９ｇ、２．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．０７３３ｇ、０．０８００

ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．０９２８ｇ、０．３２０ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．５７７ｇ、６．０ｍｍｏｌ）、無水キシレン（４０ｍＬ）を順次加えて１１時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｈ－４［Ｉ］（３．８３ｇ，収率６５％）を得た。

[1117] 化合物Ｈ－４［Ｉ］について、ＨＰＬＣ（Ｈｉｇｈ Ｐｅｒｆｏｒｍａｎｃｅ Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ）及びＬＣ－ＭＳ（Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ－Ｍａｓｓ Ｓｐｅｃｔｒｏｍｅｔｒｙ）の分析結果を以下に示す。

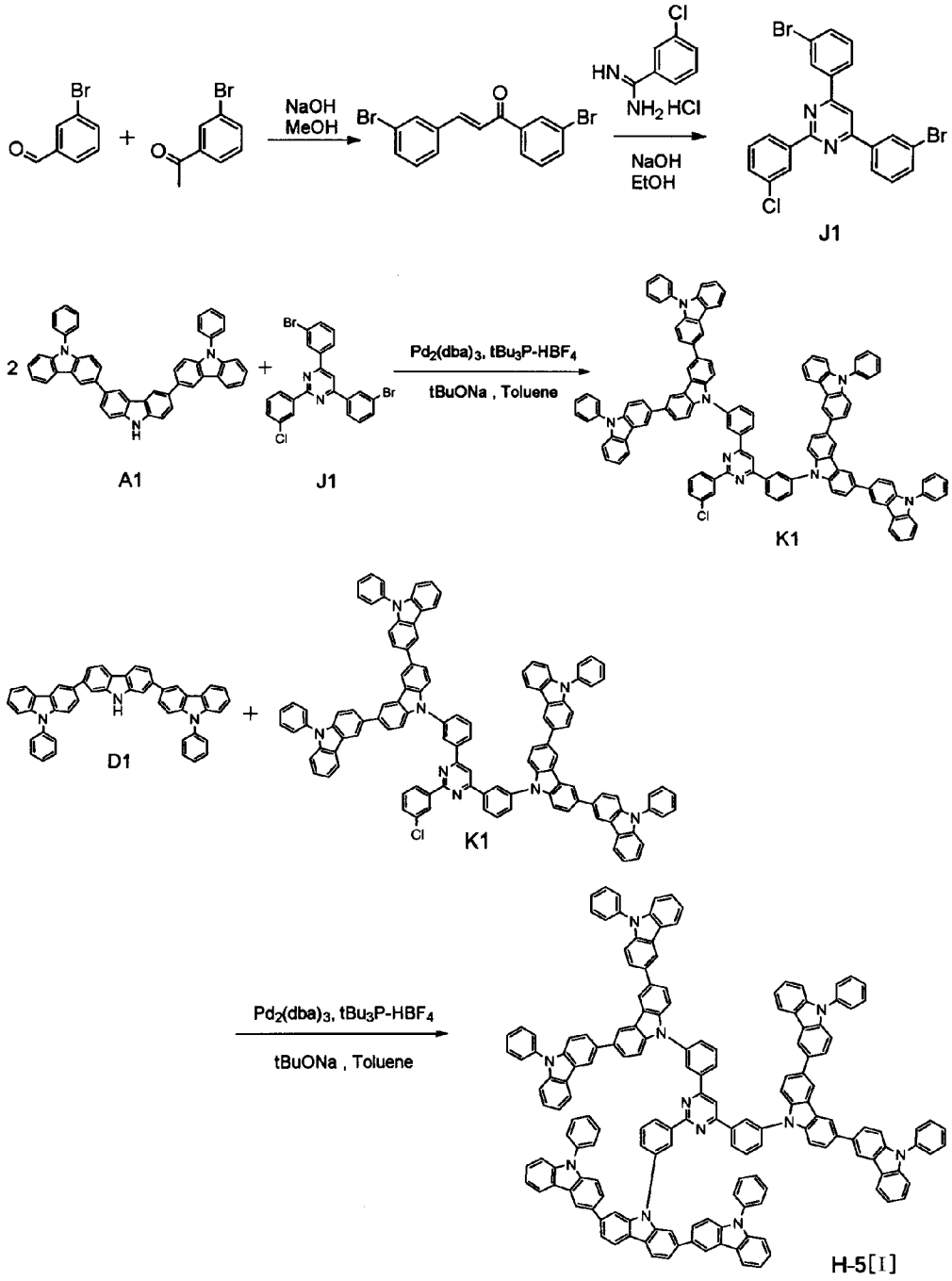
ＨＰＬＣ：純度９８．６％

ＬＣ－ＭＳ：ｃａｌｃｄ ｆｏｒ Ｃ２１９Ｈ１５０Ｎ１２＝２９４８、

ｆｏｕｎｄ ｍ／ｚ＝２９４８（Ｍ＋，１００）

[1118] 合成例５［Ｉ］（化合物Ｈ－５［Ｉ］の合成）

[化765]



[1119] ３－ブロモベンズアルデヒド（１７．０ｍＬ、１４６ｍｍｏｌ）、３－ブロモアセトフェノン（１９．３ｍＬ、１４６ｍｍｏｌ）をメタノール（３００ｍＬ）に溶解し、水酸化ナトリウム（０．５８４ｇ、１４．６ｍｍｏｌ）を加え、室温で１０．５時間攪拌した。

析出した固体を濾取し、メタノールで洗浄したのち真空乾燥し、クリーム色の粉末（４７．８ｇ、収率９０％）を得た。

続いて、得られたその粉末（１２．４ｇ、３３．９ｍｍｏｌ）に、３－クロロベンズアミジン塩酸塩（３．２３ｇ、１６．９ｍｍｏｌ）、水酸化ナトリウム（０．７４５ｇ、１８．６ｍｍｏｌ）を加えエタノール（３５ｍＬ）を追加し、加熱還流下１２．５時間反応させた。生成した白色粉末を濾取し、液の着色が無くなるまでエタノールで洗浄し、さらに水、エタノールで洗浄したのち真空乾燥し、目的とするピリミジン中間体Ｊ１（５．２５ｇ、収率６２％）を得た。

[1120] アルゴン雰囲気下、トリカルバゾリル体Ａ１（３．９０ｇ、６．００ｍｍｏｌ）、ピリミジン中間体Ｊ１（１．５０ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．２８８ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、無水トルエン（６０ｍＬ）を順次加えて１１時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｋ１（２．７０ｇ，収率５５％）を得た。

[1121] アルゴン雰囲気下、化合物Ｋ１（２．７０ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、カルバゾリル体Ｄ１（１．９５ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．２８８ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、無水トルエン（６０ｍＬ）を順次加えて１１時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｈ－５［Ｉ］（５．７４ｇ，収率８５％）を得た。

[1122] 化合物Ｈ－５［Ｉ］について、ＨＰＬＣ（Ｈｉｇｈ Ｐｅｒｆｏｒｍａｎｃｅ Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ）及びＬＣ－ＭＳ（Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ－Ｍａｓｓ Ｓｐｅｃｔｒｏｍｅｔｒｙ）の分析結果を以下に示す。

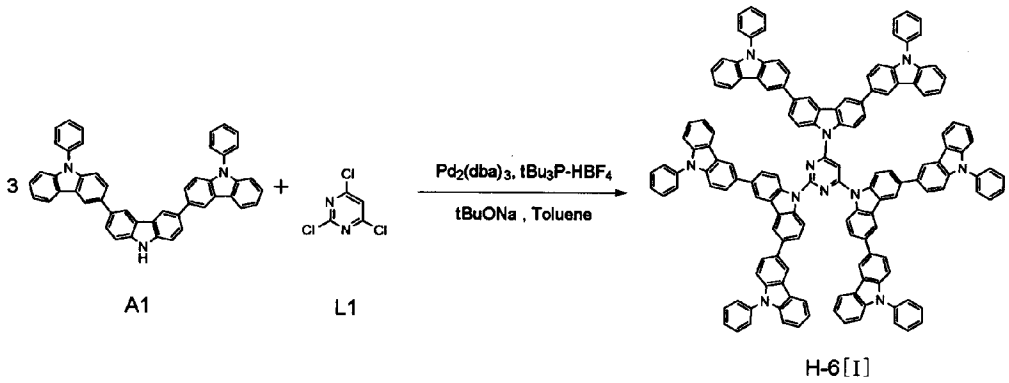
ＨＰＬＣ：純度９９．０％

ＬＣ－ＭＳ：ｃａｌｃｄ ｆｏｒ Ｃ１６６Ｈ１０３Ｎ１１＝２２４９、

ｆｏｕｎｄ ｍ／ｚ＝２２４９（Ｍ＋，１００）

[1123] 合成例６［Ｉ］（化合物Ｈ－６［Ｉ］の合成）

[化766]



[1124] アルゴン雰囲気下、トリカルバゾリル体Ａ１（５．８５ｇ、９．００ｍｍｏｌ）、ピリミジン中間体Ｌ１（０．５５０ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．２８８ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、無水トルエン（６０ｍＬ）を順次加えて１１時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｈ－６［Ｉ］（４．８６ｇ，収率８０％）を得た。

[1125] 化合物Ｈ－６［Ｉ］について、ＨＰＬＣ（Ｈｉｇｈ Ｐｅｒｆｏｒｍａｎ

ｃｅ Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ）及びＬＣ－ＭＳ（Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ－Ｍａｓｓ Ｓｐｅｃｔｒｏｍｅｔｒｙ）の分析結果を以下に示す。

ＨＰＬＣ：純度９９．０％

ＬＣ－ＭＳ：ｃａｌｃｄ ｆｏｒ Ｃ１４８Ｈ９１Ｎ１１＝２０２１、ｆｏｕｎｄ ｍ／ｚ＝２０２１（Ｍ＋，１００）

[1126] なお、以上の合成反応を参照し、目的物に合わせた公知の代替反応や原料を用いることによって、特許請求の範囲で規定の化合物を合成することが可能である。

[1127] 実施例１［Ｉ］

（基板の洗浄）

２５ｍｍ×２５ｍｍ×厚さ１．１ｍｍのＩＴＯ透明電極付ガラス基板（ジオマテック株式会社製）をイソプロピルアルコール中で、超音波洗浄を５分間行った後、ＵＶオゾン洗浄を５分間行った。

（下地層の形成）

正孔輸送材料としてＨＥＲＡＥＵＳ社製ＣＬＥＶＩＯＵＳ ＡＩ４０８３（商品名）を３０ｎｍの厚さで前記のＩＴＯ基板上にスピンコート法により成膜した。成膜後、アセトンにより不要な部分を除去し、次いで大気中で２００℃のホットプレートで１０分間焼成し、下地基板を作製した。

（発光層の形成）

ホスト材料として合成例１［Ｉ］で得た化合物Ｈ－１［Ｉ］、ドーパント材料として下記の化合物Ｄ－ｉを用い、化合物Ｈ－１［Ｉ］：化合物Ｄ－ｉが質量比で９５：５となるような混合比で１．６質量％のトルエン溶液を調製した。このトルエン溶液を用い、前記下地基板上にスピンコート法により、５０ｎｍの膜厚になるように塗布積層した。塗布成膜後、不要部分をトルエンにて除去し、１５０℃のホットプレート上で加熱乾燥し、発光層を成膜した塗布積層基板を作製した。なお、発光層の成膜にかかる全ての操作は窒素雰囲気のグローブボックス中で実施した。

（蒸着、封止）

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

（素子評価）

得られた有機ＥＬ素子を、直流電流駆動により発光させ、電流密度１０ｍＡ／ｃｍ^{2}における外部量子効率（ＥＱＥ）を測定した。測定結果を表１に示す。

[1128] なお、発光層の形成過程において、塗布成膜後の加熱乾燥温度を２００℃とし、同様に有機ＥＬ素子を別途作製し、当該有機ＥＬ素子についても、上記と同様に外部量子効率（ＥＱＥ）を測定した。測定結果を表１に示す。

[1129] 実施例２［Ｉ］

ホスト材料として合成例２［Ｉ］で得た化合物Ｈ－２［Ｉ］を用いたこと以外は、実施例１［Ｉ］と同様の方法で、塗布成膜後の加熱乾燥温度を１５０℃及び２００℃とした有機ＥＬ素子をそれぞれ作製した。当該有機ＥＬ素子の外部量子効率（ＥＱＥ）の測定結果を表１に示す。

[1130] 実施例３［Ｉ］

ホスト材料として合成例３［Ｉ］で得た化合物Ｈ－３［Ｉ］を用いたこと以外は、実施例１［Ｉ］と同様の方法で、塗布成膜後の加熱乾燥温度を１５０℃及び２００℃とした有機ＥＬ素子をそれぞれ作製した。当該有機ＥＬ素子の外部量子効率（ＥＱＥ）の測定結果を表１に示す。

[1131] 実施例４［Ｉ］

ホスト材料として合成例４［Ｉ］で得た化合物Ｈ－４［Ｉ］を用いたこと以外は、実施例１［Ｉ］と同様の方法で、塗布成膜後の加熱乾燥温度を１５０℃及び２００℃とした有機ＥＬ素子をそれぞれ作製した。当該有機ＥＬ素子の外部量子効率（ＥＱＥ）の測定結果を表１に示す。

[1132] 実施例５［Ｉ］

ホスト材料として合成例５［Ｉ］で得た化合物Ｈ－５［Ｉ］を用いたこと以外は、実施例１［Ｉ］と同様の方法で、塗布成膜後の加熱乾燥温度を１５０℃及び２００℃とした有機ＥＬ素子をそれぞれ作製した。当該有機ＥＬ素子の外部量子効率（ＥＱＥ）の測定結果を表１に示す。

[1133] 実施例６［Ｉ］

ホスト材料として合成例６［Ｉ］で得た化合物Ｈ－６［Ｉ］を用いたこと以外は、実施例１［Ｉ］と同様の方法で、塗布成膜後の加熱乾燥温度を１５０℃及び２００℃とした有機ＥＬ素子をそれぞれ作製した。当該有機ＥＬ素子の外部量子効率（ＥＱＥ）の測定結果を表１に示す。

[1134] 比較例１［Ｉ］

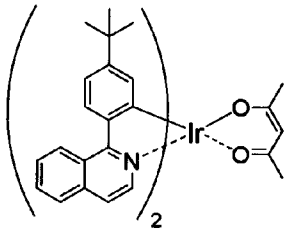
ホスト材料として公知文献ＷＯ２０１２／０８６１７０記載の下記化合物Ｑ－１［Ｉ］を用いたこと以外は、実施例１［Ｉ］と同様の方法で、塗布成膜後の加熱乾燥温度を１５０℃とした有機ＥＬ素子を作製した。当該有機ＥＬ素子の外部量子効率（ＥＱＥ）の測定結果を表１に示す。

[1135] 比較例２［Ｉ］

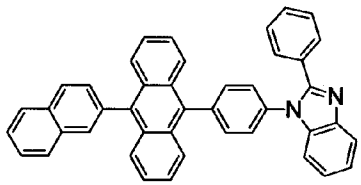
ホスト材料として下記化合物Ｑ－２［Ｉ］を用いたこと以外は、実施例１［Ｉ］と同様の方法で、塗布成膜後の加熱乾燥温度を１５０℃及び２００℃とした有機ＥＬ素子をそれぞれ作製した。当該有機ＥＬ素子の外部量子効率（ＥＱＥ）の測定結果を表１に示す。

[1136]

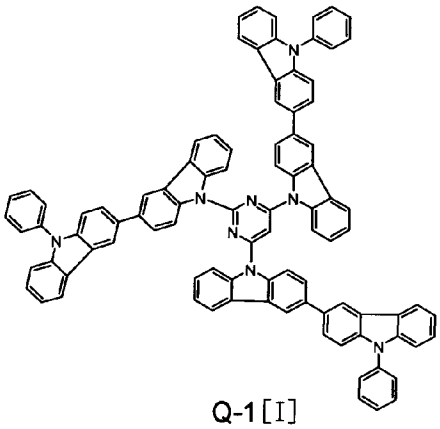
[化767]



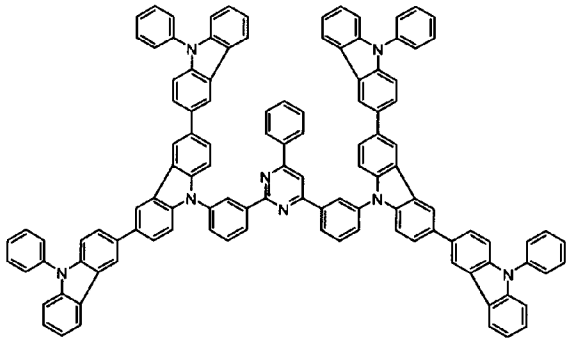
D－i



ＥＴ－１



Q-1[I]



Q-2[I]

[1137] [表1]

表１

	ホスト材料	外部量子効率(%)	
		乾燥温度 150℃	乾燥温度 200℃
実施例１［Ｉ］	Ｈ－１［Ｉ］	5.1	4.9
実施例２［Ｉ］	Ｈ－２［Ｉ］	5.2	5.0
実施例３［Ｉ］	Ｈ－３［Ｉ］	4.3	4.3
実施例４［Ｉ］	Ｈ－４［Ｉ］	4.9	4.7
実施例５［Ｉ］	Ｈ－５［Ｉ］	4.7	4.6
実施例６［Ｉ］	Ｈ－６［Ｉ］	4.5	4.1
比較例１［Ｉ］	Ｑ－１［Ｉ］	2.1	－*1
比較例２［Ｉ］	Ｑ－２［Ｉ］	4.8	2.7

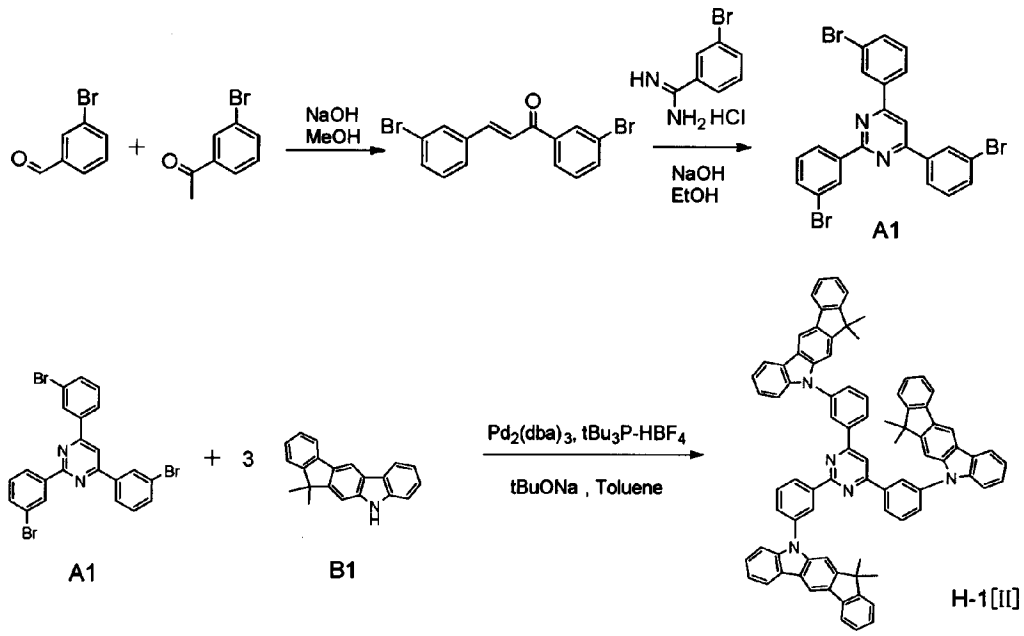
＊１：乾燥温度１５０℃の場合の外部量子効率が低かったため、未測定。

[1138] （２）次に、化合物（１［II］）の合成方法、及び該化合物（１［II］）を用いた有機ＥＬ素子の製造方法及びその評価結果を示す。

[1139] ＜＜化合物（１［II］）＞＞

合成例１［II］（化合物Ｈ－１［II］の合成）

[化768]



[1140] ３－ブロモベンズアルデヒド（１７．０ｍＬ、１４６ｍｍｏｌ）、３－ブロモアセトフェノン（１９．３ｍＬ、１４６ｍｍｏｌ）をメタノール(３００ｍＬ）に溶解し、水酸化ナトリウム（０．５８４ｇ、１４．６ｍｍｏｌ）を加え、室温で１０．５時間攪拌した。

析出した固体を濾取し、メタノールで洗浄したのち真空乾燥し、粉末（４７．８ｇ、収率９０％）を得た。

続いて、得られたその粉末（１２．４ｇ、３３．９ｍｍｏｌ）に、３－ブロモベンズアミジン塩酸塩（４．００ｇ、１６．９ｍｍｏｌ）、水酸化ナトリウム（０．７４５ｇ、１８．６ｍｍｏｌ）を加えエタノール(３５ｍＬ）を追加し、加熱還流下１２．５時間反応させた。生成した白色粉末を濾取し、液の着色が無くなるまでエタノールで洗浄し、さらに水、エタノールで洗浄

したのち真空乾燥し、目的とするピリミジン中間体Ａ１（７．４２ｇ、収率８０％）を得た。

[1141] アルゴン雰囲気下、カルバゾリル体Ｂ１（２．５５ｇ、９．００ｍｍｏｌ）、ピリミジン中間体Ａ１（１．６４ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８０ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．９６５ｇ、９．００ｍｍｏｌ）、無水トルエン（６０ｍＬ）を順次加えて８時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｈ－１［II］（２．２５ｇ，収率６５％）を得た。

[1142] 化合物Ｈ－１［II］について、ＨＰＬＣ（Ｈｉｇｈ Ｐｅｒｆｏｒｍａｎｃｅ Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ）及びＬＣ－ＭＳ（Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ－Ｍａｓｓ Ｓｐｅｃｔｒｏｍｅｔｒｙ）の分析結果を以下に示す。

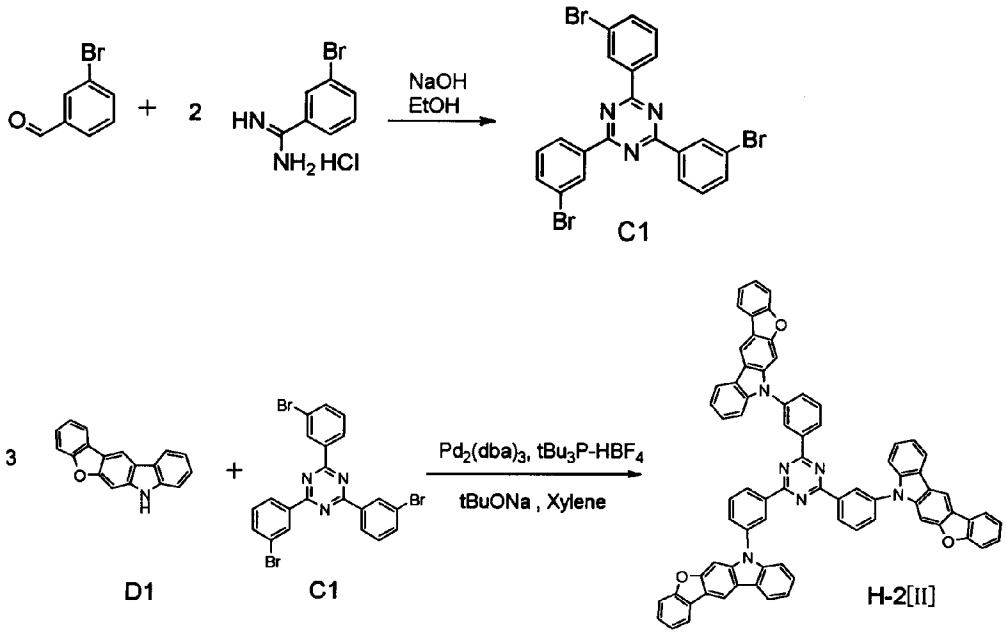
ＨＰＬＣ：純度９９．２％

ＬＣ－ＭＳ：ｃａｌｃｄ ｆｏｒ Ｃ８５Ｈ６１Ｎ５＝１１５１、

ｆｏｕｎｄ ｍ／ｚ＝１１５１（Ｍ＋，１００）

[1143] 合成例２［II］（化合物Ｈ－２［II］の合成）

[化769]



[1144] ３－ブロモベンズアルデヒド（１．８５ｇ、１０．０ｍｍｏｌ）、３－ブロモベンズアミジン塩酸塩（４．７１ｇ、２０．０ｍｍｏｌ）、水酸化ナトリウム（１．２０ｇ、３０．０ｍｍｏｌ）を加えエタノール(２００ｍＬ）を追加し、加熱還流下７時間反応させた。生成した固体を濾取した。濾液を減圧下留去し、得られた固体に、クロラニル（０．７７６ｇ、３．１６ｍｍｏｌ）、ジクロロメタン（１２０ｍＬ）を加え室温で１時間攪拌した。生成した固体を濾取し、先の固体と混ぜ、ジクロロメタンとエタノールで再結晶を２回繰り返した。析出した白色固体を濾取し、真空乾燥し、目的とするトリアジン中間体Ｃ１（４．４４ｇ、収率８１％）を得た。

[1145] アルゴン雰囲気下、カルバゾリル体Ｄ１（２．３２ｇ、９．００ｍｍｏｌ）、トリアジン中間体Ｃ１（１．６４ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８０ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．９６５ｇ、９．００ｍｍｏｌ）、無水キシレン（６０ｍＬ）を順次加えて８時間加熱還流した

。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｈ－２［II］（２．２６ｇ，収率７０％）を得た。

[1146] 化合物Ｈ－２［II］について、ＨＰＬＣ（Ｈｉｇｈ Ｐｅｒｆｏｒｍａｎｃｅ Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ）及びＬＣ－ＭＳ（Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ－Ｍａｓｓ Ｓｐｅｃｔｒｏｍｅｔｒｙ）の分析結果を以下に示す。

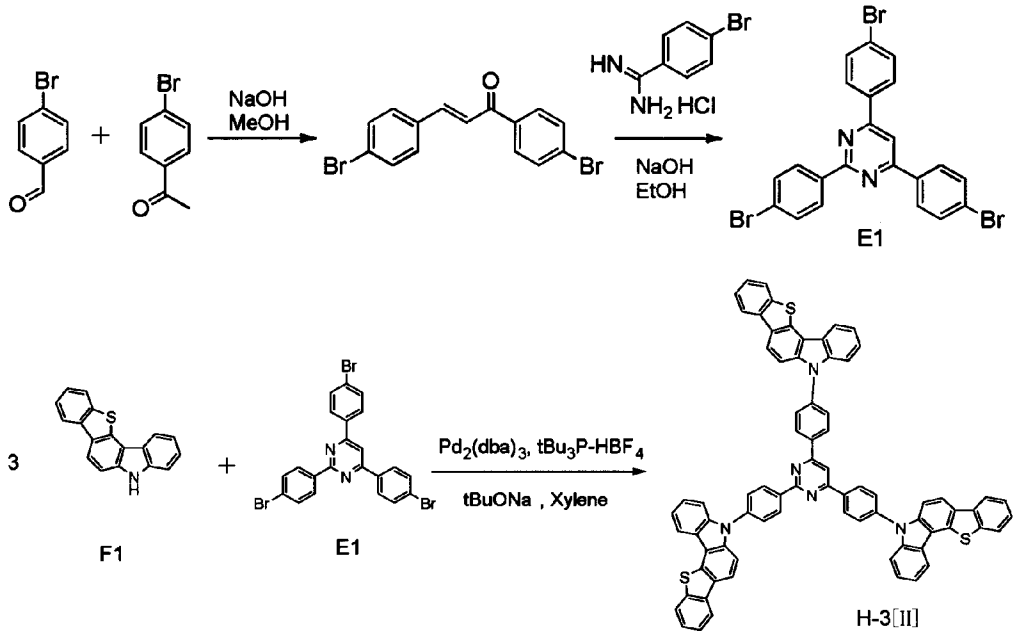
ＨＰＬＣ：純度９９．４％

ＬＣ－ＭＳ：ｃａｌｃｄ ｆｏｒ Ｃ７５Ｈ４２Ｎ６Ｏ３＝１０７４、

ｆｏｕｎｄ ｍ／ｚ＝１０７４（Ｍ＋，１００）

[1147] 合成例３［II］（化合物Ｈ－３［II］の合成）

[化770]



[1148] ４－ブロモベンズアルデヒド（１７．０ｍＬ、１４６ｍｍｏｌ）、４－ブロモアセトフェノン（１９．３ｍＬ、１４６ｍｍｏｌ）をメタノール(３００ｍＬ）に溶解し、水酸化ナトリウム（０．５８４ｇ、１４．６ｍｍｏｌ）を

加え、室温で１０．５時間攪拌した。

析出した固体を濾取し、メタノールで洗浄したのち真空乾燥し、粉末（４７．８ｇ、収率９０％）を得た。

続いて、得られたその粉末（１２．４ｇ、３３．９ｍｍｏｌ）に、４－ブロモベンズアミジン塩酸塩（４．００ｇ、１６．９ｍｍｏｌ）、水酸化ナトリウム（０．７４５ｇ、１８．６ｍｍｏｌ）を加えエタノール(３５ｍＬ）を追加し、加熱還流下１２．５時間反応させた。生成した白色粉末を濾取し、液の着色が無くなるまでエタノールで洗浄し、さらに水、エタノールで洗浄したのち真空乾燥し、目的とするピリミジン中間体Ｅ１（７．４２ｇ、収率８０％）を得た。

[1149] アルゴン雰囲気下、カルバゾリル体Ｆ１（２．４６ｇ、９．００ｍｍｏｌ）、ピリミジン中間体Ｅ１（１．６４ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８０ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．９６５ｇ、９．００ｍｍｏｌ）、無水キシレン（６０ｍＬ）を順次加えて８時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｈ－３［II］（２．１９ｇ，収率６５％）を得た。

[1150] 化合物Ｈ－３［II］について、ＨＰＬＣ（Ｈｉｇｈ Ｐｅｒｆｏｒｍａｎｃｅ Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ）及びＬＣ－ＭＳ（Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ－Ｍａｓｓ Ｓｐｅｃｔｒｏｍｅｔｒｙ）の分析結果を以下に示す。

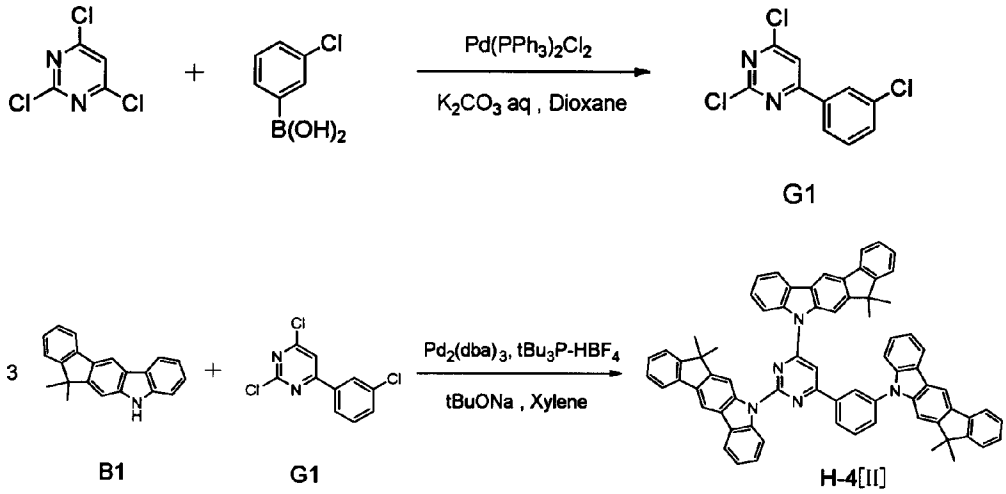
ＨＰＬＣ：純度９９．２％

ＬＣ－ＭＳ：ｃａｌｃｄ ｆｏｒ Ｃ７６Ｈ４３Ｎ５Ｓ３＝１１２１、

ｆｏｕｎｄ ｍ／ｚ＝１１２１（Ｍ＋，１００）

[1151] 合成例４［II］（化合物Ｈ－４［II］の合成）

[化771]



[1152] アルゴン雰囲気下、２，４，６－トリクロロピリミジン（３．６７ｇ、２０ｍｍｏｌ）、３－クロロフェニルボロン酸（３．１３ｇ、２０ｍｍｏｌ）、ジクロロ（ビストリフェニルホスフィン）パラジウム錯体（０．３５１ｇ、０．５ｍｍｏｌ）、１，４－ジオキサン（８０ｍＬ）、２M炭酸カリウム水溶液（４０ｍＬ）を順次加えて８時間加熱還流した。室温まで反応液を冷却した後、トルエンを加えて希釈し、水で洗浄し、減圧乾燥した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、ピリミジン中間体Ｇ１（４．０５ｇ，収率７８％）を得た。

[1153] アルゴン雰囲気下、カルバゾリル体Ｂ１（２．５５ｇ、９．００ｍｍｏｌ）、ピリミジン体Ｇ１（０．７７９ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８０ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．９６５ｇ、９．００ｍｍｏｌ）、無水キシレン（６０ｍＬ）を順次加えて８時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｈ－４［II］（１．６５ｇ，収率５５％）を得た。

[1154] 化合物Ｈ－４［II］について、ＨＰＬＣ（Ｈｉｇｈ Ｐｅｒｆｏｒｍａｎｃｅ Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ）及びＬＣ－ＭＳ（Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ－Ｍａｓｓ Ｓｐｅｃｔｒｏｍｅｔｒｙ）の分析結果を以下に示す。

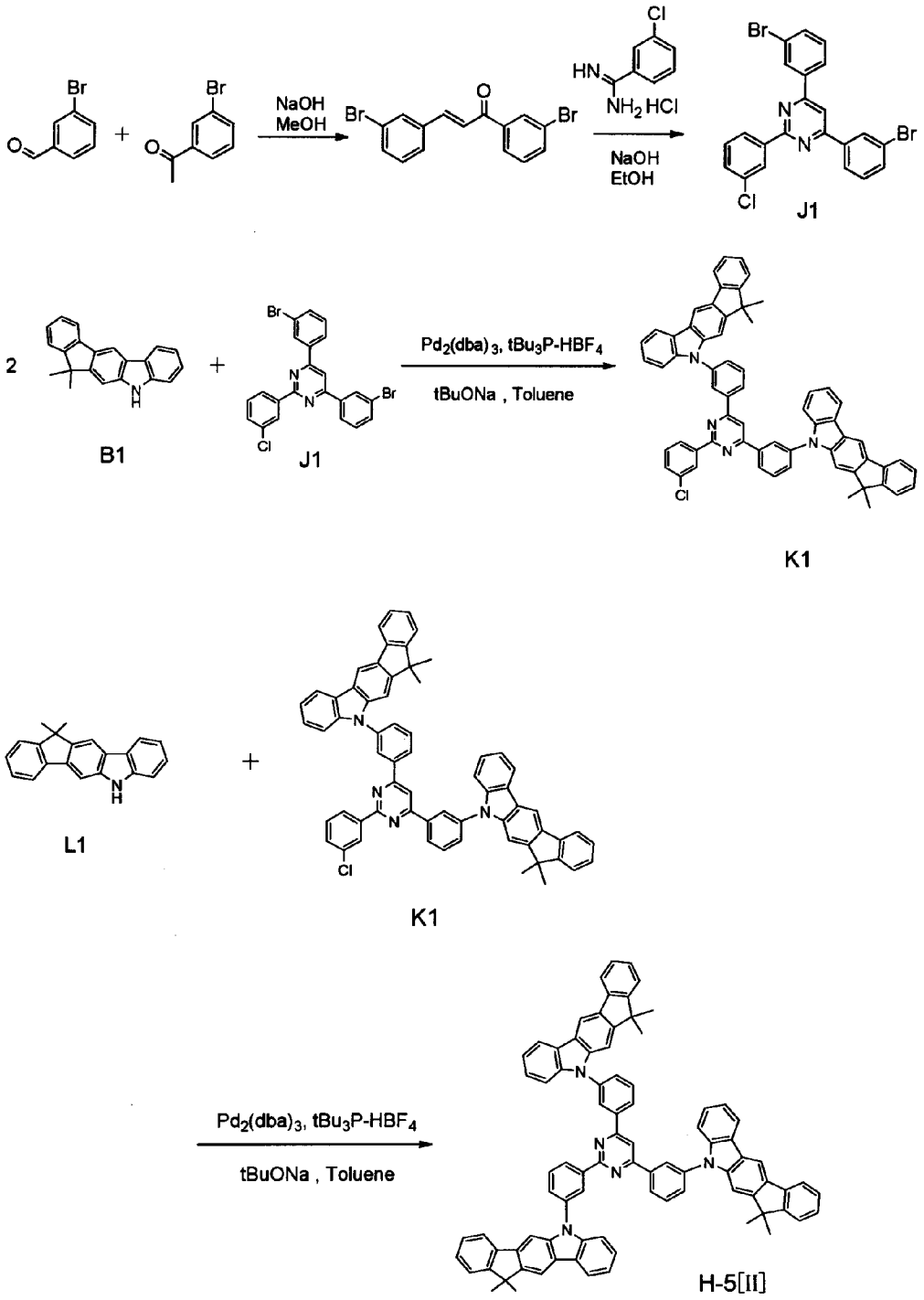
ＨＰＬＣ：純度９８．６％

ＬＣ－ＭＳ：ｃａｌｃｄ ｆｏｒ Ｃ７３Ｈ５３Ｎ５＝９９９、

ｆｏｕｎｄ ｍ／ｚ＝９９９（Ｍ＋，１００）

[1155] 合成例５［II］（化合物Ｈ－５［II］の合成）

[化772]



[1156] ３－ブロモベンズアルデヒド（１７．０ｍＬ、１４６ｍｍｏｌ）、３－ブロモアセトフェノン（１９．３ｍＬ、１４６ｍｍｏｌ）をメタノール(３００ｍＬ）に溶解し、水酸化ナトリウム（０．５８４ｇ、１４．６ｍｍｏｌ）を

加え、室温で１０．５時間攪拌した。

析出した固体を濾取し、メタノールで洗浄したのち真空乾燥し、クリーム色の粉末（４７．８ｇ、収率９０％）を得た。

続いて、得られたその粉末（１２．４ｇ、３３．９ｍｍｏｌ）に、３－クロロベンズアミジン塩酸塩（３．２３ｇ、１６．９ｍｍｏｌ）、水酸化ナトリウム（０．７４５ｇ、１８．６ｍｍｏｌ）を加えエタノール(３５ｍＬ）を追加し、加熱還流下１２．５時間反応させた。生成した白色粉末を濾取し、液の着色が無くなるまでエタノールで洗浄し、さらに水、エタノールで洗浄したのち真空乾燥し、目的とするピリミジン中間体Ｊ１（５．２５ｇ、収率６２％）を得た。

[1157] アルゴン雰囲気下、カルバゾリル体Ｂ１（１．７０ｇ、６．００ｍｍｏｌ）、ピリミジン中間体Ｊ１（１．５０ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．２８８ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、無水トルエン（６０ｍＬ）を順次加えて１１時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｋ１（１．９０ｇ，収率７０％）を得た。

[1158] アルゴン雰囲気下、化合物Ｋ１（１．９０ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、カルバゾリル体Ｌ１（０．８５０ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．２８８ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、無水トルエン（６０ｍＬ）を順次加えて１１時間加熱還流した。

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

、化合物Ｈ－５［II］（２．９４ｇ，収率８５％）を得た。

[1159] 化合物Ｈ－５［II］について、ＨＰＬＣ（Ｈｉｇｈ Ｐｅｒｆｏｒｍａｎｃｅ Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ）及びＬＣ－ＭＳ（Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ－Ｍａｓｓ Ｓｐｅｃｔｒｏｍｅｔｒｙ）の分析結果を以下に示す。

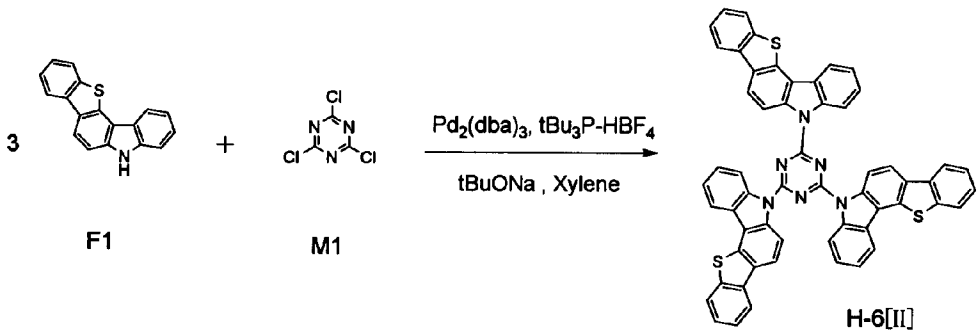
ＨＰＬＣ：純度９９．０％

ＬＣ－ＭＳ：ｃａｌｃｄ ｆｏｒ Ｃ８５Ｈ６１Ｎ５＝１１５１、

ｆｏｕｎｄ ｍ／ｚ＝１３７９（Ｍ＋，１００）

[1160] 合成例６［II］（化合物Ｈ－６［II］の合成）

[化773]



[1161] アルゴン雰囲気下、カルバゾリル体Ｆ１（２．４６ｇ、９．００ｍｍｏｌ）、トリアジン中間体Ｍ１（０．５５３ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．２８８ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、無水キシレン（６０ｍＬ）を順次加えて１１時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｈ－６［II］（２．１５ｇ，収率８０％）を得た。

[1162] 化合物Ｈ－６［II］について、ＨＰＬＣ（Ｈｉｇｈ Ｐｅｒｆｏｒｍａｎ

ｃｅ Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ）及びＬＣ－ＭＳ（Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ－Ｍａｓｓ Ｓｐｅｃｔｒｏｍｅｔｒｙ）の分析結果を以下に示す。

ＨＰＬＣ：純度９９．０％

ＬＣ－ＭＳ：ｃａｌｃｄ ｆｏｒ Ｃ５７Ｈ３０Ｎ６Ｓ３＝８９４、

ｆｏｕｎｄ ｍ／ｚ＝８９４（Ｍ＋，１００）

[1163] なお、以上の合成反応を参照し、目的物に合わせた公知の代替反応や原料を用いることによって、特許請求の範囲で規定の化合物を合成することが可能である。

[1164] 実施例１［II］

（基板の洗浄）

２５ｍｍ×２５ｍｍ×厚さ１．１ｍｍのＩＴＯ透明電極付ガラス基板（ジオマテック株式会社製）をイソプロピルアルコール中で、超音波洗浄を５分間行った後、ＵＶオゾン洗浄を５分間行った。

（下地層の形成）

正孔輸送材料としてＨＥＲＡＥＵＳ社製ＣＬＥＶＩＯＵＳ ＡＩ４０８３（商品名）を３０ｎｍの厚さで前記のＩＴＯ基板上にスピンコート法により成膜した。成膜後、アセトンにより不要な部分を除去し、次いで大気中で２００℃のホットプレートで１０分間焼成し、下地基板を作製した。

（発光層の形成）

ホスト材料として合成例１［II］で得た化合物Ｈ－１［II］、ドーパント材料として下記の化合物Ｄ－iiを用い、化合物Ｈ－１［II］：化合物Ｄ－iiが質量比で９０：１０となるような混合比で１．６質量％のトルエン溶液を調製した。このトルエン溶液を用い、前記下地基板上にスピンコート法により、５０ｎｍの膜厚になるように塗布積層した。塗布成膜後、不要部分をトルエンにて除去し、１５０℃のホットプレート上で加熱乾燥し、発光層を成膜した塗布積層基板を作製した。なお、発光層の成膜にかかる全ての操作は窒素雰囲気のグローブボックス中で実施した。

（蒸着、封止）

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

（素子評価）

得られた有機ＥＬ素子を、直流電流駆動により発光させ、電流密度１０ｍＡ／ｃｍ^{2}における外部量子効率（ＥＱＥ）を測定した。さらに、当該有機ＥＬ素子を、直流電流駆動により１０００ｃｄ／ｍ^{2}の輝度で発光させた。連続点灯させて、輝度が８００ｃｄ／ｍ^{2}になるまでの時間（ＬＴ８０）を計測した。これらの測定結果を表２に示す。

[1165] なお、発光層の形成過程において、塗布成膜後の加熱乾燥温度を２００℃とし、同様に有機ＥＬ素子を別途作製し、当該有機ＥＬ素子についても、上記と同様に外部量子効率（ＥＱＥ）のみを測定した。測定結果を表２に示す。

[1166] 実施例２［II］

ホスト材料として合成例２［II］で得た化合物Ｈ－２［II］を用いたこと以外は、実施例１［II］と同様の方法で、塗布成膜後の加熱乾燥温度を１５０℃及び２００℃とした有機ＥＬ素子をそれぞれ作製し、実施例１［II］と同様の評価をした。測定結果を表２に示す。

[1167] 実施例３［II］

ホスト材料として合成例３［II］で得た化合物Ｈ－３［II］を用いたこと以外は、実施例１［II］と同様の方法で、塗布成膜後の加熱乾燥温度を１５０℃及び２００℃とした有機ＥＬ素子をそれぞれ作製し、実施例１［II］と同様の評価をした。測定結果を表２に示す。

[1168] 実施例４［II］

ホスト材料として合成例４［II］で得た化合物Ｈ－４［II］を用いたこと

以外は、実施例１［II］と同様の方法で、塗布成膜後の加熱乾燥温度を１５０℃及び２００℃とした有機ＥＬ素子をそれぞれ作製し、実施例１［II］と同様の評価をした。測定結果を表２に示す。

[1169] 実施例５［II］

ホスト材料として合成例５［II］で得た化合物Ｈ－５［II］を用いたこと以外は、実施例１［II］と同様の方法で、塗布成膜後の加熱乾燥温度を１５０℃及び２００℃とした有機ＥＬ素子をそれぞれ作製し、実施例１［II］と同様の評価をした。測定結果を表２に示す。

[1170] 実施例６［II］

ホスト材料として合成例６［II］で得た化合物Ｈ－６［II］を用いたこと以外は、実施例１［II］と同様の方法で、塗布成膜後の加熱乾燥温度を１５０℃及び２００℃とした有機ＥＬ素子をそれぞれ作製し、実施例１［II］と同様の評価をした。測定結果を表２に示す。

[1171] 比較例１［II］

ホスト材料として公知文献ＷＯ２０１２／０８６１７０記載の下記化合物Ｑ－１［II］を用いたこと以外は、実施例１［II］と同様の方法で、塗布成膜後の加熱乾燥温度を１５０℃及び２００℃とした有機ＥＬ素子をそれぞれ作製し、実施例１［II］と同様の評価をした。測定結果を表２に示す。

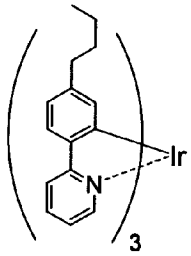
[1172] 比較例２［II］

ホスト材料としてＷＯ２０１１／１０８９０２に記載の下記化合物Ｑ－２［II］を用いたこと以外は、実施例１［II］と同様の方法で、塗布成膜後の加熱乾燥温度を１５０℃及び２００℃とした有機ＥＬ素子をそれぞれ作製し、外部量子効率（ＥＱＥ）を測定した。測定結果を表２に示す。

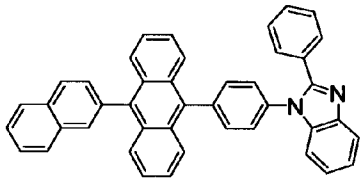
[1173] 比較例３［II］

ホスト材料として公知文献ＷＯ２００７／０６３７５４記載の下記化合物Ｑ－３［II］を用いたこと以外は、実施例１［II］と同様の方法で有機ＥＬ素子を作製しようとしたが、トルエンへの溶解性が低く、発光可能な素子を得るに至らなかった。

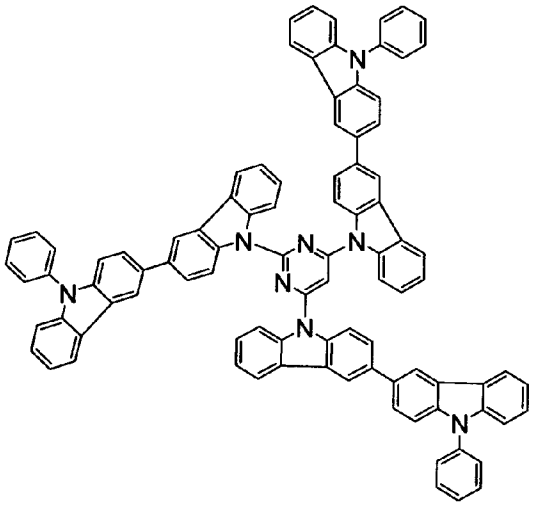
[1174] [化774]



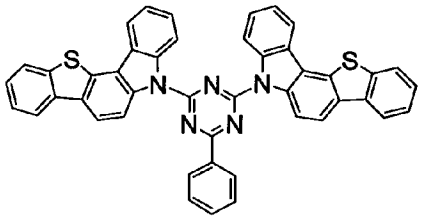
D－ii



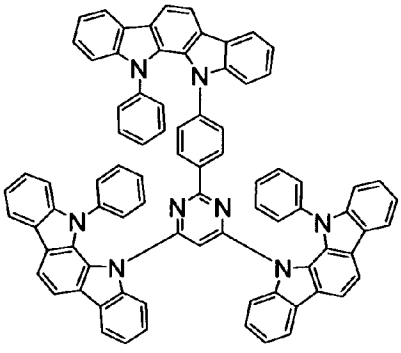
ＥＴ－１



Q-1[II]



Q-2[II]



Q-3[II]

[1175]

[表2]

表２

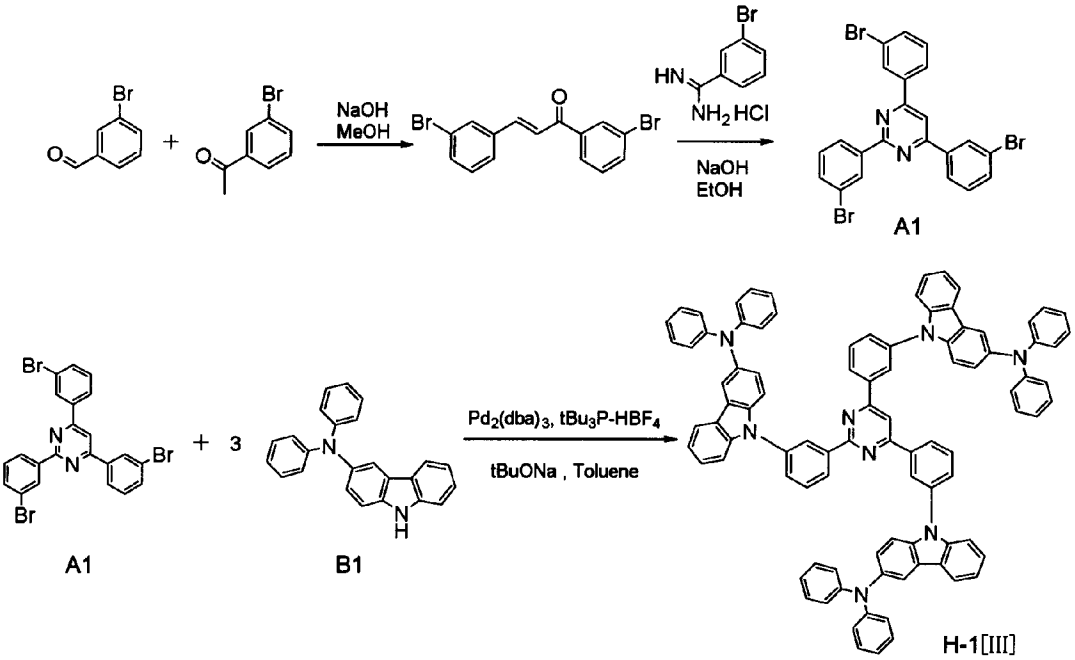
	ホスト材料	外部量子効率(%)		LT80 (hr)
		乾燥温度 150℃	乾燥温度 200℃	
実施例１［II］	Ｈ－１［II］	7.1	7.2	47
実施例２［II］	Ｈ－２［II］	6.9	7.0	44
実施例３［II］	Ｈ－３［II］	6.5	6.4	48
実施例４［II］	Ｈ－４［II］	7.9	8.1	42
実施例５［II］	Ｈ－５［II］	8.0	7.9	50
実施例６［II］	Ｈ－６［II］	7.1	6.5	46
比較例１［II］	Ｑ－１［II］	7.6	7.3	5
比較例２［II］	Ｑ－２［II］	6.8	3.2	－

[1176] （３）次に、化合物（１［III］）の合成方法、及び該化合物（１［III］）を用いた有機ＥＬ素子の製造方法及びその評価結果を示す。

[1177] ＜＜化合物（１［III］）＞＞

合成例１［III］（化合物Ｈ－１［III］の合成）

[化775]



[1178] ３－ブロモベンズアルデヒド（１７．０ｍＬ、１４６ｍｍｏｌ）、３－ブロモアセトフェノン（１９．３ｍＬ、１４６ｍｍｏｌ）をメタノール(３００ｍＬ）に溶解し、水酸化ナトリウム（０．５８４ｇ、１４．６ｍｍｏｌ）を加え、室温で１０．５時間攪拌した。

析出した固体を濾取し、メタノールで洗浄したのち真空乾燥し、クリーム色の粉末（４７．８ｇ、収率９０％）を得た。

続いて、得られたその粉末（１２．４ｇ、３３．９ｍｍｏｌ）に、３－ブロモベンズアミジン塩酸塩（４．００ｇ、１６．９ｍｍｏｌ）、水酸化ナトリウム（０．７４５ｇ、１８．６ｍｍｏｌ）を加えエタノール(３５ｍＬ）を追加し、加熱還流下１２．５時間反応させた。生成した白色粉末を濾取し、液の着色が無くなるまでエタノールで洗浄し、さらに水、エタノールで洗浄したのち真空乾燥し、目的とするピリミジン中間体Ａ１（５．７５ｇ、収率６２％）を得た。

[1179] アルゴン雰囲気下、カルバゾリル体Ｂ１（４．９１ｇ、９．００ｍｍｏｌ）、ピリミジン中間体Ａ１（１．２３ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジ

ベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８０ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．９６５ｇ、９．００ｍｍｏｌ）、無水トルエン（６０ｍＬ）を順次加えて８時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｈ－１［III］（３．２２ｇ，収率７０％）を得た。

[1180] 化合物Ｈ－１［III］について、ＨＰＬＣ（Ｈｉｇｈ Ｐｅｒｆｏｒｍａｎｃｅ Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ）及びＬＣ－ＭＳ（Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ－Ｍａｓｓ Ｓｐｅｃｔｒｏｍｅｔｒｙ）の分析結果を以下に示す。

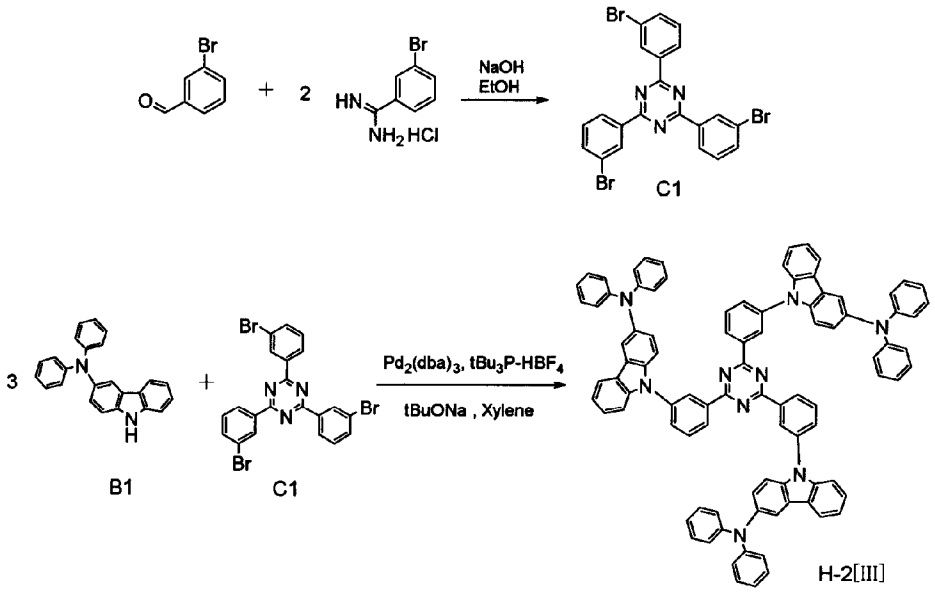
ＨＰＬＣ：純度９９．０％

ＬＣ－ＭＳ：ｃａｌｃｄ ｆｏｒ Ｃ１１２Ｈ７６Ｎ８＝１５３２、

ｆｏｕｎｄ ｍ／ｚ＝１５３２（Ｍ＋，１００）

[1181] 合成例２［III］（化合物Ｈ－２［III］の合成）

[化776]



[1182] ３－ブロモベンズアルデヒド（１．８５ｇ、１０．０ｍｍｏｌ）、３－ブロモベンズアミジン塩酸塩（４．７１ｇ、２０．０ｍｍｏｌ）、水酸化ナトリウム（１．２０ｇ、３０．０ｍｍｏｌ）を加えエタノール(２００ｍＬ）を追加し、加熱還流下７時間反応させた。生成した固体を濾取した。濾液を減圧下留去し、得られた固体に、クロラニル（０．７７６ｇ、３．１６ｍｍｏｌ）、ジクロロメタン（１２０ｍＬ）を加え室温で１時間攪拌した。生成した固体を濾取し、先の固体と混ぜ、ジクロロメタンとエタノールで再結晶を２回繰り返した。析出した白色固体を濾取し、真空乾燥し、目的とするトリアジン中間体Ｃ１（４．４４ｇ、収率８１％）を得た。

[1183] アルゴン雰囲気下、カルバゾリル中間体Ｂ１（４．９１ｇ、９．００ｍｍｏｌ）、トリアジン中間体Ｃ１（１．６４ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８０ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．９６５ｇ、９．００ｍｍｏｌ）、無水トルエン（６０ｍＬ）を順次加えて８時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｈ－２［III］（３．２２ｇ，収率７０％）を得た。

[1184] 化合物Ｈ－２［III］について、ＨＰＬＣ（Ｈｉｇｈ　Ｐｅｒｆｏｒｍａｎｃｅ　Ｌｉｑｕｉｄ　Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ）及びＬＣ－ＭＳ（Ｌｉｑｕｉｄ　Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ－Ｍａｓｓ　Ｓｐｅｃｔｒｏｍｅｔｒｙ）の分析結果を以下に示す。

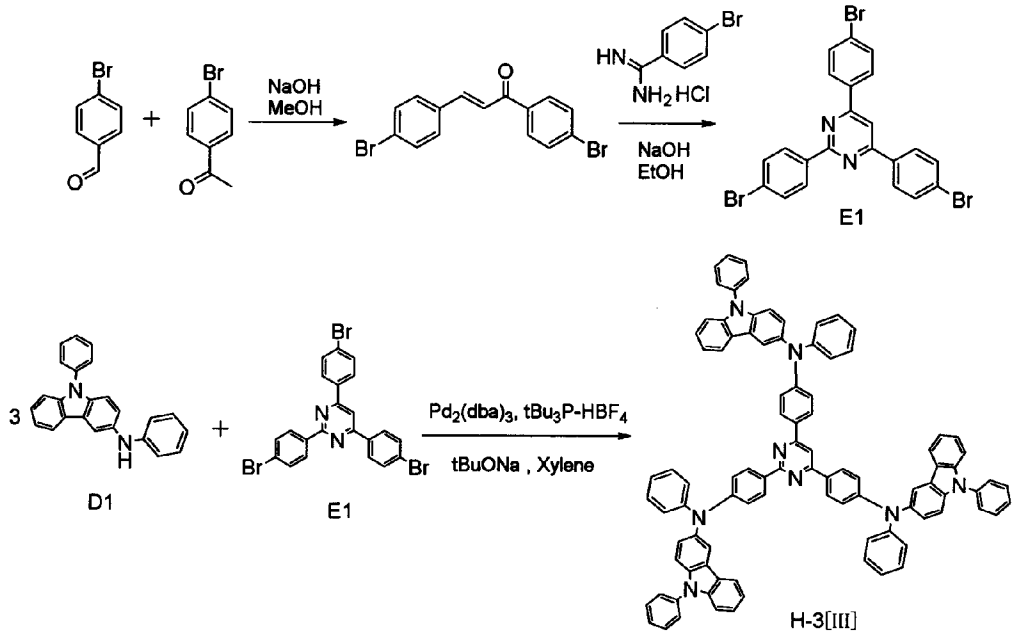
ＨＰＬＣ：純度９９．４％

ＬＣ－ＭＳ：ｃａｌｃｄ　ｆｏｒ　Ｃ１１１Ｈ７５Ｎ９＝１５３３、

ｆｏｕｎｄ　ｍ／ｚ＝１５３３（Ｍ＋，１００）

[1185] 合成例３［III］（化合物Ｈ－３［III］の合成）

[化777]



[1186] ４－ブロモベンズアルデヒド（１７．０ｍＬ、１４６ｍｍｏｌ）、４－ブロモアセトフェノン（１９．３ｍＬ、１４６ｍｍｏｌ）をメタノール(３００ｍＬ）に溶解し、水酸化ナトリウム（０．５８４ｇ、１４．６ｍｍｏｌ）を加え、室温で１０．５時間攪拌した。

析出した固体を濾取し、メタノールで洗浄したのち真空乾燥し、粉末（４７．８ｇ、収率９０％）を得た。

続いて、得られたその粉末（１２．４ｇ、３３．９ｍｍｏｌ）に、４－ブロモベンズアミジン塩酸塩（４．００ｇ、１６．９ｍｍｏｌ）、水酸化ナトリウム（０．７４５ｇ、１８．６ｍｍｏｌ）を加えエタノール(３５ｍＬ）を追加し、加熱還流下１２．５時間反応させた。生成した白色粉末を濾取し、液の着色が無くなるまでエタノールで洗浄し、さらに水、エタノールで洗浄したのち真空乾燥し、目的とするピリミジン中間体Ｅ１（７．４２ｇ、収率８０％）を得た。

[1187] アルゴン雰囲気下、カルバゾリル中間体Ｄ１（３．０１ｇ、９．００ｍｍｏｌ）、ピリミジン中間体Ｅ１（１．２３ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス

（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８０ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．９６５ｇ、９．００ｍｍｏｌ）、無水トルエン（６０ｍＬ）を順次加えて８時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｈ－３［III］（２．５５ｇ，収率６５％）を得た。

[1188] 化合物Ｈ－３［III］について、ＨＰＬＣ（Ｈｉｇｈ Ｐｅｒｆｏｒｍａｎｃｅ Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ）及びＬＣ－ＭＳ（Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ－Ｍａｓｓ Ｓｐｅｃｔｒｏｍｅｔｒｙ）の分析結果を以下に示す。

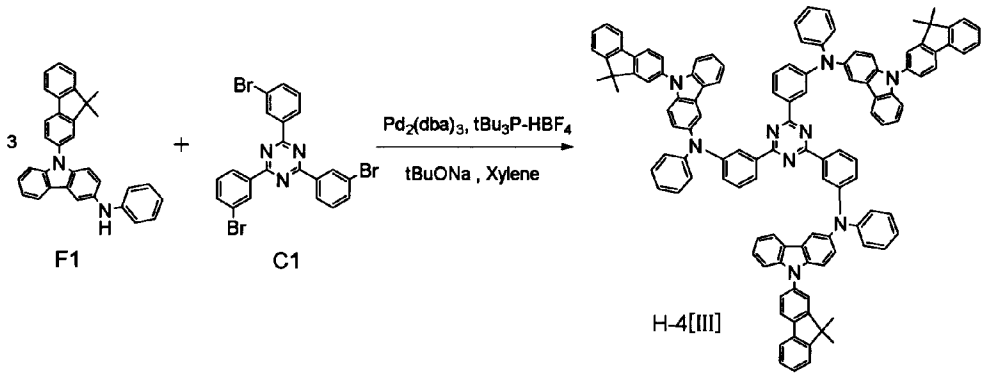
ＨＰＬＣ：純度９９．２％

ＬＣ－ＭＳ：ｃａｌｃｄ ｆｏｒ Ｃ９４Ｈ６４Ｎ８＝１３０４、

ｆｏｕｎｄ ｍ／ｚ＝１３０４（Ｍ＋，１００）

[1189] 合成例４［III］（化合物Ｈ－４［III］の合成）

[化778]



[1190] アルゴン雰囲気下、カルバゾリル体Ｆ１（４．０６ｇ、９．００ｍｍｏｌ）、トリアジン体Ｃ１（１．６４ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、

トリーｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８０ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．９６５ｇ、９．００ｍｍｏｌ）、無水トルエン（６０ｍＬ）を順次加えて８時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｈ－４［III］（２．７３ｇ，収率５５％）を得た。

[1191] 化合物Ｈ－４［III］について、ＨＰＬＣ（Ｈｉｇｈ Ｐｅｒｆｏｒｍａｎｃｅ Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ）及びＬＣ－ＭＳ（Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ－Ｍａｓｓ Ｓｐｅｃｔｒｏｍｅｔｒｙ）の分析結果を以下に示す。

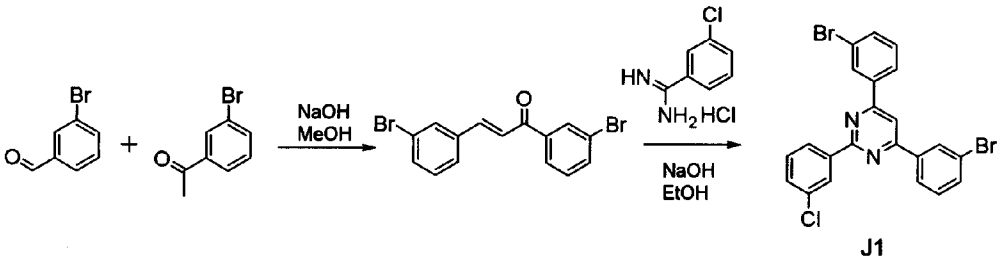
ＨＰＬＣ：純度９８．６％

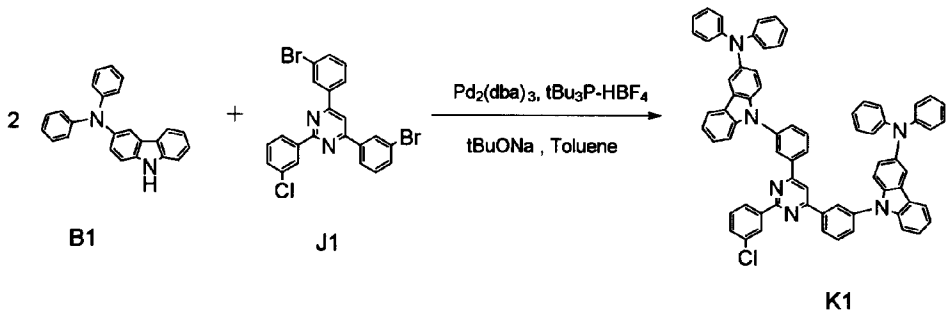
ＬＣ－ＭＳ：ｃａｌｃｄ ｆｏｒ Ｃ１２０Ｈ８７Ｎ９＝１６５３、

ｆｏｕｎｄ ｍ／ｚ＝１６５３（Ｍ＋，１００）

[1192] 合成例５［III］（化合物Ｈ－５［III］の合成）

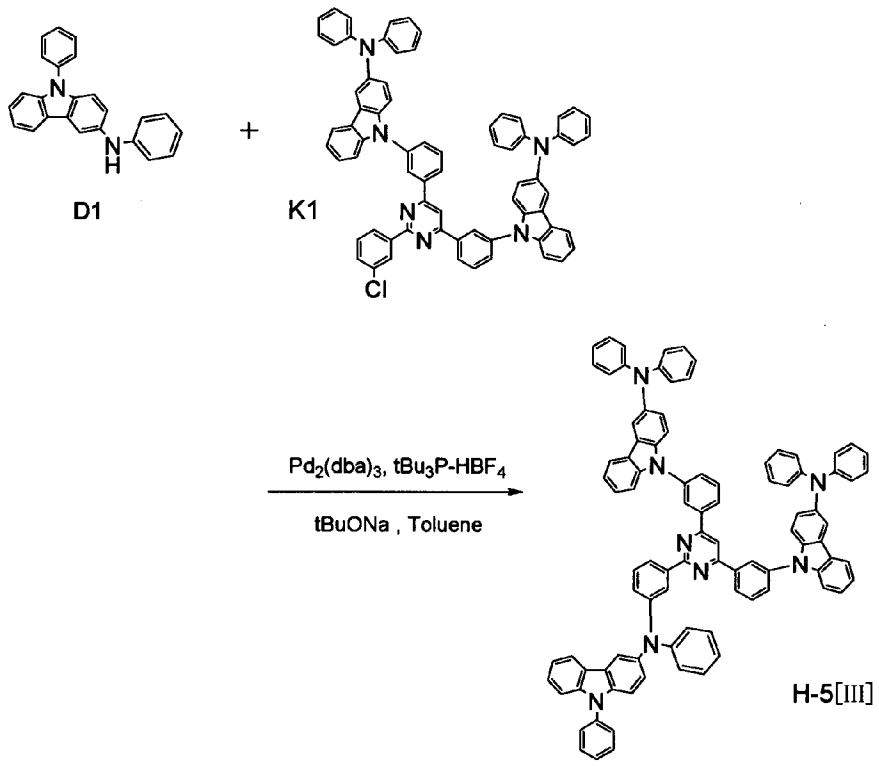
[化779]





[1193]

[化780]



[1194] ３－ブロモベンズアルデヒド（１７．０ｍＬ、１４６ｍｍｏｌ）、３－ブロモアセトフェノン（１９．３ｍＬ、１４６ｍｍｏｌ）をメタノール(３００ｍＬ）に溶解し、水酸化ナトリウム（０．５８４ｇ、１４．６ｍｍｏｌ）を加え、室温で１０．５時間攪拌した。

析出した固体を濾取し、メタノールで洗浄したのち真空乾燥し、クリーム色の粉末（４７．８ｇ、収率９０％）を得た。

続いて、得られたその粉末（１２．４ｇ、３３．９ｍｍｏｌ）に、３－クロロベンズアミジン塩酸塩（３．２３ｇ、１６．９ｍｍｏｌ）、水酸化ナトリウム（０．７４５ｇ、１８．６ｍｍｏｌ）を加えエタノール(３５ｍＬ）を追加し、加熱還流下１２．５時間反応させた。生成した白色粉末を濾取し、液の着色が無くなるまでエタノールで洗浄し、さらに水、エタノールで洗浄したのち真空乾燥し、目的とするピリミジン中間体Ｊ１（５．２５ｇ、収率６２％）を得た。

[1195] アルゴン雰囲気下、カルバゾリル体Ｂ１（２．４６ｇ、６．００ｍｍｏｌ

）、ピリミジン中間体Ｊ１（１．５０ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．２８８ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、無水トルエン（６０ｍＬ）を順次加えて１１時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｋ１（１．９１ｇ，収率５５％）を得た。

[1196] アルゴン雰囲気下、Ｋ１（１．９１ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、カルバゾリル体Ｄ１（１．００ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．２８８ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、無水トルエン（６０ｍＬ）を順次加えて１１時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｈ－５［III］（３．７２ｇ，収率８５％）を得た。

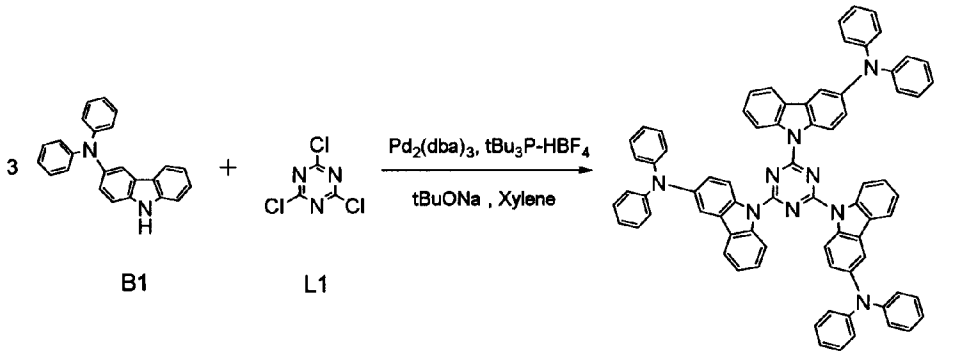
[1197] 化合物Ｈ－５［III］について、ＨＰＬＣ（Ｈｉｇｈ Ｐｅｒｆｏｒｍａｎｃｅ Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ）及びＬＣ－ＭＳ（Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ－Ｍａｓｓ Ｓｐｅｃｔｒｏｍｅｔｒｙ）の分析結果を以下に示す。

ＨＰＬＣ：純度９９．０％

ＬＣ－ＭＳ：ｃａｌｃｄ ｆｏｒ Ｃ１０６Ｈ７２Ｎ８＝１４５６、
ｆｏｕｎｄ ｍ／ｚ＝１４５６（Ｍ＋，１００）

[1198] 合成例６［III］（化合物Ｈ－６［III］の合成）

[化781]



[1199] アルゴン雰囲気下、カルバゾリル体Ｂ１（３．０１ｇ、９．００ｍｍｏｌ）、トリアジン中間体Ｌ１（０．５５３ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．２８８ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、無水キシレン（６０ｍＬ）を順次加えて１１時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｈ－６［III］（２．５９ｇ，収率８０％）を得た。

[1200] 化合物Ｈ－６［III］について、ＨＰＬＣ（Ｈｉｇｈ Ｐｅｒｆｏｒｍａｎｃｅ Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ）及びＬＣ－ＭＳ（Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ－Ｍａｓｓ Ｓｐｅｃｔｒｏｍｅｔｒｙ）の分析結果を以下に示す。

ＨＰＬＣ：純度９９．０％

ＬＣ－ＭＳ：ｃａｌｃｄ ｆｏｒ Ｃ７５Ｈ５１Ｎ９＝１０７７、

ｆｏｕｎｄ ｍ／ｚ＝１０７７（Ｍ＋，１００）

[1201] なお、以上の合成反応を参照し、目的物に合わせた公知の代替反応や原料を用いることによって、特許請求の範囲で規定の化合物を合成することが可能である。

[1202] 実施例１［III］

（基板の洗浄）

２５ｍｍ×２５ｍｍ×厚さ１．１ｍｍのＩＴＯ透明電極付ガラス基板（ジオマテック株式会社製）をイソプロピルアルコール中で、超音波洗浄を５分間行った後、ＵＶオゾン洗浄を５分間行った。

（下地層の形成）

正孔輸送材料としてＨＥＲＡＥＵＳ社製ＣＬＥＶＩＯＵＳ　ＡＩ４０８３（商品名）を３０ｎｍの厚さで前記のＩＴＯ基板上にスピンコート法により成膜した。成膜後、アセトンにより不要な部分を除去し、次いで大気中で２００℃のホットプレートで１０分間焼成し、下地基板を作製した。

（発光層の形成）

ホスト材料として合成例１［III］で得た化合物Ｈ－１［III］、ドーパント材料として下記の化合物Ｄ－ｉを用い、化合物Ｈ－１［III］：化合物Ｄ－ｉが質量比で９５：５となるような混合比で１．６質量％のトルエン溶液を調製した。このトルエン溶液を用い、前記下地基板上にスピンコート法により、５０ｎｍの膜厚になるように塗布積層した。塗布成膜後、不要部分をトルエンにて除去し、１５０℃にてホットプレート上で加熱乾燥し、発光層を成膜した塗布積層基板を作製した。なお、発光層の成膜にかかる全ての操作は窒素雰囲気のグローブボックス中で実施した。

（蒸着、封止）

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

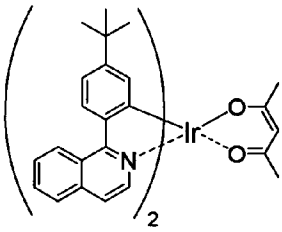
（素子評価）

得られた有機ＥＬ素子を、直流電流駆動により発光させ、電流密度１０ｍＡ／ｃｍ^{2}における外部量子収率（ＥＱＥ）を測定した。測定結果を表３に示

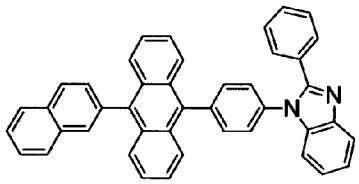
す。

[1203] なお、発光層の形成過程において、塗布成膜後の加熱乾燥温度を２００℃として同様に有機ＥＬ素子を別途作製し、当該有機ＥＬ素子についても、上記と同様に外部量子効率（ＥＱＥ）を測定した。測定結果を表３に示す。

[1204] [化782]



Ｄ－ｉ



ＥＴ－１

[1205] 実施例２［III］

ホスト材料として合成例２［III］で得た化合物Ｈ－２［III］を用いたこと以外は、実施例１［III］と同様の方法で有機ＥＬ素子を作製した。測定結果を表３に示す。

[1206] 実施例３［III］

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

[1207] 実施例４［III］

ホスト材料として合成例４［III］で得た化合物Ｈ－４［III］を用いたこと以外は、実施例１［III］と同様の方法で有機ＥＬ素子を作製した。測定結果を表３に示す。

[1208] 実施例５［III］

ホスト材料として合成例５［III］で得た化合物Ｈ－５［III］を用いたこと以外は、実施例１［III］と同様の方法で有機ＥＬ素子を作製した。測定結果を表３に示す。

[1209] 実施例６［III］

ホスト材料として合成例６［III］で得た化合物Ｈ－６［III］を用いたこと以外は、実施例１［III］と同様の方法で有機ＥＬ素子を作製した。測定結果を表３に示す。

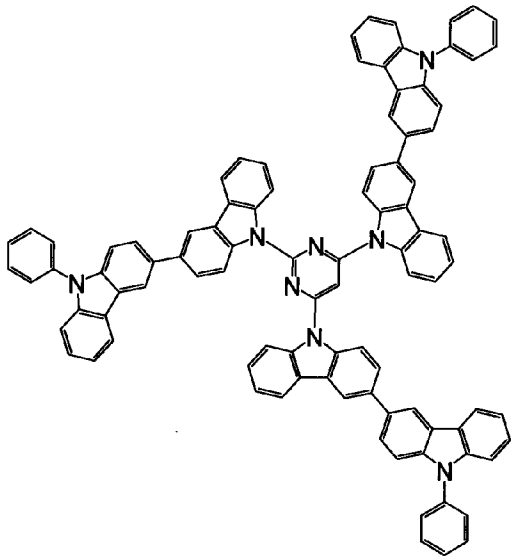
[1210] 比較例１［III］

ホスト材料として国際公開第２０１２／０８６１７０号に記載の下記化合物Ｑ－１［III］を用いたこと以外は、実施例１［III］と同様の方法で有機ＥＬ素子を作製した。測定結果を表３に示す。

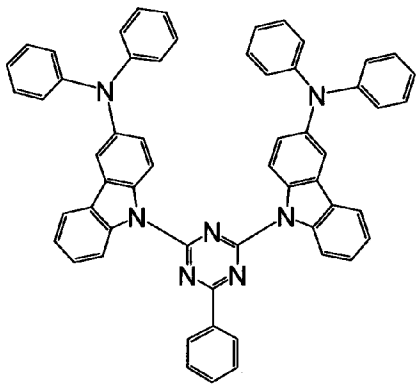
[1211] 比較例２［III］

ホスト材料として国際公開第２０１３／０８１０８８号に記載の下記化合物Ｑ－２［III］を用いたこと以外は、実施例１［III］と同様の方法で有機ＥＬ素子を作製した。測定結果を表３に示す。

[1212] [化783]



Ｑ－１［III］



Ｑ－２［III］

[1213]

[表3]

表３

	ホスト材料	外部量子効率（%）	
		乾燥温度 150℃	乾燥温度 200℃
実施例１［III］	Ｈ－１［III］	4.8	4.8
実施例２［III］	Ｈ－２［III］	4.9	4.7
実施例３［III］	Ｈ－３［III］	4.3	4.2
実施例４［III］	Ｈ－４［III］	4.4	4.2
実施例５［III］	Ｈ－５［III］	4.6	4.5
実施例６［III］	Ｈ－６［III］	4.4	4.3
比較例１［III］	Ｑ－１［III］	2.1	—＊１
比較例２［III］	Ｑ－２［III］	4.3	2.3

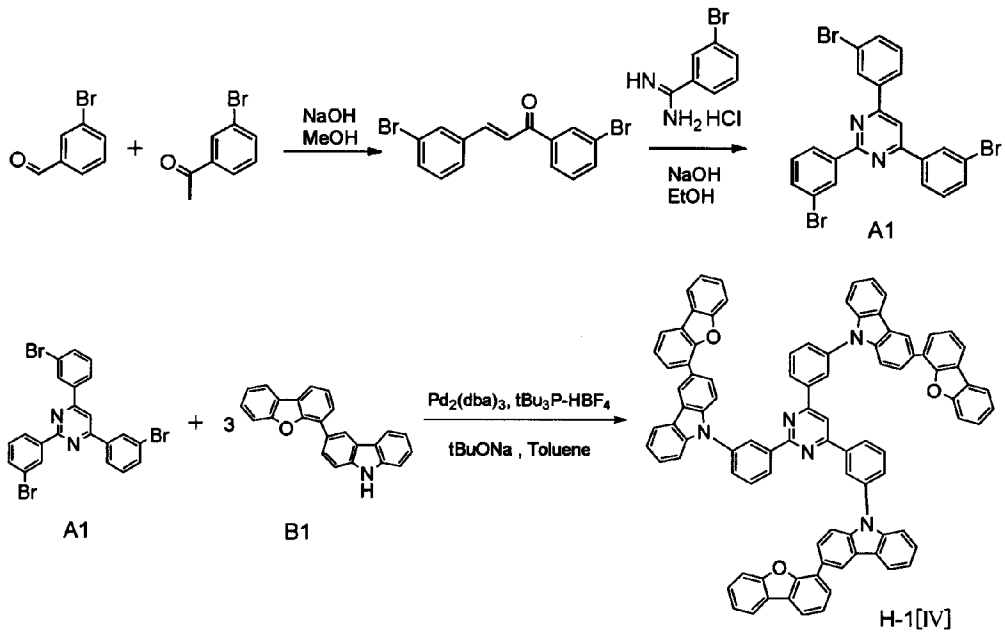
＊１：乾燥温度 150℃の場合の外部量子効率が既に
低かったため、200℃では未測定。

[1214] （４）次に、化合物（１［IV］）の合成方法、及び該化合物（１［IV］）を用いた有機ＥＬ素子の製造方法及びその評価結果を示す。

[1215] ＜＜化合物（１［IV］）＞＞

合成例１［IV］（化合物Ｈ－１［IV］の合成）

[化784]



[1216] ３－ブロモベンズアルデヒド（１７．０ｍＬ、１４６ｍｍｏｌ）、３－ブロモアセトフェノン（１９．３ｍＬ、１４６ｍｍｏｌ）をメタノール(３００ｍＬ）に溶解し、水酸化ナトリウム（０．５８４ｇ、１４．６ｍｍｏｌ）を加え、室温で１０．５時間攪拌した。

析出した固体を濾取し、メタノールで洗浄したのち真空乾燥し、クリーム色の粉末（４７．８ｇ、収率９０％）を得た。

続いて、得られたその粉末（１２．４ｇ、３３．９ｍｍｏｌ）に、３－ブロモベンズアミジン塩酸塩（４．００ｇ、１６．９ｍｍｏｌ）、水酸化ナトリウム（０．７４５ｇ、１８．６ｍｍｏｌ）を加えエタノール(３５ｍＬ）を追加し、加熱還流下１２．５時間反応させた。生成した白色粉末を濾取し、液の着色が無くなるまでエタノールで洗浄し、さらに水、エタノールで洗浄したのち真空乾燥し、目的とするピリミジン中間体Ａ１（５．７５ｇ、収率６２％）を得た。

[1217] アルゴン雰囲気下、カルバゾリル体Ｂ１（３．００ｇ、９．００ｍｍｏｌ）、ピリミジン中間体Ａ１（１．２３ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８０ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．９６５ｇ、９．００ｍｍｏｌ）、無水トルエン（６０ｍＬ）を順次加えて８時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｈ－１［IV］（２．７４ｇ，収率７０％）を得た。

[1218] 化合物Ｈ－１［IV］について、ＨＰＬＣ（Ｈｉｇｈ Ｐｅｒｆｏｒｍａｎｃｅ Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ）及びＬＣ－ＭＳ（Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ－Ｍａｓｓ Ｓｐｅｃｔｒｏｍｅｔｒｙ）の分析結果を以下に示す。

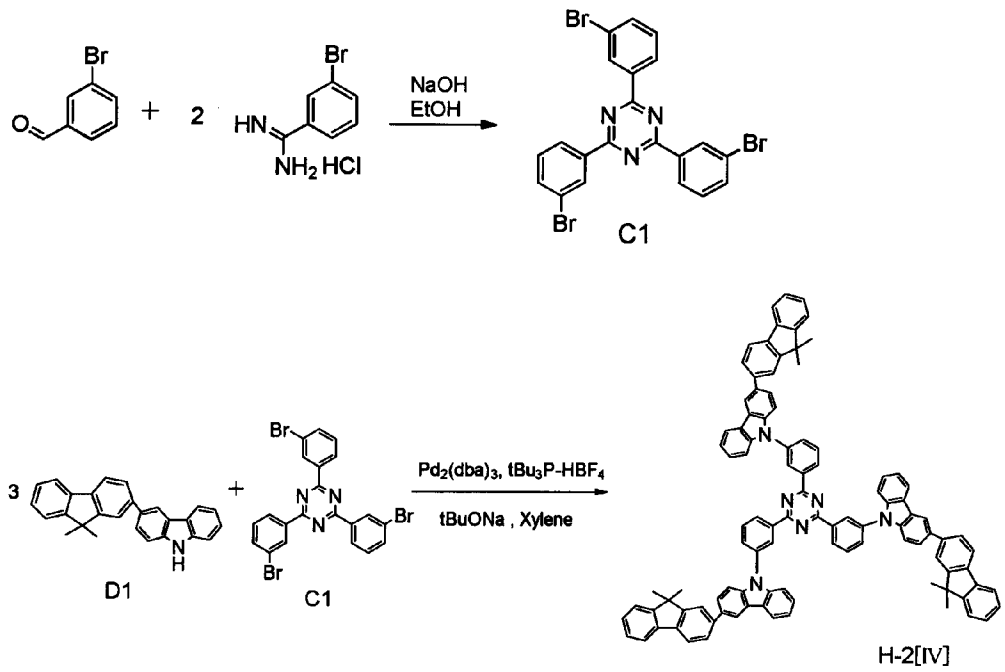
ＨＰＬＣ：純度９９．０％

ＬＣ－ＭＳ：ｃａｌｃｄ　ｆｏｒ　Ｃ９４Ｈ５５Ｎ５０３＝１３０１、

ｆｏｕｎｄ　ｍ／ｚ＝１３０１２（Ｍ＋，１００）

[1219] 合成例２［IV］（化合物Ｈ－２［IV］の合成）

[化785]



[1220] ３－ブロモベンズアルデヒド（１．８５ｇ、１０．０ｍｍｏｌ）、３－ブロモベンズアミジン塩酸塩（４．７１ｇ、２０．０ｍｍｏｌ）、水酸化ナトリウム（１．２０ｇ、３０．０ｍｍｏｌ）を加えエタノール（２００ｍＬ）を追加し、加熱還流下７時間反応させた。生成した固体を濾取した。濾液を減圧下留去し、得られた固体に、クロラニル（０．７７６ｇ、３．１６ｍｍｏｌ）、ジクロロメタン（１２０ｍＬ）を加え室温で１時間攪拌した。生成した固体を濾取し、先の固体と混ぜ、ジクロロメタンとエタノールで再結晶を２回繰り返した。析出した白色固体を濾取し、真空乾燥し、目的とするトリアジン中間体Ｃ１（４．４４ｇ、収率８１％）を得た。

[1221] アルゴン雰囲気下、カルバゾリル体Ｄ１（３．２４ｇ、９．００ｍｍｏｌ

）、トリアジン中間体Ｃ１（１．６４ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８０ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．９６５ｇ、９．００ｍｍｏｌ）、無水トルエン（６０ｍＬ）を順次加えて８時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｈ－２［IV］（２．９０ｇ，収率７０％）を得た。

[1222] 化合物Ｈ－２［IV］について、ＨＰＬＣ（Ｈｉｇｈ Ｐｅｒｆｏｒｍａｎｃｅ Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ）及びＬＣ－ＭＳ（Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ－Ｍａｓｓ Ｓｐｅｃｔｒｏｍｅｔｒｙ）の分析結果を以下に示す。

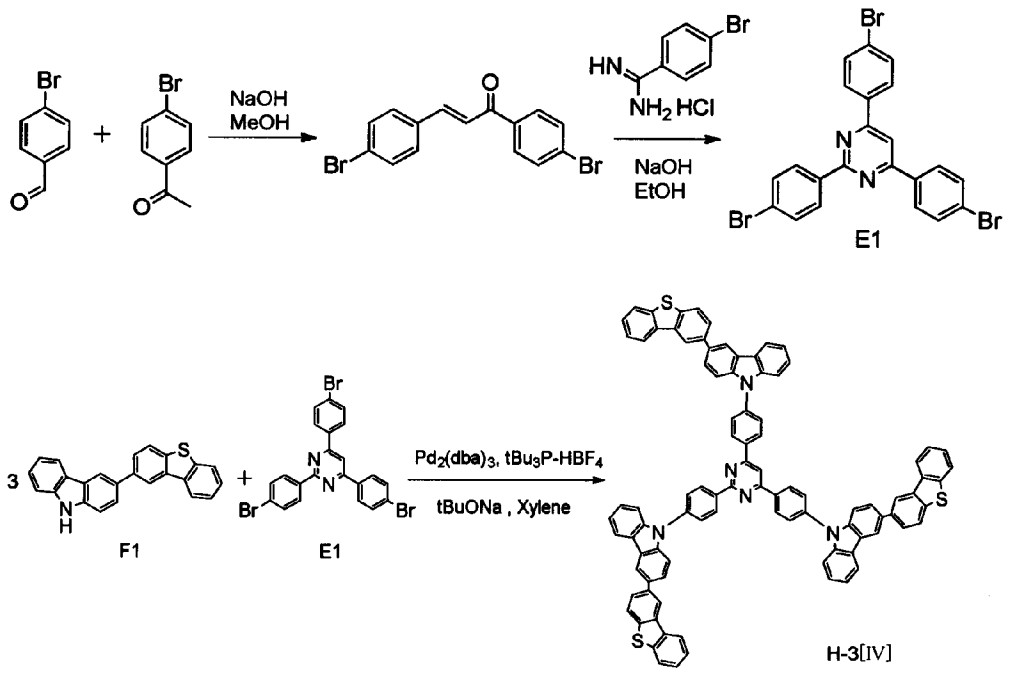
ＨＰＬＣ：純度９９．４％

ＬＣ－ＭＳ：ｃａｌｃｄ ｆｏｒ Ｃ１０２Ｈ７２Ｎ６＝１３８０、

ｆｏｕｎｄ ｍ／ｚ＝１３８０（Ｍ＋，１００）

[1223] 合成例３［IV］（化合物Ｈ－３［IV］の合成）

[化786]



[1224] ４－ブロモベンズアルデヒド（１７．０ｍＬ、１４６ｍｍｏｌ）、４－ブロモアセトフェノン（１９．３ｍＬ、１４６ｍｍｏｌ）をメタノール(３００ｍＬ）に溶解し、水酸化ナトリウム（０．５８４ｇ、１４．６ｍｍｏｌ）を加え、室温で１０．５時間攪拌した。

析出した固体を濾取し、メタノールで洗浄したのち真空乾燥し、粉末（４７．８ｇ、収率９０％）を得た。

続いて、得られたその粉末（１２．４ｇ、３３．９ｍｍｏｌ）に、４－ブロモベンズアミジン塩酸塩（４．００ｇ、１６．９ｍｍｏｌ）、水酸化ナトリウム（０．７４５ｇ、１８．６ｍｍｏｌ）を加えエタノール(３５ｍＬ）を追加し、加熱還流下１２．５時間反応させた。生成した白色粉末を濾取し、液の着色が無くなるまでエタノールで洗浄し、さらに水、エタノールで洗浄したのち真空乾燥し、目的とするピリミジン中間体Ｅ１（７．４２ｇ、収率８０％）を得た。

[1225] アルゴン雰囲気下、カルバゾリル体Ｆ１（３．１５ｇ、９．００ｍｍｏｌ

）、ピリミジン中間体Ｅ１（１．２３ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８０ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．９６５ｇ、９．００ｍｍｏｌ）、無水トルエン（６０ｍＬ）を順次加えて８時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｈ－３［IV］（２．６３ｇ，収率６５％）を得た。

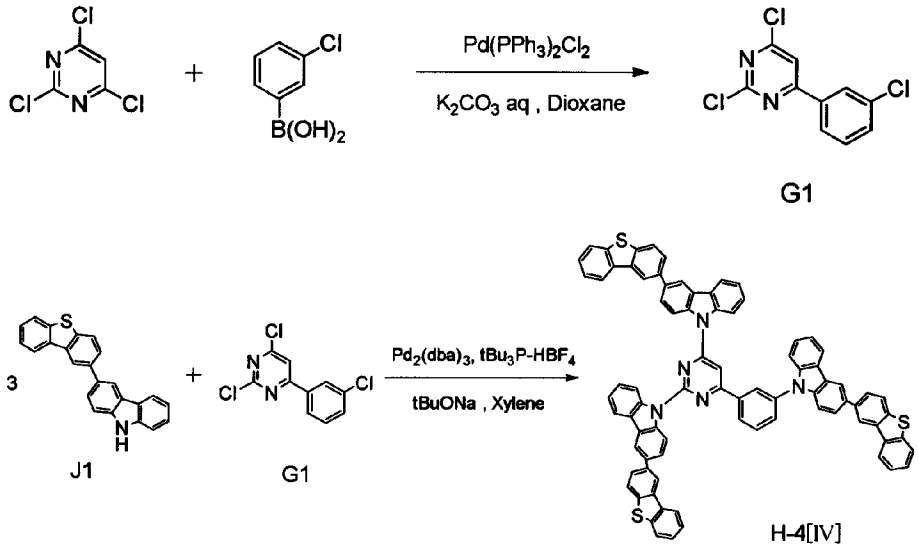
[1226] 化合物Ｈ－３［IV］について、ＨＰＬＣ（Ｈｉｇｈ Ｐｅｒｆｏｒｍａｎｃｅ Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ）及びＬＣ－ＭＳ（Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ－Ｍａｓｓ Ｓｐｅｃｔｒｏｍｅｔｒｙ）の分析結果を以下に示す。

ＨＰＬＣ：純度９９．２％

ＬＣ－ＭＳ：ｃａｌｃｄ ｆｏｒ Ｃ９４Ｈ５５Ｎ５Ｓ３＝１３４９、
ｆｏｕｎｄ ｍ／ｚ＝１３４９（Ｍ＋，１００）

[1227] 合成例４［IV］（化合物Ｈ－４［IV］の合成）

[化787]



[1228] アルゴン雰囲気下、２，４，６－トリクロロピリミジン（３．６７ｇ、２０ｍｍｏｌ）、３－クロロフェニルボロン酸（３．１３ｇ、２０ｍｍｏｌ）、ジクロロ（ビストリフェニルホスフィン）パラジウム錯体（０．３５１ｇ、０．５ｍｍｏｌ）、１，４－ジオキサン（８０ｍＬ）、２M炭酸カリウム水溶液（４０ｍＬ）を順次加えて８時間加熱還流した。室温まで反応液を冷却した後、トルエンを加えて希釈し、水で洗浄し、減圧乾燥した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、ピリミジン中間体Ｇ１（４．０５ｇ，収率７８％）を得た。

[1229] アルゴン雰囲気下、カルバゾリル体Ｊ１（３．１５ｇ、９．００ｍｍｏｌ）、ピリミジン体Ｇ１（０．７７９ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８０ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．９６５ｇ、９．００ｍｍｏｌ）、無水トルエン（６０ｍＬ）を順次加えて８時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｈ－４［IV］（１．９８ｇ，収率５５％）を得た。

[1230] 化合物Ｈ－４［IV］について、ＨＰＬＣ（Ｈｉｇｈ Ｐｅｒｆｏｒｍａｎｃｅ Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ）及びＬＣ－ＭＳ（Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ－Ｍａｓｓ Ｓｐｅｃｔｒｏｍｅｔｒｙ）の分析結果を以下に示す。

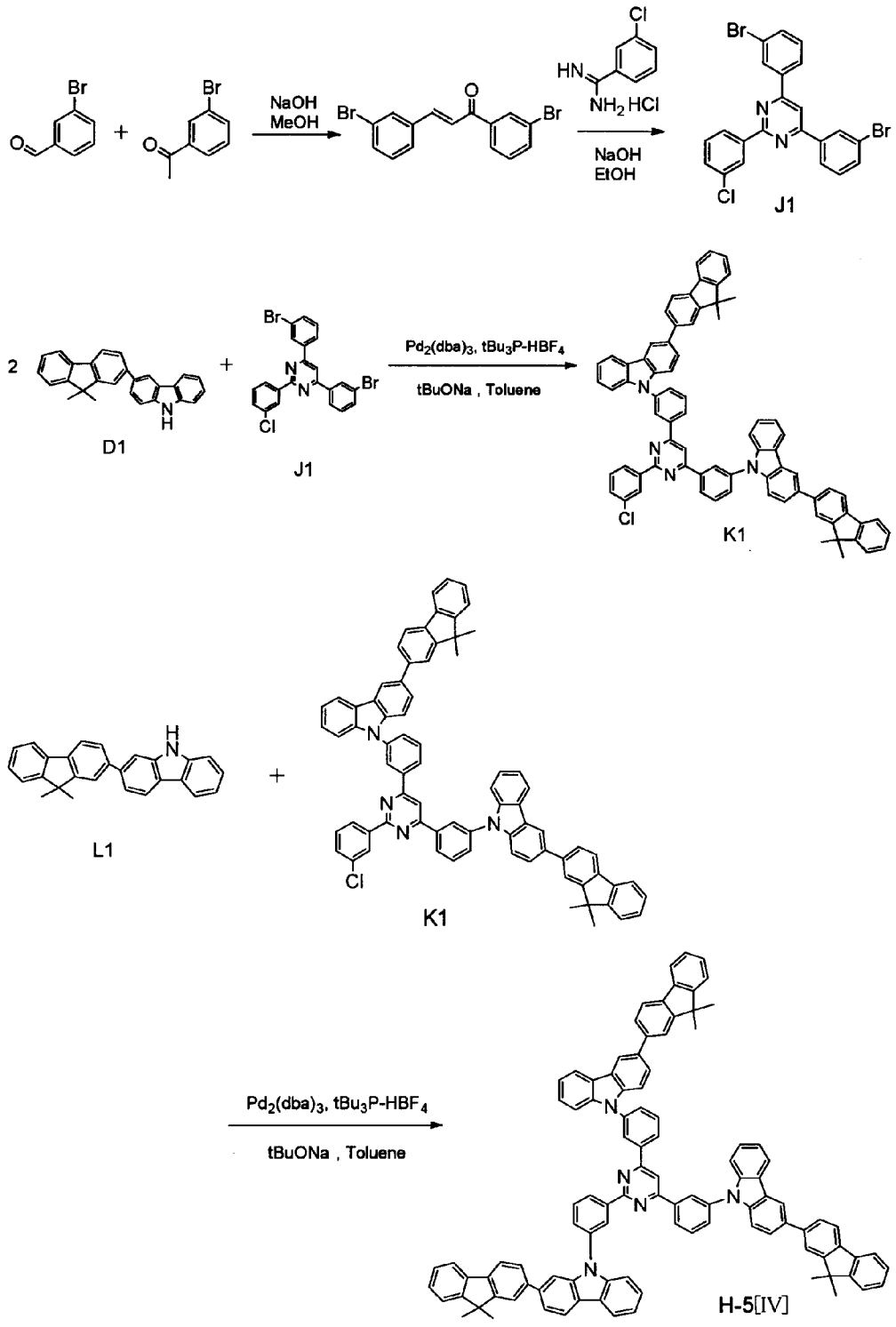
ＨＰＬＣ：純度９８．６％

ＬＣ－ＭＳ：ｃａｌｃｄ ｆｏｒ Ｃ８２Ｈ４７Ｎ５Ｓ３＝１１９７、

ｆｏｕｎｄ ｍ／ｚ＝１１９７（Ｍ＋，１００）

[1231] 合成例５［IV］（化合物Ｈ－５［IV］の合成）

[化788]



[1232] ３－ブロモベンズアルデヒド（１７．０ｍＬ、１４６ｍｍｏｌ）、３－ブロモアセトフェノン（１９．３ｍＬ、１４６ｍｍｏｌ）をメタノール(３００

ｍＬ）に溶解し、水酸化ナトリウム（０．５８４ｇ、１４．６ｍｍｏｌ）を加え、室温で１０．５時間攪拌した。

析出した固体を濾取し、メタノールで洗浄したのち真空乾燥し、クリーム色の粉末（４７．８ｇ、収率９０％）を得た。

続いて、得られたその粉末（１２．４ｇ、３３．９ｍｍｏｌ）に、３－クロロベンズアミジン塩酸塩（３．２３ｇ、１６．９ｍｍｏｌ）、水酸化ナトリウム（０．７４５ｇ、１８．６ｍｍｏｌ）を加えエタノール(３５ｍＬ）を追加し、加熱還流下１２．５時間反応させた。生成した白色粉末を濾取し、液の着色が無くなるまでエタノールで洗浄し、さらに水、エタノールで洗浄したのち真空乾燥し、目的とするピリミジン中間体Ｊ１（５．２５ｇ、収率６２％）を得た。

[1233] アルゴン雰囲気下、カルバゾリル体Ｄ１（２．１６ｇ、６．００ｍｍｏｌ）、ピリミジン中間体Ｊ１（１．５０ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．２８８ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、無水トルエン（６０ｍＬ）を順次加えて１１時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｋ１（２．２２ｇ，収率７０％）を得た。

[1234] アルゴン雰囲気下、Ｋ１（２．２２ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、カルバゾリル体Ｌ１（１．０８ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．２８８ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、無水トルエン（６０ｍＬ）を順次加えて１１時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下

留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｈ－５［IV］（３．５２ｇ，収率８５％）を得た。

[1235] 化合物Ｈ－５［IV］について、ＨＰＬＣ（Ｈｉｇｈ Ｐｅｒｆｏｒｍａｎｃｅ Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ）及びＬＣ－ＭＳ（Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ－Ｍａｓｓ Ｓｐｅｃｔｒｏｍｅｔｒｙ）の分析結果を以下に示す。

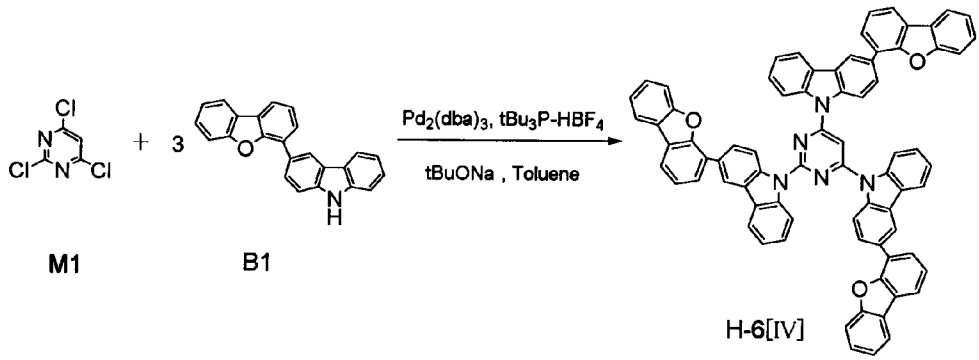
ＨＰＬＣ：純度９９．０％

ＬＣ－ＭＳ：ｃａｌｃｄ ｆｏｒ Ｃ１０３Ｈ７３Ｎ５＝１３７９、

ｆｏｕｎｄ ｍ／ｚ＝１３７９（Ｍ＋，１００）

[1236] 合成例６［IV］（化合物Ｈ－６［IV］の合成）

[化789]



[1237] アルゴン雰囲気下、カルバゾリル体Ｂ１（３．００ｇ、９．００ｍｍｏｌ）、ピリミジン中間体Ｍ１（０．５５０ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．２８８ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、無水トルエン（６０ｍＬ）を順次加えて１１時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｈ－６［IV］（２．５８ｇ，収率８０％）を得た。

[1238] 化合物Ｈ－６［IV］について、ＨＰＬＣ（Ｈｉｇｈ　Ｐｅｒｆｏｒｍａｎｃｅ　Ｌｉｑｕｉｄ　Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ）及びＬＣ－ＭＳ（Ｌｉｑｕｉｄ　Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ－Ｍａｓｓ　Ｓｐｅｃｔｒｏｍｅｔｒｙ）の分析結果を以下に示す。

ＨＰＬＣ：純度９９．０％

ＬＣ－ＭＳ：ｃａｌｃｄ　ｆｏｒ　Ｃ７６Ｈ４３Ｎ５Ｏ３＝１０７３、

ｆｏｕｎｄ　ｍ／ｚ＝１０７３（Ｍ＋，１００）

[1239] なお、以上の合成反応を参照し、目的物に合わせた公知の代替反応や原料を用いることによって、特許請求の範囲で規定の化合物を合成することが可能である。

[1240] 実施例１［IV］

（基板の洗浄）

２５ｍｍ×２５ｍｍ×厚さ１．１ｍｍのＩＴＯ透明電極付ガラス基板（ジオマテック株式会社製）をイソプロピルアルコール中で、超音波洗浄を５分間行った後、ＵＶオゾン洗浄を５分間行った。

（下地層の形成）

正孔輸送材料としてＨＥＲＡＥＵＳ社製ＣＬＥＶＩＯＵＳ　ＡＩ４０８３（商品名）を３０ｎｍの厚さで前記のＩＴＯ基板上にスピンコート法により成膜した。成膜後、アセトンにより不要な部分を除去し、次いで大気中で２００℃のホットプレートで１０分間焼成し、下地基板を作製した。

（発光層の形成）

ホスト材料として合成例１［IV］で得た化合物Ｈ－１［IV］、ドーパント材料として下記の化合物Ｄ－iiを用い、化合物Ｈ－１［IV］：化合物Ｄ－iiが質量比で９０：１０となるような混合比で１．６質量％のトルエン溶液を調製した。このトルエン溶液を用い、前記下地基板上にスピンコート法により、５０ｎｍの膜厚になるように塗布積層した。塗布成膜後、不要部分をトルエンにて除去し、１５０℃のホットプレート上で加熱乾燥し、発光層を成膜した塗布積層基板を作製した。なお、発光層の成膜にかかる全ての操作は

窒素雰囲気のグローブボックス中で実施した。

（蒸着、封止）

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

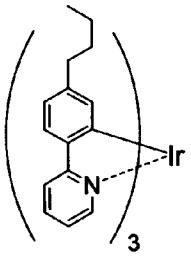
（素子評価）

得られた有機ＥＬ素子を、直流電流駆動により発光させ、電流密度１０ｍＡ／ｃｍ^{2}における外部量子収率（ＥＱＥ）を測定した。測定結果を表４に示す。

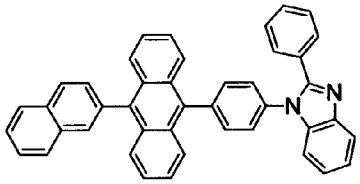
また、得られた有機ＥＬ素子を、直流電流駆動により１０００ｃｄ／ｍ^{2}の輝度で発光させた。連続点灯させて、輝度が８００ｃｄ／ｍ^{2}になるまでの時間（ＬＴ８０）を計測した結果を表４に示す。

[1241] なお、発光層の形成過程において、塗布成膜後の加熱乾燥温度を２００℃として同様に有機ＥＬ素子を別途作製し、当該有機ＥＬ素子についても、上記と同様に外部量子効率（ＥＱＥ）を測定した。測定結果を表４に示す。

[1242] [化790]



Ｄ－ｉｉ



ＥＴ－１

[1243] 実施例２［IV］

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

を表４に示す。

[1244] 実施例３［IV］

ホスト材料として合成例３［IV］で得た化合物Ｈ－３［IV］を用いたこと以外は、実施例１［IV］と同様の方法で有機ＥＬ素子を作製した。測定結果を表４に示す。

[1245] 実施例４［IV］

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

[1246] 実施例５［IV］

ホスト材料として合成例５で得た化合物Ｈ－５［IV］を用いたこと以外は、実施例１［IV］と同様の方法で有機ＥＬ素子を作製した。測定結果を表４に示す。

[1247] 実施例６［IV］

ホスト材料として合成例６［IV］で得た化合物Ｈ－６［IV］を用いたこと以外は、実施例１［IV］と同様の方法で有機ＥＬ素子を作製した。測定結果を表４に示す。

[1248] 比較例１［IV］

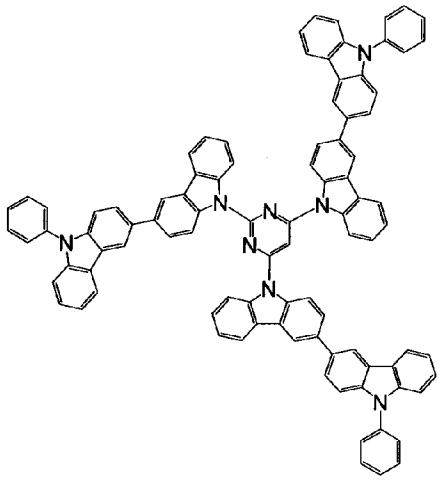
ホスト材料として国際公開第２０１２／０８６１７０号に記載の下記化合物Ｑ－１［IV］を用いたこと以外は、実施例１［IV］と同様の方法で有機ＥＬ素子を作製した。測定結果を表４に示す。

[1249] 比較例２［IV］

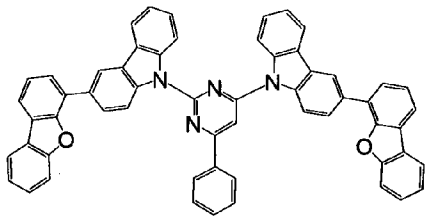
ホスト材料として国際公開第２０１３／０８１０８８号に記載の下記化合物Ｑ－２［IV］を用いたこと以外は、実施例１［IV］と同様の方法で有機ＥＬ素子を作製した。測定結果を表４に示す。

[1250]

[化791]



Q－1 [IV]



Q－2 [IV]

[1251] [表4]

表４

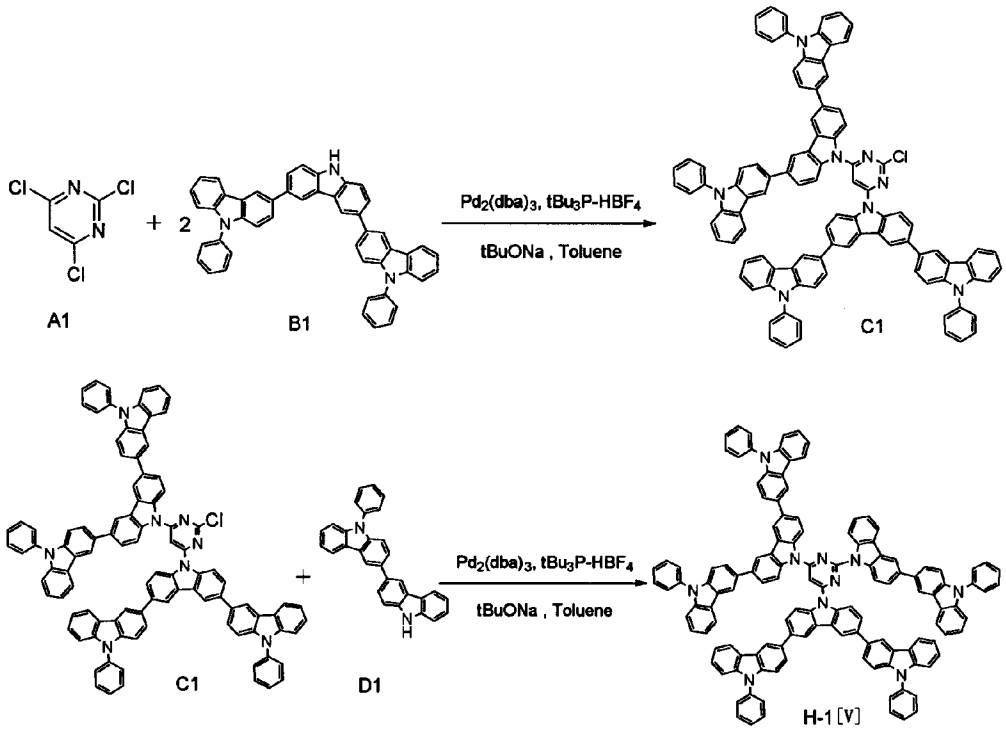
	ホスト材料	外部量子効率（%）		LT80 (hr)
		乾燥温度 150℃	乾燥温度 200℃	
実施例１ [IV]	Ｈ－１ [IV]	7.2	7.1	55
実施例２ [IV]	Ｈ－２ [IV]	7.1	6.9	58
実施例３ [IV]	Ｈ－３ [IV]	7.8	7.3	60
実施例４ [IV]	Ｈ－４ [IV]	7.7	7.6	54
実施例５ [IV]	Ｈ－５ [IV]	7.7	7.8	49
実施例６ [IV]	Ｈ－６ [IV]	7.3	7.0	48
比較例１ [IV]	Ｑ－１ [IV]	7.6	7.3	5
比較例２ [IV]	Ｑ－２ [IV]	7.4	3.8	—

[1252] （５）次に、化合物（１［Ｖ］）の合成方法、及び該化合物（１［Ｖ］）を用いた有機ＥＬ素子の製造方法及びその評価結果を示す。

[1253] ＜＜化合物（１［Ｖ］）＞＞

合成例１［Ｖ］（化合物Ｈ－１［Ｖ］の合成）

[化792]



[1254] アルゴン雰囲気下、化合物Ａ１（０．５５０ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、カルバゾリル体Ｂ１（３．９０ｇ、６．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．２８８ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、無水トルエン（６０ｍＬ）を順次加えて１１時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｃ１（３．６０ｇ，収率８５％）を得た。

[1255] アルゴン雰囲気下、化合物Ｃ１（３．６０ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、カルバゾリル体Ｄ１（１．２３ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８

ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．２８８ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、無水トルエン（６０ｍＬ）を順次加えて１１時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｈ－１［Ｖ］（４．５４ｇ、収率８５％）を得た。

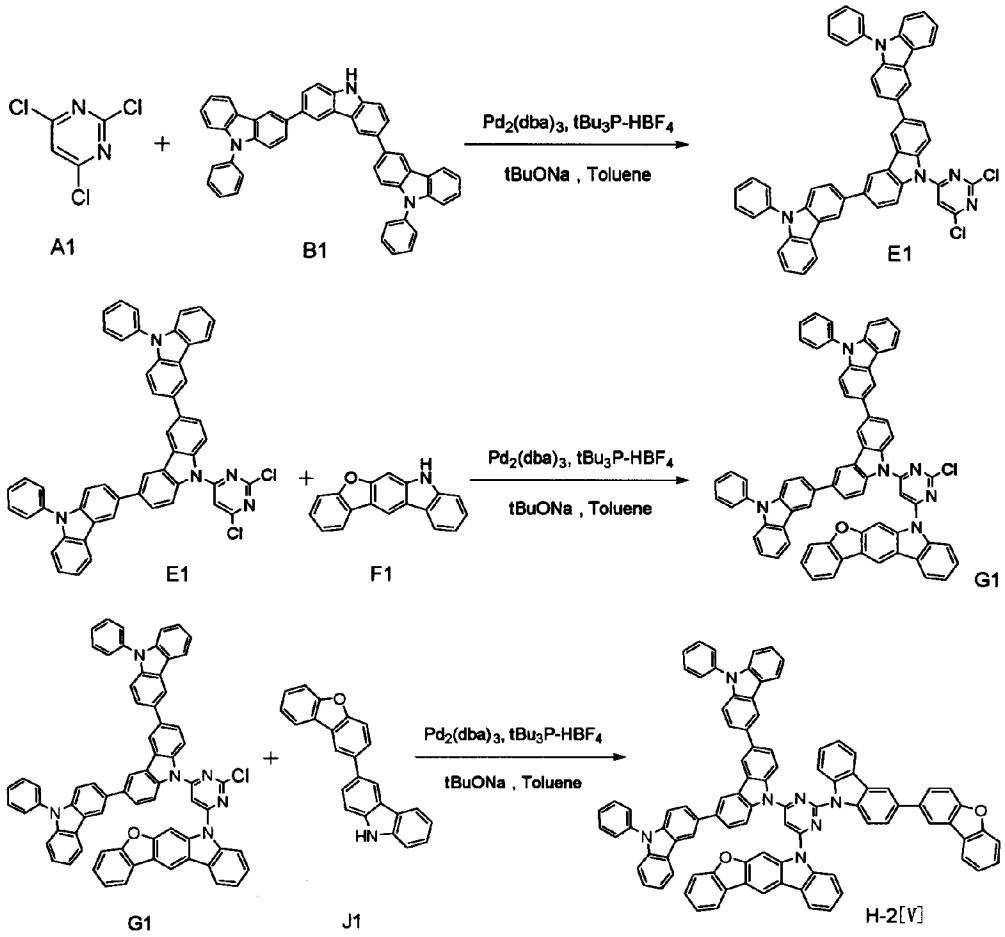
[1256] 化合物Ｈ－１［Ｖ］について、ＨＰＬＣ（Ｈｉｇｈ Ｐｅｒｆｏｒｍａｎｃｅ Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ）及びＬＣ－ＭＳ（Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ－Ｍａｓｓ Ｓｐｅｃｔｒｏｍｅｔｒｙ）の分析結果を以下に示す。

ＨＰＬＣ：純度９９．０％

ＬＣ－ＭＳ：ｃａｌｃｄ ｆｏｒ Ｃ１３０Ｈ８０Ｎ１０＝１７８０、
ｆｏｕｎｄ ｍ／ｚ＝１７８０（Ｍ＋，１００）

[1257] 合成例２［Ｖ］（化合物Ｈ－２［Ｖ］の合成）

[化793]



[1258] アルゴン雰囲気下、化合物Ａ１（０．５５０ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、カルバゾリル体Ｂ１（１．９５ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．２８８ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、無水トルエン（６０ｍＬ）を順次加えて１１時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｅ１（１．９１ｇ，収率８０％）を得た。

[1259] アルゴン雰囲気下、化合物Ｅ１（１．９１ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、カル

バゾリル体Ｆ１（０．７７１ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．２８８ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、無水トルエン（６０ｍＬ）を順次加えて１１時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｇ１（２．４４ｇ，収率８０％）を得た。

[1260] アルゴン雰囲気下、化合物Ｇ１（２．４４ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、カルバゾリル体Ｊ１（１．００ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．２８８ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、無水トルエン（６０ｍＬ）を順次加えて１１時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｈ－２［Ｖ］（３．１５ｇ，収率８０％）を得た。

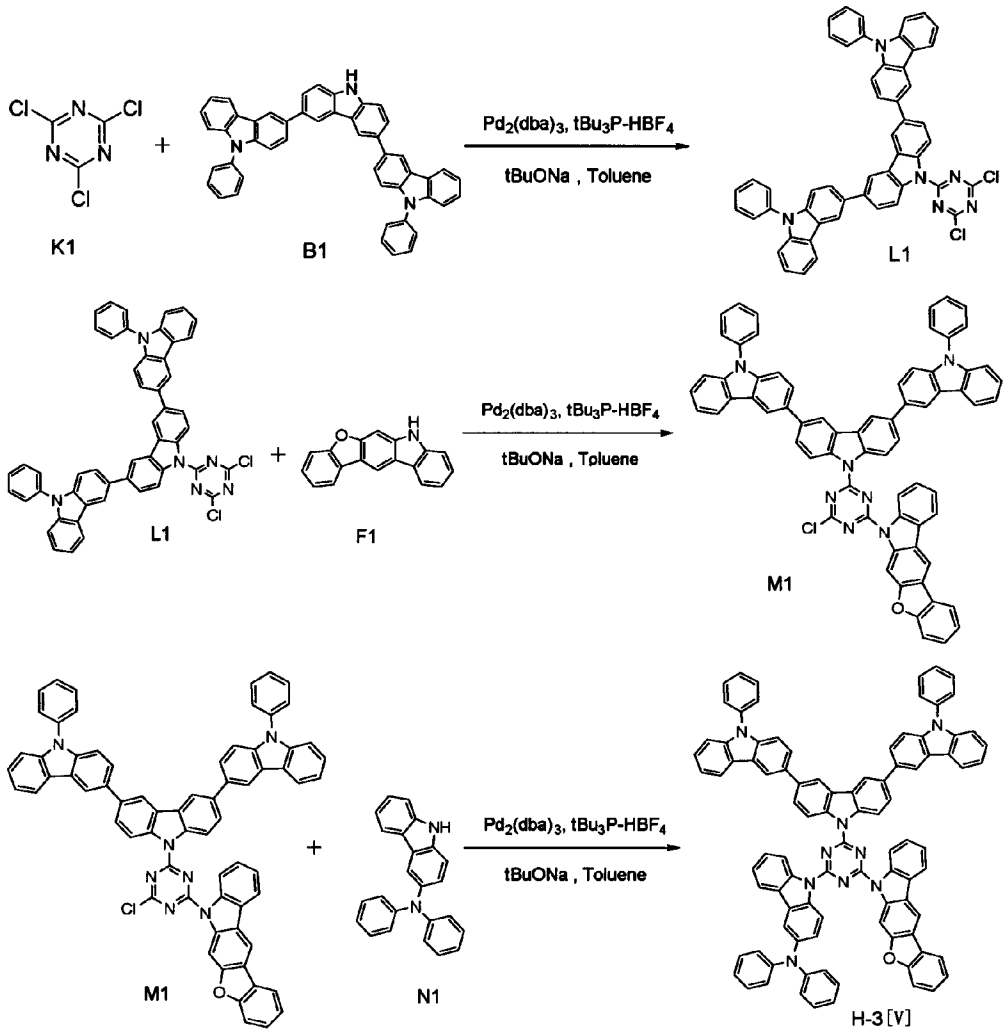
[1261] 化合物Ｈ－２［Ｖ］について、ＨＰＬＣ（Ｈｉｇｈ Ｐｅｒｆｏｒｍａｎｃｅ Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ）及びＬＣ－ＭＳ（Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ－Ｍａｓｓ Ｓｐｅｃｔｒｏｍｅｔｒｙ）の分析結果を以下に示す。

ＨＰＬＣ：純度９９．０％

ＬＣ－ＭＳ：ｃａｌｃｄ ｆｏｒ Ｃ９４Ｈ５５Ｎ７Ｏ２＝１３１３、
ｆｏｕｎｄ ｍ／ｚ＝１３１３（Ｍ＋，１００）

[1262] 合成例３［Ｖ］（化合物Ｈ－３［Ｖ］の合成）

[化794]



[1263] アルゴン雰囲気下、化合物Ｋ１（０．５５３ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、カルバゾリル体Ｂ１（１．９５ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．２８８ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、無水トルエン（６０ｍＬ）を順次加えて１１時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｌ１（１．９１ｇ，収率８０％）を得た。

[1264] アルゴン雰囲気下、化合物Ｌ１（１．９１ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、カルバゾリル体Ｆ１（０．７７２ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．２８８ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、無水トルエン（６０ｍＬ）を順次加えて１１時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｍ１（２．４４ｇ，収率８０％）を得た。

[1265] アルゴン雰囲気下、化合物Ｍ１（２．４４ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、カルバゾリル体Ｎ１（１．００ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．２８８ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、無水トルエン（６０ｍＬ）を順次加えて１１時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｈ－３［Ｖ］（３．１６ｇ，収率８０％）を得た。

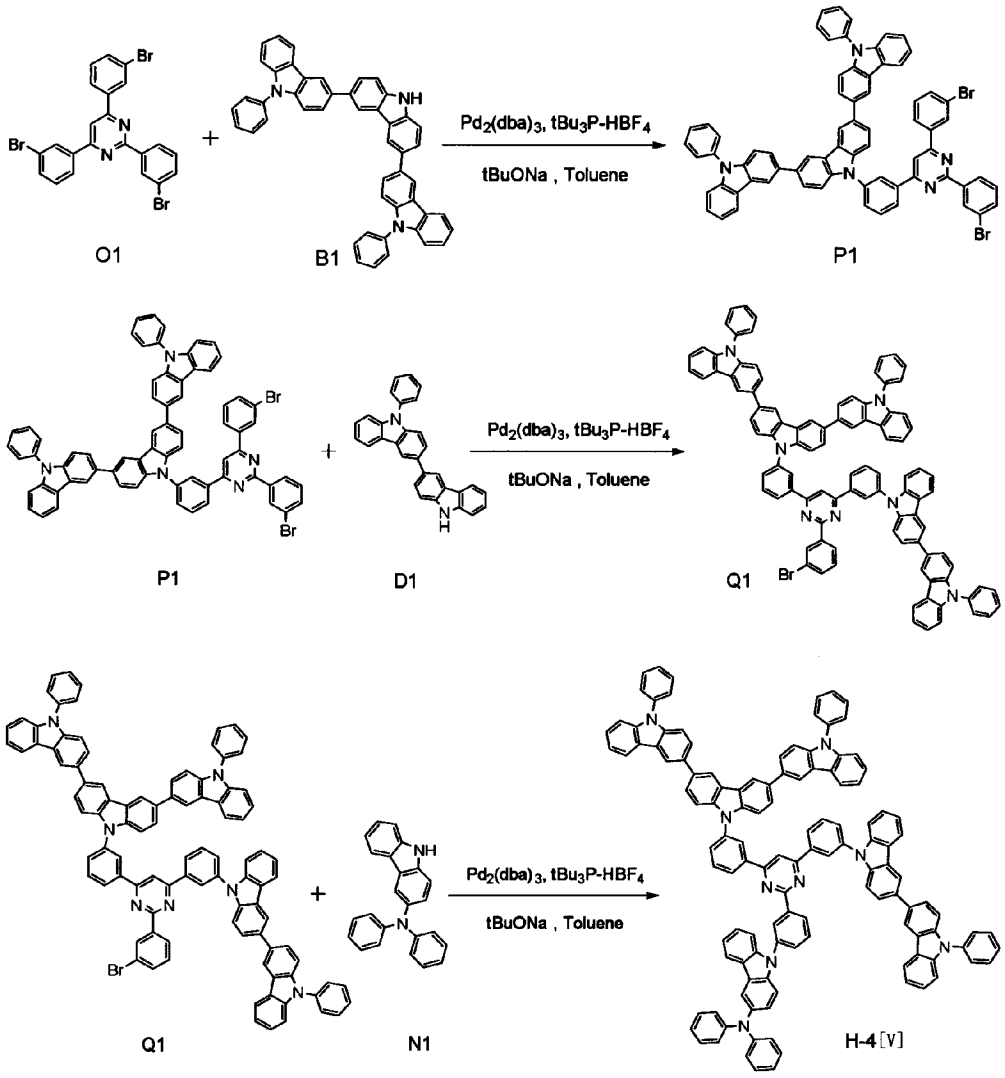
[1266] 化合物Ｈ－３［Ｖ］について、ＨＰＬＣ（Ｈｉｇｈ Ｐｅｒｆｏｒｍａｎｃｅ Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ）及びＬＣ－ＭＳ（Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ－Ｍａｓｓ Ｓｐｅｃｔｒｏｍｅｔｒｙ）の分析結果を以下に示す。

ＨＰＬＣ：純度９９．０％

ＬＣ－ＭＳ：ｃａｌｃｄ ｆｏｒ Ｃ９３Ｈ５７Ｎ９Ｏ＝１３１５、
ｆｏｕｎｄ ｍ／ｚ＝１３１５（Ｍ＋，１００）

[1267] 合成例４［Ｖ］（化合物Ｈ－４［Ｖ］の合成）

[化795]



[1268] アルゴン雰囲気下、化合物Ｏ１（１．６４ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、カルバゾリル体Ｂ１（１．９５ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．２８８ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、無水トルエン（６０ｍＬ）を順次加えて１１時間加熱還流した。

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

、化合物Ｐ１（２．６７ｇ，収率８０％）を得た。

[1269] アルゴン雰囲気下、化合物Ｐ１（２．６７ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、カルバゾリル体Ｄ１（１．２３ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．２８８ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、無水トルエン（６０ｍＬ）を順次加えて１１時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｑ１（３．４６ｇ，収率８０％）を得た。

[1270] アルゴン雰囲気下、化合物Ｑ１（３．４６ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、カルバゾリル体Ｎ１（１．００ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０．１１０ｇ、０．１２０ｍｍｏｌ）、トリ－ｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロほう酸塩（０．１３９ｇ、０．４８ｍｍｏｌ）、ｔ－ブトキシナトリウム（０．２８８ｇ、３．００ｍｍｏｌ）、無水トルエン（６０ｍＬ）を順次加えて１１時間加熱還流した。

室温まで反応液を冷却した後、不溶物を濾過して除き、有機溶媒を減圧下留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、化合物Ｈ－４［Ｖ］（４．０７ｇ，収率８０％）を得た。

[1271] 化合物Ｈ－４［Ｖ］について、ＨＰＬＣ（Ｈｉｇｈ Ｐｅｒｆｏｒｍａｎｃｅ Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ）及びＬＣ－ＭＳ（Ｌｉｑｕｉｄ Ｃｈｒｏｍａｔｏｇｒａｐｈｙ－Ｍａｓｓ Ｓｐｅｃｔｒｏｍｅｔｒｙ）の分析結果を以下に示す。

ＨＰＬＣ：純度９９．０％

ＬＣ－ＭＳ：ｃａｌｃｄ ｆｏｒ Ｃ１２４Ｈ７９Ｎ９＝１６９３、
ｆｏｕｎｄ ｍ／ｚ＝１６９３（Ｍ＋，１００）

[1272] なお、以上の合成反応を参照し、目的物に合わせた公知の代替反応や原料を用いることによって、特許請求の範囲で規定の化合物を合成することが可

能である。

[1273] 実施例１［Ｖ］

（基板の洗浄）

２５ｍｍ×２５ｍｍ×厚さ１．１ｍｍのＩＴＯ透明電極付ガラス基板（ジオマテック株式会社製）をイソプロピルアルコール中で、超音波洗浄を５分間行った後、ＵＶオゾン洗浄を５分間行った。

（下地層の形成）

正孔輸送材料としてＨＥＲＡＥＵＳ社製ＣＬＥＶＩＯＵＳ　ＡＩ４０８３（商品名）を３０ｎｍの厚さで前記のＩＴＯ基板上にスピンコート法により成膜した。成膜後、アセトンにより不要な部分を除去し、次いで大気中で２００℃のホットプレートで１０分間焼成し、下地基板を作製した。

（発光層の形成）

ホスト材料として合成例１［Ｖ］で得た化合物Ｈ－１［Ｖ］、ドーパント材料として下記の化合物Ｄ－ｉｉを用い、化合物Ｈ－１［Ｖ］：化合物Ｄ－ｉが質量比で９０：１０となるような混合比で１．６質量％のトルエン溶液を調製した。このトルエン溶液を用い、前記下地基板上にスピンコート法により、５０ｎｍの膜厚になるように塗布積層した。塗布成膜後、不要部分をトルエンにて除去し、１５０℃のホットプレート上で加熱乾燥し、発光層を成膜した塗布積層基板を作製した。なお、発光層の成膜にかかる全ての操作は窒素雰囲気のグローブボックス中で実施した。

（蒸着、封止）

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

（素子評価）

得られた有機ＥＬ素子を、直流電流駆動により発光させ、電流密度１０ｍ

Ａ／ｃｍ^{2}における外部量子効率（ＥＱＥ）を測定した。測定結果を表５に示す。

[1274] 実施例２［Ｖ］

ホスト材料として合成例２［Ｖ］で得た化合物Ｈ－２［Ｖ］を用いたこと以外は、実施例１［Ｖ］と同様の方法で有機ＥＬ素子を作製した。当該有機ＥＬ素子についても、直流電流駆動により発光させ、電流密度１０ｍＡ／ｃｍ^{2}における外部量子効率（ＥＱＥ）を測定した。測定結果を表５に示す。

[1275] 実施例３［Ｖ］

ホスト材料として合成例３［Ｖ］で得た化合物Ｈ－３［Ｖ］を用いたこと以外は、実施例１［Ｖ］と同様の方法で有機ＥＬ素子を作製した。当該有機ＥＬ素子についても、直流電流駆動により発光させ、電流密度１０ｍＡ／ｃｍ^{2}における外部量子効率（ＥＱＥ）を測定した。測定結果を表５に示す。

[1276] 実施例４［Ｖ］

ホスト材料として合成例４［Ｖ］で得た化合物Ｈ－４［Ｖ］を用いたこと以外は、実施例１［Ｖ］と同様の方法で有機ＥＬ素子を作製した。当該有機ＥＬ素子についても、直流電流駆動により発光させ、電流密度１０ｍＡ／ｃｍ^{2}における外部量子効率（ＥＱＥ）を測定した。測定結果を表５に示す。

[1277] 実施例５［Ｖ］

ドーパント材料として化合物Ｄ－ｉを用い、ホスト材料とドーパント材料の質量比を９０：１０としたこと以外は、実施例１［Ｖ］と同様の方法で有機ＥＬ素子を作製した。当該有機ＥＬ素子についても、直流電流駆動により発光させ、電流密度１０ｍＡ／ｃｍ^{2}における外部量子効率（ＥＱＥ）を測定した。測定結果を表５に示す。

[1278] 実施例６［Ｖ］

ドーパント材料として化合物Ｄ－ｉを用い、ホスト材料とドーパント材料の質量比を９０：１０としたこと以外は、実施例２［Ｖ］と同様の方法で有機ＥＬ素子を作製した。当該有機ＥＬ素子についても、直流電流駆動により発光させ、電流密度１０ｍＡ／ｃｍ^{2}における外部量子効率（ＥＱＥ）を測定

した。測定結果を表５に示す。

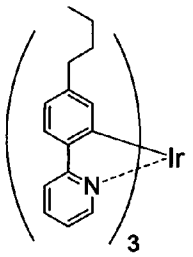
[1279] 実施例７［Ｖ］

ドーパント材料として化合物Ｄ－ｉを用い、ホスト材料とドーパント材料の質量比を９０：１０としたこと以外は、実施例３［Ｖ］と同様の方法で有機ＥＬ素子を作製した。当該有機ＥＬ素子についても、直流電流駆動により発光させ、電流密度１０ｍＡ／ｃｍ^{2}における外部量子効率（ＥＱＥ）を測定した。測定結果を表５に示す。

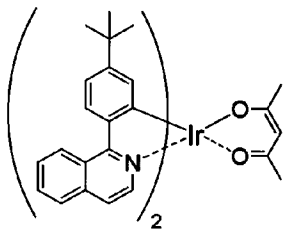
[1280] 実施例８［Ｖ］

ドーパント材料として化合物Ｄ－ｉを用い、ホスト材料とドーパント材料の質量比を９０：１０としたこと以外は、実施例４［Ｖ］と同様の方法で有機ＥＬ素子を作製した。当該有機ＥＬ素子についても、直流電流駆動により発光させ、電流密度１０ｍＡ／ｃｍ^{2}における外部量子効率（ＥＱＥ）を測定した。測定結果を表５に示す。

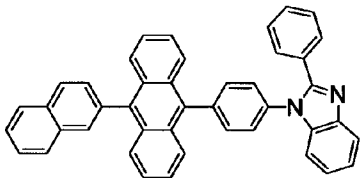
[1281] [化796]



Ｄ－ii



Ｄ－ｉ



ＥＴ－１

[1282]

[表5]

表５

	ホスト材料	ドーパント材料	EQE(%)
実施例１［V］	Ｈ－１［V］	Ｄ－ii	9.2
実施例２［V］	Ｈ－２［V］	Ｄ－ii	8.7
実施例３［V］	Ｈ－３［V］	Ｄ－ii	10.1
実施例４［V］	Ｈ－４［V］	Ｄ－ii	9.8
実施例５［V］	Ｈ－１［V］	Ｄ－ｉ	5.9
実施例６［V］	Ｈ－２［V］	Ｄ－ｉ	6.2
実施例７［V］	Ｈ－３［V］	Ｄ－ｉ	7.1
実施例８［V］	Ｈ－４［V］	Ｄ－ｉ	6.7

[1283] 実施例１～６６

（基板の洗浄）

２５ｍｍ×２５ｍｍ×厚さ１．１ｍｍのＩＴＯ透明電極付ガラス基板（ジオマテック株式会社製）をイソプロピルアルコール中で、超音波洗浄を５分間行った後、ＵＶオゾン洗浄を５分間行った。

（下地層の形成）

正孔輸送材料としてＨＥＲＡＥＵＳ社製「ＣＬＥＶＩＯＵＳ　ＡＩ４０８３」（商品名）を３０ｎｍの厚さで前記のＩＴＯ基板上にスピンコート法により成膜した。成膜後、アセトンにより不要な部分を除去し、次いで大気中で２００℃のホットプレートで１０分間焼成し、下地基板を作製した。

（発光層の形成）

ホスト材料２種（質量比＝１：１）及びドーパント材料として下記化合物Ｄ－iiを用い、ホスト材料２種：化合物Ｄ－iiが質量比で９０：１０となるような混合比で１．６質量％のトルエン溶液を調製した。このトルエン溶液を用い、前記下地基板上にスピンコート法により、５０ｎｍの膜厚になるよ

うに塗布積層した。塗布成膜後、不要部分をトルエンにて除去し、１５０℃のホットプレート上で加熱乾燥し、発光層を成膜した塗布積層基板を作製した。なお、発光層の成膜にかかる全ての操作は窒素雰囲気のグローブボックス中で実施した。

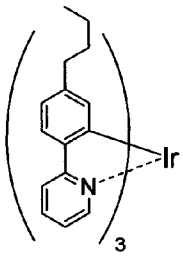
（蒸着、封止）

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

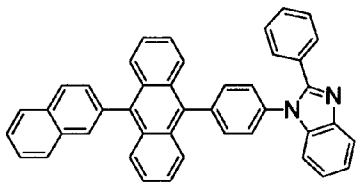
（素子評価）

得られた有機ＥＬ素子を、直流電流駆動により発光させ、電流密度１０ｍＡ／ｃｍ^{2}における外部量子効率（ＥＱＥ）を測定した。測定結果を表６及び表７に示す。

[1284] [化797]



Ｄ－ｉｉ



ＥＴ－１

[1285]

[表6]

表6

	ホスト材料		ドーパント材料	EQE(%)
実施例1	H-1[I]	A-2	D-ii	7.6
実施例2	H-1[I]	B-1	D-ii	6.8
実施例3	H-1[I]	B-4	D-ii	7.2
実施例4	H-1[I]	B-10	D-ii	7.3
実施例5	H-1[I]	B-13	D-ii	7.4
実施例6	H-1[I]	B-32	D-ii	6.5
実施例7	H-1[I]	C-219	D-ii	5.8
実施例8	H-1[I]	C-222	D-ii	5.7
実施例9	H-1[I]	C-225	D-ii	6.7
実施例10	H-1[I]	D-2	D-ii	6.0
実施例11	H-1[I]	D-3	D-ii	6.1
実施例12	H-2[I]	A-2	D-ii	7.3
実施例13	H-2[I]	B-1	D-ii	6.5
実施例14	H-2[I]	B-4	D-ii	7.1
実施例15	H-2[I]	B-10	D-ii	7.2
実施例16	H-2[I]	B-13	D-ii	7.1
実施例17	H-2[I]	B-32	D-ii	6.4
実施例18	H-2[I]	C-219	D-ii	5.4
実施例19	H-2[I]	C-222	D-ii	5.7
実施例20	H-2[I]	C-225	D-ii	6.6
実施例21	H-2[I]	D-2	D-ii	5.9
実施例22	H-2[I]	D-3	D-ii	6.0
実施例23	H-5[II]	A-2	D-ii	8.0
実施例24	H-5[II]	B-1	D-ii	7.9
実施例25	H-5[II]	B-4	D-ii	7.8
実施例26	H-5[II]	B-10	D-ii	7.9
実施例27	H-5[II]	B-13	D-ii	7.7
実施例28	H-5[II]	B-32	D-ii	7.7
実施例29	H-5[II]	C-219	D-ii	6.5
実施例30	H-5[II]	C-222	D-ii	6.5
実施例31	H-5[II]	C-225	D-ii	6.7
実施例32	H-5[II]	D-2	D-ii	5.8
実施例33	H-5[II]	D-3	D-ii	5.8

[1286]

[表7]

表7

	ホスト材料		ドーパント材料	EQE(%)
実施例34	H-4[III]	A-2	D-ii	6.7
実施例35	H-4[III]	B-1	D-ii	6.3
実施例36	H-4[III]	B-4	D-ii	6.6
実施例37	H-4[III]	B-10	D-ii	6.6
実施例38	H-4[III]	B-13	D-ii	6.3
実施例39	H-4[III]	B-32	D-ii	6.2
実施例40	H-4[III]	C-219	D-ii	5.3
実施例41	H-4[III]	C-222	D-ii	5.2
実施例42	H-4[III]	C-225	D-ii	5.8
実施例43	H-4[III]	D-2	D-ii	5.2
実施例44	H-4[III]	D-3	D-ii	5.3
実施例45	H-1[IV]	A-2	D-ii	6.7
実施例46	H-1[IV]	B-1	D-ii	6.8
実施例47	H-1[IV]	B-4	D-ii	6.3
実施例48	H-1[IV]	B-10	D-ii	6.2
実施例49	H-1[IV]	B-13	D-ii	6.2
実施例50	H-1[IV]	B-32	D-ii	6.1
実施例51	H-1[IV]	C-219	D-ii	6.0
実施例52	H-1[IV]	C-222	D-ii	5.9
実施例53	H-1[IV]	C-225	D-ii	5.4
実施例54	H-1[IV]	D-2	D-ii	4.8
実施例55	H-1[IV]	D-3	D-ii	5.0
実施例56	H-1[V]	A-2	D-ii	7.4
実施例57	H-1[V]	B-1	D-ii	7.4
実施例58	H-1[V]	B-4	D-ii	7.1
実施例59	H-1[V]	B-10	D-ii	7.0
実施例60	H-1[V]	B-13	D-ii	7.1
実施例61	H-1[V]	B-32	D-ii	7.2
実施例62	H-1[V]	C-219	D-ii	6.1
実施例63	H-1[V]	C-222	D-ii	6.0
実施例64	H-1[V]	C-225	D-ii	6.3
実施例65	H-1[V]	D-2	D-ii	5.9
実施例66	H-1[V]	D-3	D-ii	5.8

符号の説明

[1287] 1 有機ＥＬ素子

2 基板

3 陽極

４　陰極

５　発光層

６　陽極側有機薄膜層

７　陰極側有機薄膜層

１０　発光ユニット

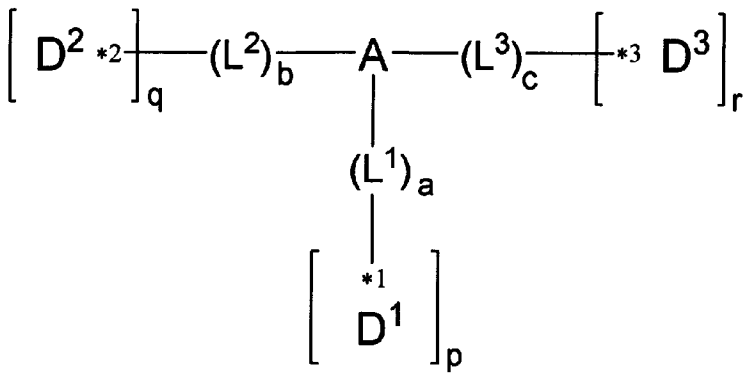
請求の範囲

[請求項1] 下記一般式（１）で表される化合物と、

下記一般式（ＣＨ１）、（ＣＨ３）、（ＣＨ４）、（ＣＨ５）、（ＣＨ６）、（ＣＨ１４）及び（ＣＨ１５）のいずれかで表される化合物から選択される少なくとも１種

とを含有する組成物。

[化1]



(1)

[一般式（１）中、Ａは、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基を表す。

Ｌ[1]～Ｌ[3]は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の複素環基、又はこれらの基が２～４個結合してなる基である。

ａ～ｃは、それぞれ独立に、０又は１である。

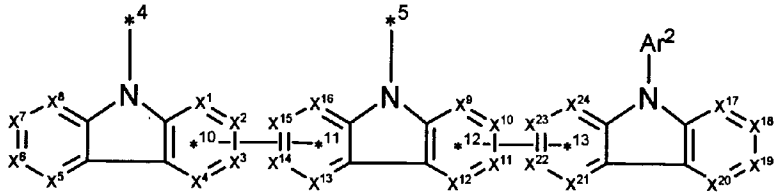
ｐ～ｒは、それぞれ独立に、０～３の整数であり、ｐ＋ｑ＋ｒ＝３である。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在するＤ[1]、Ｄ[2]及びＤ[3]は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。

＊１～＊３は、それぞれＤ[1]～Ｄ[3]と結合している。該Ｄ[1]～Ｄ[3]は

、それぞれ独立に、下記一般式（D^A）～（D^D）で表される４つの基群であるＡ群～Ｄ群から選択される基である。

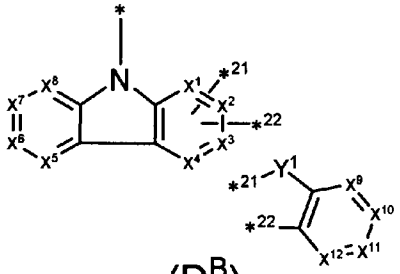
[化2]

A群



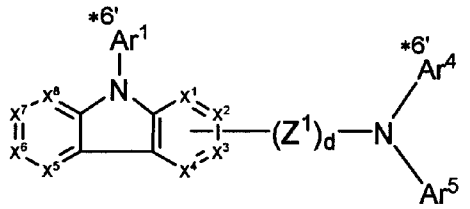
(D^A)

B群



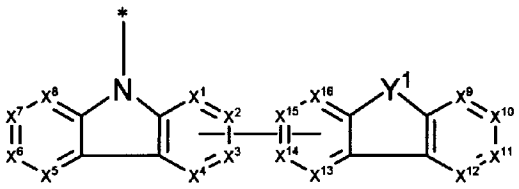
(D^B)

C群



(D^C)

D群



(D^D)

（Ａ群に属する基を表す一般式（D^A）中、＊^{4}及び＊^{5}のうち、一方は式（１）中の＊１～＊３のいずれかと結合し、他方はＡｒ^{1}と結合する。Ａｒ^{1}及びＡｒ^{2}は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数は６～３０のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数は５～３０のヘテロアリール基である。Ｘ^1～Ｘ^{4}のうち

の１つ及びＸ^{13}～Ｘ^{16}のうちの１つは、それぞれ＊^{10}及び＊^{11}に結合する炭素原子であり、それ以外の６つは、それぞれ独立にＣ（Ｒ）又は窒素原子であり、また、Ｘ^{9}～Ｘ^{12}のうちの１つ及びＸ^{21}～Ｘ^{24}のうちの１つは、それぞれ＊^{12}及び＊^{13}に結合する炭素原子であり、それ以外の６つは、それぞれ独立にＣ（Ｒ）又は窒素原子である。Ｘ^{5}～Ｘ^{8}及びＸ^{17}～Ｘ^{20}は、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子である。該Ｒは、水素原子又は置換基であって、複数存在するＲは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲ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。）

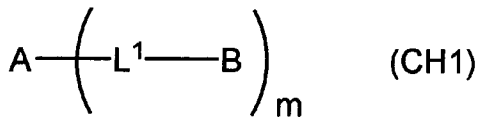
（Ｂ群に属する基を表す一般式（Ｄ^{B}）中、Ｘ^{1}～Ｘ^{4}のうちの２つは、それぞれ＊^{21}及び＊^{22}に結合する炭素原子であり、それ以外の２つは、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子であり、Ｘ^{5}～Ｘ^{12}は、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子である。該Ｒは、水素原子又は置換基であって、複数存在するＲは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲから選ばれる２つは、互いに結合して環を形成していてもよい。Ｙ^{1}は、酸素原子、硫黄原子、－Ｃ（Ｒ^{A}）（Ｒ^{B}）－、－Ｓｉ（Ｒ^{C}）（Ｒ^{D}）－、－Ｐ（Ｒ^{E}）－、－Ｐ（＝Ｏ）（Ｒ^{F}）－、－Ｓ（＝Ｏ）$_{2}$－、－Ｐ（＝Ｓ）（Ｒ^{G}）－、又は－Ｎ（Ｒ^{H}）－である。該Ｒ^{A}～Ｒ^{H}は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、Ｒ^{A}とＲ^{B}、及びＲ^{C}とＲ^{D}は、互いに結合して環を形成していてもよい。＊は式（１）中の＊１～＊３のいずれかと結合する。）

（Ｃ群に属する基を表す一般式（Ｄ^{C}）中、Ｘ^{1}～Ｘ^{8}は、それぞれＣ（Ｒ^{1}）～Ｃ（Ｒ^{8}）又は窒素原子を表す。Ｒ^{1}～Ｒ^{8}は、それぞれ独立に、水素原子または置換基である。但し、Ｘ^{1}～Ｘ^{4}のうちの１つは、Ｚ^{1}もしくはＡｒ^{4}及びＡｒ^{5}が結合する窒素原子と直接結合する炭素原子である。また、その直接結合に関与していないＲ^{1}～Ｒ^{8}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。Ａｒ^{1}、Ａｒ^{4}及びＡｒ^{5}は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０のヘテロアリール基を表す。Ｚ^{1}は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の複素環基、又はこれらの基が２～４個結合してなる基である。ｄは、０又は１である。一般式（Ｄ^{C}）中、＊６’が記されているＡｒ^{1}及びＡｒ^{4}のうちのいずれか一方が脱離して、その代わりに一般式（１）中の＊１～３のいずれかが窒素原子と直接結合している。）

（Ｄ群に属する基を表す一般式（Ｄ^{D}）中、Ｘ^{1}～Ｘ^{16}は、それぞれＣ（Ｒ^{1}）～Ｃ（Ｒ^{16}）又は窒素原子を表す。Ｒ^{1}～Ｒ^{16}は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。但し、Ｘ^{1}～Ｘ^{4}のうちのいずれか１つは炭素原子であり、Ｘ^{13}～Ｘ^{16}のうちのいずれか１つの炭素原子と直接結合をしている。また、その直接結合に関与していない、Ｒ^{1}～Ｒ^{8}から選ばれる２つ、及びＲ^{9}～Ｒ^{16}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。Ｙ^{1}は、酸素原子、硫黄原子、Ｃ（Ｒ^{A}）（Ｒ^{B}）、Ｓｉ（Ｒ^{C}）（Ｒ^{D}）、Ｐ（Ｒ^{E}）、Ｐ（＝Ｏ）（Ｒ^{F}）、Ｓ（＝Ｏ）$_{2}$、Ｐ（＝Ｓ）（Ｒ^{G}）、又は－Ｎ（Ｒ^{H}）－である。該Ｒ^{A}～Ｒ^{H}は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。Ｒ^{A}とＲ^{B}、及びＲ^{C}とＲ^{D}は、互いに結合して環を形成していてもよい。＊は式（１）中の＊１～＊３のいずれかと結合する。）］

[化3]



(CH1)

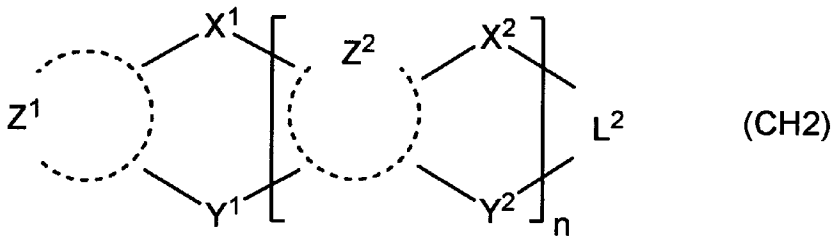
［式（ＣＨ１）中、Ａは、置換若しくは無置換の芳香族複素環基であり、

Ｌ[1]は、単結合、置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基であり、

Ｂは、下記式（ＣＨ２）で表される構造の残基であり、

ｍは、２以上の整数であり、複数のＬ[1]は互いに同一であっても異なっていてもよく、複数のＢは互いに同一であっても異なっていてもよい。]

[化4]



(CH2)

［式（ＣＨ２）中、Ｘ[1]及びＹ[1]の一方は単結合、－ＣＲ$_2$－、－ＮＲ－、－Ｏ－、－Ｓ－又は－ＳｉＲ$_2$－であり、他方は－ＮＲ－、－Ｏ－、－Ｓ－又は－ＳｉＲ$_2$－であり、

Ｘ[2]及びＹ[2]の一方は単結合、－ＣＲ$_2$－、－ＮＲ－、－Ｏ－、－Ｓ－又は－ＳｉＲ$_2$－であり、他方は－ＮＲ－、－Ｏ－、－Ｓ－又は－ＳｉＲ$_2$－であり、

Ｒは、水素原子、置換若しくは無置換のアルキル基、置換若しくは無置換のシクロアルキル基、置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基であり、

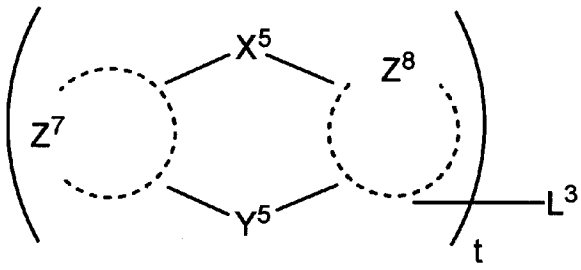
Ｚ[1]及びＺ[2]は、それぞれ独立に、置換若しくは無置換の脂肪族炭化水素環基、置換若しくは無置換の脂肪族複素環基、置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基であり、

Ｌ[2]は、連結基であり、

ｎは０～５の整数であり、ｎが２以上の場合、複数のＺ[2]は互いに同一であっても異なっていてもよく、複数のＸ[2]は互いに同一であっ

ても異なっていてもよく、複数のＹ^{2}は互いに同一であっても異なっていてもよい。］

［化5］



(CH3)

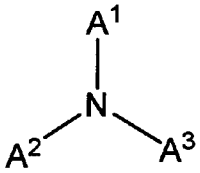
［式（ＣＨ３）中、Ｘ^{5}、Ｙ^{5}は、単結合、－ＣＲ$_{2}$－、－ＮＲ－、－Ｏ－、－Ｓ－又は－ＳｉＲ$_{2}$－であり、全てが単結合になることはない。Ｒは、前記と同じである。

Ｚ^{7}、Ｚ^{8}は、前記Ｚ^{1}、Ｚ^{2}と同じであるが、３環以上が縮環した脂肪族炭化水素環基、３環以上が縮環した脂肪族複素環基、３環以上が縮環した芳香族炭化水素環基、又は３環以上が縮環した芳香族複素環基である場合はない。

ｔは、１以上の整数である。

Ｌ^{3}は、単結合、置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基又はこれらの組合せである。ただし、ｔが１の場合、Ｌ^{3}は単結合ではない。］

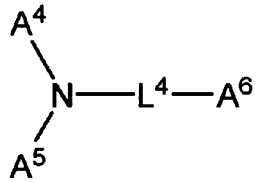
［化6］



(CH4)

［式（ＣＨ４）中、Ａ^{1}～Ａ^{3}は、それぞれ置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基である。］

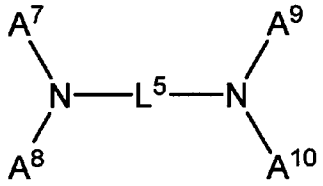
[化7]



(CH5)

［式（ＣＨ５）中、Ｌ[4]は１～４個の置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環が連結（又は含有）した２価の基、又は１～４個の置換若しくは無置換の芳香族複素環が連結した２価の基である。Ａ[4]～Ａ[6]は、それぞれ置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環基である。Ａ[4]及びＡ[5]は互いに結合して環状構造を形成してもよい。］

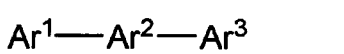
[化8]



(CH6)

［式（ＣＨ６）中、Ｌ[5]は１～６個の置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環が連結（又は含有）した２価の基、又は１～６個の置換若しくは無置換の芳香族複素環が連結した２価の基である。Ａ[7]～Ａ[10]は、それぞれ置換若しくは無置換の芳香族炭化水素環が１～１０個結合した基、又は置換若しくは無置換の芳香族複素環が１～１０個結合した基である。］

[化9]

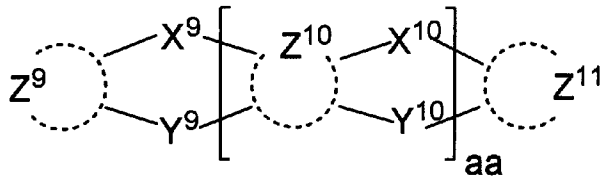


(CH7)

［式（ＣＨ７）中、Ａｒ[1]及びＡｒ[3]は、置換若しくは無置換の１価の芳香族炭化水素環基、置換若しくは無置換の１価の芳香族複素環基、Ａｒ[2]は、置換若しくは無置換の２価の芳香族炭化水素環が１～１

０個結合した基、置換若しくは無置換の２価の芳香族複素環が１～１０個結合した基である。]

[化10]



(CH14)

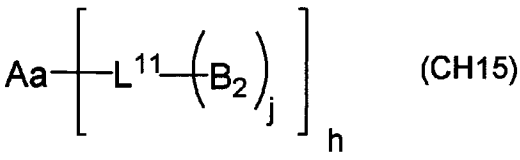
[式（ＣＨ１４）中、X^9、X^{10}、Y^9、Y^{10}は、単結合、－CR_2－、－ＮＲ－、－Ｏ－、－Ｓ－、－ＰＲ－、又は－SiR_2－で表される基であり、全てが単結合になることはない。

Ｒは、式（ＣＨ２）のX^1、X^2、Y^1及びY^2におけるＲと同義であり、

Z^9、Z^{10}、Z^{11}は、式（ＣＨ２）のZ^1、Z^2と同義であり、

ａａは１～５の整数であり、ａａが２以上の場合、複数のZ^{10}は互いに同一であっても異なっていてもよく、複数のX^{10}は互いに同一であっても異なっていてもよく、複数のY^{10}は互いに同一であっても異なっていてもよい。]

[化11]



(CH15)

[式（ＣＨ１５）中、Ａａは、式（ＣＨ１）のＡと同義であり、L^{11}は式（ＣＨ１）のL^1と同義であり、B_2は、前記式（ＣＨ２）で表される構造の残基である。

ｈは、１以上の整数であり、ｈの上限はＡａの構造に依存して決定され、特に限定されるわけではないが、好ましくは１～１０程度の範囲から選ばれるのが好ましい。より好ましくは、１～３であり、更に好ましくは、１又は２である。

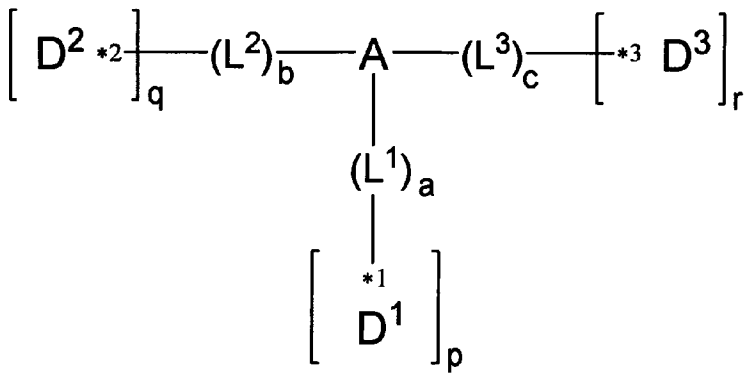
ｊは、１以上の整数であり、ｊの上限はＬ^{11}の構造に依存して決定され、特に限定されるわけではないが、好ましくは２又は３である。

ただし、ｈ＋ｊは３以上の整数である。

複数のＬ^{11}は互いに同一であっても異なっていてもよく、複数のＢ$_2$は互いに同一であっても異なっていてもよい。]

[請求項2] 下記一般式（１）で表される化合物。

[化12]



(1)

[一般式（１）中、Ａは、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基を表す。

Ｌ^1～Ｌ^{3}は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の複素環基、又はこれらの基が２～４個結合してなる基である。

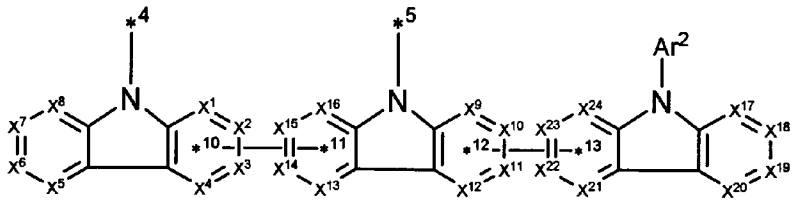
ａ～ｃは、それぞれ独立に、０又は１である。

ｐ～ｒは、それぞれ独立に、０～３の整数であり、ｐ＋ｑ＋ｒ＝３である。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在するＤ^1、Ｄ^{2}及びＤ^{3}は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。

＊１～＊３は、それぞれＤ[1]～Ｄ[3]と結合している。該Ｄ[1]～Ｄ[3]は、それぞれ独立に、下記一般式（Ｄ[A]）～（Ｄ[D]）で表される４つの基群であるＡ群～Ｄ群から選択される基である。

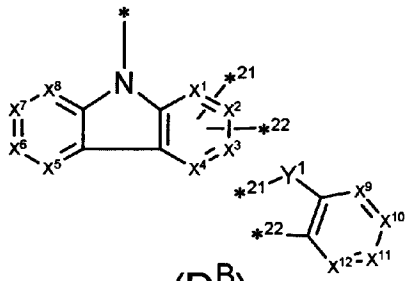
[化13]

A群



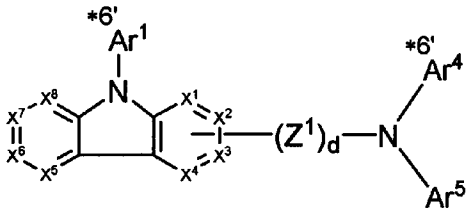
(D^A)

B群



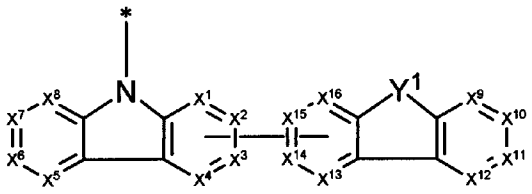
(D^B)

C群



(D^C)

D群



(D^D)

（Ａ群に属する基を表す一般式（Ｄ[A]）中、＊[4]及び＊[5]のうち、一方は式（１）中の＊１～＊３のいずれかと結合し、他方はＡｒ[1]と結合する。Ａｒ[1]及びＡｒ[2]は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の

環形成炭素数は６～３０のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数は５～３０のヘテロアリール基である。X^1～X^4のうちの１つ及びX^{13}～X^{16}のうちの１つは、それぞれ＊^{10}及び＊^{11}に結合する炭素原子であり、それ以外の６つは、それぞれ独立にＣ（Ｒ）又は窒素原子であり、また、X^9～X^{12}のうちの１つ及びX^{21}～X^{24}のうちの１つは、それぞれ＊^{12}及び＊^{13}に結合する炭素原子であり、それ以外の６つは、それぞれ独立にＣ（Ｒ）又は窒素原子である。X^5～X^8及びX^{17}～X^{20}は、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子である。該Ｒは、水素原子又は置換基であって、複数存在するＲは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲ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。）

（Ｂ群に属する基を表す一般式（D^B）中、X^1～X^4のうちの２つは、それぞれ＊^{21}及び＊^{22}に結合する炭素原子であり、それ以外の２つは、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子であり、X^5～X^{12}は、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子である。該Ｒは、水素原子又は置換基であって、複数存在するＲは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲ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。Y^1は、酸素原子、硫黄原子、－Ｃ（R^A）（R^B）－、－Ｓｉ（R^C）（R^D）－、－Ｐ（R^E）－、－Ｐ（＝Ｏ）（R^F）－、－Ｓ（＝Ｏ）$_2$－、－Ｐ（＝Ｓ）（R^G）－、又は－Ｎ（R^H）－である。該R^A～R^Hは、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、R^AとR^B、及びR^CとR^Dは、互いに結合して環を形成していてもよい。＊は式（１）中の＊１～＊３のいずれかと結合する。）

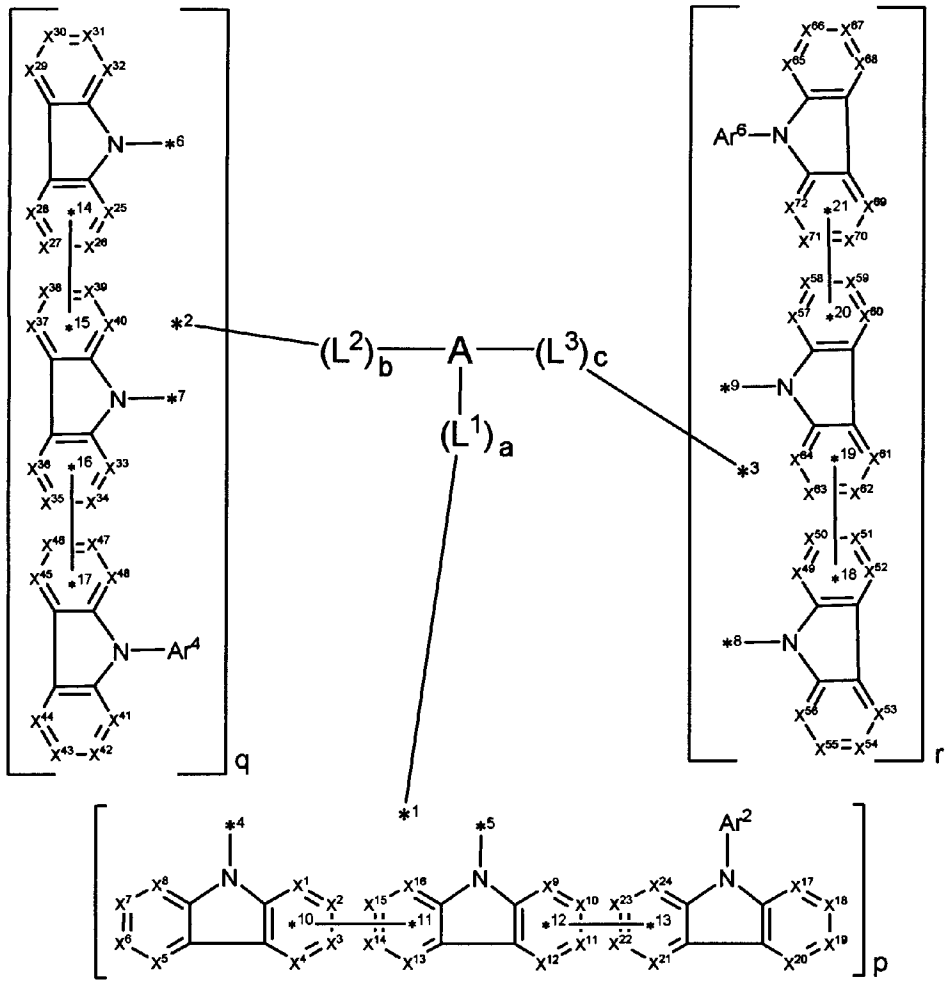
（Ｃ群に属する基を表す一般式（D^C）中、X^1～X^8は、それぞれＣ（R^1）～Ｃ（R^8）又は窒素原子を表す。R^1～R^8は、それぞれ独立に、水素原子または置換基である。但し、X^1～X^4のうちの１つ

は、Z^1もしくはAr^4及びAr^5が結合する窒素原子と直接結合する炭素原子である。また、その直接結合に関与していないR^1～R^8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。Ar^1、Ar^4及びAr^5は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０のヘテロアリール基を表す。Z^1は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の複素環基、又はこれらの基が２～４個結合してなる基である。ｄは、０又は１である。一般式（D^C）中、＊６’が記されているAr^1及びAr^4のうちのいずれか一方が脱離して、その代わりに一般式（１）中の＊１～３のいずれかが窒素原子と直接結合している。）

（Ｄ群に属する基を表す一般式（D^D）中、X^1～X^{16}は、それぞれＣ（R^1）～Ｃ（R^{16}）又は窒素原子を表す。R^1～R^{16}は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。但し、X^1～X^4のうちのいずれか１つは炭素原子であり、X^{13}～X^{16}のうちのいずれか１つの炭素原子と直接結合をしている。また、その直接結合に関与していない、R^1～R^8から選ばれる２つ、及びR^9～R^{16}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。Y^1は、酸素原子、硫黄原子、Ｃ（R^A）（R^B）、Ｓｉ（R^C）（R^D）、Ｐ（R^E）、Ｐ（＝Ｏ）（R^F）、Ｓ（＝Ｏ）$_2$、Ｐ（＝Ｓ）（R^G）、又は－Ｎ（R^H）－である。該R^A～R^Hは、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。R^AとR^B、及びR^CとR^Dは、互いに結合して環を形成していてもよい。＊は式（１）中の＊１～＊３のいずれかと結合する。）］

［請求項3］　下記一般式（１［Ｉ］）で表される、請求項２に記載の化合物。

[化14]



(1[I])

（一般式（１［Ｉ］）中、Ａは、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基を表す。

Ｌ[1]～Ｌ[3]は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の複素環基、又はこれらの基が２～４個結合してなる基である。

ａ～ｃは、それぞれ独立に、０又は１である。

＊[4]及び＊[5]のうち、一方は＊[1]と結合し、他方はＡｒ[1]と結合し、

＊[6]及び＊[7]のうち、一方は＊[2]と結合し、他方はＡｒ[3]と結合し、

＊[8]及び＊[9]のうち、一方は＊[3]と結合し、他方はＡｒ[5]と結合する。

Ａｒ[1]～Ａｒ[6]は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数は６～３０のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数は５～３０のヘテロアリール基である。

Ｘ[1]～Ｘ[4]のうちの１つ及びＸ[13]～Ｘ[16]のうちの１つは、それぞれ＊[10]及び＊[11]に結合する炭素原子であり、それ以外の６つは、それぞれ独立にＣ（Ｒ）又は窒素原子であり、

Ｘ[9]～Ｘ[12]のうちの１つ及びＸ[21]～Ｘ[24]のうちの１つは、それぞれ＊[12]及び＊[13]に結合する炭素原子であり、それ以外の６つは、それぞれ独立にＣ（Ｒ）又は窒素原子であり、

Ｘ[25]～Ｘ[28]のうちの１つ及びＸ[37]～Ｘ[40]のうちの１つは、それぞれ＊[14]及び＊[15]に結合する炭素原子であり、それ以外の６つは、それぞれ独立にＣ（Ｒ）又は窒素原子であり、

Ｘ[33]～Ｘ[36]のうちの１つ及びＸ[45]～Ｘ[48]のうちの１つは、それぞれ＊[16]及び＊[17]に結合する炭素原子であり、それ以外の６つは、それぞれ独立にＣ（Ｒ）又は窒素原子であり、

Ｘ[49]～Ｘ[52]のうちの１つ及びＸ[61]～Ｘ[64]のうちの１つは、それぞれ＊[18]及び＊[19]に結合する炭素原子であり、それ以外の６つは、それぞれ独立にＣ（Ｒ）又は窒素原子であり、

Ｘ[57]～Ｘ[60]のうちの１つ及びＸ[69]～Ｘ[72]のうちの１つは、それぞれ＊[20]及び＊[21]に結合する炭素原子であり、それ以外の６つは、それぞれ独立にＣ（Ｒ）又は窒素原子であり、

Ｘ[5]～Ｘ[8]、Ｘ[17]～Ｘ[20]、Ｘ[29]～Ｘ[32]、Ｘ[41]～Ｘ[44]、Ｘ[53]～Ｘ[56]、及びＸ[65]～Ｘ[68]は、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子である。

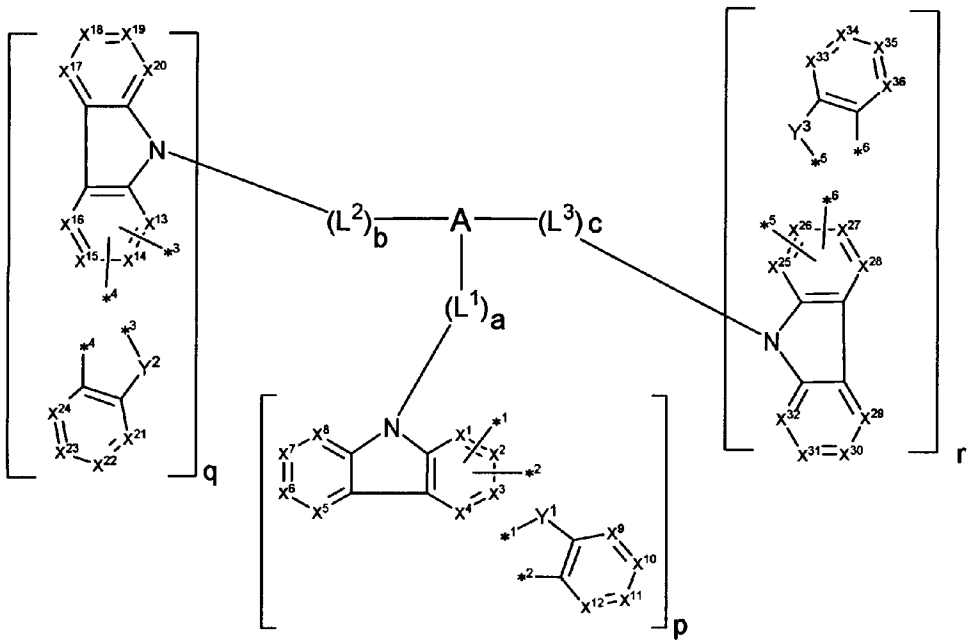
Ｒは、水素原子又は置換基であって、複数存在するＲは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲか

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。

ｐ～ｒは、それぞれ独立に、０～３の整数であり、ｐ＋ｑ＋ｒ＝３である。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。）

[請求項4] 下記一般式（１［II］）で表される、請求項２に記載の化合物。

[化15]



(1[II])

（一般式（１［II］）中、Ａは、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の窒素含有複素環基を表す。

Ｌ[1]～Ｌ[3]は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の複素環基、又はこれらの基が２～４個結合してなる基である。

ａ～ｃは、それぞれ独立に、０又は１である。

Ｘ[1]～Ｘ[4]のうちの２つは、それぞれ＊[1]及び＊[2]に結合する炭素原子であり、それ以外の２つは、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子であり、

X^{13}～X^{16}のうちの２つは、それぞれ＊^{3}及び＊^{4}に結合する炭素原子であり、それ以外の２つは、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子であり、

X^{25}～X^{28}のうちの２つは、それぞれ＊^{5}及び＊^{6}に結合する炭素原子であり、それ以外の２つは、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子であり、

X^{5}～X^{12}、X^{17}～X^{24}、及びX^{29}～X^{36}は、それぞれ独立に、Ｃ（Ｒ）又は窒素原子であり、

Ｒは、水素原子又は置換基であって、複数存在するＲは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲ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。

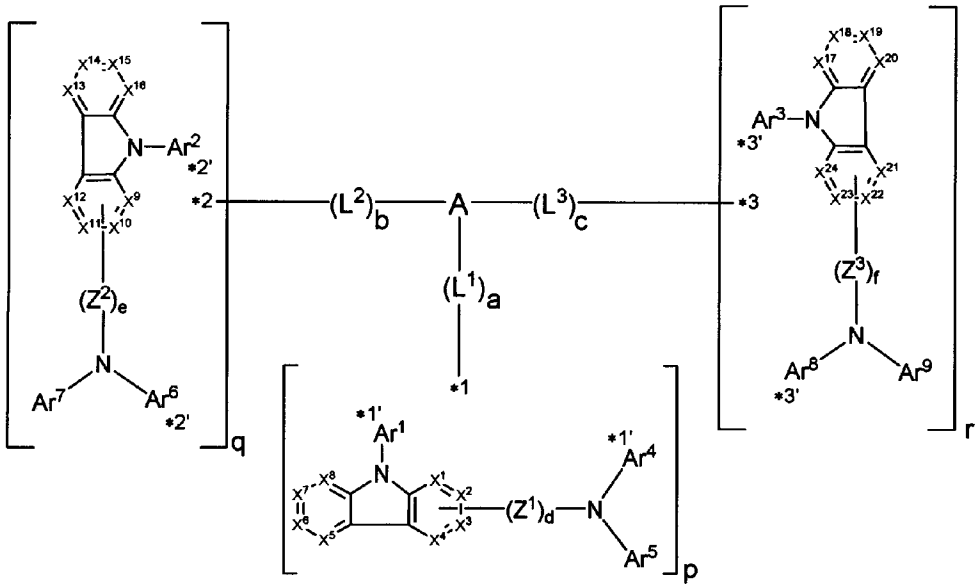
Y^{1}～Y^{3}は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、－Ｃ（R^{A}）（R^{B}）－、－Ｓｉ（R^{C}）（R^{D}）－、－Ｐ（R^{E}）－、－Ｐ（＝Ｏ）（R^{F}）－、－Ｓ（＝Ｏ）$_{2}$－、又は－Ｐ（＝Ｓ）（R^{G}）－である。

R^{A}～R^{G}は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、R^{A}～R^{G}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。

ｐ～ｒは、それぞれ独立に、０～３の整数であり、ｐ＋ｑ＋ｒ＝３である。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。）

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

[化16]



(1[III])

（一般式（１［III］）中、Ａは、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基を表す。

Ｌ[1]～Ｌ[3]は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の複素環基、又はこれらの基が２～４個結合してなる基である。

ａ～ｃは、それぞれ独立に、０又は１である。

Ｘ[1]～Ｘ[24]は、それぞれＣ（Ｒ[1]）～Ｃ（Ｒ[24]）又は窒素原子を表す。Ｒ[1]～Ｒ[24]は、それぞれ独立に、水素原子または置換基である。但し、Ｘ[1]～Ｘ[4]のうちの１つは、Ｚ[1]もしくはＡｒ[4]及びＡｒ[5]が結合する窒素原子と直接結合する炭素原子であり、Ｘ[9]～Ｘ[12]のうちの１つは、Ｚ[2]もしくはＡｒ[6]及びＡｒ[7]が結合する窒素原子と直接結合する炭素原子であり、Ｘ[21]～Ｘ[24]のうちの１つは、Ｚ[3]もしくはＡｒ[8]及びＡｒ[9]が結合する窒素原子と直接結合する炭素原子である。また、その直接結合に関与していないＲ[1]～Ｒ[8]から選ばれる２つ、Ｒ[9]～Ｒ[16]から選ばれる２つ、及びＲ[17]～Ｒ[24]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。

Ａｒ[1]～Ａｒ[3]は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０のヘテロアリール基を表す。

Ａｒ[4]～Ａｒ[9]は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０のヘテロアリール基を表す。

Ｚ[1]～Ｚ[3]は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の複素環基、又はこれらの基が２～４個結合してなる基である。

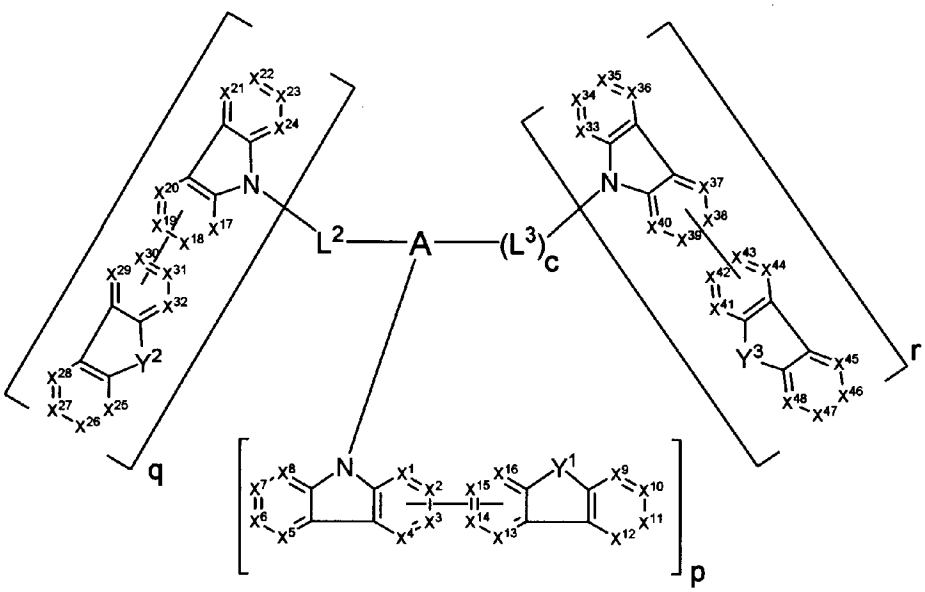
ｄ～ｆは、それぞれ独立に、０又は１である。

ｐ～ｒは、それぞれ独立に、０～３の整数であり、ｐ＋ｑ＋ｒ＝３である。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。

一般式（１［III］）中、＊１’が記されているＡｒ[1]及びＡｒ[4]のうちのいずれか一方が脱離して、その代わりに＊１が窒素原子と直接結合している。＊２’が記されているＡｒ[2]及びＡｒ[6]のうちのいずれか一方が脱離して、その代わりに＊２が窒素原子と直接結合している。＊３’が記されているＡｒ[3]及びＡｒ[8]のうちのいずれか一方が脱離して、その代わりに＊３が窒素原子と直接結合している。）

[請求項6] 下記一般式（１－ｉｉ－１［IV］）で表される、請求項２に記載の化合物。

[化17]



(1-ii-1[IV])

（一般式（１－ｉｉ－１［IV］）中、Ａは、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基を表す。

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

ｃは、０又は１である。

Ｘ[1]～Ｘ[48]は、それぞれＣ（Ｒ[1]）～Ｃ（Ｒ[48]）又は窒素原子を表す。Ｒ[1]～Ｒ[48]は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。但し、Ｘ[1]～Ｘ[4]のうちのいずれか１つは炭素原子であり、Ｘ[13]～Ｘ[16]のうちのいずれか１つの炭素原子と直接結合をしており、Ｘ[17]～Ｘ[20]のうちのいずれか１つは炭素原子であり、Ｘ[29]～Ｘ[32]のうちのいずれか１つの炭素原子と直接結合をしており、Ｘ[37]～Ｘ[40]のうちのいずれか１つは炭素原子であり、Ｘ[41]～Ｘ[4]のうちのいずれか１つの炭素原子と直接結合をしている。また、その直接結合に関与していない、Ｒ[1]～Ｒ[8]から選ばれる２つ、Ｒ[9]～Ｒ[16]から選ばれる２つ、Ｒ[17]～

R^{24}から選ばれる２つ、R^{25}～R^{32}から選ばれる２つ、R^{33}～R^{40}から選ばれる２つ、及びR^{41}～R^{48}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。

Y^1～Y^3は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、Ｃ（R^A）（R^B）、Ｓｉ（R^C）（R^D）又はＰ（R^E）である。R^A、R^B、R^C、R^D及びR^Eは、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。R^AとR^B、及びR^CとR^Dは、互いに結合して環を形成していてもよい。

ｐ～ｒは、それぞれ独立に、０～３の整数であり、ｐ＋ｑ＋ｒ＝３である。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。）

[請求項7] 前記D^1～D^3の少なくとも２つが、互いに異なる基群から選択される、請求項２に記載の化合物。

[請求項8] 前記一般式（１［Ｉ］）で表される化合物と、

前記一般式（ＣＨ１）、（ＣＨ３）、（ＣＨ４）、（ＣＨ５）、（ＣＨ６）及び（ＣＨ１４）のいずれかで表される化合物から選択される少なくとも１種

とを含有する組成物。

[請求項9] 前記一般式（１［II］）で表される化合物と、

前記一般式（ＣＨ１）、（ＣＨ３）、（ＣＨ４）、（ＣＨ５）、（ＣＨ６）及び（ＣＨ１４）のいずれかで表される化合物から選択される少なくとも１種

とを含有する組成物。

[請求項10] 前記一般式（１［III］）で表される化合物と、

前記一般式（ＣＨ１）、（ＣＨ３）、（ＣＨ４）、（ＣＨ５）、（ＣＨ６）及び（ＣＨ１４）のいずれかで表される化合物から選択される少なくとも１種

とを含有する組成物。

[請求項11] 前記一般式（１［IV］）で表される化合物と、

前記一般式（ＣＨ１）、（ＣＨ３）、（ＣＨ４）、（ＣＨ５）、（ＣＨ６）及び（ＣＨ１４）のいずれかで表される化合物から選択される少なくとも１種

とを含有する組成物。

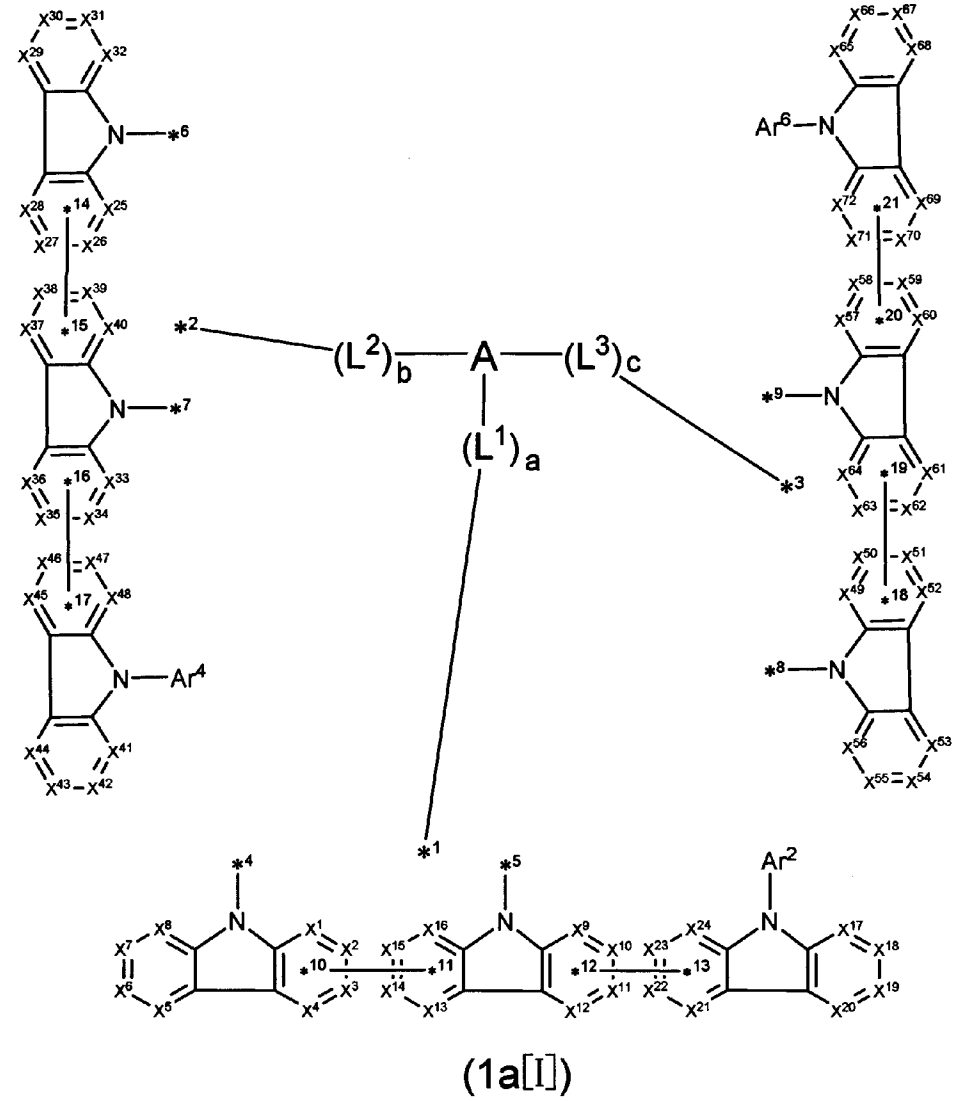
[請求項12] 前記一般式（１［Ｖ］）で表される化合物と、

前記一般式（ＣＨ１）、（ＣＨ３）、（ＣＨ４）、（ＣＨ５）、（ＣＨ６）及び（ＣＨ１４）のいずれかで表される化合物から選択される少なくとも１種

とを含有する組成物。

[請求項13] 下記一般式（１ａ［Ｉ］）で表される、請求項３に記載の化合物。

[化18]

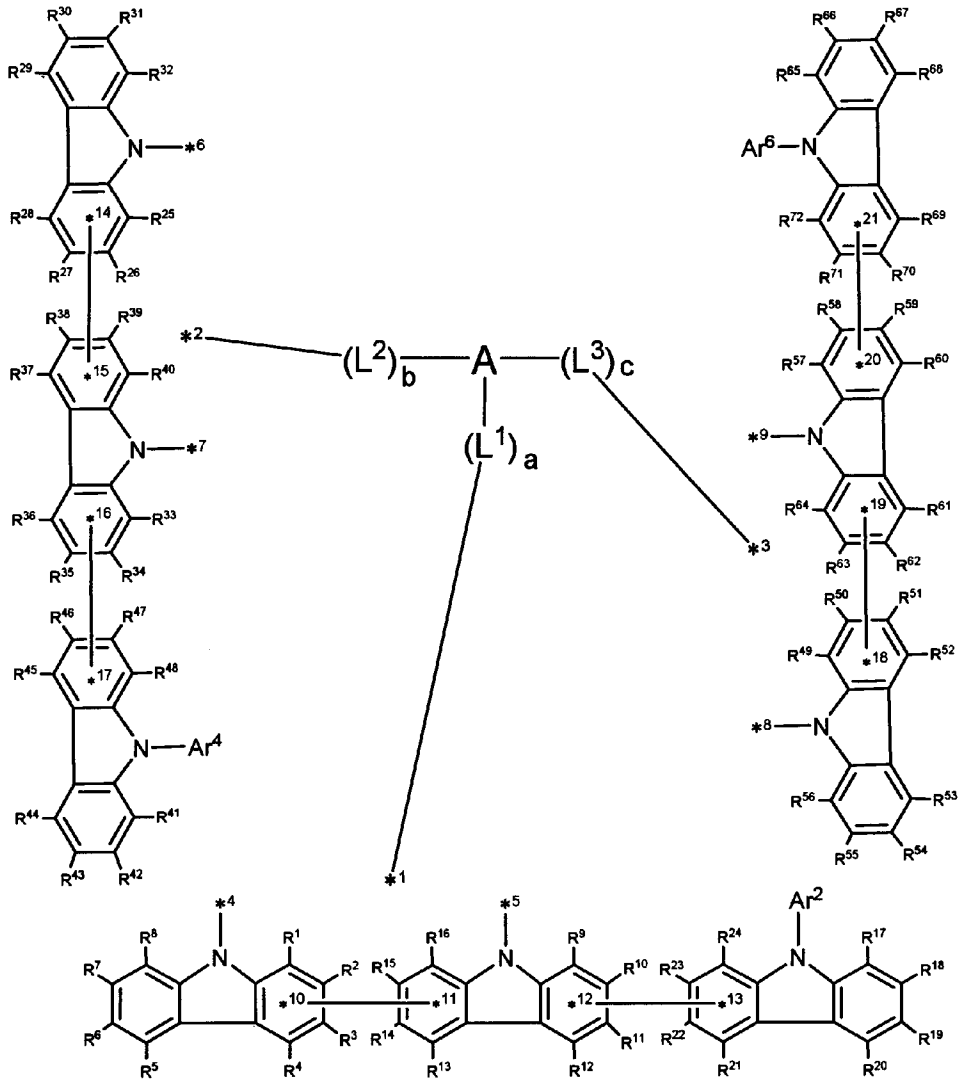


(1a[I])

（一般式（１ａ［Ｉ］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｃ、Ｘ[1]～Ｘ[72]、＊[1]～＊[21]、Ａｒ[2]、Ａｒ[4]、及びＡｒ[6]は、請求項３の記載と同じである。）

[請求項14] 下記一般式（１ａ－ｉ［Ｉ］）で表される、請求項１３に記載の化合物。

[化19]



(1a-i[I])

（一般式（１ａ－ｉ［Ｉ］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｃ、＊[1]～＊[9]、Ａｒ[2]、Ａｒ[4]、及びＡｒ[6]は、請求項３の記載と同じである。Ｒ[1]～Ｒ[72]は、請求項３に記載のＲと同じである。

＊[10]－＊[11]は、Ｒ[1]～Ｒ[4]のうちの１つ及びＲ[13]～Ｒ[16]のうちの１つがそれぞれ脱離し、当該基と結合していた炭素原子同士の結合を示し、

＊[12]－＊[13]は、Ｒ[9]～Ｒ[12]のうちの１つ及びＲ[21]～Ｒ[24]のうちの１つがそれぞれ脱離し、当該基と結合していた炭素原子同士の結合を

示し、

＊[14]－＊[15]は、Ｒ[25]～Ｒ[28]のうちの１つ及びＲ[37]～Ｒ[40]のうちの１つがそれぞれ脱離し、当該基と結合していた炭素原子同士の結合を示し、

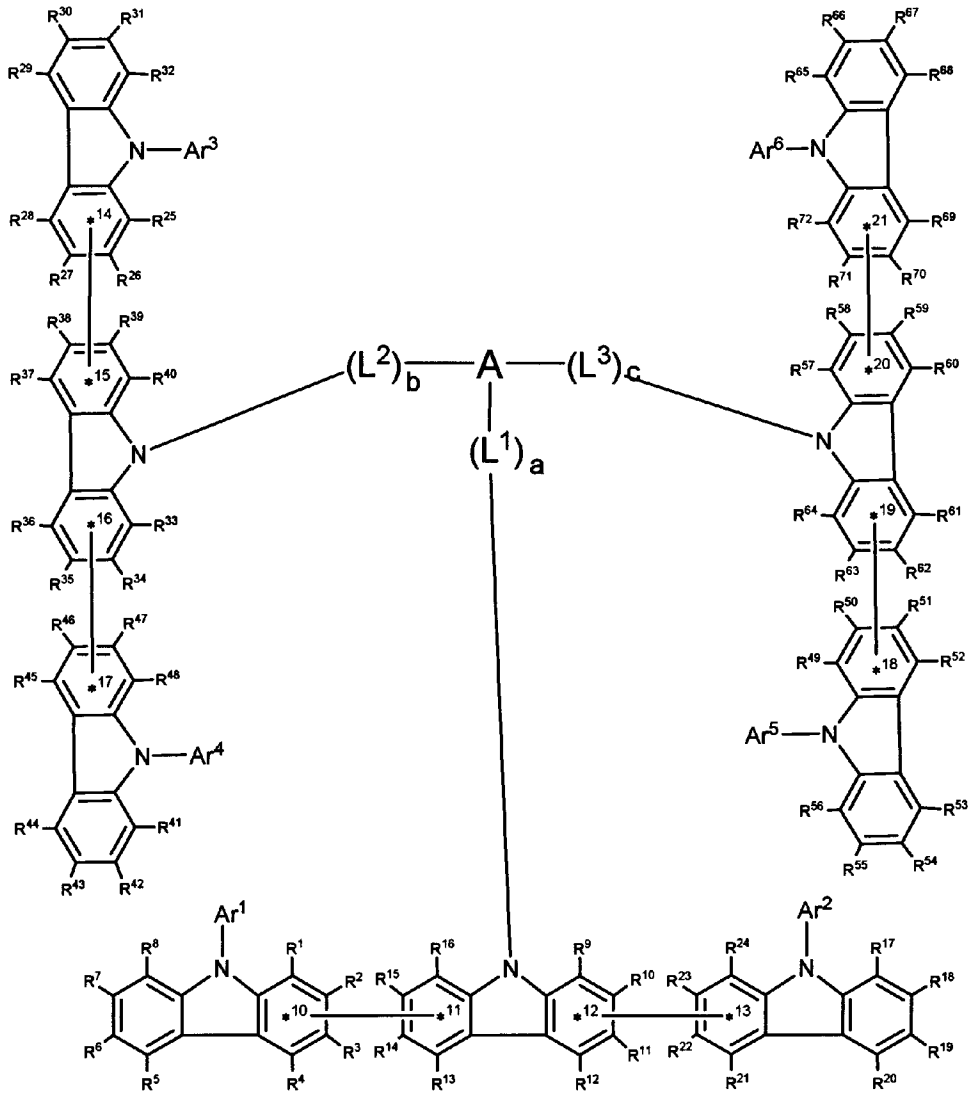
＊[16]－＊[17]は、Ｒ[33]～Ｒ[36]のうちの１つ及びＲ[45]～Ｒ[48]のうちの１つがそれぞれ脱離し、当該基と結合していた炭素原子同士の結合を示し、

＊[18]－＊[19]は、Ｒ[49]～Ｒ[52]のうちの１つ及びＲ[61]～Ｒ[64]のうちの１つがそれぞれ脱離し、当該基と結合していた炭素原子同士の結合を示し、

＊[20]－＊[21]は、Ｒ[57]～Ｒ[60]のうちの１つ及びＲ[69]～Ｒ[72]のうちの１つがそれぞれ脱離し、当該基と結合していた炭素原子同士の結合を示す。）

[請求項15] 下記一般式（１ａ－ｉｉ［Ｉ］）で表される、請求項１４に記載の化合物。

[化20]

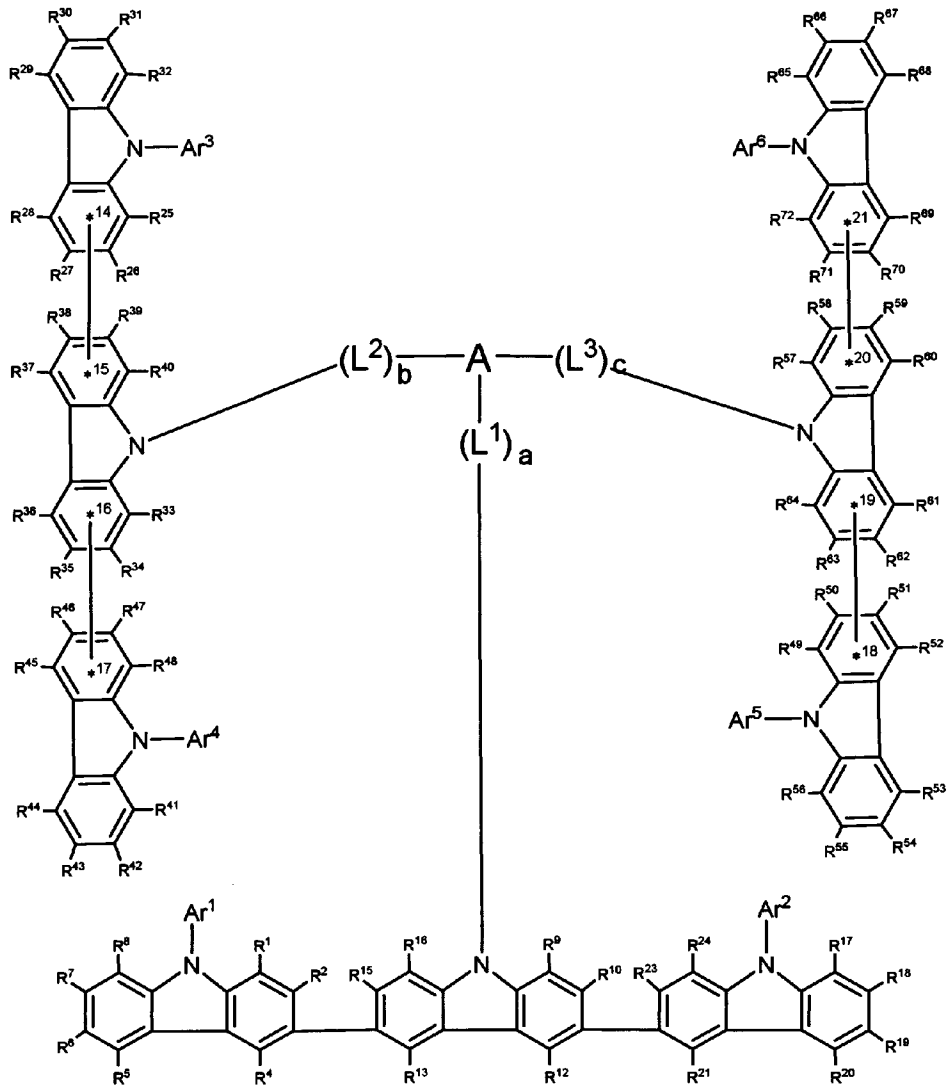


(1a-ii[I])

（一般式（１ａ－ｉｉ［Ｉ］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｃ、Ａｒ[1]～Ａｒ[6]は、請求項３の記載と同じである。Ｒ[1]～Ｒ[72]は、請求項３に記載のＲと同じである。＊[10]～＊[21]は、請求項１４の記載と同じである。）

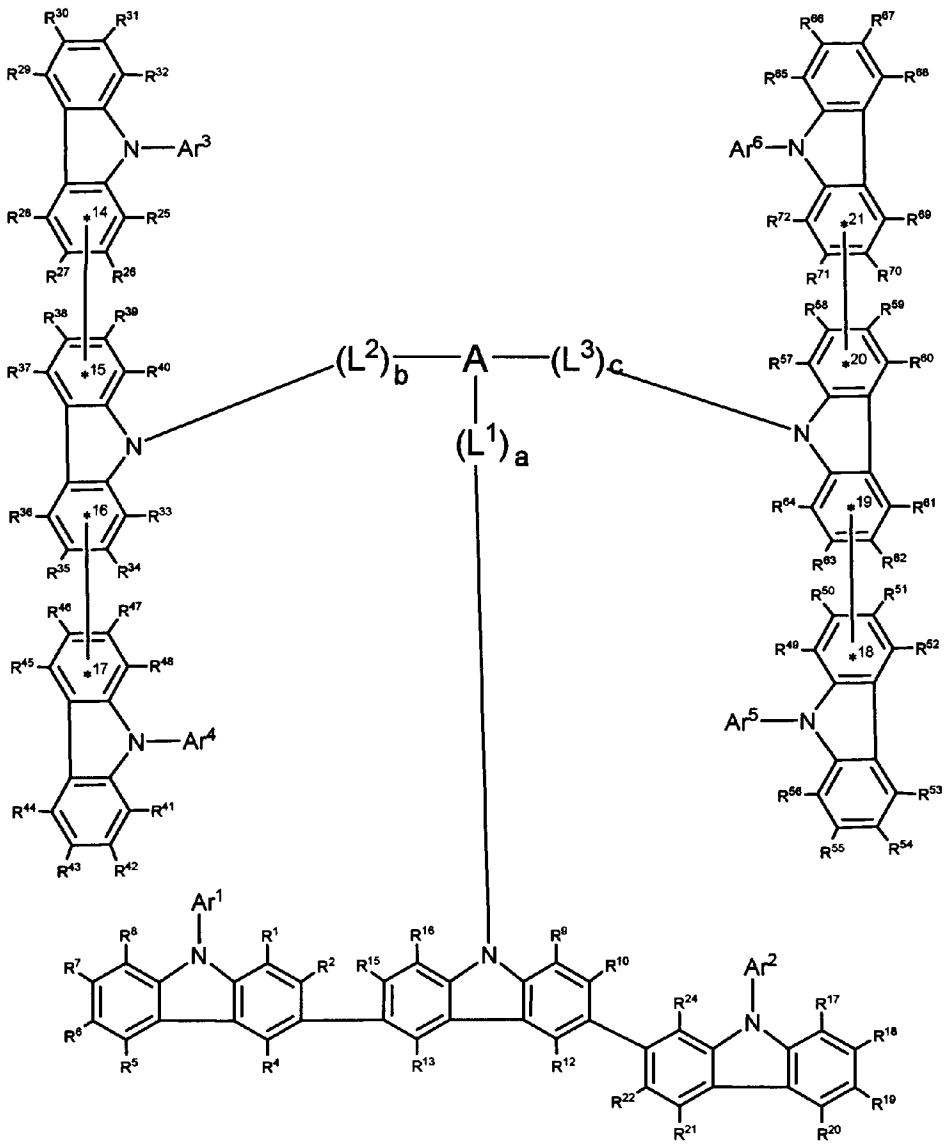
[請求項16] 下記一般式（１ａ－ｉｉ－１［Ｉ］）～（１ａ－ｉｉ－６［Ｉ］）のいずれかで表される、請求項１５に記載の化合物。

[化21]



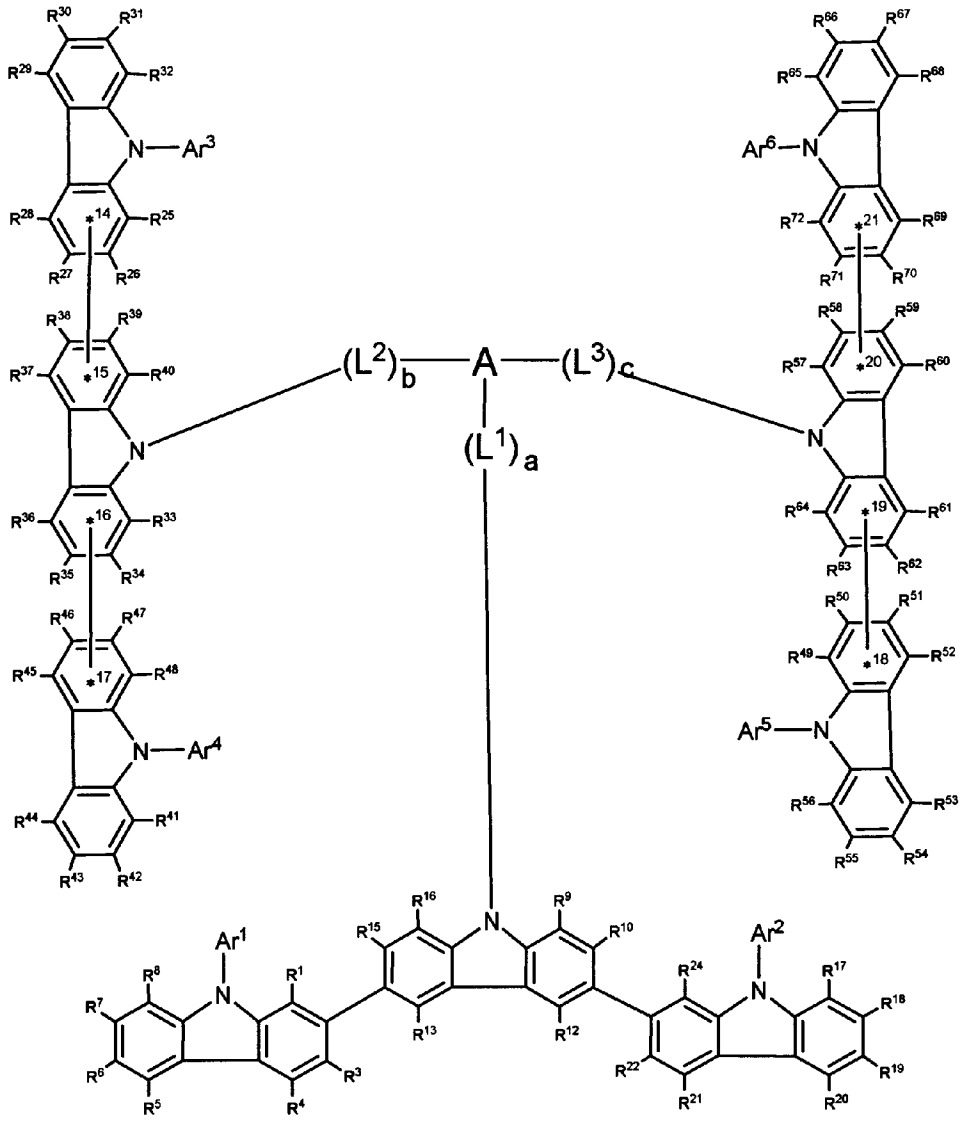
(1a-ii-1[I])

[化22]



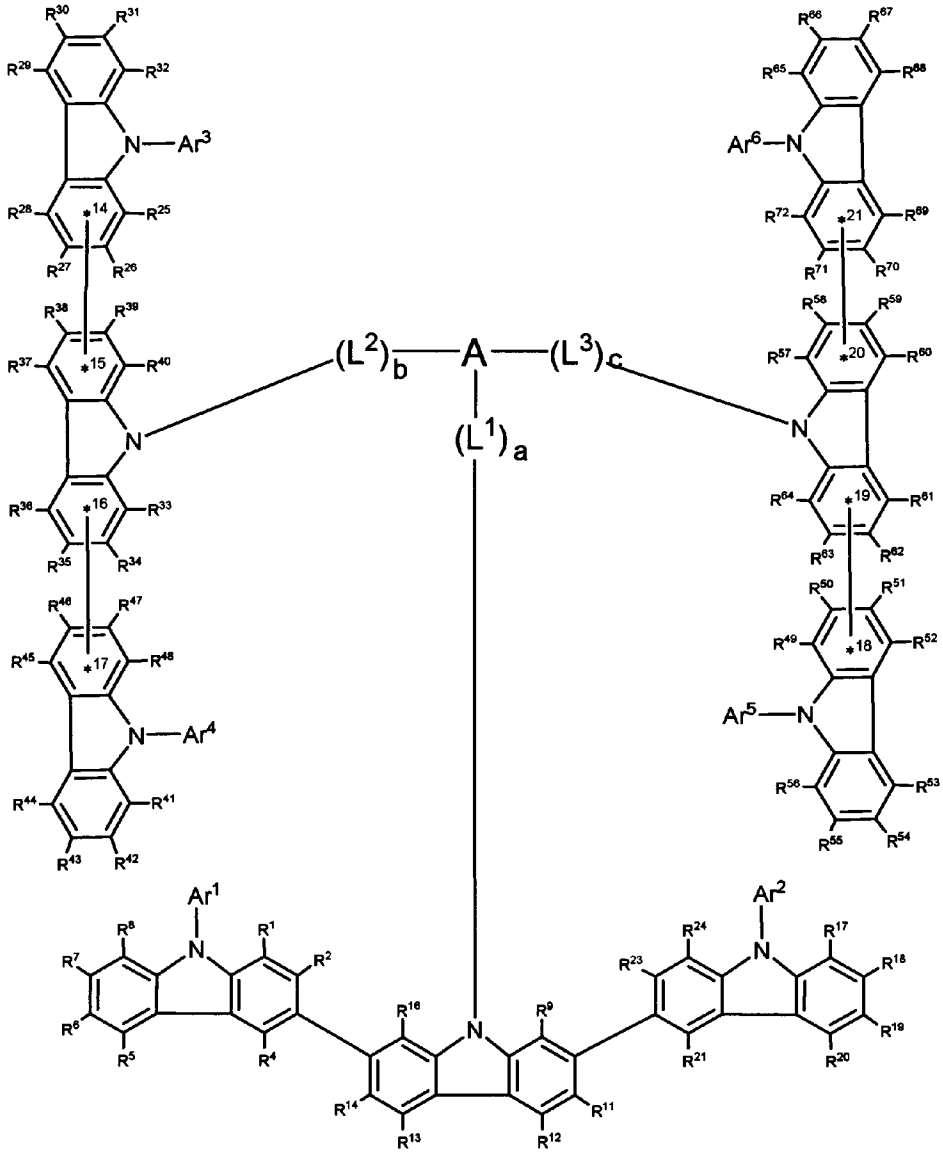
(1a-ii-2[I])

[化23]



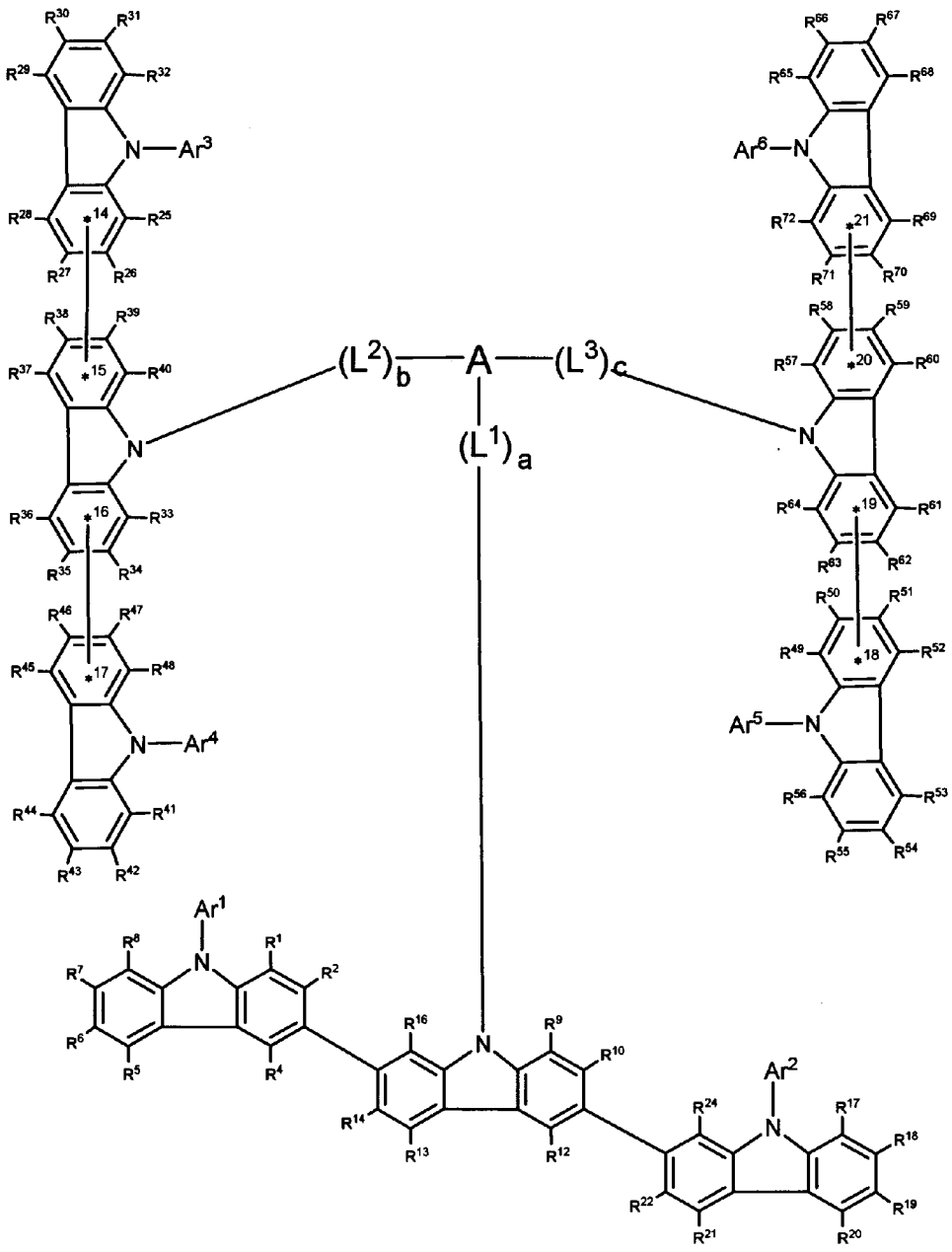
(1a-ii-3[I])

[化24]



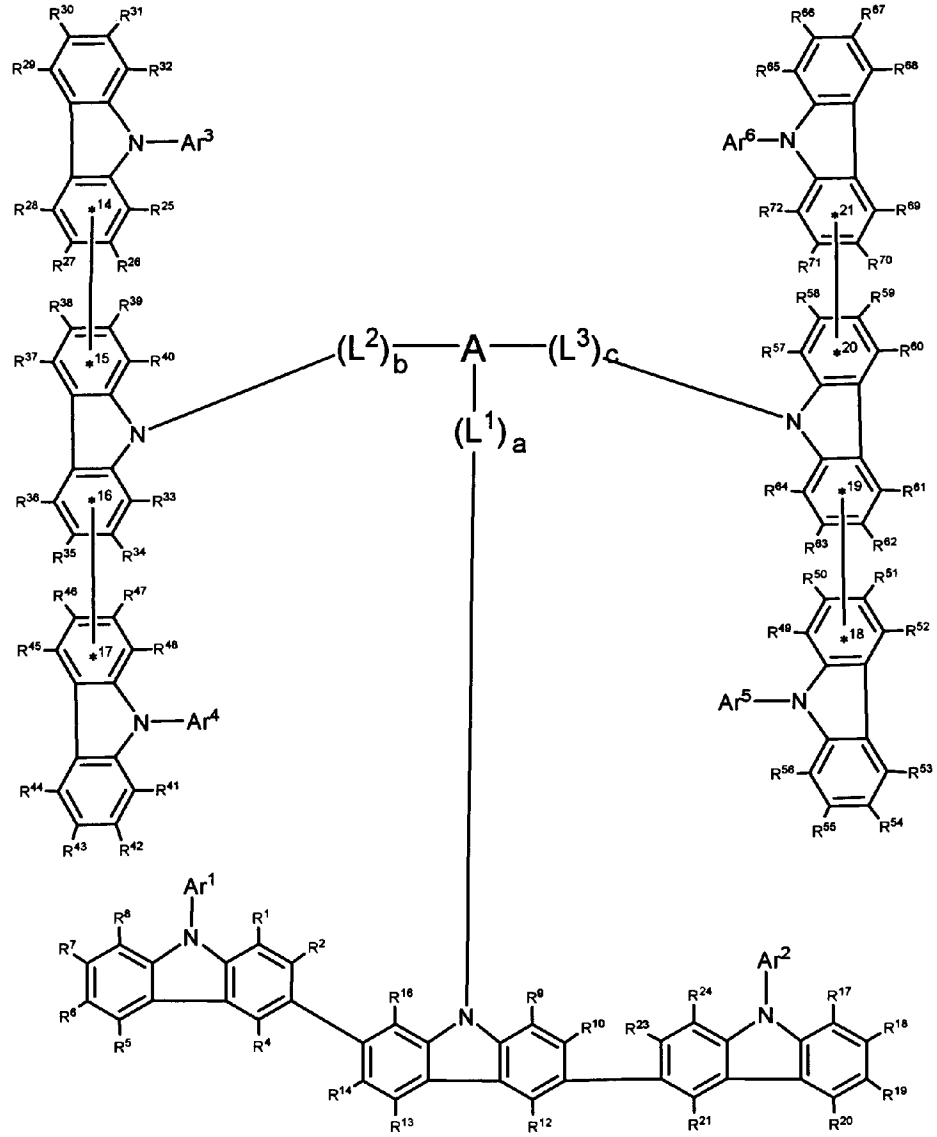
(1a-ii-4[I])

[化25]



(1a-ii-5[I])

[化26]

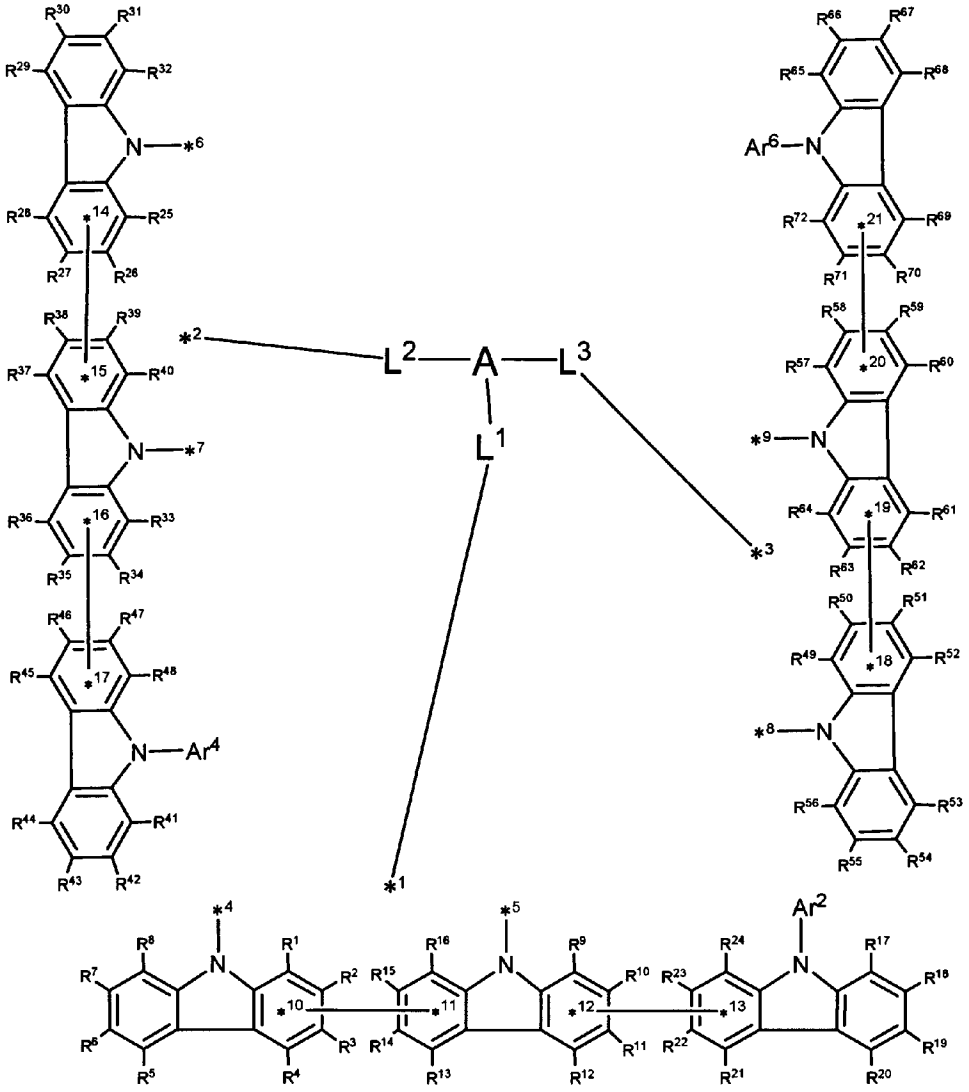


(1a-ii-6[I])

（一般式（１ａ－ｉｉ－１［Ｉ］）～（１ａ－ｉｉ－６［Ｉ］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｃ、Ａｒ[1]～Ａｒ[6]は、請求項３の記載と同じである。Ｒ[1]～Ｒ[72]は、請求項３に記載のＲと同じである。＊[14]～＊[21]は、請求項１４の記載と同じである。）

[請求項17] 下記一般式（１ａ－ｉｉｉ［Ｉ］）で表される、請求項１４に記載の化合物。

[化27]

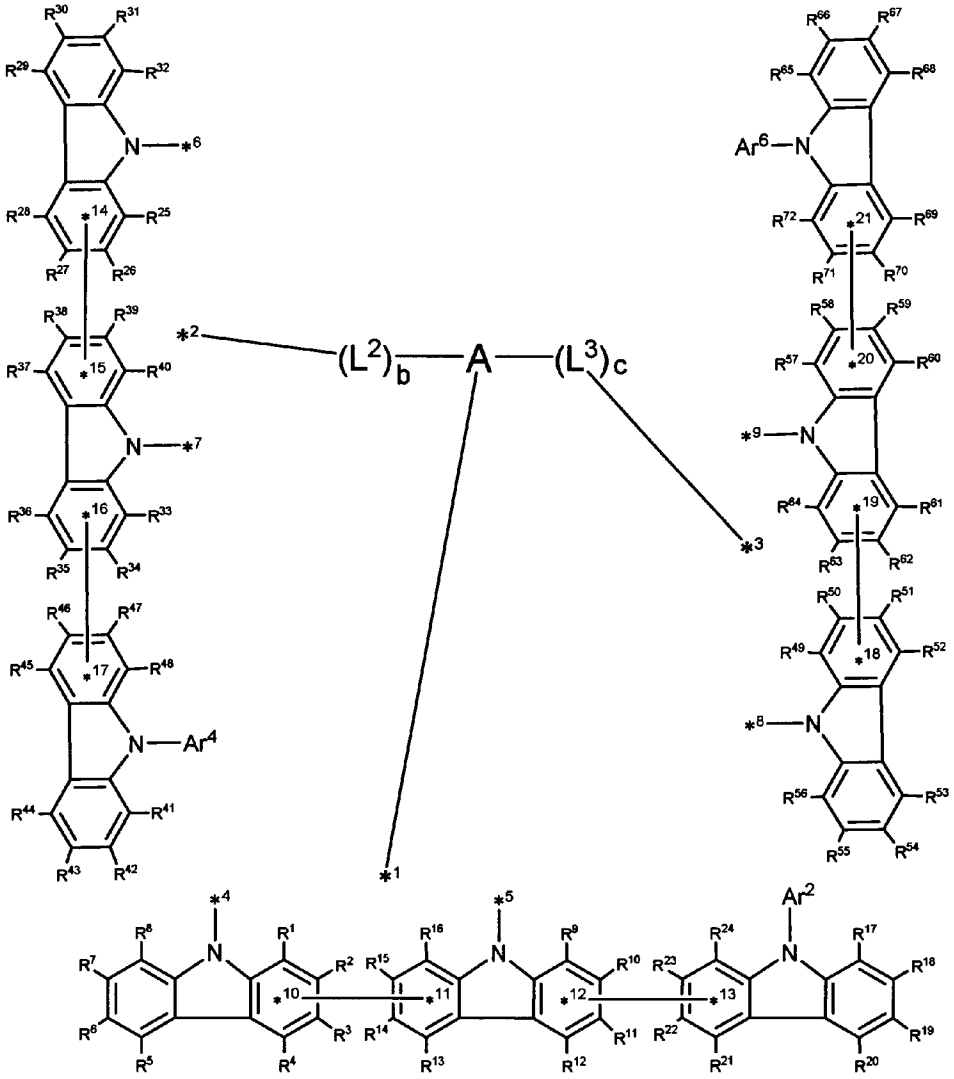


(1a-iii[I])

（一般式（１ａ－ｉｉｉ［Ｉ］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、＊[1]～＊[9]、Ａｒ[2]、Ａｒ[4]、及びＡｒ[6]は、請求項３の記載と同じである。Ｒ[1]～Ｒ[72]は、請求項３に記載のＲと同じである。＊[10]～＊[21]は、請求項１４の記載と同じである。）

[請求項18] 下記一般式（１ａ－ｉｖ［Ｉ］）で表される、請求項１４に記載の化合物。

[化28]

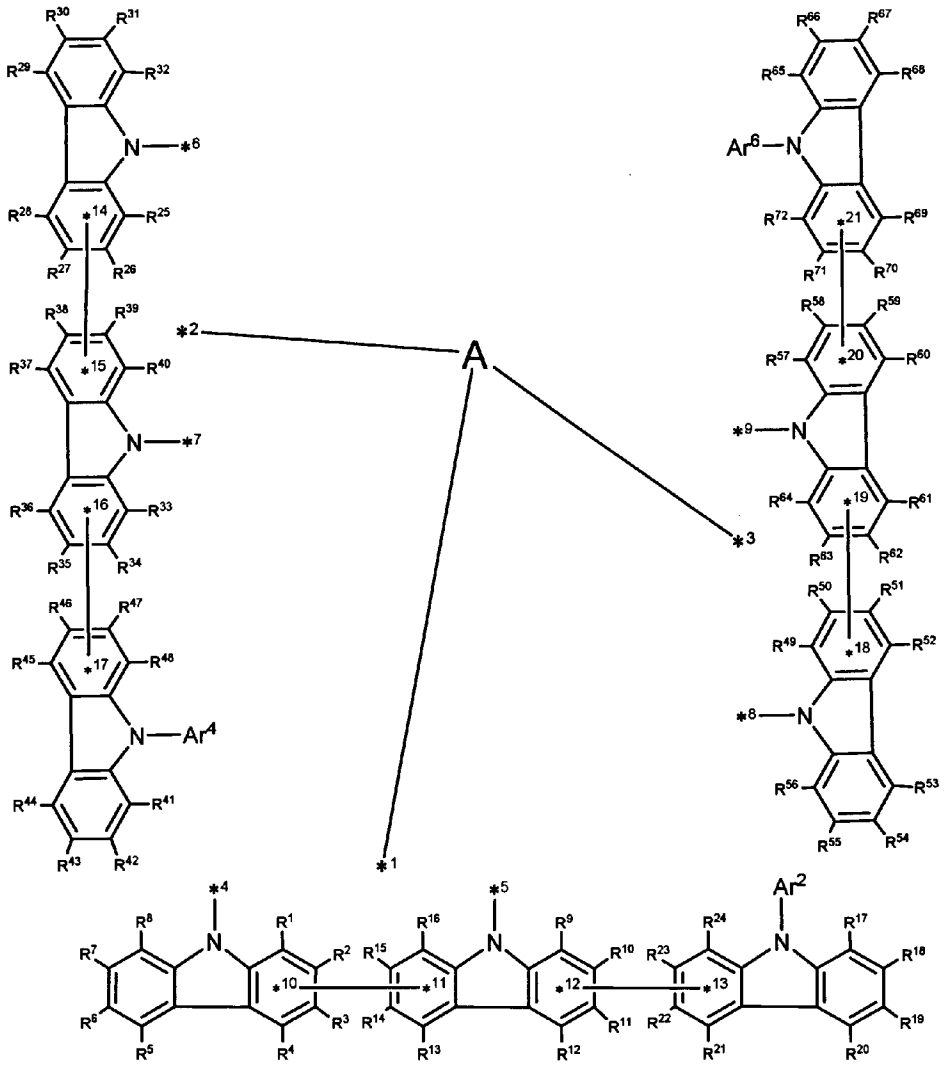


(1a-iv[I])

（一般式（１ａ－ｉｖ［Ｉ］）中、Ａ、Ｌ^{2}、Ｌ^{3}、ｂ、ｃ、＊^{1}～＊^{9}、Ａｒ^{2}、Ａｒ^{4}、及びＡｒ^{6}は、請求項３の記載と同じである。Ｒ^{1}～Ｒ^{72}は、請求項３に記載のＲと同じである。＊^{10}～＊^{21}は、請求項１４の記載と同じである。）

[請求項19] 下記一般式（１ａ－ｖ［Ｉ］）で表される、請求項１４に記載の化合物。

[化29]

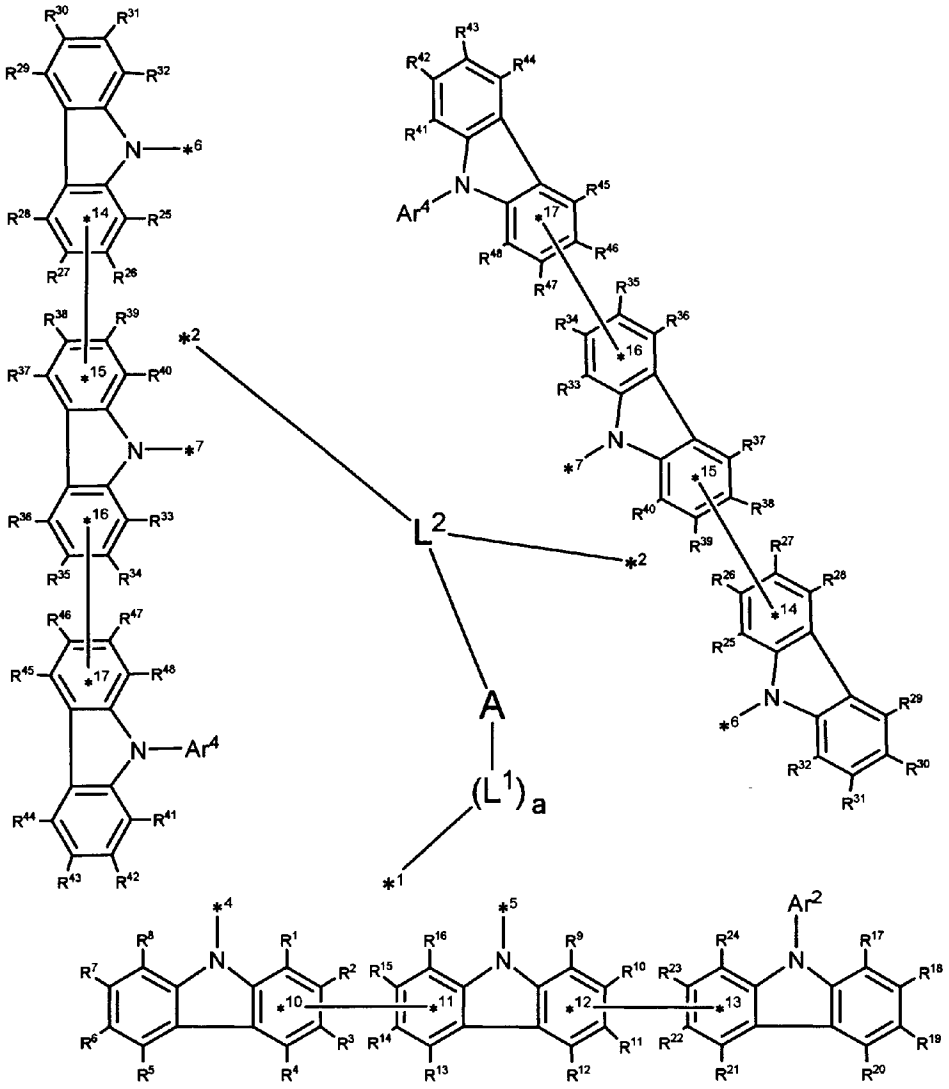


(1a-v[I])

（一般式（１ａ－ｖ［Ｉ］）中、Ａ、＊[1]～＊[9]、Ａｒ[2]、Ａｒ[4]、及びＡｒ[6]は、請求項３の記載と同じである。Ｒ[1]～Ｒ[72]は、請求項３に記載のＲと同じである。＊[10]～＊[21]は、請求項１４の記載と同じである。）

[請求項20] 下記一般式（１ｂ［Ｉ］）で表される、請求項３に記載の化合物。

[化30]



(1b[I])

（一般式（１ｂ［Ｉ］）中、Ａ、Ｌ[1]、Ｌ[2]、ａ、＊[1]～＊[7]、Ａｒ[2]、及びＡｒ[4]は、請求項３の記載と同じである。Ｒ[1]～Ｒ[48]は、請求項３に記載のＲと同じである。

＊[10]－＊[11]は、Ｒ[1]～Ｒ[4]のうちの１つ及びＲ[13]～Ｒ[16]のうちの１つがそれぞれ脱離し、当該基と結合していた炭素原子同士の結合を示し、

＊[12]－＊[13]は、Ｒ[9]～Ｒ[12]のうちの１つ及びＲ[21]～Ｒ[24]のうちの１つがそれぞれ脱離し、当該基と結合していた炭素原子同士の結合を

示し、

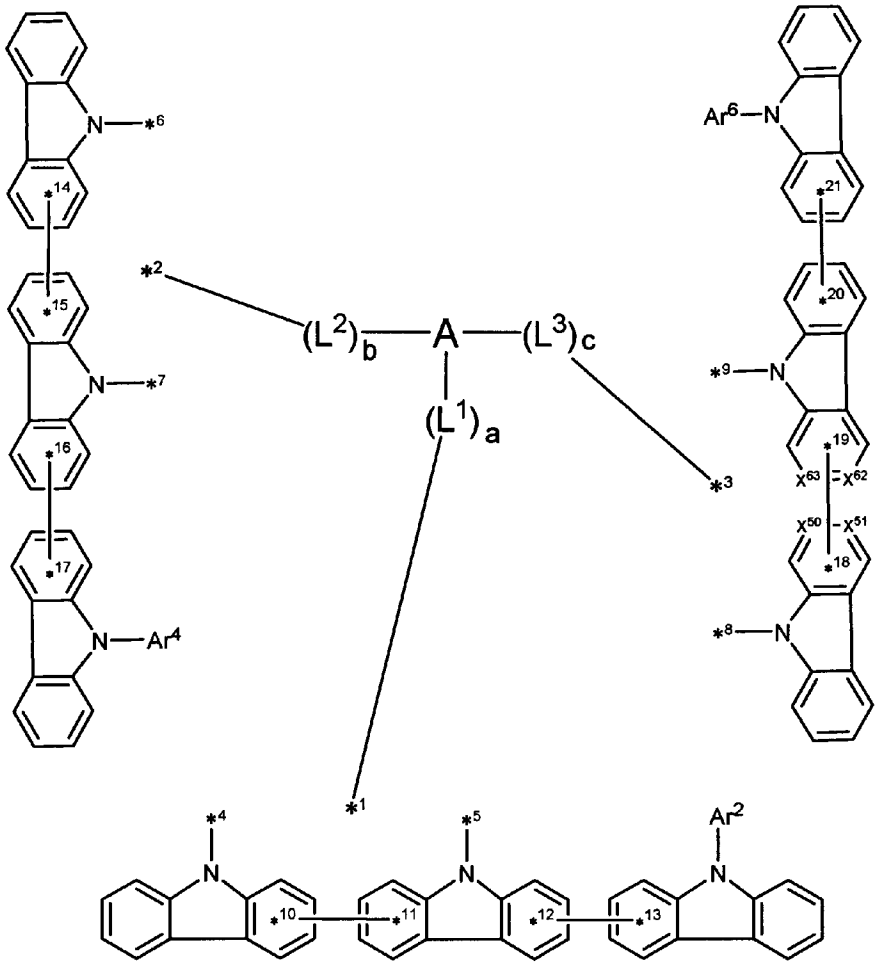
＊^{14}－＊^{15}は、Ｒ^{25}～Ｒ^{28}のうちの１つ及びＲ^{37}～Ｒ^{40}のうちの１つがそれぞれ脱離し、当該基と結合していた炭素原子同士の結合を示し、

＊^{16}－＊^{17}は、Ｒ^{33}～Ｒ^{36}のうちの１つ及びＲ^{45}～Ｒ^{48}のうちの１つがそれぞれ脱離し、当該基と結合していた炭素原子同士の結合を示す。）

[請求項21] 複数存在するＲから選ばれる２つが互いに結合して環を形成していることがない、請求項３に記載の化合物。

[請求項22] 下記一般式（１ａ－ｖｉ［Ｉ］）で表される、請求項３に記載の化合物。

[化31]



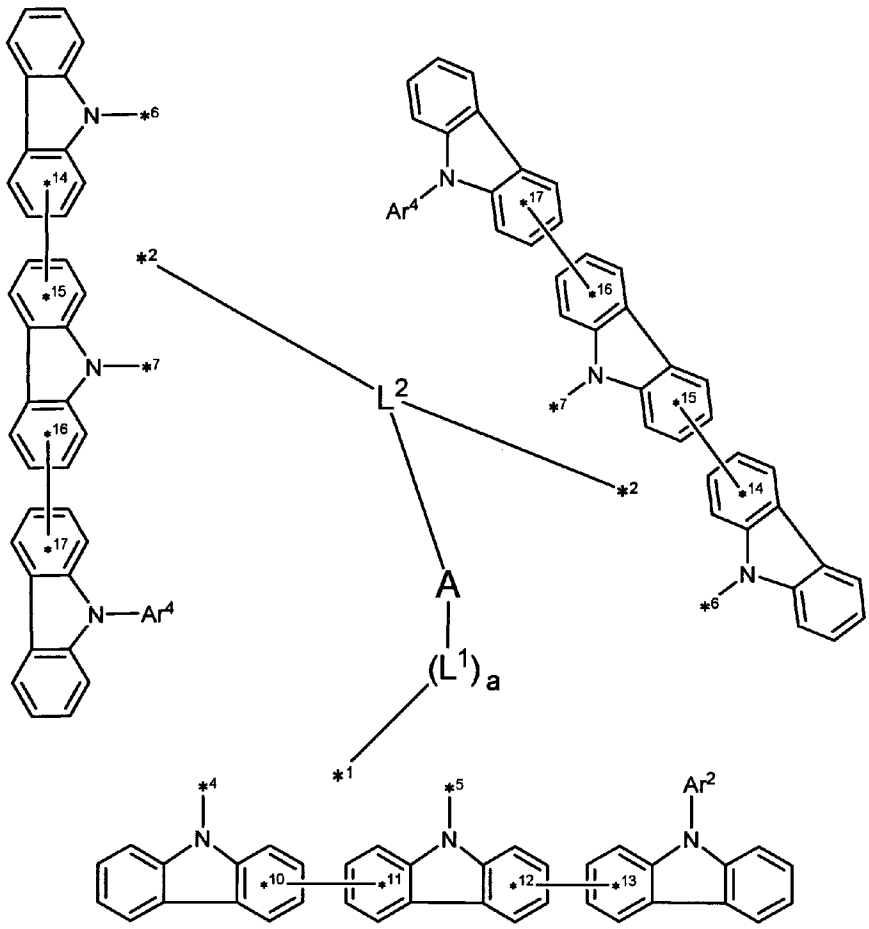
(1a-vi[I])

（一般式（１ａ－ｖｉ［Ｉ］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｃ、＊[1]～＊[9]、Ａｒ[2]、Ａｒ[4]、及びＡｒ[6]は、請求項３の記載と同じである。

＊[10]－＊[11]、＊[12]－＊[13]、＊[14]－＊[15]、＊[16]－＊[17]、＊[18]－＊[19]、＊[20]－＊[21]は、ベンゼン環中の水素原子がそれぞれ脱離した炭素原子同士の結合を示す。）

[請求項23] 下記一般式（１ｂ－ｉ［Ｉ］）で表される、請求項３に記載の化合物。

[化32]



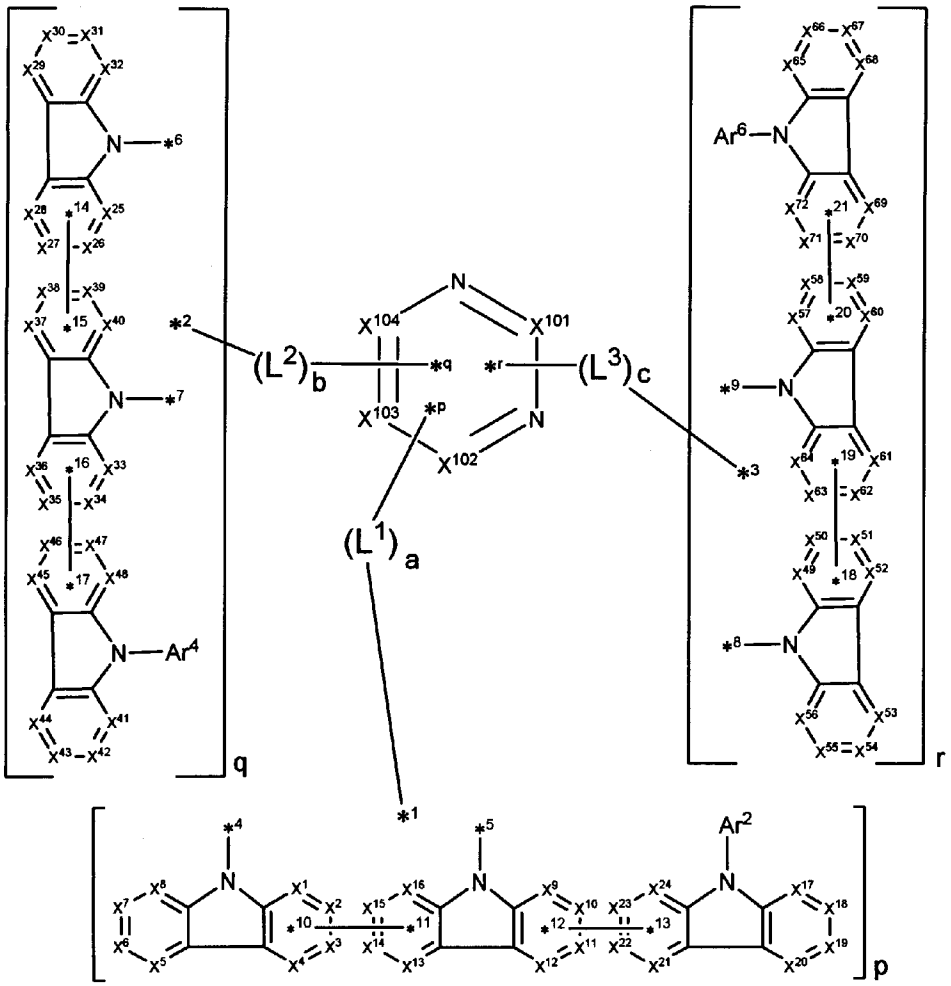
(1b-i[I])

（一般式（１ｂ－ｉ［Ｉ］）中、Ａ、Ｌ[1]、Ｌ[2]、ａ、＊[1]～＊[7]、Ａｒ[2]、Ａｒ[4]は、請求項３の記載と同じである。

＊[10]－＊[11]、＊[12]－＊[13]、＊[14]－＊[15]、＊[16]－＊[17]は、ベンゼン環中の水素原子がそれぞれ脱離した炭素原子同士の結合を示す。）

[請求項24] 下記一般式（１ｃ－ｉ［Ｉ］）で表される、請求項３に記載の化合物。

[化33]



(1c-i[I])

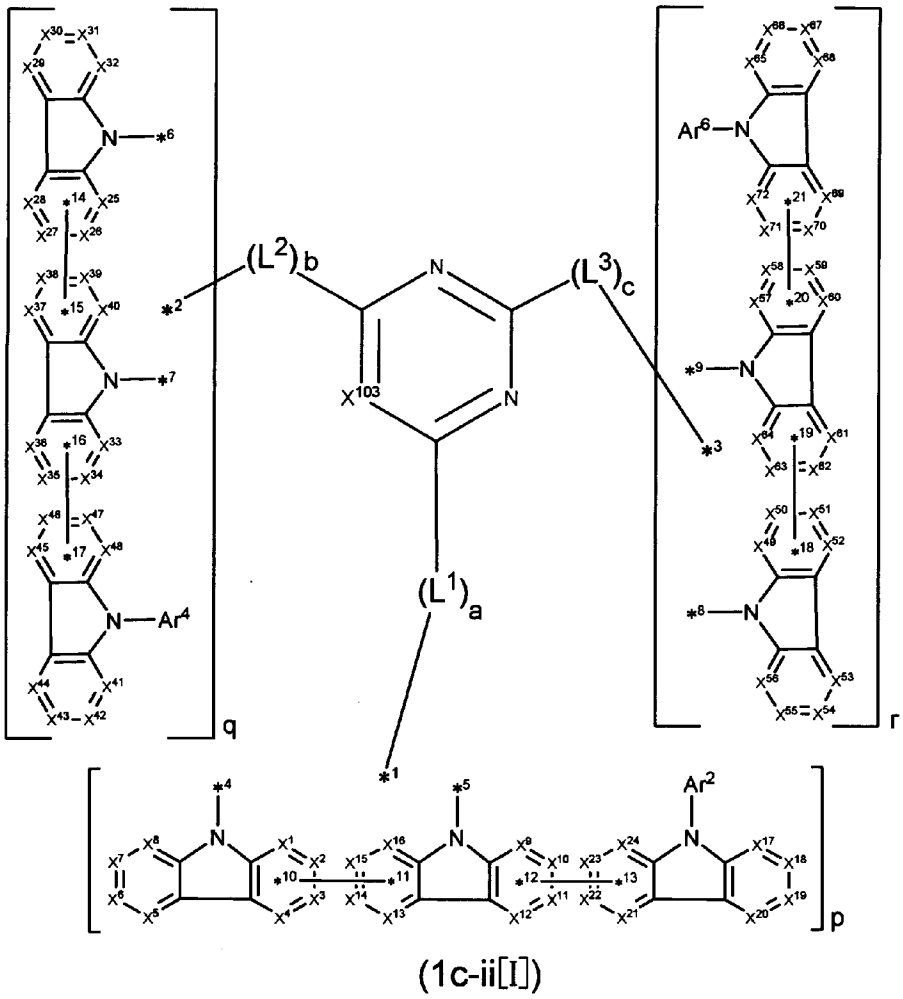
（一般式（１ｃ－ｉ［Ｉ］）中、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｃ、Ｘ[1]～Ｘ[72]、＊[1]～＊[21]、Ａｒ[2]、Ａｒ[4]、及びＡｒ[6]は、請求項３の記載と同じである。

Ｘ[101]～Ｘ[104]は、それぞれ＊[p]～＊[r]のいずれかと結合する炭素原子、Ｃ（Ｒｘ）、又は窒素原子であり、Ｒｘは水素原子又は置換基であって、複数存在するＲｘは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲｘ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25] 下記一般式（１ｃ－ｉｉ［Ｉ］）で表される、請求項３に記載の化合

物。

[化34]

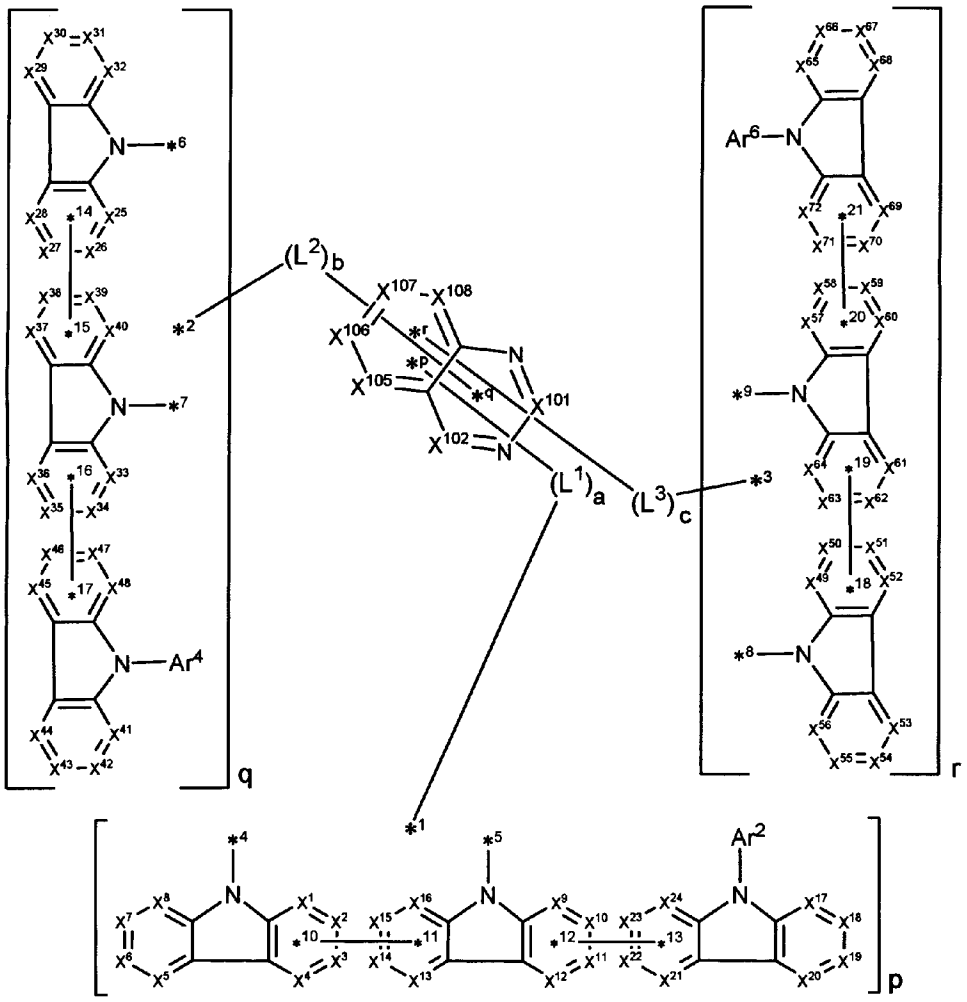


(1c-ii[I])

（一般式（１ｃ－ｉｉ［Ｉ］）中、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}、ａ～ｃ、Ｘ^{1}～Ｘ^{72}、＊^{1}～＊^{21}、Ａｒ^{2}、Ａｒ^{4}、及びＡｒ^{6}は、請求項３の記載と同じである。Ｘ^{103}は、Ｃ（Ｒｘ）又は窒素原子であり、Ｒｘは水素原子又は置換基である。）

[請求項26] 下記一般式（１ｃ－ｉｉｉ［Ｉ］）で表される、請求項３に記載の化合物。

[化35]



(1c-iii[I])

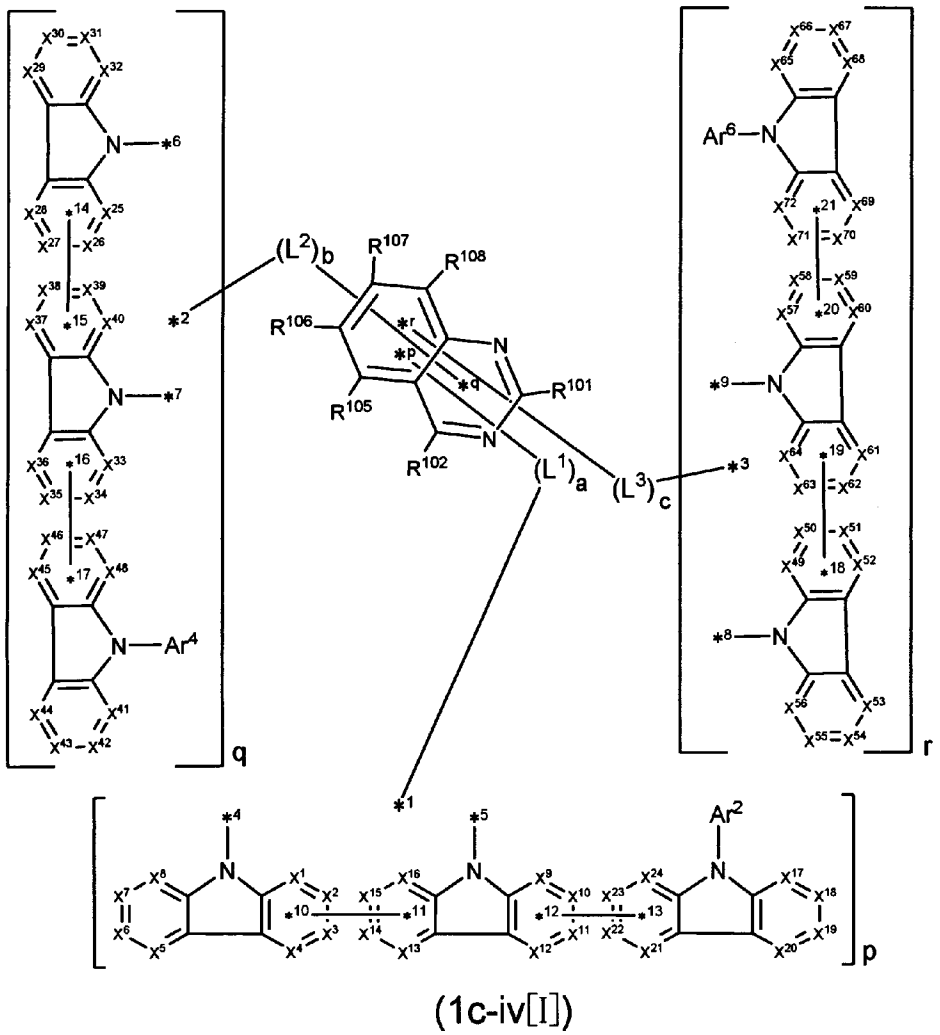
（一般式（１ｃ－ｉｉｉ［Ｉ］）中、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}、ａ～ｃ、Ｘ^{1}～Ｘ^{72}、＊^{1}～＊^{21}、Ａｒ^{2}、Ａｒ^{4}、及びＡｒ^{6}は、請求項３の記載と同じである。

Ｘ^{101}、Ｘ^{102}、Ｘ^{105}～Ｘ^{108}は、それぞれ＊^{p}～＊^{r}のいずれかと結合する炭素原子、Ｃ（Ｒｘ）、又は窒素原子であり、Ｒｘは水素原子又は置換基であって、複数存在するＲｘは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲｘ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27] 下記一般式（１ｃ－ｉｖ［Ｉ］）で表される、請求項３に記載の化合

物。

[化36]



(1c-iv[I])

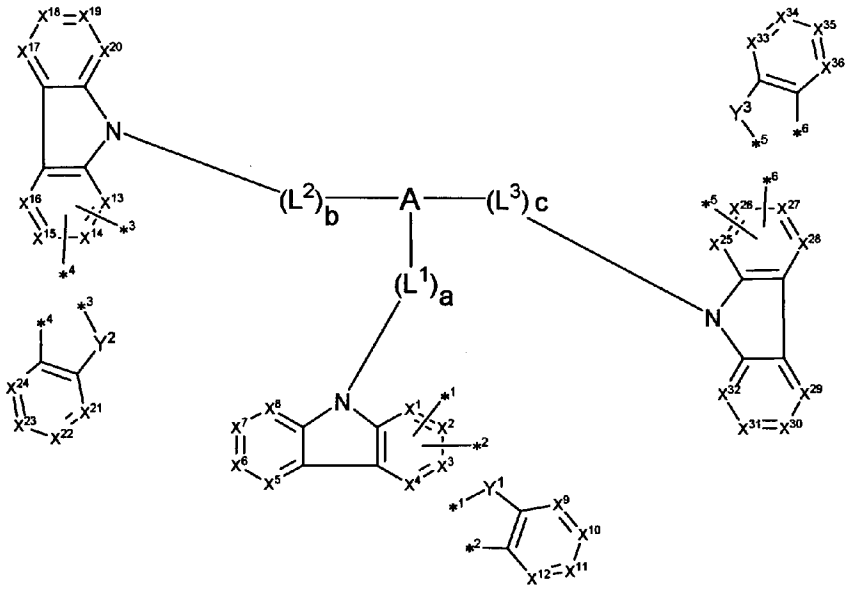
（一般式（１ｃ－ｉｖ［Ｉ］）中、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｃ、Ｘ[1]～Ｘ[72]、＊[1]～＊[21]、Ａｒ[2]、Ａｒ[4]、及びＡｒ[6]は、請求項３の記載と同じである。

Ｒ[101]、Ｒ[102]、及びＲ[105]～Ｒ[108]のうちの１～３つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子が＊[p]～＊[r]のいずれかと結合し、それ以外は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。なお、Ｒ[102]及びＲ[105]～Ｒ[108]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28] 前記Ａｒ[1]～Ａｒ[6]が、いずれも、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０のアリール基である、請求項３及び１３～２７のいずれか１項に記載の化合物。

[請求項29] 下記一般式（１ａ［II］）で表される、請求項４に記載の化合物。

[化37]

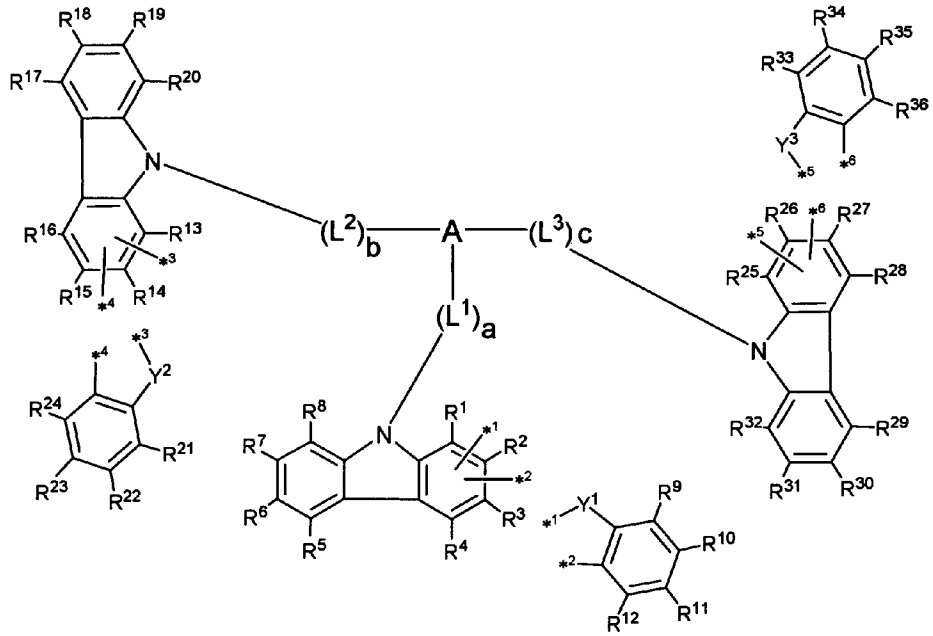


(1a[II])

（一般式（１ａ［II］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｃ、Ｘ[1]～Ｘ[36]、及びＹ[1]～Ｙ[3]は、請求項４の記載と同じである。）

[請求項30] 下記一般式（１ａ－ｉ［II］）で表される、請求項４に記載の化合物。

[化38]



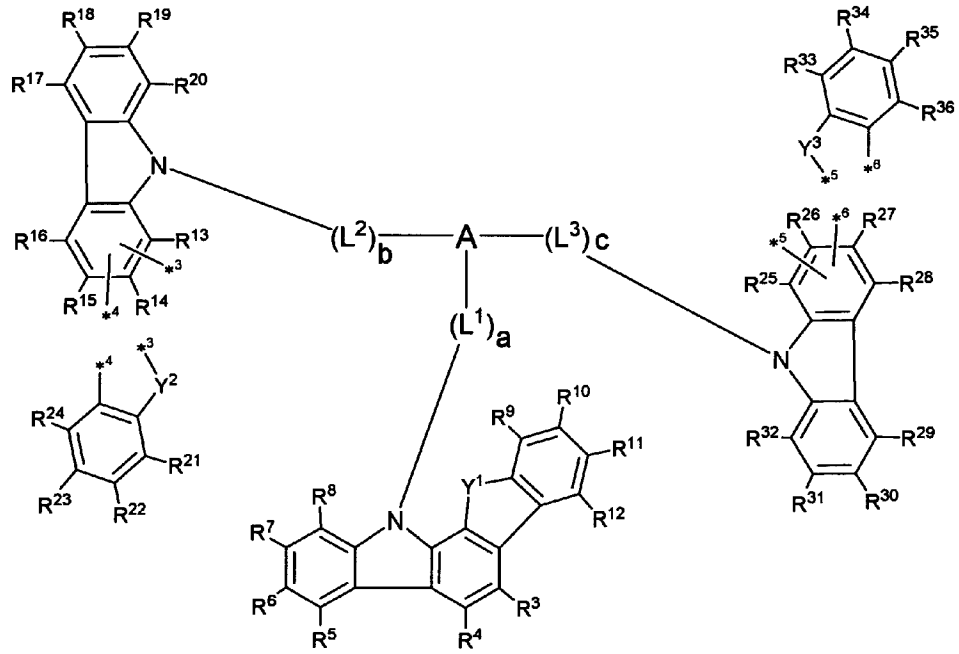
(1a-i[II])

（一般式（１ａ－ｉ［II］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｃ、及びＹ[1]～Ｙ[3]は、請求項４の記載と同じである。Ｒ[1]～Ｒ[36]は、請求項４に記載のＲと同じである。

Ｒ[1]～Ｒ[4]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[1]及び＊[2]と結合し、Ｒ[13]～Ｒ[16]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[3]及び＊[4]と結合し、Ｒ[25]～Ｒ[28]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[5]及び＊[6]と結合する。）

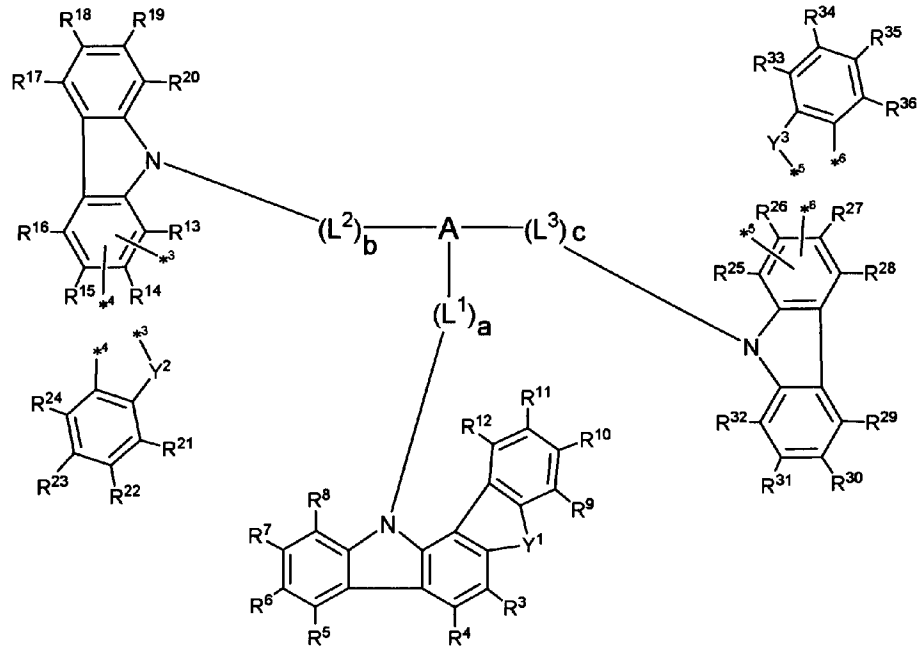
[請求項31] 下記一般式（１ａ－ｉ－１［II］）～（１ａ－ｉ－６［II］）のいずれかで表される、請求項３０に記載の化合物。

[化39]



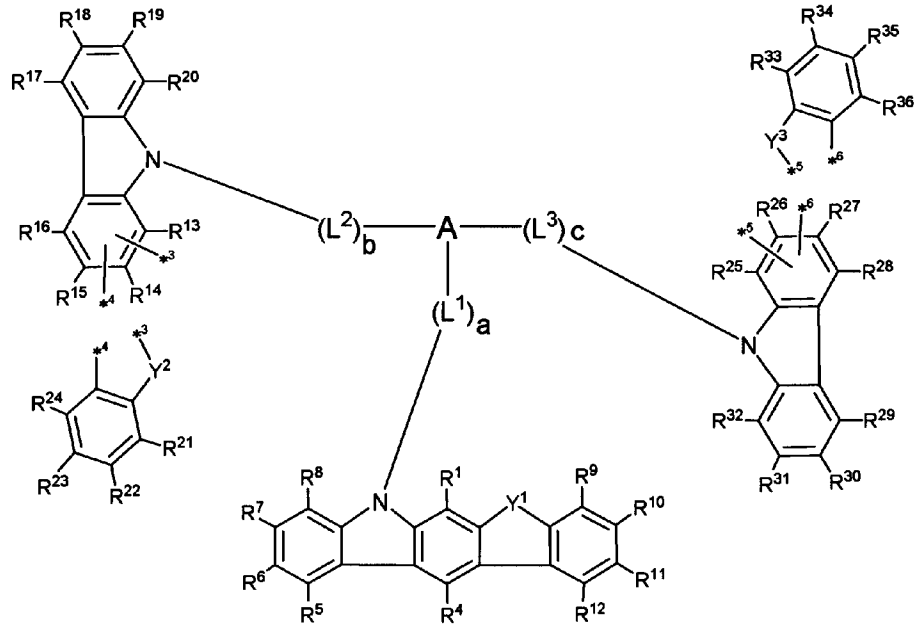
(1a-i-1[II])

[化40]



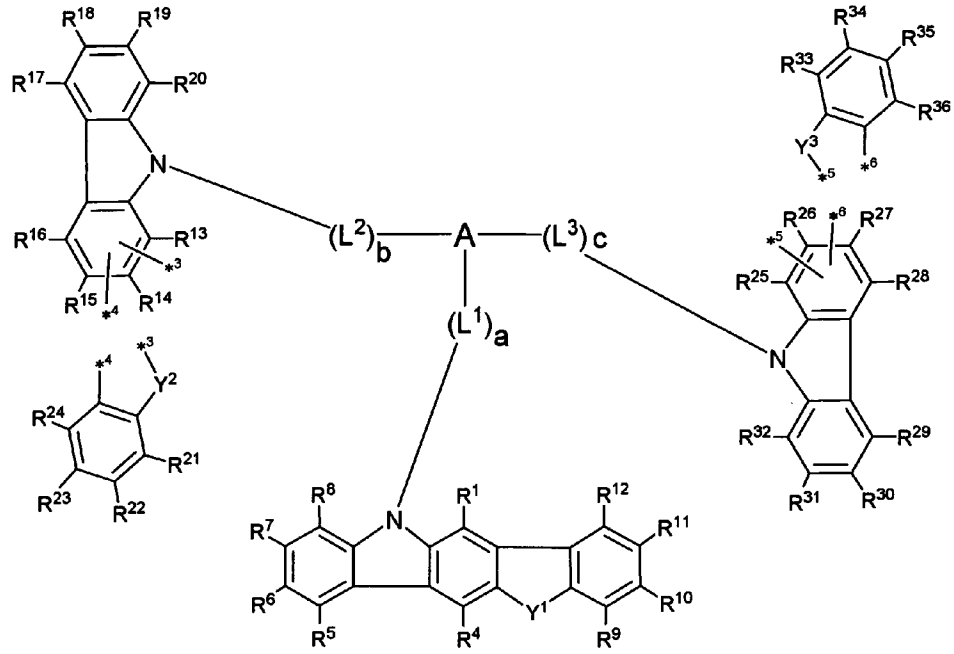
(1a-i-2[II])

[化41]



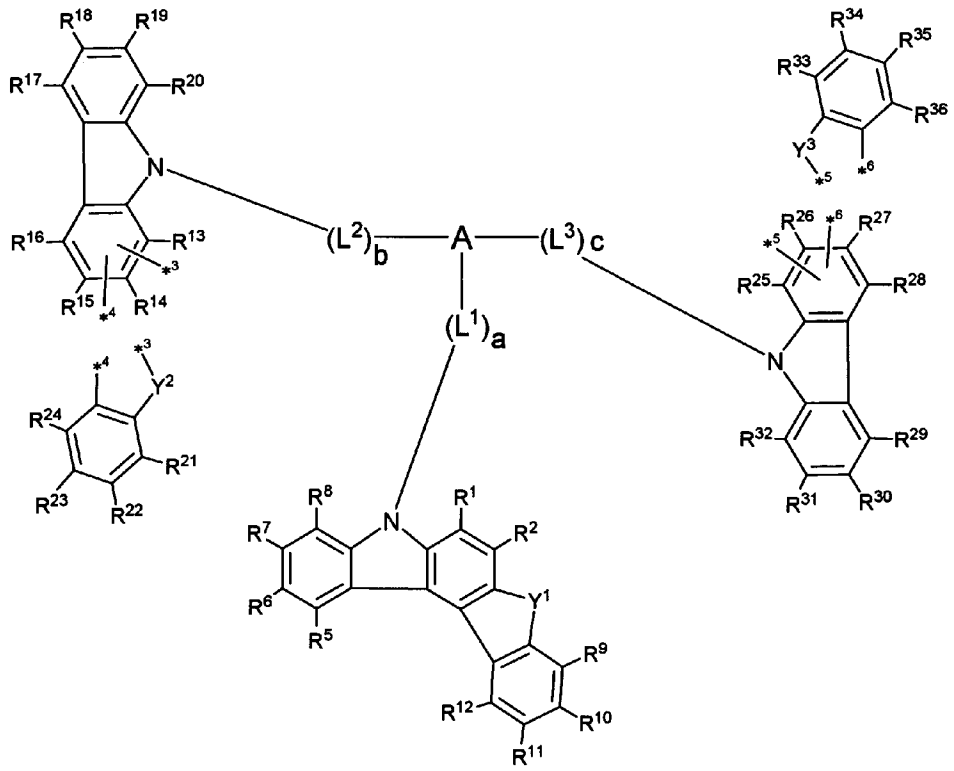
(1a-i-3[II])

[化42]



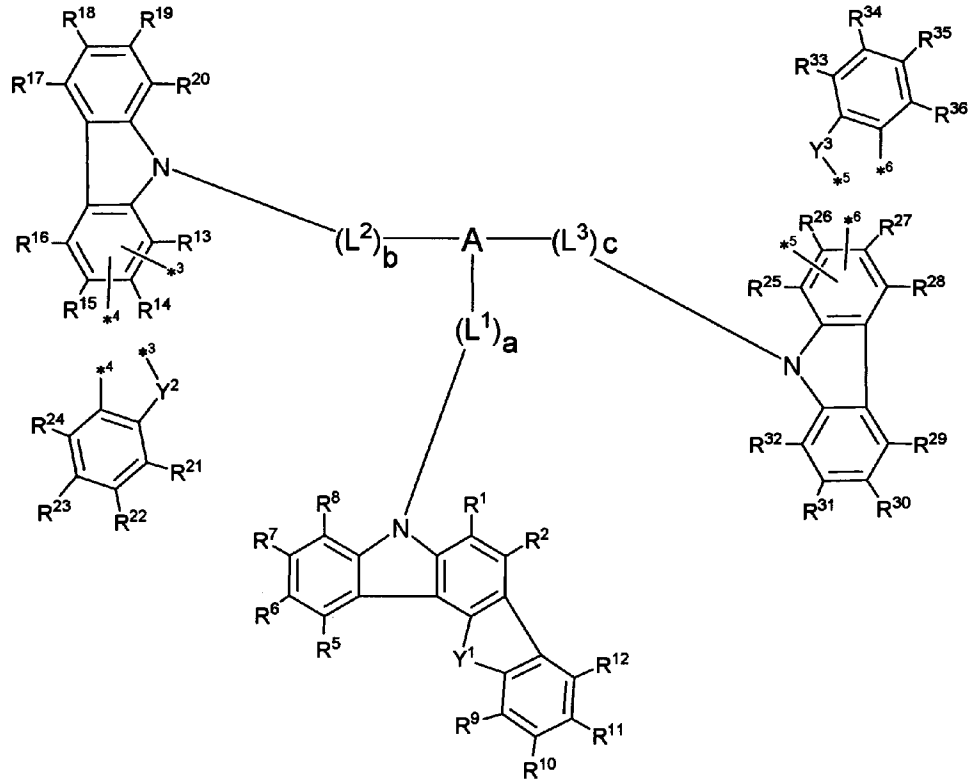
(1a-i-4[II])

[化43]



(1a-i-5[II])

[化44]



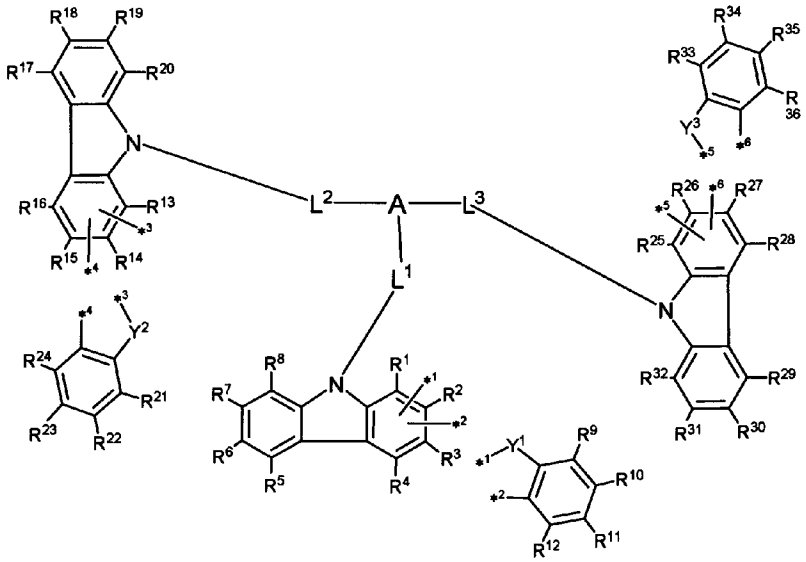
(1a-i-6[II])

（一般式（１ａ－ｉ－１［II］）～（１ａ－ｉ－６［II］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｃ、及びＹ[1]～Ｙ[3]は、請求項４の記載と同じである。Ｒ[1]～Ｒ[36]は、請求項４に記載のＲと同じである。

Ｒ[13]～Ｒ[16]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[3]及び＊[4]と結合し、Ｒ[25]～Ｒ[28]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[5]及び＊[6]と結合する。）

[請求項32] 下記一般式（１ａ－ｉｉ［II］）で表される、請求項２９に記載の化合物。

[化45]



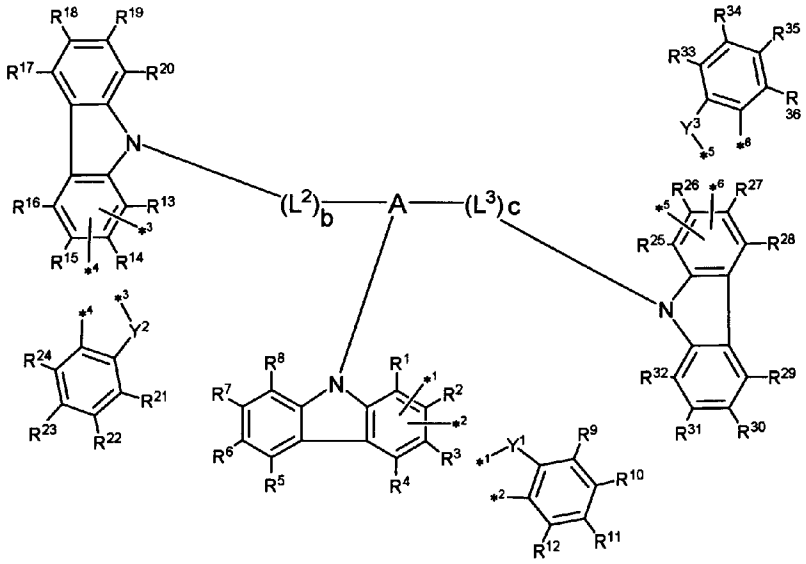
(1a-ii[II])

（一般式（１ａ－ｉｉ［II］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、及びＹ[1]～Ｙ[3]は、請求項４の記載と同じである。Ｒ[1]～Ｒ[36]は、請求項４に記載のＲと同じである。

Ｒ[1]～Ｒ[4]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[1]及び＊[2]と結合し、Ｒ[13]～Ｒ[16]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[3]及び＊[4]と結合し、Ｒ[25]～Ｒ[28]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[5]及び＊[6]と結合する。）

[請求項33] 下記一般式（１ａ－ｉｉｉ［II］）で表される、請求項２９に記載の化合物。

[化46]



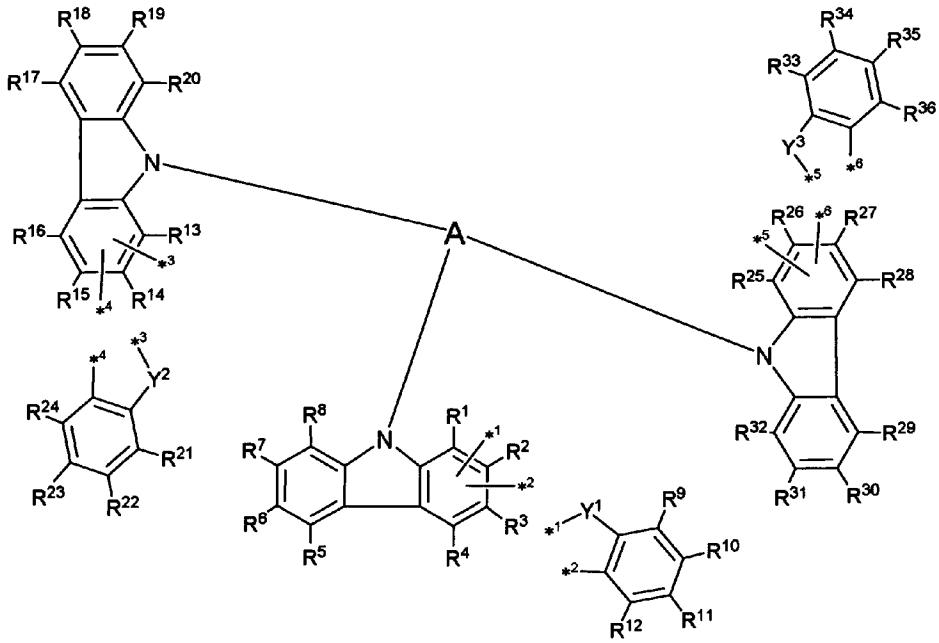
(1a-iii[II])

（一般式（１ａ－ｉｉｉ［II］）中、Ａ、Ｌ[2]～Ｌ[3]、ｂ～ｃ、及びＹ[1]～Ｙ[3]は、請求項４の記載と同じである。Ｒ[1]～Ｒ[36]は、請求項４に記載のＲと同じである。

Ｒ[1]～Ｒ[4]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[1]及び＊[2]と結合し、Ｒ[13]～Ｒ[16]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[3]及び＊[4]と結合し、Ｒ[25]～Ｒ[28]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[5]及び＊[6]と結合する。）

[請求項34] 下記一般式（１ａ－ｉｖ［II］）で表される、請求項２９に記載の化合物。

[化47]



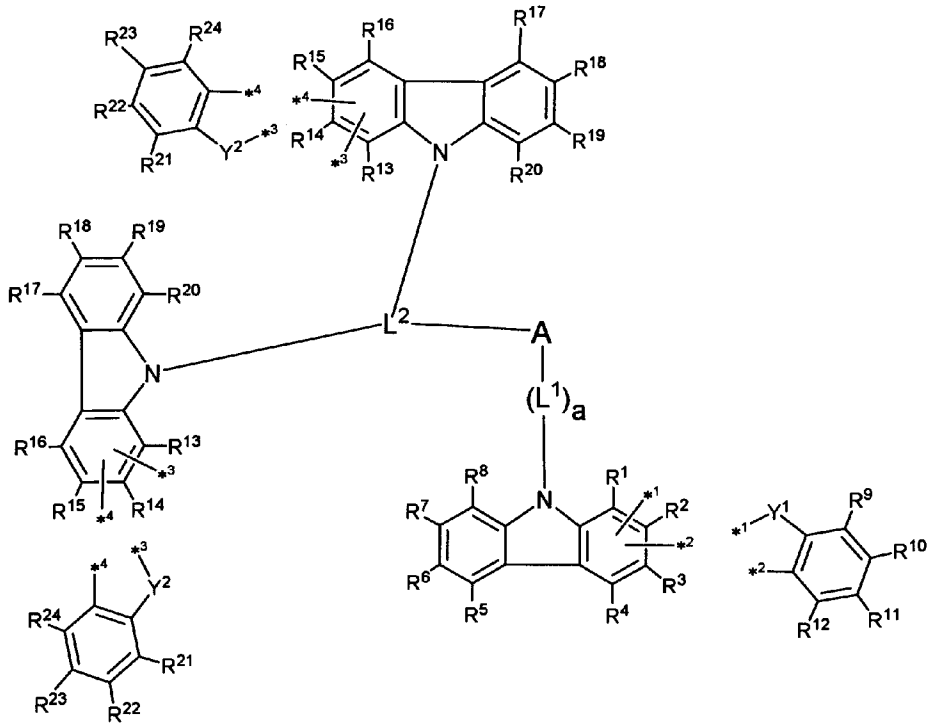
(1a-iv[II])

（一般式（１ａ－ｉｖ［II］）中、Ａ、及びＹ[1]～Ｙ[3]は、請求項４の記載と同じである。Ｒ[1]～Ｒ[36]は、請求項４に記載のＲと同じである。

Ｒ[1]～Ｒ[4]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[1]及び＊[2]と結合し、Ｒ[13]～Ｒ[16]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[3]及び＊[4]と結合し、Ｒ[25]～Ｒ[28]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[5]及び＊[6]と結合する。）

[請求項35] 下記一般式（１ｂ［II］）で表される、請求項４に記載の化合物。

[化48]



(1b[II])

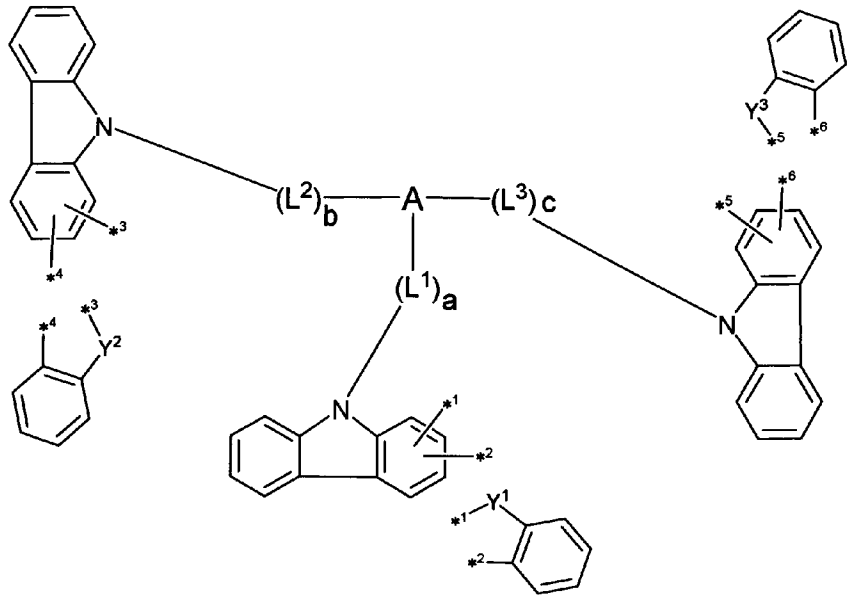
（一般式（１ｂ［II］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[2]、ａ、及びＹ[1]～Ｙ[2]は、請求項４の記載と同じである。Ｒ[1]～Ｒ[24]は、請求項４に記載のＲと同じである。

Ｒ[1]～Ｒ[4]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[1]及び＊[2]と結合し、Ｒ[13]～Ｒ[16]のうちの２つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子は＊[3]及び＊[4]と結合する。）

[請求項36] 複数存在するＲから選ばれる２つが互いに結合して環を形成していることがない、請求項４に記載の化合物。

[請求項37] 下記一般式（１ａ－ｖ［II］）で表される、請求項４に記載の化合物。

[化49]



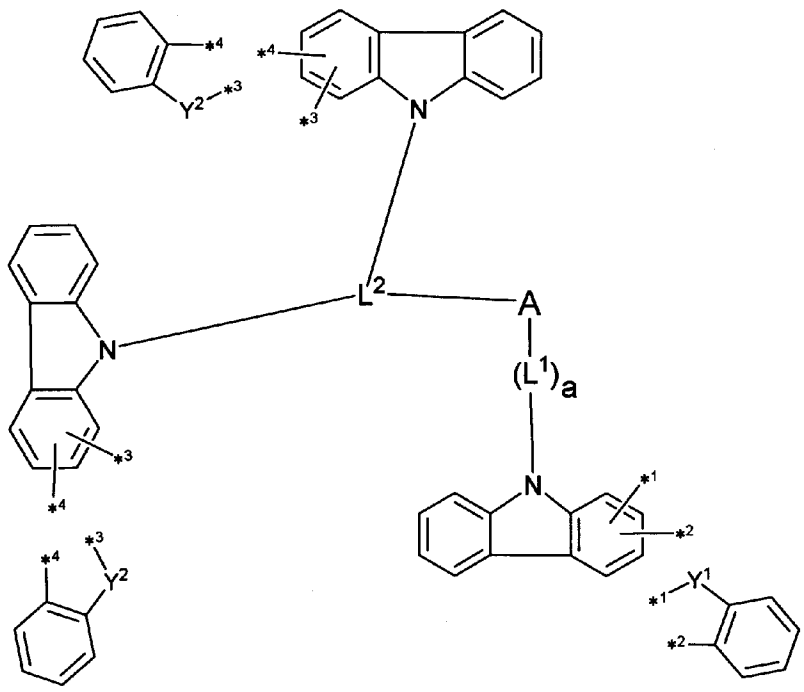
(1a-v[II])

（一般式（１ａ－ｖ［II］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｃ、及びＹ[1]～Ｙ[3]は、請求項４の記載と同じである。

カルルバゾリル基の１位、２位、３位及び４位に有する４つの水素原子のうち２つが脱離して、脱離した水素原子と結合していた炭素原子が、＊[1]及び＊[2]、＊[3]及び＊[4]、もしくは、＊[5]及び＊[6]と結合する。）

[請求項38] 下記一般式（１ｂ－ｉ［II］）で表される、請求項４に記載の化合物。

[化50]



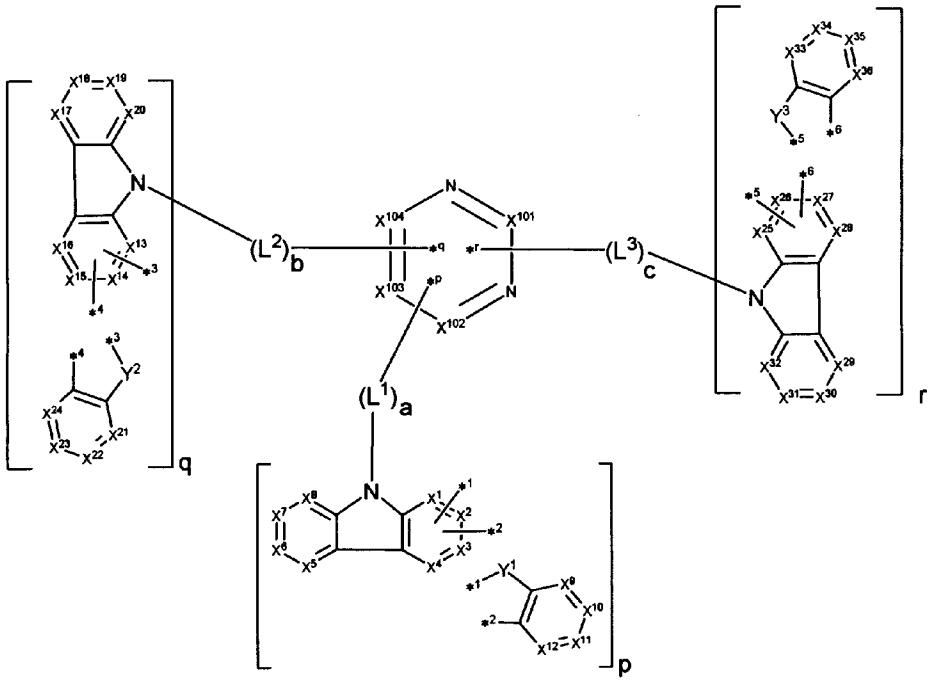
(1b-i[II])

（一般式（１ｂ－ｉ［II］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[2]、ａ、及びＹ[1]～Ｙ[2]は、請求項４の記載と同じである。

カルルバゾリル基の１位、２位、３位及び４位に有する４つの水素原子のうち２つが脱離して、脱離した水素原子と結合していた炭素原子が、＊[1]及び＊[2]、＊[3]及び＊[4]、もしくは、＊[5]及び＊[6]と結合する。）

[請求項39] 下記一般式（１ｃ－ｉ［II］）で表される、請求項４に記載の化合物。

[化51]



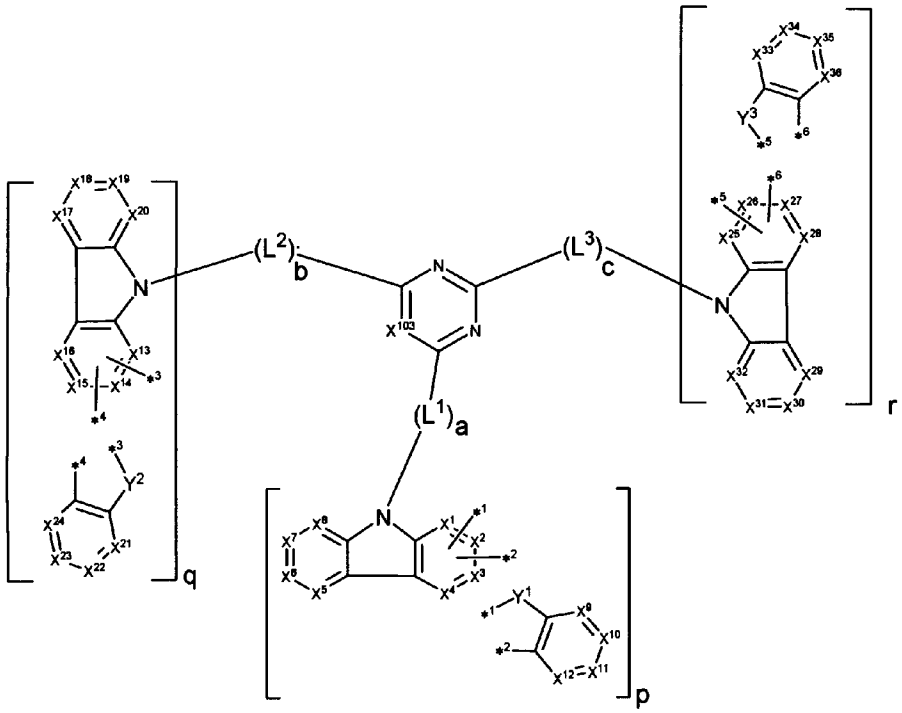
(1c-i[II])

（一般式（１ｃ－ｉ［II］）中、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}、ａ～ｃ、ｐ～ｒ、Ｘ^{1}～Ｘ^{36}、及びＹ^{1}～Ｙ^{3}は、請求項４の記載と同じである。

Ｘ^{101}～Ｘ^{104}は、それぞれ＊^{p}～＊^{r}のいずれかと結合する炭素原子、Ｃ（Ｒｘ）、又は窒素原子であり、Ｒｘは水素原子又は置換基であって、複数存在するＲｘは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲｘ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40] 下記一般式（１ｃ－ｉｉ［II］）で表される、請求項４に記載の化合物。

[化52]

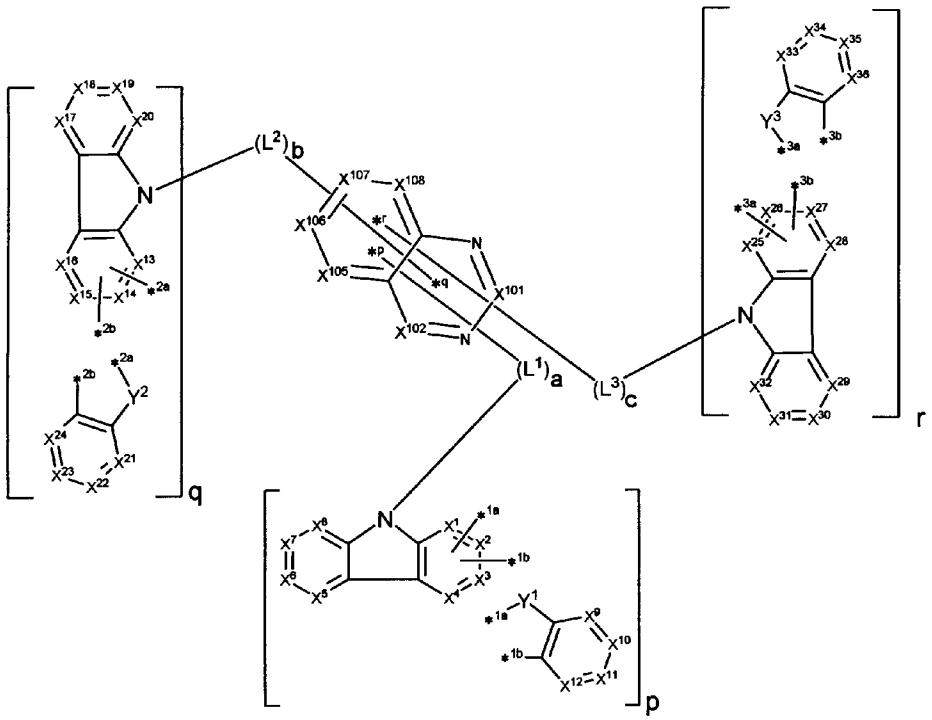


(1c-ii[II])

（一般式（１ｃ－ｉｉ［II］）中、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}、ａ～ｃ、ｐ～ｒ、Ｘ^{1}～Ｘ^{36}、及びＹ^{1}～Ｙ^{3}は、請求項４の記載と同じである。Ｘ^{103}は、Ｃ（Ｒｘ）、又は窒素原子であり、Ｒｘは水素原子又は置換基である。）

[請求項41] 下記一般式（１ｃ－ｉｉｉ［II］）で表される、請求項４に記載の化合物。

[化53]



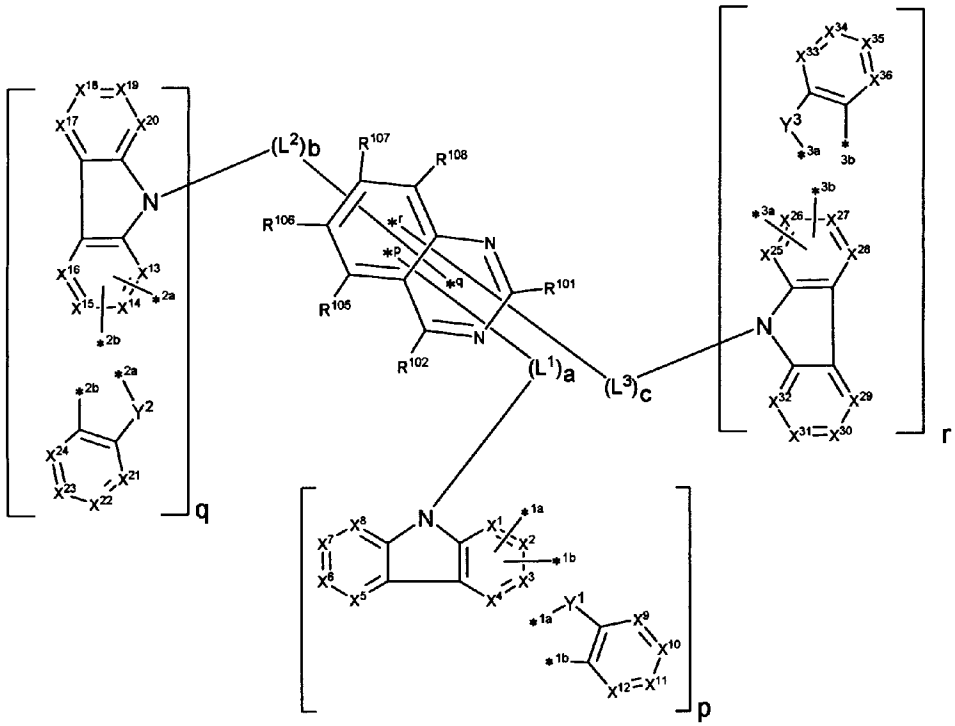
(1c-iii[II])

（一般式（１ｃ－ｉｉｉ［II］）中、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}、ａ～ｃ、ｐ～ｒ、Ｘ^{1}～Ｘ^{36}、及びＹ^{1}～Ｙ^{3}は、請求項４の記載と同じである。

Ｘ^{101}、Ｘ^{102}、Ｘ^{105}～Ｘ^{108}は、それぞれ＊^{p}～＊^{r}のいずれかと結合する炭素原子、Ｃ（Ｒｘ）、又は窒素原子であり、Ｒｘは水素原子又は置換基であって、複数存在するＲｘは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲｘ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42] 下記一般式（１ｃ－ｉｖ［II］）で表される、請求項４に記載の化合物。

[化54]



(1c-iv[II])

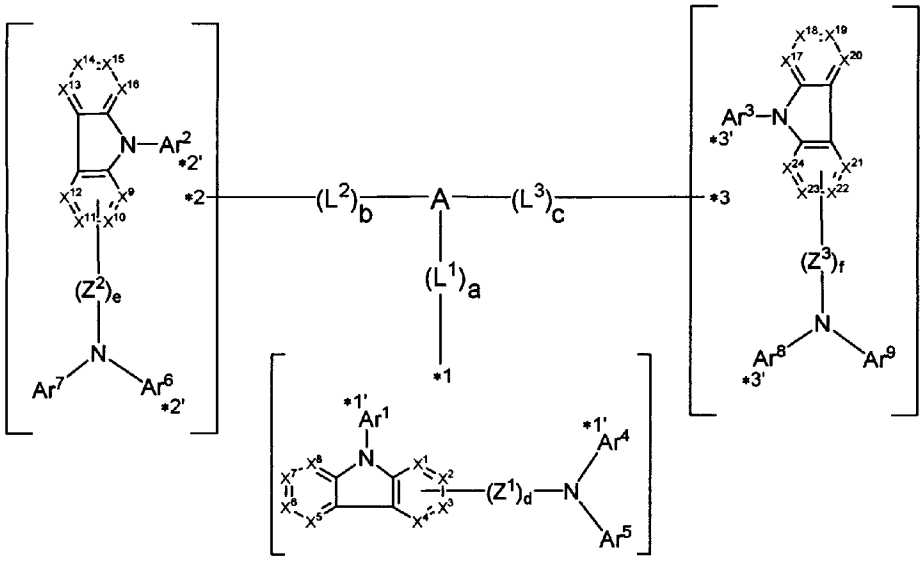
（一般式（１ｃ－ｉｖ［II］）中、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｃ、ｐ～ｒ、Ｘ[1]～Ｘ[36]、及びＹ[1]～Ｙ[3]は、請求項４の記載と同じである。

Ｒ[101]、Ｒ[102]、及びＲ[105]～Ｒ[108]のうちの１～３つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子が＊[p]～＊[r]のいずれかと結合し、それ以外は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。なお、Ｒ[102]及びＲ[105]～Ｒ[108]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43] 前記Ｙ[1]～Ｙ[3]が、いずれも、酸素原子又は硫黄原子である、請求項４及び２９～４２のいずれか１項に記載の化合物。

[請求項44] 下記一般式（１ａ［III］）で表される、請求項５に記載の化合物。

[化55]

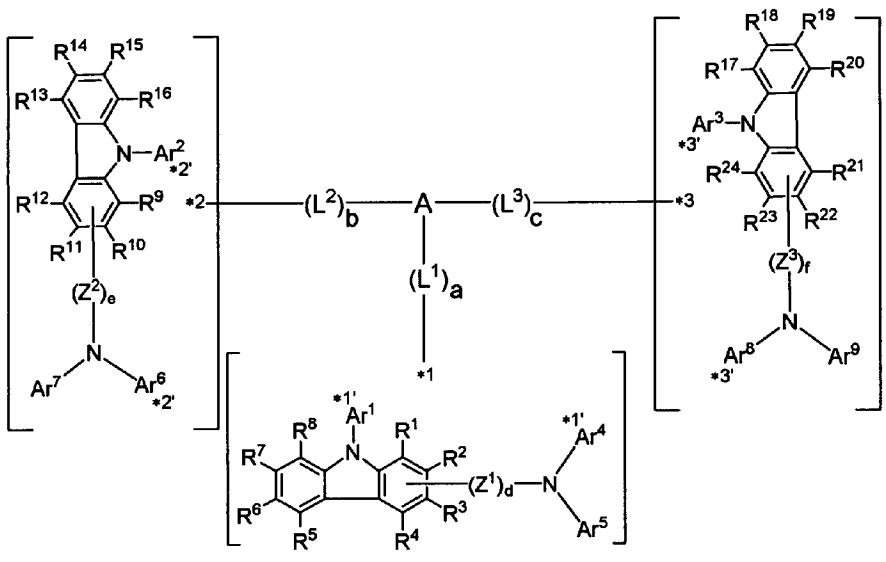


(1a[III])

（一般式（１ａ［III］）中、Ａ、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}、ａ～ｆ、Ｘ^{1}～Ｘ^{24}、Ａｒ^{1}～Ａｒ^{9}、Ｚ^{1}～Ｚ^{3}、＊１～＊３、＊１’～＊３’は、請求項５の記載と同じである。）

[請求項45] 下記一般式（１ａ’［III］）で表される、請求項４４に記載の化合物。

[化56]

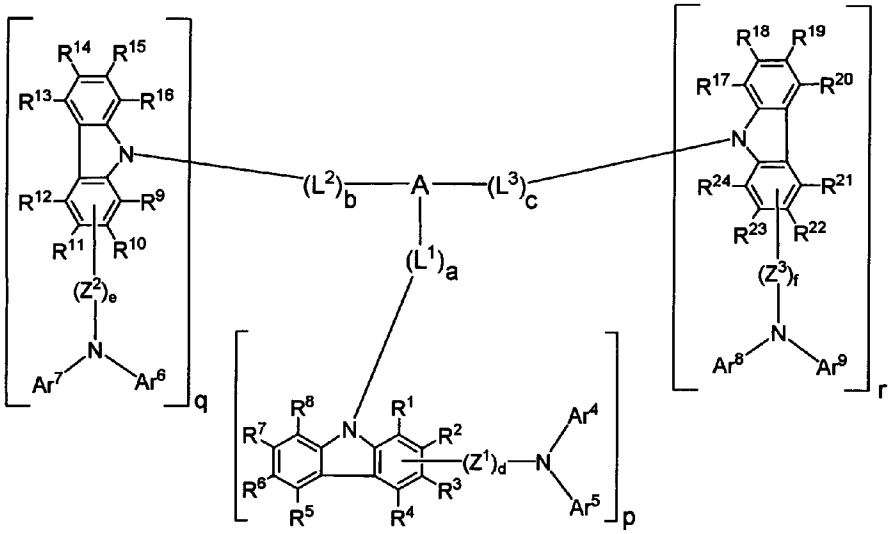


(1a'[III])

（一般式（１ａ’［III］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｆ、Ｒ[1]～Ｒ[24]、Ａｒ[1]～Ａｒ[9]、Ｚ[1]～Ｚ[3]、＊１～＊３、＊１’～＊３’は、請求項５の記載と同じである。）

[請求項46] 下記一般式（２’［III］）又は（３’［III］）で表される、請求項５に記載の化合物。

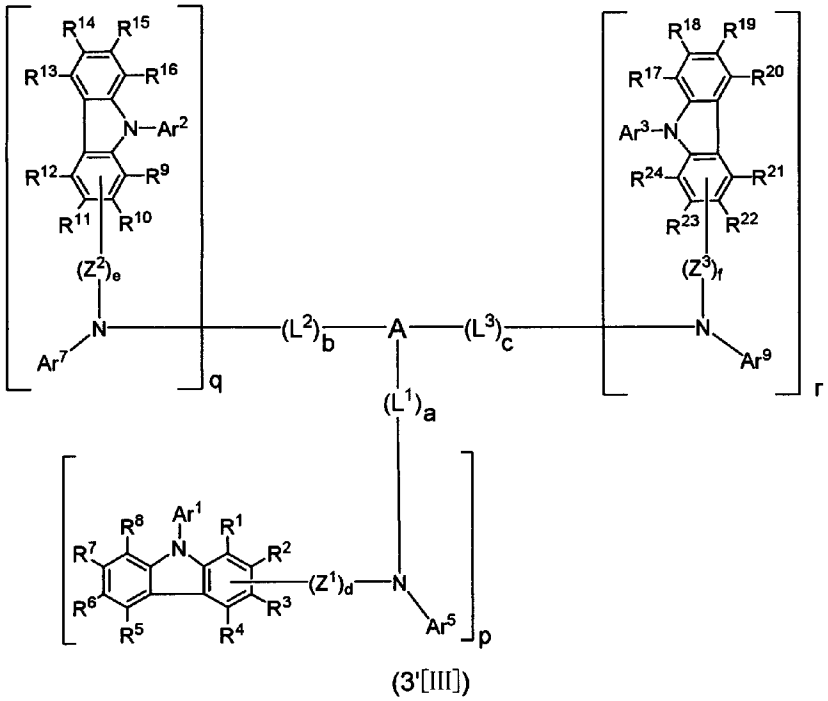
[化57]



(2'[III])

（一般式（２’［III］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｆ、ｐ～ｒ、Ｒ[1]～Ｒ[24]、Ａｒ[4]～Ａｒ[9]、Ｚ[1]～Ｚ[3]は、請求項５の記載と同じである。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［ ］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。）

[化58]

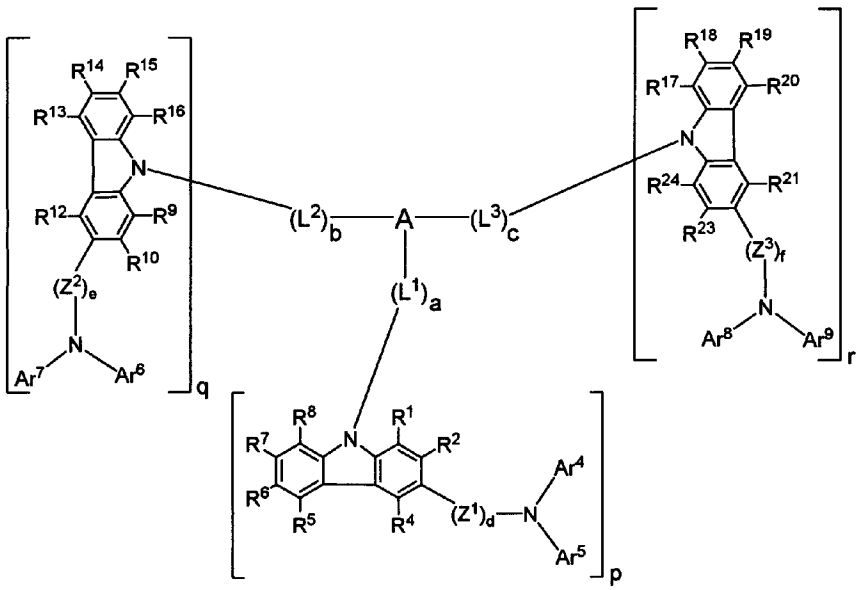


(3'[III])

（一般式（３’［III］）中、Ａ、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}、ａ～ｆ、ｐ～ｒ、Ｒ^{1}～Ｒ^{24}、Ａｒ^{1}～Ａｒ^{3}、Ａｒ^{5}、Ａｒ^{7}、Ａｒ^{9}、Ｚ^{1}～Ｚ^{3}は、請求項５の記載と同じである。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。）

[請求項47] 下記一般式（２－１［III］）で表される、請求項４６に記載の化合物。

[化59]

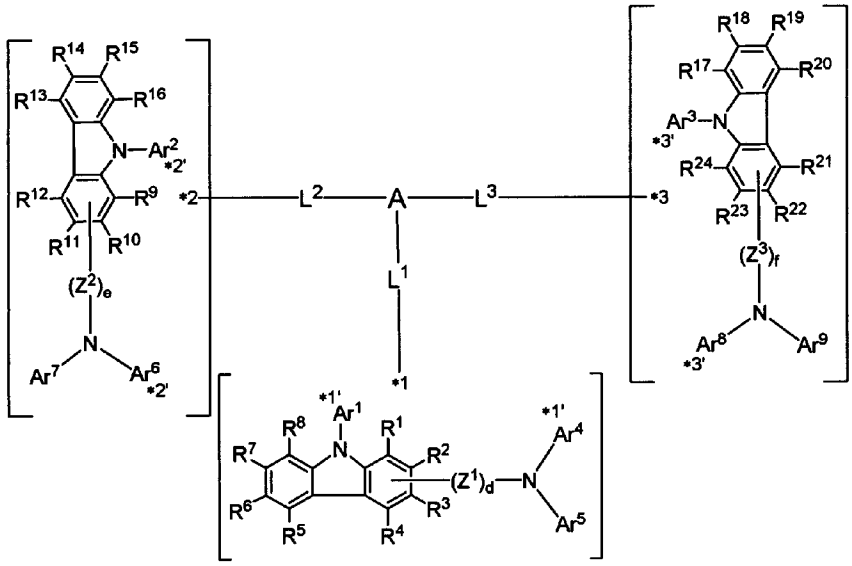


(2-1[III])

（一般式（２－１［III］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｆ、ｐ～ｒ、Ｒ[1]、Ｒ[2]、Ｒ[4]～Ｒ[10]、Ｒ[12]～Ｒ[21]、Ｒ[23]、Ｒ[24]、Ａｒ[4]～Ａｒ[9]、Ｚ[1]～Ｚ[3]は、請求項５の記載と同じである。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。）

[請求項48] 下記一般式（１ａ’－ｉ［III］）で表される、請求項５に記載の化合物。

[化60]

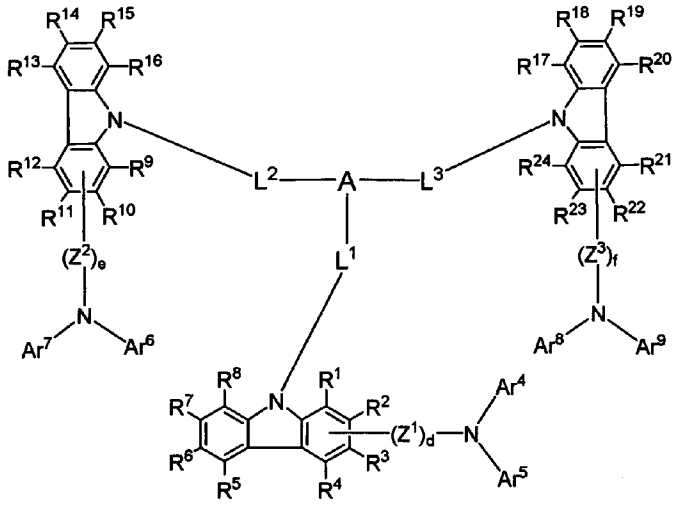


(1a'-i[III])

（一般式（１ａ’－ｉ［III］）中、Ａ、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}、ｄ～ｆ、Ｒ^{1}～Ｒ^{24}、Ａｒ^{1}～Ａｒ^{9}、Ｚ^{1}～Ｚ^{3}、＊１～＊３、＊１’～＊３’は、請求項５の記載と同じである。）

[請求項49] 下記一般式（２ａ’－ｉ［III］）又は（３ａ’－ｉ［III］）で表される、請求項４８に記載の化合物。

[化61]

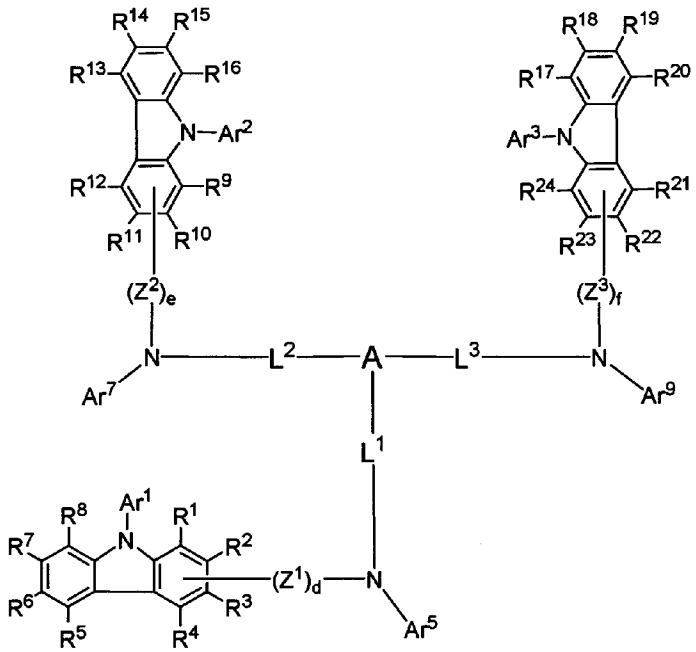


(2a'-i[III])

（一般式（２ａ’－ｉ［III］）中、Ａ、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}、ｄ～ｆ、Ｒ^{1}～

Ｒ^{24}、Ａｒ^{4}～Ａｒ^{9}、Ｚ^{1}～Ｚ^{3}は、請求項５の記載と同じである。）

[化62]

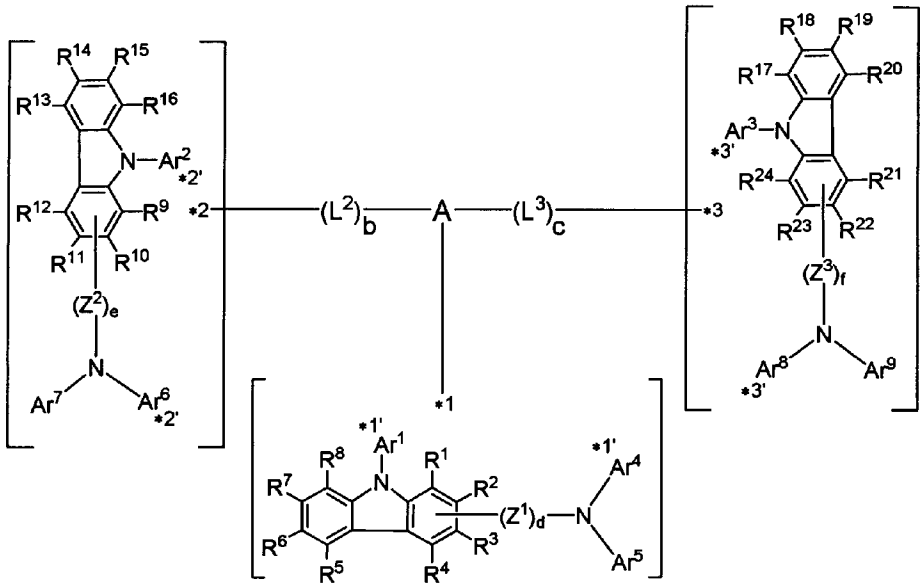


(3a'-i[III])

（一般式（３ａ’－ｉ［III］）中、Ａ、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}、ｄ～ｆ、Ｒ^{1}～Ｒ^{24}、Ａｒ^{1}～Ａｒ^{3}、Ａｒ^{5}、Ａｒ^{7}、Ａｒ^{9}、Ｚ^{1}～Ｚ^{3}は、請求項５の記載と同じである。）

[請求項50] 下記一般式（１ａ’－ｉｉ［III］）で表される、請求項５に記載の化合物。

[化63]

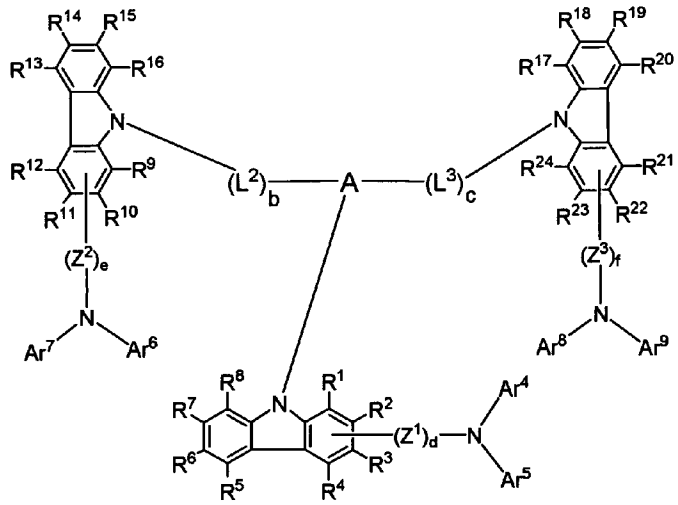


(1a'-ii[III])

（一般式（１ａ’－ｉｉ［III］）中、Ａ、Ｌ[2]、Ｌ[3]、ｂ～ｆ、Ｒ[1]～Ｒ[24]、Ａｒ[1]～Ａｒ[9]、Ｚ[1]～Ｚ[3]、＊１～＊３、＊１’～＊３’は、請求項５の記載と同じである。）

[請求項51] 下記一般式（２ａ’－ｉｉ［III］）又は（３ａ’－ｉｉ［III］）で表される、請求項５０に記載の化合物。

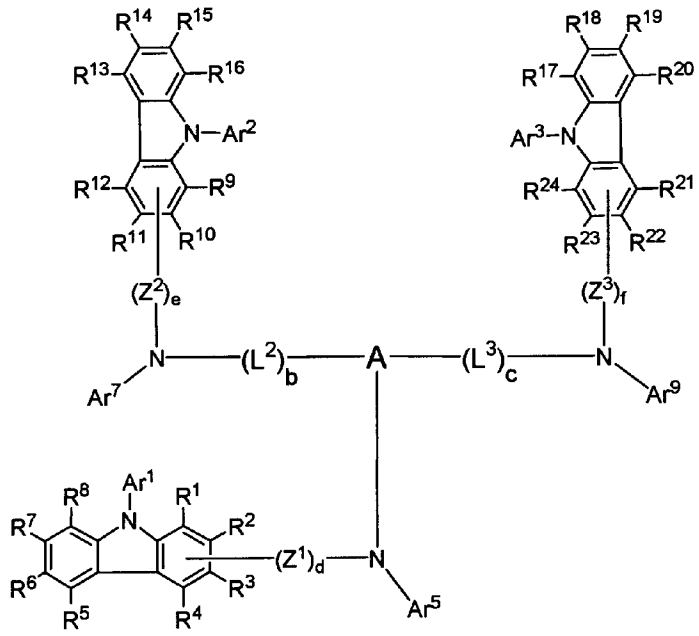
[化64]



(2a'-ii[III])

（一般式（２ａ’－ｉｉ［III］）中、Ａ、Ｌ^{2}、Ｌ^{3}、ｂ～ｆ、Ｒ^{1}～Ｒ^{24}、Ａｒ^{4}～Ａｒ^{9}、Ｚ^{1}～Ｚ^{3}は、請求項５の記載と同じである。）

[化65]

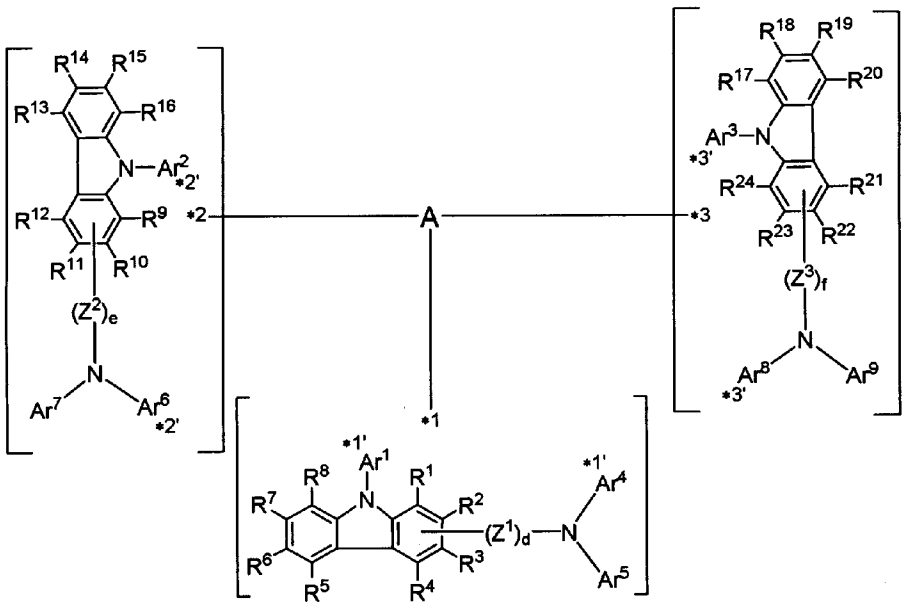


(3a'-ii[III])

（一般式（３ａ’－ｉｉ［III］）中、Ａ、Ｌ^{2}、Ｌ^{3}、ｂ～ｆ、Ｒ^{1}～Ｒ^{24}、Ａｒ^{1}～Ａｒ^{3}、Ａｒ^{5}、Ａｒ^{7}、Ａｒ^{9}、Ｚ^{1}～Ｚ^{3}は、請求項５の記載と同じである。）

[請求項52] 下記一般式（１ａ’－ｉｉｉ［III］）で表される、請求項５に記載の化合物。

[化66]

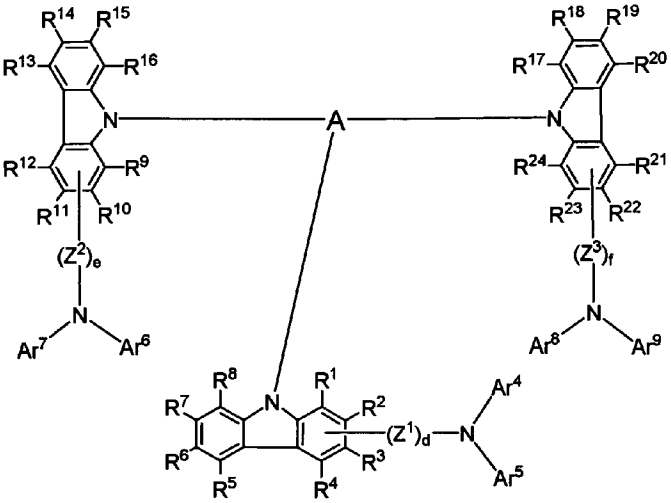


(1a'-iii[III])

（一般式（１ａ’－ｉｉｉ［III］）中、Ａ、ｄ～ｆ、Ｒ[1]～Ｒ[24]、Ａｒ[1]～Ａｒ[9]、Ｚ[1]～Ｚ[3]、＊１～＊３、＊１’～＊３’は、請求項５の記載と同じである。）

[請求項53] 下記一般式（２ａ’－ｉｉｉ［III］）又は（３ａ’－ｉｉｉ［III］）で表される、請求項５２に記載の化合物。

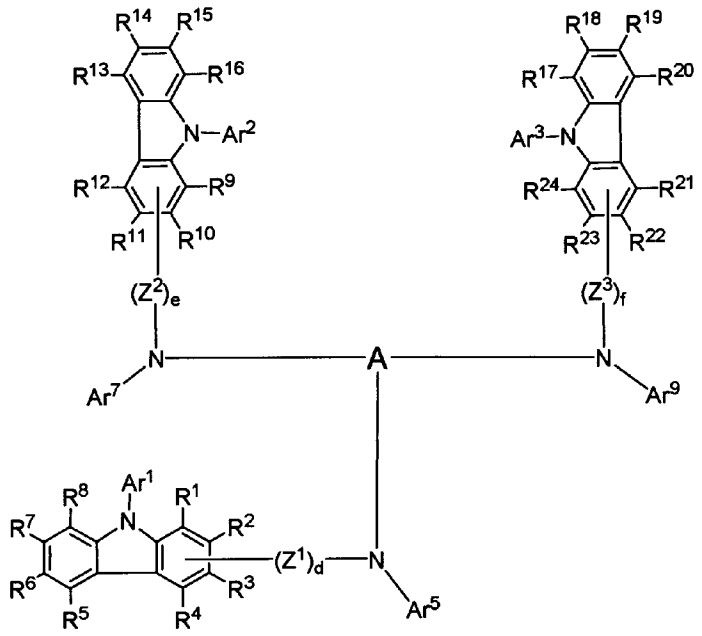
[化67]



(2a'-iii[III])

（一般式（２ａ’－ｉｉｉ［III］）中、Ａ、ｄ～ｆ、Ｒ[1]～Ｒ[24]、Ａｒ[4]～Ａｒ[9]、Ｚ[1]～Ｚ[3]は、請求項５の記載と同じである。）

[化68]

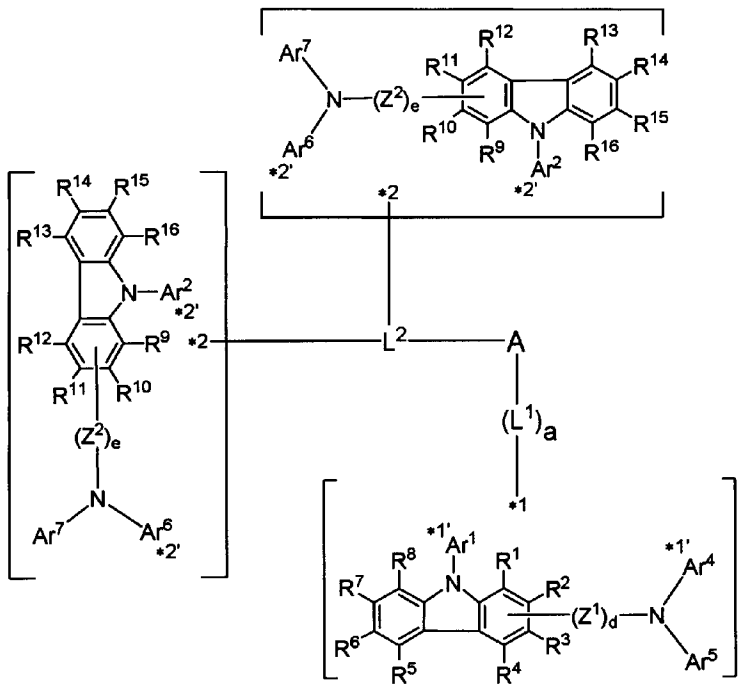


(3a'-iii[III])

（一般式（３ａ’－ｉｉｉ［III］）中、Ａ、ｄ～ｆ、Ｒ[1]～Ｒ[24]、Ａｒ[1]～Ａｒ[3]、Ａｒ[5]、Ａｒ[7]、Ａｒ[9]、Ｚ[1]～Ｚ[3]は、請求項５の記載と同じである。）

[請求項54] 下記一般式（１ａ’－ｉｖ［III］）で表される、請求項５に記載の化合物。

[化69]

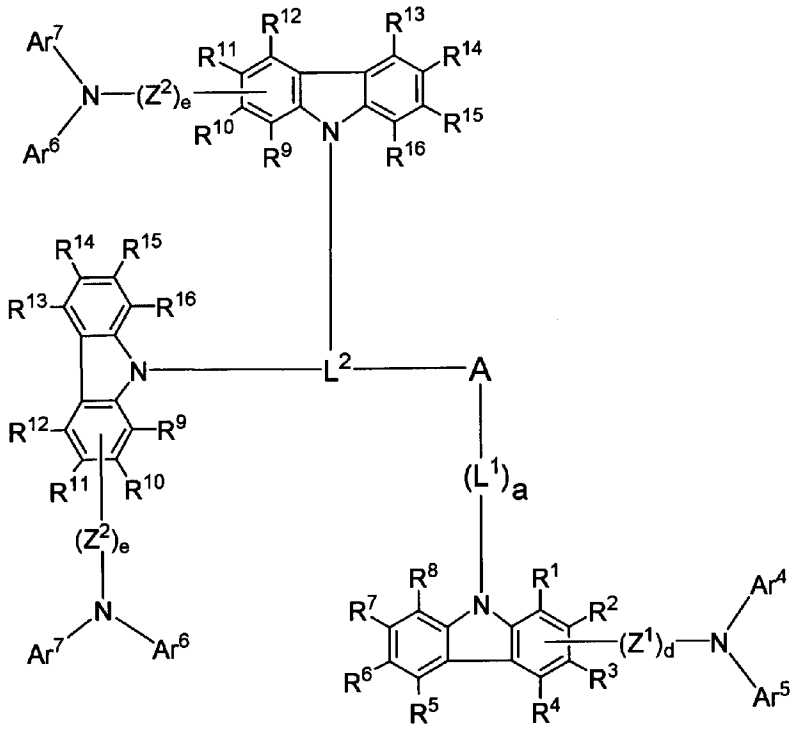


(1a'-iv[III])

（一般式（１ａ’－ｉｖ［III］）中、Ａ、Ｌ[1]、Ｌ[2]、ａ、ｄ、ｅ、Ｒ[1]～Ｒ[16]、Ａｒ[1]、Ａｒ[2]、Ａｒ[4]～Ａｒ[7]、Ｚ[1]、Ｚ[2]、＊１、＊２、＊１’、＊２’は、請求項５の記載と同じである。一般式（１ａ’－ｉｖ）中の各基において、同一の記号は、それぞれ同じであってもよいし、異なっていてもよい。）

[請求項55] 下記一般式（２ａ’－ｉｖ［III］）又は（３ａ’－ｉｖ［III］）で表される、請求項５４に記載の化合物。

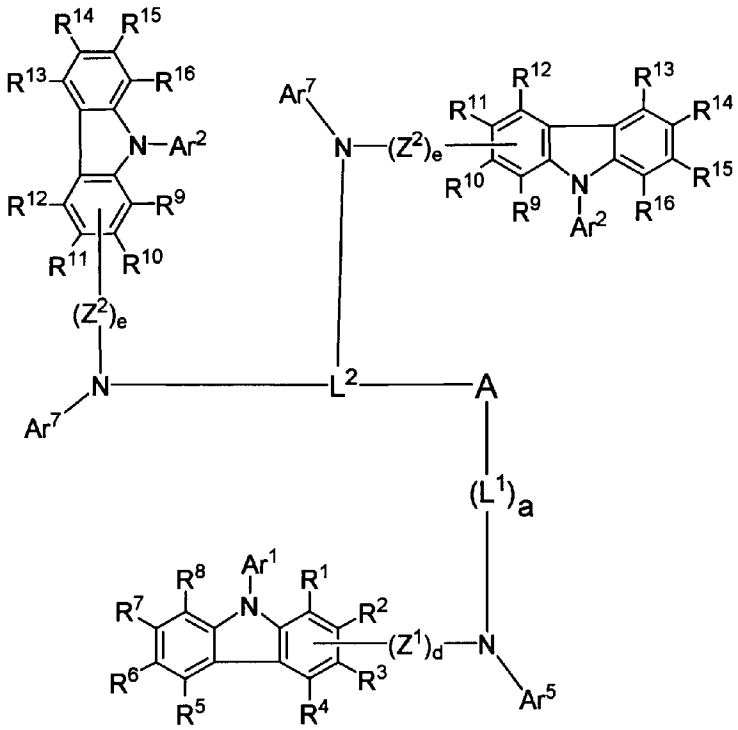
[化70]



(2a'-iv[III])

（一般式（２ａ’－ｉｖ［III］）中、Ａ、Ｌ[1]、Ｌ[2]、ａ、ｄ、ｅ、Ｒ[1]～Ｒ[16]、Ａｒ[4]～Ａｒ[7]、Ｚ[1]、Ｚ[2]は、請求項５の記載と同じである。一般式（２ａ’－ｉｖ［III］）中の各基において、同一の記号は、それぞれ同じであってもよいし、異なっていてもよい。）

[化71]



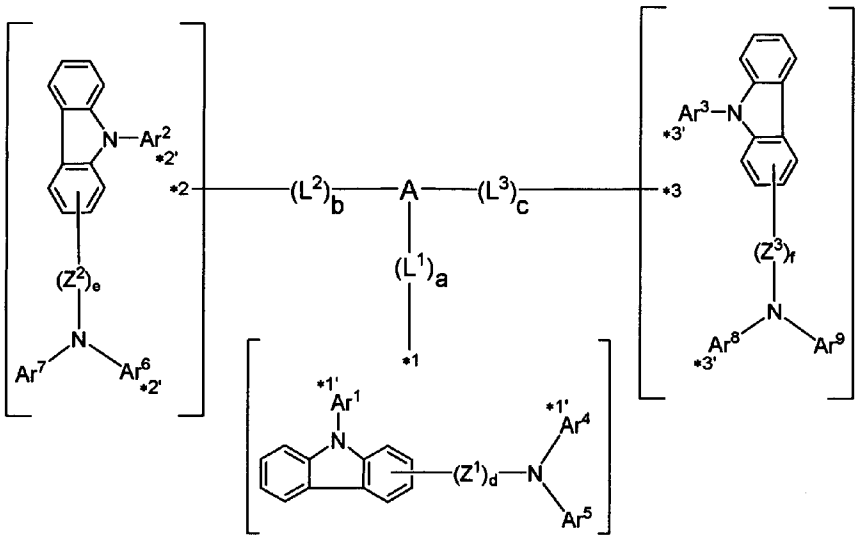
(3a'-iv[III])

（一般式（３ａ’－ｉｖ［III］）中、Ａ、Ｌ[1]、Ｌ[2]、ａ、ｄ、ｅ、Ｒ[1]～Ｒ[16]、Ａｒ[1]、Ａｒ[2]、Ａｒ[5]、Ａｒ[7]、Ｚ[1]、Ｚ[2]は、請求項５の記載と同じである。一般式（３ａ’－ｉｖ［III］）中の各基において、同一の記号は、それぞれ同じであってもよいし、異なっていてもよい。）

[請求項56] Ｒ[1]～Ｒ[24]から選ばれる２つが互いに結合して環を形成していることがない、請求項５及び４４～５５のいずれか１項に記載の化合物。

[請求項57] 下記一般式（１ａ’－Ｈ［III］）で表される、請求項４５に記載の化合物。

[化72]

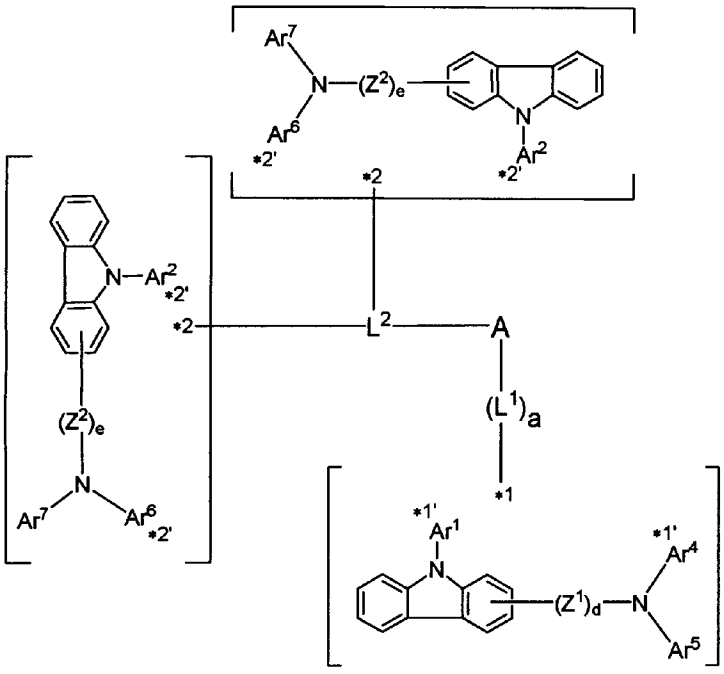


(1a'-H[III])

（一般式（１ａ’－Ｈ［III］）中、Ａ、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｆ、Ａｒ[1]～Ａｒ[9]、Ｚ[1]～Ｚ[3]、＊１～＊３、＊１’～＊３’は、請求項５の記載と同じである。）

[請求項58] 下記一般式（１ａ’－ｉｖ－Ｈ［III］）で表される、請求項５４に記載の化合物。

[化73]

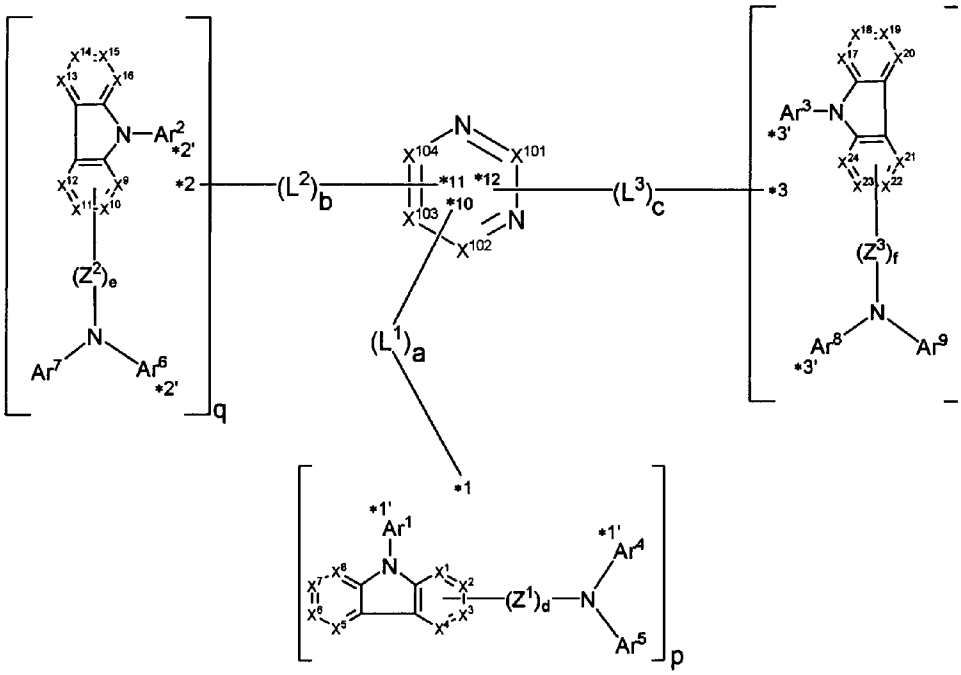


(1a'-iv-H[III])

（一般式（１ａ’－ｉｖ－Ｈ［III］）中、Ａ、Ｌ[1]、Ｌ[2]、ａ、ｄ、ｅ、Ａｒ[1]、Ａｒ[2]、Ａｒ[4]～Ａｒ[7]、Ｚ[1]、Ｚ[2]、＊１、＊２、＊１’、＊２’は、請求項５の記載と同じである。一般式（１ａ’－ｉｖ－Ｈ［III］）中の各基において、同一の記号は、それぞれ同じであってもよいし、異なっていてもよい。）

[請求項59] 下記一般式（１ｂ－ｉ［III］）で表される、請求項５に記載の化合物。

[化74]



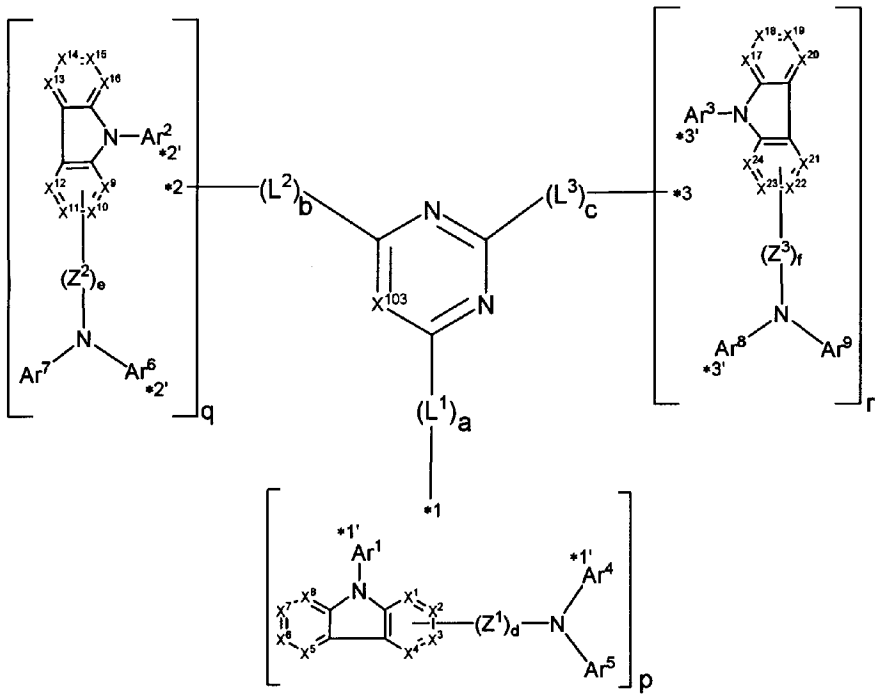
(1b-i[III])

（一般式（１ｂ－ｉ［III］）中、Ｌ[1]～Ｌ[3]、ａ～ｆ、ｐ～ｒ、Ｘ[1]～Ｘ[24]、Ａｒ[1]～Ａｒ[3]、Ａｒ[4]～Ａｒ[9]、＊１～＊３、＊１’～＊３’は、請求項５の記載と同じである。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。

Ｘ[101]～Ｘ[104]は、それぞれ＊１０～＊１２のいずれかと結合する炭素原子、Ｃ（Ｒｘ）、又は窒素原子である。該Ｒｘは水素原子又は置換基であって、複数存在するＲｘは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲｘ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60] 下記一般式（１ｂ－ｉｉ［III］）で表される、請求項５に記載の化合物。

[化75]



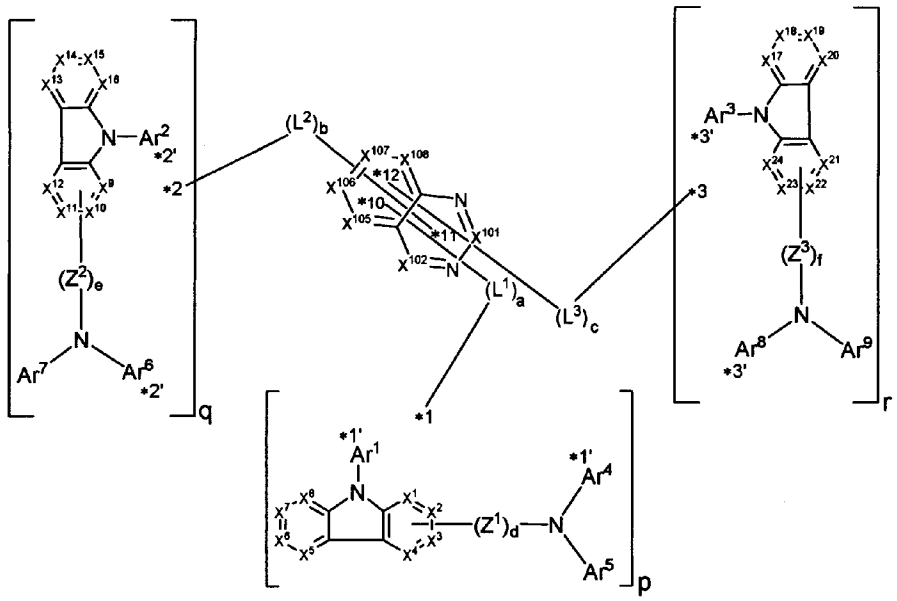
(1b-ii[III])

（一般式（１ｂ－ｉｉ［III］）中、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}、ａ～ｆ、ｐ～ｒ、Ｘ^{1}～Ｘ^{24}、Ａｒ^{1}～Ａｒ^{3}、Ａｒ^{4}～Ａｒ^{9}、＊１～＊３、＊１’～＊３’は、請求項５の記載と同じである。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。

Ｘ^{103}は、Ｃ（Ｒｘ）又は窒素原子であり、Ｒｘは水素原子又は置換基である。）

[請求項61] 下記一般式（１ｂ－ｉｉｉ［III］）で表される、請求項５に記載の化合物。

[化76]



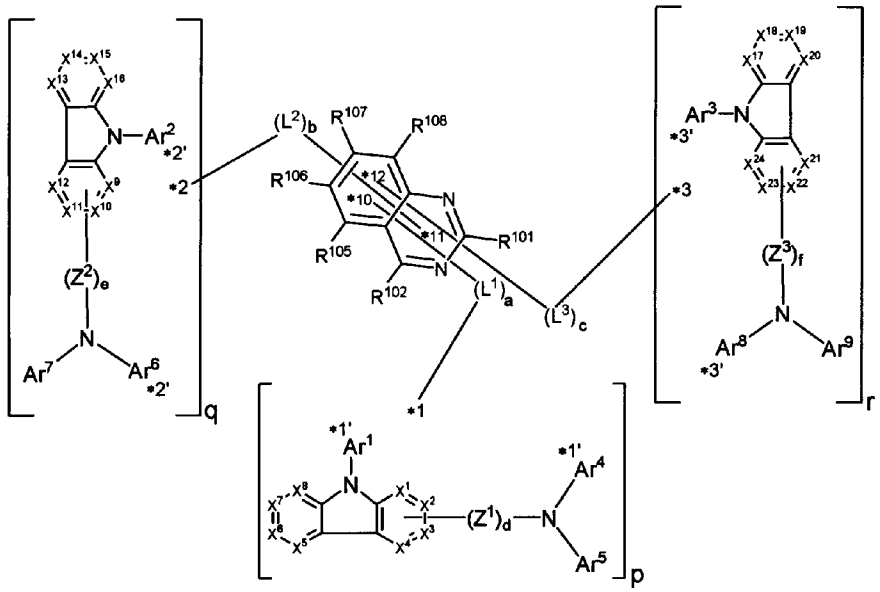
(1b-iii[III])

（一般式（１ｂ－ｉｉｉ［III］）中、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}、ａ～ｆ、ｐ～ｒ、Ｘ^{1}～Ｘ^{24}、Ａｒ^{1}～Ａｒ^{3}、Ａｒ^{4}～Ａｒ^{9}、＊１～＊３、＊１’～＊３’は、請求項５の記載と同じである。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。

Ｘ^{101}、Ｘ^{102}、Ｘ^{105}～Ｘ^{108}は、それぞれ＊１０～＊１２のいずれかと結合する炭素原子、Ｃ（Ｒｘ）、又は窒素原子である。該Ｒｘは水素原子又は置換基であって、複数存在するＲｘは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲｘ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62]　下記一般式（１ｂ－ｉｖ［III］）で表される、請求項５に記載の化合物。

[化77]



(1b-iv[III])

（一般式（１ｂ－ｉｖ［III］）中、Ｌ^{1}～Ｌ^{3}、ａ～ｆ、ｐ～ｒ、Ｘ^{1}～Ｘ^{24}、Ａｒ^{1}～Ａｒ^{3}、Ａｒ^{4}～Ａｒ^{9}、＊１～＊３、＊１’～＊３’は、請求項５の記載と同じである。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。

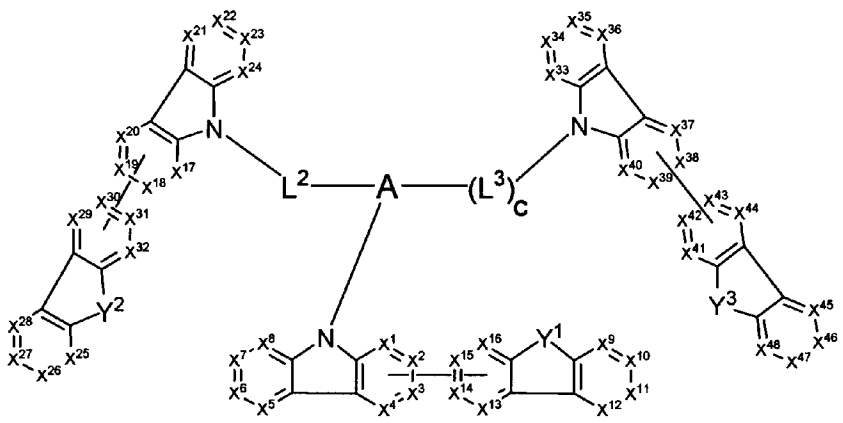
Ｒ^{101}、Ｒ^{102}及びＲ^{105}～Ｒ^{108}のうちの１～３つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子が＊１０～＊１２のいずれかと結合し、それ以外は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。なお、Ｒ^{102}及びＲ^{105}～Ｒ^{108}から選ばれる２つは、互いに結合して、環を形成していてもよい。）

[請求項63] Ａｒ^{4}～Ａｒ^{9}がいずれも、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０のアリール基である、請求項５及び４４～６２のいずれかに記載の化合物。

[請求項64] Ａｒ^{4}～Ａｒ^{9}がいずれも、置換もしくは無置換の環形成炭素数１０～３０の縮合環基である、請求項５及び４４～６２のいずれかに記載の化合物。

[請求項65] 下記一般式（１ａ－ｉｉ－１［IV］）で表される、請求項６に記載の化合物。

[化78]

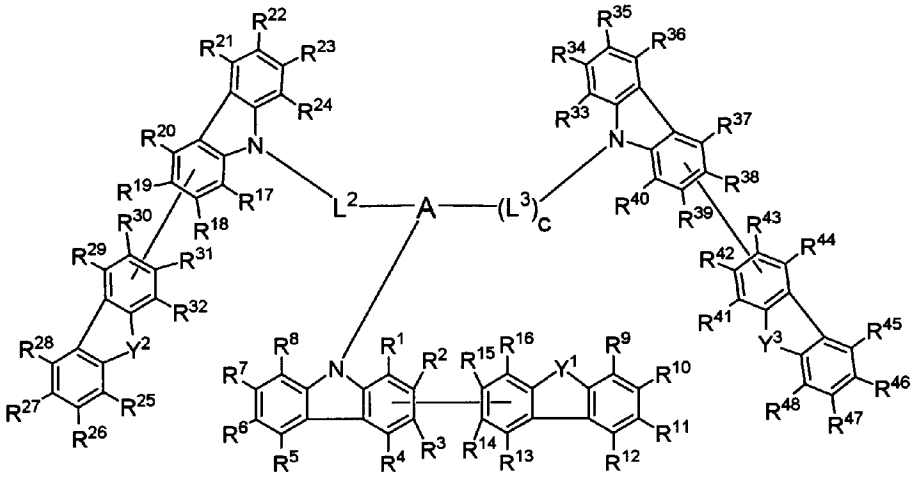


(1a-ii-1[IV])

（一般式（１ａ－ｉｉ－１［IV］）中、Ａ、Ｌ^{2}、Ｌ^{3}、ｃ、Ｘ^{1}～Ｘ^{48}、及びＹ^{1}～Ｙ^{3}は、請求項６の記載と同じである。）

[請求項66] 下記一般式（１ａ’－ｉｉ－１［IV］）で表される、請求項６に記載の化合物。

[化79]



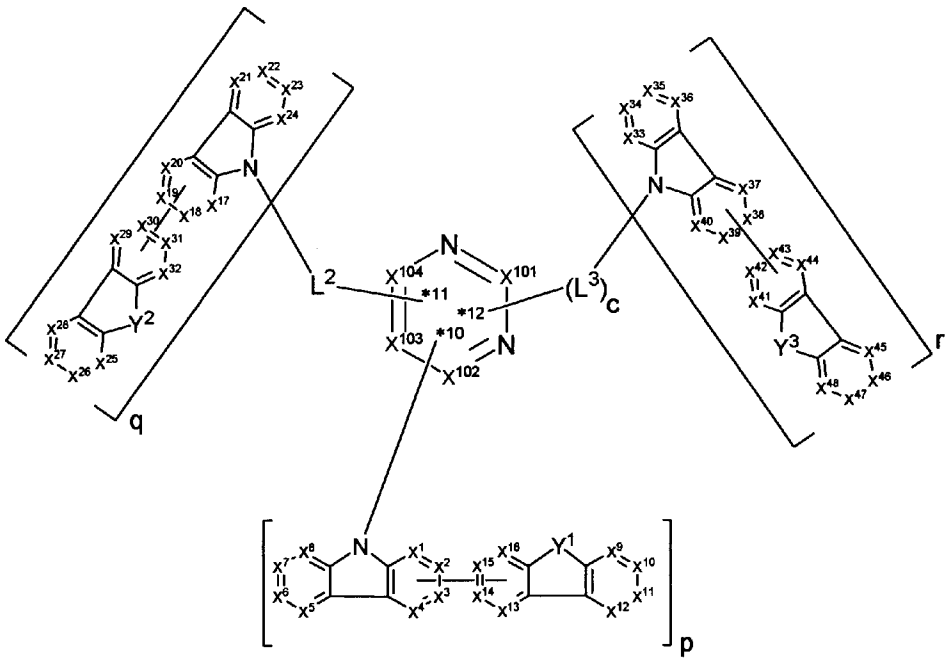
(1a'-ii-1[IV])

（一般式（１ａ’－ｉｉ－１［IV］）中、Ａ、Ｌ^{2}、Ｌ^{3}、ｃ、Ｒ^{1}～Ｒ

^{48}、及びＹ^{1}～Ｙ^{3}は、請求項６の記載と同じである。）

[請求項67] 下記一般式（１ｂ－ｉ－１［IV］）で表される、請求項６に記載の化合物。

[化80]



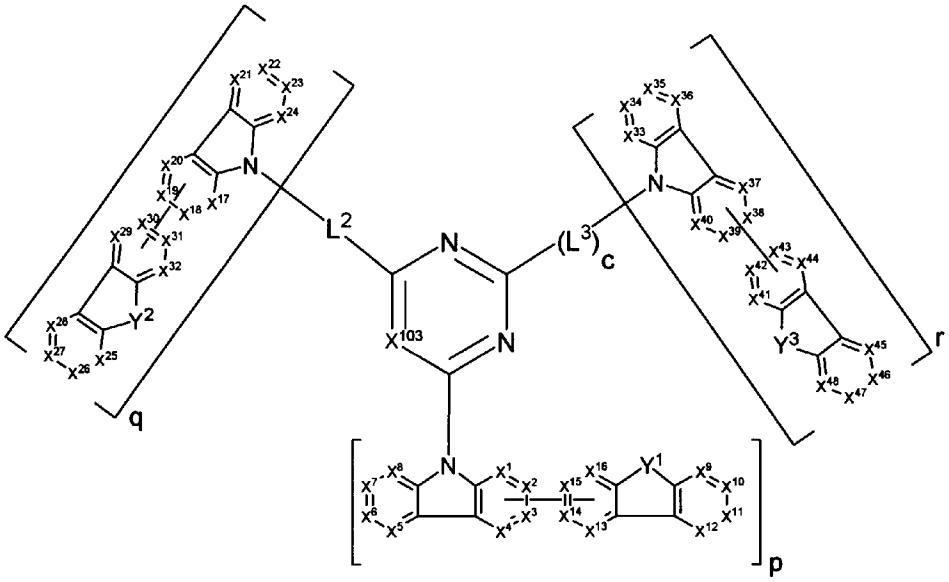
(1b-i-1[IV])

（一般式（１ｂ－ｉ－１［IV］）中、Ｌ^{2}、Ｌ^{3}、ｃ、ｐ～ｒ、Ｘ^{1}～Ｘ^{48}、及びＹ^{1}～Ｙ^{3}は、請求項６の記載と同じである。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［ ］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。

Ｘ^{101}～Ｘ^{104}は、それぞれ＊１０～＊１２のいずれかと結合する炭素原子、Ｃ（Ｒｘ）、又は窒素原子である。該Ｒｘは水素原子又は置換基であって、複数存在するＲｘは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲｘ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68] 下記一般式（１ｂ－ｉｉ－１［IV］）で表される、請求項６に記載の化合物。

[化81]



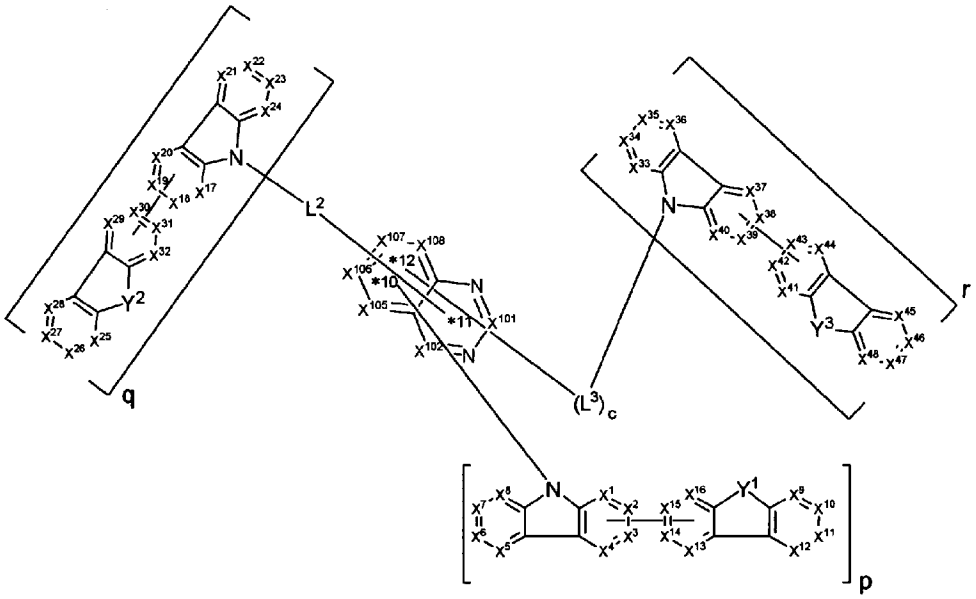
(1b-ii-1[IV])

（一般式（１ｂ－ｉｉ－１［IV］）中、Ｌ^{2}、Ｌ^{3}、ｃ、ｐ～ｒ、Ｘ^{1}～Ｘ^{48}、及びＹ^{1}～Ｙ^{3}は、請求項６の記載と同じである。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。

Ｘ^{103}は、Ｃ（Ｒｘ）又は窒素原子であり、Ｒｘは水素原子又は置換基である。）

[請求項69] 下記一般式（１ｂ－ｉｉｉ－１［IV］）で表される、請求項６に記載の化合物。

[化82]



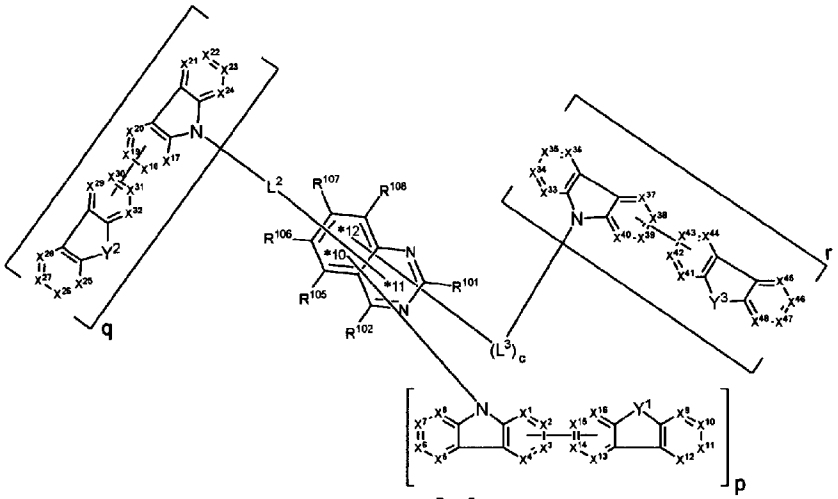
(1b-iii-1[IV])

（一般式（１ｂ－ｉｉｉ－１［IV］）中、Ｌ[2]、Ｌ[3]、ｃ、ｐ～ｒ、Ｘ[1]～Ｘ[48]、及びＹ[1]～Ｙ[3]は、請求項６の記載と同じである。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。

Ｘ[101]、Ｘ[102]、Ｘ[105]～Ｘ[108]は、それぞれ＊１０～＊１２のいずれかと結合する炭素原子、Ｃ（Ｒｘ）、又は窒素原子である。該Ｒｘは水素原子又は置換基であって、複数存在するＲｘは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲｘ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70] 下記一般式（１ｂ－ｉｖ－１［IV］）で表される、請求項６に記載の化合物。

[化83]



(1b-iv-1[IV])

（一般式（１ｂ－ｉｖ－１［IV］）中、Ｌ[2]、Ｌ[3]、ｃ、ｐ～ｒ、Ｘ[1]～Ｘ[48]、及びＹ[1]～Ｙ[3]は、請求項６の記載と同じである。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。

Ｒ[101]、Ｒ[102]、及びＲ[105]～Ｒ[108]のうちの１～３つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子が＊１０～＊１２のいずれかと結合し、それ以外は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。なお、Ｒ[102]及びＲ[105]～Ｒ[108]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71] 前記Ｒ[1]～Ｒ[48]から選ばれる２つが互いに結合して環を形成していることがない、請求項６及び６５～７０のいずれか１項に記載の化合物。

[請求項72] Ｘ[2]～Ｘ[4]のうちのいずれか１つが炭素原子であり、且つＸ[13]～Ｘ[16]のうちのいずれか１つの炭素原子と直接結合しており、Ｘ[18]～Ｘ[20]のうちのいずれか１つが炭素原子であり、且つＸ[29]～Ｘ[32]のうちのいずれか１つの炭素原子と直接結合しており、Ｘ[37]～Ｘ[39]のうちのいずれか１つが炭素原子であり、且つＸ[41]～Ｘ[44]のうちのいずれか

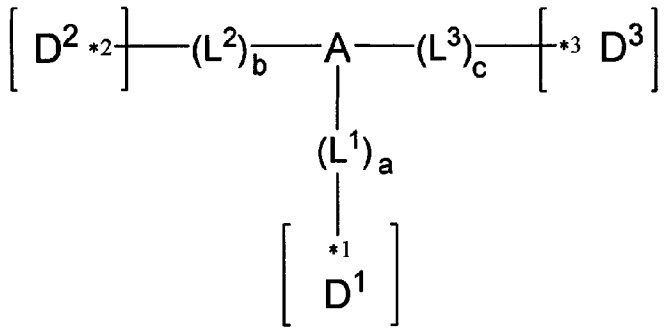
１つの炭素原子と直接結合している、請求項６及び６５～７１のいずれか１項に記載の化合物。

[請求項73] Ｘ^{2}～Ｘ^{3}のうちのいずれか１つが炭素原子であり、且つＸ^{13}～Ｘ^{16}のうちのいずれか１つの炭素原子と直接結合しており、Ｘ^{18}～Ｘ^{19}のうちのいずれか１つが炭素原子であり、且つＸ^{29}～Ｘ^{32}のうちのいずれか１つの炭素原子と直接結合しており、Ｘ^{38}～Ｘ^{39}のうちのいずれか１つが炭素原子であり、且つＸ^{41}～Ｘ^{44}のうちのいずれか１つの炭素原子と直接結合している、請求項６及び６５～７１のいずれか１項に記載の化合物。

[請求項74] Ｙ^{1}～Ｙ^{3}がいずれも酸素原子又は硫黄原子である、請求項６及び６５～７３のいずれか１項に記載の化合物。

[請求項75] 下記一般式（１ａ［Ｖ］）で表される、請求項７に記載の化合物。

[化84]

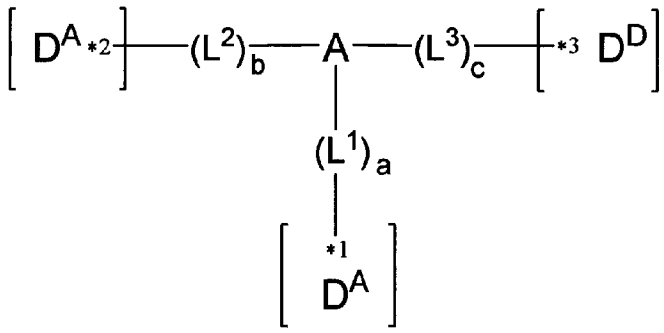


(1a[V])

（一般式（１ａ［Ｖ］）中、各記号の定義は、請求項２及び７中の記載と同じである。）

[請求項76] 下記一般式（１ａ－１［Ｖ］）で表される、請求項７に記載の化合物。

[化85]

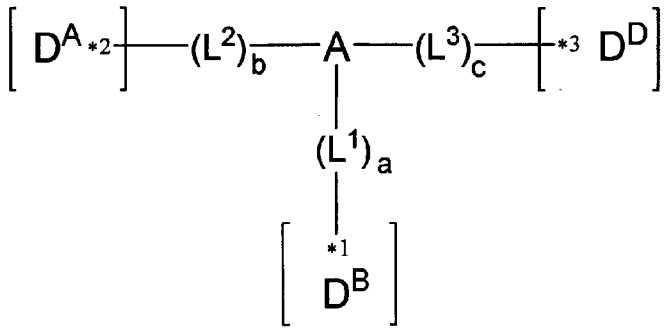


(1a-1[V])

（一般式（１ａ－１［Ｖ］）中、D^Aは、請求項２記載のＡ群に属する前記一般式（D^A）で表される基を表し、D^Dは、請求項２記載のＤ群に属する前記一般式（D^D）で表される基を表す。それ以外の各記号の定義は、請求項２の一般式（１）中の記載と同じである。）

[請求項77] 下記一般式（１ａ－２［Ｖ］）で表される、請求項７に記載の化合物。

[化86]



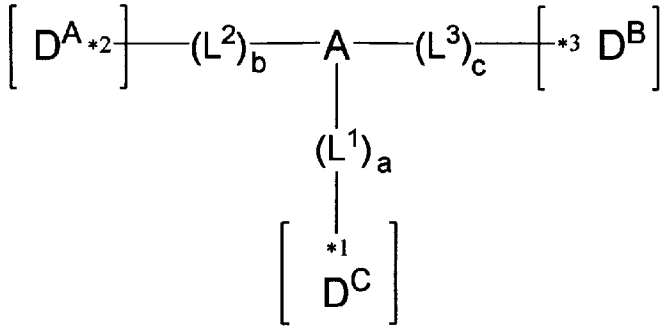
(1a-2[V])

（一般式（１ａ－２［Ｖ］）中、D^Aは、請求項２記載のＡ群に属する前記一般式（D^A）で表される基を表し、D^Bは、請求項２記載のＢ群に属する前記一般式（D^B）で表される基を表し、D^Dは、請求項２記載のＤ群に属する前記一般式（D^D）で表される基を表す。そ

れ以外の各記号の定義は、請求項２の一般式（１）中の記載と同じである。）

[請求項78] 下記一般式（１ａ－３［Ｖ］）で表される、請求項７に記載の化合物。

[化87]

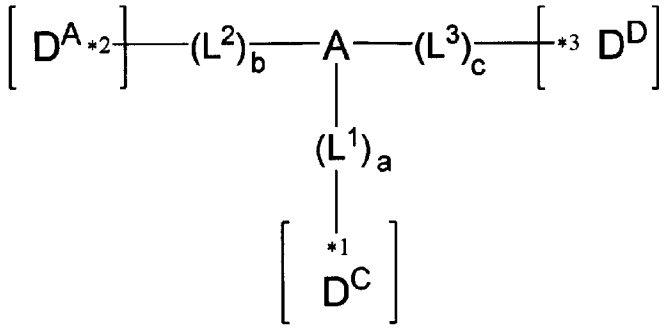


(1a-3[V])

（一般式（１ａ－３［Ｖ］）中、D^Aは、請求項２記載のＡ群に属する前記一般式（D^A）で表される基を表し、D^Bは、請求項２記載のＢ群に属する前記一般式（D^B）で表される基を表し、D^Cは、請求項２記載のＣ群に属する前記一般式（D^C）で表される基を表す。それ以外の各記号の定義は、請求項２の一般式（１）中の記載と同じである。）

[請求項79] 下記一般式（１ａ－４［Ｖ］）で表される、請求項７に記載の化合物。

[化88]

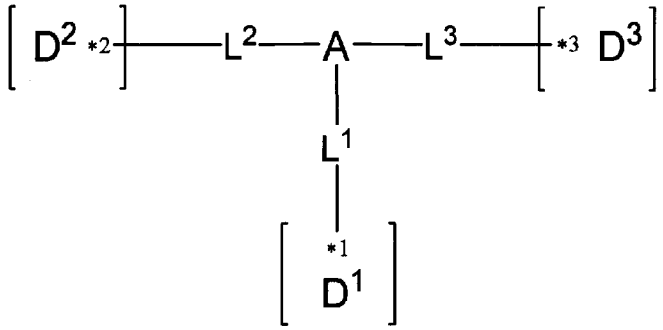


(1a-4[V])

（一般式（１ａ－４［Ｖ］）中、D^Aは、請求項２記載のＡ群に属する前記一般式（D^A）で表される基を表し、D^Cは、請求項２記載のＣ群に属する前記一般式（D^C）で表される基を表し、D^Dは、請求項２記載のＤ群に属する前記一般式（D^D）で表される基を表す。それ以外の各記号の定義は、請求項２の一般式（１）中の記載と同じである。）

[請求項80] 下記一般式（１ａ－ｉ［Ｖ］）で表される、請求項７に記載の化合物。

[化89]

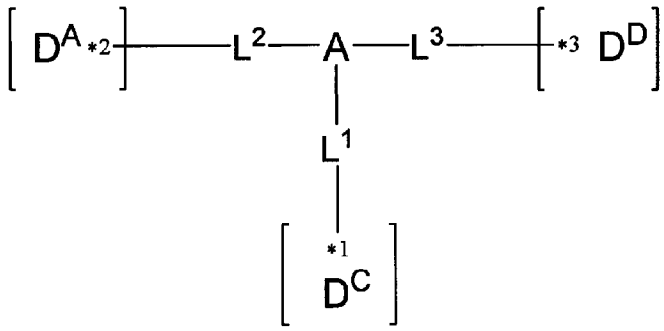


(1a-i[V])

（一般式（１ａ－ｉ［Ｖ］）中、各記号の定義は、請求項２及び７中の記載と同じである。）

[請求項81] 下記一般式（１ａ－４－ｉ［Ｖ］）で表される、請求項８０に記載の化合物。

[化90]

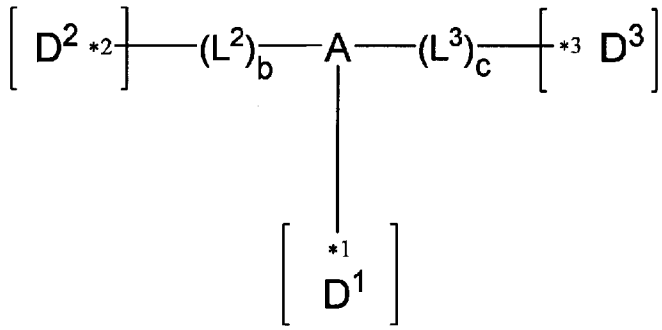


(1a-4-i[V])

（一般式（１ａ－４－ｉ［Ｖ］）中、D^Aは、請求項２記載のＡ群に属する前記一般式（D^A）で表される基を表し、D^Cは、請求項２記載のＣ群に属する前記一般式（D^C）で表される基を表し、D^Dは、請求項２記載のＤ群に属する前記一般式（D^D）で表される基を表す。それ以外の各記号の定義は、請求項２の一般式（１）中の記載と同じである。）

[請求項82] 下記一般式（１ａ－ｉｉ［Ｖ］）で表される、請求項７に記載の化合物。

[化91]

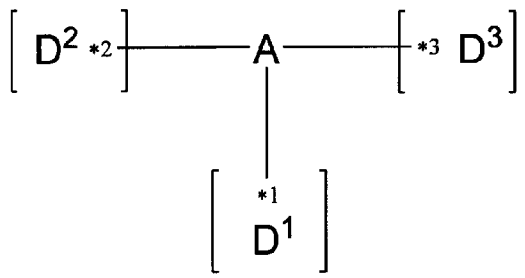


(1a-ii[V])

（一般式（１ａ－ｉｉ［Ｖ］）中、各記号の定義は、請求項２及び７中の記載と同じである。）

[請求項83] 下記一般式（１ａ－ｉｉｉ［Ｖ］）で表される、請求項７に記載の化合物。

[化92]

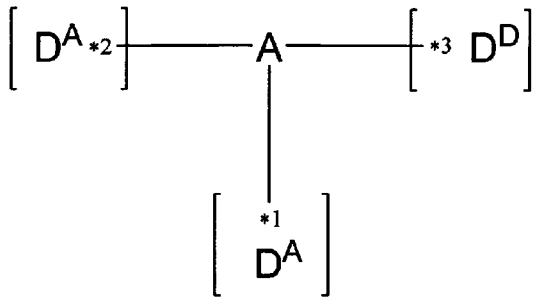


(1a-iii[V])

（一般式（１ａ－ｉｉｉ［Ｖ］）中、各記号の定義は、請求項２及び７中の記載と同じである。）

[請求項84] 下記一般式（１ａ－１－ｉｉｉ［Ｖ］）で表される、請求項８３に記載の化合物。

[化93]



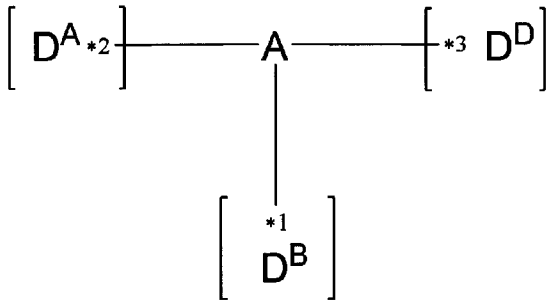
(1a-1-iii[V])

（一般式（１ａ－１－ｉｉｉ［Ｖ］）中、D^Aは、請求項２記載のＡ群に属する前記一般式（D^A）で表される基を表し、D^Dは、請求項２記載のＤ群に属する前記一般式（D^D）で表される基を表す。それ以外

の各記号の定義は、請求項２の一般式（１）中の記載と同じである。）

[請求項85] 下記一般式（１ａ－２－ｉｉｉ［Ｖ］）で表される、請求項８３に記載の化合物。

[化94]

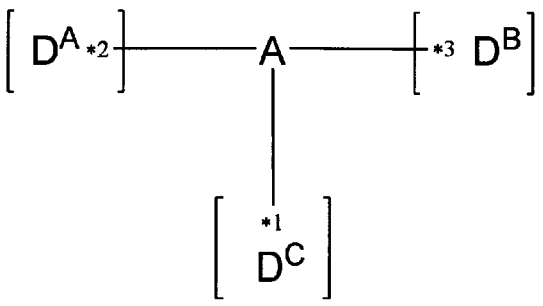


(1a-2-iii[V])

（一般式（１ａ－２－ｉｉｉ［Ｖ］）中、D^Aは、請求項２記載のＡ群に属する前記一般式（D^A）で表される基を表し、D^Bは、請求項２記載のＢ群に属する前記一般式（D^B）で表される基を表し、D^Dは、請求項２記載のＤ群に属する前記一般式（D^D）で表される基を表す。それ以外の各記号の定義は、請求項２の一般式（１）中の記載と同じである。）

[請求項86] 下記一般式（１ａ－３－ｉｉｉ［Ｖ］）で表される、請求項８３に記載の化合物。

[化95]

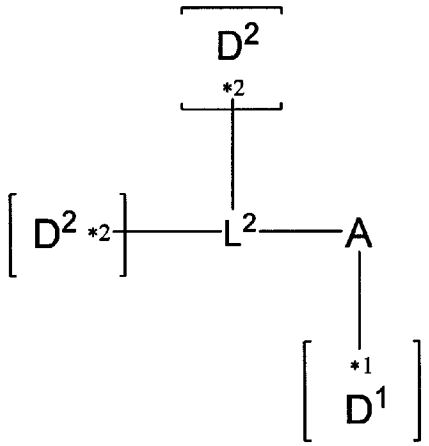


(1a-3-iii[V])

（一般式（１ａ－３－ｉｉｉ［Ｖ］）中、D^Aは、請求項２記載のＡ群に属する前記一般式（D^A）で表される基を表し、D^Bは、請求項２記載のＢ群に属する前記一般式（D^B）で表される基を表し、D^Cは、請求項２記載のＣ群に属する前記一般式（D^C）で表される基を表す。それ以外の各記号の定義は、請求項２の一般式（１）中の記載と同じである。）

[請求項87] 下記一般式（１ａ－ｉｖ［Ｖ］）で表される、請求項７に記載の化合物。

[化96]

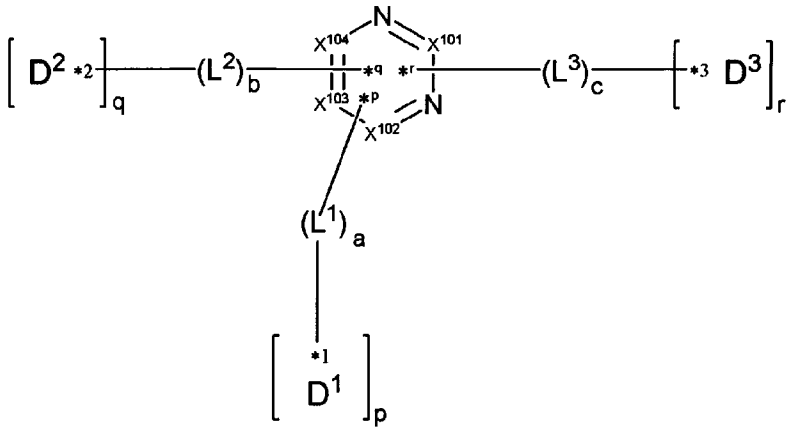


(1a-iv[V])

（一般式（１ａ－ｉｖ［Ｖ］）中、各記号の定義は、それぞれ請求項２及び７の記載と同じである。）

[請求項88] 下記一般式（１ｂ－ｉ［Ｖ］）で表される、請求項７に記載の化合物。

[化97]



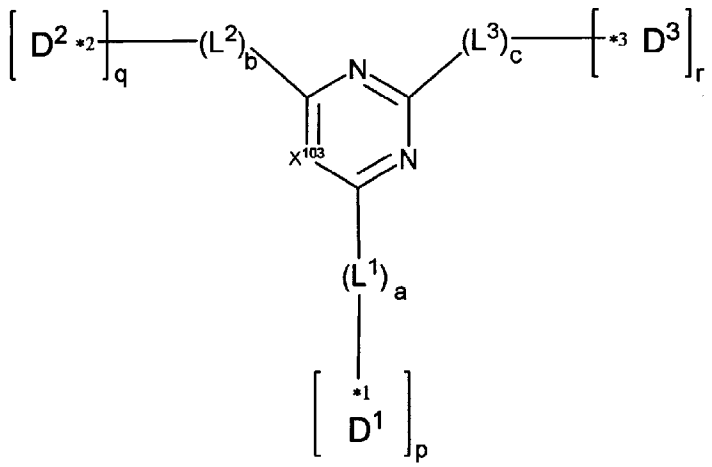
(1b-i[V])

（一般式（１ｂ－ｉ［Ｖ］）中、各記号の定義は、それぞれ請求項２及び７に記載の定義と同じである。

Ｘ^{101}～Ｘ^{104}は、それぞれ＊^{p}～＊^{r}のいずれかと結合する炭素原子、Ｃ（Ｒｘ）、又は窒素原子であり、Ｒｘは水素原子又は置換基であって、複数存在するＲｘは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲｘ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89] 下記一般式（１ｂ－ｉｉ［Ｖ］）で表される、請求項７に記載の化合物。

[化98]

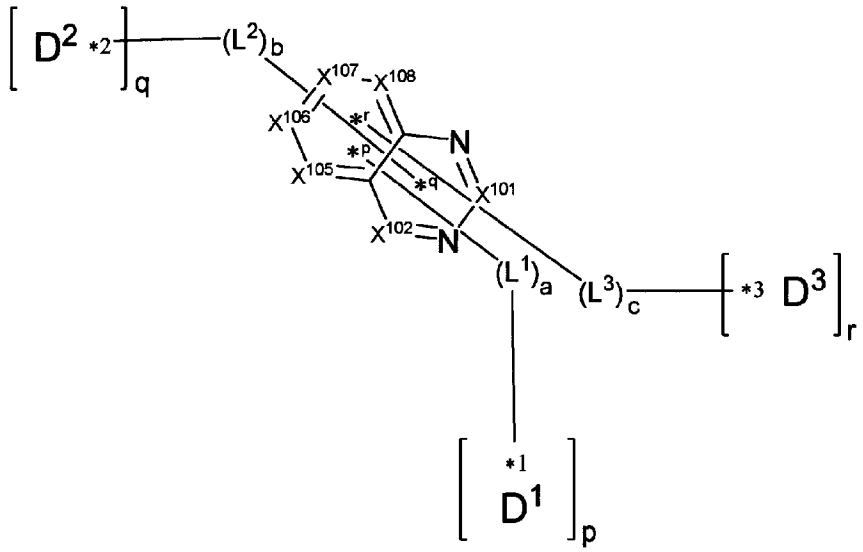


(1b-ii[V])

（一般式（１ｂ－ｉｉ［Ｖ］）中、各記号の定義は、それぞれ請求項２及び７に記載の定義と同じである。Ｘ^{103}は、Ｃ（Ｒｘ）又は窒素原子であり、Ｒｘは水素原子又は置換基である。）

[請求項90] 下記一般式（１ｂ－ｉｉｉ［Ｖ］）で表される、請求項７に記載の化合物。

[化99]



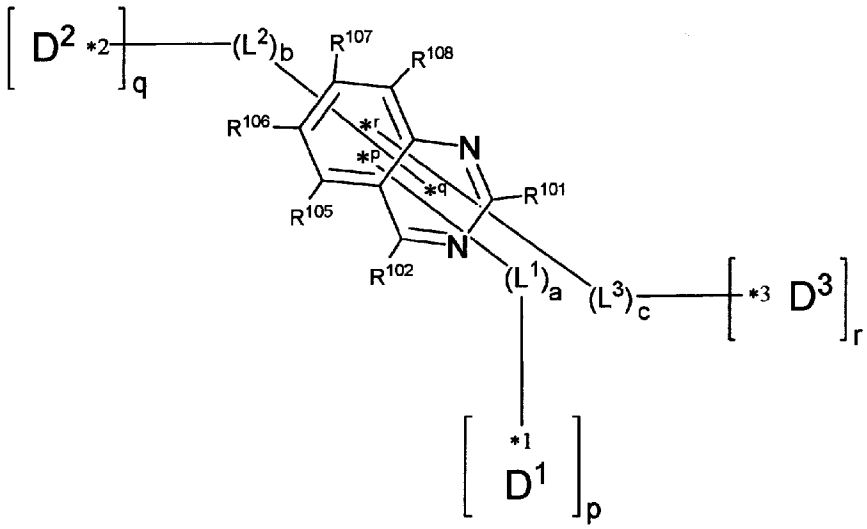
(1b-iii[V])

（一般式（１ｂ－ｉｉｉ［Ｖ］）中、各記号の定義は、それぞれ請求項２及び７に記載の定義と同じである。

Ｘ^{101}、Ｘ^{102}、Ｘ^{105}～Ｘ^{108}は、それぞれ＊^{p}～＊^{r}のいずれかと結合する炭素原子、Ｃ（Ｒｘ）、又は窒素原子であり、Ｒｘは水素原子又は置換基であって、複数存在するＲｘは、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、複数存在するＲｘ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91] 下記一般式（１ｂ－ｉｖ［Ｖ］）で表される、請求項７に記載の化合物。

[化100]



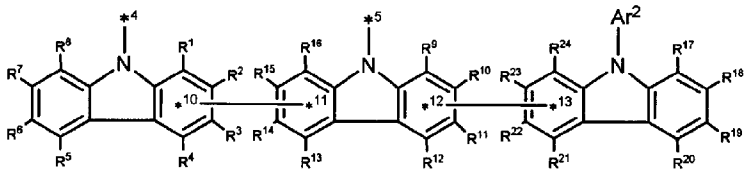
(1b-iv[V])

（一般式（１ｂ－ｉｖ［Ｖ］）中、各記号の定義は、それぞれ請求項２及び７に記載の定義と同じである。

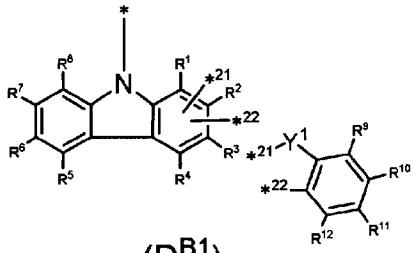
Ｒ^{101}、Ｒ^{102}、及びＲ^{105}～Ｒ^{108}のうちの１～３つの基は、脱離して、当該基と結合していた炭素原子が＊^{p}～＊^{r}のいずれかと結合し、それ以外は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。なお、Ｒ^{102}及びＲ^{105}～Ｒ^{108}から選ばれる２つは、互いに結合して、環を形成していてもよい。）

[請求項92] 前記一般式（D^A）～（D^D）で表される基が、それぞれ下記一般式（D^{A1}）～（D^{D1}）で表される基である、請求項７及び７５～９１のいずれか１項に記載の化合物。

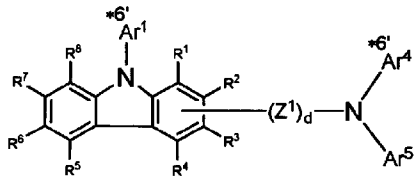
[化101]



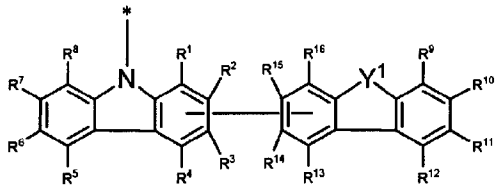
(D^{A1})



(D^{B1})



(D^{C1})

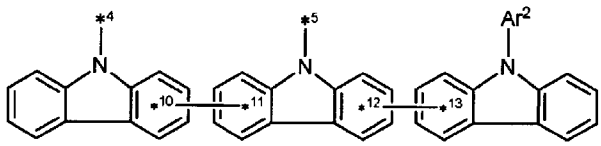


(D^{D1})

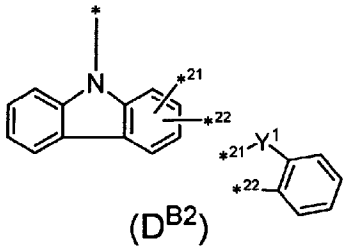
（一般式（D^{A1}）、（D^{B1}）、（D^{C1}）及び（D^{D1}）中、R^1～R^{24}は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表し、それぞれ同一であってもよく、異なっていてもよい。また、R^1～R^{24}から選ばれる２つが、互いに結合して環を形成していてもよい。それ以外の各記号の定義は、それぞれ請求項２に記載の一般式（D^A）、（D^B）、（D^C）及び（D^D）中の記載と同じである。）

[請求項93] 前記一般式（D^A）～（D^D）で表される基が、それぞれ下記一般式（D^{A2}）～（D^{D2}）で表される基である、請求項７及び７５～９１のいずれか１項に記載の化合物。

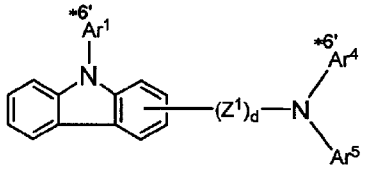
[化102]



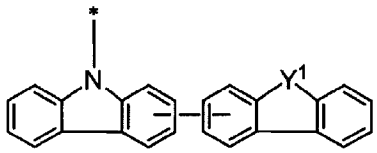
(D^{A2})



(D^{B2})



(D^{C2})



(D^{D2})

（一般式（D^{A2}）、（D^{B2}）、（D^{C2}）及び（D^{D2}）中、各記号の定義は、それぞれ請求項２に記載の一般式（D^{A}）、（D^{B}）、（D^{C}）及び（D^{D}）中の記載と同じである。但し、＊１０－＊１１、＊１２－＊１３は、ベンゼン環中の水素原子がそれぞれ脱離した炭素原子同士の結合を示す。）

[請求項94] 前記一般式（D^{B}）中のY^{1}、及び前記一般式（D^{D}）中のY^{1}が、それぞれ独立に、酸素原子又は硫黄原子である、請求項７及び７５～９３のいずれか１項に記載の化合物。

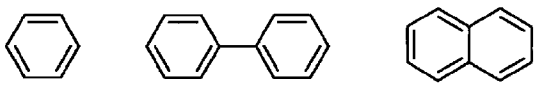
[請求項95] 前記Ar^{1}～Ar^{6}が、いずれも、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０のアリール基である、請求項７及び７５～９４のいずれか１項に記載の化合物。

[請求項96] 前記L^{1}～L^{3}が、いずれも、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基である、請求項２～９５のいずれか１項に記載の化合物。

[請求項97] 前記L^{1}～L^{3}の少なくとも一つが、下記式で表されるいずれかの

化合物の２～４価の残基である、請求項２～９５のいずれか１項に記載の化合物。

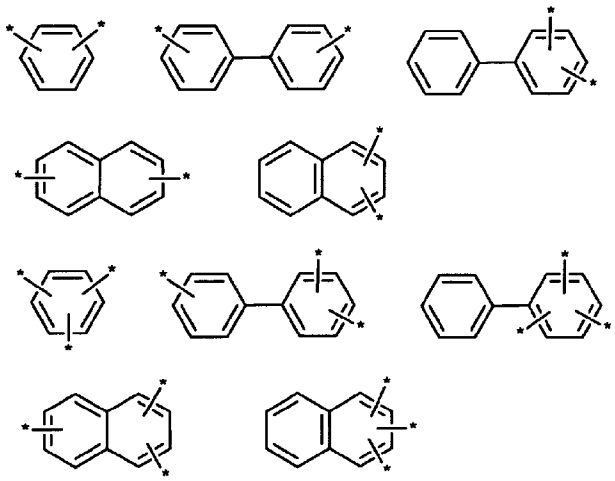
[化103]



（上記化合物中の炭素原子は置換基と結合していてもよい。）

[請求項98] 前記Ｌ[1]～Ｌ[3]の少なくとも一つが、下記式で表される基のいずれかである、請求項２～９５のいずれか１項に記載の化合物。

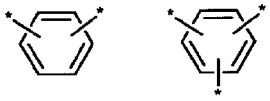
[化104]



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

[請求項99] 前記Ｌ[1]～Ｌ[3]の少なくとも一つが、下記式で表される基のいずれかである、請求項２～９５のいずれか１項に記載の化合物。

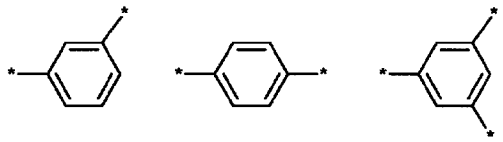
[化105]



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

[請求項100] 前記Ｌ[1]～Ｌ[3]の少なくとも一つが、下記式で表される基である、請求項２～９５のいずれか１項に記載の化合物。

[化106]



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

[請求項101] 前記置換基、又は「置換もしくは無置換」という記載における置換基が、いずれも、炭素数１～５０のアルキル基、環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、環形成炭素数６～５０のアリール基、環形成炭素数６～５０のアリール基を有する炭素数７～５１のアラルキル基、アミノ基、炭素数１～５０のアルキル基及び環形成炭素数６～５０のアリール基から選ばれる置換基を有するモノ置換又はジ置換アミノ基、炭素数１～５０のアルキル基を有するアルコキシ基、環形成炭素数６～５０のアリール基を有するアリールオキシ基、炭素数１～５０のアルキル基及び環形成炭素数６～５０のアリール基から選ばれる置換基を有するモノ置換、ジ置換又はトリ置換シリル基、環形成原子数５～５０のヘテロアリール基、炭素数１～５０のハロアルキル基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、炭素数１～５０のアルキル基及び環形成炭素数６～５０のアリール基から選ばれる置換基を有するスルホニル基、炭素数１～５０のアルキル基及び環形成炭素数６～５０のアリール基から選ばれる置換基を有するジ置換ホスフォリル基、アルキルスルホニルオキシ基、アリールスルホニルオキシ基、アルキルカルボニルオキシ基、アリールカルボニルオキシ基、ホウ素含有基、亜鉛含有基、スズ含有基、ケイ素含有基、マグネシウム含有基、リチウム含有基、ヒドロキシ基、アルキル置換又はアリール置換カルボニル基、カルボキシル基、ビニル基、（メタ）アクリロイル基、エポキシ

基、並びにオキセタニル基からなる群より選ばれる、請求項２～１００のいずれか１項に記載の化合物。

[請求項102] 請求項１及び８～１２のいずれか１項に記載の組成物、又は請求項２～７及び１３～１０１のいずれか１項に記載の化合物からなる、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

[請求項103] 溶媒、並びに、請求項１及び８～１２のいずれか１項に記載の組成物又は２～７及び１３～１０１のいずれか１項に記載の化合物を含む、インク組成物。

[請求項104] 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及び８～１２のいずれか１項に記載の組成物又は２～７及び１３～１０１のいずれか１項に記載の化合物を含む層である、有機エレクトロルミネッセンス素子。

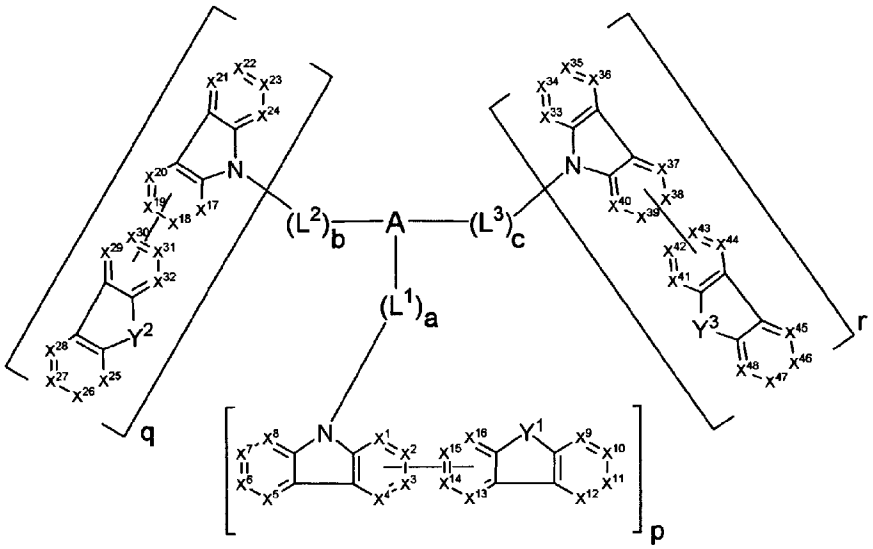
[請求項105] 前記発光層が、請求項１及び８～１２のいずれか１項に記載の組成物又は２～７及び１３～１０１のいずれか１項に記載の化合物を含む、請求項１０４に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項106] 請求項１０４又は１０５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。

[請求項107] 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、下記一般式（１［IV］）で表される化合物を含む層である、有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化107]



(1[IV])

（一般式（１［IV］）中、Ａは、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の窒素含有ヘテロ芳香族炭化水素基を表す。

Ｌ[1]～Ｌ[3]は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の環形成原子数５～３０の複素環基、又はこれらの基が２～４個結合してなる基である。

ａ～ｃは、それぞれ独立に、０又は１である。

Ｘ[1]～Ｘ[48]は、それぞれＣ（Ｒ[1]）～Ｃ（Ｒ[48]）又は窒素原子を表す。Ｒ[1]～Ｒ[48]は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。但し、Ｘ[1]～Ｘ[4]のうちのいずれか１つは炭素原子であり、Ｘ[13]～Ｘ[16]のうちのいずれか１つの炭素原子と直接結合をしており、Ｘ[17]～Ｘ[20]のうちのいずれか１つは炭素原子であり、Ｘ[29]～Ｘ[32]のうちのいずれか１つの炭素原子と直接結合をしており、Ｘ[37]～Ｘ[40]のうちのいずれか１つは炭素原子であり、Ｘ[41]～Ｘ[44]のうちのいずれか１つの炭素原子と直接結合をしている。また、その直接結合に関与していない、Ｒ[1]～Ｒ[8]から選ばれる２つ、Ｒ[9]～Ｒ[16]から選ばれる２つ、Ｒ[17]

～R^{24}から選ばれる２つ、R^{25}～R^{32}から選ばれる２つ、R^{33}～R^{40}から選ばれる２つ、及びR^{41}～R^{48}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。

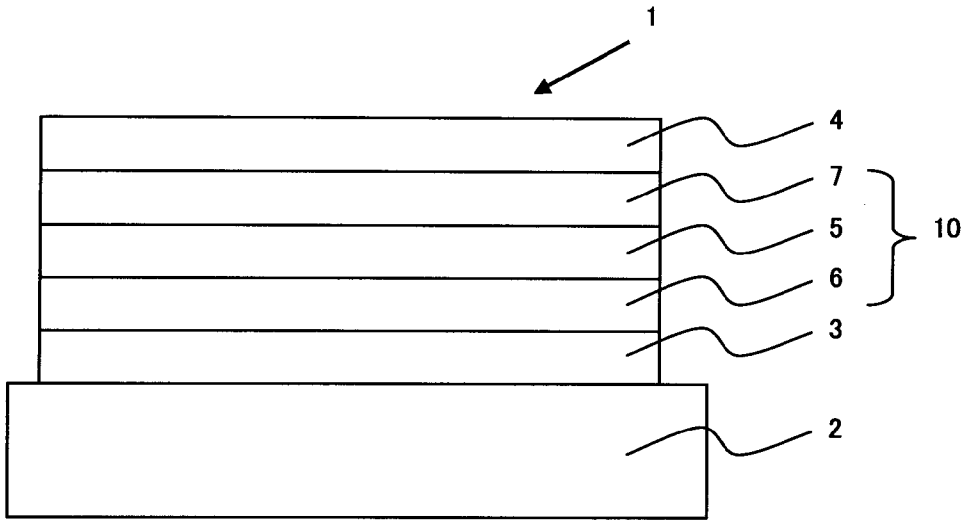
Y^1～Y^3は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、C（R^A）（R^B）、Si（R^C）（R^D）、P（R^E）、P（＝O）（R^F）、S（＝O）$_2$又はP（＝S）（R^G）である。R^A、R^B、R^C、R^D、R^E、R^F及びR^Gは、それぞれ独立に、水素原子又は置換基である。R^AとR^B、及びR^CとR^Dは、互いに結合して環を形成していてもよい。

ｐ～ｒは、それぞれ独立に、０～３の整数であり、ｐ＋ｑ＋ｒ＝３である。ｐ、ｑ又はｒが２又は３である場合、複数存在する［　］内の基は、それぞれ同一であってもよいし、異なっていてもよい。）

[請求項108] 前記発光層が、請求項１０７に記載の化合物を含む、請求項１０７に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項109] 請求項１０７又は１０８に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した、電子機器。

[図1]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2015/057392

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

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

B. FIELDS SEARCHED

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

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched
Jitsuyo Shinan Koho 1922-1996 Jitsuyo Shinan Toroku Koho 1996-2015
Kokai Jitsuyo Shinan Koho 1971-2015 Toroku Jitsuyo Shinan Koho 1994-2015

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

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X A	WO 2011/136755 A1 (UNIVERSAL DISPLAY CORP.), 03 November 2011 (03.11.2011), paragraphs [0025] to [0031], [0054], [0116] to [0118]; claims 1 to 42 & JP 2013-530515 A & US 2013/0112952 A1 & EP 2564438 A	1,2,9,96-106 3-8,10-95, 107-109
X A	WO 2010/136109 A1 (MERCK PATENT GMBH), 02 December 2010 (02.12.2010), page 4, line 30 to page 29, line 27; page 52; page 149, E27 & JP 2012-528088 A & US 2014/0048745 A1 & EP 2566875 A & DE 102009023155 A	2,4,29-40, 96-101 1,3,5-28, 41-95, 102-109

☒ 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	Date of mailing of the international search report
14 May 2015 (14.05.15)	26 May 2015 (26.05.15)
Name and mailing address of the ISA/ Japan Patent Office 3-4-3,Kasumigaseki,Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915,Japan	Authorized officer Telephone No.

Form PCT/ISA/210 (second sheet) (July 2009)

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2015/057392

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X A	WO 2011/080972 A1 (Nippon Steel Chemical Co., Ltd.), 07 July 2011 (07.07.2011), paragraphs [0055], [0063], [0069] & JP 5596706 B & US 2012/0235133 A1 & EP 2521196 A1	2,4,29-36, 96-101 1,3,5-28, 37-95, 102-109
X A	WO 2012/086170 A1 (Idemitsu Kosan Co., Ltd.), 28 June 2012 (28.06.2012), paragraph [0069] & US 2013/0306959 A1 & EP 2662368 A1	2,6,65-68, 71-74,96-109 1,3-5,7-64, 69-70,75-95
P,X	WO 2015/020217 A1 (Idemitsu Kosan Co., Ltd.), 12 February 2015 (12.02.2015), paragraphs [0090] to [0105], [0250] to [0280]; claims 1 to 28 (Family: none)	1-109

国際調査報告

国際出願番号　ＰＣＴ／ＪＰ２０１５／０５７３９２

Ａ．　発明の属する分野の分類（国際特許分類（ＩＰＣ））

Int.Cl.　C07D403/14(2006.01)i, H01L51/50(2006.01)i

Ｂ．　調査を行った分野

調査を行った最小限資料（国際特許分類（ＩＰＣ））

Int.Cl.　C07D403/14, H01L51/50

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報	１９２２－１９９６年
日本国公開実用新案公報	１９７１－２０１５年
日本国実用新案登録公報	１９９６－２０１５年
日本国登録実用新案公報	１９９４－２０１５年

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

CAplus/REGISTRY(STN)

Ｃ．　関連すると認められる文献

引用文献のカテゴリー＊	引用文献名　及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する請求項の番号
X	WO 2011/136755 A1 (UNIVERSAL DISPLAY CORPORATION) 2011.11.03, [0025]-[0031], [0054], [0116]-[0118], CLAIMS 1-42 & JP 2013-530515 A & US 2013/0112952 A1 & EP 2564438 A	1,2,9, 96-106
A		3-8,10-95, 107-109

☑　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	国際調査報告の発送日
１４．０５．２０１５	２６．０５．２０１５

国際調査機関の名称及びあて先
日本国特許庁（ＩＳＡ／ＪＰ）
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）　２Ｏ　３３１０
高松　大
電話番号　０３－３５８１－１１０１　内線　３２７１

C（続き）．　関連すると認められる文献

引用文献のカテゴリー＊	引用文献名　及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する請求項の番号
X	WO 2010/136109 A1 (MERCK PATENT GMBH) 2010.12.02, 第4頁第30行-第29頁第27行, 第52頁, 第149頁E27 & JP 2012-528088 A & US 2014/0048745 A1	2,4,29-40, 96-101
A	& EP 2566875 A & DE 102009023155 A	1,3,5-28, 41-95, 102-109
X	WO 2011/080972 A1 (新日鐵化学株式会社) 2011.07.07, [0055], [0063], [0069] & JP 5596706 B & US 2012/0235133 A1 & EP 2521196 A1	2,4,29-36, 96-101
A		1,3,5-28, 37-95, 102-109
X	WO 2012/086170 A1 (出光興産株式会社) 2012.06.28, [0069] & US 2013/0306959 A1 & EP 2662368 A1	2,6,65-68, 71-74, 96-109
A		1,3-5,7-64, 69-70,75-95
P,X	WO 2015/020217 A1 (出光興産株式会社) 2015.02.12, [0090]-[0105], [0250]-[0280], [請求項1]-[請求項28] (ファミリーなし)	1-109