

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2024年10月3日(03.10.2024)



(10) 国際公開番号

WO 2024/204430 A1

(51) 国際特許分類:

H10K 50/12 (2023.01) H10K 85/60 (2023.01)
C07D 403/14 (2006.01) H10K 101/20 (2023.01)
C07D 491/048 (2006.01) H10K 101/40 (2023.01)
C09K 11/06 (2006.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2024/012428

(22) 国際出願日: 2024年3月27日(27.03.2024)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

(30) 優先権データ:
特願 2023-050649 2023年3月27日(27.03.2023) JP

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

(72) 発明者: ジョ ヨンジウ (CHO Yong Joo); 〒8190388 福岡県福岡市西区九大新町4番地1 株式会社 Kyulux 内 Fukuoka (JP). 森尾桃子 (MORIO Momoko); 〒8190388 福岡県福岡市西区九大新町4番地1 株式会社 Kyulux 内 Fukuoka (JP). 鈴木善丈 (SUZUKI Yoshitake); 〒8190388 福岡県福岡市西区九大新町4番地1 株式会社 Kyulux 内 Fukuoka (JP). フ

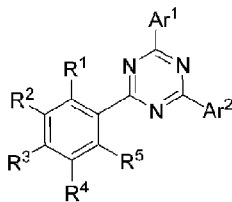
ァン ソンヘ (HWANG Songhye); 〒8190388 福岡県福岡市西区九大新町4番地1 株式会社 Kyulux 内 Fukuoka (JP). 小澤寛晃 (OZAWA Hiroaki); 〒8190388 福岡県福岡市西区九大新町4番地1 株式会社 Kyulux 内 Fukuoka (JP). 金原幸誠 (KANAHARA Kousei); 〒8190388 福岡県福岡市西区九大新町4番地1 株式会社 Kyulux 内 Fukuoka (JP). 鈴木伊織 (SUZUKI Iori); 〒8190388 福岡県福岡市西区九大新町4番地1 株式会社 Kyulux 内 Fukuoka (JP). ▲濱▼▲崎▼太郎 (HAMASAKI Taro); 〒8190388 福岡県福岡市西区九大新町4番地1 株式会社 Kyulux 内 Fukuoka (JP). 下位祐子 (SHIMOI Yuko); 〒8190388 福岡県福岡市西区九大新町4番地1 株式会社 Kyulux 内 Fukuoka (JP).

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

(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CV, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR,

(54) Title: ORGANIC LIGHT EMITTING ELEMENT

(54) 発明の名称: 有機発光素子



(57) Abstract: Disclosed is an organic light emitting element which uses a compound represented by the general formula, and has excellent emission characteristics. In the formula, R¹ to R⁵ each represent H, D, an alkyl group, an aryl group, a donor group, a triazinyl group substituted by Ar³ and Ar⁴, or the like; R² or R³ represents the triazinyl group or the like; two or more of R¹ to R⁵ are donor groups; and Ar¹ to Ar⁴ each represent an aryl group or a heteroaryl group. Meanwhile, one or more of R¹ to R⁵ are donor groups having a fused-ring structure of four or more rings, or one or more of Ar¹ to Ar⁴ are heteroaryl groups.

(57) 要約: 下記一般式の化合物を用いた有機発光素子は発光特性が優れている。R¹~R⁵はH、D、アルキル基、アリーール基、ドナー性基、Ar³とAr⁴で置換されたトリアジニル基等であり、R²またはR³は前記トリアジニル基等で、R¹~R⁵のうちの2個以上はドナー性基であり; Ar¹~Ar⁴はアリーール基、ヘテロアリーール基である。ただし、R¹~R⁵の1個以上が4環以上の縮環構造を有するドナー性基であるか、Ar¹~Ar⁴のうちの1個以上がヘテロアリーール基である。

[続葉有]



WO 2024/204430 A1

HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG,
KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU,
LY, MA, MD, MG, MK, MN, MU, MW, MX, MY,
MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL,
PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK,
SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA,
UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

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

添付公開書類:

- 一 国際調査報告 (条約第21条(3))

明 細 書

発明の名称：有機発光素子

技術分野

[0001] 本発明は、有機エレクトロルミネッセンス素子などの有機発光素子に関する。

背景技術

[0002] 有機発光素子は、有機材料を用いた発光素子であり、塗布による製造が可能であり、希少元素を使わないことから近年注目を集めている。なかでも有機エレクトロルミネッセンス素子（有機EL素子）は、自発光を放射しバックライトが不要であることから、軽量でフレキシブルな素子とすることが可能であるという利点がある。また、応答性が速く、視認性が高いという特徴も有しており、次世代光源として期待されている。このため、有機エレクトロルミネッセンス素子を始めとする有機発光素子に有用な材料の開発に関する研究が活発に進められている。特に発光材料に関する研究は盛んに行われている。発光材料として、古くから蛍光材料やリン光材料や蛍光材料が知られているが、蛍光材料には発光効率が低いという課題があり、リン光材料には希少金属を含むため高価で深青色の発光が困難であるという課題があった。近年、これらの課題に対処した発光材料として遅延蛍光材料が開発されている。

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

状態のみならず、励起三重項状態も上記の逆項間交差を介した経路により蛍光発光に利用することができるため、通常の蛍光材料に比べて高い発光効率を得られることになる。

[0004] このような原理が明らかにされて以降、様々な研究により種々の遅延蛍光材料が発見されるに至っている。その中には、ベンゼン環にドナー性基とアクセプター性基が置換した化合物が多数含まれている。例えば、ベンゼン環にドナー性基であるカルバゾール-9-イル基とアクセプター性基であるシアノ基と置換トリアジニル基が置換した骨格を有する化合物を有機発光素子に用いることが提案されている（特許文献1参照）。

先行技術文献

特許文献

[0005] 特許文献1：WO2019/191665A1

発明の概要

発明が解決しようとする課題

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

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

課題を解決するための手段

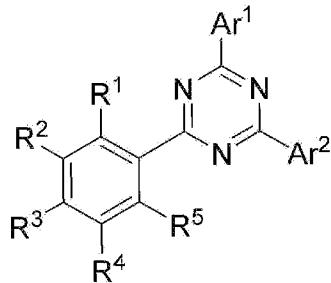
[0008] 上記の目的を達成するために鋭意検討を進めた結果、本発明者らは、特定の条件を満たす構造を有する化合物が発光材料として有用であり、優れた有機発光素子の提供を可能にするを見いだした。本発明は、こうした知見

に基づいて提案されたものであり、具体的に、以下の構成を有する。

[1] 下記一般式(1)で表される化合物と、ホスト材料またはドーパント材料とを同じ層に含む、有機発光素子。

[化1]

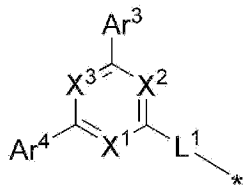
一般式(1)



[一般式(1)において、 $R^1 \sim R^5$ は、各々独立に水素原子、重水素原子、置換もしくは無置換のアルキル基、置換もしくは無置換のアリール基、ドナー性基、または下記一般式(2)で表される基を表す。また、 R^2 または R^3 は下記一般式(2)で表される基であり、 $R^1 \sim R^5$ のうちの2個以上はドナー性基である。 Ar^1 および Ar^2 は、各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。

[化2]

一般式(2)



一般式(2)において、 $X^1 \sim X^3$ は、各々独立にNまたはC(R)を表すが、 $X^1 \sim X^3$ の少なくとも1個はNである。Rは水素原子、重水素原子または置換基を表す。 Ar^3 および Ar^4 は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。 L^1 は、単結合または2価の連結基を表す。*は結合位置を表す。

ただし、前記一般式(1)で表される化合物は、 $R^1 \sim R^5$ のうちの1個以上が4環以上の縮環構造を有するドナー性基であるか、 $Ar^1 \sim Ar^4$ のうち

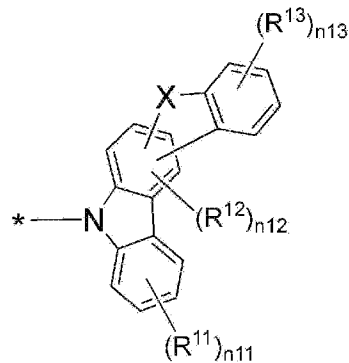
の1個以上が置換もしくは無置換のヘテロアリール基（ただし、窒素含有6員環基を除く）であるか、あるいは、 $R^1 \sim R^5$ と $Ar^1 \sim Ar^4$ がこれらの両方の条件を満たす。]

[2] 前記一般式(1)の $R^1 \sim R^5$ のうちの1個以上が4環以上の縮環構造を有するドナー性基である、[1]に記載の有機発光素子。

[3] 前記一般式(1)の $R^1 \sim R^5$ のうちの1個以上が下記一般式(3)で表されるドナー性基である、[2]に記載の有機発光素子。

[化3]

一般式(3)



[一般式(3)において、XはO、Sまたは $N-R^{14}$ を表す。 $R^{11} \sim R^{13}$ は各々独立に重水素原子または置換基を表す。 R^{14} は、重水素原子、アルキル基およびアリール基からなる群より選択される1以上の原子か基で置換されていてもよいアリール基、あるいは、重水素原子およびアリール基からなる群より選択される1以上の原子か基で置換されていてもよいアルキル基を表す。 R^{11} 同士、 R^{12} 同士、 R^{13} 同士は、それぞれ互いに結合して環状構造を形成していてもよい。 n_{11} および n_{13} は各々独立に0~4のいずれかの整数を表し、 n_{12} は0~2のいずれかの整数を表す。]

[4] 前記一般式(1)および(2)の $Ar^1 \sim Ar^4$ が各々独立に置換もしくは無置換のアリール基である、[2]または[3]に記載の化合物。

[5] 前記一般式(1)および(2)の $Ar^1 \sim Ar^4$ のうちの1個以上が置換もしくは無置換のヘテロアリール基（ただし、窒素含有6員環基を除く）である、[1]~[3]のいずれか1つに記載の有機発光素子。

[6] 前記一般式(1)および(2)の $A_{r^1} \sim A_{r^4}$ のうちの1個以上が窒素原子で結合する5員環を有するヘテロアリール基である、[5]に記載の有機発光素子。

[7] 前記一般式(1)の R^2 が前記一般式(2)で表される基である、[1]～[6]のいずれか1つに記載の有機発光素子。

[8] 前記一般式(1)の R^3 が前記一般式(2)で表される基である、[1]～[6]のいずれか1つに記載の有機発光素子。

[9] 前記ドナー性基が置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基である、[1]～[8]のいずれか1つに記載の有機発光素子。

[10] 前記一般式(1)の $R^1 \sim R^5$ のうちの3個がドナー性基である、[1]～[9]のいずれか1つに記載の有機発光素子。

[11] 前記一般式(2)の $X^1 \sim X^3$ がNである、[1]～[10]のいずれか1つに記載の有機発光素子。

[12] 前記一般式(2)の L^1 が単結合である、[1]～[11]のいずれか1つに記載の有機発光素子。

[13] 前記一般式(1)の R^1 が水素原子である、[1]～[12]のいずれか1つに記載の有機発光素子。

[14] 前記化合物が重水素原子を少なくとも1つ有する、[1]～[13]のいずれか1つに記載の有機発光素子。

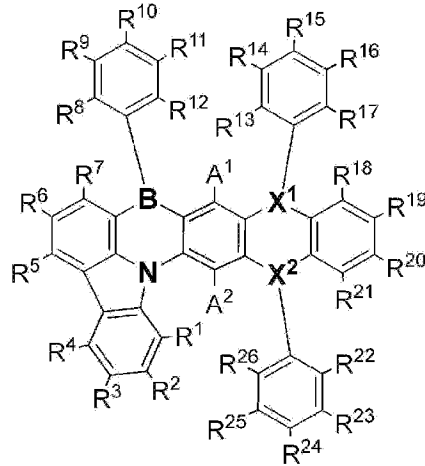
[15] 前記層が前記ドーパント材料を含む、[1]～[14]のいずれか1つに記載の有機発光素子。

[16] 前記ドーパント材料からの発光量が前記化合物からの発光量よりも多い、[15]に記載の有機発光素子。

[17] 前記ドーパント材料が下記一般式(4)で表される化合物である、[1]～[16]のいずれか1つに記載の有機発光素子。

[化4]

一般式 (4)



[一般式 (4) において、 X^1 および X^2 は、一方が窒素原子であり、他方がホウ素原子である。 $R^1 \sim R^{26}$ 、 A^1 、 A^2 は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。 R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 、 R^6 と R^7 、 R^7 と R^8 、 R^8 と R^9 、 R^9 と R^{10} 、 R^{10} と R^{11} 、 R^{11} と R^{12} 、 R^{13} と R^{14} 、 R^{14} と R^{15} 、 R^{15} と R^{16} 、 R^{16} と R^{17} 、 R^{17} と R^{18} 、 R^{18} と R^{19} 、 R^{19} と R^{20} 、 R^{20} と R^{21} 、 R^{21} と R^{22} 、 R^{22} と R^{23} 、 R^{23} と R^{24} 、 R^{24} と R^{25} 、 R^{25} と R^{26} は、互いに結合して環状構造を形成していてもよい。ただし、 X^1 が窒素原子であるとき、 R^{17} と R^{18} は互いに結合して単結合となりピロール環を形成し、 X^2 が窒素原子であるとき、 R^{21} と R^{22} は互いに結合して単結合となりピロール環を形成する。ただし、 X^1 が窒素原子であって、 R^7 と R^8 および R^{21} と R^{22} が窒素原子を介して結合して6員環を形成し、 R^{17} と R^{18} が互いに結合して単結合を形成しているとき、 $R^1 \sim R^6$ の少なくとも1つは置換もしくは無置換のアリール基であるか、 R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 のいずれかが互いに結合して芳香環または複素芳香環を形成している。また、 X^1 がホウ素原子で、 X^2 が窒素原子であり、 R^7 と R^8 、 R^{17} と R^{18} が互いに結合してホウ素原子を含む環状構造を形成している場合、その環状構造は5～7員環であり、6員環である場合は R^7 と R^8 、 R^{17} と R^{18} が互いに結合して $-B(R^{32})-$ 、 $-CO-$ 、 $-CS-$ または $-N(R^{27})-$ を形成している。 R^{27} は水素原子、重水素原子ま

たは置換基を表す。]

[18] 前記層が前記宿主材料を含む、[1]～[17]のいずれか1つに記載の有機発光素子。

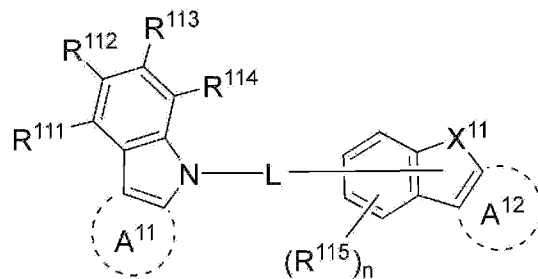
[19] 前記層に含まれる材料のうち、前記化合物からの発光量が最大である、[18

]に記載の有機発光素子。

[20] 前記宿主材料が下記一般式(5)で表される化合物である、[1]～[19]のいずれか1つに記載の有機発光素子。

[化5]

一般式(5)



[一般式(5)において、X¹¹は、O、S、N(R^A)またはC(R^B)(R^C)を表す。A¹¹およびA¹²は、各々独立にベンゼン環、フラン環、チオール環、ピロール環またはシクロペンタジエン環であって、これらの環にはさらに他の環が縮合していてもよく、また置換されていてもよい。R¹¹¹～R¹¹⁴、R^B、R^Cは、各々独立に水素原子、重水素原子、置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、置換もしくは無置換のアルキル基、またはシアノ基を表す。R¹¹⁵は、各々独立に水素原子、重水素原子、置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、置換もしくは無置換のアルキル基、シアノ基、またはLとの結合を表す。R^Aは、置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、置換もしくは無置換のアルキル基、またはLとの結合を表す。R¹¹¹とR¹¹²、R¹¹²とR¹¹³、R¹¹³とR¹¹⁴、隣り合う2個のR¹¹⁵、R^BとR^Cは、互いに結合して環状構造を形成していてもよい。nは3または

4のいずれかの整数を表す。Lは単結合、置換もしくは無置換のアリーレン基、置換もしくは無置換のヘテロアリーレン基、またはこれらの2個以上が結合した連結基を表す。]

[21] 遅延蛍光を放射する、[1]～[20]のいずれか1つに記載の有機発光素子。

発明の効果

[0009] 本発明の有機発光素子は、優れた発光特性を示す。

発明を実施するための形態

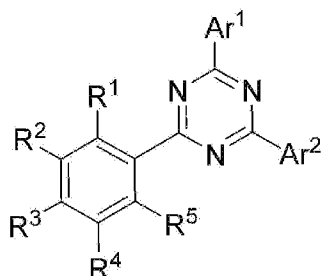
[0010] 以下において、本発明の内容について詳細に説明する。以下に記載する構成要件の説明は、本発明の代表的な実施態様や具体例に基づいてなされることがあるが、本発明はそのような実施態様や具体例に限定されるものではない。なお、本明細書において「～」を用いて表される数値範囲は、「～」の前後に記載される数値を下限値および上限値として含む範囲を意味する。また、本発明に用いられる化合物の分子内に存在する水素原子の一部または全部は重水素原子(^2H 、デューテリウムD)に置換することができる。本明細書の化学構造式では、水素原子はHと表示しているか、その表示を省略している。例えばベンゼン環の環骨格構成炭素原子に結合する原子の表示が省略されているとき、表示が省略されている箇所ではHが環骨格構成炭素原子に結合しているものとする。本明細書にて「置換基」という用語は、水素原子および重水素原子以外の原子または原子団を意味する。一方、「置換もしくは無置換の」という用語は、水素原子が重水素原子または置換基で置換されていてもよいことを意味する。

[0011] [一般式(1)で表される化合物]

下記一般式(1)で表される化合物について説明する。

[化6]

一般式 (1)



[0012] 一般式 (1) において、R¹~R⁵は、各々独立に水素原子、重水素原子、置換もしくは無置換のアルキル基、置換もしくは無置換のアリール基、ドナー性基、または下記一般式 (2) で表される基を表す。また、R²またはR³は下記一般式 (2) で表される基であり、R¹~R⁵のうちの2個以上はドナー性基である。Ar¹およびAr²は、各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。一般式 (1) で表される化合物は、R¹~R⁵のうちの1個以上が4環以上の縮環構造を有するドナー性基であるか、Ar¹~Ar⁴のうちの1個以上が置換もしくは無置換のヘテロアリール基 (ただし、窒素含有6員環基を除く) であるか、あるいは、R¹~R⁵とAr¹~Ar⁴がこれらの両方の条件を満たす。なお、Ar³とAr⁴は、一般式 (2) に存在する基である。

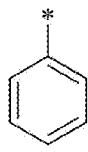
[0013] R¹~R⁵が採りうるアルキル基は、直鎖状、分枝状、環状のいずれであってもよい。また、直鎖部分と環状部分と分枝部分のうちの2種以上が混在していてもよい。アルキル基の炭素数は、例えば1以上、2以上、4以上とすることができる。また、炭素数は30以下、20以下、10以下、6以下、4以下とすることができる。アルキル基の具体例として、メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、*tert*-ブチル基、*n*-ペンチル基、イソペンチル基、*n*-ヘキシル基、イソヘキシル基、2-エチルヘキシル基、*n*-ヘプチル基、イソヘプチル基、*n*-オクチル基、イソオクチル基、*n*-ノニル基、イソノニル基、*n*-デカニル基、イソデカニル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基を挙げることができる。置換基たるアルキル基は、さらに例えば重水素原

子、アリール基、アルコキシ基、アリールオキシ基、ハロゲン原子で置換されていてもよい。本発明の一態様では、アルキル基の置換基は、アリール基および重水素原子からなる群より選択される1つ以上である。本発明の好ましい一態様では、アルキル基は無置換であり、例えばメチル基、エチル基、イソプロピル基およびtert-ブチル基からなる群より選択することができる。

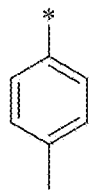
[0014] $R^1 \sim R^5$ 、 A_{r^1} および A_{r^2} が採りうるアリール基は、単環であってもよいし、2つ以上の環が縮合した縮合環であってもよい。縮合環である場合、縮合している環の数は2~6であることが好ましく、例えば2~4の中から選択することができる。環の具体例として、ベンゼン環、ナフタレン環、アントラセン環、フェナントレン環、トリフェニレン環を挙げることができる。本発明の一態様では、アリール基は置換もしくは無置換のフェニル基、置換もしくは無置換のナフタレン-1-イル基、または置換もしくは無置換のナフタレン-2-イル基であり、好ましくは置換もしくは無置換のフェニル基である。アリール基の置換基は、例えば置換基群Aから選択してもよいし、置換基群Bから選択してもよいし、置換基群Cから選択してもよいし、置換基群Dから選択してもよいし、置換基群Eから選択してもよい。本発明の一態様では、アリール基の置換基は、アルキル基、アリール基および重水素原子からなる群より選択される1つ以上である。本発明の好ましい一態様では、アリール基は少なくとも1個の重水素原子で置換されている。本発明の一態様では、アリール基は無置換である。

以下において、 $R^1 \sim R^5$ 、 A_{r^1} および A_{r^2} が採りうる置換もしくは無置換のアリール基の具体例を挙げる。ただし、本発明で採用することができるアリール基は以下の具体例によって限定的に解釈されることはない。以下の具体例において、*は結合位置を示す。また、メチル基は表示を省略している。このため、 $A_{r^2} \sim A_{r^7}$ はメチル基で置換された構造を表している。

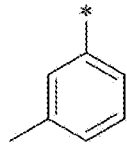
[化7]



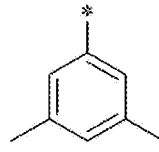
Ar1



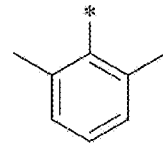
Ar2



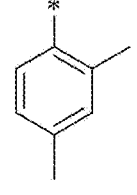
Ar3



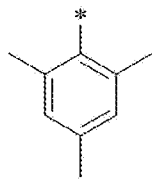
Ar4



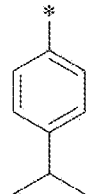
Ar5



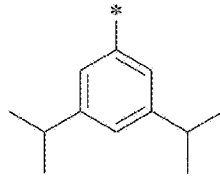
Ar6



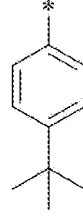
Ar7



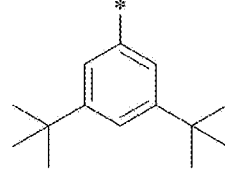
Ar8



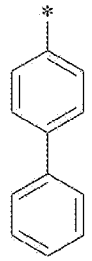
Ar9



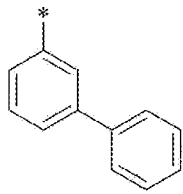
Ar10



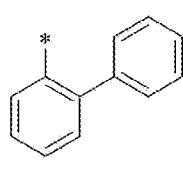
Ar11



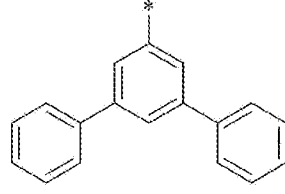
Ar12



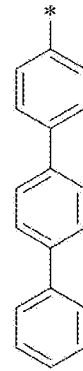
Ar13



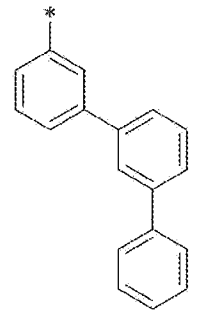
Ar14



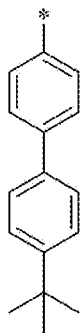
Ar15



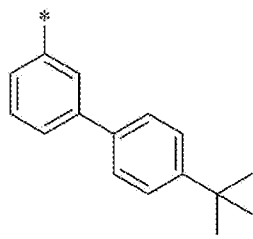
Ar16



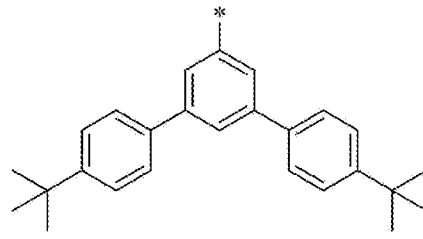
Ar17



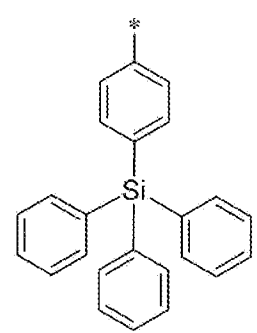
Ar18



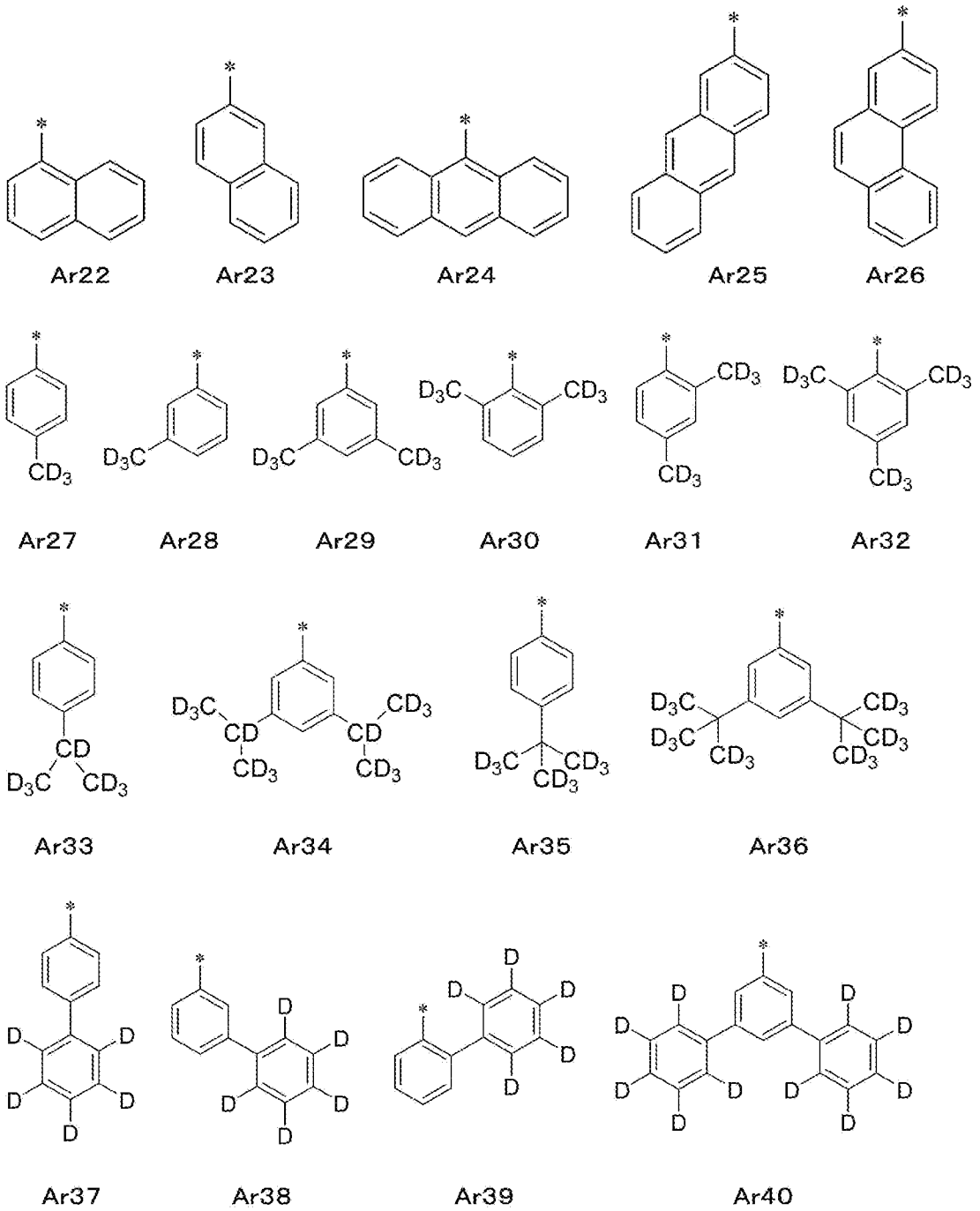
Ar19

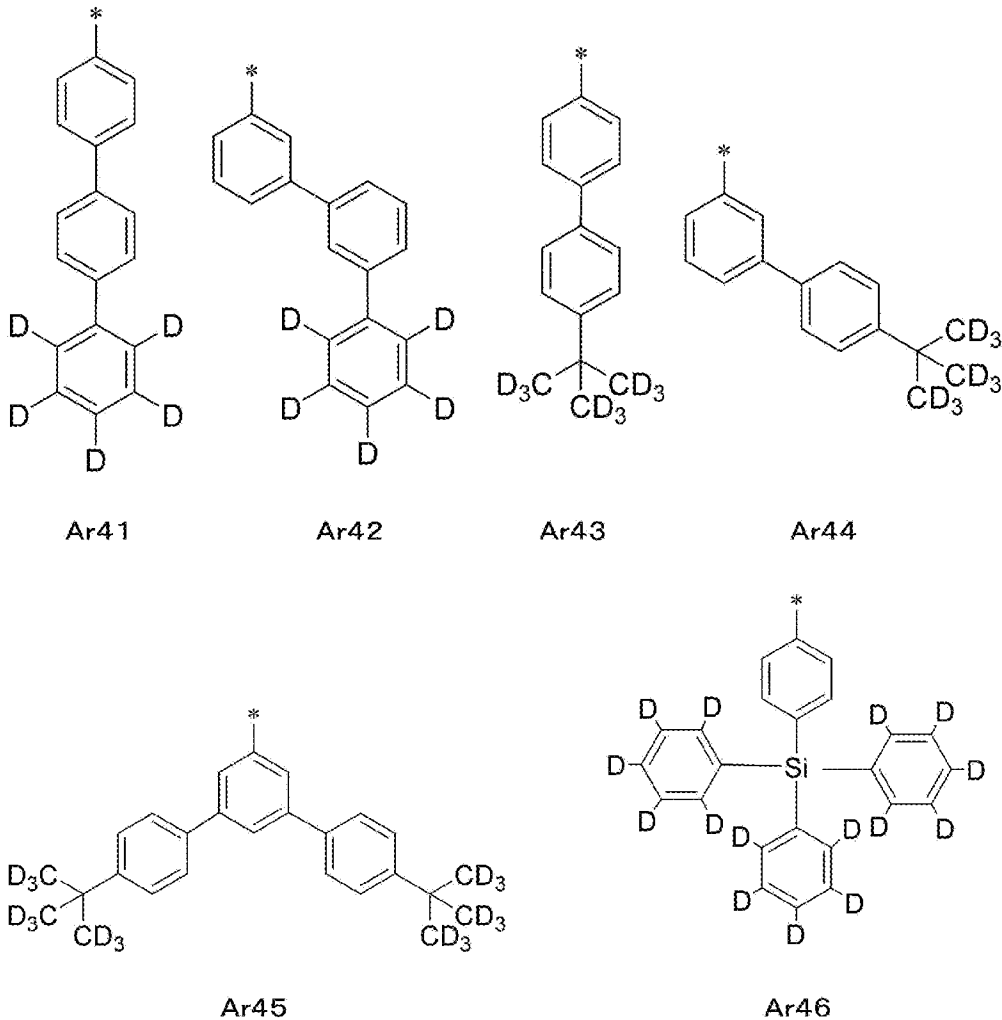


Ar20



Ar21





[0015] 上記の具体例の他に、Ar1～Ar26に存在するすべての水素原子を重水素原子に置換した基を、順にAr47～Ar72としてここに例示する。

本発明の一態様では、R¹～R⁵が採りうるアリール基はAr1～Ar72からなる群より選択される。本発明の一態様では、R¹～R⁵が採りうるアリール基はAr1またはAr47である。本発明の一態様では、R¹～R⁵が採りうるアリール基はAr2～Ar11、Ar27～Ar36、Ar48～Ar57からなる群より選択される。本発明の一態様では、R¹～R⁵が採りうるアリール基はAr12～Ar20、Ar37～Ar45、Ar58～Ar66からなる群より選択される。本発明の一態様では、R¹～R⁵が採りうるアリール基はAr22～Ar26、Ar68～Ar72からなる群より選択される。本発明の好ましい一態様では、R¹～R⁵が採りうるアリール基はAr1、Ar12～Ar15、Ar24、Ar37～Ar40、Ar47、Ar5

8～Ar61、Ar70からなる群より選択される。

本発明の一態様では、Ar¹またはAr²が採りうるアリール基はAr1～Ar72からなる群より選択される。本発明の一態様では、Ar¹またはAr²が採りうるアリール基はAr1またはAr47である。本発明の一態様では、Ar¹またはAr²が採りうるアリール基はAr2～Ar11、Ar27～Ar36、Ar48～57からなる群より選択される。本発明の一態様では、Ar¹またはAr²が採りうるアリール基はAr12～Ar20、Ar37～Ar45、Ar58～Ar66からなる群より選択される。本発明の好ましい一態様では、R¹～R⁵が採りうるアリール基はAr1、Ar12～Ar14、Ar37～Ar40、Ar47、Ar58～Ar61からなる群より選択される。

[0016] 一般式(1)のR¹～R⁵の少なくとも2個はドナー性基である。R¹～R⁵が採りうるドナー性基には、置換もしくは無置換のアリール基は含まれない。

「ドナー性基」は、ハメットのσ_p値が負の基の中から選択することができる。「アクセプター性基」は、ハメットのσ_p値が正の基の中から選択することができる。ハメットのσ_p値は、L. P. ハメットにより提唱されたものであり、パラ置換ベンゼン誘導体の反応速度または平衡に及ぼす置換基の影響を定量化したものである。具体的には、パラ置換ベンゼン誘導体における置換基と反応速度定数または平衡定数の間に成立する下記式：

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

または

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

における置換基に特有な定数(σ_p)である。上式において、k₀は置換基を持たないベンゼン誘導体の速度定数、kは置換基で置換されたベンゼン誘導体の速度定数、K₀は置換基を持たないベンゼン誘導体の平衡定数、Kは置換基で置換されたベンゼン誘導体の平衡定数、ρは反応の種類と条件によって決まる反応定数を表す。本発明における「ハメットのσ_p値」に関する説明

と各置換基の数値については、Hansch, C. et. al., Chem. Rev., 91, 165-195 (1991) の σ_p 値に関する記載を参照することができる。

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

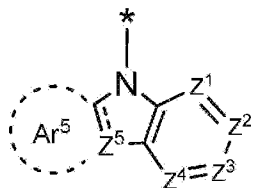
[0018] 本発明におけるドナー性基は、置換アミノ基を含む基であることが好ましい。置換アミノ基であってもよいし、置換アミノ基が結合したアリール基、なかでも置換アミノ基が結合したフェニル基であってもよい。本発明の好ましい一態様では、ドナー性基は置換アミノ基である。

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

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

[化8]

一般式 (a)



[0020] 一般式 (a) において、 Z^1 は $C-R^{14}$ または N を表し、 Z^2 は $C-R^{15}$ または N を表し、 Z^3 は $C-R^{16}$ または N を表し、 Z^4 は $C-R^{17}$ または N を表

す。Z⁵はCまたはNを表し、Ar⁵は置換もしくは無置換の芳香環、または置換もしくは無置換の複素芳香環を表す。R¹⁴とR¹⁵、R¹⁵とR¹⁶、R¹⁶とR¹⁷は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。

[0021] Z¹~Z⁴のうち、Nであるものの数は0~3であることが好ましく、0~2であることが好ましい。本発明の一態様では、Z¹~Z⁴のうち、Nであるものの数は1である。本発明の一態様では、Z¹~Z⁴のうち、Nであるものの数は0である。

R¹⁴~R¹⁷は各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。

置換基は、例えば置換基群Aの中から選択してもよいし、置換基群Bの中から選択してもよいし、置換基群Cの中から選択してもよいし、置換基群Dの中から選択してもよいし、置換基群Eの中から選択してもよい。R¹⁴~R¹⁷の2つ以上が置換基を表すとき、それらの2つ以上の置換基は同一であっても異なってもよい。R¹⁴~R¹⁷のうちの0~2個は置換基であることが好ましく、例えば1個が置換基であってもよいし、0個が置換基(R¹⁴~R¹⁷が水素原子または重水素原子)であってもよい。

R¹⁴とR¹⁵、R¹⁵とR¹⁶、R¹⁶とR¹⁷は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。環状構造は、芳香環、複素芳香環、脂肪族炭化水素環、脂肪族複素環のいずれであってもよく、また、これらが縮合した環であってもよい。好ましくは芳香環、複素芳香環である。芳香環として置換もしくは無置換のベンゼン環を挙げることができる。ベンゼン環にはさらに他のベンゼン環が縮合していてもよく、ピリジン環のような複素環が縮合していてもよい。複素芳香環は、環骨格構成原子としてヘテロ原子を含む芳香性を示す環を意味し、5~7員環であることが好ましく、例えば5員環であるものや、6員環であるものを採用したりすることができる。本発明の一態様では、複素芳香環としてフラン環、チオフェン環、ピロール環を採用することができる。本発明の好ましい一態様では、環状構造は、置換もしくは無置換のベンゾフランのフラン環、置換もしくは無置換のベンゾチオフェンのチオフェン環、置換もしくは無置換のインドールのピロール環である。ここでいうベン

ゾフラン、ベンゾチオフェン、インドールは無置換であってもよく、置換基群Aから選択される置換基で置換されていてもよいし、置換基群Bから選択される置換基で置換されていてもよいし、置換基群Cから選択される置換基で置換されていてもよいし、置換基群Dから選択される置換基で置換されていてもよいし、置換基群Eから選択される置換基で置換されていてもよい。インドールのピロール環を構成する窒素原子には置換もしくは無置換のアリール基が結合していることが好ましく、その置換基としては例えば置換基群A～Eのいずれかの群から選択される置換基を挙げることができる。環状構造は、置換もしくは無置換のシクロペンタジエン環であってもよい。本発明の一態様では、 R^{14} と R^{15} 、 R^{15} と R^{16} 、 R^{16} と R^{17} の中の1組が互いに結合して環状構造を形成している。本発明の一態様では、 R^{14} と R^{15} 、 R^{15} と R^{16} 、 R^{16} と R^{17} は、いずれも互いに結合して環状構造を形成していない。

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

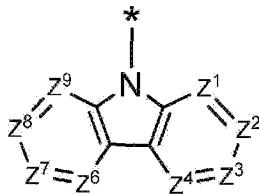
$A r^5$ が採りうる芳香環としてベンゼン環を挙げることができる。ベンゼン環にはさらに他のベンゼン環が縮合していてもよく、ピリジン環のような複素環が縮合していてもよい。 $A r^5$ が採りうる複素芳香環は5～7員環であることが好ましく、例えば5員環であるものや、6員環であるものを採用したりすることができる。本発明の一態様では、複素芳香環としてフラン環、チオフェン環、ピロール環、イミダゾール環、ピリジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、ピラジン環を採用することができる。本発明の一態様では、 Z^5 がCであり、複素芳香環が置換もしくは無置換のベンゾフランのフラン環、置換もしくは無置換のベンゾチオフェンのチオフェン環、置換もしくは無置換のキノリンのピリジン環、または置換もしくは無置換のイソキノリンのピ

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

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

[化9]

一般式 (b)



[0024] 一般式 (b) において、 Z^1 は C-R¹⁴ または N を表し、 Z^2 は C-R¹⁵ または N を表し、 Z^3 は C-R¹⁶ または N を表し、 Z^4 は C-R¹⁷ または N を表し、 Z^6 は C-R¹⁸ または N を表し、 Z^7 は C-R¹⁹ または N を表し、 Z^8 は C-R²⁰ または N を表し、 Z^9 は C-R²¹ または N を表す。R¹⁴ と R¹⁵、R¹⁵ と R¹⁶、R¹⁶ と R¹⁷、R¹⁸ と R¹⁹、R¹⁹ と R²⁰、R²⁰ と R²¹ は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。

一般式 (b) における $Z^1 \sim Z^4$ 、R¹⁴ ~ R¹⁷ については、一般式 (a) の対応する説明を参照することができる。一般式 (b) における $Z^6 \sim Z^9$ 、R¹⁸ ~ R²¹ は、一般式 (a) の $Z^1 \sim Z^4$ 、R¹⁴ ~ R¹⁷ に順に対応しており、これらの内容については一般式 (a) の $Z^1 \sim Z^4$ 、R¹⁴ ~ R¹⁷ の説明を参照することができる。

本発明の一態様では、 $Z^1 \sim Z^4$ 、 $Z^6 \sim Z^9$ のうち、N であるものの数は 0

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

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

[0026] 本発明の一態様では、 $R^1 \sim R^5$ が採りうるドナー性基は、1個以上の環が縮合しているカルバゾール-9-イル基であり、以下においてこれを「環縮合カルバゾール-9-イル基」という。 $R^1 \sim R^5$ が採りうる環縮合カルバゾール-9-イル基は、無置換であってもよく、置換基群Aから選択される置換基で置換されていてもよいし、置換基群Bから選択される置換基で置換されていてもよいし、置換基群Cから選択される置換基で置換されていてもよいし、置換基群Dから選択される置換基で置換されていてもよいし、置換基群Eから選択される置換基で置換されていてもよい。好ましくは無置換であるか、置換基群Eから選択される置換基で置換されている。本発明の一態様

では、環縮合カルバゾール-9-イル基は無置換である。本発明の好ましい一態様では、環縮合カルバゾール-9-イル基は、重水素原子、アルキル基およびアリール基からなる群より選択される1個の原子か基または2個以上を組み合わせた基で置換されていてもよいアリール基で置換されている。

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

[0028] 環縮合カルバゾール-9-イル基は、カルバゾールの環骨格を構成する窒素原子で結合する基であり、カルバゾールを構成する2つのベンゼン環の少なくとも一方に環が縮合している構造を有する。縮合している環は、芳香族炭化水素環、芳香族複素環、脂肪族炭化水素環、脂肪族複素環のいずれであってもよく、また、これらがさらに縮合した環であってもよい。好ましくは芳香族炭化水素環、芳香族複素環である。芳香族炭化水素環として置換もしくは無置換のベンゼン環を挙げることができる。ベンゼン環にはさらに他のベンゼン環が縮合していてもよく、ピリジン環のような複素環が縮合していてもよい。芳香族複素環は、環骨格構成原子としてヘテロ原子を含む芳香性を示す環を意味し、5~7員環であることが好ましく、例えば5員環であるものや、6員環であるものを採用したりすることができる。本発明の一態様では、芳香族複素環としてフラン環、チオフェン環、ピロール環を採用することができる。本発明の一態様では、縮合している環は、置換もしくは無置換のベンゾフランのフラン環、置換もしくは無置換のベンゾチオフェンのチオフェン環、置換もしくは無置換のインドールのピロール環である。なお、ピロール環の窒素原子には、置換基群Eの中から選択した置換基（ただし重水素原子のみである場合は除く）が結合していることが好ましく、アルキル基やアリール基で置換されていてもよいアリール基が結合していることがより好ましい。本発明では、酸素原子、硫黄原子および窒素原子からなる群よ

り選択される1以上の原子を環骨格構成原子とする環が縮合しているカルバゾール-9-イル基を採用することが好ましい。なかでも、ベンゾフロ構造が縮合したカルバゾール-9-イル基、ベンゾチエノ構造が縮合したカルバゾール-9-イル基、インドロ構造が縮合したカルバゾール-9-イル基を好ましく採用することができる。本発明の一態様では、ベンゾフロ構造が縮合したカルバゾール-9-イル基を少なくとも1つ有し、例えば2つ以上有する。本発明の一態様では、ベンゾチエノ構造が縮合したカルバゾール-9-イル基を少なくとも1つ有し、例えば2つ以上有する。

[0029] 環縮合カルバゾール-9-イル基として、置換もしくは無置換のベンゾフロ [2, 3-a] カルバゾール-12-イル基、置換もしくは無置換のベンゾフロ [3, 2-a] カルバゾール-12-イル基、置換もしくは無置換のベンゾフロ [2, 3-b] カルバゾール-7-イル基、置換もしくは無置換のベンゾフロ [3, 2-b] カルバゾール-11-イル基、置換もしくは無置換のベンゾフロ [2, 3-c] カルバゾール-8-イル基、置換もしくは無置換のベンゾフロ [3, 2-c] カルバゾール-5-イル基を採用することができる。また、環縮合カルバゾール-9-イル基として、置換もしくは無置換のベンゾチエノ [2, 3-a] カルバゾール-12-イル基、置換もしくは無置換のベンゾチエノ [3, 2-a] カルバゾール-12-イル基、置換もしくは無置換のベンゾチエノ [2, 3-b] カルバゾール-7-イル基、置換もしくは無置換のベンゾチエノ [3, 2-b] カルバゾール-11-イル基、置換もしくは無置換のベンゾチエノ [2, 3-c] カルバゾール-8-イル基、置換もしくは無置換のベンゾチエノ [3, 2-c] カルバゾール-5-イル基を採用することもできる。また、環縮合カルバゾール-9-イル基として、置換もしくは無置換の11-フェニルインドロ [2, 3-a] カルバゾール-12-イル基、置換もしくは無置換の5-フェニルインドロ [3, 2-a] カルバゾール-12-イル基、置換もしくは無置換の5-フェニルインドロ [2, 3-b] カルバゾール-7-イル基、置換もしくは無置換の5-フェニルインドロ [3, 2-b] カルバゾール-11-イル

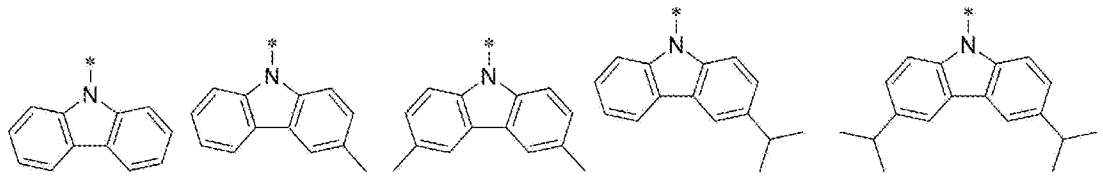
基、置換もしくは無置換の5-フェニルインドロ [2, 3-c] カルバゾール-8-イル基、置換もしくは無置換の12-フェニルインドロ [3, 2-a] カルバゾール-5-イル基を採用することもできる。

[0030] 環縮合カルバゾール-9-イル基が置換されているときの置換基の数は、1~10個であることが好ましく、1~6個であることがより好ましく、1~4個であることがさらに好ましく、例えば1個であってもよく、例えば2個であってもよい。本発明の好ましい一態様では、環縮合カルバゾール-9-イル基の3位または6位のいずれかが置換されている。本発明の好ましい一態様では、環縮合カルバゾール-9-イル基に存在するヘテロ原子からみてベンゼン環のパラ位に置換基を少なくとも1つ有する。本発明の好ましい一態様では、環縮合カルバゾール-9-イル基に存在するヘテロ原子からみてベンゼン環のパラ位にだけ置換基を少なくとも1つ有する。本発明の好ましい一態様では、環縮合カルバゾール-9-イル基に存在するヘテロ原子からみてベンゼン環の置換可能なパラ位のすべてに置換基を有する。

[0031] 以下において、一般式(1)の $R^1 \sim R^5$ が採りうるドナー性基の具体例を示す。ただし、本発明で採用することができるドナー性基は、以下の具体例によって限定的に解釈されることはない。

まず、ドナー性基が3環縮環構造を有する置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基の具体例を以下に挙げる。なお、以下の具体例において、Phはフェニル基(C_6H_5)を示し、*は結合位置を示す。メチル基は表示を省略しているため、例えばD2は1つのメチル基を有している。ただし、重水素化したメチル基は CD_3 と表記している。また、 C_6D_5 は水素原子がすべて重水素化したフェニル基を表している。Dは重水素原子を表す。

[化10]



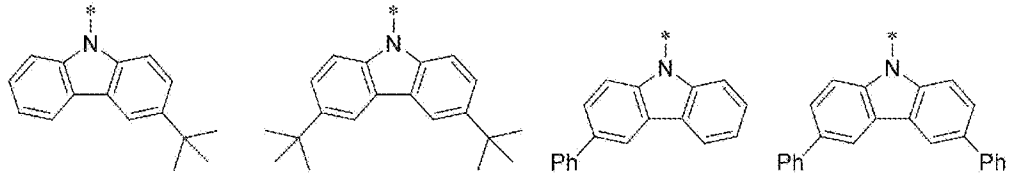
D1

D2

D3

D4

D5

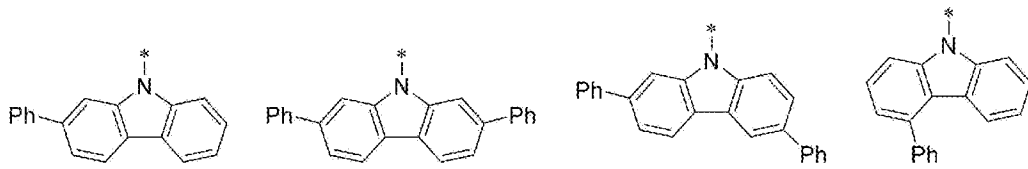


D6

D7

D8

D9

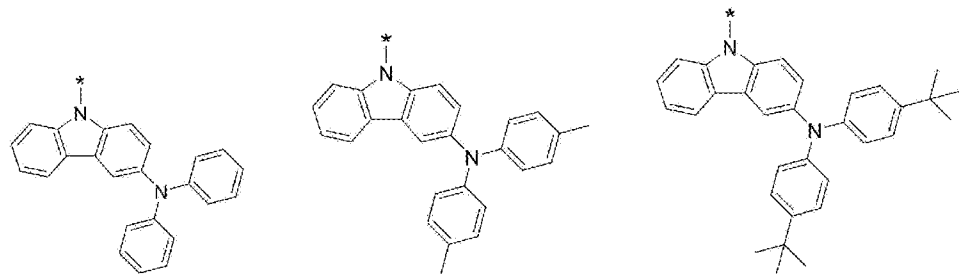


D10

D11

D12

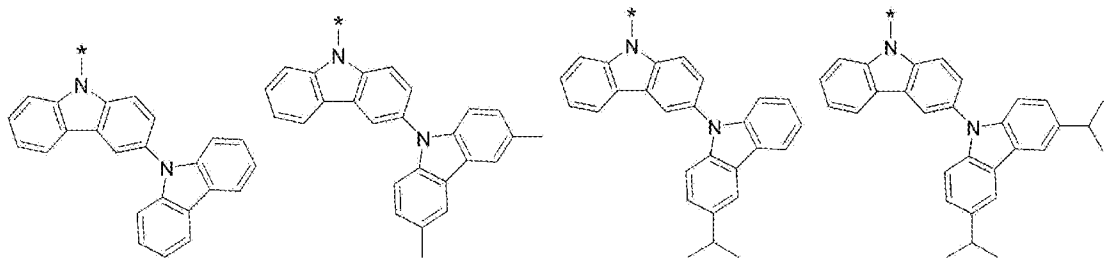
D13



D14

D15

D16

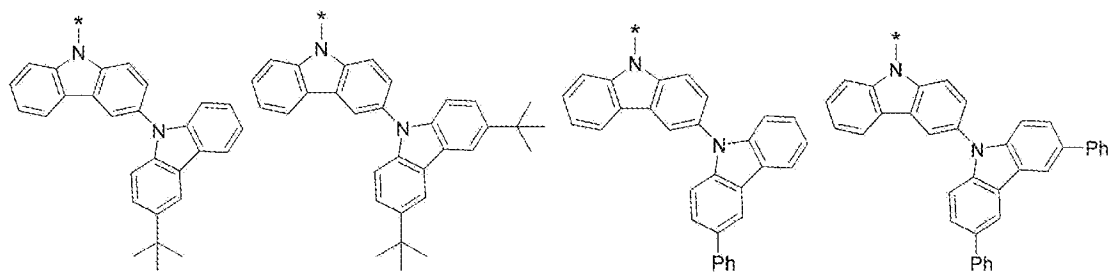


D17

D18

D19

D20

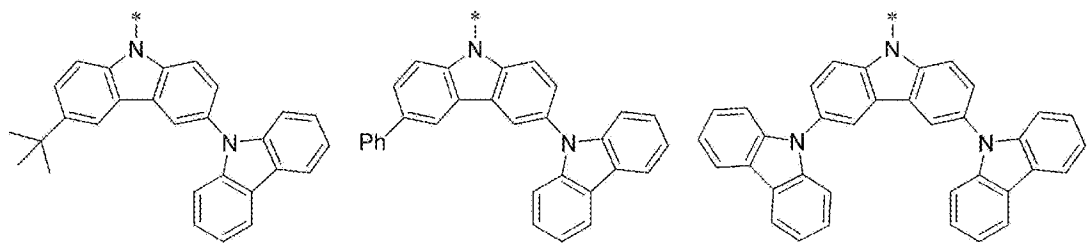


D21

D22

D23

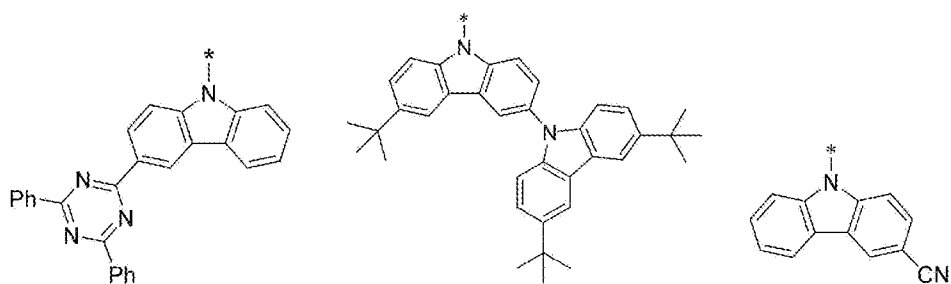
D24



D25

D26

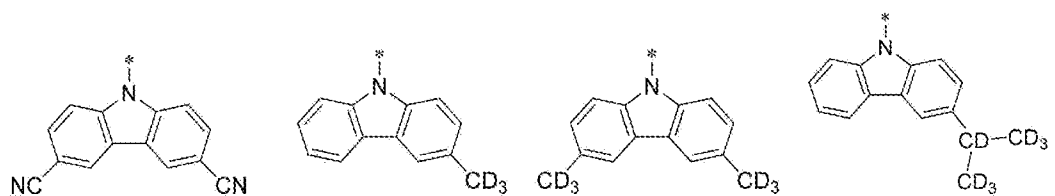
D27



D28

D29

D30

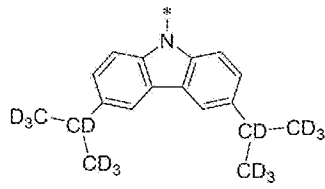


D31

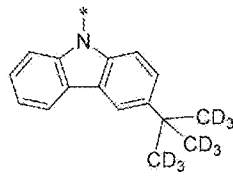
D32

D33

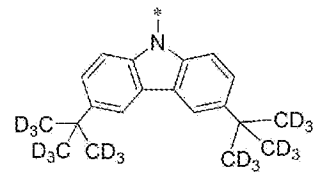
D34



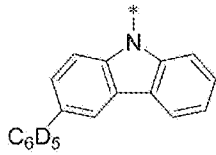
D35



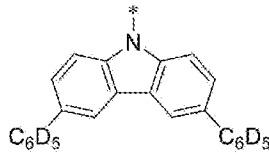
D36



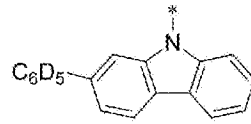
D37



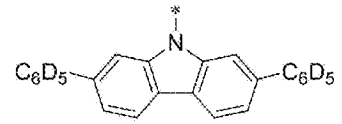
D38



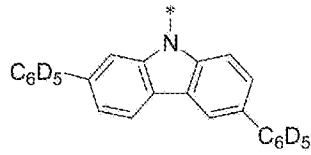
D39



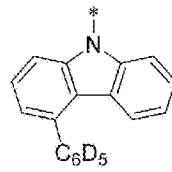
D40



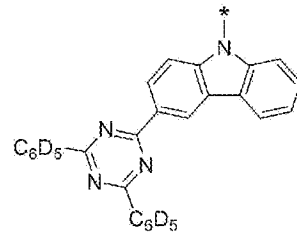
D41



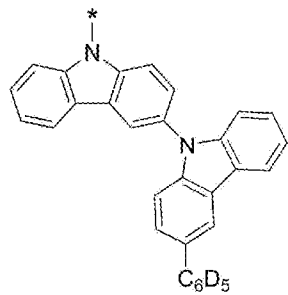
D42



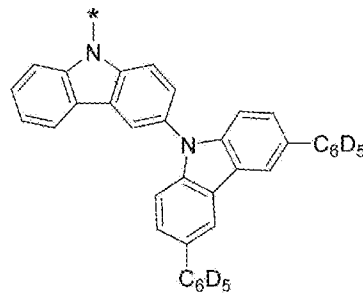
D43



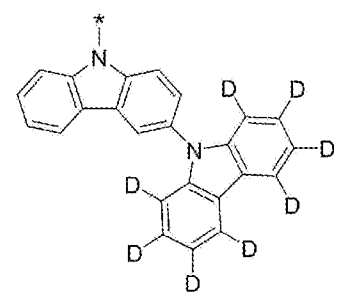
D44



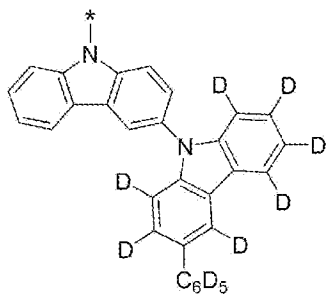
D45



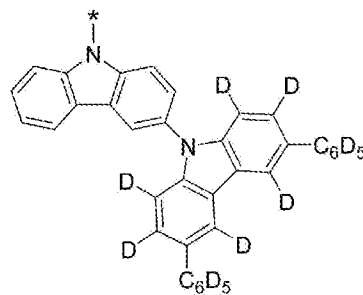
D46



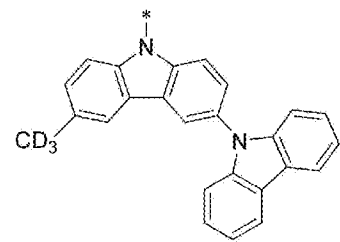
D47



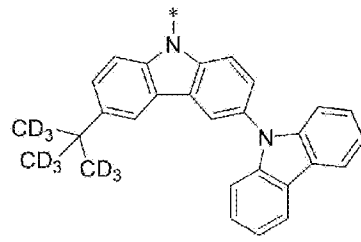
D48



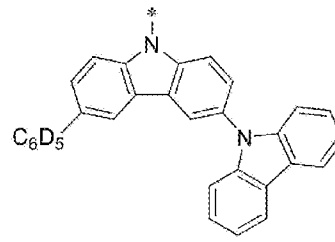
D49



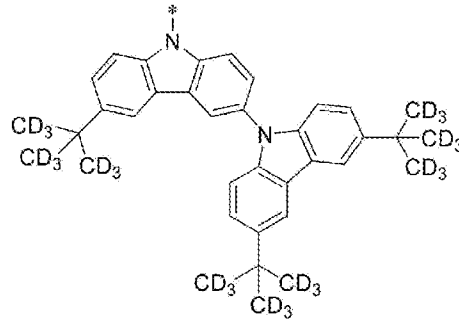
D50



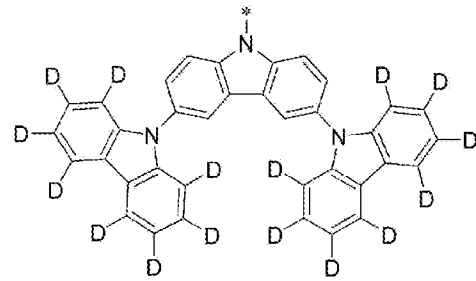
D51



D52



D53

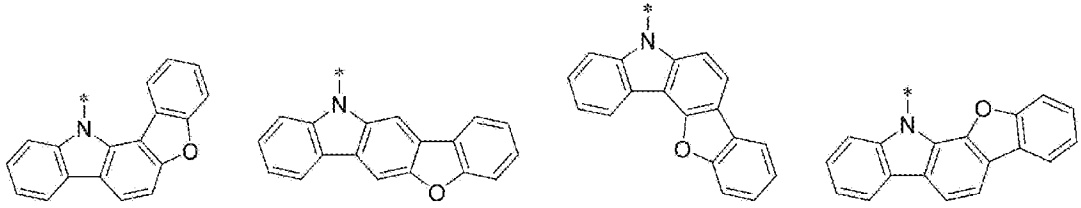


D54

[0032] 上記D 1～D 3 1内に存在する水素原子をすべて重水素原子に置換したものをD 5 5～D 8 5として開示する。

[0033] 次に、4環以上の縮環構造を有するドナー性基の具体例を以下に挙げる。

[化11]

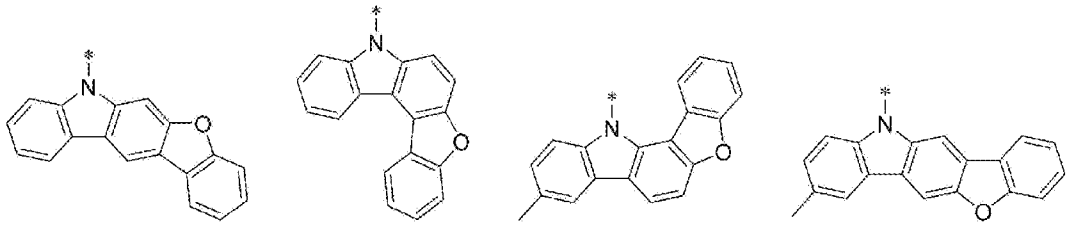


D86

D87

D88

D89

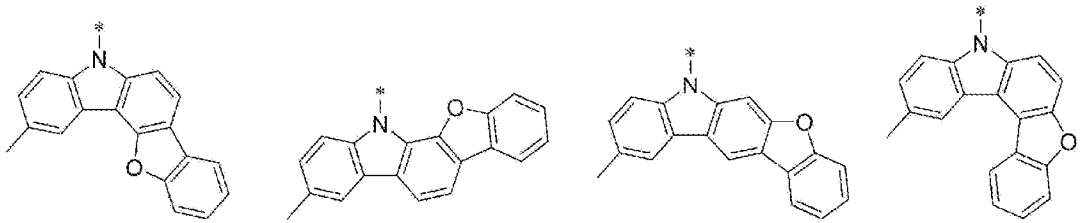


D90

D91

D92

D93

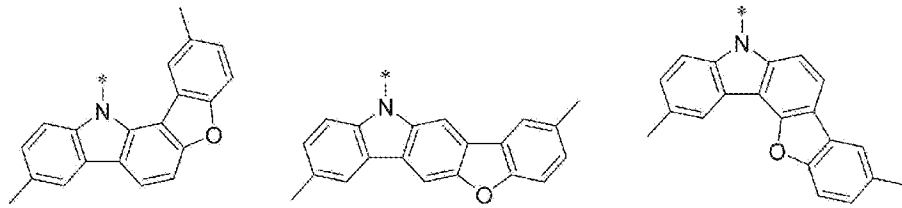


D94

D95

D96

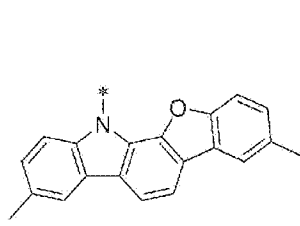
D97



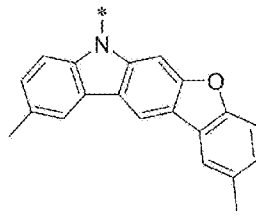
D98

D99

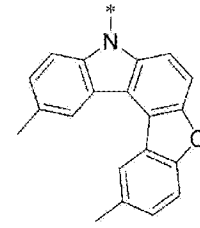
D100



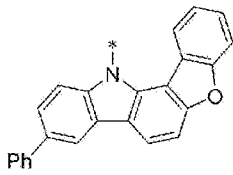
D101



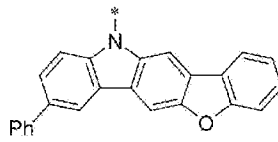
D102



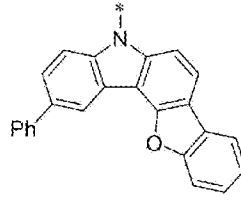
D103



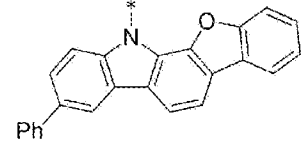
D104



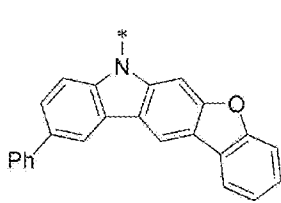
D105



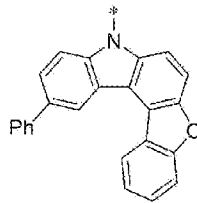
D106



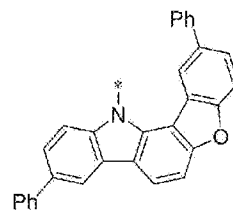
D107



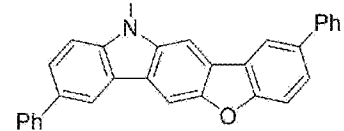
D108



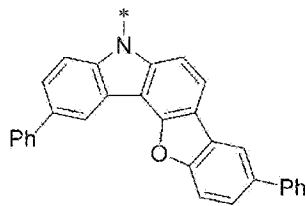
D109



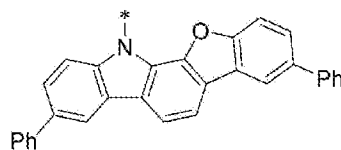
D110



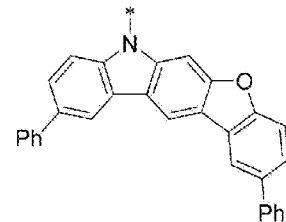
D111



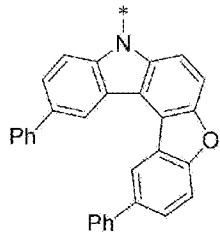
D112



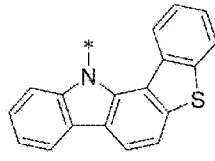
D113



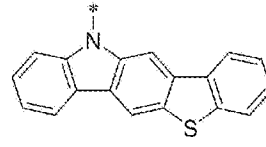
D114



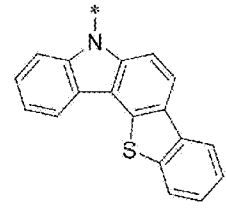
D115



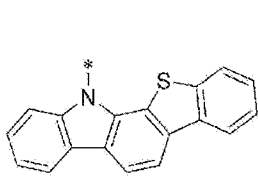
D116



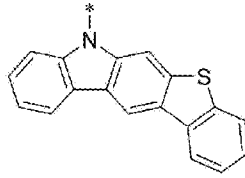
D117



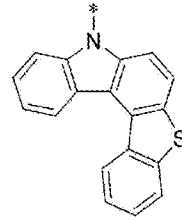
D118



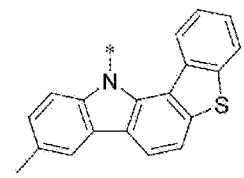
D119



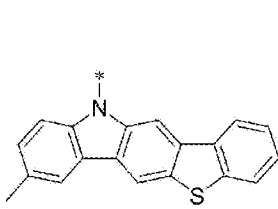
D120



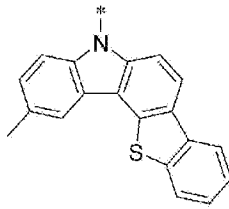
D121



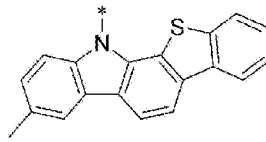
D122



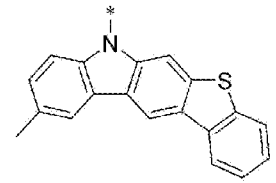
D123



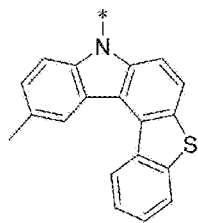
D124



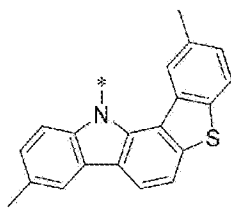
D125



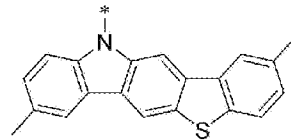
D126



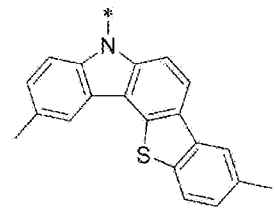
D127



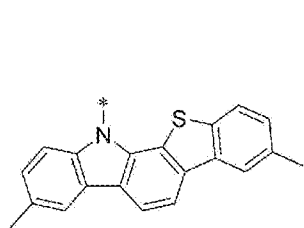
D128



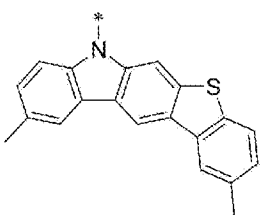
D129



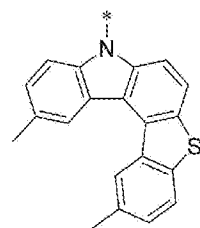
D130



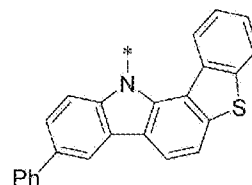
D131



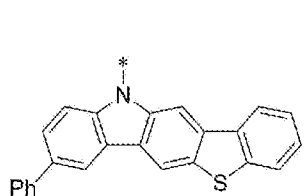
D132



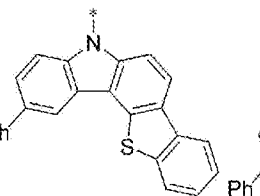
D133



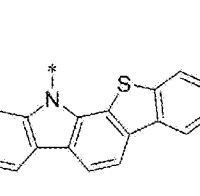
D134



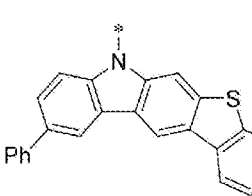
D135



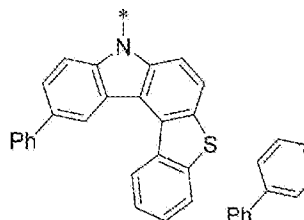
D136



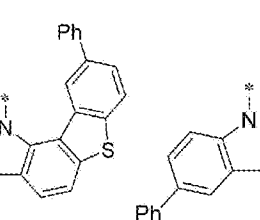
D137



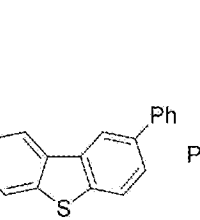
D138



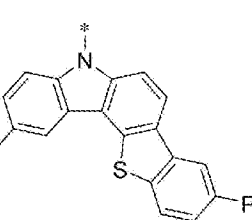
D139



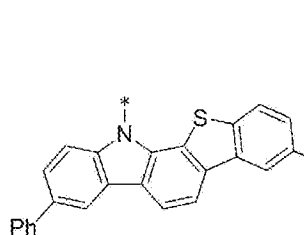
D140



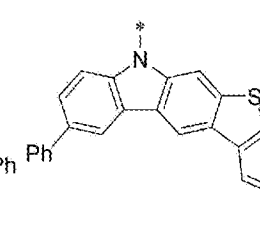
D141



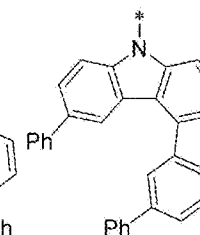
D142



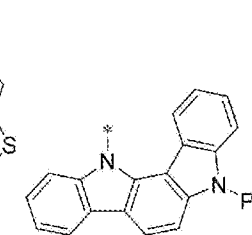
D143



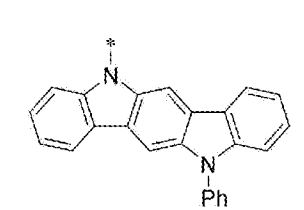
D144



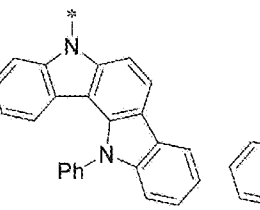
D145



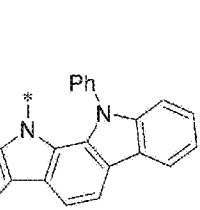
D146



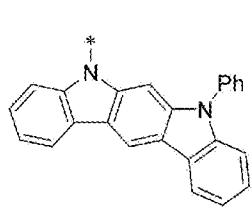
D147



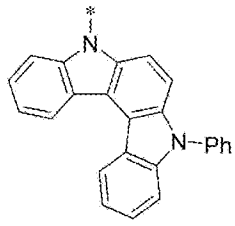
D148



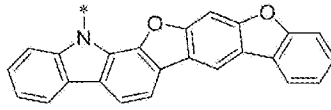
D149



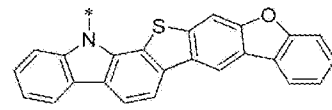
D150



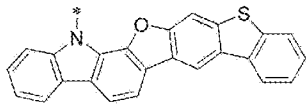
D151



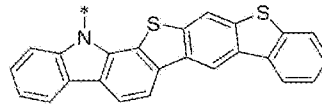
D152



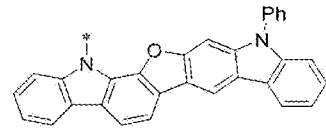
D153



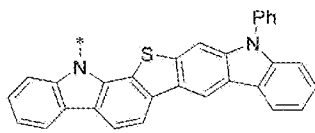
D154



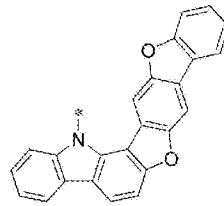
D155



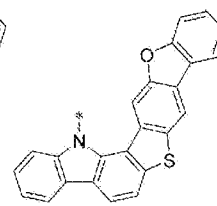
D156



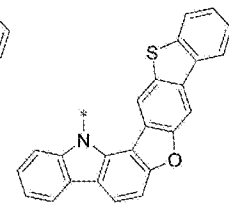
D157



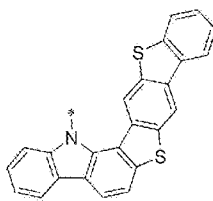
D158



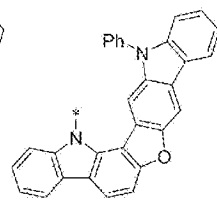
D159



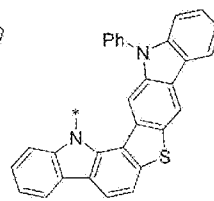
D160



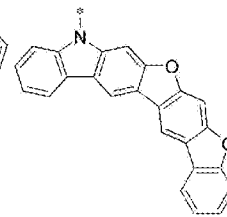
D161



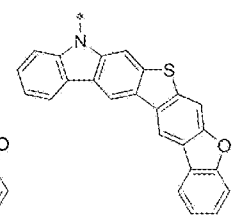
D162



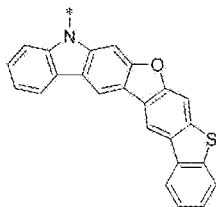
D163



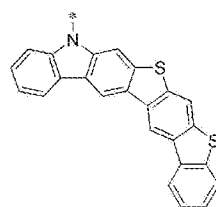
D164



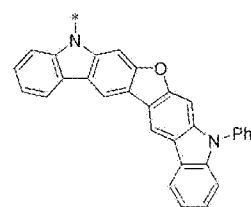
D165



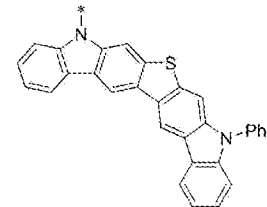
D166



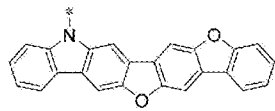
D167



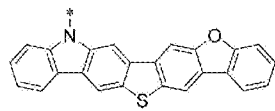
D168



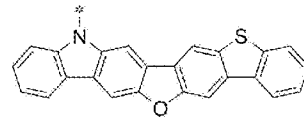
D169



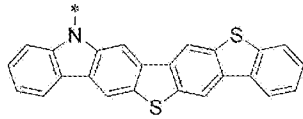
D170



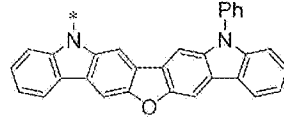
D171



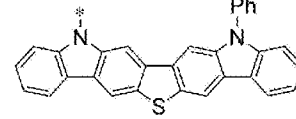
D172



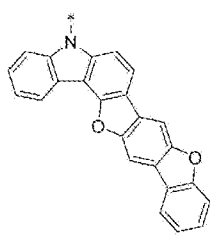
D173



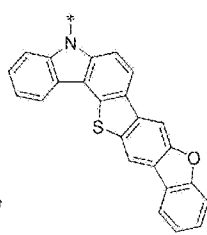
D174



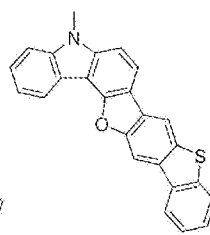
D175



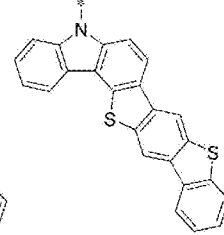
D176



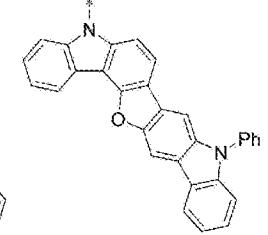
D177



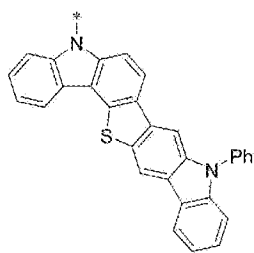
D178



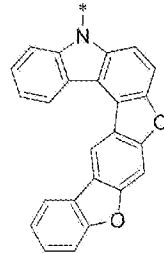
D179



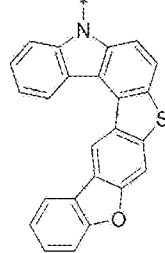
D180



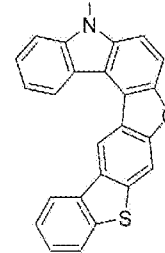
D181



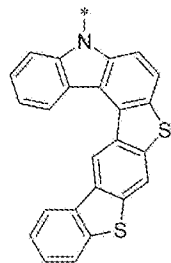
D182



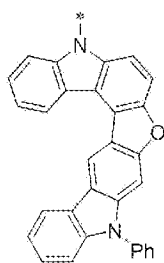
D183



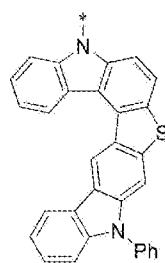
D184



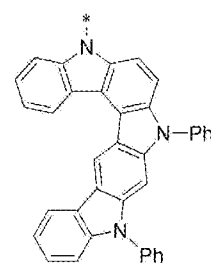
D185



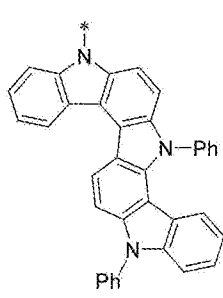
D186



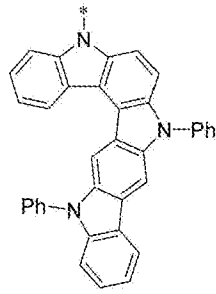
D187



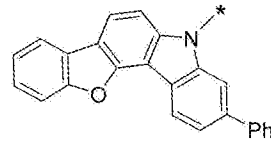
D188



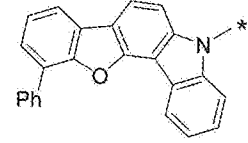
D189



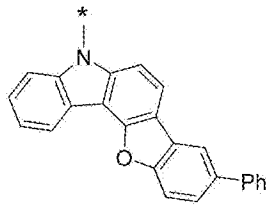
D190



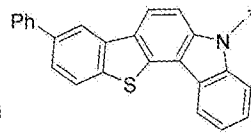
D191



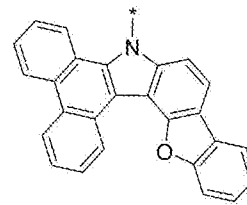
D192



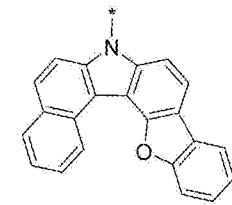
D193



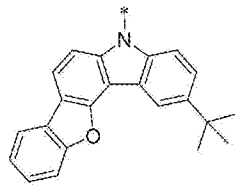
D194



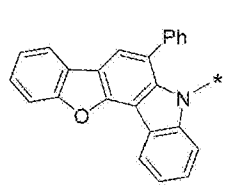
D195



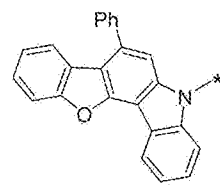
D196



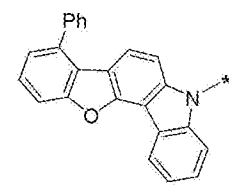
D197



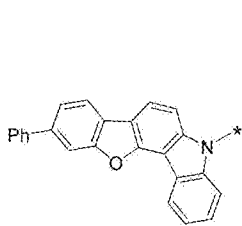
D198



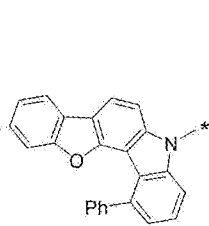
D199



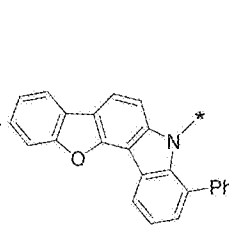
D200



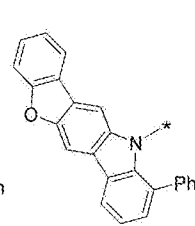
D201



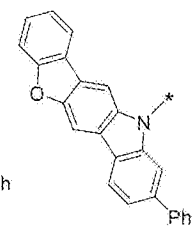
D202



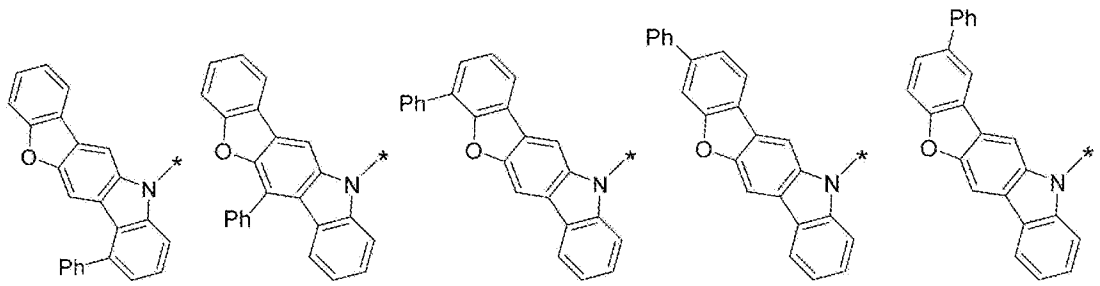
D203



D204



D205



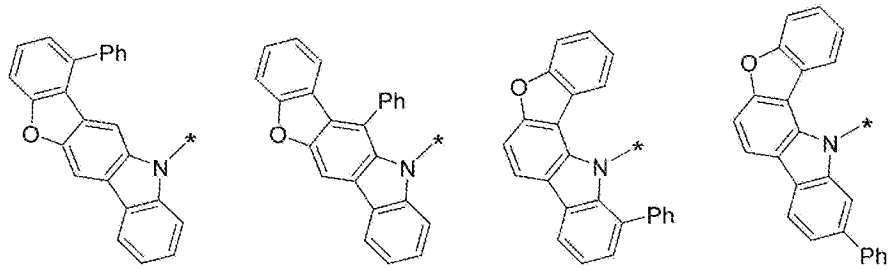
D206

D207

D208

D209

D210

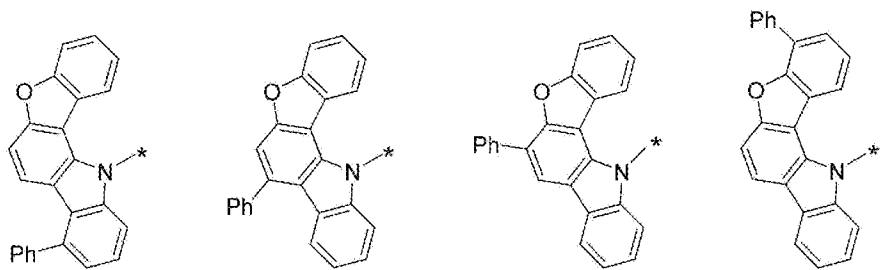


D211

D212

D213

D214

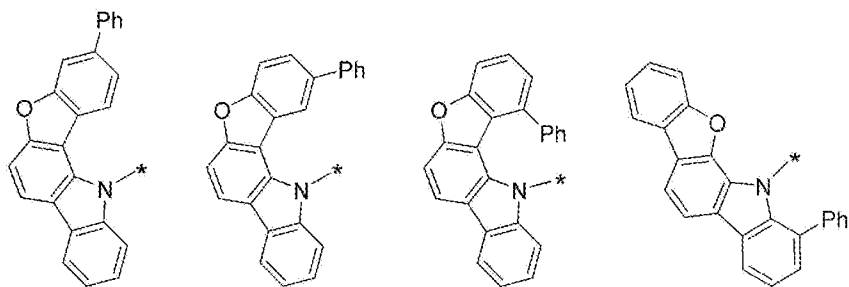


D215

D216

D217

D218

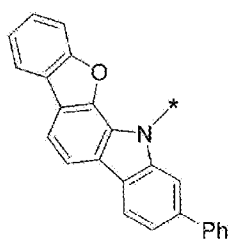


D219

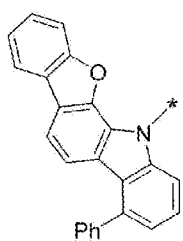
D220

D221

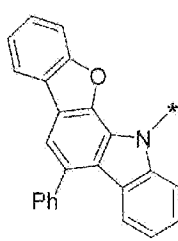
D222



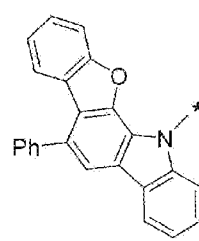
D223



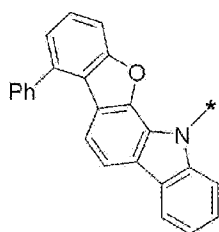
D224



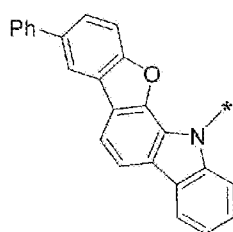
D225



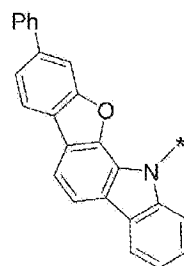
D226



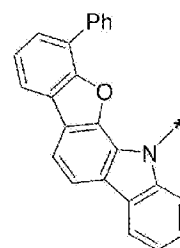
D227



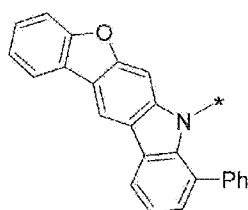
D228



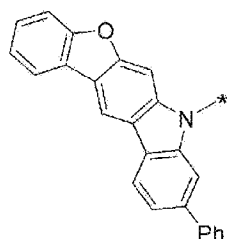
D229



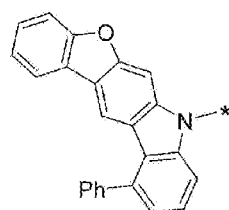
D230



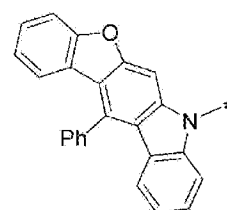
D231



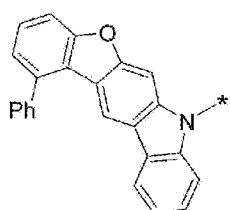
D232



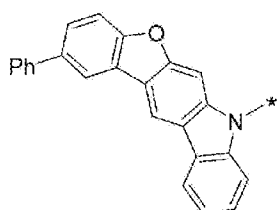
D233



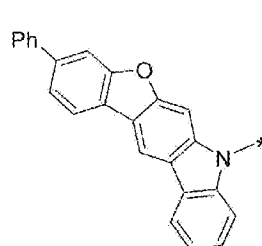
D234



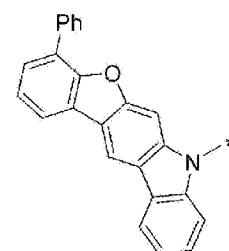
D235



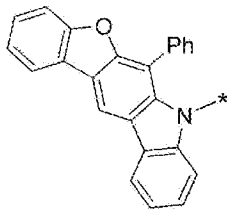
D236



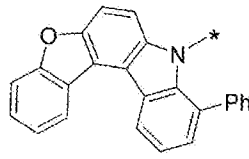
D237



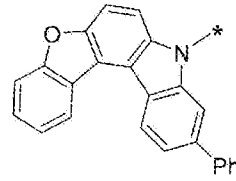
D238



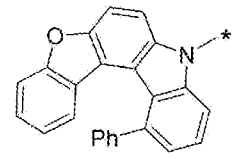
D239



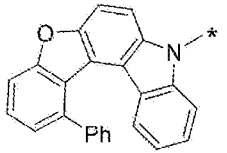
D240



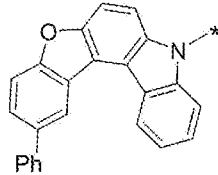
D241



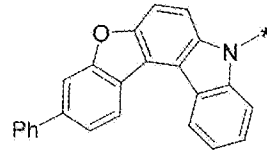
D242



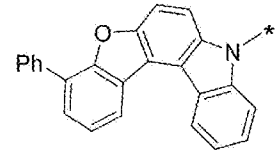
D243



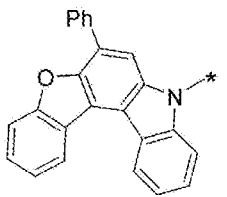
D244



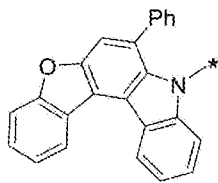
D245



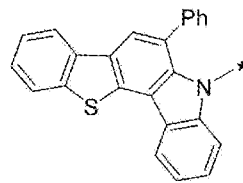
D246



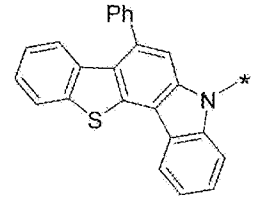
D247



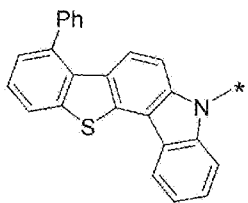
D248



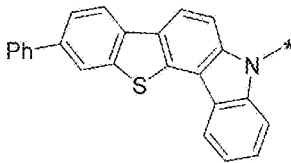
D249



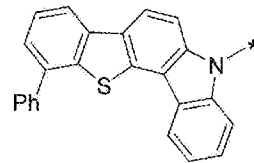
D250



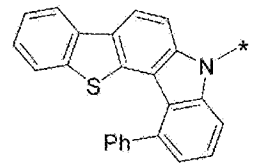
D251



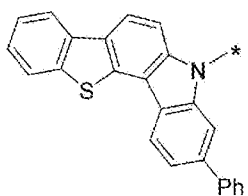
D252



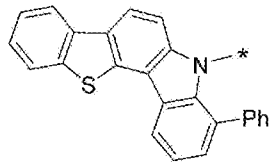
D253



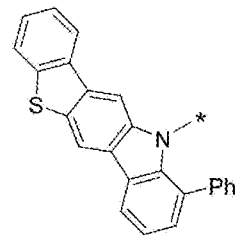
D254



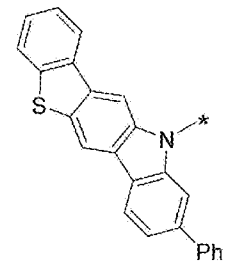
D255



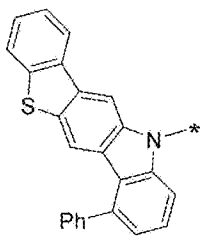
D256



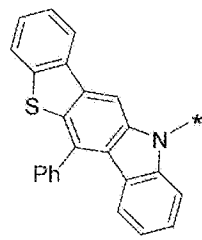
D257



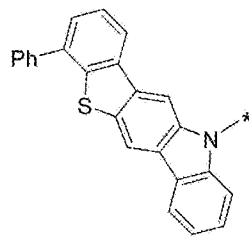
D258



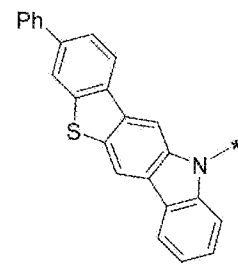
D259



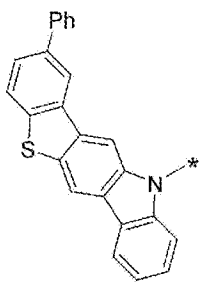
D260



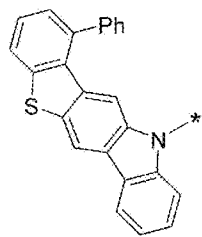
D261



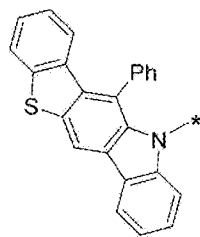
D262



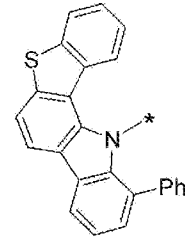
D263



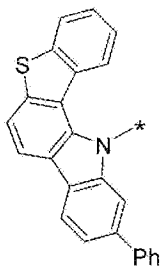
D264



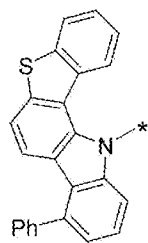
D265



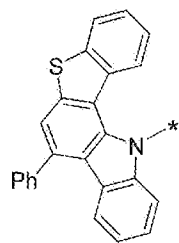
D266



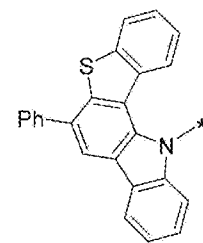
D267



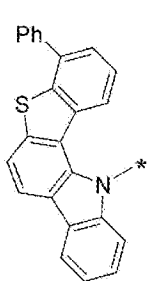
D268



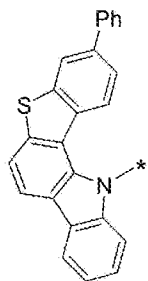
D269



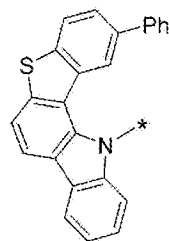
D270



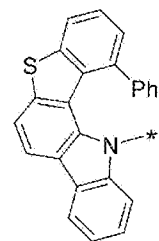
D271



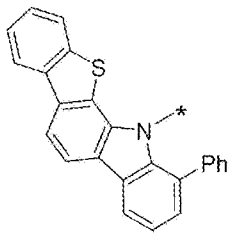
D272



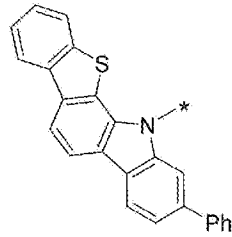
D273



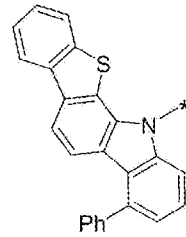
D274



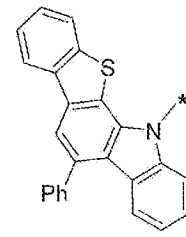
D275



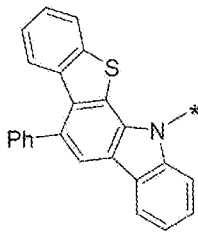
D276



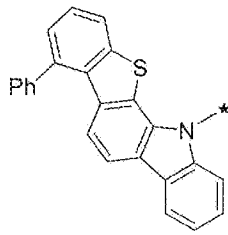
D277



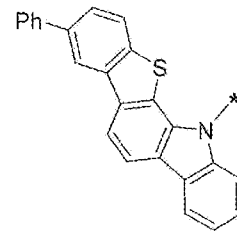
D278



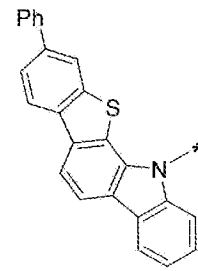
D279



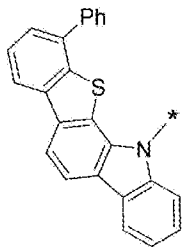
D280



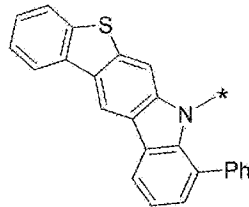
D281



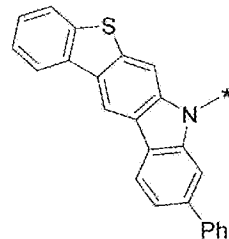
D282



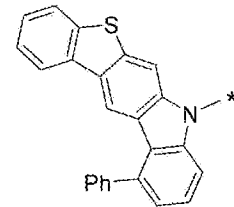
D283



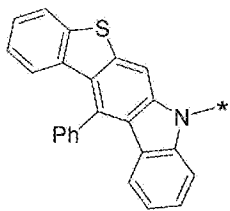
D284



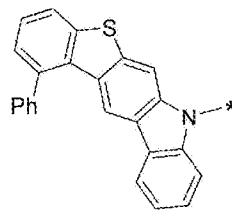
D285



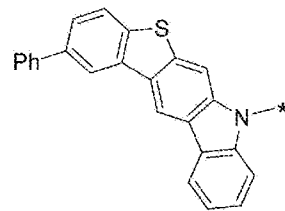
D286



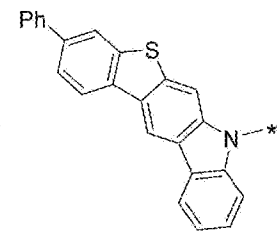
D287



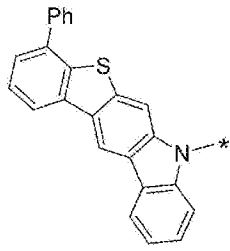
D288



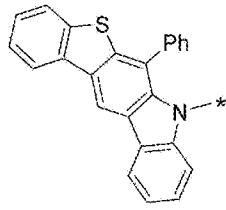
D289



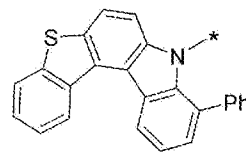
D290



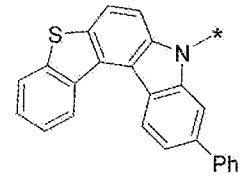
D291



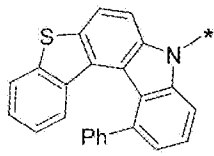
D292



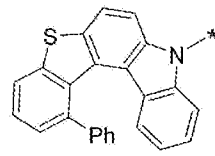
D293



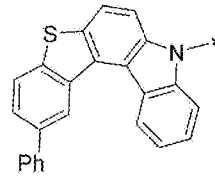
D294



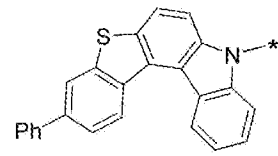
D295



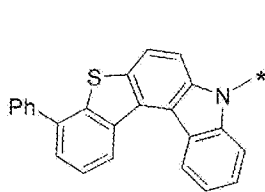
D296



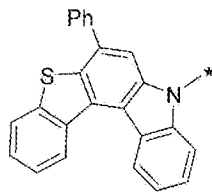
D297



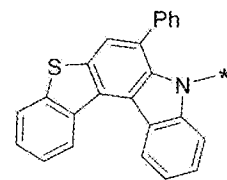
D298



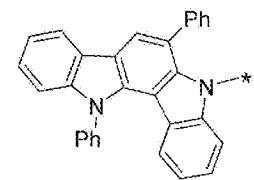
D299



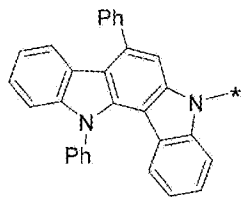
D300



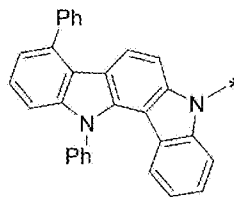
D301



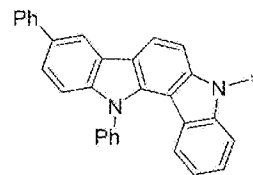
D302



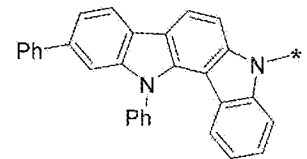
D303



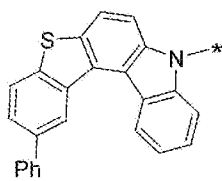
D304



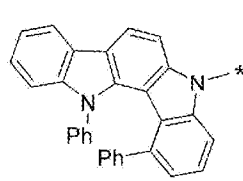
D305



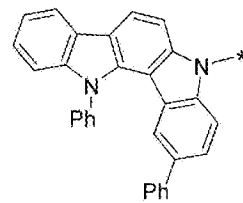
D306



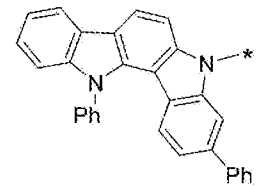
D307



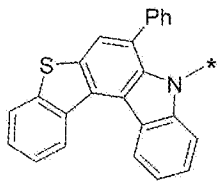
D308



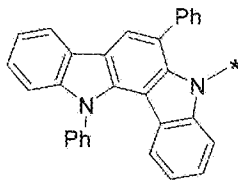
D309



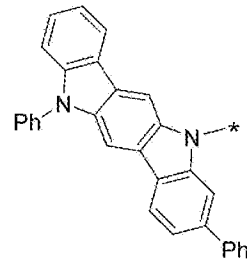
D310



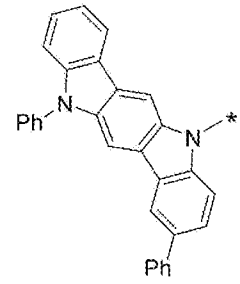
D311



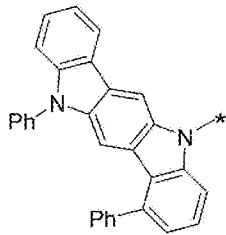
D312



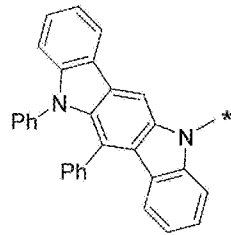
D313



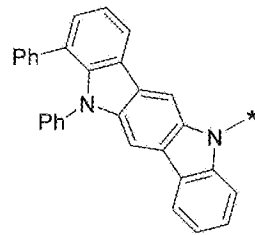
D314



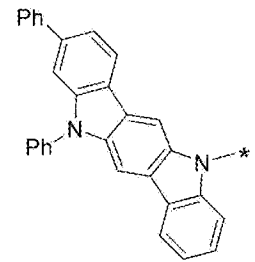
D315



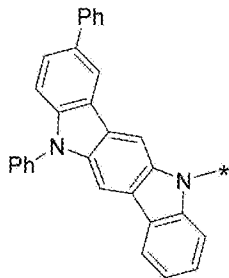
D316



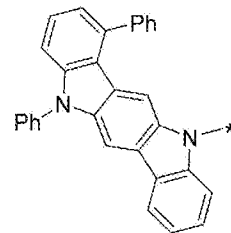
D317



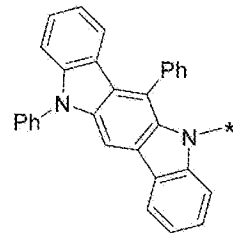
D318



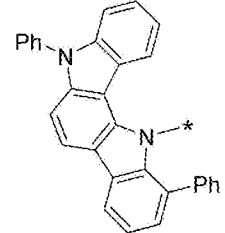
D319



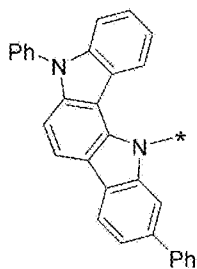
D320



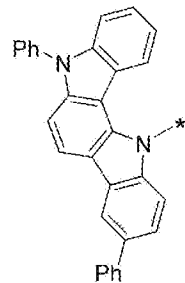
D321



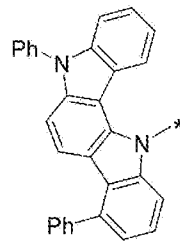
D322



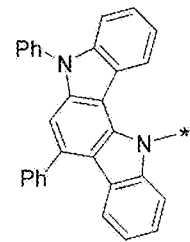
D323



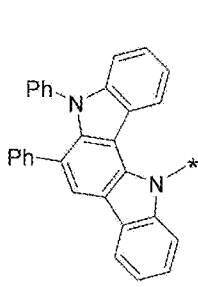
D324



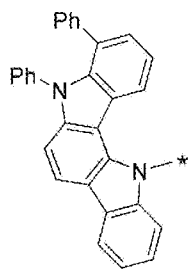
D325



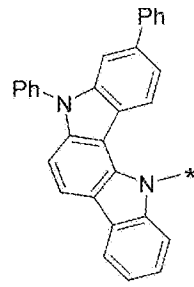
D326



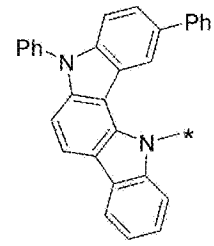
D327



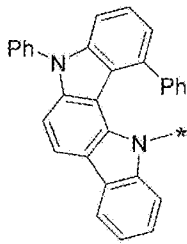
D328



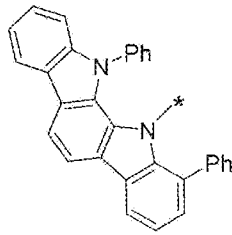
D329



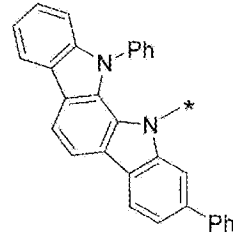
D330



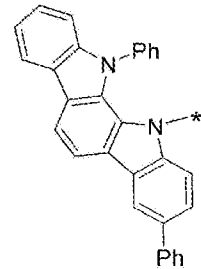
D331



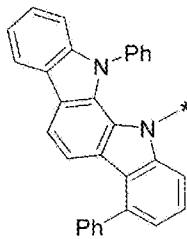
D332



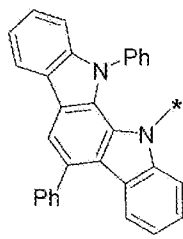
D333



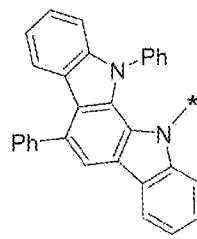
D334



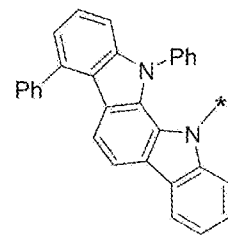
D335



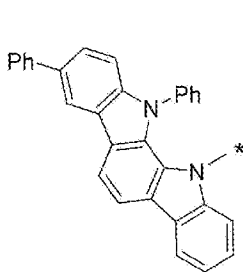
D336



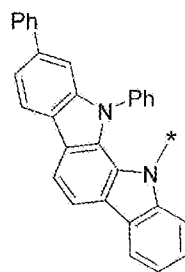
D337



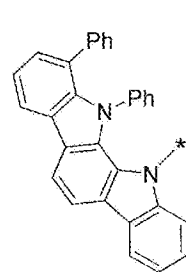
D338



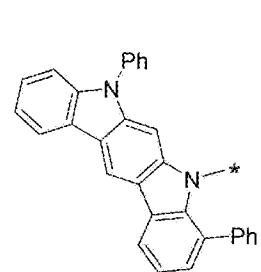
D339



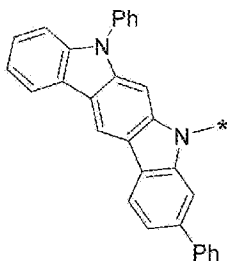
D340



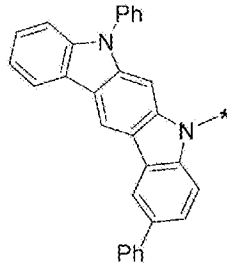
D341



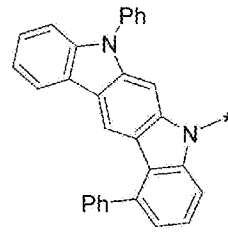
D342



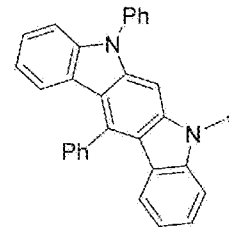
D343



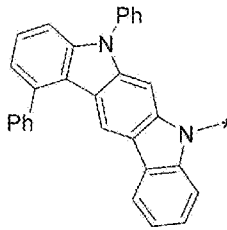
D344



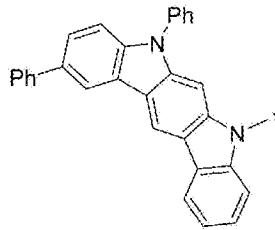
D345



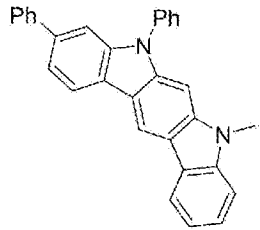
D346



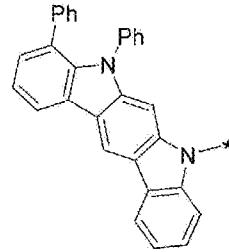
D347



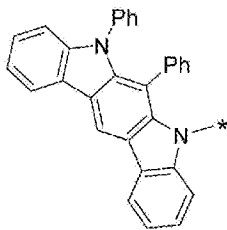
D348



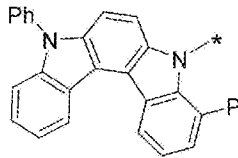
D349



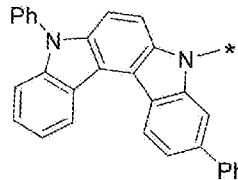
D350



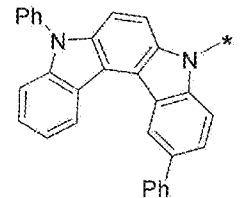
D351



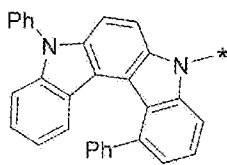
D352



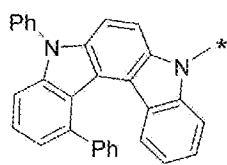
D353



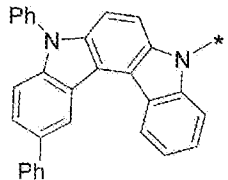
D354



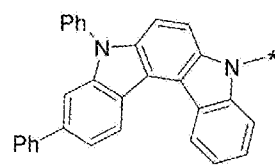
D355



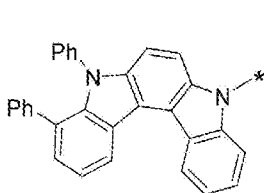
D356



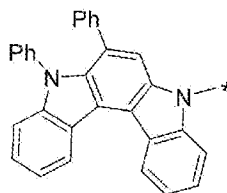
D357



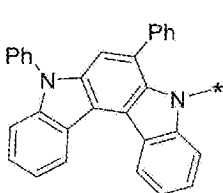
D358



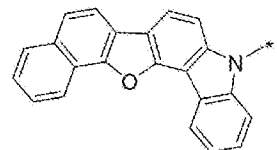
D359



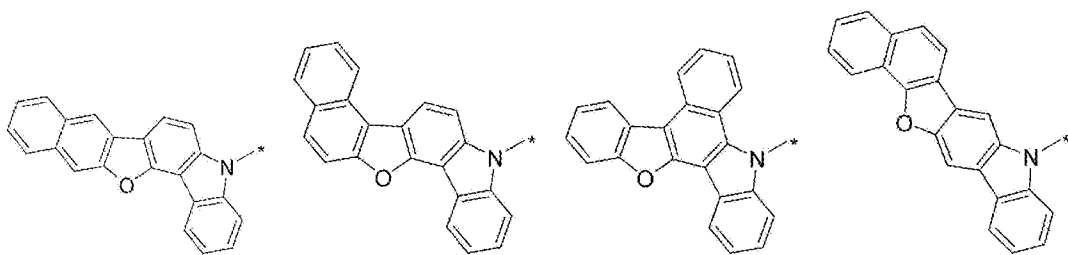
D360



D361



D362

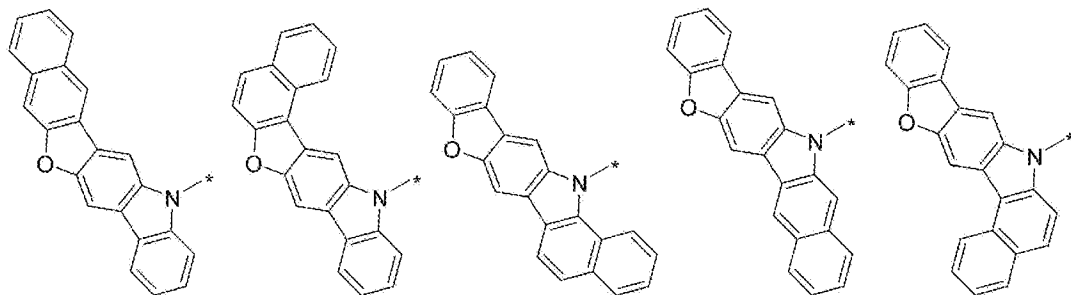


D363

D364

D365

D366



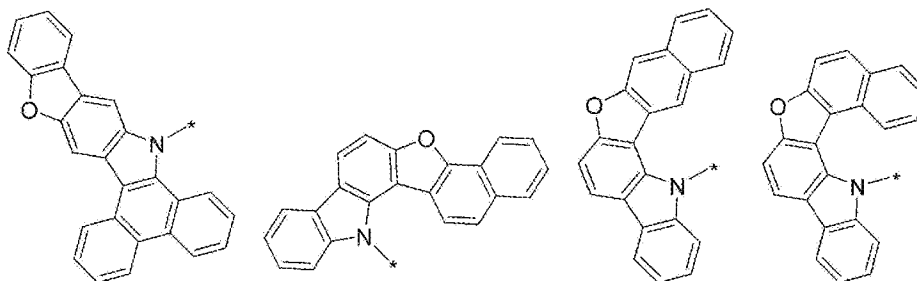
D367

D368

D369

D370

D371

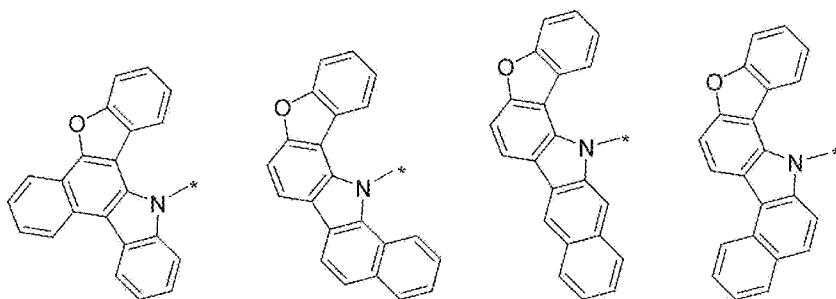


D372

D373

D374

D375

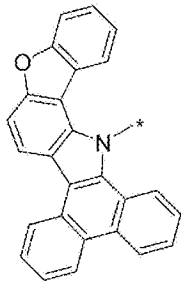


D376

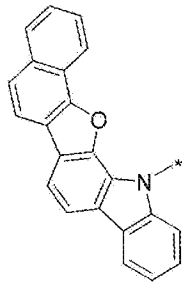
D377

D378

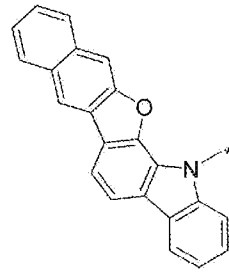
D379



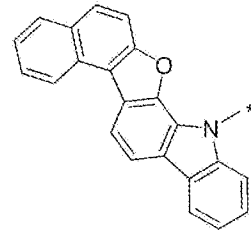
D380



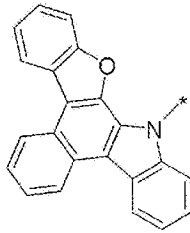
D381



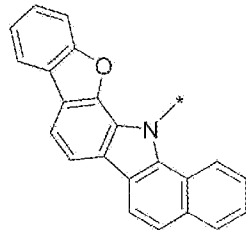
D382



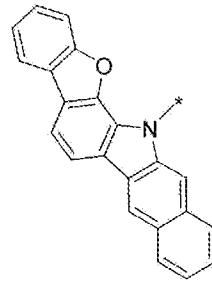
D383



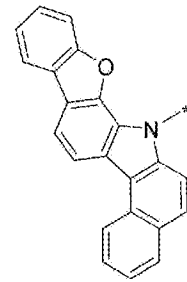
D384



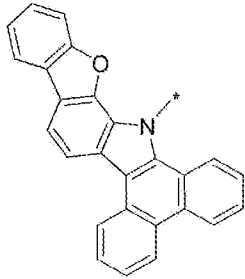
D385



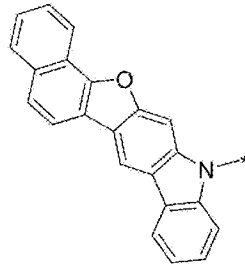
D386



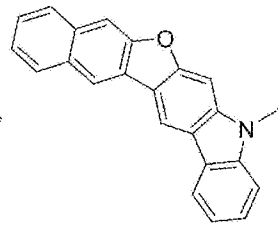
D387



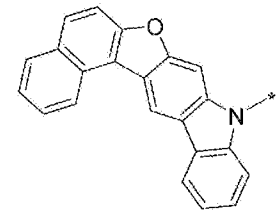
D388



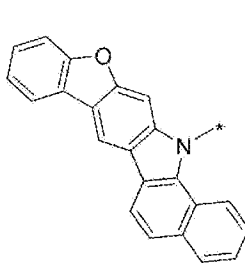
D389



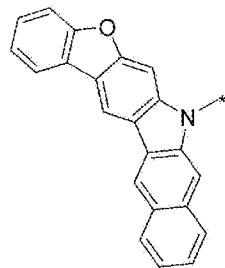
D390



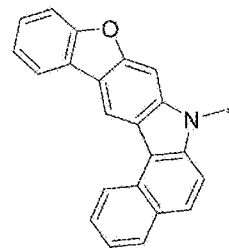
D391



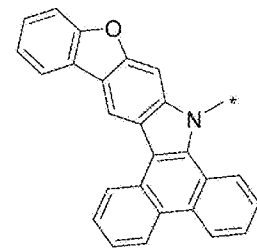
D392



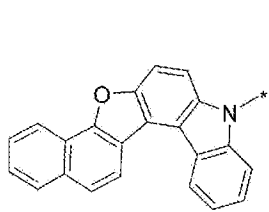
D393



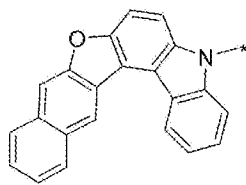
D394



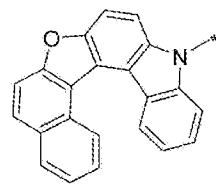
D395



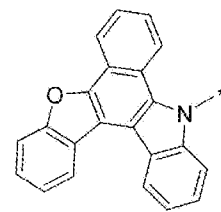
D396



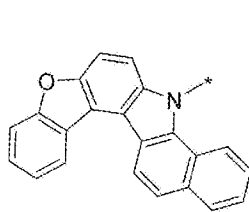
D397



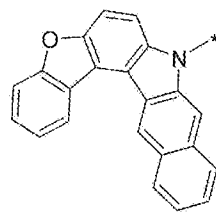
D398



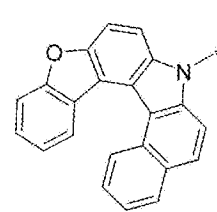
D399



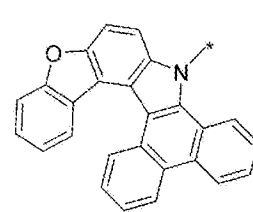
D400



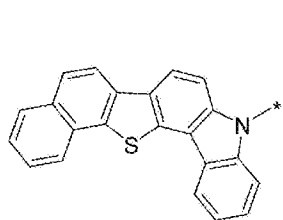
D401



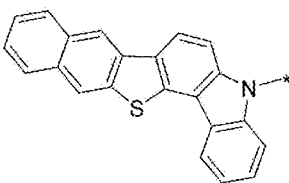
D402



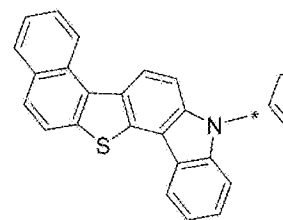
D403



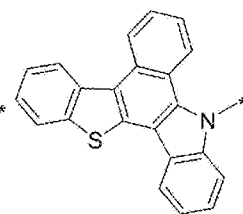
D404



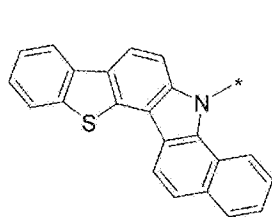
D405



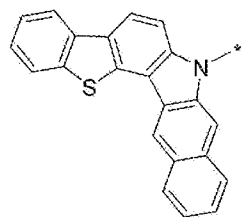
D406



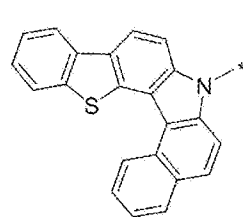
D407



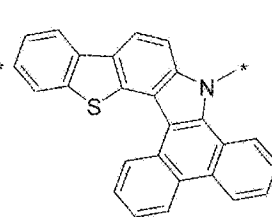
D408



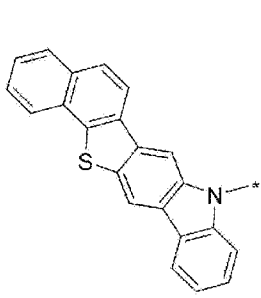
D409



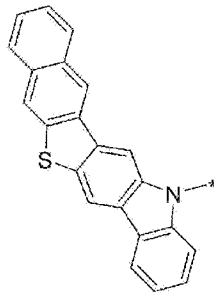
D410



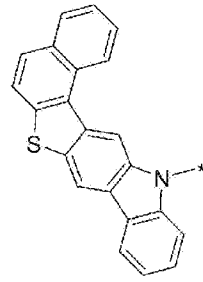
D411



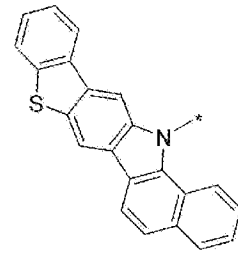
D412



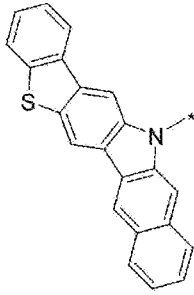
D413



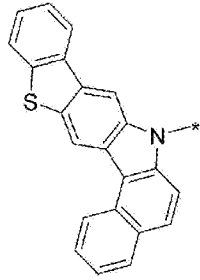
D414



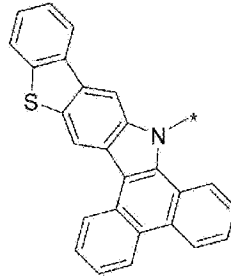
D415



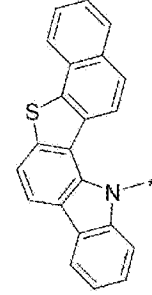
D416



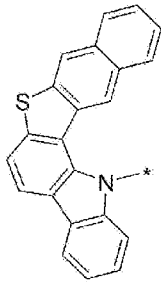
D417



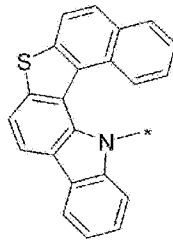
D418



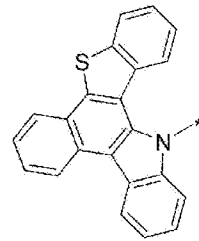
D419



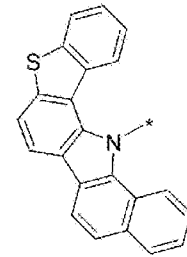
D420



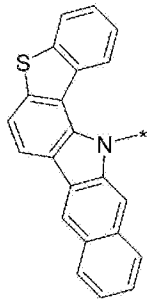
D421



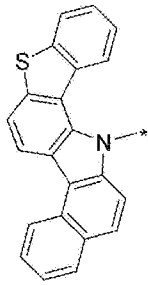
D422



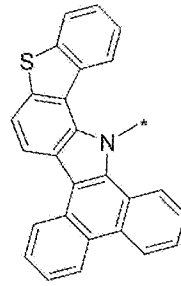
D423



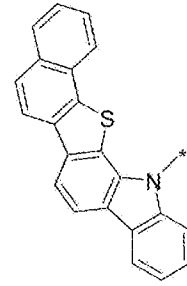
D424



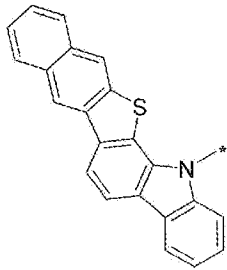
D425



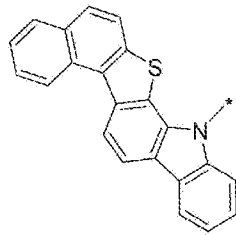
D426



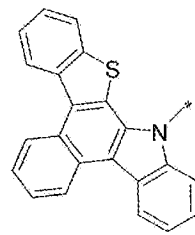
D427



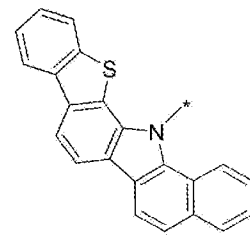
D428



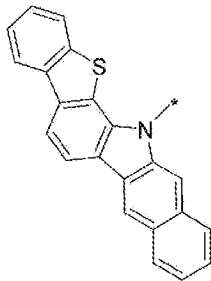
D429



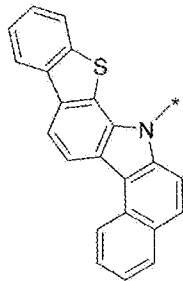
D430



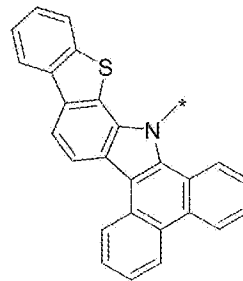
D431



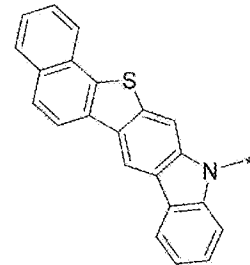
D432



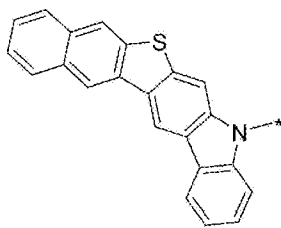
D433



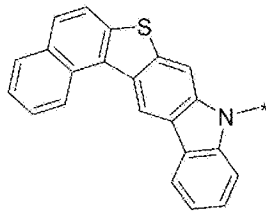
D434



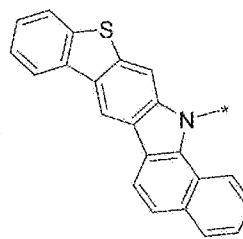
D435



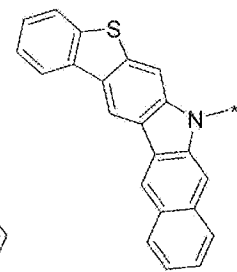
D436



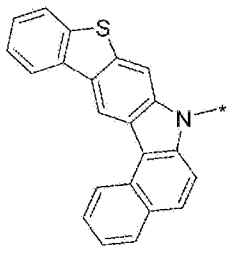
D437



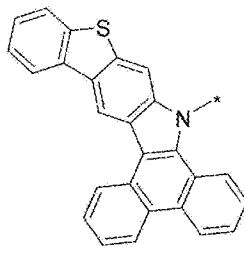
D438



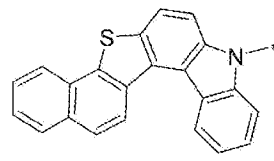
D439



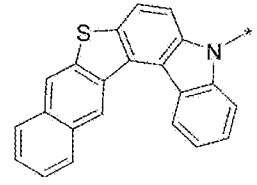
D440



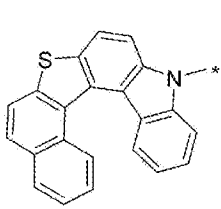
D441



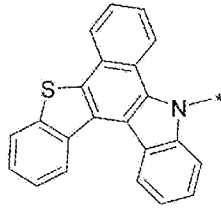
D442



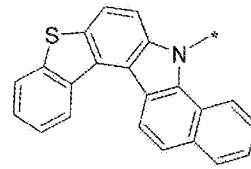
D443



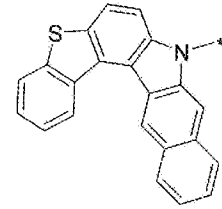
D444



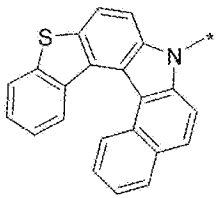
D445



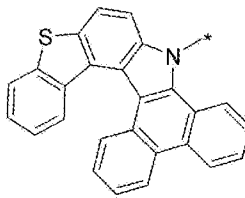
D446



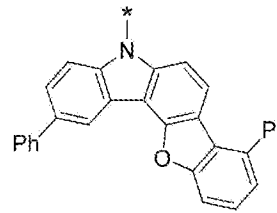
D447



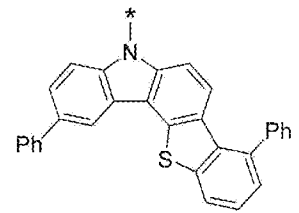
D448



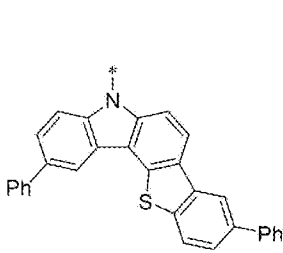
D449



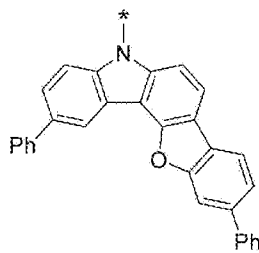
D450



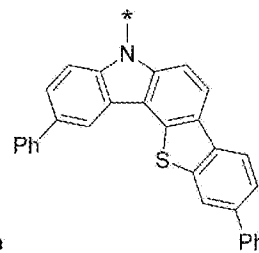
D451



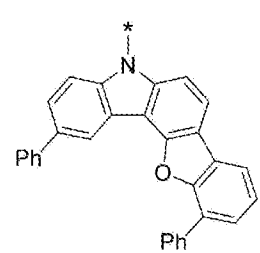
D452



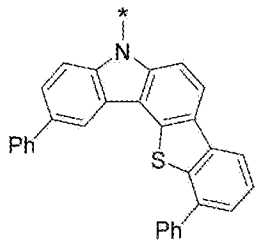
D453



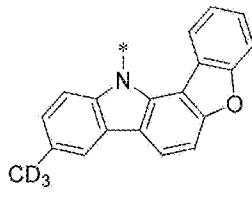
D454



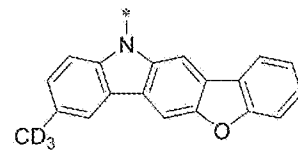
D455



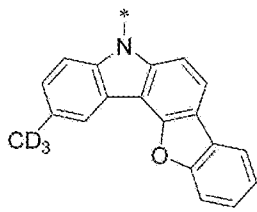
D456



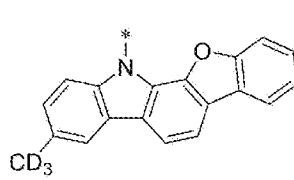
D457



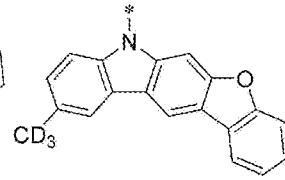
D458



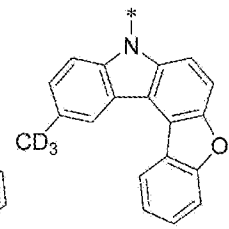
D459



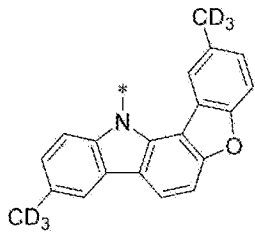
D460



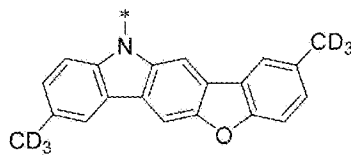
D461



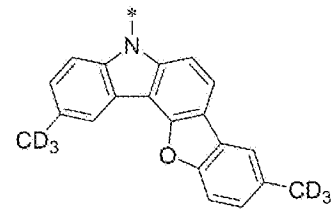
D462



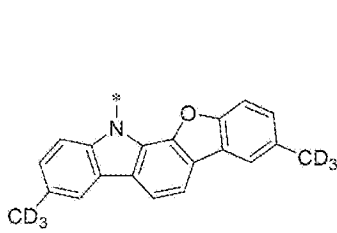
D463



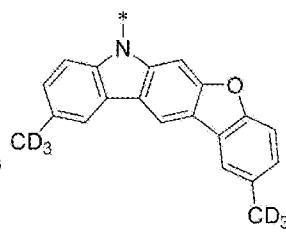
D464



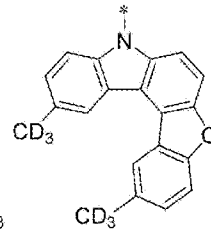
D465



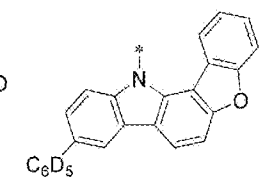
D466



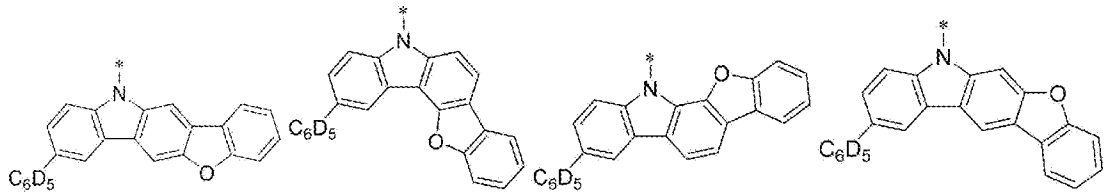
D467



D468



D469

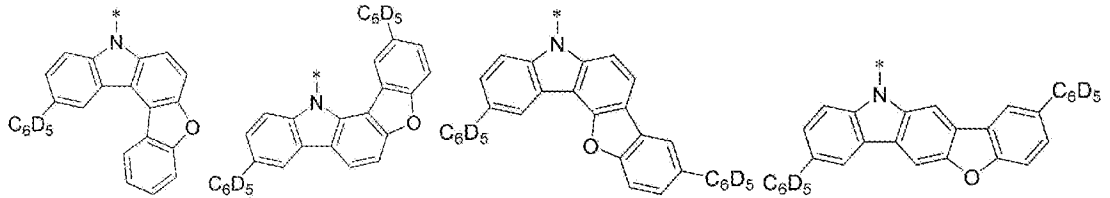


D470

D471

D472

D473

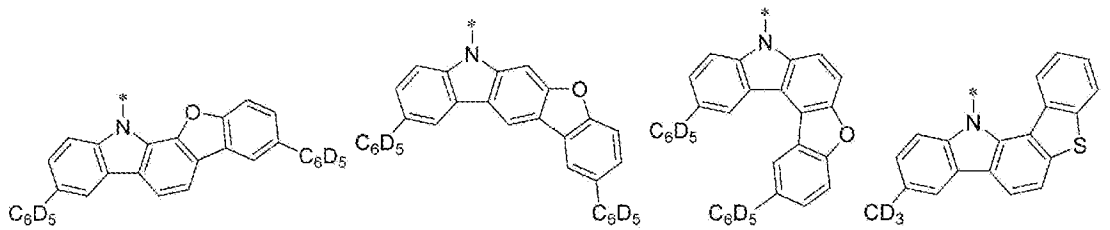


D474

D475

D476

D477

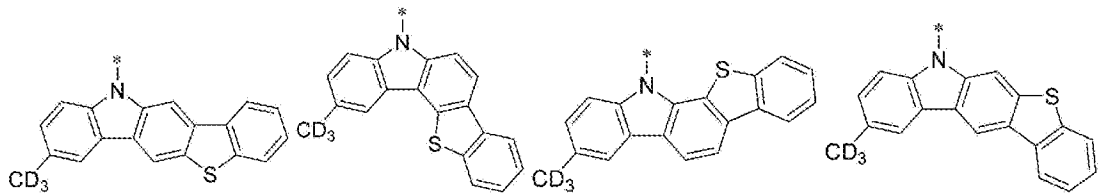


D478

D479

D480

D481

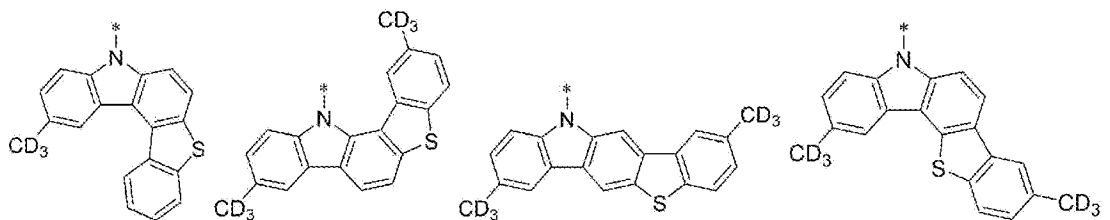


D482

D483

D484

D485

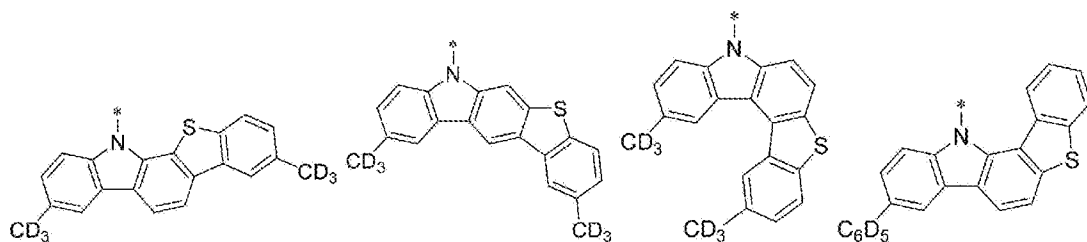


D486

D487

D488

D489

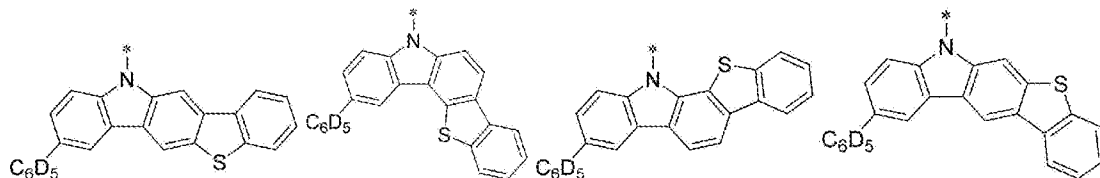


D490

D491

D492

D493

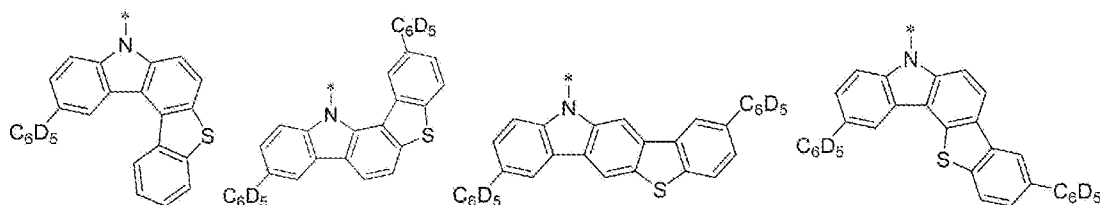


D494

D495

D496

D497

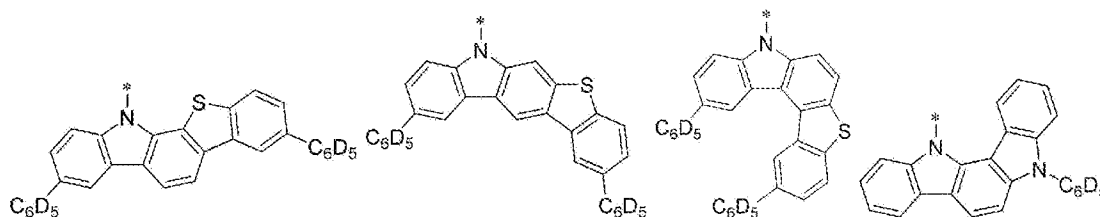


D498

D499

D500

D501

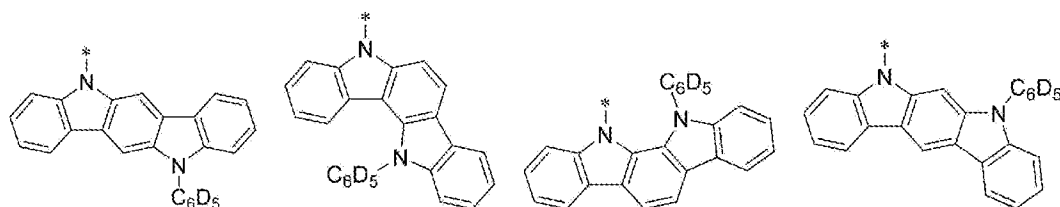


D502

D503

D504

D505

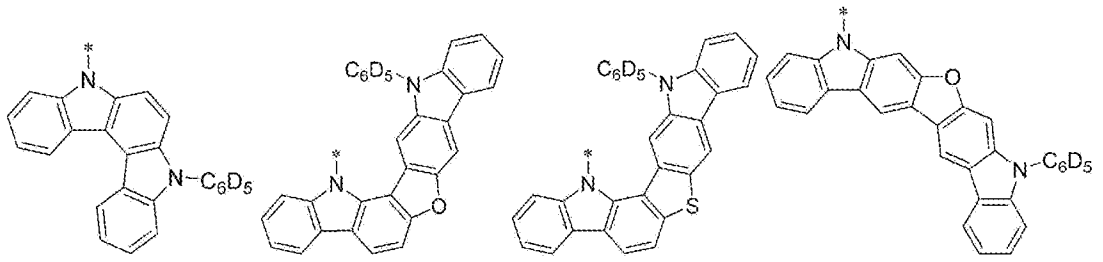


D506

D507

D508

D509

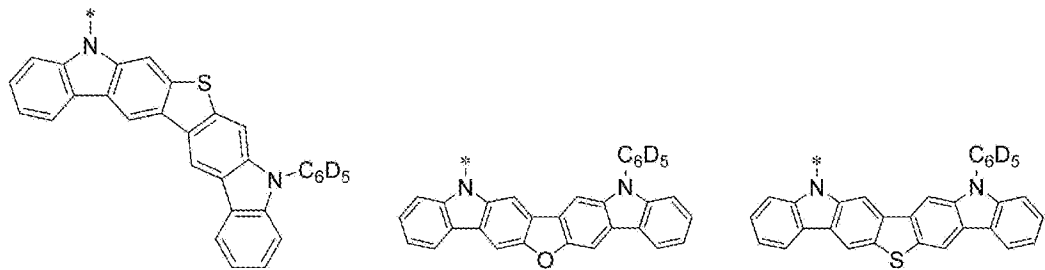


D510

D511

D512

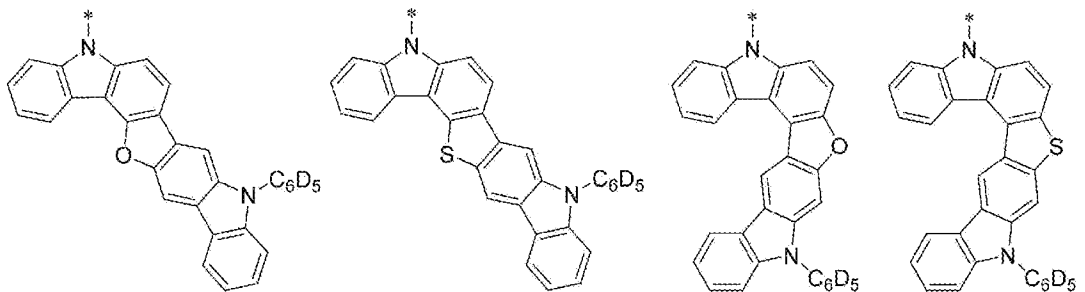
D513



D514

D515

D516

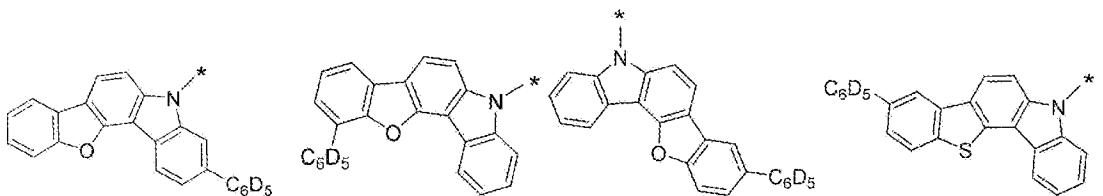


D517

D518

D519

D520

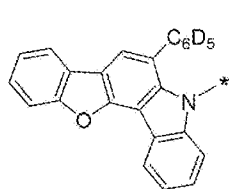


D521

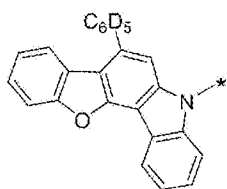
D522

D523

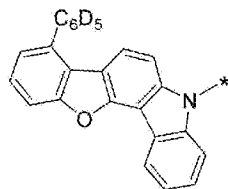
D524



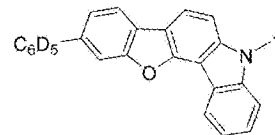
D525



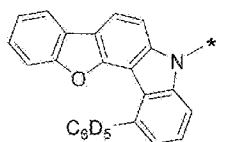
D526



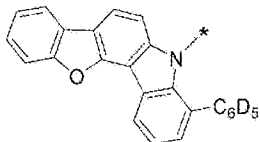
D527



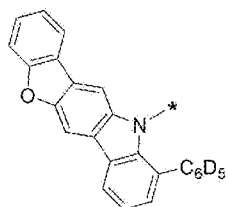
D528



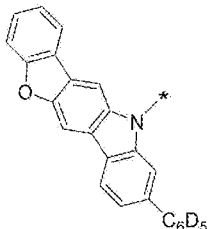
D529



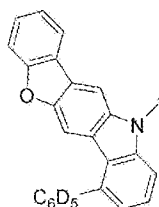
D530



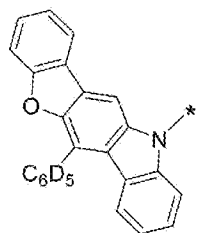
D531



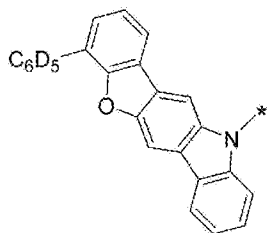
D532



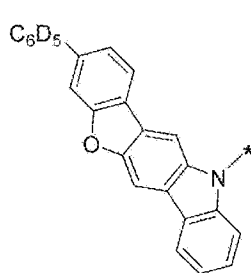
D533



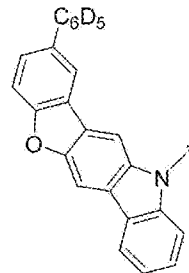
D534



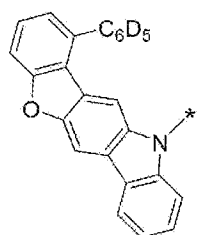
D535



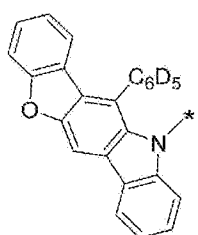
D536



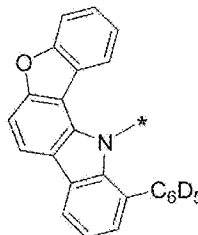
D537



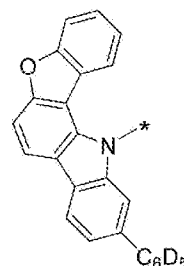
D538



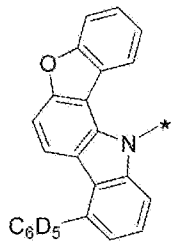
D539



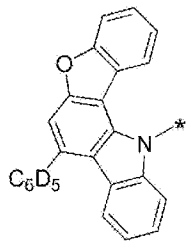
D540



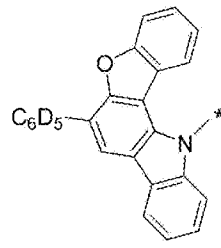
D541



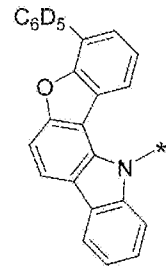
D542



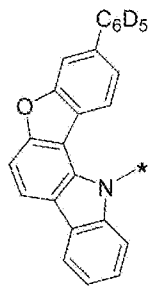
D543



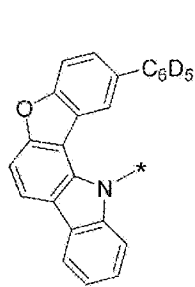
D544



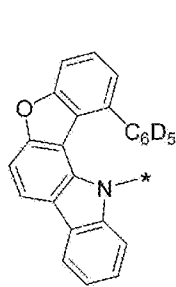
D545



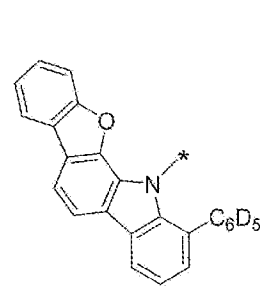
D546



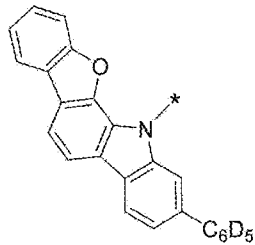
D547



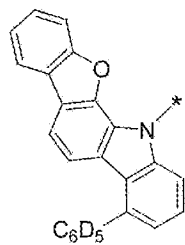
D548



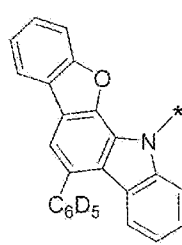
D549



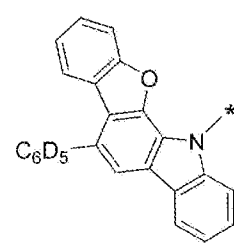
D550



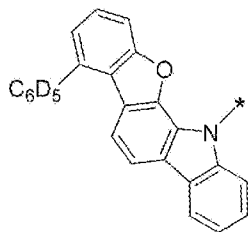
D551



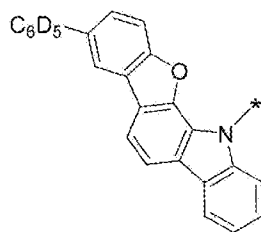
D552



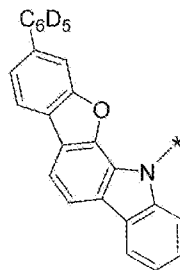
D553



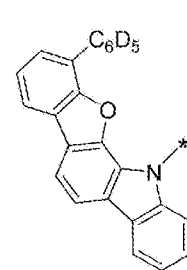
D554



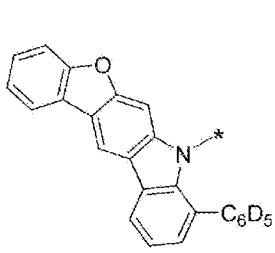
D555



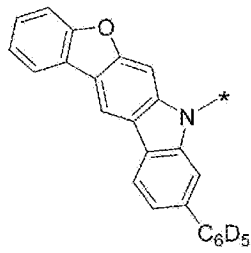
D556



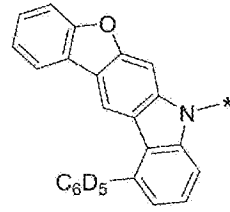
D557



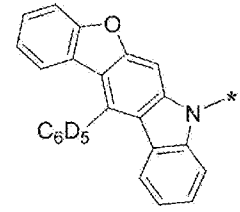
D558



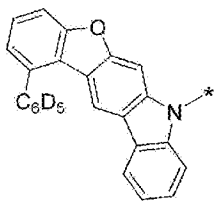
D559



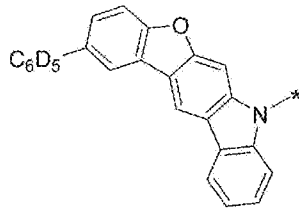
D560



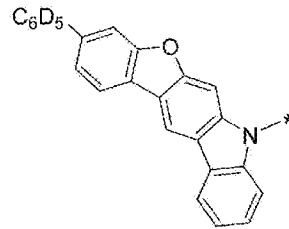
D561



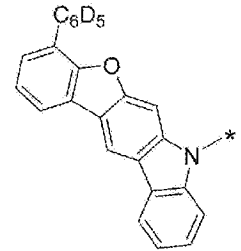
D562



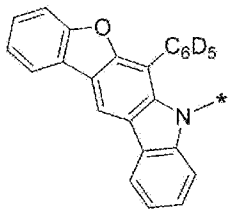
D563



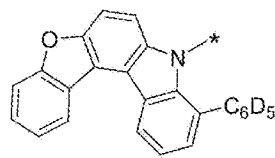
D564



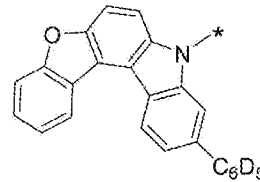
D565



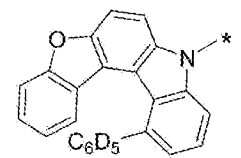
D566



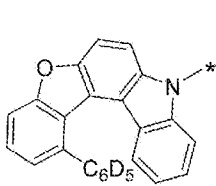
D567



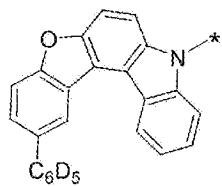
D568



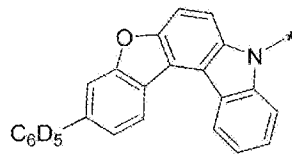
D569



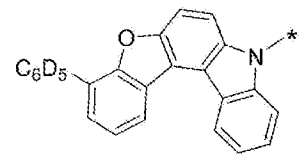
D570



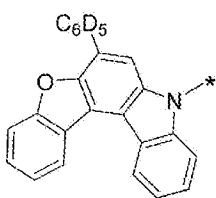
D571



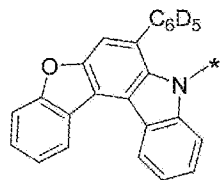
D572



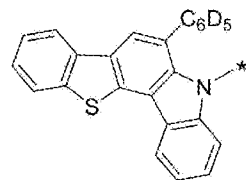
D573



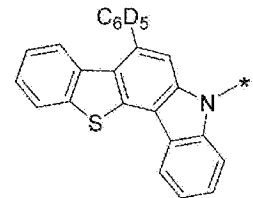
D574



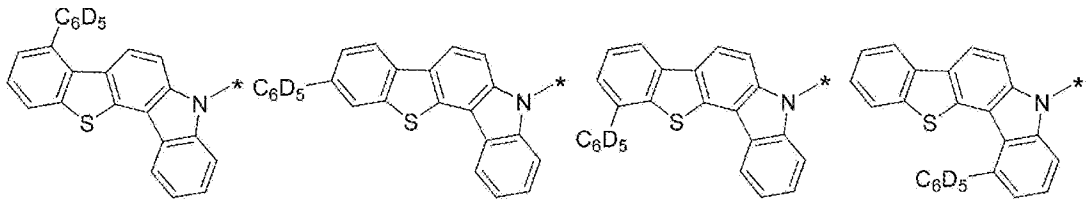
D575



D576



D577

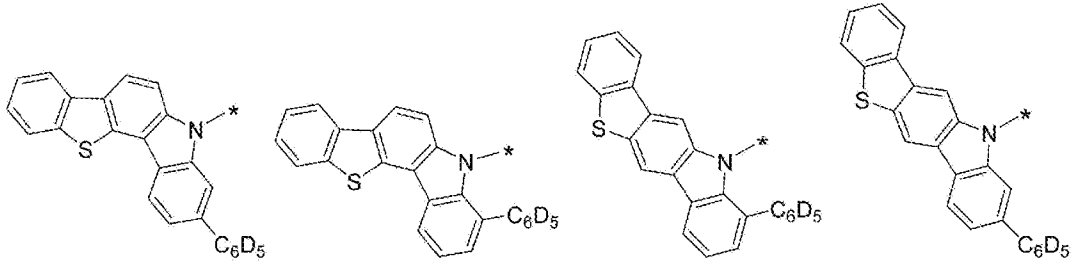


D578

D579

D580

D581

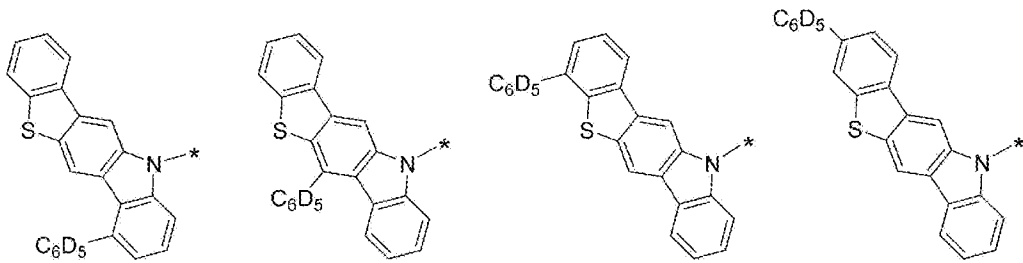


D582

D583

D584

D585

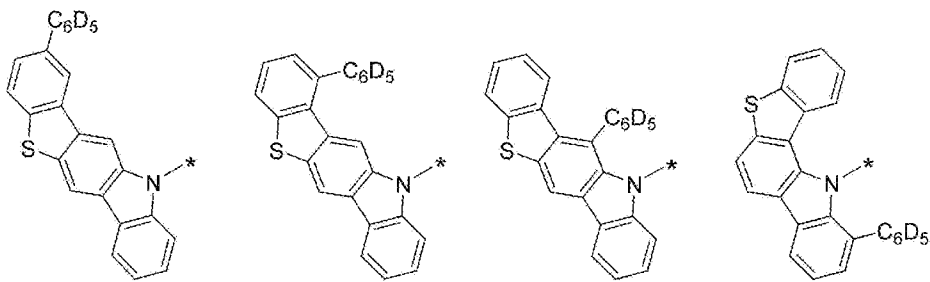


D586

D587

D588

D589

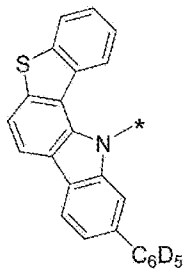


D590

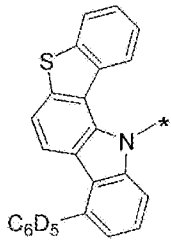
D591

D592

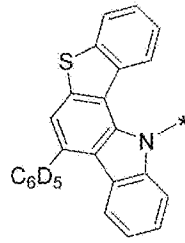
D593



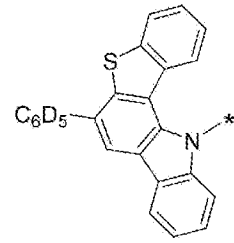
D594



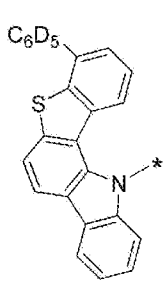
D595



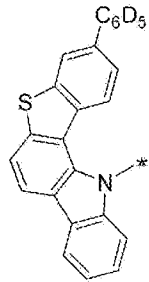
D596



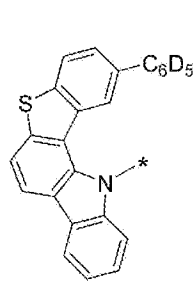
D597



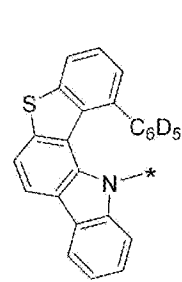
D598



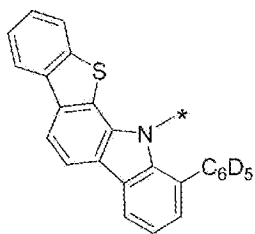
D599



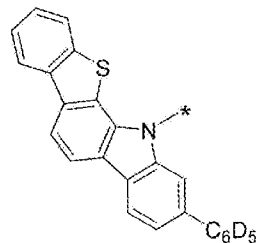
D600



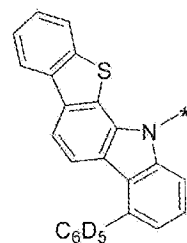
D601



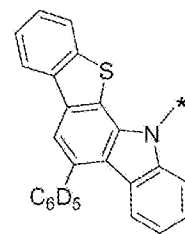
D602



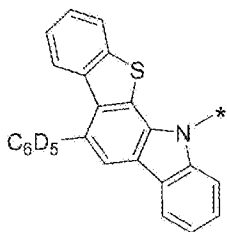
D603



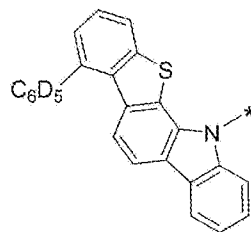
D604



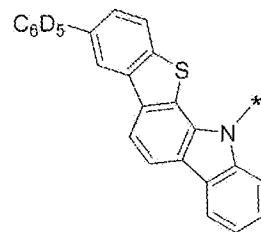
D605



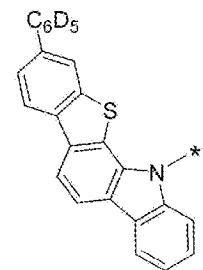
D606



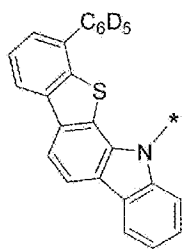
D607



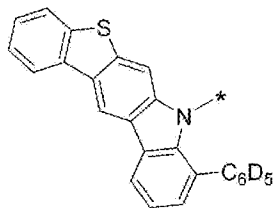
D608



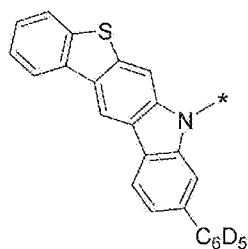
D609



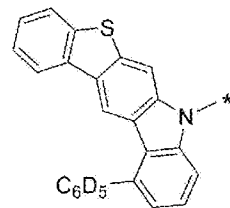
D610



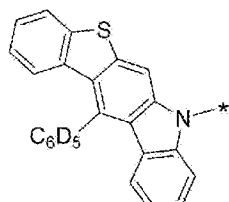
D611



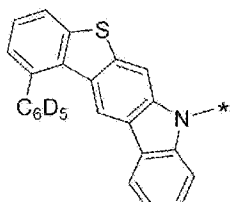
D612



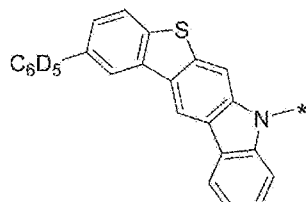
D613



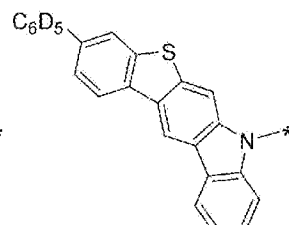
D614



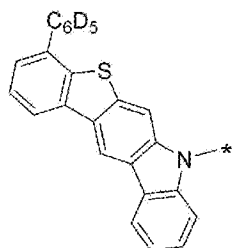
D615



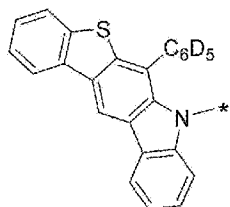
D616



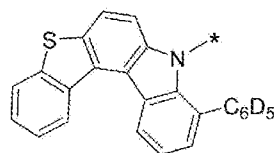
D617



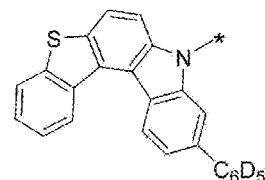
D618



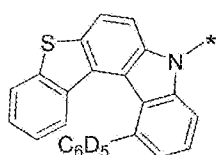
D619



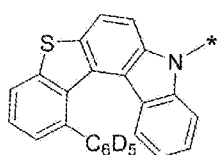
D620



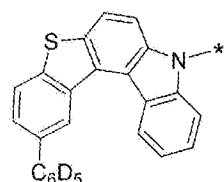
D621



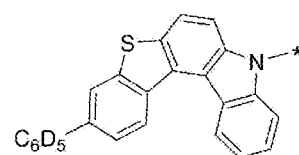
D622



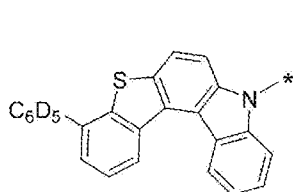
D623



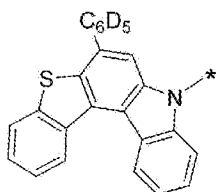
D624



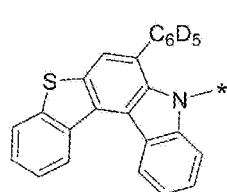
D625



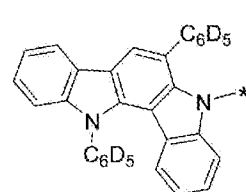
D626



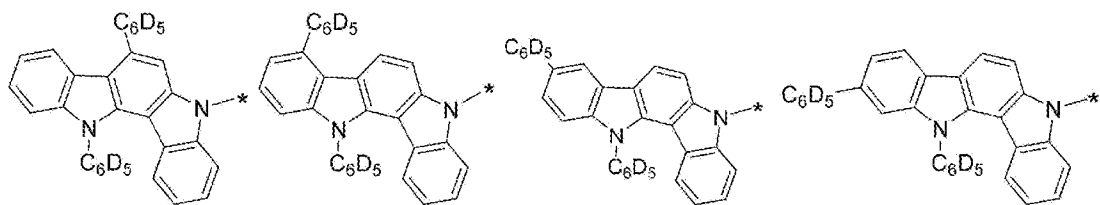
D627



D628



D629

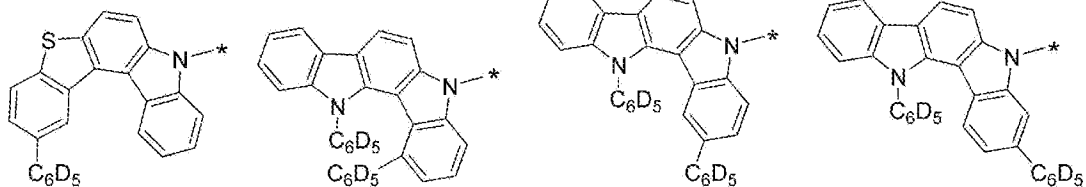


D630

D631

D632

D633

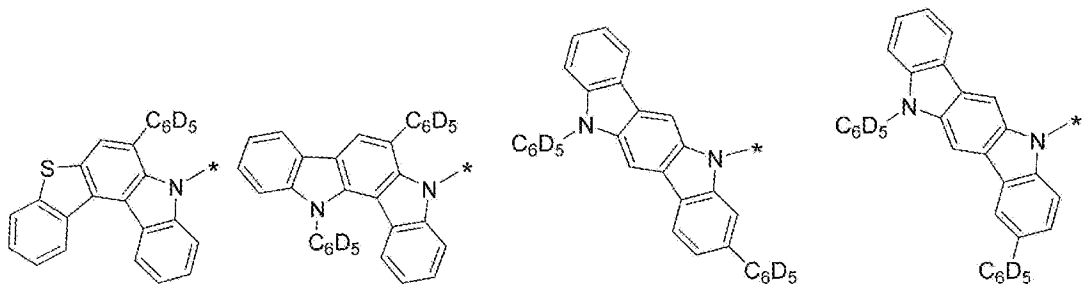


D634

D635

D636

D637

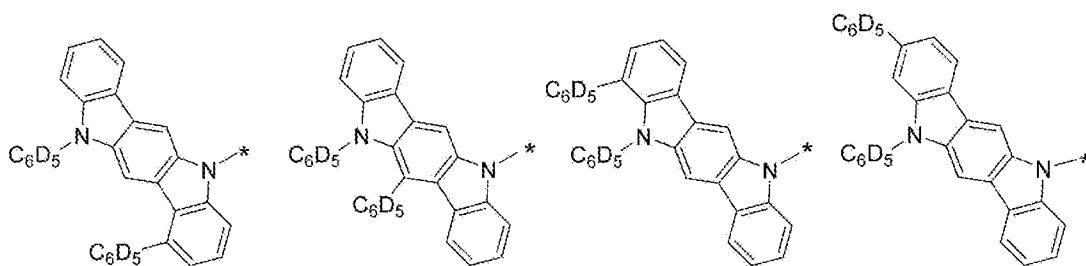


D638

D639

D640

D641

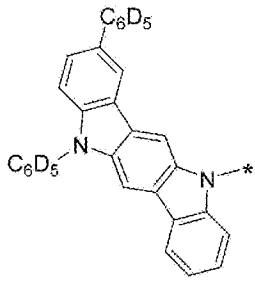


D642

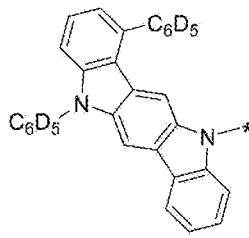
D643

D644

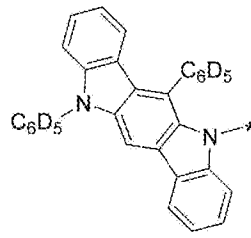
D645



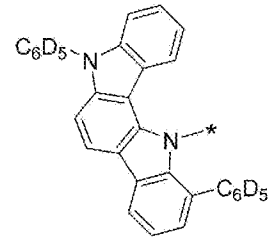
D646



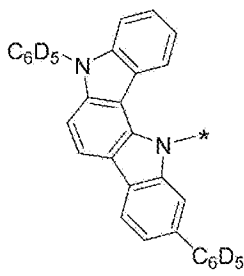
D647



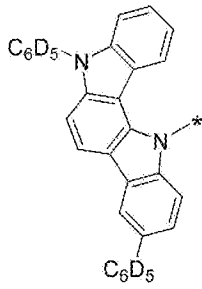
D648



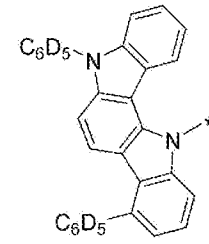
D649



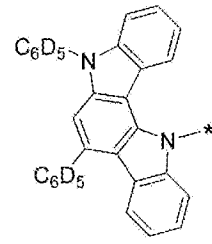
D650



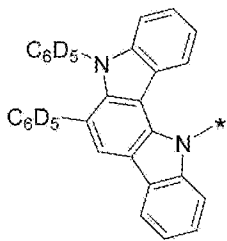
D651



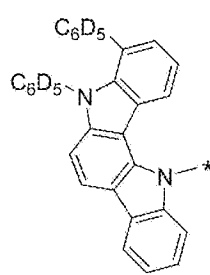
D652



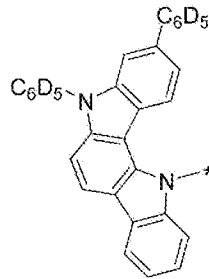
D653



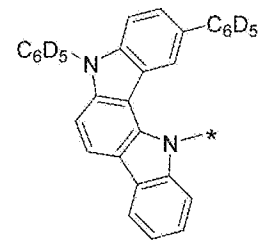
D654



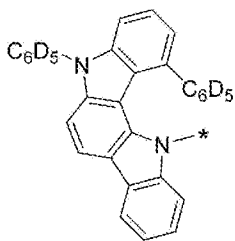
D655



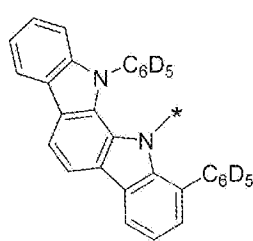
D656



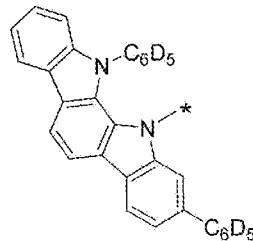
D657



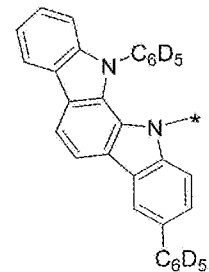
D658



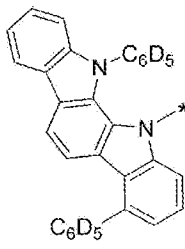
D659



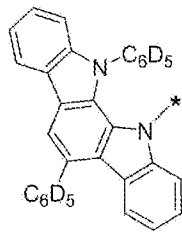
D660



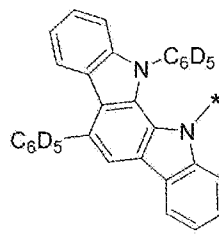
D661



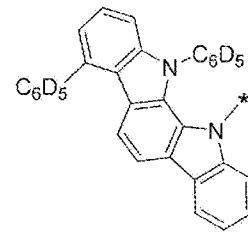
D662



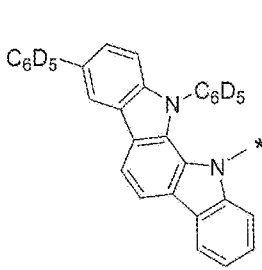
D663



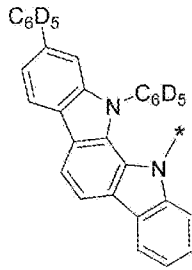
D664



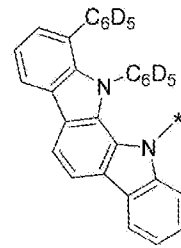
D665



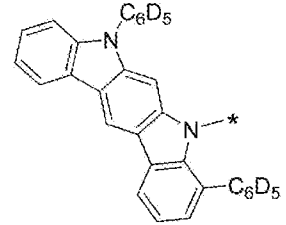
D666



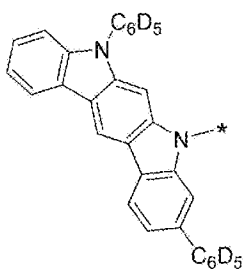
D667



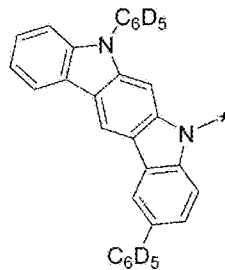
D668



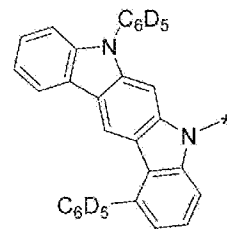
D669



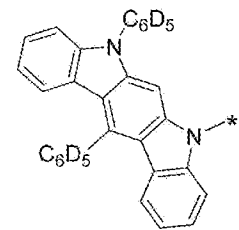
D670



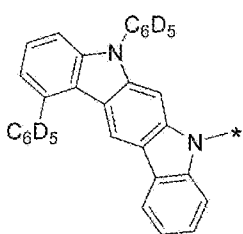
D671



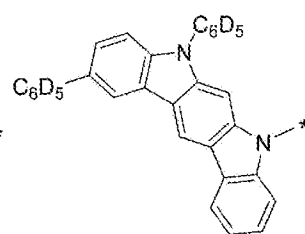
D672



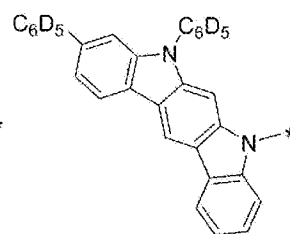
D673



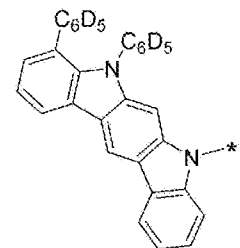
D674



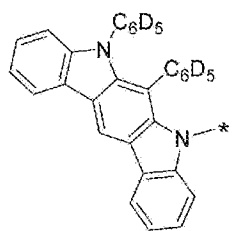
D675



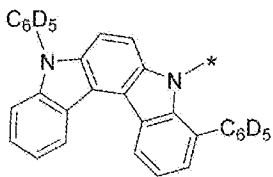
D676



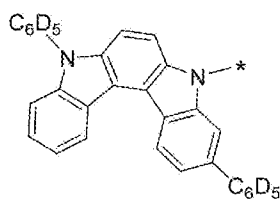
D677



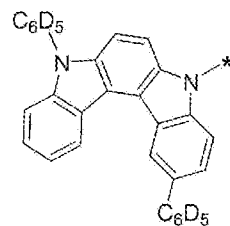
D678



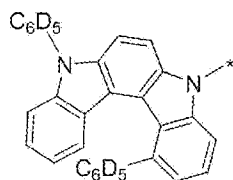
D679



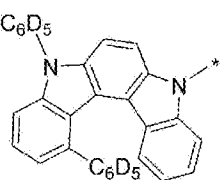
D680



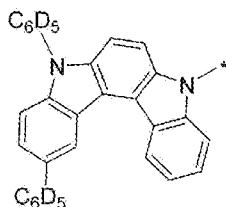
D681



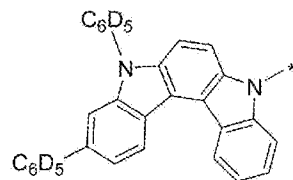
D682



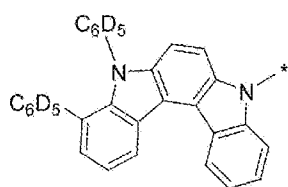
D683



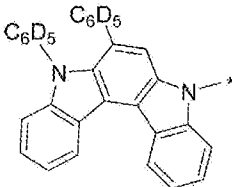
D684



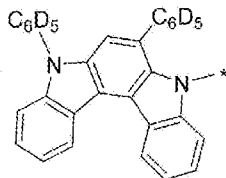
D685



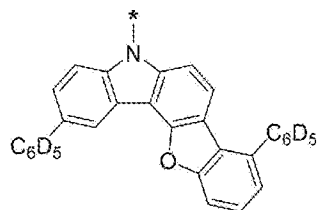
D686



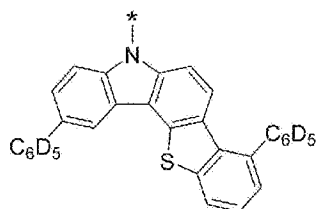
D687



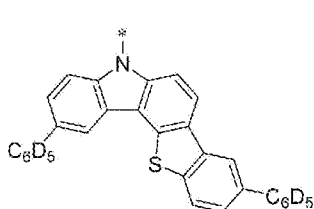
D688



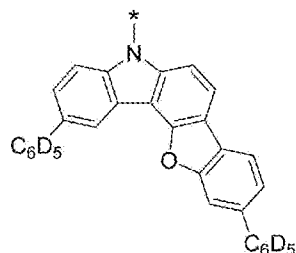
D689



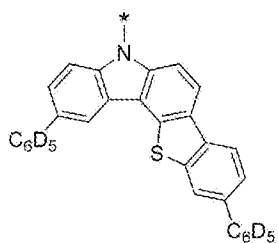
D690



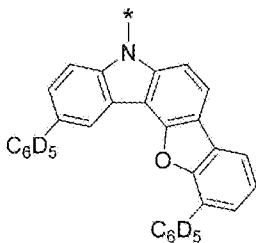
D691



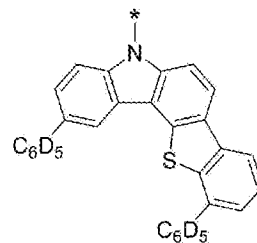
D692



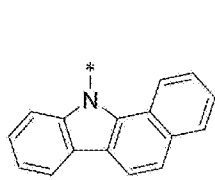
D693



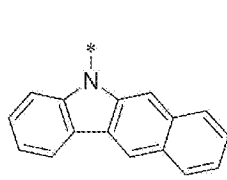
D694



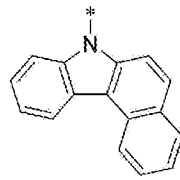
D695



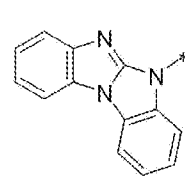
D696



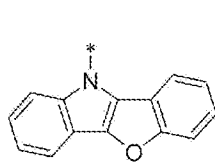
D697



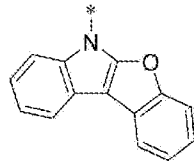
D698



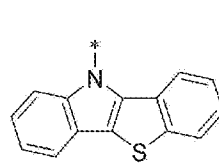
D699



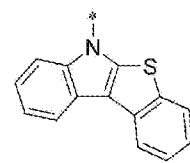
D700



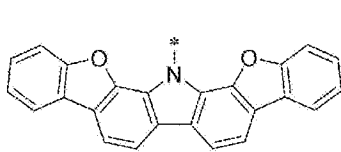
D701



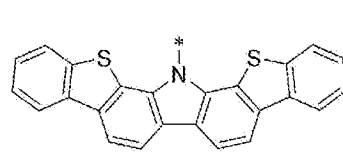
D702



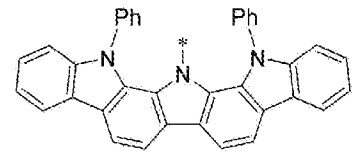
D703



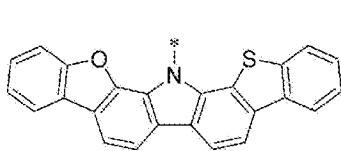
D704



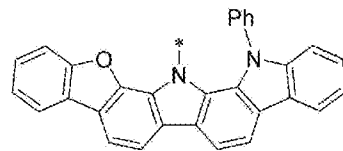
D705



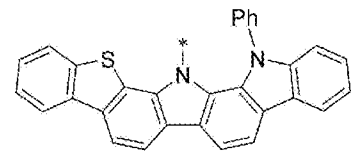
D706



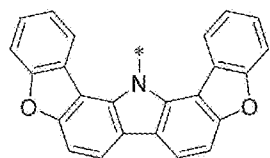
D707



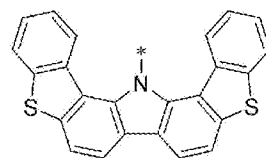
D708



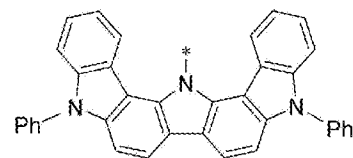
D709



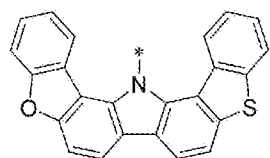
D710



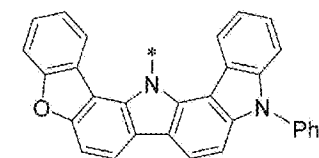
D711



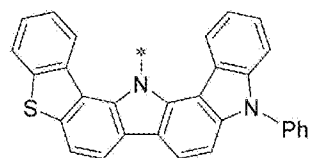
D712



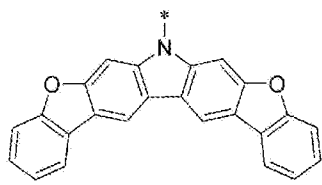
D713



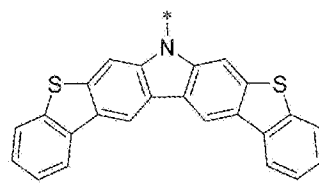
D714



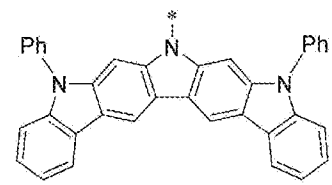
D715



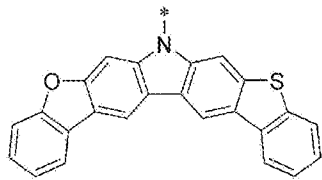
D716



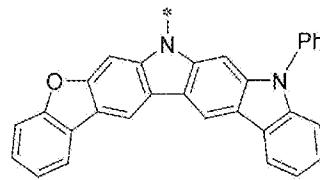
D717



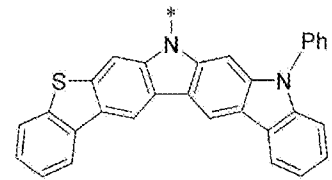
D718



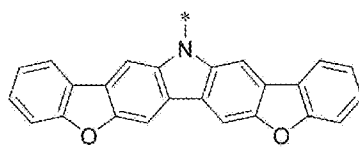
D719



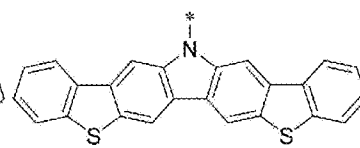
D720



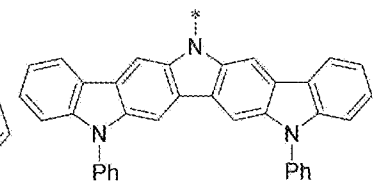
D721



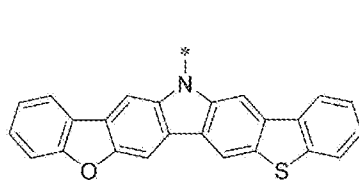
D722



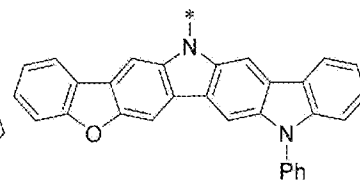
D723



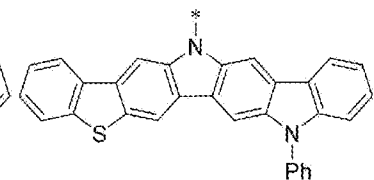
D724



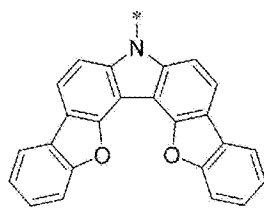
D725



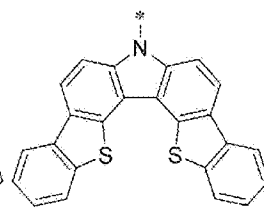
D726



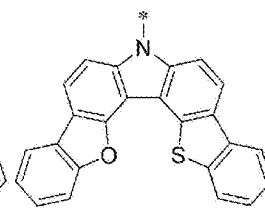
D727



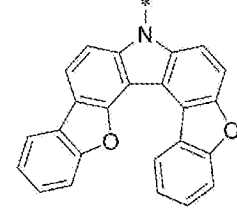
D728



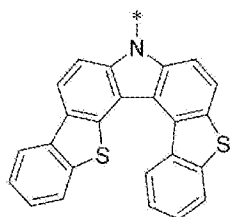
D729



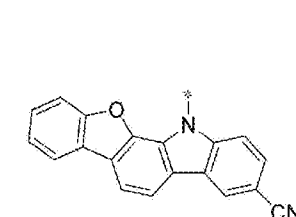
D730



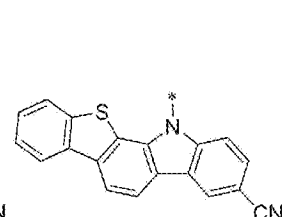
D731



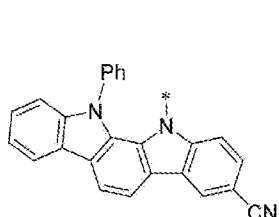
D732



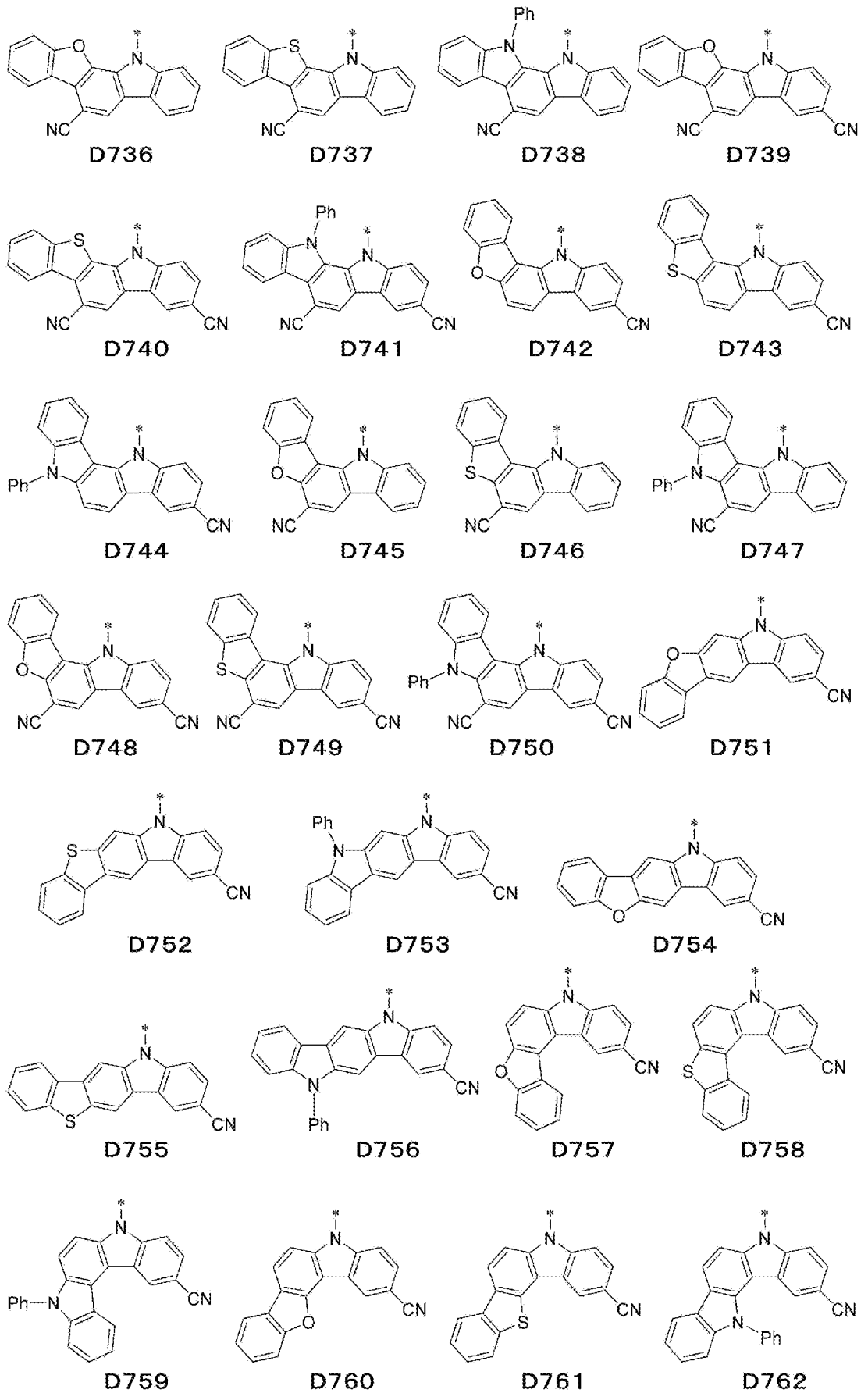
D733



D734



D735



[0034] 上記D86～D456、D696～762内に存在する水素原子をすべて重水素原子に置換したものをD763～D1210として開示する。

本発明の一態様では、 $R^1 \sim R^5$ が採りうるドナー性基はD1～D1210からなる群より選択される。本発明の一態様では、 $R^1 \sim R^5$ が採りうるドナー性基はD1～D85からなる群より選択される。本発明の一態様では、 $R^1 \sim R^5$ が採りうるドナー性基はD86～D1210からなる群より選択される。本発明の一態様では、 $R^1 \sim R^5$ が採りうるドナー性基はD86～D695、D704～D1133、D1142～1210からなる群より選択される。本発明の一態様では、 $R^1 \sim R^5$ が採りうるドナー性基はD696～D703、D1134～D1141からなる群より選択される。

[0035] 一般式(1)の $R^1 \sim R^5$ のうち2個以上はドナー性基である。本発明の一態様では、 $R^1 \sim R^5$ の2個または3個がドナー性基である。本発明の好ましい一態様では、 $R^1 \sim R^5$ の2個がドナー性基である。本発明の好ましい一態様では、 $R^1 \sim R^5$ の3個がドナー性基である。本発明の一態様では、少なくとも R^3 がドナー性基である。本発明の一態様では、少なくとも R^4 がドナー性基である。本発明の一態様では、少なくとも R^5 がドナー性基である。本発明の一態様では、 R^3 だけがドナー性基である。本発明の一態様では、 R^4 だけがドナー性基である。本発明の一態様では、 R^5 だけがドナー性基である。本発明の一態様では、 R^3 と R^5 だけがドナー性基である。本発明の一態様では、 R^2 と R^5 だけがドナー性基である。本発明の一態様では、 R^2 と R^4 だけがドナー性基である。本発明の一態様では、 R^3 と R^4 と R^5 だけがドナー性基である。本発明の一態様では、 R^2 と R^4 と R^5 だけがドナー性基である。 $R^1 \sim R^5$ の2個以上がドナー性基であるとき、それらは同一であってもよいし、異なってもよい。

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

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

本発明の一態様では、R¹～R⁵は、各々独立に水素原子、重水素原子、置換もしくは無置換のアルキル基、ドナー性基、および一般式(2)で表される基の中から選択する。本発明の一態様では、R¹～R⁵は、各々独立に水素原子、重水素原子、ドナー性基、および一般式(2)で表される基の中から選択する。本発明の一態様では、R¹～R⁵は、各々独立に水素原子、重水素原子、置換もしくは無置換の縮環していてもよいカルバゾール-9-イル基、および一般式(2)で表される基の中から選択する。

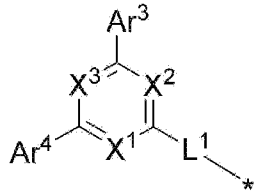
[0036] 一般式(1)のAr¹およびAr²が採りうるヘテロアリール基は、単環であってもよいし、2つ以上の環が縮合した縮合環であってもよい。縮合環である場合、縮合している環の数は2～6であることが好ましく、例えば2～4の中から選択することができる。環の具体例として、ピリジン環、ピリミジン環、ピロール環を挙げることができ、これらの環にはさらに別の環が縮合していてもよい。ヘテロアリール基の具体例として、2-ピリジル基、3-ピリジル基、4-ピリジル基、カルバゾール-9-イル基、カルバゾール-1-イル基、カルバゾール-2-イル基、カルバゾール-3-イル基、カルバゾール-4-イル基を挙げることができる。ヘテロアリール基の環骨格構成原子数は4～40であることが好ましく、5～20であることがより好ましく、5～16の範囲内で選択したり、5～12の範囲内で選択したりしてもよい。

本発明の一態様では、Ar¹およびAr²は置換もしくは無置換のアリール基である。

[0037] 一般式(1)において、R²またはR³は下記一般式(2)で表される基である。また、R¹、R⁴、R⁵も下記一般式(2)で表される基を採りうる。

[化12]

一般式 (2)



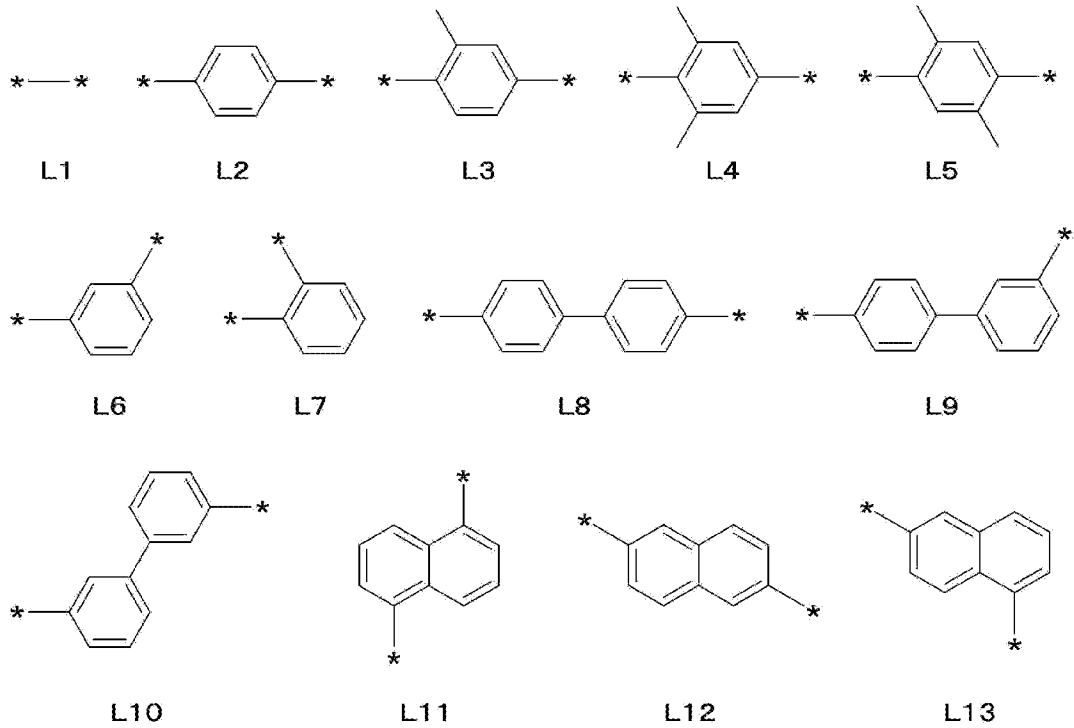
[0038] 一般式 (2) において、 $X^1 \sim X^3$ は、各々独立に N または C (R) を表すが、 $X^1 \sim X^3$ の少なくとも 1 個は N である。R は水素原子、重水素原子または置換基を表す。 Ar^3 および Ar^4 は各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。 L^1 は、単結合、置換もしくは無置換のアリーレン基、または置換もしくは無置換のヘテロアリーレン基を表す。* は結合位置を表す。

[0039] 一般式 (2) における L^1 は単結合または 2 価の連結基を表す。2 価の連結基として、置換もしくは無置換のアリーレン基、置換もしくは無置換のヘテロアリーレン基を挙げるができる。本発明の好ましい一態様では、 L^1 は単結合である。本発明の一態様では、 L^1 は置換もしくは無置換のアリーレン基である。本発明の一態様では、 L^1 は置換もしくは無置換のヘテロアリーレン基である。アリーレン基を構成するアリール部分については、上記の $R^1 \sim R^5$ の記載欄におけるアリール基の説明と好ましい範囲を参照することができる。ヘテロアリーレン基としては、アリーレン基を構成する環骨格炭素原子の少なくとも 1 つを窒素原子へ置換した連結基を挙げることができる。

以下において、 L^1 の具体例を挙げる。ただし、本発明で採用することができる L^1 は、これらの具体例によって限定的に解釈されることはない。なお、以下の具体例において、メチル基は表示を省略している。このため、例えば $L^3 \sim L^5$ はメチル基で置換されている。* は結合位置を示す。 L^1 は単結合である。

[0040]

[化13]



[0041] 上記L2～L13内に存在する水素原子をすべて重水素原子に置換したものをL14～L25として開示する。本発明の一態様では、L¹は、L1～L25からなる群より選択される。本発明の一態様では、L¹は、L1～L7、L14～L19からなる群より選択される。本発明の一態様では、L¹は、L1、L8～L13、L20～L25からなる群より選択される。本発明の一態様では、L¹は、L2～L25からなる群より選択される。

[0042] 一般式(2)におけるX¹～X³は、各々独立にNまたはC(R)を表す。ただし、X¹～X³の少なくとも1個はNである。Rは水素原子、重水素原子または置換基を表す。ここでいう置換基は、置換基群Aから選択してもよいし、置換基群Bから選択してもよいし、置換基群Cから選択してもよいし、置換基群Dから選択してもよいし、置換基群Eから選択してもよい。本発明の好ましい一態様では、X¹～X³はNである。本発明の一態様では、X¹およびX³がNであり、X²がC(R)である。本発明の一態様では、X¹およびX²がNであり、X³がC(R)である。本発明の一態様では、X¹がNであり、X²およびX³がC(R)である。本発明の一態様では、X²がNであり、X¹

および X^3 がC(R)である。本発明の一態様では、Rは水素原子または重水素原子である。本発明の一態様では、Rは重水素原子で置換されていてもよいアルキル基である。本発明の一態様では、Rは重水素原子、アルキル基またはアリール基で置換されていてもよいアリール基である。

[0043] 一般式(2)における $A r^3$ および $A r^4$ の具体例と好ましい範囲については、一般式(1)における $A r^1$ および $A r^2$ の対応する説明を参照することができる。本発明の一態様では、 $A r^1$ と $A r^3$ が同一である。本発明の好ましい一態様では、 $A r^1$ と $A r^3$ が同一であり、 $A r^2$ と $A r^4$ が同一である。本発明の一態様では、 $A r^1 \sim A r^4$ が同一である。

[0044] 本発明の好ましい一態様では、 $X^1 \sim X^3$ がNであり、 L^1 が単結合である。本発明の一態様では、 $X^1 \sim X^3$ がNであり、 L^1 が置換もしくは無置換のアリール基であり、好ましくは置換もしくは無置換のフェニレン基であり、さらに好ましくは無置換のフェニレン基(例えば L^2 であり、例えば L^6)である。

本発明の一態様では、 $X^1 \sim X^3$ がNであり、 L^1 が単結合であり、 $A r^3$ と $A r^4$ が同一である。本発明の一態様では、 $X^1 \sim X^3$ がNであり、 L^1 が単結合であり、 $A r^3$ と $A r^4$ が各々独立に置換もしくは無置換のアリール基である。本発明の一態様では、 $X^1 \sim X^3$ がNであり、 L^1 が単結合であり、 $A r^3$ と $A r^4$ が各々独立に置換もしくは無置換のヘテロアリール基(ただし、窒素含有6員環基を除く)、好ましくは窒素原子で結合するドナー性のヘテロアリール基であり、より好ましくは置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基である。本発明の一態様では、 $X^1 \sim X^3$ がNであり、 L^1 が単結合であり、 $A r^3$ が置換もしくは無置換のヘテロアリール基(ただし、窒素含有6員環基を除く)、好ましくは窒素原子で結合するドナー性のヘテロアリール基であり、より好ましくは置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基であり、 $A r^4$ が置換もしくは無置換のアリール基である。

[0045] 本発明の好ましい一態様では、 R^2 だけが一般式(2)で表される基である。本発明の好ましい一態様では、 R^3 だけが一般式(2)で表される基である。

。本発明の一態様では、 R^1 、 R^3 、 R^4 、 R^5 の中の1個と R^2 だけが、各々独立に一般式(2)で表される基である。本発明の一態様では、 R^1 、 R^2 、 R^4 、 R^5 の中の1個と R^3 だけが、各々独立に一般式(2)で表される基である。

[0046] 一般式(1)で表される化合物は、 $R^1 \sim R^5$ のうちの1個以上が4環以上の縮環構造を有するドナー性基であるか、 $A_{r^1} \sim A_{r^4}$ のうちの1個以上が置換もしくは無置換のヘテロアリール基(ただし、窒素含有6員環基を除く)であるか、あるいは、 $R^1 \sim R^5$ と $A_{r^1} \sim A_{r^4}$ がこれらの両方の条件を満たす。

ここでいう「4環以上の縮環構造を有するドナー性基」は、4環以上の縮環構造を有していて、その縮環構造の環骨格構成原子のうちの1原子で結合するドナー性基である。その1原子は炭素原子または窒素原子であることが好ましく、窒素原子であることがより好ましい。ここでいうドナー性基とは、ハメットの σ_p 値が負である基をいう。

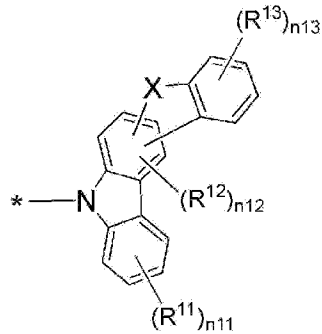
4環以上の縮環構造を有するドナー性基は、5環以上の縮環構造を有していることが好ましく、5~7環の縮環構造を有していることがより好ましい。例えば、5環の縮環構造を有しているものや、7環の縮環構造を有しているものを挙げるができる。

[0047] 4環以上の縮環構造を有するドナー性基として好ましいのは、環縮合カルバゾール-9-イル基である。具体例として、D86~D1210を挙げるができる。

特に下記一般式(3)で表される構造を有する基であることが好ましい。

[化14]

一般式 (3)



[0048] 一般式 (3) において、XはO、SまたはN-R¹⁴を表す。R¹¹~R¹³は各々独立に重水素原子または置換基を表す。R¹⁴は、重水素原子、アルキル基およびアリール基からなる群より選択される1以上の原子か基で置換されていてもよいアリール基、あるいは、重水素原子およびアリール基からなる群より選択される1以上の原子か基で置換されていてもよいアルキル基を表す。R¹¹同士、R¹²同士、R¹³同士は、それぞれ互いに結合して環状構造を形成していてもよい。n₁₁およびn₁₃は各々独立に0~4のいずれかの整数を表し、n₁₂は0~2のいずれかの整数を表す。

[0049] 一般式 (3) において、XはO、SまたはN-R¹⁴を表す。R¹⁴は、重水素原子、アルキル基およびアリール基からなる群より選択される1以上の原子か基で置換されていてもよいアリール基、あるいは、重水素原子およびアリール基からなる群より選択される1以上の原子か基で置換されていてもよいアルキル基を表す。ここで、アリール基およびアルキル基の置換基としてのアリール基は、例えば炭素数6~22のアリール基から選択することができ、アルキル基およびアリール基の置換基としてのアルキル基は、例えば炭素数1~20のアルキル基から選択することができる。本発明の好ましい一態様ではXはOである。本発明の好ましい一態様ではXはN-R¹⁴である。例えば、N-R¹⁴のR¹⁴はアリール基（例えば炭素数6~22）である。アリール基は、重水素原子、アルキル基（例えば炭素数1~20）およびアリール基（例えば炭素数6~22）からなる群より選択される1以上の原子か基で置換されていてもよいし、置換されていなくてもよい。Xは酸素原子ま

たは硫黄原子であってもよい。

一般式(3)において、カルバゾール環の一方のベンゼン環に掛かる2つの結合手は、このベンゼン環の隣り合う位置に結合して、カルバゾール環とXを含むヘテロ縮合環との縮環構造を形成する。例えばXがOである場合、縮環構造としてベンゾフロカルバゾール環が形成され、XがSである場合、縮環構造としてベンゾチエノカルバゾール環が形成され、XがN-R¹⁴である場合、縮環構造としてインドロカルバゾール環が形成される。2つの結合手が結合する位置は、カルバゾール環の1位と2位であってもよいし、2位と3位であってもよいし、3位と4位であってもよい。2つの結合手の結合位置が1位と2位であるとき、Xの結合手が結合する位置は1位であっても2位であってもよく、2つの結合手の結合位置が2位と3位である場合、Xの結合手が結合する位置は2位であっても3位であってもよく、2つの結合手の結合位置が3位と4位である場合、Xの結合手が結合する位置は3位であっても4位であってもよい。

一般式(3)において、*は結合位置を表す。

一般式(3)において、R¹¹~R¹³は各々独立に重水素原子または置換基を表す。R¹¹同士、R¹²同士、R¹³同士は、それぞれ互いに結合して環状構造を形成していてもよいが、R¹¹がR¹²~R¹⁴のいずれかと互いに結合して環状構造を形成することはなく、R¹²がR¹³、R¹⁴のいずれかと互いに結合して環状構造を形成することはなく、R¹³がR¹⁴と互いに結合して環状構造を形成することはない。置換基は、例えば置換基群Aの中から選択してもよいし、置換基群Bの中から選択してもよいし、置換基群Cの中から選択してもよいし、置換基群Dの中から選択してもよいし、置換基群Eの中から選択してもよい。本発明の好ましい一態様では、置換基は、アルキル基(例えば炭素数1~20)およびアリール基(例えば炭素数6~22)からなる群より選択される1つの基または2つ以上を組み合わせた基を意味する。

n¹¹およびn¹³は各々独立に0~4のいずれかの整数を表し、n¹²は0~2のいずれかの整数を表す。n¹¹が2以上であるとき、2つ以上の

R^{11} は同一であっても異なってもよい。 n_{13} が2以上であるとき、2つ以上の R^{13} は同一であっても異なってもよい。 n_{12} が2であるとき、2つの R^{12} は同一であっても異なってもよい。 n_{11} および n_{13} は0、1、2、3、4のいずれの数であってもよく、 n_{12} は0、1、2のいずれの数であってもよい。 n_{11} が1であるとき、 R^{11} は重水素原子であっても置換基であってもよい。 n_{11} が2以上であるとき、2以上の R^{11} は全てが重水素原子であっても全てが置換基であってもよく、その一部が重水素原子で残りが置換基であってもよい。 n_{13} が1であるとき、 R^{13} は重水素原子であっても置換基であってもよい。 n_{13} が2以上であるとき、2以上の R^{13} は全てが重水素原子であっても全てが置換基であってもよく、その一部が重水素原子で残りが置換基であってもよい。 n_{12} が1であるとき、 R^{12} は重水素原子であっても置換基であってもよい。 n_{12} が2であるとき、2つの R^{12} は両方が重水素原子であっても両方が置換基であってもよく、2つのうちの一方が重水素原子で他方が置換基であってもよい。

[0050] 4環以上の縮環構造を有するドナー性基を有する場合、 $R^1 \sim R^5$ のうちの2個以上が4環以上の縮環構造を有するドナー性基であることが好ましく、例えば2個であり、例えば3個である。 $R^1 \sim R^5$ のうちの2個以上が4環以上の縮環構造を有するドナー性基であるとき、それらは同一であってもよいし、異なってもよいが、好ましいのは同一である場合である。本発明の一態様では、少なくとも R^3 が4環以上の縮環構造を有するドナー性基である。本発明の一態様では、少なくとも R^4 が4環以上の縮環構造を有するドナー性基である。本発明の一態様では、少なくとも R^5 が4環以上の縮環構造を有するドナー性基である。本発明の一態様では、 R^3 と R^5 が4環以上の縮環構造を有するドナー性基である。本発明の一態様では、 R^3 と R^4 と R^5 が4環以上の縮環構造を有するドナー性基である。

[0051] 本発明の好ましい一態様では、 $A_{r1} \sim A_{r4}$ のうちの1個以上が置換もしくは無置換のヘテロアリール基（ただし、窒素含有6員環基を除く）である。置換もしくは無置換のヘテロアリール基（ただし、窒素含有6員環基を除く）である。

く)は、 $A r^1 \sim A r^4$ のうち1個であってもよく、2個であってもよく、3個であってもよく、すべてであってもよい。2個以上であるとき、それらは同一であっても異なってもよいが、同一であることが好ましい。置換もしくは無置換のヘテロアリアル基(ただし、窒素含有6員環基を除く)は、環骨格構成原子の1つである窒素原子で結合するヘテロアリアル基であることが好ましく、窒素原子で結合する5員環を有するヘテロアリアル基(ピロール環の窒素原子で結合する基であって、ピロール環は置換されていてもよく、縮環していることが好ましい)であることが好ましく、置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基であることがさらに好ましい。本発明の好ましい一態様では、ここでいうカルバゾール-9-イル基は、重水素原子、アルキル基およびアリアル基からなる群より選択される基で置換されていてもよいアルキル基またはアリアル基で置換されていてもよく、また、重水素原子で置換されていてもよい。カルバゾール-9-イル基の説明と詳細については、 $R^1 \sim R^5$ が採りうるカルバゾール-9-イル基の記載や環縮合カルバゾール-9-イル基の記載や具体例D1~D1210を参照することができる。

[0052] 本発明の好ましい一態様では、 $A r^1 \sim A r^4$ が各々独立に置換もしくは無置換のアリアル基である。 $A r^1 \sim A r^4$ はすべてが同一であってもよく、例えば無置換のフェニル基や過重水素化フェニル基を挙げることができる。 $A r^1 \sim A r^4$ が各々独立に置換もしくは無置換のアリアル基であるとき、 $R^1 \sim R^5$ の1個以上は4環以上の縮環構造を有するドナー性基である。4環以上の縮環構造を有するドナー性基の数は2個以上であってもよく、例えば2個であり、例えば3個である。4環以上の縮環構造を有するドナー性基として、具体例D86~D1210を参照することができる。このうち、5環以上(例えば5環、例えば7環)の縮環構造を有するドナー性基を好ましく採用することができる。本発明の好ましい一態様では、 $A r^1 \sim A r^4$ が各々独立に置換もしくは無置換のアリアル基であるとき、 $R^1 \sim R^5$ の1個以上は重水素原子を有している。例えば、重水素化された3環の縮環構造を有するドナー

性基（例えば、過重水素化カルバゾール-9-イル基）を有していてもよいし、重水素化されたアリール基（例えば、過重水素化フェニル基）を有していてもよい。

[0053] 一般式（1）で表される化合物は、金属原子を含まないことが好ましく、炭素原子、水素原子、重水素原子、窒素原子、酸素原子および硫黄原子からなる群より選択される原子だけで構成される化合物であってもよい。本発明の好ましい一態様では、一般式（1）で表される化合物は、炭素原子、水素原子、重水素原子、窒素原子および酸素原子からなる群より選択される原子だけで構成される。また、一般式（1）で表される化合物は、炭素原子、水素原子、重水素原子、窒素原子および硫黄原子からなる群より選択される原子だけで構成される化合物であってもよい。一般式（1）で表される化合物は、炭素原子、水素原子、重水素原子および窒素原子からなる群より選択される原子だけで構成される化合物であってもよい。一般式（1）で表される化合物は、炭素原子、水素原子および窒素原子からなる群より選択される原子だけで構成される化合物であってもよい。さらに、一般式（1）で表される化合物は水素原子を含まず、重水素原子を含む化合物であってもよい。

[0054] 本明細書において「置換基群A」とは、重水素原子、ヒドロキシル基、ハロゲン原子（例えばフッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子）、アルキル基（例えば炭素数1～40）、アルコキシ基（例えば炭素数1～40）、アルキルチオ基（例えば炭素数1～40）、アリール基（例えば炭素数6～30）、アリールオキシ基（例えば炭素数6～30）、アリールチオ基（例えば炭素数6～30）、ヘテロアリール基（例えば環骨格構成原子数5～30）、ヘテロアリールオキシ基（例えば環骨格構成原子数5～30）、ヘテロアリールチオ基（例えば環骨格構成原子数5～30）、アシル基（例えば炭素数1～40）、アルケニル基（例えば炭素数1～40）、アルキニル基（例えば炭素数1～40）、アルコキシカルボニル基（例えば炭素数1～40）、アリールオキシカルボニル基（例えば炭素数1～40）、ヘテロアリールオキシカルボニル基（例えば炭素数1～40）、シリル基（例えば炭

素数 1～40 のトリアルキルシリル基) およびニトロ基からなる群より選択される 1 つの原子か基または 2 つ以上を組み合わせた基を意味する。

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

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

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

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

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

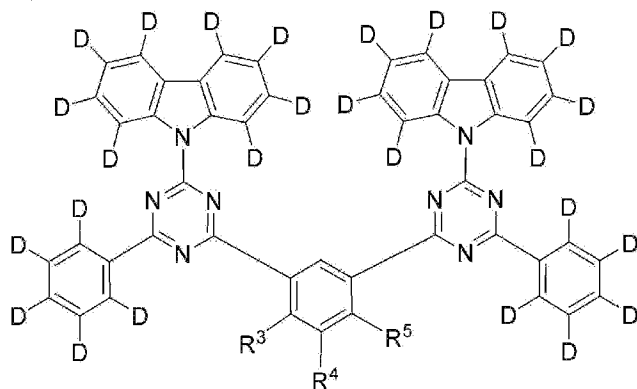
[0055] 以下の表 1～8 において、一般式 (1) で表される化合物の具体例を例示する。ただし、本発明において用いることができる一般式 (1) で表される

化合物はこれらの具体例によって限定的に解釈されるべきものではない。

表1では、下記一般式(1a)の $R^3 \sim R^5$ を化合物ごとにそれぞれ特定することにより各化合物の構造を個別に示している。すなわち、 R^2 が一般式(2)で表される基であり、 Ar^1 と Ar^3 が過重水素化カルbazool-9-イル基(D55)で、 Ar^2 と Ar^4 が過重水素化フェニル基(Ar47)であり、 $X^1 \sim X^3$ が窒素原子(N)であり、 L^1 が単結合(L1)であり、 R^1 が水素原子であり、 $R^3 \sim R^5$ が表1で特定される基である構造を、化合物1~170の構造として個別に示している。

[化15]

一般式(1a)



[表1]

No.	R ³	R ⁴	R ⁵
1	D1	D1	D1
2	D2	D1	D2
3	D3	D1	D3
4	D4	D1	D4
5	D5	D1	D5
6	D6	D1	D6
7	D7	D1	D7
8	D8	D1	D8
9	D9	D1	D9
10	D10	D1	D10
11	D11	D1	D11
12	D12	D1	D12
13	D13	D1	D13
14	D14	D1	D14
15	D15	D1	D15
16	D16	D1	D16
17	D17	D1	D17
18	D18	D1	D18
19	D19	D1	D19
20	D20	D1	D20
21	D21	D1	D21
22	D22	D1	D22
23	D23	D1	D23
24	D24	D1	D24
25	D25	D1	D25
26	D26	D1	D26
27	D27	D1	D27
28	D28	D1	D28
29	D29	D1	D29
30	D30	D1	D30
31	D31	D1	D31
32	D32	D1	D32
33	D33	D1	D33
34	D34	D1	D34
35	D35	D1	D35
36	D36	D1	D36
37	D37	D1	D37
38	D38	D1	D38
39	D39	D1	D39
40	D40	D1	D40
41	D41	D1	D41
42	D42	D1	D42
43	D43	D1	D43
44	D44	D1	D44
45	D45	D1	D45
46	D46	D1	D46
47	D47	D1	D47
48	D48	D1	D48
49	D49	D1	D49
50	D50	D1	D50
51	D51	D1	D51
52	D52	D1	D52
53	D53	D1	D53
54	D54	D1	D54
55	D55	D1	D55
56	D56	D1	D56
57	D57	D1	D57

No.	R ³	R ⁴	R ⁵
58	D58	D1	D58
59	D59	D1	D59
60	D60	D1	D60
61	D61	D1	D61
62	D62	D1	D62
63	D63	D1	D63
64	D64	D1	D64
65	D65	D1	D65
66	D66	D1	D66
67	D67	D1	D67
68	D68	D1	D68
69	D69	D1	D69
70	D70	D1	D70
71	D71	D1	D71
72	D72	D1	D72
73	D73	D1	D73
74	D74	D1	D74
75	D75	D1	D75
76	D76	D1	D76
77	D77	D1	D77
78	D78	D1	D78
79	D79	D1	D79
80	D80	D1	D80
81	D81	D1	D81
82	D82	D1	D82
83	D83	D1	D83
84	D84	D1	D84
85	D85	D1	D85
86	D1	D2	D1
87	D2	D2	D2
88	D3	D2	D3
89	D4	D2	D4
90	D5	D2	D5
91	D6	D2	D6
92	D7	D2	D7
93	D8	D2	D8
94	D9	D2	D9
95	D10	D2	D10
96	D11	D2	D11
97	D12	D2	D12
98	D13	D2	D13
99	D14	D2	D14
100	D15	D2	D15
101	D16	D2	D16
102	D17	D2	D17
103	D18	D2	D18
104	D19	D2	D19
105	D20	D2	D20
106	D21	D2	D21
107	D22	D2	D22
108	D23	D2	D23
109	D24	D2	D24
110	D25	D2	D25
111	D26	D2	D26
112	D27	D2	D27
113	D28	D2	D28
114	D29	D2	D29

No.	R ³	R ⁴	R ⁵
115	D30	D2	D30
116	D31	D2	D31
117	D32	D2	D32
118	D33	D2	D33
119	D34	D2	D34
120	D35	D2	D35
121	D36	D2	D36
122	D37	D2	D37
123	D38	D2	D38
124	D39	D2	D39
125	D40	D2	D40
126	D41	D2	D41
127	D42	D2	D42
128	D43	D2	D43
129	D44	D2	D44
130	D45	D2	D45
131	D46	D2	D46
132	D47	D2	D47
133	D48	D2	D48
134	D49	D2	D49
135	D50	D2	D50
136	D51	D2	D51
137	D52	D2	D52
138	D53	D2	D53
139	D54	D2	D54
140	D55	D2	D55
141	D56	D2	D56
142	D57	D2	D57
143	D58	D2	D58
144	D59	D2	D59
145	D60	D2	D60
146	D61	D2	D61
147	D62	D2	D62
148	D63	D2	D63
149	D64	D2	D64
150	D65	D2	D65
151	D66	D2	D66
152	D67	D2	D67
153	D68	D2	D68
154	D69	D2	D69
155	D70	D2	D70
156	D71	D2	D71
157	D72	D2	D72
158	D73	D2	D73
159	D74	D2	D74
160	D75	D2	D75
161	D76	D2	D76
162	D77	D2	D77
163	D78	D2	D78
164	D79	D2	D79
165	D80	D2	D80
166	D81	D2	D81
167	D82	D2	D82
168	D83	D2	D83
169	D84	D2	D84
170	D85	D2	D85

[0056] 表2では各段に複数の化合物の $R^3 \sim R^5$ をまとめて表示することにより、化合物1～442987の構造を示している。例えば、表2の化合物1～85の段であれば、 R^4 がD1（カルバゾール-9-イル基）に固定されており、 R^3 と R^5 が同一でありD1～D85であるものを、順に化合物1～85としている。また、表2の化合物86～170の段であれば、 R^4 がD2（3-メチルカルバゾール-9-イル基）に固定されており、 R^3 と R^5 が同一でありD1～D85であるものを、順に化合物86～170としている。すなわち、表2の化合物1～85の段と化合物86～170の段は、表1で特定される化合物1～170をまとめて2段に表示したものである。同様に、表2の化合物171～255の段であれば、 R^4 がD3（3,6-ジメチルカルバゾール-9-イル基）に固定されており、 R^3 と R^5 が同一であり、D1～D85であるものを、順に化合物171～255としている。同じ要領により、表2の化合物256～442987も特定している。

[表2]

No.		R ³	R ⁴	R ⁵	=
1 ~	85	D1~D85	D1	D1~D85	R ³ = R ⁵
86 ~	170	D1~D85	D2	D1~D85	
171 ~	255	D1~D85	D3	D1~D85	
256 ~	340	D1~D85	D4	D1~D85	
341 ~	425	D1~D85	D5	D1~D85	
426 ~	510	D1~D85	D6	D1~D85	
511 ~	595	D1~D85	D7	D1~D85	
596 ~	680	D1~D85	D8	D1~D85	
681 ~	765	D1~D85	D9	D1~D85	
766 ~	850	D1~D85	D10	D1~D85	
851 ~	935	D1~D85	D11	D1~D85	
936 ~	1020	D1~D85	D12	D1~D85	
1021 ~	1105	D1~D85	D13	D1~D85	
1106 ~	1190	D1~D85	D14	D1~D85	
1191 ~	1275	D1~D85	D15	D1~D85	
1276 ~	1360	D1~D85	D16	D1~D85	
1361 ~	1445	D1~D85	D17	D1~D85	
1446 ~	1530	D1~D85	D18	D1~D85	
1531 ~	1615	D1~D85	D19	D1~D85	
1616 ~	1700	D1~D85	D20	D1~D85	
1701 ~	1785	D1~D85	D21	D1~D85	
1786 ~	1870	D1~D85	D22	D1~D85	
1871 ~	1955	D1~D85	D23	D1~D85	
1956 ~	2040	D1~D85	D24	D1~D85	
2041 ~	2125	D1~D85	D25	D1~D85	
2126 ~	2210	D1~D85	D26	D1~D85	
2211 ~	2295	D1~D85	D27	D1~D85	
2296 ~	2380	D1~D85	D28	D1~D85	
2381 ~	2465	D1~D85	D29	D1~D85	
2466 ~	2550	D1~D85	D30	D1~D85	
2551 ~	2635	D1~D85	D31	D1~D85	
2636 ~	2720	D1~D85	D32	D1~D85	
2721 ~	2805	D1~D85	D33	D1~D85	
2806 ~	2890	D1~D85	D34	D1~D85	
2891 ~	2975	D1~D85	D35	D1~D85	
2976 ~	3060	D1~D85	D36	D1~D85	
3061 ~	3145	D1~D85	D37	D1~D85	
3146 ~	3230	D1~D85	D38	D1~D85	
3231 ~	3315	D1~D85	D39	D1~D85	
3316 ~	3400	D1~D85	D40	D1~D85	
3401 ~	3485	D1~D85	D41	D1~D85	
3486 ~	3570	D1~D85	D42	D1~D85	
3571 ~	3655	D1~D85	D43	D1~D85	
3656 ~	3740	D1~D85	D44	D1~D85	
3741 ~	3825	D1~D85	D45	D1~D85	
3826 ~	3910	D1~D85	D46	D1~D85	
3911 ~	3995	D1~D85	D47	D1~D85	
3996 ~	4080	D1~D85	D48	D1~D85	
4081 ~	4165	D1~D85	D49	D1~D85	
4166 ~	4250	D1~D85	D50	D1~D85	
4251 ~	4335	D1~D85	D51	D1~D85	
4336 ~	4420	D1~D85	D52	D1~D85	
4421 ~	4505	D1~D85	D53	D1~D85	
4506 ~	4590	D1~D85	D54	D1~D85	
4591 ~	4675	D1~D85	D55	D1~D85	
4676 ~	4760	D1~D85	D56	D1~D85	
4761 ~	4845	D1~D85	D57	D1~D85	
4846 ~	4930	D1~D85	D58	D1~D85	
4931 ~	5015	D1~D85	D59	D1~D85	
5016 ~	5100	D1~D85	D60	D1~D85	

No.	R ³	R ⁴	R ⁵	=
5101 ~ 5185	D1~D85	D61	D1~D85	R ³ = R ⁵
5186 ~ 5270	D1~D85	D62	D1~D85	
5271 ~ 5355	D1~D85	D63	D1~D85	
5356 ~ 5440	D1~D85	D64	D1~D85	
5441 ~ 5525	D1~D85	D65	D1~D85	
5526 ~ 5610	D1~D85	D66	D1~D85	
5611 ~ 5695	D1~D85	D67	D1~D85	
5696 ~ 5780	D1~D85	D68	D1~D85	
5781 ~ 5865	D1~D85	D69	D1~D85	
5866 ~ 5950	D1~D85	D70	D1~D85	
5951 ~ 6035	D1~D85	D71	D1~D85	
6036 ~ 6120	D1~D85	D72	D1~D85	
6121 ~ 6205	D1~D85	D73	D1~D85	
6206 ~ 6290	D1~D85	D74	D1~D85	
6291 ~ 6375	D1~D85	D75	D1~D85	
6376 ~ 6460	D1~D85	D76	D1~D85	
6461 ~ 6545	D1~D85	D77	D1~D85	
6546 ~ 6630	D1~D85	D78	D1~D85	
6631 ~ 6715	D1~D85	D79	D1~D85	
6716 ~ 6800	D1~D85	D80	D1~D85	
6801 ~ 6885	D1~D85	D81	D1~D85	
6886 ~ 6970	D1~D85	D82	D1~D85	
6971 ~ 7055	D1~D85	D83	D1~D85	
7056 ~ 7140	D1~D85	D84	D1~D85	
7141 ~ 7225	D1~D85	D85	D1~D85	
7226 ~ 7310	D1~D85	Ar1	D1~D85	
7311 ~ 7395	D1~D85	Ar14	D1~D85	
7396 ~ 7480	D1~D85	Ar15	D1~D85	
7481 ~ 7565	D1~D85	Ar39	D1~D85	
7566 ~ 7650	D1~D85	Ar40	D1~D85	
7651 ~ 7735	D1~D85	Ar47	D1~D85	
7736 ~ 7820	Ar1	D1~D85	D1~D85	R ⁴ = R ⁵
7821 ~ 7905	Ar14	D1~D85	D1~D85	
7906 ~ 7990	Ar15	D1~D85	D1~D85	
7991 ~ 8075	Ar39	D1~D85	D1~D85	
8076 ~ 8160	Ar40	D1~D85	D1~D85	
8161 ~ 8245	Ar47	D1~D85	D1~D85	
8246 ~ 8330	D1~D85	D1~D85	Ar1	R ³ = R ⁴
8331 ~ 8415	D1~D85	D1~D85	Ar14	
8416 ~ 8500	D1~D85	D1~D85	Ar15	
8501 ~ 8585	D1~D85	D1~D85	Ar39	
8586 ~ 8670	D1~D85	D1~D85	Ar40	
8671 ~ 8755	D1~D85	D1~D85	Ar47	
8756 ~ 9880	D86~D1210	D86~D1210	D86~D1210	R ³ = R ⁴ = R ⁵
9881 ~ 11005	D86~D1210	H	D86~D1210	
11006 ~ 12130	D86~D1210	D1	D86~D1210	
12131 ~ 13255	D86~D1210	D2	D86~D1210	
13256 ~ 14380	D86~D1210	D3	D86~D1210	
14381 ~ 15505	D86~D1210	D4	D86~D1210	
15506 ~ 16630	D86~D1210	D5	D86~D1210	
16631 ~ 17755	D86~D1210	D6	D86~D1210	
17756 ~ 18880	D86~D1210	D7	D86~D1210	
18881 ~ 20005	D86~D1210	D8	D86~D1210	
20006 ~ 21130	D86~D1210	D9	D86~D1210	
21131 ~ 22255	D86~D1210	D10	D86~D1210	
22256 ~ 23380	D86~D1210	D11	D86~D1210	
23381 ~ 24505	D86~D1210	D12	D86~D1210	
24506 ~ 25630	D86~D1210	D13	D86~D1210	
25631 ~ 26755	D86~D1210	D14	D86~D1210	
26756 ~ 27880	D86~D1210	D15	D86~D1210	
27881 ~ 29005	D86~D1210	D16	D86~D1210	
29006 ~ 30130	D86~D1210	D17	D86~D1210	

No.	R ³	R ⁴	R ⁵	=
30131 ~ 31255	D86~D1210	D18	D86~D1210	R ³ = R ⁵
31256 ~ 32380	D86~D1210	D19	D86~D1210	
32381 ~ 33505	D86~D1210	D20	D86~D1210	
33506 ~ 34630	D86~D1210	D21	D86~D1210	
34631 ~ 35755	D86~D1210	D22	D86~D1210	
35756 ~ 36880	D86~D1210	D23	D86~D1210	
36881 ~ 38005	D86~D1210	D24	D86~D1210	
38006 ~ 39130	D86~D1210	D25	D86~D1210	
39131 ~ 40255	D86~D1210	D26	D86~D1210	
40256 ~ 41380	D86~D1210	D27	D86~D1210	
41381 ~ 42505	D86~D1210	D28	D86~D1210	
42506 ~ 43630	D86~D1210	D29	D86~D1210	
43631 ~ 44755	D86~D1210	D30	D86~D1210	
44756 ~ 45880	D86~D1210	D31	D86~D1210	
45881 ~ 47005	D86~D1210	D32	D86~D1210	
47006 ~ 48130	D86~D1210	D33	D86~D1210	
48131 ~ 49255	D86~D1210	D34	D86~D1210	
49256 ~ 50380	D86~D1210	D35	D86~D1210	
50381 ~ 51505	D86~D1210	D36	D86~D1210	
51506 ~ 52630	D86~D1210	D37	D86~D1210	
52631 ~ 53755	D86~D1210	D38	D86~D1210	
53756 ~ 54880	D86~D1210	D39	D86~D1210	
54881 ~ 56005	D86~D1210	D40	D86~D1210	
56006 ~ 57130	D86~D1210	D41	D86~D1210	
57131 ~ 58255	D86~D1210	D42	D86~D1210	
58256 ~ 59380	D86~D1210	D43	D86~D1210	
59381 ~ 60505	D86~D1210	D44	D86~D1210	
60506 ~ 61630	D86~D1210	D45	D86~D1210	
61631 ~ 62755	D86~D1210	D46	D86~D1210	
62756 ~ 63880	D86~D1210	D47	D86~D1210	
63881 ~ 65005	D86~D1210	D48	D86~D1210	
65006 ~ 66130	D86~D1210	D49	D86~D1210	
66131 ~ 67255	D86~D1210	D50	D86~D1210	
67256 ~ 68380	D86~D1210	D51	D86~D1210	
68381 ~ 69505	D86~D1210	D52	D86~D1210	
69506 ~ 70630	D86~D1210	D53	D86~D1210	
70631 ~ 71755	D86~D1210	D54	D86~D1210	
71756 ~ 72880	D86~D1210	D55	D86~D1210	
72881 ~ 74005	D86~D1210	D56	D86~D1210	
74006 ~ 75130	D86~D1210	D57	D86~D1210	
75131 ~ 76255	D86~D1210	D58	D86~D1210	
76256 ~ 77380	D86~D1210	D59	D86~D1210	
77381 ~ 78505	D86~D1210	D60	D86~D1210	
78506 ~ 79630	D86~D1210	D61	D86~D1210	
79631 ~ 80755	D86~D1210	D62	D86~D1210	
80756 ~ 81880	D86~D1210	D63	D86~D1210	
81881 ~ 83005	D86~D1210	D64	D86~D1210	
83006 ~ 84130	D86~D1210	D65	D86~D1210	
84131 ~ 85255	D86~D1210	D66	D86~D1210	
85256 ~ 86380	D86~D1210	D67	D86~D1210	
86381 ~ 87505	D86~D1210	D68	D86~D1210	
87506 ~ 88630	D86~D1210	D69	D86~D1210	
88631 ~ 89755	D86~D1210	D70	D86~D1210	
89756 ~ 90880	D86~D1210	D71	D86~D1210	
90881 ~ 92005	D86~D1210	D72	D86~D1210	
92006 ~ 93130	D86~D1210	D73	D86~D1210	
93131 ~ 94255	D86~D1210	D74	D86~D1210	
94256 ~ 95380	D86~D1210	D75	D86~D1210	
95381 ~ 96505	D86~D1210	D76	D86~D1210	
96506 ~ 97630	D86~D1210	D77	D86~D1210	
97631 ~ 98755	D86~D1210	D78	D86~D1210	
98756 ~ 99880	D86~D1210	D79	D86~D1210	

No.	R ³	R ⁴	R ⁵	..
99881 ~ 101005	D86~D1210	D80	D86~D1210	R ³ = R ⁵
101006 ~ 102130	D86~D1210	D81	D86~D1210	
102131 ~ 103255	D86~D1210	D82	D86~D1210	
103256 ~ 104380	D86~D1210	D83	D86~D1210	
104381 ~ 105505	D86~D1210	D84	D86~D1210	
105506 ~ 106630	D86~D1210	D85	D86~D1210	
106631 ~ 107755	D86~D1210	Ar1	D86~D1210	
107756 ~ 108880	D86~D1210	Ar14	D86~D1210	
108881 ~ 110005	D86~D1210	Ar15	D86~D1210	
110006 ~ 111130	D86~D1210	Ar39	D86~D1210	
111131 ~ 112255	D86~D1210	Ar40	D86~D1210	
112256 ~ 113380	D86~D1210	Ar47	D86~D1210	
113381 ~ 114505	H	D86~D1210	D86~D1210	
114506 ~ 115630	D1	D86~D1210	D86~D1210	
115631 ~ 116755	D2	D86~D1210	D86~D1210	
116756 ~ 117880	D3	D86~D1210	D86~D1210	
117881 ~ 119005	D4	D86~D1210	D86~D1210	
119006 ~ 120130	D5	D86~D1210	D86~D1210	
120131 ~ 121255	D6	D86~D1210	D86~D1210	
121256 ~ 122380	D7	D86~D1210	D86~D1210	
122381 ~ 123505	D8	D86~D1210	D86~D1210	
123506 ~ 124630	D9	D86~D1210	D86~D1210	
124631 ~ 125755	D10	D86~D1210	D86~D1210	
125756 ~ 126880	D11	D86~D1210	D86~D1210	
126881 ~ 128005	D12	D86~D1210	D86~D1210	
128006 ~ 129130	D13	D86~D1210	D86~D1210	
129131 ~ 130255	D14	D86~D1210	D86~D1210	
130256 ~ 131380	D15	D86~D1210	D86~D1210	
131381 ~ 132505	D16	D86~D1210	D86~D1210	
132506 ~ 133630	D17	D86~D1210	D86~D1210	
133631 ~ 134755	D18	D86~D1210	D86~D1210	
134756 ~ 135880	D19	D86~D1210	D86~D1210	
135881 ~ 137005	D20	D86~D1210	D86~D1210	
137006 ~ 138130	D21	D86~D1210	D86~D1210	
138131 ~ 139255	D22	D86~D1210	D86~D1210	
139256 ~ 140380	D23	D86~D1210	D86~D1210	
140381 ~ 141505	D24	D86~D1210	D86~D1210	
141506 ~ 142630	D25	D86~D1210	D86~D1210	
142631 ~ 143755	D26	D86~D1210	D86~D1210	
143756 ~ 144880	D27	D86~D1210	D86~D1210	
144881 ~ 146005	D28	D86~D1210	D86~D1210	
146006 ~ 147130	D29	D86~D1210	D86~D1210	
147131 ~ 148255	D30	D86~D1210	D86~D1210	
148256 ~ 149380	D31	D86~D1210	D86~D1210	
149381 ~ 150505	D32	D86~D1210	D86~D1210	
150506 ~ 151630	D33	D86~D1210	D86~D1210	
151631 ~ 152755	D34	D86~D1210	D86~D1210	
152756 ~ 153880	D35	D86~D1210	D86~D1210	
153881 ~ 155005	D36	D86~D1210	D86~D1210	
155006 ~ 156130	D37	D86~D1210	D86~D1210	
156131 ~ 157255	D38	D86~D1210	D86~D1210	
157256 ~ 158380	D39	D86~D1210	D86~D1210	
158381 ~ 159505	D40	D86~D1210	D86~D1210	
159506 ~ 160630	D41	D86~D1210	D86~D1210	
160631 ~ 161755	D42	D86~D1210	D86~D1210	
161756 ~ 162880	D43	D86~D1210	D86~D1210	
162881 ~ 164005	D44	D86~D1210	D86~D1210	
164006 ~ 165130	D45	D86~D1210	D86~D1210	
165131 ~ 166255	D46	D86~D1210	D86~D1210	
166256 ~ 167380	D47	D86~D1210	D86~D1210	
167381 ~ 168505	D48	D86~D1210	D86~D1210	
168506 ~ 169630	D49	D86~D1210	D86~D1210	

No.	R ³	R ⁴	R ⁵	=	
169631 ~ 170755	D50	D86~D1210	D86~D1210	R ⁴ = R ⁵	
170756 ~ 171880	D51	D86~D1210	D86~D1210		
171881 ~ 173005	D52	D86~D1210	D86~D1210		
173006 ~ 174130	D53	D86~D1210	D86~D1210		
174131 ~ 175255	D54	D86~D1210	D86~D1210		
175256 ~ 176380	D55	D86~D1210	D86~D1210		
176381 ~ 177505	D56	D86~D1210	D86~D1210		
177506 ~ 178630	D57	D86~D1210	D86~D1210		
178631 ~ 179755	D58	D86~D1210	D86~D1210		
179756 ~ 180880	D59	D86~D1210	D86~D1210		
180881 ~ 182005	D60	D86~D1210	D86~D1210		
182006 ~ 183130	D61	D86~D1210	D86~D1210		
183131 ~ 184255	D62	D86~D1210	D86~D1210		
184256 ~ 185380	D63	D86~D1210	D86~D1210		
185381 ~ 186505	D64	D86~D1210	D86~D1210		
186506 ~ 187630	D65	D86~D1210	D86~D1210		
187631 ~ 188755	D66	D86~D1210	D86~D1210		
188756 ~ 189880	D67	D86~D1210	D86~D1210		
189881 ~ 191005	D68	D86~D1210	D86~D1210		
191006 ~ 192130	D69	D86~D1210	D86~D1210		
192131 ~ 193255	D70	D86~D1210	D86~D1210		
193256 ~ 194380	D71	D86~D1210	D86~D1210		
194381 ~ 195505	D72	D86~D1210	D86~D1210		
195506 ~ 196630	D73	D86~D1210	D86~D1210		
196631 ~ 197755	D74	D86~D1210	D86~D1210		
197756 ~ 198880	D75	D86~D1210	D86~D1210		
198881 ~ 200005	D76	D86~D1210	D86~D1210		
200006 ~ 201130	D77	D86~D1210	D86~D1210		
201131 ~ 202255	D78	D86~D1210	D86~D1210		
202256 ~ 203380	D79	D86~D1210	D86~D1210		
203381 ~ 204505	D80	D86~D1210	D86~D1210		
204506 ~ 205630	D81	D86~D1210	D86~D1210		
205631 ~ 206755	D82	D86~D1210	D86~D1210		
206756 ~ 207880	D83	D86~D1210	D86~D1210		
207881 ~ 209005	D84	D86~D1210	D86~D1210		
209006 ~ 210130	D85	D86~D1210	D86~D1210		
210131 ~ 211255	Ar1	D86~D1210	D86~D1210		
211256 ~ 212380	Ar14	D86~D1210	D86~D1210		
212381 ~ 213505	Ar15	D86~D1210	D86~D1210		
213506 ~ 214630	Ar39	D86~D1210	D86~D1210		
214631 ~ 215755	Ar40	D86~D1210	D86~D1210		
215756 ~ 216880	Ar47	D86~D1210	D86~D1210		
216881 ~ 218005	D86~D1210	D86~D1210	H		R ³ = R ⁴
218006 ~ 219130	D86~D1210	D86~D1210	D1		
219131 ~ 220255	D86~D1210	D86~D1210	D2		
220256 ~ 221380	D86~D1210	D86~D1210	D3		
221381 ~ 222505	D86~D1210	D86~D1210	D4		
222506 ~ 223630	D86~D1210	D86~D1210	D5		
223631 ~ 224755	D86~D1210	D86~D1210	D6		
224756 ~ 225880	D86~D1210	D86~D1210	D7		
225881 ~ 227005	D86~D1210	D86~D1210	D8		
227006 ~ 228130	D86~D1210	D86~D1210	D9		
228131 ~ 229255	D86~D1210	D86~D1210	D10		
229256 ~ 230380	D86~D1210	D86~D1210	D11		
230381 ~ 231505	D86~D1210	D86~D1210	D12		
231506 ~ 232630	D86~D1210	D86~D1210	D13		
232631 ~ 233755	D86~D1210	D86~D1210	D14		
233756 ~ 234880	D86~D1210	D86~D1210	D15		
234881 ~ 236005	D86~D1210	D86~D1210	D16		
236006 ~ 237130	D86~D1210	D86~D1210	D17		
237131 ~ 238255	D86~D1210	D86~D1210	D18		
238256 ~ 239380	D86~D1210	D86~D1210	D19		

No.	R ³	R ⁴	R ⁵	=
239381 ~ 240505	D86~D1210	D86~D1210	D20	
240506 ~ 241630	D86~D1210	D86~D1210	D21	
241631 ~ 242755	D86~D1210	D86~D1210	D22	
242756 ~ 243880	D86~D1210	D86~D1210	D23	
243881 ~ 245005	D86~D1210	D86~D1210	D24	
245006 ~ 246130	D86~D1210	D86~D1210	D25	
246131 ~ 247255	D86~D1210	D86~D1210	D26	
247256 ~ 248380	D86~D1210	D86~D1210	D27	
248381 ~ 249505	D86~D1210	D86~D1210	D28	
249506 ~ 250630	D86~D1210	D86~D1210	D29	
250631 ~ 251755	D86~D1210	D86~D1210	D30	
251756 ~ 252880	D86~D1210	D86~D1210	D31	
252881 ~ 254005	D86~D1210	D86~D1210	D32	
254006 ~ 255130	D86~D1210	D86~D1210	D33	
255131 ~ 256255	D86~D1210	D86~D1210	D34	
256256 ~ 257380	D86~D1210	D86~D1210	D35	
257381 ~ 258505	D86~D1210	D86~D1210	D36	
258506 ~ 259630	D86~D1210	D86~D1210	D37	
259631 ~ 260755	D86~D1210	D86~D1210	D38	
260756 ~ 261880	D86~D1210	D86~D1210	D39	
261881 ~ 263005	D86~D1210	D86~D1210	D40	
263006 ~ 264130	D86~D1210	D86~D1210	D41	
264131 ~ 265255	D86~D1210	D86~D1210	D42	
265256 ~ 266380	D86~D1210	D86~D1210	D43	
266381 ~ 267505	D86~D1210	D86~D1210	D44	
267506 ~ 268630	D86~D1210	D86~D1210	D45	
268631 ~ 269755	D86~D1210	D86~D1210	D46	
269756 ~ 270880	D86~D1210	D86~D1210	D47	
270881 ~ 272005	D86~D1210	D86~D1210	D48	
272006 ~ 273130	D86~D1210	D86~D1210	D49	
273131 ~ 274255	D86~D1210	D86~D1210	D50	
274256 ~ 275380	D86~D1210	D86~D1210	D51	
275381 ~ 276505	D86~D1210	D86~D1210	D52	
276506 ~ 277630	D86~D1210	D86~D1210	D53	
277631 ~ 278755	D86~D1210	D86~D1210	D54	
278756 ~ 279880	D86~D1210	D86~D1210	D55	
279881 ~ 281005	D86~D1210	D86~D1210	D56	
281006 ~ 282130	D86~D1210	D86~D1210	D57	
282131 ~ 283255	D86~D1210	D86~D1210	D58	
283256 ~ 284380	D86~D1210	D86~D1210	D59	
284381 ~ 285505	D86~D1210	D86~D1210	D60	
285506 ~ 286630	D86~D1210	D86~D1210	D61	
286631 ~ 287755	D86~D1210	D86~D1210	D62	
287756 ~ 288880	D86~D1210	D86~D1210	D63	
288881 ~ 290005	D86~D1210	D86~D1210	D64	
290006 ~ 291130	D86~D1210	D86~D1210	D65	
291131 ~ 292255	D86~D1210	D86~D1210	D66	
292256 ~ 293380	D86~D1210	D86~D1210	D67	
293381 ~ 294505	D86~D1210	D86~D1210	D68	
294506 ~ 295630	D86~D1210	D86~D1210	D69	
295631 ~ 296755	D86~D1210	D86~D1210	D70	
296756 ~ 297880	D86~D1210	D86~D1210	D71	
297881 ~ 299005	D86~D1210	D86~D1210	D72	
299006 ~ 300130	D86~D1210	D86~D1210	D73	
300131 ~ 301255	D86~D1210	D86~D1210	D74	
301256 ~ 302380	D86~D1210	D86~D1210	D75	
302381 ~ 303505	D86~D1210	D86~D1210	D76	
303506 ~ 304630	D86~D1210	D86~D1210	D77	
304631 ~ 305755	D86~D1210	D86~D1210	D78	
305756 ~ 306880	D86~D1210	D86~D1210	D79	
306881 ~ 308005	D86~D1210	D86~D1210	D80	
308006 ~ 309130	D86~D1210	D86~D1210	D81	

R³ = R⁴

No.	R ³	R ⁴	R ⁵	=
309131 ~ 310255	D86~D1210	D86~D1210	D82	R ³ = R ⁴
310256 ~ 311380	D86~D1210	D86~D1210	D83	
311381 ~ 312505	D86~D1210	D86~D1210	D84	
312506 ~ 313630	D86~D1210	D86~D1210	D85	
313631 ~ 314755	D86~D1210	D86~D1210	Ar1	
314756 ~ 315880	D86~D1210	D86~D1210	Ar14	
315881 ~ 317005	D86~D1210	D86~D1210	Ar15	
317006 ~ 318130	D86~D1210	D86~D1210	Ar39	
318131 ~ 319255	D86~D1210	D86~D1210	Ar40	
319256 ~ 320380	D86~D1210	D86~D1210	Ar47	
320381 ~ 321505	D1	D86~D1210	D1	
321506 ~ 322630	D2	D86~D1210	D2	
322631 ~ 323755	D3	D86~D1210	D3	
323756 ~ 324880	D4	D86~D1210	D4	
324881 ~ 326005	D5	D86~D1210	D5	
326006 ~ 327130	D6	D86~D1210	D6	
327131 ~ 328255	D7	D86~D1210	D7	
328256 ~ 329380	D8	D86~D1210	D8	
329381 ~ 330505	D9	D86~D1210	D9	
330506 ~ 331630	D10	D86~D1210	D10	
331631 ~ 332755	D11	D86~D1210	D11	
332756 ~ 333880	D12	D86~D1210	D12	
333881 ~ 335005	D13	D86~D1210	D13	
335006 ~ 336130	D14	D86~D1210	D14	
336131 ~ 337255	D15	D86~D1210	D15	
337256 ~ 338380	D16	D86~D1210	D16	
338381 ~ 339505	D17	D86~D1210	D17	
339506 ~ 340630	D18	D86~D1210	D18	
340631 ~ 341755	D19	D86~D1210	D19	
341756 ~ 342880	D20	D86~D1210	D20	
342881 ~ 344005	D21	D86~D1210	D21	
344006 ~ 345130	D22	D86~D1210	D22	
345131 ~ 346255	D23	D86~D1210	D23	
346256 ~ 347380	D24	D86~D1210	D24	
347381 ~ 348505	D25	D86~D1210	D25	
348506 ~ 349630	D26	D86~D1210	D26	
349631 ~ 350755	D27	D86~D1210	D27	
350756 ~ 351880	D28	D86~D1210	D28	
351881 ~ 353005	D29	D86~D1210	D29	
353006 ~ 354130	D30	D86~D1210	D30	
354131 ~ 355255	D31	D86~D1210	D31	
355256 ~ 356380	D32	D86~D1210	D32	
356381 ~ 357505	D33	D86~D1210	D33	
357506 ~ 358630	D34	D86~D1210	D34	
358631 ~ 359755	D35	D86~D1210	D35	
359756 ~ 360880	D36	D86~D1210	D36	
360881 ~ 362005	D37	D86~D1210	D37	
362006 ~ 363130	D38	D86~D1210	D38	
363131 ~ 364255	D39	D86~D1210	D39	
364256 ~ 365380	D40	D86~D1210	D40	
365381 ~ 366505	D41	D86~D1210	D41	
366506 ~ 367630	D42	D86~D1210	D42	
367631 ~ 368755	D43	D86~D1210	D43	
368756 ~ 369880	D44	D86~D1210	D44	
369881 ~ 371005	D45	D86~D1210	D45	
371006 ~ 372130	D46	D86~D1210	D46	
372131 ~ 373255	D47	D86~D1210	D47	
373256 ~ 374380	D48	D86~D1210	D48	
374381 ~ 375505	D49	D86~D1210	D49	
375506 ~ 376630	D50	D86~D1210	D50	
376631 ~ 377755	D51	D86~D1210	D51	
377756 ~ 378880	D52	D86~D1210	D52	

R³ = R⁵

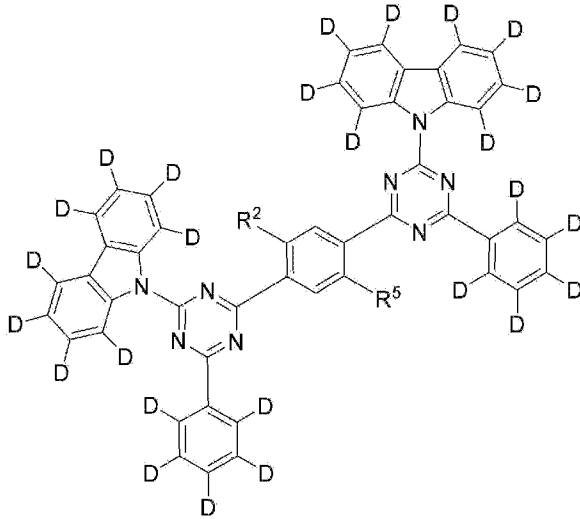
No.	R ³	R ⁴	R ⁵	=
378881 ~ 380005	D53	D86~D1210	D53	R ³ = R ⁵
380006 ~ 381130	D54	D86~D1210	D54	
381131 ~ 382255	D55	D86~D1210	D55	
382256 ~ 383380	D56	D86~D1210	D56	
383381 ~ 384505	D57	D86~D1210	D57	
384506 ~ 385630	D58	D86~D1210	D58	
385631 ~ 386755	D59	D86~D1210	D59	
386756 ~ 387880	D60	D86~D1210	D60	
387881 ~ 389005	D61	D86~D1210	D61	
389006 ~ 390130	D62	D86~D1210	D62	
390131 ~ 391255	D63	D86~D1210	D63	
391256 ~ 392380	D64	D86~D1210	D64	
392381 ~ 393505	D65	D86~D1210	D65	
393506 ~ 394630	D66	D86~D1210	D66	
394631 ~ 395755	D67	D86~D1210	D67	
395756 ~ 396880	D68	D86~D1210	D68	
396881 ~ 398005	D69	D86~D1210	D69	
398006 ~ 399130	D70	D86~D1210	D70	
399131 ~ 400255	D71	D86~D1210	D71	
400256 ~ 401380	D72	D86~D1210	D72	
401381 ~ 402505	D73	D86~D1210	D73	
402506 ~ 403630	D74	D86~D1210	D74	
403631 ~ 404755	D75	D86~D1210	D75	
404756 ~ 405880	D76	D86~D1210	D76	
405881 ~ 407005	D77	D86~D1210	D77	
407006 ~ 408130	D78	D86~D1210	D78	
408131 ~ 409255	D79	D86~D1210	D79	
409256 ~ 410380	D80	D86~D1210	D80	
410381 ~ 411505	D81	D86~D1210	D81	
411506 ~ 412630	D82	D86~D1210	D82	
412631 ~ 413755	D83	D86~D1210	D83	
413756 ~ 414880	D84	D86~D1210	D84	
414881 ~ 416005	D85	D86~D1210	D85	
416006 ~ 417130	Ar1	D86~D1210	Ar1	
417131 ~ 418255	Ar14	D86~D1210	Ar14	
418256 ~ 419380	Ar15	D86~D1210	Ar15	
419381 ~ 420505	Ar39	D86~D1210	Ar39	
420506 ~ 421630	Ar40	D86~D1210	Ar40	
421631 ~ 422755	Ar47	D86~D1210	Ar47	
422756 ~ 423879	D88	D86, D87, D89~D1210	D88	
423880 ~ 425003	D106	D86~D105, D107~D1210	D106	
425004 ~ 426127	D119	D86~D118, D120~D1210	D119	
426128 ~ 427251	D471	D86~D470, D472~D1210	D471	
427252 ~ 428375	D705	D86~D704, D706~D1210	D705	
428376 ~ 429499	D737	D86~D736, D738~D1210	D737	
429500 ~ 430623	D760	D86~D759, D761~D1210	D760	
430624 ~ 431747	D763	D86~D762, D764~D1210	D763	
431748 ~ 432871	D783	D86~D782, D784~D1210	D783	

No.	R ³	R ⁴	R ⁵	=
432872 ~ 433995	D86, D87, D89~D1210	D88	D86, D87, D89~D1210	R ³ = R ⁵
433996 ~ 435119	D86~D105, D107~D1210	D106	D86~D105, D107~D1210	
435120 ~ 436243	D86~D118, D120~D1210	D119	D86~D118, D120~D1210	
436244 ~ 437367	D86~D470, D472~D1210	D471	D86~D470, D472~D1210	
437368 ~ 438491	D86~D704, D706~D1210	D705	D86~D704, D706~D1210	
438492 ~ 439615	D86~D736, D738~D1210	D737	D86~D736, D738~D1210	
439616 ~ 440739	D86~D759, D761~D1210	D760	D86~D759, D761~D1210	
440740 ~ 441863	D86~D762, D764~D1210	D763	D86~D762, D764~D1210	
441864 ~ 442987	D86~D782, D784~D1210	D783	D86~D782, D784~D1210	

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

[化16]

一般式（1 b）



[表3]

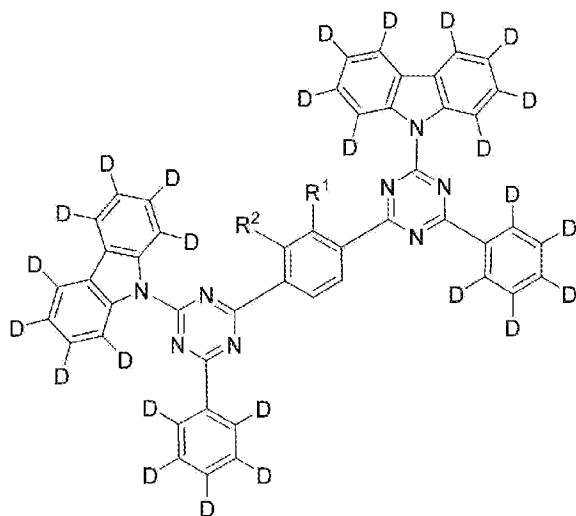
No.	R ²	R ⁵	= R ² = R ⁵
442988 ~ 444197	D1~D1210	D1~D1210	
444198 ~ 445322	D86~D1210	D1	
445323 ~ 446447	D86~D1210	D2	
446448 ~ 447572	D86~D1210	D3	
447573 ~ 448697	D86~D1210	D4	
448698 ~ 449822	D86~D1210	D5	
449823 ~ 450947	D86~D1210	D6	
450948 ~ 452072	D86~D1210	D7	
452073 ~ 453197	D86~D1210	D8	
453198 ~ 454322	D86~D1210	D9	
454323 ~ 455447	D86~D1210	D10	
455448 ~ 456572	D86~D1210	D11	
456573 ~ 457697	D86~D1210	D12	
457698 ~ 458822	D86~D1210	D13	
458823 ~ 459947	D86~D1210	D14	
459948 ~ 461072	D86~D1210	D15	
461073 ~ 462197	D86~D1210	D16	
462198 ~ 463322	D86~D1210	D17	
463323 ~ 464447	D86~D1210	D18	
464448 ~ 465572	D86~D1210	D19	
465573 ~ 466697	D86~D1210	D20	
466698 ~ 467822	D86~D1210	D21	
467823 ~ 468947	D86~D1210	D22	
468948 ~ 470072	D86~D1210	D23	
470073 ~ 471197	D86~D1210	D24	
471198 ~ 472322	D86~D1210	D25	
472323 ~ 473447	D86~D1210	D26	
473448 ~ 474572	D86~D1210	D27	
474573 ~ 475697	D86~D1210	D28	
475698 ~ 476822	D86~D1210	D29	
476823 ~ 477947	D86~D1210	D30	R ² ≠ R ⁵
477948 ~ 479072	D86~D1210	D31	
479073 ~ 480197	D86~D1210	D32	
480198 ~ 481322	D86~D1210	D33	
481323 ~ 482447	D86~D1210	D34	
482448 ~ 483572	D86~D1210	D35	
483573 ~ 484697	D86~D1210	D36	
484698 ~ 485822	D86~D1210	D37	
485823 ~ 486947	D86~D1210	D38	
486948 ~ 488072	D86~D1210	D39	
488073 ~ 489197	D86~D1210	D40	
489198 ~ 490322	D86~D1210	D41	
490323 ~ 491447	D86~D1210	D42	
491448 ~ 492572	D86~D1210	D43	
492573 ~ 493697	D86~D1210	D44	
493698 ~ 494822	D86~D1210	D45	
494823 ~ 495947	D86~D1210	D46	
495948 ~ 497072	D86~D1210	D47	
497073 ~ 498197	D86~D1210	D48	
498198 ~ 499322	D86~D1210	D49	
499323 ~ 500447	D86~D1210	D50	
500448 ~ 501572	D86~D1210	D51	
501573 ~ 502697	D86~D1210	D52	
502698 ~ 503822	D86~D1210	D53	
503823 ~ 504947	D86~D1210	D54	
504948 ~ 506072	D86~D1210	D55	
506073 ~ 507197	D86~D1210	D56	
507198 ~ 508322	D86~D1210	D57	
508323 ~ 509447	D86~D1210	D58	
509448 ~ 510572	D86~D1210	D59	

No.	R ²	R ⁵	=
510573 ~ 511697	D86~D1210	D60	R ² ≠ R ⁵
511698 ~ 512822	D86~D1210	D61	
512823 ~ 513947	D86~D1210	D62	
513948 ~ 515072	D86~D1210	D63	
515073 ~ 516197	D86~D1210	D64	
516198 ~ 517322	D86~D1210	D65	
517323 ~ 518447	D86~D1210	D66	
518448 ~ 519572	D86~D1210	D67	
519573 ~ 520697	D86~D1210	D68	
520698 ~ 521822	D86~D1210	D69	
521823 ~ 522947	D86~D1210	D70	
522948 ~ 524072	D86~D1210	D71	
524073 ~ 525197	D86~D1210	D72	
525198 ~ 526322	D86~D1210	D73	
526323 ~ 527447	D86~D1210	D74	
527448 ~ 528572	D86~D1210	D75	
528573 ~ 529697	D86~D1210	D76	
529698 ~ 530822	D86~D1210	D77	
530823 ~ 531947	D86~D1210	D78	
531948 ~ 533072	D86~D1210	D79	
533073 ~ 534197	D86~D1210	D80	
534198 ~ 535322	D86~D1210	D81	
535323 ~ 536447	D86~D1210	D82	
536448 ~ 537572	D86~D1210	D83	
537573 ~ 538697	D86~D1210	D84	
538698 ~ 539822	D86~D1210	D85	

[0058] 次に下記一般式（1c）で表される構造を有する化合物の具体例を表4に示す。表4では、表2と同じ要領で各化合物の構造を示している。

[化17]

一般式（1c）



[表4]

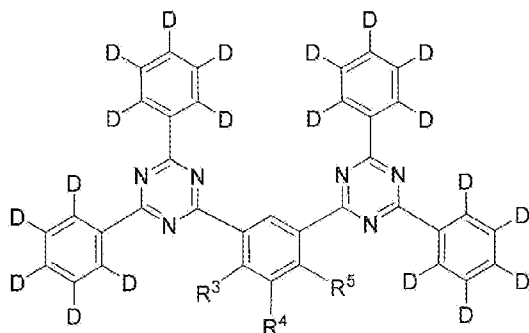
No.	R ¹	R ²	= R ¹ = R ²
539823 ~ 541032	D1~D1210	D1~D1210	R ¹ = R ²
541033 ~ 542157	D86~D1210	D1	
542158 ~ 543282	D86~D1210	D2	
543283 ~ 544407	D86~D1210	D3	
544408 ~ 545532	D86~D1210	D4	
545533 ~ 546657	D86~D1210	D5	
546658 ~ 547782	D86~D1210	D6	
547783 ~ 548907	D86~D1210	D7	
548908 ~ 550032	D86~D1210	D8	
550033 ~ 551157	D86~D1210	D9	
551158 ~ 552282	D86~D1210	D10	
552283 ~ 553407	D86~D1210	D11	
553408 ~ 554532	D86~D1210	D12	
554533 ~ 555657	D86~D1210	D13	
555658 ~ 556782	D86~D1210	D14	
556783 ~ 557907	D86~D1210	D15	
557908 ~ 559032	D86~D1210	D16	
559033 ~ 560157	D86~D1210	D17	
560158 ~ 561282	D86~D1210	D18	
561283 ~ 562407	D86~D1210	D19	
562408 ~ 563532	D86~D1210	D20	
563533 ~ 564657	D86~D1210	D21	
564658 ~ 565782	D86~D1210	D22	
565783 ~ 566907	D86~D1210	D23	
566908 ~ 568032	D86~D1210	D24	
568033 ~ 569157	D86~D1210	D25	
569158 ~ 570282	D86~D1210	D26	
570283 ~ 571407	D86~D1210	D27	
571408 ~ 572532	D86~D1210	D28	
572533 ~ 573657	D86~D1210	D29	
573658 ~ 574782	D86~D1210	D30	R ¹ ≠ R ²
574783 ~ 575907	D86~D1210	D31	
575908 ~ 577032	D86~D1210	D32	
577033 ~ 578157	D86~D1210	D33	
578158 ~ 579282	D86~D1210	D34	
579283 ~ 580407	D86~D1210	D35	
580408 ~ 581532	D86~D1210	D36	
581533 ~ 582657	D86~D1210	D37	
582658 ~ 583782	D86~D1210	D38	
583783 ~ 584907	D86~D1210	D39	
584908 ~ 586032	D86~D1210	D40	
586033 ~ 587157	D86~D1210	D41	
587158 ~ 588282	D86~D1210	D42	
588283 ~ 589407	D86~D1210	D43	
589408 ~ 590532	D86~D1210	D44	
590533 ~ 591657	D86~D1210	D45	
591658 ~ 592782	D86~D1210	D46	
592783 ~ 593907	D86~D1210	D47	
593908 ~ 595032	D86~D1210	D48	
595033 ~ 596157	D86~D1210	D49	
596158 ~ 597282	D86~D1210	D50	
597283 ~ 598407	D86~D1210	D51	
598408 ~ 599532	D86~D1210	D52	
599533 ~ 600657	D86~D1210	D53	
600658 ~ 601782	D86~D1210	D54	
601783 ~ 602907	D86~D1210	D55	
602908 ~ 604032	D86~D1210	D56	
604033 ~ 605157	D86~D1210	D57	
605158 ~ 606282	D86~D1210	D58	
606283 ~ 607407	D86~D1210	D59	

No.	R ¹	R ²	=
607408 ~ 608532	D86~D1210	D60	R ¹ ≠ R ²
608533 ~ 609657	D86~D1210	D61	
609658 ~ 610782	D86~D1210	D62	
610783 ~ 611907	D86~D1210	D63	
611908 ~ 613032	D86~D1210	D64	
613033 ~ 614157	D86~D1210	D65	
614158 ~ 615282	D86~D1210	D66	
615283 ~ 616407	D86~D1210	D67	
616408 ~ 617532	D86~D1210	D68	
617533 ~ 618657	D86~D1210	D69	
618658 ~ 619782	D86~D1210	D70	
619783 ~ 620907	D86~D1210	D71	
620908 ~ 622032	D86~D1210	D72	
622033 ~ 623157	D86~D1210	D73	
623158 ~ 624282	D86~D1210	D74	
624283 ~ 625407	D86~D1210	D75	
625408 ~ 626532	D86~D1210	D76	
626533 ~ 627657	D86~D1210	D77	
627658 ~ 628782	D86~D1210	D78	
628783 ~ 629907	D86~D1210	D79	
629908 ~ 631032	D86~D1210	D80	
631033 ~ 632157	D86~D1210	D81	
632158 ~ 633282	D86~D1210	D82	
633283 ~ 634407	D86~D1210	D83	
634408 ~ 635532	D86~D1210	D84	
635533 ~ 636657	D86~D1210	D85	

[0059] 次に下記一般式（1 d）で表される構造を有する化合物の具体例を表5に示す。表5では、表2と同じ要領で各化合物の構造を示している。

[化18]

一般式（1 d）



[表5]

No.	R ³	R ⁴	R ⁵	=
636658 ~ 637782	D86~D1210	D86~D1210	D86~D1210	R ³ = R ⁴ = R ⁵
637783 ~ 638907	D86~D1210	H	D86~D1210	R ³ = R ⁵
638908 ~ 640032	D86~D1210	D1	D86~D1210	
640033 ~ 641157	D86~D1210	D2	D86~D1210	
641158 ~ 642282	D86~D1210	D3	D86~D1210	
642283 ~ 643407	D86~D1210	D4	D86~D1210	
643408 ~ 644532	D86~D1210	D5	D86~D1210	
644533 ~ 645657	D86~D1210	D6	D86~D1210	
645658 ~ 646782	D86~D1210	D7	D86~D1210	
646783 ~ 647907	D86~D1210	D8	D86~D1210	
647908 ~ 649032	D86~D1210	D9	D86~D1210	
649033 ~ 650157	D86~D1210	D10	D86~D1210	
650158 ~ 651282	D86~D1210	D11	D86~D1210	
651283 ~ 652407	D86~D1210	D12	D86~D1210	
652408 ~ 653532	D86~D1210	D13	D86~D1210	
653533 ~ 654657	D86~D1210	D14	D86~D1210	
654658 ~ 655782	D86~D1210	D15	D86~D1210	
655783 ~ 656907	D86~D1210	D16	D86~D1210	
656908 ~ 658032	D86~D1210	D17	D86~D1210	
658033 ~ 659157	D86~D1210	D18	D86~D1210	
659158 ~ 660282	D86~D1210	D19	D86~D1210	
660283 ~ 661407	D86~D1210	D20	D86~D1210	
661408 ~ 662532	D86~D1210	D21	D86~D1210	
662533 ~ 663657	D86~D1210	D22	D86~D1210	
663658 ~ 664782	D86~D1210	D23	D86~D1210	
664783 ~ 665907	D86~D1210	D24	D86~D1210	
665908 ~ 667032	D86~D1210	D25	D86~D1210	
667033 ~ 668157	D86~D1210	D26	D86~D1210	
668158 ~ 669282	D86~D1210	D27	D86~D1210	
669283 ~ 670407	D86~D1210	D28	D86~D1210	
670408 ~ 671532	D86~D1210	D29	D86~D1210	
671533 ~ 672657	D86~D1210	D30	D86~D1210	
672658 ~ 673782	D86~D1210	D31	D86~D1210	
673783 ~ 674907	D86~D1210	D32	D86~D1210	
674908 ~ 676032	D86~D1210	D33	D86~D1210	
676033 ~ 677157	D86~D1210	D34	D86~D1210	
677158 ~ 678282	D86~D1210	D35	D86~D1210	
678283 ~ 679407	D86~D1210	D36	D86~D1210	
679408 ~ 680532	D86~D1210	D37	D86~D1210	
680533 ~ 681657	D86~D1210	D38	D86~D1210	
681658 ~ 682782	D86~D1210	D39	D86~D1210	
682783 ~ 683907	D86~D1210	D40	D86~D1210	
683908 ~ 685032	D86~D1210	D41	D86~D1210	
685033 ~ 686157	D86~D1210	D42	D86~D1210	
686158 ~ 687282	D86~D1210	D43	D86~D1210	
687283 ~ 688407	D86~D1210	D44	D86~D1210	
688408 ~ 689532	D86~D1210	D45	D86~D1210	
689533 ~ 690657	D86~D1210	D46	D86~D1210	
690658 ~ 691782	D86~D1210	D47	D86~D1210	
691783 ~ 692907	D86~D1210	D48	D86~D1210	
692908 ~ 694032	D86~D1210	D49	D86~D1210	
694033 ~ 695157	D86~D1210	D50	D86~D1210	
695158 ~ 696282	D86~D1210	D51	D86~D1210	
696283 ~ 697407	D86~D1210	D52	D86~D1210	
697408 ~ 698532	D86~D1210	D53	D86~D1210	
698533 ~ 699657	D86~D1210	D54	D86~D1210	
699658 ~ 700782	D86~D1210	D55	D86~D1210	
700783 ~ 701907	D86~D1210	D56	D86~D1210	
701908 ~ 703032	D86~D1210	D57	D86~D1210	
703033 ~ 704157	D86~D1210	D58	D86~D1210	

No.	R ³	R ⁴	R ⁵	≡
704158 ~ 705282	D86~D1210	D59	D86~D1210	R ³ = R ⁵
705283 ~ 706407	D86~D1210	D60	D86~D1210	
706408 ~ 707532	D86~D1210	D61	D86~D1210	
707533 ~ 708657	D86~D1210	D62	D86~D1210	
708658 ~ 709782	D86~D1210	D63	D86~D1210	
709783 ~ 710907	D86~D1210	D64	D86~D1210	
710908 ~ 712032	D86~D1210	D65	D86~D1210	
712033 ~ 713157	D86~D1210	D66	D86~D1210	
713158 ~ 714282	D86~D1210	D67	D86~D1210	
714283 ~ 715407	D86~D1210	D68	D86~D1210	
715408 ~ 716532	D86~D1210	D69	D86~D1210	
716533 ~ 717657	D86~D1210	D70	D86~D1210	
717658 ~ 718782	D86~D1210	D71	D86~D1210	
718783 ~ 719907	D86~D1210	D72	D86~D1210	
719908 ~ 721032	D86~D1210	D73	D86~D1210	
721033 ~ 722157	D86~D1210	D74	D86~D1210	
722158 ~ 723282	D86~D1210	D75	D86~D1210	
723283 ~ 724407	D86~D1210	D76	D86~D1210	
724408 ~ 725532	D86~D1210	D77	D86~D1210	
725533 ~ 726657	D86~D1210	D78	D86~D1210	
726658 ~ 727782	D86~D1210	D79	D86~D1210	
727783 ~ 728907	D86~D1210	D80	D86~D1210	
728908 ~ 730032	D86~D1210	D81	D86~D1210	
730033 ~ 731157	D86~D1210	D82	D86~D1210	
731158 ~ 732282	D86~D1210	D83	D86~D1210	
732283 ~ 733407	D86~D1210	D84	D86~D1210	
733408 ~ 734532	D86~D1210	D85	D86~D1210	
734533 ~ 735657	D86~D1210	Ar1	D86~D1210	
735658 ~ 736782	D86~D1210	Ar14	D86~D1210	
736783 ~ 737907	D86~D1210	Ar15	D86~D1210	
737908 ~ 739032	D86~D1210	Ar39	D86~D1210	
739033 ~ 740157	D86~D1210	Ar40	D86~D1210	
740158 ~ 741282	D86~D1210	Ar47	D86~D1210	
741283 ~ 742407	H	D86~D1210	D86~D1210	R ⁴ = R ⁵
742408 ~ 743532	D1	D86~D1210	D86~D1210	
743533 ~ 744657	D2	D86~D1210	D86~D1210	
744658 ~ 745782	D3	D86~D1210	D86~D1210	
745783 ~ 746907	D4	D86~D1210	D86~D1210	
746908 ~ 748032	D5	D86~D1210	D86~D1210	
748033 ~ 749157	D6	D86~D1210	D86~D1210	
749158 ~ 750282	D7	D86~D1210	D86~D1210	
750283 ~ 751407	D8	D86~D1210	D86~D1210	
751408 ~ 752532	D9	D86~D1210	D86~D1210	
752533 ~ 753657	D10	D86~D1210	D86~D1210	
753658 ~ 754782	D11	D86~D1210	D86~D1210	
754783 ~ 755907	D12	D86~D1210	D86~D1210	
755908 ~ 757032	D13	D86~D1210	D86~D1210	
757033 ~ 758157	D14	D86~D1210	D86~D1210	
758158 ~ 759282	D15	D86~D1210	D86~D1210	
759283 ~ 760407	D16	D86~D1210	D86~D1210	
760408 ~ 761532	D17	D86~D1210	D86~D1210	
761533 ~ 762657	D18	D86~D1210	D86~D1210	
762658 ~ 763782	D19	D86~D1210	D86~D1210	
763783 ~ 764907	D20	D86~D1210	D86~D1210	
764908 ~ 766032	D21	D86~D1210	D86~D1210	
766033 ~ 767157	D22	D86~D1210	D86~D1210	
767158 ~ 768282	D23	D86~D1210	D86~D1210	
768283 ~ 769407	D24	D86~D1210	D86~D1210	
769408 ~ 770532	D25	D86~D1210	D86~D1210	
770533 ~ 771657	D26	D86~D1210	D86~D1210	
771658 ~ 772782	D27	D86~D1210	D86~D1210	
772783 ~ 773907	D28	D86~D1210	D86~D1210	

No.	R ³	R ⁴	R ⁵	=
773908 ~ 775032	D29	D86~D1210	D86~D1210	R ⁴ = R ⁵
775033 ~ 776157	D30	D86~D1210	D86~D1210	
776158 ~ 777282	D31	D86~D1210	D86~D1210	
777283 ~ 778407	D32	D86~D1210	D86~D1210	
778408 ~ 779532	D33	D86~D1210	D86~D1210	
779533 ~ 780657	D34	D86~D1210	D86~D1210	
780658 ~ 781782	D35	D86~D1210	D86~D1210	
781783 ~ 782907	D36	D86~D1210	D86~D1210	
782908 ~ 784032	D37	D86~D1210	D86~D1210	
784033 ~ 785157	D38	D86~D1210	D86~D1210	
785158 ~ 786282	D39	D86~D1210	D86~D1210	
786283 ~ 787407	D40	D86~D1210	D86~D1210	
787408 ~ 788532	D41	D86~D1210	D86~D1210	
788533 ~ 789657	D42	D86~D1210	D86~D1210	
789658 ~ 790782	D43	D86~D1210	D86~D1210	
790783 ~ 791907	D44	D86~D1210	D86~D1210	
791908 ~ 793032	D45	D86~D1210	D86~D1210	
793033 ~ 794157	D46	D86~D1210	D86~D1210	
794158 ~ 795282	D47	D86~D1210	D86~D1210	
795283 ~ 796407	D48	D86~D1210	D86~D1210	
796408 ~ 797532	D49	D86~D1210	D86~D1210	
797533 ~ 798657	D50	D86~D1210	D86~D1210	
798658 ~ 799782	D51	D86~D1210	D86~D1210	
799783 ~ 800907	D52	D86~D1210	D86~D1210	
800908 ~ 802032	D53	D86~D1210	D86~D1210	
802033 ~ 803157	D54	D86~D1210	D86~D1210	
803158 ~ 804282	D55	D86~D1210	D86~D1210	
804283 ~ 805407	D56	D86~D1210	D86~D1210	
805408 ~ 806532	D57	D86~D1210	D86~D1210	
806533 ~ 807657	D58	D86~D1210	D86~D1210	
807658 ~ 808782	D59	D86~D1210	D86~D1210	
808783 ~ 809907	D60	D86~D1210	D86~D1210	
809908 ~ 811032	D61	D86~D1210	D86~D1210	
811033 ~ 812157	D62	D86~D1210	D86~D1210	
812158 ~ 813282	D63	D86~D1210	D86~D1210	
813283 ~ 814407	D64	D86~D1210	D86~D1210	
814408 ~ 815532	D65	D86~D1210	D86~D1210	
815533 ~ 816657	D66	D86~D1210	D86~D1210	
816658 ~ 817782	D67	D86~D1210	D86~D1210	
817783 ~ 818907	D68	D86~D1210	D86~D1210	
818908 ~ 820032	D69	D86~D1210	D86~D1210	
820033 ~ 821157	D70	D86~D1210	D86~D1210	
821158 ~ 822282	D71	D86~D1210	D86~D1210	
822283 ~ 823407	D72	D86~D1210	D86~D1210	
823408 ~ 824532	D73	D86~D1210	D86~D1210	
824533 ~ 825657	D74	D86~D1210	D86~D1210	
825658 ~ 826782	D75	D86~D1210	D86~D1210	
826783 ~ 827907	D76	D86~D1210	D86~D1210	
827908 ~ 829032	D77	D86~D1210	D86~D1210	
829033 ~ 830157	D78	D86~D1210	D86~D1210	
830158 ~ 831282	D79	D86~D1210	D86~D1210	
831283 ~ 832407	D80	D86~D1210	D86~D1210	
832408 ~ 833532	D81	D86~D1210	D86~D1210	
833533 ~ 834657	D82	D86~D1210	D86~D1210	
834658 ~ 835782	D83	D86~D1210	D86~D1210	
835783 ~ 836907	D84	D86~D1210	D86~D1210	
836908 ~ 838032	D85	D86~D1210	D86~D1210	
838033 ~ 839157	Ar1	D86~D1210	D86~D1210	
839158 ~ 840282	Ar14	D86~D1210	D86~D1210	
840283 ~ 841407	Ar15	D86~D1210	D86~D1210	
841408 ~ 842532	Ar39	D86~D1210	D86~D1210	
842533 ~ 843657	Ar40	D86~D1210	D86~D1210	

No.	R ³	R ⁴	R ⁵	= R ³ = R ⁵
843658 ~ 844782	Ar47	D86~D1210	D86~D1210	
844783 ~ 845907	D86~D1210	D86~D1210	H	
845908 ~ 847032	D86~D1210	D86~D1210	D1	
847033 ~ 848157	D86~D1210	D86~D1210	D2	
848158 ~ 849282	D86~D1210	D86~D1210	D3	
849283 ~ 850407	D86~D1210	D86~D1210	D4	
850408 ~ 851532	D86~D1210	D86~D1210	D5	
851533 ~ 852657	D86~D1210	D86~D1210	D6	
852658 ~ 853782	D86~D1210	D86~D1210	D7	
853783 ~ 854907	D86~D1210	D86~D1210	D8	
854908 ~ 856032	D86~D1210	D86~D1210	D9	
856033 ~ 857157	D86~D1210	D86~D1210	D10	
857158 ~ 858282	D86~D1210	D86~D1210	D11	
858283 ~ 859407	D86~D1210	D86~D1210	D12	
859408 ~ 860532	D86~D1210	D86~D1210	D13	
860533 ~ 861657	D86~D1210	D86~D1210	D14	
861658 ~ 862782	D86~D1210	D86~D1210	D15	
862783 ~ 863907	D86~D1210	D86~D1210	D16	
863908 ~ 865032	D86~D1210	D86~D1210	D17	
865033 ~ 866157	D86~D1210	D86~D1210	D18	
866158 ~ 867282	D86~D1210	D86~D1210	D19	
867283 ~ 868407	D86~D1210	D86~D1210	D20	
868408 ~ 869532	D86~D1210	D86~D1210	D21	
869533 ~ 870657	D86~D1210	D86~D1210	D22	
870658 ~ 871782	D86~D1210	D86~D1210	D23	
871783 ~ 872907	D86~D1210	D86~D1210	D24	
872908 ~ 874032	D86~D1210	D86~D1210	D25	
874033 ~ 875157	D86~D1210	D86~D1210	D26	
875158 ~ 876282	D86~D1210	D86~D1210	D27	
876283 ~ 877407	D86~D1210	D86~D1210	D28	
877408 ~ 878532	D86~D1210	D86~D1210	D29	
878533 ~ 879657	D86~D1210	D86~D1210	D30	
879658 ~ 880782	D86~D1210	D86~D1210	D31	
880783 ~ 881907	D86~D1210	D86~D1210	D32	
881908 ~ 883032	D86~D1210	D86~D1210	D33	
883033 ~ 884157	D86~D1210	D86~D1210	D34	
884158 ~ 885282	D86~D1210	D86~D1210	D35	
885283 ~ 886407	D86~D1210	D86~D1210	D36	
886408 ~ 887532	D86~D1210	D86~D1210	D37	
887533 ~ 888657	D86~D1210	D86~D1210	D38	
888658 ~ 889782	D86~D1210	D86~D1210	D39	
889783 ~ 890907	D86~D1210	D86~D1210	D40	
890908 ~ 892032	D86~D1210	D86~D1210	D41	
892033 ~ 893157	D86~D1210	D86~D1210	D42	
893158 ~ 894282	D86~D1210	D86~D1210	D43	
894283 ~ 895407	D86~D1210	D86~D1210	D44	
895408 ~ 896532	D86~D1210	D86~D1210	D45	
896533 ~ 897657	D86~D1210	D86~D1210	D46	
897658 ~ 898782	D86~D1210	D86~D1210	D47	
898783 ~ 899907	D86~D1210	D86~D1210	D48	
899908 ~ 901032	D86~D1210	D86~D1210	D49	
901033 ~ 902157	D86~D1210	D86~D1210	D50	
902158 ~ 903282	D86~D1210	D86~D1210	D51	
903283 ~ 904407	D86~D1210	D86~D1210	D52	
904408 ~ 905532	D86~D1210	D86~D1210	D53	
905533 ~ 906657	D86~D1210	D86~D1210	D54	
906658 ~ 907782	D86~D1210	D86~D1210	D55	
907783 ~ 908907	D86~D1210	D86~D1210	D56	
908908 ~ 910032	D86~D1210	D86~D1210	D57	
910033 ~ 911157	D86~D1210	D86~D1210	D58	
911158 ~ 912282	D86~D1210	D86~D1210	D59	
912283 ~ 913407	D86~D1210	D86~D1210	D60	

R³ = R⁴

No.	R ³	R ⁴	R ⁵	=	
913408 ~ 914532	D86~D1210	D86~D1210	D61	R ³ = R ⁴	
914533 ~ 915657	D86~D1210	D86~D1210	D62		
915658 ~ 916782	D86~D1210	D86~D1210	D63		
916783 ~ 917907	D86~D1210	D86~D1210	D64		
917908 ~ 919032	D86~D1210	D86~D1210	D65		
919033 ~ 920157	D86~D1210	D86~D1210	D66		
920158 ~ 921282	D86~D1210	D86~D1210	D67		
921283 ~ 922407	D86~D1210	D86~D1210	D68		
922408 ~ 923532	D86~D1210	D86~D1210	D69		
923533 ~ 924657	D86~D1210	D86~D1210	D70		
924658 ~ 925782	D86~D1210	D86~D1210	D71		
925783 ~ 926907	D86~D1210	D86~D1210	D72		
926908 ~ 928032	D86~D1210	D86~D1210	D73		
928033 ~ 929157	D86~D1210	D86~D1210	D74		
929158 ~ 930282	D86~D1210	D86~D1210	D75		
930283 ~ 931407	D86~D1210	D86~D1210	D76		
931408 ~ 932532	D86~D1210	D86~D1210	D77		
932533 ~ 933657	D86~D1210	D86~D1210	D78		
933658 ~ 934782	D86~D1210	D86~D1210	D79		
934783 ~ 935907	D86~D1210	D86~D1210	D80		
935908 ~ 937032	D86~D1210	D86~D1210	D81		
937033 ~ 938157	D86~D1210	D86~D1210	D82		
938158 ~ 939282	D86~D1210	D86~D1210	D83		
939283 ~ 940407	D86~D1210	D86~D1210	D84		
940408 ~ 941532	D86~D1210	D86~D1210	D85		
941533 ~ 942657	D86~D1210	D86~D1210	Ar1		
942658 ~ 943782	D86~D1210	D86~D1210	Ar14		
943783 ~ 944907	D86~D1210	D86~D1210	Ar15		
944908 ~ 946032	D86~D1210	D86~D1210	Ar39		
946033 ~ 947157	D86~D1210	D86~D1210	Ar40		
947158 ~ 948282	D86~D1210	D86~D1210	Ar47		
948283 ~ 949407	D1	D86~D1210	D1		R ³ = R ⁵
949408 ~ 950532	D2	D86~D1210	D2		
950533 ~ 951657	D3	D86~D1210	D3		
951658 ~ 952782	D4	D86~D1210	D4		
952783 ~ 953907	D5	D86~D1210	D5		
953908 ~ 955032	D6	D86~D1210	D6		
955033 ~ 956157	D7	D86~D1210	D7		
956158 ~ 957282	D8	D86~D1210	D8		
957283 ~ 958407	D9	D86~D1210	D9		
958408 ~ 959532	D10	D86~D1210	D10		
959533 ~ 960657	D11	D86~D1210	D11		
960658 ~ 961782	D12	D86~D1210	D12		
961783 ~ 962907	D13	D86~D1210	D13		
962908 ~ 964032	D14	D86~D1210	D14		
964033 ~ 965157	D15	D86~D1210	D15		
965158 ~ 966282	D16	D86~D1210	D16		
966283 ~ 967407	D17	D86~D1210	D17		
967408 ~ 968532	D18	D86~D1210	D18		
968533 ~ 969657	D19	D86~D1210	D19		
969658 ~ 970782	D20	D86~D1210	D20		
970783 ~ 971907	D21	D86~D1210	D21		
971908 ~ 973032	D22	D86~D1210	D22		
973033 ~ 974157	D23	D86~D1210	D23		
974158 ~ 975282	D24	D86~D1210	D24		
975283 ~ 976407	D25	D86~D1210	D25		
976408 ~ 977532	D26	D86~D1210	D26		
977533 ~ 978657	D27	D86~D1210	D27		
978658 ~ 979782	D28	D86~D1210	D28		
979783 ~ 980907	D29	D86~D1210	D29		
980908 ~ 982032	D30	D86~D1210	D30		
982033 ~ 983157	D31	D86~D1210	D31		

No.	R ³	R ⁴	R ⁵	≡
983158 ~ 984282	D32	D86~D1210	D32	
984283 ~ 985407	D33	D86~D1210	D33	
985408 ~ 986532	D34	D86~D1210	D34	
986533 ~ 987657	D35	D86~D1210	D35	
987658 ~ 988782	D36	D86~D1210	D36	
988783 ~ 989907	D37	D86~D1210	D37	
989908 ~ 991032	D38	D86~D1210	D38	
991033 ~ 992157	D39	D86~D1210	D39	
992158 ~ 993282	D40	D86~D1210	D40	
993283 ~ 994407	D41	D86~D1210	D41	
994408 ~ 995532	D42	D86~D1210	D42	
995533 ~ 996657	D43	D86~D1210	D43	
996658 ~ 997782	D44	D86~D1210	D44	
997783 ~ 998907	D45	D86~D1210	D45	
998908 ~ 1000032	D46	D86~D1210	D46	
1000033 ~ 1001157	D47	D86~D1210	D47	
1001158 ~ 1002282	D48	D86~D1210	D48	
1002283 ~ 1003407	D49	D86~D1210	D49	
1003408 ~ 1004532	D50	D86~D1210	D50	
1004533 ~ 1005657	D51	D86~D1210	D51	
1005658 ~ 1006782	D52	D86~D1210	D52	
1006783 ~ 1007907	D53	D86~D1210	D53	
1007908 ~ 1009032	D54	D86~D1210	D54	
1009033 ~ 1010157	D55	D86~D1210	D55	
1010158 ~ 1011282	D56	D86~D1210	D56	
1011283 ~ 1012407	D57	D86~D1210	D57	
1012408 ~ 1013532	D58	D86~D1210	D58	
1013533 ~ 1014657	D59	D86~D1210	D59	
1014658 ~ 1015782	D60	D86~D1210	D60	
1015783 ~ 1016907	D61	D86~D1210	D61	
1016908 ~ 1018032	D62	D86~D1210	D62	
1018033 ~ 1019157	D63	D86~D1210	D63	
1019158 ~ 1020282	D64	D86~D1210	D64	
1020283 ~ 1021407	D65	D86~D1210	D65	
1021408 ~ 1022532	D66	D86~D1210	D66	
1022533 ~ 1023657	D67	D86~D1210	D67	
1023658 ~ 1024782	D68	D86~D1210	D68	
1024783 ~ 1025907	D69	D86~D1210	D69	
1025908 ~ 1027032	D70	D86~D1210	D70	
1027033 ~ 1028157	D71	D86~D1210	D71	
1028158 ~ 1029282	D72	D86~D1210	D72	
1029283 ~ 1030407	D73	D86~D1210	D73	
1030408 ~ 1031532	D74	D86~D1210	D74	
1031533 ~ 1032657	D75	D86~D1210	D75	
1032658 ~ 1033782	D76	D86~D1210	D76	
1033783 ~ 1034907	D77	D86~D1210	D77	
1034908 ~ 1036032	D78	D86~D1210	D78	
1036033 ~ 1037157	D79	D86~D1210	D79	
1037158 ~ 1038282	D80	D86~D1210	D80	
1038283 ~ 1039407	D81	D86~D1210	D81	
1039408 ~ 1040532	D82	D86~D1210	D82	
1040533 ~ 1041657	D83	D86~D1210	D83	
1041658 ~ 1042782	D84	D86~D1210	D84	
1042783 ~ 1043907	D85	D86~D1210	D85	

$R^3 = R^5$

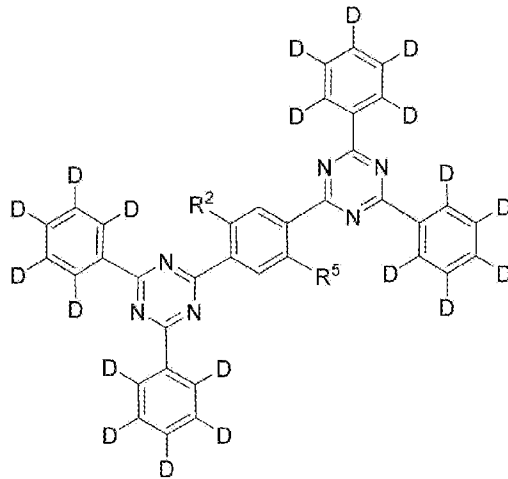
No.	R ³	R ⁴	R ⁵	=
1043908 ~ 1045031	D88	D86, D87, D89~D1210	D88	R ³ = R ⁵
1045032 ~ 1046155	D106	D86~D105, D107~D1210	D106	
1046156 ~ 1047279	D119	D86~D118, D120~D1210	D119	
1047280 ~ 1048403	D471	D86~D470, D472~D1210	D471	
1048404 ~ 1049527	D705	D86~D704, D706~D1210	D705	
1049528 ~ 1050651	D737	D86~D736, D738~D1210	D737	
1050652 ~ 1051775	D760	D86~D759, D761~D1210	D760	
1051776 ~ 1052899	D763	D86~D762, D764~D1210	D763	
1052900 ~ 1054023	D783	D86~D782, D784~D1210	D783	

No.	R ³	R ⁴	R ⁵	=
1054024 ~ 1055147	D86, D87, D89~D1210	D88	D86, D87, D89~D1210	R ³ = R ⁵
1055148 ~ 1056271	D86~D105, D107~D1210	D106	D86~D105, D107~D1210	
1056272 ~ 1057395	D86~D118, D120~D1210	D119	D86~D118, D120~D1210	
1057396 ~ 1058519	D86~D470, D472~D1210	D471	D86~D470, D472~D1210	
1058520 ~ 1059643	D86~D704, D706~D1210	D705	D86~D704, D706~D1210	
1059644 ~ 1060767	D86~D736, D738~D1210	D737	D86~D736, D738~D1210	
1060768 ~ 1061891	D86~D759, D761~D1210	D760	D86~D759, D761~D1210	
1061892 ~ 1063015	D86~D762, D764~D1210	D763	D86~D762, D764~D1210	
1063016 ~ 1064139	D86~D782, D784~D1210	D783	D86~D782, D784~D1210	

[0060] 次に下記一般式（1 e）で表される構造を有する化合物の具体例を表6に示す。表6では、表2と同じ要領で各化合物の構造を示している。

[化19]

一般式（1 e）



[表6]

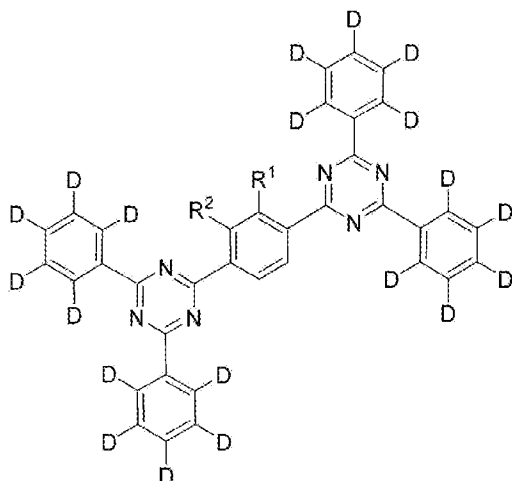
No.	R ²	R ⁵	=
1064140 ~ 1065264	D86~D1210	D86~D1210	R ² = R ⁵
1065265 ~ 1066389	D86~D1210	D1	R ² ≠ R ⁵
1066390 ~ 1067514	D86~D1210	D2	
1067515 ~ 1068639	D86~D1210	D3	
1068640 ~ 1069764	D86~D1210	D4	
1069765 ~ 1070889	D86~D1210	D5	
1070890 ~ 1072014	D86~D1210	D6	
1072015 ~ 1073139	D86~D1210	D7	
1073140 ~ 1074264	D86~D1210	D8	
1074265 ~ 1075389	D86~D1210	D9	
1075390 ~ 1076514	D86~D1210	D10	
1076515 ~ 1077639	D86~D1210	D11	
1077640 ~ 1078764	D86~D1210	D12	
1078765 ~ 1079889	D86~D1210	D13	
1079890 ~ 1081014	D86~D1210	D14	
1081015 ~ 1082139	D86~D1210	D15	
1082140 ~ 1083264	D86~D1210	D16	
1083265 ~ 1084389	D86~D1210	D17	
1084390 ~ 1085514	D86~D1210	D18	
1085515 ~ 1086639	D86~D1210	D19	
1086640 ~ 1087764	D86~D1210	D20	
1087765 ~ 1088889	D86~D1210	D21	
1088890 ~ 1090014	D86~D1210	D22	
1090015 ~ 1091139	D86~D1210	D23	
1091140 ~ 1092264	D86~D1210	D24	
1092265 ~ 1093389	D86~D1210	D25	
1093390 ~ 1094514	D86~D1210	D26	
1094515 ~ 1095639	D86~D1210	D27	
1095640 ~ 1096764	D86~D1210	D28	
1096765 ~ 1097889	D86~D1210	D29	
1097890 ~ 1099014	D86~D1210	D30	
1099015 ~ 1100139	D86~D1210	D31	
1100140 ~ 1101264	D86~D1210	D32	
1101265 ~ 1102389	D86~D1210	D33	
1102390 ~ 1103514	D86~D1210	D34	
1103515 ~ 1104639	D86~D1210	D35	
1104640 ~ 1105764	D86~D1210	D36	
1105765 ~ 1106889	D86~D1210	D37	
1106890 ~ 1108014	D86~D1210	D38	
1108015 ~ 1109139	D86~D1210	D39	
1109140 ~ 1110264	D86~D1210	D40	
1110265 ~ 1111389	D86~D1210	D41	
1111390 ~ 1112514	D86~D1210	D42	
1112515 ~ 1113639	D86~D1210	D43	
1113640 ~ 1114764	D86~D1210	D44	
1114765 ~ 1115889	D86~D1210	D45	
1115890 ~ 1117014	D86~D1210	D46	
1117015 ~ 1118139	D86~D1210	D47	
1118140 ~ 1119264	D86~D1210	D48	
1119265 ~ 1120389	D86~D1210	D49	
1120390 ~ 1121514	D86~D1210	D50	
1121515 ~ 1122639	D86~D1210	D51	
1122640 ~ 1123764	D86~D1210	D52	
1123765 ~ 1124889	D86~D1210	D53	
1124890 ~ 1126014	D86~D1210	D54	
1126015 ~ 1127139	D86~D1210	D55	
1127140 ~ 1128264	D86~D1210	D56	
1128265 ~ 1129389	D86~D1210	D57	
1129390 ~ 1130514	D86~D1210	D58	
1130515 ~ 1131639	D86~D1210	D59	

No.	R ²	R ⁵	=
1131640 ~ 1132764	D86~D1210	D60	R ² ≠ R ⁵
1132765 ~ 1133889	D86~D1210	D61	
1133890 ~ 1135014	D86~D1210	D62	
1135015 ~ 1136139	D86~D1210	D63	
1136140 ~ 1137264	D86~D1210	D64	
1137265 ~ 1138389	D86~D1210	D65	
1138390 ~ 1139514	D86~D1210	D66	
1139515 ~ 1140639	D86~D1210	D67	
1140640 ~ 1141764	D86~D1210	D68	
1141765 ~ 1142889	D86~D1210	D69	
1142890 ~ 1144014	D86~D1210	D70	
1144015 ~ 1145139	D86~D1210	D71	
1145140 ~ 1146264	D86~D1210	D72	
1146265 ~ 1147389	D86~D1210	D73	
1147390 ~ 1148514	D86~D1210	D74	
1148515 ~ 1149639	D86~D1210	D75	
1149640 ~ 1150764	D86~D1210	D76	
1150765 ~ 1151889	D86~D1210	D77	
1151890 ~ 1153014	D86~D1210	D78	
1153015 ~ 1154139	D86~D1210	D79	
1154140 ~ 1155264	D86~D1210	D80	
1155265 ~ 1156389	D86~D1210	D81	
1156390 ~ 1157514	D86~D1210	D82	
1157515 ~ 1158639	D86~D1210	D83	
1158640 ~ 1159764	D86~D1210	D84	
1159765 ~ 1160889	D86~D1210	D85	

[0061] 次に下記一般式（1 f）で表される構造を有する化合物の具体例を表7に示す。表7では、表2と同じ要領で各化合物の構造を示している。

[化20]

一般式（1 f）



[表7]

No.	R ¹	R ²	=
1160890 ~ 1162014	D86~D1210	D86~D1210	R ¹ = R ²
1162015 ~ 1163139	D86~D1210	D1	R ¹ ≠ R ²
1163140 ~ 1164264	D86~D1210	D2	
1164265 ~ 1165389	D86~D1210	D3	
1165390 ~ 1166514	D86~D1210	D4	
1166515 ~ 1167639	D86~D1210	D5	
1167640 ~ 1168764	D86~D1210	D6	
1168765 ~ 1169889	D86~D1210	D7	
1169890 ~ 1171014	D86~D1210	D8	
1171015 ~ 1172139	D86~D1210	D9	
1172140 ~ 1173264	D86~D1210	D10	
1173265 ~ 1174389	D86~D1210	D11	
1174390 ~ 1175514	D86~D1210	D12	
1175515 ~ 1176639	D86~D1210	D13	
1176640 ~ 1177764	D86~D1210	D14	
1177765 ~ 1178889	D86~D1210	D15	
1178890 ~ 1180014	D86~D1210	D16	
1180015 ~ 1181139	D86~D1210	D17	
1181140 ~ 1182264	D86~D1210	D18	
1182265 ~ 1183389	D86~D1210	D19	
1183390 ~ 1184514	D86~D1210	D20	
1184515 ~ 1185639	D86~D1210	D21	
1185640 ~ 1186764	D86~D1210	D22	
1186765 ~ 1187889	D86~D1210	D23	
1187890 ~ 1189014	D86~D1210	D24	
1189015 ~ 1190139	D86~D1210	D25	
1190140 ~ 1191264	D86~D1210	D26	
1191265 ~ 1192389	D86~D1210	D27	
1192390 ~ 1193514	D86~D1210	D28	
1193515 ~ 1194639	D86~D1210	D29	
1194640 ~ 1195764	D86~D1210	D30	
1195765 ~ 1196889	D86~D1210	D31	
1196890 ~ 1198014	D86~D1210	D32	
1198015 ~ 1199139	D86~D1210	D33	
1199140 ~ 1200264	D86~D1210	D34	
1200265 ~ 1201389	D86~D1210	D35	
1201390 ~ 1202514	D86~D1210	D36	
1202515 ~ 1203639	D86~D1210	D37	
1203640 ~ 1204764	D86~D1210	D38	
1204765 ~ 1205889	D86~D1210	D39	
1205890 ~ 1207014	D86~D1210	D40	
1207015 ~ 1208139	D86~D1210	D41	
1208140 ~ 1209264	D86~D1210	D42	
1209265 ~ 1210389	D86~D1210	D43	
1210390 ~ 1211514	D86~D1210	D44	
1211515 ~ 1212639	D86~D1210	D45	
1212640 ~ 1213764	D86~D1210	D46	
1213765 ~ 1214889	D86~D1210	D47	
1214890 ~ 1216014	D86~D1210	D48	
1216015 ~ 1217139	D86~D1210	D49	
1217140 ~ 1218264	D86~D1210	D50	
1218265 ~ 1219389	D86~D1210	D51	
1219390 ~ 1220514	D86~D1210	D52	
1220515 ~ 1221639	D86~D1210	D53	
1221640 ~ 1222764	D86~D1210	D54	
1222765 ~ 1223889	D86~D1210	D55	
1223890 ~ 1225014	D86~D1210	D56	
1225015 ~ 1226139	D86~D1210	D57	
1226140 ~ 1227264	D86~D1210	D58	
1227265 ~ 1228389	D86~D1210	D59	

No.	R ¹	R ²	=
1228390 ~ 1229514	D86~D1210	D60	R ¹ ≠ R ²
1229515 ~ 1230639	D86~D1210	D61	
1230640 ~ 1231764	D86~D1210	D62	
1231765 ~ 1232889	D86~D1210	D63	
1232890 ~ 1234014	D86~D1210	D64	
1234015 ~ 1235139	D86~D1210	D65	
1235140 ~ 1236264	D86~D1210	D66	
1236265 ~ 1237389	D86~D1210	D67	
1237390 ~ 1238514	D86~D1210	D68	
1238515 ~ 1239639	D86~D1210	D69	
1239640 ~ 1240764	D86~D1210	D70	
1240765 ~ 1241889	D86~D1210	D71	
1241890 ~ 1243014	D86~D1210	D72	
1243015 ~ 1244139	D86~D1210	D73	
1244140 ~ 1245264	D86~D1210	D74	
1245265 ~ 1246389	D86~D1210	D75	
1246390 ~ 1247514	D86~D1210	D76	
1247515 ~ 1248639	D86~D1210	D77	
1248640 ~ 1249764	D86~D1210	D78	
1249765 ~ 1250889	D86~D1210	D79	
1250890 ~ 1252014	D86~D1210	D80	
1252015 ~ 1253139	D86~D1210	D81	
1253140 ~ 1254264	D86~D1210	D82	
1254265 ~ 1255389	D86~D1210	D83	
1255390 ~ 1256514	D86~D1210	D84	
1256515 ~ 1257639	D86~D1210	D85	

[0062] 表1~4では、一般式(1)のAr¹とAr³が過重水素化カルバゾール9-イル基(D55)であり、Ar²とAr⁴が過重水素化フェニル基(Ar47)である構造を、化合物1~636657の構造として特定した。表5~7では、一般式(1)のAr¹~Ar⁴が過重水素化フェニル基(Ar47)である構造を、化合物636658~1257639の構造として特定した。

以下の表8には、これらの化合物1~1257639とともに、化合物1~636657の全部または一部について、Ar¹~Ar⁴を表8に示す通りにそれぞれ変更した化合物を順に表の形式で表示した。表8では、対応関係をわかりやすくするために、化合物1~636657を1段目に表示し、化合物636658~1257639を2段目に表示している。表8の3段目では、化合物1~636657のAr¹とAr³がともにD1である化合物を、順に化合物1(1)~636657(1)としている。例えば化合物1(1)は、化合物1のAr¹とAr³をD1に置換した構造を有する化合物を示

している。また、化合物 2 (1) は化合物 2 の $A r^1$ と $A r^3$ を $D 1$ に置換した構造を有する化合物を示している。化合物 6 3 6 6 5 7 (1) は化合物 6 3 6 6 5 7 の $A r^1$ と $A r^3$ を $D 1$ に置換した構造を有する化合物を示している。表 8 の 4 段目では、化合物 1 ~ 6 3 6 6 5 7 の $A r^1$ と $A r^3$ がともに $D 7$ である化合物を、順に化合物 1 (2) ~ 6 3 6 6 5 7 (2) としている。このような要領で、化合物 1 ~ 6 3 6 6 5 7 の $A r^1$ と $A r^3$ 、 $A r^2$ と $A r^4$ が表 8 に記載されるものである化合物を順に特定している。なお、表 8 で特定される化合物の $X^1 \sim X^3$ はいずれも窒素原子 (N) であり、 L^1 は単結合 ($L 1$) であり、 R^1 は水素原子である。 $A r^1$ と $A r^3$ は同一であり、 $A r^2$ と $A r^4$ は同一である。

[表8]

No.	Ar ¹ , Ar ³	Ar ² , Ar ⁴	No.	Ar ¹ , Ar ³	Ar ² , Ar ⁴
1	~ 636657	D55 Ar47	1(60)	~ 636657(60)	D1 Ar12
636658	~ 1257639	Ar47 Ar47	1(61)	~ 636657(61)	D7 Ar12
1(1)	~ 636657(1)	D1 Ar47	1(62)	~ 636657(62)	D8 Ar12
1(2)	~ 636657(2)	D7 Ar47	1(63)	~ 636657(63)	D9 Ar12
1(3)	~ 636657(3)	D8 Ar47	1(64)	~ 636657(64)	D17 Ar12
1(4)	~ 636657(4)	D9 Ar47	1(65)	~ 636657(65)	D27 Ar12
1(5)	~ 636657(5)	D17 Ar47	1(66)	~ 636657(66)	D37 Ar12
1(6)	~ 636657(6)	D27 Ar47	1(67)	~ 636657(67)	D39 Ar12
1(7)	~ 636657(7)	D37 Ar47	1(68)	~ 636657(68)	D47 Ar12
1(8)	~ 636657(8)	D39 Ar47	1(69)	~ 636657(69)	D51 Ar12
1(9)	~ 636657(9)	D47 Ar47	1(70)	~ 636657(70)	D55 Ar12
1(10)	~ 636657(10)	D51 Ar47	1(71)	~ 636657(71)	D61 Ar12
1(11)	~ 636657(11)	D61 Ar47	1(72)	~ 636657(72)	D62 Ar12
1(12)	~ 636657(12)	D62 Ar47	1(73)	~ 636657(73)	D63 Ar12
1(13)	~ 636657(13)	D63 Ar47	1(74)	~ 636657(74)	D71 Ar12
1(14)	~ 636657(14)	D71 Ar47	1(75)	~ 636657(75)	D81 Ar12
1(15)	~ 636657(15)	D81 Ar47	1(76)	~ 636657(76)	D88 Ar12
1(16)	~ 636657(16)	D88 Ar47	1(77)	~ 636657(77)	D106 Ar12
1(17)	~ 636657(17)	D106 Ar47	1(78)	~ 636657(78)	D119 Ar12
1(18)	~ 636657(18)	D119 Ar47	1(79)	~ 636657(79)	D765 Ar12
1(19)	~ 636657(19)	D765 Ar47	1(80)	~ 636657(80)	D1 Ar14
1(20)	~ 636657(20)	D1 Ar1	1(81)	~ 636657(81)	D7 Ar14
1(21)	~ 636657(21)	D7 Ar1	1(82)	~ 636657(82)	D8 Ar14
1(22)	~ 636657(22)	D8 Ar1	1(83)	~ 636657(83)	D9 Ar14
1(23)	~ 636657(23)	D9 Ar1	1(84)	~ 636657(84)	D17 Ar14
1(24)	~ 636657(24)	D17 Ar1	1(85)	~ 636657(85)	D27 Ar14
1(25)	~ 636657(25)	D27 Ar1	1(86)	~ 636657(86)	D37 Ar14
1(26)	~ 636657(26)	D37 Ar1	1(87)	~ 636657(87)	D39 Ar14
1(27)	~ 636657(27)	D39 Ar1	1(88)	~ 636657(88)	D47 Ar14
1(28)	~ 636657(28)	D47 Ar1	1(89)	~ 636657(89)	D51 Ar14
1(29)	~ 636657(29)	D51 Ar1	1(90)	~ 636657(90)	D55 Ar14
1(30)	~ 636657(30)	D55 Ar1	1(91)	~ 636657(91)	D61 Ar14
1(31)	~ 636657(31)	D61 Ar1	1(92)	~ 636657(92)	D62 Ar14
1(32)	~ 636657(32)	D62 Ar1	1(93)	~ 636657(93)	D63 Ar14
1(33)	~ 636657(33)	D63 Ar1	1(94)	~ 636657(94)	D71 Ar14
1(34)	~ 636657(34)	D71 Ar1	1(95)	~ 636657(95)	D81 Ar14
1(35)	~ 636657(35)	D81 Ar1	1(96)	~ 636657(96)	D88 Ar14
1(36)	~ 636657(36)	D88 Ar1	1(97)	~ 636657(97)	D106 Ar14
1(37)	~ 636657(37)	D106 Ar1	1(98)	~ 636657(98)	D119 Ar14
1(38)	~ 636657(38)	D119 Ar1	1(99)	~ 636657(99)	D765 Ar14
1(39)	~ 636657(39)	D765 Ar1	1(100)	~ 636657(100)	D1 Ar15
1(40)	~ 636657(40)	D1 Ar10	1(101)	~ 636657(101)	D7 Ar15
1(41)	~ 636657(41)	D7 Ar10	1(102)	~ 636657(102)	D8 Ar15
1(42)	~ 636657(42)	D8 Ar10	1(103)	~ 636657(103)	D9 Ar15
1(43)	~ 636657(43)	D9 Ar10	1(104)	~ 636657(104)	D17 Ar15
1(44)	~ 636657(44)	D17 Ar10	1(105)	~ 636657(105)	D27 Ar15
1(45)	~ 636657(45)	D27 Ar10	1(106)	~ 636657(106)	D37 Ar15
1(46)	~ 636657(46)	D37 Ar10	1(107)	~ 636657(107)	D39 Ar15
1(47)	~ 636657(47)	D39 Ar10	1(108)	~ 636657(108)	D47 Ar15
1(48)	~ 636657(48)	D47 Ar10	1(109)	~ 636657(109)	D51 Ar15
1(49)	~ 636657(49)	D51 Ar10	1(110)	~ 636657(110)	D55 Ar15
1(50)	~ 636657(50)	D55 Ar10	1(111)	~ 636657(111)	D61 Ar15
1(51)	~ 636657(51)	D61 Ar10	1(112)	~ 636657(112)	D62 Ar15
1(52)	~ 636657(52)	D62 Ar10	1(113)	~ 636657(113)	D63 Ar15
1(53)	~ 636657(53)	D63 Ar10	1(114)	~ 636657(114)	D71 Ar15
1(54)	~ 636657(54)	D71 Ar10	1(115)	~ 636657(115)	D81 Ar15
1(55)	~ 636657(55)	D81 Ar10	1(116)	~ 636657(116)	D88 Ar15
1(56)	~ 636657(56)	D88 Ar10	1(117)	~ 636657(117)	D106 Ar15
1(57)	~ 636657(57)	D106 Ar10	1(118)	~ 636657(118)	D119 Ar15
1(58)	~ 636657(58)	D119 Ar10	1(119)	~ 636657(119)	D765 Ar15
1(59)	~ 636657(59)	D765 Ar10			

No.	Ar ¹ ,Ar ³	Ar ² ,Ar ⁴	No.	Ar ¹ ,Ar ³	Ar ² ,Ar ⁴
1(120) ~ 636657(120)	D1	Ar35	1(180) ~ 636657(180)	D1	Ar40
1(121) ~ 636657(121)	D7	Ar35	1(181) ~ 636657(181)	D7	Ar40
1(122) ~ 636657(122)	D8	Ar35	1(182) ~ 636657(182)	D8	Ar40
1(123) ~ 636657(123)	D9	Ar35	1(183) ~ 636657(183)	D9	Ar40
1(124) ~ 636657(124)	D17	Ar35	1(184) ~ 636657(184)	D17	Ar40
1(125) ~ 636657(125)	D27	Ar35	1(185) ~ 636657(185)	D27	Ar40
1(126) ~ 636657(126)	D37	Ar35	1(186) ~ 636657(186)	D37	Ar40
1(127) ~ 636657(127)	D39	Ar35	1(187) ~ 636657(187)	D39	Ar40
1(128) ~ 636657(128)	D47	Ar35	1(188) ~ 636657(188)	D47	Ar40
1(129) ~ 636657(129)	D51	Ar35	1(189) ~ 636657(189)	D51	Ar40
1(130) ~ 636657(130)	D55	Ar35	1(190) ~ 636657(190)	D55	Ar40
1(131) ~ 636657(131)	D61	Ar35	1(191) ~ 636657(191)	D61	Ar40
1(132) ~ 636657(132)	D62	Ar35	1(192) ~ 636657(192)	D62	Ar40
1(133) ~ 636657(133)	D63	Ar35	1(193) ~ 636657(193)	D63	Ar40
1(134) ~ 636657(134)	D71	Ar35	1(194) ~ 636657(194)	D71	Ar40
1(135) ~ 636657(135)	D81	Ar35	1(195) ~ 636657(195)	D81	Ar40
1(136) ~ 636657(136)	D88	Ar35	1(196) ~ 636657(196)	D88	Ar40
1(137) ~ 636657(137)	D106	Ar35	1(197) ~ 636657(197)	D106	Ar40
1(138) ~ 636657(138)	D119	Ar35	1(198) ~ 636657(198)	D119	Ar40
1(139) ~ 636657(139)	D765	Ar35	1(199) ~ 636657(199)	D765	Ar40
1(140) ~ 636657(140)	D1	Ar37	1(200) ~ 636657(200)	D1	Ar56
1(141) ~ 636657(141)	D7	Ar37	1(201) ~ 636657(201)	D7	Ar56
1(142) ~ 636657(142)	D8	Ar37	1(202) ~ 636657(202)	D8	Ar56
1(143) ~ 636657(143)	D9	Ar37	1(203) ~ 636657(203)	D9	Ar56
1(144) ~ 636657(144)	D17	Ar37	1(204) ~ 636657(204)	D17	Ar56
1(145) ~ 636657(145)	D27	Ar37	1(205) ~ 636657(205)	D27	Ar56
1(146) ~ 636657(146)	D37	Ar37	1(206) ~ 636657(206)	D37	Ar56
1(147) ~ 636657(147)	D39	Ar37	1(207) ~ 636657(207)	D39	Ar56
1(148) ~ 636657(148)	D47	Ar37	1(208) ~ 636657(208)	D47	Ar56
1(149) ~ 636657(149)	D51	Ar37	1(209) ~ 636657(209)	D51	Ar56
1(150) ~ 636657(150)	D55	Ar37	1(210) ~ 636657(210)	D55	Ar56
1(151) ~ 636657(151)	D61	Ar37	1(211) ~ 636657(211)	D61	Ar56
1(152) ~ 636657(152)	D62	Ar37	1(212) ~ 636657(212)	D62	Ar56
1(153) ~ 636657(153)	D63	Ar37	1(213) ~ 636657(213)	D63	Ar56
1(154) ~ 636657(154)	D71	Ar37	1(214) ~ 636657(214)	D71	Ar56
1(155) ~ 636657(155)	D81	Ar37	1(215) ~ 636657(215)	D81	Ar56
1(156) ~ 636657(156)	D88	Ar37	1(216) ~ 636657(216)	D88	Ar56
1(157) ~ 636657(157)	D106	Ar37	1(217) ~ 636657(217)	D106	Ar56
1(158) ~ 636657(158)	D119	Ar37	1(218) ~ 636657(218)	D119	Ar56
1(159) ~ 636657(159)	D765	Ar37	1(219) ~ 636657(219)	D765	Ar56
1(160) ~ 636657(160)	D1	Ar39	1(220) ~ 636657(220)	D1	Ar58
1(161) ~ 636657(161)	D7	Ar39	1(221) ~ 636657(221)	D7	Ar58
1(162) ~ 636657(162)	D8	Ar39	1(222) ~ 636657(222)	D8	Ar58
1(163) ~ 636657(163)	D9	Ar39	1(223) ~ 636657(223)	D9	Ar58
1(164) ~ 636657(164)	D17	Ar39	1(224) ~ 636657(224)	D17	Ar58
1(165) ~ 636657(165)	D27	Ar39	1(225) ~ 636657(225)	D27	Ar58
1(166) ~ 636657(166)	D37	Ar39	1(226) ~ 636657(226)	D37	Ar58
1(167) ~ 636657(167)	D39	Ar39	1(227) ~ 636657(227)	D39	Ar58
1(168) ~ 636657(168)	D47	Ar39	1(228) ~ 636657(228)	D47	Ar58
1(169) ~ 636657(169)	D51	Ar39	1(229) ~ 636657(229)	D51	Ar58
1(170) ~ 636657(170)	D55	Ar39	1(230) ~ 636657(230)	D55	Ar58
1(171) ~ 636657(171)	D61	Ar39	1(231) ~ 636657(231)	D61	Ar58
1(172) ~ 636657(172)	D62	Ar39	1(232) ~ 636657(232)	D62	Ar58
1(173) ~ 636657(173)	D63	Ar39	1(233) ~ 636657(233)	D63	Ar58
1(174) ~ 636657(174)	D71	Ar39	1(234) ~ 636657(234)	D71	Ar58
1(175) ~ 636657(175)	D81	Ar39	1(235) ~ 636657(235)	D81	Ar58
1(176) ~ 636657(176)	D88	Ar39	1(236) ~ 636657(236)	D88	Ar58
1(177) ~ 636657(177)	D106	Ar39	1(237) ~ 636657(237)	D106	Ar58
1(178) ~ 636657(178)	D119	Ar39	1(238) ~ 636657(238)	D119	Ar58
1(179) ~ 636657(179)	D765	Ar39	1(239) ~ 636657(239)	D765	Ar58

No.	Ar ¹ ,Ar ³	Ar ² ,Ar ⁴	No.	Ar ¹ ,Ar ³	Ar ² ,Ar ⁴
1(240) ~ 636657(240)	D1	Ar60	8756(300) ~ 442987(300)	Ar1	Ar1
1(241) ~ 636657(241)	D7	Ar60	8756(301) ~ 442987(301)	Ar10	Ar10
1(242) ~ 636657(242)	D8	Ar60	8756(302) ~ 442987(302)	Ar12	Ar12
1(243) ~ 636657(243)	D9	Ar60	8756(303) ~ 442987(303)	Ar14	Ar14
1(244) ~ 636657(244)	D17	Ar60	8756(304) ~ 442987(304)	Ar15	Ar15
1(245) ~ 636657(245)	D27	Ar60	8756(305) ~ 442987(305)	Ar35	Ar35
1(246) ~ 636657(246)	D37	Ar60	8756(306) ~ 442987(306)	Ar37	Ar37
1(247) ~ 636657(247)	D39	Ar60	8756(307) ~ 442987(307)	Ar39	Ar39
1(248) ~ 636657(248)	D47	Ar60	8756(308) ~ 442987(308)	Ar40	Ar40
1(249) ~ 636657(249)	D51	Ar60	8756(309) ~ 442987(309)	Ar56	Ar56
1(250) ~ 636657(250)	D55	Ar60	8756(310) ~ 442987(310)	Ar58	Ar58
1(251) ~ 636657(251)	D61	Ar60	8756(311) ~ 442987(311)	Ar61	Ar61
1(252) ~ 636657(252)	D62	Ar60	443073(312) ~ 539822(312)	Ar1	Ar1
1(253) ~ 636657(253)	D63	Ar60	443073(313) ~ 539822(313)	Ar10	Ar10
1(254) ~ 636657(254)	D71	Ar60	443073(314) ~ 539822(314)	Ar12	Ar12
1(255) ~ 636657(255)	D81	Ar60	443073(315) ~ 539822(315)	Ar14	Ar14
1(256) ~ 636657(256)	D88	Ar60	443073(316) ~ 539822(316)	Ar15	Ar15
1(257) ~ 636657(257)	D106	Ar60	443073(317) ~ 539822(317)	Ar35	Ar35
1(258) ~ 636657(258)	D119	Ar60	443073(318) ~ 539822(318)	Ar37	Ar37
1(259) ~ 636657(259)	D765	Ar60	443073(319) ~ 539822(319)	Ar39	Ar39
1(260) ~ 636657(260)	D1	Ar61	443073(320) ~ 539822(320)	Ar40	Ar40
1(261) ~ 636657(261)	D7	Ar61	443073(321) ~ 539822(321)	Ar56	Ar56
1(262) ~ 636657(262)	D8	Ar61	443073(322) ~ 539822(322)	Ar58	Ar58
1(263) ~ 636657(263)	D9	Ar61	443073(323) ~ 539822(323)	Ar61	Ar61
1(264) ~ 636657(264)	D17	Ar61	539908(324) ~ 636657(324)	Ar1	Ar1
1(265) ~ 636657(265)	D27	Ar61	539908(325) ~ 636657(325)	Ar10	Ar10
1(266) ~ 636657(266)	D37	Ar61	539908(326) ~ 636657(326)	Ar12	Ar12
1(267) ~ 636657(267)	D39	Ar61	539908(327) ~ 636657(327)	Ar14	Ar14
1(268) ~ 636657(268)	D47	Ar61	539908(328) ~ 636657(328)	Ar15	Ar15
1(269) ~ 636657(269)	D51	Ar61	539908(329) ~ 636657(329)	Ar35	Ar35
1(270) ~ 636657(270)	D55	Ar61	539908(330) ~ 636657(330)	Ar37	Ar37
1(271) ~ 636657(271)	D61	Ar61	539908(331) ~ 636657(331)	Ar39	Ar39
1(272) ~ 636657(272)	D62	Ar61	539908(332) ~ 636657(332)	Ar40	Ar40
1(273) ~ 636657(273)	D63	Ar61	539908(333) ~ 636657(333)	Ar56	Ar56
1(274) ~ 636657(274)	D71	Ar61	539908(334) ~ 636657(334)	Ar58	Ar58
1(275) ~ 636657(275)	D81	Ar61	539908(335) ~ 636657(335)	Ar61	Ar61
1(276) ~ 636657(276)	D88	Ar61	8756(336) ~ 442987(336)	Ar47	Ar1
1(277) ~ 636657(277)	D106	Ar61	8756(337) ~ 442987(337)	Ar47	Ar10
1(278) ~ 636657(278)	D119	Ar61	8756(338) ~ 442987(338)	Ar47	Ar12
1(279) ~ 636657(279)	D765	Ar61	8756(339) ~ 442987(339)	Ar47	Ar14
1(280) ~ 636657(280)	D1	D55	8756(340) ~ 442987(340)	Ar47	Ar15
1(281) ~ 636657(281)	D7	D55	8756(341) ~ 442987(341)	Ar47	Ar35
1(282) ~ 636657(282)	D8	D55	8756(342) ~ 442987(342)	Ar47	Ar37
1(283) ~ 636657(283)	D9	D55	8756(343) ~ 442987(343)	Ar47	Ar39
1(284) ~ 636657(284)	D17	D55	8756(344) ~ 442987(344)	Ar47	Ar40
1(285) ~ 636657(285)	D27	D55	8756(345) ~ 442987(345)	Ar47	Ar56
1(286) ~ 636657(286)	D37	D55	8756(346) ~ 442987(346)	Ar47	Ar58
1(287) ~ 636657(287)	D39	D55	8756(347) ~ 442987(347)	Ar47	Ar61
1(288) ~ 636657(288)	D47	D55	443073(348) ~ 539822(348)	Ar47	Ar1
1(289) ~ 636657(289)	D51	D55	443073(349) ~ 539822(349)	Ar47	Ar10
1(290) ~ 636657(290)	D55	D55	443073(350) ~ 539822(350)	Ar47	Ar12
1(291) ~ 636657(291)	D61	D55	443073(351) ~ 539822(351)	Ar47	Ar14
1(292) ~ 636657(292)	D62	D55	443073(352) ~ 539822(352)	Ar47	Ar15
1(293) ~ 636657(293)	D63	D55	443073(353) ~ 539822(353)	Ar47	Ar35
1(294) ~ 636657(294)	D71	D55	443073(354) ~ 539822(354)	Ar47	Ar37
1(295) ~ 636657(295)	D81	D55	443073(355) ~ 539822(355)	Ar47	Ar39
1(296) ~ 636657(296)	D88	D55	443073(356) ~ 539822(356)	Ar47	Ar40
1(297) ~ 636657(297)	D106	D55	443073(357) ~ 539822(357)	Ar47	Ar56
1(298) ~ 636657(298)	D119	D55	443073(358) ~ 539822(358)	Ar47	Ar58
1(299) ~ 636657(299)	D765	D55	443073(359) ~ 539822(359)	Ar47	Ar61

No.	Ar ¹ , Ar ³	Ar ² , Ar ⁴
539908(360) ~ 636657(360)	Ar47	Ar1
539908(361) ~ 636657(361)	Ar47	Ar10
539908(362) ~ 636657(362)	Ar47	Ar12
539908(363) ~ 636657(363)	Ar47	Ar14
539908(364) ~ 636657(364)	Ar47	Ar15
539908(365) ~ 636657(365)	Ar47	Ar35
539908(366) ~ 636657(366)	Ar47	Ar37
539908(367) ~ 636657(367)	Ar47	Ar39
539908(368) ~ 636657(368)	Ar47	Ar40
539908(369) ~ 636657(369)	Ar47	Ar56
539908(370) ~ 636657(370)	Ar47	Ar58
539908(371) ~ 636657(371)	Ar47	Ar61

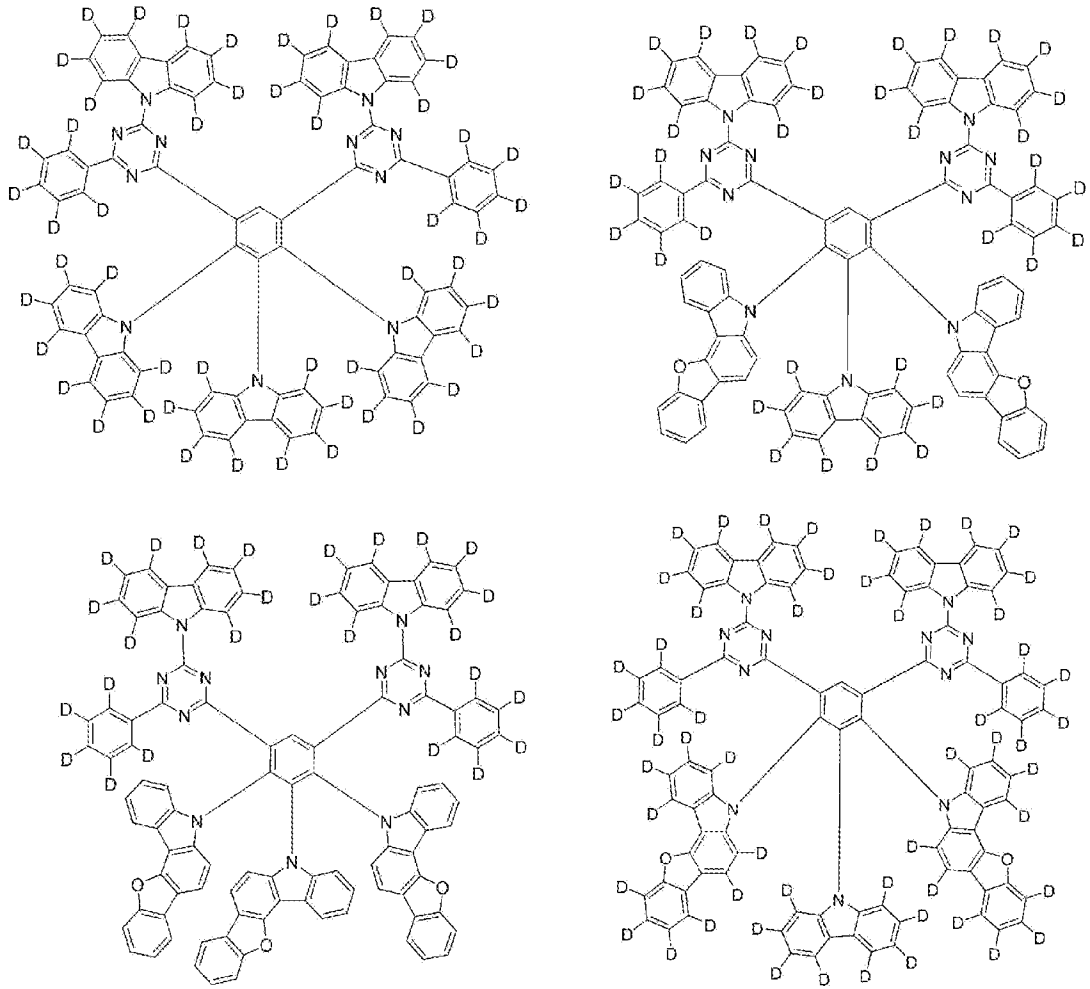
[0063] 表8に記載される化合物1～化合物636657(371)は、一般式(1)におけるR¹が水素原子である化合物である。これらの化合物のR¹を重水素原子に置換した構造を有する化合物を、順に化合物1d～化合物636657(371)dとする。また、これらの化合物のR¹を過重水素化フェニル基(Ar47)に置換した構造を有する化合物を、順に化合物1D～化合物636657(371)Dとする。

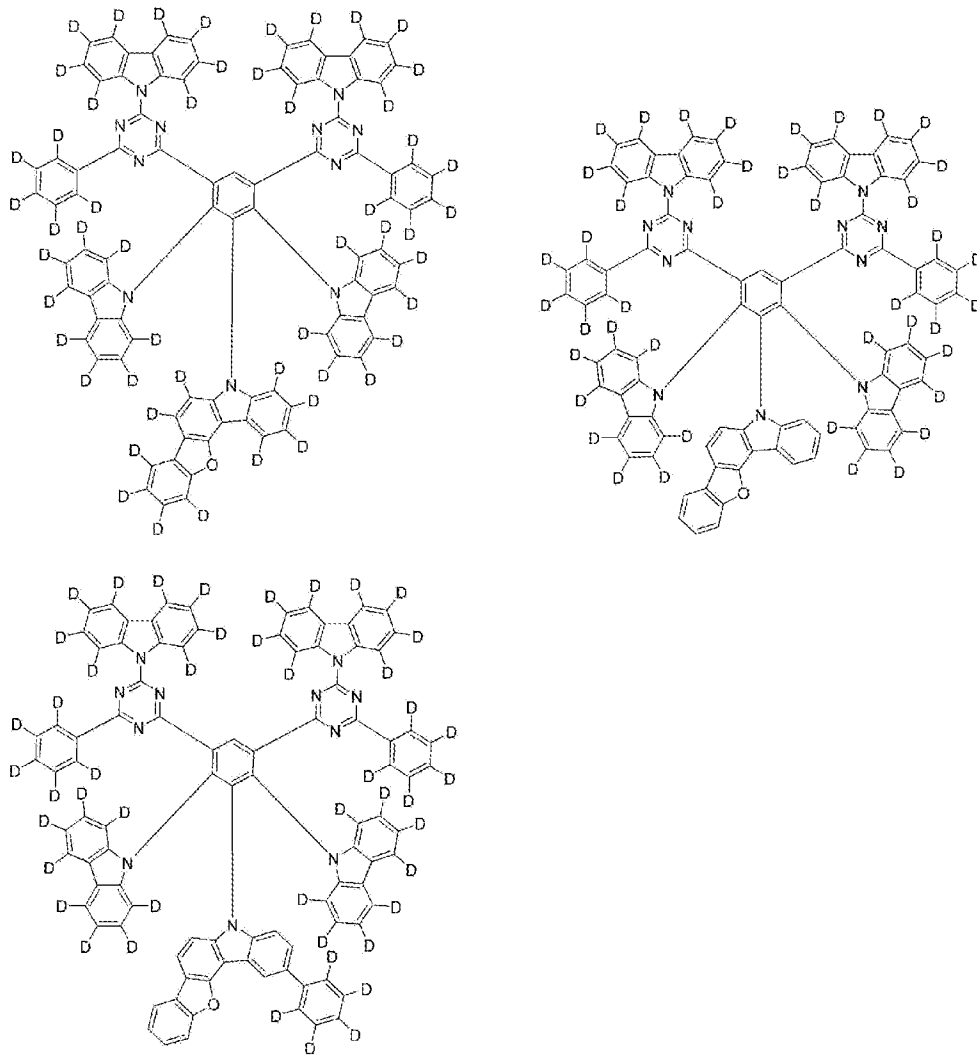
表1～8において番号で特定される化合物と、化合物1d～化合物636657(371)dと、化合物1D～化合物636657(371)Dは、すべてが個別に開示されているものとする。なお、上記の化合物具体例のうち、回転異性体が存在する場合は、回転異性体の混合物と、分離した各回転異性体も、本明細書に開示されているものとする。

本発明の一態様では、表8にて特定される化合物群の中から化合物を選択する。

[0064] 一般式(1)で表される好ましい化合物群の一例を挙げる。

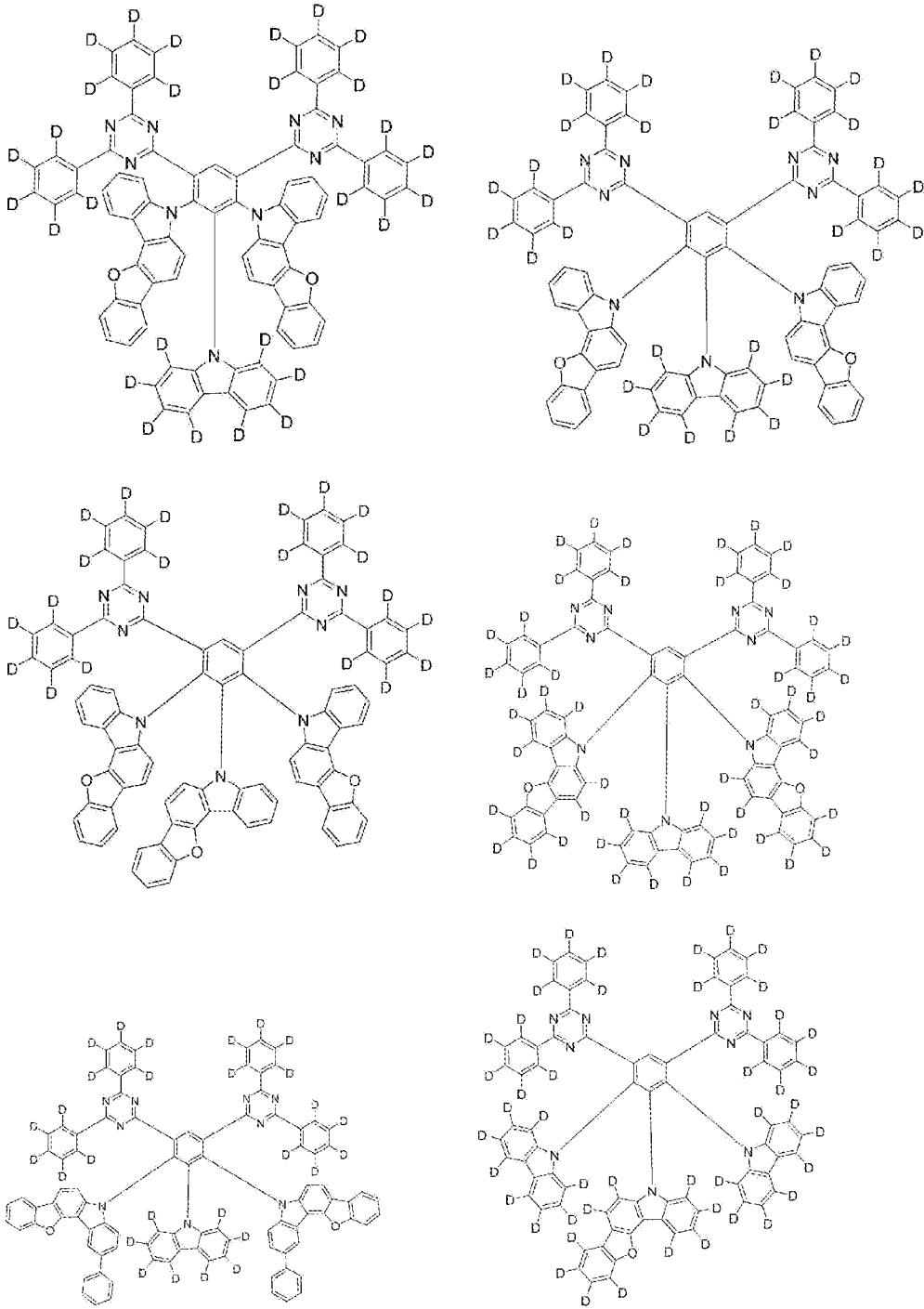
[化21]

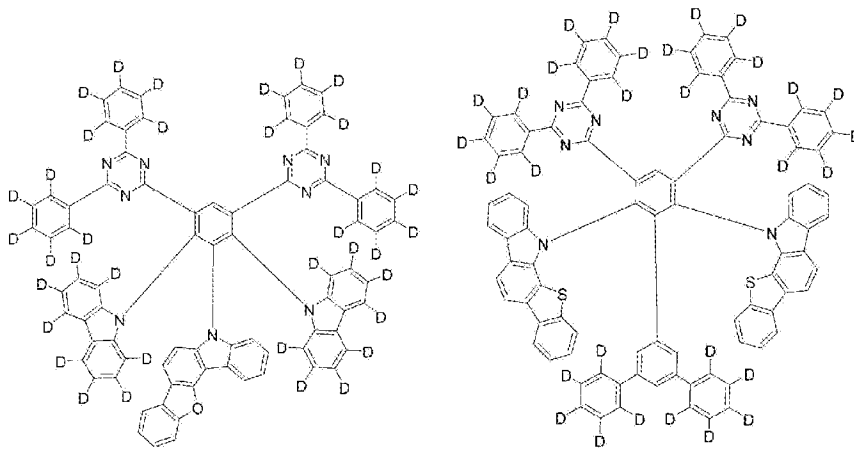




[0065] 一般式(1)で表される別の好ましい化合物群の一例を挙げる。

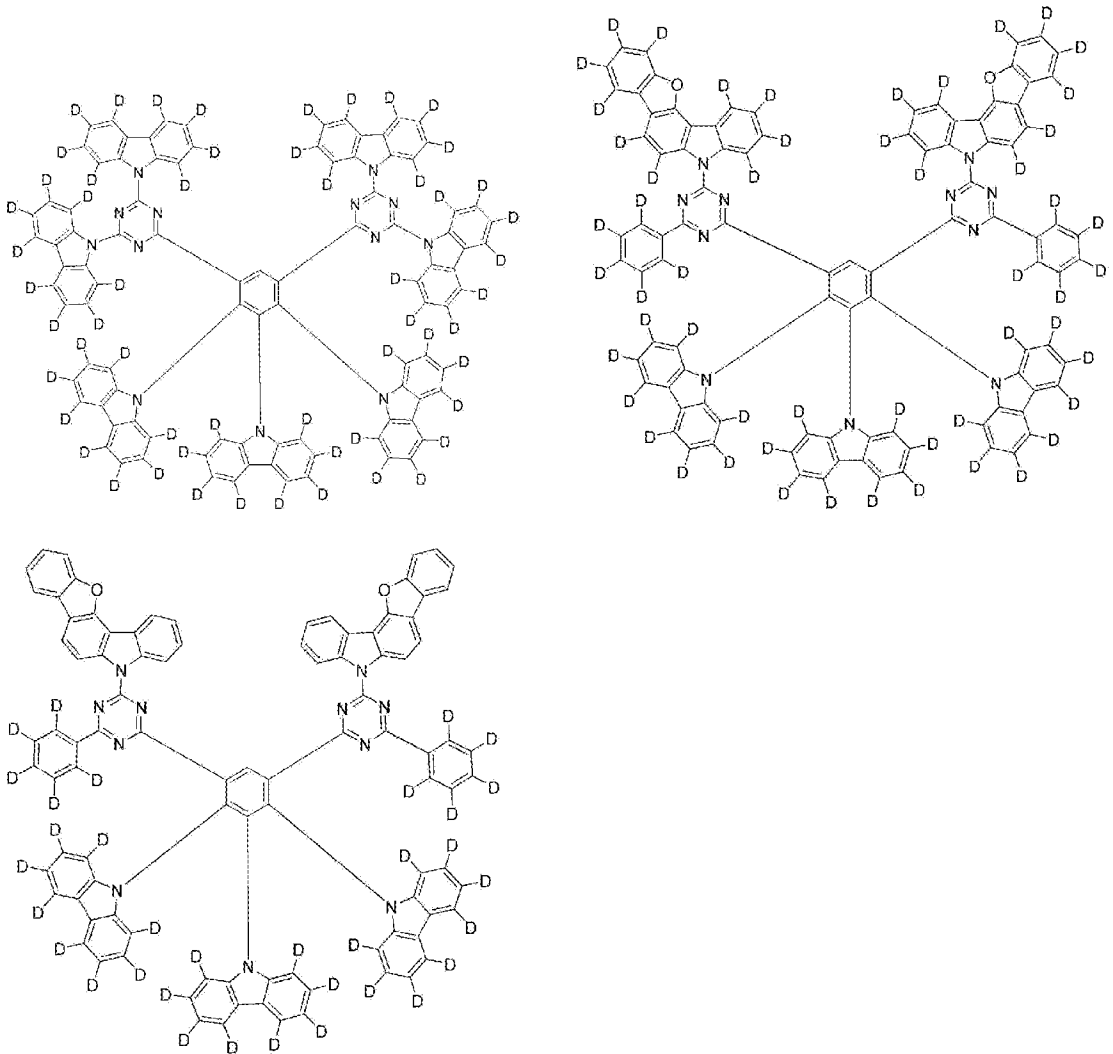
[化22]





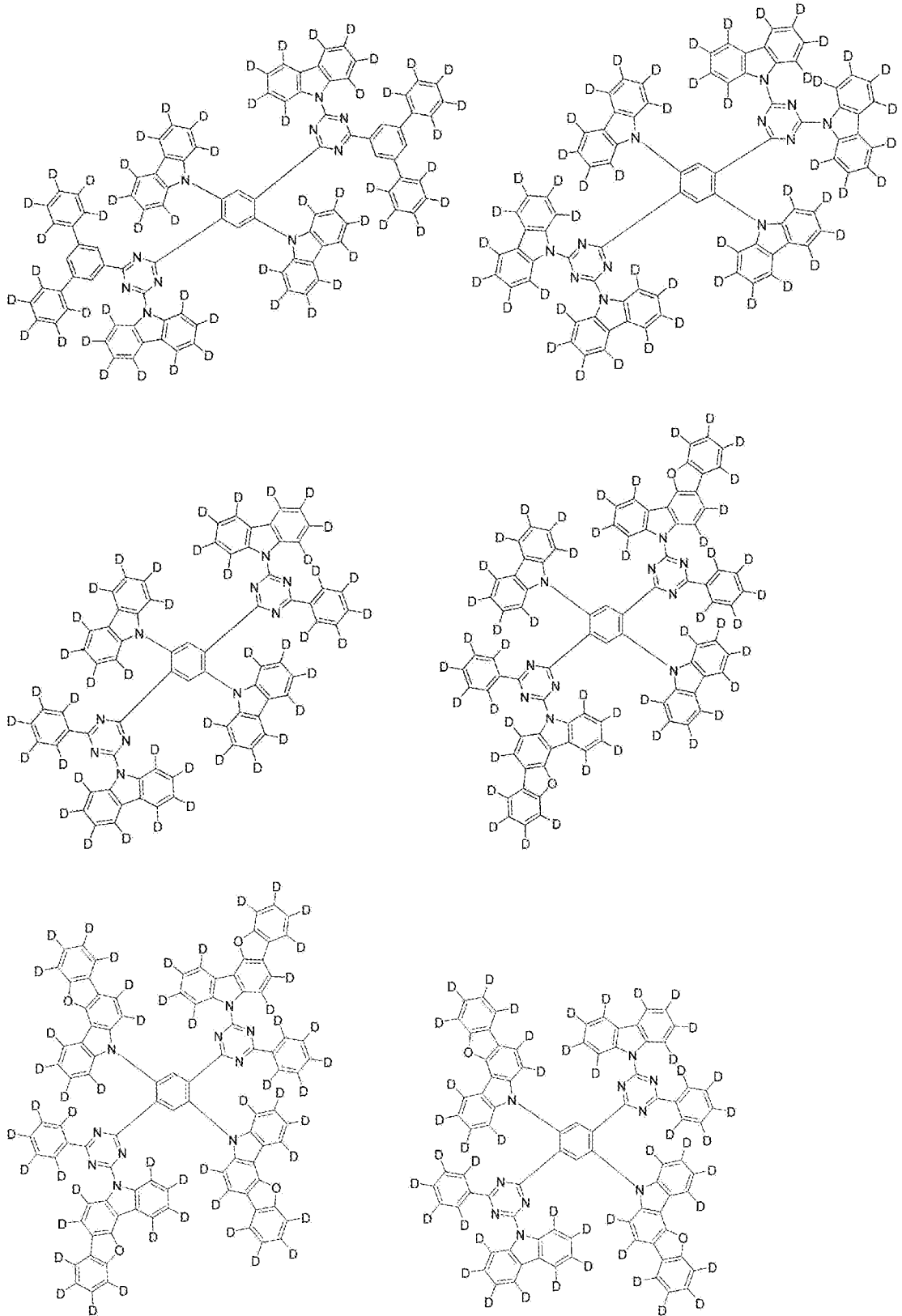
[0066] 一般式 (1) で表される別の好ましい化合物群の一例を挙げる。

[化23]



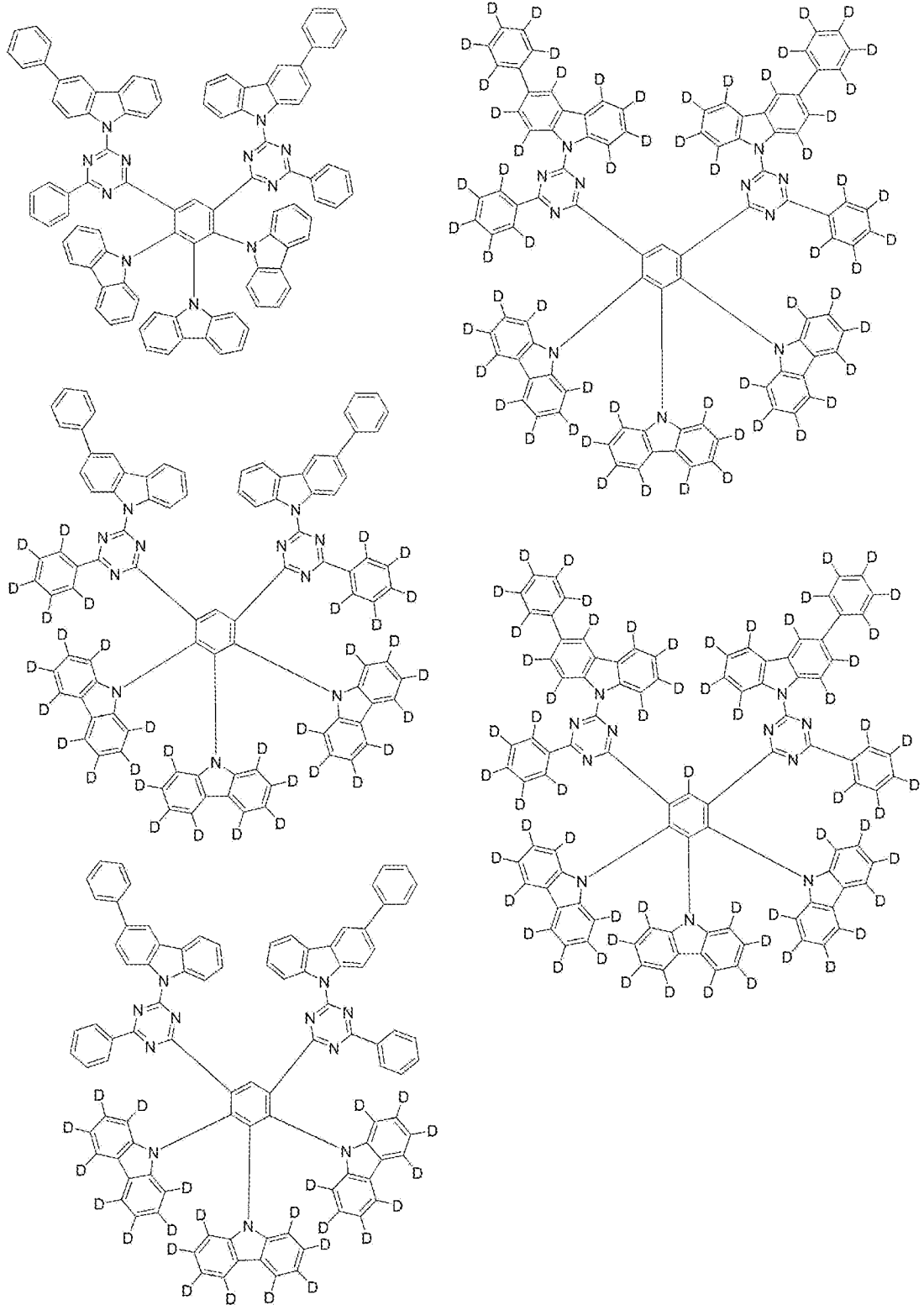
[0067] 一般式 (1) で表される別の好ましい化合物群の一例を挙げる。

[化24]



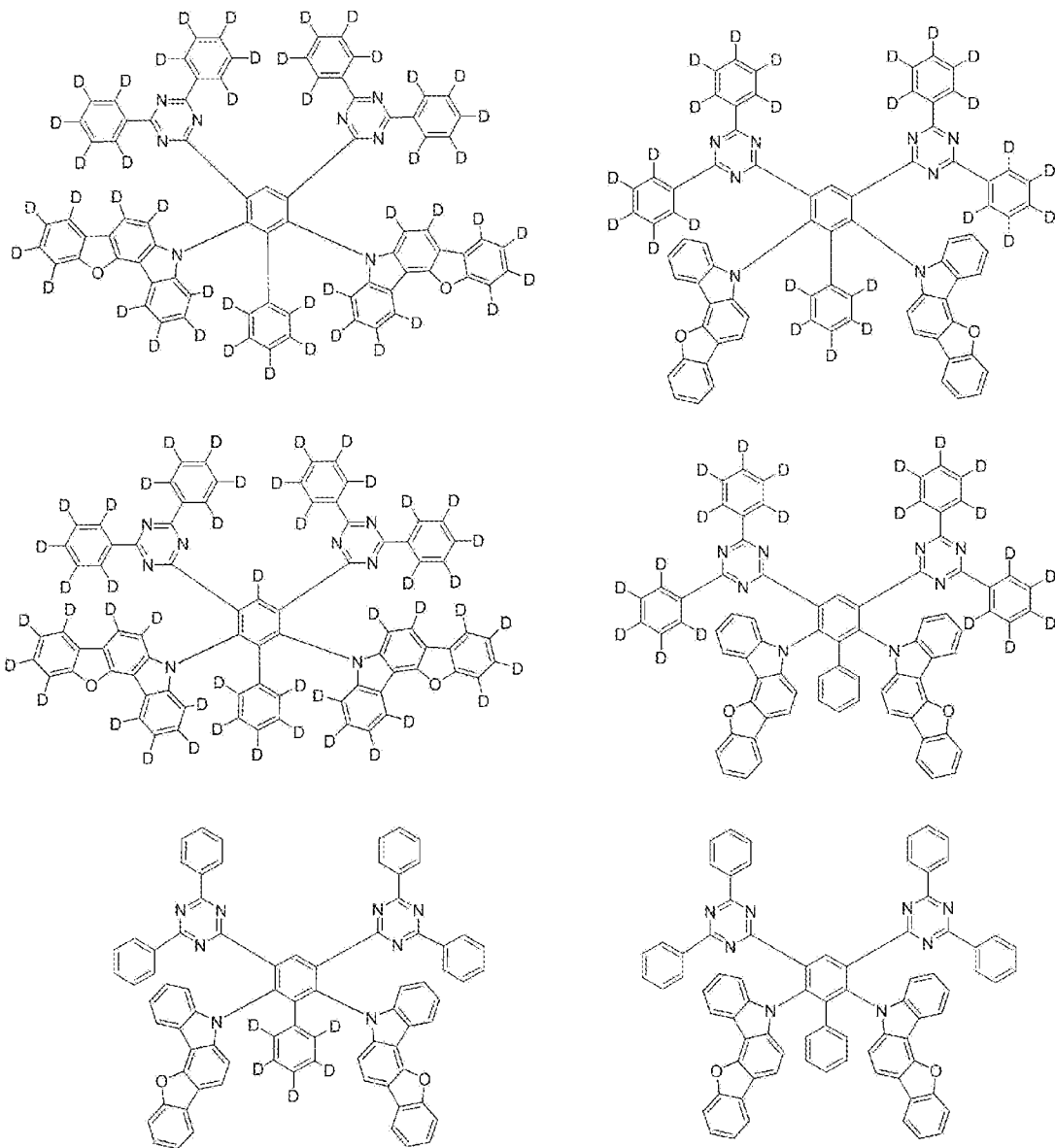
[0068] 一般式(1)で表される別の好ましい化合物群の一例を挙げる。

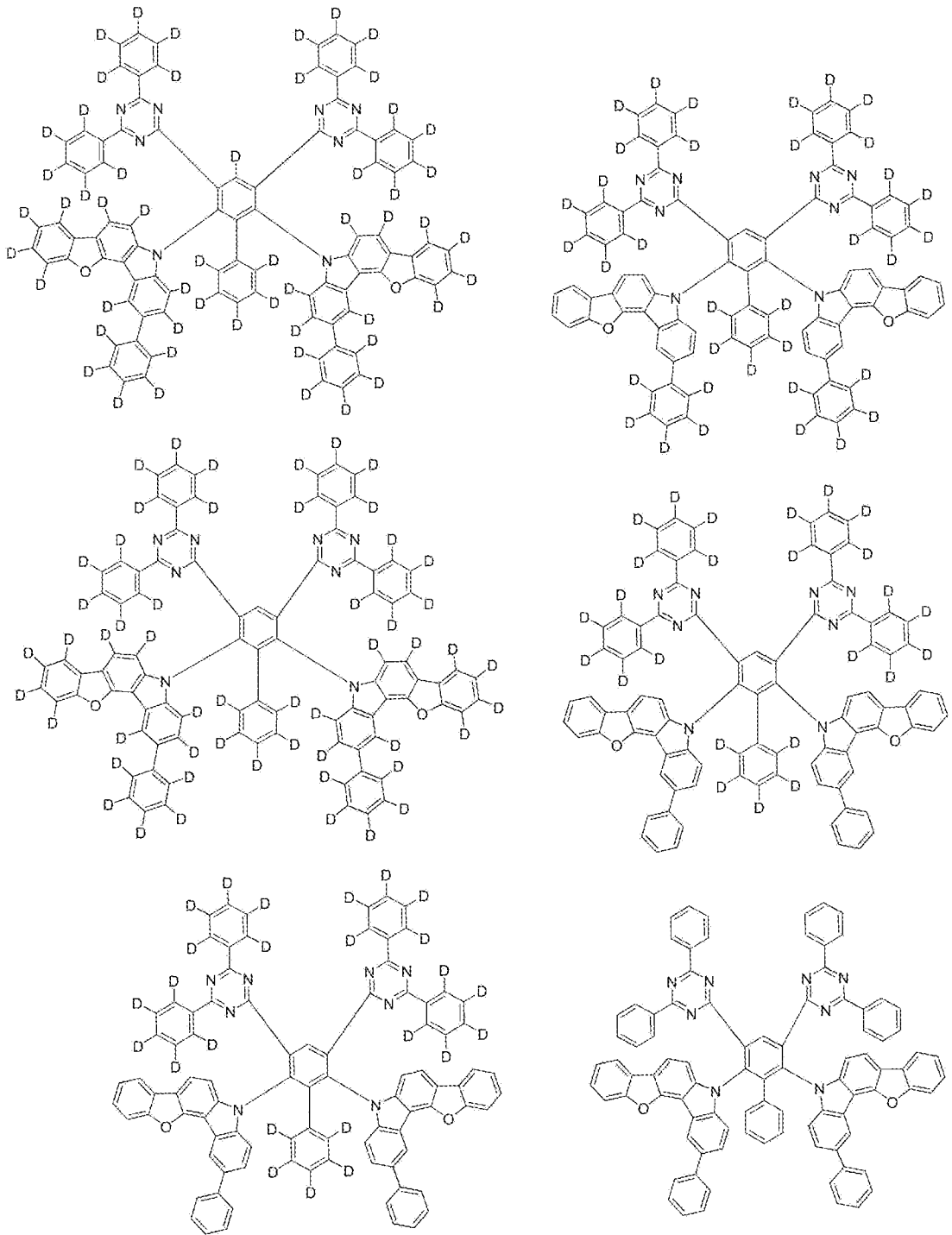
[化25]



[0069] 一般式(1)で表される別の好ましい化合物群の一例を挙げる。

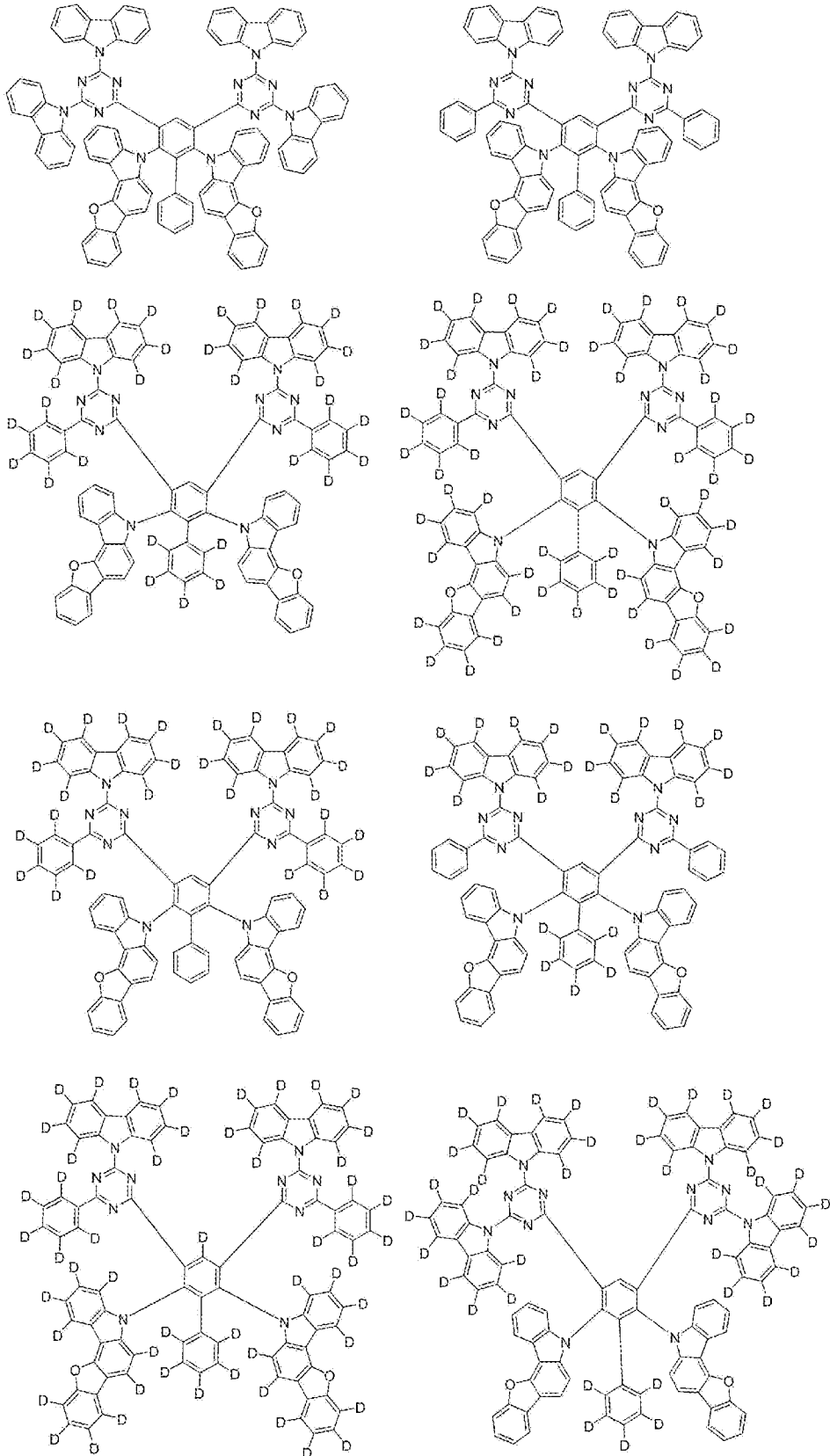
[化26]

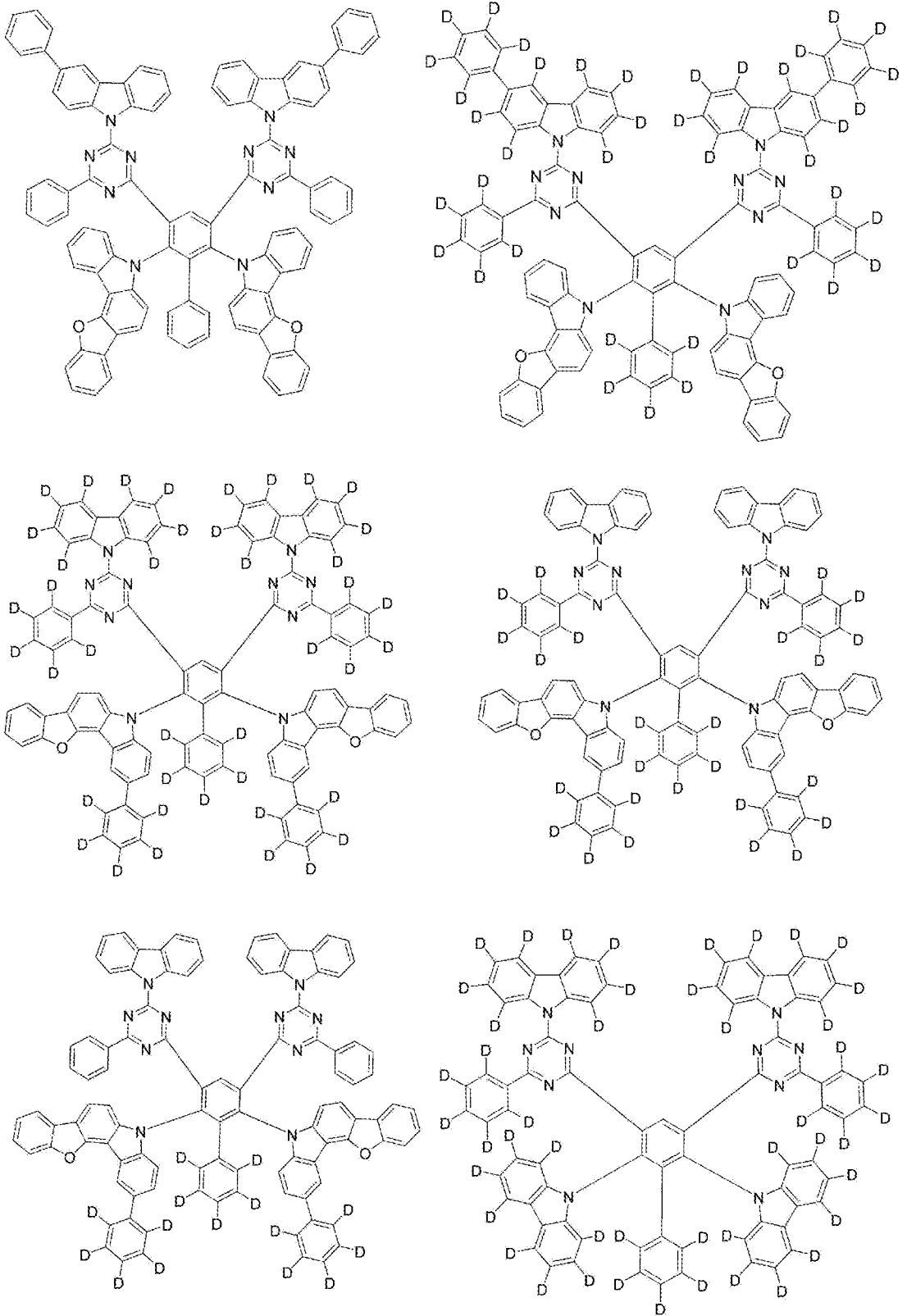




[0070] 一般式(1)で表される別の好ましい化合物群の一例を挙げる。

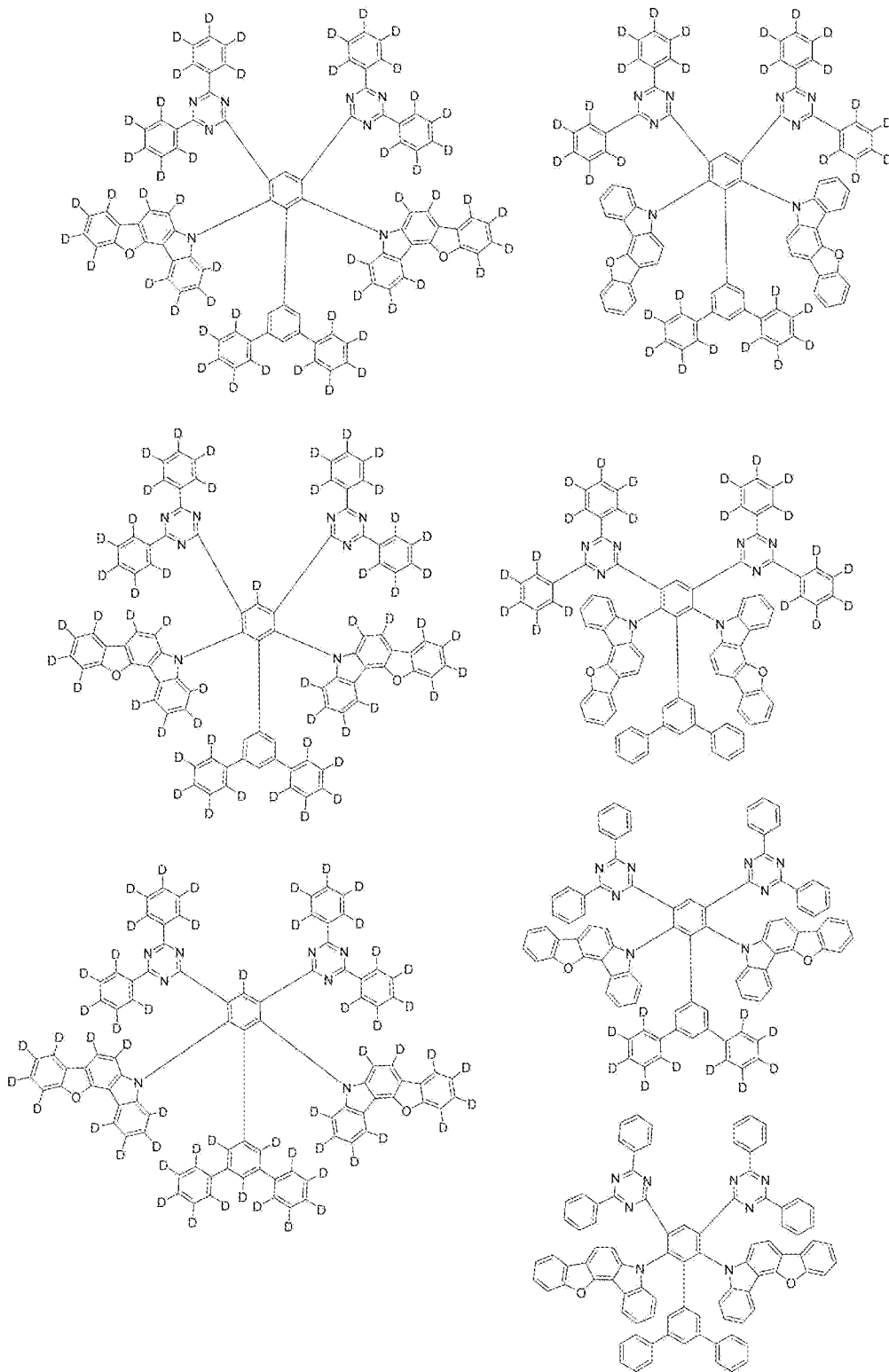
[化27]

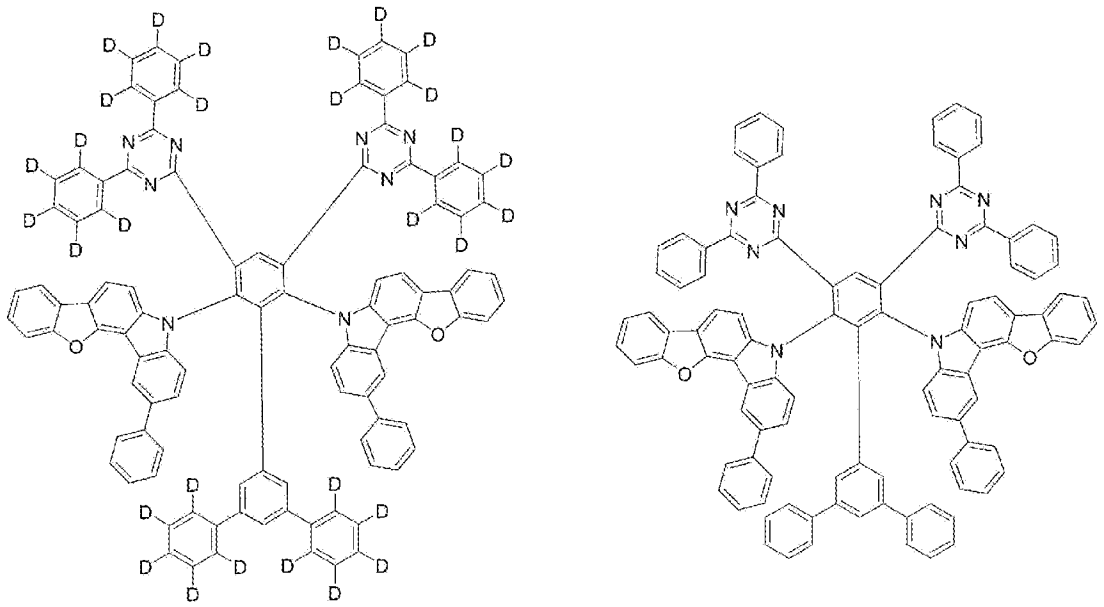




[0071] 一般式(1)で表される別の好ましい化合物群の一例を挙げる。

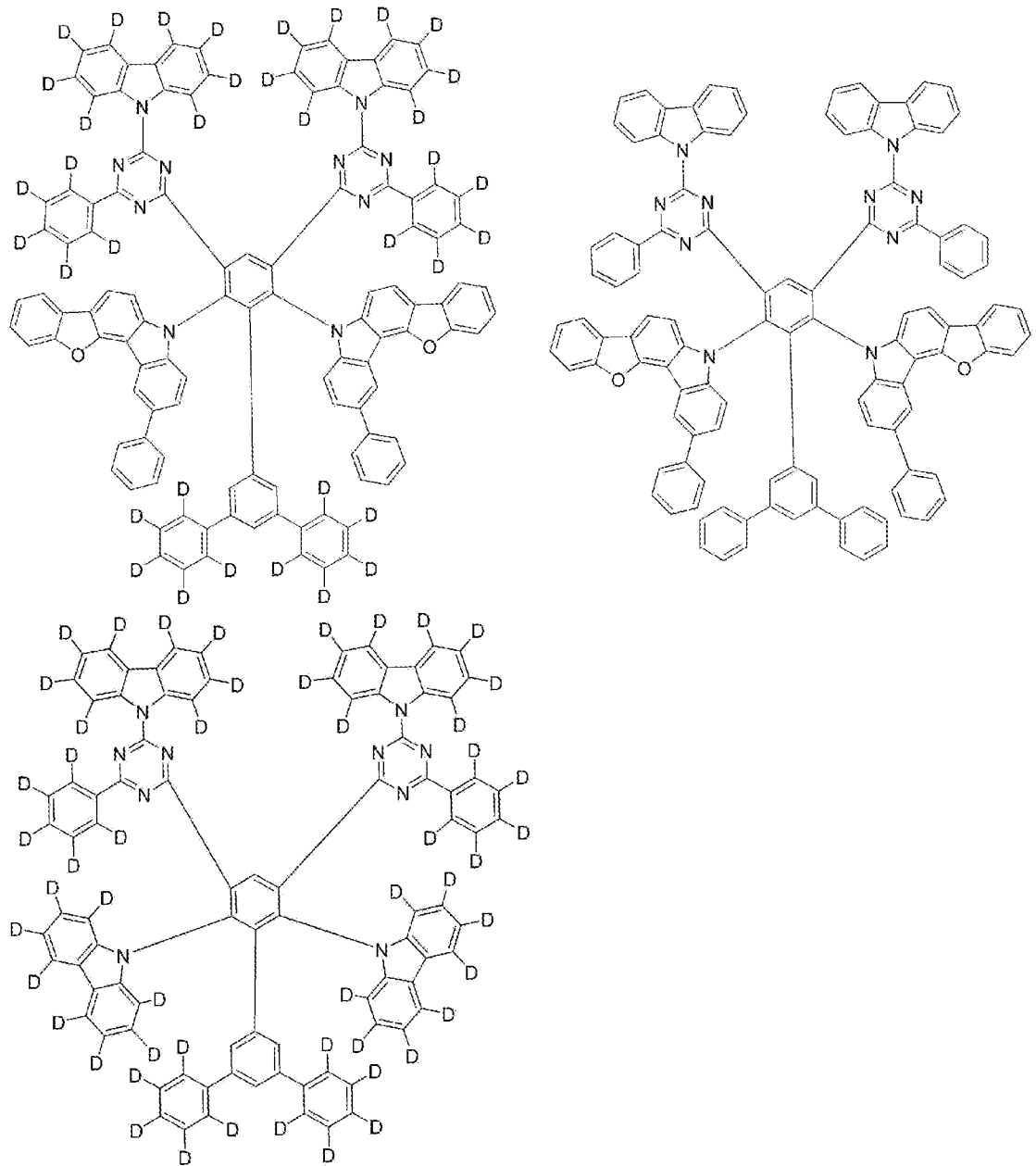
[化28]





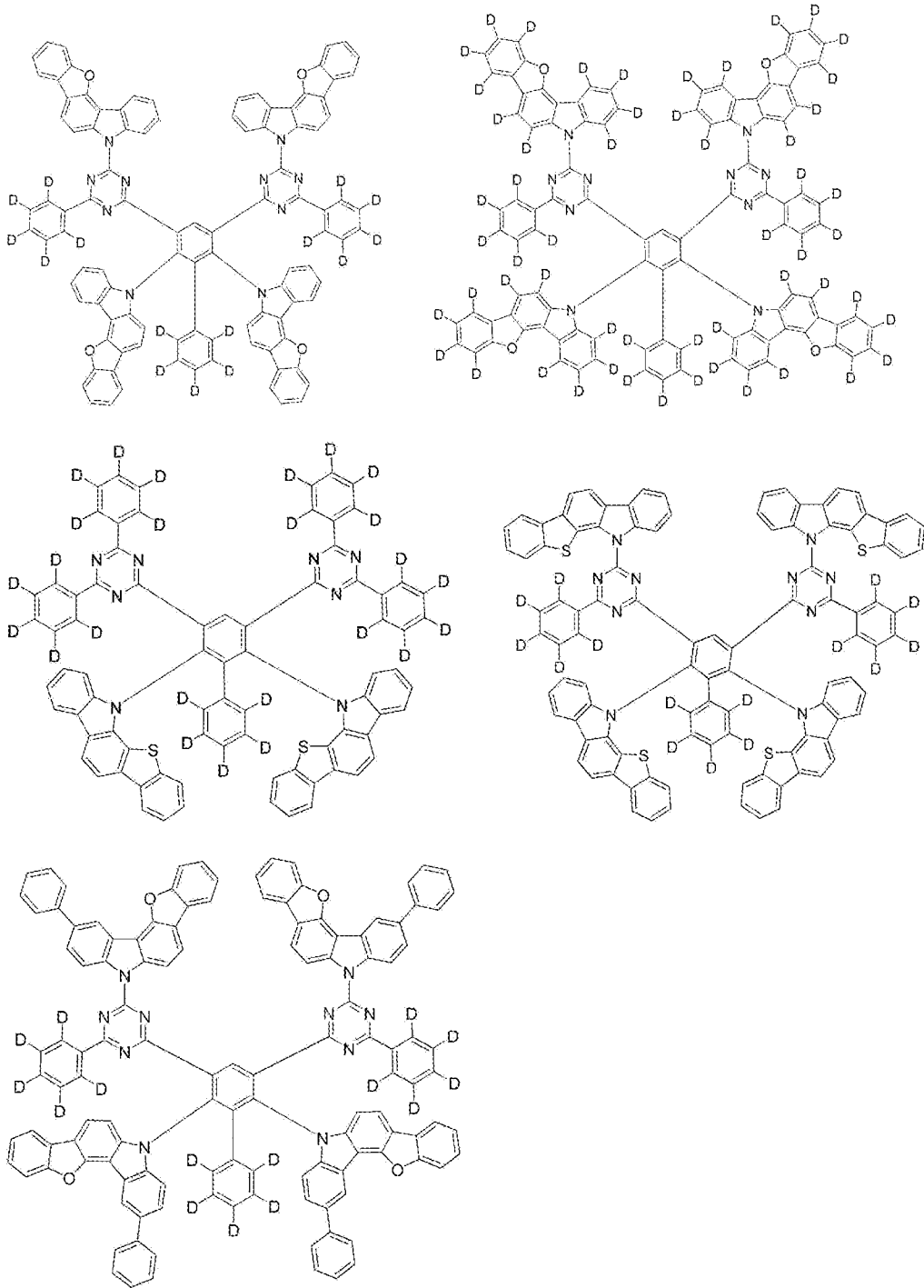
[0072] 一般式（1）で表される別の好ましい化合物群の一例を挙げる。

[化29]



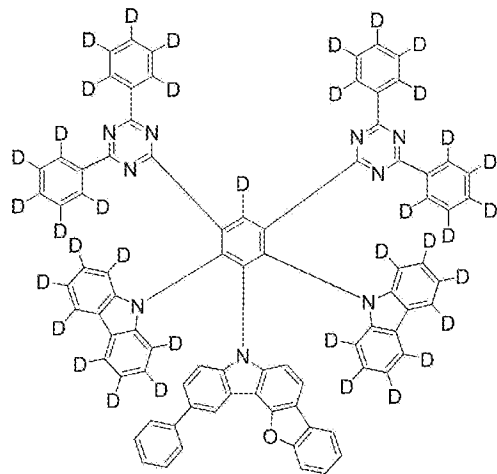
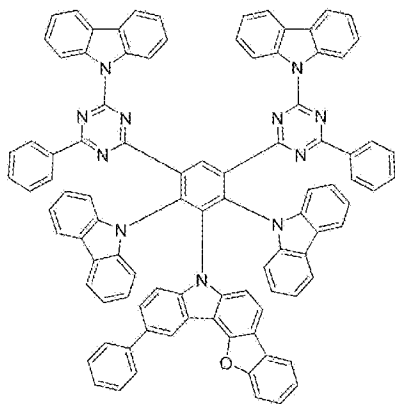
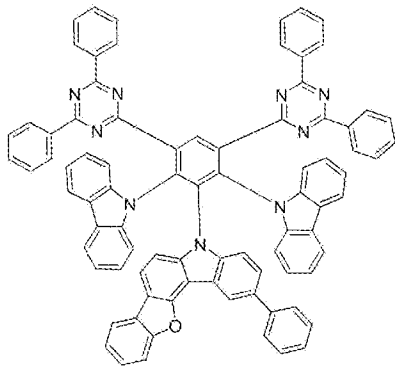
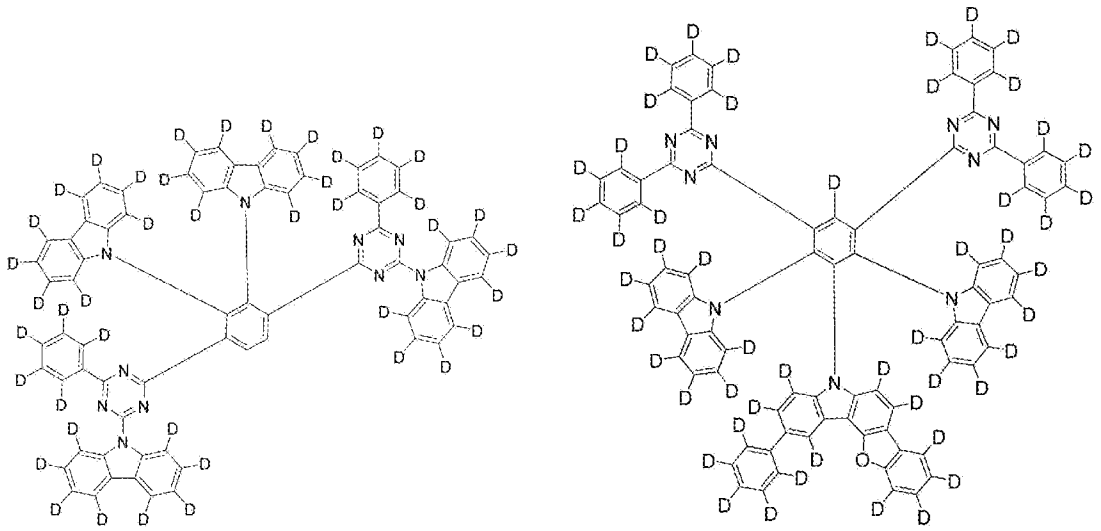
[0073] 一般式(1)で表される別の好ましい化合物群の一例を挙げる。

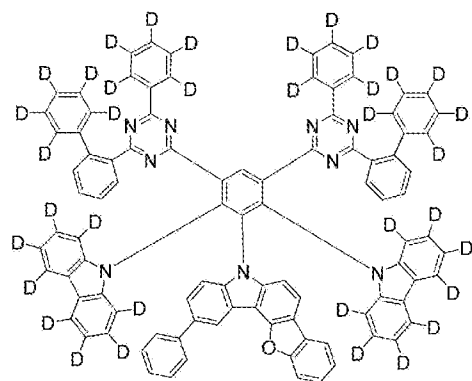
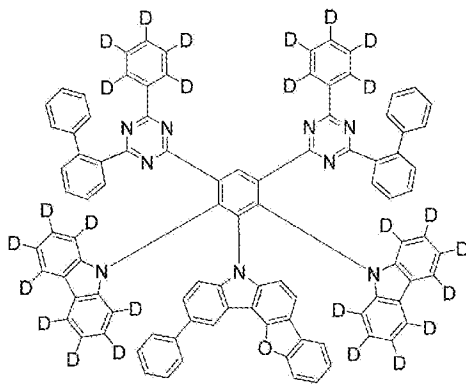
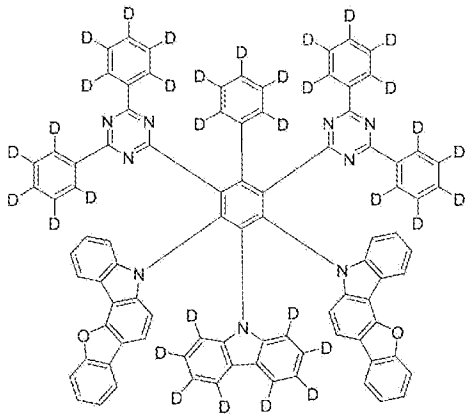
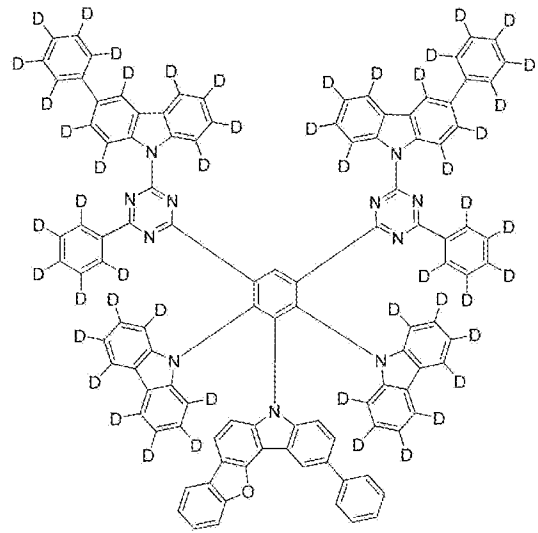
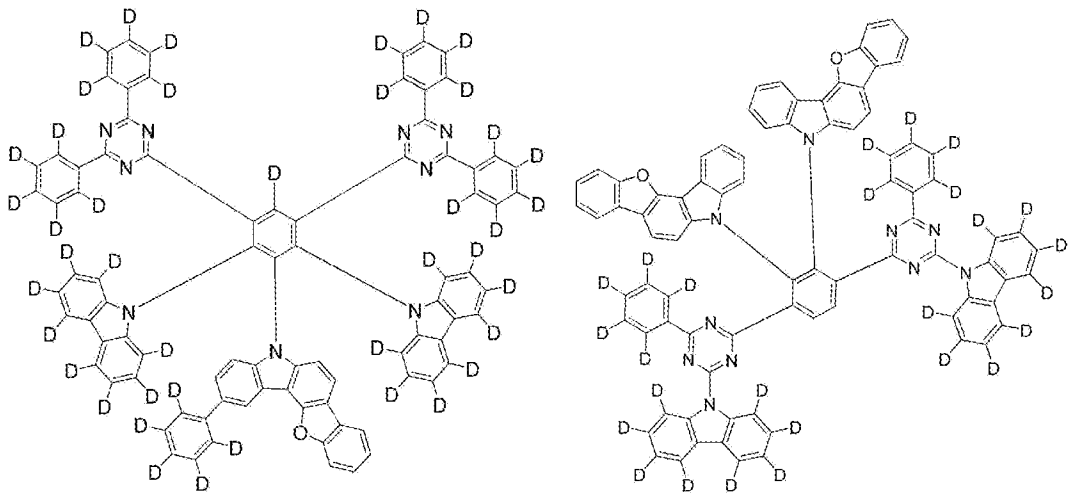
[化30]

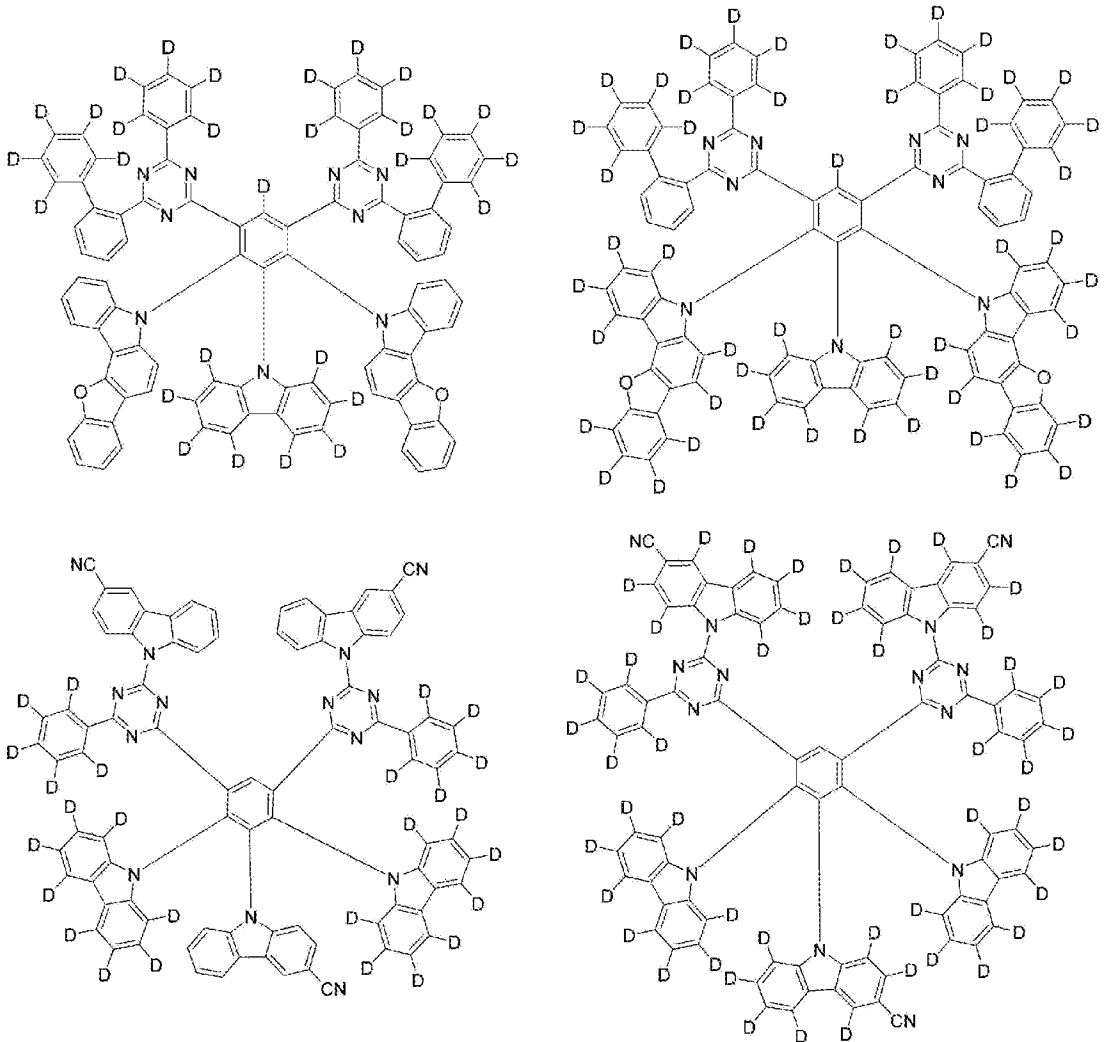


[0074] 一般式(1)で表される別の好ましい化合物群の一例を挙げる。

[化31]







[0075] 一般式(1)で表される化合物の分子量は、例えば一般式(1)で表される化合物を含む有機層を蒸着法により製膜して利用することを意図する場合には、1500以下であることが好ましく、1200以下であることがより好ましく、1000以下であることがさらに好ましく、900以下であることがさらに好ましい。分子量の下限値は、一般式(1)で表される最小化合物の分子量である。

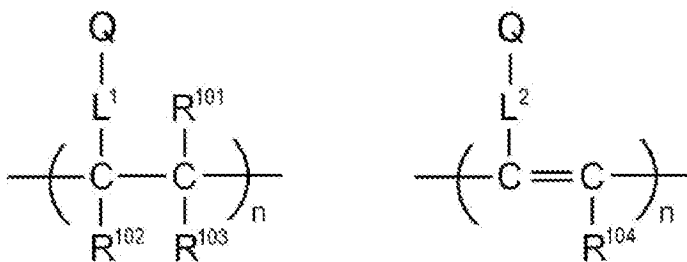
一般式(1)で表される化合物は、分子量にかかわらず塗布法で成膜してもよい。塗布法を用いれば、分子量が比較的大きな化合物であっても成膜することが可能である。一般式(1)で表される化合物は、有機溶媒に溶解しやすいという利点がある。このため、一般式(1)で表される化合物は塗布法を適用しやすいうえ、精製して純度を高めやすい。

[0076] 本発明を応用して、分子内に一般式（１）で表される構造を複数個含む化合物を、発光材料として用いることも考えられる。

例えば、一般式（１）で表される構造中にあらかじめ重合性基を存在させておいて、その重合性基を重合させることによって得られる重合体を、発光材料として用いることが考えられる。例えば、一般式（１）のいずれかの部位に重合性官能基を含むモノマーを用意して、これを単独で重合させるか、他のモノマーとともに共重合させることにより、繰り返し単位を有する重合体を得て、その重合体を発光材料として用いることが考えられる。あるいは、一般式（１）で表される構造を有する化合物どうしをカップリングさせることにより、二量体や三量体を得て、それらを発光材料として用いることも考えられる。

[0077] 一般式（１）で表される構造を含む繰り返し単位を有する重合体の例として、下記２つの一般式のいずれかで表される構造を含む重合体を挙げることができる。

[化32]



[0078] 上の一般式において、Qは一般式（１）で表される構造を含む基を表し、L¹およびL²は連結基を表す。連結基の炭素数は、好ましくは0～20であり、より好ましくは1～15であり、さらに好ましくは2～10である。連結基は-X¹¹-L¹¹-で表される構造を有するものであることが好ましい。ここで、X¹¹は酸素原子または硫黄原子を表し、酸素原子であることが好ましい。L¹¹は連結基を表し、置換もしくは無置換のアルキレン基、または置換もしくは無置換のアリーレン基であることが好ましく、炭素数1～10の置換もしくは無置換のアルキレン基、または置換もしくは無置換のフェニレ

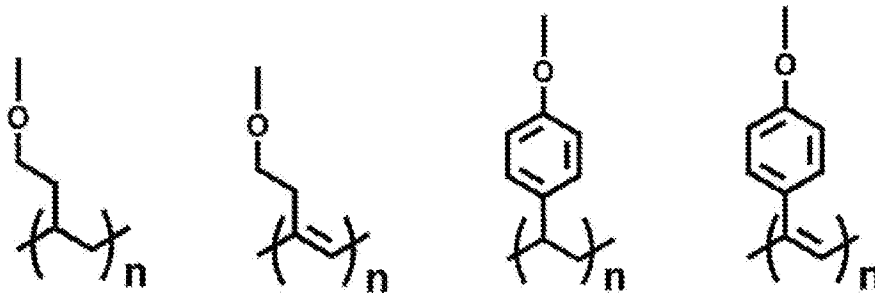
ン基であることがより好ましい。

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

L^1 および L^2 で表される連結基は、Qを構成する一般式(1)のいずれかの部位に結合することができる。1つのQに対して連結基が2つ以上連結して架橋構造や網目構造を形成していてもよい。

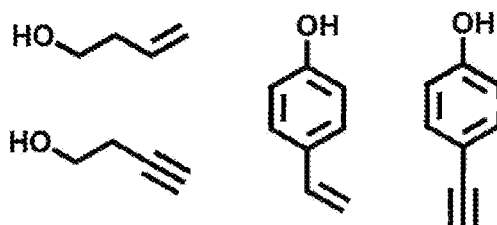
[0079] 繰り返し単位の具体的な構造例として、下記式で表される構造を挙げることができる。

[化33]



[0080] これらの式を含む繰り返し単位を有する重合体は、一般式(1)のいずれかの部位にヒドロキシ基を導入しておき、それをリンカーとして下記化合物を反応させて重合性基を導入し、その重合性基を重合させることにより合成することができる。

[化34]



[0081] 分子内に一般式(1)で表される構造を含む重合体は、一般式(1)で表される構造を有する繰り返し単位のみからなる重合体であってもよいし、それ以外の構造を有する繰り返し単位を含む重合体であってもよい。また、重合体の中に含まれる一般式(1)で表される構造を有する繰り返し単位は、単一種であってもよいし、2種以上であってもよい。一般式(1)で表される構造を有さない繰り返し単位としては、通常の共重合に用いられるモノマーから誘導されるものを挙げるができる。例えば、エチレン、スチレンなどのエチレン性不飽和結合を有するモノマーから誘導される繰り返し単位を挙げるができる。

[0082] 一般式(1)で表される化合物の用途等については、本明細書の一部としてここに引用するWO2022/168956A1の[0058]～[0059]、[0061]、[0063]を参照することができる。

[0083] [一般式(1)で表される化合物の合成方法]

一般式(1)で表される化合物は、新規化合物を含む。

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

[0084] [有機発光素子]

本発明の有機発光素子は、一般式(1)で表される化合物と、ホスト材料またはドーパント材料とを同じ層に含む。ここでいう同じ層は、発光層であることが好ましい。本発明の一態様では、一般式(1)で表される化合物とホスト材料を同じ層に含む。ホスト材料は、一般式(1)で表される化合物よりも多い濃度で用いられ、最低励起一重項エネルギーが一般式(1)で表される化合物より高いことが好ましい。本発明の一態様では、一般式(1)

で表される化合物とドーパント材料を同じ層に含む。ドーパント材料は、一般式（１）で表される化合物よりも少ない濃度で用いられ、最低励起一重項エネルギーが一般式（１）で表される化合物より低いことが好ましい。

ある実施形態では、一般式（１）で表される化合物は、燐光増感蛍光（Phosphorescence Sensitized Fluorescence）に適用する。

ある実施形態では、有機発光素子において一般式（１）で表される化合物は発光材料として機能する。ある実施形態では、有機発光素子において一般式（１）で表される化合物は遅延蛍光を発する発光材料として機能する。

本開示のある実施形態では、一般式（１）で表される化合物は、熱的または電子的手段で励起されるとき、UV領域、可視スペクトルのうち青色、緑色、黄色、オレンジ色、赤色領域（例えば約420nm～約500nm、約500nm～約600nmまたは約600nm～約700nm）または近赤外線領域で光を発することができる。

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

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

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

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

本開示のある実施形態では、一般式（１）で表される化合物は、熱的また

は電子的手段で励起されるとき、紫外スペクトル領域（例えば280～400 nm）で光を発することができる。

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

[0085] 有機発光素子の層を形成する際には、フィルム化の技術を利用することができる。

ある実施形態では、一般式（1）で表される化合物を含むフィルムは、湿式工程で形成することができる。湿式工程では、本発明の化合物を含む組成物を溶解した溶液を面に塗布し、溶媒の除去後にフィルムを形成する。湿式工程として、スピコート法、スリットコート法、インクジェット法（スプレー法）、グラビア印刷法、オフセット印刷法、フレキソ印刷法を挙げることができるが、これらに限定されるものではない。湿式工程では、本発明の化合物を含む組成物を溶解することができる適切な有機溶媒を選択して用いる。ある実施形態では、組成物に含まれる化合物に、有機溶媒に対する溶解性を上げる置換基（例えばアルキル基）を導入することができる。

ある実施形態では、本発明の化合物を含むフィルムは、乾式工程で形成することができる。ある実施形態では、乾式工程として真空蒸着法を採用することができる、これに限定されるものではない。真空蒸着法を採用する場合は、フィルムを構成する化合物を個別の蒸着源から共蒸着させてもよいし、化合物を混合した単一の蒸着源から共蒸着させてもよい。単一の蒸着源を用いる場合は、化合物の粉末を混合した混合粉を用いてもよいし、その混合粉を圧縮した圧縮成形体を用いてもよいし、各化合物を加熱溶解して冷却した混合物を用いてもよい。ある実施形態では、単一の蒸着源に含まれる複数の化合物の蒸着速度（重量減少速度）が一致ないしほぼ一致する条件で共蒸着を行うことにより、蒸着源に含まれる複数の化合物の組成比に対応する組成比のフィルムを形成することができる。形成されるフィルムの組成比と同じ組成比で複数の化合物を混合して蒸着源とすれば、所望の組成比を有するフ

ィルムを簡便に形成することができる。ある実施形態では、共蒸着される各化合物が同じ重量減少率になる温度を特定して、その温度を共蒸着時の温度として採用することができる。

[0086] ある実施形態では、有機発光素子は有機光ルミネッセンス素子（有機PL素子）である。ある実施形態では、有機発光素子は、有機エレクトロルミネッセンス素子（有機EL素子）である。ある実施形態では、一般式（1）で表される化合物は、発光層に含まれる他の発光材料の光放射を（いわゆるアシストドーパントとして）補助する。ある実施形態では、発光層に含まれる一般式（1）で表される化合物は、その最低の励起一重項エネルギー準位にあり、発光層に含まれるホスト材料の最低励起一重項エネルギー準位と発光層に含まれる他の発光材料の最低励起一重項エネルギー準位との間に含まれる。

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

[0087] 発光層：

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

ある実施形態では、発光層はドーパント材料である発光材料とホスト材料とを含む。ある実施形態では、発光材料は、一般式（1）で表される化合物

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

[0088] (ドーパント材料)

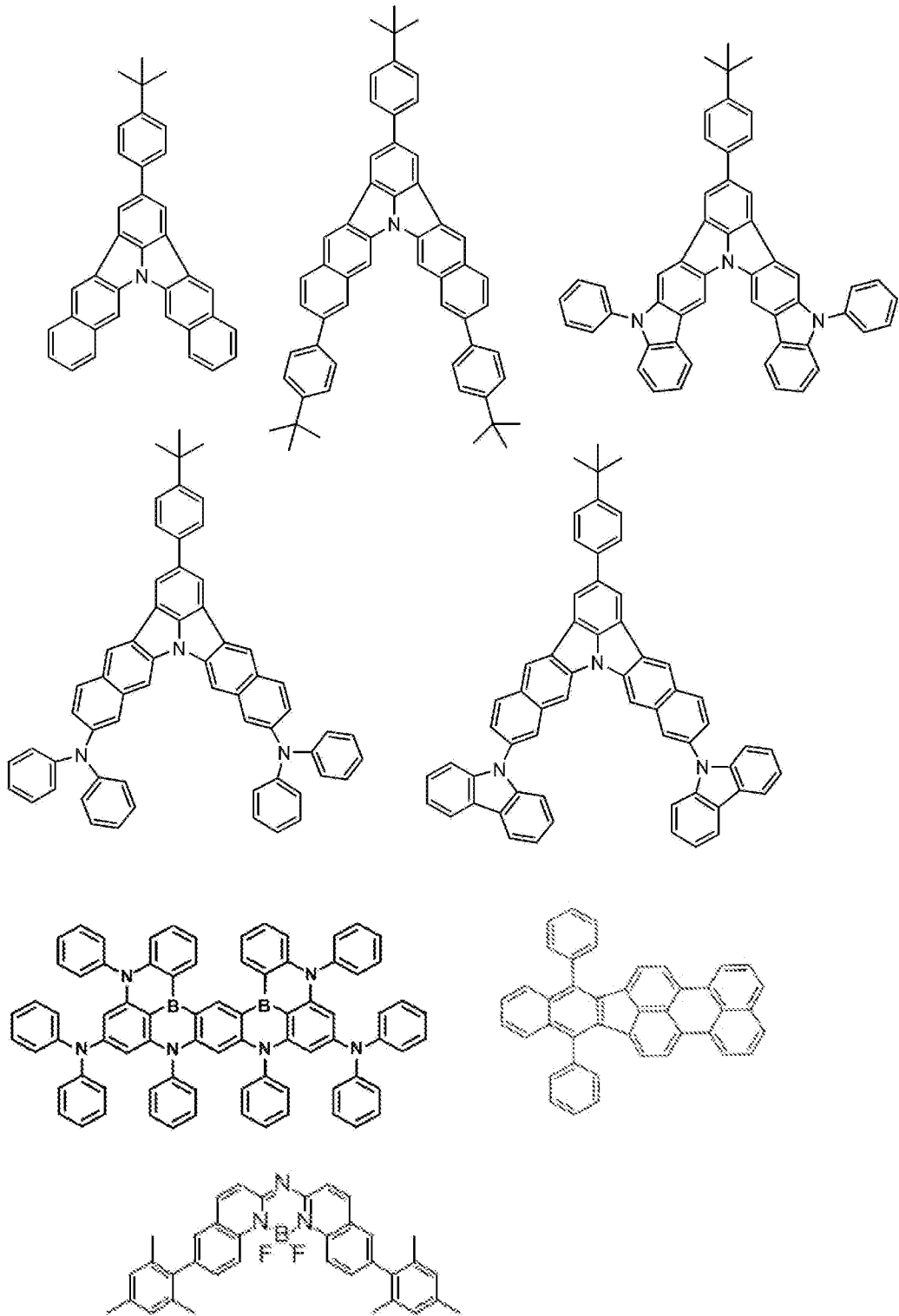
一般式(1)で表される化合物をホスト材料またはアシストドーパントとして用いるとき、ドーパント材料である発光材料(好ましくは蛍光材料)として様々な化合物を採用することが可能である。そのような発光材料としては、アントラセン誘導体、テトラセン誘導体、ナフタセン誘導体、ピレン誘導体、ペリレン誘導体、クリセン誘導体、ルブレン誘導体、クマリン誘導体

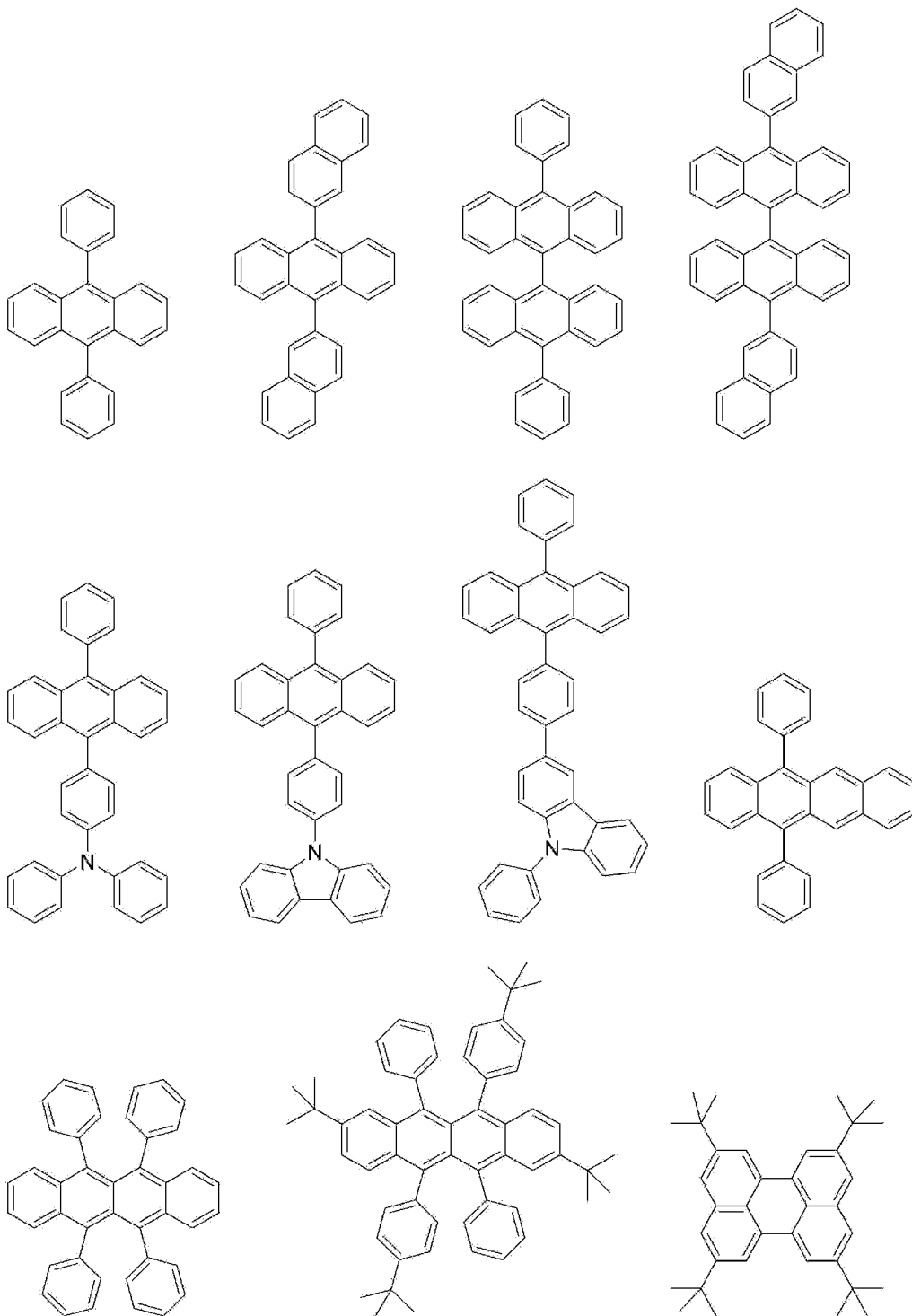
、ピラン誘導体、スチルベン誘導体、フルオレン誘導体、アントリル誘導体、ピロメテン誘導体、ターフェニル誘導体、ターフェニレン誘導体、フルオランテン誘導体、アミン誘導体、キナクリドン誘導体、オキサジアゾール誘導体、マロノニトリル誘導体、ピラン誘導体、カルバゾール誘導体、ジュロリジン誘導体、チアゾール誘導体、金属（Al, Zn）を有する誘導体等を用いることが可能である。これらの例示骨格には置換基を有してもよいし、置換基を有していなくてもよい。また、これらの例示骨格どうしを組み合わせてもよい。

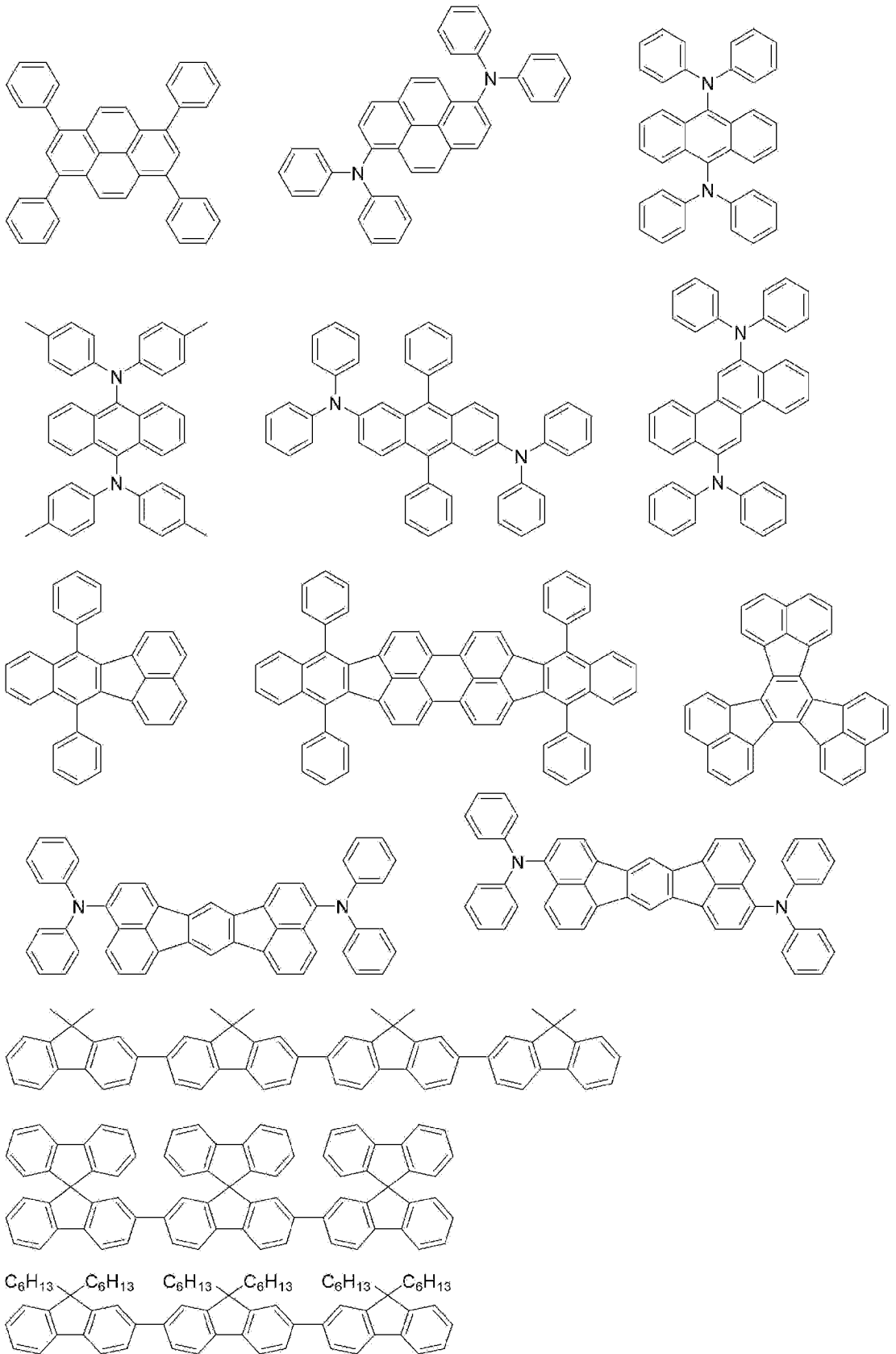
以下において、一般式（1）で表される化合物と組み合わせて用いることができるドーパント材料（発光材料）を例示する。

[0089]

[化35]







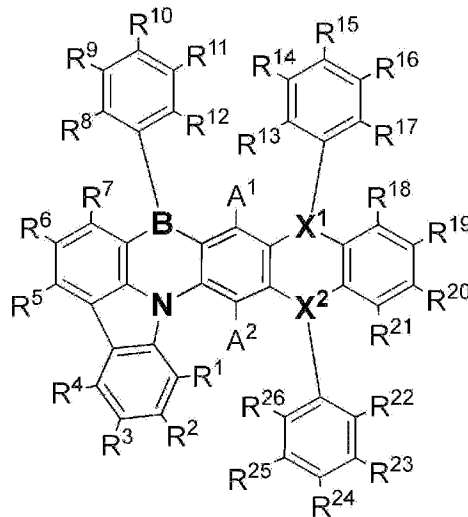
[0090] 上記以外にも、WO2015/022974号公報の段落0220~02

39に記載の化合物も、一般式(1)で表される構造を有するアシストドープメントとともに用いる発光材料として、採用することができる。

[0091] 一般式(1)で表される化合物と組み合わせて用いることができるドープメント材料(発光材料)として、特に下記一般式(4)で表される化合物を好ましく用いることができる。

[化36]

一般式(4)



[0092] 一般式(4)において、X¹およびX²は、一方が窒素原子であり、他方がホウ素原子である。本発明の一態様では、X¹が窒素原子であり、X²がホウ素原子である。このとき、R¹⁷とR¹⁸は互いに結合して単結合となりピロール環を形成する。本発明の別の態様では、X¹がホウ素原子であり、X²が窒素原子である。このとき、R²¹とR²²は互いに結合して単結合となりピロール環を形成する。

[0093] 一般式(4)において、R¹~R²⁶、A¹、A²は、各々独立に水素原子、重水素原子または置換基を表す。

R¹とR²、R²とR³、R³とR⁴、R⁴とR⁵、R⁵とR⁶、R⁶とR⁷、R⁷とR⁸、R⁸とR⁹、R⁹とR¹⁰、R¹⁰とR¹¹、R¹¹とR¹²、R¹³とR¹⁴、R¹⁴とR¹⁵、R¹⁵とR¹⁶、R¹⁶とR¹⁷、R¹⁷とR¹⁸、R¹⁸とR¹⁹、R¹⁹とR²⁰、R²⁰とR²¹、R²¹とR²²、R²²とR²³、R²³とR²⁴、R²⁴とR²⁵、R²⁵とR²⁶は、互いに結合して環状構造を形成していてもよい。

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

る。本発明の一態様では、 R^7 と R^8 、 R^{17} と R^{18} 、 R^{21} と R^{22} のすべてが互いに結合している。

[0094] R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 、 R^6 と R^7 、 R^8 と R^9 、 R^9 と R^{10} 、 R^{10} と R^{11} 、 R^{11} と R^{12} 、 R^{13} と R^{14} 、 R^{14} と R^{15} 、 R^{15} と R^{16} 、 R^{16} と R^{17} 、 R^{18} と R^{19} 、 R^{19} と R^{20} 、 R^{20} と R^{21} 、 R^{22} と R^{23} 、 R^{23} と R^{24} 、 R^{24} と R^{25} 、 R^{25} と R^{26} が互いに結合して形成する環状構造は、芳香環であっても脂肪環であってもよく、またヘテロ原子を含むものであってもよく、さらに他の環が1環以上縮合していてもよい。ここでいうヘテロ原子としては、窒素原子、酸素原子および硫黄原子からなる群より選択されるものであることが好ましい。形成される環状構造の例として、ベンゼン環、ピリジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、ピラジン環、ピロール環、イミダゾール環、ピラゾール環、トリアゾール環、イミダゾリン環、フラン環、チオフェン環、オキサゾール環、イソオキサゾール環、チアゾール環、イソチアゾール環、シクロヘキサジエン環、シクロヘキセン環、シクロペンテン環、シクロヘプタトリエン環、シクロヘプタジエン環、シクロヘプテン環、およびこれらの環からなる群より選択される1つ以上の環がさらに縮合した環を挙げることができる。本発明の好ましい一態様では、環状構造は置換もしくは無置換のベンゼン環（さらに環が縮合していてもよい）であり、例えば、アルキル基またはアリアル基で置換されていてもよいベンゼン環である。本発明の好ましい一態様では、環状構造は置換もしくは無置換の複素芳香環であり、好ましくはベンゾフランのフラン環、ベンゾチオフェンのチオフェン環である。 R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 、 R^6 と R^7 、 R^8 と R^9 、 R^9 と R^{10} 、 R^{10} と R^{11} 、 R^{11} と R^{12} 、 R^{13} と R^{14} 、 R^{14} と R^{15} 、 R^{15} と R^{16} 、 R^{16} と R^{17} 、 R^{18} と R^{19} 、 R^{19} と R^{20} 、 R^{20} と R^{21} 、 R^{22} と R^{23} 、 R^{23} と R^{24} 、 R^{24} と R^{25} 、 R^{25} と R^{26} のうち、互いに結合して環状構造を形成している組み合わせの数は0であってもよいし、例えば1～6のいずれかであってもよい。例えば1～4のいずれかであってもよく、1を選択したり、2を選択したり、3または4を選択したり

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

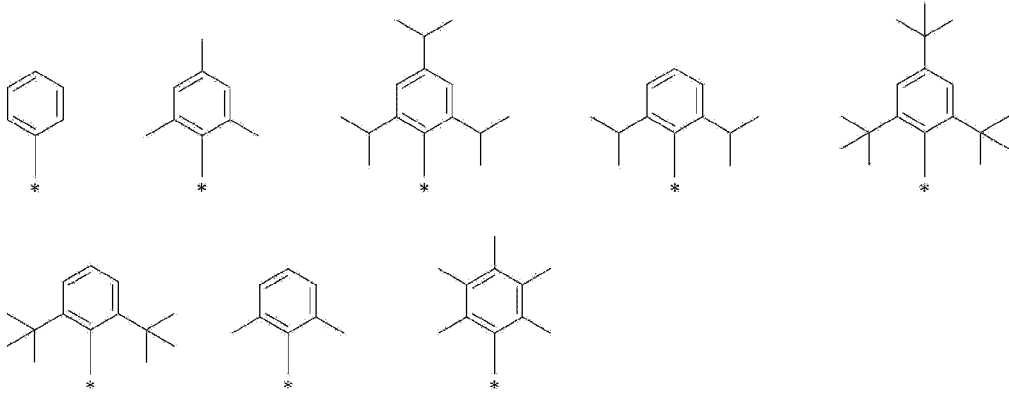
[0095] 隣接する R^n ($n = 1 \sim 26$) と互いに結合していない $R^1 \sim R^{26}$ は、水素原子、重水素原子または置換基である。置換基としては、置換基群A～Eのいずれかから選択される基を採用することができる。

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

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

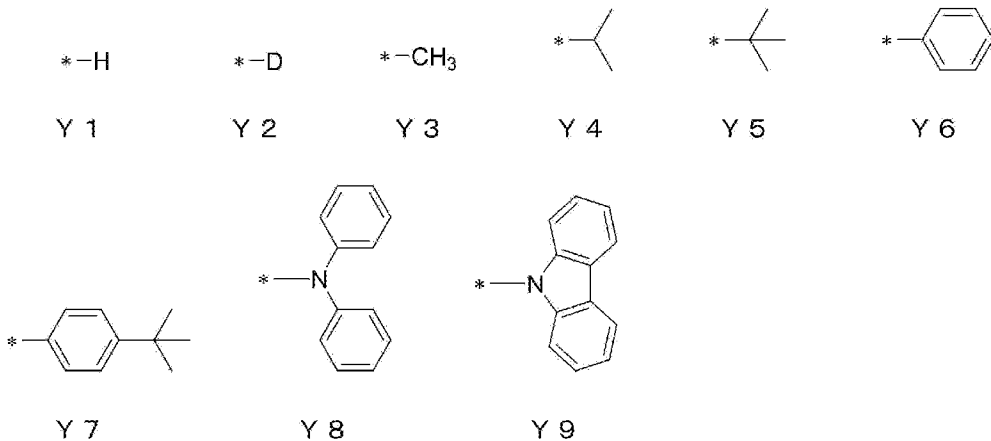
CH₃の表示を省略している。*は結合位置を表す。

[化37]



[0096] 以下において、一般式(4)のR¹~R²⁶の具体例を挙げる。R¹~R⁷、X¹が窒素原子であるときのR¹³~R²¹、X²が窒素原子であるときのR¹⁸~R²⁶としてY¹~Y⁹が好ましく、R⁸~R¹²、X¹が窒素原子であるときのR²²~R²⁶、X²が窒素原子であるときのR¹³~R¹⁷としてY¹~Y⁷が好ましい。ただし、本発明で採用することができるホウ素原子に結合する基は、以下の具体例により限定的に解釈されることはない。Dは重水素原子を表す。*は結合位置を表す。

[化38]



[0097] A¹およびA²は、水素原子、重水素原子または置換基である。置換基としては、置換基群A~Eのいずれかから選択される基を採用することができる。

本発明の好ましい一態様では、A¹およびA²は、各々独立に水素原子また

は重水素原子である。例えば、 A^1 および A^2 は水素原子である。例えば、 A^1 および A^2 は重水素原子である。

A^1 および A^2 の一方は置換基であってもよい。また、 A^1 および A^2 は各々独立に置換基であってもよい。 A^1 および A^2 が採りうる好ましい置換基は、アクセプター性基である。アクセプター性基は、ハメットの σ_p 値が正の基である。

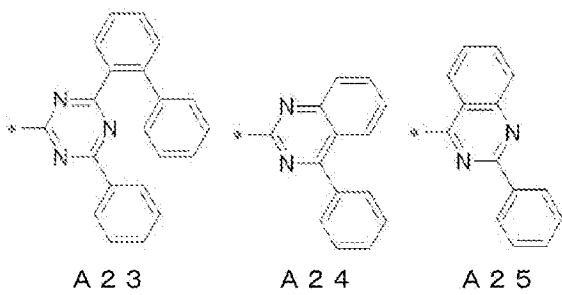
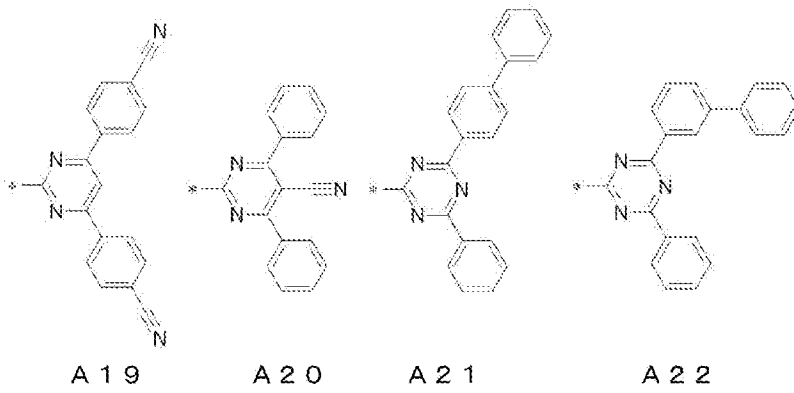
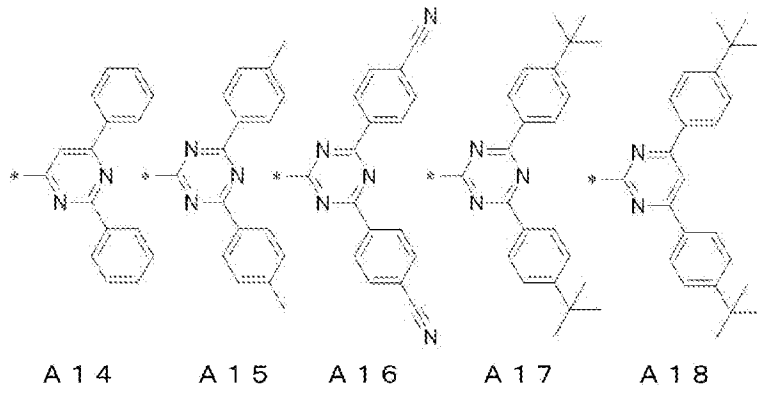
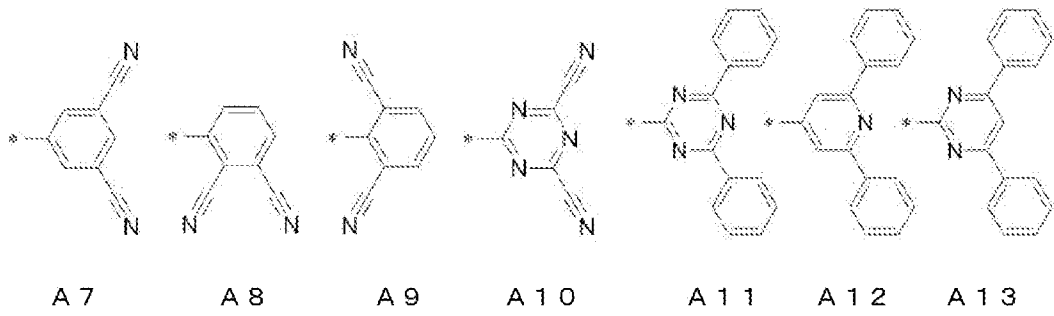
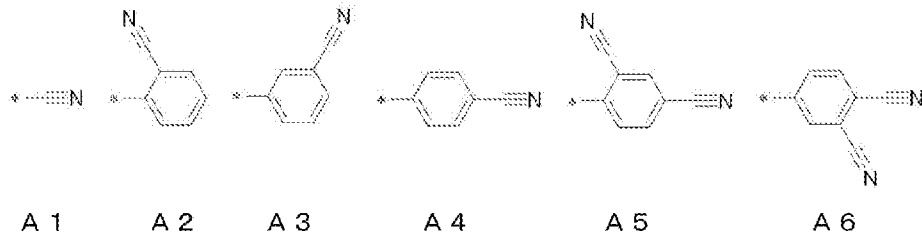
A^1 および A^2 が採りうるアクセプター性基は、ハメットの σ_p 値が0.2より大きい基であることがより好ましい。ハメットの σ_p 値が0.2より大きい基として、シアノ基、少なくともシアノ基で置換されているアリール基、フッ素原子を含む基、環骨格構成原子として窒素原子を含む置換もしくは無置換のヘテロアリール基を挙げることができる。ここでいう少なくともシアノ基で置換されているアリール基は、シアノ基以外の置換基（例えばアルキル基やアリール基）で置換されていてもよいが、シアノ基だけで置換されているアリール基であってもよい。少なくともシアノ基で置換されているアリール基は、少なくともシアノ基で置換されているフェニル基であることが好ましい。シアノ基の置換数は1または2であることが好ましく、例えば1であってもよく、2であってもよい。フッ素原子を含む基は、フッ素原子、フッ化アルキル基、フッ素原子またはフッ化アルキル基で少なくとも置換されたアリール基を挙げることができる。フッ化アルキル基は、パーフルオロアルキル基であることが好ましく、炭素原子数は1~6であることが好ましく、1~3であることがより好ましい。また、環骨格構成原子として窒素原子を含むヘテロアリール基は、単環であってもよいし、2つ以上の環が縮合した縮合環であってもよい。縮合環である場合、縮合した後の環の数は2~6であることが好ましく、例えば2~4の中から選択したり、2としたりすることができる。ヘテロアリール基を構成する環の具体例として、ピリジン環、ピリミジン環、ピラジン環、トリアジン環、キノリン環、イソキノリン環、キナゾリン環、キノキサリン環、キナゾリン環やキノキサリン環以外のナフチリジン環を挙げることができる。ヘテロアリール基を構成する環は、

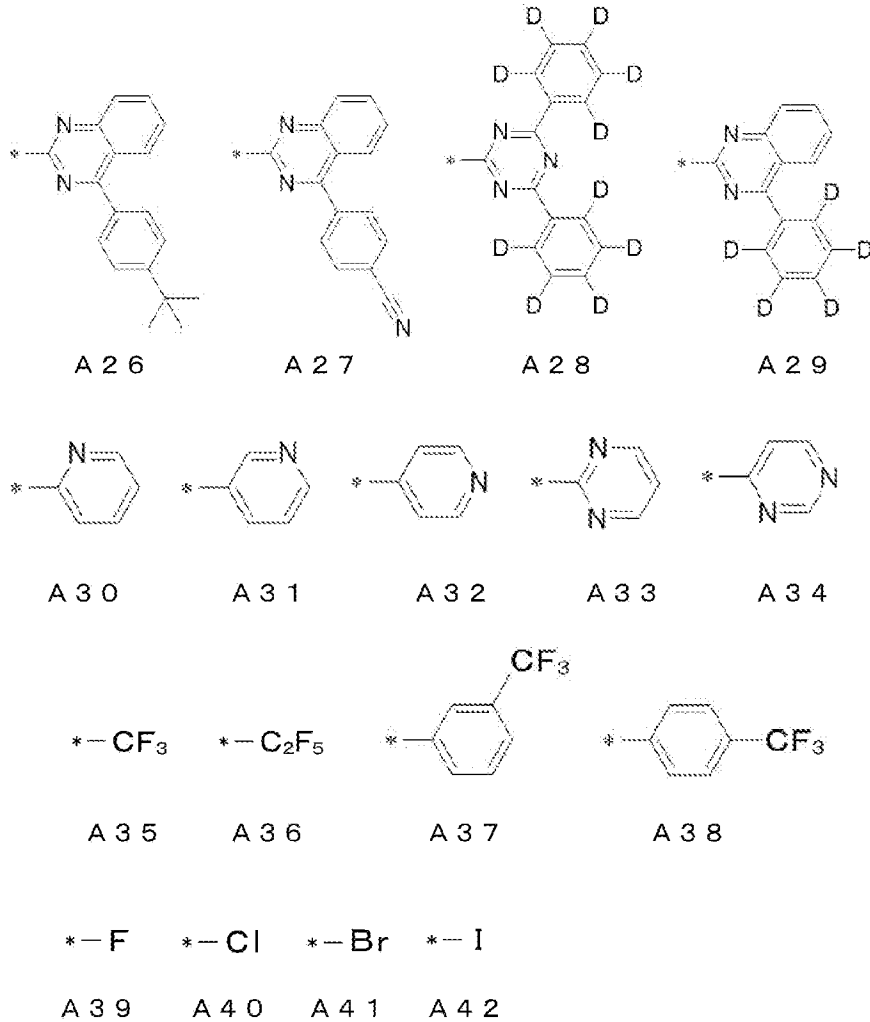
重水素原子や置換基で置換されていてもよく、置換基としては例えば、アルキル基、アリール基およびヘテロアリール基からなる群より選択される1つの基または2つ以上を組み合わせて形成される基を挙げることができる。A¹およびA²が採りうるアクセプター性基として特に好ましいのはシアノ基である。

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

[0098] 以下において、本発明で採用することができるアクセプター性基の具体例を示す。ただし、本発明において用いることができるアクセプター性基は以下の具体例によって限定的に解釈されることはない。本明細書中ではメチル基はC H₃の表示を省略している。このため、例えばA 1 5であれば、4-メチルフェニル基が2つ含まれる基を示している。また「D」は重水素原子を表す。*は結合位置を表す。

[化39]





[0099] なお、 X^1 が窒素原子であって、 R^7 と R^8 が窒素原子を介して結合して6員環を形成し、 R^{21} と R^{22} が窒素原子を介して結合して6員環を形成し、 R^{17} と R^{18} が互いに結合して単結合を形成しているとき、 $R^1 \sim R^6$ の少なくとも1つは置換もしくは無置換のアリール基であるか、 R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^3 と R^4 、 R^4 と R^5 、 R^5 と R^6 のいずれかが互いに結合して芳香環（縮合していてもよい置換もしくは無置換のベンゼン環）または複素芳香環（好ましくは縮合していてもよい置換もしくは無置換のベンゾフランのフラン環、縮合していてもよい置換もしくは無置換のベンゾチオフェンのチオフェン環）を形成している。

また、 X^1 がホウ素原子で、 X^2 が窒素原子であり、 R^7 と R^8 、 R^{17} と R^{18} が互いに結合してホウ素原子を含む環状構造を形成している場合、その環状

構造は5～7員環であり、6員環である場合は R^7 と R^8 、 R^{17} と R^{18} が互いに結合して $-B(R^{32})-$ 、 $-CO-$ 、 $-CS-$ または $-N(R^{27})-$ を形成している。 R^{27} は水素原子、重水素原子または置換基を表すことが好ましい。

一般式(4)で表される化合物の詳細と具体例については、本明細書の一部としてここに引用するWO2022/270354A1の[0019]～[0128]を参照することができる。

[0100] ある実施形態では、発光層は2種類以上の構造が異なるTADF分子を含む。例えば、励起一重項エネルギー準位がホスト材料、第1TADF分子、第2TADF分子の順に高い、これら3種の材料を含む発光層とすることができる。このとき、第1TADF分子と第2TADF分子は、ともに最低励起一重項エネルギー準位と77Kの最低励起三重項エネルギー準位の差 ΔE_0 が0.3eV以下であることが好ましく、0.25eV以下であることがより好ましく、0.2eV以下であることがより好ましく、0.15eV以下であることがより好ましく、0.1eV以下であることがさらに好ましく、0.07eV以下であることがさらにより好ましく、0.05eV以下であることがさらにまた好ましく、0.03eV以下であることがさらになお好ましく、0.01eV以下であることが特に好ましい。発光層における第1TADF分子の濃度は、第2TADF分子の濃度よりも大きいことが好ましい。また、発光層におけるホスト材料の濃度は、第2TADF分子の濃度よりも大きいことが好ましい。発光層における第1TADF分子の濃度は、ホスト材料の濃度よりも大きくてもよいし、小さくてもよいし、同じであってもよい。ある実施形態では、発光層内の組成を、ホスト材料を10～70重量%、第1TADF分子を10～80重量%、第2TADF分子を0.1～30重量%としてもよい。ある実施形態では、発光層内の組成を、ホスト材料を20～45重量%、第1TADF分子を50～75重量%、第2TADF分子を5～20重量%としてもよい。ある実施形態では、第1TADF分子とホスト材料の共蒸着膜(この共蒸着膜における第1TADF分子の濃度

= A重量%)の光励起による発光量子収率 $\phi_{PL1}(A)$ と、第2TADF分子とホスト材料の共蒸着膜(この共蒸着膜における第2TADF分子の濃度=A重量%)の光励起による発光量子収率 $\phi_{PL2}(A)$ が、 $\phi_{PL1}(A) > \phi_{PL2}(A)$ の関係式を満たす。ある実施形態では、第2TADF分子とホスト材料の共蒸着膜(この共蒸着膜における第2TADF分子の濃度=B重量%)の光励起による発光量子収率 $\phi_{PL2}(B)$ と、第2TADF分子の単独膜の光励起による発光量子収率 $\phi_{PL2}(100)$ が、 $\phi_{PL2}(B) > \phi_{PL2}(100)$ の関係式を満たす。ある実施形態では、発光層は3種類の構造が異なるTADF分子を含むことができる。本発明の化合物は、発光層に含まれる複数のTADF化合物のいずれであってもよい。

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

発光層が本発明の化合物以外のTADF材料を含むとき、そのTADF材料は公知の遅延蛍光材料であってよい。好ましい遅延蛍光材料として、WO 2013/154064号公報の段落0008~0048および0095~0133、WO 2013/011954号公報の段落0007~0047および0073~0085、WO 2013/011955号公報の段落0007~0033および0059~0066、WO 2013/081088号公報の段落0008~0071および0118~0133、特開2013-256490号公報の段落0009~0046および0093~0134、特

開2013-116975号公報の段落0008~0020および0038~0040、WO2013/133359号公報の段落0007~0032および0079~0084、WO2013/161437号公報の段落0008~0054および0101~0121、特開2014-9352号公報の段落0007~0041および0060~0069、特開2014-9224号公報の段落0008~0048および0067~0076、特開2017-119663号公報の段落0013~0025、特開2017-119664号公報の段落0013~0026、特開2017-222623号公報の段落0012~0025、特開2017-226838号公報の段落0010~0050、特開2018-100411号公報の段落0012~0043、WO2018/047853号公報の段落0016~0044に記載される一般式に包含される化合物、特に例示化合物であって、遅延蛍光を放射しうるものが含まれる。また、ここでは、特開2013-253121号公報、WO2013/133359号公報、WO2014/034535号公報、WO2014/115743号公報、WO2014/122895号公報、WO2014/126200号公報、WO2014/136758号公報、WO2014/133121号公報、WO2014/136860号公報、WO2014/196585号公報、WO2014/189122号公報、WO2014/168101号公報、WO2015/008580号公報、WO2014/203840号公報、WO2015/002213号公報、WO2015/016200号公報、WO2015/019725号公報、WO2015/072470号公報、WO2015/108049号公報、WO2015/080182号公報、WO2015/072537号公報、WO2015/080183号公報、特開2015-129240号公報、WO2015/129714号公報、WO2015/129715号公報、WO2015/133501号公報、WO2015/136880号公報、WO2015/137244号公報、WO2015/137202号公報、WO2015/137136号公報、WO2015/14654

1号公報、WO2015/159541号公報に記載される発光材料であって、遅延蛍光を放射しうるものを好ましく採用することができる。なお、この段落に記載される上記の公報は、本明細書の一部としてここに引用する。

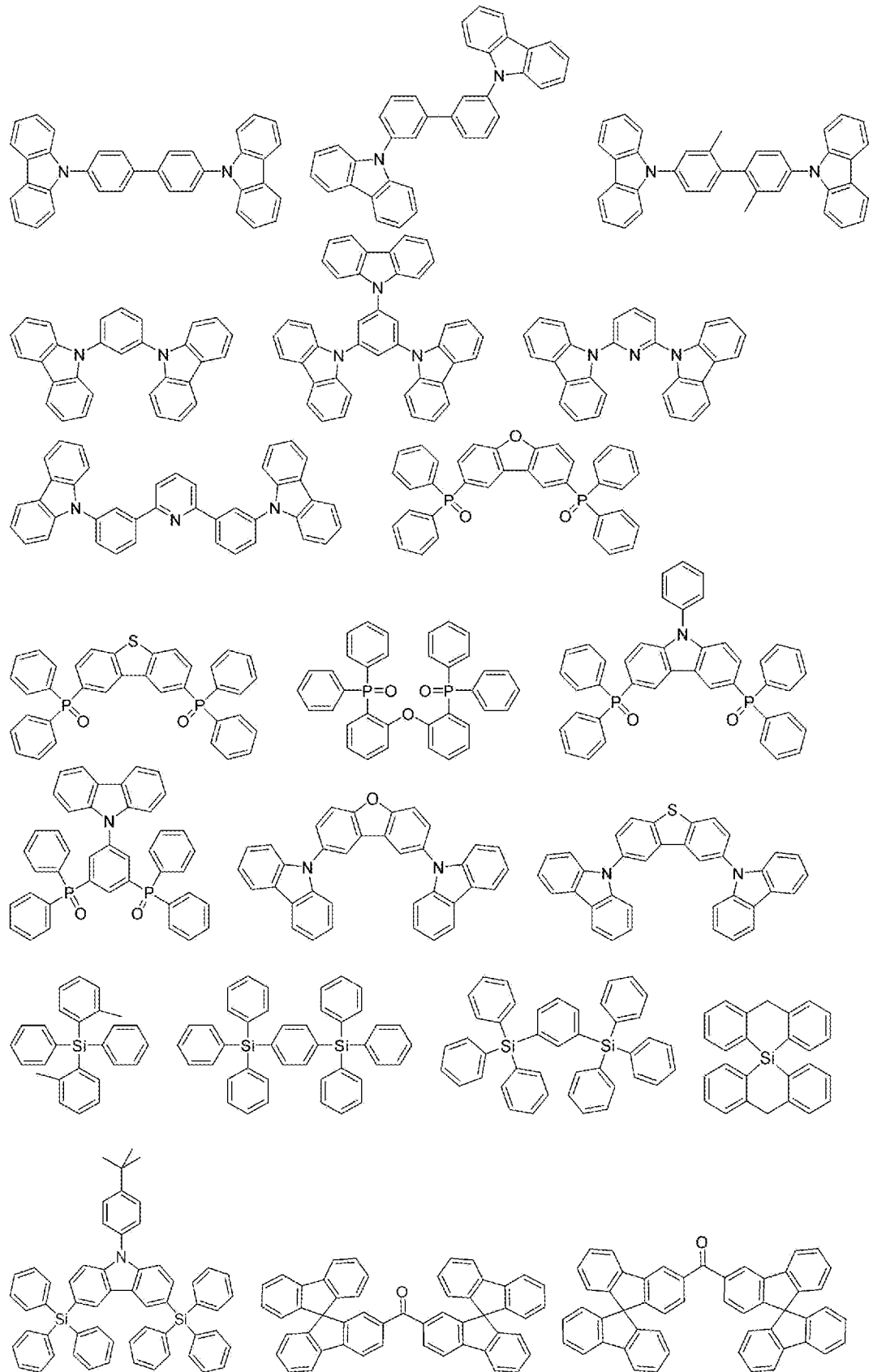
[0101] (ホスト材料)

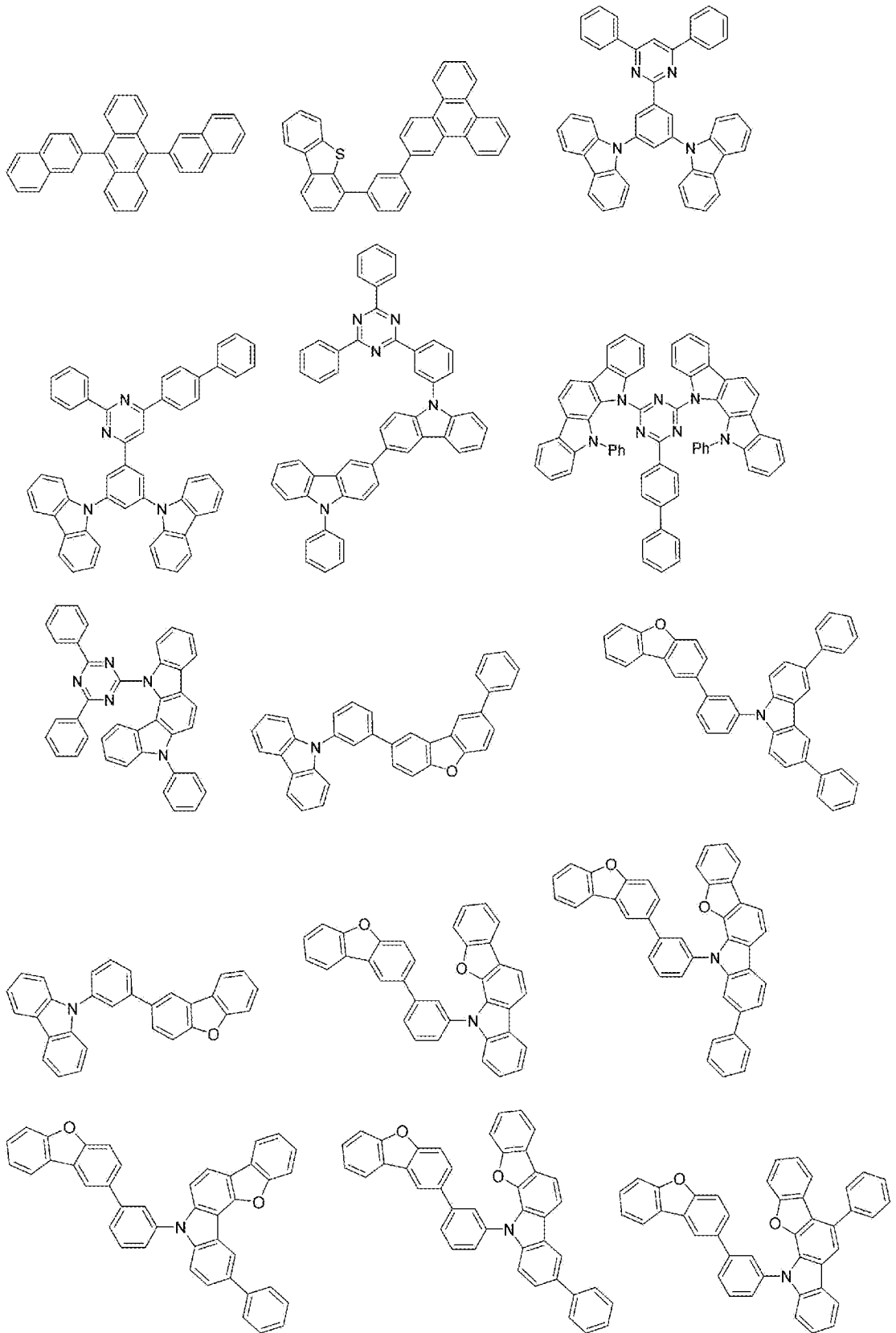
一般式(1)で表される化合物をホスト材料とともに用いる場合、一般式(1)で表される化合物の量は、0.1重量%以上である。ある実施形態では、ホスト材料を用いるとき、発光層に含まれる発光材料としての一般式(1)で表される化合物の量は、1重量%以上である。ある実施形態では、ホスト材料を用いるとき、発光層に含まれる発光材料としての一般式(1)で表される化合物の量は、50重量%以下である。ある実施形態では、ホスト材料を用いるとき、発光層に含まれる発光材料としての一般式(1)で表される化合物の量は、20重量%以下である。ある実施形態では、ホスト材料を用いるとき、発光層に含まれる発光材料としての一般式(1)で表される化合物の量は、10重量%以下である。

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

[0102] いくつかの実施形態では、ホスト材料は以下からなる群から選択される：

[化40]



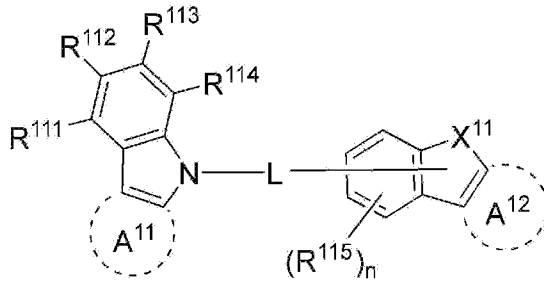


[0103] 本発明の好ましい一態様では、一般式（１）で表される化合物とともに用

いるホスト材料は下記の一般式（５）で表される構造を有する化合物である。

[化41]

一般式（５）



[0104] 一般式（５）において、X¹¹は、O、S、N（R^A）またはC（R^B）（R^C）を表す。本発明の一態様では、X¹¹はO、SまたはN（R^A）である。本発明の一態様では、X¹¹はOまたはSである。本発明の一態様では、X¹¹はN（R^A）である。本発明の一態様では、X¹¹はOである。本発明の一態様では、X¹¹はSである。X¹¹がO、SまたはC（R^B）（R^C）であるとき、Lは（R¹¹⁵）_nが結合しているベンゼン環に結合する。X¹¹がN（R^A）であるとき、Lは（R¹¹⁵）_nが結合しているベンゼン環か、あるいはX¹¹が表すNに結合する。Lから右方に伸長する結合手は、ここで説明したように、（R¹¹⁵）_nが結合しているベンゼン環に結合するか、あるいはX¹¹がNであるときにX¹¹（すなわちN）に結合することを意味している。

[0105] 一般式（５）において、A¹¹およびA¹²は、各々独立にベンゼン環、フラン環、チオール環、ピロール環またはシクロペンタジエン環であって、これらの環にはさらに他の環が縮合していてもよく、また置換されていてもよい。本発明の好ましい一態様では、A¹¹はベンゼン環である。本発明の好ましい一態様では、A¹²はベンゼン環である。本発明のさらに好ましい一態様では、A¹¹およびA¹²はともにベンゼン環である。本発明の一態様では、A¹¹とA¹²の少なくとも一方は、フラン環、チオール環、ピロール環またはシクロペンタジエン環である。本発明の一態様では、A¹¹とA¹²の少なくとも一方はフラン環である。本発明の一態様では、A¹¹とA¹²の少なくとも一方は

チオール環である。本発明の一態様では、 A^{11} と A^{12} の少なくとも一方はピロール環である。本発明の一態様では、 A^{11} と A^{12} の少なくとも一方はシクロペンタジエン環である。

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

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

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

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

[0106] 一般式(5)において、 $R^{111} \sim R^{114}$ 、 R^B 、 R^C は、各々独立に水素原子

、重水素原子、置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、置換もしくは無置換のアルキル基、またはシアノ基を表す。R¹¹⁵は、各々独立に水素原子、重水素原子、置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、置換もしくは無置換のアルキル基、シアノ基、またはLとの結合（すなわちLへの単結合）を表す。R^Aは、置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、置換もしくは無置換のアルキル基、またはLとの結合（すなわちLへの単結合）を表す。アリール基、ヘテロアリール基、アルキル基については、上記の「アリール基」、「ヘテロアリール基」、「アルキル基」の説明を参照することができる。アリール基の炭素数は6～14が好ましく、例えばフェニル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基を挙げることができる。ヘテロアリール基は5員環または6員環で構成されているものが好ましく、2-ピリジル基、3-ピリジル基、4-ピリジル基、カルバゾール-9-イル基、ジベンゾフリル基、ジベンゾチエニル基を挙げることができる。アルキル基の炭素数は1～6が好ましく、例えばメチル基、エチル基、イソプロピル基、tert-ブチル基を挙げることができる。これらのアリール基、ヘテロアリール基、アルキル基は置換されていてもよく、置換されている場合は、重水素原子、アリール基、ヘテロアリール基、アルキル基、シアノ基からなる群より選択される1つの原子か基または2つ以上を組み合わせた基で置換されていることが好ましく、重水素原子、アリール基、ヘテロアリール基、アルキル基からなる群より選択される1つの原子か基または2つ以上を組み合わせた基で置換されていることがより好ましい。本発明の一態様では、R¹¹²が置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、置換もしくは無置換のアルキル基、またはシアノ基である。本発明の一態様では、R¹¹¹～R¹¹⁴は、各々独立に水素原子または重水素原子である。

R¹¹¹とR¹¹²、R¹¹²とR¹¹³、R¹¹³とR¹¹⁴、隣り合う2個のR¹¹⁵、R^BとR^Cは、互いに結合して環状構造を形成していてもよい。ここでいう環状構造については、上記のA¹¹とA¹²の説明欄におけるベンゼン環にさらに

縮合する環の記載を参照することができる。本発明の一態様では、 R^{111} と R^{112} 、 R^{112} と R^{113} 、 R^{113} と R^{114} の1組が互いに結合してベンゾフラン環（フラン環で縮合する）、ベンゾチオフェン環（チオフェン環で縮合する）またはインドール環（ピロール環で縮合する）を形成している。

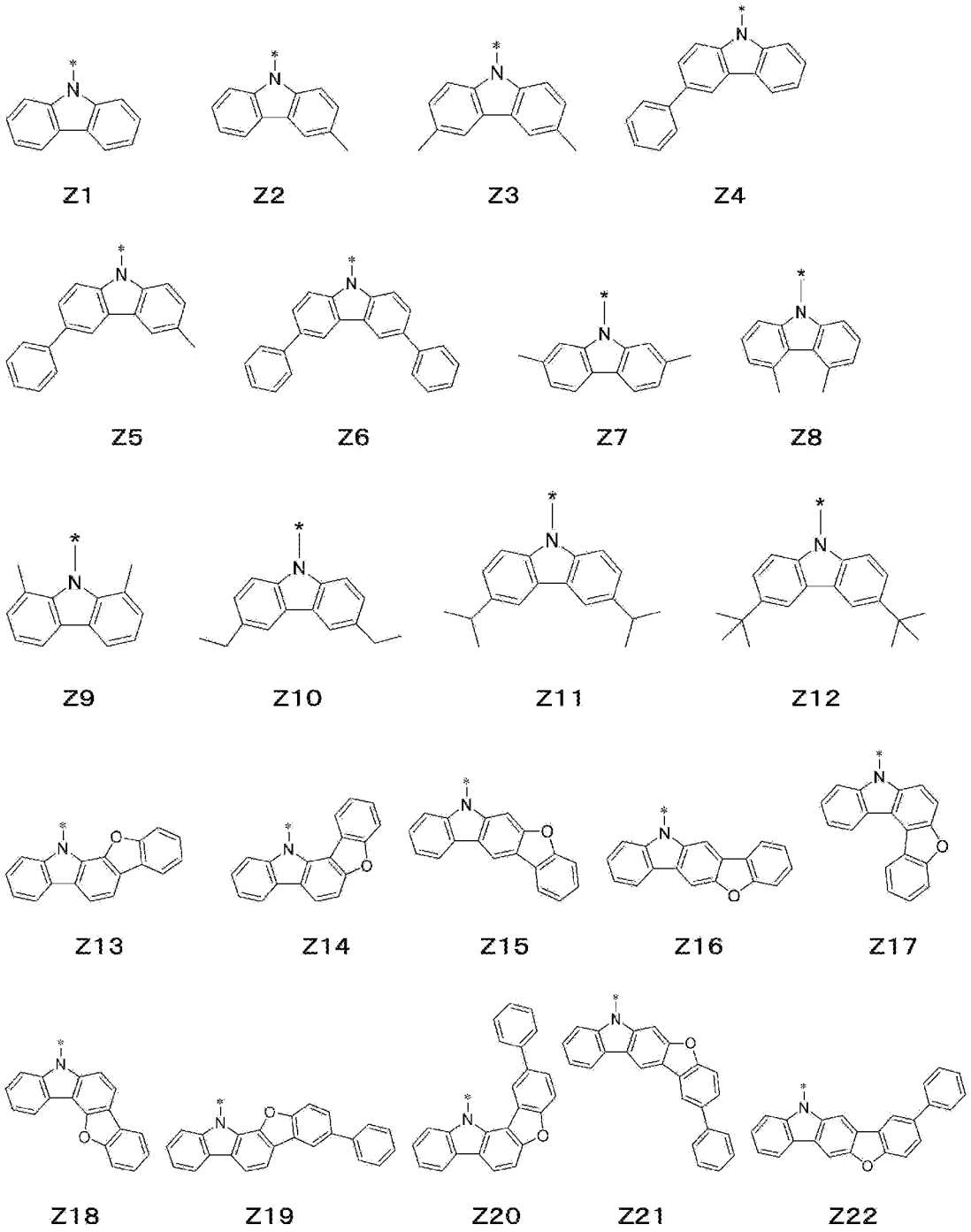
[0107] 本発明の一態様では、一般式（5）においてLに左から結合している基は、置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基である。例えば、重水素原子、アルキル基、アリール基、またはこれらを組み合わせた基で3位か6位の少なくとも一方（好ましくは両方）が置換されているカルバゾール-9-イル基である。また、無置換のカルバゾール-9-イル基であってもよい。本発明の一態様では、一般式（5）においてLに左から結合している基は、置換もしくは無置換のベンゾフロ[2, 3-a]カルバゾール-12-イル基、置換もしくは無置換のベンゾフロ[3, 2-a]カルバゾール-12-イル基、置換もしくは無置換のベンゾフロ[2, 3-b]カルバゾール-7-イル基、置換もしくは無置換のベンゾフロ[3, 2-b]カルバゾール-11-イル基、置換もしくは無置換のベンゾフロ[2, 3-c]カルバゾール-8-イル基、置換もしくは無置換のベンゾフロ[3, 2-c]カルバゾール-5-イル基である。本発明の一態様では、一般式（5）においてLに左から結合している基は、置換もしくは無置換のベンゾチエノ[2, 3-a]カルバゾール-12-イル基、置換もしくは無置換のベンゾチエノ[3, 2-a]カルバゾール-12-イル基、置換もしくは無置換のベンゾチエノ[2, 3-b]カルバゾール-7-イル基、置換もしくは無置換のベンゾチエノ[3, 2-b]カルバゾール-11-イル基、置換もしくは無置換のベンゾチエノ[2, 3-c]カルバゾール-8-イル基、置換もしくは無置換のベンゾチエノ[3, 2-c]カルバゾール-5-イル基である。本発明の一態様では、一般式（5）においてLに左から結合している基は、置換もしくは無置換の11-フェニルインドロ[2, 3-a]カルバゾール-12-イル基、置換もしくは無置換の5-フェニルインドロ[3, 2-a]カルバゾール-12-イル基、置換もしくは無置換の5-フェニルインドロ[2

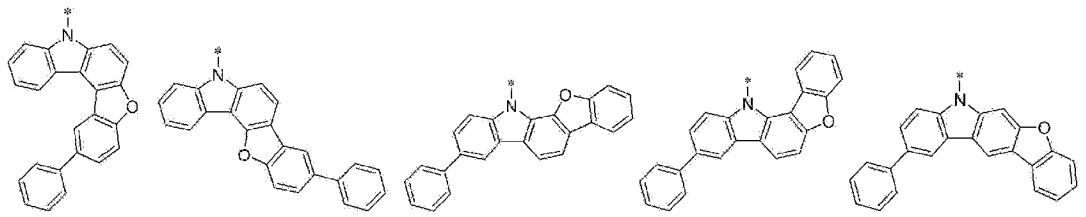
、 3-b] カルバゾール-7-イル基、置換もしくは無置換の5-フェニルインドロ [3, 2-b] カルバゾール-11-イル基、置換もしくは無置換の5-フェニルインドロ [2, 3-c] カルバゾール-8-イル基、置換もしくは無置換の12-フェニルインドロ [3, 2-a] カルバゾール-5-イル基である。

本発明の一態様では、一般式(5)においてLに右から結合している基についても、上記のLに左から結合している基として例示した基を採用することができる。ただし、無置換のカルバゾール-9-イル基であることはない。

[0108] 以下において、一般式(5)においてLの左から結合している基として採りうる基の具体例を挙げる。ただし、本発明で採用することができる基は、これらの具体例によって限定的に解釈されることはない。なお、以下の具体例において、メチル基は表示を省略している。このため、例えばZ₂やZ₃はメチル基で置換されている。*はLへの結合位置を示す。

[化42]





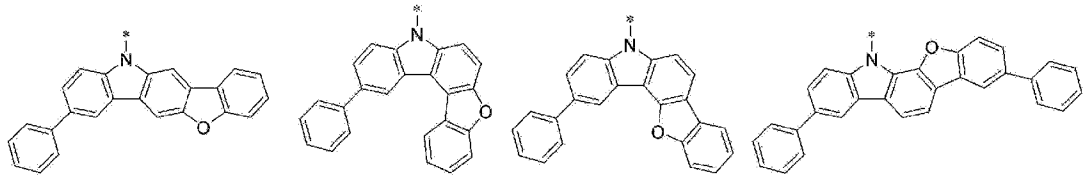
Z23

Z24

Z25

Z26

Z27

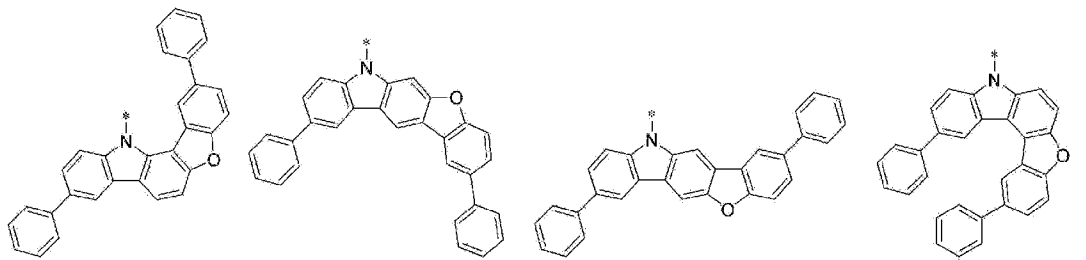


Z28

Z29

Z30

Z31

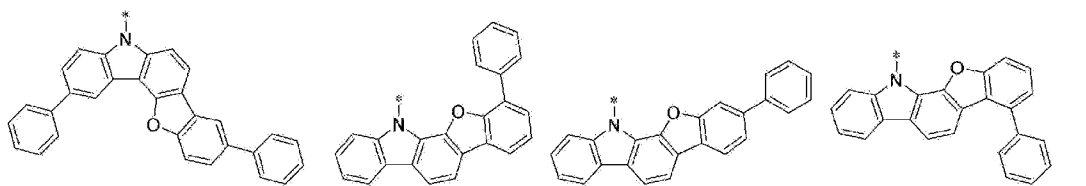


Z32

Z33

Z34

Z35

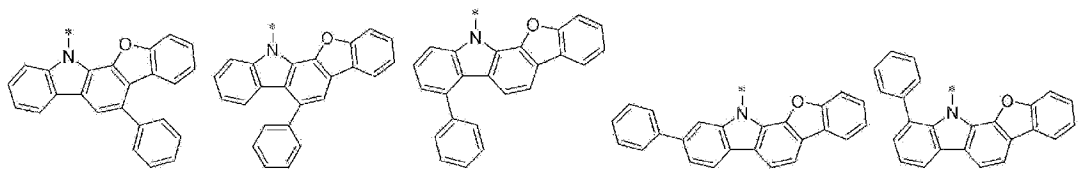


Z36

Z37

Z38

Z39



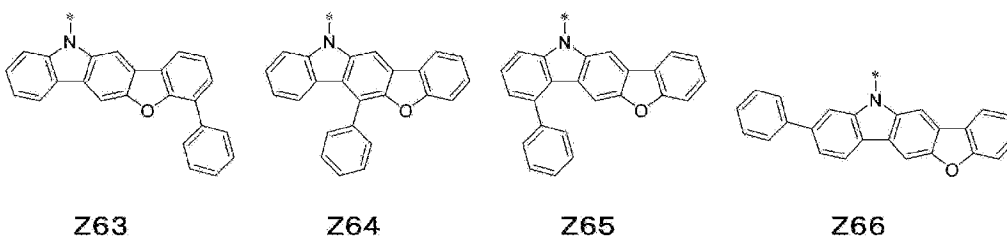
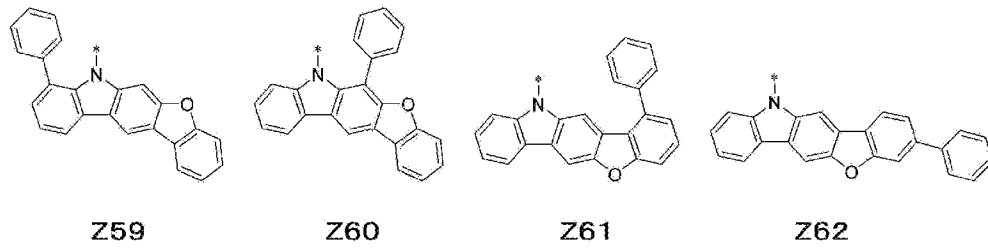
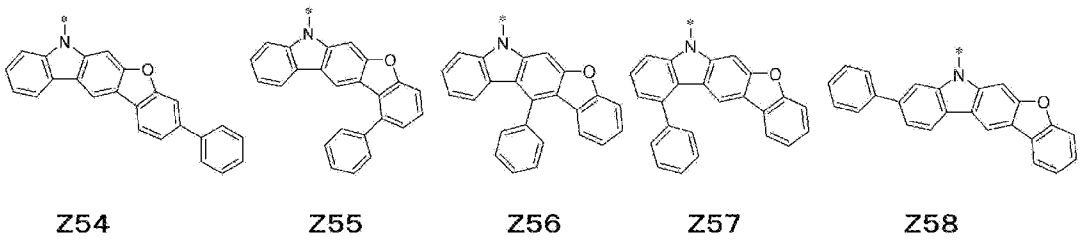
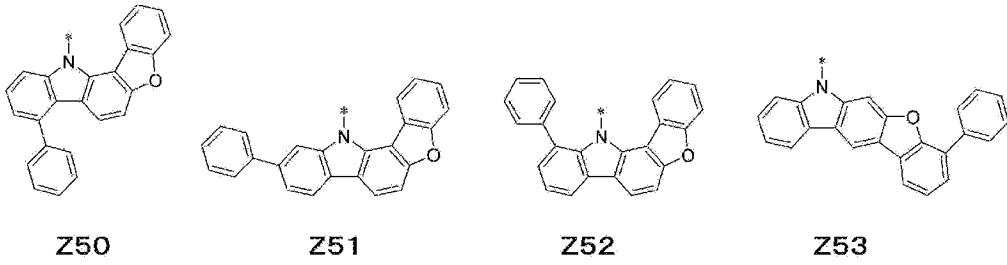
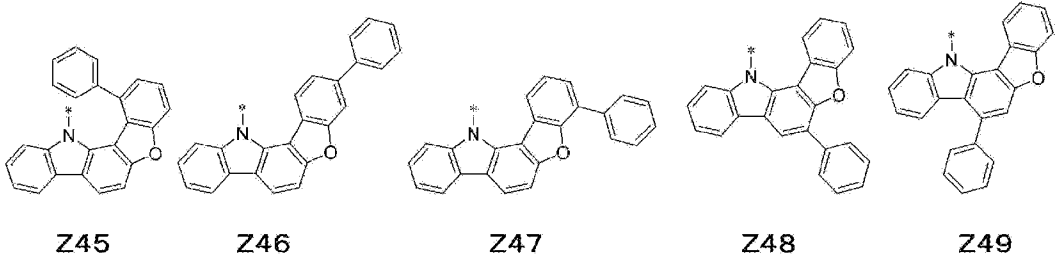
Z40

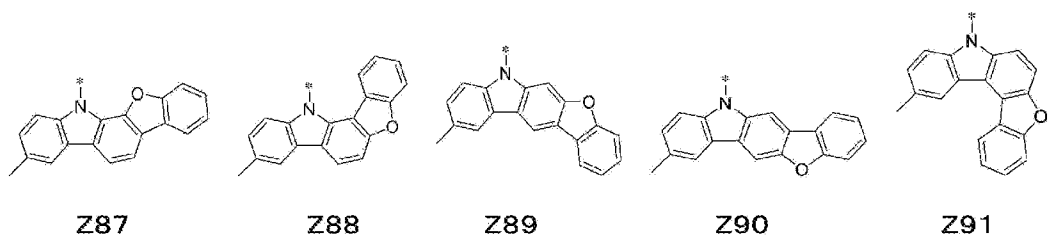
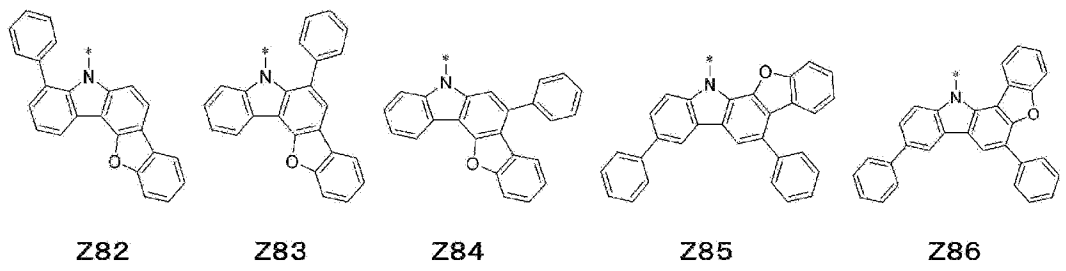
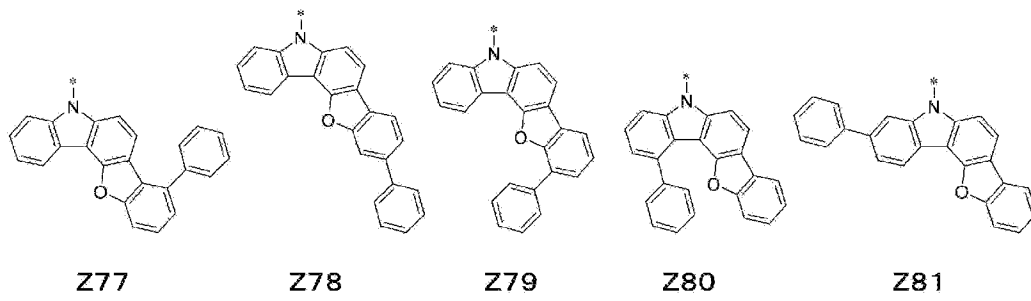
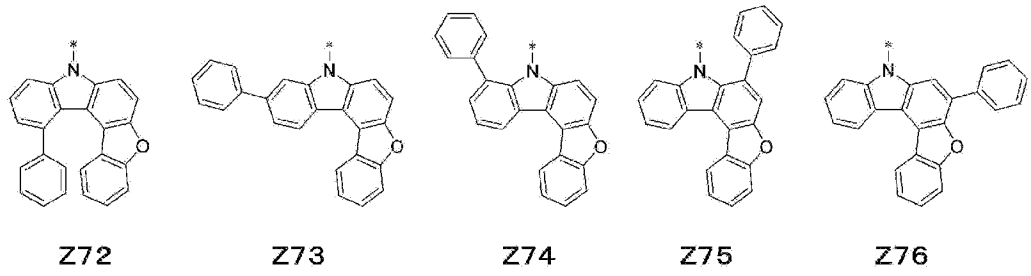
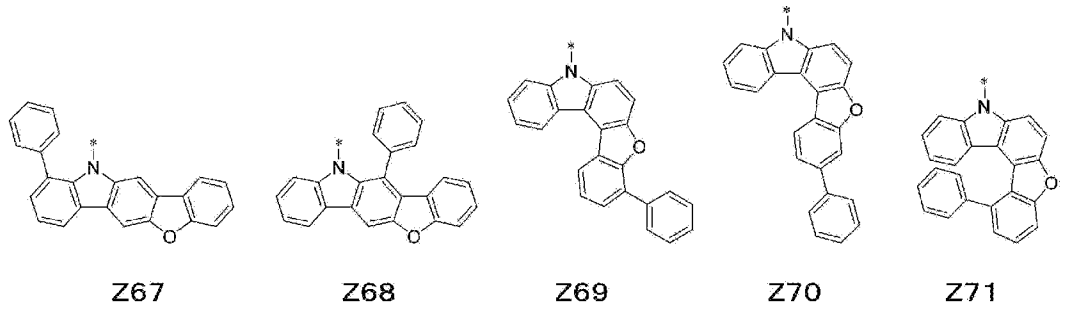
Z41

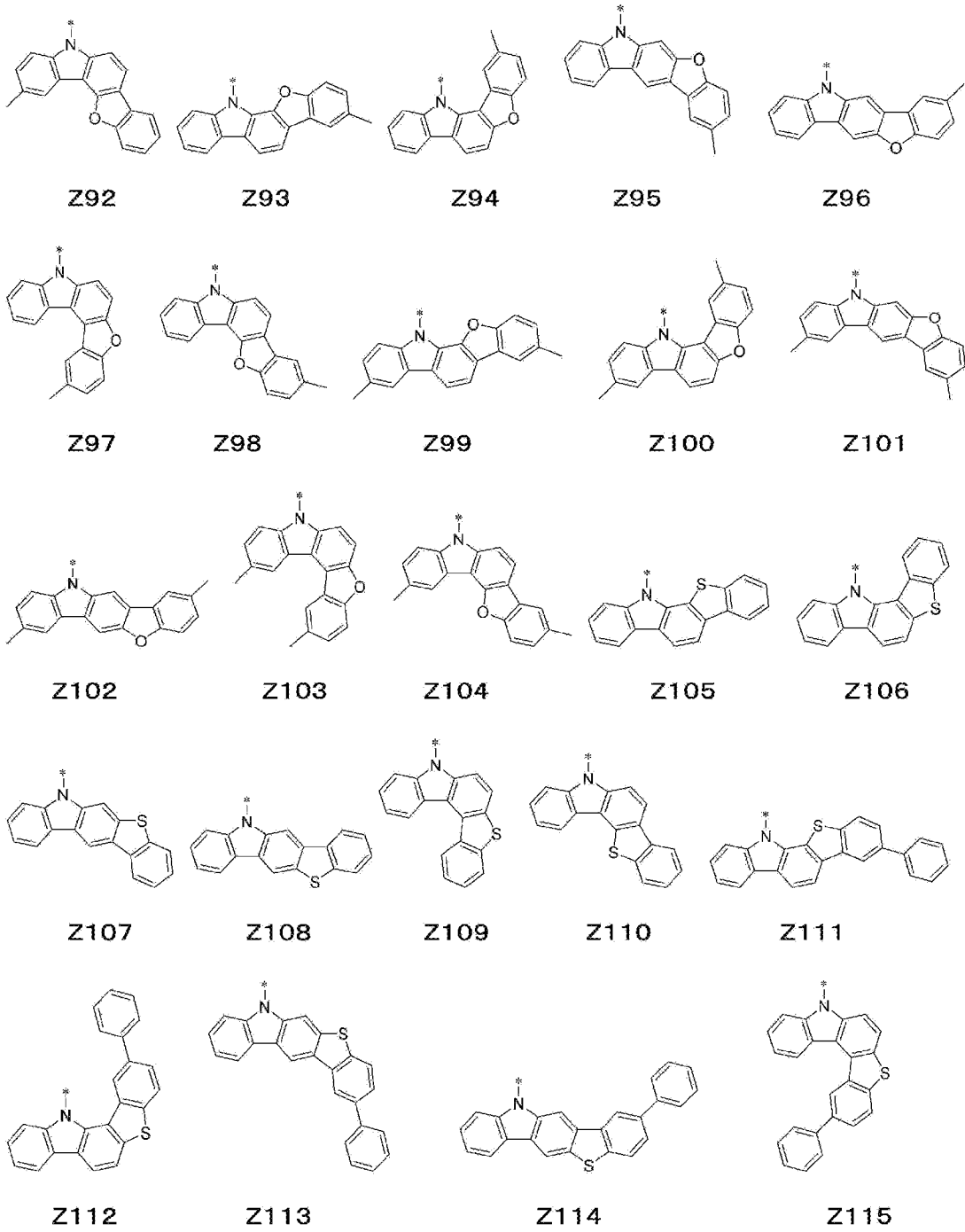
Z42

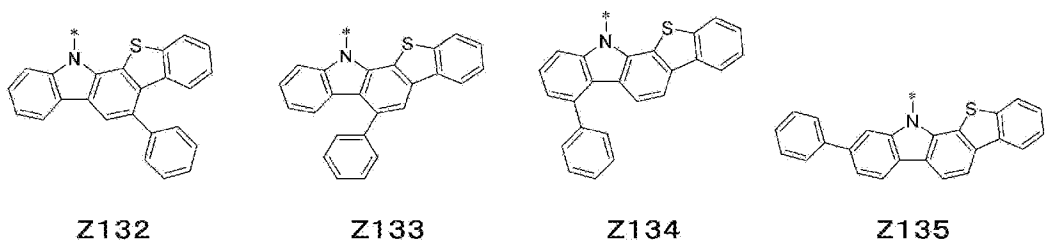
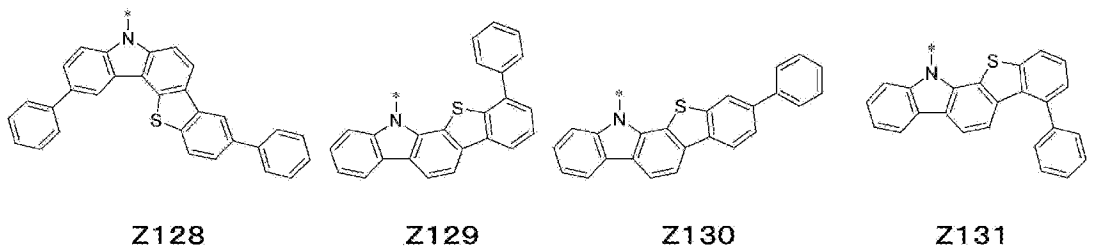
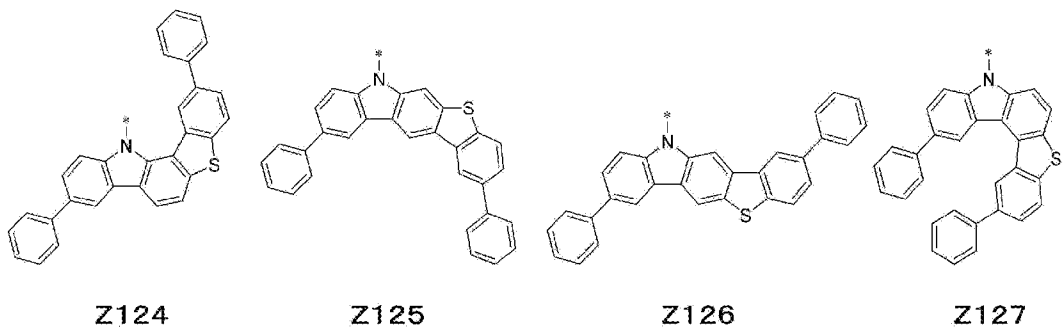
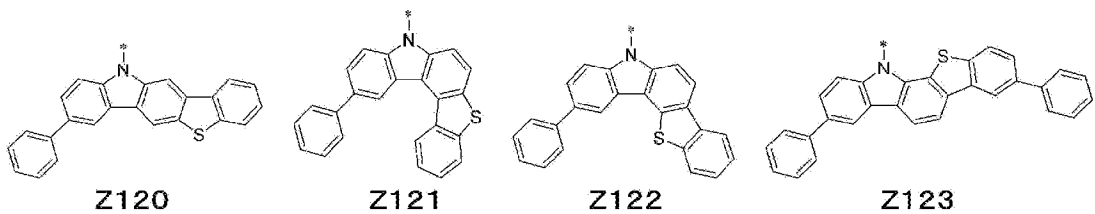
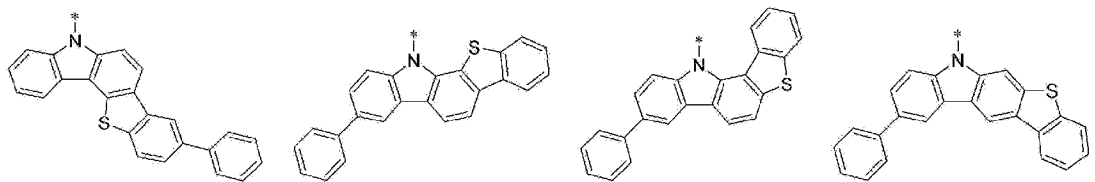
Z43

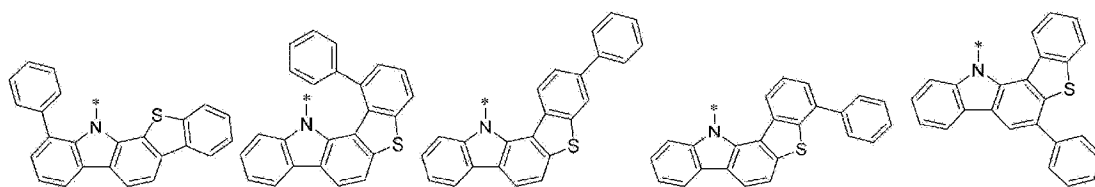
Z44











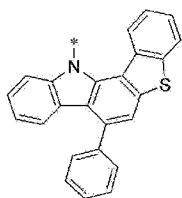
Z136

Z137

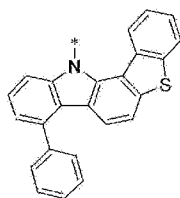
Z138

Z139

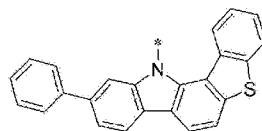
Z140



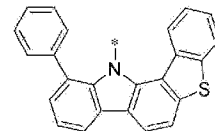
Z141



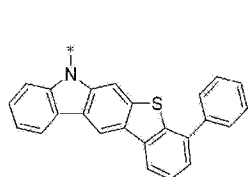
Z142



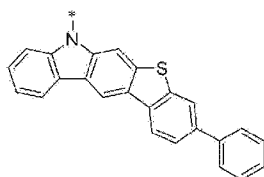
Z143



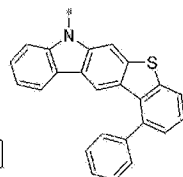
Z144



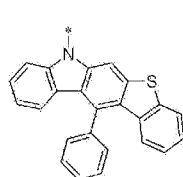
Z145



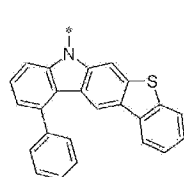
Z146



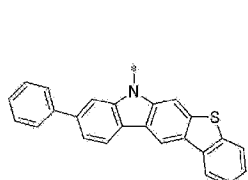
Z147



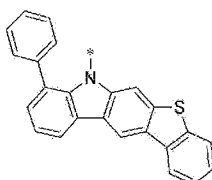
Z148



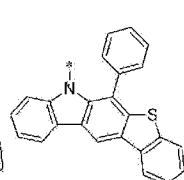
Z149



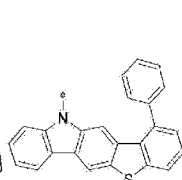
Z150



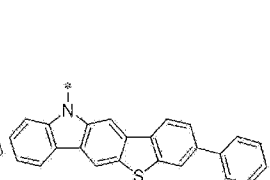
Z151



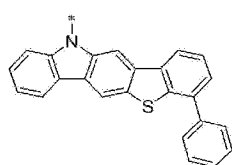
Z152



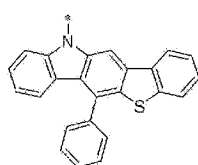
Z153



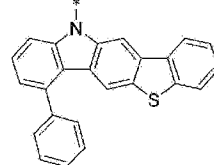
Z154



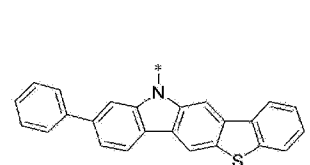
Z155



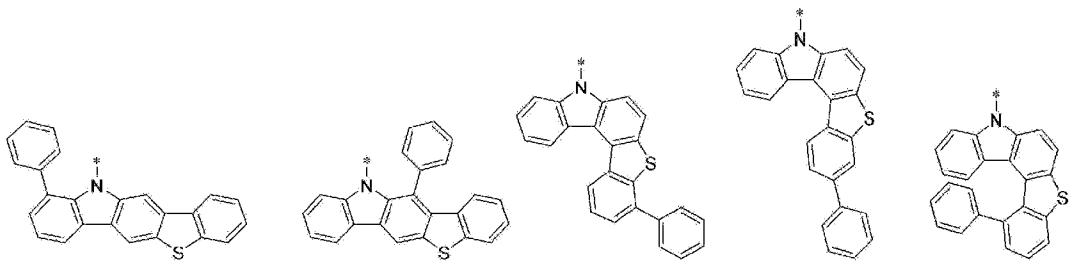
Z156



Z157



Z158



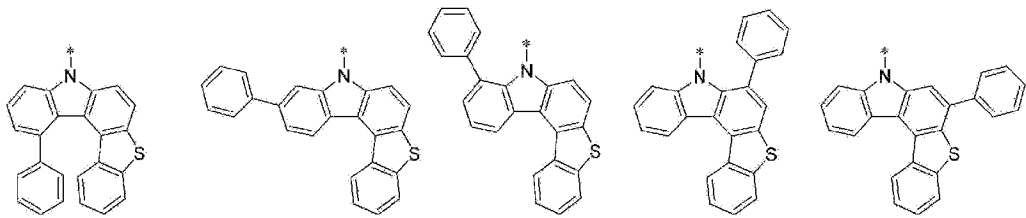
Z159

Z160

Z161

Z162

Z163



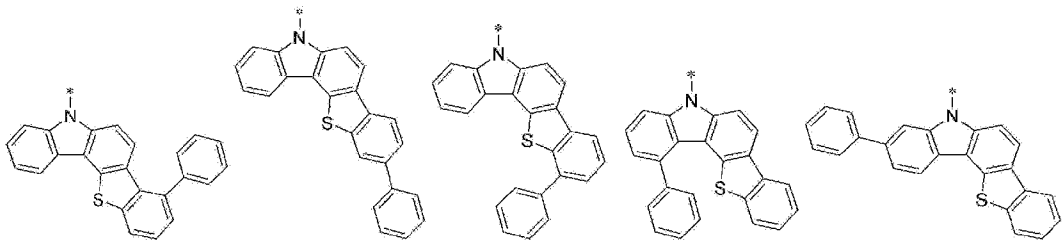
Z164

Z165

Z166

Z167

Z168



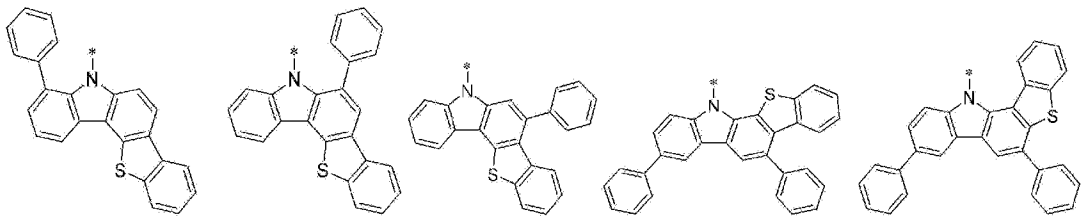
Z169

Z170

Z171

Z172

Z173



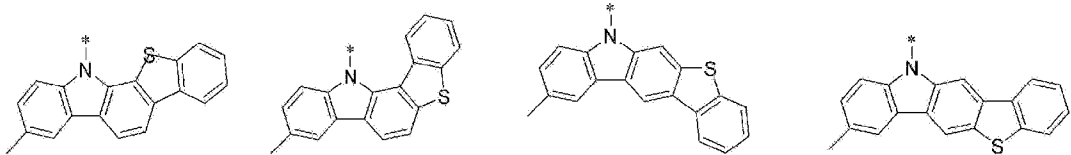
Z174

Z175

Z176

Z177

Z178

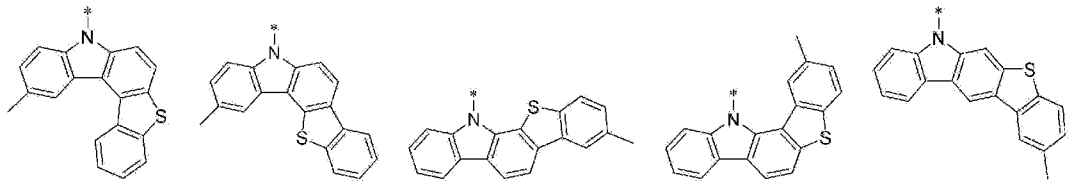


Z179

Z180

Z181

Z182



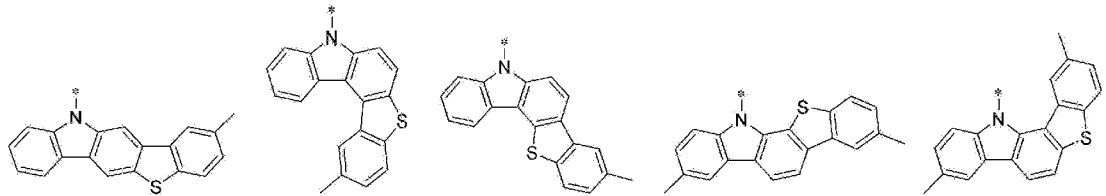
Z183

Z184

Z185

Z186

Z187



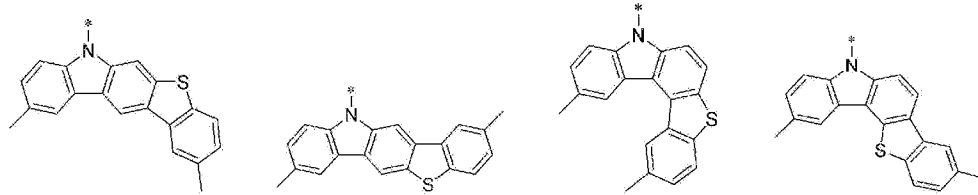
Z188

Z189

Z190

Z191

Z192



Z193

Z194

Z195

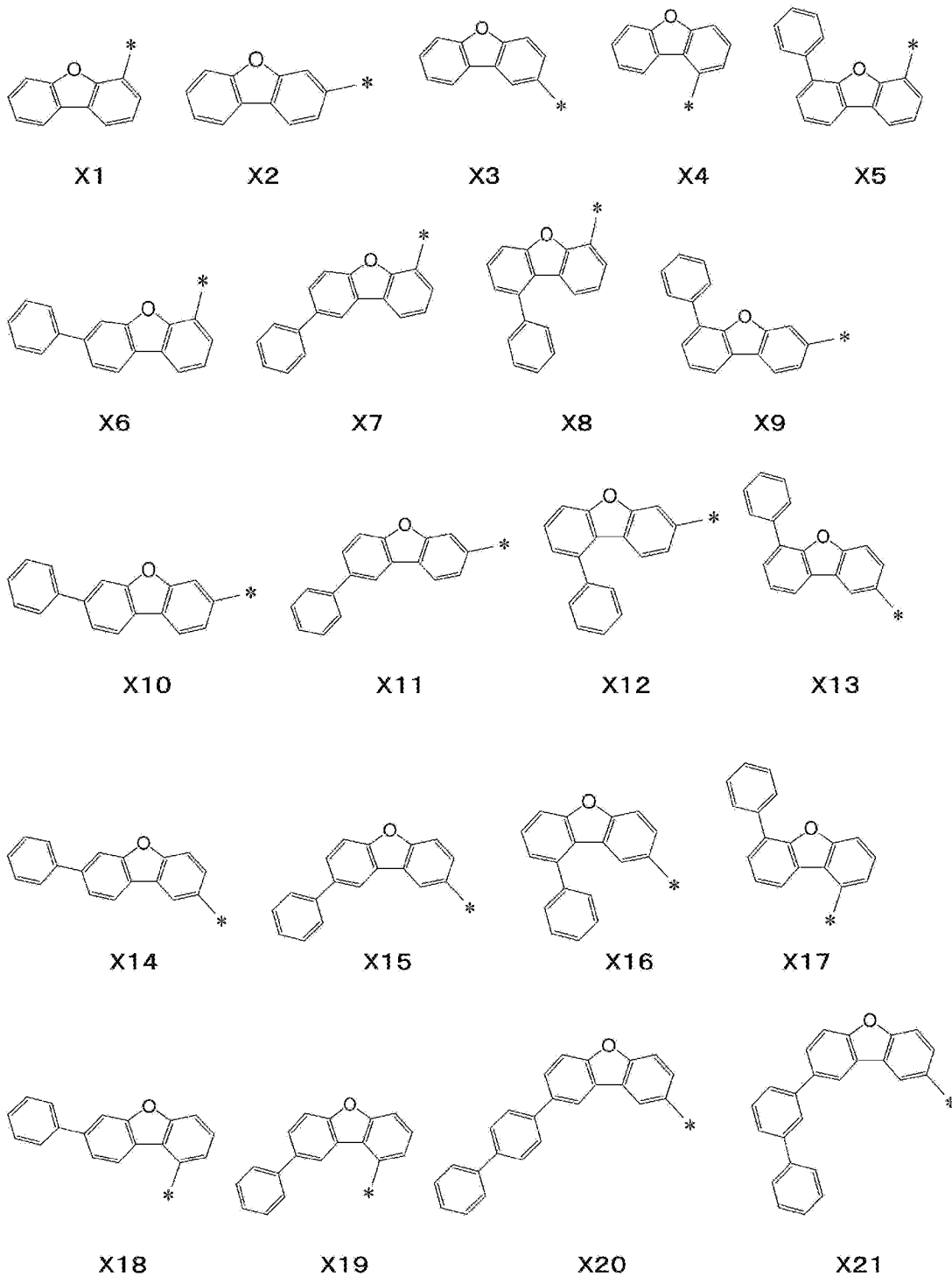
Z196

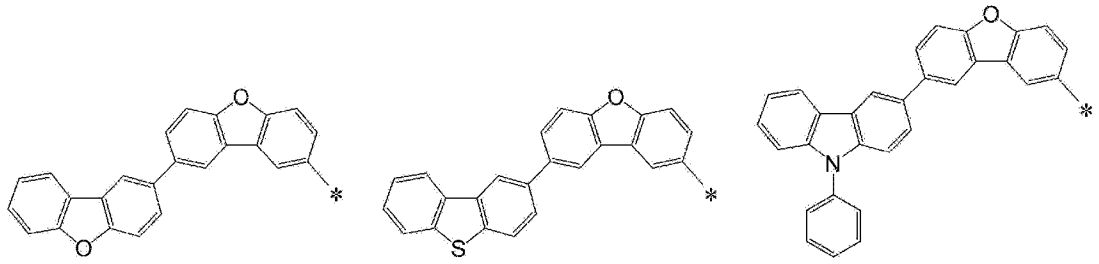
[0109] 上記の具体例の他に、Z 2、Z 3、Z 5、Z 7～Z 12、Z 87～Z 104 およびZ 179～Z 196のアルキル基のすべての水素原子を重水素原子に置換した基を、それぞれZ 2 (m)、Z 3 (m)、Z 5 (m)、Z 7 (m)～Z 12 (m)、Z 87 (m)～Z 104 (m)、Z 179 (m)～Z 196 (m)としてここに例示する。また、Z 4～Z 6、Z 19～Z 86およびZ 111～Z 178のフェニル基(C₆H₅)を、重水素化したC₆D₅で置換した基を、それぞれZ 4 (p)～Z 6 (p)、Z 19 (p)～Z 86 (p)、Z 111 (p)～Z 178 (p)としてここに例示する。さらに、Z 1～Z 196のすべての水素原子を重水素化した基を、それぞれZ 1 (D)～Z 196 (D)としてここに例示する。

[0110] 一般式(5)においてLの右から結合している基として採りうる基の具体例として、上記のZ 2～Z 196とこれらの重水素原子置換体の他に、以下に示す具体例も挙げる事ができる。ただし、本発明で採用することができる基は、これらの具体例によって限定的に解釈されることはない。なお、以

下の具体例においても、メチル基は表示を省略している。*はLへの結合位置を示す。

[化43]

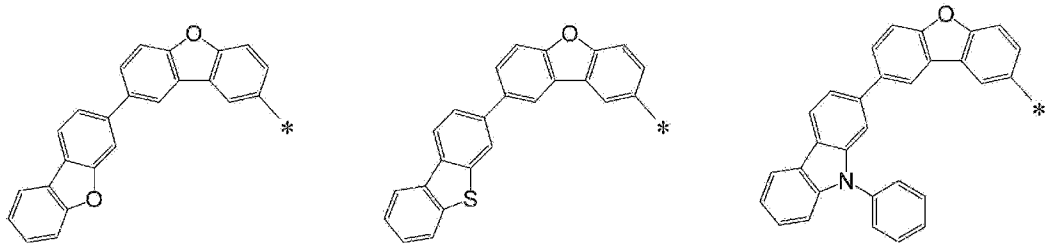




X22

X23

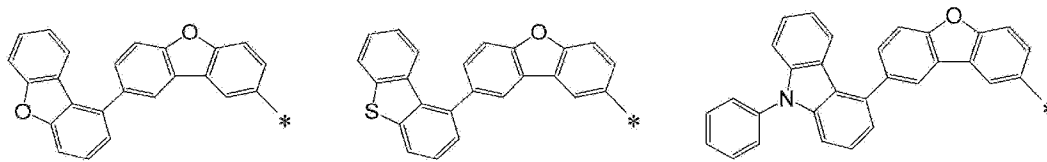
X24



X25

X26

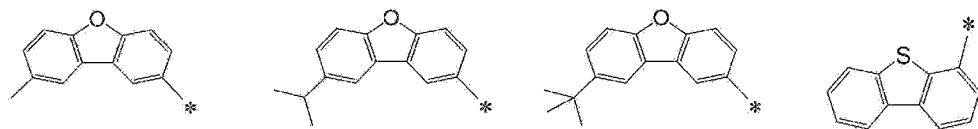
X27



X28

X29

X30

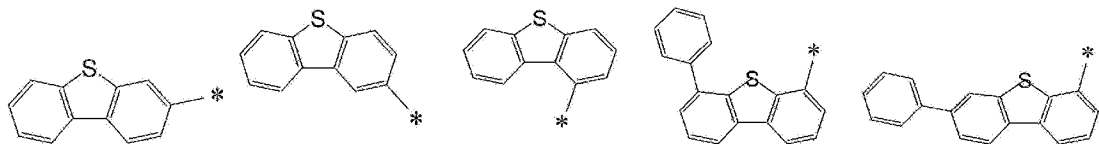


X31

X32

X33

X34



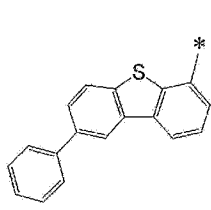
X35

X36

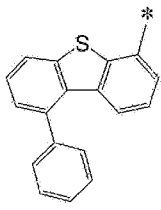
X37

X38

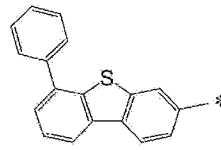
X39



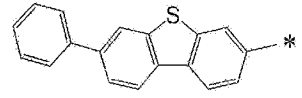
X40



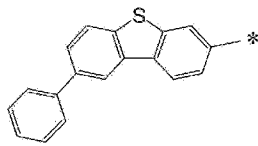
X41



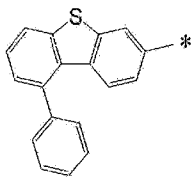
X42



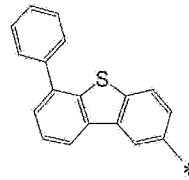
X43



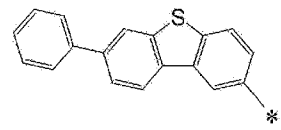
X44



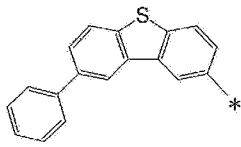
X45



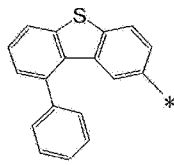
X46



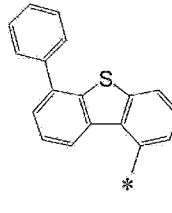
X47



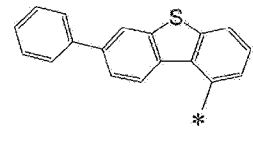
X48



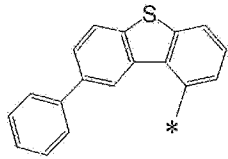
X49



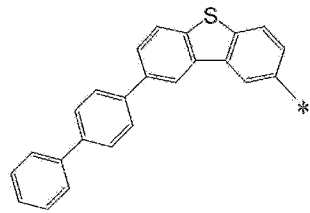
X50



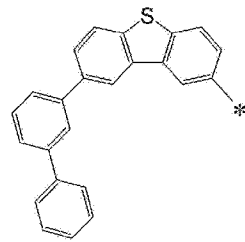
X51



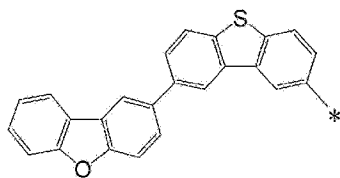
X52



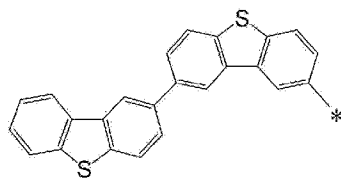
X53



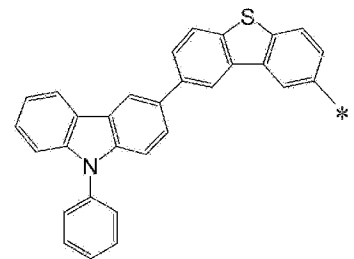
X54



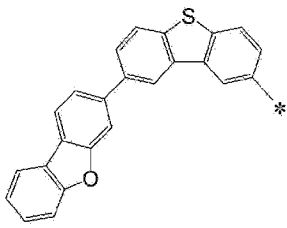
X55



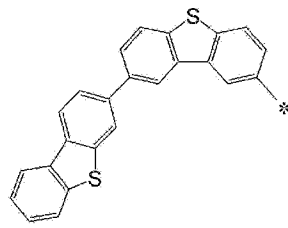
X56



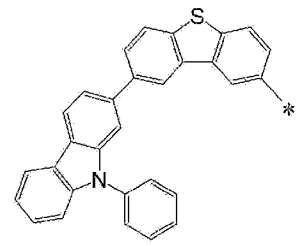
X57



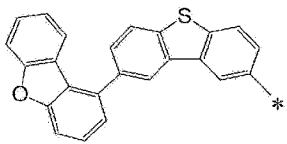
X58



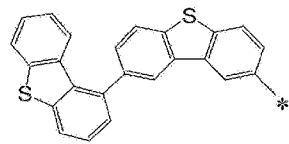
X59



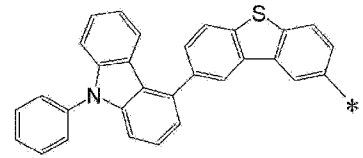
X60



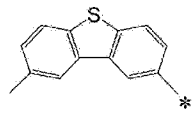
X61



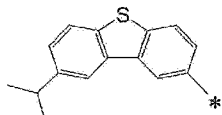
X62



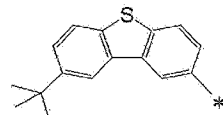
X63



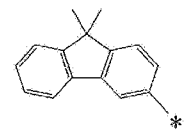
X64



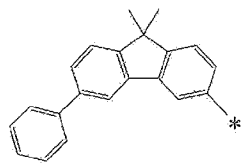
X65



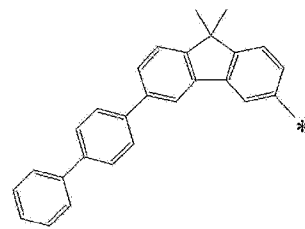
X66



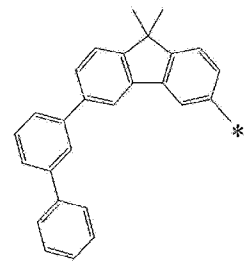
X67



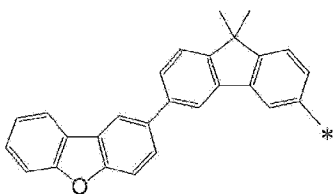
X68



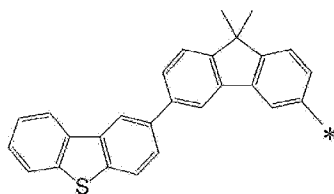
X69



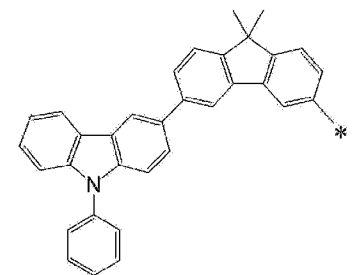
X70



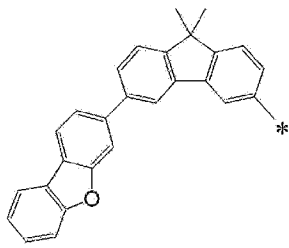
X71



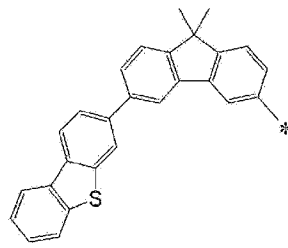
X72



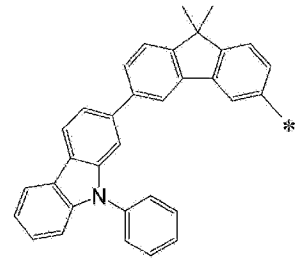
X73



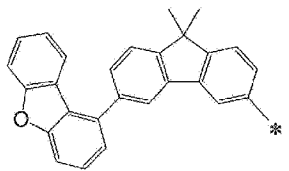
X74



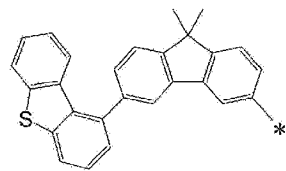
X75



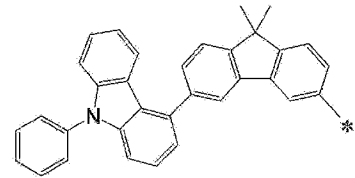
X76



X77



X78



X79

[0111] 上記の具体例の他に、X31～X33、X64～X79のメチル基(CH_3)を、重水素化した CD_3 で置換した基を、それぞれX31(m)～X33(m)、X64(m)～X79(m)としてここに例示する。また、X5～X21、X38～X54、X68～X70のフェニル基(C_6H_5)を、重水素化した C_6D_5 で置換した基を、それぞれX5(p)～X21(p)、X38(p)～X54(p)、X68(p)～X70(p)としてここに例示する。さらに、X1～X79のすべての水素原子を重水素化した基を、それぞれX1(D)～X79(D)としてここに例示する。

[0112] 一般式(5)のnは3または4の整数を表す。X¹¹がO、SまたはC(R^B)(R^C)であるとき、Lは(R¹¹⁵)_nが結合しているベンゼン環に結合するためnは3である。X¹¹がN(R^A)であって、Lが(R¹¹⁵)_nが結合しているベンゼン環に結合している場合はnは3であり、また、X¹¹がN(R^A)であって、LがX¹¹が表すNに結合している場合はnは4である。n個のR¹¹⁵は互いに同一であっても異なっても構わない。

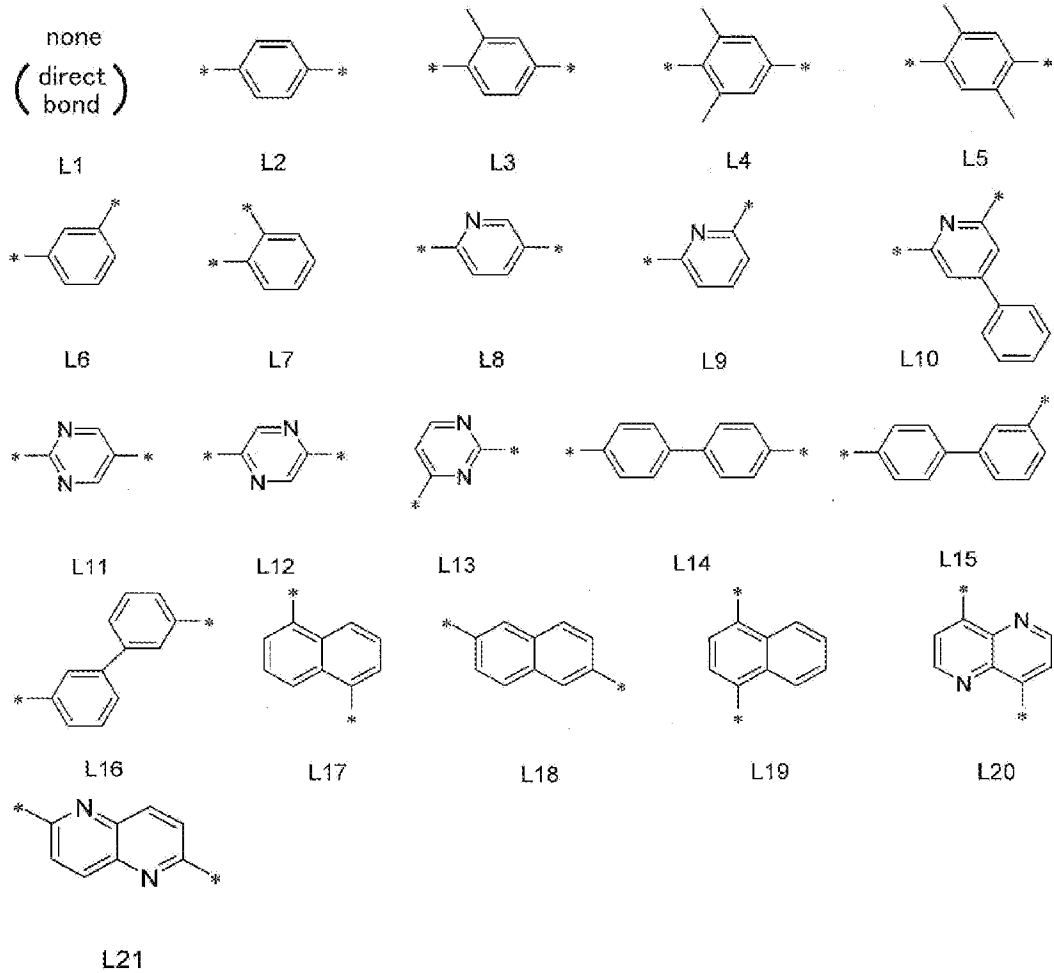
[0113] 一般式(5)のLは単結合、置換もしくは無置換のアリーレン基、置換もしくは無置換のヘテロアリーレン基、またはこれらの2個以上が結合した連結基を表す。アリーレン基のアリール構造とヘテロアリーレン基のヘテロア

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

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

[0114]

[化44]



[0115] 本発明の一態様では、一般式(5)のLの左から結合する基はZ1~Z196およびその重水素化体の中から選択し、Lの右から結合する基はX1~X79およびその重水素化体の中から選択する(態様1)。本発明の一態様では、Lの左から結合する基はZ1~Z12およびその重水素化体の中から選択し、Lの右から結合する基はX1~X79およびその重水素化体の中から選択する(態様2)。本発明の一態様では、Lの左から結合する基はZ13~Z196およびその重水素化体の中から選択し、Lの右から結合する基はX1~X79およびその重水素化体の中から選択する(態様3)。本発明の一態様では、Lの左から結合する基はZ1~Z196およびその重水素化体の中から選択し、Lの右から結合する基はX1~X66およびその重水素化体の中から選択する(態様4)。本発明の一態様では、Lの左から結合す

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

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

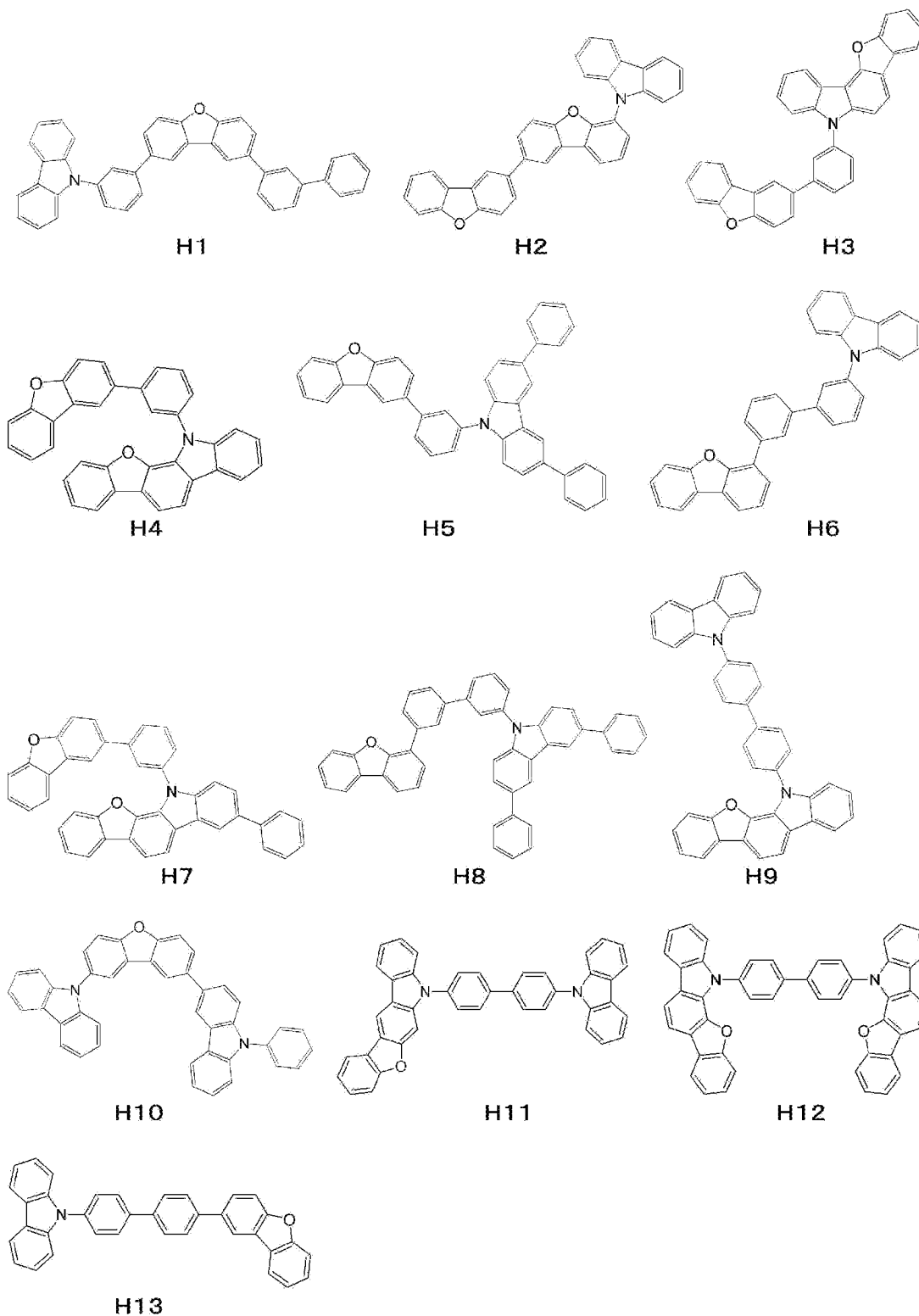
本発明の一態様では、態様1でLはL 6である。本発明の一態様では、態様2でLはL 6である。本発明の一態様では、態様3でLはL 6である。本発明の一態様では、態様4でLはL 6である。本発明の一態様では、態様5でLはL 6である。本発明の一態様では、態様6でLはL 6である。本発明の一態様では、態様7でLはL 6である。

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

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

[0116] 以下において、一般式（5）で表される化合物の具体例を示す。ただし、本発明で採用することができる一般式（5）で表される化合物は、以下の具体例によって限定的に解釈されることはない。

[0117] [化45]



- [0118] 上記の具体例の他に、H 1 ~ H 1 3 に存在する置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基に存在するすべての水素原子を重水素原子で置換した化合物を、それぞれH 1 (d) ~ H 1 3 (d) としてここに例示する。また、H 1 ~ H 1 3 に存在するすべての水素原子を重水素原子で置換した化合物を、それぞれH 1 (D) ~ H 1 3 (D) としてここに例示する。
- [0119] 一般式 (5) で表される化合物の分子量は、例えば一般式 (5) で表される化合物を含む有機層を蒸着法により製膜して利用することを意図する場合には、1500以下であることが好ましく、1200以下であることがより好ましく、1000以下であることがさらに好ましく、800以下であることがさらに好ましく、例えば600以下であってもよい。分子量の下限値は、一般式 (5) で表される化合物群の最小化合物の分子量である。
- [0120] 一般式 (5) で表される化合物は、双極子モーメントが小さい方が膜形成したときの配向性が高くなるため好ましい。双極子モーメントは、2.3より小さいことが好ましく、2.0より小さいことがより好ましく、1.7より小さいことがさらに好ましく、1.4より小さいことがさらに好ましい。
- [0121] 一般式 (5) で表される化合物として、炭素原子、水素原子、重水素原子、窒素原子、酸素原子および硫黄原子からなる群より選択される原子からなる化合物を選択することができる。例えば、一般式 (5) で表される化合物として、炭素原子、水素原子、重水素原子、窒素原子および酸素原子からなる群より選択される原子からなる化合物を選択することができる。例えば、一般式 (5) で表される化合物として、炭素原子、水素原子、重水素原子、窒素原子および硫黄原子からなる群より選択される原子からなる化合物を選択することができる。例えば、一般式 (5) で表される化合物として、炭素原子、水素原子、重水素原子および窒素原子からなる群より選択される原子からなる化合物を選択することができる。
- [0122] 以下において、有機エレクトロルミネッセンス素子の各部材および発光層以外の各層について説明する。

[0123] 基材：

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

[0124] 陽極：

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

[0125] 陰極：

いくつかの実施形態では、前記陰極は、低い仕事関数を有する金属（4 eV以下）（電子注入金属と称される）、合金、導電性化合物またはその組み合わせなどの電極材料で作製される。いくつかの実施形態では、前記電極材料は、ナトリウム、ナトリウム-カリウム合金、マグネシウム、リチウム、マグネシウム-銅混合物、マグネシウム-銀混合物、マグネシウム-アルミニウム混合物、マグネシウム-インジウム混合物、アルミニウム-酸化アルミニウム（ Al_2O_3 ）混合物、インジウム、リチウム-アルミニウム混合物および希土類元素から選択される。いくつかの実施形態では、電子注入金属と、電子注入金属より高い仕事関数を有する安定な金属である第2の金属との混合物が用いられる。いくつかの実施形態では、前記混合物は、マグネシウム-銀混合物、マグネシウム-アルミニウム混合物、マグネシウム-インジウム混合物、アルミニウム-酸化アルミニウム（ Al_2O_3 ）混合物、リチウム-アルミニウム混合物およびアルミニウムから選択される。いくつかの実施形態では、前記混合物は電子注入特性および酸化に対する耐性を向上させる。いくつかの実施形態では、陰極は、蒸着またはスパッタリングにより電極材料を薄膜として形成させることによって製造される。いくつかの実施形態では、前記陰極は単位面積当たり数百オーム以下のシート抵抗を有する。いくつかの実施形態では、前記陰極の厚は10 nm～5 μmである。いくつかの実施形態では、前記陰極の厚は50～200 nmである。いくつかの実施形態では、放射光を透過させるため、有機エレクトロルミネッセンス素子の陽極および陰極のいずれか1つは透明または半透明である。いくつかの実施形態では、透明または半透明のエレクトロルミネッセンス素子は光放射輝度を向上させる。

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

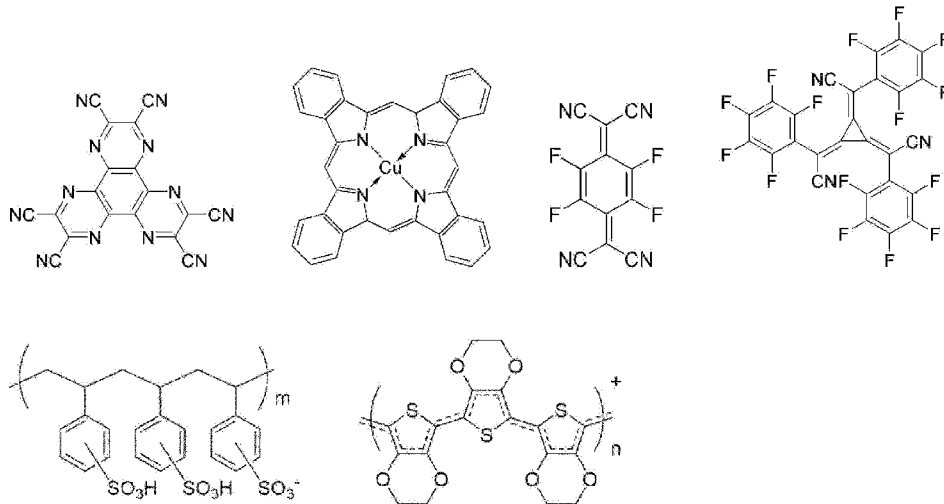
[0126] 注入層：

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

以下に、正孔注入材料として用いることができる好ましい化合物例を挙げる。

[0127] [化46]

$M \circ O_3,$



[0128] 次に、電子注入材料として用いることができる好ましい化合物例を挙げる

。

[化47]



[0129] 障壁層：

障壁層は、発光層に存在する電荷（電子または正孔）および／または励起子が、発光層の外側に拡散することを阻止できる層である。いくつかの実施形態では、電子障壁層は、発光層と正孔輸送層との間に存在し、電子が発光層を通過して正孔輸送層へ至ることを阻止する。いくつかの実施形態では、

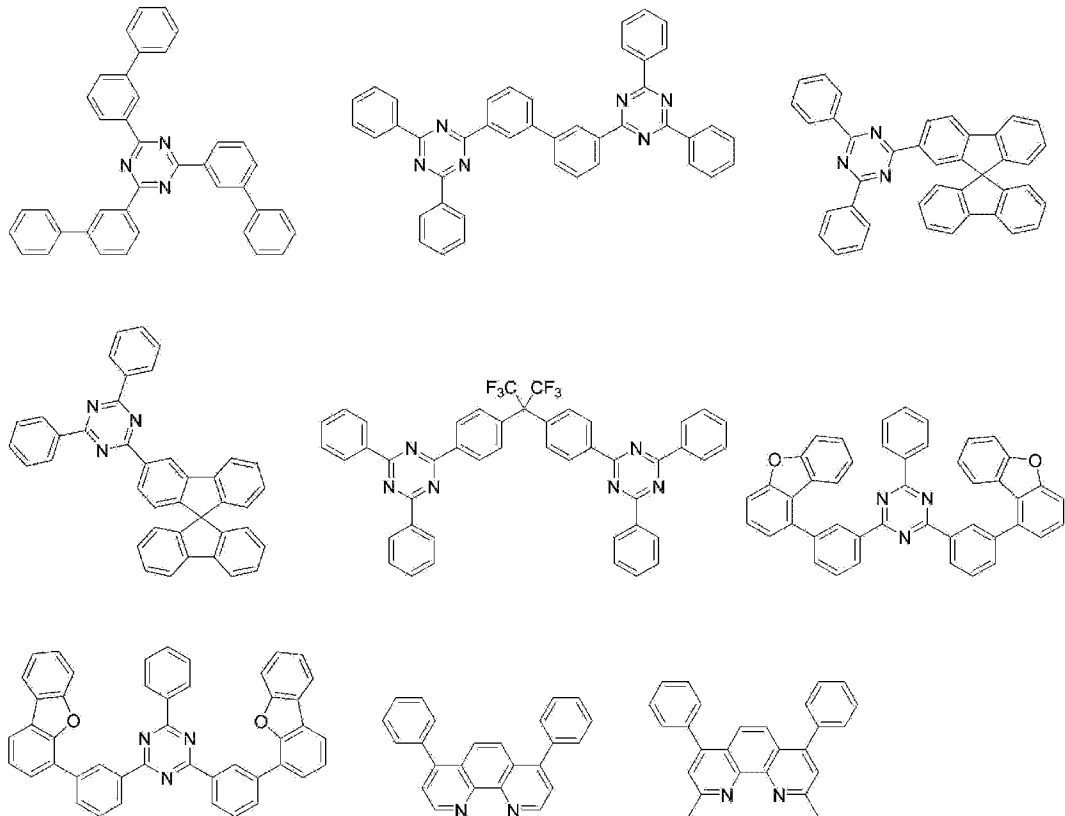
正孔障壁層は、発光層と電子輸送層との間に存在し、正孔が発光層を通過して電子輸送層へ至ることを阻止する。いくつかの実施形態では、障壁層は、励起子が発光層の外側に拡散することを阻止する。いくつかの実施形態では、電子障壁層および正孔障壁層は励起子障壁層を構成する。本明細書で用いる用語「電子障壁層」または「励起子障壁層」には、電子障壁層の、および励起子障壁層の機能の両方を有する層が含まれる。

[0130] 正孔障壁層：

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

以下に、正孔障壁層に用いることができる好ましい化合物例を挙げる。

[0131] [化48]



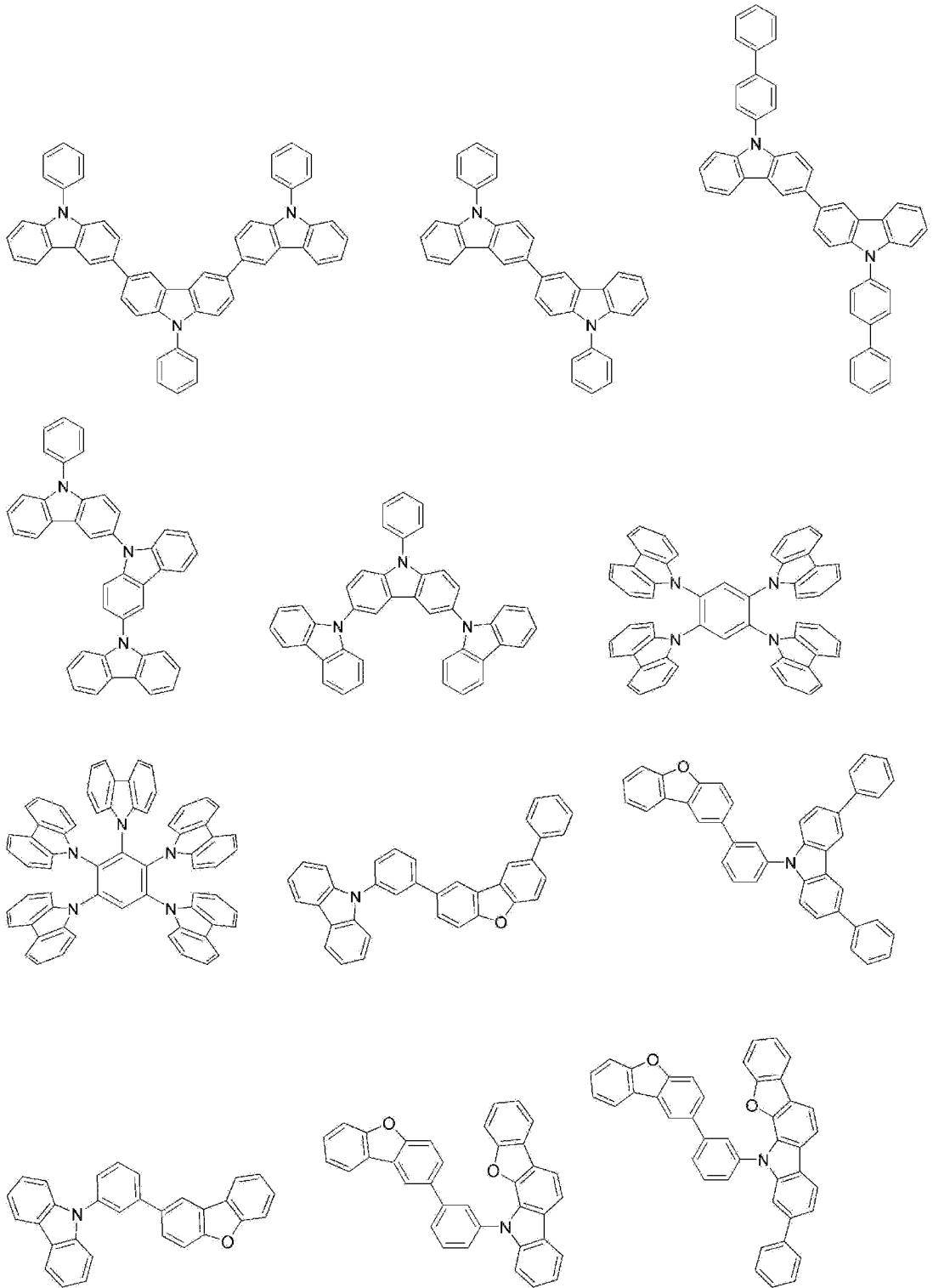
[0132] 電子障壁層：

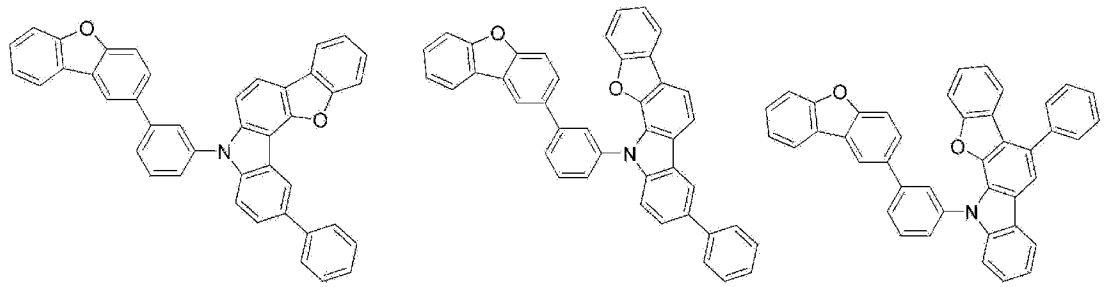
電子障壁層は、正孔を輸送する。いくつかの実施形態では、正孔の輸送の間、電子障壁層は電子が正孔輸送層に至ることを阻止する。いくつかの実施形態では、電子障壁層は、発光層における電子と正孔との再結合の確率を高める。電子障壁層に用いる材料は、正孔輸送層について前述したのと同じ材料であってもよい。

以下に電子障壁材料として用いることができる好ましい化合物の具体例を挙げる。

[0133]

[化49]





[0134] 励起子障壁層：

励起子障壁層は、発光層における正孔と電子との再結合を通じて生じた励起子が電荷輸送層まで拡散することを阻止する。いくつかの実施形態では、励起子障壁層は、発光層における励起子の有効な閉じ込め（confinement）を可能にする。いくつかの実施形態では、装置の光放射効率が向上する。いくつかの実施形態では、励起子障壁層は、発光層の陽極の側と陰極の側のいずれか一方の側だけに隣接するように存在してもよいし、1つの励起子障壁層が発光層の陽極の側に隣接するように存在するとともに別の励起子障壁層が発光層の陰極の側に隣接するように存在してもよい。いくつかの実施形態では、励起子障壁層が陽極側に存在するとき、当該層は、正孔輸送層と発光層との間に存在し、当該発光層に隣接してもよい。いくつかの実施形態では、励起子障壁層が陰極側に存在するとき、当該層は、発光層と陰極との間に存在し、当該発光層に隣接してもよい。いくつかの実施形態では、正孔注入層、電子障壁層または同様の層は、陽極と、陽極側の発光層に隣接する励起子障壁層との間に存在する。いくつかの実施形態では、正孔注入層、電子障壁層、正孔障壁層または同様の層は、陰極と、陰極側の発光層に隣接する励起子障壁層との間に存在する。いくつかの実施形態では、励起子障壁層は、励起一重項エネルギーと励起三重項エネルギーを含み、その少なくとも1つが、それぞれ、発光材料の励起一重項エネルギーと励起三重項エネルギーより高い。

[0135] 正孔輸送層：

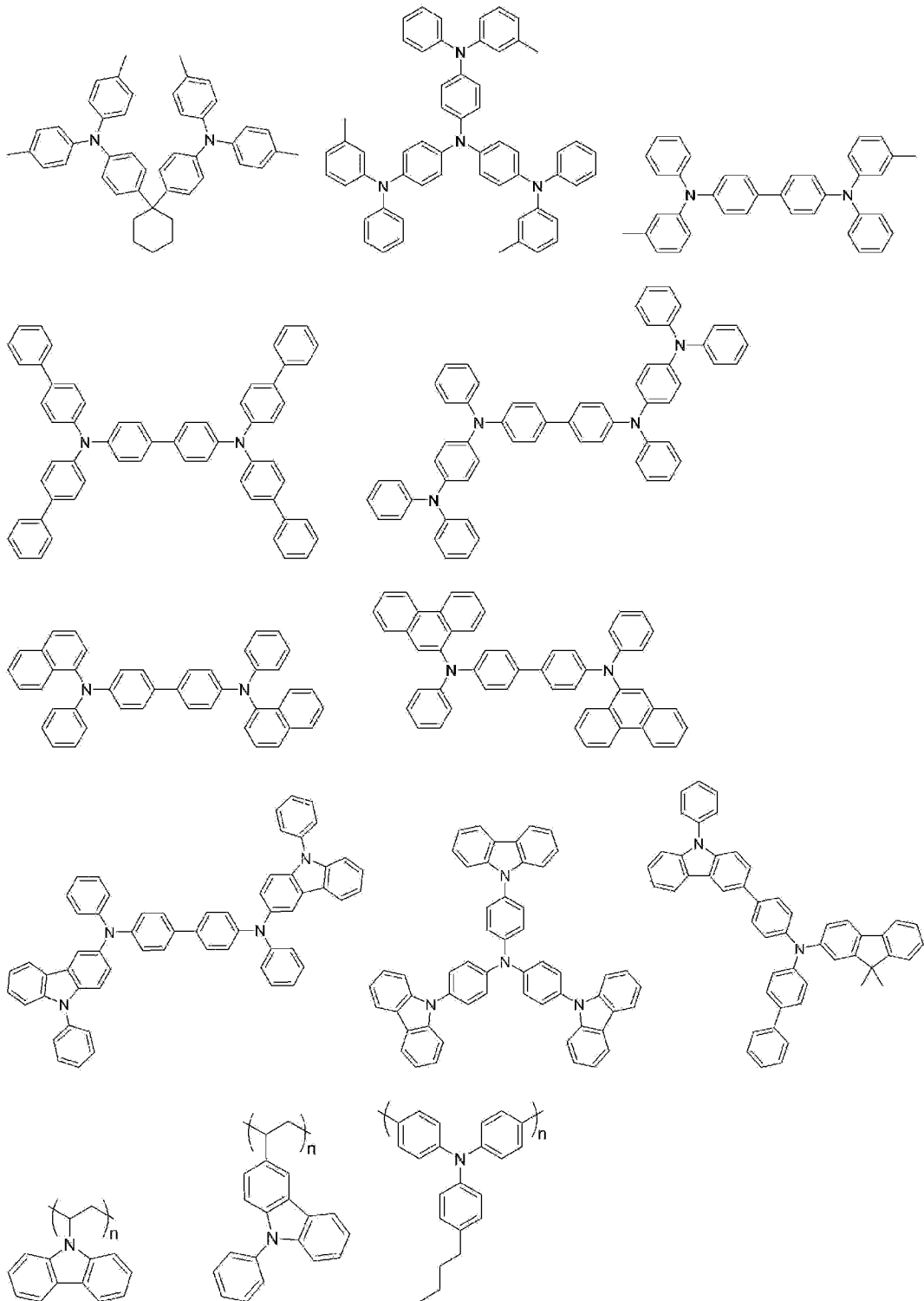
正孔輸送層は、正孔輸送材料を含む。いくつかの実施形態では、正孔輸送層は単層である。いくつかの実施形態では、正孔輸送層は複数の層を有する

。

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

[0136]

[化50]



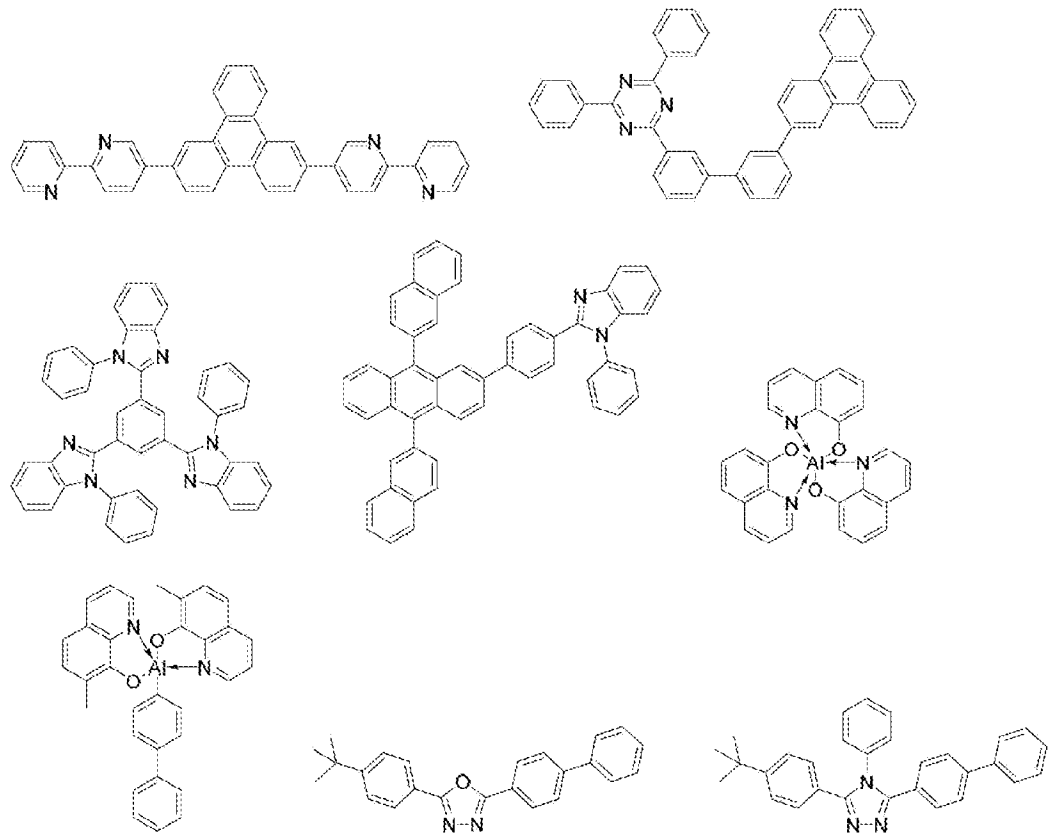
[0137] 電子輸送層：

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

。

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

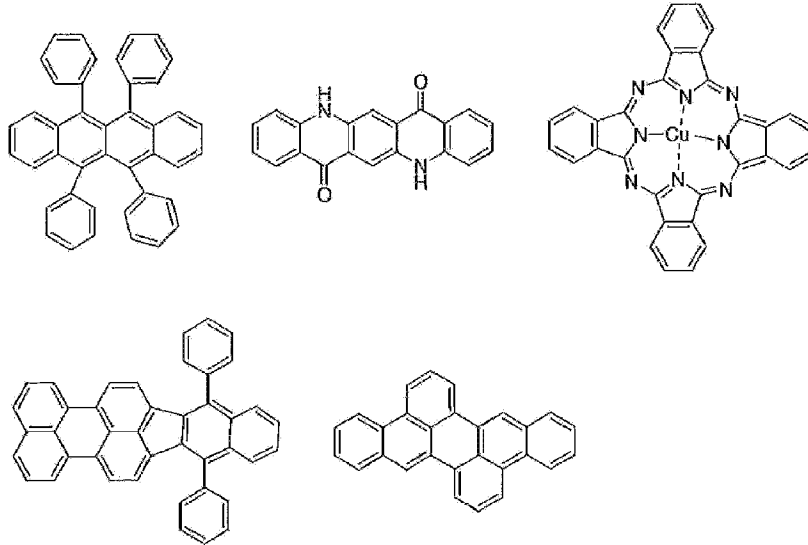
[0138] [化51]



[0139] さらに、各有機層に添加可能な材料として好ましい化合物例を挙げる。例

例えば、安定化材料として添加すること等が考えられる。

[0140] [化52]



[0141] 有機エレクトロルミネッセンス素子に用いることができる好ましい材料を具体的に例示したが、本発明において用いることができる材料は、以下の例示化合物によって限定的に解釈されることはない。また、特定の機能を有する材料として例示した化合物であっても、その他の機能を有する材料として転用することも可能である。

[0142] デバイス：

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

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

いくつかの実施形態では、本願明細書に記載の構成物は、OLEDまたは光電子デバイスなどの、様々な感光性または光活性化デバイスに組み込まれる。いくつかの実施形態では、前記構成物はデバイス内の電荷移動またはエネルギー移動の促進に、および／または正孔輸送材料として有用でありう

る。前記デバイスとしては、例えば有機発光ダイオード（O L E D）、有機集積回線（O I C）、有機電界効果トランジスタ（O - F E T）、有機薄膜トランジスタ（O - T F T）、有機発光トランジスタ（O - L E T）、有機太陽電池（O - S C）、有機光学検出装置、有機光受容体、有機磁場クエンチ（f i e l d - q u e n c h）装置（O - F Q D）、発光燃料電池（L E C）または有機レーザダイオード（O - レーザー）が挙げられる。

[0143] バルブまたはランプ：

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

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

いくつかの実施形態では、デバイスは、

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

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

回路基板用のハウジングと、

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

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

[0144] ディスプレイまたはスクリーン：

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

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

蒸着マスク用の好ましい材料はインバーである。インバーは、製鉄所で長い薄型シート状に冷延された金属合金である。インバーは、ニッケルマスク

としてスピンマンドレル上へ電着することができない。蒸着用マスク内に開口領域を形成するための適切かつ低コストの方法は、湿式化学エッチングによる方法である。

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

[0145] デバイスの製造方法：

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

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

[0146] 本発明の他の態様では、有機発光ダイオード（OLED）ディスプレイの製造方法を提供し、当該方法は、

マザーパネルのベース基材上に障壁層を形成する工程と、

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

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

前記セルパネル間のインタフェース部に有機フィルムを塗布する工程と、を含む。

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

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

[0147] 前記有機フィルムと平坦化フィルムの各々は、ポリイミドおよびアクリルのいずれか1つを含んでもよい。いくつかの実施形態では、前記障壁層は無機フィルムであってもよい。いくつかの実施形態では、前記ベース基材はポリイミドで形成されてもよい。前記方法は更に、ポリイミドで形成されたベース基材の1つの表面に障壁層を形成する前に、当該ベース基材のもう1つの表面にガラス材料で形成されたキャリア基材を取り付ける工程と、インタフェース部に沿った切断の前に、前記キャリア基材をベース基材から分離す

る工程と、を含んでもよい。いくつかの実施形態では、前記OLEDディスプレイはフレキシブルなディスプレイである。

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

[0148] いくつかの実施形態では、前記発光層は、ピクセル電極と、対電極と、当該ピクセル電極と当該対電極との間に配置された有機発光層と、を有する。いくつかの実施形態では、前記ピクセル電極は、TFT層のソース／ドレイン電極に連結している。

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

いくつかの実施形態では、ディスプレイユニットを被覆し、外部の水分の浸透を防止するカプセル化層は、有機フィルムと無機フィルムとが交互に積層する薄膜状のカプセル化構造に形成されてもよい。いくつかの実施形態では、前記カプセル化層は、複数の薄膜が積層した薄膜状カプセル化構造を有する。いくつかの実施形態では、インタフェース部に塗布される有機フィルムは、複数のディスプレイユニットの各々と間隔を置いて配置される。いくつかの実施形態では、前記有機フィルムは、一部の有機フィルムが直接ベー

ス基材と接触し、有機フィルムの残りの部分が障壁層の端部を囲む一方で障壁層と接触する態様で形成される。

[0149] 一実施形態では、OLEDディスプレイはフレキシブルであり、ポリイミドで形成された柔軟なベース基材を使用する。いくつかの実施形態では、前記ベース基材はガラス材料で形成されたキャリア基材上に形成され、次に当該キャリア基材が分離される。

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

[0150] いくつかの実施形態では、前記の製造方法は、更にインタフェース部に沿って切断する工程を含み、そこでは溝が障壁層に形成され、少なくとも一部の有機フィルムが溝で形成され、当該溝がベース基材に浸透しない。いくつかの実施形態では、各セルパネルのTFT層が形成され、無機フィルムである不動態化層と有機フィルムである平坦化フィルムが、TFT層上に配置され、TFT層を被覆する。例えばポリイミドまたはアクリル製の平坦化フィルムが形成されるのと同時に、インタフェース部の溝は、例えばポリイミドまたはアクリル製の有機フィルムで被覆される。これは、各セルパネルがインタフェース部で溝に沿って切断されるとき、生じた衝撃を有機フィルムに吸収させることによってひびが生じるのを防止する。すなわち、全ての障壁層が有機フィルムなしで完全に露出している場合、各セルパネルがインタフェース部で溝に沿って切断されるとき、生じた衝撃が障壁層に伝達され、それによりひびが生じるリスクが増加する。しかしながら、一実施形態では、障壁層間のインタフェース部の溝が有機フィルムで被覆されて、有機フィルムがなければ障壁層に伝達されうる衝撃を吸収するため、各セルパネルをソフトに切断し、障壁層でひびが生じるのを防止してもよい。一実施形態では

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

[0151] いくつかの実施形態では、ディスプレイユニットは、発光ユニットの形成により形成され、カプセル化層は、ディスプレイユニットを被覆するためディスプレイユニット上に配置される。これにより、マザーパネルが完全に製造された後、ベース基材を担持するキャリア基材がベース基材から分離される。いくつかの実施形態では、レーザー光線がキャリア基材へ放射されると、キャリア基材は、キャリア基材とベース基材との間の熱膨張率の相違により、ベース基材から分離される。

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

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

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

実施例

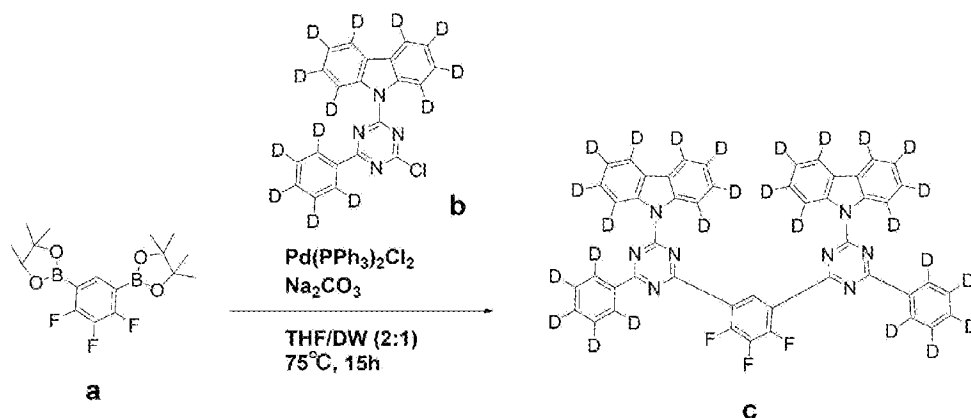
[0152] 以下に合成例と実施例を挙げて本発明の特徴をさらに具体的に説明する。

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

[0153] (合成例1) 化合物C1の合成

化合物c

[化53]



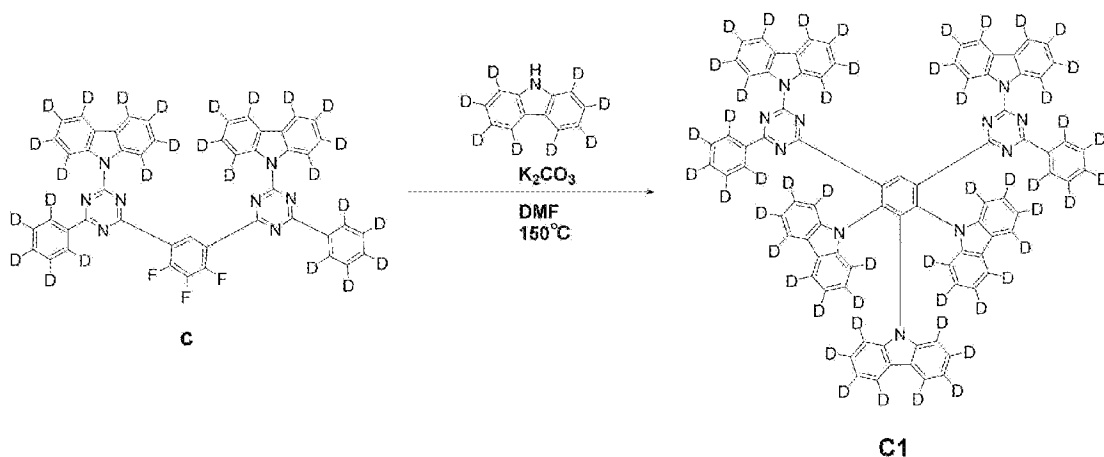
[0154] 化合物 a (5.29 g, 13.7 mmol) のテトラヒドロフラン (THF, 140 mL) および水 (70 mL) 混合溶媒を窒素バブリングさせた。窒素気流下、この溶液に、化合物 b (10.4 g, 28.1 mmol)、ピス (トリフェニルホスフィン) パラジウム (II) ジクロリド (0.96 g, 1.37 mmol)、炭酸ナトリウム (7.31 g, 69.0 mmol) を加え 75°C にて 15 時間加熱攪拌した。その反応容器を室温まで冷却し、水を加えクエンチした。その溶液をろ過し、得られた灰色固体を濾別し、ジクロロメタンおよび酢酸エチルで洗浄した。その固体を加熱した 1,2-ジクロロベンゼン (ODCB) により溶かし、熱時に、漏斗 (桐山ロート) に敷

き詰めたセライト／シリカゲル／セライトに通した。その溶液をエバポレータにより減圧濃縮し、得られた固体をトルエン洗浄・乾燥することで、薄黄色の固体の化合物cを得た（7.24 g, 9.06 mmol, 収率66%）。

ASAP MSスペクトル分析： $C_{48}HD_{26}F_3N_8$:理論値798.39, 観測値799.46

[0155] 化合物C 1

[化54]



[0156] 窒素気流下、化合物c（0.83 g, 1.04 mmol）、カルバゾール-1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8-d₈（0.60 g, 3.42 mmol）のN, N-ジメチルホルムアミド（DMF, 40 mL）溶液に炭酸カリウム（0.57 g, 4.15 mmol）を加え、150°Cで3時間攪拌した。反応溶液を室温に冷却し、水を加えてクエンチした。その溶液をろ過し、漏斗に残存した固体を水で洗浄した。その固体をジクロロメタンに溶解させ、硫酸マグネシウムにて乾燥した。その溶液をエバポレータにて減圧濃縮したのち、カラムクロマトグラフィー（トルエン：ヘキサン＝1：1）にて精製し、黄色の化合物C1を得た（0.35 g, 0.276 mmol, 収率27%）。

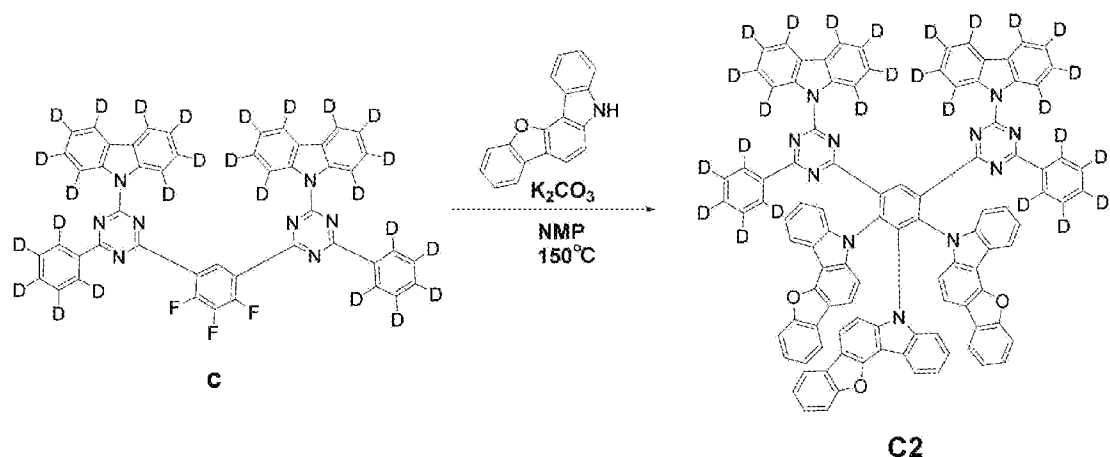
1H -NMR (400 MHz, $CDCl_3$): δ 9.26 (s, 1H)

ASAP MSスペクトル分析： $C_{84}HD_{50}N_{11}$:理論値1263.7, 観測値1263.1

[0157] (合成例2) 化合物C2の合成

化合物C 2

[化55]



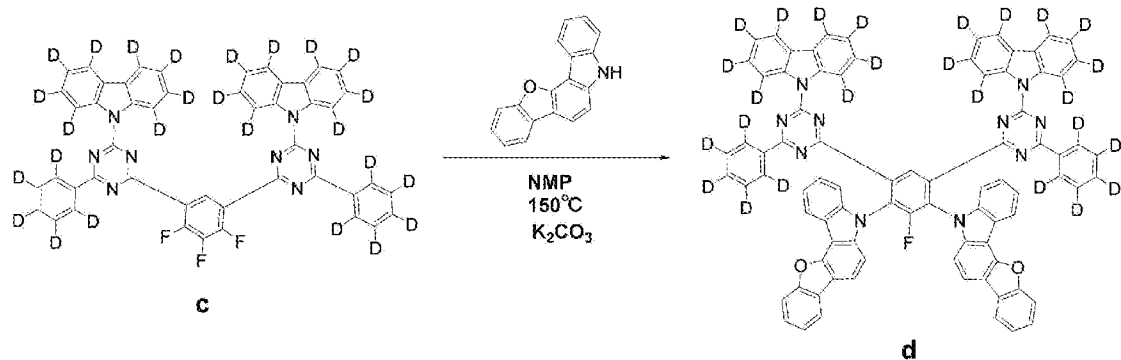
[0158] 窒素気流下、化合物c (0.50g, 0.62mmol)、5H-ベンゾフロ[3,2-c]カルバゾール(0.48g, 1.87mmol)のN-メチル-2-ピロリドン(NMP, 30mL)溶液に炭酸カリウム(0.34g, 2.50mmol)を加え、150°Cで3時間攪拌した。反応溶液を室温に冷却し、水を加えてクエンチした。その溶液をろ過し、漏斗に残存した固体を水で洗浄した。その固体をジクロロメタンに溶解させ、硫酸マグネシウムにて乾燥した。その溶液をエバポレータにて減圧濃縮したのち、カラムクロマトグラフィー(トルエン:ヘキサン=1:1)にて精製し、黄色の化合物C2を得た(0.44g, 0.29mmol, 収率47%)。

ASAP MSスペクトル分析: $C_{102}H_{31}D_{26}N_{11}O_3$:理論値1509.6, 観測値1510.7

[0159] (合成例3) 化合物C3の合成

化合物d

[化56]



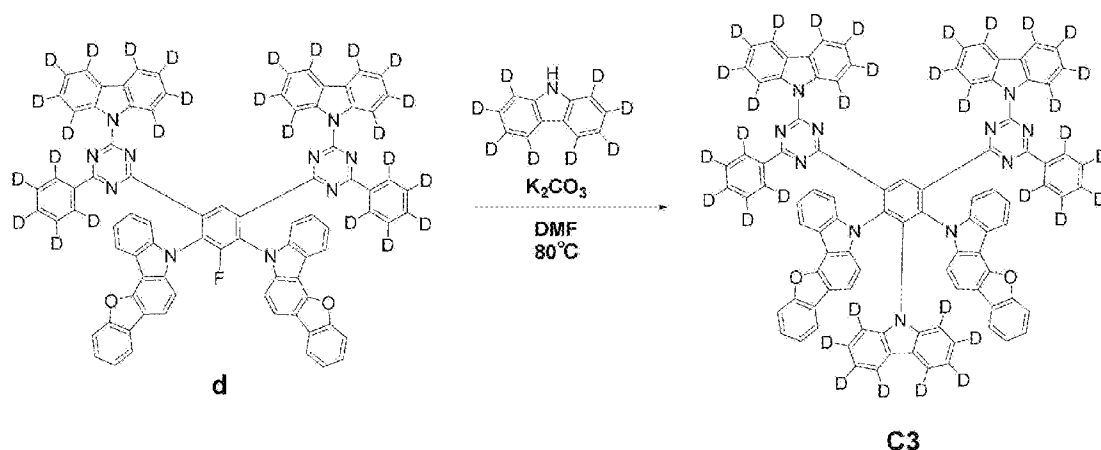
[0160] 窒素気流下、化合物c (2.0 g, 2.50 mmol)、5H-ベンゾフロ[3,2-c]カルバゾール (1.28 g, 5.00 mmol) のNMP (90 mL) 溶液に炭酸カリウム (0.86 g, 6.25 mmol) を加え、150°Cで3時間攪拌した。反応溶液を室温に冷却し、水を加えてクエンチした。その溶液をろ過し、漏斗に残存した固体を水で洗浄した。その固体をジクロロメタンに溶解させ、硫酸マグネシウムにて乾燥した。その溶液をエバポレータにて減圧濃縮したのち、カラムクロマトグラフィー (トルエン:ヘキサン=1:1) にて精製し、黄色の化合物dを得た (1.93 g, 1.51 mmol, 収率61%)。

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3): δ 9.40 (s, 1H), 8.40–8.30 (m, 2H), 8.12–7.90 (m, 4H), 7.80–7.30 (m, 14H).

ASAP MSスペクトル分析: $\text{C}_{84}\text{H}_{21}\text{D}_{26}\text{FN}_{10}\text{O}_2$:理論値1272.5, 観測値1272.8

[0161] 化合物C3

[化57]



[0162] 窒素気流下、化合物d (1.76 g, 1.38 mmol)、カルバゾール-1,2,3,4,5,6,7,8-d8 (0.72 g, 4.14 mmol) のDMF (50 mL) 溶液に炭酸カリウム (0.76 g, 5.52 mmol) を加え、80°Cで72時間攪拌した。反応溶液を室温に冷却し、水を加えてクエンチした。その溶液をろ過し、漏斗に残存した固体を水で洗浄した。その固体をジクロロメタンに溶解させ、硫酸マグネシウムにて乾燥した。その溶液をエバポレータにて減圧濃縮したのち、カラムクロマトグラフィー

(トルエン：ヘキサン＝1：1)にて精製し、黄色の化合物C3を得た(0.30g, 0.21mmol, 収率15%)。

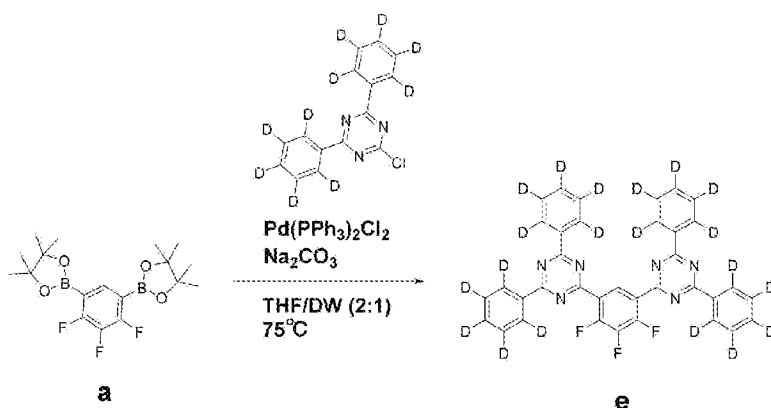
$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3): δ 9.37 (s, 1H), 7.97 (dd, $J=4.8\text{Hz}$, 1.2 Hz, 2H), 7.80 (d, $J=8.4\text{Hz}$, 2H), 7.61–7.56 (m, 2H), 7.51 (d, $J=8.4\text{Hz}$, 2H), 7.45–7.35 (m, 4H), 7.34–7.22 (m, 4H), 7.10–7.00 (m, 4H).

ASAP MSスペクトル分析： $\text{C}_{96}\text{H}_{21}\text{D}_{34}\text{N}_{11}\text{O}_2$:理論値1427.6, 観測値1427.8

[0163] (合成例4) 化合物C4の合成

化合物e

[化58]



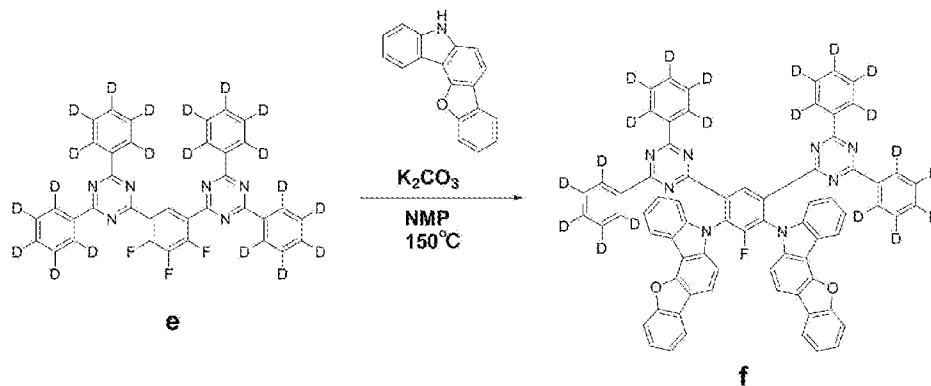
[0164] 化合物a (2.30g, 5.99mmol)のTHF (60mL)および水 (30mL)混合溶媒を窒素バブリングさせた。窒素気流下、この溶液に、2-クロロ-4,6-(ジフェニル-2,3,4,5,6-d5)-1,3,5-トリアジン (3.39g, 12.2mmol)、ビス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(II)ジクロリド (0.42g, 0.59mmol)、炭酸ナトリウム (3.17g, 29.9mmol)を加え75°Cにて18時間加熱攪拌した。その反応容器を室温まで冷却し、水を加えクエンチした。その溶液をろ過し、得られた灰色固体を濾別し、ジクロロメタンおよび酢酸エチルで洗浄した。その固体を加熱したODCBにより溶かし、熱時に、漏斗(桐山ロート)に敷き詰めたセライト/シリカゲル/セライトに通した。その溶液をエバポレータにより減圧濃縮し、得られた固体をトルエン洗浄・乾燥することで、薄黄色の固体の化合物eを得た(2.54g, 4.

1.3 mmol, 収率69%)。

ASAP MSスペクトル分析： $C_{36}H_{20}F_3N_6$:理論値614.30, 観測値615.40

化合物 f

[化59]



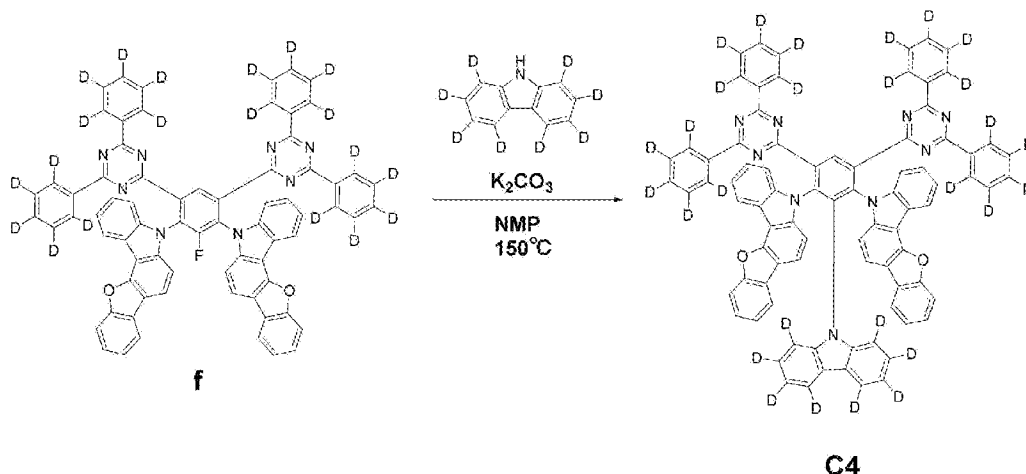
[0165] 窒素気流下、化合物 e (2.0 g, 3.25 mmol)、5H-ベンゾフロ[3,2-c]カルバゾール (1.67 g, 6.50 mmol) のNMP (120 mL) 溶液に炭酸カリウム (1.12 g, 8.13 mmol) を加え、150°Cで3時間攪拌した。反応溶液を室温に冷却し、水を加えてクエンチした。その溶液をセライトを詰めた漏斗 (桐山ロート) でろ過し、漏斗に残存した固体を水で洗浄した。これをジクロロメタンに溶解させ、硫酸マグネシウムにて乾燥した。その溶液をろ過し、得られた溶液をエバポレータにて減圧濃縮したのち、カラムクロマトグラフィー (トルエン:ヘキサン=1:1) にて精製し、得られた固体をメタノールにて洗浄することで、黄色の化合物 f を得た (2.61 g, 2.39 mmol, 収率73%)。

1H -NMR(400 MHz, $CDCl_3$): δ 9.61 (d, $J=1.6$ Hz, 1H), 8.46(d, $J=7.6$ Hz, 2H), 8.00–7.96 (m, 4H), 7.70 (d, $J=8.4$ Hz, 2H), 7.48–7.38 (m, 12H).

ASAP MSスペクトル分析： $C_{72}H_{21}D_{20}FN_8O_2$:理論値1088.46, 観測値1089.66

[0166] 化合物 C 4

[化60]



[0167] 窒素気流下、化合物 f (1.61 g, 1.47 mmol)、カルバゾール-1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8-d8 (0.31 g, 1.77 mmol) の NMP (50 mL) 溶液に炭酸カリウム (0.41 g, 2.96 mmol) を加え、150°C で 3 時間攪拌した。反応溶液を室温に冷却し、水を加えてクエンチした。その溶液をろ過し、漏斗に残存した固体を水で洗浄した。その固体をジクロロメタンに溶解させ、硫酸マグネシウムにて乾燥した。その溶液をエバポレータにて減圧濃縮したのち、カラムクロマトグラフィー (トルエン : ヘキサン = 1 : 1) にて精製し、黄色の化合物 C4 を得た (1.59 g, 1.27 mmol, 収率 86%)。

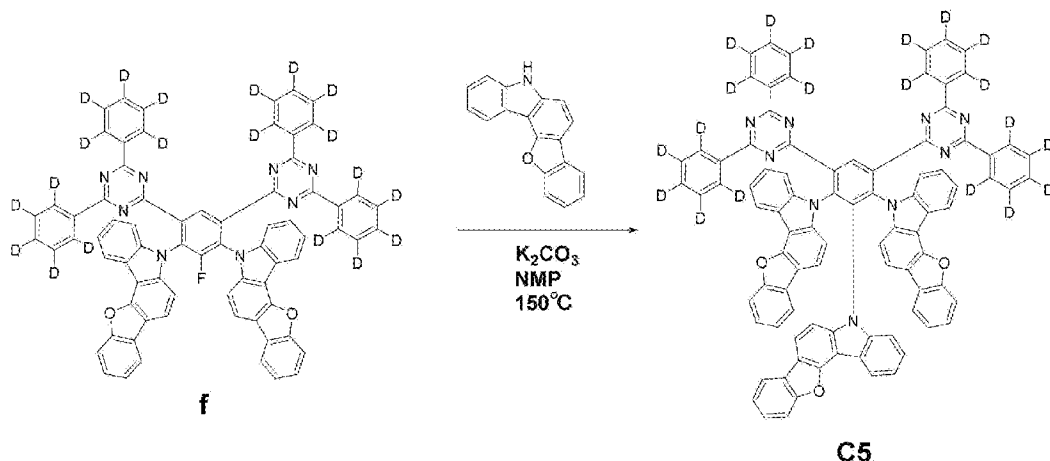
$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3): δ 9.49 (s, 1H), 8.01 (d, $J=7$ Hz, 2H), 7.83 (d, $J=7$ Hz, 2H), 7.59–7.52 (m, 4H), 7.38–7.28 (m, 8H), 7.10–7.12 (m, 4H).

ASAP MS スペクトル分析: $\text{C}_{84}\text{H}_{21}\text{D}_{28}\text{N}_9\text{O}_2$: 理論値 1243.58, 観測値 1244.73

[0168] (合成例 5) 化合物 C5 の合成

化合物 C5

[化61]



[0169] 窒素気流下、化合物 f (1.0 g, 0.91 mmol)、5H-ベンゾフロ[3,2-c]カルバゾール (0.28 g, 1.10 mmol) の NMP (50 mL) 溶液に炭酸カリウム (0.25 g, 1.83 mmol) を加え、150°C で 3 時間攪拌した。反応溶液を室温に冷却し、水を加えてクエンチした。その溶液をろ過し、漏斗に残存した固体を水で洗浄した。その固体をジクロロメタンに溶解させ、硫酸マグネシウムにて乾燥した。その溶液をエバポレータにて減圧濃縮したのち、カラムクロマトグラフィー (トルエン : ヘキサン = 1 : 1) にて精製し、メタノールで洗浄し、再結晶 (トルエン) することで、黄色の化合物 C5 を得た (0.99 g, 0.746 mmol, 収率 82%)。

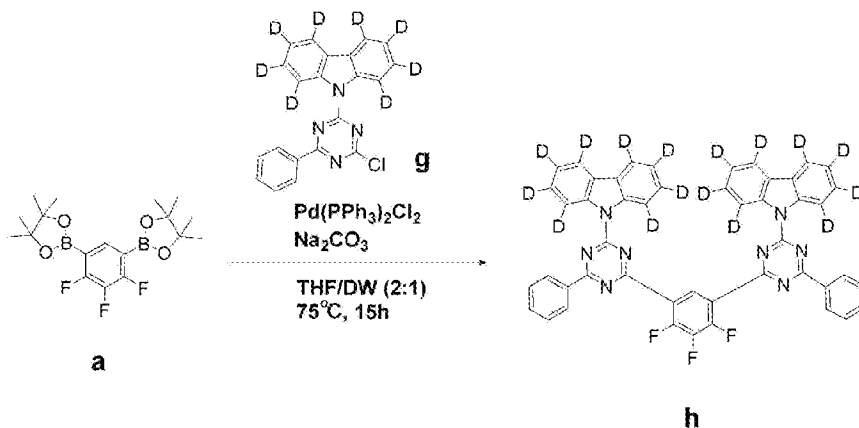
$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3): δ 9.53 (s, 1H), 8.0–6.76 (m, 30H)

ASAP MS スペクトル分析: $\text{C}_{90}\text{H}_{31}\text{D}_{20}\text{N}_9\text{O}_3$: 理論値 1325.54, 観測値 1327.79

[0170] (合成例 6) 化合物 C6 の合成

化合物 h

[化62]

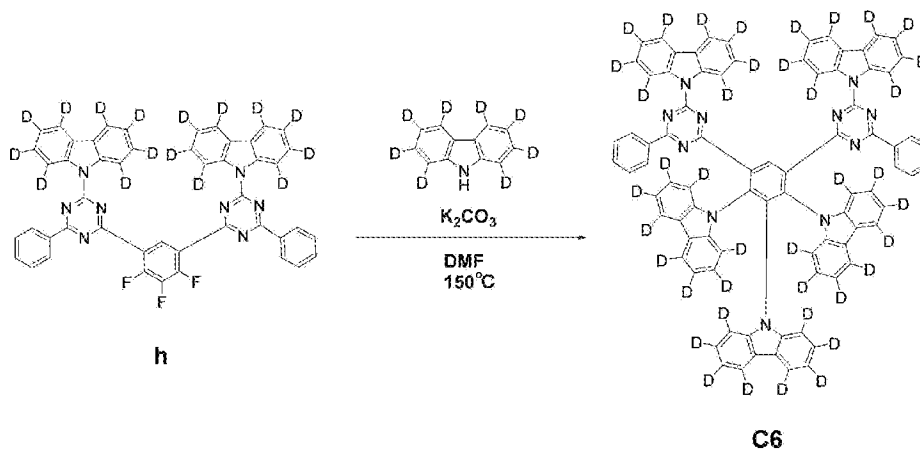


[0171] 化合物 **a** (4.84 g, 12.6 mmol) の THF (200 mL) および水 (80 mL) 混合溶媒を窒素バブリングさせた。窒素気流下、この溶液に、化合物 **g** (9.40 g, 25.7 mmol)、ビス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(II)ジクロリド (0.88 g, 1.26 mmol)、炭酸ナトリウム (6.69 g, 105.9 mmol) を加え 75°C にて 15 時間加熱攪拌した。その反応容器を室温まで冷却し、水を加えクエンチした。その溶液をろ過し、得られた灰色固体を濾別し、水およびトルエンにより洗浄し、灰色固体の化合物 **h** を得た (9.2 g, 11.6 mmol, 収率 92%)。

ASAP MS スペクトル分析: $\text{C}_{48}\text{H}_{11}\text{D}_{16}\text{F}_3\text{N}_8$: 理論値 788.3, 観測値 789.62

[0172] 化合物 C6

[化63]



[0173] 窒素気流下、化合物h (1.50g, 1.90mmol)、カルバゾール-1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8-d8 (1.33g, 7.60mmol) のDMF (70mL) 溶液に炭酸カリウム (1.05g, 7.60mmol) を加え、150℃で3時間攪拌した。反応溶液を室温に冷却し、水を加えてクエンチした。その溶液をろ過し、漏斗に残存した固体を水で洗浄した。その固体をジクロロメタンに溶解させ、硫酸マグネシウムにて乾燥した。その溶液をエバポレータにて減圧濃縮したのち、カラムクロマトグラフィー (トルエン:ヘキサン=1:1) にて精製し、黄色の化合物C6を得た (0.66g, 0.52mmol, 収率28%)。

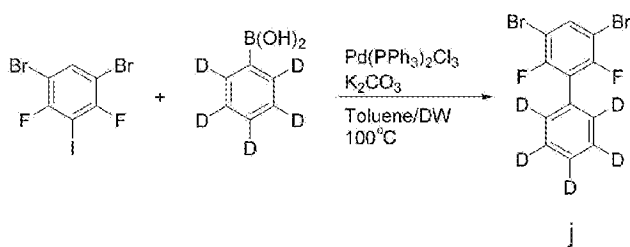
¹H-NMR (400 MHz, CDCl₃): δ 9.25 (s, 1H), 7.52-7.48(m, 4H), 7.42-7.38 (m, 2H), 7.26-7.16(m, 4H)

ASAP MSスペクトル分析: C₈₄H₁₁D₄₀N₁₁:理論値1253.6, 観測値1254.0

[0174] (合成例7) 化合物C7の合成

化合物j

[化64]



[0175] 1,5-ジブロモ-2,4-ジフロロ-3-ヨードベンゼン (15.8g, 39.9mmol) のトルエン (100mL) とイオン交換水 (30mL) の混合溶液にフェニル-d5-ボロン酸 (6.2g, 48.8mmol)、ビス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(II)ジクロリド (1.4g, 2.0mmol)、炭酸カリウム (29.0g, 210mmol) を加え、窒素雰囲気下、100℃で23時間攪拌した。反応溶液を室温に冷却し、飽和食塩水を加え、有機相と水相を分離した。水相をトルエンで抽出した後、合わせた有機相を無水硫酸マグネシウムで乾燥、ろ過後、ろ液を濃縮した。粗生成物をシリカゲルクロマトグラフィー (ヘキサン) で精製し、白色

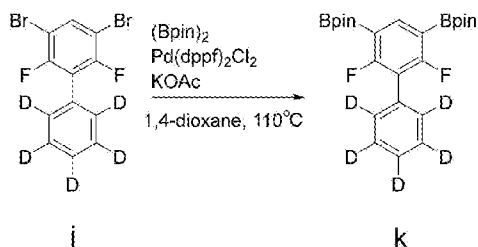
固体の化合物 j を 9.0 g (25.5 mmol, 収率 64%) で得た。

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3): δ 7.77 (t, $J=6.8$ Hz, 1H).

ASAP MS スペクトル分析: $\text{C}_{12}\text{HD}_5\text{Br}_2\text{F}_2$: 理論値 350.91, 観測値 350.93 [M]

[0176] 化合物 k

[化65]

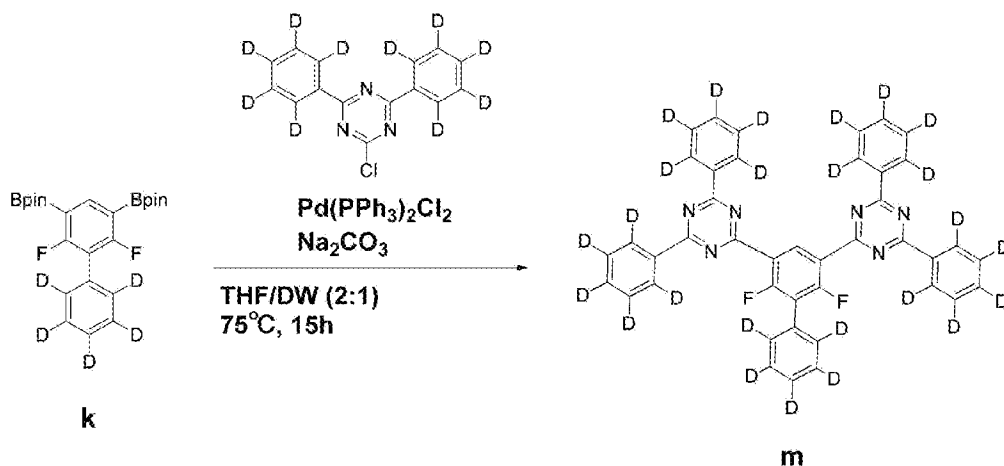


[0177] 化合物 j (2.1 g, 5.98 mmol)、[1, 1' -ビス (ジフェニルホスフィノ) フェロセン] ジクロロパラジウム (II) (0.22 g, 0.30 mmol)、酢酸カリウム (4.1 g, 42.0 mmol)、ビス (ピナコラート) ジボロン (7.1 g, 27.9 mmol)、1, 4 -ジオキササン (60 mL) の反応混合物を、110°Cにて15時間攪拌を行った。反応混合物を室温まで冷却後、酢酸エチルで希釈し、シリカろ過した。ろ液を濃縮後、得られた反応混合物を塩化メチレンに溶解させシリカろ過を行った。得られた固体をヘキサンで洗浄し、白色固体の化合物 k を 1.84 g (4.11 mmol, 収率 69%) 得た。

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3): δ 8.11 (t, $J=7.2$ Hz, 1H), 1.36(s, 24H).

化合物 m

[化66]

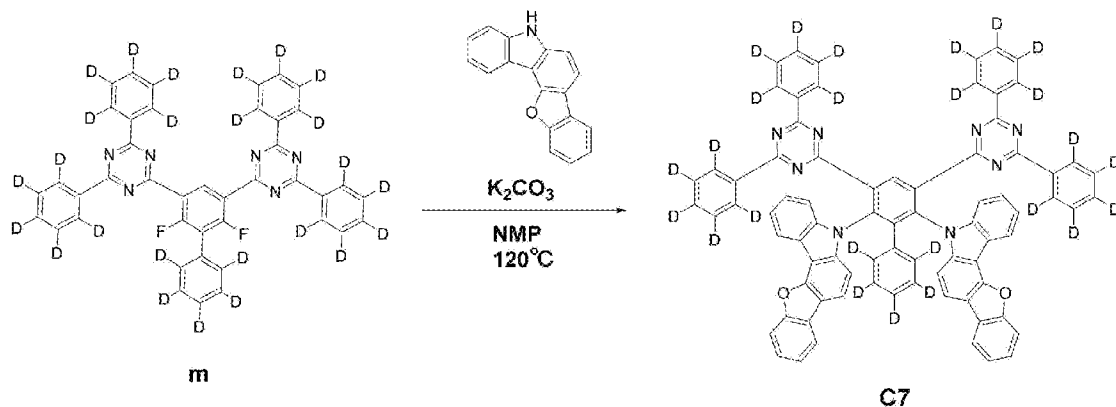


[0178] 化合物k (8.00g, 17.89mmol)をTHF (138mL)、イオン交換水 (46mL)に溶解させ、2-クロロ-4,6-ビス(フェニルー-d5)-1,3,5-トリアジン (4.35g, 35.78mmol)、ビス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(II)ジクロリド (0.63g, 0.89mmol)、炭酸ナトリウム (9.48g, 89.46mmol)を加え75°Cにて15時間攪拌した。反応容器を室温まで冷却し、得られた灰色固体を濾別した。固体をイオン交換水、メタノール、THFで洗浄した。集めた固体を熱トルエン中で攪拌し、固体を濾別、トルエンで洗浄することで、黒色固体の化合物mを4.1g得た (6.05mmol, 収率34%)。

ASAP MSスペクトル分析: $\text{C}_{42}\text{HD}_{25}\text{F}_2\text{N}_6$:理論値677, 観測値678 [M+H⁺]

[0179] 化合物C7

[化67]



[0180] 窒素気流下、化合物m (1.75 g, 2.58 mmol)、5H-ベンゾフロ[3,2-c]カルバゾール (1.60 g, 6.22 mmol) のNMP (90 mL) 溶液に炭酸カリウム (1.07 g, 7.74 mmol) を加え、120°Cで18時間攪拌した。反応溶液を室温に冷却し、水を加えてクエンチした。その溶液をろ過し、漏斗に残存した固体を水で洗浄した。その固体をジクロロメタンに溶解させ、硫酸マグネシウムにて乾燥した。その溶液をエバポレータにて減圧濃縮したのち、カラムクロマトグラフィー (トルエン:ヘキサン=1:1) にて精製し、メタノールで洗浄し、再結晶 (トルエン) することで、黄色の化合物C7を得た (0.80 g, 0.69 mmol, 収率27%)。

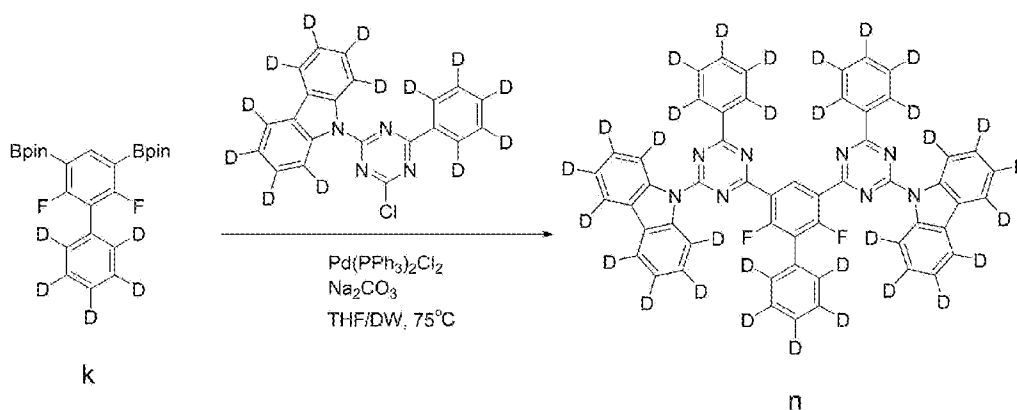
¹H-NMR (400 MHz, CDCl₃): δ 9.51 (s, 1H), 7.57 (d, J=7.2Hz, 2H), 7.94-7.87 (m, 4H), 7.62 (d, J=7.2Hz, 2H), 7.38-7.24 (m, 12H).

ASAP MSスペクトル分析: C₇₈H₂₁D₂₅N₈O₂: 理論値1151.5, 観測値1151.6

[0181] (合成例8) 化合物C8の合成

化合物n

[化68]



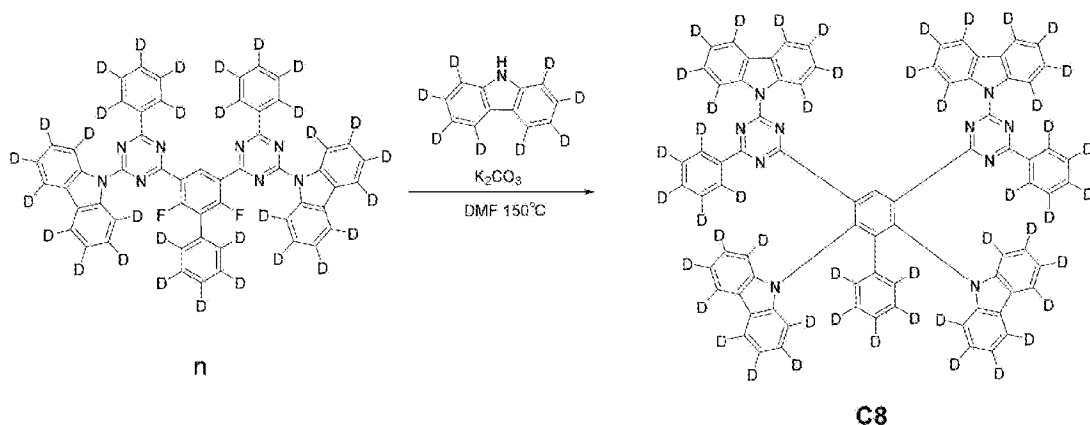
[0182] 化合物k (1.81 g, 4.05 mmol) をTHF (30 mL)、イオン交換水 (10 mL) に溶解させ、9-(4-クロロ-6-(フェニル-d5)-1,3,5-トリアジン-2-イル)-9H-カルバゾール-1,2,3,4,5,6,7,8-d8 (3.05 g, 8.25 mmol)、ビス(トリフェニルホスフィン)パラジウム (II) ジクロリド (0.15 g, 0

、21 mmol)、炭酸ナトリウム(2.20 g, 20.8 mmol)を加え75℃にて16時間攪拌した。反応容器を室温まで冷却し、得られた灰色固体を濾別した。固体をイオン交換水、メタノール、THFで洗浄した。集めた固体を熱トルエン中で攪拌し、固体を濾別、トルエンで洗浄することで、黒色固体の化合物nを3.30 g (3.82 mmol, 収率94%)得た。

ASAP MSスペクトル分析： $C_{54}HD_{31}F_2N_8$:理論値861.47, 観測値862..72 [M+H⁺]

[0183] 化合物C8

[化69]



[0184] 化合物n(2.85 g, 3.30 mmol)とのDMF(65 mL)の混合物にカルバゾール-1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8-d₈(1.28 g, 7.30 mmol)、炭酸カリウム(1.37 g, 9.91 mmol)を加え、150℃で3時間攪拌した。反応溶液を室温に冷却し、固体をろ過、酢酸エチルで洗浄した。得られたろ液を濃縮後、メタノールを加え生じた固体を濾別し、メタノールで洗浄した。得られた粗生成物をカラムクロマトグラフィー(トルエン/ヘキサン=3:1)にて精製し、得られた固体を酢酸エチル/ヘキサンで再沈殿することで、淡緑色の化合物C8を2.13 g (1.81 mmol, 収率55%)得た。

¹H-NMR(400 MHz, DMSO-d₆): δ 9.20 (s, 1H).

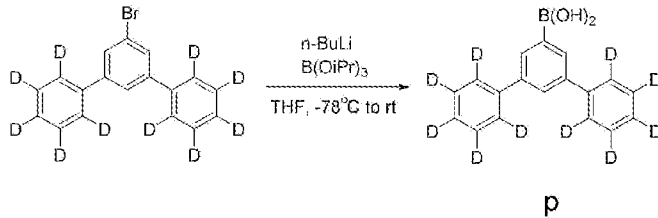
ASAP MSスペクトル分析： $C_{78}HD_{47}N_{10}$:理論値1171.70, 観測値1172.15 [M+

H⁺]

[0185] (合成例9) 化合物C9の合成

化合物 p

[化70]

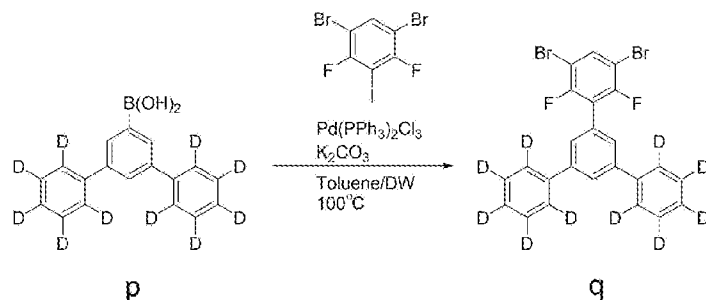


[0186] 窒素雰囲気下、 -78°C にて5'-ブromo-1,1':3',1''-terフェニル-2,2'',3,3'',4,4'',5,5'',6,6''-d₁₀ (12.0 g, 37.6 mmol) のTHF (75 mL) 溶液を2.3 Mのn-ブチルリチウムのシクロヘキサン溶液 (21 mL, 48.3 mmol) をゆっくりと滴下した。80分間攪拌した後にホウ酸トリイソプロピル (12.8 mL, 56.4 mmol) を加え、反応器を室温に昇温した。2時間攪拌した後に 0°C に冷却し、4 N塩酸水溶液 (70 mL) を加えた。室温にて30分間攪拌したのちに有機相と水相を分離した。水相をジエチルエーテルで抽出し、合わせた有機相をイオン交換水と飽和食塩水で洗浄した。有機相を濃縮し、得られた白色固体をヘキサンで洗浄することで白色の化合物 p を9.30 g (32.7 mmol, 収率87%) 得た。

¹H-NMR (400 MHz, DMSO-d₆): δ 8.26 (brs, 2H), 8.08 (d, J=1.6 Hz, 2H), 7.92-7.93 (m, 1H).

[0187] 化合物 q

[化71]



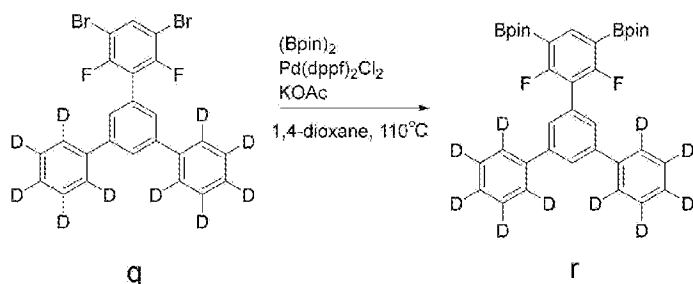
[0188] 1, 5-ジブロモ-2, 4-ジフロロ-3-ヨードベンゼン (5.1 g, 13.0 mmol) のトルエン (30 mL) とイオン交換水 (10 mL) の混合溶液に化合物 p (4.0 g, 14.0 mmol)、ビス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(II)ジクロリド (0.46 g, 0.64 mmol)、炭酸カリウム (3.60 g, 26.0 mmol) を加え、100°C で15時間攪拌した。反応溶液を室温に冷却し、飽和食塩水を加え、有機相と水相を分離した。水相を酢酸エチルで抽出した後に、合わせた有機相を無水硫酸マグネシウムで乾燥、ろ過後、ろ液を濃縮した。粗生成物をシリカゲルクロマトグラフィー (ヘキサン/酢酸エチル=40:1) と (ヘキサン/塩化メチレン=10:1) で精製し、得られた白色固体をヘキサンで洗浄することで化合物 q を4.84 g (9.48 mmol, 収率73%) 得た。

¹H-NMR (400 MHz, CDCl₃): δ 7.88 (t, J=2.0 Hz, 1H), 7.81 (t, J=6.8 Hz, 1H), 7.62 (q, J=2.0 Hz, 2H).

ASAP MSスペクトル分析: C₂₄H₄D₁₀Br₂F₂:理論値 508.00, 観測値509.03 [M+H⁺]

[0189] 化合物 r

[化72]



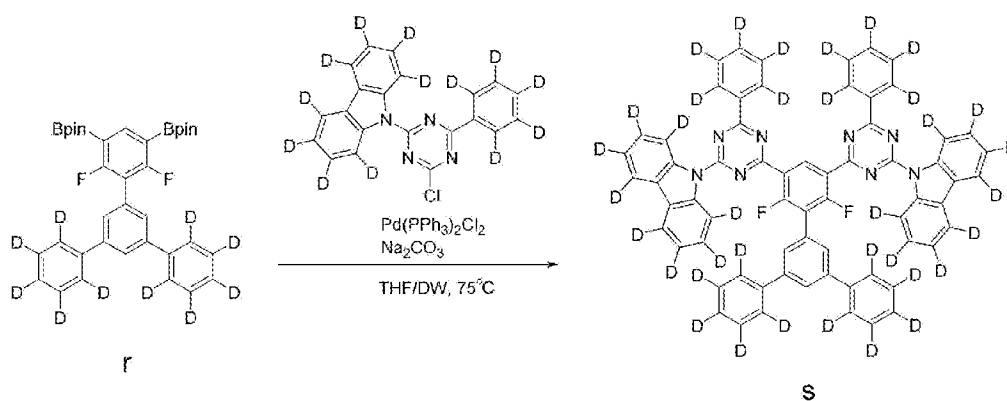
を濃縮後、得られた反応混合物を塩化メチレンに溶解させシリカろ過を行った。得られた固体をヘキサンで洗浄することで黄色固体の化合物 *r* を 5.00 g (8.27 mmol, 収率 88%) 得た。

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3): δ 8.15 (t, $J=6.8$ Hz, 1H), 7.79–7.80 (m, 1H), 7.66 (brs, 2H), 1.26 (s, 24H).

ASAP MS スペクトル分析: $\text{C}_{36}\text{H}_{28}\text{D}_{10}\text{B}_2\text{F}_2\text{O}_4$: 理論値 604.37, 観測値 605.47 [M+H⁺]

[0191] 化合物 *s*

[化73]

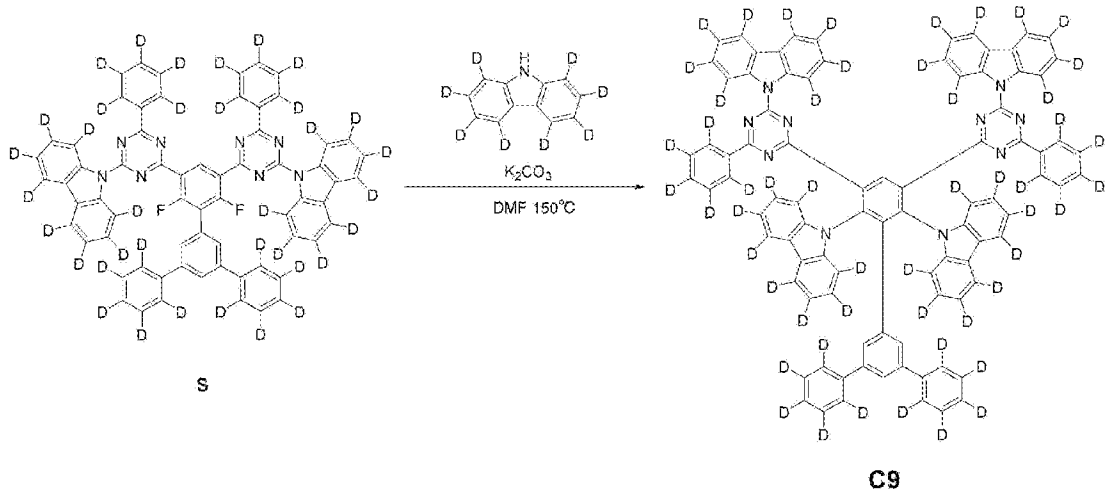


[0192] 化合物 *r* (4.98 g, 8.24 mmol) を THF (60 mL)、イオン交換水 (20 mL) に溶解させ、9-(4-クロロ-6-(フェニル-d₅)-1,3,5-トリアジン-2-イル)-9H-カルバゾール-1,2,3,4,5,6,7,8-d₈ (6.10 g, 16.5 mmol)、ビス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(II)ジクロリド (0.29 g, 0.41 mmol)、炭酸ナトリウム (4.37 g, 41.2 mmol) を加え、75℃にて20時間攪拌した。反応容器を室温まで冷却し、得られた灰色固体を濾別した。固体を THF とイオン交換水で洗浄した。集めた固体を熱トルエン中で攪拌し、固体を濾別、トルエンで洗浄、乾燥することで灰色固体の化合物 *s* を 7.98 g (7.83 mmol, 収率 95%) 得た。

ASAP MS スペクトル分析: $\text{C}_{66}\text{H}_4\text{D}_{36}\text{F}_2\text{N}_8$: 理論値 1018.56, 観測値 1019.83 [M+H⁺]

[0193] 化合物 C 9

[化74]



[0194] 化合物 s (3.06 g, 3.00 mmol) との DMF (60 mL) の混合物にカルバゾール-1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8-d₈ (1.16 g, 6.61 mmol)、炭酸カリウム (1.24 g, 8.97 mmol) を加え、150°C で 3 時間攪拌した。反応溶液を室温に冷却し、固体をろ過、酢酸エチルで洗浄した。得られたろ液を濃縮後、メタノールを加え生じた固体を濾別し、メタノールで洗浄した。得られた粗生成物をカラムクロマトグラフィー (トルエン/ヘキサン=1:1 から 2:1) にて精製し、得られた固体を酢酸エチル/ヘキサンで再沈殿することで、緑色の化合物 C 9 を 1.47 g (1.10 mmol, 収率 37%) 得た。

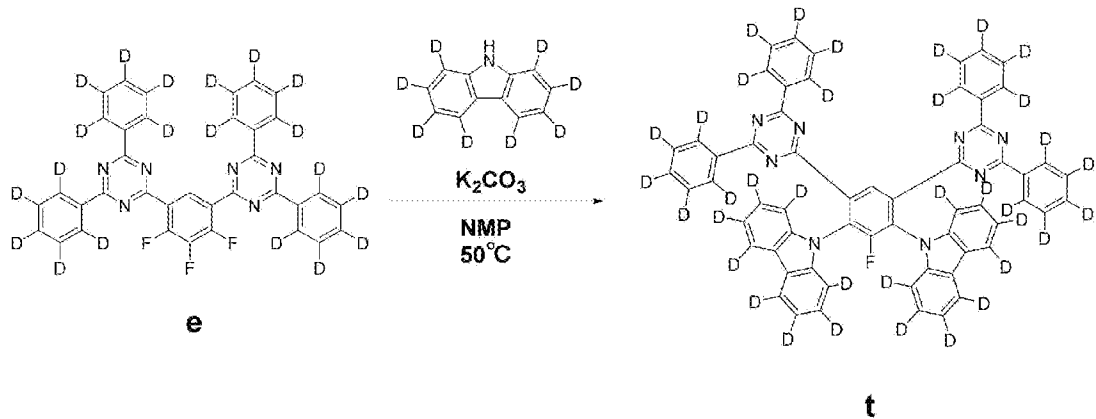
¹H-NMR (400 MHz, DMSO-d₆): δ 9.40 (s, 1H), 7.14 (d, J=1.6 Hz, 2H), 7.07 (d, J=1.6 Hz, 1H).

ASAP MS スペクトル分析: C₉₀H₄D₅₂N₁₀: 理論値 1328.80, 観測値 1329.84 [M +H⁺]

[0195] (合成例 10) 化合物 C 10 の合成

化合物 t

[化75]



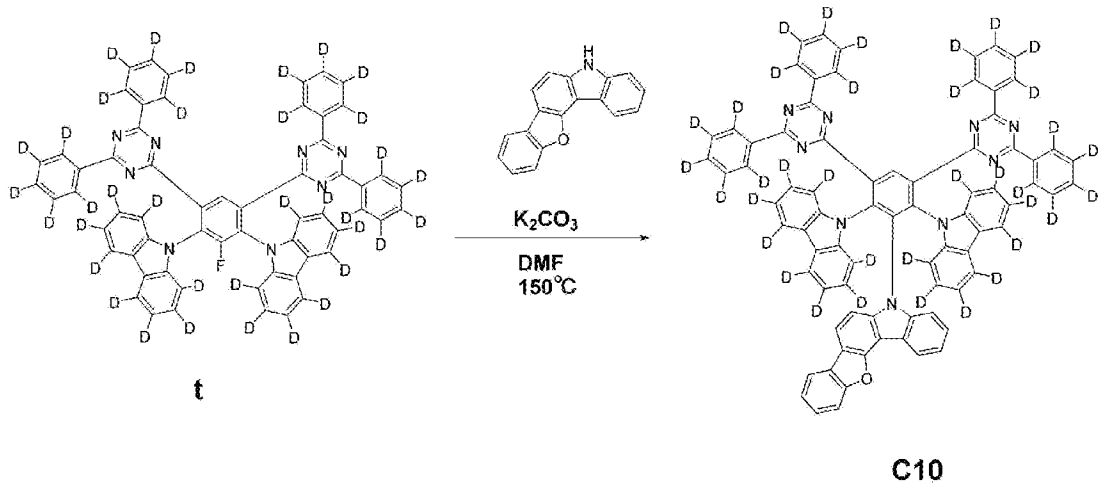
[0196] 窒素気流下、化合物 e (5.0 g, 8.13 mmol)、カルバゾール 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8-d₈ (2.85 g, 16.2 mmol) の NMP (30 mL) 溶液に炭酸カリウム (3.37 g, 24.4 mmol) を加え、50°C で 15 時間攪拌した。反応溶液を室温に冷却し、水を加えてクエンチした。その溶液をろ過し、漏斗に残存した固体を水およびメタノールで洗浄した。その固体を加熱した ODCB に溶かし、その溶液を用いたチャージにより、カラムクロマトグラフィー (トルエン : ヘキサン = 1 : 1) にて精製した。さらにトルエン再結晶により黄色の化合物 t を得た (4.80 g, 5.18 mmol, 収率 63%)。

¹H-NMR (400 MHz, CDCl₃): δ 9.50 (dd, J=1.6 Hz, 1H).

ASAP MS スペクトル分析 : C₆₀H₃₆FN₈: 理論値 924.5, 観測値 924.7

[0197] 化合物 C10

[化76]



[0198] 窒素気流下、化合物 t (1.45 g, 1.57 mmol)、5H-ベンゾフロ [3, 2-c] カルバゾール (1.21 g, 4.70 mmol) の DMF (50 mL) 溶液に炭酸カリウム (0.87 g, 6.27 mmol) を加え、150°C で 3 時間攪拌した。反応溶液を室温に冷却し、水を加えてクエンチした。その溶液をろ過し、漏斗に残存した固体を水およびメタノールで洗浄した。その固体を加熱した ODCB に溶かし、その溶液を用いたチャージにより、カラムクロマトグラフィー (トルエン : ヘキサン = 1 : 1) にて精製した。さらにトルエン再結晶により、黄色の化合物 C10 を得た (1.47 g, 1.26 mmol, 収率 81%)。

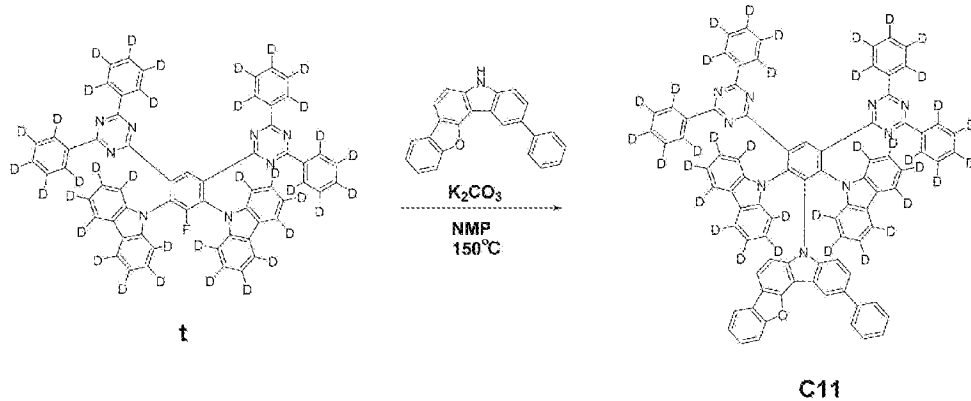
1H -NMR (400 MHz, $CDCl_3$): δ 9.44 (s, 1H), 7.87 (d, $J=7.2$ Hz, 1H), 7.74 (d, $J=7.2$ Hz, 1H), 7.54–7.49 (m, 1H), 7.32–7.22 (m, 5H), 6.93 (t, $J=7.2$ Hz, 1H), 6.78 (t, $J=7.2$ Hz, 1H).

ASAP MS スペクトル分析: $C_{78}H_{11}D_{36}N_9$: 理論値 1161.6, 観測値 1162.1

[0199] (合成例 11) 化合物 C11 の合成

化合物 C11

[化77]



[0200] 窒素気流下、化合物 t (1.0 g, 1.08 mmol)、2-フェニル-5H-ベンゾフロ [3, 2-c] カルバゾール (1.08 g, 3.24 mmol) の DMF (40 mL) 溶液に炭酸カリウム (0.60 g, 4.32 mmol) を加え、150°C で3時間攪拌した。反応溶液を室温に冷却し、水を加えてクエンチした。その溶液をろ過し、漏斗に残存した固体を水で洗浄した。その溶液をろ過し、漏斗に残存した固体を水およびメタノールで洗浄した。その固体を加熱した ODCB に溶かし、その溶液を用いたチャージにより、カラムクロマトグラフィー (トルエン : ヘキサン = 1 : 1) にて精製した。さらにトルエン再結晶により、黄色の化合物 C11 を得た (0.98 g, 0.08 mmol, 収率 73%)。

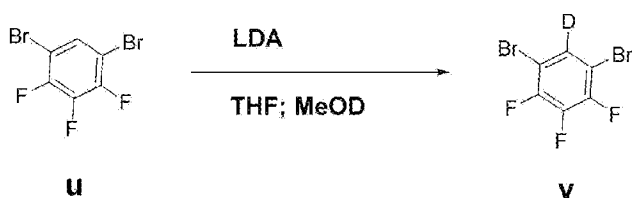
1H -NMR (400 MHz, $CDCl_3$): δ 9.45 (s, 1H), 8.08 (d, $J=1.2$ Hz, 1H), 7.75 (d, $J=6.8$ Hz, 1H), 7.54–7.51 (m, 3H), 7.40 (t, $J=7.2$ Hz, 2H), 7.34–7.24 (m, 6H), 7.04–7.00 (m, 1H).

ASAP MS スペクトル分析: $C_{84}H_{15}D_{36}N_{90}$: 理論値 1237.6, 観測値 1239.2

[0201] (合成例 12) 化合物 C12 の合成

化合物 v

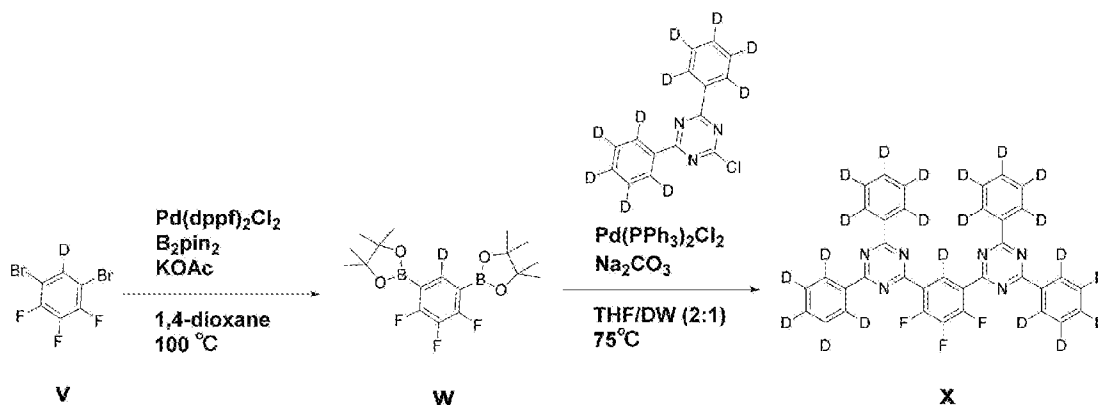
[化78]



化合物 u (25.7 g, 88.6 mmol) の THF (295 mL) 溶液を窒素バブリングさせ、 -78°C に冷却した。窒素気流下、この溶液に 1 M リチウムジイソプロピルアミド (LDA, 99.6 mL, 99.6 mmol) を 30 分かけて滴下した。さらに -78°C で 1 時間攪拌した後、 CH_3OD (7.3 g, 221 mmol) を加え、一晩攪拌した。室温に昇温し、飽和塩化アンモニウム水溶液を加えた後、エバポレーターにより、THF を留去した。ジクロロメタン、水を加え、有機層を抽出したのち、飽和食塩水で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥させた。溶液を濃縮した後、シリカゲルクロマトグラフィーにて精製した。さらに、減圧蒸留により精製したところ、透明液体の化合物 v を得た (10 g, 34.4 mmol, 収率 36.6%)。

化合物 x

[化79]



[0202] 化合物 v (9 g, 30.9 mmol)、[1, 1' -ビス (ジフェニルホスフィノ) フェロセン] ジクロロパラジウム (II) (2.3 g, 3.09 mmol)、酢酸カリウム (21.1 g, 21.1 mmol)、ビス (ピナコラート) ジボロン (39.1 g, 154 mmol)、1, 4-ジオキサン (310 mL) の反応混合物を、 110°C にて 15 時間攪拌を行った。反応混合物を室温まで冷却後、酢酸エチルで希釈し、シリカろ過した。得られた固体をヘキサンで洗浄し、白色固体の化合物 w を 10.0 g (25.9 mmol, 収率 76%) 得た。

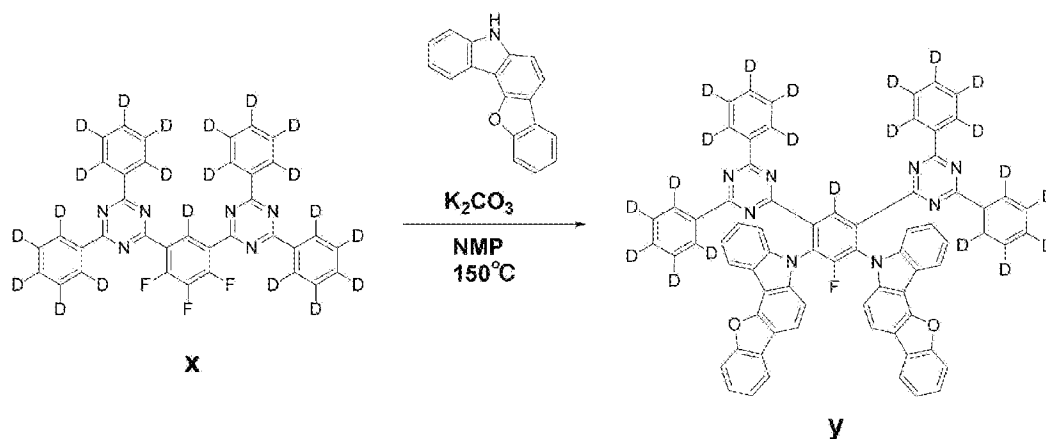
化合物 w (10.0 g, 25.9 mmol) を THF (260 mL)、イ

オン交換水（130 mL）に溶解させ、2-クロロ-4,6-ビス（フェニル-d5）-1,3,5-トリアジン（17.9 g, 64.7 mmol）、ビス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（II）ジクロリド（1.81 g, 2.59 mmol）、炭酸ナトリウム（8.22 g, 77.6 mmol）を加え75℃にて15時間攪拌した。反応容器を室温まで冷却し、反応液を濃縮した。得られた灰色固体を濾別し、固体をイオン交換水、メタノール、THFで洗浄した。集めた固体を熱トルエン中で攪拌し、固体を濾別、トルエンで洗浄することで、黒色固体の化合物xを1.86 g得た（3.02 mmol, 収率11.6%）。

ASAP MSスペクトル分析： $C_{36}D_{21}F_3N_6$:理論615.31, 観測値616.41

化合物 y

[化80]



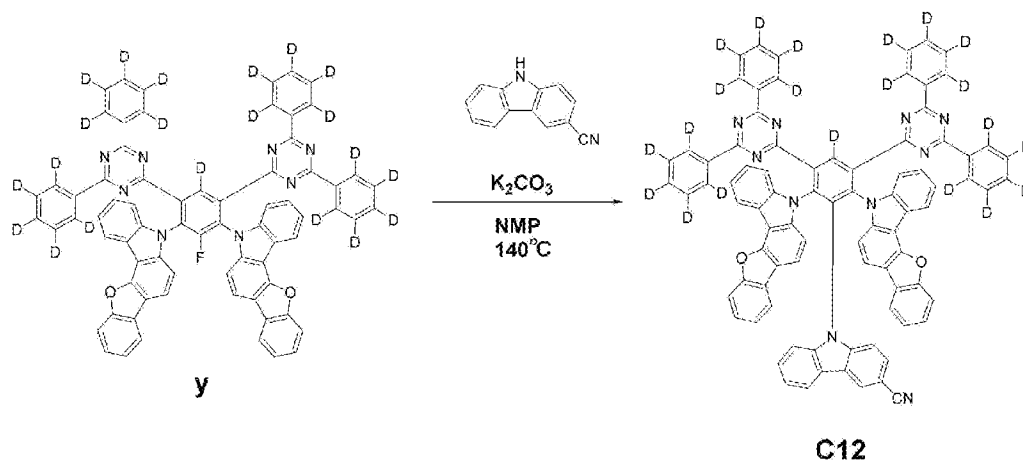
[0203] 窒素気流下、化合物x（1.32 g, 2.14 mmol）、5H-ベンゾフロ[3,2-c]カルバゾール（1.37 g, 5.35 mmol）のTHF（71 mL）溶液を-25℃に冷却し、カリウム tert-ブトキシド（0.72 g, 6.42 mmol）のTHF（71 mL）溶液を滴下した。室温に昇温した後、15時間攪拌した。その後、水を加え、懸濁液をろ過し、漏斗に残存した固体を水、メタノールで洗浄した。これをジクロロメタンに溶解させ、カラムクロマトグラフィー（トルエン：ヘキサン=1：1）にて精製し、得られた固体をメタノールにて洗浄することで、黄色の化合物yを1.18 g得た（1.08 mmol, 収率51%）。

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3): 8.46 (d, $J=7.6$ Hz, 2H), 8.01–7.95 (m, 4H), 7.71 (d, $J=8.4$ Hz, 2H), 7.52–7.35 (m, 12H).

ASAP MS スペクトル分析: $\text{C}_{72}\text{H}_{20}\text{D}_{21}\text{FN}_8\text{O}_2$: 理論値 1089.47, 観測値 1090.61

化合物 C 1 2

[化81]



[0204] 窒素気流下、化合物 y (0.60 g, 0.55 mmol)、9H-カルバゾール-3-カルボニトリル (0.16 g, 0.84 mmol) の NMP (5.5 mL) 溶液に炭酸カリウム (0.15 g, 1.09 mmol) を加え、140°C で 15 時間攪拌した。反応溶液を室温に冷却し、水を加えてクエンチした。その溶液をろ過し、漏斗に残存した固体を水、メタノールで洗浄した。その固体をジクロロメタンに溶解させ、硫酸マグネシウムにて乾燥した。ろ過後、その溶液をエバポレーターにて減圧濃縮したのち、カラムクロマトグラフィー (トルエン:ヘキサン=1:1) にて精製し、黄色の化合物 C 1 2 を得た (0.51 g, 0.40 mmol, 収率 74%)。

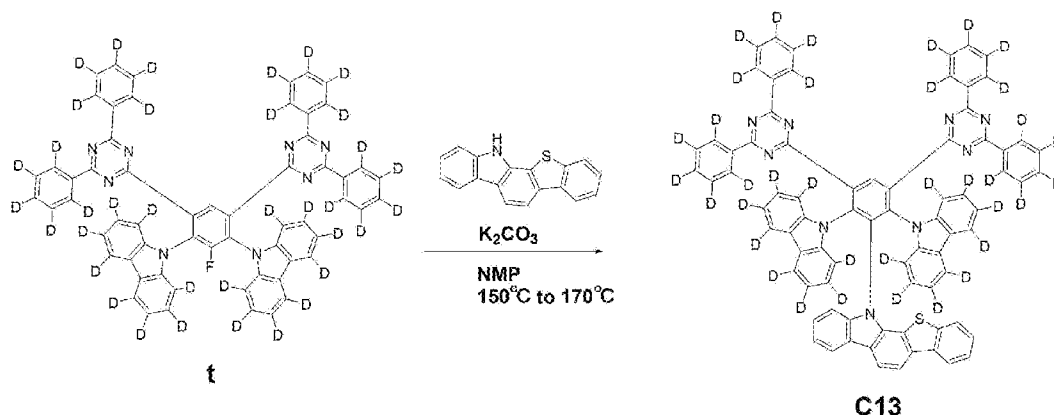
$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3): δ 8.07–8.00 (m, 2H), 7.84 (dd, $J=7.2$ Hz, 12.8 Hz, 2H), 7.69 (s, 1H), 7.63–7.50 (m, 4H), 7.43–7.19 (m, 11H), 7.16–6.69 (m, 7H).

ASAP MS スペクトル分析: $\text{C}_{85}\text{H}_{27}\text{D}_{21}\text{N}_{10}\text{O}_2$: 理論値 1261.53, 観測値 1262.77

[0205] (合成例 1 3) 化合物 C 1 3 の合成

化合物 C 1 3

[化82]



[0206] 窒素気流下、化合物 t (1.0 g, 1.08 mmol)、12H-[1]ベンゾチエノ[2,3-a]カルバゾール (0.59 g, 2.16 mmol) の NMP (11 mL) 溶液に炭酸カリウム (0.45 g, 3.23 mmol) を加え、150°C で 15 時間攪拌した。さらに 170°C に昇温し、3 時間攪拌した。反応溶液を室温に冷却し、水を加えてクエンチした。その溶液をろ過し、漏斗に残存した固体を水、メタノールで洗浄した。その溶液をろ過し、漏斗に残存した固体を水およびメタノールで洗浄した。その固体を加熱した ODCB に溶かし、その溶液を用いたチャージにより、カラムクロマトグラフィー (トルエン : ヘキサン = 1 : 1) にて精製したところ、黄色固体 C13 を得た (0.35 g, 0.29 mmol, 収率 27%)。

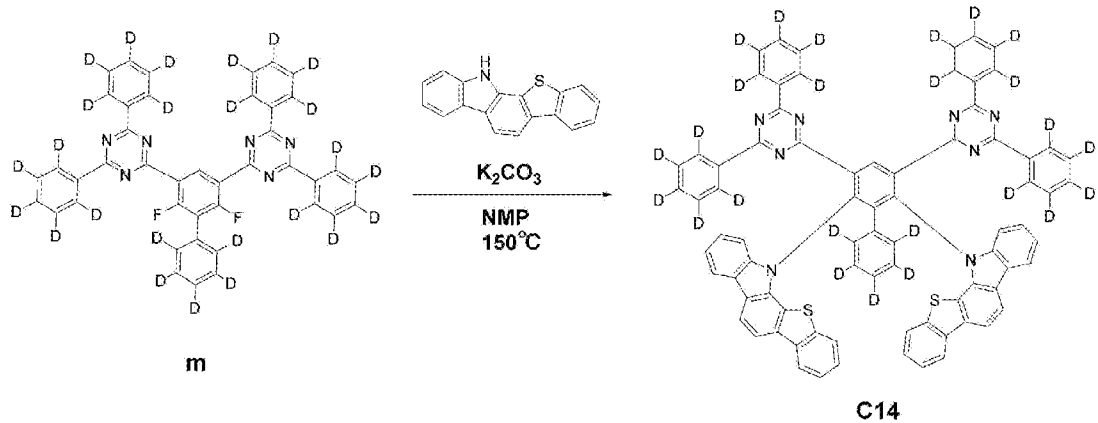
1H -NMR (400 MHz, $CDCl_3$): δ 9.73 (s, 1H), 7.93–7.90 (m, 1H) 7.83–7.80 (m, 1H), 7.61 (m, 5H), 7.08 (d, $J = 8$ Hz, 1H), 6.90–6.84 (m, 1H), 6.81–6.75 (m, 1H).

ASAP MS スペクトル分析 : $C_{78}H_{11}D_{36}N_9S$: 理論値 1177.59, 観測値 1178.71

[0207] (合成例 14) 化合物 C14 の合成

化合物 C14

[化83]



[0208] 窒素気流下、化合物m (2 g, 2.95 mmol)、12H-[1]ベンゾチエノ[2,3-a]カルバゾール (1.60 g, 6.22 mmol) のNMP (90 mL) 溶液に炭酸カリウム (2.41 g, 8.85 mmol) を加え、150°Cで15時間攪拌した。反応溶液を室温に冷却し、水を加えてクエンチした。その固体を加熱したODCBに溶かし、その溶液を用いたチャージにより、カラムクロマトグラフィー (トルエン:ヘキサン=1:1) にて精製したところ、黄色の化合物C14を得た (0.153 g, 1.57 mmol, 収率53%)。

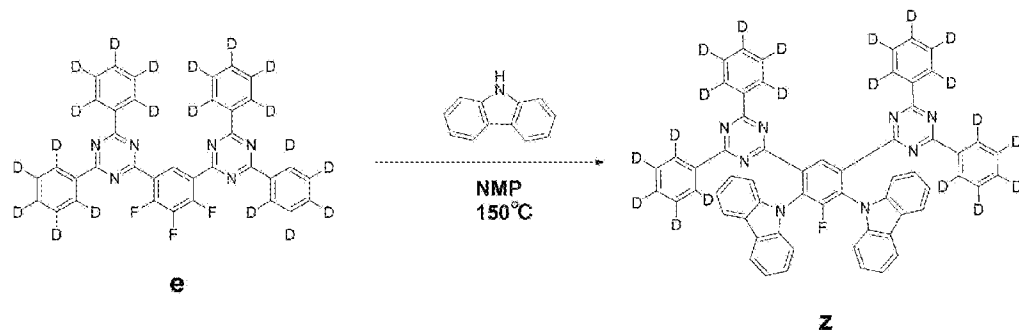
¹H-NMR (400 MHz, CDCl₃): δ 10.18 (s, 1H, major rotamer), 9.95 (s, 1H, minor rotamer), 8.21–8.15 (m, 2H), 7.97–7.91 (m, 7H), 7.81–7.77 (m, 1H), 7.54–7.29 (m, 8H), 7.22–7.17 (m, 2H).

ASAP MSスペクトル分析: C₇₈H₂₁D₂₅N₈S₂: 理論値1183.49, 観測値1184.75

[0209] (合成例15) 比較化合物Aの合成

化合物z

[化84]



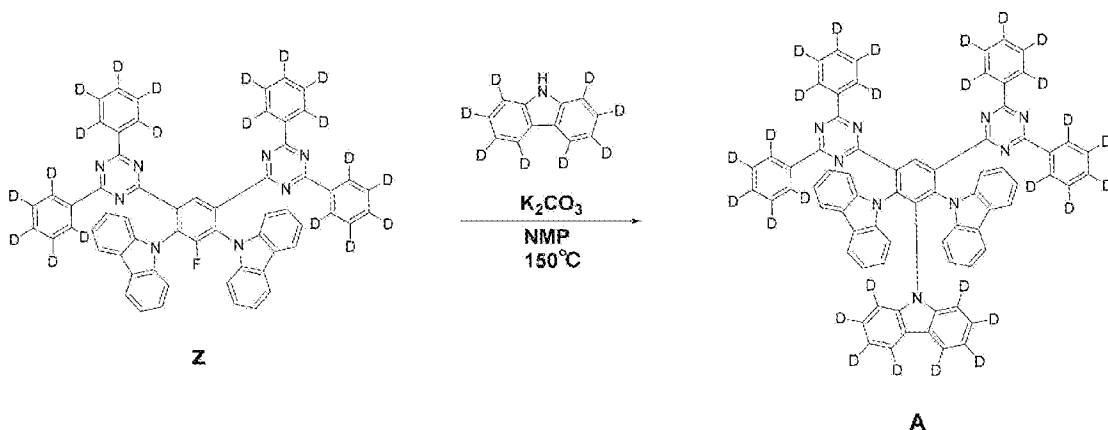
[0210] 窒素気流下、化合物 e (1.50 g, 2.44 mmol)、9H-カルバゾール (0.81 g, 4.88 mmol) の NMP (90 mL) 溶液に炭酸カリウム (0.84 g, 6.10 mmol) を加え、150°C で 3 時間攪拌した。反応溶液を室温に冷却し、水を加えてクエンチした。その溶液をろ過し、漏斗に残存した固体を水で洗浄した。その固体をジクロロメタンに溶解させ、硫酸マグネシウムにて乾燥した。その溶液をエバポレータにて減圧濃縮したのち、カラムクロマトグラフィー (トルエン : ヘキサン = 1 : 1) にて精製し、黄色の化合物 z を得た (1.27 g, 1.39 mmol, 収率 57%)。

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3): δ 9.51 (d, $J=1.6$ Hz, 1H), 8.03 (d, $J=8.0$ Hz, 4H), 7.40–7.37 (m, 8H), 7.28–7.23 (m, 4H).

ASAP MS スペクトル分析: $\text{C}_{60}\text{H}_{17}\text{D}_{20}\text{FN}_8$: 理論値 908.4, 観測値 909.75

[0211] 比較化合物 A

[化85]



[0212] 窒素気流下、化合物 z (1.03 g, 1.13 mmol)、カルバゾール-1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8-d₈ (0.29 g, 1.69 mmol) の NMP (50 mL) 溶液に炭酸カリウム (0.31 g, 2.26 mmol) を加え、130°C で 3 時間攪拌した。反応溶液を室温に冷却し、水を加えてクエンチした。その溶液をろ過し、漏斗に残存した固体を水で洗浄した。その固体をジクロロメタンに溶解させ、硫酸マグネシウムにて乾燥した。その溶液をエバポレータにて減圧濃縮したのち、カラムクロマト

グラフィー（トルエン：ヘキサン＝１：１）にて精製し、黄色の比較化合物 A を得た（０．７８ｇ，０．７３ｍｍｏｌ，収率６５％）。

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3): δ 9.40 (d, $J=4.8$ Hz, 1H), 7.57 (dd, $J=4.8$ Hz, 1.2 Hz, 4H), 7.28–7.24 (m, 4H), 6.98–6.94 (m, 8H).

A S A P M S スペクトル分析： $\text{C}_{72}\text{H}_{17}\text{D}_{28}\text{N}_9$:理論値1063.5, 観測値1063.7

[0213]（実施例１）有機エレクトロルミネッセンス素子の作製と評価

膜厚50 nmのインジウム・スズ酸化物（ITO）からなる陽極が形成されたガラス基板上に、各薄膜を真空蒸着法にて、真空度 5.0×10^{-5} Paで積層した。まず、ITO上にHAT-CNを10 nmの厚さに形成し、その上にNPDを30 nmの厚さに形成し、さらにその上にTrisPCzを10 nmの厚さに形成し、その上にH1を5 nmの厚さに形成した。次に、H1と化合物C1とドーパントEM1を異なる蒸着源から共蒸着し、40 nmの厚さの層を形成して発光層とした。発光層におけるH1の濃度は44.2質量%、化合物C1の濃度は55.0質量%、EM1の濃度は0.8質量%とした。次に、SF3-TRZを10 nmの厚さに形成した後、Li qとSF3-TRZを異なる蒸着源から共蒸着し、30 nmの厚さの層を形成した。この層におけるLi qとSF3-TRZの濃度はそれぞれ30質量%と70質量%である。さらにLi qを2 nmの厚さに形成し、次いでアルミニウム（Al）を100 nmの厚さに蒸着することにより陰極を形成し、有機エレクトロルミネッセンス素子とした。

化合物C1を用いて作製した有機エレクトロルミネッセンス素子を駆動したところ、緑色の遅延蛍光が認められた。6.3 mA/cm²で駆動したときの電圧を測定したところ3.82 Vであった。また、6.3 mA/cm²で駆動したときの外部量子効率（EQE）を測定したところ24.7%の高い値を示した。これらの結果は、一般式（1）で表される化合物を用いた有機発光素子の発光特性が優れていることを示している。

[0214]（実施例２）有機エレクトロルミネッセンス素子の作製と評価

実施例１の有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層の代わりに、H2

と化合物C 1とドーパントEM 1を異なる蒸着源から共蒸着し、H 2の濃度が6 4. 2質量%、化合物C 1の濃度が3 5. 0質量%、EM 1の濃度が0. 8質量%である厚さ4 0 nmの発光層を形成した。それ以外は実施例 1と同じ手順にしたがって有機エレクトロルミネッセンス素子を作製した。

また、実施例 1の有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層を形成する代わりに、H 2と化合物C 3とドーパントEM 1を異なる蒸着源から共蒸着し、H 2の濃度が7 4. 2質量%、化合物C 3の濃度が2 5. 0質量%、EM 1の濃度が0. 8質量%である厚さ4 0 nmの発光層を形成した。それ以外は実施例 1と同じ手順にしたがって有機エレクトロルミネッセンス素子を作製した。また、化合物C 3の代わりに化合物C 4、化合物C 5、化合物C 1 2、化合物C 1 4、比較化合物Aを用いて同様にして有機エレクトロルミネッセンス素子を作製した。

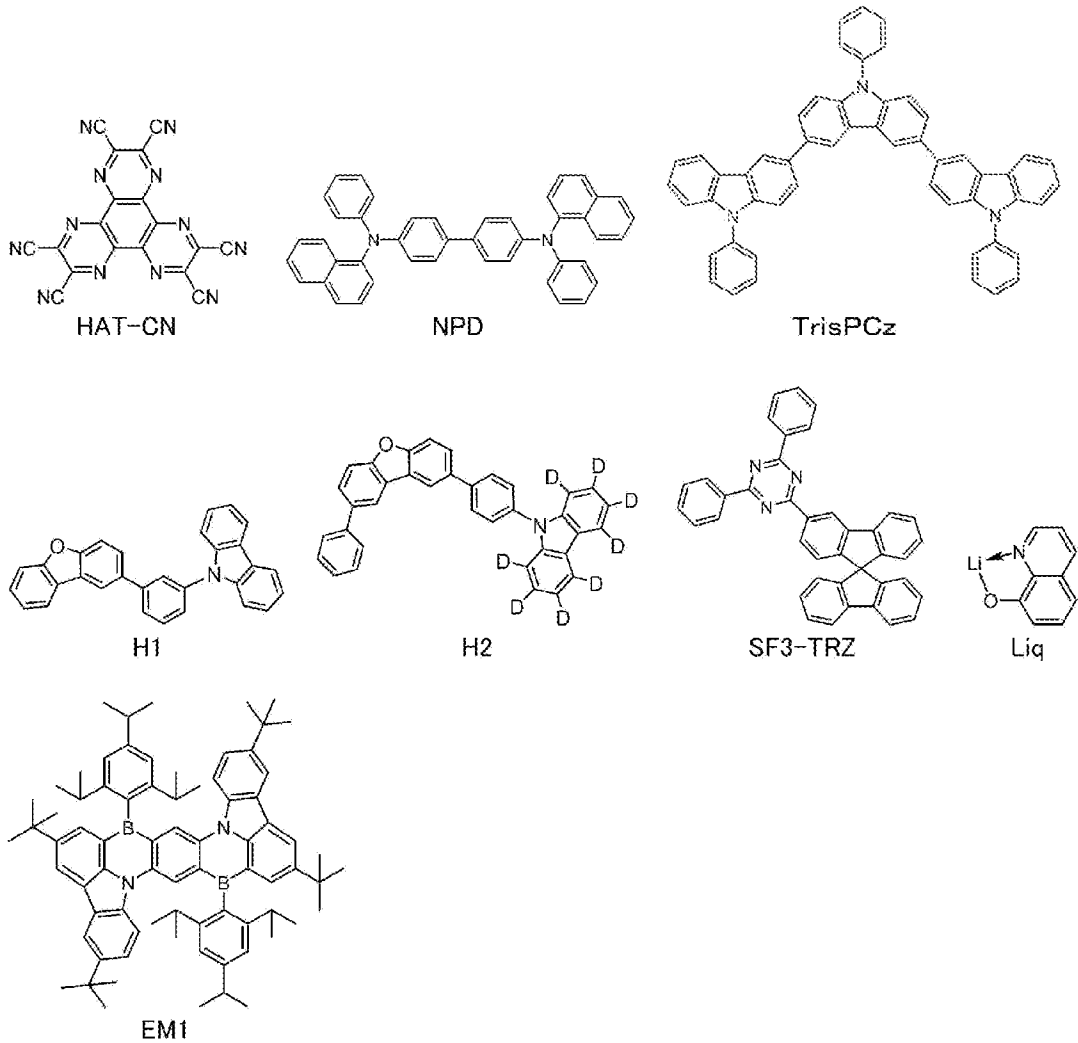
これらの各素子を2 5. 2 mA / c m²で駆動して、駆動開始時から発光強度が9 5%になるまでの時間(L T 9 5)を測定した。測定結果を、比較化合物Aを用いた有機エレクトロルミネッセンス素子のL T 9 5を1としたときの相対値で表9に示した。表9の結果は、一般式(1)で表される化合物を用いた有機発光素子は寿命が長くて優れていることを示している。

[表9]

使用した化合物	寿命(相対値)
化合物C 1	1 2. 7
化合物C 3	1 0. 4
化合物C 4	1 1. 6
化合物C 5	1 0. 9
化合物C 1 2	1 4. 5
化合物C 1 4	9. 5
比較化合物A	1

[0215]

[化86]



産業上の利用可能性

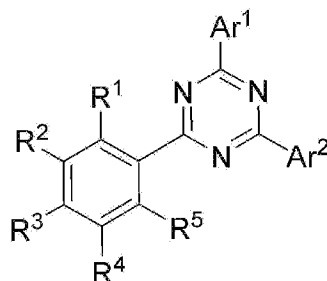
[0216] 一般式(1)で表される化合物を用いた有機発光素子は、発光特性が良好である。このため、本発明は産業上の利用可能性が高い。

請求の範囲

[請求項1] 下記一般式（1）で表される化合物と、ホスト材料またはドープン
ト材料とを同じ層に含む、有機発光素子。

[化1]

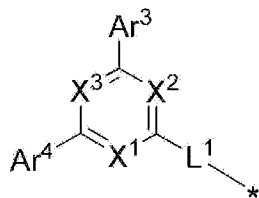
一般式（1）



[一般式（1）において、 $R^1 \sim R^5$ は、各々独立に水素原子、重水
素原子、置換もしくは無置換のアルキル基、置換もしくは無置換のア
リール基、ドナー性基、または下記一般式（2）で表される基を表す
。また、 R^2 または R^3 は下記一般式（2）で表される基であり、 R^1
 $\sim R^5$ のうち2個以上はドナー性基である。 Ar^1 および Ar^2 は、
各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無
置換のヘテロアリール基を表す。

[化2]

一般式（2）



一般式（2）において、 $X^1 \sim X^3$ は、各々独立にNまたはC（R
）を表すが、 $X^1 \sim X^3$ の少なくとも1個はNである。Rは水素原子
、重水素原子または置換基を表す。 Ar^3 および Ar^4 は各々独立に
置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のヘテ
ロアリール基を表す。 L^1 は、単結合または2価の連結基を表す。*
は結合位置を表す。

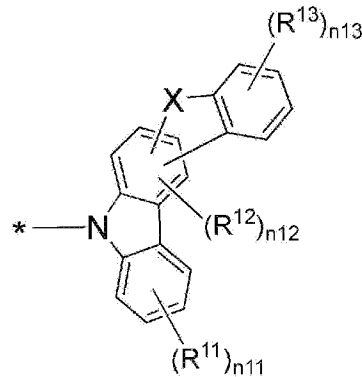
ただし、前記一般式（１）で表される化合物は、 $R^1 \sim R^5$ のうちの１個以上が４環以上の縮環構造を有するドナー性基であるか、 $Ar^1 \sim Ar^4$ のうちの１個以上が置換もしくは無置換のヘテロアリアル基（ただし、窒素含有６員環基を除く）であるか、あるいは、 $R^1 \sim R^5$ と $Ar^1 \sim Ar^4$ がこれらの両方の条件を満たす。]

[請求項２] 前記一般式（１）の $R^1 \sim R^5$ のうちの１個以上が４環以上の縮環構造を有するドナー性基である、請求項１に記載の有機発光素子。

[請求項３] 前記一般式（１）の $R^1 \sim R^5$ のうちの１個以上が下記一般式（３）で表されるドナー性基である、請求項２に記載の有機発光素子。

[化３]

一般式（３）



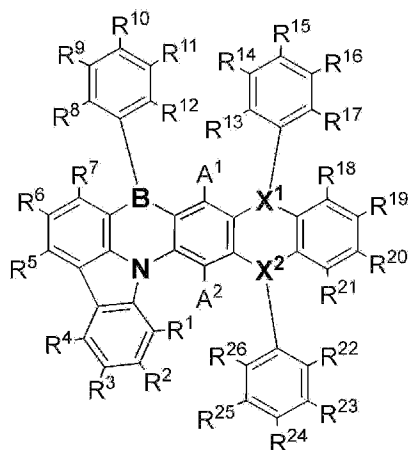
[一般式（３）において、 X は O 、 S または $N-R^{14}$ を表す。 $R^{11} \sim R^{13}$ は各々独立に重水素原子または置換基を表す。 R^{14} は、重水素原子、アルキル基およびアリアル基からなる群より選択される１以上の原子か基で置換されていてもよいアリアル基、あるいは、重水素原子およびアリアル基からなる群より選択される１以上の原子か基で置換されていてもよいアルキル基を表す。 R^{11} 同士、 R^{12} 同士、 R^{13} 同士は、それぞれ互いに結合して環状構造を形成していてもよい。 n_{11} および n_{13} は各々独立に $0 \sim 4$ のいずれかの整数を表し、 n_{12} は $0 \sim 2$ のいずれかの整数を表す。]

[請求項４] 前記一般式（１）および（２）の $Ar^1 \sim Ar^4$ が各々独立に置換もしくは無置換のアリアル基である、請求項２に記載の化合物。

- [請求項5] 前記一般式 (1) および (2) の $A_{r1} \sim A_{r4}$ のうちの 1 個以上が置換もしくは無置換のヘテロアリール基 (ただし、窒素含有 6 員環基を除く) である、請求項 1 に記載の有機発光素子。
- [請求項6] 前記一般式 (1) および (2) の $A_{r1} \sim A_{r4}$ のうちの 1 個以上が窒素原子で結合する 5 員環を有するヘテロアリール基である、請求項 5 に記載の有機発光素子。
- [請求項7] 前記一般式 (1) の R^2 が前記一般式 (2) で表される基である、請求項 1 に記載の有機発光素子。
- [請求項8] 前記一般式 (1) の R^3 が前記一般式 (2) で表される基である、請求項 1 に記載の有機発光素子。
- [請求項9] 前記ドナー性基が置換もしくは無置換のカルバゾール-9-イル基である、請求項 1 に記載の有機発光素子。
- [請求項10] 前記一般式 (1) の $R^1 \sim R^5$ のうちの 3 個がドナー性基である、請求項 1 に記載の有機発光素子。
- [請求項11] 前記一般式 (2) の $X^1 \sim X^3$ が N である、請求項 1 に記載の有機発光素子。
- [請求項12] 前記一般式 (2) の L^1 が単結合である、請求項 1 に記載の有機発光素子。
- [請求項13] 前記一般式 (1) の R^1 が水素原子である、請求項 1 に記載の有機発光素子。
- [請求項14] 前記化合物が重水素原子を少なくとも 1 つ有する、請求項 1 に記載の有機発光素子。
- [請求項15] 前記層が前記ドーパント材料を含む、請求項 1 ~ 14 のいずれか 1 項に記載の有機発光素子。
- [請求項16] 前記ドーパント材料からの発光量が前記化合物からの発光量よりも多い、請求項 15 に記載の有機発光素子。
- [請求項17] 前記ドーパント材料が下記一般式 (4) で表される化合物である、請求項 15 に記載の有機発光素子。

[化4]

一般式 (4)



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

ある場合は R^7 と R^8 、 R^{17} と R^{18} が互いに結合して $-B(R^{32})-$ 、 $-CO-$ 、 $-CS-$ または $-N(R^{27})-$ を形成している。 R^{27} は水素原子、重水素原子または置換基を表す。]

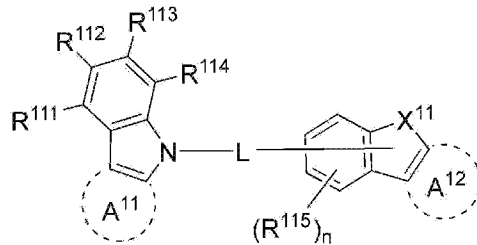
[請求項18] 前記層が前記宿主材料を含む、請求項1～14のいずれか1項に記載の有機発光素子。

[請求項19] 前記層に含まれる材料のうち、前記化合物からの発光量が最大である、請求項18に記載の有機発光素子。

[請求項20] 前記宿主材料が下記一般式(5)で表される化合物である、請求項18に記載の有機発光素子。

[化5]

一般式(5)



一般式(5)

[一般式(5)において、 X^{11} は、O、S、N(R^A)またはC(R^B)(R^C)を表す。 A^{11} および A^{12} は、各々独立にベンゼン環、フラン環、チオール環、ピロール環またはシクロペンタジエン環であって、これらの環にはさらに他の環が縮合していてもよく、また置換されていてもよい。 $R^{111} \sim R^{114}$ 、 R^B 、 R^C は、各々独立に水素原子、重水素原子、置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、置換もしくは無置換のアルキル基、またはシアノ基を表す。 R^{115} は、各々独立に水素原子、重水素原子、置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、置換もしくは無置換のアルキル基、シアノ基、またはLとの結合を表す。 R^A は、置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のヘテロアリール基、置換もしくは無置換のアルキル基、またはL

との結合を表す。R¹¹¹とR¹¹²、R¹¹²とR¹¹³、R¹¹³とR¹¹⁴、隣り合う2個のR¹¹⁵、R^BとR^Cは、互いに結合して環状構造を形成していてもよい。nは3または4のいずれかの整数を表す。Lは単結合、置換もしくは無置換のアリーレン基、置換もしくは無置換のヘテロアリーレン基、またはこれらの2個以上が結合した連結基を表す。
]

[請求項21] 遅延蛍光を放射する、請求項1～14のいずれか1項に記載の有機発光素子。

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2024/012428

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER		
<i>H10K 50/12</i> (2023.01)i; <i>C07D 403/14</i> (2006.01)i; <i>C07D 491/048</i> (2006.01)i; <i>C09K 11/06</i> (2006.01)i; <i>H10K 85/60</i> (2023.01)i; <i>H10K 101/20</i> (2023.01)n; <i>H10K 101/40</i> (2023.01)n FI: H10K50/12; C07D403/14; C07D491/048; C09K11/06 660; C09K11/06 690; H10K85/60; H10K101:20; H10K101:40		
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) H10K50/00-H10K102/20; C07D403/14; C07D491/048; C09K11/06		
Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched Published examined utility model applications of Japan 1922-1996 Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2024 Registered utility model specifications of Japan 1996-2024 Published registered utility model applications of Japan 1994-2024		
Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) CAplus/REGISTRY (STN)		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	WO 2018/237385 A1 (KYULUX, INC.) 27 December 2018 (2018-12-27) claims, p. 29, line 13 to p. 69, line 1	1-21
A	WO 2020/189117 A1 (KONICA MINOLTA, INC.) 24 September 2020 (2020-09-24) paragraphs [0036]-[0038], [0128], [0135]	1-21
A	JP 2022-500481 A (LG CHEM, LTD.) 04 January 2022 (2022-01-04) entire text	1-21
A	JP 2022-501333 A (LG CHEM, LTD.) 06 January 2022 (2022-01-06) entire text	1-21
A	WO 2021/040467 A1 (LG CHEM, LTD.) 04 March 2021 (2021-03-04) entire text	1-21
<input checked="" type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex.		
* Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "D" document cited by the applicant in the international application "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed "T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art "&" document member of the same patent family		
Date of the actual completion of the international search 23 May 2024		Date of mailing of the international search report 04 June 2024
Name and mailing address of the ISA/JP Japan Patent Office (ISA/JP) 3-4-3 Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915 Japan		Authorized officer Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2024/012428

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	KR 10-2018-0047306 A (RESEARCH & BUSINESS FOUNDATION SUNGKYUNKWAN UNIVERSITY) 10 May 2018 (2018-05-10) entire text	1-21
A	CN 105481845 A (SHANGHAI TIANMA ORGANIC LIGHT-EMITTING DISPLAY TECHNOLOGY CO., LTD.) 13 April 2016 (2016-04-13) whole document	1-21
P, X	CN 115894457 A (BEIJING ETERNAL MATERIAL TECHNOLOGY CO., LTD.) 04 April 2023 (2023-04-04) claims, paragraphs [0007]-[0113], [0133]-[0142], [0160]-[0173]	1-2, 4, 7-13, 15, 18-21
P, A		3, 5-6, 14, 16-17

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/JP2024/012428

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
WO	2018/237385	A1	27 December 2018	US 2020/0115364 A1 US 2020/0115376 A1 US 2020/0119287 A1 WO 2018/237389 A1 WO 2018/237393 A1 EP 3642303 A1 KR 10-2020-0019694 A CN 110914378 A KR 10-2020-0023371 A JP 2020-525438 A JP 2020-525437 A	
WO	2020/189117	A1	24 September 2020	US 2022/0185824 A1 paragraphs [0051]-[0055], [0109], D-144, D-145, D-162, D-163	
JP	2022-500481	A	04 January 2022	US 2021/0355128 A1 US 2021/0363132 A1 US 2021/0399232 A1 WO 2020/111673 A1 EP 3842428 A1 KR 10-2020-0063060 A CN 112673004 A TW 202026291 A	
JP	2022-501333	A	06 January 2022	US 2021/0355128 A1 US 2021/0363132 A1 WO 2020/111780 A1 EP 3842428 A1 EP 3854792 A1 KR 10-2020-0063076 A CN 112673004 A CN 112673005 A TW 202026291 A TW 202026401 A	
WO	2021/040467	A1	04 March 2021	KR 10-2021-0027172 A CN 113454078 A	
KR	10-2018-0047306	A	10 May 2018	(Family: none)	
CN	105481845	A	13 April 2016	(Family: none)	
CN	115894457	A	04 April 2023	(Family: none)	

<p>A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC））</p> <p>H10K 50/12(2023.01)i; C07D 403/14(2006.01)i; C07D 491/048(2006.01)i; C09K 11/06(2006.01)i; H10K 85/60(2023.01)i; H10K 101/20(2023.01)n; H10K 101/40(2023.01)n FI: H10K50/12; C07D403/14; C07D491/048; C09K11/06 660; C09K11/06 690; H10K85/60; H10K101:20; H10K101:40</p>																																		
<p>B. 調査を行った分野</p> <p>調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC））</p> <p>H10K50/00-H10K102/20; C07D403/14; C07D491/048; C09K11/06</p> <p>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</p> <table border="0"> <tr> <td>日本国実用新案公報</td> <td>1922 - 1996年</td> </tr> <tr> <td>日本国公開実用新案公報</td> <td>1971 - 2024年</td> </tr> <tr> <td>日本国実用新案登録公報</td> <td>1996 - 2024年</td> </tr> <tr> <td>日本国登録実用新案公報</td> <td>1994 - 2024年</td> </tr> </table> <p>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）</p> <p>CAplus/REGISTRY (STN)</p>			日本国実用新案公報	1922 - 1996年	日本国公開実用新案公報	1971 - 2024年	日本国実用新案登録公報	1996 - 2024年	日本国登録実用新案公報	1994 - 2024年																								
日本国実用新案公報	1922 - 1996年																																	
日本国公開実用新案公報	1971 - 2024年																																	
日本国実用新案登録公報	1996 - 2024年																																	
日本国登録実用新案公報	1994 - 2024年																																	
<p>C. 関連すると認められる文献</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>引用文献の カテゴリー*</th> <th>引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示</th> <th>関連する 請求項の番号</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>A</td> <td>WO 2018/237385 A1 (KYULUX, INC.) 27.12.2018 (2018 - 12 - 27) Claims, p.29, 113 - p.69, 1.1</td> <td>1-21</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td>WO 2020/189117 A1 (コニカミノルタ株式会社) 24.09.2020 (2020 - 09 - 24) 段落[0036]-[0038], [0128], [0135]</td> <td>1-21</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td>JP 2022-500481 A (エルジー・ケム・リミテッド) 04.01.2022 (2022 - 01 - 04) 全文</td> <td>1-21</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td>JP 2022-501333 A (エルジー・ケム・リミテッド) 06.01.2022 (2022 - 01 - 06) 全文</td> <td>1-21</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td>WO 2021/040467 A1 (LG CHEM, LTD.) 04.03.2021 (2021 - 03 - 04) 全文</td> <td>1-21</td> </tr> </tbody> </table> <p><input checked="" type="checkbox"/> C欄の続きにも文献が列挙されている。 <input checked="" type="checkbox"/> パテントファミリーに関する別紙を参照。</p> <table border="0"> <tr> <td>* 引用文献のカテゴリー</td> <td>“T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの</td> </tr> <tr> <td>“A” 特に関連のある文献ではなく、一般的技术水準を示すもの</td> <td>“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</td> </tr> <tr> <td>“D” 国際出願で出願人が先行技術文献として記載した文献</td> <td>“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</td> </tr> <tr> <td>“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</td> <td>“&” 同一パテントファミリー文献</td> </tr> <tr> <td>“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）</td> <td></td> </tr> <tr> <td>“O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献</td> <td></td> </tr> <tr> <td>“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</td> <td></td> </tr> </table>			引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号	A	WO 2018/237385 A1 (KYULUX, INC.) 27.12.2018 (2018 - 12 - 27) Claims, p.29, 113 - p.69, 1.1	1-21	A	WO 2020/189117 A1 (コニカミノルタ株式会社) 24.09.2020 (2020 - 09 - 24) 段落[0036]-[0038], [0128], [0135]	1-21	A	JP 2022-500481 A (エルジー・ケム・リミテッド) 04.01.2022 (2022 - 01 - 04) 全文	1-21	A	JP 2022-501333 A (エルジー・ケム・リミテッド) 06.01.2022 (2022 - 01 - 06) 全文	1-21	A	WO 2021/040467 A1 (LG CHEM, LTD.) 04.03.2021 (2021 - 03 - 04) 全文	1-21	* 引用文献のカテゴリー	“T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの	“A” 特に関連のある文献ではなく、一般的技术水準を示すもの	“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	“D” 国際出願で出願人が先行技術文献として記載した文献	“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	“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	“&” 同一パテントファミリー文献	“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	
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号																																
A	WO 2018/237385 A1 (KYULUX, INC.) 27.12.2018 (2018 - 12 - 27) Claims, p.29, 113 - p.69, 1.1	1-21																																
A	WO 2020/189117 A1 (コニカミノルタ株式会社) 24.09.2020 (2020 - 09 - 24) 段落[0036]-[0038], [0128], [0135]	1-21																																
A	JP 2022-500481 A (エルジー・ケム・リミテッド) 04.01.2022 (2022 - 01 - 04) 全文	1-21																																
A	JP 2022-501333 A (エルジー・ケム・リミテッド) 06.01.2022 (2022 - 01 - 06) 全文	1-21																																
A	WO 2021/040467 A1 (LG CHEM, LTD.) 04.03.2021 (2021 - 03 - 04) 全文	1-21																																
* 引用文献のカテゴリー	“T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの																																	
“A” 特に関連のある文献ではなく、一般的技术水準を示すもの	“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																																	
“D” 国際出願で出願人が先行技術文献として記載した文献	“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																																	
“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	“&” 同一パテントファミリー文献																																	
“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																																		
<p>国際調査を完了した日</p> <p>23.05.2024</p>	<p>国際調査報告の発送日</p> <p>04.06.2024</p>																																	
<p>名称及びあて先</p> <p>日本国特許庁 (ISA/JP) 〒100-8915 日本国 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号</p>	<p>権限のある職員（特許庁審査官）</p> <p>横川 美穂 2K 4749</p> <p>電話番号 03-3581-1101 内線 3255</p>																																	

C. 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリ*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
A	KR 10-2018-0047306 A (RESEARCH & BUSINESS FOUNDATION SUNGKYUNKWAN UNIVERSITY) 10.05.2018 (2018 - 05 - 10) 全文	1-21
A	CN 105481845 A (SHANGHAI TIANMA ORGANIC LIGHT-EMITTING DISPLAY TECHNOLOGY CO., LTD.) 13.04.2016 (2016 - 04 - 13) Whole Documents	1-21
P, X	CN 115894457 A (BEIJING ETERNAL MATERIAL TECHNOLOGY CO., LTD.) 04.04.2023 (2023 - 04 - 04) [特許請求の範囲], 段落[0007]-[0113], [0133]-[0142], [0160]-[0173]	1-2, 4, 7-13, 15, 18-21
P, A		3, 5-6, 14, 16-17

国際調査報告
 パテントファミリーに関する情報

国際出願番号

PCT/JP2024/012428

引用文献	公表日	パテントファミリー文献	公表日
WO 2018/237385 A1	27.12.2018	US 2020/0115364 A1 US 2020/0115376 A1 US 2020/0119287 A1 WO 2018/237389 A1 WO 2018/237393 A1 EP 3642303 A1 KR 10-2020-0019694 A CN 110914378 A KR 10-2020-0023371 A JP 2020-525438 A JP 2020-525437 A	
WO 2020/189117 A1	24.09.2020	US 2022/0185824 A1 paras. [0051]-[0055], [0109]D-144, D-145, D-162, D-163	
JP 2022-500481 A	04.01.2022	US 2021/0355128 A1 US 2021/0363132 A1 US 2021/0399232 A1 WO 2020/111673 A1 EP 3842428 A1 KR 10-2020-0063060 A CN 112673004 A TW 202026291 A	
JP 2022-501333 A	06.01.2022	US 2021/0355128 A1 US 2021/0363132 A1 WO 2020/111780 A1 EP 3842428 A1 EP 3854792 A1 KR 10-2020-0063076 A CN 112673004 A CN 112673005 A TW 202026291 A TW 202026401 A	
WO 2021/040467 A1	04.03.2021	KR 10-2021-0027172 A CN 113454078 A	
KR 10-2018-0047306 A	10.05.2018	(ファミリーなし)	
CN 105481845 A	13.04.2016	(ファミリーなし)	
CN 115894457 A	04.04.2023	(ファミリーなし)	