

(19) 日本国特許庁(JP)

再公表特許(A1)

(11) 国際公開番号

W02012/105629

発行日 平成26年7月3日(2014.7.3)

(43) 国際公開日 平成24年8月9日(2012.8.9)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
H01L 51/50 (2006.01)	H05B 33/22 B	3K107
C09K 11/06 (2006.01)	H05B 33/14 A	4C050
C07D 235/26 (2006.01)	H05B 33/22 A	4C065
C07D 487/04 (2006.01)	C09K 11/06 690	4C072
C07D 513/04 (2006.01)	C07D 235/26 C S P C	
審査請求 未請求 予備審査請求 未請求 (全 95 頁) 最終頁に続く		

出願番号	特願2012-555942 (P2012-555942)	(71) 出願人	000183646 出光興産株式会社 東京都千代田区丸の内3丁目1番1号
(21) 国際出願番号	PCT/JP2012/052319	(74) 代理人	100078732 弁理士 大谷 保
(22) 国際出願日	平成24年2月1日(2012.2.1)	(74) 代理人	100135758 弁理士 伊藤 高志
(31) 優先権主張番号	特願2011-21240 (P2011-21240)	(72) 発明者	水谷 清香 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地
(32) 優先日	平成23年2月2日(2011.2.2)	(72) 発明者	佐土 貴康 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地
(33) 優先権主張国	日本国(JP)	(72) 発明者	石田 弘毅 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地
		Fターム(参考)	3K107 AA01 BB01 BB02 CC04 CC12 DD76 DD78 DD84 DD86 最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 含窒素複素環誘導体、有機エレクトロルミネッセンス素子用電子輸送材料、及びそれを用いてなる有機エレクトロルミネッセンス素子

(57) 【要約】

ウレア構造を有する特定の含窒素複素環化合物、それからなる電子輸送材料、及び陰極と陽極との間に、発光層及び電子輸送層を含み、該電子輸送層が、前記電子輸送材料もしくは前記含窒素複素環誘導体を含む有機エレクトロルミネッセンス素子により、低電圧でありながら発光効率が高い有機EL素子及びそれを実現する有機EL素子用材料を提供する。

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

下記一般式(1)で表される電子輸送材料。



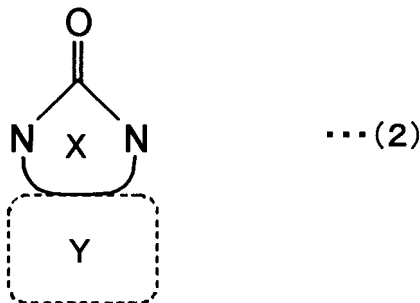
(式中、

L_1 、 L_2 、 L_3 及び L_4 は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキレン基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルケニレン基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキニレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリーレン基であり、

Ar_1 は置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基であり、

A_1 は下記一般式(2)で表される環構造含有化合物のm価の残基を表し、
mは1以上の整数を表す。)

【化 1】



(式中、環Xは窒素原子及び炭素原子を環形成原子とする置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の5～8員環であり、

また、環Xは、1以上の環Yと縮合していてもよく、

該環Yは、置換もしくは無置換の炭化水素環、又は置換もしくは無置換の複素環である。)

【請求項 2】

下記一般式(1-1)で表される電子輸送材料。



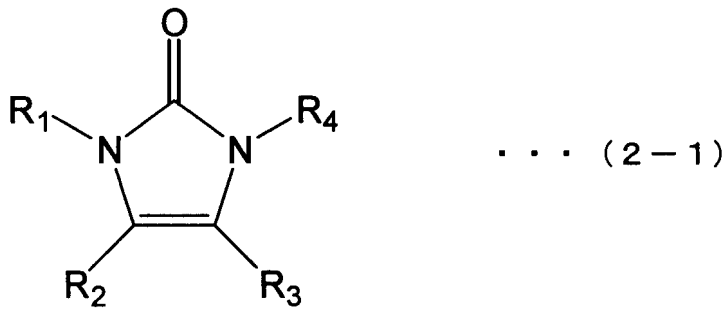
(式中、

L_{11} 、 L_{21} 、 L_{31} 及び L_{41} は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキレン基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルケニレン基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキニレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリーレン基であり、

Ar_{11} は置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基であり、

A_{11} は下記一般式(2-1)で表される環構造含有化合物のp価の残基を表し、
pは1以上の整数を表す。)

【化 2】



10

(式中、 $R_1 \sim R_4$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーロキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリーロキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリーロシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、スルホニル基、ボリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキシル基、又は L_{11} と結合する結合手を表すか、あるいは、 R_1 と R_2 、 R_2 と R_3 、 R_3 と R_4 は、それぞれ互いに結合して置換もしくは無置換の炭化水素環、又は置換もしくは無置換の複素環である環 Y を形成する。)

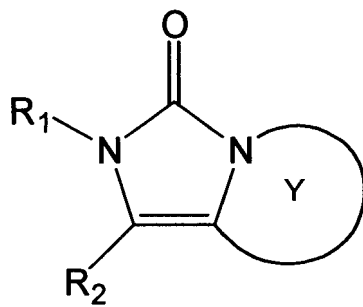
20

30

【請求項 3】

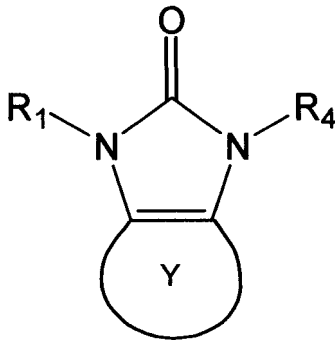
前記 A_{11} が、下記一般式 (2-1-1)、(2-1-2) 又は (2-1-3) で表される化合物の p 個の残基を表す請求項 2 に記載の電子輸送材料。

【化 3】



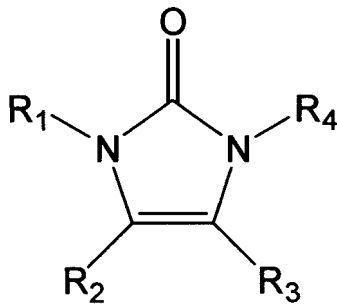
... (2-1-1)

10



... (2-1-2)

20



... (2-1-3)

30

(式中、 $R_1 \sim R_4$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数1～50のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数1

40

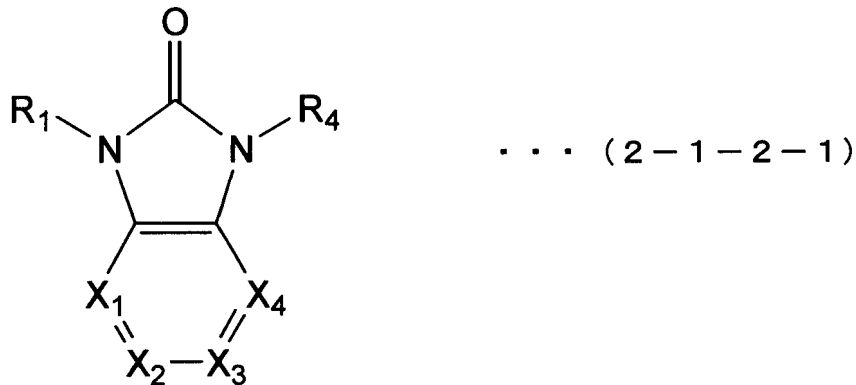
Yは、前記環Yを表す。)

50

【請求項 4】

前記 A₁₁が、下記一般式(2-1-2-1)で表される化合物の p 価の残基を表す請求項 2 又は 3 に記載の電子輸送材料。

【化 4】



10

(式中、X₁ ~ X₄は、それぞれ独立に、C R₅又はNを表し、

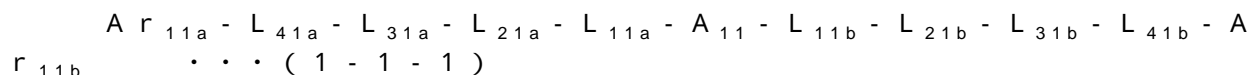
R₁、R₄及びR₅は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーロキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリーロキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリーロキシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、スルホニル基、ポリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキシル基、又はL₁₁と結合する結合手を表すか、あるいは、それぞれ互いに結合して前記環 Y の一部を構成する環を形成する。)

20

30

【請求項 5】

下記一般式(1-1-1)で表される請求項 2 ~ 4 のいずれかに記載の電子輸送材料。



40

(式中、

L_{11a}、L_{21a}、L_{31a}、L_{41a}、L_{11b}、L_{21b}、L_{31b}及びL_{41b}は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキレン基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニレン基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリーレン基であり、

A₁₁は、前記一般式(2-1)、(2-1-1)、(2-1-2)、(2-1-3)又は(2-1-2-1)で表される化合物の 2 価の残基を表し、

50

Ar_{11a} は置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基であり、

Ar_{11b} は置換もしくは無置換の環形成炭素数12～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数12～30のヘテロアリール基である。))

【請求項6】

下記一般式(1-2)で表される電子輸送材料。



(式中、

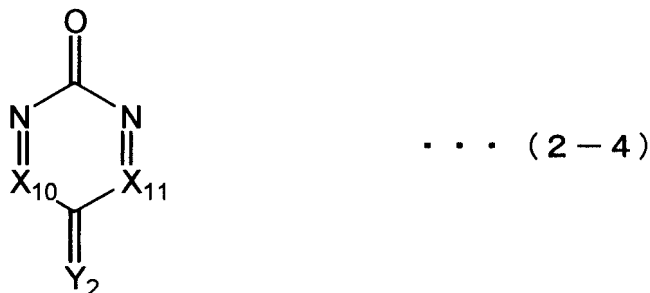
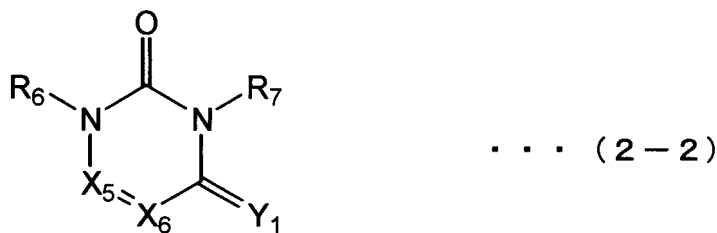
L_{12} 、 L_{22} 、 L_{32} 及び L_{42} は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキレン基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルケニレン基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキニレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリーレン基であり、

Ar_{12} は置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基であり、

A_{12} は下記一般式(2-2)、(2-3)又は(2-4)で表される化合物のq価の残基を表し、

qは1以上の整数を表す。)

【化5】



(式中、 $X_5 \sim X_{11}$ は、それぞれ独立に、 CR_9 又はNを表し、

Y_1 及び Y_2 は、それぞれ独立に、 $CR_{10}R_{11}$ 又は NR_{12} を表し、

$R_6 \sim R_{12}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の

10

20

30

40

50

炭素数 1 ~ 50 のアルコキシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、スルホニル基、ポリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキシル基、又は L_{12} と結合する結合手を表すか、あるいは、それぞれ互いに結合して置換もしくは無置換の炭化水素環、又は置換もしくは無置換の複素環である環 Y を形成する。)

10

20

30

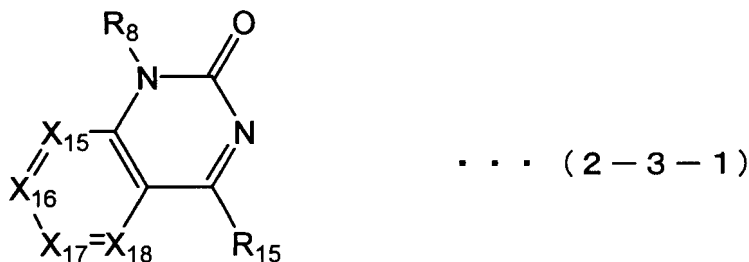
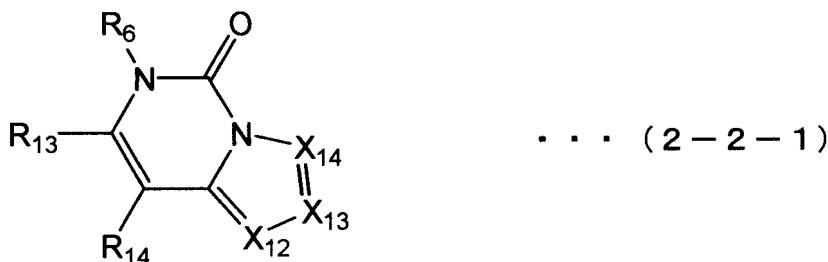
40

50

【請求項 7】

前記 A_{12} が下記一般式 (2-2-1) 又は (2-3-1) で表される化合物の q 個の残基を表す請求項 6 に記載の電子輸送材料。

【化 6】



(式中、 $X_{12} \sim X_{18}$ は、それぞれ独立に、 CR_{16} 又は N を表し、

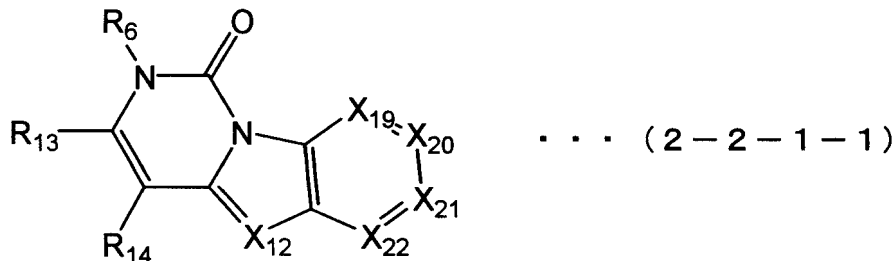
R_6 、 R_8 及び $R_{13} \sim R_{16}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールシリル基、置換もしくは無置換

の環形成炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、スルホニル基、ポリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキシル基、又は L_{12} と結合する結合手を表すか、あるいは、それぞれ互いに結合して置換もしくは無置換の炭化水素環、又は置換もしくは無置換の複素環を形成する。) 10

【請求項 8】

前記 A_{12} が下記一般式 (2 - 2 - 1 - 1) で表される化合物の q 価の残基を表す請求項 6 又は 7 に記載の電子輸送材料。

【化 7】



20

(式中 X_{12} 及び $X_{19} \sim X_{22}$ は、それぞれ独立に、C R_{17} 又は N を表し、

R_6 、 R_{13} 、 R_{14} 及び R_{17} は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、スルホニル基、ポリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキシル基、又は L_{12} と結合する結合手を表すか、あるいは、それぞれ互いに結合して置換もしくは無置換の炭化水素環、又は置換もしくは無置換の複素環を形成する。) 30

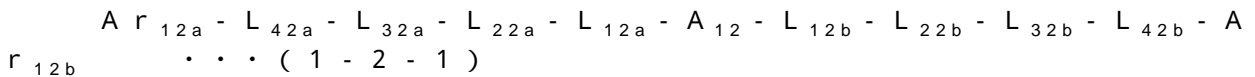
30

40

【請求項 9】

下記一般式 (1 - 2 - 1) で表される請求項 6 ~ 8 のいずれかに記載の電子輸送材料。

50



(式中、

L_{12a} 、 L_{22a} 、 L_{32a} 、 L_{42a} 、 L_{12b} 、 L_{22b} 、 L_{32b} 及び L_{42b} は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキレン基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルケニレン基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキニレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリーレン基であり、

A_{12} は、一般式(2-2)、(2-2-1)、(2-2-1-1)、(2-3)、(2-3-1)又は(2-4)で表される化合物の2価の残基を表し、

$A r_{12a}$ は置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基であり、

$A r_{12b}$ は置換もしくは無置換の環形成炭素数12～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数12～30のヘテロアリール基である。)

【請求項10】

前記環Yが、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30の非縮合芳香族炭化水素環、置換もしくは無置換の環形成炭素数10～30の縮合芳香族炭化水素環、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の非縮合複素環、又は置換もしくは無置換の環形成原子数10～30の縮合複素環である請求項1～9のいずれかに記載の電子輸送材料。

【請求項11】

下記一般式(1-1)で表される含窒素複素環誘導体。



(式中、

L_{11} 、 L_{21} 、 L_{31} 及び L_{41} は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキレン基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルケニレン基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキニレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリーレン基であり、

$A r_{11}$ は置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基であり、

A_{11} は下記一般式(2-1)で表される環構造含有化合物のp価の残基を表し、

pは1以上の整数を表す。

但し、 L_{11} 、 L_{21} 、 L_{31} 及び L_{41} のいずれか1つ以上が、置換もしくは無置換のアントラセニレン基、置換もしくは無置換のフェナントレニレン基、置換もしくは無置換のクリセニレン基、置換もしくは無置換のピレニレン基、置換もしくは無置換のアセナフチレニレン基、置換もしくは無置換のアセナフテニレン基、置換もしくは無置換のフルオランテニレン基、置換もしくは無置換のフルオレニレン基、置換もしくは無置換のナフチレン基、置換もしくは無置換のベンゾフルオランテニレン基、置換もしくは無置換のベンゾフェナントレニレン基、置換もしくは無置換のベンゾクリセニレン基、置換もしくは無置換のベンゾトリフェニレニレン基、置換もしくは無置換のベンゾアントラセニレン基、置換もしくは無置換のジベンゾフェナントレニレン基、又は置換もしくは無置換のトリフェニレニレン基を表すか、あるいは、 $A r_{11}$ が、置換もしくは無置換のアントラセニル基、置換もしくは無置換のクリセニル基、置換もしくは無置換のピレニル基、置換もしくは無置換のアセナフチレニル基、置換もしくは無置換のアセナフテニル基、置換もしくは無置換のフルオランテニル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換のナフ

10

20

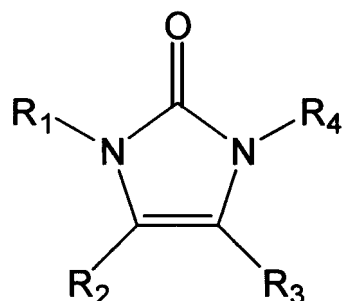
30

40

50

チル基、置換もしくは無置換のベンゾフルオランテニル基、置換もしくは無置換のベンゾフェナントレニル基、置換もしくは無置換のベンゾクリセニル基、置換もしくは無置換のベンゾトリフェニレニル基、置換もしくは無置換のベンゾアントラセニル基、置換もしくは無置換のジベンゾフェナントレニル基、又は置換もしくは無置換のトリフェニレニル基を表す。)

【化 8】



・・・ (2-1)

10

(式中、 $R_1 \sim R_4$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーロキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリーロキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリーロキシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、スルホニル基、ポリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキシル基、又は L_{11} と結合する結合手を表すか、あるいは、 R_1 と R_2 、 R_2 と R_3 、 R_3 と R_4 は、それぞれ互いに結合して置換もしくは無置換の炭化水素環、又は置換もしくは無置換の複素環である環 Y を形成する。)

20

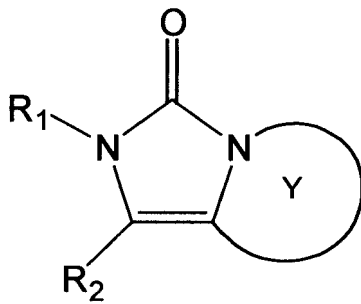
30

【請求項 1 2】

前記 A_{11} が、下記一般式 (2-1-1)、(2-1-2) 又は (2-1-3) で表される化合物の p 価の残基を表す請求項 1 1 に記載の含窒素複素環誘導体。

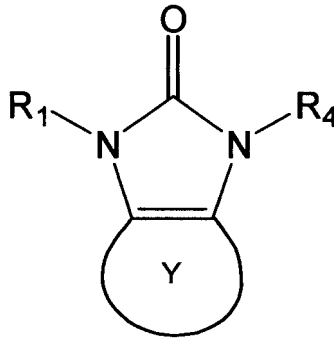
40

【化 9】



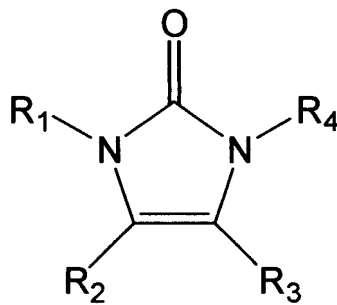
... (2-1-1)

10



... (2-1-2)

20



... (2-1-3)

30

(式中、 $R_1 \sim R_4$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数1～50のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数1

40

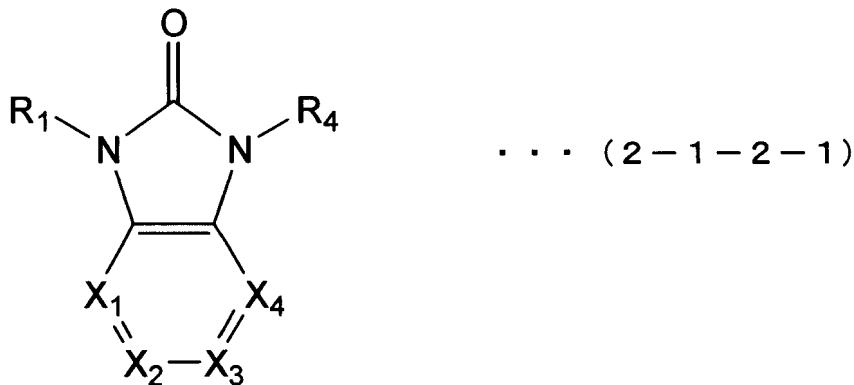
Yは、前記環Yを表す。)

50

【請求項 13】

前記 A₁₁が、下記一般式(2-1-2-1)で表される化合物のp個の残基を表す請求項 11 又は 12 に記載の含窒素複素環誘導体。

【化 10】



10

(式中、X₁~X₄は、それぞれ独立に、C R₅又はNを表し、

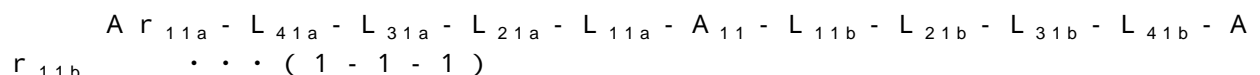
R₁、R₄及びR₅は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルコキシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3~50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数5~30のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数1~50のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数1~50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数5~30のヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数2~50のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数5~30のヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数2~50のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリールオキシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリールチオ基、スルホニル基、ポリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキシル基、又はL₁₁と結合する結合手を表すか、あるいは、それぞれ互いに結合して前記環Yの一部を構成する環を形成する。)

20

30

【請求項 14】

下記一般式(1-1-1)で表される請求項 11~13 のいずれかに記載の含窒素複素環誘導体。



(式中、

L_{11a}、L_{21a}、L_{31a}、L_{41a}、L_{11b}、L_{21b}、L_{31b}及びL_{41b}は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキレン基、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルケニレン基、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキニレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3~50のシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5~30のヘテロアリーレン基であり、

A₁₁は、一般式(2-1)、(2-1-1)、(2-1-2)、(2-1-3)又は(

40

50

2 - 1 - 2 - 1) で表される化合物の 2 価の残基を表し、

$A r_{11a}$ は置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基であり、

$A r_{11b}$ は置換もしくは無置換の環形成炭素数 12 ~ 30 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 12 ~ 30 のヘテロアリール基である。))

【請求項 15】

下記一般式 (1 - 2) で表される含窒素複素環誘導体。



10

(式中、

L_{12} 、 L_{22} 、 L_{32} 及び L_{42} は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキレン基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニレン基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリーレン基であり、

$A r_{12}$ は置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基であり、

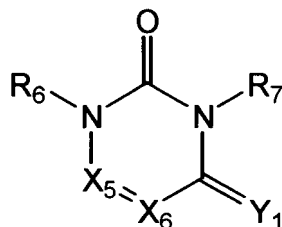
20

A_{12} は下記一般式 (2 - 2)、(2 - 3) 又は (2 - 4) で表される環構造含有化合物の q 価の残基を表し、

q は 1 以上の整数を表す。

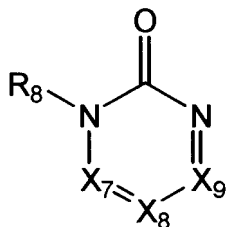
但し、 L_{12} 、 L_{22} 、 L_{32} 及び L_{42} のいずれか 1 つ以上が、置換もしくは無置換の炭素数 12 ~ 30 のアリーレン基を表すか、あるいは、 $A r_{12}$ が、置換もしくは無置換の炭素数 12 ~ 30 のアリール基を表す。))

【化 11】



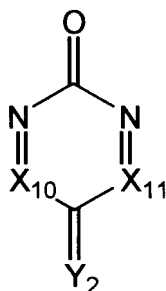
... (2-2)

30



... (2-3)

40



... (2-4)

50

(式中、 $X_5 \sim X_{11}$ は、それぞれ独立に、 CR_9 又はNを表し、

Y_1 及び Y_2 は、それぞれ独立に、 $CR_{10}R_{11}$ 又は NR_{12} を表し、

$R_6 \sim R_{12}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数1～50のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基、スルホニル基、ポリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキシル基、又は L_{12} と結合する結合手を表すか、あるいは、それぞれ互いに結合して置換もしくは無置換の炭化水素環、又は置換もしくは無置換の複素環である環Yを形成する。)

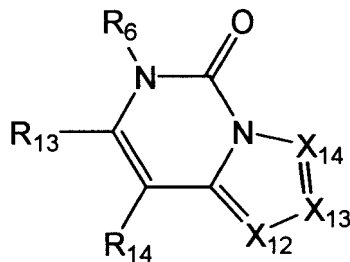
10

20

【請求項16】

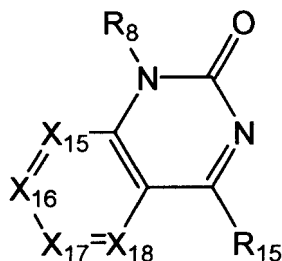
前記 A_{12} が下記一般式(2-2-1)又は(2-3-1)で表される化合物のq価の残基を表す請求項15に記載の含窒素複素環誘導体。

【化12】



... (2-2-1)

30



... (2-3-1)

40

(式中、 $X_{12} \sim X_{18}$ は、それぞれ独立に、 CR_{16} 又はNを表し、

R_6 、 R_8 及び $R_{13} \sim R_{16}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール

50

ル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、スルホニル基、ポリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキシル基、又は L₁₂ と結合する結合手を表すか、あるいは、それぞれ互いに結合して置換もしくは無置換の炭化水素環、又は置換もしくは無置換の複素環を形成する。)

10

20

30

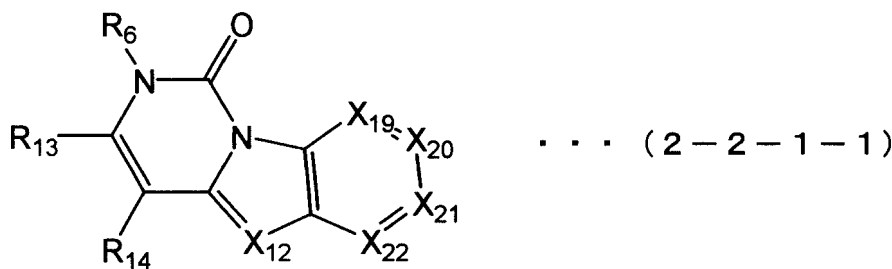
40

50

【請求項 17】

前記 A₁₂ が下記一般式 (2-2-1-1) で表される化合物の q 価の残基を表す請求項 15 又は 16 に記載の含窒素複素環誘導体。

【化 13】



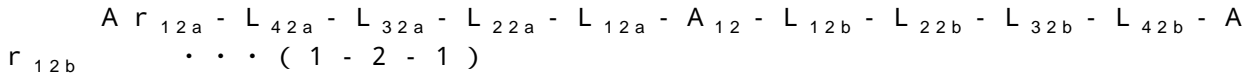
(式中 X₁₂ 及び X₁₉ ~ X₂₂ は、それぞれ独立に、C R₁₇ 又は N を表し、

R₆、R₁₃、R₁₄ 及び R₁₇ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールチオ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、スルホニル基、ポリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒ

ドロキシ基、カルボキシ基、又は L_{12} と結合する結合手を表すか、あるいは、それぞれ互いに結合して置換もしくは無置換の炭化水素環、又は置換もしくは無置換の複素環を形成する。)

【請求項 18】

下記一般式(1-2-1)で表される請求項 15 ~ 17 のいずれかに記載の含窒素複素環誘導体。



(式中、

L_{12a} 、 L_{22a} 、 L_{32a} 、 L_{42a} 、 L_{12b} 、 L_{22b} 、 L_{32b} 及び L_{42b} は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキレン基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニレン基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリーレン基であり、

A_{12} は、一般式(2-2)、(2-2-1)、(2-2-1-1)、(2-3)、(2-3-1)又は(2-4)で表される化合物の 2 価の残基を表し、

Ar_{12a} は置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基であり、

Ar_{12b} は置換もしくは無置換の環形成炭素数 12 ~ 30 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 12 ~ 30 のヘテロアリール基である。)

【請求項 19】

上記環 Y が、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の非縮合芳香族炭化水素環、置換もしくは無置換の環形成炭素数 10 ~ 30 の縮合芳香族炭化水素環、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の非縮合複素環、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 10 ~ 30 の縮合複素環である請求項 11 ~ 18 のいずれかに記載の含窒素複素環誘導体。

【請求項 20】

請求項 11 ~ 19 のいずれかに記載の芳香族複素環誘導体を含む有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【請求項 21】

陰極と陽極との間に、発光層及び電子輸送層を含み、該電子輸送層が、請求項 1 ~ 10 のいずれかに記載の電子輸送材料を含有する有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 22】

陰極と陽極との間に、発光層及び電子輸送層を含み、該電子輸送層が、請求項 11 ~ 19 のいずれかに記載の含窒素複素環誘導体を含有する有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 23】

前記電子輸送層が、さらに還元性ドーパントを含有する請求項 21 又は 22 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 24】

前記還元性ドーパントが、アルカリ金属、アルカリ土類金属及び希土類金属からなる群より選ばれる少なくとも 1 種を含有する化合物である請求項 23 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 25】

前記還元性ドーパントが、アルカリ金属、アルカリ金属酸化物、アルカリ金属ハロゲン化物、アルカリ土類金属酸化物、アルカリ土類金属ハロゲン化物、希土類金属酸化物、及び希土類金属ハロゲン化物からなる群より選ばれる少なくとも 1 種である請求項 24 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

10

20

30

40

50

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、含窒素複素環誘導体、有機エレクトロルミネッセンス素子用電子輸送材料、及びそれを用いた有機エレクトロルミネッセンス素子に関する。

【背景技術】

【0002】

有機物質を使用した有機エレクトロルミネッセンス(EL)素子は、固体発光型の安価な大面積フルカラー表示素子としての用途が有望視され、多くの開発が行われている。一般にEL素子は、発光層及び該層をはさんだ一对の対向電極から構成されている。発光は、両電極間に電界が印加されると、陰極側から電子が注入され、陽極側から正孔が注入される。さらに、この電子が発光層において正孔と再結合し、励起状態を生成し、励起状態が基底状態に戻る際にエネルギーを光として放出する現象である。

従来の有機EL素子は、無機発光ダイオードに比べて駆動電圧が高く、発光効率も低かった。また、特性劣化も著しく実用化には至っていなかった。最近の有機EL素子は徐々に改良されているものの、さらに低電圧での高発光効率が要求されている。

これらを解決するものとして、例えば、特許文献1に、ベンゾイミダゾール構造を有する化合物を発光材料として用いた素子が開示され、この素子が電圧9Vにて200cd/m²の輝度で発光することが記載されている。また、特許文献2には、ベンゾイミダゾール環及びアントラセン骨格を有する化合物が記載されている。特許文献3には、イミダゾール環を有する化合物が記載されているが、発光層、正孔ブロック層に用いられている。しかしながら、これらの化合物を用いた有機EL素子よりもさらなる高い発光効率及び低電圧駆動が可能な素子が求められている。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0003】

【特許文献1】米国特許第5,645,948号明細書

【特許文献2】特開2002-38141号公報

【特許文献3】特開2004-146368号公報

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0004】

本発明は、前記の課題を解決するためになされたもので、有機EL素子の構成成分として有用で、かつ新規な含窒素複素環誘導体を提供し、この含窒素複素環誘導体を有機薄膜層の少なくとも一層に用いることにより、低電圧でありながら発光効率が高い有機EL素子を実現することを目的とする。

【課題を解決するための手段】

【0005】

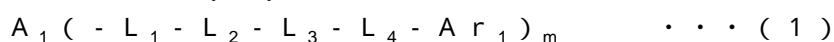
本発明者らは、前記目的を達成するために、鋭意研究を重ねた結果、ウレア構造は、メソメリー効果により酸素が負に分極していることにより、金属との親和性が増し、金属からの電子注入性が良くなることを見出し、従って、アリアル基又は複素環基を置換基として含有するウレア構造を有する含窒素複素環誘導体を、有機EL素子の有機薄膜層の少なくとも一層に用いることにより、有機EL素子の低電圧化及び高効率化を達成できることを見出し、本発明を完成するに至った。

結果として、従来よりホスト材料または正孔輸送材料としてしか報告されていなかったウレア構造について、新たに、電子輸送材料として有用であることを見出した。

【0006】

すなわち、本発明(本発明の化合物の水素原子は重水素原子を含む。)は、

[1] 下記一般式(1)で表される電子輸送材料。



10

20

30

40

50

(式中、

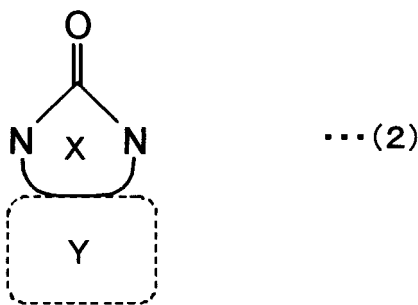
L_1 、 L_2 、 L_3 及び L_4 は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキレン基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルケニレン基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキニレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリーレン基であり、

Ar_1 は、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリアル基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリアル基であり、

10

A_1 は下記一般式(2)で表される環構造含有化合物のm個の残基を表し、
mは1以上の整数を表す。)

【化1】



20

(式中、環Xは窒素原子及び炭素原子を環形成原子とする置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の5～8員環であり、

また、環Xは、1以上の環Yと縮合していてもよく、

該環Yは、置換もしくは無置換の炭化水素環、又は置換もしくは無置換の複素環である。)

[2] 下記一般式(1-1)で表される電子輸送材料。



30

(式中、

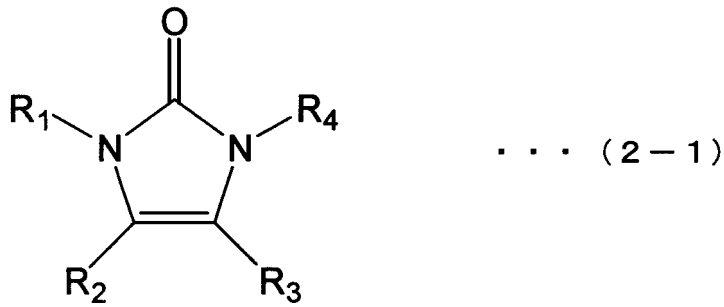
L_{11} 、 L_{21} 、 L_{31} 及び L_{41} は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキレン基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルケニレン基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキニレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリーレン基であり、

Ar_{11} は置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリアル基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリアル基であり、

40

A_{11} は下記一般式(2-1)で表される環構造含有化合物のp個の残基を表し、
pは1以上の整数を表す。)

【化 2】



10

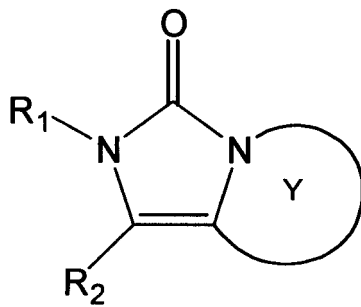
(式中、 $R_1 \sim R_4$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーロキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリーロキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリーロシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、スルホニル基、ポリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキシル基、又は L_{11} と結合する結合手を表すか、あるいは、 R_1 と R_2 、 R_2 と R_3 、 R_3 と R_4 は、それぞれ互いに結合して置換もしくは無置換の炭化水素環、又は置換もしくは無置換の複素環である環 Y を形成する。)

20

30

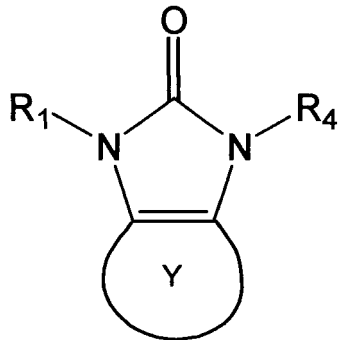
[3] 前記 A_{11} が、下記一般式 (2-1-1)、(2-1-2) 又は (2-1-3) で表される化合物の p 価の残基を表す [2] に記載の電子輸送材料。

【化 3】



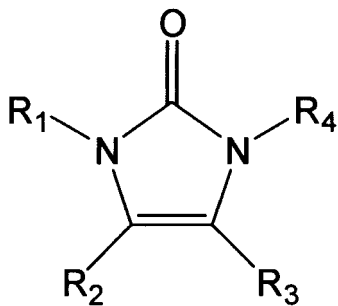
... (2-1-1)

10



... (2-1-2)

20



... (2-1-3)

30

(式中、 $R_1 \sim R_4$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数1～50のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基、スルホニル基、ポリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキシル基、又は L_{11} と結合する結合手を表す。

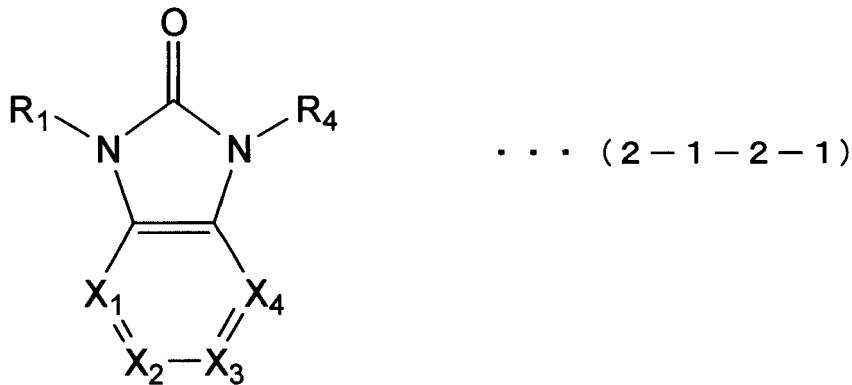
40

Yは、前記環Yを表す。)

50

[4] 前記 A₁₁が、下記一般式(2 - 1 - 2 - 1)で表される化合物の p 価の残基を表す [2] 又は [3] に記載の電子輸送材料。

【化 4】



10

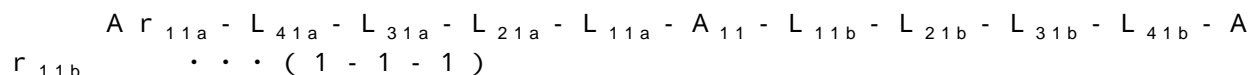
(式中、X₁ ~ X₄は、それぞれ独立に、C R₅又はNを表し、

R₁、R₄及びR₅は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーロキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリーロキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリーロキシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、スルホニル基、ポリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキシル基、又はL₁₁と結合する結合手を表すか、あるいは、それぞれ互いに結合して前記環 Y の一部を構成する環を形成する。)

20

30

[5] 下記一般式(1 - 1 - 1)で表される [2] ~ [4] のいずれかに記載の電子輸送材料。



40

(式中、

L_{11a}、L_{21a}、L_{31a}、L_{41a}、L_{11b}、L_{21b}、L_{31b}及びL_{41b}は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキレン基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニレン基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリーレン基であり、

A₁₁は、前記一般式(2 - 1)、(2 - 1 - 1)、(2 - 1 - 2)、(2 - 1 - 3)又は(2 - 1 - 2 - 1)で表される化合物の 2 価の残基を表し、

50

$A r_{11a}$ は置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基であり、

$A r_{11b}$ は置換もしくは無置換の環形成炭素数12～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数12～30のヘテロアリール基である。))

[6] 下記一般式(1-2)で表される電子輸送材料。



(式中、

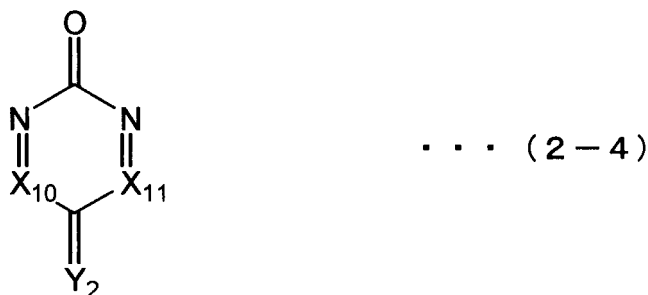
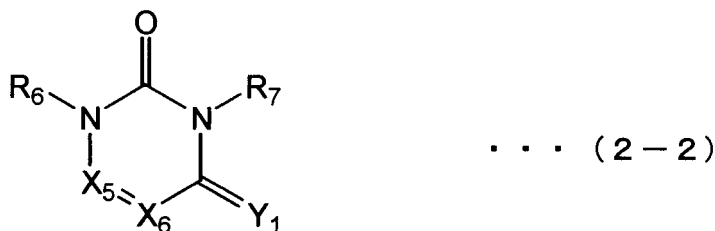
L_{12} 、 L_{22} 、 L_{32} 及び L_{42} は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキレン基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルケニレン基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキニレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリーレン基であり、

$A r_{12}$ は置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基であり、

A_{12} は下記一般式(2-2)、(2-3)又は(2-4)で表される化合物のq価の残基を表し、

qは1以上の整数を表す。))

【化5】



(式中、 $X_5 \sim X_{11}$ は、それぞれ独立に、 CR_9 又はNを表し、

Y_1 及び Y_2 は、それぞれ独立に、 CR_{10} 、 R_{11} 又は NR_{12} を表し、

$R_6 \sim R_{12}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50

10

20

30

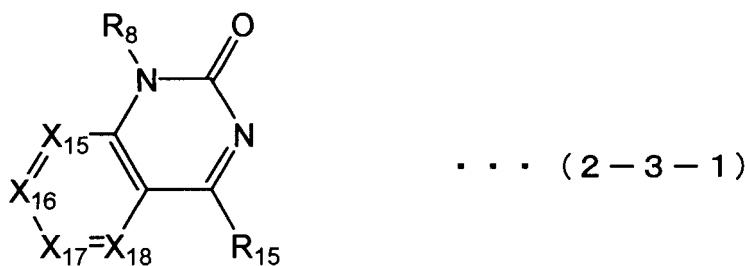
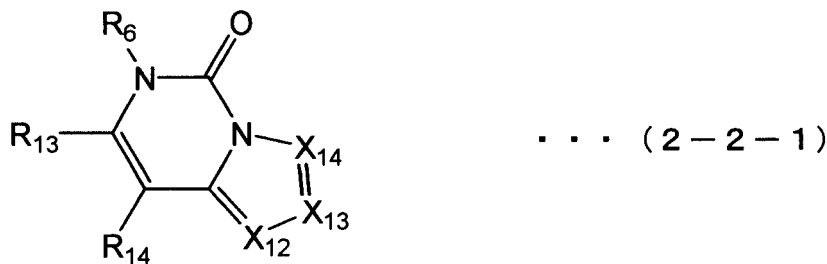
40

50

のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、スルホニル基、ポリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキシル基、又は L_{12} と結合する結合手を表すか、あるいは、それぞれ互いに結合して置換もしくは無置換の炭化水素環、又は置換もしくは無置換の複素環である環 Y を形成する。) 10

[7] 前記 A_{12} が下記一般式 (2 - 2 - 1) 又は (2 - 3 - 1) で表される化合物の q 価の残基を表す [6] に記載の電子輸送材料。 20

【化 6】



(式中、 $X_{12} \sim X_{18}$ は、それぞれ独立に、C R_{16} 又は N を表し、 40

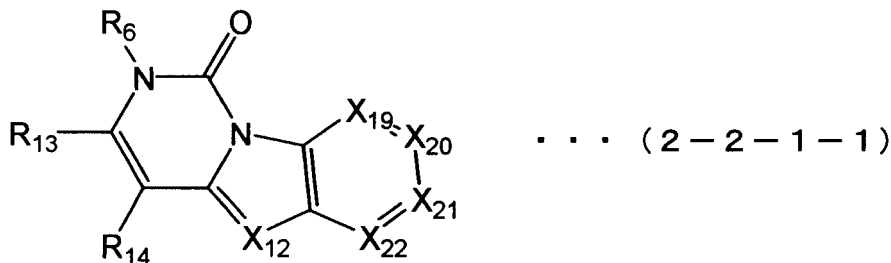
R_6 、 R_8 及び $R_{13} \sim R_{16}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の 50

炭素数 1 ~ 50 のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、スルホニル基、ポリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキシル基、又は L_{12} と結合する結合手を表すか、あるいは、それぞれ互いに結合して置換もしくは無置換の炭化水素環、又は置換もしくは無置換の複素環を形成する。) 10

[8] 前記 A_{12} が下記一般式 (2 - 2 - 1 - 1) で表される化合物の q 価の残基を表す

[6] 又は [7] に記載の電子輸送材料。

【化 7】



20

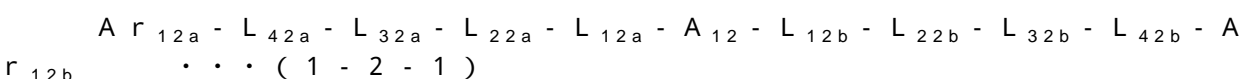
(式中、 X_{12} 及び $X_{19} \sim X_{22}$ は、それぞれ独立に、 $C R_{17}$ 又は N を表し、

R_6 、 R_{13} 、 R_{14} 及び R_{17} は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、スルホニル基、ポリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキシル基、又は L_{12} と結合する結合手を表すか、あるいは、それぞれ互いに結合して置換もしくは無置換の炭化水素環、又は置換もしくは無置換の複素環を形成する。) 30

30

40

[9] 下記一般式 (1 - 2 - 1) で表される [6] ~ [8] のいずれかに記載の電子輸送材料。



50

(式中、

L_{12a} 、 L_{22a} 、 L_{32a} 、 L_{42a} 、 L_{12b} 、 L_{22b} 、 L_{32b} 及び L_{42b} は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキレン基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニレン基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリーレン基であり、

A_{12} は、一般式 (2 - 2)、(2 - 2 - 1)、(2 - 2 - 1 - 1)、(2 - 3)、(2 - 3 - 1) 又は (2 - 4) で表される化合物の 2 価の残基を表し、

$A_{r_{12a}}$ は置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基であり、

$A_{r_{12b}}$ は置換もしくは無置換の環形成炭素数 12 ~ 30 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 12 ~ 30 のヘテロアリール基である。))

[10] 前記環 Y が、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 の非縮合芳香族炭化水素環、置換もしくは無置換の環形成炭素数 10 ~ 30 の縮合芳香族炭化水素環、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の非縮合複素環、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 10 ~ 30 の縮合複素環である [1] ~ [9] のいずれかに記載の電子輸送材料。

[11] 下記一般式 (1 - 1) で表される含窒素複素環誘導体。



(式中、

L_{11} 、 L_{21} 、 L_{31} 及び L_{41} は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキレン基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニレン基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリーレン基であり、

$A_{r_{11}}$ は置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基であり、

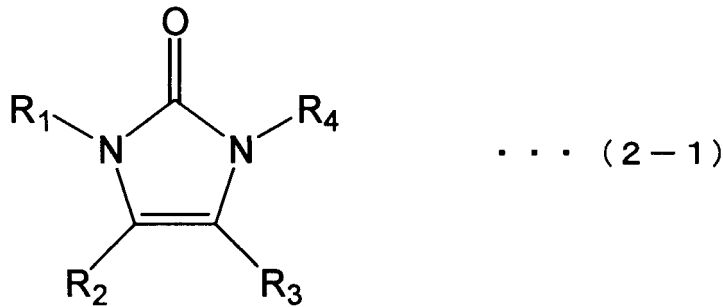
A_{11} は下記一般式 (2 - 1) で表される環構造含有化合物の p 価の残基を表し、

p は 1 以上の整数を表す。

但し、 L_{11} 、 L_{21} 、 L_{31} 及び L_{41} のいずれか 1 つ以上が、置換もしくは無置換のアントラセニレン基、置換もしくは無置換のフェナントレニレン基、置換もしくは無置換のクリセニレン基、置換もしくは無置換のピレニレン基、置換もしくは無置換のアセナフチレニレン基、置換もしくは無置換のアセナフテニレン基、置換もしくは無置換のフルオランテニレン基、置換もしくは無置換のフルオレニレン基、置換もしくは無置換のナフチレン基、置換もしくは無置換のベンゾフルオランテニレン基、置換もしくは無置換のベンゾフェナントレニレン基、置換もしくは無置換のベンゾクリセニレン基、置換もしくは無置換のベンゾトリフェニレニレン基、置換もしくは無置換のベンゾアントラセニレン基、置換もしくは無置換のジベンゾフェナントレニレン基、又は置換もしくは無置換のトリフェニレニレン基を表すか、あるいは、 $A_{r_{11}}$ が、置換もしくは無置換のアントラセニル基、置換もしくは無置換のクリセニル基、置換もしくは無置換のピレニル基、置換もしくは無置換のアセナフチレニル基、置換もしくは無置換のアセナフテニル基、置換もしくは無置換のフルオランテニル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のベンゾフルオランテニル基、置換もしくは無置換のベンゾフェナントレニル基、置換もしくは無置換のベンゾクリセニル基、置換もしくは無置換のベンゾトリフェニレニル基、置換もしくは無置換のベンゾアントラセニル基、置換もしくは無置換のジベンゾフェナントレニル基、又は置換もしくは無置換のトリフェニレニル基

を表す。)

【化 8】



10

(式中、 $R_1 \sim R_4$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリアルオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリアルチオ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリアル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリアルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアルアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリアルアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリアルオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアルオキシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアルチオ基、スルホニル基、ポリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキシル基、又は L_{11} と結合する結合手を表すか、あるいは、 R_1 と R_2 、 R_2 と R_3 、 R_3 と R_4 は、それぞれ互いに結合して置換もしくは無置換の炭化水素環、又は置換もしくは無置換の複素環である環 Y を形成する。)

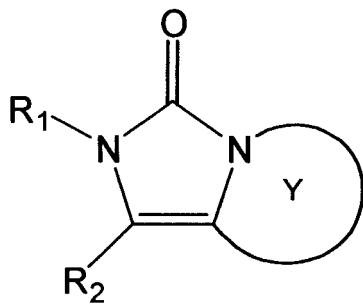
20

30

[1 2] 前記 A_{11} が、下記一般式 (2 - 1 - 1)、(2 - 1 - 2) 又は (2 - 1 - 3) で表される化合物の p 価の残基を表す [1 1] に記載の含窒素複素環誘導体。

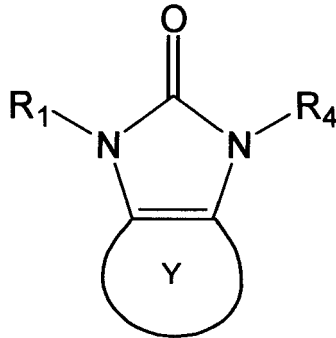
40

【化 9】



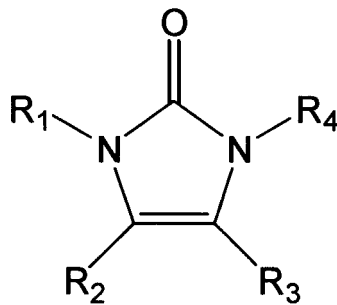
... (2-1-1)

10



... (2-1-2)

20



... (2-1-3)

30

(式中、 $R_1 \sim R_4$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、スルホニル基、ポリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキシル基、又は L_{11} と結合する結合手を表す。

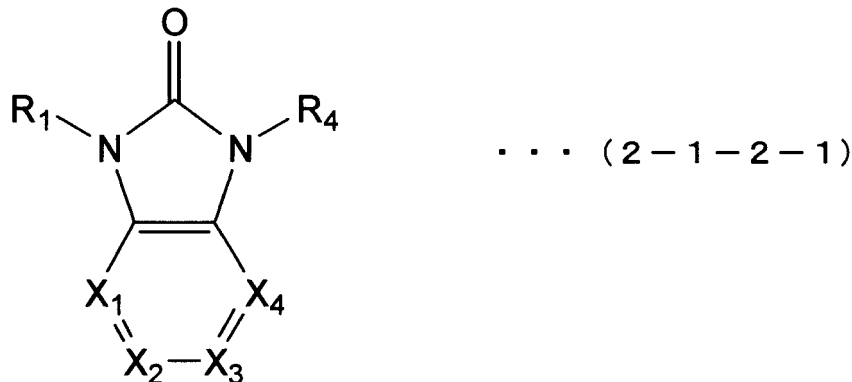
40

50

Y は、前記環 Y を表す。)

[1 3] 前記 A₁₁ が、下記一般式 (2 - 1 - 2 - 1) で表される化合物の p 価の残基を表す [1 1] 又は [1 2] に記載の含窒素複素環誘導体。

【化 1 0】

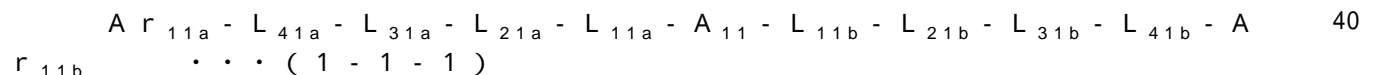


10

(式中、X₁ ~ X₄ は、それぞれ独立に、C R₅ 又は N を表し、

R₁、R₄ 及び R₅ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリアルオキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリアル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリアルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリアルアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリアルオキシ、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアルオキシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアルチオ基、スルホニル基、ポリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキシル基、又は L₁₁ と結合する結合手を表すか、あるいは、それぞれ互いに結合して前記環 Y の一部を構成する環を形成する。)

[1 4] 下記一般式 (1 - 1 - 1) で表される [1 1] ~ [1 3] のいずれかに記載の含窒素複素環誘導体。



(式中、

L_{11a}、L_{21a}、L_{31a}、L_{41a}、L_{11b}、L_{21b}、L_{31b} 及び L_{41b} は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキレン基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニレン基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリーレン基であり、

A₁₁ は、一般式 (2 - 1)、(2 - 1 - 1)、(2 - 1 - 2)、(2 - 1 - 3) 又は (2 - 1 - 2 - 1) で表される化合物の 2 価の残基を表し、

50

$A_{r_{11a}}$ は置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基であり、

$A_{r_{11b}}$ は置換もしくは無置換の環形成炭素数12～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数12～30のヘテロアリール基である。))

[15] 下記一般式(1-2)で表される含窒素複素環誘導体。



(式中、

L_{12} 、 L_{22} 、 L_{32} 及び L_{42} は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキレン基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルケニレン基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキニレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリーレン基であり、

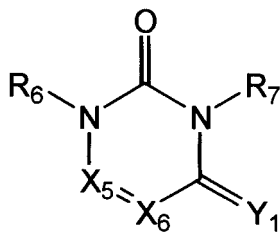
$A_{r_{12}}$ は置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基であり、

A_{12} は下記一般式(2-2)、(2-3)又は(2-4)で表される環構造含有化合物のq個の残基を表し、

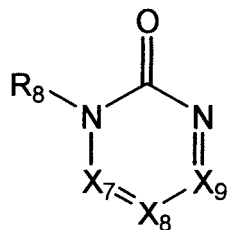
qは1以上の整数を表す。

但し、 L_{12} 、 L_{22} 、 L_{32} 及び L_{42} のいずれか1つ以上が、置換もしくは無置換の炭素数12～30のアリーレン基を表すか、あるいは、 $A_{r_{12}}$ が、置換もしくは無置換の炭素数12～30のアリール基を表す。))

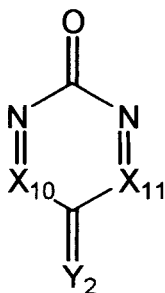
【化11】



⋯ (2-2)



⋯ (2-3)



⋯ (2-4)

(式中、 $X_5 \sim X_{11}$ は、それぞれ独立に、 CR_9 又はNを表し、

Y_1 及び Y_2 は、それぞれ独立に、 $CR_{10}R_{11}$ 又は NR_{12} を表し、

10

20

30

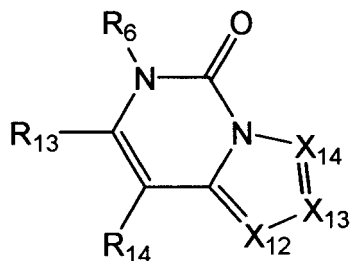
40

50

$R_6 \sim R_{12}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーロキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリーロキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリーロキシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、スルホニル基、ポリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキシル基、又は L_{12} と結合する結合手を表すか、あるいは、それぞれ互いに結合して置換もしくは無置換の炭化水素環、又は置換もしくは無置換の複素環である環 Y を形成する。) 10

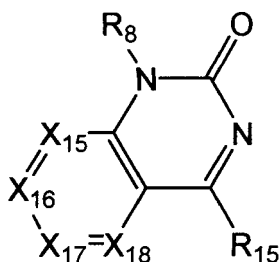
[16] 前記 A_{12} が下記一般式 (2 - 2 - 1) 又は (2 - 3 - 1) で表される化合物の q 個の残基を表す [15] に記載の含窒素複素環誘導体。 20

【化 12】



... (2 - 2 - 1)

30



... (2 - 3 - 1)

40

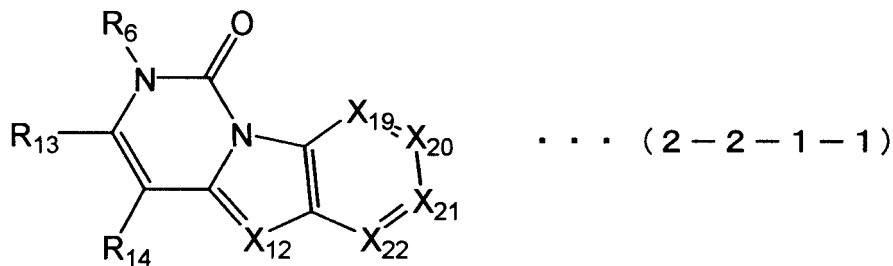
(式中、 $X_{12} \sim X_{18}$ は、それぞれ独立に、 $C R_{16}$ 又は N を表し、

R_6 、 R_8 及び $R_{13} \sim R_{16}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーロキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のアルキルシリル基 50

、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、スルホニル基、ポリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキシル基、又は L_{12} と結合する結合手を表すか、あるいは、それぞれ互いに結合して置換もしくは無置換の炭化水素環、又は置換もしくは無置換の複素環を形成する。) 10

[17] 前記 A_{12} が下記一般式 (2 - 2 - 1 - 1) で表される化合物の q 価の残基を表す [15] 又は [16] に記載の含窒素複素環誘導体。

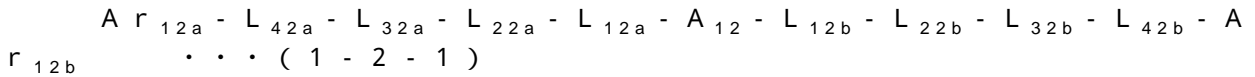
【化 13】



(式中、 X_{12} 及び $X_{19} \sim X_{22}$ は、それぞれ独立に、 $C R_{17}$ 又は N を表し、

R_6 、 R_{13} 、 R_{14} 及び R_{17} は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、スルホニル基、ポリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキシル基、又は L_{12} と結合する結合手を表すか、あるいは、それぞれ互いに結合して置換もしくは無置換の炭化水素環、又は置換もしくは無置換の複素環を形成する。) 30 40

[18] 下記一般式 (1 - 2 - 1) で表される [15] ~ [17] のいずれかに記載の含窒素複素環誘導体。



(式中、

L_{12a} 、 L_{22a} 、 L_{32a} 、 L_{42a} 、 L_{12b} 、 L_{22b} 、 L_{32b} 及び L_{42b} は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキレン基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルケニレン基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキニレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリーレン基であり、

A_{12} は、一般式(2-2)、(2-2-1)、(2-2-1-1)、(2-3)、(2-3-1)又は(2-4)で表される化合物の2価の残基を表し、

10

Ar_{12a} は置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基であり、

Ar_{12b} は置換もしくは無置換の環形成炭素数12～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数12～30のヘテロアリール基である。))

[19] 上記環Yが、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30の非縮合芳香族炭化水素環、置換もしくは無置換の環形成炭素数10～30の縮合芳香族炭化水素環、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の非縮合複素環、又は置換もしくは無置換の環形成原子数10～30の縮合複素環である[11]～[18]のいずれかに記載の含窒素複素環誘導体

20

[20] [11]～[19]までのいずれかに記載の芳香族複素環誘導体を含む有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

[21] 陰極と陽極との間に、発光層及び電子輸送層を含み、該電子輸送層が、[1]～[10]のいずれかに記載の電子輸送材料を含有する有機エレクトロルミネッセンス素子。

[22] 陰極と陽極との間に、発光層及び電子輸送層を含み、該電子輸送層が、[11]～[19]のいずれかに記載の含窒素複素環誘導体を含む有機エレクトロルミネッセンス素子。

30

[23] 前記電子輸送層が、さらに還元性ドーパントを含有する[21]又は[22]に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[24] 前記還元性ドーパントが、アルカリ金属、アルカリ土類金属及び希土類金属からなる群より選ばれる少なくとも1種を含有する化合物である[23]に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[25] 前記還元性ドーパントが、アルカリ金属、アルカリ金属酸化物、アルカリ金属ハロゲン化物、アルカリ土類金属酸化物、アルカリ土類金属ハロゲン化物、希土類金属酸化物、及び希土類金属ハロゲン化物からなる群より選ばれる少なくとも1種である[24]に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

を提供する。

40

【発明の効果】

【0007】

本発明の含窒素複素環誘導体を用いることにより、低電圧でありながら発光効率が高い有機EL素子を実現する。

【発明を実施するための形態】

【0008】

本発明は、下記一般式(1)で表される電子輸送材料を提供するものである。



(式中、

L_1 、 L_2 、 L_3 及び L_4 は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の炭素数1～

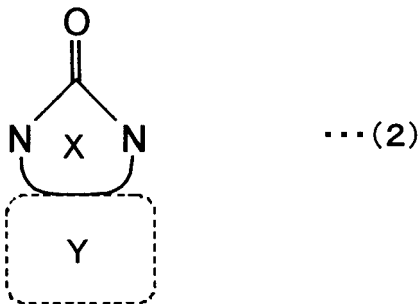
50

50のアルキレン基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルケニレン基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキニレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリーレン基であり、

A_{r_1} は置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基であり、

A_1 は下記一般式(2)で表される環構造含有化合物のm個の残基を表し、
mは1以上の整数を表す。) 10

【0009】
【化14】



20

(式中、環Xは窒素原子及び炭素原子を環形成原子とする置換もしくは無置換の、飽和又は不飽和の5～8員環であり、

また、環Xは、1以上の環Yと縮合していてもよく、

該環Yは、置換もしくは無置換の炭化水素環、又は置換もしくは無置換の複素環である。)

【0010】

上記環Yは、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30の非縮合芳香族炭化水素環、置換もしくは無置換の環形成炭素数10～30の縮合芳香族炭化水素環、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の非縮合複素環、又は置換もしくは無置換の環形成原子数10～30の縮合複素環であることが好ましい。 30

【0011】

本発明の電子輸送材料は、好ましくは下記一般式(1-1)又は(1-2)で表される。



(式中、

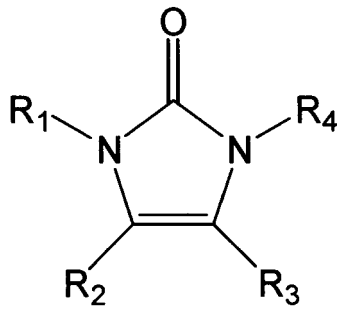
L_{11} 、 L_{21} 、 L_{31} 及び L_{41} は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキレン基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルケニレン基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキニレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリーレン基であり、 40

$A_{r_{11}}$ は置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基であり、

A_{11} は下記一般式(2-1)で表される環構造含有化合物のp個の残基を表し、
pは1以上の整数を表す。)

【0012】

【化 15】



... (2-1)

10

【0013】

(式中、 $R_1 \sim R_4$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数1～50のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールオシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基、スルホニル基、ボリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキシル基、又は L_{11} と結合する結合手を表すか、あるいは、 R_1 と R_2 、 R_2 と R_3 、 R_3 と R_4 は、それぞれ互いに結合して置換もしくは無置換の炭化水素環、又は置換もしくは無置換の複素環である環Yを形成する。)

20

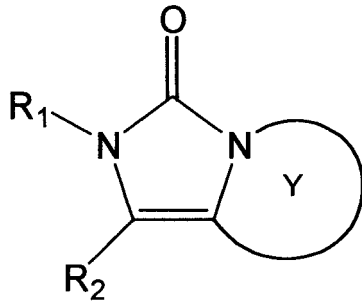
30

【0014】

前記一般式(1-1)における A_{11} は、下記一般式(2-1-1)、(2-1-2)、(2-1-3)又は(2-1-4)で表される化合物のp個の残基を表すことが好ましい。

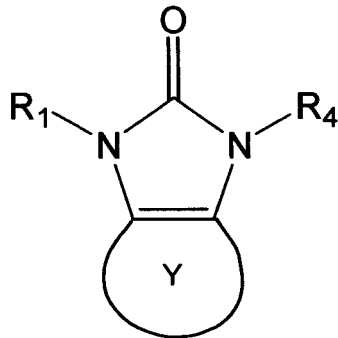
。

【化 1 6】



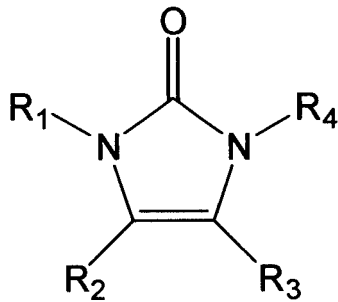
... (2-1-1)

10



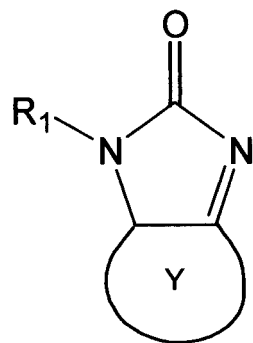
... (2-1-2)

20



... (2-1-3)

30



... (2-1-4)

【0015】

40

(式中、 $R_1 \sim R_4$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールチオ基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数1～50のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数1～50のアルキル基で置換されたアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数1～50のハロアルキル

50

基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、スルホニル基、ポリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキシル基、又は L_{11} と結合する結合手を表す。

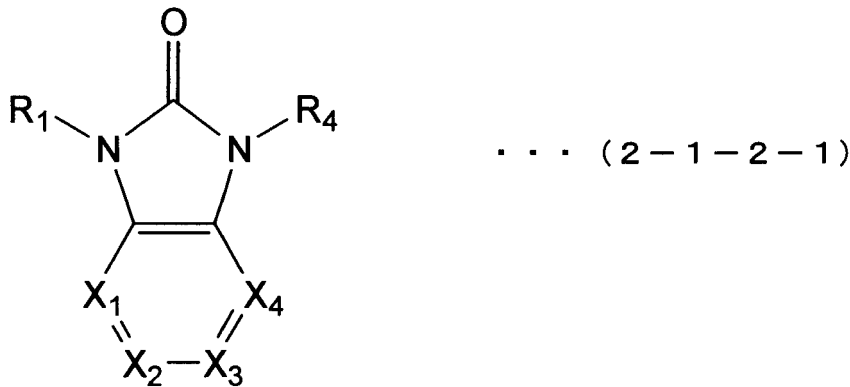
10

Y は前記環 Y を表す。)

【0016】

また、前記 A_{11} は、下記一般式 (2-1-2-1) で表される化合物の p 個の残基を表すことが好ましい。

【化17】



20

【0017】

(式中、 $X_1 \sim X_4$ は、それぞれ独立に、 CR_5 又は N を表し、

30

R_1 、 R_4 及び R_5 は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、スルホニル基、ポリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキシル基、又は L_{11} と結合する結合手を表すか、あるいは、それぞれ互いに結合して前記環 Y の一部を構成する環を形成する。)

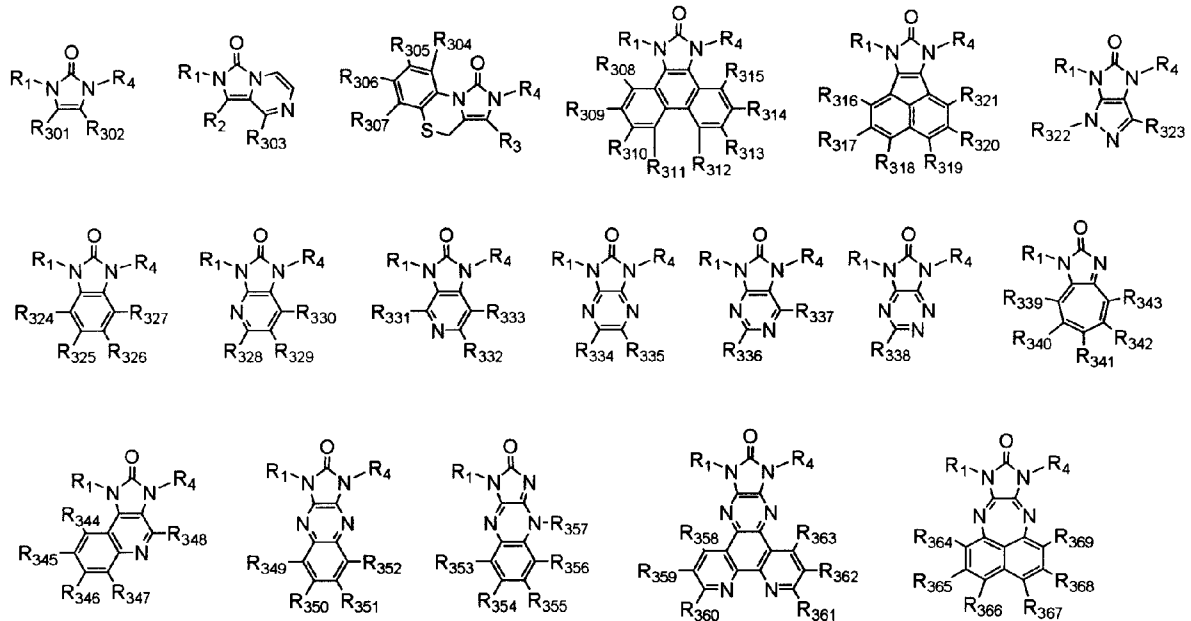
40

50

【0018】

前記一般式(2-1)で表される化合物の具体例としては、下記式で表されるものが挙げられる。

【化18】



10

20

【0019】

R₁ ~ R₄、R₄、R₃₀₁ ~ R₃₆₉はそれぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 50のアルコキシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3 ~ 50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 30のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 50のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数5 ~ 30のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数1 ~ 50のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 50のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数1 ~ 50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 50のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 50のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 30のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数5 ~ 30のヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 50のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数5 ~ 30のヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 50のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 30のアリールオキシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 50のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 30のアリールチオ基、スルホニル基、ボリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキシル基、又はL₁₁と結合する結合手を表すか、あるいは、それぞれ互いに結合して置換もしくは無置換の炭化水素環、又は置換もしくは無置換の複素環を形成する。) 30

30

40

【0020】

上記式(1-1)で表される電子輸送材料としては、下記式(1-1a)や(1-1-1)で表されるものが特に好ましい。



(式中、L_{11a}、L_{21a}、L_{31a}及びL_{41a}は、それぞれ独立に、単結合、環形成炭素数6 ~ 30のアリーレン基、又は環形成原子数5 ~ 30のヘテロアリーレン基であり、

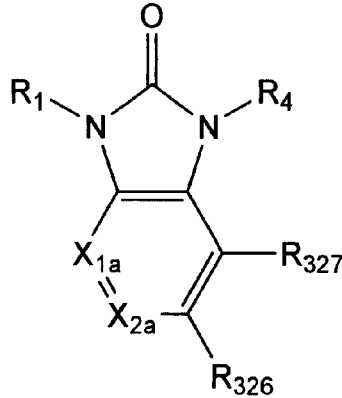
50

Ar_{11a} 及び Ar_{21a} は炭素数1～5のアルキル基、環形成炭素数3～30のシクロアルキル基、環形成炭素数6～30のアリール基、又は環形成原子数5～30のヘテロアリール基であり、

A_{11a} は下記式(2-1-2-1a)で表される2価基を表す。)

【0021】

【化19】



... (2-1-2-1a)

10

【0022】

(式中、 X_{1a} 及び X_{2a} は、それぞれ独立に、 CR_{5a} 又はNを表し、

20

R_1 、 R_4 、 R_{326} 、 R_{327} 及び R_{5a} は、それぞれ独立に、水素原子、炭素数1～5のアルキル基(好ましくはメチル基、エチル基)、環形成炭素数5～18のシクロアルキル基(好ましくはシクロヘキシル基)、環形成炭素数6～18のアリール基(好ましくはフェニル基、ピフェニル基、ナフチル基)、環形成原子数5～18のヘテロアリール基、又は L_{12a} と結合する結合手を表す。)

上記 X_{1a} 及び X_{2a} は、少なくとも一方が CR_{5a} を表すことが好ましく、

上記 R_{5a} は水素原子、炭素数1～5のアルキル基、又はフェニル基であることが好ましい。

【0023】

$Ar_{11a} - L_{41a} - L_{31a} - L_{21a} - L_{11a} - A_{11} - L_{11b} - L_{21b} - L_{31b} - L_{41b} - Ar_{11b}$
 ... (1-1-1)

30

(式中、

L_{11a} 、 L_{21a} 、 L_{31a} 、 L_{41a} 、 L_{11b} 、 L_{21b} 、 L_{31b} 及び L_{41b} は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキレン基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルケニレン基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキニレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリレン基であり、

A_{11} は、前記一般式(2-1)、(2-1-1)、(2-1-2)、(2-1-3)又は(2-1-2-1)で表される化合物の2価の残基を表し、

40

Ar_{11a} は置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基であり、

Ar_{11b} は置換もしくは無置換の環形成炭素数12～30(好ましくは13～30)のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数12～30(好ましくは14～30)のヘテロアリール基である。)

【0024】

一般式(1-1-1)においては、 Ar_{11b} が置換もしくは無置換の環形成炭素数12～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数12～30のヘテロアリール

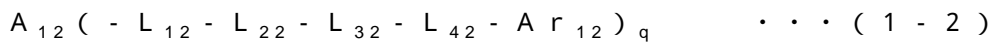
50

ル基であるため、分子の非対称性が高くなり、本発明の効果の観点から好ましい。この非対象性の観点から、他方の Ar_{11a} は、炭素数 1 ~ 5 のアルキル基（より好ましくはメチル基、エチル基）、環形成炭素数 5 ~ 12 のシクロアルキル基（より好ましくはシクロヘキシル基）、環形成炭素数 6 ~ 12 のアリール基（好ましくはフェニル基、ピフェニル基、ナフチル基）、又は環形成原子数 5 ~ 12 のヘテロアリール基を表すことが好ましい。

一般式 (1-1-1) における Ar_{11a} 及び Ar_{11b} の定義及び具体例は、それぞれ Ar_{11} と同様であり、 L_{11a} 、 L_{11b} の定義及び具体例は、それぞれ L_{11} と同様であり、 L_{21a} 、 L_{21b} の定義及び具体例は、それぞれ L_{21} と同様であり、 L_{31a} 、 L_{31b} の定義及び具体例は、それぞれ L_{31} と同様であり、 L_{41a} 、 L_{41b} の定義及び具体例は、それぞれ L_{41} と同様である。

10

【0025】



(式中、

L_{12} 、 L_{22} 、 L_{32} 及び L_{42} は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキレン基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニレン基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリーレン基であり、

Ar_{12} は置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基であり、

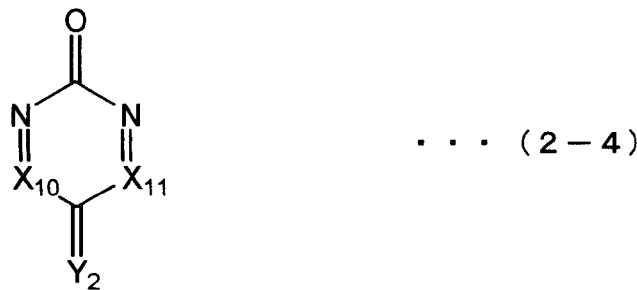
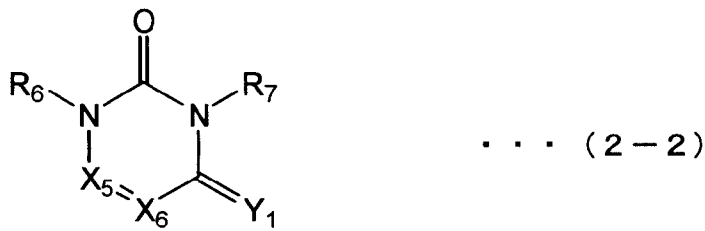
20

A_{12} は下記一般式 (2-2)、(2-3) 又は (2-4) で表される化合物の q 価の残基を表し、

q は 1 以上の整数を表す。)

【0026】

【化 2 0】



10

20

【0027】

(式中、 $X_5 \sim X_{11}$ は、それぞれ独立に、 CR_9 又は N を表し、

Y_1 及び Y_2 は、それぞれ独立に、 $CR_{10}R_{11}$ 又は NR_{12} を表し、

$R_6 \sim R_{12}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数1～50のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数2～50のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基、スルホニル基、ボリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキシル基、又は L_{12} と結合する結合手を表すか、あるいは、それぞれ互いに結合して置換もしくは無置換の炭化水素環、又は置換もしくは無置換の複素環を形成する。)

30

40

【0028】

50

前記一般式(1-2)において、 L_{12} 、 L_{22} 、 L_{32} 及び L_{42} のいずれか1つ以上が、置換もしくは無置換のアントラセニレン基、置換もしくは無置換のフェナントレニレン基、置換もしくは無置換のクリセニレン基、置換もしくは無置換のピレニレン基、置換もしくは無置換のアセナフチレニレン基、置換もしくは無置換のアセナフテニレン基、置換もしくは無置換のフルオランテニレン基、置換もしくは無置換のフルオレニレン基、置換もしくは無置換のナフチレン基、置換もしくは無置換のベンゾフルオランテニレン基、置換もしくは無置換のベンゾフェナントレニレン基、置換もしくは無置換のベンゾクリセニレン基、置換もしくは無置換のベンゾトリフェニレニレン基、置換もしくは無置換のベンゾアントラセニレン基、置換もしくは無置換のジベンゾフェナントレニレン基、又は置換もしくは無置換のトリフェニレニレン基を表すことが好ましく、あるいは、 Ar_{12} が、置換もしくは無置換のアントラセニル基、置換もしくは無置換のフェナントレニル基、置換もしくは無置換のクリセニル基、置換もしくは無置換のピレニル基、置換もしくは無置換のアセナフチレニル基、置換もしくは無置換のアセナフテニル基、置換もしくは無置換のフルオランテニル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のベンゾフルオランテニル基、置換もしくは無置換のベンゾフェナントレニル基、置換もしくは無置換のベンゾクリセニル基、置換もしくは無置換のベンゾトリフェニレニル基、置換もしくは無置換のベンゾアントラセニル基、置換もしくは無置換のジベンゾフェナントレニル基、又は置換もしくは無置換のトリフェニレニル基を表すことが好ましい。

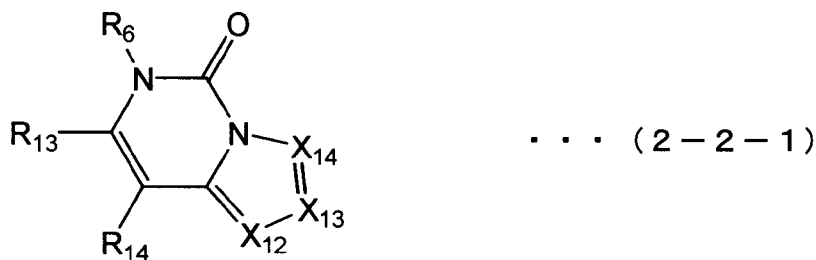
10

20

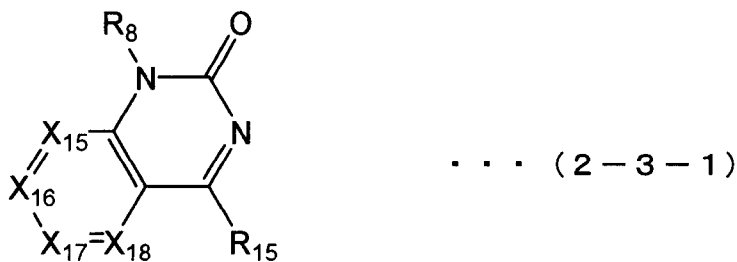
【0029】

前記 A_{12} は、下記一般式(2-2-1)又は(2-3-1)で表される化合物のq価の残基を表すことが好ましい。

【化21】



30



40

【0030】

(式中、 $X_{12} \sim X_{18}$ は、それぞれ独立に、 CR_{16} 又はNを表し、

R_6 、 R_8 及び $R_{13} \sim R_{16}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルコキシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3~50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数5~30のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数1~50のアルキルシリル基

50

、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、スルホニル基、ポリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキシル基、又は L_{12} と結合する結合手を表すか、あるいは、それぞれ互いに結合して置換もしくは無置換の炭化水素環、又は置換もしくは無置換の複素環を形成する。)

10

20

30

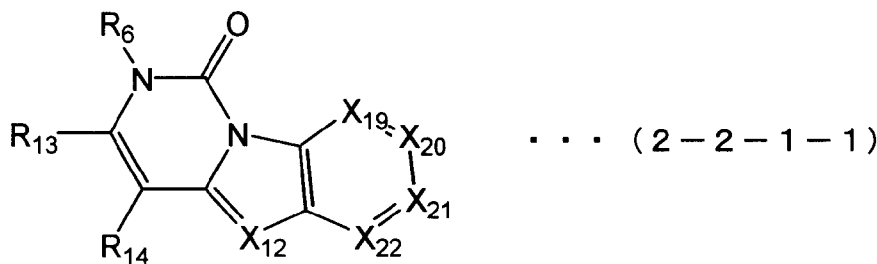
40

50

【0031】

また、前記 A_{12} は、下記一般式 (2-2-1-1) で表される化合物の q 価の残基を表すことが好ましい。

【化22】



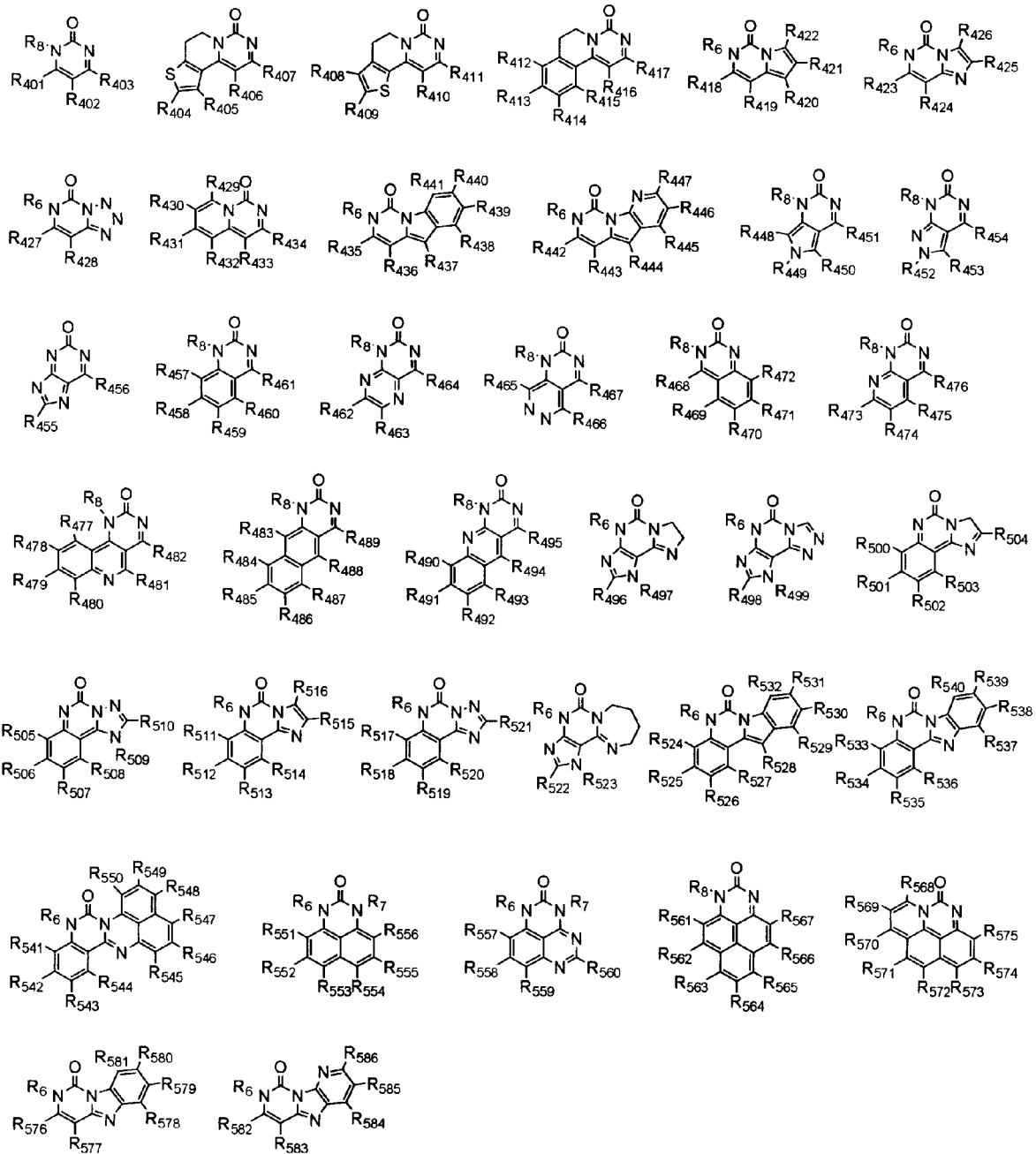
【0032】

(式中、 X_{12} 及び $X_{19} \sim X_{22}$ は、それぞれ独立に、 $C R_{17}$ 又は N を表し、 R_6 、 R_{13} 、 R_{14} 及び R_{17} は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、スルホニル基、ポリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキシル基、又は L_{12} と結合する結合手を表すか、あるいは、それぞれ互いに結合して置換もしくは無置換の炭化水素環、又は置換もしくは無置換の複素環を形成する。)

【0033】

前記一般式(2-2)、(2-3)又は(2-4)で表される化合物の具体例としては、下記式で表されるものが挙げられる。

【化23】



10

20

30

40

【0034】

($R_6 \sim R_8$ 、 $R_{401} \sim R_{586}$ はそれぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数1～50のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数1～50のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアル

50

ケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、スルホニル基、ポリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキシル基、又は L_{12} と結合する結合手を表すか、あるいは、それぞれ互いに結合して置換もしくは無置換の炭化水素環、又は置換もしくは無置換の複素環を形成する。)

10

【0035】

上記式 (1-2) で表される電子輸送材料としては、下記式 (1-2a) で表されるものが特に好ましい。



(式中、

L_{12a} 、 L_{22a} 、 L_{32a} 及び L_{42a} は、それぞれ独立に、単結合、環形成炭素数 6 ~ 30 のアリーレン基、又は環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリーレン基であり、

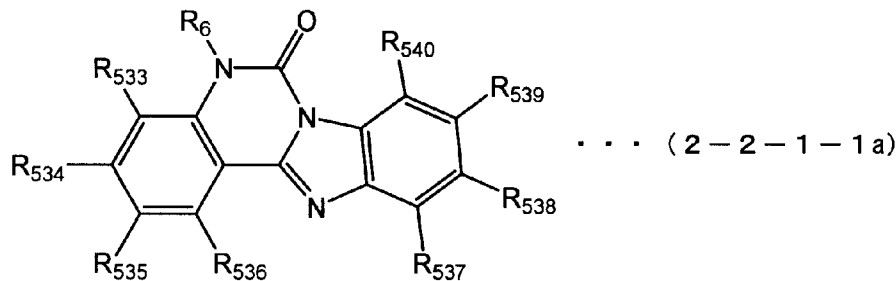
Ar_{12a} 及び Ar_{22a} は、炭素数 1 ~ 5 のアルキル基、環形成炭素数 3 ~ 30 のシクロアルキル基、環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、又は環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基であり、

20

A_{12a} は下記式 (2-2-1-1a) で表される 2 価基を表す。)

【0036】

【化24】



30

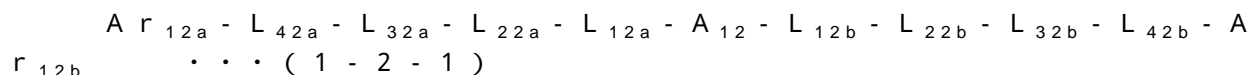
【0037】

(式中 R_6 及び $R_{533} \sim R_{540}$ はそれぞれ独立に、水素原子、炭素数 1 ~ 5 のアルキル基 (好ましくはメチル基、エチル基)、環形成炭素数 5 ~ 18 のシクロアルキル基 (好ましくはシクロヘキシル基)、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基 (好ましくはフェニル基、ピフェニル基、ナフチル基)、環形成原子数 5 ~ 18 のヘテロアリール基、又は L_{12a} と結合する結合手を表す。)

40

上記 R_6 は、水素原子、炭素数 1 ~ 5 のアルキル基、又はフェニル基であることが好ましい。

【0038】



(式中、

50

L_{12a} 、 L_{22a} 、 L_{32a} 、 L_{42a} 、 L_{12b} 、 L_{22b} 、 L_{32b} 及び L_{42b} は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキレン基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニレン基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリーレン基であり、

A_{12} は、一般式 (2 - 2)、(2 - 2 - 1)、(2 - 2 - 1 - 1)、(2 - 3)、(2 - 3 - 1) 又は (2 - 4) で表される化合物の 2 価の残基を表し、

Ar_{12a} は置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基であり、

Ar_{12b} は置換もしくは無置換の環形成炭素数 12 ~ 30 (好ましくは 13 ~ 30) のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 12 ~ 30 (好ましくは 14 ~ 30) のヘテロアリール基である。))

【0039】

一般式 (1 - 2 - 1) においては、 Ar_{12b} が置換もしくは無置換の環形成炭素数 12 ~ 30 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 12 ~ 30 のヘテロアリール基であるため、分子の非対称性が高くなり、本発明の効果の観点から好ましい。この非対称性の観点から、他方の Ar_{12a} は、炭素数 1 ~ 5 のアルキル基 (より好ましくはメチル基、エチル基)、環形成炭素数 5 ~ 12 のシクロアルキル基 (より好ましくはシクロヘキシル基)、環形成炭素数 6 ~ 12 のアリール基 (好ましくはフェニル基、ピフェニル基、ナフチル基)、又は環形成原子数 5 ~ 12 のヘテロアリール基を表すことが好ましい。

一般式 (1 - 2 - 1) における Ar_{12a} 及び Ar_{12b} の定義及び具体例は、それぞれ Ar_{12} と同様であり、 L_{12a} 、 L_{12b} の定義及び具体例は、それぞれ L_{12} と同様であり、 L_{22a} 、 L_{22b} の定義及び具体例は、それぞれ L_{22} と同様であり、 L_{32a} 、 L_{32b} の定義及び具体例は、それぞれ L_{32} と同様であり、 L_{42a} 、 L_{42b} の定義及び具体例は、それぞれ L_{42} と同様である。

【0040】

前記 Ar_1 、 Ar_{11} 、 Ar_{12} 、 Ar_{11a} 、 Ar_{21a} 、 Ar_{12a} 、 Ar_{22a} 及び $R_1 \sim R_{17}$ 、 $R_{301} \sim R_{369}$ 、 $R_{401} \sim R_{586}$ で表される置換もしくは無置換のアリール基及びヘテロアリール基としては、例えば、フェニル基、1 - ナフチル基、2 - ナフチル基、1 - アントリル基、2 - アントリル基、9 - アントリル基、1 - フェナントリル基、2 - フェナントリル基、3 - フェナントリル基、4 - フェナントリル基、9 - フェナントリル基、1 - ナфтаセニル基、2 - ナфтаセニル基、9 - ナфтаセニル基、1 - ピレニル基、2 - ピレニル基、4 - ピレニル基、2 - ピフェニル基、3 - ピフェニル基、4 - ピフェニル基、p - テルフェニル 4 - イル基、p - テルフェニル 3 - イル基、p - テルフェニル 2 - イル基、m - テルフェニル 4 - イル基、m - テルフェニル 3 - イル基、m - テルフェニル 2 - イル基、o - トリル基、m - トリル基、p - トリル基、p - t - ブチルフェニル基、p - (2 - フェニルプロピル) フェニル基、3 - メチル - 2 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - アントリル基、4' - メチルピフェニル基、4" - t - ブチル - p - テルフェニル 4 - イル基、フルオランテニル基、フルオレニル基、9, 9 - ジメチルフルオレニル基、1 - ピロリル基、2 - ピロリル基、3 - ピロリル基、ピラジニル基、2 - ピリジニル基、3 - ピリジニル基、4 - ピリジニル基、1 - インドリル基、2 - インドリル基、3 - インドリル基、4 - インドリル基、5 - インドリル基、6 - インドリル基、7 - インドリル基、1 - イソインドリル基、2 - イソインドリル基、3 - イソインドリル基、4 - イソインドリル基、5 - イソインドリル基、6 - イソインドリル基、7 - イソインドリル基、2 - フリル基、3 - フリル基、2 - ベンゾフラニル基、3 - ベンゾフラニル基、4 - ベンゾフラニル基、5 - ベンゾフラニル基、6 - ベンゾフラニル

基、7 - ベンゾフラニル基、1 - イソベンゾフラニル基、3 - イソベンゾフラニル基、4
 - イソベンゾフラニル基、5 - イソベンゾフラニル基、6 - イソベンゾフラニル基、7 -
 イソベンゾフラニル基、1 - ジベンゾフラニル基、2 - ジベンゾフラニル基、3 - ジベン
 ゾフラニル基、4 - ジベンゾフラニル基、1 - ジベンゾチオフェニル基、2 - ジベンゾチ
 オフェニル基、3 - ジベンゾチオフェニル基、4 - ジベンゾチオフェニル基、キノリル基
 、3 - キノリル基、4 - キノリル基、5 - キノリル基、6 - キノリル基、7 - キノリル基
 、8 - キノリル基、1 - イソキノリル基、3 - イソキノリル基、4 - イソキノリル基、5
 - イソキノリル基、6 - イソキノリル基、7 - イソキノリル基、8 - イソキノリル基、2
 - キノキサリニル基、5 - キノキサリニル基、6 - キノキサリニル基、1 - カルバゾリル
 基、2 - カルバゾリル基、3 - カルバゾリル基、4 - カルバゾリル基、9 - カルバゾリル
 基、1 - フェナントリジニル基、2 - フェナントリジニル基、3 - フェナントリジニル基
 、4 - フェナントリジニル基、6 - フェナントリジニル基、7 - フェナントリジニル基、
 8 - フェナントリジニル基、9 - フェナントリジニル基、10 - フェナントリジニル基、
 1 - アクリジニル基、2 - アクリジニル基、3 - アクリジニル基、4 - アクリジニル基、
 9 - アクリジニル基、1, 7 - フェナントロリン - 2 - イル基、1, 7 - フェナントロリ
 ン - 3 - イル基、1, 7 - フェナントロリン - 4 - イル基、1, 7 - フェナントロリン -
 5 - イル基、1, 7 - フェナントロリン - 6 - イル基、1, 7 - フェナントロリン - 8 -
 イル基、1, 7 - フェナントロリン - 9 - イル基、1, 7 - フェナントロリン - 10 - イ
 ル基、1, 8 - フェナントロリン - 2 - イル基、1, 8 - フェナントロリン - 3 - イル基
 、1, 8 - フェナントロリン - 4 - イル基、1, 8 - フェナントロリン - 5 - イル基、1
 , 8 - フェナントロリン - 6 - イル基、1, 8 - フェナントロリン - 7 - イル基、1, 8
 - フェナントロリン - 9 - イル基、1, 8 - フェナントロリン - 10 - イル基、1, 9 -
 フェナントロリン - 2 - イル基、1, 9 - フェナントロリン - 3 - イル基、1, 9 - フェ
 ナントロリン - 4 - イル基、1, 9 - フェナントロリン - 5 - イル基、1, 9 - フェナ
 ントロリン - 6 - イル基、1, 9 - フェナントロリン - 7 - イル基、1, 9 - フェナ
 ントロリン - 8 - イル基、1, 9 - フェナントロリン - 10 - イル基、1, 10 - フェナ
 ントロリン - 2 - イル基、1, 10 - フェナントロリン - 3 - イル基、1, 10 - フェナ
 ントロリン - 4 - イル基、1, 10 - フェナントロリン - 5 - イル基、2, 9 - フェナ
 ントロリン - 1 - イル基、2, 9 - フェナントロリン - 3 - イル基、2, 9 - フェナ
 ントロリン - 4 - イル基、2, 9 - フェナントロリン - 5 - イル基、2, 9 - フェナ
 ントロリン - 6 -
 イル基、2, 9 - フェナントロリン - 7 - イル基、2, 9 - フェナントロリン - 8 - イル
 基、2, 9 - フェナントロリン - 10 - イル基、2, 8 - フェナントロリン - 1 - イル基
 、2, 8 - フェナントロリン - 3 - イル基、2, 8 - フェナントロリン - 4 - イル基、2
 , 8 - フェナントロリン - 5 - イル基、2, 8 - フェナントロリン - 6 - イル基、2, 8
 - フェナントロリン - 7 - イル基、2, 8 - フェナントロリン - 9 - イル基、2, 8 - フ
 ェナントロリン - 10 - イル基、2, 7 - フェナントロリン - 1 - イル基、2, 7 - フェ
 ナントロリン - 3 - イル基、2, 7 - フェナントロリン - 4 - イル基、2, 7 - フェ
 ナ
 ントロリン - 5 - イル基、2, 7 - フェナントロリン - 6 - イル基、2, 7 - フェ
 ナ
 ントロリン - 8 - イル基、2, 7 - フェナントロリン - 9 - イル基、2, 7 - フェ
 ナ
 ントロリン - 10 - イル基、1 - フェナジニル基、2 - フェナジニル基、1 - フェノ
 チアジニル基、
 2 - フェノチアジニル基、3 - フェノチアジニル基、4 - フェノチアジニル基、10 - フ
 ェ
 ノチアジニル基、1 - フェノキサジニル基、2 - フェノキサジニル基、3 - フェノ
 キ
 サジニル基、4 - フェノキサジニル基、10 - フェノキサジニル基、2 - オキサゾリル
 基、
 4 - オキサゾリル基、5 - オキサゾリル基、2 - オキサジアゾリル基、5 - オキサ
 ジ
 アゾリル基、3 - フラザニル基、2 - チエニル基、3 - チエニル基、2 - メチルピロ
 ー
 ル - 1 - イル基、2 - メチルピロール - 3 - イル基、2 - メチルピロール - 4 - イ
 ル
 基、2 - メチルピロール - 5 - イル基、3 - メチルピロール - 1 - イル基、3 - メ
 チ
 ルピロール - 2 - イル基、3 - メチルピロール - 4 - イル基、3 - メチルピロ
 ー
 ル - 5 - イル基、2 - t
 -
 プチルピロール - 4 - イル基、3 - (2 - フェニルプロピル)ピロール - 1 - イ
 ル
 基、
 2 - メチル - 1 - インドリル基、4 - メチル - 1 - インドリル基、2 - メチル - 3 - イン

ドリル基、4 - メチル - 3 - インドリル基、2 - t - ブチル - 1 - インドリル基、4 - t - ブチル - 1 - インドリル基、2 - t - ブチル - 3 - インドリル基、4 - t - ブチル - 3 - インドリル基、2, 2' - ビピリジル基、2, 3' - ビピリジル基、2, 4' - ビピリジル基、3, 2' - ビピリジル基、3, 3' - ビピリジル基、3, 4' - ビピリジル基、4, 2' - ビピリジル基、4, 3' - ビピリジル基、(p - ピリジ - 4 - イル)フェニル基、(p - ピリジ - 3 - イル)フェニル基、(p - ピリジ - 2 - イル)フェニル基、(m - ピリジ - 4 - イル)フェニル基、(m - ピリジ - 3 - イル)フェニル基、(m - ピリジ - 2 - イル)フェニル基等が挙げられる。

これらの中で、好ましくはフェニル基、ナフチル基、ピフェニル基、アントラセニル基、フェナントリル基、ピレニル基、クリセニル基、フルオランテニル基、9, 9 - ジメチルフルオレニル基である。

【0041】

前記 Ar_1 、 Ar_{11} 、 Ar_{12} 、 Ar_{11a} 、 Ar_{21a} 、 Ar_{12a} 、 Ar_{22a} 及び $R_1 \sim R_{17}$ 、 $R_{301} \sim R_{369}$ 、 $R_{401} \sim R_{586}$ で表される置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 (好ましくは炭素数 1 ~ 20、さらに好ましくは炭素数 1 ~ 10) のアルキル基としては、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、n - ブチル基、s - ブチル基、イソブチル基、t - ブチル基、n - ペンチル基、n - ヘキシル基、n - ヘプチル基、n - オクチル基、ヒドロキシメチル基、1 - ヒドロキシエチル基、2 - ヒドロキシエチル基、2 - ヒドロキシイソブチル基、1, 2 - ジヒドロキシエチル基、1, 3 - ジヒドロキシイソプロピル基、2, 3 - ジヒドロキシ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリヒドロキシプロピル基、フルオロメチル基、ジフルオロメチル基、トリフルオロメチル基、1 - フルオロエチル基、2 - フルオロエチル基、2, 2, 2 - トリフルオロエチル基、3, 3, 3, 2, 2 - ペンタフルオロエチル基、2 - フルオロイソブチル基、1, 2 - フルオロエチル基、1, 3 - フルオロイソプロピル基、2, 3 - フルオロ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリフルオロプロピル基、クロロメチル基、1 - クロロエチル基、2 - クロロエチル基、2 - クロロイソブチル基、1, 2 - ジクロロエチル基、1, 3 - ジクロロイソプロピル基、2, 3 - ジクロロ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリクロロプロピル基、プロモメチル基、1 - プロモエチル基、2 - プロモエチル基、2 - プロモイソブチル基、1, 2 - ジプロモエチル基、1, 3 - ジプロモイソプロピル基、2, 3 - ジプロモ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリプロモプロピル基、ヨードメチル基、1 - ヨードエチル基、2 - ヨードエチル基、2 - ヨードイソブチル基、1, 2 - ジヨードエチル基、1, 3 - ジヨードイソプロピル基、2, 3 - ジヨード - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリヨードプロピル基、アミノメチル基、1 - アミノエチル基、2 - アミノエチル基、2 - アミノイソブチル基、1, 2 - ジアミノエチル基、1, 3 - ジアミノイソプロピル基、2, 3 - ジアミノ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリアミノプロピル基、シアノメチル基、1 - シアノエチル基、2 - シアノエチル基、2 - シアノイソブチル基、1, 2 - ジシアノエチル基、1, 3 - ジシアノイソプロピル基、2, 3 - ジシアノ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリシアノプロピル基、ニトロメチル基、1 - ニトロエチル基、2 - ニトロエチル基、2 - ニトロイソブチル基、1, 2 - ジニトロエチル基、1, 3 - ジニトロイソプロピル基、2, 3 - ジニトロ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリニトロプロピル基等が挙げられる。

【0042】

前記 Ar_1 、 Ar_{11} 、 Ar_{12} 、 Ar_{11a} 、 Ar_{21a} 、 Ar_{12a} 、 Ar_{22a} 及び $R_1 \sim R_{17}$ 、 $R_{301} \sim R_{369}$ 、 $R_{401} \sim R_{586}$ で表される置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 (好ましくは環形成炭素数 3 ~ 20、さらに好ましくは環形成炭素数 3 ~ 10) のシクロアルキル基の具体例としては、例えば、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、4 - メチルシクロヘキシル基、1 - アダマンチル基、2 - アダマンチル基、1 - ノルボルニル基、2 - ノルボルニル基等が挙げられる。

【0043】

前記 Ar_1 、 Ar_{11} 、 Ar_{12} 、 Ar_{11a} 、 Ar_{21a} 、 Ar_{12a} 、 Ar_{22a} 及び $R_1 \sim R_{17}$ 、 $R_{301} \sim R_{369}$ 、 $R_{401} \sim R_{586}$ で表される置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアラ

10

20

30

40

50

ルキル基の例としては、ベンジル基、1 - フェニルエチル基、2 - フェニルエチル基、1 - フェニルイソプロピル基、2 - フェニルイソプロピル基、フェニル - t - ブチル基、
 - ナフチルメチル基、1 - - ナフチルエチル基、2 - - ナフチルエチル基、1 - -
 ナフチルイソプロピル基、2 - - ナフチルイソプロピル基、 - ナフチルメチル基、1
 - - ナフチルエチル基、2 - - ナフチルエチル基、1 - - ナフチルイソプロピル基
 、2 - - ナフチルイソプロピル基、1 - ピロリルメチル基、2 - (1 - ピロリル) エチ
 ル基、p - メチルベンジル基、m - メチルベンジル基、o - メチルベンジル基、p - クロ
 ロベンジル基、m - クロロベンジル基、o - クロロベンジル基、p - プロモベンジル基、
 m - プロモベンジル基、o - プロモベンジル基、p - ヨードベンジル基、m - ヨードベン
 ジル基、o - ヨードベンジル基、p - ヒドロキシベンジル基、m - ヒドロキシベンジル基
 、o - ヒドロキシベンジル基、p - アミノベンジル基、m - アミノベンジル基、o - アミ
 ノベンジル基、p - ニトロベンジル基、m - ニトロベンジル基、o - ニトロベンジル基、
 p - シアノベンジル基、m - シアノベンジル基、o - シアノベンジル基、1 - ヒドロキシ
 - 2 - フェニルイソプロピル基、1 - クロロ - 2 - フェニルイソプロピル基等が挙げられ
 る。

10

【0044】

前記 $R_1 \sim R_{17}$ 、 $R_{301} \sim R_{369}$ 、 $R_{401} \sim R_{586}$ で表される置換もしくは無置換の炭素数
 1 ~ 50 (好ましくは炭素数 1 ~ 20、さらに好ましくは炭素数 1 ~ 10) のアルコキシ
 基は、-OZ で表される基であり、Z の例としては、前記アルキル基で説明したものと同
 様の例が挙げられる。

20

前記 $R_1 \sim R_{17}$ 、 $R_{301} \sim R_{369}$ 、 $R_{401} \sim R_{586}$ で表される置換もしくは無置換の環形成
 炭素数 6 ~ 50 のアリアルオキシ基は、-OZ' と表され、Z' の例としては前記アリアル
 基で説明したものと同様の例が挙げられる。

前記 $R_1 \sim R_{17}$ 、 $R_{301} \sim R_{369}$ 、 $R_{401} \sim R_{586}$ で表される置換もしくは無置換の環形成
 原子数 5 ~ 30 のヘテロアリアルオキシ基は、-OZ'' と表され、Z'' の例としては
 前記ヘテロアリアル基で説明したものと同様の例が挙げられる。

前記 $R_1 \sim R_{17}$ 、 $R_{301} \sim R_{369}$ 、 $R_{401} \sim R_{586}$ で表される置換もしくは無置換の環形成
 炭素数 6 ~ 50 のアリアルチオ基は、-SZ' と表され、Z' の例としては前記アリアル
 基で説明したものと同様の例が挙げられる。

前記 $R_1 \sim R_{17}$ 、 $R_{301} \sim R_{369}$ 、 $R_{401} \sim R_{586}$ で表される置換もしくは無置換の炭素数
 1 ~ 50 (好ましくは炭素数 1 ~ 20、さらに好ましくは炭素数 1 ~ 10) のアルコキシ
 カルボニル基は、-COOZ で表される基であり、Z の例としては、前記アルキル基で説
 明したものと同様の例が挙げられる。

30

前記 $R_1 \sim R_{17}$ 、 $R_{301} \sim R_{369}$ 、 $R_{401} \sim R_{586}$ で表される置換もしくは無置換の環形成
 炭素数 6 ~ 30 のアリアルアミノ基におけるアリアル基の例としては、前記アリアル基で
 説明したものと同様の例が挙げられる。

前記 $R_1 \sim R_{17}$ 、 $R_{301} \sim R_{369}$ 、 $R_{401} \sim R_{586}$ で表される置換もしくは無置換の環形成
 原子数 5 ~ 30 のヘテロアリアルアミノ基におけるアリアル基の例としては、前記アリアル
 基で説明したものと同様の例が挙げられる。

前記 $R_1 \sim R_{17}$ 、 $R_{301} \sim R_{369}$ 、 $R_{401} \sim R_{586}$ で表される置換もしくは無置換の炭素数
 2 ~ 50 のアシル基におけるアルキル基の例としては、前記アルキル基で説明したものと
 同様の例が挙げられる。

40

前記 $R_1 \sim R_{17}$ 、 $R_{301} \sim R_{369}$ 、 $R_{401} \sim R_{586}$ で表される置換もしくは無置換の炭素数
 2 ~ 50 のアシルアミノ基におけるアルキル基の例としては、前記アルキル基で説明した
 ものと同様の例が挙げられる。

前記 $R_1 \sim R_{17}$ 、 $R_{301} \sim R_{369}$ 、 $R_{401} \sim R_{586}$ で表される置換もしくは無置換の環形成
 炭素数 6 ~ 30 のアリアルオキシカルボニル基におけるアリアル基の例としては前記アリアル
 基で説明したものと同様の例が挙げられる。

前記 $R_1 \sim R_{17}$ 、 $R_{301} \sim R_{369}$ 、 $R_{401} \sim R_{586}$ で表される置換もしくは無置換の炭素数
 1 ~ 50 のアルキルカルボニル基におけるアルキル基の例としては、前記アルキル基で説

50

明したものと同様の例が挙げられる。

前記 $R_1 \sim R_{17}$ 、 $R_{301} \sim R_{369}$ 、 $R_{401} \sim R_{586}$ で表される置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルチオ基におけるアルキル基の例としては、前記アルキル基で説明したものと同様の例が挙げられる。

前記 $R_1 \sim R_{17}$ 、 $R_{301} \sim R_{369}$ 、 $R_{401} \sim R_{586}$ で表されるスルホニル基としては、 $-SO_2Z$ で表される基であり、 Z の例としては前記アルキル基で説明したものと同様の例等が挙げられる。

前記 $R_1 \sim R_{17}$ 、 $R_{301} \sim R_{369}$ 、 $R_{401} \sim R_{586}$ で表されるハロゲン原子としては、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子等が挙げられ、フッ素原子が好ましい。

前記 $R_1 \sim R_{17}$ 、 $R_{301} \sim R_{369}$ 、 $R_{401} \sim R_{586}$ で表されるハロゲン原子としては、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子等が挙げられ、フッ素原子が好ましい。

10

【0045】

前記 $R_1 \sim R_{17}$ 、 $R_{301} \sim R_{369}$ 、 $R_{401} \sim R_{586}$ で表される置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 (好ましくは炭素数 1 ~ 20、さらに好ましくは炭素数 1 ~ 10) のアルキルシリル基としては、例えば、トリメチルシリル基、トリエチルシリル基、トリブチルシリル基、ジメチルエチルシリル基、ジメチルイソプロピルシリル基、ジメチルプロピルシリル基、ジメチルブチルシリル基、ジメチルターシャリーブチルシリル基、ジエチルイソプロピルシリル基などが挙げられる。

前記 $R_1 \sim R_{17}$ 、 $R_{301} \sim R_{369}$ 、 $R_{401} \sim R_{586}$ で表される置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールシリル基としては、例えば、フェニルジメチルシリル基、ジフェニルメチルシリル基、ジフェニルターシャリーブチルシリル基、トリフェニルシリルなどが挙げられる。

20

前記 $R_1 \sim R_{17}$ 、 $R_{301} \sim R_{369}$ 、 $R_{401} \sim R_{586}$ で表される置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 (好ましくは炭素数 1 ~ 20、さらに好ましくは炭素数 1 ~ 10) のアルキルアミノ基としては、例えば、メチルアミノ基、ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基、 n -プロピルアミノ基などが挙げられる。

前記 $R_1 \sim R_{17}$ 、 $R_{301} \sim R_{369}$ 、 $R_{401} \sim R_{586}$ で表される置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 (好ましくは炭素数 1 ~ 20、さらに好ましくは炭素数 1 ~ 10) のハロアルキル基としては、例えば、前記アルキル基が 1 以上のハロゲン原子で置換されたものが挙げられる。

30

前記 $R_1 \sim R_{17}$ 、 $R_{301} \sim R_{369}$ 、 $R_{401} \sim R_{586}$ で表される置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 (好ましくは炭素数 2 ~ 20、さらに好ましくは炭素数 2 ~ 10) アルケニル基としては、前記アルキル基で説明した置換基から、2つの水素原子を除いて2つの炭素原子間に二重結合を設けることによりできる一価の置換基が挙げられる。

前記 $R_1 \sim R_{17}$ 、 $R_{301} \sim R_{369}$ 、 $R_{401} \sim R_{586}$ で表される置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 (好ましくは炭素数 2 ~ 20、さらに好ましくは炭素数 2 ~ 10) アルキニル基としては、前記アルキル基で説明した置換基から、4つの水素原子を除いて2つの炭素原子間に三重結合を設けることによりできる一価の置換基が挙げられる。

【0046】

前記 L_1 、 L_2 、 L_3 、 L_4 、 L_{11} 、 L_{21} 、 L_{31} 、 L_{41} 、 L_{12} 、 L_{22} 、 L_{32} 及び L_{42} で表される置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 (好ましくは炭素数 1 ~ 20、さらに好ましくは炭素数 1 ~ 10) のアルキレン基の具体例としては、前記アルキル基で説明した置換基から、さらに1つの水素原子を除くことによりできる二価の置換基が挙げられる。

40

前記 L_1 、 L_2 、 L_3 、 L_4 、 L_{11} 、 L_{21} 、 L_{31} 、 L_{41} 、 L_{12} 、 L_{22} 、 L_{32} 及び L_{42} で表される置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 (好ましくは炭素数 1 ~ 20、さらに好ましくは炭素数 1 ~ 10) のアルケニレン基の具体例としては、前記アルキレン基で説明した置換基から、2つの水素原子を除いて2つの炭素原子間に二重結合を設けることによりできる二価の置換基が挙げられる。

前記 L_1 、 L_2 、 L_3 、 L_4 、 L_{11} 、 L_{21} 、 L_{31} 、 L_{41} 、 L_{12} 、 L_{22} 、 L_{32} 及び L_{42} で表される置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 (好ましくは炭素数 1 ~ 20、さらに好ましく

50

は炭素数 1 ~ 10) のアルキレン基の具体例としては、前記アルキレン基で説明した置換基から、4つの水素原子を除いて2つの炭素原子間に三重結合を設けることによりできる二価の置換基が挙げられる。

前記 L_1 、 L_2 、 L_3 、 L_4 、 L_{11} 、 L_{21} 、 L_{31} 、 L_{41} 、 L_{12} 、 L_{22} 、 L_{32} 及び L_{42} で表される置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 (好ましくは環形成炭素数 3 ~ 20、さらに好ましくは環形成炭素数 3 ~ 10) のシクロアルキレン基の具体例としては、前記シクロアルキル基で説明した置換基から、さらに1つの水素原子を除くことによりできる二価の置換基が挙げられる。

前記 L_1 、 L_2 、 L_3 、 L_4 、 L_{11} 、 L_{21} 、 L_{31} 、 L_{41} 、 L_{12} 、 L_{22} 、 L_{32} 、 L_{11a} 、 L_{21a} 、 L_{31a} 、 L_{41a} 、 L_{12a} 、 L_{22a} 、 L_{32a} 、 L_{42a} 及び L_{42} で表される置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリーレン基の具体例としては、前記アリール基で説明した置換基から、さらに1つの水素原子を除くことによりできる二価の置換基が挙げられる。

前記 L_1 、 L_2 、 L_3 、 L_4 、 L_{11} 、 L_{21} 、 L_{31} 、 L_{41} 、 L_{12} 、 L_{22} 、 L_{32} 、 L_{11a} 、 L_{21a} 、 L_{31a} 、 L_{41a} 、 L_{12a} 、 L_{22a} 、 L_{32a} 、 L_{42a} 及び L_{42} で表される置換もしくは無置換の核原子数 5 ~ 30 のヘテロアリーレン基の具体例としては、前記ヘテロアリール基で説明した置換基から、さらに1つの水素原子を除くことによりできる二価の残基が挙げられる。

【0047】

また、前記一般式 (1)、(1-1)、(1-2)、(1-1a) 及び (1-2a) において、 L_1 、 L_2 、 L_3 、 L_4 、 L_{11} 、 L_{21} 、 L_{31} 、 L_{41} 、 L_{12} 、 L_{22} 、 L_{32} 、 L_{11a} 、 L_{21a} 、 L_{31a} 、 L_{41a} 、 L_{12a} 、 L_{22a} 、 L_{32a} 、 L_{42a} 及び L_{42} で表されるアリーレン基としては、置換もしくは無置換のフェニレン基、又は多環芳香族化合物である置換もしくは無置換のアントラセニレン基、置換もしくは無置換のフェナントレニレン基、置換もしくは無置換のクリセニレン基、置換もしくは無置換のピレニレン基、置換もしくは無置換のアセナフチレニレン基、置換もしくは無置換のアセナフテニレン基、置換もしくは無置換のフルオランテニレン基、置換もしくは無置換のフルオレニレン基、置換もしくは無置換のナフチレン基、置換もしくは無置換のベンゾフルオランテニレン基、置換もしくは無置換のベンゾフェナントレニレン基、置換もしくは無置換のベンゾクリセニレン基、置換もしくは無置換のベンゾトリフェニレニレン基、置換もしくは無置換のベンゾアントラセニレン基、置換もしくは無置換のジベンゾフェナントレニレン基、及び置換もしくは無置換のトリフェニレニレン基が好ましく、アントラセニレン基、フェナントレニレン基、クリセニレン基、ナフチレン基、トリフェニレニレン基、フルオランテニレン基、ベンゾクリセニレン基、ベンゾアントラセニレン基、フェニレン基、又はピレニレン基が好ましく、アントラセニレン基が特に好ましい。

【0048】

上記 L_1 、 L_2 、 L_3 、 L_4 、 L_{11} 、 L_{21} 、 L_{31} 、 L_{41} 、 L_{12} 、 L_{22} 、 L_{32} 、 L_{11a} 、 L_{21a} 、 L_{31a} 、 L_{41a} 、 L_{12a} 、 L_{22a} 、 L_{32a} 、 L_{42a} 及び L_{42} で表されるアリーレン基は、置換基を有していてもよい。

アリーレン基の置換基としては、例えば、ハロゲン原子、ヒドロキシル基、置換もしくは無置換のアミノ基、ニトロ基、シアノ基、置換もしくは無置換のアルキル基、置換もしくは無置換のアルケニル基、置換もしくは無置換のシクロアルキル基、置換もしくは無置換のアルコキシ基、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、置換もしくは無置換のアラルキル基、置換もしくは無置換のアリールオキシ基、置換もしくは無置換のアルキルシリル基、置換もしくは無置換のアリールシリル基、置換もしくは無置換のアルコキシカルボニル基、又は、カルボキシル基が挙げられる。アリーレン基の好ましい例としては、ナフチル基、フェナントレニル基、フルオレニル基、9,9-ジメチルフルオレニル基、クリセニル基、フルオランテニル基、ピレニル基、ベンゾクリセニル基及びトリフェニレニル基を挙げることができる。

アリーレン基が複数の置換基を有する場合、それらが環を形成していてもよい。

【0049】

10

20

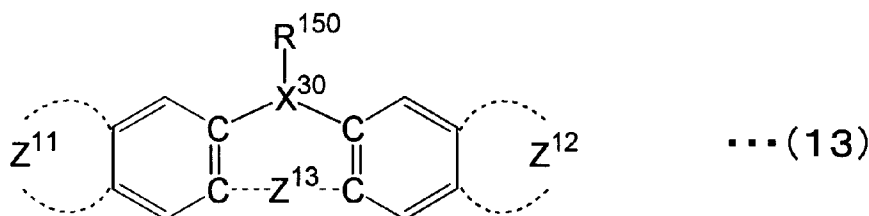
30

40

50

前記 L_1 、 L_2 、 L_3 、 L_4 、 L_{11} 、 L_{21} 、 L_{31} 、 L_{41} 、 L_{12} 、 L_{22} 、 L_{32} 、 L_{11a} 、 L_{21a} 、 L_{31a} 、 L_{41a} 、 L_{12a} 、 L_{22a} 、 L_{32a} 、 L_{42a} 及び L_{42} で表されるヘテロアリーレン基としては、下記式 (13) で表される化合物より 2 つの水素原子を除いてなるものが挙げられる。

【化 25】



10

【0050】

式 (13) 中、 Z^{11} は置換もしくは無置換の複素環を表し、 Z^{12} は、置換もしくは無置換の複素環または炭化水素環を表し、 Z^{13} は 2 価の連結基または結合手を表す。 X^{30} は $-NR^{150}-$ 、 $-O-$ 又は $-S-$ を表す。 R^{150} は水素原子または置換基を表す。

Z^{11} 、 Z^{12} で表される複素環としては、フラン環、チオフェン環、ピリジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、ピラジン環、トリアジン環、ベンゾイミダゾール環、オキサジアゾール環、トリアゾール環、イミダゾール環、ピラゾール環、チアゾール環、インドール環、ベンゾイミダゾール環、ベンゾチアゾール環、ベンゾオキサゾール環、キノキサリン環、キナゾリン環、フタラジン環、カルバゾール環、カルボリン環、カルボリン環を構成する炭化水素環の炭素原子が更に窒素原子で置換されている環等が挙げられる。

20

【0051】

前記式 (13) において、 Z^{12} で表される炭化水素環としては、ベンゼン環、ビフェニル環、ナフタレン環、アズレン環、アントラセン環、フェナントレン環、ピレン環、クリセン環、ナフタセン環、トリフェニレン環、*o*-テルフェニル環、*m*-テルフェニル環、*p*-テルフェニル環、アセナフテン環、コロネン環、フルオレン環、フルオラントレン環、ナフタセン環、ペンタセン環、ペリレン環、ペンタフェン環、ピセン環、ピレン環、ピラントレン環、アンスラアントレン環等が挙げられる。

30

【0052】

式 (13) において、 R^{150} で表される置換基としては、アルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アリール基、複素環基、アルコキシル基、シクロアルコキシル基、アリールオキシ基、アルキルチオ基、アリールチオ基、アルコキシカルボニル基、アリールオキシカルボニル基、スルファモイル基、アシル基、アシルオキシ基、アミド基、カルバモイル基、ウレイド基、スルフィニル基、アルキルスルホニル基、アリールスルホニル基、アミノ基、ハロゲン原子、フッ化炭化水素基、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシ基、メルカプト基、シリル基等が挙げられる。

【0053】

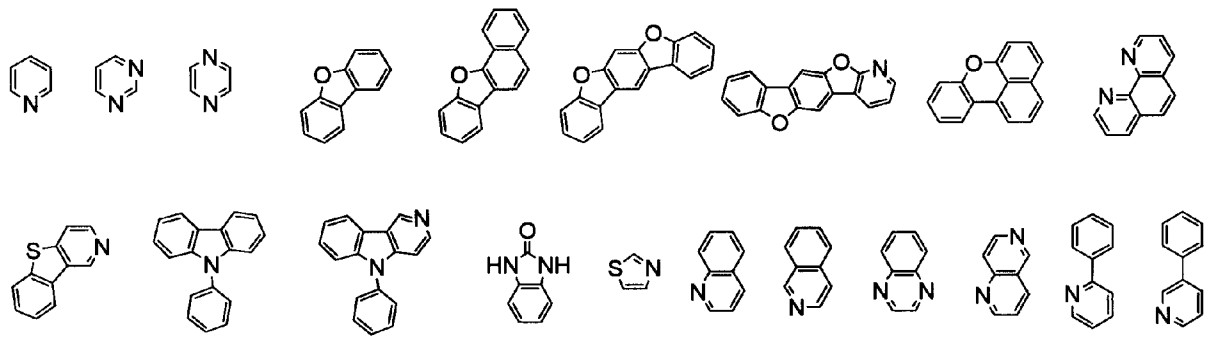
これらの置換基は、上記の置換基によって更に置換されていてもよい。また、これらの置換基は複数が互いに結合して環を形成していてもよい。

40

【0054】

前記 L_1 、 L_2 、 L_3 、 L_4 、 L_{11} 、 L_{21} 、 L_{31} 、 L_{41} 、 L_{12} 、 L_{22} 、 L_{32} 、 L_{11a} 、 L_{21a} 、 L_{31a} 、 L_{41a} 、 L_{12a} 、 L_{22a} 、 L_{32a} 、 L_{42a} 及び L_{42} で表されるヘテロアリーレン基の具体例としては、以下の化合物より 2 つの水素原子を除いてなるものが挙げられる。

【化 2 6】

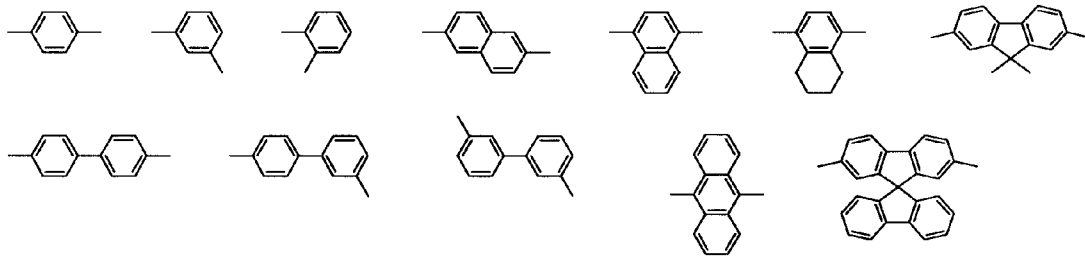


10

【 0 0 5 5】

前記 L_1 、 L_2 、 L_3 、 L_4 、 L_{11} 、 L_{21} 、 L_{31} 、 L_{41} 、 L_{12} 、 L_{22} 、 L_{32} 、 L_{11a} 、 L_{21a} 、 L_{31a} 、 L_{41a} 、 L_{12a} 、 L_{22a} 、 L_{32a} 、 L_{42a} 及び L_{42} で表されるアリーレン基としては、下記式で表されるものが好ましい。

【化 2 7】



20

【 0 0 5 6】

本願明細書中において「置換もしくは無置換」という場合の置換基としては、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールチオ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のアルキル基で置換されたアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基で置換されたアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、スルホニル基、ポリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキ

30

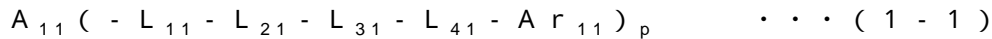
40

50

シル基が挙げられる。

【 0 0 5 7 】

本発明はまた、下記一般式 (1 - 1)、(1 - 2) で表される含窒素複素環誘導体をも提供する。



(式中、

L_{11} 、 L_{21} 、 L_{31} 及び L_{41} は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のアルキレン基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のアルケニレン基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のアルキニレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 5 0 のシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 3 0 のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 3 0 のヘテロアリーレン基であり、

$A r_{11}$ は置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 5 0 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 3 0 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 3 0 のヘテロアリール基であり、

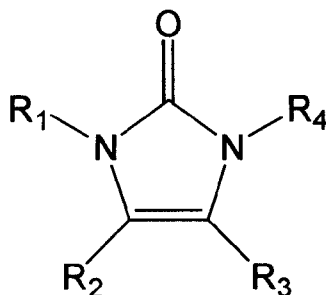
A_{11} は下記一般式 (2 - 1) で表される環構造含有化合物の p 価の残基を表し、

p は 1 以上の整数を表す。

但し、 L_{11} 、 L_{21} 、 L_{31} 及び L_{41} のいずれか 1 つ以上が、置換もしくは無置換のアントラセニレン基、置換もしくは無置換のフェナントレニレン基、置換もしくは無置換のクリセニレン基、置換もしくは無置換のピレニレン基、置換もしくは無置換のアセナフチレニレン基、置換もしくは無置換のアセナフテニレン基、置換もしくは無置換のフルオランテニレン基、置換もしくは無置換のフルオレニレン基、置換もしくは無置換のナフチレン基、置換もしくは無置換のベンゾフルオランテニレン基、置換もしくは無置換のベンゾフェナントレニレン基、置換もしくは無置換のベンゾクリセニレン基、置換もしくは無置換のベンゾトリフェニレニレン基、置換もしくは無置換のベンゾアントラセニレン基、置換もしくは無置換のジベンゾフェナントレニレン基、又は置換もしくは無置換のトリフェニレニレン基を表すか、あるいは、 $A r_{11}$ が、置換もしくは無置換のアントラセニル基、置換もしくは無置換のクリセニル基、置換もしくは無置換のピレニル基、置換もしくは無置換のアセナフチレニル基、置換もしくは無置換のアセナフテニル基、置換もしくは無置換のフルオランテニル基、置換もしくは無置換のフルオレニル基、置換もしくは無置換のナフチル基、置換もしくは無置換のベンゾフルオランテニル基、置換もしくは無置換のベンゾフェナントレニル基、置換もしくは無置換のベンゾクリセニル基、置換もしくは無置換のベンゾトリフェニレニル基、置換もしくは無置換のベンゾアントラセニル基、置換もしくは無置換のジベンゾフェナントレニル基、又は置換もしくは無置換のトリフェニレニル基を表す。))

【 0 0 5 8 】

【 化 2 8 】



... (2 - 1)

【 0 0 5 9 】

(式中、 $R_1 \sim R_4$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 0

のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーロキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のアルキル基で置換されたアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基で置換されたアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリーロキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリーロキシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、スルホニル基、ボリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキシル基、又は L_{11} と結合する結合手を表すか、あるいは、 R_1 と R_2 、 R_2 と R_3 、 R_3 と R_4 は、それぞれ互いに結合して置換もしくは無置換の炭化水素環、又は置換もしくは無置換の複素環である環 Y を形成する。

10

20

【 0 0 6 0 】



(式中、

L_{12} 、 L_{22} 、 L_{32} 及び L_{42} は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキレン基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニレン基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリーレン基であり、

30

$A r_{12}$ は置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基であり、

A_{12} は下記一般式 (2 - 2)、(2 - 3) 又は (2 - 4) で表される環構造含有化合物の q 個の残基を表し、

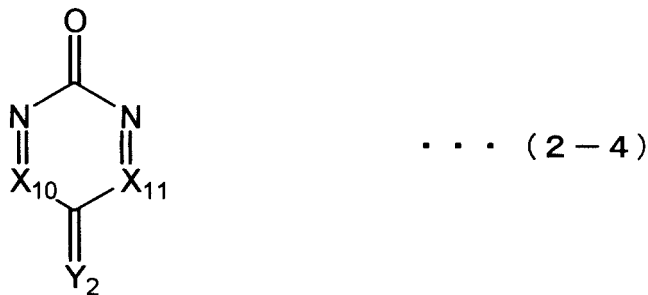
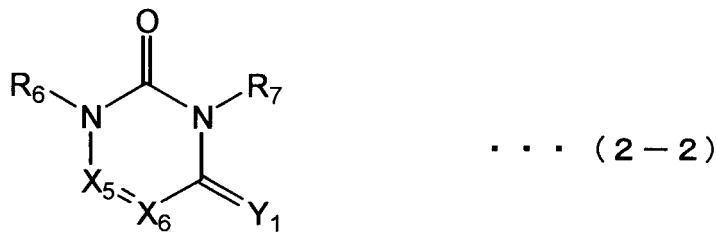
q は 1 以上の整数を表す。

但し、 L_{12} 、 L_{22} 、 L_{32} 及び L_{42} のいずれか 1 つ以上が、置換もしくは無置換の炭素数 1 2 ~ 3 0 のアリーレン基を表すか、あるいは、 $A r_{12}$ が、置換もしくは無置換の炭素数 1 2 ~ 3 0 のアリール基を表す。)

40

【 0 0 6 1 】

【化 2 9】



10

20

【 0 0 6 2 】

(式中、 $X_5 \sim X_{11}$ は、それぞれ独立に、 CR_9 又は N を表し、

Y_1 及び Y_2 は、それぞれ独立に、 $CR_{10}R_{11}$ 又は NR_{12} を表し、

$R_6 \sim R_{12}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリアルオキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリアル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のアルキルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリアルシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のアルキル基で置換されたアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリアル基で置換されたアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアルアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリアルアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシルアミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリアルオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアシル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアルオキシカルボニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルカルボニル基、メルカプト基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアルチオ基、スルホニル基、ポリル基、ホスフィノ基、アミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、カルボキシル基、又は L_{12} と結合する結合手を表すか、あるいは、それぞれ互いに結合して置換もしくは無置換の炭化水素環、又は置換

30

40

50

もしくは無置換の複素環を形成する。)

【0063】

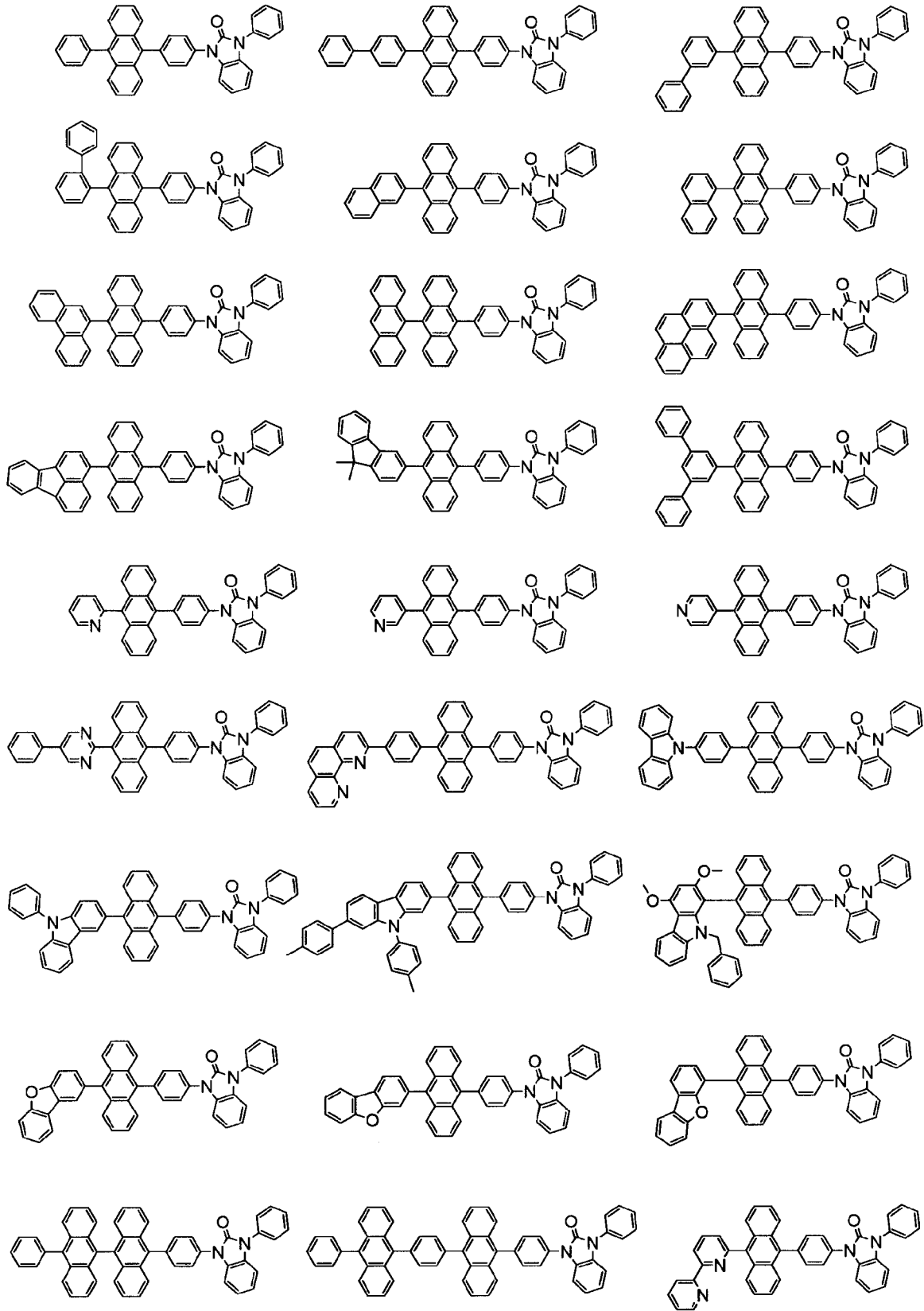
本発明の含窒素複素環誘導体の詳細、好ましい態様等については、上述の本発明の電子輸送材料と同様である。

【0064】

本発明の一般式(1)、(1-1)、(1-1a)、(1-2)、(1-2a)で表される電子輸送材料もしくは含窒素複素環誘導体の具体例を以下に示すが、これら例示化合物に限定されるものではない。

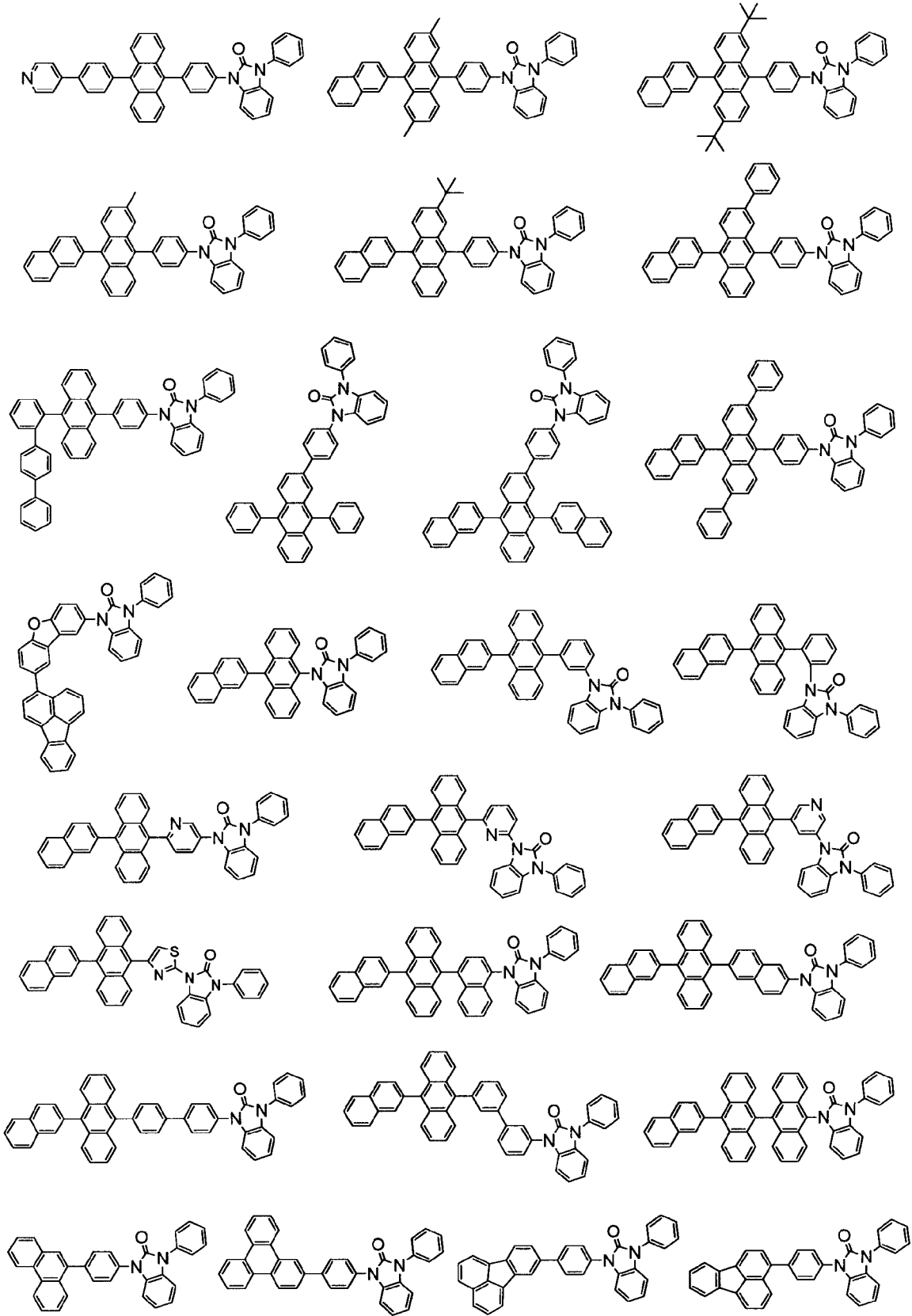
【0065】

【化 3 0】



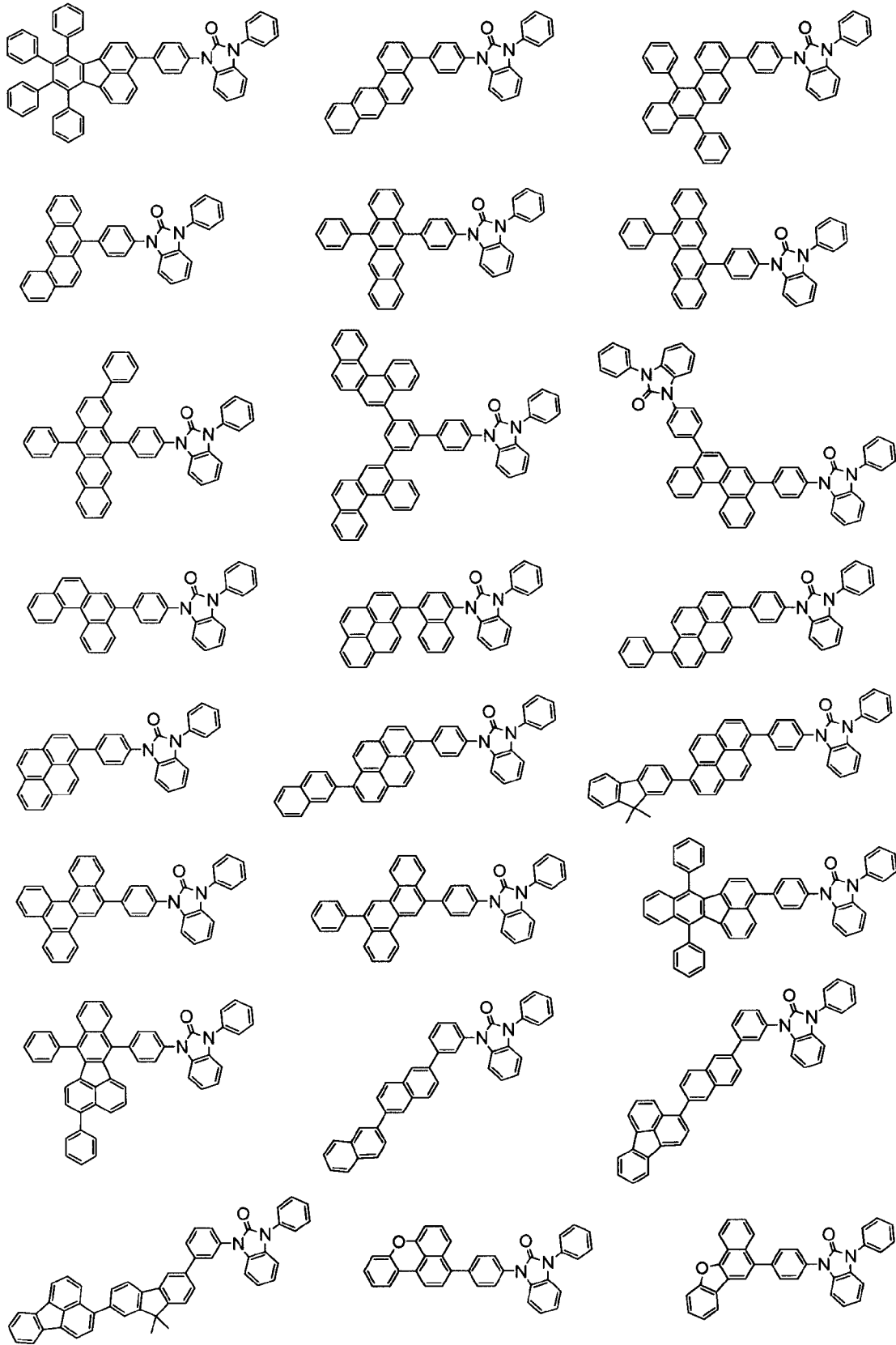
【 0 0 6 6】

【化 3 1】



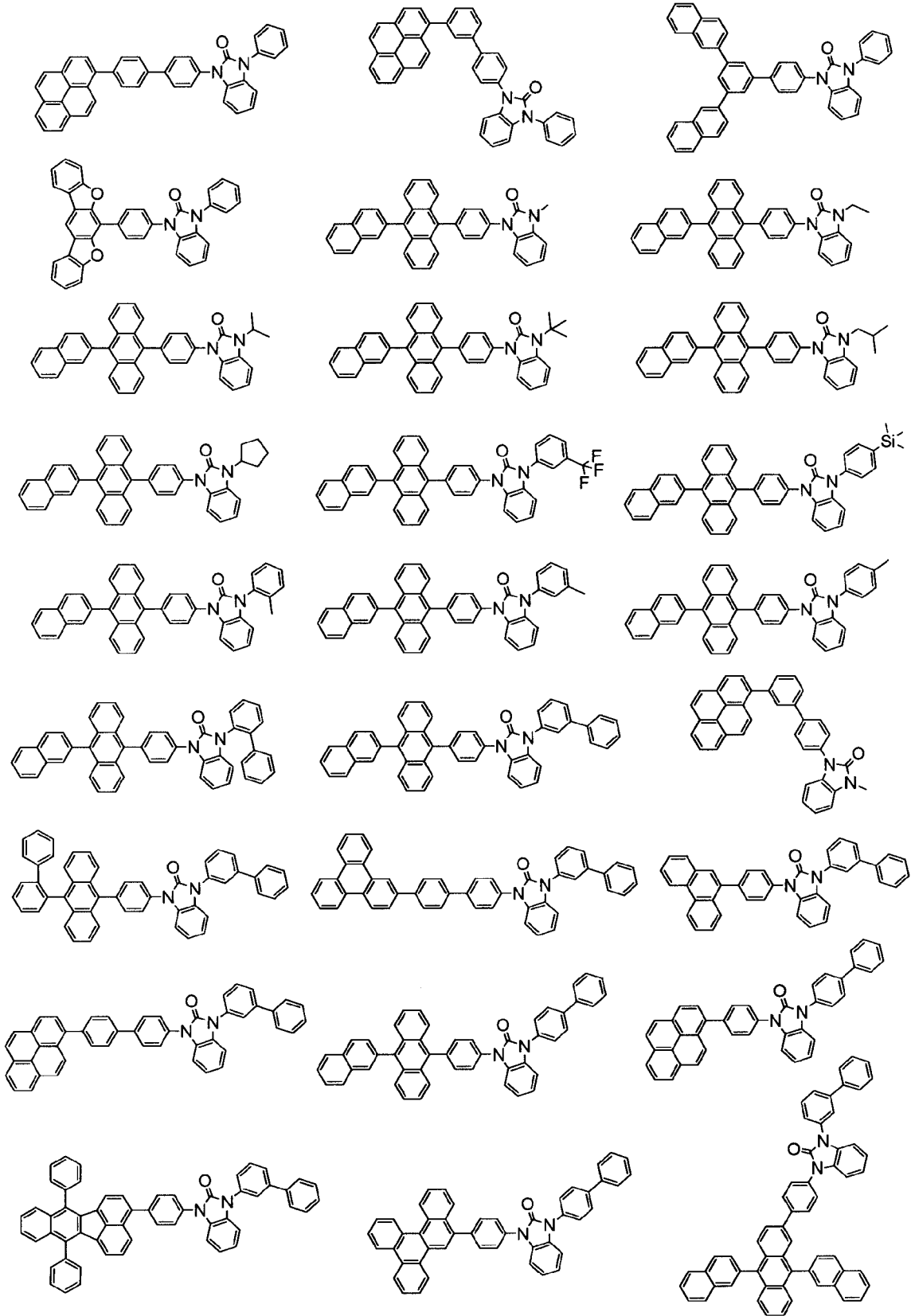
【 0 0 6 7 】

【化 3 2】



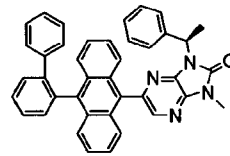
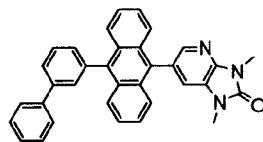
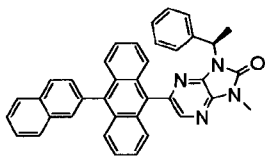
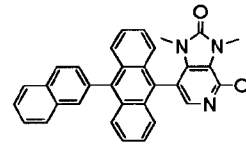
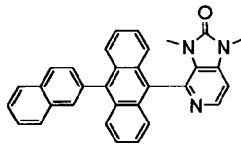
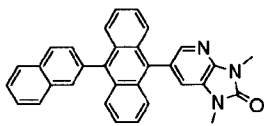
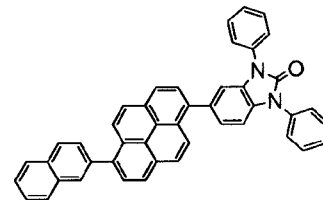
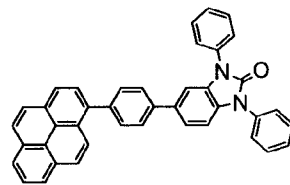
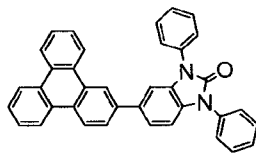
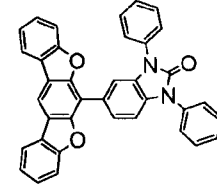
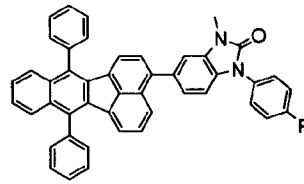
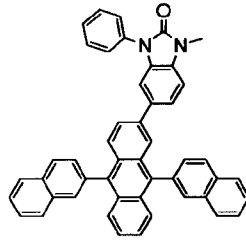
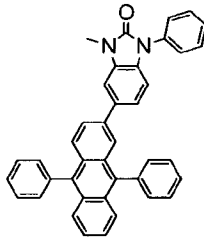
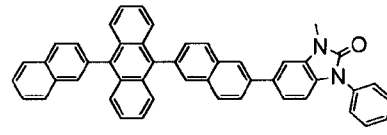
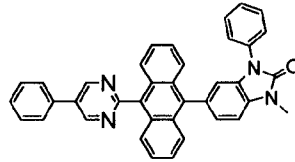
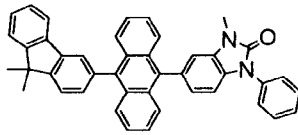
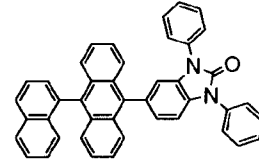
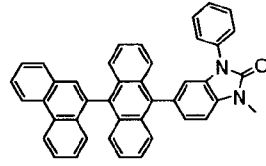
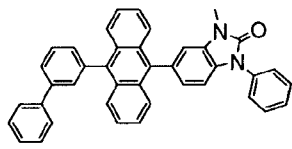
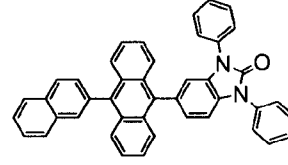
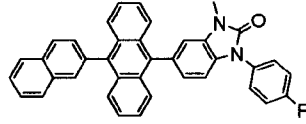
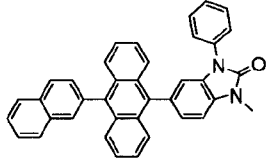
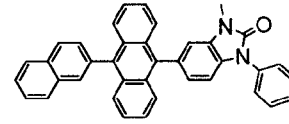
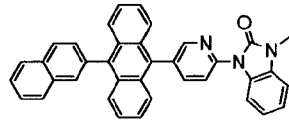
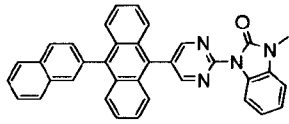
【 0 0 6 8 】

【化 3 3】



【 0 0 6 9 】

【化 3 4】



10

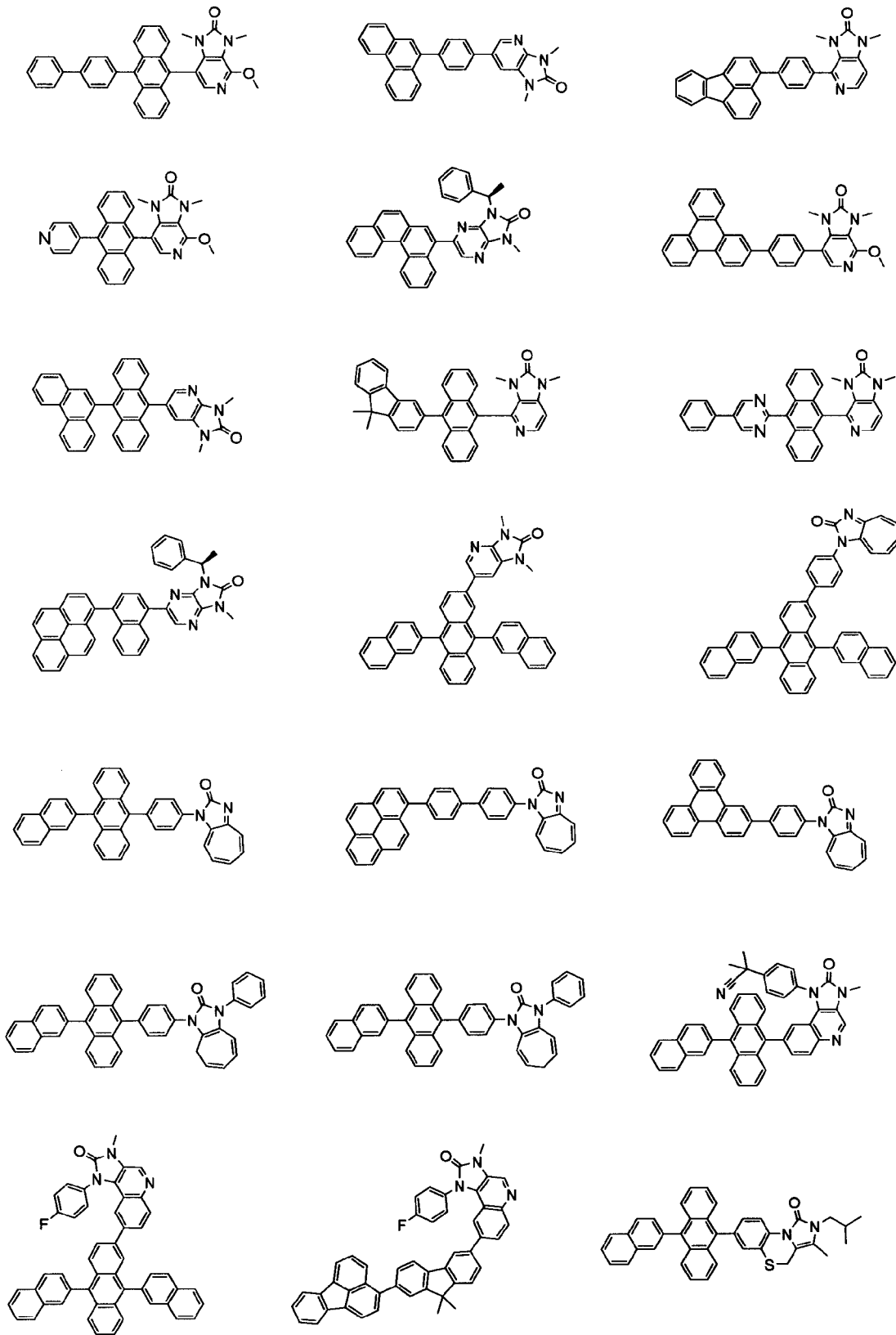
20

30

40

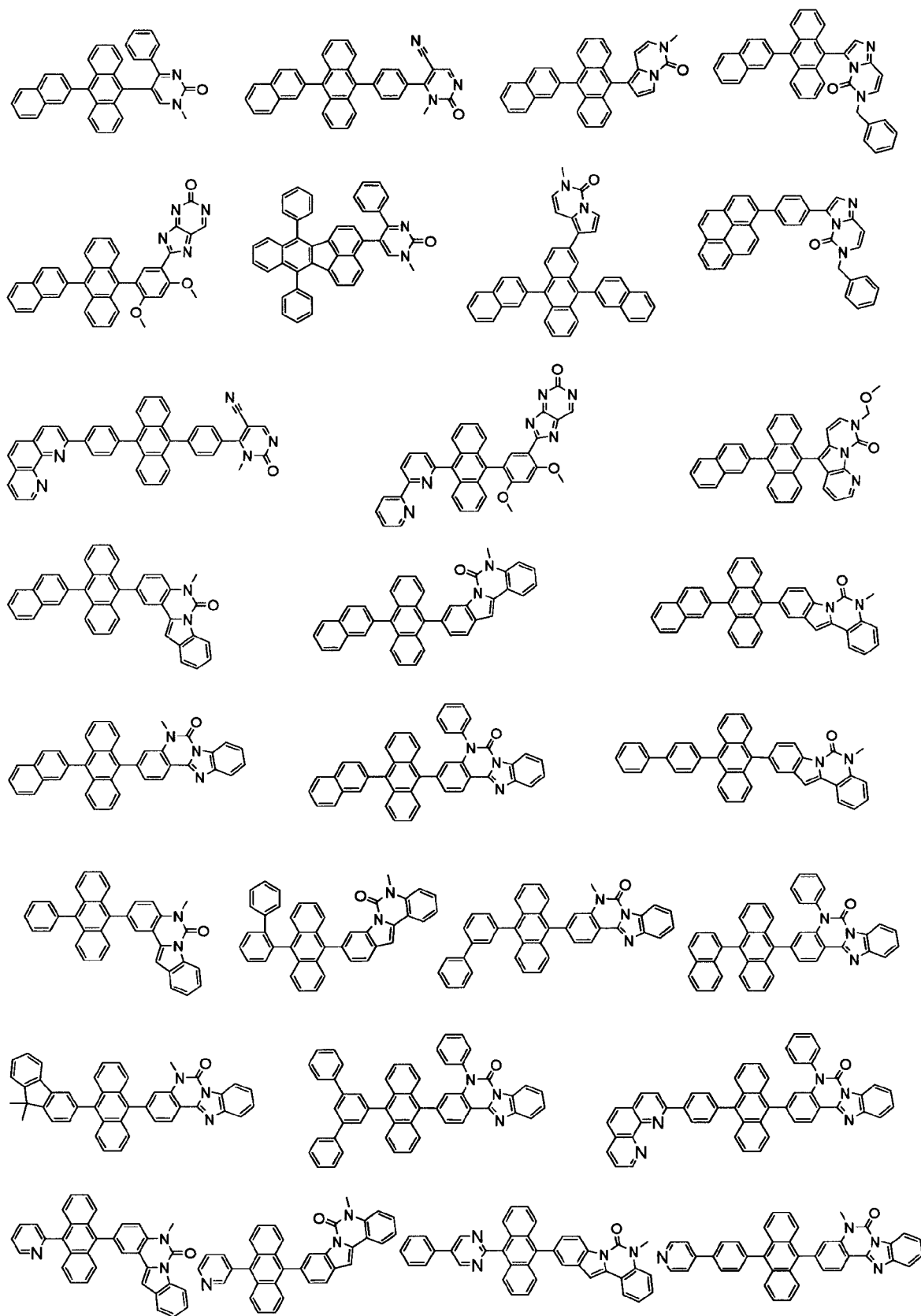
【 0 0 7 0 】

【化 3 5】



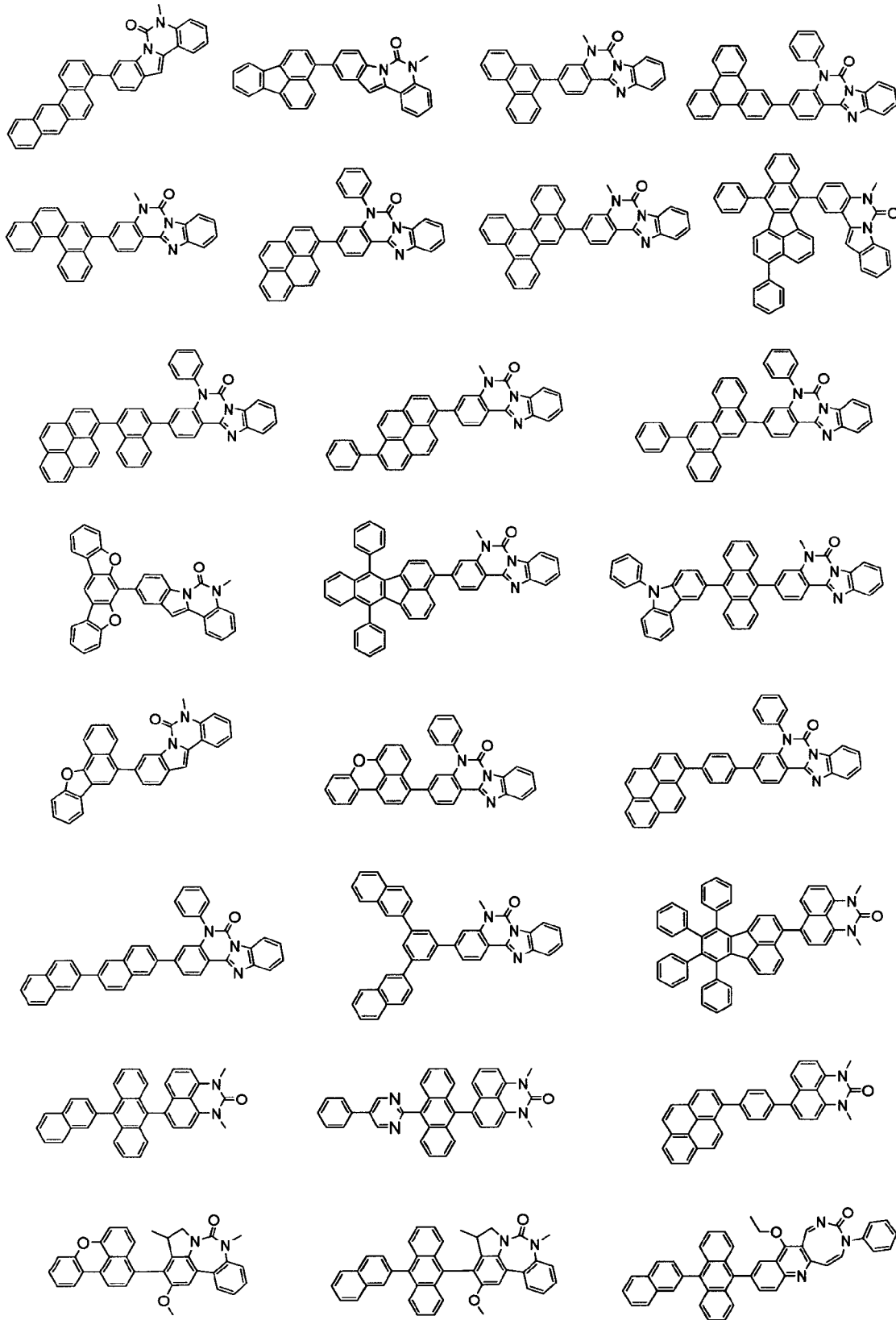
【 0 0 7 1】

【化 3 6】



【 0 0 7 2 】

【化 3 8】



【0074】

本発明の含窒素複素環誘導体は、有機EL素子用材料として好適に用いることができる。

。

本発明の含窒素複素環誘導体は、有機EL素子用電子輸送材料として好適に用いることができる。

【 0 0 7 5 】

次に、本発明の有機 E L 素子について説明する。

本発明の有機 E L 素子は、陰極と陽極間に少なくとも発光層を含む一層又は複数層からなる有機薄膜層が挟持されている有機 E L 素子において、その有機薄膜層の少なくとも 1 層が、前記含窒素複素環誘導体を単独もしくは混合物の成分として含有する。

本発明の有機 E L 素子は、前記有機薄膜層が発光層と陰極との間に少なくとも一層の電子輸送層を有し、その電子輸送層が、本発明の前記含窒素複素環誘導体を単独もしくは混合物の成分として含有すると好ましい。

【 0 0 7 6 】

本発明の有機 E L 素子は、好ましくは、本発明の前記含窒素複素環誘導体を含有する電子輸送層が、還元性ドーパントを含有するものである。

還元性ドーパントとしては、ドナー性金属、ドナー性金属化合物及びドナー性金属錯体が挙げられ、これら還元性ドーパントは 1 種単独で使用してもよいし、2 種以上を組み合わせ使用してもよい。

ここで、還元性ドーパントとは、電子を供与する材料（電子供与性材料という）である。この電子供与性材料は、当該電子供与性材料と共に電子輸送層に含まれる他の有機材料、もしくは電子輸送層に隣接する層を構成する有機材料と相互作用し、ラジカルアニオンを生じさせる材料、又は電子供与性ラジカルを有する材料である。

【 0 0 7 7 】

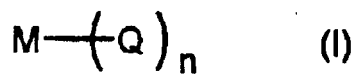
ドナー性金属とは、仕事関数 3 . 8 e V 以下の金属をいい、好ましくはアルカリ金属、アルカリ土類金属及び希土類金属であり、より好ましくは Cs , Li , Na , Sr , K , Mg , Ca , Ba , Yb , Eu 及び Ce である。

ドナー性金属化合物とは、上記のドナー性金属を含む化合物であり、好ましくはアルカリ金属、アルカリ土類金属又は希土類金属を含む化合物であり、より好ましくはこれらの金属のハロゲン化物、酸化物、炭酸塩、ホウ酸塩である。例えば、 MO_x （M はドナー性金属、x は 0 . 5 ~ 1 . 5 ）、 MF_x （x は 1 ~ 3 ）、 $M(CO_3)_x$ （x は 0 . 5 ~ 1 . 5 ）で表される化合物である。

【 0 0 7 8 】

ドナー性金属錯体とは、上記のドナー性金属の錯体であり、好ましくはアルカリ金属、アルカリ土類金属又は希土類金属の有機金属錯体である。好ましくは下記式（I）で表される有機金属錯体である。

【 化 3 9 】



【 0 0 7 9 】

（式中、M はドナー性金属であり、Q は配位子であり、好ましくはカルボン酸誘導体、ジケトン誘導体又はキノリン誘導体であり、n は 1 ~ 4 の整数である。）

【 0 0 8 0 】

ドナー性金属錯体の具体例としては、特開 2 0 0 5 - 7 2 0 1 2 号公報に記載のタンゲステン水車等が挙げられる。さらに、特開平 1 1 - 3 4 5 6 8 7 号公報に記載された中心金属がアルカリ金属、アルカリ土類金属であるフタロシアニン化合物等もドナー性金属錯体として使用できる。

【 0 0 8 1 】

上記還元性ドーパントは、好ましくはアルカリ金属、アルカリ土類金属、希土類金属、アルカリ金属の酸化物、アルカリ金属のハロゲン化物、アルカリ土類金属の酸化物、アルカリ土類金属のハロゲン化物、希土類金属の酸化物、希土類金属のハロゲン化物、アルカ

10

20

30

40

50

リ金属の有機錯体、アルカリ土類金属の有機錯体及び希土類金属の有機錯体からなる群から選択される1種又は2種以上であり、より好ましくはアルカリ金属の8-キノリノール錯体である。

【0082】

アルカリ金属としては、例えば、

- Li (リチウム、仕事関数：2.93 eV)、
- Na (ナトリウム、仕事関数：2.36 eV)、
- K (カリウム、仕事関数：2.3 eV)、
- Rb (ルビジウム、仕事関数：2.16 eV)、及び
- Cs (セシウム、仕事関数：1.95 eV)

が挙げられる。なお、括弧内の仕事関数の値は、化学便覧(基礎編I I, 1984年, P. 493, 日本化学会編)に記載されたものであり、以下同様である。

また、好ましいアルカリ土類金属としては、例えば、

- Ca (カルシウム、仕事関数：2.9 eV)、
- Mg (マグネシウム、仕事関数：3.66 eV)、
- Ba (バリウム、仕事関数：2.52 eV)、及び
- Sr (ストロンチウム、仕事関数：2.0~2.5 eV)

が挙げられる。なお、ストロンチウムの仕事関数の値は、フィジックス・オブ・セミコンダクターデバイス(N. Y. ワイロー, 1969年, P. 366)に記載されたものである。

また、好ましい希土類金属としては、例えば、

- Yb (イッテルビウム、仕事関数：2.6 eV)、
- Eu (ユーロピウム、仕事関数：2.5 eV)、
- Gd (ガドニウム、仕事関数：3.1 eV)、及び
- Er (エルビウム、仕事関数：2.5 eV)

が挙げられる。

また、アルカリ金属酸化物としては、例えば、 Li_2O 、 LiO 、及び NaO が挙げられる。また、好ましいアルカリ土類金属酸化物としては、例えば、 CaO 、 BaO 、 SrO 、 BeO 、及び MgO が挙げられる。

また、アルカリ金属のハロゲン化物としては、例えば、 LiF 、 NaF 、 CsF 、及び KF といったフッ化物のほかに、 $LiCl$ 、 KCl 、及び $NaCl$ といった塩化物が挙げられる。

また、好ましいアルカリ土類金属のハロゲン化物としては、例えば、 CaF_2 、 BaF_2 、 SrF_2 、 MgF_2 、及び BeF_2 といったフッ化物や、フッ化物以外のハロゲン化物が挙げられる。

【0083】

本発明の有機EL素子は、電子輸送層に本発明の含窒素複素環誘導体含有すると、有機EL素子の低電圧駆動及び高効率化が可能となるため特に好ましい。本発明の含窒素複素環誘導体はウレア構造を有し、該ウレア構造は、メソメリー効果により酸素が負に分極していることにより、金属との親和性が増し、金属からの電子注入性が良くなる。その結果、電子輸送層内の電子量が増すことになり、発光層への電子注入が促進される。電子注入が促進された結果、発光層における正孔との再結合確率が高まり、電流量が増加する。電流量が増加した結果、低電圧化する。

電子輸送層中における含窒素複素環誘導体の含有量は、50質量%以上が好ましく、60質量%以上がより好ましい。

【0084】

以下、本発明の有機EL素子の素子構成について説明する。

(1) 有機EL素子の構成

本発明の有機EL素子の代表的な素子構成としては、下記のような構成である。

本発明のEL素子における電子輸送層は、発光層と陰極の間にある。また、該電子輸送

10

20

30

40

50

層は、LiF等の還元性ドーパントを含有する層と隣接して設けられる場合がある。

一方、本発明のEL素子における電子障壁層は、発光層と電子輸送層の間にある。

本発明の含酸素縮合環誘導体は、有機EL素子用材料として用いると好ましく、有機EL素子の障壁材料として用いるとより好ましい。

(1) 陽極 / 発光層 / 電子輸送層 / 陰極

(2) 陽極 / 発光層 / 電子輸送層1 / 電子輸送層2 / 陰極

(3) 陽極 / 正孔注入層 / 発光層 / 電子輸送層 / 陰極

(4) 陽極 / 正孔注入層 / 発光層 / 電子輸送層1 / 電子輸送層2 / 陰極

(5) 陽極 / 正孔注入層 / 発光層 / 電子輸送層1 / 電子輸送層2 / 還元性ドーパントを含有する層 / 陰極 10

(6) 陽極 / 正孔注入層 / 発光層 / 電子輸送層 / 還元性ドーパントを含有する層 / 陰極

(7) 陽極 / 正孔注入層 / 正孔輸送層 / 発光層 / 電子輸送層 / 陰極

(8) 陽極 / 正孔注入層 / 正孔輸送層 / 発光層 / 電子輸送層 / 還元性ドーパントを含有する層 / 陰極

(9) 陽極 / 正孔注入層 / 正孔輸送層 / 発光層 / 電子障壁層 / 電子輸送層 / 還元性ドーパントを含有する層 / 陰極

(10) 陽極 / 絶縁層 / 正孔注入層 / 正孔輸送層 / 発光層 / 電子輸送層 / 陰極

(11) 陽極 / 絶縁層 / 正孔注入層 / 正孔輸送層 / 発光層 / 電子輸送層 / 還元性ドーパントを含有する層 / 陰極 20

(12) 陽極 / 絶縁層 / 正孔注入層 / 正孔輸送層 / 発光層 / 電子障壁層 / 電子輸送層 / 還元性ドーパントを含有する層 / 陰極

などの構造を挙げることができる。

これらの中で通常(8)の構成が好ましく用いられるが、これらに限定されるものではない。

【0085】

(2) 透光性基板

本発明の有機EL素子は、透光性の基板上に作製する。ここでいう透光性基板は有機EL素子を支持する基板であり、400~700nmの可視領域の光の透過率が50%以上で平滑な基板が好ましい。 30

具体的には、ガラス板、ポリマー板等が挙げられる。ガラス板としては、特にソーダ石灰ガラス、バリウム・ストロンチウム含有ガラス、鉛ガラス、アルミノケイ酸ガラス、ホウケイ酸ガラス、バリウムホウケイ酸ガラス、石英等が挙げられる。またポリマー板としては、ポリカーボネート、アクリル、ポリエチレンテレフタレート、ポリエーテルサルファイド、ポリサルフォン等を挙げることができる。

【0086】

(3) 陽極

本発明の有機EL素子の陽極は、正孔を正孔輸送層又は発光層に注入する機能を有するものであり、4.5eV以上の仕事関数を有することが効果的である。本発明に用いられる陽極材料の具体例としては、酸化インジウム錫合金(ITO)、酸化錫(NESA)、インジウム-亜鉛酸化物(IZO)、金、銀、白金、銅等が挙げられる。 40

陽極は、これらの電極物質を蒸着法やスパッタリング法等の方法で薄膜を形成させることにより作製することができる。

このように発光層からの発光を陽極から取り出す場合、陽極の発光に対する透過率が10%より大きくすることが好ましい。また、陽極のシート抵抗は、数百Ω以下が好ましい。陽極の膜厚は材料にもよるが、通常10nm~1μm、好ましくは10~200nmの範囲で選択される。

【0087】

(4) 発光層

本発明の有機EL素子の発光層は電子と正孔の再結合の場を提供し、これを発光につなげる機能を有する。

この発光層を形成する方法としては、例えば蒸着法、スピンコート法、LB法等の公知の方法を適用することができる。発光層は、特に分子堆積膜であることが好ましい。ここで分子堆積膜とは、気相状態の材料化合物から沈着され形成された薄膜や、溶液状態又は液相状態の材料化合物から固体化され形成された膜のことであり、通常この分子堆積膜は、LB法により形成された薄膜(分子累積膜)とは凝集構造、高次構造の相違や、それに起因する機能的な相違により区分することができる。

また、樹脂等の結着剤と材料化合物とを溶剤に溶かして溶液とした後、これをスピンコート法等により薄膜化することによっても、発光層を形成することができる。

本発明においては、本発明の目的が損なわれない範囲で、所望により発光層に本発明の含窒素複素環誘導体からなる発光材料以外の他の公知の発光材料を含有させてもよく、また、本発明の含窒素複素環誘導体からなる発光材料を含む発光層に、他の公知の発光材料を含む発光層を積層してもよい。

【0088】

発光層に使用できる発光材料又はドーピング材料としては、例えば、アリールアミン化合物、スチリルアミン化合物、アントラセン誘導体、ナフタレン誘導体、フェナントレン誘導体、ピレン誘導体、テトラセン誘導体、コロネン誘導体、クリセン誘導体、フルオレセイン誘導体、ペリレン誘導体、フタロペリレン誘導体、ナフタロペリレン誘導体、ペリノン誘導体、フタロペリノン誘導体、ナフタロペリノン誘導体、ジフェニルプタジエン誘導体、テトラフェニルプタジエン誘導体、クマリン誘導体、オキサジアゾール誘導体、ビスベンゾキサゾリン誘導体、ビススチリル誘導体、ピラジン誘導体、シクロペンタジエン誘導体、キノリン金属錯体、アミノキノリン金属錯体、ベンゾキノリン金属錯体、イミン化合物、ジフェニルエチレン誘導体、ビニルアントラセン誘導体、ジアミノカルバゾール誘導体、ピラン誘導体、チオピラン誘導体、ポリメチン化合物、メロシアニン化合物、イミダゾールキレート化オキシノイド化合物、キナクリドン化合物、ルブレン誘導体及び蛍光色素等が挙げられるが、これらに限定されるものではない。

【0089】

また、本発明の有機EL素子は、発光層が、アリールアミン化合物、スチリルアミン化合物、アントラセン化合物、ナフタレン化合物、フェナントレン化合物、ピレン化合物を含有すると好ましい。

【0090】

(5) 正孔注入・輸送層

正孔注入・輸送層は発光層への正孔注入を助け、発光領域まで輸送する層であって、正孔移動度が大きく、イオン化エネルギーが通常5.5 eV以下と小さい。このような正孔注入・輸送層としては、より低い電界強度で正孔を発光層に輸送する材料が好ましく、さらに正孔の移動度が、例えば $10^4 \sim 10^6$ V/cmの電界印加時に、少なくとも 10^{-4} cm²/V・秒であれば好ましい。

正孔注入・輸送層を形成する材料としては、前記の好ましい性質を有するものであれば特に制限はなく、従来、光導伝材料において正孔の電荷輸送材料として慣用されているものや、有機EL素子の正孔注入・輸送層に使用される公知のものの中から任意のものを選択して用いることができる。

【0091】

具体例としては、トリアゾール誘導体、オキサジアゾール誘導体、イミダゾール誘導体、ポリアリールアルカン誘導体、ピラゾリン誘導体及びピラゾロン誘導体、フェニレンジアミン誘導体、アリールアミン誘導体、アミノ置換カルコン誘導体、オキサゾール誘導体、スチリルアントラセン誘導体、フルオレノン誘導体、ヒドラゾン誘導体、スチルベン誘導体、シラザン誘導体、ポリシラン系、アニリン系共重合体、導電性高分子オリゴマー(特にチオフエンオリゴマー)等を挙げることができる。

【0092】

10

20

30

40

50

正孔注入・輸送層の材料としては上記のものを使用することができるが、ポルフィリン化合物、芳香族第三級アミン化合物及びスチリルアミン化合物、特に芳香族第三級アミン化合物を用いることが好ましい。

【0093】

(6) 電子輸送層

電子輸送層は、発光層への電子の注入を助け、発光領域まで輸送する層であって、電子移動度が大きく、電子親和力が通常 2.5 eV 以上と大きい。このような電子輸送層としては、より低い電界強度で電子を発光層に輸送する材料が好ましく、さらに電子の移動度が、例えば $10^4 \sim 10^6 \text{ V/cm}$ の電界印加時に、少なくとも $10^{-6} \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{秒}$ であれば好ましい。

本発明の含窒素複素環誘導体を電子輸送層に用いる場合、本発明の含窒素複素環誘導体単独で形成してもよく、他の材料と混合してもよい。

本発明の含窒素複素環誘導体と混合して電子注入・輸送層を形成する材料としては、前記の好ましい性質を有するものであれば特に制限はなく、従来、光導伝材料において電子の電荷輸送材料として慣用されているものや、有機EL素子の電子注入・輸送層に使用される公知のものの中から任意のものを選択して用いることができる。

【0094】

本発明の有機EL素子の好ましい形態に、電子を輸送する領域又は陰極と有機層の界面領域に、還元性ドーパントを含有する素子がある。本発明では、本発明化合物に還元性ドーパントを含有する有機EL素子が好ましい。したがって、一定の還元性を有するものであれば、様々なものが用いられ、例えば、アルカリ金属、アルカリ土類金属、希土類金属、アルカリ金属の酸化物、アルカリ金属のハロゲン化物、アルカリ土類金属の酸化物、アルカリ土類金属のハロゲン化物、希土類金属の酸化物又は希土類金属のハロゲン化物、アルカリ金属の有機錯体、アルカリ土類金属の有機錯体、希土類金属の有機錯体からなる群から選択される少なくとも一つの物質を好適に使用することができる。

また、より具体的に、好ましい還元性ドーパントとしては、Na (仕事関数: 2.36 eV)、K (仕事関数: 2.28 eV)、Rb (仕事関数: 2.16 eV) 及びCs (仕事関数: 1.95 eV) からなる群から選択される少なくとも一つのアルカリ金属や、Ca (仕事関数: 2.9 eV)、Sr (仕事関数: $2.0 \sim 2.5 \text{ eV}$)、及びBa (仕事関数: 2.52 eV) からなる群から選択される少なくとも一つのアルカリ土類金属が挙げられる仕事関数が 2.9 eV 以下のものが特に好ましい。これらのうち、より好ましい還元性ドーパントは、K、Rb及びCsからなる群から選択される少なくとも一つのアルカリ金属であり、さらに好ましくは、Rb又はCsであり、最も好ましいのは、Csである。これらのアルカリ金属は、特に還元能力が高く、電子注入域への比較的少量の添加により、有機EL素子における発光輝度の向上や長寿命化が図られる。また、仕事関数が 2.9 eV 以下の還元性ドーパントとして、これら2種以上のアルカリ金属の組合せも好ましく、特に、Csを含んだ組み合わせ、例えば、CsとNa、CsとK、CsとRbあるいはCsとNaとKとの組み合わせであることが好ましい。Csを組み合わせることで、還元能力を効率的に発揮することができ、電子注入域への添加により、有機EL素子における発光輝度の向上や長寿命化が図られる。

【0095】

本発明においては陰極と有機層の間に絶縁体や半導体で構成される電子注入層をさらに設けても良い。この時、電流のリークを有効に防止して、電子注入性を向上させることができる。このような絶縁体としては、アルカリ金属カルコゲニド、アルカリ土類金属カルコゲニド、アルカリ金属のハロゲン化物及びアルカリ土類金属のハロゲン化物からなる群から選択される少なくとも一つの金属化合物を使用するのが好ましい。電子注入層がこれらのアルカリ金属カルコゲニド等で構成されていれば、電子注入性をさらに向上させることができる点で好ましい。具体的に、好ましいアルカリ金属カルコゲニドとしては、例えば、 Li_2O 、 K_2O 、 Na_2S 、 Na_2Se 及び Na_2O が挙げられ、好ましいアルカリ土類金属カルコゲニドとしては、例えば、 CaO 、 BaO 、 SrO 、 BeO 、 BaS 、及び

10

20

30

40

50

CaSeが挙げられる。また、好ましいアルカリ金属のハロゲン化物としては、例えば、LiF、NaF、KF、LiCl、KCl及びNaCl等が挙げられる。また、好ましいアルカリ土類金属のハロゲン化物としては、例えば、CaF₂、BaF₂、SrF₂、MgF₂及びBeF₂といったフッ化物や、フッ化物以外のハロゲン化物が挙げられる。

また、電子輸送層を構成する半導体としては、Ba、Ca、Sr、Yb、Al、Ga、In、Li、Na、Cd、Mg、Si、Ta、Sb及びZnの少なくとも一つの元素を含む酸化物、窒化物又は酸化窒化物等の一種単独又は二種以上の組み合わせが挙げられる。また、電子輸送層を構成する無機化合物が、微結晶又は非晶質の絶縁性薄膜であることが好ましい。電子輸送層がこれらの絶縁性薄膜で構成されていれば、より均質な薄膜が形成されるために、ダークスポット等の画素欠陥を減少させることができる。なお、このよう

10

【0096】

(7) 陰極

陰極としては、電子注入・輸送層又は発光層に電子を注入するため、仕事関数の小さい(4eV以下)金属、合金、電気伝導性化合物及びこれらの混合物を電極物質とするものが用いられる。このような電極物質の具体例としては、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・銀合金、アルミニウム/酸化アルミニウム、アルミニウム・リチウム合金、インジウム、希土類金属などが挙げられる。

20

この陰極はこれらの電極物質を蒸着やスパッタリング等の方法により薄膜を形成させることにより、作製することができる。

ここで発光層からの発光を陰極から取り出す場合、陰極の発光に対する透過率は10%より大きくすることが好ましい。

また、陰極としてのシート抵抗は数百 / 以下が好ましく、膜厚は通常10nm~1μm、好ましくは50~200nmである。

【0097】

(8) 絶縁層

有機EL素子は超薄膜に電界を印可するために、リークやショートによる画素欠陥が生じやすい。これを防止するために、一对の電極間に絶縁性の薄膜層を挿入することが好ましい。

30

絶縁層に用いられる材料としては例えば酸化アルミニウム、弗化リチウム、酸化リチウム、弗化セシウム、酸化セシウム、酸化マグネシウム、弗化マグネシウム、酸化カルシウム、弗化カルシウム、窒化アルミニウム、酸化チタン、酸化珪素、酸化ゲルマニウム、窒化珪素、窒化ホウ素、酸化モリブデン、酸化ルテニウム、酸化バナジウム等が挙げられ、これらの混合物や積層物を用いてもよい。

【0098】

(9) 電子障壁層

電子障壁層の材料としては、ワイドギャップによって3重項エネルギーが高く、3重項励起子の閉じ込め効果が高い化合物が用いられる。3重項励起子の閉じ込め効果により、2つの3重項励起子の衝突融合により1重項励起子が生成する現象、すなわちTTF(Triplet-Triplet Fusion)現象が発現する。このような電子輸送層の化合物としては、炭化水素環だけでなく、複素環からなる化合物も用いられている。

40

【0099】

(10) 有機EL素子の製造方法

以上例示した材料及び形成方法により陽極、必要に応じて正孔注入層、輸送層、発光層、電子輸送層、必要に応じて電子注入層を形成し、さらに陰極を形成することにより有機EL素子を作製することができる。また陰極から陽極へ、前記と逆の順序で有機EL素子を作製することもできる。

以下、透光性基板上に陽極/正孔注入層/正孔輸送層/発光層/電子輸送層/陰極が順

50

次設けられた構成の有機EL素子の作製例を記載する。

まず、適当な透光性基板上に陽極材料からなる薄膜を1 μm以下、好ましくは10~200 nmの範囲の膜厚になるように蒸着やスパッタリング等の方法により形成して陽極を作製する。次に、この陽極上に正孔注入層を設ける。正孔注入層の形成は、前述したように真空蒸着法、スピンコート法、キャスト法、LB法等の方法により行うことができるが、均質な膜が得られやすく、かつピンホールが発生しにくい等の点から真空蒸着法により形成することが好ましい。真空蒸着法により正孔注入層を形成する場合、その蒸着条件は使用する化合物(正孔注入層の材料)、目的とする正孔注入層の結晶構造や再結合構造等により異なるが、一般に蒸着源温度50~450、真空度 10^{-7} ~ 10^{-3} Torr、蒸着速度0.01~50 nm/秒、基板温度-50~300、膜厚5 nm~5 μmの範囲で適宜選択することが好ましい。

10

【0100】

次に、正孔注入層上に形成する正孔輸送層も、所望の正孔輸送材料を用いて真空蒸着法、スパッタリング、スピンコート法、キャスト法等の方法で正孔輸送材料を薄膜化することにより形成できるが、均質な膜が得られやすく、かつピンホールが発生しにくい等の点から真空蒸着法により形成することが好ましい。真空蒸着法により正孔輸送層を形成する場合、その蒸着条件は使用する化合物により異なるが、一般的に正孔注入層と同じような条件範囲の中から選択することができる。

次に、正孔輸送層上に形成する発光層も、所望の有機発光材料を用いて真空蒸着法、スパッタリング、スピンコート法、キャスト法等の方法により有機発光材料を薄膜化することにより形成できるが、均質な膜が得られやすく、かつピンホールが発生しにくい等の点から真空蒸着法により形成することが好ましい。真空蒸着法により発光層を形成する場合、その蒸着条件は使用する化合物により異なるが、一般的に正孔注入層と同じような条件範囲の中から選択することができる。

20

次に、この発光層上に電子輸送層を設ける。正孔注入層、正孔輸送層、発光層と同様、均質な膜を得る必要から真空蒸着法により形成することが好ましい。蒸着条件は正孔注入層、正孔輸送層、発光層と同様の条件範囲から選択することができる。

本発明の含窒素複素環誘導体は、真空蒸着法を用いる場合は他の材料との共蒸着をすることができる。また、スピンコート法を用いる場合は、他の材料と混合することによって含有させることができる。

30

最後に陰極を積層して有機EL素子を得ることができる。

陰極は金属から構成されるもので、蒸着法、スパッタリングを用いることができる。しかし下地の有機物層を製膜時の損傷から守るためには真空蒸着法が好ましい。

この有機EL素子の作製は一回の真空引きで一貫して陽極から陰極まで作製することが好ましい。

【0101】

本発明の有機EL素子の各層の形成方法は特に限定されない。従来公知の真空蒸着法、スピンコーティング法等による形成方法を用いることができる。本発明の有機EL素子に用いる、前記一般式(1)で示される化合物を含有する有機薄膜層は、真空蒸着法、分子線蒸着法(MBE法)あるいは溶媒に解かした溶液のディッピング法、スピンコーティング法、キャスト法、パーコート法、ロールコート法等の塗布法による公知の方法で形成することができる。

40

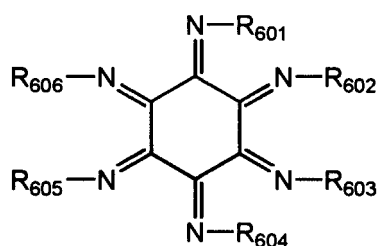
本発明の有機EL素子の各有機層の膜厚は特に制限されないが、一般に膜厚が薄すぎるとピンホール等の欠陥が生じやすく、逆に厚すぎると高い印加電圧が必要となり効率が悪くなるため、通常は数nmから1 μmの範囲が好ましい。

【0102】

本発明の有機EL素子の陽極と正孔注入層の間に、又は正孔注入層に下記式で表される化合物も用いることができる。

【0103】

【化 4 0】



10

【 0 1 0 4】

前記式中、 $R_{601} \sim R_{606}$ は置換または無置換のアルキル基、置換または無置換のアリール基、置換または無置換のアラルキル基、置換または無置換の複素環基のいずれかを示す。但し、 $R_{601} \sim R_{606}$ は同じでも異なってもよい。また、 R_{601} と R_{602} 、 R_{603} と R_{604} 、 R_{605} と R_{606} または R_{601} と R_{606} 、 R_{602} と R_{603} 、 R_{604} と R_{605} が縮合環を形成していてもよい。

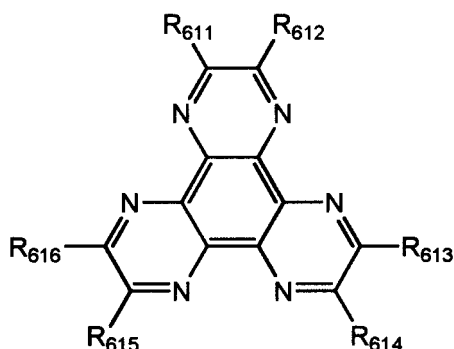
【 0 1 0 5】

さらに、本発明の有機EL素子の陽極と正孔注入層の間に、又は正孔注入層に下記式の化合物も用いることができる。

【 0 1 0 6】

20

【化 4 1】



30

【 0 1 0 7】

前記式中、 $R_{611} \sim R_{616}$ は置換基であり、好ましくはシアノ基、ニトロ基、スルホニル基、カルボニル基、トリフルオロメチル基、ハロゲンなどの電子吸引基である。

【実施例】

【 0 1 0 8】

以下、本発明を実施例により説明するが、本発明は下記実施例に限定されるものではない。

【 0 1 0 9】

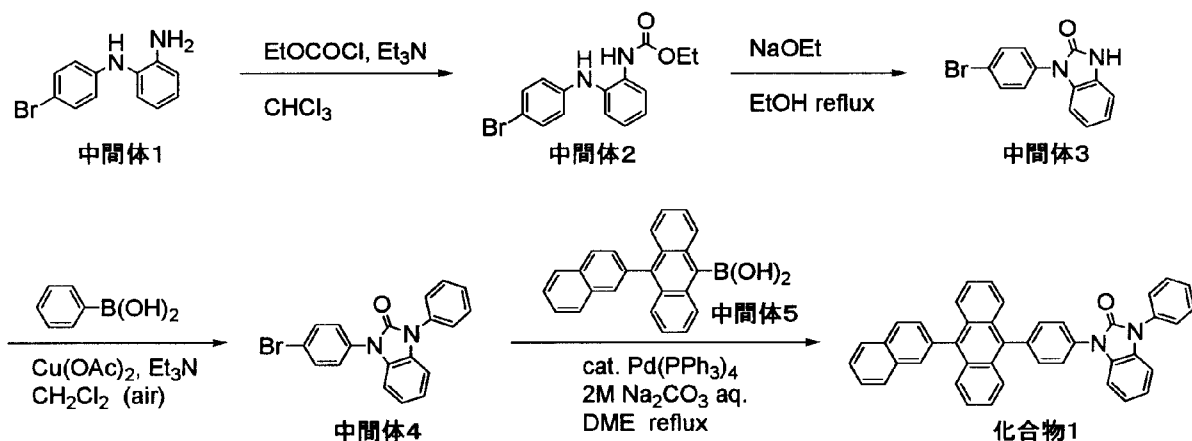
40

合成例 1

(a) 化合物 1 の合成

下記スキームに従って、化合物 1 を合成した。

【化 4 2】



10

【0110】

(a-1) 中間体2の合成

アルゴン雰囲気下、(4-ブロモフェニル)-(2-ニトロフェニル)アミン(中間体1)(16.3g、62mmol)、クロロホルム(100mL)、トリエチルアミン(17.3mL、124mmol)を0℃に冷却した後、クロロギ酸エチル(11.8mL、124mmol)を滴下し、室温で2時間攪拌した。反応溶液をジクロロメタンで希釈し、飽和食塩水で有機層を洗浄、硫酸マグネシウムで乾燥し、濃縮して得られた固体をヘキサンで洗浄した後、減圧乾燥し、中間体2(18.5g、収率91%)を白色固体として得た。

20

【0111】

(a-2) 中間体3の合成

アルゴン雰囲気下、ナトリウムエトキシド(36.6g、537mmol)、脱水エタノール(2.6L)に室温で中間体2を(18.5g、55mmol)加え、3.5時間加熱還流した。冷却後、溶媒を減圧留去し、水を加えて2N塩酸で中和した。得られた固体をろ取して水で洗浄し、酢酸エチル及びジクロロメタンに溶かして硫酸ナトリウムで乾燥し、溶媒を減圧留去し、得られた固体をヘキサンで洗浄した後、減圧乾燥し、中間体3(14.3g、収率90%)を淡褐色固体として得た。

30

【0112】

(a-3) 中間体4の合成

空气中、中間体3(3.0g、10mmol)、トリエチルアミン(4.3mL、31mmol)、酢酸銅(II)(5.7g、31mmol)、ジクロロメタン(90mL)に、室温でフェニルボロン酸(6.3g、52mmol)を徐々に加えながら12時間攪拌した。溶媒を減圧留去し、酢酸エチル、10%炭酸カリウム水溶液を加えて室温で1時間攪拌した。反応溶液をセライトろ過して、有機層を水、飽和食塩水で順次洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥し、溶媒を減圧留去した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(酢酸エチル/トルエン)で精製し、得られた固体をヘキサンで洗浄した後、減圧乾燥し、3.8g(収率100%)の白色固体を得た。FD-MS(フィールドイオンマスマスペクトル)の分析により、中間体4と同定した。

40

【0113】

(a-4) 化合物1の合成

中間体4(2.1g、5.8mmol)を1,2-ジメトキシエタン(30mL)に溶かし、10-ナフタレン-2-イルアントラセン-9-ボロン酸(中間体5)(2.2g、6.4mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)(0.3g、2.9mmol)、2M炭酸ナトリウム水溶液(15mL)を加え、5.5時間加熱還流した。反応終了後、水を加えて得られた固体をろ取し、水で洗浄して減圧乾燥した。得られた粗生成物をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(酢酸エチル/トルエン/ヘキ

50

サン)で精製し、得られた固体をヘキサンで洗浄した後、減圧乾燥し、3.2 g (収率 94%)の淡黄色固体を得た。FD-MSの分析により、化合物1と同定した。

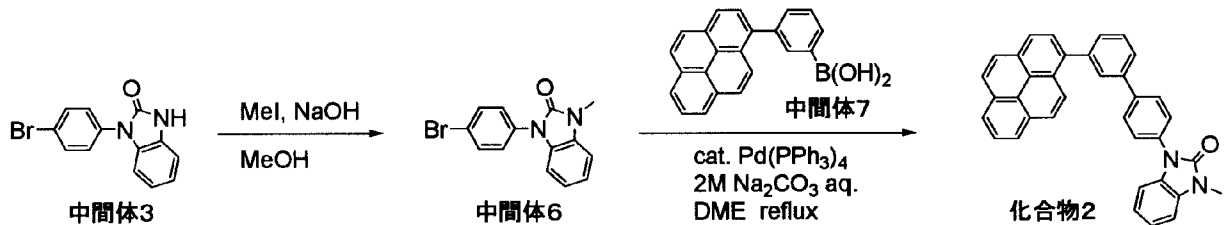
【0114】

合成例 2

(b) 化合物 2 の合成

下記スキームに従って、化合物 2 を合成した。

【化 4 3】



10

【0115】

(b-1) 中間体 6 の合成

中間体 3 (5.0 g, 17 mmol)、水酸化ナトリウム (2.1 g, 52 mmol)、ヨードメタン (8.6 mL, 138 mmol)、脱水メタノール (100 mL) を室温で 16 時間攪拌し、水を加えて得られた固体をろ取り、水で洗浄した後、減圧乾燥し、5.1 g (収率 98%) の白色固体を得た。FD-MS の分析により、中間体 6 と同定した。

20

【0116】

(b-2) 化合物 2 の合成

合成例 1 の (a-4) において、中間体 4 の代わりに中間体 6、中間体 5 の代わりに中間体 7 を用いた以外は同様の方法で合成した。FD-MS の分析により、化合物 2 と同定した。

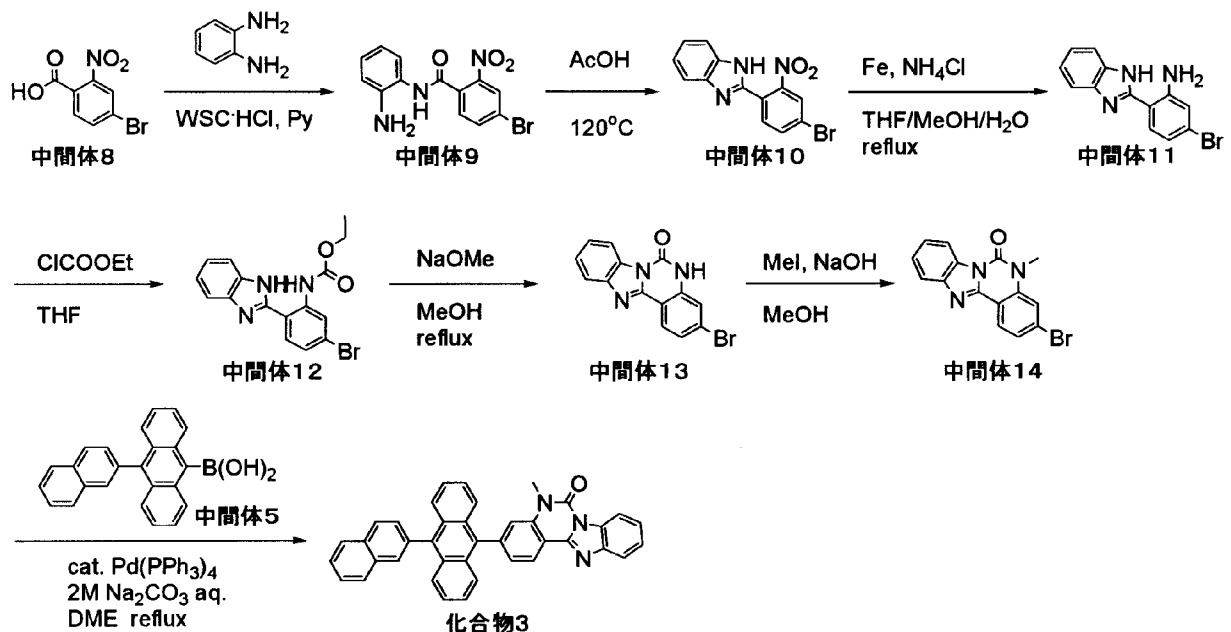
【0117】

合成例 3

(c) 化合物 3 の合成

下記スキームに従って、化合物 3 を合成した。

【化 4 4】



40

50

【0118】

(c-1) 中間体9の合成

アルゴン雰囲気下、4-ブロモ-2-ニトロ安息香酸(中間体8)(25.0g、102mmol)、1,2-フェニレンジアミン(11.0g、102mmol)、ピリジン(200mL)に室温で1-(3-ジメチルアミノプロピル)-3-エチルカルボジイミド塩酸塩(23.5g、122mmol)を加え、4.5時間攪拌した。水を加えて得られた固体をろ取し、水で洗浄して減圧乾燥し、中間体9(27.8g、収率81%)を黄色固体として得た。

【0119】

(c-2) 中間体10の合成

アルゴン雰囲気下、中間体9(26.0g、77mmol)に酢酸(260mL)を加え、14時間加熱還流した。冷却後、20%水酸化ナトリウム水溶液で中和した。得られた固体をろ取して、飽和炭酸水素ナトリウム水溶液及び水で順次洗浄し、減圧乾燥し、中間体10(21.3g、収率87%)を黄色固体として得た。

10

【0120】

(c-3) 中間体11の合成

中間体10(15.4g、48mmol)、テトラヒドロフラン(60mL)に、鉄(18.9g、339mmol)、塩化アンモニウム(13.0g、242mmol)、メタノール(30mL)、水(30mL)を加え、8.5時間加熱還流した。冷却後、セライトろ過し、ろ液を酢酸エチルで抽出し、有機層を水、飽和食塩水で順次洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥し、溶媒を減圧留去した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(酢酸エチル/ヘキサン)で精製し、得られた固体をヘキサンで洗浄した後、減圧乾燥し、中間体11(12.5g、収率89%)を白色固体として得た。

20

【0121】

(c-4) 中間体12の合成

アルゴン雰囲気下、中間体11(7.4g、26mmol)、クロロギ酸エチル(2.9mL、31mmol)、脱水テトラヒドロフラン(50mL)を24時間加熱還流した。冷却後、水を加えて得られた固体をろ取し、水及びアセトンで順次洗浄し、減圧乾燥し、中間体12(9.0g、収率98%)を白色固体として得た。

30

【0122】

(c-5) 中間体13の合成

アルゴン雰囲気下、中間体12(1.9g、5.4mmol)、脱水メタノール(26mL)に、ナトリウムメトキシドの5Mメタノール溶液(1.6mL、8.0mmol)を加え、5時間加熱還流した。冷却後、水を加えて得られた固体をろ取し、水、メタノール、アセトン及びジクロロメタンで順次洗浄した後、減圧乾燥し、中間体13(1.4g、収率86%)を白色固体として得た。

【0123】

(c-6) 中間体14の合成

合成例2の(b-1)において、中間体3の代わりに中間体13を用いた以外は同様の方法で合成した(収率95%)。FD-MSの分析により、中間体14と同定した。

40

【0124】

(c-7) 化合物3の合成

合成例1の(a-4)において、中間体4の代わりに中間体14を用いた以外は同様の方法で合成した(収率87%)。FD-MSの分析により、化合物3と同定した。

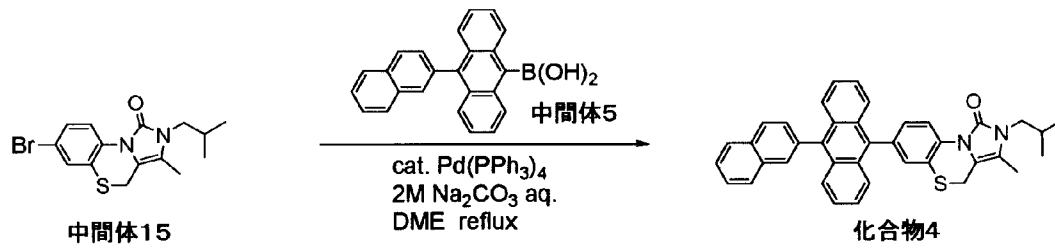
【0125】

合成例4

(d) 化合物4の合成

下記スキームに従って、化合物4を合成した。

【化 4 5】



合成例 1 の (a - 4) において、中間体 4 の代わりに中間体 15 を用いた以外は同様の方法で合成した。FD - MS の分析により、化合物 4 と同定した。

10

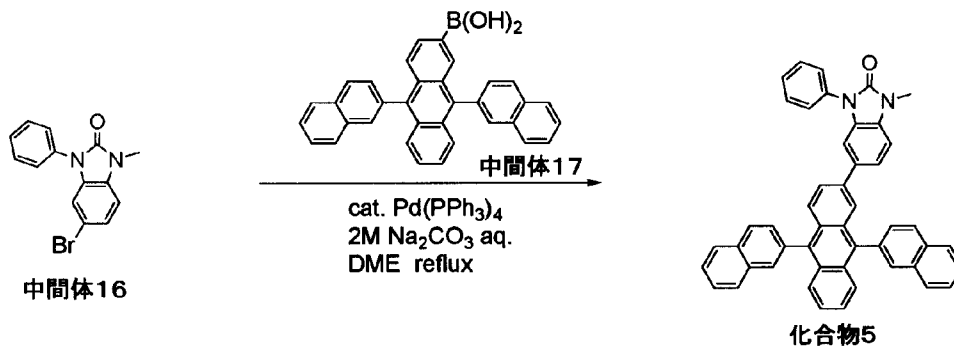
【 0 1 2 6】

合成例 5

(e) 化合物 5 の合成

下記スキームに従って、化合物 5 を合成した。

【化 4 6】



20

合成例 1 の (a - 4) において、中間体 4 の代わりに中間体 16、中間体 5 の代わりに中間体 17 を用いた以外は同様の方法で合成した。FD - MS の分析により、化合物 5 と同定した。

30

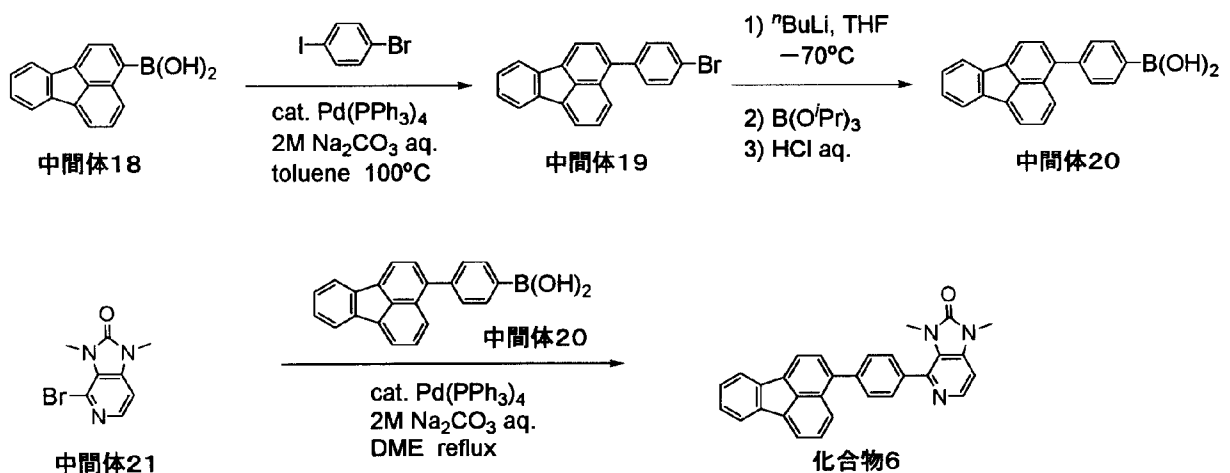
【 0 1 2 7】

合成例 6

(f) 化合物 6 の合成

下記スキームに従って、化合物 6 を合成した。

【化 4 7】



40

50

【0128】

(f-1) 中間体19の合成

合成例1の(a-4)において、中間体4の代わりに4-ブロモヨードベンゼン、中間体5の代わりに中間体18、1,2-ジメトキシエタンの代わりにトルエンを用い、100で反応を行った以外は同様の方法で合成した。反応終了後は、反応溶液を室温まで冷却し、トルエンで抽出した。水層を除去し有機層を飽和食塩水で洗浄した後、無水硫酸ナトリウムで乾燥させた。その後、溶媒を減圧留去し残渣をシリカゲルクロマトグラフィで精製し、中間体19(9.2g、収率70%)を得た。

【0129】

(f-2) 中間体20の合成

アルゴン雰囲気下、中間体19(9.2g、26mmol)、テトラヒドロフラン(129mL)をフラスコに仕込み、反応溶液を-70に冷却し、n-ブチルリチウムの1.65Mヘキサン溶液(17.2mL、28mmol)を滴下し、-70にて2時間攪拌を行った。反応溶液にホウ酸トリイソプロピル(17.7mL、77mmol)を滴下し、-70にて1時間攪拌した後、反応溶液を室温まで昇温しながら5時間攪拌した。反応液に2M塩酸を加えて酸性にした後、反応溶液を酢酸エチルで抽出した。水層を除去し有機層を飽和食塩水で洗浄した後、無水硫酸ナトリウムで乾燥させた。その後、溶媒を減圧留去し残渣をヘキサン-酢酸エチル混合溶液で洗浄し、中間体20(7.9g、収率95%)を得た。

10

【0130】

(f-3) 化合物6の合成

合成例1の(a-4)において、中間体4の代わりに中間体21、中間体5の代わりに中間体20を用いた以外は同様の方法で合成した。FD-MSの分析により、化合物6と同定した。

20

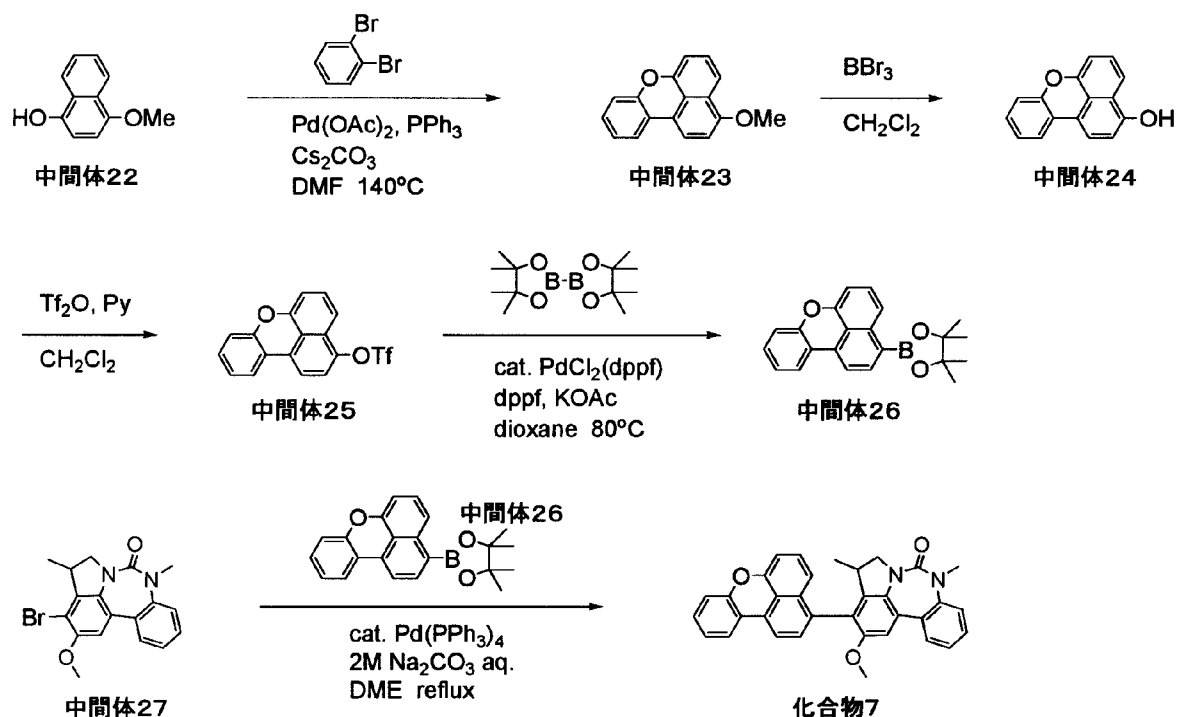
【0131】

合成例7

(g) 化合物7の合成

下記スキームに従って、化合物7を合成した。

【化48】



30

40

50

【0132】

(g-1) 中間体23の合成

4-メトキシ-1-ナフトール中間体22(7.0g、40mmol)及び1,2-ジプロモベンゼン(11.3g、48mmol)をジメチルホルムアミド(200mL)に溶解し、炭酸セシウム(52.1g、160mmol)、トリフェニルフォスフィン(2.1g、8.0mmol)及び酢酸パラジウム(II)(0.45g、2.0mmol)を順次加え、140℃にて15時間撹拌を行った。室温まで冷却し、水及び酢酸エチルを加えて分液を行い、水層を酢酸エチルで抽出を行い、水及び飽和食塩水で洗浄し、有機層を合わせて無水硫酸ナトリウムで乾燥し濾過した後、濃縮を行った。得られた残渣に水及びメタノールを加えて、ジエチルエーテル及び酢酸エチルで抽出を行い、水及び飽和食塩水で洗浄し、有機層を合わせて無水硫酸ナトリウムで乾燥し濾過した後、濃縮を行った。得られた残渣をシリカゲルクロマトグラフィーで精製したのち、得られた残渣をヘキサン-酢酸エチル混合溶液で分散洗浄して乾燥を行い、中間体23(3.2g、収率33%)を黄色固体として得た。

10

【0133】

(g-2) 中間体24の合成

アルゴン雰囲気下、中間体23(3.3g、13mmol)をジクロロメタン(100mL)に溶解し、ドライアイス-メタノール浴で-68℃に冷却し、三臭化ホウ素の1Mジクロロメタン溶液(14mL、14mmol)を20分間かけて滴下した。室温まで徐々に昇温しながら4時間撹拌を行った。得られた混合物を氷冷して、数滴ずつ水を加えて慎重に失活させ、さらに100mLの水を加えた。生成した沈殿を濾取し、水及びジクロロメタンで洗浄して乾燥を行い、中間体24(2.4g)を固体として得た。濾液は分液し、水層をジクロロメタン抽出し、有機層を合わせて無水硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過した後濃縮した。得られた残渣を少量のジクロロメタンで分散洗浄を行い、乾燥を行い、中間体24(0.5g)を固体として得た。両者を合わせて中間体24(2.9g、収率94%)を得た。

20

【0134】

(g-3) 中間体25の合成

アルゴン雰囲気下、中間体24(2.9g、12mmol)をジクロロメタン(100mL)に分散し、氷冷し、ピリジン(4.0mL、49mmol)を加えた。得られた溶液にトリフルオロメタンスルホン酸無水物(3.0mL、18mmol)を10分間かけて滴下し、氷冷下で5分撹拌した後、徐々に室温に昇温しながら3時間撹拌を行った。得られた溶液に氷冷下で1M塩酸(50mL)を加え、混合溶液をジクロロメタンで抽出し、飽和重曹水で洗浄した後、無水硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過して濃縮した。この残渣をヘキサン-酢酸エチル混合溶液で分散洗浄して乾燥させ、中間体25の固体を得た。洗浄母液を濃縮し、シリカゲルクロマトグラフィーで精製を行った。得られた残渣をヘキサンで分散洗浄して乾燥させ、中間体25の固体を得た。両者を合わせ、中間体25(3.0g、収率67%)を茶白色固体として得た。

30

【0135】

(g-4) 中間体26の合成

中間体25(3.0g、8.2mmol)、ビスピナコラートジボロン(2.3g、9.0mmol)、[1,1'-ビス(ジフェニルホスフィノ)フェロセン]パラジウム(II)ジクロリド ジクロロメタン付加物(0.34g、0.41mmol)、1,1'-ビス(ジフェニルホスフィノ)フェロセン(0.23g、0.41mmol)及び酢酸カリウム(2.42g、25mmol)を1,4-ジオキサン(50mL)に溶解し、80℃にて17時間撹拌した。ビスピナコラートジボロン(1.15g、4.5mmol)、[1,1'-ビス(ジフェニルホスフィノ)フェロセン]パラジウム(II)ジクロリド ジクロロメタン付加物(0.34g、0.41mmol)及び1,1'-ビス(ジフェニルホスフィノ)フェロセン(0.23g、0.41mmol)を加えて80℃にて7時間半撹拌した。反応液を室温まで冷却し、水及び酢酸エチルを加えて濾過した。得られ

40

50

た混合液を分液し、酢酸エチルで抽出した後、有機層を合わせて飽和食塩水で洗浄し、無水硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過した後、濃縮を行った。得られた残渣をシリカゲルクロマトグラフィーで精製し、中間体 26 (1.5 g、収率 52%) を黄色固体として得た。

【0136】

(g-5) 化合物 7 の合成

合成例 1 の (a-4) において、中間体 4 の代わりに中間体 27、中間体 5 の代わりに中間体 26 を用いた以外は同様の方法で合成した。FD-MS の分析により、化合物 7 と同定した。

【0137】

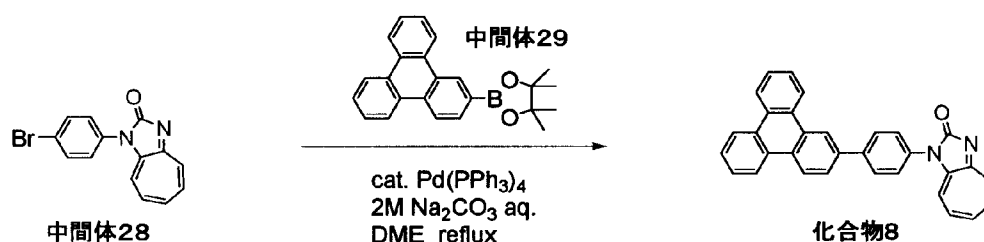
合成例 8

10

(h) 化合物 8 の合成

下記スキームに従って、化合物 8 を合成した。

【化 49】



20

【0138】

合成例 1 の (a-4) において、中間体 4 の代わりに中間体 28、中間体 5 の代わりに中間体 29 を用いた以外は同様の方法で合成した。FD-MS の分析により、化合物 8 と同定した。

【0139】

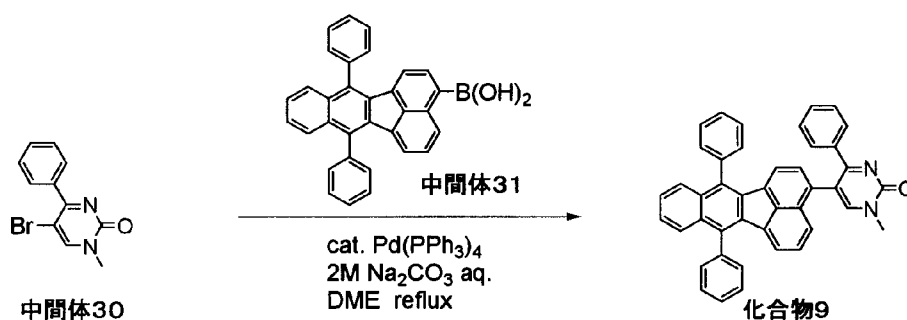
合成例 9

30

(i) 化合物 9 の合成

下記スキームに従って、化合物 9 を合成した。

【化 50】



40

合成例 1 の (a-4) において、中間体 4 の代わりに中間体 30、中間体 5 の代わりに中間体 31 を用いた以外は同様の方法で合成した。FD-MS の分析により、化合物 9 と同定した。

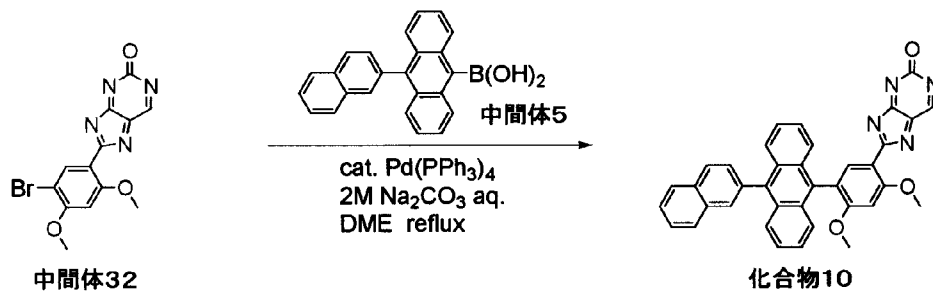
【0140】

合成例 10

(j) 化合物 10 の合成

下記スキームに従って、化合物 10 を合成した。

【化 5 1】



10

合成例 1 の (a - 4) において、中間体 4 の代わりに中間体 3 2 を用いた以外は同様の方法で合成した。FD - MS の分析により、化合物 1 0 と同定した。

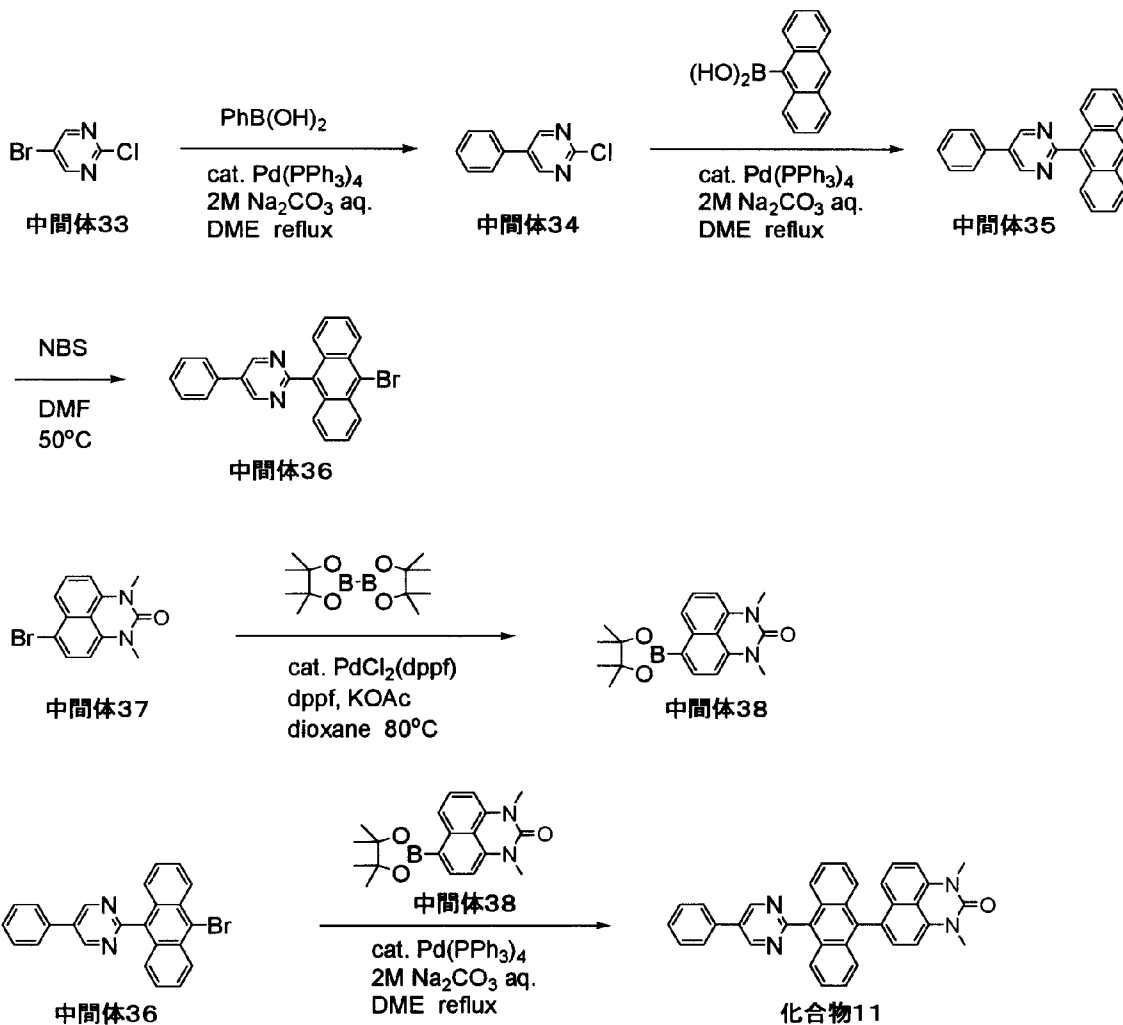
【 0 1 4 1】

合成例 1 1

(k) 化合物 1 1 の合成

下記スキームに従って、化合物 1 1 を合成した。

【化 5 2】



20

30

40

【 0 1 4 2】

(k - 1) 中間体 3 4 の合成

合成例 1 の (a - 4) において、中間体 4 の代わりに 5 - プロモ - 2 - クロロピリミジ

50

ン中間体 33 (18.1 g、94 mmol)、中間体 5 の代わりにジヒドロキシフェニルボラン (11.6 g、95 mmol) を用いた以外は同様の方法で合成し、中間体 34 (14 g、収率 77%) を得た。

【0143】

(k-2) 中間体 35 の合成

合成例 1 の (a-4) において、中間体 4 の代わりに中間体 34、中間体 5 の代わりに 9-アントラセンボロン酸を用いた以外は同様の方法で合成し、中間体 35 を得た。

【0144】

(k-3) 中間体 36 の合成

アルゴン雰囲気下、中間体 35 (4.8 g、14 mmol) を無水ジメチルホルムアミド (95 mL) に 40 で溶解し、N-プロモスクシンイミド (2.7 g、15 mmol) を加え、50 にて 2.5 時間攪拌した。反応終了後、水を加えて得られた固体をろ取り、水で洗浄して減圧乾燥した。得られた粗生成物をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (酢酸エチル/ヘキサン) で精製し、得られた固体をヘキサン及びメタノールで洗浄した後、減圧乾燥し、4.6 g (収率 78%) の黄色固体を得た。FD-MS の分析により、化合物 36 と同定した。

10

【0145】

(k-4) 中間体 38 の合成

合成例 7 の (g-4) において中間体 25 の代わりに中間体 37 を用いた以外は同様の方法で合成し中間体 38 を得た。

20

【0146】

(k-5) 化合物 11 の合成

合成例 1 の (a-4) において、中間体 4 の代わりに中間体 36、中間体 5 の代わりに中間体 38 を用いた以外は同様の方法で合成した。FD-MS の分析により、化合物 11 と同定した。

【0147】

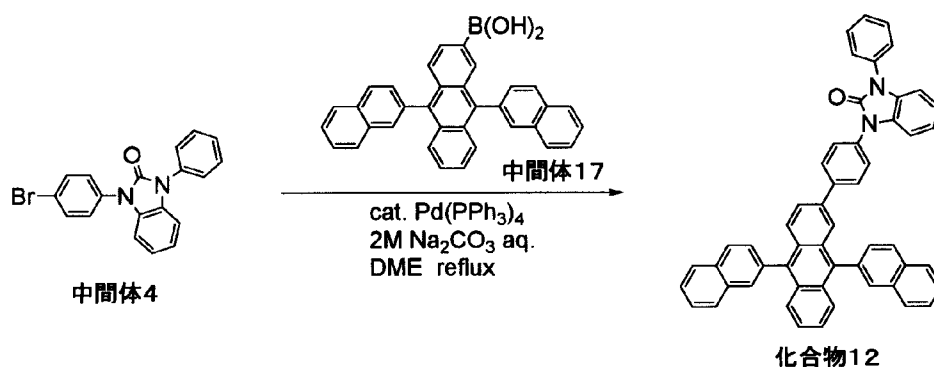
合成例 12

(l) 化合物 12 の合成

下記スキームに従って、化合物 12 を合成した。

30

【化 53】



40

合成例 1 の (a-4) において、中間体 5 の代わりに中間体 17 を用いた以外は同様の方法で合成した (収率 79%)。FD-MS の分析により、化合物 12 と同定した。

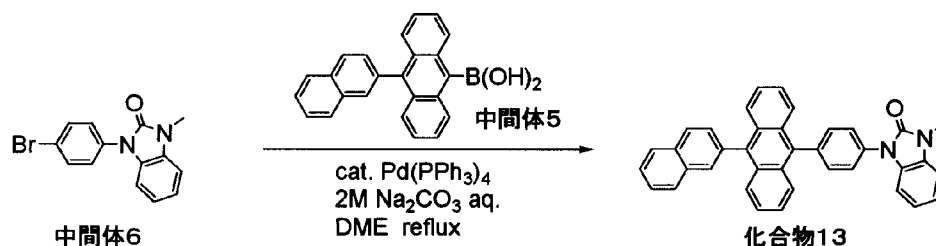
【0148】

合成例 13

(m) 化合物 13 の合成

下記スキームに従って、化合物 13 を合成した。

【化54】



合成例1の(a-4)において、中間体4の代わりに中間体6を用いた以外は同様の方法で合成した(収率95%)。FD-MSの分析により、化合物13と同定した。 10

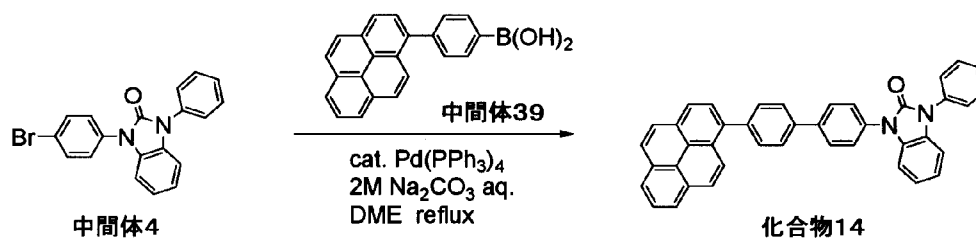
【0149】

合成例14

(n) 化合物14の合成

下記スキームに従って、化合物14を合成した。

【化55】



合成例1の(a-4)において、中間体5の代わりに中間体39を用いた以外は同様の方法で合成した(収率67%)。FD-MSの分析により、化合物14と同定した。 20

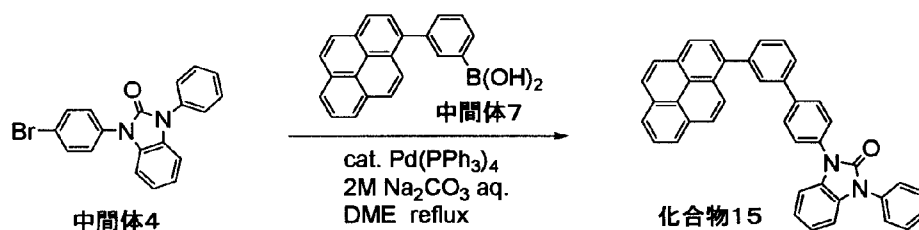
【0150】

合成例15

(o) 化合物15の合成

下記スキームに従って、化合物15を合成した。 30

【化56】



合成例1の(a-4)において、中間体5の代わりに中間体7を用いた以外は同様の方法で合成した(収率73%)。FD-MSの分析により、化合物15と同定した。 40

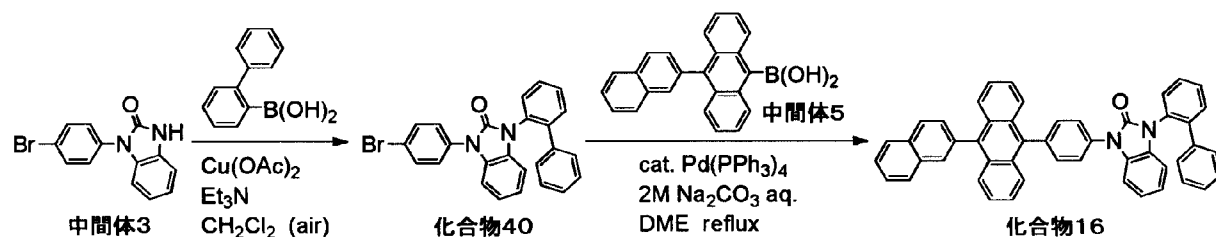
【0151】

合成例16

(p) 化合物16の合成

下記スキームに従って、化合物16を合成した。

【化57】



【0152】

10

(p-1) 中間体40の合成

合成例1の(a-3)において、フェニルボロン酸の代わりに2-ビフェニルボロン酸を用いた以外は同様の方法で合成し、中間体40(収率20%)を得た。

【0153】

(p-2) 化合物16の合成

合成例1の(a-4)において、中間体4の代わりに中間体40を用いた以外は同様の方法で合成した(収率88%)。FD-MSの分析により、化合物16と同一した。

【0154】

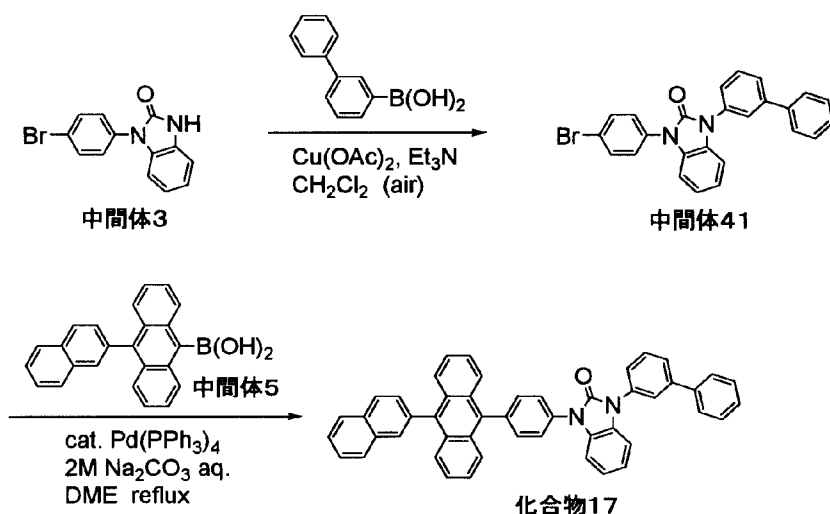
合成例17

(q) 化合物17の合成

20

下記スキームに従って、化合物17を合成した。

【化58】



30

【0155】

(q-1) 中間体41の合成

合成例1の(q-3)において、フェニルボロン酸の代わりに3-ビフェニルボロン酸を用いた以外は同様の方法で合成し、中間体41(収率73%)を得た。

40

【0156】

(q-2) 化合物17の合成

合成例1の(a-4)において、中間体4の代わりに中間体41を用いた以外は同様の方法で合成した(収率91%)。FD-MSの分析により、化合物17と同一した。

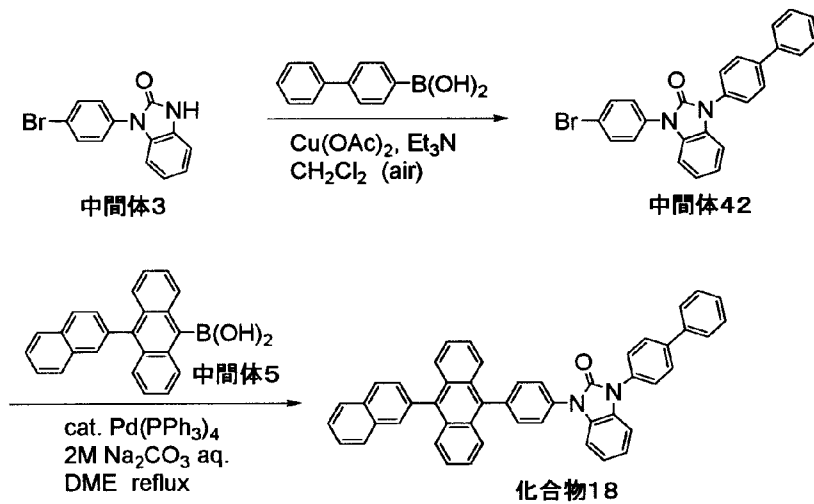
【0157】

合成例18

(r) 化合物18の合成

下記スキームに従って、化合物18を合成した。

【化59】



10

【0158】

(r-1) 中間体42の合成

合成例1の(a-3)において、フェニルボロン酸の代わりに4-ビフェニルボロン酸を用いた以外は同様の方法で合成し、中間体42(収率60%)を得た。

20

【0159】

(r-2) 化合物18の合成

合成例1の(a-4)において、中間体4の代わりに中間体42を用いた以外は同様の方法で合成した(収率91%)。FD-MSの分析により、化合物18と同定した。

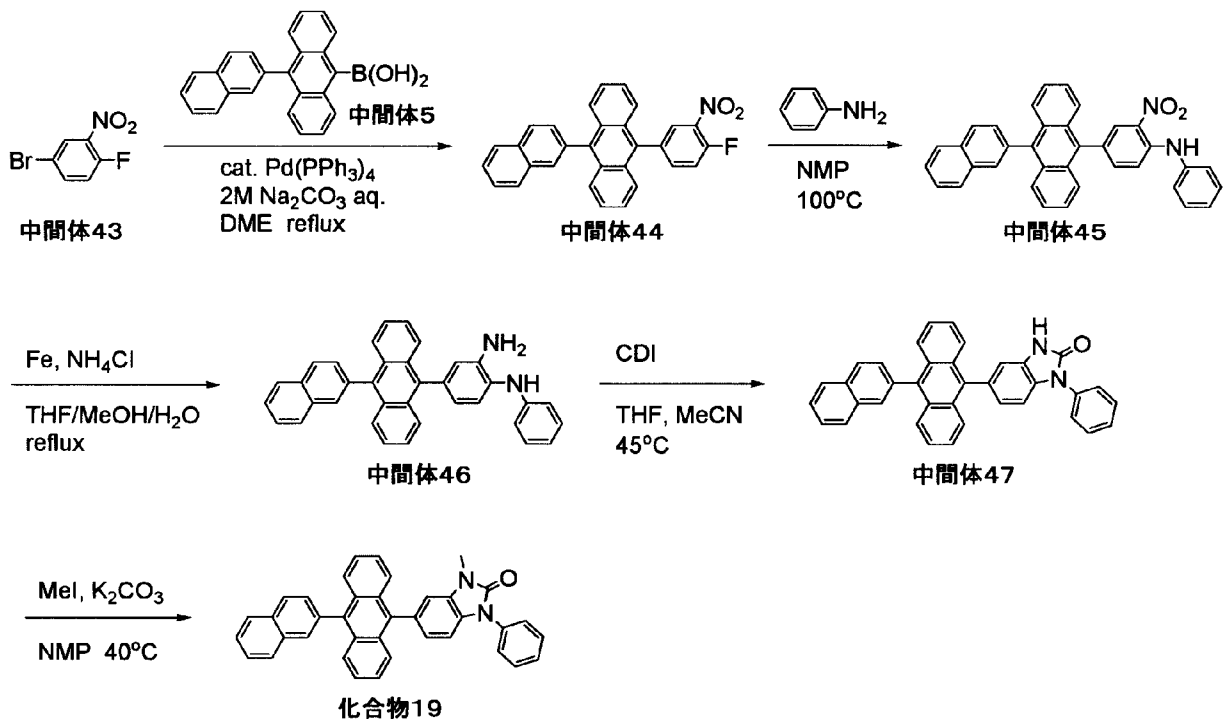
【0160】

合成例19

(s) 化合物19の合成

下記スキームに従って、化合物19を合成した。

【化60】



30

40

【0161】

50

(s - 1) 中間体 44 の合成

合成例 1 の (a - 4) において、中間体 4 の代わりに中間体 43 を用いた以外は同様の方法で合成し、中間体 44 (収率 62%) を得た。

【0162】

(s - 2) 中間体 46 の合成

アルゴン雰囲気下、中間体 44 (29.0 g、56 mmol)、アニリン (17.3 g、186 mmol) に 1 - メチル - 2 - ピロリドン (250 mL) を加え、100 にて 16 時間撹拌した。室温まで冷却し、水を加えて得られた固体をろ取り、水、メタノールで洗浄して減圧乾燥し、中間体 45 (29.1 g) を得た。次いで、合成例 3 の (c - 3) において、中間体 10 の代わりに中間体 45 を用いた以外は同様の方法で合成し、中間体 46 (収率 81%) を得た。

10

【0163】

(s - 3) 中間体 47 の合成

アルゴン雰囲気下、中間体 46 (22.0 g、35 mmol) に脱水 THF (200 mL) を加え、45 にて、1, 1' - カルボニルジイミダゾール (10.4 g、69 mmol) の脱水アセトニトリル (150 mL) 溶液を 1.5 時間かけて滴下し、引き続き 45 にて 18 時間撹拌した。室温まで冷却し、析出した固体をろ取り、メタノールで洗浄した後、減圧乾燥し、中間体 47 (17.5 g、収率 76%) を得た。FD - MS の分析により、中間体 47 と同定した。

20

【0164】

(s - 4) 化合物 19 の合成

アルゴン雰囲気下、中間体 47 (17.5 g、34 mmol)、炭酸カリウム (9.4 g、68 mmol)、ヨードメタン (9.7 g、68 mmol)、1 - メチル - 2 - ピロリドン (500 mL) を 40 にて 18 時間撹拌した。室温まで冷却して、氷水へ注ぎ、トルエンで抽出し、有機層を水、飽和食塩水で順次洗浄した。硫酸マグネシウムで乾燥し、溶媒を減圧留去して得られた固体をろ取り、ヘプタンで洗浄した後、減圧乾燥し、14.4 g (収率 80%) の淡黄色固体を得た。FD - MS の分析により、化合物 19 と同定した。

【0165】

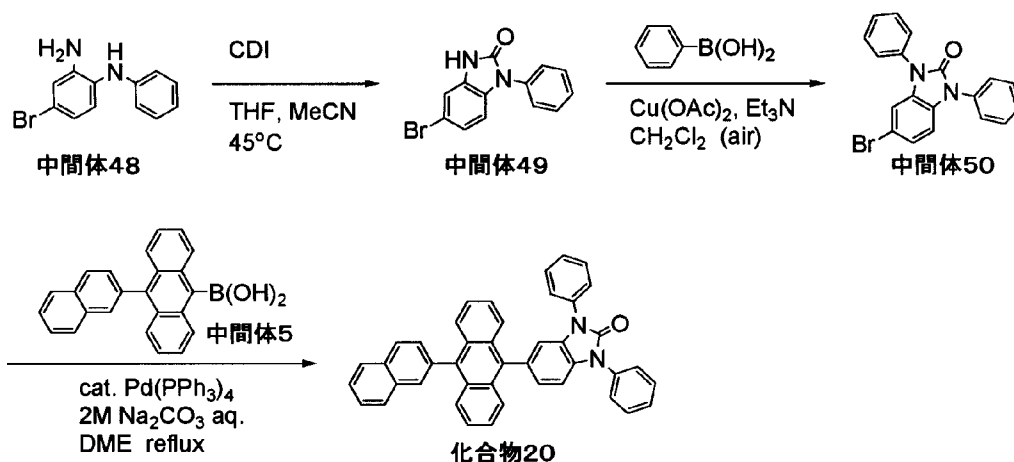
合成例 20

30

(t) 化合物 20 の合成

下記スキームに従って、化合物 20 を合成した。

【化 6 1】



40

【0166】

(t - 1) 中間体 49 の合成

合成例 19 の (s - 3) において、中間体 46 の代わりに中間体 48 を用いた以外は同

50

様の方法で合成し、中間体 49 (収率 97%) を得た。

【0167】

(t-2) 中間体 50 の合成

合成例 1 の (a-3) において、中間体 3 の代わりに中間体 49 を用いた以外は同様の方法で合成し、中間体 50 (収率 84%) を得た。

【0168】

(t-3) 化合物 20 の合成

合成例 1 の (a-4) において、中間体 4 の代わりに中間体 50 を用いた以外は同様の方法で合成した (収率 98%)。FD-MS の分析により、化合物 20 と同定した。

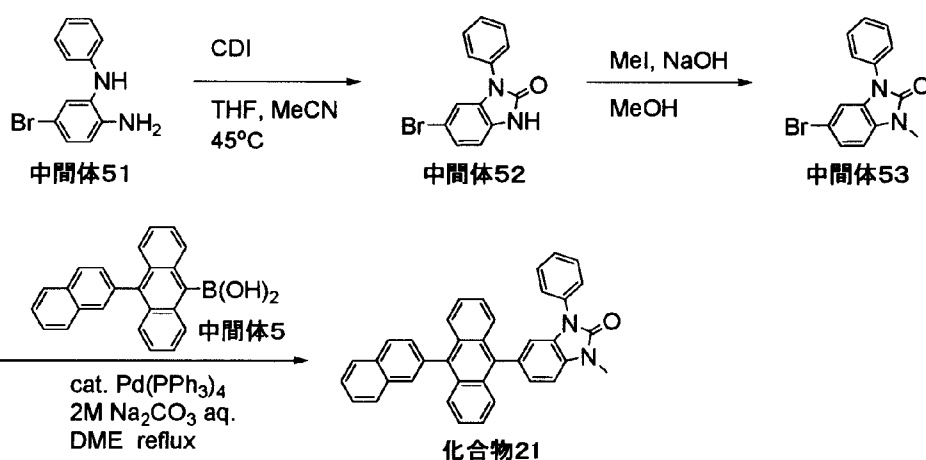
【0169】

合成例 2 1

(u) 化合物 21 の合成

下記スキームに従って、化合物 21 を合成した。

【化 6 2】



【0170】

(u-1) 中間体 52 の合成

合成例 19 の (s-3) において、中間体 46 の代わりに中間体 51 を用いた以外は同様の方法で合成し、中間体 52 (収率 91%) を得た。

【0171】

(u-2) 中間体 53 の合成

合成例 2 の (b-2) において、中間体 3 の代わりに中間体 52 を用いた以外は同様の方法で合成し、中間体 53 (収率 53%) を得た。

【0172】

(u-3) 化合物 21 の合成

合成例 1 の (a-4) において、中間体 4 の代わりに中間体 53 を用いた以外は同様の方法で合成した (収率 65%)。FD-MS の分析により、化合物 21 と同定した。

【0173】

実施例 1

(1) 有機 EL 素子の製造

25 mm × 75 mm × 0.7 mm 厚の ITO 透明電極 (陽極) 付きガラス基板 (ジオマティック社製) をイソプロピルアルコール中で超音波洗浄を 5 分間行なった後、UV オゾン洗浄を 30 分間行なった。

洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインを覆うようにして膜厚 50 nm の化合物 HT-1 を成膜した。HT-1 膜は正孔注入層として機能する。続けて、化合物 HT-2 を蒸着して HT-1 膜上に膜厚 45 nm の HT-2 膜を成膜した。HT-2 膜は正孔輸送層として機能する。

10

20

30

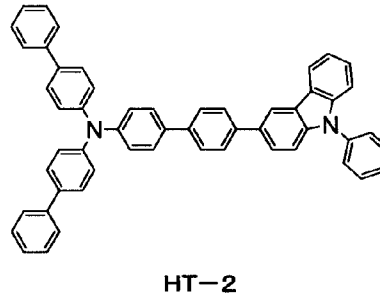
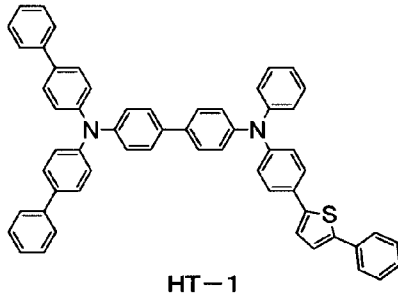
40

50

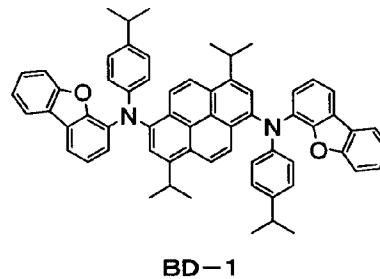
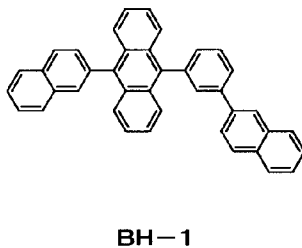
HT-2 膜上に化合物 BH-1 (ホスト材料) 及び化合物 BD-1 (ドーパント材料) を、化合物 BD-1 が 3 質量% となる膜厚比で蒸着し、膜厚 20 nm の有機層を成膜した。この有機層は発光層として機能する。発光層の上に化合物 1 を蒸着して膜厚 30 nm の電子輸送層を形成した。この後、LiF を膜厚 1 nm で成膜した。この LiF 膜上に金属 Al を 80 nm 蒸着させ金属陰極を形成し有機 EL 発光素子を作製した。

【0174】

【化63】



10



20

【0175】

(2) 有機 EL 素子の評価

作製した有機 EL 素子について、電流密度 10 mA/cm^2 となるように電圧を印加し、そのときの電圧値 (V) を測定した。また、そのときの EL 発光スペクトルを分光放射輝度計 (CS-1000: コニカミノルタ社製) にて計測した。得られた分光放射輝度スペクトルから、外部量子効率 (%) を算出した。結果を表 1 に示す。

30

【0176】

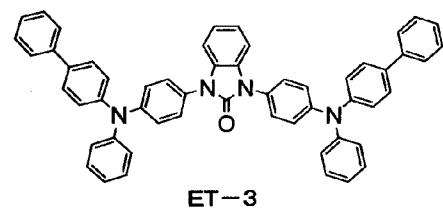
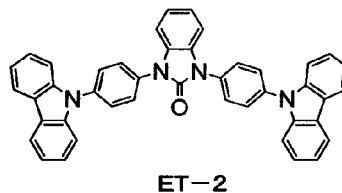
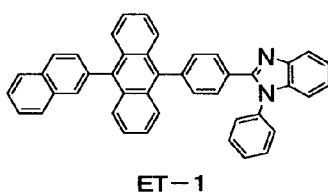
実施例 2 ~ 3 及び比較例 1 ~ 3

化合物 1 の代わりに化合物 3 (実施例 2)、化合物 20 (実施例 3)、化合物 ET-1 (比較例 1)、化合物 ET-2 (比較例 2)、化合物 ET-3 (比較例 3) を用いて電子輸送層を形成した以外は実施例 1 と同様にして有機 EL 素子を作製し評価した。結果を表 1 に示す。

【0177】

【化64】

40



【0178】

【表 1】

表 1

	電子輸送層	駆動電圧 (V)	外部量子効率 (%)	発光色
実施例 1	化合物 1	3.9	7.4	青
実施例 2	化合物 3	3.7	6.5	青
実施例 3	化合物 20	3.8	7.5	青
比較例 1	化合物 ET-1	4.6	6.2	青
比較例 2	化合物 ET-2	11.1	0.1	青
比較例 3	化合物 ET-3	10.3	0.1	青

10

【 0 1 7 9 】

実施例 4

25 mm × 75 mm × 0.7 mm 厚の ITO 透明電極（陽極）付きガラス基板（ジオマテック社製）をイソプロピルアルコール中で超音波洗浄を 5 分間行なった後、UV オゾン洗浄を 30 分間行なった。

洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインを覆うようにして膜厚 50 nm の化合物 HT-1 を成膜した。HT-1 膜は正孔注入層として機能する。続けて、化合物 HT-2 を蒸着して HT-1 膜上に膜厚 45 nm の HT-2 膜を成膜した。HT-2 膜は正孔輸送層として機能する。

HT-2 膜上に化合物 BH-1（ホスト材料）及び化合物 BD-1（ドーパント材料）を、化合物 BD-1 が 3 質量% となる膜厚比で蒸着し、膜厚 20 nm の発光層を成膜した。発光層の上に化合物 1 とリチウム（Li）を、Li が 2 質量% となる膜厚比で蒸着して、発光層上に膜厚 30 nm の電子輸送層を形成した。この電子輸送層上に金属 Al を 80 nm 蒸着させ金属陰極を形成し有機 EL 素子を作製した。

得られた有機 EL 素子を実施例 1 と同様にして評価した。結果を表 2 に示す。

20

【 0 1 8 0 】

実施例 5 ~ 12 及び比較例 4 ~ 6

化合物 1 の代わりに化合物 12（実施例 5）、化合物 13（実施例 6）、化合物 14（実施例 7）、化合物 17（実施例 8）、化合物 18（実施例 9）、化合物 19（実施例 10）、化合物 20（実施例 11）、化合物 21（実施例 12）、化合物 ET-1（比較例 4）、化合物 ET-2（比較例 5）、化合物 ET-3（比較例 6）を用いて電子輸送層を形成した以外は実施例 4 と同様にして有機 EL 素子を作製し評価した。結果を表 2 に示す。

30

【 0 1 8 1 】

【表 2】

表 2

	電子輸送層	駆動電圧 (V)	外部量子効率 (%)	発光色
実施例4	化合物1+Li	3.3	5.9	青
実施例5	化合物12+Li	3.5	5.9	青
実施例6	化合物13+Li	3.4	6.0	青
実施例7	化合物14+Li	3.2	5.1	青
実施例8	化合物17+Li	3.5	5.7	青
実施例9	化合物18+Li	3.5	6.0	青
実施例10	化合物19+Li	3.5	5.1	青
実施例11	化合物20+Li	3.2	5.1	青
実施例12	化合物21+Li	3.2	5.2	青
比較例4	化合物ET-1+Li	3.7	5.1	青
比較例5	化合物ET-2+Li	11.0	5.4	青
比較例6	化合物ET-3+Li	10.7	5.4	青

10

【産業上の利用可能性】

20

【0182】

以上詳細に説明したように、本発明の含窒素複素環誘導体を有機EL素子の有機薄膜層の少なくとも一層に用いることにより、低電圧でありながら発光効率が高く、電子輸送性が優れ高発光効率を達成できる。このため、本発明の有機EL素子は、各種電子機器の光源等として極めて有用である。

【 国際調査報告 】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2012/052319

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER H01L51/50(2006.01)i, C07D235/26(2006.01)i, C07D239/36(2006.01)i, C07D239/70(2006.01)i, C07D471/04(2006.01)i, C07D473/28(2006.01)i, C07D487/04(2006.01)i, C07D487/06(2006.01)i, C07D513/04(2006.01)i According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
B. FIELDS SEARCHED Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) H01L51/50, C07D235/26, C07D239/36, C07D239/70, C07D471/04, C07D473/28, C07D487/04, C07D487/06, C07D513/04 Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched Jitsuyo Shinan Koho 1922-1996 Jitsuyo Shinan Toroku Koho 1996-2012 Kokai Jitsuyo Shinan Koho 1971-2012 Toroku Jitsuyo Shinan Koho 1994-2012 Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X Y A	WO 2007/063760 A1 (Mitsubishi Chemical Corp.), 07 June 2007 (07.06.2007), paragraphs [0020] to [0023], [0050], [0080] & US 2009/0284134 A1 & KR 10-2008-0074103 A & JP 2007-176930 A & EP 1956008 A1 & CN 101287713 A	1-5,10,21 23-25 6-9,11-20
X A	JP 10-246973 A (Mita Kogyo Kabushiki Kaisha), 14 September 1998 (14.09.1998), claim 1; paragraphs [0010], [0022] (Family: none)	1-3,5 4,6-25
X A	WO 2010/136401 A2 (KIRNER, HansJurg), 02 December 2010 (02.12.2010), page 18, line 5 to page 19, line 16; page 60, line 1 to page 61, line 7 & WO 2010/136352 A1 & WO 2010/136353 A1	1-4,10 5-9,11-25
<input checked="" type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input 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 "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 10 April, 2012 (10.04.12)		Date of mailing of the international search report 17 April, 2012 (17.04.12)
Name and mailing address of the ISA/ Japanese Patent Office		Authorized officer
Facsimile No.		Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2012/052319

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X A	Jeffery T.Kuethe, Audrey Wong, and Ian W. Davies, Synthesis of Disubstituted Imidazo [4,5-b]pyridin-2-ones, Journal of Organic Chemistry, 2004.07.01, 2004, 69, 7752-7754, TABLE 2	1, 6, 10 2-5, 7-9, 11-25
X A	JP 2008-164776 A (Kyocera Mita Corp.), 17 July 2008 (17.07.2008), claim 1; paragraph [0014] (Family: none)	11-14 1-10, 15-25
X A	J.S.Yadav, B.V.S.reddy, Jaishri J.Naidu, and K.Sadashiv, NbCl ₅ -catalyzed Papid and Effecient Synthesis of 3,4-Dihydropyrimidinones Under Ambient Conditions, Chemistry Letters, 2004.03.18, Vol.33, No.7, 926-927, Scheme 1., Table 1.	15 1-14, 16-25
X A	Kevin Lewandowski, Peter Murer, Frantisek Svec, and Jean M. J. Frechet, A combinatorial Approach to Recognition of Chirality: Preparation of Highly Enantioselective Aryl-Dihydropyrimidine Selector for Chiral HPLC, Jornal of Combinatorial Chemistry, 1998.09.08, 1999, 1, 105-112, Figure 1., Figure 3.	15 1-14, 16-25
Y A	JP 2010-10576 A (Canon Inc.), 14 January 2010 (14.01.2010), claim 3; paragraph [0051] (Family: none)	23-25 1-22
Y A	JP 2006-176448 A (Idemitsu Kosan Co., Ltd.), 06 July 2006 (06.07.2006), paragraph [0070] & US 2008/0111473 A1 & WO 2006/067931 A1 & KR 10-2007-0088728 A & CN 101087759 A	23-25 1-22

国際調査報告		国際出願番号 PCT/J P 2 0 1 2 / 0 5 2 3 1 9									
A. 発明の属する分野の分類 (国際特許分類 (IPC))											
Int.Cl. H01L51/50(2006.01)i, C07D235/26(2006.01)i, C07D239/36(2006.01)i, C07D239/70(2006.01)i, C07D471/04(2006.01)i, C07D473/28(2006.01)i, C07D487/04(2006.01)i, C07D487/06(2006.01)i, C07D513/04(2006.01)i											
B. 調査を行った分野											
調査を行った最小限資料 (国際特許分類 (IPC))											
Int.Cl. H01L51/50, C07D235/26, C07D239/36, C07D239/70, C07D471/04, C07D473/28, C07D487/04, C07D487/06, C07D513/04											
最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの											
<table border="0"> <tr> <td>日本国実用新案公報</td> <td>1922-1996年</td> </tr> <tr> <td>日本国公開実用新案公報</td> <td>1971-2012年</td> </tr> <tr> <td>日本国実用新案登録公報</td> <td>1996-2012年</td> </tr> <tr> <td>日本国登録実用新案公報</td> <td>1994-2012年</td> </tr> </table>				日本国実用新案公報	1922-1996年	日本国公開実用新案公報	1971-2012年	日本国実用新案登録公報	1996-2012年	日本国登録実用新案公報	1994-2012年
日本国実用新案公報	1922-1996年										
日本国公開実用新案公報	1971-2012年										
日本国実用新案登録公報	1996-2012年										
日本国登録実用新案公報	1994-2012年										
国際調査で使用した電子データベース (データベースの名称、調査に使用した用語)											
C. 関連すると認められる文献											
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号									
X Y A	WO 2007/063760 A1 (三菱化学株式会社) 2007.06.07, 段落 [0020] - [0023], [0050], [0080] & US 2009/0284134 A1 & KR 10-2008-0074103 A & JP 2007-176930 A & EP 1956008 A1 & CN 101287713 A	1-5, 10, 21 23-25 6-9, 11-20									
X A	JP 10-246973 A (三田工業株式会社) 1998.09.14, 【請求項1】、段落【0010】、【0022】 (ファミリーなし)	1-3, 5 4, 6-25									
<input checked="" type="checkbox"/> C欄の続きにも文献が列挙されている。 <input type="checkbox"/> パテントファミリーに関する別紙を参照。											
* 引用文献のカテゴリー		の日の後に公表された文献									
「A」特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの		「T」国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの									
「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		「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									
「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)		「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									
「O」口頭による開示、使用、展示等に言及する文献		「&」同一パテントファミリー文献									
「P」国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願											
国際調査を完了した日 10.04.2012		国際調査報告の発送日 17.04.2012									
国際調査機関の名称及びあて先 日本国特許庁 (ISA/J P) 郵便番号100-8915 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号		特許庁審査官 (権限のある職員) 野田 洋平	20 4844								
		電話番号 03-3581-1101 内線 3271									

国際調査報告		国際出願番号 PCT/J P 2 0 1 2 / 0 5 2 3 1 9
C (続き) . 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
X A	WO 2010/136401 A2 (KIRNER, HansJurg) 2010.12.02, 第18頁第5行-第19頁第16行, 第60頁第1行-第61頁第7行 & WO 2010/136352 A1 & WO 2010/136353 A1	1-4, 10 5-9, 11-25
X A	Jeffery T.Kueth, Audrey Wong, and Ian W. Davies, Synthesis of Disubstituted Imidazo[4,5-b]pyridin-2-ones, Journal of Organic Chemistry, 2004.07.01, 2004, 69, 7752-7754, TABLE 2	1, 6, 10 2-5, 7-9, 11-25
X A	JP 2008-164776 A (京セラミタ株式会社) 2008.07.17, 【請求項1】, 段落【0014】 (ファミリーなし)	11-14 1-10, 15-25
X A	J. S. Yadav, B. V. S. reddy, Jaishri J. Naidu, and K. Sadashiv, NbCl ₅ -catalyzed Rapid and Efficient Synthesis of 3,4-Dihydropyrimidinones Under Ambient Conditions, Chemistry Letters, 2004.03.18, Vol.33, No.7, 926-927, Scheme 1., Table 1.	15 1-14, 16-25
X A	Kevin Lewandowski, Peter Murer, Frantisek Svec, and Jean M. J. Frechet, A combinatorial Approach to Recognition of Chirality: Preparation of Highly Enantioselective Aryl-Dihydropyrimidine Selector for Chiral HPLC, Journal of Combinatorial Chemistry, 1998.09.08, 1999, 1, 105-112, Figure 1., Figure 3.	15 1-14, 16-25
Y A	JP 2010-10576 A (キャノン株式会社) 2010.01.14, 【請求項3】, 段落【0051】 (ファミリーなし)	23-25 1-22
Y A	JP 2006-176448 A (出光興産株式会社) 2006.07.06, 段落【0070】 & US 2008/0111473 A1 & WO 2006/067931 A1 & KR 10-2007-0088728 A & CN 101087759 A	23-25 1-22

フロントページの続き

(51) Int.Cl.		F I	テーマコード (参考)
C 0 7 D 471/04	(2006.01)	C 0 7 D 487/04	1 4 4
C 0 7 D 487/06	(2006.01)	C 0 7 D 513/04	3 8 1
C 0 7 D 239/70	(2006.01)	C 0 7 D 471/04	1 0 7 A
C 0 7 D 239/36	(2006.01)	C 0 7 D 487/06	
C 0 7 D 473/28	(2006.01)	C 0 7 D 239/70	
		C 0 7 D 239/36	
		C 0 7 D 473/28	

(81) 指定国 AP(BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), EA(AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, T J, TM), EP(AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, R O, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OA(BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG), AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, H U, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KM, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI , NO, NZ, OM, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN

F ターム(参考) 4C050 AA01 AA02 AA07 BB04 BB05 CC04 CC08 DD03 EE02 EE03
 EE04 FF05 GG01 GG03 HH01
 4C065 AA01 BB06 CC01 DD03 EE02 HH02 JJ01 KK09 LL04 PP03
 4C072 AA01 AA06 BB02 BB06 CC02 CC16 EE17 FF05 GG01 HH02
 UU10

(注) この公表は、国際事務局(WIPO)により国際公開された公報を基に作成したものである。なおこの公表に係る日本語特許出願(日本語実用新案登録出願)の国際公開の効果は、特許法第184条の10第1項(実用新案法第48条の13第2項)により生ずるものであり、本掲載とは関係ありません。

专利名称(译)	含氮杂环衍生物，用于有机电致发光器件的电子传输材料，以及使用其的有机电致发光器件		
公开(公告)号	JPWO2012105629A1	公开(公告)日	2014-07-03
申请号	JP2012555942	申请日	2012-02-01
[标]申请(专利权)人(译)	出光兴产株式会社		
申请(专利权)人(译)	出光兴产株式会社		
[标]发明人	水谷清香 佐土貴康 石田弘毅		
发明人	水谷 清香 佐土 貴康 石田 弘毅		
IPC分类号	H01L51/50 C09K11/06 C07D235/26 C07D487/04 C07D513/04 C07D471/04 C07D487/06 C07D239/70 C07D239/36 C07D473/28		
CPC分类号	H01L51/0072 C07D235/02 C07D235/18 C07D235/26 C07D239/36 C07D239/70 C07D401/04 C07D401/10 C07D403/04 C07D403/10 C07D403/14 C07D405/10 C07D417/04 C07D471/04 C07D473/28 C07D487/04 C07D487/06 C07D493/04 C07D513/04 C07F5/02 C07F5/025 H01L51/0052 H01L51/0053 H01L51/0054 H01L51/0067 H01L51/0073 H01L51/5072 H01L51/5076		
FI分类号	H05B33/22.B H05B33/14.A H05B33/22.A C09K11/06.690 C07D235/26.CSP.C C07D487/04.144 C07D513/04.381 C07D471/04.107.A C07D487/06 C07D239/70 C07D239/36 C07D473/28		
F-TERM分类号	3K107/AA01 3K107/BB01 3K107/BB02 3K107/CC04 3K107/CC12 3K107/DD76 3K107/DD78 3K107/DD84 3K107/DD86 4C050/AA01 4C050/AA02 4C050/AA07 4C050/BB04 4C050/BB05 4C050/CC04 4C050/CC08 4C050/DD03 4C050/EE02 4C050/EE03 4C050/EE04 4C050/FF05 4C050/GG01 4C050/GG03 4C050/HH01 4C065/AA01 4C065/BB06 4C065/CC01 4C065/DD03 4C065/EE02 4C065/HH02 4C065/JJ01 4C065/KK09 4C065/LL04 4C065/PP03 4C072/AA01 4C072/AA06 4C072/BB02 4C072/BB06 4C072/CC02 4C072/CC16 4C072/EE17 4C072/FF05 4C072/GG01 4C072/HH02 4C072/UU10		
代理人(译)	伊藤 高志		
优先权	2011021240 2011-02-02 JP		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

具有脲结构的特定的含氮杂环化合物，包含该含氮杂环化合物的电子传输材料以及在阴极和阳极之间包括发光层和电子传输层的有机电致发光器件，其中电子传输层包括电子传输材料或含氮杂环衍生物。描述了即使在低电压下也表现出高发射效率的有机EL器件和用于有机EL器件的材料。

