

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11) 特許出願公開番号

特開2005-112856
(P2005-112856A)

(43) 公開日 平成17年4月28日(2005.4.28)

(51) Int.Cl.⁷

C07D 498/04
C07D 513/04
C07D 517/04
C09K 11/06
H05B 33/14

F 1

C07D 498/04 103
C07D 513/04 331
C07D 517/04 C S P
C09K 11/06 655
H05B 33/14 B

テーマコード(参考)

3K007
4C072

審査請求 有 請求項の数 29 O L (全 62 頁)

(21) 出願番号 特願2004-292535 (P2004-292535)
(22) 出願日 平成16年10月5日 (2004.10.5)
(31) 優先権主張番号 2003-069702
(32) 優先日 平成15年10月7日 (2003.10.7)
(33) 優先権主張国 韓国(KR)

(71) 出願人 590002817
三星エスディアイ株式会社
大韓民国京畿道水原市靈通区▲しん▼洞5
75番地
(74) 代理人 100072349
弁理士 八田 幹雄
(74) 代理人 100110995
弁理士 奈良 泰男
(74) 代理人 100111464
弁理士 斎藤 悅子
(74) 代理人 100114649
弁理士 宇谷 勝幸
(74) 代理人 100124615
弁理士 藤井 敏史

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】イミダゾール環含有化合物及びそれを利用した有機電界発光素子

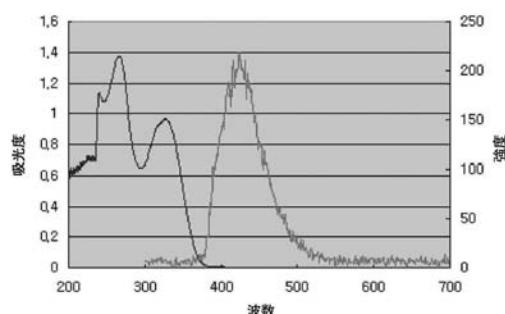
(57) 【要約】

【課題】 イミダゾール環含有化合物及びそれを利用した有機電界発光素子を提供する。

【解決手段】 単独で使われるか、またはドープ剤と共に発光層のような有機膜形成材料として使用できるイミダゾール環含有化合物。かかるイミダゾール環含有化合物を含有する有機膜を利用すれば輝度、効率、駆動電圧、色純度に優れた有機電界発光素子を製造できる。

【選択図】

図2

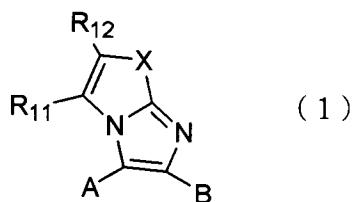


【特許請求の範囲】

【請求項 1】

下記式(1)：

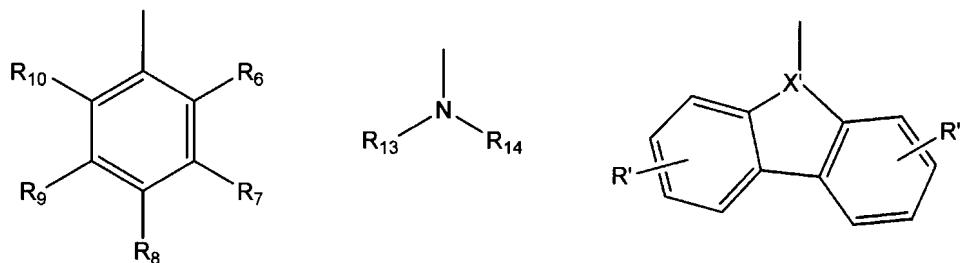
【化 1】



10

前記式中、Aは、下記式：

【化 2】

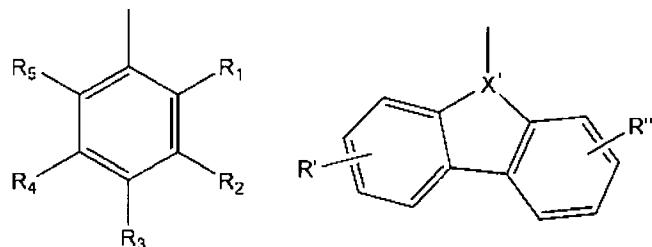


20

よりなる群から選択され、

Bは、下記式：

【化 3】



30

よりなる群から選択され、

Xは、O、NH、CR、SまたはSeであり、

X'は、CRまたはNであり、

R₁ないしR_{1,2}は、互いに独立して、水素、炭素数1ないし30の置換または非置換のアルキル基、炭素数1ないし30の置換または非置換のアルコキシ基、炭素数4ないし30の置換または非置換のシクロアルキル基、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリール基、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリールオキシ基、炭素数2ないし30の置換または非置換のヘテロアリール基、炭素数2ないし30の置換または非置換のヘテロアリールオキシ基、炭素数6ないし30の置換または非置換の縮合多環基、アミノ基、炭素数1ないし30の置換または非置換のアルキルアミノ基、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリールアミノ基、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシ基、ハロゲン原子、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリールスルホニル基または炭素数1ないし30の置換または非置換のアルキルスルホニル基を表し、またはR₁ないしR_{1,2}のうち互いに隣接した基は互いに結合されて炭素数2ないし30の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、

R、R'及びR''は、互いに独立して、一置換または多置換作用基であって、水素、炭素数1ないし30の置換または非置換のアルキル基、炭素数1ないし30の置換または非置換のアルコキシ基、炭素数4ないし30の置換または非置換のシクロアルキル基、炭素

40

50

数 6 ないし 30 の置換または非置換のアリール基、炭素数 6 ないし 30 の置換または非置換のアリールオキシ基、炭素数 2 ないし 30 の置換または非置換のヘテロアリール基、炭素数 2 ないし 30 の置換または非置換の縮合多環基、アミノ基、炭素数 1 ないし 30 の置換または非置換のアルキルアミノ基、炭素数 6 ないし 30 の置換または非置換のアリールアミノ基、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシ基、ハロゲン原子、炭素数 6 ないし 30 の置換または非置換のアリールスルホニル基または炭素数 1 ないし 30 の置換または非置換のアルキルスルホニル基を表し、または R' 及び R'' のうち互いに隣接した基は互いに結合されて飽和または不飽和環を形成し、

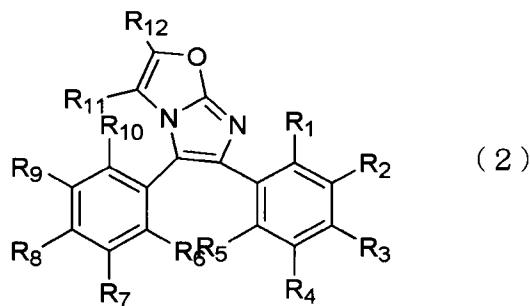
前記 R_{1~3} と R_{1~4} とは、互いに独立して、炭素数 1 ないし 30 の置換または非置換のアルキル基、炭素数 6 ないし 30 の置換または非置換のアリール基または炭素数 2 ないし 30 の置換または非置換のヘテロアリール基である、

で表わされるイミダゾール環含有化合物。

【請求項 2】

下記式(2)：

【化 4】

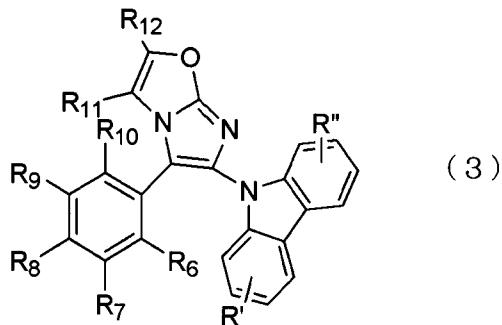


前記式中、R₁ ないし R₁₀ は、請求項 1 の式(1)の定義と同様であり、
R_{1~1} 及び R_{1~2} は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数 2 ないし
30 の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成する、
で表わされる、請求項 1 に記載のイミダゾール環含有化合物。

【請求項 3】

下記式(3)：

【化 5】



前記式中、R₆ ないし R₁₀ は、請求項 1 の式(1)の定義と同様であり、
R_{1~1} 及び R_{1~2} は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数 2 ないし
30 の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、
R' 及び R'' は、いずれも水素である、
で表わされる請求項 1 に記載のイミダゾール環含有化合物。

【請求項 4】

下記式(4)：

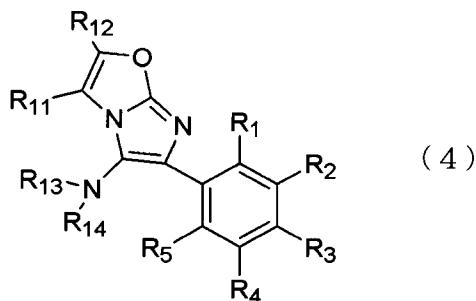
10

20

30

40

【化6】



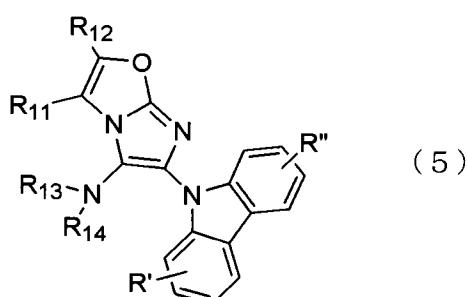
10

前記式中、R₁ないしR₅は、請求項1の式(1)の定義と同様であり、R₁₁及びR₁₂は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数2ないし30の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、R₁₃ないしR₁₄は、互いに独立して、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリール基または炭素数2ないし30の置換または非置換のヘテロアリール基である、で表わされる、請求項1に記載のイミダゾール環含有化合物。

【請求項5】

下記式(5)：

【化7】



20

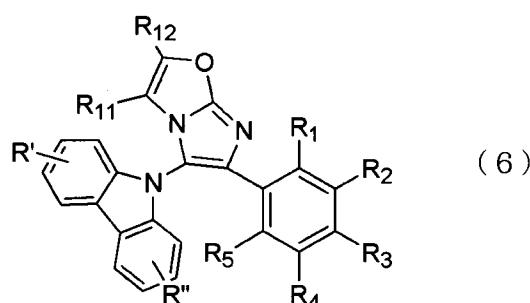
前記式中、R₁₁及びR₁₂は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数2ないし30の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、R₁₃及びR₁₄は、互いに独立して、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリール基または炭素数2ないし30の置換または非置換のヘテロアリール基であり、R'及びR''はいずれも水素である、で表わされる、請求項1に記載のイミダゾール環含有化合物。

30

【請求項6】

下記式(6)：

【化8】



40

前記式中、R₁ないしR₅は、請求項1の式(1)の定義と同様であり、R₁₁及びR₁₂は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数2ないし30の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、R'及びR''は、いずれも水素である、

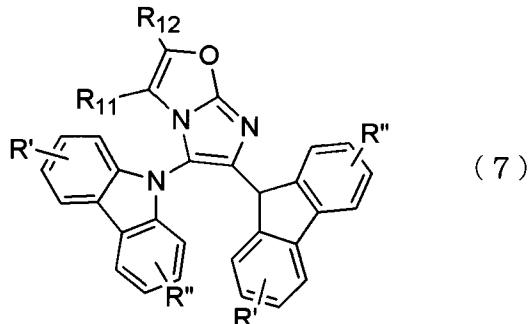
50

で表わされる、請求項 1 に記載のイミダゾール環含有化合物。

【請求項 7】

下記式(7)：

【化 9】



10

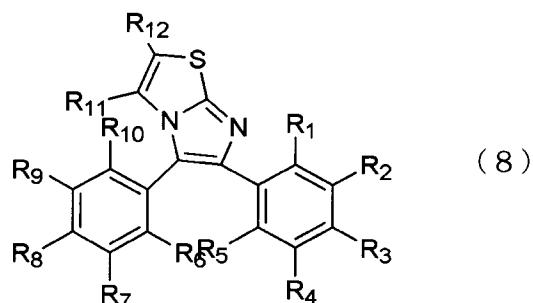
前記式中、R₁₁ 及び R₁₂ は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数 2 ないし 3 0 の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、

R' 及び R'' は、請求項 1 の式(1)の定義と同様である、
で表わされる、請求項 1 に記載のイミダゾール環含有化合物。

【請求項 8】

下記式(8)：

【化 10】



30

前記式中、R₁ ないし R₁₀ は、請求項 1 の式(1)の定義と同様であり、

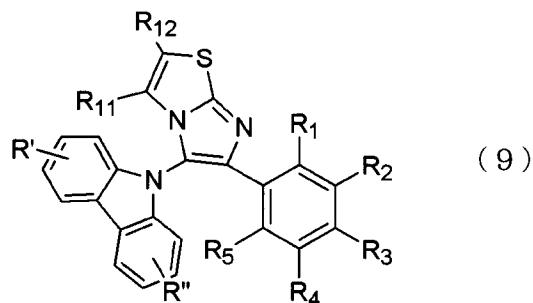
R₁₁ 及び R₁₂ は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数 2 ないし 3 0 の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成する、

で表わされる、請求項 1 に記載のイミダゾール環含有化合物。

【請求項 9】

下記式(9)：

【化 11】



40

前記式中、R₁ ないし R₅ は、請求項 1 の式(1)の定義と同様であり、

R₁₁ 及び R₁₂ は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数 2 ないし 3 0 の置換または非置換の飽和または不飽和炭素輪を形成し、

R' 及び R'' は、いずれも水素である、

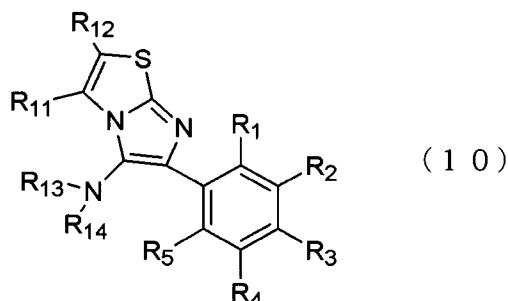
50

で表わされる、請求項 1 に記載のイミダゾール環含有化合物。

【請求項 10】

下記式(10)：

【化 12】



10

前記式中、R₁ないしR₅は、請求項1の式(1)の定義と同様であり、R₁₁及びR₁₂は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数2ないし30の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、

R₁₃及びR₁₄は、互いに独立して、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリール基または炭素数2ないし30の置換または非置換のヘテロアリール基である、

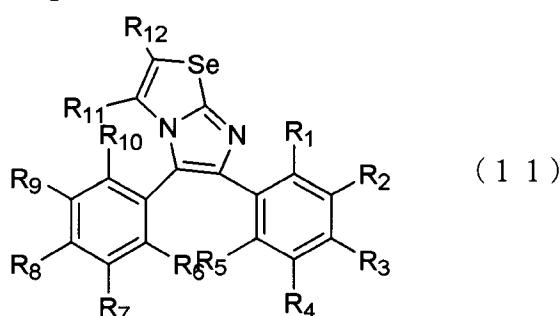
で表わされる、請求項1に記載のイミダゾール環含有化合物。

【請求項 11】

20

下記式(11)：

【化 13】



30

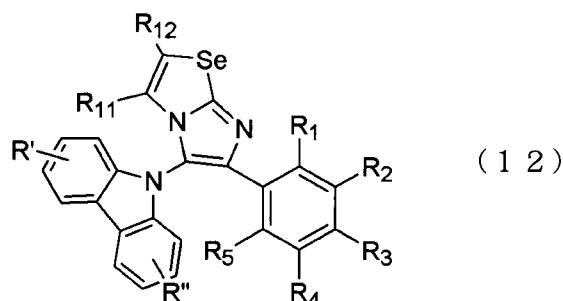
前記式中、R₁ないしR₁₀は、請求項1の式(1)の定義と同様であり、R₁₁及びR₁₂は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数6ないし30の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成する、

で表わされる、請求項1に記載のイミダゾール環含有化合物。

【請求項 12】

下記式(12)：

【化 14】



40

前記式中、R₁ないしR₅は、請求項1の式(1)の定義と同様であり、

R₁₁及びR₁₂は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数2ないし30の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、

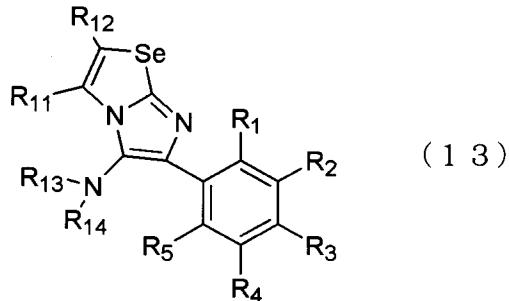
50

R' 及び R'' は、いずれも水素である、
で表わされる、請求項 1 に記載のイミダゾール環含有化合物。

【請求項 1 3】

下記式(13)：

【化 1 5】



10

前記式中、R₁ ないし R₅ は、請求項 1 の式(1)の定義と同様であり、
R₁₁ 及び R₁₂ は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて置換または非置換の炭素数 2 ないし 30 の飽和または不飽和環を形成し、

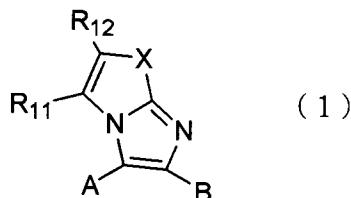
R₁₃ 及び R₁₄ は、互いに独立して、炭素数 6 ないし 30 の置換または非置換のアリール基または炭素数 2 ないし 30 の置換または非置換のヘテロアリール基である、
で表わされる、請求項 1 に記載のイミダゾール環含有化合物。

20

【請求項 1 4】

一对の電極間に有機膜を含む有機電界発光素子において、前記有機膜が下記式(1)：

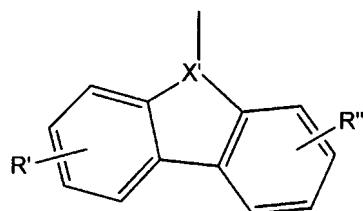
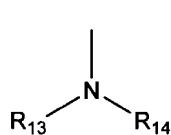
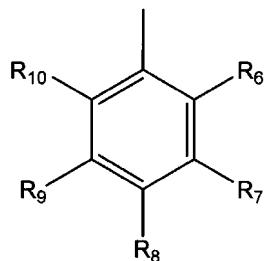
【化 1 6】



30

前記式中、A は、下記式：

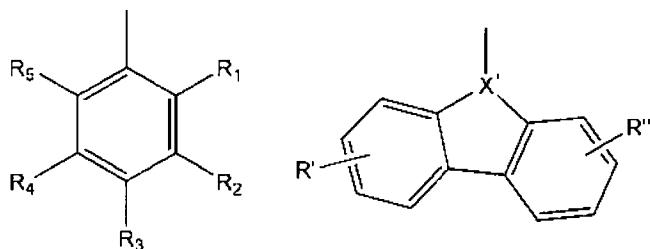
【化 1 7】



40

よりなる群から選択され、
B は、下記式：

【化18】



よりなる群から選択され、

10

Xは、O、NH、CR、SまたはSeであり、

X'は、CRまたはNであり、

R₁ないしR_{1~2}は、互いに独立して、水素、炭素数1ないし30の置換または非置換のアルキル基、炭素数1ないし30の置換または非置換のアルコキシ基、炭素数4ないし30の置換または非置換のシクロアルキル基、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリール基、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリールオキシ基、炭素数2ないし30の置換または非置換のヘテロアリール基、炭素数2ないし30の置換または非置換の縮合多環基、アミノ基、炭素数1ないし30の置換または非置換のアルキルアミノ基、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリールアミノ基、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシ基、ハロゲン原子、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリールスルホニル基または炭素数1ないし30の置換または非置換のアルキルスルホニル基を表し、またはR₁ないしR_{1~2}のうち互いに隣接した基は互いに結合されて炭素数2ないし30の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、

20

R、R'及びR''は、互いに独立して、一置換または多置換作用基であつて、水素、炭素数1ないし30の置換または非置換のアルキル基、炭素数1ないし30の置換または非置換のアルコキシ基、炭素数4ないし30の置換または非置換のシクロアルキル基、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリール基、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリールオキシ基、炭素数2ないし30の置換または非置換のヘテロアリール基、炭素数2ないし30の置換または非置換の縮合多環基、アミノ基、炭素数1ないし30の置換または非置換のアルキルアミノ基、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシ基、ハロゲン原子、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリールスルホニル基または炭素数1ないし30の置換または非置換のアルキルスルホニル基を表し、またはR'及びR''のうち互いに隣接した基は互いに結合されて飽和または不飽和環を形成し、

30

前記R_{1~3}とR_{1~4}とは、互いに独立して、炭素数1ないし30の置換または非置換のアルキル基、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリール基または炭素数2ないし30の置換または非置換のヘテロアリール基である、

で表わされるイミダゾール環含有化合物を含むことを特徴とする有機電界発光素子。

40

【請求項15】

前記有機膜が電界発光層であることを特徴とする、請求項14に記載の有機電界発光素子。

【請求項16】

前記電界発光層が可視領域の熒光または蛍光ドープ剤をさらに含むことを特徴とする、請求項14または15に記載の有機電界発光素子。

【請求項17】

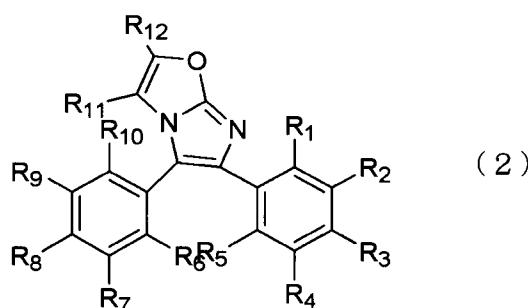
前記有機膜がホール注入層またはホール輸送層であることを特徴とする、請求項14～16のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

【請求項18】

50

前記式(1)の化合物が下記式(2)：

【化19】



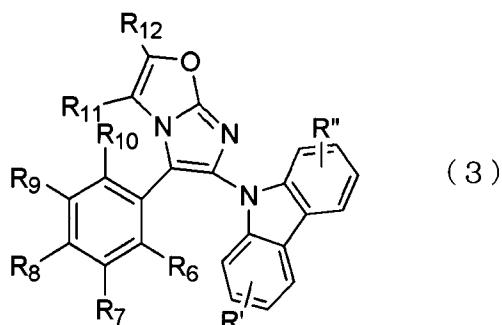
10

前記式中、R₁ないしR₁₀は、請求項14の式(1)の定義と同様であり、
R₁₁及びR₁₂は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数2ないし
30の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成する、
で表わされる、請求項14～17のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

【請求項19】

前記式(1)の化合物が下記式(3)：

【化20】



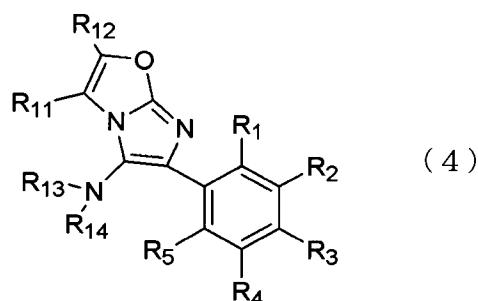
20

前記式中、R₆ないしR₁₀は、請求項14の式(1)の定義と同様であり、
R₁₁及びR₁₂は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数2ないし
30の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、
R'及びR''は、いずれも水素である、
で表わされる、請求項14～17のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

【請求項20】

前記式(1)の化合物が下記式(4)：

【化21】



40

前記式中、R₁ないしR₅は、請求項14の式(1)の定義と同様であり、
R₁₁及びR₁₂は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数2ないし
30の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、
R₁₃ないしR₁₄は、互いに独立して、炭素数6ないし30の置換または非置換のア
リール基または炭素数2ないし30の置換または非置換のヘテロアリール基である、

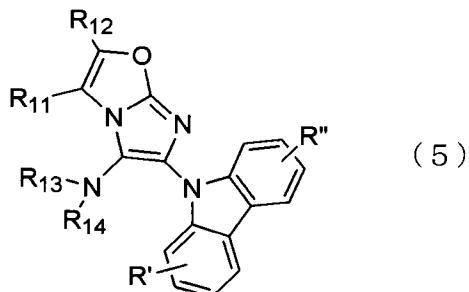
50

で表わされる、請求項 14 ~ 17 のいずれか 1 項に記載の有機電界発光素子。

【請求項 21】

前記式(1)の化合物が下記式(5)：

【化 22】



10

前記式中、R₁₁ 及び R₁₂ は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数 2 ないし 3 0 の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、

R₁₃ 及び R₁₄ は、互いに独立して、炭素数 6 ないし 3 0 の置換または非置換のアリール基または炭素数 2 ないし 3 0 の置換または非置換のヘテロアリール基であり、

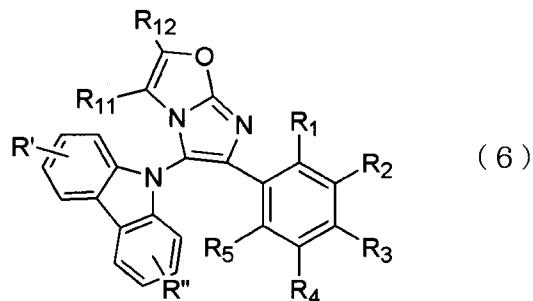
R' 及び R'' はいずれも水素である、

で表わされる、請求項 14 ~ 17 のいずれか 1 項に記載の有機電界発光素子。

【請求項 22】

前記式(1)の化合物が下記式(6)：

【化 23】



20

30

前記式中、R₁ ないし R₅ は、請求項 14 の式(1)の定義と同様であり、

R₁₁ 及び R₁₂ は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数 2 ないし 3 0 の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、

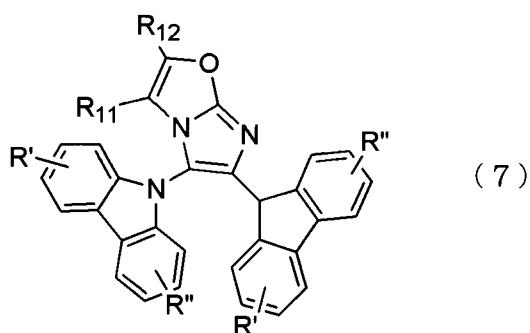
R' 及び R'' は、いずれも水素である、

で表わされる、請求項 14 ~ 17 のいずれか 1 項に記載の有機電界発光素子。

【請求項 23】

前記式(1)の化合物が下記式(7)：

【化 24】



40

前記式中、R₁₁ 及び R₁₂ は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素

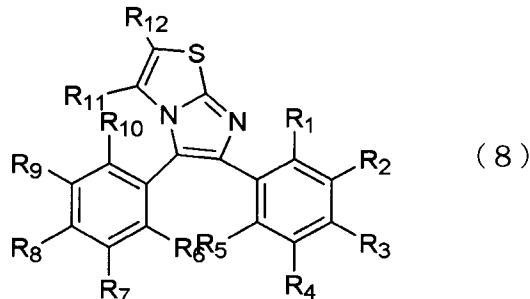
50

数 2 ないし 3 0 の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、
 R' 及び R'' は、請求項 1 の式 (1) の定義と同様である、
 で表わされる、請求項 14 ~ 17 のいずれか 1 項に記載の有機電界発光素子。

【請求項 24】

前記式 (1) の化合物が下記式 (8) :

【化 25】

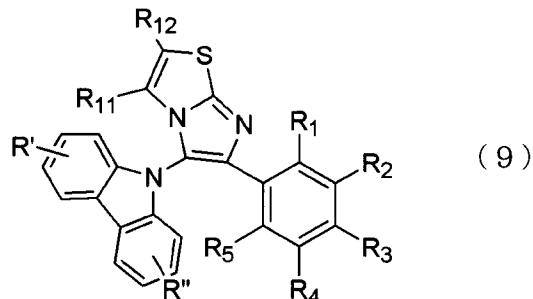


前記式中、R₁ ないし R₁₀ は、請求項 14 の式 (1) の定義と同様であり、
 R₁₁ 及び R₁₂ は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数 2 ないし
 3 0 の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成する、
 で表わされる、請求項 14 ~ 17 のいずれか 1 項に記載の有機電界発光素子。

【請求項 25】

前記式 (1) の化合物が下記式 (9) :

【化 26】



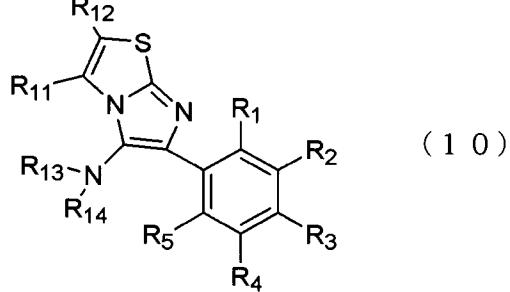
前記式中、R₁ ないし R₅ は、請求項 14 の式 (1) の定義と同様であり、
 R₁₁ 及び R₁₂ は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数 2 ないし
 3 0 の置換または非置換の飽和または不飽和炭素輪を形成し、
 R' 及び R'' は、いずれも水素である、

で表わされる、請求項 14 ~ 17 のいずれか 1 項に記載の有機電界発光素子。

【請求項 26】

前記式 (1) の化合物が下記式 (10) :

【化 27】



前記式中、R₁ ないし R₅ は、請求項 14 の式 (1) の定義と同様であり、
 R₁₁ 及び R₁₂ は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数 2 ないし

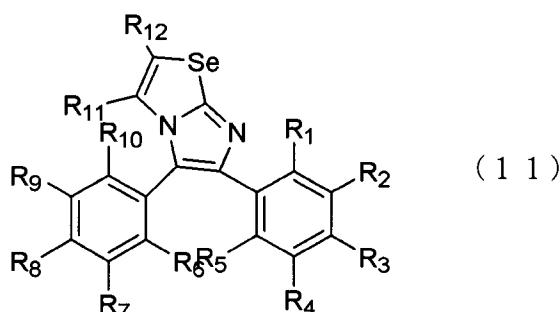
30の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、

R_{1~3}及びR_{1~4}は、互いに独立して、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリール基または炭素数2ないし30の置換または非置換のヘテロアリール基である、
で表わされる、請求項14~17のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

【請求項27】

前記式(1)の化合物が下記式(11)：

【化28】



10

前記式中、R₁ないしR₁₀は、請求項14の式(1)の定義と同様であり、

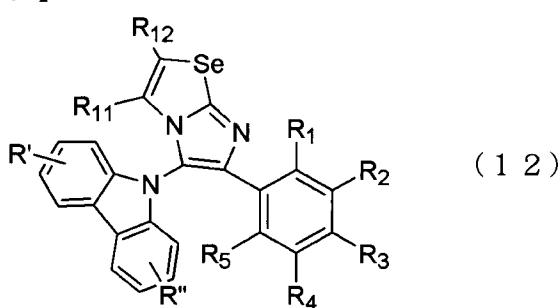
R_{1~1}及びR_{1~2}は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数6ないし30の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成する、
で表わされる、請求項14~17のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

20

【請求項28】

前記式(1)の化合物が下記式(12)：

【化29】



30

前記式中、R₁ないしR₅は、請求項14の式(1)の定義と同様であり、

R_{1~1}及びR_{1~2}は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数2ないし30の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、

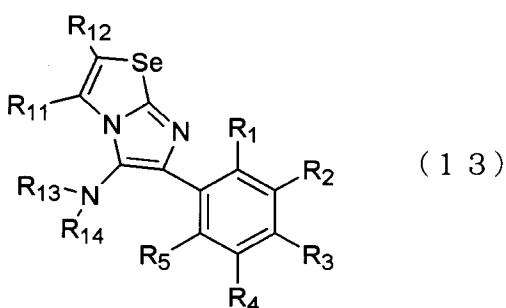
R'及びR''は、いずれも水素である、

で表わされる、請求項14~17のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

【請求項29】

前記式(1)の化合物が下記式(13)：

【化30】



40

前記式中、R₁ないしR₅は、請求項14の式(1)の定義と同様であり、

50

$R_{1,1}$ 及び $R_{1,2}$ は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて置換または非置換の炭素数 2 ないし 3 の飽和または不飽和環を形成し、

$R_{1,3}$ 及び $R_{1,4}$ は、互いに独立して、炭素数 6 ないし 3 の置換または非置換のアリール基または炭素数 2 ないし 3 の置換または非置換のヘテロアリール基である、
で表わされる、請求項 14 ~ 17 のいずれか 1 項に記載の有機電界発光素子。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、イミダゾール環含有化合物及びそれを利用した有機電界発光素子に係り、より詳細には、赤色、緑色、青色など多様な燐光または蛍光ドープ剤に対するホストとしてイミダゾール環含有化合物を使用して製造される高効率、高輝度、低消費電力を持つ有機電界発光表示素子に関する。 10

【背景技術】

【0002】

電界発光 (ElectroLuminescent : EL) 素子は、自発光型表示素子であり、視野角が広くてコントラストに優れるだけでなく応答時間が速い。そして、EL 素子は発光層 (Electroluminescent Layer : EML) 形成用材料によって無機 EL 素子と有機 EL 素子とに区分される。ここで有機 EL 素子は、無機 EL 素子に比べて輝度がより高く、駆動電圧がより低く及び応答時間がより短く、多色化が可能であるという長所を持っている。 20

【0003】

一般的な有機 EL 素子は、基板上にアノードが形成されており、このアノード上にホール輸送層 (Hole Transporting Layer : HTL)、電界発光層 (Electroluminescent Layer : EML)、電子輸送層 (Electron Transporting Layer : ETL) 及びカソードが順次形成されている構造になっている。ここで HTL、EML 及び ETL は有機化合物よりなる薄膜である。 20

【0004】

前記のような構造を持つ有機 EL 素子の駆動原理は次の通りである。

【0005】

前記アノード及びカソード間に電圧を印加すると、アノードから注入されたホールは HTL を経由して EML に移動する。一方、カソードから注入された電子は ETL を経由して EML に移動し、EML 領域でホールと結合してエキシトン (exciton) を生成する。このエキシトンが励起状態から基底状態に変化すると、これによって EML の分子が発光して画像が形成される。この時、エキシトンが一重項励起状態（以下、S1 と称する）から基底状態（以下、S0 と称する）に転移する際に生じる発光を‘蛍光’といい、三重項励起状態（以下、T1 と称する）から基底状態（以下、S0 と称する）に転移する際に生じる発光を‘燐光’という。蛍光の場合、25% の一重項励起状態のエキシトン（75% の三重項状態のエキシトン）のみが使用され、発光効率の限界がある。その一方、燐光を使用すれば、75% の三重項励起状態のエキシトン及び 25% の一重項励起状態のエキシトンが利用できるので、理論的には 100% の内部量子効率が達成できる。 40

【0006】

スピン - 軌道結合の大きい Ir、Pt のような重い元素を中心に持つ燐光色素である Ir (ppy)₃ 及び PtOEP をドープ剤として使用して、三重項状態（燐光）でも効果的に光を出す、緑色及び赤色の高効率有機 EL 素子が開発された。この時、有機 EL 素子では、ホストとして CBP (4,4'-N,N'-ジカルバゾール-ビフェニル) が使用されている。

【0007】

しかしながら、前記の有機 EL 素子は、CBP のガラス転移温度が 110 ℃ と低くて結晶化しやすいため、寿命が 150 時間以下と短い。このため、有機 EL 素子は、商業的使 50

用側面から見れば不十分である。

【発明の開示】

【発明が解決しようとする課題】

【0008】

本発明が解決しようとする技術的課題は、電気的な安定性に優れ、高い電荷輸送能力を持ち、ガラス転移温度が高くて、結晶化を防止できる、赤色、緑色、青色、白色などのあらゆるカラーの蛍光及び燐光ドープ剤に適したホスト物質を提供することである。

【0009】

本発明が解決しようとする他の技術的課題は、前記物質を利用して高効率、低電圧、高輝度、長寿名の有機EL素子を提供することである。

10

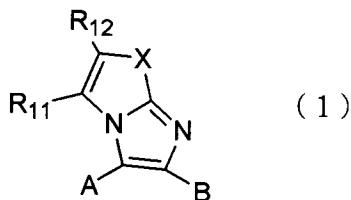
【課題を解決するための手段】

【0010】

前記第1の技術的課題を解決するために、本発明では、下記式(1)：

【0011】

【化1】



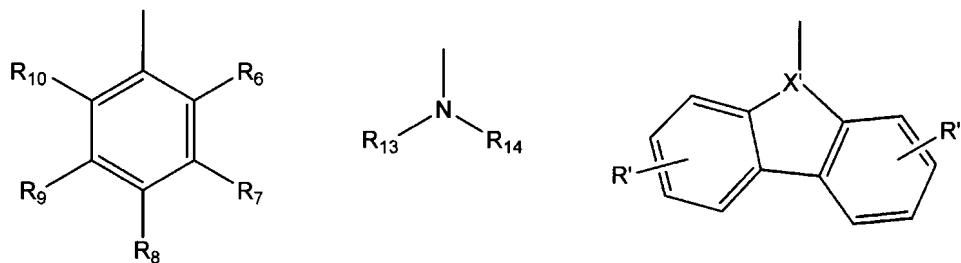
20

【0012】

前記式中、Aは、下記式：

【0013】

【化2】



30

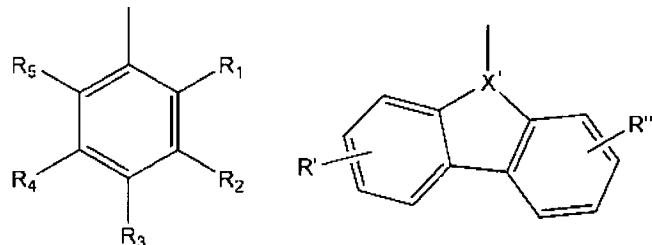
【0014】

よりなる群から選択され、

Bは、下記式：

【0015】

【化3】



40

【0016】

よりなる群から選択され、

Xは、O、NH、CR、SまたはSeであり、

50

X'は、C RまたはNであり、

R₁ないしR_{1,2}は、互いに独立して、水素、炭素数1ないし30の置換または非置換のアルキル基、炭素数1ないし30の置換または非置換のアルコキシ基、炭素数4ないし30の置換または非置換のシクロアルキル基、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリール基、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリールオキシ基、炭素数2ないし30の置換または非置換のヘテロアリール基、炭素数2ないし30の置換または非置換のヘテロアリールオキシ基、炭素数6ないし30の置換または非置換の縮合多環基、アミノ基、炭素数1ないし30の置換または非置換のアルキルアミノ基、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリールアミノ基、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシ基、ハロゲン原子、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリールスルホニル基または炭素数1ないし30の置換または非置換のアルキルスルホニル基を表し、またはR₁ないしR_{1,2}のうち互いに隣接した基は互いに結合されて炭素数2ないし30の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、

10

R、R'及びR"は、互いに独立して、一置換または多置換作用基であって、水素、炭素数1ないし30の置換または非置換のアルキル基、炭素数1ないし30の置換または非置換のアルコキシ基、炭素数4ないし30の置換または非置換のシクロアルキル基、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリール基、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリールオキシ基、炭素数2ないし30の置換または非置換のヘテロアリール基、炭素数2ないし30の置換または非置換のヘテロアリールオキシ基、炭素数6ないし30の置換または非置換の縮合多環基、アミノ基、炭素数1ないし30の置換または非置換のアルキルアミノ基、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリールアミノ基、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシ基、ハロゲン原子、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリールスルホニル基または炭素数1ないし30の置換または非置換のアルキルスルホニル基を表し、またはR'及びR"のうち互いに隣接した基は互いに結合されて飽和または不飽和環を形成し、

20

前記R_{1,3}とR_{1,4}とは、互いに独立して、炭素数1ないし30の置換または非置換のアルキル基、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリール基または炭素数2ないし30の置換または非置換のヘテロアリール基である、
で表わされるイミダゾール環含有化合物を提供する。

30

【0017】

本発明の他の技術的課題は、一対の電極間に有機膜を含む有機EL素子において、前記有機膜が前述した本発明のイミダゾール環含有化合物を含むことを特徴とする有機EL素子によって解決される。

【発明の効果】

【0018】

本発明による上記式(1)で表わされるイミダゾール環含有化合物を含有する有機膜を利用すれば、輝度、効率、駆動電圧、色純度に優れた有機EL素子を製造できる。

【発明を実施するための最良の形態】

【0019】

以下、本発明をより詳細に説明する。

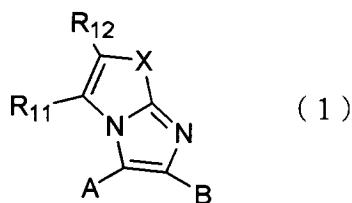
40

【0020】

本発明の第一は、下記式(1)：

【0021】

【化4】



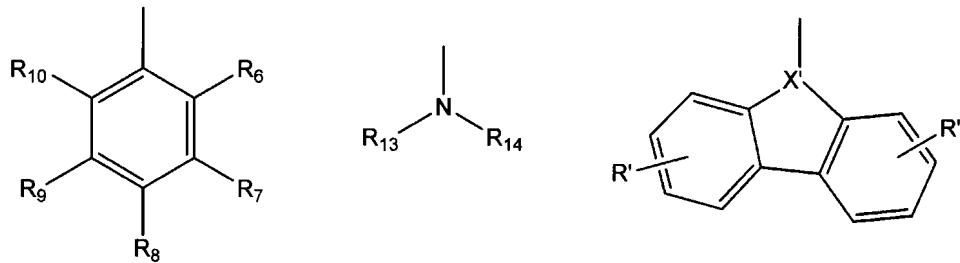
【0022】

前記式中、Aは、下記式：

10

【0023】

【化5】



20

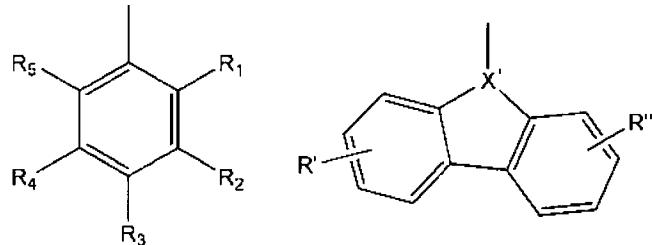
【0024】

よりなる群から選択され、

Bは、下記式：

【0025】

【化6】



30

【0026】

よりなる群から選択され、

Xは、O、NH、CR、SまたはSeであり、好ましくはO、NH、SまたはSeであり、より好ましくはO、SまたはSeであり、

X'は、CRまたはNであり、

R₁ないしR_{1,2}は、互いに独立して、水素、炭素数1ないし30の置換または非置換のアルキル基、炭素数1ないし30の置換または非置換のアルコキシ基、炭素数4ないし30の置換または非置換のシクロアルキル基、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリール基、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリールオキシ基、炭素数2ないし30の置換または非置換のヘテロアリール基、炭素数2ないし30の置換または非置換のヘテロアリールオキシ基、炭素数6ないし30の置換または非置換の縮合多環基、アミノ基、炭素数1ないし30の置換または非置換のアルキルアミノ基、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリールアミノ基、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシ基、ハロゲン原子、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリールスルホニル基または炭素数1ないし30の置換または非置換のアルキルスルホニル基を表し、またはR₁ないしR_{1,2}のうち互いに隣接した基は互いに結合されて炭素数2ないし30の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、

40

50

R、R'及びR''は、互いに独立して、一置換または多置換作用基であって、水素、炭素数1ないし30の置換または非置換のアルキル基、炭素数1ないし30の置換または非置換のアルコキシ基、炭素数4ないし30の置換または非置換のシクロアルキル基、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリール基、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリールオキシ基、炭素数2ないし30の置換または非置換のヘテロアリール基、炭素数2ないし30の置換または非置換のヘテロアリールオキシ基、炭素数6ないし30の置換または非置換の縮合多環基、アミノ基、炭素数1ないし30の置換または非置換のアルキルアミノ基、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリールアミノ基、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシ基、ハロゲン原子、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリールスルホニル基または炭素数1ないし30の置換または非置換のアルキルスルホニル基を表し、またはR'及びR''のうち互いに隣接した基は互いに結合されて飽和または不飽和環を形成し、10

前記R₁₋₃とR₁₋₄とは、互いに独立して、炭素数1ないし30の置換または非置換のアルキル基、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリール基または炭素数2ないし30の置換または非置換のヘテロアリール基である、
で表わされるイミダゾール環含有化合物に関するものである。

【0027】

上記式(1)において、非置換の炭素数1ないし30のアルキル基は、このような炭素原子数を有するものであれば特に制限されず、直鎖または分岐鎖のいずれでもよいが、具体的な例としては、メチル基、エチル基、プロピル基、イソブチル基、sec-ブチル基、ペンチル基、イソアミル基、ヘキシル基などが挙げられる。前記アルキル基のうち一つ以上の水素原子は、ハロゲン原子、ヒドロキシル基、ニトロ基、シアノ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジノ基(-HN-NH₂)、ヒドラゾノ基(=N-NH₂)、カルボキシル基やその塩、スルホン酸基やその塩、リン酸基やその塩、またはC_{1-C30}のアルキル基、C_{1-C30}のアルケニル基、C_{1-C30}のアルキニル基、C_{6-C30}のアリール基、C_{7-C20}のアリールアルキル基、C_{2-C20}のヘテロアリール基、またはC_{3-C30}のヘテロアリールアルキル基に置換できる。20

【0028】

また、上記式(1)において、非置換の炭素数1ないし30のアルコキシ基は、このような炭素原子数を有するものであれば特に制限されず、直鎖または分岐鎖のいずれでもよいが、具体的な例としては、メトキシ基、エトキシ基、シクロヘキシルオキシ基、イソブロピルオキシ基などがあり、これらアルコキシ基のうち少なくとも一つ以上の水素原子は、前述したアルキル基の場合と同様な置換基に置換可能である。30

【0029】

上記式(1)において、炭素数4ないし30の非置換のシクロアルキル基は、このような炭素原子数を有するものであれば特に制限されないが、例えば、シクロヘキシル基、シクロペンチル基などがあり、シクロアルキル基のうち一つ以上の水素原子は、前述したアルキル基の場合と同様な置換基に置換可能である。

【0030】

上記式(1)において、非置換の炭素数6ないし30のアリール基は、単独または組合させて使われて、一つ以上の環を含む炭素原子数6ないし30のカルボサイクル芳香族システムを意味し、前記環はペンドント方法で互いに結合(共に付着)されるか、または縮合(融合)されうる。アリールという用語は、フェニル、ナフチル、テトラヒドロナフチルのような芳香族ラジカルを含む。よって、非置換のアリール基の例としては、フェニル基、ナフチル基、テトラヒドロナフチル基などがあり、これらアリール基のうち一つ以上の水素原子は、前述したアルキル基の場合と同様な置換基に置換可能である。40

【0031】

非置換の炭素数6ないし30のアリールオキシ基の例としては、フェニルオキシ基、ナフチレンオキシ基、ジフェニルオキシ基などがある。前記アリールオキシ基のうち一つ以上の水素原子は、前述したアルキル基の場合と同様な置換基に置換可能である。50

【0032】

上記式(1)において、非置換の炭素数2ないし30のヘテロアリール基は、N、O、PまたはSのうち選択された1個以上(例えば、1、2または3個)のヘテロ原子を含む環原子数5ないし30の環システムを意味する。ヘテロアリール基の例として、チエニル基、ピリジル基、フリル基などがある。前記ヘテロアリール基のうち一つ以上の水素原子は、前述したアルキル基の場合と同様な置換基に置換可能である。

【0033】

上記式(1)において、非置換の炭素数2ないし30のヘテロアリールオキシ基は、前記定義されたようなヘテロアリール基に酸素が結合されたことを意味する。例えば、チエニルオキシ基、ピリジルオキシ基、フリルオキシ基などがある。前記ヘテロアリールオキシ基のうち一つ以上の水素原子は、前述したアルキル基の場合と同様な置換基に置換可能である。

10

【0034】

上記式(1)において、炭素数6ないし30の非置換の縮合多環基は、2つ以上の単環がそれぞれの環の辺を互いに1つだけ供給(縮合するという)してできる縮合環を意味する。具体的には、ペンタレニル基、インデニル基、ナフタレニル基、アズレニル基、ヘプタレニル基、ビフェニレニル基、*a s*-インダセニル基、*s*-インダセニル基、アセナフチレニル基、フルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、アセフェナントリレニル基、アセアントリレニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、テトラセニル基、ブレイアデニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ペンタセニル基、テトラフェニレニル基、ヘキサフェニル基などがある。前記縮合多環基のうち一つ以上の水素原子は、前述したアルキル基の場合と同様な置換基に置換可能である。

20

【0035】

上記式(1)において、炭素数1ないし30の非置換のアルキルアミノ基は、このような炭素原子数を有するものであれば特に制限されず、直鎖または分岐鎖のいずれでもよいが、具体的な例としては、メチルアミノ基、エチルアミノ基、ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基、プロピルアミノ基、*n*-ブチルアミノ基、*s e c*-ブチルアミノ基及び*t e r*-ブチルアミノ基などがある。前記アルキルアミノ基のうち一つ以上の水素原子は、前述したアルキル基の場合と同様な置換基に置換可能である。

30

【0036】

上記式(1)において、炭素数6ないし30の非置換のアリールアミノ基は、このような炭素原子数を有するものであれば特に制限されないが、例えば、アニリノ基、*o*-，*m*-若しくは*p*-トルイジノ基、1，2-若しくは1，3-キシリジノ基、*o*-，*m*-若しくは*p*-メトキシアニリノ基などがある。前記アリールアミノ基のうち一つ以上の水素原子は、前述したアルキル基の場合と同様な置換基に置換可能である。

【0037】

上記式(1)において、ハロゲン原子は、フッ素原子、塩素原子、臭素原子及びヨウ素原子のいずれでもよい。

40

【0038】

上記式(1)において、炭素数6ないし30の非置換のアリールスルホニル基は、このような炭素原子数を有するものであれば特に制限されないが、例えば、フェニルスルホニル基、*p*-メチルフェニルスルホニル基、*p*-*t*-ブチルフェニルスルホニル基、ジフェニルスルホニル基、ジ-*p*-メチルフェニルスルホニル基、ジ-*p*-*t*-ブチルフェニルスルホニル基などがある。前記アリールスルホニル基のうち一つ以上の水素原子は、前述したアルキル基の場合と同様な置換基に置換可能である。

【0039】

上記式(1)において、炭素数1ないし30の非置換のアルキルスルホニル基は、このような炭素原子数を有するものであれば特に制限されず、直鎖または分岐鎖のいずれでもよいが、具体的な例としては、メチルスルホニル基、エチルスルホニル基、*n*-プロピル

50

スルホニル基、n-ブチルスルホニル基、sec-ブチルスルホニル基、n-ペンチルスルホニル基、n-ヘキシルスルホニル基、n-ヘプチルスルホニル基、n-オクチルスルホニル基、2-エチルヘキシルスルホニル基、ジメチルスルホニル基、ジエチルスルホニル基、ジ-n-プロピルスルホニル基、ジ-n-ブチルスルホニル基、ジ-sec-ブチルスルホニル基、ジ-n-ペンチルスルホニル基、ジ-n-ヘキシルスルホニル基、ジ-n-ヘプチルスルホニル基、ジ-n-オクチルスルホニル基などがある。前記アルキルスルホニル基のうち一つ以上の水素原子は、前述したアルキル基の場合と同様な置換基に置換可能である。

【0040】

または、前記式(1)において、R₁ないしR_{1~2}のうち互いに隣接した基、例えば、R₁とR₂、R₃とR₄、R₆とR₇、R₈とR₉、R₁₁とR_{1~2}は、互いに結合されて炭素数2ないし30の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成できる。この時、飽和または不飽和環としては、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリール基、炭素数6ないし30の置換または非置換の縮合多環基、炭素数2ないし30の置換または非置換のヘテロアリール基などを挙げられ、その例としては、上記例示と同様の例が使用でき、好ましくは、フェニル基、ナフタレン基などがある。前記式(1)において、R₁ないしR_{1~2}は、同一であってもあるいは異なるものであってもよい。なお、上記定義は、R'及びR''のうち互いに隣接した基が互いに結合されて飽和または不飽和環を形成する場合についても、同様にして適用される。

【0041】

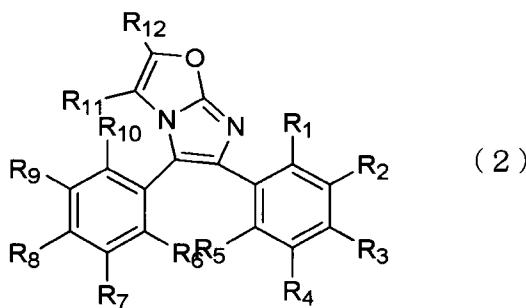
前記式(1)において、R、R'及びR''として使用される置換基についても、上記と同様の定義が使用できる。なお、置換基X及びX'を表わす式に、置換基Rが共通して使用されているが、置換基X及びX'が双方ともCRを示す場合には、これらは同一であってもあるいは異なるものであってもよい。また、置換基A及びBを表わす式において、置換基R'及びR''は、各ベンゼン環のいずれの位置に結合してもよいことを示し、これらは、同一であってもあるいは異なるものであってもよい。また、それぞれ、置換基R'及びR''は、1つのベンゼン環に、複数個(2~5個)存在してもよく、この際、これらは、それぞれ、同一であってもあるいは異なるものであってもよい。

【0042】

前記式(1)の化合物の好ましい具体例としては、置換基AとBとの組合せによって、下記式(2)ないし(13)で表わされる化合物が挙げられる。

【0043】

【化7】

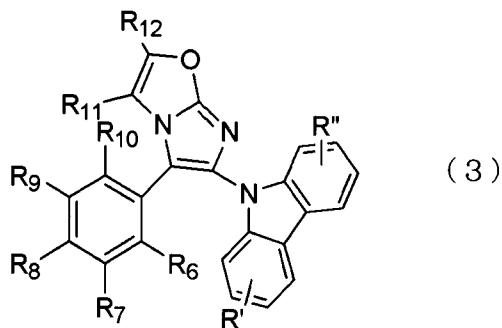


【0044】

前記式中、R₁ないしR_{1~0}は、上記式(1)の定義と同様であり、R_{1~1}及びR_{1~2}は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数2ないし30の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成する。

【0045】

【化8】



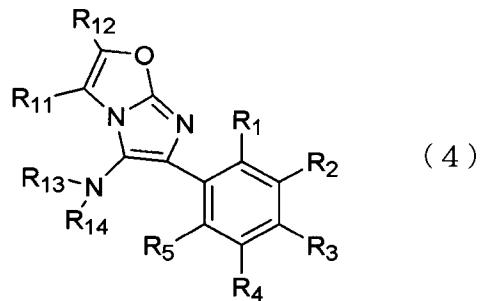
10

【0046】

前記式中、R₆ないしR₁₀は、上記式(1)の定義と同様であり、R₁₁及びR₁₂は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数2ないし30の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、R'及びR''は、いずれも水素である。

【0047】

【化9】



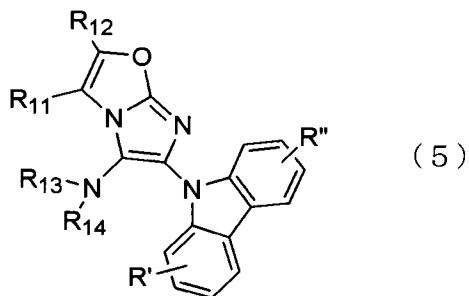
20

【0048】

前記式中、R₁ないしR₅は、上記式(1)の定義と同様であり、R₁₁及びR₁₂は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数2ないし30の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、R₁₃ないしR₁₄は、互いに独立して、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリール基または炭素数2ないし30の置換または非置換のヘテロアリール基である。

【0049】

【化10】



40

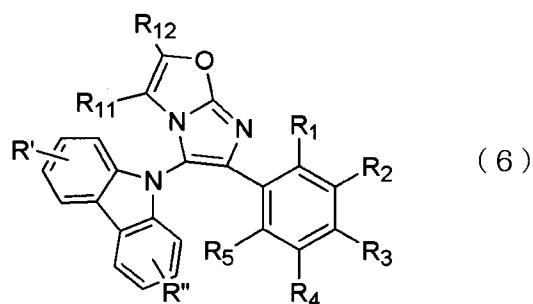
【0050】

前記式中、R₁₁及びR₁₂は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数2ないし30の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、R₁₃及びR₁₄は、互いに独立して、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリール基または炭素数2ないし30の置換または非置換のヘテロアリール基であり、R'及びR''はいずれも水素である。

50

【0051】

【化11】



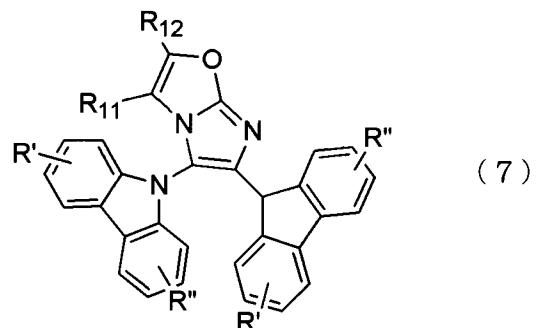
10

【0052】

前記式中、R₁ないしR₅は、上記式(1)の定義と同様であり、
R₁₁及びR₁₂は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数2ないし
30の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、
R'及びR''は、いずれも水素である。

【0053】

【化12】



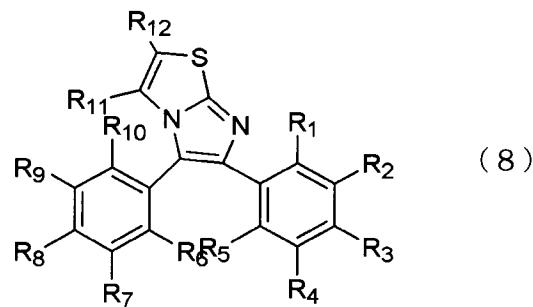
20

【0054】

前記式中、R₁₁及びR₁₂は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素
数2ないし30の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、
R'及びR''は、上記式(1)の定義と同様である。

【0055】

【化13】



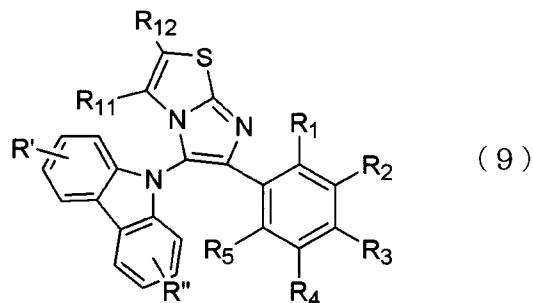
40

【0056】

前記式中、R₁ないしR₁₀は、上記式(1)の定義と同様であり、
R₁₁及びR₁₂は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数2ないし
30の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成する。

【0057】

【化14】



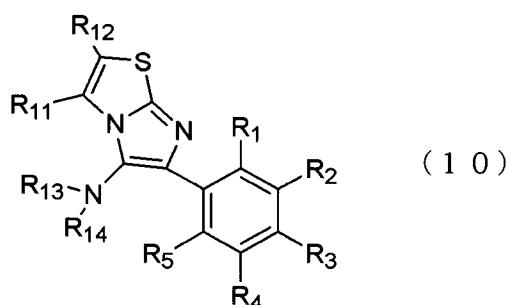
10

【0058】

前記式中、 R_1 ないし R_5 は、上記式(1)の定義と同様であり、
 R_{11} 及び R_{12} は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数2ないし
30の置換または非置換の飽和または不飽和炭素輪を形成し、
 R' 及び R'' は、いずれも水素である。

【0059】

【化15】



20

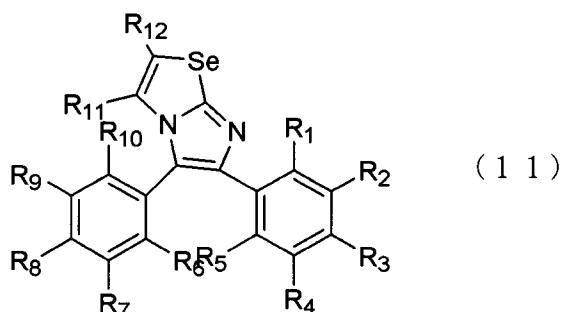
【0060】

前記式中、 R_1 ないし R_5 は、上記式(1)の定義と同様であり、
 R_{11} 及び R_{12} は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数2ないし
30の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、
 R_{13} 及び R_{14} は、互いに独立して、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリール基または炭素数2ないし30の置換または非置換のヘテロアリール基である。

30

【0061】

【化16】



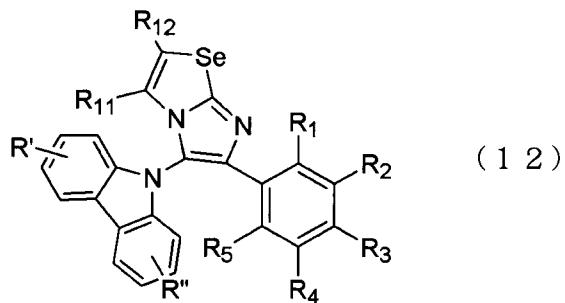
40

【0062】

前記式中、 R_1 ないし R_{10} は、上記式(1)の定義と同様であり、
 R_{11} 及び R_{12} は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数6ないし
30の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成する。

【0063】

【化17】



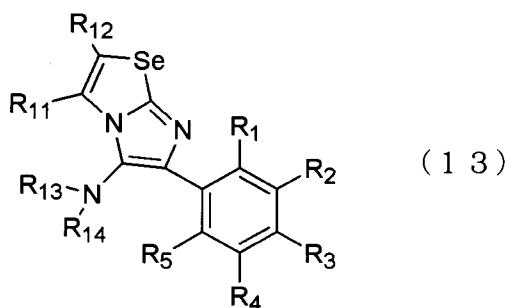
10

【0064】

前記式中、R₁ないしR₅は、上記式(1)の定義と同様であり、R₁₁及びR₁₂は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数2ないし30の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、R'及びR''は、いずれも水素である。

【0065】

【化18】



20

【0066】

前記式中、R₁ないしR₅は、上記式(1)の定義と同様であり、R₁₁及びR₁₂は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて置換または非置換の炭素数2ないし30の飽和または不飽和環を形成し、R₁₃及びR₁₄は、互いに独立して、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリール基または炭素数2ないし30の置換または非置換のヘテロアリール基である。

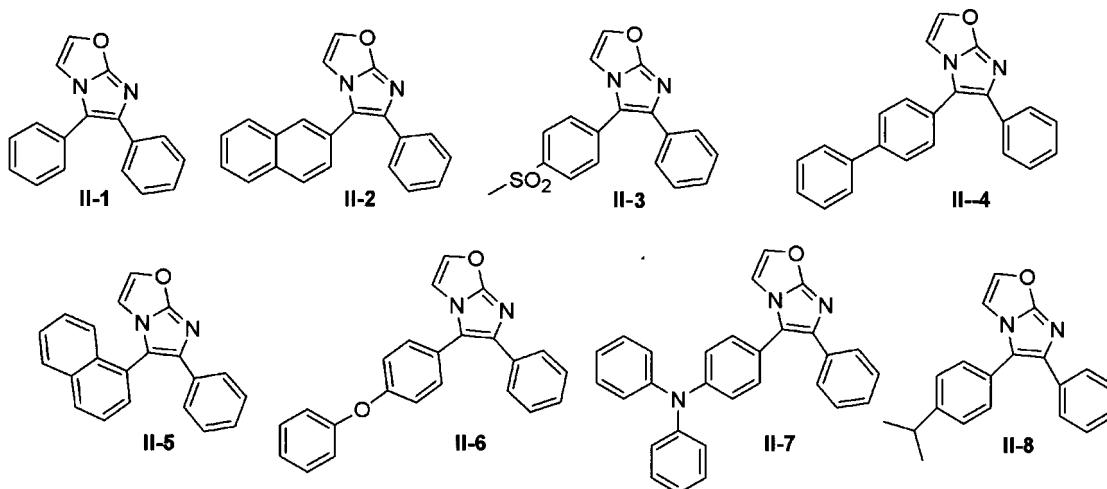
30

【0067】

前記式(2)で表わされる化合物の例として、下記構造式で表わされる化合物がある。

【0068】

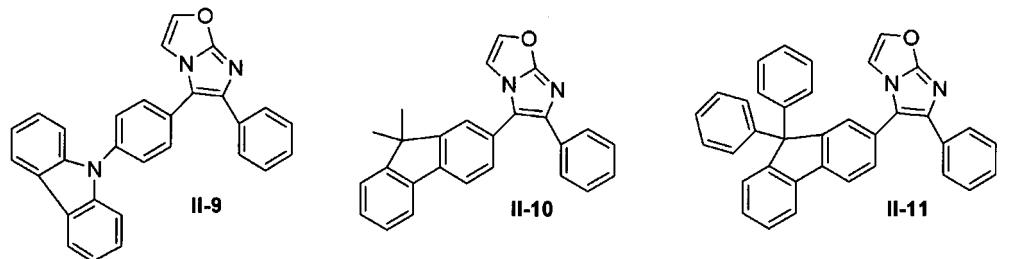
【化19-1】



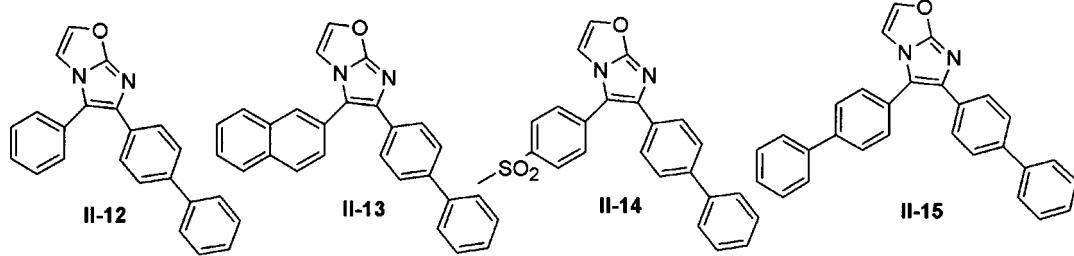
40

50

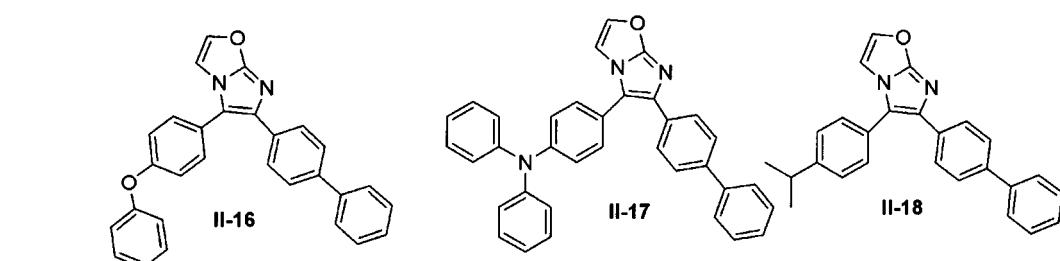
【 0 0 6 9 】
【 化 1 9 - 2 】



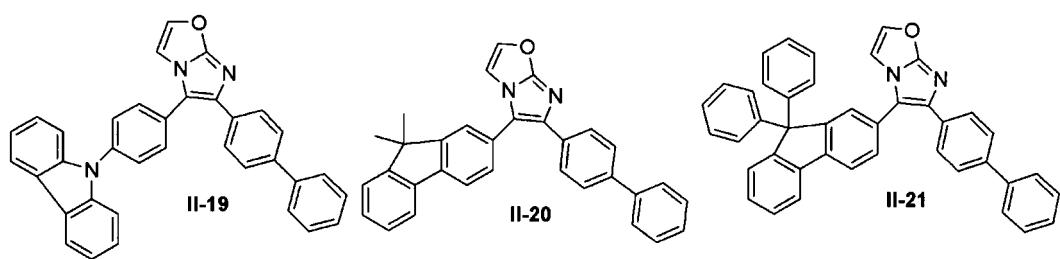
10



【 0 0 7 0 】
【 化 1 9 - 3 】



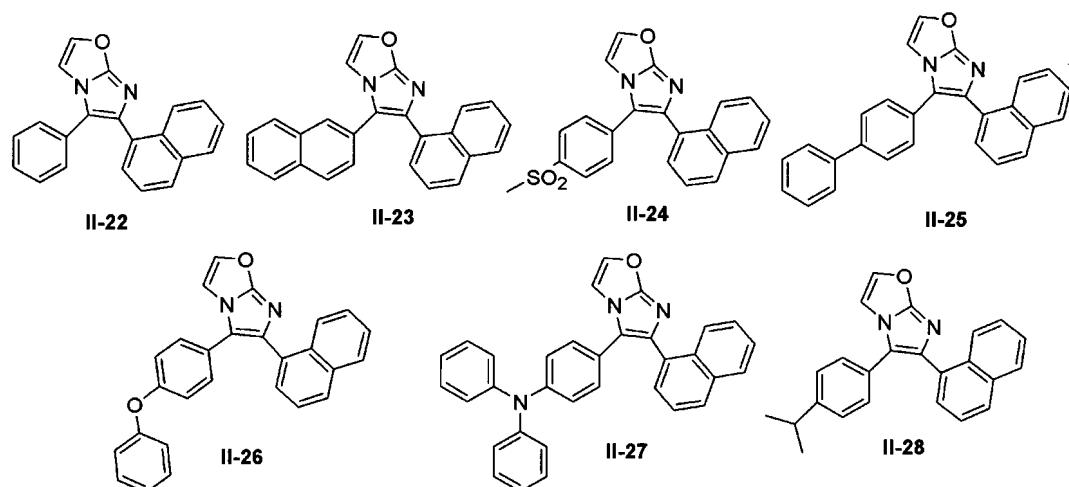
20



30

【 0 0 7 1 】

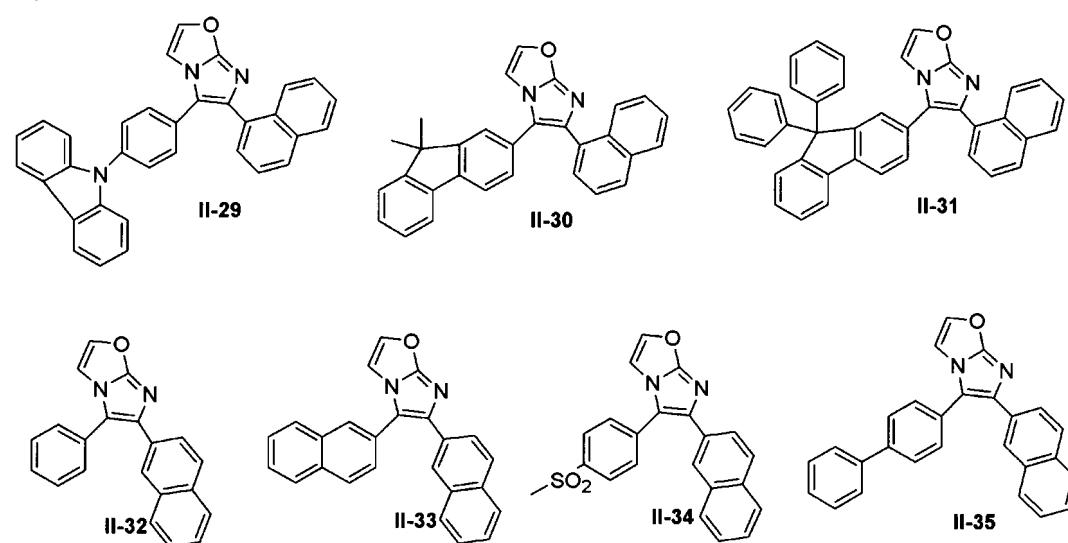
【化19-4】



10

【0072】

【化19-5】

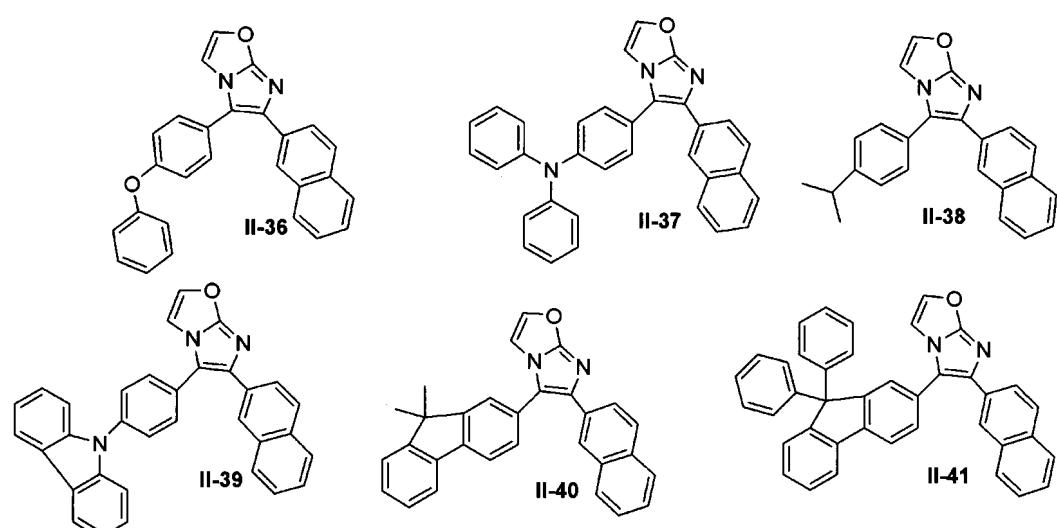


20

30

【0073】

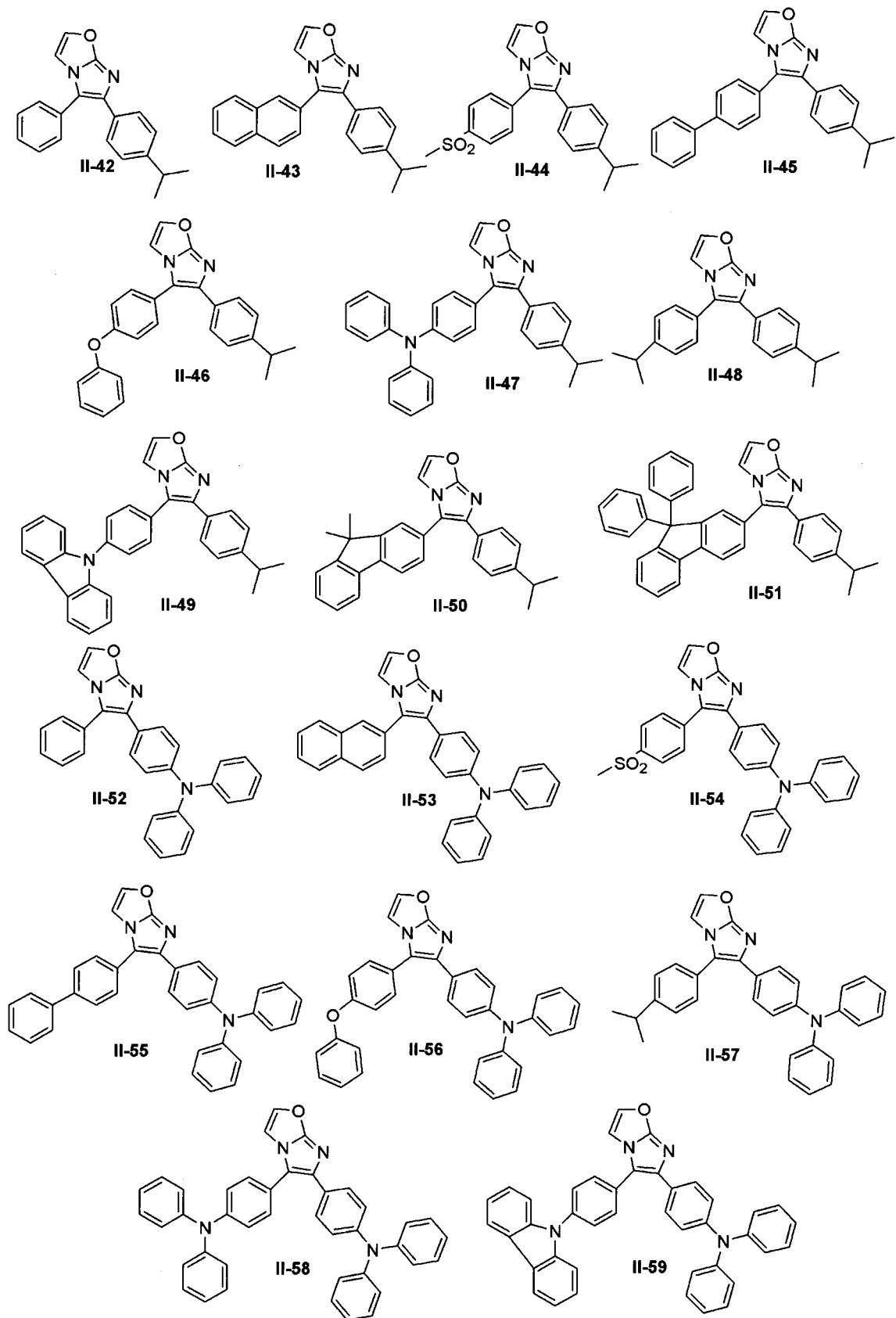
【化19-6】



40

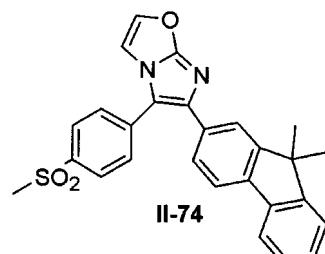
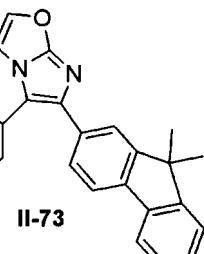
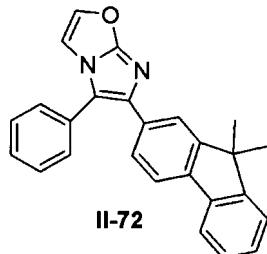
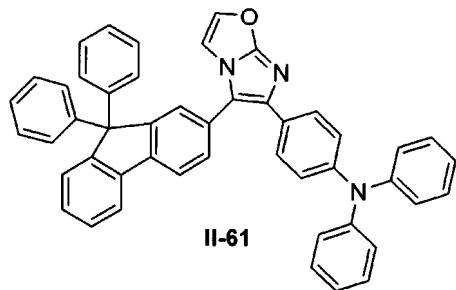
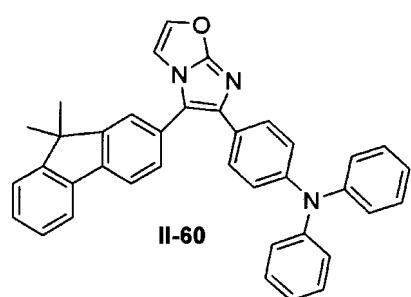
50

【化19-7】



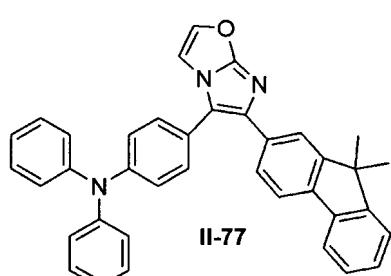
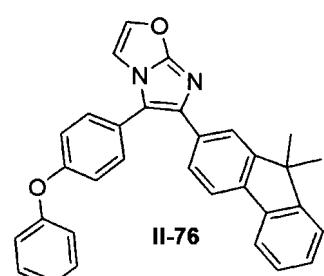
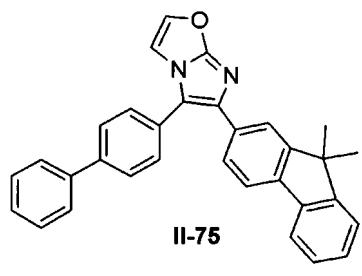
【0075】

【化19-8】



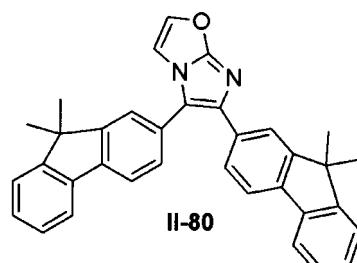
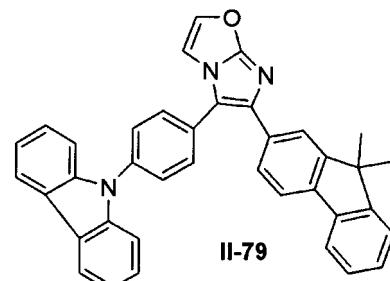
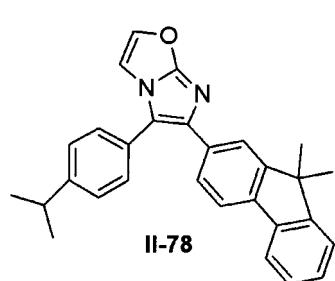
10

20

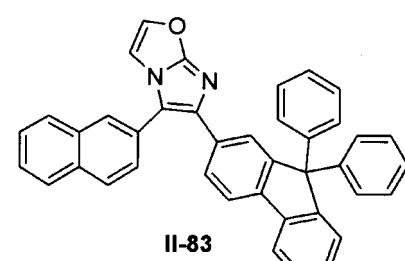
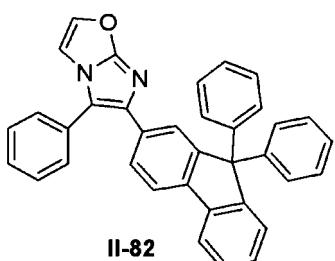
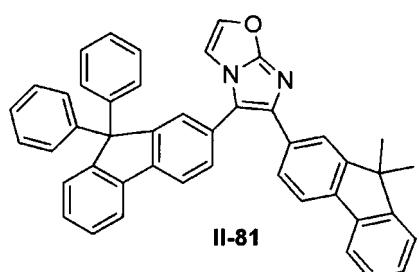


【0076】

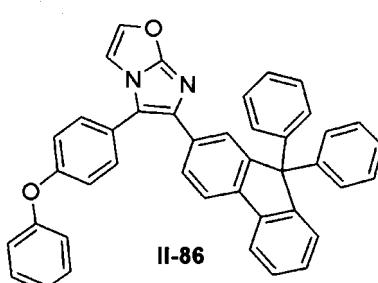
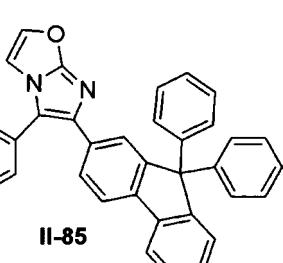
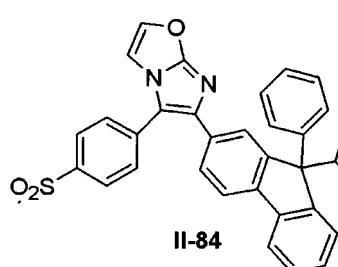
【化19-9】



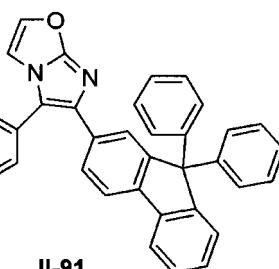
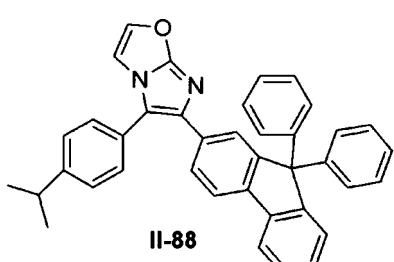
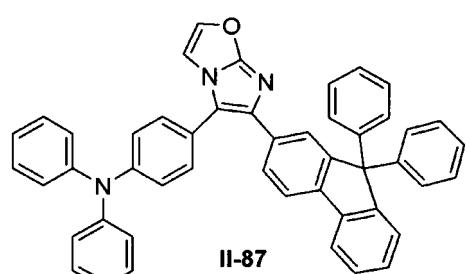
10



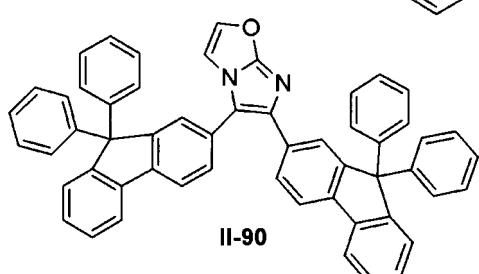
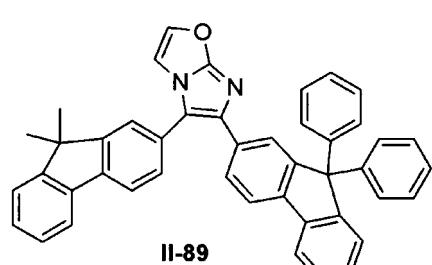
20



30

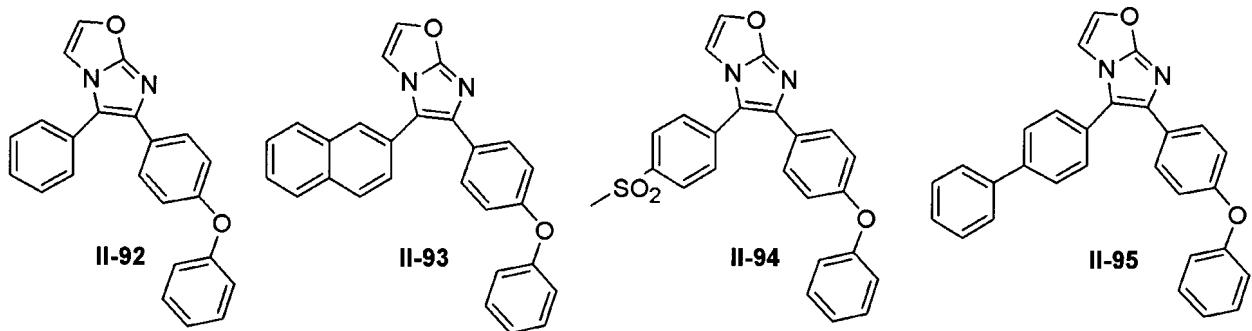


40



【0077】

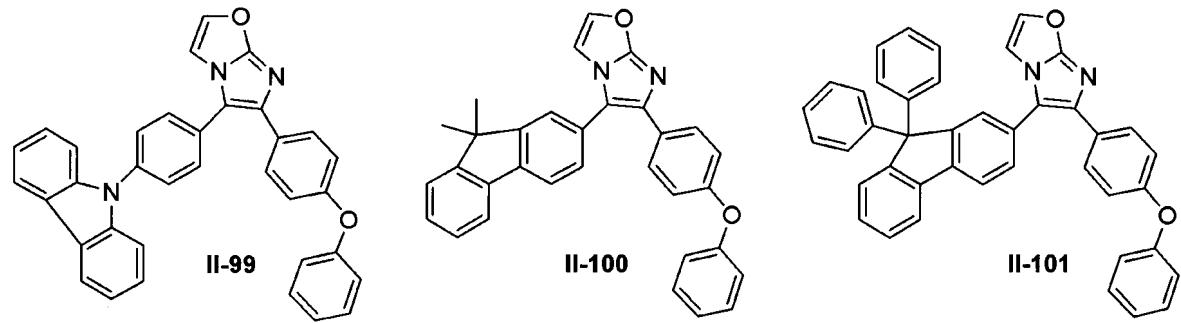
【化 19 - 10】



10

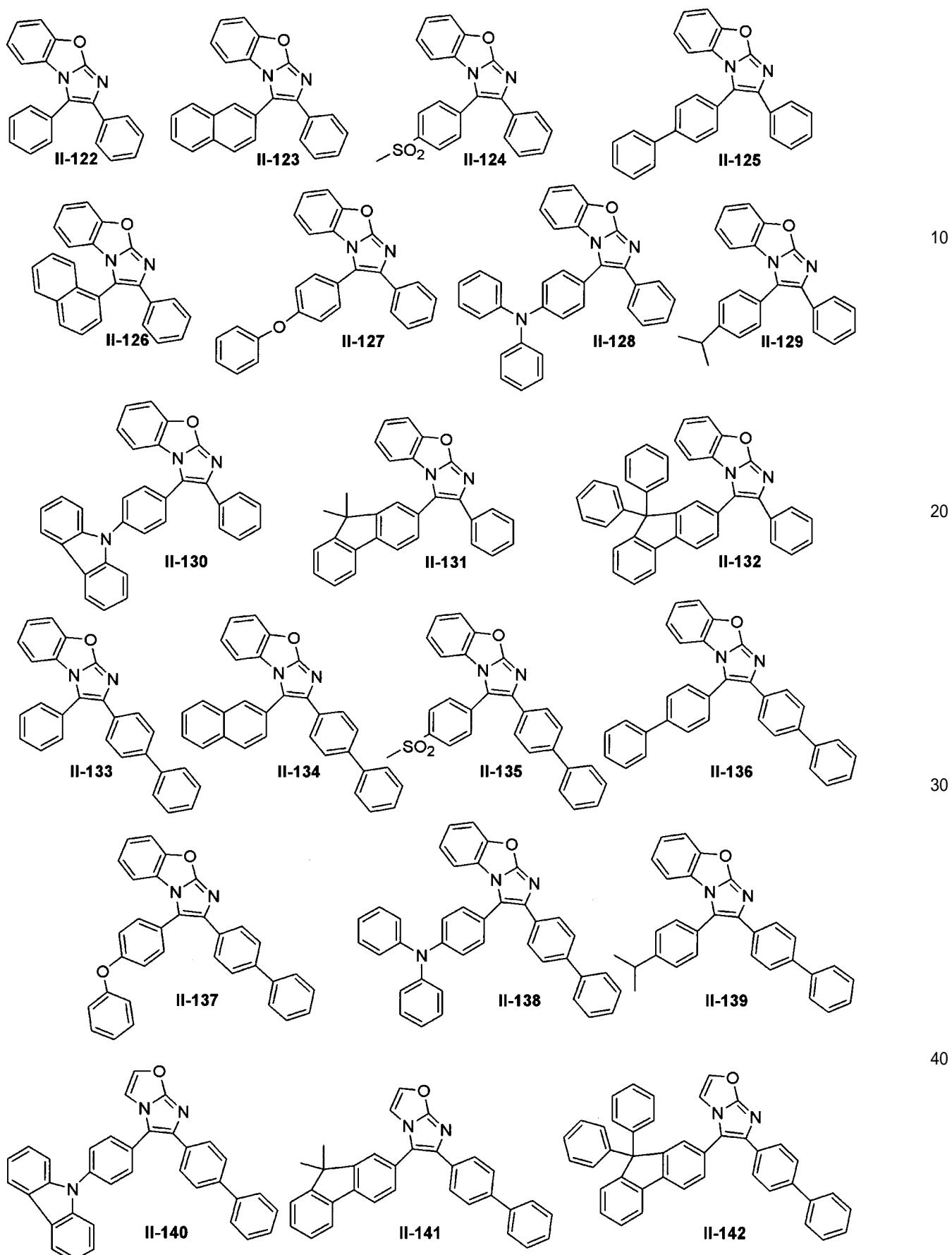
20

30



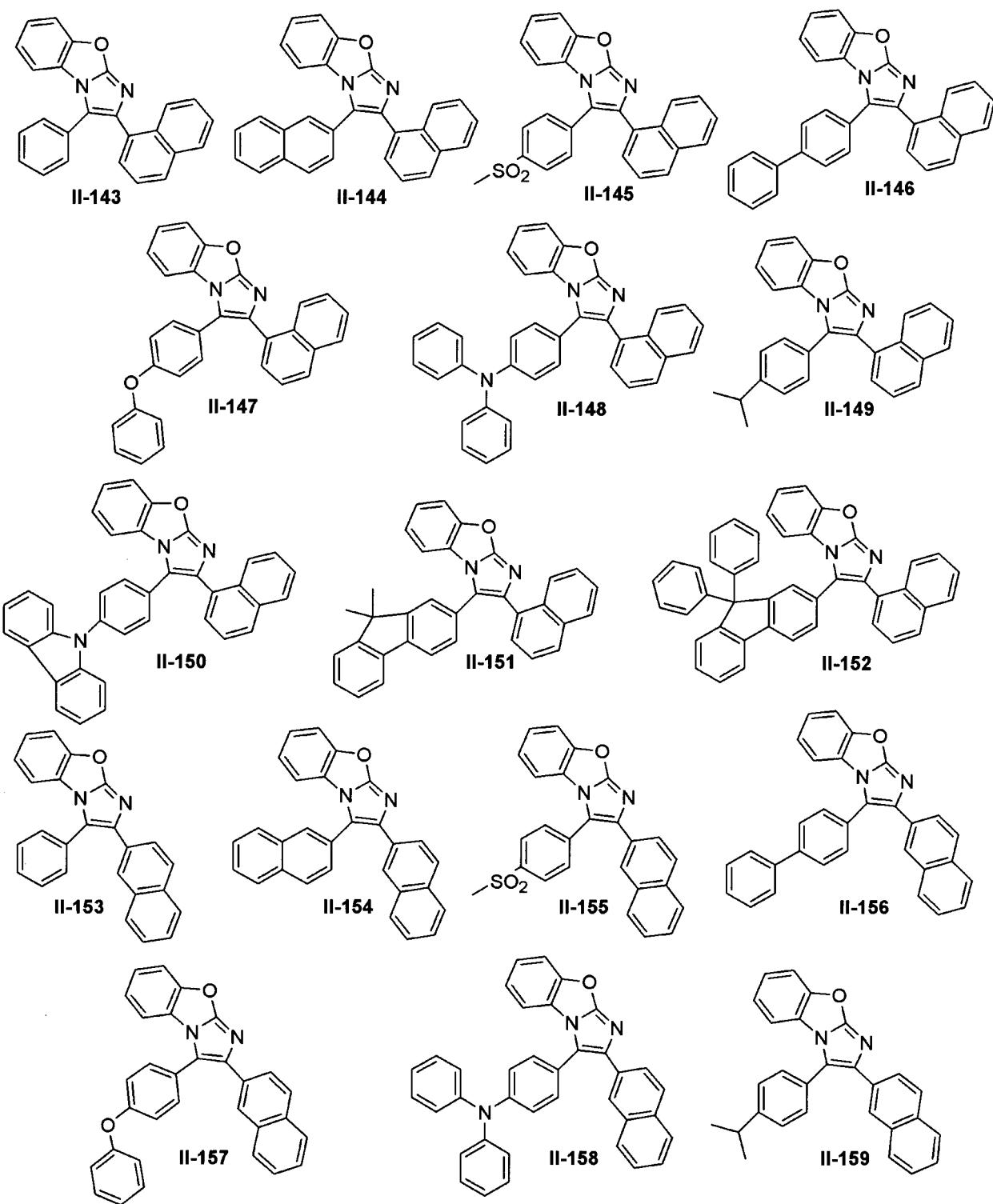
【0078】

【化19-11】



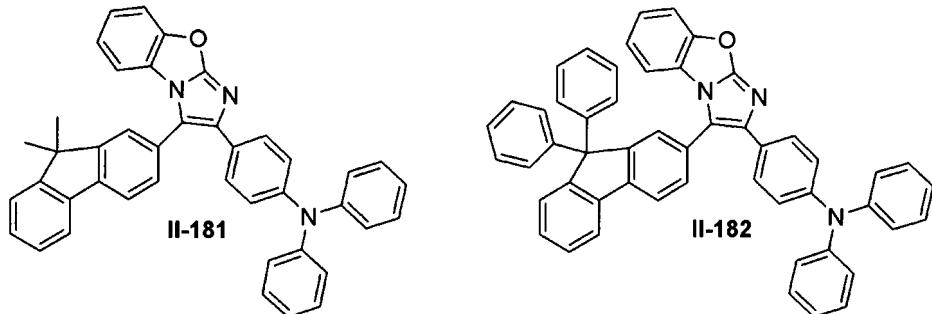
【0079】

【化 19 - 12】



【 0 0 8 0 】

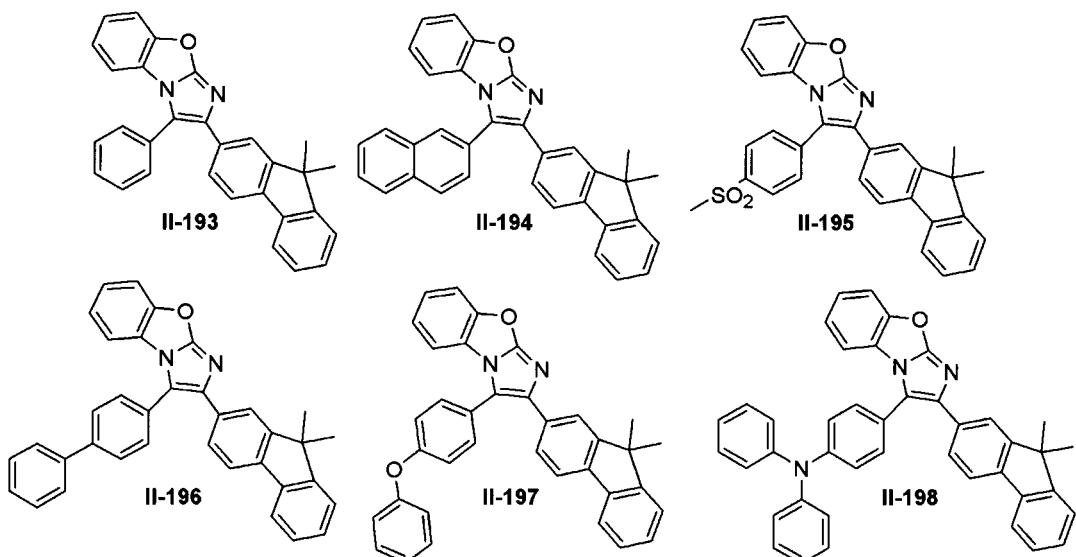
【化19-13】



10

【0081】

【化19-14】

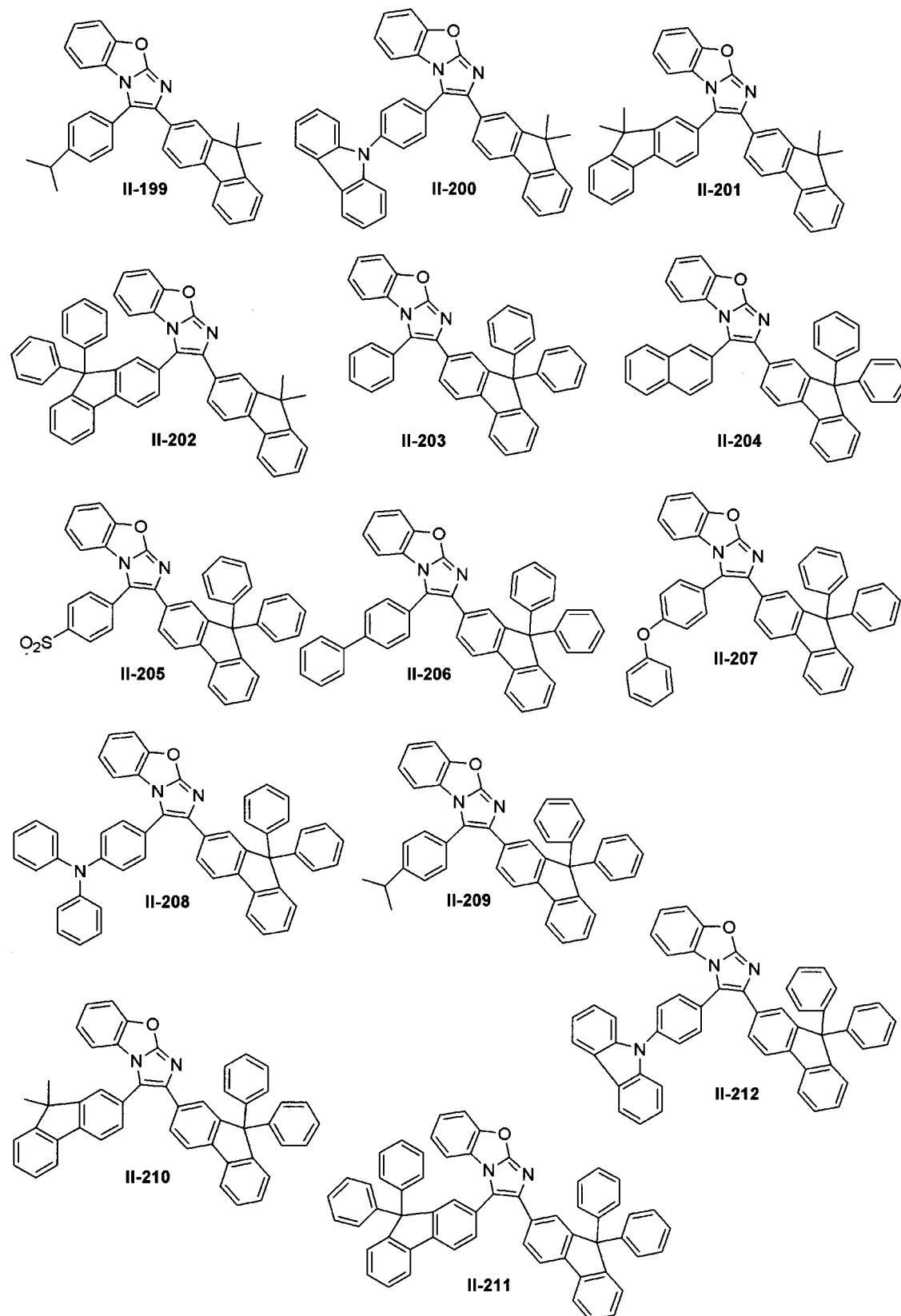


20

【0082】

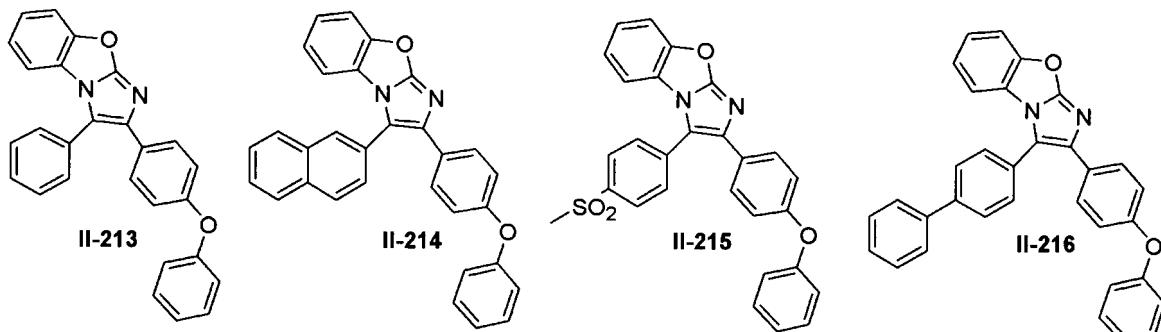
30

【化19-15】

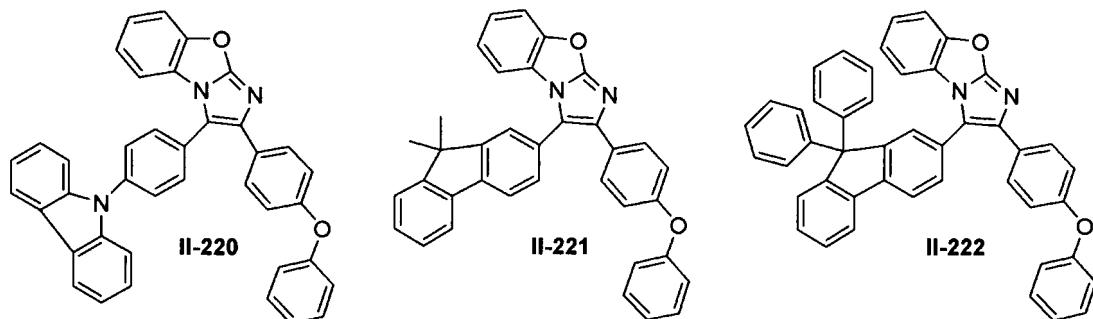
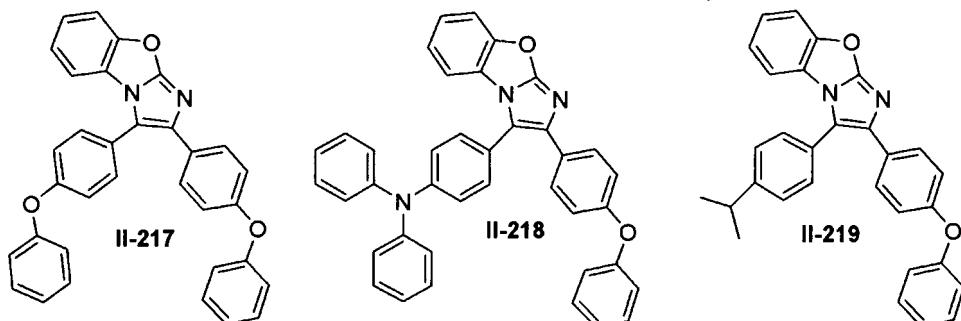


【0083】

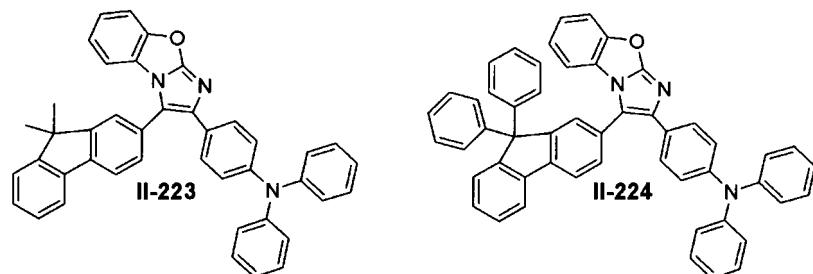
【化19-16】



10



20



30

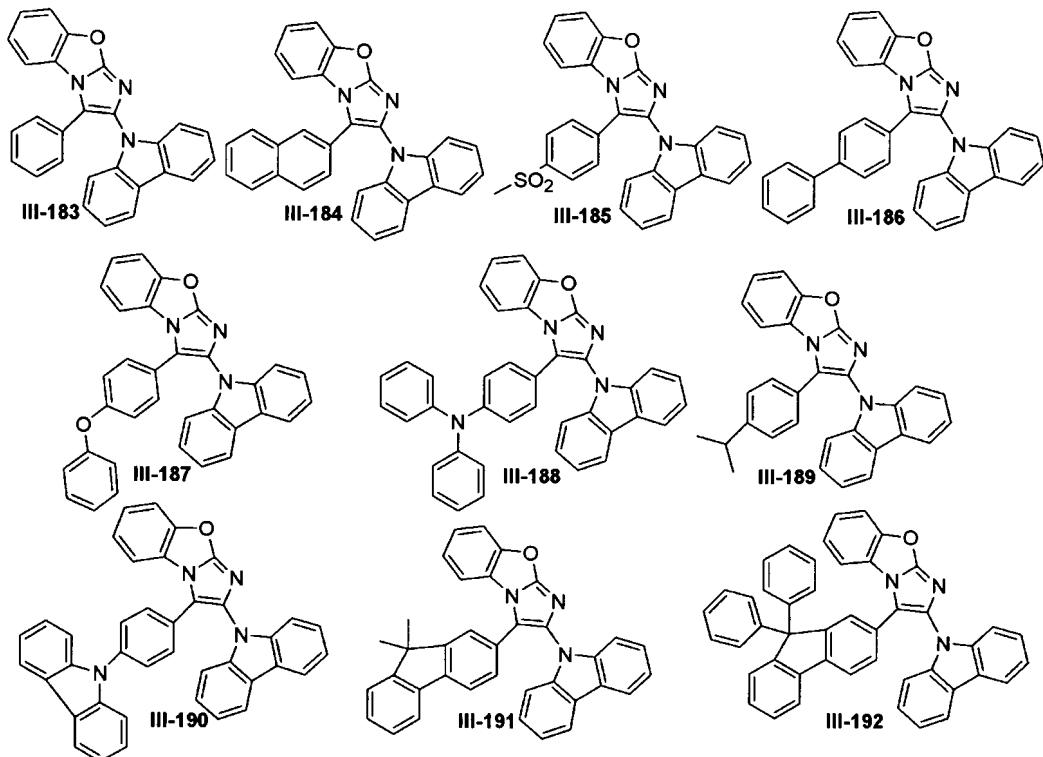
【0084】

前記式(3)で表わされる化合物の具体的な例として、下記構造式で表わされる化合物がある。

【0085】

40

【化20】

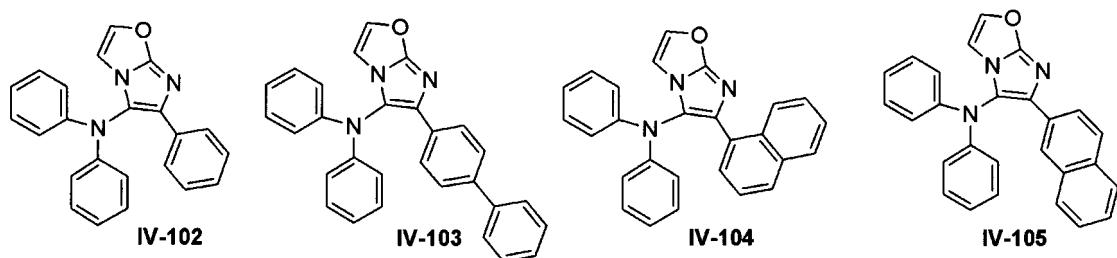


【0086】

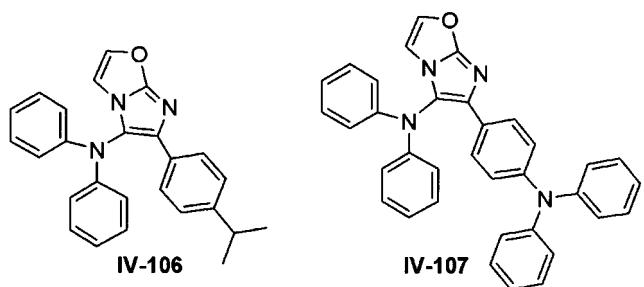
前記式(4)で表わされる化合物は下記構造式で表わされる化合物がある。

【0087】

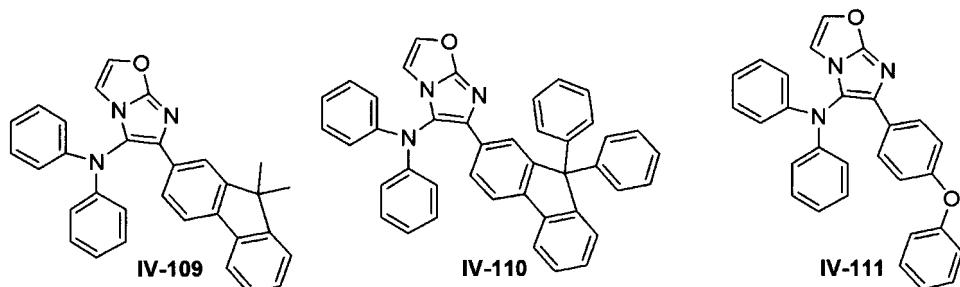
【化21-1】



10

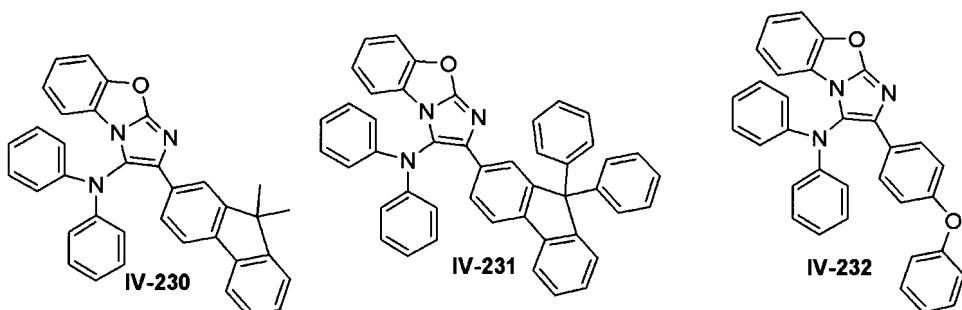
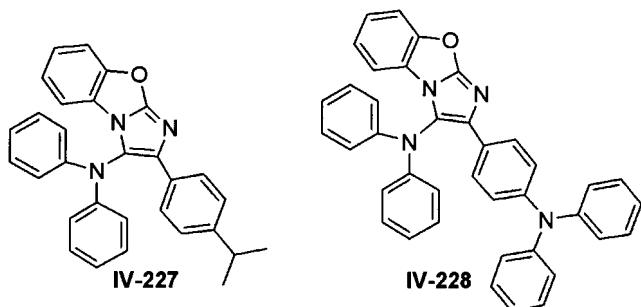
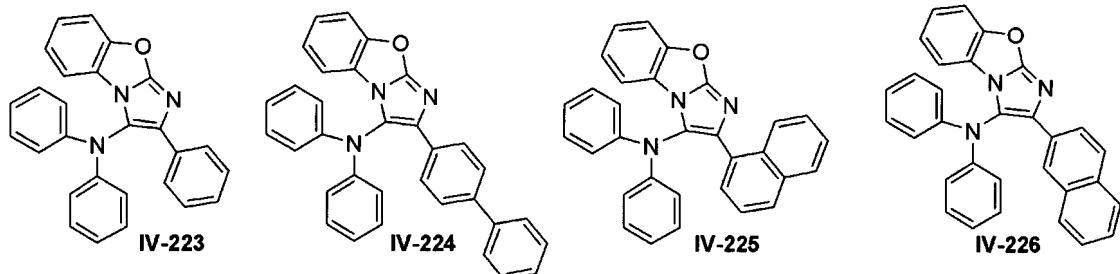


20



【0088】

【化21-2】



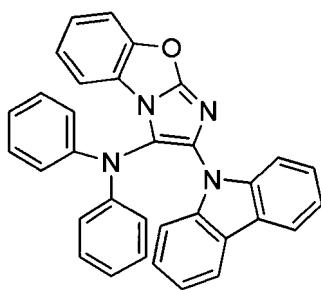
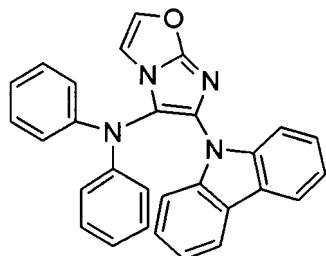
【0089】

前記式(5)で表わされる化合物の具体的な例として、下記構造式で表わされる化合物がある。

30

【0090】

【化22】

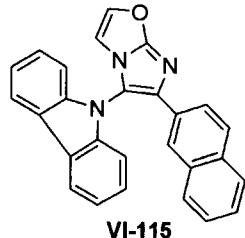
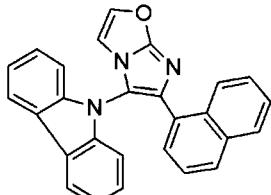
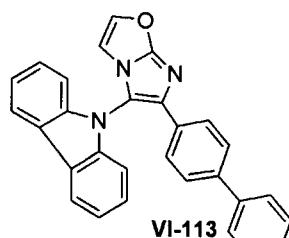


【0091】

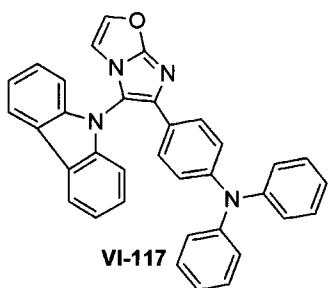
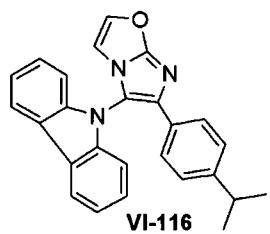
前記式(6)で表わされる化合物の具体的な例として、下記構造式で表わされる化合物がある。

【0092】

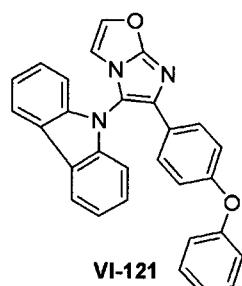
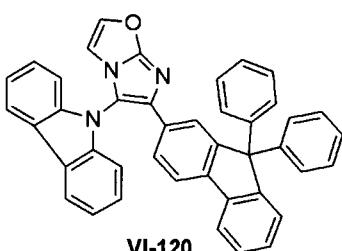
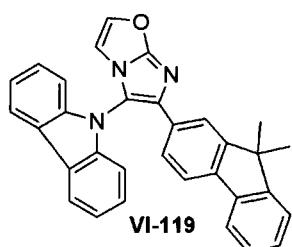
【化23-1】



10

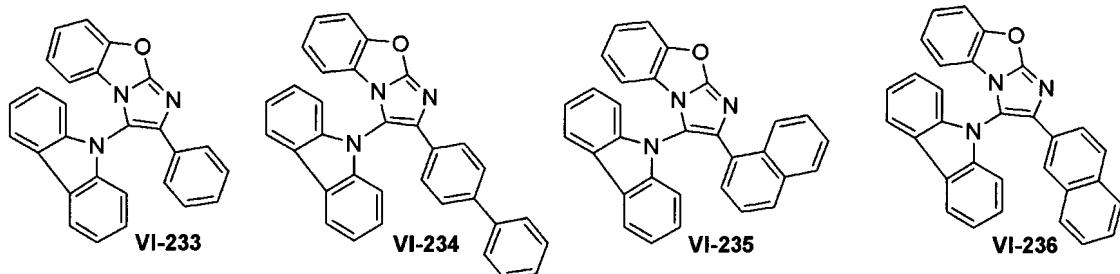


20

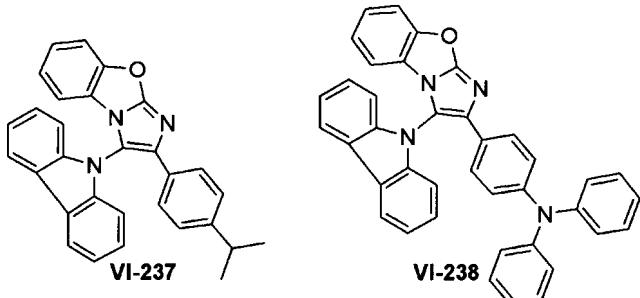


【0093】

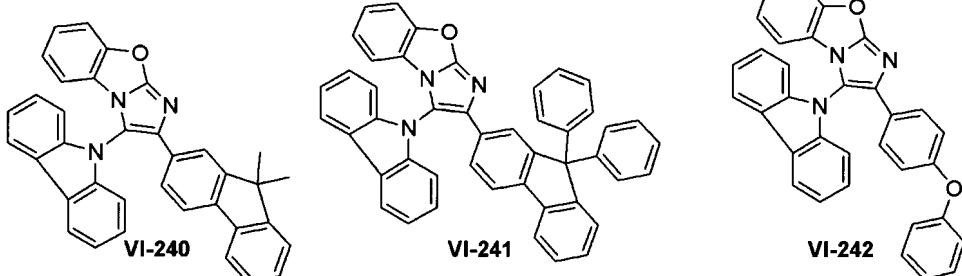
【化23-2】



10



20



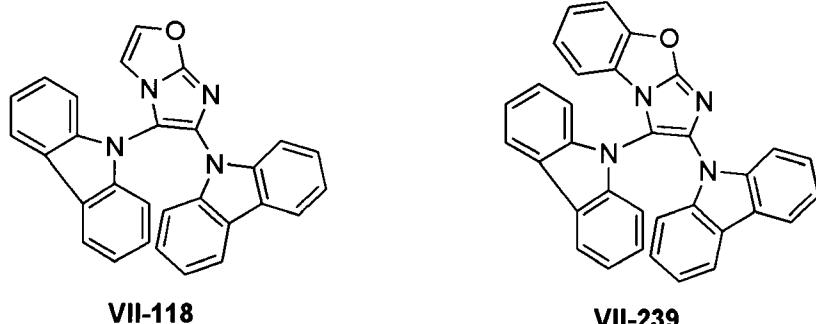
【0094】

前記式(7)で表わされる化合物の具体的な例として、下記構造式で表わされる化合物がある。

30

【0095】

【化24】



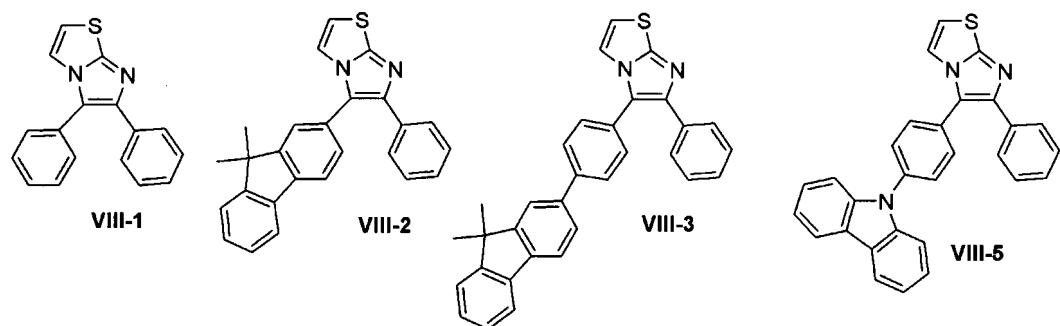
40

【0096】

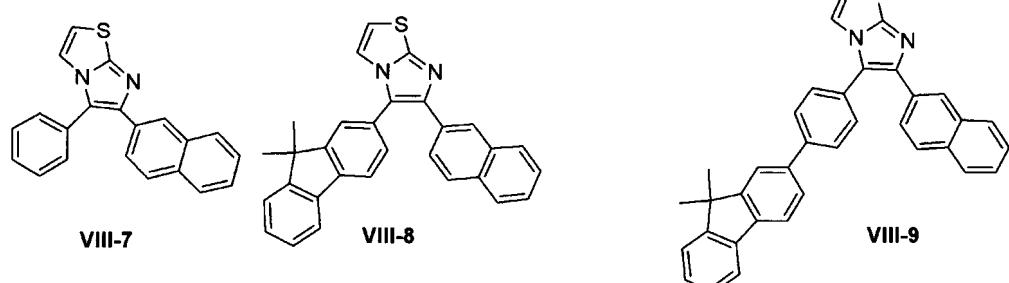
前記式(8)で表わされる化合物の具体的な例として、下記構造式で表わされる化合物がある。

【0097】

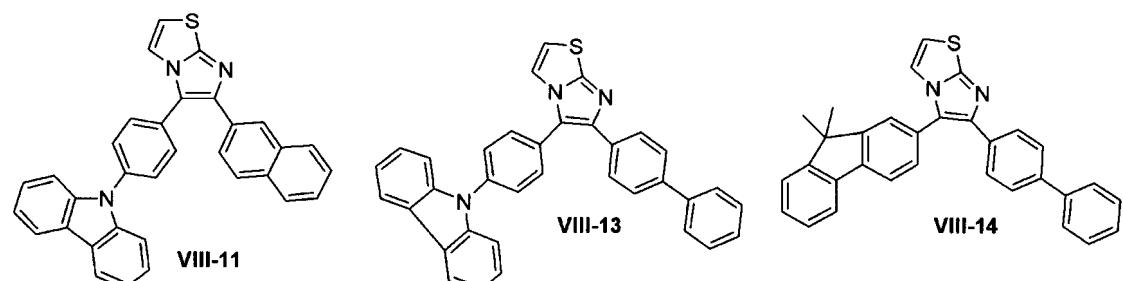
【化25-1】



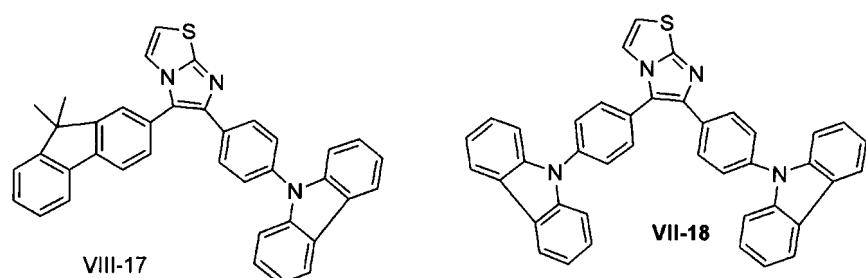
10



20

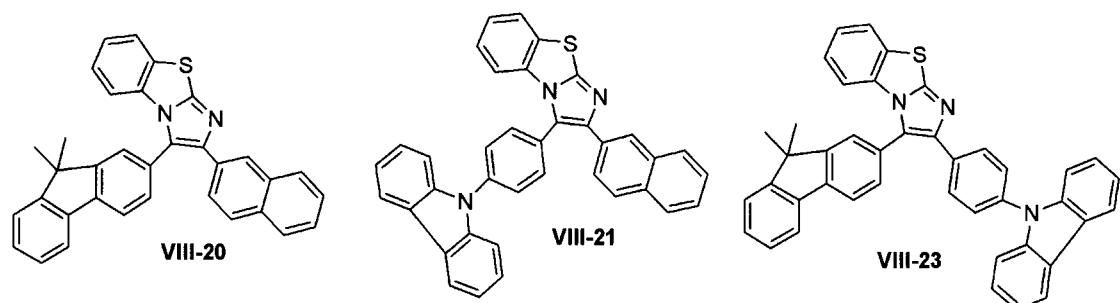


30



【0098】

【化25-2】



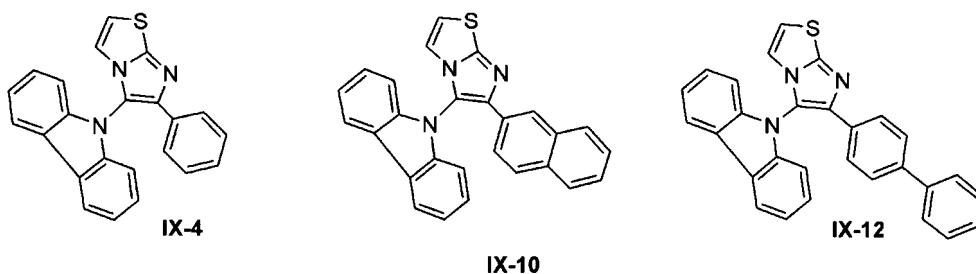
40

【0099】

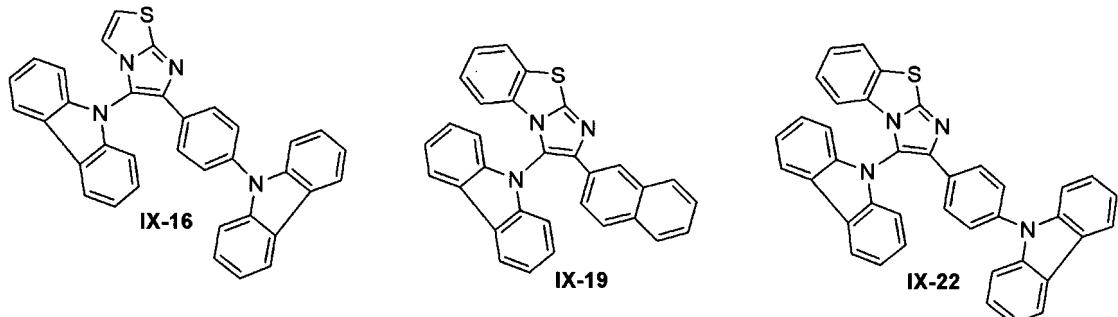
前記式(9)で表わされる化合物の例として、下記構造式で表わされる化合物がある。

【0100】

【化26】



10



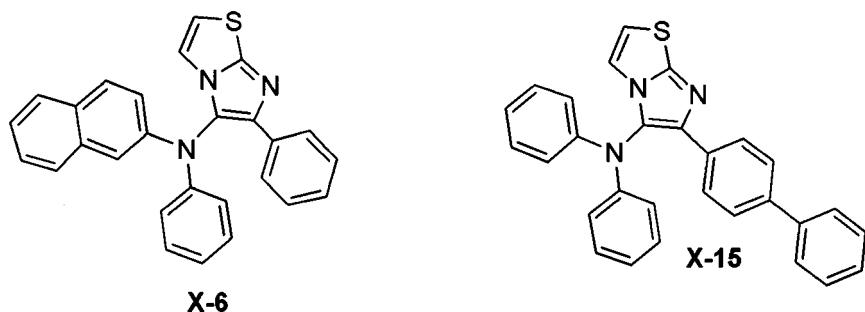
【0101】

前記式(10)で表わされる化合物の例として下記構造式で表わされる化合物がある。

20

【0102】

【化27】



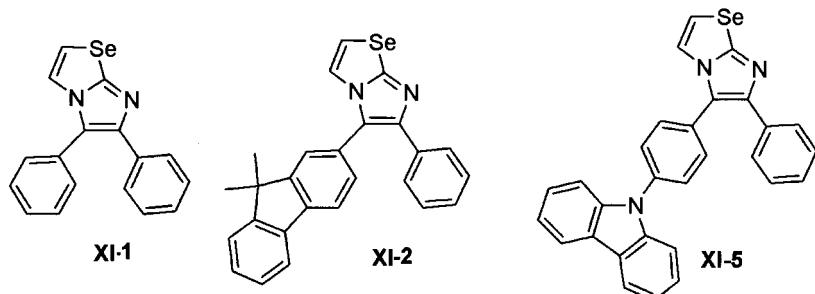
30

【0103】

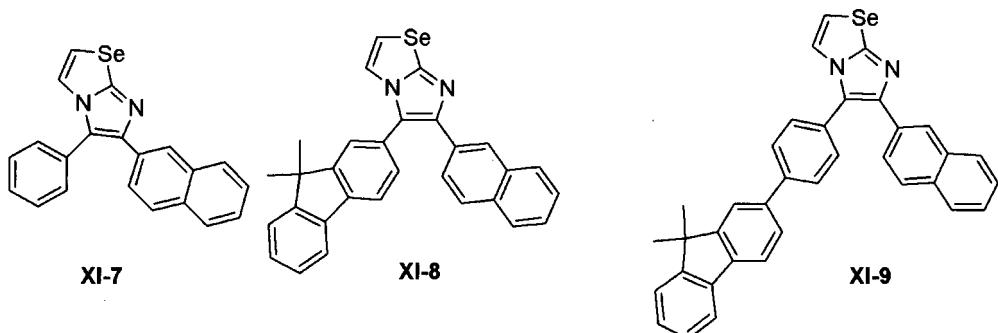
前述した式(11)で表わされる化合物の例として下記構造式で表わされる化合物を挙げられる。

【0104】

【化28-1】



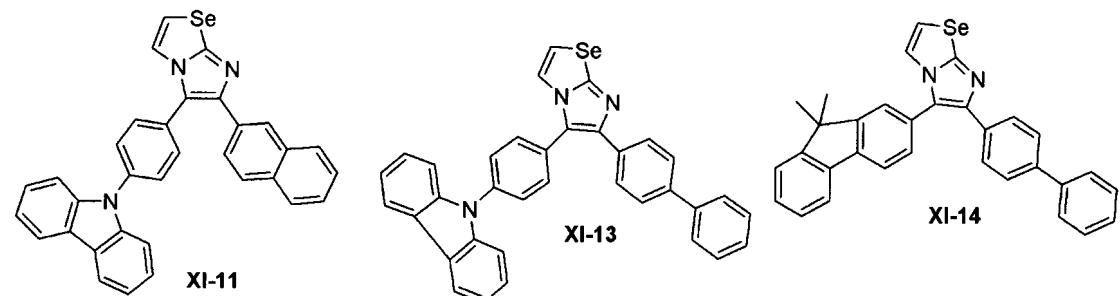
10



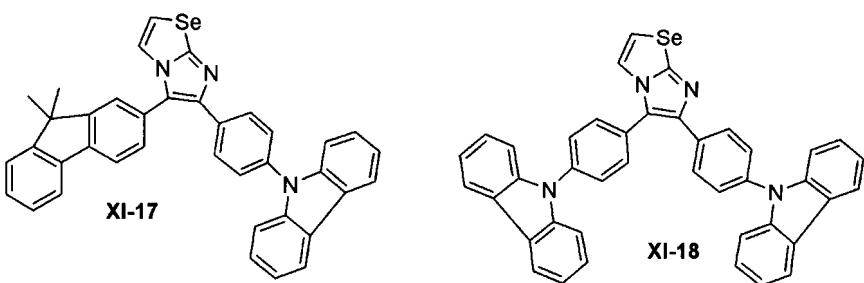
20

【0105】

【化28-2】



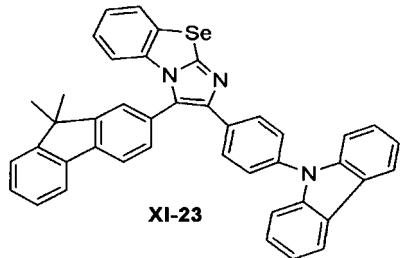
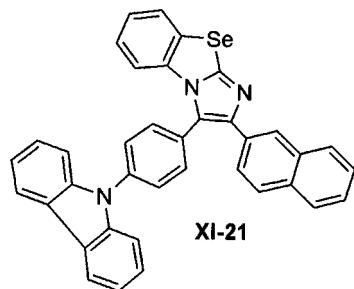
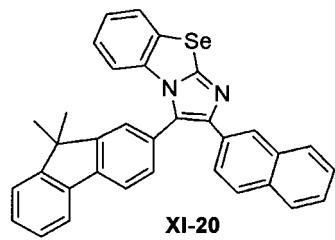
30



40

【0106】

【化28-3】



10

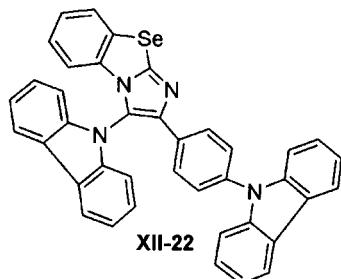
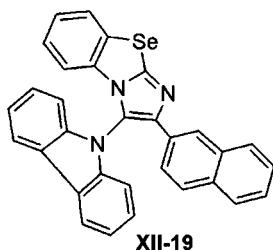
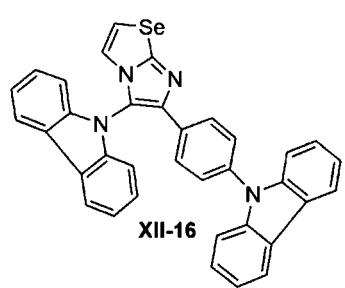
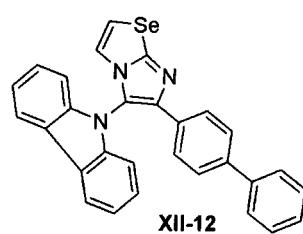
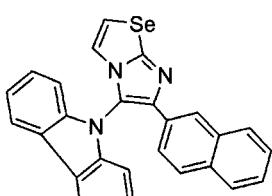
【0107】

前記式(12)で表わされる化合物の例として下記構造式で表わされる化合物がある。

【0108】

20

【化29】



30

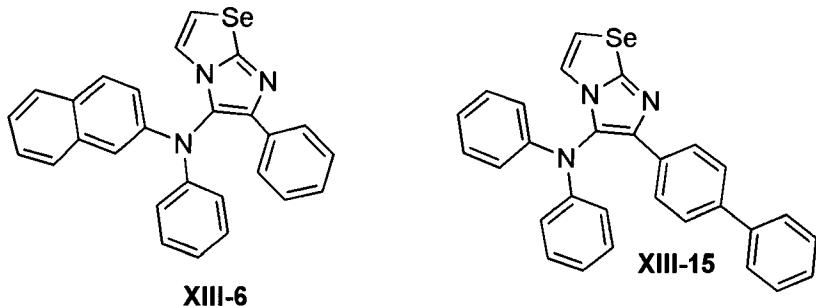
【0109】

前記式(13)で表わされる化合物の例として下記構造式で表わされる化合物がある。

【0110】

40

【化30】



10

【0111】

本発明の上記式(1)のイミダゾール環含有化合物の製造方法は、特に制限されるものではなく、公知の方法を単独あるいは組み合わせて使用することができ、特に好ましい実施態様を、下記実施例に記載し、他の化合物についても同様の方法が適用できる。しかしながら、本発明のイミダゾール環含有化合物の製造方法は、下記例に限定されるものではない。

【0112】

上記本発明のイミダゾール環含有化合物は、単独あるいはドープ剤と組み合わせて、有機膜、好ましくは電界発光層(EML)、ホール注入層(HIL)及びホール輸送層(HTL)の少なくとも一種、特に電界発光層(EML)の材料として好適に使用できる。また、このようにして本発明のイミダゾール環含有化合物を含む有機膜を有する有機電界発光素子は、輝度、効率、駆動電圧、色純度に優れる。したがって、本発明の第二は、一対の電極間に有機膜を含む有機電界発光素子において、前記有機膜が上記式(1)で表わされる本発明のイミダゾール環含有化合物を含むことを特徴とする有機電界発光素子に関するものである。

【0113】

本発明による式(1)で表わされるイミダゾール環含有化合物は、発光特性、特に青色発光特性、及びホール伝達特性に優れ、青色発光材料ならびに燐光及び蛍光ホスト材料として有効である。このため、本発明のイミダゾール環含有化合物は、有機電界発光素子を構成するいずれの層(膜)中に含まれてもよく、例えば、下記層のホール注入層(HIL)、ホール輸送層(HTL)、電界発光層(EML)、ホールブロッキング層(HBL)、電子輸送層(ETL)、電子注入層(EIL)のいずれの有機膜(層)に含まれてもよい。好ましくは、電子発光層(EML)、ホール注入層(HIL)、ホール輸送層(HTL)の少なくとも一に含まれる。この際、本発明のイミダゾール環含有化合物は、上記各層中に、単独で含まれてもあるいは2種以上の混合物の形態で含まれてもよい。このようなイミダゾール環含有化合物を利用した有機膜を採用した有機EL素子の製造方法は、特に制限されず、公知と同様の方法が使用できるが、本発明において好ましく使用される製造方法の一実施態様を以下に説明する。

【0114】

図1は、一般的な有機EL素子の構造を示す断面図である。

40

【0115】

まず、基板表面にアノード電極用物質をコーティングすることによって、アノード電極を形成する。ここで基板としては、通常的な有機EL素子で使われる基板を使用することができ、特に制限されないが、透明性、表面平滑性、取扱容易性及び防水性に優れたガラス基板または透明プラスチック基板が望ましい。そして、アノード電極用物質としては、特に制限されず、公知の材料が使用できる。具体には、透明かつ伝導性に優れた酸化インジウム錫(ITO)、酸化インジウム亜鉛(IZO)、酸化錫(SnO₂)、酸化亜鉛(ZnO)などを使用する。

【0116】

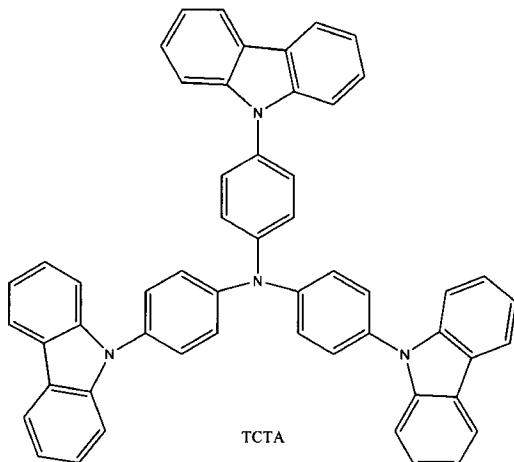
前記アノード電極上部に、ホール注入層(Hole Injecting Layer)

50

: H I L) 用物質を、公知の方法、例えば、真空熱蒸着またはスピンコーティングによりコーティングすることによって、H I Lを形成する。この際、H I L用物質としては、上記式(1)のイミダゾール環含有化合物が好ましく使用される。または、H I Lは、上記式(1)のイミダゾール環含有化合物に代えてあるいはに加えて、他のH I L用物質を含んでもよい。この際、他のH I L用物質としては特別に制限されず、公知の材料が使用できる。具体低には、銅フタロシアニン(CuPc)またはスターバスト型アミン類であるT C T A(下記式参照)、m-M T D A T A(下記式参照)、m-M T D A P BをH I L用物質として好ましく使用できる。

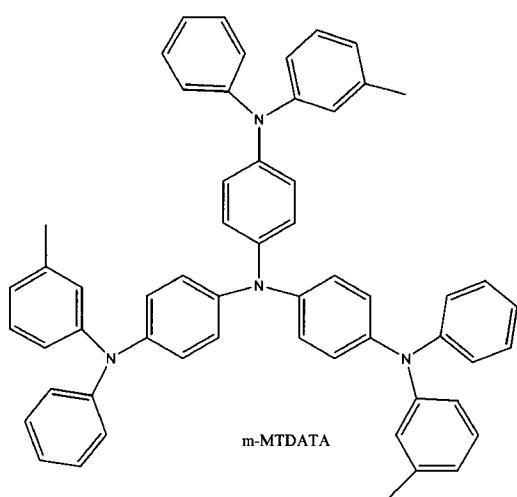
【0117】

【化31】



10

20



30

【0118】

次に、前記H I L上部に、ホール輸送層(Hole Transporting Layer:HTL)用物質を、公知の方法、例えば、真空熱蒸着またはスピンコーティングによりコーティングすることによって、HTLを形成する。この際、HTL用物質としては、上記式(1)のイミダゾール環含有化合物が好ましく使用される。または、HTLは、上記式(1)のイミダゾール環含有化合物に代えてあるいはに加えて、他のHTL用物質を含んでもよい。この際、他のHTL用物質は、特別に制限されず、公知の材料が使用できる。具体低には、N,N'-ビス(3-メチルフェニル)-N,N'-ジフェニル-[1,1-ビフェニル]-4,4'-ジアミン(TPD)、N,N'-ジ(ナフタレン-1-イル)-N,N'-ジフェニルベンジジン(-N P D)などが使われる。

40

【0119】

次いで、前記HTL上部に、電界発光層(Electro Luminescent Layer:EML)を形成する。

50

ayer : EML) が形成される。この際、EML用材料は特別に制限されず、公知の材料が使用できるが、前記式(1)の化合物を単独で使用するまたは発光ホストとして使用する(即ち、ドープ剤と組み合わせて使用する)ことが好ましい。前記化合物を発光ホストとして使用する時に共に使われるドープ剤は、特別に制限されず、公知のドープ剤が使用できるが、可視領域の燐光または蛍光ドープ剤であることが好ましい。蛍光ドープ剤としては、例えば、IDE102、IDE105(出光社製)などが使用でき、前記燐光ドープ剤としては、例えば、Ir(ppy)₃(ppyはフェニルピリジンの略語である)(緑色)、(4,6-F₂ppy)₂Irpic(参照文献: Chihaya Adachi etc. Appl. Phys. Lett., 79, 2082-2084, 2001)、PtOEP(ptatinium(II) Octaethylporphyrin)、TEB002(コビオン(Cobion)社製)などが使用できる。

【0120】

前記EML形成方法は、特に制限されず、EML用材料によって適宜選択できるが、例えば、真空熱共蒸着法が使われる。

【0121】

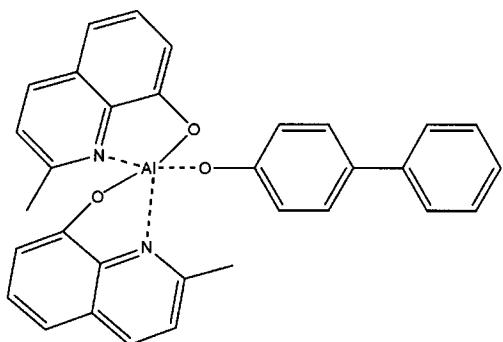
発光層がドープ剤を含む場合の、ドープ剤の含有量は、特に制限されず、公知と同様の量が使用できる。例えば、EML用形成材料100質量部(すなわち、ホストである式(1)の化合物及びドープ剤の総質量が100質量部)を基準として、0.1~20質量部、特に0.5~12質量部であることが望ましい。この際、ドープ剤の含有量が0.1質量部未満であれば、ドープ剤の添加による効果が十分でない可能性がある。これに対して、20質量部を超過すれば、燐光や蛍光いずれにも濃度消光が起きて望ましくないおそれがある。

【0122】

さらに、EML上に、電子輸送層(Electron Transporting Layer:ETL)用物質を、公知の方法、例えば、真空蒸着方法またはスピンコーティング方法によりコーティングすることによって、ETLを形成する。ETL用材料としては、特別に制限されず、公知の材料が使用できる。具体低には、Alq3(トリス(8-キノリノラト)-アルミニウム)を利用できる。そして、EMLが燐光ドープ剤を含む場合には、三重項状態のエキシトンまたはホールがETLに移動する現象を防止するために、図1に示されるように、追加でホールブロッキング層(Hole Blocking Layer:HBL)をEML上に形成することが好ましい。この際、HBLの形成方法は、特に制限されないが、例えば、ホールブロッキング物質を真空熱蒸着することによって、HBLが形成できる。この時、ホールブロッキング物質としては、特別に制限されず、公知の材料が使用できる。具体低には、電子輸送能力を持ちながら発光化合物より高いイオン化ポテンシャルを持つものが好ましく使用でき、代表的にBalq(下記式参照)、BCP(下記式参照)などが使われる。

【0123】

【化32】



Balq

【0124】

10

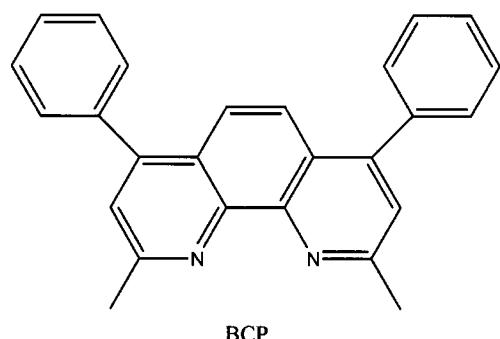
20

30

40

50

【化33】



10

【0125】

また、必要であれば、ETL上に、電子注入層(Electron Injection Layer: EIL)が選択的に積層されることができ、EIL形成物質は、特別に制限されず、公知の材料が使用できる。具体低には、前記EIL形成物質としては、LiF、NaCl、CsF、Li₂O、BaOなどの物質を利用できる。次に、EIL上部に、カソード形成用金属を、公知の方法により、例えば、真空熱蒸着して、カソード電極を形成し、これによって有機EL素子が完成される。ここで、カソード形成用金属としては、特に制限されず、公知の材料が使用できる。具体低には、リチウム(Li)、マグネシウム(Mg)、アルミニウム(Al)、アルミニウム-リチウム(Al-Li)、カルシウム(Ca)、マグネシウム-インジウム(Mg-In)、マグネシウム-銀(Mg-Ag)などが利用される。また、前面発光素子を得るために、ITO、IZOを使用して、透過型カソードを形成してもよい。本発明の有機EL素子は、上記したように、アノード電極、HIL、HTL、EML、HBL、ETL、EIL、カソード電極を含むが、必要に応じて、1層または2層の中間層をさらに形成することも可能である。

20

【実施例】

【0126】

以下、本発明を下記実施例を挙げて説明するが、本発明が下記実施例のみに限定されるものではない。

【0127】

合成例1：化合物VIII-2の製造

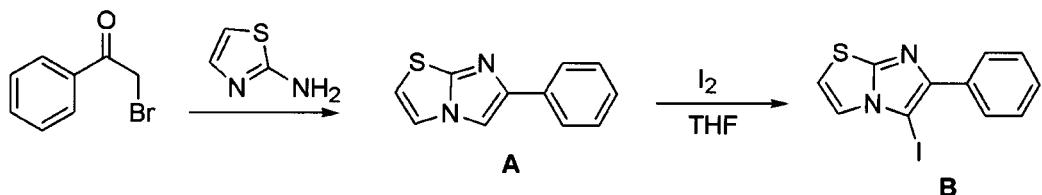
30

下記反応式(1)によって化合物VIII-2を合成した。

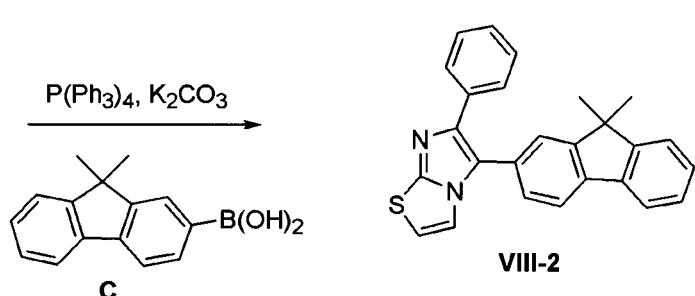
【0128】

【化34】

<反応式(1)>



40



50

【0129】

<反応式(1)>

1) 中間体Aの合成

プロモアセトフェノン6g(50mmol)をジメトキシエタン(Dimethoxyethane:DME)(250mL)に溶かして、2-アミノチアゾール(10g、50mmol)を固体状態でこの溶液に加えた後、常温で5時間攪拌し、さらに12時間還流させた。反応混合物を減圧蒸留して溶媒を除去した後、ジクロロメタン(250mL)を加えて、残渣を溶解した。次いで、この溶液を10%炭酸ナトリウム溶液を利用してpH10に合わせた後、ジクロロメタン層を分離した。残っている水層をジクロロメタン(200mL)を使用して2回抽出した。集められた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥し、溶媒を蒸発させて得られた、残留物をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで分離精製して、中間体Aを8.4g(収率84%)得た。

10

【0130】

2) 中間体Bの合成

上記段階1)で合成された中間体A 1g(5mmol)をTHF(15mL)に溶かして、ヨウ素(1.9g、7.5mmol)を加えた後、50℃で5時間攪拌した。この反応混合物に飽和シュウ酸溶液を添加して、反応を中止させた後、ジクロロメタン(20mL)で3回抽出した。集められた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥し、溶媒を蒸発させて、得られた残留物をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで分離精製して、中間体Bを1.1g(収率73%)得た。この化合物の構造は¹H NMRで確認した。

20

【0131】

¹H NMR(CDCl₃、400MHz) (ppm) 8.00(d, 2H), 7.47-7.42(m, 7H), 7.37-7.32(m, 1H), 6.90(s, 1H)

3) 中間体Cの合成

2-ブロモ-9,9'-ジメチルフルオレン(1.63g、6mmol)をTHF(20mL)に溶かした後、-78℃でn-ヘキサンに溶かした2.5M n-ブチルリチウム(3.2mL、7.8mmol)の溶液を滴下した後、2時間攪拌した。ホウ酸トリメチル(2mL、1.8mmol)を前記の反応液に加えた後、同じ温度で3時間、さらに常温で12時間攪拌した。1.2M 塩酸水溶液でpH1に合わせた後、常温で2時間攪拌した。4M NaOH水溶液でpH14に合わせた後、ジエチルエーテル50mLずつで3回抽出した。集められた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥し、溶媒を蒸発させて、得られた残留物をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで分離精製することによって、中間体Cを白色固体の形態で1g(収率72%)得た。この化合物の構造は¹H NMRで確認した。

30

【0132】

¹H NMR(CDCl₃、400MHz) (ppm) 8.32(s, 2H), 7.91-7.90(m, 2H), 7.51(s, 1H), 7.39(s, 2H), 1.63(s, 6H)

4) 化合物VII - 2の合成

中間体B 90mg(0.276mmol)、上記段階3)で合成された中間体C 73mg(0.276mmol)をTHF 3mLに溶かした後、テトラキストリフェニルホスフィンパラジウム(7mg、0.005mmol)及びK₂CO₃(190mg、1.38mmol)を3mLの蒸溜水に溶かした水溶液を順次加えて、75℃で12時間攪拌した。反応液を酢酸エチル5mLずつで3回抽出した。集められた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥し、溶媒を蒸発させて、得られた残留物をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで分離精製することによって、化合物VII - 2を100mg(収率95%)得た。この化合物の構造は¹H NMRで確認した。

40

【0133】

¹H NMR(CDCl₃、400MHz) (ppm) 7.80(d, 1H), 7.75(dd, 1H), 7.66(dd, 2H), 7.48-7.42(m, 4H), 7

50

. 37 - 7 . 34 (m , 2 H) , 7 . 27 - 7 . 21 (m , 3 H) , 6 . 84 (d , 1 H) , 1 . 44 (s , 6 H)

前記合成例 1 によって得た化合物 VIII-2 を、 CHCl₃ で 0 . 2 mM 濃度になるように希釀し、 UVスペクトルを観察した(図2)。その結果、化合物 VIII-2 は、最大吸収波長が 327 . 5 nm であることが分かった。

【0134】

前記化合物 VIII-2 を、 CHCl₃ で 10 mM 濃度になるように希釀し、 327 . 5 nm でフォトルミネセンス(Photoluminescence: PL)特性を調べ(図2)。測定結果を図2に示す。これから、化合物 VIII-2 は、最大発光波長が 423 nm であることが分かった(図2)。この波長での色純度はNTSC色座標系で CIE(x, y) : 0 . 1959, 0 . 0907 であった。

【0135】

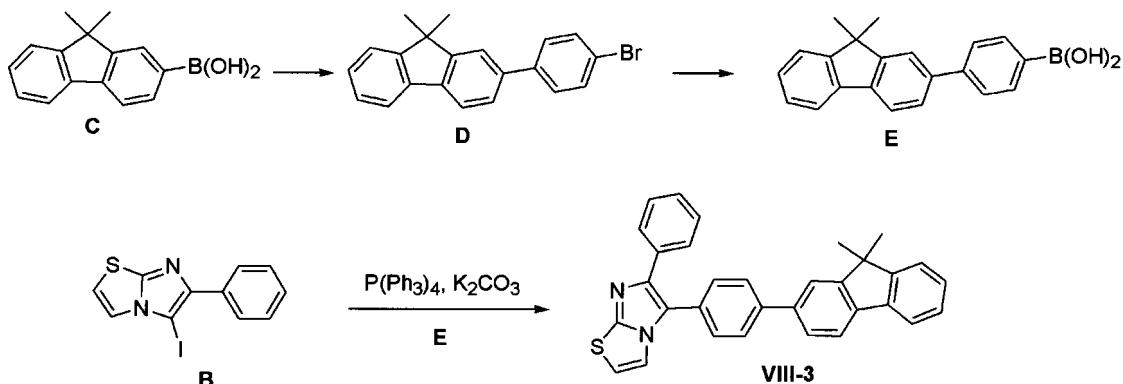
合成例2：化合物 VIII-3 の合成

下記反応式(2)によって化合物 VIII-3 を合成した。

【0136】

【化35】

<反応式(2)>



【0137】

<反応式(2)>

1) 中間体Dの合成

上記合成例1に記載されるのと同様にして製造された中間体C 100 mg (0 . 42 mmol) 及び 1,4-ジブロモベンゼン 250 mg (1 . 05 mmol) を、 THF 5 mL に溶かした後、テトラキストリフェニルホスフィンパラジウム(10 mg, 0 . 08 mmol)を加え、さらにK₂CO₃ (580 mg, 4 . 2 mmol)を3 mLの蒸溜水に溶かした水溶液を加えて、75 ℃で12時間攪拌した。反応混合物を、酢酸エチル10 mLずつで3回抽出した。集められた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥し、溶媒を蒸発させて、得られた残留物をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで分離精製することによって、中間体Dを100 mg (収率67%) 得た。この中間体Dの構造は¹H NMRで確認した。

【0138】

¹H NMR (CDCl₃, 400 MHz) (ppm) 7 . 78 (s, 1 H), 7 . 75 - 7 . 73 (m, 1 H), 7 . 60 - 7 . 55 (m, 3 H), 7 . 54 - 7 . 50 (m, 3 H), 7 . 46 - 7 . 43 (m, 1 H), 7 . 37 - 7 . 31 (m, 2 H), 1 . 53 (s, 6 H)

2) 中間体Eの合成

上記段階1)で合成された中間体D (560 mg, 1 . 6 mmol) をTHF (10 mL) に溶かした後、-78 ℃でn-ヘキサンに溶かした2 . 5 M n-ブチルリチウム (0 . 85 mL, 2 . 08 mmol) の溶液を滴下し、2時間攪拌した。ホウ酸トリメチル (0 . 45 mL, 4 mmol) を前記反応液に加えた後、同じ温度で3時間、そして常温

10

20

30

40

50

で12時間さらに攪拌した。12M 塩酸水溶液で反応混合物のpHを1に合わせた後、常温で2時間攪拌した。次いで、4M NaOH水溶液で反応混合物をpH14に合わせた後、ジエチルエーテル50mLずつで3回抽出した。集められた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥し、溶媒を蒸発させて、得られた残留物をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで分離精製することによって、中間体Eを白色固体の形態で390mg(収率77%)を得た。

【0139】

3) 化合物VI III - 3の合成

合成例1に記載されるのと同じ方法で合成された中間体B(90mg、0.276mmol)と上記段階2)で合成された中間体E(95mg、0.276mmol)とを、合成例1に記載されるのと同様にして反応させて、化合物VI III - 3を112mg(収率87%)得た。得られた化合物を昇華精製装置を利用して1torr窒素圧力下で300で昇華、精製して、白色固体を得た。この化合物の構造は¹H NMRで確認した。

【0140】

¹H NMR(CDCl₃, 400MHz) (ppm) 7.81(d, 1H), 7.77-7.74(m, 3H), 7.71-7.67(m, 3H), 6.64(dd, 1H), 7.56-7.52(m, 2H), 7.48-7.44(m, 2H), 7.37-7.28(m, 4H), 7.27-7.24(m, 1H), 6.83(d, 1H), 1.56(s, 6H); ¹³C NMR(CDCl₃, 100MHz) (ppm) 154.4, 153.9, 149.1, 143.7, 141.3, 139.3, 138.9, 138.7, 134.5, 129.4, 129.2, 128.3, 127.8, 127.6, 127.4, 127.2, 127.1, 126.0, 122.6, 122.5, 121.2, 120.4, 120.2, 117.5, 112.5, 46.9, 27.3

前記合成例2によって合成された化合物VI III - 3を、CHCl₃で0.2mM濃度になるように希釈し、UVスペクトルを観察した(図3)。その結果、化合物VI III - 3は、最大吸収波長が326.5nmであるということが分かった(図3)。そして化合物VI III - 3を、CHCl₃で10mM濃度になるように希釈し、326.5nmでPLを測定した(図3)ところ、化合物VI III - 3は、418nmで最大発光ピークを観察した(図3)。この波長での色純度はNTSC色座標系でCIE(x, y):0.1664、0.0562であった。

【0141】

また、化合物VI III - 3及びポリメチルメタアクリレート(PMMA)高分子を1:1の混合質量比でクロロホルムに溶かした溶液を、ガラス基板(1.0T、50mm×50mm)上に、スピンドルティングして薄膜を形成した。この薄膜について、PLを測定したところ、425nmで最大発光ピークを示した(図4)。この波長での色純度はNTSC色座標系でCIE(x, y):0.1594、0.0264であった。

【0142】

そして、化合物VI III - 3を蛍光ホストとして使用し、ドープ剤として青色蛍光ドープ剤である5質量%のIDE105(出光社製)を使用して、薄膜を形成し、薄膜についてPLを測定し、同じ条件で青色蛍光ホストであるIDE140(出光社製)と比較した(図5)。図5に示されるように、最大発光波長444nmでは、化合物VI III - 3の方が、IDE-140より非常に大きい強度を示すことが分かった。

【0143】

UV吸収スペクトル及びイオン化ポテンシャル測定系であるAC-2を用いてHOMO(Highest Occupied Molecular Orbital)エネルギー準位及びLUMO(Lowest Occupied Molecular Orbital)エネルギー準位を測定したところ、それぞれ、5.79eV及び2.64eVであった。

【0144】

また、化合物VI III - 3について、熱重量分析(Thermo Gravimeter)50

ic Analysis : TGA) 及び示差走査熱量計 (Differential Scanning Calorimetry : DSC) を利用した熱分析を実施した。この時、熱分析は N_2 ガス雰囲気下で、TGAは、常温～600（昇温速度：10 / min）の温度範囲で行ない、DSCは、常温～400 の温度範囲で実施した。TGA及びDSCの結果を、それぞれ、図6及び7に示す。

【0145】

その結果、化合物VIII-3は、Tdが278、Tgが107、Tmが194であることが分かった（図6、図7）。

【0146】

合成例3：化合物VIII-5の合成

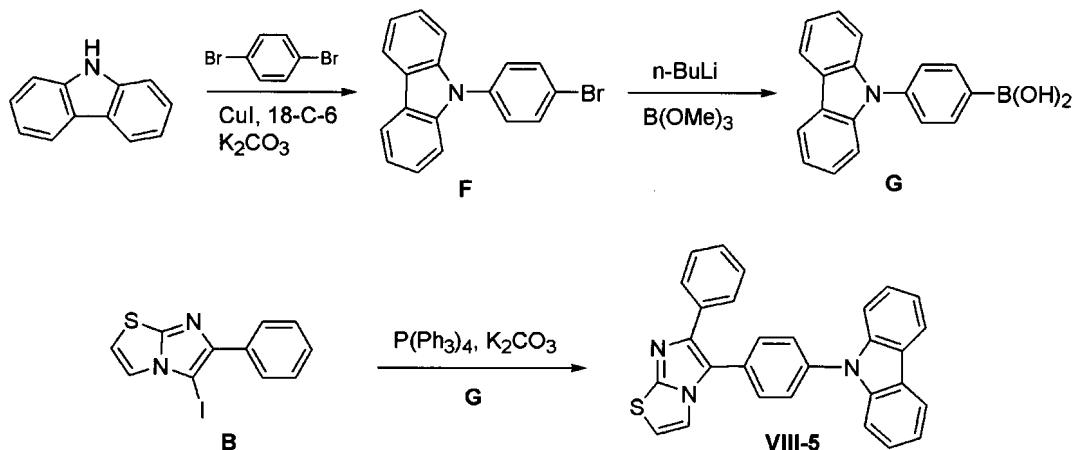
10

下記反応式(3)によって化合物VIII-5を合成した。

【0147】

【化36】

<反応式(3)>



20

【0148】

<反応式(3)>

1) 中間体Fの合成

30

カルバゾール（335mg、2mmol）、1,4-ジブロモベンゼン（1.2g、5mmol）、CuI（76mg、0.4mmol）、 K_2CO_3 （1.1g、8mmol）及び18-クラウン-6（10mg、0.04mmol）を、DMPU（1,3-ジメチル-3,4,5,6-テトラヒドロ-（1H）-ピリミジノン）（5mL）に溶かした後、170で8時間加熱した。常温に冷やした後に、固体物質を濾別し、濾液に少量のアンモニア水を添加した後に、ジエチルエーテル10mLで3回洗浄した。洗浄されたジエチルエーテル層を、減圧下で $MgSO_4$ で乾燥させた後、粗生成物を得た。この粗生成物を、シリカゲルカラムクロマトグラフィーで分離精製することによって、中間体Fを固体で480mg（收率75%）得た。この化合物の構造は¹H NMRで確認した。

【0149】

40

¹H NMR ($CDCl_3$, 400MHz) (ppm) 8.12 (d, 2H), 7.70 (d, 2H), 7.43-7.34 (m, 6H), 7.30-7.26 (m, 2H)

2) 中間体Gの合成

上記段階1)で合成された中間体F（200mg、0.62mmol）を、THF（3mL）に溶かした後、-78でn-ヘキサンに溶かした2.5M n-ブチルリチウム（0.325mL、0.806mmol）の溶液を滴下して、2時間攪拌した。前記反応混合物にホウ酸トリメチル（0.2mL、1.86mmol）を添加した後、これと同じ温度で3時間、そして常温で12時間さらに攪拌した。次いで、反応混合物を12M塩酸水溶液でpH1に合わせた後、常温で2時間攪拌した。4M NaOH水溶液でpH1

50

4に調節した後、反応混合物をジエチルエーテル50mLずつで3回抽出した。集められた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥して溶媒を蒸発させた。さらに得られた反応産物をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで分離精製することによって、中間体Gを白色固体で145mg(収率81%)を得た。

【0150】

3) 化合物VIII-5の合成

合成例1に記載されるのと同じ方法で合成された中間体B(28mg、0.087mmol)と上記段階2)で合成された中間体G(25mg、0.087mmol)とを、合成例1に記載されるのと同様にして反応させて、化合物VIII-5を27mg(収率71%)得た。構造は¹H NMRで確認した。

10

【0151】

¹H NMR(CDCl₃, 400MHz)(ppm) 8.16(d, 2H), 7.72-7.68(m, 6H), 7.55-7.50(m, 3H), 7.47-7.43(m, 2H), 7.38-7.28(m, 5H), 6.88(d, 1H)

前記合成例3によって合成した化合物VIII-5を、CHCl₃で0.2mM濃度になるように希釈し、UVスペクトルを観察した。その結果、最大吸収波長323.5nmを観察した。

【0152】

そして化合物VIII-5を、CHCl₃に10mM濃度になるように希釈し、323.5nmでPL特性を調べたところ、417nmで最大発光ピークを観察した(図8)。この波長での色純度はNTSC色座標系でCIE(x, y):0.1981, 0.1183であった。

20

【0153】

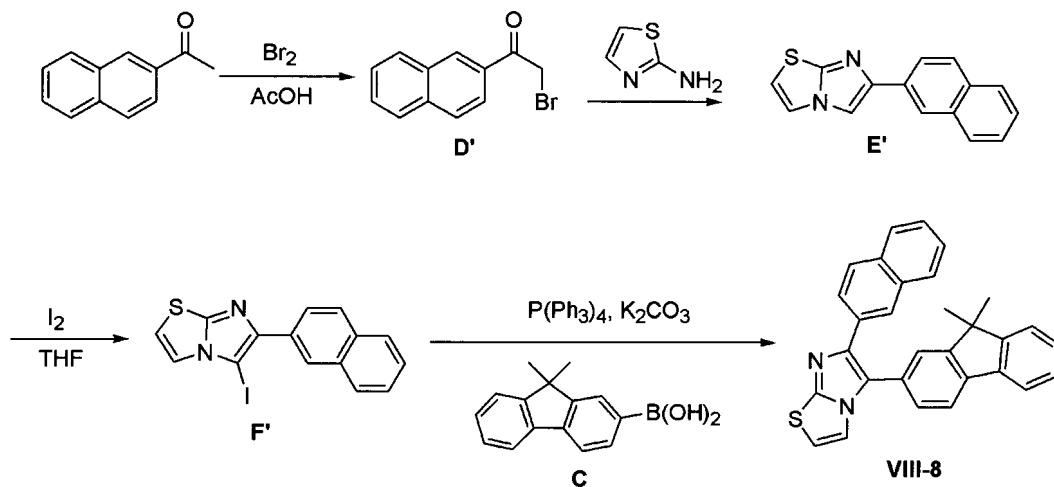
合成例4: 化合物VIII-8の合成

下記反応式(4)によって化合物VIII-8を合成した。

【0154】

【化37】

<反応式(4)>



【0155】

<反応式(4)>

1) 中間体D'の合成

アセチルナフタレン(17g、100mmol)を、CCl₄(300mL)に溶かした後、0℃に冷却して触媒量の無水HClを添加した。次いで、Br₂(100mmol)を滴下して、同温度で3時間攪拌した後、臭素の色がなくなるまで常温で攪拌し、さらに氷水で3回洗浄した。洗浄されたCCl₄層をMgSO₄で乾燥した後、減圧乾燥して粗生成物を得た。この粗生成物をヘキサンで再結晶して、中間体D'を固体で19.9

50

g (収率 80 %) 得た。

【 0 1 5 6 】

2) 中間体 E' の合成

上記段階 1) で合成された中間体 D' 249 mg (1 mmol) を DME (5 mL) に溶かして、2 - アミノチアゾール (0.1 g, 1 mmol) を固体状態で加えた後、常温で 5 時間攪拌して、さらに 12 時間還流させた。反応産物を減圧蒸留して溶媒を除去した後、ジクロロメタン (250 mL) を加えて、残渣を溶かした。10 % の炭酸ナトリウム溶液で、溶液の pH を 10 に合わせた後、ジクロロメタン層を分離した。残っている水層をジクロロメタン (10 mL) を使用して 2 回抽出した。集められた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥し、溶媒を蒸発させて、得られた残留物をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで分離精製することによって、中間体 E' を 218 mg (収率 87 %) 得た。この中間体 E' の構造は ¹H NMR で確認した。
10

【 0 1 5 7 】

¹H NMR (CDCl₃, 400 MHz) (ppm) 8.37 (s, 1 H), 7.89 - 7.80 (m, 5 H), 7.48 - 7.40 (m, 3 H), 6.81 (d, 1 H)

3) 中間体 F' の合成

上記段階 2) で合成された中間体 E' 200 mg (0.8 mmol) を THF (4 mL) に溶かして、ヨウ素 (300 mg, 1.2 mmol) を加えた後、50 で 5 時間攪拌した。前記反応混合物に飽和シュウ酸溶液を添加して、反応を中止させた後、ジクロロメタン (5 mL) で 3 回抽出した。集められた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥し、溶媒を蒸発させて、得られた残留物をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで分離精製することによって、中間体 F' を 150 mg (収率 50 %) 得た。この中間体 F' の構造は ¹H NMR で確認した。
20

【 0 1 5 8 】

¹H NMR (CDCl₃, 400 MHz) (ppm) 8.48 (s, 1 H), 8.14 (dd, 1 H), 7.93 - 7.81 (m, 3 H), 7.49 - 7.45 (m, 3 H), 6.93 (d, 1 H)

4) 化合物 V III - 8 の合成

上記段階 3) で合成された中間体 F (20 mg, 0.053 mmol) と合成例 1 で合成した中間体 C (14 mg, 0.053 mmol) とを、合成例 1 に記載されるのと同様にして反応させて、化合物 V III - 8 を 18 mg (収率 75 %) 得た。構造は ¹H NMR で確認した。
30

【 0 1 5 9 】

¹H NMR (CDCl₃, 400 MHz) (ppm) 8.25 (s, 1 H), 7.83 (d, 1 H), 7.78 - 7.67 (m, 5 H), 7.54 - 7.37 (m, 8 H), 6.86 (d, 1 H), 1.43 (s, 6 H)

前記合成例 4 によって合成された化合物 V III - 8 を、CHCl₃ で 0.2 mM 濃度になるように希釈し、UV スペクトルを調べたところ、最大吸収波長が 328.5 nm であるということが分かった。
40

【 0 1 6 0 】

そして化合物 V III - 8 を、CHCl₃ で 10 mM 濃度になるように希釈し、328.5 nm で PL 特性を調べたところ、化合物 V III - 8 は、426 nm で最大発光ピークを観察した (図 9)。この波長での色純度は NTSC 色座標系で CIE (x, y) : 0.1711, 0.0773 を得た。

【 0 1 6 1 】

合成例 5 : 化合物 V III - 9 の合成

合成例 4 に記載されるのと同じ方法で合成された中間体 F' (20 mg, 0.053 mmol) と合成例 3 に記載されるのと同じ方法で合成された中間体 E (17 mg, 0.053 mmol) とを、合成例 1 に記載されるのと同様にして反応させて、化合物 V III - 9
50

- 9 を 20 mg (収率 78 %) 得た。構造は ^1H NMR で確認した。

【 0 1 6 2 】

^1H NMR (CDCl₃, 400 MHz) (ppm) 8.25 (s, 1 H), 7.83 (d, 1 H), 7.78 - 7.67 (m, 5 H), 7.54 - 7.37 (m, 8 H), 6.86 (d, 1 H), 1.43 (s, 6 H)

前記合成例 5 によって合成した化合物 V III - 9 を、 CHCl₃ に 0.2 mM 濃度になるように希釈し、 UV スペクトルを観察した。その結果、最大吸収波長 327 nm を観察した。

【 0 1 6 3 】

そして、化合物 V III - 9 を、 CHCl₃ に 10 mM 濃度になるように希釈し、 327 nm で PL 特性を調べた。その結果、化合物 V III - 9 は、 429 nm で最大発光ピークを観察した (図 10)。この波長での色純度は NTSC 色座標系で CIE (x, y) : 0.1661, 0.0718 であった。

【 0 1 6 4 】

合成例 6 : 化合物 V III - 11 の合成

合成例 4 に記載されるのと同じ方法で合成された中間体 F' (20 mg, 0.053 mmol) と合成例 3 に記載されるのと同じ方法で合成された中間体 G (14 mg, 0.053 mmol) とを、合成例 1 に記載されるのと同様にして反応させて、化合物 V III - 11 を 18 mg (収率 75 %) 得た。構造は ^1H NMR で確認した。

【 0 1 6 5 】

^1H NMR (CDCl₃, 400 MHz) (ppm) 8.24 (s, 1 H), 8.17 (d, 2 H), 7.84 - 7.68 (m, 8 H), 7.57 (d, 1 H), 7.53 (d, 2 H), 7.48 - 7.44 (m, 4 H), 7.33 (dd, 2 H), 6.92 (d, 1 H)

前記合成例 6 によって合成した化合物 V III - 11 を、 CHCl₃ に 0.2 mM 濃度になるように希釈し、 UV スペクトルを調べた。その結果、最大吸収波長 325.5 nm を観察した。

【 0 1 6 6 】

そして化合物 V III - 11 を、 CHCl₃ に 10 mM 濃度になるように希釈し、 325.5 nm で PL スペクトルを調べた。その結果、化合物 V III - 11 は、 421 nm で最大発光ピークを観察した (図 11)。この波長での色純度は NTSC 色座標系で CIE (x, y) : 0.1823, 0.0941 を得た。

【 0 1 6 7 】

前述したように、前記合成例によって得たイミダゾール環含有化合物を含む溶液及び薄膜について PL 特性を測定した結果、本発明のイミダゾール環含有化合物は、最大波長ピークが 417 ~ 429 nm であり、 NTSC 色座標系での CIE (x, y) : それぞれ、 0.15 ~ 0.19, 0.03 ~ 0.11 という高い色純度を持つ青色発光特性を示すということが分かった。

【 0 1 6 8 】

実施例 1

アノードとしては 10 / cm² の抵抗を有する ITO 基板 (米国のコーニング社製) を使用し、前記基板上に、 IDE 406 (出光社製) を真空蒸着して、 HIL を 600 厚さに形成した。次いで、前記 HIL 上に、 IDE 320 (出光社製) を 300 の厚さに真空蒸着して、 HTL を形成した。前記 HTL 上に、 90 : 10 の混合質量比の化合物 V III - 2 と IDE 105 (出光社製) を真空蒸着して、 300 厚さの EML を形成した。

【 0 1 6 9 】

その後、前記 EML 上に、 Balq を真空蒸着して、 50 厚さの HBL を形成した。その後、前記 HBL 上に、 Alq3 を真空蒸着して、 200 厚さの ETL を形成した。この ETL 部に、 LiF と Al とを、それぞれ、 10 及び 3000 の厚みに、順次真

10

20

30

40

50

空蒸着により積層して、カソードを形成し、これによって有機EL素子が完成した。

【0170】

前記実施例1によって製造された有機EL素子について、輝度、効率、駆動電圧、色純度特性を調べた。

【0171】

その結果、前記実施例1の有機EL素子は輝度、効率、駆動電圧、色純度特性に優れたことが確認できた。

【産業上の利用可能性】

【0172】

本発明による式(1)で表わされるイミダゾール環含有化合物は単独で使われるか、またはドープ剤と共にEMLのような有機膜形成材料として使用できる。 10

【図面の簡単な説明】

【0173】

【図1】一般的な有機EL素子の断面図である。

【図2】本発明の化合物VIII-2に対するUVスペクトル及びフォトルミネセンス(PL)スペクトルを示す図面である。

【図3】本発明の化合物VIII-3を含有した溶液のPLスペクトルを示す図面である。
。

【図4】本発明の化合物VIII-3及びポリメチルメタクリレートを利用して形成した薄膜に対するPLスペクトルを示す図面である。 20

【図5】本発明の化合物VIII-3を利用して形成した薄膜に対するPLスペクトルを示す図面である。

【図6】本発明の化合物VIII-3に対する熱重量分析(TGA)結果を示す図面である。

【図7】本発明の化合物VIII-3に対する示差走査熱分析(DSC)曲線を示す図面である。

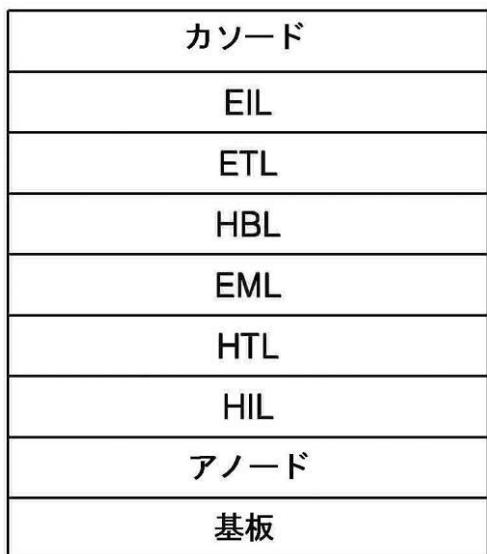
【図8】本発明の化合物VIII-5を含有した溶液のPLスペクトルを示す図面である。
。

【図9】本発明の化合物VIII-8を含有した溶液のUVスペクトル及びPLスペクトルを示す図面である。 30

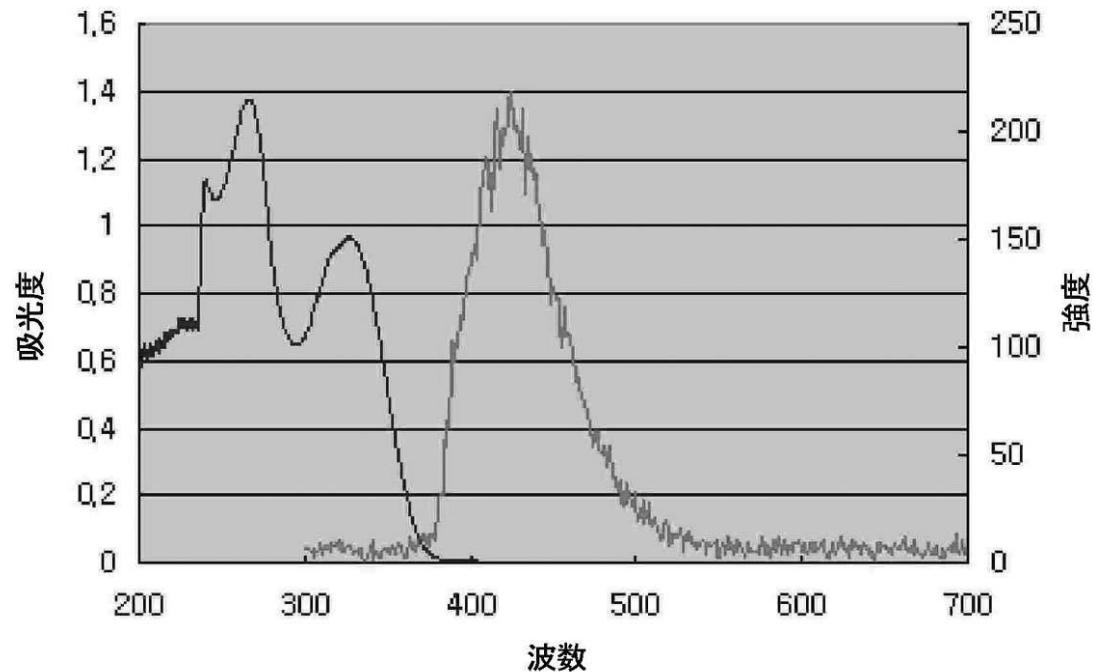
【図10】本発明の化合物VIII-9を含有した溶液のUVスペクトル及びPLスペクトルを示す図面である。

【図11】本発明の化合物VIII-11を含有した溶液のUVスペクトル及びPLスペクトルを示す図面である。

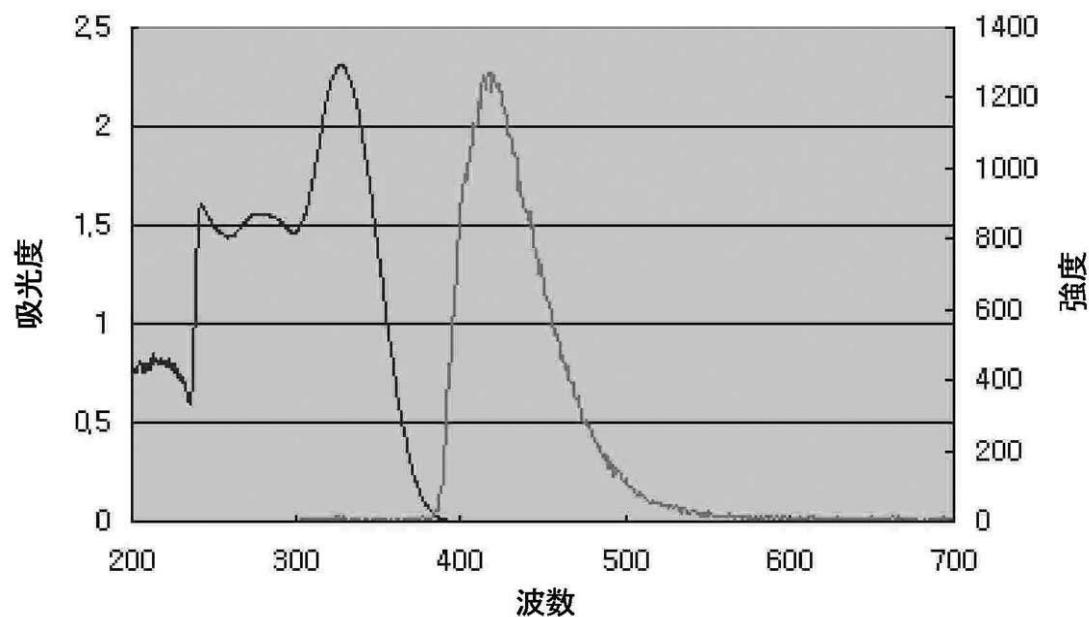
【図1】



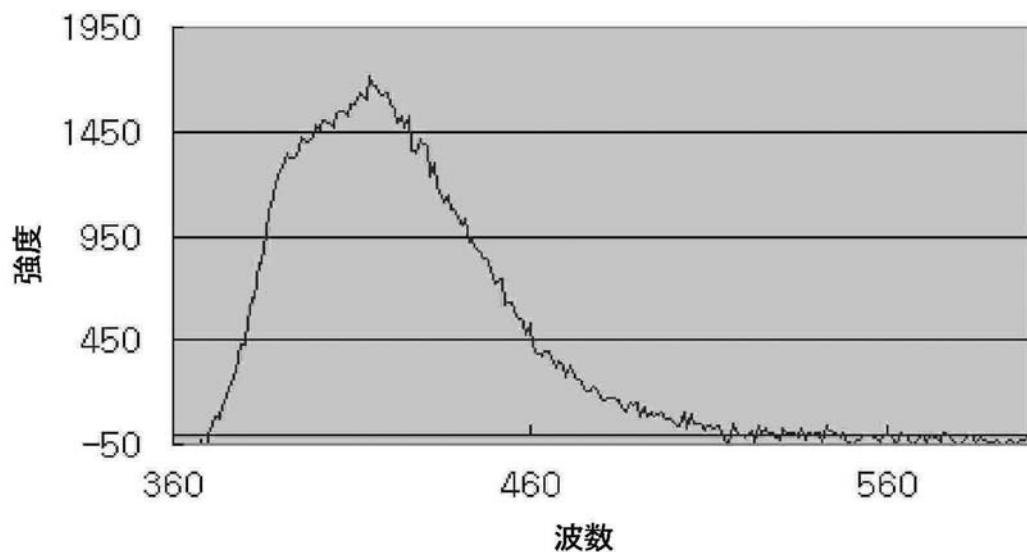
【図2】



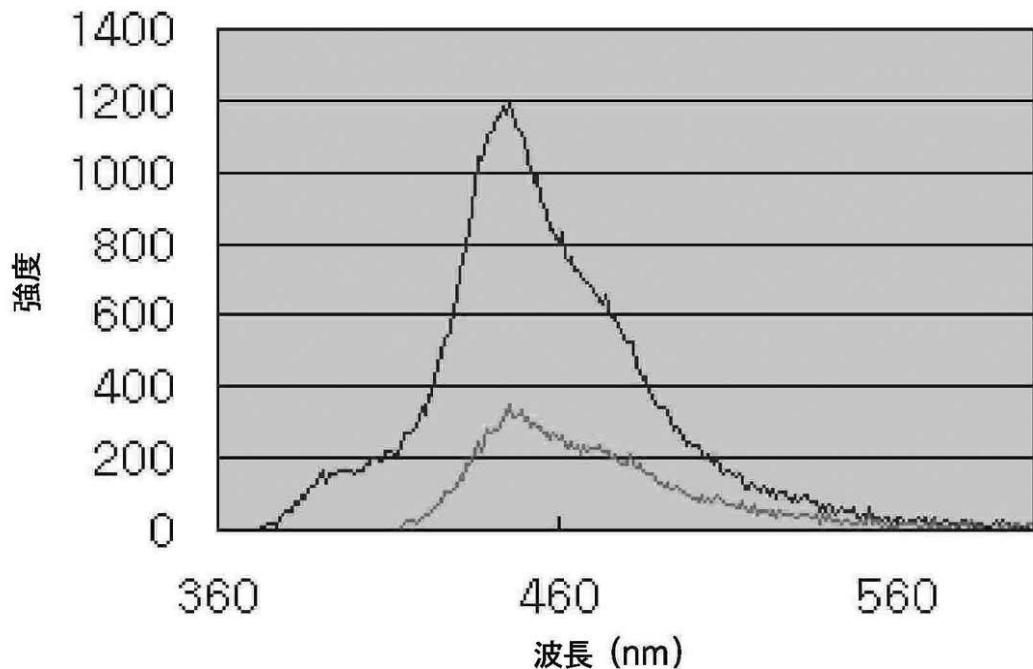
【図3】



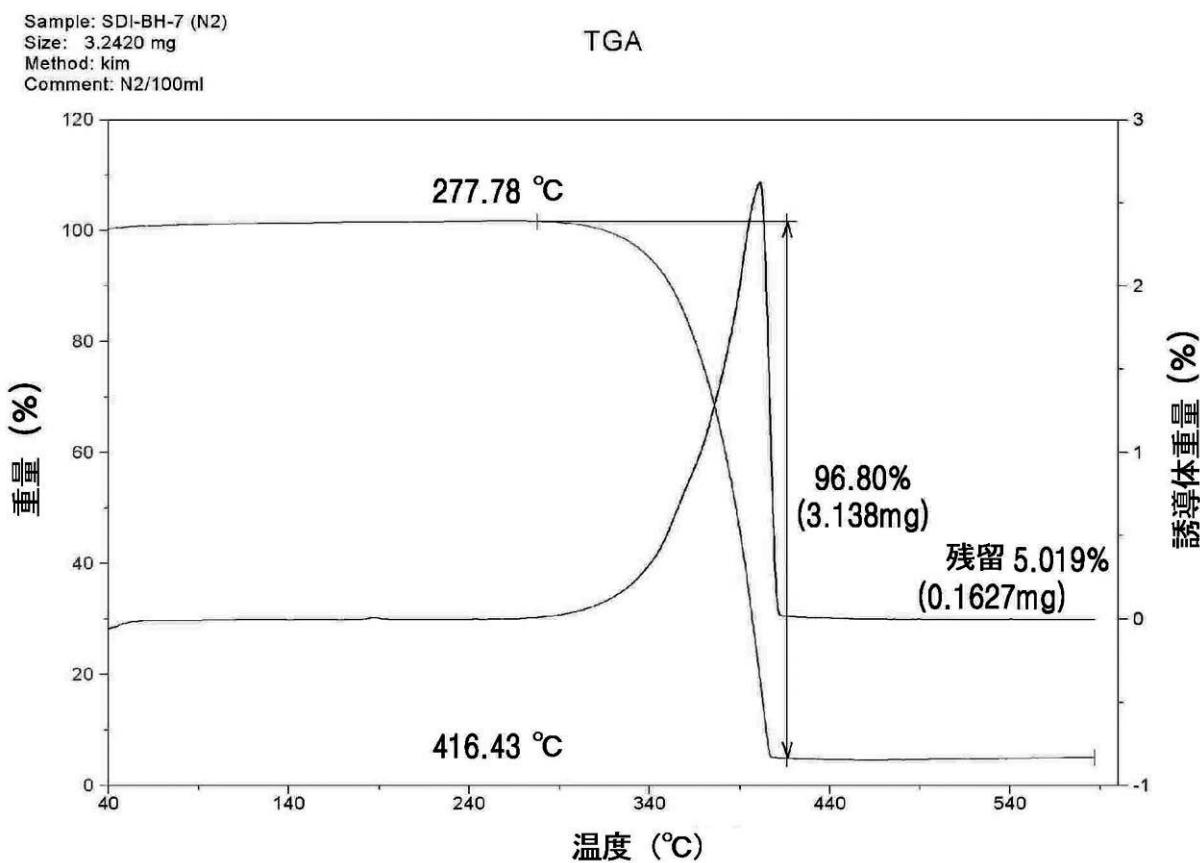
【図4】



【図5】



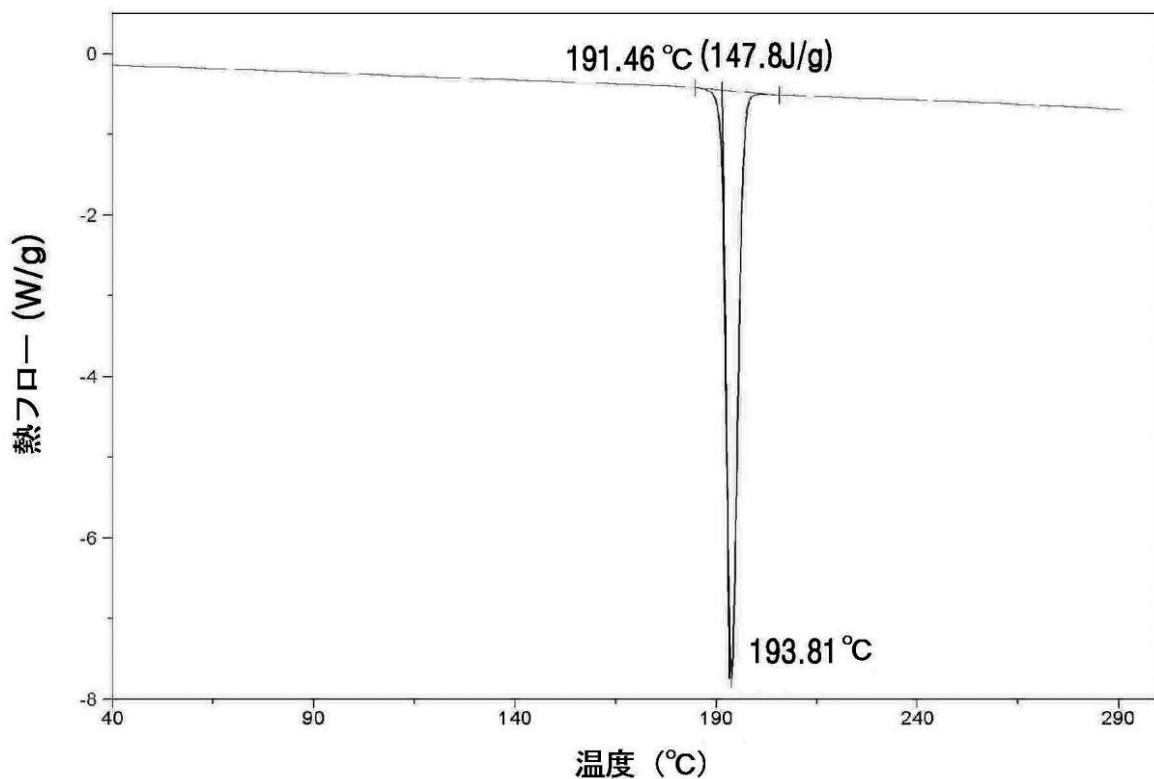
【図6】



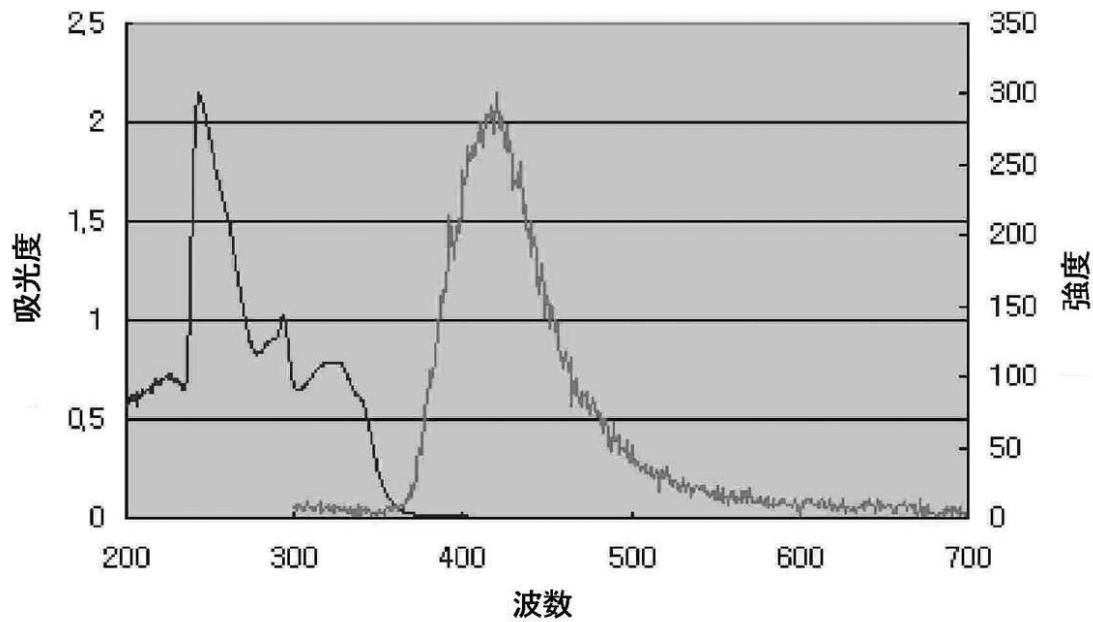
【図7】

Sample: SDI-BH-7
 Size: 1.2400 mg
 Method: KIM
 Comment: purge gas 55mL/min

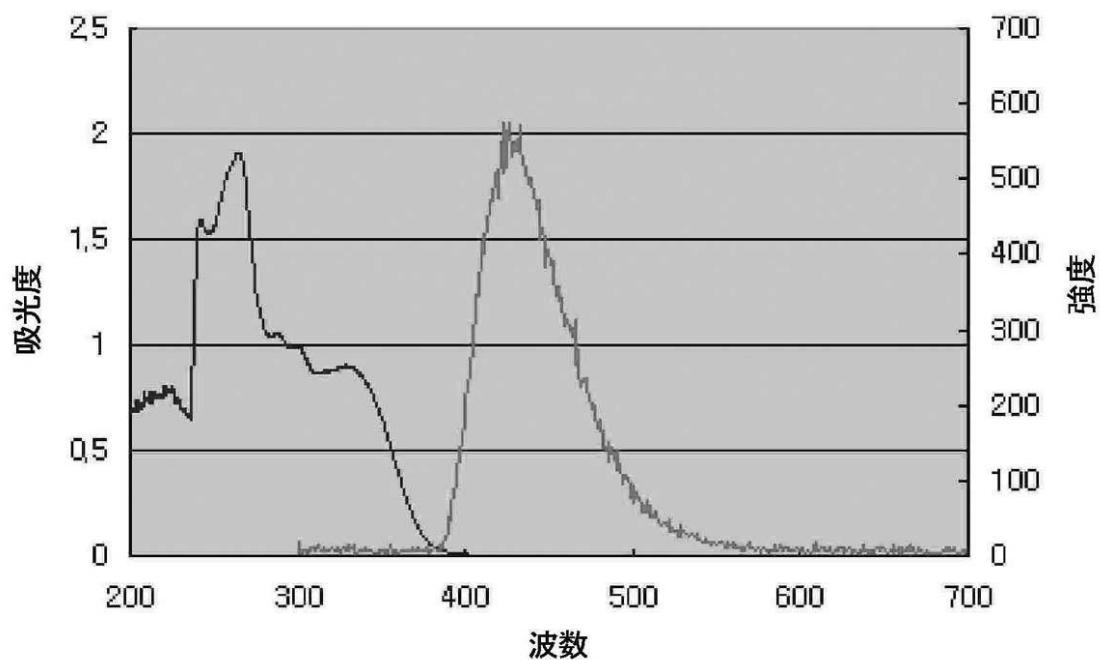
DSC



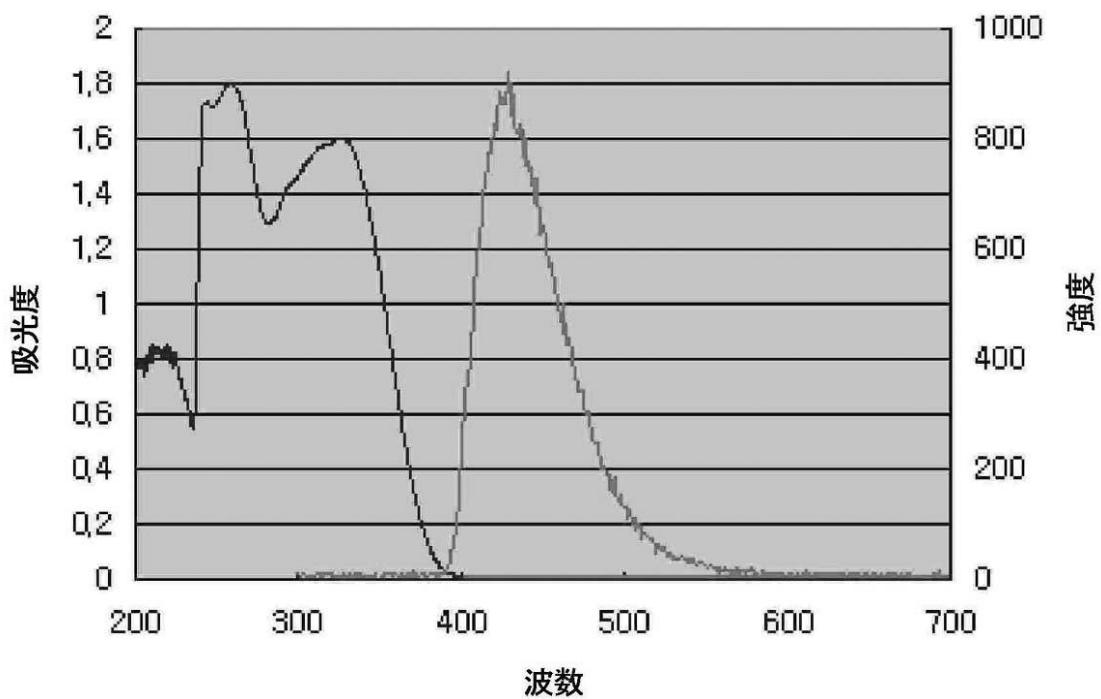
【図8】



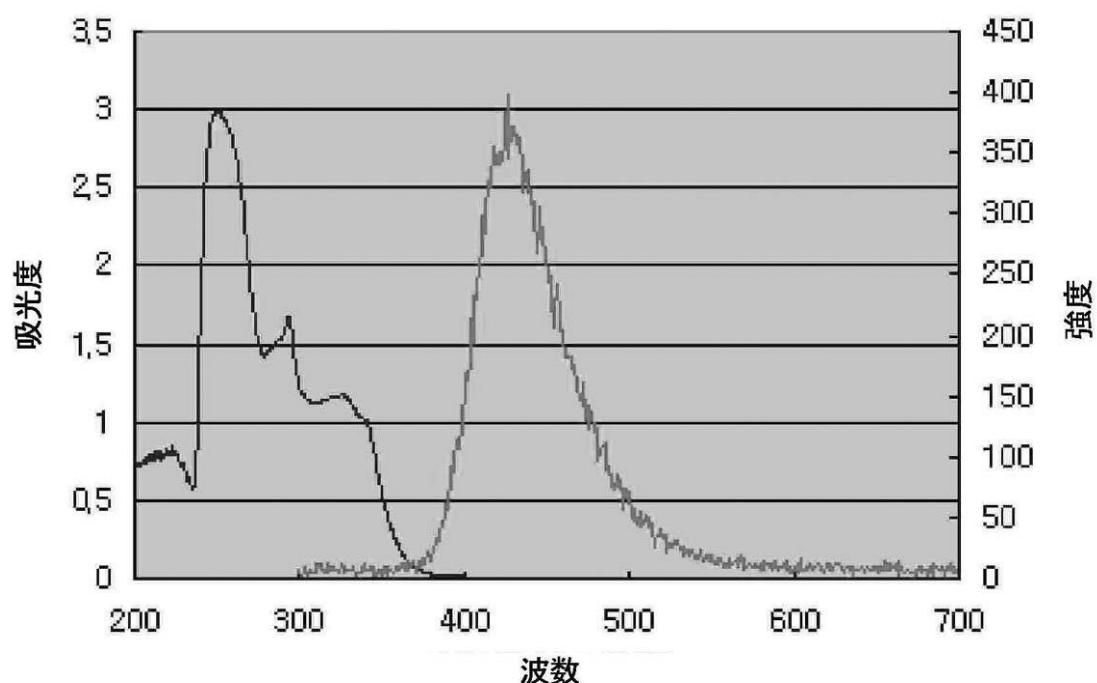
【図9】



【図10】



【図11】



フロントページの続き

(72)発明者 李 錫 宗
大韓民国京畿道水原市勸善区勸善洞1305番地 大宇アパート324棟104号

(72)発明者 金 榮 國
大韓民国京畿道水原市靈通区靈通洞1019-23番地403号

(72)発明者 黃 せき 煥
大韓民国京畿道水原市靈通区網浦洞693番地 現代1次アイパーク104棟1701号

(72)発明者 梁 承 かく
大韓民国京畿道水原市靈通区靈通洞973-3番地 宇成アパート826棟703号

(72)発明者 金 喜 けん
大韓民国京畿道水原市靈通区靈通洞958-2番地 ファミリータワー1306号

(72)発明者 都 永 洛
大韓民国ソウル特別市鍾路区母岳洞 母岳現代アパート108棟501号

(72)発明者 宋 住 翰
大韓民国京畿道水原市靈通区靈通洞966-2番地 シンナムシル建榮アパート665棟1404号

F ターム(参考) 3K007 AB02 AB03 AB04 AB06 AB11 DB03 FA01
4C072 AA01 BB02 CC02 CC11 CC16 DD05 EE03 EE13 FF05 GG01
GG08 HH02 HH07 UU05

专利名称(译)	含咪唑环的化合物和使用其的有机电致发光器件		
公开(公告)号	JP2005112856A	公开(公告)日	2005-04-28
申请号	JP2004292535	申请日	2004-10-05
[标]申请(专利权)人(译)	三星斯笛爱股份有限公司		
申请(专利权)人(译)	三星工スディアイ株式会社		
[标]发明人	李錫宗 金榮國 黃せき煥 梁承かく 金喜けん 都永洛 宋住翰		
发明人	李錫宗 金榮國 黃▲せき▼煥 梁承▲かく▼ 金喜▲けん▼ 都永洛 宋住翰		
IPC分类号	H01L51/50 C07D498/04 C07D513/04 C07D517/04 C09K11/06 H01L51/00 H05B33/14		
CPC分类号	H01L51/0072 C07D513/04 C09K11/06 C09K2211/1033 C09K2211/1037 C09K2211/104 C09K2211/1044 H01L51/0052 H01L51/0059 H01L51/006 H01L51/0067 H01L51/0081 H01L51/5012 H01L2251/308 H05B33/14 Y10S428/917		
FI分类号	C07D498/04.103 C07D513/04.331 C07D517/04.CSP C09K11/06.655 H05B33/14.B		
F-TERM分类号	3K007/AB02 3K007/AB03 3K007/AB04 3K007/AB06 3K007/AB11 3K007/DB03 3K007/FA01 4C072/AA01 4C072/BB02 4C072/CC02 4C072/CC11 4C072/CC16 4C072/DD05 4C072/EE03 4C072/EE13 4C072/FF05 4C072/GG01 4C072/GG08 4C072/HH02 4C072/HH07 4C072/UU05 3K107/AA01 3K107/CC02 3K107/CC04 3K107/CC07 3K107/CC12 3K107/CC24 3K107/DD59 3K107/DD66 3K107/DD67 3K107/DD68 3K107/DD69 3K107/DD71 3K107/DD78		
代理人(译)	宇谷胜幸 藤井敏文		
优先权	1020030069702 2003-10-07 KR		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

解决的问题：提供一种含咪唑环的化合物和使用该化合物的有机电致发光器件。含咪唑环的化合物可单独使用或与掺杂剂一起用作有机膜形成材料，例如发光层。通过使用含有这种具有咪唑环的化合物的有机膜，可以制造具有优异的亮度，效率，驱动电压和色纯度的有机电致发光器件。[选择图]图2

