

(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 I

C07D 498/04

1 O 3

C07D 513/04

3 3 1

C07D 517/04

C S P

C09K 11/06

6 5 5

H05B 33/14

B

テーマコード (参考)

3 K O O 7

4 C O 7 2

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 齋藤 悦子

(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

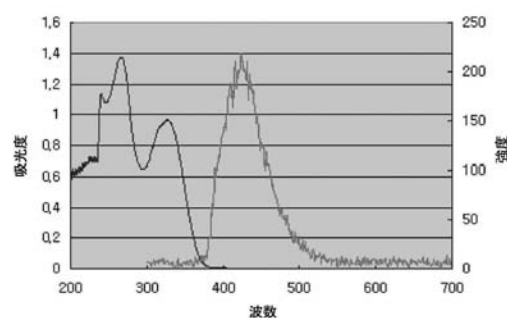
(54) 【発明の名称】 イミダゾール環含有化合物及びそれを利用した有機電界発光素子

(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、またはドーパ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

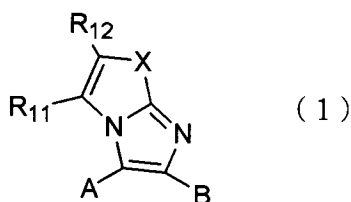


【特許請求の範囲】

【請求項 1】

下記式 (1) :

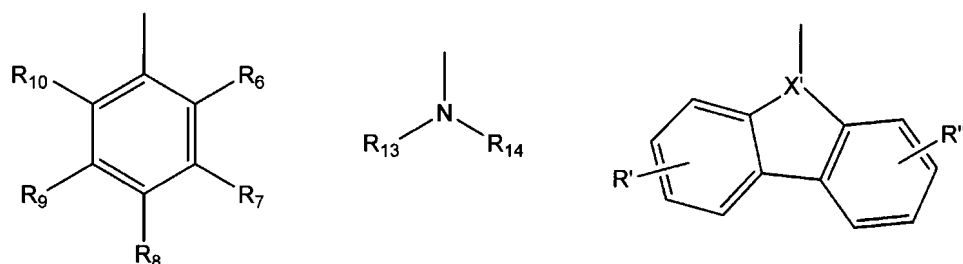
【化 1】



10

前記式中、A は、下記式 :

【化 2】

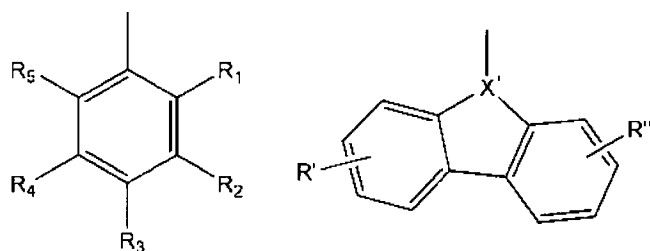


20

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 R₁₂ 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 R₁₂ 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

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

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、

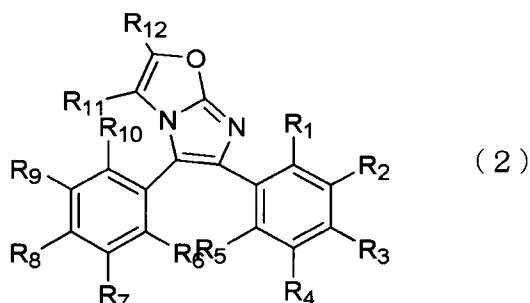
前記 R₁₃ と R₁₄ とは、互いに独立して、炭素数 1 ないし 30 の置換または非置換のアルキル基、炭素数 6 ないし 30 の置換または非置換のアリール基または炭素数 2 ないし 30 の置換または非置換のヘテロアリール基である、
で表わされるイミダゾール環含有化合物。

10

【請求項 2】

下記式 (2) :

【化 4】



20

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、

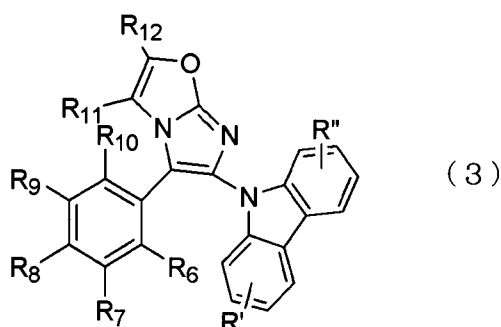
R₁₁ 及び R₁₂ は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数 2 ないし 30 の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成する、
で表わされる、請求項 1 に記載のイミダゾール環含有化合物。

30

【請求項 3】

下記式 (3) :

【化 5】



40

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、

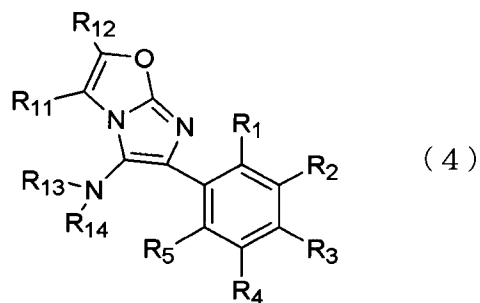
R₁₁ 及び R₁₂ は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数 2 ないし 30 の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、

R' 及び R'' は、いずれも水素である、
で表わされる請求項 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) :

【化 6】



10

前記式中、 R_1 ないし R_5 は、請求項 1 の式 (1) の定義と同様であり、

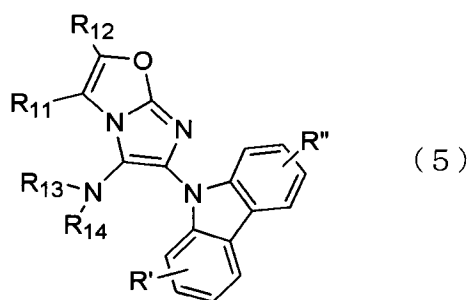
R_{11} 及び R_{12} は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数 2 ないし 30 の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、

R_{13} ないし 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、
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、 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、

30

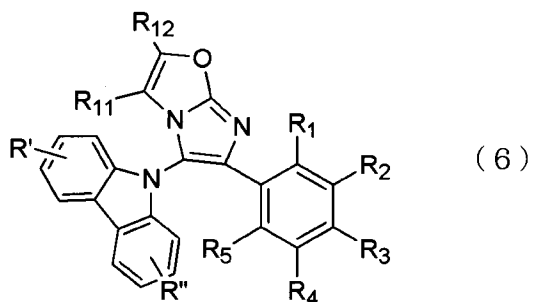
R_{13} 及び R_{14} は、互いに独立して、炭素数 6 ないし 30 の置換または非置換のアリール基または炭素数 2 ないし 30 の置換または非置換のヘテロアリール基であり、

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。

【請求項 6】

下記式 (6) :

【化 8】



40

前記式中、 R_1 ないし R_5 は、請求項 1 の式 (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' 及び R'' は、いずれも水素である、

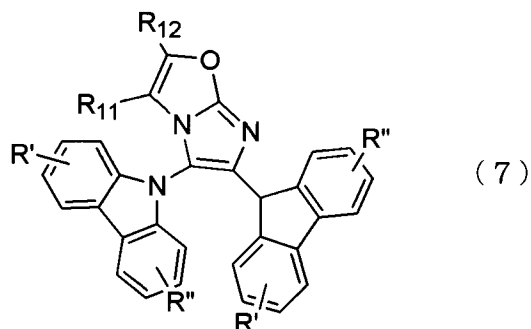
50

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

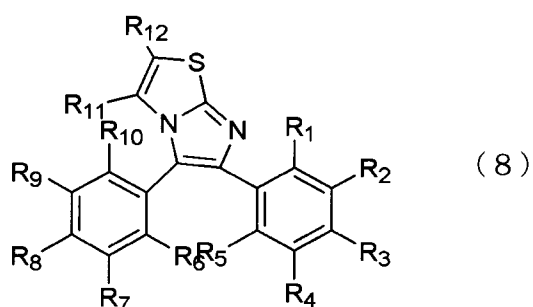
前記式中、 R_{11} 及び R_{12} は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数 2 ないし 30 の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、

R' 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

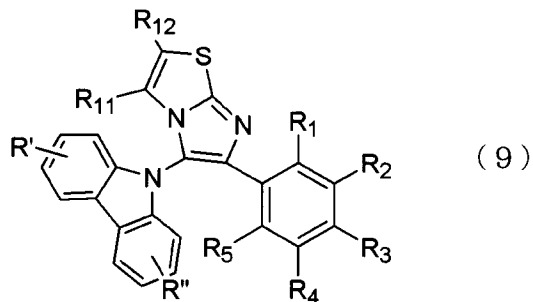
前記式中、 R_1 ないし R_{10} は、請求項 1 の式 (1) の定義と同様であり、

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、 R_1 ないし R_5 は、請求項 1 の式 (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、

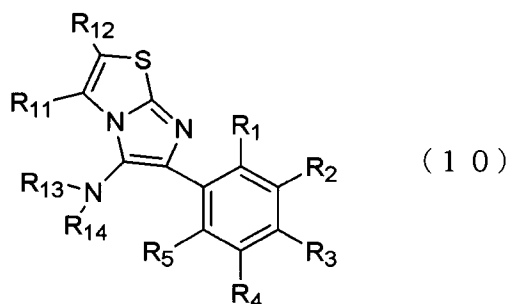
50

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、 R_1 ないし R_5 は、請求項 1 の式 (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、

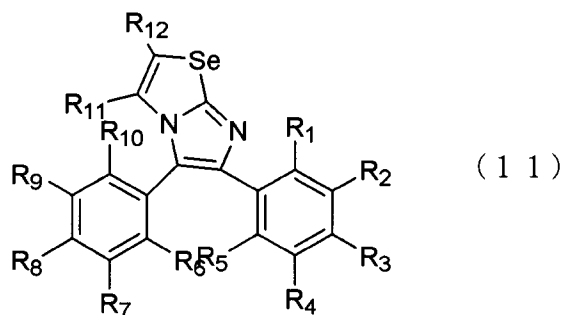
R_{13} 及び R_{14} は、互いに独立して、炭素数 6 ないし 30 の置換または非置換のアリール基または炭素数 2 ないし 30 の置換または非置換のヘテロアリール基である、

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】

下記式 (11) :

【化 13】



30

前記式中、 R_1 ないし R_{10} は、請求項 1 の式 (1) の定義と同様であり、

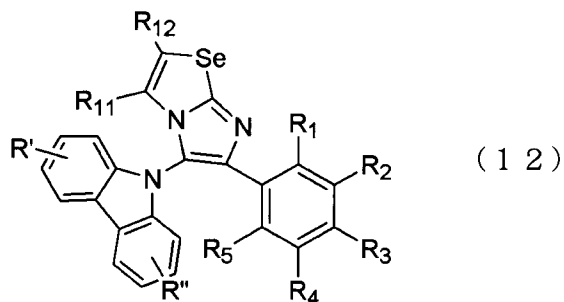
R_{11} 及び R_{12} は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数 6 ないし 30 の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成する、

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、 R_1 ないし R_5 は、請求項 1 の式 (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、

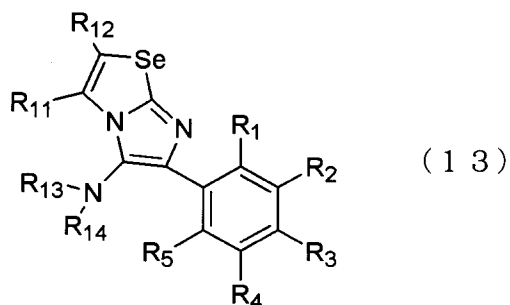
50

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 13】

下記式 (13) :

【化 15】



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、

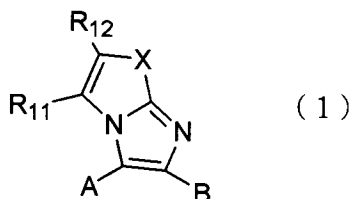
R₁₃ 及び R₁₄ は、互いに独立して、炭素数 6 ないし 30 の置換または非置換のアリール基または炭素数 2 ないし 30 の置換または非置換のヘテロアリール基である、
で表わされる、請求項 1 に記載のイミダゾール環含有化合物。

20

【請求項 14】

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、前記有機膜が下記式 (1) :

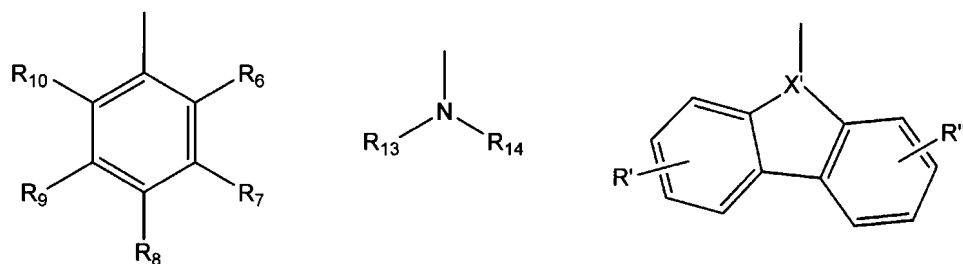
【化 16】



30

前記式中、A は、下記式 :

【化 17】

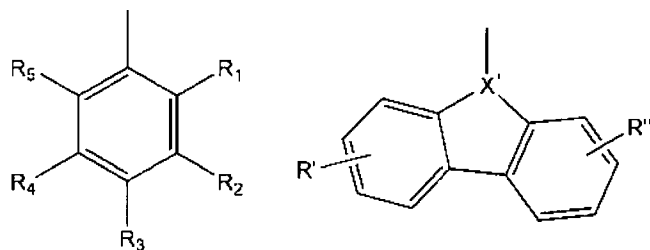


40

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、

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、

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。

【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燐光または蛍光ドーブ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】

10

20

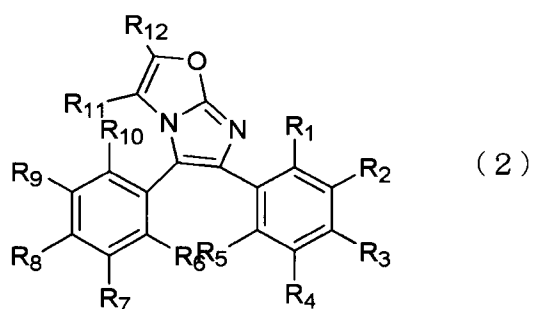
30

40

50

前記式(1)の化合物が下記式(2)：

【化19】



10

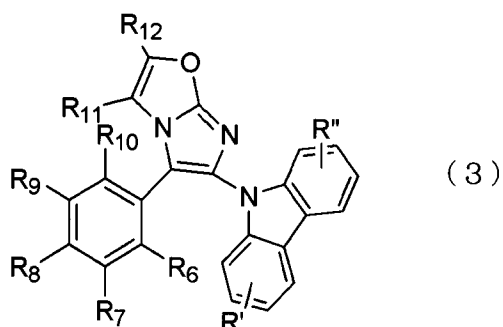
前記式中、 R_1 ないし R_{10} は、請求項14の式(1)の定義と同様であり、

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、 R_6 ないし R_{10} は、請求項14の式(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、

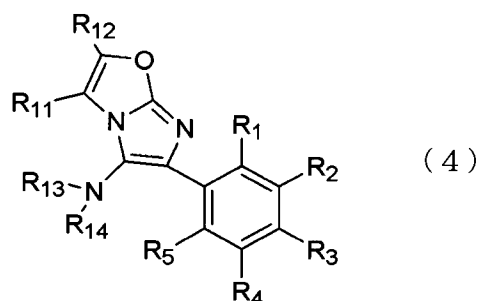
R' 及び R'' は、いずれも水素である、
で表わされる、請求項14～17のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

30

【請求項20】

前記式(1)の化合物が下記式(4)：

【化21】



40

前記式中、 R_1 ないし R_5 は、請求項14の式(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} ないし 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、

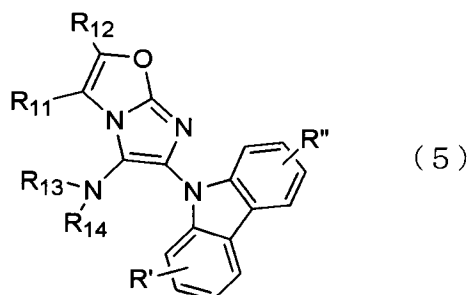
50

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、 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、

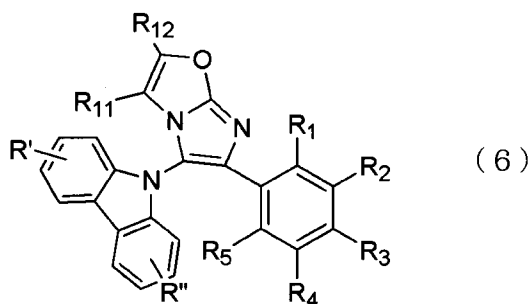
R' 及び R'' はいずれも水素である、

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】



30

前記式中、 R_1 ないし R_5 は、請求項 14 の式 (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、

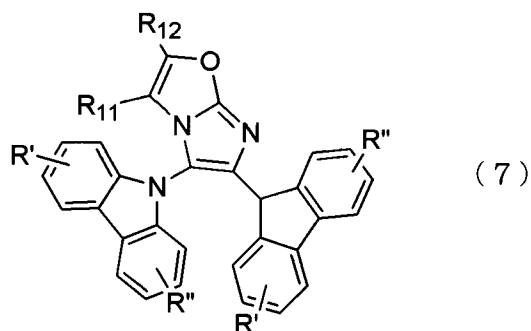
R' 及び R'' は、いずれも水素である、

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、 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

50

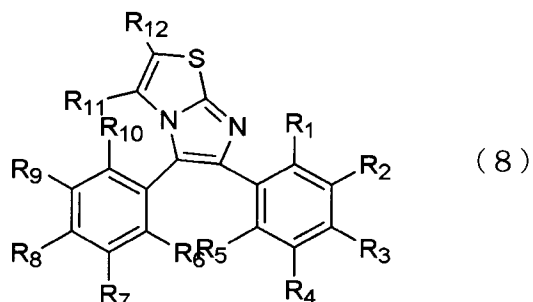
数 2 ないし 3 0 の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、

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 1 4 ~ 1 7 のいずれか 1 項に記載の有機電界発光素子。

【請求項 2 4】

前記式 (1) の化合物が下記式 (8) :

【化 2 5】



10

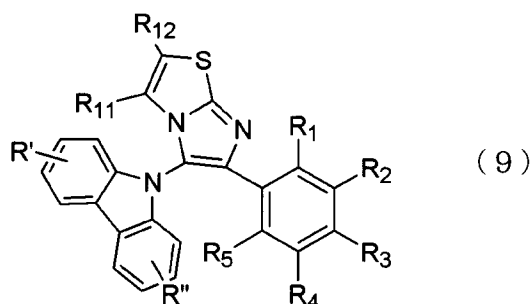
前記式中、R₁ ないし R₁₀ は、請求項 1 4 の式 (1) の定義と同様であり、

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 4 ~ 1 7 のいずれか 1 項に記載の有機電界発光素子。

【請求項 2 5】

前記式 (1) の化合物が下記式 (9) :

【化 2 6】



30

前記式中、R₁ ないし R₅ は、請求項 1 4 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、

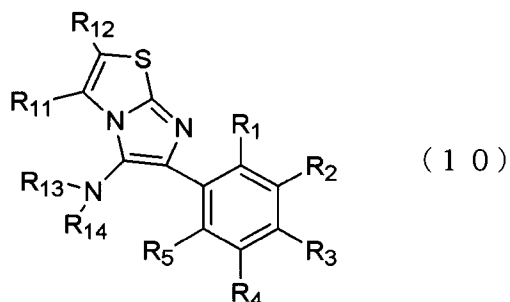
R' 及び R'' は、いずれも水素である、

で表わされる、請求項 1 4 ~ 1 7 のいずれか 1 項に記載の有機電界発光素子。

【請求項 2 6】

前記式 (1) の化合物が下記式 (10) :

【化 2 7】



40

前記式中、R₁ ないし R₅ は、請求項 1 4 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

50

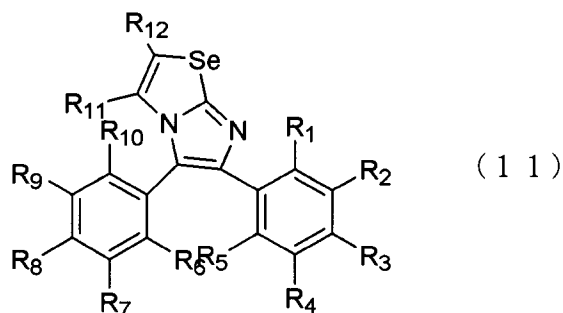
30の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、

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、
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、 R_1 ないし R_{10} は、請求項14の式(1)の定義と同様であり、

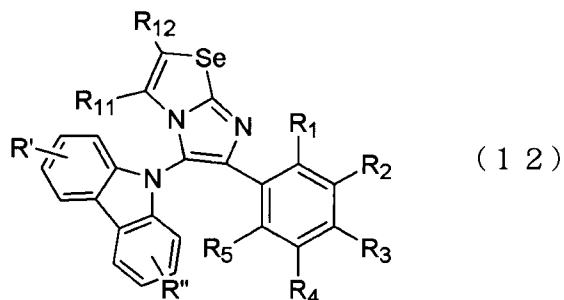
R_{11} 及び R_{12} は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数6ないし30の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成する、
で表わされる、請求項14～17のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

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、 R_1 ないし R_5 は、請求項14の式(1)の定義と同様であり、

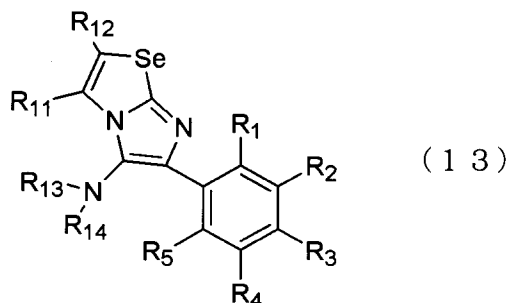
R_{11} 及び R_{12} は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数2ないし30の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、

R' 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、 R_1 ないし R_5 は、請求項14の式(1)の定義と同様であり、

50

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、

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、
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パ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。

【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】

30

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、 S_1 と称する) から基底状態 (以下、 S_0 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、 T_1 と称する) から基底状態 (以下、 S_0 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) のみを使用され、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ため、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 $Ir(ppp)_3$ 及び PtOEP をドーパ剤として使用して、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ブ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、長寿命の有機EL素子を提供することである。

10

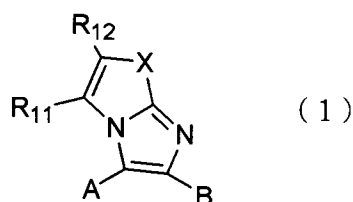
【課題を解決するための手段】

【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】



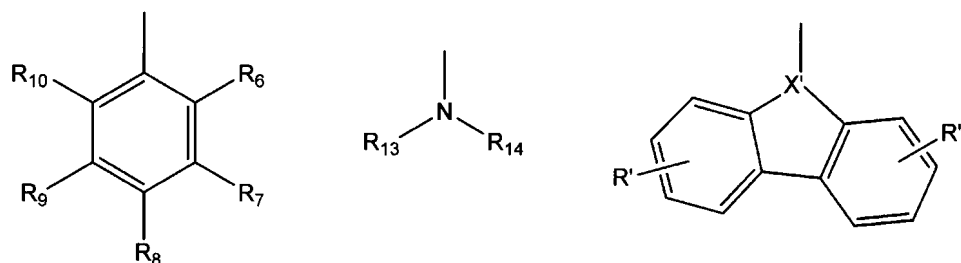
20

【0012】

前記式中、Aは、下記式：

【0013】

【化2】



30

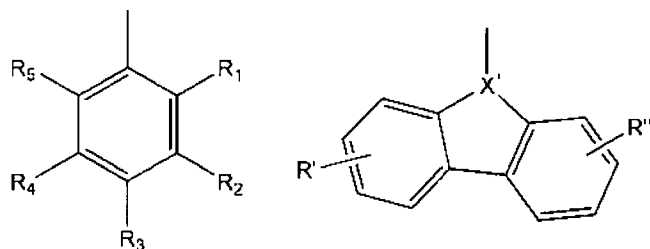
【0014】

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、CR または N であり、

R₁ ないし R₁₂ 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 R₁₂ 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、

前記 R₁₃ と R₁₄ 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。

【0017】

本発明の他の技術的課題は、一对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。

【0020】

本発明の第一は、下記式(1)：

【0021】

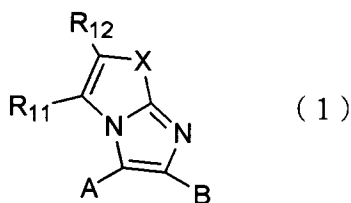
10

20

30

40

【化 4】



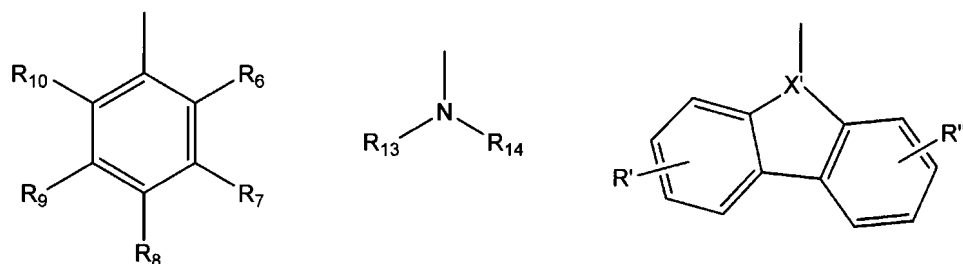
【0022】

前記式中、Aは、下記式：

10

【0023】

【化 5】



20

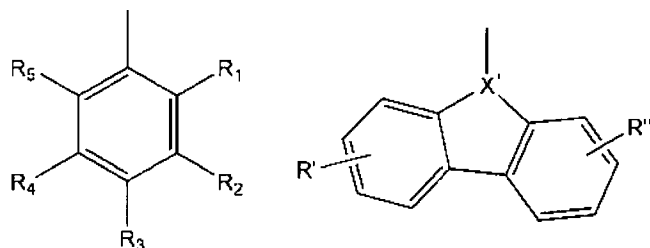
【0024】

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R₁₂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R₁₂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 R₁₃ と R₁₄ 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 C1-C30 のアルキル基、C1-C30 のアルケニル基、C1-C30 のアルキニル基、C6-C30 のアリール基、C7-C20 のアリールアルキル基、C2-C20 のヘテロアリール基、または C3-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、イソプ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、単独または組合わせて使われて、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、前記環はペンダ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

【 0 0 3 2 】

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。

【 0 0 3 3 】

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

【 0 0 3 4 】

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、トリフェニル基、ピレニル基、クリセニル基、テトラセニル基、プレイアデニル基、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

【 0 0 3 5 】

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

【 0 0 3 6 】

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。

【 0 0 3 7 】

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。

【 0 0 3 8 】

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。

40

【 0 0 3 9 】

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、 R_1 ないし R_{12} のうち互いに隣接した基、例えば、 R_1 と R_2 、 R_3 と R_4 、 R_6 と R_7 、 R_8 と R_9 、 R_{11} と R_{12} 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、 R_1 ないし R_{12} 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。

10

【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。

20

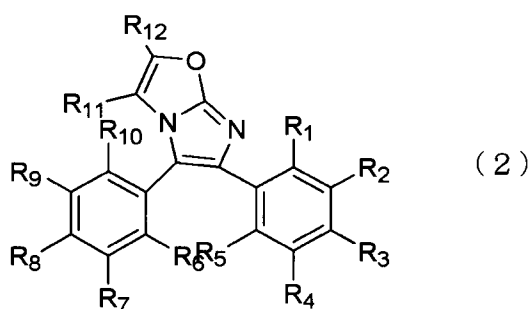
【0042】

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 との組合わせによって、下記式(2)ないし(13)で表わされる化合物が挙げられる。

30

【0043】

【化7】



40

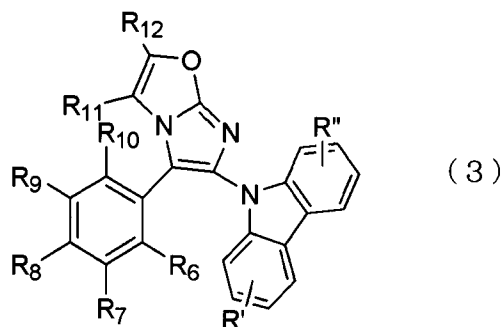
【0044】

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】

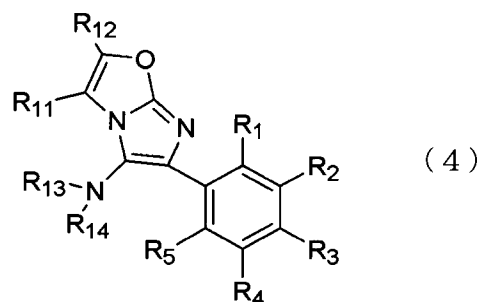
前記式中、 R_6 ないし R_{10} は、上記式(1)の定義と同様であり、

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】

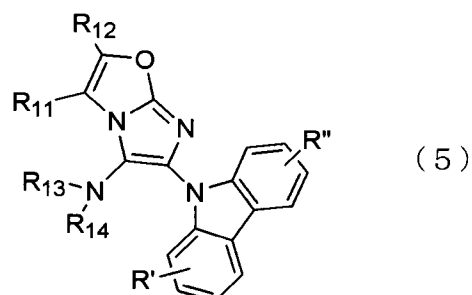
前記式中、 R_1 ないし R_5 は、上記式(1)の定義と同様であり、

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} ないし 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。

【0049】

【化 10】



40

【0050】

前記式中、 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、

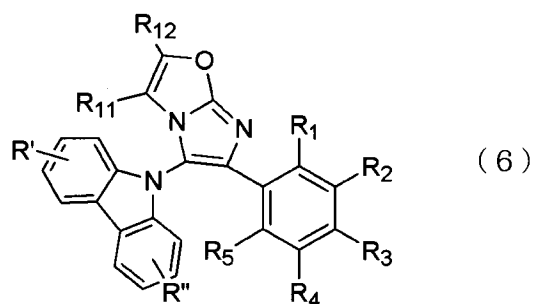
R_{13} 及び R_{14} は、互いに独立して、炭素数6ないし30の置換または非置換のアリール基または炭素数2ないし30の置換または非置換のヘテロアリール基であり、

R' 及び R'' はいずれも水素である。

50

【 0 0 5 1 】

【 化 1 1 】



10

【 0 0 5 2 】

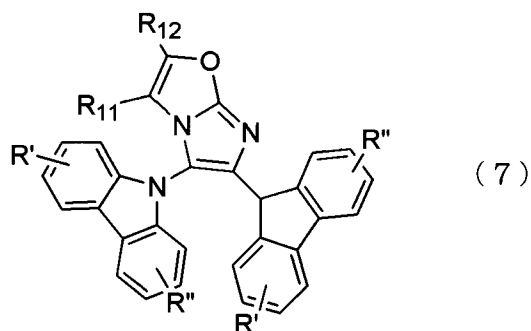
前記式中、 R_1 ないし R_5 は、上記式 (1) の定義と同様であり、

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 3 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。

【 0 0 5 3 】

【 化 1 2 】



20

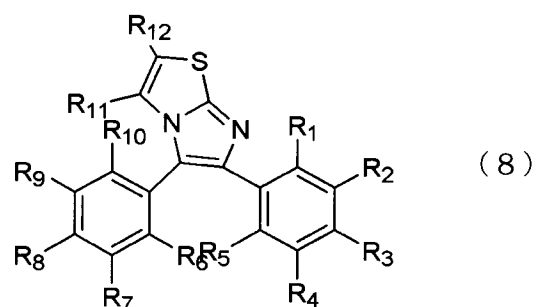
【 0 0 5 4 】

前記式中、 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 3 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。

【 0 0 5 5 】

【 化 1 3 】



40

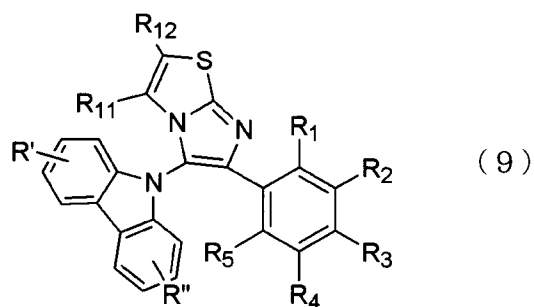
【 0 0 5 6 】

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 2 ないし 3 の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成する。

【 0 0 5 7 】

【化 1 4】



10

【0058】

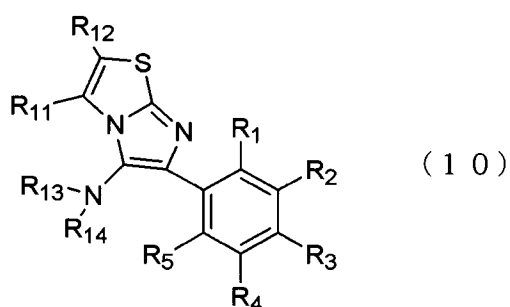
前記式中、R₁ ないし R₅ は、上記式(1)の定義と同様であり、

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炭素輪を形成し、

R' 及び R'' は、いずれも水素である。

【0059】

【化 1 5】



20

【0060】

前記式中、R₁ ないし R₅ は、上記式(1)の定義と同様であり、

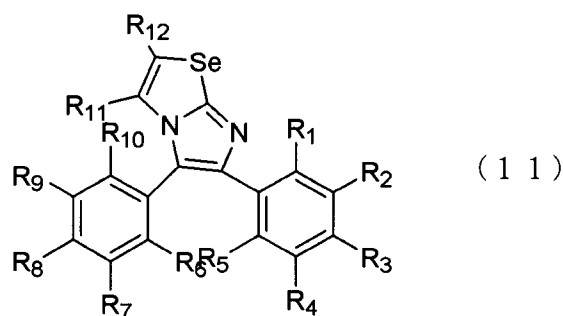
R₁₁ 及び R₁₂ は、いずれも水素であるか、または互いに結合されて炭素数2ないし30の置換または非置換の飽和または不飽和環を形成し、

30

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。

【0061】

【化 1 6】



40

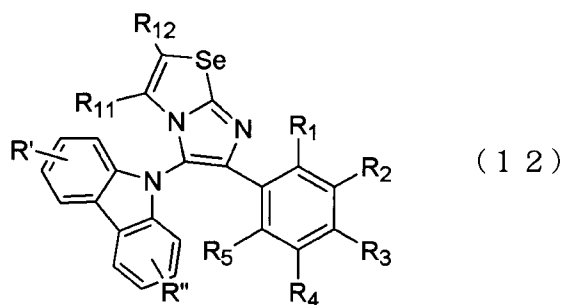
【0062】

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】

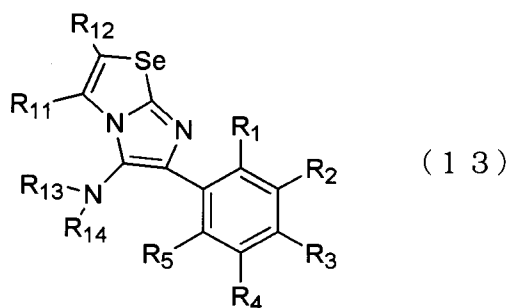
前記式中、 R_1 ないし R_5 は、上記式(1)の定義と同様であり、

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' 及び R'' は、いずれも水素である。

【0065】

【化 18】



20

【0066】

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、

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。

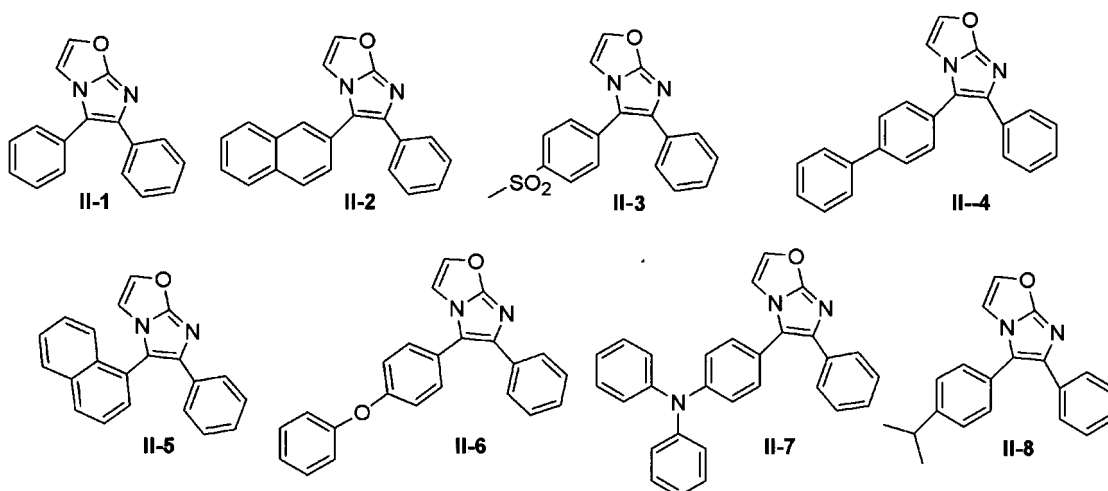
30

【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】

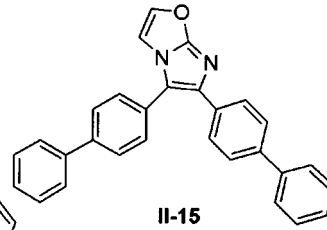
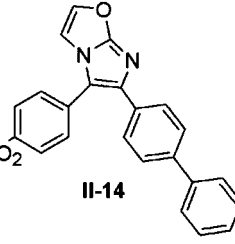
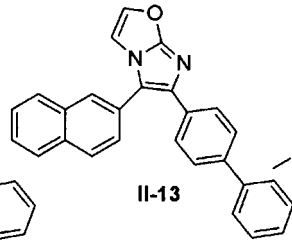
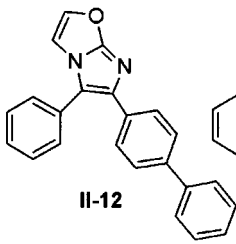
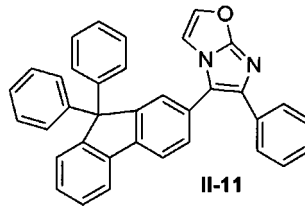
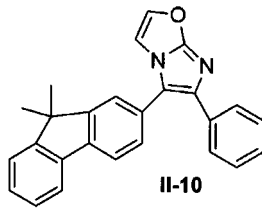
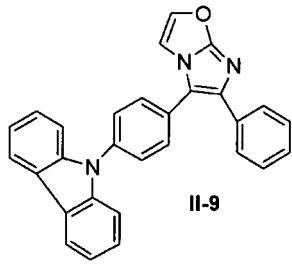


40

50

【 0 0 6 9 】

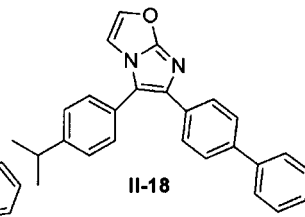
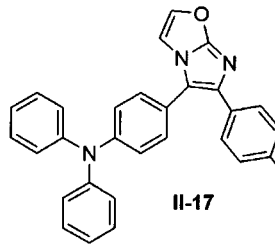
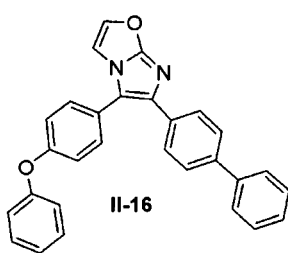
【 化 1 9 - 2 】



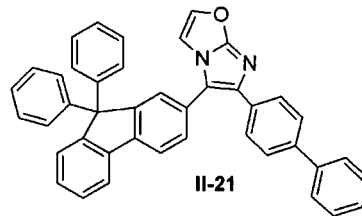
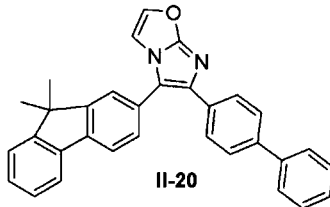
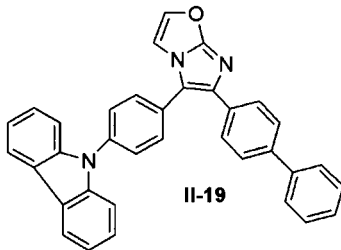
10

【 0 0 7 0 】

【 化 1 9 - 3 】



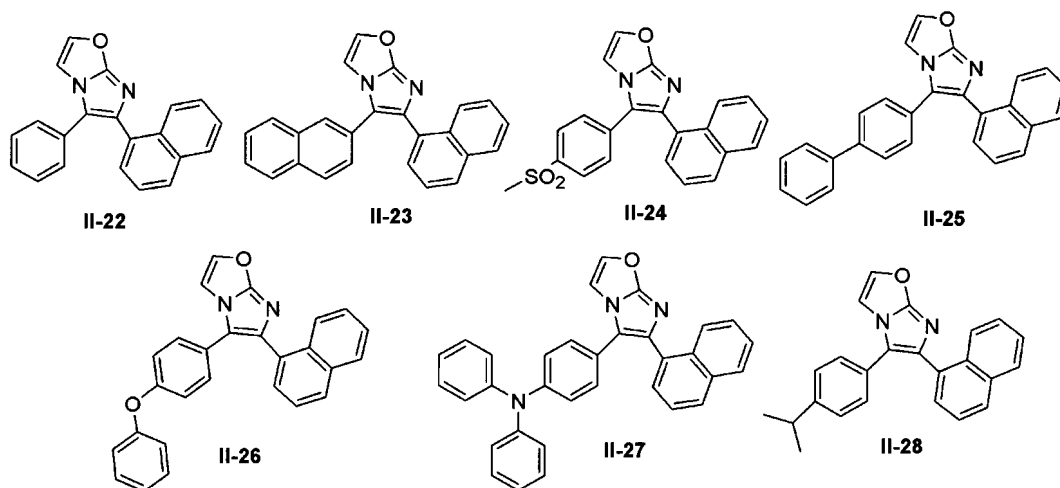
20



30

【 0 0 7 1 】

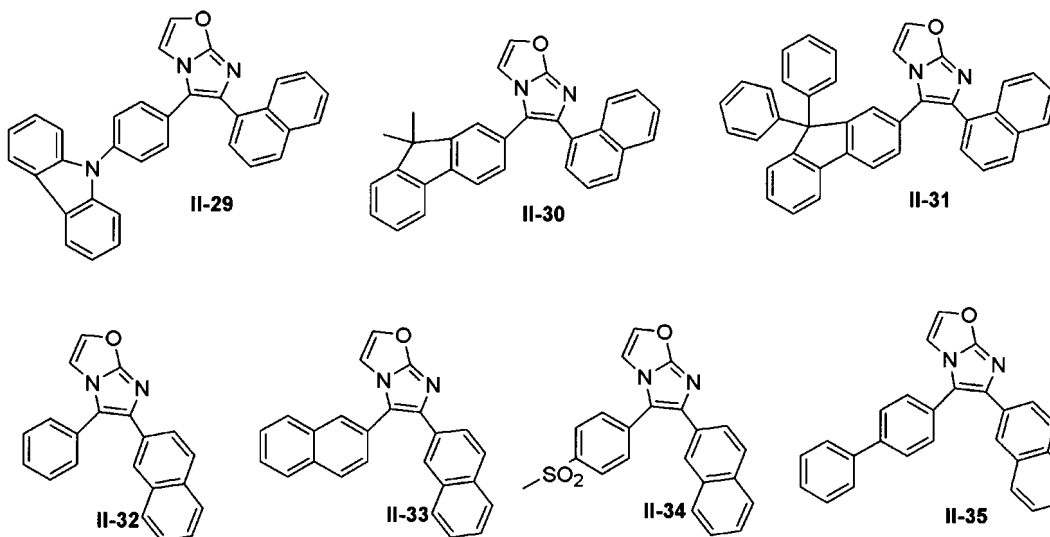
【化 19 - 4】



10

【 0 0 7 2】

【化 19 - 5】

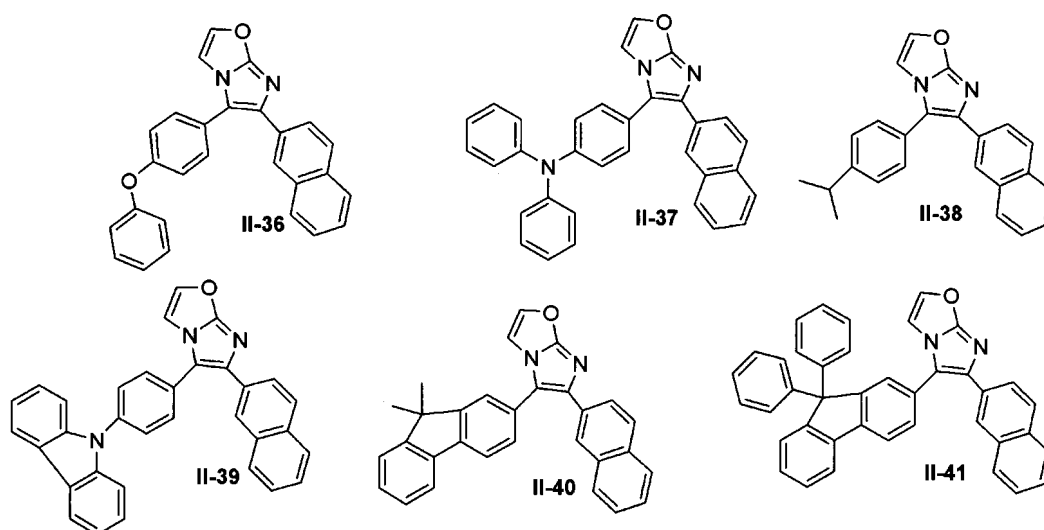


20

30

【 0 0 7 3】

【化 19 - 6】

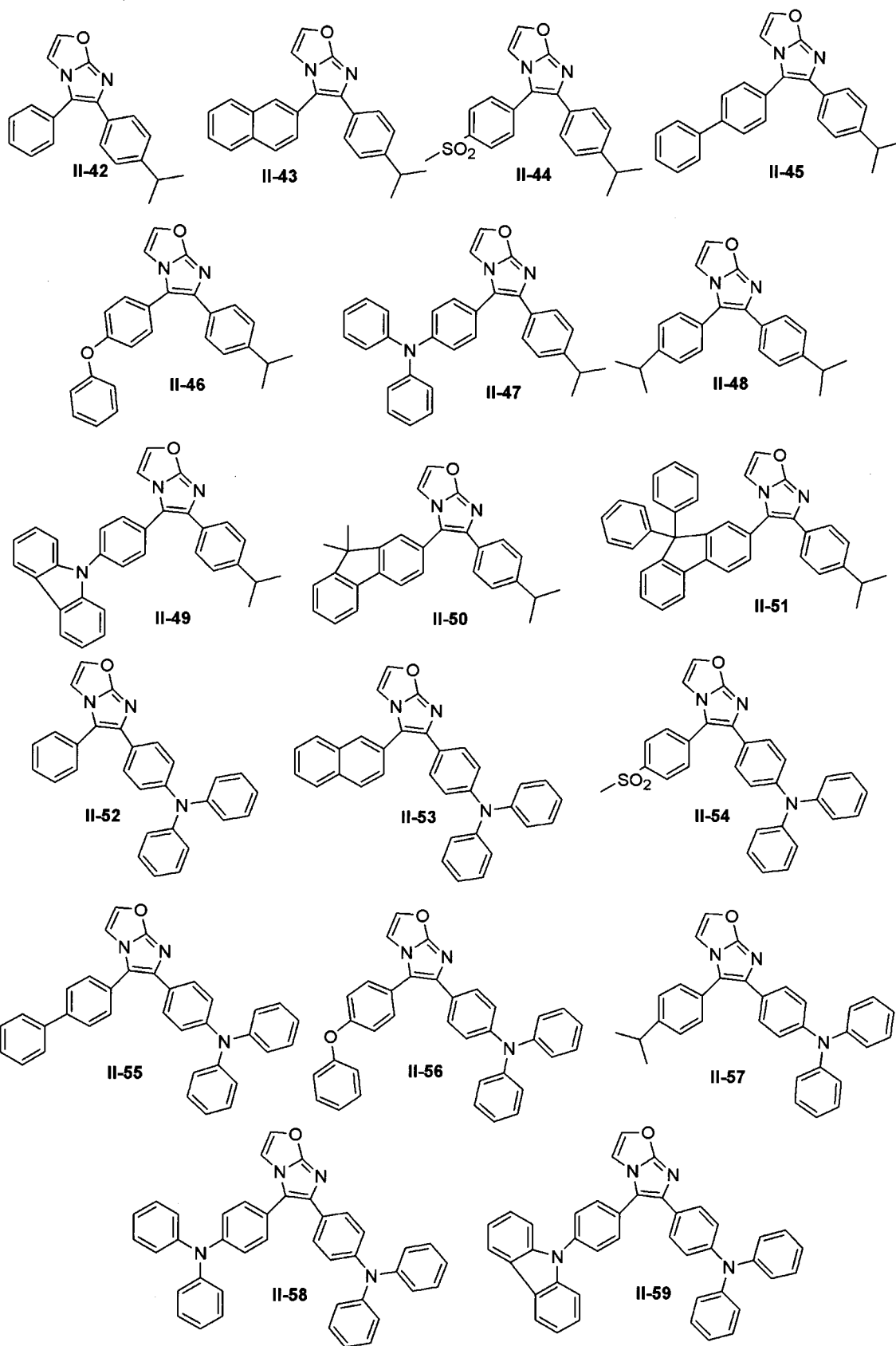


40

【 0 0 7 4】

50

【化 19 - 7】



10

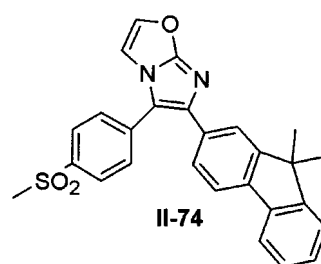
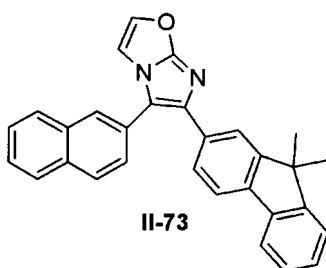
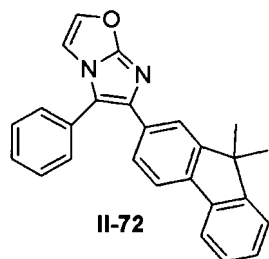
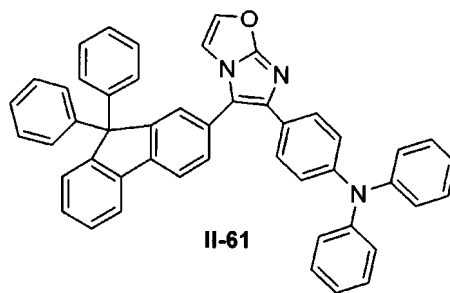
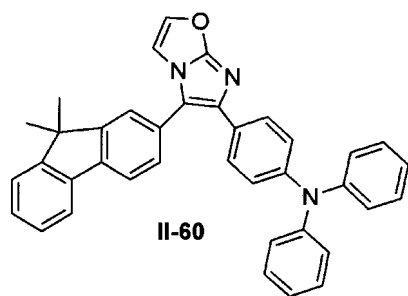
20

30

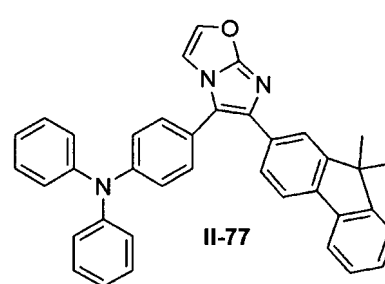
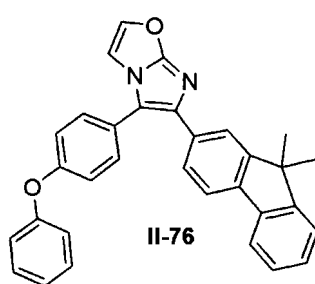
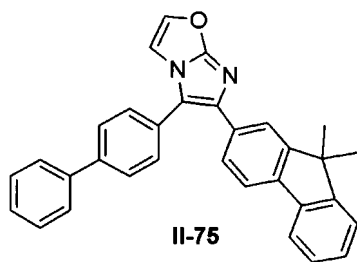
40

【0075】

【化 19 - 8】



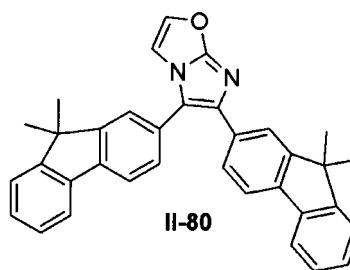
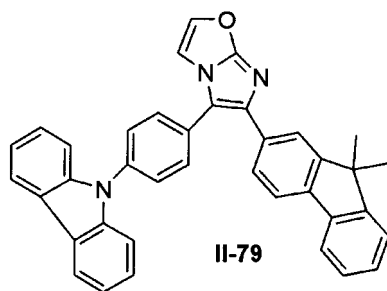
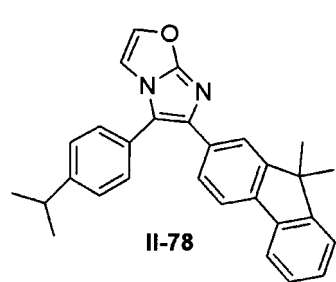
10



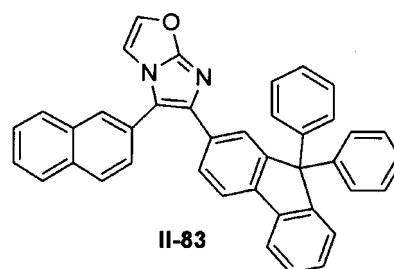
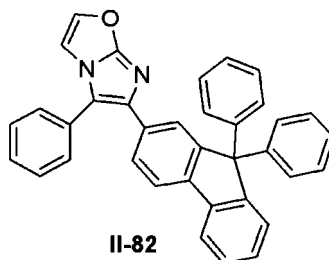
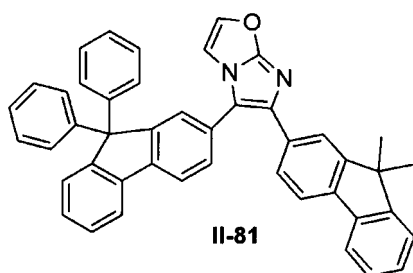
20

【 0 0 7 6 】

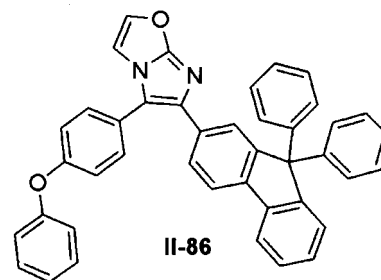
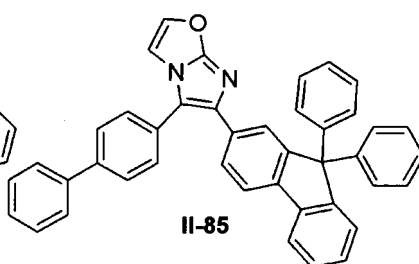
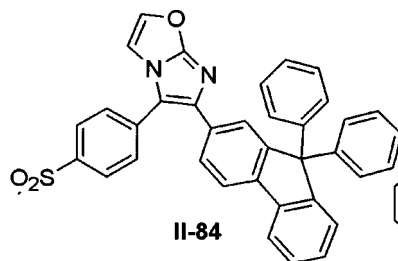
【化 19 - 9】



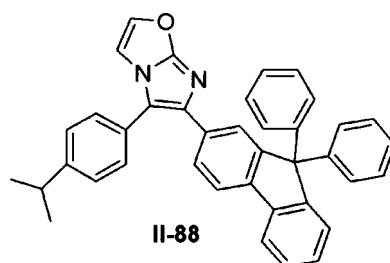
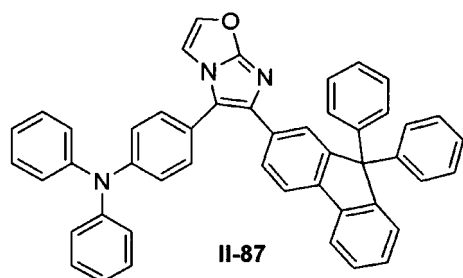
10



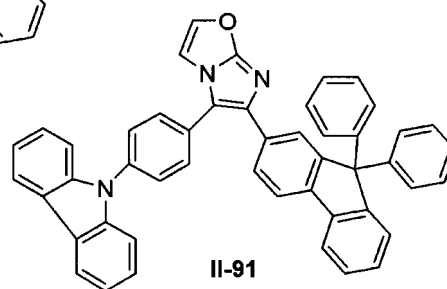
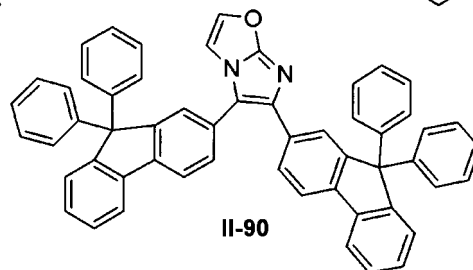
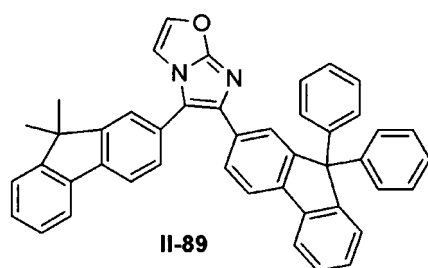
20



30

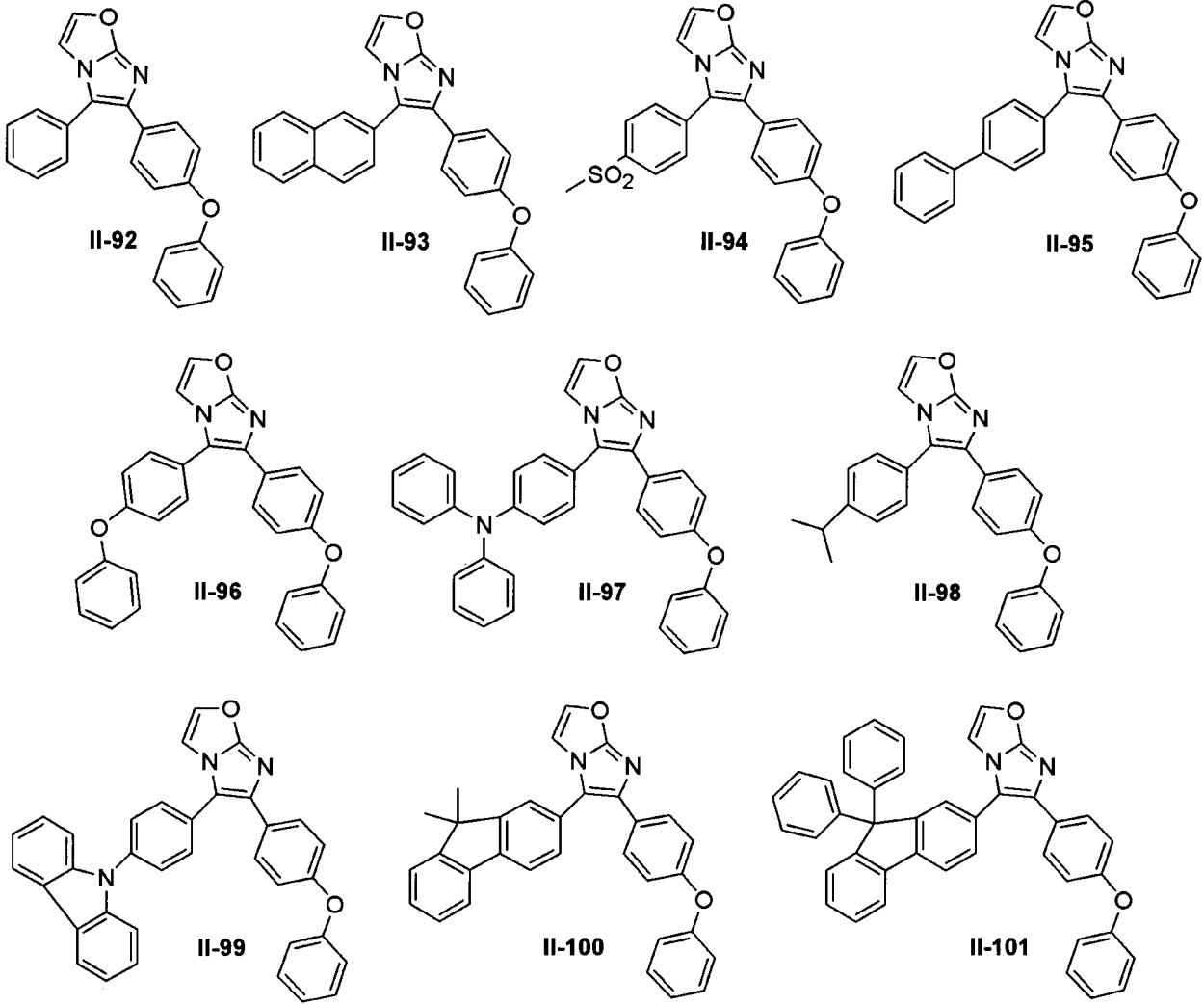


40



【 0 0 7 7 】

【化 19 - 10】



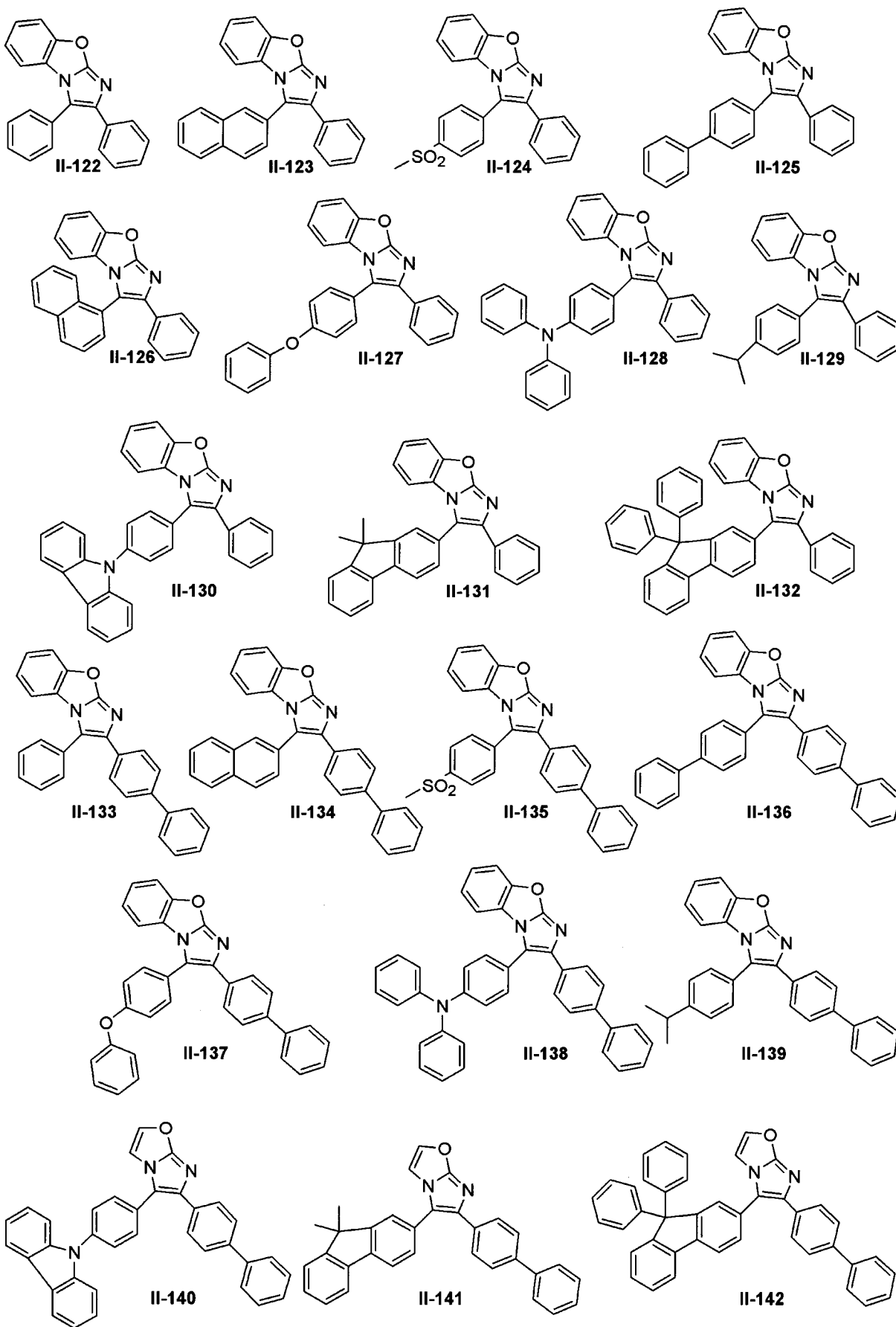
10

20

30

【 0 0 7 8 】

【化 19 - 11】



10

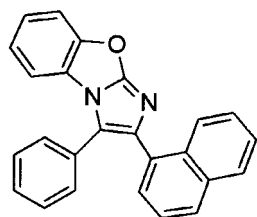
20

30

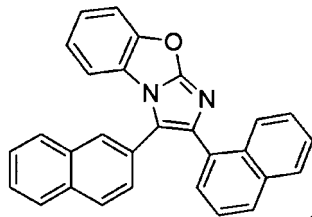
40

【 0 0 7 9 】

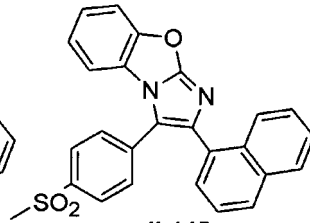
【化 1 9 - 1 2】



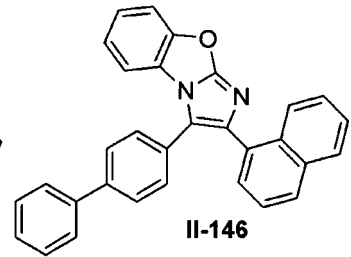
II-143



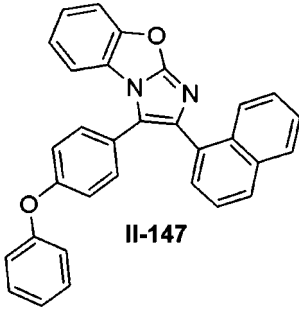
II-144



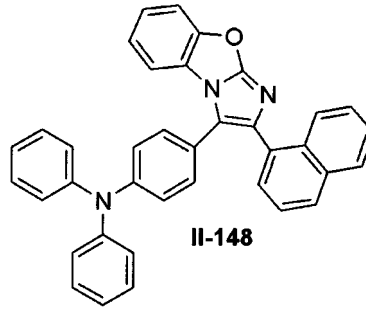
II-145



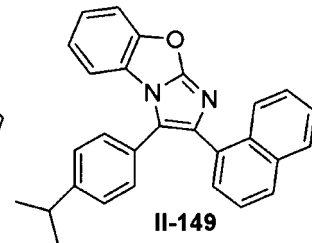
II-146



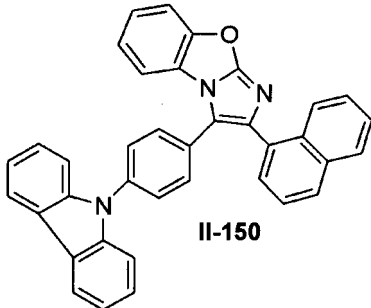
II-147



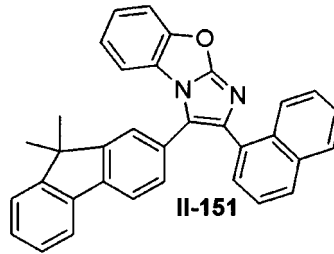
II-148



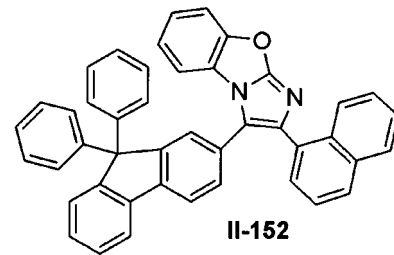
II-149



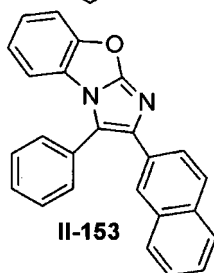
II-150



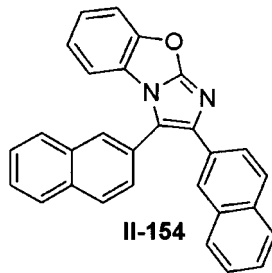
II-151



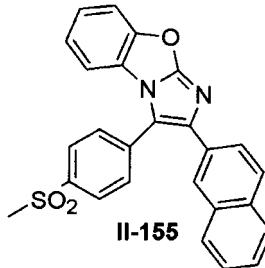
II-152



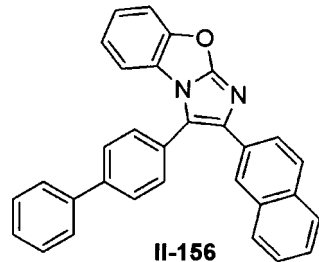
II-153



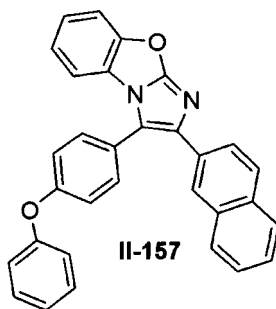
II-154



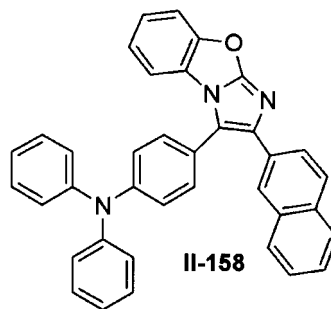
II-155



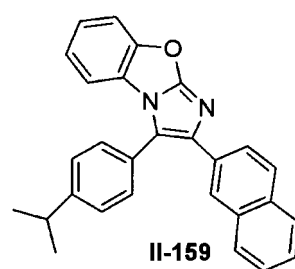
II-156



II-157



II-158



II-159

【 0 0 8 0 】

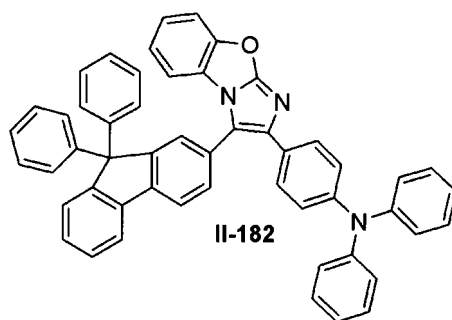
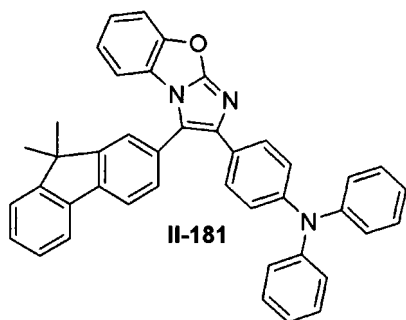
10

20

30

40

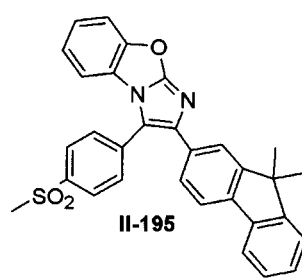
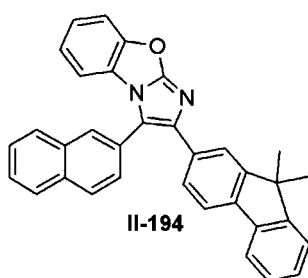
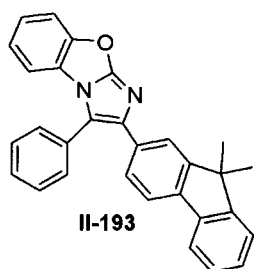
【化 19 - 13】



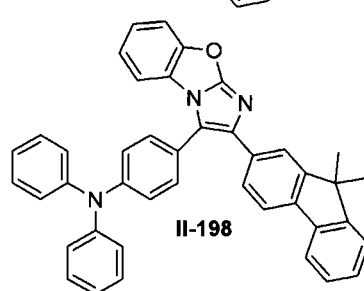
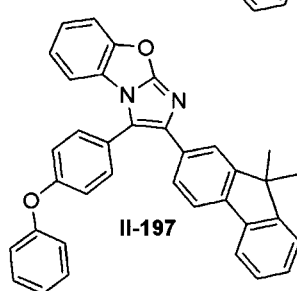
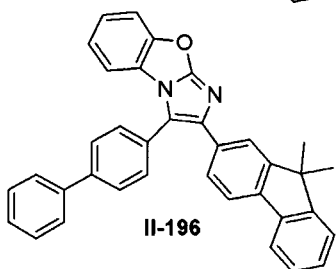
10

【 0 0 8 1】

【化 19 - 14】



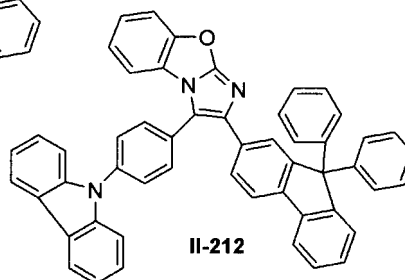
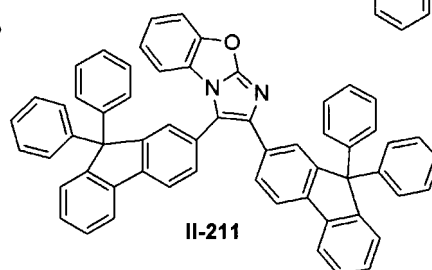
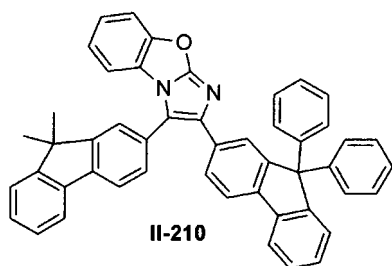
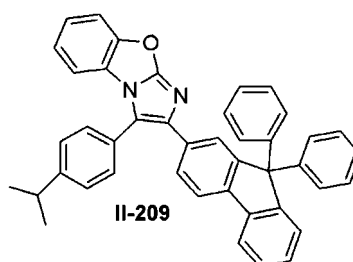
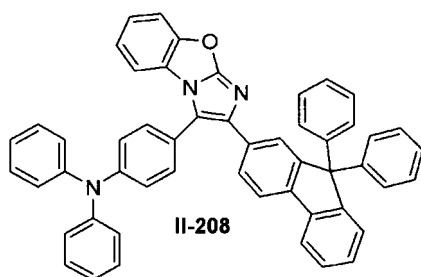
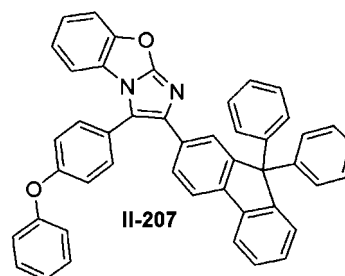
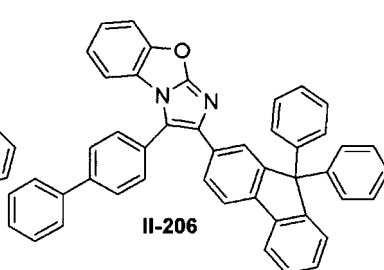
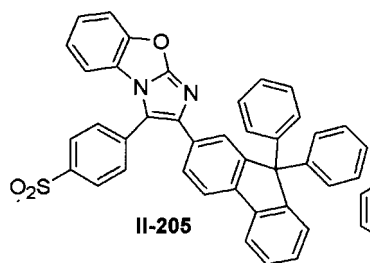
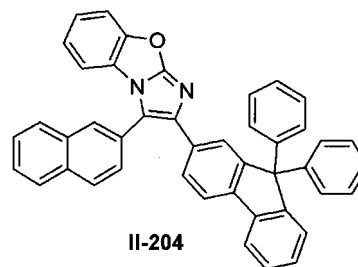
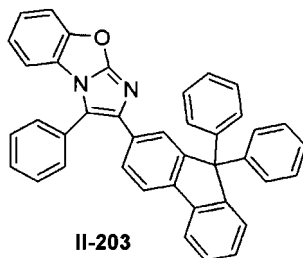
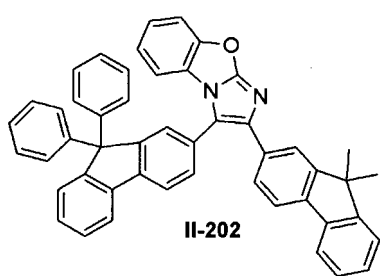
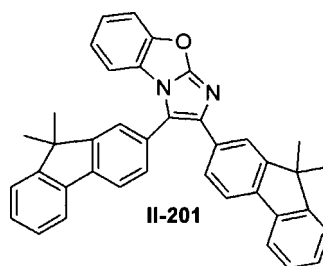
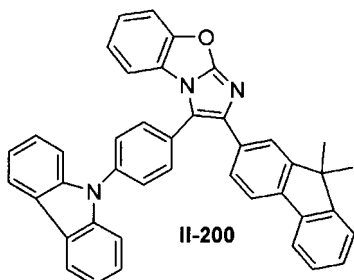
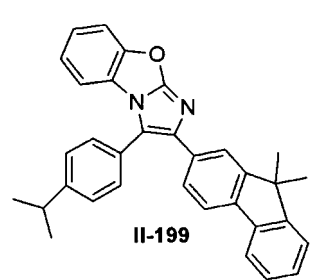
20



【 0 0 8 2】

30

【化 19 - 15】



10

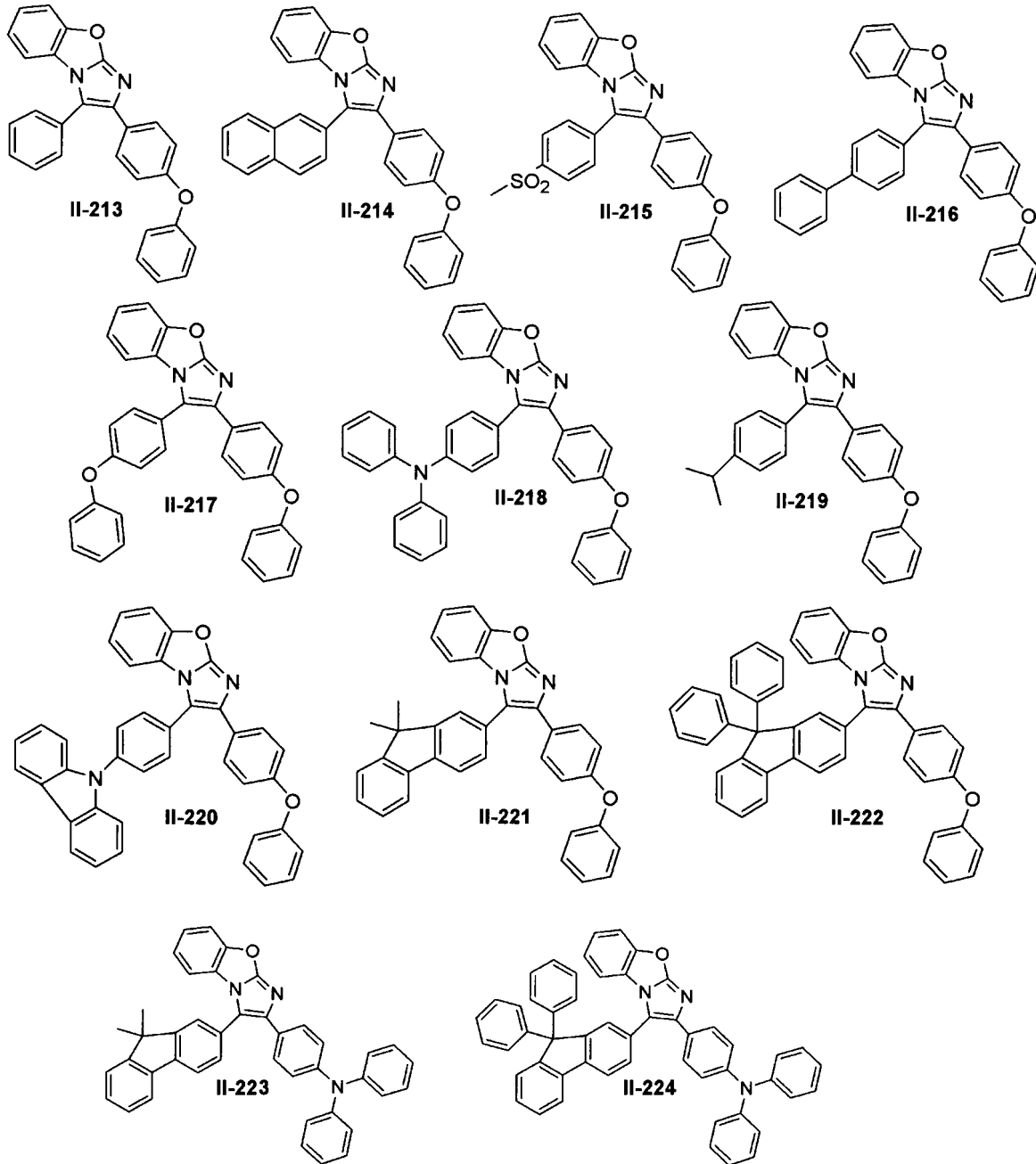
20

30

40

【 0 0 8 3 】

【化 19 - 16】



10

20

30

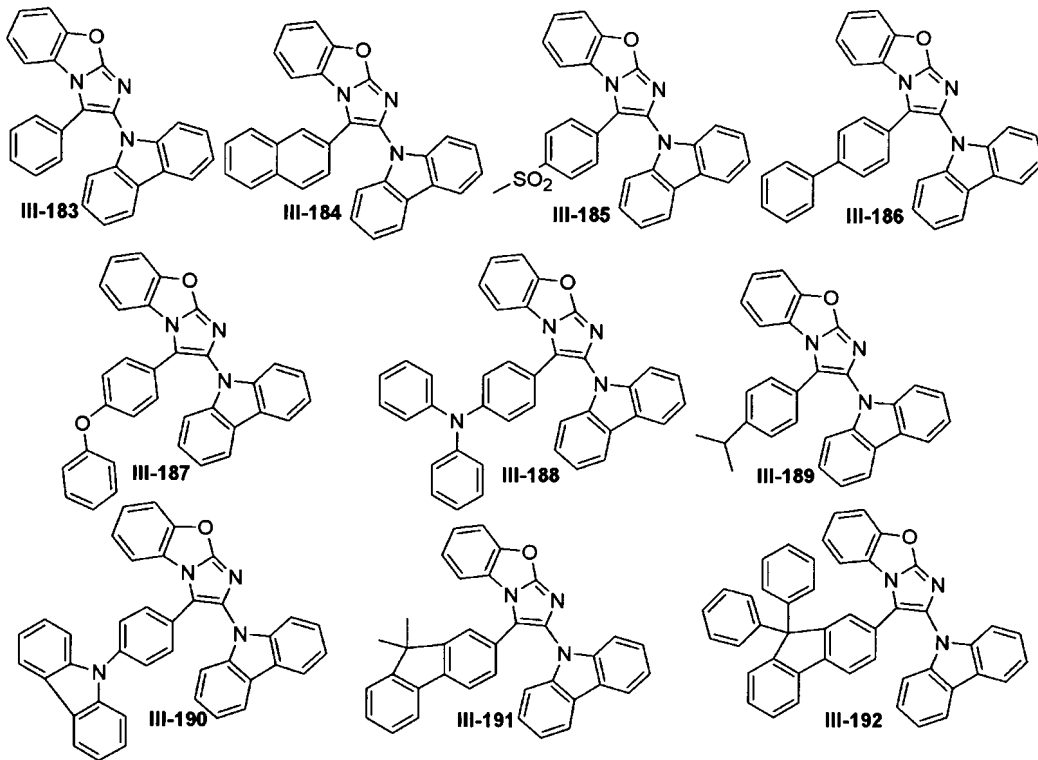
【0084】

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】



10

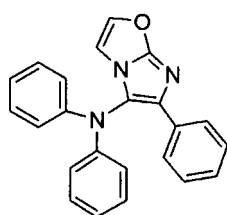
20

【0086】

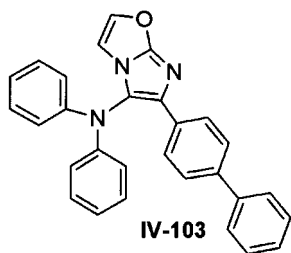
前記式(4)で表わされる化合物は下記構造式で表わされる化合物がある。

【0087】

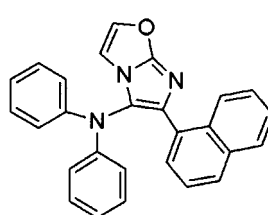
【化 2 1 - 1】



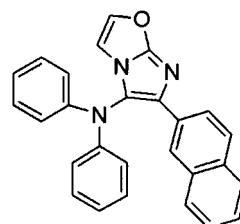
IV-102



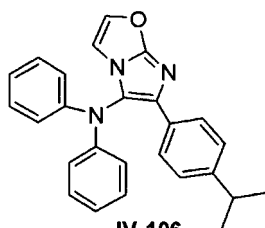
IV-103



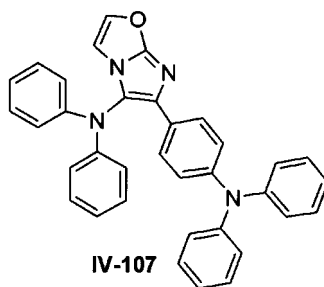
IV-104



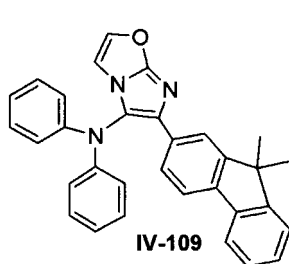
IV-105



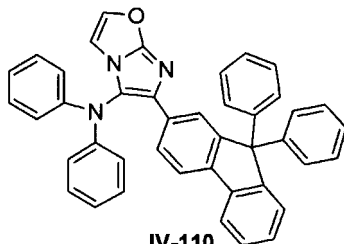
IV-106



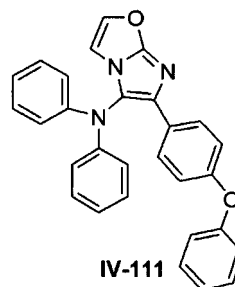
IV-107



IV-109



IV-110



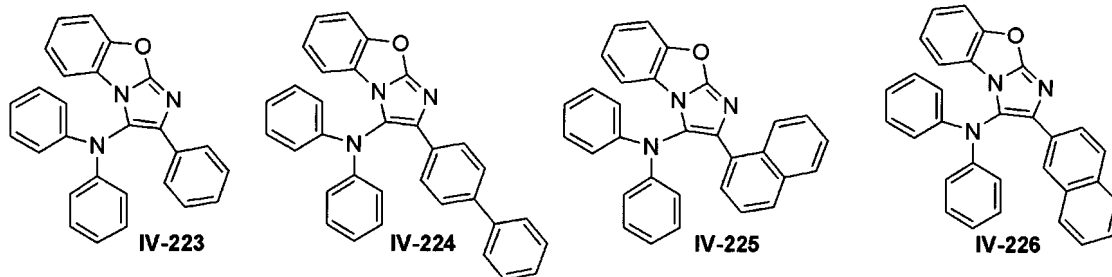
IV-111

10

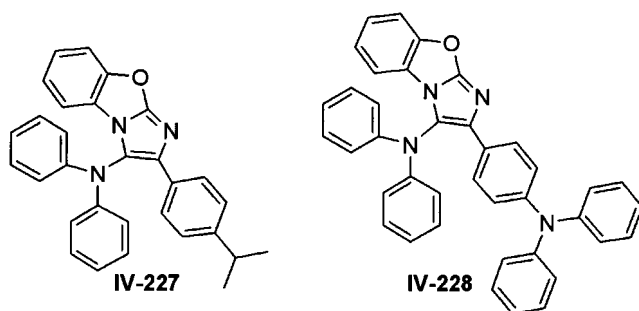
20

【 0 0 8 8 】

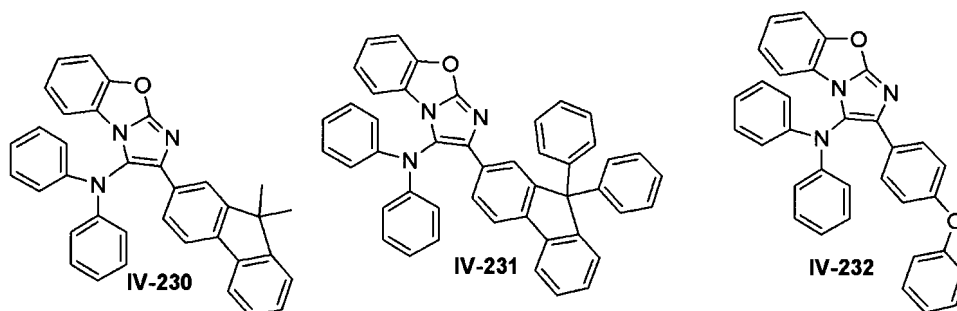
【化 2 1 - 2】



10



20

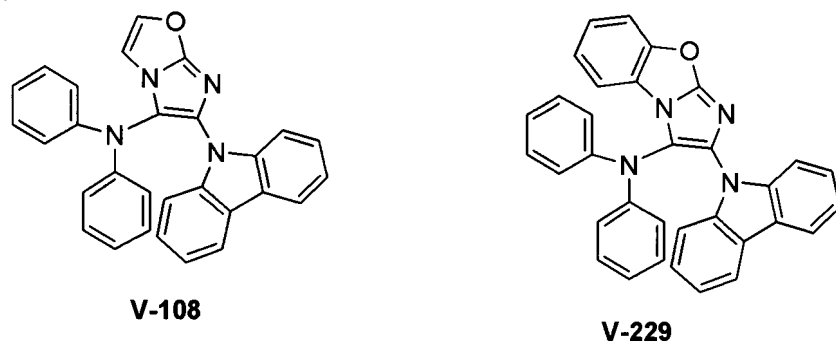


【 0 0 8 9 】

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

【 0 0 9 0 】

【化 2 2】



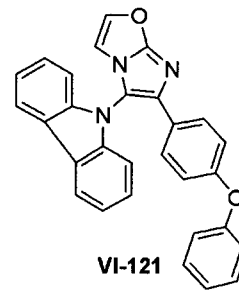
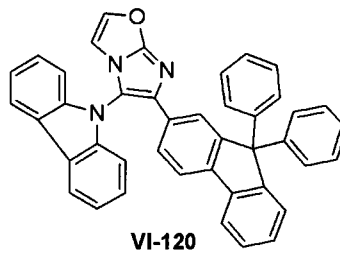
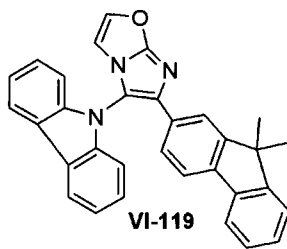
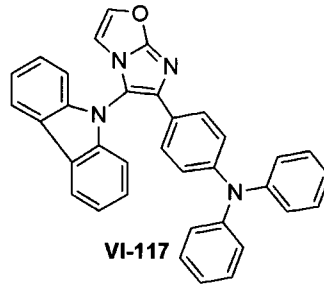
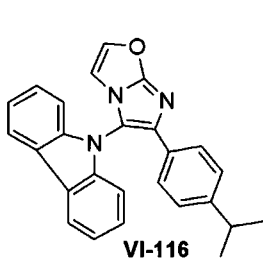
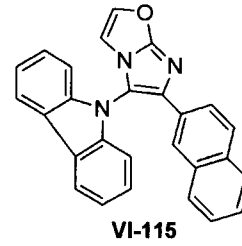
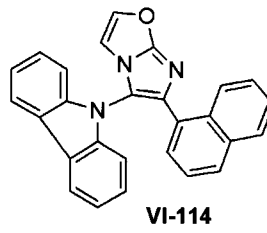
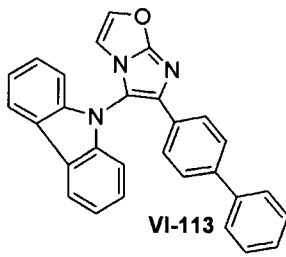
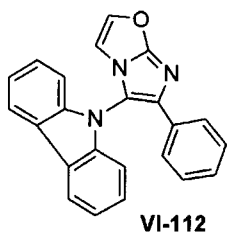
40

【 0 0 9 1 】

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。

【 0 0 9 2 】

【化 2 3 - 1】

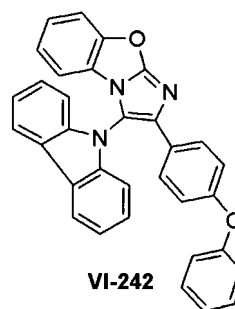
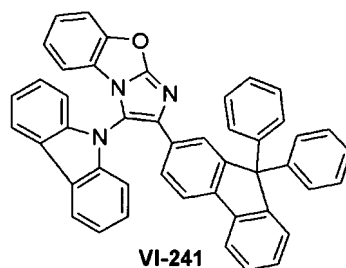
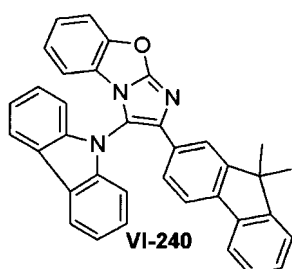
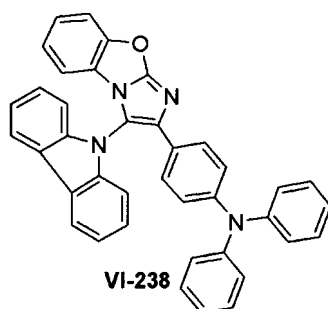
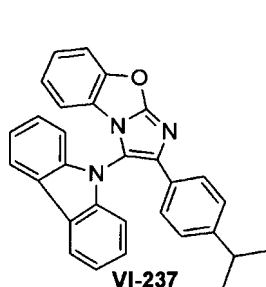
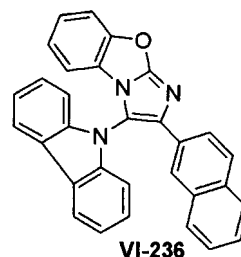
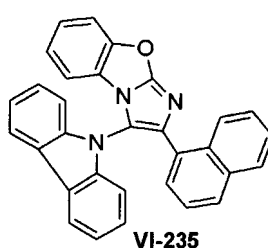
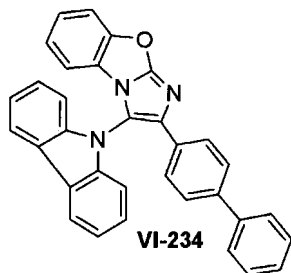
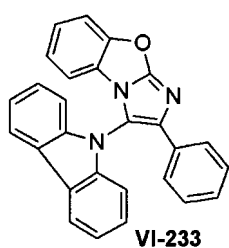


【 0 0 9 3 】

10

20

【化 2 3 - 2】



10

20

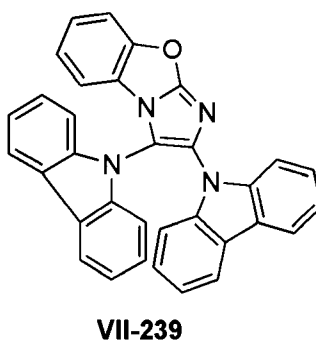
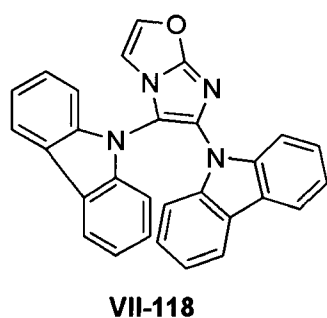
【 0 0 9 4 】

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

【 0 0 9 5 】

【化 2 4】



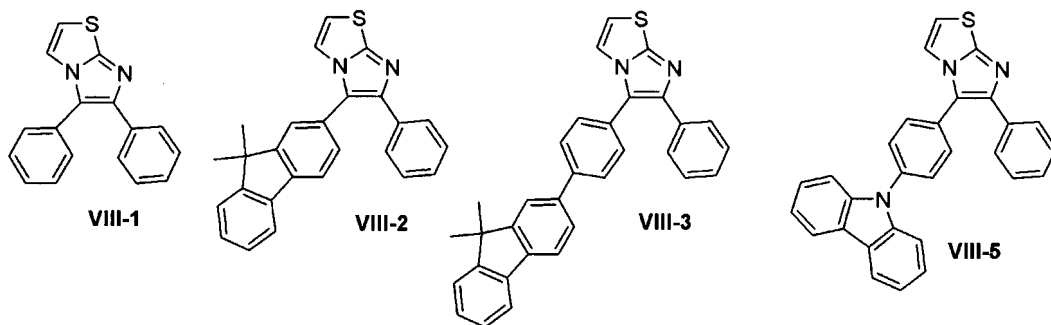
40

【 0 0 9 6 】

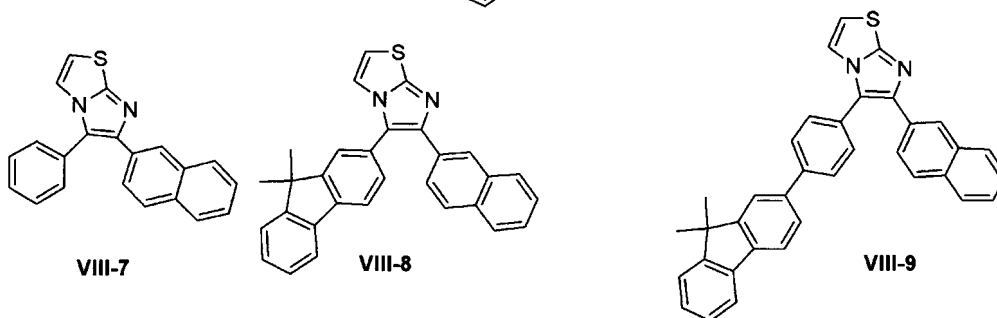
前記式(8)で表わされる化合物の具体的な例として、下記構造式で表わされる化合物がある。

【 0 0 9 7 】

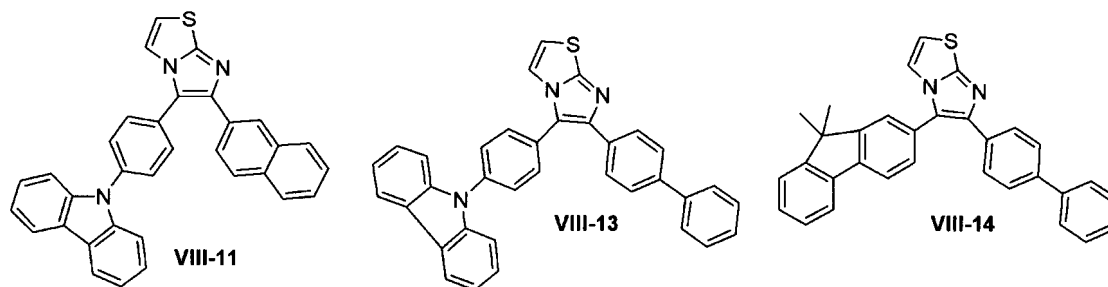
【化 2 5 - 1】



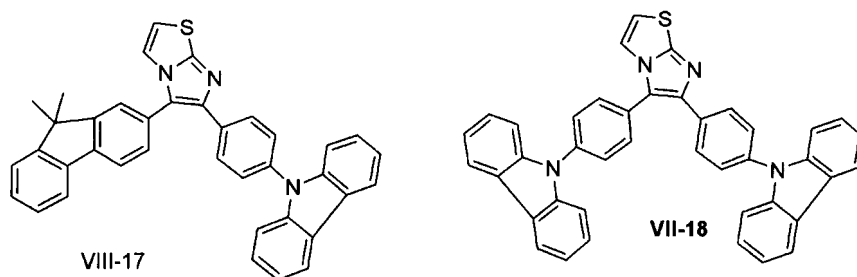
10



20



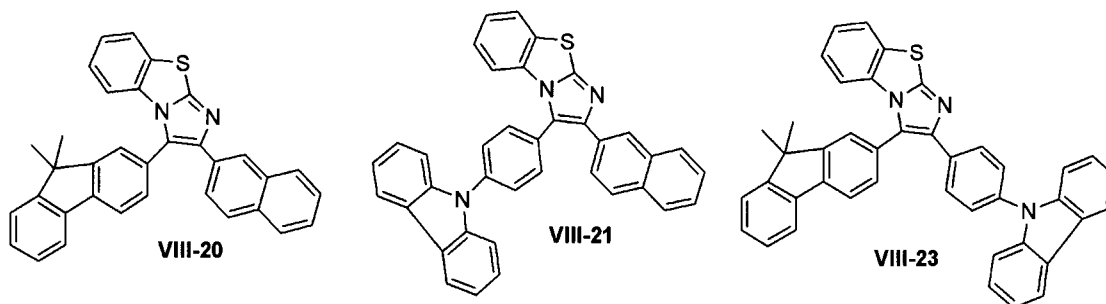
30



【 0 0 9 8 】

【化 2 5 - 2】

40

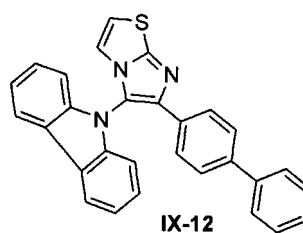
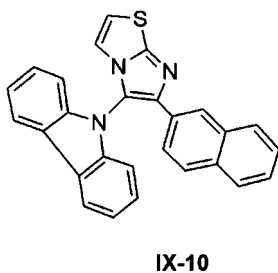
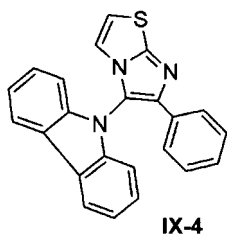


【 0 0 9 9 】

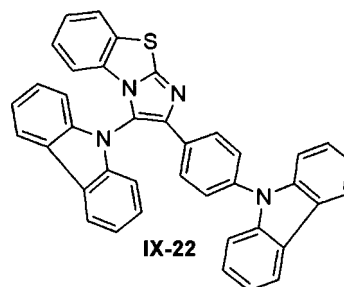
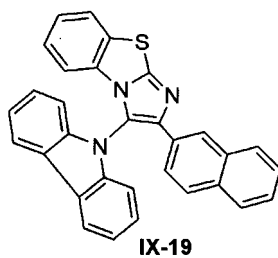
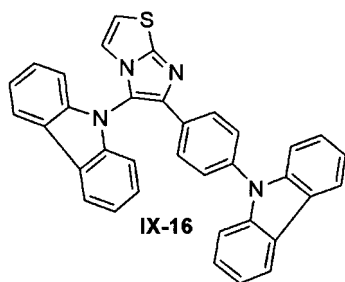
前記式(9)で表わされる化合物の例として、下記構造式で表わされる化合物がある。

【 0 1 0 0 】

【化 2 6】



10



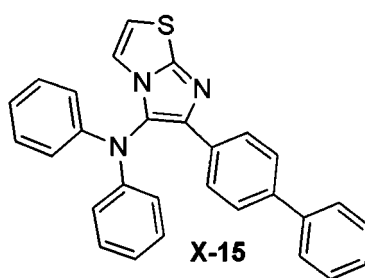
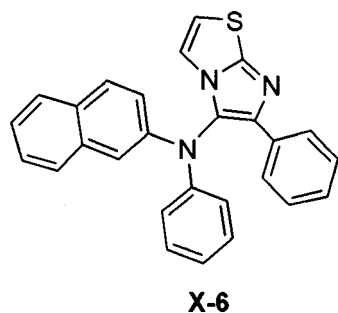
【 0 1 0 1】

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

【 0 1 0 2】

【化 2 7】



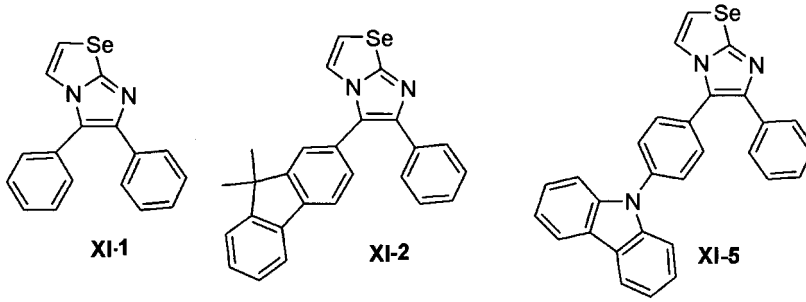
30

【 0 1 0 3】

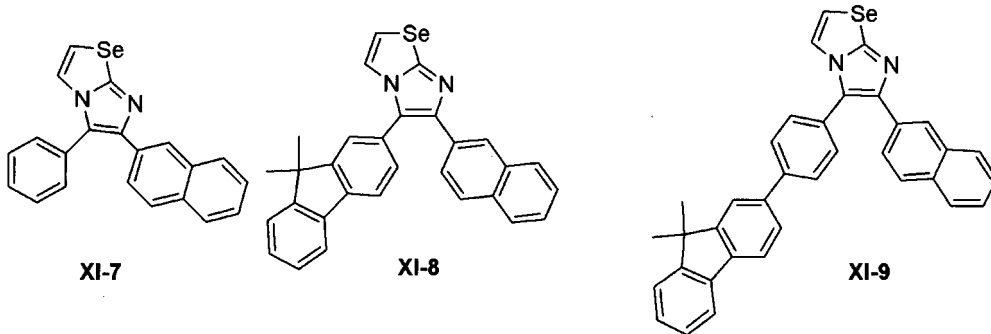
前述した式(11)で表わされる化合物の例として下記構造式で表わされる化合物を挙げられる。

【 0 1 0 4】

【化 28 - 1】



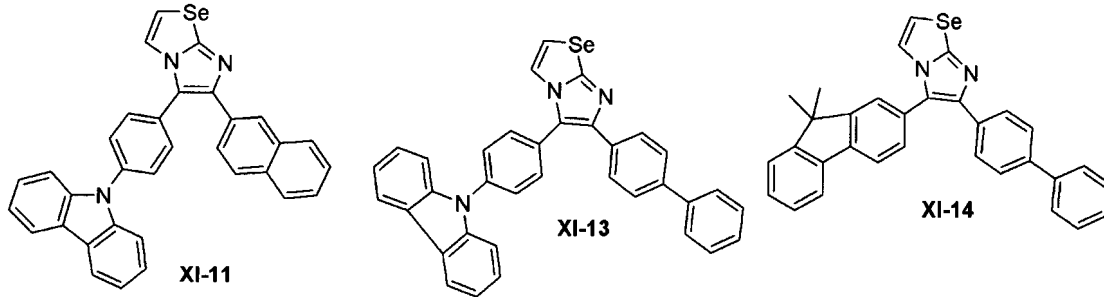
10



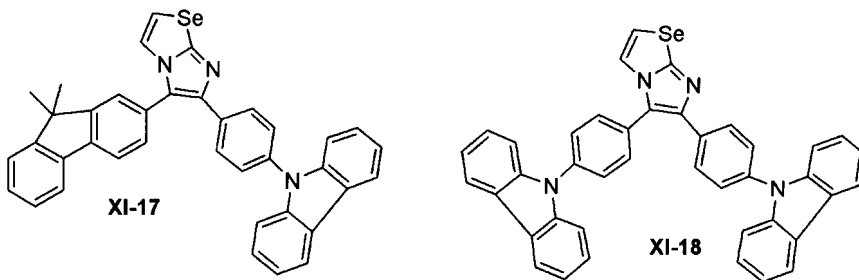
20

【 0 1 0 5 】

【化 28 - 2】



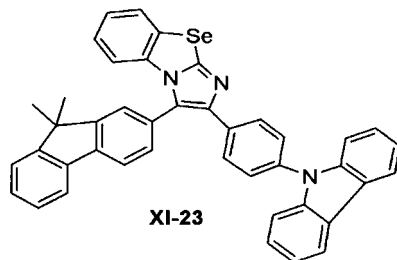
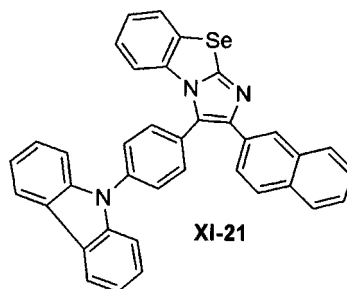
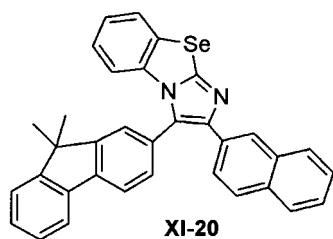
30



40

【 0 1 0 6 】

【化 28 - 3】



10

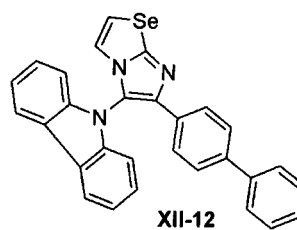
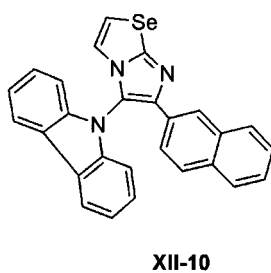
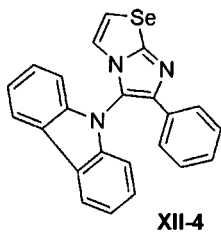
【0107】

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。

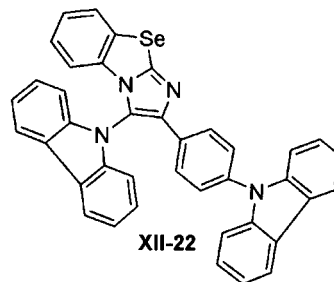
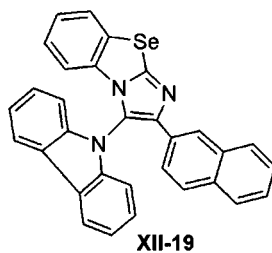
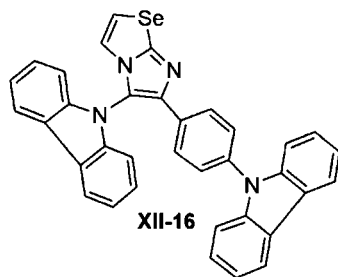
【0108】

20

【化 29】



30



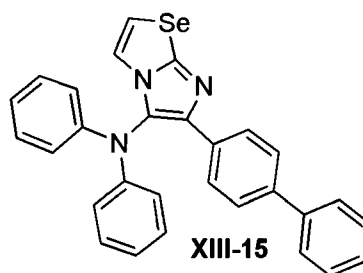
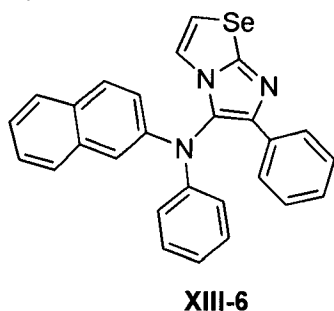
【0109】

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。

40

【0110】

【化 3 0】



10

【 0 1 1 1】

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、公知の方法を単独で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。

【 0 1 1 2】

上記本発明のイミダゾール環含有化合物は、単独であるいはドーパ剤と組み合わせて、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。

20

【 0 1 1 3】

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。

30

【 0 1 1 4】

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

【 0 1 1 5】

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。具体低には、透明で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。

【 0 1 1 6】

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

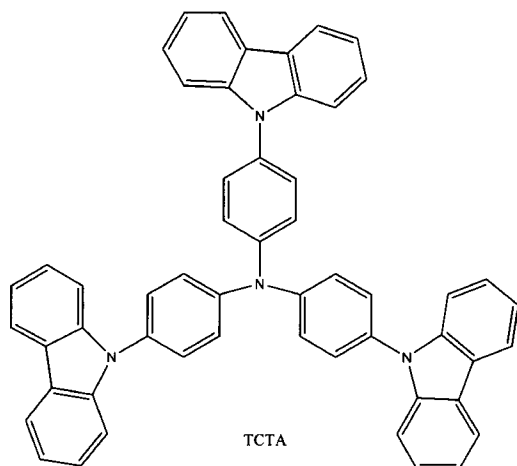
50

：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（C u P c）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。

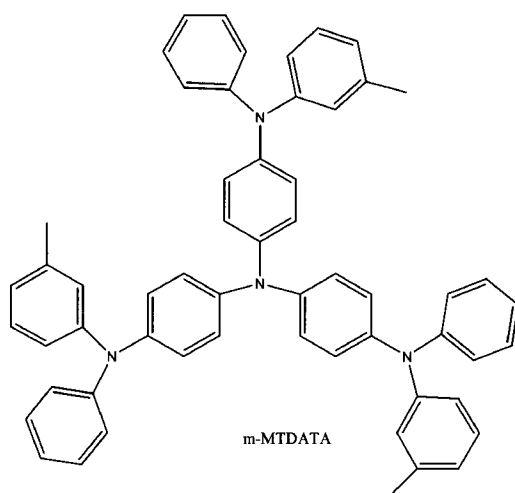
【 0 1 1 7 】

【 化 3 1 】

10



20



30

【 0 1 1 8 】

次に、前記H I L上部に、ホール輸送層（H o l e T r a n s p o r t i n g L a y e r : H T 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 T Lを形成する。この際、H T 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 T 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 T L用物質を含んでもよい。この際、他のH T L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（ T P D ） 、 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

【 0 1 1 9 】

次いで、前記H T L上部に、電界発光層（ E l e c t r o L u m i n e s c e n t L

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、ドーパ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パ剤は、特別に制限されず、公知のドーパ剤が使用できるが、可視領域の燐光または蛍光ドーパ剤であることが好ましい。蛍光ドーパ剤としては、例えば、IDE102、IDE105(出光社製)などが使用でき、前記燐光ドーパ剤としては、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 et al. Appl. Phys. Lett., 79, 2082-2084, 2001)、PtOEP(platinum(II) Octaethylporphyrin) 10、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】

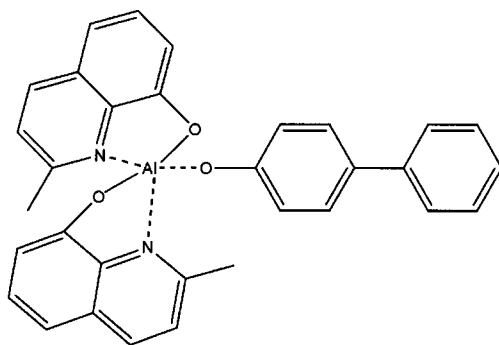
発光層がドーパ剤を含む場合の、ドーパ剤の含有量は、特に制限されず、公知と同様の量が使用できる。例えば、EML用形成材料100質量部(すなわち、ホストである式(1)の化合物及びドーパ剤の総質量が100質量部)を基準として、0.1~20質量部、特に0.5~12質量部であることが望ましい。この際、ドーパ剤の含有量が0.1質量部未満であれば、ドーパ剤の添加による効果が十分でない可能性がある。これに対して 20、20質量部を超過すれば、燐光や蛍光いずれにも濃度消光が起きて望ましくないおそれがある。

【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パイ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が燐光ドーパ剤を含む場合には、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】

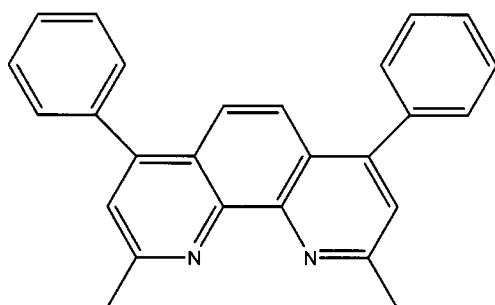
【化32】



Balq

【0124】

【化 3 3】



BCP

10

【0125】

また、必要であれば、ETL上に、電子注入層 (Electron Injecting 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VII-2の製造

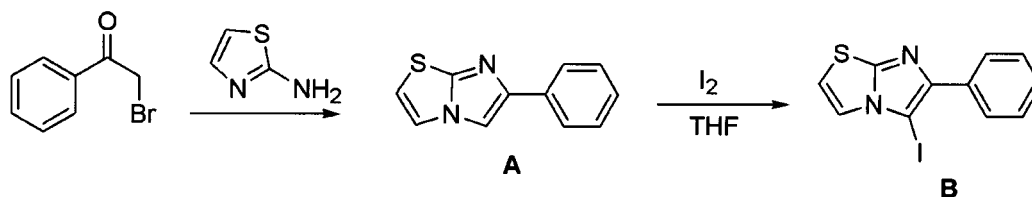
30

下記反応式(1)によって化合物VII-2を合成した。

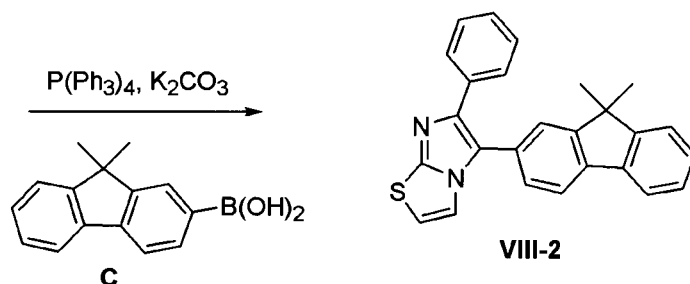
【0128】

【化 3 4】

<反応式(1)>



40



【0129】

50

< 反応式 (1) >

1) 中間体 A の合成

ブromoアセトフェノン 6 g (50 mmol) をジメトキシエタン (Dimethoxyethane : DME) (250 mL) に溶かして、2 - アミノチアゾール (10 g、50 mmol) 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 (250 mL) 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 pH 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 (200 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して、中間体 A を 8.4 g (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 1 g (5 mmol) を THF (15 mL) に溶かして、ヨウ素 (1.9 g、7.5 mmol) 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 (20 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して、中間体 B を 1.1 g (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 (CDCl_3 、400 MHz) (ppm) 8.00 (d, 2 H), 7.47 - 7.42 (m, 7 H), 7.37 - 7.32 (m, 1 H), 6.90 (s, 1 H)

3) 中間体 C の合成

2 - ブロモ - 9, 9' - ジメチルフルオレン (1.63 g、6 mmol) を THF (20 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 (3.2 mL、7.8 mmol) の溶液を滴下した後、2 時間攪拌した。ホウ酸トリメチル (2 mL、1.8 mmol) 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。12 M 塩酸水溶液で pH 1 に合わせた後、常温で 2 時間攪拌した。4 M NaOH 水溶液で pH 14 に合わせた後、ジエチルエーテル 50 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 C を白色固体の形態で 1 g (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 (CDCl_3 、400 MHz) (ppm) 8.32 (s, 2 H), 7.91 - 7.90 (m, 2 H), 7.51 (s, 1 H), 7.39 (s, 2 H), 1.63 (s, 6 H)

4) 化合物 VII I - 2 の合成

中間体 B 90 mg (0.276 mmol)、上記段階 3) で合成された中間体 C 73 mg (0.276 mmol) を THF 3 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 (7 mg、0.005 mmol) 及び K_2CO_3 (190 mg、1.38 mmol) を 3 mL の蒸留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 5 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、化合物 VII I - 2 を 100 mg (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 (CDCl_3 、400 MHz) (ppm) 7.80 (d, 1 H), 7.75 (dd, 1 H), 7.66 (dd, 2 H), 7.48 - 7.42 (m, 4 H), 7

50

. 37 - 7.34 (m, 2H), 7.27 - 7.21 (m, 3H), 6.84 (d, 1H), 1.44 (s, 6H)

前記合成例1によって得た化合物VIII-2を、 CHCl_3 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2)。その結果、化合物VIII-2は、最大吸収波長が327.5nmであることが分かった。

【0134】

前記化合物VIII-2を、 CHCl_3 で10mM濃度になるように希釈し、327.5nmでフォトルミネセンス(Photoluminescence: PL)特性を調べた(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423nmであるということが分かった(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。

10

【0135】

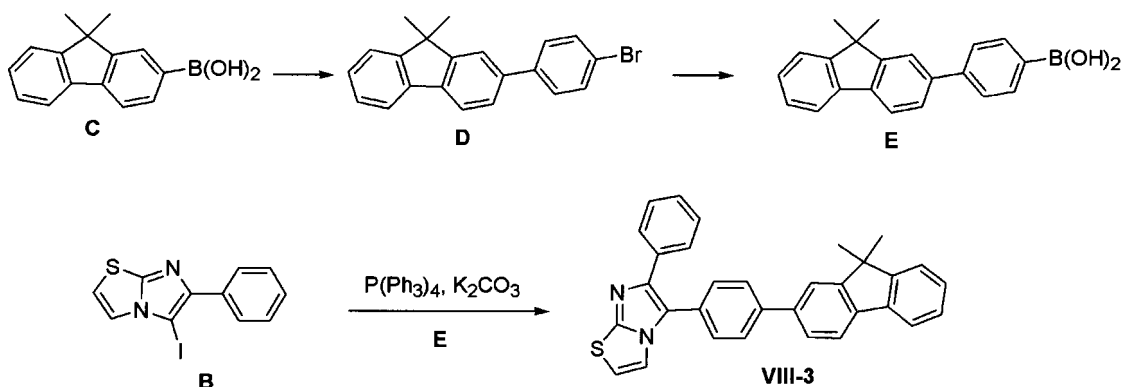
合成例2: 化合物VIII-3の合成

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)>



20

【0137】

<反応式(2)>

30

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 100mg (0.42mmol)及び1,4-ジブロモベンゼン250mg (1.05mmol)を、THF 5mL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(10mg、0.008mmol)を加え、さらに K_2CO_3 (580mg、4.2mmol)を3mLの蒸留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10mL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100mg(収率67%)得た。この中間体Dの構造は ^1H NMRで確認した。

40

【0138】

^1H NMR(CDCl_3 , 400MHz) (ppm) 7.78 (s, 1H), 7.75 - 7.73 (m, 1H), 7.60 - 7.55 (m, 3H), 7.54 - 7.50 (m, 3H), 7.46 - 7.43 (m, 1H), 7.37 - 7.31 (m, 2H), 1.53 (s, 6H)

2) 中間体Eの合成

上記段階1)で合成された中間体D(560mg、1.6mmol)をTHF(10mL)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(0.85mL、2.08mmol)の溶液を滴下し、2時間攪拌した。ホウ酸トリメチル(0.45mL、4mmol)を前記反応液に加えた後、同じ温度で3時間、そして常温

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%)得た。

【0139】

3) 化合物VIII-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VIII-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VIII-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VIII-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VIII-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VIII-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VIII-3及びポリメチルメタアクリレート(PMMA)高分子を15:1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、スピンコー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VIII-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VIII-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VIII-3について、熱重量分析(Thermo Gravimetry

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】

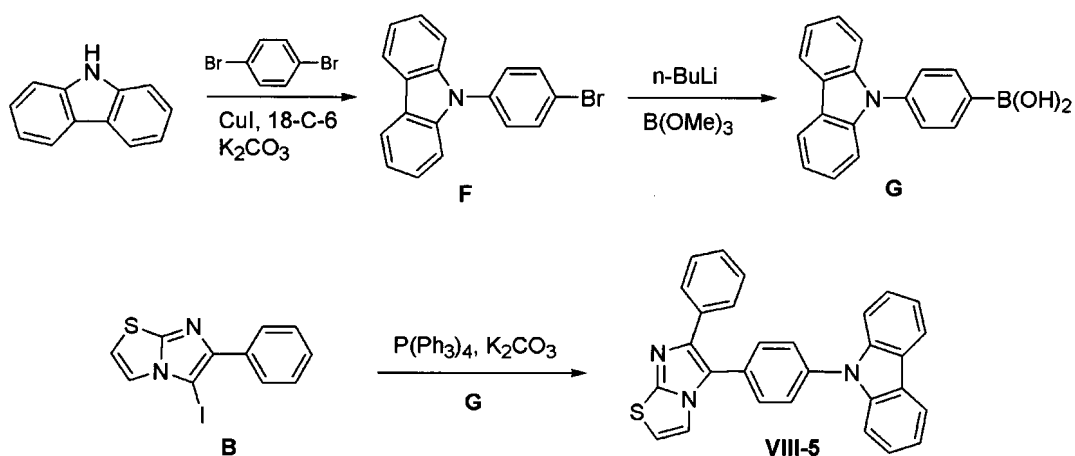
合成例 3 : 化合物 VIII-5 の合成

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) >



【0148】

< 反応式 (3) >

1) 中間体 F の合成

カルバゾール (335 mg、2 mmol)、1,4-ジブロモベンゼン (1.2 g、5 mmol)、CuI (76 mg、0.4 mmol)、 K_2CO_3 (1.1 g、8 mmol)、及び 18-クラウン-6 (10 mg、0.04 mmol) 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) (5 mL) 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 10 mL 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 480 mg (収率 75%) 得た。この化合物の構造は 1H NMR で確認した。

【0149】

1H NMR ($CDCl_3$, 400 MHz) (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 (200 mg、0.62 mmol) を、THF (3 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 (0.325 mL、0.806 mmol) 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 (0.2 mL、1.86 mmol) 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 12 M 塩酸水溶液で pH 1 に合わせた後、常温で 2 時間攪拌した。4 M NaOH 水溶液で pH 1

10

20

30

40

50

4 に調節した後、反応混合物をジエチルエーテル 50 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 145 mg (収率 81%) 得た。

【0150】

3) 化合物 VII-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 (28 mg、0.087 mmol) と上記段階 2) で合成された中間体 G (25 mg、0.087 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 VII-5 を 27 mg (収率 71%) 得た。構造は ^1H NMR で確認した。

10

【0151】

^1H NMR (CDCl_3 , 400 MHz) (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 VII-5 を、 CHCl_3 で 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 323.5 nm を観察した。

【0152】

そして化合物 VII-5 を、 CHCl_3 に 10 mM 濃度になるように希釈し、323.5 nm で PL 特性を調べたところ、417 nm 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】

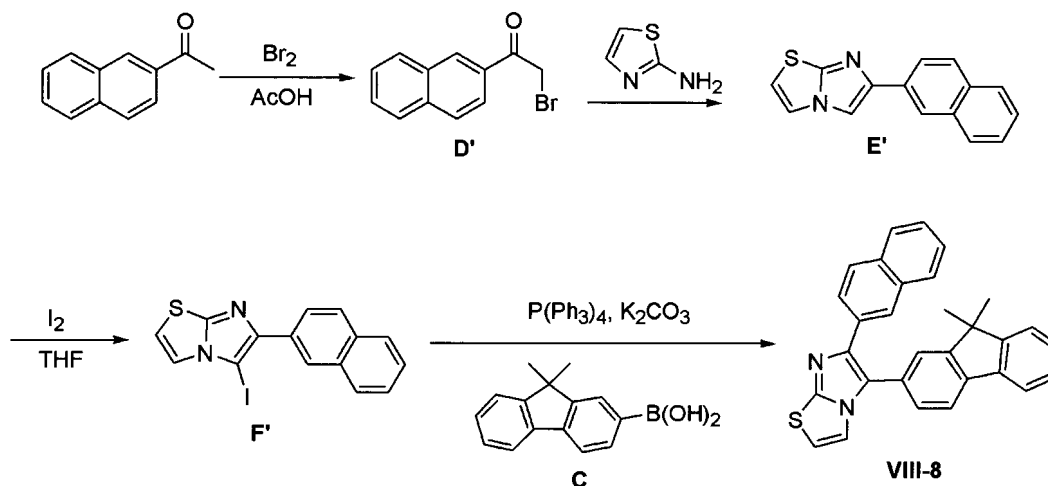
合成例 4: 化合物 VIII-8 の合成

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)>



30

40

【0155】

<反応式 (4)>

1) 中間体 D' の合成

アセチルナフタレン (17 g、100 mmol) を、 CCl_4 (300 mL) 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、 Br_2 (100 mmol) 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 CCl_4 層を MgSO_4 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。

【0156】

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

【0157】

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

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

【0158】

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

4) 化合物 VII I - 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 VII I - 8 を 18 mg (収率 75%) 得た。構造は ^1H NMR で確認した。

30

【0159】

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

前記合成例 4 によって合成された化合物 VII I - 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

【0160】

そして化合物 VII I - 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 VII I - 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。

【0161】

合成例 5: 化合物 VII I - 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 VII I

50

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

【0162】

^1H NMR (CDCl_3 , 400 MHz) (ppm) 8.25 (s, 1H), 7.83 (d, 1H), 7.78 - 7.67 (m, 5H), 7.54 - 7.37 (m, 8H), 6.86 (d, 1H), 1.43 (s, 6H)

前記合成例 5 によって合成した化合物 VII-9 を、 CHCl_3 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。

【0163】

そして、化合物 VII-9 を、 CHCl_3 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 VII-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。

【0164】

合成例 6 : 化合物 VII-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 VII-11 を 18 mg (収率 75%) 得た。構造は ^1H NMR で確認した。

【0165】

^1H NMR (CDCl_3 , 400 MHz) (ppm) 8.24 (s, 1H), 8.17 (d, 2H), 7.84 - 7.68 (m, 8H), 7.57 (d, 1H), 7.53 (d, 2H), 7.48 - 7.44 (m, 4H), 7.33 (dd, 2H), 6.92 (d, 1H)

前記合成例 6 によって合成した化合物 VII-11 を、 CHCl_3 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。

【0166】

そして化合物 VII-11 を、 CHCl_3 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 VII-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。

【0167】

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。

【0168】

実施例 1

アノードとしては $10 \text{ } \Omega/\text{cm}^2$ 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 VII-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。

【0169】

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 E L 素子が完成した。

【 0 1 7 0 】

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

【 0 1 7 1 】

その結果、前記実施例 1 の有機 E L 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】

【 0 1 7 2 】

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、またはドーブ剤と共に E M L 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】

【 0 1 7 3 】

【図 1】一般的な有機 E L 素子の断面図である。

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

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

【図 4】本発明の化合物 V I I I - 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 P L スペクトルを示す図面である。 20

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

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

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

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

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

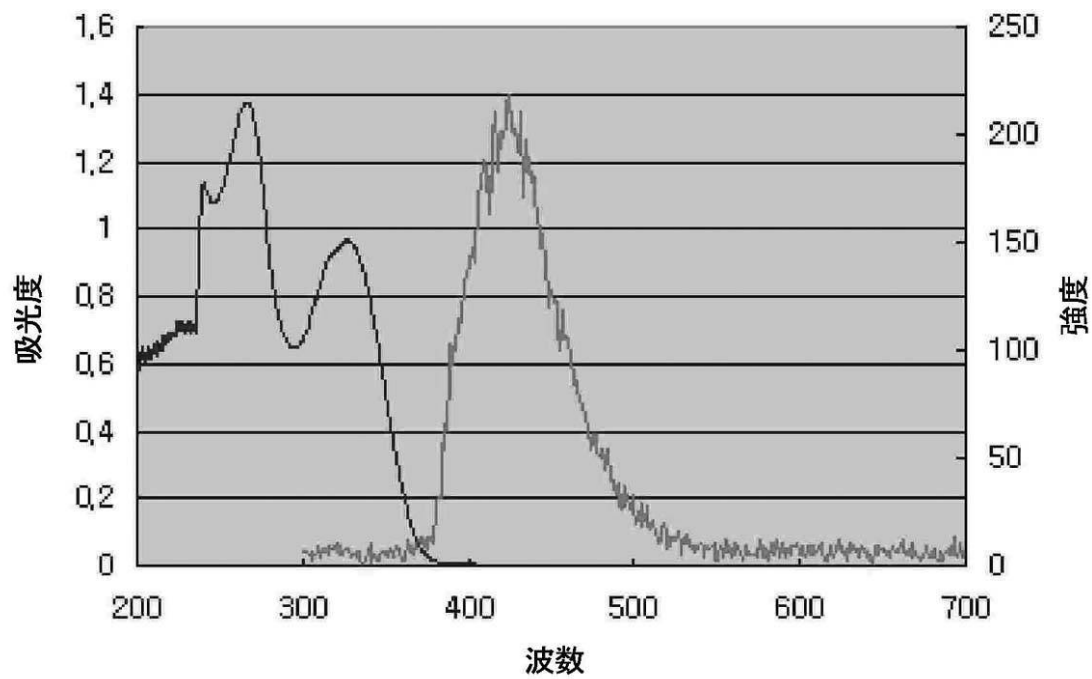
【図 10】本発明の化合物 V I I I - 9 を含有した溶液の U V スペクトル及び P L スペクトルを示す図面である。

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

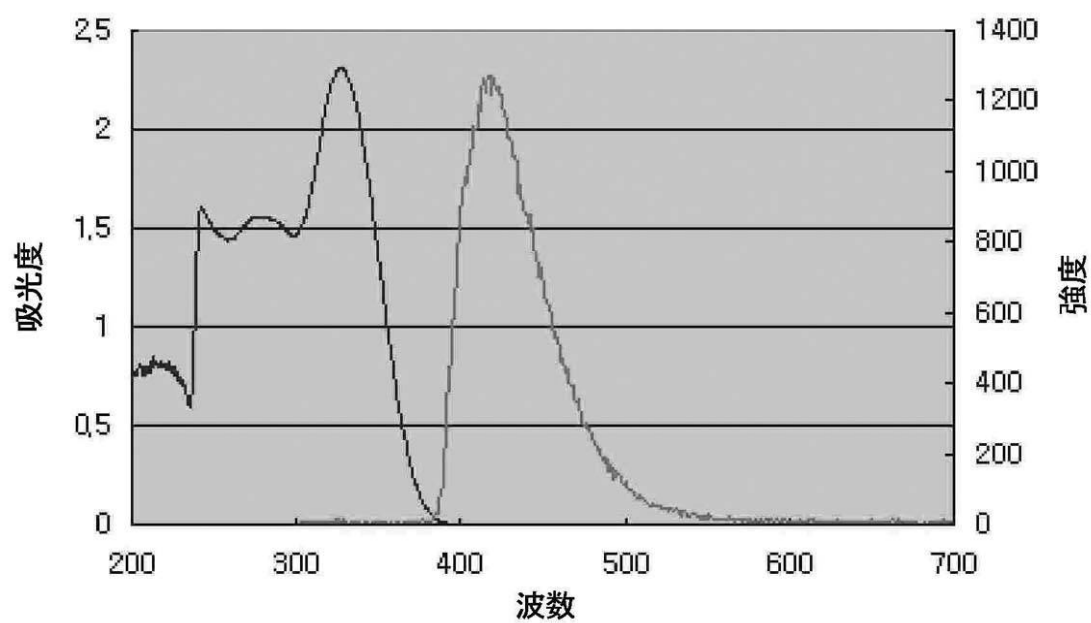
【図 1】

カソード
EIL
ETL
HBL
EML
HTL
HIL
アノード
基板

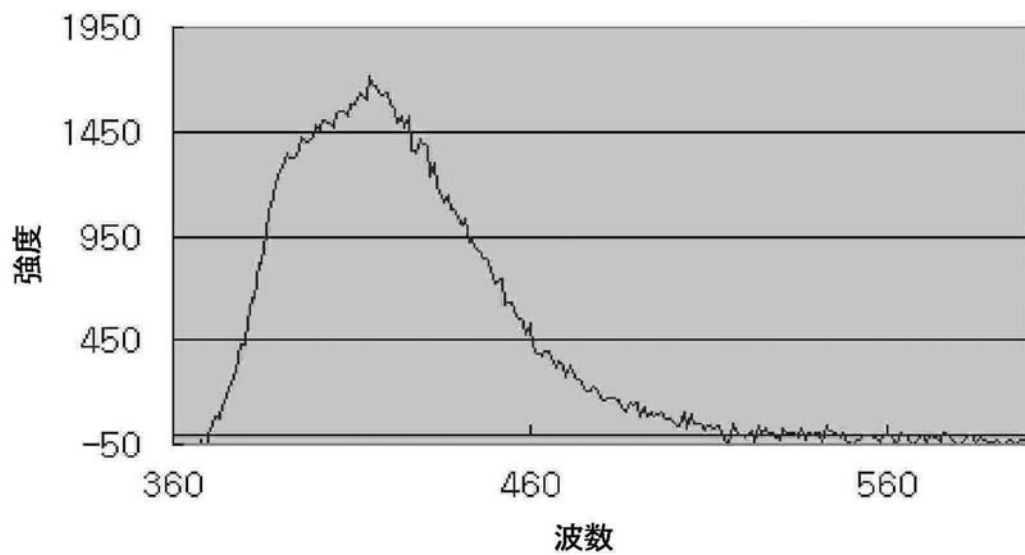
【図 2】



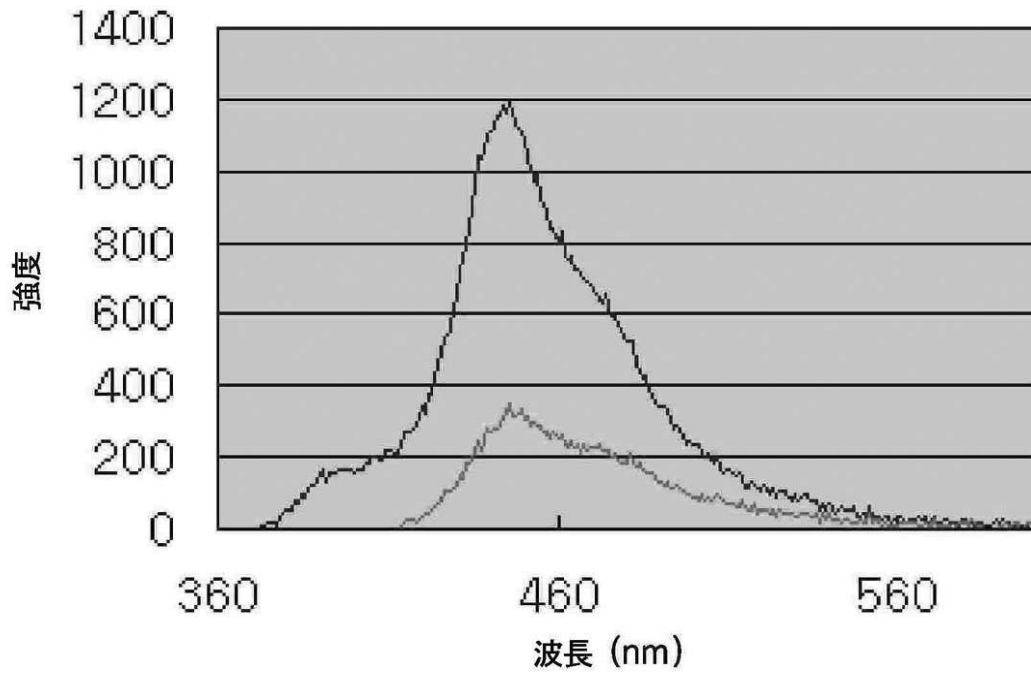
【 図 3 】



【 図 4 】



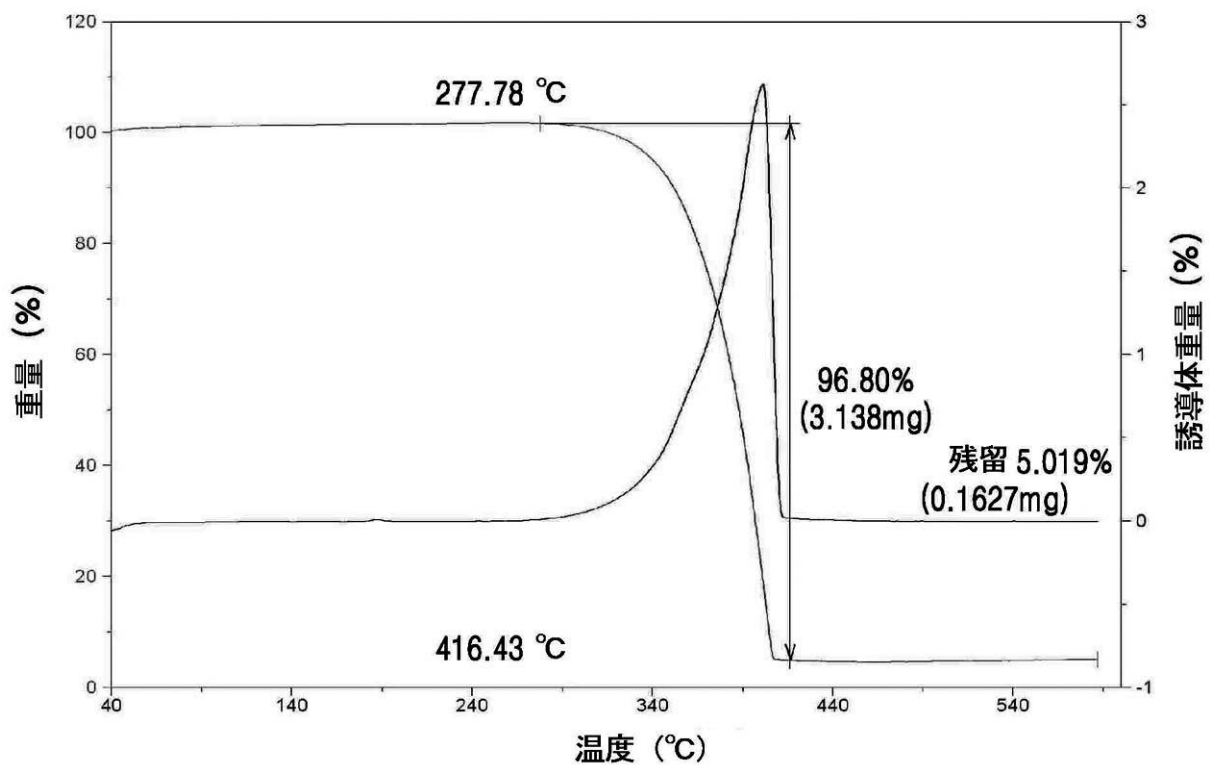
【 図 5 】



【 図 6 】

Sample: SDI-BH-7 (N2)
Size: 3.2420 mg
Method: klm
Comment: N2/100ml

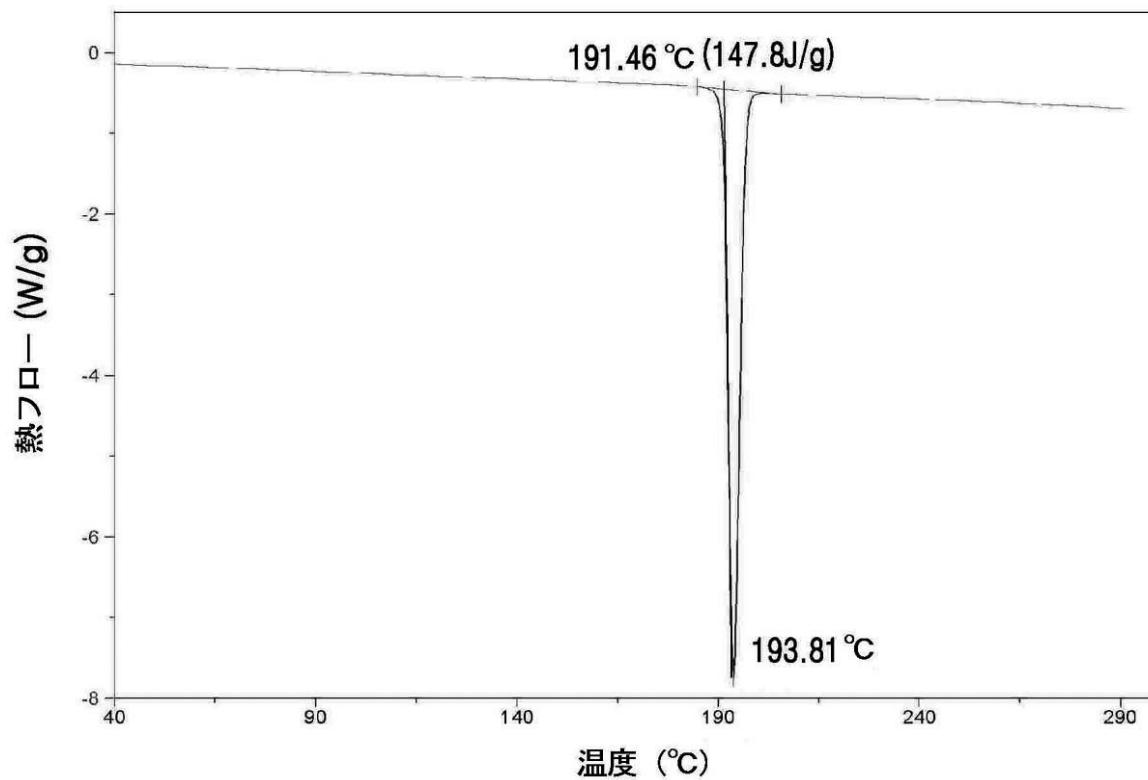
TGA



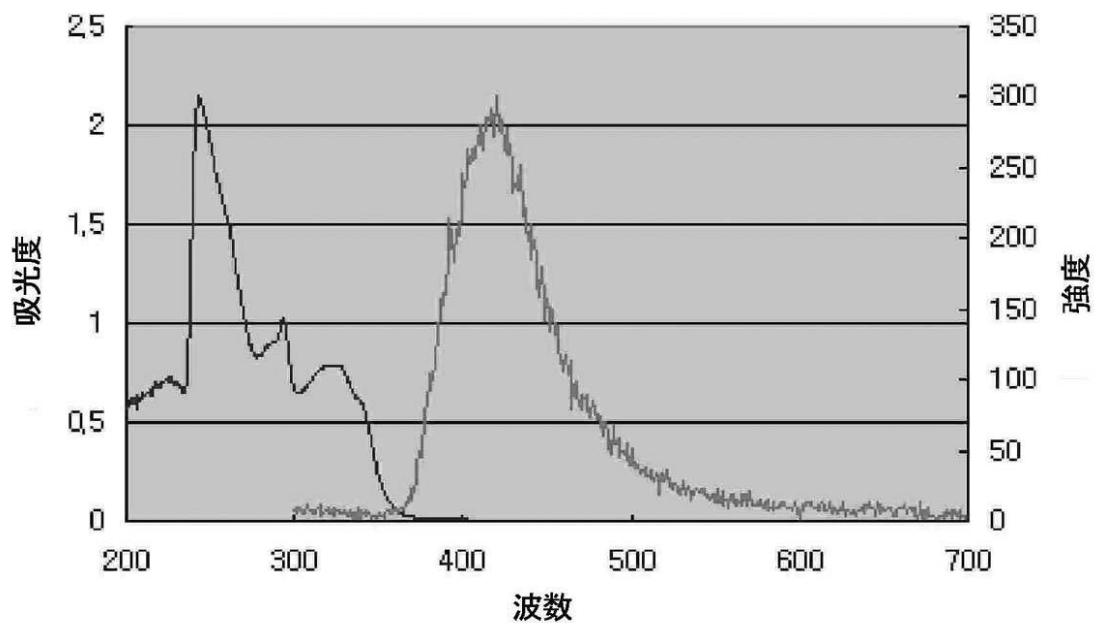
【 図 7 】

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

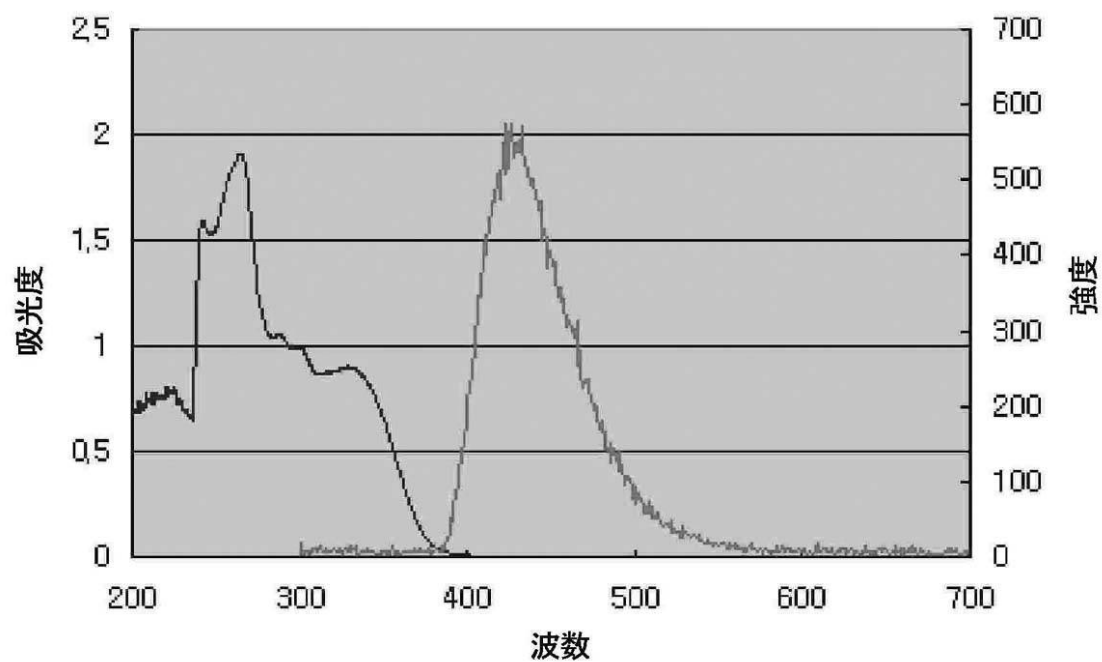
DSC



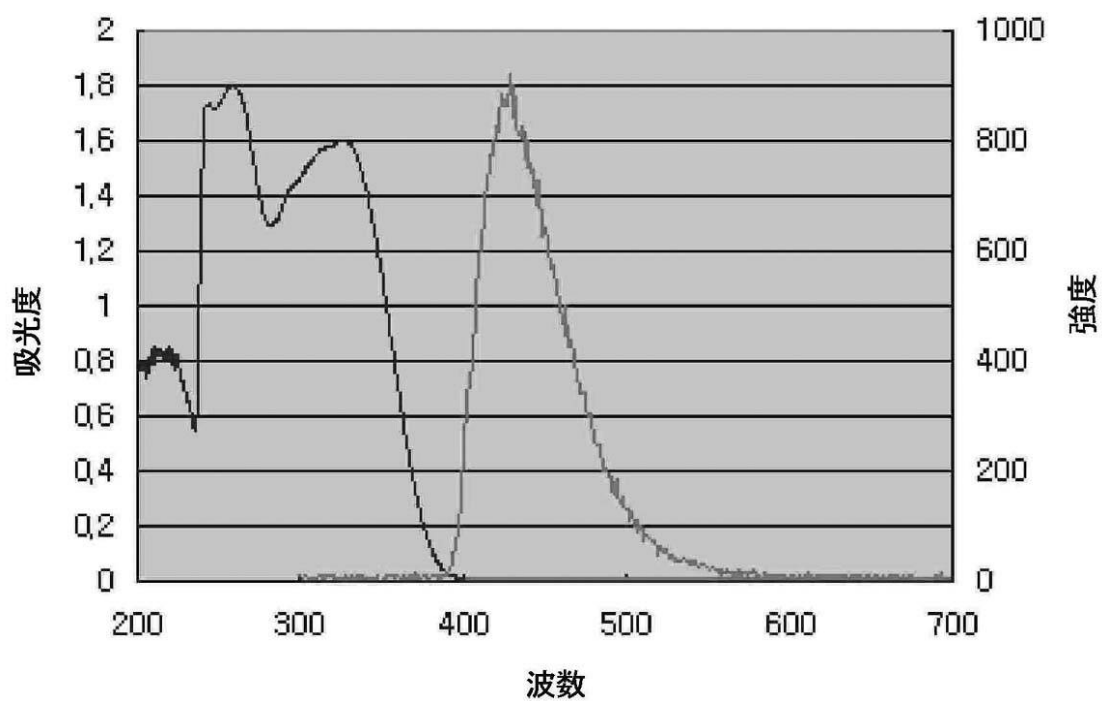
【 図 8 】



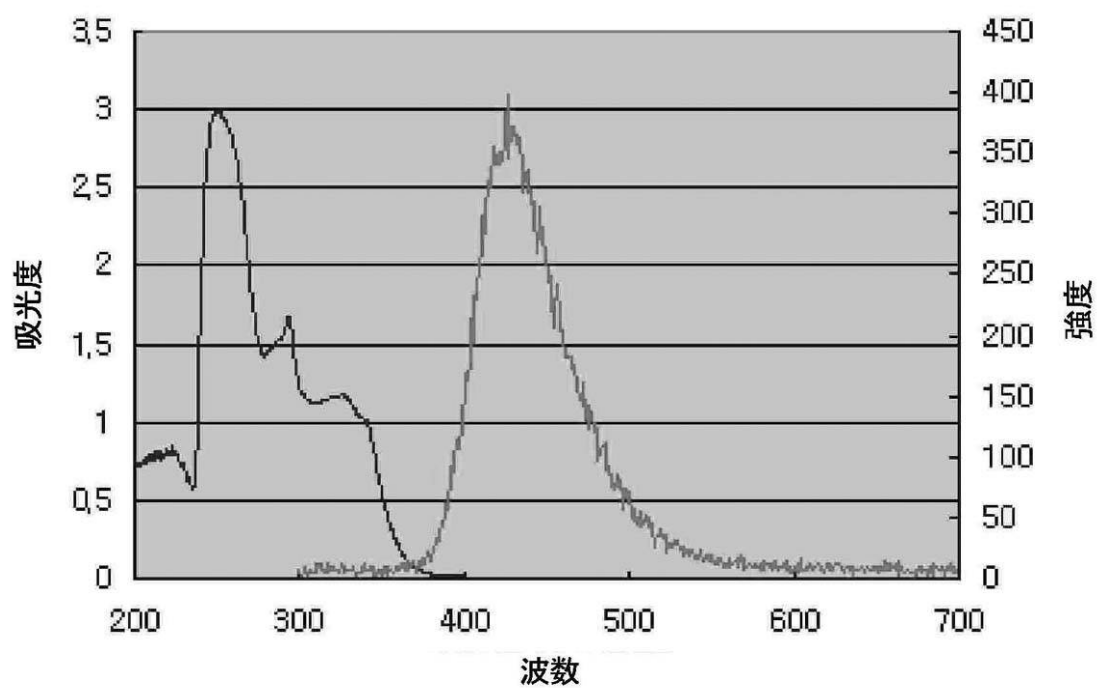
【 図 9 】



【 図 10 】



【図 1 1】



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 1 3 0 5 番地 大宇アパート 3 2 4 棟 1 0 4 号
- (72)発明者 金 榮 國
大韓民国京畿道水原市靈通区靈通洞 1 0 1 9 - 2 3 番地 4 0 3 号
- (72)発明者 黄 せき 煥
大韓民国京畿道水原市靈通区網浦洞 6 9 3 番地 現代 1 次アイパーク 1 0 4 棟 1 7 0 1 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 9 7 3 - 3 番地 宇成アパート 8 2 6 棟 7 0 3 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 9 5 8 - 2 番地 ファミリータワー 1 3 0 6 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 1 0 8 棟 5 0 1 号
- (72)発明者 宋 住 翰
大韓民国京畿道水原市靈通区靈通洞 9 6 6 - 2 番地 シンナムシル建築アパート 6 6 5 棟 1 4 0 4 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)	三星エスディアイ株式会社		
[标]发明人	李錫宗 金榮國 黄せき煥 梁承かく 金喜けん 都永洛 宋住翰		
发明人	李 錫 宗 金 榮 國 黄 ▲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

