

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特許公報(B2)

(11) 特許番号

特許第6821234号  
(P6821234)

(45) 発行日 令和3年1月27日(2021.1.27)

(24) 登録日 令和3年1月8日(2021.1.8)

(51) Int. Cl.	F I
<b>CO7D 487/04</b> (2006.01)	CO7D 487/04 137
<b>HO1L 51/50</b> (2006.01)	CO7D 487/04 CSP
	HO5B 33/14 B
	HO5B 33/22 B

請求項の数 11 (全 65 頁)

(21) 出願番号	特願2018-563129 (P2018-563129)	(73) 特許権者	500239823
(86) (22) 出願日	平成29年5月25日 (2017. 5. 25)		エルジー・ケム・リミテッド
(65) 公表番号	特表2019-520347 (P2019-520347A)		大韓民国 07336 ソウル, ヨンドウ
(43) 公表日	令和1年7月18日 (2019. 7. 18)		ンポーグ, ヨイーデロ 128
(86) 国際出願番号	PCT/US2017/034434	(74) 代理人	100110364
(87) 国際公開番号	W02017/210075		弁理士 実広 信哉
(87) 国際公開日	平成29年12月7日 (2017. 12. 7)	(74) 代理人	100122161
審査請求日	令和1年6月21日 (2019. 6. 21)		弁理士 渡部 崇
(31) 優先権主張番号	15/171, 482	(72) 発明者	マイケル ヘンリー ハワード ジュニア
(32) 優先日	平成28年6月2日 (2016. 6. 2)		アメリカ合衆国 19710 デラウェア
(33) 優先権主張国・地域又は機関	米国 (US)		州 モンチャニン モンチャニン ロード
			908

最終頁に続く

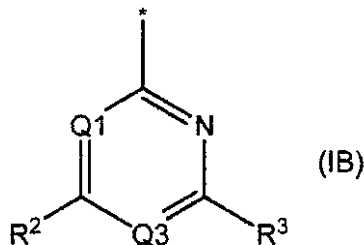
(54) 【発明の名称】 電気活性材料

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

下記の式 I B の置換基を有する N - 複素環を含む化合物において、前記 N - 複素環は、下記の式 I V - b である、化合物。

【化 1】



式中：

Q 1 および Q 3 は、同じまたは異なるものであり、N および C R <sup>1</sup> からなる群から選択され；

R <sup>1</sup> は、H、D、CN、炭化水素アリール、ヘテロアリール、重水素化炭化水素アリール、および重水素化ヘテロアリールからなる群から選択され；

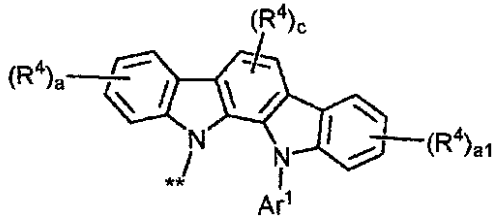
R <sup>2</sup> および R <sup>3</sup> は、出現ごとに同じまたは異なるものであり、炭化水素アリール、炭化水素アリールオキシ、重水素化炭化水素アリール、または重水素化炭化水素アリールオキシ

であり；

\* は、前記 N - 複素環中の N への結合点を表し；

ただし、Q 1 および Q 3 の少なくとも 1 つは C - C N であり；

【化 2】



(IV-b)

10

式中：

$Ar^1$  は、炭化水素アリール、または重水素化炭化水素アリールであり；

$R^4$  は、D であり、

a および a 1 は、同じまたは異なるものであり、0 ~ 4 の整数であり；

c は、0 ~ 2 の整数であり；

\*\* は、式 I B を有する前記置換基への結合点を表す。

20

【請求項 2】

前記  $R^2$  および  $R^3$  は、出現ごとに同じまたは異なるものであり、フェニル、ナフチル、ピフェニル、ピナフチル、テルフェニル、またはフェノキシである、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 3】

$Ar^1$  は、フェニル、ナフチル、ピフェニル、ピナフチル、テルフェニルである、請求項 1 または 2 に記載の化合物。

【請求項 4】

$Ar^1$  はテルフェニルである、請求項 1 ~ 3 のいずれか一項に記載の化合物。

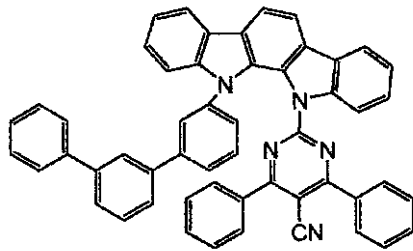
【請求項 5】

下記の化合物 I - 2 ~ 化合物 I - 5 から選択される、請求項 1 ~ 4 のいずれか一項に記載の化合物。

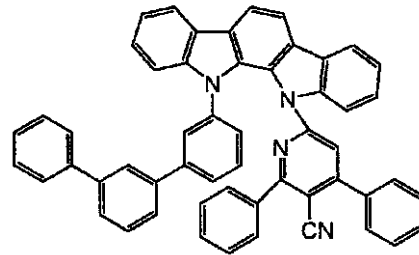
30

## 【化3】

化合物 I-2

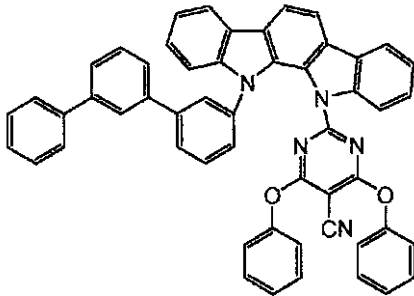


化合物 I-3

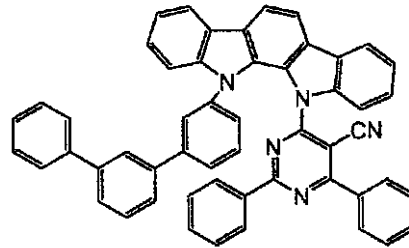


10

化合物 I-4



化合物 I-5



20

## 【請求項6】

(a) 380 ~ 750 nmに発光極大を有するエレクトロルミネセンスの能力があるドーパント、(b) 請求項1 ~ 5のいずれか一項に記載の第1ホスト化合物、および(c) 第2ホスト化合物を含む組成物。

## 【請求項7】

アノード、カソード、およびそれらの間の少なくとも1つの有機活性層を含む有機電子デバイスであって、前記有機活性層が、請求項1 ~ 5のいずれか一項に記載の化合物を含むデバイス。

## 【請求項8】

前記有機活性層が光活性層である、請求項7に記載のデバイス。

30

## 【請求項9】

請求項1 ~ 5のいずれか一項に記載の前記化合物が第1ホスト化合物であり、前記光活性層が、(a) 380 ~ 750 nmに発光極大を有するエレクトロルミネセンスの能力があるドーパント、および(c) 第2ホスト化合物をさらに含む、請求項8に記載のデバイス。

## 【請求項10】

前記第2ホスト化合物が、インドロカルバゾール、クリセン、それらの置換誘導体、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される、請求項9に記載のデバイス。

## 【請求項11】

前記有機活性層が電子輸送層である、請求項7に記載のデバイス。

40

## 【発明の詳細な説明】

## 【技術分野】

## 【0001】

本開示は、新規電気活性化合物に関する。本開示はさらに、そのような電気活性化合物を含む少なくとも1つの層を有する電子デバイスに関する。

## 【背景技術】

## 【0002】

OLEDディスプレイを構成する、有機発光ダイオード(「OLED」)などの、有機電子デバイスにおいて、1つ以上の有機電気活性層が2つの電気コンタクト層の間に挟ま

50

れる。OLEDにおいて、少なくとも1つの有機電気活性層は、電気コンタクト層にわたって電圧を印加した時に光透過性電気コンタクト層を通して発光する。

【0003】

発光ダイオード中の発光成分として有機エレクトロルミネセンス化合物を使用することは周知である。簡単な有機分子、共役ポリマー、および有機金属錯体を使用されている。発光材料は、単独で使用されてもよいし、または電気活性ホスト材料中に存在してもよい。

【0004】

エレクトロルミネセンス材料を使用するデバイスは頻繁に、光活性（例えば、発光）層とコンタクト層（正孔注入コンタクト層）との間に配置される、1つ以上の電荷輸送層を含む。デバイスは、2つ以上のコンタクト層を含有することができる。正孔輸送層は、光活性層と正孔注入コンタクト層との間に配置することができる。正孔注入コンタクト層はまた、アノードと呼ばれてもよい。電子輸送層は、光活性層と電子注入コンタクト層との間に配置することができる。電子注入コンタクト層はまた、カソードと呼ばれてもよい。

10

【0005】

電子デバイスに使用するための電気活性材料は、継続的に必要とされている。

【発明の概要】

【課題を解決するための手段】

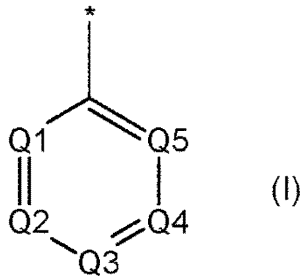
【0006】

式 I

20

【0007】

【化1】



30

【0008】

（式中：

Q1、Q2、Q3、Q4、およびQ5は、同じまたは異なるものであり、NおよびCR<sup>1</sup>からなる群から選択され；

R<sup>1</sup>は、出現ごとに同じまたは異なるものであり、H、D、CN、炭化水素アリール、ヘテロアル、重水素化炭化水素アリール、および重水素化ヘテロアリールからなる群から選択され；

\*は、N-複素環中のNへの結合点を表し；

ただし、Q1～Q5の少なくとも1つはNであり、Q1～Q5の少なくとも1つはC-C

40

Nである）の少なくとも1つの置換基を有するN-複素環を含む化合物が提供される。

【0009】

（a）380～750nmに発光極大を有するエレクトロルミネセンスの能力があるドープメント、（b）式Iの置換基を有するN-複素環を含む第1ホスト化合物、および（c）第2ホスト化合物を含む組成物もまた提供される。

【0010】

式Iの置換基を有するN-複素環を含む化合物を含む少なくとも1つの層を有する電子デバイスもまた提供される。

【0011】

50

前述の概要および以下の詳細な説明は、例示的な、かつ、説明的なものであるにすぎず、添付の特許請求の範囲において規定されるような、本発明を限定するものではない。

【0012】

実施形態は、本明細書に示されるような概念の理解を深めるために添付図において例示される。

【図面の簡単な説明】

【0013】

【図1】本明細書に記載される新規化合物を含む有機電子デバイスの一例の図解を含む。

【図2】本明細書に記載される新規化合物を含む有機電子デバイスの別の例の図解を含む。

【発明を実施するための形態】

【0014】

当業者は、図中の対象物が簡潔にかつ明確にするために例示されており、必ずしも一定の縮尺で描かれたものではないことを十分理解する。例えば、図中の対象物のいくつかの寸法は、実施形態の理解を深めるのに役立つように、他の対象物に対して誇張されている場合がある。

【0015】

以下に詳細に記載されるように、式Iの少なくとも1つの置換基を有するN-複素環である化合物が提供される。

【0016】

さらに、(a) 380~750nmに発光極大を有するエレクトロルミネセンスの能力があるドーパント、(b) 式Iの少なくとも1つの置換基を有するN-複素環である第1ホスト化合物、および(c) 第2ホスト化合物を含む組成物が提供される。

【0017】

さらに、式Iの少なくとも1つの置換基を有するN-複素環である化合物を含む少なくとも1つの層を有する電子デバイスが提供される。

【0018】

さらに、上で記載された組成物の1つを含む少なくとも1つの層を有する電子デバイスが提供される。

【0019】

多くの態様および実施形態が、上で記載されており、例示的であるにすぎず、限定的ではない。本明細書を読んだ後に、当業者は、他の態様および実施形態が本発明の範囲から逸脱することなしに可能であることを十分理解する。

【0020】

実施形態の任意の1つ以上の他の特徴および利益が、以下の詳細な説明から、および特許請求の範囲から明らかであろう。詳細な説明は先ず、用語の定義および明確化に取り組み、これに、式Iの置換基を有する化合物、式Iの置換基を有する化合物を含む組成物、電子デバイス、および最後に実施例が続く。

【0021】

1. 用語の定義および明確化

以下に記載される実施形態の詳細に取り組む前に、いくつかの用語が定義されるまたは明らかにされる。

【0022】

「用語の定義および明確化」において用いるところでは、R、R'およびR''ならびに任意の他の変数は、総称であり、式中で定義されるものと同じものであってもよいし、またはそれとは異なるものであってもよい。

【0023】

本明細書で用いるところでは、用語「アルキル」は、分岐および直鎖の飽和脂肪族炭化水素基を包含する。特に明記しない限り、この用語はまた、環状基を包含することを意図する。アルキル基の例としては、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、イソブチル

10

20

30

40

50

、secブチル、tertブチル、ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、シクロペンチル、ヘキシル、シクロヘキシル、イソヘキシル等が挙げられる。用語「アルキル」は、置換および非置換炭化水素基の両方をさらに包含する。いくつかの実施形態において、アルキル基は、モノ-、ジ-およびトリ-置換されていてもよい。置換アルキル基の一例はトリフルオロメチルである。他の置換アルキル基は、本明細書に記載される置換基の1つ以上から形成される。特定の実施形態において、アルキル基は、1~20個の炭素原子を有する。他の実施形態において、この基は、1~6個の炭素原子を有する。この用語は、ヘテロアルキル基を包含することを意図する。ヘテロアルキル基は、1~20個の炭素原子を有してもよい。

【0024】

用語「芳香族化合物」は、 $4n+2$ の非局在化パイ電子を有する少なくとも1つの不飽和環状基を含む有機化合物を意味することを意図する。この用語は、炭素および水素原子のみを有する芳香族化合物、および環状基内の炭素原子の1つ以上が窒素、酸素、硫黄等の、別の原子によって置換されているヘテロ芳香族化合物の両方を包含することを意図する。

【0025】

用語「アリール」または「アリール基」は、芳香族化合物に由来する部分を意味する。化合物「に由来する」基は、1個以上の水素（「H」）または重水素（「D」）の除去によって形成されるラジカルを示す。アリール基は、単環（単環式）であってもよいし、または一緒に縮合したまたは共有結合によって結合した複数環（二環式以上）を有してもよい。「炭化水素アリール」は、芳香環中に炭素原子のみを有する。「ヘテロアリール」は、少なくとも1つの芳香環中に1つ以上のヘテロ原子を有する。いくつかの実施形態において、炭化水素アリール基は、6~60個の環炭素原子を有し；いくつかの実施形態において、6~30個の環炭素原子を有する。いくつかの実施形態において、ヘテロアリール基は、4~50個の環炭素原子を有し；いくつかの実施形態において、4~30個の環炭素原子を有する。

【0026】

用語「アルコキシ」は、基-OR（式中、Rはアルキルである）を意味することを意図する。

【0027】

用語「アリーロキシ」は、基-OR（式中、Rはアリールである）を意味することを意図する。

【0028】

特に明記しない限り、すべての基は、置換または非置換であり得る。アルキルまたはアリールなどの、しかしそれらに限定されない、場合により置換されている基は、同じまたは異なるものであってもよい1つ以上の置換基で置換されていてもよい。好適な置換基には、D、アルキル、アリール、ニトロ、シアノ、 $-N(R')(R'')$ 、ハロ、ヒドロキシ、カルボキシ、アルケニル、アルキニル、シクロアルキル、ヘテロアリール、アルコキシ、アリーロキシ、ヘテロアリーロキシ、アルコキシカルボニル、ペルフルオロアルキル、ペルフルオロアルコキシ、アリールアルキル、シリル、シロキシ、シロキサン、チオアルコキシ、 $-S(O)_2-N(R')(R'')$ 、 $-C(=O)-N(R')(R'')$ 、 $(R')(R'')N$ -アルキル、 $(R')(R'')N$ -アルコキシアルキル、 $(R')(R'')N$ -アルキルアリーロキシアルキル、 $-S(O)_s$ -アリール（式中、 $s=0\sim 2$ ）または $-S(O)_s$ -ヘテロアリール（式中、 $s=0\sim 2$ ）が含まれる。各 $R'$ および $R''$ は独立して、場合により置換されているアルキル、シクロアルキル、またはアリール基である。特定の実施形態において、 $R'$ および $R''$ は、それらが結合している窒素原子と一緒に、環系を形成することができる。置換基はまた、架橋基であってもよい。利用可能な水素を持った先行基のいずれもまた重水素化されていてもよい。

【0029】

10

20

30

40

50

用語「電荷輸送」は、層、材料、部材、または構造に言及している場合、そのような層、材料、部材、または構造が、比較的効率よく、かつ小さい電荷損失で、そのような層、材料、部材、または構造の厚さを通してそのような電荷の移動を容易にすることを意味することを意図する。正孔輸送材料は正電荷を容易にし、電子輸送材料は負電荷を容易にする。発光材料もまたいくつかの電荷輸送特性を有していてもよいが、用語「電荷輸送層、材料、部材、または構造」は、その一次機能が発光である層、材料、部材、または構造を包含することを意図しない。

【0030】

用語「化合物」は、化学結合を破壊することなく物理的手段によってそれらの相当する分子から原子を分離することができない、原子をさらに含む分子から構成される非荷電物質を意味することを意図する。この用語は、オリゴマーおよびポリマーを包含することを意図する。

10

【0031】

用語「重水素化(されている)」は、少なくとも1個の水素(「H」)が重水素(「D」)によって置換されていることを意味することを意図する。用語「重水素化類似体」は、1つ以上の利用可能な水素が重水素で置換されている化合物または基の構造類似体を指す。重水素化化合物または重水素化類似体において、重水素は、天然存在度レベルの少なくとも100倍存在している。

【0032】

用語「ドーパント」は、ホスト材料を含む層内で、その層の電子的特性、または放射線放出、受容、もしくはフィルタリングの目標波長を、そのような材料のない層の電子的特性、または放射線放出、受容、もしくはフィルタリングの波長に比べて変化させる材料を意味することを意図する。

20

【0033】

用語「電気活性」は、それが層または材料に言及するところでは、デバイスの動作を電子的に容易にする層または材料を示すことを意図する。電気活性材料の例としては、電荷(電荷は、電子か正孔かのいずれでもあり得る)を導く、注入する、輸送する、もしくはブロックする材料、または放射線を発する材料もしくは放射線を受ける時に電子-正孔対の濃度の変化を示す材料が挙げられるが、それらに限定されない。不活性材料の例としては、平坦化材料、絶縁材料、および環境バリア材が挙げられるが、それらに限定されない。

30

【0034】

接頭辞「フルオロ」は、基中の1個以上の水素原子がフッ素で置換されていることを示すことを意図する。

【0035】

用語「ゲルミル」は、基  $R_3Ge-$  (式中、Rは、出現ごとに同じまたは異なるものであり、H、D、C1~20アルキル、重水素化アルキル、フルオロアルキル、アリール、または重水素化アリールである)を指す。重水素化ゲルミル基は、1つ以上のR基が重水素化されているものである。

【0036】

接頭辞「ヘテロ」は、1個以上の炭素原子が異なる原子で置換されていることを示す。いくつかの実施形態において、ヘテロ原子は、O、N、S、またはそれらの組み合わせである。

40

【0037】

用語「ホスト材料」は、ドーパントが添加される材料を意味することを意図する。ホスト材料は、電子的特性、または放射線を発する、受容する、もしくはフィルタする能力を有してもよいし、または有していなくてもよい。いくつかの実施形態において、ホスト材料は、より高い濃度で存在する。

【0038】

用語「液体組成物」は、材料が溶解して溶液を形成する液体媒体、材料が分散して分散

50

系を形成する液体媒体、または材料が懸濁して懸濁液もしくはエマルションを形成する液体媒体を意味することを意図する。

【0039】

用語「光活性」は、(発光ダイオードもしくは化学セルにおけるなどの)印加電圧によって活性化されるときに発光する材料もしくは層、(ダウンコンバート発光体デバイスにおけるなどの)光子の吸収後に発光する材料もしくは層、または(光検出器もしくは光起電力セルにおけるなどの)輻射エネルギーに応答し、印加バイアス電圧を使用してまたは使用せずに信号を発生する材料もしくは層を指す。

【0040】

用語「シロキサン」は、基  $R_3SiOR_2Si-$  (式中、Rは、出現ごとに同じまたは異なるものであり、H、D、C1~20アルキル、重水素化アルキル、フルオロアルキル、アリール、または重水素化アリールである)を指す。いくつかの実施形態において、Rアルキル基中の1個以上の炭素は、Siで置換されている。重水素化シロキサン基は、1つ以上のR基が重水素化されているものである。

10

【0041】

用語「シロキシ」は、基  $R_3SiO-$  (式中、Rは、出現ごとに同じまたは異なるものであり、H、D、C1~20アルキル、重水素化アルキル、フルオロアルキル、アリール、または重水素化アリールである)を指す。重水素化シロキシ基は、1つ以上のR基が重水素化されているものである。

【0042】

20

用語「シリル」は、基  $R_3Si-$  (式中、Rは、出現ごとに同じまたは異なるものであり、H、D、C1~20アルキル、重水素化アルキル、フルオロアルキル、アリール、または重水素化アリールである)を指す。いくつかの実施形態において、Rアルキル基中の1個以上の炭素はSiで置換されている。重水素化シリル基は、1つ以上のR基が重水素化されているものである。

【0043】

置換基結合が以下に示されるように1つ以上の環を貫通する構造において、

【0044】

【化2】



30

【0045】

置換基Rは1つ以上の環上の任意の利用可能な位置で結合していてもよいことが意味される。

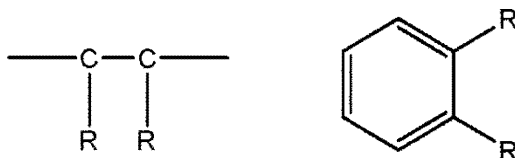
【0046】

語句「に隣接した(adjacent to)」は、デバイスにおける層に言及するために用いられる場合、1つの層が別の層のすぐ隣りにあることを必ずしも意味しない。他方で、語句「隣接R基(adjacent R group)」は、化学式中で互いに隣りにあるR基(すなわち、結合によって連結された原子上にあるR基)を指すために用いられる。例示的な隣接R基は以下に示される:

40

【0047】

【化3】



50



## 【0048】

本明細書において、特に明示的に述べられないか、または使用に関連してそれとは反対を示されない限り、本明細書の主題の実施形態が、ある特定の特徴または要素を含む、包含する、含有する、有する、それらからなる、またはそれらによってもしくはそれらから構成されると述べられまたは記載される場合、明示的に述べられたまたは記載されたものに加えて1つ以上の特徴または要素が実施形態に存在してもよい。本明細書の開示された主題の代替りの実施形態であって、その実施形態において、操作の原理または実施形態の際立った特性を実質的に変えるだろう特徴または要素がそこに存在しない実施形態は、特定の特征または要素から本質的になると記載される。本明細書の記載された主題のさらなる代替りの実施形態であって、その実施形態において、またはその実態のない変形において、具体的に述べられたまたは記載された特徴または要素のみが存在する実施形態は、ある特定の特征または要素からなると記載される。

10

## 【0049】

さらに、明確にそれとは反対をはっきりと述べられない限り、「または(or)」は、包括的な「または」を意味し、排他的な「または」を意味しない。例えば、条件AまたはBは、以下のいずれか1つによって満たされる：Aが真であり(または存在し)、かつBが偽である(または存在しない)、Aが偽であり(または存在せず)、かつBが真である(または存在する)、ならびにAおよびBが両方とも真である(または存在する)。

## 【0050】

また、「a」または「an」の使用は、本明細書に記載される要素および成分を記載するために用いられる。これは、便宜上および本発明の範囲の一般的な意味を与えるために行われるにすぎない。この記載は、1つまたは少なくとも1つを包含すると解釈されるべきであり、単数はまた、それが別の意味を有することが明らかでない限り複数をも包含する。

20

## 【0051】

元素の周期表内の列に相当する族番号は、CRC Handbook of Chemistry and Physics, 81<sup>st</sup> Edition (2000~2001年)に見られるような「新表記法」規約を使用する。

## 【0052】

特に定義しない限り、本明細書に用いられるすべての技術用語および科学用語は、本発明が属する技術分野の当業者によって一般に理解されるものと同一の意味を有する。本明細書に記載されるものと同様のまたは同等の方法および材料を、本発明の実施形態の実施または試験において用いることができるが、好適な方法および材料は、以下に記載される。本明細書に述べられるすべての刊行物、特許出願、特許、および他の参考文献は、特定の節が引用されない限り、それらの全体を参照により本明細書に援用される。不一致がある場合、定義を含めて、本明細書が優先される。さらに、材料、方法、および実施例は、例証的であるにすぎず、限定的であることを意図しない。

30

## 【0053】

本明細書に記載されていない範囲まで、特定の材料、処理動作、および回路に関する多くの詳細は、従来のものであり、有機発光ダイオードディスプレイ、光検出器、光起電力、および半導体部材技術内の教科書および他の情報源に見いだされ得る。

40

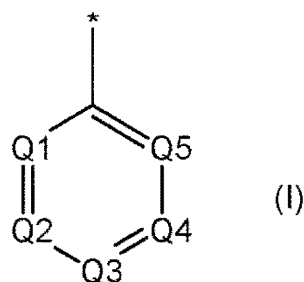
## 【0054】

2. 式Iの置換基を有する化合物

化合物が、式I

## 【0055】

## 【化4】



10

## 【0056】

(式中：

Q1、Q2、Q3、Q4、およびQ5は、同じまたは異なるものであり、NおよびCR<sup>1</sup>からなる群から選択され；

R<sup>1</sup>は、出現ごとに同じまたは異なるものであり、H、D、CN、炭化水素アリール、ヘテロアリール、重水素化炭化水素アリール、および重水素化ヘテロアリールからなる群から選択され；

\*は、N-複素環中のNへの結合点を表し；

ただし、Q1～Q5の少なくとも1つはNであり、Q1～Q5の少なくとも1つはC-CNである)

20

の置換基を有するN-複素環である、化合物が提供される。

## 【0057】

いくつかの実施形態において、化合物は重水素化されている。いくつかの実施形態において、化合物は少なくとも10%重水素化されている。「%重水素化されている」または「%重水素化」とは、百分率として表される、重陽子対プロトンプラス重陽子の合計の比を意味する。いくつかの実施形態において、化合物は少なくとも20%重水素化されており；いくつかの実施形態において、少なくとも30%重水素化されており；いくつかの実施形態において、少なくとも40%重水素化されており；いくつかの実施形態において、少なくとも50%重水素化されており；いくつかの実施形態において、少なくとも60%重水素化されており；いくつかの実施形態において、少なくとも70%重水素化されており；いくつかの実施形態において、少なくとも80%重水素化されており；いくつかの実施形態において、少なくとも90%重水素化されており；いくつかの実施形態において、100%重水素化されている。

30

## 【0058】

いくつかの実施形態において、重水素化は、N-複素環上に存在する。

## 【0059】

いくつかの実施形態において、重水素化は、式Iの置換基上に存在する。

## 【0060】

いくつかの実施形態において、重水素化は、N-複素環および式Iの置換基の両方上に存在する。

40

## 【0061】

いくつかの実施形態において、N-複素環は、少なくとも1個の環Nを持った少なくとも2つの縮合芳香環を有する縮合環N-複素環である。いくつかの実施形態において、N-複素環は、少なくとも1個の環Nを持った少なくとも3つの縮合芳香環を有する。

## 【0062】

いくつかの実施形態において、N-複素環は、カルバゾール、ベンゾカルバゾール、ジベンゾカルバゾール、インドロカルバゾール、インドール、インドロインドール、それらの置換誘導体、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される。

## 【0063】

いくつかの実施形態において、N-複素環は、ベンゾカルバゾール、ジベンゾカルバゾ

50

ール、インドロカルバゾール、インドール、インドロインドール、それらの置換誘導体、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される。

【0064】

いくつかの実施形態において、N-複素環は、インドロカルバゾール、インドール、インドロインドール、それらの置換誘導体、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される。

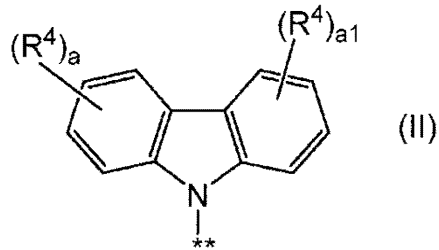
【0065】

いくつかの実施形態において、N-複素環は、式 I I

【0066】

【化5】

10



【0067】

(式中：

$R^4$ は、出現ごとに同じまたは異なるものであり、D、F、CN、アルキル、フルオロアルキル、炭化水素アリール、フルオロアリール、ヘテロアリール、アミノ、シリル、ゲルミル、アルコキシ、アリールオキシ、フルオロアルコキシ、シロキサン、シロキシ、重水素化アルキル、重水素化部分フッ素化アルキル、重水素化炭化水素アリール、重水素化部分フッ素化アリール、重水素化ヘテロアリール、重水素化アミノ、重水素化シリル、重水素化ゲルミル、重水素化アルコキシ、重水素化アリールオキシ、重水素化フルオロアルコキシ、重水素化シロキサン、および重水素化シロキシからなる群から選択され、ここで、隣接  $R^4$  基は、互いに結合して縮合環を形成することができ；

a および a 1 は、同じまたは異なるものであり、0 ~ 4 の整数であり；

\*\* は、式 I を有する置換基への結合点を表す)

を有するカラバゾールである。

【0068】

式 I I のいくつかの実施形態において、a = 0 である。

【0069】

式 I I のいくつかの実施形態において、a = 1 である。

【0070】

式 I I のいくつかの実施形態において、a = 2 である。

【0071】

式 I I のいくつかの実施形態において、a = 3 である。

【0072】

式 I I のいくつかの実施形態において、a = 4 である。

【0073】

式 I I のいくつかの実施形態において、a > 0 である。

【0074】

式 I I のいくつかの実施形態において、a > 0 であり、少なくとも 1 つの  $R^4$  は D である。

【0075】

式 I I のいくつかの実施形態において、a > 0 であり、少なくとも 1 つの  $R^4$  は、アルキルまたは重水素化アルキルである。いくつかの実施形態において、アルキルは、1 ~ 20 個の炭素を有し；いくつかの実施形態において、1 ~ 12 個の炭素を有し；いくつかの

20

30

40

50

実施形態において、1～8個の炭素を有する。

【0076】

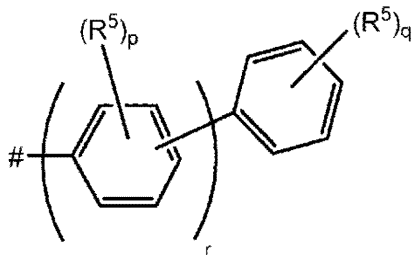
式IIのいくつかの実施形態において、 $a > 0$ であり、少なくとも1つの $R^4$ は、炭化水素アールまたは重水素化炭化水素アールである。

【0077】

式IIのいくつかの実施形態において、 $a > 0$ であり、少なくとも1つの $R^4$ は、式a

【0078】

【化6】



式a

10

【0079】

(式中：

$R^5$ は、出現ごとに同じまたは異なるものであり、D、アルキル、アルコキシ、シロキサン、シリル、ゲルミル、ジアールアミノ、カルバゾリル、重水素化アルキル、重水素化アルコキシ、重水素化シロキサン、重水素化シリル、重水素化ゲルミル、重水素化ジアールアミノ、および重水素化カルバゾリルからなる群から選択され、ここで、隣接 $R^5$ 基は、互いに結合して縮合芳香環または重水素化縮合芳香環を形成することができ；

$p$ は、出現ごとに同じまたは異なるものであり、0～4の整数であり；

$q$ は、0～5の整数であり；

$r$ は、1～5の整数であり；

#は、結合点を示す)

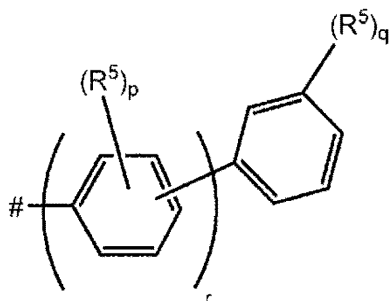
を有する。

【0080】

式IIのいくつかの実施形態において、 $a > 0$ であり、少なくとも1つの $R^4$ は、式b

【0081】

【化7】



式b

30

40

【0082】

(式中、 $R^5$ 、 $p$ 、 $q$ 、 $r$ および#は、式aにおけるのと同様である)

を有する。

【0083】

式IIのいくつかの実施形態において、 $a > 0$ であり、少なくとも1つの $R^4$ は、フェニル、ナフチル、ピフェニル、それらの置換誘導体、およびそれらの重水素類似体からなる群から選択される。いくつかの実施形態において、置換基は、D、アルキル、アルコキ

50

シ、シリル、ゲルミル、重水素化アルキル、重水素化アルコキシ、重水素化シリル、重水素化ゲルミル、およびそれらの組み合わせからなる群から選択される。

【0084】

式IIのいくつかの実施形態において、 $a_1 = 0$ である。

【0085】

式IIのいくつかの実施形態において、 $a_1 = 1$ である。

【0086】

式IIのいくつかの実施形態において、 $a_1 = 2$ である。

【0087】

式IIのいくつかの実施形態において、 $a_1 = 3$ である。

10

【0088】

式IIのいくつかの実施形態において、 $a_1 = 4$ である。

【0089】

式IIのいくつかの実施形態において、 $a_1 > 0$ である。

【0090】

式IIのいくつかの実施形態において、 $a_1 > 0$ であり、少なくとも1つの $R^4$ は上で記載されたとおりである。

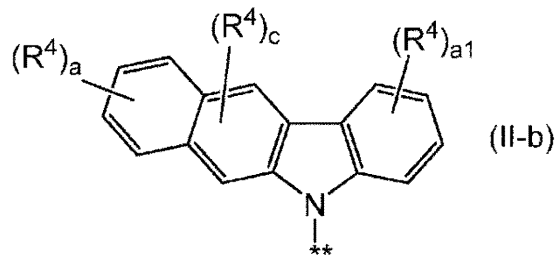
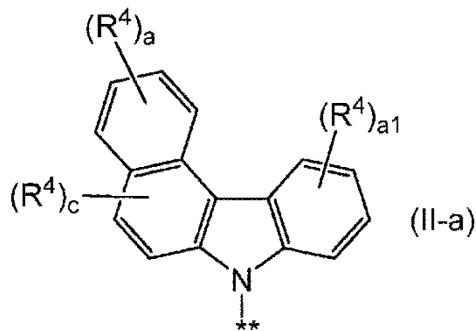
【0091】

いくつかの実施形態において、N-複素環は、式II-a、式II-b、または式II-c

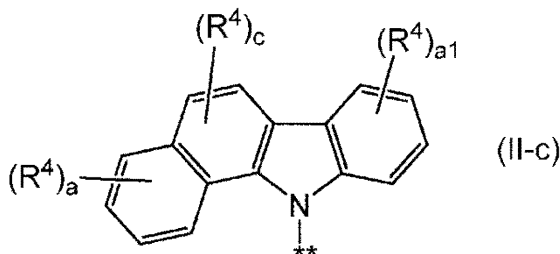
20

【0092】

【化8】



30



40

【0093】

(式中：

$R^4$ は、出現ごとに同じまたは異なるものであり、D、F、CN、アルキル、フルオロアルキル、炭化水素アリール、フルオロアリール、ヘテロアリール、アミノ、シリル、ゲルミル、アルコキシ、アリールオキシ、フルオロアルコキシ、シロキサン、シロキシ、重水素化アルキル、重水素化部分フッ素化アルキル、重水素化炭化水素アリール、重水素化部分フッ素化アリール、重水素化ヘテロアリール、重水素化アミノ、重水素化シリル、重水素化ゲルミル、重水素化アルコキシ、重水素化アリールオキシ、重水素化フルオロアルコキシ、重水素化シロキサン、および重水素化シロキシからなる群から選択され、ここで、隣接 $R^4$ 基は、互いに結合して縮合環を形成することができ；

50

a および a 1 は、出現ごとに同じまたは異なるものであり、0 ~ 4 の整数であり；

c は、出現ごとに同じまたは異なるものであり、0 ~ 2 の整数であり；

\*\* は、式 I を有する置換基への結合点を表す)

を有するベンゾカルバゾールである。

【0094】

いくつかの実施形態において、N - 複素環は、式 II - a を有する。

【0095】

いくつかの実施形態において、N - 複素環は、式 II - b を有する。

【0096】

いくつかの実施形態において、N - 複素環は、式 II - c を有する。

10

【0097】

式 II - a、式 II - b、および式 II - c のいくつかの実施形態において、c = 0 である。

【0098】

式 II - a、式 II - b、および式 II - c のいくつかの実施形態において、c = 1 である。

【0099】

式 II - a、式 II - b、および式 II - c のいくつかの実施形態において、c = 2 である。

【0100】

式 II - a、式 II - b、および式 II - c のいくつかの実施形態において、c > 0 である。

20

【0101】

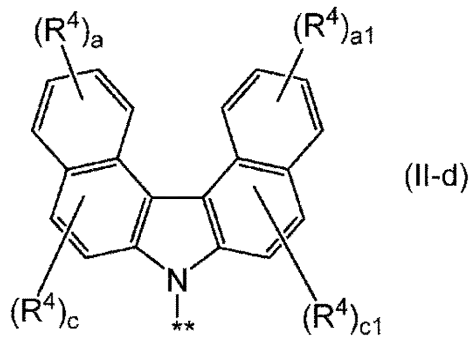
式 II 中の a、a 1、および R<sup>4</sup> についての上記の実施形態は、式 II - a、式 II - b、および式 II - c 中の a、a 1、および R<sup>4</sup> に同様に当てはまる。

【0102】

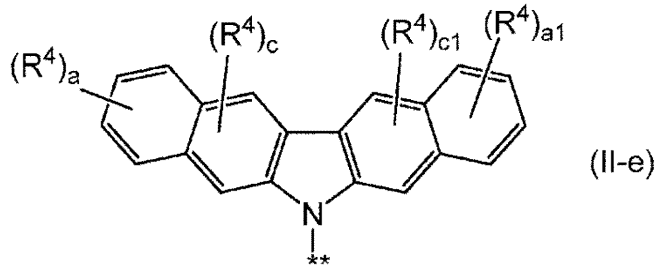
いくつかの実施形態において、N - 複素環は、式 II - d、式 II - e、または式 II - f

【0103】

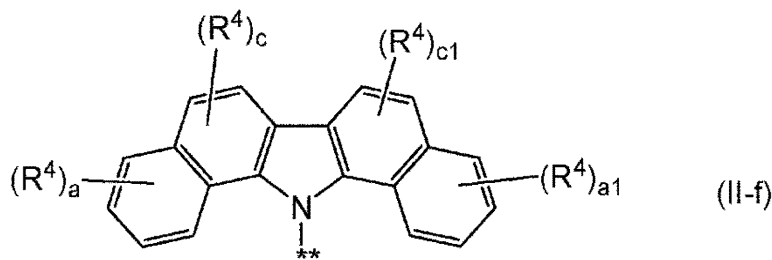
## 【化9】



10



20



## 【0104】

(式中：

$R^4$ は、出現ごとに同じまたは異なるものであり、D、F、CN、アルキル、フルオロアルキル、炭化水素アリール、フルオロアリール、ヘテロアリール、アミノ、シリル、ゲルミル、アルコキシ、アリールオキシ、フルオロアルコキシ、シロキサン、シロキシ、重水素化アルキル、重水素化部分フッ素化アルキル、重水素化炭化水素アリール、重水素化部分フッ素化アリール、重水素化ヘテロアリール、重水素化アミノ、重水素化シリル、重水素化ゲルミル、重水素化アルコキシ、重水素化アリールオキシ、重水素化フルオロアルコキシ、重水素化シロキサン、および重水素化シロキシからなる群から選択され、ここで、隣接 $R^4$ 基は、互いに結合して縮合環を形成することができ；

30

aおよびa1は、出現ごとに同じまたは異なるものであり、0～4の整数であり；

cおよびc1は、出現ごとに同じまたは異なるものであり、0～2の整数であり；

\*\*は、式Iを有する置換基への結合点を表す)

40

を有するジベンゾカルバゾールである。

## 【0105】

いくつかの実施形態において、N-複素環は、式II-dを有する。

## 【0106】

いくつかの実施形態において、N-複素環は、式II-eを有する。

## 【0107】

いくつかの実施形態において、N-複素環は、式II-fを有する。

## 【0108】

式II-d、式II-e、および式II-fのいくつかの実施形態において、 $c1 = 0$ である。

50

## 【0109】

式II-d、式II-e、および式II-fのいくつかの実施形態において、 $c_1 = 1$ である。

## 【0110】

式II-d、式II-e、および式II-fのいくつかの実施形態において、 $c_1 = 2$ である。

## 【0111】

式II-d、式II-e、および式II-fのいくつかの実施形態において、 $c_1 > 0$ である。

## 【0112】

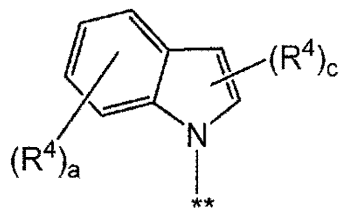
式II-a中のa、 $a_1$ 、c、および $R^4$ についての上記の実施形態は、式II-d、式II-e、および式II-f中のa、 $a_1$ 、c、および $R^4$ に同様に当てはまる。

## 【0113】

いくつかの実施形態において、N-複素環は、式III-a

## 【0114】

## 【化10】



(III-a)

10

20

## 【0115】

(式中：

$R^4$ は、出現ごとに同じまたは異なるものであり、D、F、CN、アルキル、フルオロアルキル、炭化水素アリール、フルオロアリール、ヘテロアリール、アミノ、シリル、ゲルミル、アルコキシ、アリーロキシ、フルオロアルコキシ、シロキサン、シロキシ、重水素化アルキル、重水素化部分フッ素化アルキル、重水素化炭化水素アリール、重水素化部分フッ素化アリール、重水素化ヘテロアリール、重水素化アミノ、重水素化シリル、重水素化ゲルミル、重水素化アルコキシ、重水素化アリーロキシ、重水素化フルオロアルコキシ、重水素化シロキサン、および重水素化シロキシからなる群から選択され、ここで、隣接 $R^4$ 基は、互いに結合して縮合環を形成することができ；

aは、0～4の整数であり；

cは、0～2の整数であり；

\*\*は、式Iを有する置換基への結合点を表す)

を有するインドールである。

## 【0116】

式II-a中のa、c、および $R^4$ についての上記の実施形態は、式III-a中のa、c、および $R^4$ に同様に当てはまる。

## 【0117】

いくつかの実施形態において、N-複素環は、式III-b

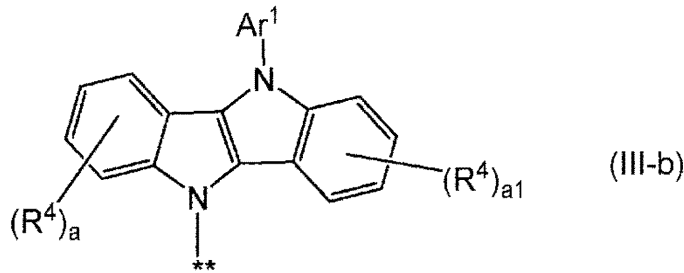
## 【0118】

30

40



## 【化 1 1】



10

## 【0119】

(式中：

$Ar^1$ は、炭化水素アリール、ヘテロアリール、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択され；

$R^4$ は、出現ごとに同じまたは異なるものであり、D、F、CN、アルキル、フルオロアルキル、炭化水素アリール、フルオロアリール、ヘテロアリール、アミノ、シリル、ゲルミル、アルコキシ、アリールオキシ、フルオロアルコキシ、シロキサラン、シロキシ、重水素化アルキル、重水素化部分フッ素化アルキル、重水素化炭化水素アリール、重水素化部分フッ素化アリール、重水素化ヘテロアリール、重水素化アミノ、重水素化シリル、重水素化ゲルミル、重水素化アルコキシ、重水素化アリールオキシ、重水素化フルオロアルコキシ、重水素化シロキサラン、および重水素化シロキシからなる群から選択され、ここで、隣接 $R^4$ 基は、互いに結合して縮合環を形成することができ；

20

$a$ および $a_1$ は、同じまたは異なるものであり、0～4の整数であり；

\*\*は、式Iを有する置換基への結合点を表す)

を有するインドロインドールである。

## 【0120】

式III-bのいくつかの実施形態において、 $Ar^1$ は、炭化水素アリールまたはその重水素化類似体である。いくつかの実施形態において、炭化水素アリールは、6～24個の環炭素を有する。

## 【0121】

式III-bのいくつかの実施形態において、 $Ar^1$ は、上で定義されたような、式aを有する。

30

## 【0122】

式III-bのいくつかの実施形態において、 $Ar^1$ は、上で定義されたような、式bを有する。

## 【0123】

式III-bのいくつかの実施形態において、 $Ar^1$ は、非芳香族置換基をまったく持たない炭化水素アリールである。

## 【0124】

式III-bのいくつかの実施形態において、 $Ar^1$ は、他の置換基をまったく持たない重水素化炭化水素アリールである。

40

## 【0125】

式III-bのいくつかの実施形態において、 $Ar^1$ は置換炭化水素アリールである。いくつかの実施形態において、置換基は、D、アルキル、アルコキシ、シリル、ゲルミル、重水素化アルキル、重水素化アルコキシ、重水素化シリル、重水素化ゲルミル、およびそれらの組み合わせからなる群から選択される。

## 【0126】

式III-bのいくつかの実施形態において、 $Ar^1$ は、フェニル、ナフチル、ピフェニル、テルフェニル、それらの置換誘導体、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される。

50

## 【 0 1 2 7 】

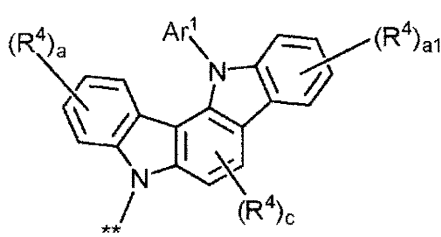
式 I I - a 中の a、a 1、および R<sup>4</sup> について上記の実施形態は、式 I I I - b 中の a、a 1、および R<sup>4</sup> に同様に当てはまる。

## 【 0 1 2 8 】

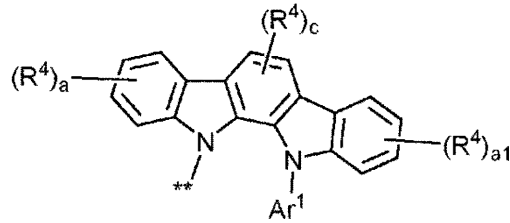
いくつかの実施形態において、N - 複素環は、式 I V - a、式 I V - b、式 I V - c、式 I V - d、または式 I V - e

## 【 0 1 2 9 】

## 【 化 1 2 】

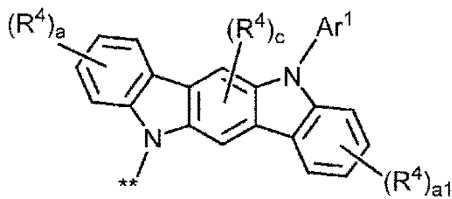


(IV-a)

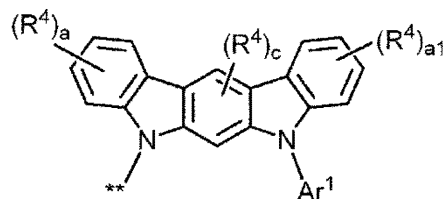


(IV-b)

10

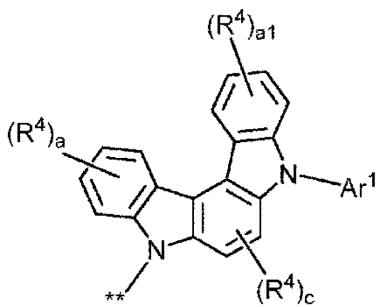


(IV-c)



(IV-d)

20



(IV-e)

30

## 【 0 1 3 0 】

( 式中 )

Ar<sup>1</sup> は、炭化水素アリール、ヘテロアリール、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択され；

40

R<sup>4</sup> は、出現ごとに同じまたは異なるものであり、D、F、CN、アルキル、フルオロアルキル、炭化水素アリール、フルオロアリール、ヘテロアリール、アミノ、シリル、ゲルミル、アルコキシ、アリールオキシ、フルオロアルコキシ、シロキサン、シロキシ、重水素化アルキル、重水素化部分フッ素化アルキル、重水素化炭化水素アリール、重水素化部分フッ素化アリール、重水素化ヘテロアリール、重水素化アミノ、重水素化シリル、重水素化ゲルミル、重水素化アルコキシ、重水素化アリールオキシ、重水素化フルオロアルコキシ、重水素化シロキサン、および重水素化シロキシからなる群から選択され、ここで、隣接 R<sup>4</sup> 基は、互いに結合して縮合環を形成することができ；

a および a 1 は、出現ごとに同じまたは異なるものであり、0 ~ 4 の整数であり；

50

c は、0 ~ 2 の整数であり；

\*\* は、式 I を有する置換基への結合点を表す）

を有するインドロカルバゾールである。

【0131】

いくつかの実施形態において、N - 複素環は、式 IV - a を有する。

【0132】

いくつかの実施形態において、N - 複素環は、式 IV - b を有する。

【0133】

いくつかの実施形態において、N - 複素環は、式 IV - c を有する。

【0134】

いくつかの実施形態において、N - 複素環は、式 IV - d を有する。

【0135】

いくつかの実施形態において、N - 複素環は、式 IV - e を有する。

【0136】

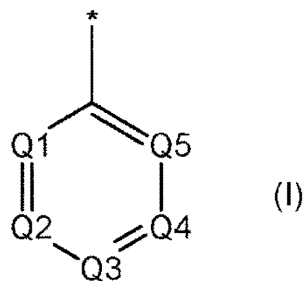
式 III - b 中の a、a<sup>1</sup>、c、Ar<sup>1</sup>、および R<sup>4</sup> について上記の実施形態は、式 IV - a、式 IV - b、式 IV - c、式 IV - d、および式 IV - e 中の a、a<sup>1</sup>、c、Ar<sup>1</sup>、および R<sup>4</sup> に同様に当てはまる。

【0137】

N - 複素環は、式 I

【0138】

【化13】



【0139】

(式中：

Q<sup>1</sup>、Q<sup>2</sup>、Q<sup>3</sup>、Q<sup>4</sup>、および Q<sup>5</sup> は、同じまたは異なるものであり、N および CR<sup>1</sup> からなる群から選択され；

R<sup>1</sup> は、出現ごとに同じまたは異なるものであり、H、D、CN、炭化水素アリール、ヘテロアリール、重水素化炭化水素アリール、および重水素化ヘテロアリールからなる群から選択され；

\* は、N - 複素環中の N への結合点を表し；

ただし、Q<sup>1</sup> ~ Q<sup>5</sup> の少なくとも 1 つは N であり、Q<sup>1</sup> ~ Q<sup>5</sup> の少なくとも 1 つは C - C N である)

を有する少なくとも 1 つの置換基を有する。

【0140】

式 I の置換基は、N - 複素環中の環窒素に直接結合している。

【0141】

いくつかの実施形態において、N - 複素環は、式 I のただ 1 つの置換基を有する。

【0142】

式 I のいくつかの実施形態において、Q<sup>1</sup> = N である。

【0143】

式 I のいくつかの実施形態において、Q<sup>2</sup> = N である。

【0144】

10

20

30

40

50

- 式 I のいくつかの実施形態において、 $Q_3 = N$  である。
- 【 0 1 4 5 】
- 式 I のいくつかの実施形態において、 $Q_4 = N$  である。
- 【 0 1 4 6 】
- 式 I のいくつかの実施形態において、 $Q_5 = N$  である。
- 【 0 1 4 7 】
- 式 I のいくつかの実施形態において、 $Q_1 = CR^1$  である。
- 【 0 1 4 8 】
- 式 I のいくつかの実施形態において、 $Q_2 = CR^1$  である。
- 【 0 1 4 9 】 10
- 式 I のいくつかの実施形態において、 $Q_3 = CR^1$  である。
- 【 0 1 5 0 】
- 式 I のいくつかの実施形態において、 $Q_4 = CR^1$  である。
- 【 0 1 5 1 】
- 式 I のいくつかの実施形態において、 $Q_5 = CR^1$  である。
- 【 0 1 5 2 】
- 式 I のいくつかの実施形態において、 $Q_1 = C - CN$  である。
- 【 0 1 5 3 】
- 式 I のいくつかの実施形態において、 $Q_2 = C - CN$  である。
- 【 0 1 5 4 】 20
- 式 I のいくつかの実施形態において、 $Q_3 = C - CN$  である。
- 【 0 1 5 5 】
- 式 I のいくつかの実施形態において、 $Q_4 = C - CN$  である。
- 【 0 1 5 6 】
- 式 I のいくつかの実施形態において、 $Q_5 = C - CN$  である。
- 【 0 1 5 7 】
- 式 I のいくつかの実施形態において、 $Q_1 \sim Q_5$  の 2 つは  $N$  である。
- 【 0 1 5 8 】
- 式 I のいくつかの実施形態において、 $Q_1 \sim Q_5$  の 1 つのみが  $C - CN$  である。
- 【 0 1 5 9 】 30
- 式 I のいくつかの実施形態において、 $Q_1 \sim Q_5$  の少なくとも 1 つは  $CR^1$  であり、ここで、 $R^1$  は、 $H$  または  $D$  である。
- 【 0 1 6 0 】
- 式 I のいくつかの実施形態において、 $Q_1 \sim Q_5$  の少なくとも 1 つは  $CR^1$  であり、ここで、 $R^1$  は、炭化水素アリールまたはその重水素化類似体である。いくつかの実施形態において、炭化水素アリールは、6 ~ 24 個の環炭素有する。
- 【 0 1 6 1 】
- 式 I のいくつかの実施形態において、 $Q_1 \sim Q_5$  の少なくとも 1 つは  $CR^1$  であり、ここで、 $R^1$  は、上で定義されたような、式 a を有する。
- 【 0 1 6 2 】 40
- 式 I のいくつかの実施形態において、 $Q_1 \sim Q_5$  の少なくとも 1 つは  $CR^1$  であり、ここで、 $R^1$  は、上で定義されたような、式 b を有する。
- 【 0 1 6 3 】
- 式 I のいくつかの実施形態において、 $Q_1 \sim Q_5$  の少なくとも 1 つは  $CR^1$  であり、ここで、 $R^1$  は、非芳香族置換基をまったく持たない炭化水素アリールである。
- 【 0 1 6 4 】
- 式 I のいくつかの実施形態において、 $Q_1 \sim Q_5$  の少なくとも 1 つは  $CR^1$  であり、ここで、 $R^1$  は、他の置換基をまったく持たない重水素化炭化水素アリールである。
- 【 0 1 6 5 】
- 式 I のいくつかの実施形態において、 $Q_1 \sim Q_5$  の少なくとも 1 つは  $CR^1$  であり、こ 50

ここで、 $R^1$ は、置換炭化水素アリールである。いくつかの実施形態において、置換基は、D、アルキル、アルコキシ、シリル、ゲルミル、重水素化アルキル、重水素化アルコキシ、重水素化シリル、重水素化ゲルミル、およびそれらの組み合わせからなる群から選択される。

## 【0166】

式Iのいくつかの実施形態において、 $Q1 \sim Q5$ の少なくとも1つは $CR^1$ であり、ここで、 $R^1$ は、フェニル、ナフチル、ピフェニル、ピナフチル、テルフェニル、それらの置換誘導体、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される。

## 【0167】

式Iのいくつかの実施形態において、 $Q1 \sim Q5$ の少なくとも1つは $CR^1$ であり、ここで、 $R^1$ は、アリールオキシまたは重水素化アリールオキシ基である。

10

## 【0168】

式Iのいくつかの実施形態において、 $Q1 \sim Q5$ の少なくとも1つは $CR^1$ であり、ここで、 $R^1$ は、炭化水素アリールオキシまたは重水素化炭化水素アリールオキシ基である。いくつかの実施形態において、アリールオキシ基のアリール部分は、6～18個の環炭素を有し；いくつかの実施形態において、6～12個の環炭素を有する。

## 【0169】

式Iのいくつかの実施形態において、 $Q1 \sim Q5$ の少なくとも1つは $CR^1$ であり、ここで、 $R^1$ は、フェノキシ、その置換誘導体、およびその重水素化類似体からなる群から選択される。

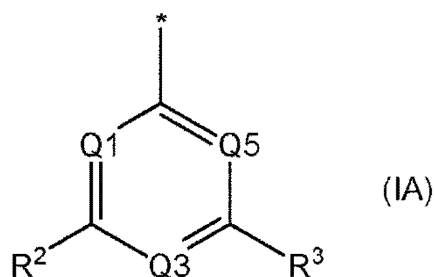
20

## 【0170】

いくつかの実施形態において、N-複素環上の置換基は、式IA

## 【0171】

## 【化14】



30

## 【0172】

(式中：

$Q1$ 、 $Q3$ 、および $Q5$ は、同じまたは異なるものであり、Nおよび $CR^1$ からなる群から選択され；

$R^1$ 、 $R^2$ 、および $R^3$ は、出現ごとに同じまたは異なるものであり、H、D、CN、炭化水素アリール、ヘテロアリール、重水素化炭化水素アリール、および重水素化ヘテロアリールからなる群から選択され；

40

\*は、N-複素環中のNへの結合点を表し；

ただし、 $Q1$ 、 $Q3$ 、および $Q5$ の少なくとも1つはNであり、 $Q1$ 、 $Q3$ 、および $Q5$ の少なくとも1つはC-CNである)

を有する。

## 【0173】

式IAのいくつかの実施形態において、 $Q1 = N$ である。

## 【0174】

式IAのいくつかの実施形態において、 $Q3 = N$ である。

## 【0175】

式IAのいくつかの実施形態において、 $Q5 = N$ である。

50

【 0 1 7 6 】

式 I A のいくつかの実施形態において、 $Q 1 = C R^3$ である。

【 0 1 7 7 】

式 I A のいくつかの実施形態において、 $Q 3 = C R^3$ である。

【 0 1 7 8 】

式 I A のいくつかの実施形態において、 $Q 5 = C R^3$ である。

【 0 1 7 9 】

式 I A のいくつかの実施形態において、 $Q 1 = C - C N$ である。

【 0 1 8 0 】

式 I A のいくつかの実施形態において、 $Q 3 = C - C N$ である。

10

【 0 1 8 1 】

式 I A のいくつかの実施形態において、 $Q 5 = C - C N$ である。

【 0 1 8 2 】

式 I A のいくつかの実施形態において、 $R^2 = R^3$ である。

【 0 1 8 3 】

式 I A のいくつかの実施形態において、 $R^2 R^3$ である。

【 0 1 8 4 】

式 I A のいくつかの実施形態において、 $R^2$ は、HまたはDである。

【 0 1 8 5 】

式 I A のいくつかの実施形態において、 $R^2$ は、炭化水素アリールまたはその重水素化類似体である。いくつかの実施形態において、炭化水素アリールは、6 ~ 24 個の環炭素を有する。

20

【 0 1 8 6 】

式 I A のいくつかの実施形態において、 $R^2$ は、上で定義されたような、式 a を有する。

【 0 1 8 7 】

式 I A のいくつかの実施形態において、 $R^2$ は、上で定義されたような、式 b を有する。

【 0 1 8 8 】

式 I A のいくつかの実施形態において、 $R^2$ は、非芳香族置換基をまったく持たない炭化水素アリールである。

30

【 0 1 8 9 】

式 I A のいくつかの実施形態において、 $R^2$ は、他の置換基をまったく持たない重水素化炭化水素アリールである。

【 0 1 9 0 】

式 I A のいくつかの実施形態において、 $R^2$ は、置換炭化水素アリールである。いくつかの実施形態において、置換基は、D、アルキル、アルコキシ、シリル、ゲルミル、重水素化アルキル、重水素化アルコキシ、重水素化シリル、重水素化ゲルミル、およびそれらの組み合わせからなる群から選択される。

【 0 1 9 1 】

式 I A のいくつかの実施形態において、 $R^2$ は、フェニル、ナフチル、ビフェニル、ピナフチル、テルフェニル、それらの置換誘導体、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される。

40

【 0 1 9 2 】

式 I A のいくつかの実施形態において、 $R^2$ は、アリールオキシまたは重水素化アリールオキシ基である。

【 0 1 9 3 】

式 I A のいくつかの実施形態において、 $R^2$ は、炭化水素アリールオキシまたは重水素化炭化水素アリールオキシ基である。いくつかの実施形態において、アリールオキシ基のアリール部分は、6 ~ 18 個の環炭素を有し；いくつかの実施形態において、6 ~ 12 個

50

の環炭素を有する。

【0194】

式 I A のいくつかの実施形態において、 $R^2$  は、フェノキシ、その置換誘導体、およびその重水素化類似体からなる群から選択される。

【0195】

$R^2$  について上記の実施形態のすべてが、 $R^3$  に同様に当てはまる。

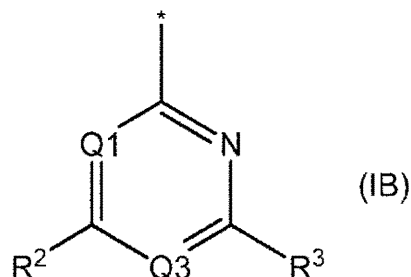
【0196】

いくつかの実施形態において、置換基は、式 I B

【0197】

【化15】

10



【0198】

(式中：

Q1 および Q3 は、同じまたは異なるものであり、N および  $CR^1$  からなる群から選択され；

$R^1$ 、 $R^2$ 、および  $R^3$  は、出現ごとに同じまたは異なるものであり、H、D、CN、炭化水素アリアル、ヘテロアリアル、重水素化炭化水素アリアル、および重水素化ヘテロアリアルからなる群から選択され；

\* は、N - 複素環中の N への結合点を表し；

ただし、Q1 および Q3 の少なくとも1つは C - CN である) を有する。

20

【0199】

式 I B のいくつかの実施形態において、Q1 = C - CN である。

【0200】

式 I B のいくつかの実施形態において、Q3 = C - CN である。

【0201】

式 I B のいくつかの実施形態において、Q1 =  $CR^1$  である。

【0202】

式 I B のいくつかの実施形態において、Q3 =  $CR^1$  である。

【0203】

式 I A 中の  $R^1$ 、 $R^2$ 、および  $R^3$  についての上記の実施形態のすべてが、式 I B 中の  $R^1$ 、 $R^2$ 、および  $R^3$  に同様に当てはまる。

【0204】

N - 複素環についてのおよび置換基についての上の実施形態のどれも、それらが相互排他的でない限り、他の実施形態の1つ以上と組み合わせることができる。例えば、N - 複素環が、式 I I を有するカルバゾールである実施形態は、置換基が式 I I A を有する実施形態と組み合わせることができ、Q1 が N である実施形態と組み合わせることができ、 $R^2 = R^3$  であり、そしてフェニルである実施形態と組み合わせることができる。同じことが、上で考察された他の非相互排他的な実施形態についても言える。当業者は、どの実施形態が相互排他的であるかを理解するであろうし、その結果、本出願によって考えられる実施形態の組み合わせを容易に決定できるであろう。

30

40

【0205】

50

本明細書に記載される化合物は、C - CまたはC - N結合をもたらす任意の技術を用いて製造することができる。鈴木、山本、Stille、および金属触媒C - Nカップリングならびに金属触媒および酸化直接アリール化などの、様々なそのような技術が公知である。

【0206】

式IV - aのコアのインドロカルバゾールは、2, 3' - ビンドリルから文献手順に従って合成することができる: Janosik, T.; Bergman, J. *Tetrahedron* (1999), 55, 2371。2, 3' - ビンドリルは、Robertson, N.; Parsons, S.; MacLean, E. J.; Coxall, R. A.; Mount, Andrew R. *Journal of Materials Chemistry* (2000), 10, 2043に記載されている手順に従って合成された。

10

【0207】

式IV - bのコアのインドロカルバゾールは、欧州特許出願公開第2080762A1号明細書および米国特許第8,062,769号明細書に見いだされる手順に従って合成することができる。

【0208】

式IV - cのコアのインドロカルバゾールは、Pindur, U.; Mueller, J. *Arch. Pharm.* (1987), 320, 280に見いだされる手順に従って商業的に入手可能な3, 3' - メチレンジインドールから合成することができる。

20

【0209】

式IV - dのコアのインドロカルバゾールは、Knolker, Hans - Joachim; Reddy, Kethiri R. *Tetrahedron Letters* (1998), 39(23), 4007 - 4008に見いだされる手順に従って合成することができる。

【0210】

式IV - eのコアのインドロカルバゾールは、Desarbre, EricおよびBergman, Jan; *Journal of the Chemical Society, Perkin Transactions 1: Organic and Bio - Organic Chemistry*, (13), 2009 - 2016; 1998に見いだされる手順に従って合成することができる。

30

【0211】

重水素化化合物は、重水素化前駆体材料を使用して同様な方法でまたは、より一般的には、トリフルオロメタンスルホン酸、三塩化アルミニウムまたは二塩化エチルアルミニウムなどの、ルイス酸H/D交換触媒の存在下で、ベンゼン - d<sub>6</sub>などの、重水素化溶媒で非重水素化化合物を処理することによって調製することができる。

【0212】

例示的な調製が実施例において示される。

【0213】

式Iの置換基を有するN - 複素環化合物のいくつかの非限定的な例が下に示される。

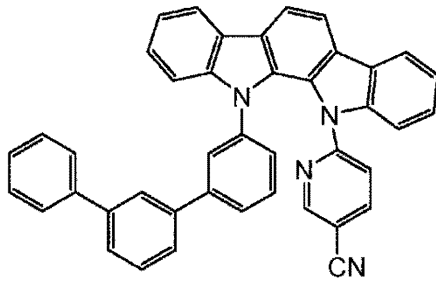
40

【0214】

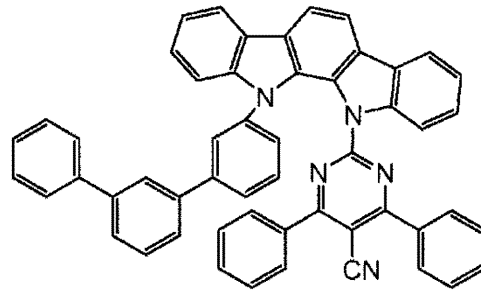


## 【化16】

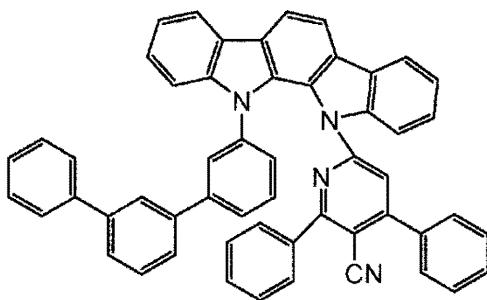
化合物 I-1



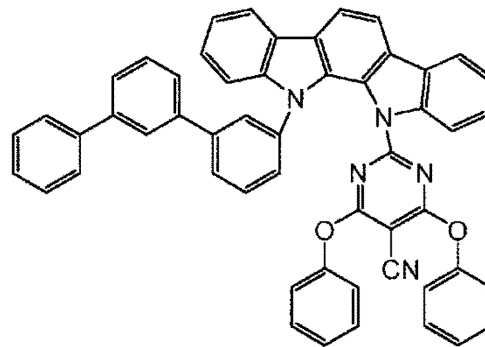
化合物 I-2



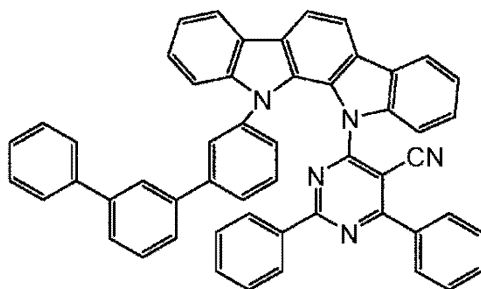
化合物 I-3



化合物 I-4



化合物 I-5



## 【0215】

式 I の置換基を有する N - 複素環化合物は、電子デバイスの層を形成することができる。用語「層」は、用語「薄膜」と同じ意味で用いられ、所望の領域を覆うコーティングを指す。この用語はサイズによって限定されない。この領域は、全体デバイスと同じくらい大きい、または実際の表示装置などの特定の機能領域と同じくらい小さい、または単一のサブピクセルと同じくらい小さいものであり得る。層および薄膜は、蒸着、液体堆積（連続技術および不連続技術）、ならびに熱転写などの、任意の従来の堆積技術によって形成することができる。連続液体堆積技術には、スピコート、グラビアコーティング、カーテンコーティング、浸漬コーティング、スロットダイコーティング、吹付けコーティング、および連続ノズルコーティングが含まれるが、それらに限定されない。不連続液体堆積技術には、インクジェット印刷、グラビア印刷、およびスクリーン印刷が含まれるが、それらに限定されない。

## 【0216】

いくつかの実施形態において、式 I の置換基を有する新規 N - 複素環化合物は、デバイスにおけるエレクトロルミネセンス材料用のホストとして使用することができる。

## 【0217】

いくつかの実施形態において、式Iの置換基を有する新規N-複素環化合物は、デバイスにおける電子輸送材料として使用することができる。

## 【0218】

3. 式Iの少なくとも1つの置換基を有するN-複素環を含む組成物

いくつかの実施形態において、組成物が(a)380~750nmに発光極大を有するエレクトロルミネセンスの能力があるドーパント、(b)式Iの少なくとも1つの置換基を有するN-複素環である第1ホスト化合物、および(c)第2ホスト化合物を含む組成物が提供される。

## 【0219】

(a)ドーパント

光活性層にドーパントとして使用することができるエレクトロルミネセンス(「EL」)材料には、小分子有機発光性化合物、発光性金属錯体、共役ポリマー、およびそれらの混合物が含まれるが、それらに限定されない。小分子発光性有機化合物の例としては、クリセン、ピレン、ペリレン、ルブレン、クマリン、アントラセン、チアジアゾール、ベンゾフルオレン、それらの誘導体、およびそれらの混合物が挙げられるが、それらに限定されない。金属錯体の例としては、金属キレートオキシノイド化合物、ならびにイリジウム、ロジウム、ルテニウム、オスミウム、および白金などの金属のシクロメタル化錯体が挙げられるが、それらに限定されない。共役ポリマーの例としては、ポリ(フェニレンビニレン)、ポリフルオレン、ポリ(スピロビフルオレン)、ポリチオフェン、ポリ(p-フェニレン)、それらのコポリマー、およびそれらの混合物が挙げられるが、それらに限定されない。

## 【0220】

いくつかの実施形態において、ドーパントは有機金属錯体である。いくつかの実施形態において、有機金属錯体はシクロメタル化である。「シクロメタル化」とは、少なくとも2点で金属に結合し、少なくとも1つ炭素-金属結合を持った少なくとも1つの5または6員環を形成している少なくとも1つの配位子を錯体が含有することを意味する。いくつかの実施形態において、金属は、イリジウムまたは白金である。いくつかの実施形態において、有機金属錯体は、電氣的に中性である。そのような材料は、例えば、米国特許第6,670,645号明細書ならびにPCT出願公開国際公開第03/063555号パンフレット、国際公開第2004/016710号パンフレット、および国際公開第03/040257号パンフレットに開示されている。

## 【0221】

いくつかの実施形態において、ドーパントは、式 $Ir(L1)_x(L2)_y(L3)_z$ を有する錯体であり；式中、

L1は、炭素および窒素を介して配位したモノアニオン性二座シクロメタル化配位子であり；

L2は、炭素を介して配位していないモノアニオン性二座配位子であり；

L3は、単座配位子であり；

xは、1~3であり；

yおよびzは独立して、0~2であり；

x、y、およびzは、イリジウムが六配位であり、錯体が電氣的に中性であるように選択される。

## 【0222】

式のいくつかの例としては、 $Ir(L1)_3$ ； $Ir(L1)_2(L2)$ ；および $Ir(L1)_2(L3)(L3')$ (式中、L3はアニオン性であり、L3'は非イオン性である)が挙げられるが、それらに限定されない。配位子は、非置換であってもよいし、またはF、D、アルキル、ペルフルオロアルキル、アルコキシル、アルキルアミノ、アリールアミノ、CN、シリル、フルオロアルコキシル、アリール基、またはそれらの重水素化類似体で置換されていてもよい。

10

20

30

40

50

## 【0223】

錯体  $\text{Ir}(\text{L}1)_3$  のいくつかの実施形態において、すべての3つのL1配位子は同じものであり、錯体は、ホモレプティックである。

## 【0224】

錯体  $\text{Ir}(\text{L}1)_3$  のいくつかの実施形態において、少なくとも1つのL1配位子は他とは異なり、錯体はヘテロレプティックである。いくつかの実施形態において、ヘテロレプティック錯体は、3つの異なるL1配位子を有する。

## 【0225】

いくつかの実施形態において、L1は、アリールがフェニルまたはナフチルであり、そしてN-複素環が、ピリジン、キノリン、イソキノリン、ジアジン、ピロール、ピラゾールまたはイミダゾールである、アリールN-複素環である。

10

## 【0226】

いくつかの実施形態において、L1は、フェニルピリジン、フェニルキノリン、フェニルイソキノリン、フェニルピリミジン、フェニルピラゾール、チエニルピリジン、チエニルキノリン、およびチエニルピリミジンからなる群から選択される。

## 【0227】

モノアニオン性二座配位子、L2は、金属配位化学の技術分野において周知である。一般にこれらの配位子は、配位原子としてN、O、P、またはSを有し、イリジウムに配位した場合に5または6員環を形成する。好適な配位基には、アミノ、イミノ、アミド、アルコキシド、カルボキシレート、ホスフィノ、チオレート等が含まれる。これらの配位子用の好適な親化合物の例としては、 $\beta$ -ジカルボニル( $\beta$ -エノレート配位子)、およびそれらのNおよびS類似体；アミノカルボン酸(アミノカルボキシレート配位子)；ピリジンカルボン酸(イミノカルボキシレート配位子)；サリチル酸誘導体(サリチレート配位子)；ヒドロキシキノリン(ヒドロキシキノリネート配位子)およびそれらのS類似体；ならびにホスフィノアルカノール(ホスフィノアルコキシド配位子)が挙げられる。

20

## 【0228】

いくつかの実施形態において、L2は、 $\beta$ -ジエノレート、ジケチミン、ピコリネート、N-アコキシピラゾール、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される。

## 【0229】

単座配位子L3は、アニオン性または非イオン性であり得る。アニオン性配位子には、H<sup>-</sup>(「ヒドリド」)および配位原子としてC、OまたはSを有する配位子が含まれるが、それらに限定されない。配位基には、アルコキシド、カルボキシレート、チオカルボキシレート、ジチオカルボキシレート、スルホネート、チオレート、カルバメート、ジチオカルバメート、チオカルバゾンアニオン、スルホンアミドアニオン等が含まれるが、それらに限定されない。いくつかの場合には、 $\beta$ -エノレートおよびホスフィノアルコキシドなどの、L2として上にリストアップされた配位子が、単座配位子として機能することができる。単座配位子はまた、ハライド、シアニド、イソシアニド、ナイトレート、スルフェート、ヘキサハロアンチモネート等の配位アニオンであり得る。これらの配位子は、一般に商業的に入手可能である。

30

## 【0230】

単座L3配位子はまた、COなどの、非イオン性配位子または単座ホスフィン配位子であり得る。

40

## 【0231】

イリジウム錯体ドーパントは、例えば、米国特許第6,670,644号明細書に記載されているような標準合成技術を用いて製造することができる。

## 【0232】

いくつかの実施形態において、ドーパントは、小有機発光性化合物である。いくつかの実施形態において、ドーパントは、非ポリマースピロピフルオレン化合物およびフルオランテン化合物からなる群から選択される。

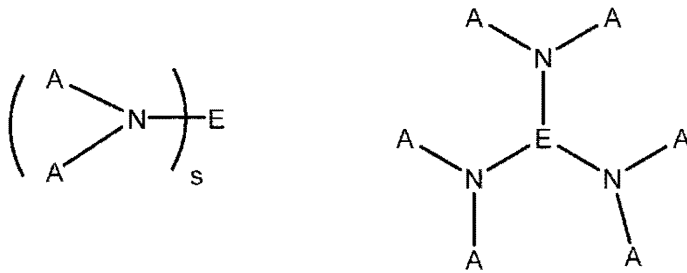
## 【0233】

50

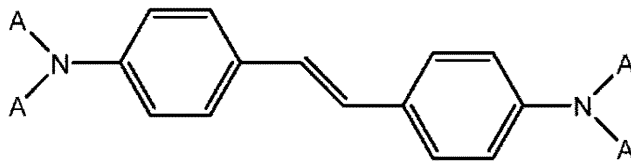
いくつかの実施形態において、ドーパントは、アリアルアミン基を有する化合物である。  
いくつかの実施形態において、ドーパントは、下式：

【0234】

【化17】



10



【0235】

(式中：

Aは、出現ごとに同じまたは異なるものであり、炭化水素アリアル、ヘテロアリアル、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択され；

Eは、炭化水素アリアル基またはその重水素化類似体であり；

sは、1～6の整数である)

から選択される。

【0236】

上式のいくつかの実施形態において、Eは、少なくとも少なくとも3つの縮合環を有する。

【0237】

上式のいくつかの実施形態において、s = 2である。

【0238】

いくつかの実施形態において、Eは、ナフタレン、アントラセン、クリセン、ピレン、テトラセン、キサントレン、ペリレン、クマリン、ローダミン、キナクリドン、ベンゾフルオレン、およびブルブレンからなる群から選択される化合物に由来する。

【0239】

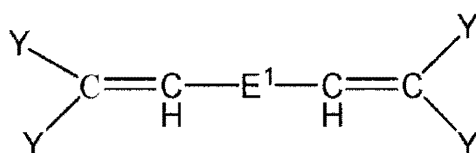
いくつかの実施形態において、Aは、フェニル、ピフェニル、テルフェニル、トリル、ナフチル、ナフチルフェニル、およびアントラセニル基からなる群から選択される。

【0240】

いくつかの実施形態において、ドーパントは、下式：

【0241】

【化18】



【0242】

50

(式中：

Yは、出現ごとに同じまたは異なるものであり、3～60個の炭素原子を有する芳香族基であり；

E<sup>1</sup>は、芳香族基、二価トリフェニルアミン残基、または単結合である)を有する。

【0243】

いくつかの実施形態において、ドーパントは、アリールアセンである。いくつかの実施形態において、ドーパントは、非対称アリールアセンである。

【0244】

いくつかの実施形態において、小分子有機ドーパントは、アミノ置換クリセン、アミノ置換アントラセン、アミノ置換ベンゾフルオレン、アミノ置換ピレン、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される。

10

【0245】

組成物のいくつかの実施形態において、ドーパントは、おおよそ600～750nmに発光極大を有するエレクトロルミネセンスの能力がある。そのような材料は本明細書では、「赤色発光材料」または「赤色発光ドーパント」と言われる。

【0246】

赤色発光材料の例としては、フェニルキノリンまたはフェニルイソキノリン配位子、ペリフランテン、フルオランテン、およびペリレンを有するIrの錯体が挙げられるが、それらに限定されない。赤色発光材料は、例えば、米国特許第6,875,524号明細書、および米国特許出願公開第2005-0158577号明細書に開示されている。

20

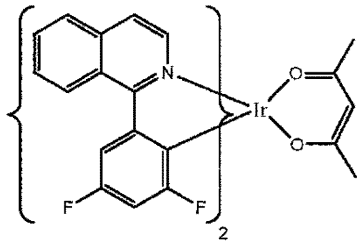
【0247】

赤色発光有機金属イリジウム錯体の例としては、下記の化合物D1～D10が挙げられるが、それらに限定されない。

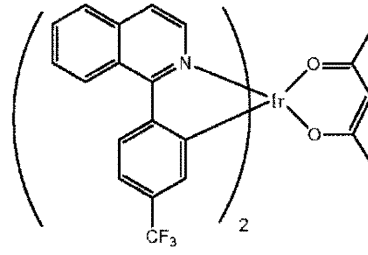
【0248】

【化 1 9】

D1:

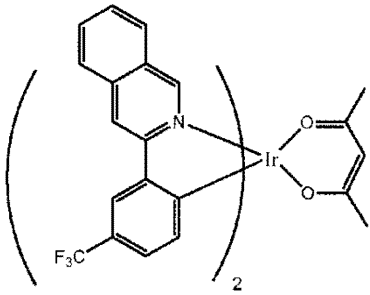


D2:

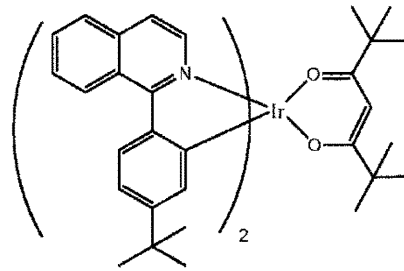


10

D3:

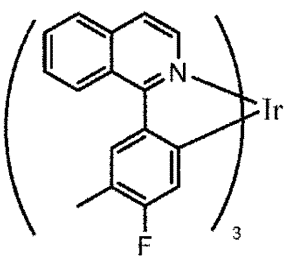


D4:

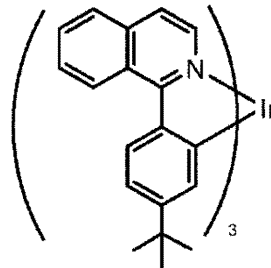


20

D5:

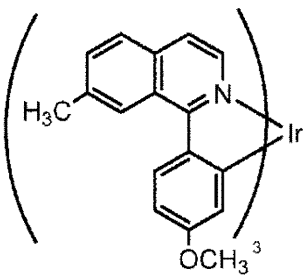


D6:

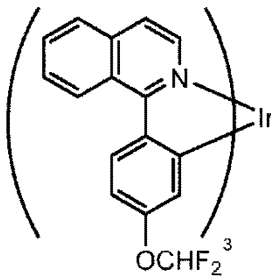


30

D7:



D8:

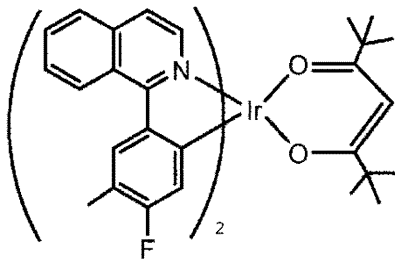


40

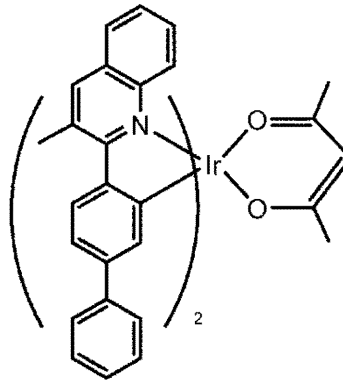
【 0 2 4 9】

【化20】

D9



D10



10

【0250】

組成物のいくつかの実施形態において、ドーパントは、おおよそ495～600nmに発光極大を有するエレクトロルミネセンスの能力がある。そのような材料は本明細書では、「緑色発光材料」または「緑色発光ドーパント」と言われる。

【0251】

いくつかの実施形態において、緑色発光材料は、495～570nmに発光極大を有する。

20

【0252】

いくつかの実施形態において、緑色発光材料は、色がより黄色であり、おおよそ570～590nmに発光極大を有する。そのような材料は本明細書では、「黄色発光材料」または「黄色発光ドーパント」と言われる。

【0253】

緑色発光材料の例としては、フェニルピリジン配位子、ビス(ジアリールアミノ)アントラセン、およびポリフェニレンポリマーを有するIrの錯体が挙げられるが、それらに限定されない。緑色発光材料は、例えば、PCT出願公開国際公開第2007/021117号パンフレットに開示されている。

30

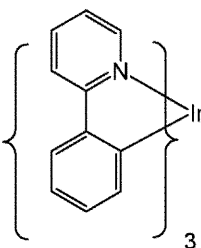
【0254】

緑色発光有機金属Ir錯体の例としては、下記のD11～D33が挙げられるが、それらに限定されない。

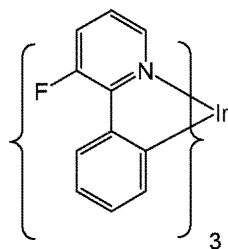
【0255】

【化21】

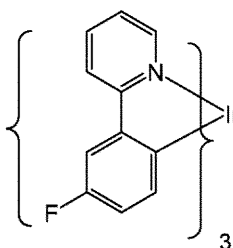
D11



D12



D13

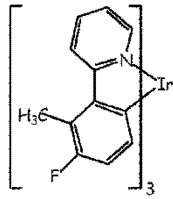


40

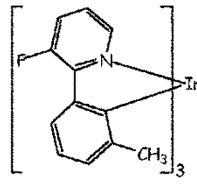
【0256】

## 【化 2 2】

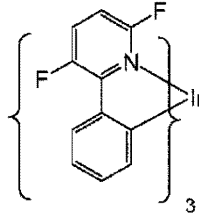
D14



D15

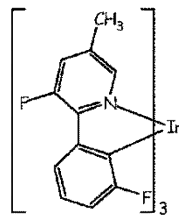


D16

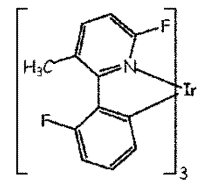


10

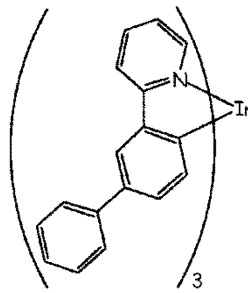
D17



D18

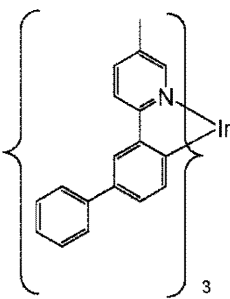


D19

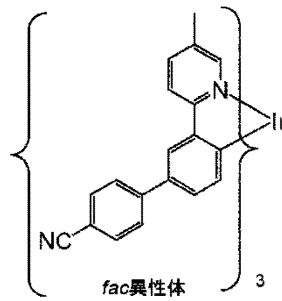


20

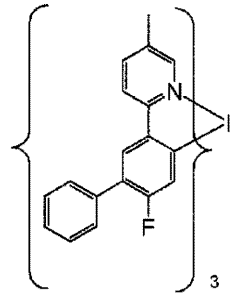
D20



D21

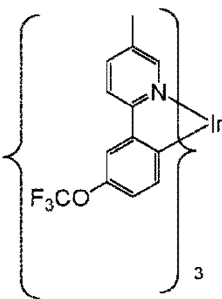


D22

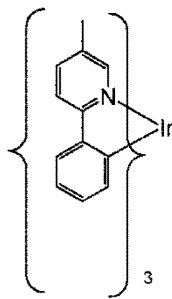


30

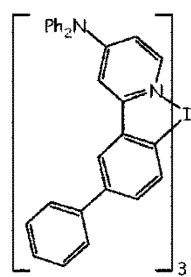
D23



D24



D25



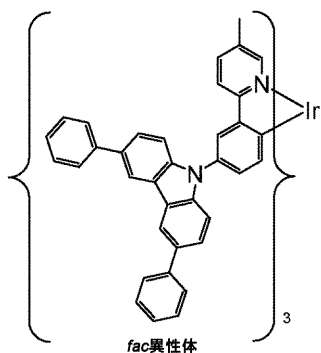
40

## 【 0 2 5 7】

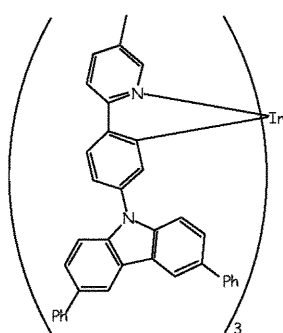


## 【化23】

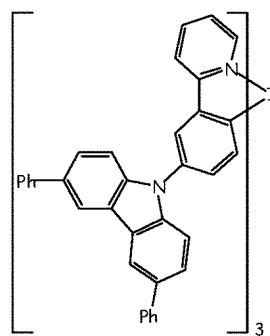
D26



D27

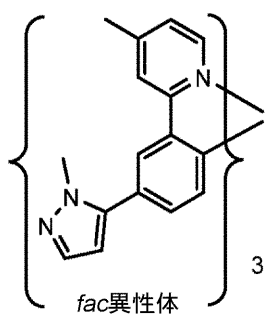


D28

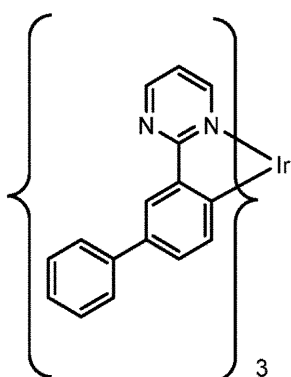


10

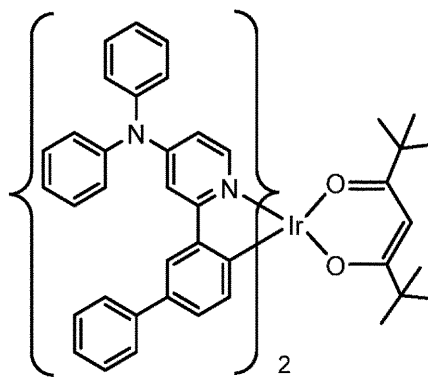
D29



D30

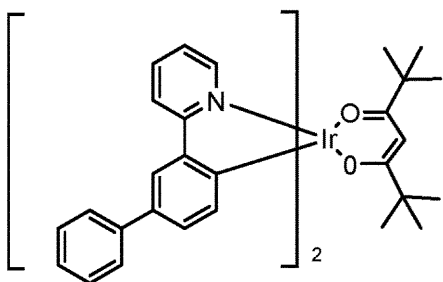


D31

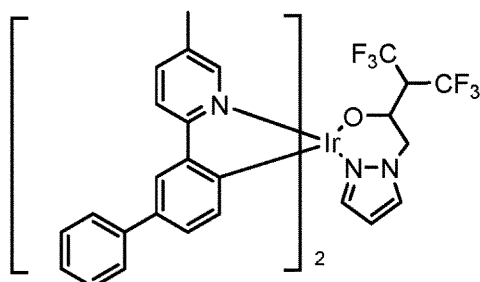


20

D32



D33



30

## 【0258】

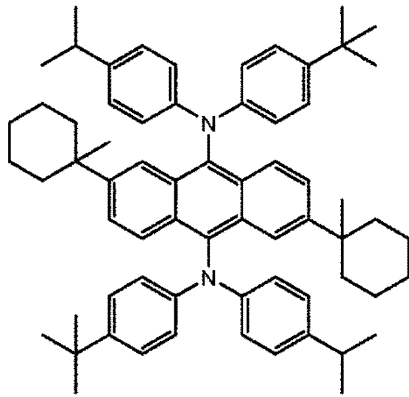
小分子有機緑色発光材料のいくつかの例としては、下に示される化合物D52～D59が挙げられるが、それらに限定されない。

40

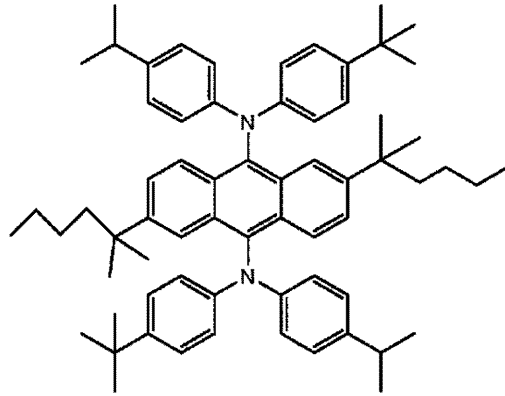
## 【0259】

【化 2 4】

D52:

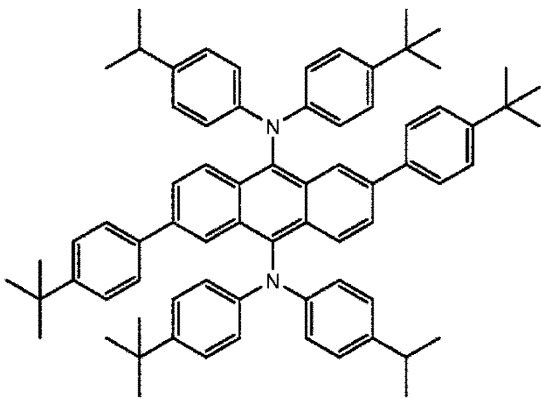


D53:

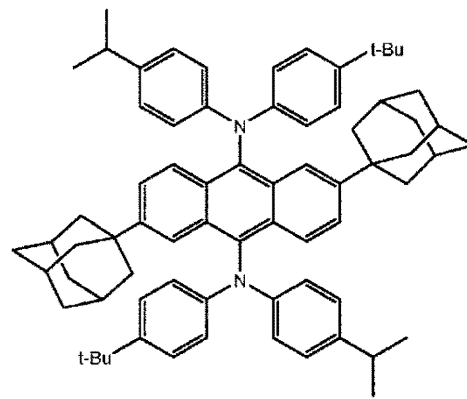


10

D54:

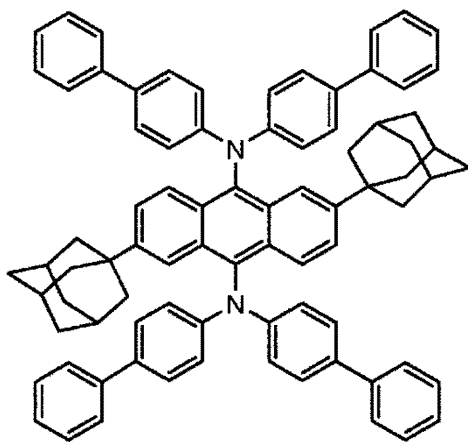


D55:

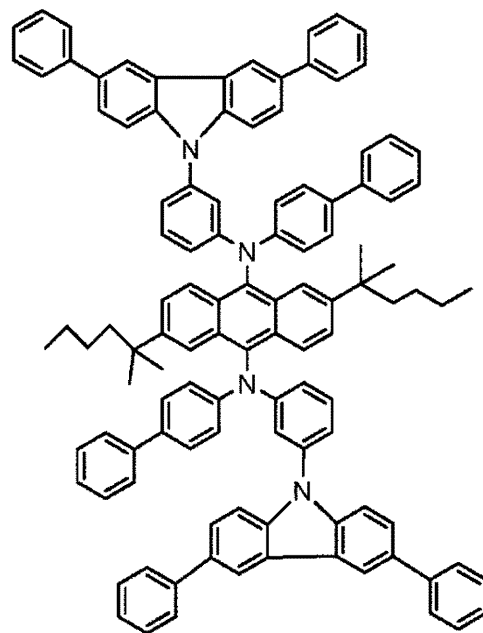


20

D56:



D57:

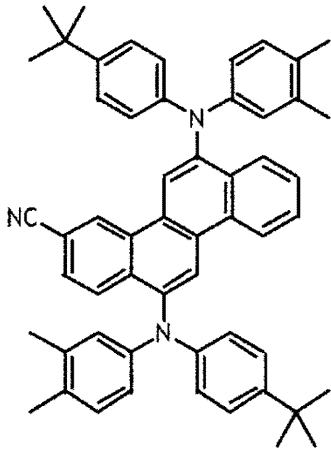


30

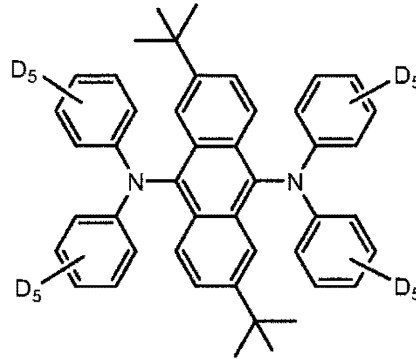
40

## 【化 2 5】

D58:



D59:



10

## 【 0 2 6 1】

組成物のいくつかの実施形態において、ドーパントは、おおよそ 380 ~ 495 nm に発光極大を有するエレクトロルミネセンスの能力がある。そのような材料は本明細書では、「青色発光材料」または「青色発光ドーパント」と言われる。

20

## 【 0 2 6 2】

いくつかの実施形態において、青色発光材料は、450 ~ 495 nm に発光極大を有する。

## 【 0 2 6 3】

青色発光材料の例としては、フェニルピリジンまたはフェニルイミダゾール配位子、ジアリールアントラセン、ジアミノクリセン、ジアミノピレン、ジアミノベンゾフルオレン、およびポリフルオレンポリマーを有する Ir の錯体が挙げられるが、それらに限定されない。青色発光材料は、例えば、米国特許第 6,875,524 号明細書、ならびに米国特許出願公開第 2007-0292713 号明細書および同第 2007-0063638 号明細書に開示されている。

30

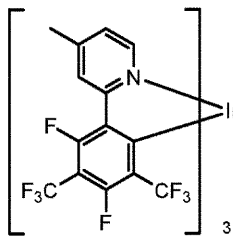
## 【 0 2 6 4】

青色発光有機金属 Ir 錯体の例としては、下記の D34 ~ D51 が挙げられるが、それらに限定されない。

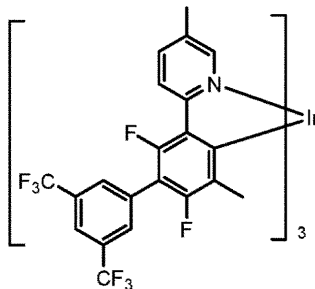
## 【 0 2 6 5】

## 【化 2 6】

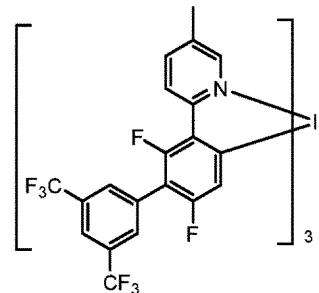
D34



D35



D36

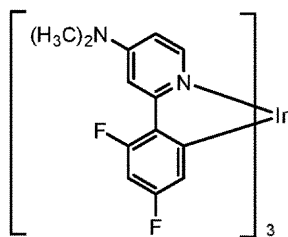


40

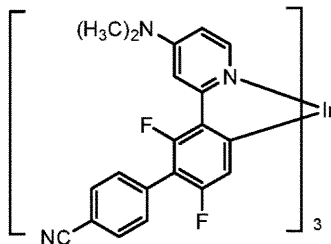
## 【 0 2 6 6】

【化 2 7】

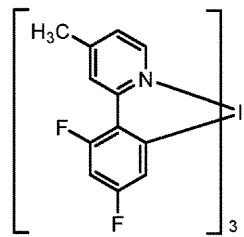
D37



D38

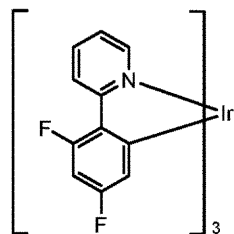


D39

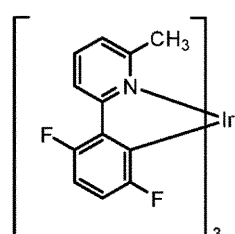


10

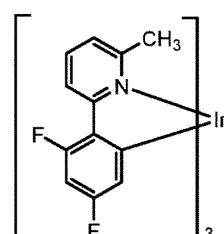
D40



D41

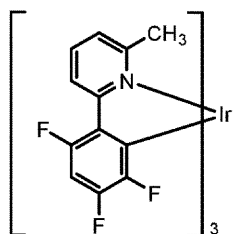


D42

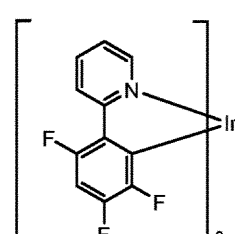


20

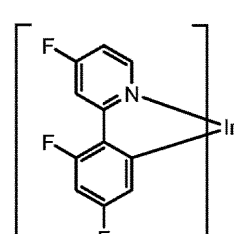
D43



D44

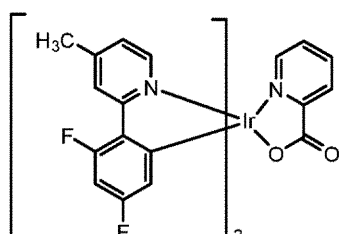


D45

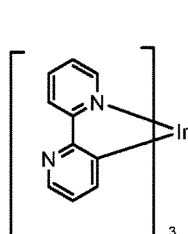


30

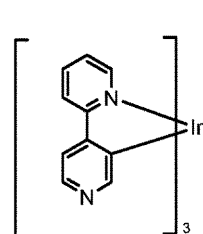
D46



D47

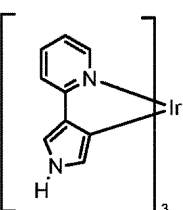


D48

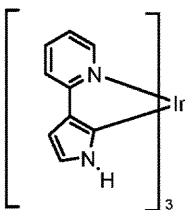


40

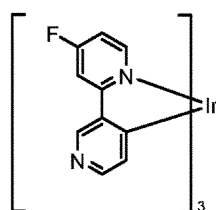
D49



D50



D51



【 0 2 6 7 】

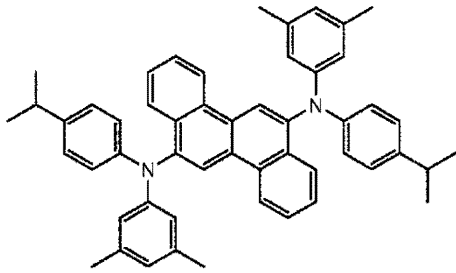
50

小分子有機青色発光材料の例としては、下に示される化合物 D 6 0 ~ D 6 8 が挙げられるが、それらに限定されない。

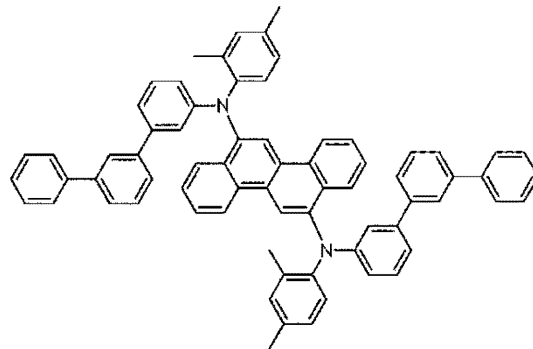
【 0 2 6 8 】

【 化 2 8 】

D60:

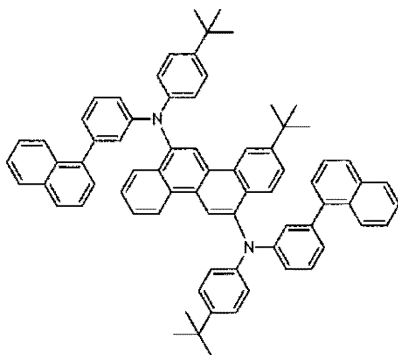


D61:

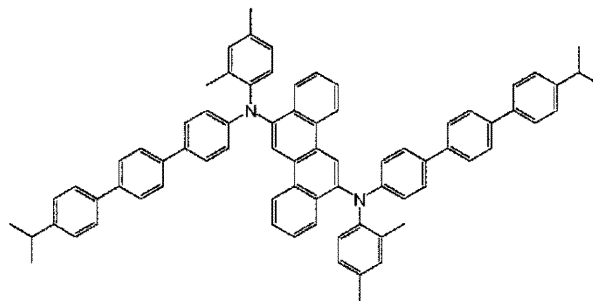


10

D62:

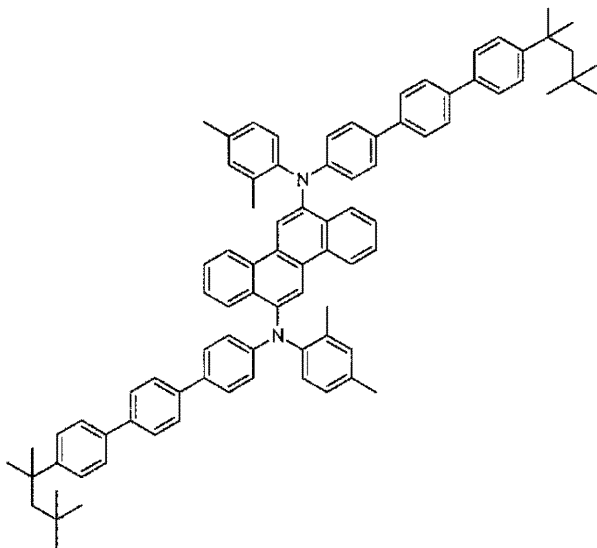


D63:



20

D64:



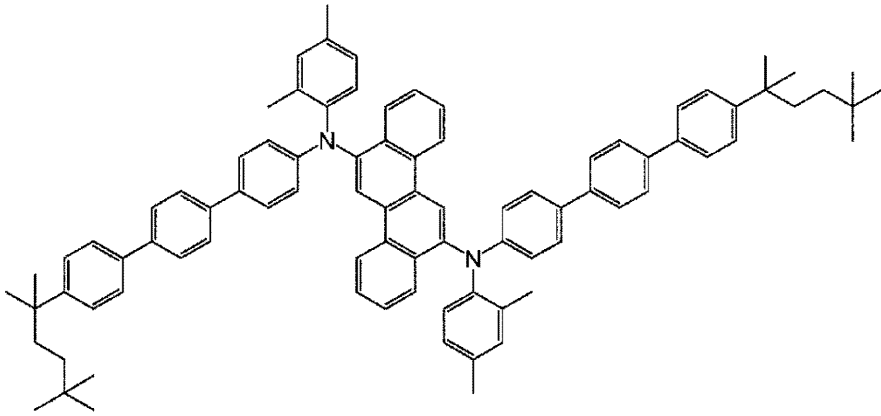
30

40

【 0 2 6 9 】

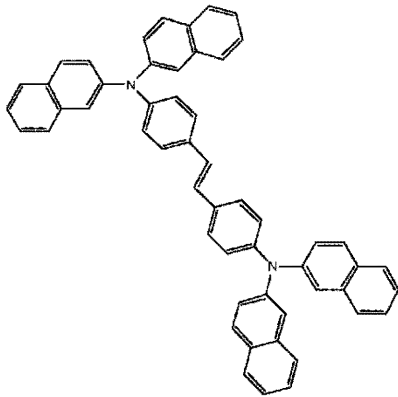
【化 2 9】

D65:



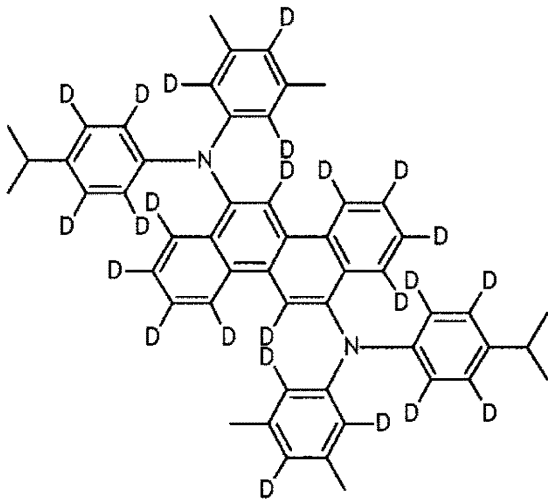
10

D66:



20

D67:

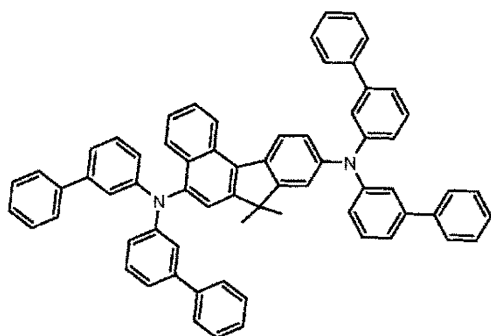


40

【 0 2 7 0 】

## 【化 3 0】

D68:



10

## 【 0 2 7 1】

(b) 第 1 ホスト

第 1 ホスト化合物は、上で詳細に記載されたように、式 I の少なくとも 1 つの置換基を有する N - 複素環である。

## 【 0 2 7 2】

(c) 第 2 ホスト

いくつかの実施形態において、第 2 ホストは重水素化されている。いくつかの実施形態において、第 2 ホストは、少なくとも 10 % 重水素化されており；いくつかの実施形態において、少なくとも 20 % 重水素化されており；いくつかの実施形態において、少なくとも 30 % 重水素化されており；いくつかの実施形態において、少なくとも 40 % 重水素化されており；いくつかの実施形態において、少なくとも 50 % 重水素化されており；いくつかの実施形態において、少なくとも 60 % 重水素化されており；いくつかの実施形態において、少なくとも 70 % 重水素化されており；いくつかの実施形態において、少なくとも 80 % 重水素化されており；いくつかの実施形態において、少なくとも 90 % 重水素化されている。いくつかの実施形態において、第 2 ホストは、100 % 重水素化されている。

20

## 【 0 2 7 3】

第 2 ホスト材料の例としては、カルバゾール、インドロカルバゾール、クリセン、フェナントレン、トリフェニレン、フェナントロリン、トリアジン、ナフタレン、アントラセン、キノリン、イソキノリン、キノキサリン、フェニルピリジン、ベンゾジフラン、ジベンゾフラン、ベンゾジフラン、金属キノリネート錯体、それらの置換誘導体、およびそれらの重水素化類似体が挙げられるが、それらに限定されない。

30

## 【 0 2 7 4】

いくつかの実施形態において、第 2 ホストは、インドロカルバゾール、クリセン、トリフェニレン、ジベンゾフラン、ベンゾジフラン、それらの置換誘導体、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される。

## 【 0 2 7 5】

いくつかの実施形態において、第 2 ホストは、インドロカルバゾール、クリセン、それらの置換誘導体、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される。

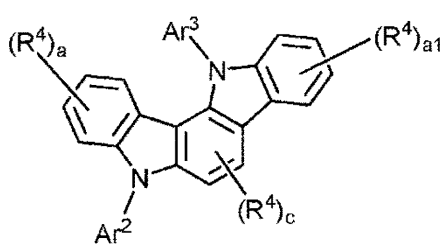
40

## 【 0 2 7 6】

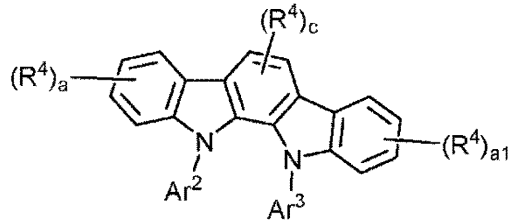
いくつかの実施形態において、第 2 ホストは、式 V ( a )、式 V ( b )、式 V ( c )、式 V ( d )、および式 V ( e )

## 【 0 2 7 7】

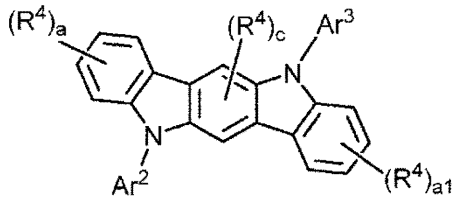
## 【化31】



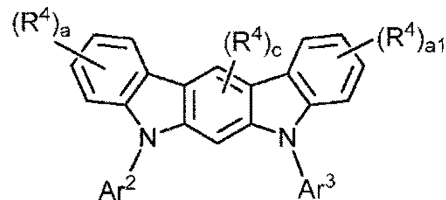
(V-a)



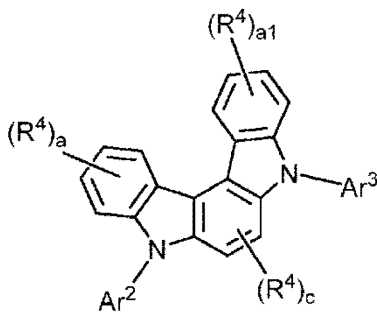
(V-b)



(V-c)



(V-d)



(V-e)

## 【0278】

(式中：

$Ar^2$ および $Ar^3$ は、同じまたは異なるものであり、炭化水素アリールまたは重水素化炭化水素アリール基であり；

$R^4$ は、出現ごとに同じまたは異なるものであり、D、F、CN、アルキル、フルオロアルキル、炭化水素アリール、フルオロアリール、ヘテロアリール、アミノ、シリル、ゲルミル、アルコキシ、アリールオキシ、フルオロアルコキシ、シロキサン、シロキシ、重水素化アルキル、重水素化部分フッ素化アルキル、重水素化炭化水素アリール、重水素化部分フッ素化アリール、重水素化ヘテロアリール、重水素化アミノ、重水素化シリル、重水素化ゲルミル、重水素化アルコキシ、重水素化アリールオキシ、重水素化フルオロアルコキシ、重水素化シロキサン、および重水素化シロキシからなる群から選択され、ここで、隣接 $R^4$ 基は、互いに結合して縮合環を形成することができ；

$a$ および $a_1$ は、同じまたは異なるものであり、0～4の整数であり；

$c$ は、0～2の整数である)

の1つを有する。

## 【0279】

いくつかの実施形態において、第2ホストは、式V-aを有する。

## 【0280】

いくつかの実施形態において、第2ホストは、式V-bを有する。

## 【0281】

いくつかの実施形態において、第2ホストは、式V-cを有する。

## 【0282】

10

20

30

40

50



いくつかの実施形態において、第2ホストは、式V - dを有する。

【0283】

いくつかの実施形態において、第2ホストは、式V - eを有する。

【0284】

式V - a ~ V - eのいくつかの実施形態において、 $Ar^2$ は、6 ~ 24個の環炭素有する炭化水素アリールまたはその重水素化類似体である。

【0285】

式V - a ~ V - eのいくつかの実施形態において、 $Ar^2$ は、上で定義されたような、式aを有する。

【0286】

式V - a ~ V - eのいくつかの実施形態において、 $Ar^2$ は、上で定義されたような、式bを有する。

【0287】

式V - a ~ V - eのいくつかの実施形態において、 $Ar^2$ は、非芳香族置換基をまったく持たない炭化水素アリールである。

【0288】

式V - a ~ V - eのいくつかの実施形態において、 $Ar^2$ は、他の置換基をまったく持たない重水素化炭化水素アリールである。

【0289】

式V - a ~ V - eのいくつかの実施形態において、 $Ar^2$ は、置換炭化水素アリールである。いくつかの実施形態において、置換基は、D、アルキル、アルコキシ、シリル、ゲルミル、重水素化アルキル、重水素化アルコキシ、重水素化シリル、重水素化ゲルミル、およびそれらの組み合わせからなる群から選択される。

【0290】

式V - a ~ V - eのいくつかの実施形態において、 $Ar^2$ は、フェニル、ナフチル、ピフェニル、ピナフチル、テルフェニル、それらの置換誘導体、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される。

【0291】

$Ar^2$ について上記の実施形態のすべてが、 $Ar^3$ に同様に当てはまる。

【0292】

式V - a ~ V - eのいくつかの実施形態において、 $a = 0$ である。

【0293】

式V - a ~ V - eのいくつかの実施形態において、 $a = 1$ である。

【0294】

式V - a ~ V - eのいくつかの実施形態において、 $a = 2$ である。

【0295】

式V - a ~ V - eのいくつかの実施形態において、 $a = 3$ である。

【0296】

式V - a ~ V - eのいくつかの実施形態において、 $a = 4$ である。

【0297】

式V - a ~ V - eのいくつかの実施形態において、 $a > 0$ である。

【0298】

式V - a ~ V - eのいくつかの実施形態において、 $a > 0$ であり、少なくとも1つの $R^4 = D$ である。

【0299】

式V - a ~ V - eのいくつかの実施形態において、 $a > 0$ であり、少なくとも1つの $R^4$ は、1 ~ 12個の炭素原子を有するアルキルまたは重水素化アルキルである。

【0300】

式V - a ~ V - eのいくつかの実施形態において、 $a > 0$ であり、少なくとも1つの $R^4$ は、6 ~ 24個の環炭素有する炭化水素アリールまたは重水素化炭化水素アリールで

10

20

30

40

50

ある。

【0301】

式  $V - a \sim V - e$  のいくつかの実施形態において、 $a > 0$  であり、少なくとも1つの  $R^4$  は、非芳香族置換基をまったく持たない炭化水素アリールである。

【0302】

式  $V - a \sim V - e$  のいくつかの実施形態において、 $a > 0$  であり、少なくとも1つの  $R^4$  は、他の置換基をまったく持たない重水素化炭化水素アリールである。

【0303】

式  $V - a \sim V - e$  のいくつかの実施形態において、 $a > 0$  であり、少なくとも1つの  $R^4$  は、上で定義されたような、式  $a$  を有する。

10

【0304】

式  $V - a \sim V - e$  のいくつかの実施形態において、 $a > 0$  であり、少なくとも1つの  $R^4$  は、上で定義されたような、式  $b$  を有する。

【0305】

式  $V - a \sim V - e$  のいくつかの実施形態において、 $a > 0$  であり、少なくとも1つの  $R^4$  は、フェニル、ナフチル、ピフェニル、それらの置換誘導体、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される。いくつかの実施形態において、置換基は、D、アルキル、アルコキシ、シリル、ゲルミル、重水素化アルキル、重水素化アルコキシ、重水素化シリル、重水素化ゲルミル、およびそれらの組み合わせからなる群から選択される。

【0306】

式  $V - a \sim V - e$  のいくつかの実施形態において、 $a_1 = 0$  である。

20

【0307】

式  $V - a \sim V - e$  のいくつかの実施形態において、 $a_1 = 1$  である。

【0308】

式  $V - a \sim V - e$  のいくつかの実施形態において、 $a_1 = 2$  である。

【0309】

式  $V - a \sim V - e$  のいくつかの実施形態において、 $a_1 = 3$  である。

【0310】

式  $V - a \sim V - e$  のいくつかの実施形態において、 $a_1 = 4$  である。

【0311】

式  $V - a \sim V - e$  のいくつかの実施形態において、 $a_1 > 0$  である。

30

【0312】

式  $V - a \sim V - e$  のいくつかの実施形態において、 $a_1 > 0$  であり、少なくとも1つの  $R^4$  は、上で定義されたとおりである。

【0313】

式  $V - a \sim V - e$  のいくつかの実施形態において、 $c = 0$  である。

【0314】

式  $V - a \sim V - e$  のいくつかの実施形態において、 $c = 1$  である。

【0315】

式  $V - a \sim V - e$  のいくつかの実施形態において、 $c > 0$  である。

40

【0316】

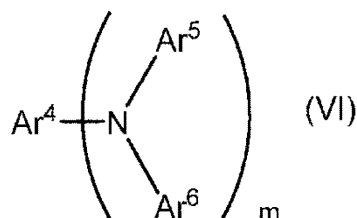
式  $V - a \sim V - e$  のいくつかの実施形態において、 $c > 0$  であり、 $R^4 = D$  である。

【0317】

いくつかの実施形態において、第2ホストは、式  $V I$

【0318】

## 【化32】



## 【0319】

(式中：

$\text{Ar}^4$ は、少なくとも2つの縮合環を有する炭化水素アリール、少なくとも2つの縮合環を有するヘテロアリール、それらの置換誘導体、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択され；

$\text{Ar}^5$ および $\text{Ar}^6$ は、出現ごとに同じまたは異なるものであり、炭化水素アリール、ヘテロアリール、それらの置換誘導体、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択され；

$m$ は、1または2である)

を有する。

## 【0320】

式VIのいくつかの実施形態において、 $\text{Ar}^4$ は、3~5つの縮合芳香環を有する。

## 【0321】

式VIのいくつかの実施形態において、 $\text{Ar}^4$ は、アントラセン、クリセン、ピレン、フェナントレン、トリフェニレン、フェナントロリン、ナフタレン、アントラセン、キノリン、イソキノリン、キノキサリン、フェニルピリジン、ジベンゾフラン、ジフラノベンゼン、それらの置換誘導体、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される。

## 【0322】

式VIのいくつかの実施形態において、 $\text{Ar}^4$ は、アントラセン、クリセン、ピレン、フェナントレン、トリフェニレン、それらの置換誘導体、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される。

## 【0323】

式VIのいくつかの実施形態において、 $\text{Ar}^5 = \text{Ar}^6$ である。

## 【0324】

式VIのいくつかの実施形態において、 $\text{Ar}^5 \neq \text{Ar}^6$ である。

## 【0325】

式VIのいくつかの実施形態において、 $\text{Ar}^5$ は、炭化水素アリールまたはその重水素化類似体である。いくつかの実施形態において、炭化水素アリールは、6~24個の環炭素を有する。

## 【0326】

式VIのいくつかの実施形態において、 $\text{Ar}^5$ は、上で定義されたような、式aを有する。

## 【0327】

式VIのいくつかの実施形態において、 $\text{Ar}^5$ は、上で定義されたような、式bを有する。

## 【0328】

式VIのいくつかの実施形態において、 $\text{Ar}^5$ は、非芳香族置換基をまったく持たない炭化水素アリールである。

## 【0329】

式VIのいくつかの実施形態において、 $\text{Ar}^5$ は、他の置換基をまったく持たない重水素化炭化水素アリールである。

## 【0330】

10

20

30

40

50

式V Iのいくつかの実施形態において、 $Ar^5$ は、置換炭化水素アリールである。いくつかの実施形態において、置換基は、D、アルキル、アルコキシ、シリル、ゲルミル、重水素化アルキル、重水素化アルコキシ、重水素化シリル、重水素化ゲルミル、およびそれらの組み合わせからなる群から選択される。

【0331】

式V Iのいくつかの実施形態において、 $Ar^5$ は、フェニル、ナフチル、ビフェニル、ピナフチル、テルフェニル、フェナントリル、アントラセニル、4-ナフチルフェニル、4-フェナントリルフェニル、それらの置換誘導体、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される。

【0332】

$Ar^5$ について上記の実施形態のすべてが、 $Ar^6$ に同様に当てはまる。

【0333】

式V Iのいくつかの実施形態において、 $m = 1$ である。

【0334】

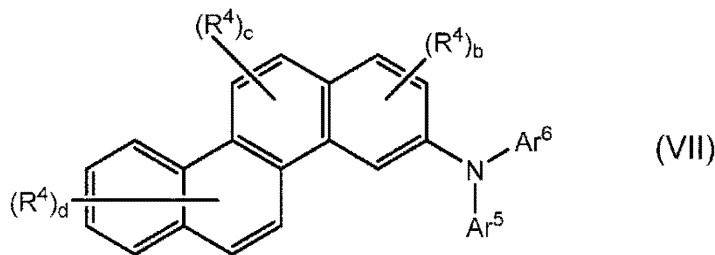
式V Iのいくつかの実施形態において、 $m = 2$ である。

【0335】

いくつかの実施形態において、第2ホストは、式V I I

【0336】

【化33】



【0337】

(式中：

$Ar^5$ および $Ar^6$ は、同じまたは異なるものであり、炭化水素アリール、ヘテロアリール、それらの置換誘導体、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択され；

$R^4$ は、出現ごとに同じまたは異なるものであり、D、F、CN、アルキル、フルオロアルキル、炭化水素アリール、フルオロアリール、ヘテロアリール、アミノ、シリル、ゲルミル、アルコキシ、アリールオキシ、フルオロアルコキシ、シロキサン、シロキシ、重水素化アルキル、重水素化部分フッ素化アルキル、重水素化炭化水素アリール、重水素化部分フッ素化アリール、重水素化ヘテロアリール、重水素化アミノ、重水素化シリル、重水素化ゲルミル、重水素化アルコキシ、重水素化アリールオキシ、重水素化フルオロアルコキシ、重水素化シロキサン、および重水素化シロキシからなる群から選択され、ここで、隣接 $R^4$ 基は、互いに結合して縮合環を形成することができ；

$b$ は、0～3の整数であり；

$c$ は、0～2の整数であり；

$d$ は、0～6の整数である)

を有する。

【0338】

式V I Iのいくつかの実施形態において、 $b = 0$ である。

【0339】

式V I Iのいくつかの実施形態において、 $b = 1$ である。

【0340】

式V I Iのいくつかの実施形態において、 $b = 2$ である。

【0341】

- 式VIIのいくつかの実施形態において、 $b = 3$ である。
- 【0342】
- 式VIIのいくつかの実施形態において、 $b > 0$ である。
- 【0343】
- 式VIIのいくつかの実施形態において、 $d > 0$ であり、少なくとも1つの $R^4$ はDである。
- 【0344】
- 式VIIのいくつかの実施形態において、 $d > 0$ であり、少なくとも1つの $R^4$ は、1~12個の炭素有するアルキルまたはその重水素化類似体である。
- 【0345】 10
- 式VIIのいくつかの実施形態において、 $d > 0$ であり、少なくとも1つの $R^4$ は、6~20個の環炭素有する炭化水素アリールまたはその重水素化類似体である。
- 【0346】
- 式VIIのいくつかの実施形態において、 $c = 0$ である。
- 【0347】
- 式VIIのいくつかの実施形態において、 $c = 1$ である。
- 【0348】
- 式VIIのいくつかの実施形態において、 $c = 2$ である。
- 【0349】
- 式VIIのいくつかの実施形態において、 $c > 0$ である。 20
- 【0350】
- 式VIIのいくつかの実施形態において、 $c > 0$ であり、少なくとも1つの $R^4$ は、上で記載されたとおりである。
- 【0351】
- 式VIIのいくつかの実施形態において、 $d = 0$ である。
- 【0352】
- 式VIIのいくつかの実施形態において、 $d = 1$ である。
- 【0353】
- 式VIIのいくつかの実施形態において、 $d = 2$ である。
- 【0354】 30
- 式VIIのいくつかの実施形態において、 $d = 3$ である。
- 【0355】
- 式VIIのいくつかの実施形態において、 $d = 4$ である。
- 【0356】
- 式VIIのいくつかの実施形態において、 $d = 5$ である。
- 【0357】
- 式VIIのいくつかの実施形態において、 $d = 6$ である。
- 【0358】
- 式VIIのいくつかの実施形態において、 $d > 0$ である。
- 【0359】 40
- 式VIIのいくつかの実施形態において、 $d > 0$ であり、少なくとも1つの $R^4$ は、上で記載されたとおりである。
- 【0360】
- 式VI中の $Ar^5$ および $Ar^6$ について上記の実施形態は、式VII中の $Ar^5$ および $Ar^6$ に同様に当てはまる。
- 【0361】
- 新規組成物のいくつかの実施形態において、組成物中の重量に基づいて、第1ホストは、第2ホストよりも高い濃度で存在する。
- 【0362】
- 新規組成物のいくつかの実施形態において、第1ホスト対第2ホストの重量比は、10 50

: 1 ~ 1 : 10 の範囲にある。いくつかの実施形態において、この重量比は、6 : 1 ~ 1 : 6 の範囲にあり；いくつかの実施形態において、5 : 1 ~ 1 : 2 の範囲にあり；いくつかの実施形態において、3 : 1 ~ 1 : 1 の範囲にある。

【0363】

新規組成物のいくつかの実施形態において、ドーパント対第1ホストおよび第2ホストの合計（「全ホスト」）の重量比は、1 : 99 ~ 20 : 80 の範囲にあり；いくつかの実施形態において、5 : 95 ~ 15 : 85 の範囲にある。

【0364】

いくつかの実施形態において、新規組成物は、インクを形成するために液体媒体に溶解させられるかまたは分散させられる。インクは、層を形成するための材料の液体堆積のために使用することができる。

10

【0365】

用語「液体媒体」は、純粋液体、液体の組み合わせ、溶液、分散系、懸濁液、およびエマルジョンなどの、液状材料を意味することを意図する。液体媒体は、1つ以上の溶媒が存在するかどうかにかかわらず使用される。

【0366】

いくつかの実施形態において、液体媒体は、極性の非水性溶媒である。極性溶媒の例としては、 $C_1 \sim C_{20}$  アルコール、エーテル、および酸エステルが挙げられるが、それらに限定されない。

【0367】

いくつかの実施形態において、液体媒体は、比較的非極性溶媒である。非極性溶媒の例としては、 $C_1 \sim C_{12}$  アルカン、トルエン、キシレン、トリフルオロトルエンなどの芳香族化合物等が挙げられるが、それらに限定されない。

20

【0368】

いくつかの実施形態において、液体媒体は、2つ以上の溶媒の混合物である。

【0369】

いくつかの実施形態において、液体媒体は、塩素化炭化水素（塩化メチレン、クロロホルム、クロロベンゼンなどの）、芳香族炭化水素（トリフルオロトルエンなどの、置換または非置換トルエンまたはキシレンなどの）、極性溶媒（テトラヒドロフラン（THF）、N-メチルピロリドン（NMP）などの）、エステル（酢酸エチル、安息香酸メチル、またはフタル酸ジエチルなどの）、エーテル（アニソールまたはジメトキシベンゼンなどの）、アルコール（イソプロパノールなどの）、ケトン（シクロペンタノンなどの）、およびそれらの任意の混合物からなる群から選択される。

30

【0370】

エレクトロルミネセンス材料用の好適な溶媒は、例えば、PCT出願公開国際公開第2007/145979号パンフレットに記載されている。

【0371】

#### 4. 電子デバイス

本明細書に記載されるような少なくとも1つの化合物を含む1つ以上の層を有することから恩恵を受け得る有機電子デバイスには、(1)電気エネルギーを放射線へ変換するデバイス（例えば、発光ダイオード、発光ダイオードディスプレイ、照明デバイス、照明器具、またはダイオードレーザー）、(2)エレクトロニクスプロセスによって信号を検出するデバイス（例えば、光検出器、光導電セル、フォトレジスタ、フォトスイッチ、フォトトランジスタ、光電管、赤外検出器、バイオセンサー）、(3)放射線を電気エネルギーへ変換するデバイス（例えば、光起電力デバイスまたは太陽電池）、(4)1つの波長の光をより長い波長の光に変換するデバイス（例えば、ダウンコンバート燐光体デバイス）；および(5)1つ以上の有機半導体層を含む1つ以上の電子部品を含むデバイス（例えば、トランジスタまたはダイオード）が含まれるが、それらに限定されない。本発明による組成物の他の使用には、メモリ記憶デバイス用のコーティング材料、帯電防止薄膜、バイオセンサー、エレクトロクロミックデバイス、固体電解質コンデンサ、再充電可能バ

40

50

ッテリなどのエネルギー貯蔵装置、および電磁遮蔽用途が含まれる。

【0372】

本明細書に記載される新規化合物を利用することができる有機電子デバイス構造の図解は、図1に示される。デバイス100は、第1電気コンタクト層、アノード層110および第2電気コンタクト層、カソード層160、ならびにそれらの間の光活性層140を有する。付加的な層が場合により存在していてもよい。緩衝層と言われることもある、正孔注入層120が、アノードに隣接していてもよい。正孔輸送材料を含む、正孔輸送層130が、正孔注入層に隣接していてもよい。電子輸送材料を含む、電子輸送層150が、カソードに隣接していてもよい。選択肢として、デバイスは、アノード110の隣に1つ以上の付加的な正孔注入層もしくは正孔輸送層（図示せず）および/またはカソード160の隣に1つ以上の付加的な電子注入層もしくは電子輸送層（図示せず）が使用されてもよい。層120～150は個別におよび一括して有機活性層と言われる。

10

【0373】

いくつかの実施形態において、フルカラーを達成するために、発光層は、異なる色のそれぞれについてサブピクセル単位で、ピクセル化される。ピクセル化デバイスの図解は、図2に示される。デバイス200は、アノード110、正孔注入層120、正孔輸送層130、光活性層140、電子輸送層150、およびカソード160を有する。光活性層は、サブピクセル141、142、143に分けられ、それらは、層全体にわたって繰り返される。いくつかの実施形態において、サブピクセルは、赤色、青色および緑色放射を示す。3つの異なるサブピクセル単位が図2に描かれているが、2つまたは4つ以上のサブピクセル単位が用いられてもよい。

20

【0374】

異なる層が、図1に関連して本明細書でさらに考察される。しかしながら、本考察は、図2および他の配置構成に同様に当てはまる。

【0375】

いくつかの実施形態において、異なる層は、以下の範囲の厚さを有する：アノード110、500～5000、いくつかの実施形態において、1000～2000；正孔注入層120、50～2000、いくつかの実施形態において、200～1000；正孔輸送層130、50～3000、いくつかの実施形態において、200～2000；光活性層140、10～2000、いくつかの実施形態において、100～1000；電子輸送層150、50～2000、いくつかの実施形態において、100～1000；カソード160、200～10000、いくつかの実施形態において、300～5000。層厚さの所望の比率は、使用される材料の正確な性質次第である。

30

【0376】

本明細書に記載される式Iの少なくとも1つの置換基を有するN-複素環を含む新規化合物の1つ以上が、デバイスの電気活性層の1つ以上に存在してもよい。

【0377】

いくつかの実施形態において、式Iの少なくとも1つの置換基を有するN-複素環を含む新規化合物は、層140における光活性ドーパント材料として有用である。いくつかの実施形態において、式Iの少なくとも1つの置換基を有するN-複素環を含む新規化合物は、1つ以上のホスト材料に光活性ドーパント材料として存在する。

40

【0378】

いくつかの実施形態において、式Iの少なくとも1つの置換基を有するN-複素環を含む新規化合物は、光活性層140における光活性ドーパント材料用のホスト材料として有用である。

【0379】

いくつかの実施形態において、式Iの少なくとも1つの置換基を有するN-複素環を含む新規化合物は、電子輸送層150における電子輸送材料として有用である。

【0380】

いくつかの実施形態において、有機電子デバイスは、アノード、カソード、およびそれ

50

らの間の少なくとも1つの有機活性層を含み、ここで、有機活性層は、式Iの少なくとも1つの置換基を有するN-複素環を含む新規化合物を含む。

【0381】

いくつかの実施形態において、有機電子デバイスは、アノード、カソード、およびそれらの間の光活性層を含み、ここで、光活性層は、式Iの少なくとも1つの置換基を有するN-複素環を含む新規化合物を含む。

【0382】

いくつかの実施形態において、有機電子デバイスは、アノード、カソード、およびそれらの間の光活性層を含み、ここで、光活性層は、(a) 380~750nmに発光極大を有するエレクトロルミネセンスの能力があるドーパント、(b) 式Iの少なくとも1つの置換基を有するN-複素環である第1ホスト化合物、および(c) 第2ホスト化合物を含む。

10

【0383】

いくつかの実施形態において、有機電子デバイスは、アノード、カソード、およびそれらの間の光活性層を含み、そして、式Iの少なくとも1つの置換基を有するN-複素環を含む化合物を含む付加的な有機活性層をさらに含む。いくつかの実施形態において、付加的な有機活性層は、正孔輸送層である。いくつかの実施形態において、付加的な有機活性層は、電子輸送層である。

【0384】

アノード110は、正電荷キャリアを注入するために特に効率的である電極である。それは、例えば、金属、合金、金属酸化物もしくは混合金属酸化物を含有する材料から製造され得るか、またはそれは、導電性ポリマー、およびそれらの混合物であり得る。好適な金属には、11族金属、4族、5族、および6族の金属、ならびに8族~10族遷移金属が含まれる。アノードが光透過性である場合、酸化インジウムスズなどの、12族、13族および14族金属の混合金属酸化物が一般的に使用される。アノードはまた、「Flexible light-emitting diodes made from soluble conducting polymer」, Nature vol. 357, pp 477-479 (11 June 1992)に記載されるようにポリアニリンなどの有機材料を含んでもよい。アノードおよびカソードの少なくとも1つは、発生した光を観察することができるように少なくとも部分的に透明であるべきである。

20

30

【0385】

任意選択の正孔注入層120は、正孔注入材料を含む。用語「正孔注入層」または「正孔注入材料」は、導電性材料または半導体材料を意味することを意図し、下位層の平坦化、電荷輸送および/もしくは電荷注入特性、酸素もしくは金属イオンなどの不純物の捕捉、ならびに有機電子デバイスの性能を促進するかまたは改善するための他の態様を含むが、それらに限定されない、1つ以上の機能を有機電子デバイスにおいて有し得る。正孔注入材料は、ポリマー、オリゴマー、または小分子であってもよく、溶液、分散系、懸濁液、エマルジョン、コロイド状混合物、または他の組成物の形態にあってもよい。

【0386】

正孔注入層は、しばしばプロトン酸でドーブされる、ポリアニリン(PANI)またはポリエチレンジオキシチオフェン(PEDOT)などの、ポリマー材料で形成することができる。プロトン酸は、例えば、ポリ(スチレンスルホン酸)、ポリ(2-アクリルアミド-2-メチル-1-プロパンスルホン酸)等であり得る。正孔注入層120は、銅フタロシアニンおよびテトラチアフルバレン-テトラシアノキノジメタン系(TTF-TCNQ)などの、電荷移動化合物等を含むことができる。いくつかの実施形態において、正孔注入層120は、導電性ポリマーとコロイド形成ポリマー酸との分散系から製造される。そのような材料は、例えば、米国特許出願公開第2004-0102577号明細書、同第2004-0127637号明細書、および同第2005-0205860号明細書に記載されている。

40

【0387】

50



層130は、正孔輸送材料を含む。正孔輸送層用の正孔輸送材料の例は、例えば、Y. Wangによる、Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology, Fourth Edition, Vol. 18, p. 837-860, 1996に要約されている。正孔輸送小分子およびポリマーの両方を使用することができる。一般に使用される正孔輸送分子には、4,4',4''-トリス(N,N-ジフェニル-アミノ)-トリフェニルアミン(TDATA); 4,4',4''-トリス(N-3-メチルフェニル-N-フェニル-アミノ)-トリフェニルアミン(MTDATA); N,N'-ジフェニル-N,N'-ビス(3-メチルフェニル)-[1,1'-ピフェニル]-4,4'-ジアミン(TPD); 4,4'-ビス(カルバゾール-9-イル)ピフェニル(CBP); 1,3-ビス(カルバゾール-9-イル)ベンゼン(mCP); 1,1'-ビス[(ジ-4-トリルアミノ)フェニル]シクロヘキサン(TAPC); N,N'-ビス(4-メチルフェニル)-N,N'-ビス(4-エチルフェニル)-[1,1'-(3,3'-ジメチル)ピフェニル]-4,4'-ジアミン(ETPD); テトラキス-(3-メチルフェニル)-N,N,N',N'-2,5-フェニレンジアミン(PDA); -フェニル-4-N,N-ジフェニルアミノスチレン(TPS); p-(ジエチルアミノ)ベンズアルデヒドジフェニルヒドラゾン(DEH); トリフェニルアミン(TPA); ビス[4-(N,N-ジエチルアミノ)-2-メチルフェニル](4-メチルフェニル)メタン(MPMP); 1-フェニル-3-[p-(ジエチルアミノ)スチリル]-5-[p-(ジエチルアミノ)フェニル]ピラゾリン(PPRまたはDEASP); 1,2-トランス-ビス(9H-カルバゾール-9-イル)シクロブタン(DCZB); N,N,N',N'-テトラキス(4-メチルフェニル)-(1,1'-ピフェニル)-4,4'-ジアミン(TTB); N,N'-ビス(ナフタレン-1-イル)-N,N'-ビス-(フェニル)ベンジジン(-NPB); および銅フタロアシアニンなどの、ポルフィリン化合物が含まれるが、それらに限定されない。一般に使用される正孔輸送ポリマーには、ポリビニルカルバゾール、(フェニルメチル)ポリシラン、ポリ(ジオキシチオフェン)、ポリアニリン、およびポリピロールが含まれるが、それらに限定されない。上述したものなどの正孔輸送分子をポリスチレンおよびポリカーボネートなどのポリマー中へドープすることによって正孔輸送ポリマーを得ることがまた可能である。いくつかの場合に、トリアリールアミンポリマー、とりわけトリアリールアミン-フルオレンコポリマーが使用される。いくつかの場合に、ポリマーおよびコポリマーは架橋性である。架橋性正孔輸送ポリマーの例は、例えば、米国特許出願公開第2005-0184287号明細書およびPCT出願公開国際公開第2005/052027号パンフレットに見いだすことができる。いくつかの実施形態において、正孔輸送層は、テトラフルオロテトラシアノキノジメタンおよびペリレン-3,4,9,10-テトラカルボン酸-3,4,9,10-二無水物などの、p-ドーパントがドープされる。

#### 【0388】

デバイスの用途に応じて、光活性層140は、(発光ダイオードもしくは発光電気化学セルにおけるなどの)印加電圧によって活性化される発光層、(ダウンコンバート燐光体デバイスにおけるなどの)光を吸収し、より長い波長を有する光を発する材料の層、または(光検出器もしくは光起電力デバイスにおけるなどの)輻射エネルギーに応答し、印加バイアス電圧を使用してまたは使用せずに信号を発生する材料の層であり得る。

#### 【0389】

いくつかの実施形態において、光活性層は、式Iの少なくとも1つの置換基を有するN-複素環を含む化合物を光活性材料として含む。いくつかの実施形態において、光活性層は、ホスト材料をさらに含む。ホスト材料の例としては、クリセン、フェナントレン、トリフェニレン、フェナントロリン、ナフタレン、アントラセン、キノリン、イソキノリン、キノキサリン、フェニルピリジン、カルバゾール、インドロカルバゾール、フラン、ベンゾフラン、ジベンゾフラン、ベンゾジフラン、および金属キノリネート錯体が挙げられるが、それらに限定されない。いくつかの実施形態において、ホスト材料は、重水素化されている。

10

20

30

40

50

【0390】

いくつかの実施形態において、光活性層は、式Iを有する化合物をホスト材料として含み、光活性ドーパントをさらに含む。好適な光活性ドーパントは、上に記載されている。

【0391】

いくつかの実施形態において、光活性層は、(a) 380 ~ 750 nmに発光極大を有するエレクトロルミネセンスの能力があるドーパント、(b) 式Iの少なくとも1つの置換基を有するN-複素環である第1ホスト化合物、および(c) 第2ホスト化合物を含む。好適な第2ホスト化合物は、上に記載されている。

【0392】

いくつかの実施形態において、光活性層は、ただ(a) 380 ~ 750 nmに発光極大を有するエレクトロルミネセンスの能力があるドーパント、(b) 式Iの少なくとも1つの置換基を有するN-複素環である第1ホスト化合物、および(c) 第2ホスト化合物だけを含み、ここで、操作の原理または層の際立った特性を実質的に変えるだろう付加的な材料は存在しない。

10

【0393】

いくつかの実施形態において、光活性層中の重量に基づいて、第1ホストは、第2ホストよりも高い濃度で存在する。

【0394】

いくつかの実施形態において、光活性層中の第1ホスト対第2ホストの重量比は、10 : 1 ~ 1 : 10の範囲にある。いくつかの実施形態において、この重量比は、6 : 1 ~ 1 : 6の範囲にあり；いくつかの実施形態において、5 : 1 ~ 1 : 2の範囲にあり；いくつかの実施形態において、3 : 1 ~ 1 : 1の範囲にある。

20

【0395】

いくつかの実施形態において、ドーパント対全ホストの重量比は、1 : 99 ~ 20 : 80の範囲にあり；いくつかの実施形態において、5 : 95 ~ 15 : 85の範囲にある。

【0396】

いくつかの実施形態において、光活性層は、(a) 赤色発光ドーパント、(b) 式Iの少なくとも1つの置換基を有するN-複素環である第1ホスト化合物、および(c) 上で定載されたような、式VIを有する第2ホスト化合物を含む。

【0397】

いくつかの実施形態において、光活性層は、(a) 赤色発光ドーパント、(b) 式Iの少なくとも1つの置換基を有するN-複素環である第1ホスト化合物、および(c) 上で定載されたような、式VIIを有する第2ホスト化合物を含む。

30

【0398】

いくつかの実施形態において、光活性層は、(a) 緑色発光ドーパント、(b) 式Iの少なくとも1つの置換基を有するN-複素環である第1ホスト化合物、および(c) 上で定載されたような、式V(a)、式V(b)、式V(c)、式V(d)、および式V(e)の1つを有する第2ホスト化合物を含む。

【0399】

いくつかの実施形態において、光活性層は、(a) 緑色発光ドーパント、(b) 式Iの少なくとも1つの置換基を有するN-複素環である第1ホスト化合物、および(c) 式V(a)を有する第2ホスト化合物を含む。

40

【0400】

いくつかの実施形態において、光活性層は、(a) 緑色発光ドーパント、(b) 式Iの少なくとも1つの置換基を有するN-複素環である第1ホスト化合物、および(c) 式V(b)を有する第2ホスト化合物を含む。

【0401】

いくつかの実施形態において、光活性層は、(a) 緑色発光ドーパント、(b) 式Iの少なくとも1つの置換基を有するN-複素環である第1ホスト化合物、および(c) 式V(c)を有する第2ホスト化合物を含む。

50

## 【0402】

いくつかの実施形態において、光活性層は、(a) 緑色発光ドーパント、(b) 式 I の少なくとも 1 つの置換基を有する N - 複素環である第 1 ホスト化合物、および (c) 式 V (d) を有する第 2 ホスト化合物を含む。

## 【0403】

いくつかの実施形態において、光活性層は、(a) 緑色発光ドーパント、(b) 式 I の少なくとも 1 つの置換基を有する N - 複素環である第 1 ホスト化合物、および (c) 式 V (e) を有する第 2 ホスト化合物を含む。

## 【0404】

いくつかの実施形態において、光活性層は、(a) 黄色発光ドーパント、(b) 式 I の少なくとも 1 つの置換基を有する N - 複素環である第 1 ホスト化合物、および (c) 上で定義されたような、式 V (a)、式 V (b)、式 V (c)、式 V (d)、および式 V (e) の 1 つを有する第 2 ホスト化合物を含む。

10

## 【0405】

いくつかの実施形態において、光活性層は、(a) 黄色発光ドーパント、(b) 式 I の少なくとも 1 つの置換基を有する N - 複素環である第 1 ホスト化合物、および (c) 式 V (e) を有する第 2 ホスト化合物を含む。

## 【0406】

いくつかの実施形態において、光活性層は、(a) 黄色発光ドーパント、(b) 式 I の少なくとも 1 つの置換基を有する N - 複素環である第 1 ホスト化合物、および (c) 式 V (b) を有する第 2 ホスト化合物を含む。

20

## 【0407】

いくつかの実施形態において、光活性層は、(a) 黄色発光ドーパント、(b) 式 I の少なくとも 1 つの置換基を有する N - 複素環である第 1 ホスト化合物、および (c) 式 V (c) を有する第 2 ホスト化合物を含む。

## 【0408】

いくつかの実施形態において、光活性層は、(a) 黄色発光ドーパント、(b) 式 I の少なくとも 1 つの置換基を有する N - 複素環である第 1 ホスト化合物、および (c) 式 V (d) を有する第 2 ホスト化合物を含む。

## 【0409】

いくつかの実施形態において、光活性層は、(a) 黄色発光ドーパント、(b) 式 I の少なくとも 1 つの置換基を有する N - 複素環である第 1 ホスト化合物、および (c) 式 V (e) を有する第 2 ホスト化合物を含む。

30

## 【0410】

任意選択の層 150 は、電子輸送を促進するように、およびまた層界面での励起子の消滅を防ぐための閉じ込め層としても役立つように両方に機能することができる。好ましくは、この層は電子移動度を促進し、励起子消滅を低減する。

## 【0411】

いくつかの実施形態において、層 150 は、式 I の少なくとも 1 つの置換基を有する N - 複素環を含む化合物を含む。

40

## 【0412】

いくつかの実施形態において、層 150 は、式 I の少なくとも 1 つの置換基を有する N - 複素環を含む化合物のみを含み、ここで、操作の原理または層の際立った特性を実質的に変えるだろう付加的な材料は存在しない。

## 【0413】

いくつかの実施形態において、層 150 は、他の電子輸送材料を含む。任意選択の電子輸送層 150 に使用することができる電子輸送材料の例としては、トリス(8 - ヒドロキシキノラト)アルミニウム(A1Q)、ビス(2 - メチル - 8 - キノリノラト)(p - フェニルフェノラト)アルミニウム(BA1q)、テトラキス - (8 - ヒドロキシキノラト)ハフニウム(HfQ)およびテトラキス - (8 - ヒドロキシキノラト)ジルコニウム(

50

ZrQ)などの金属キノレート誘導体などの、金属キレート化オキシノイド化合物；ならびに、2-(4-ピフェニル)-5-(4-t-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール(PBD)、3-(4-ピフェニル)-4-フェニル-5-(4-t-ブチルフェニル)-1,2,4-トリアゾール(TAZ)、および1,3,5-トリ(フェニル-2-ベンゾイミダゾール)ベンゼン(TPBI)などのアゾール化合物；2,3-ビス(4-フルオロフェニル)キノキサリンなどのキノキサリン誘導体；4,7-ジフェニル-1,10-フェナントロリン(DPA)および2,9-ジメチル-4,7-ジフェニル-1,10-フェナントロリン(DDPA)などのフェナントロリン；トリアジン；フラレン；ならびにそれらの混合物が挙げられる。いくつかの実施形態において、電子輸送材料は、金属キノレートおよびフェナントロリン誘導体からなる群から選択される。いくつかの実施形態において、電子輸送層は、n-ドーパントをさらに含む。n-ドーパント材料は周知である。n-ドーパントには、1族および2族金属；LiF、CsF、およびCs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>などの、1族および2族金属塩；Liキノレートなどの、1族および2族金属有機化合物；およびロイコ染料、金属錯体、例えば、W<sub>2</sub>(hpp)<sub>4</sub>(式中、hpp=1,3,4,6,7,8-ヘキサヒドロ-2H-ピリミド-[1,2-a]-ピリミジンである)およびコバルトセンなど、テトラチアナフタセン、ビス(エチレンジチオ)テトラチアフルバレン、複素環ラジカルまたはジラジカル、および複素環式ラジカルまたはジラジカルダイマー、オリゴマー、ポリマー、ジスピロ化合物および多環などの、分子n-ドーパントが含まれるが、それらに限定されない。

10

【0414】

20

任意選択の電子注入層が、電子輸送層一面に堆積されてもよい。電子注入材料の例としては、Li含有有機金属化合物、LiF、Li<sub>2</sub>O、Liキノレート、Cs含有有機金属化合物、CsF、Cs<sub>2</sub>O、およびCs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>が挙げられるが、それらに限定されない。この層は、下にある電子輸送層、上にあるカソード、または両方と反応してもよい。電子注入層が存在する場合、堆積される材料の量は一般に、1~100の範囲にあり、いくつかの実施形態において、1~10の範囲にある。

【0415】

カソード160は、電子または負電荷キャリアを注入するために特に効率的である電極である。カソードは、アノードよりも低い仕事関数を有する任意の金属または非金属であり得る。カソード用の材料は、1族のアルカリ金属(例えば、Li、Cs)、2族(アルカリ土類)金属、稀土類元素およびランタニド、ならびにアクチニドを含めた、12族金属から選択することができる。アルミニウム、インジウム、カルシウム、バリウム、サマリウムおよびマグネシウム、ならびに組み合わせなどの材料を使用することができる。

30

【0416】

有機電子デバイスにおいて他の層を有することが知られている。例えば、注入される正電荷の量を制御するためのおよび/もしくは層のバンドギャップ整合を提供するための、または保護層として機能するための層(図示せず)が、アノード110と正孔注入層120との間に存在することができる。銅フタロアシアニン、オキシ窒化ケイ素、フルオロカーボン、シランなどの、当技術分野で公知である層、またはPtなどの、金属の極薄層を使用することができる。あるいは、アノード層110、活性層120、130、140、および150、またはカソード層160のうちのいくつかまたはすべてを表面処理して、電荷キャリア輸送効率を増加させることができる。構成層のそれぞれ用の材料の選択は好ましくは、高いエレクトロルミネセンス効率のデバイスを提供するためにエミッター層において正電荷と負電荷とのバランスを保つことによって決定される。

40

【0417】

それぞれの機能性層が2つ以上の層から構成され得ることは理解される。

【0418】

デバイス層は、蒸着、液体堆積、および熱転写などの、任意の堆積技術、または技術の組み合わせによって形成することができる。ガラス、プラスチック、および金属などの基材を使用することができる。熱蒸発、化学蒸着等などの、従来の蒸着技術を用いることが

50

できる。有機層は、スピンコーティング、浸漬コーティング、ロール - ツー - ロール技術、インクジェット印刷、連続ノズル印刷、スクリーン印刷、グラビア印刷等を含むがそれらに限定されない従来のコーティングまたは印刷技術を用いて、好適な溶媒中の溶液または分散系から適用することができる。

【0419】

液体堆積方法について、特定の化合物または関連したクラスの化合物用の好適な溶媒は、当業者によって容易に決定され得る。いくつかの用途のために、化合物は非水溶媒に溶解させられることが望ましい。そのような非水溶媒は、 $C_1 \sim C_{20}$  アルコール、エーテル、および酸エステルのように、比較的極性であり得るか、または  $C_1 \sim C_{12}$  アルカンもしくはトルエン、キシレン、トリフルオロトルエン等などの芳香族化合物のように比較的極性であり得る。新規化合物を含む、液体組成物を、本明細書に記載されるような溶液が分散系かのいずれかとして、製造するのに使用するための他の好適な液体には、塩素化炭化水素（塩化メチレン、クロロホルム、クロロベンゼンなどの）、芳香族炭化水素（置換および非置換トルエンおよびキシレンなどの）、トリフルオロトルエンなどの）、極性溶媒（テトラヒドロフラン（THF）、N-メチルピロリドンなどの）エステル（酢酸エチルなどの）アルコール（イソプロパノール）、ケトン（シクロペンタトン）、ならびにそれらの混合物が含まれるが、それらに限定されない。エレクトロルミネセンス材料用の好適な溶媒は、例えば、PCT出願公開国際公開第2007/145979号パンフレットに記載されている。

10

【0420】

いくつかの実施形態において、デバイスは、正孔注入層、正孔輸送層、および光活性層の液体堆積によって、ならびにアノード、電子輸送層、電子注入層およびカソードの蒸着によって製造される。

20

【0421】

本明細書に記載された新規な組成物を使って製造されたデバイスの効率が、デバイスにおける他の層を最適化することによってさらに改善できることは理解される。例えば、Ca、BaまたはLiFなどのより効率的なカソードを使用することができる。造形基材と、動作電圧の低下をもたらすかまたは量子効率を増加させる新規な正孔輸送材料とがまた適用できる。付加的な層をまた、様々な層のエネルギーレベルを調整し、そしてエレクトロルミネセンスを促進するために加えることができる。

30

【0422】

いくつかの実施形態において、デバイスは順に、以下の構造：アノード、正孔注入層、正孔輸送層、光活性層、電子輸送層、電子注入層、カソードを有する。

【0423】

本明細書に記載されるものと同様のまたは同等な方法および材料を本発明の実施または試験に使用することができるが、好適な方法および材料は、以下に記載される。さらに、材料、方法、および実施例は、例証的であるにすぎず、限定することを意図するものではない。本明細書に述べられるすべての刊行物、特許出願、特許、および他の参照文献は、それらの全体を参照により援用される。

【実施例】

40

【0424】

本明細書に記載される概念は、特許請求の範囲に記載される本発明の範囲を限定しない、以下の実施例においてさらに説明される。

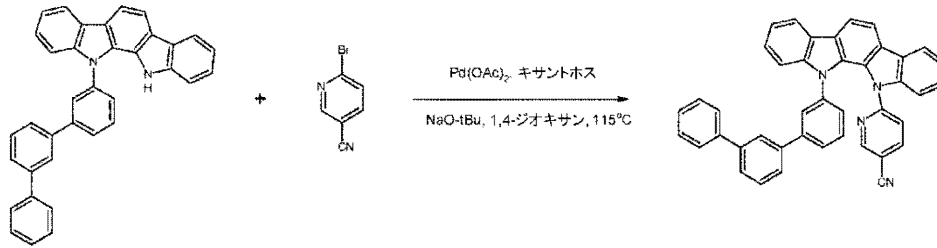
【0425】

合成例 1

この実施例は、化合物 I - 1 の調製を例示する。

【0426】

## 【化34】



I-1

10

## 【0427】

グローブボックス中で、104 mLの1,4-ジオキサン中の1.77 gの2-ブロモ-5-シアノピリジンと、52 mgのPd(OAc)<sub>2</sub>と、280 mgの9,9-ジメチル-4,5-ビス(ジフェニルホスフィノ)キサンテンとの混合物を、3.9 gの12-[3-(3-フェニルフェニル)フェニル]-11H-インドロ[2,3-a]カルバゾールで処理し、1.09 gのナトリウムtert-ブトキシドを添加した。反応物を115度で一晩加熱した。反応混合物を室温に冷却し、水を添加し、内容物をジクロロメタンで抽出した。組み合わせた有機層を硫酸ナトリウム上で乾燥させ、濾過し、回転蒸発によって濃縮した。粗固体をジクロロメタンに溶解させ、80:20~30:70のヘキサン:ジクロロメタンで溶出する中圧液体クロマトグラフィー(MPLC)によって精製した。最も純粋な画分を組み合わせ、回転蒸発によって濃縮して生成物を黄色発泡体として得た。材料のさらなる精製は、トルエン(10 mL)に溶解させ、トルエン(375 mL)、次にジクロロメタンで溶出する、Florisil(100~200メッシュ)の1インチ直径詰め物(54 g)を通過させることによって成し遂げた。最も純粋な画分を組み合わせ、回転蒸発によって濃縮した。生成物をジクロロメタンおよびメタノールに溶解させ、回転蒸発によって注意深く濃縮して固体を得て、それを濾過し、メタノールで洗浄し、減圧下で濃縮してジクロロメタンを除去し、I-1を非常に淡い黄色固体(3.05 g、64%収率、超高速液体クロマトグラフィー(Ultra Performance Liquid Chromatography)(UPLC)により99.99%純粋)を得た。デバイス製造前の最終精製は、真空昇華によって成し遂げられた。

20

30

## 【0428】

合成例2

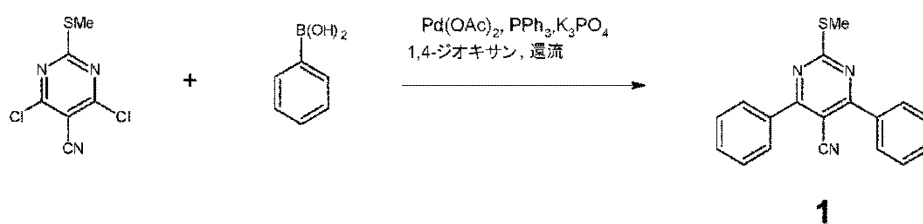
この実施例は、化合物I-2の調製を例示する。

## 【0429】

a. 2-メチルチオ-4,6-ジフェニルピリミジン-5-カルボニトリル(中間体1)の合成。

## 【0430】

## 【化35】



1

40

## 【0431】

グローブボックス中で、500 mLの1,4-ジオキサン中の2.36 gの4,6-ジクロロ-2-(メチルチオ)ピリミジン-5-カルボニトリルに、2.82 gのフェニルボロン酸、14.70 gのリン酸カリウム、60 mgの酢酸パラジウム(II)、次に14

50

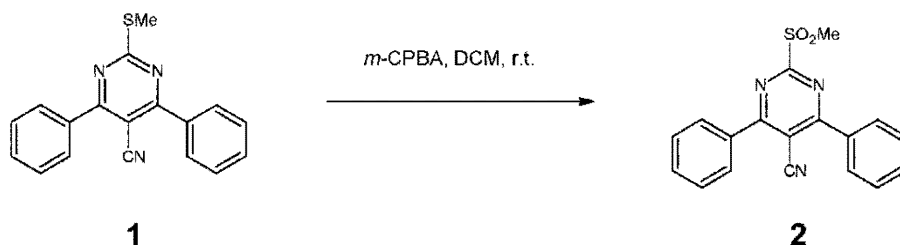
1 mg のトリフェニルホスフィンを添加した。反応物を 2 . 2 5 時間窒素下で還流させ、室温に冷却し、次に回転蒸発によって濃縮した。水を添加し、内容物をジクロロメタンで抽出した。組み合わせた有機層を硫酸ナトリウム上で乾燥させ、濾過し、回転蒸発によって濃縮して固体を得て、それを、4 5 mL のメチル *t e r t* - ブチルエーテル : ジクロロメタンの 2 : 1 混合物でトリチュレーションし、次にメチル *t e r t* - ブチルエーテルで洗浄して中間体 1 を黄褐色固体 ( 2 . 2 5 g 、 6 5 % 収率 ) として得た。

【 0 4 3 2 】

b . 2 - メチルスルホニル - 4 , 6 - ジフェニルピリミジン - 5 - カルボニトリル ( 中間体 2 ) の合成。

【 0 4 3 3 】

【 化 3 6 】



【 0 4 3 4 】

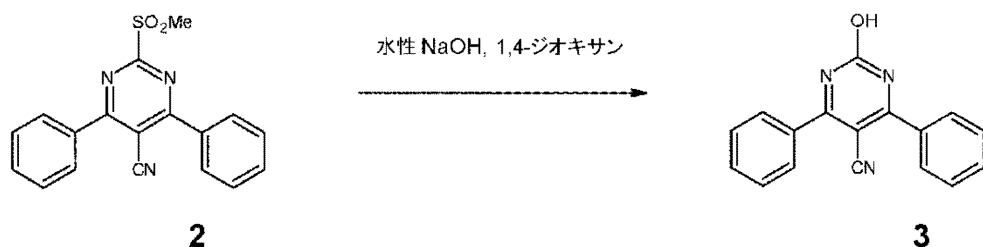
3 7 6 mL ジクロロメタン中の 6 . 1 1 g の中間体 1 に、1 7 0 mL ジクロロメタン中の 1 1 . 7 5 g の *m* - クロロ過安息香酸 ( 7 7 % ) を室温で 5 分にわたって添加した。2 時間後に、反応物を飽和水性重炭酸ナトリウム溶液、次に飽和亜硫酸ナトリウム、次に飽和水性重炭酸ナトリウムで洗浄した。有機層を分離し、1 7 0 mL の 1 M  $\text{NaHSO}_3$  およびいくらかの 1 , 4 - ジオキサンと室温で 9 0 分間攪拌した。有機層を分離し、水層をジクロロメタンで抽出した。組み合わせた有機層を硫酸ナトリウム上で乾燥させ、濾過し、回転蒸発によって濃縮した。結果として生じた固体を、7 5 mL のメチル *t e r t* - ブチルエーテル : ジクロロメタンの 2 : 1 混合物でトリチュレーションして真っ白でない固体を得た。固体をジクロロメタンに溶解させ、ジクロロメタンで溶出する、シリカゲルクロマトグラフィーによって精製して、最も純粋な画分を組み合わせ、そして濃縮した後に、中間体 2 を白色固体 ( 5 . 4 g 、 8 0 % 収率 ) として得た。

【 0 4 3 5 】

c . 2 - ヒドロキシ - 4 , 6 - ジフェニルピリミジン - 5 - カルボニトリル ( 中間体 3 ) の合成。

【 0 4 3 6 】

【 化 3 7 】



【 0 4 3 7 】

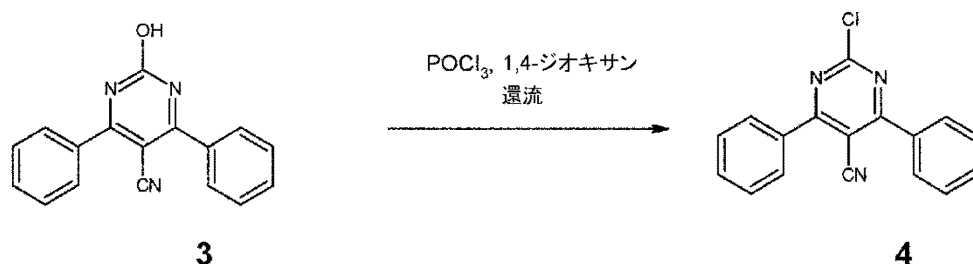
4 2 3 mL の 1 , 4 - ジオキサン中の 5 . 7 g の中間体 2 に、3 4 . 0 mL の 1 M 水性  $\text{NaOH}$  を添加した。反応物を室温で一晩攪拌した後、水 ( 2 0 0 mL ) を添加し、pH を濃厚水性  $\text{HCl}$  で pH = 2 まで調整した。内容物をジクロロメタンで抽出し、組み合わせた有機層を硫酸ナトリウム上で乾燥させ、濾過し、回転蒸発によって濃縮して中間体 3 を白色固体 ( 5 . 1 g 、 定量的収率 ) として得た。

【0438】

d. 2-クロロ-4,6-ジフェニルピリミジン-5-カルボニトリル(中間体4)の合成。

【0439】

【化38】



10

【0440】

97 mLの1,4-ジオキサン中の5.1 gの中間体3の懸濁液に、6.8 mLのオキシ塩化リンを添加した。反応物を1時間還流で加熱し、室温に冷却し、水(300 mL)および重炭酸ナトリウムを塩基性になるまで添加した。内容物をジクロロメタンで抽出し、組み合わせた有機層を硫酸ナトリウム上で乾燥させ、濾過し、回転蒸発によって濃縮してオレンジ-白色固体を得た。粗材料を、ジクロロメタンで溶出する、MPLCによって精製し、最も純粋な画分を組み合わせて、回転蒸発による濃縮後に、中間体4を白色固体(3.2 g、2工程にわたって65%収率)として得た。

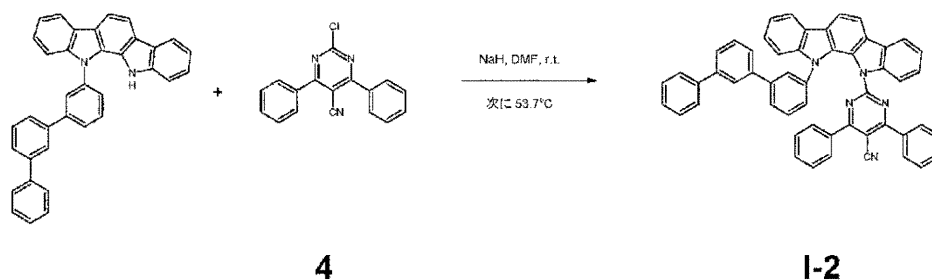
20

【0441】

e. 11-(m-テルフェニル)-12-(4,6-ジフェニル-5-シアノピリミジン-2-イル)-インドロ[2,3-a]カルバゾール(I-2)の合成。

【0442】

【化39】



30

【0443】

グローブボックス中で、室温での47 mLのN,N-ジメチルホルムアミド中の4.43 gの12-[3-(3-フェニルフェニル)フェニル]-11H-インドロ[2,3-a]カルバゾールに、436 mgの60% NaHを添加した。室温で50分間攪拌した後、127 mLのN,N-ジメチルホルムアミド中の3.2 gの中間体4を7分にわたって添加した。反応物を一晚54で加熱した。反応混合物を室温に冷却し、水(400 mL)および飽和水性塩化アンモニウム(20 mL)を添加した。内容物をジクロロメタンで抽出し、組み合わせた有機層を硫酸ナトリウム上で乾燥させ、濾過し、回転蒸発によって濃縮した。粗材料を、90:10~50:50ヘキサン:ジクロロメタンで溶出するMPLCによって精製した。最も純粋な画分を組み合わせ、濃縮して残留物にし、それをジクロロメタン(30 mL)に溶解させた。アセトニトリル(50 mL)を添加し、回転蒸発による部分濃縮は、濾過後に、より純粋な材料を提供した。沸騰するジクロロメタン(30 mL)およびアセトニトリル(34 mL)に溶解させることによる再結晶は、集められた固体をアセトニトリルで洗浄後に、I-2を黄色固体(2.55 g、38%収率、UPLCにより99.99%純粋)として与えた。

40

50



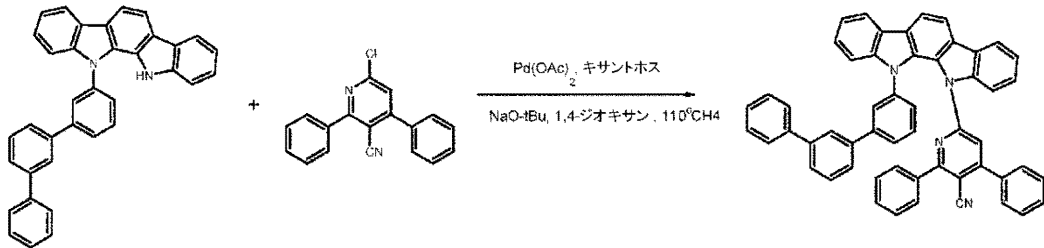
【0444】

合成例3

この実施例は、化合物 I - 3 の調製を例示する。

【0445】

【化40】



10

I-3

【0446】

グローブボックス中で、88 mL の 1,4-ジオキサン中の 2.38 g の 2-クロロ-4,6-ジフェニル5-シアノピリジンと、44 mg の酢酸パラジウム (II) と、237 mg の 9,9-ジメチル-4,5-ビス(ジフェニルホスフィノ)-キサンテンとの混合物を、3.3 g の 12-[3-(3-フェニルフェニル)フェニル]-11H-インドロ[2,3-a]カルバゾールおよび 924 mg のナトリウム tert-ブトキシドで処理した。反応物を 10.5 時間還流で加熱した。3 mL の 1,4-ジオキサン中の追加の 772 mg の 2-クロロ-4,6-ジフェニル5-シアノピリジン。還流で 1.5 時間の加熱後に、9 mg の酢酸パラジウム (II)、48 mg の 9,9-ジメチル-4,5-ビス(ジフェニルホスフィノ)-キサンテン、および 300 mg のナトリウム tert-ブトキシドを添加した。反応物を 4 時間還流で加熱した。反応混合物を室温に冷却し、内容物をジクロロメタンで抽出し、硫酸ナトリウム上で乾燥させ、濾過し、回転蒸発によって濃縮した。粗固体をジクロロメタンに溶解させ、85:15 ~ 50:50 ヘキサン:ジクロロメタンで溶出する MPLC によって精製した。最も純粋な画分を組み合わせ、回転蒸発によって濃縮して 1.87 g の生成物を非常に淡い黄色固体として得た。固体をサンプル 1:1 ジクロロメタン:アセトニトリル (60 mL) に溶解させ、いくらかの固体が沈澱するまで部分濃縮した。1 時間後に、固体を濾過し、アセトニトリルで洗浄して I-3 を非常に淡い黄色固体 (1.40 g、28% 収率、UPLC により 99.99% 純粋) として得た。デバイス製造前の最終精製は、真空昇華によって成し遂げた。

20

30

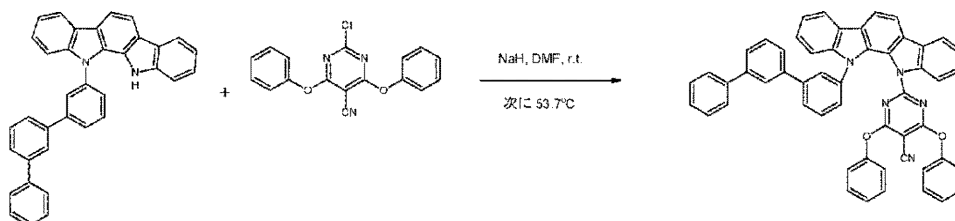
【0447】

合成例4

この実施例は、化合物 I - 4 の調製を例示する。

【0448】

【化41】



40

I-4

【0449】

グローブボックス中で、室温での 150 mL の N,N-ジメチルホルムアミド中の 5.0

50

g の 1 2 - [ 3 - ( 3 - フェニルフェニル ) フェニル ] - 1 1 H - インドロ [ 2 , 3 - a ] カルバゾールに、鉱油中の 4 9 6 m g の水素化ナトリウムの 6 0 % 分散系を添加した。室温で 5 0 分間攪拌した後、2 5 m L の N , N - ジメチルホルムアミド中の 4 . 0 g の 2 - クロロ - 4 , 6 - ジフェノキシ - 5 - シアノピリミジン を 7 分 に わ た っ て 添 加 し た 。 反 応 物 を 6 . 5 時 間 5 5 ° で 加 熱 し 、 次 に 室 温 に 冷 却 し た 。 水 ( 4 0 0 m L ) を 添 加 し 、 内 容 物 を ジ ク ロ ロ メ タ ン で 抽 出 し た 。 組 み 合 わ せ た 有 機 層 を 硫 酸 ナ ト リ ウ ム 上 で 乾 燥 さ せ 、 濾 過 し 、 4 5 m L の 容 積 ま で 濃 縮 し た 。 ヘ キ サ ン ( 約 5 0 m L ) を 添 加 し 、 混 合 物 を 濾 過 し 、 ヘ キ サ ン ( 約 2 0 0 m L ) で 洗 浄 し て 6 . 0 5 g の 生 成 物 を 淡 黄 色 固 体 と し て 得 た 。 固 体 を 最 小 量 の ジ ク ロ ロ メ タ ン で ト リ チ ュ レ ー シ ョ ン し 、 次 に ジ ク ロ ロ メ タ ン ( 1 9 0 m L ) に 溶 解 さ せ 、 7 5 : 2 5 ~ 4 0 : 6 0 ヘ キ サ ン : ジ ク ロ ロ メ タ ン で 溶 出 す る M P L C 10  
 によって精製した。最も純粋な画分を組み合わせ、回転蒸発によって濃縮して固体を得て、それを等量の T H F / ヘ キ サ ン を 使 用 し て 2 回 再 結 晶 し 、 1 : 1 ヘ キ サ ン : T H F で 洗 浄 し て I - 4 を 良 好 な 結 晶 ( 1 . 2 1 g 、 1 5 % 収 率 ) を 得 た 。 デ バ イ ス 製 造 前 の 最 終 精 製 は 、 真 空 昇 華 に よ っ て 成 し 遂 げ ら れ た 。

【 0 4 5 0 】

合成例 5

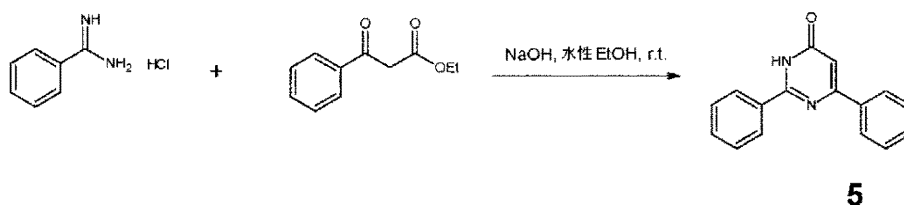
この実施例は、化合物 I - 5 の調製を例示する。

【 0 4 5 1 】

a . 2 , 6 - ジフェニルピリミジン - 4 - オン ( 中間体 5 ) の合成。

【 0 4 5 2 】

【 化 4 2 】



【 0 4 5 3 】

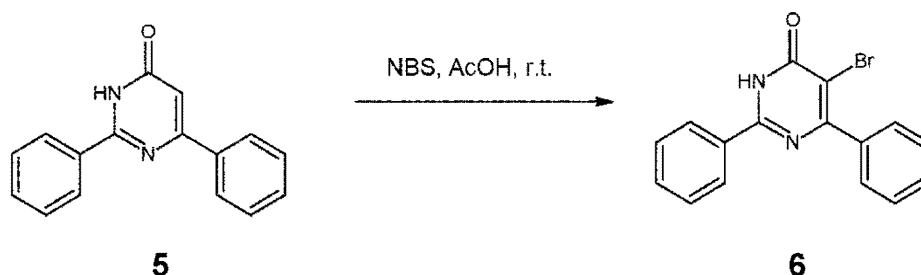
4 7 m L 水 中 の 1 8 . 4 7 g の ベ ン ザ ミ ジ ン 塩 酸 塩 を 、 1 0 m L 水 中 の 4 . 7 4 g の 水 酸 化 ナ ト リ ウ ム で 処 理 し た 。 次 に 、 2 1 . 4 5 m L の ベ ン ザ イ ル 酢 酸 エ チ ル 、 引 き 続 き 5 0 m L の エ タ ノ ール を 添 加 し て 均 一 な 反 応 物 を 生 成 し 、 そ れ を 室 温 で 一 晩 攪 拌 し た 。 不 均 一 な 反 応 物 を 濾 過 し 、 固 体 を メ チ ル t e r t - ブ チ ル エ ー テ ル で 洗 浄 し て 中 間 体 5 を 白 色 固 体 ( 1 9 . 9 g 、 6 8 % 収 率 ) と し て 得 た 。 30

【 0 4 5 4 】

b . 2 , 6 - ジフェニル 5 - ブロモピリミジン - 4 - オン ( 中間体 6 ) の合成。

【 0 4 5 5 】

【 化 4 3 】



【 0 4 5 6 】

5 7 0 m L 酢 酸 中 の 1 9 . 9 g の 中 間 体 5 に 、 2 1 . 4 g の N - プ ロ モ ス ク シ ン イ ミ ド を 添 加 し た 。 不 均 一 反 応 物 を 室 温 で 一 晩 攪 拌 し た 。 水 を 添 加 し 、 内 容 物 を ジ ク ロ ロ メ タ ン で 50

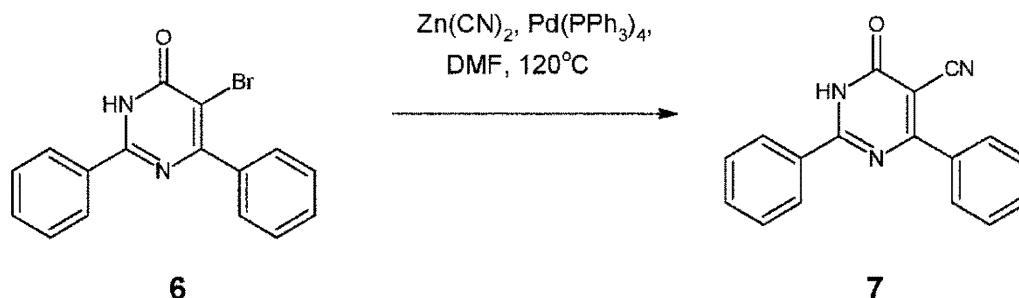
抽出した。組み合わせた有機層を硫酸ナトリウム上で乾燥させ、濾過し、回転蒸発によって濃縮して固体を得て、それを熱いエタノールでトリチュレーションし、エタノールで2回、次にメチル tert - ブチルエーテルで1回洗浄して中間体6を白色固体 ( 20 . 25 g、77%収率 ) として得た。

【 0 4 5 7 】

c . 2 , 6 - ジフェニル 5 - シアノピリミジン - 4 - オン ( 中間体 7 ) の合成。

【 0 4 5 8 】

【 化 4 4 】



10

【 0 4 5 9 】

グローブボックス中で、145 mL の N , N - ジメチルホルムアミド中の 4 . 0 g の中間体6および 4 . 0 g の Pd ( P P h <sub>3</sub> ) <sub>4</sub> を、50 の内温に加熱した。次に、2 . 8 8 g のシアン化亜鉛を添加し、反応物を一晚 1 1 8 の内温で加熱した。反応物を冷却し、水 ( 1 L ) を反応物に添加し、内容物をクロロホルムで抽出した。組み合わせた有機層を硫酸ナトリウム上で乾燥させ、回転蒸発によって濃縮して固体を得て、それをジクロロメタンでトリチュレーションして中間体7を白色固体 ( 7 4 0 m g、22%収率 ) として得た。

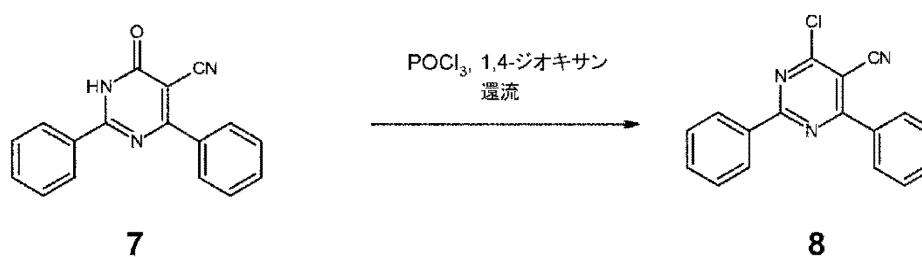
20

【 0 4 6 0 】

d . 2 , 6 - ジフェニル 5 - プロモピリミジン - 4 - オン ( 中間体 8 ) の合成。

【 0 4 6 1 】

【 化 4 5 】



30

【 0 4 6 2 】

76 mL の 1 , 4 - ジオキサン中の 4 . 4 9 g の中間体7の懸濁液に、23 . 5 mL のオキシ塩化リンを添加した。反応物を 3 . 5 時間還流させ、室温に冷却し、氷浴中で冷却される水に注ぎ込んだ。飽和水性炭酸ナトリウムの溶液を pH = 6 まで添加したとき、内容物をジクロロメタンで抽出した。組み合わせた有機層を硫酸ナトリウム上で乾燥させ、濾過し、回転蒸発によって濃縮して真っ白でない固体を得て、それをジクロロメタンに溶解させ、70 : 30 ~ 50 : 50 ヘキサン : ジクロロメタンで溶出する中圧液体クロマトグラフィー ( M P L C ) によって精製した。最も純粋な画分を組み合わせ、回転蒸発によって濃縮して中間体8を白色固体 ( 3 . 1 5 g、66%収率 ) として得た。

40

【 0 4 6 3 】

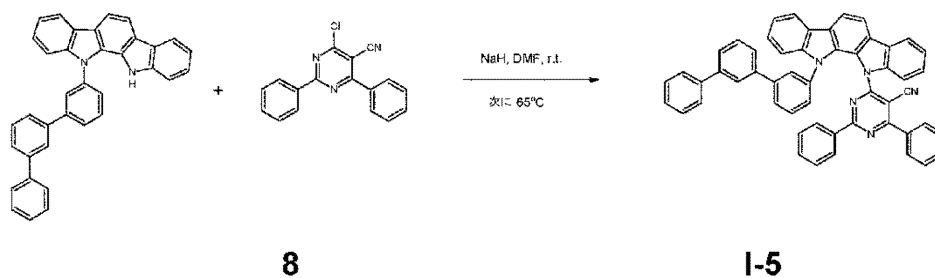
e . 1 1 - ( m - テルフェニル ) - 1 2 - ( 2 , 6 - ジフェニル - 5 - シアノピリミジ

50

ン - 4 - イル) - インドロ [ 2 , 3 - a ] カルバゾール ( I - 5 ) の合成。

【 0 4 6 4 】

【 化 4 6 】



10

【 0 4 6 5 】

グローブボックス中で、室温での 31 mL の DMF 中の 4.30 g の 12 - [ 3 - ( 3 - フェニルフェニル ) フェニル ] - 11 H - インドロ [ 2 , 3 - a ] カルバゾールに、10 mL の DMF 中の 434 mg の 60 % NaH を添加した。室温で 1 時間攪拌した後、103 mL の DMF 中の 3.1 g の中間体 8 を添加した。反応物を 60 ~ 65 で加熱した。3 時間後に、1 mL の DMF 中の追加の 55 mg の NaH ( 鉱油中 60 % ) を添加した。反応物を一晩攪拌した後、水 ( 500 mL ) および飽和水性塩化アンモニウム ( 10 mL ) を添加した。内容物をジクロロメタンで抽出し、組み合わせた有機層を硫酸ナトリウム上で乾燥させ、濾過し、回転蒸発によって濃縮して金 - オレンジ色オイルを得た。粗材料を、90 : 10 ~ 50 : 50 ヘキサン : ジクロロメタンで溶出する、MPLC によって精製した。最も純粋な画分を組み合わせ、回転蒸発によって濃縮して黄色固体を得て、それをジクロロメタンに溶解させ、濾過し、ジクロロメタン / アセトニトリルからの回転蒸発によって注意深く濃縮して I - 5 を黄色固体 ( 1.32 g、22 % 収率、UPLC により 99.99 % 純度 ) として得た。デバイス製造前の最終精製は、真空昇華によって成し遂げられた。

20

【 0 4 6 6 】

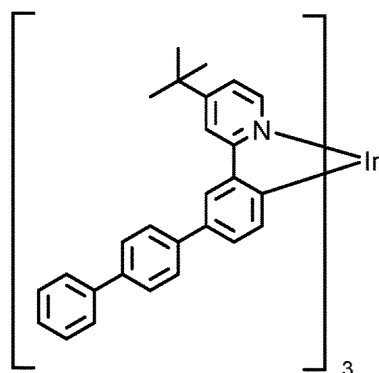
デバイス実施例 :

( 1 ) 原材料

D 1 は、シクロメタル化イリジウム錯体である。そのような材料は、例えば、PCT 出願公開国際公開第 2013142634 号パンフレットに記載されている。

【 0 4 6 7 】

【 化 4 7 】



40

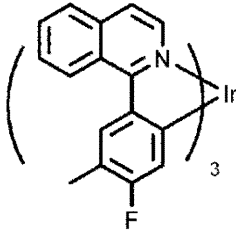
【 0 4 6 8 】

D 2 は、シクロメタル化イリジウム錯体である。そのような材料は、例えば、米国特許第 7,276,716 号明細書に記載されている。

【 0 4 6 9 】

50

## 【化48】



## 【0470】

10

ET-1は、アリアルホスフィンオキシドである。

ET-2は、リチウムキノレートである。

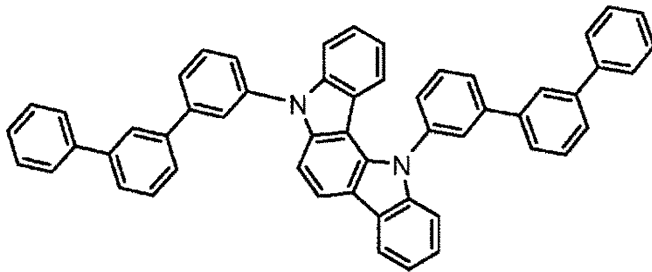
HIJ-1は、導電性ポリマーとポリマーフッ素化スルホン酸との水性分散系から製造される正孔注入材料である。そのような材料は、例えば、米国特許第7,351,358号明細書、同第7,431,866号明細書、同第7,462,298号明細書、およびPCT出願公開国際公開第2009/018009号パンフレットに記載されている。

下に示される、Host H1は、インドロカルバゾールである。そのような材料は、例えば、PCT出願公開国際公開第2012087955号パンフレットに記載されている。

## 【0471】

20

## 【化49】



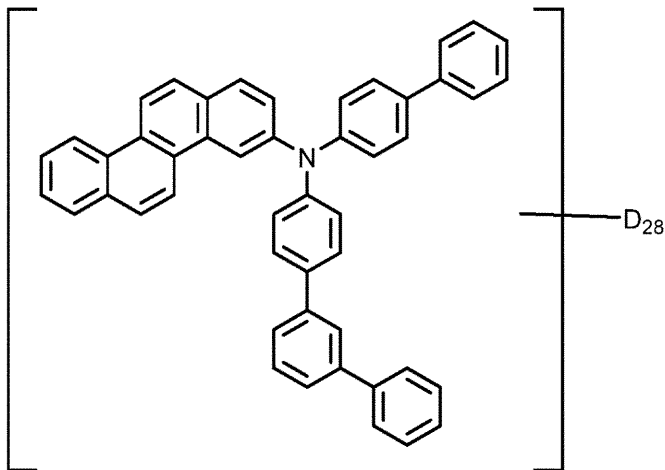
## 【0472】

30

下に示される、Host H2は、重水素化アミノクリセン化合物である。そのような材料は、例えば、米国特許第8,968,883号明細書に記載されている。

## 【0473】

## 【化50】



40

## 【0474】

50

HTM - 1は、トリアリールアミンポリマーである。

【0475】

(2) デバイス製造

OLEDデバイスは、溶液加工と熱蒸発技術との組み合わせによって製造した。Thin Film Devices, Inc製のパターン化酸化インジウムスズ(ITO)被覆ガラス基材を使用した。これらのITO基材は、30オーム/平方のシート抵抗および80%光透過率を有するITOで被覆されたCorning 1737ガラスをベースとしている。パターン化ITO基材を、水性洗剤溶液中で超音波によってきれいにし、蒸留水でリンスした。パターン化ITOをその後、アセトン中で超音波によってきれいにし、イソプロパノールでリンスし、窒素の流れ中で乾燥させた。

10

【0476】

デバイス製造の直前に、きれいにした、パターン化ITO基材を10分間UVオゾンで処理した。冷却直後に、HIJ - 1の水性分散系をITO表面一面にスピンコートし、溶媒を除去するために加熱して正孔注入層(「HIL」)を形成した。冷却後に、基材を次に、正孔輸送材料のトルエン溶液でコートし、次に溶媒を除去するために加熱して正孔輸送層(「HTL」)を形成した。冷却後に基材を、ホストおよびドーパントの安息香酸メチル溶液でスピンコートし、溶媒を除去するために加熱して、エレクトロルミネセンス層(「EML」)を形成した。基材をマスクし、真空チャンバに入れた。電子輸送材料の層を、熱蒸発によって堆積させて電子輸送層(「ETL」)を形成した。マスクを次に真空中で変え、Alの層を熱蒸発によって堆積させて、カソードを形成した。チャンバをガス抜きし、デバイスを、ガラス蓋、乾燥剤、および紫外線硬化性エポキシを使用して封入した。

20

【0477】

(3) デバイス特性評価

OLEDデバイスを、それらの(1)電流 - 電圧(I - V)曲線、(2)エレクトロルミネセンス放射輝度対電圧、および(3)エレクトロルミネセンススペクトル対電圧を測定することによって特性評価した。すべての3つの測定を同時に行い、コンピュータによって制御した。特定電圧でのデバイスの電流効率は、LEDのエレクトロルミネセンス放射輝度をデバイスを運転するために必要とされる電流密度で割ることによって求められる。単位はcd/Aである。電力効率は、運転電圧で割られた電流効率である。単位はlm/Wである。色座標は、Minolta CS - 100メーターかPhotoresearch PR - 705メーターかのいずれかを用いてを決定した。

30

【0478】

デバイス実施例1 ~ 4

これらの実施例は、デバイスにおけるホスト材料としての、式Iを有する材料の使用を例示する。デバイスは、上記のとおり製造し、以下の層を有した。

アノード = ITO (50 nm)

HIL = HIJ - 1 (50 nm)

HTL = HTM - 1 : HTM - 2 (重量で、8 : 2) (18 nm)

EML = 44重量%第1ホスト、40重量%第2ホストH1、および16重量%D1 (53 nm)。第1ホストを、下の、表1に示す。

40

ETL = ET - 1 : ET - 2 (重量で2 : 3) (20 nm)

カソード = Al (100 nm)

結果を下表1に示す。

【0479】

## 【表 1】

表 1. デバイス結果

実施例	第 1 ホスト 化合物	CE (cd/A)	EQE (%)	T95 (時間)
1	I-5	20	7	75
2	I-2	60	17	75
3	I-3	72	20	12
4	I-1	30	8	4

10

## 【0480】

T95を除いて、すべてのデータは、2000ニット（カンデラ毎平方メートル）でのものである。CEは電流効率であり；EQE＝外部量子効率であり；T95は、デバイスが5mA/cm<sup>2</sup>および50で初期輝度の95％に達するための時間単位の時間である。

## 【0481】

デバイス実施例5～7

これらの実施例は、デバイスにおけるホスト材料としての、式Iを有する材料の使用を例示する。デバイスは、上記のとおり製造し、以下の層を有した。

20

アノード＝ITO（50nm）

HIL＝HIJ-1（78nm）

HTL＝HTM-1：HTM-2（重量で、8：2）（18nm）

EML＝65重量％第1ホスト、21重量％第2ホストH2、8重量％D2および6重量％D1（64nm）。第1ホストを、下表2に示す。

ETL＝ET-1：ET-2（重量で2：3）（22nm）

カソード＝Al（100nm）

結果を下表2に示す。

## 【0482】

## 【表 2】

30

表 2. デバイス結果

実施例	第 1 ホスト 化合物	CE (cd/A)	EQE (%)	T95 (時間)
5	I-5	20.5	19.5	500
6	I-2	21.5	20.5	650
7	I-3	21	20	100

40

## 【0483】

T95を除いて、すべてのデータは、2000ニットでのものである。CEは電流効率であり；EQE＝外部量子効率であり；T95は、デバイスが8mA/cm<sup>2</sup>および50で初期輝度の95％に達するための時間単位の時間である。

## 【0484】

概要または実施例において上で記載された作業のすべてが必要であるわけではないこと、特定の作業の一部が必要でなくてもよいこと、そして1つ以上のさらなる作業が、記載されている作業に加えて行われてもよいことに留意されたい。さらにまた、作業がリストアップされる順序は、必ずしも作業が行われる順序ではない。

## 【0485】

50

前述の明細書において、本概念は、具体的な実施形態に関連して説明されてきた。しかしながら、当業者は、様々な修正および変更が、以下の特許請求の範囲に説明されるような本発明の範囲から逸脱することなく行い得ることを十分理解するであろう。したがって、本明細書および図は、限定的な意味ではなく例証的な意味で考えられるべきであり、すべてのそのような修正は本発明の範囲内に含まれることが意図される。

【0486】

利益、他の利点、および問題の解決策は、特定の実施形態に関して上で記載されてきた。しかしながら、利益、利点、問題の解決策、および任意の利益、利点、または解決策を生じさせ得るかもしくはより顕著なものにならせ得る任意の特徴は、任意のもしくはすべての請求項の決定的に重要な、必要とされる、または本質的な特徴と解釈されるべきではない。

10

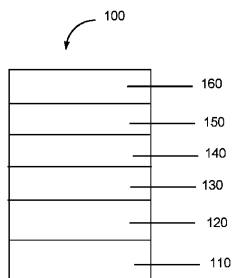
【0487】

特定の特徴が、明確にするために、別個の実施形態との関連で本明細書に記載され、単一の実施形態において組み合わせても提供されてもよいことは十分理解されるべきである。反対に、簡潔にするために、単一の実施形態との関連で記載される様々な特徴がまた、別個にまたは任意の副次的組み合わせで提供されてよい。本明細書で明記される様々な範囲の数値の使用は、記述範囲内の最小値および最大値が両方とも語「約」によって先行されるかのように近似値として記述される。このようにして、記述範囲の上下のわずかな変動は、範囲内の値と実質的に同じ結果を達成するために用いることができる。また、これらの範囲の開示は、1つの値の成分のいくつか異なる値のそれらと混ぜられる場合に生じ得る小数値を含む最小平均値と最大平均値との間のあらゆる値を含む連続した範囲を意図する。さらに、より広いおよびより狭い範囲が開示される場合、1つの範囲からの最小値を別の範囲からの最大値とマッチさせることは本発明の熟慮内であり、逆もまた同様である。

20

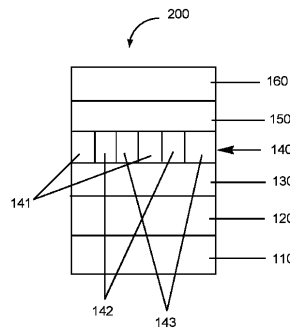
【図1】

FIG. 1



【図2】

FIG. 2





## フロントページの続き

- (72)発明者 ティ ミン フライン  
アメリカ合衆国 19808 デラウェア州 ウィルミントン ペッパー リッジ コート 58  
22
- (72)発明者 グレグ エー . ホステトラー  
アメリカ合衆国 19702 デラウェア州 ニューアーク アローウッド レーン 416
- (72)発明者 デニス コリエビッチ コンダコフ  
アメリカ合衆国 19808 デラウェア州 ウィルミントン エルダール ドライブ 2155
- (72)発明者 カーウィン ディー . ドブス  
アメリカ合衆国 19803 デラウェア州 ウィルミントン ブラッドリー ドライブ 20

審査官 早川 裕之

- (56)参考文献 特開2014-072407(JP,A)  
特開2009-094486(JP,A)  
特開2015-172166(JP,A)  
特表2011-513473(JP,A)  
国際公開第2016/017684(WO,A1)  
国際公開第2015/050253(WO,A1)  
中国特許出願公開第105400507(CN,A)  
韓国公開特許第10-2016-0029662(KR,A)  
韓国公開特許第10-2012-0092909(KR,A)  
国際公開第2016/181773(WO,A1)  
国際公開第2016/181772(WO,A1)  
特表2014-509067(JP,A)  
Advanced Materials, 2016年, 28, 3122-3130  
J. Heterocyclic Chem., 2013年, 50, 544-550

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

C07D 487/04  
H01L 51/50  
CAplus/REGISTRY(STN)