

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第6890975号
(P6890975)

(45) 発行日 令和3年6月18日 (2021.6.18)

(24) 登録日 令和3年5月28日 (2021.5.28)

(51) Int. Cl.		F I	
C O 7 D 471/14	(2006.01)	C O 7 D 471/14	1 0 1
C O 7 D 487/04	(2006.01)	C O 7 D 487/04	1 3 7
C O 7 D 491/048	(2006.01)	C O 7 D 487/04	1 4 0
C O 7 D 491/147	(2006.01)	C O 7 D 491/048	C S P
C O 7 D 495/04	(2006.01)	C O 7 D 491/147	

請求項の数 16 (全 120 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号	特願2016-567008 (P2016-567008)	(73) 特許権者	597035528
(86) (22) 出願日	平成27年4月1日 (2015.4.1)		メルク パテント ゲーエムベーハー
(65) 公表番号	特表2017-514878 (P2017-514878A)		ドイツ国, D-64293 ダルムシュタット
(43) 公表日	平成29年6月8日 (2017.6.8)		ド フランクフルター ストラッセ 25
(86) 国際出願番号	PCT/EP2015/000705		O
(87) 国際公開番号	W02015/169412	(74) 代理人	100108855
(87) 国際公開日	平成27年11月12日 (2015.11.12)		弁理士 蔵田 昌俊
審査請求日	平成30年3月30日 (2018.3.30)	(74) 代理人	100103034
審査番号	不服2019-17081 (P2019-17081/J1)		弁理士 野河 信久
審査請求日	令和1年12月18日 (2019.12.18)	(74) 代理人	100179062
(31) 優先権主張番号	14001573.6		弁理士 井上 正
(32) 優先日	平成26年5月5日 (2014.5.5)	(74) 代理人	100199565
(33) 優先権主張国・地域又は機関	欧州特許庁 (EP)		弁理士 飯野 茂
		(74) 代理人	100153051
			弁理士 河野 直樹

最終頁に続く

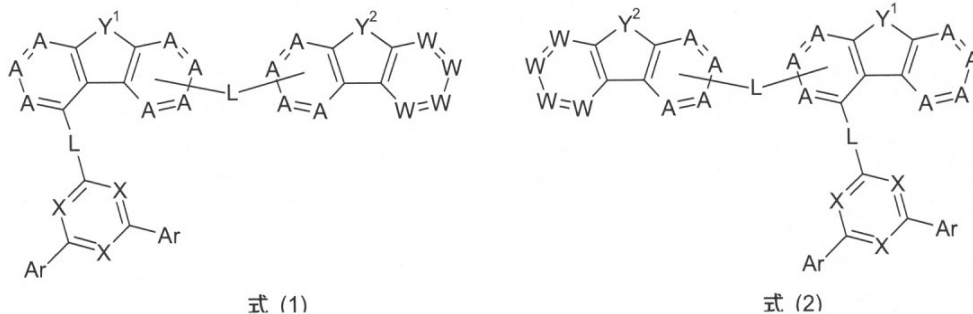
(54) 【発明の名称】 有機エレクトロルミネッセンス素子のための材料

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

式 (1) または (2) の化合物 :

【化 1】

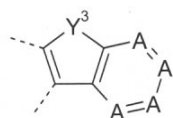


式中、使用される記号と添え字には、以下が適用される ;

A は、出現毎に同一であるか異なり、C R または N であり、ここで、環毎の最大 2 個の基 A は、N であり、また、L がこの位置で結合する場合には、A は C であり ;

W は、出現毎に同一であるか異なり、C R または N であり、ここで、最大 2 個の基 W は、N であるか、または 2 個の隣接する基 W は、一緒になって以下の式 (3) の基であり、ここで、式 (1) もしくは式 (2) の化合物は、最大 1 個の式 (3) の基を含み、

【化2】



式(3)

式中、破線の結合は、この基の結合を示し、Aは、上記所与の意味を有し、ただし、 Y^1 が CR_2 である場合には、式(2)の化合物は、式(3)の基を含まず、

Xは、出現毎に同一であるか異なり、CRまたはNであり、ただし、少なくとも一つの基Xは、Nであり；

Arは、出現毎に同一であるか異なり、1以上の基Rにより置換されてもよい5~30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり；

Y^1 、 Y^2 、 Y^3 は、出現毎に同一であるか異なり、O、NR、Sまたは CR_2 であり、ここで、Nに結合する基Rは、Hではなく；

Lは、出現毎に同一であるか異なり、単結合または1以上の基Rにより置換されてよい5~30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり；

Rは、出現毎に同一であるか異なり、H、D、F、Cl、Br、I、CN、 NO_2 、 $N(Ar^1)_2$ 、 $N(R^1)_2$ 、 $C(=O)Ar^1$ 、 $C(=O)R^1$ 、 $P(=O)(Ar^1)_2$ 、 $P(Ar^1)_2$ 、 $B(Ar^1)_2$ 、 $Si(Ar^1)_3$ 、 $Si(R^1)_3$ 、1~20個のC原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基、3~20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基、2~20個のC原子を有するアルケニル基(夫々、1以上の基 R^1 により置換されてもよく、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^1C=CR^1$ 、 $Si(R^1)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=NR^1$ 、 $P(=O)(R^1)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^1 、O、Sもしくは $CONR^1$ で置き換えられてよく、ここで、1以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、CNもしくは NO_2 で置き換えられてよい。)または、各場合に1以上の基 R^1 により置換されてよい5~40個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、または、1以上の基 R^1 により置換されてよい5~40個の芳香族環原子を有するアリーロキシもしくはヘテロアリーロキシ基、または、1以上の基 R^1 により置換されてよい5~40個の芳香族環原子を有するアラルキルもしくはヘテロアラルキル基より成る基から選ばれ；同じ炭素原子もしくは隣接する炭素原子に結合する2個の置換基Rは、1以上の基 R^1 により置換されてよいモノあるいはポリ環状の脂肪族、芳香族もしくは複素環式芳香族環構造を随意に形成してもよく；

Ar^1 は、出現毎に、1以上の非芳香族基 R^1 により置換されてもよい5~30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり；同じN原子、P原子もしくはB原子に結合する2個の基 Ar^1 は、単結合または $N(R^1)$ 、 $C(R^1)_2$ 、OもしくはSから選ばれるブリッジにより互いにブリッジされてもよく；

R^1 は、出現毎に同一であるか異なり、H、D、F、Cl、CN、1~20個のC原子を有する脂肪族炭化水素基または5~30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり、ここで、1以上のH原子は、D、F、Cl、Br、IもしくはCNで置き換えられてよく、夫々、1~4個の炭素原子を有する一以上のアルキル基により置換されてよく、2個以上の隣接する置換基 R^1 は、モノあるいはポリ環状の脂肪族環構造を互いに形成してもよく；

ただし、以下の化合物は除く。

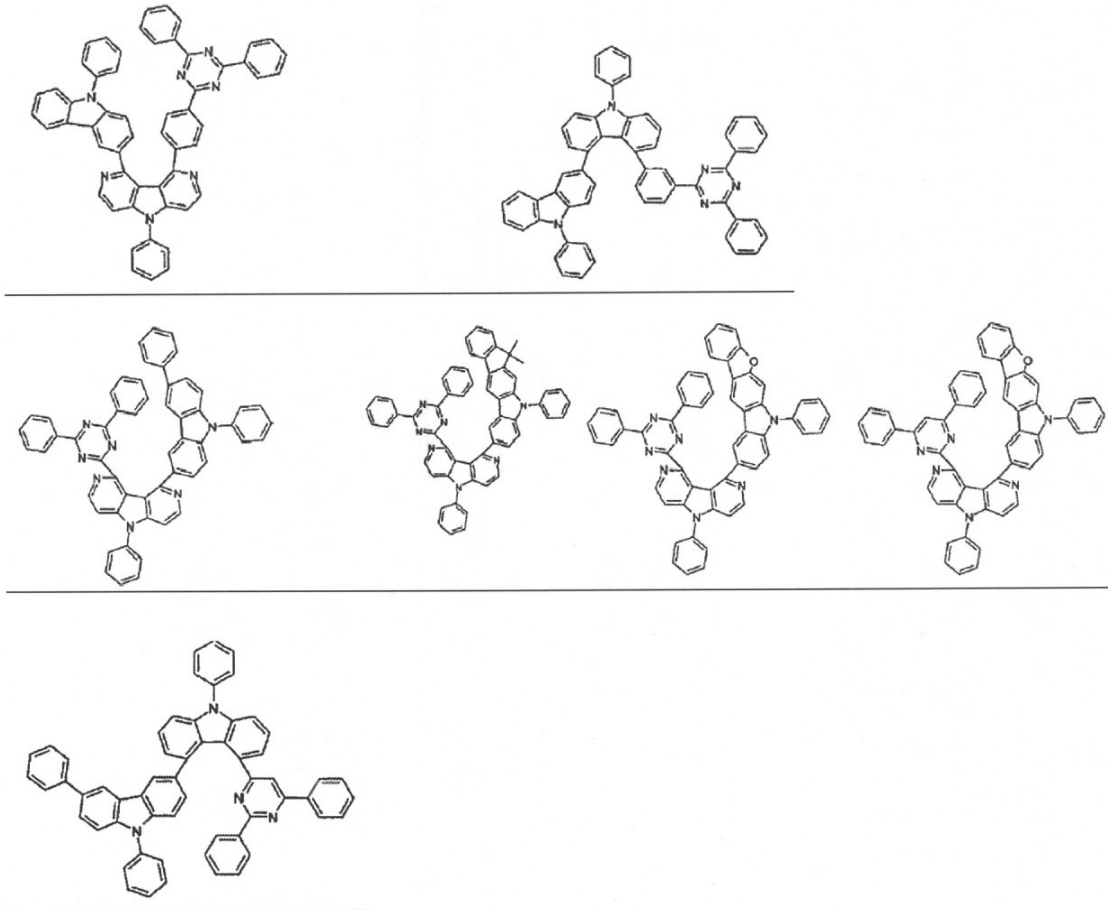
10

20

30

40

【化 3】



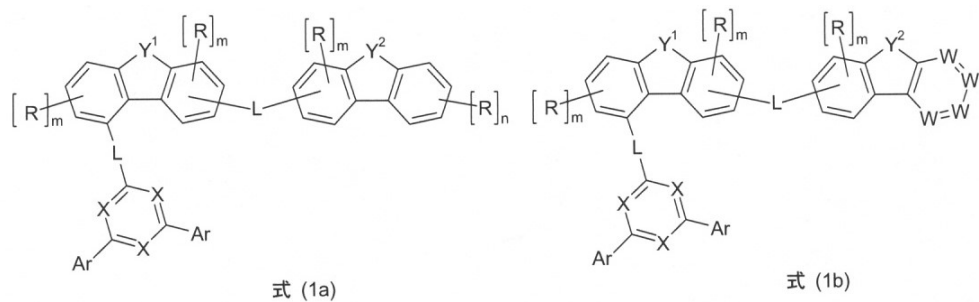
10

20

【請求項 2】

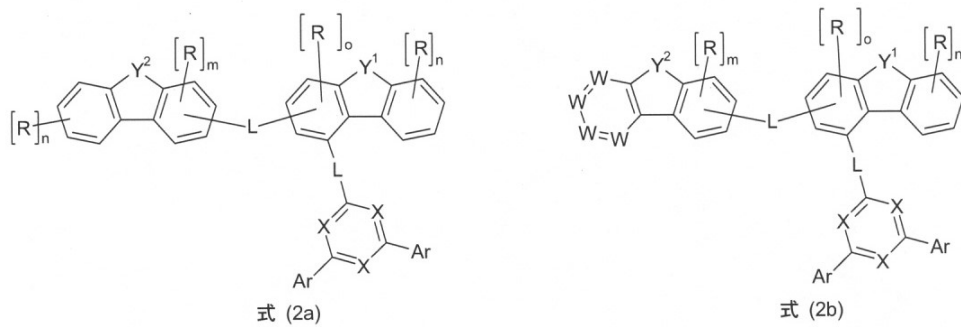
Wは、出現毎に同一であるか異なり、CRであり、Aは、出現毎に同一であるか異なり、CRであり、式(1a)、(1b)、(2a)および(2b)の化合物から選ばれることを特徴とする、請求項1記載の化合物：

【化 4】



式 (1a)

式 (1b)



式 (2a)

式 (2b)

式中、

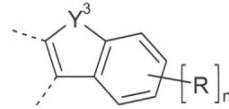
2個の隣接する基Wは、一緒になって、以下の式(3a)の基であり、その他の2個の基Wは、CRであり、

30

40

50

【化5】



式 (3a)

式中、破線の結合はこの基の結合を示し；

nは、出現毎に同一であるか異なり、0、1、2、3または4であり；

mは、出現毎に同一であるか異なり、0、1、2または3であり；

oは、0または1であり；

使用される他の記号は、請求項1で与えられる定義を有し；

ここで、Y¹がCR₂である式(2b)の化合物は、本発明から除外される。

【請求項3】

少なくとも2個の基XはNであることを特徴とする、請求項1または2記載の化合物。

【請求項4】

Y¹およびY²は、出現毎に同一であるか異なり、O、NR(ここで、窒素に結合する基Rは、Hではない。)またはSであることを特徴とする、請求項1~3何れか1項記載の化合物。

【請求項5】

以下である、請求項1~4何れか1項記載の化合物：

Xは、出現毎に同一であるか異なり、CRまたはNであり、少なくとも2個の基Xは、Nであり；

Y¹、Y²は、出現毎に同一であるか異なり、O、NR(ここで、窒素に結合する基Rは、Hではない。)またはSであり；

Y³は、O、NR(ここで、窒素に結合する基Rは、Hではない。)またはSであり；

Lは、出現毎に同一であるか異なり、単結合または5~24個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり；

Arは、出現毎に同一であるか異なり、1以上の基Rにより置換されてもよい6~24個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり；

nは、式(1a)もしくは(2a)において、出現毎に同一であるか異なり、0、1、2または3であり；

mは、式(1a)もしくは(2a)において、出現毎に同一であるか異なり、0、1または2であり；

nは、式(1a)もしくは(2a)において、0または1であり；

oは、式(1a)もしくは(2a)において、0または1であり；

Rは、出現毎に同一であるか異なり、H、D、F、CN、N(Ar¹)₂、C(=O)Ar¹、P(=O)(Ar¹)₂、1~10個のC原子を有する直鎖アルキルもしくはアルコキシ基、3~10個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキルもしくはアルコキシ基、2~10個のC原子を有するアルケニル基(夫々、1以上の基R¹により置換されてよく、1以上の隣接しないCH₂基は、Oで置き換えられてよく、ここで、1以上のH原子は、DもしくはFで置き換えられてよい。)または、夫々、各場合に1以上の基R¹により置換されてよい5~24個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、または、1以上の基R¹により置換されてよい5~25個の芳香族環原子を有するアラルキルもしくはヘテロアラルキル基より成る基から選ばれ；同じ炭素原子もしくは隣接する炭素原子に結合する2個の置換基Rは、1以上の基R¹により置換されてよいモノあるいはポリ環状の脂肪族、芳香族もしくは複素環式芳香族環構造を随意に形成してもよい。

【請求項6】

以下である、請求項1~5何れか1項記載の化合物：

Xは、Nであり；

Y^1 、 Y^2 は、出現毎に同一であるか異なり、OまたはNRであり、ここで、窒素原子に結合する基Rは、Hではなく；

Y^3 は、NR（ここで、窒素に結合する基Rは、Hではない。）または CR_2 であり；

Lは、単結合であり；

Arは、出現毎に同一であるか異なり、6～18個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり；

nは、式(1a)もしくは(2a)において、出現毎に同一であるか異なり、0または1であり；

mは、式(1a)もしくは(2a)において、0であり；

oは、式(1a)もしくは(2a)において、0であり；

Rは、出現毎に同一であるか異なり、H、D、F、CN、 $N(Ar^1)_2$ 、1～8個のC原子を有する直鎖アルキル基、3～8個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル基、2～8個のC原子を有するアルケニル基（夫々、1以上の基 R^1 により置換されてもよい。）または、各場合に、1以上の非芳香族基 R^1 により置換されてよい6～24個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造より成る基から選ばれ；同じ炭素原子もしくは隣接する炭素原子に結合する2個の置換基Rは、1以上の基 R^1 により置換されてよいモノあるいはポリ環状の脂肪族、芳香族もしくは複素環式芳香族環構造を随意に形成してもよい。

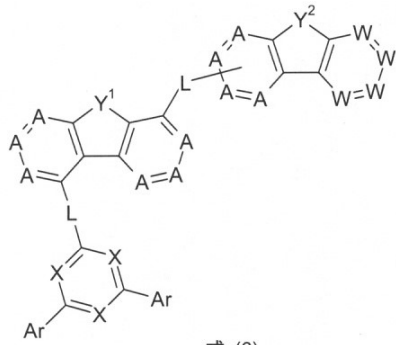
【請求項7】

化合物は、式(6)、(7)、(8)、(9)および(10)から選ばれることを特徴とする、請求項1～6何れか1項記載の化合物；

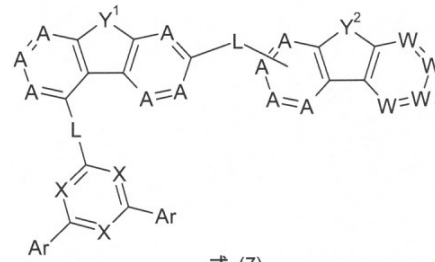
10

20

【化6】

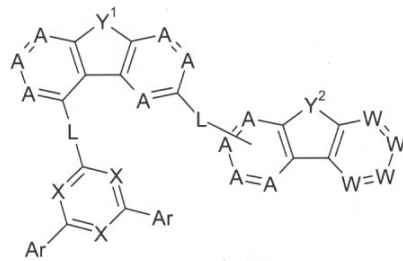


式 (6)

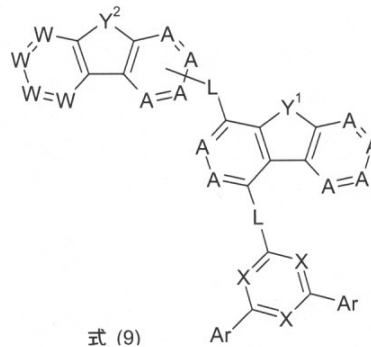


式 (7)

10

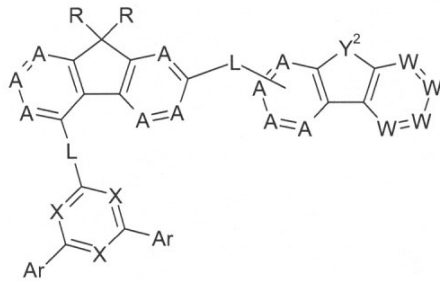


式 (8)



式 (9)

20



式 (10)

30

式中、 Y^1 は、O、NRまたはSであり、使用される他の記号は、請求項1で与えられる意味を有する。

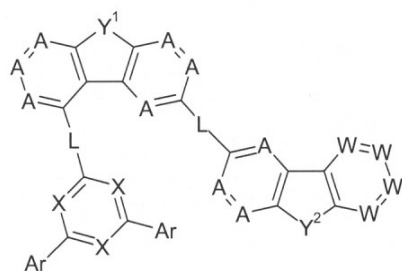
【請求項8】

AとWは、出現毎に同一であるか異なり、CRであることを特徴とする、請求項7記載の化合物。

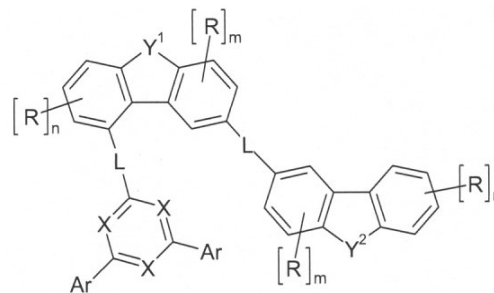
【請求項9】

式(8a)および(8b)から選ばれる、請求項8記載の化合物：

【化7】



式 (8a)



式 (8b)

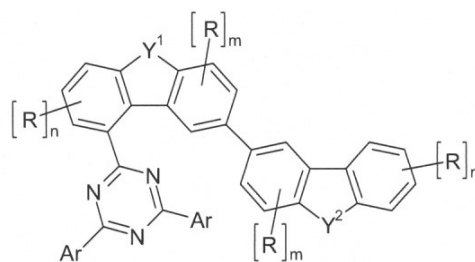
40

式中、 Y^1 および Y^2 は、出現毎に同一であるか異なり、O、NRまたはSであり、使用される他のその記号は、請求項1および2で与えられる定義を有する。

【請求項10】

50

式(8c)の、請求項9記載の化合物：
【化8】



式(8c)

10

式中、使用される記号と添え字には、以下が適用される；

Y^1 、 Y^2 は、出現毎に同一であるか異なり、OまたはNR(ここで、窒素に結合する基Rは、Hではない。)またはSであるが、ただし、少なくとも一つの基 Y^1 および/または Y^2 は、NRであり；

Arは、出現毎に同一であるか異なり、各場合に、1以上の基Rにより置換されてもよい6~24個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり；

nは、出現毎に同一であるか異なり、0、1、2または3であり；

mは、出現毎に同一であるか異なり、0、1または2であり；

Rは、出現毎に同一であるか異なり、H、D、F、CN、 $N(Ar^1)_2$ 、 $C(=O)Ar^1$ 、 $P(=O)(Ar^1)_2$ 、1~10個のC原子を有する直鎖アルキルもしくはアルコキシ基、3~10個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキルもしくはアルコキシ基、2~10個のC原子を有するアルケニル基(夫々、1以上の基 R^1 により置換されてもよく、1以上の隣接しない CH_2 基は、Oで置き代えられてよく、ここで、1以上のH原子は、DもしくはFで置き代えられてよい。)または、各場合に1以上の基 R^1 により置換されてよい5~24個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、または、1以上の基 R^1 により置換されてよい5~25個の芳香族環原子を有するアラルキルもしくはヘテロアラルキル基より成る基から選ばれ；同じ炭素原子もしくは隣接する炭素原子に結合する2個の置換基Rは、1以上の基 R^1 により置換されてよいモノあるいはポリ環状の脂肪族、芳香族もしくは複素環式芳香族環構造を随意に形成してもよい。

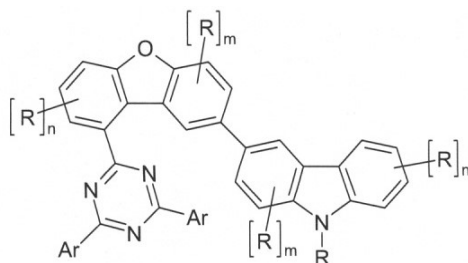
20

30

【請求項11】

式(8d)の、請求項10記載の化合物：

【化9】



式(8d)

40

式中、使用される記号と添え字には、以下が適用される；

nは、出現毎に同一であるか異なり、0、1または2であり；

mは、出現毎に同一であるか異なり、0または1であり；

窒素に結合する基Rは、各場合に1以上の基 R^1 により置換されてよい5~24個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり；

使用されるその他の記号と添え字は、請求項10で与えられる定義を有する。

【請求項12】

請求項1~11何れか1項記載の少なくとも一つの化合物と少なくとも一つのさらなる化合物および/または少なくとも一つの溶媒を含む、混合物。

50

【請求項 1 3】

請求項 1 ~ 1 1 何れか 1 項記載の化合物または請求項 1 2 記載の混合物の、電子素子での使用。

【請求項 1 4】

請求項 1 ~ 1 1 何れか 1 項記載の少なくとも一つの化合物または請求項 1 2 記載の混合物を含む電子素子。

【請求項 1 5】

有機エレクトロルミネッセンス素子であることを特徴とする請求項 1 4 記載の電子素子。

【請求項 1 6】

請求項 1 ~ 1 1 何れか 1 項記載の化合物が、発光層中で、または正孔ブロック層中でまたは電子輸送層中で用いられることを特徴とする、請求項 1 4 記載の電子素子。

10

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、特に、有機エレクトロルミネッセンス素子での三重項マトリックス材料としての使用のための、電子不足複素環式芳香族基で置換されたカルバゾール、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェンおよびフルオレン誘導体に関する。本発明は、さらに、本発明による化合物の製造方法とこれらの化合物を含む電子素子に関する。

【0002】

有機半導体が機能性材料として用いられる有機エレクトロルミネッセンス素子 (O L E D) の構造は、たとえば、US 4539507、US 5151629、EP0676461およびW098/27136に記載されている。用いられる発光材料は、蛍光発光ではなく燐光発光を示す有機金属錯体であることが多い。量子力学的理由により、4 倍までのエネルギーとパワー効率、燐光発光エミッターとして有機金属化合物を使用して可能である。一般的に、O L E D の場合において、特に、燐光発光を示すO L E D の場合において、たとえば、効率、駆動電圧および寿命に関して、改善に対する必要性が未だ存在する。

20

【0003】

燐光発光O L E D の特性は、用いられる三重項エミッターによってだけ決定されるのではない。特に、使用されるその他の材料、たとえば、マトリックス材料は、また、ここで、特に重要である。そこで、これら材料に対する改善は、また、O L E D 特性に顕著な改善をもたらし得る。

30

【0004】

先行技術にしたがい、カルバゾール誘導体 (たとえば、WO 2014/015931にしたがうもの)、インドロカルバゾール誘導体 (たとえば、WO 2007/063754もしくはWO 2008/056746にしたがうもの) またはインデノカルバゾール誘導体 (たとえば、WO 2010/136109もしくはWO2011/000455にしたがうもの)、特に、トリアジン等の電子不足複素環式芳香族化合物で置換されたものが、燐光エミッターのためのマトリックス材料として使用される。さらに、たとえば、ビスジベンゾフラン誘導体 (たとえば、EP 2301926にしたがうもの) が燐光エミッターのためのマトリックス材料として使用される。WO 2011/057706は、2 個のトリフェニルトリアジン基により置換されたカルバゾール誘導体を開示している。ここで、さらなる改善は、特に、三重項準位と昇華安定性に関して未だ望まれている。WO 2011/046182は、トリアジン上でフルオレニル基により置換されたカルバゾール-アリーレン-トリアジンを開示している。これらの化合物の特徴的性格はフルオレニル基の存在である。置換基としてフルオレニル基を含まない化合物は、開示されていない。WO 2013/077352は、トリアジン基が、2 価のアリーレン基を介してジベンゾフラン基に結合したトリアジン誘導体を開示している。これらの化合物は、正孔ブロック材料として記載されている。燐光エミッターのためのホスト材料としてのこれらの材料の使用は、記載されていない。

40

【0005】

一般的に、特に、寿命に関してのみならず、素子の効率と駆動電圧に関して、マトリックス材料としての使用のためのこれらの材料の改善に対する必要性が未だに存在する。

50

【0006】

本発明の目的は、燐光もしくは蛍光OLEDでの、特に、マトリックス材料としての使用のために適する化合物の提供である。特に、赤色、黄色および緑色燐光OLEDおよび随意に青色燐光OLEDのためにも適し、長い寿命、良好な効率と低駆動電圧をもたらすマトリックス材料を提供することが本発明の目的である。マトリックス材料の特性は、特に、また、有機エレクトロルミッセンス素子の寿命と効率に重要な影響を有する。

【0007】

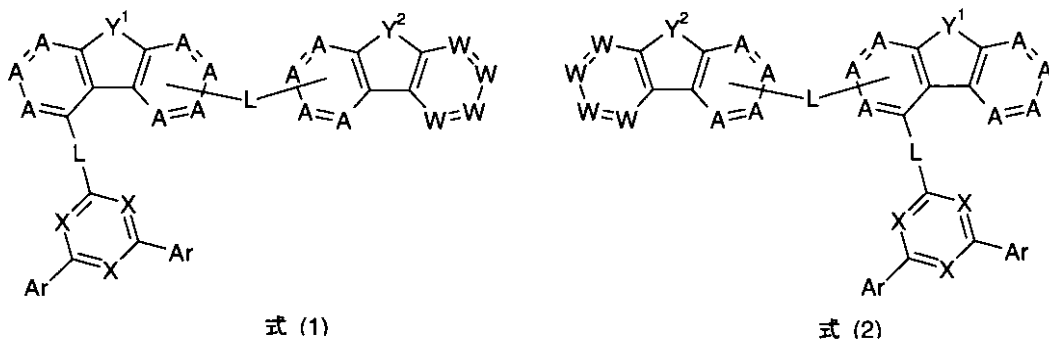
驚くべきことに、以下の式(1)または(2)の化合物を含むエレクトロルミッセンス素子が、特に、燐光ドープのためのマトリックス材料として使用される場合に、先行技術を超える改善を有することが見出された。

【0008】

したがって、本発明は、以下の式(1)または(2)の化合物に関し：

【0009】

【化1】



【0010】

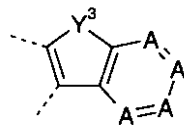
式中、使用される記号と添え字には、以下が適用される；

Aは、出現毎に同一であるか異なり、CRまたはNであり、ここで、環毎の最大2個の基Aは、好ましくは、環毎の最大1個の基Aは、Nであり、また、Lがこの位置で結合する場合には、AはCであり；

Wは、出現毎に同一であるか異なり、CRまたはNであり、ここで、最大2個の基Wは、Nであるか、または2個の隣接する基Wは、一緒になって以下の式(3)の基であり、ここで、式(1)もしくは式(2)の化合物は、最大1個の式(3)の基を含み、

【0011】

【化2】



式 (3)

【0012】

式中、破線の結合は、この基の結合を示し、Aは、上記所与の意味を有し、ただし、Y¹がCR₂である場合には、式(2)の化合物は、式(3)の基を含まず、

Xは、出現毎に同一であるか異なり、CRまたはNであり、ただし、少なくとも一つの基Xは、Nであり；

Arは、出現毎に同一であるか異なり、1以上の基Rにより置換されてもよい5~30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり；

Y¹、Y²、Y³は、出現毎に同一であるか異なり、O、NR、SまたはCR₂であり

10

20

30

40

50

、ここで、Nに結合する基Rは、Hではなく；

Lは、出現毎に同一であるか異なり、単結合または1以上の基Rにより置換されてよい5～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり；

Rは、出現毎に同一であるか異なり、H、D、F、Cl、Br、I、CN、NO₂、N(Ar¹)₂、N(R¹)₂、C(=O)Ar¹、C(=O)R¹、P(=O)(Ar¹)₂、P(Ar¹)₂、B(Ar¹)₂、Si(Ar¹)₃、Si(R¹)₃、1～20個のC原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基、2～20個のC原子を有するアルケニル基（夫々、1以上の基R¹により置換されてもよく、1以上の隣接しないCH₂基は、R¹C=CR¹、Si(R¹)₂、C=O、C=S、C=NR¹、P(=O)(R¹)、SO、SO₂、NR¹、O、SもしくはCONR¹で置き換えられてよく、ここで、1以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、CNもしくはNO₂で置き換えられてよい。）または、各場合に1以上の基R¹により置換されてよい5～40個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、または、1以上の基R¹により置換されてよい5～40個の芳香族環原子を有するアリーロキシもしくはヘテロアリーロキシ基、または、1以上の基R¹により置換されてよい5～40個の芳香族環原子を有するアラルキルもしくはヘテロアラルキル基より成る基から選ばれ；同じ炭素原子もしくは隣接する炭素原子に結合する2個の置換基Rは、1以上の基R¹により置換されてよいモノあるいはポリ環状の脂肪族、芳香族もしくは複素環式芳香族環構造を随意に形成してもよく；

Ar¹は、出現毎に、1以上の非芳香族基R¹により置換されてよい5～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり；同じN原子、P原子もしくはB原子に結合する2個の基Ar¹は、単結合またはN(R¹)、C(R¹)₂、OもしくはSから選ばれるブリッジにより互いにブリッジされてもよく；

R¹は、出現毎に同一であるか異なり、H、D、F、Cl、Br、I、CN、1～20個のC原子を有する脂肪族炭化水素基または5～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり、ここで、1以上のH原子は、D、F、Cl、Br、IもしくはCNで置き換えられてよく、夫々、1～4個の炭素原子を有する1以上のアルキル基により置換されてよく、2個以上の隣接する置換基R¹は、モノあるいはポリ環状の脂肪族環構造を互いに形成してもよい。

【0013】

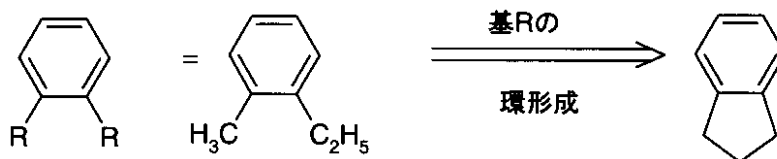
本発明の意味での隣接する炭素原子は、互いに直接結合する炭素原子である。

【0014】

2個以上の基が、互いに環を形成してもよいという表現は、本説明の目的では、特に、2個の基が、2個の水素原子の形式的開裂を伴い、化学結合により互いに結合する意味で使用されることを意図している。これは、以下のスキームにより図解される：

【0015】

【化3】



【0016】

しかしながら、さらに、上記言及した表現は、2個の基の1つが水素である場合には、第2の基は、水素原子が結合した位置で結合して環を形成する意味で使用されることを意図している。これは、以下のスキームにより図解される。

10

20

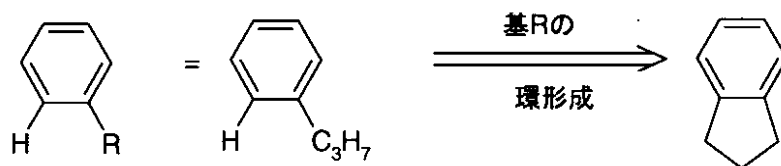
30

40

50

【0017】

【化4】



10

【0018】

縮合アリール基は、本発明の意味では、2個以上の芳香族基が縮合する、すなわち、たとえば、ナフタレン等の、共通の端部を介して互いに環縮合する基である。逆に、たとえば、フルオレンは、フルオレン中の2個の芳香族基が共通の端部を有さないことから、本発明の意味での縮合アリール基でない。

【0019】

アリール基は、本発明の意味では、6～40個のC原子を含有し、ヘテロアリール基は、本発明の意味では、2～40個のC原子と少なくとも1つのヘテロ原子を含有し、ただしC原子とヘテロ原子の合計は、少なくとも5個である。ヘテロ原子は、好ましくはN、Oおよび/またはSから選択される。ここで、アリール基またはヘテロアリール基は、単純な芳香族環、すなわち、ベンゼン、または単純な複素環式芳香族環、たとえば、ピリジン、ピリミジン、チオフェン等、または縮合アリールもしくはヘテロアリール基、たとえば、ナフタレン、アントラセン、フェナントレン、キノリン、イソキノリン等の意味で使用される。

20

【0020】

芳香族環構造は、本発明の意味では、環構造中に6～40個のC原子を含有する。複素環式芳香族環構造は、本発明の意味では、環構造中に1～40個のC原子と少なくとも1つのヘテロ原子を含有し、ただしC原子とヘテロ原子の合計は、少なくとも5個である。ヘテロ原子は、好ましくは、N、Oおよび/またはSから選択される。芳香族または複素環式芳香族環構造は、本発明の意味では、必ずしもアリールまたはヘテロアリール基だけを含有するとは限らず、2個以上のアリールまたはヘテロアリール基が、非芳香族単位（好ましくは、10%未満のH以外の原子）、たとえば、C、NもしくはO原子またはカルボニル基によって中断されてよい構造の意味で使用されることを意図している。したがって、たとえば、9,9'-スピロビフルオレン、9,9-ジアリールフルオレン、トリアリールアミン、ジアリールエーテル、スチルベン等の構造は、2個以上のアリール基が、たとえば、直鎖もしくは環式アルキル基またはシリル基によって中断されている構造と同様に、本発明の意味では芳香族環構造の意味で使用されることを意図している。さらに、2個以上のアリールもしくはヘテロアリール基が、直接互いに結合した構造、たとえば、ビフェニル、テルフェニル、クアテルフェニルもしくはビピリジンも同様に、芳香族もしくは複素環式芳香族環構造の意味で使用されることを意図している。

30

40

【0021】

環式アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基は、本発明の意味では、モノ環式、ビ環式もしくはポリ環式の意味で使用される。

【0022】

本発明の目的のために、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル基は、ここで、さらに、個々の水素原子もしくは CH_2 基は、上記言及した基により置換されていてよく、たとえば、基メチル、エチル、*n*-プロピル、*i*-プロピル、シクロプロピル、*n*-ブチル、*i*-ブチル、*s*-ブチル、*t*-ブチル、シクロブチル、2-メチルブチル、*n*-ペンチル、*s*-ペンチル、*t*-ペンチル、2-ペンチル、ネオペンチル、シクロペンチル、*n*-ヘキシル、*s*-ヘキシル、*t*-ヘキシル、2-ヘキ

50

シル、3-ヘキシル、ネオヘキシル、シクロヘキシル、1-メチルシクロペンチル、2-メチルペンチル、n-ヘプチル、2-ヘプチル、3-ヘプチル、4-ヘプチル、シクロヘプチル、1-メチルシクロヘキシル、n-オクチル、2-エチルヘキシル、シクロオクチル、1-ビスシクロ[2.2.2]オクチル、2-ビスシクロ[2.2.2]オクチル、2-(2,6-ジメチル)オクチル、3-(3,7-ジメチル)オクチル、アダマンチル、トリフルオロメチル、ペンタフルオロエチル、2,2,2-トリフルオロエチル、1,1-ジメチル-n-ヘキサ-1-イル、1,1-ジメチル-n-ヘプタ-1-イル、1,1-ジメチル-n-オクタ-1-イル、1,1-ジメチル-n-デカ-1-イル、1,1-ジメチル-n-ドデカ-1-イル、1,1-ジメチル-n-テトラデカ-1-イル、1,1-ジメチル-n-ヘキサデカ-1-イル、1,1-ジメチル-n-オクタデカ-1-イル、1,1-ジエチル-n-ヘキサ-1-イル、1,1-ジエチル-n-ヘプタ-1-イル、1,1-ジエチル-n-オクタ-1-イル、1,1-ジエチル-n-デカ-1-イル、1,1-ジエチル-n-ドデカ-1-イル、1,1-ジエチル-n-テトラデカ-1-イル、1,1-ジエチル-n-ヘキサデカ-1-イル、1,1-ジエチル-n-オクタデカ-1-イル、1-(n-プロピル)シクロヘキサ-1-イル、1-(n-ブチル)シクロヘキサ-1-イル、1-(n-ヘキシル)シクロヘキサ-1-イル、1-(n-オクチル)シクロヘキサ-1-イルおよび1-(n-デシル)シクロヘキサ-1-イル基の意味で使用される。アルケニル基は、たとえば、エテニル、プロペニル、ブテニル、ペンテニル、シクロペンテニル、ヘキセニル、シクロヘキセニル、ヘプテニル、シクロヘプテニル、オクテニル、シクロオクテニルまたはシクロオクタジ

エニルの意味で使用される。アルキニル基は、たとえば、エチニル、プロピニル、ブチニル、ペンチニル、ヘキシニル、ヘプチニルまたはオクチニルの意味で使用される。C₁ ~ C₄₀-アルコキシ基は、たとえば、メトキシ、トリフルオロメトキシ、エトキシ、n-プロポキシ、i-プロポキシ、n-ブトキシ、i-ブトキシ、s-ブトキシ、t-ブトキシまたは2-メチルブトキシの意味で使用される。

【0023】

各場合において、前述の基により置換されていてもよく、任意の所望の位置で、芳香族もしくは複素環式芳香族環構造に連結していてもよい、5 ~ 40個の芳香族環原子を有する芳香族または複素環式芳香族環構造は、たとえば、ベンゼン、ナフタレン、アントラセン、ベンズアントラセン、フェナントレン、ベンゾフェナントレン、ピレン、クリセン、ペリレン、フルオランテン、ベンゾフルオランテン、ナフタセン、ペンタセン、ベンゾピレン、ピフェニル、ピフェニレン、テルフェニル、テルフェニレン、フルオレン、スピロピフルオレン、ジヒドロフェナントレン、ジヒドロピレン、テトラヒドロピレン、cis-もしくはtrans-インデノフルオレン、trans-モノベンゾインデノフルオレン、cis-もしくはtrans-ジベンゾインデノフルオレン、トルキセン、イソトルキセン、スピロトルキセン、スピロイソトルキセン、フラン、ベンゾフラン、イソベンゾフラン、ジベンゾフラン、チオフェン、ベンゾチオフェン、イソベンゾチオフェン、ジベンゾチオフェン、ピロール、インドール、イソインドール、カルバゾール、インドロカルバゾール、インデノカルバゾール、ピリジン、キノリン、イソキノリン、アクリジン、フェナントリジン、ベンゾ-5,6-キノリン、ベンゾ-6,7-キノリン、ベンゾ-7,8-キノリン、フェノチアジン、フェノキサジン、ピラゾール、インダゾール、イミダゾール、ベンズイミダゾール、ナフトイミダゾール、フェナントロイミダゾール、ピリドイミダゾール、ピラジンイミダゾール、キノキサリンイミダゾール、オキサゾール、ベンゾオキサゾール、ナフトオキサゾール、アントロオキサゾール、フェナントロオキサゾール、イソオキサゾール、1,2-チアゾール、1,3-チアゾール、ベンゾチアゾール、ピリダジン、ベンゾピリダジン、ピリミジン、ベンゾピリミジン、キノキサリン、1,5-ジアザアントラセン、2,7-ジアザピレン、2,3-ジアザピレン、1,6-ジアザピレン、1,8-ジアザピレン、4,5-ジアザピレン、4,5,9,10-テトラアザペリレン、ピラジン、フェナジン、フェノキサジン、フェノチアジン、フルオルピン、ナフチリジン、アザカルバゾール、ベンゾカルボリン、フェナントロリン、1,2,3-トリアゾール、1,2,4-トリアゾール、ベンゾトリアゾール、1,2,3-オキサジアゾール、1,2,4-オキサジアゾール、1,2,5-オキサジアゾール、1,3,4-オキサジアゾール、1,2,3-チアジアゾール、1,2,4-チアジアゾール、1,2,5-チアジアゾール、1,3,4-チアジアゾール、1,3,5-トリアジン、1,2,4-トリアジン、1,2,3-トリアジン、テトラゾール、1,2,4,5-テトラジン、1,2,

10

20

30

40

50

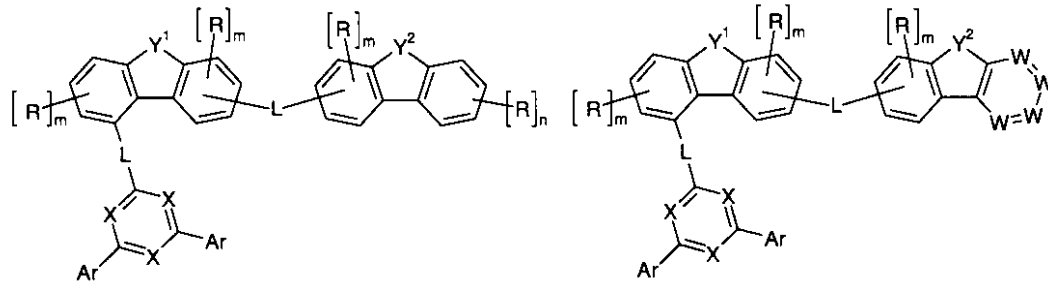
3,4-テトラジン、1,2,3,5-テトラジン、プリン、プテリジン、インドリジンおよびベンゾチアジアゾールに由来する基の意味で使用される。

【0024】

本発明の好ましい1態様では、Wは、出現毎に同一であるか異なり、CRであるか、または2個のWは、式(3a)の基であり、残りのWは、CRであり、およびAは、出現毎に同一であるか異なり、CRである。好ましいのは、それゆえ以下の式(1a)、(1b)、(2a)および(2b)の化合物であり、

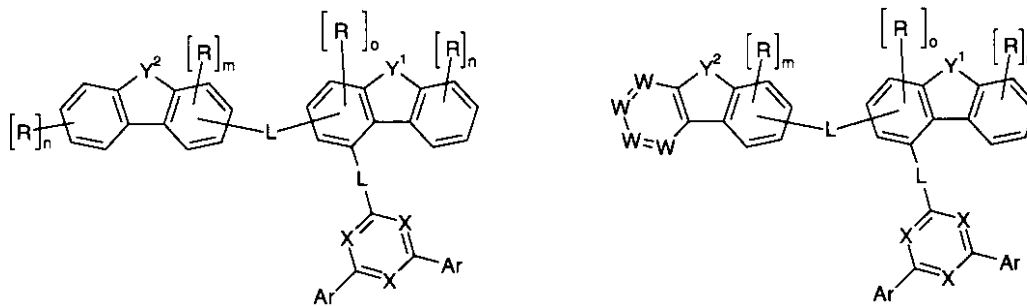
【0025】

【化5】



式(1a)

式(1b)



式(2a)

式(2b)

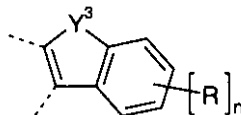
【0026】

式中、

2個の隣接する基Wは、一緒になって、以下の式(3a)の基であり、その他の2個の基Wは、CR、好ましくは、CHであり、

【0027】

【化6】



式(3a)

【0028】

式中、破線の結合はこの基の結合を示し；

nは、出現毎に同一であるか異なり、0、1、2、3または4であり；

mは、出現毎に同一であるか異なり、0、1、2または3であり；

oは、0または1であり；

使用されるその他の記号は、上記所与の意味を有し；

10

20

30

40

50

ここで、 Y^1 が CR_2 である (2b) の化合物は、本発明から除外される。

【0029】

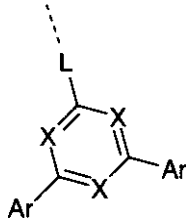
本発明の好ましい1態様では、少なくとも2個の基Xは、Nであり、随意の残りの基Xは、CR、特に、CHである。本発明の特に好ましい1態様では、全ての基Xは、Nである。それゆえ、ジアリールトリアジン基が特に好ましい。

【0030】

本発明の好ましい1態様では、式(1)と(2)もしくはその好ましい態様において結合する以下の基は、

【0031】

【化7】

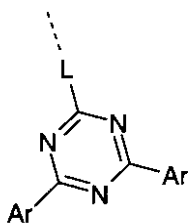


【0032】

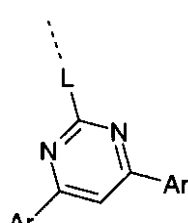
それゆえ、以下の基 (HetAr-1)、(HetAr-2) もしくは (HetAr-3) から選ばれ、

【0033】

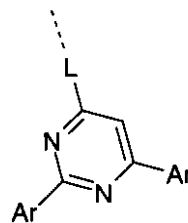
【化8】



(HetAr-1)



(HetAr-2)



(HetAr-3)

【0034】

式中、LとArは、上記所与の意味を有し、破線の結合は、この基の結合を示す。

【0035】

本発明のさらに好ましい1態様では、 Y^1 と Y^2 は、出現毎に同一であるか異なり、OまたはNR(ここで、窒素に結合する基Rは、Hではない。)またはSである。ここで、基 Y^1 および/または Y^2 は、NRであり、式(2)において、 Y^1 は、OまたはSであることが好ましい。本発明の特に好ましい1態様では、 Y^1 と Y^2 は、出現毎に同一であるか異なり、OまたはNRであり、ここで、窒素に結合する基Rは、Hではなく、 Y^1 と Y^2 は、好ましくは、異なる。非常に特に好ましくは、 Y^1 は、Oであり、 Y^2 は、NRであり、ここで、窒素に結合する基Rは、Hではない。

【0036】

本発明のさらに好ましい1態様では、化合物が式(3)の基を含む場合には、 Y^3 は、O、NR(窒素に結合する基Rは、Hではない。)または $C(R)_2$ であり、特に好ましくは、NR(ここで、窒素結合する基Rは、Hではない。)または $C(R)_2$ であり、非常に特に好ましくは、 $C(R)_2$ である。

【0037】

本発明による化合物が、式(3)の基を含む場合には、これは、種々の位置で結合する

10

20

30

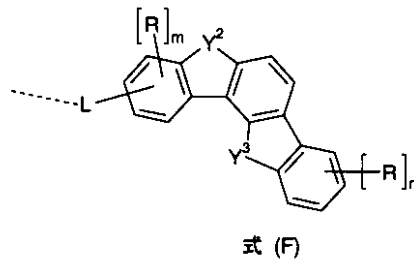
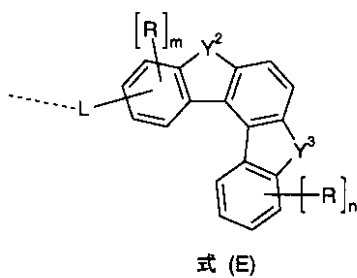
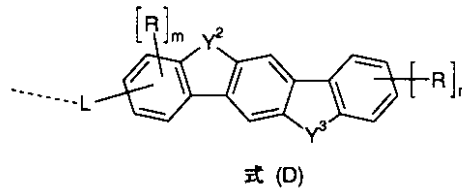
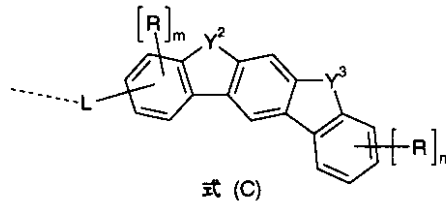
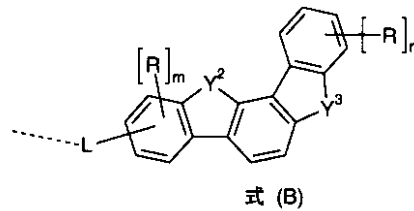
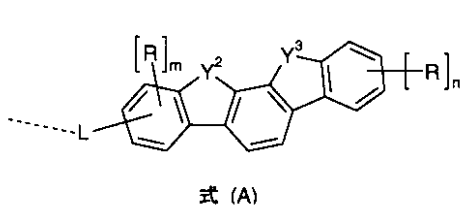
40

50

ことができる。これは、基 A とその他の基 W が C R である好ましい態様を参照して、式 (A) ~ (F) により以下に図示され：

【 0 0 3 8 】

【 化 9 】



【 0 0 3 9 】

式中、使用される記号と添え字は、上記所与の意味を有し、破線の結合は、本発明による化合物中の結合を示す。

【 0 0 4 0 】

本発明のさらに好ましい 1 態様では、L は、出現毎に同一であるか異なり、単結合または 1 以上の基 R により置換されてよい 5 ~ 24 個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造である。L は、特に好ましくは、出現毎に同一であるか異なり、単結合または 6 ~ 12 個の芳香族環原子を有する芳香族環構造または 6 ~ 13 個の芳香族環原子を有する複素環式芳香族環構造であって、各場合に、1 以上の基 R により置換されてよいが、好ましくは、置換されない。L は、非常に特に好ましくは、単結合である。適切な芳香族もしくは複素環式芳香族環構造 L の例は、オルト-、メタ-もしくはパラ-フェニレン、ピフェニル、フルオレン、ピリジン、ピリミジン、トリアジン、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェンおよびカルバゾールより成る群から選ばれ、夫々、1 以上の基 R により置換されてよいが、好ましくは、置換されない。

【 0 0 4 1 】

本発明のさらに好ましい 1 態様では、Ar は、出現毎に同一であるか異なり、6 ~ 24 個の芳香族環原子を有する、好ましくは、6 ~ 18 個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり、特に好ましくは、6 ~ 12 個の芳香族環原子を有する芳香族環構造もしくは 6 ~ 13 個の芳香族環原子を有する複素環式芳香族環構造であり、各場合に、1 以上の基 R により置換されてよいが、好ましくは、置換されない。適切な基 Ar の例は、フェニル、オルト-、メタ-もしくはパラ-ピフェニル、テルフェニル、特に、分岐テルフェニル、クアテルフェニル、特に、分岐クアテルフェニル、1-,2-,3-もしくは 4-フルオレニル、1-,2-,3-もしくは 4-スピロピフルオレニル、ピリジル、ピリミジル、1-,2-,3-もしくは 4-ジベンゾフラニル、1-,2-,3-もしくは 4-ジベンゾチエニルおよび 1-,2-

10

20

30

40

50

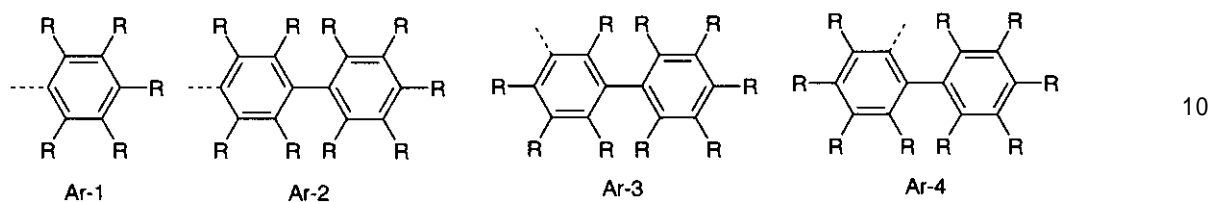
-,3-もしくは4-カルバゾリルより成る群から選ばれ、夫々、1以上の基Rにより置換されてよいが、好ましくは、置換されない。

【0042】

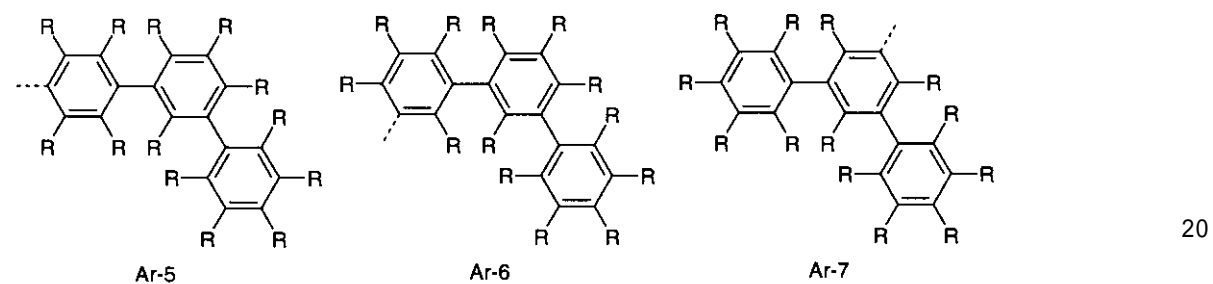
適切な基Arの例は、以下に示される式Ar-1~Ar-19の構造であり：

【0043】

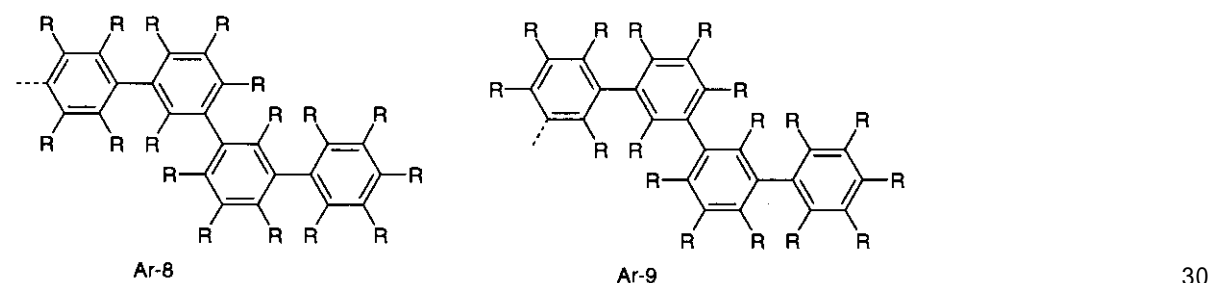
【化10-1】



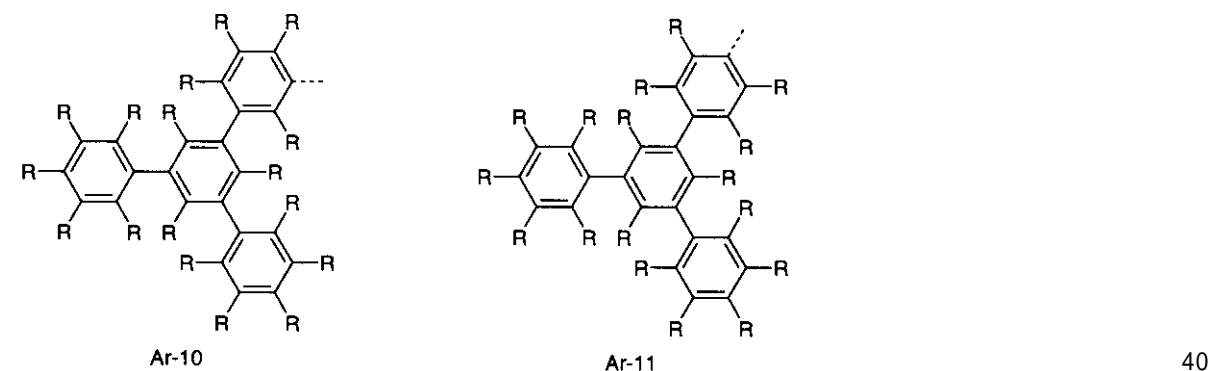
10



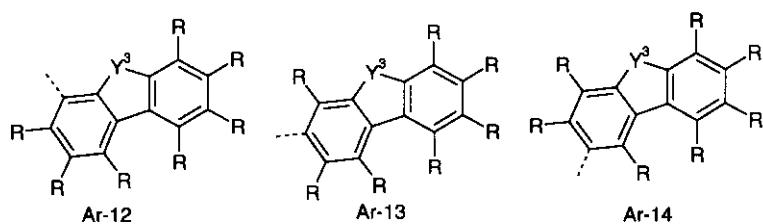
20



30



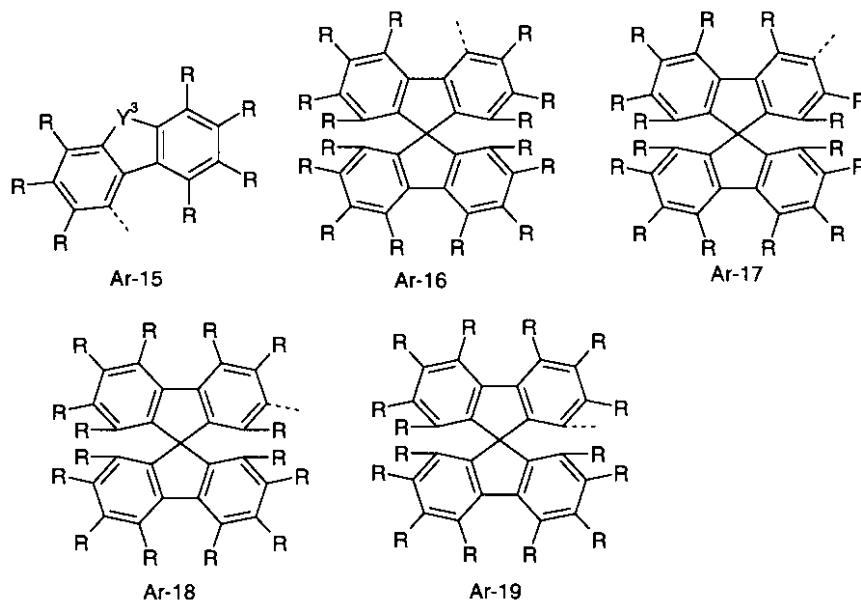
40



【0044】

50

【化10-2】



10

【0045】

式中、 Y^3 と R は、上記所与の意味を有し、破線の結合は、式(1)もしくは式(2)において、6員環ヘテロアリアル環基への結合である。

20

【0046】

本発明のさらに好ましい1態様では、式(1a)もしくは(2a)の化合物中の添え字 n は、0、1、2または3、特に好ましくは、0、1または2、非常に特に好ましくは、0または1である。

【0047】

本発明のなおさらに好ましい1態様では、式(1a)もしくは(2a)の化合物中の添え字 m は、0、1または2、特に好ましくは、0または1、非常に特に好ましくは、0である。

30

【0048】

本発明のなおさらに好ましい1態様では、式(1a)もしくは(2a)の化合物中の添え字 o は、0または1、特に好ましくは、0である。

【0049】

好ましい置換基 R は、以下に記載される。ここで、好ましい置換基は、それらが、AもしくはWにまたはArに、または Y^1 、 Y^2 もしくは Y^3 に結合するかどうかによって依存し、およびまた、どのように、 Y^1 、 Y^2 、 Y^3 が選ばれるかに依存する。

【0050】

AがCRである場合、またはWがCRである場合、または基Arが置換基Rにより置換される場合には、これらの置換基Rは、そこで、好ましくは、H、D、F、CN、 $N(Ar^1)_2$ 、 $C(=O)Ar^1$ 、 $P(=O)(Ar^1)_2$ 、1~10個のC原子を有する直鎖アルキルもしくはアルコキシ基、3~10個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキルもしくはアルコキシ基、2~10個のC原子を有するアルケニル基(夫々、1以上の基 R^1 により置換されてもよく、1以上の隣接しない CH_2 基はOで置き換えられてよく、ここで、1以上のH原子は、DもしくはFで置き換えられてよい。)または、各場合に1以上の基 R^1 により置換されてよいが、好ましくは、置換されない5~24個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、または、1以上の基 R^1 により置換されてよい5~25個の芳香族環原子を有するアラルキルもしくはヘテロアラルキル基より成る基から選ばれ; 同じ炭素原子もしくは隣接する炭素原子に結合する2個の置換基Rは、1以上の基 R^1 により置換されてよいモノあるいはポリ環状の脂肪族、芳香族もしくは

40

50

は複素環式芳香族環構造を随意に形成してもよい。

【0051】

これらの置換基 R は、特に好ましくは、H、D、F、CN、 $N(Ar^1)_2$ 、1~8個のC原子を有する、好ましくは、1、2、3もしくは4個のC原子を有する直鎖アルキル基、3~8個のC原子を有する、好ましくは、3もしくは4個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル基、2~8個のC原子を有する、好ましくは、2、3もしくは4個のC原子を有するアルケニル基（夫々、1以上の基 R^1 により置換されてもよいが、好ましくは、置換されない。）または、各場合に1以上の非芳香族基 R^1 により置換されてよいが、好ましくは、置換されない6~24個の芳香族環原子を有する、好ましくは、6~18個の芳香族環原子を有する、特に好ましくは、6~13個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造より成る基から選ばれ；同じ炭素原子もしくは隣接する炭素原子に結合する2個の置換基 R は、1以上の基 R^1 により置換されてよいが、好ましくは、置換されないモノあるいはポリ環状の脂肪族環構造を随意に形成してもよい。

10

【0052】

置換基 R は、非常に特に好ましくは、H、または、各場合に1以上の非芳香族基 R^1 により置換されてよいが、好ましくは、置換されない6~18個の芳香族環原子を有する、好ましくは、6~13個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造より成る基から選ばれる。適切な置換基 R の例は、フェニル、オルト-、メタ-もしくはパラ-ピフェニル、テルフェニル、特に、分岐テルフェニル、クアテルフェニル、特に、分岐クアテルフェニル、1-,2-,3-もしくは4-フルオレニル、1-,2-,3-もしくは4-スピロピフルオレニル、ピリジル、ピリミジル、1-,2-,3-もしくは4-ジベンゾフラニル、1-,2-,3-もしくは4-ジベンゾチエニル、1-,2-,3-もしくは4-カルバゾリルより成る基から選ばれ、夫々、1以上の基 R^1 により置換されてよいが、好ましくは、置換されない。ここで、適切な構造 R は、 $Ar-1 \sim Ar-19$ に対して上記に示されるのと同じ構造であり、ここで、これらの構造は R ではなく R^1 により置換される。基 Ar 上の置換基 R に対しては、上記言及した基とは別に、1~4個のC原子を有する直鎖アルキル基、3~6個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル基が、また、特に好ましい。

20

【0053】

Y^1 、 Y^2 、 Y^3 が、NRである場合には、この窒素原子に結合する基 R は、好ましくは、出現毎に同一であるか異なり、各場合に1以上の基 R^1 により置換されてよい5~24個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、特に好ましくは、1以上の基 R^1 により置換されてよい6~18個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造である。適切な置換基 R の例は、フェニル、オルト-、メタ-もしくはパラ-ピフェニル、テルフェニル、特に、分岐テルフェニル、クアテルフェニル、特に、分岐クアテルフェニル、1-,2-,3-もしくは4-フルオレニル、1-,2-,3-もしくは4-スピロピフルオレニル、ピリジル、ピリミジル、1,3,5-トリアジニル、4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジニル、1-,2-,3-もしくは4-ジベンゾフラニル、1-,2-,3-もしくは4-ジベンゾチエニル、1-,2-,3-もしくは4-カルバゾリルより成る基から選ばれ、ここで、カルバゾリル基は、窒素原子上で、HもしくはDではない基 R^1 により置換される。これらの基は、夫々、基 R^1 により置換されてよいが、好ましくは、置換されない。ここで、適切な構造 R は、 $Ar-1 \sim Ar-19$ に対して上記に示されるのと同じ構造であり、ここで、これらの構造は、Rではなく R^1 により置換される。

30

40

【0054】

Y^1 、 Y^2 、 Y^3 が、 $C(R)_2$ である場合には、この炭素原子に結合する基 R は、好ましくは、出現毎に同一であるか異なり、1~10個のC原子を有する直鎖アルキル基、3~10個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル基、2~10個のC原子を有するアルケニル基（夫々、1以上の基 R^1 により置換されてもよく、1以上の隣接しない CH_2 基はOで置き代えられてよく、ここで、1以上のH原子は、DもしくはFで置き代えられてよい。）または、各場合に1以上の基 R^1 により置換されてよい5~24個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり；2個の置換基 R は、1以上

50

の基 R^1 により置換されてよいモノあるいはポリ環状の脂肪族、芳香族もしくは複素環式芳香族環構造を随意に形成してもよい。2個の置換基 R の環形成は、基 R がフェニル基である場合には、スピロ構造、たとえば、スピロビフルオレンもしくはスピロビフルオレン誘導体を形成する。

【0055】

本発明のさらに好ましい1態様では、 R^1 は、出現毎に同一であるか異なり、H、D、F、CN、1~10個のC原子を有する、好ましくは、1、2、3もしくは4個のC原子を有する脂肪族炭化水素基または5~30個の芳香族環原子を有する、好ましくは、5~24個の芳香族環原子を有する、特に、好ましくは、5~13個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり、夫々、1~4個の炭素原子を有する一以上のアルキル基により置換されてよいが、好ましくは、置換されない。

10

【0056】

本発明による化合物が、芳香族もしくは複素環式芳香族基 R もしくは R^1 はまたは Ar もしくは Ar^1 により置換される場合には、これらは、好ましくは、互いに直接縮合した2個を超える芳香族6員環を有するアリールもしくはヘテロアリール基を含まない。置換基は、特に好ましくは、互いに直接縮合した6員環を有するアリールもしくはヘテロアリール基を絶対に含まない。この選好は、このような構造の低い三重項エネルギーに基づいている。しかしながら、本発明にしたがって、適切でもある互いに直接縮合した2個を超える芳香族6員環を有する縮合アリール基は、フェナントレンとトリフェニレンである。というのは、これらは、また、高い三重項準位を有するからである。

20

【0057】

上記示された選好は、個々にまたは一緒に出現してよい。上記示された選好は、好ましくは、一緒に出現する。

【0058】

したがって、好ましいのは、以下である上記言及した式(1)、(2)、(1a)、(1b)、(2a)および(2b)の化合物であり；

X は、出現毎に同一であるか異なり、 CR または N であり、少なくとも2個の基 X は、 N でありおよび任意の残りの基 X は、 CR 、特に、 CH であり；

Y^1 、 Y^2 は、出現毎に同一であるか異なり、 O 、 NR (ここで、窒素に結合する基 R は、 H ではない。) または S であり、好ましくは、少なくとも一つの基 Y^1 および/または Y^2 は、 NR であり、ここで、式(2)、(2a)および(2b)における Y^1 は、 O または S であり；

30

Y^3 は、 O 、 NR (ここで、窒素に結合する基 R は、 H ではない。) または CR_2 であり；

L は、出現毎に同一であるか異なり、単結合または1以上の基 R により置換されてよいが、好ましくは、置換されない5~24個の芳香族環原子を有する、特に、6~12個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり；

Ar は、出現毎に同一であるか異なり、1以上の基 R により置換されてもよいが、好ましくは、置換されない6~24個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり；

40

n は、式(1a)、(1b)、(2a)もしくは(2b)において、出現毎に同一であるか異なり、0、1、2または3、好ましくは、0、1または2であり；

m は、式(1a)、(1b)、(2a)もしくは(2b)において、出現毎に同一であるか異なり、0、1または2、好ましくは、0または1であり；

o は、式(1a)、(1b)、(2a)もしくは(2b)において、0または1であり；

R は、出現毎に同一であるか異なり、H、D、F、CN、 $N(Ar^1)_2$ 、 $C(=O)Ar^1$ 、 $P(=O)(Ar^1)_2$ 、1~10個のC原子を有する直鎖アルキルもしくはアルコキシ基、3~10個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキルもしくはアルコキシ基、2~10個のC原子を有するアルケニル基(夫々、1以上の基 R^1 により置換されて

50

もよく、1以上の隣接しない CH_2 基は、Oで置き代えられてよく、ここで、1以上のH原子は、DもしくはFで置き代えられてよい。)または、各場合に1以上の基 R^1 により置換されてよい5~24個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、または、1以上の基 R^1 により置換されてよい5~25個の芳香族環原子を有するアラキルもしくはヘテロアラキル基より成る基から選ばれ;同じ炭素原子もしくは隣接する炭素原子に結合する2個の置換基Rは、1以上の基 R^1 により置換されてよいモノあるいはポリ環状の脂肪族、芳香族もしくは複素環式芳香族環構造を随意に形成してもよく;
 R^1 は、上記のとおり定義される。

【0059】

特に好ましいのは、以下である上記言及した式(1)、(2)、(1a)、(1b)、(2a)および(2b)の化合物であり;

Xは、Nであり;

Y^1 、 Y^2 は、出現毎に同一であるか異なり、OまたはNR(ここで、窒素原子に結合する基Rは、Hではない。)であり;好ましくは、 Y^1 は、Oであり、 Y^2 は、NRであるか、または Y^1 は、NRであり、 Y^2 は、Oであるか、または Y^1 と Y^2 は、NRであり;

Y^3 は、NRで(ここで、窒素原子に結合する基Rは、Hではない。)または CR_2 であり;

Lは、単結合であり;

Arは、出現毎に同一であるか異なり、1以上の基Rにより置換されてもよいが、好ましくは、置換されない6~18個の芳香族環原子を有する、好ましくは、6~13個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり;

nは、式(1a)~(2b)において、出現毎に同一であるか異なり、0または1であり;

mは、式(1a)~(2b)において、0であり;

oは、式(1a)~(2b)において、0であり;

Rは、出現毎に同一であるか異なり、H、D、F、CN、 $\text{N}(\text{Ar}^1)_2$ 、1~8個のC原子を有する、好ましくは、1、2、3もしくは4個のC原子を有する直鎖アルキル基、3~8個のC原子を有する、好ましくは、3もしくは4個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル基、2~8個のC原子を有する、好ましくは、2、3もしくは4個のC原子を有するアルケニル基(夫々、1以上の基 R^1 により置換されてもよいが、好ましくは、置換されない。)または、各場合に1以上の非芳香族基 R^1 により置換されてよいが、好ましくは、置換されない6~24個の芳香族環原子を有する、好ましくは、6~18個の芳香族環原子を有する、特に好ましくは、6~12個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造より成る基から選ばれ;同じ炭素原子もしくは隣接する炭素原子に結合する2個の置換基Rは、1以上の基 R^1 により置換されてよいが、好ましくは、置換されないモノあるいはポリ環状の脂肪族、芳香族もしくは複素環式芳香族環構造を随意に形成してもよく;

R^1 は、上記のとおり定義される。

【0060】

Y^1 と Y^2 を含む基は、 Y^1 もしくは $\text{Y}^2 = \text{O}$ に対して、ジベンゾフラン誘導体、 Y^1 もしくは $\text{Y}^2 = \text{NR}$ に対して、カルバゾール誘導体、 Y^1 もしくは $\text{Y}^2 = \text{S}$ に対して、ジベンゾチオフェン誘導体、 Y^1 もしくは $\text{Y}^2 = \text{C}(\text{R})_2$ に対して、フルオレン誘導体である。 CR_2 基中の2個の基Rが互いに環を形成する場合には、そこからスピロ構造を形成し、たとえば、基Rがフェニルである場合は、スピロビフルオレン誘導体を形成する。

【0061】

これらの基は、種々の位置で互いに結合してよく、種々の位置で置換されてよい。個々の基の位置の番号付けは、式(4)と(5)により、以下に図示され、ここで、本発明による化合物は、互いに基Lを介して式(4)と(5)の結合を通じて生じる。

【0062】

10

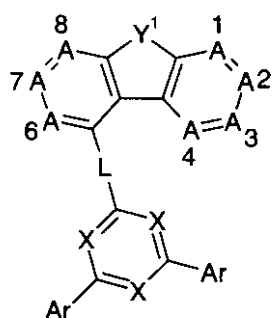
20

30

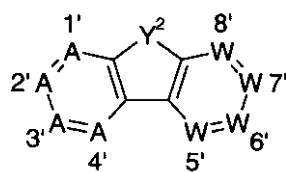
40

50

【化 1 1】



式 (4)



式 (5)

10

【 0 0 6 3】

式 (1) の化合物に対して、結合1-1'、1-2'、1-3'、1-4'、2-1'、2-2'、2-3'、2-4'、3-1'、3-2'、3-3'、3-4'、4-1'、4-2'、4-3'および4-4'が、それ故に適している。ここで、結合1-2'は、たとえば、式 (4) の基と式 (5) の基が、夫々、1-位と2'-位を介して基Lを介して互いに結合することを意味する。

【 0 0 6 4】

式 (2) の化合物に対して、結合6-1'、6-2'、6-3'、6-4'、7-1'、7-2'、7-3'、7-4'、8-1'、8-2'、8-3'および8-4'が、適している。

20

【 0 0 6 5】

原則として、上記示された全ての結合パターンが、記号と添え字に対する上記示された選好と組み合わせることができる。好ましい結合パターンは、 Y^1 と Y^2 の選択に依存する。

【 0 0 6 6】

Y^1 が、O、NRまたはSである場合には、式 (4) の基は、好ましくは、式 (1) 中の1-位、2-位もしくは3-位を介してまたは式 (2) 中の8-位を介して結合する。結合1-1'、1-2'、1-3'、1-4'、2-1'、2-2'、2-3'、2-4'、3-1'、3-2'、3-3'および3-4'は、それゆえ、 $Y^1 = O$ 、NRまたはSである式 (1) の化合物に対して好ましく、結合8-1'、8-2'、8-3'および8-4'は、それゆえ、式 (2) の化合物に対して好ましい。

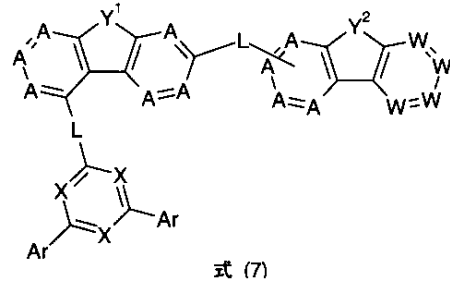
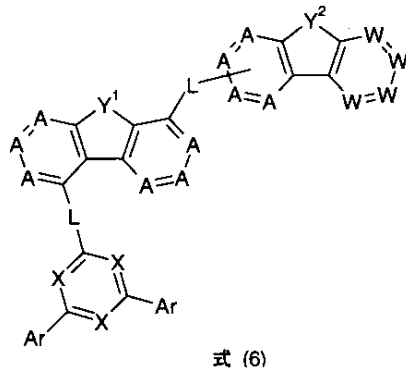
30

【 0 0 6 7】

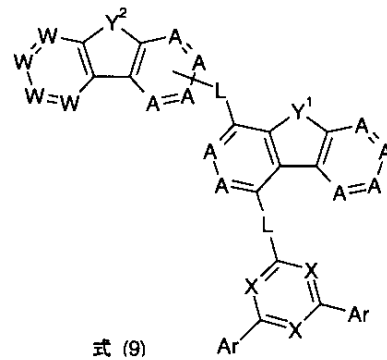
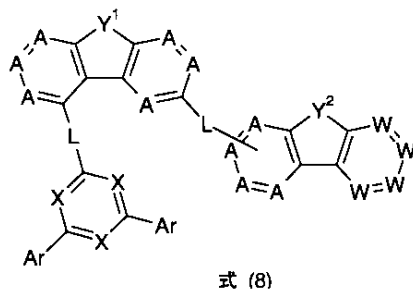
したがって、本発明による化合物の好ましい態様は、以下の式 (6)、(7)、(8) および (9) の化合物であり：

【 0 0 6 8】

【化 1 2】



10



20

【0069】

式中、 Y^1 は、O、NRまたはSであり、使用されるその他の記号は、上記所与の意味を有し、Aは、好ましくは、出現毎に同一であるか異なり、CRであり、Wは、好ましくは、出現毎に同一であるか異なり、CRであるか、または2個の基Wは、上記示される式(3)の基であり、その他の基WはCRである。特に好ましくは、AとWは、出現毎に同一であるか異なり、CRである。

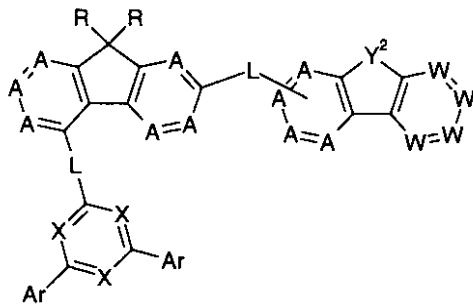
【0070】

Y^1 が、 $C(R)_2$ である場合には、式(4)の基は、好ましくは、式(1)中の2-位を介して、または、式(2)中の7-位を介して結合する。したがって、結合2-1'、2-2'、2-3'および2-4'は、 $Y^1 = C(R)_2$ である式(1)の化合物に対して好ましく、結合7-1'、7-2'、7-3'および7-4'は、式(2)の化合物に対して好ましい。 $Y = C(R)_2$ に対しては、式(2)の化合物ではなく、式(1)の化合物が、特に、関与される。したがって、 $Y^1 = C(R)_2$ に対する本発明による化合物の好ましい1態様は、以下の式(10)の化合物であり、

【0071】

30

【化 1 3】



式 (10)

10

【 0 0 7 2】

式中、使用される記号は、上記所与の意味を有し、AとWは、好ましくは、出現毎に同一であるか異なり、CRである。

【 0 0 7 3】

Y^2 が、Oである場合には、式(5)の基は、好ましくは、1'-、3'-もしくは4'-位を介して結合する。結合1-1'、1-3'、1-4'、2-1'、2-3'、2-4'、3-1'、3-3'、3-4'、4-1'、4-3'および4-4'は、それゆえ、式(1)の化合物に対して好ましい。結合6-1'、6-3'、6-4'、7-1'、7-3'、7-4'、8-1'、8-3'および8-4'は、式(2)の化合物に対して好ましい。

20

【 0 0 7 4】

Y^2 が、NRである場合には、式(5)の基は、好ましくは、2'-もしくは3'-位を介して結合する。結合1-2'、1-3'、2-2'、2-3'、3-2'、3-3'、4-2'および4-3'は、それゆえ、式(1)の化合物に対して好ましい。結合6-2'、6-3'、7-2'、7-3'、8-2'および8-3'は、式(2)の化合物に対して好ましい。

【 0 0 7 5】

Y^2 が、Sである場合には、式(5)の基は、好ましくは、1-、2-、3-もしくは4-位を介して結合する。結合1-1'、1-2'、1-3'、1-4'、2-1'、2-2'、2-3'、2-4'、3-1'、3-2'、3-3'、3-4'、4-1'、4-2'、4-3'および4-4'は、それゆえ、式(1)の化合物に対して好ましい。結合6-1'、6-2'、6-3'、6-4'、7-1'、7-2'、7-3'、7-4'、8-1'、8-2'、8-3'および8-4'は、式(2)の化合物に対して好ましい。

30

【 0 0 7 6】

Y^2 が、 $C(R)_2$ である場合には、式(5)の基は、好ましくは、1'-、2'-もしくは4'-位、特に好ましくは、2'-もしくは4'-位を介して結合する。結合1-1'、2-1'、3-1'、4-1'、1-2'、2-2'、3-2'、4-2'、1-4'、2-4'、3-4'および4-4'は、それゆえ、式(1)の化合物に対して好ましく、結合6-1'、7-1'、8-1'、6-2'、7-2'、8-2'、6-4'、7-4'および8-4'は、式(2)の化合物に対して好ましい。

【 0 0 7 7】

上記示された基 Y^2 に対する正確な好ましい結合パターンは、上記記載されたとおり、各場合に、使用される基 Y^1 に依存する。

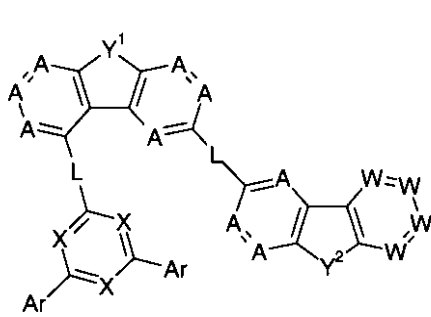
40

【 0 0 7 8】

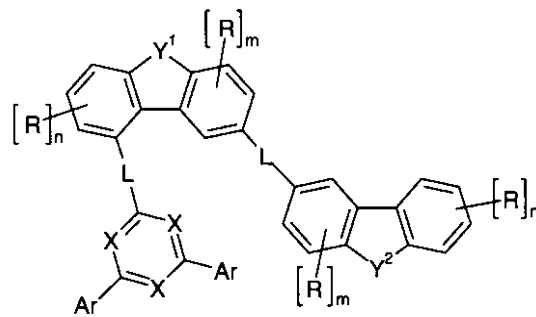
好ましいのは、 Y^2 が、NR、OもしくはSであり、式(5)の基が、3'-位を介して結合する式(8)の化合物であり、以下の式(8a)にしたがい、好ましくは、以下の式(8b)にしたがい：

【 0 0 7 9】

【化14】



式 (8a)



式 (8b)

10

【0080】

式中、 Y^1 は、O、NRまたはSであり、 Y^2 は、NR、OまたはSであり、使用されるその他の記号と添え字は、上記所与の意味、特に、好ましいとされ、特に好ましいとされる所与の意味を有する。

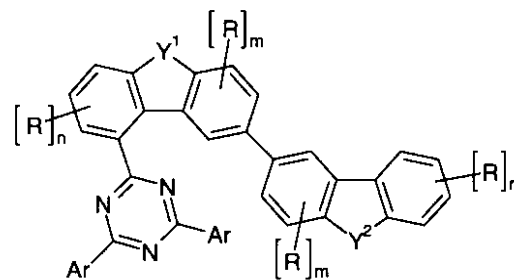
【0081】

したがって、特に好ましいのは、以下の式(8c)の化合物であり：

【0082】

【化15】

20



式 (8c)

30

【0083】

式中、使用される記号と添え字には、以下が適用される；

Y^1 、 Y^2 は、出現毎に同一であるか異なり、OまたはNR（ここで、窒素に結合する基Rは、Hではない。）またはSであるが、ただし、少なくとも一つの基 Y^1 および/または Y^2 は、NRであり、好ましくは、OもしくはNRであり、ここで、窒素原子に結合する基Rは、Hではなく；

40

Arは、出現毎に同一であるか異なり、1以上の基Rにより置換されてもよいが、好ましくは、置換されない6~24個の芳香族環原子を有する、好ましくは、6~18個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり；

nは、出現毎に同一であるか異なり、0、1、2または3、好ましくは、0、1または2、特に好ましくは、0または1であり；

mは、出現毎に同一であるか異なり、0、1または2であり、好ましくは、0または1、特に好ましくは、0であり；

oは、0または1、好ましくは、0であり；

Rは、出現毎に同一であるか異なり、H、D、F、CN、 $N(Ar^1)_2$ 、 $C(=O)Ar^1$ 、 $P(=O)(Ar^1)_2$ 、1~10個のC原子を有する直鎖アルキルもしくはア

50

ルコキシ基、3～10個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキルもしくはアルコキシ基、2～10個のC原子を有するアルケニル基（夫々、1以上の基 R^1 により置換されてもよく、1以上の隣接しない CH_2 基は、Oで置き換えられてよく、ここで、1以上のH原子は、DもしくはFで置き換えられてよい。）または、夫々、各場合に1以上の基 R^1 により置換されてよい5～24個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、または、1以上の基 R^1 により置換されてよい5～25個の芳香族環原子を有するアラルキルもしくはヘテロアラルキル基より成る基から選ばれ；同じ炭素原子もしくは隣接する炭素原子に結合する2個の置換基Rは、1以上の基 R^1 により置換されてよいモノあるいはポリ環状の脂肪族、芳香族もしくは複素環式芳香族環構造を随意に形成してもよく、Rは、好ましくは、出現毎に同一であるか異なり、H、D、F、CN、N(Ar¹)₂、1～8個のC原子を有する、好ましくは、1、2、3もしくは4個のC原子を有する直鎖アルキル基、3～8個のC原子を有する、好ましくは、3もしくは4個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル基、2～8個のC原子を有する、好ましくは、2、3もしくは4個のC原子を有するアルケニル基（夫々、1以上の基 R^1 により置換されてもよいが、好ましくは、置換されない。）または、各場合に1以上の非芳香族基 R^1 により置換されてよいが、好ましくは、置換されない6～24個の芳香族環原子を有する、好ましくは、6～18個の芳香族環原子を有する、特に好ましくは、6～12個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造より成る基から選ばれ；同じ炭素原子もしくは隣接する炭素原子に結合する2個の置換基Rは、1以上の基 R^1 により置換されてよいが、好ましくは、置換されないモノあるいはポリ環状の脂肪族、芳香族もしくは複素環式芳香族環構造を随意に形成してもよい。

10

20

【0084】

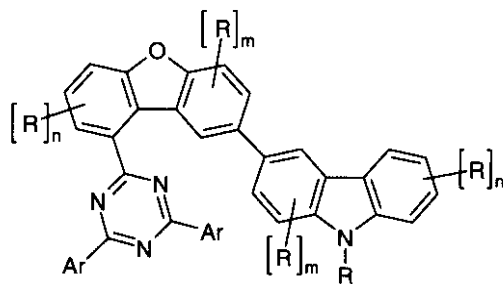
ここで、 R^1 は、上記所与の意味を有し、 Y^1 および/または Y^2 が、NRである場合には、この基Rは、好ましくは、R上の好ましい置換基として上記示されたとおりの置換基から選ばれる。

【0085】

非常に特に好ましいのは、以下の式(8d)の化合物であり：

【0086】

【化16】



式(8d)

30

【0087】

式中、使用される記号と添え字には、式(8c)の元での所与の意味を有し、窒素に結合する基Rは、各場合に1以上の基 R^1 により置換されてよい5～24個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり、好ましくは、各場合に1以上の基 R^1 により置換されてよい6～18個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造である。

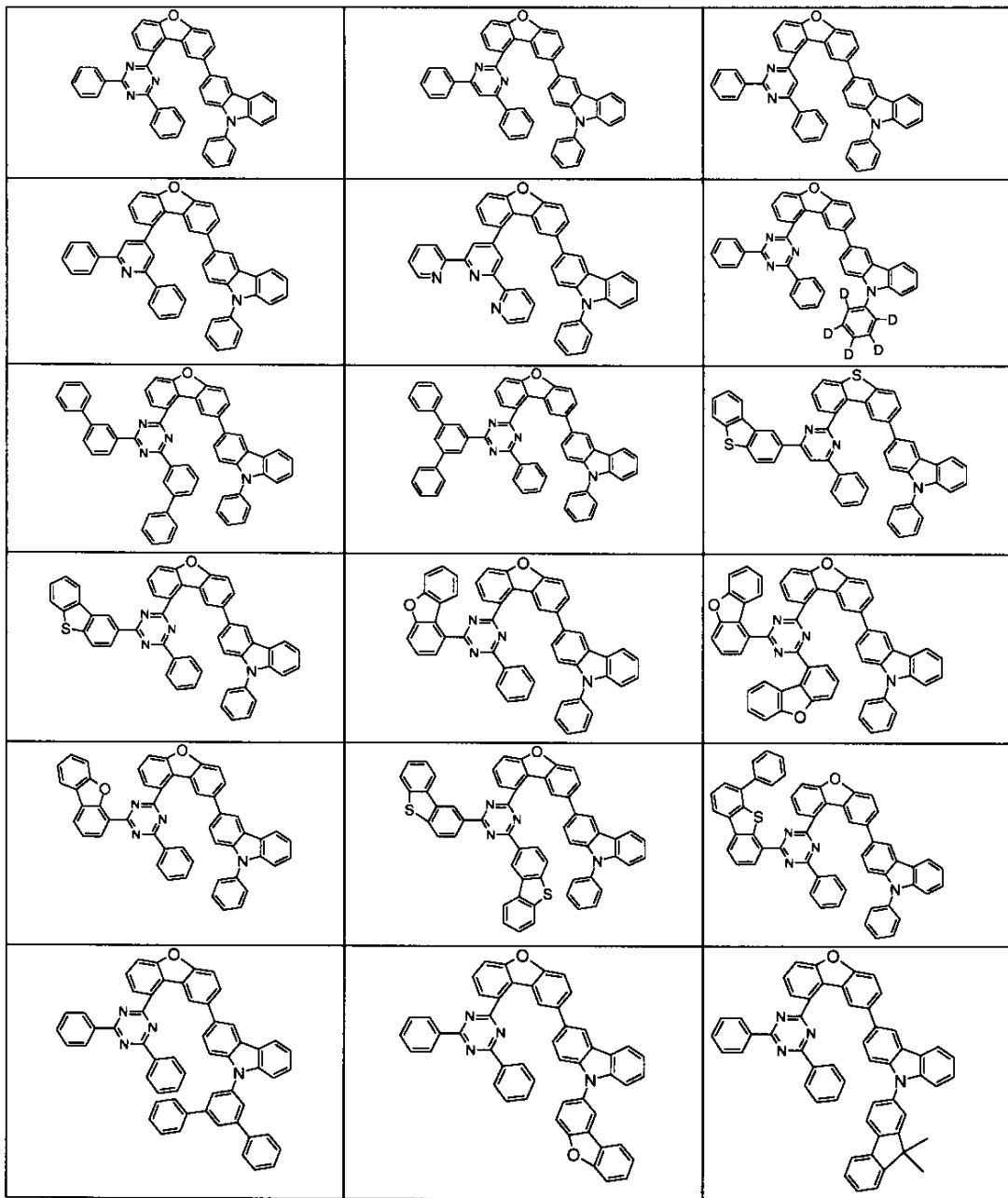
【0088】

本発明による適切な化合物の例は、以下に示される構造である。

【0089】

40

【化 17 - 1】



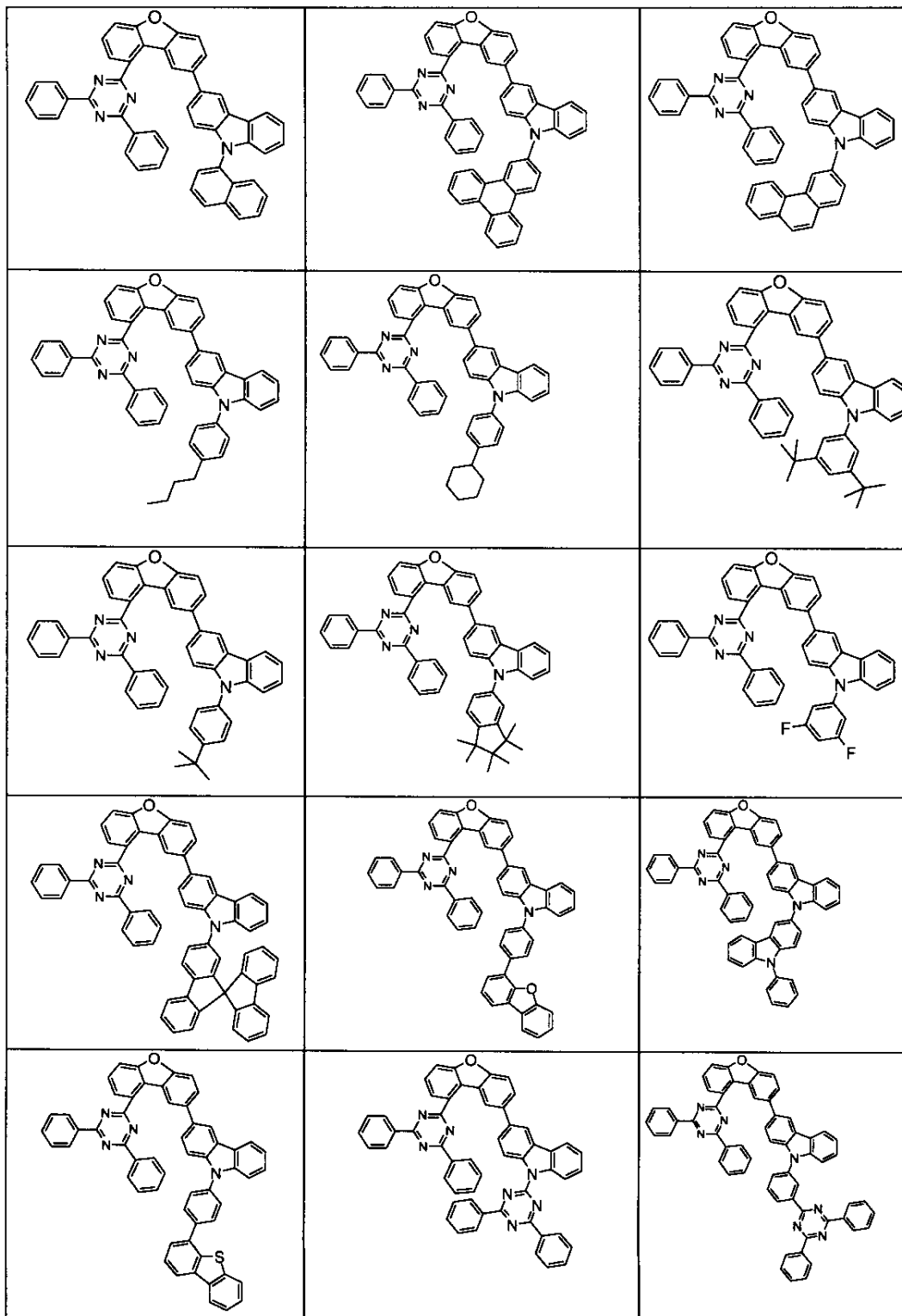
10

20

30

【 0 0 9 0 】

【化 17 - 2】



10

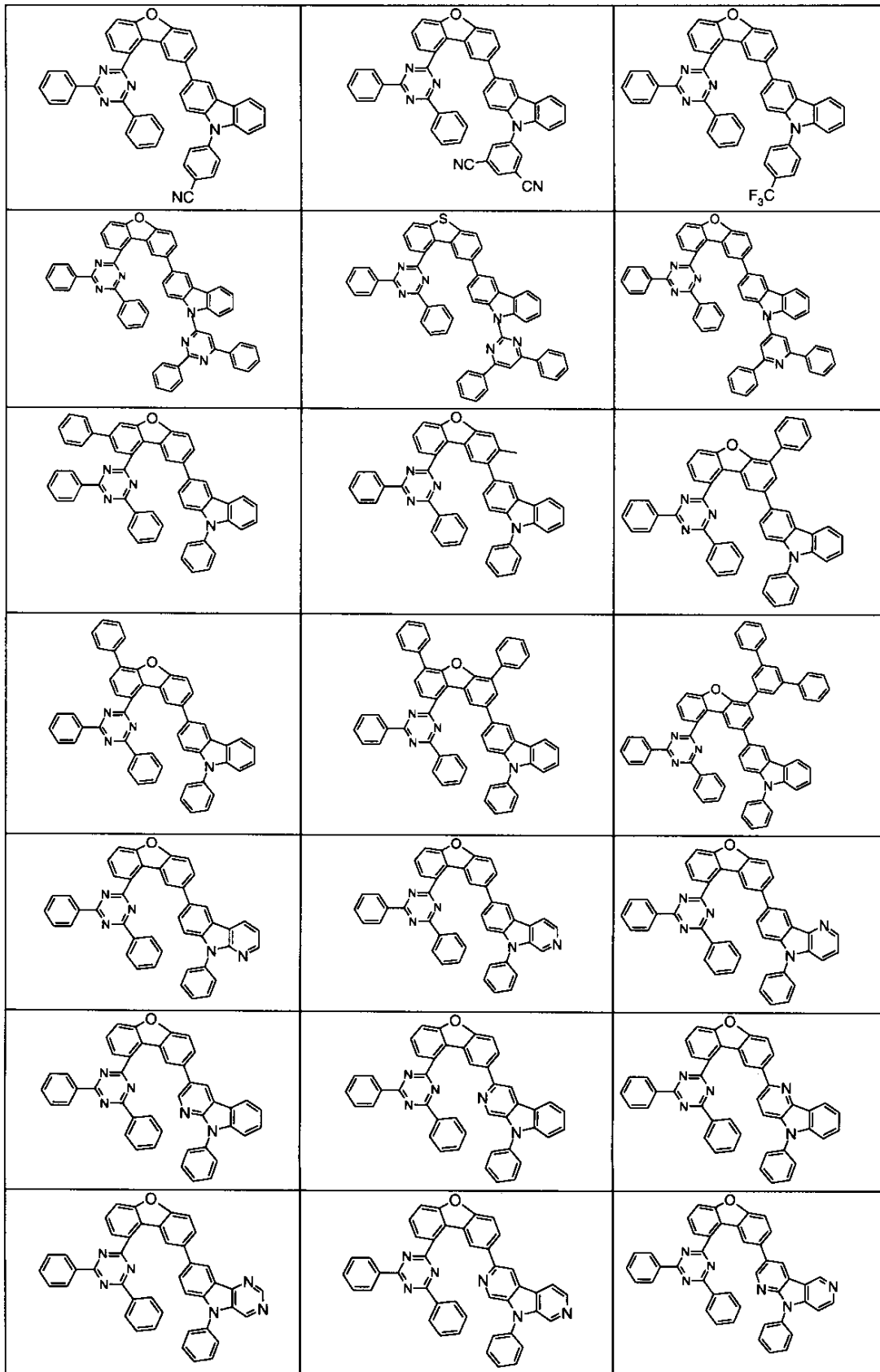
20

30

40

【 0 0 9 1 】

【化 17 - 3】



10

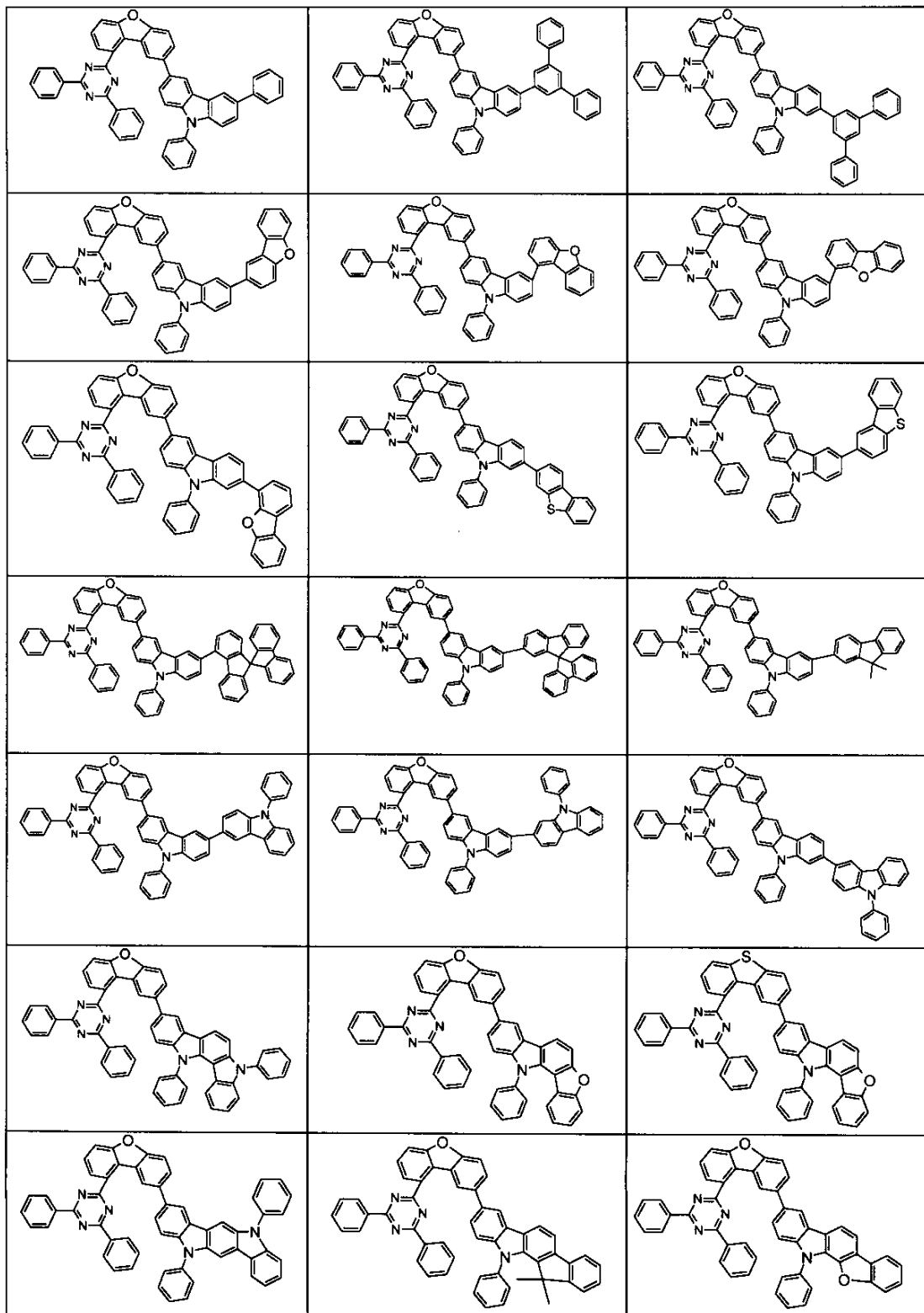
20

30

40

【 0 0 9 2】

【化 17 - 4】



10

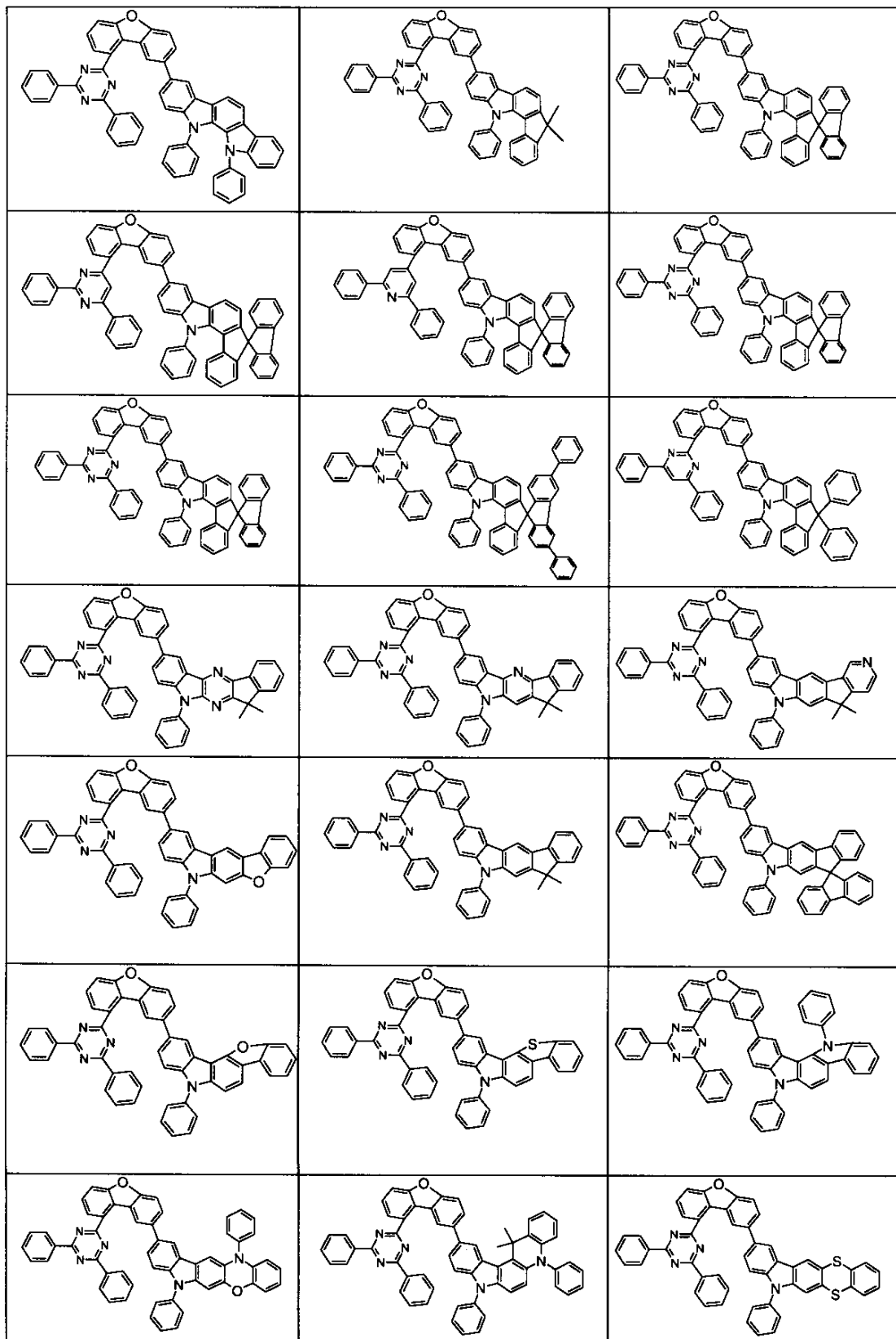
20

30

40

【 0 0 9 3 】

【化 17 - 5】



10

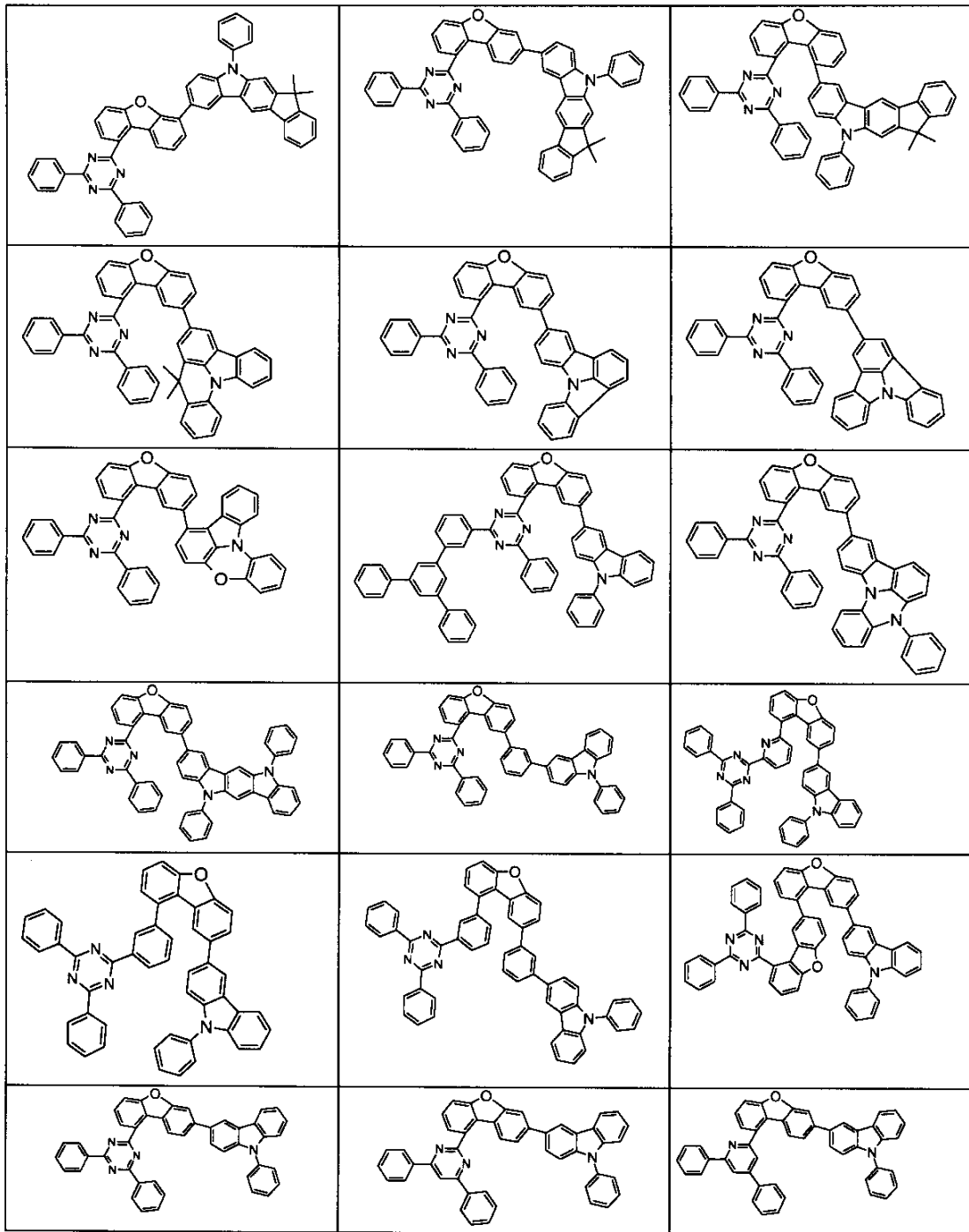
20

30

40

【 0 0 9 4 】

【化 17 - 6】



10

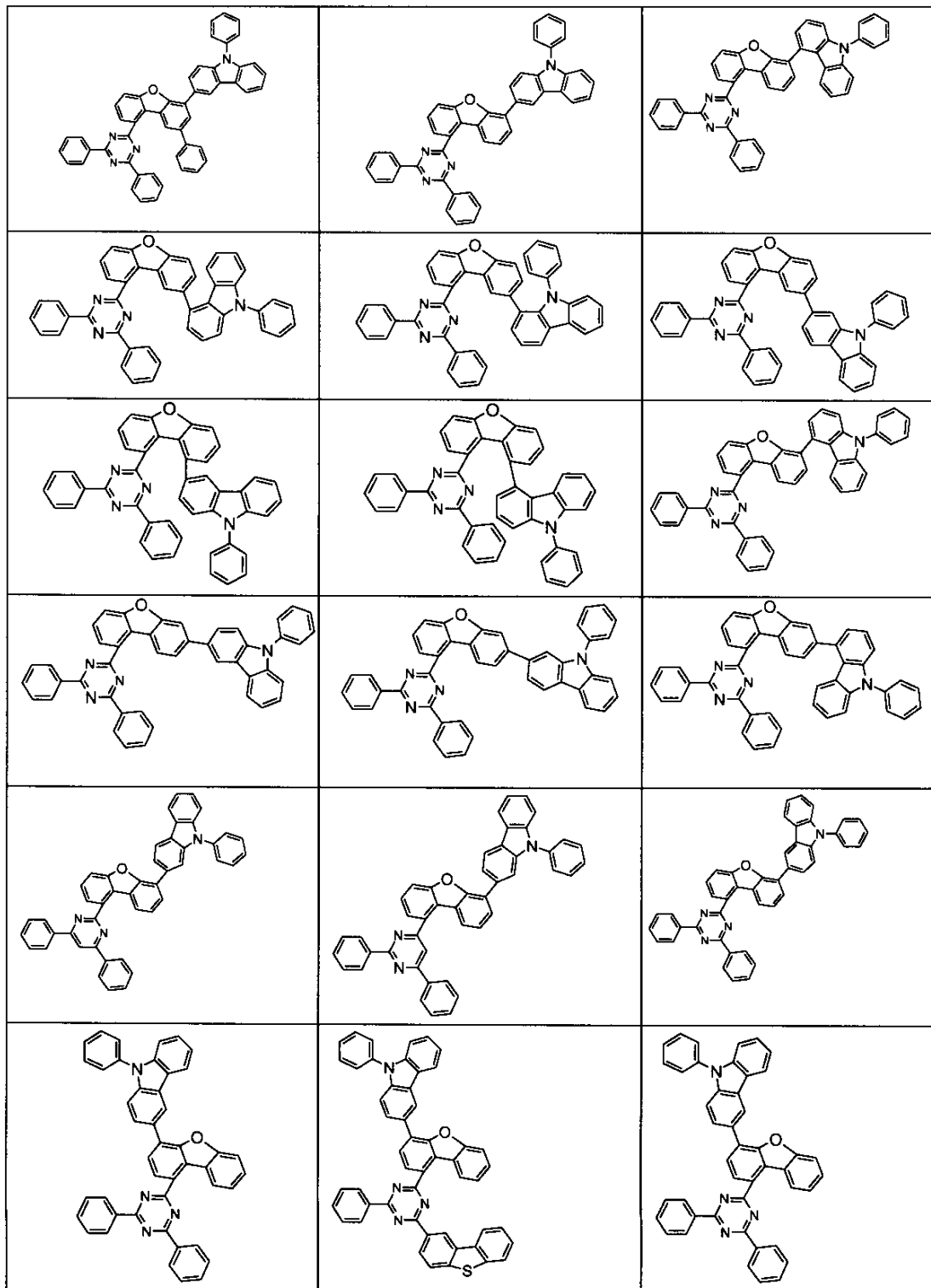
20

30

40

【 0 0 9 5 】

【化 17 - 7】



10

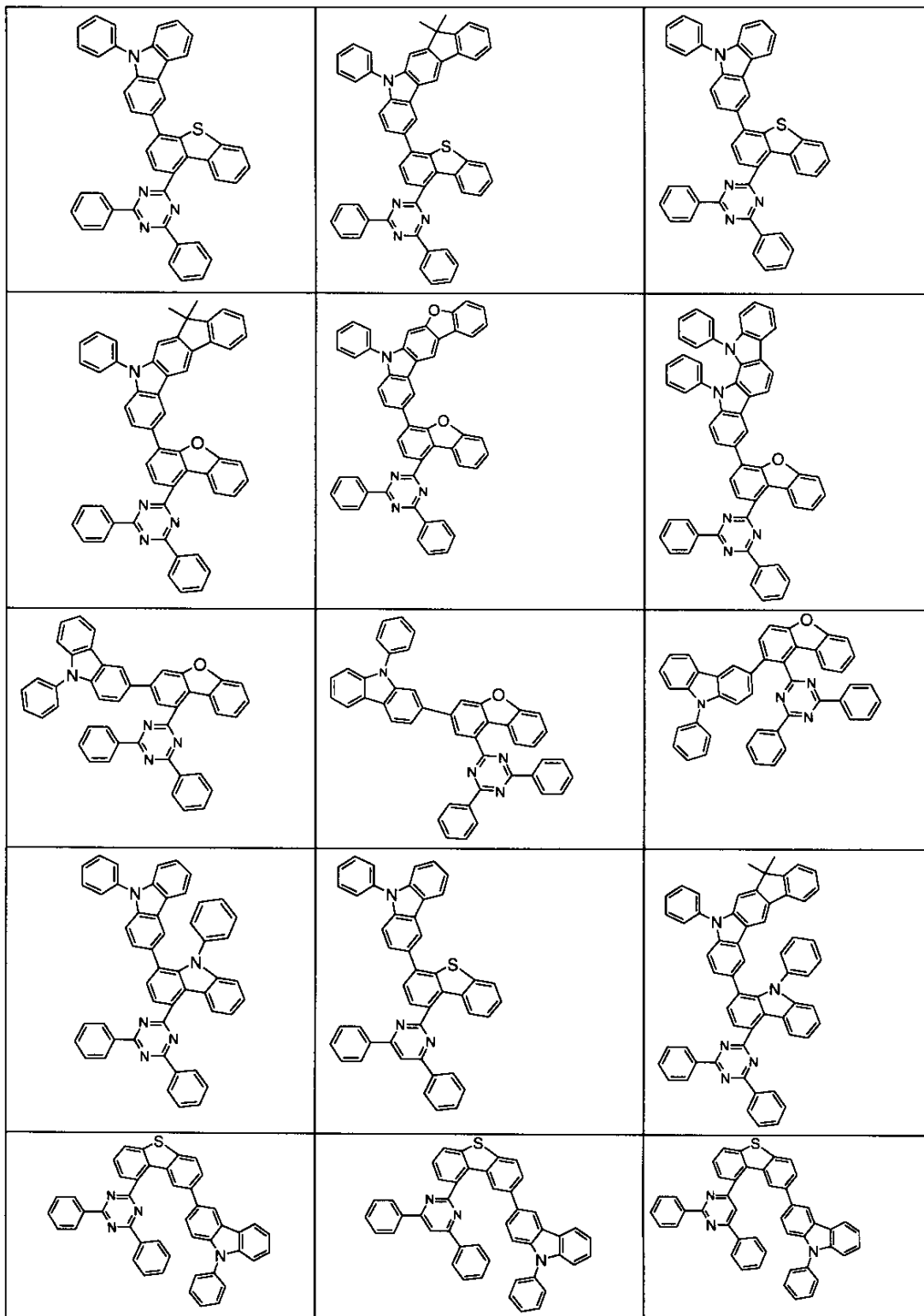
20

30

40

【 0 0 9 6 】

【化 17 - 8】



10

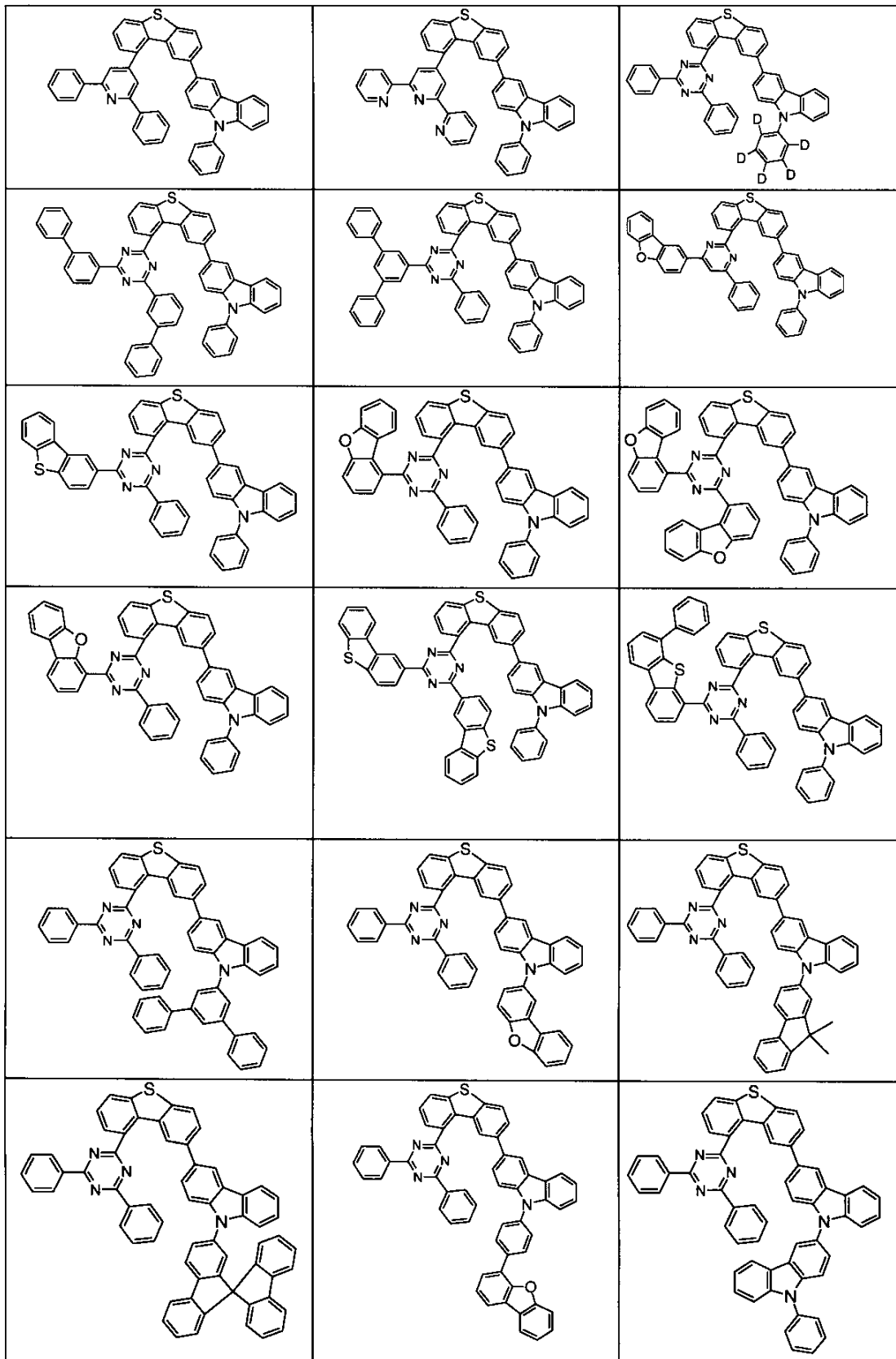
20

30

40

【 0 0 9 7 】

【化 17 - 9】



10

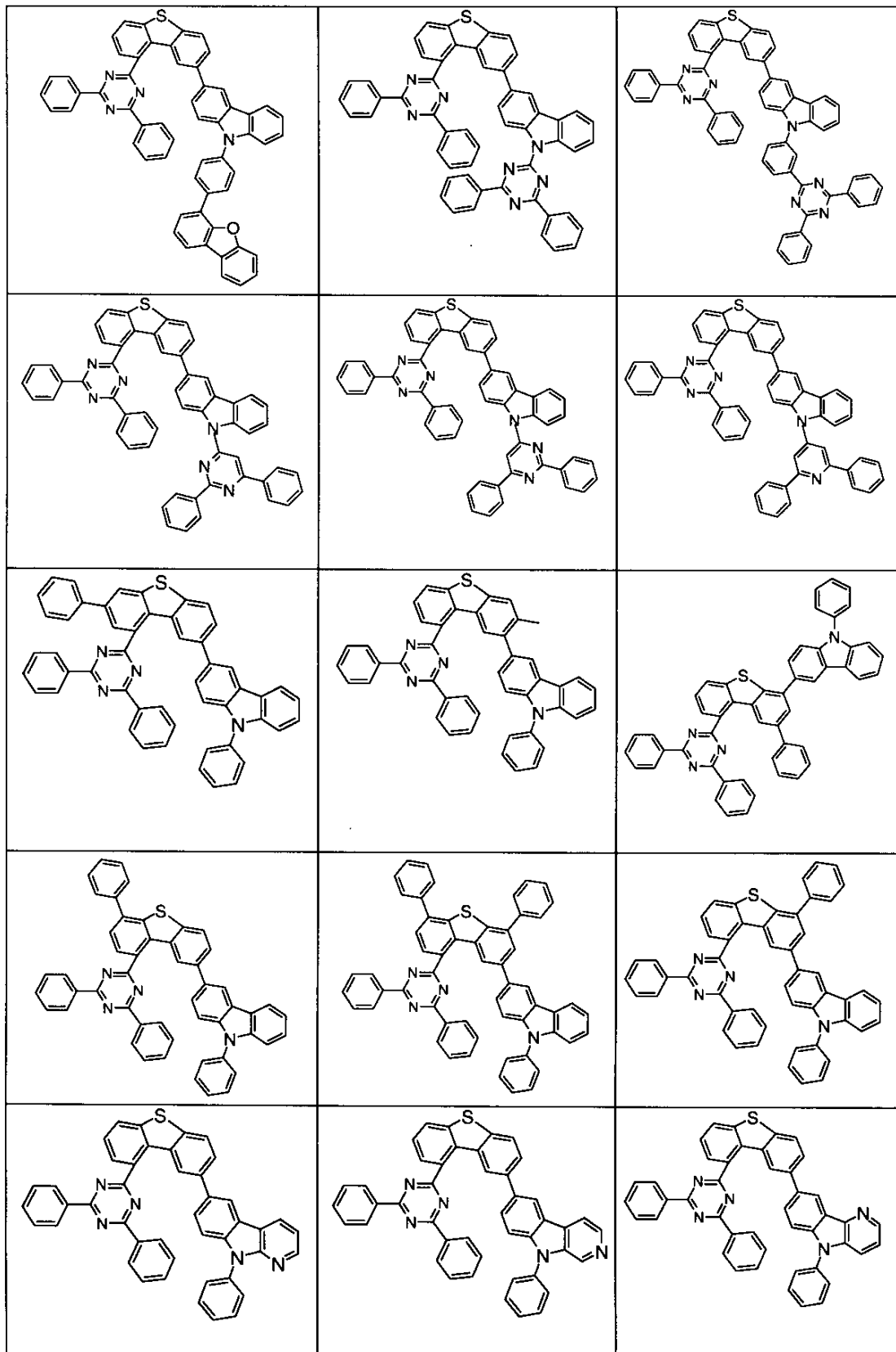
20

30

40

【 0 0 9 8 】

【化 17 - 10】



10

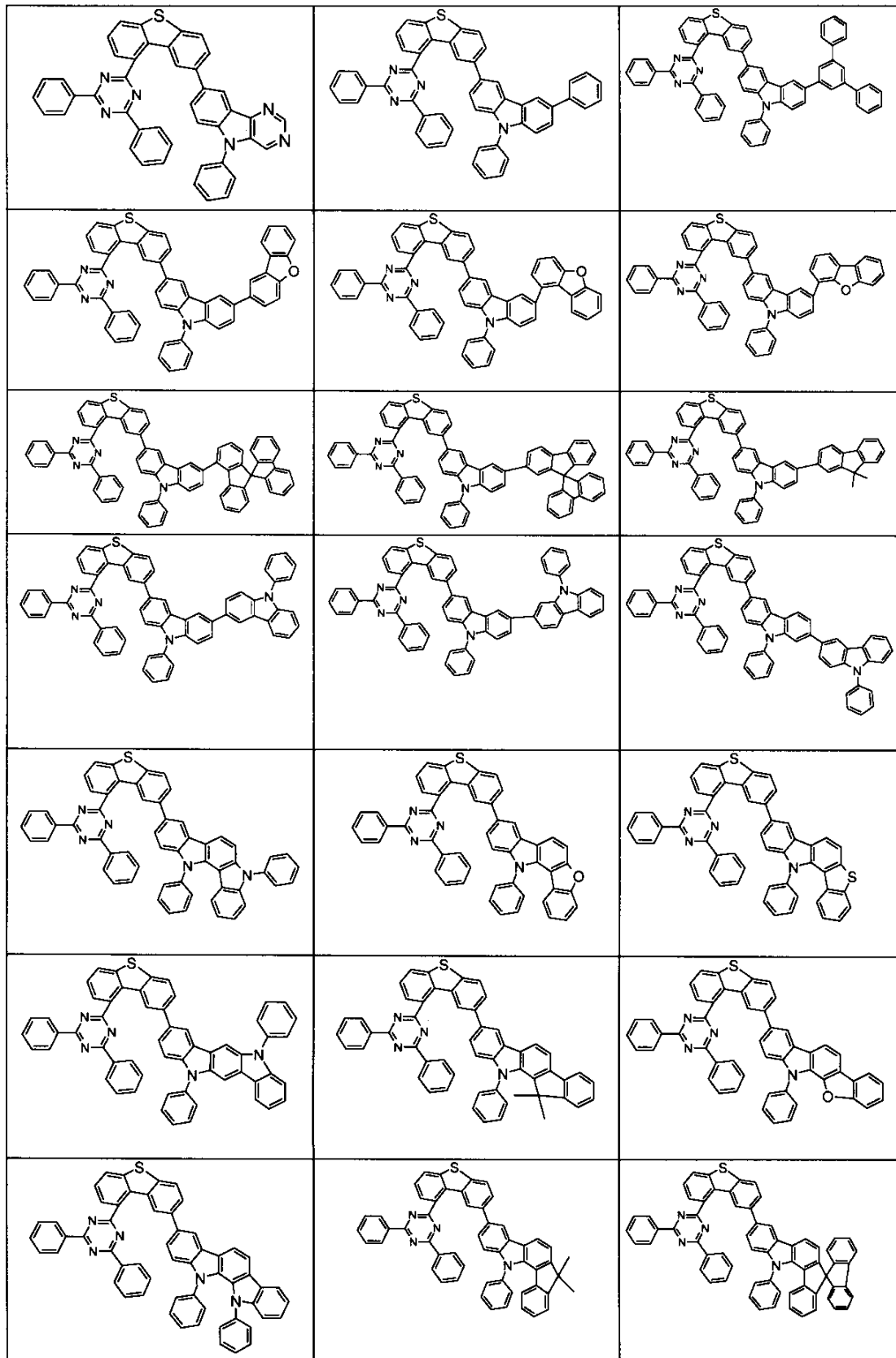
20

30

40

【 0 0 9 9 】

【化 17 - 11】



10

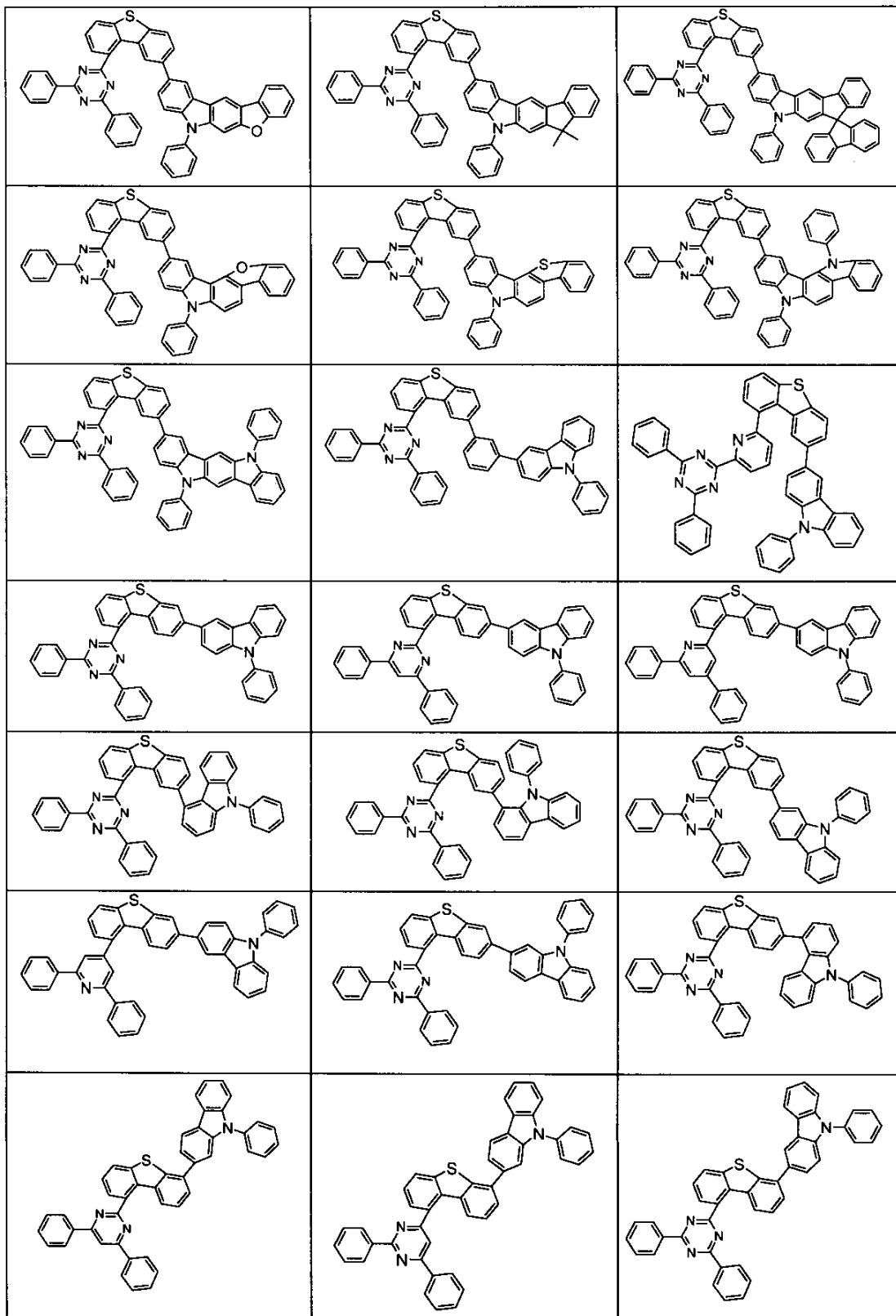
20

30

40

【 0 1 0 0 】

【化 1 7 - 1 2】



10

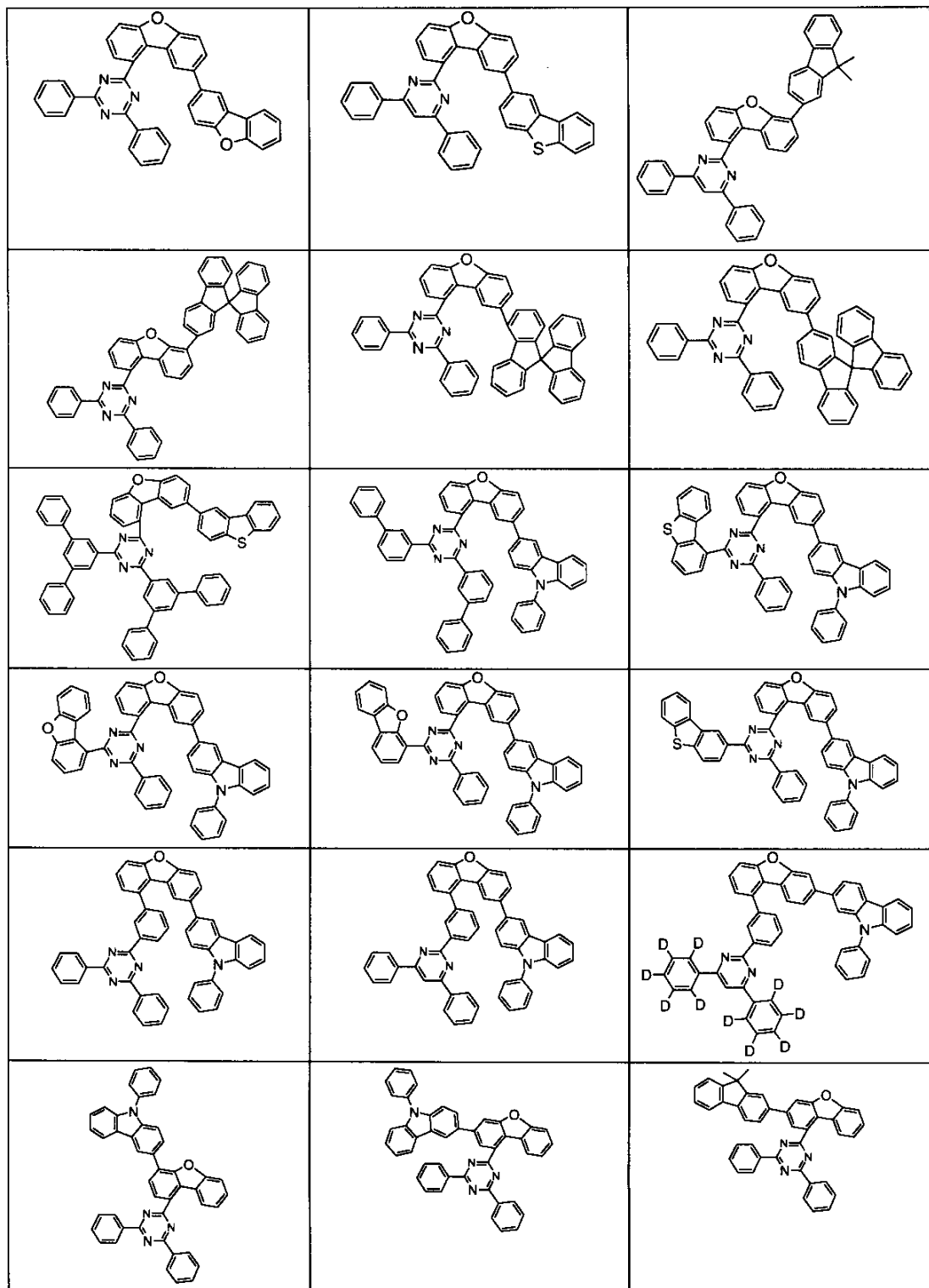
20

30

40

【 0 1 0 1】

【化 17 - 13】



10

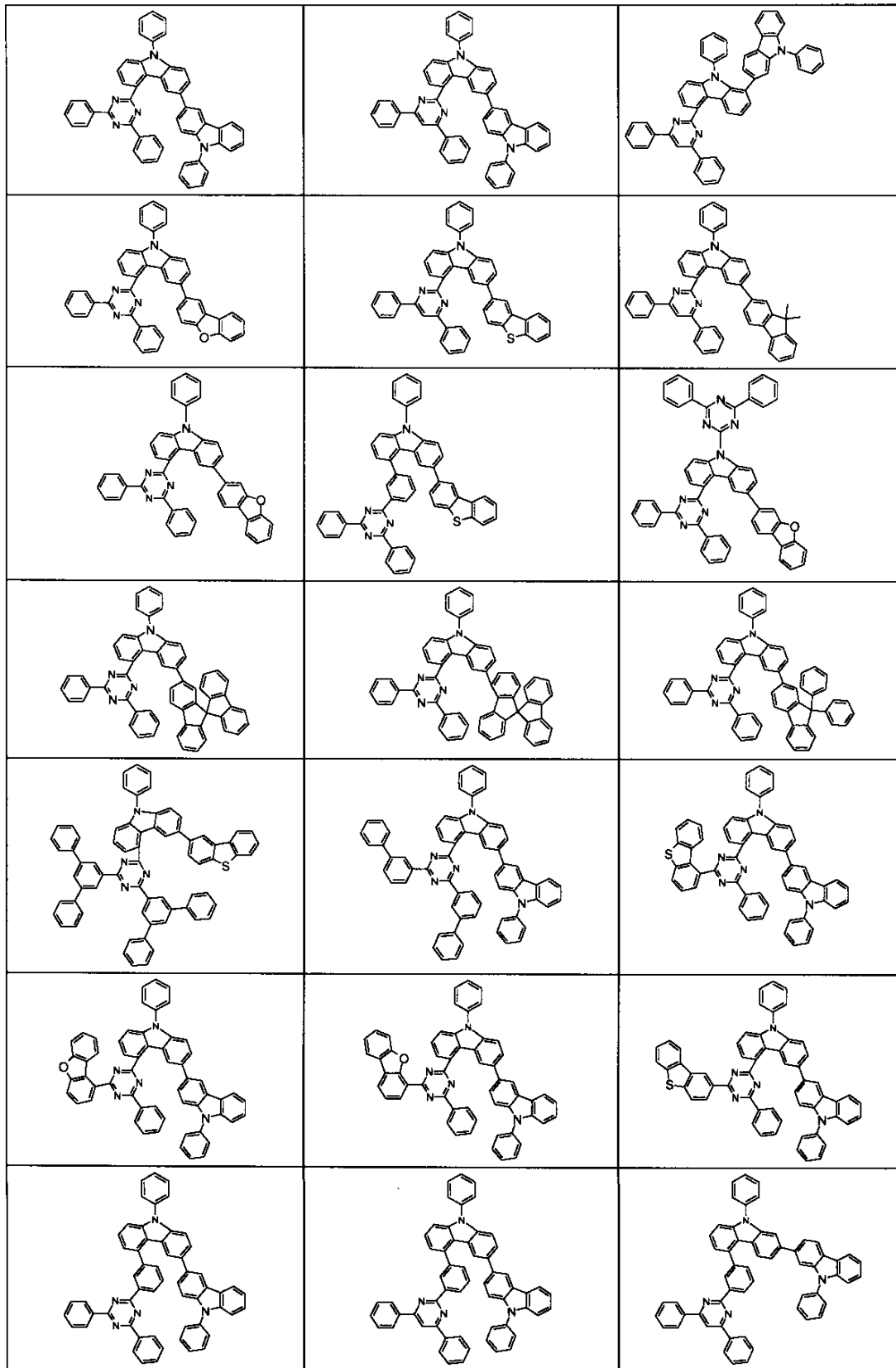
20

30

40

【 0 1 0 2 】

【化 17 - 14】



10

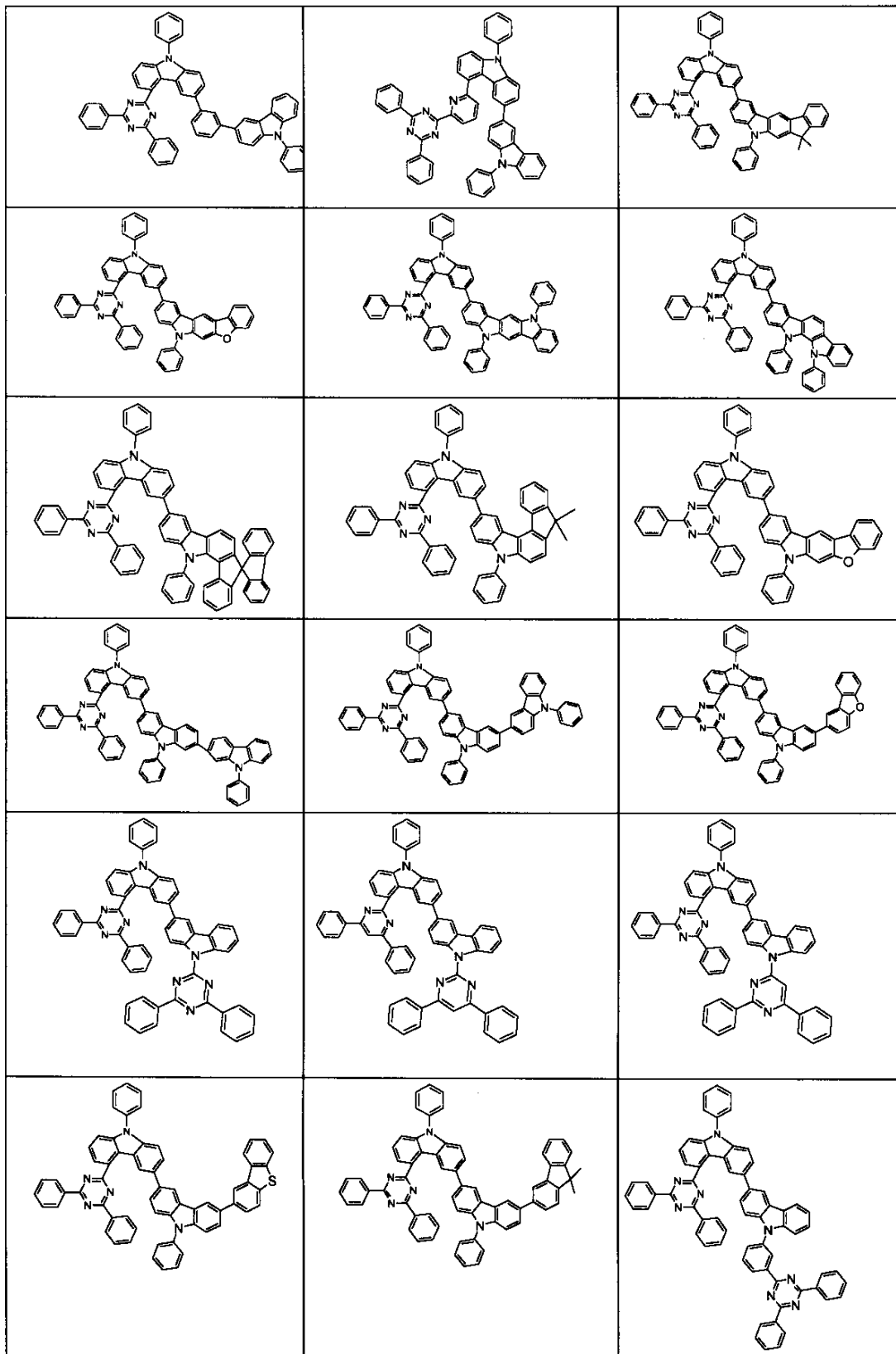
20

30

40

【 0 1 0 3 】

【化 17 - 15】



10

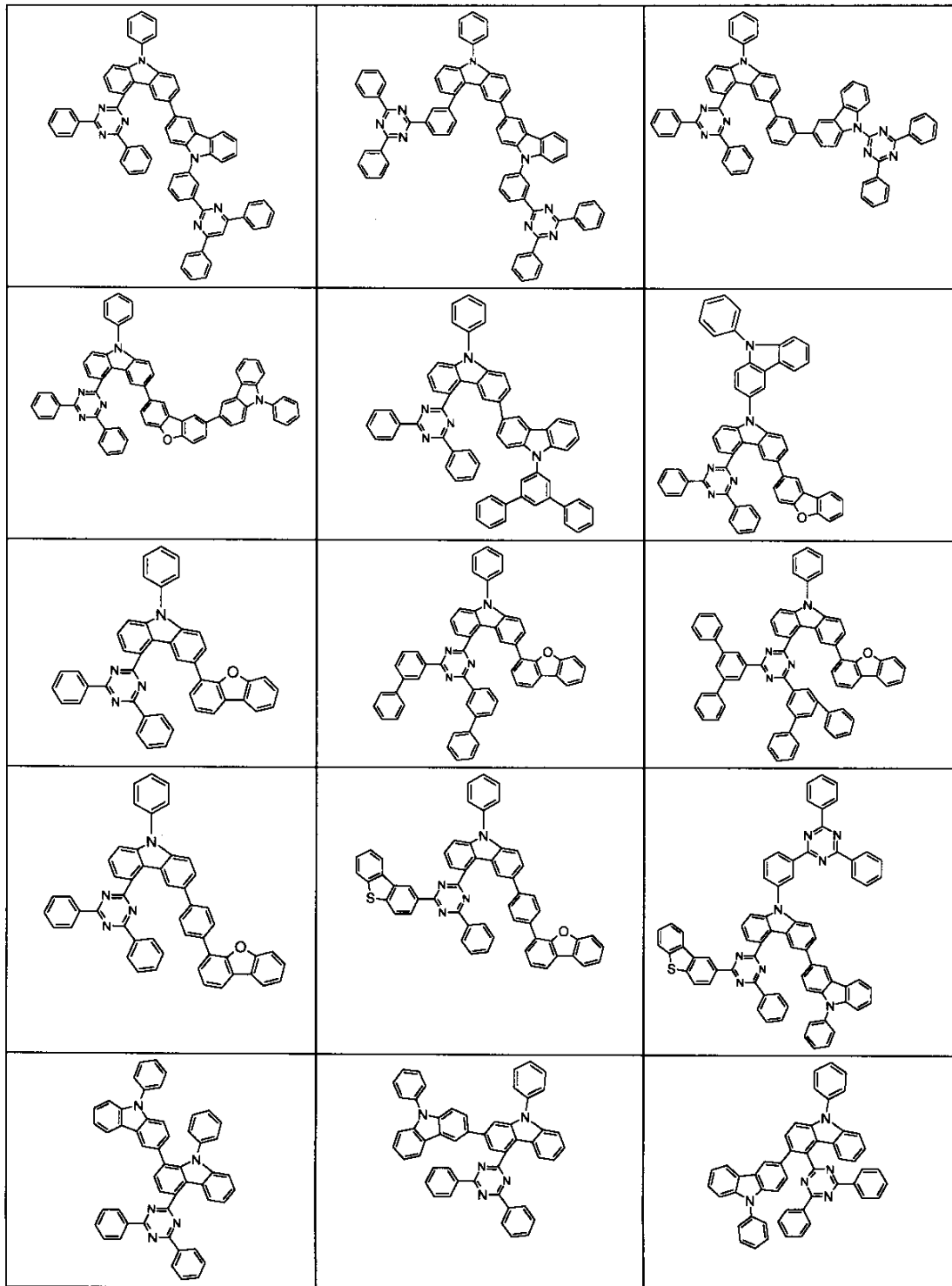
20

30

40

【 0 1 0 4 】

【化 17 - 16】



10

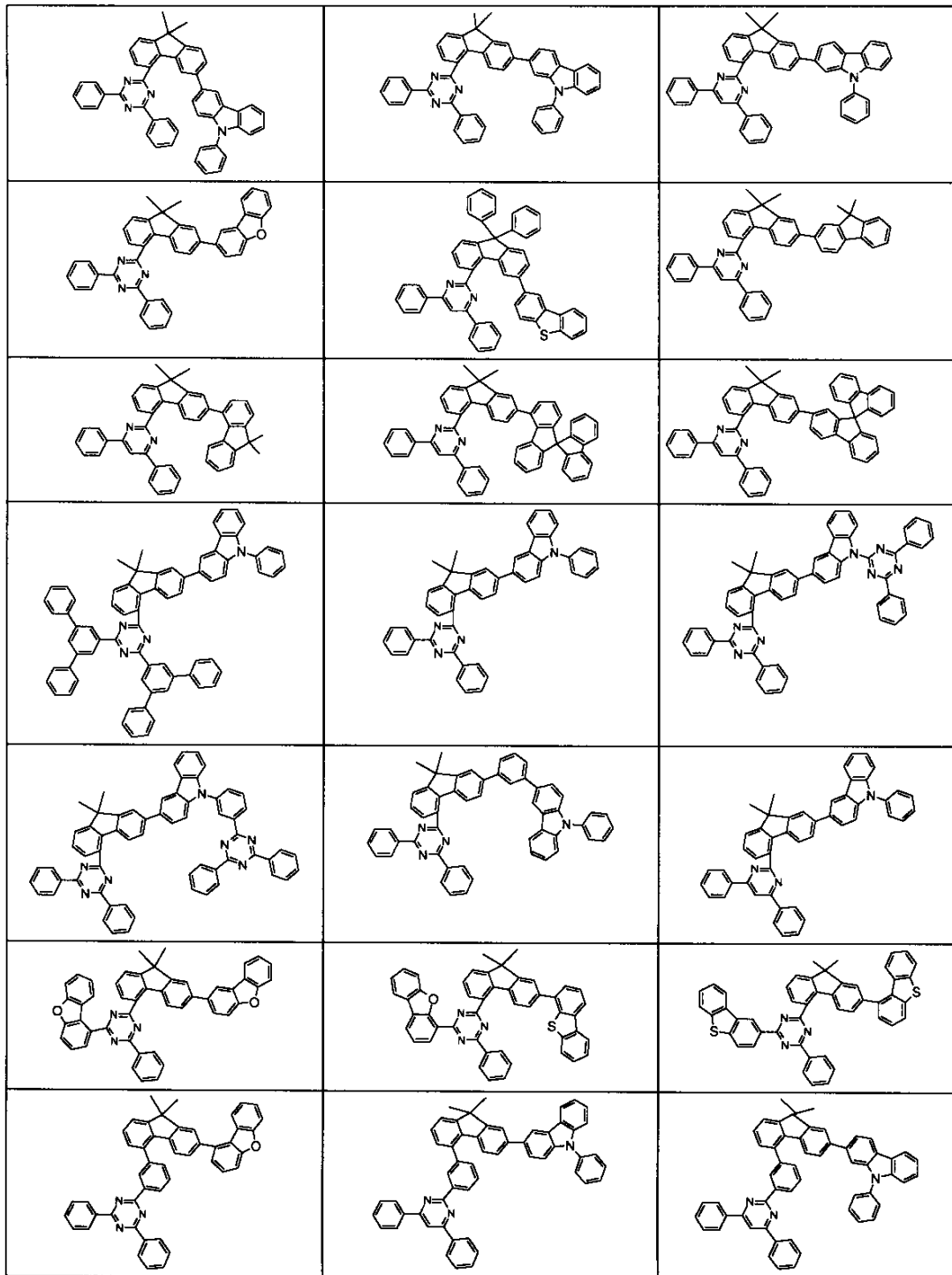
20

30

40

【 0 1 0 5 】

【化 17 - 17】



10

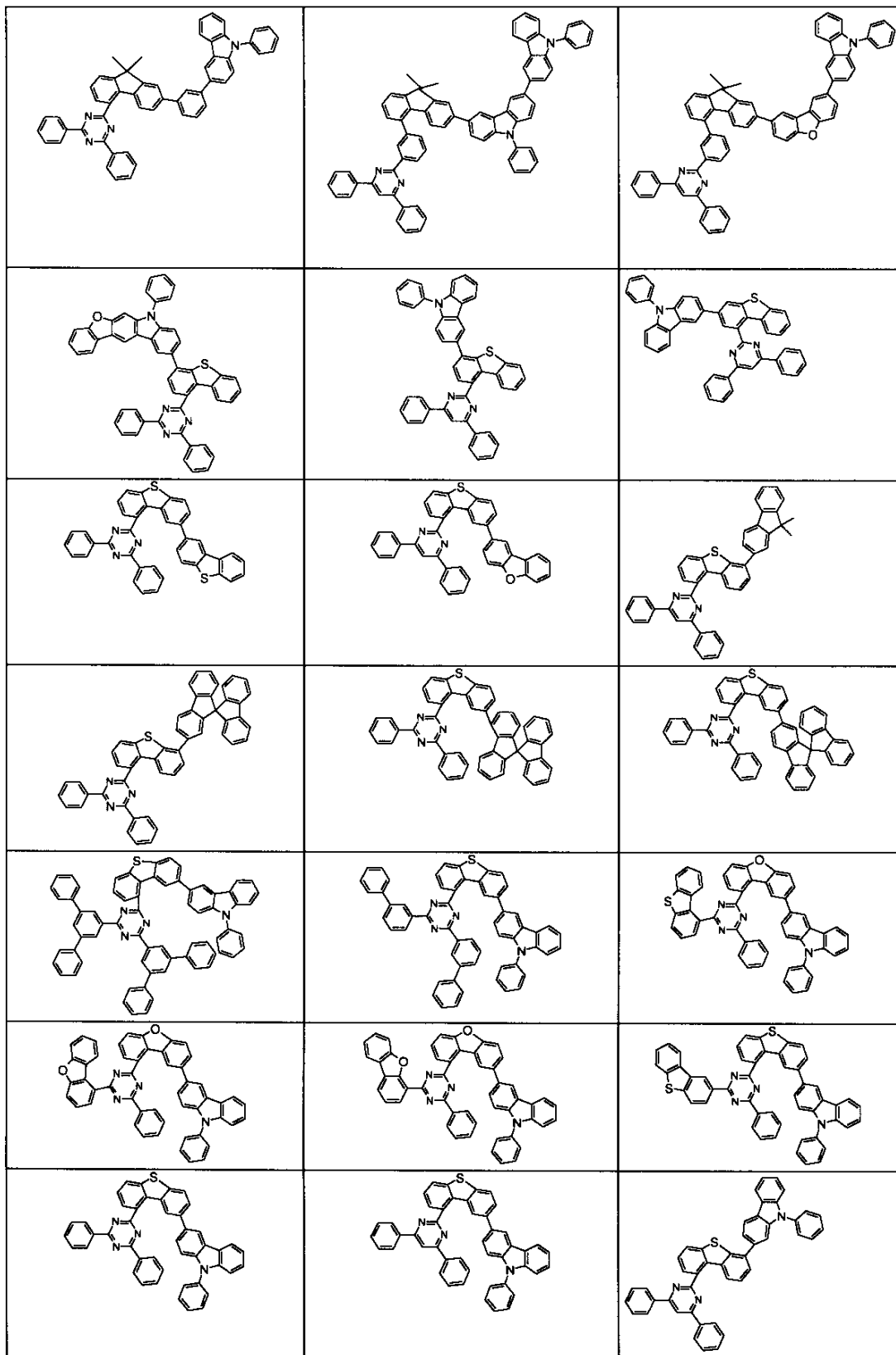
20

30

40

【 0 1 0 6 】

【化 17 - 18】



10

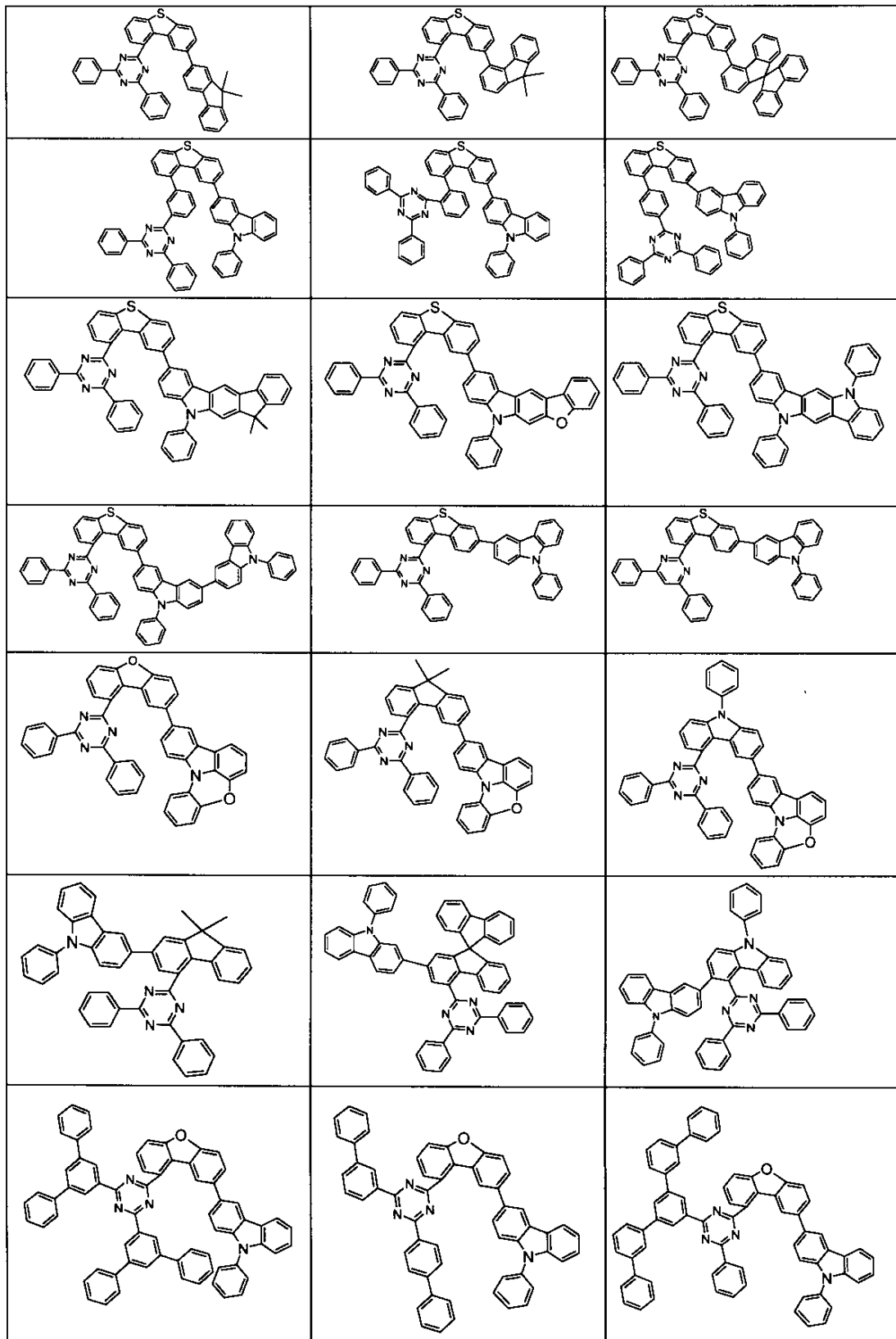
20

30

40

【 0 1 0 7 】

【化 17 - 19】



10

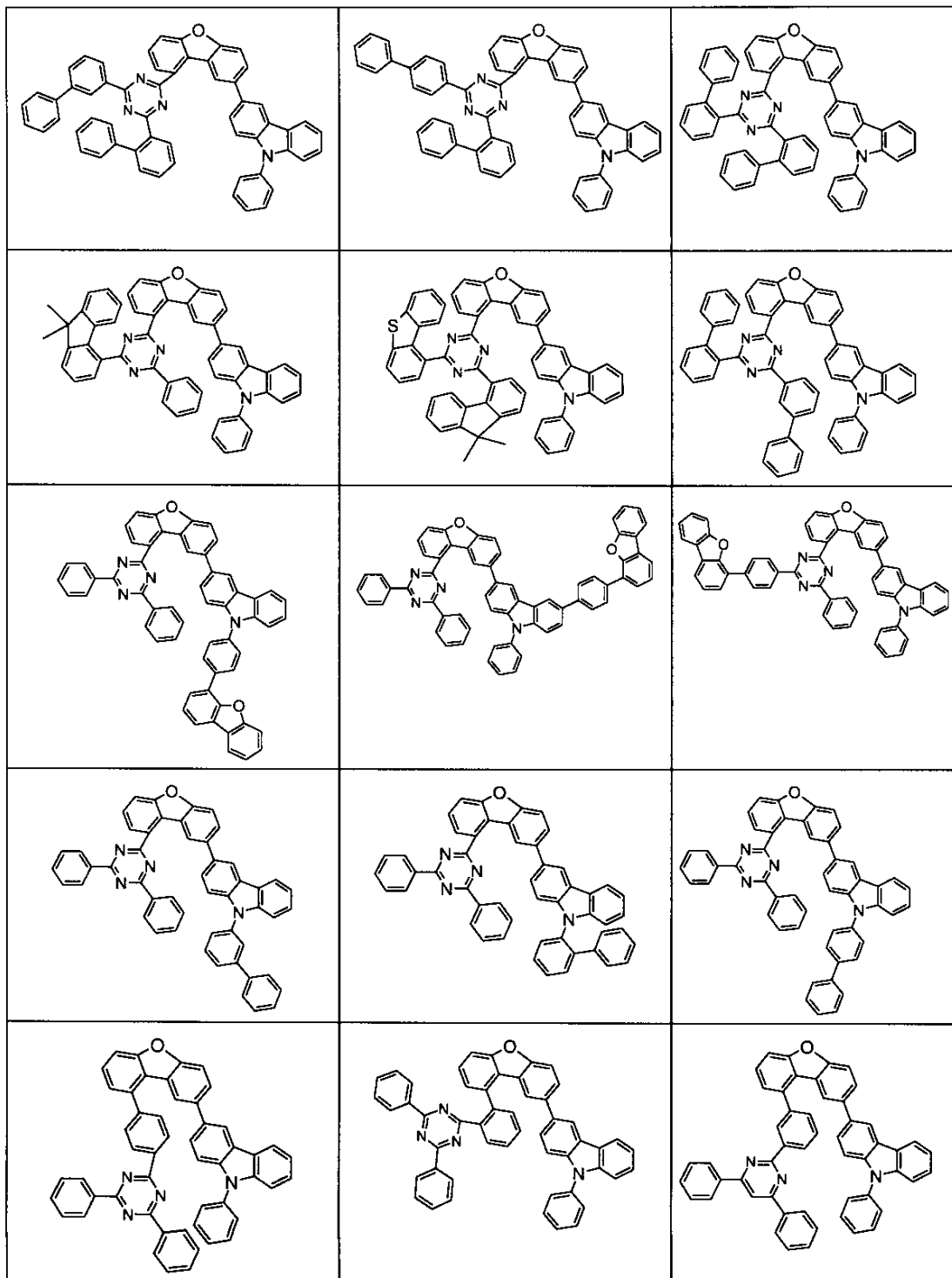
20

30

40

【 0 1 0 8 】

【化 17 - 20】



10

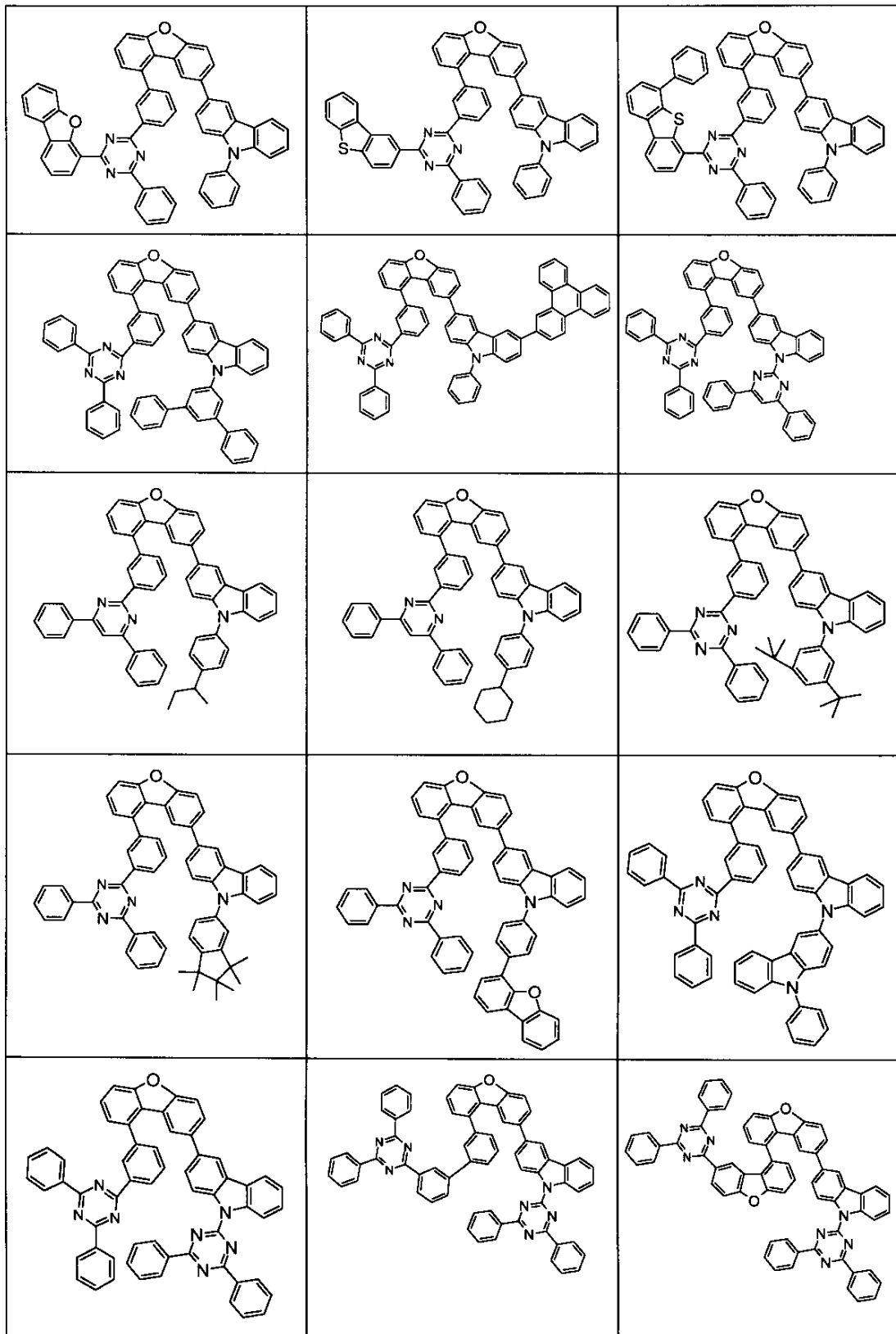
20

30

40

【 0 1 0 9 】

【化 17 - 21】



10

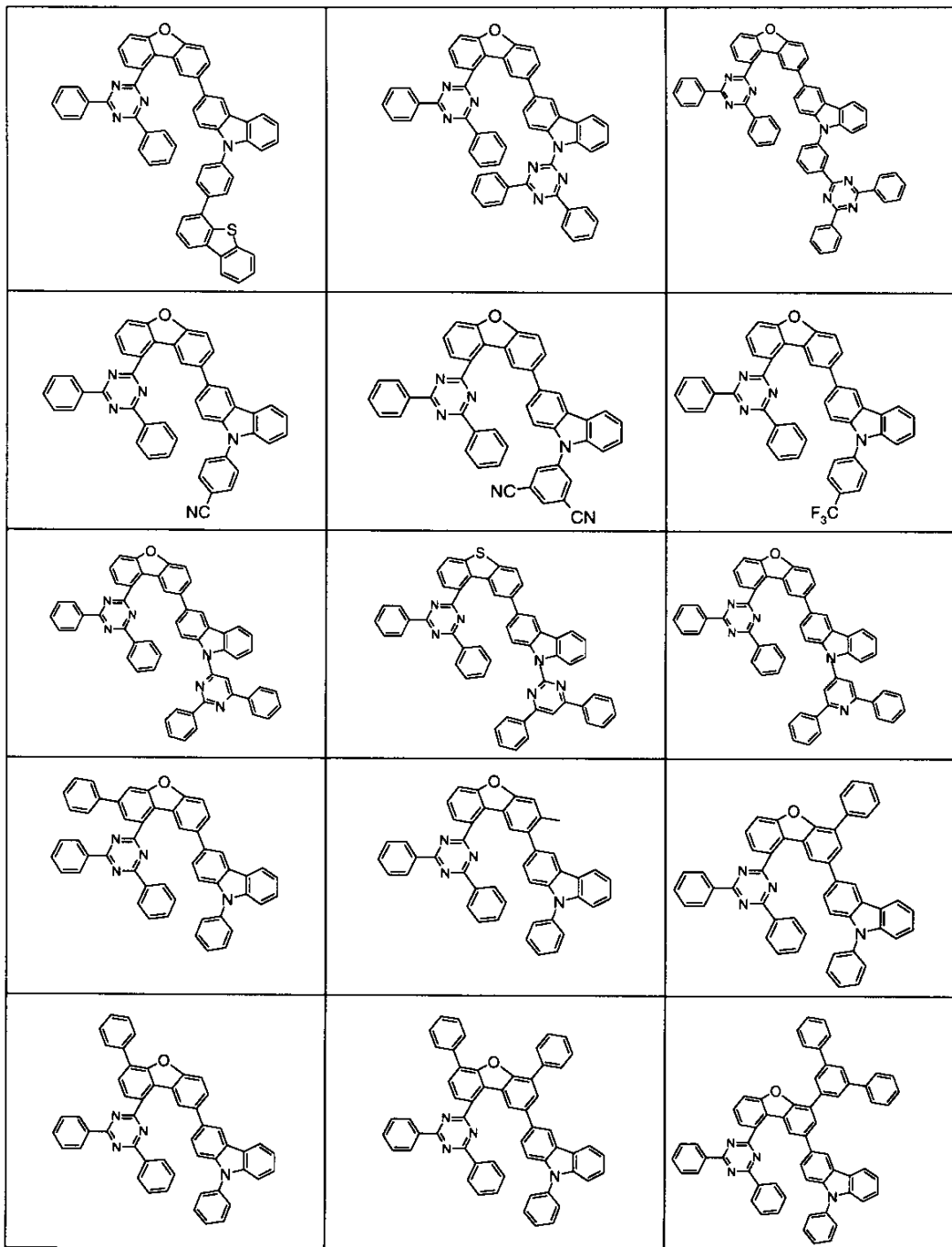
20

30

40

【 0 1 1 0 】

【化 1 7 - 2 2】



10

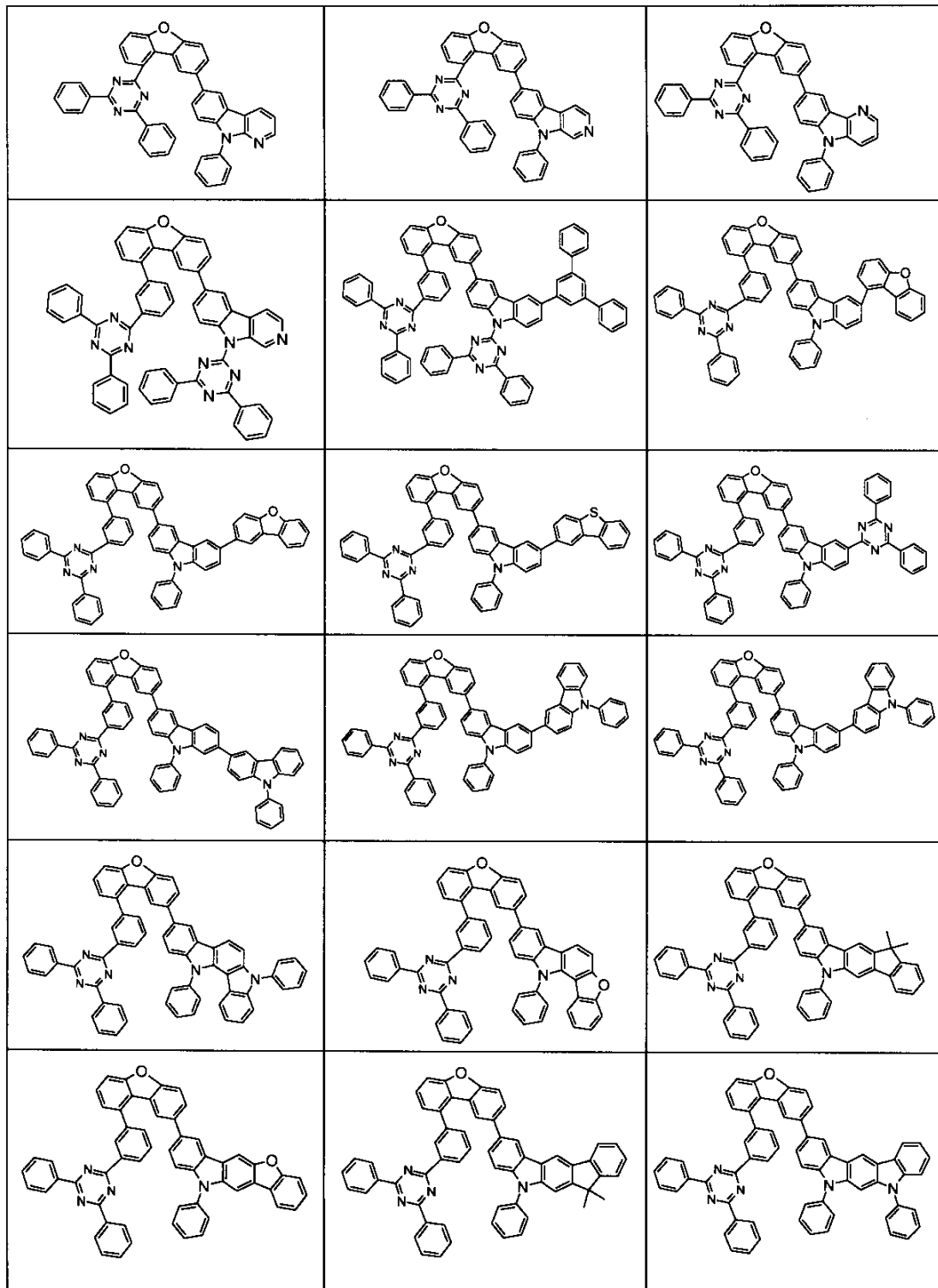
20

30

40

【 0 1 1 1】

【化 1 7 - 2 3】



10

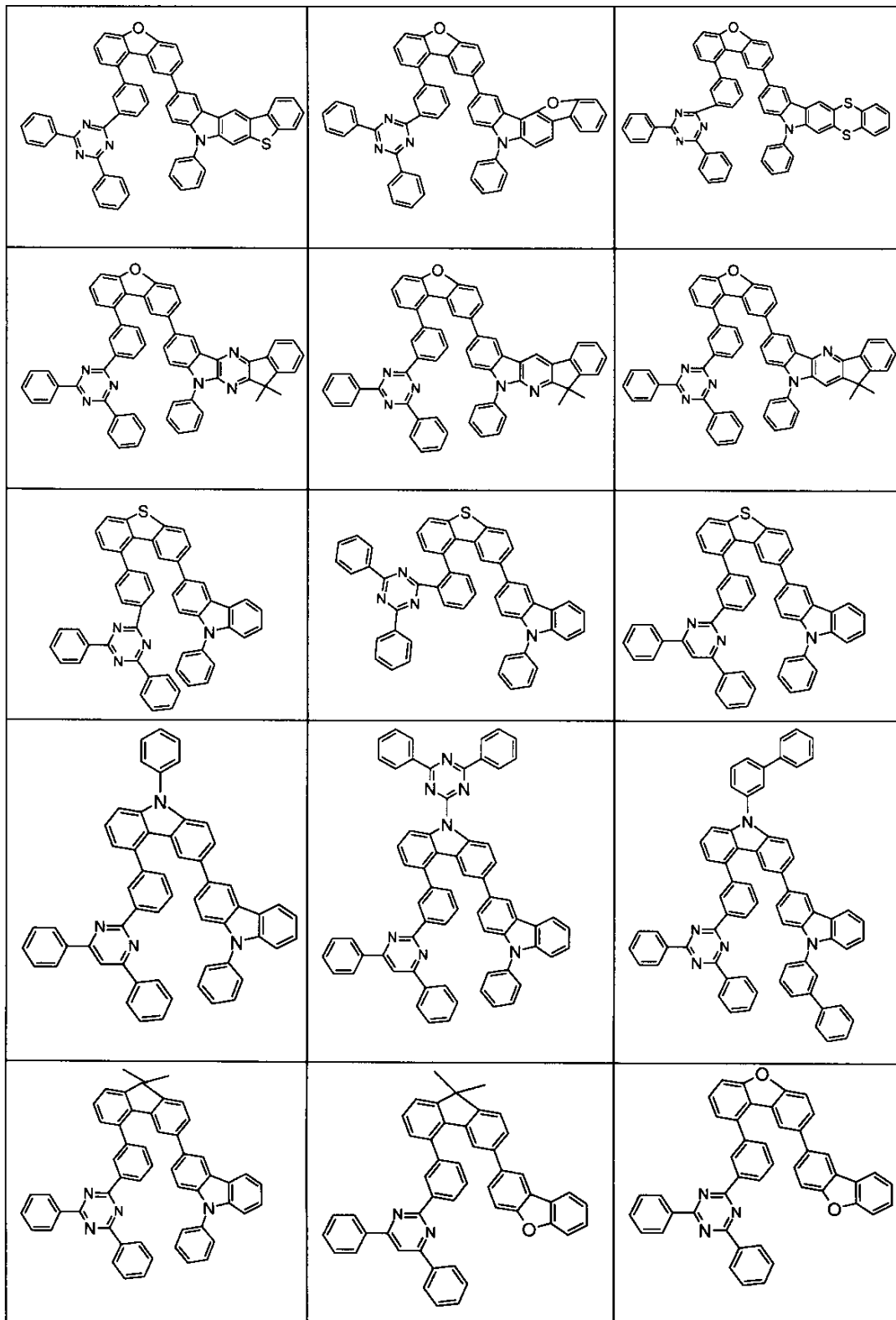
20

30

40

【 0 1 1 2】

【化 17 - 24】



10

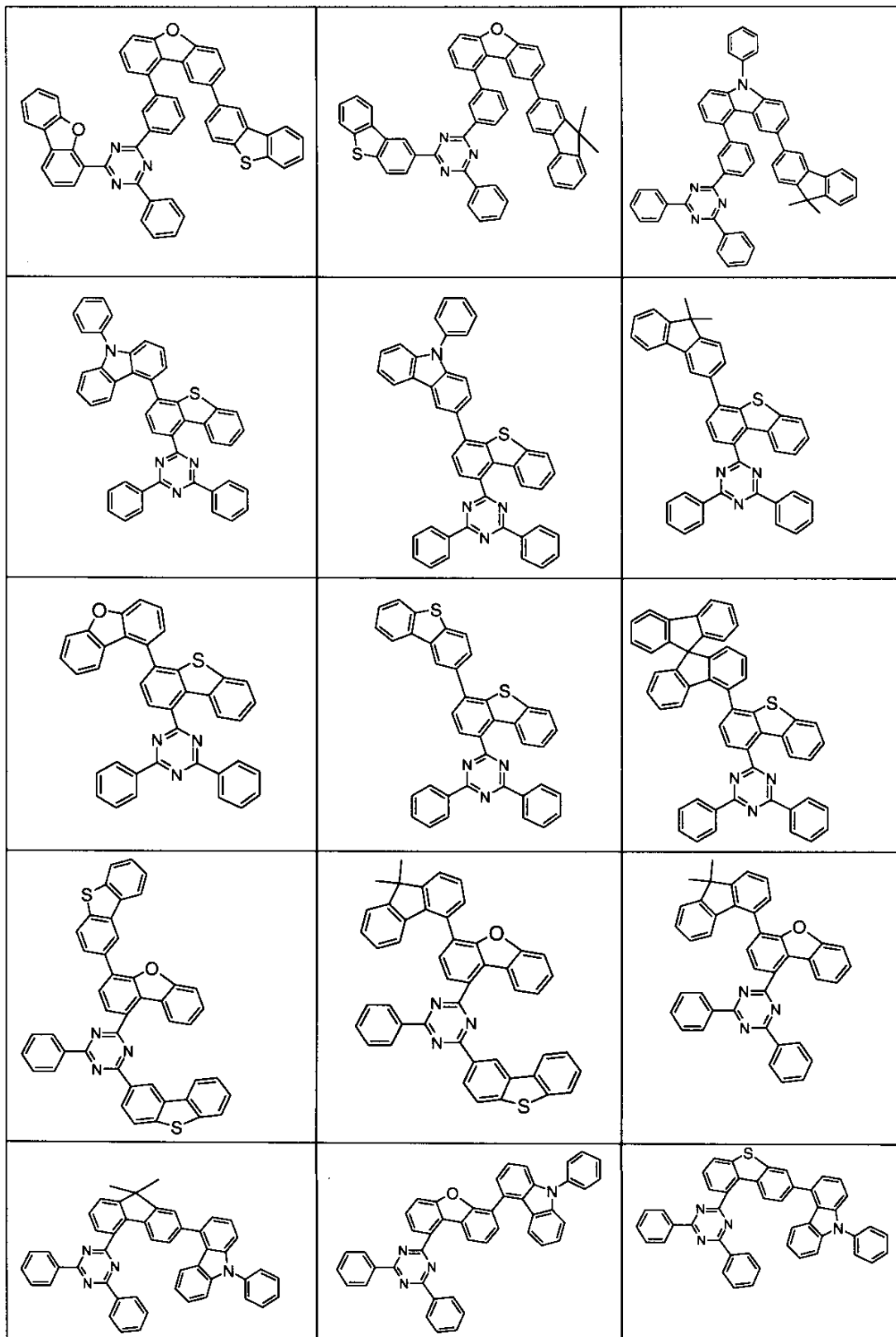
20

30

40

【 0 1 1 3 】

【化 17 - 25】



10

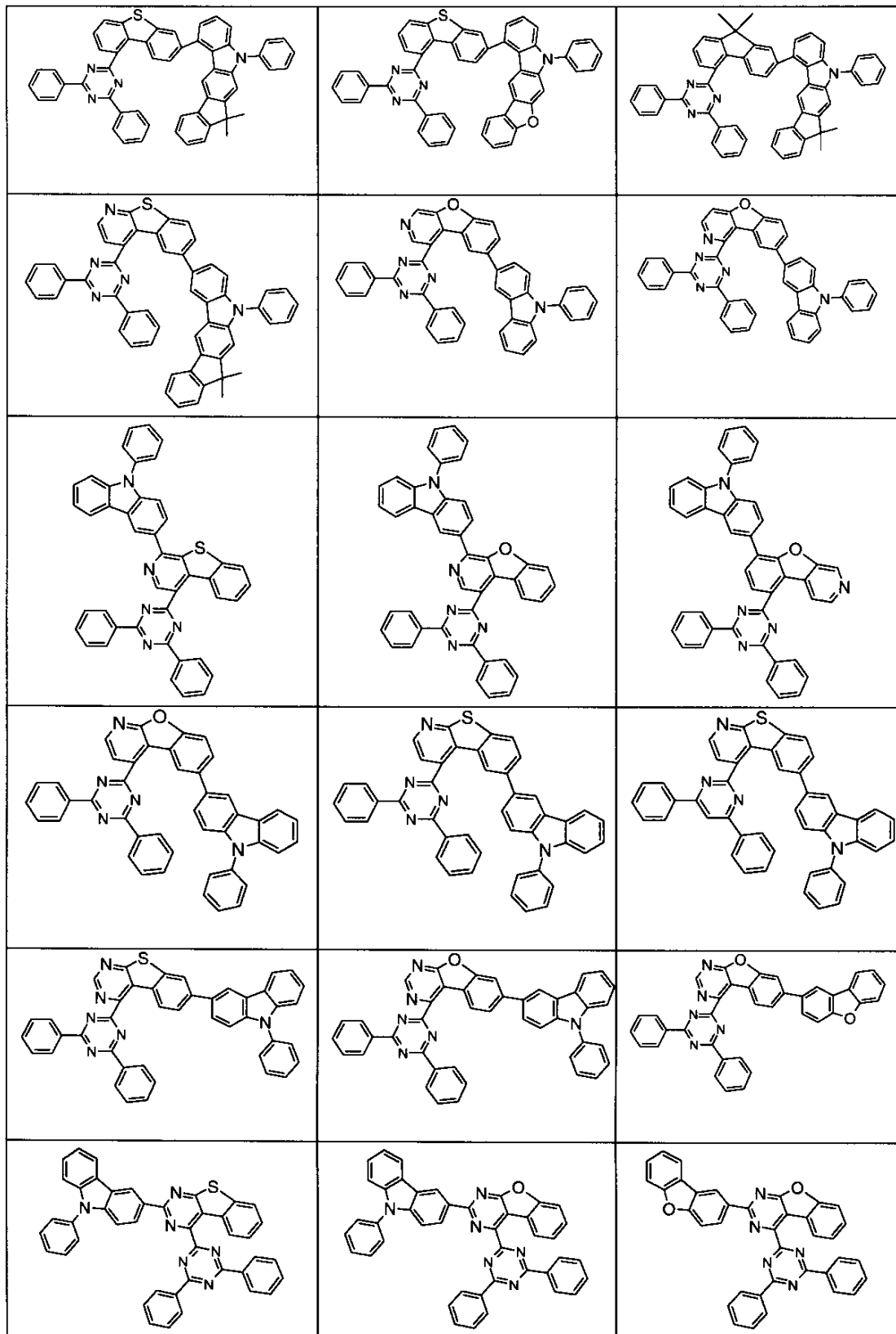
20

30

40

【 0 1 1 4 】

【化 17 - 26】



10

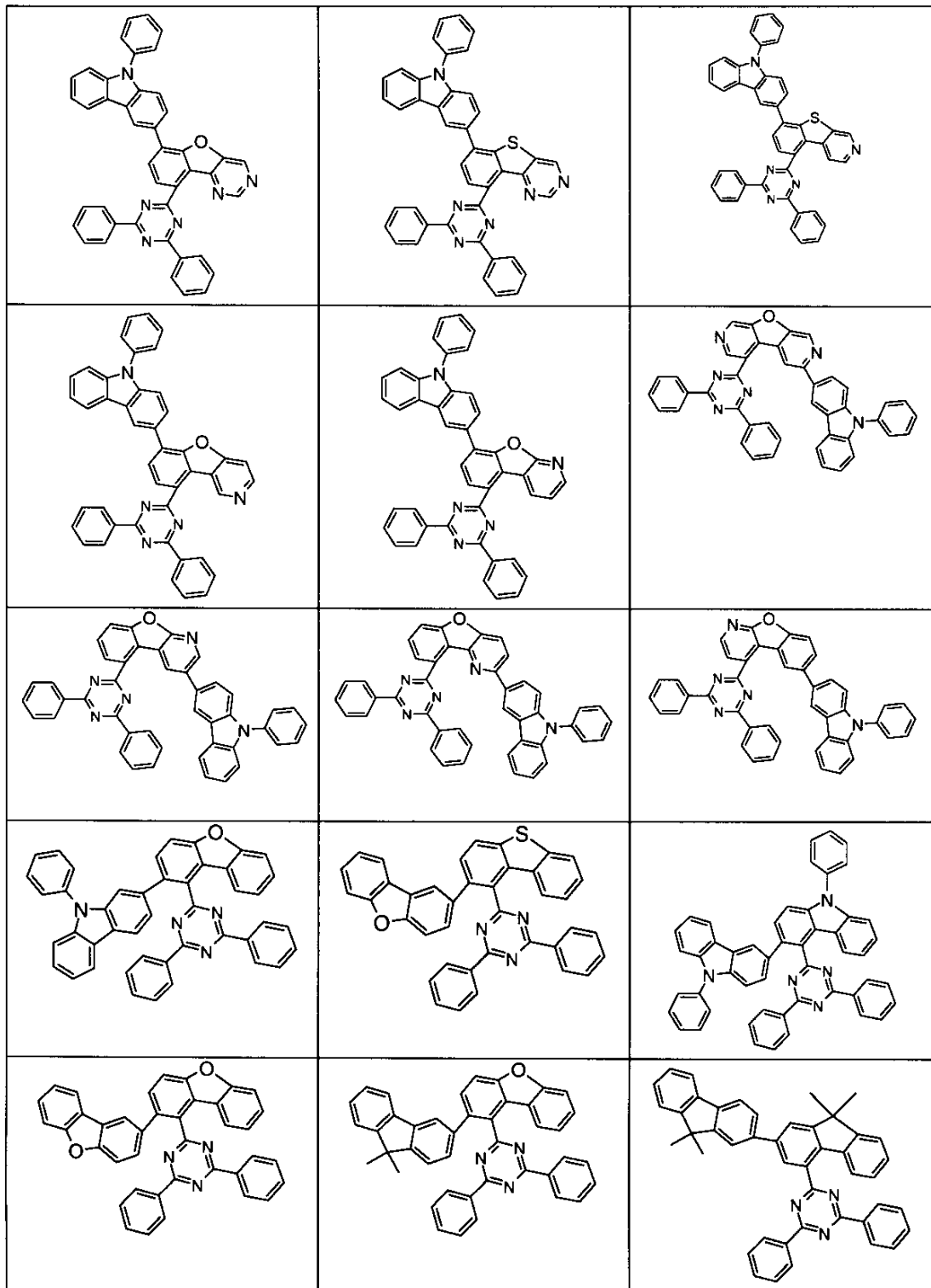
20

30

40

【 0 1 1 5 】

【化 17 - 27】



10

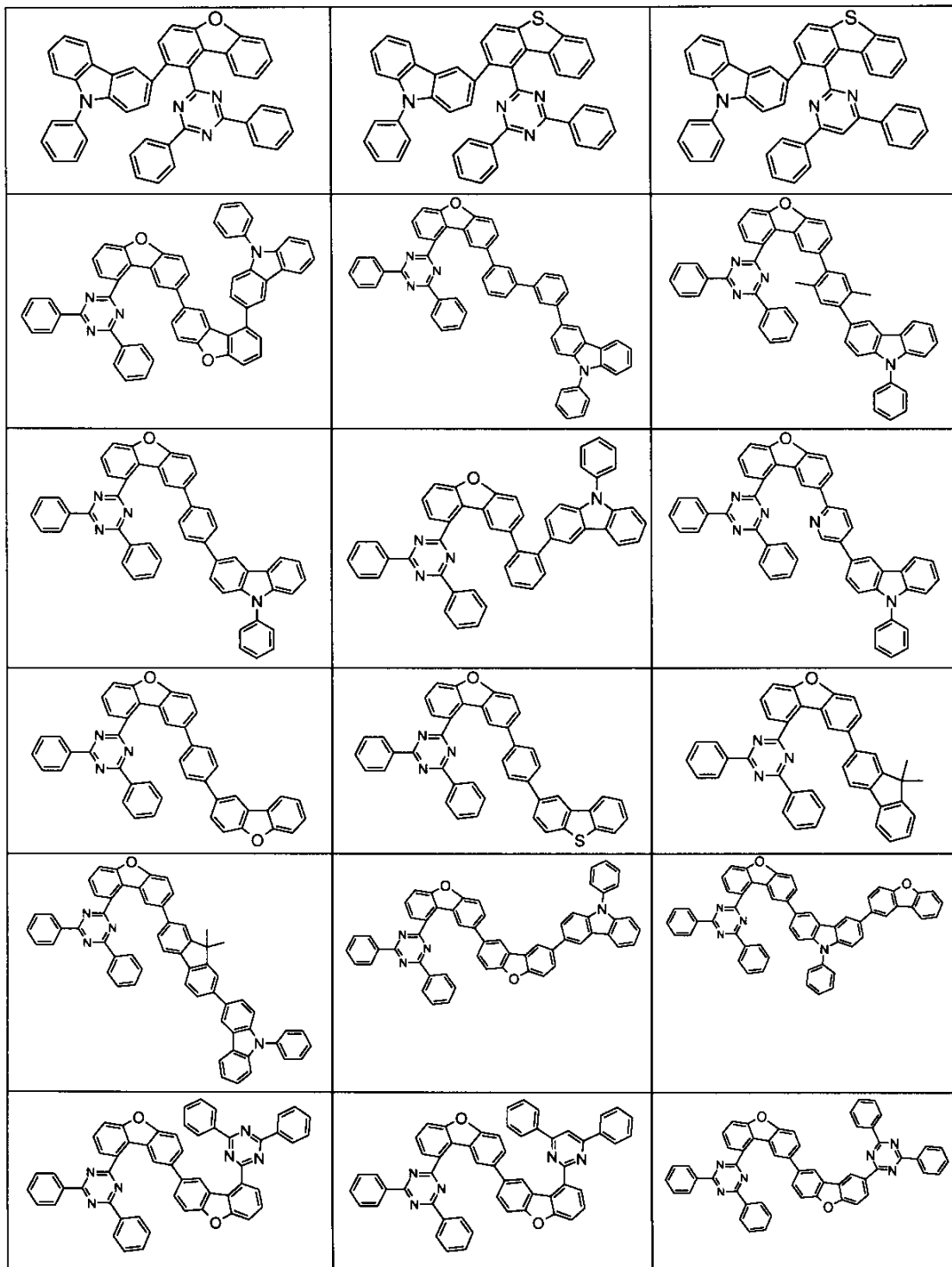
20

30

40

【 0 1 1 6 】

【化 1 7 - 2 8】



10

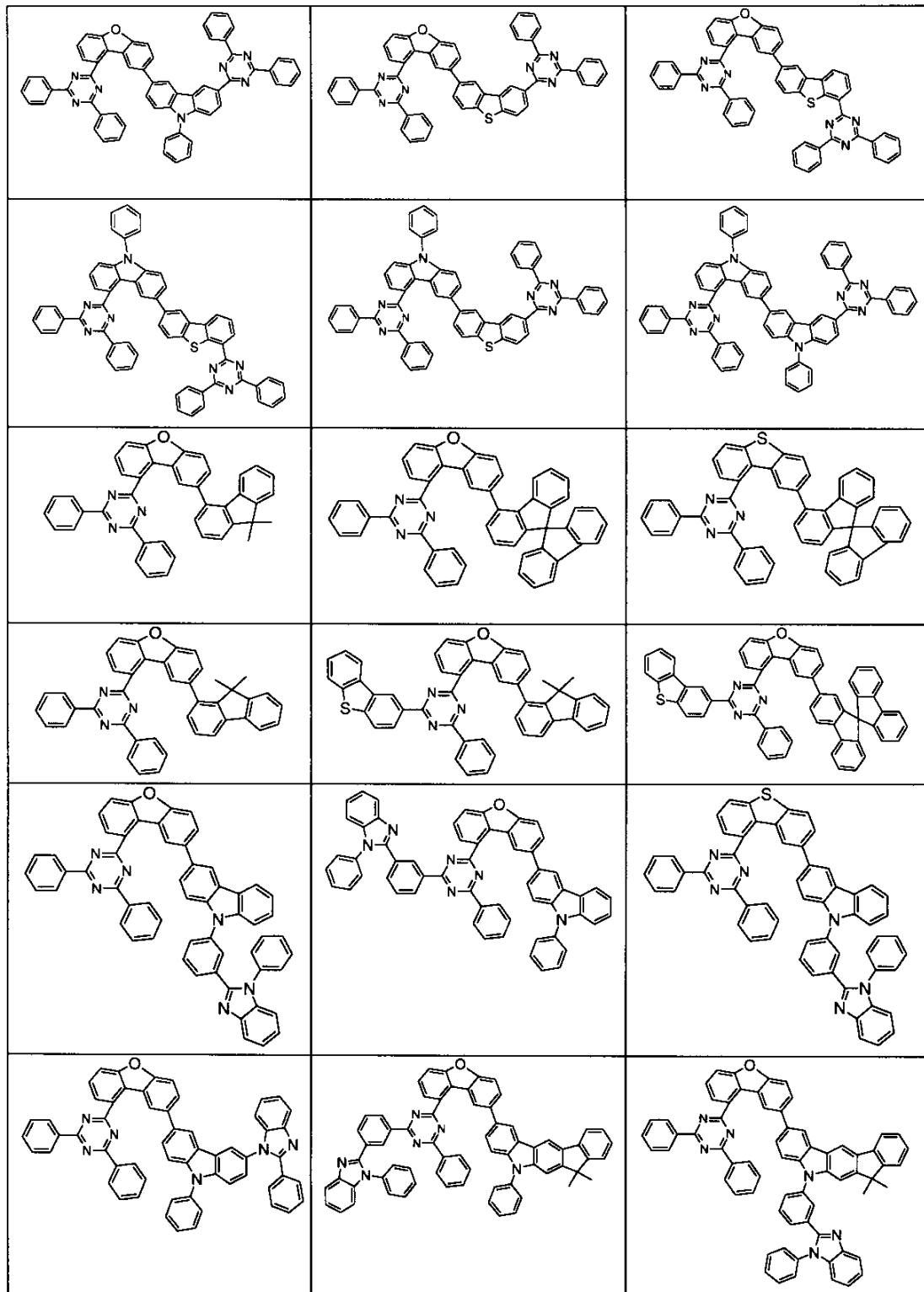
20

30

40

【 0 1 1 7】

【化 17 - 29】



10

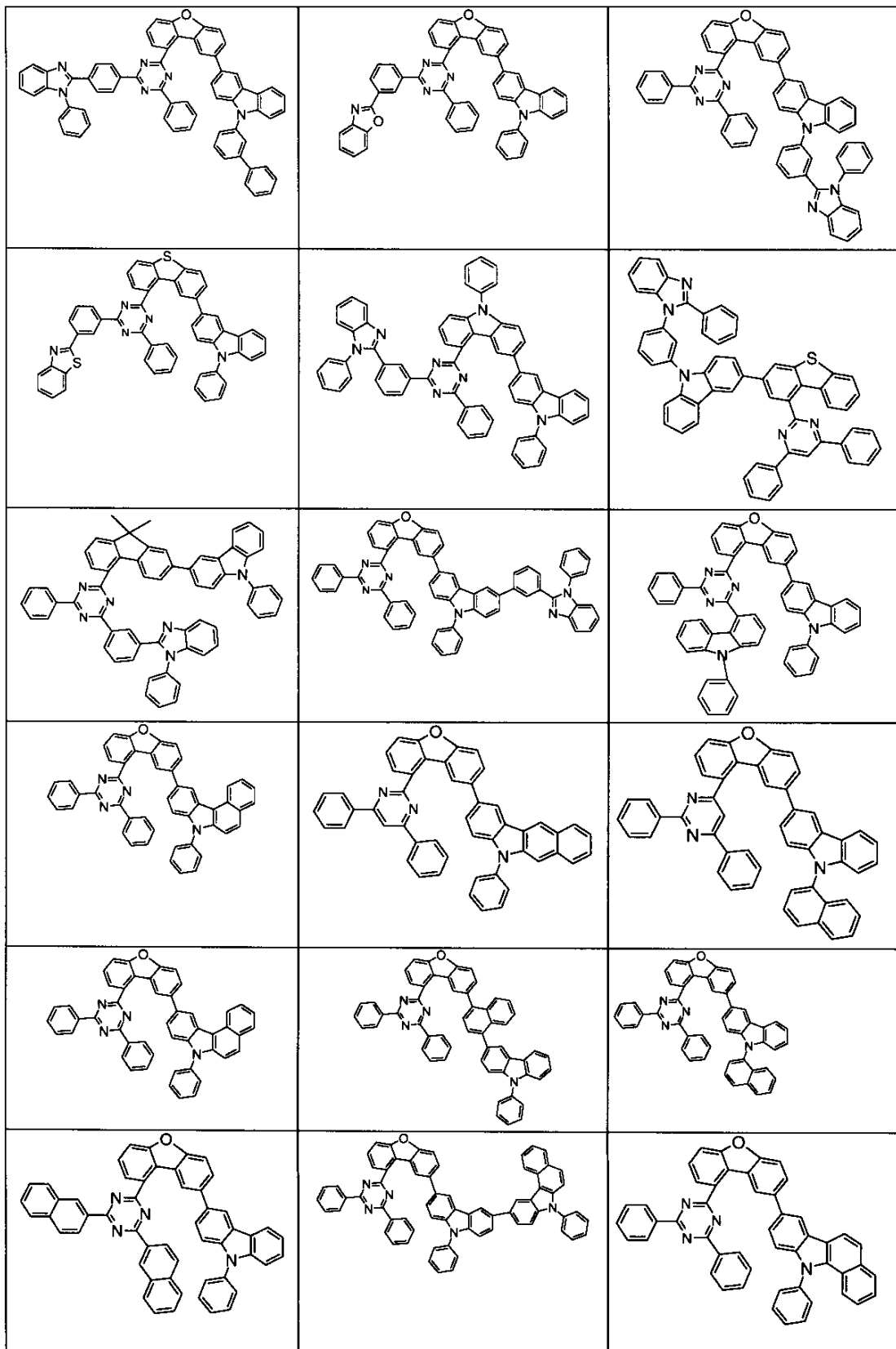
20

30

40

【 0 1 1 8 】

【化 17 - 30】



10

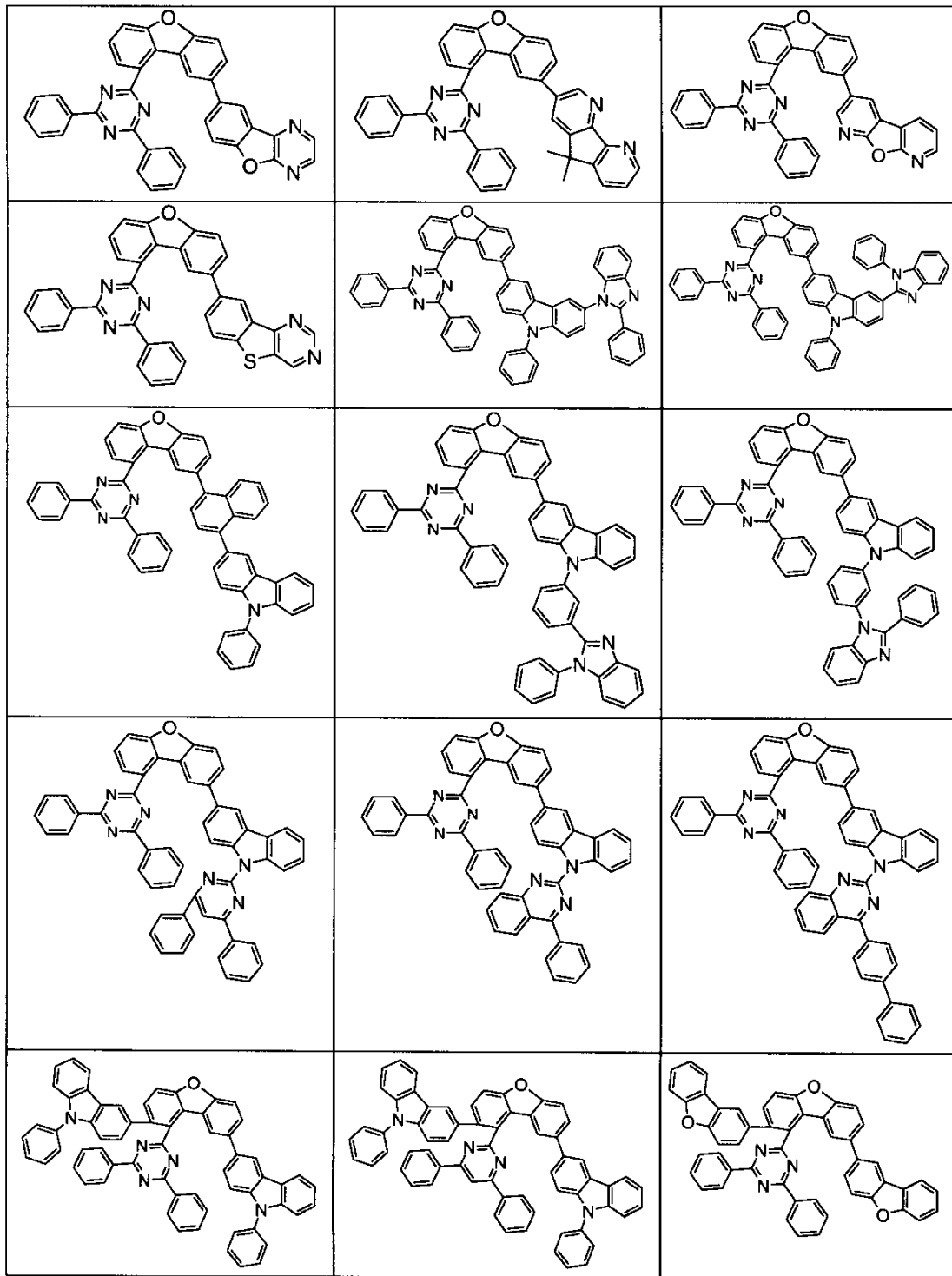
20

30

40

【 0 1 1 9 】

【化 1 7 - 3 1】



10

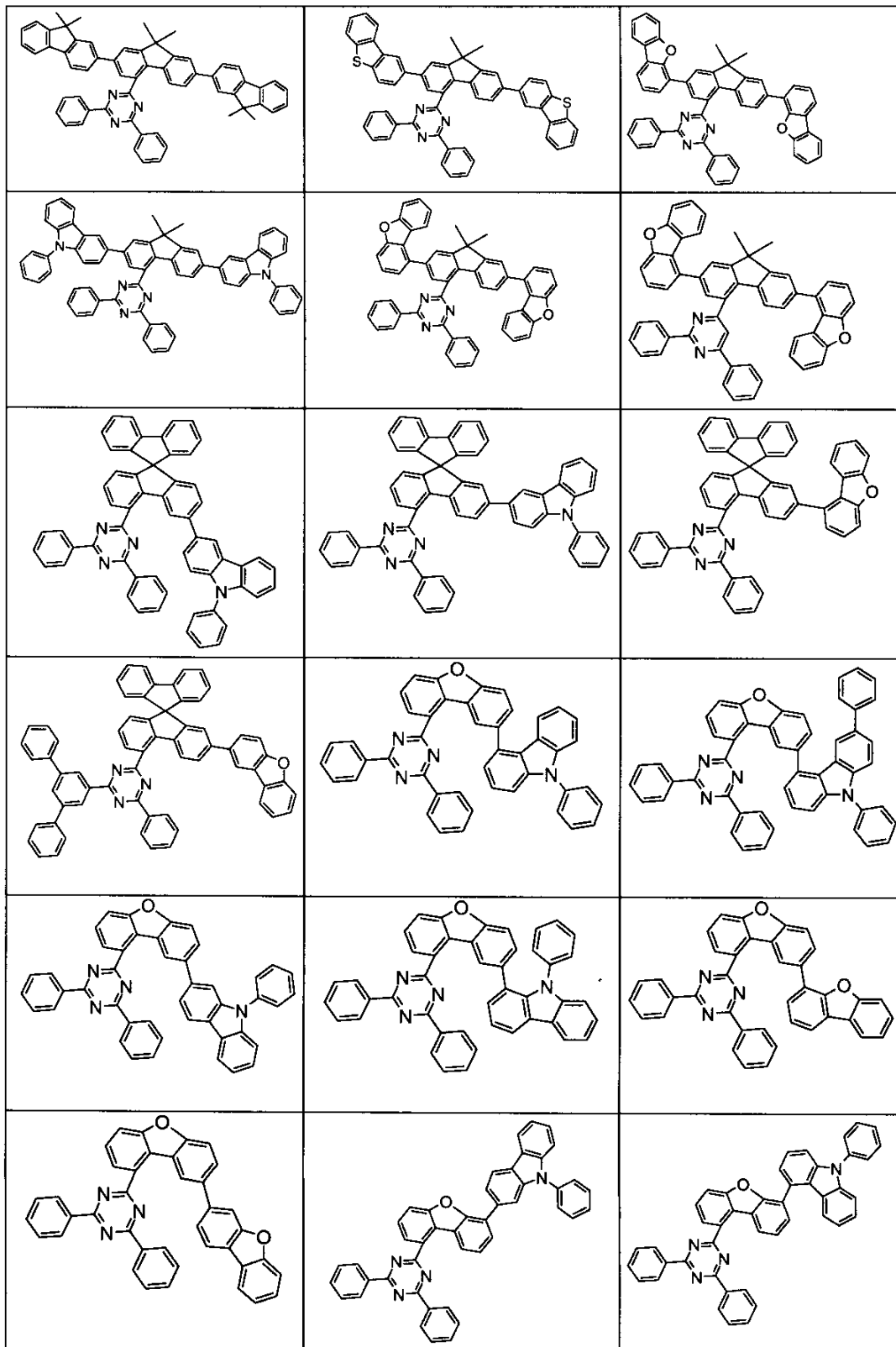
20

30

40

【 0 1 2 0】

【化 1 7 - 3 2】



10

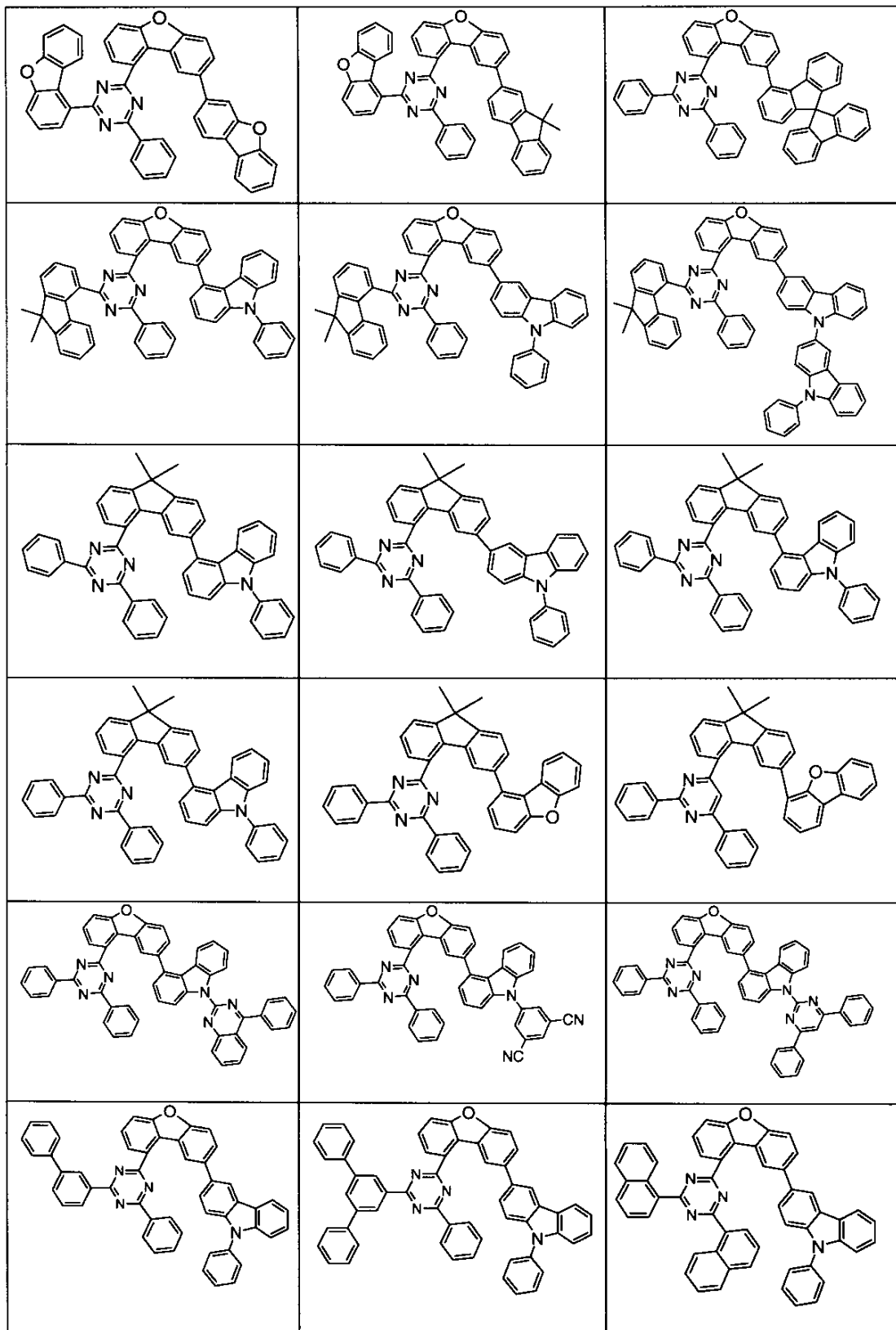
20

30

40

【 0 1 2 1】

【化 17 - 33】



10

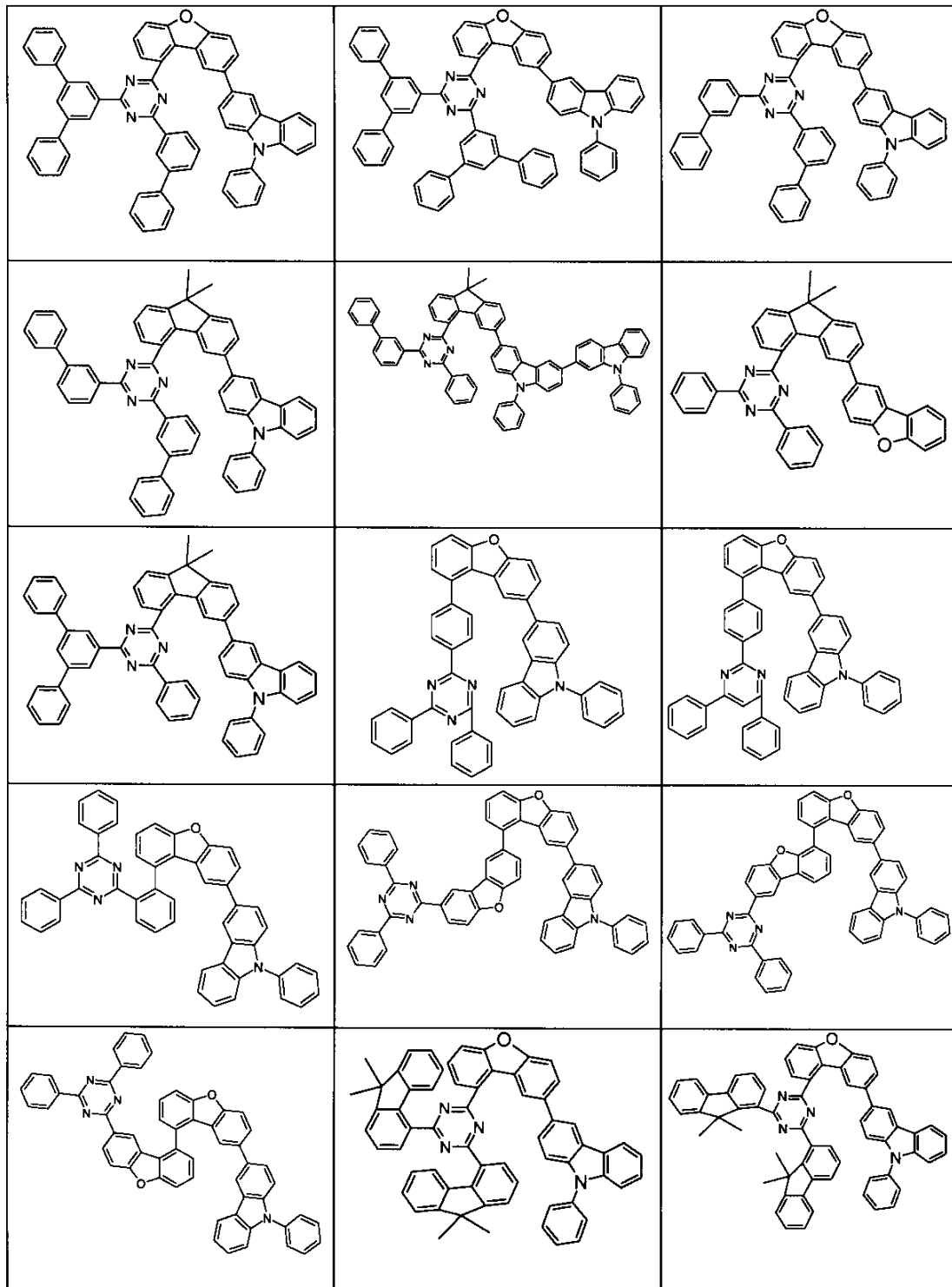
20

30

40

【 0 1 2 2 】

【化 1 7 - 3 4】



10

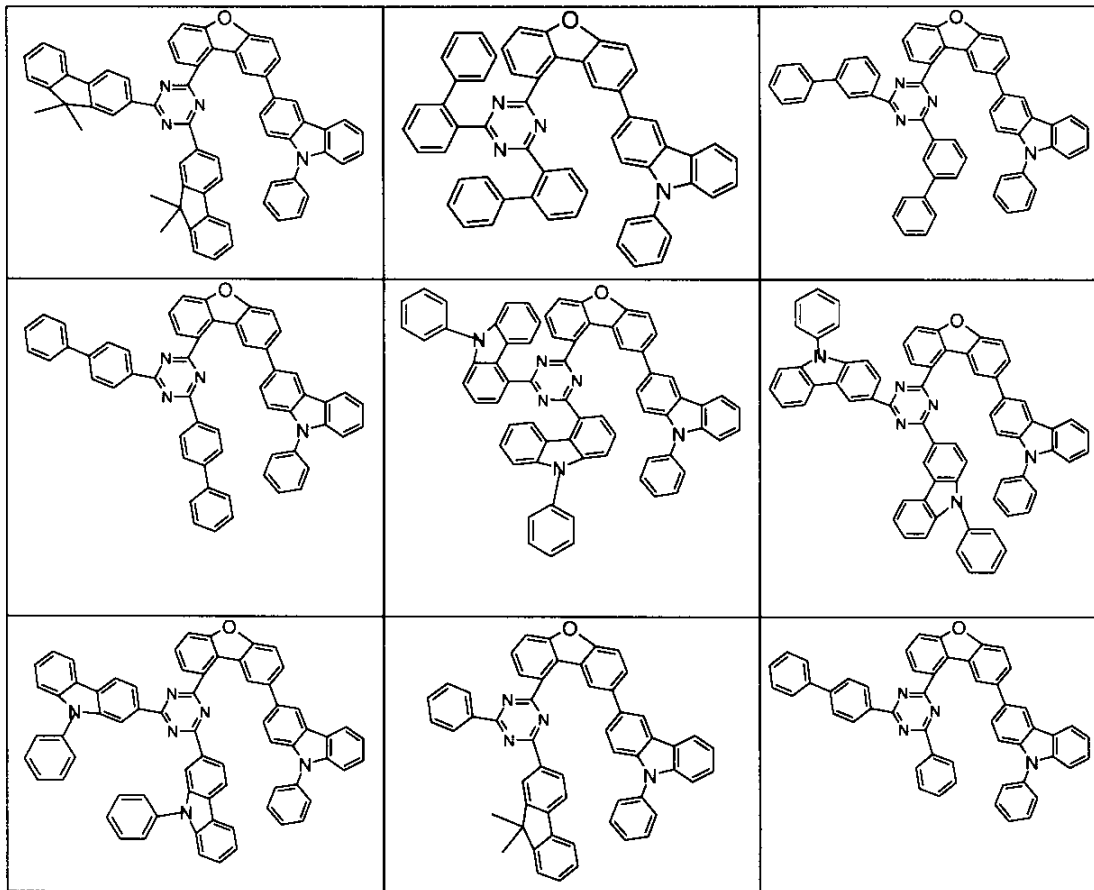
20

30

40

【 0 1 2 3】

【化 17 - 35】



10

20

【0124】

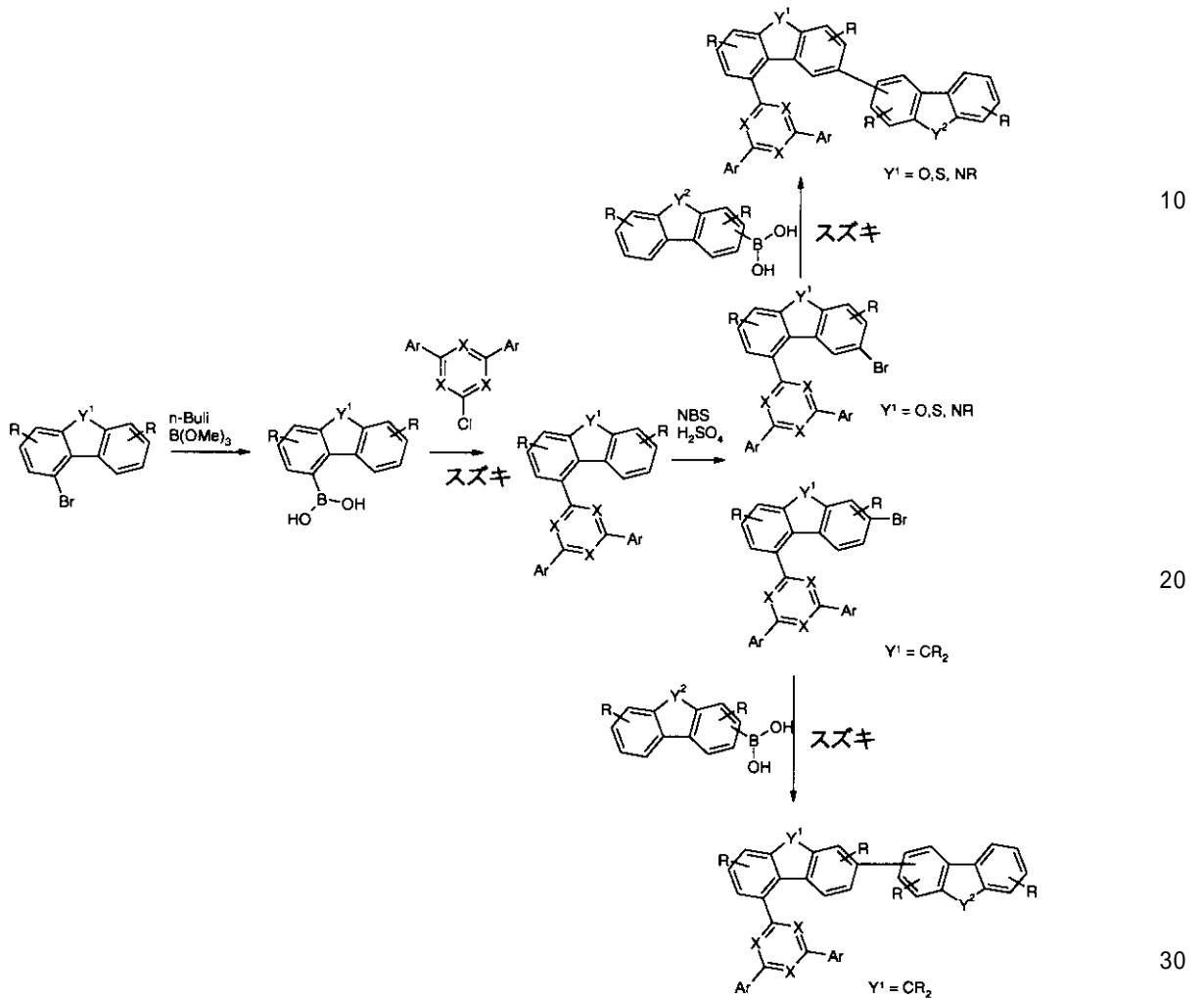
本発明による化合物は、たとえば、臭素化、スズキカップリング、ウルマンカップリング、ハートウィッグ-ブフバルトカップリング等の当業者に知られた合成工程により製造することができる。適切な合成プロセスは、以下のスキーム1において、一般的用語で示される。

30

【0125】

【化18】

スキーム1



【0126】

たとえば、スピンコーティングまたは印刷法による液相からの本発明による化合物の加工は、本発明による化合物の調合物を必要とする。これらの調合物は、たとえば、溶液、分散液もしくはエマルジョンであり得る。二以上の溶媒の混合物を使用することが、この目的のために好ましい可能性がある。適切で好ましい溶媒は、たとえば、トルエン、アニソール、*o*-、*m*-もしくは*p*-キシレン、メチルベンゾエート、メシチレン、テトラリン、ペラトール、THF、メチル-THF、THP、クロロベンゼン、ジオキサン、フェノキシトルエン、特に、3-フェノキシトルエン、(-)-フェンコンヌ、1,2,3,5-テトラメチルベンゼン、1,2,4,5-テトラメチルベンゼン、1-メチルナフタレン、2-メチルベンゾチアゾール、2-フェノキシエタノール、2-ピロリジノン、3-メチルアニソール、4-メチルアニソール、3,4-ジメチルアニソール、3,5-ジメチルアニソール、アセトフェノン、 α -テルピネオール、ベンゾチアゾール、ブチルベンゾエート、クメン、シクロヘキサノール、シクロヘキサノン、シクロヘキシルベンゼン、デカリン、ドデシルベンゼン、エチルベンゾエート、インダン、メチルベンゾエート、NMP、*p*-シメン、フェネトール、1,4-ジイソプロピルベンゼン、ジベンジルエーテル、ジエチレングリコールブチルメチルエーテル、トリエチレングリコールブチルメチルエーテル、ジエチレングリコールジブチルエーテル、トリエチレングリコールジメチルエーテル、ジエチレングリコールモノブチルエーテル、トリプロピレングリコールジメチルエーテル、テトラエチレングリコールジメチルエーテル、

2-イソプロピルナフタレン、ペンチルベンゼン、ヘキシルベンゼン、ヘプチルベンゼン、オクチルベンゼン、1,1-ビス(3,4-ジメチルフェニル)エタンもしくはこれら溶媒の混合物である。

【0127】

したがって、本発明は、本発明による化合物と少なくとも一つのさらなる化合物とを含む調合物に関する。さらなる化合物は、たとえば、溶媒、特に、上記溶媒の一つ、またはこれら溶媒の混合物であってよい。しかしながら、さらなる化合物は、電子素子で同様に用いられる少なくとも一つのさらなる有機もしくは無機化合物、たとえば、発光化合物、特に、燐光ドーパントおよび/またはさらなるマトリックス材料であってよい。適切な発光化合物とさらなるマトリックス材料は、有機エレクトロルミッセンス素子に関連して、以下に示される。このさらなる化合物は、ポリマー状であってよい。

10

【0128】

本発明による化合物と混合物は、電子素子での使用のために適している。ここで、電子素子は、少なくとも一つの有機化合物を含む少なくとも一つの層を含む素子の意味で使用される。しかしながら、ここで、素子はまた、無機材料または完全に無機材料から構成される層を含んでもよい。

【0129】

したがって、本発明は、さらに、本発明による化合物もしくは混合物の、電子素子での、特に、有機エレクトロルミッセンス素子での使用に関する。

【0130】

本発明は、なおさらに、少なくとも一つの上記言及した本発明による化合物もしくは混合物を含む電子素子に関する。化合物に対する上記述べた選好は、電子素子にもあてはまる。

20

【0131】

電子素子は、好ましくは、有機エレクトロルミネッセンス素子(OLED、PLED)、有機集積回路(O-IC)、有機電界効果トランジスタ(O-FET)、有機薄膜トランジスタ(O-TFT)、有機発光トランジスタ(O-LET)、有機太陽電池(O-SC)、有機染料増感性太陽電池、有機光学検査器、有機光受容器、有機電場消光素子(O-FQD)、発光電子化学電池(LEC)、有機レーザーダイオード(O-laser)および「有機プラズモン発光素子」(D. M. Koller et al., Nature Photonics 2008, 1-4)より成る群から選ばれるが、好ましくは、有機エレクトロルミネッセンス素子(OLED)、特に、燐光OLEDである。

30

【0132】

有機エレクトロルミッセンス素子は、カソード、アノードと少なくとも一つの発光層を含む。これらの層に加えて、さらなる層、たとえば、各場合に、1以上の正孔注入層、正孔輸送層、正孔ブロック層、電子輸送層、電子注入層、励起子ブロック層、電子ブロック層および/または電荷生成層を含んでもよい。たとえば、励起子ブロック機能を有する中間層を、2個の発光層の間に導入することも同様に可能である。しかしながら、これらの層は、必ずしも存在する必要はないことが指摘されねばならない。ここで、有機エレクトロルミネッセンス素子は、一つの発光層または複数の発光層を含んでもよい。複数の発光層が存在する場合には、これらは、好ましくは、380nm~750nm間に全体で複数の最大発光波長を有し、その結果全体として、白色発光が生じるものであり、換言すれば、蛍光もしくは燐光を発生得る種々の発光化合物が、発光層で使用される。特に好ましいものは、3個の発光層を有する構造であり、その3層は青色、緑色およびオレンジ色もしくは赤色発光を呈する(基本構造については、たとえば、WO 2005/011013参照)。これらは、蛍光もしくは燐光発光層または蛍光および燐光発光層が互いに組み合わせられたハイブリッド系であり得る。白色発光エレクトロルミッセンス素子を、たとえば、照明用のみならず、全色表示装置のための着色フィルターと組み合わせ使用することができる。

40

【0133】

上記態様にしたがう本発明による化合物は、その正確な構造に応じて、種々の層に用い

50

ることができる。好ましいものは、式(1)もしくは式(2)の化合物またはその好ましい態様にしたがる化合物を、その正確な置換に応じて、蛍光もしくは燐光エミッターのための、特に、燐光エミッターのためのマトリックス材料として、および/または電子輸送層および/または電子ブロック層または励起子ブロック層中に、および/または正孔輸送層中に含む有機エレクトロルミネッセンス素子である。上記示された好ましい態様は、有機電子素子での材料の使用にもあてはまる。

【0134】

本発明の好ましい1態様では、式(1)もしくは式(2)の化合物またはその好ましい態様にしたがる化合物は、発光層中で、蛍光もしくは燐光化合物のための、特に、燐光化合物のためのマトリックス材料として用いられる。ここで、有機エレクトロルミネッセンス素子は、一つの発光層または複数の発光層を含んでもよく、ここで、少なくとも一つの発光層は、少なくとも一つの本発明による化合物をマトリックス材料として含む。

10

【0135】

式(1)もしくは式(2)の化合物またはその好ましい態様にしたがる化合物が、発光層中で、発光化合物のためのマトリックス材料として用いられるならば、好ましくは、一以上の燐光材料(三重項エミッター)と組み合わせて用いられる。本発明の意味での燐光発光は、スピン多重度 > 1 、特に、励起三重項状態からのルミネッセンスという意味で使用される。本出願の目的のために、全てのルミネッセンス遷移金属錯体もしくはルミネッセンスランタノイド錯体、特に、すべてのイリジウム、白金および銅錯体が、燐光化合物とみなされるべきである。

20

【0136】

式(1)もしくは式(2)の化合物またはその好ましい態様にしたがる化合物と発光化合物の混合物は、エミッターとマトリックス材料を含む全混合物を基礎として、式(1)の化合物または好ましい態様によるものを、99体積%~1体積%、好ましくは、98体積%~10体積%、特に好ましくは、97体積%~60体積%、特に、95体積%~80体積%含む。対応して、混合物は、エミッターとマトリックス材料を含む全混合物を基礎として、エミッターを、1体積%~99体積%、好ましくは、2体積%~90体積%、特に好ましくは、3体積%~40体積%、特別には、5体積%~20体積%含む。化合物が溶液から加工される場合には、体積%で上記示された量に代えて、重量%で対応する量が、好ましくは、使用される。

30

【0137】

適切な燐光化合物(=三重項エミッター)は、特に、好ましくは、可視域で適切な励起により発光する化合物であり、加えて、20より大きい原子番号、好ましくは、38~84の原子番号、より好ましくは、56~80の原子番号を有する少なくとも一つの原子、特に、この原子数を有する金属を含む。使用される燐光エミッターは、好ましくは、銅、モリブデン、タングステン、レニウム、ルテニウム、オスミウム、ロジウム、イリジウム、パラジウム、白金、銀、金またはユウロピウムを含む化合物、特に、イリジウムもしくは白金を含む化合物である。本発明の目的のために、上記言及した金属を含むすべてのルミネッセント化合物が、燐光化合物であるとみなされる。

【0138】

上記記載されたエミッターの例は、出願WO00/70655、WO2001/41512、WO2002/02714、WO2002/15645、EP1191613、EP1191612、EP1191614、WO05/033244、WO05/019373、US2005/0258742、WO2009/146770、WO2010/015307、WO2010/031485、WO2010/054731、WO2010/054728、WO2010/086089、WO2010/099852、WO2010/102709、WO2011/032626、WO2011/066898、WO2011/157339、WO2012/007086、WO2014/008982、WO2014/023377、WO2014/094961、WO2014/094960および未公開出願EP13004411.8、EP14000345.0、EP14000417.7およびEP14002623.8により明らかにされる。一般的には、燐光発光OLEDのために先行技術にしたがい使用され、有機エレクトロルミネッセンス素子分野の当業者に知られるようなすべての燐光発光錯体が適切であり、当業者は発明性を行使することなく、さらなる燐光錯体を使用することができるであろう。

40

50

【 0 1 3 9 】

本発明のさらに好ましい1態様は、式(1)もしくは式(2)の化合物またはその好ましい態様にしたがる化合物の、さらなるマトリックス材料と組み合わせたの燐光エミッターのためのマトリックス材料としての使用である。本発明のさらに好ましい1態様では、さらなるマトリックス材料は、正孔輸送化合物である。本発明のさらに好ましい1態様では、さらなるマトリックス材料は、電子輸送化合物である。本発明のなおさらに好ましい1態様では、さらなるマトリックス材料は、層中で正孔および電子輸送に関与しないか、顕著な程度には関与しない広いバンドギャップを有する化合物である。

【 0 1 4 0 】

式(1)もしくは式(2)の化合物またはその好ましい態様にしたがる化合物と組み合わせて用いることのできる、適切なマトリックス材料は、たとえば、WO 2004/013080、WO 2004/093207、WO 2006/005627もしくはWO 2010/006680にしたがる芳香族ケトン、芳香族ホスフィンオキシドまたは芳香族スルホキシドもしくはスルホン、トリアリールアミン、特に、モノアミン、たとえば、WO 2014/015935にしたがるもの、カルバゾール誘導体、たとえば、CBP (N,N-ビスカルバゾリルピフェニル)または、WO 2005/039246、US 2005/0069729、JP 2004/288381、EP 1205527もしくはWO 2008/086851に記載されたカルバゾール誘導体、たとえば、WO 2007/063754もしくはWO 2008/056746にしたがるインドロカルバゾール誘導体、WO2010/136109およびWO2011/000455にしたがるインデノカルバゾール誘導体、たとえば、EP 1617710、EP 1617711、EP 1731584、JP 2005/347160にしたがるアザカルバゾール誘導体、たとえば、WO 2007/137725にしたがるバイポーラマトリックス材料、たとえば、WO 2005/111172にしたがるシラン、たとえば、WO 2006/117052にしたがるアザカルバゾールもしくはボロン酸エステル、たとえば、WO 2010/15306、WO 2007/063754もしくはWO 2008/056746にしたがるトリアジン誘導体、たとえば、EP 652273もしくはWO 2009/062578にしたがる亜鉛錯体、たとえば、WO 2010/054729にしたがるジアザシロールもしくはテトラアザシロール誘導体、たとえば、WO 2010/054730にしたがるジアザホスホール誘導体、たとえば、US 2009/0136779、WO 2010/050778、WO 2011/042107、WO 2011/088877もしくはWO 2012/143080にしたがる架橋カルバゾール誘導体、たとえば、WO 2012/048781にしたがるトリフェニレン誘導体、WO 2011/116865、WO 2011/137951もしくはWO2013/064206にしたがるラクタム、またはWO 2014/094963もしくは未公開出願EP14002104.9にしたがる4-スピロカルバゾール誘導体である。通常のエミッターよりも、より短い波長で発光するさらなる燐光エミッターが、同様に、コホストとして混合物中に存在してもよい。

【 0 1 4 1 】

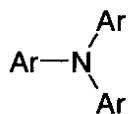
好ましいコホスト材料は、トリアリールアミン誘導体、特に、モノアミン、インデノカルバゾール誘導体、4-スピロカルバゾール誘導体、ラクタムおよびカルバゾール誘導体である。

【 0 1 4 2 】

本発明による化合物と一緒にコホスト材料として用いられるトリアリールアミン誘導体は、以下の式(11)の化合物から選ばれ、

【 0 1 4 3 】

【 化 1 9 】



式 (11)

【 0 1 4 4 】

式中、Arは、出現毎に同一であるか異なり、上記所与の意味を有する。基Arは、好

10

20

30

40

50

ましくは、出現毎に同一であるか異なり、上記示された基 $Ar - 1 \sim Ar - 19$ から選ばれる。

【0145】

式(11)の化合物の好ましい1態様では、少なくとも一つの基 Ar は、オルト-、メタ-もしくはパラ-ビフェニル基であり得るビフェニルから選ばれる。式(11)の化合物のさらに好ましい1態様では、少なくとも一つの Ar は、フルオレン基またはスピロビフルオレン基から選ばれ、ここで、これらの基は、夫々、1-,2-,3-もしくは4位で、窒素に結合してよい。式(11)の化合物のなおさらに好ましい1態様では、少なくとも一つの Ar は、ジベンゾフラン基、ジベンゾチオフェン基もしくはカルバゾール基、特に、ジベンゾフラン基で置換されたオルト-、メタ-もしくはパラ-結合基であるフェニレンまたは

10

ビフェニレン基から選ばれ、ここで、ジベンゾフランもしくはジベンゾチオフェン基は、1-,2-,3-もしくは4位を介してフェニレンもしくはビフェニレンに結合し、ここで、カルバゾール基は、1-,2-,3-もしくは4位を介してまたは窒素原子を介してフェニレンまたは

【0146】

式(11)の化合物の特に好ましい1態様では、一つの基 Ar は、フルオレンまたはスピロビフルオレン基、特に、4-フルオレンまたは4-スピロビフルオレン基から選ばれ、一つの基 Ar は、ビフェニル基、特に、パラ-ビフェニル基またはフルオレン基、特に、2-フルオレン基から選ばれ、第3の基 Ar は、ジベンゾフラン基、特に、4-ジベンゾフラン基で置換されたパラ-フェニレン基またはパラ-ビフェニル基、またはカルバゾール基、

20

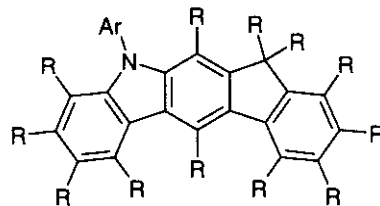
特に、N-カルバゾール基もしくは3-カルバゾール基から選ばれる。

【0147】

本発明による化合物と一緒にコホスト材料として用いられる好ましいインデノカルバゾール誘導体は、以下の式(12)の化合物から選ばれ、

【0148】

【化20】



30

式(12)

【0149】

式中、 Ar と R は、上記所与の意味を有する。ここで、基 Ar の好ましい態様は、上記示された $Ar - 1 \sim Ar - 19$ 構造である。

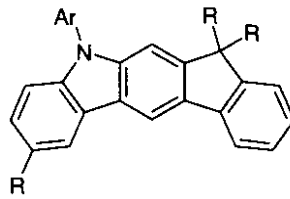
【0150】

式(12)の化合物の好ましい態様は、以下の式(12a)の化合物であり、

40

【0151】

【化 2 1】



式 (12a)

10

【 0 1 5 2】

式中、Ar と R は、上記所与の意味を有する。ここで、インデノ炭素原子に結合する 2 個の基 R は、好ましくは、出現毎に同一であるか異なり、1 ~ 4 個の C 原子を有するアルキル基、特に、メチル基、または 6 ~ 12 個の C 原子を有する芳香族環構造、特に、フェニル基である。特に好ましくは、インデノ炭素原子に結合する 2 個の基 R は、メチル基である。さらに好ましくは、式 (12a) のインデノカルバゾール骨格に結合する置換基 R は、H またはカルバゾール基であり、1-, 2-, 3- もしくは 4- 位を介してまたは N 原子を介して、特に、3- 位を介してインデノカルバゾール骨格に結合することができる。

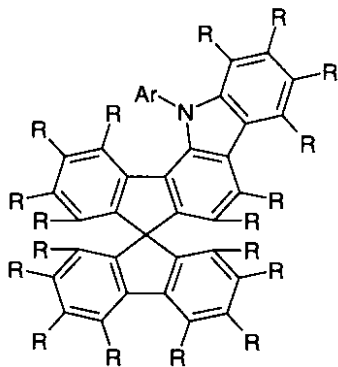
【 0 1 5 3】

20

本発明による化合物と一緒にコホスト材料として用いられる好ましい 4-スピロカルバゾール誘導体は、以下の式 (13) の化合物から選ばれ、

【 0 1 5 4】

【化 2 2】



式 (13)

30

【 0 1 5 5】

40

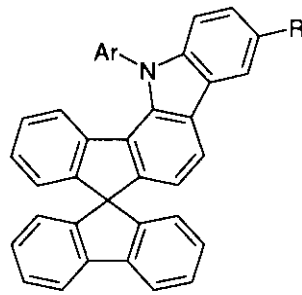
式中、Ar と R は、上記所与の意味を有する。ここで、基 Ar の好ましい態様は、上記示された Ar - 1 ~ Ar - 19 の構造である。

【 0 1 5 6】

式 (13) の化合物の好ましい態様は、以下の式 (13a) の化合物であり、

【 0 1 5 7】

【化 2 3】



式 (13a)

10

【 0 1 5 8 】

式中、Ar と R は、上記所与の意味を有する。

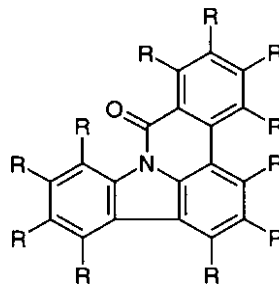
【 0 1 5 9 】

本発明による化合物と一緒にコホスト材料として用いられる好ましいラクタムは、以下の式 (1 4) の化合物から選ばれ、

【 0 1 6 0 】

【化 2 4】

20



式 (14)

30

【 0 1 6 1 】

式中、R は、上記所与の意味を有する。

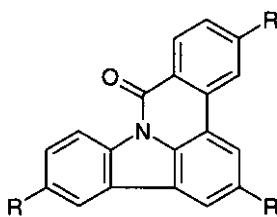
【 0 1 6 2 】

式 (1 4) の化合物の好ましい態様は、以下の式 (1 4 a) の化合物であり、

【 0 1 6 3 】

【化 2 5】

40



式 (14a)

50

【0164】

式中、Rは、上記所与の意味を有する。ここで、Rは、好ましくは、出現毎に同一であるか異なり、Hまたは1以上の基R¹により置換されてよい5～40個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造である。置換基Rは、非常に特に好ましくは、Hまたは各場合に1以上の非芳香族基R¹により置換されてよいが、好ましくは、置換されない6～18個の芳香族環原子を有する、好ましくは、6～13個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造より成る群から選ばれる。適切な置換基Rの例は、フェニル、オルト-、メタ-もしくはパラ-ビフェニル、テルフェニル、特に、分岐テルフェニル、クアテルフェニル、特に、分岐クアテルフェニル、1-,2-,3-もしくは4-フルオレニル、1-,2-,3-もしくは4-スピロピフルオレニル、ピリジル、ピリミジニル、1-,2-,3-もしくは4-ジベンゾフラニル、1-,2-,3-もしくは4-ジベンゾチエニル、1-,2-,3-もしくは4-カルバゾリルであり、夫々、1以上の基R¹により置換されてよいが、好ましくは、置換されない。ここで、適切な構造Rは、Ar-1～Ar-19に対して上記示されるのと同じ構造であり、これらの構造は、Rに代えてR¹により置換される。

10

【0165】

本発明のさらなる1態様では、本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子は、別々の正孔注入層および/または正孔輸送層および/または正孔ブロック層および/または電子輸送層を含まず、換言すれば、たとえば、WO 2005/053501に記載されるとおり、発光層は、正孔注入層もしくはアノードに直接隣接し、および/または発光層は、電子輸送層もしくは電子注入層もしくはカソードに直接隣接することを意味する。さらに、たとえば、WO 2009/030981に記載されるとおり、発光層中の金属錯体と同一または類似する金属錯体を、発光層に直接隣接して、正孔輸送もしくは正孔注入材料として使用することも可能である。

20

【0166】

本発明による化合物を、正孔ブロックでまたは電子輸送層中で用いることがさらに好ましい。これは、特に、カルバゾール構造を含まない本発明による化合物に、特に、あてはまる。これらは、好ましくは、1以上のさらなる電子輸送基、たとえば、ベンズイミダゾール基により置換されてもよい。

【0167】

本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子のさらなる層では、先行技術にしたがって通常用いられるとおりの全ての材料を使用することができる。したがって、当業者は、発明性を行使することなく、本発明による式(1)または式(2)の化合物または好ましい態様によるものと組み合わせて、有機エレクトロルミネッセンス素子のために知られた全ての材料を使用することができる。

30

【0168】

更に好ましいのは、1以上の層が、昇華プロセスにより適用されることを特徴とする有機エレクトロルミネッセンス素子であり、材料は、10⁻⁵ mbar未満、好ましくは、10⁻⁶ mbar未満の初期圧力で、真空昇華ユニット中で気相堆積により適用される。しかしながら、初期圧力は、さらにより低くても、たとえば、10⁻⁷ mbar未満でも可能である。

【0169】

同様に好ましいのは、1以上の層が、OVPD(有機気相堆積)法もしくはキャリアガス昇華により被覆されることを特徴とする有機エレクトロルミネッセンス素子であり、この場合に、材料は、10⁻⁵ mbar～1 barの圧力で適用される。この方法の特別な場合は、OVJP(有機気相ジェット印刷)法であり、材料はノズルにより直接適用され、そのように構造化される(たとえば、M. S. Arnold et al., Appl. Phys. Lett. 2008, 92, 053301)。

40

【0170】

さらに、好ましいのは、1以上の層が、溶液から、たとえば、スピンコーティングにより、もしくは、たとえば、インクジェット印刷、LEIT(光誘起熱画像化、熱転写印刷)、スクリーン印刷、フレキソ印刷、オフセット印刷もしくはノズル印刷のような任意の

50

所望の印刷プロセスにより製造されることを特徴とする有機エレクトロルミネッセンス素子である。たとえば、適切な置換により得られた可溶性の化合物が、この目的のために必要である。

【0171】

また、たとえば、一以上の層が溶液から適用され、一以上のさらなる層が気相堆積により適用されるハイブリッド法が可能である。したがって、たとえば、溶液から発光層を適用し、気相堆積により電子輸送層を適用することも可能である。

【0172】

これらの方法は、当業者に一般的用語で知られており、本発明の化合物を含む有機エレクトロルミネッセンス素子を、発明性を行使することなく適用することができる。

10

【0173】

本発明の化合物は、有機エレクトロルミネッセンス素子に使用すると、非常に良好な特性を一般的に有する。特に、本発明による化合物を有機エレクトロルミネッセンス素子に使用すると、先行技術にしたがう同様の化合物と比べて、寿命は顕著により良好である。有機エレクトロルミネッセンス素子のその他の特性、特に、効率と電圧は、同様により良好であるか、少なくとも同等である。

【0174】

本発明は、次の例により詳細に説明されるが、それにより限定することを望むものではない。

【0175】

20

例

以下の合成を、別段の指定がない限り、無水溶媒中で、保護ガス雰囲気下で実施する。溶媒および試薬を、たとえばSigma-ALDRICHまたはABCRから購入することができる。対応するCAS番号もまた各場合に、文献から知られている化合物について示されている。

【0176】

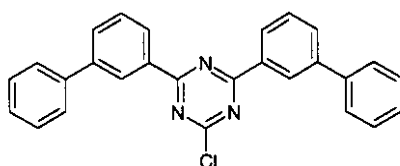
合成例

a) トリアジンの合成：2,4-ビスビフェニル-3-イル-6-クロロ-1,3,5-トリアジン

【0177】

【化26】

30



【0178】

5.2 gのマグネシウム(0.215モル)を最初に、500 mlの四つ口フラスコに入れ、200 mlのTHF中、50 gのプロモビフェニル(214ミリモル)の溶液をゆっくりと滴下する。反応混合物を1.5時間、沸騰加熱し、その後、室温まで冷ます。150 mlのTHF中の塩化シアン(17.2 g、93ミリモル)を最初に、第2のフラスコに入れ、0℃に冷やす。冷却されたグリニャール試薬をこの温度で滴下し、混合物を室温で12時間、攪拌する。この時間後、150 mlのHClを反応混合物に添加し、水相をジクロロメタンにより三度抽出する。結合した有機相を水で洗浄し、Na₂SO₄で脱水させ、蒸発させる。残留物をEtOHから再結晶化させる。収率は32.8 g(78ミリモル、84%)である。

40

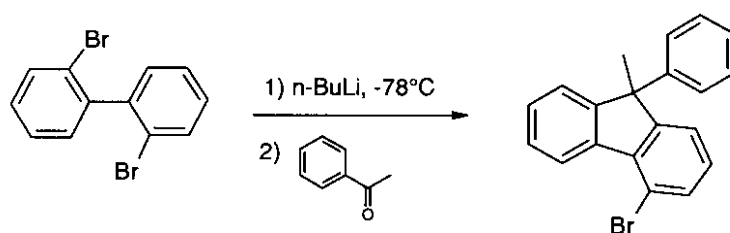
【0179】

b) 4-プロモ-9-メチル-9-フェニル-9H-フルオレン

【0180】

50

【化27】



10

【0181】

30 g (94ミリモル)の2,2'-ジブロモビフェニルを、加熱により乾燥させたフラスコ中の200mlの無水THFに溶解させる。反応混合物を-78に冷却する。この温度で、ヘキサン(94ミリモル)中、n-ブチル-リチウムの37.7mlの2.5M溶液をゆっくりと滴下する(期間:約1時間)。バッチを-70でさらに1時間攪拌する。その後、11.1mlのアセトフェノン(94ミリモル)を100mlのTHFに溶解させ、-70で滴下する。添加が完了したとき、反応混合物をゆっくりと室温まで温め、NH₄Clでクエンチし、その後、ロータリーエバポレーターで濃縮する。300mlの酢酸を、濃縮した溶液に慎重に添加し、50mlの発煙HClをその後、添加する。バッチを75で6時間、加熱し、その期間に、白色の固形物を沈殿させる。バッチを室温に冷まし、沈殿した固形物を吸引濾過し、メタノールで濯ぐ。残留物を40で真空で乾燥させる。収率は25.3g(75ミリモル)(理論値の80%)である。

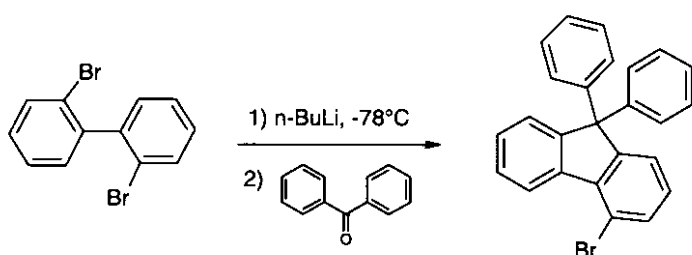
20

【0182】

c) 4-プロモ-9,9-ジフェニル-9H-フルオレン

【0183】

【化28】



30

【0184】

37g(152ミリモル)の2,2'-ジブロモビフェニルを、加熱により乾燥させたフラスコ中の300mlの無水THFに溶解させる。反応混合物を-78に冷却する。この温度で、ヘキサン(119ミリモル)中、n-ブチル-リチウムの75mlの15%溶液をゆっくりと滴下する(期間:約1時間)。バッチを-70でさらに1時間攪拌する。その後、21.8gのベンゾフェノン(119ミリモル)を、100mlのTHFに溶解させ、-70で滴下する。添加が完了したとき、反応混合物をゆっくりと室温まで温め、NH₄Clでクエンチし、その後、ロータリーエバポレーターで濃縮する。510mlの酢酸を、濃縮した溶液に慎重に添加し、100mlの発煙HClをその後、添加する。バッチを75で4時間、加熱し、その期間に、白色固形物を沈殿させる。バッチを次いで、室温に冷まし、沈殿した固形物を吸引濾過し、メタノールで濯ぐ。残留物を40で真空で乾燥させる。収率は33.2g(83ミリモル)(理論値の70%)である。

40

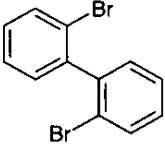
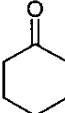
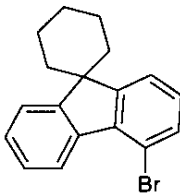
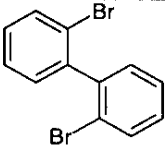

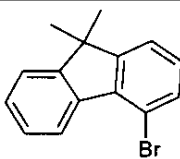
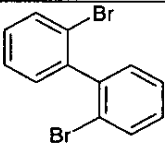
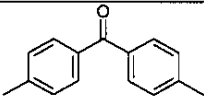
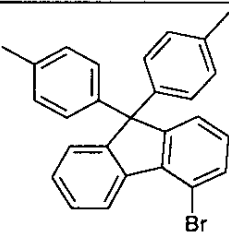
50

【 0 1 8 5 】

同じような方法で、以下の臭素化化合物を調製する：

【 0 1 8 6 】

【 化 2 9 】

	出発材料 1	出発材料 2	生成物	収率
c1				78%
c2				70%
c3				82%

10

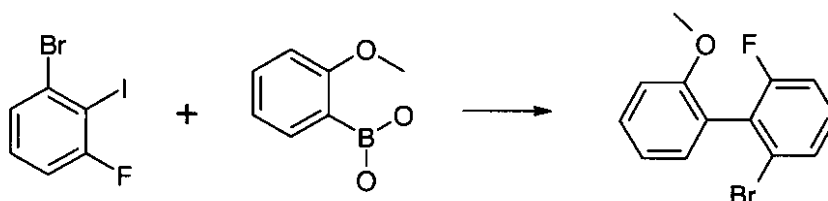
20

【 0 1 8 7 】

d) 6-ブromo-2-フルオロ-2'-メトキシビフェニル

【 0 1 8 8 】

【 化 3 0 】



30

【 0 1 8 9 】

200 g (664ミリモル)の1-ブromo-3-フルオロ-2-ヨードベンゼンと、101 g (664ミリモル)の2-メトキシフェニルボロン酸と、137.5 g (997ミリモル)の四ホウ酸ナトリウムとを、1000 mlのTHFと600 mlの水とに溶解させ、脱気する。9.3 g (13.3ミリモル)のビス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(II)クロリドと1 g (20ミリモル)の水酸化ヒドラジニウムとを添加する。その後、反応混合物を、70℃で保護ガス雰囲気下で、48時間攪拌する。冷却した溶液をトルエンで増し、水で複数回洗浄し、乾燥させ、蒸発させる。生成物をトルエン/ヘプタン(1:2)とともに、シリカゲルにおいてクロマトグラフィにより精製する。収率：155 g (553ミリモル)、理論値の83%。

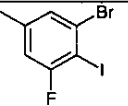
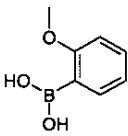
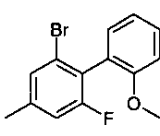
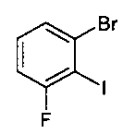
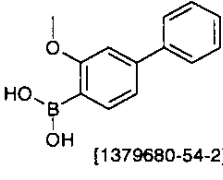
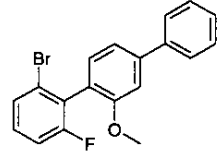
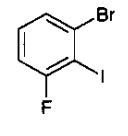
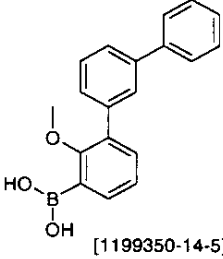
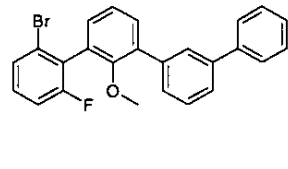
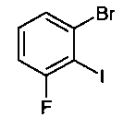
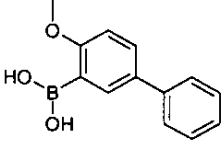
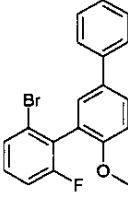
40

【 0 1 9 0 】

同じような方法で、以下の化合物を調製する：

【 0 1 9 1 】

【化31】

	出発材料 1	出発材料 2	生成物	収率
d1	 [1000576-09-9]			77%
d2		 [1379680-54-2]		74%
d3		 [1199350-14-5]		76%
d4		 [1114496-44-4]		71%

10

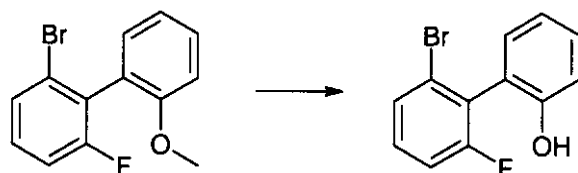
20

【0192】

e) 6'-プロモ-2'-フルオロビフェニル-2-オル

【0193】

【化32】



30

40

【0194】

112g (418ミリモル)の6-プロモ-2-フルオロ-2'-メトキシビフェニルを2lのジクロロメタンに溶解させ、5℃に冷却する。41.01ml (431モル)の三臭化ホウ素を、90分間にわたりこの溶液に滴加し、終夜、攪拌を続ける。その後、水を混合物にゆっくりと添加し、有機相を水で三度洗浄し、 Na_2SO_4 で脱水させ、ロータリーエバポレーターで蒸発させ、クロマトグラフィにより精製する。収率：104g (397ミリモル)、理論値の98%。

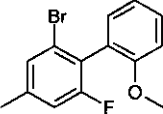
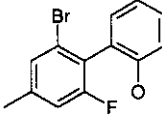
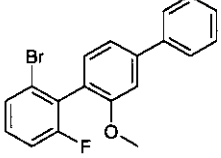
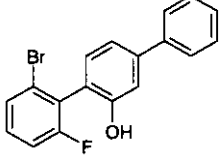
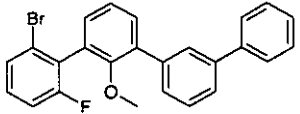
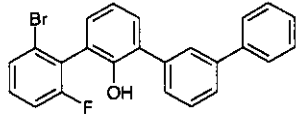
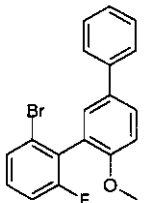
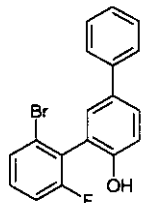
【0195】

同じような方法で、以下の化合物を調製する：

【0196】

50

【化33】

	出発材料 1	生成物	収率
e1			92%
e2			90%
e3			93%
e4			94%

10

20

【0197】

f) 1-ブロモジベンゾフラン

【0198】

【化34】



30

【0199】

111g (416ミリモル)の6'-ブromo-2'-フルオロビフェニル-2-オルを、2lのSeccoSolv(登録商標)DMF(最大0.003%のH₂O)で溶解させ、5℃に冷却する。20g(449ミリモル)の水素化ナトリウム(パラフィンオイル中60%の懸濁液)を、この溶液に小分けして添加し、混合物の添加が完了後、混合物をさらに20分間攪拌し、次いで、100℃で45分間加熱する。冷ました後、500mlのエタノールをこの混合物へゆっくりと滴下し、次いで、ロータリーエバポレーターで蒸発させ、次いでクロマトグラフィにより精製する。収率：90g(367ミリモル)、理論値の88.5%。

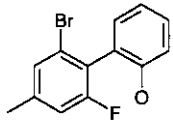
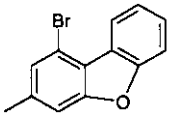
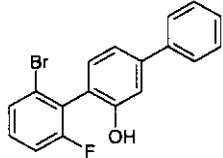
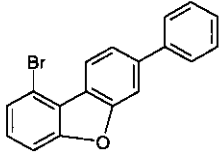
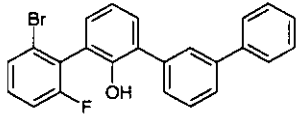
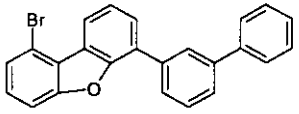
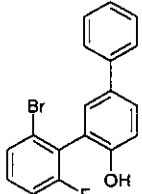
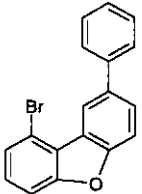
40

【0200】

同じような方法で、以下の化合物を調製する：

【0201】

【化35】

	出発材料 1	生成物	収率
f1			81%
f2			78%
f3			73%
f4			79%

10

20

【0202】

g) ジベンゾフラン-1-ボロン酸と、ボロン酸エステル

【0203】

【化36】



30

【0204】

180 g (728ミリモル)の1-ブロモジベンゾフランを1500 mlの無水THFに溶解させ、-78℃に冷却する。この温度で、305 ml (764ミリモル/ヘキサン中2.5 M)のn-ブチルリチウムを約5分間にわたって添加し、その後、混合物を-78℃でさらに2.5時間攪拌する。この温度で、151 g (1456ミリモル)のホウ酸トリメチルを可能な限り迅速に添加し、反応混合物をゆっくりと室温にさせておく(約18時間)。反応溶液を水で洗浄し、沈殿した固形物を濾過し、有機相をトルエンと共沸的に脱水させる。粗生成物は、約40 gでトルエン/塩化メチレンとともに攪拌洗浄され、吸引濾過される。収率：146 g (690ミリモル)、理論値の95%。

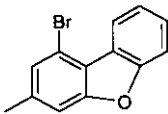
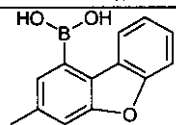
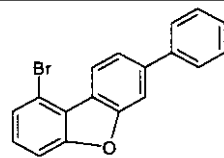
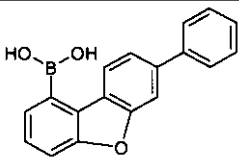
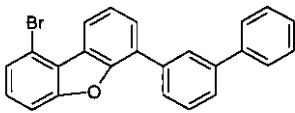
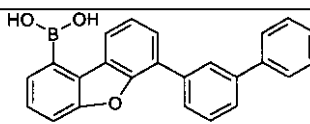
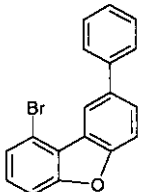
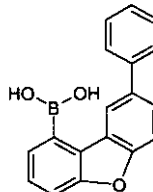
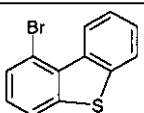
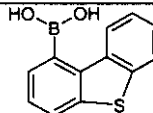
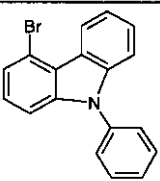
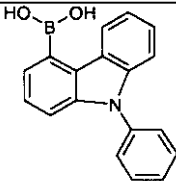
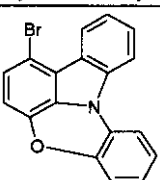
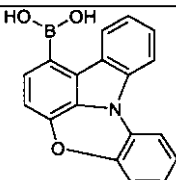
40

【0205】

同じような方法で、以下の化合物を調製する：

【0206】

【化 3 7 - 1】

	出発材料 1	生成物	収率
g1			81%
g2			78%
g3			73%
g4			79%
g5	 [65642-94-6]		73%
g6	 [1097884-37-1]		70%
g7	 [1415901-44-8]		70%

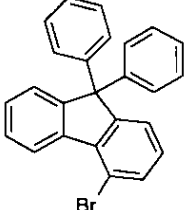
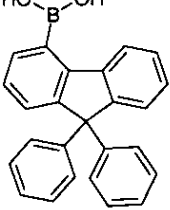
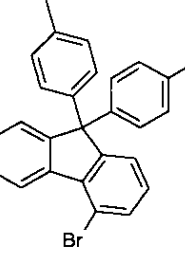
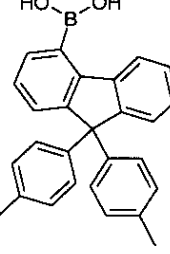
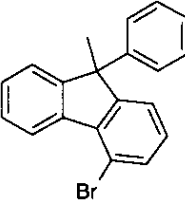
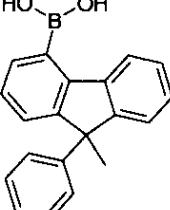
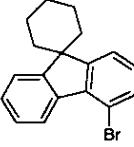
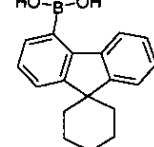
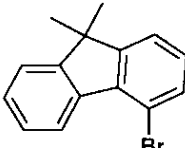
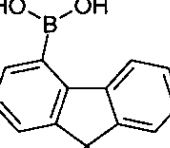
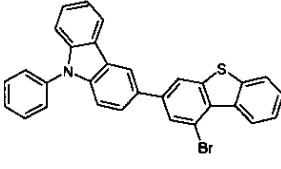
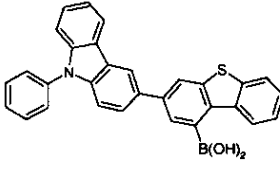
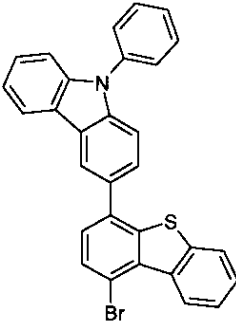
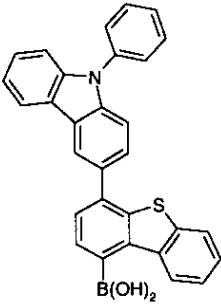
10

20

30

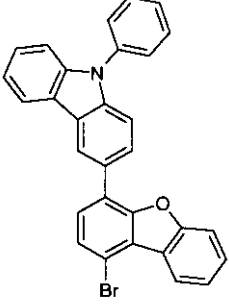
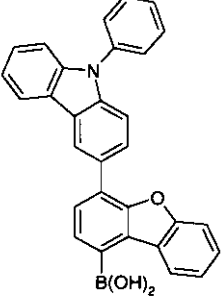
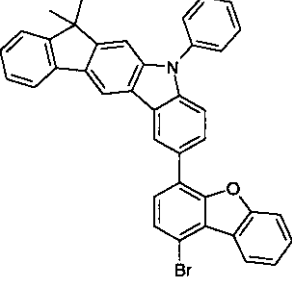
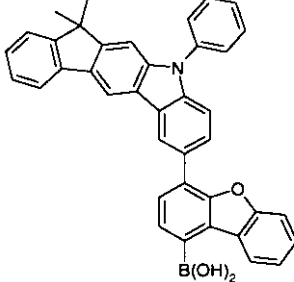
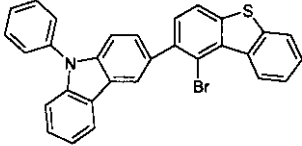
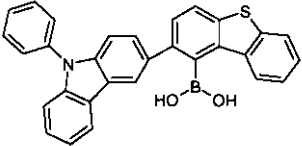
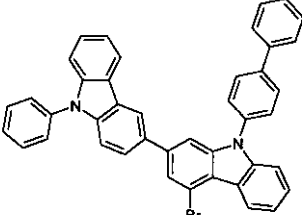
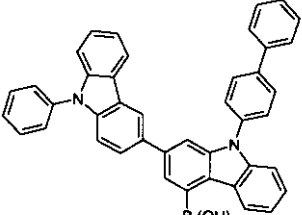
【 0 2 0 7 】

【化 3 7 - 2】

g8			78%	10
g9			81%	20
g10			86%	30
g11			83%	40
g12			85%	
g13	 <p style="text-align: center;">K)</p>	 <p style="text-align: center;">B(OH)₂</p>	82%	
g14	 <p style="text-align: center;">K1</p>	 <p style="text-align: center;">B(OH)₂</p>	80%	

【 0 2 0 8】

【化37-3】

g15	 K2	 B(OH) ₂	83%	
g16	 K3	 B(OH) ₂	82%	
g17	 K4	 HO-B-OH	81%	
g18	 K5	 B(OH) ₂	84%	

10

20

30

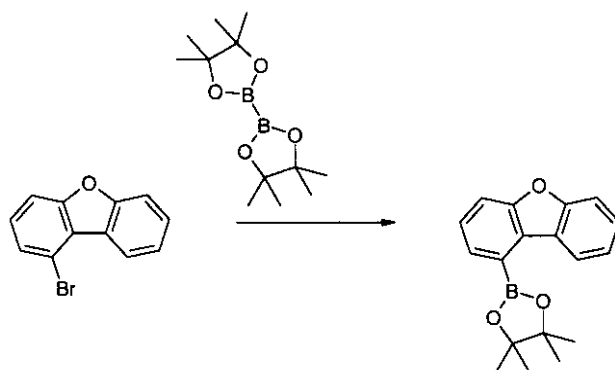
【0209】

g 19) 1-(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)-ジベンゾフランの合成

【0210】

40

【化38】



10

【0211】

101 g (410ミリモル)の1-ブロモジベンゾフランを、500 mlのフラスコ中の、保護ガス下の、273 g (1055ミリモル)のビス(ピナコラート)ジボラン(CAS 73183-34-3)とともに、1500 mlの無水DMFに溶解させ、30分間脱気する。121 g (1229ミリモル)の酢酸カリウムと、8.4 g (37ミリモル)の酢酸パラジウムとを、その後、添加し、パッチを終夜、80 で加熱する。反応が完了したとき、混合物を300 mlのトルエンで希釈し、水で抽出する。溶媒をロータリーエバポレーターで除去し、生成物をヘプタンから再結晶化させる。収率：118 g (401ミリモル)、理論値の98%。

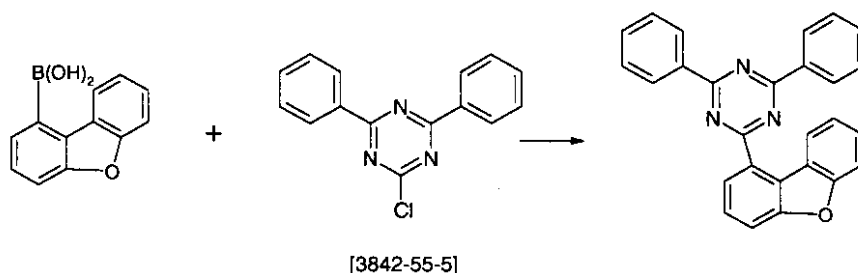
20

【0212】

h) 2-ジベンゾフラン-1-イル-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン

【0213】

【化39】



30

【0214】

23 g (110.0ミリモル)のジベンゾフラン-1-ボロン酸と、29.5 g (110.0ミリモル)の2-クロロ-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジンと、21 g (210.0ミリモル)の炭酸ナトリウムとを、500 mlのエチレングリコールジアミンエーテルと、500 mlの水とに懸濁させる。913 mg (3.0ミリモル)のトリ-*o*-トリルホスフィンと、次いで112 mg (0.5ミリモル)の酢酸パラジウム(II)とをこの懸濁液に添加し、反応混合物を還流下で16時間、加熱する。冷ました後、有機相を分離させ、シリカゲルを通して濾過し、200 mlの水で三度洗浄し、その後、蒸発乾固させる。残留物をトルエンと、ジクロロメタン/ヘプタンとから再結晶化させる。収率は37 g (94ミリモル)であり、理論値の87%に対応する。

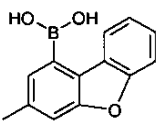
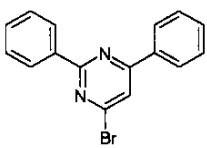
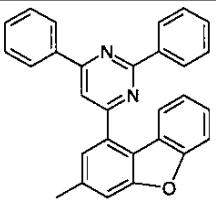
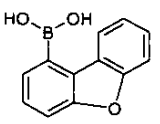
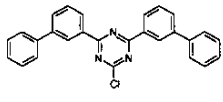
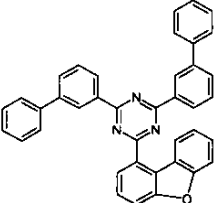
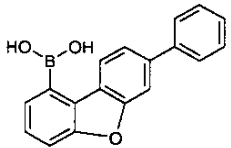
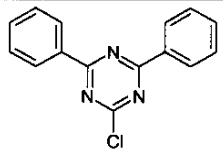
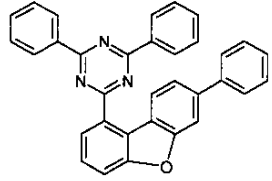
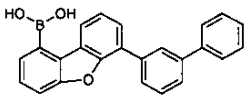
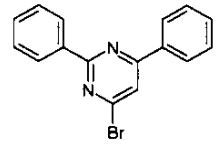
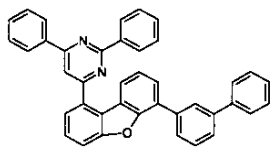
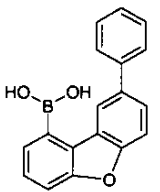
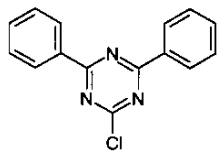
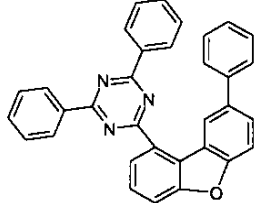
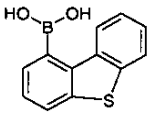
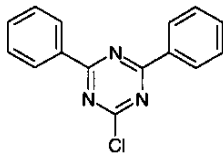
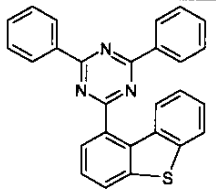
40

【0215】

同じような方法で、以下の化合物を調製する：

【0216】

【化40-1】

	出発材料 1	出発材料 2	生成物	収率
h1		 [40734-24-5]		73%
h2				82%
h3		 [3842-55-5]		73%
h4		 40734-4-5		72%
h5				65%
h6				63%

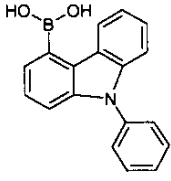
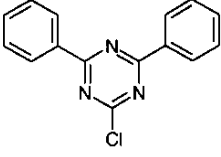
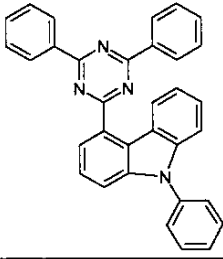
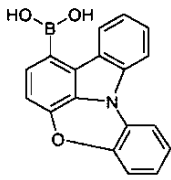
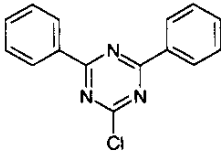
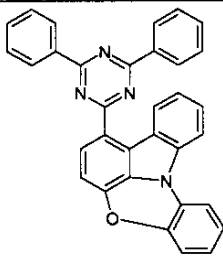
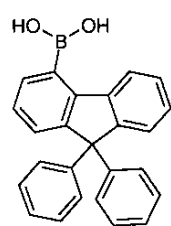
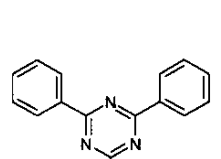
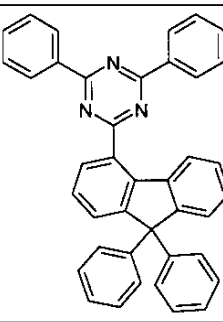
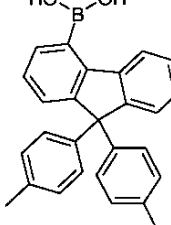
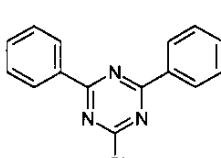
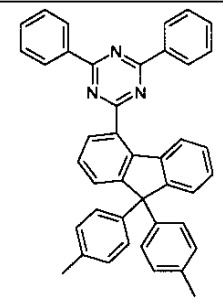
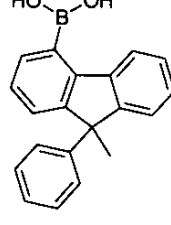
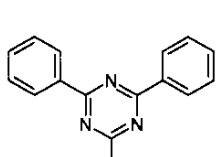
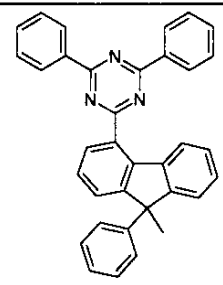
10

20

30

【0217】

【化40-2】

h7				72%
h8				75%
h9				79%
h10				81%
h11				85%

10

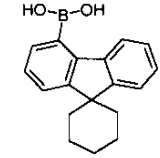
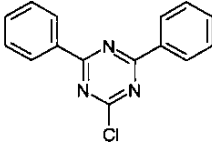
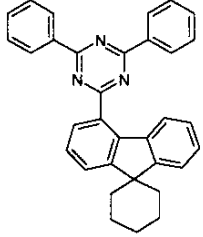
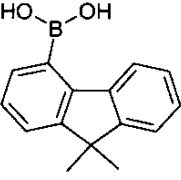
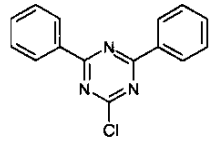
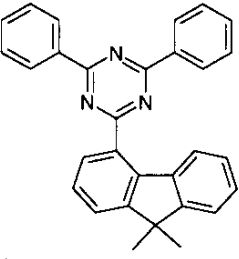
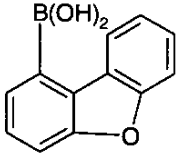
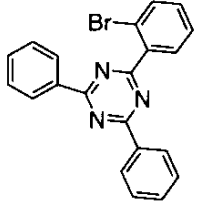
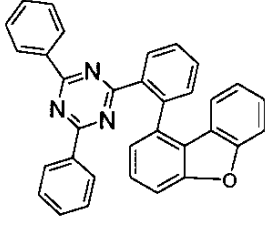
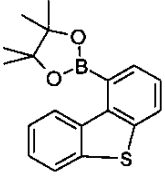
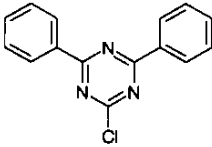
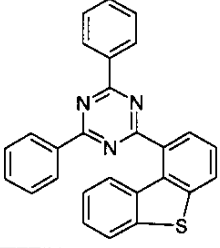
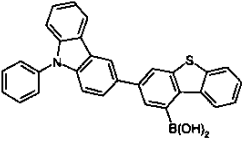
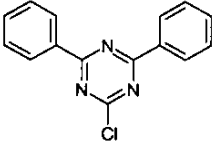
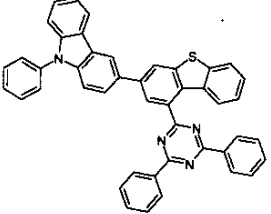
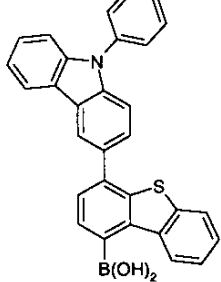
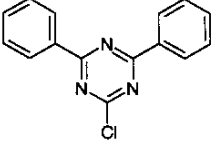
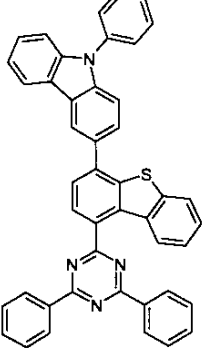
20

30

40

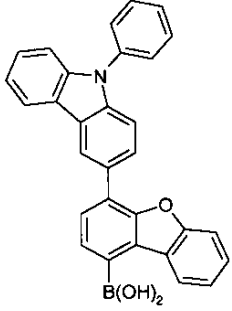
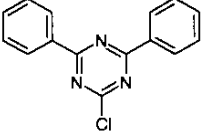
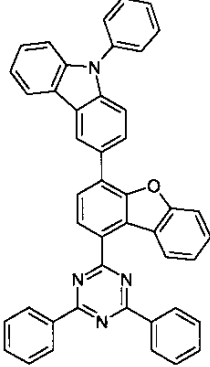
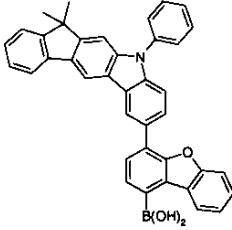
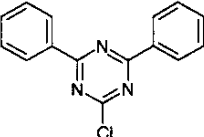
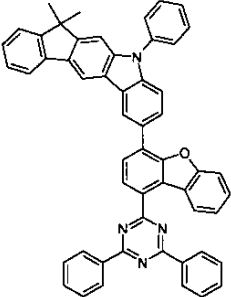
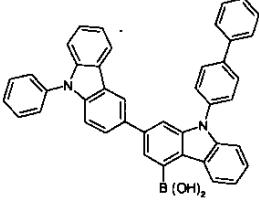
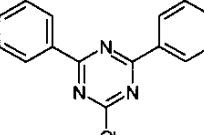
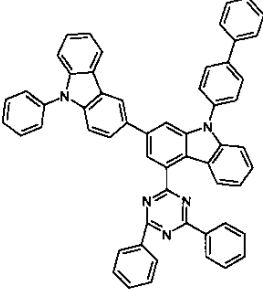
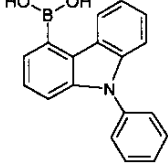
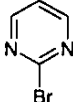
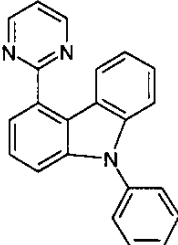
【0218】

【化40-3】

h12				80%	10
h13				79%	
h14		 <p>77989-15-2</p>		77%	20
h15	 <p>[1434286-69-7]</p>			76%	30
h16				71%	40
h17				75%	

【0219】

【化40-4】

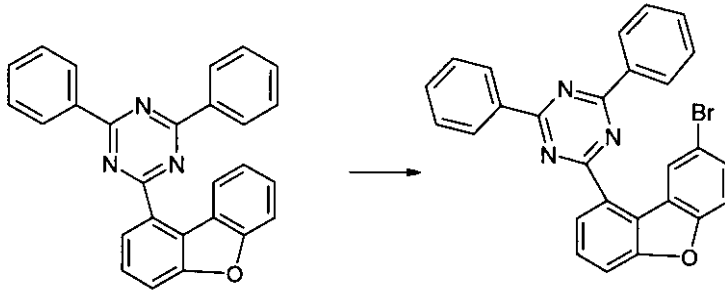
h18				76%	10
h19				80%	20
h20				79%	30
h21		 <p>4595-60-2</p>		82%	40

【0220】

i) 2-(8-ブロモジベンゾフラン-1-イル)-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン

【0221】

【化 4 1】



10

【 0 2 2 2 】

70 g (190.0ミリモル)の2-ジベンゾフラン-1-イル-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジンを、2000 mlの酢酸(100%)と、2000 mlの硫酸(95-98%)とに懸濁させる。34 g (190ミリモル)のNBSをこの懸濁液に小分けして添加し、混合物を、暗所で2時間攪拌する。次いで水/氷を添加し、固形物を分離させ、エタノールで濯ぐ。残留物をトルエンから再結晶化させる。収率は80 g (167ミリモル)であり、理論値の87%に対応する。

【 0 2 2 3 】

同じような方法で、以下の化合物を調製する：

【 0 2 2 4 】

20

【化 4 2 - 1】

	出発材料 1	生成物	収率
i1			80%
i2			41%
i3			52%
i4			64%
i5			33%

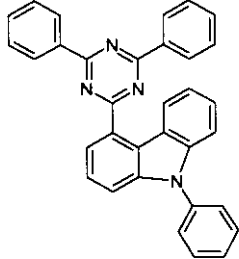
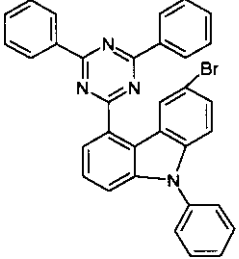
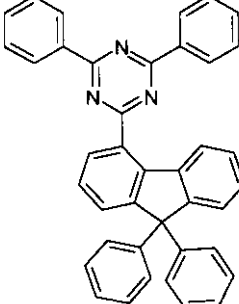
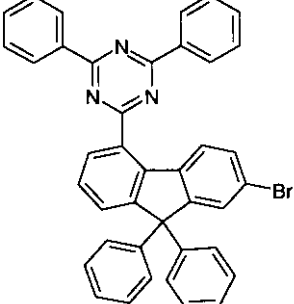
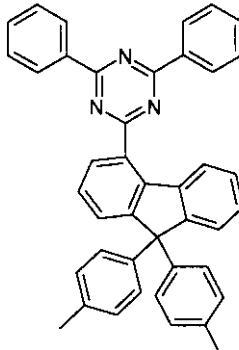
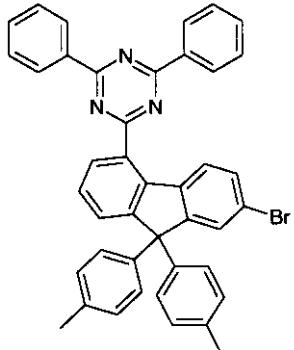
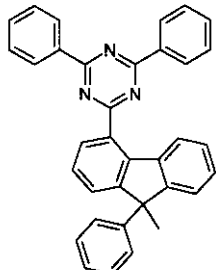
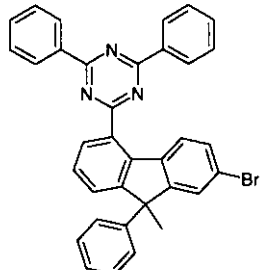
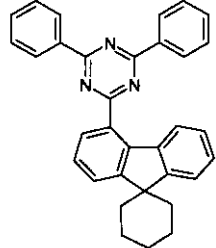
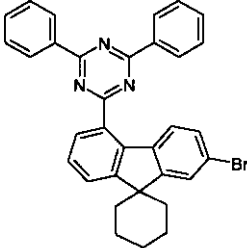
10

20

30

【 0 2 2 5 】

【化 4 2 - 2】

i6			73%
i7			78%
i8			80%
i9			70%
i10			86%

10

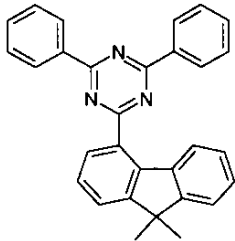
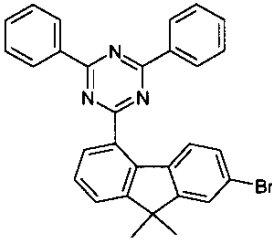
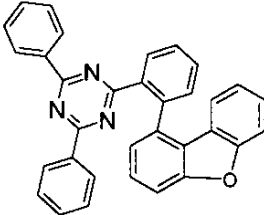
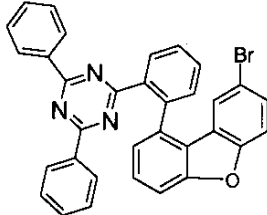
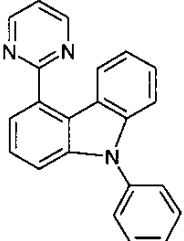
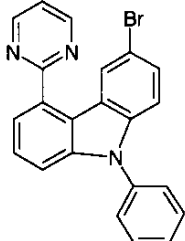
20

30

40

【 0 2 2 6 】

【化42-3】

i11			88%
i12			41%
i13			73%

10

20

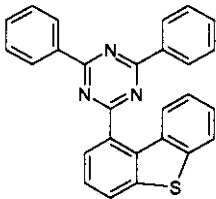
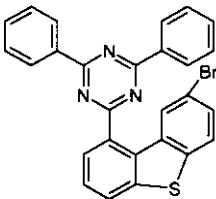
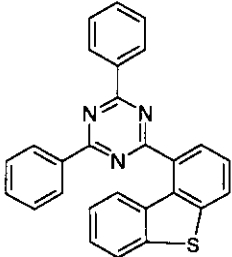
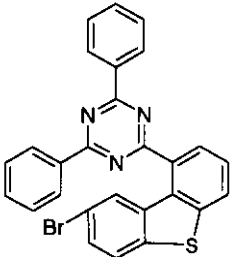
【0227】

ジベンゾチオフェン誘導体の場合、ニトロベンゼンが硫酸の代わりに使用され、元素状臭素がNBSの代わりに用いられる：

【0228】

【化43】

30

i14			55%
i15			52%

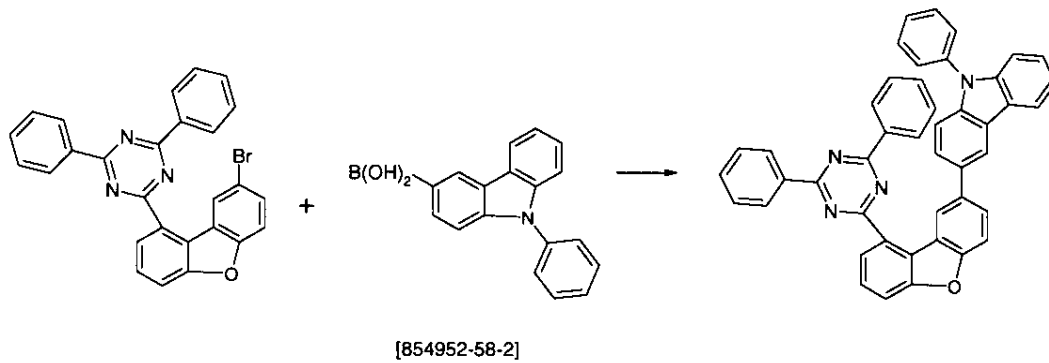
40

【0229】

j) 3-[9-(4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン-2-イル)ジベンゾフラン-2-イル]-9-フェニル-9H-カルバゾール

【0230】

【化44】



10

【0231】

75 g (156ミリモル)の2-(8-ブロモジベンゾフラン-1-イル)-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジンと、50 g (172ミリモル)のN-フェニルカルバゾール-3-ボロン酸と、36 g (340ミリモル)の炭酸ナトリウムとを、1000 mlのエチレングリコールジアミンエーテルと280 mlの水に懸濁させる。1.8 g (1.5ミリモル)のテトラキス-(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)をこの懸濁液に添加し、反応混合物を還流下で16時間、加熱する。冷ました後、有機相を分離させ、シリカゲルを通して濾過し、2000 mlの水で三度洗浄し、その後蒸発乾固させる。生成物をトルエン/ヘプタン(1:2)とともにシリカゲルにおいてクロカラムクロマトグラフィにより精製し、最後に高真空($p = 5 \times 10^{-7}$ mbar)で昇華させる(純度99.9%)。収率は50 g (78ミリモル)であり、理論値の50%に対応する。

20

【0232】

同じような方法で、以下の化合物を調製する：

【0233】

【化45-1】

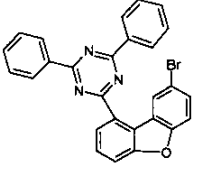
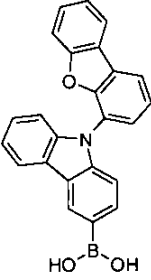
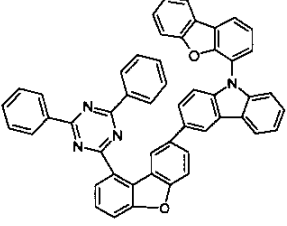
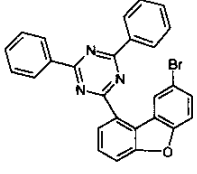
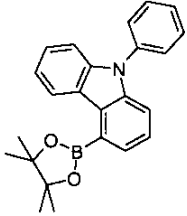
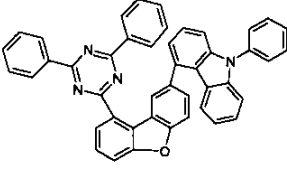
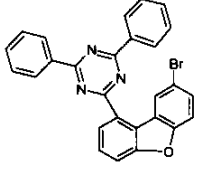
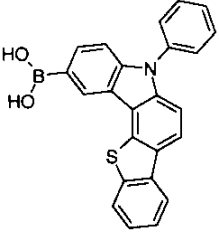
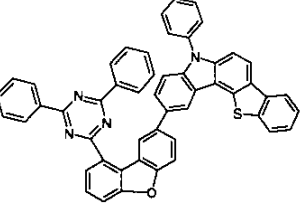
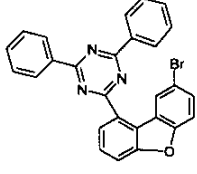
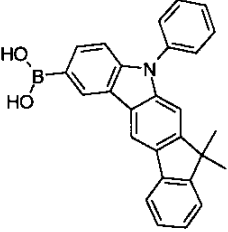
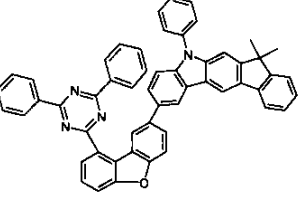
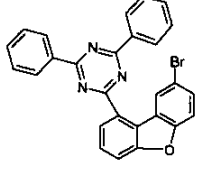
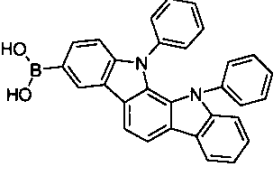
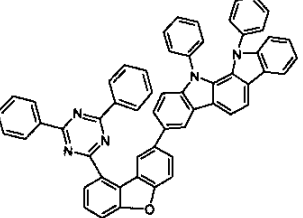
	出発材料 1	出発材料 2	生成物	収率
j1		 [1572537-61-1]		61%

30

【0234】

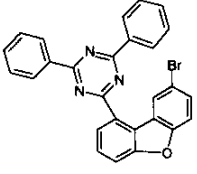
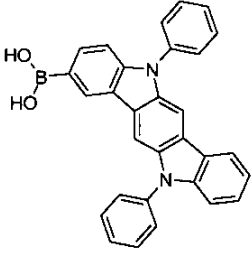
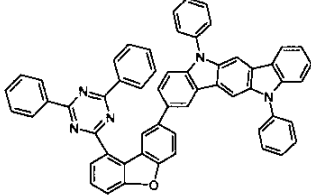
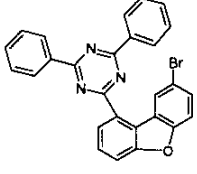
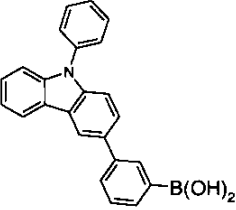
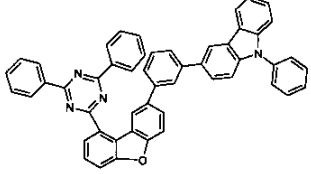
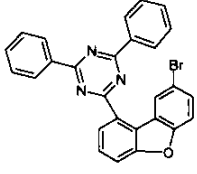
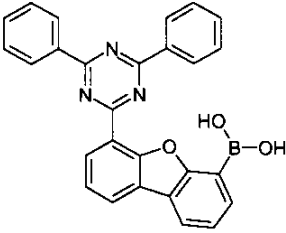
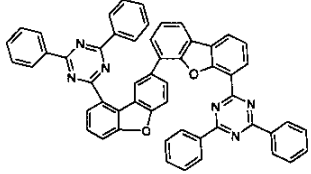
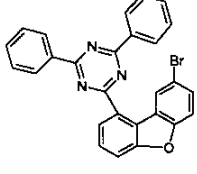
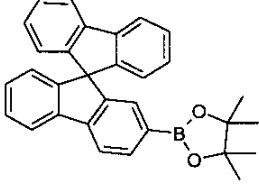
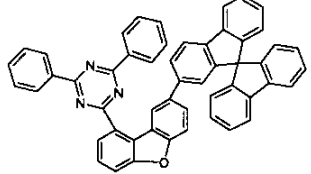
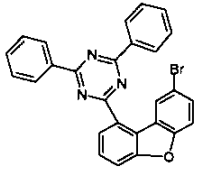
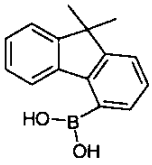
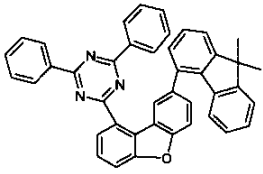
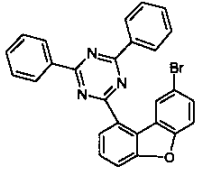
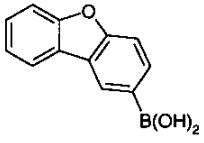
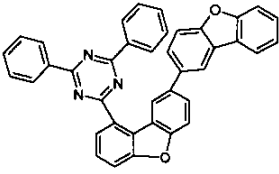
40

【化45-2】

j2		 [1547397-15-8]		67%	10
j3		 [1547492-13-6]		65%	20
j4		 [1391729-63-7]		53%	30
j5		 [1379585-25-7]		58%	40
j6		 [1373359-67-1]		54%	

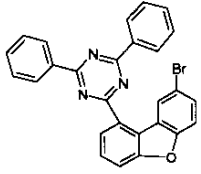
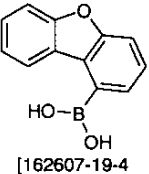
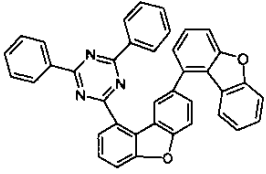
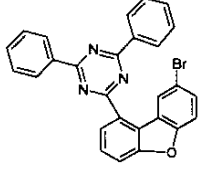
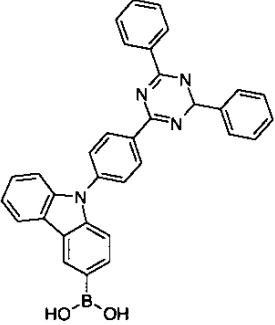
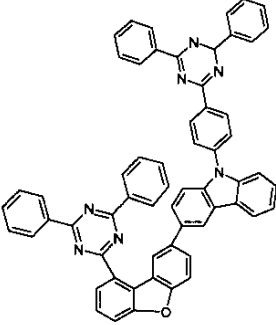
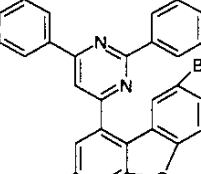
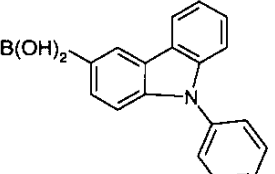
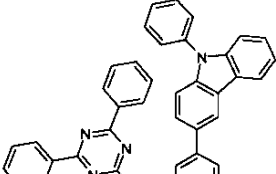
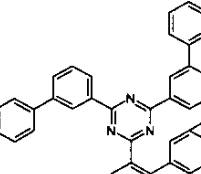
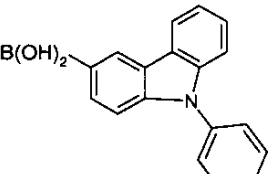
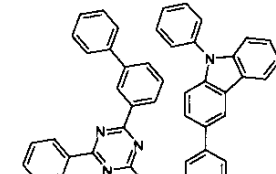
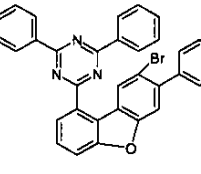
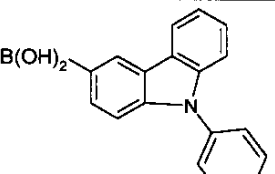
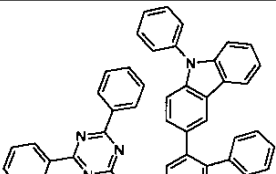
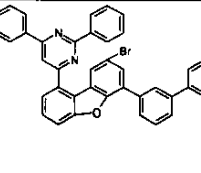
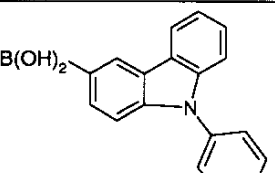
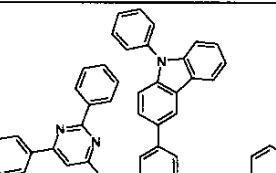
【0235】

【化45-3】

j7		 [1314019-74-3]		65%	10
j8		 854952-60-6		71%	
j9		 [1449739-29-0]		56%	20
j10		 [1557257-88-1]		79%	30
j11		 [1246022-50-3]		70%	40
j12		 [402936-15-6]		82%	

【0236】

【化45-4】

j13		 HO-B(OH) ₂ [162607-19-4]		69%
j14		 HO-B(OH) ₂		65%
j15		 B(OH) ₂		77%
j16		 B(OH) ₂		82%
j17		 B(OH) ₂		54%
j18		 B(OH) ₂		67%

10

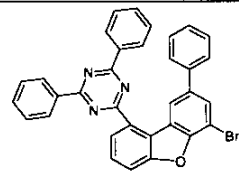
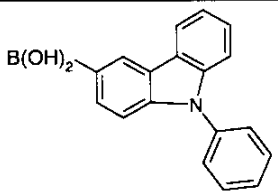
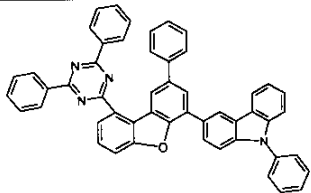
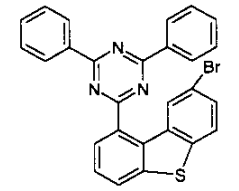
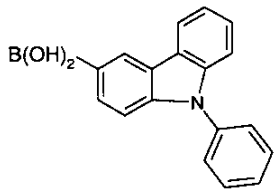
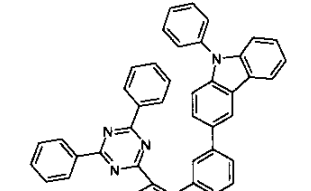
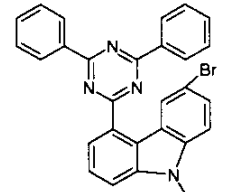
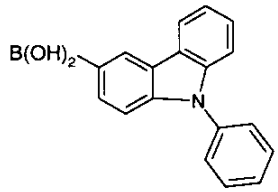
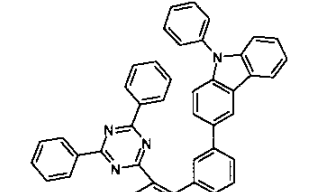
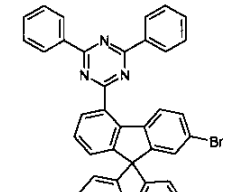
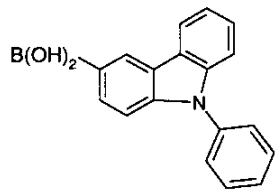
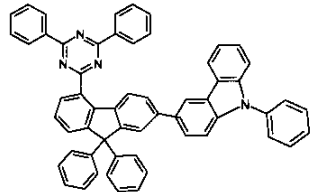
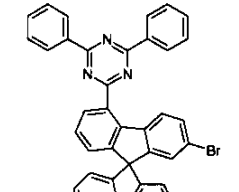
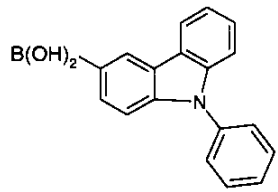
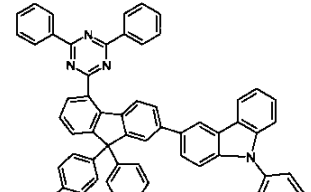
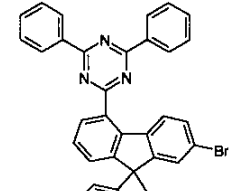
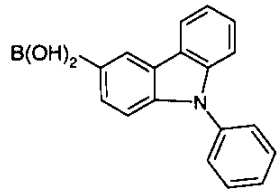
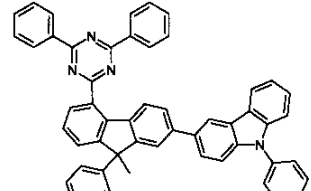
20

30

40

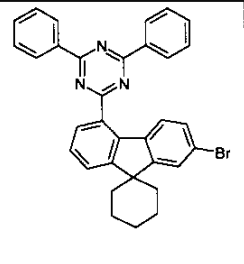
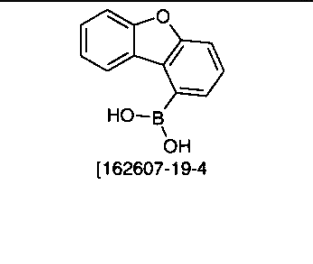
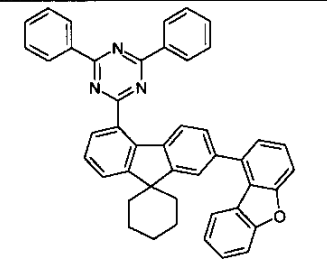
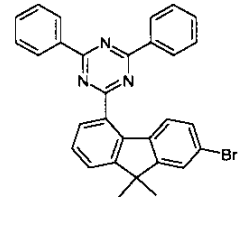
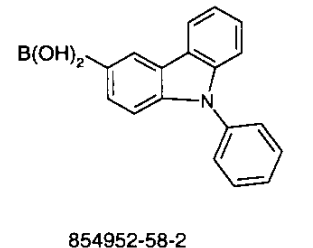
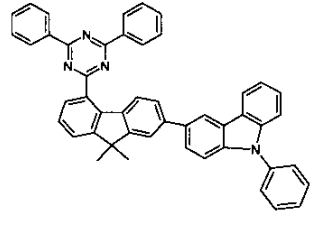
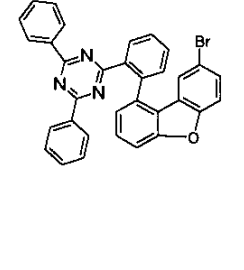
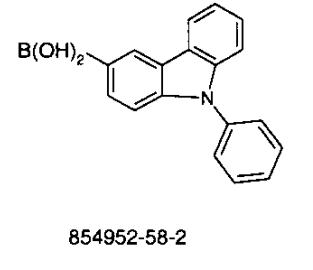
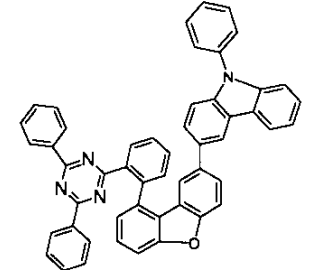
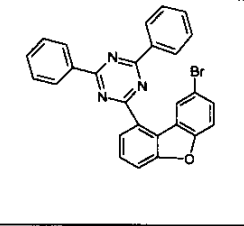
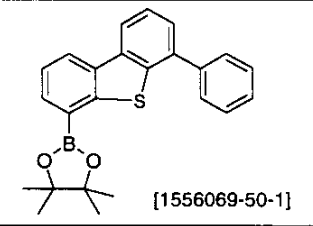
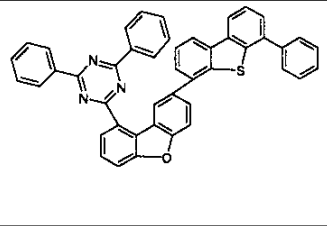
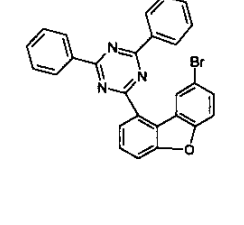
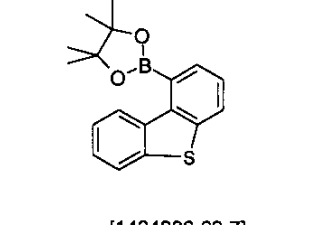
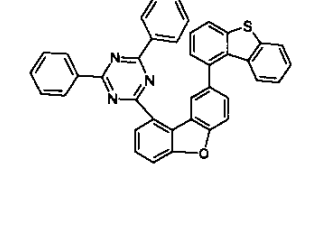
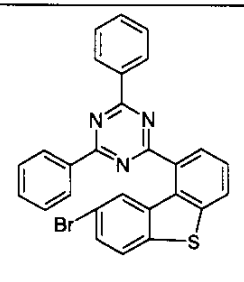
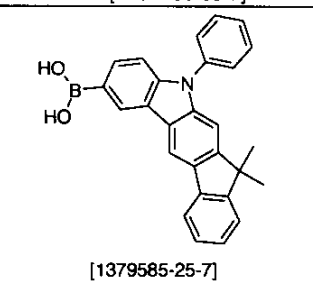
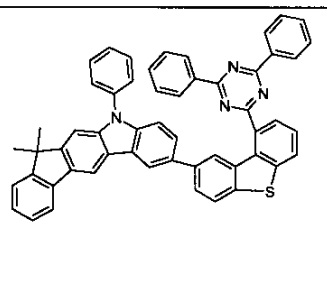
【0237】

【化45-5】

j19		 B(OH) ₂		65%	10
		854952-58-2			
j20		 B(OH) ₂		63%	20
		854952-58-2			
j21		 B(OH) ₂		79%	30
		854952-58-2			
j22		 B(OH) ₂		65%	40
		854952-58-2			
j23		 B(OH) ₂		55%	
		854952-58-2			
j24		 B(OH) ₂		67%	
		854952-58-2			

【0238】

【化45-6】

j25		 HO-B(OH) ₂ [162607-19-4]		73%	10
j26		 B(OH) ₂ 854952-58-2		66%	
j27		 B(OH) ₂ 854952-58-2		59%	20
j28		 [1556069-50-1]		64%	30
j29		 [1434286-69-7]		71%	
j30		 HO-B(OH) ₂ [1379585-25-7]		62%	40

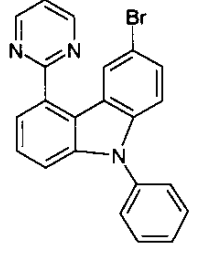
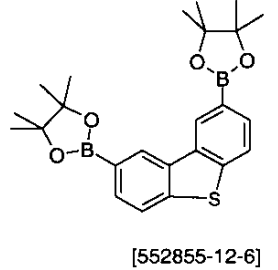
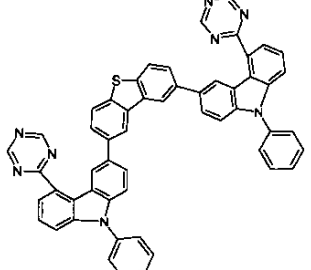
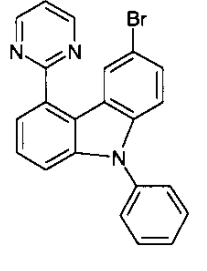
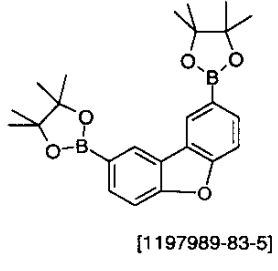
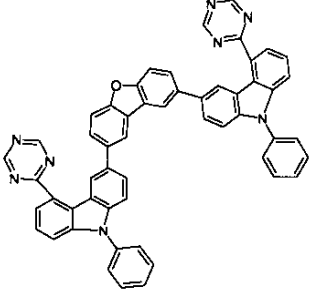
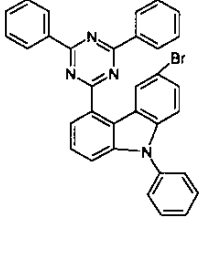
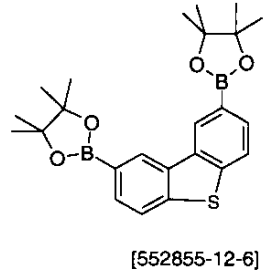
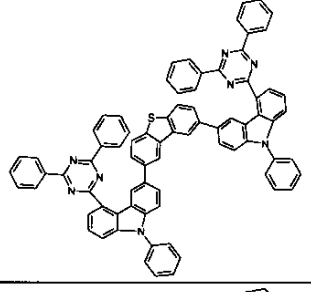
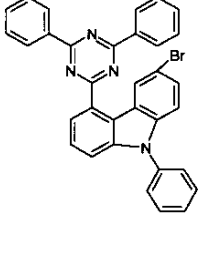
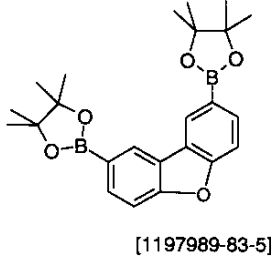
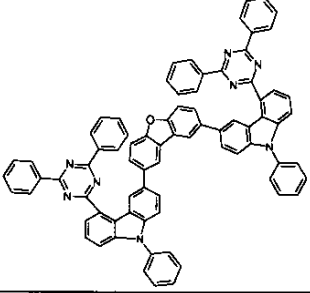
【0239】

同じような方法で、0.5当量の対応する臭化物を使用して、以下の化合物を調製する

:

【0240】

【化46】

<p>j31 化合物</p>		 <p>[552855-12-6]</p>		<p>72%</p>
<p>j32 化合物</p>		 <p>[1197989-83-5]</p>		<p>73%</p>
<p>j33</p>		 <p>[552855-12-6]</p>		<p>74%</p>
<p>j34</p>		 <p>[1197989-83-5]</p>		<p>77%</p>

10

20

30

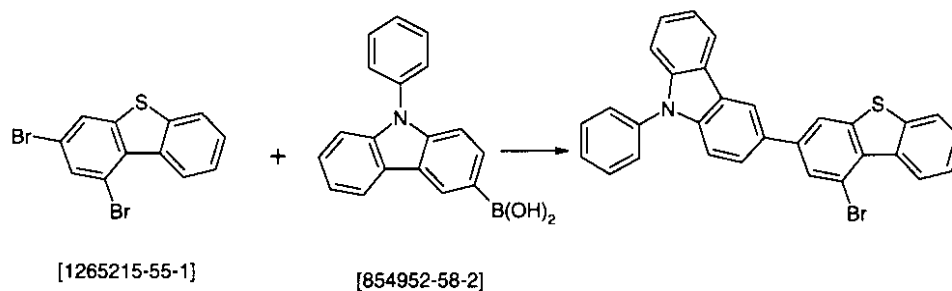
【0241】

k) 3-(1-プロモジベンゾチオフェン-3-イル)-9-フェニル-9H-カルバゾール

【0242】

40

【化47】



10

【0243】

2.2 g (6.6 mmol) の1,3-ジブロモジベンゾチオフェンと、1.7 g (6.64 mmol) のN-フェニルカルバゾール-3-ボロン酸と、13.7 g (100 mmol) の四ホウ酸ナトリウムとを、100 ml のTHFと60 mlの水とに溶解させ、脱気する。0.9 g (1.3 mmol) のビス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(II)クロリドと、1 g (20 mmol) の水酸化ヒドラジニウムとを添加する。その後、反応混合物を保護ガス雰囲気下で、48時間、70℃で撹拌する。冷却された溶液をトルエンで増し、水で複数回洗浄し、乾燥させ、蒸発させる。生成物をトルエン/ヘプタン(1:2)とともにシリカゲルにおいてクロカラムクロマトグラフィにより精製する。収率：13.2 g (26 mmol)、理論値の40%。

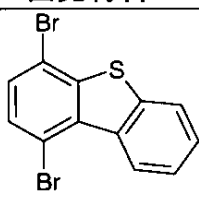
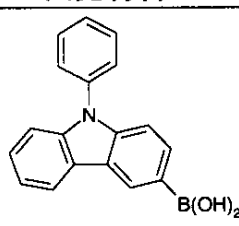
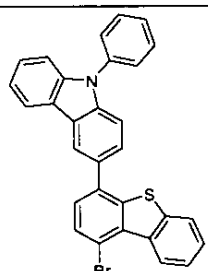
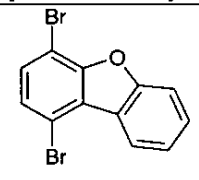
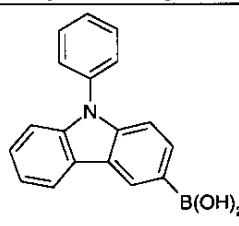
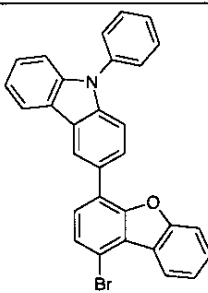
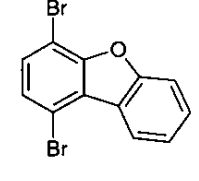
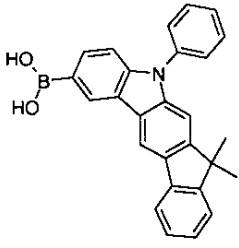
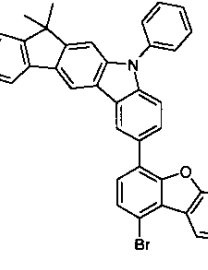
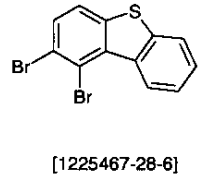
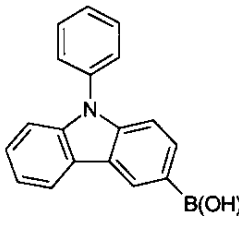
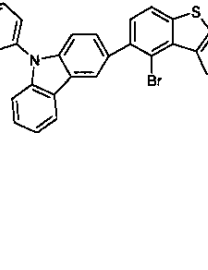
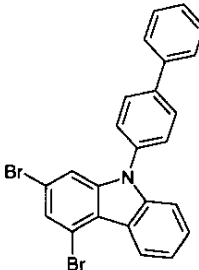
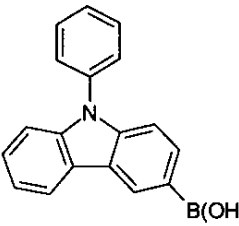
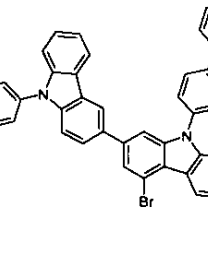
20

【0244】

同じような方法で、以下の化合物を調製する：

【0245】

【化48】

	出発材料 1	出発材料 2	生成物	収率
k1	 [1225467-30-0]	 [854952-58-2]		27%
k2	 [617707-25-2]	 [854952-58-2]		29%
k3	 [617707-25-2]	 [1379585-25-7]		34%
k4	 [1225467-28-6]	 [854952-58-2]		24%
k5	 [1453088-13-5]	 [854952-58-2]		31%

10

20

30

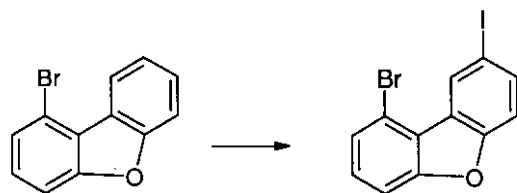
40

【0246】

1) 1-ブロモ-8-ヨードジベンゾフラン

【0247】

【化49】



【0248】

20 g (80ミリモル)のジベンゾフラン-1-ボロン酸と、2.06 g (40.1ミリモル)のヨウ素と、3.13 g (17.8ミリモル)のヨード酸と、80 mlの酢酸と、5 mlの硫酸と、5 mlの水と、2 mlのクロロホルムとを、65 で3時間、攪拌する。冷ました後、水を混合物に添加し、沈殿した固形物を吸引濾過し、水で三度洗浄する。残留物をトルエンと、ジクロロメタン/ヘプタンとから再結晶化させる。収率は25.6 g (68ミリモル)であり、理論値の85%に対応する。

10

【0249】

同じような方法で、以下の化合物を調製する：

【0250】

【化50】

20

	出発材料 1	生成物	収率
I1	 [65642-94-6]		81%
I2			84%
I3			78%

30

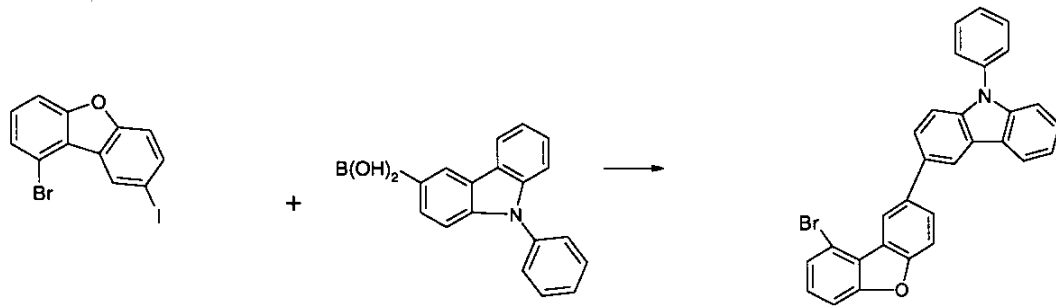
40

【0251】

m) 3-(9-プロモジベンゾフラン-2-イル)-9-フェニル-9H-カルバゾール

【0252】

【化51】



10

【0253】

58 g (156ミリモル)の1-ブromo-8-ヨードジベンゾフランと、50 g (172ミリモル)のN-フェニルカルバゾール-3-ボロン酸と、36 g (340ミリモル)の炭酸ナトリウムとを、1000 mlのエチレングリコールジアミンエーテルと、280 mlの水に懸濁させる。1.8 g (1.5ミリモル)のテトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)をこの懸濁液に添加し、反応混合物を還流下で16時間、加熱する。冷ました後、有機相を分離させ、シリカゲルを通して濾過し、200 mlの水で三度洗浄し、その後蒸発乾固させる。収率は48 g (89ミリモル)であり、理論値の64%に対応する。

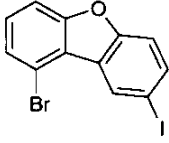
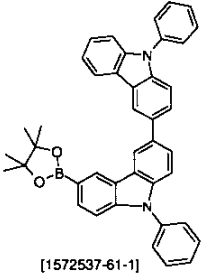
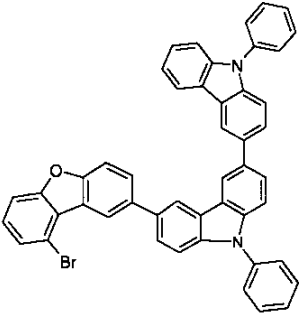
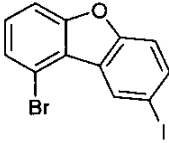
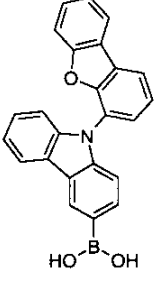
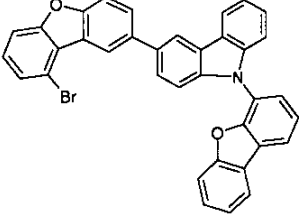
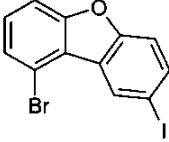
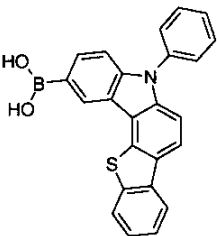
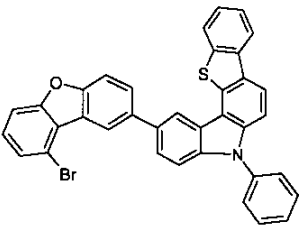
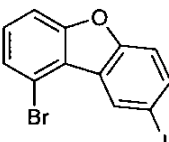
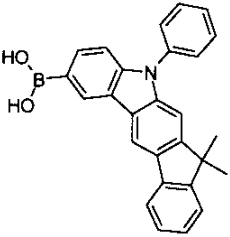
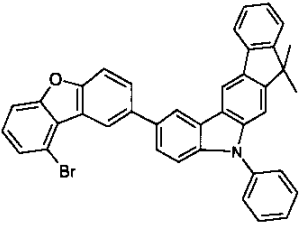
20

【0254】

同じような方法で、以下の化合物を調製する：

【0255】

【化52-1】

	出発材料 1	出発材料 2	生成物	収率
m1		 [1572537-61-1]		60%
m2		 HO-B-OH [1547397-15-8]		62%
m3		 HO-B-OH [1391729-63-7]		54%
m4		 HO-B-OH [1379585-25-7]		50%

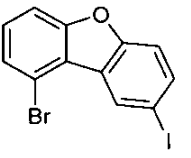
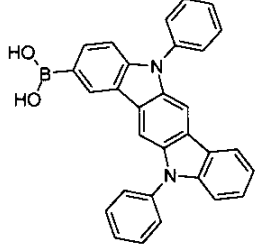
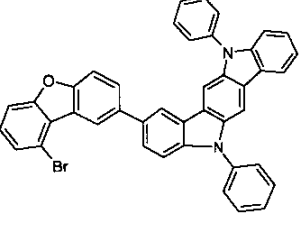
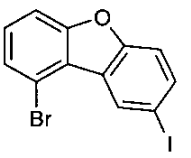
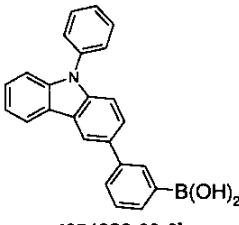
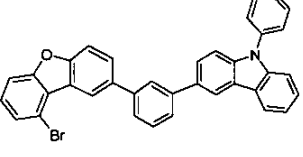
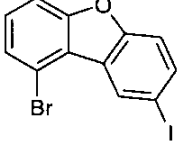
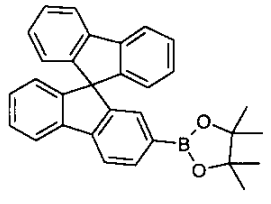
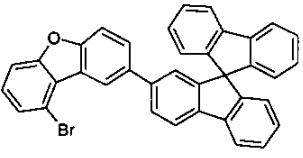
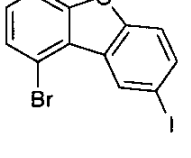
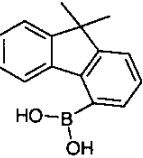
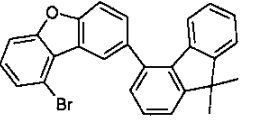
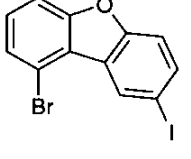
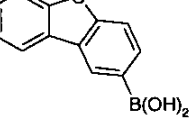
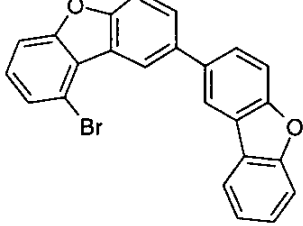
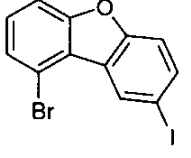
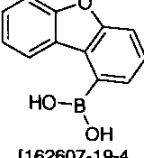
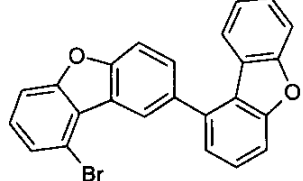
10

20

30

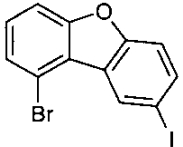
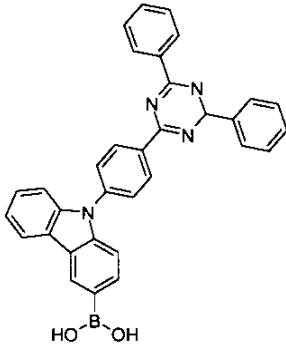
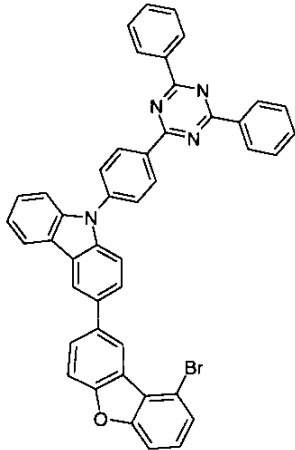
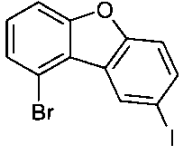
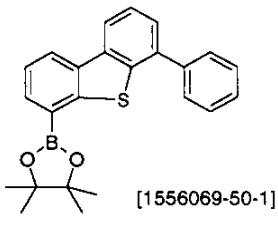
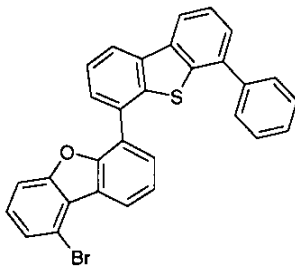
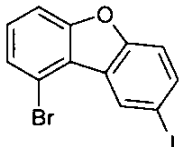
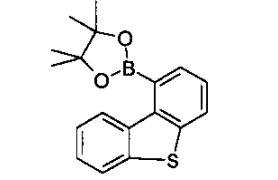
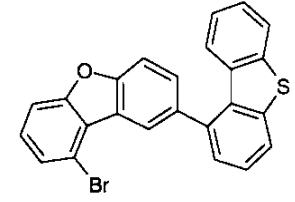
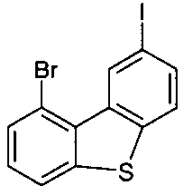
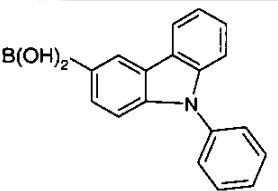
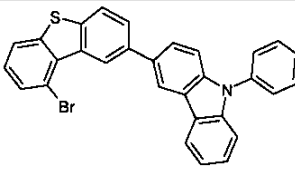
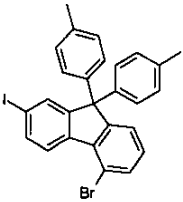
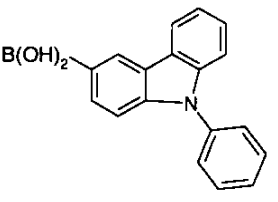
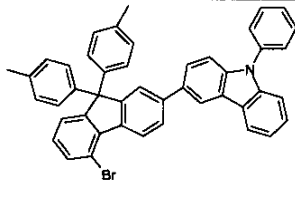
【0256】

【化52-2】

m5		 [1314019-74-3]		55%	10
m6		 [854952-60-6]		56%	
m7		 [1557257-88-1]		57%	20
m8		 [1246022-50-3]		61%	30
m9		 [402936-15-6]		52%	
m10		 [162607-19-4]		50%	40

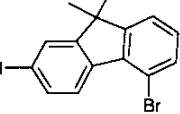
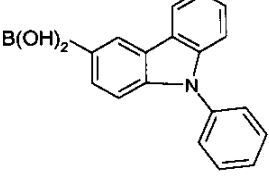
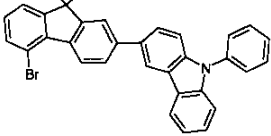
【0257】

【化52-3】

m11		 HO-B-OH		48%	10
m12		 [1556069-50-1]		52%	20
m13		 [1434286-69-7]		54%	
m14		 B(OH) ₂ 854952-58-2		57%	30
m15		 B(OH) ₂ 854952-58-2		48%	40

【0258】

【化52-4】

m16		 B(OH) ₂ 854952-58-2		46%
-----	---	--	--	-----

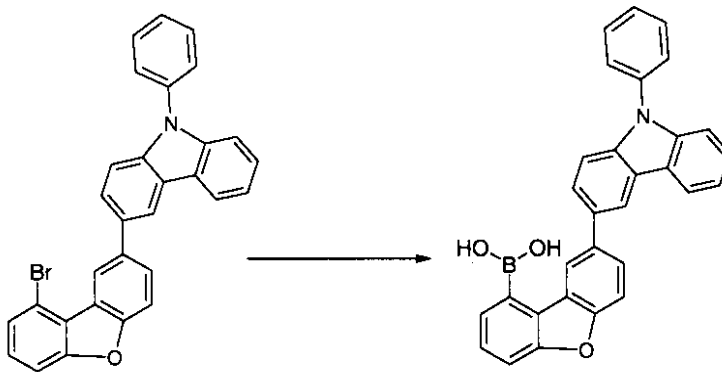
10

【0259】

o) 8-(9-フェニル-9H-カルバゾール-3-イル)ジベンゾフラン-1-ボロン酸

【0260】

【化53】



20

【0261】

20 g (182ミリモル)の3-(9-プロモジベンゾフラン-2-イル)-9-フェニル-9H-カルバゾールを400 mlの無水THFに溶解させ、-78℃に冷却する。この温度で、77 ml (190ミリモル/ヘキサン中2.5 M)のn-ブチルリチウムを約5分間にわたって添加し、その後、混合物を-78℃でさらに2.5時間、攪拌する。この温度で、38 g (365ミリモル)のホウ酸トリメチルを可能な限り迅速に添加し、反応物をゆっくりと室温にさせておく(約18時間)。反応溶液を水で洗浄し、沈殿した固形物を濾過し、有機相をトルエンと共沸的に脱水させる。粗生成物をトルエン/塩化メチレンとともに約40℃で攪拌洗浄し、吸引濾過する。収率：16.7 g (690ミリモル)、理論値の90%。

30

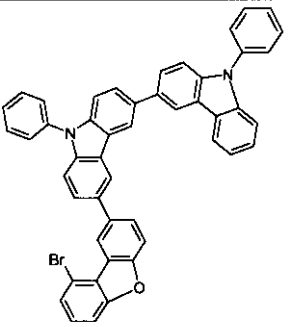
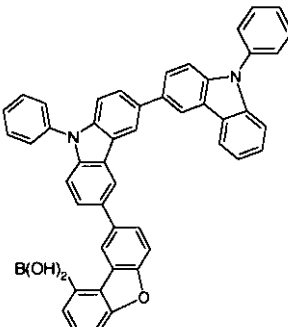
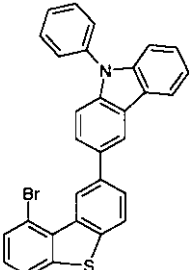
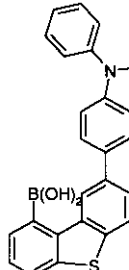
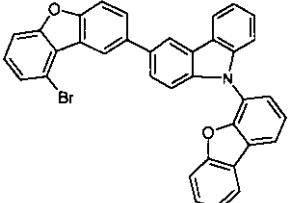
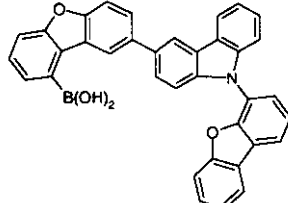
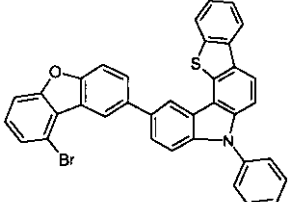
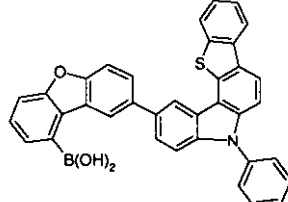
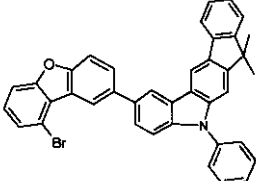
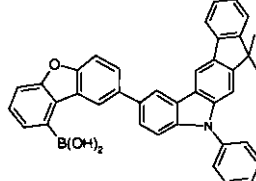
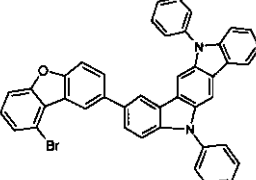
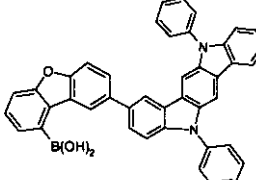
【0262】

同じような方法で、以下の化合物を調製する：

【0263】

40

【化54-1】

	出発材料	生成物	収率
o1			81%
o2			84%
o3			82%
o4			81%
o5			79%
o6			77%

10

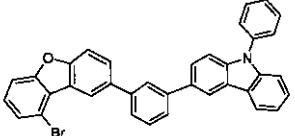
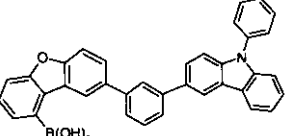
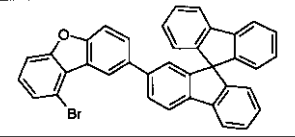
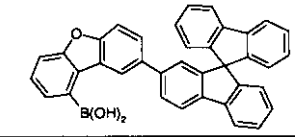
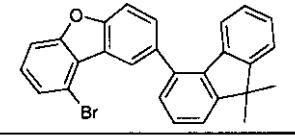
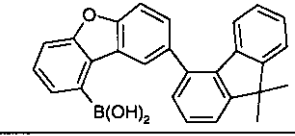
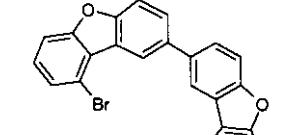
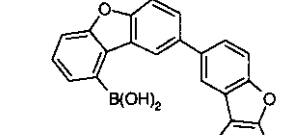
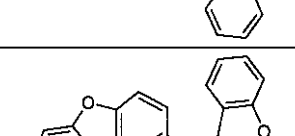
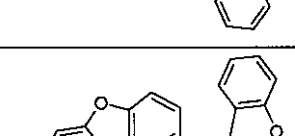
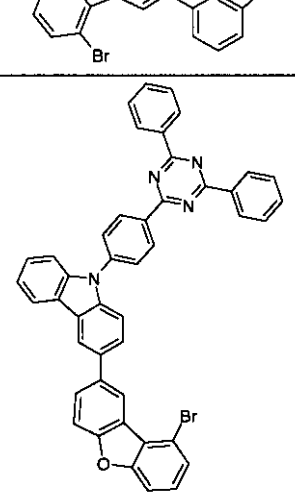
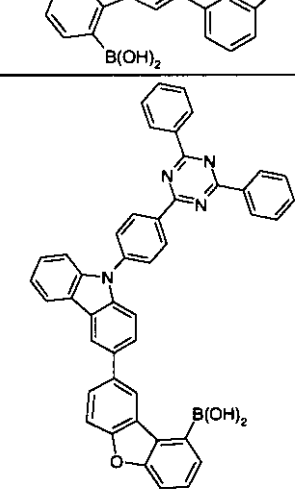
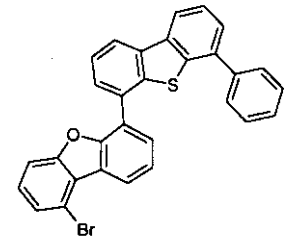
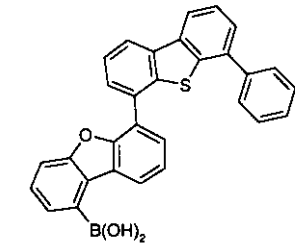
20

30

40

【0264】

【化54-2】

o7			75%
o8			78%
o9			76%
o10			81%
o11			80%
o12			71%
o13			69%

10

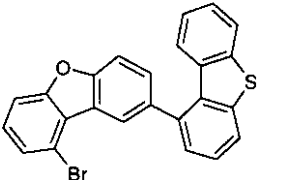
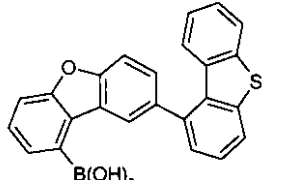
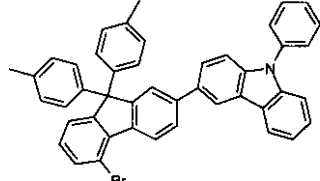
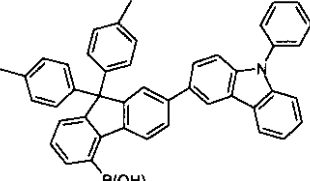
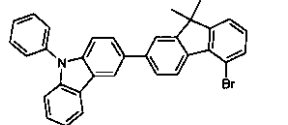
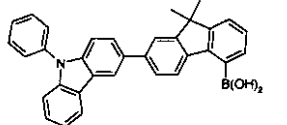
20

30

40

【0265】

【化54-3】

o14			88%
o15			78%
o16			77%

10

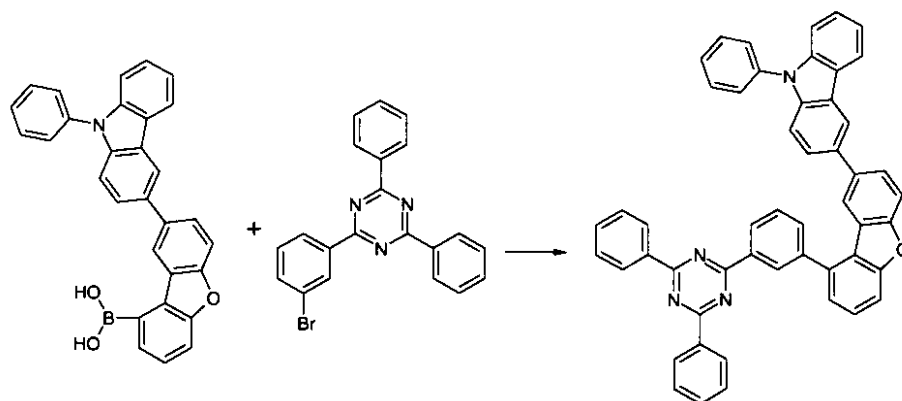
【0266】

p) 3-{9-[3-(4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン-2-イル)フェニル]ジベンゾフラン-2-イル}-9-フェニル-9H-カルバゾール

【0267】

【化55】

20



30

【0268】

49.8 g (110.0ミリモル)の8-(9-フェニル-9H-カルバゾール-3-イル)ジベンゾフラン-1-ボロン酸と、42.6 g (110.0ミリモル)の2-(3-プロモフェニル)-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジンと、26 g (210.0ミリモル)の炭酸ナトリウムとを、500 mlのエチレングリコールジメチルエーテルと500 mlの水に懸濁させる。913 mg (3.0ミリモル)のトリ-*o*-トリルホスフィンと、次いで112 mg (0.5ミリモル)の酢酸パラジウム(II)とを、この懸濁液に添加し、反応混合物を還流下で16時間、加熱する。冷ました後、有機相を分離させ、シリカゲルを通して濾過し、200 mlの水で三度洗浄し、その後蒸発乾固させる。生成物をトルエン/ヘプタン(1:2)とともにシリカゲルにおいてクロカラムクロマトグラフィにより精製し、最後に高真空($p = 5 \times 10^{-7}$ mbar)で昇華させる(純度99.9%)。収率は52 g (72ミリモル)であり、理論値の78%に対応する。

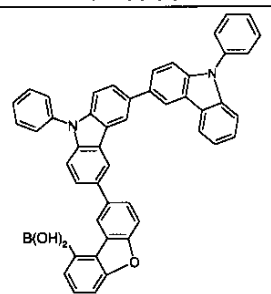
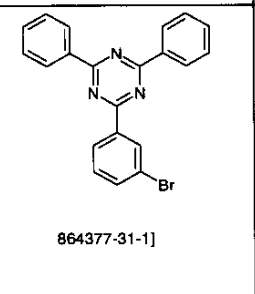
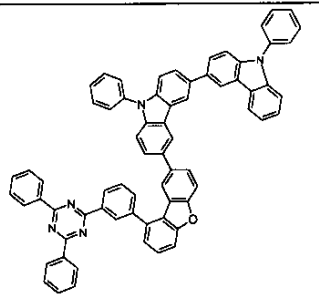
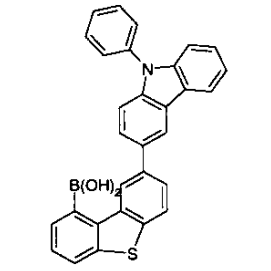
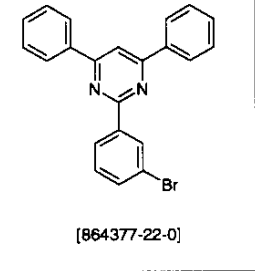
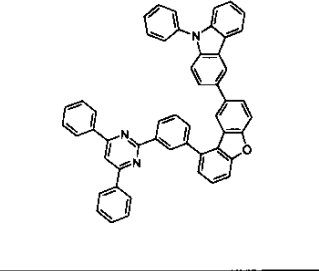
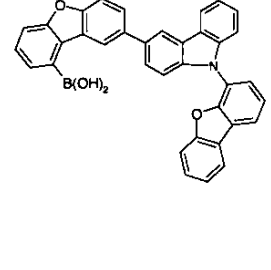
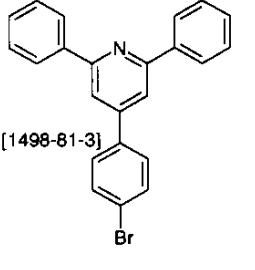
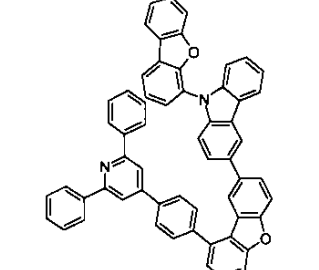
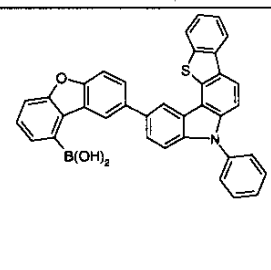
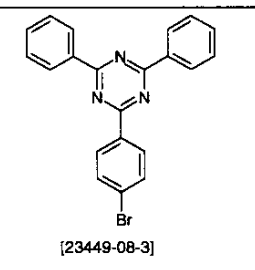
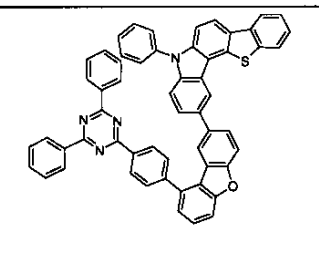
40

【0269】

同じような方法で、以下の化合物を調製する：

50

【 0 2 7 0 】
 【 化 5 6 - 1 】

	出発材料 1	出発材料 2	生成物	収率
p1		 864377-31-1]		59%
p2		 [864377-22-0]		67%
p3		 [1498-81-3]		62%
p4		 [23449-08-3]		69%

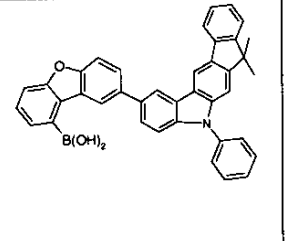
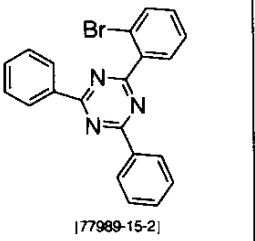
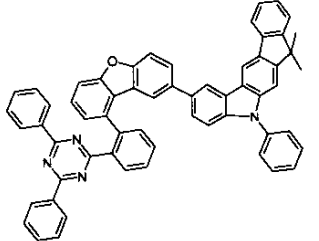
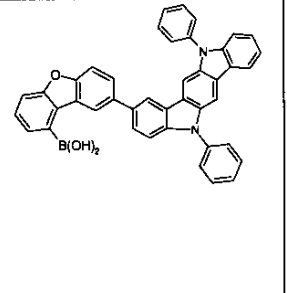
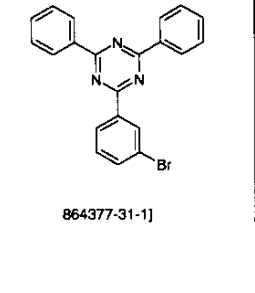
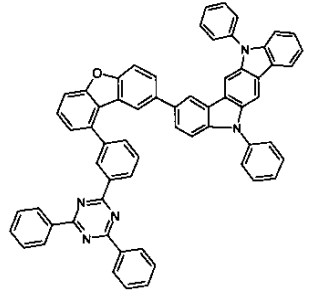
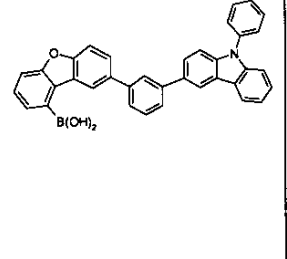
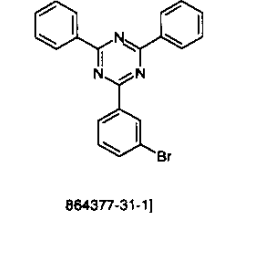
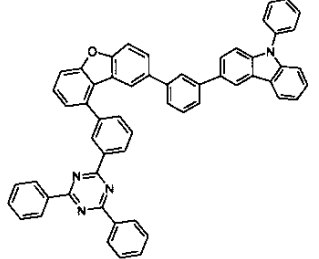
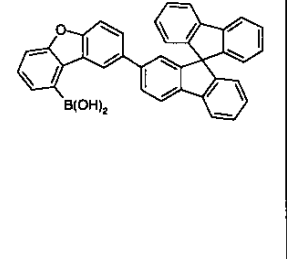
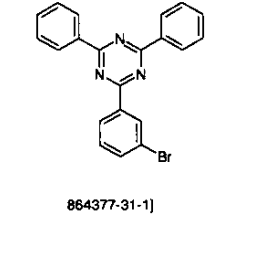
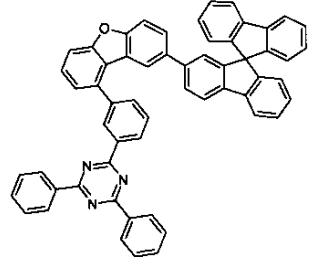
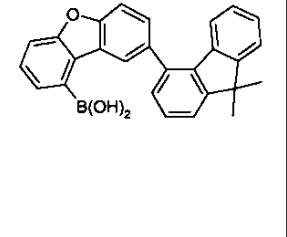
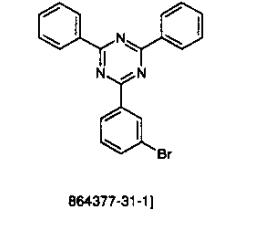
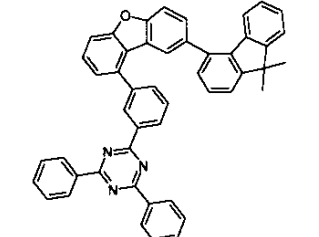
10

20

30

【 0 2 7 1 】

【化56-2】

p5		 [77989-15-2]		67%
p6		 864377-31-1]		68%
p7		 864377-31-1]		69%
p8		 864377-31-1]		60%
p9		 864377-31-1]		63%

10

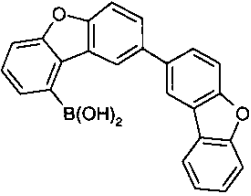
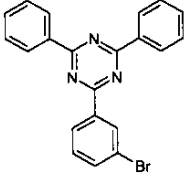
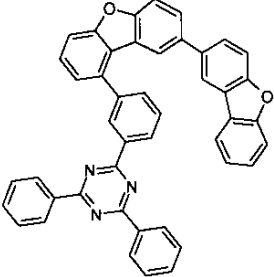
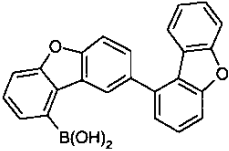
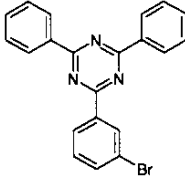
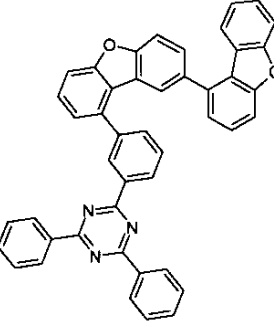
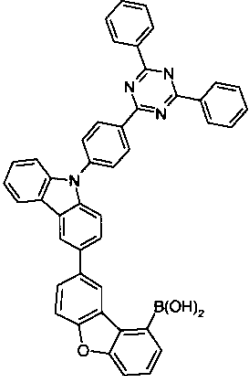
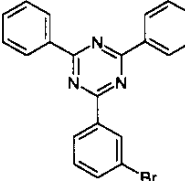
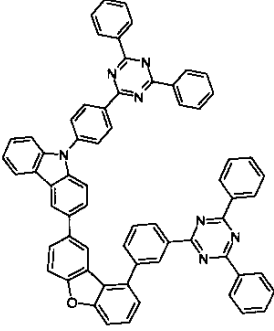
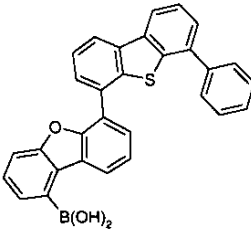
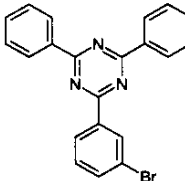
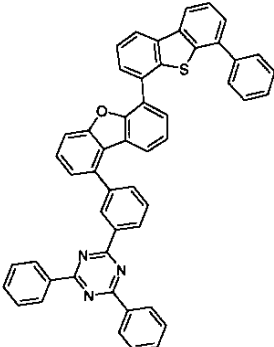
20

30

40

【0272】

【化56-3】

p10		 864377-31-1		66%
p11		 864377-31-1		60%
p12		 864377-31-1		61%
p13		 864377-31-1		65%

10

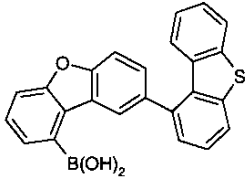
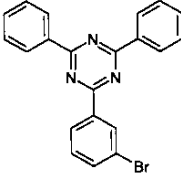
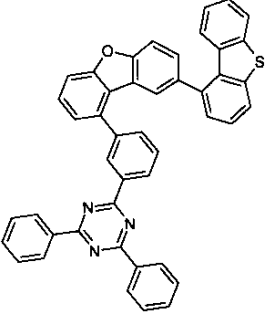
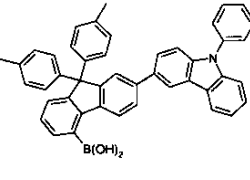
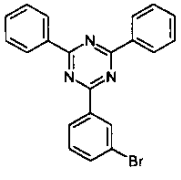
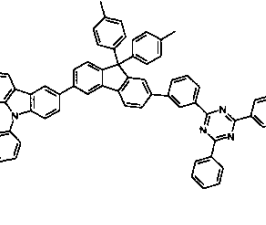
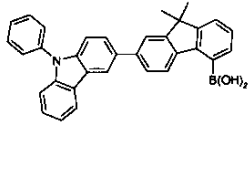
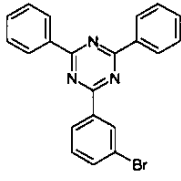
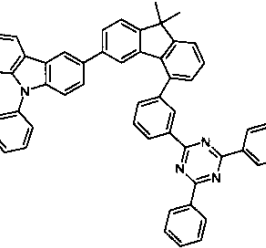
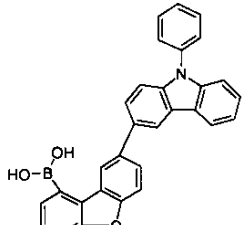
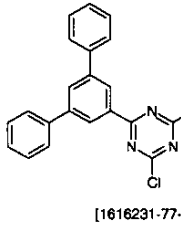
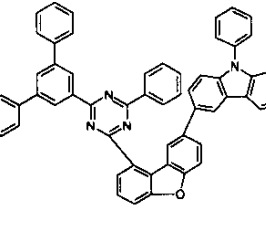
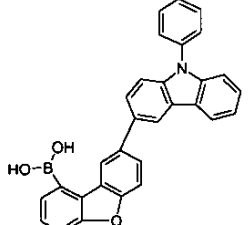
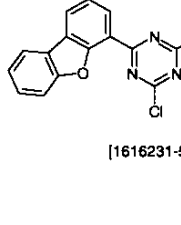
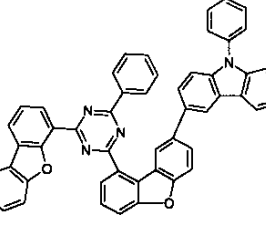
20

30

【0273】

40

【化56-4】

p14		 864377-31-1]		63%
p15		 864377-31-1]		65%
p16		 864377-31-1]		63%
p17		 [1616231-77-2]		65%
p18		 [1616231-51-6]		67%

10

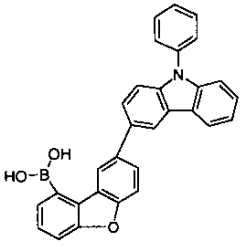
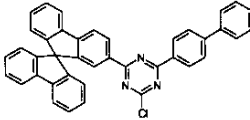
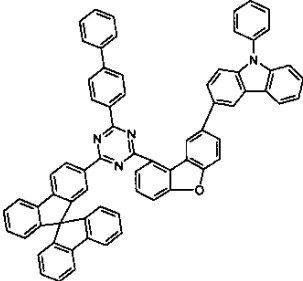
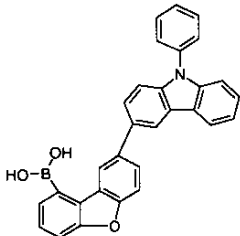
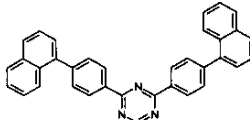
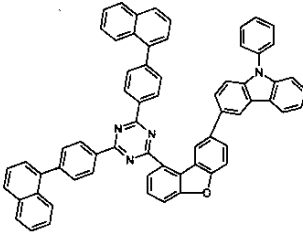
20

30

【0274】

40

【化56-5】

p19		 [1616231-53-6]		72%
p20		 [886442-35-9]		66%

10

【0275】

OLEDの製造

種々のOLEDについてのデータを、以下の例V1～E37で提示する(表1および2を参照)。

【0276】

例V1-E37の前処理: 厚さ50nmの構造化されたITO(インジウム錫酸化物)で被覆されたガラス板が、改善された加工のために、20nmのPEDOT:PSS(ポリ(3,4-エチレンジオキシチオフェン)ポリ(スチレン・スルホン酸))で水溶液からのスピニング、Heraeus Precious Metals GmbH独国からCLEVIOS(登録商標)PVP Al 4083として購入)で被覆される。これらの被覆されたガラス板は、OLEDが適用される基板を形成する。OLEDは、基本的に、次の層構造を有する: 基板/正孔輸送層(HTL)/随意に、中間層(IL)/電子ブロック層(EBL)/発光層(EML)/随意に、正孔ブロック層(HBL)/電子輸送層(ETL)/随意に、電子注入層(EIL)および最後にカソード。カソードは、100nm厚のアルミニウム層により形成される。OLEDの正確な構造が、表1に示されている。OLEDの製造のために必要な材料を、表3に示す。

30

【0277】

すべての材料は、真空室において、熱気相堆積により適用される。ここでは、発光層は、常に、少なくとも一種のマトリクス材料(ホスト材料)と、共蒸発により特定の体積割合で一種または複数種のマトリクス材料と予備混合される発光ドーパント(エミッター)とから成る。ここでは、IC1:IC3:TEG1(55%:35%:10%)等の表現は、材料IC1が55体積%の割合で層中に存在し、IC3が35体積%の割合で層中に存在し、TEG1が10体積%の割合で層中に存在することを意味する。同じように、電子輸送層も、二種の材料の混合物から成ってもよい。

40

【0278】

OLEDは、標準方法により特性決定される。この目的のために、エレクトロルミネセンススペクトル、ランベルト発光特性を仮定して、電流/電圧/輝度特性線(IUL特性線)から計算した、輝度の関数としての電流効率(cd/Aで測定)、パワー効率(Im/Wで測定)、外部量子効率(EQE、パーセントで測定)および寿命が測定される。エレクトロルミネセンススペクトルは、輝度1000cd/m²で測定され、CIE1931xおよびy色座標はそこから計算される。表2での言い回しU1000は、輝度1000

50

cd/m² に対して必要とされる電圧を示す。CE1000とPE1000は、1000 cd/m² で達成される電流およびパワー効率をそれぞれ示す。最後に、EQE1000 は、駆動輝度1000 cd/m² での外部量子効率を示す。寿命LTは、一定の電流で動作する輝度が、初期輝度から、ある比率L1に低下するまでの時間として定義される。表2中のL0; j0 = 4000 cd/m² とL1 = 70%という表現は、列LTに示される寿命が、初期輝度が4000 cd/m² から2800 cd/m² に低下した後の時間に対応することを意味する。同じように、L0; j0 = 20 mA/cm² とL1 = 80%は、輝度が、20 mA/cm² で動作する時間LT後に、その初期輝度の80%に低下することを意味する。

【0279】

種々のOLEDについてのデータを、表2に要約する。例V1~V6は先行技術による比較例であり、例E1~E37は、本発明によるOLEDのデータを示している。

【0280】

いくつかの例を、本発明のOLEDの優位性を証明するために、以下により詳細に説明する。

【0281】

燐光OLEDの発光層における本発明による混合物の使用

燐光OLEDでマトリックス材料として使用するとき、本発明による材料は、先行技術と比べて、素子の寿命に関して、著しい改善を与える。緑色発光ドーパントTEG1と組み合わせる本発明による化合物EG1~EG4を使用することにより、先行技術と比べて、200%を超える寿命の増加が可能になる(例V1とE1、E6、V2とE2、V3とE3、V4、V5とE4の比較)。

【0282】

【表1-1】

表1: OLEDの構造

例	HTL 厚さ	IL 厚さ	EBL 厚さ	EML 厚さ	HBL 厚さ	ETL 厚さ	EIL 厚さ
V1	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	SdT1:TEG1 (90%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
V2	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	SdT2:TEG1 (90%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
V3	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	SdT3:TEG1 (90%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
V4	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	SdT4:TEG1 (90%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
V5	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	SdT5:TEG1 (90%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
V6	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	SdT6:TEG1 (90%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E1	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG1:TEG1 (90%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E2	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG2:TEG1 (90%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E3	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG3:TEG1 (90%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E4	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG4:TEG1 (90%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E5	SpA1 90nm	HATCN 5nm	SpMA1 130nm	EG5:TER1 (92%:8%) 30nm	---	ST2:LiQ (50%:50%) 40nm	---
E6	SpA1 90nm	HATCN 5nm	SpMA1 130nm	EG6:TER1 (92%:8%) 30nm	---	ST2:LiQ (50%:50%) 40nm	---
E7	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG7:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	ST2:LiQ (50%:50%) 40nm	---
E8	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG8:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	ST2:LiQ (50%:50%) 40nm	---

10

20

30

40

50

【 0 2 8 3 】

【 表 1 - 2 】

E9	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG9:IC3:TEG1 (45%:45%:10%) 30nm	IC1 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E10	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG10:IC3:TEG1 (45%:45%:10%) 30nm	IC1 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E11	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG11:IC3:TEG1 (45%:45%:10%) 30nm	IC1 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E12	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	IC1:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	EG12 40nm	LiQ 3nm
E13	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	IC1:TEG1 (90%:10%) 30nm	IC1 10nm	EG13:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E14	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG14:IC3:TEG1 (65%:25%:10%) 30nm	IC1 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E15	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	IC1:TEG1 (90%:10%) 30nm	EG15 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E16	HATCN 5nm	SpMA1 70nm	SpMA2 15nm	EG16:L1:TEY1 (45%:45%:10%) 25nm	---	ST1 45nm	LiQ 3nm
E17	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG17:TEG1 (90%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E18	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG18:IC3:TEG1 (45%:45%:10%) 30nm	IC1 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E19	HATCN 5nm	SpMA1 70nm	SpMA2 15nm	EG19:L1:TEY1 (45%:45%:10%) 25nm	---	ST1 45nm	LiQ 3nm
E20	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	IC1:TEG1 (90%:10%) 30nm	EG20 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E21	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG21:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	ST2:LiQ (50%:50%) 40nm	---
E22	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG22:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E23	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	IC1:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	EG23:ST1 40nm	LiQ 3nm
E24	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG24:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E25	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG25:IC3:TEG1 (50%:40%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E26	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG26:IC3:TEG1 (55%:35%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E27	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG27:IC3:TEG1 (45%:45%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---

10

20

30

【 0 2 8 4 】

【表 1 - 3】

E28	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	IC1:TEG1 (90%:10%) 30nm	IC1 10nm	EG28:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E29	SpA1 90nm	HATCN 5nm	SpMA1 130nm	EG29:TER1 (92%:8%) 30nm	---	ST2:LiQ (50%:50%) 40nm	---
E30	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG30:IC3:TEG1 (45%:45%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E31	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG1:IC3:TEG1 (50%:40%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E32	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG1:IC4:TEG1 (40%:45%:15%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E33	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG1:IC5:TEG1 (70%:25%:5%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E34	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG1:IC6:TEG1 (45%:45%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E35	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG1:IC7:TEG1 (40%:50%:10%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E36	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG1:IC8:TEG1 (30%:50%:20%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
E37	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG1:L1:TEG1 (25%:55%:20%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---

【 0 2 8 5 】

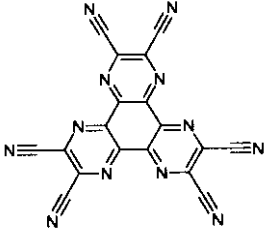
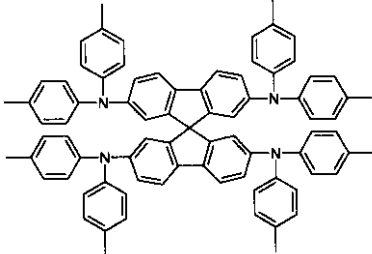
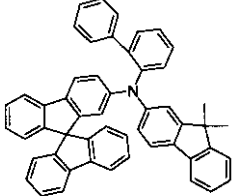
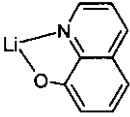
【表 2】

表 2: OLED のデータ

例	U1000 (V)	CE1000 (cd/A)	PE1000 (lm/W)	EQE 1000	1000 cd/m ² における CIE x/y	Lo; jo	L1 %	LT (時間)
V1	3.6	51	44	13.7%	0.33/0.63	20mA/cm ²	80	95
V2	4.2	50	37	14.3%	0.33/0.62	20mA/cm ²	80	10
V3	4.3	55	40	14.7%	0.33/0.64	20mA/cm ²	80	15
V4	3.5	48	43	12.8%	0.32/0.64	20mA/cm ²	80	190
V5	3.7	59	50	15.7%	0.33/0.64	20mA/cm ²	80	125
V6	3.4	44	41	11.8%	0.31/0.65	20mA/cm ²	80	20
E1	3.5	40	36	11.6%	0.33/0.62	20mA/cm ²	80	290
E2	4.3	51	37	14.5%	0.33/0.62	20mA/cm ²	80	20
E3	4.4	55	39	15.0%	0.33/0.63	20mA/cm ²	80	35
E4	3.6	41	36	11.9%	0.32/0.63	20mA/cm ²	80	300
E5	4.4	13	9	12.4%	0.66/0.34	4000 cd/m ²	80	340
E6	4.6	11	8	11.4%	0.67/0.34	4000 cd/m ²	80	370
E7	3.4	59	55	15.9%	0.33/0.63	20mA/cm ²	80	115
E8	3.6	56	49	15.2%	0.33/0.62	20mA/cm ²	80	125
E9	3.4	62	57	16.5%	0.34/0.63	20 mA/cm ²	80	240
E10	3.5	60	54	16.1%	0.33/0.63	20 mA/cm ²	80	350
E11	3.6	57	50	15.5%	0.33/0.63	20 mA/cm ²	80	290
E12	3.3	64	61	17.1%	0.33/0.63	20 mA/cm ²	80	125
E13	3.7	62	53	16.5%	0.34/0.63	20 mA/cm ²	80	165
E14	3.3	60	57	16.7%	0.32/0.63	20 mA/cm ²	80	270
E15	3.5	59	53	16.0%	0.34/0.63	20 mA/cm ²	80	145
E16	2.9	75	81	22.4%	0.44/0.55	50mA/cm ²	90	85
E17	3.4	41	37	11.7%	0.33/0.63	20mA/cm ²	80	140
E18	3.5	60	53	16.3%	0.33/0.63	20 mA/cm ²	80	260
E19	2.8	77	86	23.1%	0.45/0.55	50mA/cm ²	90	100
E20	3.7	59	50	15.8%	0.33/0.63	20 mA/cm ²	80	155
E21	3.7	55	47	14.7%	0.36/0.61	20mA/cm ²	80	135
E22	3.8	58	48	15.6%	0.33/0.63	20mA/cm ²	80	140
E23	3.4	62	57	17.0%	0.31/0.64	20mA/cm ²	80	130
E24	3.8	56	46	15.3%	0.33/0.63	20mA/cm ²	80	125
E25	3.6	60	52	16.0%	0.35/0.62	20mA/cm ²	80	360
E26	3.7	57	48	15.2%	0.33/0.63	20mA/cm ²	80	275
E27	3.6	54	47	15.5%	0.34/0.61	20mA/cm ²	80	255
E28	3.6	60	52	16.4%	0.34/0.62	20mA/cm ²	80	170
E29	4.5	13	9	11.6%	0.67/0.33	4000cd/m ²	80	340
E30	3.5	58	52	15.6%	0.33/0.63	20mA/cm ²	80	270
E31	3.4	59	55	15.9%	0.32/0.64	20mA/cm ²	80	380
E32	3.4	61	56	16.2%	0.33/0.64	20mA/cm ²	80	360
E33	3.3	59	56	15.7%	0.33/0.63	20mA/cm ²	80	335
E34	3.5	61	55	16.3%	0.33/0.63	20mA/cm ²	80	355
E35	3.4	62	57	16.6%	0.31/0.64	20mA/cm ²	80	340
E36	3.4	59	55	16.1%	0.33/0.63	20mA/cm ²	80	345
E37	3.3	54	51	15.0%	0.32/0.63	20mA/cm ²	80	395

【表 3 - 1】

表 3: OLED の材料の構造式

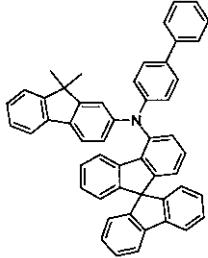
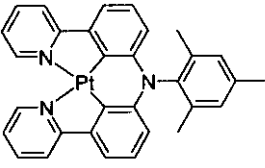
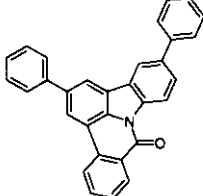
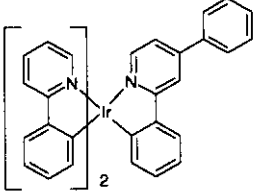
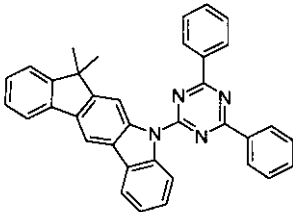
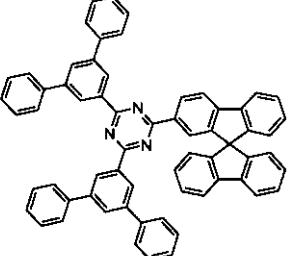
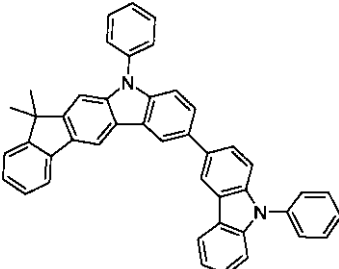
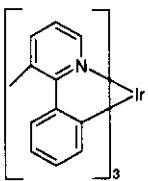
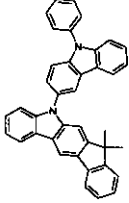
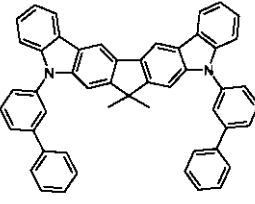
	
<p>HATCN</p>	<p>SpA1</p>
	
<p>SpMA1</p>	<p>LiQ</p>

10

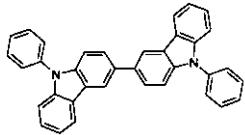
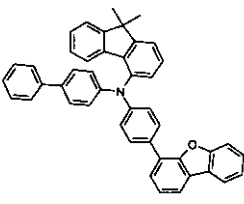
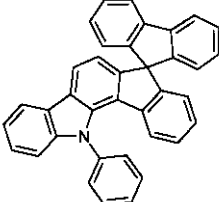
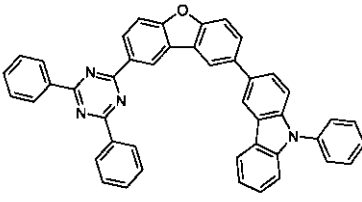
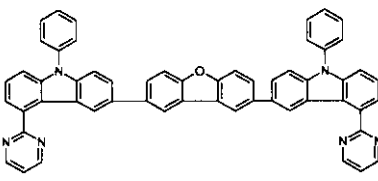
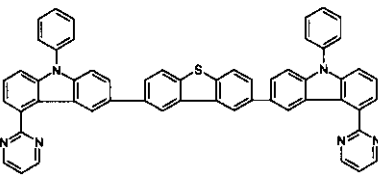
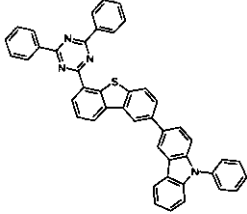
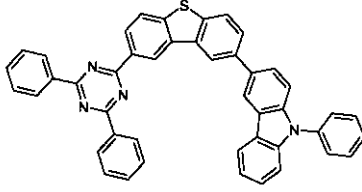
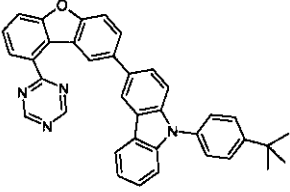
20

【 0 2 8 7 】

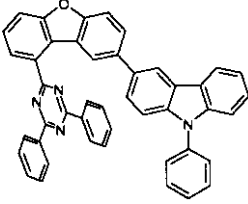
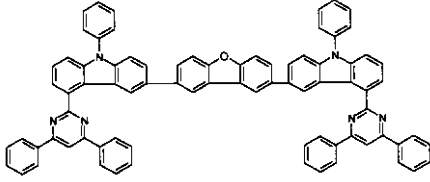
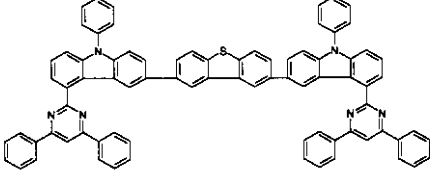
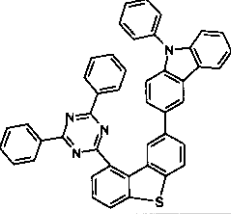
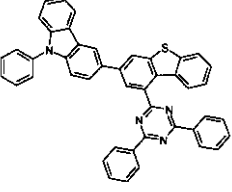
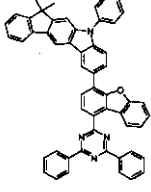
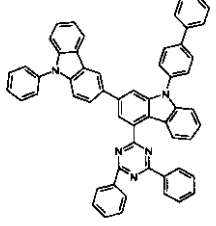
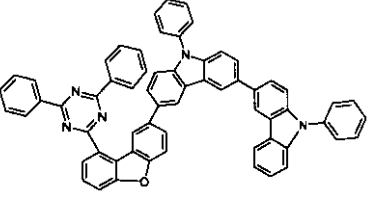
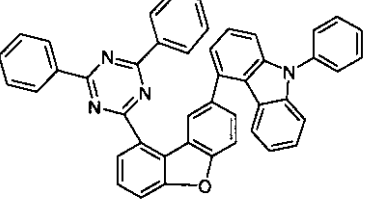
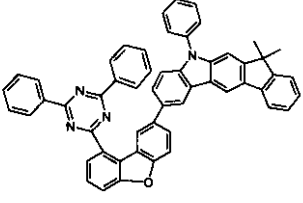
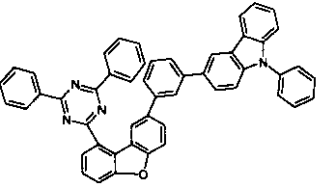
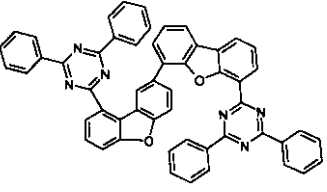
【表 3 - 2】

		10
<p style="text-align: center;">SpMA2</p>	<p style="text-align: center;">TER1</p>	
		
<p style="text-align: center;">L1</p>	<p style="text-align: center;">TEY1</p>	
		20
<p style="text-align: center;">IC1</p>	<p style="text-align: center;">ST2</p>	
		30
<p style="text-align: center;">IC3</p>	<p style="text-align: center;">TEG1</p>	
		40
<p style="text-align: center;">IC4</p>	<p style="text-align: center;">IC5</p>	

【表 3 - 3】

		10
IC6	IC7	
		
IC8	SdT1	
		20
SdT2	SdT3	
		30
SdT4	SdT5	
		40
SdT6		

【表 3 - 4】

	
EG1	EG2
	
EG3	EG4
	
EG5	EG6
	
EG7	EG8
	
EG9	EG10
	
EG11	E12

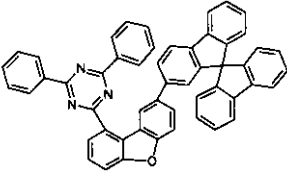
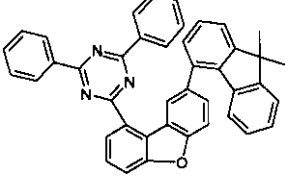
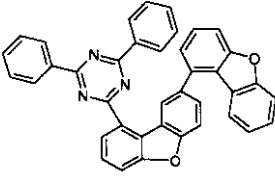
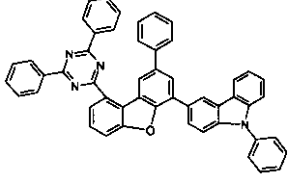
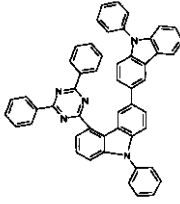
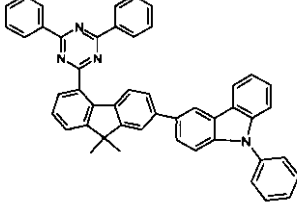
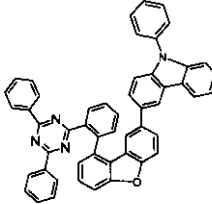
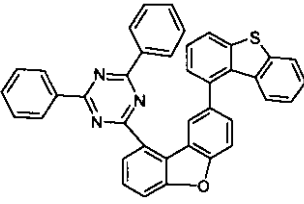
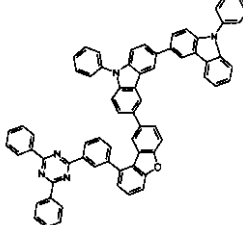
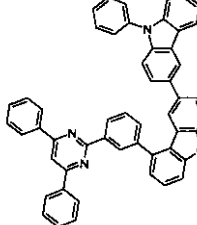
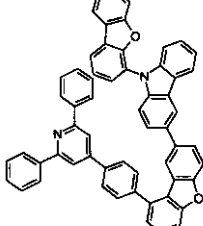
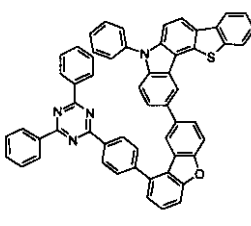
10

20

30

40

【表 3 - 5】

	
EG13	EG14
	
EG15	EG16
	
EG17	EG18
	
EG19	EG20
	
EG21	EG22
	
EG23	EG24

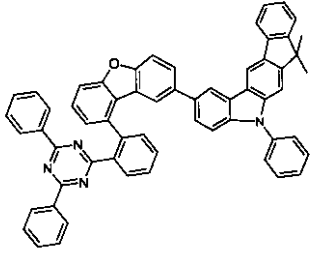
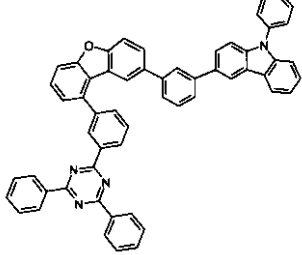
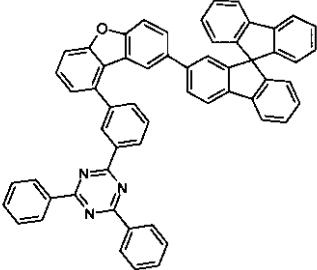
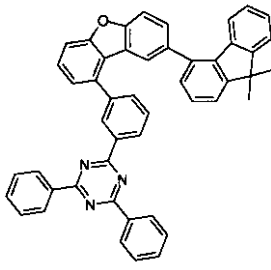
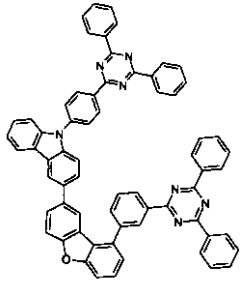
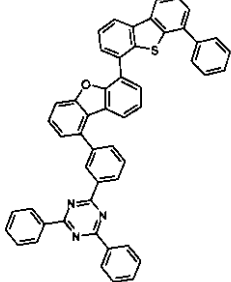
10

20

30

40

【表 3 - 6】

 <p>Chemical structure of EG25: A complex molecule featuring a central benzimidazole ring system. It is substituted with a phenyl group, a benzimidazole ring, and a benzimidazole ring with a methyl group. The structure is highly branched and contains multiple nitrogen atoms.</p>	 <p>Chemical structure of EG26: A complex molecule featuring a central benzimidazole ring system. It is substituted with a phenyl group, a benzimidazole ring, and a benzimidazole ring with a methyl group. The structure is highly branched and contains multiple nitrogen atoms.</p>
EG25	EG26
 <p>Chemical structure of EG27: A complex molecule featuring a central benzimidazole ring system. It is substituted with a phenyl group, a benzimidazole ring, and a benzimidazole ring with a methyl group. The structure is highly branched and contains multiple nitrogen atoms.</p>	 <p>Chemical structure of EG28: A complex molecule featuring a central benzimidazole ring system. It is substituted with a phenyl group, a benzimidazole ring, and a benzimidazole ring with a methyl group. The structure is highly branched and contains multiple nitrogen atoms.</p>
EG27	EG28
 <p>Chemical structure of EG29: A complex molecule featuring a central benzimidazole ring system. It is substituted with a phenyl group, a benzimidazole ring, and a benzimidazole ring with a methyl group. The structure is highly branched and contains multiple nitrogen atoms.</p>	 <p>Chemical structure of EG30: A complex molecule featuring a central benzimidazole ring system. It is substituted with a phenyl group, a benzimidazole ring, and a benzimidazole ring with a methyl group. The structure is highly branched and contains multiple nitrogen atoms.</p>
EG29	EG30

10

20

30

フロントページの続き

(51)Int.Cl.		F I	
C 0 7 D 498/04	(2006.01)	C 0 7 D 495/04	1 0 3
C 0 9 K 11/06	(2006.01)	C 0 7 D 495/04	1 0 5
H 0 1 L 51/50	(2006.01)	C 0 7 D 495/04	1 1 1
		C 0 7 D 498/04	1 1 2 Q
		C 0 9 K 11/06	6 3 0
		H 0 5 B 33/14	B
		H 0 5 B 33/22	B
		H 0 5 B 33/22	D

- (74)代理人 100162570
弁理士 金子 早苗
- (72)発明者 パルハム、アミア・ホサイン
ドイツ連邦共和国、6 0 4 8 6 フランクフルト・アム・マイン、ロエミッシャー・リング 2 6
- (72)発明者 ヤトシュ、アンヤ
ドイツ連邦共和国、6 0 4 8 9 フランクフルト・アム・マイン、ヨセフ・マイ・シュトラッセ 2
- (72)発明者 エベルレ、トマス
ドイツ連邦共和国、7 6 8 2 9 ランダウ、ピリー・ブランド・シュトラッセ 6
- (72)発明者 グロスマン、トビアス
ドイツ連邦共和国、6 4 2 9 7 ダルムシュタット、ロイターアレ 7 1
- (72)発明者 クロエベル、ヨナス・バレンティン
ドイツ連邦共和国、6 0 3 1 1 フランクフルト・アム・マイン、ファールガッセ 4
- (72)発明者 ドーベルマン、ラルス
ドイツ連邦共和国、6 4 2 9 5 ダルムシュタット、ホルツォファーレ 1 6

合議体

- 審判長 村上 騎見高
審判官 大熊 幸治
審判官 安孫子 由美

- (56)参考文献 特表2013-510803(JP,A)
特開2012-49518(JP,A)
特表2016-534095(JP,A)
特表2016-534988(JP,A)
国際公開第2014/015931(WO,A1)
中国特許出願公開第103232843(CN,A)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

C07D
H05B 33/14- 33/22
CAplus / REGISTRY (STN)