

(19)日本国特許庁(JP)

(12)公表特許公報(A)

(11)公表番号

特表2024-537075

(P2024-537075A)

(43)公表日 令和6年10月10日(2024.10.10)

(51)国際特許分類		F I	テーマコード(参考)
C 0 7 C	211/61 (2006.01)	C 0 7 C 211/61	3 K 1 0 7
C 0 7 D	307/91 (2006.01)	C 0 7 D 307/91	C S P 4 H 0 0 6
C 0 7 D	333/76 (2006.01)	C 0 7 D 333/76	
C 0 7 D	407/12 (2006.01)	C 0 7 D 407/12	
C 0 7 D	311/96 (2006.01)	C 0 7 D 311/96	
		審査請求 未請求 予備審査請求 未請求 (全129頁) 最終頁に続く	

(21)出願番号	特願2024-519670(P2024-519670)	(71)出願人	597035528
(86)(22)出願日	令和4年8月18日(2022.8.18)		メルク パテント ゲーエムベーハー
(85)翻訳文提出日	令和6年4月17日(2024.4.17)		ドイツ国, D - 6 4 2 9 3 ダルムスタ
(86)国際出願番号	PCT/EP2022/073050		ッド フランクフルター ストラッセ 2
(87)国際公開番号	WO2022/223850		5 0
(87)国際公開日	令和4年10月27日(2022.10.27)	(74)代理人	110003708
(31)優先権主張番号	21200276.0		弁理士法人鈴榮特許総合事務所
(32)優先日	令和3年9月30日(2021.9.30)	(72)発明者	モンテネグロ、エルピラ
(33)優先権主張国・地域又は機関	欧州特許庁(EP)		ドイツ連邦共和国、6 4 2 9 3 ダルム
(31)優先権主張番号	22167862.6		シュタット、フランクフルター・シュト
(32)優先日	令和4年4月12日(2022.4.12)		ラーセ 2 5 0、メルク・カーゲーアー
(33)優先権主張国・地域又は機関	欧州特許庁(EP)	(72)発明者	アー気付
(81)指定国・地域	AP(BW,GH,GM,KE,LR,LS,MW,MZ,NA		エンゲルハルト、イエンス
	最終頁に続く		ドイツ連邦共和国、6 4 2 9 3 ダルム
			シュタット、フランクフルター・シュト
			最終頁に続く

(54)【発明の名称】 電子デバイス用の化合物

(57)【要約】

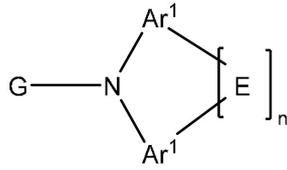
本願は、部分的に重水素化されたフルオレニルアミン誘導体およびスピロビフルオレニルアミン誘導体に関する。本発明はさらに、そのような化合物を調製するための方法、電子デバイスにおけるそのような化合物の使用、およびそのような化合物を含有する電子デバイスに関する。

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

式 (I)

【化 1】



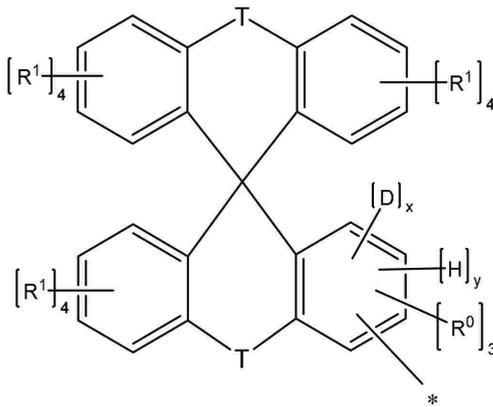
式 (I)

10

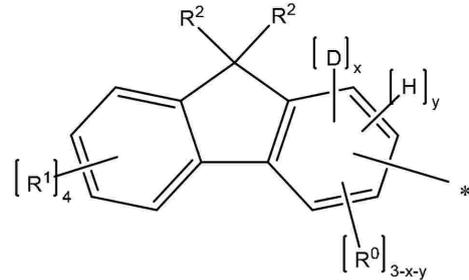
[式中、

G は、式 (G - 1)、(G - 2) または (G - 3)

【化 2】

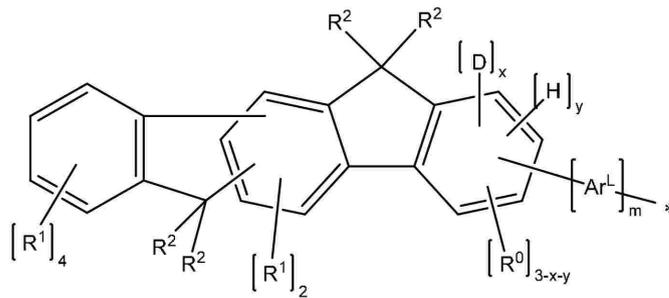


式 (G-1)



式 (G-2)

20



式 (G-3)

30

(式中、式 (I) の残部への結合は * と表示され、

T は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、単結合、 $C(R^2)_2$ 、 $C=O$ 、 $Si(R^2)_4$ 、 NR^2 、O および S から選択され；

40

E は単結合、 $C(R^3)_2$ 、 $C(R^3)_2-C(R^3)_2$ 、 $C(R^3)=C(R^3)$ 、 $C=O$ 、 $Si(R^3)_4$ 、 NR^3 、O および S から選択され；Ar¹ は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、6 ~ 40 個の芳香族環原子を有し、R³ ラジカルにより置換されている芳香族環系、および 5 ~ 40 個の芳香族環原子を有し、R³ ラジカルにより置換されているヘテロ芳香族環系から選択され；Ar^L は、6 ~ 40 個の芳香族環原子を有し、R³ ラジカルにより置換されている芳香族環系、および 5 ~ 40 個の芳香族環原子を有し、R³ ラジカルにより置換されているヘテロ芳香族環系から選択され；R⁰ は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、F、Cl、Br、I、 $C(=O)R^4$ 、CN、 $Si(R^4)_3$ 、 $N(R^4)_2$ 、 $P(=O)(R^4)_2$ 、 OR^4 、S

50

(=O)R⁴、S(=O)₂R⁴、1~20個の炭素原子を有する直鎖アルキルまたはアルコキシ基、3~20個の炭素原子を有する分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、2~20個の炭素原子を有するアルケニルまたはアルキニル基、6~40個の芳香族環原子を有する芳香族環系、および5~40個の芳香族環原子を有するヘテロ芳香族環系から選択され；2つ以上のR⁰ラジカルは、互いに結合していても、環を形成していてもよく；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基、ならびに言及した芳香族環系およびヘテロ芳香族環系は、それぞれR⁴ラジカルにより置換されており；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基中の1つ以上のCH₂基は、-R⁴C=CR⁴-、-C-C-、Si(R⁴)₂、C=O、C=NR⁴、-C(=O)O-、-C(=O)NR⁴-、NR⁴、P(=O)(R⁴)、-O-、-S-、SOまたはSO₂により置きかえられていてもよく；

R¹は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、H、D、F、Cl、Br、I、C(=O)R⁴、CN、Si(R⁴)₃、N(R⁴)₂、P(=O)(R⁴)₂、OR⁴、S(=O)R⁴、S(=O)₂R⁴、1~20個の炭素原子を有する直鎖アルキルまたはアルコキシ基、3~20個の炭素原子を有する分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、2~20個の炭素原子を有するアルケニルまたはアルキニル基、6~40個の芳香族環原子を有する芳香族環系、および5~40個の芳香族環原子を有するヘテロ芳香族環系から選択され；2つ以上のR¹ラジカルは、互いに結合していても、環を形成していてもよく；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基、ならびに言及した芳香族環系およびヘテロ芳香族環系は、それぞれR⁴ラジカルにより置換されており；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基中の1つ以上のCH₂基は、-R⁴C=CR⁴-、-C-C-、Si(R⁴)₂、C=O、C=NR⁴、-C(=O)O-、-C(=O)NR⁴-、NR⁴、P(=O)(R⁴)、-O-、-S-、SOまたはSO₂により置きかえられていてもよく；

R²は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、H、D、F、Cl、Br、I、C(=O)R⁴、CN、Si(R⁴)₃、N(R⁴)₂、P(=O)(R⁴)₂、OR⁴、S(=O)R⁴、S(=O)₂R⁴、1~20個の炭素原子を有する直鎖アルキルまたはアルコキシ基、3~20個の炭素原子を有する分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、2~20個の炭素原子を有するアルケニルまたはアルキニル基、6~40個の芳香族環原子を有する芳香族環系、および5~40個の芳香族環原子を有するヘテロ芳香族環系から選択され；2つ以上のR²ラジカルは、互いに結合していても、環を形成していてもよく；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基、ならびに言及した芳香族環系およびヘテロ芳香族環系は、それぞれR⁴ラジカルにより置換されており；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基中の1つ以上のCH₂基は、-R⁴C=CR⁴-、-C-C-、Si(R⁴)₂、C=O、C=NR⁴、-C(=O)O-、-C(=O)NR⁴-、NR⁴、P(=O)(R⁴)、-O-、-S-、SOまたはSO₂により置きかえられていてもよく；

R³は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、H、D、F、Cl、Br、I、C(=O)R⁴、CN、Si(R⁴)₃、N(R⁴)₂、P(=O)(R⁴)₂、OR⁴、S(=O)R⁴、S(=O)₂R⁴、1~20個の炭素原子を有する直鎖アルキルまたはアルコキシ基、3~20個の炭素原子を有する分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、2~20個の炭素原子を有するアルケニルまたはアルキニル基、6~40個の芳香族環原子を有する芳香族環系、および5~40個の芳香族環原子を有するヘテロ芳香族環系から選択され；2つ以上のR³ラジカルは、互いに結合していても、環を形成していてもよく；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基、ならびに言及した芳香族環系およびヘテロ芳香族環系は、それぞれR⁴ラジカルにより置換されており；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基中の1つ以上のCH₂基は、-R⁴C=CR⁴-、-C-C-、Si(R⁴)₂、C=O、C=NR⁴、-C(=O)O-、-C(=O)NR⁴-、NR⁴、P(=O)(R⁴)、-O-、-S-、SOまたはSO₂により置きかえられていてもよく；

10

20

30

40

50

R^4 は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、H、D、F、Cl、Br、I、C(=O) R^5 、CN、Si(R^5)₃、N(R^5)₂、P(=O)(R^5)₂、OR⁵、S(=O) R^5 、S(=O)₂ R^5 、1~20個の炭素原子を有する直鎖アルキルまたはアルコキシ基、3~20個の炭素原子を有する分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、2~20個の炭素原子を有するアルケニルまたはアルキニル基、6~40個の芳香族環原子を有する芳香族環系、および5~40個の芳香族環原子を有するヘテロ芳香族環系から選択され；2つ以上の R^4 ラジカルは、互いに結合していても、環を形成していてもよく；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基、ならびに言及した芳香族環系およびヘテロ芳香族環系は、それぞれ R^5 ラジカルにより置換されており；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基中の1つ以上のCH₂基は、 $-R^5C=CR^5-$ 、 $-C=C-$ 、Si(R^5)₂、C=O、C=NR⁵、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^5-$ 、NR⁵、P(=O)(R^5)、 $-O-$ 、 $-S-$ 、SOまたはSO₂により置きかえられていてもよく；

R^5 は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、H、D、F、Cl、Br、I、CN、1~20個の炭素原子を有するアルキルまたはアルコキシ基、2~20個の炭素原子を有するアルケニルまたはアルキニル基、6~40個の芳香族環原子を有する芳香族環系、および5~40個の芳香族環原子を有するヘテロ芳香族環系から選択され；2つ以上の R^5 ラジカルは、互いに結合していても、環を形成していてもよく；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基、ならびに言及した芳香族環系およびヘテロ芳香族環系は、FおよびCNから選択される1つ以上のラジカルにより置換されていてもよく；

xは1または2であり、xとyの合計は3以下であり；

yは1または2であり、xとyの合計は3以下であり；

nは0または1であり、n=0である場合、E基は存在せず、2つのAr¹基は互いに結合せず；

mは0または1であり、m=0である場合、Ar^Lに結合する2つの基は互いに直接結合している)

に合致する]

の化合物。

【請求項2】

a)式(I)において、窒素原子に結合する前記Ar¹、Ar¹およびG基はそれぞれ、その芳香族またはヘテロ芳香族環上で部分的に重水素化されているか、もしくは完全に重水素化されており、好ましくは部分的に重水素化されているか、または

b)式(I)において、前記G基のみがその芳香族またはヘテロ芳香族環上で部分的に重水素化または完全に重水素化され、好ましくは部分的に重水素化され、前記Ar¹基は重水素化されていない

ことを特徴とする、請求項1に記載の化合物。

【請求項3】

前記化合物に存在する全ての脂肪族基が重水素化されていないことを特徴とする、請求項1または2に記載の化合物。

【請求項4】

以下の式：

10

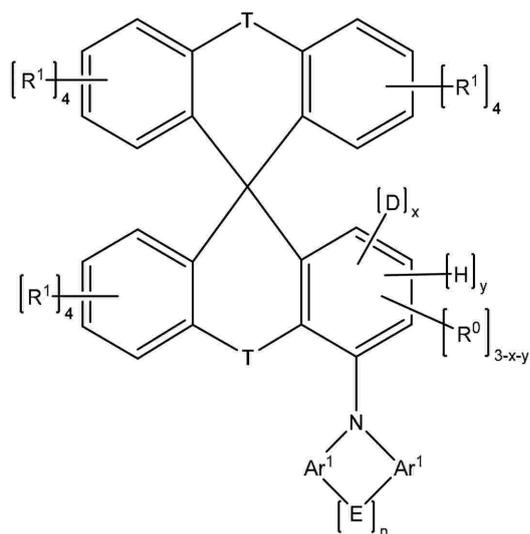
20

30

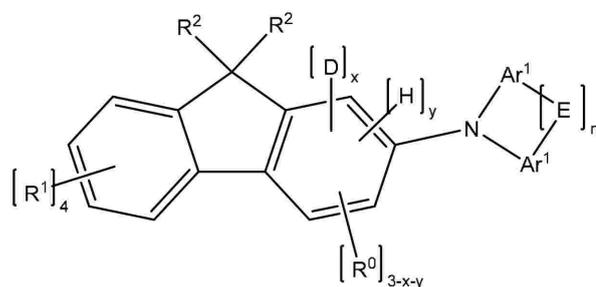
40

50

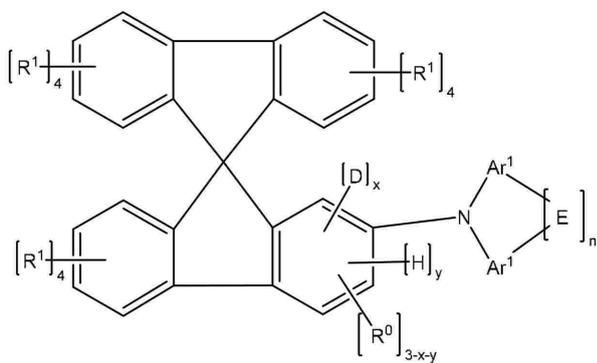
【化 3 - 1】



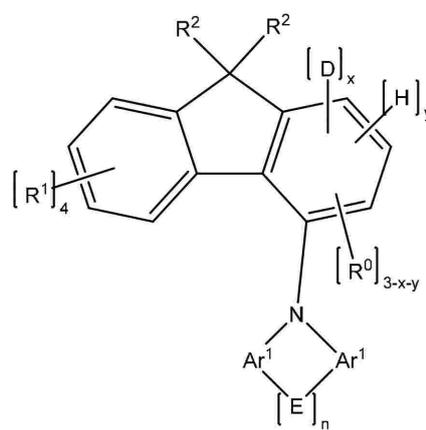
式 (I-A)



式 (I-B)



式 (I-C)



式 (I-D)

10

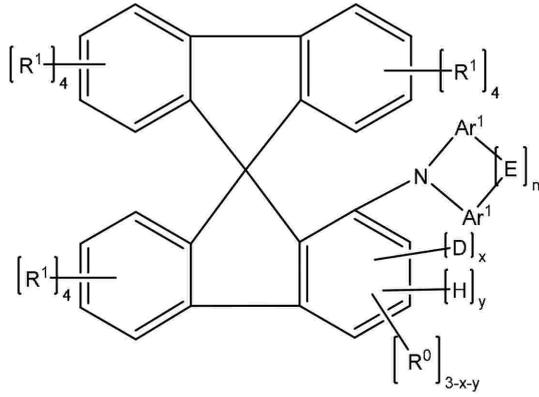
20

30

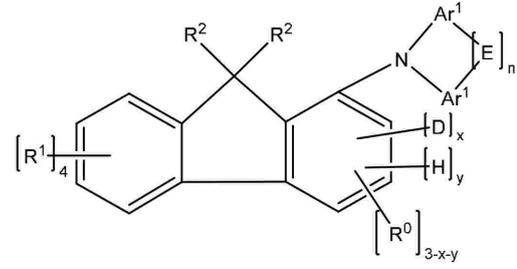
40

50

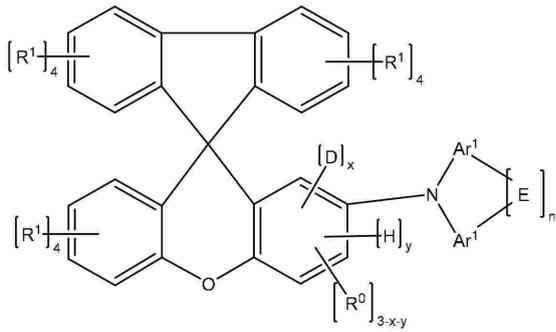
【化 3 - 2】



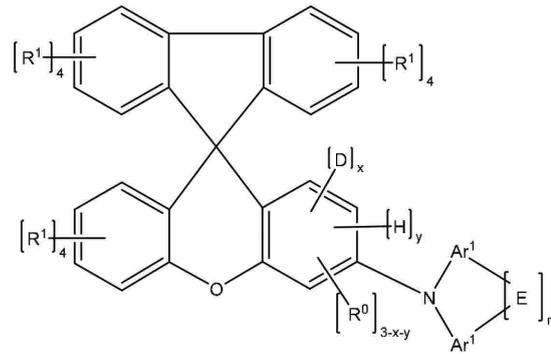
式 (I-E)



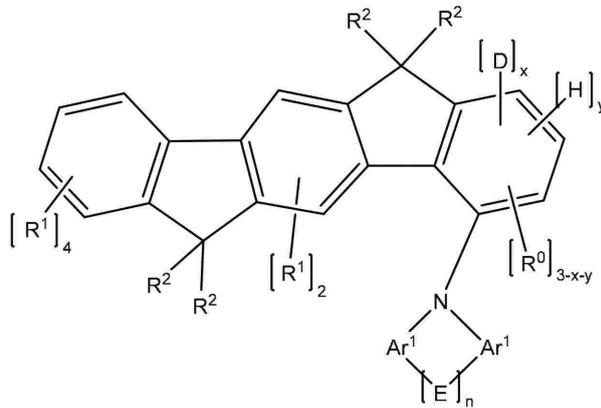
式 (I-F)



式 (I-G)



式 (I-H)



式 (I-J)

(式中、出現する変数は、請求項 1 ~ 3 の何れか 1 項において定義した通りである)
 のうちの 1 つに合致することを特徴とする、請求項 1 ~ 3 の何れか 1 項に記載の化合物。

【請求項 5】

以下の式：

10

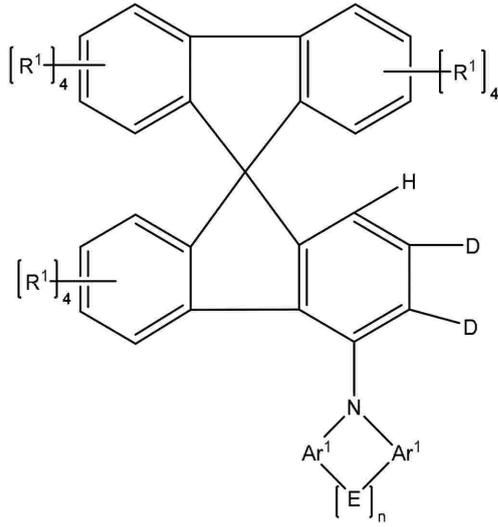
20

30

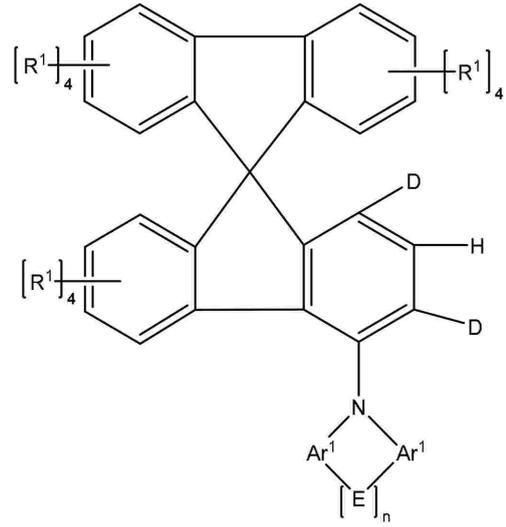
40

50

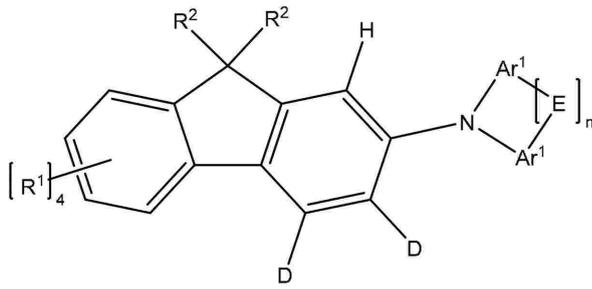
【化 4 - 1】



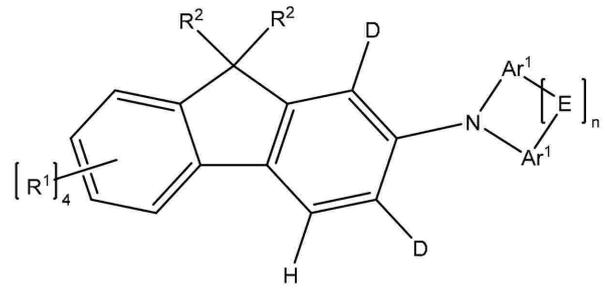
式 (I-A-a-1)



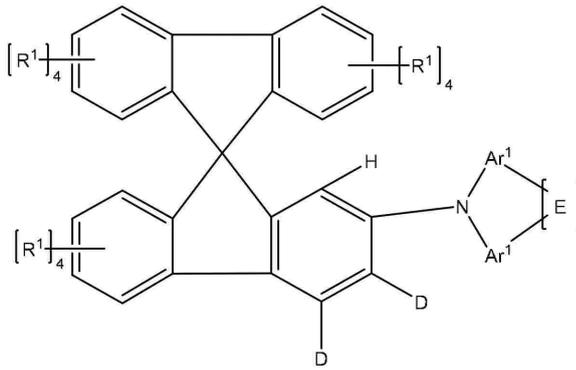
式 (I-A-b-1)



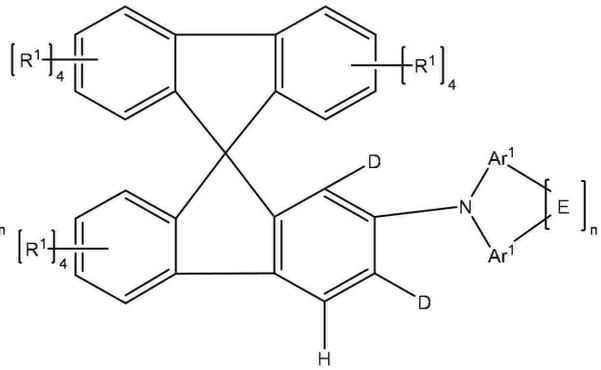
式 (I-B-a)



式 (I-B-b)



式 (I-C-a)



式 (I-C-b)

10

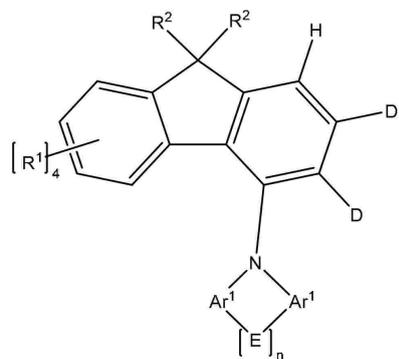
20

30

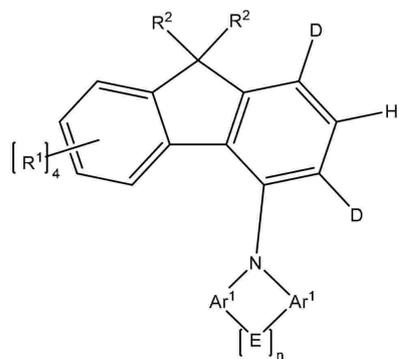
40

50

【化 4 - 2】

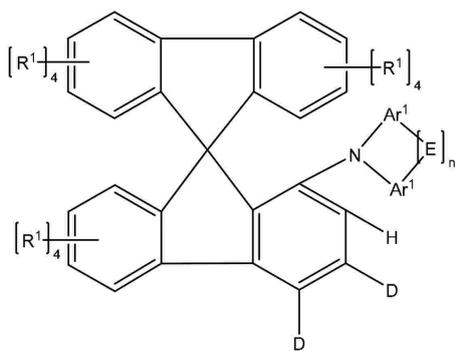


式 (I-D-a)

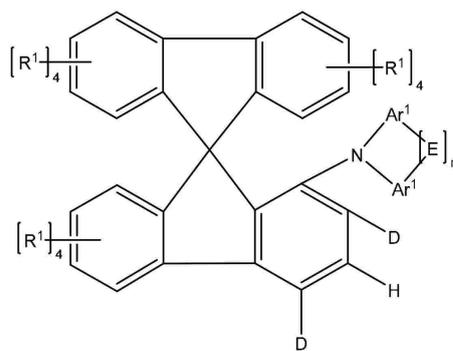


式 (I-D-b)

10

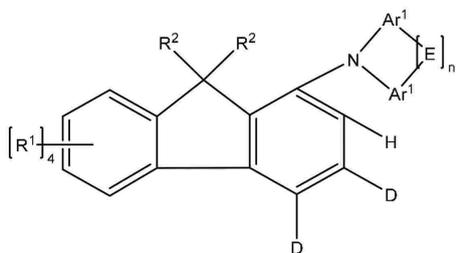


式 (I-E-a)

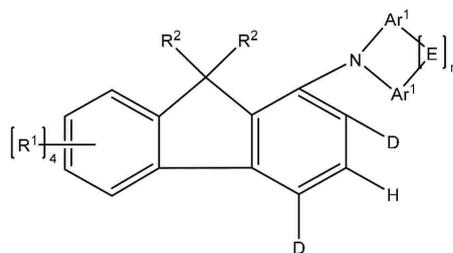


式 (I-E-b)

20

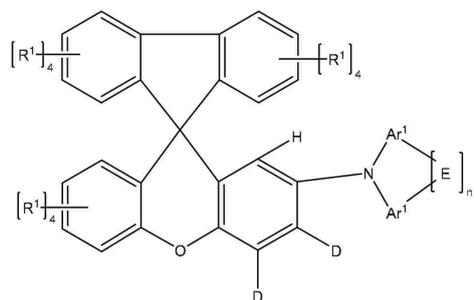


式 (I-F-a)

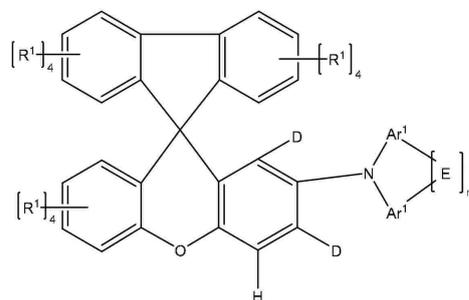


式 (I-F-b)

30



式 (I-G-a)

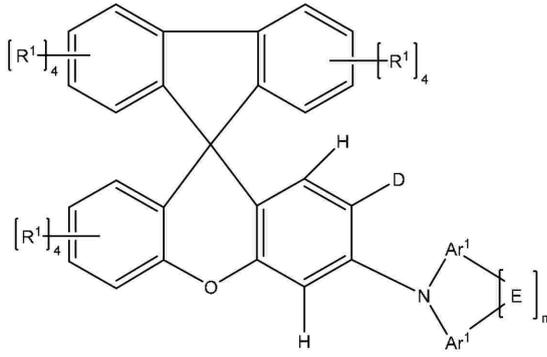


式 (I-G-b)

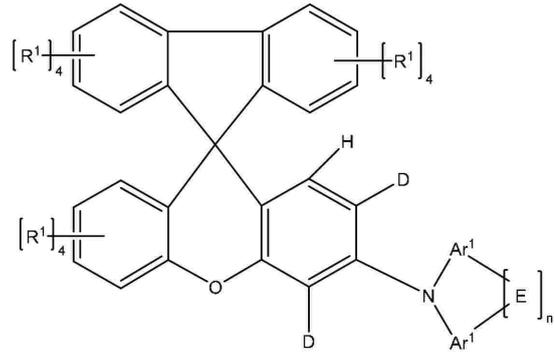
40

50

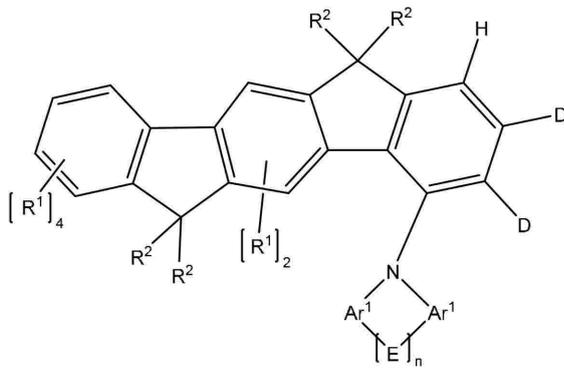
【化 4 - 3】



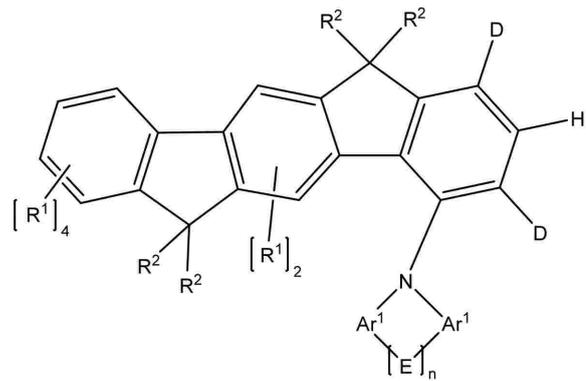
式 (I-H-a)



式 (I-H-b)



式 (I-J-a)



式 (I-J-b)

(式中、出現する変数は、請求項 1 ~ 3 の何れか 1 項において定義した通りである) のうちの 1 つに合致することを特徴とする、請求項 1 ~ 4 の何れか 1 項に記載の化合物。

【請求項 6】

式 (I) の前記化合物において、厳密に 1 つの Ar^1 または G 基が、1 - スピロピフルオレニル基、4 - スピロピフルオレニル基、1 - フルオレニル基および 4 - フルオレニル基から選択され、厳密に 1 つのさらなる Ar^1 または G 基が、2 - スピロピフルオレニル基および 2 - フルオレニル基から選択され、残りの第 3 の Ar^1 または G 基が、1 - スピロピフルオレニル基、4 - スピロピフルオレニル基、1 - フルオレニル基、4 - フルオレニル基、2 - スピロピフルオレニル基、2 - フルオレニル基、および 5 または 6 ~ 40 個の芳香族環原子を有する他の芳香族またはヘテロ芳香族環系から選択されることを特徴とする、請求項 1 ~ 5 の何れか 1 項に記載の化合物。

【請求項 7】

G および / または Ar^1 基としてスピロキサンテン基、好ましくは G および / または Ar^1 基として 2 - スピロキサンテン基または 3 - スピロキサンテン基を含むことを特徴とする、請求項 1 ~ 6 の何れか 1 項に記載の化合物。

【請求項 8】

その中の少なくとも 1 つの Ar^1 基が、以下の式：

10

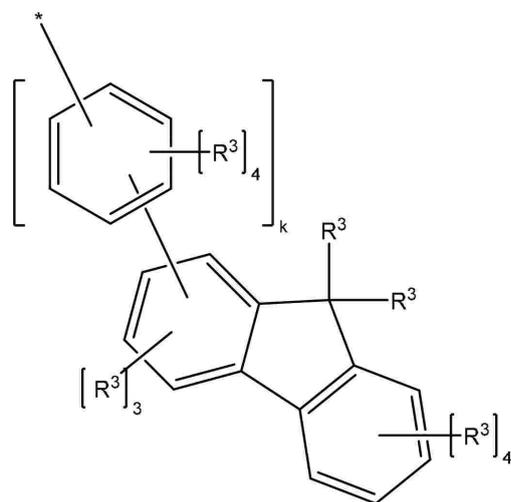
20

30

40

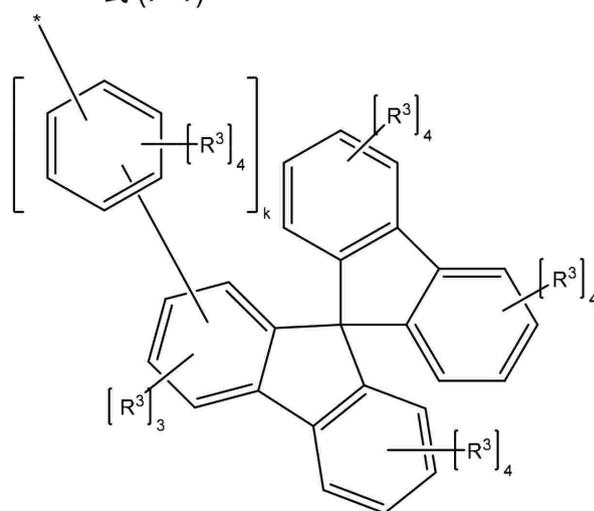
50

【化 5】



10

式 (F-1)



20

式 (F-2)

30

(式中、 k は 0、1、2 または 3 であり、好ましくは 0 または 1 であり、最も好ましくは 0 であり、 R^3 はそれぞれの場合において同じであるかまたは異なり、H および D から選択され、式の残部への結合点は * と表示され、他の変数は請求項 1 ~ 7 の何れか 1 項において定義した通りである)

のうちの 1 つに合致することを特徴とする、請求項 1 ~ 7 の何れか 1 項に記載の化合物。

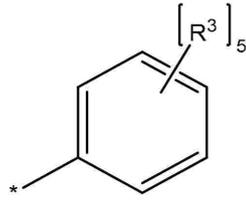
【請求項 9】

その中の少なくとも 1 つの Ar^1 基が、以下の式：

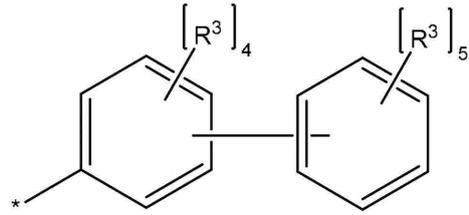
40

50

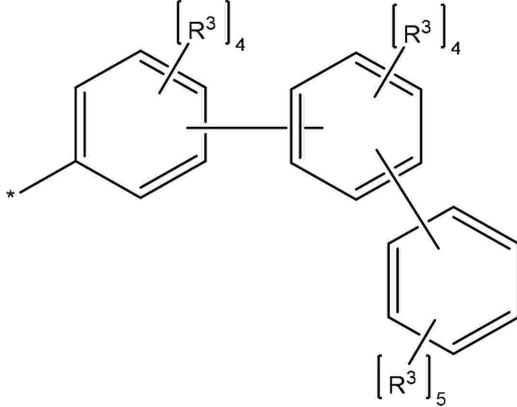
【化 6】



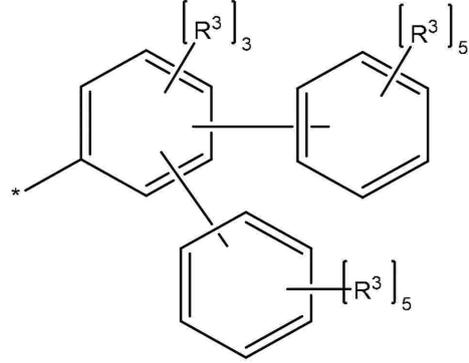
式 (A-1)



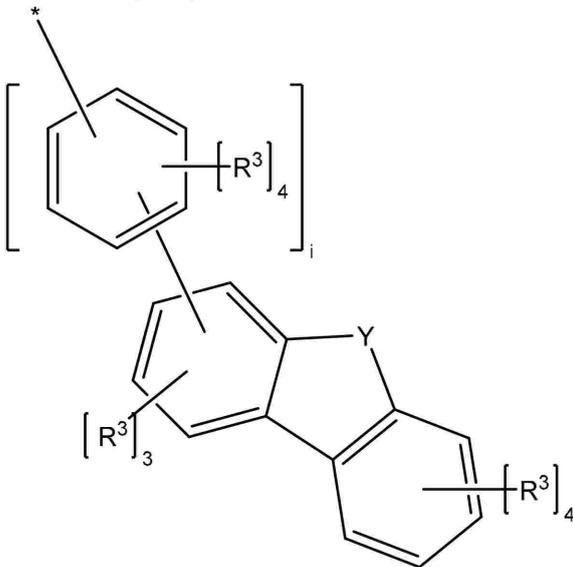
式 (A-2)



式 (A-3)



式 (A-4)



式 (A-5)

(式中、YはOまたはSであり、iは0、1、2または3であり、好ましくは0または1であり、 R^3 はそれぞれの場合において同じであるかまたは異なり、HおよびDから選択され、式の残部への結合点は*と表示され、他の変数は請求項1～8の何れか1項において定義した通りである)

のうちの1つに合致することを特徴とする、請求項8に記載の化合物。

【請求項10】

nが0であることを特徴とする、請求項1～9の何れか1項に記載の化合物。

【請求項11】

xおよびyの合計が3であり、好ましくはx=2およびy=1であることを特徴とする、請求項1～10の何れか1項に記載の化合物。

【請求項12】

互いのH/DアイソトポマーまたはH/Dアイソトポログであり、式(I)によって包含される、請求項1～11の何れか1項に記載の2つ以上の化合物を含む混合物。

40

30

10

20

50

【請求項 13】

前記混合物中の全てのアイソトポマーおよびアイソトポログ化合物について平均された水素原子対重水素原子の比が、1 : 10乃至10 : 1、好ましくは1 : 3乃至3 : 1、より好ましくは1 : 2乃至2 : 1であることを特徴とする、請求項12に記載の混合物。

【請求項 14】

重水素原子の数が前記化合物中よりも整数dだけ小さく、水素原子の数が前記化合物中よりも整数dだけ大きい、請求項1～11の何れか1項に記載の化合物のH/Dアイソトポログを、

a) 遷移金属触媒を用いて、かつ重水素化溶媒を使用して、請求項1～11の何れか1項に記載の1つ以上の異なる化合物に変換するか、または

b) 酸の作用下で、かつ重水素化溶媒を使用して、請求項1～11の何れか1項に記載の1つ以上の異なる化合物に変換する

ことを特徴とする、請求項1～11の何れか1項に記載の化合物または請求項12もしくは13に記載の混合物を調製するための方法。

【請求項 15】

請求項1～11の何れか1項に記載の化合物および少なくとも1種の溶媒を含む、調合物。

【請求項 16】

電子デバイスにおける、請求項1～11の何れか1項に記載の化合物または請求項12もしくは13に記載の混合物の使用。

【請求項 17】

請求項1～11の何れか1項に記載の化合物または請求項12もしくは13に記載の混合物を含む、電子デバイス、好ましくは有機エレクトロルミネッセントデバイス。

【請求項 18】

アノード、カソード、発光層、および電子阻止層を含む有機エレクトロルミネッセントデバイスであって、前記電子阻止層が、請求項1～11の何れか1項に記載の化合物または請求項12もしくは13に記載の混合物を含有することを特徴とする、請求項17に記載の電子デバイス。

【発明の詳細な説明】

【発明の概要】

【0001】

本願は、部分的に重水素化されたフルオレニルアミン誘導体およびスピロビフルオレニルアミン誘導体に関する。化合物は、電子デバイスにおける使用に好適である。

【0002】

部分重水素化は、ここでは、化合物の少なくとも1つの水素原子が重水素原子により置きかえられ、好ましくは化合物中の2つ以上の水素原子が重水素原子により置きかえられているが、全ての水素原子ではなく、それにより1つ以上の重水素原子と同様に、少なくとも1つの水素原子も化合物中に存在することを意味すると理解される。「H原子」または「H」または「水素」または「水素原子」という用語は、ここでおよび本願全体で、プロチウム原子、すなわち同位体¹Hを意味すると理解される。「D原子」または「D」または「重水素」または「重水素原子」という用語は、ここでおよび本願全体で、同位体²Hを意味すると理解される。

【0003】

本願の文脈における電子デバイスは、機能材料として有機半導体材料を含む、いわゆる有機電子デバイスを意味するものと理解される。より詳細には、これらは、OLED（有機エレクトロルミネッセントデバイス）を意味するものと理解される。OLEDという用語は、有機化合物を含む1つ以上の層を有し、電圧を印可すると光を発する電子デバイスを意味するものと理解される。OLEDの構造および機能の一般的原理は、当業者に公知である。

【0004】

電子デバイス、とりわけOLEDにおいて、性能データの向上に強い関心が集まっている。これらの側面において、未だに完全に満足のいく解決策は何も見出すことができていない。

【0005】

電子デバイスの性能データに対する大きな影響を及ぼすのが、正孔輸送性機能を有する層である。これらの層に使用するために、新規の化合物、とりわけ正孔輸送性化合物および電子阻止化合物の探求が続けられている。この目的のため、特に、高いガラス転移温度、高い安定性、および正孔に関する高い伝導性を有する化合物が探求されている。

【0006】

電子デバイスの長寿命を達成するために、化合物の高い安定性が依然として望ましい。また、電子デバイスに使用することで、デバイスの性能データ、特に高効率、長寿命および低作動電圧が改善される化合物も探求されている。

10

【0007】

先行技術では、特にトリアリールアミン化合物、たとえばスピロピフルオレンアミンおよびフルオレンアミンは、電子デバイス用の正孔輸送材料および正孔輸送性マトリックス材料として公知である。しかし、上記の特質に関して、特にデバイスの寿命および効率に関して、依然として改善の必要性がある。いくつかの先行技術文献は、特定の場合に化合物の重水素化アイソトポログが、対応する非重水素化化合物と比較して、他の点では同一の性能データを持つ電子デバイスの寿命が長くなることを開示している。

【0008】

20

1つ以上の水素原子を含有する化合物は、重水素化反応により、化合物中の水素原子の1つ以上が重水素原子により置きかえられたH/Dアイソトポログに変換することができる。重水素化反応は、反応物中の全ての水素原子が反応生成物中の重水素原子により置きかえられているように、化合物の完全な重水素化を達成することができる。しかし、反応物が完全に重水素化される重水素化反応の実行は時間がかかり、多くの場合副生成物および/または低収率につながる可能性のある高い複雑性および/または材料へのストレスを伴う。

【0009】

現在、驚くべきことに、フルオレンアミンおよびスピロピフルオレンアミンを部分的に重水素化するだけでも、完全な重水素化から得られるものと他の点では同一の性能データを持って、同等の寿命の改善を達成できることが見出されている。同時に、部分重水素化は、合成的により単純かつ複雑でない方法で達成することができる。

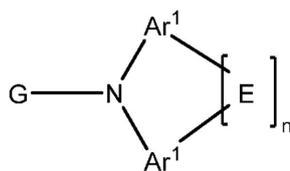
30

【0010】

したがって、本願は、式(I)

【0011】

【化1】



40

式(I)

【0012】

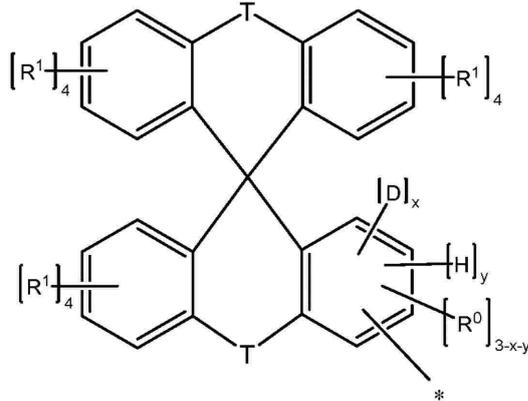
[式中、

Gは、式(G-1)、(G-2)または(G-3)

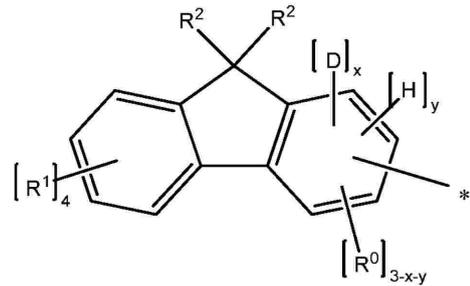
【0013】

50

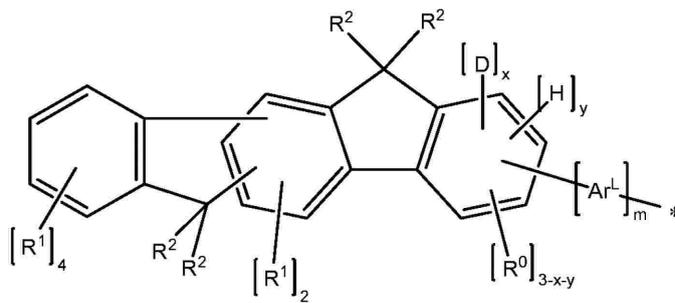
【化 2】



式 (G-1)



式 (G-2)



式 (G-3)

【 0 0 1 4 】

(式中、式 (I) の残部への結合は * と表示され、

T は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、単結合、 $C(R^2)_2$ 、 $C(=O)$ 、 $Si(R^2)_4$ 、 NR^2 、O および S から選択され；

E は単結合、 $C(R^3)_2$ 、 $C(R^3)_2 - C(R^3)_2$ 、 $C(R^3) = C(R^3)$ 、 $C(=O)$ 、 $Si(R^3)_4$ 、 NR^3 、O および S から選択され；

Ar^1 は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、6 ~ 40 個の芳香族環原子を有し、 R^3 ラジカルにより置換されている芳香族環系、および 5 ~ 40 個の芳香族環原子を有し、 R^3 ラジカルにより置換されているヘテロ芳香族環系から選択され；

Ar^L は、6 ~ 40 個の芳香族環原子を有し、 R^3 ラジカルにより置換されている芳香族環系、および 5 ~ 40 個の芳香族環原子を有し、 R^3 ラジカルにより置換されているヘテロ芳香族環系から選択され；

R^0 は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、F、Cl、Br、I、 $C(=O)R^4$ 、CN、 $Si(R^4)_3$ 、 $N(R^4)_2$ 、 $P(=O)(R^4)_2$ 、 OR^4 、 $S(=O)R^4$ 、 $S(=O)_2R^4$ 、1 ~ 20 個の炭素原子を有する直鎖アルキルまたはアルコキシ基、3 ~ 20 個の炭素原子を有する分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、2 ~ 20 個の炭素原子を有するアルケニルまたはアルキニル基、6 ~ 40 個の芳香族環原子を有する芳香族環系、および 5 ~ 40 個の芳香族環原子を有するヘテロ芳香族環系から選択され；2 つ以上の R^0 ラジカルは、互いに結合していても、環を形成していてもよく；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基、ならびに言及した芳香族環系およびヘテロ芳香族環系は、それぞれ R^4 ラジカルにより置換されており；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基中の 1 つ以上の CH_2 基は、 $-R^4C=CR^4-$ 、 $-C-C-$ 、 $Si(R^4)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^4$ 、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^4-$ 、 NR^4 、 $P(=O)(R^4)$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、SO または SO_2 により置きかえられていてもよく；

10

20

40

50

R¹は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、H、D、F、Cl、Br、I、C(=O)R⁴、CN、Si(R⁴)₃、N(R⁴)₂、P(=O)(R⁴)₂、OR⁴、S(=O)R⁴、S(=O)₂R⁴、1~20個の炭素原子を有する直鎖アルキルまたはアルコキシ基、3~20個の炭素原子を有する分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、2~20個の炭素原子を有するアルケニルまたはアルキニル基、6~40個の芳香族環原子を有する芳香族環系、および5~40個の芳香族環原子を有するヘテロ芳香族環系から選択され；2つ以上のR¹ラジカルは、互いに結合していても、環を形成していてもよく；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基、ならびに言及した芳香族環系およびヘテロ芳香族環系は、それぞれR⁴ラジカルにより置換されており；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基中の1つ以上のCH₂基は、-R⁴C=CR⁴-、-C-C-、Si(R⁴)₂、C=O、C=NR⁴、-C(=O)O-、-C(=O)NR⁴-、NR⁴、P(=O)(R⁴)、-O-、-S-

R²は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、H、D、F、Cl、Br、I、C(=O)R⁴、CN、Si(R⁴)₃、N(R⁴)₂、P(=O)(R⁴)₂、OR⁴、S(=O)R⁴、S(=O)₂R⁴、1~20個の炭素原子を有する直鎖アルキルまたはアルコキシ基、3~20個の炭素原子を有する分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、2~20個の炭素原子を有するアルケニルまたはアルキニル基、6~40個の芳香族環原子を有する芳香族環系、および5~40個の芳香族環原子を有するヘテロ芳香族環系から選択され；2つ以上のR²ラジカルは、互いに結合していても、環を形成していてもよく；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基、ならびに言及した芳香族環系およびヘテロ芳香族環系は、それぞれR⁴ラジカルにより置換されており；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基中の1つ以上のCH₂基は、-R⁴C=CR⁴-、-C-C-、Si(R⁴)₂、C=O、C=NR⁴、-C(=O)O-、-C(=O)NR⁴-、NR⁴、P(=O)(R⁴)、-O-、-S-

R³は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、H、D、F、Cl、Br、I、C(=O)R⁴、CN、Si(R⁴)₃、N(R⁴)₂、P(=O)(R⁴)₂、OR⁴、S(=O)R⁴、S(=O)₂R⁴、1~20個の炭素原子を有する直鎖アルキルまたはアルコキシ基、3~20個の炭素原子を有する分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、2~20個の炭素原子を有するアルケニルまたはアルキニル基、6~40個の芳香族環原子を有する芳香族環系、および5~40個の芳香族環原子を有するヘテロ芳香族環系から選択され；2つ以上のR³ラジカルは、互いに結合していても、環を形成していてもよく；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基、ならびに言及した芳香族環系およびヘテロ芳香族環系は、それぞれR⁴ラジカルにより置換されており；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基中の1つ以上のCH₂基は、-R⁴C=CR⁴-、-C-C-、Si(R⁴)₂、C=O、C=NR⁴、-C(=O)O-、-C(=O)NR⁴-、NR⁴、P(=O)(R⁴)、-O-、-S-

R⁴は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、H、D、F、Cl、Br、I、C(=O)R⁵、CN、Si(R⁵)₃、N(R⁵)₂、P(=O)(R⁵)₂、OR⁵、S(=O)R⁵、S(=O)₂R⁵、1~20個の炭素原子を有する直鎖アルキルまたはアルコキシ基、3~20個の炭素原子を有する分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、2~20個の炭素原子を有するアルケニルまたはアルキニル基、6~40個の芳香族環原子を有する芳香族環系、および5~40個の芳香族環原子を有するヘテロ芳香族環系から選択され；2つ以上のR⁴ラジカルは、互いに結合していても、環を形成していてもよく；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基、ならびに言及した芳香族環系およびヘテロ芳香族環系は、それぞれR⁵ラジカルにより置換されており；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基中の1つ以上のCH₂基は、-R⁵C=CR⁵-、-C-C-、Si(R⁵)₂、C=O、C=NR⁵、

- C (= O) O - 、 - C (= O) N R ⁵ - 、 N R ⁵ 、 P (= O) (R ⁵) 、 - O - 、 - S - 、 S O または S O ₂ により置きかえられていてもよく ;

R ⁵ は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、H、D、F、Cl、Br、I、CN、1 ~ 20 個の炭素原子を有するアルキルまたはアルコキシ基、2 ~ 20 個の炭素原子を有するアルケニルまたはアルキニル基、6 ~ 40 個の芳香族環原子を有する芳香族環系、および 5 ~ 40 個の芳香族環原子を有するヘテロ芳香族環系から選択され ; 2 つ以上の R ⁵ ラジカルは、互いに結合していても、環を形成していてもよく ; 言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基、ならびに言及した芳香族環系およびヘテロ芳香族環系は、F および CN から選択される 1 つ以上のラジカルにより置換されていてもよく ;

10

x は 1 または 2 であり、x と y の合計は 3 以下であり ;

y は 1 または 2 であり、x と y の合計は 3 以下であり ;

n は 0 または 1 であり、n = 0 である場合、E 基は存在せず、2 つの A r ¹ 基は互いに結合せず ;

m は 0 または 1 であり、m = 0 である場合、A r ^L に結合する 2 つの基は互いに直接結合している)

に合致する]

の化合物を提供する。

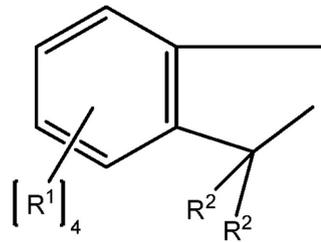
【 0 0 1 5 】

ベンゼン環に可変的に結合しているとして式 (G - 3) に示される基

20

【 0 0 1 6 】

【 化 3 】



30

【 0 0 1 7 】

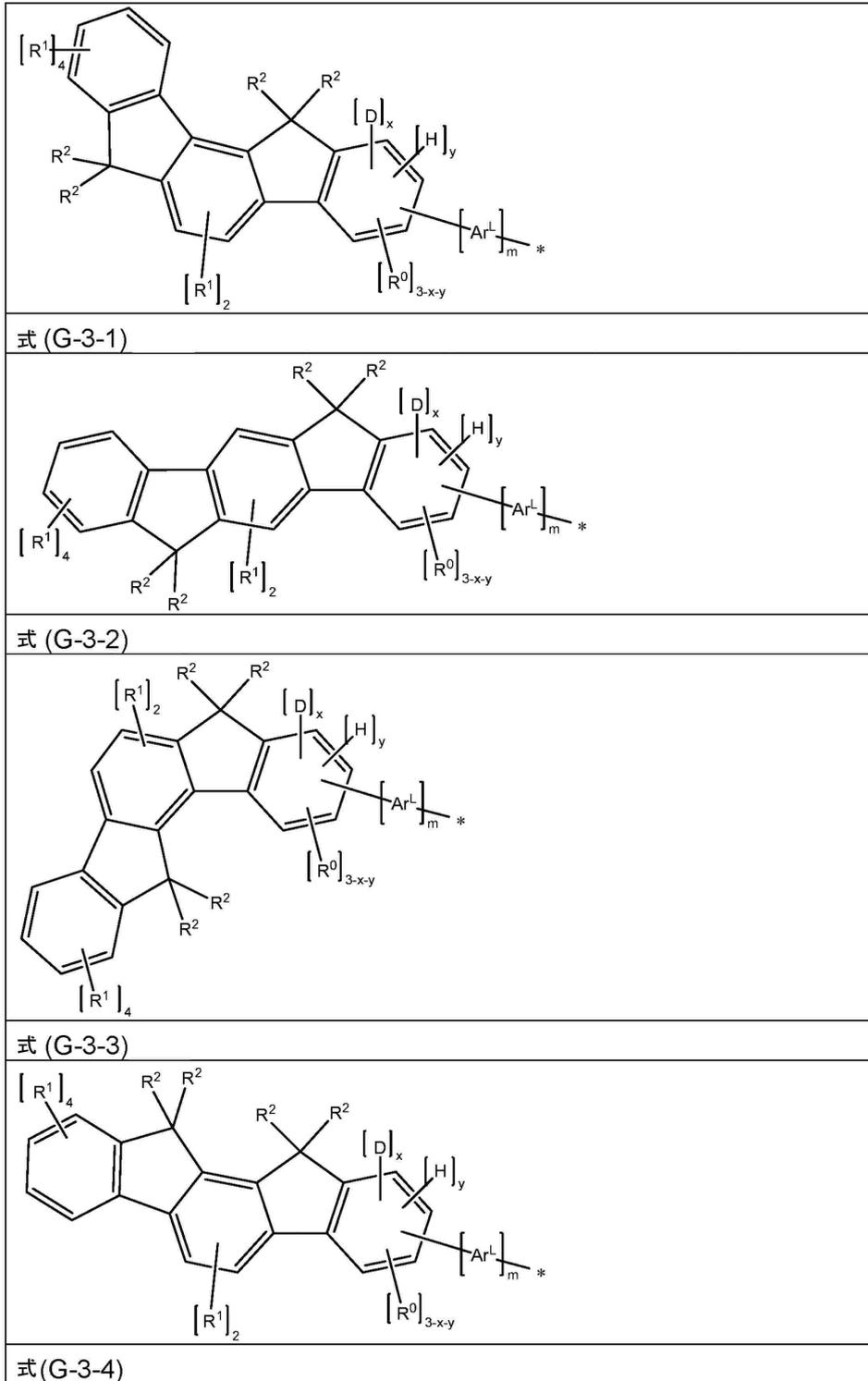
は、ベンゼン環上の 6 つの可能な位置全てに結合していてもよく、それにより式 (G - 3) の基の以下の 6 つの変形が起こり得る :

【 0 0 1 8 】

40

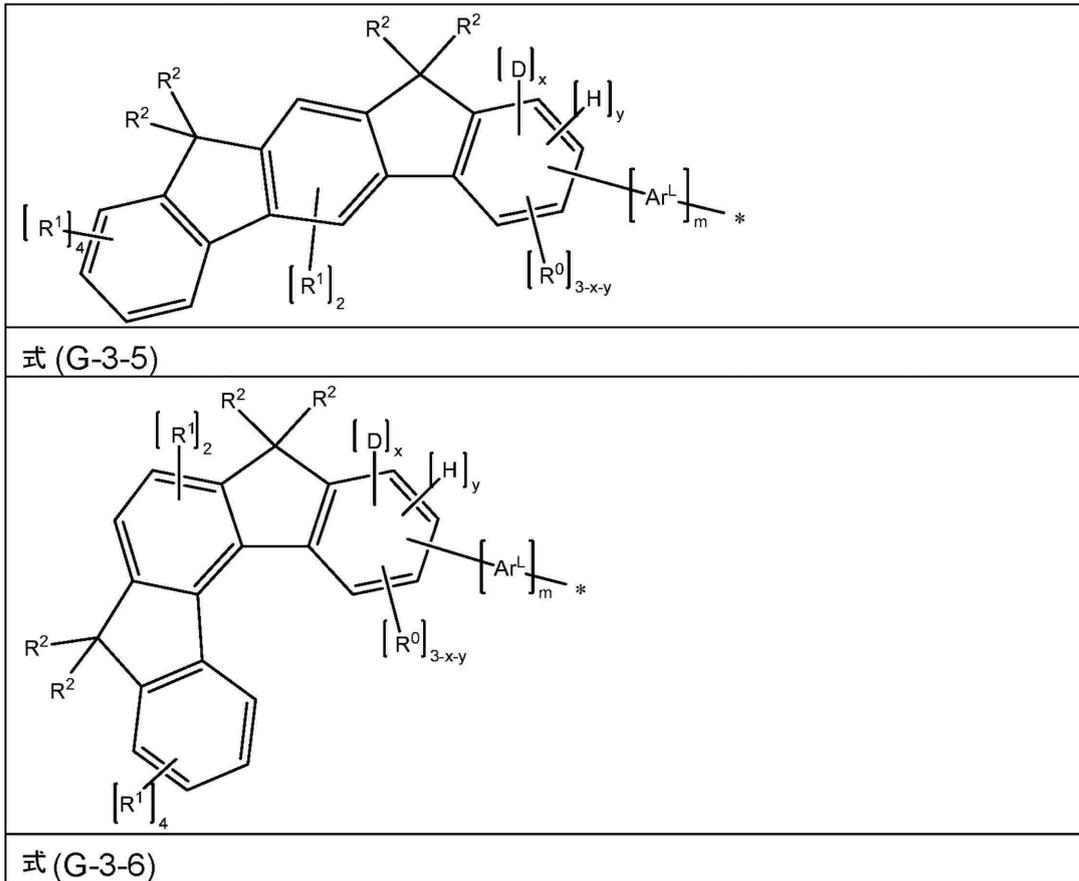
50

【化 4 - 1】



【 0 0 1 9 】

【化 4 - 2】



【 0 0 2 0】

与えられた式の中で、式 (G - 3 - 2) が好ましい。

【 0 0 2 1】

[D]_x は、ここでは、式 (G - 1)、(G - 2) または (G - 3) のベンゼン環において、無置換として示されている 4 つの位置の x = 1 または 2 のそれぞれに 1 つの重水素原子が結合していることを意味すると理解される。

30

【 0 0 2 2】

[H]_y は、ここでは、式 (G - 1)、(G - 2) または (G - 3) のベンゼン環において、無置換として示されている 4 つの位置の y = 1 または 2 のそれぞれに 1 つの水素原子 (重水素原子ではない ; 上記の定義を参照) が結合していることを意味すると理解される。

【 0 0 2 3】

[R⁰]_{3-x-y} は、ここでは、式 (G - 1)、(G - 2) または (G - 3) のベンゼン環において、無置換として示されている 4 つの位置の (3 - x - y) のそれぞれに 1 つの R⁰ 基が結合していることを意味すると理解される。上記の x および y の定義によれば、(3 - x - y) は 0 の値または 1 の値のいずれかをとり得る。前者の場合、R⁰ 基は結合しておらず、後者の場合、厳密に 1 つの R⁰ 基が結合している。

40

【 0 0 2 4】

式 (G - 1)、(G - 2) および (G - 3) のベンゼン環における [R¹]₄ および [R¹]₂ の表現、すなわち当該のベンゼン環において無置換として示されている 4 つまたは 2 つの位置のそれぞれに 1 つの R¹ ラジカルが結合していること、および本願の式におけるさらなる対応する表現についても同様である。

【 0 0 2 5】

以下に続く定義は、本願において使用される化学基に適用可能である。それらは、何らかのさらなる具体的な定義が与えられない限り適用可能である。

50

【0026】

本発明の文脈におけるアリール基は、単一の芳香族環、すなわちベンゼン、または縮合芳香族多環、たとえばナフタレン、フェナントレンもしくはアントラセンの何れかを意味するものと理解される。本願の文脈における縮合芳香族多環は、互いに縮合した2つ以上の単一の芳香族環からなる。環間の縮合は、ここでは環が少なくとも1つの縁を互いに共有していることを意味するものと理解される。本発明の文脈におけるアリール基は、6～40個の芳香族環原子を含有する。さらに、アリール基は芳香族環原子としてヘテロ原子を含有せず、炭素原子のみを含有する。

【0027】

本発明の文脈におけるヘテロアリール基は、単一のヘテロ芳香族環、たとえばピリジン、ピリミジンもしくはチオフエン、または縮合ヘテロ芳香族多環、たとえばキノリンもしくはカルバゾールの何れかを意味するものと理解される。本願の文脈における縮合ヘテロ芳香族多環は、互いに縮合した2つ以上の単一の芳香族またはヘテロ芳香族環からなり、芳香族およびヘテロ芳香族環の少なくとも1つは、ヘテロ芳香族環である。環間の縮合は、ここでは環が少なくとも1つの縁を互いに共有していることを意味するものと理解される。本発明の文脈におけるヘテロアリール基は、5～40個の芳香族環原子を含有し、そのうちの少なくとも1個がヘテロ原子である。ヘテロアリール基のヘテロ原子は、好ましくはN、OおよびSから選択される。

【0028】

アリールまたはヘテロアリール基は、そのそれぞれが上記のラジカルにより置換されていてもよく、とりわけベンゼン、ナフタレン、アントラセン、フェナントレン、ピレン、ジヒドロピレン、クリセン、ペリレン、トリフェニレン、フルオランテン、ベンゾアントラセン、ベンゾフェナントレン、テトラセン、ペンタセン、ベンゾピレン、フラン、ベンゾフラン、イソベンゾフラン、ジベンゾフラン、チオフエン、ベンゾチオフエン、イソベンゾチオフエン、ジベンゾチオフエン、ピロール、インドール、イソインドール、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、ベンゾイミダゾール、ベンゾイミダゾール[1,2-a]ベンゾイミダゾール、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、ピラジニイミダゾール、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、ピラジン、フェナジン、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、1,2,3,4-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から誘導される基を意味するものと理解される。

【0029】

本発明の文脈における芳香族環系は、必ずしもアリール基のみを含有するとは限らず、少なくとも1つのアリール基に縮合した1つ以上の非芳香族環を追加で含有してもよい系である。これらの非芳香族環は、環原子として炭素原子のみを含有する。この定義に包含される基の例は、テトラヒドロナフタレン、フルオレンおよびスピロピフルオレンである。加えて、「芳香族環系」という用語には、単結合を介して互いに結合した2つ以上の芳香族環系からなる系、たとえばビフェニル、テルフェニル、7-フェニル-2-フルオレニル、クアテルフェニルおよび3,5-ジフェニル-1-フェニルが含まれる。本発明の

10

20

30

40

50

文脈における芳香族環系は、環系に6～40個の炭素原子を含有するが、ヘテロ原子を含有しない。「芳香族環系」の定義には、ヘテロアリアル基は含まれない。

【0030】

ヘテロ芳香族環系は、環原子として少なくとも1個のヘテロ原子を含有しなければならないことを除き、上記の芳香族環系の定義に合致する。芳香族環系の場合と同様、ヘテロ芳香族環系は、アリアル基とヘテロアリアル基のみを含有する必要はなく、少なくとも1つのアリアルまたはヘテロアリアル基に縮合した1つ以上の非芳香族環を追加で含有してもよい。非芳香族環は、環原子として炭素原子のみを含有してもよく、1個以上のヘテロ原子を追加で含有してもよく、ヘテロ原子は、好ましくはN、OおよびSから選択される。このようなヘテロ芳香族環系の一例は、ベンゾピラニルである。加えて、「ヘテロ芳香族環系」という用語は、単結合を介して互いに結合している2つ以上の芳香族またはヘテロ芳香族環系からなる系、たとえば4,6-ジフェニル-2-トリアジニルを意味するものと理解される。本発明の文脈におけるヘテロ芳香族環系は、炭素およびヘテロ原子から選択される5～40個の環原子を含有し、環原子のうち少なくとも1個はヘテロ原子である。ヘテロ芳香族環系のヘテロ原子は、好ましくはN、OおよびSから選択される。

10

【0031】

したがって、本願に定義した通りの「ヘテロ芳香族環系」および「芳香族環系」という用語は、芳香族環系が環原子としてヘテロ原子を有することができない一方、ヘテロ芳香族環系は、環原子として少なくとも1個のヘテロ原子を有していなければならないという点で互いに異なる。このヘテロ原子は、非芳香族ヘテロ環式環の環原子として存在しても、芳香族ヘテロ環式環の環原子として存在してもよい。

20

【0032】

上記の定義によると、アリアル基はいずれも「芳香族環系」という用語に包含され、ヘテロアリアル基はいずれも「ヘテロ芳香族環系」という用語に包含される。

【0033】

6～40個の芳香族環原子を有する芳香族環系、または5～40個の芳香族環原子を有するヘテロ芳香族環系は、とりわけアリアル基およびヘテロアリアル基の下で先に言及した基から、およびピフェニル、テルフェニル、クアテルフェニル、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、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、インデノカルバゾール、またはこれらの基の組み合わせから誘導される基を意味するものと理解される。

30

【0034】

本発明の文脈において、1～20個の炭素原子を有する直鎖アルキル基および3～20個の炭素原子を有する分枝または環状アルキル基および2～40個の炭素原子を有するアルケニルまたはアルキニル基は、個々の水素原子またはCH₂基がまた、ラジカルの定義において先に言及した基により置換されていてもよく、好ましくはメチル、エチル、n-プロピル、i-プロピル、n-ブチル、i-ブチル、s-ブチル、t-ブチル、2-メチルブチル、n-ペンチル、s-ペンチル、シクロペンチル、ネオペンチル、n-ヘキシル、シクロヘキシル、ネオヘキシル、n-ヘプチル、シクロヘプチル、n-オクチル、シクロオクチル、2-エチルヘキシル、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、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、エチニル、プロピニル、ブチニル、ペンチニル、ヘキシニルまたはオクチニルラジカルを意味するものと理解される。

40

【0035】

1～20個の炭素原子を有するアルコキシまたはチオアルキル基は、個々の水素原子またはCH₂基がまた、ラジカルの定義において先に言及した基により置換されていてもよく、好ましくはメトキシ、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、n-ペントキシ、

50

s - ペントキシ、2 - メチルプトキシ、n - ヘキソキシ、シクロヘキシルオキシ、n - ヘプトキシ、シクロヘプチルオキシ、n - オクチルオキシ、シクロオクチルオキシ、2 - エチルヘキシルオキシ、ペンタフルオロエトキシ、2, 2, 2 - トリフルオロエトキシ、メチルチオ、エチルチオ、n - プロピルチオ、i - プロピルチオ、n - ブチルチオ、i - ブチルチオ、s - ブチルチオ、t - ブチルチオ、n - ペンチルチオ、s - ペンチルチオ、n - ヘキシルチオ、シクロヘキシルチオ、n - ヘプチルチオ、シクロヘプチルチオ、n - オクチルチオ、シクロオクチルチオ、2 - エチルヘキシルチオ、トリフルオロメチルチオ、ペンタフルオロエチルチオ、2, 2, 2 - トリフルオロエチルチオ、エテニルチオ、プロペニルチオ、ブテニルチオ、ペンテニルチオ、シクロペンテニルチオ、ヘキセニルチオ、シクロヘキセニルチオ、ヘプテニルチオ、シクロヘプテニルチオ、オクテニルチオ、シクロオクテニルチオ、エチニルチオ、プロピニルチオ、ブチニルチオ、ペンチニルチオ、ヘキシニルチオ、ヘプチニルチオまたはオクチニルチオを意味するものと理解される。

【0036】

2つ以上のラジカルが一緒になって環を形成してもよいという表現は、本願の文脈において、とりわけ2つのラジカルが化学結合により互いに結合していることを意味すると当然に理解される。ただし、これに加えて、上記の表現は、2つのラジカル的一方が水素である場合、第2のラジカルは水素原子が結合していた位置に結合して環を形成することを意味するものとも当然に理解すべきである。

【0037】

式(I)の化合物の好ましい態様において、化合物はモノアミンであり、化合物が単一のトリアリールアミノ基のみ、好ましくは単一のアミノ基のみを含有することを意味する。基、たとえばカルバゾール、インドールおよびピロールならびにそれらの誘導体は、好ましくはトリアリールアミノ基を含有する基またはアミノ基を含有する基とはみなされない。トリアリールアミノ基は、窒素原子が3つの基に結合する全ての基を意味するとここで理解され、基は任意に置換された芳香族およびヘテロ芳香族環系、特に任意に置換されたアリールおよびヘテロアリール基から選択される。

【0038】

化合物は部分的に重水素化されており、すなわち少なくとも1つの水素原子を含有する。化合物中の水素原子と重水素原子の比は、好ましくは1:10乃至10:1、より好ましくは1:3乃至3:1、最も好ましくは1:2乃至2:1である。

【0039】

好ましい態様において、式(I)中、窒素原子に結合する Ar^1 、 Ar^1 およびG基は、その芳香族またはヘテロ芳香族環上でそれぞれ部分的に重水素化または完全に重水素化され、好ましくは部分的に重水素化される。

【0040】

代替的な好ましい態様において、式(I)中、G基のみがその芳香族またはヘテロ芳香族環上で部分的に重水素化または完全に重水素化され、好ましくは部分的に重水素化され、 Ar^1 基は重水素化されていない。この文脈における「完全に重水素化されている」とは、基の芳香族またはヘテロ芳香族環に結合する水素原子が全て重水素に交換されていることを意味する。この文脈における「部分的に重水素化されている」とは、基の芳香族またはヘテロ芳香族環に結合する水素原子の全てではないが1つ以上が重水素により置き換えられていることを意味する。

【0041】

Ar^1 基の芳香族またはヘテロ芳香族環は、好ましくは Ar^1 基の置換基 R^3 に存在する環ではなく、 Ar^1 基自体を形成する環を意味すると理解される。より好ましくは、これはまた、 Ar^1 基の置換基 R^3 、 Ar^1 基の置換基 R^3 の置換基 R^4 、および Ar^1 基の置換基 R^3 の置換基 R^4 の置換基 R^5 の環を意味すると理解される。G基も同様であり、それによりG基の芳香族またはヘテロ芳香族環は、好ましくはG基の置換基 R^0 または R^1 に存在する環ではなく、G基自体を形成する環を意味すると理解される。より好ましくは、これはまた、G基の置換基 R^0 、 R^1 および R^2 の環、G基の置換基 R^0 、 R^1 お

よび R^2 の置換基 R^4 、ならびに G 基の置換基 R^0 、 R^1 および R^2 の置換基 R^4 の置換基 R^5 を意味すると理解される。

【0042】

芳香族またはヘテロ芳香族環ではないが水素原子を有する Ar^1 および G 基の一部は、重水素化されていなくてもよいが、完全に重水素化されていてもよいが、または部分的に重水素化されていてもよい。芳香族でもヘテロ芳香族環でもなく、水素原子を有する Ar^1 および G 基の置換基は、重水素化されていなくてもよいが、部分的に重水素化されていてもよいが、または完全に重水素化されていてもよく、芳香族またはヘテロ芳香族環の場合、好ましくは部分的に重水素化または完全に重水素化され、より好ましくは完全に重水素化されており、脂肪族基、特にアルキル基の場合、好ましくは重水素化されていないがまたは部分的に重水素化され、より好ましくは重水素化されていない。

10

【0043】

さらに、式 (I) の化合物中に存在する全ての脂肪族基が重水素化されていないことが好ましい。脂肪族基は、非芳香族である全ての基、特に全てのアルキル基、アルケニル基およびアルキニル基を意味し、それらの環状形態を含むと理解される。特に、式 (I) 中のフルオレニル基の 9 位のアルキル基は重水素化されていないことが好ましい。

【0044】

一般に、任意の化学基に関して、「重水素化されていない」とは、基中に存在する水素原子が全て 1H であることを意味する。「部分的に重水素化されている」とは、基中に 2 つ以上の水素原子が存在し、そのうち 1 つ以上が 1H であり、1 つ以上が 2H であることを意味する。好ましい態様において、「部分的に重水素化されている」とは、基中に 2 つ以上の水素原子が存在し、そのうちの半分以上が 2H であり、少なくとも 1 つ、しかし多くとも半分が 1H であることを意味する。「完全に重水素化されている」とは、基中に存在する全ての水素原子が 2H であることを意味する。

20

【0045】

Ar^1 基が完全に重水素化されているか、または部分的に重水素化されているかどうかを考慮する場合、芳香族またはヘテロ芳香族環系の拡張のために置換基 R^3 が含まれる前に、定義による Ar^1 の芳香族またはヘテロ芳香族環系の許容される大きさが完全に使用されることが好ましい。たとえば、 Ar^1 が、6 ~ 40 個の芳香族環原子を有し、 R^3 ラジカルにより置換されている芳香族環系、または 5 ~ 40 個の芳香族環原子を有し、 R^3 ラジカルにより置換されているヘテロ芳香族環系と定義される場合、ピフェニル基は、 R^3 ラジカルを有さない 12 個の芳香族環原子を有する芳香族環系とみなされ、フェニル基である R^3 ラジカルを有する 6 個の芳香族環原子を有する芳香族環系とはみなされない。

30

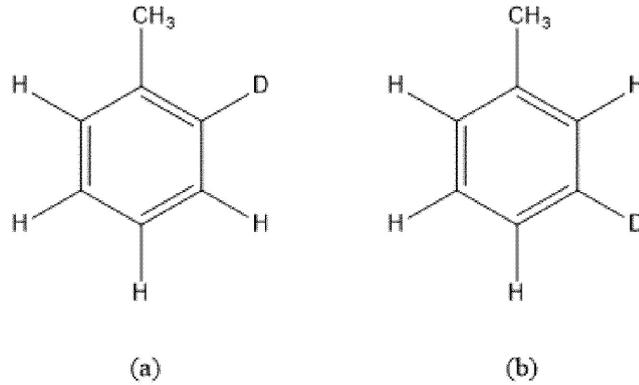
【0046】

式 (I) の化合物は、好ましくは式 (I) の化合物の H / D アイソトポマー、または式 (I) の化合物の H / D アイソトポログであるという点でのみ式 (I) の化合物と異なる、一定の割合の他の式 (I) の化合物との混合物中に存在する。第 1 の化合物の H / D アイソトポマーは、化合物の化学構造における H および D 同位体の位置によってのみ第 1 の化合物と異なる化合物を意味すると理解される。第 1 の化合物およびその H / D アイソトポマーは、いずれも (互いの) H / D アイソトポマーと称される。2 つの H / D アイソトポマーの一例は、以下に示される化合物 (a) および (b) である。

40

【0047】

【化5】



10

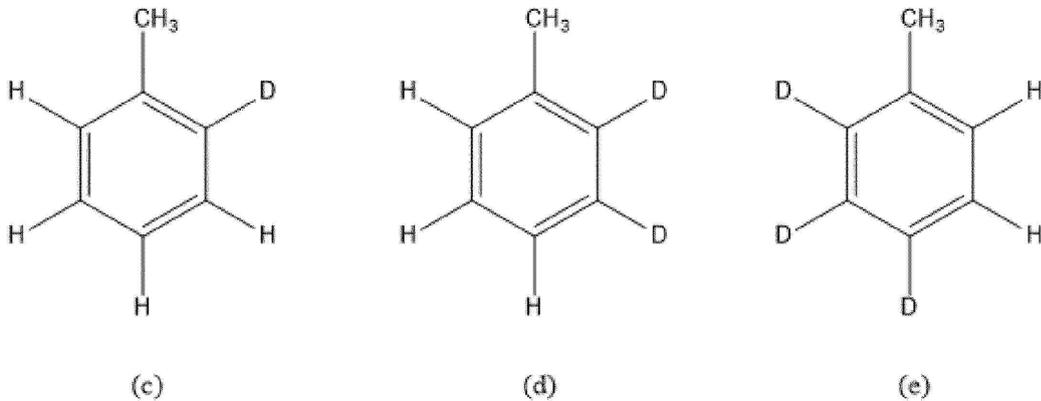
【0048】

第1の化合物のH/Dアイソトポログは、化合物中の同位体 ^2H (=D)の数のみが第1の化合物と異なるが、それ以外は同一である化合物を意味すると理解され、化合物の化学構造における同位体 ^2H の位置もさらに異なる場合がある。第1の化合物およびそのH/Dアイソトポログは、いずれも(互いの)H/Dアイソトポログと称される。H/Dアイソトポログの一例は、以下に示される3つの化合物(c)、(d)および(e)である。

【0049】

20

【化6】



30

【0050】

混合物中の全てのアイソトポマーおよびアイソトポログ化合物について平均すると、水素原子対重水素原子の比は、好ましくは1:10乃至10:1、より好ましくは1:3乃至3:1、最も好ましくは1:2乃至2:1である。

【0051】

式(I)の化合物のH/Dアイソトポマー、または式(I)の化合物のH/Dアイソトポログであるという点のみが式(I)の化合物と異なる混合物中の式(I)の他の化合物の割合は、好ましくは50重量%乃至99重量%である。

40

【0052】

第1の化合物のH/Dアイソトポマーでも第1の化合物のH/Dアイソトポログでもない化合物は、好ましくは混合物中に存在するとしても無視できる割合でしか存在しない。この割合は、好ましくは0.5重量%未満、より好ましくは0.1重量%未満、さらに好ましくは0.01重量%未満、最も好ましくは0.001重量%未満である。

【0053】

したがって、本願は、互いのH/DアイソトポマーまたはH/Dアイソトポログであり、式(I)によって包含される2種以上の化合物を含有する混合物も提供する。混合物は、2種以上のH/Dアイソトポログおよび/またはH/Dアイソトポマーの他に、好まし

50

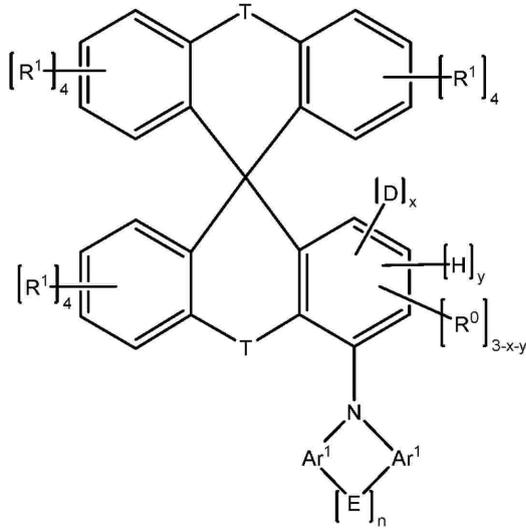
くは上記の割合で、好ましくは互いのH/DアイソトポマーでもH/Dアイソトポログでもないさらなる化合物のわずかな割合のみを含有する。混合物は、互いのH/DアイソトポマーまたはH/Dアイソトポログであり、式(I)によって包含される2種以上の化合物からなることがさらに好ましい。

【0054】

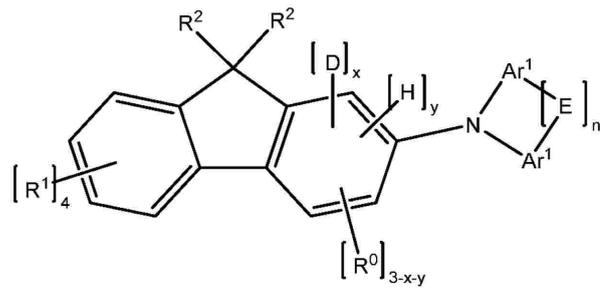
式(I)は、好ましくは以下の2つの式：

【0055】

【化7】



式(I-A)



式(I-B)

10

20

【0056】

(式中、出現する変数は上記で定義した通りである)のうちの1つに合致する。特に好ましくは、式(I-A)において、各Tは、下記式(I-A-1)となるように、単結合である。さらに、特に好ましくは、上記式中、 $n = 0$ である。また、以下に記載される変数の好ましい態様は、式と関連して好ましいと考えられる。さらに、式(I-B)のフルオレンの9位の各 R^2 は、重水素化されていない化学基であることが好ましく、好ましくは同じであるかまたは異なり、重水素化されていないメチルまたは重水素化されていないフェニルである。

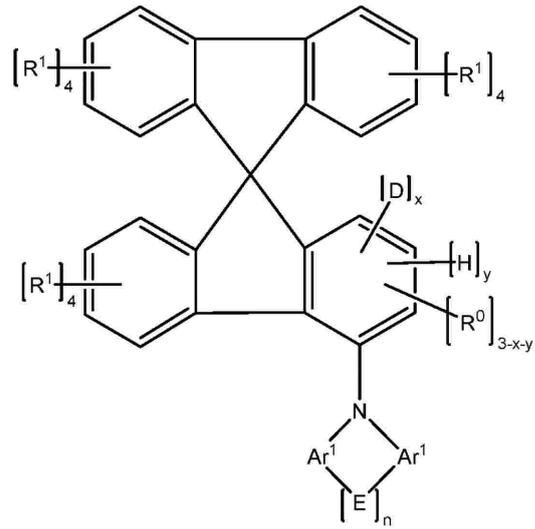
30

【0057】

40

50

【化 8】



10

式(I-A-1)

【 0 0 5 8 】

さらに好ましくは、式 (I) は、以下の式：

20

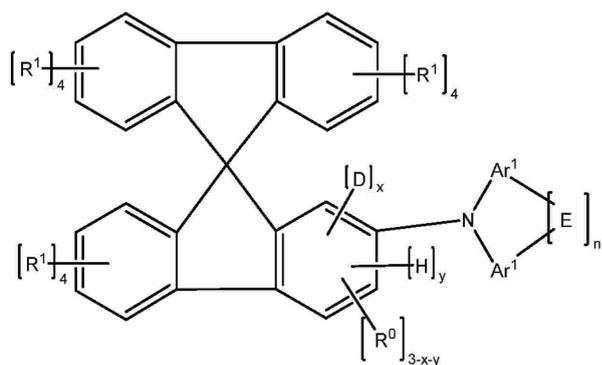
【 0 0 5 9 】

30

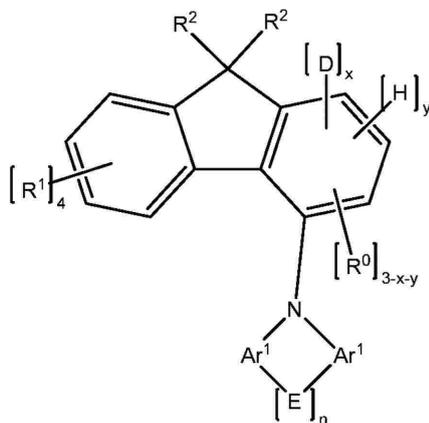
40

50

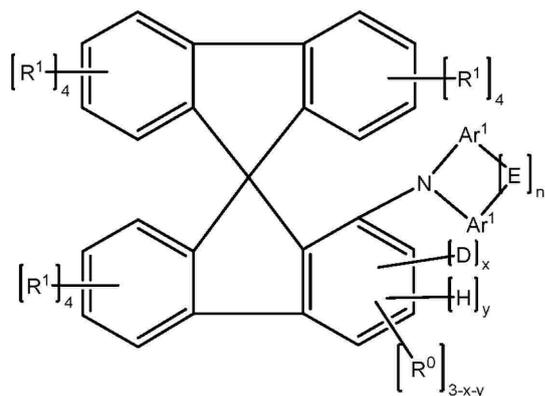
【化 9 - 1】



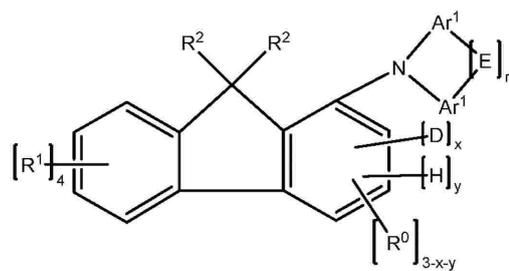
式 (I-C)



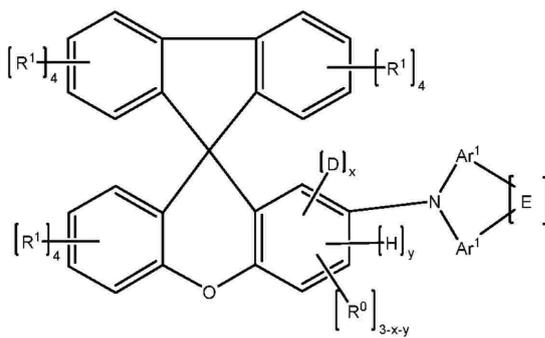
式 (I-D)



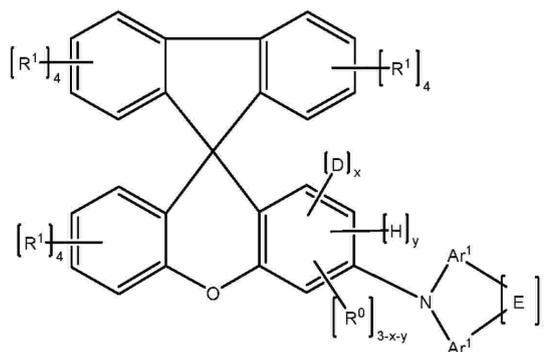
式 (I-E)



式 (I-F)



式 (I-G)



式 (I-H)

【 0 0 6 0 】

10

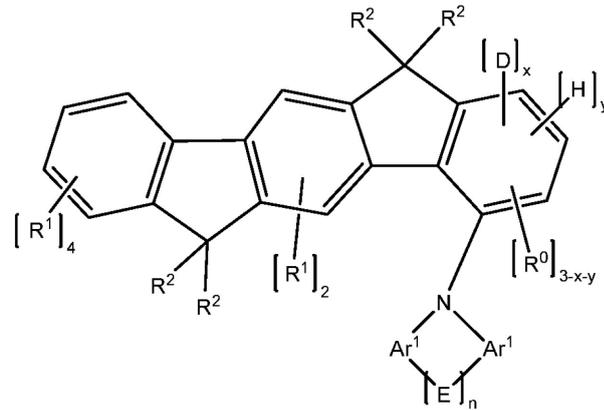
20

30

40

50

【化 9 - 2】



式 (I-J)

10

【0061】

(式中、出現する変数は上記で定義した通りであり、 n は好ましくは0であり、以下に記載される変数の好ましい態様も好ましい)のうちの1つに合致する。さらに、式(I-D)、(I-F)および(I-J)のフルオレンの9位の各 R^2 は、重水素化されていない化学基であることが好ましく、好ましくは同じであるかまたは異なり、重水素化されていないメチルまたは重水素化されていないフェニルである。

20

【0062】

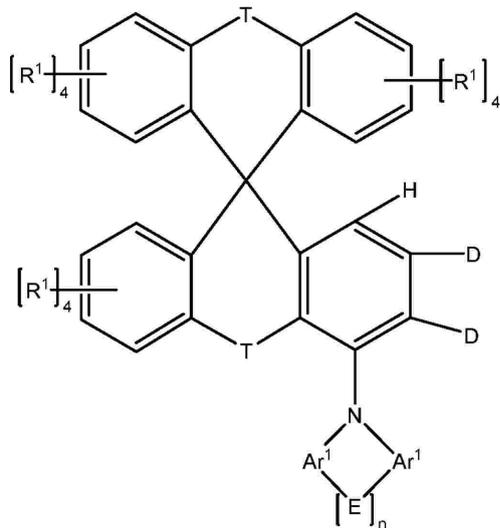
特に好ましくは、化合物は、式(I-A-1)、(I-B)、(I-C)、(I-D)、(I-E)、(I-F)、(I-G)、(I-H)および(I-J)のうちの1つに合致する。

【0063】

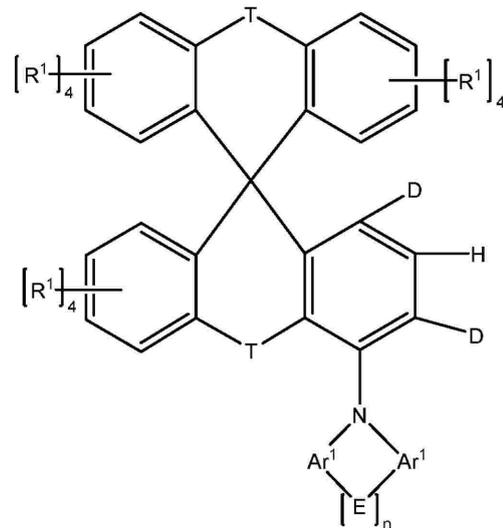
好ましくは、式(I-A)~(I-J)は、以下の式：

【0064】

【化10-1】



式 (I-A-a)



式 (I-A-b)

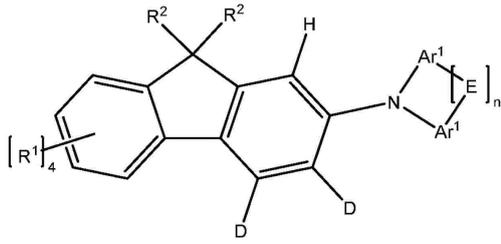
30

40

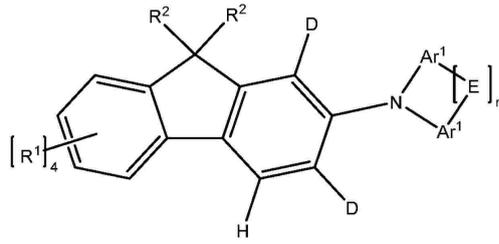
【0065】

50

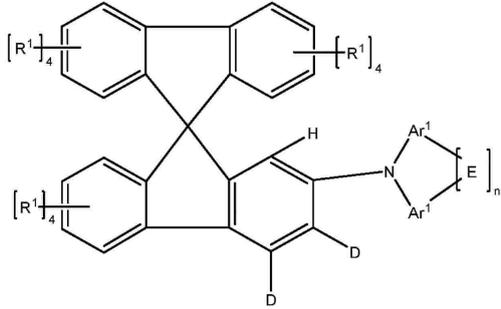
【化 1 0 - 2】



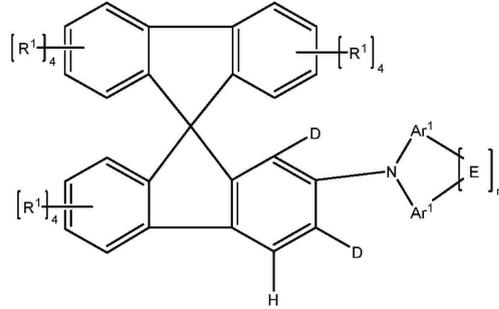
式 (I-B-a)



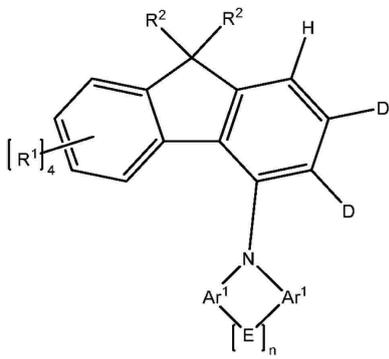
式 (I-B-b)



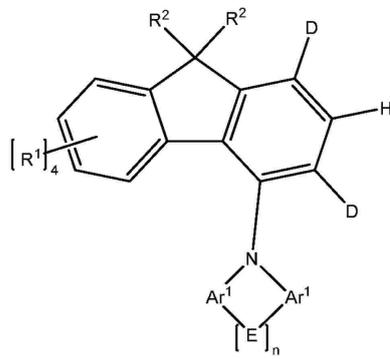
式 (I-C-a)



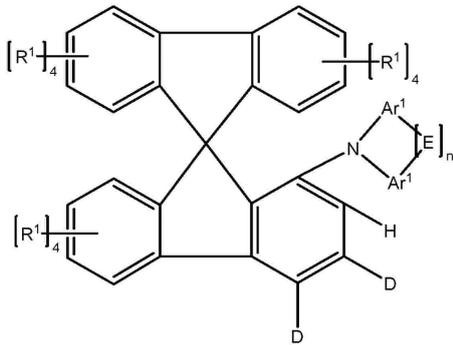
式 (I-C-b)



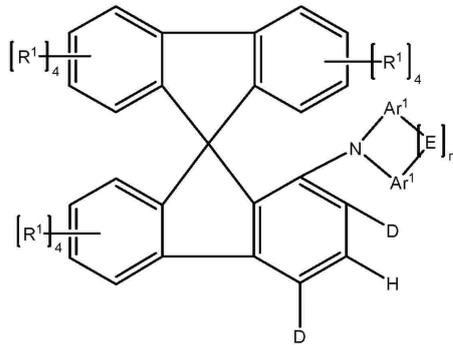
式 (I-D-a)



式 (I-D-b)



式 (I-E-a)



式 (I-E-b)

10

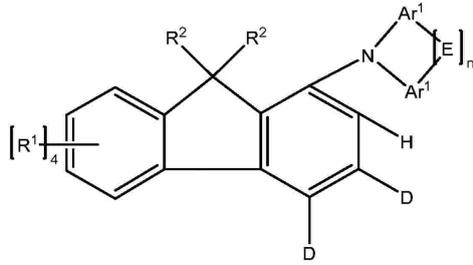
20

30

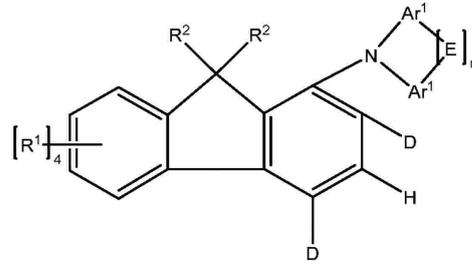
40

【 0 0 6 6 】

【化 1 0 - 3】

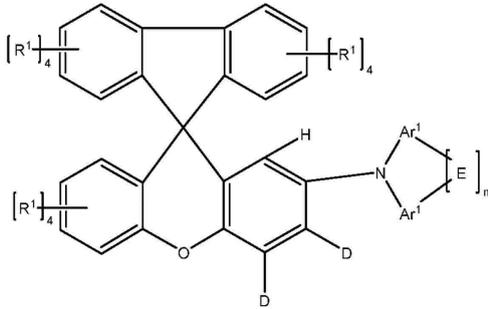


式 (I-F-a)

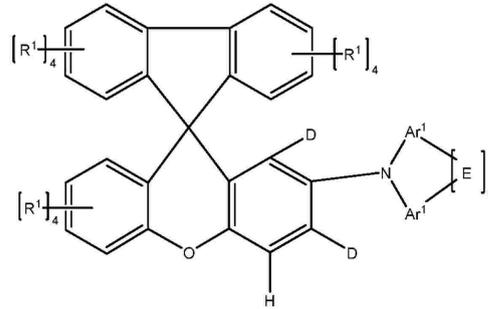


式 (I-F-b)

10

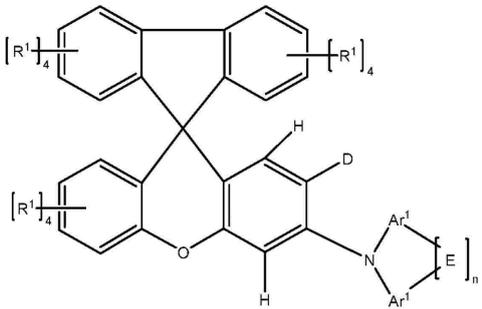


式 (I-G-a)

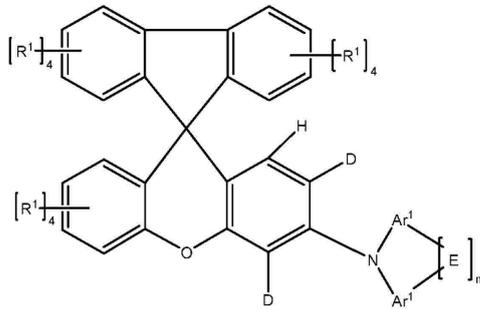


式 (I-G-b)

20

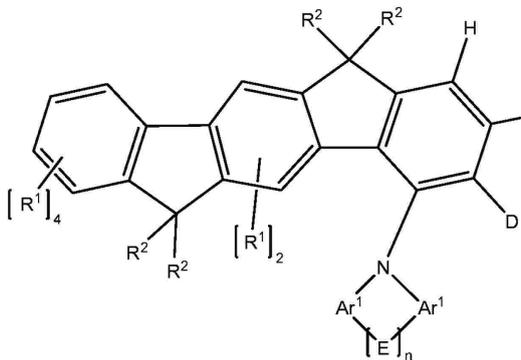


式 (I-H-a)

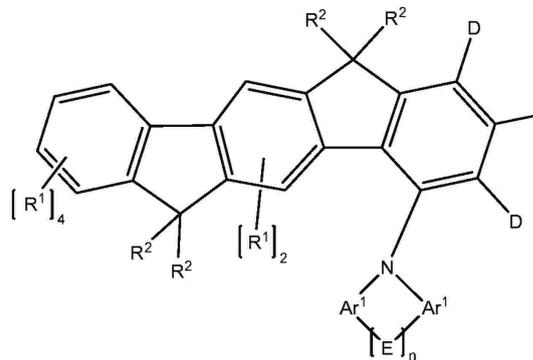


式 (I-H-b)

30



式 (I-J-a)



式 (I-J-b)

40

【 0 0 6 7】

(式中、出現する変数は上記で定義した通りであり、 n は好ましくは0であり、以下に記載される変数の好ましい態様も好ましい)に合致する。さらに、式(I-B)および(I-D)および(I-F)および(I-J)のフルオレンの9位の各 R^2 は、重水素化されていない化学基であることが好ましく、好ましくは同じであるかまたは異なり、重水素化されていないメチルまたは重水素化されていないフェニルである。

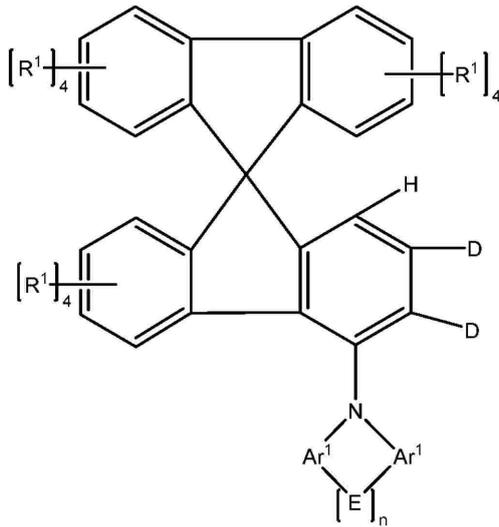
【 0 0 6 8】

式(I-A-a)および(I-A-b)は、好ましくは以下の式：

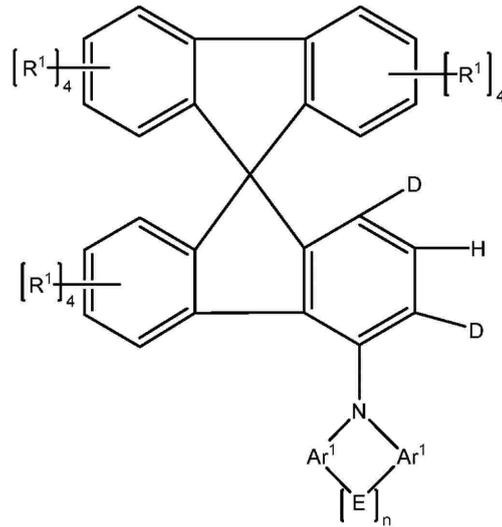
【 0 0 6 9】

50

【化 1 1】



式 (I-A-a-1)



式 (I-A-b-1)

10

【0070】

(式中、出現する変数は上記で定義した通りであり、 n は好ましくは0であり、以下に記載される変数の好ましい態様も好ましい)に合致する。

20

【0071】

特に好ましくは、化合物は、式 (I - A - a - 1)、(I - A - b - 1)、(I - B - a)、(I - B - b)、(I - C - a)、(I - C - b)、(I - D - a)、(I - D - b)、(I - E - a)、(I - E - b)、(I - F - a)、(I - F - b)、(I - G - a)、(I - G - b)、(I - H - a)、(I - H - b)、(I - J - a)および (I - J - b)のうちの1つに合致する。

【0072】

式 (I)の化合物が、1 - スピロピフルオレニル基、4 - スピロピフルオレニル基、1 - フルオレニル基、4 - フルオレニル基および4 - インデノフルオレニル基から選択される少なくとも1つの基を、好ましくは Ar^1 および / または G 基として含有することが好ましい。式 (I)の化合物が、2 - スピロピフルオレニル基および2 - フルオレニル基から選択される少なくとも1つの基を、好ましくは Ar^1 および / または G 基として含有することがさらに好ましい。より好ましくは、式 (I)の化合物は、1 - スピロピフルオレニル基、4 - スピロピフルオレニル基、1 - フルオレニル基、4 - フルオレニル基および4 - インデノフルオレニル基から選択される少なくとも1つの基、ならびに2 - スピロピフルオレニル基および2 - フルオレニル基から選択される少なくとも1つの基を、好ましくはそれぞれ Ar^1 および / または G 基として含有する。

30

【0073】

最も好ましくは、式 (I)の化合物において、厳密に1つの Ar^1 または G 基が、1 - スピロピフルオレニル基、4 - スピロピフルオレニル基、1 - フルオレニル基、4 - フルオレニル基および4 - インデノフルオレニル基から選択され、厳密に1つのさらなる Ar^1 または G 基が、2 - スピロピフルオレニル基および2 - フルオレニル基から選択される。ここで、残りの第3の Ar^1 または G 基は、1 - スピロピフルオレニル基、4 - スピロピフルオレニル基、1 - フルオレニル基、4 - フルオレニル基、2 - スピロピフルオレニル基、2 - フルオレニル基、および5または6 ~ 40個の芳香族環原子を有する他の芳香族またはヘテロ芳香族環系から選択される。特に好ましい態様において、1 - スピロピフルオレニル基、4 - スピロピフルオレニル基、1 - フルオレニル基、4 - フルオレニル基、4 - インデノフルオレニル基、2 - スピロピフルオレニル基および2 - フルオレニル基から選択されるこれらの基は、窒素原子に直接結合しているか、または窒素原子にリンカ

40

50

ー基を介して結合しており、リンカー基は、好ましくはフェニレンおよびピフェニレンから選択され、これらの各々は R^3 ラジカルによって置換され、好ましくは R^3 ラジカルによって置換されたフェニレンである。

【0074】

代替的な好ましい態様において、化合物は、好ましくはGおよび/または Ar^1 基としてスピロキサンテン基、特に2-スピロキサンテン基または3-スピロキサンテン基を含有する。

【0075】

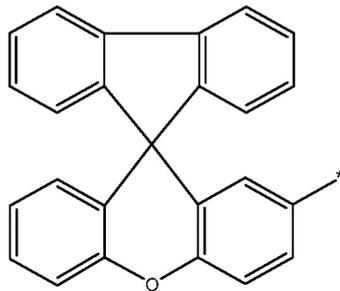
1-スピロピフルオレニル基は、ここでは、その1位に結合し、任意に置換されているスピロピフルオレニル基を意味すると理解される。4-スピロピフルオレニル基は、ここでは、その4位に結合し、任意に置換されているスピロピフルオレニル基を意味すると理解される。2-スピロピフルオレニル基は、ここでは、その2位に結合し、任意に置換されているスピロピフルオレニル基を意味すると理解される。1-フルオレニル基は、ここでは、その1位に結合し、任意に置換されているフルオレニル基を意味すると理解される。4-フルオレニル基は、ここでは、その4位に結合し、任意に置換されているフルオレニル基を意味すると理解される。2-フルオレニル基は、ここでは、その2位に結合し、任意に置換されているフルオレニル基を意味すると理解される。4-インデノフルオレニル基は、ここでは、その4位に結合し、任意に置換されているインデノフルオレニル基を意味すると理解される。

【0076】

2-スピロキサンテン基は、以下の基：

【0077】

【化12】

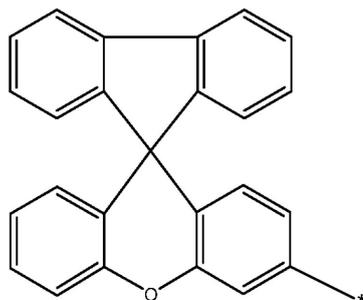


【0078】

を意味すると理解され、3-スピロキサンテン基は、以下の基：

【0079】

【化13】



【0080】

を意味すると理解され、2つの基のそれぞれは任意に置換されていてもよく、結合位置は*と表示される。

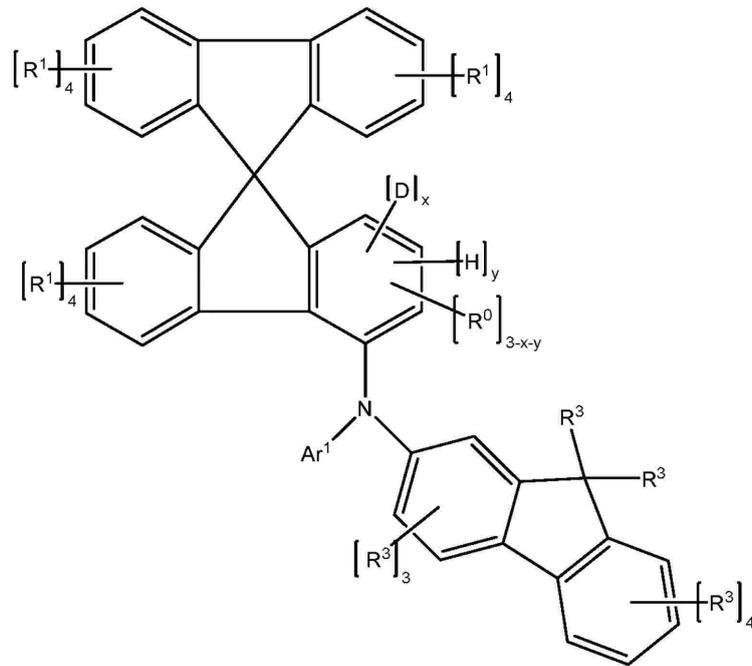
【0081】

式(I-A)および式(I-A-1)において、少なくとも1つの Ar^1 基、好ましく

は両方の Ar^1 基が、それぞれ R^3 ラジカルにより置換された 2 - フルオレニル基または 2 - スピロフルオレニル基を含有することが好ましい。式 (I - A - 1) は、好ましくは以下の式：

【 0 0 8 2 】

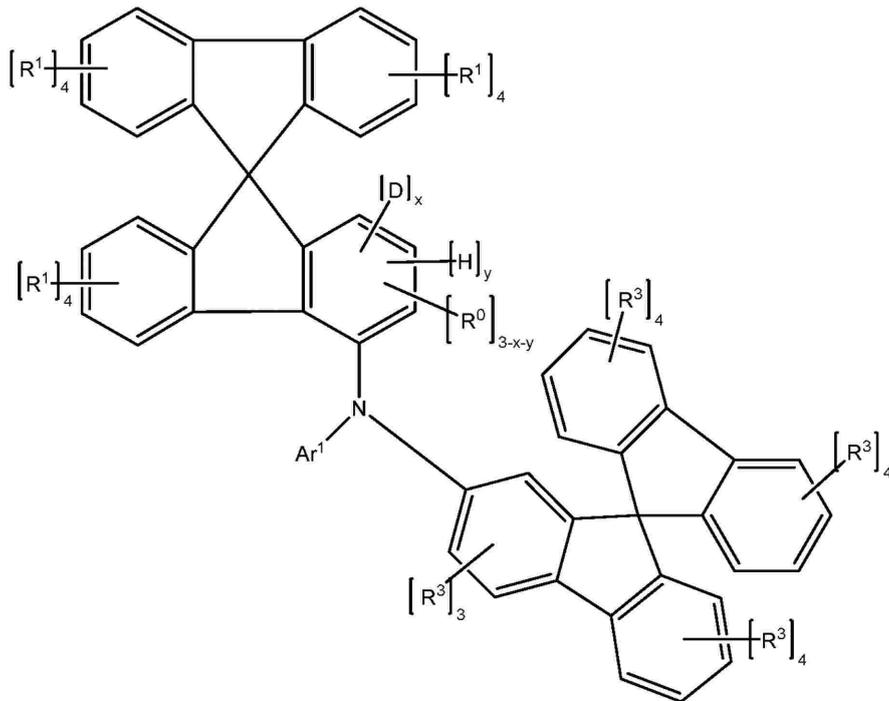
【 化 1 4 】



10

20

式 (I-A-1-1)



30

40

式 (I-A-1-2)

【 0 0 8 3 】

(式中、出現する基は上記で定義した通りであり、好ましくはそれらの好ましい態様に対応する)のうちの1つに合致する。さらに、式 (I - A - 1) のフルオレンの 9 位の各 R^3 は、重水素化されていない化学基であることが好ましく、好ましくは同じであるかまたは異なり、重水素化されていないメチルまたは重水素化されていないフェニルである。

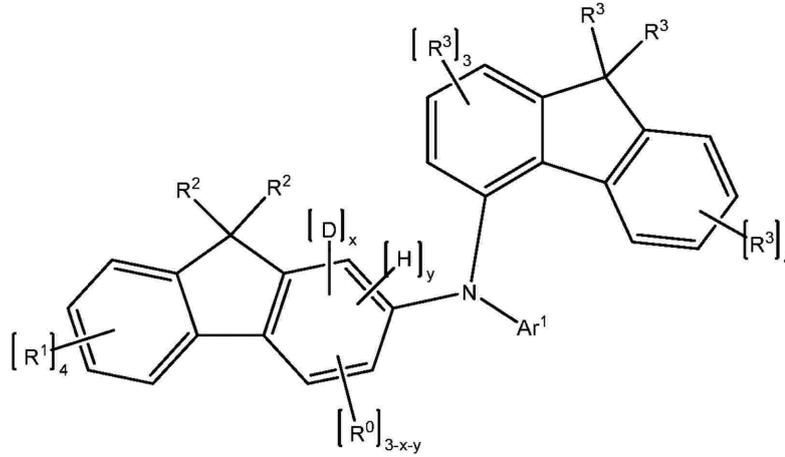
50

【 0 0 8 4 】

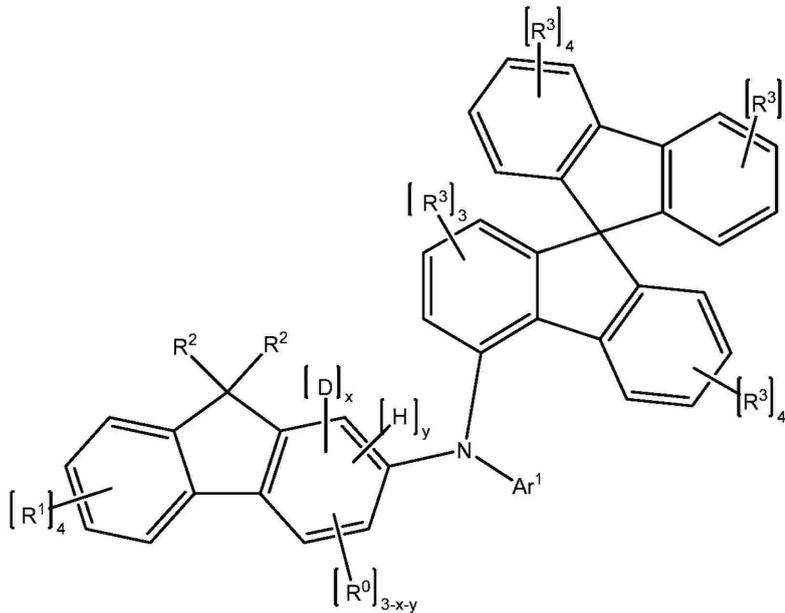
式 (I - B) において、少なくとも 1 つの Ar^1 基、好ましくは両方の Ar^1 基が、 R^3 ラジカルにより置換された 4 - スピロピフルオレニル基または 4 - フルオレニル基を含有することが好ましい。式 (I - B) は、好ましくは以下の式：

【 0 0 8 5 】

【 化 1 5 】



式 (I-B-1)



式 (I-B-2)

【 0 0 8 6 】

(式中、出現する基は上記で定義した通りであり、好ましくはそれらの好ましい態様に対応する) のうちの 1 つに合致する。さらに、式 (I - B - 1) のフルオレンの 9 位の各 R^3 、ならびに式 (I - B - 1) および (I - B - 2) のフルオレンの 9 位の各 R^2 は、重水素化されていない化学基であることが好ましく、好ましくは同じであるかまたは異なり、重水素化されていないメチルまたは重水素化されていないフェニルである。

【 0 0 8 7 】

式 (I - C) において、少なくとも 1 つの Ar^1 基、好ましくは両方の Ar^1 基が、 R^3 ラジカルにより置換された 4 - スピロピフルオレニル基または 4 - フルオレニル基を含有することが好ましい。式 (I - C) は、好ましくは以下の式：

【 0 0 8 8 】

10

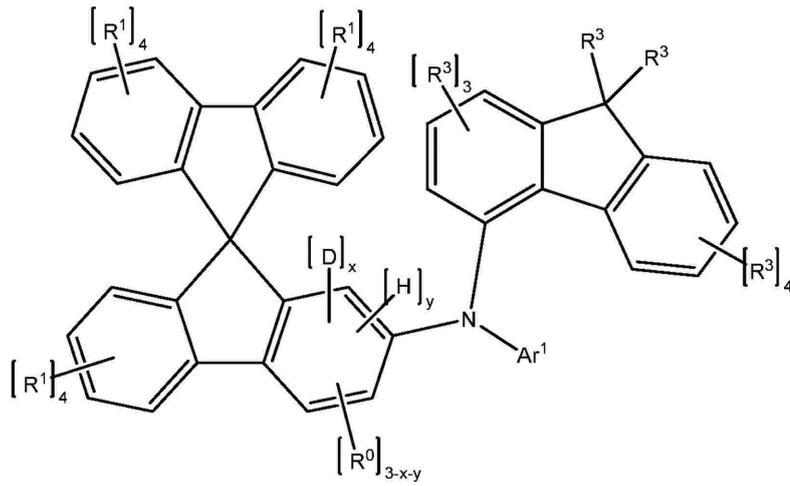
20

30

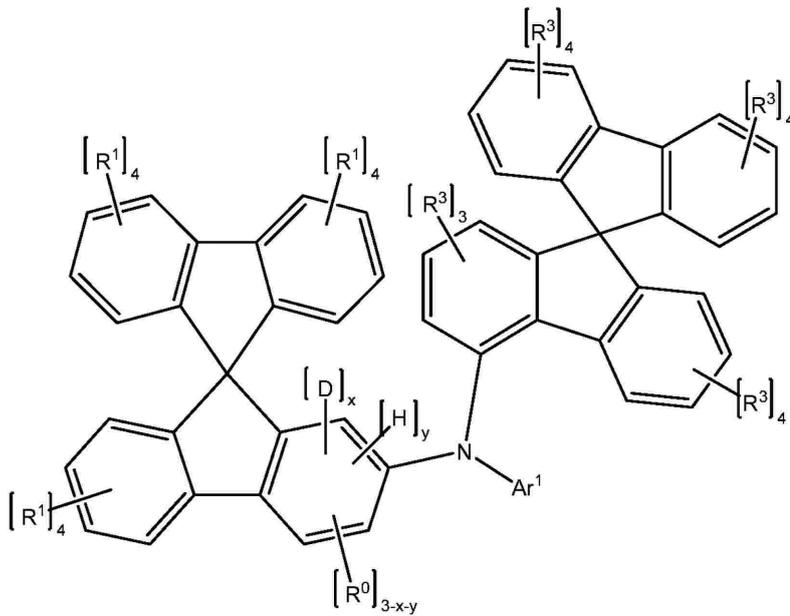
40

50

【化 1 6】



式 (I-C-1)



式 (I-C-2)

【0089】

(式中、出現する基は上記で定義した通りであり、好ましくはそれらの好ましい態様に対応する)のうちの1つに合致する。さらに、式(I-C-1)のフルオレンの9位の各 R^3 は、重水素化されていない化学基であることが好ましく、好ましくは同じであるかまたは異なり、重水素化されていないメチルまたは重水素化されていないフェニルである。

【0090】

式(I-D)において、少なくとも1つの Ar^1 基、好ましくは両方の Ar^1 基が、それぞれ R^3 ラジカルにより置換された2-フルオレニル基または2-スピロビフルオレニル基を含有することが好ましい。式(I-D)は、好ましくは、以下の式：

【0091】

10

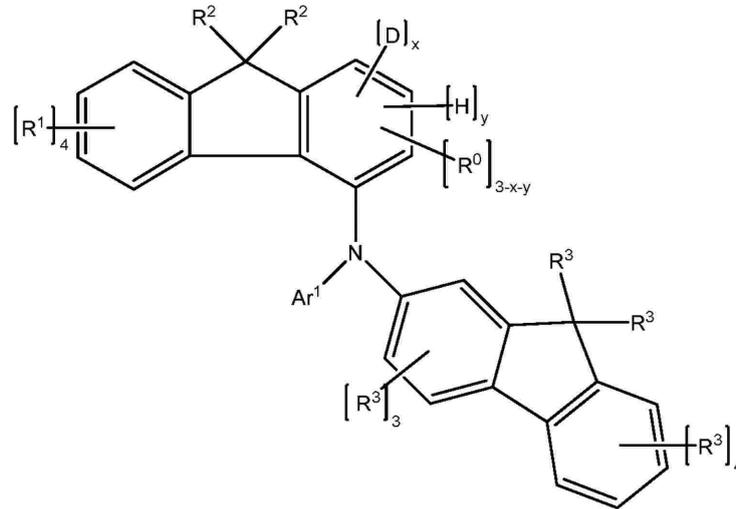
20

30

40

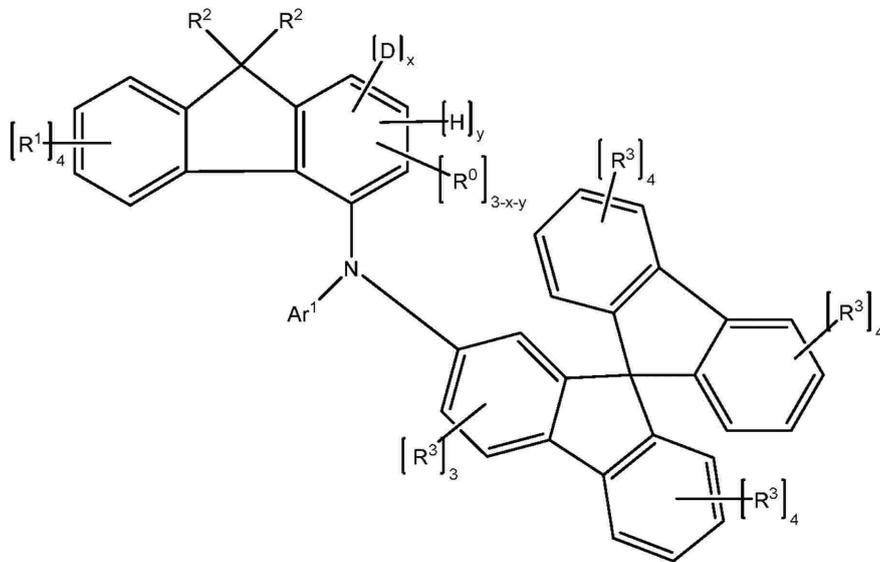
50

【化 1 7】



式 (I-D-1)

10



式 (I-D-2)

20

30

【0092】

(式中、出現する基は上記で定義した通りであり、好ましくはそれらの好ましい態様に
 対応する)のうちの一つに合致する。さらに、式(I-D-1)のフルオレンの9位の各 R^3 、
 ならびに式(I-D-1)および(I-D-2)のフルオレンの9位の各 R^2 は、重
 水素化されていない化学基であることが好ましく、好ましくは同じであるかまたは異なり
 重水素化されていないメチルまたは重水素化されていないフェニルである。

40

【0093】

好ましい態様において、 Ar^1 基は部分的に重水素化または完全に重水素化されてお
 り、より好ましくは部分的に重水素化されている。

【0094】

代替的な好ましい態様において、 Ar^1 基は重水素化されておらず、より好ましくはそ
 れらの置換基 R^3 、それらの置換基 R^3 の置換基 R^4 、およびそれらの置換基 R^3 の置換
 基 R^4 の置換基 R^5 を含む場合も重水素化されていない。

【0095】

選択される Ar^1 基は、好ましくは異なる。

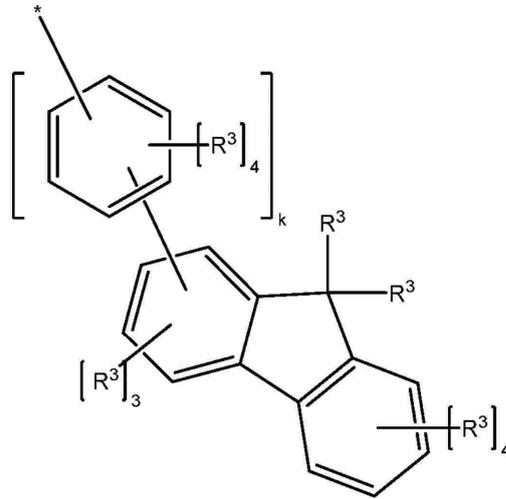
50

【 0 0 9 6 】

好ましい態様において、式 (I) および上記の好ましい式中、少なくとも 1 つの $A r^1$ 基は、以下の式：

【 0 0 9 7 】

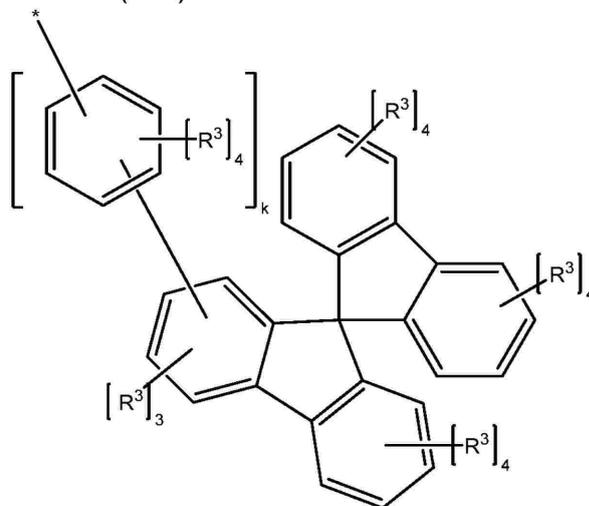
【 化 1 8 】



10

式 (F-1)

20



30

式 (F-2)

【 0 0 9 8 】

(式中、 k は、0、1、2 または 3 であり、好ましくは 0 または 1 であり、最も好ましくは 0 であり、式の残部との結合位置は * と表示され、他の変数は上記で定義した通りである) のうちの 1 つに合致する。好ましい態様において、式 (F - 1) および (F - 2) 中の R^3 は、それぞれの場合において同一であるかまたは異なり、H および D から選択される。

40

【 0 0 9 9 】

好ましい態様において、式 (F - 1) および (F - 2) の基は、部分的に重水素化または完全に重水素化され、より好ましくは完全に重水素化されている。さらに、式 (F - 1) のフルオレンの 9 位の R^3 は、重水素化されていない化学基であることが好ましく、好ましくは重水素化されていないメチルまたは重水素化されていないフェニルである。

【 0 1 0 0 】

代替的な好ましい態様において、式 (F - 1) および (F - 2) の基は、それらの置換基 R^3 、それらの置換基 R^3 の置換基 R^4 、およびそれらの置換基 R^3 の置換基 R^4 の置換基 R^5 を含む場合でも重水素化されていない。

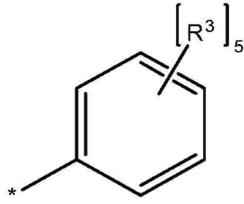
50

【0101】

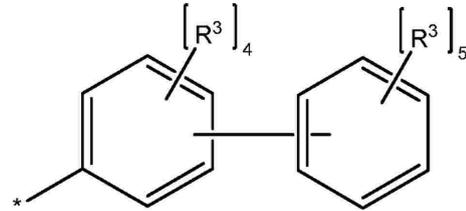
さらなる好ましい態様において、式(I)および上述の好ましい式(I-A)~(I-J)、特に式(I-A-a)~(I-J-b)では、少なくとも1つのAr¹基、好ましくは厳密に1つのAr¹基が、以下の式:

【0102】

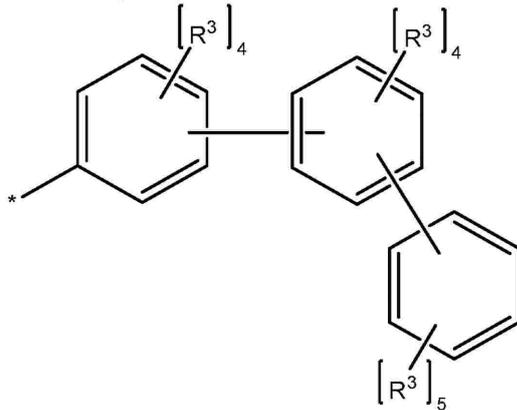
【化19】



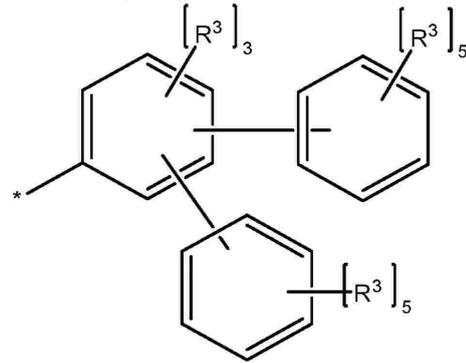
式(A-1)



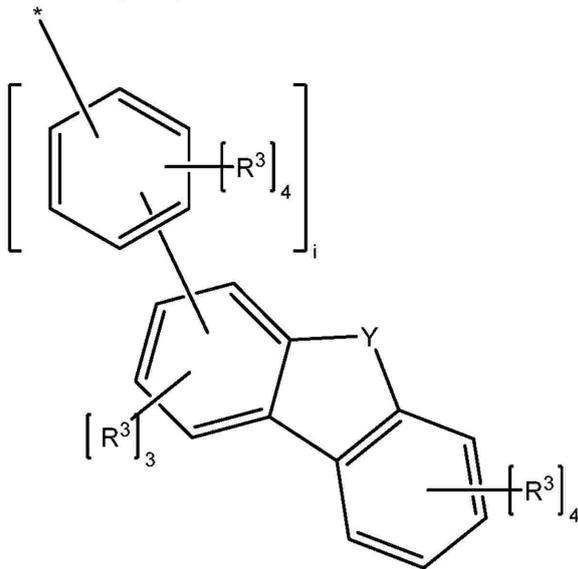
式(A-2)



式(A-3)



式(A-4)



式(A-5)

【0103】

(式中、YはOまたはSであり、iは0、1、2または3であり、好ましくは0または1であり、式の残部への付着位置は*と表示され、他の変数は上記で定義した通りである)のうちの1つに合致する。好ましい態様において、式(A-1)~(A-5)中のR³は、それぞれの場合において同一であるかまたは異なり、HおよびDから選択され、特に式(A-5)中のR³は、それぞれの場合において同一であるかまたは異なり、HおよびDから選択される。

10

20

30

40

50

【 0 1 0 4 】

好ましい態様において、式 (A - 1) ~ (A - 5) の基は、部分的に重水素化または完全に重水素化されており、より好ましくは完全に重水素化されている。

【 0 1 0 5 】

代替的な好ましい態様において、式 (A - 1) ~ (A - 5) の基は、それらの置換基 R^3 、それらの置換基 R^3 の置換基 R^4 、およびそれらの置換基 R^3 の置換基 R^4 の置換基 R^5 を含む場合でも重水素化されていない。

【 0 1 0 6 】

特に好ましい態様において、式 (I) 中、2つの Ar^1 基のうちの厳密に1つは、上述の式 (F - 1) および (F - 2) から選択される式に合致し、2つの Ar^1 基のうちの他方は、上述の式 (A - 1) ~ (A - 5) から選択される式に合致する。 10

【 0 1 0 7 】

したがって、式 (I) の化合物における Ar^1 基と G 基の以下の組み合わせ：

【 0 1 0 8 】

【 化 2 0 - 1 】

式	G	Ar^1	Ar^1
(I-a)	(G-1)	(F-1)	(A-1)
(I-b)	(G-1)	(F-1)	(A-2)
(I-c)	(G-1)	(F-1)	(A-3)
(I-d)	(G-1)	(F-1)	(A-4)
(I-e)	(G-1)	(F-1)	(A-5)
(I-f)	(G-1)	(F-2)	(A-1)
(I-g)	(G-1)	(F-2)	(A-2)
(I-h)	(G-1)	(F-2)	(A-3)
(I-i)	(G-1)	(F-2)	(A-4)
(I-j)	(G-1)	(F-2)	(A-5)

20

30

【 0 1 0 9 】

40

50

【化 2 0 - 2】

(l-k)	(G-2)	(F-1)	(A-1)
(l-l)	(G-2)	(F-1)	(A-2)
(l-m)	(G-2)	(F-1)	(A-3)
(l-n)	(G-2)	(F-1)	(A-4)
(l-o)	(G-2)	(F-1)	(A-5)
(l-p)	(G-2)	(F-2)	(A-1)
(l-q)	(G-2)	(F-2)	(A-2)
(l-r)	(G-2)	(F-2)	(A-3)
(l-s)	(G-2)	(F-2)	(A-4)
(l-t)	(G-2)	(F-2)	(A-5)
(l-u)	(G-3)	(F-1)	(A-1)
(l-v)	(G-3)	(F-1)	(A-2)
(l-w)	(G-3)	(F-1)	(A-3)
(l-x)	(G-3)	(F-1)	(A-4)
(l-y)	(G-3)	(F-1)	(A-5)
(l-z)	(G-3)	(F-2)	(A-1)
(l-aa)	(G-3)	(F-2)	(A-2)
(l-ab)	(G-3)	(F-2)	(A-3)
(l-ac)	(G-3)	(F-2)	(A-4)
(l-ad)	(G-3)	(F-2)	(A-5)

10

20

【0 1 1 0】

(式中、変数は上記で定義した通りであり、好ましくはそれらの好ましい態様に対応する)

30

が特に好ましい。

【0 1 1 1】

$A r^1$ 基は、好ましくはそれぞれの場合において同じであるかまたは異なり、ベンゼン、ピフェニル、テルフェニル、クオテルフェニル、ナフチル、フルオレニル、特に 9, 9'-ジメチルフルオレニルおよび 9, 9'-ジフェニルフルオレニル、ベンゾフルオレニル、スピロピフルオレニル、インデノフルオレニル、インデノカルバゾリル、ジベンゾフラニル、ジベンゾチオフエニル、カルバゾリル、ベンゾフラニル、ベンゾチオフエニル、ならびにナフチル、フルオレニル、スピロピフルオレニル、ジベンゾフラニル、ジベンゾチオフエニル、カルバゾリル、ピリジル、ピリミジル、およびトリアジニルから選択される基により置換されたフェニルから選択され、上記の態様は、それぞれ R^3 ラジカルにより置換されている。

40

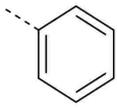
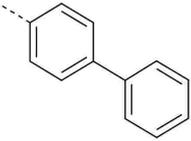
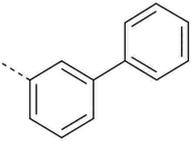
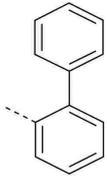
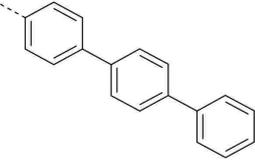
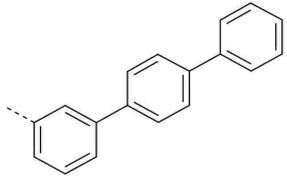
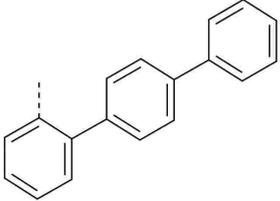
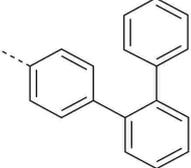
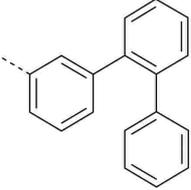
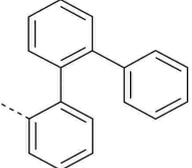
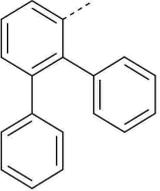
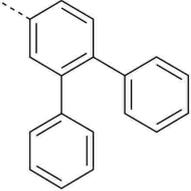
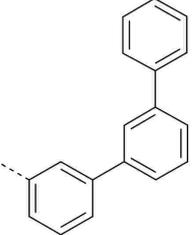
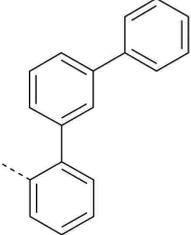
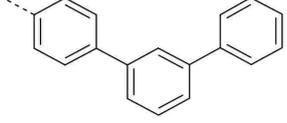
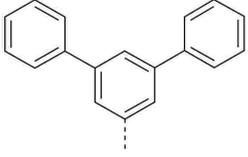
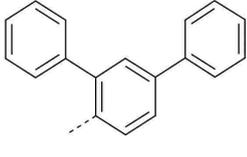
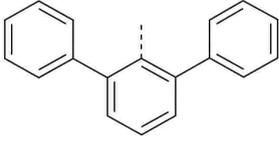
【0 1 1 2】

式(A-1) ~ (A-5)の特に好ましい態様は、以下の式：

【0 1 1 3】

50

【化 2 1 - 1】

		
Ar-1	Ar-2	Ar-3
		
Ar-4	Ar-5	Ar-6
		
Ar-7	Ar-8	Ar-9
		
Ar-10	Ar-11	Ar-12
		
Ar-13	Ar-14	Ar-15
		
Ar-16	Ar-17	Ar-19

10

20

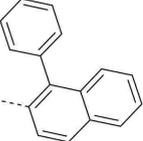
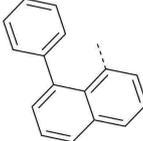
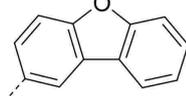
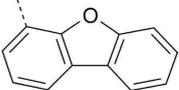
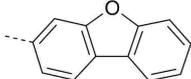
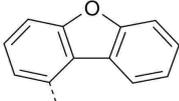
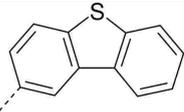
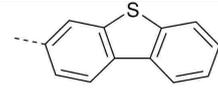
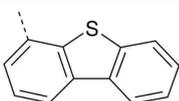
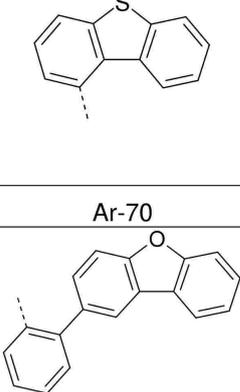
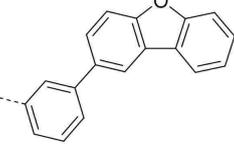
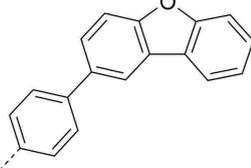
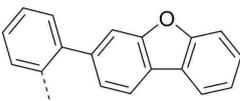
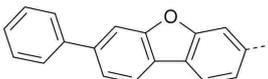
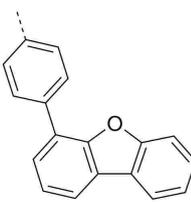
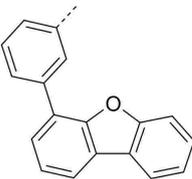
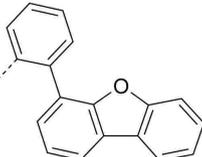
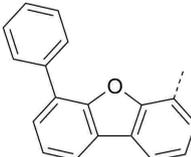
30

40

【 0 1 1 4 】

50

【化 2 1 - 2】

		
Ar-61	Ar-62	Ar-63
		
Ar-64	Ar-65	Ar-66
		
Ar-67	Ar-68	Ar-69
		
Ar-70	Ar-71	Ar-72
		
Ar-73	Ar-74	Ar-75
		
Ar-76	Ar-77	Ar-78
Ar-79	Ar-80	Ar-81

10

20

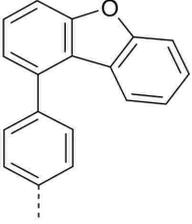
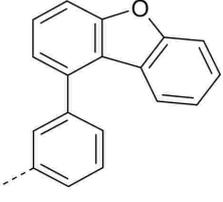
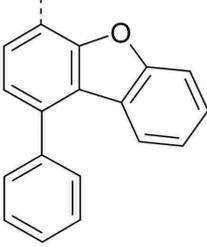
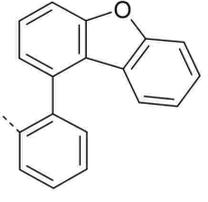
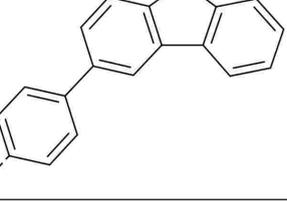
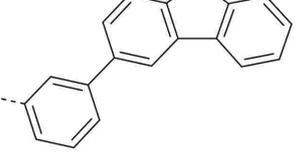
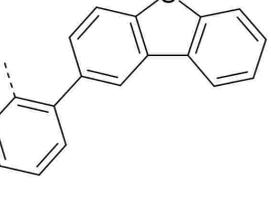
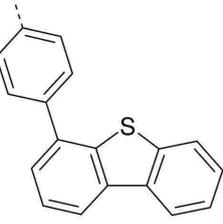
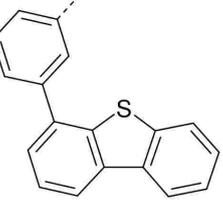
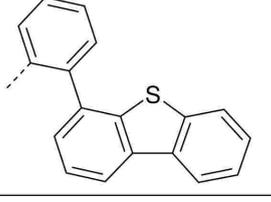
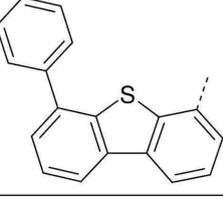
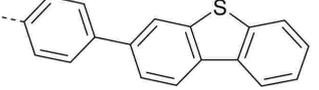
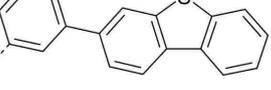
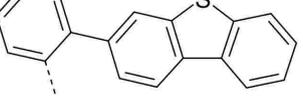
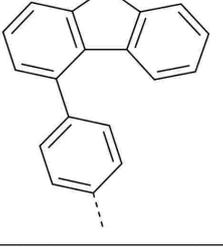
30

40

【 0 1 1 5 】

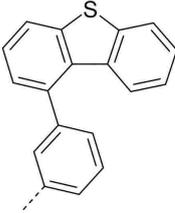
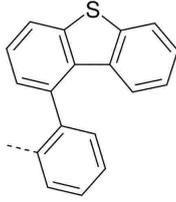
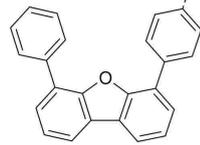
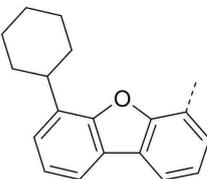
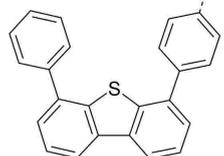
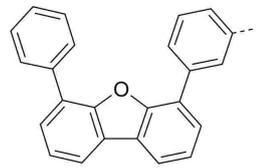
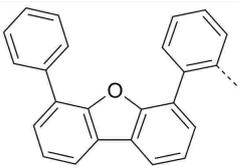
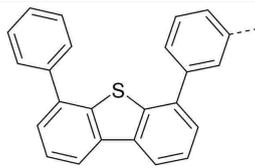
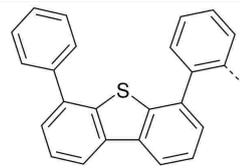
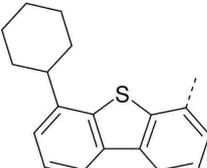
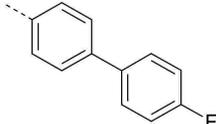
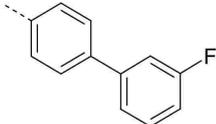
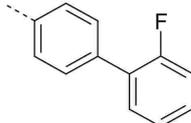
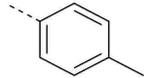
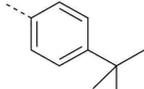
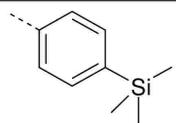
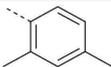
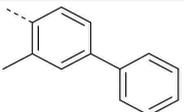
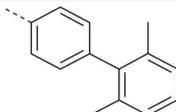
50

【化 2 1 - 3】

			
Ar-82	Ar-83	Ar-84	10
			
Ar-85	Ar-86	Ar-87	20
			
Ar-88	Ar-89	Ar-90	30
			
Ar-91	Ar-92	Ar-93	40
			
Ar-94	Ar-95	Ar-96	50

【 0 1 1 6】

【化 2 1 - 4】

		
Ar-97	Ar-98	Ar-99
		
Ar-100	Ar-101	Ar-102
		
Ar-103	Ar-104	Ar-105
		
Ar-106	Ar-238	Ar-239
		
Ar-240	Ar-241	Ar-242
		
Ar-243		
		
Ar-244	Ar-245	Ar-246

10

20

30

40

【 0 1 1 7 】

50

【化 2 1 - 5】

Ar-247	Ar-248	Ar-252
Ar-253	Ar-254	Ar-255
Ar-256	Ar-271	Ar-272
Ar-273		

10

20

30

【0118】

から選択され、これらはそれぞれ無置換として示される位置で R^3 ラジカルにより置換されており、これらの場合における R^3 ラジカルは、好ましくはHまたはDである。

40

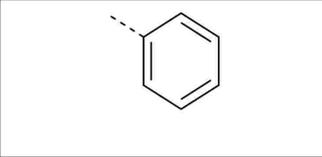
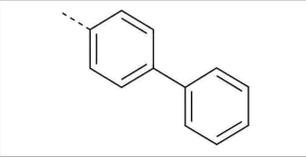
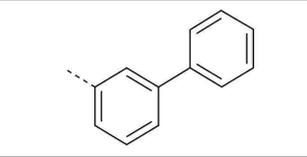
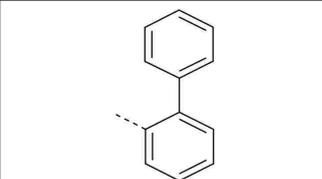
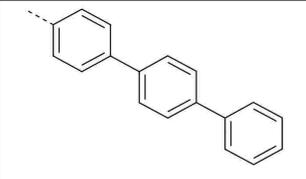
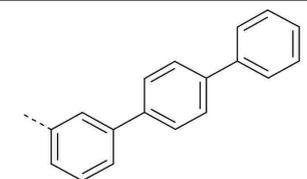
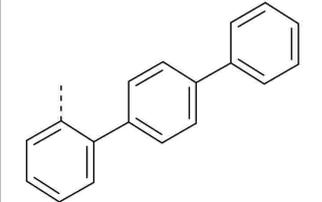
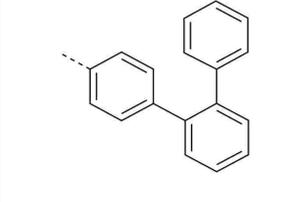
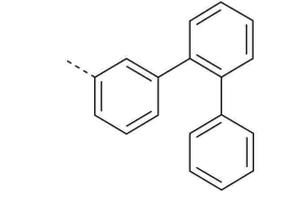
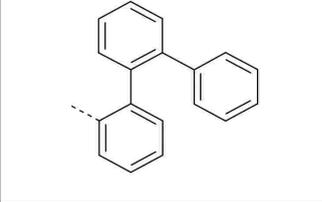
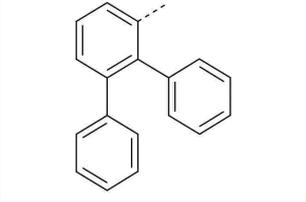
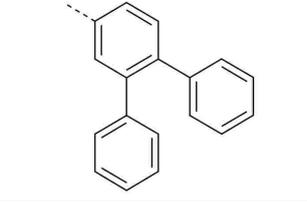
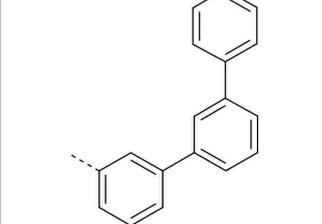
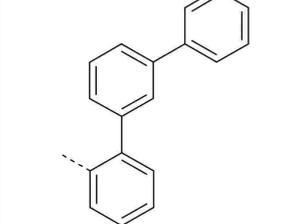
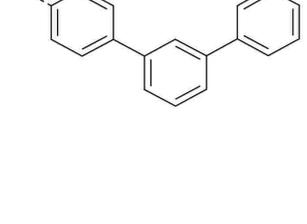
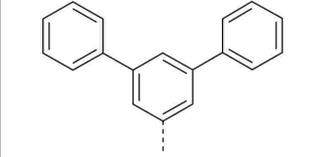
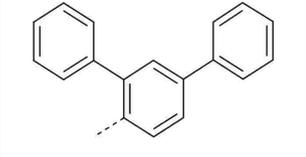
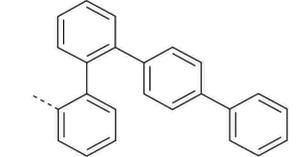
【0119】

さらに好ましい態様において、 Ar^1 は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、以下の式：

【0120】

50

【化 2 2 - 1】

		
Ar-1	Ar-2	Ar-3
		
Ar-4	Ar-5	Ar-6
		
Ar-7	Ar-8	Ar-9
		
Ar-10	Ar-11	Ar-12
		
Ar-13	Ar-14	Ar-15
		
Ar-16	Ar-17	Ar-18

10

20

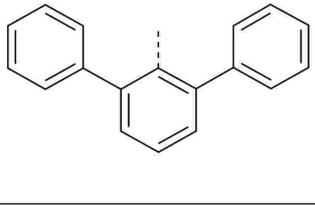
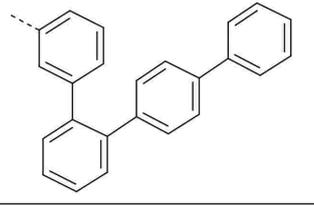
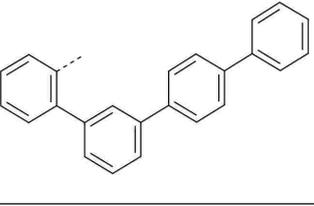
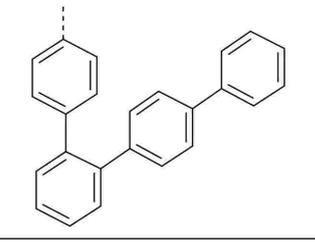
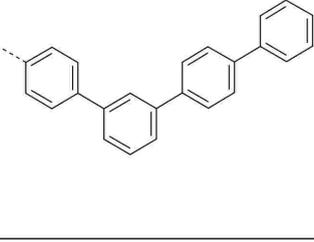
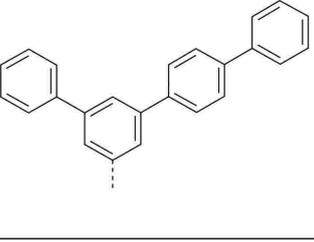
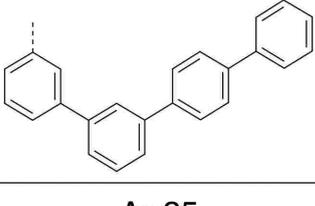
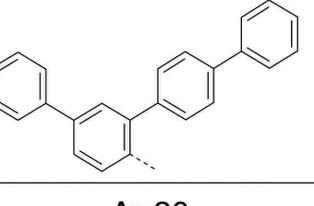
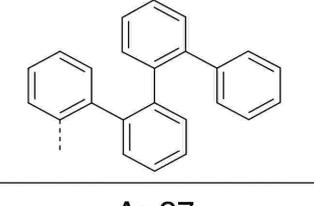
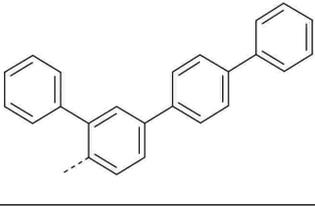
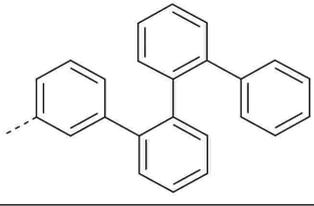
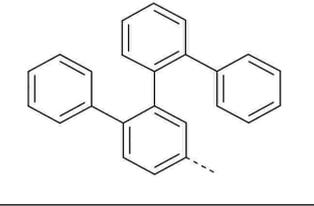
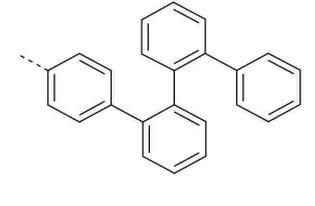
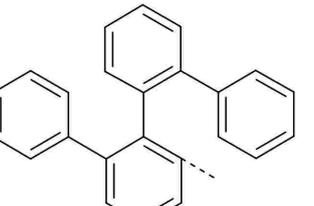
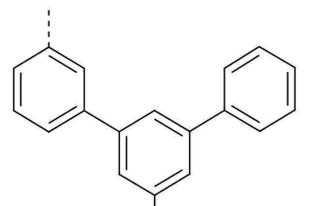
30

40

【 0 1 2 1 】

50

【化 2 2 - 2】

		
Ar-19	Ar-20	Ar-21
		
Ar-22	Ar-23	Ar-24
		
Ar-25	Ar-26	Ar-27
		
Ar-28	Ar-29	Ar-30
		
Ar-31	Ar-32	Ar-33

10

20

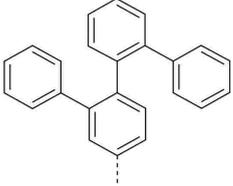
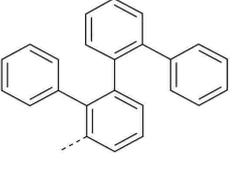
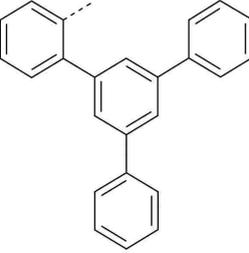
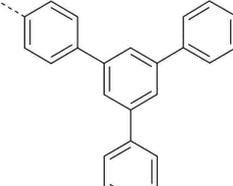
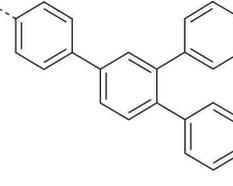
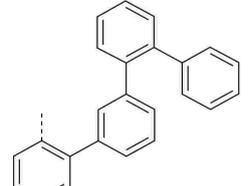
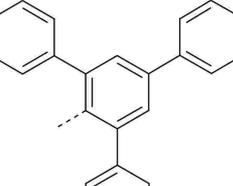
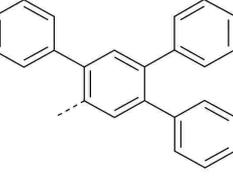
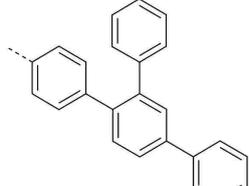
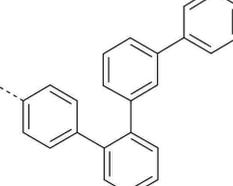
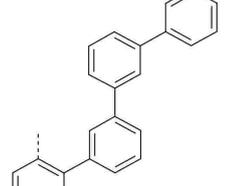
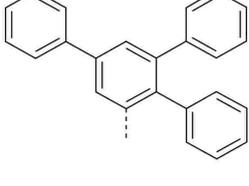
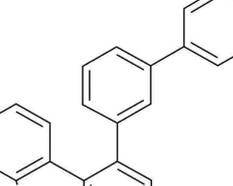
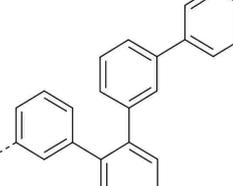
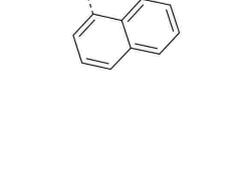
30

40

【 0 1 2 2 】

50

【化 2 2 - 3】

		
Ar-34	Ar-35	Ar-36
		
Ar-37	Ar-38	Ar-39
		
Ar-40	Ar-41	Ar-42
		
Ar-43	Ar-44	Ar-45
		
Ar-46	Ar-47	Ar-48

10

20

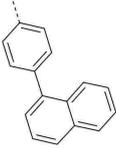
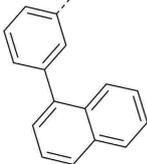
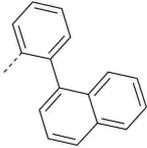
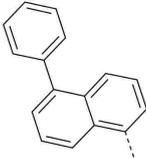
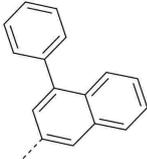
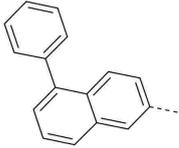
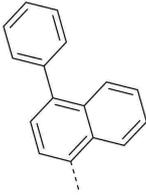
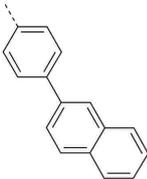
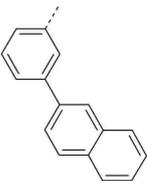
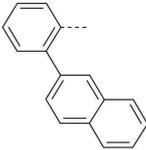
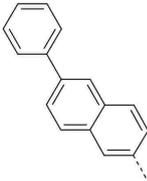
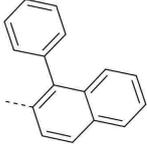
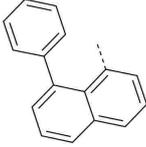
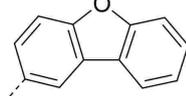
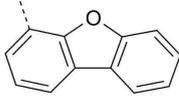
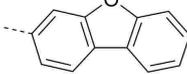
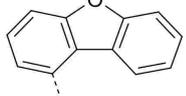
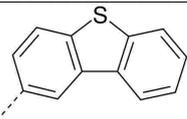
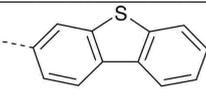
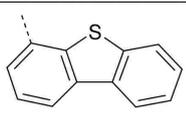
30

40

【 0 1 2 3】

50

【化 2 2 - 4】

		
Ar-49	Ar-50	Ar-51
		
Ar-52	Ar-53	Ar-54
		
Ar-55	Ar-56	Ar-57
		
Ar-58	Ar-59	Ar-60
		
Ar-61	Ar-62	Ar-63
		
Ar-64	Ar-65	Ar-66
		
Ar-67	Ar-68	Ar-69

10

20

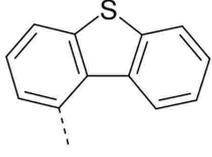
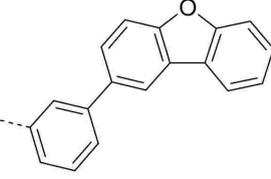
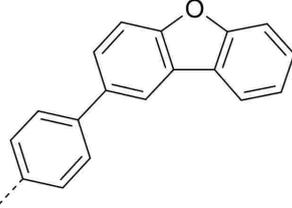
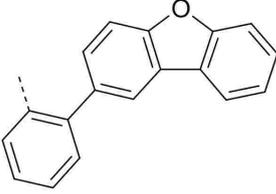
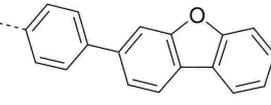
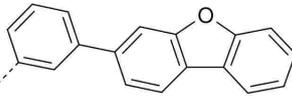
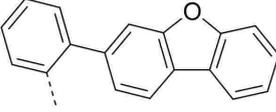
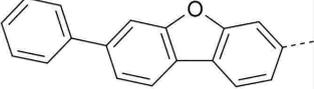
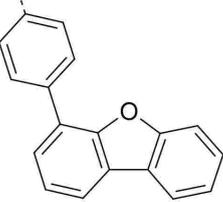
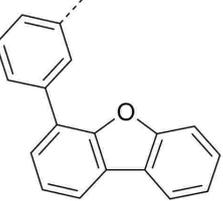
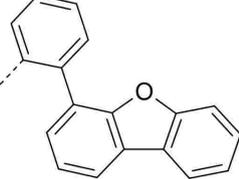
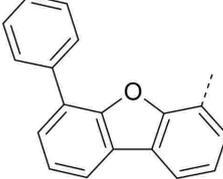
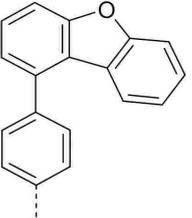
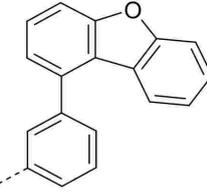
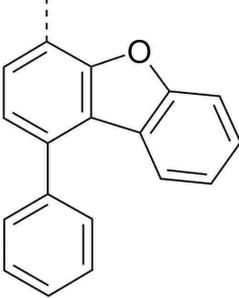
30

40

【 0 1 2 4 】

50

【化 2 2 - 5】

		
Ar-70	Ar-71	Ar-72
		
Ar-73	Ar-74	Ar-75
		
Ar-76	Ar-77	Ar-78
		
Ar-79	Ar-80	Ar-81
		
Ar-82	Ar-83	Ar-84

10

20

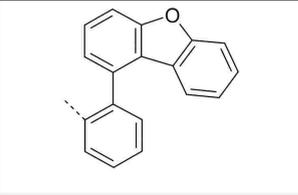
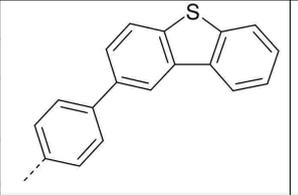
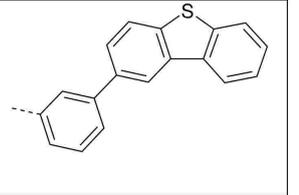
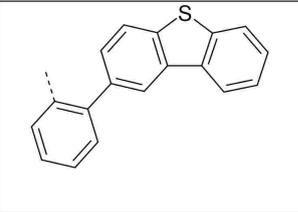
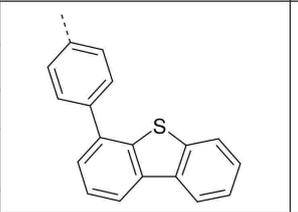
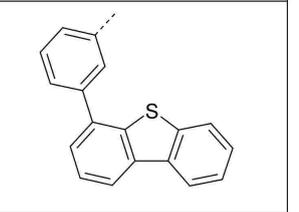
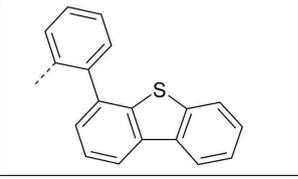
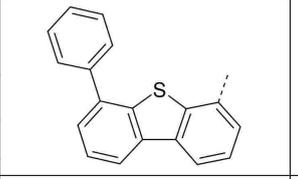
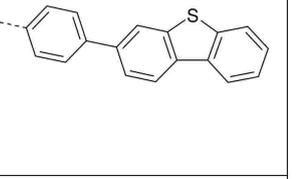
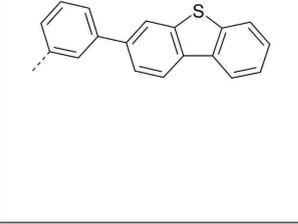
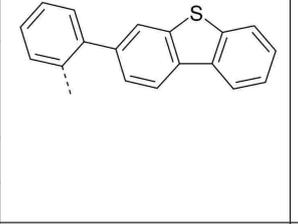
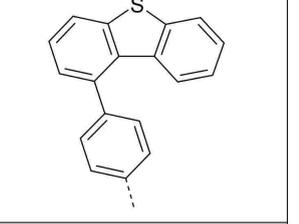
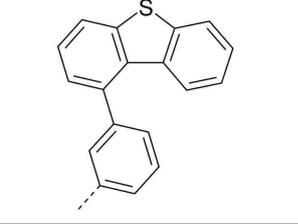
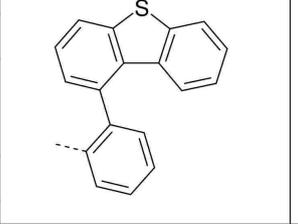
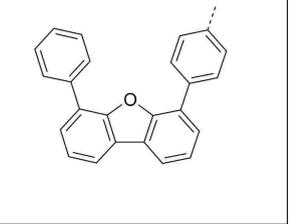
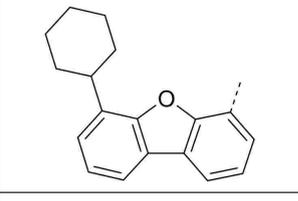
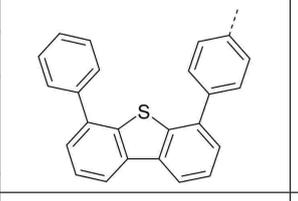
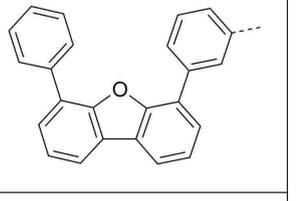
30

40

【 0 1 2 5 】

50

【化 2 2 - 6】

		
Ar-85	Ar-86	Ar-87
		
Ar-88	Ar-89	Ar-90
		
Ar-91	Ar-92	Ar-93
		
Ar-94	Ar-95	Ar-96
		
Ar-97	Ar-98	Ar-99
		
Ar-100	Ar-101	Ar-102

10

20

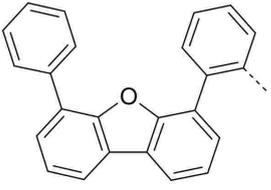
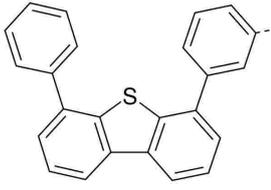
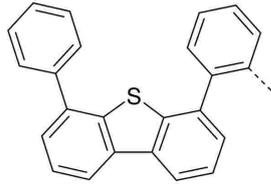
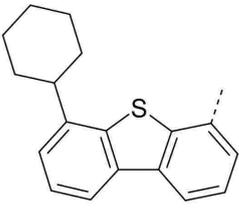
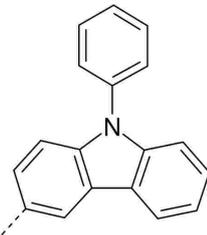
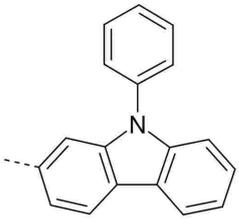
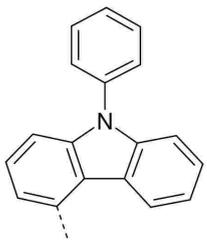
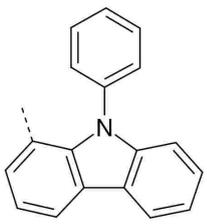
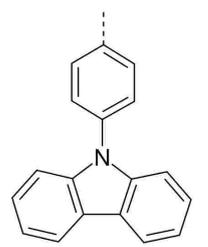
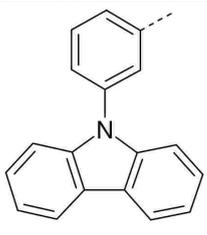
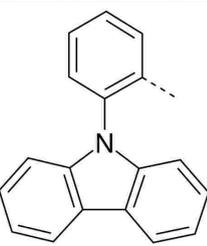
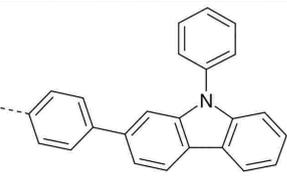
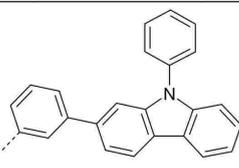
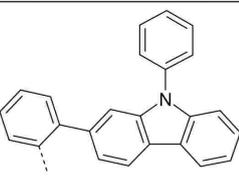
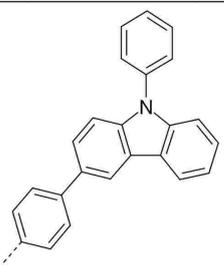
30

40

【 0 1 2 6 】

50

【化 2 2 - 7】

		
Ar-103	Ar-104	Ar-105
		
Ar-106	Ar-107	Ar-108
		
Ar-109	Ar-110	Ar-111
		
Ar-112	Ar-113	Ar-114
		
Ar-115	Ar-116	Ar-117

10

20

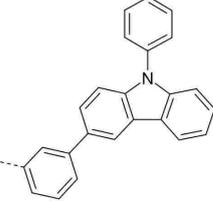
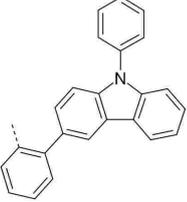
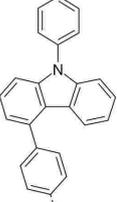
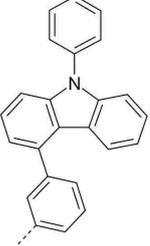
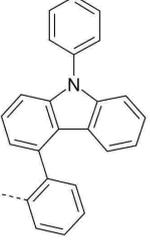
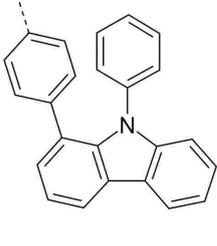
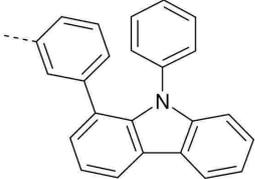
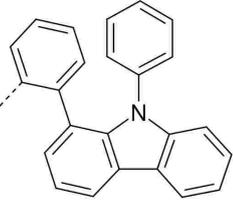
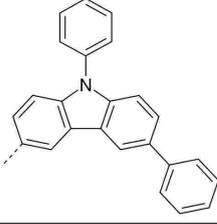
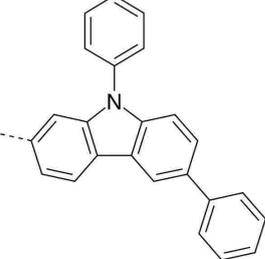
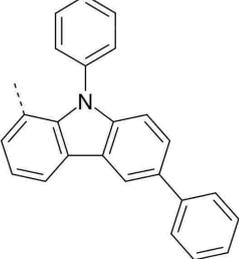
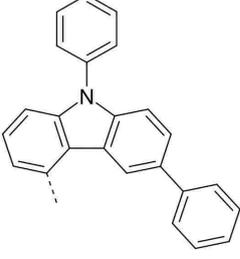
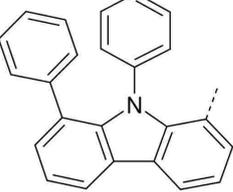
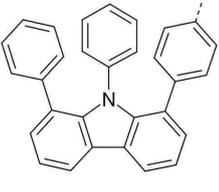
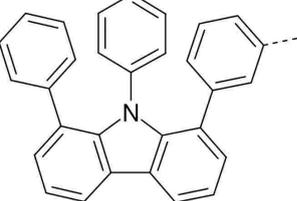
30

40

【 0 1 2 7 】

50

【化 2 2 - 8】

		
Ar-118	Ar-119	Ar-120
		
Ar-121	Ar-122	Ar-123
		
Ar-124	Ar-125	Ar-126
		
Ar-127	Ar-128	Ar-129
		
Ar-130	Ar-131	Ar-132

10

20

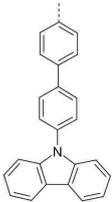
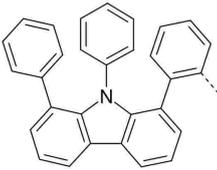
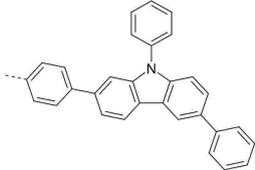
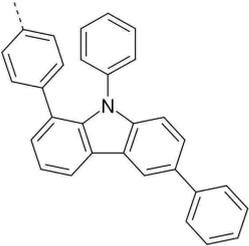
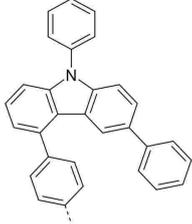
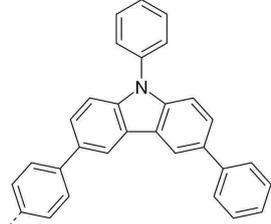
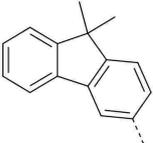
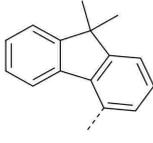
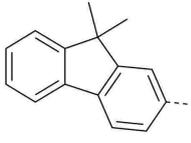
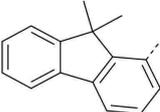
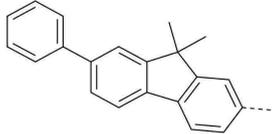
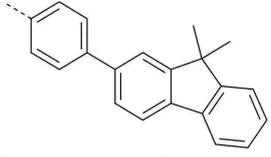
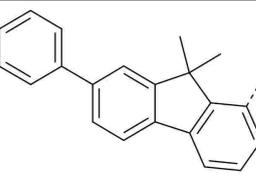
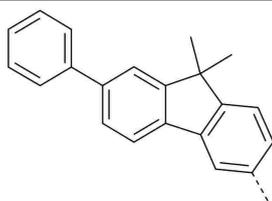
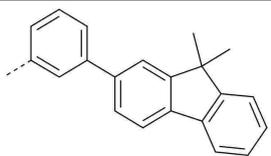
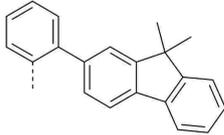
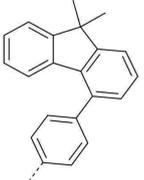
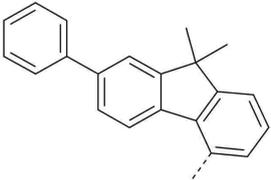
30

40

【 0 1 2 8】

50

【化 2 2 - 9】

		
Ar-133	Ar-134	Ar-135
		
Ar-136	Ar-137	Ar-138
		
Ar-139	Ar-140	Ar-141
		
Ar-142	Ar-143	Ar-144
		
Ar-145	Ar-146	Ar-147
		
Ar-148	Ar-149	Ar-150

10

20

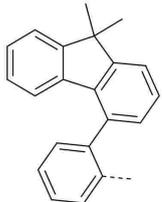
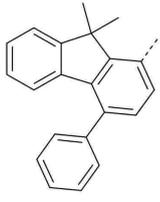
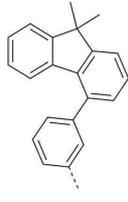
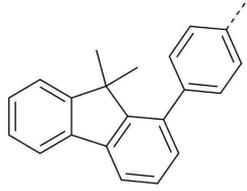
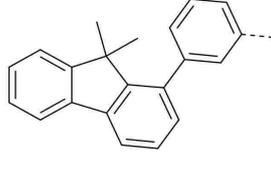
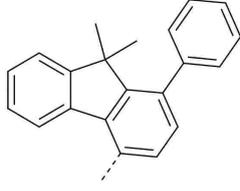
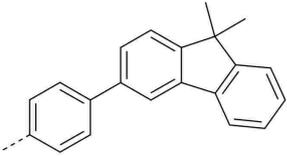
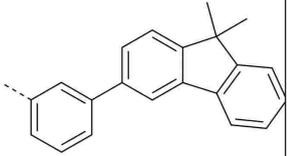
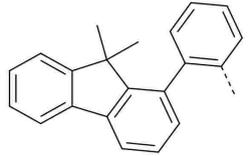
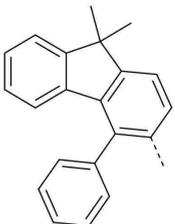
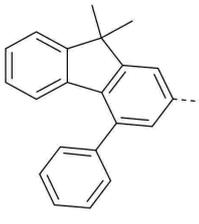
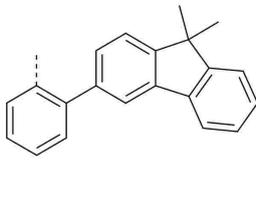
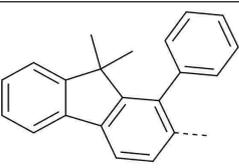
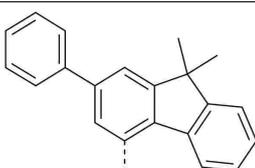
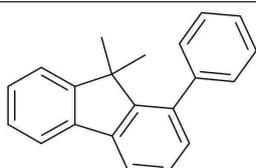
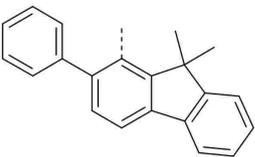
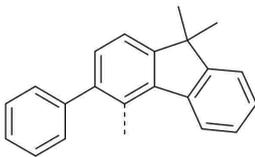
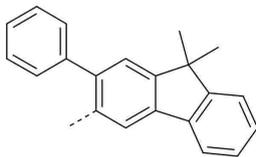
30

40

【 0 1 2 9 】

50

【化 2 2 - 1 0】

		
Ar-151	Ar-152	Ar-153
		
Ar-154	Ar-155	Ar-156
		
Ar-157	Ar-158	Ar-159
		
Ar-160	Ar-161	Ar-162
		
Ar-163	Ar-164	Ar-165
		
Ar-166	Ar-167	Ar-168

10

20

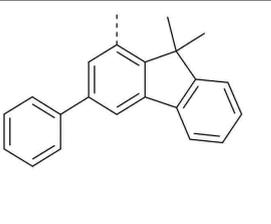
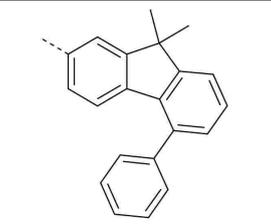
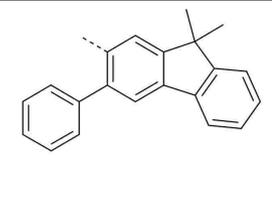
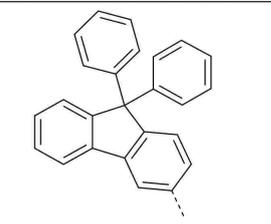
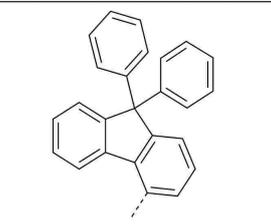
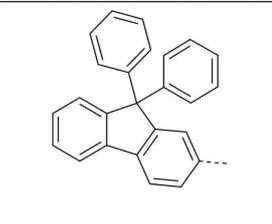
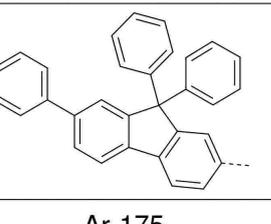
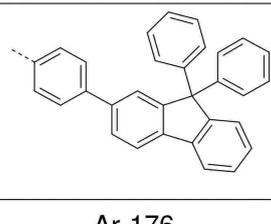
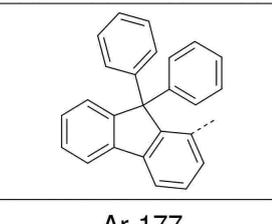
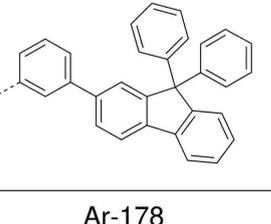
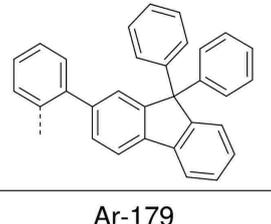
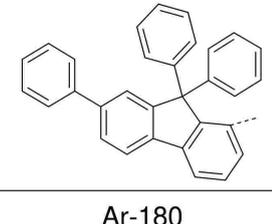
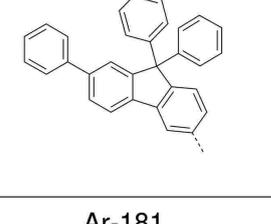
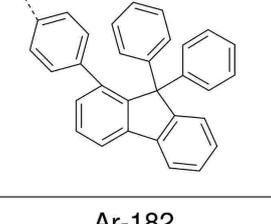
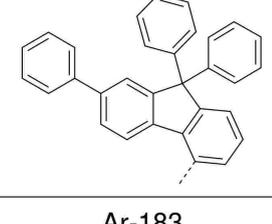
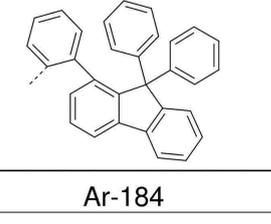
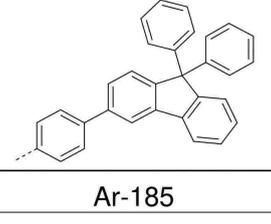
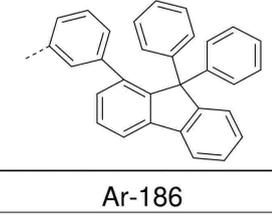
30

40

【 0 1 3 0】

50

【化 2 2 - 1 1】

		
Ar-169	Ar-170	Ar-171
		
Ar-172	Ar-173	Ar-174
		
Ar-175	Ar-176	Ar-177
		
Ar-178	Ar-179	Ar-180
		
Ar-181	Ar-182	Ar-183
		
Ar-184	Ar-185	Ar-186

10

20

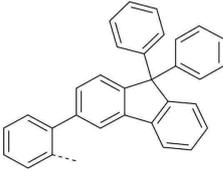
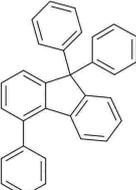
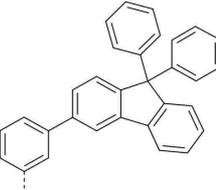
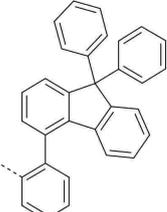
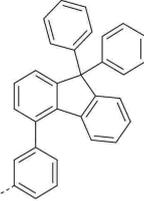
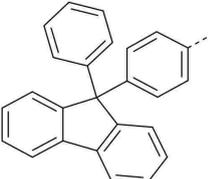
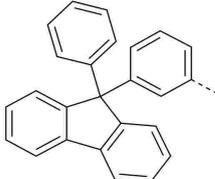
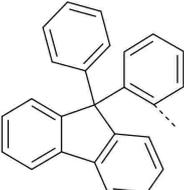
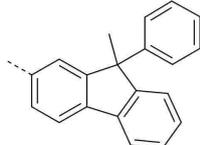
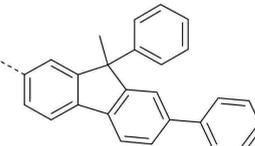
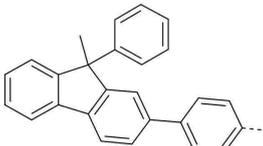
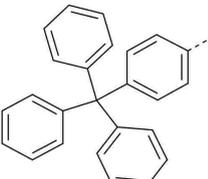
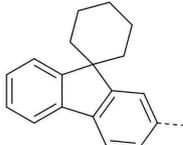
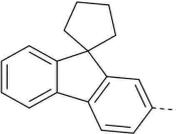
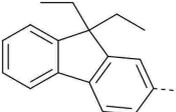
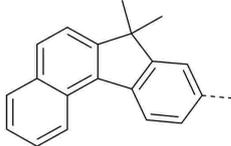
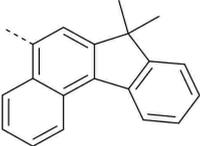
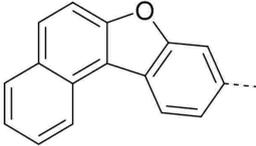
30

40

【 0 1 3 1】

50

【化 2 2 - 1 2】

		
Ar-187	Ar-188	Ar-189
		
Ar-190	Ar-191	Ar-192
		
Ar-193	Ar-194	Ar-195
		
Ar-196	Ar-197	Ar-198
		
Ar-199	Ar-200	Ar-201
		
Ar-202	Ar-203	Ar-204

10

20

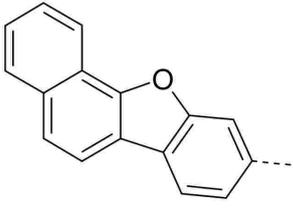
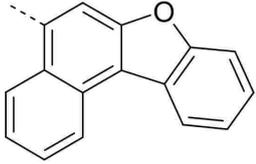
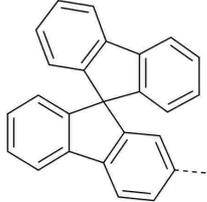
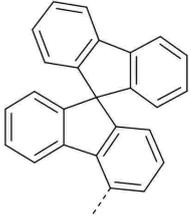
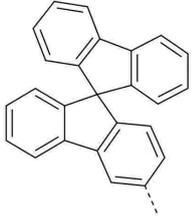
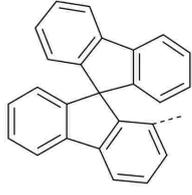
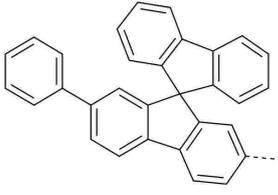
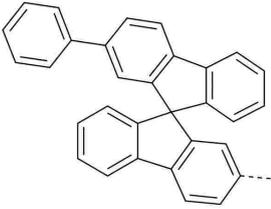
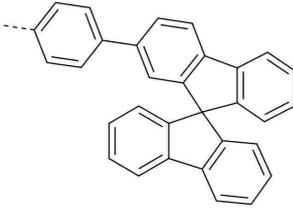
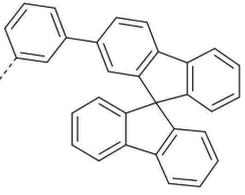
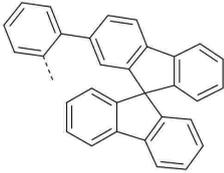
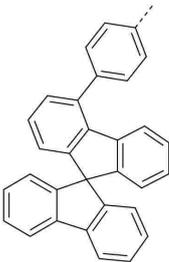
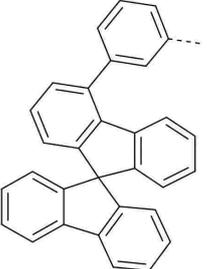
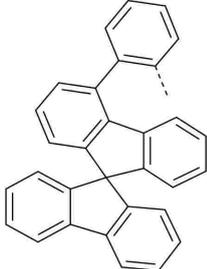
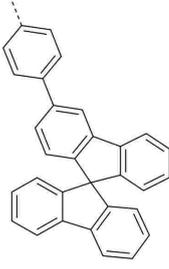
30

40

【 0 1 3 2】

50

【化 2 2 - 1 3】

		
Ar-205	Ar-206	Ar-207
		
Ar-208	Ar-209	Ar-210
		
Ar-211	Ar-212	Ar-213
		
Ar-214	Ar-215	Ar-216
		
Ar-217	Ar-218	Ar-219

10

20

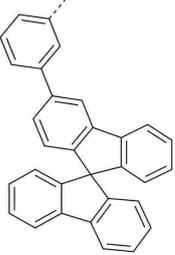
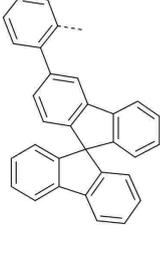
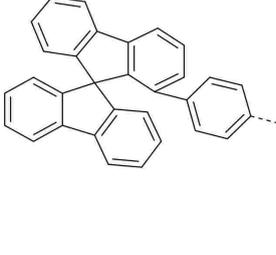
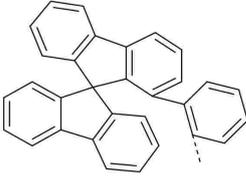
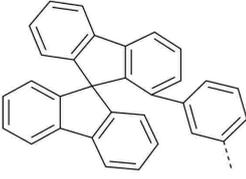
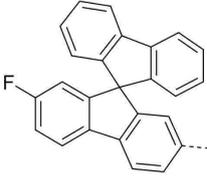
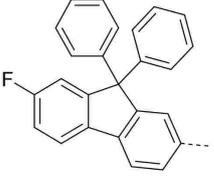
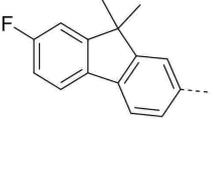
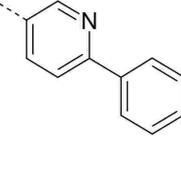
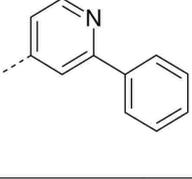
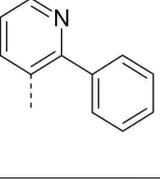
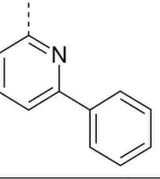
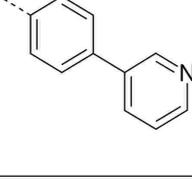
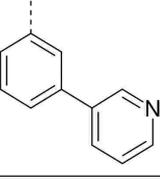
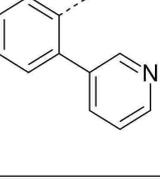
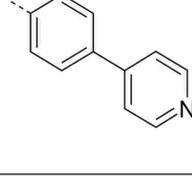
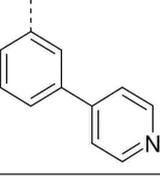
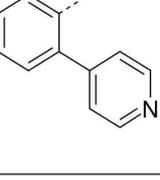
30

40

【 0 1 3 3】

50

【化 2 2 - 1 4】

		
Ar-220	Ar-221	Ar-222
		
Ar-223	Ar-224	Ar-225
		
Ar-226	Ar-227	Ar-228
		
Ar-229	Ar-230	Ar-231
		
Ar-232	Ar-233	Ar-234
		
Ar-235	Ar-236	Ar-237

10

20

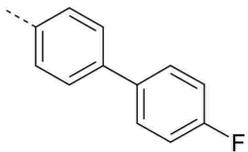
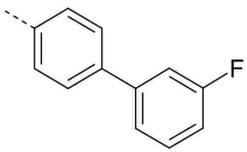
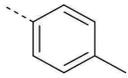
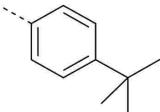
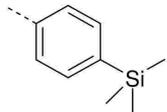
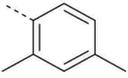
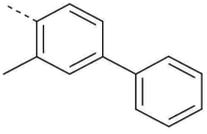
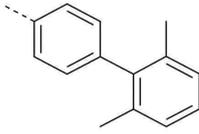
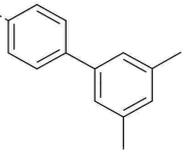
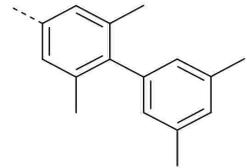
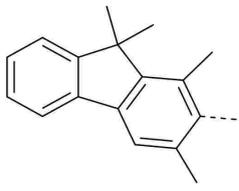
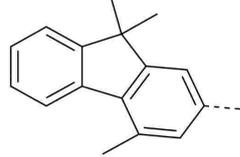
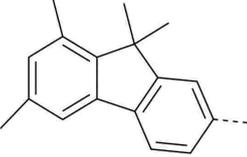
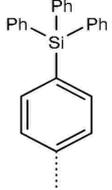
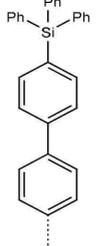
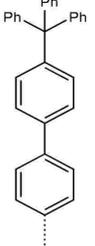
30

40

【 0 1 3 4】

50

【化 2 2 - 1 5】

		
Ar-238	Ar-239	Ar-240
		
Ar-241	Ar-242	Ar-243
		
Ar-244	Ar-245	Ar-246
		
Ar-247	Ar-248	Ar-249
		
Ar-250	Ar-251	Ar-252
		
Ar-253	Ar-254	Ar-255

10

20

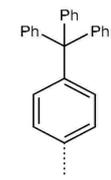
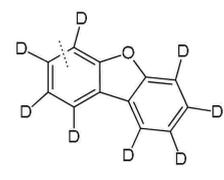
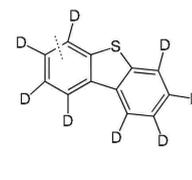
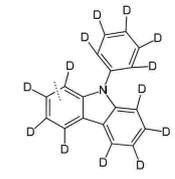
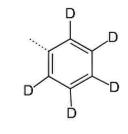
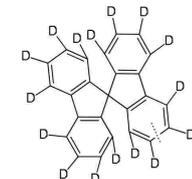
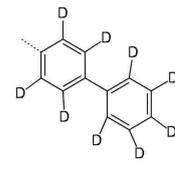
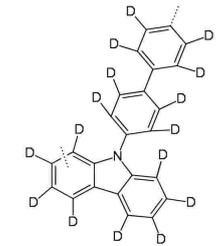
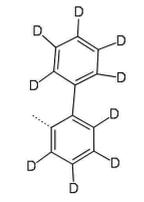
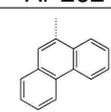
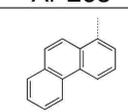
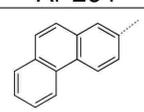
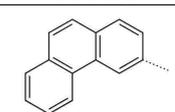
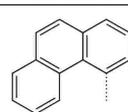
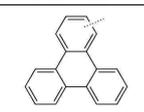
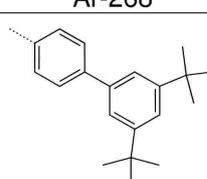
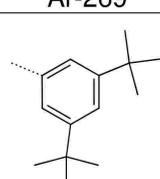
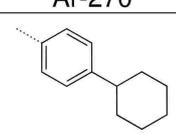
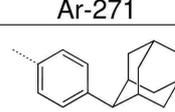
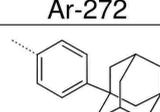
30

40

【 0 1 3 5】

50

【化 2 2 - 1 6】

		
Ar-256	Ar-257	Ar-258
		
Ar-259	Ar-260	Ar-261
		
Ar-262	Ar-263	Ar-264
		
Ar-265	Ar-266	Ar-267
		
Ar-268	Ar-269	Ar-270
		
Ar-271	Ar-272	Ar-273
		
Ar-274	Ar-275	

10

20

30

40

【0 1 3 6】

から選択され、これらはそれぞれ無置換として示される位置で R^3 ラジカルにより置換されており、これらの場合における R^3 ラジカルは、好ましくは H または D である。

【0 1 3 7】

Ar^L は、好ましくは 6 ~ 25 個の芳香族環原子を有し、 R^3 ラジカルにより置換された芳香族環系であり、より好ましくはそれぞれ R^3 ラジカルにより置換されたフェニル、ビフェニル、ナフチルまたはフルオレニルであり、最も好ましくは R^3 ラジカルにより置換されたフェニルである。

【0 1 3 8】

50

Tは、好ましくはそれぞれの場合において同じであるかまたは異なり、単結合、OおよびS、特に単結合およびOから選択される。

【0139】

特に好ましい態様において、それぞれの場合におけるTは単結合である。代替的な特に好ましい態様において、当該式中の一例におけるTは単結合から選択され、当該式中の別の例におけるTは、Oから選択される。

【0140】

さらに、Eは好ましくは単結合であるか、またはnは0であり、それによりEは存在しない。より好ましくは、nは0である。

【0141】

R⁰は、好ましくはそれぞれの場合において同じであるかまたは異なり、F、CN、Si(R⁴)₃、N(R⁴)₂、1~20個の炭素原子を有する直鎖アルキルまたはアルコキシ基、3~20個の炭素原子を有する分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、6~40個の芳香族環原子を有する芳香族環系、および5~40個の芳香族環原子を有するヘテロ芳香族環系から選択され；言及したアルキルおよびアルコキシ基、言及した芳香族環系、ならびに言及したヘテロ芳香族環系は、それぞれR⁴ラジカルにより置換されており；言及したアルキルまたはアルコキシ基中の1つ以上のCH₂基は、-C-C-、-R⁴C=CR⁴-、Si(R⁴)₂、C=O、C=NR⁴、-NR⁴-、-O-、-S-、-C(=O)O-または-C(=O)NR⁴-により置きかえられていてもよい。

10

【0142】

好ましくは、xとyの合計は3であり、それによりR⁰は存在しない。

20

【0143】

好ましくは、m=0である。

【0144】

R¹は、好ましくはそれぞれの場合において同じであるかまたは異なり、H、D、F、CN、Si(R⁴)₃、N(R⁴)₂、1~20個の炭素原子を有する直鎖アルキルまたはアルコキシ基、3~20個の炭素原子を有する分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、6~40個の芳香族環原子を有する芳香族環系、および5~40個の芳香族環原子を有するヘテロ芳香族環系から選択され；言及したアルキルおよびアルコキシ基、言及した芳香族環系、ならびに言及したヘテロ芳香族環系は、それぞれR⁴ラジカルにより置換されており；言及したアルキルまたはアルコキシ基中の1つ以上のCH₂基は、-C-C-、-R⁴C=CR⁴-、Si(R⁴)₂、C=O、C=NR⁴、-NR⁴-、-O-、-S-、-C(=O)O-または-C(=O)NR⁴-により置きかえられていてもよい。

30

【0145】

好ましくは、式(G-1)または(G-2)または(G-3)中の芳香族環1つにつき少なくとも1つのR¹基はHであり、式(G-1)または(G-2)または(G-3)中の芳香族環1つにつき少なくとも1つのR¹基はDである。より好ましくは、R¹は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、HおよびDから選択され、式(G-1)または(G-2)または(G-3)中の芳香族環1つにつき少なくとも1つのR¹基はHであり、式(G-1)または(G-2)または(G-3)中の芳香族環1つにつき少なくとも1つのR¹基はDである。HであるR¹ラジカルとDであるR¹ラジカルの比は、好ましくは1:10乃至10:1、より好ましくは1:3乃至3:1、最も好ましくは1:2乃至2:1である。

40

【0146】

R²は、好ましくはそれぞれの場合において同じであるかまたは異なり、F、CN、Si(R⁴)₃、N(R⁴)₂、1~20個の炭素原子を有する直鎖アルキルまたはアルコキシ基、3~20個の炭素原子を有する分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、6~40個の芳香族環原子を有する芳香族環系、および5~40個の芳香族環原子を有するヘテロ芳香族環系から選択され；言及したアルキルおよびアルコキシ基、言及した芳香族

50

環系および言及したヘテロ芳香族環系は、それぞれ R^4 ラジカルにより置換され；言及したアルキルまたはアルコキシ基の1つ以上の CH_2 基は、 $-C-C-$ 、 $-R^4C=CR^4-$ 、 $Si(R^4)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^4$ 、 $-NR^4-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(=O)O-$ または $-C(=O)NR^4-$ により置きかえられていてもよい。より好ましくは、 R^2 は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、1～20個の炭素原子を有する直鎖アルキル基、3～20個の炭素原子を有する分枝または環状アルキル基、6～40個の芳香族環原子を有する芳香族環系、および5～40個の芳香族環原子を有するヘテロ芳香族環系から選択され；前記アルキル基、前記芳香族環系、および前記ヘテロ芳香族環系は、それぞれ R^4 ラジカルによって置換されている。最も好ましくは、 R^2 は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、それぞれ R^4 ラジカルで置換されたメチルおよびフェニル、最も好ましくは無置換のメチルおよびフェニルから選択される。 R^2 ラジカル上の R^4 ラジカルは、好ましくはHではなく、好ましくは重水素原子を含有しない。

【0147】

好ましくは、 R^3 は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、H、D、F、CN、 $Si(R^4)_3$ 、 $N(R^4)_2$ 、1～20個の炭素原子を有する直鎖アルキルまたはアルコキシ基、3～20個の炭素原子を有する分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、6～40個の芳香族環原子を有する芳香族環系、および5～40個の芳香族環原子を有するヘテロ芳香族環系から選択され；言及したアルキルおよびアルコキシ基、言及した芳香族環系、ならびに言及したヘテロ芳香族環系は、それぞれ R^4 ラジカルにより置換されており；言及したアルキルまたはアルコキシ基中の1つ以上の CH_2 基は、 $-C-C-$ 、 $-R^4C=CR^4-$ 、 $Si(R^4)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^4$ 、 $-NR^4-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(=O)O-$ または $-C(=O)NR^4-$ により置きかえられていてもよい。好ましくは、 Ar^1 基の芳香族環1つにつき少なくとも1つの R^3 基はHであり、 Ar^1 基の芳香族環1つにつき少なくとも1つの R^1 基はDである。

【0148】

好ましい態様において、Hである R^3 ラジカルとDである R^3 ラジカルの比は、1：10乃至10：1、より好ましくは1：3乃至3：1、最も好ましくは1：2乃至2：1である。

【0149】

代替的な好ましい態様において、 R^3 はDではない。

【0150】

好ましくは、 R^4 はそれぞれの場合において同じであるかまたは異なり、H、D、F、CN、 $Si(R^5)_3$ 、 $N(R^5)_2$ 、1～20個の炭素原子を有する直鎖アルキルまたはアルコキシ基、3～20個の炭素原子を有する分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、6～40個の芳香族環原子を有する芳香族環系、および5～40個の芳香族環原子を有するヘテロ芳香族環系から選択され；言及したアルキルおよびアルコキシ基、言及した芳香族環系および言及したヘテロ芳香族環系は、それぞれ R^5 ラジカルにより置換され；言及したアルキルまたはアルコキシ基の1つ以上の CH_2 基は、 $-C-C-$ 、 $-R^5C=CR^5-$ 、 $Si(R^5)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^5$ 、 $-NR^5-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(=O)O-$ または $-C(=O)NR^5-$ により置換されていてもよい。より好ましくは、 R^4 は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、H、D、F、CN、1～20個の炭素原子を有する直鎖アルキル基、3～20個の炭素原子を有する分枝または環状アルキル基、6～40個の芳香族環原子を有する芳香族環系、および5～40個の芳香族環原子を有するヘテロ芳香族環系から選択される。Hである R^4 ラジカルとDである R^4 ラジカルの比は、好ましくは1：10乃至10：1、より好ましくは1：3乃至3：1、最も好ましくは1：2乃至2：1である。

【0151】

好ましくは、 R^5 は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、H、D、F、CN、1～20個の炭素原子を有するアルキル基、6～40個の芳香族環原子を有する

芳香族環系、および5～40個の芳香族環原子を有するヘテロ芳香族環系から選択される。HであるR⁵ラジカルとDであるR⁵ラジカルの比は、好ましくは1：10乃至10：1、より好ましくは1：3乃至3：1、最も好ましくは1：2乃至2：1である。

【0152】

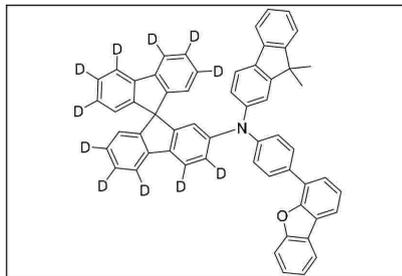
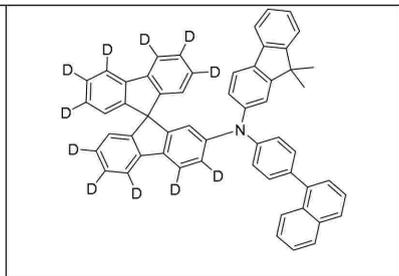
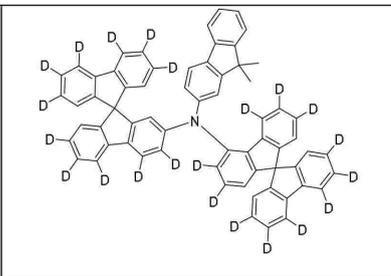
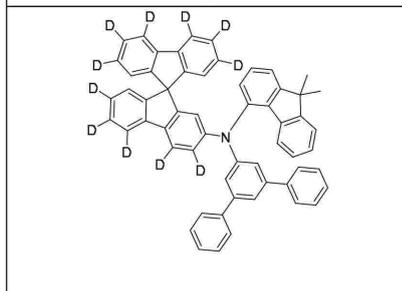
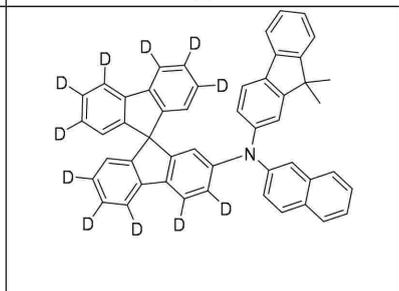
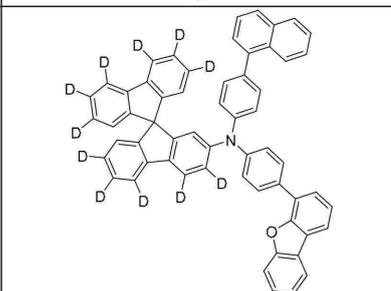
xは好ましくは2である。指数yは好ましくは1である。より好ましくは、xは2であり、yは1である。

【0153】

式(I)の化合物の好ましい態様を以下の表に示す：

【0154】

【化23-1】

		
1	2	3
		
4	5	6

10

20

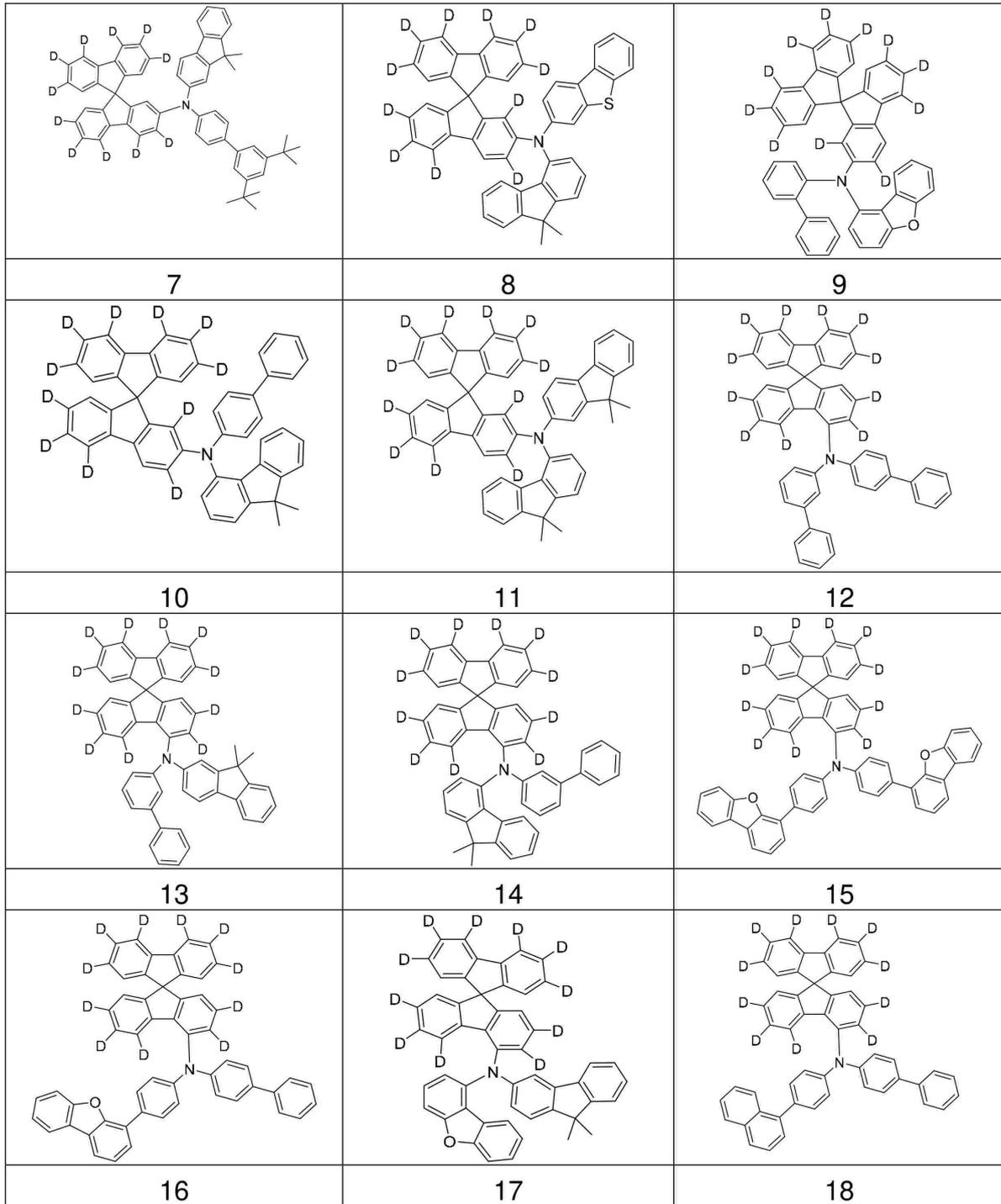
【0155】

30

40

50

【化 2 3 - 2】



10

20

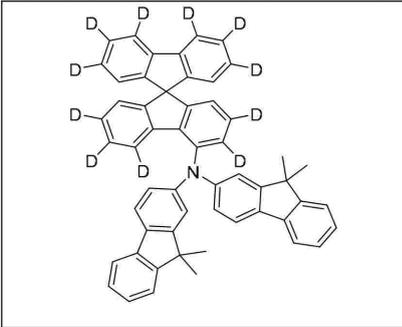
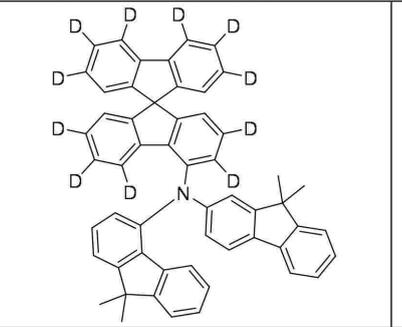
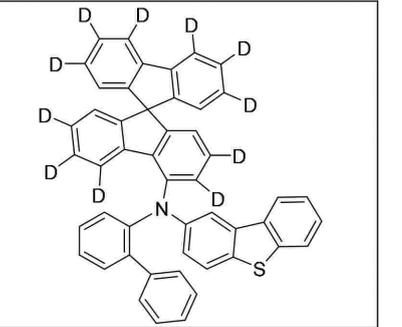
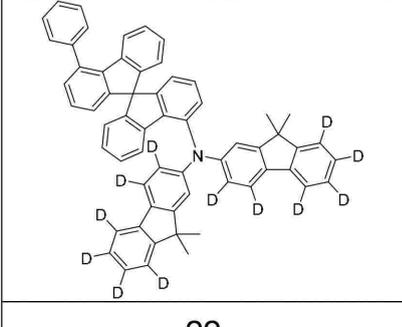
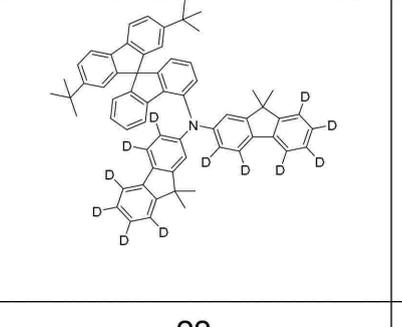
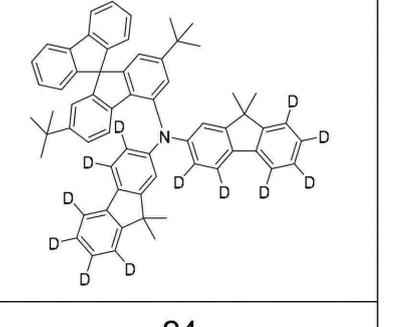
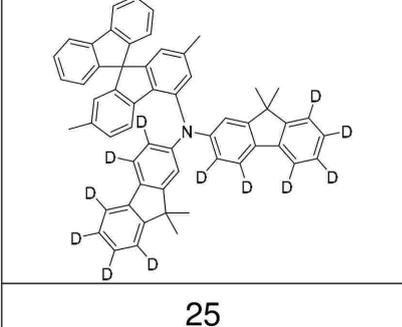
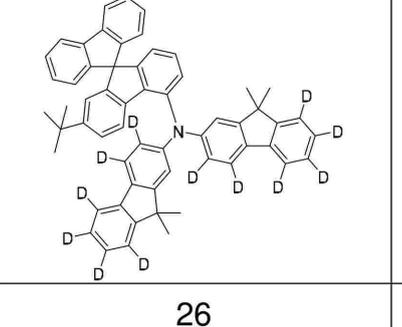
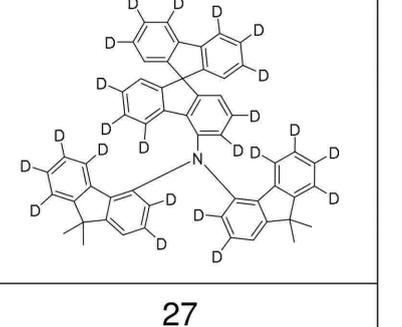
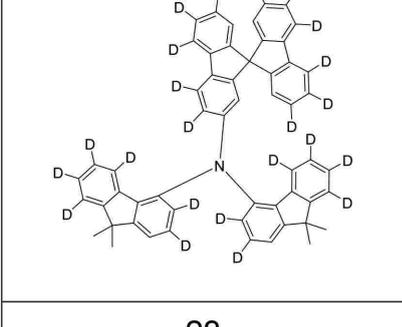
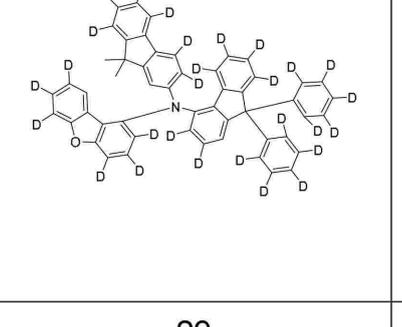
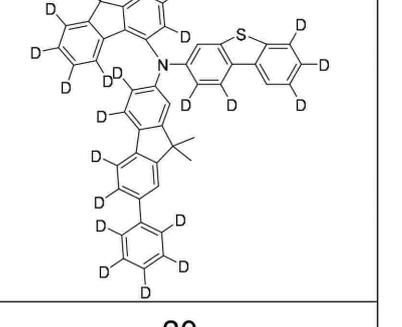
30

【 0 1 5 6 】

40

50

【化 2 3 - 3】

		
19	20	21
		
22	23	24
		
25	26	27
		
28	29	30

10

20

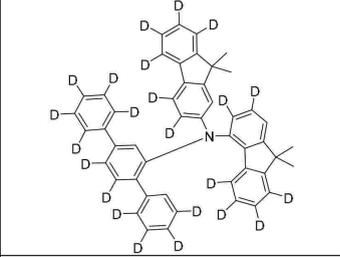
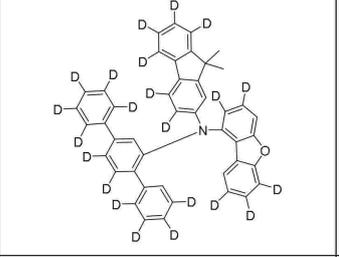
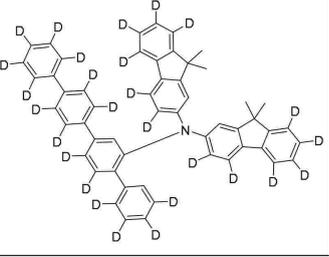
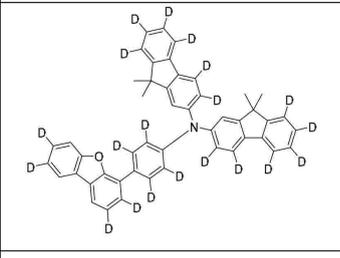
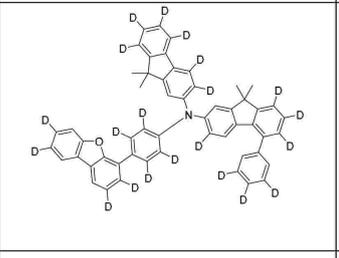
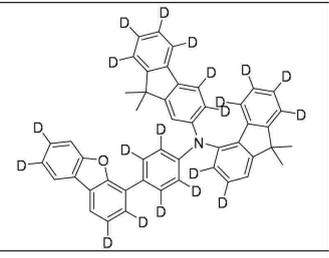
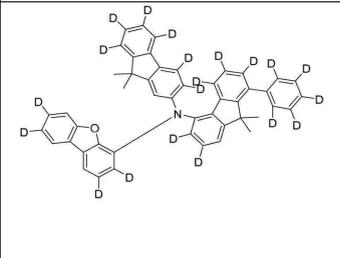
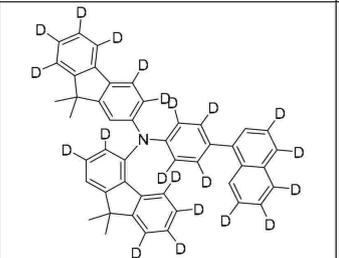
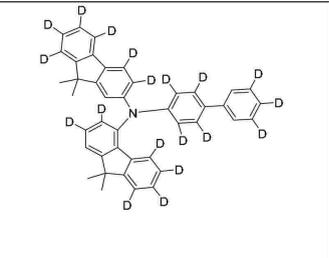
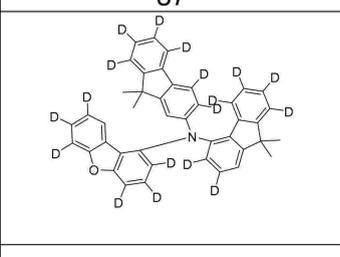
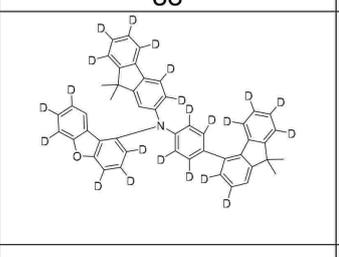
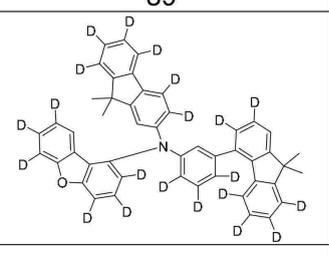
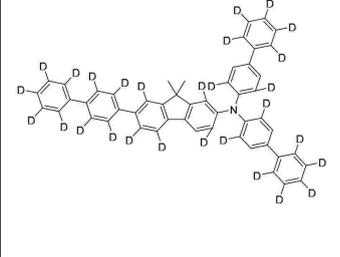
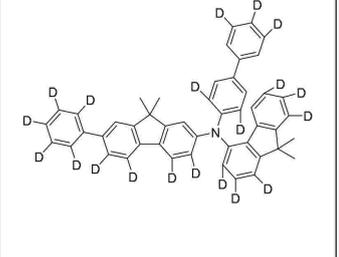
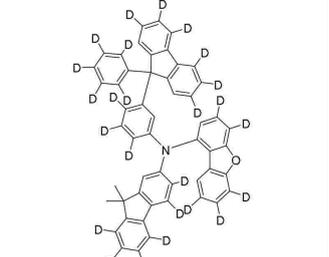
30

40

【 0 1 5 7 】

50

【化 2 3 - 4】

		
31	32	33
		
34	35	36
		
37	38	39
		
40	41	42
		
43	44	45

10

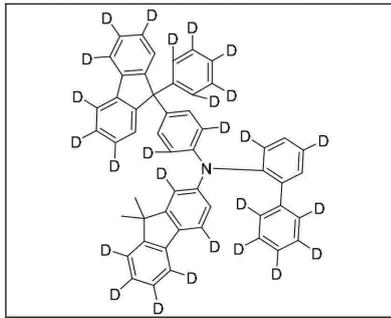
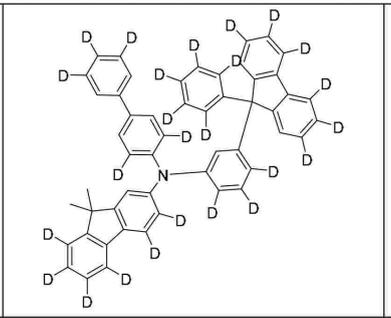
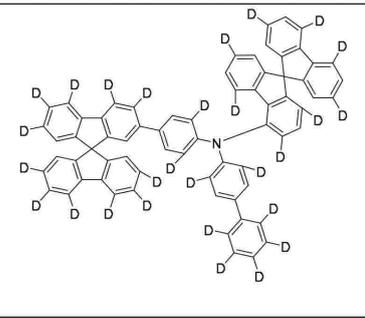
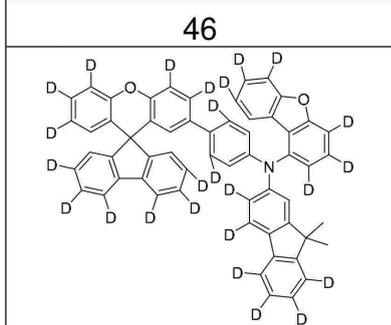
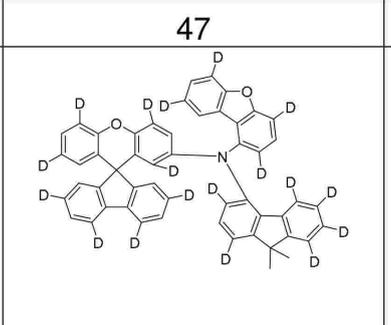
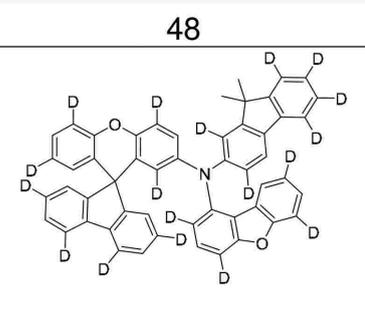
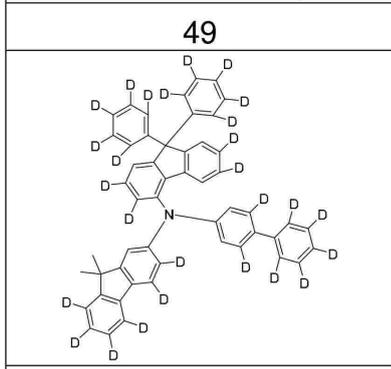
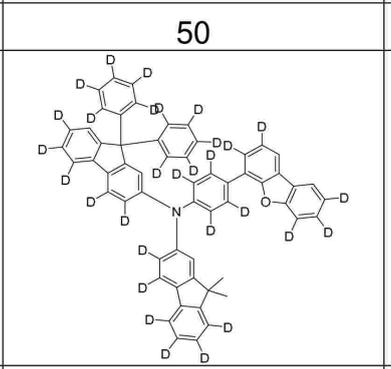
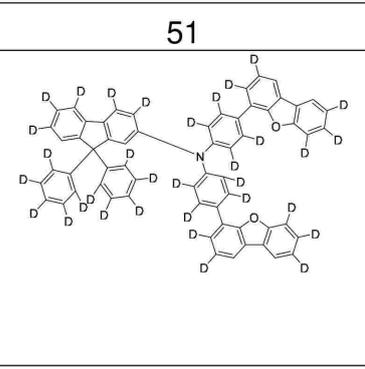
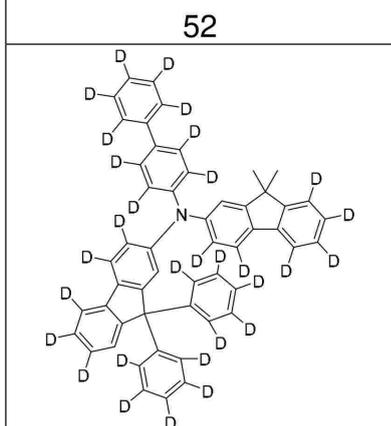
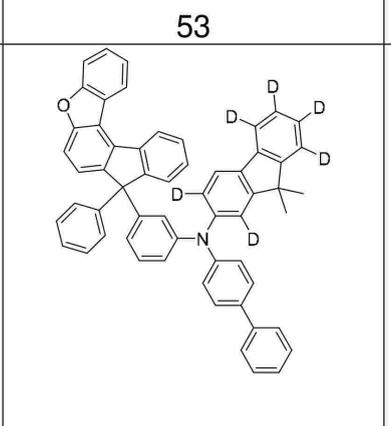
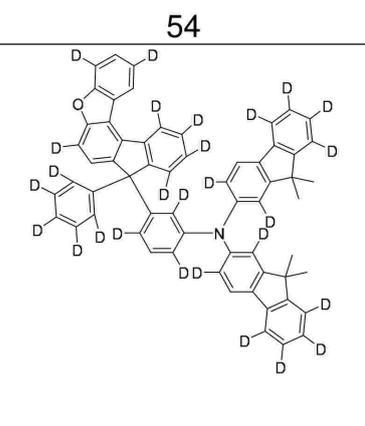
20

30

40

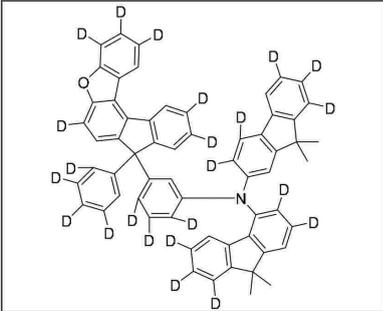
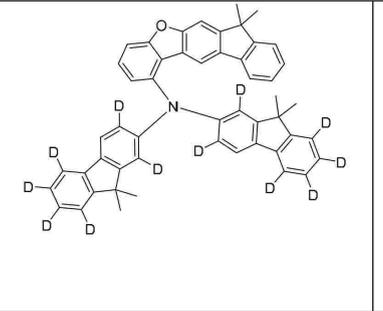
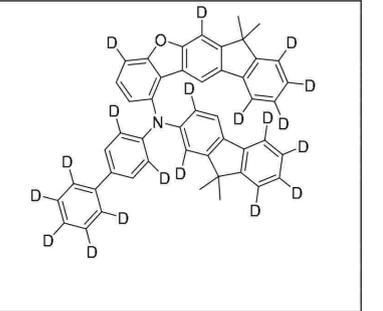
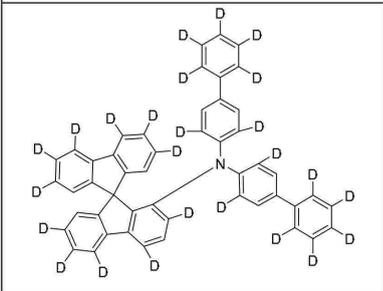
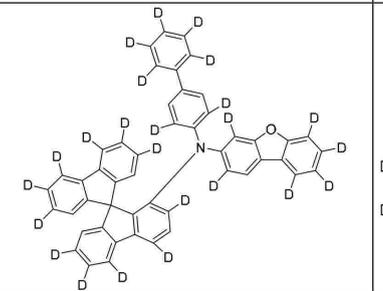
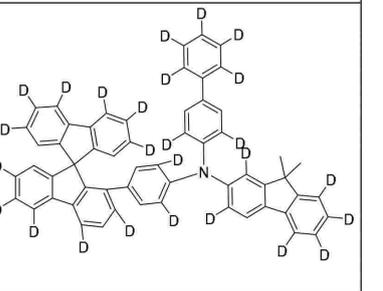
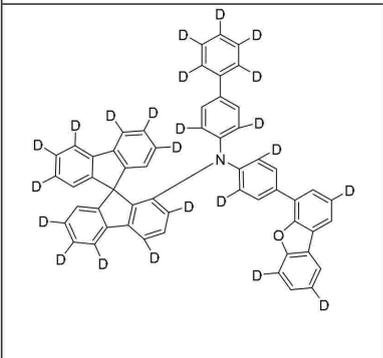
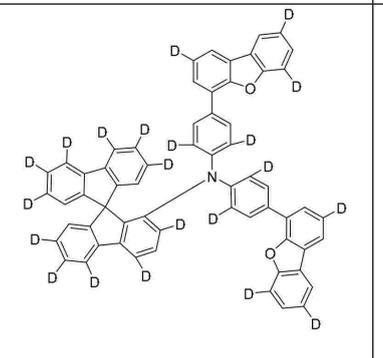
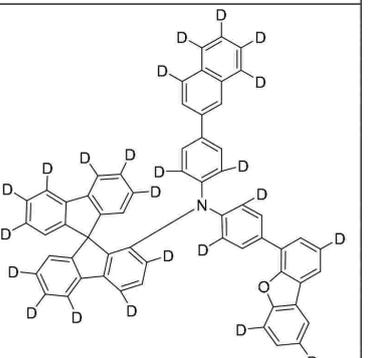
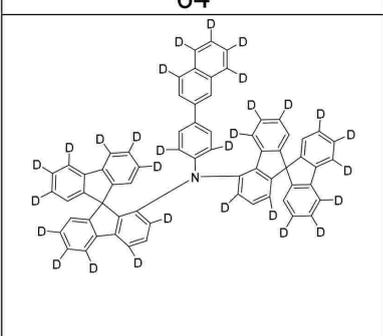
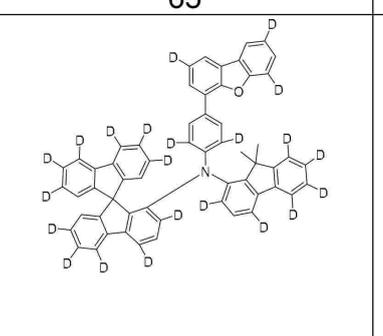
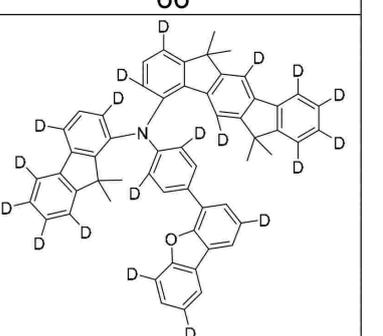
【 0 1 5 8 】

【化 2 3 - 5】

			
46	47	48	10
			
49	50	51	20
			
52	53	54	30
			
55	56	57	40

【 0 1 5 9 】

【化 2 3 - 6】

		
58	59	60
		
61	62	63
		
64	65	66
		
67	68	69

10

20

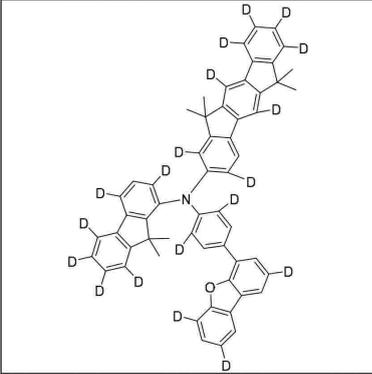
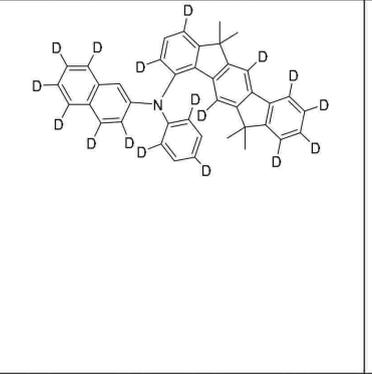
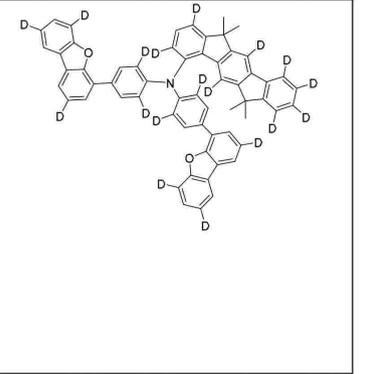
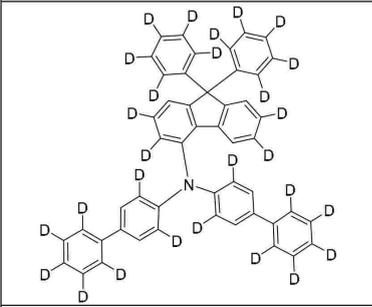
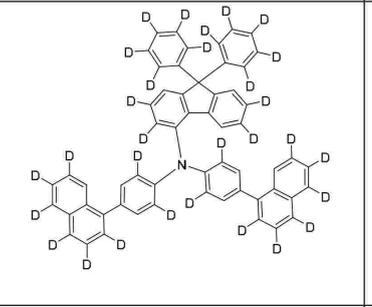
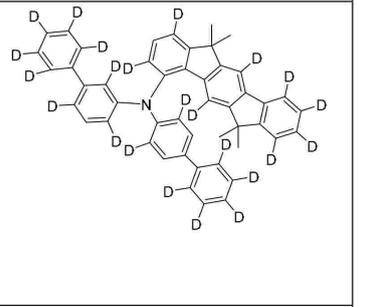
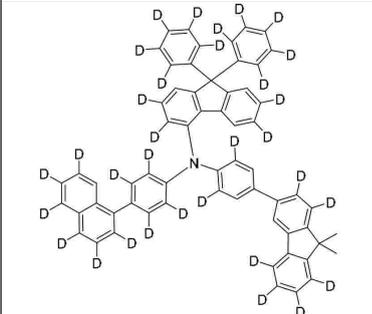
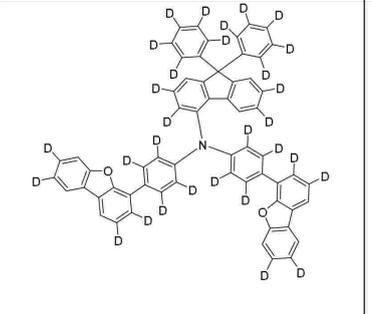
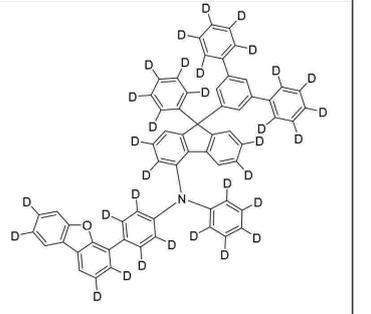
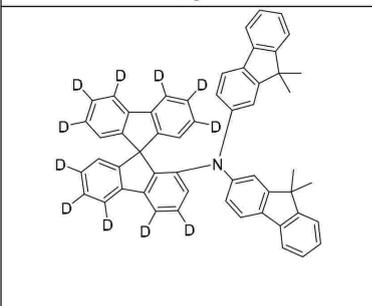
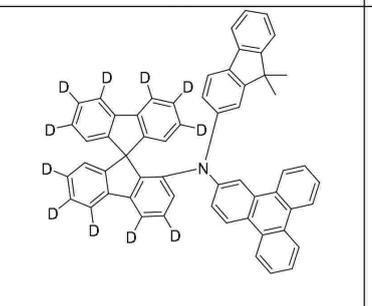
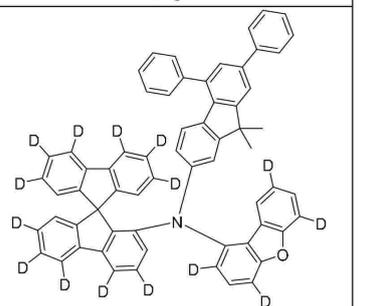
30

40

【 0 1 6 0 】

50

【化 2 3 - 7】

		
70	71	72
		
73	74	75
		
76	77	78
		
79	80	81

10

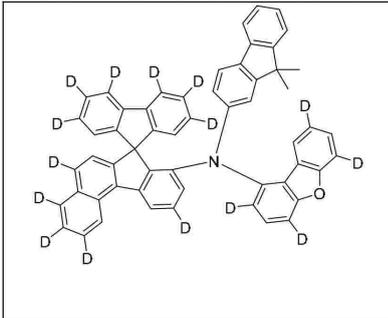
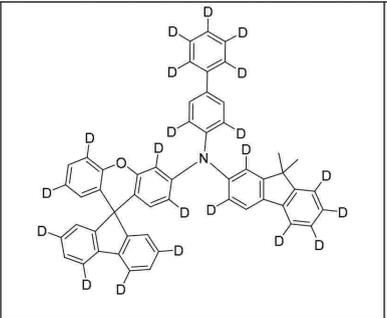
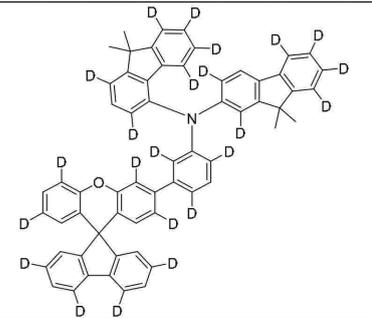
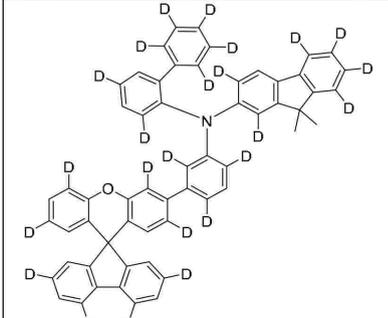
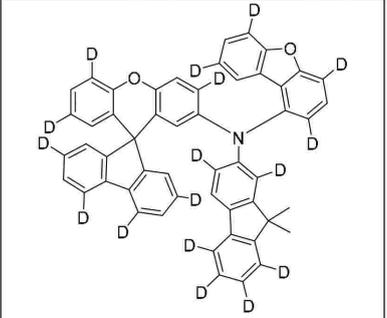
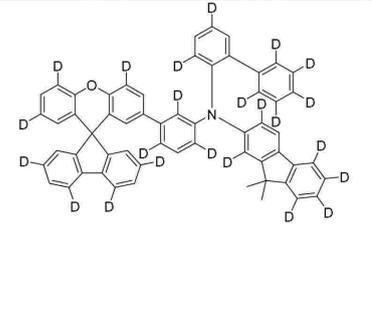
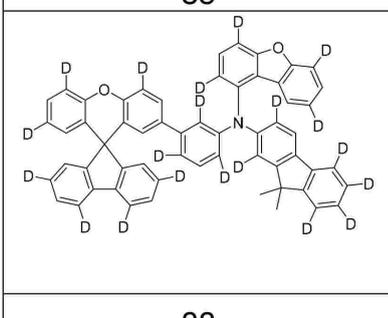
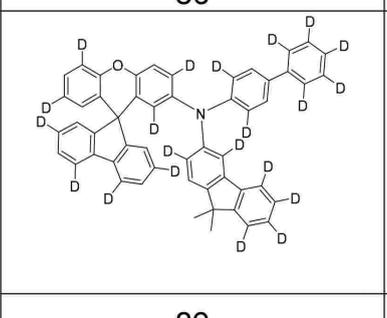
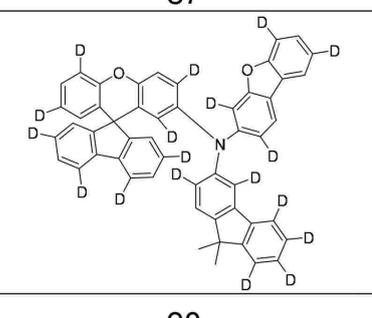
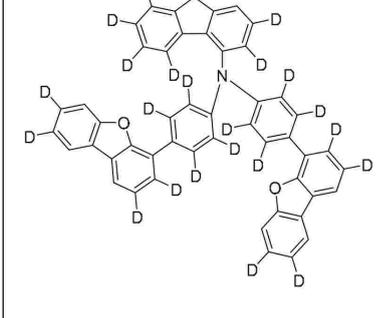
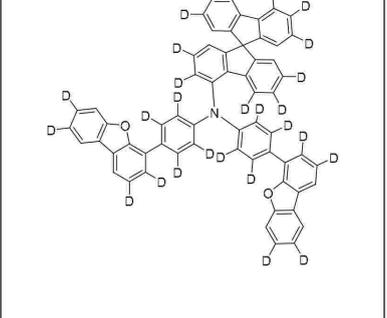
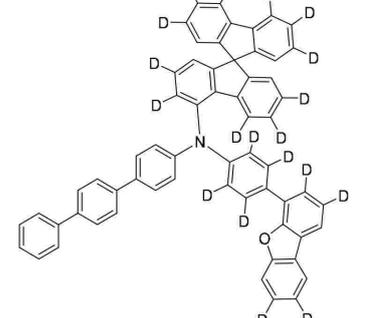
20

30

40

【 0 1 6 1 】

【化 2 3 - 8】

		
82	83	84
		
85	86	87
		
88	89	90
		
91	92	93

10

20

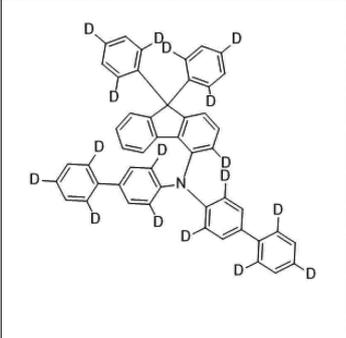
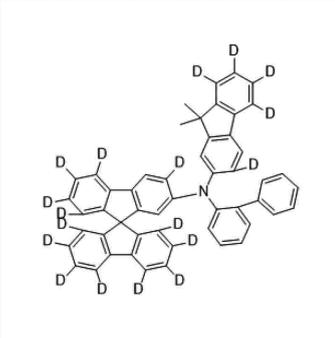
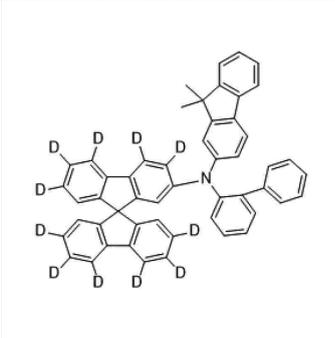
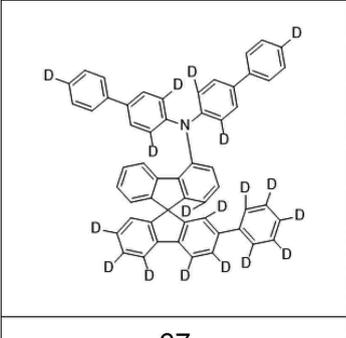
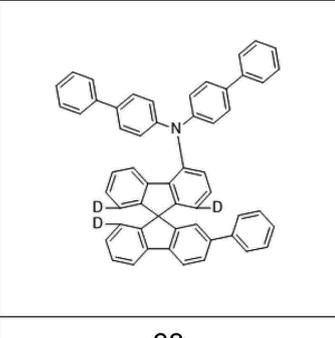
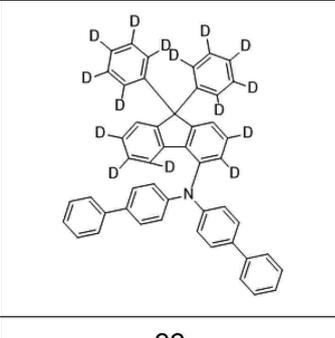
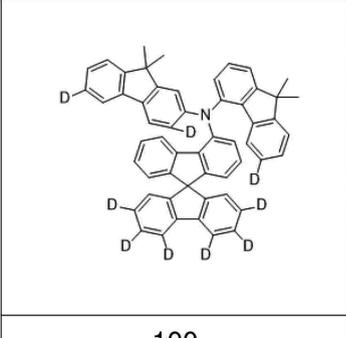
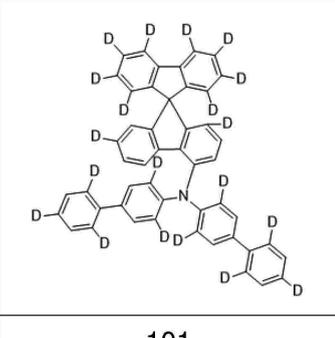
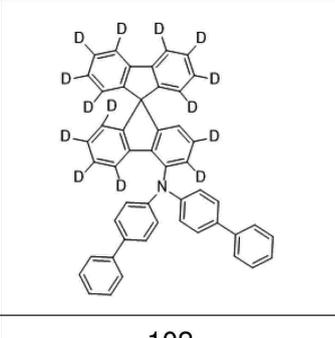
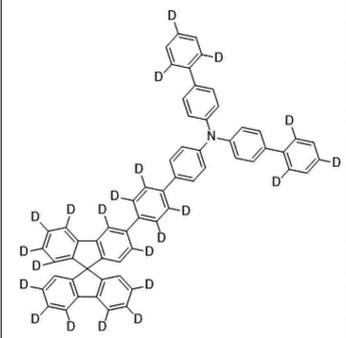
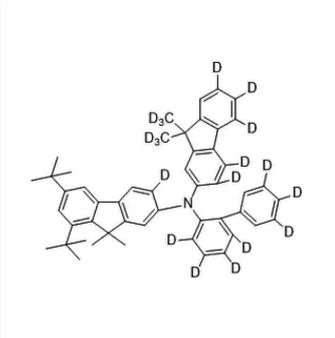
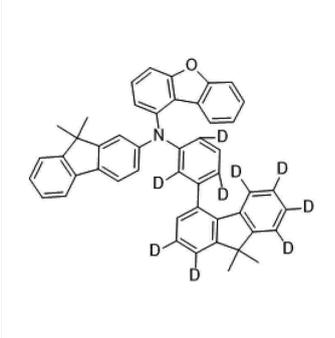
30

40

【 0 1 6 2】

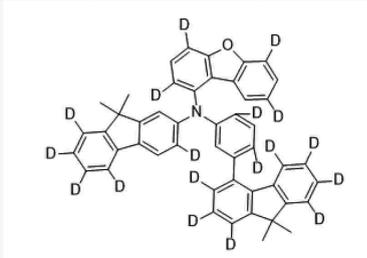
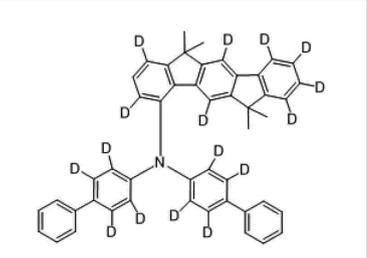
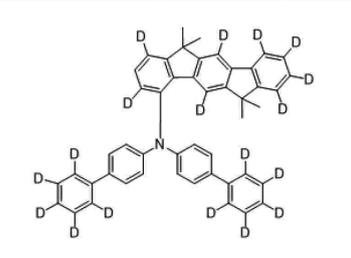
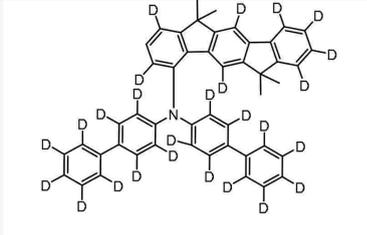
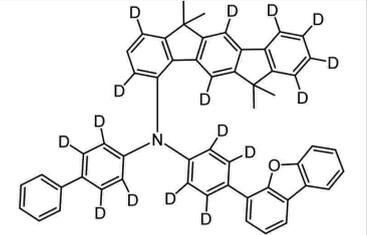
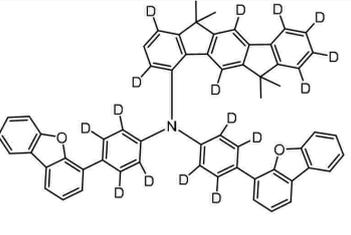
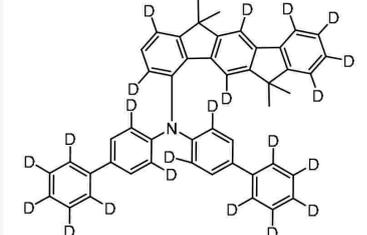
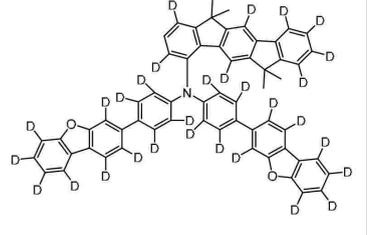
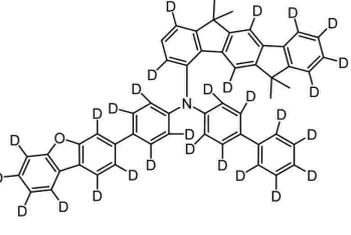
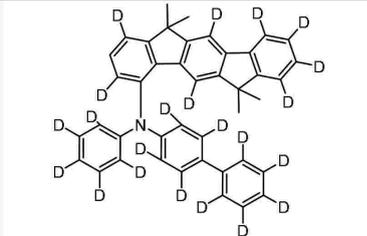
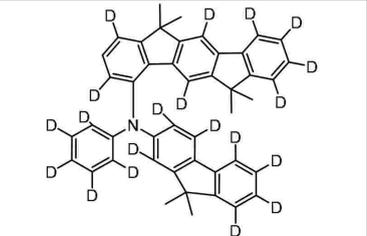
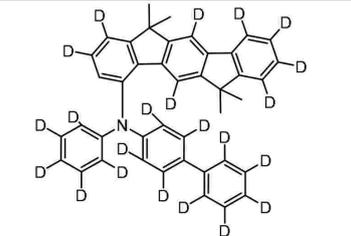
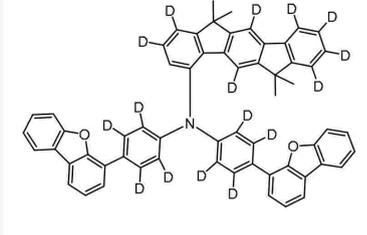
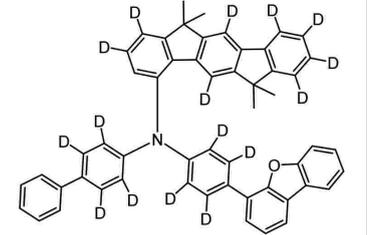
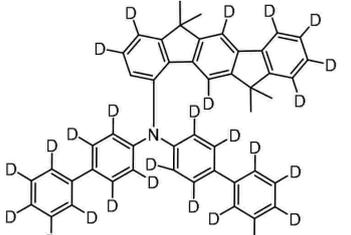
50

【化 2 3 - 9】

			
94	95	96	10
			
97	98	99	20
			
100	101	102	30
			
103	104	105	40

【 0 1 6 3 】

【化 2 3 - 1 0】

		
106	107	108
		
109	110	111
		
112	113	114
		
115	116	117
		
118	119	120

10

20

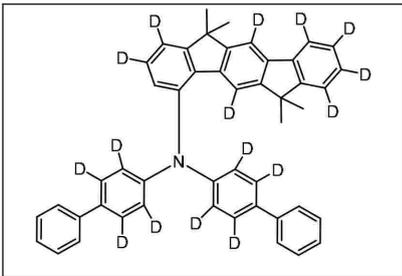
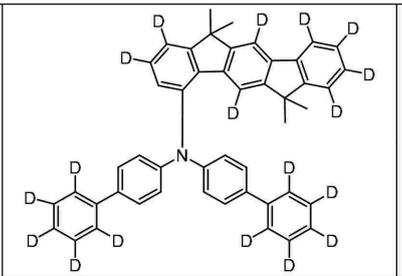
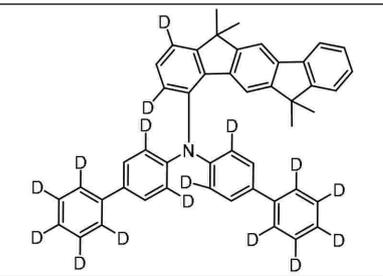
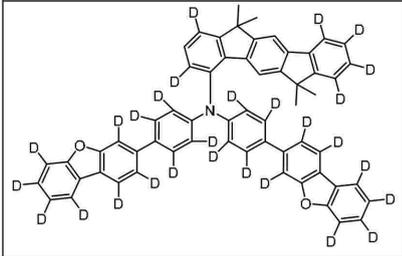
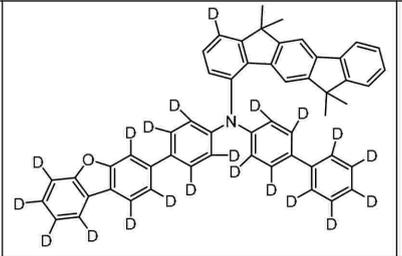
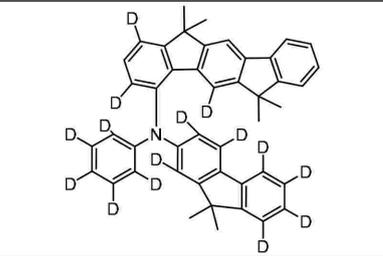
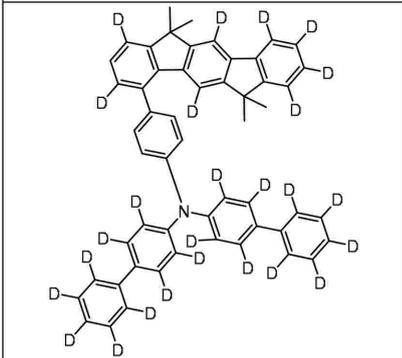
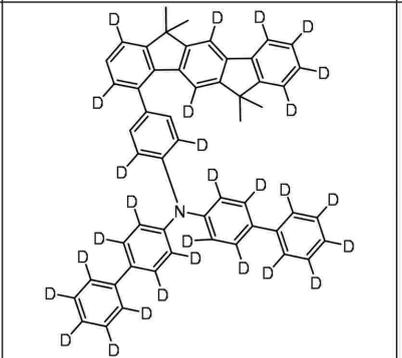
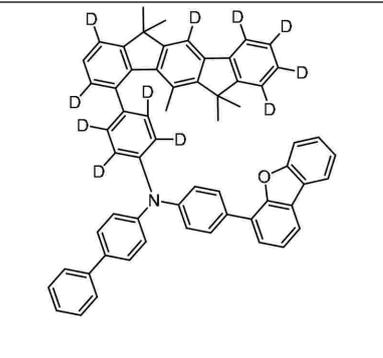
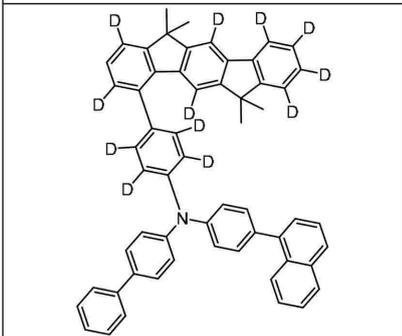
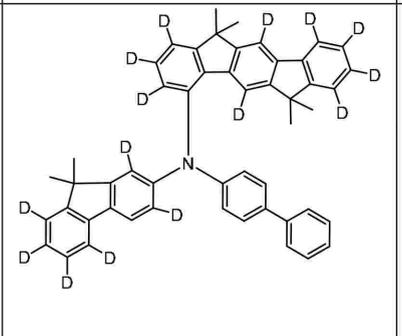
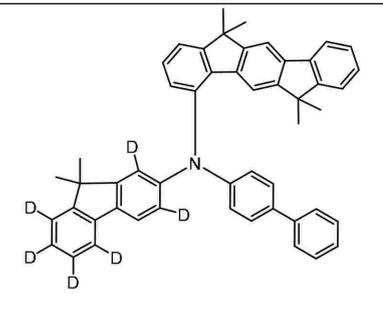
30

40

【 0 1 6 4】

50

【化 2 3 - 1 1】

		
121	122	123
		
124	125	126
		
127	128	129
		
130	131	132

10

20

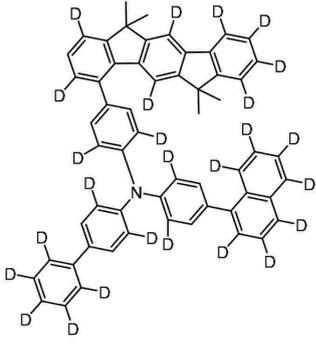
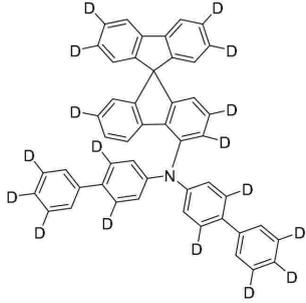
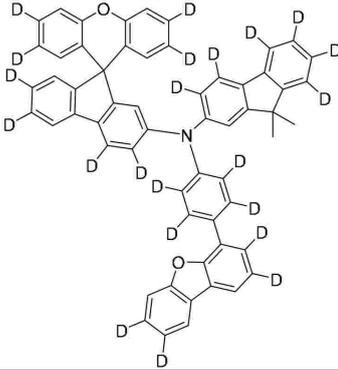
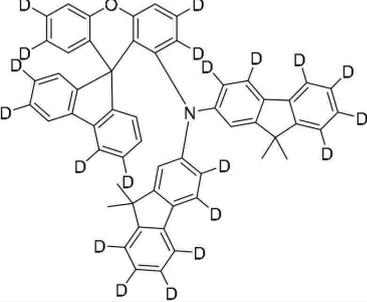
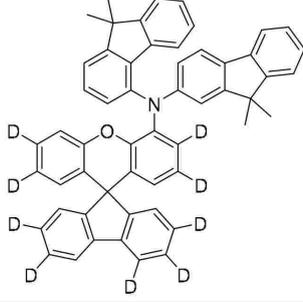
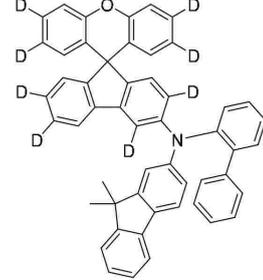
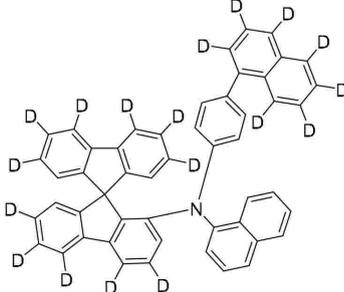
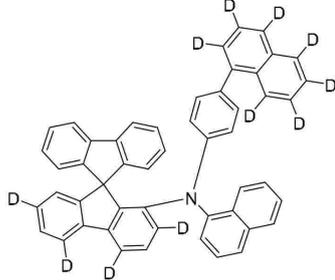
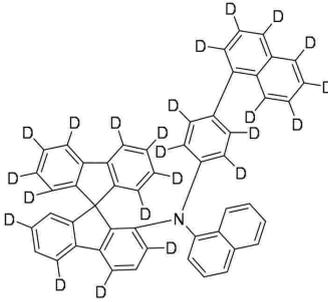
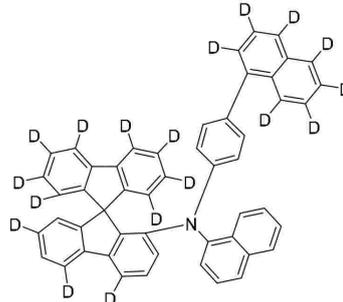
30

【 0 1 6 5 】

40

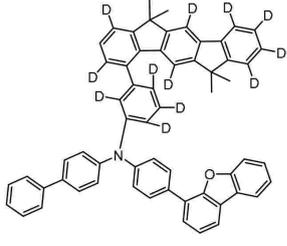
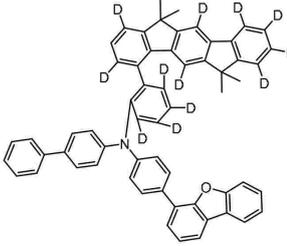
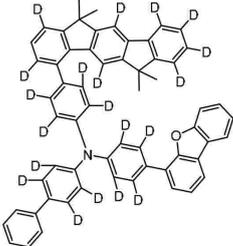
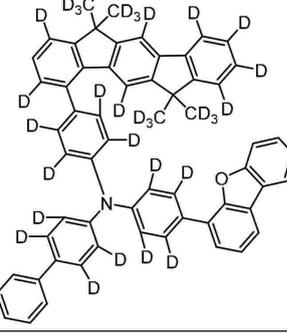
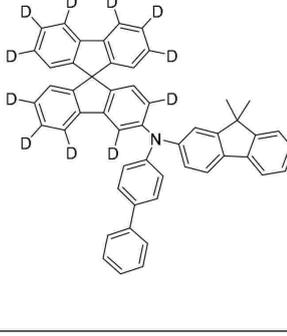
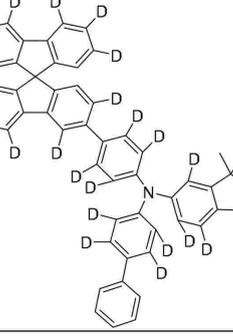
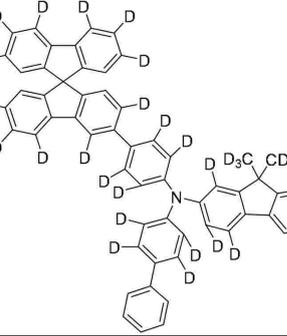
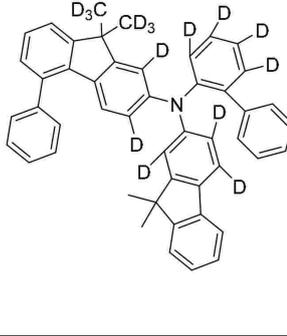
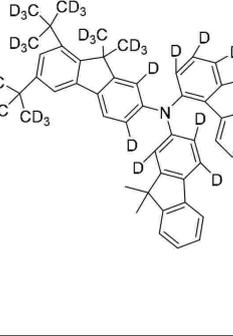
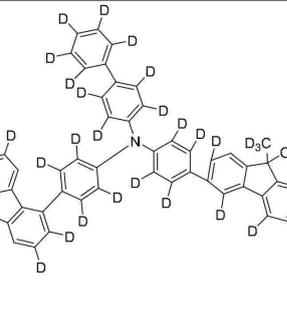
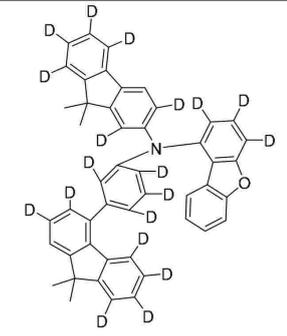
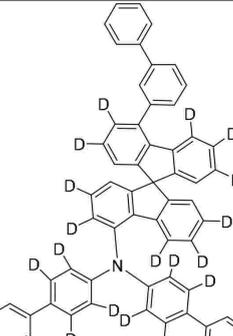
50

【化 2 3 - 1 2】

			10
<p style="text-align: center;">133</p> 	<p style="text-align: center;">134</p> 	<p style="text-align: center;">135</p> 	20
<p style="text-align: center;">136</p> 	<p style="text-align: center;">137</p> 	<p style="text-align: center;">138</p>	30
<p style="text-align: center;">139</p> 	<p style="text-align: center;">140</p> 	<p style="text-align: center;">141</p>	40
<p style="text-align: center;">141</p>	<p style="text-align: center;">142</p>	<p style="text-align: center;">142</p>	

【 0 1 6 6 】

【化 2 3 - 1 3】

			
143	144	145	
			10
146	147	148	
			20
149	150	151	
			30
152	153	154	
			40

【0167】

本願による化合物および本願による混合物は、種々の合成経路によって、特に重水素化反応を使用して製造されてもよい。本願による化合物の合成が以下で考察される場合、これは本願による混合物も意味する。

【0168】

本願による化合物の合成に対する2つの異なる基本的な手法を以下に示す。

【0169】

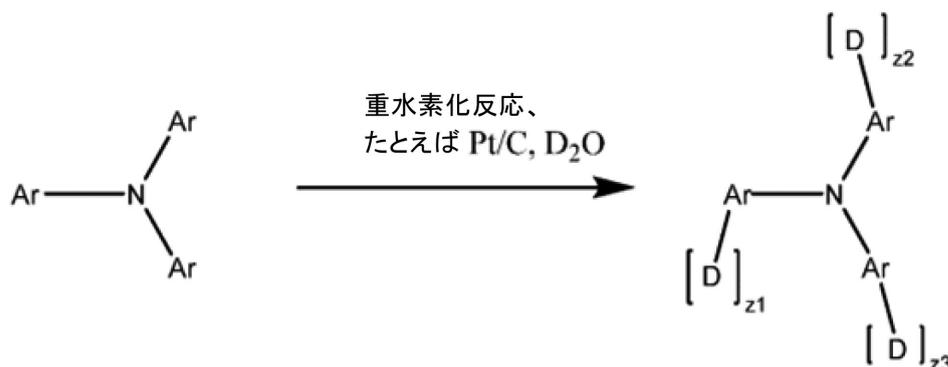
合成のための好ましい手法では、化合物、好ましくは電子デバイス、特に有機エレクトロルミネッセントデバイスにおける使用に好適な化合物を、重水素化反応で用途に応じた

化合物に変換する。出発化合物は、好ましくは重水素化されていない。この一例が、スキーム 1 に示す以下の反応である：

【 0 1 7 0 】

【 化 2 4 】

スキーム 1



10

【 0 1 7 1 】

ここで Ar は同じであるかまたは異なり、任意に置換されていてもよい芳香族およびヘテロ芳香族環系から選択され、z 1、z 2、z 3 はそれぞれ同一または異なる自然数であり、反応物および生成物中の水素原子は示されていない。

20

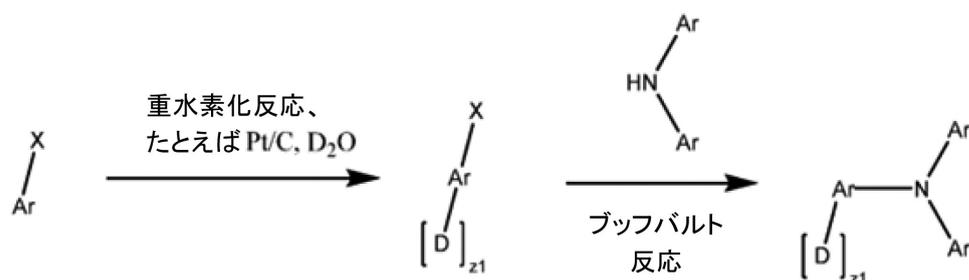
【 0 1 7 2 】

代替的な同様に好ましい合成手法では、反応性化合物、好ましくは中間体、より好ましくはブッフバルト反応の中間体を重水素化反応で重水素化し、好ましくは部分的に重水素化し、さらに変換する。このさらなる変換によってのみ、本願による化合物が得られる。この合成手法の一例を以下のスキーム 2 に示す：

【 0 1 7 3 】

【 化 2 5 】

スキーム 2



30

【 0 1 7 4 】

ここで Ar は同じであるかまたは異なり、任意に置換されていてもよい芳香族およびヘテロ芳香族環系から選択され、z 1 は自然数であり、反応物および生成物中の水素原子は示されず、X は反応性基、好ましくは Cl、Br または I である。

40

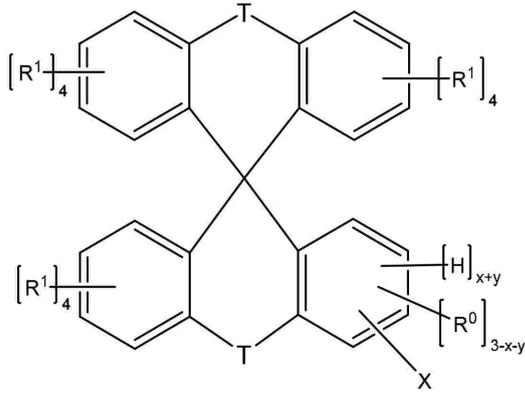
【 0 1 7 5 】

上記に示される合成方法における反応物 Ar - X の好ましい態様は、式 (G - 1) および (G - 2) および (G - 3) の基から誘導される以下の中間体：

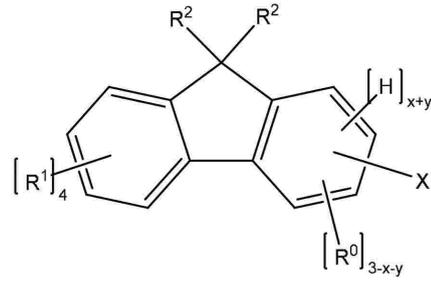
【 0 1 7 6 】

50

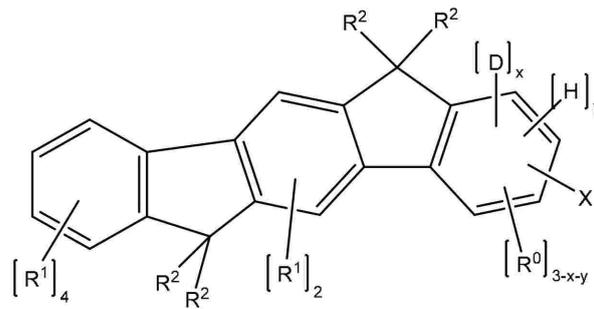
【化 2 6】



式 (Int-1)



式 (Int-2)



式 (Int-3)

10

20

【 0 1 7 7 】

(式中、出現する基は上記で定義した通りであり、好ましくはそれらの好ましい態様に対応する)

である。

【 0 1 7 8 】

これらの反応物の特に好ましい態様は、以下の式：

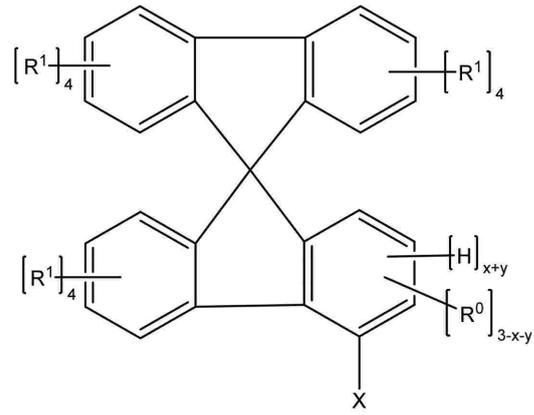
30

【 0 1 7 9 】

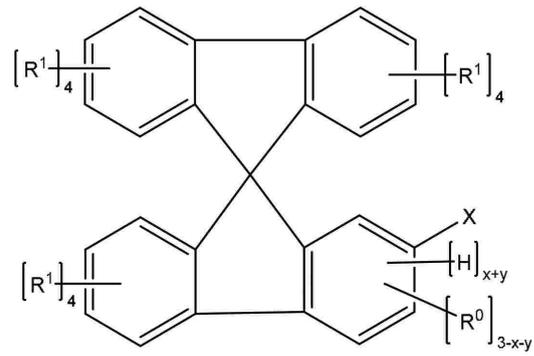
40

50

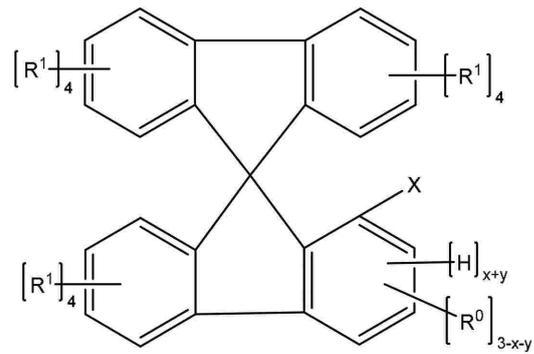
【化 2 7 - 1】



式 (Int-1-1)



式 (Int-1-2)



式 (Int-1-3)

【 0 1 8 0】

10

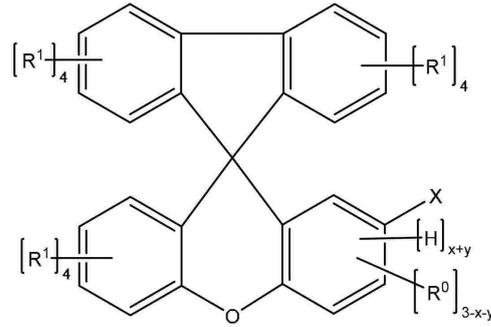
20

30

40

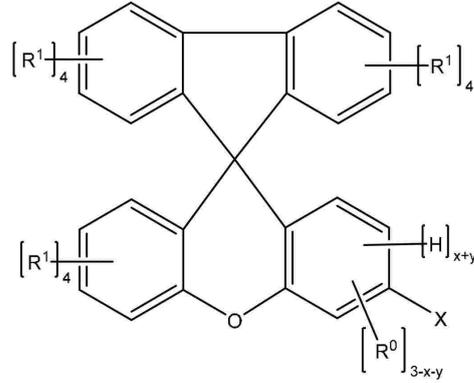
50

【化 2 7 - 2】



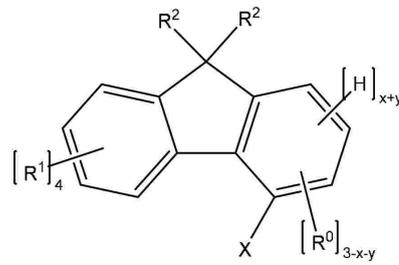
式 (Int-1-4)

10



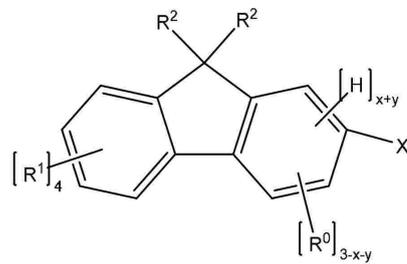
式 (Int-1-5)

20



式 (Int-2-1)

30



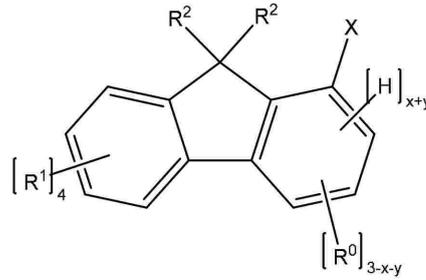
式 (Int-2-2)

40

【 0 1 8 1】

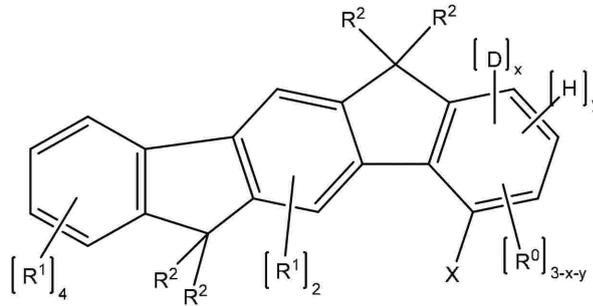
50

【化 2 7 - 3】



式 (Int-2-3)

10



式 (Int-3-1)

20

【 0 1 8 2 】

(式中、出現する基は上記で定義した通りであり、好ましくはそれらの好ましい態様に
 対応する)

に合致する。

【 0 1 8 3 】

2つの手法の文脈では、異なる重水素化反応が使用されてもよい。好ましい重水素化反
 応は、遷移金属触媒および重水素源、たとえば重水素化溶媒、および高い反応温度を使用
 する。ここでの「重水素源」という用語は、1つ以上の重水素原子を含有し、好適な条件
 下で重水素原子を放出できる化合物を包含する。ここでの反応温度は、好ましくは100

30

乃至200、より好ましくは140乃至180である。遷移金属触媒は、好まし
 くは活性炭上Pt、好ましくは木炭上5%乾燥白金、および木炭上パラジウム、好まし
 くは木炭上5%乾燥パラジウムから選択される。重水素化溶媒および重水素源は、好まし
 くは同じであるかまたは異なり、D₂O、ベンゼン-d₆、クロロホルム-d、アセトニ
 トリル-d₃、アセトン-d₆、酢酸-d₄、メタノール-d₄、トルエン-d₈およびこ
 れらの溶媒の混合物から選択される。好ましい重水素源は、D₂O、またはD₂Oと完全
 重水素化有機溶媒の組み合わせである。特に好ましい重水素源は、D₂Oと完全重水素化
 有機溶媒との組み合わせであり、ここでの完全重水素化溶媒は限定されない。ここで特
 に好適な完全重水素化溶媒は、ベンゼン-d₆およびトルエン-d₈である。特に好ましい
 重水素源または重水素化溶媒は、D₂Oとトルエン-d₈の混合物である。さらに、反応

40

【 0 1 8 4 】

したがって、本願は、重水素原子の数が本願による化合物よりも整数dだけ小さく、水
 素原子の数が本願による化合物よりも整数dだけ大きい化合物のH/Dアイソトポログを
 、遷移金属触媒を用いて、かつ重水素化溶媒を使用して、本願による1つ以上の異なる化
 合物に変換することを特徴とする、本願による化合物または混合物を製造するための方法
 を提供する。本願による化合物のH/Dアイソトポログは、好ましくは重水素化されてい
 ない化合物である。整数dは、少なくとも1、好ましくは少なくとも5、より好ましくは
 少なくとも10である。

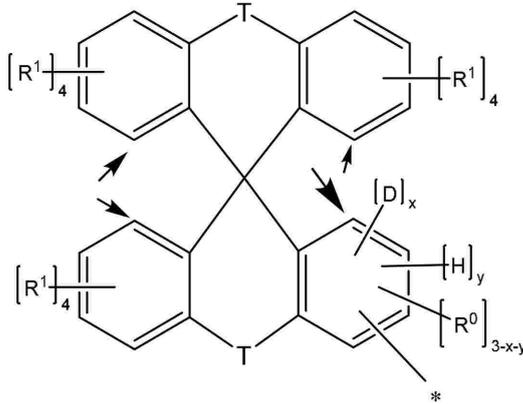
【 0 1 8 5 】

50

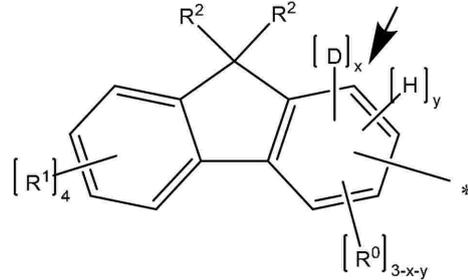
特徴的に遷移金属触媒を使用するこの重水素化反応では、立体アクセス性の悪い水素原子は優先的にはDと交換されない。これらは特に、式(G-1)および(G-2)および(G-3)において以下の通り矢印で示されるフルオレニル基およびスピロビフルオレニル基の1位の水素原子を含む：

【0186】

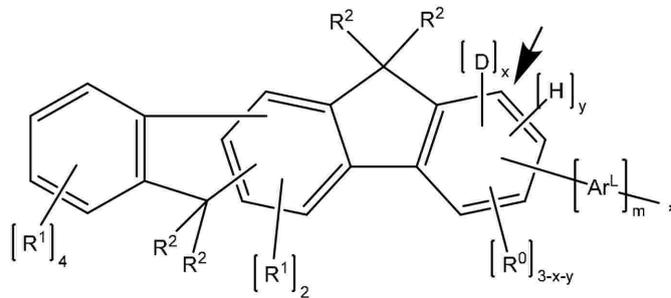
【化28】



式(G-1)



式(G-2)



式(G-3)

【0187】

この反応によって式(I-A)~(I-J)の化合物が変換される場合、好ましく得られるものは、式(I-A-a)、(I-A-a-1)、(I-B-a)、(I-C-a)、(I-D-a)、(I-E-a)、(I-F-a)、(I-G-a)、(I-H-a)および(I-J-a)の化合物である。

【0188】

代替的な好ましい重水素化反応は、酸性条件、任意に好ましくは芳香族および/またはプロトン性であり、より好ましくはベンゼン-d₆、クロロホルム-d、アセトニトリル-d₃、アセトン-d₆、酢酸-d₄、メタノール-d₄およびトルエン-d₈から選択されるさらなる重水素化溶媒と組み合わせられたD₂O、および低い反応温度を使用する。反応温度は、好ましくは-10~30である。第1の工程では、10乃至30、好ましくは15乃至25の温度で作業することが好ましく、D₂Oを添加する第2の工程は、より低い温度、好ましくは-10乃至10、より好ましくは-5乃至5で行われる。重水素化溶媒は、好ましくは芳香族および/またはプロトン性溶媒、より好ましくはD₂O、ベンゼン-d₆、クロロホルム-d、アセトニトリル-d₃、アセトン-d₆、酢酸-d₄、メタノール-d₄およびトルエン-d₈、ならびにこれらの溶媒の混合物から選択される。酸性条件は、好ましくは、好ましくはトリフルオロメタンスルホン酸、p-トルエンスルホン酸、ベンゼンスルホン酸、フルオロアンチモン酸、メタンスルホ

10

20

30

40

50

ン酸、ペンタシアノシクロペンタジエン、スルホン酸系イオン交換体、トリシアノメタンおよびトリフルオロ酢酸から選択される強有機酸、最も好ましくはトリフルオロメタンスルホン酸の添加によって確立される。

【0189】

したがって、本願は、重水素原子の数が本願による化合物よりも整数 d だけ小さく、水素原子の数が本願による化合物よりも整数 d だけ大きい化合物の H / D アイソトポログを、酸の作用下で、かつ重水素化溶媒を使用して、本願による 1 つ以上の異なる化合物に変換することを特徴とする、本願による化合物または混合物を製造するための方法を提供する。本願による化合物の H / D アイソトポログは、好ましくは重水素化されていない化合物である。整数 d は、少なくとも 1、好ましくは少なくとも 5、より好ましくは少なくとも 10 である。

10

【0190】

特徴的に酸性条件下で行われるこの重水素化反応では、+M 効果を有する置換基、たとえば式 (I) における芳香族 6 員環上のアミノ基、または塩素、臭素またはヨウ素原子に対してメタ位にある位置における水素原子は、優先的には D に変換されない。当業者は、上記のアミノ基および塩素、ヨウ素および臭素原子以外に、求電子的芳香族置換反応において上記の +M 効果またはオルト / パラ指向効果を発揮する置換基を把握しているため、こうした場合には、酸性条件下での重水素化反応による H / D 交換の選択性を予測することができる。

【0191】

式 (I - A) ~ (I - J) の化合物がこの反応で変換される場合、好ましく得られるものは、式 (I - A - b)、(I - A - b - 1)、(I - B - b)、(I - C - b)、(I - D - b)、(I - E - b)、(I - F - b)、(I - G - b)、(I - H - b) および (I - J - b) の化合物である。

20

【0192】

本願による化合物および混合物を液相から、たとえばスピンコーティングまたは印刷法によって処理するためには、本願による化合物または混合物の調合物が必要である。これらの調合物は、たとえば溶液、分散体またはエマルジョンであってもよい。この目的のため、2 種以上の溶媒の混合物を使用することが好ましいことがある。好適な好ましい溶媒は、たとえば、トルエン、アニソール、*o*-、*m*-もしくは *p*-キシレン、安息香酸メチル、メシチレン、テトラリン、ペラトロール、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、とりわけ 3-フェノキシトルエン、(-)-フェンコン、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、アルファ-テルピネオール、ベンゾチアゾール、安息香酸ブチル、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、安息香酸エチル、インダン、安息香酸メチル、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、またはこれらの溶媒の混合物である。

30

40

【0193】

したがって、本発明は、本願による少なくとも 1 つの化合物または混合物と、少なくとも 1 種の溶媒、好ましくは有機溶媒とを含む調合物、とりわけ溶液、分散体またはエマルジョンをさらに提供する。そのような溶液を調製することができる方法は、当業者に公知

50

である。

【0194】

本願による化合物および混合物は、電子デバイス、特に有機エレクトロルミネッセントデバイス（OLED）における使用に好適である。置換に応じて、これらは異なる機能および層で使用することができる。正孔輸送性層、特に電子阻止層における正孔輸送性材料として、および/または発光層において、より好ましくはリン光発光体との組み合わせでマトリックス材料として使用することが好ましい。

【0195】

したがって、本発明は、電子デバイスにおける本願による化合物または混合物の使用をさらに提供する。この電子デバイスは、好ましくは有機集積回路（OIC）、有機電界効果トランジスタ（OFET）、有機薄膜トランジスタ（OTFT）、有機発光トランジスタ（OLET）、有機ソーラーセル（OSC）、有機光学検出器、有機光受容器、有機電場消光デバイス（OFQD）、有機発光電気化学セル（OLEC）、有機レーザーダイオード（O-レーザー）からなる群から選択され、より好ましくは有機エレクトロルミネッセントデバイス（OLED）である。

【0196】

本発明は、本願による少なくとも1つの化合物または混合物を含む電子デバイスをさらに提供する。この電子デバイスは、好ましくは上記のデバイスから選択される。

【0197】

アノード、カソード、および少なくとも1つの発光層を含み、本願による少なくとも1つの化合物または混合物を含む少なくとも1つの有機層がデバイスに存在することを特徴とする、有機エレクトロルミネッセントデバイスが特に好ましい。アノード、カソード、および少なくとも1つの発光層を含み、正孔輸送性層および発光層から選択されるデバイスの中の少なくとも1つの有機層が本願による少なくとも1つの化合物または混合物を含むことを特徴とする、有機エレクトロルミネッセントデバイスが好ましい。

【0198】

正孔輸送性層は、ここでは、アノードと発光層の間に配設される全ての層を意味するものと理解され、好ましくは正孔注入層、正孔輸送層および電子阻止層である。正孔注入層は、ここでは、アノードに直接隣接する層を意味するものと理解される。正孔輸送層は、ここでは、アノードと発光層の間にあるが、アノードには直接隣接せず、好ましくは発光層にも直接隣接しない層を意味するものと理解される。電子阻止層は、ここでは、アノードと発光層の間にあり、発光層に直接隣接する層を意味するものと理解される。電子阻止層は、好ましくは高エネルギーLUMOを有し、したがって、発光層から電子が出て行くことを防止する。

【0199】

カソード、アノードおよび発光層の他に、電子デバイスは、さらなる層を含んでもよい。これらは、たとえば、各場合において1つ以上の正孔注入層、正孔輸送層、正孔阻止層、電子輸送層、電子注入層、電子阻止層、励起子阻止層、中間層、電荷生成層、および/または有機もしくは無機p/n接合から選択される。ただし、指摘すべきことであるが、これらの層の全てが必ずしも存在する必要はなく、層の選択は常に、使用する化合物に依存し、とりわけデバイスが蛍光エレクトロルミネッセントデバイスであるかリン光エレクトロルミネッセントデバイスであるかにも依存する。

【0200】

電子デバイスにおける層の配列は、好ましくは下記の通りである：

- アノード -
- 正孔注入層 -
- 正孔輸送層 -
- 任意にさらなる正孔輸送層 -
- 電子阻止層 -
- 発光層 -

10

20

30

40

50

- 任意に正孔阻止層 -
- 電子輸送層 -
- 電子注入層 -
- カソード -。

【0201】

言及した全ての層が存在することは必須でなく、および/またはさらなる層が追加的に存在してもよい。

【0202】

電子デバイスにおける層の配列は、好ましくは下記の通りである：

- アノード -
- 正孔注入層 -
- 正孔輸送層 -
- 電子阻止層 -
- 発光層 -
- 正孔阻止層 -
- 電子輸送層 -
- 電子注入層 -
- カソード -。

10

【0203】

本願による化合物または混合物は、ここでは、好ましくは上述の層順序を有する電子デ

20

【0204】

好ましい態様において、本願による化合物または混合物を含有する電子デバイスは、連続して配列された複数の発光層を含有し、各発光層は380nm乃至750nmの異なる発光極大を有する。換言すれば、複数の発光層のそれぞれに使用される様々な発光化合物は、蛍光またはリン光を発生し、青色、緑色、黄色、橙色または赤色の光を発生する。好ましい態様において、電子デバイスは、スタックに連続して3つの発光層を含有し、それぞれの場合において、そのうちの1つが青色発光、1つが緑色発光、1つが橙色または赤色、好ましくは赤色発光を示す。好ましくは、この場合、青色発光層は蛍光層であり、緑色発光層はリン光層であり、赤色または橙色発光層はリン光層である。本願による化合物または混合物は、好ましくは正孔輸送性層または発光層中に存在する。留意すべきことであるが、白色光の生成のためには、有色発光する複数の発光体化合物ではなく、広い波長域に亘って発光する個別に使用される発光体化合物も好適な場合がある。

30

【0205】

本願による化合物または混合物は、特に電子阻止層における正孔輸送材料として使用されることが好ましい。ここでは、発光層は、蛍光発光層であってもよく、リン光発光層であってもよい。発光層は、好ましくは青色蛍光発光層または緑色リン光発光層である。

【0206】

本願による化合物または混合物を含有するデバイスがリン光発光層を含有する場合、この層が、2種以上、好ましくは厳密に2種の異なるマトリックス材料（混合マトリックス系）を含有することが好ましい。混合マトリックス系の好ましい態様は、後に詳細に記載する。

40

【0207】

本願による化合物または混合物が正孔輸送層、正孔注入層または電子阻止層における正孔輸送材料として使用される場合、本願による化合物または混合物は、単独で、すなわち100%の割合で正孔輸送層に使用されてもよいが、または1種以上のさらなる化合物と組み合わせて使用されてもよい。

【0208】

好ましい態様において、本願による化合物または混合物を含む正孔輸送性層は、1種以上のさらなる正孔輸送性化合物を追加で含む。これらのさらなる正孔輸送性化合物は、好

50

ましくはトリアリールアミン化合物から、より好ましくはモノトリアリールアミン化合物から選択される。これらは、最も好ましくは、さらに下に規定される正孔輸送材料の好ましい態様から選択される。記載する好ましい態様において、本願による化合物または混合物と、1種以上のさらなる正孔輸送性化合物は、好ましくはそれぞれ少なくとも10%の割合で、より好ましくはそれぞれ少なくとも20%の割合で存在する。

【0209】

好ましい態様において、本願による化合物または混合物を含む正孔輸送性層は、1種以上のp-ドーパントを追加で含有する。本発明に従い使用されるp-ドーパントは、好ましくは混合物中の1種以上の他の化合物を酸化することができる有機電子受容体化合物である。

10

【0210】

p-ドーパントとして特に好ましいのは、キノジメタン化合物、アザインデノフルorenジオン、アザフェナレン、アザトリフェニレン、 I_2 、金属ハロゲン化物、好ましくは遷移金属ハロゲン化物、金属酸化物、好ましくは少なくとも1種の遷移金属または第3主族からの金属を含む金属酸化物、ならびに遷移金属錯体、好ましくは少なくとも1個の酸素原子を結合部位として含有する配位子を持つCu、Co、Ni、PdおよびPtの錯体である。ドーパントとしてさらに遷移金属酸化物が好ましく、好ましくはレニウム、モリブデンおよびタングステンの酸化物、より好ましくは Re_2O_7 、 MoO_3 、 WO_3 および ReO_3 である。(III)酸化状態にあるビスマスの錯体、より詳細には電子不足配位子、より詳細にはカルボキシラート配位子を持つビスマス(III)錯体がなおさらに好ましい。

20

【0211】

p-ドーパントは、好ましくはp-ドーブ層に実質的に均一に分布する。これは、たとえば、p-ドーパントと正孔輸送材料マトリックスとの同時蒸着によって達成できる。p-ドーパントは、好ましくはp-ドーブ層に1%~10%の割合で存在する。

【0212】

特に好ましいp-ドーパントは、WO2021/104749の99頁~100頁の表に示される化合物である。

【0213】

好ましい態様において、下記の態様の1つに合致する正孔注入層が、デバイスに存在する：a)トリアリールアミンとp-ドーパントを含有する；またはb)単一の電子不足材料(電子受容体)を含有する。態様a)の好ましい態様において、トリアリールアミンは、モノトリアリールアミン、とりわけ後に言及する好ましいトリアリールアミン誘導体のうちの1種である。態様b)の好ましい態様において、電子不足材料は、US2007/0092755に記載されるようなヘキサアザトリフェニレン誘導体である。

30

【0214】

本願による化合物または混合物は、デバイスの正孔注入層、正孔輸送層および/または電子阻止層に存在してもよい。正孔注入層または正孔輸送層に存在する場合、化合物は、好ましくはp-ドーブされており、それは、上記のように、層中でp-ドーパントとの混合形態にあることを意味する。

40

【0215】

より好ましくは、本願による化合物または混合物は、電子阻止層に存在する。この場合、化合物は、好ましくはp-ドーブされていない。さらに好ましくは、この場合、好ましくはさらなる化合物を添加することなく単独で層中に存在する。

【0216】

代替的な好ましい態様において、本願による化合物または混合物は、発光層において、1種以上の発光化合物、好ましくはリン光発光化合物と組み合わせてマトリックス材料として使用される。リン光発光化合物は、好ましくは赤色リン光を発する化合物および緑色リン光を発する化合物から選択される。

【0217】

50

この場合、発光層におけるマトリックス材料の割合は、体積で50.0%乃至99.9%、好ましくは体積で80.0%乃至99.5%、より好ましくは体積で85.0%乃至97.0%である。

【0218】

これに対応し、発光化合物の割合は、体積で0.1%乃至50.0%、好ましくは体積で0.5%乃至20.0%、より好ましくは体積で3.0%乃至15.0%である。

【0219】

有機エレクトロルミネッセントデバイスの発光層はまた、複数のマトリックス材料を含む系（混合マトリックス系）および/または複数の発光化合物を含有してもよい。この場合も、発光化合物は一般に、系中での割合が低い方の化合物であり、マトリックス材料は、系中での割合が高い方の化合物である。ただし、個々の場合において、系中の単一のマトリックス材料の割合が単一の発光化合物の割合より低くてもよい。

【0220】

本願による化合物または混合物が、好ましくはリン光発光体用の混合マトリックス系の成分として使用されることが好ましい。混合マトリックス系は、好ましくは2種または3種の異なるマトリックス材料、より好ましくは2種の異なるマトリックス材料を含む。好ましくは、この場合、2種の材料のうち的一方は正孔輸送性特質を有する材料であり、他方の材料は、電子輸送性特質を有する材料である。材料のうち的一方が、HOMOとLUMOの間のエネルギー差が大きな化合物（ワイドバンドギャップ材料）から選択されることがさらに好ましい。混合マトリックス系における本願による化合物または混合物は、好ましくは、正孔輸送性特質を有するマトリックス材料である。これに対応し、本願による化合物または混合物がOLEDの発光層においてリン光発光体用のマトリックス材料として使用される場合、電子輸送性特質を有する第2のマトリックス化合物が、発光層に存在する。この2種の異なるマトリックス材料は、1:50~1:1、好ましくは1:20~1:1、より好ましくは1:10~1:1、最も好ましくは1:4~1:1の比で存在してもよい。

【0221】

ただし、混合マトリックス成分の所望の電子輸送性および正孔輸送性特質はまた、単一の混合マトリックス成分が主に、または完全に併せ持っていてよく、その場合、さらなる混合マトリックス成分は、他の機能を果たす。

【0222】

デバイスの上記の層に、下記の材料のクラスを使用することが好ましい：

リン光発光体：

「リン光発光体」という用語は、スピン禁制遷移、たとえば励起三重項状態またはより高いスピン量子数を有する状態、たとえば五重項状態からの遷移により光の放出が生じる化合物を典型的には包含する。

【0223】

好適なリン光発光体はとりわけ、適切に励起されると、好ましくは可視領域の光を発し、原子番号が20より大きい、好ましくは38より大きく84より小さい、より好ましくは56より大きく80より小さい少なくとも1種の原子も含有する化合物である。リン光発光体として、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有する化合物、とりわけイリジウム、白金または銅を含有する化合物を使用することが好ましい。

【0224】

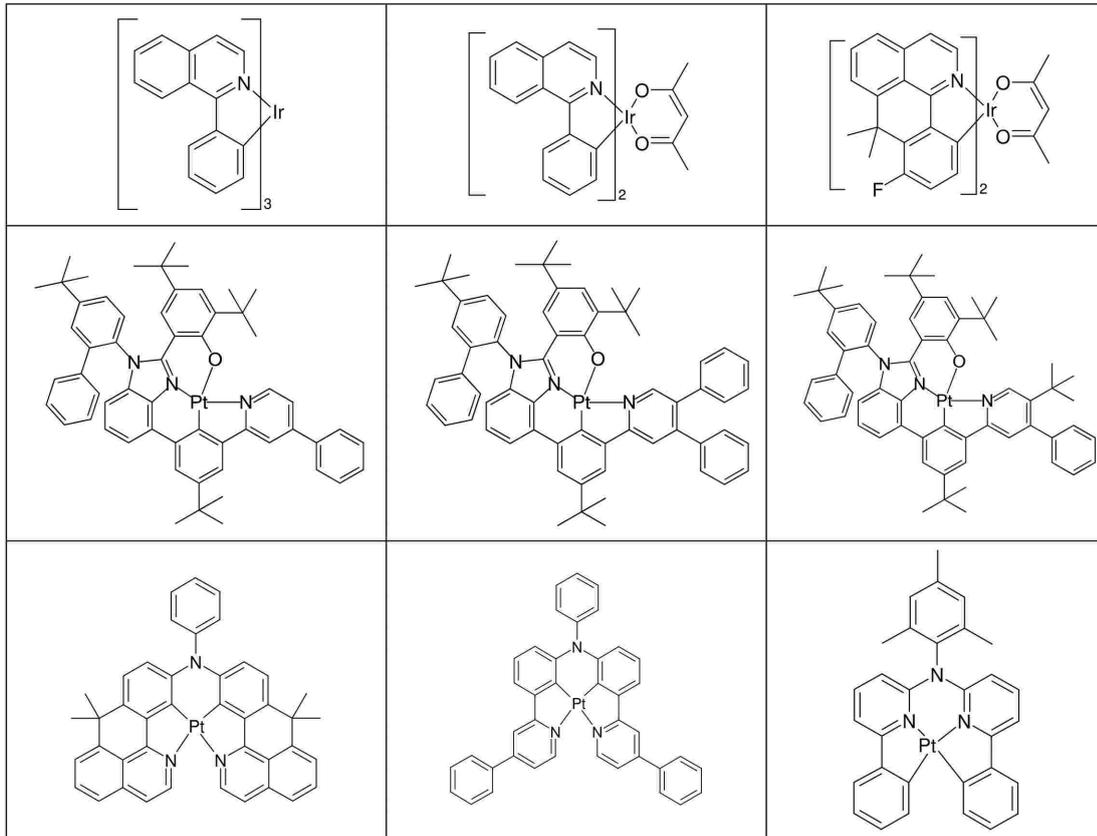
本発明の文脈において、発光性のイリジウム、白金または銅錯体は全て、リン光化合物であるとみなされる。

【0225】

一般に、先行技術に従いリン光OLEDに使用され、有機エレクトロルミネッセントデバイスの分野の当業者に公知であるようなリン光錯体は全て、本願によるデバイスへの使用に好適である。以下の表に図示される化合物が特に好適である：

【 0 2 2 6 】

【 化 2 9 - 1 】



10

20

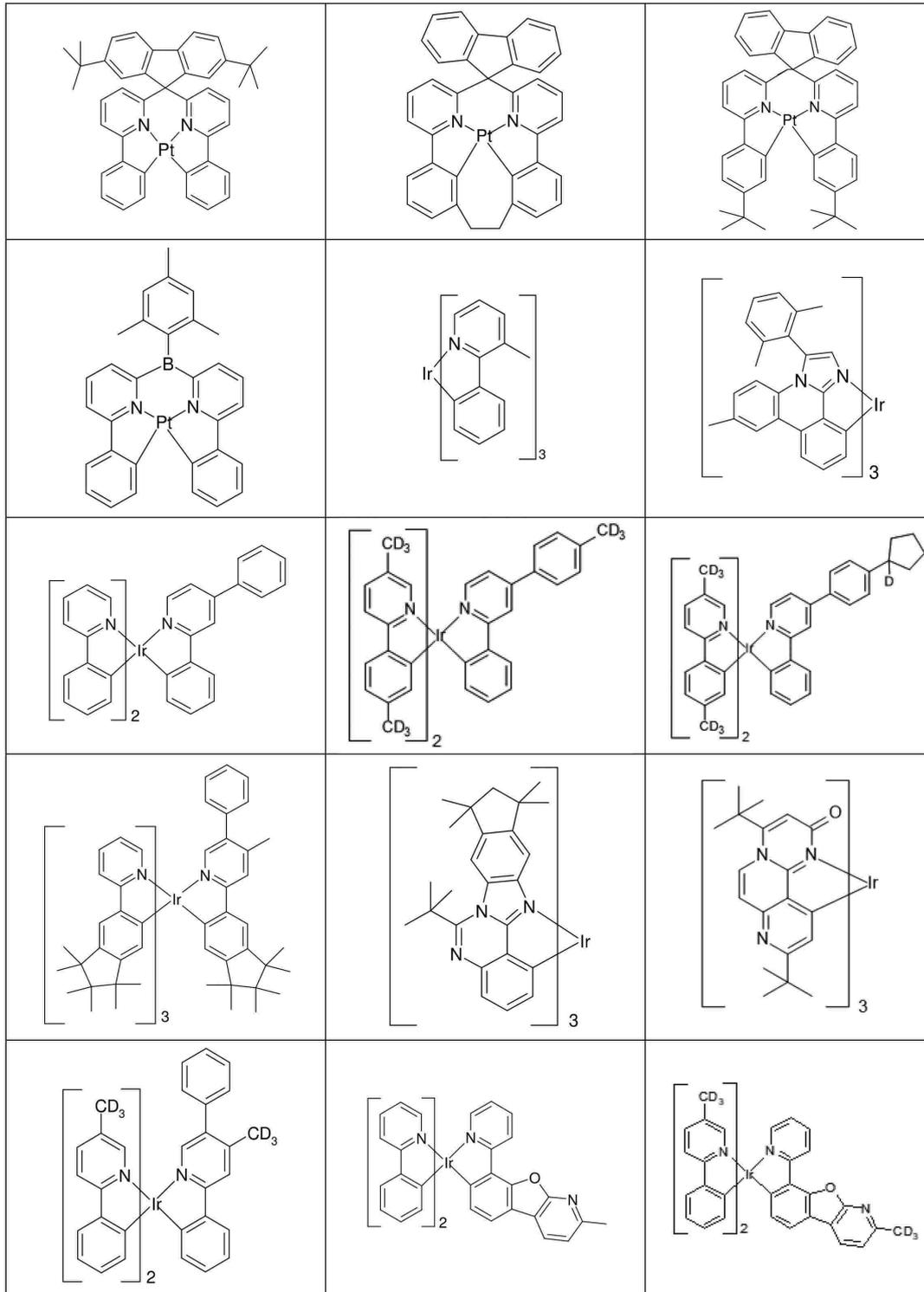
【 0 2 2 7 】

30

40

50

【化 2 9 - 2】



10

20

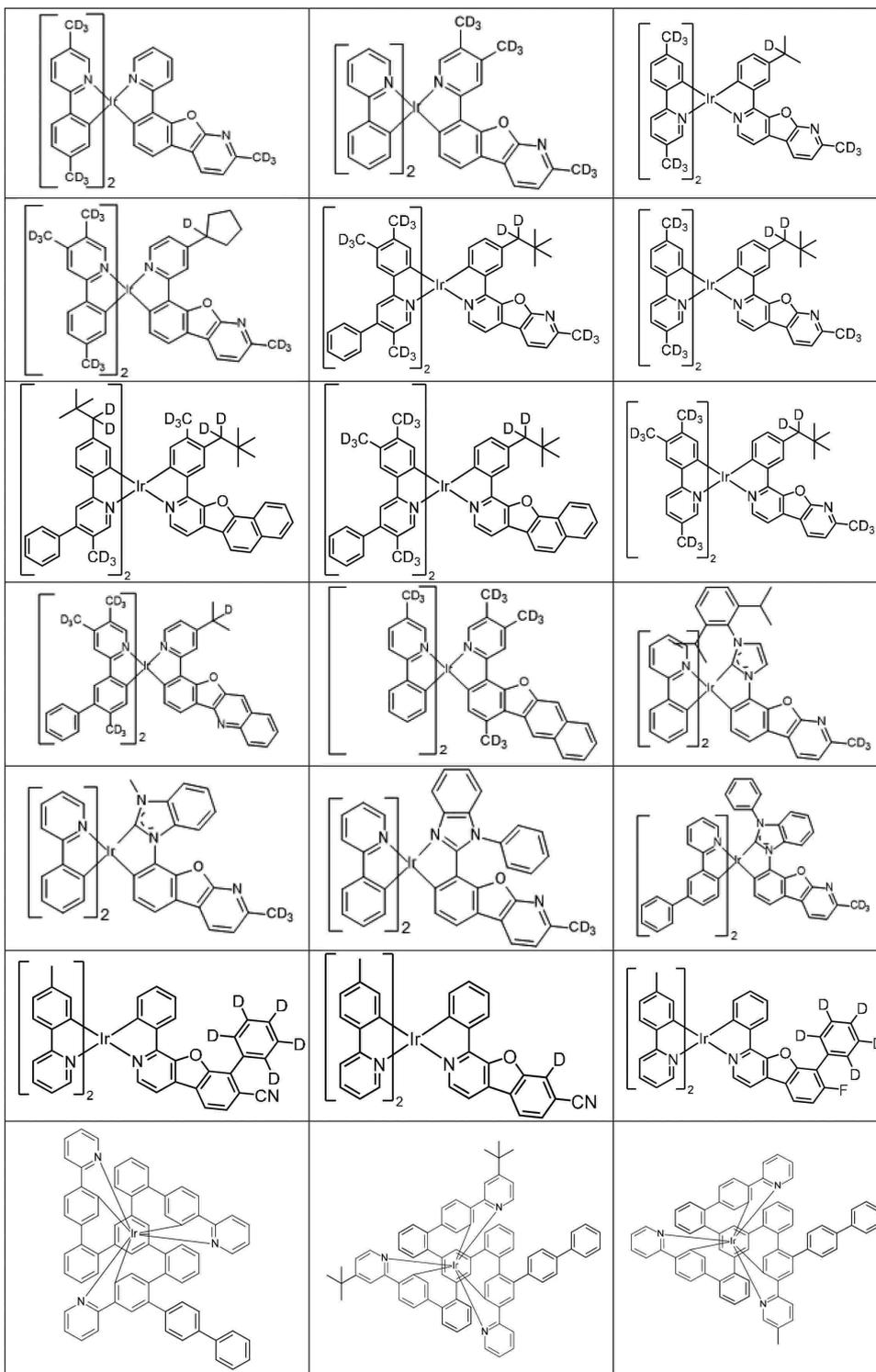
30

40

【 0 2 2 8 】

50

【化 2 9 - 3】



10

20

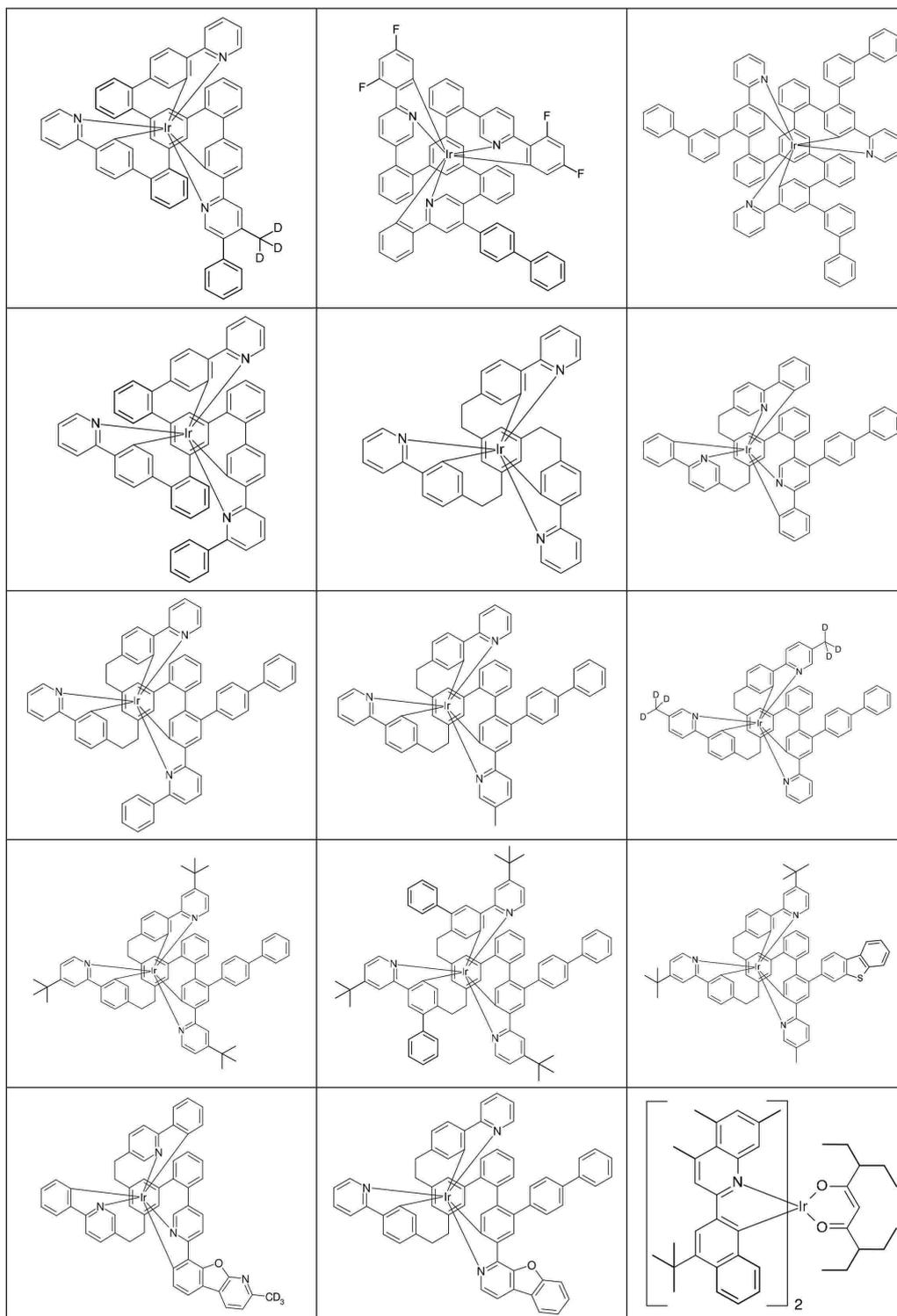
30

40

【 0 2 2 9 】

50

【化 2 9 - 4】



10

20

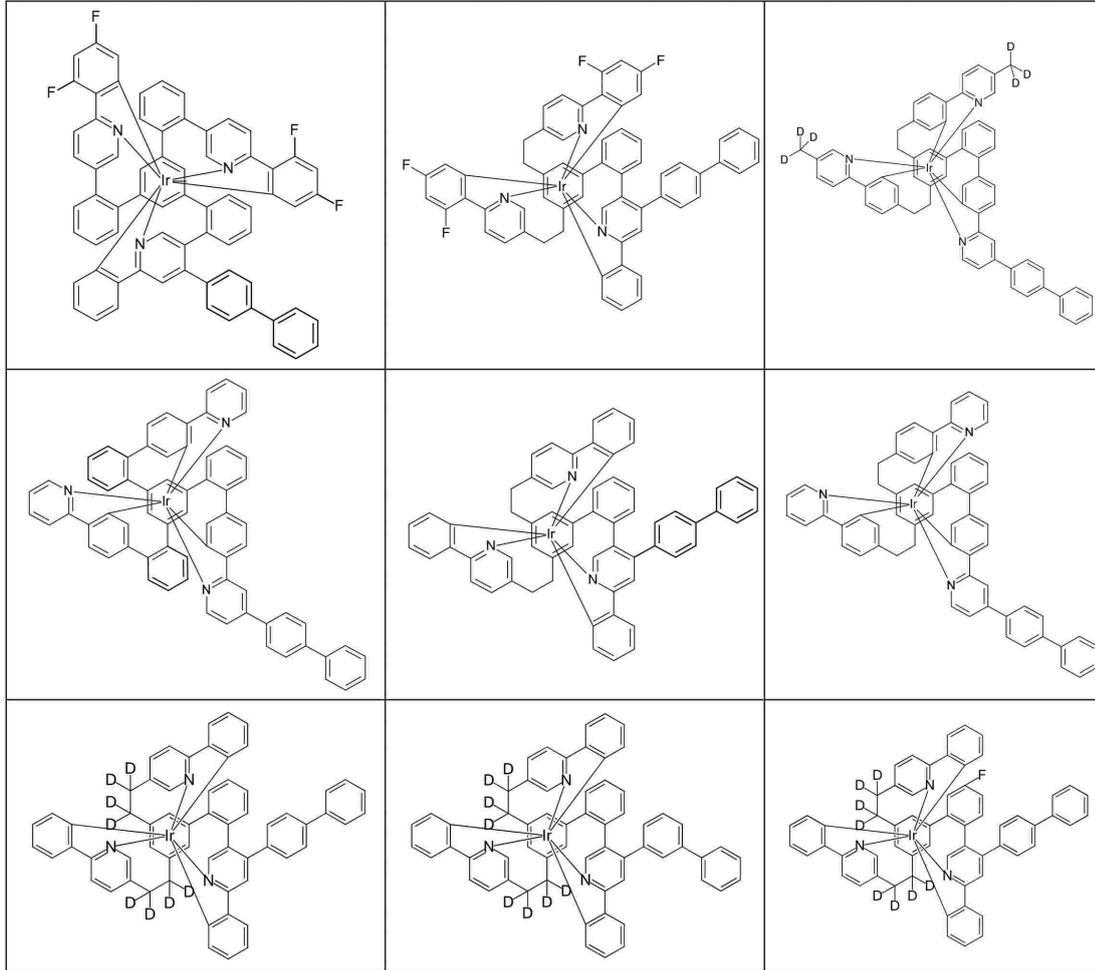
30

40

【 0 2 3 0 】

50

【化 2 9 - 5】



10

20

【 0 2 3 1】

蛍光発光体：

好ましい蛍光発光化合物は、アリールアミンのクラスから選択される。本発明の文脈におけるアリールアミンまたは芳香族アミンは、窒素に直接結合した3つの置換または無置換の芳香族またはヘテロ芳香族環系を含有する化合物を意味するものと理解される。好ましくは、これらの芳香族またはヘテロ芳香族環系のうちの少なくとも1つは縮合環系であり、より好ましくは、少なくとも14個の芳香族環原子を有する。これらの好ましい例は、芳香族アントラセンアミン、芳香族アントラセンジアミン、芳香族ピレンアミン、芳香族ピレンジアミン、芳香族クリセンアミンまたは芳香族クリセンジアミンである。芳香族アントラセンアミンは、ジアリールアミノ基がアントラセン基に、好ましくは9位において直接結合している化合物を意味するものと理解される。芳香族アントラセンジアミンは、2つのジアリールアミノ基がアントラセン基に、好ましくは9、10位において直接結合している化合物を意味するものと理解される。芳香族ピレンアミン、ピレンジアミン、クリセンアミンおよびクリセンジアミンも同様に定義され、ジアリールアミノ基はピレンに、好ましくは1位または1、6位において結合している。さらなる好ましい発光化合物は、インデノフルオレンアミンまたはジアミン、ベンゾインデノフルオレンアミンまたはジアミン、およびジベンゾインデノフルオレンアミンまたはジアミン、ならびに縮合アリール基を有するインデノフルオレン誘導体である。同様に好ましいのは、ピレンアリールアミンである。同様に好ましいのは、ベンゾインデノフルオレンアミン、ベンゾフルオレンアミン、拡張ベンゾインデノフルオレン、フェノキサジン、およびフラン単位またはチオフェン単位に結合しているフルオレン誘導体である。

30

40

【 0 2 3 2】

50

蛍光発光体用のマトリックス材料：

蛍光発光体用の好ましいマトリックス材料は、オリゴアリーレン（たとえば 2, 2', 7, 7' - テトラフェニルスピロピフルオレン）、とりわけ縮合芳香族基を含有するオリゴアリーレン、オリゴアリーレンビニレン、多脚金属錯体、正孔伝導化合物、電子伝導化合物、とりわけケトン、ホスフィンオキシドおよびスルホキシド；アトロプ異性体、ボロン酸誘導体またはベンゾアントラセンのクラスから選択される。特に好ましいマトリックス材料は、ナフタレン、アントラセン、ベンゾアントラセンおよび/もしくはピレンを含むオリゴアリーレンまたはこれらの化合物のアトロプ異性体、オリゴアリーレンビニレン、ケトン、ホスフィンオキシド、ならびにスルホキシドのクラスから選択される。非常に特に好ましいマトリックス材料は、アントラセン、ベンゾアントラセン、ベンゾフェナントレンおよび/もしくはピレンを含むオリゴアリーレンまたはこれらの化合物のアトロプ異性体のクラスから選択される。本発明の文脈におけるオリゴアリーレンは、少なくとも 3 つのアリールまたはアリーレン基が互いに結合している化合物を意味すると当然に理解される。

10

【0233】

リン光発光体用のマトリックス材料：

リン光発光体の好ましいマトリックス材料、および本願による化合物または混合物は、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、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) またはカルバゾール誘導体、インドロカルバゾール誘導体、インデノカルバゾール誘導体、アザカルバゾール誘導体、双極性マトリックス材料、シラン、アザボロールまたはボロン酸エステル、トリアジン誘導体、亜鉛錯体、ジアザシロールまたはテトラアザシロール誘導体、ジアザホスホール誘導体、架橋カルバゾール誘導体、トリフェニレン誘導体、またはラクタムである。

20

【0234】

電子輸送性材料：

好適な電子輸送性材料は、たとえば Y. Shirota ら、Chem. Rev. 2007、107 (4)、953 - 1010 に開示の化合物、または先行技術に従いこれらの層に使用される他の材料である。

【0235】

電子輸送層に使用される材料は、先行技術に従い電子輸送層に電子輸送材料として使用される任意の材料であってもよい。とりわけ好適なのは、アルミニウム錯体、たとえば Alq₃、ジルコニウム錯体、たとえば Zr q₄、リチウム錯体、たとえば Liq、ベンゾイミダゾール誘導体、トリアジン誘導体、ピリミジン誘導体、ピリジン誘導体、ピラジン誘導体、キノキサリン誘導体、キノリン誘導体、オキサジアゾール誘導体、芳香族ケトン、ラクタム、ボラン、ジアザホスホール誘導体およびホスフィンオキシド誘導体である。

30

【0236】

好ましい電子輸送および電子注入材料は、WO 2020 / 127176 の 122 頁 ~ 123 頁の表に示される化合物である。

【0237】

好ましい態様において、本願による少なくとも 1 つの化合物または混合物を含有する電子デバイスの電子輸送層および正孔阻止層は、トリアジン基を含有する化合物を含有する。

40

【0238】

本発明のさらに好ましい態様において、電子デバイスの電子輸送層、好ましくは電子輸送層および電子注入層は、キノリン酸リチウムおよび少なくとも 1 種のさらなる化合物を含有する混合物を含有する。

【0239】

正孔輸送性材料：

本願による化合物または混合物に加えて、本願による OLED の正孔輸送性層に優先的

50

に使用されるさらなる化合物は、インデノフルオレンアミン誘導体、アミン誘導体、ヘキサザトリフェニレン誘導体、縮合芳香族系を有するアミン誘導体、モノベンゾインデノフルオレンアミン、ジベンゾインデノフルオレンアミン、スピロビフルオレンアミン、フルオレンアミン、スピロジベンゾピランアミン、ジヒドロアクリジン誘導体、スピロジベンゾフランおよびスピロジベンゾチオフエン、フェナントレジアリールアミン、スピロトリベンゾトロポロン、メタフェニルジアミン基を有するスピロビフルオレン、スピロビスアクリジン、キサンテンジアリールアミン、ならびにジアリールアミノ基を有する9,10-ジヒドロアントラセンスピロ化合物である。好ましい正孔輸送性化合物は、特に、WO2021/104749の116頁下から120頁下までの表に開示されている化合物である。

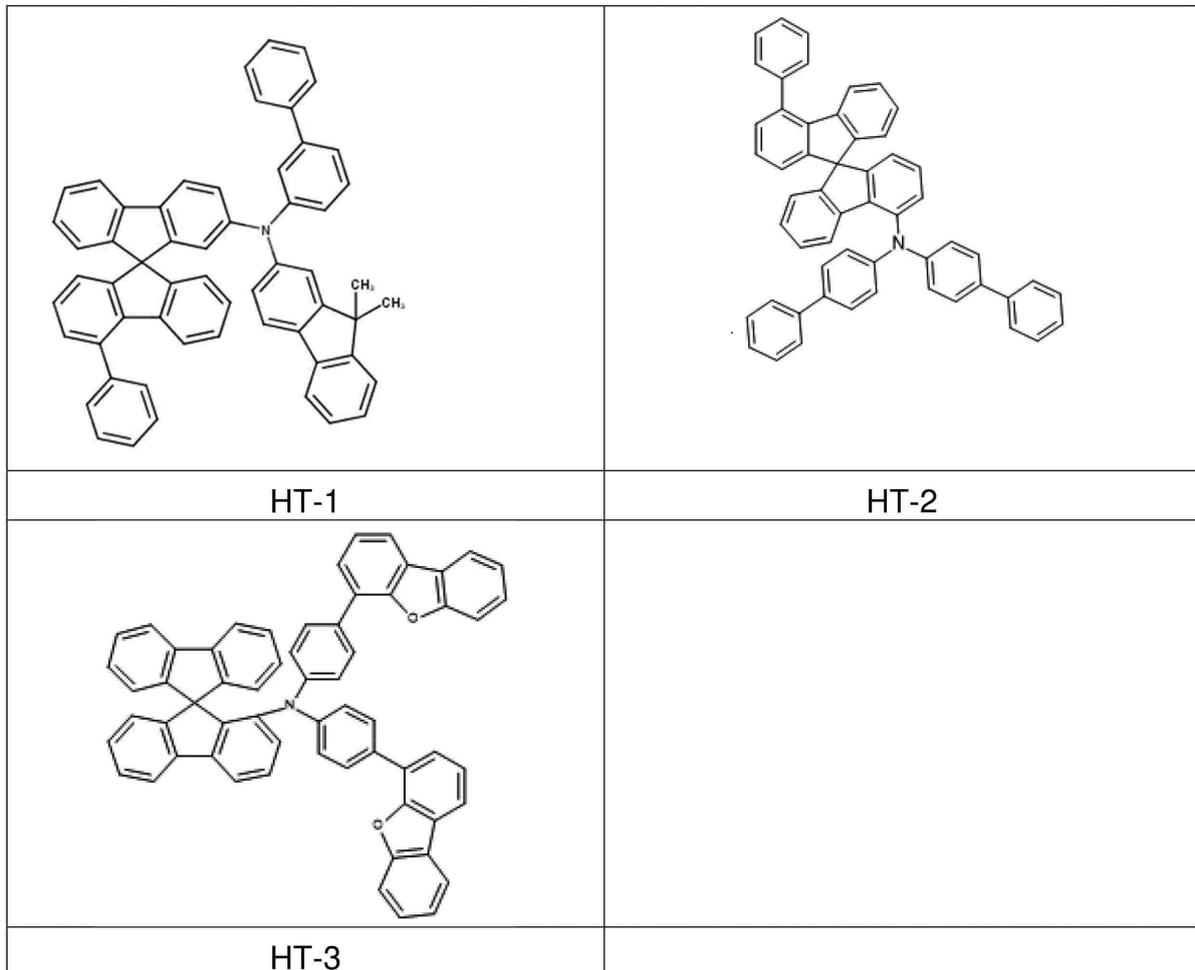
10

【0240】

本願の定義によるOLEDだけでなく、任意のOLED中の正孔輸送性機能を有する層に使用するための特に好適な化合物としては、以下の化合物HT-1~HT-3が挙げられる：

【0241】

【化30】



20

30

40

【0242】

化合物HT-1~HT-3は、一般に正孔輸送性層における使用に好適である。それらの使用は、特定のOLED、たとえば、たとえば本願に記載されるOLEDに限定されない。

【0243】

化合物HT-1~HT-3は、WO2012/034627A1、および未だ公開されていない出願EP20205399.7に開示される方法によって調製されてもよい。こ

50

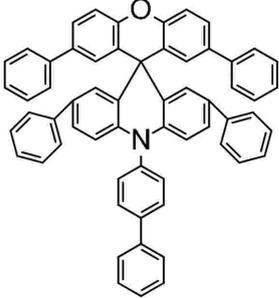
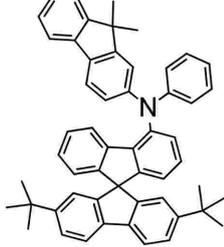
これらの特許出願に開示された化合物の使用および調製に関するさらなる教示は、参照により明示的にここに組み込まれ、好ましくは上記化合物の正孔輸送性材料としての使用に関する上記の教示と組み合わせられる。化合物は、OLEDに使用された場合、卓越した特性、特に卓越した寿命および効率を示す。

【0244】

本願の定義によるOLEDだけでなく、任意のOLED中の正孔輸送性機能を有する層に使用するための特に好適な化合物としては、以下の化合物HT-4～HT-13が挙げられる：

【0245】

【化31-1】

	
WO 2013/083216	WO 2013/120577 および WO 2017/016632
(HT-4)	(HT-5)

10

20

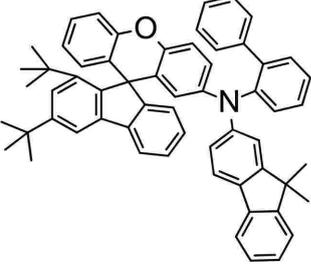
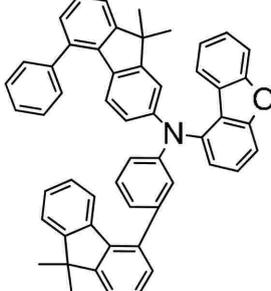
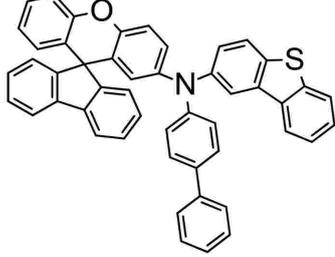
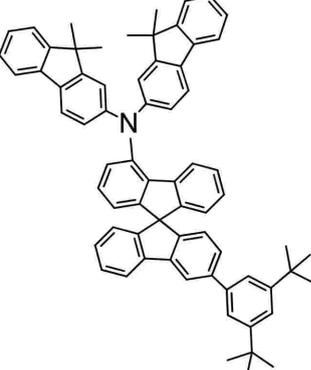
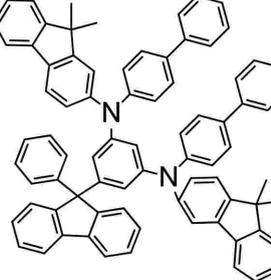
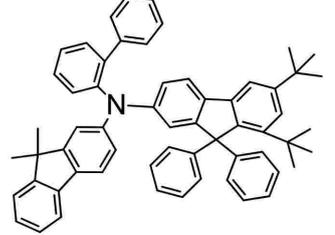
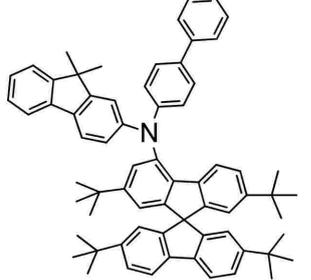
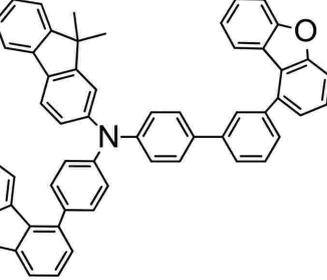
【0246】

30

40

50

【化 3 1 - 2】

			10
<p>WO 2014/072017 (HT-6)</p>	<p>WO 2019/115577 および WO 2015/082056 (HT-7)</p>	<p>WO 2014/072017 (HT-8)</p>	
			20
<p>WO 2013/120577 および WO 2017/102063 (HT-9)</p>	<p>WO 2009/124627 (HT-10)</p>	<p>WO 2019/115577 (HT-11)</p>	
			30
<p>WO 2022/096172 (HT-12)</p>	<p>WO 2015/082056 (HT-13)</p>		

【 0 2 4 7 】

化合物 HT - 4 ~ HT - 13 は、一般に正孔輸送性層における使用に好適である。それらの使用は、特定の OLED、たとえば、たとえば本願に記載される OLED に限定されない。

【 0 2 4 8 】

化合物 HT - 4 ~ HT - 13 は、上表の化合物に関連付けて記載された特許明細書に開示された方法により調製されてもよい。これらの特許出願に開示された化合物の使用および調製に関するさらなる教示は、参照により明示的にここに組み込まれ、好ましくは上記化合物の正孔輸送材料としての使用に関する上記の教示と組み合わせられる。化合物は、OLED に使用された場合、卓越した特性、特に卓越した寿命および効率を示す。

【 0 2 4 9 】

40

50

電子デバイスの好ましいカソードは、低い仕事関数を有する金属、金属合金、または様々な金属、たとえばアルカリ土類金属、アルカリ金属、主族金属もしくはランタノイド（たとえばCa、Ba、Mg、Al、In、Mg、Yb、Smなど）で構成される多層構造である。加えて好適なのは、アルカリ金属またはアルカリ土類金属と銀で構成される合金、たとえばマグネシウムと銀で構成される合金である。多層構造の場合、言及した金属に加え、比較的高い仕事関数を有するさらなる金属、たとえばAgまたはAlを使用することも可能であり、その場合、金属の組み合わせ、たとえばCa/Ag、Mg/AgまたはBa/Agなどが一般に使用される。高誘電率を有する材料の薄い中間層を金属製カソードと有機半導体との間に導入することが好ましいこともある。この目的のために有用な材料の例は、アルカリ金属またはアルカリ土類金属フッ化物に加え、対応する酸化物または炭酸塩（たとえばLiF、Li₂O、BaF₂、MgO、NaF、CsF、Cs₂CO₃など）である。この目的のために、キノリン酸リチウム（LiQ）を使用することも可能である。この層の層厚は、好ましくは0.5乃至5nmである。

【0250】

好ましいアノードは、高い仕事関数を有する材料である。好ましくは、アノードは対真空で4.5eVを超える仕事関数を有する。第1に、高い酸化還元電位を有する金属がこの目的のために好適であり、たとえばAg、PtまたはAuである。第2に、金属/金属酸化物電極（たとえばAl/Ni/NiO_x、Al/PtO_x）が好ましいこともある。用途によっては、有機材料の照射（有機ソーラーセル）または光の放出（OLED、レーザー）の何れかを可能とするために、電極の少なくとも一方が透明または部分的に透明である必要がある。ここでは、好ましいアノード材料は、導電性混合金属酸化物である。インジウムスズ酸化物（ITO）またはインジウム亜鉛酸化物（IZO）が特に好ましい。さらに、導電性のドーパされた有機材料、とりわけ導電性のドーパされたポリマーが好ましい。加えて、アノードはまた、2つ以上の層、たとえばITOの内層と、金属酸化物、好ましくは酸化タングステン、酸化モリブデンまたは酸化バナジウムの外層からなっている。

【0251】

好ましい態様において、電子デバイスは、1つ以上の層が、昇華法によりコーティングされることを特徴とする。この場合、材料は、真空昇華系において、10⁻⁵mba r未満、好ましくは10⁻⁶mba r未満の初期圧力で蒸着により付与される。ただし、この場合、初期圧力をさらに低く、たとえば10⁻⁷mba r未満とすることも可能である。

【0252】

同様に、1つ以上の層がOVPD（有機気相堆積）法により、またはキャリアガス昇華の助けを借りてコーティングされることを特徴とする電子デバイスが好ましい。この場合、材料は、10⁻⁵mba r乃至1ba rの圧力で付与される。この方法の特殊なケースがOVJP（有機蒸気ジェット印刷）法であり、この方法では、材料がノズルにより直接付与され、したがって構造化される（たとえばM. S. Arnoldら、Appl. Phys. Lett. 2008、92、053301）。

【0253】

加えて、1つ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、または任意の印刷法、たとえばスクリーン印刷、フレキソ印刷、ノズル印刷もしくはオフセット印刷であるが、より好ましくはLITI（光誘起熱イメージング、熱転写印刷）もしくはインクジェット印刷により生成されることを特徴とする電子デバイスが好ましい。この目的のためには、可溶性の化合物が必要である。高い溶解度は、化合物の好適な置換により実現することができる。

【0254】

本願による電子デバイスは、1つ以上の層を溶液から付与し、1つ以上の層を昇華法により付与することによって製造されることがさらに好ましい。

【0255】

層の付与後、用途に応じ、デバイスは構造化され、接点が接続され、水および空気の損

傷効果を排除するため、最終的に密閉される。

【0256】

本発明によると、本願による化合物または混合物を含む電子デバイスは、ディスプレイにおいて、照明用途における光源として、ならびに医療および/または美容用途における光源として、使用することができる。

【0257】

[例]

A) 合成例

以下の合成は、特に断りのない限り、乾燥溶媒中で保護ガス雰囲気下で行う。そのうちのいくつかは角括弧内に記載されている、文献から公知の反応物の番号は、対応するCAS番号である。

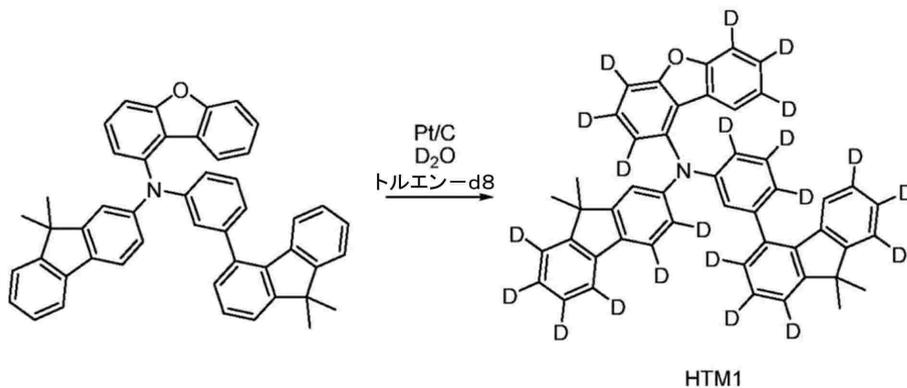
【0258】

例1

d_{21} -N-(9,9-ジメチル-9H-フルオレン-2-イル)-N-[3-(9,9-ジメチル-9H-フルオレン-4-イル)フェニル]-8-オキサトリシクロ[7.4.0.0^{2,7}]トリデカ-1(9),2,4,6,10,12-ヘキサン-3-アミン

【0259】

【化32】



20

30

【0260】

合成の出発化合物は、WO2015/082056A1、86~87頁に記載のように調製されてもよい。

【0261】

10.0g (15.5mmol; 1.00eq)のN-(9,9-ジメチル-9H-フルオレン-2-イル)-N-[3-(9,9-ジメチル-9H-フルオレン-4-イル)フェニル]-8-オキサトリシクロ[7.4.0.0^{2,7}]トリデカ-1(9),2,4,6,10,12-ヘキサエン-3-アミン(合成は、適切な反応物とともに、WO2015/082056A1、例1、86頁ff.に記載のように行うことができる)および20.0gの活性炭上Pt5%を、400g(502mmol; 1.00eq)の酸化重水素[CAS 7789-20-0]および200g(778mmol; 1.55eq)のトルエン-d₈[CAS 2037-26-5]に懸濁させる。反応混合物を、165および自己昇圧で5時間攪拌する。冷却後、テトラヒドロフランで2回抽出し、合わせた有機相を食塩水で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥する。その後、溶媒を減圧下で除去する。抽出、再結晶および昇華によるさらなる精製後、H/DアイソトポマーおよびH/Dアイソトポログの画分との混合物中の上記で示された生成物(4.52g、6.82mmol、理論値の44%)を得る。

40

【0262】

例2

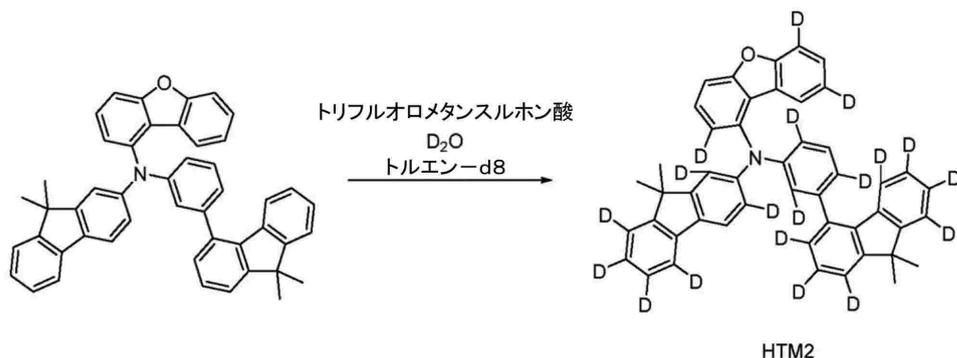
d_{19} -N-(9,9-ジメチル-9H-フルオレン-2-イル)-N-[3-(9,

50

9 - ジメチル - 9 H - フルオレン - 4 - イル) フェニル] - 8 - オキサトリシクロ [7 . 4 . 0 . 0^{2,7}] トリデカ - 1 (9) , 2 , 4 , 6 , 10 , 12 - ヘキサ - 3 - アミン

【 0 2 6 3 】

【 化 3 3 】



10

【 0 2 6 4 】

10.0 g (15.5 mmol ; 1.00 eq) の N - (9 , 9 - ジメチル - 9 H - フルオレン - 2 - イル) - N - [3 - (9 , 9 - ジメチル - 9 H - フルオレン - 4 - イル) フェニル] - 8 - オキサトリシクロ [7 . 4 . 0 . 0^{2,7}] トリデカ - 1 (9) , 2 , 4 , 6 , 10 , 12 - ヘキサ - 3 - アミン (合成は、適切な反応物を用いて、WO 2015 / 082056 A 1、例 1、86 頁 ff . に記載のように行うことができる) を、200 ml (120 eq) のトルエン - d₈ [CAS 2037 - 26 - 5] に懸濁させる。この混合物に、冷却しながら 13.6 ml (10 eq .) のトリフルオロメタンスルホン酸を添加する。反応混合物を室温で 6 時間攪拌する。その後、36.4 ml (130 eq) の酸化重水素 [CAS 7789 - 20 - 0] を 0 で滴下添加する。硫酸カリウム溶液で中和した後、トルエンで抽出し、合わせた有機相を食塩水で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥する。ろ過後、溶媒を減圧下で除去する。抽出、再結晶および昇華によるさらなる精製後、H / D アイソトプマーおよび H / D アイソトポログの画分との混合物中で、7.90 g (11.9 mmol、理論値の 77%) の上記に示される生成物を得る。

20

【 0 2 6 5 】

以下の化合物も同様に得ることができる：

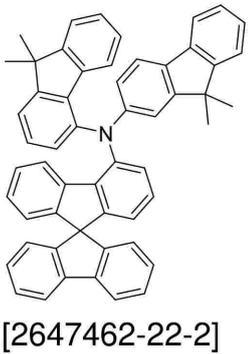
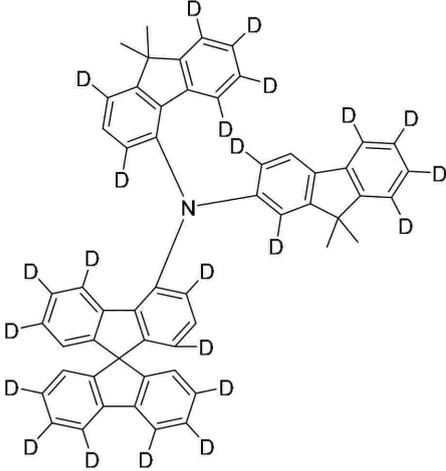
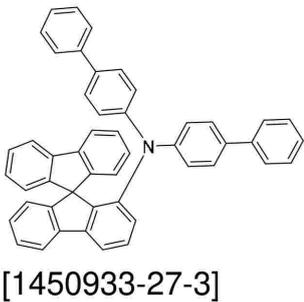
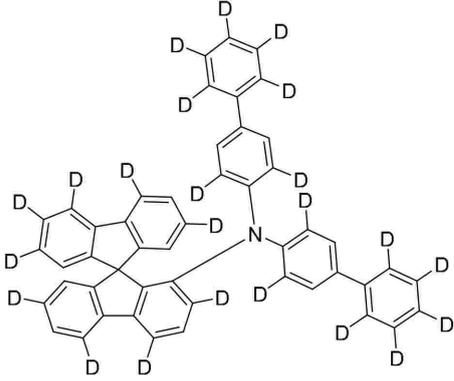
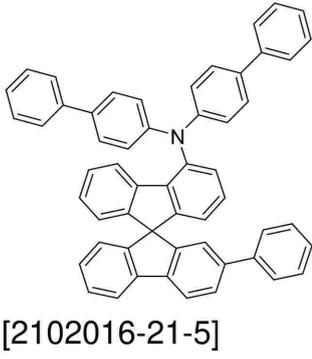
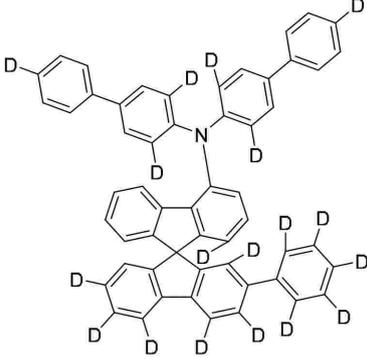
30

【 0 2 6 6 】

40

50

【化 3 4 - 1】

例	反応物	生成物	収率
2b	 [2647462-22-2]		45%
2c	 [1450933-27-3]		80%
2d	 [2102016-21-5]		62%

10

20

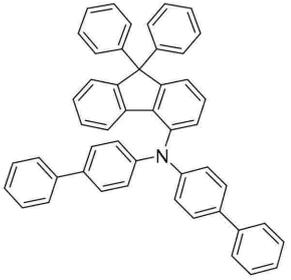
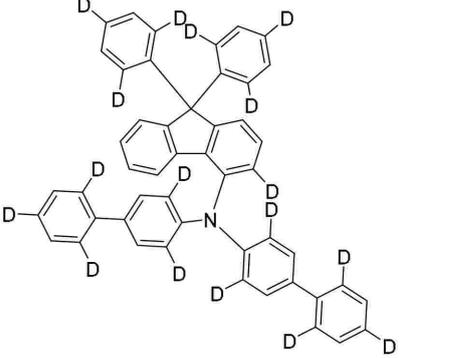
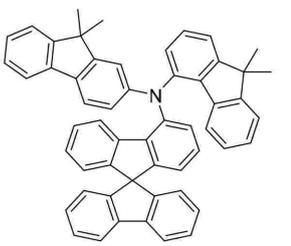
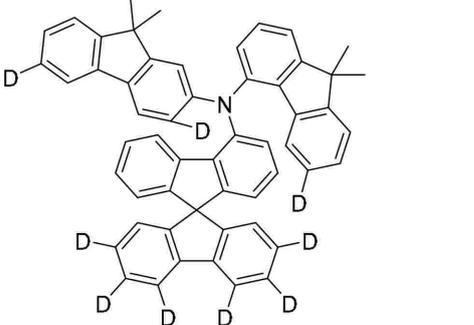
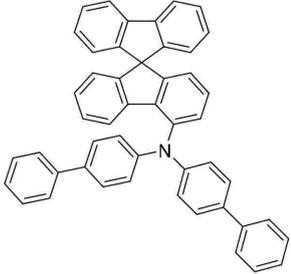
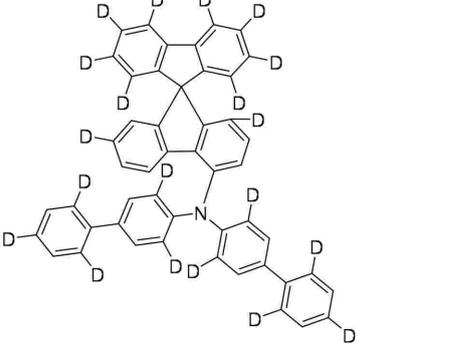
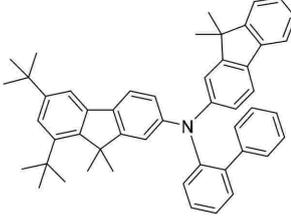
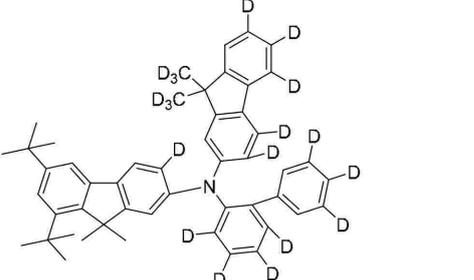
30

40

【 0 2 6 7 】

50

【化 3 4 - 2】

<p>2e</p>  <p>[1547491-36-0]</p>		<p>58%</p>
<p>2f</p>  <p>[2647462-04-0]</p>		<p>75%</p>
<p>2g</p>  <p>[1450933-43-3]</p>		<p>70%</p>
<p>2h</p>  <p>WO2019/115577</p>		<p>63%</p>

10

20

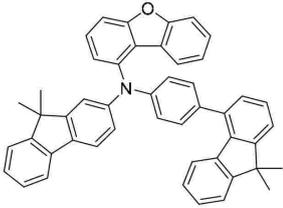
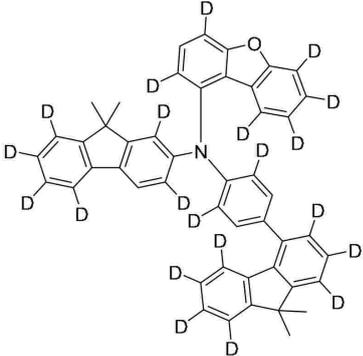
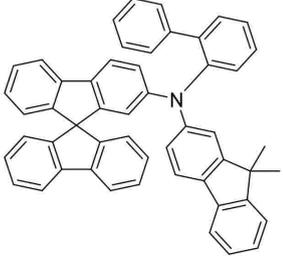
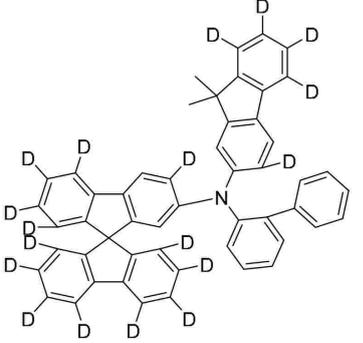
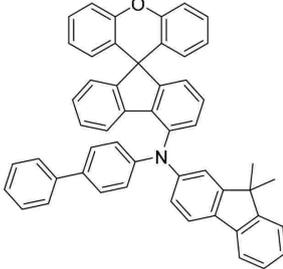
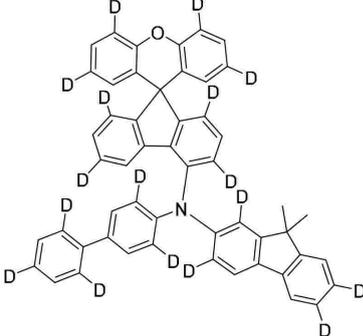
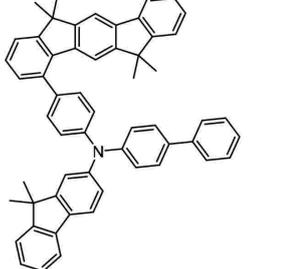
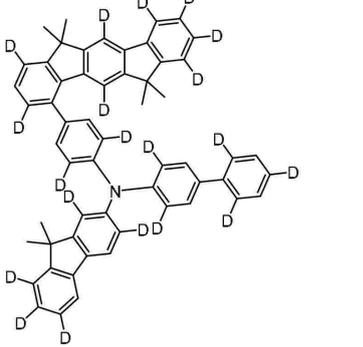
30

【 0 2 6 8 】

40

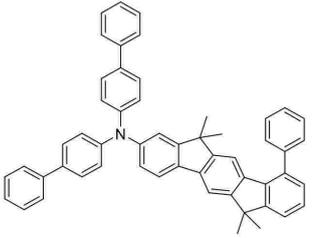
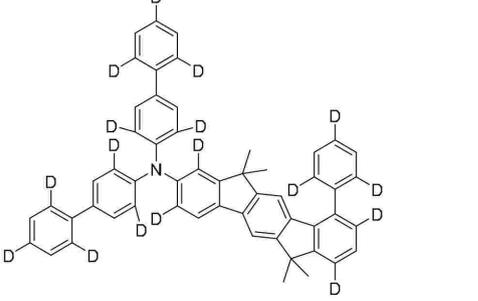
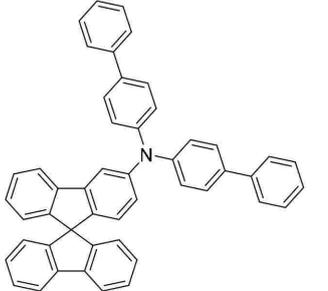
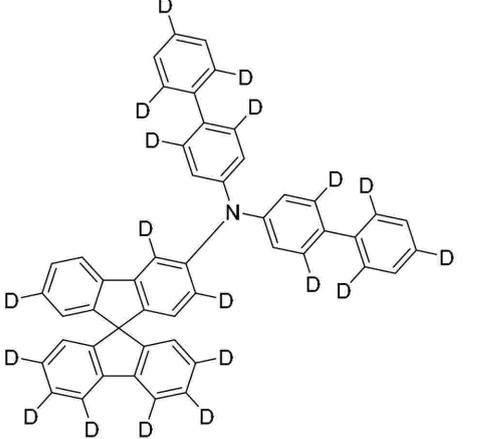
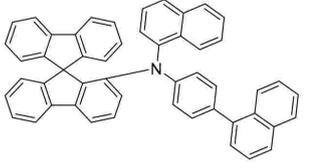
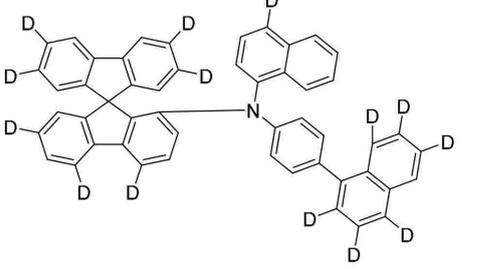
50

【化 3 4 - 3】

2i	 <p>WO2015/082056</p>		71%	10
2j	 <p>[1364603-07-5]</p>		74%	20
2k	 <p>[1609484-48-1]</p>		66%	30
2l	 <p>[2299232-17-8]</p>		58%	40

【 0 2 6 9 】

【化34-4】

2m	 <p>[2300016-25-3]</p>		44%
2n	 <p>[1450933-35-3]</p>		51%
2o	 <p>[2730012-53-8]</p>		49%

10

20

30

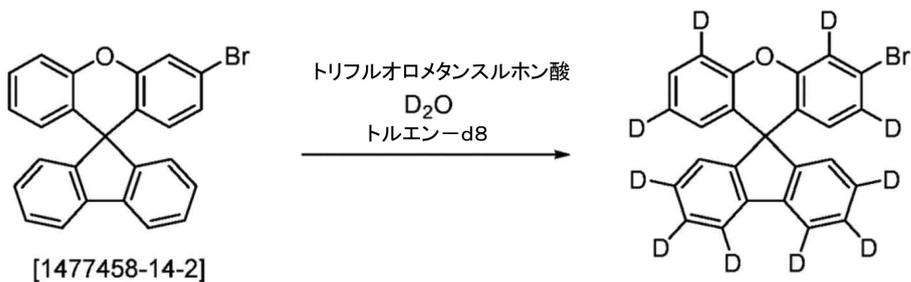
【0270】

例3

d₁₀-6'-ブromo(2,2',3,4,4',5,6,7,7'-2H9)スピロ[フルオレン-9,9'-キサテン]

【0271】

【化35】



40

【0272】

20.5g(50.0mmol;1.00eq)の6'-ブromo(2,2',3,4,4',5,6,7,7'-2H9)スピロ[フルオレン-9,9'-キサテン](市販)を640ml(120eq)のトルエン-d₈[CAS2037-26-5]に懸濁させる

50

。この混合物に、冷却しながらトリフルオロメタンスルホン酸 16.6 ml (6.00 eq.) を添加する。反応混合物を室温で6時間攪拌する。その後、120 ml (130 eq.) の酸化重水素 [CAS 7789-20-0] を 0 で滴下添加する。硫酸カリウム溶液で中和した後、トルエンで抽出し、合わせた有機相を食塩水で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥する。ろ過後、溶媒を減圧下で除去する。クロマトグラフィーによる精製後、H/DアイソトポマーおよびH/Dアイソトポログの画分との混合物中で17.4 g (41.4 mmol、理論値の83%) の上記生成物を得る。

【0273】

以下の化合物も同様に得ることができる：

【0274】

10

20

30

40

50

【化 3 6 - 1】

例	反応物	生成物	収率
3b	 [1161009-88-6]		95%
3c	 [1477458-14-2]		78%
3d	 [713125-22-5]		66%
3e	 [1860896-40-7]		72%
3f	 [171408-76-7]		82%
3g	 [1911626-20-4]		71%

10

20

30

40

【 0 2 7 5 】

【化 3 6 - 2】

3h	 [2299231-59-5]		78%
----	--------------------	--	-----

50

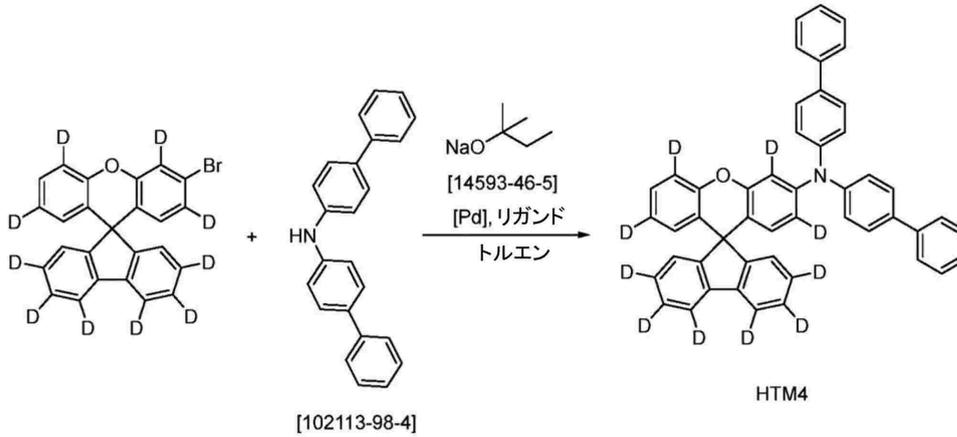
【0276】

例4

d10-N,N-ビス({[1,1'-ビフェニル]-4-イル}) (2,2',3,4,4',5,6,7,7'-2H9)スピロ[フルオレン-9,9'-キサテン]-6'-アミン

【0277】

【化37】



10

20

【0278】

16.3 g (38.9 mmol; 1.00 eq.) の d₉-6'-プロモ(2,2',3,4,4',5,6,7,7'-2H9)スピロ[フルオレン-9,9'-キサテン]、12.6 g (39.3 mmol; 1.01 eq.) の N- {[1,1'-ビフェニル]-4-イル} - [1,1'-ビフェニル]-4-アミン [CAS 102113-98-4] および 200 ml のトルエン [CAS 108-88-3] 中 4.96 g (42.7 mmol; 1.10 eq.) のナトリウム tert-ペントキシド [CAS 14593-46-5] の最初の投入物を、アルゴン気流中で30分間不活性化する。次に、479 mg (1.17 mmol; 3モル%) のジシクロヘキシル-(2',6'-ジメトキシビフェニル-2-イル)ホスファン(SPhos) [CAS 657408-07-6]、262 mg (1.17 mmol; 3モル%) の酢酸パラジウム [CAS 3375-31-3] を添加し、混合物を18時間加熱還流する。変換が完了し、室温まで冷却した後、500 ml の水を反応物に添加する。相を分離し、水相をトルエン [CAS 108-88-3] で抽出した後、合わせた有機相を濃縮し、ヘプタンを添加する。沈殿した固体を単離する。ソックスレー抽出、再結晶および真空昇華による精製により、所望の生成物を得る(14.5 g; 21.9 mmol; 理論値の56%)。

30

【0279】

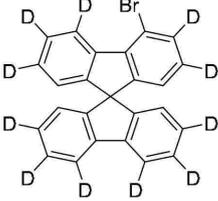
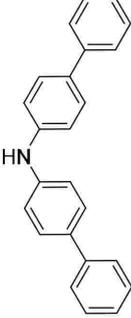
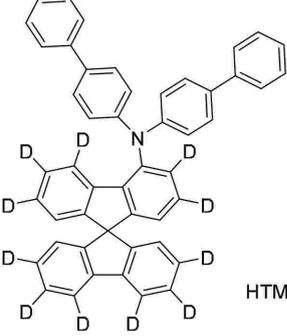
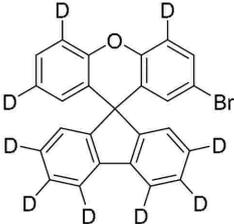
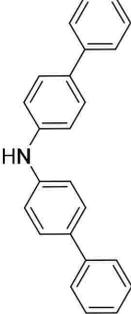
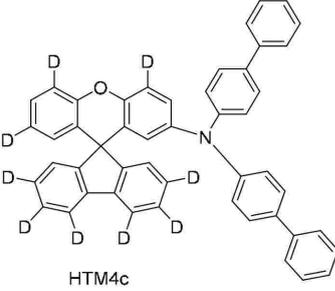
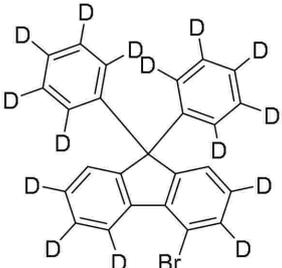
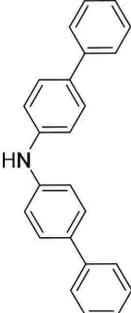
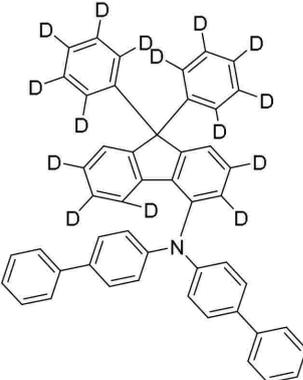
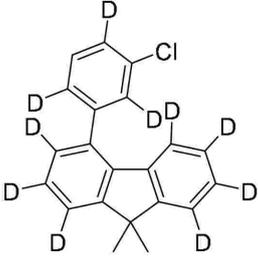
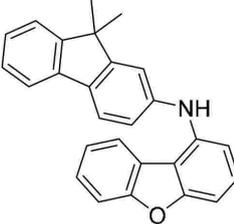
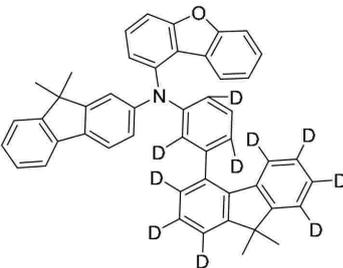
以下の化合物も同様に得ることができる：

【0280】

40

50

【化 3 8 - 1】

例	反応物	反応物	生成物	収率
4b		 [102113-98-4]	 HTM4b	53%
4c		 [102113-98-4]	 HTM4c	53%
4d		 [102113-98-4]		65%
4e		 [2225845-23-6]		67%

10

20

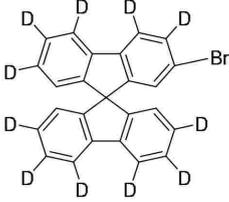
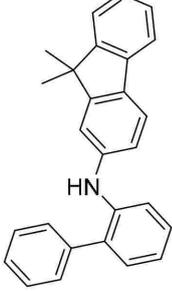
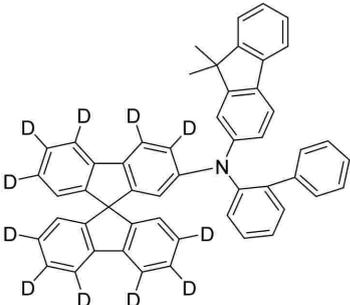
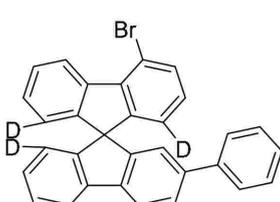
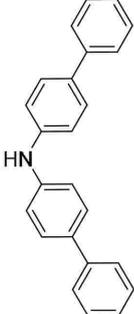
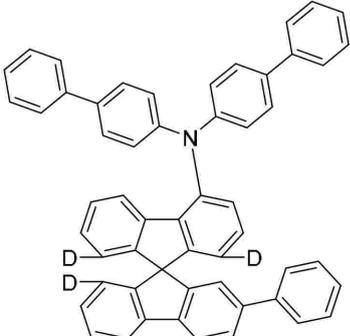
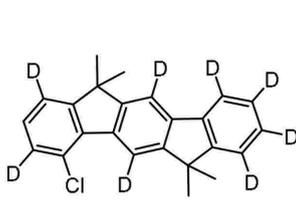
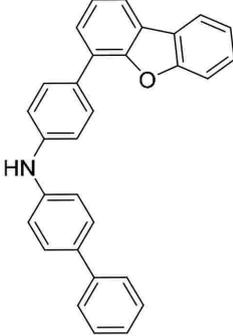
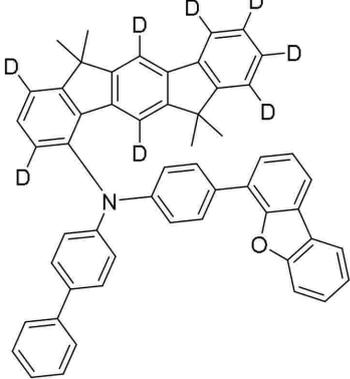
30

40

【 0 2 8 1 】

50

【化 3 8 - 2】

4f		 [1198395-24-2]	 58%	
4g		 [102113-98-4]	 71%	
4h		 [955959-89-4]	 55%	

10

20

30

【 0 2 8 2 】

B) デバイス例

O L E D の製造

以下の例 V - 1 ~ V - 9 および B - 1 ~ B - 1 0 (表 1 ~ 5 参照) では、様々な O L E D のデータを示す。

【 0 2 8 3 】

例 V - 1 ~ V - 9 および B 1 ~ B - 1 0 の前処理：

厚さ 5 0 n m の構造化 I T O (酸化インジウムスズ) でコーティングされたガラスプレートを、コーティング前に酸素プラズマで処理し、続いてアルゴンプラズマで処理する。このプラズマ処理されたガラスプレートが、O L E D が適用される基板を形成する。

40

【 0 2 8 4 】

O L E D は基本的に、以下の層構造：基板 / 正孔注入層 (H I L) / 正孔輸送層 (H T L) / 電子阻止層 (E B L) / 発光層 (E M L) / 任意選択の正孔阻止層 (H B L) / 電子輸送層 (E T L) / 任意選択の電子注入層 (E I L)、最後にカソードを有する。カソードは、厚さ 1 0 0 n m のアルミニウム層により形成される。O L E D の正確な構造は、表 1 および表 4 に見出すことができる。O L E D の製造に必要な材料は、上記に記載がない場合、表 3 に示される。

【 0 2 8 5 】

50

材料は全て、真空チャンバにおいて熱蒸着により付与される。この場合、発光層は常に、少なくとも1種のマトリックス材料（ホスト材料）と、共蒸着により特定の体積割合でマトリックス材料に添加される発光ドーパント（発光体）からなる。E1：Sd T1：TEG1（32%：60%：8%）のような形態で示される詳細は、ここでは、材料E1が32%の体積割合、Sd T1が60%の割合、TEG1が8%の割合で層中に存在することを意味する。同様に、電子輸送層はまた、2つの材料の混合物からなってもよい。

【0286】

OLEDは標準的な方法により特性評価される。この目的のため、エレクトロルミネッセンススペクトル、電圧、およびランバート放射特性を仮定する電流 - 電圧 - 輝度特性（IUL特性）から計算される輝度の関数としての外部量子効率（EQE、パーセント単位で測定）、および寿命を判定する。エレクトロルミネッセンススペクトルは、1000 cd/m²の輝度で決定され、これらはCIE 1931のxおよびy色座標の計算に使用される。表2および表5のパラメータU1000は、ここでは1000 cd/m²の輝度に必要な電圧を指す。CE1000は、1000 cd/m²で達成される電流効率を示す。最後に、EQE1000は、作動輝度1000 cd/m²における外部量子効率を指す。寿命LD95@1000 cd/m³は、初期輝度が1000 cd/m²からある割合まで低下した後の時間として定義される。表2のLD95または表5のLD80という数値は、LD95またはLD80の欄に示された寿命が、初期輝度が1000 cd/m²からその初期値の95%、または20000 cd/m²から80%まで低下した後の時間に対応することを意味する。様々なOLEDのデータを表2および表5にまとめる。例V-1～V-9は従来技術による比較例であり、例B1～B10は本発明のOLEDのデータを示す。

【0287】

本発明のOLEDの利点を例示するために、例のいくつかを以下に詳細に説明する。

【0288】

青色蛍光発光OLEDにおける電子阻止層（EBL）としての本発明の化合物の使用
本発明化合物2c、2d、2e、2g、4bおよび4hを、青色蛍光発光OLEDにおける電子阻止層（EBL）の使用において先行技術材料Sd T1～Sd T5と比較する。本願によれば、化合物2c、2d、2e、2g、4bおよび4hは、重水素化されていない化合物Sd T1～Sd T5の部分重水素化誘導体である。

【0289】

10

20

30

40

50

【表 1】

表1:青色蛍光発光OLEDのデバイス構造						
例	HIL	HTL	EBL	EML	ETL	EIL
	厚さ / nm	厚さ / nm	厚さ / nm	厚さ / nm	厚さ / nm	厚さ / nm
V1	HTM:ドーパント(5%) 20 nm	HTM 160 nm	SdT1 10 nm	H:SEB(3%) 20 nm	ETM1:LiQ(50%) 30 nm	LiQ 1 nm
V2	HTM:ドーパント(5%) 20 nm	HTM 160 nm	SdT2 10 nm	H:SEB(3%) 20 nm	ETM1:LiQ(50%) 30 nm	LiQ 1 nm
V3	HTM:ドーパント(5%) 20 nm	HTM 160 nm	SdT3 10 nm	H:SEB(3%) 20 nm	ETM1:LiQ(50%) 30 nm	LiQ 1 nm
V4	HTM:ドーパント(5%) 20 nm	HTM 160 nm	SdT4 10 nm	H:SEB(3%) 20 nm	ETM1:LiQ(50%) 30 nm	LiQ 1 nm
V5	HTM:ドーパント(5%) 20 nm	HTM 160 nm	SdT5 10 nm	H:SEB(3%) 20 nm	ETM1:LiQ(50%) 30 nm	LiQ 1 nm
B1	HTM:ドーパント(5%) 20 nm	HTM 160 nm	2c 10 nm	H:SEB(3%) 20 nm	ETM1:LiQ(50%) 30 nm	LiQ 1 nm
B2	HTM:ドーパント(5%) 20 nm	HTM 160 nm	2d 10 nm	H:SEB(3%) 20 nm	ETM1:LiQ(50%) 30 nm	LiQ 1 nm
B3	HTM:ドーパント(5%) 20 nm	HTM 160 nm	2e 10 nm	H:SEB(3%) 20 nm	ETM1:LiQ(50%) 30 nm	LiQ 1 nm
B4	HTM:ドーパント(5%) 20 nm	HTM 160 nm	2g 10 nm	H:SEB(3%) 20 nm	ETM1:LiQ(50%) 30 nm	LiQ 1 nm
B5	HTM:ドーパント(5%) 20 nm	HTM 160 nm	4b 10 nm	H:SEB(3%) 20 nm	ETM1:LiQ(50%) 30 nm	LiQ 1 nm
B6	HTM:ドーパント(5%) 20 nm	HTM 160 nm	4h 10 nm	H:SEB(3%) 20 nm	ETM1:LiQ(50%) 30 nm	LiQ 1 nm

10

20

30

【 0 2 9 0 】

達成された性能データは、表 2 に見出すことができる。

【 0 2 9 1 】

40

50

【表 2】

表2: 青色蛍光発光OLEDの性能データ				
例	U1000 (V)	EQE1000 (%)	LD95 @ 1000 cd/m ² (h)	CIE x/y @ 1000 cd/m ²
V-1	3.7	9.1	360	0.14 / 0.19
V-2	3.6	8.8	330	0.15 / 0.18
V-3	3.7	9.2	310	0.15 / 0.18
V-4	3.7	8.9	340	0.15 / 0.18
V-5	3.8	9.0	300	0.15 / 0.18
B-1	3.7	9.2	480	0.14 / 0.19
B-2	3.7	8.7	420	0.15 / 0.18
B-3	3.7	9.0	370	0.15 / 0.18
B-4	3.8	9.0	440	0.15 / 0.18
B-5	3.8	9.1	400	0.15 / 0.18
B-6	3.7	8.9	400	0.15 / 0.18

10

20

【0292】

本発明例 B - 1 ~ B - 6 は、先行技術例 V - 1 ~ V - 5 と比較して、同等の作動電圧および効率と相まって寿命が明らかに改善されている。驚くべきことに、本願による部分重水素化合物の場合におけるこの利点は、完全重水素化合物のものと同様に顕著である。

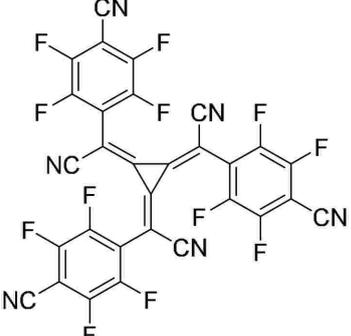
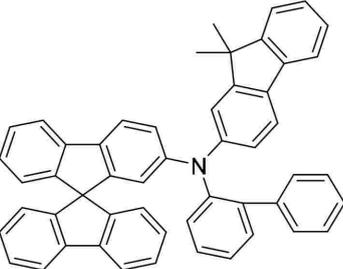
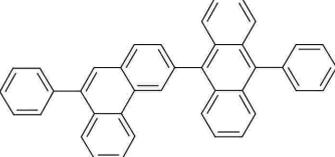
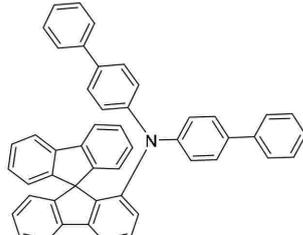
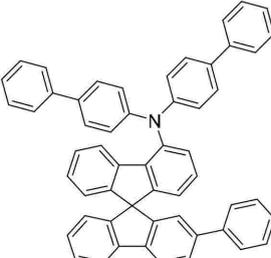
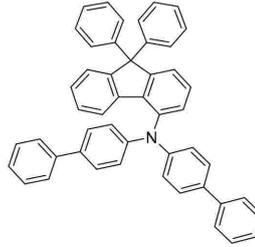
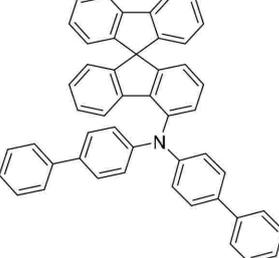
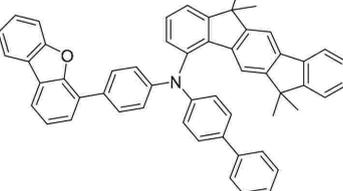
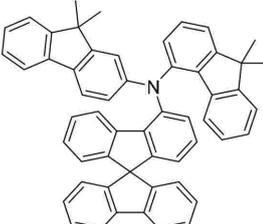
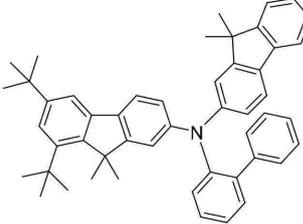
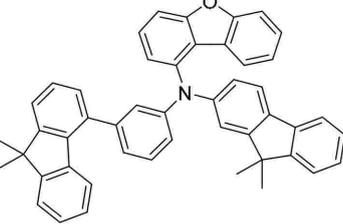
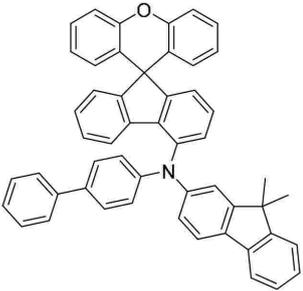
【0293】

30

40

50

【表 3 - 1】

表3: OLEDデバイスの材料		
		
p-ドーパント	HTM	H
		
SdT1	SdT2	SdT3
		
SdT4	SdT5	SdT6
		
SdT7	SdT8	SdT9

10

20

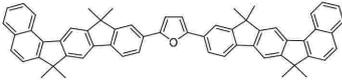
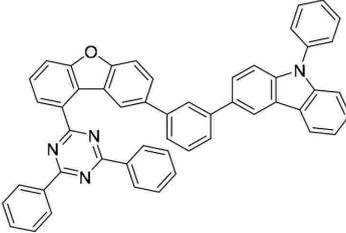
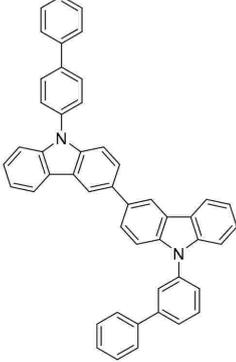
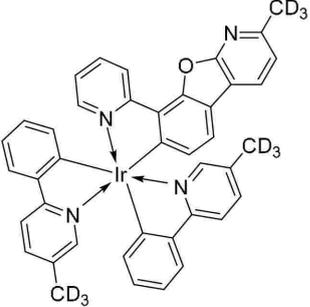
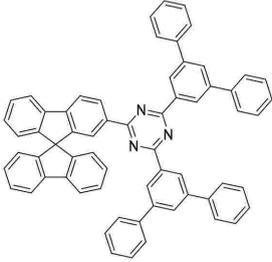
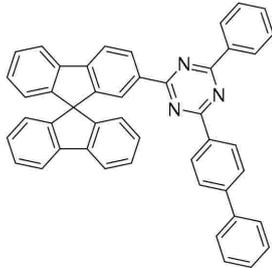
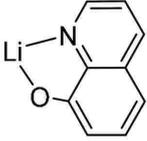
30

【 0 2 9 4 】

40

50

【表 3 - 2】

			10
SEB	TMM1	TMM2	
			20
TEG	ETM1	ETM2	
			
LiQ			

【0295】

緑色リン光発光OLEDのEBLにおける本発明化合物の使用

本発明化合物 2 b、2 h、2 k および 4 e を、緑色リン光発光 OLED における電子阻止層 (EBL) の使用において先行技術材料 S d T 6 ~ S d T 9 と比較する。本願によれば、化合物 2 b、2 h、2 k および 4 e は、重水素化されていない化合物 S d T 6 ~ S d T 9 の部分重水素化誘導体である。

【0296】

以下の OLED を製造する：

【0297】

30

40

50

【表 4】

例	HIL	HTL1	HTL2	EBL	EML	HBL	ETL	EIL
	厚さ / nm	厚さ / nm	厚さ / nm	厚さ / nm	厚さ / nm	厚さ / nm	厚さ / nm	厚さ / nm
V-6	HTM: p-ドープバント(5%) 20 nm	HTM 210 nm	SdT6: p-ドープバント(5%) 20 nm	SdT6 20 nm	TMM1(42%) TMM2(50%) TEG (8%) 30 nm	ETM2 30nm	ETM2: LiQ(30%) 10 nm	LiQ 1 nm
V-7	HTM: p-ドープバント(5%) 20 nm	HTM 210 nm	SdT7: p-ドープバント(5%) 20 nm	SdT7 20 nm	TMM1(42%) TMM2(50%) TEG (8%) 30 nm	ETM2 30nm	ETM2: LiQ(30%) 10 nm	LiQ 1 nm
V-8	HTM: p-ドープバント(5%) 20 nm	HTM 210 nm	SdT8: p-ドープバント(5%) 20 nm	SdT8 20 nm	TMM1(42%) TMM2(50%) TEG (8%) 30 nm	ETM2 30nm	ETM2: LiQ(30%) 10 nm	LiQ 1 nm
V-9	HTM: p-ドープバント(5%) 20 nm	HTM 210 nm	SdT9: p-ドープバント(5%) 20 nm	SdT9 20 nm	TMM1(42%) TMM2(50%) TEG (8%) 30 nm	ETM2 30nm	ETM2: LiQ(30%) 10 nm	LiQ 1 nm
B-7	HTM: p-ドープバント(5%) 20 nm	HTM 210 nm	2b: p-ドープバント(5%) 20 nm	2b 20 nm	TMM1(42%) TMM2(50%) TEG (8%) 30 nm	ETM2 30nm	ETM2: LiQ(30%) 10 nm	LiQ 1 nm
B-8	HTM: p-ドープバント(5%) 20 nm	HTM 210 nm	2h: p-ドープバント(5%) 20 nm	2h 20 nm	TMM1(42%) TMM2(50%) TEG (8%) 30 nm	ETM2 30nm	ETM2: LiQ(30%) 10 nm	LiQ 1 nm
B-9	HTM: p-ドープバント(5%) 20 nm	HTM 210 nm	4e: p-ドープバント(5%) 20 nm	4e 20 nm	TMM1(42%) TMM2(50%) TEG (8%) 30 nm	ETM2 30nm	ETM2: LiQ(30%) 10 nm	LiQ 1 nm
B-10	HTM: p-ドープバント(5%) 20 nm	HTM 210 nm	2k: p-ドープバント(5%) 20 nm	2k 20 nm	TMM1(42%) TMM2(50%) TEG (8%) 30 nm	ETM2 30nm	ETM2: LiQ(30%) 10 nm	LiQ 1 nm

10

20

【 0 2 9 8 】

【表 5】

例	U1000 (V)	EQE1000 (%)	LD80 @ 20000 cd/m ² (h)	CIE x/y @ 1000 cd/m ²
V-6	2.8	24.2	1340	0.34 / 0.63
V-7	2.7	23.5	1500	0.34 / 0.63
V-8	3.0	24.4	1340	0.34 / 0.63
V-9	2.8	23.9	1350	0.34 / 0.63
B-7	2.8	24.1	1590	0.34 / 0.63
B-8	2.8	23.6	1650	0.34 / 0.63
B-9	2.9	24.4	1550	0.34 / 0.63
B-10	2.8	24.0	1590	0.34 / 0.63

30

40

【 0 2 9 9 】

本発明例 B - 7 ~ B - 10 は、先行技術例 V - 6 ~ V - 9 と比較して、同等の作動電圧および効率と相まって寿命が明らかに改善されている。驚くべきことに、本願による部分重水素化合物の場合におけるこの利点は、完全重水素化合物のものと同様に顕著である。

50

【 手続補正書 】

【 提出日 】 令和6年7月8日(2024.7.8)

【 手続補正1 】

【 補正対象書類名 】 特許請求の範囲

【 補正対象項目名 】 全文

【 補正方法 】 変更

【 補正の内容 】

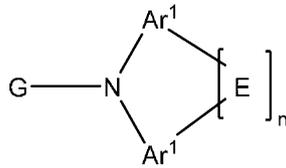
【 特許請求の範囲 】

【 請求項1 】

式(I)

10

【 化1 】



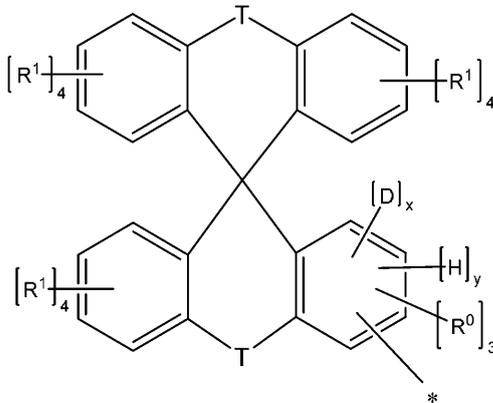
式(I)

[式中、

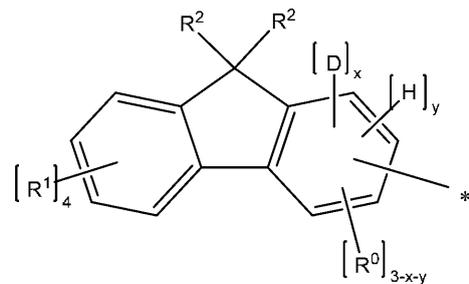
Gは、式(G-1)、(G-2)または(G-3)

20

【 化2 】

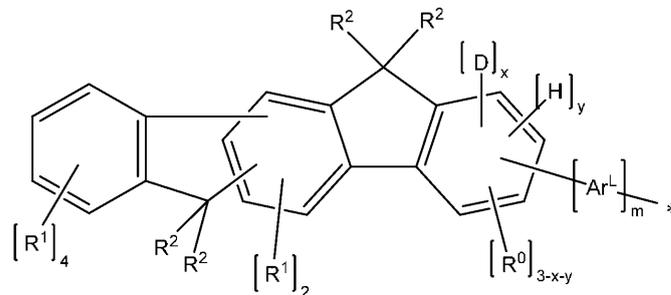


式(G-1)



式(G-2)

30



式(G-3)

40

(式中、式(I)の残部への結合は*と表示され、

Tは、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、単結合、C(R²)₂、C=O、Si(R²)₄、NR²、OおよびSから選択され；Eは単結合、C(R³)₂、C(R³)₂-C(R³)₂、C(R³)=C(R³)、C=O、Si(R³)₄、NR³、OおよびSから選択され；Ar¹は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、6~40個の芳香族環

50

原子を有し、 R^3 ラジカルにより置換されている芳香族環系、および5～40個の芳香族環原子を有し、 R^3 ラジカルにより置換されているヘテロ芳香族環系から選択され；

Ar^L は、6～40個の芳香族環原子を有し、 R^3 ラジカルにより置換されている芳香族環系、および5～40個の芳香族環原子を有し、 R^3 ラジカルにより置換されているヘテロ芳香族環系から選択され；

R^0 は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、F、Cl、Br、I、C(=O) R^4 、CN、Si(R^4)₃、N(R^4)₂、P(=O)(R^4)₂、OR⁴、S(=O) R^4 、S(=O)₂ R^4 、1～20個の炭素原子を有する直鎖アルキルまたはアルコキシ基、3～20個の炭素原子を有する分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、2～20個の炭素原子を有するアルケニルまたはアルキニル基、6～40個の芳香族環原子を有する芳香族環系、および5～40個の芳香族環原子を有するヘテロ芳香族環系から選択され；2つ以上の R^0 ラジカルは、互いに結合していても、環を形成していてもよく；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基、ならびに言及した芳香族環系およびヘテロ芳香族環系は、それぞれ R^4 ラジカルにより置換されており；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基中の1つ以上のCH₂基は、 $-R^4C=CR^4-$ 、 $-C-C-$ 、Si(R^4)₂、C=O、C=NR⁴、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^4-$ 、NR⁴、P(=O)(R^4)、 $-O-$ 、 $-S-$ 、SOまたはSO₂により置きかえられていてもよく；

R^1 は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、H、D、F、Cl、Br、I、C(=O) R^4 、CN、Si(R^4)₃、N(R^4)₂、P(=O)(R^4)₂、OR⁴、S(=O) R^4 、S(=O)₂ R^4 、1～20個の炭素原子を有する直鎖アルキルまたはアルコキシ基、3～20個の炭素原子を有する分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、2～20個の炭素原子を有するアルケニルまたはアルキニル基、6～40個の芳香族環原子を有する芳香族環系、および5～40個の芳香族環原子を有するヘテロ芳香族環系から選択され；2つ以上の R^1 ラジカルは、互いに結合していても、環を形成していてもよく；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基、ならびに言及した芳香族環系およびヘテロ芳香族環系は、それぞれ R^4 ラジカルにより置換されており；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基中の1つ以上のCH₂基は、 $-R^4C=CR^4-$ 、 $-C-C-$ 、Si(R^4)₂、C=O、C=NR⁴、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^4-$ 、NR⁴、P(=O)(R^4)、 $-O-$ 、 $-S-$ 、SOまたはSO₂により置きかえられていてもよく；

R^2 は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、H、D、F、Cl、Br、I、C(=O) R^4 、CN、Si(R^4)₃、N(R^4)₂、P(=O)(R^4)₂、OR⁴、S(=O) R^4 、S(=O)₂ R^4 、1～20個の炭素原子を有する直鎖アルキルまたはアルコキシ基、3～20個の炭素原子を有する分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、2～20個の炭素原子を有するアルケニルまたはアルキニル基、6～40個の芳香族環原子を有する芳香族環系、および5～40個の芳香族環原子を有するヘテロ芳香族環系から選択され；2つ以上の R^2 ラジカルは、互いに結合していても、環を形成していてもよく；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基、ならびに言及した芳香族環系およびヘテロ芳香族環系は、それぞれ R^4 ラジカルにより置換されており；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基中の1つ以上のCH₂基は、 $-R^4C=CR^4-$ 、 $-C-C-$ 、Si(R^4)₂、C=O、C=NR⁴、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^4-$ 、NR⁴、P(=O)(R^4)、 $-O-$ 、 $-S-$ 、SOまたはSO₂により置きかえられていてもよく；

R^3 は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、H、D、F、Cl、Br、I、C(=O) R^4 、CN、Si(R^4)₃、N(R^4)₂、P(=O)(R^4)₂、OR⁴、S(=O) R^4 、S(=O)₂ R^4 、1～20個の炭素原子を有する直鎖アルキルまたはアルコキシ基、3～20個の炭素原子を有する分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、2～20個の炭素原子を有するアルケニルまたはアルキニル基、6～40個の芳香族環原子を有する芳香族環系、および5～40個の芳香族環原子を有するヘテロ芳

10

20

30

40

50

香族環系から選択され；2つ以上の R^3 ラジカルは、互いに結合していても、環を形成していてもよく；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基、ならびに言及した芳香族環系およびヘテロ芳香族環系は、それぞれ R^4 ラジカルにより置換されており；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基中の1つ以上の CH_2 基は、 $-R^4C=CR^4-$ 、 $-C-C-$ 、 $Si(R^4)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^4$ 、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^4-$ 、 NR^4 、 $P(=O)(R^4)$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 SO または SO_2 により置きかえられていてもよく；

R^4 は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、 H 、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 $C(=O)R^5$ 、 CN 、 $Si(R^5)_3$ 、 $N(R^5)_2$ 、 $P(=O)(R^5)_2$ 、 OR^5 、 $S(=O)R^5$ 、 $S(=O)_2R^5$ 、1~20個の炭素原子を有する直鎖アルキルまたはアルコキシ基、3~20個の炭素原子を有する分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、2~20個の炭素原子を有するアルケニルまたはアルキニル基、6~40個の芳香族環原子を有する芳香族環系、および5~40個の芳香族環原子を有するヘテロ芳香族環系から選択され；2つ以上の R^4 ラジカルは、互いに結合していても、環を形成していてもよく；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基、ならびに言及した芳香族環系およびヘテロ芳香族環系は、それぞれ R^5 ラジカルにより置換されており；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基中の1つ以上の CH_2 基は、 $-R^5C=CR^5-$ 、 $-C-C-$ 、 $Si(R^5)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^5$ 、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^5-$ 、 NR^5 、 $P(=O)(R^5)$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 SO または SO_2 により置きかえられていてもよく；

R^5 は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、 H 、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 、1~20個の炭素原子を有するアルキルまたはアルコキシ基、2~20個の炭素原子を有するアルケニルまたはアルキニル基、6~40個の芳香族環原子を有する芳香族環系、および5~40個の芳香族環原子を有するヘテロ芳香族環系から選択され；2つ以上の R^5 ラジカルは、互いに結合していても、環を形成していてもよく；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基、ならびに言及した芳香族環系およびヘテロ芳香族環系は、 F および CN から選択される1つ以上のラジカルにより置換されていてもよく；

x は1または2であり、 x と y の合計は3以下であり；

y は1または2であり、 x と y の合計は3以下であり；

n は0または1であり、 $n=0$ である場合、 E 基は存在せず、2つの Ar^1 基は互いに結合せず；

m は0または1であり、 $m=0$ である場合、 Ar^L に結合する2つの基は互いに直接結合している)

に合致する]

の化合物。

【請求項2】

a)式(I)において、窒素原子に結合する前記 Ar^1 、 Ar^1 および G 基はそれぞれ、その芳香族またはヘテロ芳香族環上で部分的に重水素化されているか、もしくは完全に重水素化されており、好ましくは部分的に重水素化されているか、または

b)式(I)において、前記 G 基のみがその芳香族またはヘテロ芳香族環上で部分的に重水素化または完全に重水素化され、好ましくは部分的に重水素化され、前記 Ar^1 基は重水素化されていない

ことを特徴とする、請求項1に記載の化合物。

【請求項3】

前記化合物に存在する全ての脂肪族基が重水素化されていないことを特徴とする、請求項1または2に記載の化合物。

【請求項4】

以下の式：

10

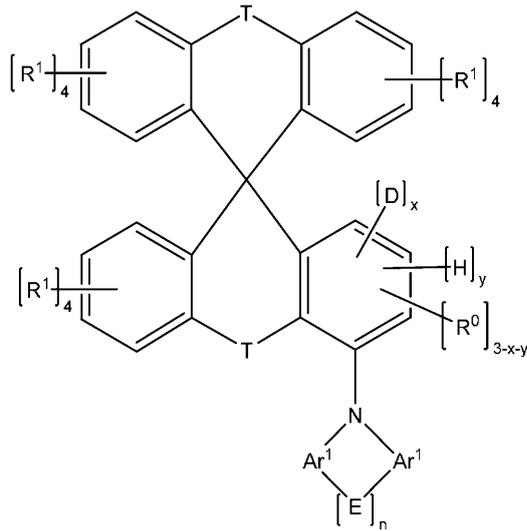
20

30

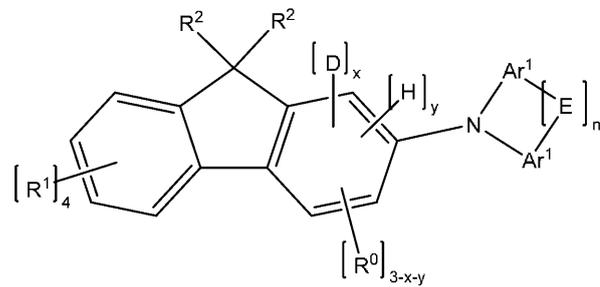
40

50

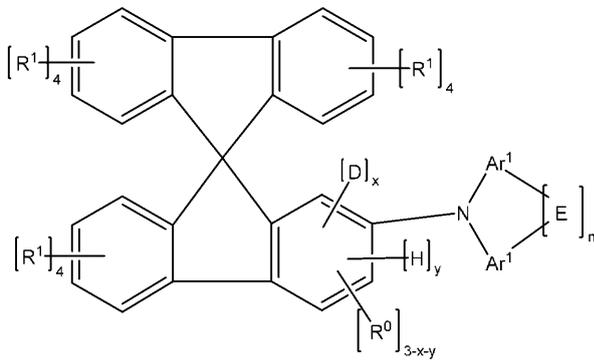
【化 3 - 1】



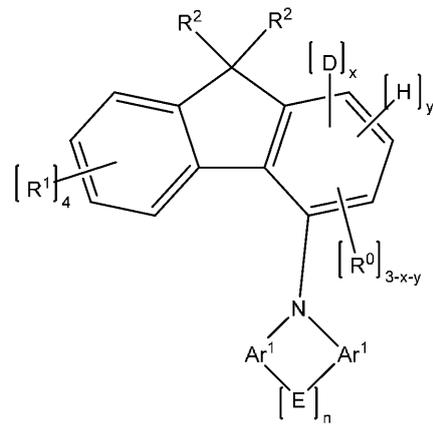
式 (I-A)



式 (I-B)



式 (I-C)



式 (I-D)

10

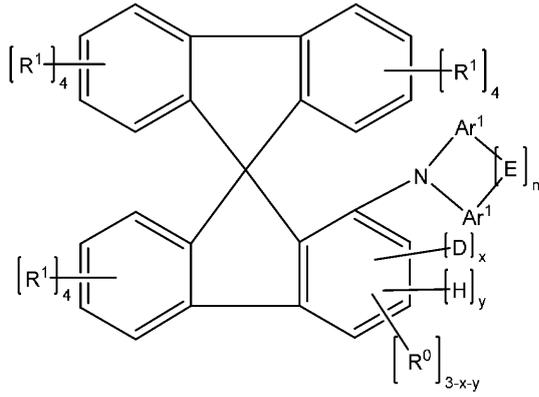
20

30

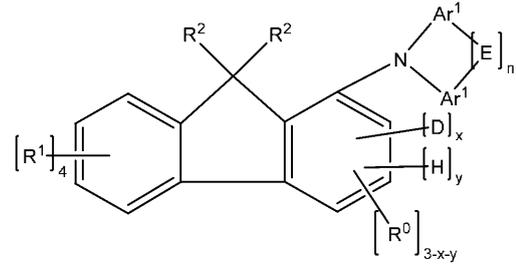
40

50

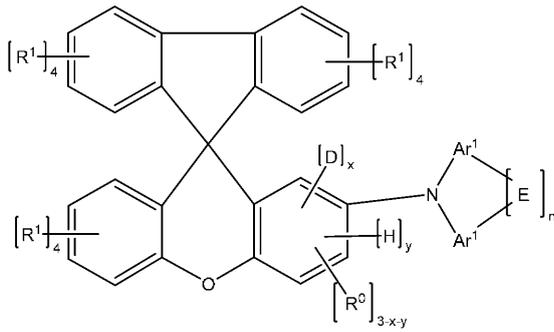
【化 3 - 2】



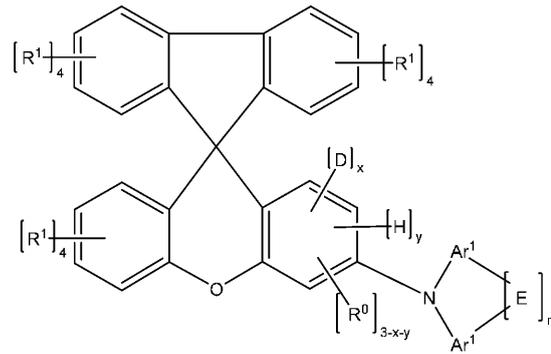
式 (I-E)



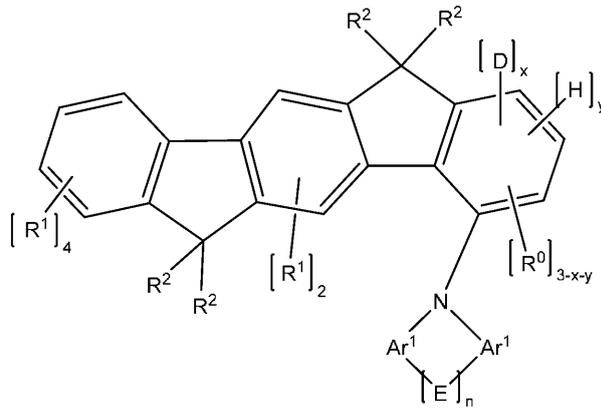
式 (I-F)



式 (I-G)



式 (I-H)



式 (I-J)

(式中、出現する変数は、請求項 1 において定義した通りである)

のうちの 1 つに合致することを特徴とする、請求項 1 の何れか 1 項に記載の化合物。

【請求項 5】

以下の式：

10

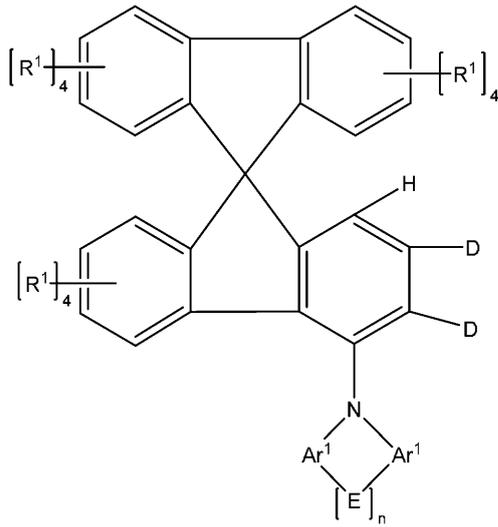
20

30

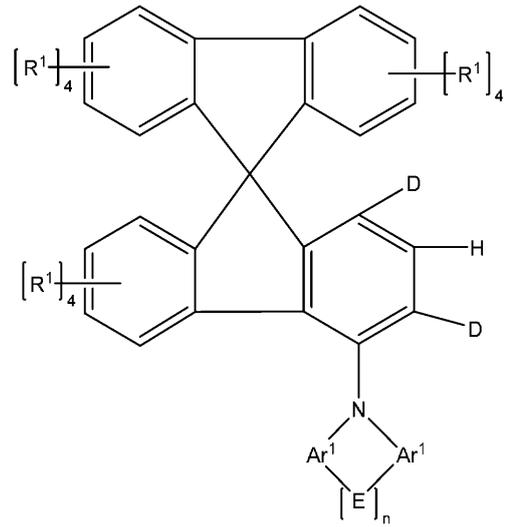
40

50

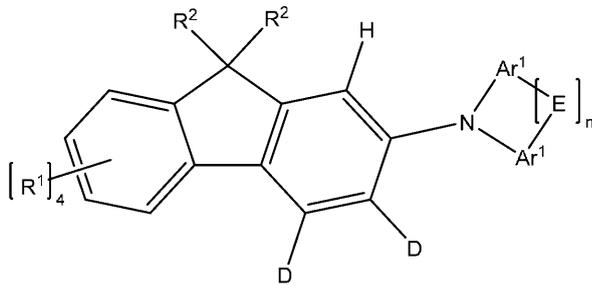
【化 4 - 1】



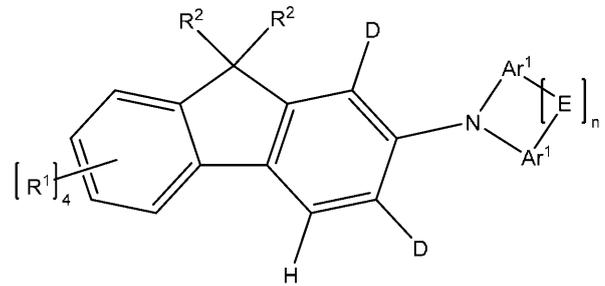
式 (I-A-a-1)



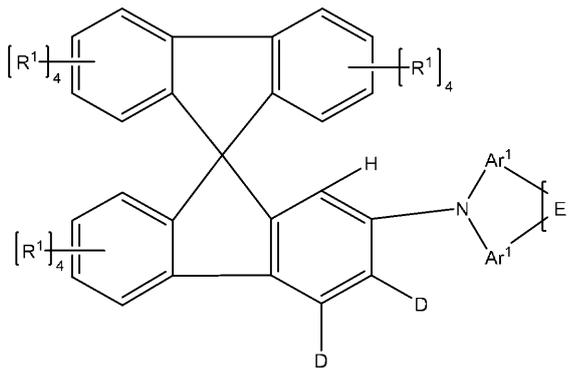
式 (I-A-b-1)



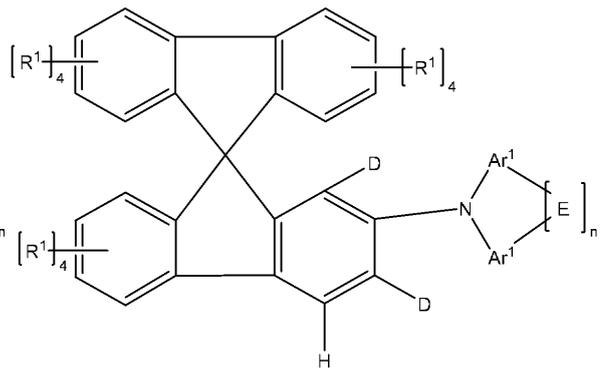
式 (I-B-a)



式 (I-B-b)



式 (I-C-a)



式 (I-C-b)

10

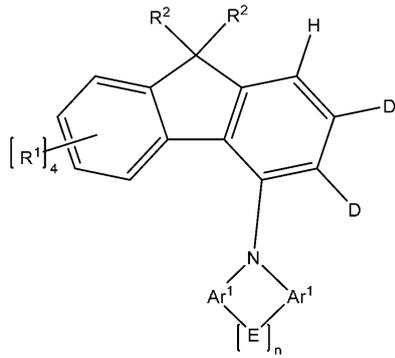
20

30

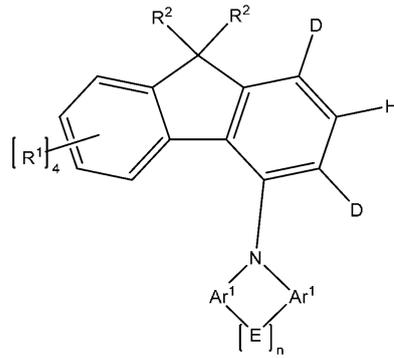
40

50

【化 4 - 2】

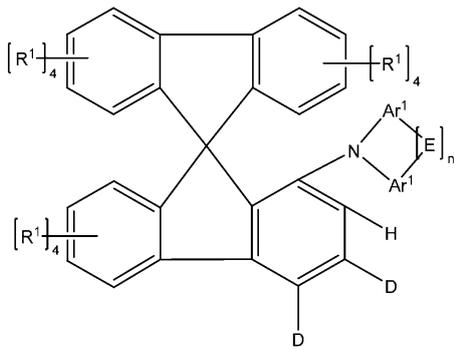


式 (I-D-a)

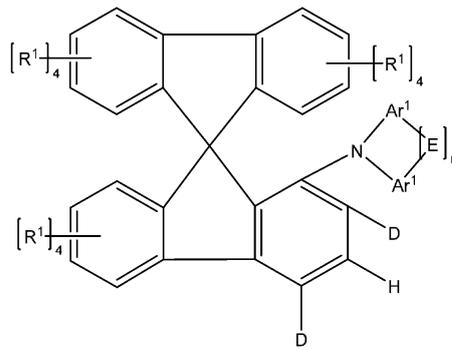


式 (I-D-b)

10

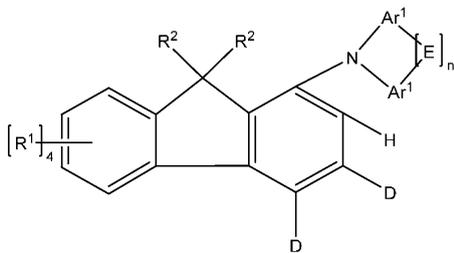


式 (I-E-a)

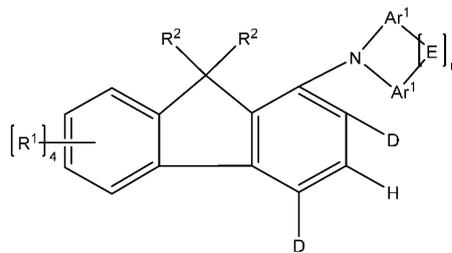


式 (I-E-b)

20

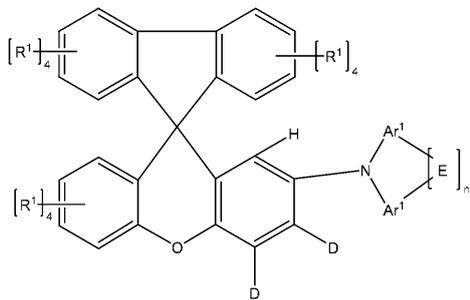


式 (I-F-a)

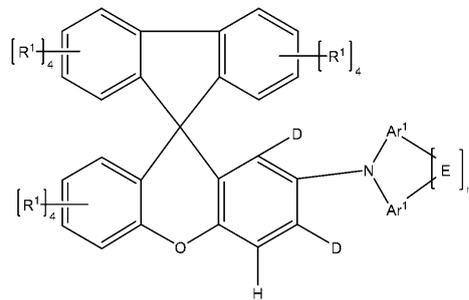


式 (I-F-b)

30



式 (I-G-a)

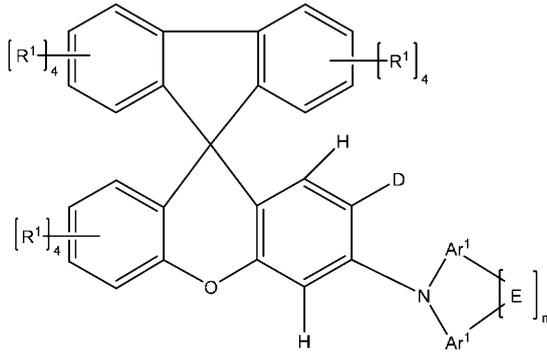


式 (I-G-b)

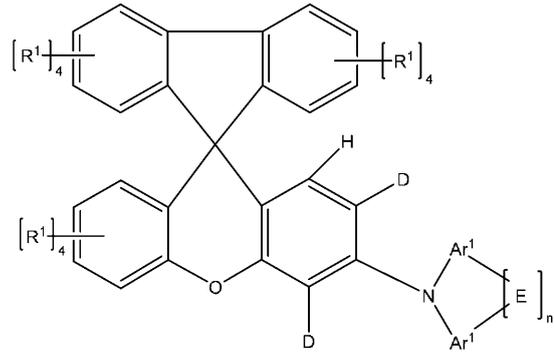
40

50

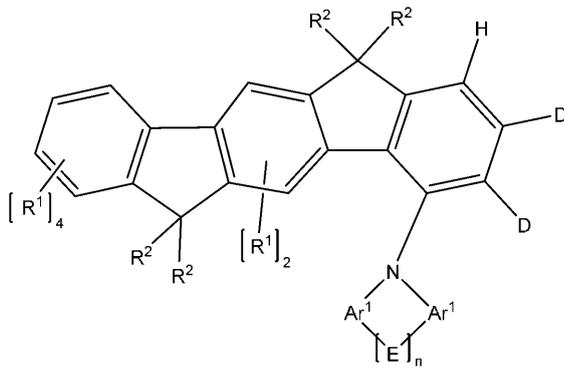
【化 4 - 3】



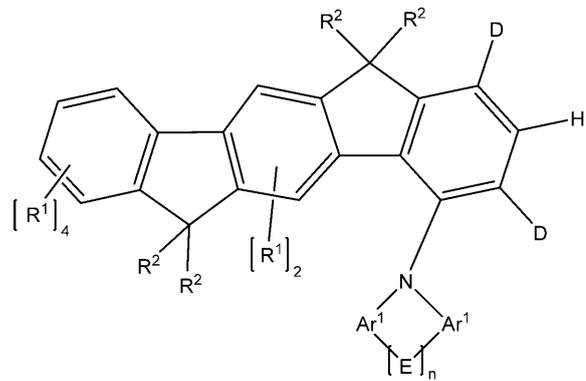
式 (I-H-a)



式 (I-H-b)



式 (I-J-a)



式 (I-J-b)

(式中、出現する変数は、請求項 1 の何れか 1 項において定義した通りである) のうちの 1 つに合致することを特徴とする、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 6】

式 (I) の前記化合物において、厳密に 1 つの Ar¹ または G 基が、1 - スピロピフルオレニル基、4 - スピロピフルオレニル基、1 - フルオレニル基および 4 - フルオレニル基から選択され、厳密に 1 つのさらなる Ar¹ または G 基が、2 - スピロピフルオレニル基および 2 - フルオレニル基から選択され、残りの第 3 の Ar¹ または G 基が、1 - スピロピフルオレニル基、4 - スピロピフルオレニル基、1 - フルオレニル基、4 - フルオレニル基、2 - スピロピフルオレニル基、2 - フルオレニル基、および 5 または 6 ~ 40 個の芳香族環原子を有する他の芳香族またはヘテロ芳香族環系から選択されることを特徴とする、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 7】

G および / または Ar¹ 基としてスピロキサンテン基、好ましくは G および / または Ar¹ 基として 2 - スピロキサンテン基または 3 - スピロキサンテン基を含むことを特徴とする、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 8】

その中の少なくとも 1 つの Ar¹ 基が、以下の式：

10

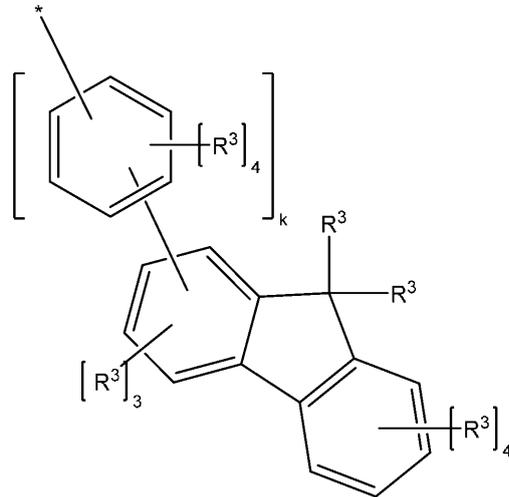
20

30

40

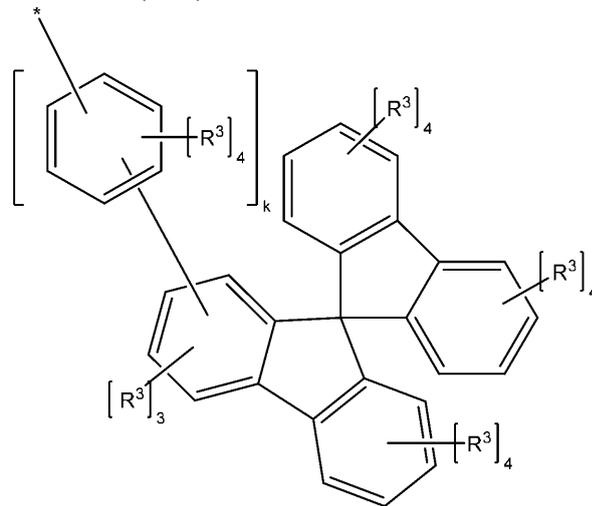
50

【化 5】



10

式 (F-1)



20

式 (F-2)

30

(式中、 k は0、1、2または3であり、好ましくは0または1であり、最も好ましくは0であり、 R^3 はそれぞれの場合において同じであるかまたは異なり、HおよびDから選択され、式の残部への結合点は*と表示され、他の変数は請求項1において定義した通りである)

のうちの1つに合致することを特徴とする、請求項1に記載の化合物。

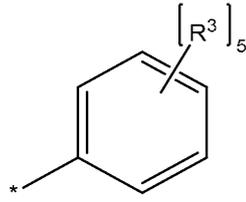
【請求項9】

その中の少なくとも1つのAr¹基が、以下の式：

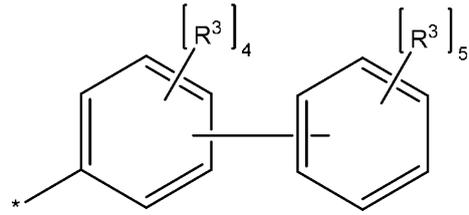
40

50

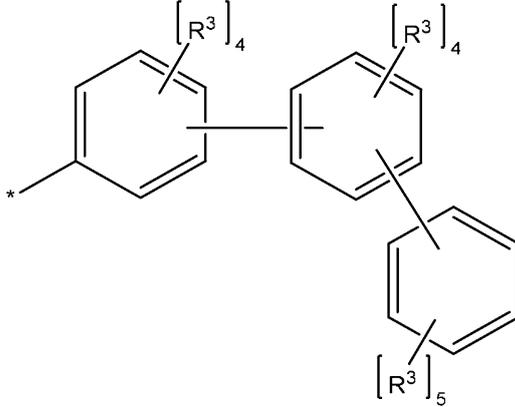
【化 6】



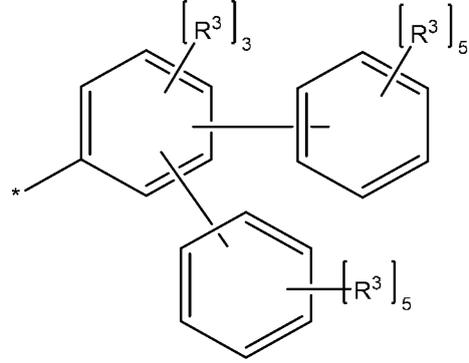
式 (A-1)



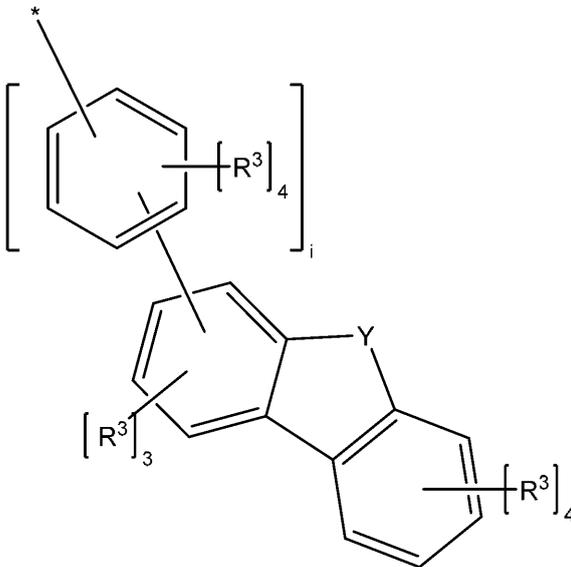
式 (A-2)



式 (A-3)



式 (A-4)



式 (A-5)

(式中、YはOまたはSであり、iは0、1、2または3であり、好ましくは0または1であり、 R^3 はそれぞれの場合において同じであるかまたは異なり、HおよびDから選択され、式の残部への結合点は*と表示され、他の変数は請求項1において定義した通りである)

のうちの1つに合致することを特徴とする、請求項8に記載の化合物。

【請求項10】

nが0であることを特徴とする、請求項1に記載の化合物。

【請求項11】

xおよびyの合計が3であり、好ましくはx=2およびy=1であることを特徴とする、請求項1に記載の化合物。

【請求項12】

互いのH/DアイソトポマーまたはH/Dアイソトポログであり、式(I)によって包含される、請求項1に記載の2つ以上の化合物を含む混合物。

10

20

30

40

50

【請求項 13】

前記混合物中の全てのアイソトポマーおよびアイソトポログ化合物について平均された水素原子対重水素原子の比が、1 : 10 乃至 10 : 1、好ましくは 1 : 3 乃至 3 : 1、より好ましくは 1 : 2 乃至 2 : 1 であることを特徴とする、請求項 12 に記載の混合物。

【請求項 14】

重水素原子の数が前記化合物中よりも整数 d だけ小さく、水素原子の数が前記化合物中よりも整数 d だけ大きい、請求項 1 に記載の化合物の H / D アイソトポログを、

a) 遷移金属触媒を用いて、かつ重水素化溶媒を使用して、請求項 1 に記載の 1 つ以上の異なる化合物に変換するか、または

b) 酸の作用下で、かつ重水素化溶媒を使用して、請求項 1 に記載の 1 つ以上の異なる化合物に変換する

ことを特徴とする、請求項 1 に記載の化合物を調製するための方法。

【請求項 15】

重水素原子の数が前記化合物中よりも整数 d だけ小さく、水素原子の数が前記化合物中よりも整数 d だけ大きい、請求項 1 に記載の化合物の H / D アイソトポログを、

a) 遷移金属触媒を用いて、かつ重水素化溶媒を使用して、請求項 1 に記載の 1 つ以上の異なる化合物に変換するか、または

b) 酸の作用下で、かつ重水素化溶媒を使用して、請求項 1 に記載の 1 つ以上の異なる化合物に変換する

ことを特徴とする、請求項 12 もしくは 13 に記載の混合物を調製するための方法。

【請求項 16】

請求項 1 に記載の化合物および少なくとも 1 種の溶媒を含む、調合物。

【請求項 17】

電子デバイスにおける、請求項 1 に記載の化合物の使用。

【請求項 18】

電子デバイスにおける、請求項 12 もしくは 13 に記載の混合物の使用。

【請求項 19】

請求項 1 に記載の化合物を含む、電子デバイス、好ましくは有機エレクトロルミネッセントデバイス。

【請求項 20】

請求項 12 もしくは 13 に記載の混合物を含む、電子デバイス、好ましくは有機エレクトロルミネッセントデバイス。

【請求項 21】

アノード、カソード、発光層、および電子阻止層を含む有機エレクトロルミネッセントデバイスであって、前記電子阻止層が、請求項 1 に記載の化合物を含有することを特徴とする、請求項 17 に記載の電子デバイス。

【請求項 22】

アノード、カソード、発光層、および電子阻止層を含む有機エレクトロルミネッセントデバイスであって、前記電子阻止層が請求項 12 もしくは 13 に記載の混合物を含有することを特徴とする、請求項 18 に記載の電子デバイス。

10

20

30

40

【 国際調査報告 】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT		International application No. PCT/EP2022/073050
A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER <i>H01L 51/54(2006.01)i</i> According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
B. FIELDS SEARCHED Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) H01L Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) EPO-Internal		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 2021 120835 A1 (SHAANXI LIGHTE OPTOELECTRONICS MAT CO LTD [CN]) 24 June 2021 (2021-06-24) compound 149	1,3,10-12,14,16
X	WO 2021 156323 A1 (MERCK PATENT GMBH [DE]) 12 August 2021 (2021-08-12) page 82, lines 4-9,16-24; compounds HTM-1, HTM-2, HTM-3 page 1, line 29 - page 2, line 8	1-18
X,P	WO 2021 206478 A1 (DUK SAN NEOLUX CO LTD [KR]) 14 October 2021 (2021-10-14) compounds P-1	1
<input type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex.		
* Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed		"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art "&" document member of the same patent family
Date of the actual completion of the international search 24 November 2022		Date of mailing of the international search report 02 December 2022
Name and mailing address of the ISA/EP European Patent Office p.b. 5818, Patentlaan 2, 2280 HV Rijswijk Netherlands Telephone No. (+31-70)340-2040 Facsimile No. (+31-70)340-3016		Authorized officer Fratiloiu, Silvia Telephone No.

Form PCT/ISA/210 (second sheet) (January 2015)

10

20

30

40

50

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.
PCT/EP2022/073050

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)			Publication date (day/month/year)
WO	2021120835	A1	24 June 2021	CN	111875505	A	03 November 2020
				KR	20220009466	A	24 January 2022
				WO	2021120835	A1	24 June 2021
WO	2021156323	A1	12 August 2021	CN	115003654	A	02 September 2022
				EP	4100392	A1	14 December 2022
				KR	20220139919	A	17 October 2022
				WO	2021156323	A1	12 August 2021
WO	2021206478	A1	14 October 2021	CN	115380025	A	22 November 2022
				KR	20210126822	A	21 October 2021
				WO	2021206478	A1	14 October 2021

10

20

30

40

50

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Internationales Aktenzeichen
PCT/EP2022/073050

A. KLASIFIZIERUNG DES ANMELDUNGSGEGENSTANDES INV. H01L51/54 ADD.		
Nach der Internationalen Patentklassifikation (IPC) oder nach der nationalen Klassifikation und der IPC		
B. RESEARCHIERTE GEBIETE		
Recherchierter Mindestprüfstoff (Klassifikationssystem und Klassifikationssymbole) H01L		
Recherchierte, aber nicht zum Mindestprüfstoff gehörende Veröffentlichungen, soweit diese unter die recherchierten Gebiete fallen		
Während der internationalen Recherche konsultierte elektronische Datenbank (Name der Datenbank und evtl. verwendete Suchbegriffe) EPO-Internal		
C. ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN		
Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
X	WO 2021/120835 A1 (SHAANXI LIGHTE OPTOELECTRONICS MAT CO LTD [CN]) 24. Juni 2021 (2021-06-24) Verbindung 149 -----	1, 3, 10-12, 14, 16
X	WO 2021/156323 A1 (MERCCK PATENT GMBH [DE]) 12. August 2021 (2021-08-12) Seite 82, Zeilen 4-9,16-24; Verbindungen HTM-1, HTM-2, HTM-3 Seite 1, Zeile 29 - Seite 2, Zeile 8 -----	1-18
X,P	WO 2021/206478 A1 (DUK SAN NEOLUX CO LTD [KR]) 14. Oktober 2021 (2021-10-14) Verbindungen P-1 -----	1
<input type="checkbox"/> Weitere Veröffentlichungen sind der Fortsetzung von Feld C zu entnehmen <input checked="" type="checkbox"/> Siehe Anhang Patentfamilie		
* Besondere Kategorien von angegebenen Veröffentlichungen : "A" Veröffentlichung, die den allgemeinen Stand der Technik definiert, aber nicht als besonders bedeutsam anzusehen ist "E" frühere Anmeldung oder Patent, die bzw. das jedoch erst am oder nach dem internationalen Anmeldedatum veröffentlicht worden ist "L" Veröffentlichung, die geeignet ist, einen Prioritätsanspruch zweifelhaft erscheinen zu lassen, oder durch die das Veröffentlichungsdatum einer anderen im Recherchenbericht genannten Veröffentlichung belegt werden soll oder die aus einem anderen besonderen Grund angegeben ist (wie ausgeführt) "O" Veröffentlichung, die sich auf eine mündliche Offenbarung, eine Benutzung, eine Ausstellung oder andere Maßnahmen bezieht "P" Veröffentlichung, die vor dem internationalen Anmeldedatum, aber nach dem beanspruchten Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist		"T" Spätere Veröffentlichung, die nach dem internationalen Anmeldedatum oder dem Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist und mit der Anmeldung nicht kollidiert, sondern nur zum Verständnis des der Erfindung zugrundeliegenden Prinzips oder der ihr zugrundeliegenden Theorie angegeben ist "X" Veröffentlichung von besonderer Bedeutung;; die beanspruchte Erfindung kann allein aufgrund dieser Veröffentlichung nicht als neu oder auf erfinderscher Tätigkeit beruhend betrachtet werden "Y" Veröffentlichung von besonderer Bedeutung;; die beanspruchte Erfindung kann nicht als auf erfinderscher Tätigkeit beruhend betrachtet werden, wenn die Veröffentlichung mit einer oder mehreren Veröffentlichungen dieser Kategorie in Verbindung gebracht wird und diese Verbindung für einen Fachmann naheliegend ist "&" Veröffentlichung, die Mitglied derselben Patentfamilie ist
Datum des Abschlusses der internationalen Recherche 24. November 2022		Absenddatum des internationalen Recherchenberichts 02/12/2022
Name und Postanschrift der Internationalen Recherchenbehörde Europäisches Patentamt, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL - 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Fax: (+31-70) 340-3016		Bevollmächtigter Bediensteter Fratiloiu, Silvia

10

20

30

40

1

50

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Angaben zu Veröffentlichungen, die zur selben Patentfamilie gehören

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP2022/073050

Im Recherchenbericht angeführtes Patentdokument	Datum der Veröffentlichung	Mitglied(er) der Patentfamilie	Datum der Veröffentlichung
WO 2021120835 A1	24-06-2021	CN 111875505 A	03-11-2020
		KR 20220009466 A	24-01-2022
		WO 2021120835 A1	24-06-2021

WO 2021156323 A1	12-08-2021	CN 115003654 A	02-09-2022
		EP 4100392 A1	14-12-2022
		KR 20220139919 A	17-10-2022
		WO 2021156323 A1	12-08-2021

WO 2021206478 A1	14-10-2021	CN 115380025 A	22-11-2022
		KR 20210126822 A	21-10-2021
		WO 2021206478 A1	14-10-2021

10

20

30

40

50

フロントページの続き

(51)国際特許分類

F I

テーマコード (参考)

<i>C 0 7 B</i>	<i>59/00 (2006.01)</i>	<i>C 0 7 B</i>	<i>59/00</i>	
<i>C 0 9 K</i>	<i>11/06 (2006.01)</i>	<i>C 0 9 K</i>	<i>11/06</i>	<i>6 9 0</i>
<i>H 1 0 K</i>	<i>50/18 (2023.01)</i>	<i>H 1 0 K</i>	<i>50/18</i>	
<i>H 1 0 K</i>	<i>85/60 (2023.01)</i>	<i>H 1 0 K</i>	<i>85/60</i>	
<i>H 1 0 K</i>	<i>50/15 (2023.01)</i>	<i>H 1 0 K</i>	<i>50/15</i>	

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

ラーセ 2 5 0、メルク・カーゲーアーアー気付

(72)発明者

メイヤー、セバスティアン

ドイツ連邦共和国、6 4 2 9 3 ダルムシュタット、フランクフルター・シュトラッセ 2 5 0、メ
 ルク・カーゲーアーアー気付

Fターム (参考)

3K107 AA01 BB01 BB02 CC04 CC21 DD74 DD78 DD87
 4H006 AA01 AA02 AA03 AB92 AC84 CN10