(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号
特許第7250773号
(P7250773)

(45)発行日　令和5年4月3日(2023.4.3)

(24)登録日　令和5年3月24日(2023.3.24)

(51)国際特許分類

		FI		
ＣＯ７Ｃ　211/61	(2006.01)	ＣＯ７Ｃ	211/61	ＣＳＰ
Ｈ１０Ｋ　50/00	(2023.01)	Ｈ０５Ｂ	33/14	Ｂ
Ｈ１０Ｋ　50/15	(2023.01)	Ｈ０５Ｂ	33/22	Ｄ
ＣＯ７Ｃ　211/54	(2006.01)	ＣＯ７Ｃ	211/54	
ＣＯ７Ｄ　307/91	(2006.01)	ＣＯ７Ｄ	307/91	

請求項の数　14　（全158頁）　最終頁に続く

(21)出願番号　特願2020-513911(P2020-513911)
(86)(22)出願日　平成30年9月5日(2018.9.5)
(65)公表番号　特表2020-533324(P2020-533324 A)
(43)公表日　令和2年11月19日(2020.11.19)
(86)国際出願番号　PCT/EP2018/073794
(87)国際公開番号　WO2019/048443
(87)国際公開日　平成31年3月14日(2019.3.14)
審査請求日　令和3年9月3日(2021.9.3)
(31)優先権主張番号　17190206.7
(32)優先日　平成29年9月8日(2017.9.8)
(33)優先権主張国・地域又は機関　欧州特許庁(EP)

(73)特許権者　597035528
メルク パテント ゲーエムベーハー
ドイツ国，Ｄ－６４２９３ ダルムスタッド フランクフルター ストラッセ ２５０
(74)代理人　110003708
弁理士法人鈴榮特許綜合事務所
(74)代理人　100108855
弁理士　蔵田 昌俊
(74)代理人　100103034
弁理士　野河 信久
(74)代理人　100179062
弁理士　井上 正
(74)代理人　100199565
弁理士　飯野 茂

最終頁に続く

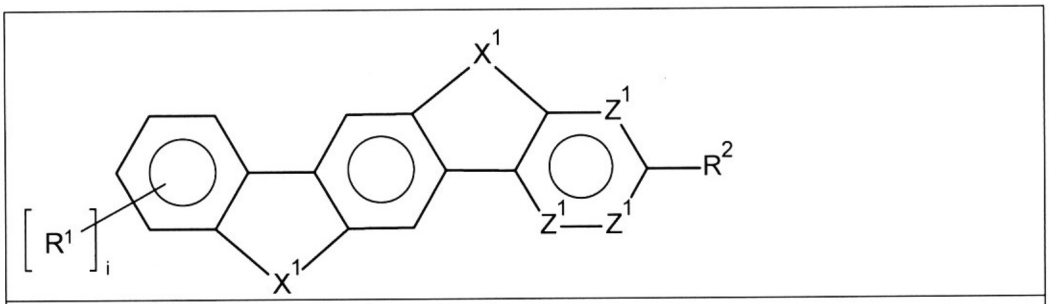
(54)【発明の名称】　電子デバイス用材料

(57)【特許請求の範囲】

【請求項１】

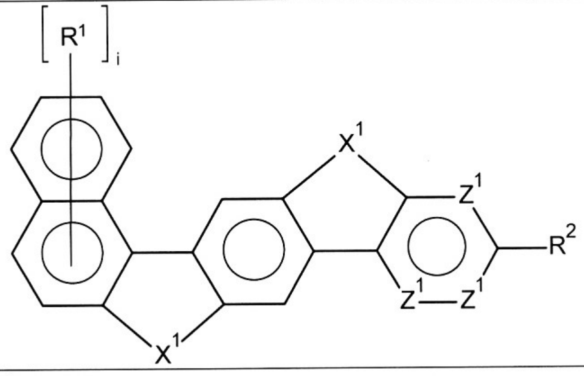
以下の式（Ｉ－１）、（Ｉ－３）、（Ｉ－６）、（Ｉ－７）および（Ｉ－８）のうちの１つに対応する化合物；、

【化１－１】

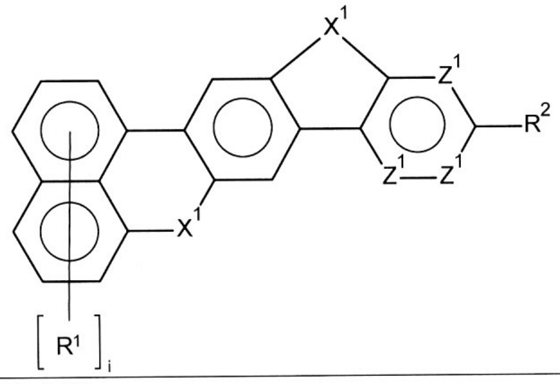


式 (I-1)

【化１－２】

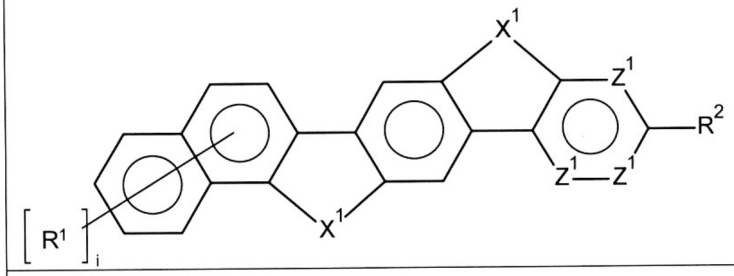


式 (I-3)

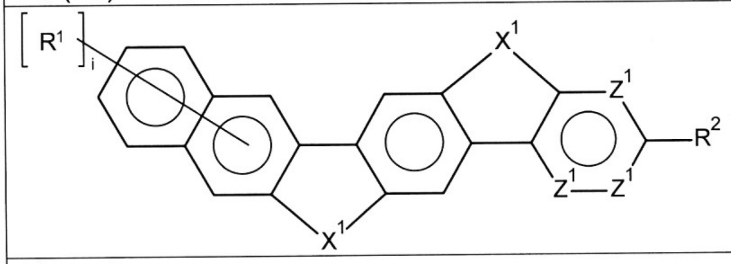


式 (I-6)

【化１－３】



式 (I-7)



式 (I-8)

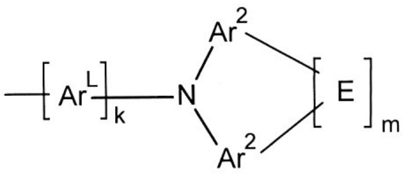
（式中、出現する可変基は、下記の通りである：

Z^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、CR^1およびCR^3から選択され；

X^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、$-C(R^4)_2-$から選択される２価基であり；

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、式（Ｎ）

【化２】



式(N)

の基であり；

Ａｒ^{L}は、６～４０個の芳香族環原子を有し、１つ以上のＲ^{5}ラジカルにより置換されていてもよい芳香族環系から選択され；

Ａｒ^{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、６～４０個の芳香族環原子を有し、１つ以上のＲ^{5}ラジカルにより置換されていてもよい芳香族環系から選択され；

Ｅは、単結合またはＣ（Ｒ^{5}）$_{2}$、Ｓｉ（Ｒ^{5}）$_{2}$、Ｎ（Ｒ^{5}）、Ｏ、およびＳから選択される２価基であり；

Ｒ^{2}は、Ｈ、Ｄ、Ｆ、ＣＮ、Ｎ（Ｒ^{7}）$_{2}$、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；ここで、言及した前記アルキル基、ならびに言及した前記芳香族環系およびヘテロ芳香族環系は、それぞれ１つ以上のＲ^{7}ラジカルにより置換されていてもよく；

Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、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、Ｎ（Ｒ^{7}）$_{2}$、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；ここで、言及した前記アルキル基、ならびに言及した前記芳香族環系およびヘテロ芳香族環系は、それぞれ１つ以上のＲ^{7}ラジカルにより置換されていてもよく；

Ｒ^{6}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；ここで、言及した前記アルキル基、ならびに言及した前記芳香族環系およびヘテロ芳香族環系は、それぞれ１つ以上のＲ^{7}ラジカルにより置換されていてもよく；

Ｒ^{7}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であり；

ｋは、０または１であり、ここで、ｋ＝０の場合、前記Ａｒ^{L}基は存在せず、式（Ｎ）の基の窒素原子は、結合位置を構成し；

ｍは、０または１であり、ここで、ｍ＝０の場合、前記Ｅ基は存在せず、前記Ａｒ^{2}基は互いに結合しておらず；

ｉは、０または１であり、ここで、ｉ＝０の場合、前記Ｒ^{1}基は存在せず；

ここで、ＣＲ^{1}である少なくとも１つのＺ^{1}基が存在し、前記化合物は、それぞれ芳香族環上の非占有位置においてＲ^{3}またはＲ^{6}ラジカルにより置換されていてもよい。）

【請求項２】

ｉ）１つのＺ^{1}基がＣＲ^{1}であり、他の２つのＺ^{1}基がＣＲ^{3}である、またはｉｉ）２つのＺ^{1}基がＣＲ^{1}であり、他のＺ^{1}基がＣＲ^{3}である、の何れか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３】

Ｘ^{1}への結合に対してメタ位置にあるＺ^{1}基がＣＲ^{1}であることを特徴とする、請求項１または２に記載の化合物。

【請求項４】

窒素原子に直接結合しているＡｒ^{2}の基が芳香族環系であ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。

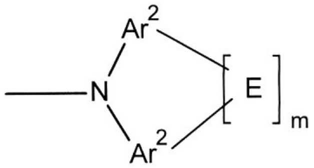
【請求項５】

ｍ＝０であ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】

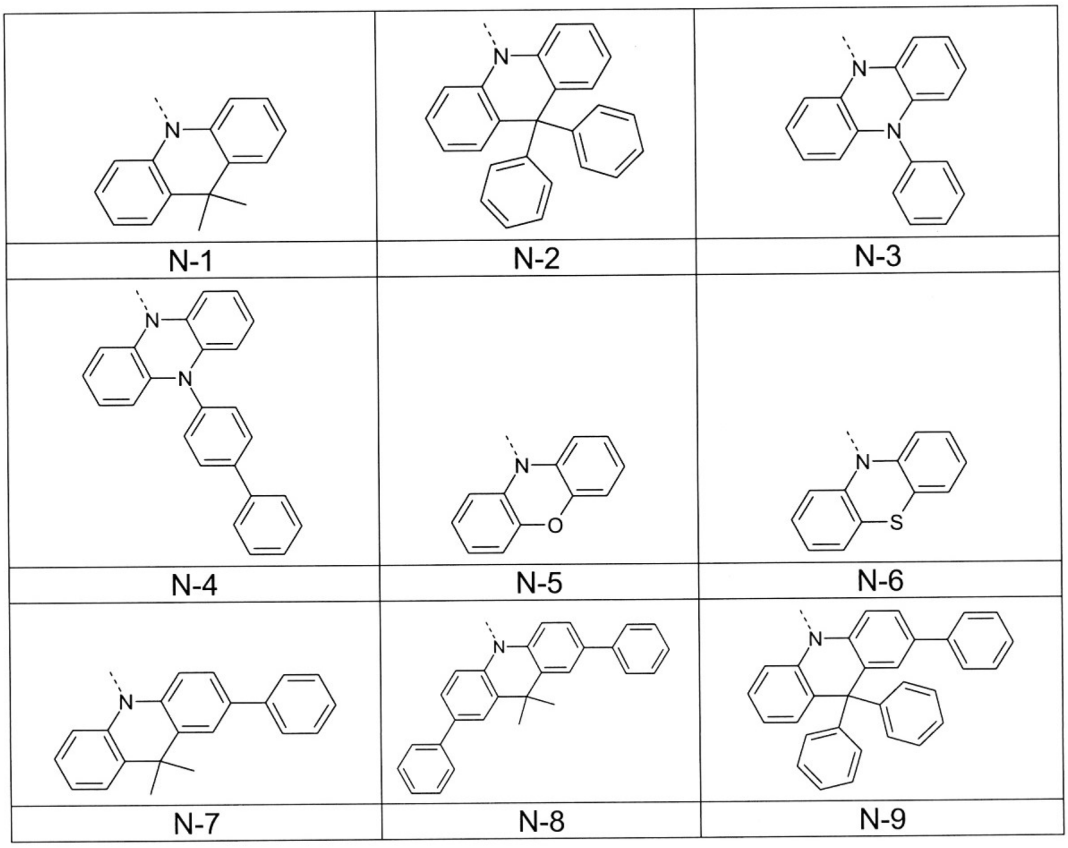
ｍ＝１であり、前記式（Ｎ）の前記基からの単位

【化３】

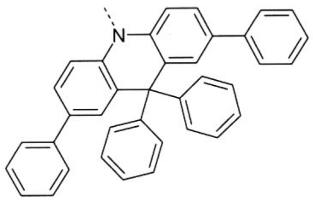
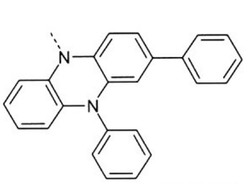
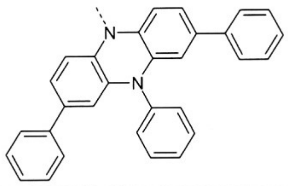
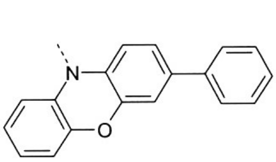
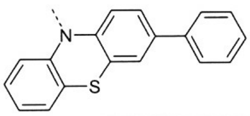
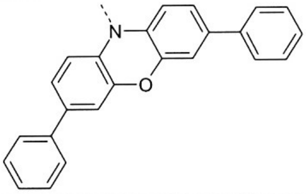
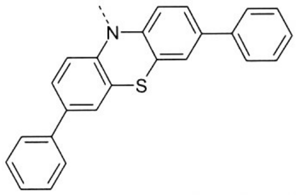
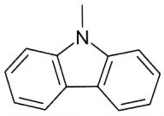
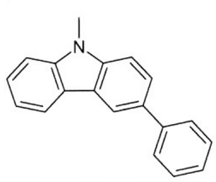
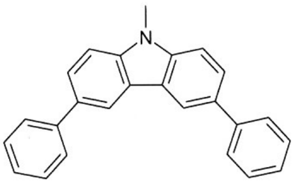
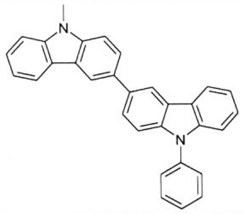
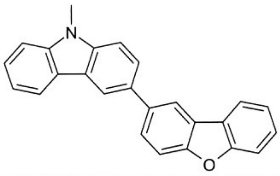
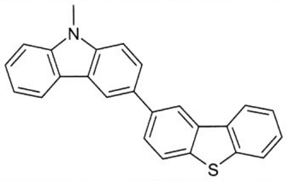
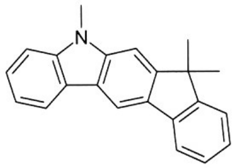
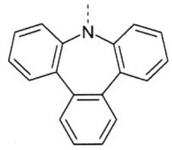
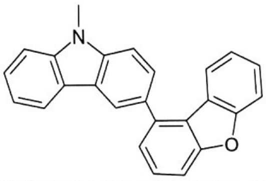
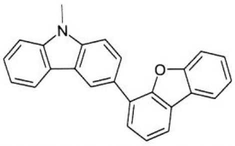
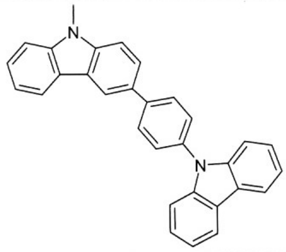


が、下記の基：

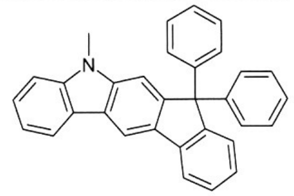
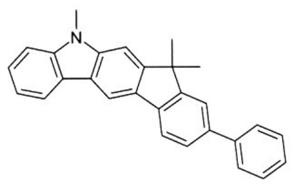
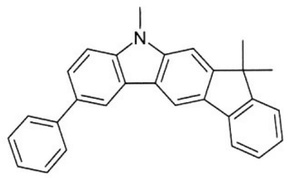
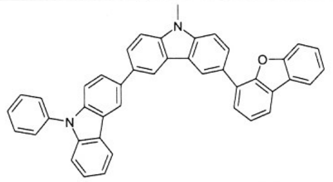
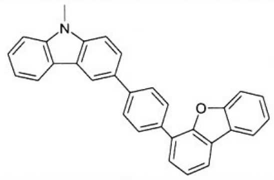
【化４－１】



【化４－２】

		
N-10	N-11	N-12
		
N-13	N-14	N-15
		
N-16	N-17	N-18
		
N-19	N-20	N-21
		
N-22	N-23	N-24
		
N-25	N-26	N-27

【化４－３】

		
N-28	N-29	N-30
		
N-31	N-32	

（式中、前記基は、それらの非占有位置においてそれぞれＲ^{5}ラジカルにより置換されていてもよく、破線で示される結合は、式の残部への結合を表す）
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】

Ｒ^{2}がＨであることを特徴とする、請求項１～６の何れか１項に記載の化合物。

【請求項８】

Ｒ^{6}がＨであ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】

２つのカルボン酸エステル基、芳香族またはヘテロ芳香族環系および反応基を持つベンゼン化合物を、スズキ反応において、ボロン酸基ならびに反応基、ジアリールアミノ基、ジアリールアミノアリール基およびジアリールアミノヘテロアリール基から選択される基を含有するベンゼン化合物と反応させることを特徴とする、請求項１～８の何れか１項に記載の式（Ｉ－１）、（Ｉ－３）、（Ｉ－６）、（Ｉ－７）および（Ｉ－８）のうちの１つに対応する化合物を調製するための方法。

【請求項１０】

請求項１～８の何れか１項に記載の少なくとも１種の化合物と、少なくとも１種の溶媒を含む調合物。

【請求項１１】

請求項１～８の何れか１項に記載の少なくとも１種の化合物を含む電子デバイス。

【請求項１２】

アノード、カソードおよび少なくとも１つの発光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、前記少なくとも１種の化合物を含むのが発光層および正孔輸送層から選択される前記デバイスの少なくとも１つの有機層であることを特徴とする、請求項１１に記載の電子デバイス。

【請求項１３】

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、前記少なくとも１種の化合物が電子阻止層に存在することを特徴とする、請求項１２に記載の有機エレクトロルミネッセントデバイス。

【請求項１４】

請求項１～８の何れか１項に記載の化合物の電子デバイスにおける使用。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【０００１】

本願は、以下に定義する式（Ｉ）による、アミノ基、架橋アミノ基およびカルバゾール基から選択される基を含有する芳香族化合物に関する。これらの化合物は、電子デバイスにおける使用に適している。

【０００２】

本願に関する電子デバイスは、機能材料として有機半導体材料を含有する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、電圧を印加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の構成および機能の一般原理は、当業者に公知である。

【０００３】

電子デバイス、とりわけＯＬＥＤにおいて、性能データ、とりわけ寿命、効率および作動電圧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、十分に満足のいく解決策は未だ見出されていない。

【０００４】

加えて、とりわけＯＬＥＤの正孔輸送層に使用するための、ガラス転移温度が高く、結晶化する傾向が低く、屈折率が高い材料が探求されている。

【０００５】

電子デバイスの性能データに大きく影響するのが、発光層と、正孔輸送機能を有する層である。これらの層に使用するための新規な化合物、とりわけ正孔輸送化合物、および発光層においてとりわけリン光発光体用のマトリックス材料として機能できる化合物も求められている。

【０００６】

アミノ基、架橋アミノ基およびカルバゾール基から選択される基を含有する多様な芳香族化合物が、先行技術において電子デバイスにおける正孔輸送材料および／またはマトリックス材料として公知である。

【０００７】

しかしながら、電子デバイスにおける使用に適する代替的化合物が依然として必要とされている。電子デバイスの使用における性能データに関し、とりわけ寿命、作動電圧および効率に関し、改善も必要とされている。

【０００８】

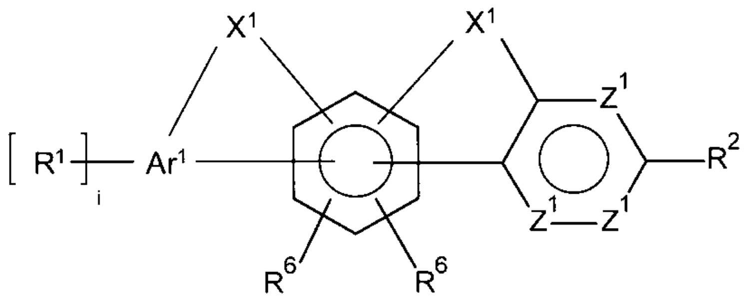
上記の構造のクラスからの特定の化合物は、電子デバイスにおける使用に、とりわけＯＬＥＤにおける使用に、殊にとりわけＯＬＥＤにおける正孔輸送材料としての使用およびリン光発光体用のマトリックス材料としての使用に極めて適していることが現在見出されている。化合物は、好ましくはデバイスの長寿命、高効率および低作動電圧に繋がるものである。さらに好ましくは、化合物は、結晶化する傾向が低く、ガラス転移温度が高く、屈折率が高いものである。

【０００９】

化合物は、下記の式（Ｉ）：

【００１０】

【化１】



式 (I)

【００１１】

（式中、出現する可変基は、下記の通りである：

Ｚ^{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、ＣＲ^{1}およびＣＲ^{3}から選

択され；

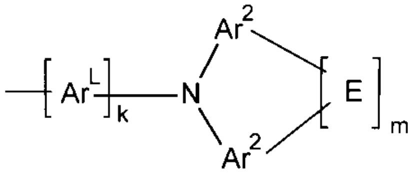
Ａｒ^{1}は、６～２０個の芳香族環原子を有し、１つ以上のＲ^{3}ラジカルにより置換されていてもよいアリール基、または５～２０個の芳香族環原子を有し、１つ以上のＲ^{3}ラジカルにより置換されていてもよいヘテロアリール基であり；

Ｘ^{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、－Ｃ（Ｒ^{4}）$_{2}$－、－Ｃ（Ｒ^{4}）$_{2}$－Ｃ（Ｒ^{4}）$_{2}$－、－ＣＲ^{4}＝ＣＲ^{4}－および－Ｓｉ（Ｒ^{4}）$_{2}$－から選択される２価基であり；

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、式（Ｎ）

【００１２】

【化２】



式 (N)

【００１３】

の基であり；

Ａｒ^{L}は、６～４０個の芳香族環原子を有し、１つ以上のＲ^{5}ラジカルにより置換されていてもよい芳香族環系、および５～４０個の芳香族環原子を有し、１つ以上のＲ^{5}ラジカルにより置換されていてもよいヘテロ芳香族環系から選択され；

Ａｒ^{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、６～４０個の芳香族環原子を有し、１つ以上のＲ^{5}ラジカルにより置換されていてもよい芳香族環系、および５～４０個の芳香族環原子を有し、１つ以上のＲ^{5}ラジカルにより置換されていてもよいヘテロ芳香族環系から選択され；

Ｅは、単結合またはＣ（Ｒ^{5}）$_{2}$、Ｓｉ（Ｒ^{5}）$_{2}$、Ｎ（Ｒ^{5}）、Ｏ、およびＳから選択される２価基であり；

Ｒ^{2}は、Ｈ、Ｄ、Ｆ、Ｃ（＝Ｏ）Ｒ^{7}、ＣＮ、Ｓｉ（Ｒ^{7}）$_{3}$、Ｎ（Ｒ^{7}）$_{2}$、Ｐ（＝Ｏ）（Ｒ^{7}）$_{2}$、ＯＲ^{7}、Ｓ（＝Ｏ）Ｒ^{7}、Ｓ（＝Ｏ）$_{2}$Ｒ^{7}、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；ここで、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１つ以上のＲ^{7}ラジカルにより置換されていてもよく；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中の１つ以上のＣＨ$_{2}$基は、－Ｒ^{7}Ｃ＝ＣＲ^{7}－、－Ｃ≡Ｃ－、Ｓｉ（Ｒ^{7}）$_{2}$、Ｃ＝Ｏ、Ｃ＝ＮＲ^{7}、－Ｃ（＝Ｏ）Ｏ－、－Ｃ（＝Ｏ）ＮＲ^{7}－、Ｐ（＝Ｏ）（Ｒ^{7}）、－Ｏ－、－Ｓ－、ＳＯまたはＳＯ$_{2}$により置きかえられていてもよく；

Ｒ^{3}、Ｒ^{4}、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、Ｃ（＝Ｏ）Ｒ^{7}、ＣＮ、Ｓｉ（Ｒ^{7}）$_{3}$、Ｎ（Ｒ^{7}）$_{2}$、Ｐ（＝Ｏ）（Ｒ^{7}）$_{2}$、ＯＲ^{7}、Ｓ（＝Ｏ）Ｒ^{7}、Ｓ（＝Ｏ）$_{2}$Ｒ^{7}、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；ここで、２つ以上のＲ^{3}またはＲ^{4}または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、それぞれ１つ以上のＲ^{7}ラジカルにより置換されていてもよく；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中の１つ以上のCH_2基は、－R^7C＝CR^7－、－C≡C－、Si（R^7）$_2$、C＝O、C＝NR^7、－C（＝O）O－、－C（＝O）NR^7－、NR^7、P（＝O）（R^7）、－O－、－S－、SOまたはSO_2により置きかえられていてもよく；

R^6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、C（＝O）R^7、CN、Si（R^7）$_3$、P（＝O）（R^7）$_2$、OR^7、S（＝O）R^7、S（＝O）$_2$$R^7$、１～２０個の炭素原子を有する直鎖アルキルまたはアルコキシ基、３～２０個の炭素原子を有する分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、２～２０個の炭素原子を有するアルケニルまたはアルキニル基、６～４０個の芳香族環原子を有する芳香族環系、および５～４０個の芳香族環原子を有するヘテロ芳香族環系から選択され；ここで、２つ以上のR^6ラジカルは、互いに結合していても、環を形成していてもよく；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基、ならびに言及した芳香族環系およびヘテロ芳香族環系は、それぞれ１つ以上のR^7ラジカルにより置換されていてもよく；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基中の１つ以上のCH_2基は、－R^7C＝CR^7－、－C≡C－、Si（R^7）$_2$、C＝O、C＝NR^7、－C（＝O）O－、－C（＝O）NR^7－、NR^7、P（＝O）（R^7）、－O－、－S－、SOまたはSO_2により置きかえられていてもよく；

R^7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、C（＝O）R^8、CN、Si（R^8）$_3$、N（R^8）$_2$、P（＝O）（R^8）$_2$、OR^8、S（＝O）R^8、S（＝O）$_2$$R^8$、１～２０個の炭素原子を有する直鎖アルキルまたはアルコキシ基、３～２０個の炭素原子を有する分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、２～２０個の炭素原子を有するアルケニルまたはアルキニル基、６～４０個の芳香族環原子を有する芳香族環系、および５～４０個の芳香族環原子を有するヘテロ芳香族環系から選択され；ここで、２つ以上のR^7ラジカルは、互いに結合していても、環を形成していてもよく；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基、ならびに言及した芳香族環系およびヘテロ芳香族環系は、それぞれ１つ以上のR^8ラジカルにより置換されていてもよく；言及したアルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基中の１つ以上のCH_2基は、－R^8C＝CR^8－、－C≡C－、Si（R^8）$_2$、C＝O、C＝NR^8、－C（＝O）O－、－C（＝O）NR^8－、NR^8、P（＝O）（R^8）、－O－、－S－、SOまたはSO_2により置きかえられていてもよく；

R^8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；ここで、２つ以上のR^8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、芳香族環系およびヘテロ芳香族環系は、FまたはCNにより置換されていてもよく；

kは、０または１であり、ここで、k＝０の場合、Ar^L基は存在せず、式（N）の基の窒素原子は、結合位置を構成し；

mは、０または１であり、ここで、m＝０の場合、E基は存在せず、Ar^2基は互いに結合しておらず；

iは、０または１であり、ここで、i＝０の場合、R^1基は存在せず；

CR^1である少なくとも１つのZ^1基が存在する）

に合致する。

【００１４】

式（Ｉ）の６員環に描かれている円は、当該の６員環が芳香族性を有することを意味する。ベンゼン環の中へと描かれている結合は、当該の結合が、ベンゼン環上の任意の位置に局在していていてもよいことを表している。より詳細には、X^1架橋は、互いにトランス位置だけでなくシス位置に配置されていてもよい。

【００１５】

本発明に関するアリール基は、６～４０個の芳香族環原子を含有し、その何れもヘテロ

原子ではない。本発明に関するアリール基は、単一の芳香族環、即ちベンゼン、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。本願に関す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することを意味するものと理解される。

【００１６】

本発明に関す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つ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。本発明に関す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ェン、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。本願に関する縮合ヘテロ芳香族多環は、互いに縮合した２つ以上の単一のヘテロ芳香族環からなる。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することを意味するものと理解される。

【００１７】

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、任意所望の位置を介して芳香族またはヘテロ芳香族系に結合していてもよいが、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、チオフェン、ベンゾチオフェン、イソベンゾチオフェン、ジベンゾチオフェン、ピロール、インドール、イソインドール、カルバゾール、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、ナフトイミダゾール、フェナントロイミダゾール、ピリドイミダゾール、ピラジンイミダゾール、キノキサリンイミダゾール、オキサゾール、ベンゾオキサゾール、ナフトオキサゾール、アントロオキサゾール、フェナントロオキサゾール、イソオキサゾール、１，２－チアゾール、１，３－チアゾール、ベンゾチアゾール、ピリダジン、ベンゾピリダジン、ピリミジン、ベンゾピリミジン、キノキサリン、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。

【００１８】

本発明に関する芳香族環系は、環系に６～４０個の炭素原子を含有し、芳香族環原子としてヘテロ原子を何ら含まない。したがって、本発明に関する芳香族環系は、ヘテロアリール基を何ら含有しない。本発明に関する芳香族環系は、必ずしもアリール基のみを含有するとは限らず、複数のアリール基が単結合または非芳香族単位、たとえば１つ以上の任意に置換されていてもよいＣ、Ｓｉ、Ｎ、ＯまたはＳ原子によって結合していることも可能な系を意味すると当然に理解される。この場合、非芳香族単位は、好ましくは、系中のＨ以外の原子の総数に基づき１０％未満のＨ以外の原子を含む。たとえば、系、たとえば９，９’－スピロビフルオレン、９，９’－ジアリールフルオレン、トリアリールアミン、ジアリールエーテルおよびスチルベンも、本発明に関する芳香族環系とみなされ、２つ以上のアリール基が、たとえば、直鎖状もしくは環状アルキル、アルケニルもしくはアルキニル基、またはシリル基によって結合している系も同様である。加えて、２つ以上のアリ

ール基が単結合を介して互いに結合している系も、本発明に関する芳香族環系とみなされ、たとえば、系、たとえばビフェニルおよびテルフェニルである。

【００１９】

好ましくは、芳香族環系は、中に存在するアリール基が互いに共役している化学基を意味するものと理解される。これは、存在するアリール基が、単結合を介して、または共役に関与できる自由π電子対を有する連結単位を介して互いに結合していなければならないことを意味する。ここでの連結単位は、好ましくは窒素原子、個々のＣ＝Ｃ単位、個々のＣ≡Ｃ単位、互いに共役した複数のＣ＝Ｃ単位および／またはＣ≡Ｃ単位、－Ｏ－、ならびに－Ｓ－から選択される。

【００２０】

本発明に関するヘテロ芳香族環系は、５～４０個の芳香族環原子を含有し、そのうち少なくとも１個がヘテロ原子である。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／またはＳから選択される。ヘテロ芳香族環系は、芳香族環系の上記の定義に対応するが、芳香族環原子として少なくとも１個のヘテロ原子を有する。このようにして、ヘテロ芳香族環系は、本願の定義の意味における芳香族環系とは異なっており、芳香族環系は、この定義によれば、芳香族環原子としてヘテロ原子を何ら含有できない。

【００２１】

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、アリール基およびヘテロアリール基の下で先に言及した基から、およびビフェニル、テルフェニル、クアテルフェニル、フルオレン、スピロビフルオレン、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合せから誘導される基を意味するものと理解される。

【００２２】

本発明に関して、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CH_2基が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。

【００２３】

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CH_2基がラジカルの定義において先に言及した基により置きかえられていてもよく、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、ｓ－ペントキシ、２－メチルブトキシ、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。

【００２４】

２つ以上のラジカルが共に環を形成してもよいという表現は、本願に関して、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つのラジカルのうちの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る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される。

【００２５】

式（Ｉ）の化合物は、好ましくは単一のジアリールアミノ基のみを有する。より好ましくは、単一のアミノ基のみを有する。

【００２６】

好ましくは、１つの$Ｚ^1$基が$ＣＲ^1$であり、他の２つの$Ｚ^1$基が$ＣＲ^3$である；または、２つの$Ｚ^1$基が$ＣＲ^1$であり、他の$Ｚ^1$基が$ＣＲ^3$である。より好ましくは、１つの$Ｚ^1$基が$ＣＲ^1$であり、他の２つの$Ｚ^1$基が$ＣＲ^3$である。

【００２７】

$Ｘ^1$への結合に対してメタ位置にある$Ｚ^1$基は、$ＣＲ^1$であることが好ましい。

【００２８】

好ましくは、$Ｚ^1$基の構成要素である$Ｒ^3$ラジカルは、互いに環を形成しない。

【００２９】

好ましくは、$Ａｒ^1$は、６～１４個の芳香族環原子を有し、１つ以上の$Ｒ^3$ラジカルにより置換されていてもよいアリール基、より好ましくは、１つ以上の$Ｒ^3$ラジカルにより置換されていてもよいフェニルまたはナフチル基、最も好ましくは、１つ以上の$Ｒ^3$ラジカルにより置換されていてもよいフェニル基である。

【００３０】

$Ｘ^1$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、$Ｃ（Ｒ^4）_2$および$Ｓｉ（Ｒ^4）_2$から選択され；より好ましくは、$Ｘ^1$は$Ｃ（Ｒ^4）_2$である。

【００３１】

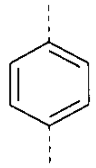
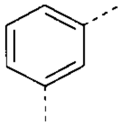
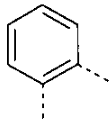
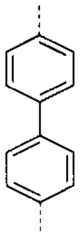
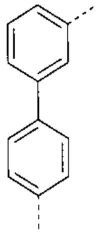
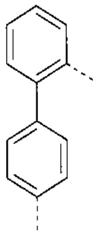
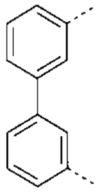
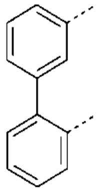
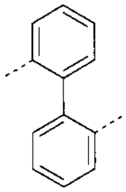
$Ａｒ^L$基は、好ましくは、６～２０個の芳香族環原子を有し、１つ以上の$Ｒ^5$ラジカルにより置換されていてもよい芳香族環系、および５～２０個の芳香族環原子を有し、１つ以上の$Ｒ^5$ラジカルにより置換されていてもよいヘテロ芳香族環系から選択される。特に好ましい$Ａｒ^L$基は、ベンゼン、ビフェニル、テルフェニル、ナフタレン、フルオレン、インデノフルオレン、スピロビフルオレン、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、およびカルバゾールから誘導される２価基から選択され、これらのそれぞれは、１つ以上の$Ｒ^5$ラジカルにより置換されていてもよい。最も好ましくは、$Ａｒ^L$は、各場合において１つ以上の$Ｒ^5$ラジカルにより置換されていてもよいベンゼンから誘導される２価基である。$Ａｒ^L$基は、それぞれの場合において同一に、または異なるように選択されてもよい。

【００３２】

好ましい$Ａｒ^L$基は、下記の式：

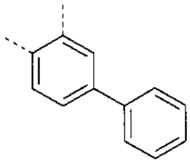
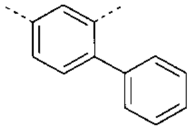
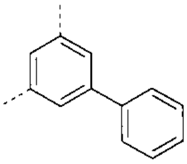
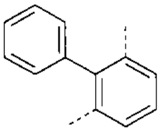
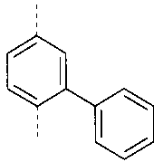
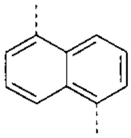
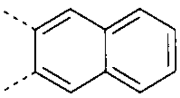
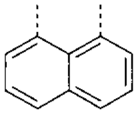
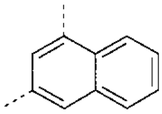
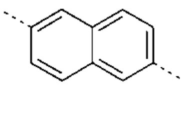
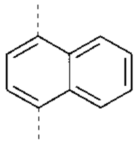
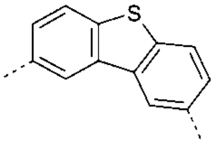
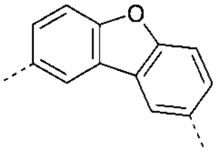
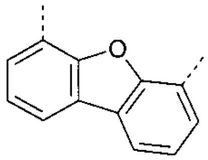
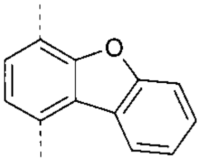
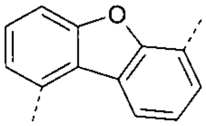
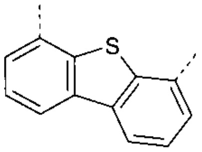
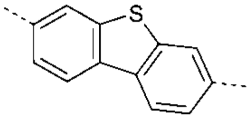
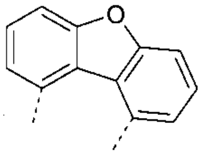
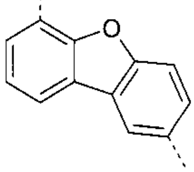
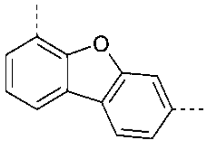
【００３３】

【化３－１】

		
Ar^{L}-1	Ar^{L}-2	Ar^{L}-3
		
Ar^{L}-4	Ar^{L}-5	Ar^{L}-6
		
Ar^{L}-7	Ar^{L}-8	Ar^{L}-9

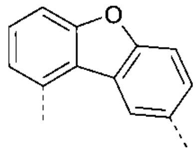
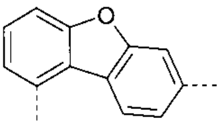
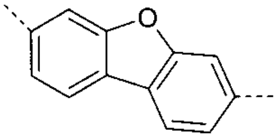
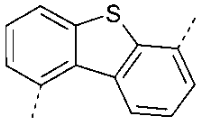
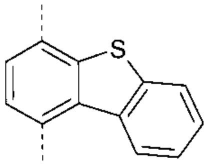
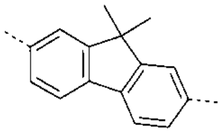
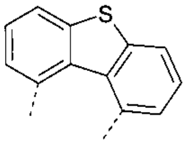
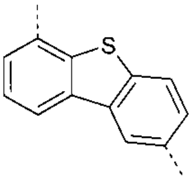
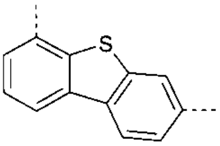
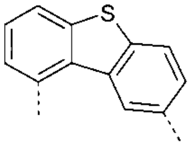
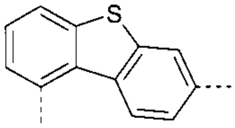
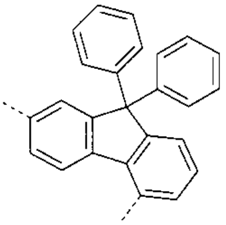
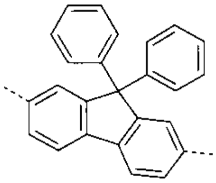
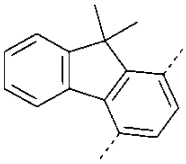
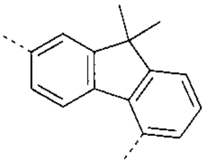
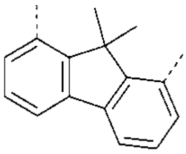
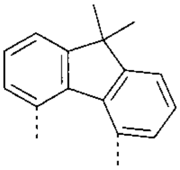
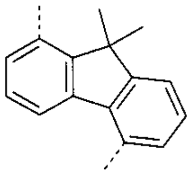
【００３４】

【化３－２】

		
Ar^{L}-10	Ar^{L}-11	Ar^{L}-12
		
Ar^{L}-13	Ar^{L}-14	Ar^{L}-15
		
Ar^{L}-16	Ar^{L}-17	Ar^{L}-18
		
Ar^{L}-19	Ar^{L}-20	Ar^{L}-21
		
Ar^{L}-22	Ar^{L}-23	Ar^{L}-24
		
Ar^{L}-25	Ar^{L}-26	Ar^{L}-27
		
Ar^{L}-28	Ar^{L}-29	Ar^{L}-30

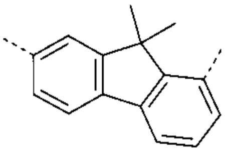
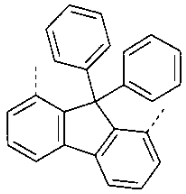
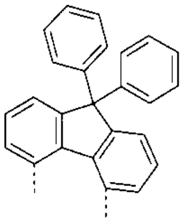
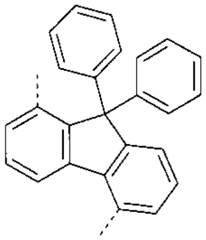
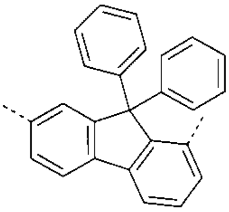
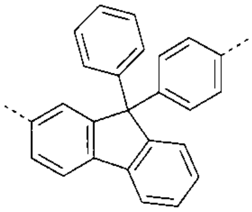
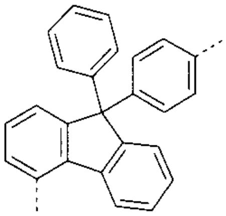
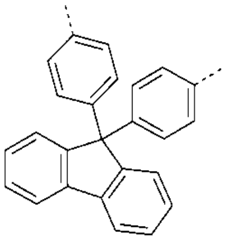
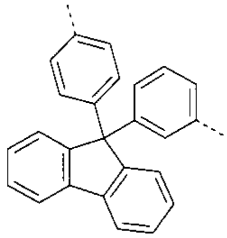
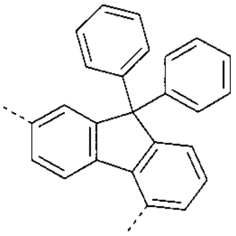
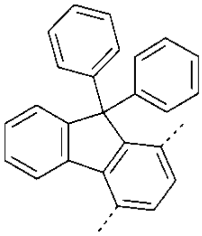
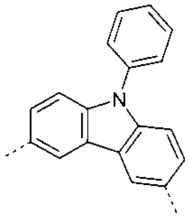
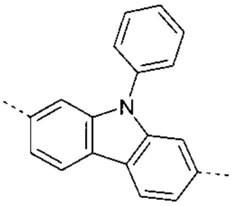
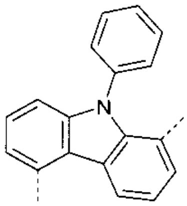
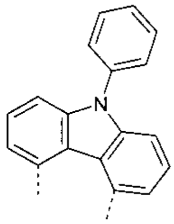
【００３５】

【化３－３】

		
Ar^{L}-31	Ar^{L}-32	Ar^{L}-33
		
Ar^{L}-34	Ar^{L}-35	Ar^{L}-36
		
Ar^{L}-37	Ar^{L}-38	Ar^{L}-39
		
Ar^{L}-40	Ar^{L}-41	Ar^{L}-42
		
Ar^{L}-43	Ar^{L}-44	Ar^{L}-45
		
Ar^{L}-46	Ar^{L}-47	Ar^{L}-48

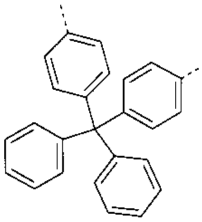
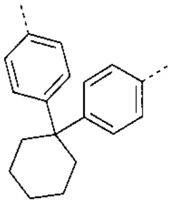
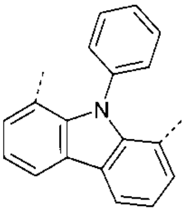
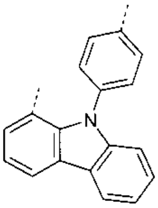
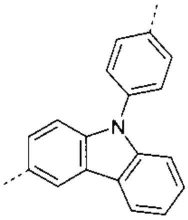
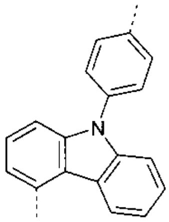
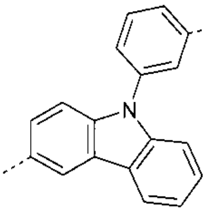
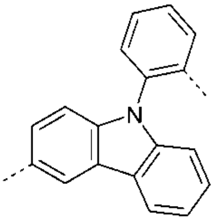
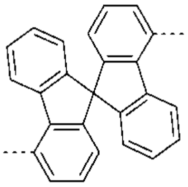
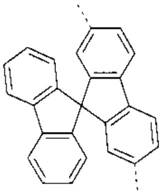
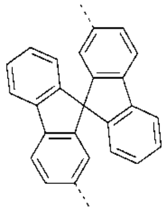
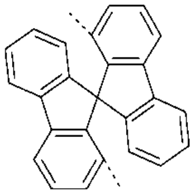
【００３６】

【化３－４】

		
Ar^L-49	Ar^L-50	Ar^L-51
		
Ar^L-52	Ar^L-53	Ar^L-54
		
Ar^L-55	Ar^L-56	Ar^L-57
		
Ar^L-58	Ar^L-59	Ar^L-60
		
Ar^L-61	Ar^L-62	Ar^L-63

【００３７】

【化３－５】

		
Ar^{L}-64	Ar^{L}-65	Ar^{L}-66
		
Ar^{L}-67	Ar^{L}-68	Ar^{L}-69
		
Ar^{L}-70	Ar^{L}-71	Ar^{L}-72
		
Ar^{L}-73	Ar^{L}-74	Ar^{L}-75

【００３８】
（式中、点線は、式（Ｉ）の残部への結合を表す）
に合致する。
【００３９】
好ましくは、Ａｒ^{2}基は、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、１つ以上のＲ^{5}ラジカルにより置換されていてもよい芳香族環系、および５～４０個の芳香族環原子を有し、１つ以上のＲ^{5}ラジカルにより置換されていてもよいヘテロ芳香族環系から選択される。
【００４０】
ここで、窒素原子に直接結合しているＡｒ^{2}の基は、芳香族環系であることが一般に好ましい。
【００４１】
好ましくは、Ａｒ^{2}基は、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、ビフェニル、テルフェニル、クアテルフェニル、ナフタレン、フルオレン、とりわけ９，９’－ジメチルフルオレンおよび９，９’－ジフェニルフルオレン、ベンゾフルオレン、スピロビフルオレン、インデノフルオレン、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、ベンゾカルバゾール、カルバゾール、ベンゾフラン、ベンゾチオフェン、インドール、キノリン、ピリジン、ピリミジン、ピラジン、ピリダジン、ならびにトリアジンから誘導される１価基から選択され、ここで、１価基は、それぞれ１つ以上のＲ^{5}ラジカルにより置換されていてもよい。あるいは、Ａｒ^{2}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、ビフェニル、テルフェニル、クアテルフェニル、ナフタレン、フルオレン、とりわけ９，９’－ジメチルフルオレンおよび９，９’－ジフェニルフルオレン、ベンゾフルオレン、スピロビフルオレン、インデノフルオレン、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、カルバゾール、ベンゾフラン、ベンゾチオフェン、インドール、キノリン、ピリジン、ピリミジン、ピラジン、ピリダジン、ならびにトリアジンから誘導される基の組合せから選択されてもよく、ここで、基は、それぞれ１つ以上のＲ^{5}ラジカルにより置換されていてもよい。

【００４２】

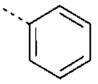
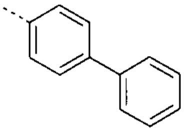
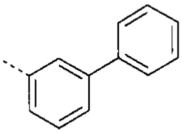
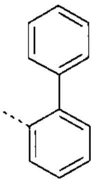
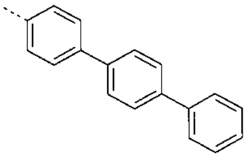
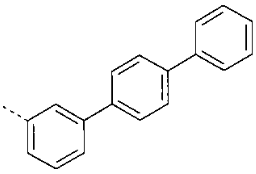
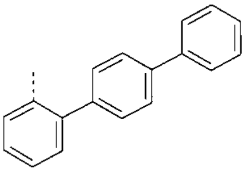
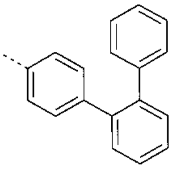
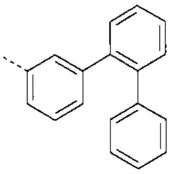
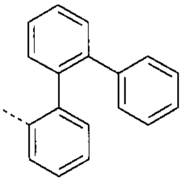
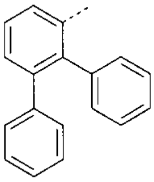
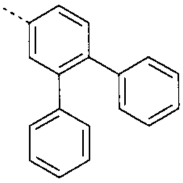
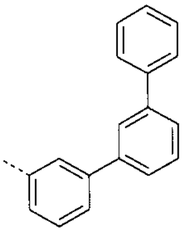
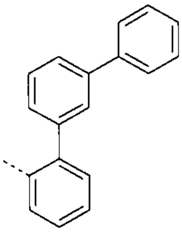
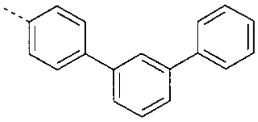
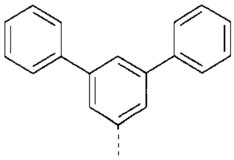
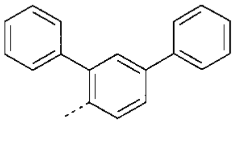
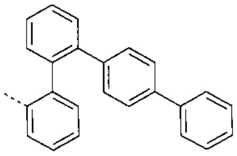
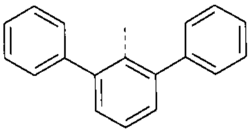
特に好ましいＡｒ^{2}基は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、フェニル、ビフェニル、テルフェニル、クアテルフェニル、ナフチル、フルオレニル、とりわけ９，９’－ジメチルフルオレニルおよび９，９’－ジフェニルフルオレニル、ベンゾフルオレニル、スピロビフルオレニル、インデノフルオレニル、ジベンゾフラニル、ジベンゾチオフェニル、カルバゾリル、ベンゾフラニル、ベンゾチオフェニル、ベンゾ縮合ジベンゾフラニル、ベンゾ縮合ジベンゾチオフェニル、ナフチル置換フェニル、フルオレニル置換フェニル、スピロビフルオレニル置換フェニル、ジベンゾフラニル置換フェニル、ジベンゾチオフェニル置換フェニル、カルバゾリル置換フェニル、ピリジル置換フェニル、ピリミジル置換フェニル、ならびにトリアジニル置換フェニルから選択され、ここで、言及した基は、それぞれ１つ以上のＲ^{5}ラジカルにより置換されていてもよい。

【００４３】

特に好ましいＡｒ^{2}基は、下記の式：

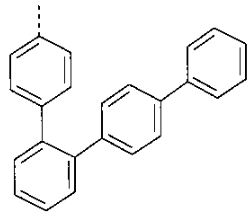
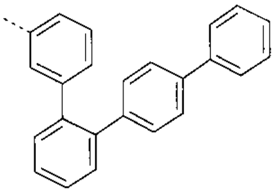
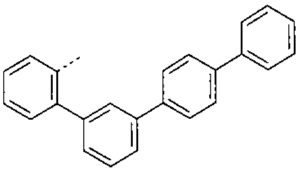
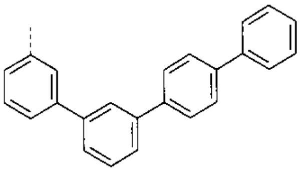
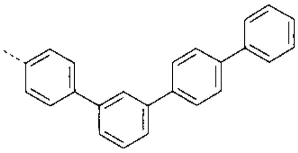
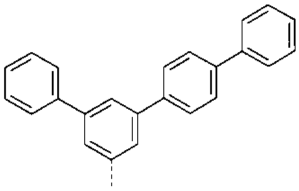
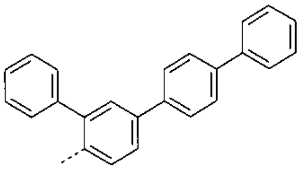
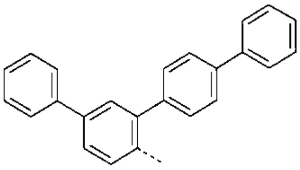
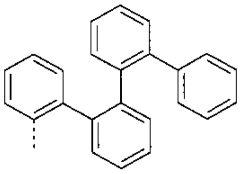
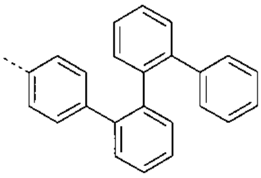
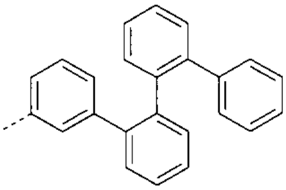
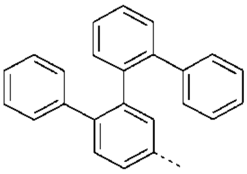
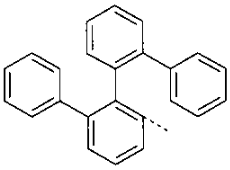
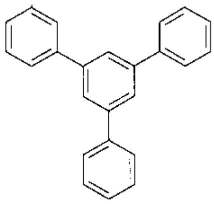
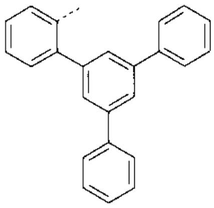
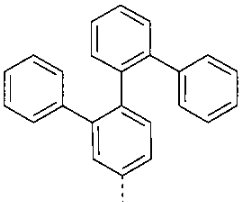
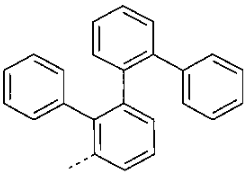
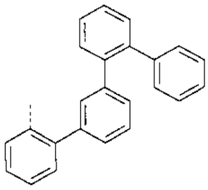
【００４４】

【化４－１】

		
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
		
Ar-19		

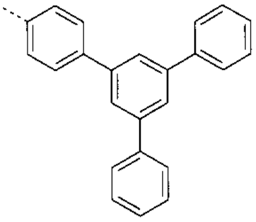
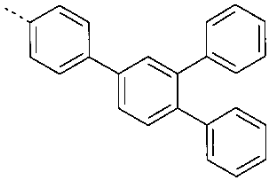
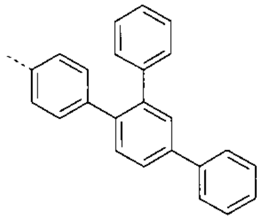
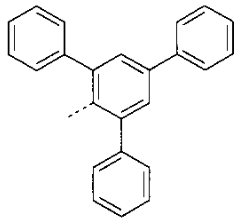
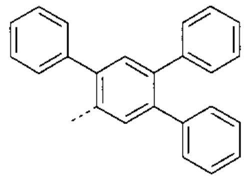
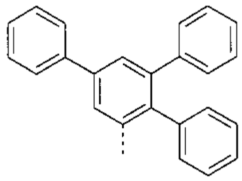
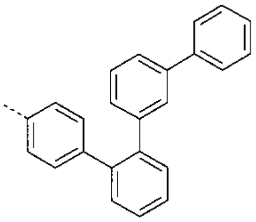
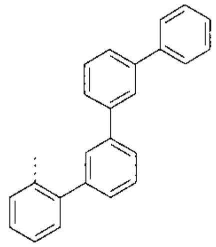
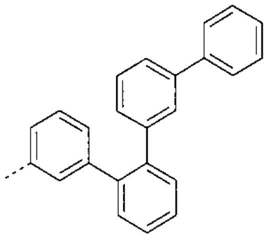
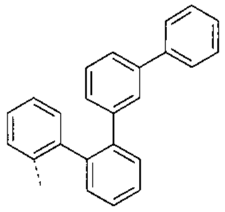
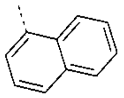
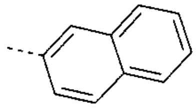
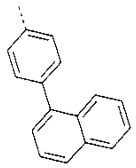
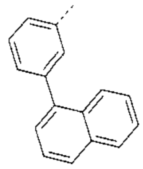
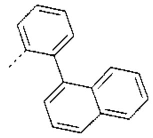
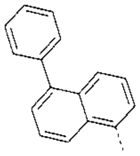
【００４５】

【化４－２】

		
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	Ar-34
		
Ar-35	Ar-36	Ar-37

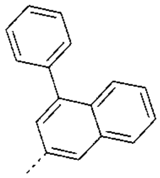
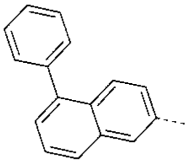
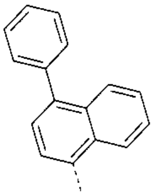
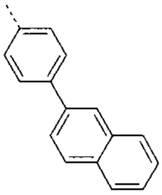
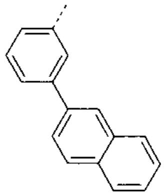
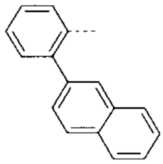
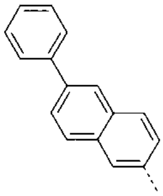
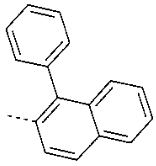
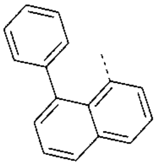
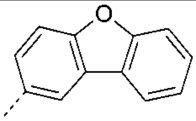
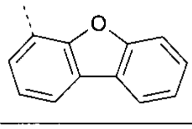
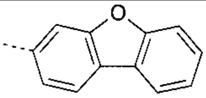
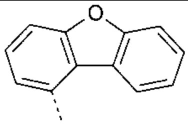
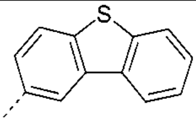
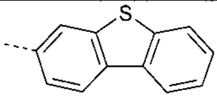
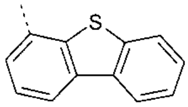
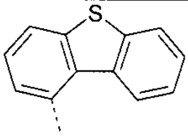
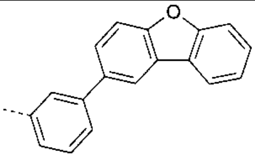
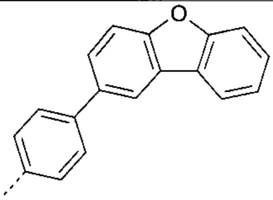
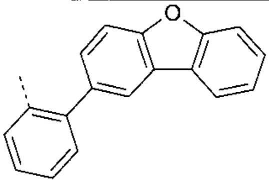
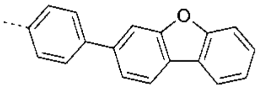
【００４６】

【化４－３】

		
Ar-38	Ar-39	Ar-40
		
Ar-41	Ar-42	Ar-43
		
Ar-44	Ar-45	Ar-46
		
Ar-47		
		
Ar-48	Ar-49	Ar-50
		
Ar-51	Ar-52	Ar-53

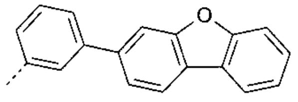
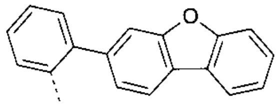
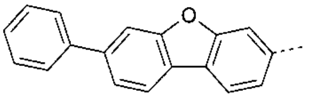
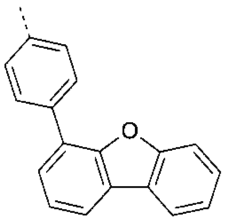
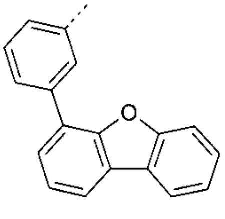
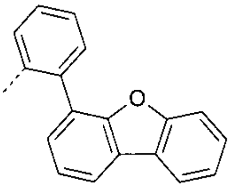
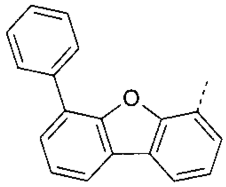
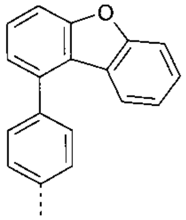
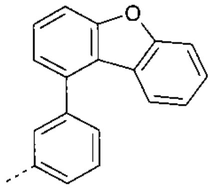
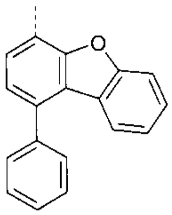
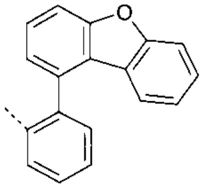
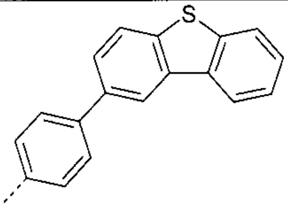
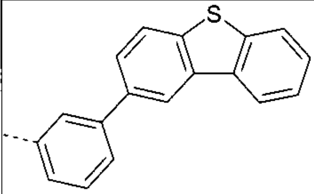
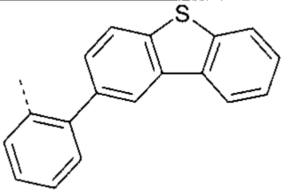
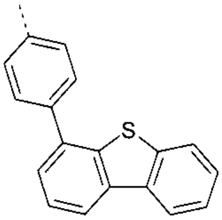
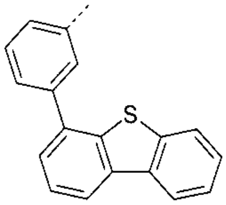
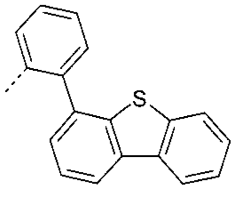
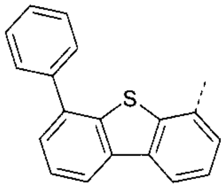
【００４７】

【化４－４】

		
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	Ar-70	Ar-71
		
Ar-72	Ar-73	Ar-74

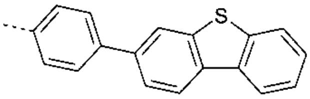
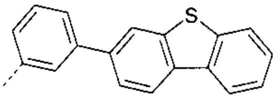
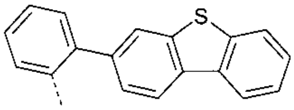
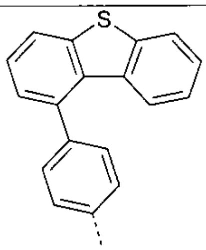
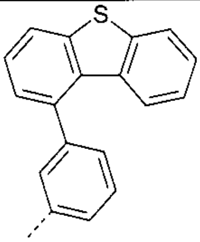
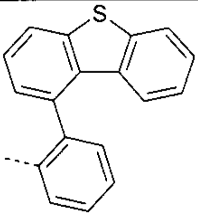
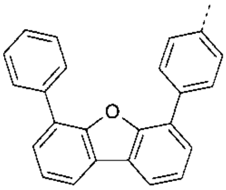
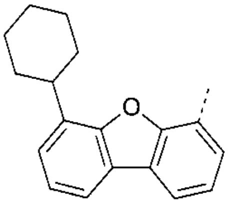
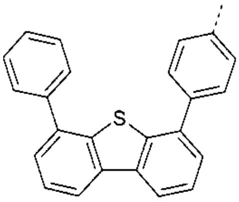
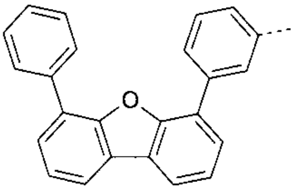
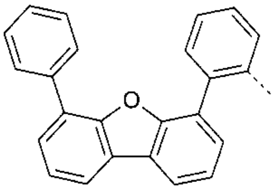
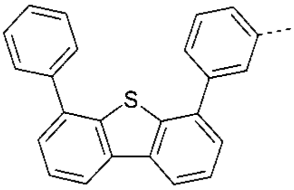
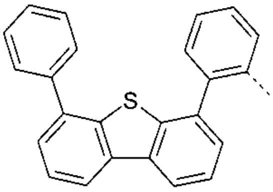
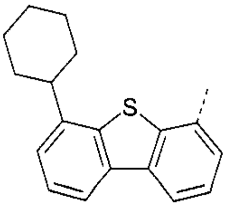
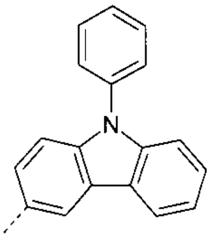
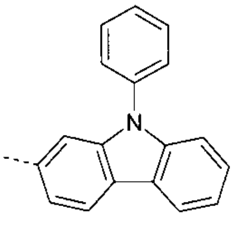
【００４８】

【化４－５】

		
Ar-75	Ar-76	Ar-77
		
Ar-78	Ar-79	Ar-80
		
Ar-81	Ar-82	Ar-83
		
Ar-84	Ar-85	Ar-86
		
Ar-87	Ar-88	Ar-89
		
Ar-90	Ar-91	Ar-92

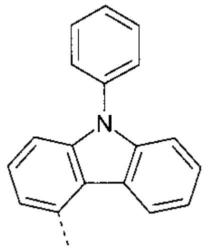
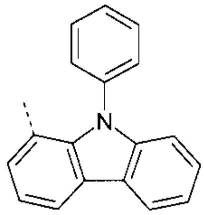
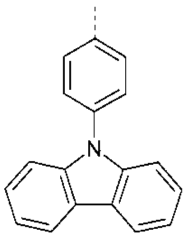
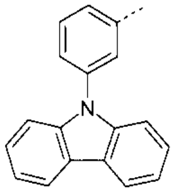
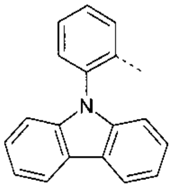
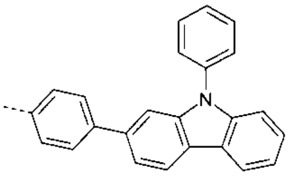
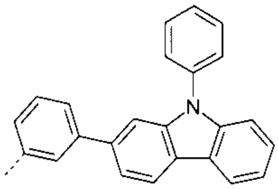
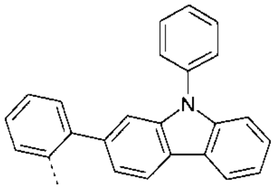
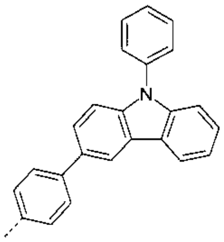
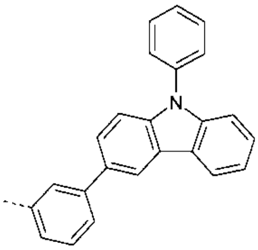
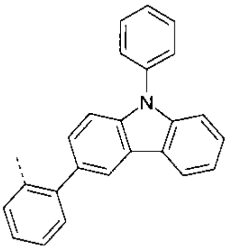
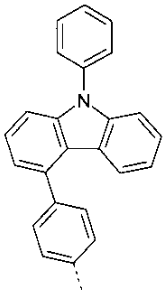
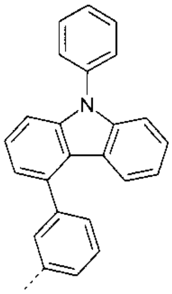
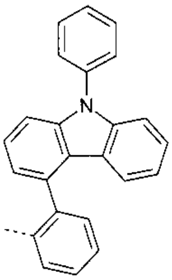
【００４９】

【化４－６】

		
Ar-93	Ar-94	Ar-95
		
Ar-96	Ar-97	Ar-98
		
Ar-99	Ar-100	Ar-101
		
Ar-102	Ar-103	Ar-104
		
Ar-105		
		
Ar-106	Ar-107	Ar-108

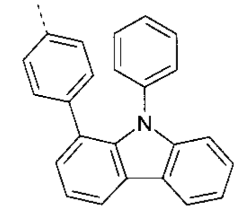
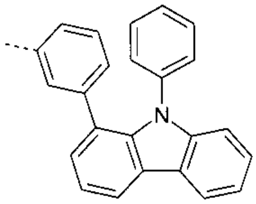
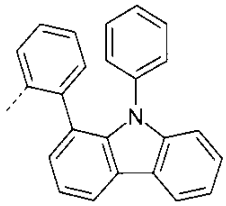
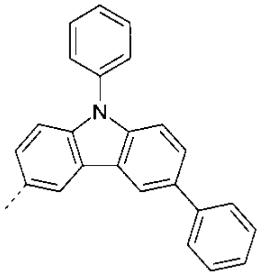
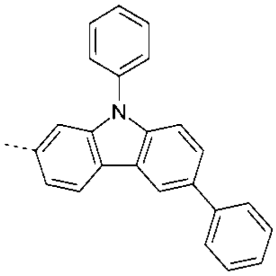
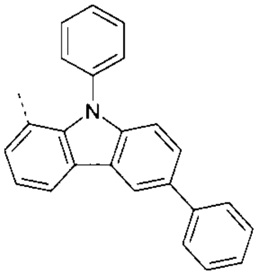
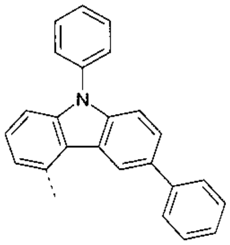
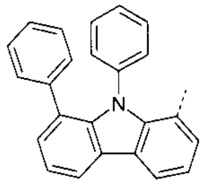
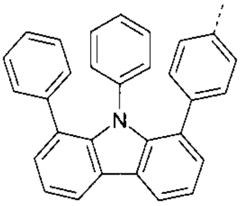
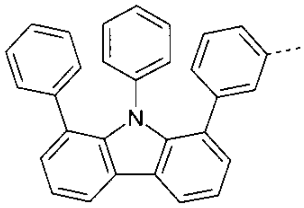
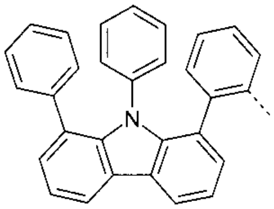
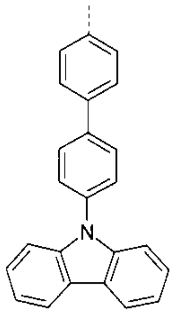
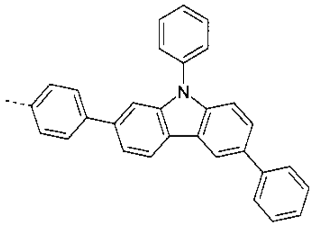
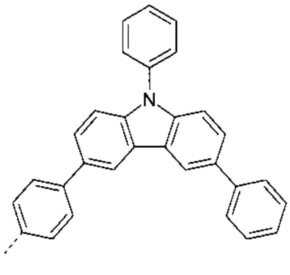
【００５０】

【化４－７】

		
Ar-109	Ar-110	Ar-111
		
Ar-112	Ar-113	
		
Ar-114	Ar-115	Ar-116
		
Ar-117	Ar-118	Ar-119
		
Ar-120	Ar-121	Ar-122

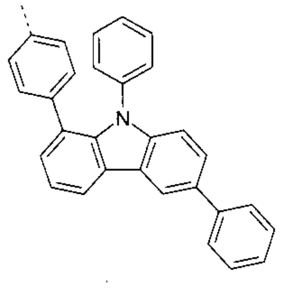
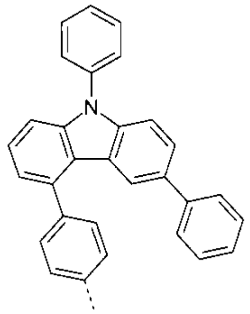
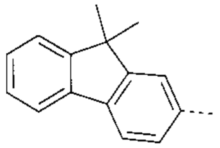
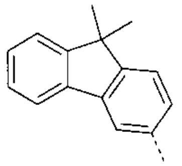
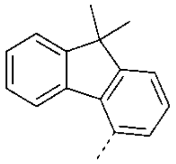
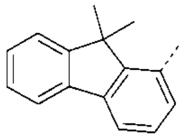
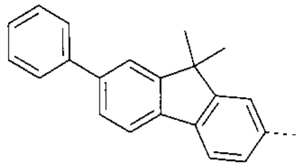
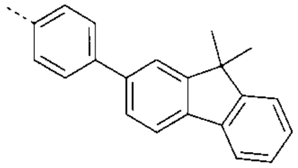
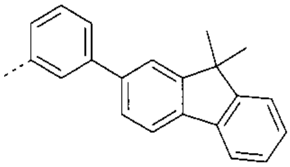
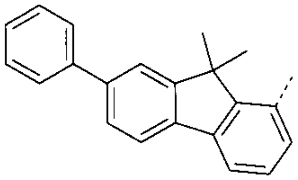
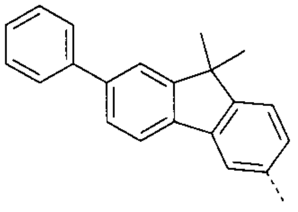
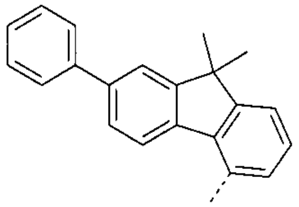
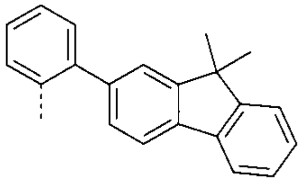
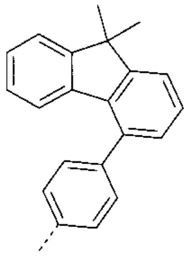
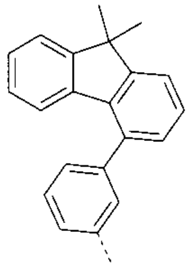
【００５１】

【化４－８】

		
Ar-123	Ar-124	Ar-125
		
Ar-126	Ar-127	Ar-128
		
Ar-129	Ar-130	Ar-131
		
Ar-132	Ar-133	
		
Ar-134	Ar-135	Ar-136

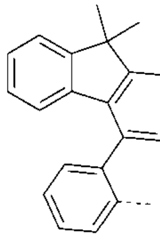
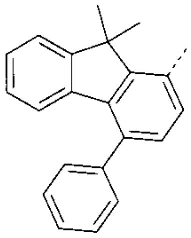
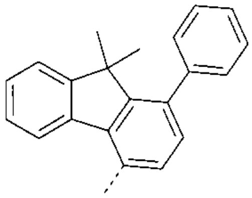
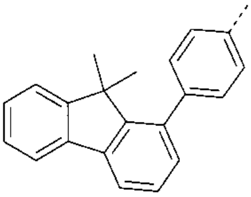
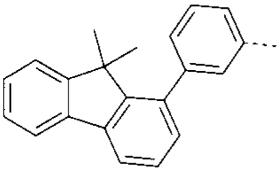
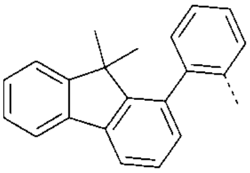
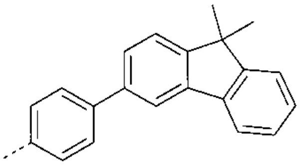
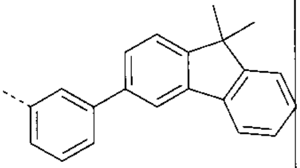
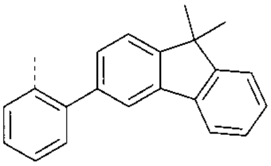
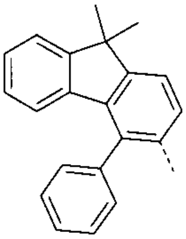
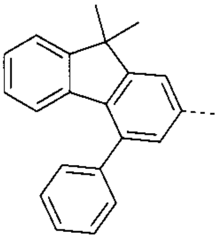
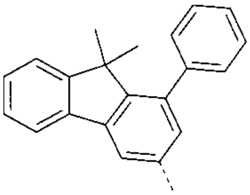
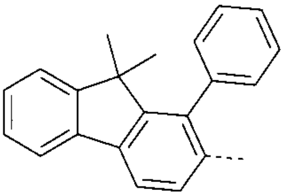
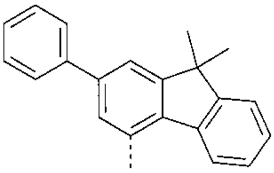
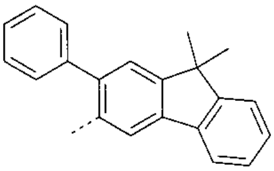
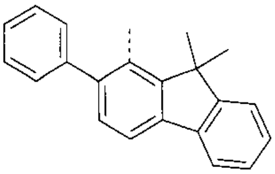
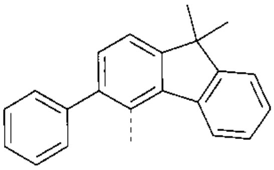
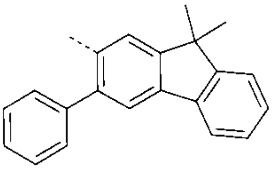
【００５２】

【化４－９】

		
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	Ar-151

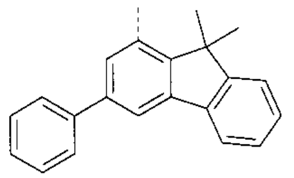
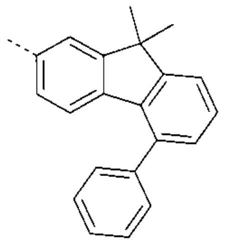
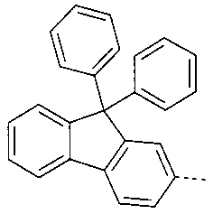
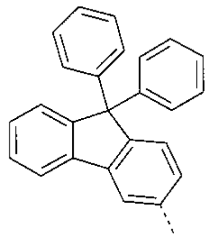
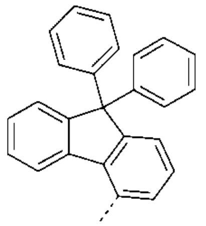
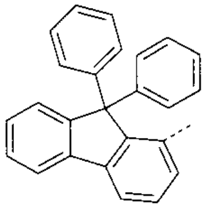
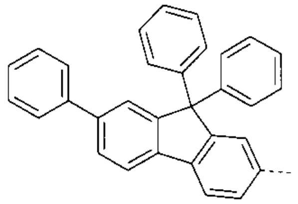
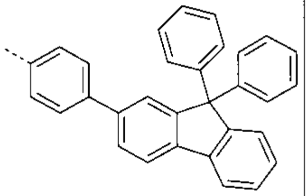
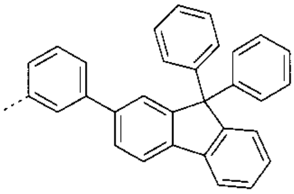
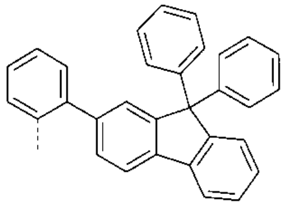
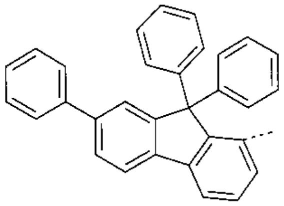
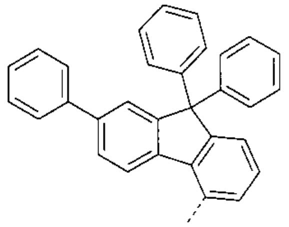
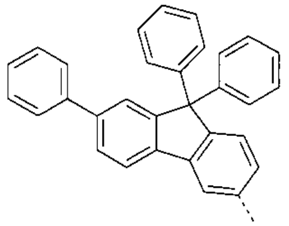
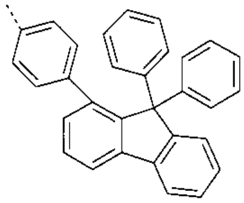
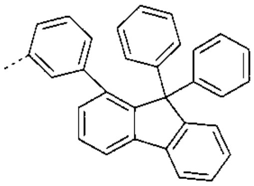
【００５３】

【化４－１０】

		
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	Ar-169

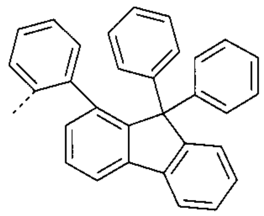
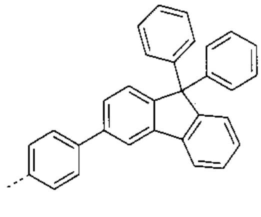
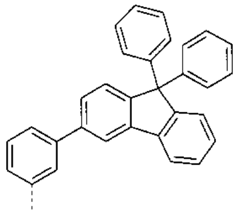
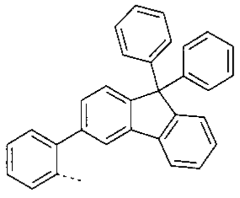
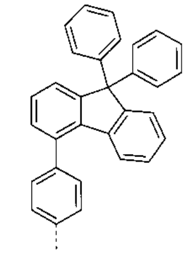
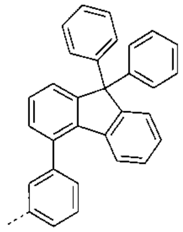
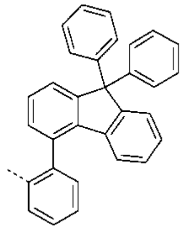
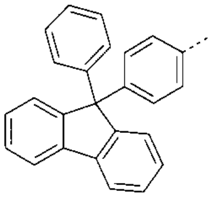
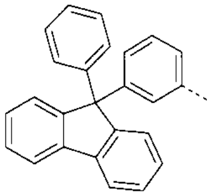
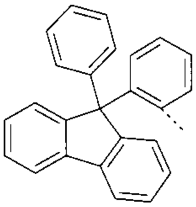
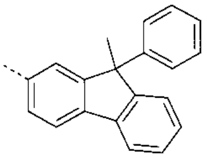
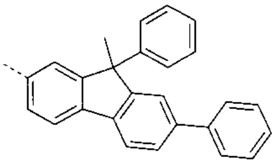
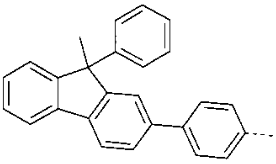
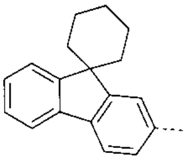
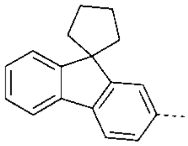
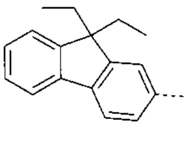
【００５４】

【化４－１１】

		
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

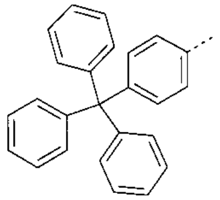
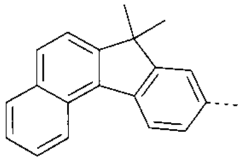
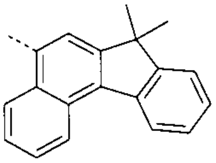
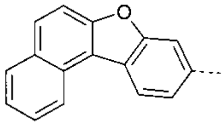
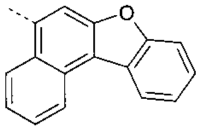
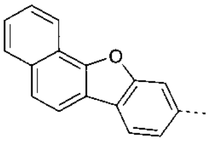
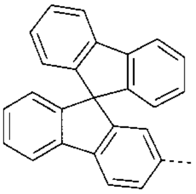
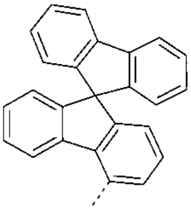
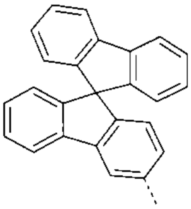
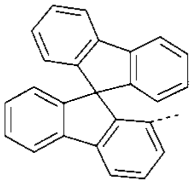
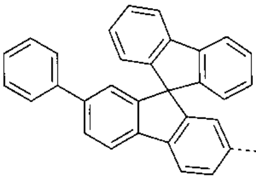
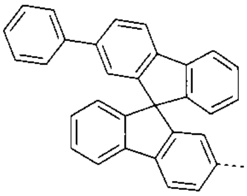
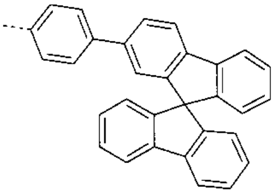
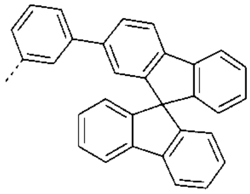
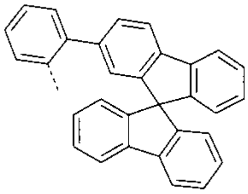
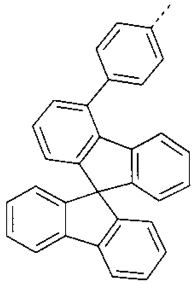
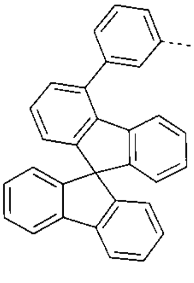
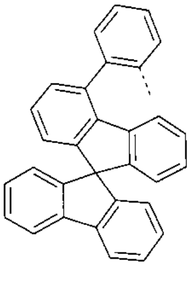
【００５５】

【化４－１２】

		
Ar-185	Ar-186	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

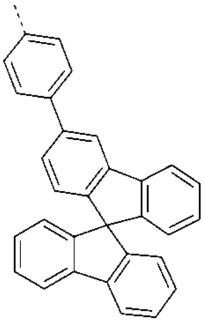
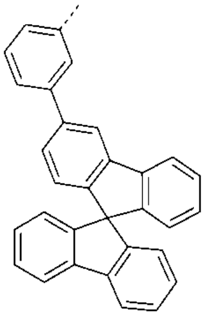
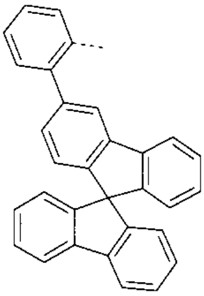
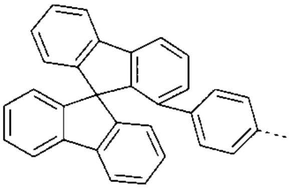
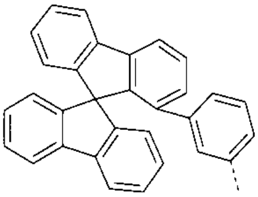
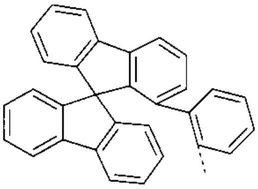
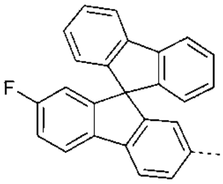
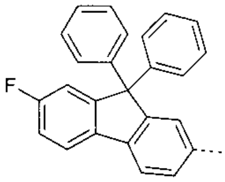
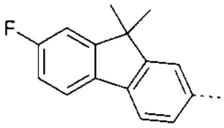
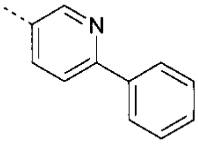
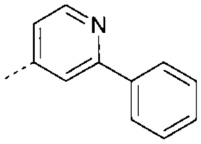
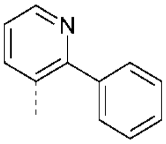
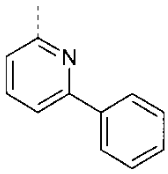
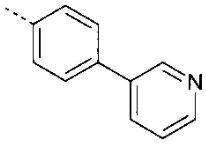
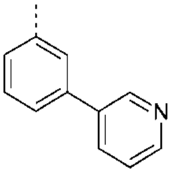
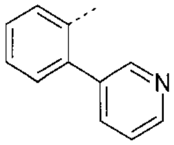
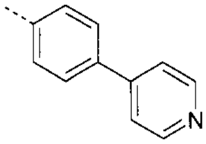
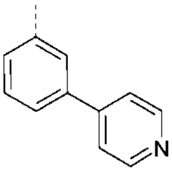
【００５６】

【化４－１３】

		
Ar-201	Ar-202	Ar-203
		
Ar-204	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

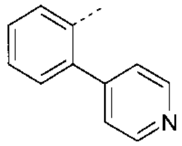
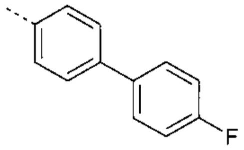
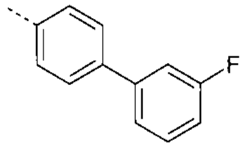
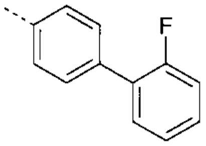
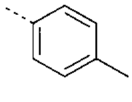
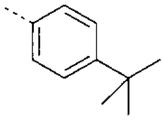
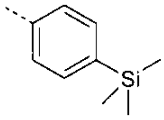
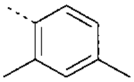
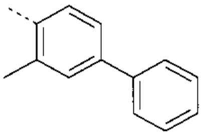
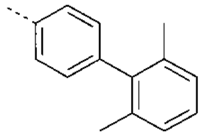
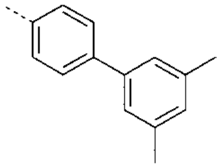
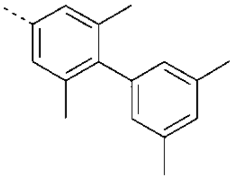
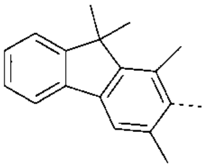
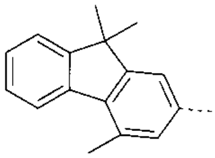
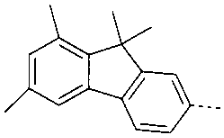
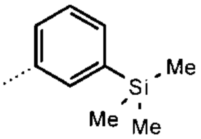
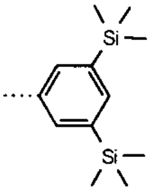
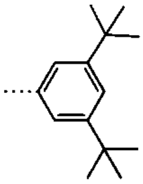
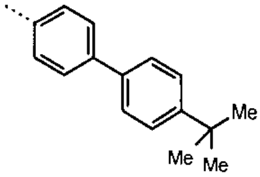
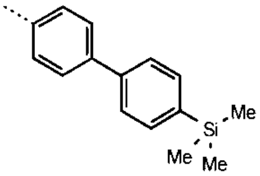
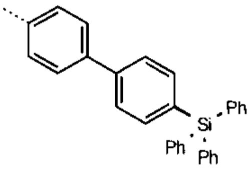
【００５７】

【化４－１４】

		
Ar-219	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

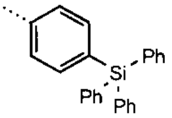
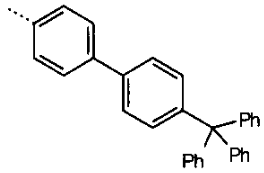
【００５８】

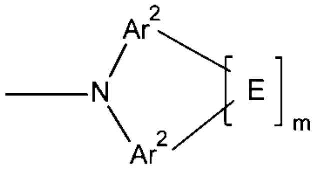
【化４－１５】

		
Ar-237	Ar-238	Ar-239
		
Ar-240	Ar-241	Ar-242
		
Ar-243	Ar-244	Ar-245
		
Ar-246	Ar-247	Ar-248
		
Ar-250	Ar-251	Ar-252
		
Ar-253	Ar-254	Ar-255
		
Ar-256	Ar-257	Ar-258

【００５９】

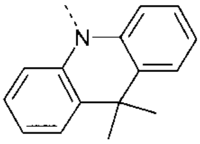
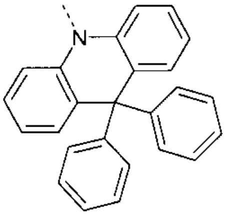
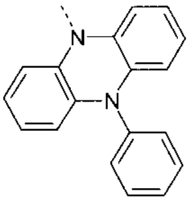
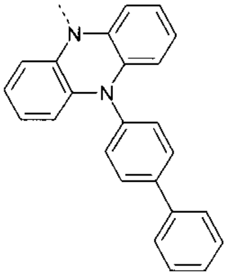
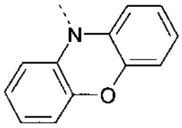
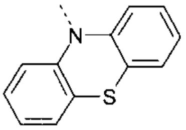
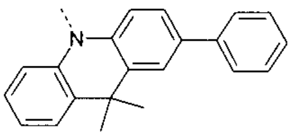
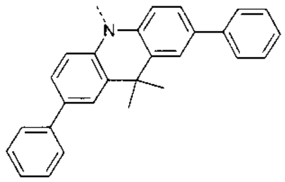
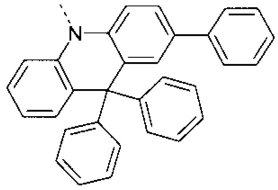
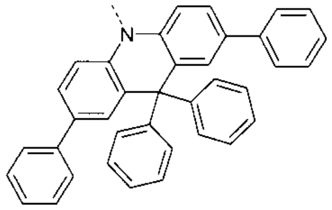
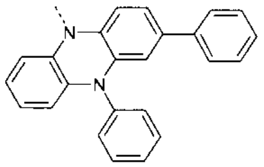
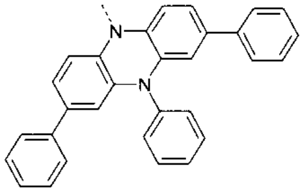
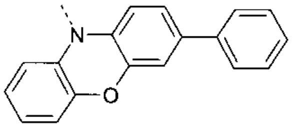
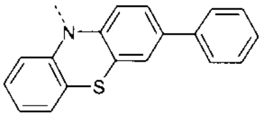
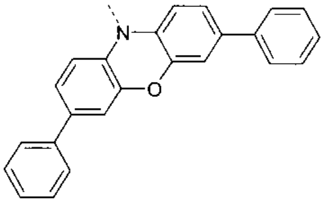
【化４－１６】

		
Ar-259	Ar-260	

【００６０】
（式中、基は、全ての非占有位置でそれぞれＲ^{5}ラジカルにより置換されていてもよく、破線で示される結合は、式（Ｎ）中の窒素原子への結合を表す）
から選択される。
【００６１】
２つの異なるＡｒ^{2}基が、式（Ｎ）中の各窒素原子に結合していることが好ましい。
【００６２】
Ｅ基は、好ましくは単結合である。
【００６３】
好ましくは、Ｅ基が存在しないように、ｍ＝０である。
【００６４】
同様に好ましい代替的態様において、Ａｒ^{2}基がＥ基を介して互いに結合するように、ｍ＝１である。この場合、Ａｒ^{2}基は、フェニルおよびフルオレニルから選択されることが好ましく、これらのそれぞれは、１つ以上のＲ^{5}ラジカルにより置換されていてもよい。加えて、この場合、２つのＡｒ^{2}基を互いに結合しているＥ基は、当該のＡｒ^{2}基に、Ａｒ^{2}基の式（Ｎ）中のアミノ基への結合に対してオルト位置で結合していることが好ましい。加えて、Ｅ基は、Ａｒ^{2}基と一緒になって、ＥがＣ（Ｒ^{5}）$_{2}$、Ｓｉ（Ｒ^{5}）$_{2}$、ＮＲ^{5}、ＯおよびＳから選択される場合は６員環を、Ｅが単結合である場合は５員環を形成することが好ましい。
【００６５】
ｍ＝１である場合の式（Ｎ）の基からの単位
【００６６】
【化５】


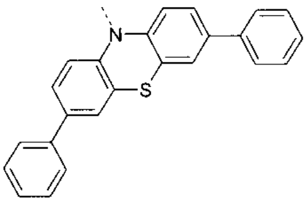
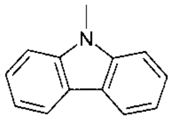
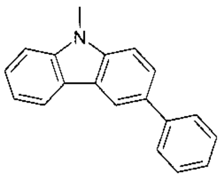
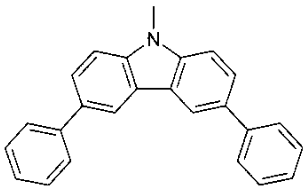
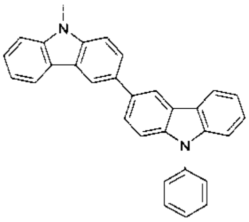
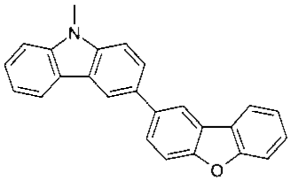
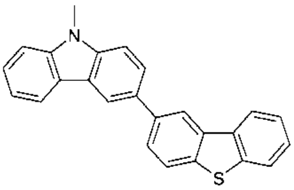
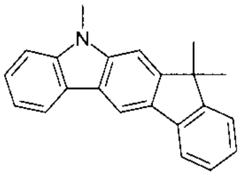
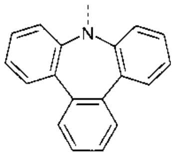
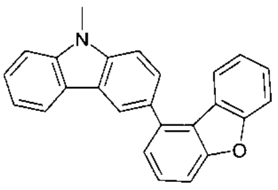
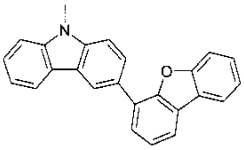
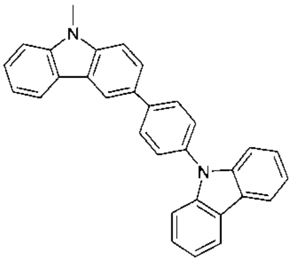
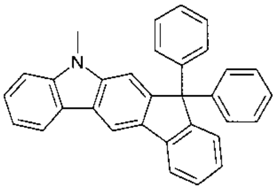
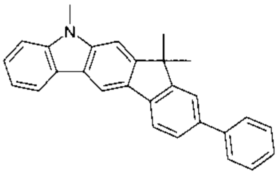
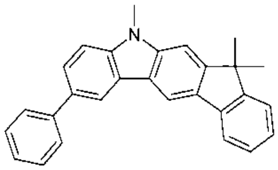
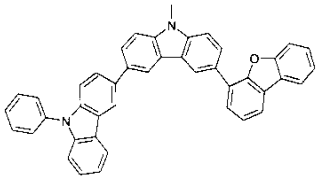
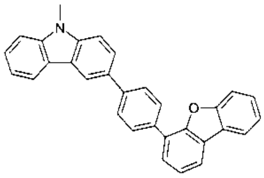
【００６７】
の好ましい態様は、以下に図示する基：
【００６８】

【化６－１】

		
N-1	N-2	N-3
		
N-4	N-5	N-6
		
N-7	N-8	N-9
		
N-10	N-11	N-12
		
N-13	N-14	N-15

【００６９】

【化６－２】

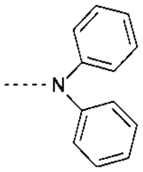
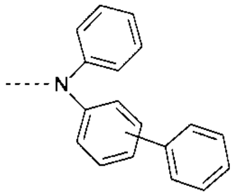
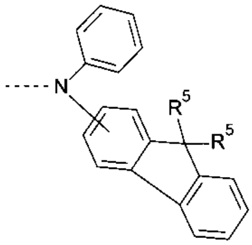
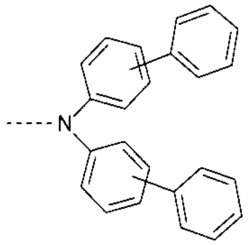
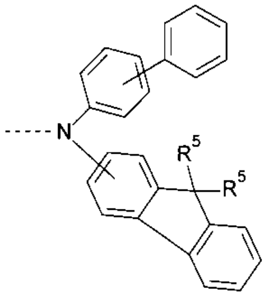
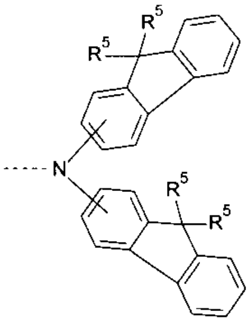
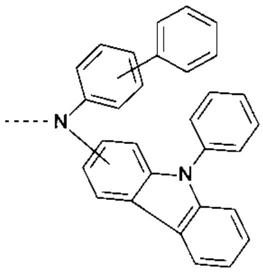
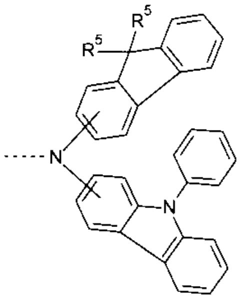
		
N-16	N-17	N-18
		
N-19	N-20	N-21
		
N-22	N-23	N-24
		
N-25	N-26	N-27
		
N-28	N-29	N-30
		
N-31	N-32	

【００７０】
（式中、基は、それらの非占有位置においてそれぞれR^5ラジカルにより置換されていてもよく、好ましくは非占有位置において無置換であり、破線で示される結合は、式の残部への結合を表す）
である。

【００７１】
ｍ＝０である場合の式（Ｎ）の基からの好ましい態様は、以下に図示する基：

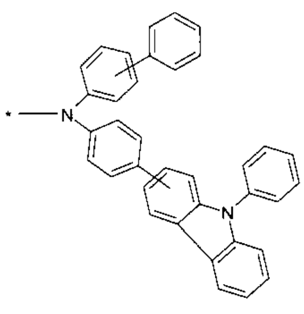
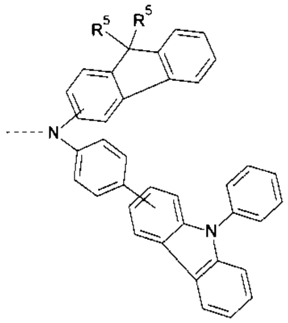
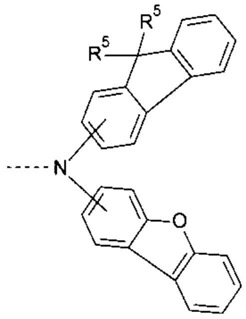
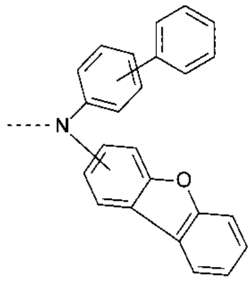
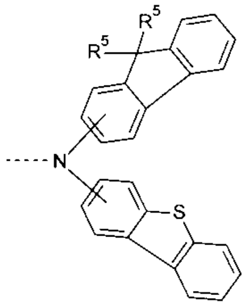
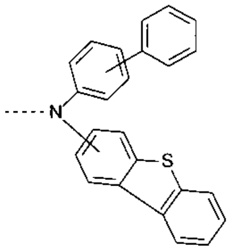
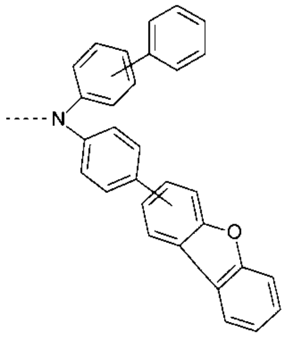
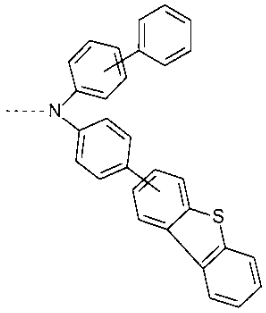
【００７２】

【化７－１】

	
A-1	A-2
	
A-3	A-4
	
A-5	A-6
	
A-7	A-8

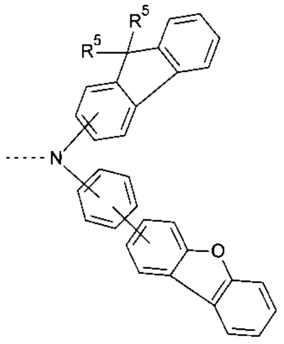
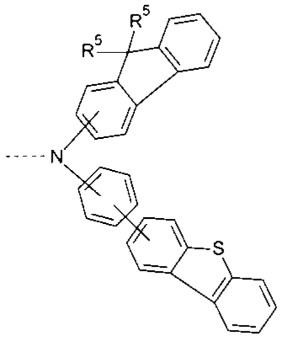
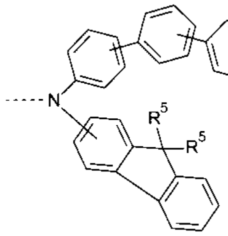
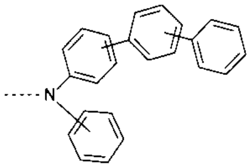
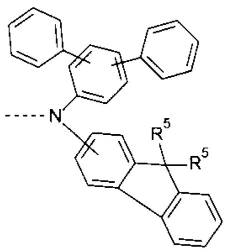
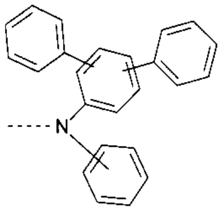
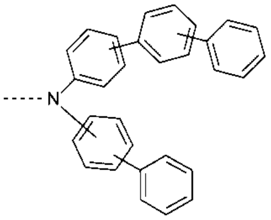
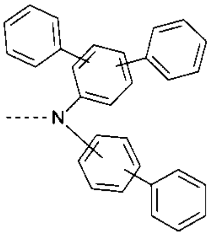
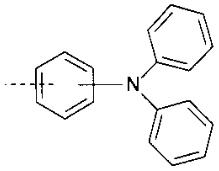
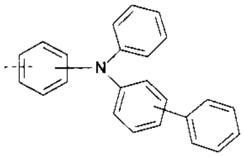
【００７３】

【化７－２】

	
A-9	A-10
	
A-11	A-12
	
A-13	A-14
	
A-15	A-16

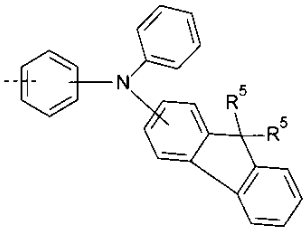
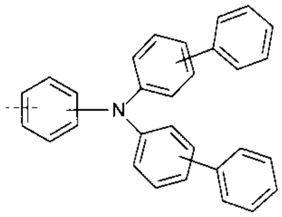
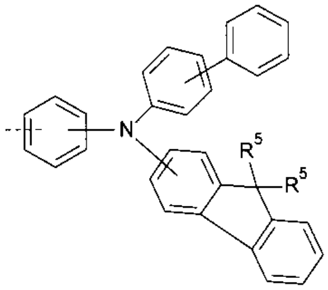
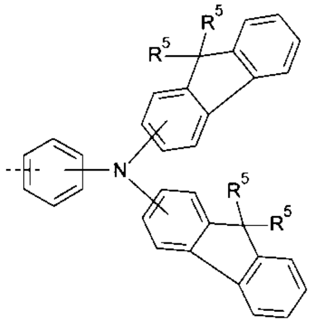
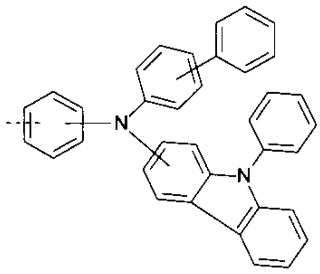
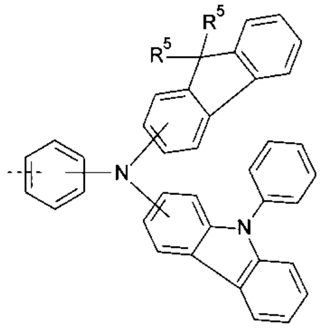
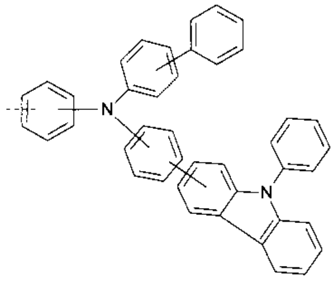
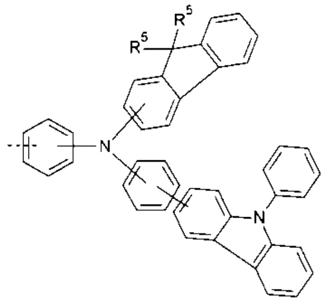
【００７４】

【化７－３】

	
A-17	A-18
	
A-19	A-20
	
A-21	A-22
	
A-23	A-24
	
A-25	A-26

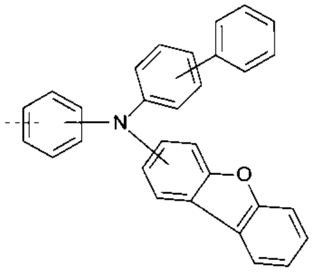
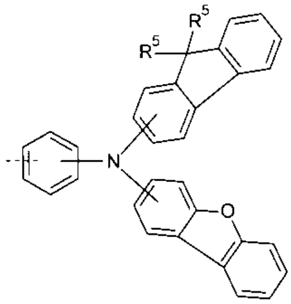
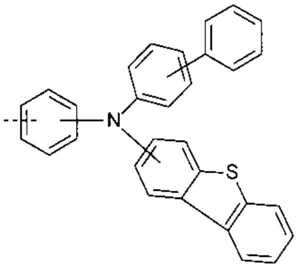
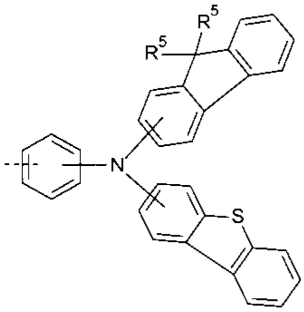
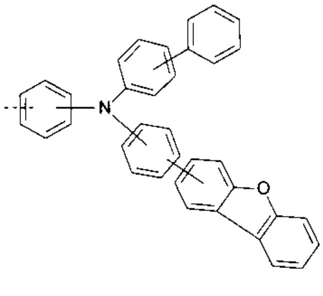
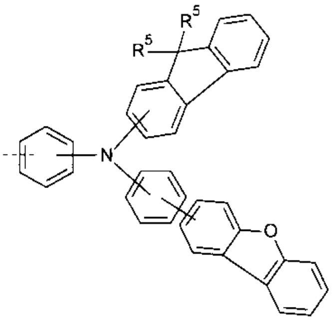
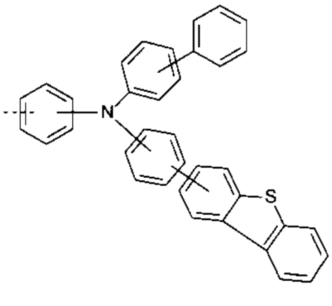
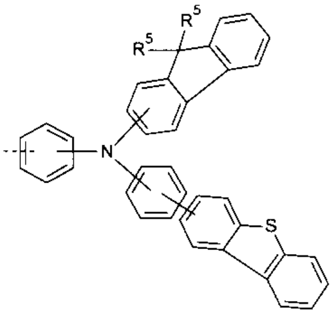
【００７５】

【化７－４】

	
A-27	A-28
	
A-29	A-30
	
A-31	A-32
	
A-33	A-34

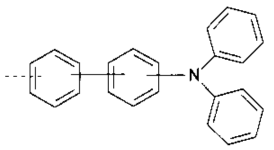
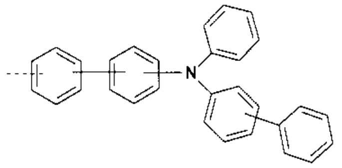
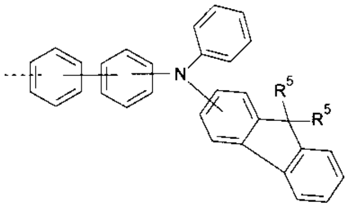
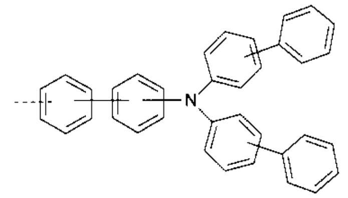
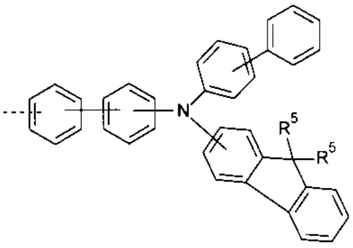
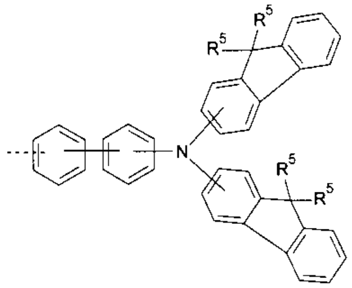
【００７６】

【化７－５】

	
A-35	A-36
	
A-37	A-38
	
A-39	A-40
	
A-41	A-42

【００７７】

【化７－６】

	
A-43	A-44
	
A-45	A-46
	
A-47	A-48

【００７８】
（式中、基は、それらの非占有位置においてそれぞれR^5ラジカルにより置換されていてもよく、好ましくは非占有位置において無置換であり、破線で示される結合は、式の残部への結合を表す）
である。

【００７９】
R^2は、好ましくは、Ｈ、Ｄ、Ｆ、ＣＮ、１～１０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、３～１０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、２～１０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、ここで、前記アルキル、アルコキシ、アルケニルおよびアルキニル基ならびに前記芳香族環系およびヘテロ芳香族環系は、それぞれ１つ以上のR^7ラジカルにより置換されていてもよい。より好ましくは、R^2は、Ｈ、Ｆ、ＣＮ、１～１０個の炭素原子を有する直鎖アルキル基、３～１０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；ここで、前記アルキル基ならびに前記芳香族環系およびヘテロ芳香族環系は、それぞれ１つ以上のR^7ラジカルにより置換されていてもよい。最も好ましくは、R^2はＨである。

【００８０】
R^3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（R^7）$_3$、Ｎ（R^7）$_2$、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、ここで、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１つ以上のR^7ラジカルにより置換されていてもよい。

【００８１】

Ｒ^{4}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、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；ここで、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１つ以上のＲ^{7}ラジカル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、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および６～４０個の芳香族環原子を有する芳香族環系から選択され、ここで、言及したアルキル基および言及した芳香族環系は、それぞれ１つ以上のＲ^{7}ラジカルにより置換されていてもよい。

【００８２】

Ｒ^{5}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（Ｒ^{7}）$_{3}$、Ｎ（Ｒ^{7}）$_{2}$、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、ここで、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１つ以上のＲ^{7}ラジカルにより置換されていてもよい。

【００８３】

Ｒ^{6}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（Ｒ^{7}）$_{3}$、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；ここで、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１つ以上のＲ^{7}ラジカルにより置換されていてもよい。より好ましくは、Ｒ^{6}はＨである。

【００８４】

Ｒ^{7}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（Ｒ^{8}）$_{3}$、Ｎ（Ｒ^{8}）$_{2}$、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、ここで、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１つ以上のＲ^{8}ラジカルにより置換されていてもよい。

【００８５】

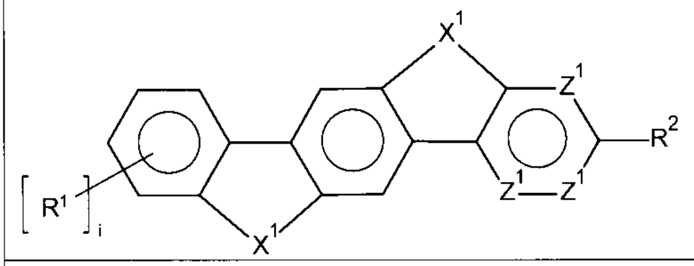
添え字ｉは、好ましくは０である。

【００８６】

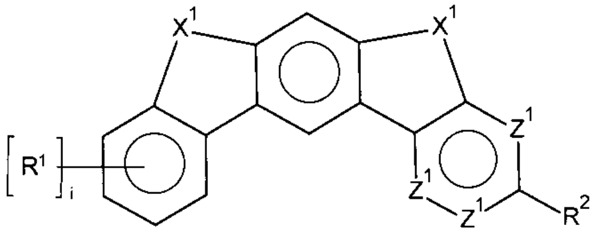
式（Ｉ）の好ましい態様は、下記の式（Ｉ－１）～（Ｉ－９）：

【００８７】

【化８－１】



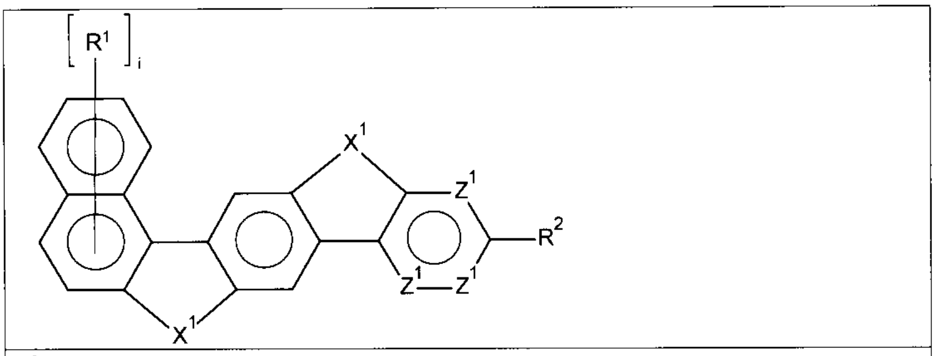
式 (I-1)



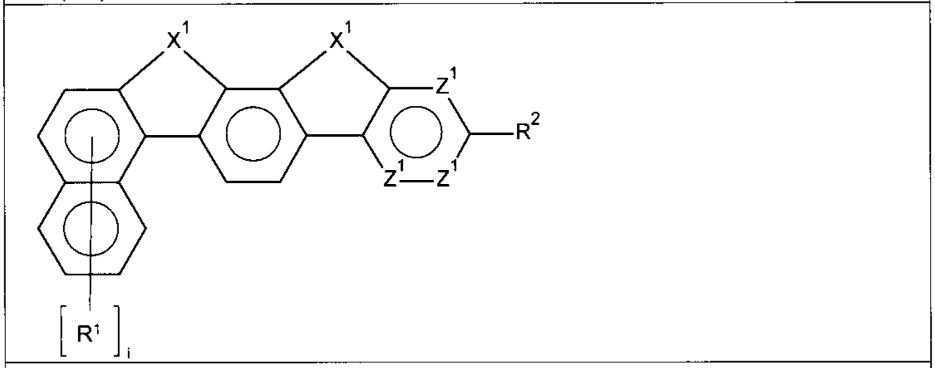
式 (I-2)

【００８８】

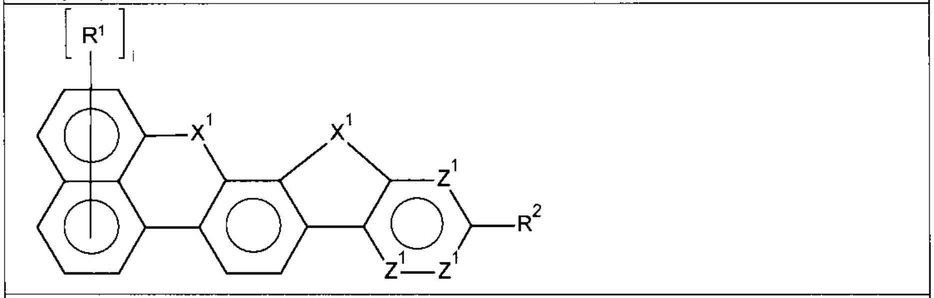
【化８－２】



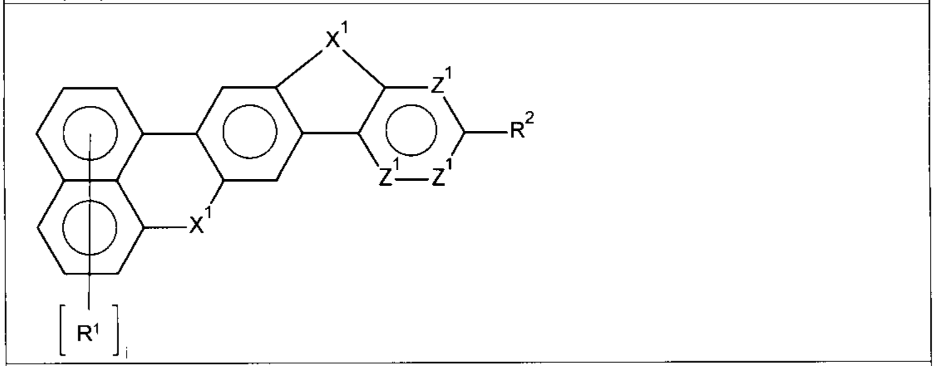
式 (I-3)



式 (I-4)



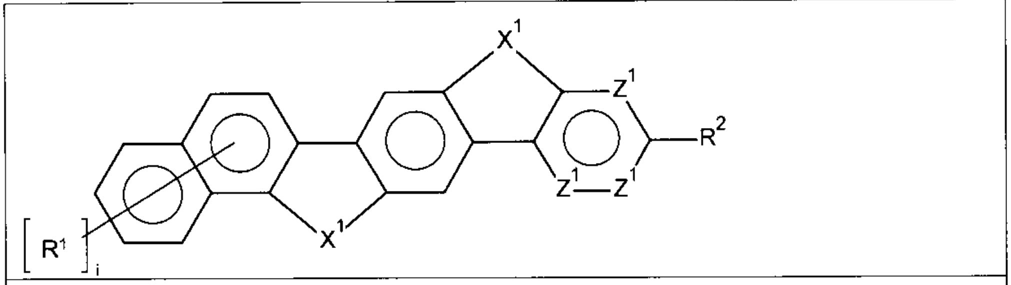
式 (I-5)



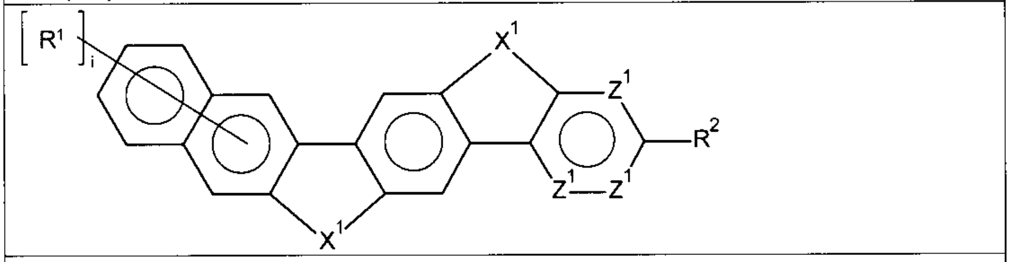
式 (I-6)

【００８９】

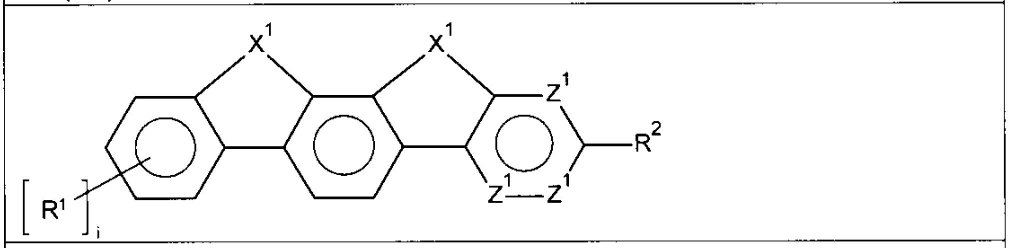
【化８－３】



式 (I-7)



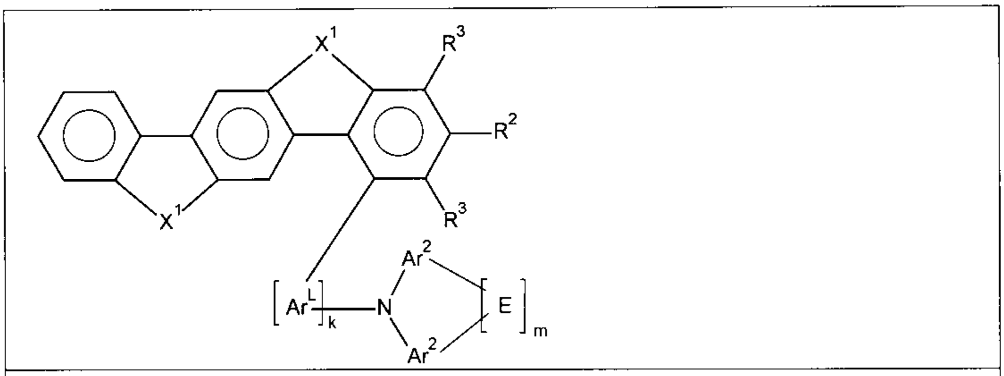
式 (I-8)



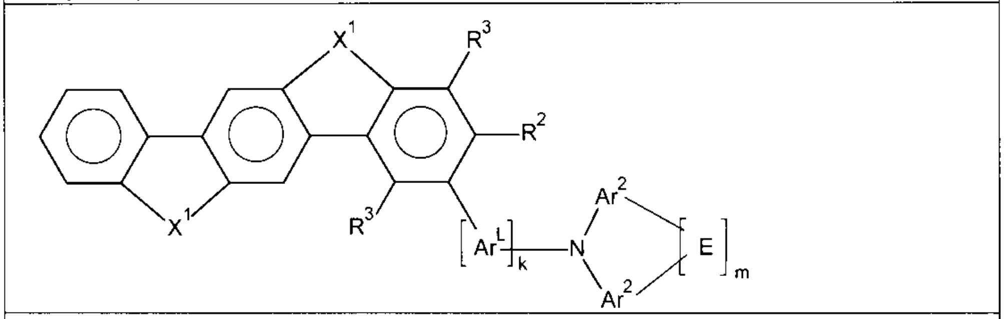
式 (I-9)

【００９０】
（式中、出現する可変基は、先に定義した通りであり、Ｘ^{1}は好ましくはＣ（Ｒ^4）$_2$であり、化合物は、それぞれ芳香族環上の非占有位置においてＲ^{3}またはＲ^{6}ラジカルにより置換されていてもよく、好ましくはこれらの位置において無置換である）
のうちの１つに対応する。
【００９１】
式（Ｉ－１）～（Ｉ－９）の好ましい態様は、以下に示す式：
【００９２】

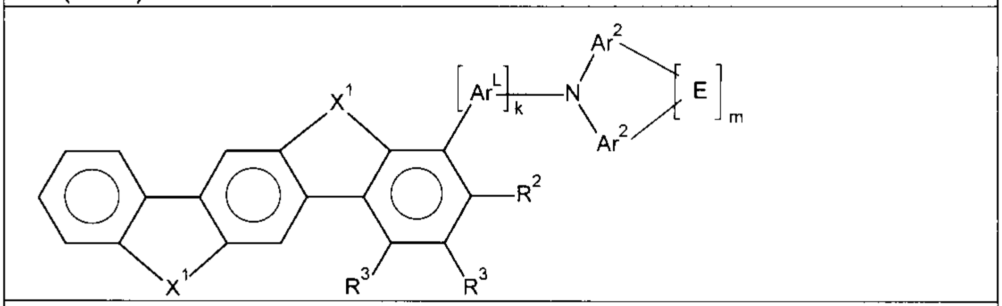
【化９－１】



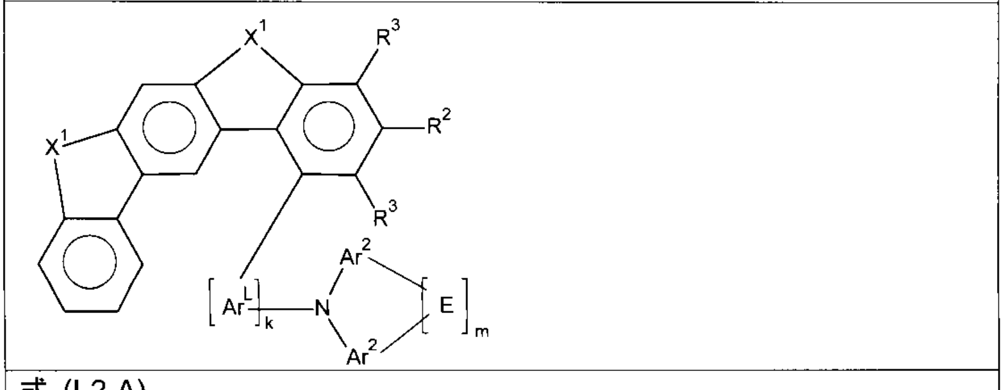
式 (I-1-A)



式 (I-1-B)



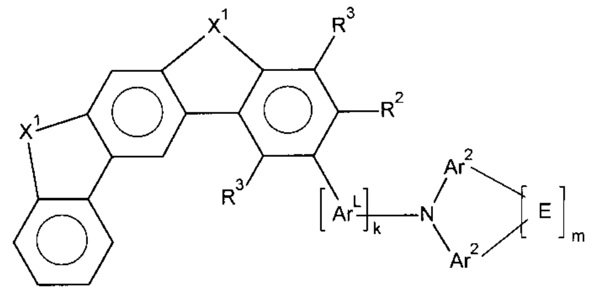
式 (I-1-C)



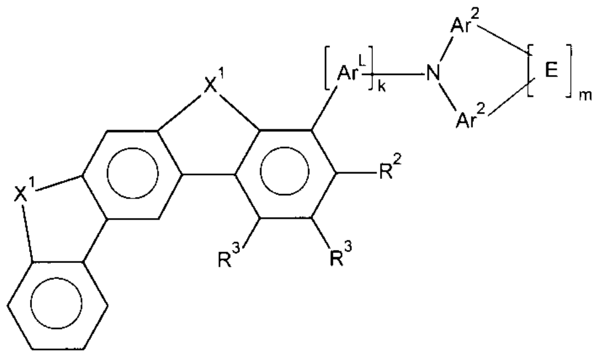
式 (I-2-A)

【００９３】

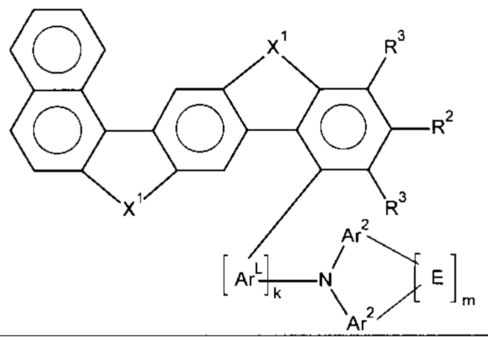
【化９－２】



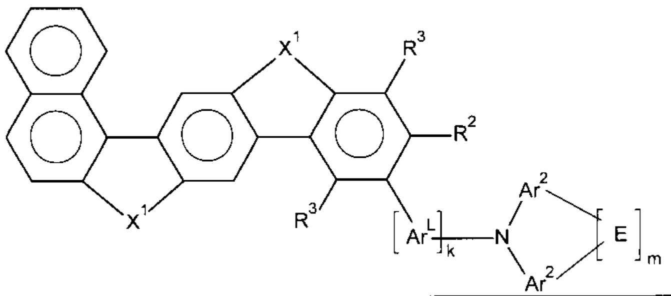
式 (I-2-B)



式 (I-2-C)



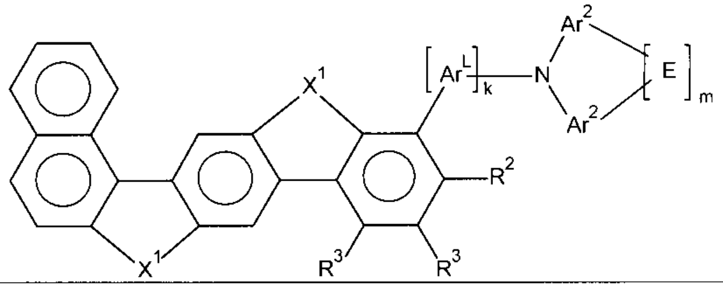
式 (I-3-A)



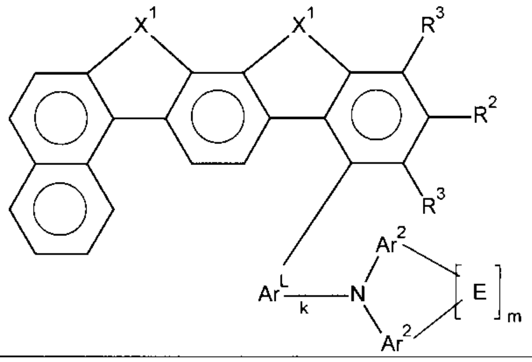
式 (I-3-B)

【００９４】

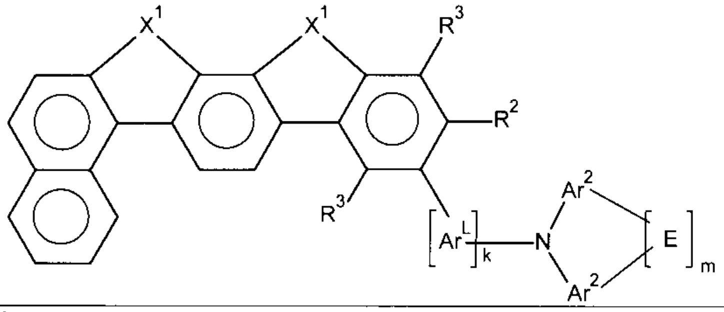
【化９－３】



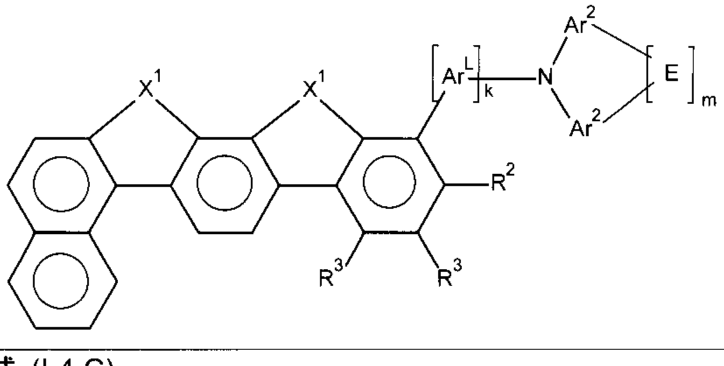
式（I-3-C）



式（I-4-A）



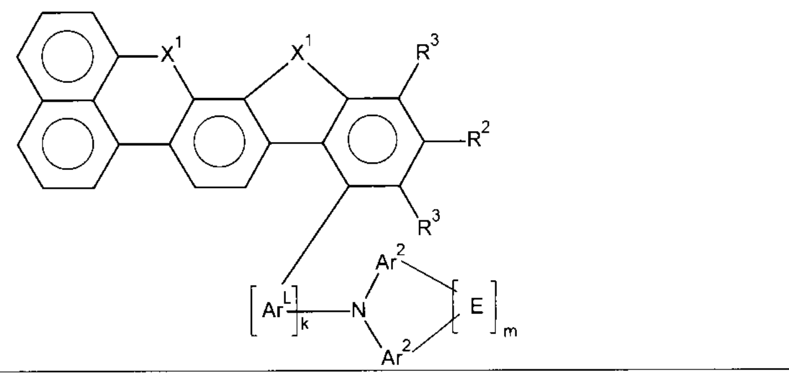
式（I-4-B）



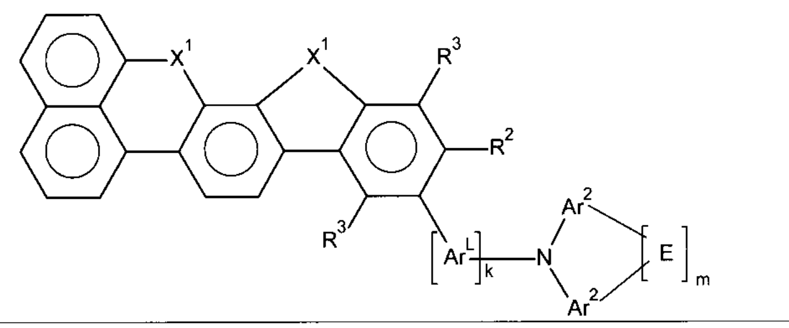
式（I-4-C）

【００９５】

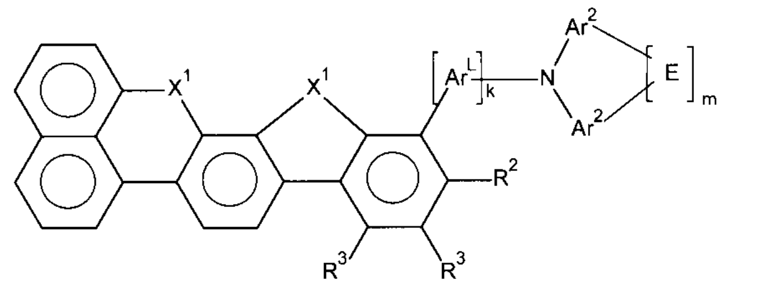
【化９－４】



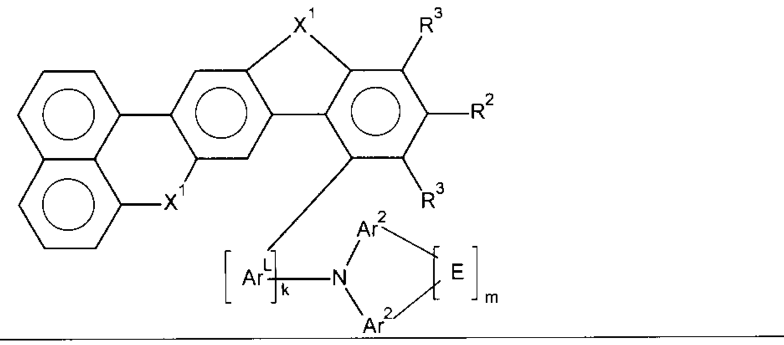
式 (I-5-A)



式 (I-5-B)



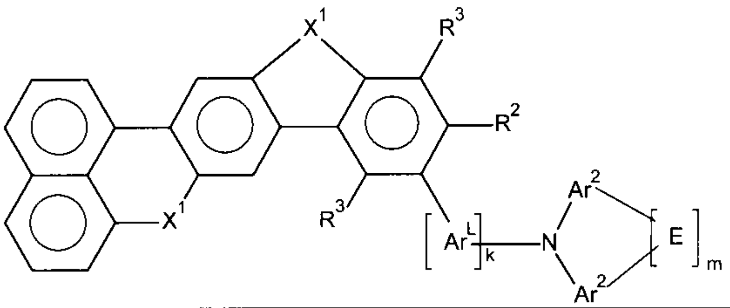
式 (I-5-C)



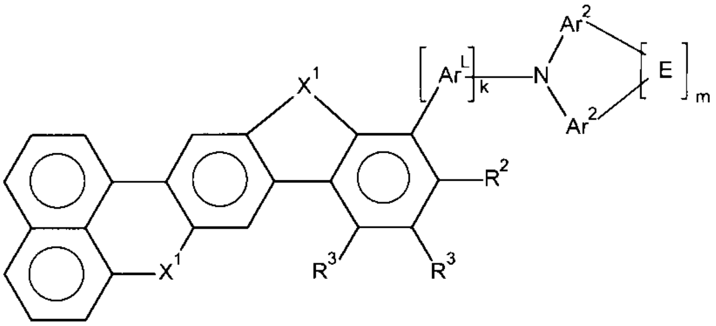
式 (I-6-A)

【００９６】

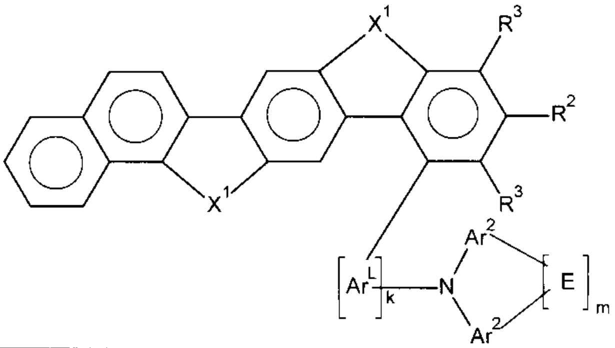
【化９－５】



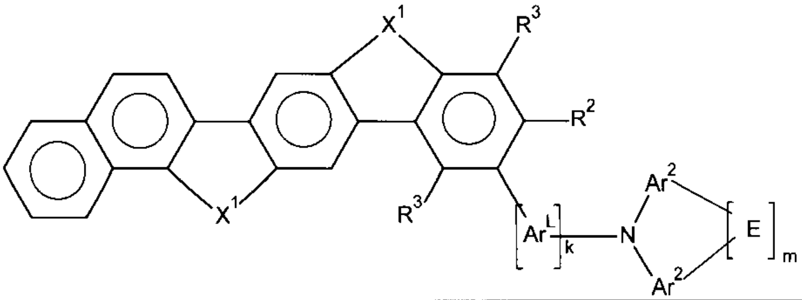
式 (I-6-B)



式 (I-6-C)



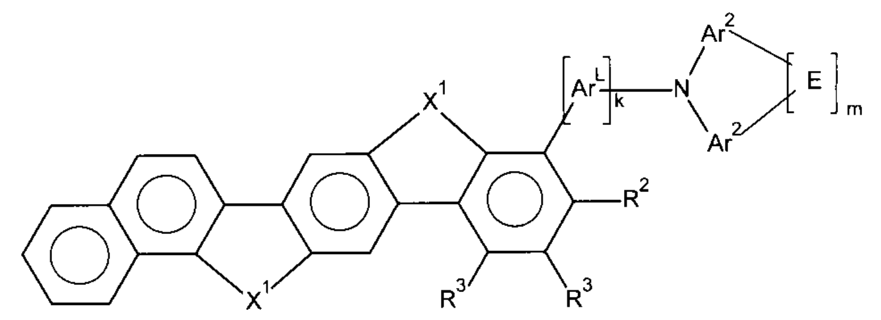
式 (I-7-A)



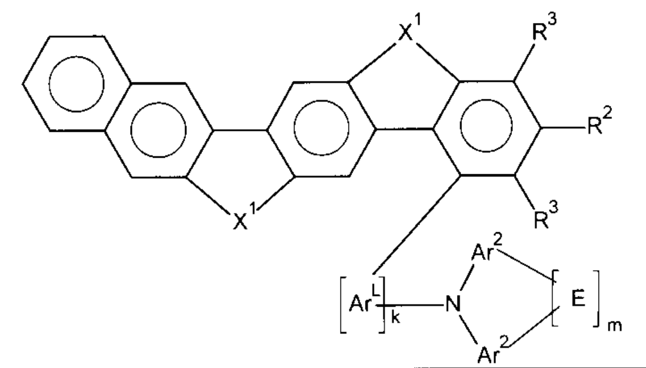
式 (I-7-B)

【００９７】

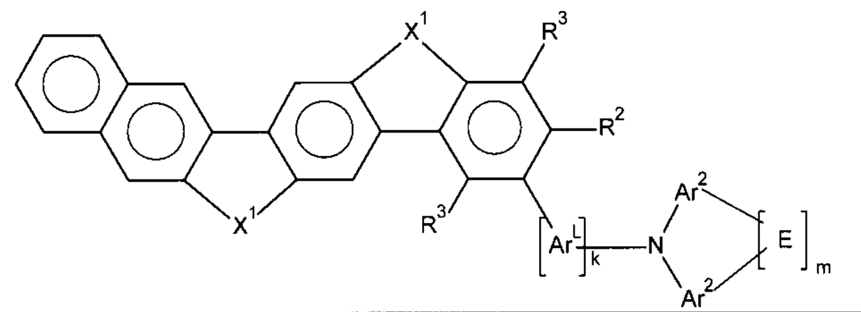
【化９－６】



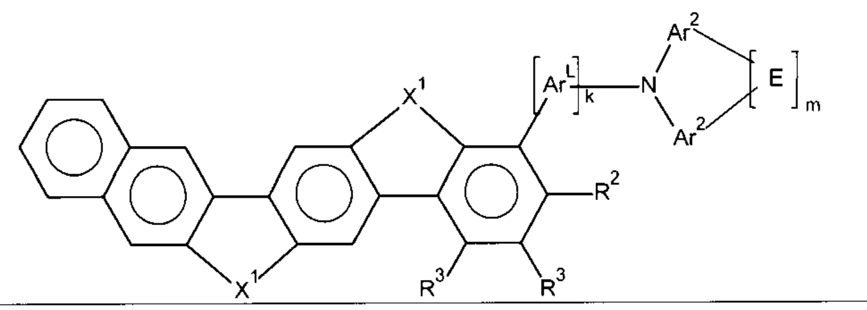
式 (I-7-C)



式 (I-8-A)



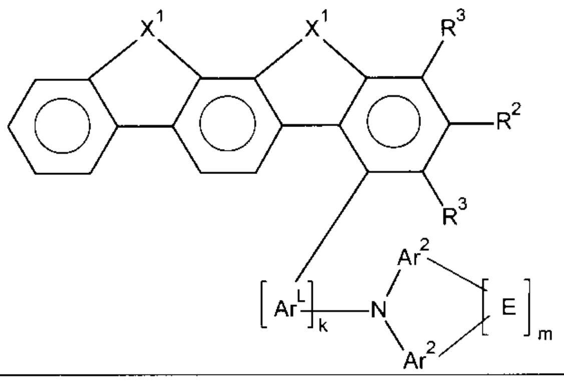
式 (I-8-B)



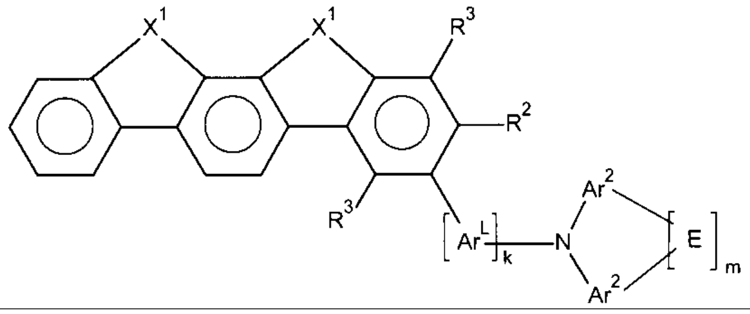
式 (I-8-C)

【００９８】

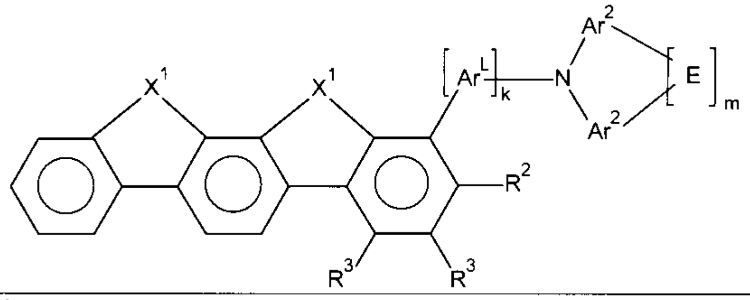
【化９－７】



式 (I-9-A)



式 (I-9-B)



式 (I-9-C)

【００９９】

（式中、出現する可変基は、先に定義した通りであり、Ｘ^{1}は好ましくはＣ（Ｒ^{4}）$_{2}$であり、化合物は、それぞれ芳香族環上の非占有位置においてＲ^{3}またはＲ^{6}ラジカルにより置換されていてもよく、好ましくはこれらの位置において無置換である）

に合致する。

【０１００】

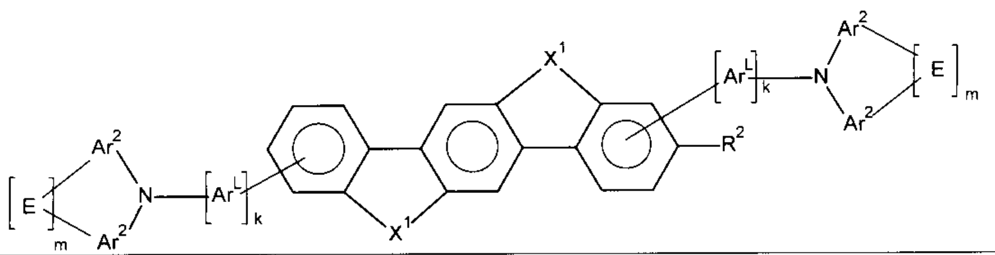
上記の式の中で、式（Ｉ－１－Ａ）、（Ｉ－２－Ａ）、（Ｉ－３－Ａ）、（Ｉ－４－Ａ）、（Ｉ－５－Ａ）、（Ｉ－６－Ａ）、（Ｉ－７－Ａ）、（Ｉ－８－Ａ）および（Ｉ－９－Ａ）が好ましい。式（Ｉ－１－Ａ）が特に好ましい。

【０１０１】

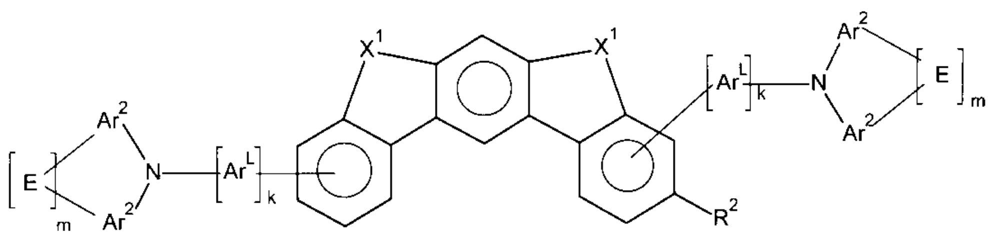
式（Ｉ）の化合物のさらなる好ましい態様は、下記の式：

【０１０２】

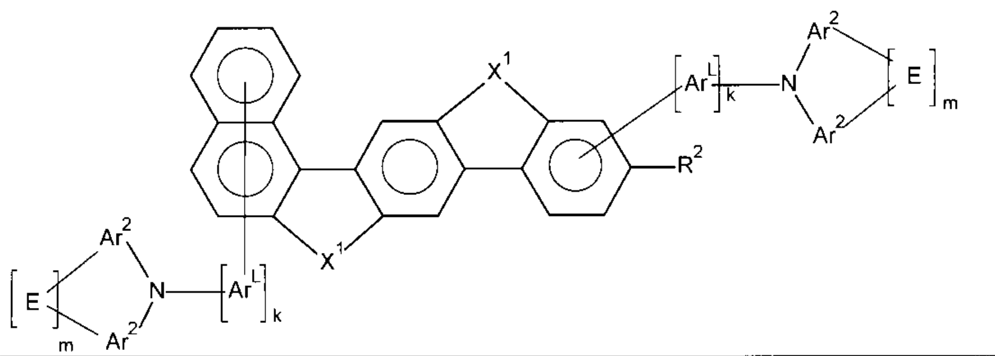
【化１０－１】



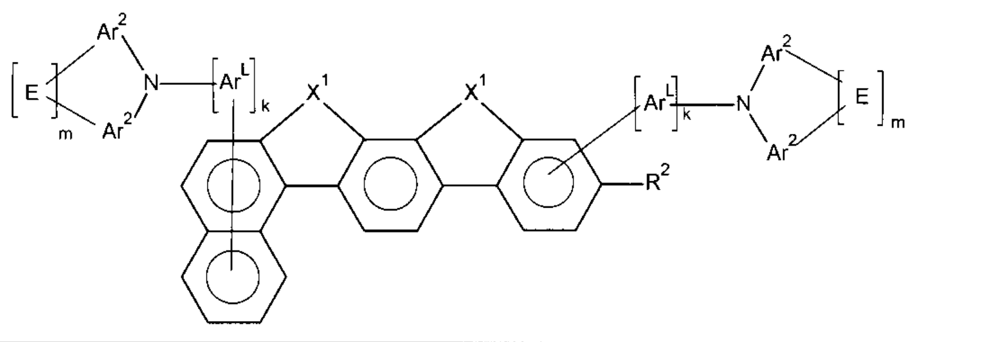
式 (I-1-D)



式 (I-2-D)



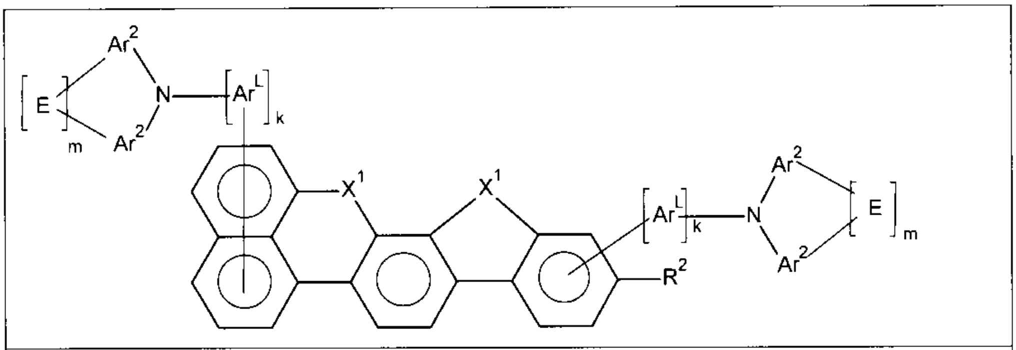
式 (I-3-D)



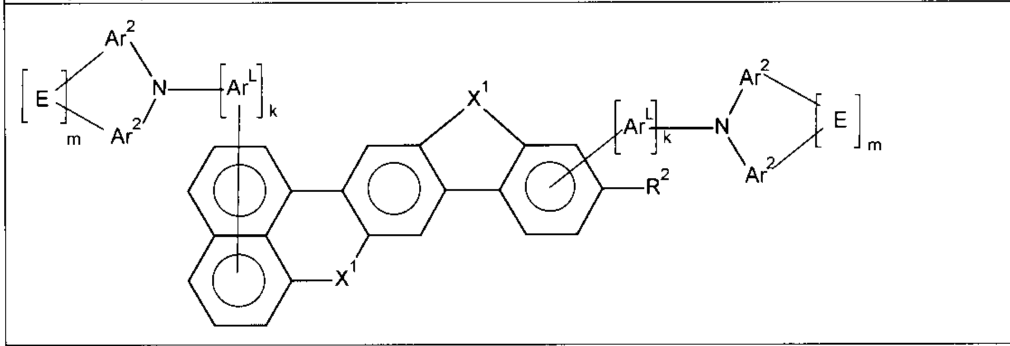
式 (I-4-D)

【０１０３】

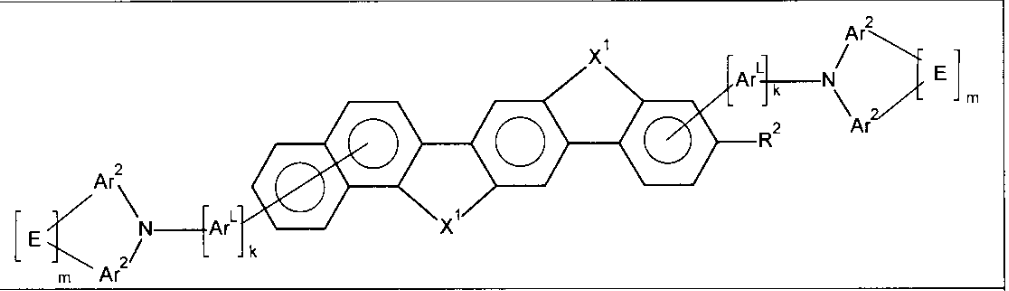
【化１０－２】



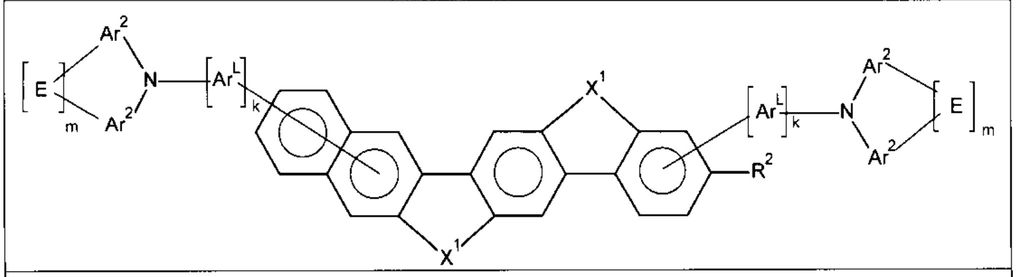
式 (I-5-D)



式 (I-6-D)



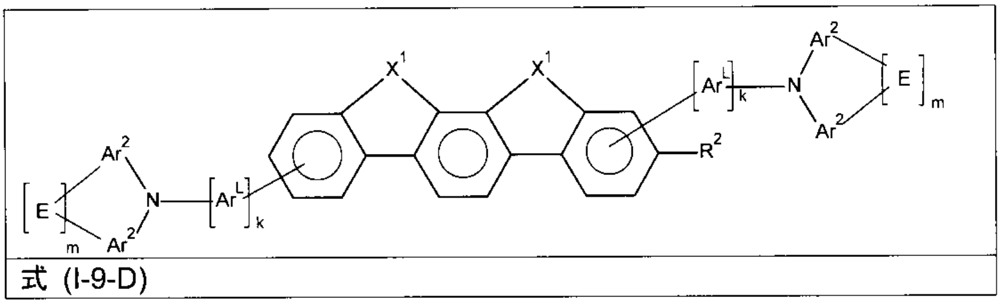
式 (I-7-D)



式 (I-8-D)

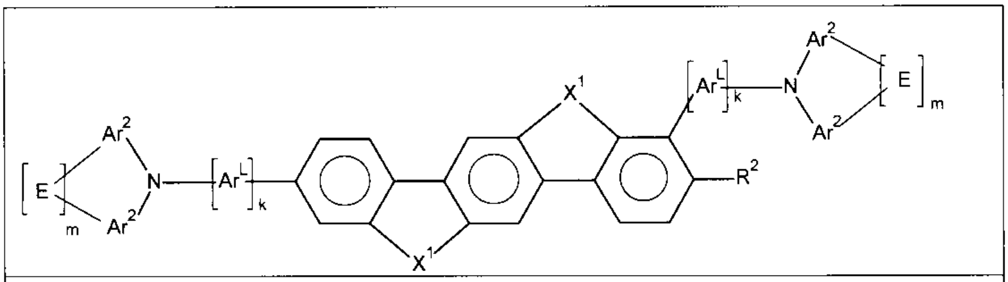
【０１０４】

【化１０－３】

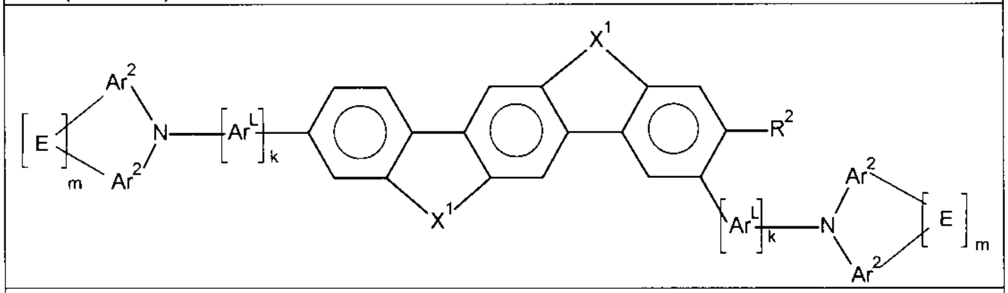


式 (I-9-D)

【０１０５】
（式中、出現する可変基は、先に定義した通りであり、X^{1}は好ましくはC（R^4）$_2$であり、化合物は、それぞれ芳香族環上の非占有位置においてR^{3}またはR^{6}ラジカルにより置換されていてもよく、好ましくはこれらの位置において無置換である）
に対応する。
【０１０６】
式（Ｉ－１－Ｄ）の好ましい態様は、下記の式：
【０１０７】
【化１１－１】



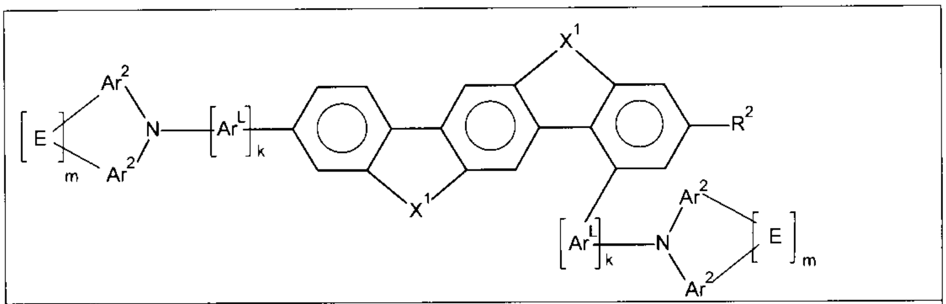
式 (I-1-D-1)



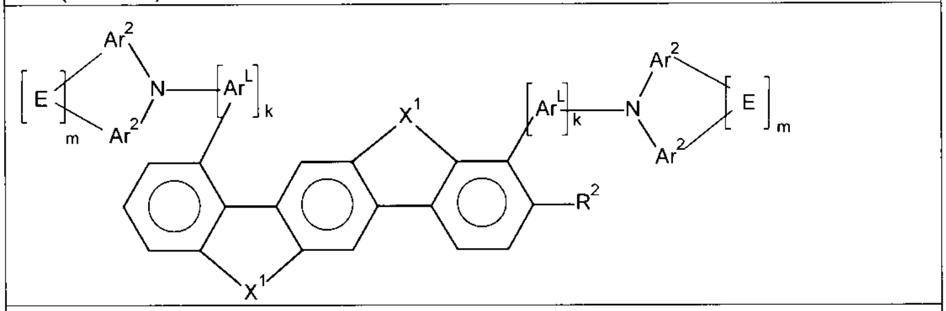
式 (I-1-D-2)

【０１０８】

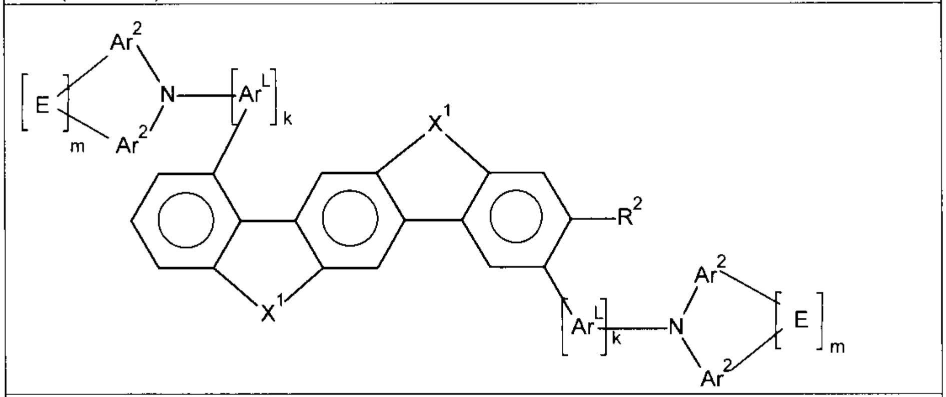
【化１１－２】



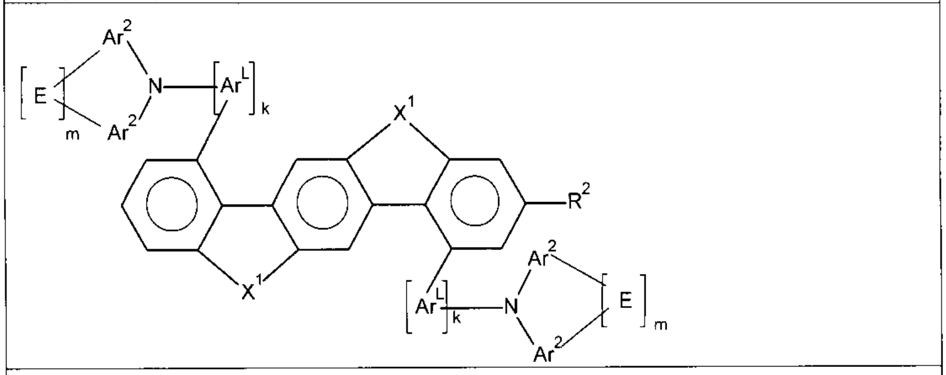
式 (I-1-D-3)



式 (I-1-D-4)



式 (I-1-D-5)



式 (I-1-D-6)

【０１０９】

（式中、出現する可変基は、先に定義した通りであり、X^1は好ましくは$C(R^4)_2$であり、化合物は、それぞれ芳香族環上の非占有位置においてR^3またはR^6ラジカルにより置換されていてもよく、好ましくはこれらの位置において無置換である）

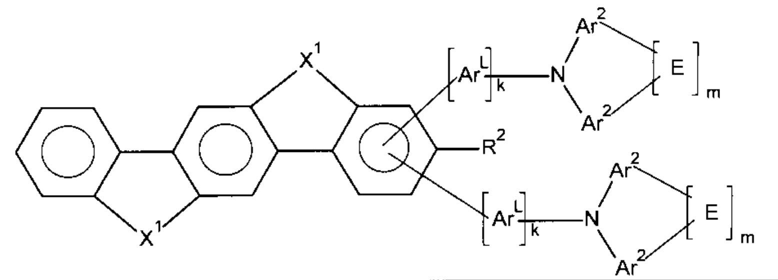
に対応する。

【０１１０】

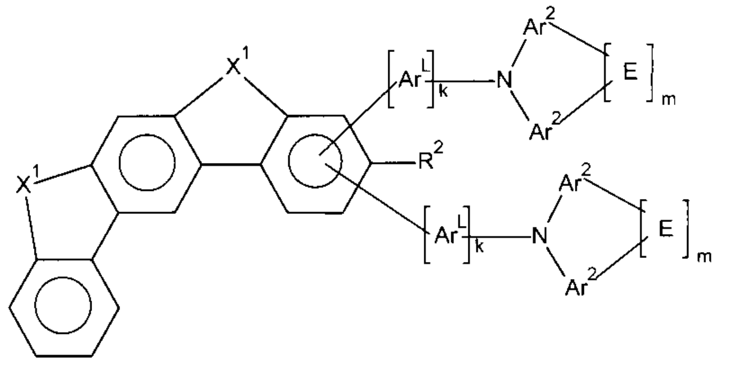
式（Ｉ－１）～（Ｉ－８）の化合物のさらなる好ましい態様は、下記の式：

【０１１１】

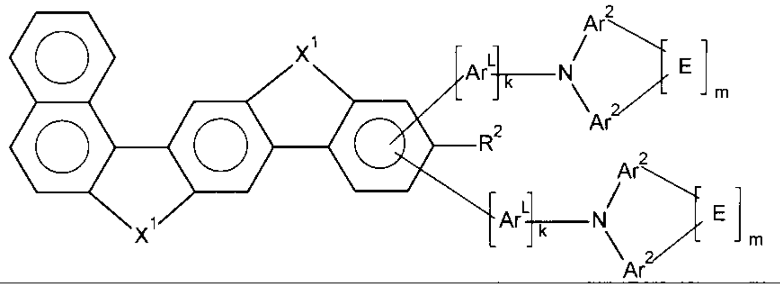
【化１２－１】



式 (I-1-E)



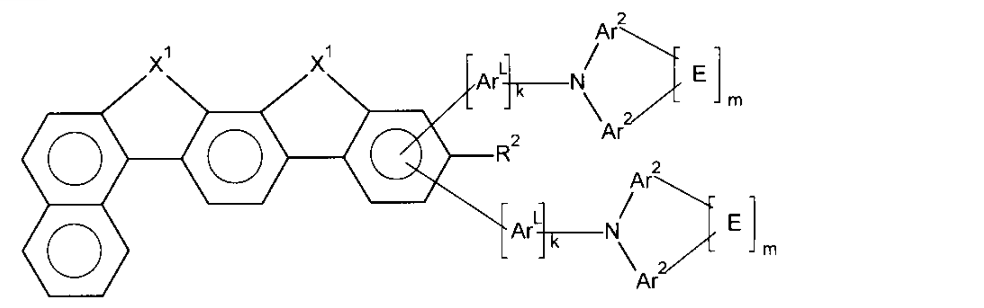
式 (I-2-E)



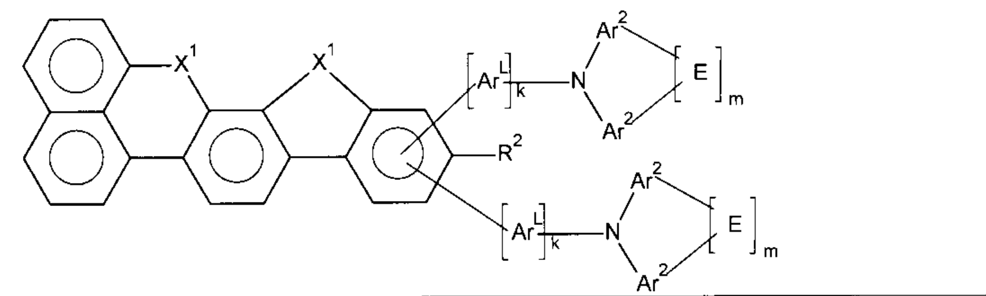
式 (I-3-E)

【０１１２】

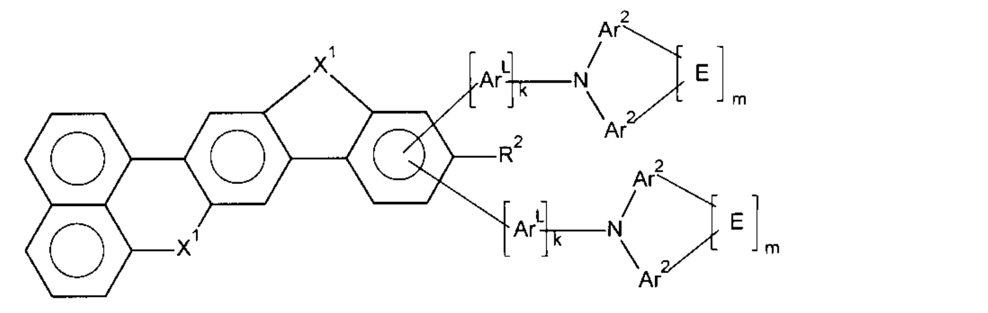
【化１２－２】



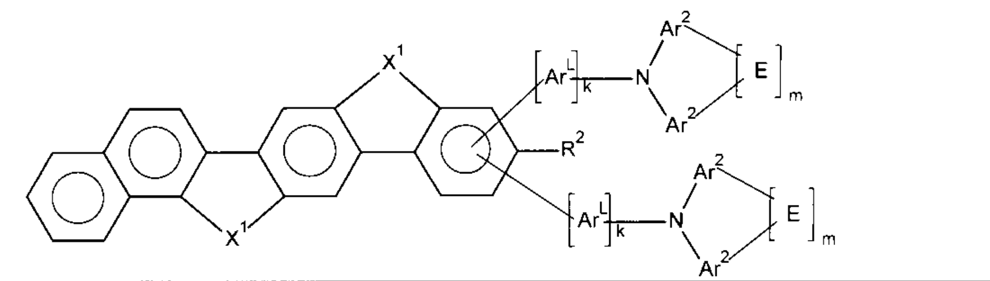
式 (I-4-E)



式 (I-5-E)



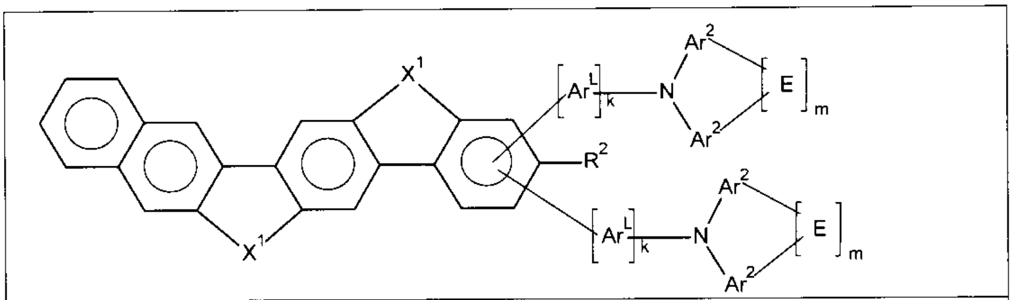
式 (I-6-E)



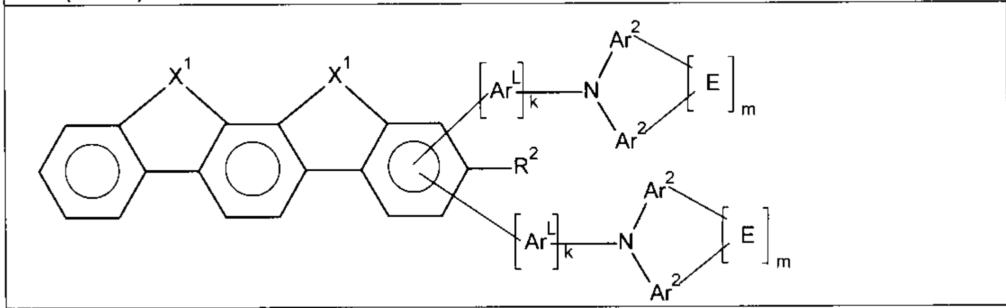
式 (I-7-E)

【０１１３】

【化１２－３】



式 (I-8-E)



式 (I-9-E)

【０１１４】

（式中、出現する可変基は、先に定義した通りであり、Ｘ^{1}は好ましくはＣ（Ｒ^4）$_2$であり、化合物は、それぞれ芳香族環上の非占有位置においてＲ^{3}またはＲ^{6}ラジカルにより置換されていてもよく、好ましくはこれらの位置において無置換である）

に対応する。

【０１１５】

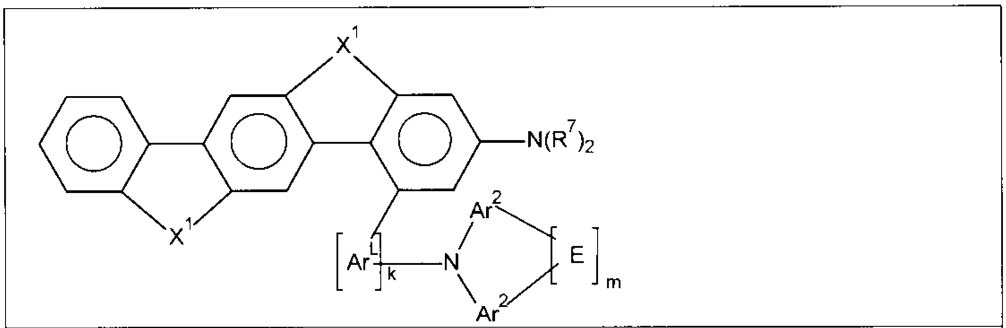
これらの式の中で、特に式（Ｉ－１－Ｅ）が好ましい。

【０１１６】

式（Ｉ－１－Ｅ）～（Ｉ－９－Ｅ）の好ましい態様は、以下に示す式：

【０１１７】

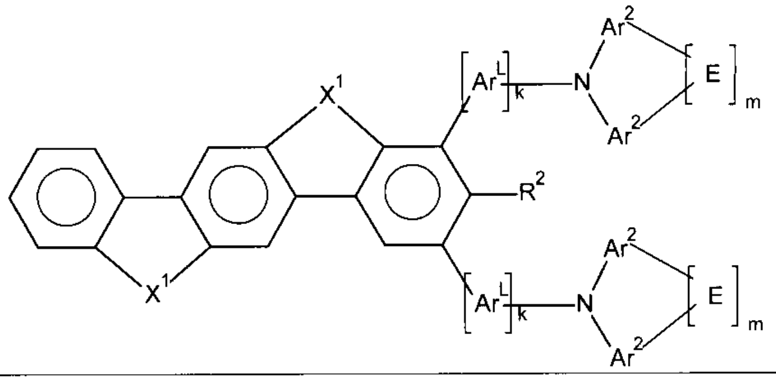
【化１３－１】



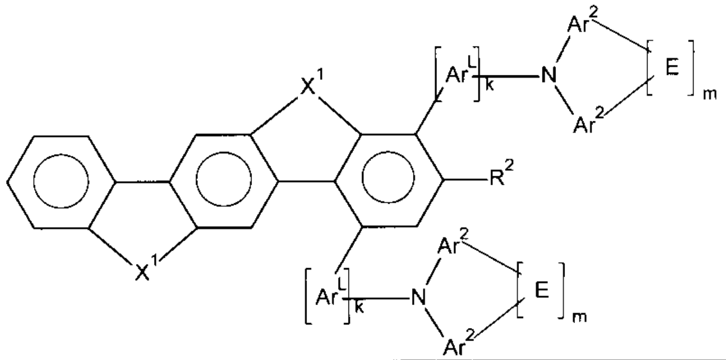
式 (I-1-E-1)

【０１１８】

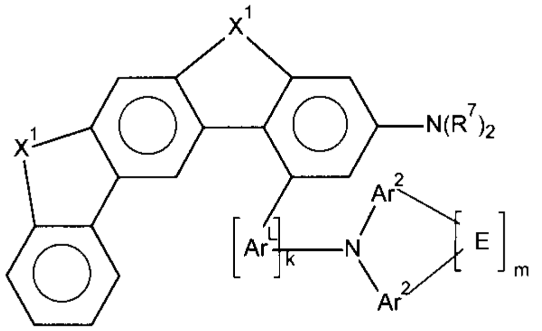
【化１３－２】



式 (I-1-E-2)



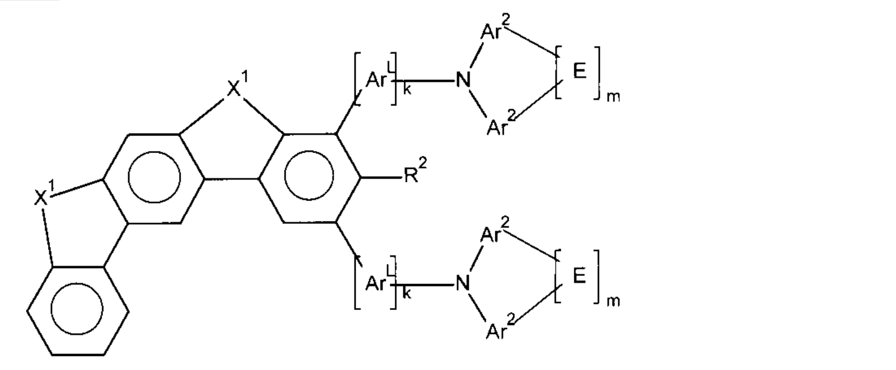
式 (I-1-E-3)



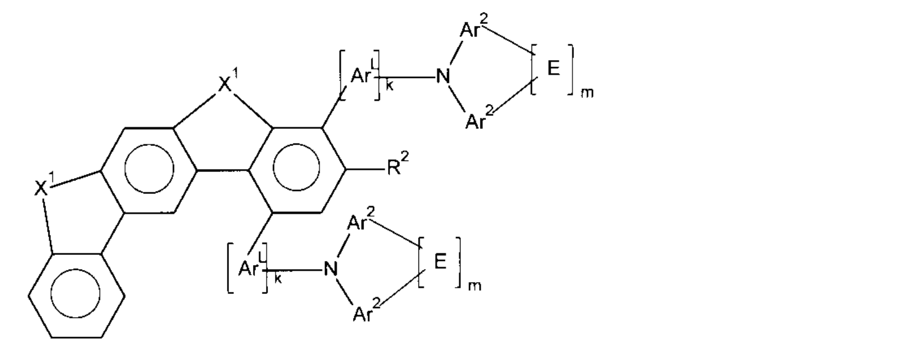
式 (I-2-E-1)

【０１１９】

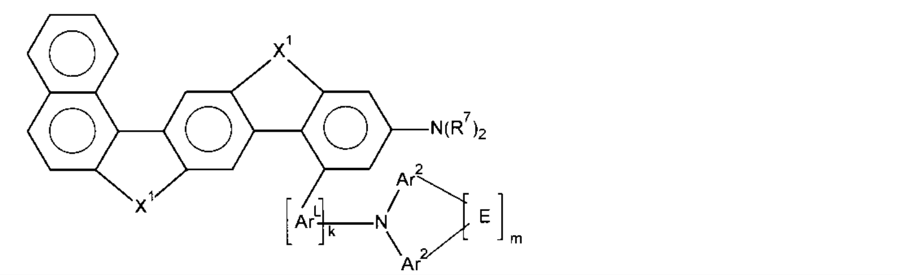
【化１３－３】



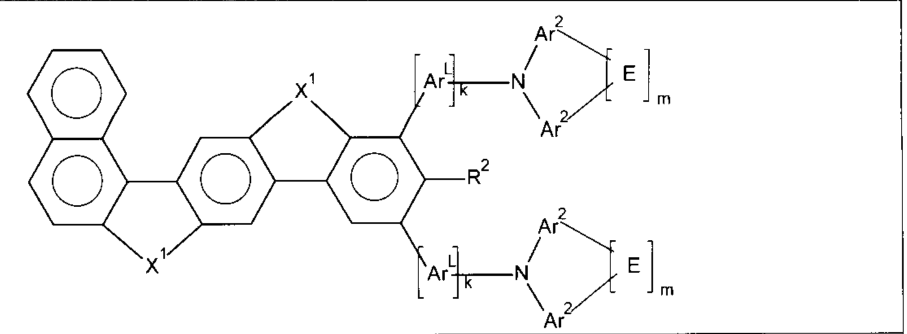
式 (I-2-E-2)



式 (I-2-E-3)



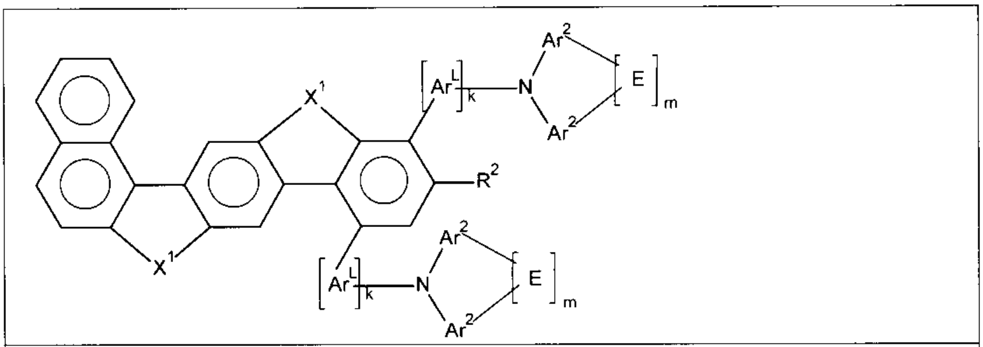
式 (I-3-E-1)



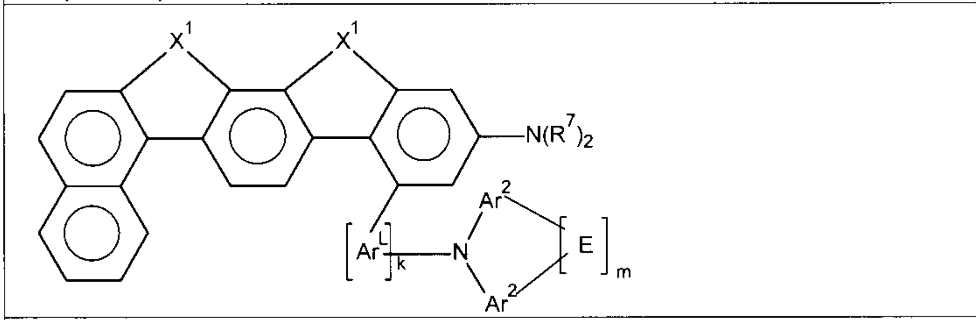
式 (I-3-E-2)

【０１２０】

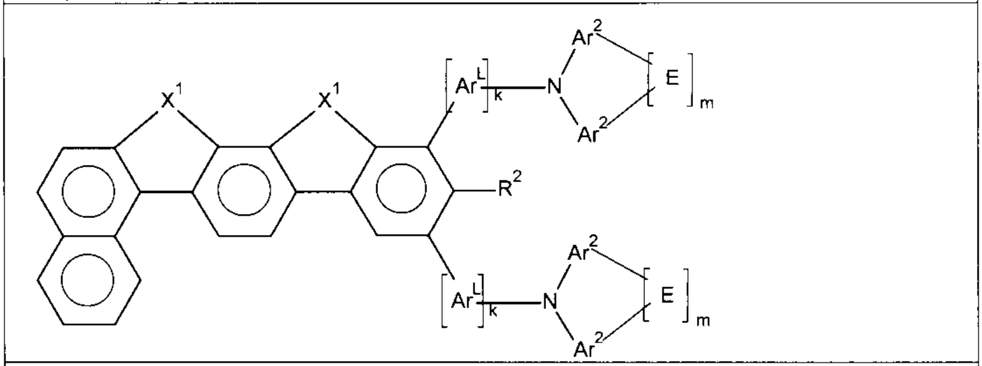
【化１３－４】



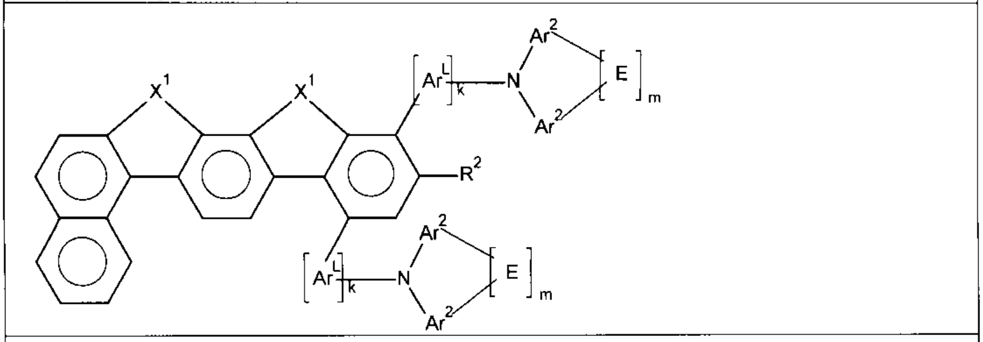
式 (I-3-E-3)



式 (I-4-E-1)



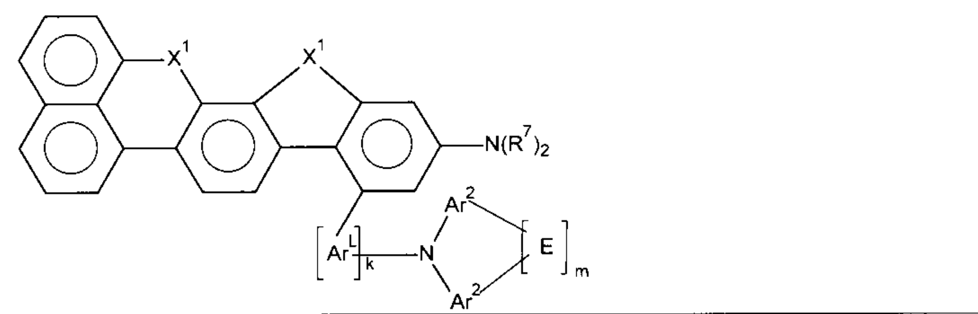
式 (I-4-E-2)



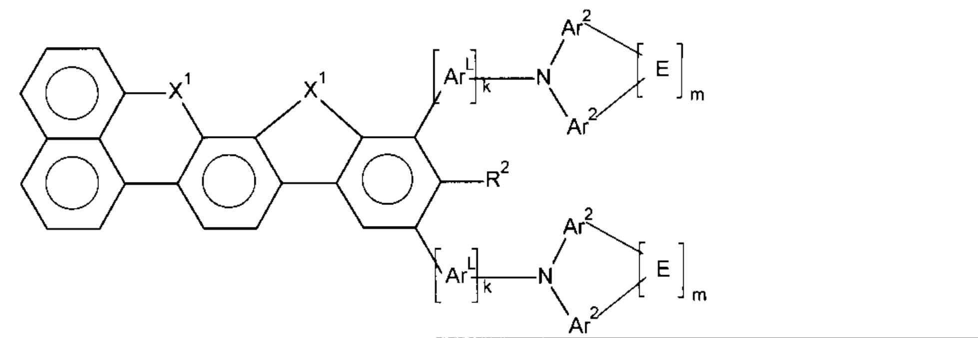
式 (I-4-E-3)

【０１２１】

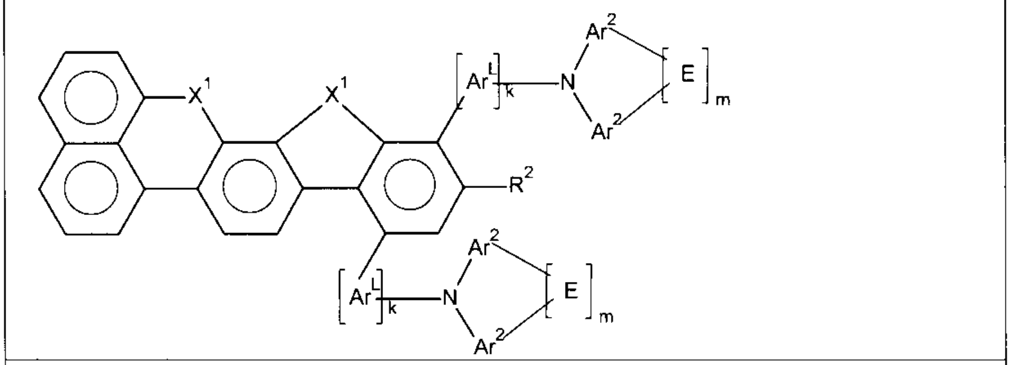
【化１３－５】



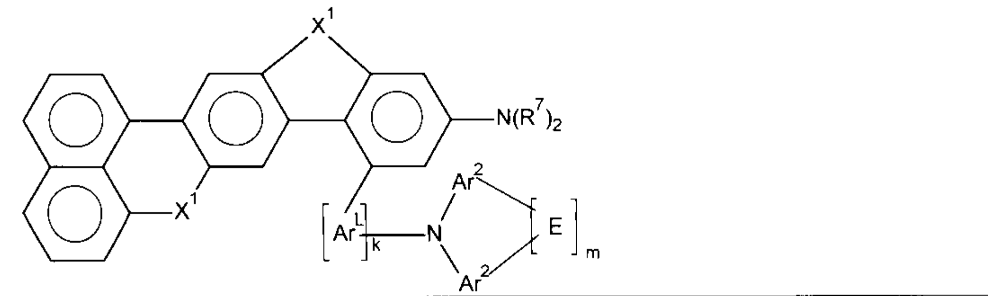
式 (I-5-E-1)



式 (I-5-E-2)



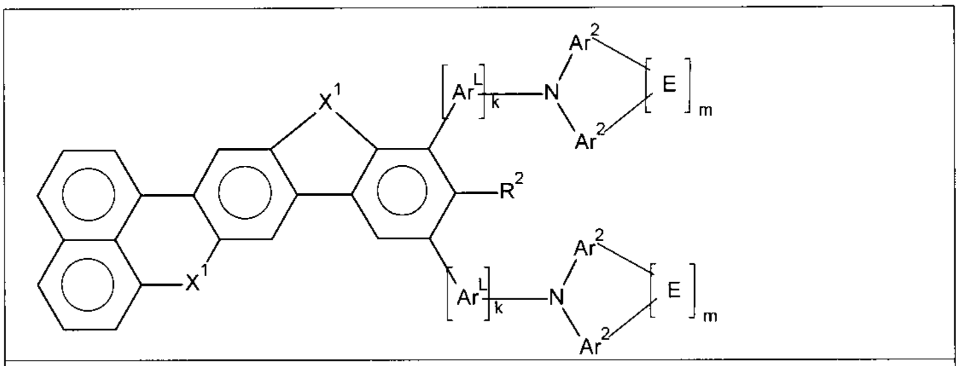
式 (I-5-E-3)



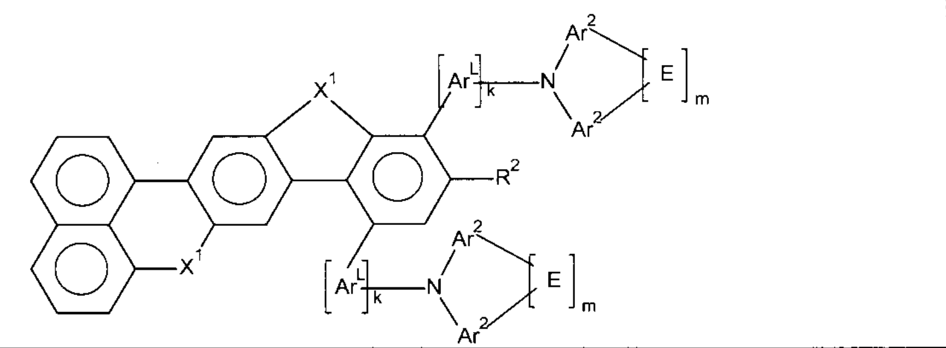
式 (I-6-E-1)

【０１２２】

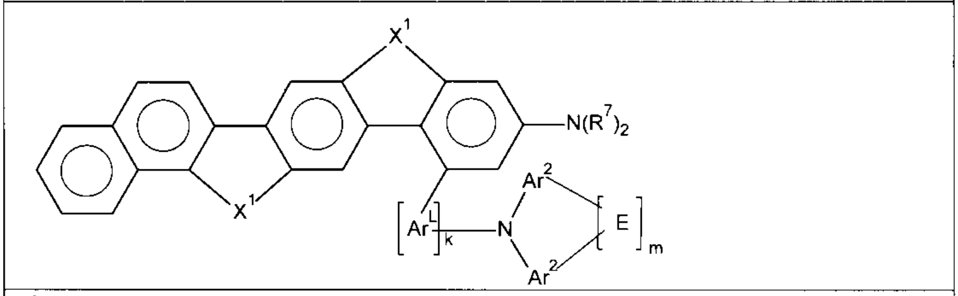
【化１３－６】



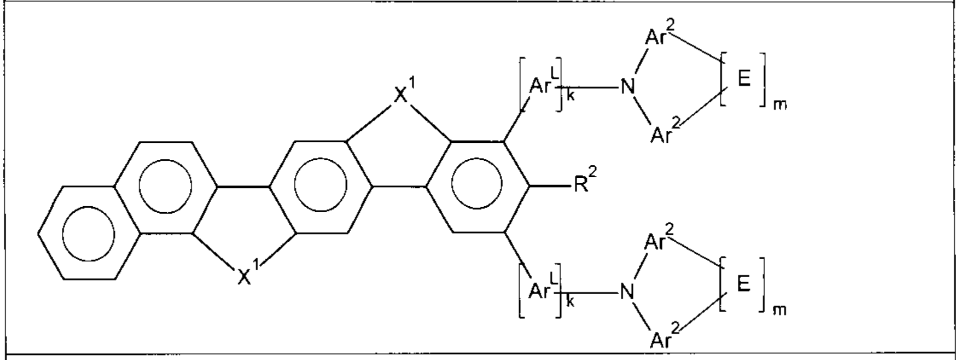
式 (I-6-E-2)



式 (I-6-E-3)



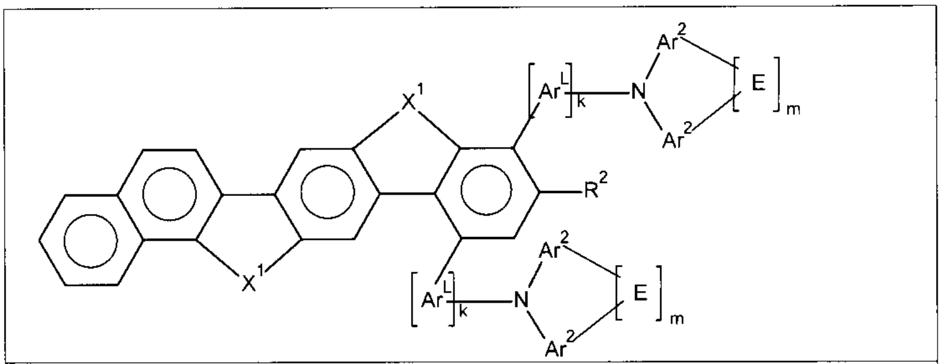
式 (I-7-E-1)



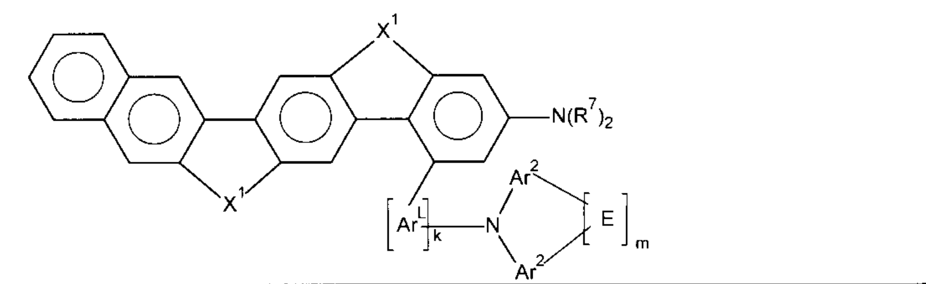
式 (I-7-E-2)

【０１２３】

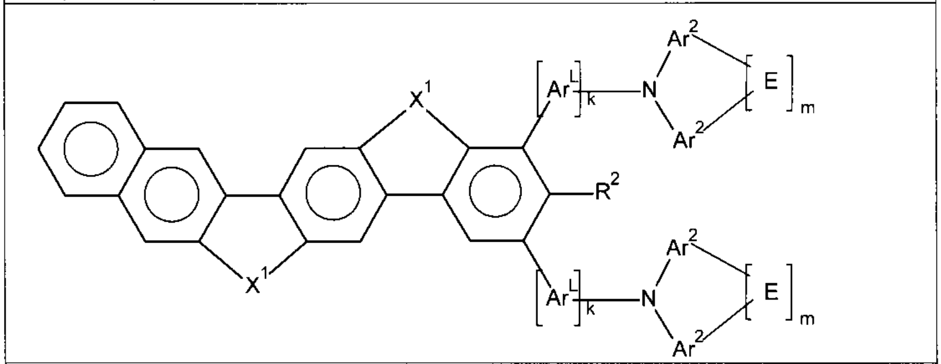
【化１３－７】



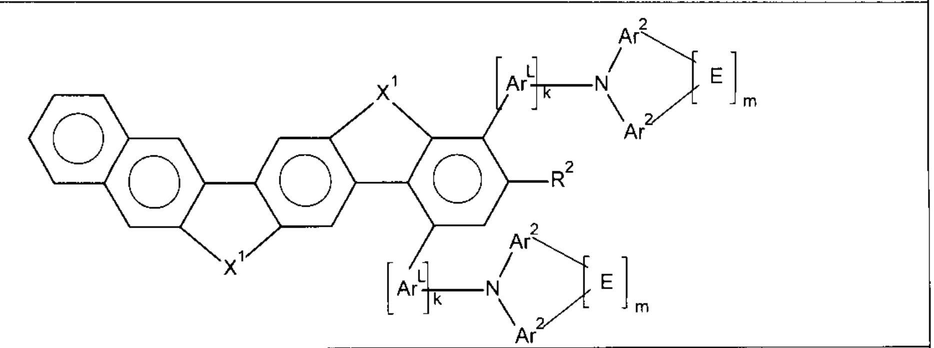
式 (I-7-E-3)



式 (I-8-E-1)



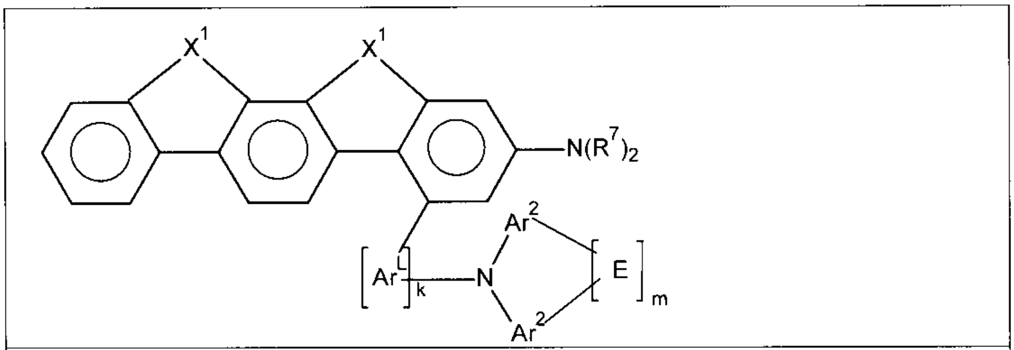
式 (I-8-E-2)



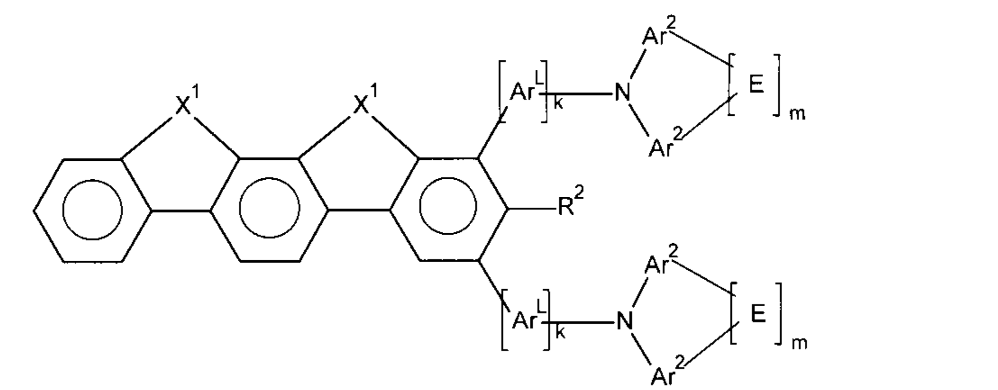
式 (I-8-E-3)

【０１２４】

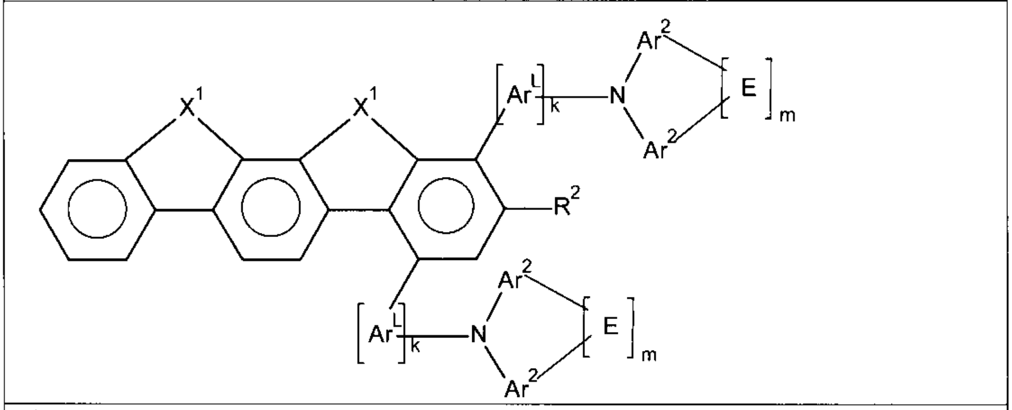
【化１３－８】



式 (I-9-E-1)



式 (I-9-E-2)



式 (I-9-E-3)

【０１２５】

（式中、出現する可変基は、先に定義した通りであり、Ｘ^{1}は好ましくはＣ（Ｒ^{4}）$_{2}$であり、化合物は、それぞれ芳香族環上の非占有位置においてＲ^{3}またはＲ^{6}ラジカルにより置換されていてもよく、好ましくはこれらの位置において無置換である）

に合致する。

【０１２６】

これらの式の中で、特に式（Ｉ－１－Ｅ－１）、（Ｉ－１－Ｅ－２）および（Ｉ－１－Ｅ－３）が好ましい。

【０１２７】

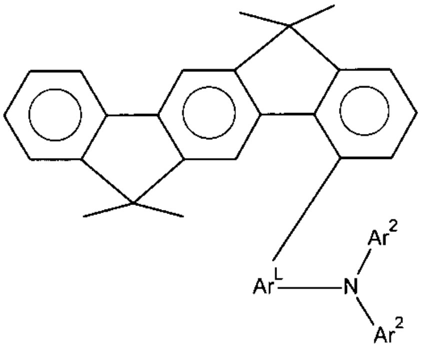
上記の好ましい基本構造に関し、可変基の上記の好ましい態様が好ましくは適用可能である。

【０１２８】

特に好ましい具体的化合物は、下記の式に合致する：

【０１２９】

【化１４】



式 (I-1-A-1)

【０１３０】
（式中、出現する可変基ＡｒＬおよびＡｒ２は、下記のように選択される）
【０１３１】
【化１５－１】

化合物	ArL 基	1方の Ar2 基	他方の Ar2 基
C-1	ArL-1	Ar-1	Ar-1
C-2	"	"	Ar-2
C-3	"	"	Ar-4
C-4	"	"	Ar-5
C-5	"	"	Ar-74
C-6	"	"	Ar-78
C-7	"	"	Ar-82
C-8	"	"	Ar-108
C-9	"	"	Ar-117
C-10	"	"	Ar-139
C-11	"	"	Ar-150
C-12	"	"	Ar-172
C-13	"	"	Ar-207
C-14	"	Ar-2	Ar-2
C-15	"	"	Ar-4
C-16	"	"	Ar-5
C-17	"	"	Ar-74
C-18	"	"	Ar-78
C-19	"	"	Ar-82
C-20	"	"	Ar-108
C-21	"	"	Ar-117

【０１３２】

【化１５－２】

C-22	"	"	Ar-139
C-23	"	"	Ar-150
C-24	"	"	Ar-172
C-25	"	"	Ar-207
C-26	"	Ar-4	Ar-4
C-27	"	"	Ar-5
C-28	"	"	Ar-74
C-29	"	"	Ar-78
C-30	"	"	Ar-82
C-31	"	"	Ar-108
C-32	"	"	Ar-117
C-33	"	"	Ar-139
C-34	"	"	Ar-150
C-35	"	"	Ar-172
C-36	"	"	Ar-207
C-37	"	Ar-5	Ar-5
C-38	"	"	Ar-74
C-39	"	"	Ar-78
C-40	"	"	Ar-82
C-41	"	"	Ar-108
C-42	"	"	Ar-117
C-43	"	"	Ar-139
C-44	"	"	Ar-150
C-45	"	"	Ar-172
C-46	"	"	Ar-207
C-47	"	Ar-74	Ar-74
C-48	"	"	Ar-78
C-49	"	"	Ar-82
C-50	"	"	Ar-108
C-51	"	"	Ar-117
C-52	"	"	Ar-139
C-53	"	"	Ar-150
C-54	"	"	Ar-172
C-55	"	"	Ar-207
C-56	"	Ar-78	Ar-78
C-57	"	"	Ar-82
C-58	"	"	Ar-108
C-59	"	"	Ar-117
C-60	"	"	Ar-139
C-61	"	"	Ar-150
C-62	"	"	Ar-172
C-63	"	"	Ar-207

【０１３３】

【化１５－３】

C-64	"	Ar-82	Ar-82
C-65	"	"	Ar-108
C-66	"	"	Ar-117
C-67	"	"	Ar-139
C-68	"	"	Ar-150
C-69	"	"	Ar-172
C-70	"	"	Ar-207
C-71	"	Ar-108	Ar-108
C-72	"	"	Ar-117
C-73	"	"	Ar-139
C-74	"	"	Ar-150
C-75	"	"	Ar-172
C-76	"	"	Ar-207
C-77	"	Ar-117	Ar-117
C-78	"	"	Ar-139
C-79	"	"	Ar-150
C-80	"	"	Ar-172
C-81	"	"	Ar-207
C-82	"	Ar-139	Ar-139
C-83	"	"	Ar-150
C-84	"	"	Ar-172
C-85	"	"	Ar-207
C-86	"	Ar-150	Ar-150
C-87	"	"	Ar-172
C-88	"	"	Ar-207
C-89	"	Ar-172	Ar-172
C-90	"	"	Ar-207
C-91	"	Ar-207	Ar-207
C-92	Ar^L-2	Ar-1	Ar-1
C-93	"	"	Ar-2
C-94	"	"	Ar-4
C-95	"	"	Ar-5
C-96	"	"	Ar-74
C-97	"	"	Ar-78
C-98	"	"	Ar-82
C-99	"	"	Ar-108
C-100	"	"	Ar-117
C-101	"	"	Ar-139
C-102	"	"	Ar-150
C-103	"	"	Ar-172
C-104	"	"	Ar-207
C-105	"	Ar-2	Ar-2

【０１３４】

【化１５－４】

C-106	"	"	Ar-4
C-107	"	"	Ar-5
C-108	"	"	Ar-74
C-109	"	"	Ar-78
C-110	"	"	Ar-82
C-111	"	"	Ar-108
C-112	"	"	Ar-117
C-113	"	"	Ar-139
C-114	"	"	Ar-150
C-115	"	"	Ar-172
C-116	"	"	Ar-207
C-117	"	Ar-4	Ar-4
C-118	"	"	Ar-5
C-119	"	"	Ar-74
C-120	"	"	Ar-78
C-121	"	"	Ar-82
C-122	"	"	Ar-108
C-123	"	"	Ar-117
C-124	"	"	Ar-139
C-125	"	"	Ar-150
C-126	"	"	Ar-172
C-127	"	"	Ar-207
C-128	"	Ar-5	Ar-5
C-129	"	"	Ar-74
C-130	"	"	Ar-78
C-131	"	"	Ar-82
C-132	"	"	Ar-108
C-133	"	"	Ar-117
C-134	"	"	Ar-139
C-135	"	"	Ar-150
C-136	"	"	Ar-172
C-137	"	"	Ar-207
C-138	"	Ar-74	Ar-74
C-139	"	"	Ar-78
C-140	"	"	Ar-82
C-141	"	"	Ar-108
C-142	"	"	Ar-117
C-143	"	"	Ar-139
C-144	"	"	Ar-150
C-145	"	"	Ar-172
C-146	"	"	Ar-207
C-147	"	Ar-78	Ar-78

【０１３５】

【化１５－５】

C-148	"	"	Ar-82
C-149	"	"	Ar-108
C-150	"	"	Ar-117
C-151	"	"	Ar-139
C-152	"	"	Ar-150
C-153	"	"	Ar-172
C-154	"	"	Ar-207
C-155	"	Ar-82	Ar-82
C-156	"	"	Ar-108
C-157	"	"	Ar-117
C-158	"	"	Ar-139
C-159	"	"	Ar-150
C-160	"	"	Ar-172
C-161	"	"	Ar-207
C-162	"	Ar-108	Ar-108
C-163	"	"	Ar-117
C-164	"	"	Ar-139
C-165	"	"	Ar-150
C-166	"	"	Ar-172
C-167	"	"	Ar-207
C-168	"	Ar-117	Ar-117
C-169	"	"	Ar-139
C-170	"	"	Ar-150
C-171	"	"	Ar-172
C-172	"	"	Ar-207
C-173	"	Ar-139	Ar-139
C-174	"	"	Ar-150
C-175	"	"	Ar-172
C-176	"	"	Ar-207
C-177	"	Ar-150	Ar-150
C-178	"	"	Ar-172
C-179	"	"	Ar-207
C-180	"	Ar-172	Ar-172
C-181	"	"	Ar-207
C-182	"	Ar-207	Ar-207
C-183	Ar^L-3	Ar-1	Ar-1
C-184	"	"	Ar-2
C-185	"	"	Ar-4
C-186	"	"	Ar-5
C-187	"	"	Ar-74
C-188	"	"	Ar-78
C-189	"	"	Ar-82

【０１３６】

【化１５－６】

C-190	"	"	Ar-108
C-191	"	"	Ar-117
C-192	"	"	Ar-139
C-193	"	"	Ar-150
C-194	"	"	Ar-172
C-195	"	"	Ar-207
C-196	"	Ar-2	Ar-2
C-197	"	"	Ar-4
C-198	"	"	Ar-5
C-199	"	"	Ar-74
C-200	"	"	Ar-78
C-201	"	"	Ar-82
C-202	"	"	Ar-108
C-203	"	"	Ar-117
C-204	"	"	Ar-139
C-205	"	"	Ar-150
C-206	"	"	Ar-172
C-207	"	"	Ar-207
C-208	"	Ar-4	Ar-4
C-209	"	"	Ar-5
C-210	"	"	Ar-74
C-211	"	"	Ar-78
C-212	"	"	Ar-82
C-213	"	"	Ar-108
C-214	"	"	Ar-117
C-215	"	"	Ar-139
C-216	"	"	Ar-150
C-217	"	"	Ar-172
C-218	"	"	Ar-207
C-219	"	Ar-5	Ar-5
C-220	"	"	Ar-74
C-221	"	"	Ar-78
C-222	"	"	Ar-82
C-223	"	"	Ar-108
C-224	"	"	Ar-117
C-225	"	"	Ar-139
C-226	"	"	Ar-150
C-227	"	"	Ar-172
C-228	"	"	Ar-207
C-229	"	Ar-74	Ar-74
C-230	"	"	Ar-78
C-231	"	"	Ar-82

【０１３７】

【化１５－７】

C-232	"	"	Ar-108
C-233	"	"	Ar-117
C-234	"	"	Ar-139
C-235	"	"	Ar-150
C-236	"	"	Ar-172
C-237	"	"	Ar-207
C-238	"	Ar-78	Ar-78
C-239	"	"	Ar-82
C-240	"	"	Ar-108
C-241	"	"	Ar-117
C-242	"	"	Ar-139
C-243	"	"	Ar-150
C-244	"	"	Ar-172
C-245	"	"	Ar-207
C-246	"	Ar-82	Ar-82
C-247	"	"	Ar-108
C-248	"	"	Ar-117
C-249	"	"	Ar-139
C-250	"	"	Ar-150
C-251	"	"	Ar-172
C-252	"	"	Ar-207
C-253	"	Ar-108	Ar-108
C-254	"	"	Ar-117
C-255	"	"	Ar-139
C-256	"	"	Ar-150
C-257	"	"	Ar-172
C-258	"	"	Ar-207
C-259	"	Ar-117	Ar-117
C-260	"	"	Ar-139
C-261	"	"	Ar-150
C-262	"	"	Ar-172
C-263	"	"	Ar-207
C-264	"	Ar-139	Ar-139
C-265	"	"	Ar-150
C-266	"	"	Ar-172
C-267	"	"	Ar-207
C-268	"	Ar-150	Ar-150
C-269	"	"	Ar-172
C-270	"	"	Ar-207
C-271	"	Ar-172	Ar-172
C-272	"	"	Ar-207
C-273	"	Ar-207	Ar-207

【０１３８】

【化１５－８】

C-274	Ar^{L}-4	Ar-1	Ar-1
C-275	"	"	Ar-2
C-276	"	"	Ar-4
C-277	"	"	Ar-5
C-278	"	"	Ar-74
C-279	"	"	Ar-78
C-280	"	"	Ar-82
C-281	"	"	Ar-108
C-282	"	"	Ar-117
C-283	"	"	Ar-139
C-284	"	"	Ar-150
C-285	"	"	Ar-172
C-286	"	"	Ar-207
C-287	"	Ar-2	Ar-2
C-288	"	"	Ar-4
C-289	"	"	Ar-5
C-290	"	"	Ar-74
C-291	"	"	Ar-78
C-292	"	"	Ar-82
C-293	"	"	Ar-108
C-294	"	"	Ar-117
C-295	"	"	Ar-139
C-296	"	"	Ar-150
C-297	"	"	Ar-172
C-298	"	"	Ar-207
C-299	"	Ar-4	Ar-4
C-300	"	"	Ar-5
C-301	"	"	Ar-74
C-302	"	"	Ar-78
C-303	"	"	Ar-82
C-304	"	"	Ar-108
C-305	"	"	Ar-117
C-306	"	"	Ar-139
C-307	"	"	Ar-150
C-308	"	"	Ar-172
C-309	"	"	Ar-207
C-310	"	Ar-5	Ar-5
C-311	"	"	Ar-74
C-312	"	"	Ar-78
C-313	"	"	Ar-82
C-314	"	"	Ar-108
C-315	"	"	Ar-117

【０１３９】

【化１５－９】

C-316	"	"	Ar-139
C-317	"	"	Ar-150
C-318	"	"	Ar-172
C-319	"	"	Ar-207
C-320	"	Ar-74	Ar-74
C-321	"	"	Ar-78
C-322	"	"	Ar-82
C-323	"	"	Ar-108
C-324	"	"	Ar-117
C-325	"	"	Ar-139
C-326	"	"	Ar-150
C-327	"	"	Ar-172
C-328	"	"	Ar-207
C-329	"	Ar-78	Ar-78
C-330	"	"	Ar-82
C-331	"	"	Ar-108
C-332	"	"	Ar-117
C-333	"	"	Ar-139
C-334	"	"	Ar-150
C-335	"	"	Ar-172
C-336	"	"	Ar-207
C-337	"	Ar-82	Ar-82
C-338	"	"	Ar-108
C-339	"	"	Ar-117
C-340	"	"	Ar-139
C-341	"	"	Ar-150
C-342	"	"	Ar-172
C-343	"	"	Ar-207
C-344	"	Ar-108	Ar-108
C-345	"	"	Ar-117
C-346	"	"	Ar-139
C-347	"	"	Ar-150
C-348	"	"	Ar-172
C-349	"	"	Ar-207
C-350	"	Ar-117	Ar-117
C-351	"	"	Ar-139
C-352	"	"	Ar-150
C-353	"	"	Ar-172
C-354	"	"	Ar-207
C-355	"	Ar-139	Ar-139
C-356	"	"	Ar-150
C-357	"	"	Ar-172

【０１４０】

【化１５－１０】

C-358	"	"	Ar-207
C-359	"	Ar-150	Ar-150
C-360	"	"	Ar-172
C-361	"	"	Ar-207
C-362	"	Ar-172	Ar-172
C-363	"	"	Ar-207
C-364	"	Ar-207	Ar-207
C-365	Ar^{L}-7	Ar-1	Ar-1
C-366	"	"	Ar-2
C-367	"	"	Ar-4
C-368	"	"	Ar-5
C-369	"	"	Ar-74
C-370	"	"	Ar-78
C-371	"	"	Ar-82
C-372	"	"	Ar-108
C-373	"	"	Ar-117
C-374	"	"	Ar-139
C-375	"	"	Ar-150
C-376	"	"	Ar-172
C-377	"	"	Ar-207
C-378	"	Ar-2	Ar-2
C-379	"	"	Ar-4
C-380	"	"	Ar-5
C-381	"	"	Ar-74
C-382	"	"	Ar-78
C-383	"	"	Ar-82
C-384	"	"	Ar-108
C-385	"	"	Ar-117
C-386	"	"	Ar-139
C-387	"	"	Ar-150
C-388	"	"	Ar-172
C-389	"	"	Ar-207
C-390	"	Ar-4	Ar-4
C-391	"	"	Ar-5
C-392	"	"	Ar-74
C-393	"	"	Ar-78
C-394	"	"	Ar-82
C-395	"	"	Ar-108
C-396	"	"	Ar-117
C-397	"	"	Ar-139
C-398	"	"	Ar-150
C-399	"	"	Ar-172

【０１４１】

【化１５－１１】

C-400	"	"	Ar-207
C-401	"	Ar-5	Ar-5
C-402	"	"	Ar-74
C-403	"	"	Ar-78
C-404	"	"	Ar-82
C-405	"	"	Ar-108
C-406	"	"	Ar-117
C-407	"	"	Ar-139
C-408	"	"	Ar-150
C-409	"	"	Ar-172
C-410	"	"	Ar-207
C-411	"	Ar-74	Ar-74
C-412	"	"	Ar-78
C-413	"	"	Ar-82
C-414	"	"	Ar-108
C-415	"	"	Ar-117
C-416	"	"	Ar-139
C-417	"	"	Ar-150
C-418	"	"	Ar-172
C-419	"	"	Ar-207
C-420	"	Ar-78	Ar-78
C-421	"	"	Ar-82
C-422	"	"	Ar-108
C-423	"	"	Ar-117
C-424	"	"	Ar-139
C-425	"	"	Ar-150
C-426	"	"	Ar-172
C-427	"	"	Ar-207
C-428	"	Ar-82	Ar-82
C-429	"	"	Ar-108
C-430	"	"	Ar-117
C-431	"	"	Ar-139
C-432	"	"	Ar-150
C-433	"	"	Ar-172
C-434	"	"	Ar-207
C-435	"	Ar-108	Ar-108
C-436	"	"	Ar-117
C-437	"	"	Ar-139
C-438	"	"	Ar-150
C-439	"	"	Ar-172
C-440	"	"	Ar-207
C-441	"	Ar-117	Ar-117

【０１４２】

【化１５－１２】

C-442	"	"	Ar-139
C-443	"	"	Ar-150
C-444	"	"	Ar-172
C-445	"	"	Ar-207
C-446	"	Ar-139	Ar-139
C-447	"	"	Ar-150
C-448	"	"	Ar-172
C-449	"	"	Ar-207
C-450	"	Ar-150	Ar-150
C-451	"	"	Ar-172
C-452	"	"	Ar-207
C-453	"	Ar-172	Ar-172
C-454	"	"	Ar-207
C-455	"	Ar-207	Ar-207
C-456	Ar^L-19	Ar-1	Ar-1
C-457	"	"	Ar-2
C-458	"	"	Ar-4
C-459	"	"	Ar-5
C-460	"	"	Ar-74
C-461	"	"	Ar-78
C-462	"	"	Ar-82
C-463	"	"	Ar-108
C-464	"	"	Ar-117
C-465	"	"	Ar-139
C-466	"	"	Ar-150
C-467	"	"	Ar-172
C-468	"	"	Ar-207
C-469	"	Ar-2	Ar-2
C-470	"	"	Ar-4
C-471	"	"	Ar-5
C-472	"	"	Ar-74
C-473	"	"	Ar-78
C-474	"	"	Ar-82
C-475	"	"	Ar-108
C-476	"	"	Ar-117
C-477	"	"	Ar-139
C-478	"	"	Ar-150
C-479	"	"	Ar-172
C-480	"	"	Ar-207
C-481	"	Ar-4	Ar-4
C-482	"	"	Ar-5
C-483	"	"	Ar-74

【０１４３】

【化１５－１３】

C-484	"	"	Ar-78
C-485	"	"	Ar-82
C-486	"	"	Ar-108
C-487	"	"	Ar-117
C-488	"	"	Ar-139
C-489	"	"	Ar-150
C-490	"	"	Ar-172
C-491	"	"	Ar-207
C-492	"	Ar-5	Ar-5
C-493	"	"	Ar-74
C-494	"	"	Ar-78
C-495	"	"	Ar-82
C-496	"	"	Ar-108
C-497	"	"	Ar-117
C-498	"	"	Ar-139
C-499	"	"	Ar-150
C-500	"	"	Ar-172
C-501	"	"	Ar-207
C-502	"	Ar-74	Ar-74
C-503	"	"	Ar-78
C-504	"	"	Ar-82
C-505	"	"	Ar-108
C-506	"	"	Ar-117
C-507	"	"	Ar-139
C-508	"	"	Ar-150
C-509	"	"	Ar-172
C-510	"	"	Ar-207
C-511	"	Ar-78	Ar-78
C-512	"	"	Ar-82
C-513	"	"	Ar-108
C-514	"	"	Ar-117
C-515	"	"	Ar-139
C-516	"	"	Ar-150
C-517	"	"	Ar-172
C-518	"	"	Ar-207
C-519	"	Ar-82	Ar-82
C-520	"	"	Ar-108
C-521	"	"	Ar-117
C-522	"	"	Ar-139
C-523	"	"	Ar-150
C-524	"	"	Ar-172
C-525	"	"	Ar-207

【０１４４】

【化１５－１４】

C-526	"	Ar-108	Ar-108
C-527	"	"	Ar-117
C-528	"	"	Ar-139
C-529	"	"	Ar-150
C-530	"	"	Ar-172
C-531	"	"	Ar-207
C-532	"	Ar-117	Ar-117
C-533	"	"	Ar-139
C-534	"	"	Ar-150
C-535	"	"	Ar-172
C-536	"	"	Ar-207
C-537	"	Ar-139	Ar-139
C-538	"	"	Ar-150
C-539	"	"	Ar-172
C-540	"	"	Ar-207
C-541	"	Ar-150	Ar-150
C-542	"	"	Ar-172
C-543	"	"	Ar-207
C-544	"	Ar-172	Ar-172
C-545	"	"	Ar-207
C-546	"	Ar-207	Ar-207
C-547	Ar^L-36	Ar-1	Ar-1
C-548	"	"	Ar-2
C-549	"	"	Ar-4
C-550	"	"	Ar-5
C-551	"	"	Ar-74
C-552	"	"	Ar-78
C-553	"	"	Ar-82
C-554	"	"	Ar-108
C-555	"	"	Ar-117
C-556	"	"	Ar-139
C-557	"	"	Ar-150
C-558	"	"	Ar-172
C-559	"	"	Ar-207
C-560	"	Ar-2	Ar-2
C-561	"	"	Ar-4
C-562	"	"	Ar-5
C-563	"	"	Ar-74
C-564	"	"	Ar-78
C-565	"	"	Ar-82
C-566	"	"	Ar-108
C-567	"	"	Ar-117

【０１４５】

【化１５－１５】

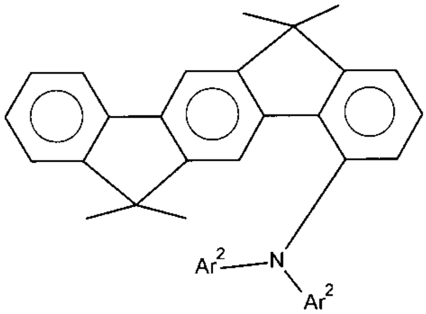
C-568	"	"	Ar-139
C-569	"	"	Ar-150
C-570	"	"	Ar-172
C-571	"	"	Ar-207
C-572	"	Ar-4	Ar-4
C-573	"	"	Ar-5
C-574	"	"	Ar-74
C-575	"	"	Ar-78
C-576	"	"	Ar-82
C-577	"	"	Ar-108
C-578	"	"	Ar-117
C-579	"	"	Ar-139
C-580	"	"	Ar-150
C-581	"	"	Ar-172
C-582	"	"	Ar-207
C-583	"	Ar-5	Ar-5
C-584	"	"	Ar-74
C-585	"	"	Ar-78
C-586	"	"	Ar-82
C-587	"	"	Ar-108
C-588	"	"	Ar-117
C-589	"	"	Ar-139
C-590	"	"	Ar-150
C-591	"	"	Ar-172
C-592	"	"	Ar-207
C-593	"	Ar-74	Ar-74
C-594	"	"	Ar-78
C-595	"	"	Ar-82
C-596	"	"	Ar-108
C-597	"	"	Ar-117
C-598	"	"	Ar-139
C-599	"	"	Ar-150
C-600	"	"	Ar-172
C-601	"	"	Ar-207
C-602	"	Ar-78	Ar-78
C-603	"	"	Ar-82
C-604	"	"	Ar-108
C-605	"	"	Ar-117
C-606	"	"	Ar-139
C-607	"	"	Ar-150
C-608	"	"	Ar-172
C-609	"	"	Ar-207

【０１４６】

【化１５－１６】

C-610	"	Ar-82	Ar-82
C-611	"	"	Ar-108
C-612	"	"	Ar-117
C-613	"	"	Ar-139
C-614	"	"	Ar-150
C-615	"	"	Ar-172
C-616	"	"	Ar-207
C-617	"	Ar-108	Ar-108
C-618	"	"	Ar-117
C-619	"	"	Ar-139
C-620	"	"	Ar-150
C-621	"	"	Ar-172
C-622	"	"	Ar-207
C-623	"	Ar-117	Ar-117
C-624	"	"	Ar-139
C-625	"	"	Ar-150
C-626	"	"	Ar-172
C-627	"	"	Ar-207
C-628	"	Ar-139	Ar-139
C-629	"	"	Ar-150
C-630	"	"	Ar-172
C-631	"	"	Ar-207
C-632	"	Ar-150	Ar-150
C-633	"	"	Ar-172
C-634	"	"	Ar-207
C-635	"	Ar-172	Ar-172
C-636	"	"	Ar-207
C-637	"	Ar-207	Ar-207

【０１４７】
　さらなる特に好ましい具体的化合物は、下記の式に合致する：
【０１４８】
【化１６】



式 (I-1-A-2)

【０１４９】
（式中、出現する可変基Ａｒ ^{2} は、下記のように選択される）
【０１５０】

【化１７－１】

化合物	1方の Ar^2 基	他方の Ar^2 基
C-638	Ar-1	Ar-1
C-639	"	Ar-2
C-640	"	Ar-4
C-641	"	Ar-5
C-642	"	Ar-74
C-643	"	Ar-78
C-644	"	Ar-82
C-645	"	Ar-108
C-646	"	Ar-117
C-647	"	Ar-139
C-648	"	Ar-150
C-649	"	Ar-172
C-650	"	Ar-207
C-651	Ar-2	Ar-2
C-652	"	Ar-4
C-653	"	Ar-5
C-654	"	Ar-74
C-655	"	Ar-78
C-656	"	Ar-82
C-657	"	Ar-108
C-658	"	Ar-117
C-659	"	Ar-139
C-660	"	Ar-150
C-661	"	Ar-172
C-662	"	Ar-207
C-663	Ar-4	Ar-4
C-664	"	Ar-5
C-665	"	Ar-74
C-666	"	Ar-78
C-667	"	Ar-82
C-668	"	Ar-108
C-669	"	Ar-117
C-670	"	Ar-139
C-671	"	Ar-150
C-672	"	Ar-172
C-673	"	Ar-207
C-674	Ar-5	Ar-5
C-675	"	Ar-74
C-676	"	Ar-78

【０１５１】

【化１７－２】

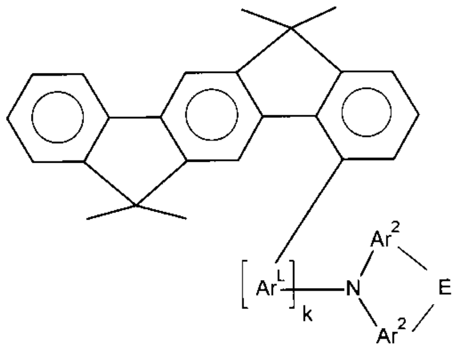
C-677	"	Ar-82
C-678	"	Ar-108
C-679	"	Ar-117
C-680	"	Ar-139
C-681	"	Ar-150
C-682	"	Ar-172
C-683	"	Ar-207
C-684	Ar-74	Ar-74
C-685	"	Ar-78
C-686	"	Ar-82
C-687	"	Ar-108
C-688	"	Ar-117
C-689	"	Ar-139
C-690	"	Ar-150
C-691	"	Ar-172
C-692	"	Ar-207
C-693	Ar-78	Ar-78
C-694	"	Ar-82
C-695	"	Ar-108
C-696	"	Ar-117
C-697	"	Ar-139
C-698	"	Ar-150
C-699	"	Ar-172
C-700	"	Ar-207
C-701	Ar-82	Ar-82
C-702	"	Ar-108
C-703	"	Ar-117
C-704	"	Ar-139
C-705	"	Ar-150
C-706	"	Ar-172
C-707	"	Ar-207
C-708	Ar-108	Ar-108
C-709	"	Ar-117
C-710	"	Ar-139
C-711	"	Ar-150
C-712	"	Ar-172
C-713	"	Ar-207
C-714	Ar-117	Ar-117
C-715	"	Ar-139
C-716	"	Ar-150
C-717	"	Ar-172
C-718	"	Ar-207

【０１５２】

【化１７－３】

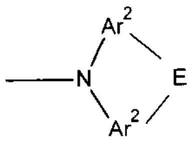
C-719	Ar-139	Ar-139
C-720	"	Ar-150
C-721	"	Ar-172
C-722	"	Ar-207
C-723	Ar-150	Ar-150
C-724	"	Ar-172
C-725	"	Ar-207
C-726	Ar-172	Ar-172
C-727	"	Ar-207
C-728	Ar-207	Ar-207

【０１５３】
　さらなる特に好ましい具体的化合物は、下記の式に合致する：
【０１５４】
【化１８】



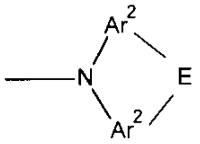
式 (I-1-A-3)

【０１５５】
（式中、出現する可変基ｋ、Ａｒ^{L}基および単位
【０１５６】
【化１９】



【０１５７】
は、下記のように選択される）
【０１５８】

【化２０】

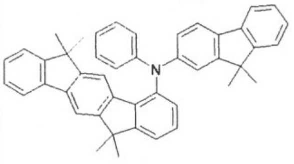
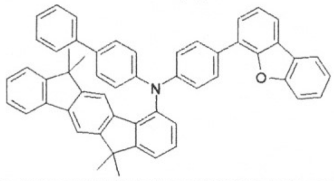
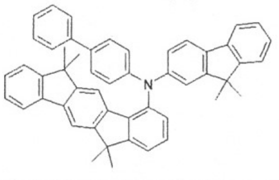
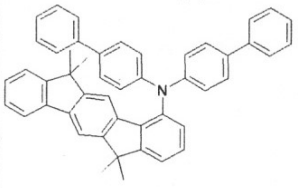
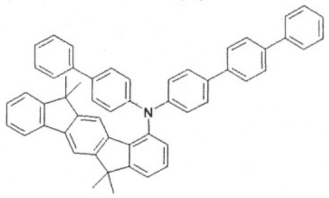
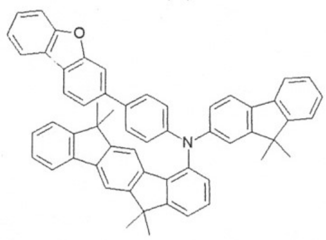
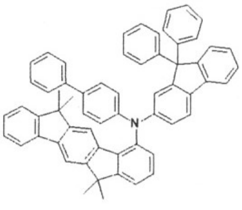
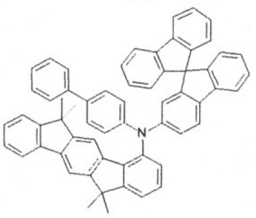
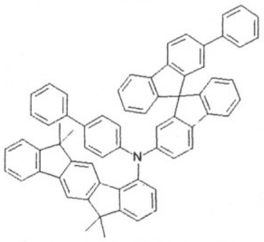
化合物	k	Ar^L	単位 
C-729	0	--	N-17
C-730	0	--	N-20
C-731	1	Ar^L-1	N-17
C-732	1	Ar^L-1	N-20
C-733	1	Ar^L-2	N-17
C-734	1	Ar^L-2	N-20
C-735	1	Ar^L-3	N-17
C-736	1	Ar^L-3	N-20
C-737	1	Ar^L-4	N-17
C-738	1	Ar^L-4	N-20
C-739	1	Ar^L-7	N-17
C-740	1	Ar^L-7	N-20
C-741	1	Ar^L-19	N-17
C-742	1	Ar^L-19	N-20
C-743	1	Ar^L-36	N-17
C-744	1	Ar^L-36	N-20

【０１５９】

式（Ｉ）の好ましい具体的化合物を、下記の表に図示する：

【０１６０】

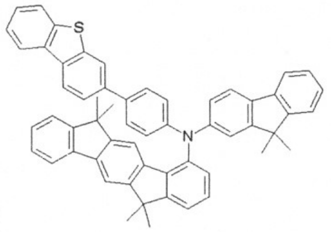
【化２１－１】

(1) 	(2) 	(3) 
(4) 	(5) 	(6) 
(7) 	(8) 	(9) 

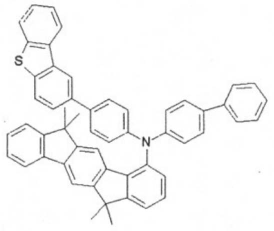
【０１６１】

【化２１－２】

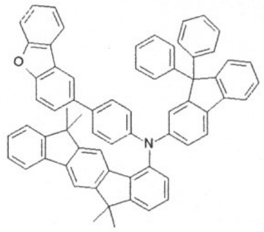
(10)



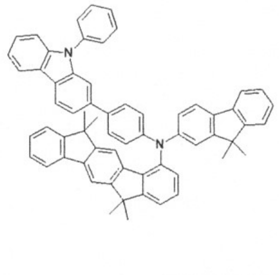
(11)



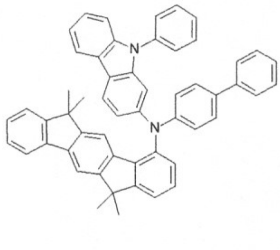
(12)



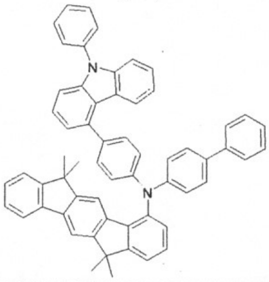
(13)



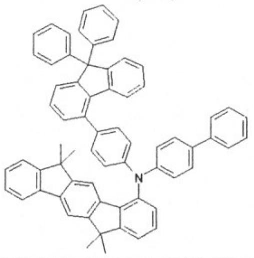
(14)



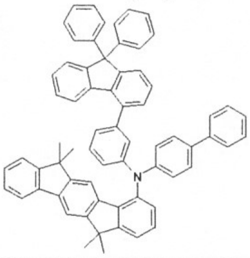
(15)



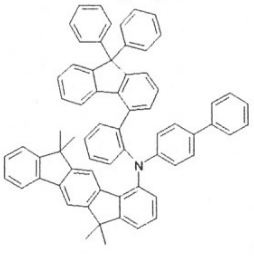
(16)



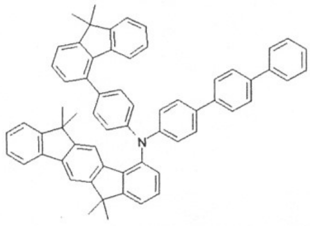
(17)



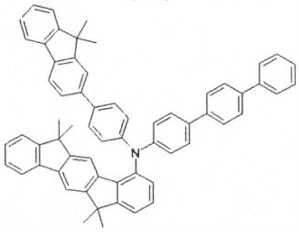
(18)



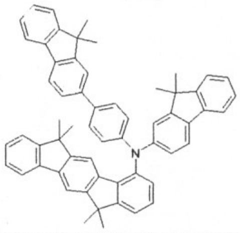
(19)



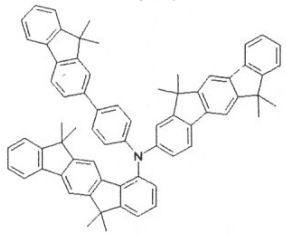
(20)



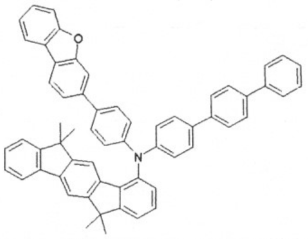
(21)



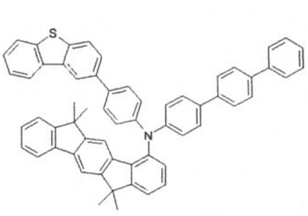
(22)



(23)



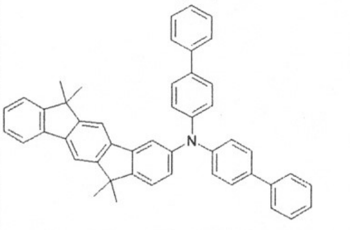
(24)



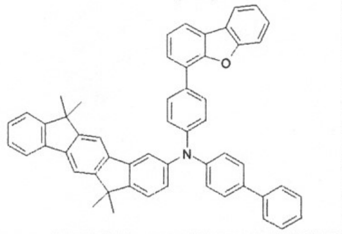
【０１６２】

【化２１－３】

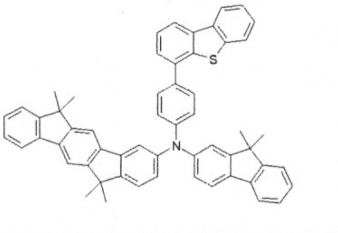
(25)



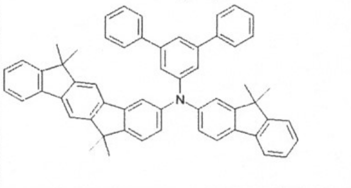
(26)



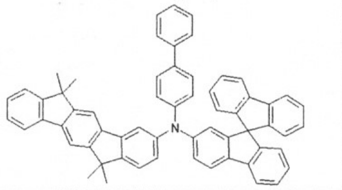
(27)



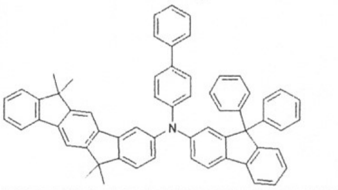
(28)



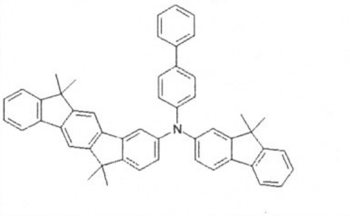
(29)



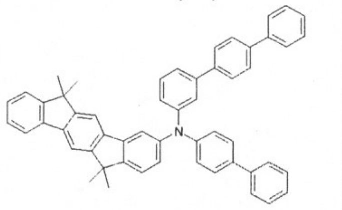
(30)



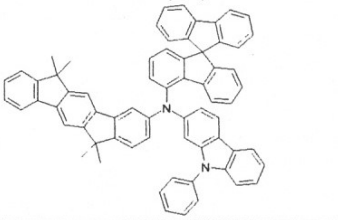
(31)



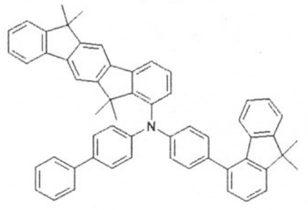
(32)



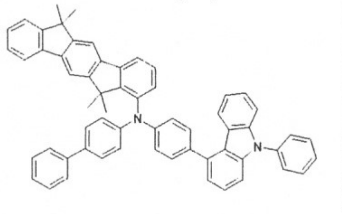
(33)



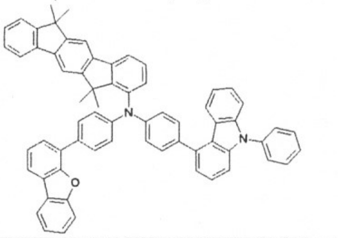
(34)



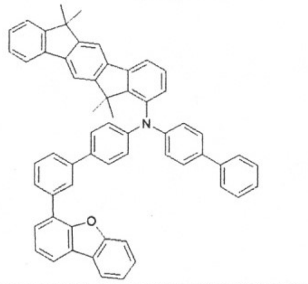
(35)



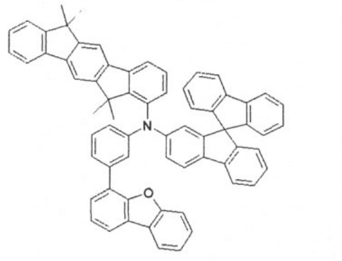
(36)



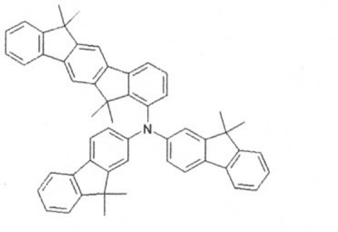
(37)



(38)



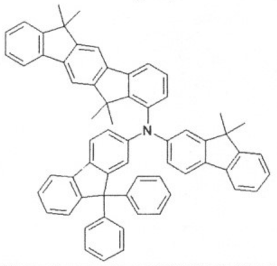
(39)



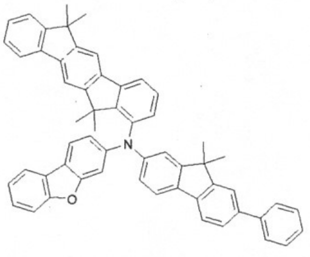
【０１６３】

【化２１－４】

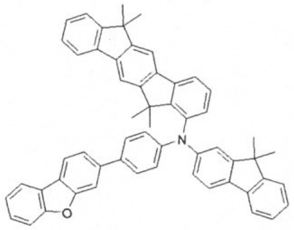
(40)



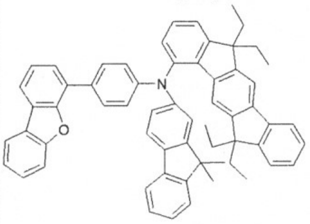
(41)



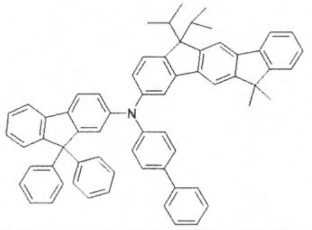
(42)



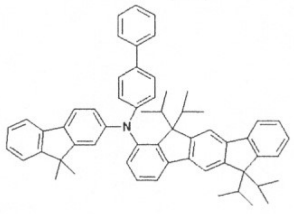
(43)



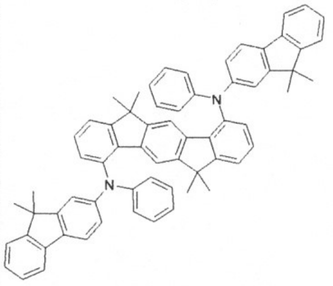
(44)



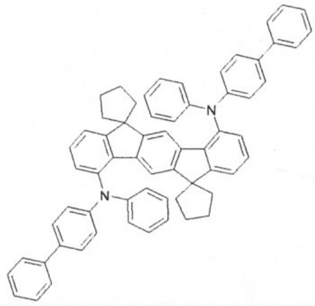
(45)



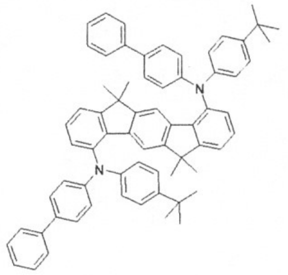
(46)



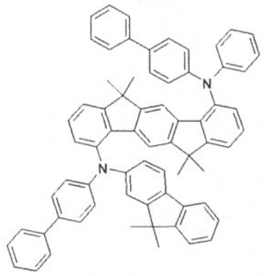
(47)



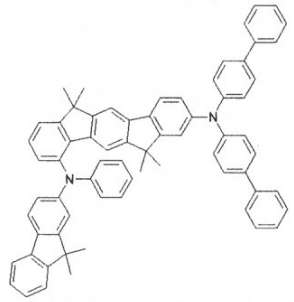
(48)



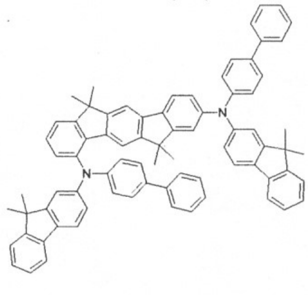
(49)



(50)

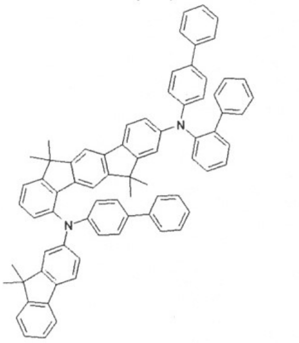
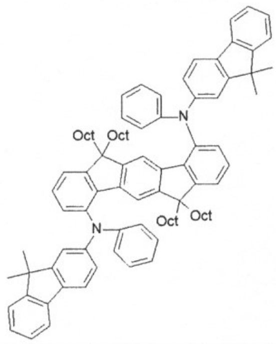
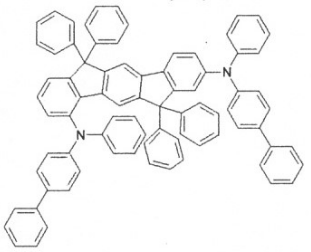
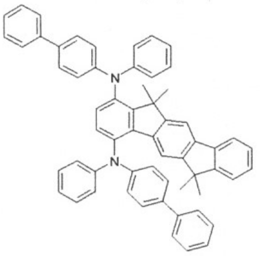
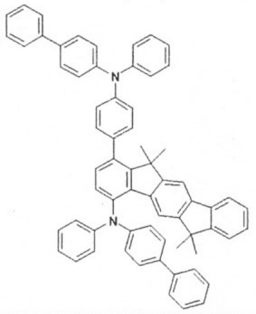
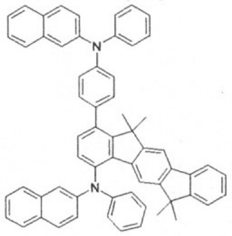
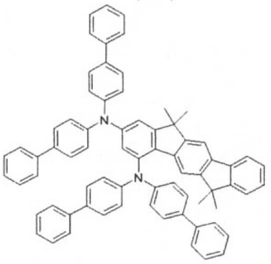
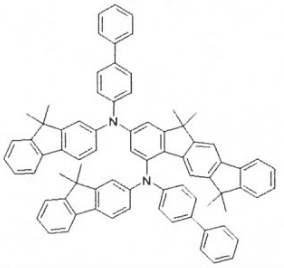
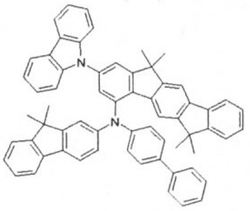
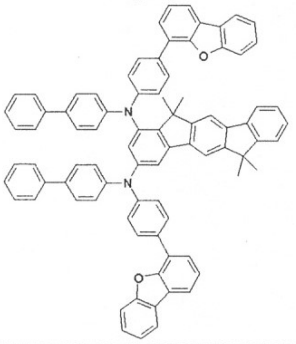
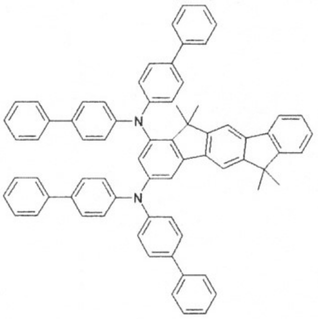
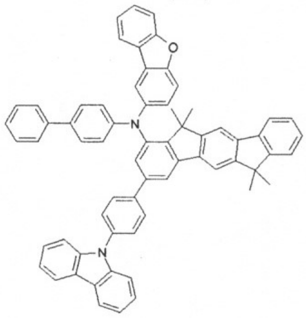


(51)



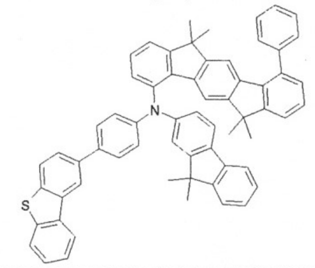
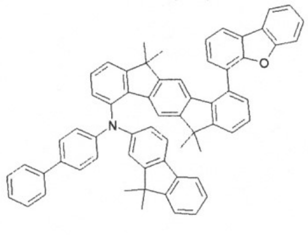
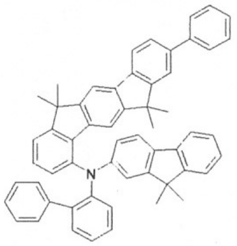
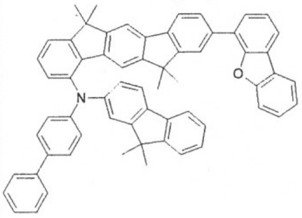
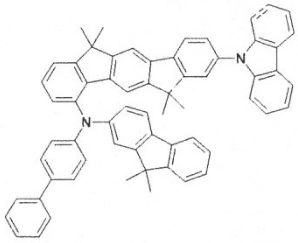
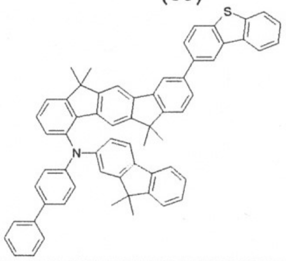
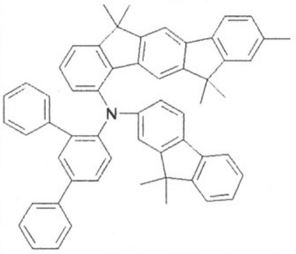
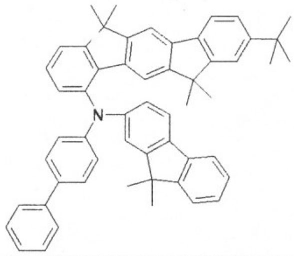
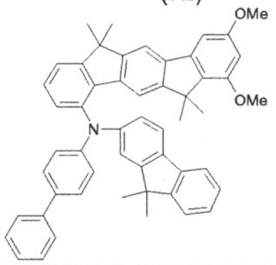
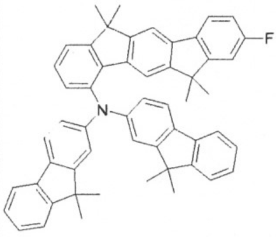
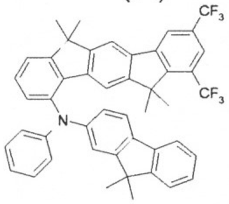
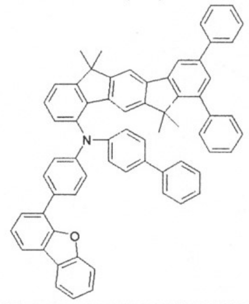
【０１６４】

【化２１－５】

(52) 	(53) 	(54) 
(55) 	(56) 	(57) 
(58) 	(59) 	(60) 
(61) 	(62) 	(63) 

【０１６５】

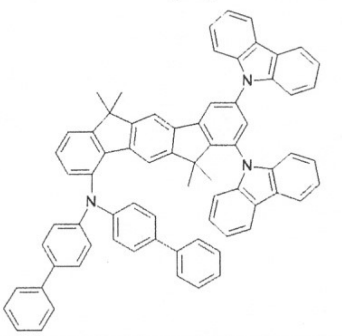
【化２１－６】

(64) 	(65) 	(66) 
(67) 	(68) 	(69) 
(70) 	(71) 	(72) 
(73) 	(74) 	(75) 

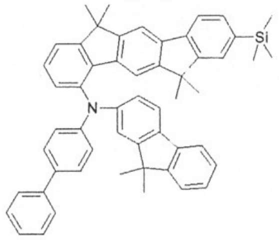
【０１６６】

【化２１－７】

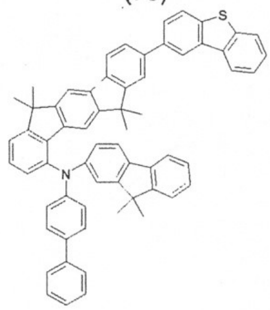
(76)



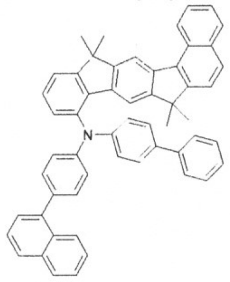
(77)



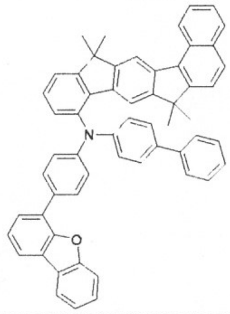
(78)



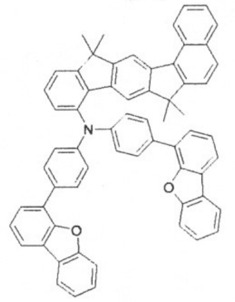
(79)



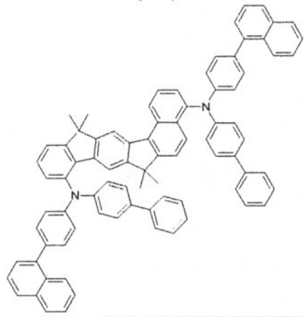
(80)



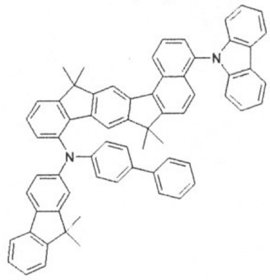
(81)



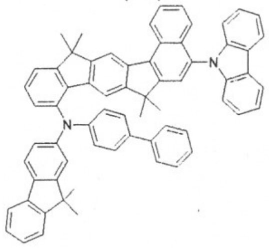
(82)



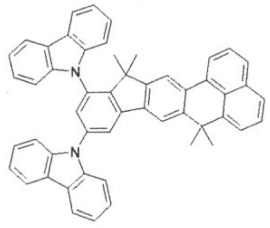
(83)



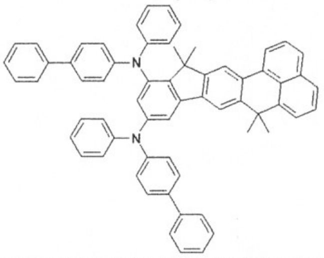
(84)



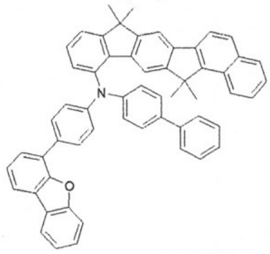
(85)



(86)



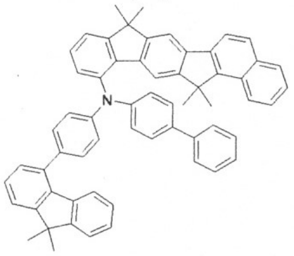
(87)



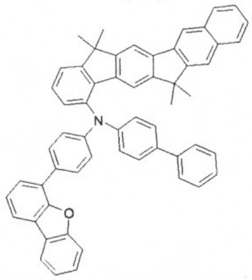
【０１６７】

【化２１－８】

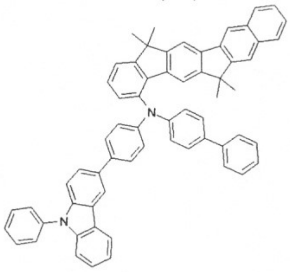
(88)



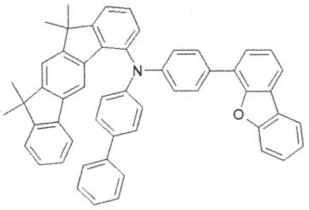
(89)



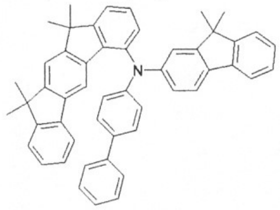
(90)



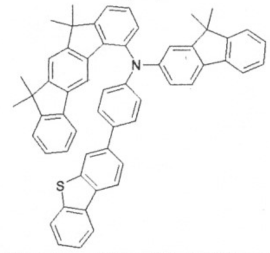
(91)



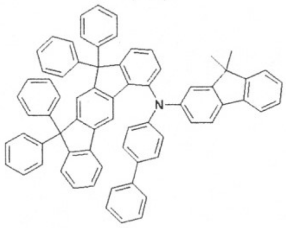
(92)



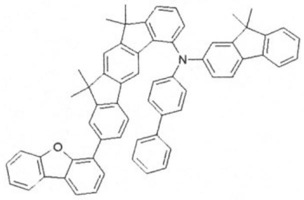
(93)



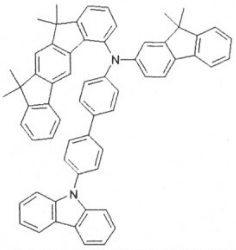
(94)



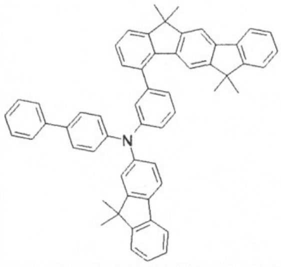
(95)



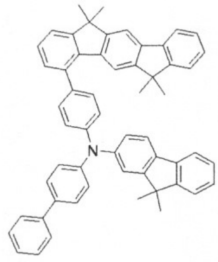
(96)



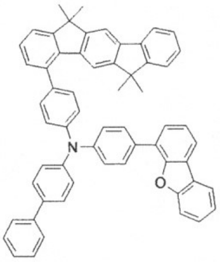
(97)



(98)



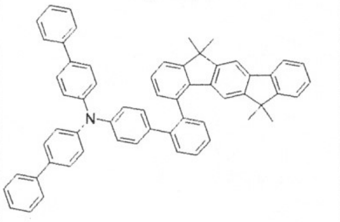
(99)



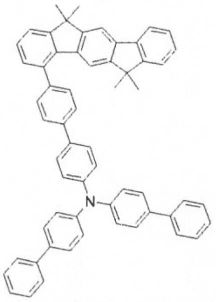
【０１６８】

【化２１－９】

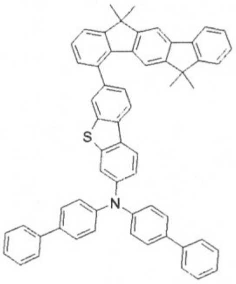
(100)



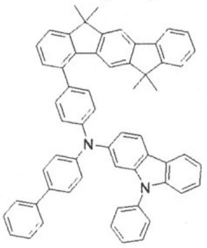
(101)



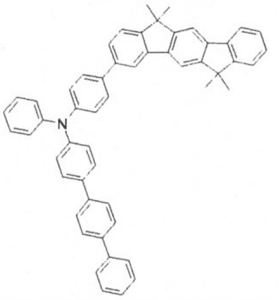
(102)



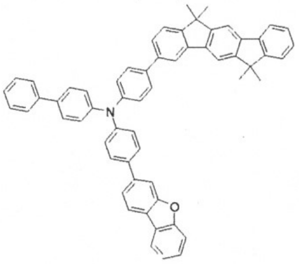
(103)



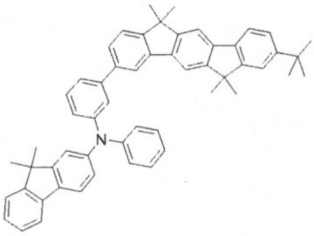
(104)



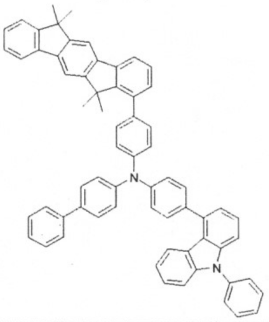
(105)



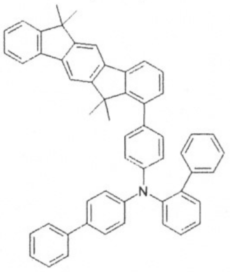
(106)



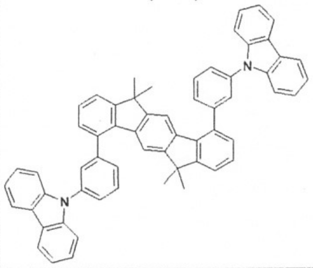
(107)



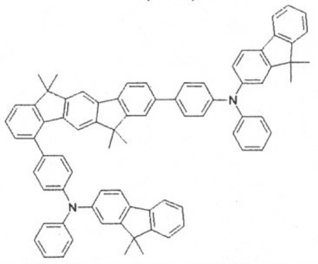
(108)



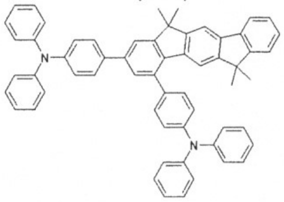
(109)



(110)



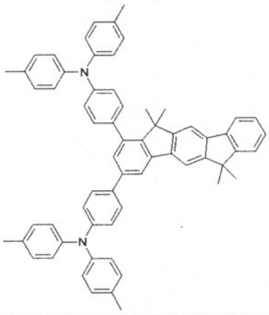
(111)



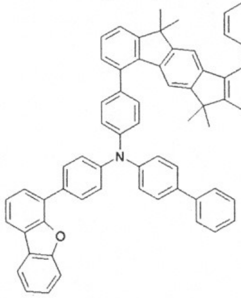
【０１６９】

【化２１－１０】

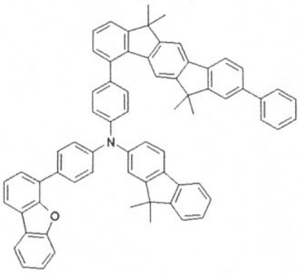
(112)



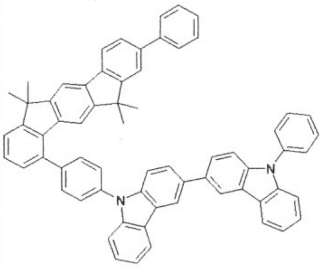
(113)



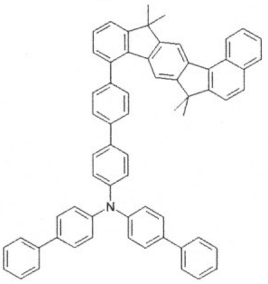
(114)



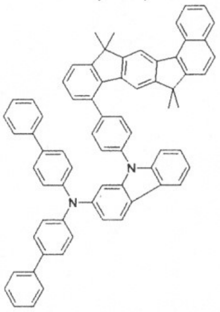
(115)



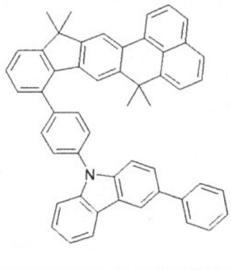
(116)



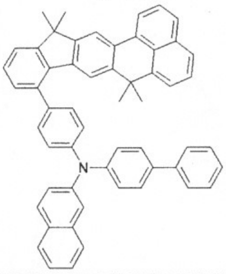
(117)



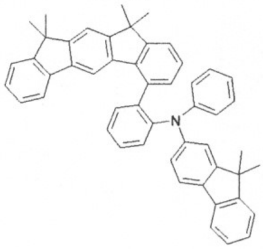
(118)



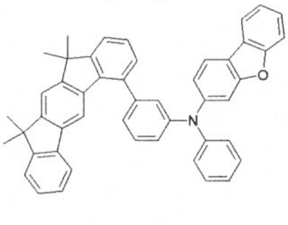
(119)



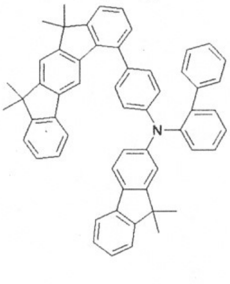
(120)



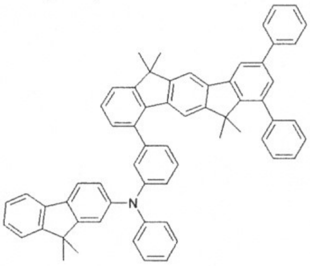
(121)



(122)

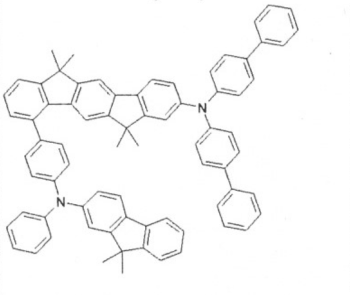
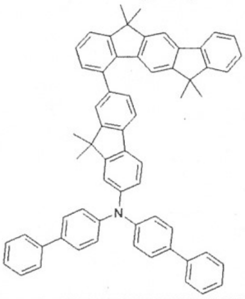
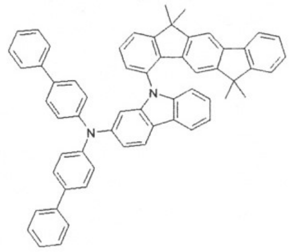
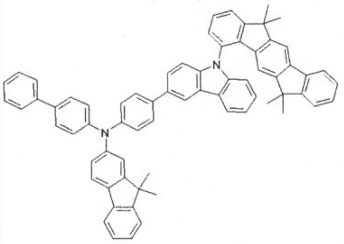
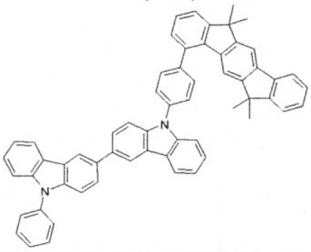
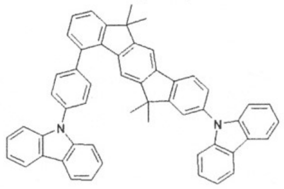
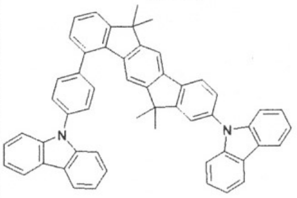
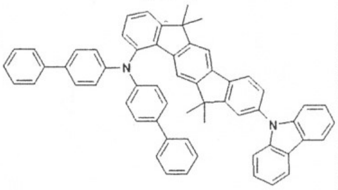
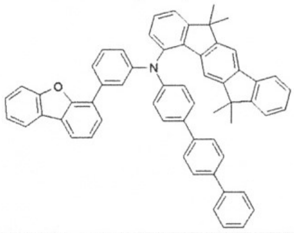
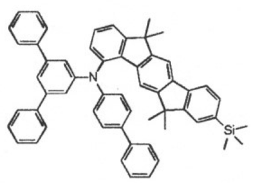
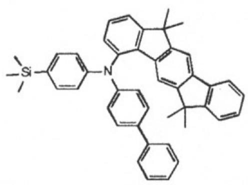
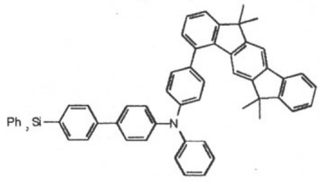
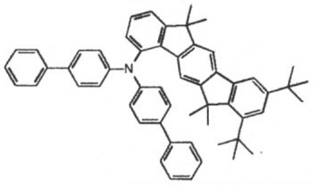
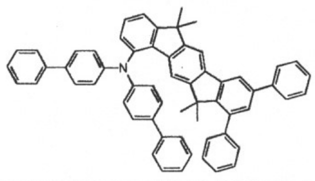
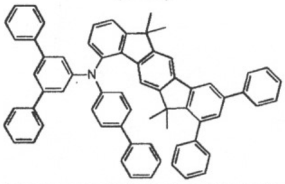


(123)



【０１７０】

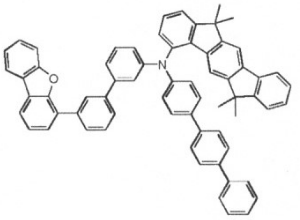
【化２１－１１】

(124) 	(125) 	(126) 
(127) 	(128) 	(129) 
(130) 	(131) 	(132) 
(133) 	(134) 	(135) 
(136) 	(137) 	(138) 

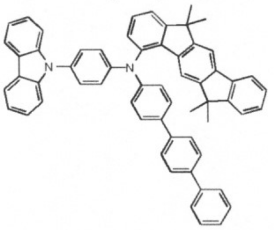
【０１７１】

【化２１－１２】

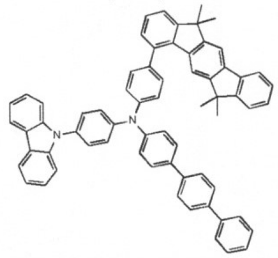
(139)



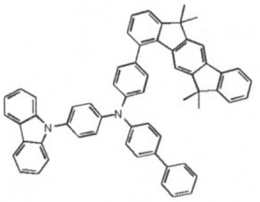
(140)



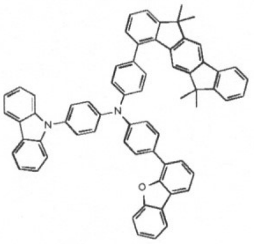
(141)



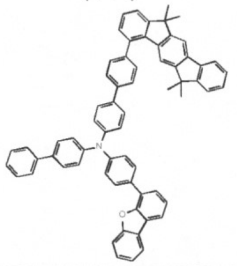
(142)



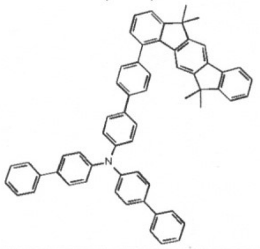
(143)



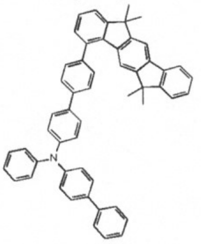
(144)



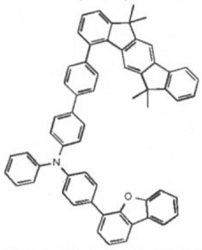
(145)



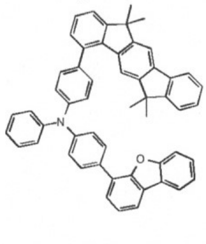
(146)



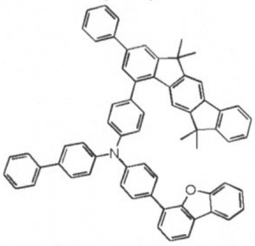
(147)



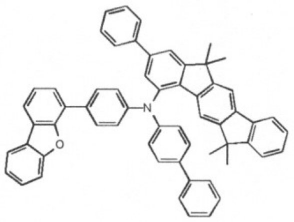
(148)



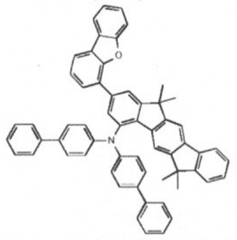
(149)



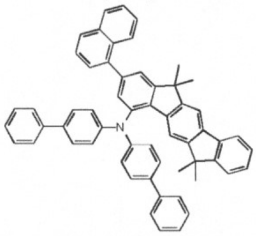
(150)



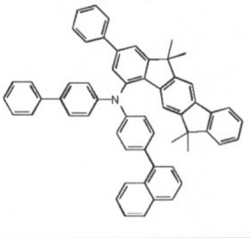
(151)



(152)

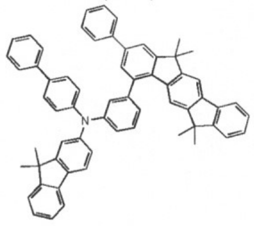
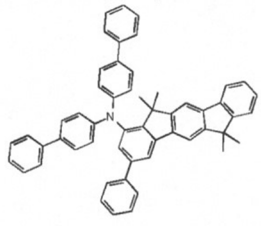
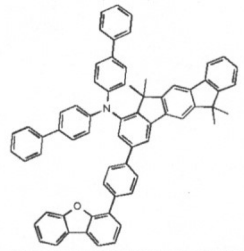
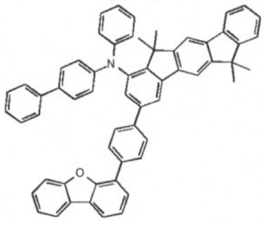
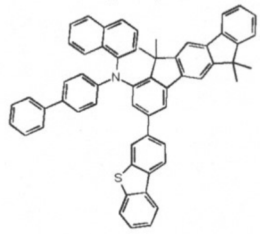
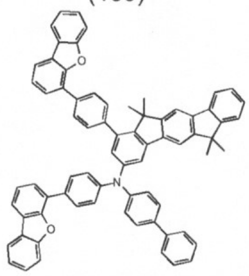
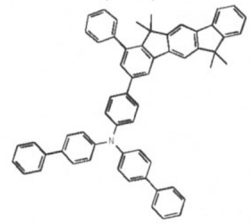
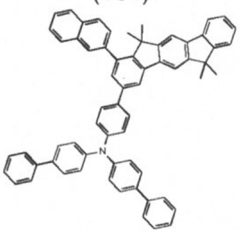
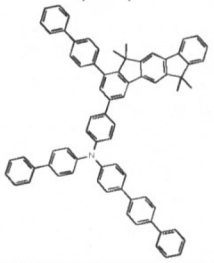
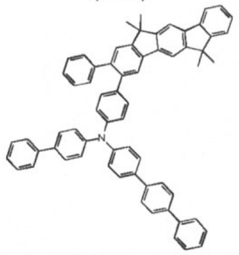
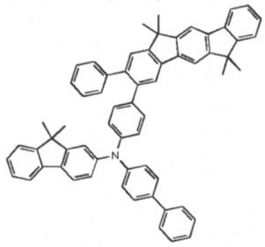
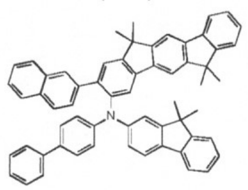
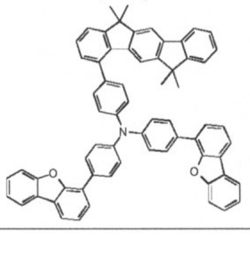
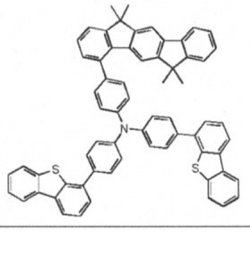
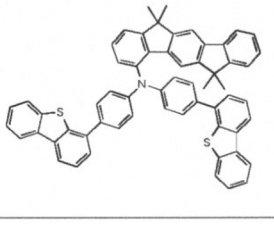


(153)



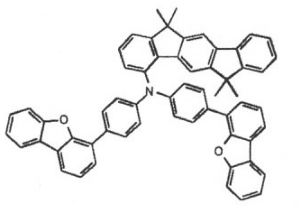
【０１７２】

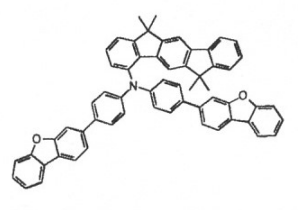
【化２１－１３】

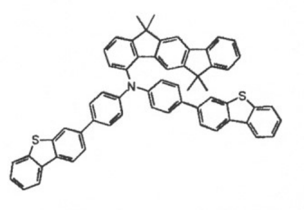
(154) 	(155) 	(156) 
(157) 	(158) 	(159) 
(160) 	(161) 	(162) 
(163) 	(164) 	(165) 
(166) 	(167) 	(168) 

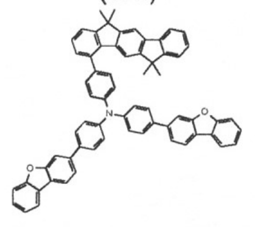
【０１７３】

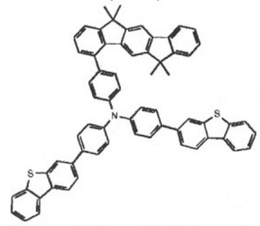
【化２１－１４】

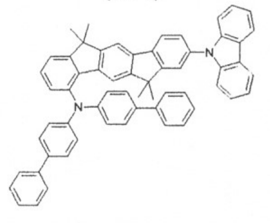
(169)


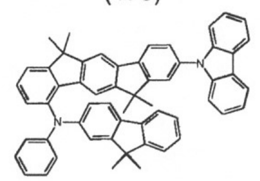
(170)


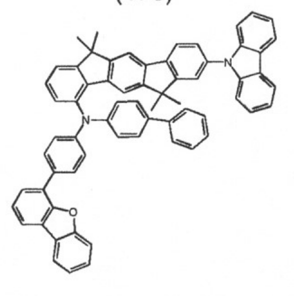
(171)


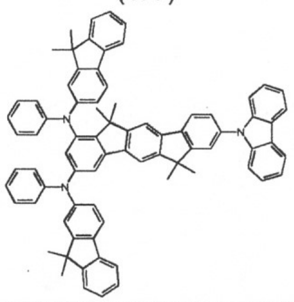
(172)


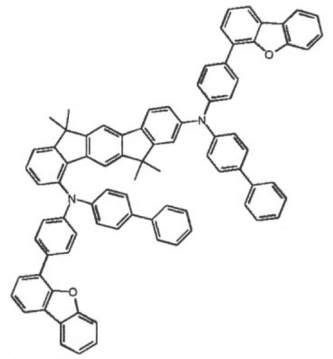
(173)


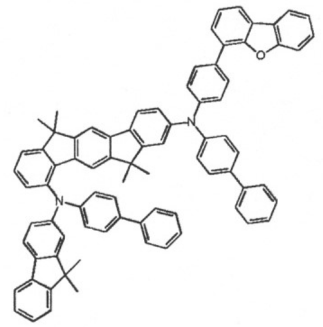
(174)


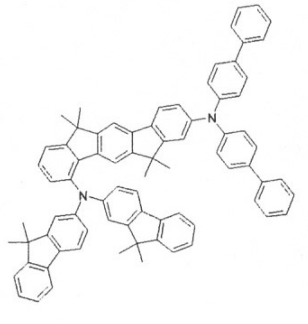
(175)


(176)


(177)


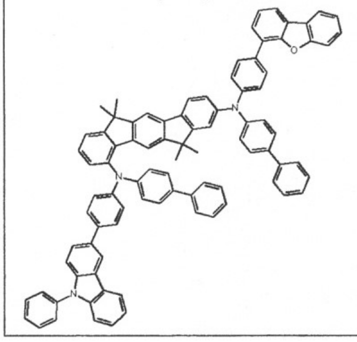
(178)


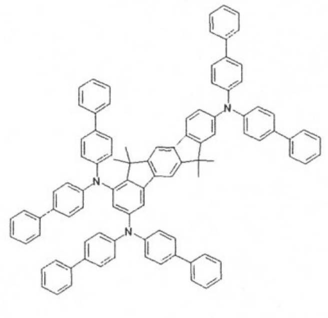
(179)


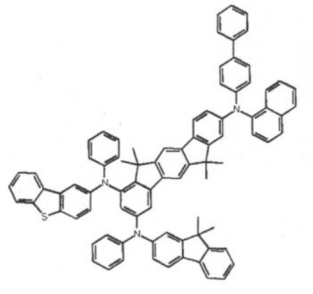
(180)


【０１７４】

【化２１－１５】

(181)


(182)


(183)


【０１７５】

式（Ｉ）の化合物は、公知の有機反応により、とりわけスズキ反応、ハートウイッグ－ブッフバルト反応、および環化反応により調製することができる。

【０１７６】

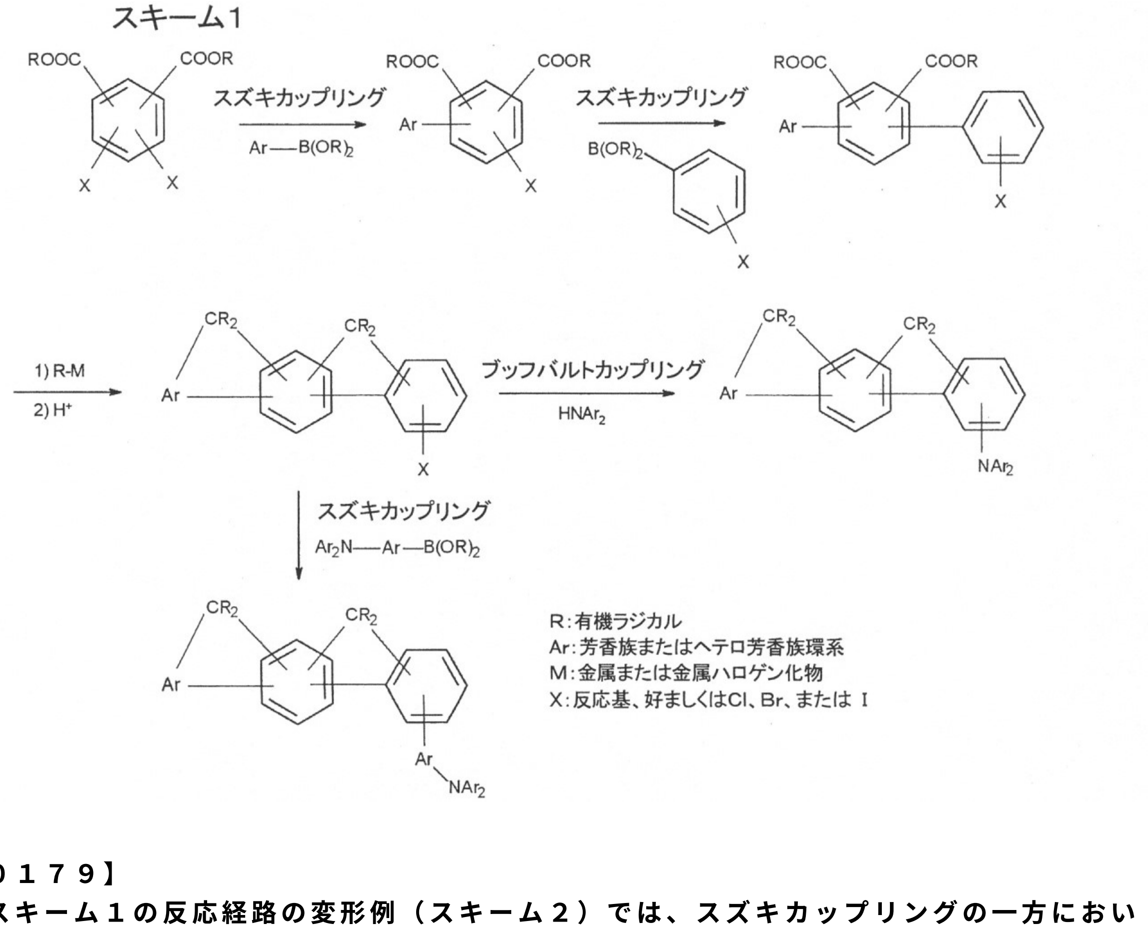
好ましい方法（スキーム１）において、２つの反応性Ｘ基と２つのカルボン酸エステル基を持つベンゼン化合物から開始して、２回の連続するスズキカップリングにより、端末フェニル基が反応性Ｘ基を有する、３つのアリール基（Ａｒ基と２つのフェニル基）の鎖を有する化合物が調製される。反応性Ｘ基は、中心のフェニル基への結合に対してオルトまたはメタ位置にあるか、反応性フェニルボロン酸化合物では、ボロン酸基に対してオルトまたはメタ位置にある。

【０１７７】

続いて、この化合物のカルボン酸エステル基が、金属アルキル化合物、好ましくはリチウムアルキル化合物またはグリニャールアルキル化合物との反応によって第３級アルコキシ基に変換される。これらの第３級アルコキシ基は、酸の作用下で環化して環を形成する。最後に、式（Ｉ）の化合物が得られるように、ブッフバルトカップリングによりアミノ基が導入され、またはスズキ反応によってジアリールアミノアリールまたはジアリールアミノヘテロアリール基が導入される。

【０１７８】

【化２２】

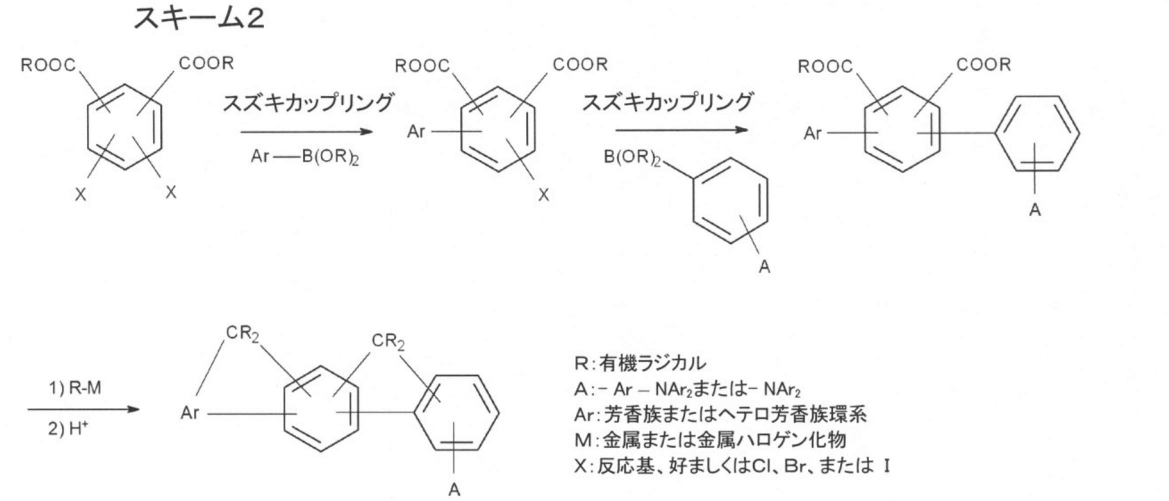


【０１７９】

スキーム１の反応経路の変形例（スキーム２）では、スズキカップリングの一方において、反応性Ｘ基ではなく、－Ａｒ－ＮＡｒ$_2$および－ＮＡｒ$_2$基から選択されるＡ基を有するフェニル基が導入される。当該のＡ基は、スキーム１のＸ基と同様、ボロン酸基に対してオルトまたはメタ位置にある。この合成経路において、スキーム１の最終工程で起こるスズキまたはブッフバルトカップリングは必要ない。

【０１８０】

【化２３】



【０１８１】

したがって、本願は、式（Ｉ）の化合物を調製するための方法をさらに提供し、方法は、２つのカルボン酸エステル基、芳香族またはヘテロ芳香族環系および反応基を持つベンゼン化合物を、スズキ反応において、ボロン酸基ならびに反応基、ジアリールアミノ基、ジアリールアミノアリール基およびジアリールアミノヘテロアリール基から選択される基を含有するベンゼン化合物と反応させることを特徴とする。ボロン酸基と反応基、ジアリールアミノ基、ジアリールアミノアリール基およびジアリールアミノヘテロアリール基から選択される基は、ここではベンゼン環上で互いに対してオルトまたはメタ位置にある。

【０１８２】

ここでの反応基は、好ましくはＣｌ、Ｂｒ、Ｉ、トリフラート、メシラートおよびトシラートから選択される。

【０１８３】

上記の式（Ｉ）の化合物、とりわけ反応性脱離基、たとえば臭素、ヨウ素、塩素、ボロン酸またはボロン酸エステルにより置換された化合物は、対応するオリゴマー、デンドリマーまたはポリマーを製造するためのモノマーとしての用途を見出すことができる。適する反応性脱離基は、たとえば臭素、ヨウ素、塩素、ボロン酸、ボロン酸エステル、アミン、末端Ｃ－Ｃ二重結合もしくはＣ－Ｃ三重結合を有するアルケニルまたはアルキニル基、オキシラン、オキセタン、付加環化、たとえば１，３－双極性付加環化に関与する基、たとえばジエンもしくはアジド、カルボン酸誘導体、アルコールおよびシランである。

【０１８４】

したがって、本発明は、１種以上の式（Ｉ）の化合物を含有するオリゴマー、ポリマーまたはデンドリマーをさらに提供し、ここで、ポリマー、オリゴマーまたはデンドリマーへの結合（複数可）は、式（Ｉ）においてＲ^1、Ｒ^2、Ｒ^3、Ｒ^{4}またはＲ^{5}により置換される任意所望の位置に局在してもよい。式（Ｉ）の化合物の結合に応じて、化合物は、オリゴマーもしくはポリマーの側鎖の一部または主鎖の一部となる。本発明に関するオリゴマーは、少なくとも３つのモノマー単位から形成される化合物を意味するものと理解される。本発明に関するポリマーは、少なくとも１０個のモノマー単位から形成される化合物を意味するものと理解される。本発明のポリマー、オリゴマーまたはデンドリマーは、共役、部分共役、または非共役であってもよい。本発明のオリゴマーまたはポリマーは、直鎖状、分枝または樹枝状であってもよい。直鎖状結合を有する構造において、式（Ｉ）の単位は、互いに直接結合していてもよく、２価基を介して、たとえば置換もしくは無置換アルキレン基を介して、ヘテロ原子を介して、または２価の芳香族もしくはヘテロ芳香族基を介して互いに結合していてもよい。分枝および樹枝状構造においては、たとえば、３つ以上の式（Ｉ）の単位が３価以上の基を介して、たとえば３価以上の芳香族またはヘテロ芳香族基を介して結合して、分枝または樹枝状オリゴマーまたはポリマーを形成するこ

とが可能である。

【０１８５】

オリゴマー、デンドリマーおよびポリマーにおける式（Ｉ）の反復単位については、式（Ｉ）の化合物について記載したのと同じ選好が当てはまる。

【０１８６】

オリゴマーまたはポリマーの調製のためには、本発明のモノマーを単独重合させるか、さらなるモノマーと共重合させる。適する好ましいコモノマーは、フルオレン（たとえばＥＰ８４２２０８もしくはＷＯ２０００／２２０２６による）、スピロビフルオレン（たとえばＥＰ７０７０２０、ＥＰ８９４１０７もしくはＷＯ２００６／０６１１８１による）、パラフェニレン（たとえばＷＯ１９９２／１８５５２による）、カルバゾール（たとえばＷＯ２００４／０７０７７２もしくはＷＯ２００４／１１３４６８による）、チオフェン（たとえばＥＰ１０２８１３６による）、ジヒドロフェナントレン（たとえばＷＯ２００５／０１４６８９もしくはＷＯ２００７／００６３８３による）、ｃｉｓ－およびｔｒａｎｓ－インデノフルオレン（たとえばＷＯ２００４／０４１９０１もしくはＷＯ２００４／１１３４１２による）、ケトン（たとえばＷＯ２００５／０４０３０２による）、フェナントレン（たとえばＷＯ２００５／１０４２６４もしくはＷＯ２００７／０１７０６６による）、またはこれらの単位の複数から選択される。ポリマー、オリゴマーおよびデンドリマーは、典型的にはなおさらなる単位、たとえば発光（蛍光もしくはリン光）単位、たとえばビニルトリアリールアミン（たとえばＷＯ２００７／０６８３２５による）もしくはリン光金属錯体（たとえばＷＯ２００６／００３０００による）、および／または電荷輸送単位、とりわけトリアリールアミンに基づくものを含有する。

【０１８７】

本発明のポリマーおよびオリゴマーは一般に、１種類以上のモノマーの重合により調製され、そのうちの少なくとも１種のモノマーが、ポリマー中に式（Ｉ）の反復単位をもたらす。適する重合反応は当業者に公知であり、文献に記載されている。Ｃ－ＣまたはＣ－Ｎ結合の形成をもたらす特に適する好ましい重合反応は、スズキ重合、ヤマモト重合、スティル重合およびハートウイッグ－ブッフバルト重合である。

【０１８８】

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り本発明の化合物を加工するには、本発明の化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、分散物またはエマルシ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の使用が好ましいことがある。適する好ましい溶媒は、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、ベラトロール、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、α－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。

【０１８９】

したがって、本発明は、少なくとも１種の式（Ｉ）の化合物と少なくとも１種の溶媒、

好ましくは有機溶媒を含む調合物、とりわけ溶液、分散物またはエマルションをさらに提供する。このような溶液を調製することができる方法は当業者には公知であり、たとえばＷＯ２００２／０７２７１４、ＷＯ２００３／０１９６９４およびこれらに引用された文献に記載されている。

【０１９０】

本発明の化合物は、電子デバイス、とりわけ有機エレクトロルミネッセントデバイス（ＯＬＥＤ）への使用に適している。置換に応じて、化合物は、様々な機能および層に使用される。

【０１９１】

したがって、本発明は、式（Ｉ）の化合物の電子デバイスにおける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）、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）からなる群から選択される。

【０１９２】

既に上記したように、本発明は、少なくとも１種の式（Ｉ）の化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、好ましくは先に言及したデバイスから選択される。

【０１９３】

電子デバイスは、より好ましくは、アノード、カソード、および少なくとも１つの発光層を含む有機エレクトロルミネッセントデバイス（ＯＬＥＤ）であって、発光層、正孔輸送層または別の層であってもよい少なくとも１つの有機層が少なくとも１種の式（Ｉ）の化合物を含むことを特徴とする。

【０１９４】

カソード、アノード、および発光層の他に、有機エレクトロルミネッセントデバイスは、さらなる層をさらに含んでもよい。これらは、それぞれの場合において、たとえば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（ＩＤＭＣ２００３、Ｔａｉｗａｎ；Ｓｅｓｓｉｏｎ　２１　ＯＬＥＤ（５）、Ｔ．Ｍａｔｓｕｍｏｔｏ、Ｔ．Ｎａｋａｄａ、Ｊ．Ｅｎｄｏ、Ｋ．Ｍｏｒｉ、Ｎ．Ｋａｗａｍｕｒａ、Ａ．Ｙｏｋｏｉ、Ｊ．Ｋｉｄｏ、Ｍｕｌｔｉｐｈｏｔｏｎ　Ｏｒｇａｎｉｃ　ＥＬ　Ｄｅｖｉｃｅ　Ｈａｖｉｎｇ　Ｃｈａｒｇｅ　Ｇｅｎｅｒａｔｉｏｎ　Ｌａｙｅｒ）、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。

【０１９５】

式（Ｉ）の化合物を含む有機エレクトロルミネッセントデバイスの層の順序は、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－任意のさらなる正孔輸送層（複数可）－任意の電子阻止層－発光層－任意の正孔阻止層－電子輸送層－電子注入層－カソード。加えて、さらなる層がＯＬＥＤに存在することも可能である。

【０１９６】

本発明の有機エレクトロルミネッセントデバイスは、２つ以上の発光層を含有してもよい。より好ましくは、これらの発光層は、この場合、全体として３８０ｎｍ乃至７５０ｎｍに幾つかの発光極大を有し、全体として白色発光を生じるものである；換言すれば、蛍光またはリン光を発することができ、青色、緑色、黄色、橙色または赤色の光を発する様々な発光化合物が、発光層に使用される。とりわけ好ましいのは、３層系、即ち、３つの発光層を有する系であり、ここで、３層は青色、緑色および橙色または赤色の発光を示す（基本構成については、たとえばＷＯ２００５／０１１０１３を参照されたい）。本発明の化合物は、ここでは好ましくは正孔輸送層、正孔注入層、電子阻止層、および／または発光層に、より好ましくは発光層にマトリックス材料として、および／または電子阻止層に存在する。

【０１９７】

本発明によると、好ましいのは、式（Ｉ）の化合物が１種以上のリン光発光化合物を含む電子デバイスに使用される場合である。この場合、化合物は、異なる層に、好ましくは正孔輸送層、電子阻止層、正孔注入層、および／または発光層に存在してもよい。より好ましくは、化合物は、電子阻止層に、またはリン光発光化合物と組み合わせて発光層に存在する。後者の場合、リン光発光化合物は、好ましくは赤色または緑色リン光発光化合物から選択される。最も好ましくは、化合物は電子阻止層に存在する。

【０１９８】

「リン光発光化合物」という用語は、典型的には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スピン禁制遷移により発光が生じる化合物を包含する。

【０１９９】

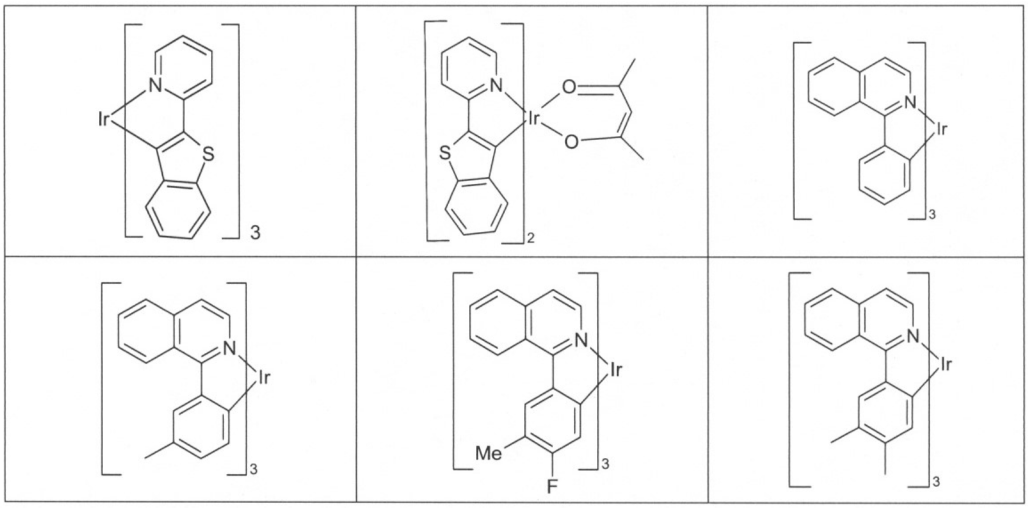
適するリン光発光化合物（＝三重項発光体）はとりわけ、適切に励起されると、好ましくは可視領域の光を発する化合物であり、原子番号が２０より大きい、好ましくは３８より大きく８４より小さい、より好ましくは５６より大きく８０より小さい少なくとも１種の原子をさらに含有する。リン光発光化合物として、銅、モリブデン、タングステン、レニウム、ルテニウム、オスミウム、ロジウム、イリジウム、パラジウム、白金、銀、金またはユウロピウムを含有する化合物、とりわけ、イリジウム、白金または銅を含有する化合物を使用することが好ましい。本発明に関して、発光性のイリジウム、白金または銅錯体は全て、リン光発光化合物であるとみなされる。

【０２００】

上記の発光化合物の例は、出願ＷＯ００／７０６５５、ＷＯ０１／４１５１２、ＷＯ０２／０２７１４、ＷＯ０２／１５６４５、ＥＰ１１９１６１３、ＥＰ１１９１６１２、ＥＰ１１９１６１４、ＷＯ０５／０３３２４４、ＷＯ０５／０１９３７３およびＵＳ２００５／０２５８７４２に見出すことができる。一般に、先行技術によりリン光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適している。当業者は、独創的な創作能力を発揮することなく、有機エレクトロルミネッセントデバイスにおいてさらなるリン光錯体を式（Ｉ）の化合物と組み合わせて使用することも可能である。さらなる例を、下記の表に挙げる：

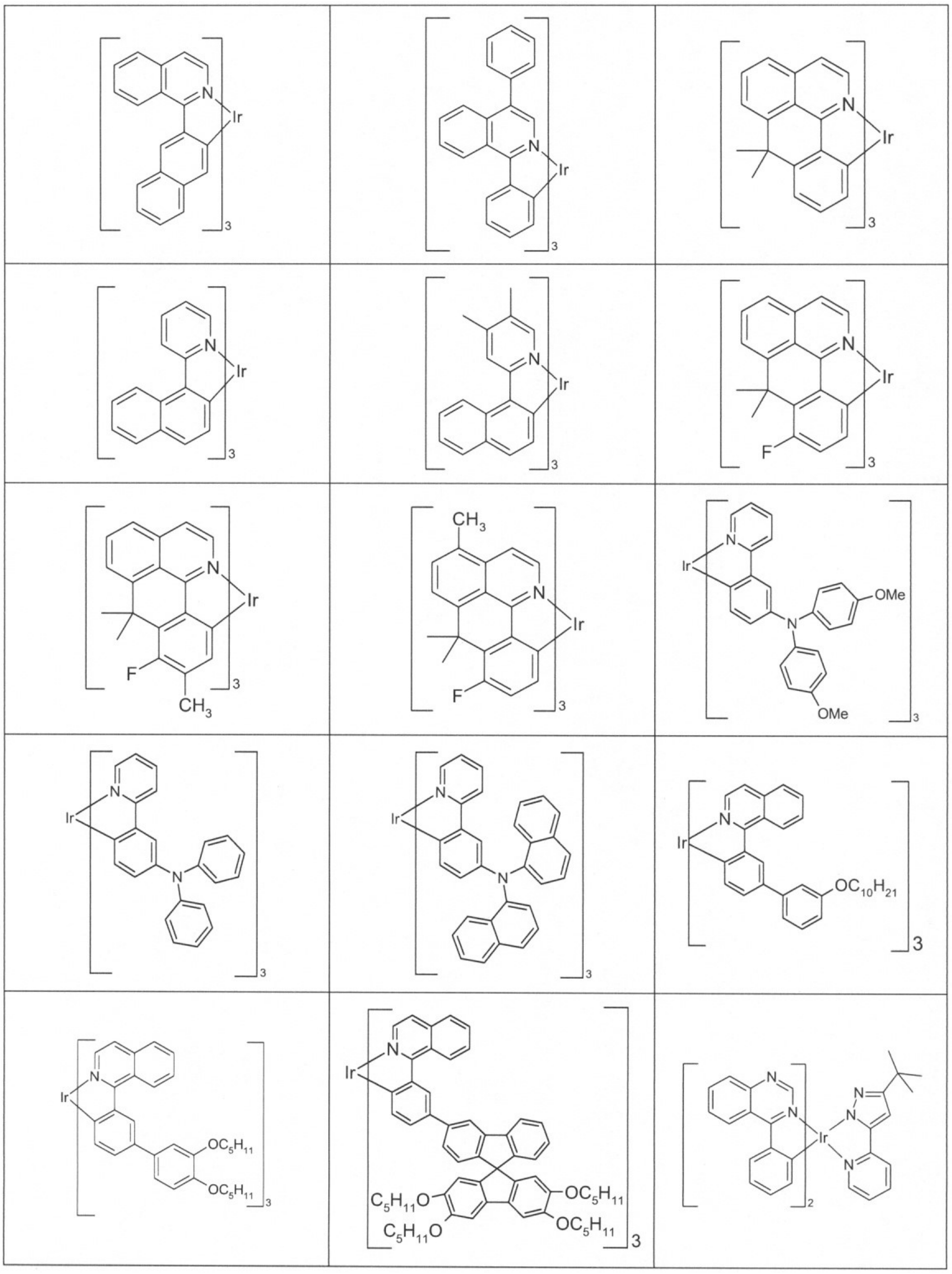
【０２０１】

【化２４－１】



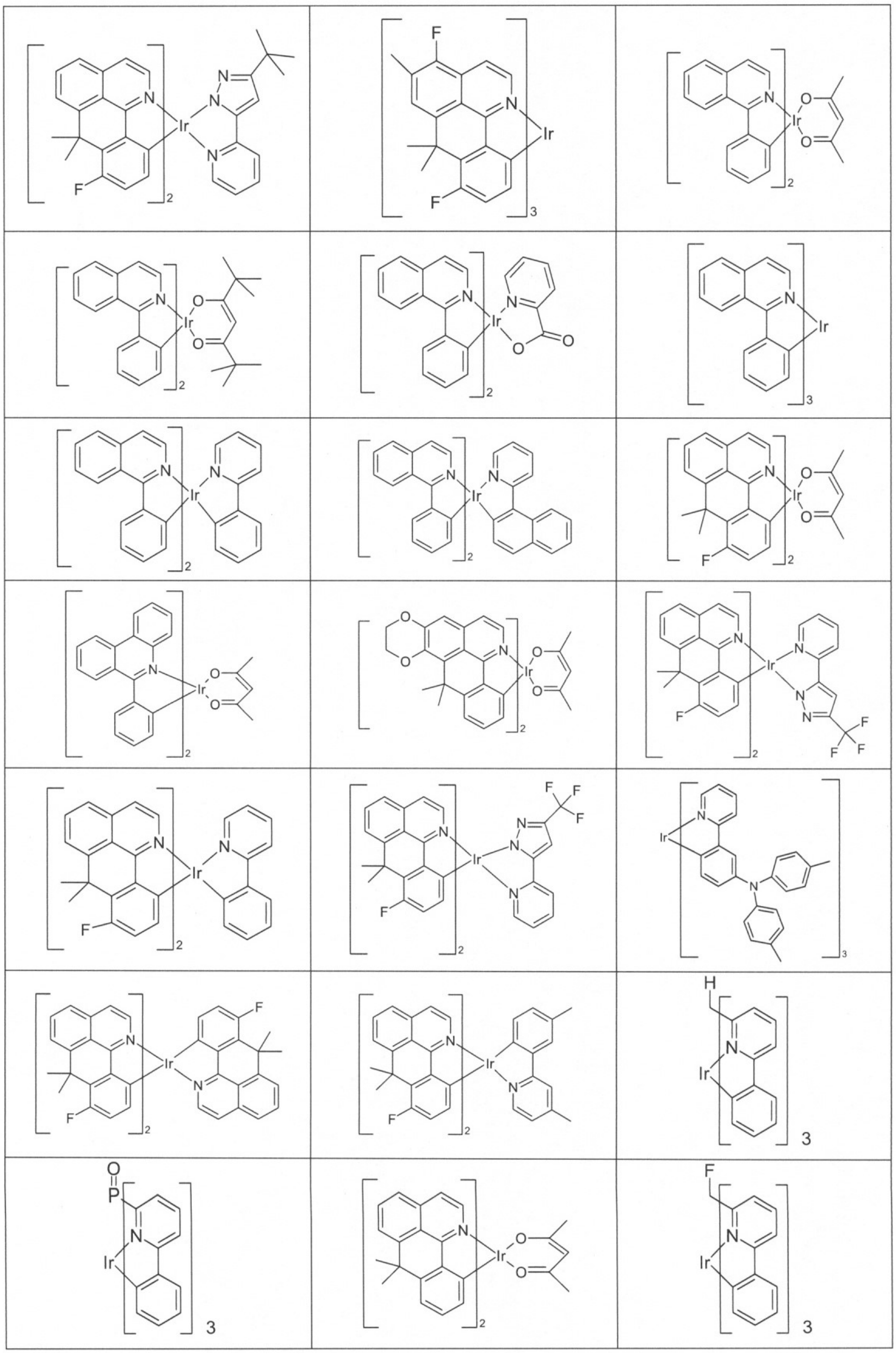
【０２０２】

【化２４－２】



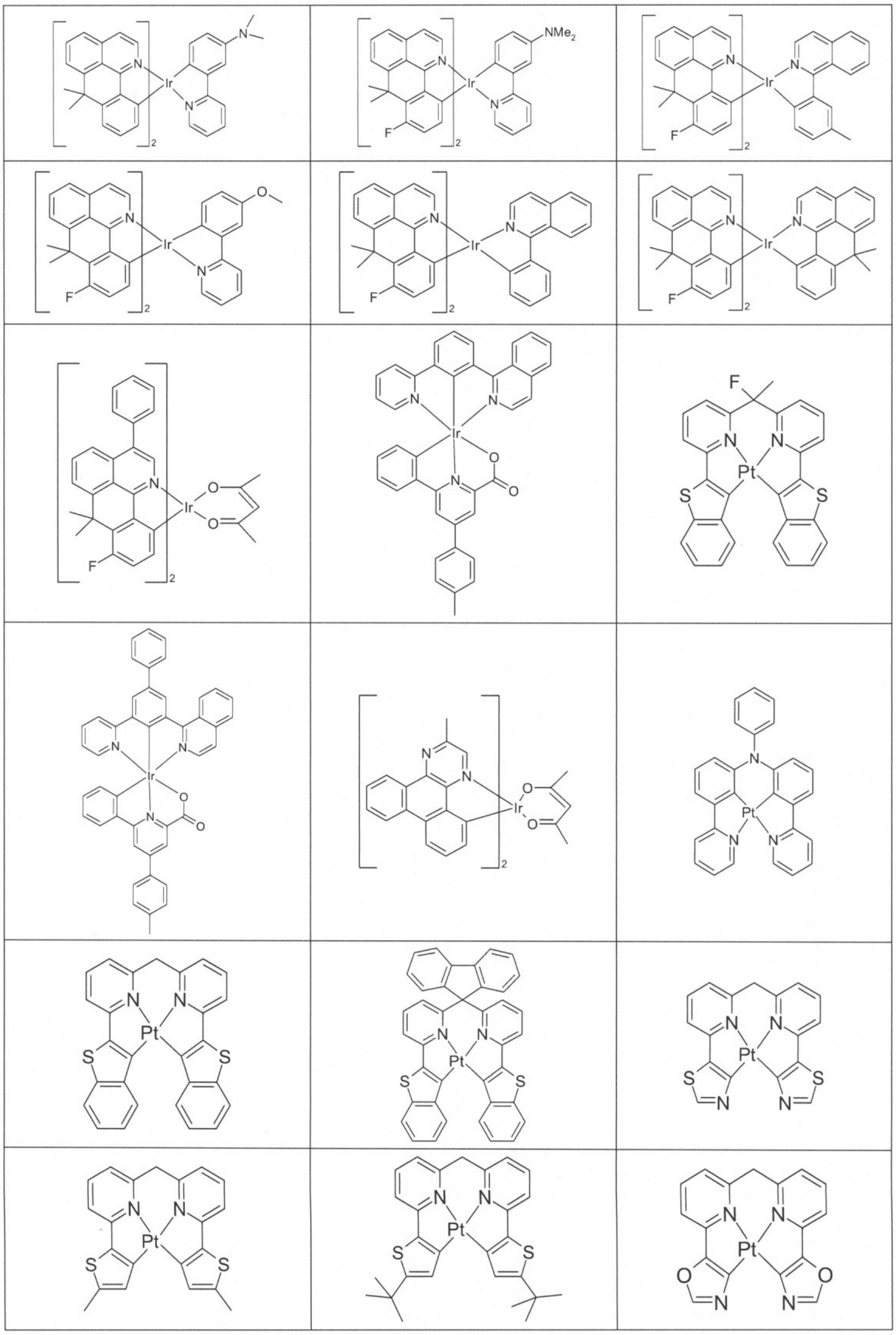
【０２０３】

【化２４－３】



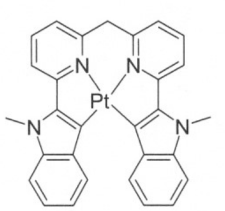
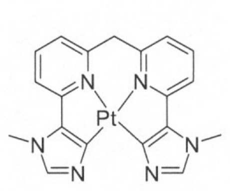
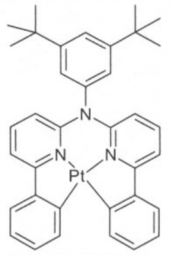
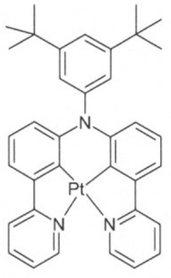
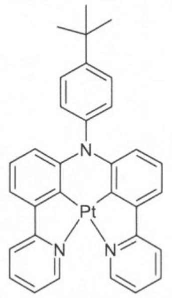
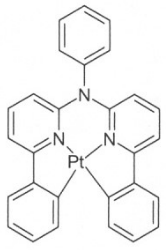
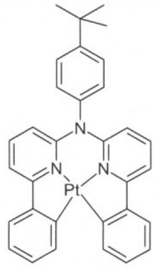
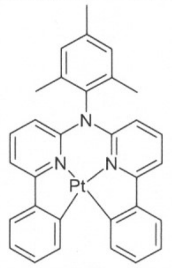
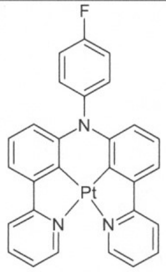
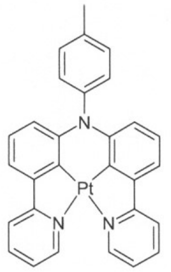
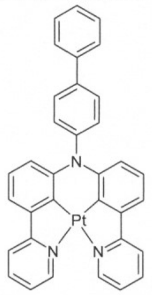
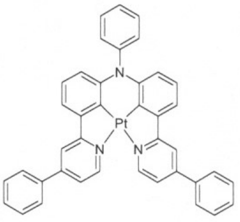
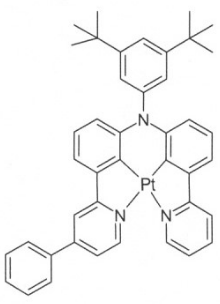
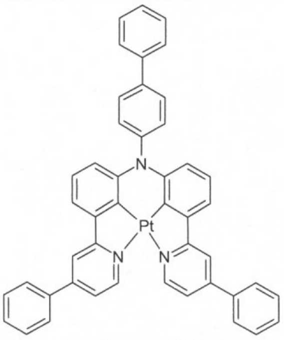
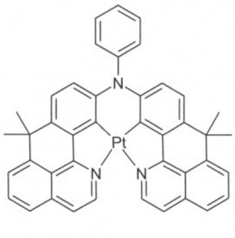
【０２０４】

【化２４－４】



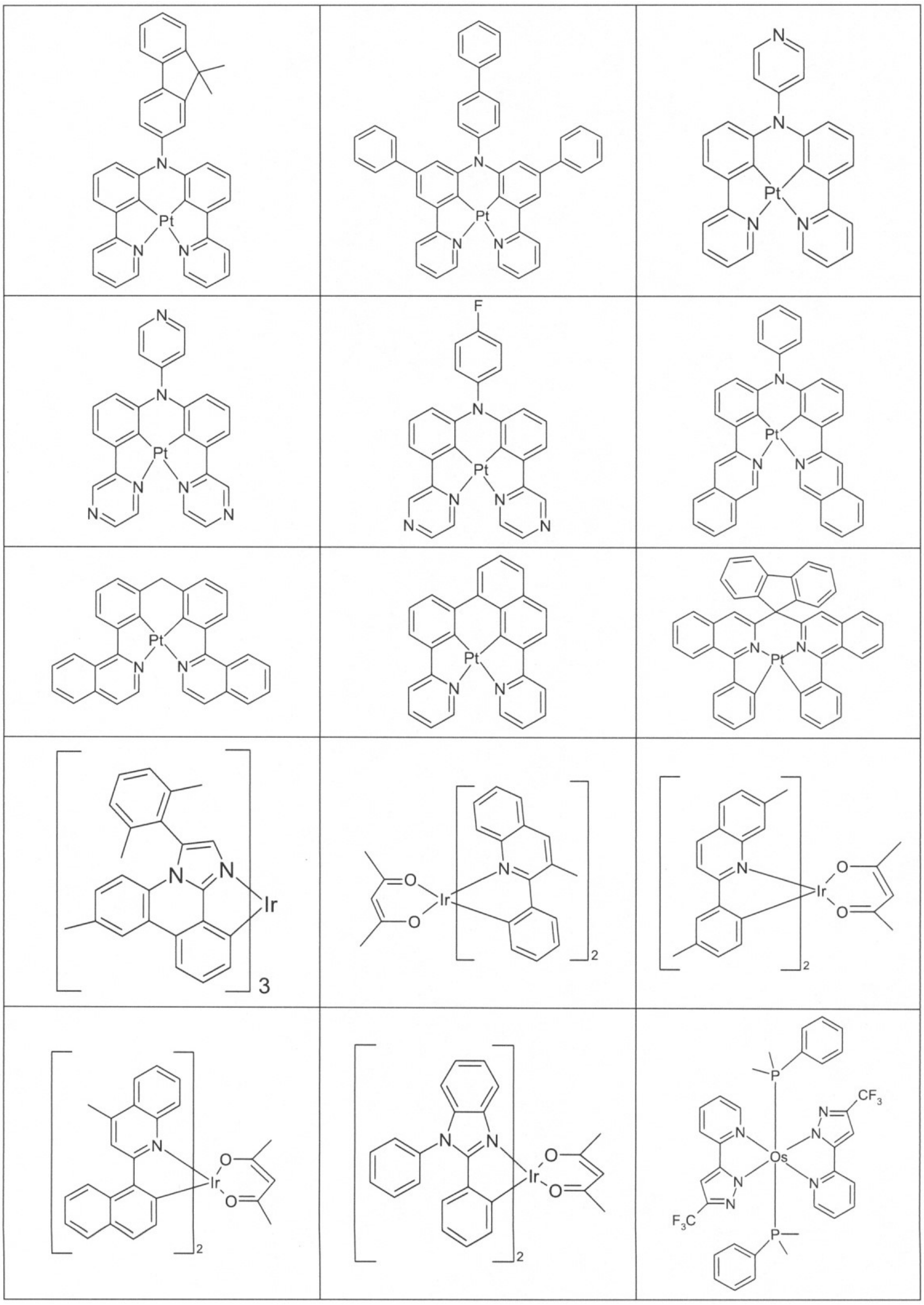
【０２０５】

【化２４－５】

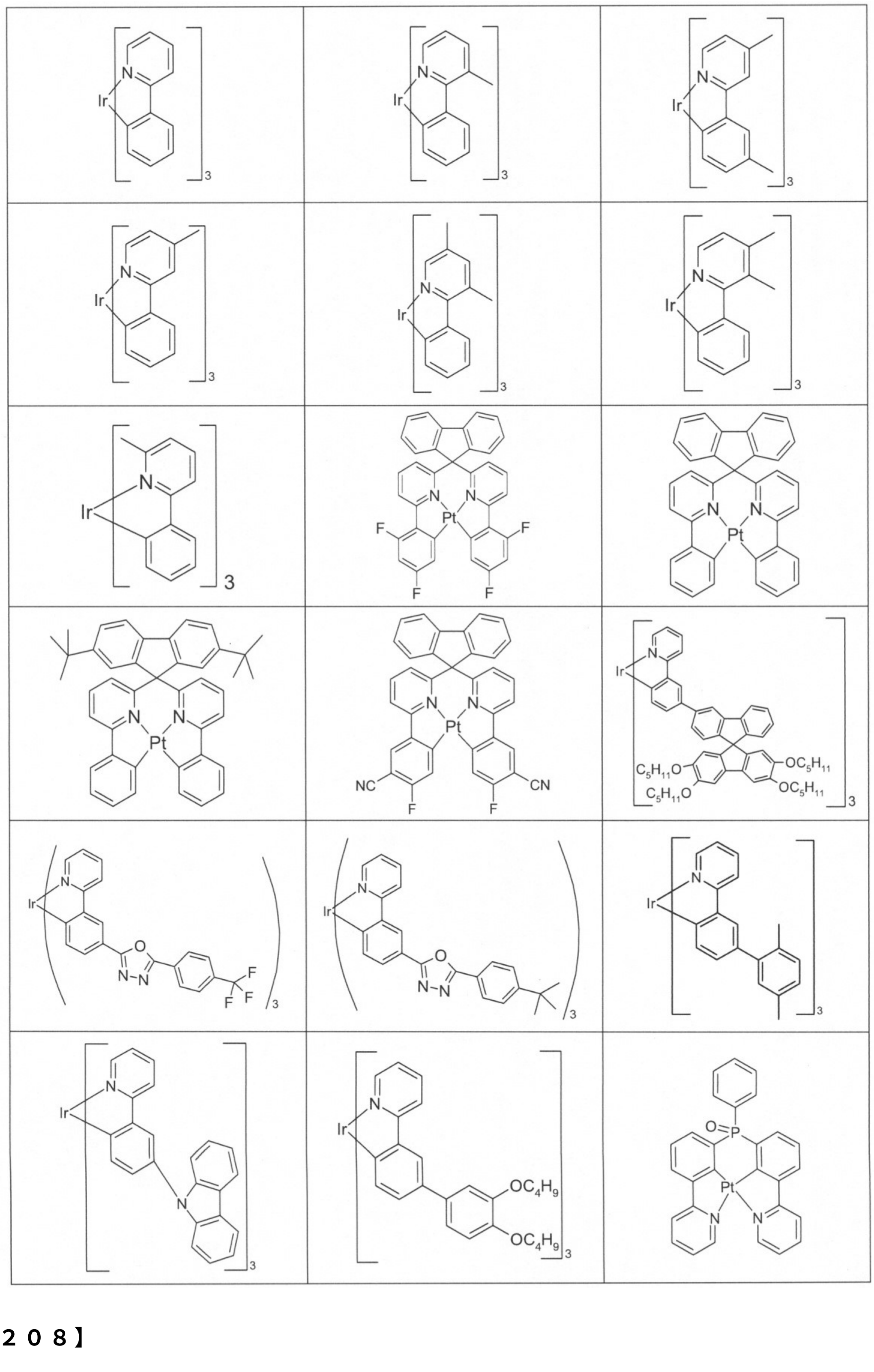
【０２０６】

【化２４－６】


N
Pt
N
N
Pt
N
N
N
Pt
N
N
N
N
Pt
N
N
N
F
N
N
Pt
N
N
N
N
Pt
N
N
N
Pt
N
N
Pt
N
N
Pt
N
N
N
Ir
3
O
O
Ir
N
2
N
Ir
O
O
2
N
O
Ir
O
2
N
N
Ir
O
O
2
P
CF_3
N
N
Os
N
N
N
N
F_3C
P

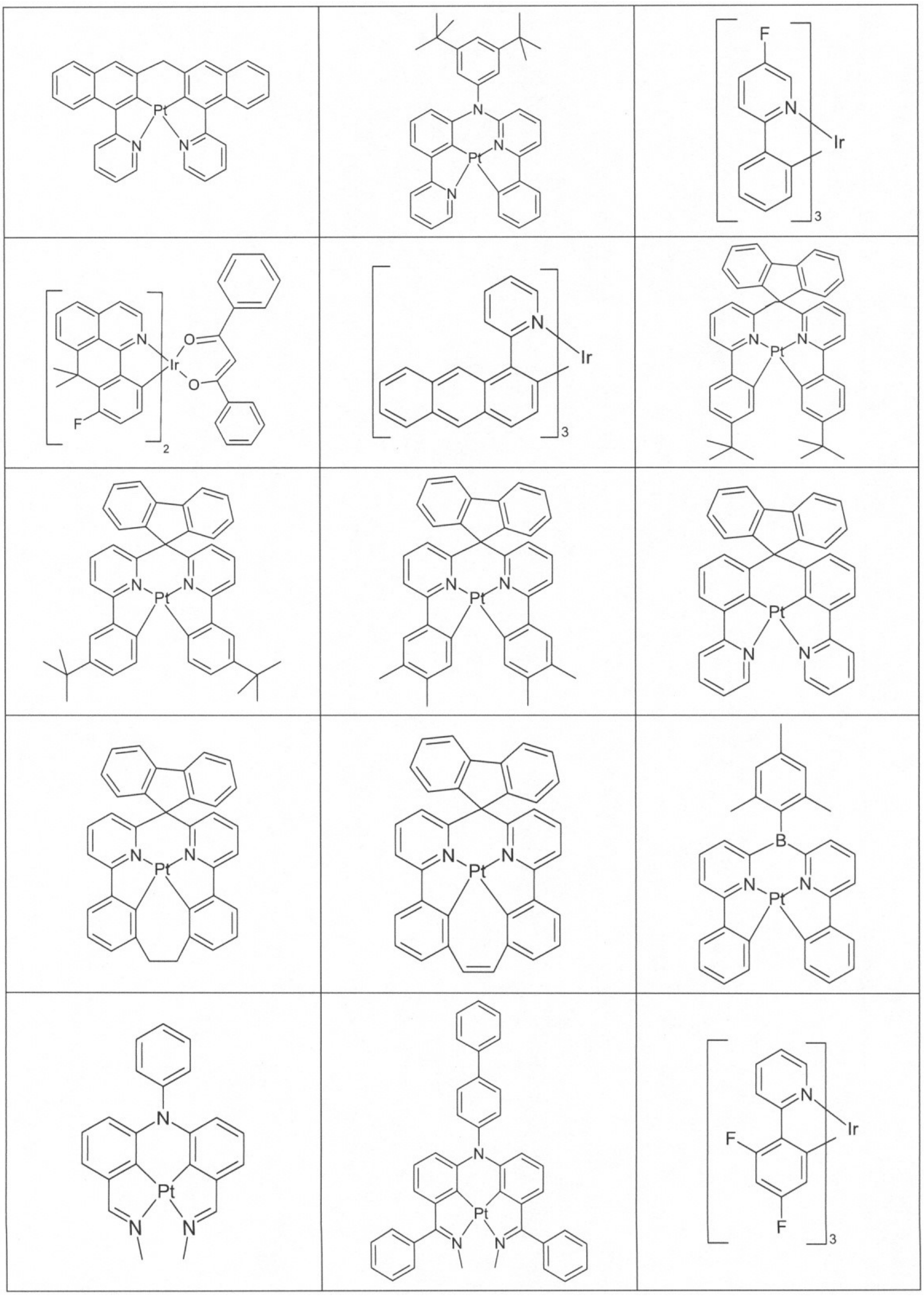
【０２０７】

【化２４－７】



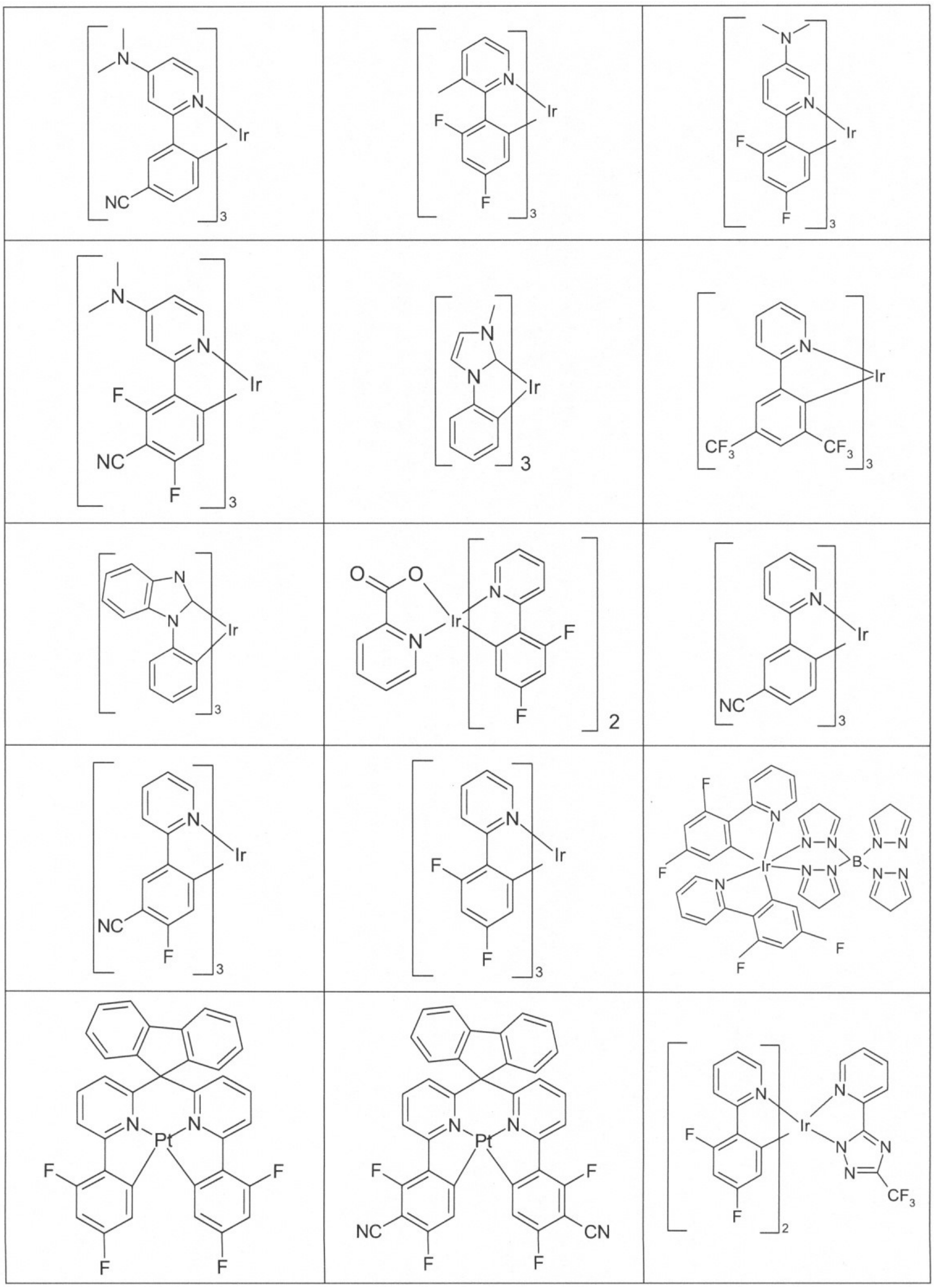
【０２０８】

【化２４－８】



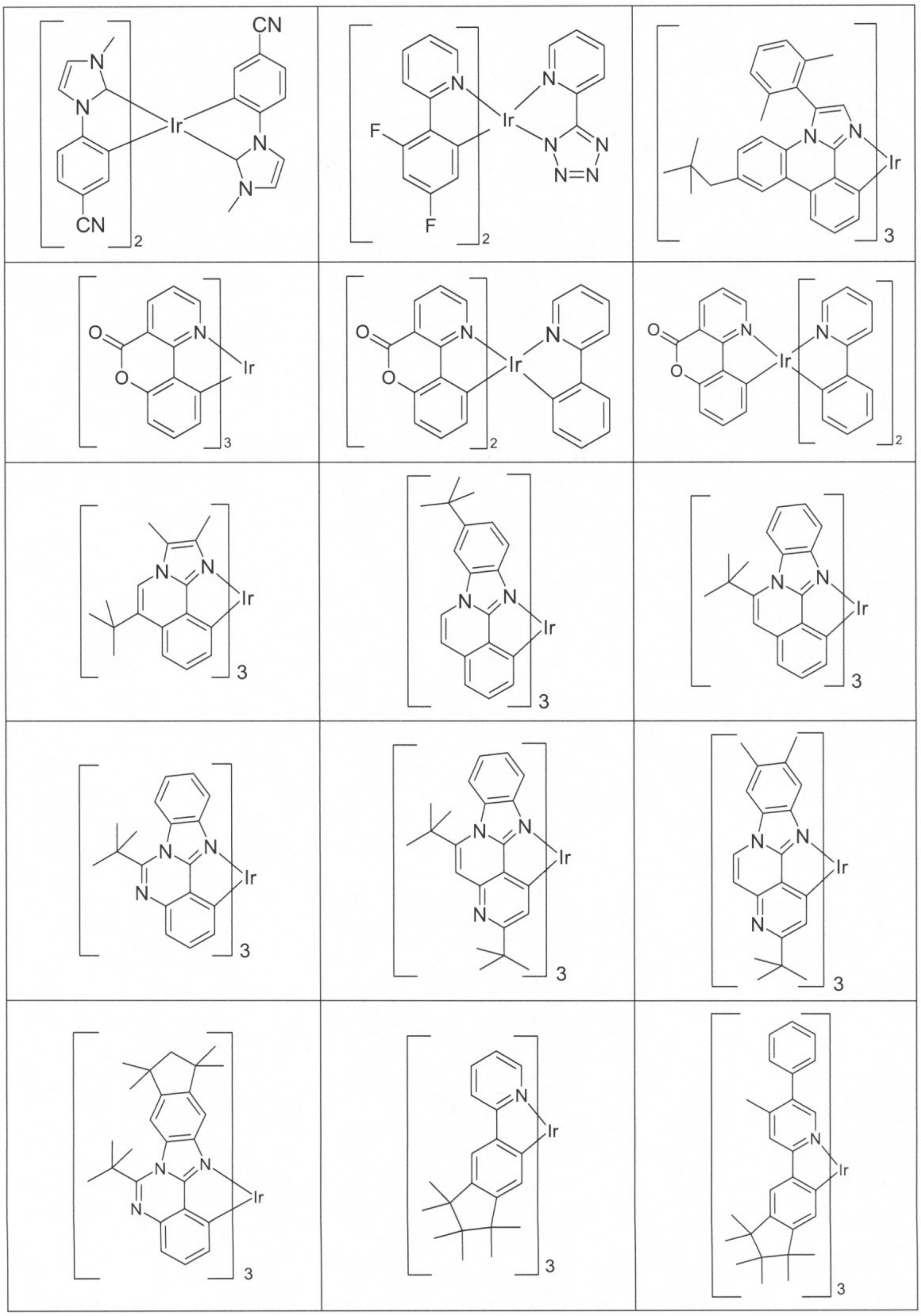
【０２０９】

【化２４－９】



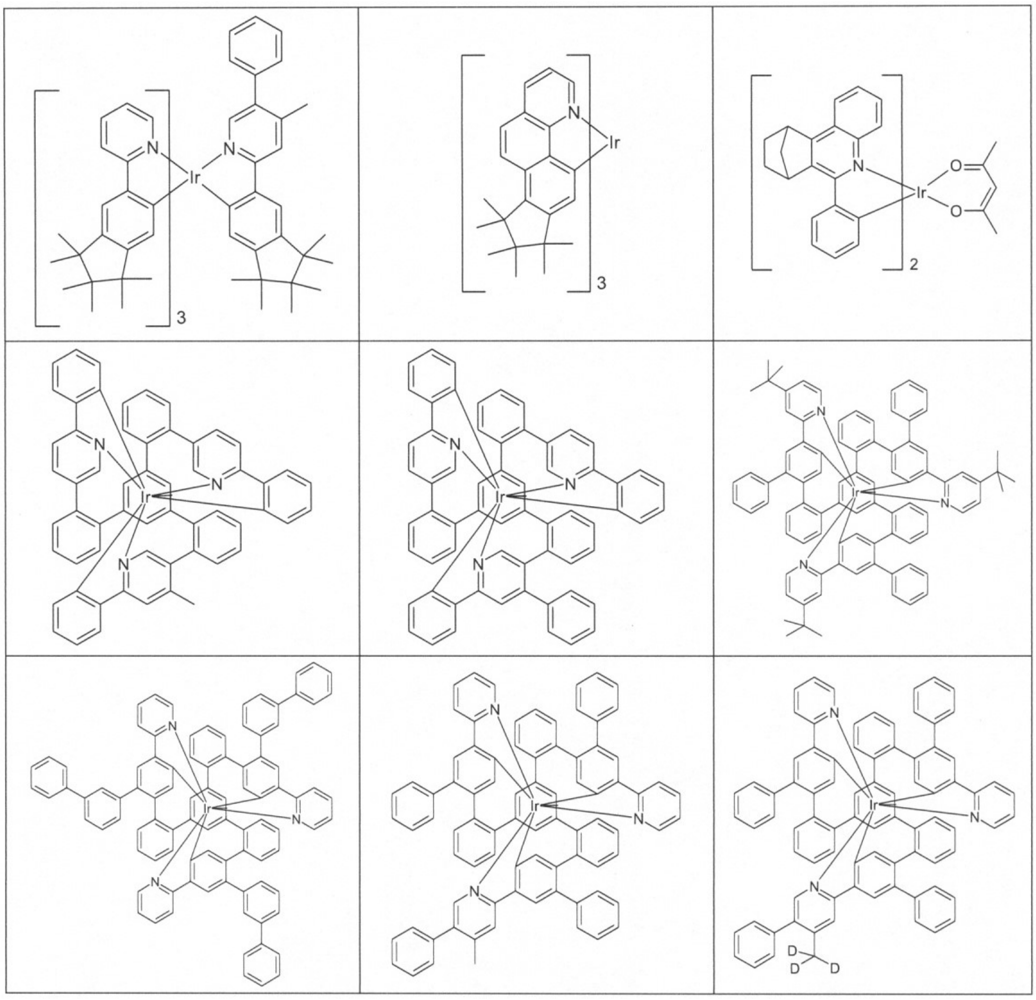
【０２１０】

【化２４－１０】



【０２１１】

【化２４－１１】



【０２１２】

本発明の好ましい態様において、式（Ｉ）の化合物は、正孔輸送材料として使用される。その場合、化合物は、好ましくは正孔輸送層に存在する。正孔輸送層の好ましい態様は、正孔輸送層、電子阻止層および正孔注入層である。式（Ｉ）の化合物が正孔輸送層に存在する場合、後者は、好ましくは電子阻止層である。これは、好ましくは、アノード側で発光層に直接隣接している。

【０２１３】

本願による正孔輸送層は、アノードと発光層との間の正孔輸送機能を有する層である。より詳細には、正孔注入層でも電子阻止層でもない正孔輸送層である。

【０２１４】

正孔注入層および電子阻止層は、本願に関しては、正孔輸送層の具体的態様であると理解される。正孔注入層は、アノードと発光層との間に複数の正孔輸送層がある場合、アノードに直接隣接しているか、またはアノードの単一のコーティングによりアノードから分離されている正孔輸送層である。電子阻止層は、アノードと発光層との間に複数の正孔輸送層がある場合、アノード側で発光層に直接隣接している正孔輸送層である。好ましくは、本発明のＯＬＥＤは、アノードと発光層との間に２つ、３つまたは４つの正孔輸送層を含み、そのうちの少なくとも１つは、好ましくは式（Ｉ）の化合物を含有し、より好ましくは１つまたは２つのみが式（Ｉ）の化合物を含有する。

【０２１５】

式（Ｉ）の化合物が正孔輸送層、正孔注入層または電子阻止層において正孔輸送材料として使用される場合、化合物は、純粋な材料として、即ち、１００％の割合で正孔輸送層に使用することも、１種以上のさらなる化合物と組み合わせて使用することもできる。そ

の場合、好ましい態様において、式（Ｉ）の化合物を含む有機層は、１種以上のｐ－ドーパントを追加で含有する。本発明により使用されるｐ－ドーパントは、好ましくは混合物中の他の化合物の１種以上を酸化することができる有機電子受容体化合物である。

【０２１６】

ｐ－ドーパントの特に好ましい態様は、ＷＯ２０１１／０７３１４９、ＥＰ１９６８１３１、ＥＰ２２７６０８５、ＥＰ２２１３６６２、ＥＰ１７２２６０２、ＥＰ２０４５８４８、ＤＥ１０２００７０３１２２０、ＵＳ８０４４３９０、ＵＳ８０５７７１２、ＷＯ２００９／００３４５５、ＷＯ２０１０／０９４３７８、ＷＯ２０１１／１２０７０９、ＵＳ２０１０／００９６６００、ＷＯ２０１２／０９５１４３およびＤＥ１０２０１２２０９５２３に開示の化合物である。

【０２１７】

特に好ましいｐ－ドーパントは、キノジメタン化合物、アザインデノフルオレンジオン、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主属の金属を含有する金属酸化物、ならびに遷移金属錯体、好ましくは結合部位として少なくとも１個の酸素原子を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。

【０２１８】

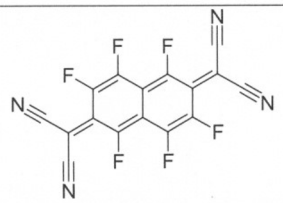
ｐ－ドーパントは、好ましくは、ｐ－ドープ層に実質的に均一に分布する。これは、たとえばｐ－ドーパントと正孔輸送材料マトリックスの同時蒸着によって達成することができる。

【０２１９】

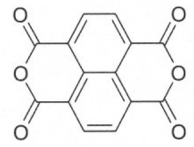
好ましいｐ－ドーパントはとりわけ、下記の化合物である：

【０２２０】

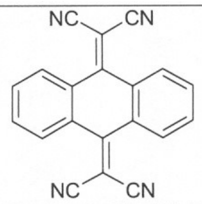
【化２５】



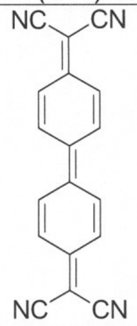
(D-1)



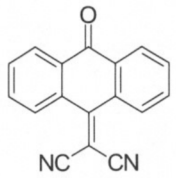
(D-2)



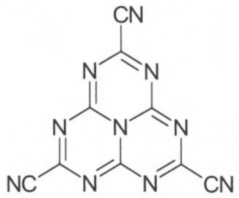
(D-3)



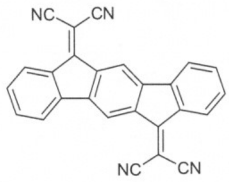
(D-4)



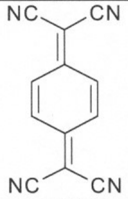
(D-5)



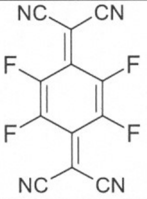
(D-6)



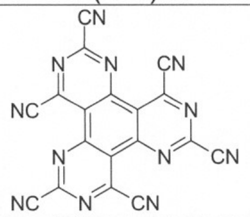
(D-7)



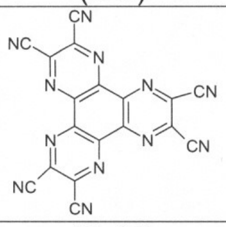
(D-8)



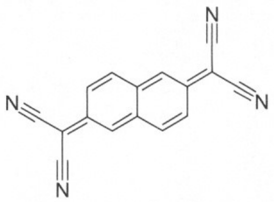
(D-9)



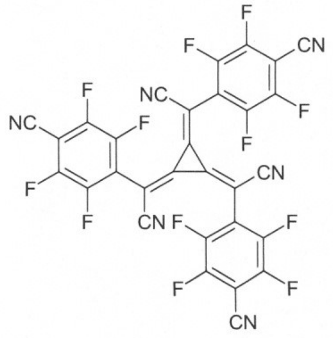
(D-10)



(D-11)



(D-12)



(D-13)

【０２２１】

本発明のさらなる好ましい態様において、式（Ｉ）の化合物は、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と組み合わせて正孔輸送材料としてＯＬＥＤに使用される。ここでは、ヘキサアザトリフェニレン誘導体を独立した層に使用することが特に好ましい。

【０２２２】

本発明の好ましい態様において、式（Ｉ）の化合物は、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。ここでのリン光発光化合物は、好ましくは赤色リン光および緑色リン光化合物から選択

される。

【０２２３】

この場合の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。

【０２２４】

これに対応して、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。

【０２２５】

有機エレクトロルミネッセントデバイスの発光層は、複数のマトリックス材料（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む系を含有してもよい。この場合も、発光化合物は一般に系中の占有率が低い方の化合物であり、マトリックス材料は、系中の占有率が高い方の化合物である。ただし、個々の場合では、系中の単一のマトリックス材料の割合は、単一の発光化合物の割合より低くてもよい。

【０２２６】

式（Ｉ）の化合物は、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種の材料のうちの一方は、正孔輸送特性を有する材料であり、他方の材料は、電子輸送特性を有する材料である。式（Ｉ）の化合物は、好ましくは正孔輸送特性を有するマトリックス材料である。これに対応して、式（Ｉ）の化合物は、ＯＬＥＤの発光層におけるリン光発光体用のマトリックス材料として使用され、電子輸送特性を有する第２のマトリックス化合物が、発光層に存在する。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。混合マトリックス系に関するより具体的詳細は、とりわけ出願ＷＯ２０１０／１０８５７９に記載されており、その対応する技術的教示は、この文脈において参照することにより組み込まれる。

【０２２７】

ただし、混合マトリックス成分の所望の電子輸送および正孔輸送特性は、単一の混合マトリックス成分が主として、あるいは完全に併せ持っていてもよく、この場合、さらなる混合マトリックス成分（複数可）は、他の機能を果たす。

【０２２８】

混合マトリックス系は、１種以上の発光化合物、好ましくは１種以上のリン光発光化合物を含んでもよい。一般に、混合マトリックス系は、好ましくはリン光有機エレクトロルミネッセントデバイスに使用される。

【０２２９】

本発明の化合物と組み合わせて混合マトリックス系のマトリックス成分として使用できる特に適するマトリックス材料は、リン光発光化合物に関して以下に規定する好ましいマトリックス材料から、中でもとりわけ電子輸送特性を有するものから選択される。

【０２３０】

電子デバイスにおける異なる機能材料の好ましい態様を、以下に挙げる。

【０２３１】

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。本発明に関するアリールアミンまたは芳香族アミンは、窒素に直接結合している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位で直接結

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位で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、ここで、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位で結合している。さらなる好ましい発光化合物は、たとえばＷＯ２００６／１０８４９７またはＷＯ２００６／１２２６３０によるインデノフルオレンアミンまたはジアミン、たとえばＷＯ２００８／００６４４９によるベンゾインデノフルオレンアミンまたはジアミン、およびたとえばＷＯ２００７／１４０８４７による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ＷＯ２０１０／０１２３２８に開示の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、ＷＯ２０１２／０４８７８０およびＷＯ２０１３／１８５８７１に開示のピレンアリールアミンである。同様に好ましいのは、ＷＯ２０１４／０３７０７７に開示のベンゾインデノフルオレンアミン、ＷＯ２０１４／１０６５２２に開示のベンゾフルオレンアミン、ＷＯ２０１４／１１１２６９およびＷＯ２０１７／０３６５７４に開示の拡張ベンゾインデノフルオレン、ＷＯ２０１７／０２８９４０およびＷＯ２０１７／０２８９４１に開示のフェノキサジン、ならびにＷＯ２０１６／１５０５４４に開示のフラン単位またはチオフェン単位に結合したフルオレン誘導体である。

【０２３２】

好ましくは蛍光発光化合物用の有用なマトリックス材料には、様々な物質のクラスの材料が含まれる。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、ＥＰ６７６４６１による２，２’，７，７’－テトラフェニルスピロビフルオレン、もしくはジナフチルアントラセン）、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（たとえば、ＥＰ６７６４６１によるＤＰＶＢｉもしくはスピロ－ＤＰＶＢｉ）、ポリポダル金属錯体（たとえばＷＯ２００４／０８１０１７による）、正孔伝導化合物（たとえばＷＯ２００４／０５８９１１による）、電子伝導化合物、とりわけケトン、ホスフィンオキシド、スルホキシドなど（たとえばＷＯ２００５／０８４０８１およびＷＯ２００５／０８４０８２による）、アトロプ異性体（たとえばＷＯ２００６／０４８２６８による）、ボロン酸誘導体（たとえばＷＯ２００６／１１７０５２による）、またはベンゾアントラセン（たとえばＷＯ２００８／１４５２３９による）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、およびスルホキシドのクラスから選択される。特に非常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／もしくはピレンまたはこれらの化合物のアトロプ異性体を含むオリゴアリーレンのクラスから選択される。本発明に関す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。さらに、ＷＯ２００６／０９７２０８、ＷＯ２００６／１３１１９２、ＷＯ２００７／０６５５５０、ＷＯ２００７／１１０１２９、ＷＯ２００７／０６５６７８、ＷＯ２００８／１４５２３９、ＷＯ２００９／１００９２５、ＷＯ２０１１／０５４４４２およびＥＰ１５５３１５４に開示のアントラセン誘導体、ＥＰ１７４９８０９、ＥＰ１９０５７５４およびＵＳ２０１２／０１８７８２６に開示のピレン化合物、ＷＯ２０１５／１５８４０９に開示のベンゾアントラセニルアントラセン化合物、ＷＯ２０１７／０２５１６５に開示のインデノベンゾフラン、ならびにＷＯ２０１７／０３６５７３に開示のフェナントリルアントラセンが好ましい。

【０２３３】

リン光発光化合物用の好ましいマトリックス材料は、式（Ｉ）の化合物に加え、たとえばＷＯ２００４／０１３０８０、ＷＯ２００４／０９３２０７、ＷＯ２００６／００５６２７もしくはＷＯ２０１０／００６６８０による芳香族ケトン、芳香族ホスフィンオキシドまたは芳香族スルホキシドもしくはスルホン、ＷＯ２００５／０３９２４６、ＵＳ２００５／００６９７２９、ＪＰ２００４／２８８３８１、ＥＰ１２０５５２７もしくはＷＯ

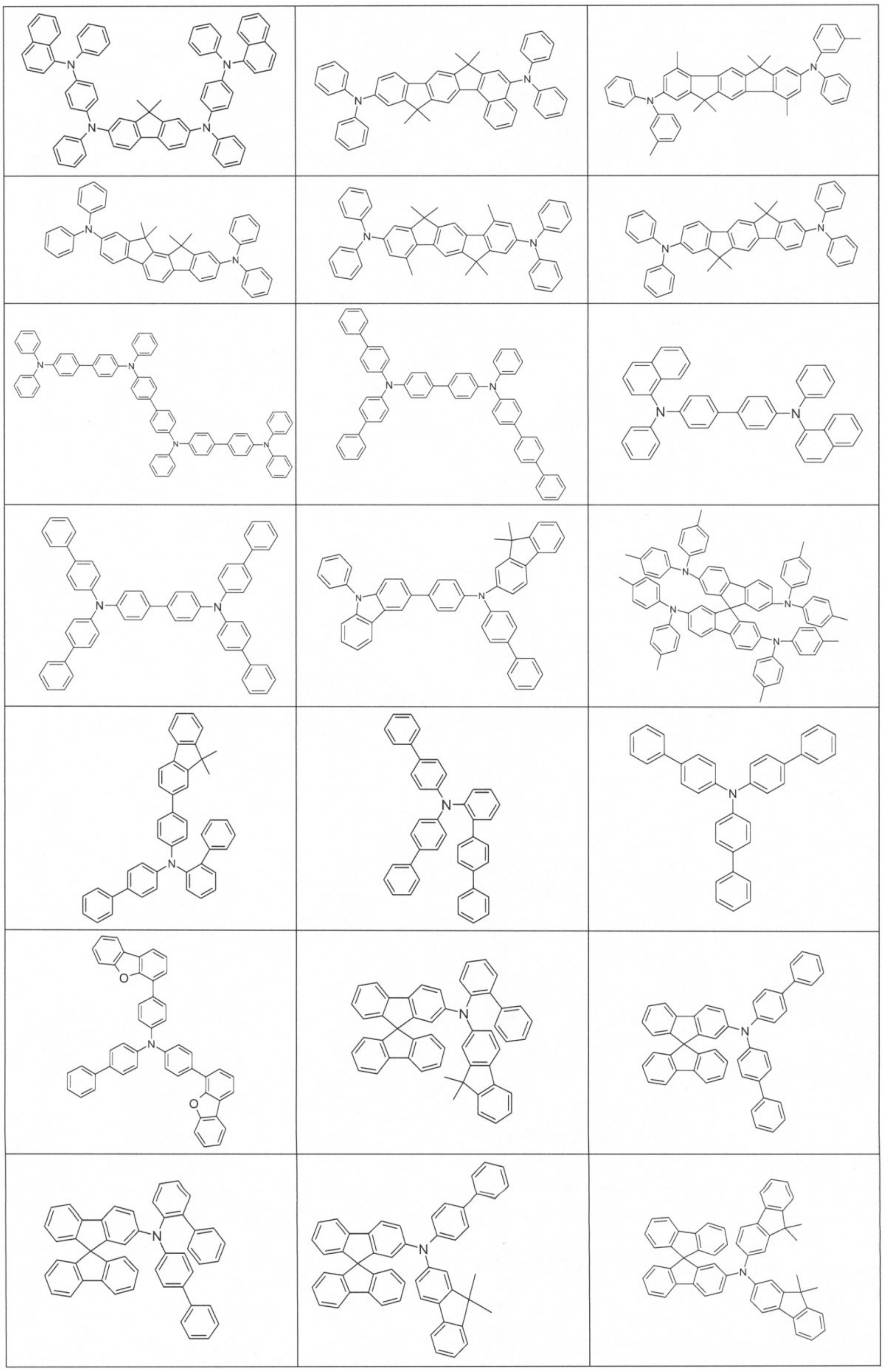
２００８／０８６８５１に開示のトリアリールアミン、カルバゾール誘導体、たとえばＣＢＰ（Ｎ，Ｎ－ビスカルバゾリルビフェニル）もしくはカルバゾール誘導体、たとえばＷＯ２００７／０６３７５４もしくはＷＯ２００８／０５６７４６によるインドロカルバゾール誘導体、たとえばＷＯ２０１０／１３６１０９、ＷＯ２０１１／０００４５５もしくはＷＯ２０１３／０４１１７６によるインデノカルバゾール誘導体、たとえばＥＰ１６１７７１０、ＥＰ１６１７７１１、ＥＰ１７３１５８４、ＪＰ２００５／３４７１６０によるアザカルバゾール誘導体、たとえばＷＯ２００７／１３７７２５による双極性マトリックス材料、たとえばＷＯ２００５／１１１１７２によるシラン、たとえばＷＯ２００６／１１７０５２によるアザボロールもしくはボロン酸エステル、たとえばＷＯ２０１０／０１５３０６、ＷＯ２００７／０６３７５４もしくはＷＯ２００８／０５６７４６によるトリアジン誘導体、たとえばＥＰ６５２２７３もしくはＷＯ２００９／０６２５７８による亜鉛錯体、たとえばＷＯ２０１０／０５４７２９によるジアザシロールもしくはテトラアザシロール誘導体、たとえばＷＯ２０１０／０５４７３０によるジアザホスホール誘導体、たとえばＵＳ２００９／０１３６７７９、ＷＯ２０１０／０５０７７８、ＷＯ２０１１／０４２１０７、ＷＯ２０１１／０８８８７７もしくはＷＯ２０１２／１４３０８０による架橋カルバゾール誘導体、たとえばＷＯ２０１２／０４８７８１によるトリフェニレン誘導体、またはたとえばＷＯ２０１１／１１６８６５もしくはＷＯ２０１１／１３７９５１によるラクタムである。

【０２３４】

本発明の電子デバイスの正孔注入もしくは正孔輸送層または電子阻止層に、または電子輸送層に使用可能な適する電荷輸送材料は、式（Ｉ）の化合物に加え、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ような他の材料である。正孔輸送および正孔注入層用の好ましい材料は、とりわけ下記の材料から選択される：

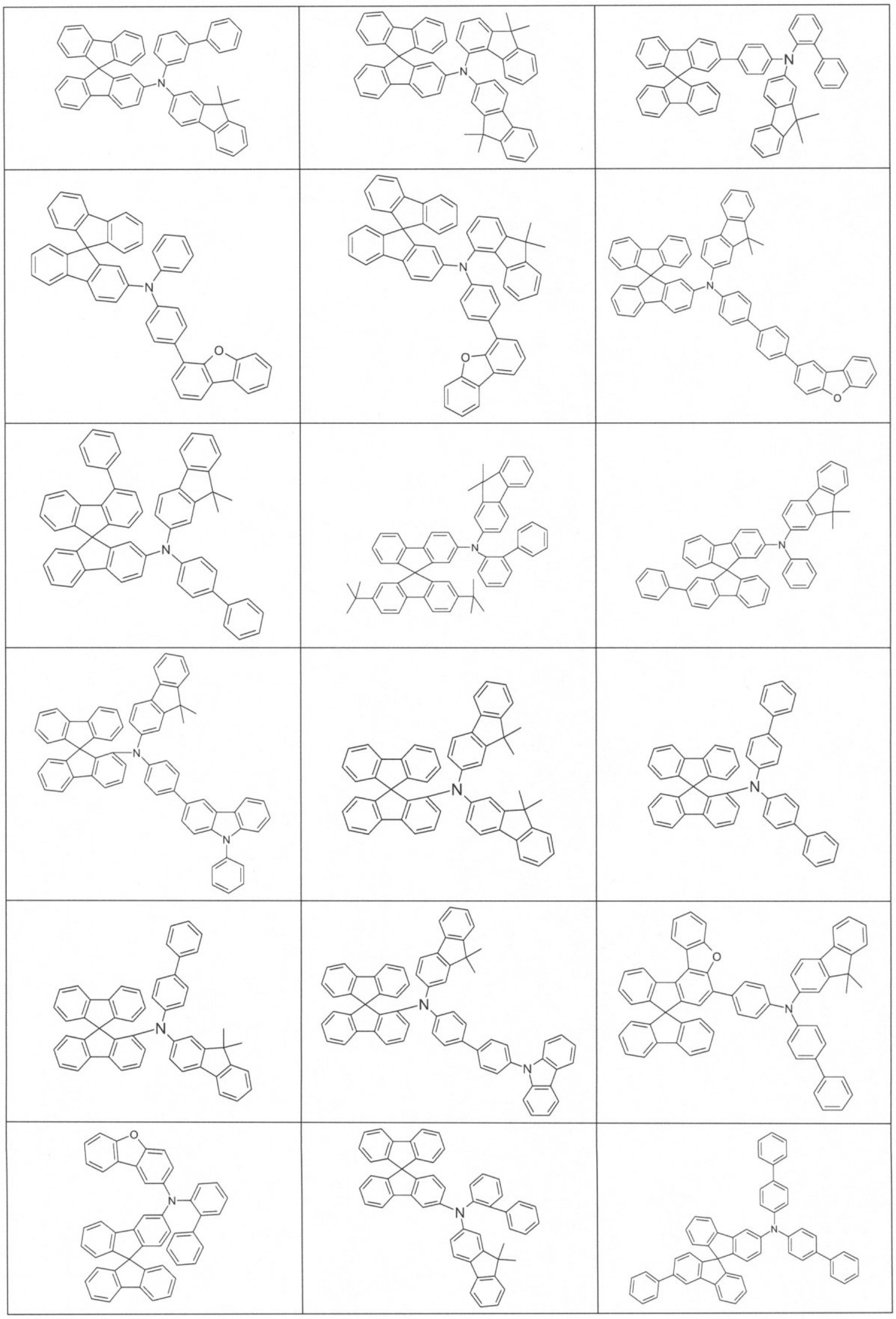
【０２３５】

【化２６－１】



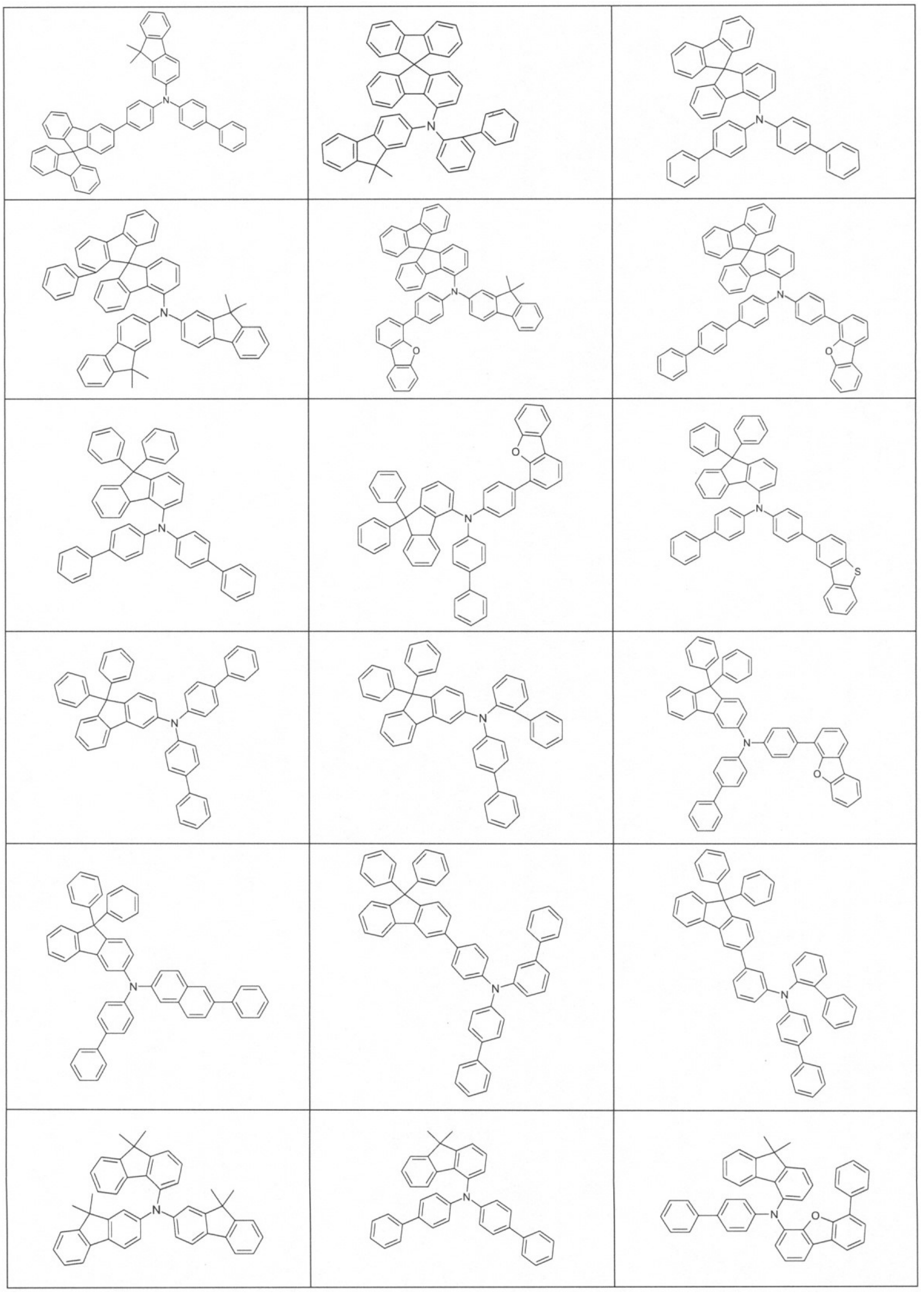
【０２３６】

【化２６－２】



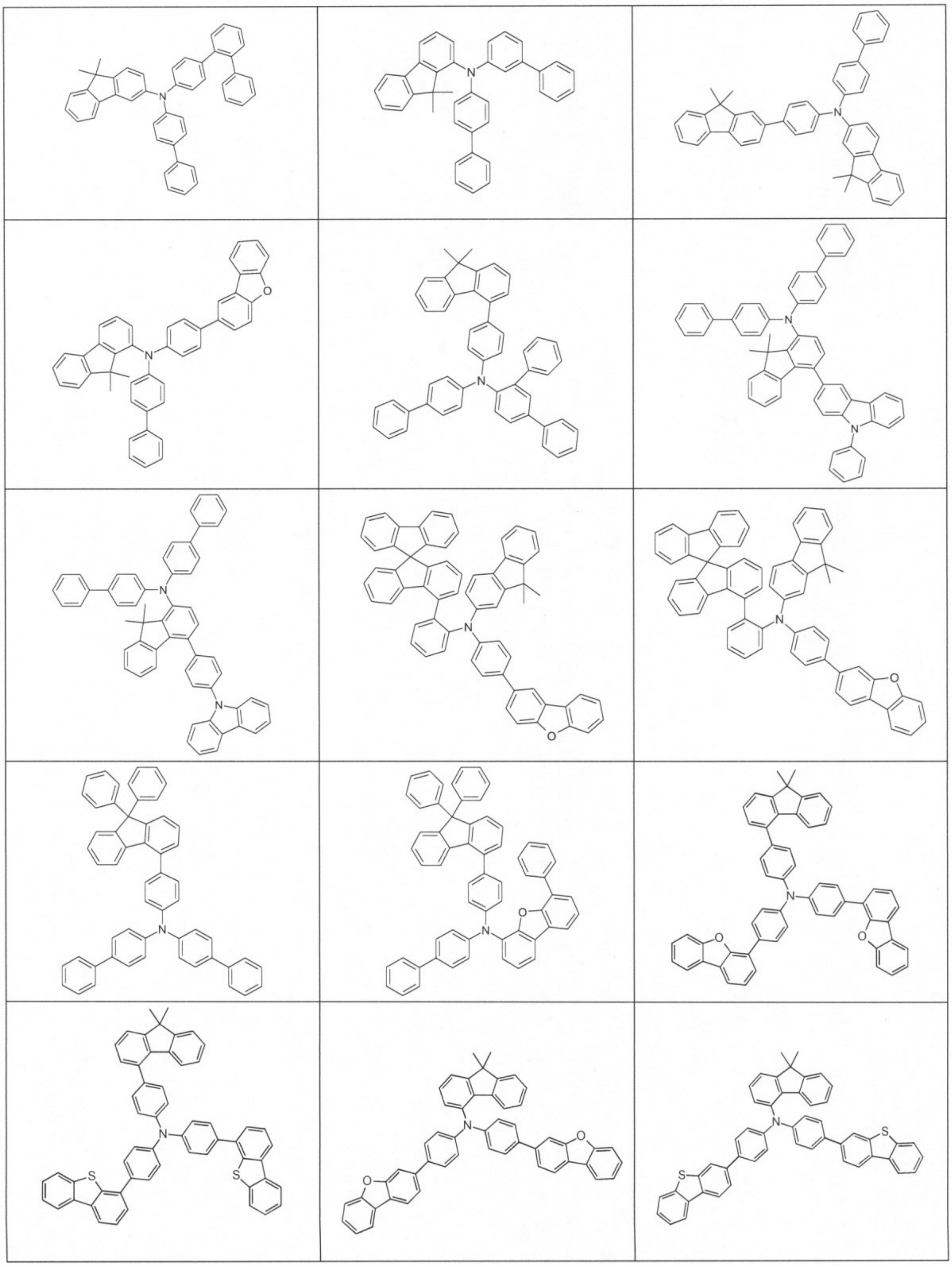
【０２３７】

【化２６－３】



【０２３８】

【化２６－４】



【０２３９】

好ましくは、本発明のＯＬＥＤは、２つ以上の異なる正孔輸送層を含む。式（Ｉ）の化合物は、ここでは、正孔輸送層の１つ以上に、または全てに使用してもよい。好ましい態様において、式（Ｉ）の化合物は、正孔輸送層の１つのみ、または２つのみに使用され、他の化合物、好ましくは芳香族アミン化合物が、存在するさらなる正孔輸送層に使用される。式（Ｉ）の化合物と共に、好ましくは本発明のＯＬＥＤの正孔輸送層において使用されるさらなる化合物はとりわけ、インデノフルオレンアミン誘導体（たとえばＷＯ０６／１２２６３０またはＷＯ０６／１００８９６による）、ＥＰ１６６１８８８に開示のアミン誘導体、ヘキサアザトリフェニレン誘導体（たとえばＷＯ０１／０４９８０６による）、縮合芳香族化合物を含むアミン誘導体（たとえばＵＳ５，０６１，５６９による）、ＷＯ９５／０９１４７に開示のアミン誘導体、モノベンゾインデノフルオレンアミン（たと

えばＷＯ０８／００６４４９による）、ジベンゾインデノフルオレンアミン（たとえばＷＯ０７／１４０８４７による）、スピロビフルオレンアミン（たとえばＷＯ２０１２／０３４６２７またはＷＯ２０１３／１２０５７７による）、フルオレンアミン（たとえばＷＯ２０１４／０１５９３７、ＷＯ２０１４／０１５９３８、ＷＯ２０１４／０１５９３５およびＷＯ２０１５／０８２０５６による）、スピロジベンゾピランアミン（たとえばＷＯ２０１３／０８３２１６による）、ジヒドロアクリジン誘導体（たとえばＷＯ２０１２／１５０００１による）、たとえばＷＯ２０１５／０２２０５１、ＷＯ２０１６／１０２０４８およびＷＯ２０１６／１３１５２１によるスピロジベンゾフランおよびスピロジベンゾチオフェン、たとえばＷＯ２０１５／１３１９７６によるフェナントレンジアリールアミン、たとえばＷＯ２０１６／０８７０１７によるスピロトリベンゾトロポロン、たとえばＷＯ２０１６／０７８７３８によるメタフェニルジアミン基を持つスピロビフルオレン、たとえばＷＯ２０１５／１５８４１１によるスピロビスアクリジン、たとえばＷＯ２０１４／０７２０１７によるキサンテンジアリールアミン、ならびにＷＯ２０１５／０８６１０８によるジアリールアミノ基を持つ９，１０－ジヒドロアントラセンスピロ化合物である。

【０２４０】

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ような任意の材料であってもよい。とりわけ適切なのは、アルミニウム錯体、たとえばＡｌｑ$_3$、ジルコニウム錯体、たとえばＺｒｑ$_4$、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。さらなる適する材料は、ＪＰ２０００／０５３９５７、ＷＯ２００３／０６０９５６、ＷＯ２００４／０２８２１７、ＷＯ２００４／０８０９７５およびＷＯ２０１０／０７２３００に開示されるような、上記の化合物の誘導体である。

【０２４１】

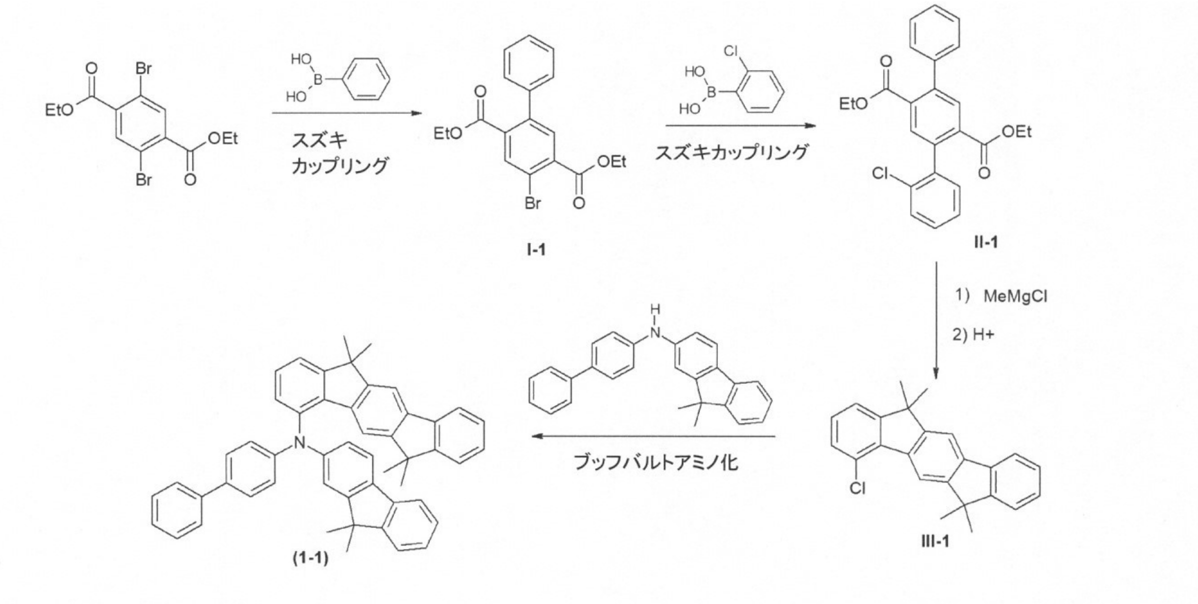
電子デバイスの好ましいカソードは、低い仕事関数を有する金属、金属合金、または様々な金属、たとえばアルカリ土類金属、アルカリ金属、主族金属もしくはランタノイド（たとえば、Ｃａ、Ｂａ、Ｍｇ、Ａｌ、Ｉｎ、Ｍｇ、Ｙｂ、Ｓｍなど）で構成される多層構造である。これに加え、適するのは、アルカリ金属またはアルカリ土類金属と銀で構成される合金、たとえばマグネシウムと銀で構成される合金である。多層構造の場合、言及した金属に加え、比較的高い仕事関数を有するさらなる金属、たとえばＡｇまたはＡｌを使用することも可能であり、この場合、金属の組合せ、たとえばＣａ／Ａｇ、Ｍｇ／ＡｇまたはＢａ／Ａｇなどが一般に使用される。高誘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、Ｌｉ$_2$Ｏ、ＢａＦ$_2$、ＭｇＯ、ＮａＦ、ＣｓＦ、Ｃｓ$_2$ＣＯ$_3$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。

【０２４２】

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。第一に、高い酸化還元電位を有する金属がこの目的に適しており、たとえばＡｇ、ＰｔまたはＡｕである。第二に、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、電極の少なくとも一方は、有機材料の照射（有機ソーラーセル）または発光（ＯＬＥＤ、Ｏ－ＬＡＳＥＲ）の何れかを可能とするため、透明または部分的に透明でなければならない。ここでの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、導電性のドープされた有機材料、とりわけ伝導性のドープされたポリマーが好ましい。加えて、アノードは、２つ以上の層、たとえばＩＴＯの内層と、金属酸化物、好まし

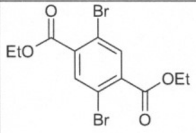
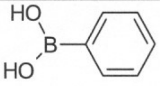
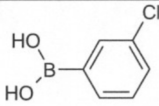
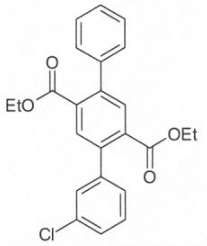
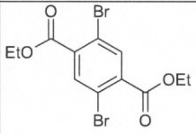
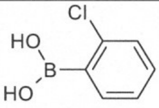
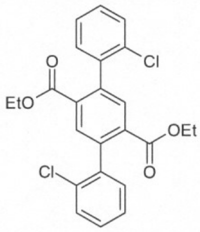
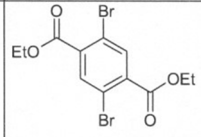
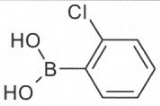
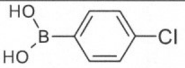
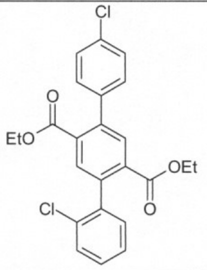
くはタングステン酸化物、モリブデン酸化物または酸化バナジウムの外層からなっていてもよい。
【０２４３】
デバイスは適切に（用途に応じて）構造化され、接点が接続され、水と空気の損傷効果を排除するために、最終的に密閉される。
【０２４４】
好ましい一態様において、電子デバイスは、１つ以上の層が昇華プロセスによりコーティングされることを特徴とする。この場合、材料は、真空昇華系において、１０$^{-5}$ｍｂａｒ未満、好ましくは１０$^{-6}$ｍｂａｒ未満の初期圧力で蒸着により付与される。ただし、この場合、初期圧力をさらに低く、たとえば１０$^{-7}$ｍｂａｒ未満とすることも可能である。
【０２４５】
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力により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$^{-5}$ｍｂａｒ乃至１ｂａｒ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）。
【０２４６】
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式（Ｉ）の可溶性化合物が必要である。高い溶解度は、化合物の適切な置換により実現することができる。
【０２４７】
本発明の電子デバイスは、１つ以上の層を溶液から付与し、１つ以上の層を昇華プロセスにより付与することにより製造されることがさらに好ましい。
【０２４８】
本発明によると、１つ以上の式（Ｉ）の化合物を含む電子デバイスは、照明用途の光源として、医療用および／または美容用途（たとえば、光線療法）の光源として、表示装置に使用することができる。
【０２４９】
［例］
Ａ）合成例
例１－１：本発明の化合物１－１およびバリアントの合成
【０２５０】

【化２７】



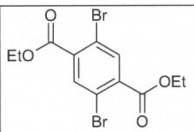
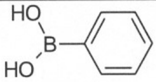
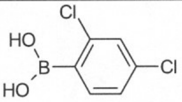
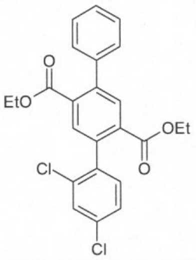
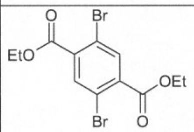
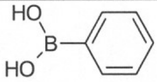
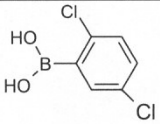
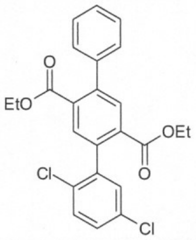
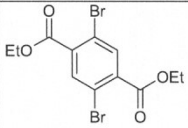
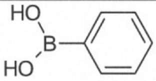
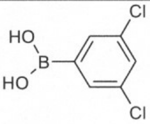
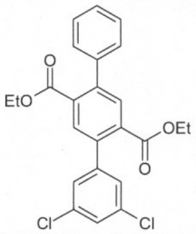
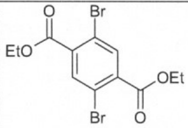
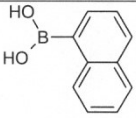
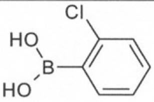
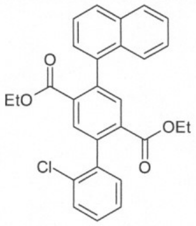
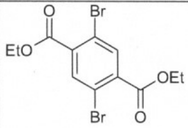
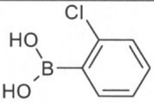
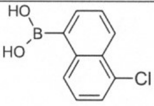
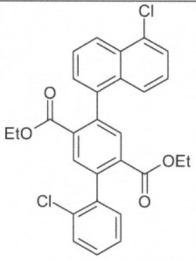
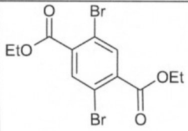
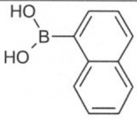
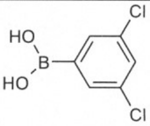
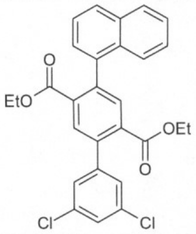
【０２５１】
中間体Ｉ－１
　１０ｇのフェニルボロン酸（８１ｍｍｏｌ）と３０ｇのジブロモジカルボン酸エステル（ＣＡＳ番号１８０１３－９７－３）（７７ｍｍｏｌ）を７５０ｍｌのＴＨＦに懸濁させる。１６０ｍｌの２Ｍ炭酸カリウム溶液をゆっくりと滴加する。溶液を脱気し、$Ｎ_2$で飽和させる。その後、０．８９ｇ（０．８ｍｍｏｌ）のＰｄ（$Ｐｈ_3$Ｐ）$_4$を添加する。反応混合物を保護雰囲気下で１６時間加熱して沸騰させる。続いて、混合物をトルエンと水との間で分画し、有機相を水で３回洗浄し、$Ｎａ_2ＳＯ_4$上で乾燥させ、回転蒸発により濃縮する。残った残留物をカラムクロマトグラフィーにより精製する。収率は、１５．３ｇ（理論値の５２％）である。
中間体ＩＩ－１
　７ｇの４－クロロフェニルボロン酸（４４．６ｍｍｏｌ）と１５．３ｇのブロモ誘導体Ｉ－１（４０．５６ｍｍｏｌ）を３００ｍｌのＴＨＦに懸濁させる。８１ｍｌの１Ｍ炭酸カリウム溶液をゆっくりと滴加する。溶液を脱気し、$Ｎ_2$で飽和させる。その後、０．４５ｇ（０．４ｍｍｏｌ）のＰｄ（$Ｐｈ_3$Ｐ）$_4$を添加する。反応混合物を保護雰囲気下で１２時間加熱して沸騰させる。続いて、混合物をトルエンと水との間で分画し、有機相を水で３回洗浄し、$Ｎａ_2ＳＯ_4$上で乾燥させ、回転蒸発により濃縮する。粗生成物をトルエンと共にシリカゲルを通してろ過した後、残った残留物をＭｅＯＨから再結晶させる。収率は、１４．５ｇ（理論値の８０％）である。
【０２５２】
　同様に、下記の化合物を調製する（理論値の３０～９０％の収率）：
【０２５３】

【化２８－１】

	反応物質 1	ボロン酸誘導体 1	ボロン酸誘導体 2	生成物
II-2				
II-3		 (2 eq.)		
II-4				

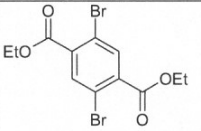
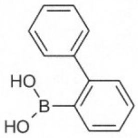
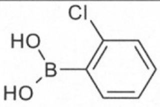
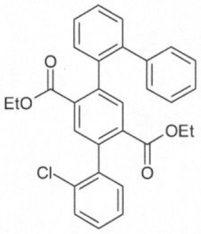
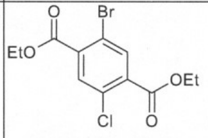
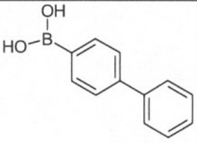
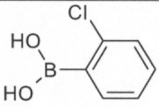
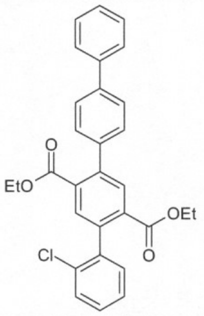
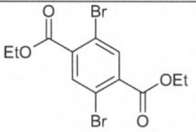
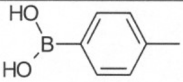
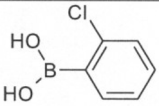
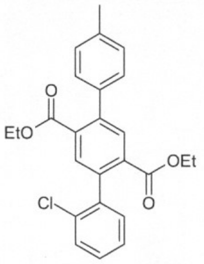
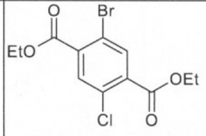
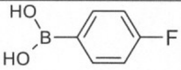
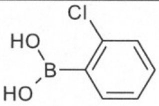
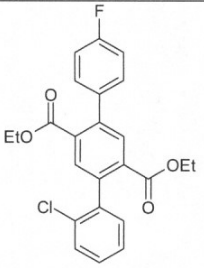
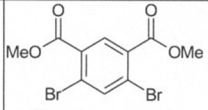
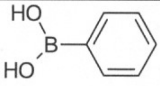
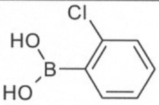
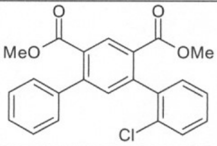
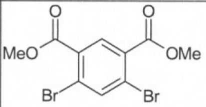
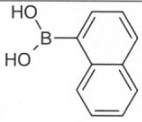
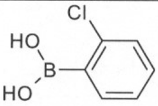
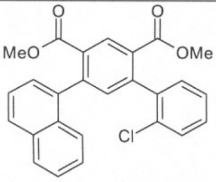
【０２５４】

【化２８－２】

II-5				
II-6				
II-7				
II-8				
II-9				
II-10				

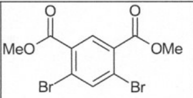
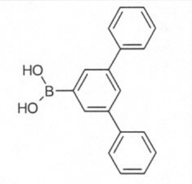
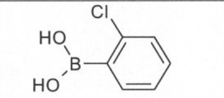
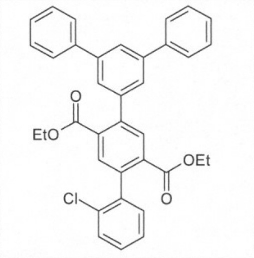
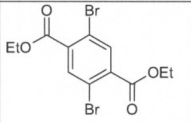
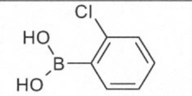
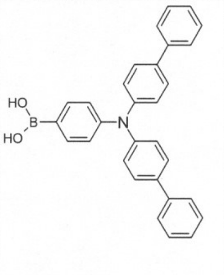
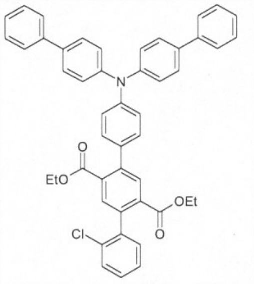
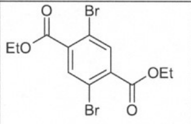
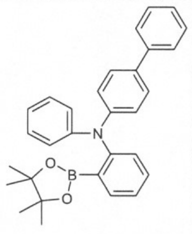
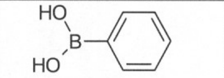
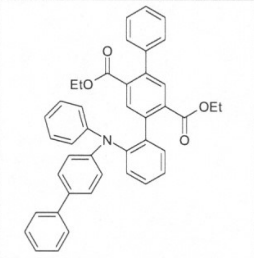
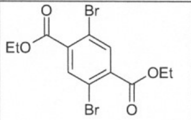
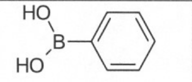
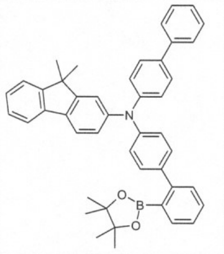
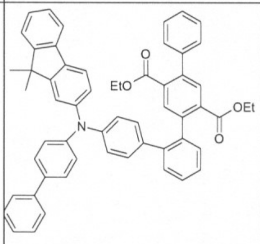
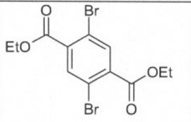
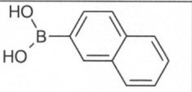
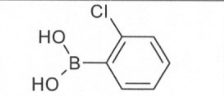
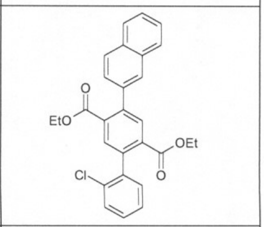
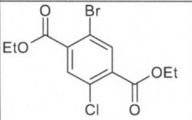
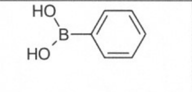
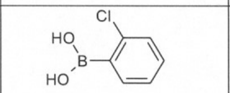
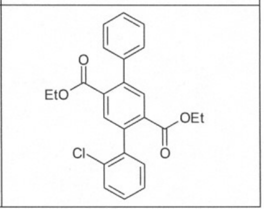
【０２５５】

【化２８－３】

II-11				
II-12	 (340148-60-9)			
II-13				
II-14	 (340148-60-9)			
II-15	 (90766-77-1)			
II-16				

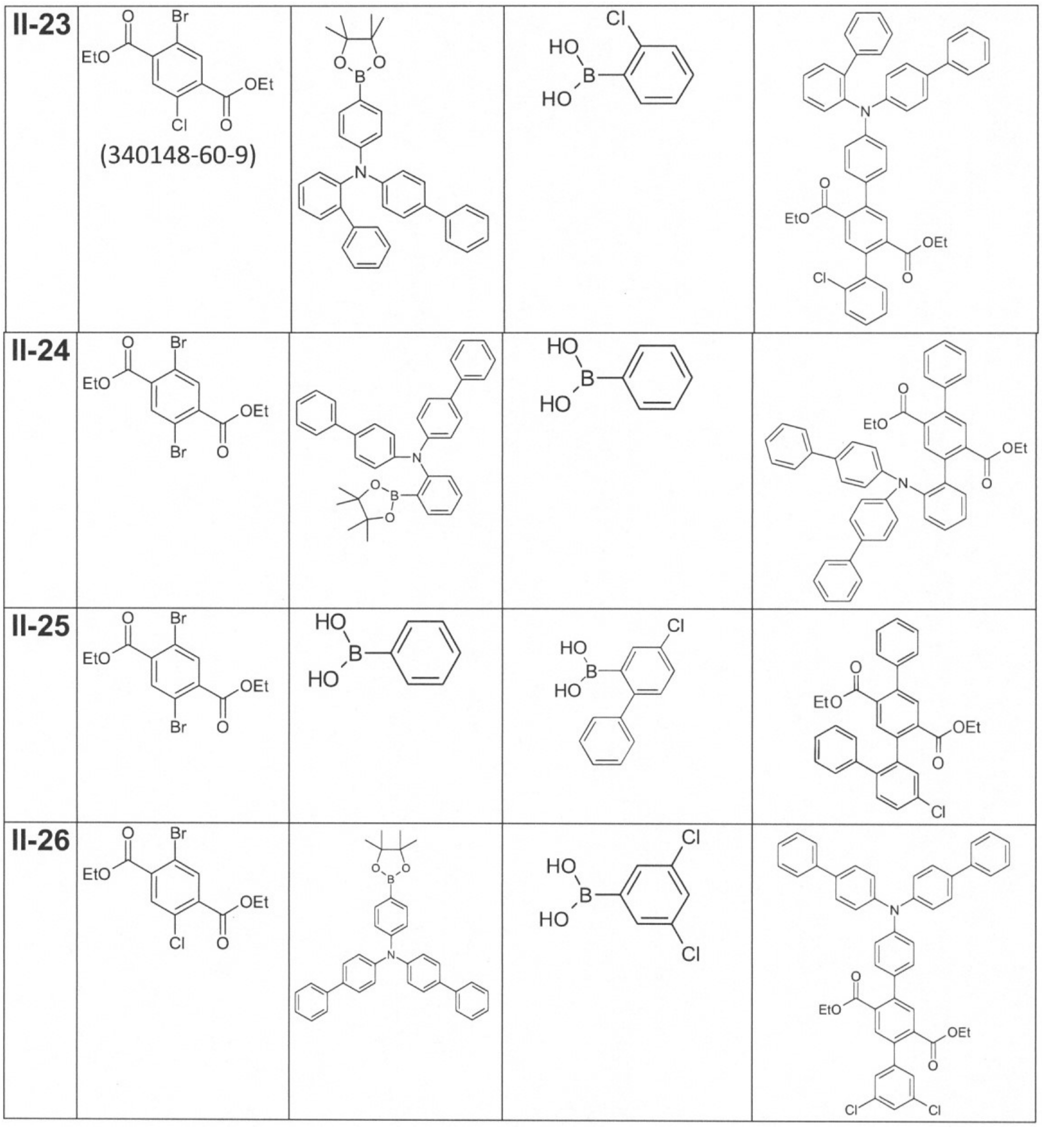
【０２５６】

【化２８－４】

II-17				
II-18				
II-19				
II-20				
II-21				
II-22	 (340148-60-9)			

【０２５７】

【化２８－５】



【０２５８】

中間体ＩＩＩ－１

１４．０ｇ（３４．２ｍｍｏｌ）の中間体ＩＩ－１を焼成フラスコ中で２５０ｍｌの乾燥ＴＨＦに溶解させる。溶液を$Ｎ_2$で飽和させる。澄明な溶液を－５℃に冷却し、次いで６８．５ｍｌ（２０５ｍｍｏｌ）の３Ｍ塩化メチルマグネシウム溶液を添加する。反応混合物を室温まで徐々に温め、次いで塩化アンモニウムでクエンチする。続いて、混合物を酢酸エチルと水との間で分画し、有機相を水で３回洗浄し、$Ｎａ_2ＳＯ_4$上で乾燥させ、回転蒸発により濃縮する。

【０２５９】

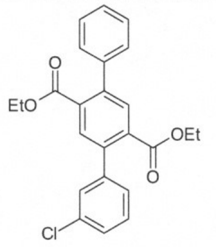
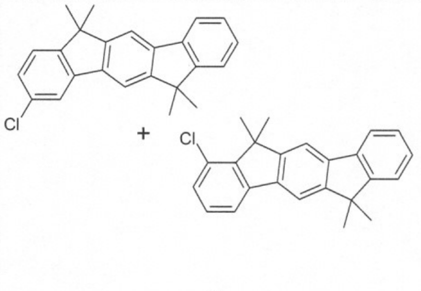
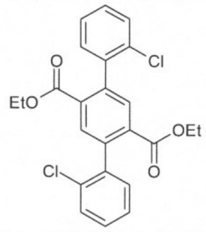
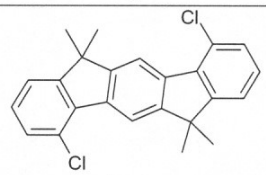
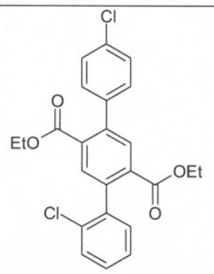
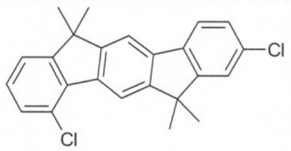
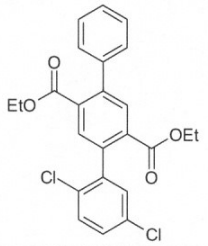
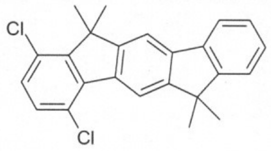
回転蒸発により濃縮した溶液をトルエンに溶解させ、６．６ｇのＡｍｂｅｒｌｙｓｔ１５を添加する。混合物を１１０℃に加熱し、この温度に８時間保持する。この時間の間に白色固体が沈殿する。混合物を次いで室温に冷却し、沈殿した固体を吸引ろ過し、ヘプタンで洗浄する。残留物を減圧下４０℃で乾燥させる。粗生成物をヘプタン：酢酸エチル（１：１）と共にシリカゲルを通してろ過した後、１０．２ｇ（理論値の８６％）の生成物ＩＩＩ－１が得られる。

【０２６０】

同様に、下記の化合物を調製する（理論値の５０～９５％の収率）：

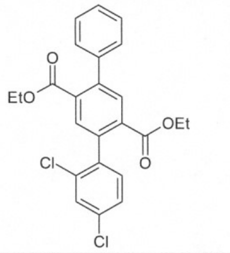
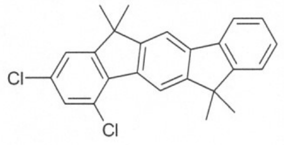
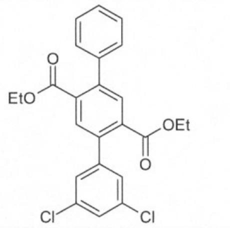
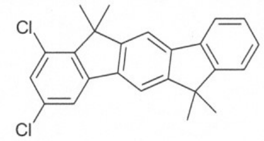
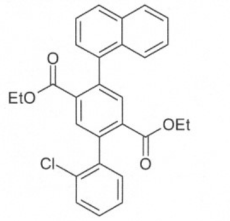
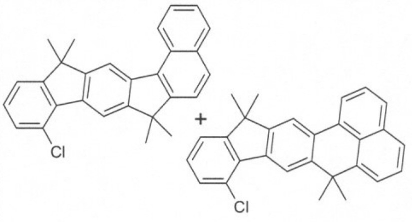
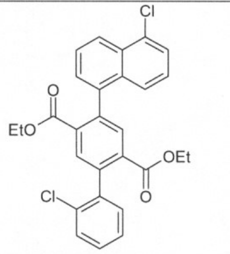
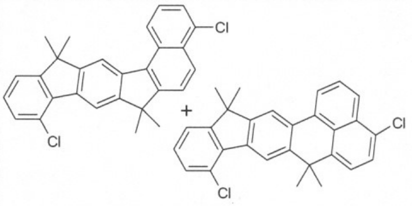
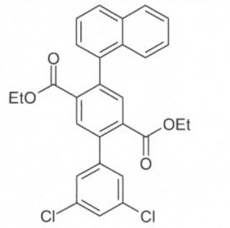
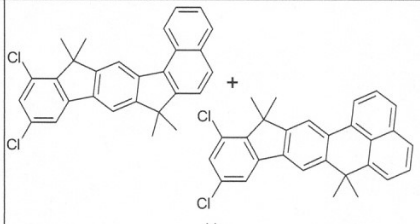
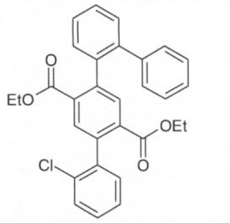
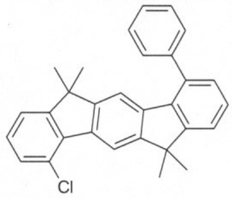
【０２６１】

【化２９－１】

	反応物質 1	反応物質 2	生成物
III-2		MeMgBr	 #
III-3		MeMgBr	
III-4		MeMgCl	
III-5		MeMgCl	

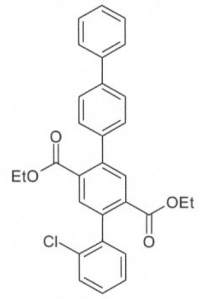
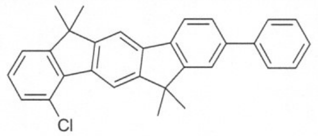
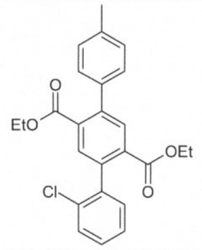
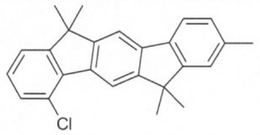
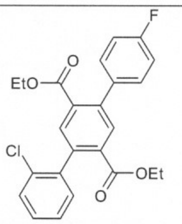
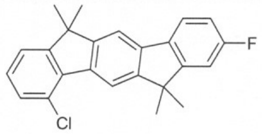
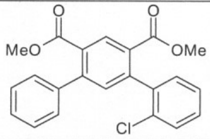
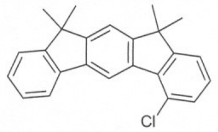
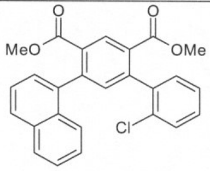
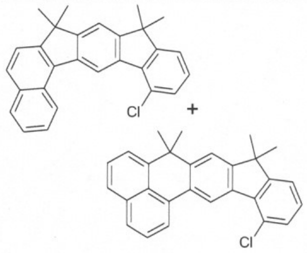
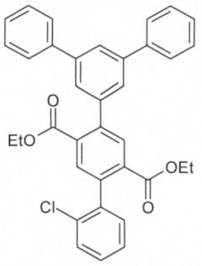
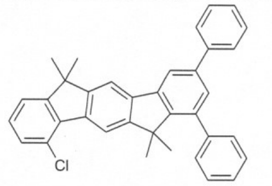
【０２６２】

【化２９－２】

III-6		MeMgCl	
III-7		MeMgBr	
III-8		MeMgCl	 #
III-9		MeMgCl	 #
III-10		MeLi	 #
III-11		MeMgBr	

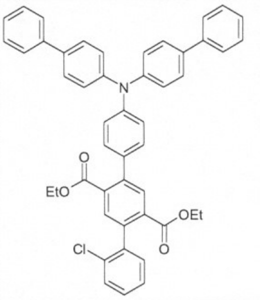
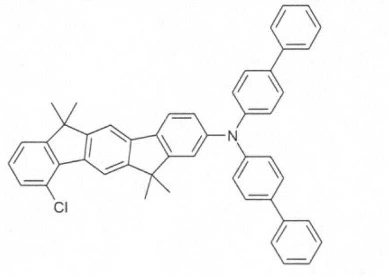
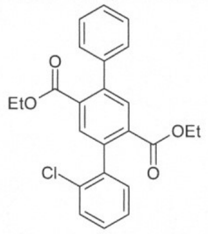
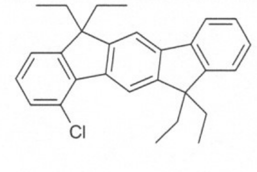
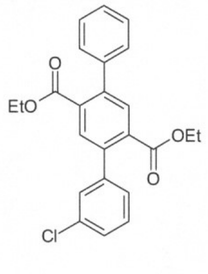
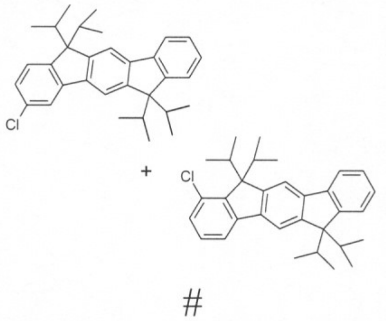
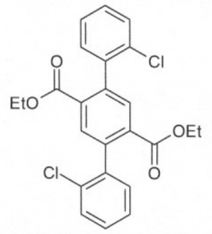
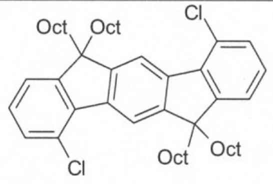
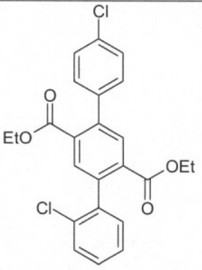
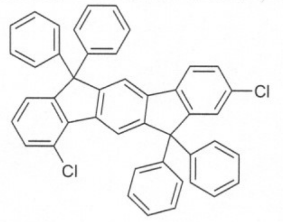
【０２６３】

【化２９－３】

III-12		MeMgCl	
III-13		MeMgCl	
III-14		MeMgCl	
III-15		MeMgCl	
III-16		MeMgBr	 #
III-17		MeLi	

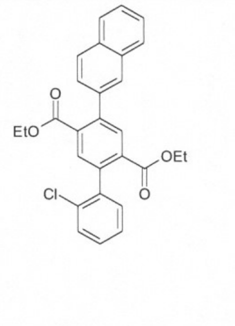
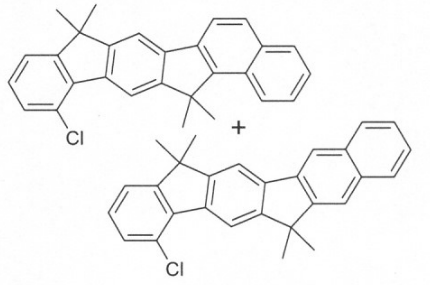
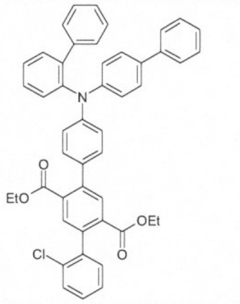
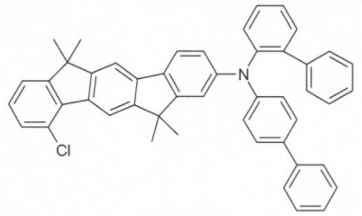
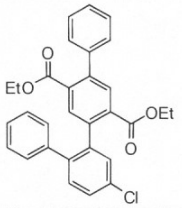
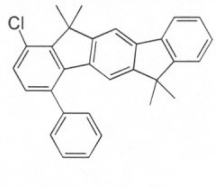
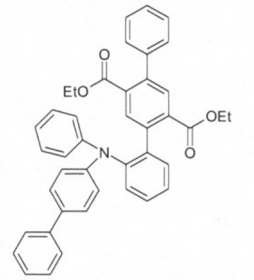
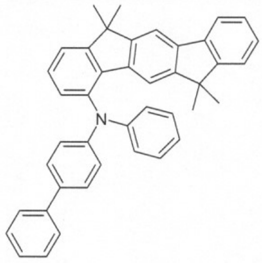
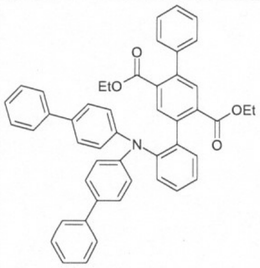
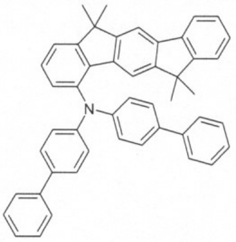
【０２６４】

【化２９－４】

III-18		MeMgCl	
III-19		EtMgBr	
III-20		i-PrMgBr	
III-21		i-OctMgBr	
III-22		PhLi	

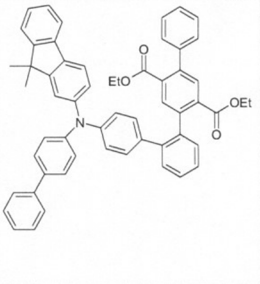
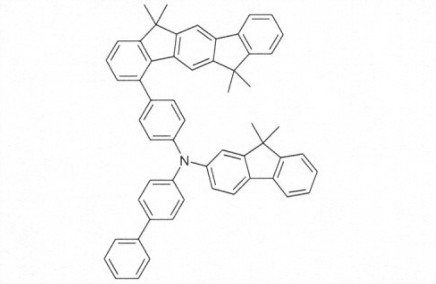
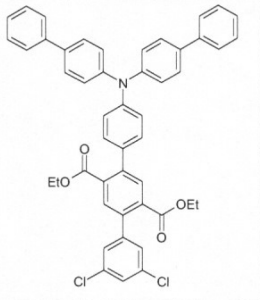
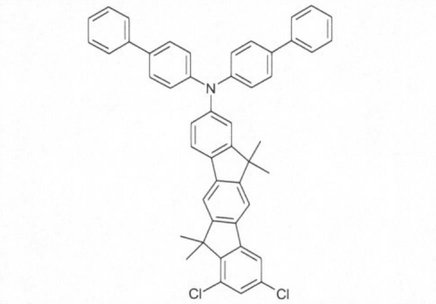
【０２６５】

【化２９－５】

III-23		MeMgBr	 #
III-24		MeMgBr	
III-25		MeMgCl	
1-33		MeMgBr	
1-34		MeMgBr	

【０２６６】

【化２９－６】

2-18		MeMgCl	
2-19		MeMgBr	

【０２６７】

＃：化合物は、クロマトグラフィーにより、または再結晶化によって分離することができる。

化合物１－１

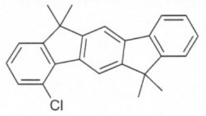
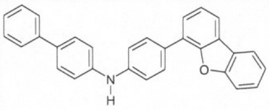
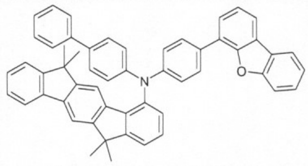
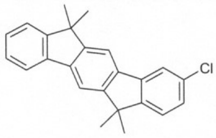
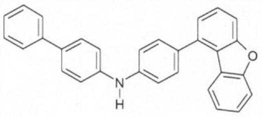
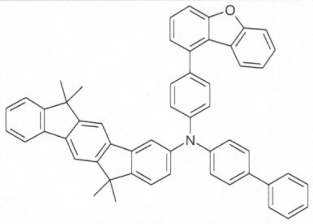
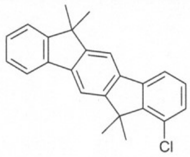
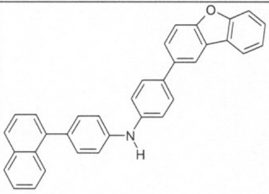
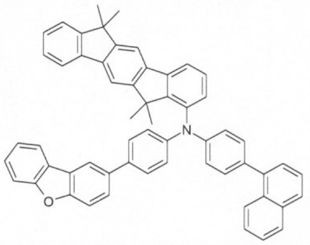
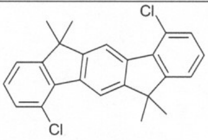
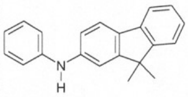
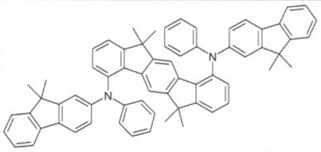
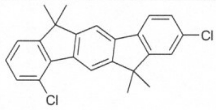
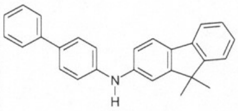
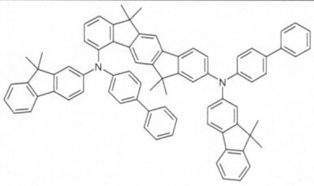
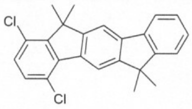
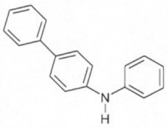
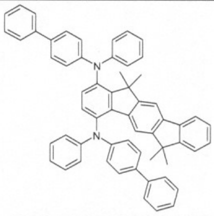
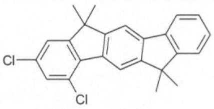
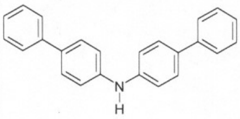
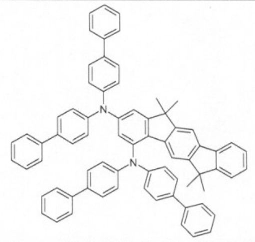
　１４．６ｇの４－ビフェニル（９，９－ジメチル－９Ｈ－フルオレン－２－イル）アミン（４０．６ｍｍｏｌ）と１４ｇの中間体ＩＩＩ－１（４０．６ｍｍｏｌ）を４００ｍｌのトルエンに溶解させる。溶液を脱気し、$Ｎ_2$で飽和させる。その後、これに０．３３ｇ（０．８１ｍｍｏｌ）のＳ－Ｐｈｏｓと０．４６ｇ（１．７５ｍｍｏｌ）の$Ｐｄ_2$（ｄｂａ）$_3$を添加し、次いで５．８５ｇのナトリウムｔｅｒｔ－ブトキシド（８０．９ｍｏｌ）を添加する。反応混合物を保護雰囲気下で６時間加熱して沸騰させる。続いて、混合物をトルエンと水との間で分画し、有機相を水で３回洗浄し、$Ｎａ_2ＳＯ_4$上で乾燥させ、回転蒸発により濃縮する。粗生成物をトルエンと共にシリカゲルを通してろ過した後、残った残留物をヘプタン／トルエンから再結晶させる。収率は、２０ｇ（理論値の７５％）である。最後に、この材料を高真空下で昇華させる。純度は９９．９％である。

【０２６８】

　同様に、下記の化合物を調製する（理論値の２０～８０％の収率）：

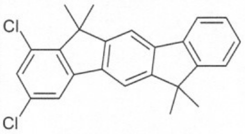
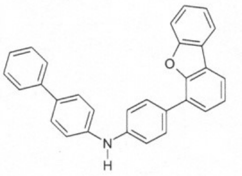
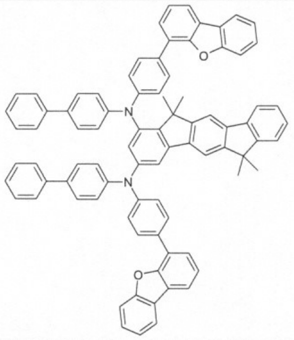
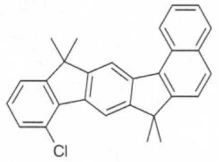
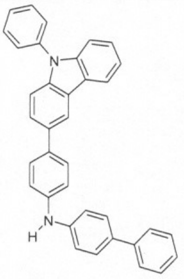
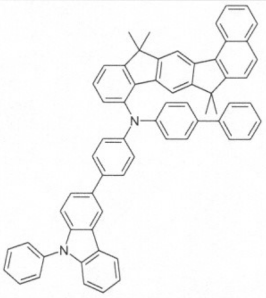
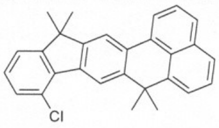
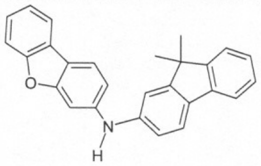
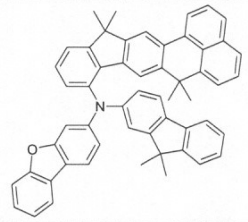
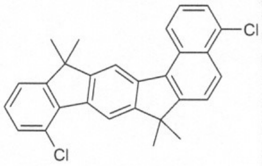
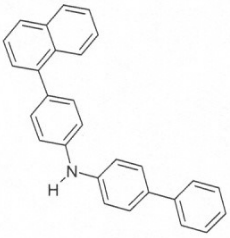
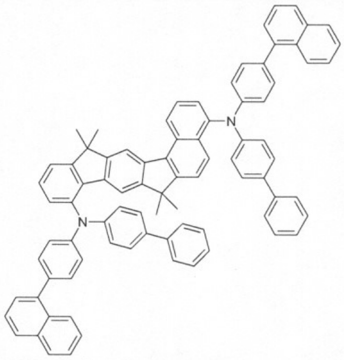
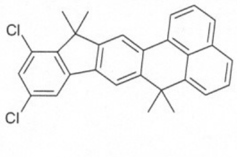
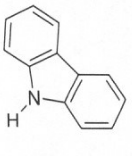
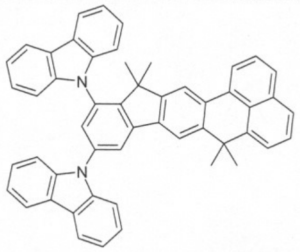
【０２６９】

【化３０－１】

	反応物質 1	反応物質 2	生成物
1-2			
1-3			
1-4			
1-5		2 eq. 	
1-6		2 eq. 	
1-7		2 eq. 	
1-8		2 eq. 	

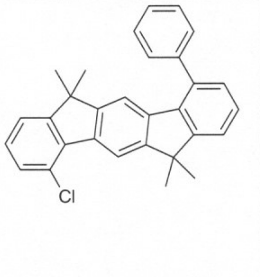
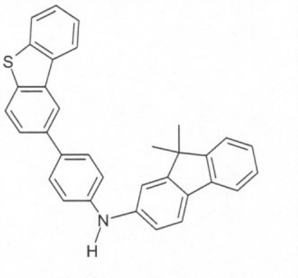
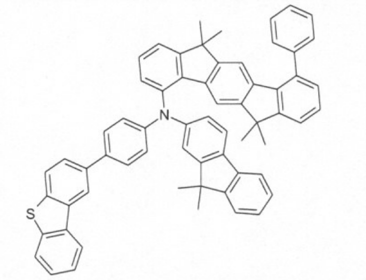
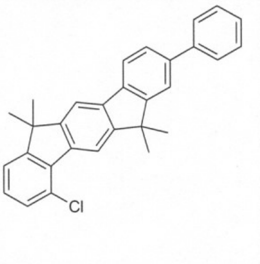
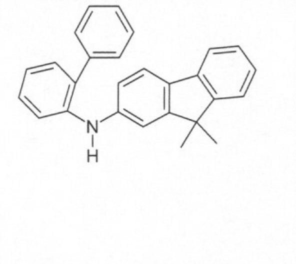
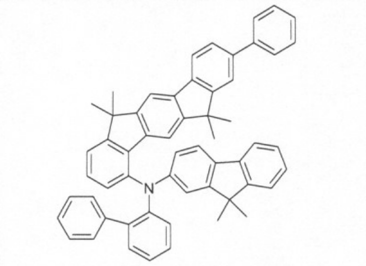
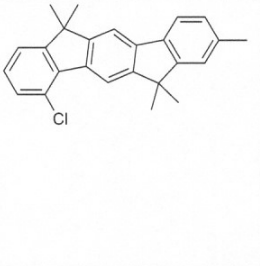
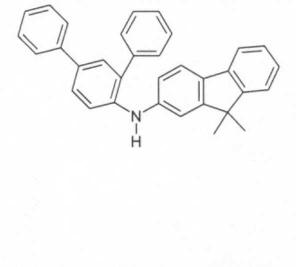
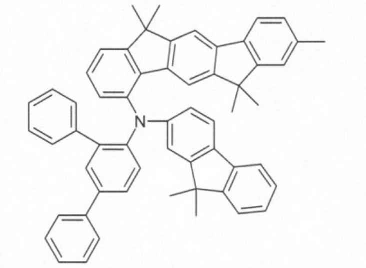
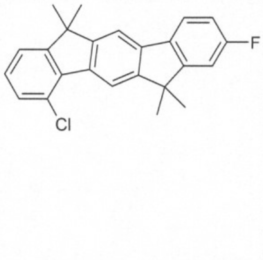
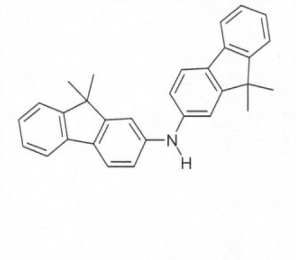
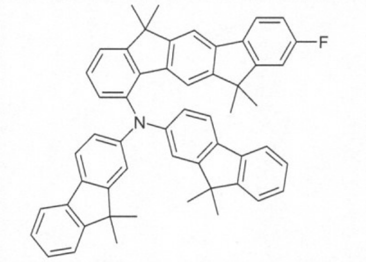
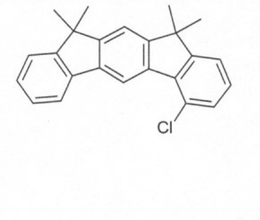
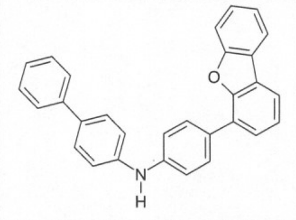
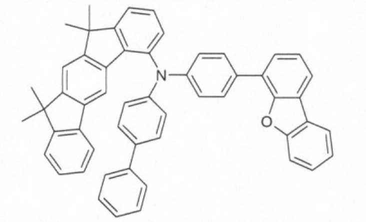
【０２７０】

【化３０－２】

1-9		2 eq. 	
1-10			
1-11			
1-12		2 eq. 	
1-13		2 eq. 	

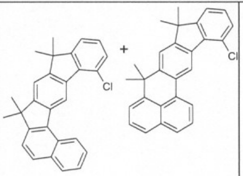
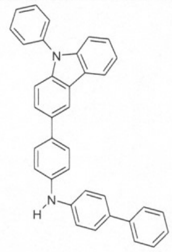
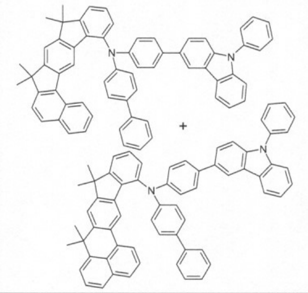
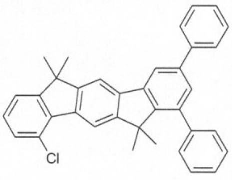
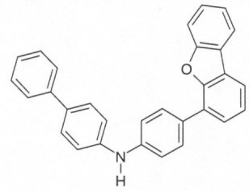
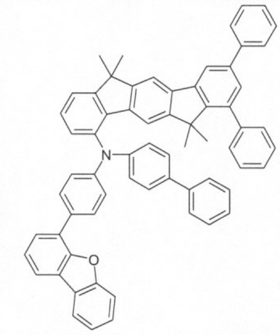
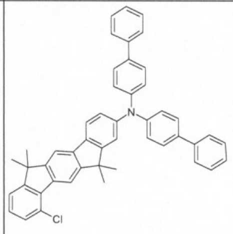
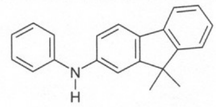
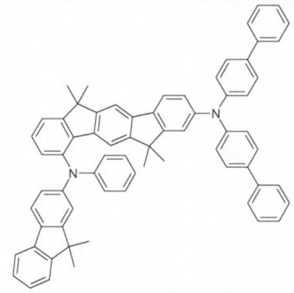
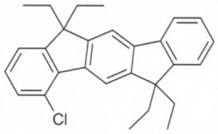
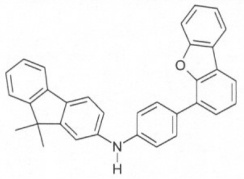
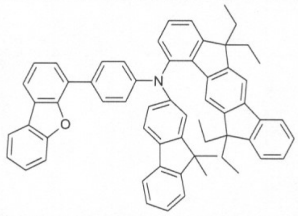
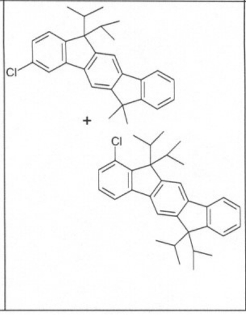
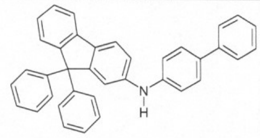
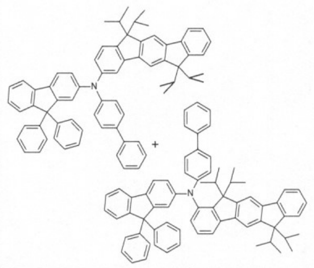
【０２７１】

【化３０－３】

1-14			
1-15			
1-16			
1-17			
1-18			

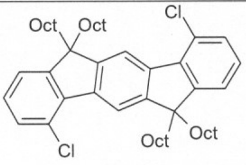
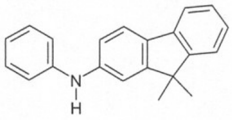
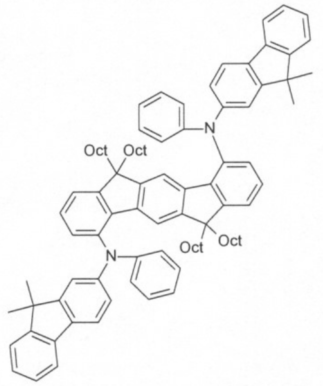
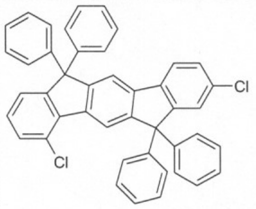
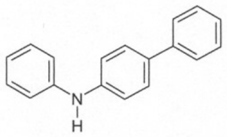
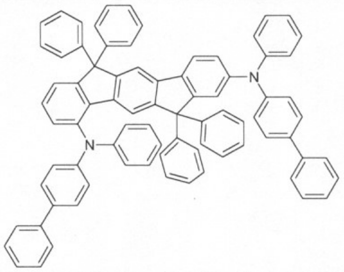
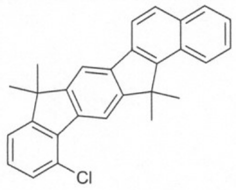
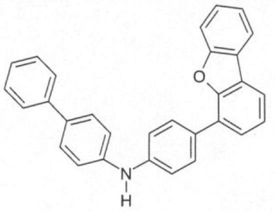
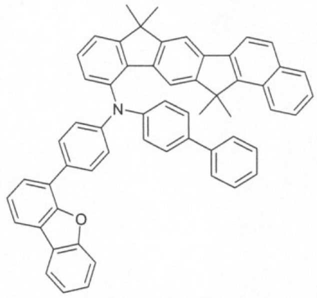
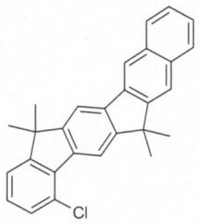
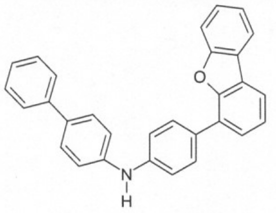
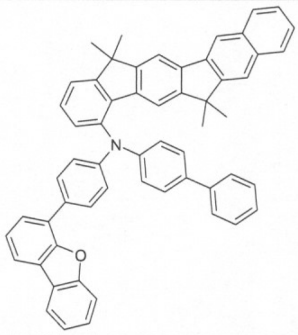
【０２７２】

【化３０－４】

1-19			# 
1-20			
1-21			
1-22			
1-23			# 

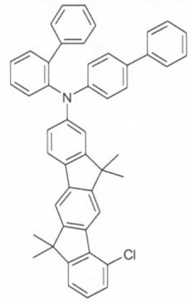
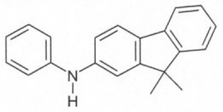
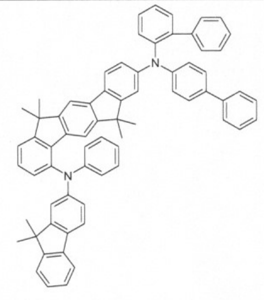
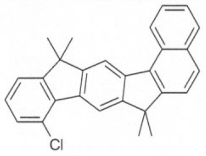
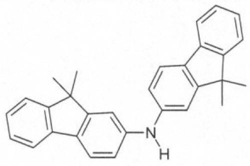
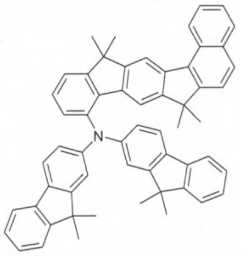
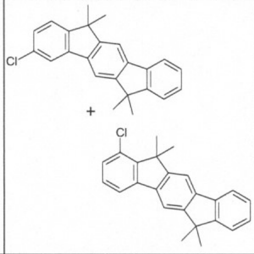
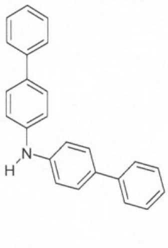
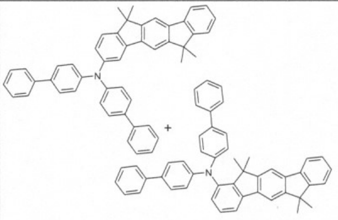
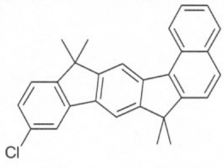
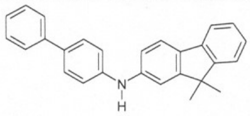
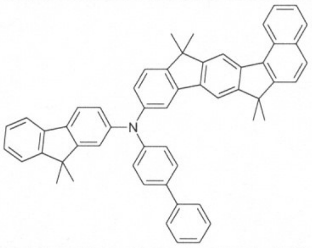
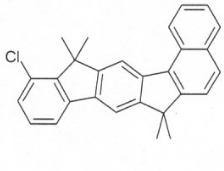
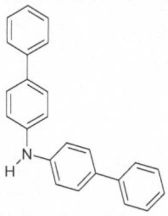
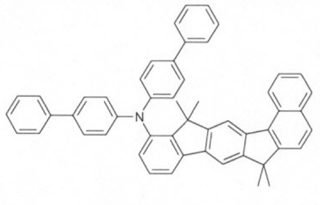
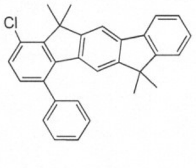
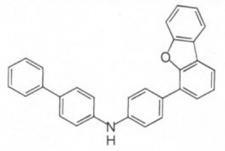
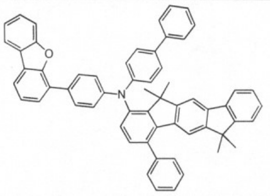
【０２７３】

【化３０－５】

1-24		2 eq. 	
1-25		2 eq. 	
1-26			
1-27			

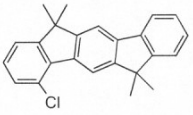
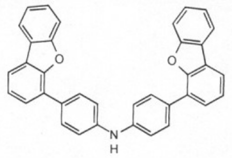
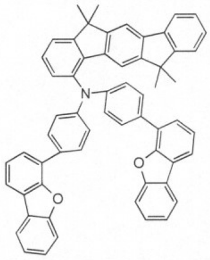
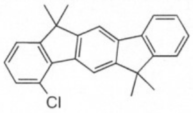
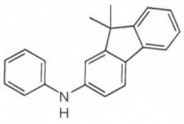
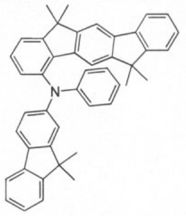
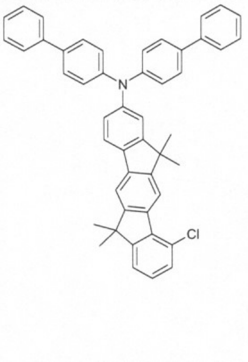
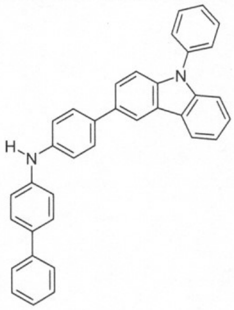
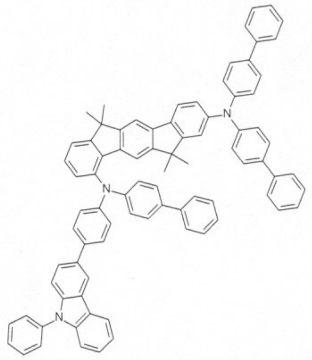
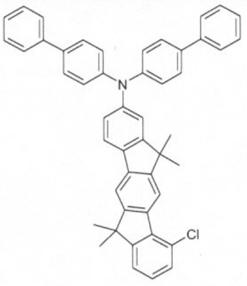
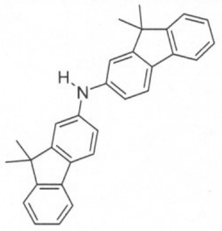
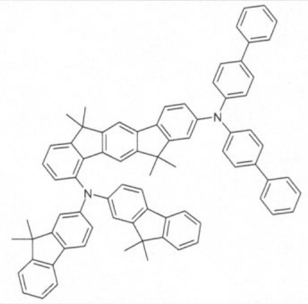
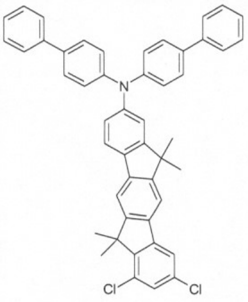
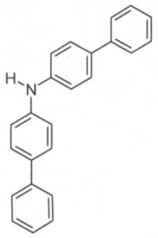
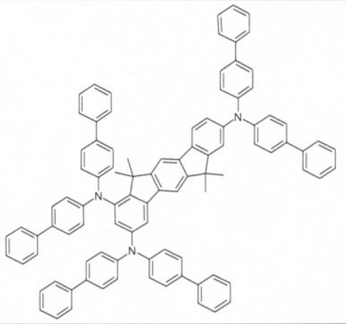
【０２７４】

【化３０－６】

1-28			
1-29			
1-30			 #
1-31			
1-32			
1-35			

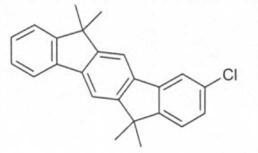
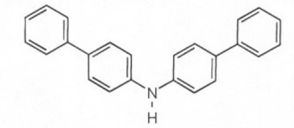
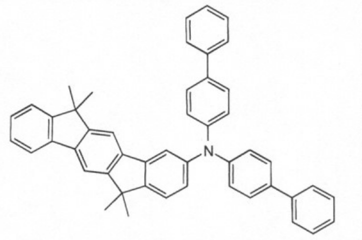
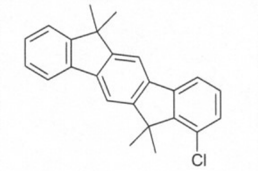
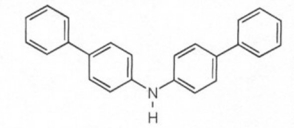
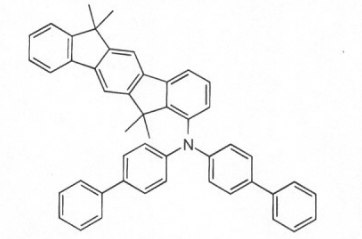
【０２７５】

【化３０－７】

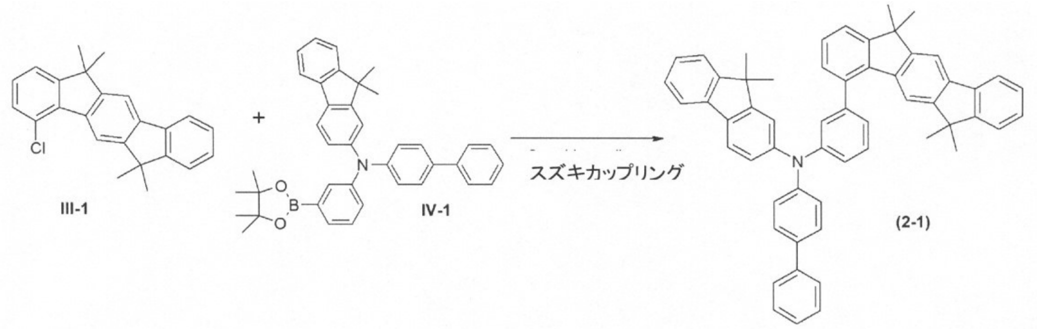
1-36			
1-37			
1-38			
1-39			
1-40			

【０２７６】

【化３０－８】

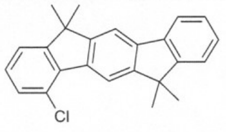
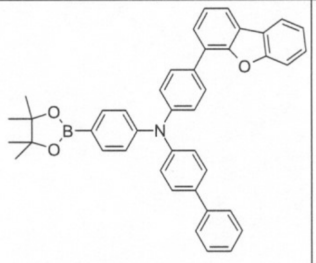
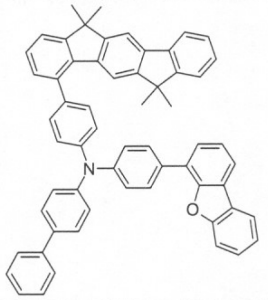
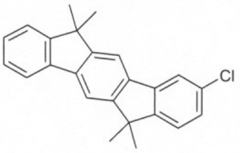
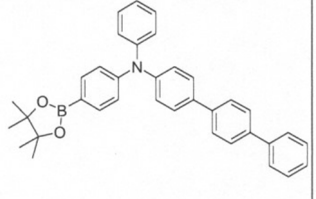
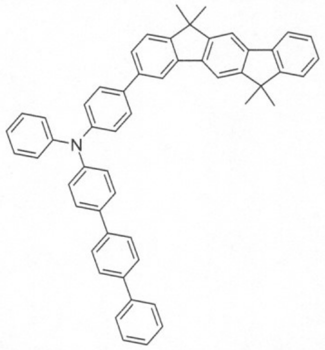
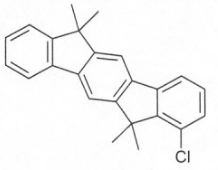
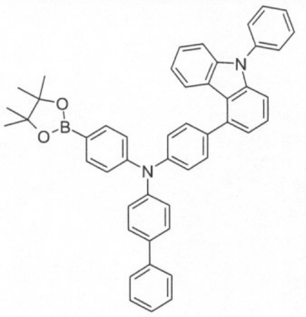
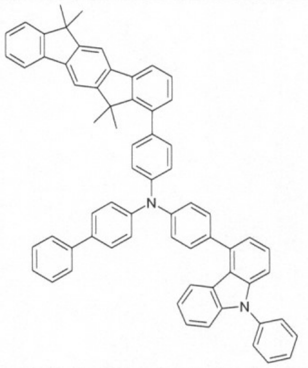
1-41			
1-42			

【０２７７】
＃：化合物は、クロマトグラフィーにより、または再結晶化によって分離することができる。
【０２７８】
例２－１：
本発明の化合物２－１およびバリアントの合成
【０２７９】
【化３１】



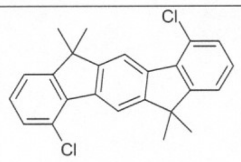
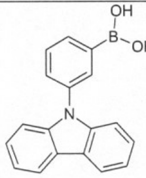
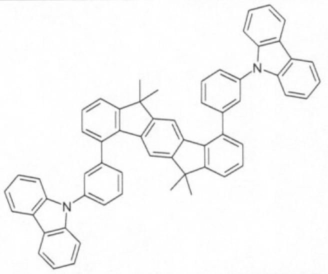
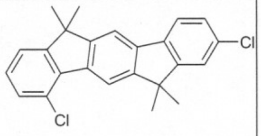
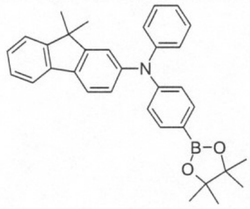
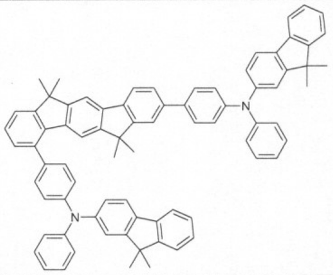
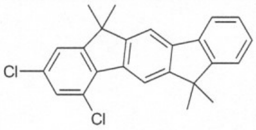
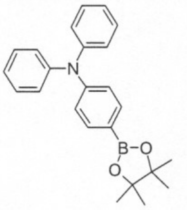
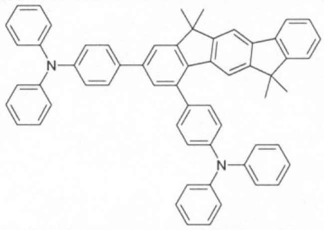
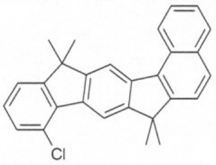
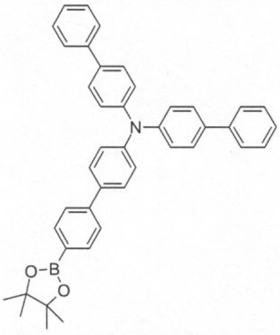
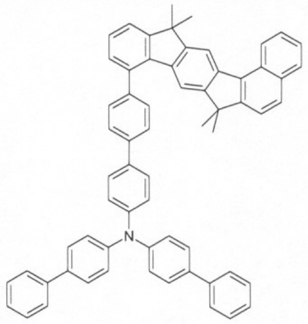
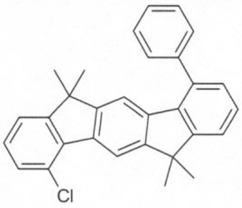
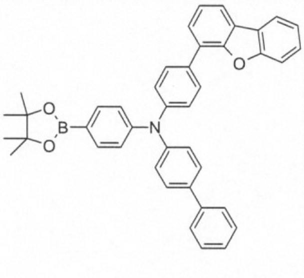
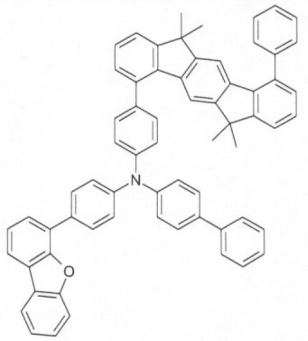
【０２８０】
化合物２－１
１９．６ｇ（３４．８ｍｍｏｌ）のピナコールボロン酸エステル誘導体（ＣＡＳ番号：１６１６６３２－７３－５）と１２．０５ｇ（４５ｍｍｏｌ）の中間体ＩＩＩ－１を３５０ｍｌのジオキサンと１０．６ｇのフッ化セシウム（６９．９ｍｍｏｌ）に懸濁させる。この懸濁液に１．０２ｇ（１．３９ｍｍｏｌ）のビス（トリシクロヘキシルホスフィン）パラジウムジクロリドを添加し、反応混合物を還流下１８時間加熱する。冷却後、有機相を取り出し、シリカゲルを通してろ過し、８０ｍｌの水で３回洗浄し、次いで乾燥するまで濃縮する。粗生成物をトルエンと共にシリカゲル通してろ過した後、残った残留物をヘプタン／トルエンから再結晶させる。収率は、２０ｇ（理論値の７８％）である。最後に、この材料を高真空下で昇華させる。純度は９９．９％である。
【０２８１】
同様に、下記の化合物を調製する（理論値の６０～８５％の収率）：
【０２８２】

【化３２－１】

	反応物質２	反応物質２	生成物
2-2			
2-3			
2-4			

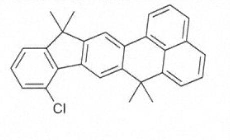
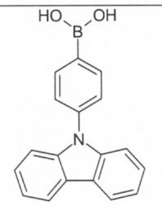
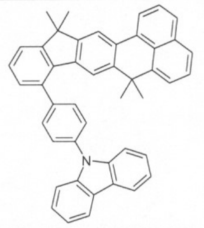
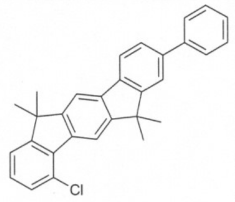
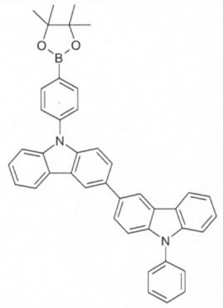
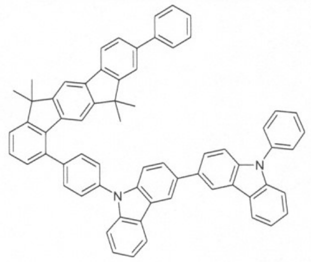
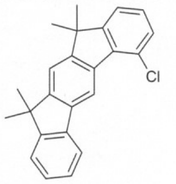
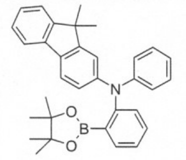
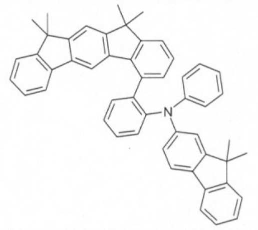
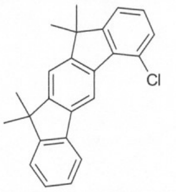
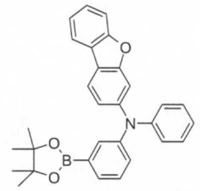
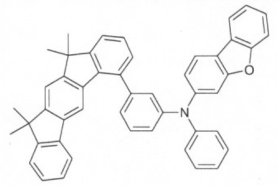
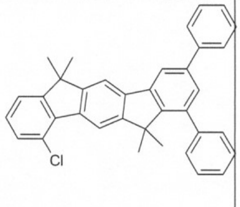
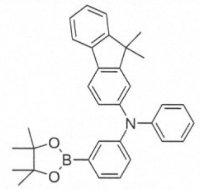
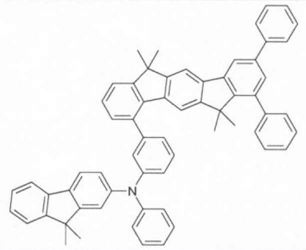
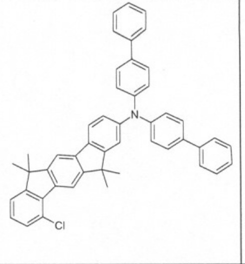
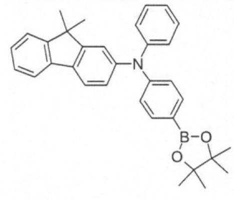
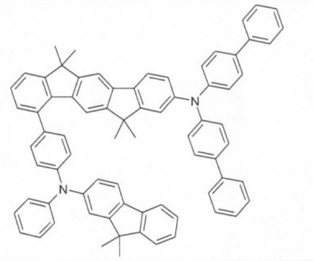
【０２８３】

【化３２－２】

2-5			
2-6			
2-7			
2-8			
2-9			

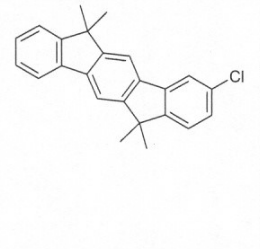
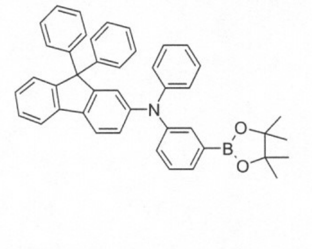
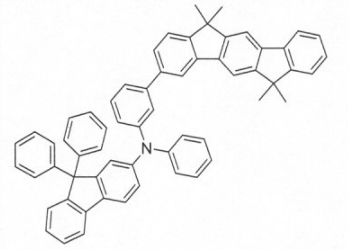
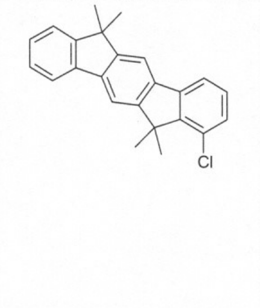
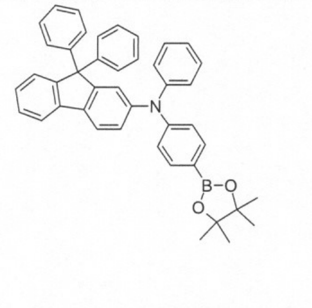
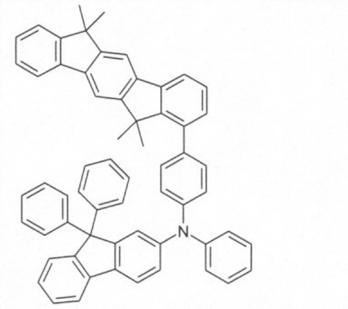
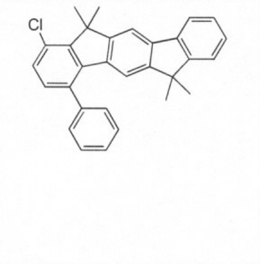
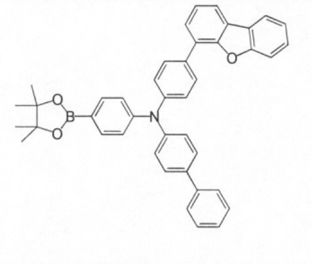
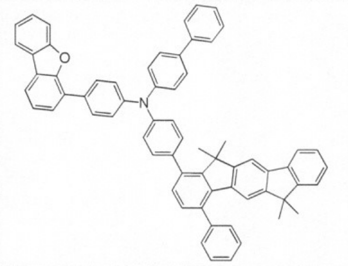
【０２８４】

【化３２－３】

2-10			
2-11			
2-12			
2-13			
2-14			
2-15			

【０２８５】

【化３２－４】

2-16			
2-17			
2-19			

【０２８６】
Ｂ）デバイス例
　例示的ＯＬＥＤを、下記の一般的方法に従い製造する：
　使用した基板は、構造化されたＩＴＯ（インジウムスズ酸化物）の厚さ５０ｎｍの層でコーティングされたガラスプラークである。これに下記の層構造が付与される：正孔注入層（ＨＩＬ）／正孔輸送層（ＨＴＬ）／電子阻止層（ＥＢＬ）／発光層（ＥＭＬ）／電子輸送層（ＥＴＬ）／電子注入層（ＥＩＬ）／カソード。カソードは、厚さ１００ｎｍのアルミニウム層からなる。例示的ＯＬＥＤの対応する層に使用される材料を表１に示し、これらの材料の化学構造を表３に挙げる。
【０２８７】
　材料は、真空チャンバにおいて熱気相堆積によって付与される。ここでの発光層は常に、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（複数可）に添加される発光ドーパント（発光体）からなる。ＴＭＭ：ＴＥＧ（１２％）という表現は、ここでは層中にＴＭＭ材料が８８％の体積割合で存在し、ＴＥＧ材料が１２％の体積割合で存在することを意味する。同じことが、発光層以外の層にも当てはまる。これらは同様に、これに対応して２種以上の材料を含有してもよい。
【０２８８】
　ＯＬＥＤは、標準的な方法により特徴決定される。この目的のため、エレクトロルミネッセンススペクトル、および電流－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、％単位で測定）を判定する。これは、ランバート発光特性を仮定して行われる。加えて、作動電圧を判定する（Ｕ、Ｖ単位）。
【０２８９】
　ＥＱＥ＠１０ｍＡ／ｃｍ^{2}は、１０ｍＡ／ｃｍ^{2}の作動電流密度での外部量子効率である。ＬＴ８０＠４０ｍＡ／ｃｍ^{2}は、ＯＬＥＤの５０００ｃｄ／ｍ^{2}の初期輝度が加速因子を何ら考慮に入れずにこの輝度の８０％、即ち４０００ｃｄ／ｍ^{2}に低下するまでの時間である。

Ｂ－１）緑色蛍光ＯＬＥＤにおける本発明の化合物の使用
　ＯＬＥＤ例Ｅ－０～Ｅ－１７は、表１に示す層構造を有し、各場合において本発明の化合物ＥＢＬ－０～ＥＢＬ－１７（表３）の１種がＥＢＬに存在する。
【０２９０】
　全ての場合において、本発明のＯＬＥＤは、作動電圧、寿命およびＥＱＥに関して良好な結果を達成する（表２）。
【０２９１】
【表１】

表 1: デバイス構成

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
E-0	HTM:p-ドーパント (5%) 20 nm	HTM 220 nm	EBL-0 10 nm	TMM-1:TMM-2 (28%): TEG (12%) 30 nm	ETM:LiQ(50%) 30 nm	LiQ 1 nm
E-1	"	"	EBL-1 10 nm	"	"	"
E-2	"	"	EBL-2 10 nm	"	"	"
E-3	"	"	EBL-3 10 nm	"	"	"
E-4	"	"	EBL-4 10 nm	"	"	"
E-5	"	"	EBL-5 10 nm	"	"	"
E-6	"	"	EBL-6 10 nm	"	"	"
E-7	"	"	EBL-7 10 nm	"	"	"
E-8	"	"	EBL-8 10 nm	"	"	"
E-9	"	"	EBL-9 10 nm	"	"	"
E-10	"	"	EBL-10 10 nm	"	"	"
E-15	"	"	EBL-15 10 nm	"	"	"
E-16	"	"	EBL-16 10 nm	"	"	"
E-17	"	"	EBL-17 10 nm	"	"	"

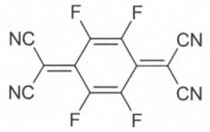
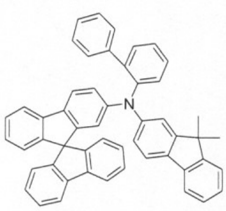
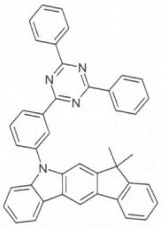
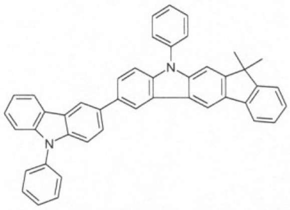
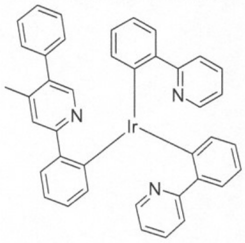
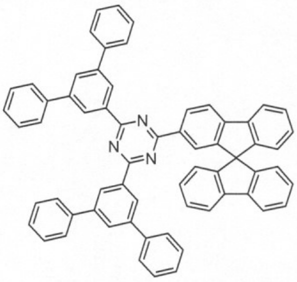
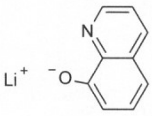
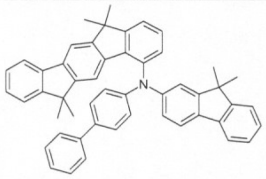
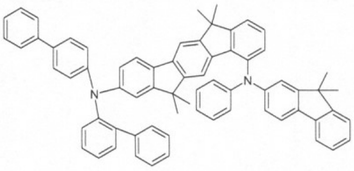
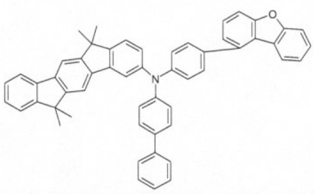
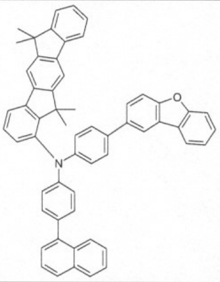
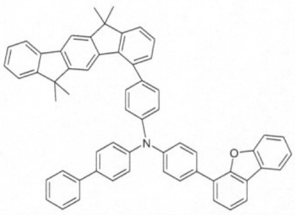
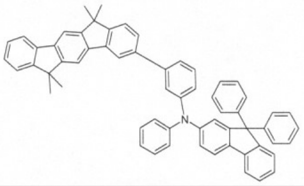
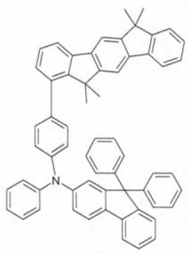
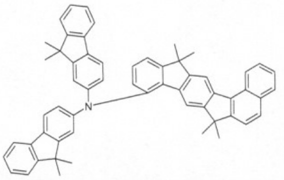
【０２９２】

【表２】

表 2: OLED のデータ			
例	U	EQE @ 10 mA/cm^2	LT80 @ 40 mA/cm^2
	[V]	[%]	[h]
E-0	3.9	>16.5	>250
E-1	3.7	>16.0	>300
E-2	4.1	>17.0	>300
E-3	4.1	>18.0	>200
E-4	4.1	>16.0	>250
E-5	4.0	>16.5	>200
E-6	4.0	>17.0	>250
E-7	3.9	>15.5	>250
E-8	3.8	>15.0	>250
E-9	4.1	>15.5	>300
E-10	4.0	>17.0	>250
E-15	4.2	>16.0	>350
E-16	4.1	>16.0	>250
E-17	4.1	>14.0	>300

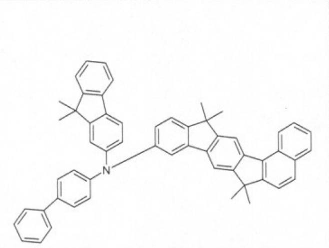
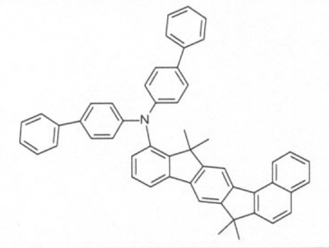
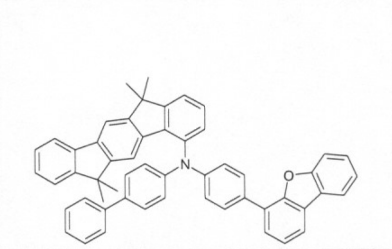
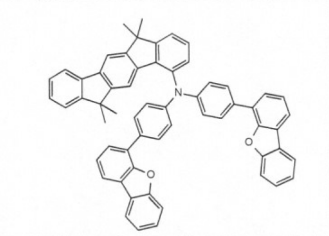
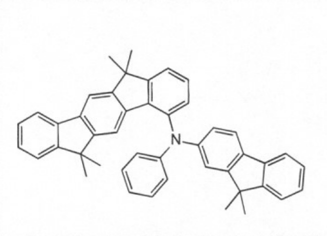
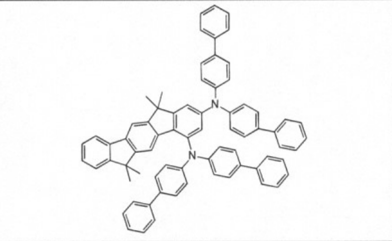
【０２９３】

【表３－１】

表 3: 使用した材料		
		
p-ドーパント	HTM	TMM-1
		
TMM-2	TEG	ETM
		
LiQ	EBL-0	EBL-1
		
EBL-2	EBL-3	EBL-4
		
EBL-5	EBL-6	EBL-7

【０２９４】

【表３－２】

		
EBL-8	EBL-9	EBL-10
		
EBL-15	EBL-16	EBL-17

【０２９５】

Ｂ－２）本発明の化合物ＥＢＬ－１２、ＥＢＬ－１３およびＥＢＬ－１４と先行技術による化合物ＥＢＬ－１１との比較

　ＯＬＥＤ例Ｅ－１２、Ｅ－１３およびＥ－１４はそれぞれ、本発明の化合物ＥＢＬ－１２、ＥＢＬ－１３およびＥＢＬ－１４のうちの１種を電子阻止層に含有する。比較例ＯＬＥＤ　Ｅ－１１は、化合物ＥＢＬ－１１を電子阻止層に含有する。ＥＱＥに関し、ＯＬＥＤ　Ｅ－１２、Ｅ－１３およびＥ－１４では、比較用ＯＬＥＤ　Ｅ１１よりも高い値が認められる。より詳細には、どちらの場合も４．１Ｖの電圧で、本発明のＯＬＥＤ　Ｅ－１４の場合、１６％を超えるＥＱＥ＠１０ｍＡ／ｃｍ^{2}が得られたが、比較例Ｅ－１１の場合、１５％未満のＥＱＥ＠１０ｍＡ／ｃｍ^{2}が得られた。

【０２９６】

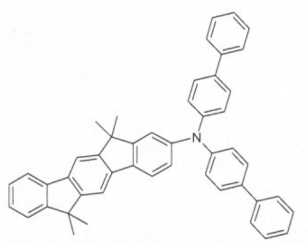
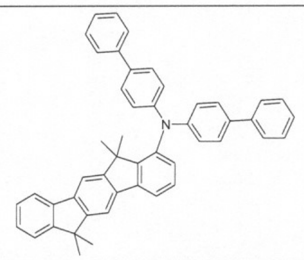
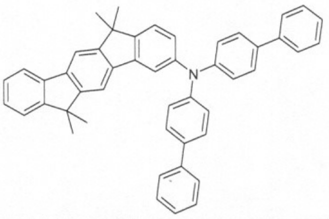
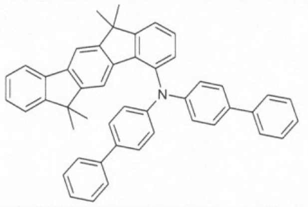
【表４】

表1b: デバイス構成

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
E-11 (比較)	HTM:p-ドーパント (5%) 20 nm	HTM 220 nm	EBL-11 10 nm	TMM-1:TMM-2 (28%): TEG (12%) 30 nm	ETM:LiQ(50%) 30 nm	LiQ 1 nm
E-12	"	"	EBL-12 10 nm	"	"	"
E-13	"	"	EBL-13 10 nm	"	"	"
E-14	"	"	EBL-14 10 nm	"	"	"

【０２９７】

【表５】

表 3b: 使用した材料		
		
EBL-11	EBL-12	EBL-13
		
EBL-14		

【０２９８】

Ｂ－３）青色蛍光ＯＬＥＤにおける本発明の化合物の使用

　ＯＬＥＤ例Ｅ－１９およびＥ－２０は、表１ｃに示す層構造を有し、各場合において本発明の化合物ＥＢＬ－１５またはＥＢＬ－１６（表３ｃ参照）の一方がＥＢＬに存在する。

【０２９９】

　全ての場合において、本発明のＯＬＥＤは、作動電圧、寿命およびＥＱＥに関して良好な結果を達成する（表２ｃ）。

【０３００】

【表６】

表 1c: デバイス構成

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
E-19	HTM:p-ドーパント (5%) 20 nm	HTM 180 nm	EBL-15 10 nm	SMB-1:SEB-1 (5%) 20 nm	ETM:LiQ(50%) 30 nm	LiQ 1 nm
E-20	"	"	EBL-16 10 nm	"	"	"

【０３０１】

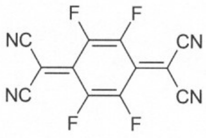
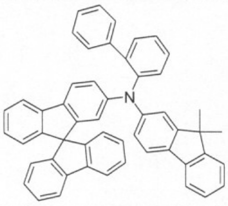
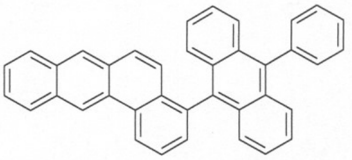
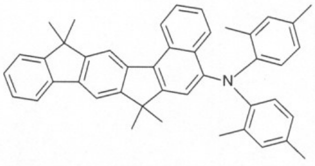
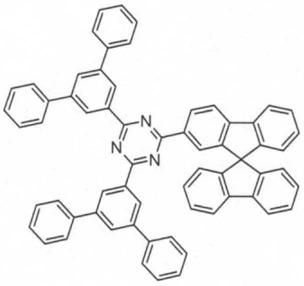
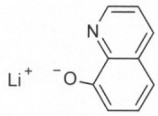
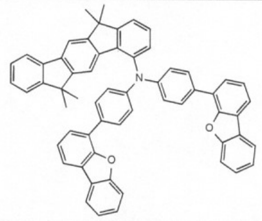
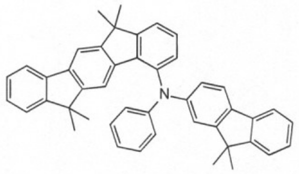
【表７】

表 2c: OLED のデータ

例	U	EQE @ 10 mA/cm^2	LT80 @ 60 mA/cm^2
	[V]	[%]	[h]
E-19	4.0	約 8.5	約 350
E-20	4.0	約 8.5	約 350

【０３０２】

【表８】

表 3c: 使用した材料		
		
p-ドーパント	HTM	SMB-1
		
SEB-1	ETM	LiQ
		
EBL-15	EBL-16	

フロントページの続き

(51)国際特許分類　　　　　ＦＩ

C07D 407/14 (2006.01)	ＣＯ７Ｄ 407/14
C07D 209/82 (2006.01)	ＣＯ７Ｄ 209/82
C07D 221/20 (2006.01)	ＣＯ７Ｄ 221/20
C07D 221/18 (2006.01)	ＣＯ７Ｄ 221/18

(74)代理人　100219542
弁理士　大宅 郁治
(74)代理人　100153051
弁理士　河野 直樹
(74)代理人　100162570
弁理士　金子 早苗
(72)発明者　モンテネグロ、エルビラ
ドイツ連邦共和国、６９４６９ バインハイム、ホラツベーク ５
(72)発明者　ムジカーフェルナウド、テレサ
ドイツ連邦共和国、６４２８３ ダルムシュタット、ハインリッヒシュトラーセ １１９
(72)発明者　マイヤーーフライク、フロリアン
ドイツ連邦共和国、６９４６９ バインハイム、フリードリヒシュトラーセ １５
(72)発明者　フォゲス、フランク
ドイツ連邦共和国、６７０９８ バート・デュルクハイム、バイトプラッツ ２
審査官　安藤 倫世

(56)参考文献　特表２０２０－５３３３２５（ＪＰ，Ａ）
国際公開第２０１７／１０２０６４（WO，Ａ１）
国際公開第２００９／１４８０６２（WO，Ａ１）
欧州特許出願公開第０３０１００６７（ＥＰ，Ａ１）
韓国公開特許第１０－２０１４－０１３４８８４（ＫＲ，Ａ）
韓国公開特許第１０－２０１５－０１１４６３６（ＫＲ，Ａ）
特開２０１７－０３９６９３（ＪＰ，Ａ）
国際公開第２０１５／０１２６１８（WO，Ａ１）
特表２０１６－５１６００６（ＪＰ，Ａ）
国際公開第２０１４／１７１７７９（WO，Ａ１）
特開２０１６－１５５７９７（ＪＰ，Ａ）
韓国公開特許第１０－２０１２－０１１６８８１（ＫＲ，Ａ）
特開２０１６－１５３３９４（ＪＰ，Ａ）
米国特許出願公開第２０１６／０２１１４５６（ＵＳ，Ａ１）
特開２０１４－０５１４４８（ＪＰ，Ａ）
特開２０１３－２５１４８０（ＪＰ，Ａ）
特表２００８－５４５６３０（ＪＰ，Ａ）
特表２０１３－５１９７４０（ＪＰ，Ａ）
国際公開第２０１７／０３６５７３（WO，Ａ１）
特表２００９－５４２７３５（ＪＰ，Ａ）
特開２０１２－０２８５４８（ＪＰ，Ａ）
韓国公開特許第１０－２０１７－００４１６４６（ＫＲ，Ａ）
欧州特許出願公開第０３１３０５９１（ＥＰ，Ａ１）
Huang, Chuyi et al，Dopant-Free Hole-Transporting Material with a C3h Symmetrical Truxene Core for Highly Efficient Perovskite Solar Cells，Journal of the American Chemical Society，2016年，138(8),，2528-2531
Lai, Wen-Yong et al，Synthesis and characterization of 2,3,7,8,12,13-hexabromotruxene and its hexaaryl derivatives，Chemistry Letters，2009年，38(3),，286-287
Lin, Wei-Bin et al，Synthesis, Structures, Resolution, and Chiroptical Properties of 1,16-Dia

ryl-Substituted Benzo[5]helicene Derivatives，Chemistry - An Asian Journal ，2017年，12(1),，86-94

Yasuhiro Shirota, Hiroyuki Kageyama ，Charge Carrier Transpoting Molecular Materials and Their Applications in Devices，Chemical Reviews，2007年，107,，953-1010

(58)調査した分野 (Int.Cl.，ＤＢ名)

Ｃ０７Ｃ
Ｃ０７Ｄ
Ｈ１０Ｋ
ＣＡｐｌｕｓ／ＲＥＧＩＳＴＲＹ（ＳＴＮ）