

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特 許 公 報(B2)

(11) 特許番号

特許第5844282号
(P5844282)

(45) 発行日 平成28年1月13日(2016.1.13)

(24) 登録日 平成27年11月27日(2015.11.27)

(51) Int. Cl.	F I
CO7D 471/06 (2006.01)	CO7D 471/06 C S P
CO7D 487/06 (2006.01)	CO7D 487/06
CO7D 519/00 (2006.01)	CO7D 519/00 3 1 1
CO7D 471/16 (2006.01)	CO7D 471/16
HO1L 51/50 (2006.01)	HO5B 33/22 D

請求項の数 9 (全 118 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号	特願2012-550325 (P2012-550325)	(73) 特許権者	597035528
(86) (22) 出願日	平成22年12月17日(2010.12.17)		メルク パテント ゲーエムベーハー
(65) 公表番号	特表2013-518068 (P2013-518068A)		ドイツ国, D-64293 ダルムスタット
(43) 公表日	平成25年5月20日(2013.5.20)		ド フランクフルター ストラッセ 25
(86) 国際出願番号	PCT/EP2010/007740		O
(87) 国際公開番号	W02011/088877	(74) 代理人	100108855
(87) 国際公開日	平成23年7月28日(2011.7.28)		弁理士 蔵田 昌俊
審査請求日	平成25年12月16日(2013.12.16)	(74) 代理人	100103034
(31) 優先権主張番号	102010005697.9		弁理士 野河 信久
(32) 優先日	平成22年1月25日(2010.1.25)	(74) 代理人	100075672
(33) 優先権主張国	ドイツ(DE)		弁理士 峰 隆司
前置審査		(74) 代理人	100153051
			弁理士 河野 直樹
		(74) 代理人	100140176
			弁理士 砂川 克

最終頁に続く

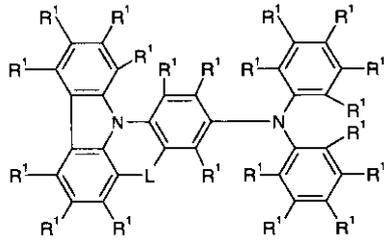
(54) 【発明の名称】 電子デバイス用化合物

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

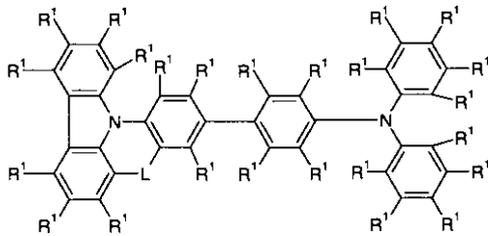
以下の式(1-2)、(1-17)、(1-41)、(1-43)の内の一つの化合物：

【化1】



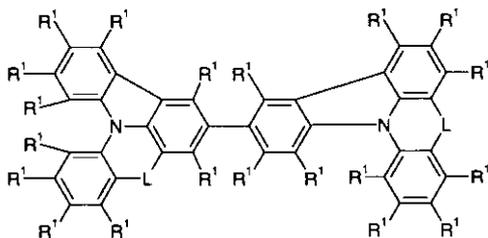
式 (I-2)

10



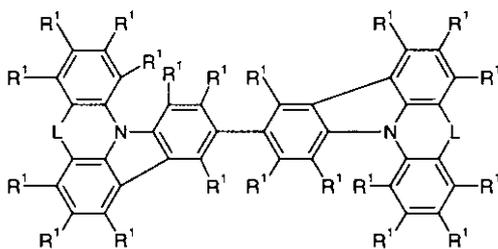
式 (I-17)

20



式 (I-41)

30



式 (I-43)

式中、

Lは、出現するごとに同一または異なり、 $C(R^2)_2$ および NR^2 から選択され；

R^1 は、出現するごとに同一または異なり、H、D、F、Cl、Br、I、CHO、 $C(=O)R^3$ 、 $P(=O)(R^3)_2$ 、 $S(=O)R^3$ 、 $S(=O)_2R^3$ 、 $CR^3=C(R^3)_2$ 、CN、 NO_2 、 $Si(R^3)_3$ 、 $B(OR^3)_2$ 、 OSO_2R^3 、OH、1~40個のC原子を有する直鎖のアルキル基、アルコキシ基もしくはチオアルキル基、または3~40個のC原子を有する分岐もしくは環状のアルキル基、アルコキシ基もしくはチオアルキル基、または2~40個のC原子を有するアルケニル基もしくはアルキニル基（これらの各々は1以上の基 R^3 によって置換されていてもよい）（ここで、1つ以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^3C=CR^3$ 、 $C-C$ 、 $Si(R^3)_2$ 、 $Ge(R^3)_2$ 、 $Sn(R^3)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^3$ 、 $P(=O)(R^3)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^3 、O、Sまたは $CONR^3$ によって置きかえられていてもよく、1つ以上の

40

50

H原子は、D、F、Cl、Br、I、CN、またはNO₂によって置きかえられていてもよい)、または5~60個の芳香環原子を有する単環もしくは多環の芳香族環系(これは各々の場合において1つ以上の非芳香族基R³によって置換されていてもよい)、または5~60個の芳香環原子を有するアリーロキシ基もしくはヘテロアリーロキシ基(これは1つ以上の非芳香族基R³によって置換されていてもよい)、またはこれらの系の組合せであり;

R²は、出現するごとに同一または異なり、H、D、F、Cl、Br、I、CHO、N(R³)₂、C(=O)R³、P(=O)(R³)₂、S(=O)R³、S(=O)₂R³、CR³=C(R³)₂、CN、NO₂、Si(R³)₃、B(OR³)₂、OSO₂R³、OH、1~40個のC原子を有する直鎖のアルキル基、アルコキシ基もしくはチオアルキル基、または3~40個のC原子を有する分岐もしくは環状のアルキル基、アルコキシ基もしくはチオアルキル基、または2~40個のC原子を有するアルケニル基もしくはアルキニル基(これらの各々は1以上の基R³によって置換されていてもよい)(ここで、1つ以上の隣接しないCH₂基は、R³C=CR³、C=C、Si(R³)₂、Ge(R³)₂、Sn(R³)₂、C=O、C=S、C=Se、C=NR³、P(=O)(R³)、SO、SO₂、NR³、O、SまたはCONR³によって置きかえられていてもよく、1つ以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、CN、またはNO₂によって置きかえられていてもよい)、または5~60個の芳香環原子を有する単環もしくは多環の芳香族環系もしくはヘテロ芳香族環系(これは各々の場合において1つ以上の非芳香族基R³によって置換されていてもよい)、または5~60個の芳香環原子を有するアリーロキシ基もしくはヘテロアリーロキシ基(これは1つ以上の非芳香族基R³によって置換されていてもよい)、またはこれらの系の組合せであり、ここで、2つ以上の基R²は、互いに連結していてもよく、単環または多環の脂肪族環系または芳香族環系を形成していてもよく;

R³は、出現するごとに同一または異なり、H、D、F、Cl、Br、I、CHO、N(R⁴)₂、C(=O)R⁴、P(=O)(R⁴)₂、S(=O)R⁴、S(=O)₂R⁴、CR⁴=C(R⁴)₂、CN、NO₂、Si(R⁴)₃、B(OR⁴)₂、OSO₂R⁴、OH、1~40個のC原子を有する直鎖のアルキル基、アルコキシ基もしくはチオアルキル基、または3~40個のC原子を有する分岐もしくは環状のアルキル基、アルコキシ基もしくはチオアルキル基、または2~40個のC原子を有するアルケニル基もしくはアルキニル基(これらの各々は、1つ以上の基R⁴によって置換されていてもよい)(ここで、1つ以上の隣接しないCH₂基は、R⁴C=CR⁴、C=C、Si(R⁴)₂、Ge(R⁴)₂、Sn(R⁴)₂、C=O、C=S、C=Se、C=NR⁴、P(=O)(R⁴)、SO、SO₂、NR⁴、O、SまたはCONR⁴によって置きかえられていてもよく、1つ以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、CN、またはNO₂によって置きかえられていてもよい)、または5~60個の芳香環原子を有する単環もしくは多環の芳香族環系もしくはヘテロ芳香族環系(これは各々の場合において1つ以上の非芳香族基R⁴によって置換されていてもよい)、または5~60個の芳香環原子を有するアリーロキシ基もしくはヘテロアリーロキシ基(これは1つ以上の非芳香族基R⁴によって置換されていてもよい)、またはこれらの系の組合せであり、ここで、2つ以上の基R³は、互いに連結していてもよく、単環または多環の脂肪族環系または芳香族環系を形成していてもよく;

R⁴は、出現するごとに同一または異なり、H、D、Fまたは1~20個のC原子を有する脂肪族、芳香族および/または複素芳香族有機基(ここで、さらに、1つ以上のH原子は、DまたはFによって置きかえられていてもよい)であり;ここで2つ以上の同一または異なる置換基R⁴は、また、互いに連結していてもよく、単環または多環の脂肪族環系または芳香族環系を形成していてもよく;

ここで、以下の構造は除かれる。

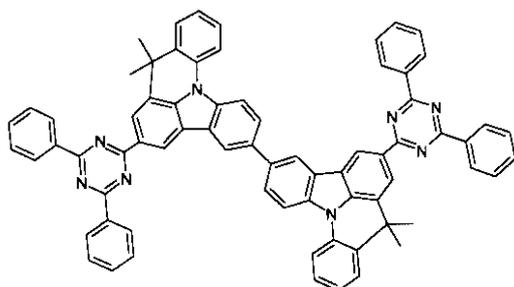
10

20

30

40

【化 2】



10

【請求項 2】

R¹ が、出現するごとに同一または異なり、H、D、F、CN、Si(R³)₃、または 1 ~ 20 個の C 原子を有する直鎖のアルキル基もしくはアルコキシ基、または 3 ~ 20 個の C 原子を有する分岐もしくは環状のアルキル基もしくはアルコキシ基（これらの各々は 1 以上の基 R³ によって置換されているもよい）（ここで、1 つ以上の隣接するまたは隣接しない CH₂ 基は、-C-C-、R³C=CR³、Si(R³)₂、C=O、C=NR³、NR³、O、S、COO または CONR³ によって置きかえられているもよい）、または 5 ~ 30 個の芳香環原子を有するアリール基（これは各々の場合において 1 つ以上の基 R³ によって置換されているもよい）から選択されることを特徴とする、請求項 1 に記載の化合物。

20

【請求項 3】

R² が、出現するごとに同一または異なり、H、D、1 ~ 8 個の炭素原子を有する直鎖のアルキル基、3 ~ 8 個の炭素原子を有する分岐のアルキル基、または 6 ~ 18 個の炭素原子を有するアリール基から選択され、前記基は、各々、1 つ以上の基 R³ によって置換されているもよいことを特徴とする、請求項 1 または 2 に記載の化合物。

【請求項 4】

1 つ以上の基 R³ によって置換されている 6 ~ 10 個の炭素原子を有するアリール基を表す少なくとも 1 つの基 R² が、存在しなければならないことを特徴とする、請求項 1 ~ 3 の何れか 1 項に記載の化合物。

【請求項 5】

請求項 1 ~ 4 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 種の溶媒とを含む配合物。

30

【請求項 6】

請求項 1 ~ 4 の何れか 1 項に記載の化合物を製造するための方法であって、架橋基 L の導入のために少なくとも 1 つの閉環反応が行われることを特徴とする方法。

【請求項 7】

電子デバイスにおける請求項 1 ~ 4 の何れか 1 項に記載の化合物の使用。

【請求項 8】

請求項 1 ~ 4 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であって、有機集積回路 (O-IC)、有機電界効果トランジスタ (O-FET)、有機薄膜トランジスタ (O-TFT)、有機発光トランジスタ (O-LET)、有機太陽電池 (O-SC)、有機光学検出器、有機感光体、有機電場消光デバイス (O-FQD)、発光電気化学電池 (LEC)、有機レーザーダイオード (O-laser) および有機エレクトロルミネッセントデバイス (OLED) から選択される電子デバイス。

40

【請求項 9】

請求項 1 ~ 4 の何れか 1 項に記載の化合物が、正孔輸送層もしくは正孔注入層における正孔輸送物質として、および/またはマトリックス物質として、発光層において、用いられることを特徴とする、請求項 8 に記載の有機エレクトロルミネッセントデバイス。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

50

【0001】

本発明は、式(I)の化合物、および電子デバイスにおけるその使用、およびこれらの化合物を含む電子デバイスに関する。

【背景技術】

【0002】

有機半導体物質、例えば本発明に係る化合物は、電子デバイスにおける多数の異なる用途のために開発されつつある。

【0003】

本発明に係る化合物が機能的物質として使用され得る有機エレクトロルミネッセントデバイス(OLED)の構造は、例えば、米国特許第4539507号、米国特許第5151629号、EP0676461およびWO98/27136に記載されている。

10

【0004】

有機エレクトロルミネッセントデバイスの性能データに関して、特に、幅広い商業的使用について、さらなる改善が依然として必要である。これに関連して特に重要なことは、有機エレクトロルミネッセントデバイスの寿命、効率および動作電圧、ならびに達成される明度である。特に、青色発光エレクトロルミネッセンスデバイスの場合においては、デバイスの寿命に関して改善の可能性がある。

【0005】

加えて、高い熱安定性と高いガラス転移温度とを有し、分解せずに昇華し得る有機半導体物質として使用するための化合物が望まれる。

20

【0006】

さらに、従来技術に従う正孔輸送物質の場合の電圧は、一般に、正孔輸送層の層厚とともに増加する。実際に、正孔輸送層のより大きな層厚がしばしば望まれるが、これは、多くの場合、高い動作電圧と貧弱な性能データの結果を有する。これに関連して、高い電荷担体移動度を有し、動作電圧におけるほんの僅かな増加を用いて、より厚い正孔輸送層を達成し得る新規な正孔輸送物質が要求される。

【0007】

アリアルアミン誘導体は、正孔輸送物質および正孔注入物質として従来技術から知られている。インデノフルオレンに基づくこのタイプの物質は、例えば、WO06/100896およびWO06/122630に開示されている。上記インデノフルオレンアミンは、蒸着またはコーティングプロセス、初期の堆積の間の加工性に不都合があり、それ故、工業的プロセスの複雑化が生じ得る。さらに、既知の正孔輸送物質は、しばしば、電子安定性が低く、結果として前記化合物を含む電子デバイスの寿命が短くなる。ここにおいてさらに改善する必要がある。

30

【0008】

さらに、電子デバイスにおける使用のための代替のマトリックス物質が要求される。特に、良好な効率、長期寿命および低い動作電圧を同時にもたらすリン光性発光体のためのマトリックス物質が要求される。それは、正確には、有機エレクトロルミネッセントデバイスの寿命と効率に対してしばしば制限しているマトリックス物質の特性である。

【0009】

従来技術に従って、カルバゾール誘導体、例えばビス(カルバゾリル)ビフェニルは、しばしば、マトリックス物質として使用される。特に、上記物質の寿命とガラス転移温度に関して、改善の可能性はまだある。さらに、対象とする物質を含む電子デバイスの動作電圧に関して、改善される必要がある。

40

【0010】

さらに、ケトン(WO04/093207)、ホスフィンオキシド、スルホン(WO05/003253)およびトリアジン化合物、例えばトリアジニルスピロピフルオレン(WO05/053055出願、ならびにWO10/015306およびWO10/072300出願を参照されたい)は、リン光性発光体用のマトリックス物質として使用される。低動作電圧と長期寿命は、特にケトンを用いて達成される。特に、ケトケトネートリガ

50

ンド、例えばアセチルアセトネートを含む金属錯体を用いた効率と適合性に関して、ここにおいて改善の可能性がまたある。

【0011】

さらに、金属錯体、例えばBAIQまたはビス[2-(2-ベンゾチアゾール)フェノレート]亜鉛(II)は、リン光性発光体用のマトリックス物質として使用される。特に動作電圧と化学的安定性に関して、まだ改善される必要がある。純粋な有機化合物は、これらの金属錯体よりもしばしば安定である。このようにして、これらの金属錯体のいくつかは、加水分解に感受性であり、それは、錯体の取扱いをより困難にする。

【0012】

また特に関心もたれることは、混合されたマトリックスシステムのマトリックス成分として代替の物質の提供である。本出願の意味における混合されたマトリックスシステムは、1種以上のドーパント化合物と一緒に混合された2種以上の異なるマトリックス化合物が発光層として用いられるシステムを意味するものとされる。これらのシステムは、特に、リン光性有機エレクトロルミネッセントデバイスの場合において対象となる。より詳細な情報については、未公開出願のDE102009014513.3を参照されたい。

【0013】

混合されたマトリックスシステムにおけるマトリックス成分として言及され得る従来技術から知られている化合物は、とりわけ、CBP(ビスカルバゾリルピフェニル)とTCCTA(トリスカルバゾリルトリフェニルアミン)である(例部の表4を参照されたい)。しかしながら、混合されたマトリックスシステムにおけるマトリックス成分として使用するための代替の化合物に対する要求が続いている。特に、電子デバイスの動作電圧と寿命における改善を達成する化合物が要求されている。

【0014】

蛍光OLEDについて、特に青色発光エレクトロルミネッセンスデバイス用に、従来技術に従って使用されるマトリックス物質は、特に、縮合芳香族化合物、特に、アントラセン誘導体、例えば、9,10-ビス(2-ナフチル)アントラセン(米国特許第5935721号)である。WO03/095445およびCN1362464は、OLEDにおいて使用するための9,10-ビス(1-ナフチル)アントラセン誘導体を開示する。さらなるアントラセン誘導体は、WO01/076323、WO01/021729、WO04/013073、WO04/018588、WO03/087023、またはWO04/018587において開示されている。アリール置換されたピレンおよびクリセンに基づくマトリックス物質は、WO04/016575に開示されている。ベンズアントラセン誘導体に基づくマトリックス物質は、WO08/145239に開示されている。高品質用途には、利用可能なさらなるマトリックス物質を有することが望ましく、それは、好ましくは改善された特性を有する。

【0015】

青色発光化合物の場合に言及され得る従来技術は、アリールビニルアミンの使用である(例えば、WO04/013073、WO04/016575、WO04/018587)。しかしながら、これらの化合物は、熱的に不安定であり、分解せずに蒸発させることはできず、これは、OLED製造のための高度な技術的複雑さを必要とするものであり、それ故に、技術的欠点を示す。したがって、高品質用途には、特に、デバイスならびに昇華安定性および発光色に関して、利用可能な改善された発光体を有することが望ましい。

【0016】

全体としては、好ましくは、改善された特性を有する代替の物質について、電子デバイス用の機能的物質の領域において要求がある。

【0017】

とりわけ、WO2006/033563および米国特許出願公開第2009/0136779号出願は、個々のアリール基を互いに架橋するトリアリールアミン誘導体を開示する。これらの化合物は、電子デバイスにおける正孔輸送物質および/または発光物質として用いられる。

10

20

30

40

50

【0018】

WO10/083871出願は、アリール基がピペリジン環に縮合された化合物を開示する。これらの化合物は、電子デバイスにおける正孔輸送物質および/または発光物質として用いられる。さらに、未公開出願のDE102009048791.3は、トリアジニル基を含む架橋されたカルバゾール誘導体を開示する。これらの化合物は、好ましくは、リン光性ドープメント用のマトリックス物質、および電子輸送物質として用いられる。

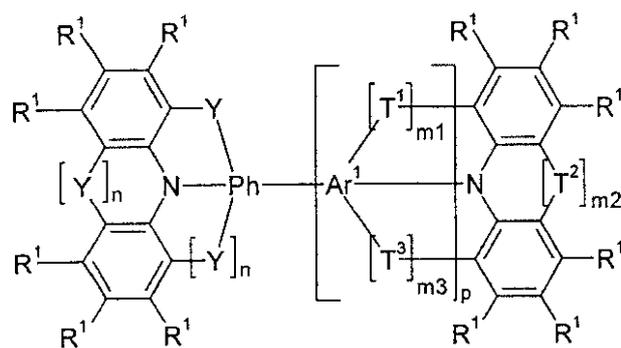
【0019】

しかしながら、これらのデバイスの寿命、効率および動作電圧に関して、改善する必要性が継続している。さらに、これらの化合物は、高い熱安定性と高いガラス転移温度とを有し、分解せずに昇華し得ることは有利である。

【発明の概要】

【0020】

したがって、本発明は、以下の式(I)の化合物に関する【化1】



式(I)

【0021】

(式中、使用した記号および添え字には、以下が適用される：

Yは、出現するごとに同一または異なり、単結合、BR²、C(R²)₂、R²C=CR²、Si(R²)₂、C=O、C=NR²、O、S、SO、SO₂、PR²、POR²またはNR²であり、ここで、単結合を表す少なくとも1つの基Yが存在し；

T¹、T²、T³は、出現するごとに同一または異なり、単結合、BR²、C(R²)₂、R²C=CR²、Si(R²)₂、C=O、C=NR²、O、S、SO、SO₂、PR²、POR²またはNR²であり；

Phは、フェニル基であり、これは1つ以上の基R¹によって置換されていてもよい；

Ar¹は、6~30個の芳香環原子を有する芳香族環系であり、これは1つ以上の基R¹によって置換されていてもよい；

R¹、R²は、出現するごとに同一または異なり、H、D、F、Cl、Br、I、CHO、N(R³)₂、C(=O)R³、P(=O)(R³)₂、S(=O)₂R³、CR³=C(R³)₂、CN、NO₂、Si(R³)₃、B(OR³)₂、OSO₂R³、OH、1~40個のC原子を有する直鎖のアルキル基、アルコキシ基もしくはチオアルキル基、または3~40個のC原子を有する分岐もしくは環状のアルキル基、アルコキシ基もしくはチオアルキル基、または2~40個のC原子を有するアルケニル基もしくはアルキニル基(これらの各々は1以上の基R³によって置換されていてもよい)(ここで、1つ以上の隣接しないCH₂基は、R³C=CR³、C=C、Si(R³)₂、Ge(R³)₂、Sn(R³)₂、C=O、C=S、C=Se、C=NR³、P(=O)(R³)、SO、SO₂、NR³、O、SまたはCONR³によって置きかえられてい

てもよく、1つ以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、CN、またはNO₂によって置きかえられていてもよい)、または5~60個の芳香環原子を有する単環もしくは多環の芳香族環系もしくはヘテロ芳香族環系(これは各々の場合において1つ以上の非芳香族基R³によって置換されていてもよい)、または5~60個の芳香環原子を有するアリアルオキシ基もしくはヘテロアリアルオキシ基(これは1つ以上の非芳香族基R³によって置換されていてもよい)、またはこれらの系の組合せであり、ここで、2つ以上の基R¹および/またはR²は、互いに連結していてもよく、単環または多環の脂肪族環系または芳香族環系を形成していてもよく;

R³は、出現するごとに同一または異なり、H、D、F、Cl、Br、I、CHO、N(R⁴)₂、C(=O)R⁴、P(=O)(R⁴)₂、S(=O)R⁴、S(=O)₂R⁴、CR⁴=C(R⁴)₂、CN、NO₂、Si(R⁴)₃、B(OR⁴)₂、OSO₂R⁴、OH、1~40個のC原子を有する直鎖のアルキル基、アルコキシ基もしくはチオアルキル基、または3~40個のC原子を有する分岐もしくは環状のアルキル基、アルコキシ基もしくはチオアルキル基、または2~40個のC原子を有するアルケニル基もしくはアルキニル基(これらの各々は1以上の基R⁴によって置換されていてもよい)(ここで、1つ以上の隣接しないCH₂基は、R⁴C=CR⁴、C-C、Si(R⁴)₂、Ge(R⁴)₂、Sn(R⁴)₂、C=O、C=S、C=Se、C=NR⁴、P(=O)(R⁴)、SO、SO₂、NR⁴、O、SまたはCONR⁴によって置きかえられていてもよく、1つ以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、CN、またはNO₂によって置きかえられていてもよい)、または5~60個の芳香環原子を有する単環もしくは多環の芳香族環系もしくはヘテロ芳香族環系(これは各々の場合において1つ以上の非芳香族基R⁴によって置換されていてもよい)、または5~60個の芳香環原子を有するアリアルオキシ基もしくはヘテロアリアルオキシ基(これは1つ以上の非芳香族基R⁴によって置換されていてもよい)、またはこれらの系の組合せであり、ここで、2つ以上の基R³は、互いに連結していてもよく、単環または多環の脂肪族環系または芳香族環系を形成していてもよく;

R⁴は、出現するごとに同一または異なり、H、D、Fまたは1~20個のC原子を有する脂肪族、芳香族および/または複素芳香族有機基(ここで、さらに、1つ以上のH原子は、DまたはFによって置きかえられていてもよい)であり; 2つ以上の同一または異なった置換基R⁴はまた、互いに連結していてもよく、単環または多環の脂肪族環系または芳香族環系を形成していてもよく;

nは、出現するごとに同一または異なり、0または1であり、ここで、nの値の合計は、1または2に等しく、n=0のとき、基R¹が基Yの代わりに結合され;

m₁、m₂、m₃は、出現するごとに同一または異なり、0または1であり、ここで、m₁、m₂またはm₃=0のとき、それぞれ、基R¹は基T¹、T²またはT³の代わりに結合され;

pは、0または1に等しく;

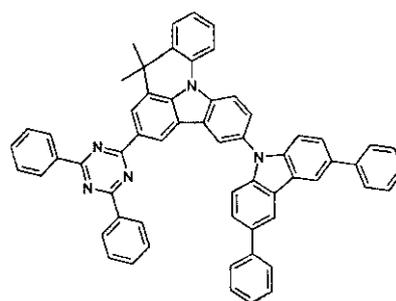
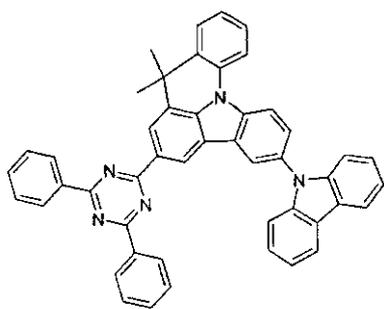
ここで、以下の構造は除かれ、

10

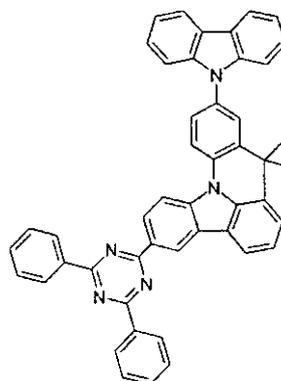
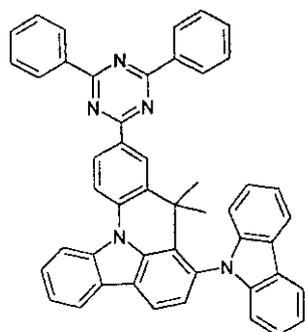
20

30

【化 2】

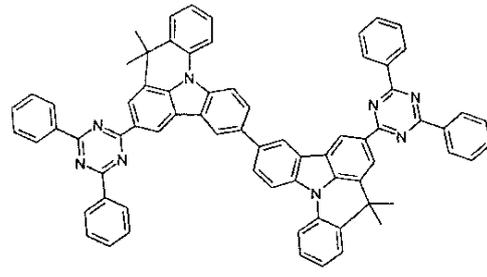
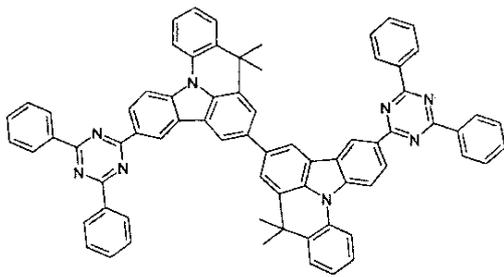


10

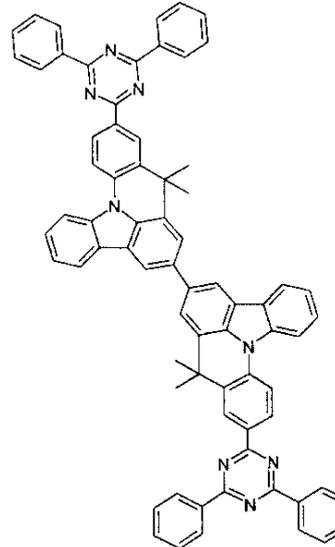
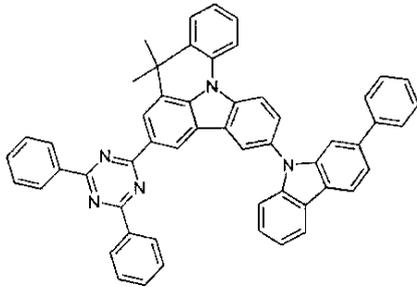


20

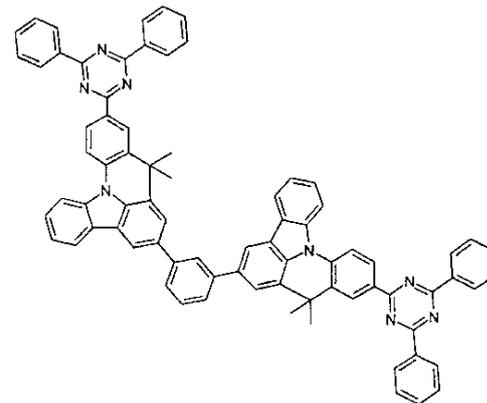
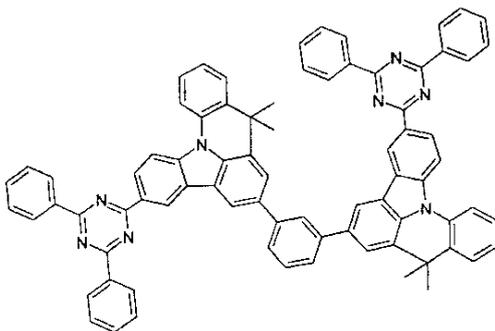
【化3】



10



20



30

【0022】

そして、式 $N(R^3)_2$ の基を表す1つ以下の基 R^1 は、式 (I) における単一のトリ
アリールアミン基に結合されていてもよく、ここで R^3 はアリール基である]。

40

【0023】

本発明の好ましい実施形態では、式 (I) の化合物における基 T^2 は、 $p = 1$ および $m_1 = m_3 = 0$ については単結合を表すことができない。本発明の特に好ましい実施形態では、 T^1 、 T^2 および T^3 は、 p が1に等しく、添え字 m_1 、 m_2 および m_3 の値の合計が1に等しい場合において、単結合を表さない。本発明のさらに特に好ましい実施形態では、式 (I) の化合物における基 T^2 は、 $m_1 = m_3 = 0$ である場合、単結合を表すことができない。

【0024】

式 $N(R^3)_2$ (式中、 R^3 はアリール基である) の基を表す1つ以下の基 R^1 が、式

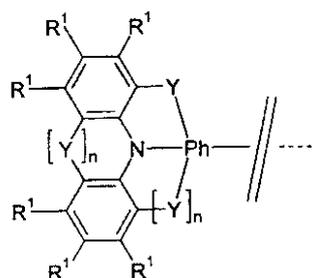
50

(I)における単一のトリアリールアミン基に結合されてもよい条件は、以下により詳細に説明される。

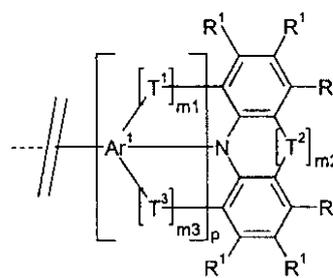
【0025】

本発明に係る化合物の構造式における左側部分(式(Ia))と右側部分(式(Ib))の両方は、上記定義の意味において単一のトリアリールアミノ基を表す。

【化4】



式(Ia)



式(Ib)

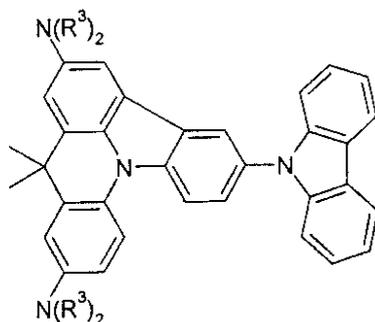
10

20

【0026】

例えば、R³がアリール基を表す以下に示される式は、本出願の特許請求の範囲内に含まれない化合物を表す：

【化5】



30

【0027】

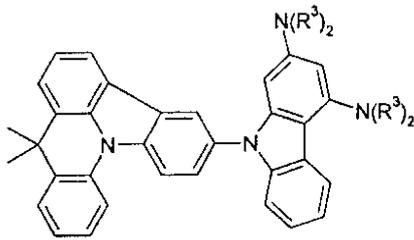
上記の一般式によって表される化合物において、2つの基N(R³)₂(式中、R³はアリール基である)は、上記で説明されるように単一のトリアリールアミノ基に結合されている。

40

【0028】

この状況は、R³がアリール基を表す以下の式の化合物と同じである。

【化6】

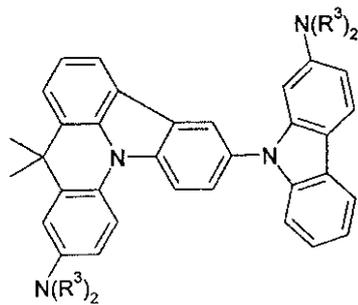


10

【0029】

対照的に、 R^3 がアリール基を表す以下の式の化合物は、本出願の特許請求の範囲に含まれる。

【化7】



20

【0030】

これは、この場合、単一の基 $N(R^3)_2$ (式中、 R^3 はアリール基を表す) は、上記で説明されるように、単一のトリアリールアミノ基に結合されているためである。

30

【0031】

本発明の意味におけるアリール基は6～60個のC原子を含む；本発明の意味におけるヘテロアリール基は、1～60個のC原子と少なくとも1つのヘテロ原子とを含み、ただし、C原子とヘテロ原子との合計は少なくとも5である。ヘテロ原子は、好ましくは、N、Oおよび/またはSから選択される。アリール基またはヘテロアリール基は、ここで、単純な芳香族環、即ち、ベンゼン、または単純なヘテロ芳香族環、例えば、ピリジン、ピリミジン、チオフェンなど、または縮合(融合)アリール基もしくはヘテロアリール基、例えば、ナフタレン、アントラセン、フェナントレン、キノリン、イソキノリン、カルバゾールなどのいずれかを意味するものとする。

【0032】

本発明の意味における芳香族環系は、その環系中に6～60個のC原子を含む。本発明の意味におけるヘテロ芳香族環系は、その環系中に5～60個の芳香環原子と少なくとも1つのヘテロ原子とを含み、ただし、C原子とヘテロ原子との合計は少なくとも5である。ヘテロ原子は、好ましくは、N、Oおよび/またはSから選択される。本発明の意味における芳香族またはヘテロ芳香族環系は、必ずしもアリール基またはヘテロアリール基のみを含まず、代わりに複数のアリール基またはヘテロアリール基が、非芳香族単位(好ましくは、10%未満のH以外の原子)、例えば、 sp^3 混成C、NまたはO原子などにより接続されていてもよい系を意味することを意図する。したがって、例えば、9,9-スピロピフルオレン、9,9-ジアリールフルオレン、トリアリールアミン、ジアリールエーテル、スチルベンなどの系も、2つ以上のアリール基が、例えば直鎖状もしくは環状の

40

50

アルキル基またはシリル基によって中断されているが、本発明の意味において、芳香族環系であると解されることが意図される。

【0033】

各々の場合において、上述される基によって置換されていてもよく、任意の所望の位置を介して芳香族環系またはヘテロ芳香族環系に連結されてもよいアリアル基またはヘテロアリアル基は、特に、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、フルオランテン、ベンズアントラセン、ベンゾフェナンアントレン、テトラセン、ペンタセン、ベンゾピレン、フラン、ベンゾフラン、イソベンゾフラン、ジベンゾフラン、チオフエン、ベンゾチオフエン、イソベンゾチオフエン、ジベンゾチオフエン、ピロール、インドール、イソインドール、カルバゾール、インドロカルバゾール、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、ピラジニイミダゾール、キノキサリンイミダゾール、オキサゾール、ベンズオキサゾール、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に由来する基、またはこれらの基の組合せを意味するものとする。

【0034】

各々の場合において、上記で定義された通りの基によって置換されていてもよく、任意の所望の位置を介して芳香族基または複素芳香族基に連結されていてもよい5~60個の芳香環原子を有する芳香族環系またはヘテロ芳香族環系は、特に、ベンゼン、ナフタレン、アントラセン、ベンズアントラセン、フェナントレン、ベンゾフェナントレン、ピレン、クリセン、ペリレン、フルオランテン、ナフタセン、ペンタセン、ベンゾピレン、ピフェニル、ピフェニレン、テルフェニル、テルフェニレン、フルオレン、インデノフルオレン、インデノカルバゾール、スピロピフルオレン、ジヒドロフェナントレン、ジヒドロピレン、テトラヒドロピレン、シス-またはトランス-インデノフルオレン、トルキセン、イソトルキセン、スピロトルキセン、スピロイソトルキセン、フラン、ベンゾフラン、イソベンゾフラン、ジベンゾフラン、チオフエン、ベンゾチオフエン、イソベンゾチオフエン、ジベンゾチオフエン、ピロール、インドール、イソインドール、カルバゾール、ピリジン、キノリン、イソキノリン、アクリジン、フェナントリジン、ベンゾ-5,6-キノリン、ベンゾ-6,7-キノリン、ベンゾ-7,8-キノリン、フェノチアジン、フェノキサジン、ピラゾール、インダゾール、イミダゾール、ベンゾイミダゾール、ナフトイミダゾール、フェナントロイミダゾール、ピリドイミダゾール、ピラジニイミダゾール、キノキサリンイミダゾール、オキサゾール、ベンズオキサゾール、ナフトオキサゾール、アントロオキサゾール、フェナントロオキサゾール、イソオキサゾール、1,2-チアゾール、1,3-チアゾール、ベンゾチアゾール、ピリダジン、ベンゾピリダジン、ピリミジン、ベンゾピリミジン、キノキサリン、1,5-ジアザアントラセン、2,7-ジアザピレン、2,3-ジアザピレン、1,6-ジアザピレン、1,8-ジアザピレン、4,5-ジアザピレン、4,5,9,10-テトラアザペリレン、ピラジン、フェナジン、フェノキサジン、フェノチアジン、フルオルピン、ナフチリジン、アザカルバゾール、ベンゾカ

10

20

30

40

50

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に由来する基を意味するものとする。

【0035】

本発明の目的のためには、1 ~ 40 個の C 原子を有する直鎖のアルキル基、または 3 ~ 40 個の C 原子を有する分岐もしくは環状のアルキル基、または 2 ~ 40 個の C 原子を有するアルケニル基もしくはアルキニル基は、その場合、さらに、個々の H 原子または CH_2 基が上記基 R^1 および R^2 の定義の下に上述される基によって置換されていてよく、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、またはオクチニルの各基を意味するものとされる。1 ~ 40 個の C 原子を有するアルコキシ基またはチオアルキル基は、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される。

【0036】

存在する場合、基 Y は、各々が窒素原子への結合に対してオルト位で基 Ph に結合されていることが好ましい。

【0037】

存在する場合、基 T^1 、 T^2 および T^3 は、各々が窒素原子への結合に対してオルト位で Ar^1 に結合されていることがさらに好ましい。

【0038】

本発明に係る化合物の好ましい実施形態では、単結合を表す最大 2 つの基 Y が存在する。特に好ましくは、単結合を表す厳密に 1 つの基 Y が存在する。

【0039】

本発明のさらに好ましい実施形態では、n の値の合計は 1 に等しい。

【0040】

本発明の特に好ましい実施形態では、厳密に 1 つの基 Y は単結合を表し、厳密に 1 つのさらなる基 Y は、 BR^2 、 $\text{C}(\text{R}^2)_2$ 、 $\text{Si}(\text{R}^2)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^2$ 、 O 、 S

10

20

30

40

50

、 SO 、 SO_2 、 PR^2 、 POR^2 および NR^2 から選択される。

【0041】

T^1 、 T^2 および T^3 は、出現するごとに同一または異なり、単結合、 $C(R^2)_2$ 、 $C=O$ 、 O 、 S および NR^2 から選択されることがさらに好ましい。この場合、 R^2 は、好ましくは、 H 、 D 、1～8個の炭素原子を有する直鎖のアルキル基、3～8個の炭素原子を有する分岐のアルキル基、または6～10個の炭素原子を有するアリール基から選択され、ここで、前記基は、各々、1つ以上の基 R^3 によって置換されていてもよい。

【0042】

T^1 、 T^2 および T^3 は、特に好ましくは、出現するごとに、単結合である。ここにおいて、上記される T^1 、 T^2 および T^3 の2つの好ましい実施形態を組み合わせ、 T^2 は、 $p=1$ および $m_1=m_3=0$ である場合、単結合を表さないことがさらに好ましい。

10

【0043】

本発明に従って、 Y は、出現するごとに同一または異なり、単結合、 $C(R^2)_2$ 、 $C=O$ 、 O 、 S または NR^2 であることがさらに好ましく、この場合、単結合を表す少なくとも1つの基 Y が存在する。

【0044】

この場合、 R^2 は、好ましくは、 H 、 D 、1～8個の炭素原子を有する直鎖のアルキル基、3～8個の炭素原子を有する分岐のアルキル基、または6～10個の炭素原子を有するアリール基から選択され、ここで、前記基は、各々、1つ以上の基 R^3 によって置換されていてもよい。

20

【0045】

本発明の好ましい実施形態では、添え字 m_1 、 m_2 および m_3 の値の合計は2に等しい。

【0046】

この場合、本発明に従って、2つの基 T^1 、 T^2 および T^3 の厳密に1つは単結合を表し、存在する2つの基 T^1 、 T^2 および T^3 の他方は、 $C(R^2)_2$ 、 $C=O$ 、 O 、 S または NR^2 を含む群から選択される基を表すことが好ましい。この場合、同時に、値 n の合計は1に等しいことがさらに好ましい。

【0047】

本発明のさらに好ましい実施形態では、添え字 m_1 、 m_2 および m_3 の値の合計は1に等しい。前記好ましい実施形態と組み合わせ、この場合に存在する単一の基 T^1 、 T^2 または T^3 は単結合を表さないことが好ましい。

30

【0048】

本発明のさらに好ましい実施形態では、全ての添え字 m_1 、 m_2 および m_3 はゼロに等しい。

【0049】

R^1 は、さらに好ましくは、基 $N(R^3)_2$ ではなく、ここで、 R^3 はアリール基である。

【0050】

R^1 は、再びさらに好ましくは、出現するごとに同一または異なり、 H 、 D 、 F 、 CN 、 $Si(R^3)_3$ 、または1～20個のC原子を有する直鎖のアルキル基もしくはアルコキシ基、または3～20個のC原子を有する分岐もしくは環状のアルキル基もしくはアルコキシ基（これは1つ以上の基 R^3 によって置換されていてもよい）（ここで、1つ以上の隣接するまたは隣接しない CH_2 基は、 $-C-C-$ 、 $R^3C=CR^3$ 、 $Si(R^3)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^3$ 、 NR^3 、 O 、 S 、 COO または $CONR^3$ によって置きかえられていてもよい）、または5～30個の芳香族環原子を有するアリール基もしくはヘテロアリール基（これは各々の場合において1つ以上の基 R^3 によって置換されていてもよい）から選択される。

40

【0051】

基 R^2 は、好ましくは、出現するごとに同一または異なり、 H 、 D 、 F 、 CN 、 Si (

50

R^3)₃、 $N(R^3)$ ₂ または 1 ~ 20 個の C 原子を有する直鎖のアルキル基もしくはアルコキシ基、または 3 ~ 20 個の C 原子を有する分岐もしくは環状のアルキル基もしくはアルコキシ基 (これらの各々は 1 以上の基 R^3 によって置換されていてもよい) (ここで、1 つ以上の隣接するまたは隣接しない CH_2 基は、 $-C-C-$ 、 $R^3C=CR^3$ 、 $Si(R^3)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^3$ 、 NR^3 、 O 、 S 、 COO または $CONR^3$ によって置きかえられていてもよい)、または 5 ~ 30 個の芳香族環原子を有するアリール基もしくはヘテロアリール基 (この各々の場合において 1 つ以上の基 R^3 によって置換されていてもよい) から選択される。

【0052】

R^2 は、特に好ましくは、出現するごとに同一または異なり、H、D、1 ~ 8 個の炭素原子を有する直鎖のアルキル基、3 ~ 8 個の炭素原子を有する分岐のアルキル基、または 6 ~ 18 個の炭素原子を有するアリール基から選択され、前記基は、各々、1 つ以上の基 R^3 によって置換されていてもよい。 R^2 は、特に非常に好ましくは、H、D、メチルまたはフェニルに等しい。

【0053】

本発明に係る化合物は、1 つ以上の基 R^3 によって置換される、6 ~ 10 個の炭素原子を有するアリール基を表す少なくとも 1 つの基 R^2 を含まなければならないことがさらに好ましい。本発明に係る化合物は、特に好ましくは、1 つ以上の基 R^3 によって置換されるフェニル基を表す少なくとも 1 つの基 R^2 を含む。

【0054】

2 つ以上の基 R^2 は、互いに一緒になって環を形成していることがさらに好ましい。2 つの基 R^2 の環形成は、スピロ化合物を形成していることが特に好ましい。さらに、Y、 T^1 、 T^2 、 T^3 または L を表す基 $C(R^2)_2$ の部分である 2 つの基 R^2 は、特に好ましくは、スピロ化合物を形成している。ここで、L は、以下のセクションの 1 つにおいて定義された通りである。

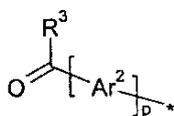
【0055】

本発明に従って、基 R^1 および R^2 は、以下の式 (A) ~ (G) の構造を表さないことが好ましい。

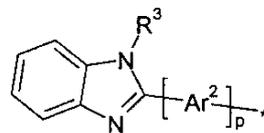
【化 8】



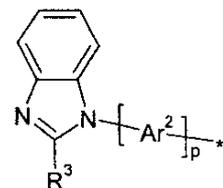
式(A)



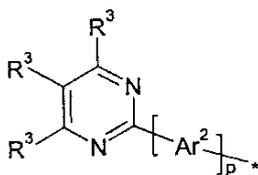
式(B)



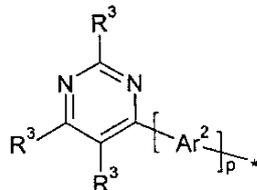
式(C)



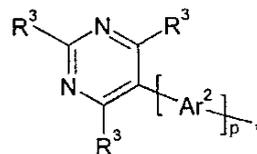
式(D)



式(E)



式(F)



式(G)

【0056】

式中、使用した記号および添え字には、以下が適用される：

10

20

30

40

50

Ar^2 は、出現するごとに同一または異なり、1つ以上の非芳香族基 R^3 によって置換されていてもよい、5 ~ 30 個の芳香環原子を有する芳香族環系またはヘテロ芳香族環系であり；同一のN原子またはP原子に結合されている2つの基 Ar^2 はまた、単結合、または $N(R^3)$ 、 $C(R^3)_2$ もしくはOから選択される架橋によって互いに連結されていてもよく；

R^3 は、上記で定義された通りであり；

p は、0 または 1 を表し；

記号 * は、この基が結合されている位置を示す。

【0057】

本発明に従って、基 R^1 および R^2 は、互いに連結されていないことがさらに好ましい

10

【0058】

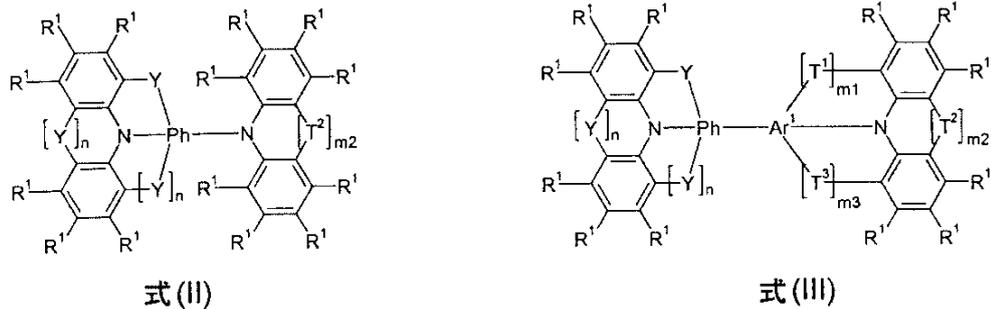
基 R^3 は、好ましくは、出現するごとに同一または異なり、H、D、F、CN、 $Si(R^4)_3$ 、 $N(R^4)_2$ 、または1 ~ 20 個のC原子を有する直鎖のアルキル基もしくはアルコキシ基（これらの各々は1以上の基 R^4 によって置換されていてもよい）（ここで、1つ以上の隣接するまたは隣接しない CH_2 基は、 $-C-C-$ 、 $R^4C=CR^4$ 、 $Si(R^4)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^4$ 、 NR^4 、O、S、 COO または $CONR^4$ によって置きかえられていてもよい）、または5 ~ 30 個の芳香環原子を有するアリール基もしくはヘテロアリール基（この各々の場合において1つ以上の基 R^4 によって置換されていてもよい）から選択される。

20

【0059】

また、本発明に係る式(I)の化合物は、2つの式(II)と(III)のうちの1つによって表すことができる：

【化9】



30

【0060】

式中、記号および添え字は上記で指示された通りに定義される。

【0061】

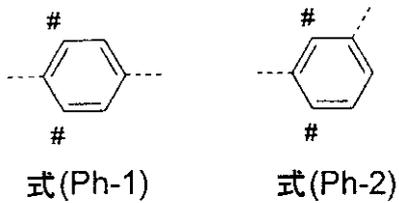
式(III)の化合物について、基 T^2 は、 $m_1 = m_3 = 0$ である場合、単結合を表さないことが好ましい。

40

【0062】

基 Ph の好ましい実施形態は、式(Ph-1)および(Ph-2)に従う：

【化10】



10

【0063】

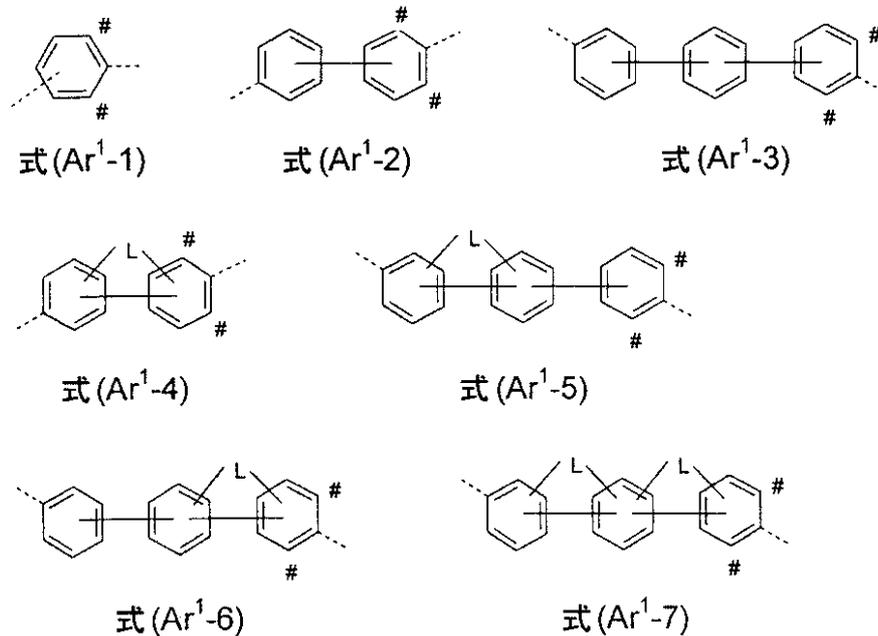
(式中、2つの窒素原子への結合、または窒素原子および基 Ar^1 への結合は、破線によって表され、記号 # は、存在する場合、基 Y への結合位置を示し、ここで、それらの構造は、上記で定義された通りの基 R^1 によって、何れもの自由な位置 (free position) において置換されていてもよい)。

【0064】

基 Ar^1 の好ましい実施形態は、以下の式 (Ar^1-1) ~ (Ar^1-7) に従う：

【化11】

20



30

【0065】

式中、L は、出現するごとに同一または異なり、 BR^2 、 $C(R^2)_2$ 、 $R^2C=CR^2$ 、 $Si(R^2)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^2$ 、O、S、SO、 SO_2 、 PR^2 、 POR^2 および NR^2 から選択され；

ここで、基 Ph への結合および窒素原子への結合は、破線によって表され、記号 # は、存在する場合、基 T^1 、 T^2 または T^3 への結合位置を示し、ここで、それらの基は、上記で定義された通りの基 R^1 によって何れもの自由な位置において置換されていてもよい。

【0066】

本発明の好ましい実施形態では、L は、出現するごとに同一または異なり、 $C(R^2)$

50

$_2$ 、C=O、O、S、および NR^2 から選択される。

【0067】

この場合、 R^2 は、好ましくは、H、D、1～8個の炭素原子を有する直鎖のアルキル基、3～8個の炭素原子を有する分岐のアルキル基、または6～10個の炭素原子を有するアリール基から選択され、ここで、前記基は、各々、1つ以上の基 R^3 によって置換されていてもよい。

【0068】

Lは、特に非常に好ましくは、出現するごとに同一または異なり、 $\text{C}(\text{R}^2)_2$ および NR^2 から選択される。

【0069】

この場合、 R^2 は、好ましくは、H、D、1～8個の炭素原子を有する直鎖のアルキル基、3～8個の炭素原子を有する分岐のアルキル基、または6～10個の炭素原子を有するアリール基から選択され、ここで、前記基は、各々、1つ以上の基 R^3 によって置換されていてもよい。

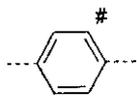
【0070】

本発明に従って、 Ar^1 は、1つ以上の基 R^1 によって置換される、6～20個の芳香環原子を有する芳香族環系を表すことが好ましい。 Ar^1 は、特に好ましくは、排他的にフェニル基を含み、1つ以上の基 R^1 によって置換される、6～18個の芳香環原子を有する芳香族系である。本発明の特に好ましい実施形態では、 Ar^1 は、1つ以上の基 R^1 によって置換されるフェニル基である。

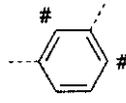
【0071】

基 Ar^1 の特に好ましい実施形態は、以下の式(Ar¹-8)～(Ar¹-35)に従う：

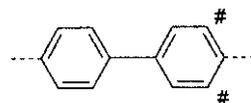
【化12】



式(Ar¹-8)



式(Ar¹-9)



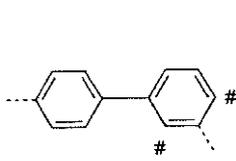
式(Ar¹-10)

10

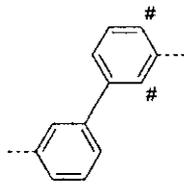
20

30

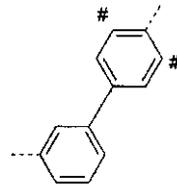
【化 1 3】



式 (Ar¹-11)

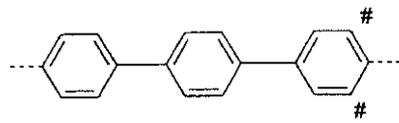


式 (Ar¹-12)

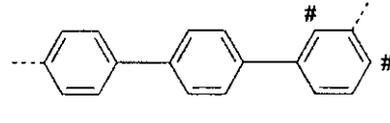


式 (Ar¹-13)

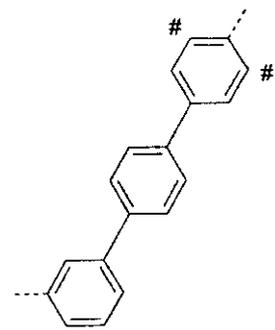
10



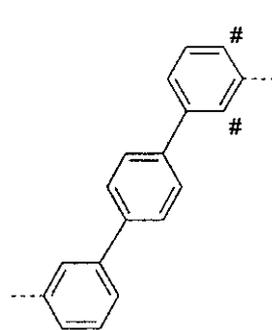
式 (Ar¹-14)



式 (Ar¹-15)

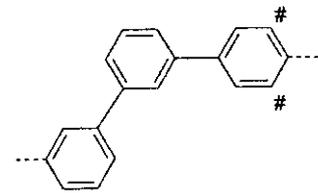


式 (Ar¹-16)

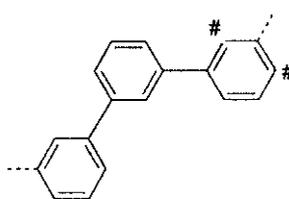


式 (Ar¹-17)

20

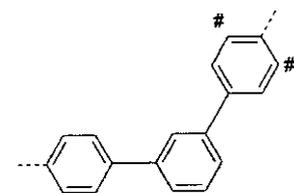


式 (Ar¹-18)

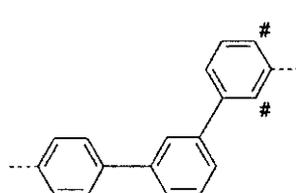


式 (Ar¹-19)

30



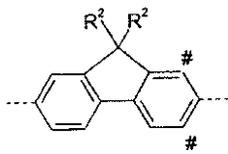
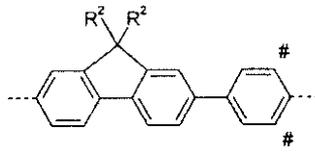
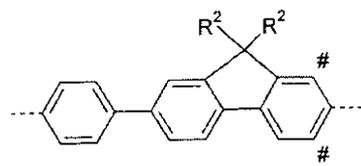
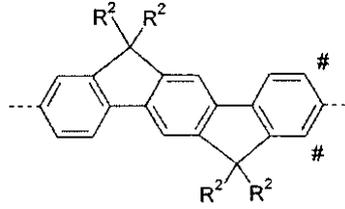
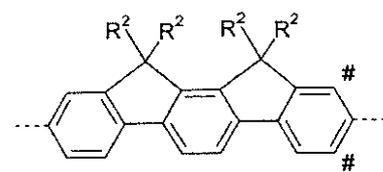
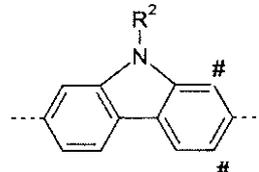
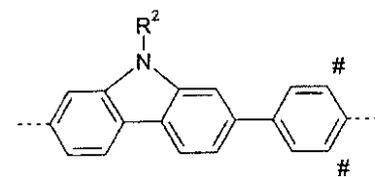
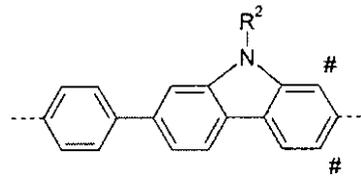
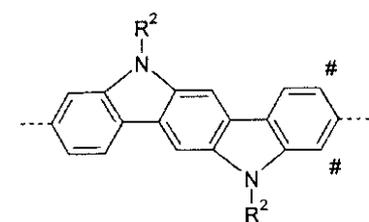
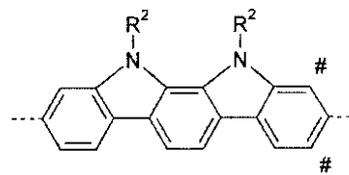
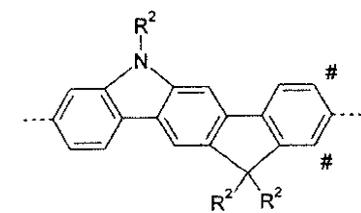
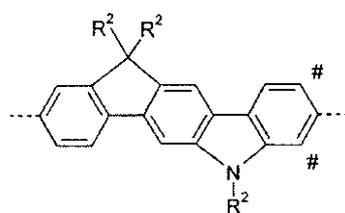
式 (Ar¹-20)



式 (Ar¹-21)

40

【化 1 4】

式 (Ar¹-22)式 (Ar¹-23)式 (Ar¹-24)式 (Ar¹-25)式 (Ar¹-26)式 (Ar¹-27)式 (Ar¹-28)式 (Ar¹-29)式 (Ar¹-30)式 (Ar¹-31)式 (Ar¹-32)式 (Ar¹-33)

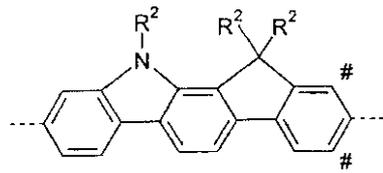
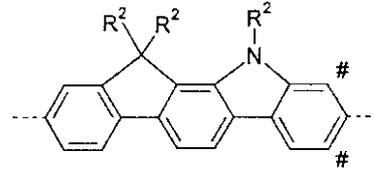
10

20

30

40

【化15】

式(Ar¹-34)式(Ar¹-35)

10

【0072】

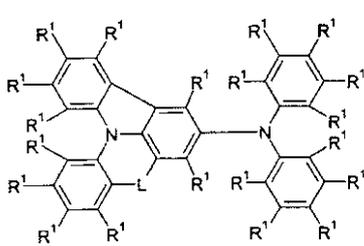
式中、基Phへの結合および窒素原子への結合は、破線によって表され、記号#は、存在する場合、基T¹、T²またはT³への結合位置を示し、ここで、それらの基は、基R¹によって何れもの自由な位置において置換されていてもよく、基R¹は互いに連結されていてもよく、したがって、さらなる脂肪族環または芳香族環を形成してもよい。

【0073】

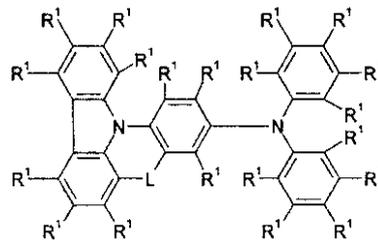
本発明に係る式(I)の化合物の特に好ましい実施形態は、以下の式(I-1)~(I-55)によって表される：

【化16】

20

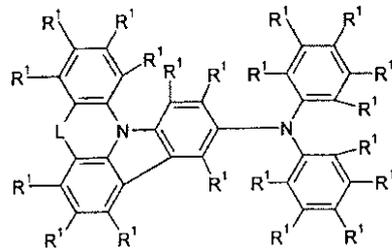


式(I-1)

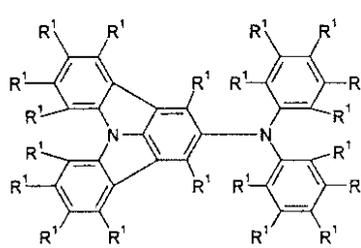


式(I-2)

30



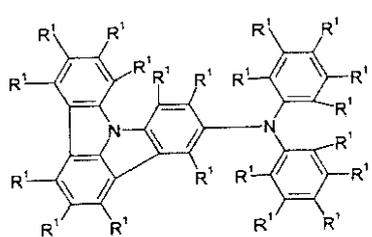
式(I-3)



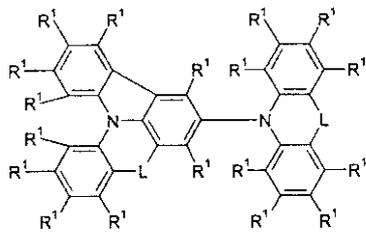
式(I-4)

40

【化 17】

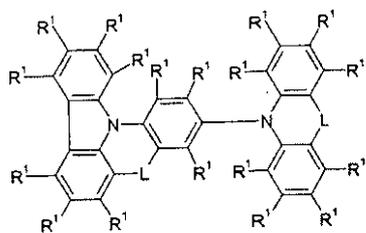


式(1-5)

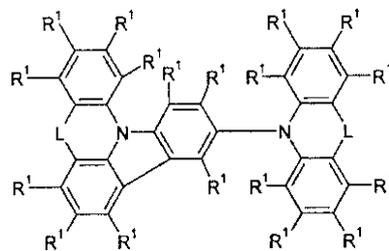


式(1-6)

10

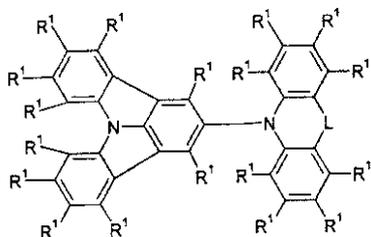


式(1-7)

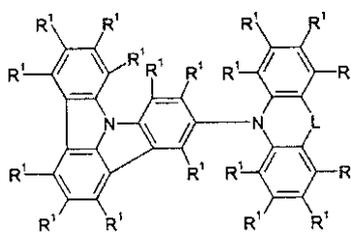


式(1-8)

20

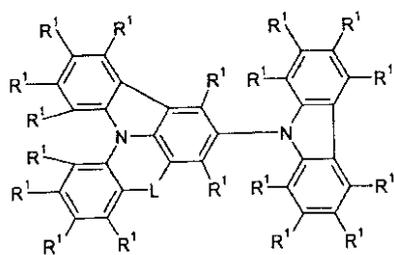


式(1-9)

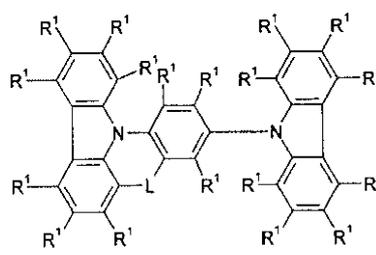


式(1-10)

30

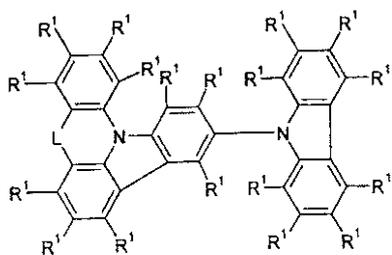


式(1-11)

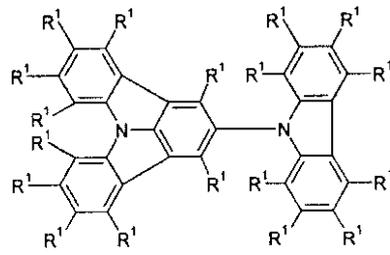


式(1-12)

40

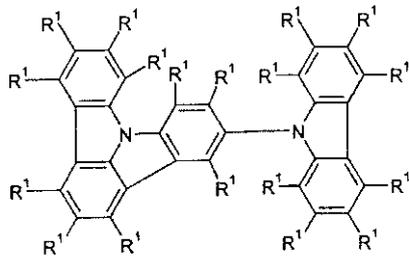


式(1-13)

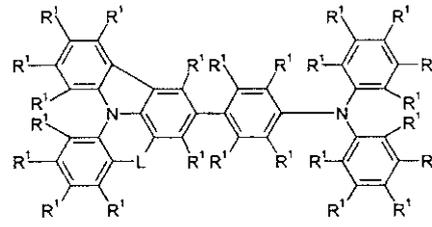


式(1-14)

【化 1 8】

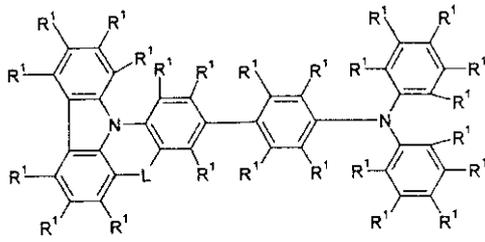


式 (I-15)

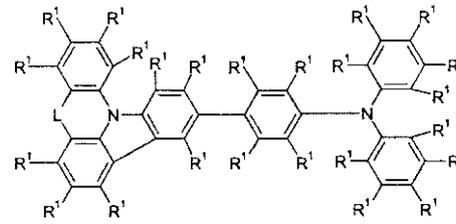


式 (I-16)

10

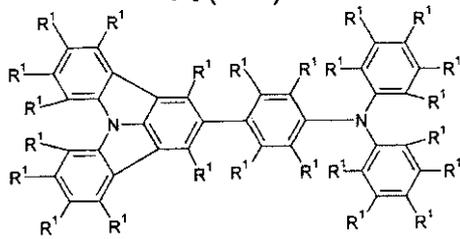


式 (I-17)

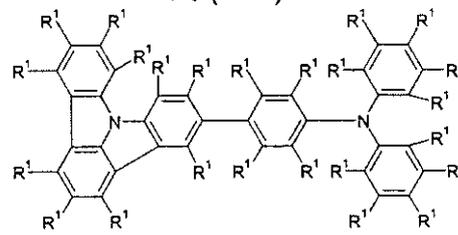


式 (I-18)

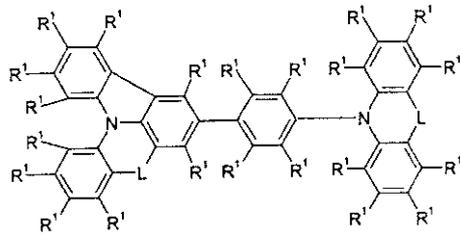
20



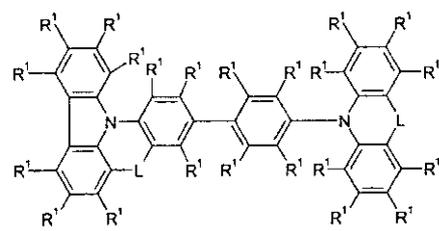
式 (I-19)



式 (I-20)

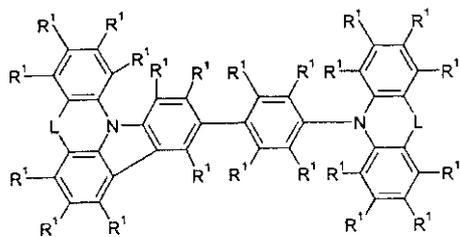


式 (I-21)

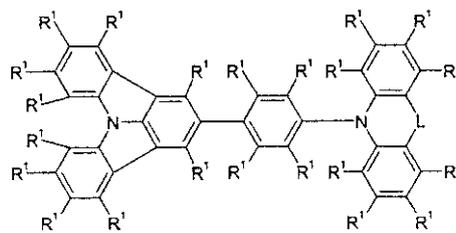


式 (I-22)

30



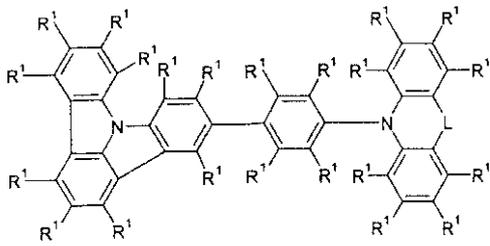
式 (I-23)



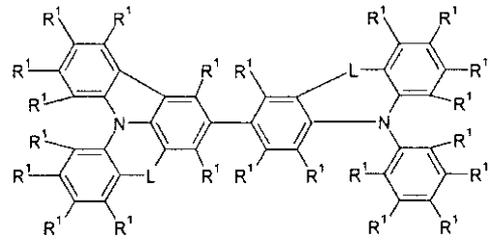
式 (I-24)

40

【化 19】

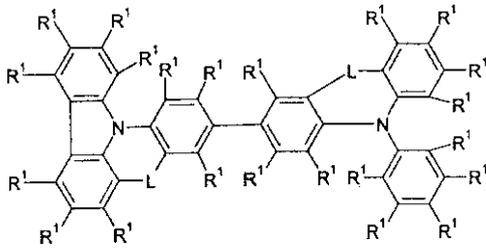


式 (I-25)

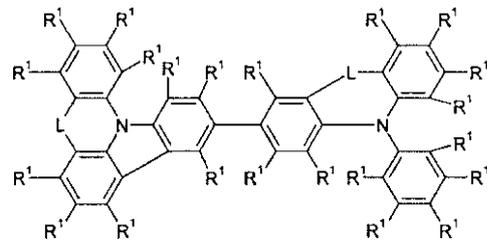


式 (I-26)

10

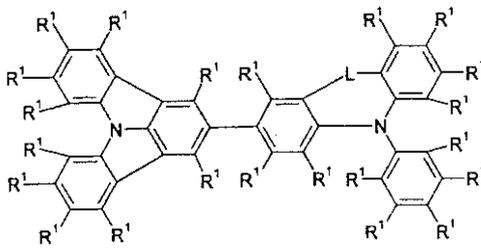


式 (I-27)

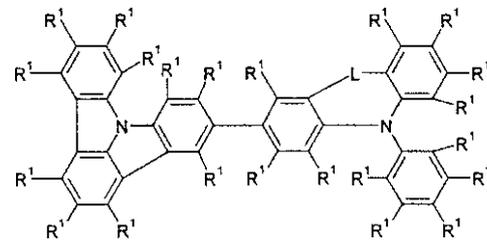


式 (I-28)

20

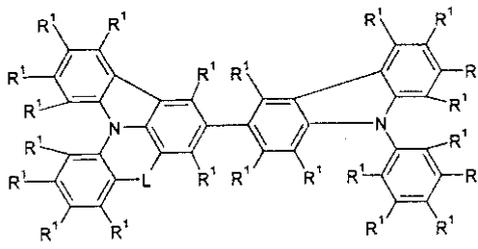


式 (I-29)

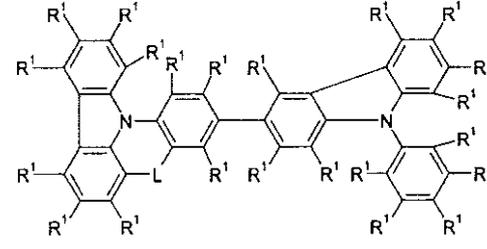


式 (I-30)

30

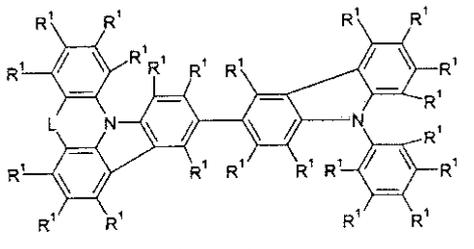


式 (I-31)

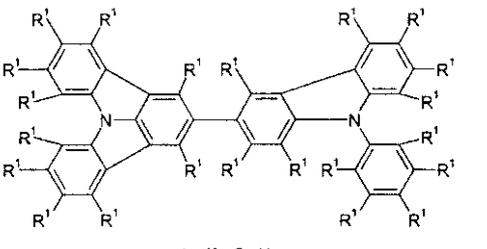


式 (I-32)

40

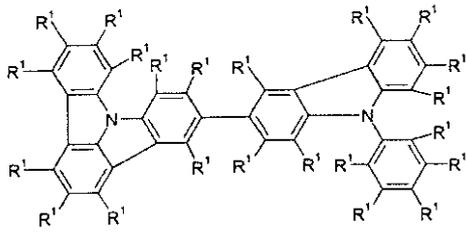


式 (I-33)

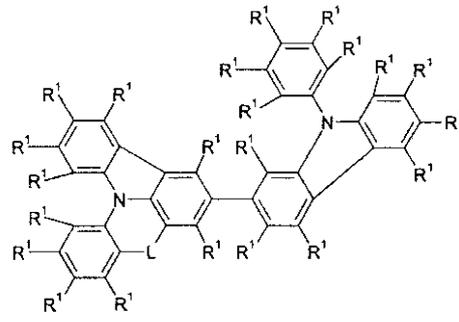


式 (I-34)

【化 20】

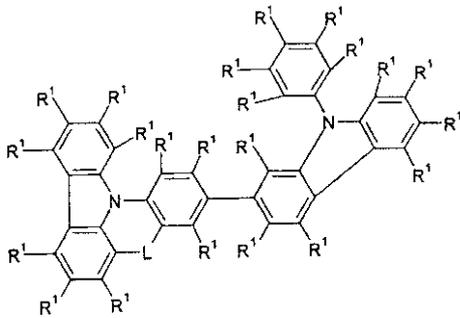


式 (I-35)

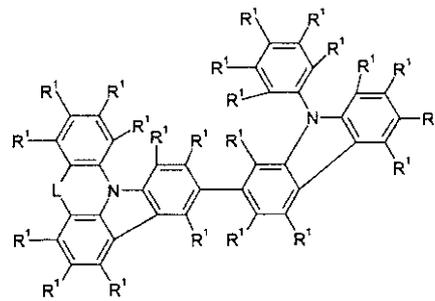


式 (I-36)

10

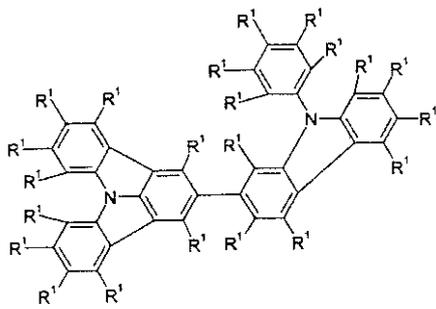


式 (I-37)

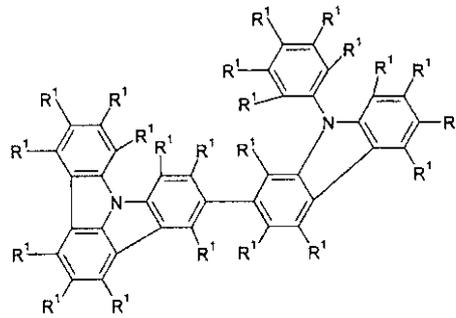


式 (I-38)

20

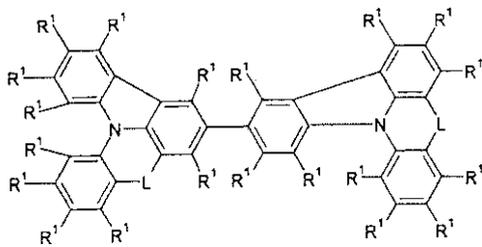


式 (I-39)

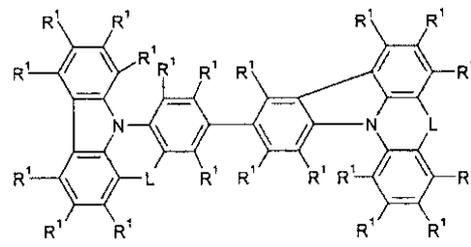


式 (I-40)

30



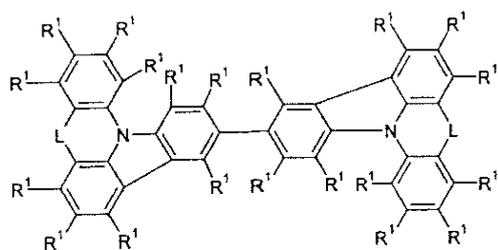
式 (I-41)



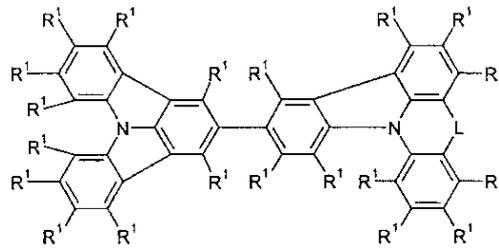
式 (I-42)

40

【化 2 1】

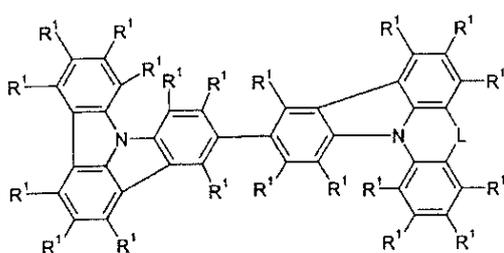


式 (I-43)

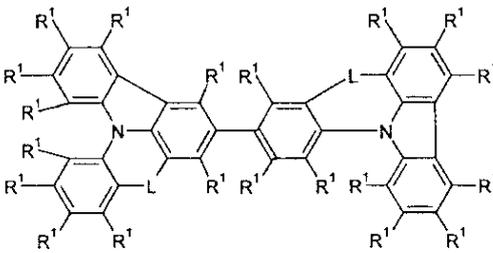


式 (I-44)

10

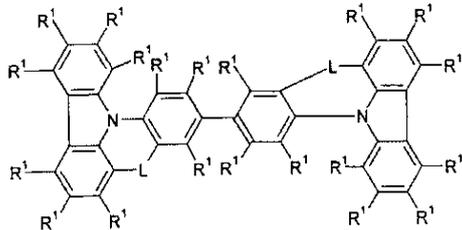


式 (I-45)

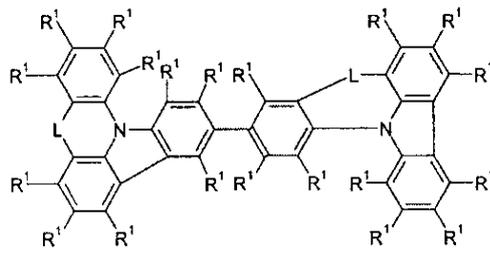


式 (I-46)

20

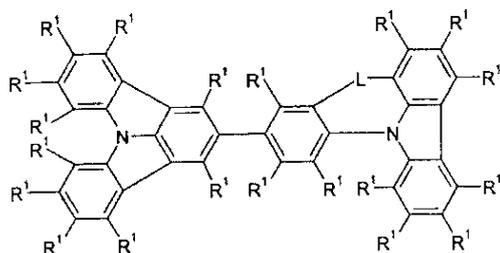


式 (I-47)

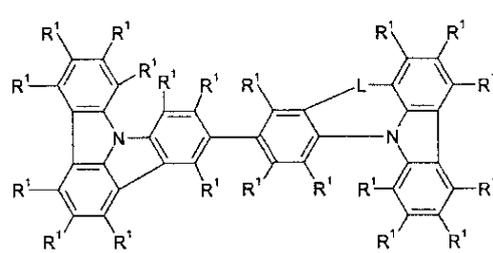


式 (I-48)

30

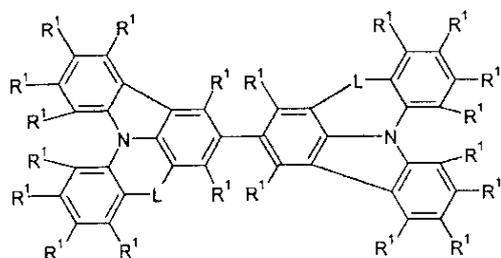


式 (I-49)

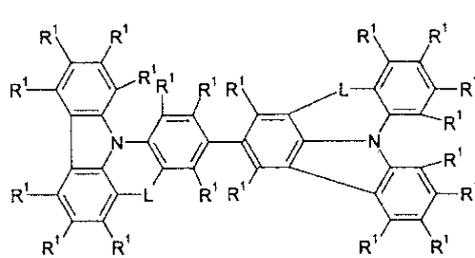


式 (I-50)

40

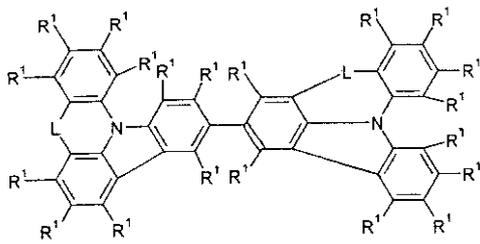


式 (I-51)

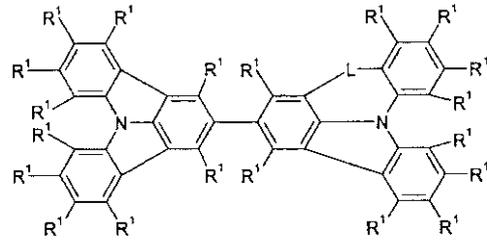


式 (I-52)

【化 2 2】

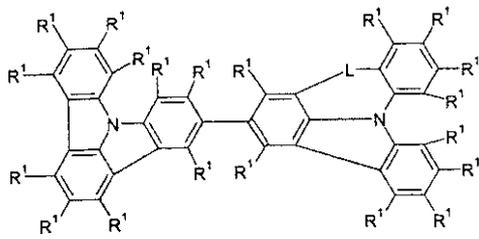


式 (I-53)



式 (I-54)

10



式 (I-55)

20

【0074】

式中、基 L および R^1 は、上記で指示されるように定義される。上記で指示された式中の L は、特に非常に好ましくは、出現することに同一または異なり、 $C(R^2)_2$ および NR^2 から選択される。

【0075】

この場合、 R^2 は、好ましくは、H、D、1～8個の炭素原子を有する直鎖のアルキル基、3～8個の炭素原子を有する分岐のアルキル基、または6～10個の炭素原子を有するアリール基から選択され、ここで、前記基は、各々、1つ以上の基 R^3 によって置換されていてもよい

30

一般に、本出願において言及される好ましい実施形態および特に好ましい実施形態は、本発明に従って、所望により互いに組み合わせることができる。

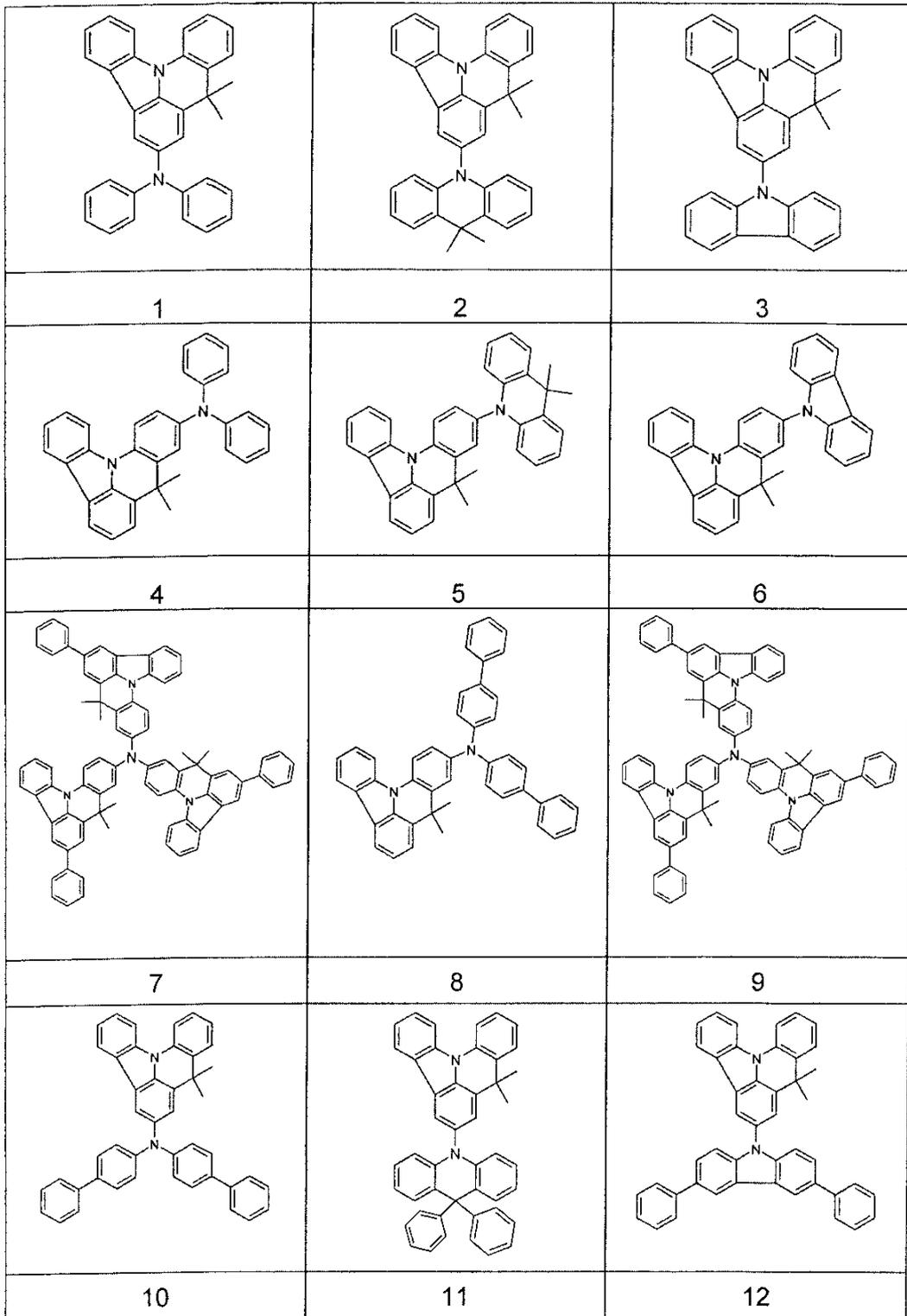
【0076】

特に、 Ar^1 、 R^1 、Y、 T^1 、 T^2 、 T^3 および L が、互いに組み合わせて生じることが、前記好ましい実施形態について好ましい。

【0077】

式 (I) の好ましい化合物の例は、以下に示される構造である。

【化 2 3】



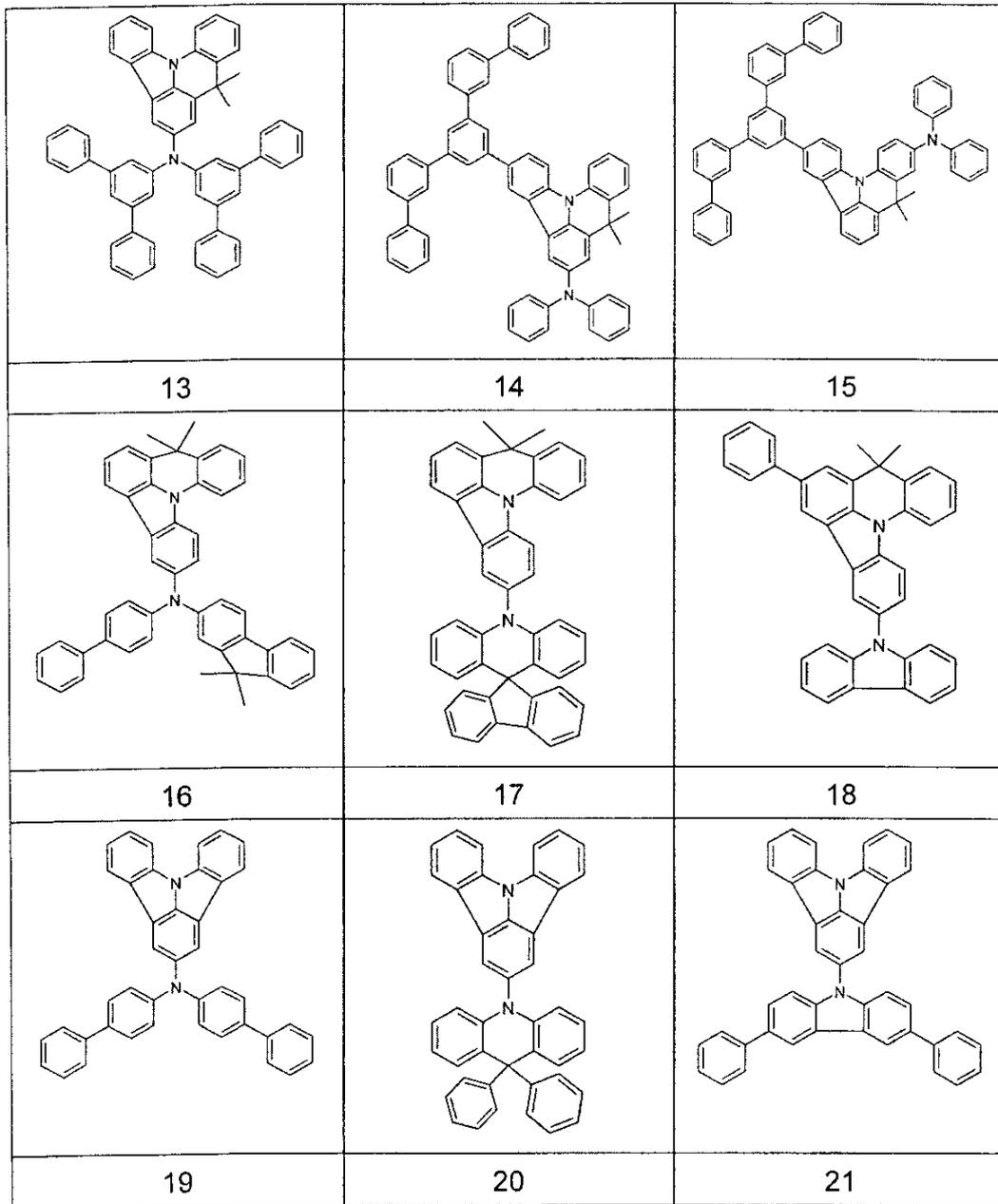
10

20

30

40

【化 2 4】

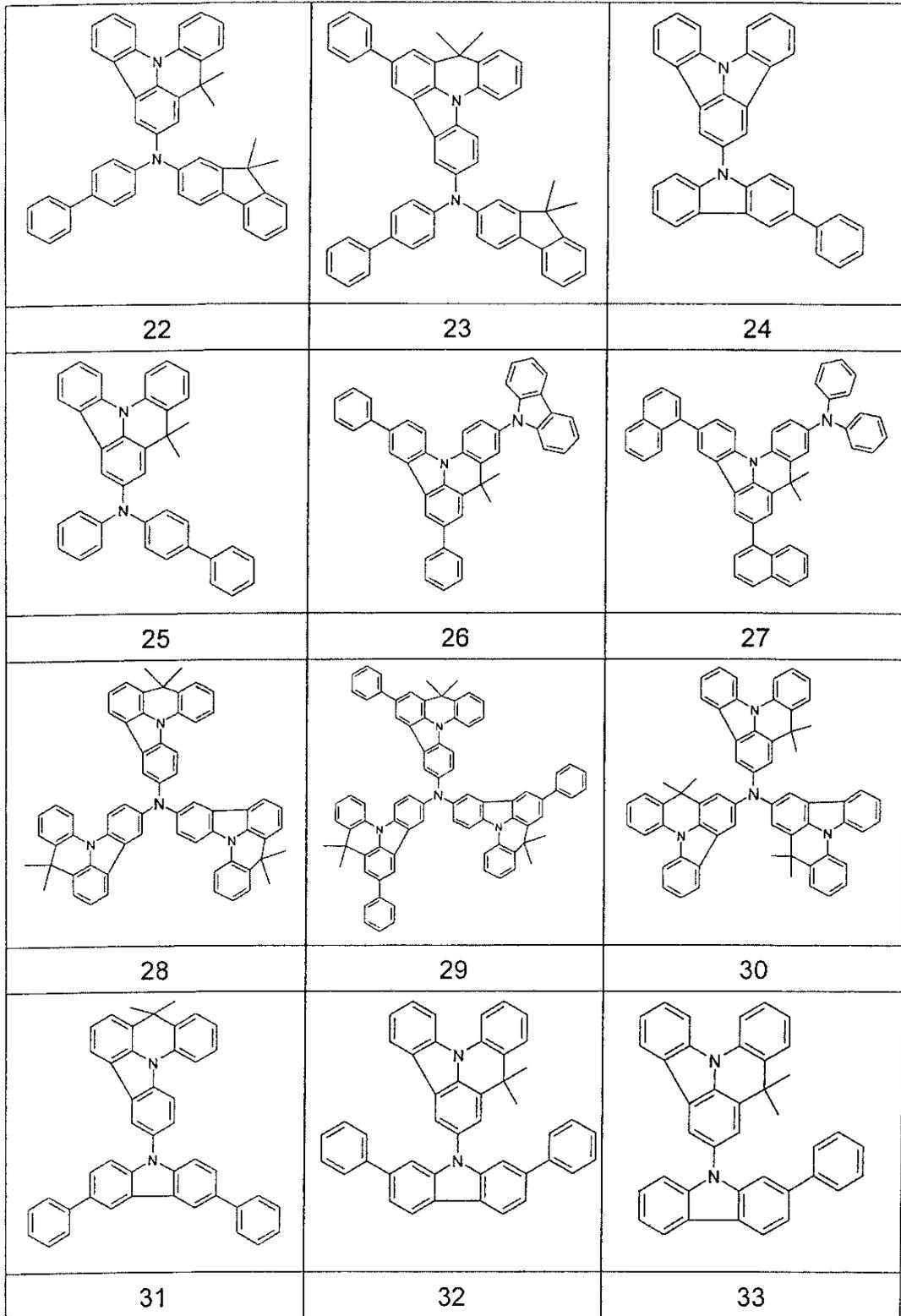


10

20

30

【化 2 5】



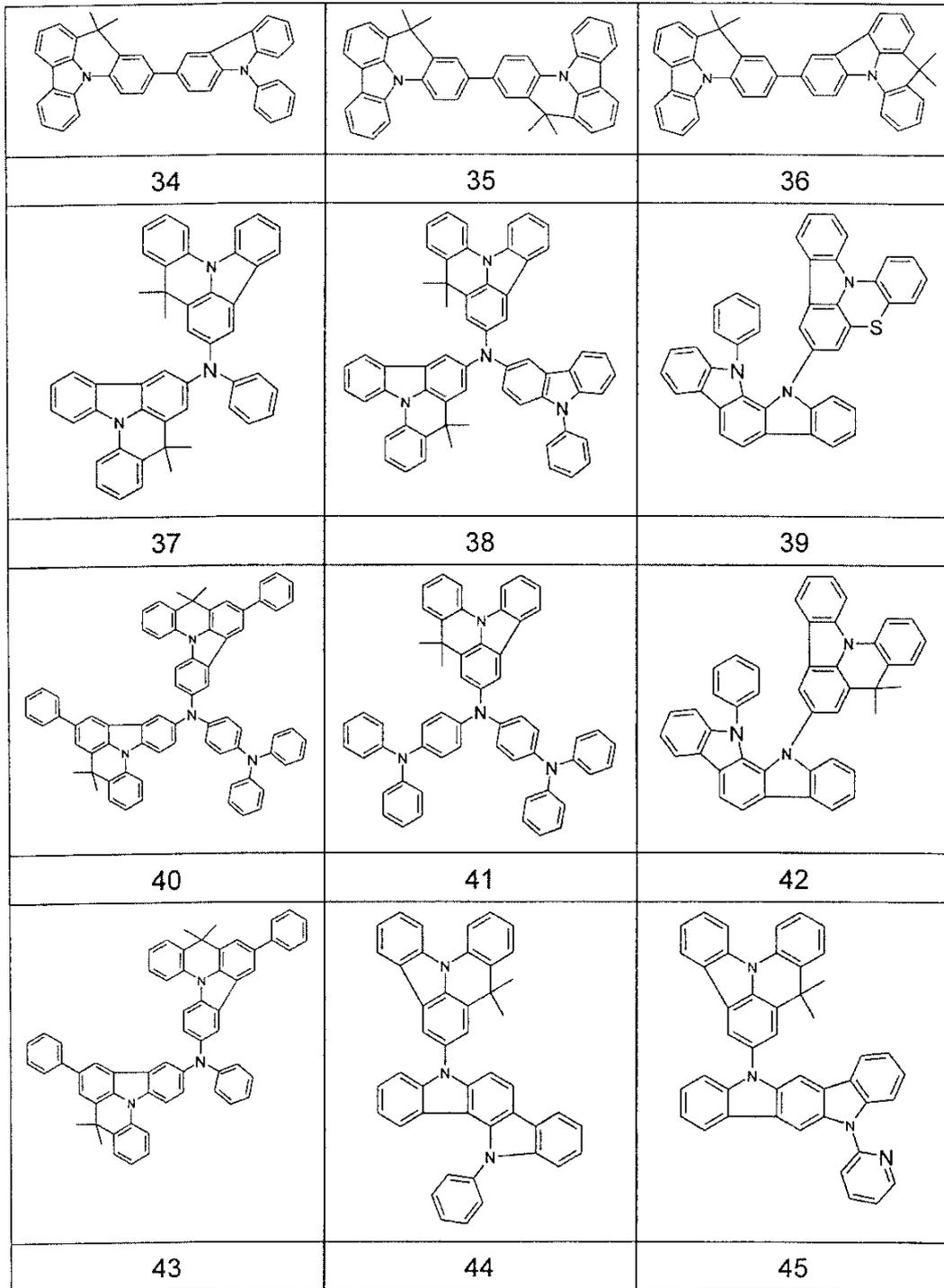
10

20

30

40

【化 26】



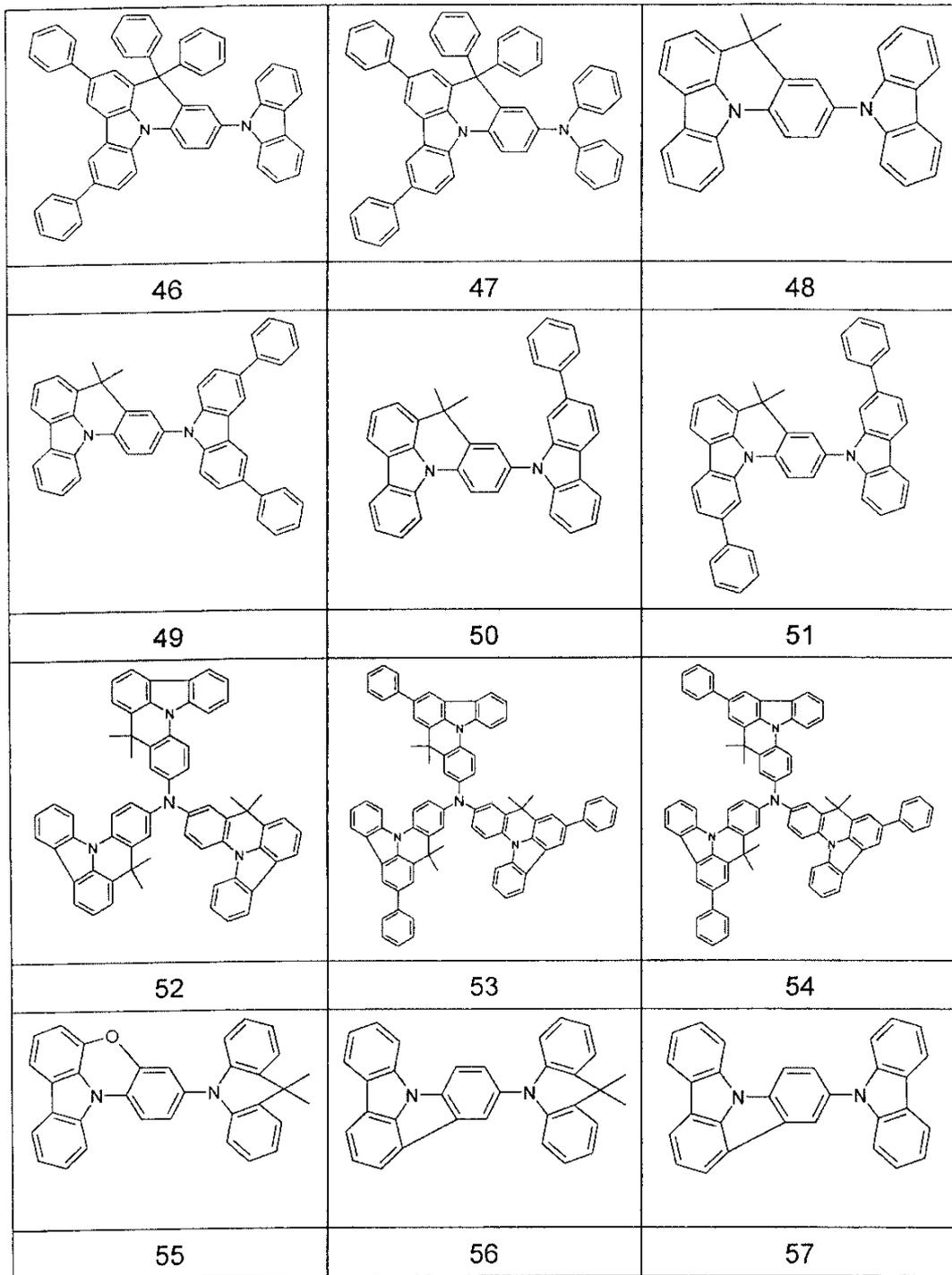
10

20

30

40

【化 27】



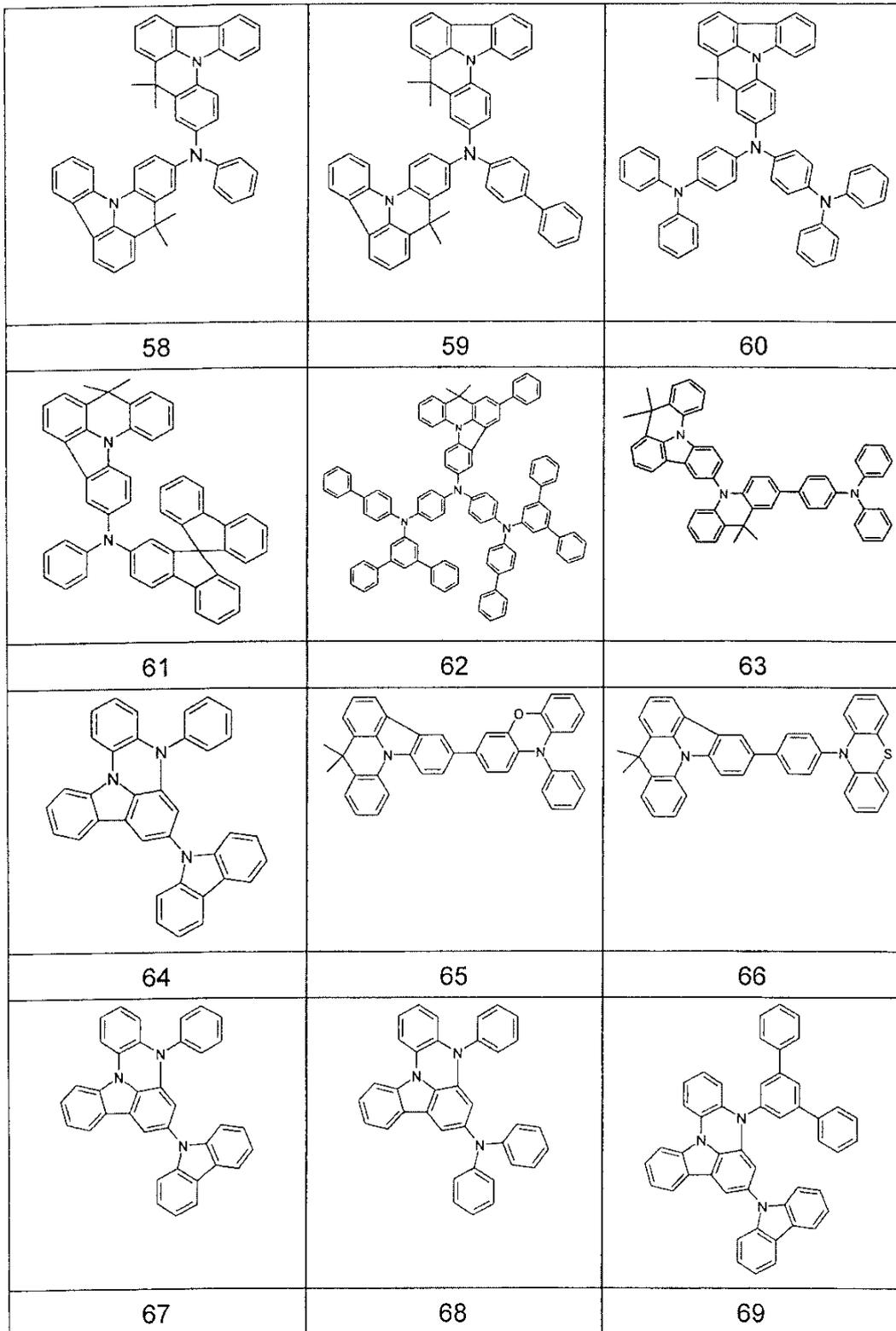
10

20

30

40

【化 2 8】



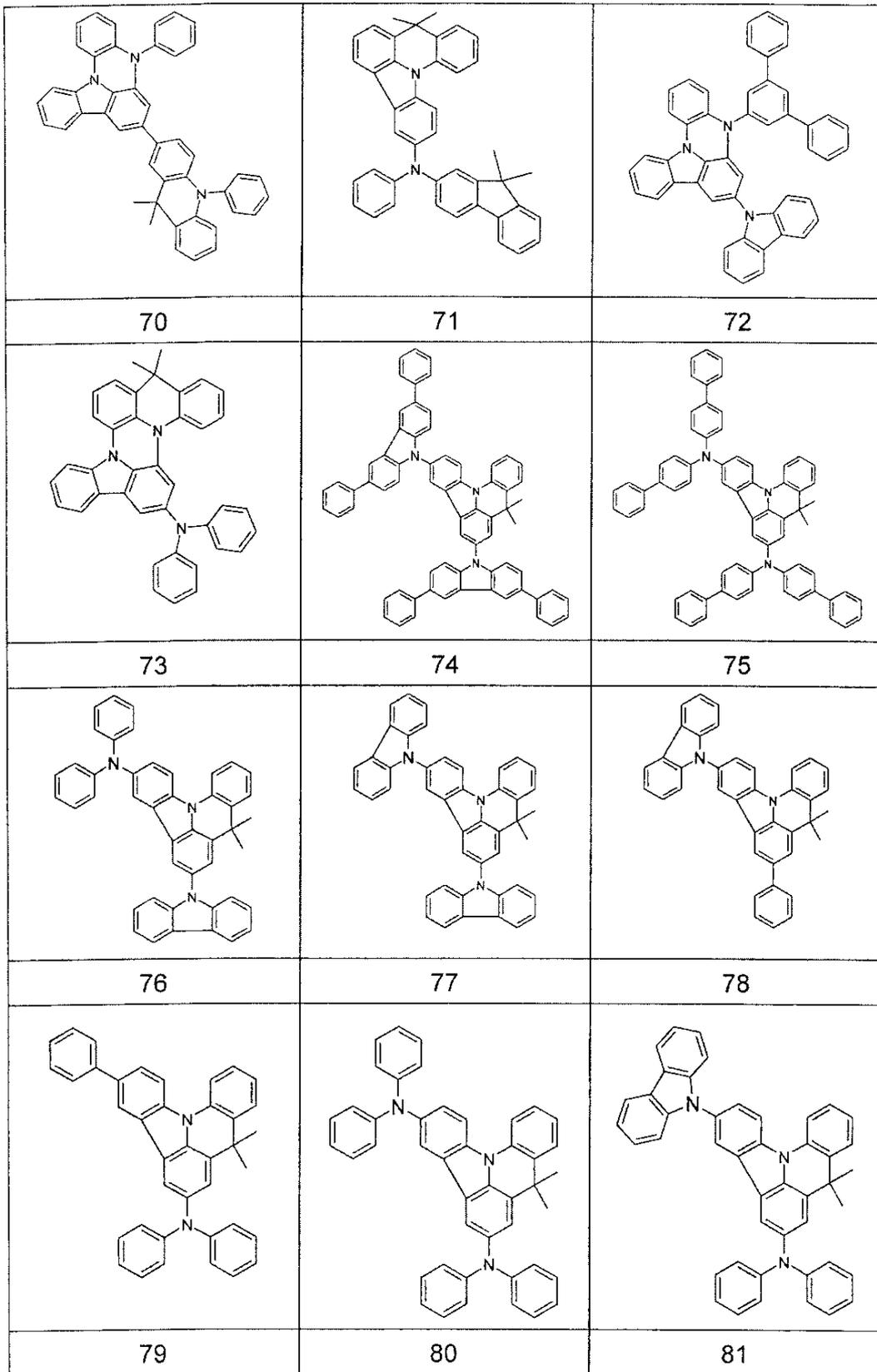
10

20

30

40

【化 2 9】



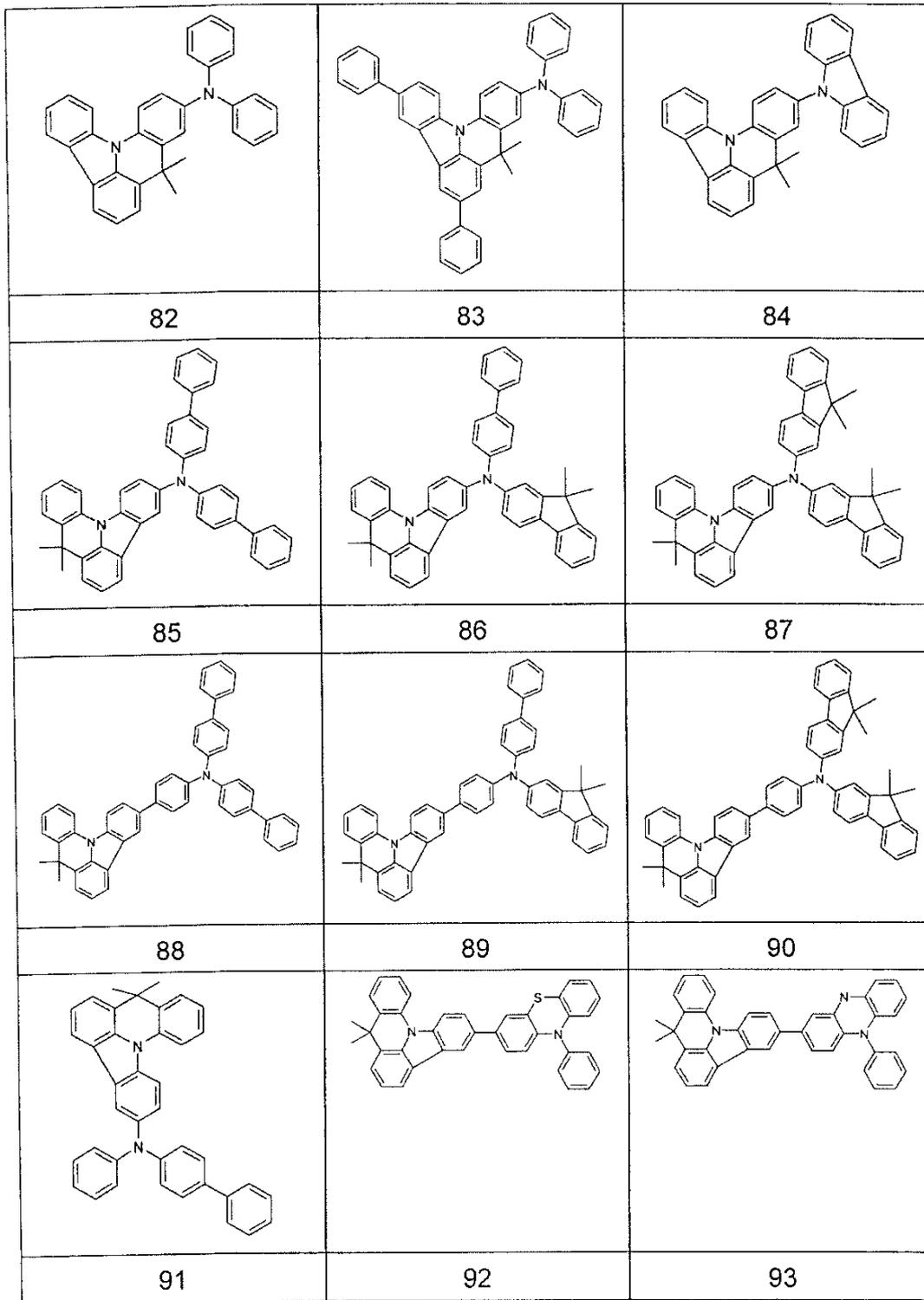
10

20

30

40

【化 3 0】



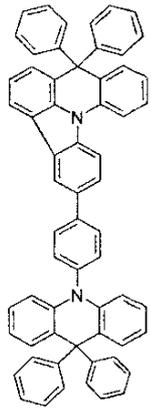
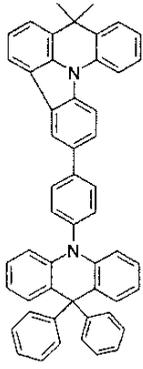
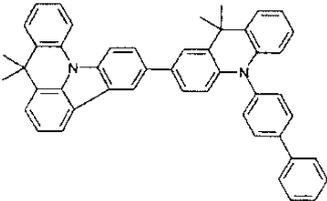
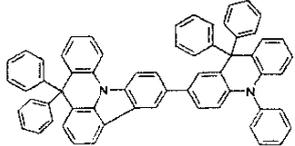
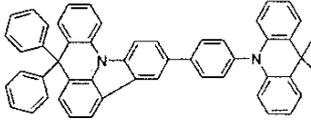
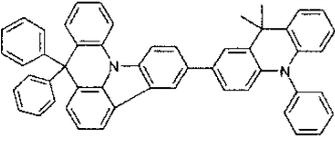
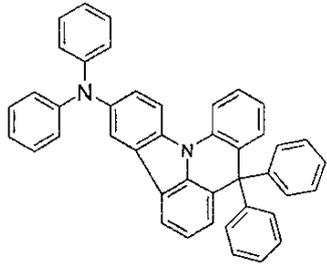
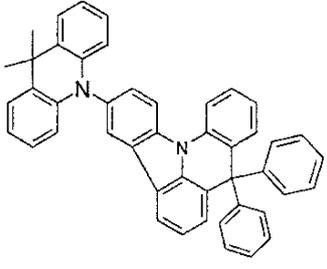
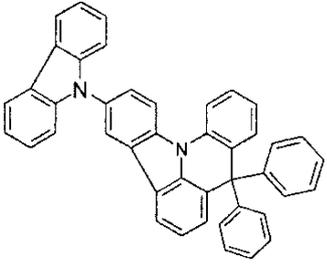
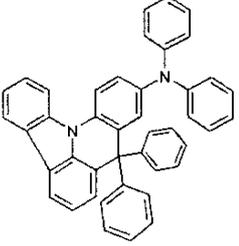
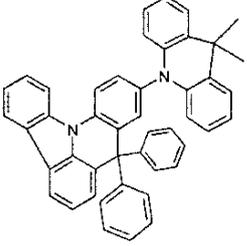
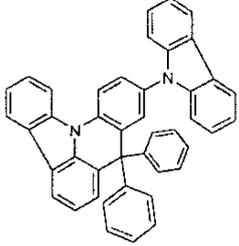
10

20

30

40

【化 3 1】

		
94	95	96
		
97	98	99
		
100	101	102
		
103	104	104

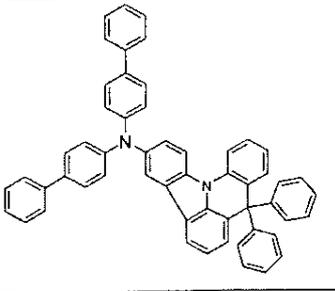
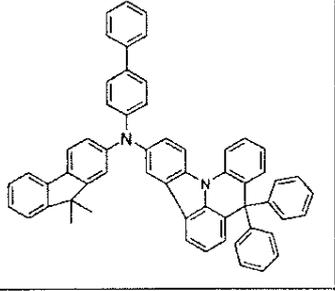
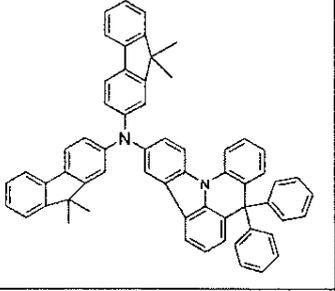
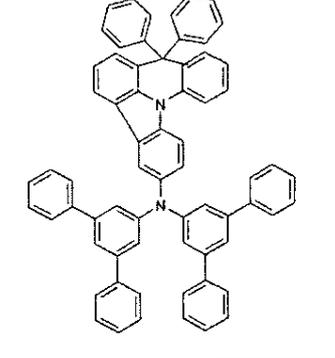
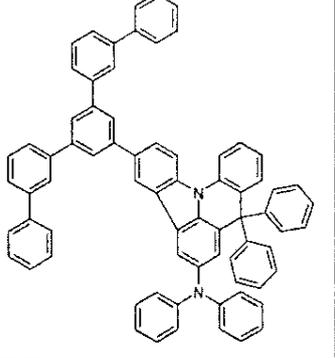
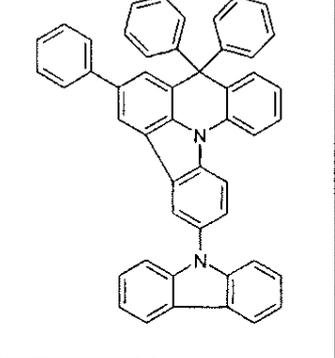
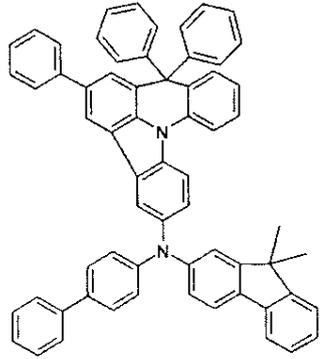
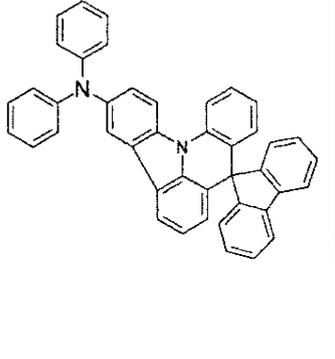
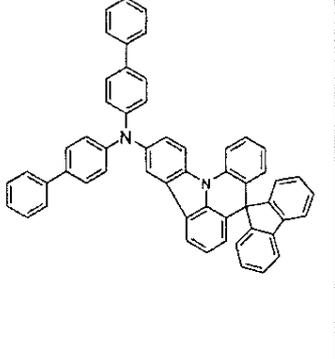
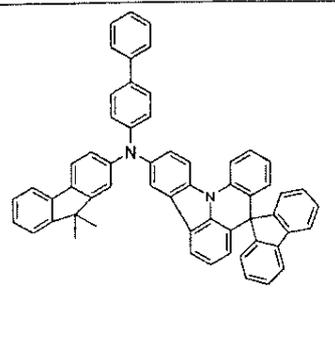
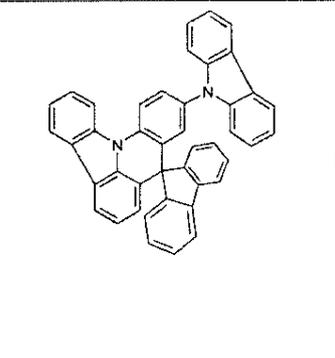
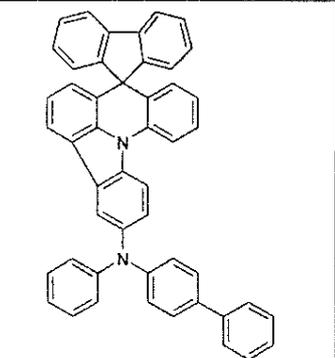
10

20

30

40

【化 3 2】

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

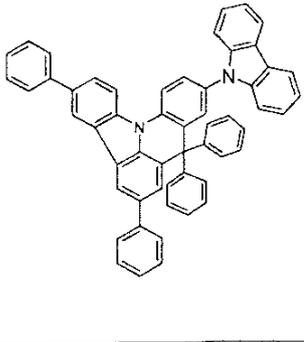
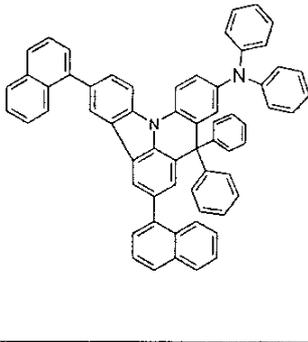
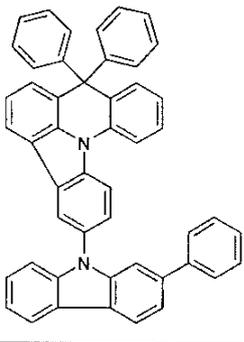
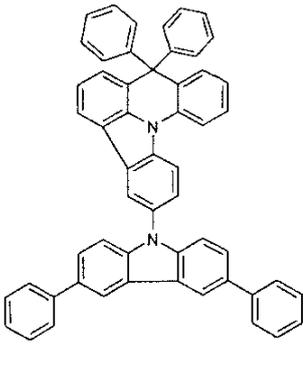
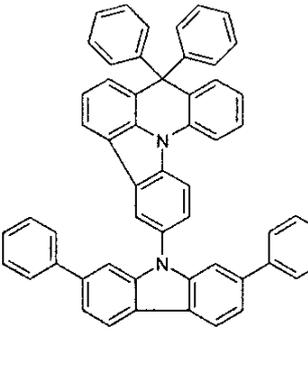
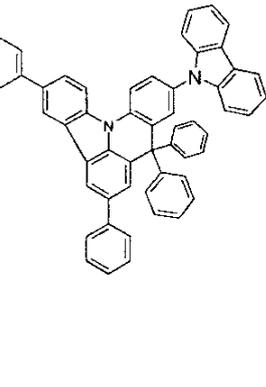
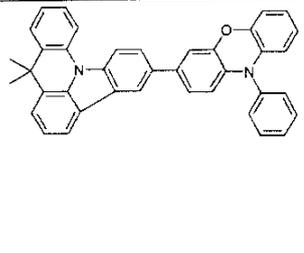
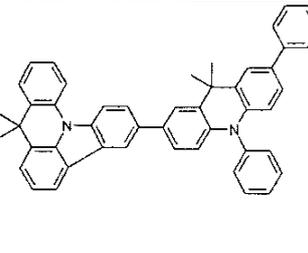
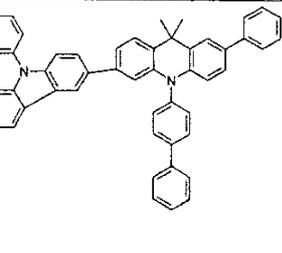
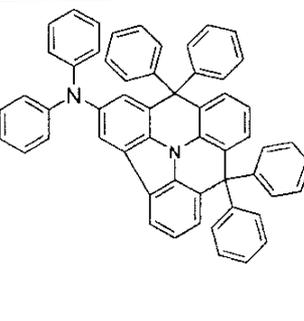
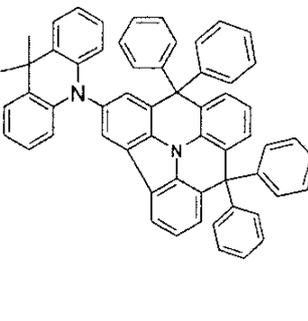
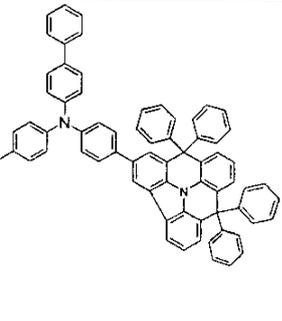
10

20

30

40

【化 3 3】

		
118	118	120
		
121	122	123
		
124	125	126
		
127	128	129

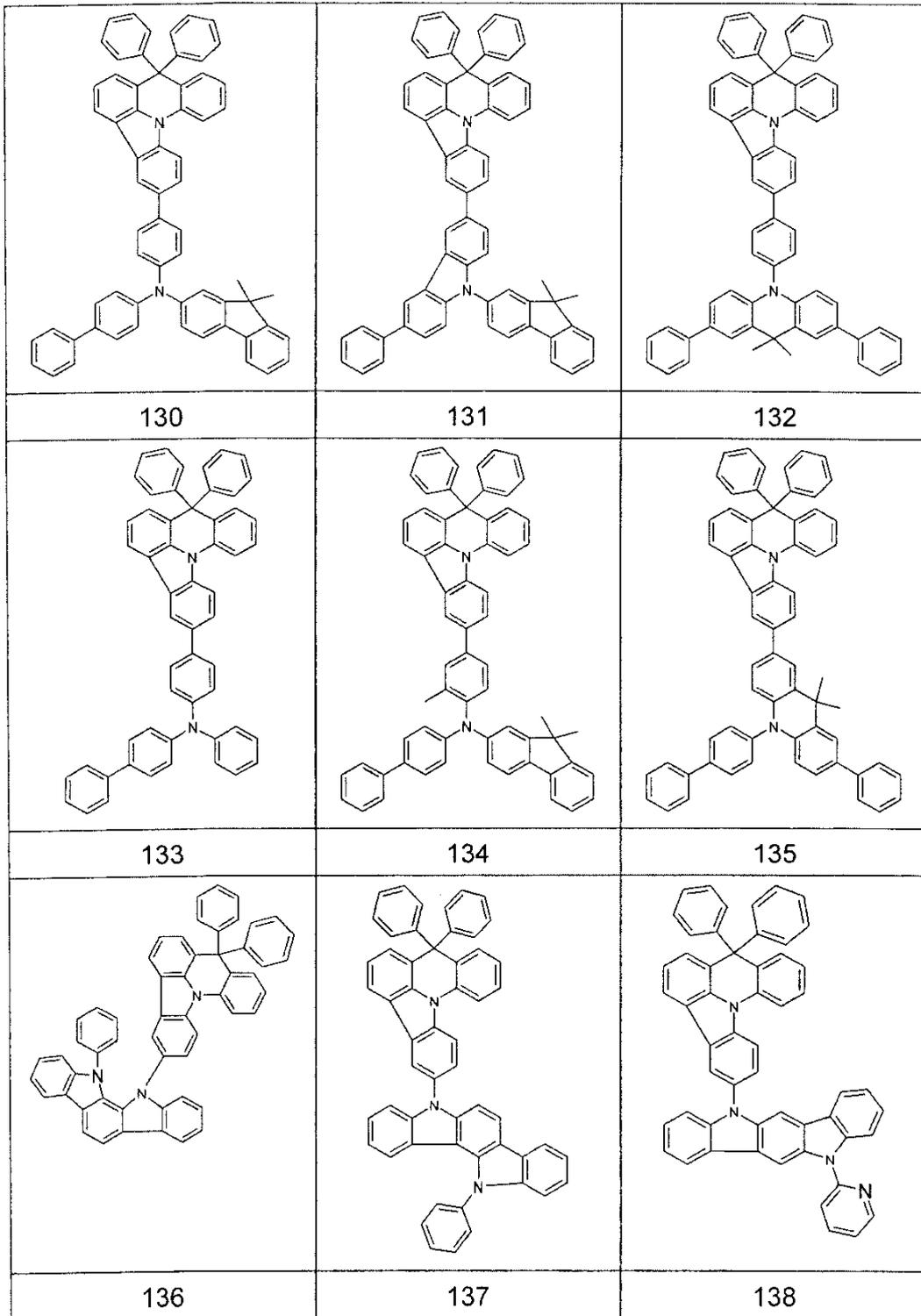
10

20

30

40

【化 3 4】



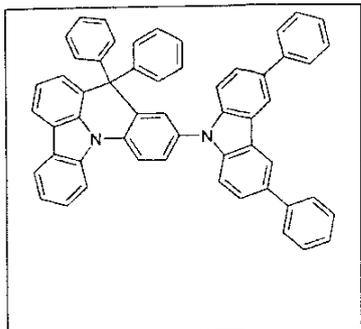
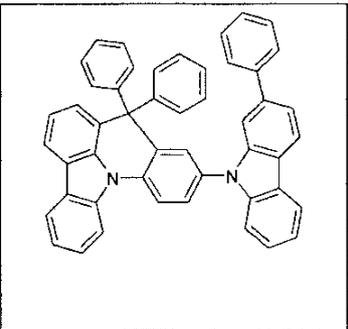
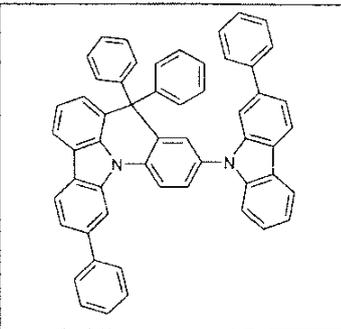
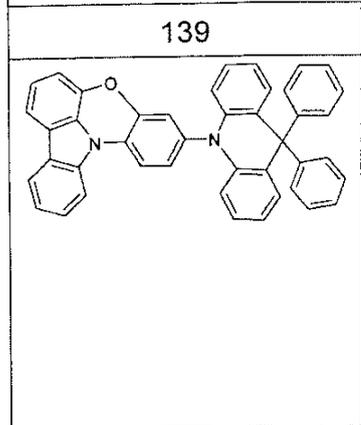
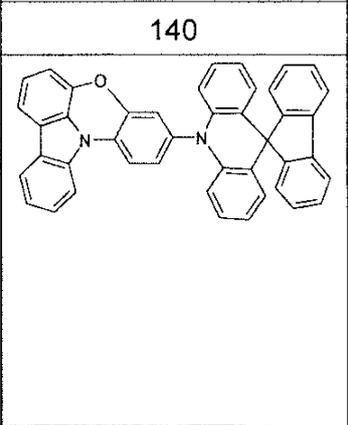
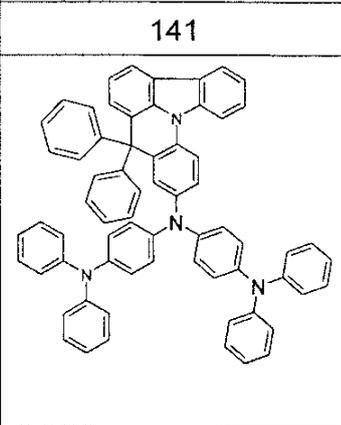
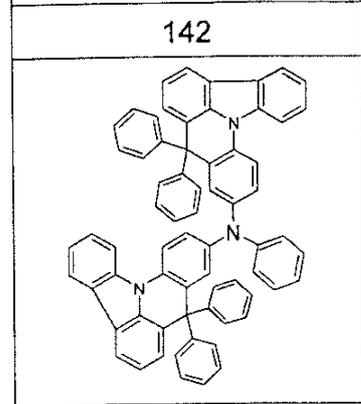
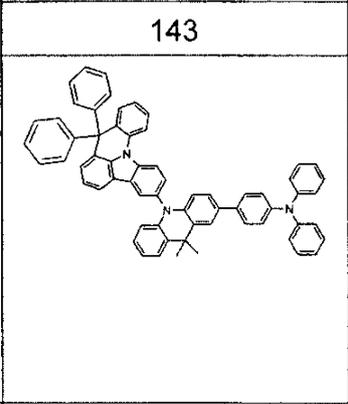
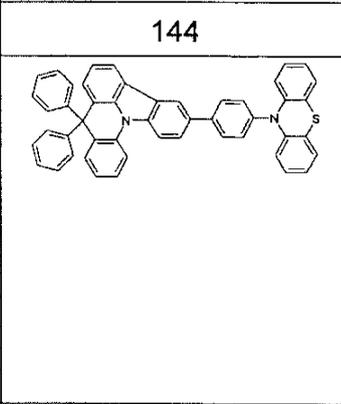
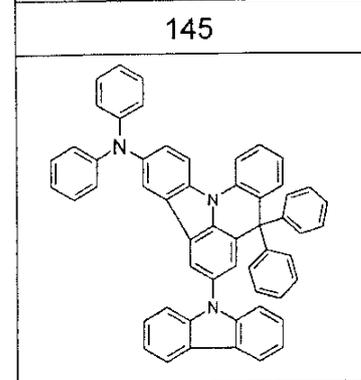
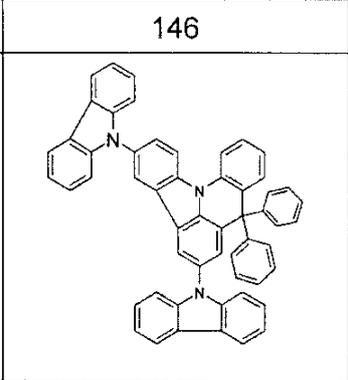
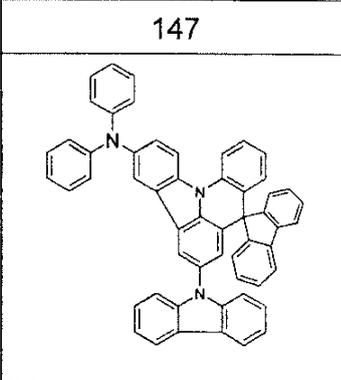
10

20

30

40

【化 3 5】

		
139	140	141
		
142	143	144
		
145	146	147
		
148	149	150

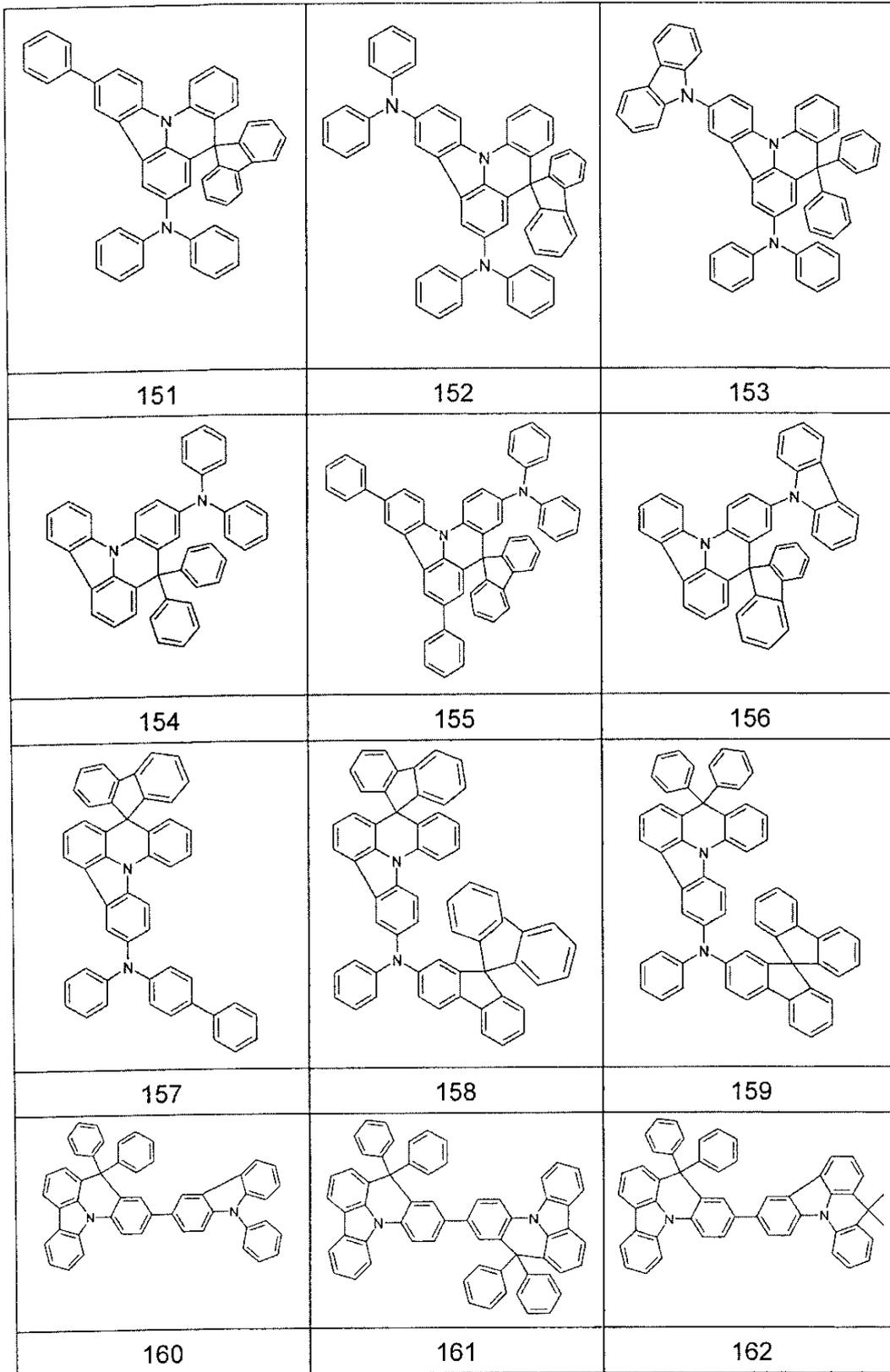
10

20

30

40

【化 3 6 - 1】



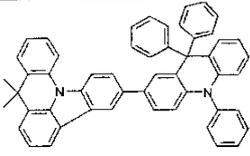
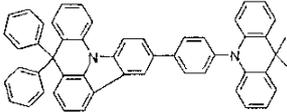
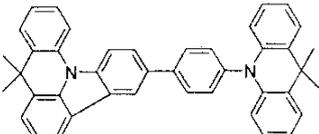
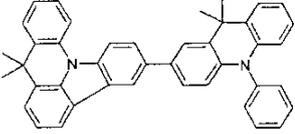
10

20

30

40

【化 3 6 - 2】

		
163	164	165
		
166		

10

【 0 0 7 8 】

本発明に係る化合物は、当業者に知られている合成ステップ、例えば、遷移金属触媒カップリング反応および酸触媒閉環反応によって得ることができる。

【 0 0 7 9 】

したがって、例えば、ジアリールアミノ基は、ハロゲン置換された基 Ar^1 が本発明に係る化合物の前駆分子に存在する場合、ハートウィッグ - ブッフバルト (Hartwig - Buchwald) カップリングによって導入され得る。

20

【 0 0 8 0 】

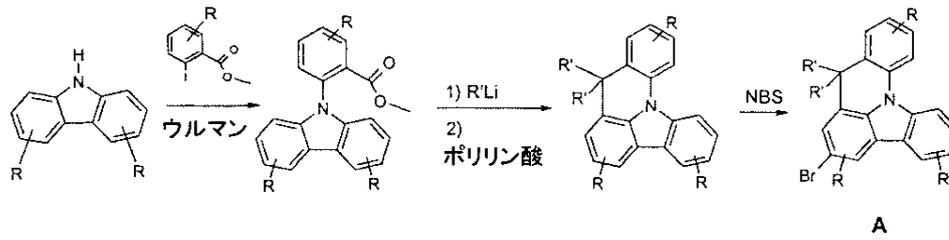
以下のスキーム 1 は、本発明に係る化合物の合成において重要な中間体である種々の架橋されたトリアリールアミン単位 (A - E) の合成を示す。

【 0 0 8 1 】

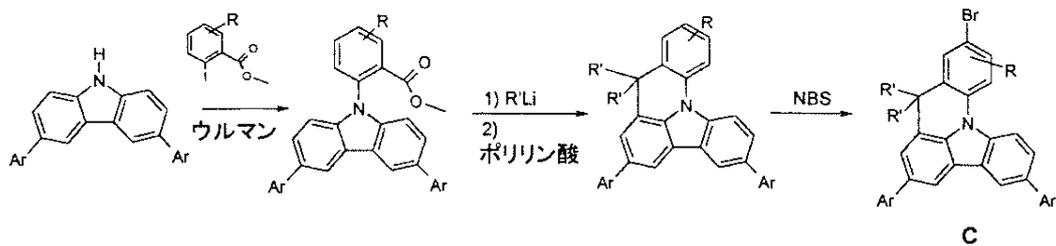
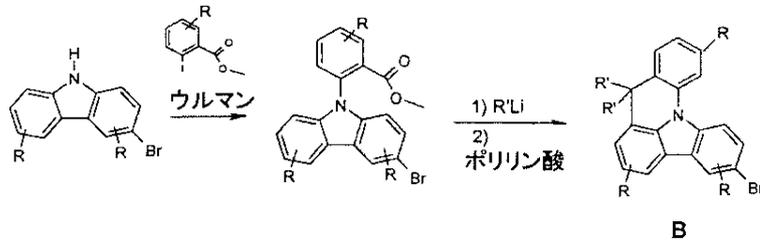
一般に、以下のスキームにおける R および R' は、上記 R^1 および R^2 によって定義された通りの基を表す。

【化37】

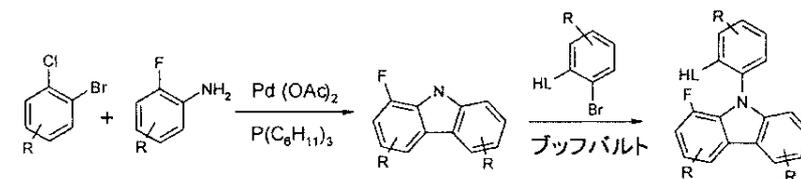
スキーム1



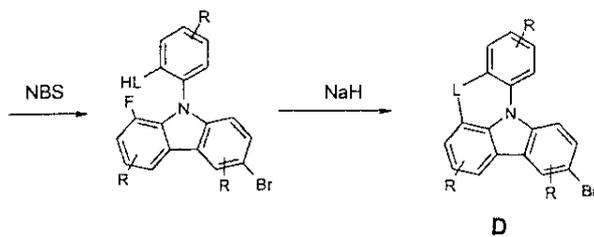
10



20



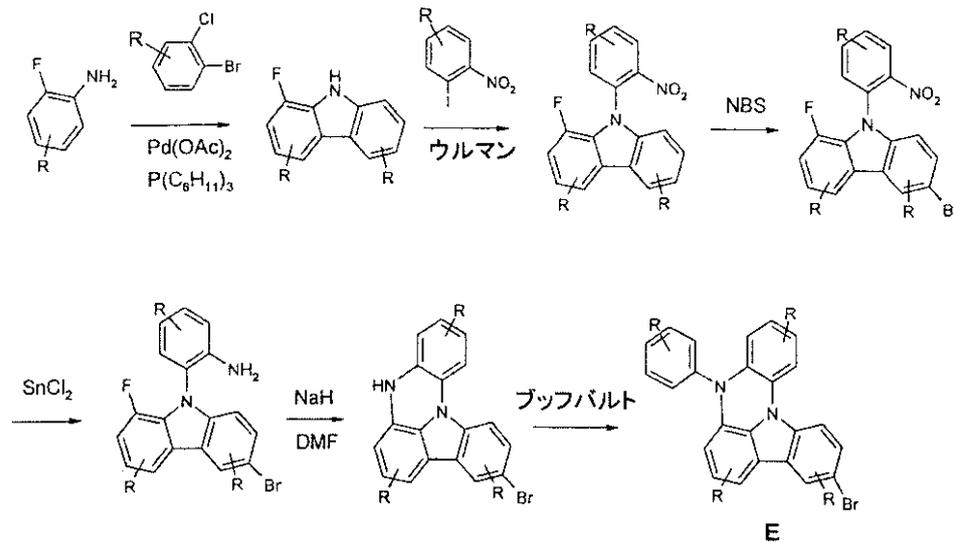
30



L = OまたはS

40

【化 3 8】



10

【 0 0 8 2】

所望の臭素置換 (A - C、スキーム 1) に依存して、環化は、芳香族の親構造の臭素化の前または後で第三級アルコールの中間体を介して行うことができる。閉環は、二価 (C R')₂ 架橋を与える (A - C、スキーム 1)。

20

【 0 0 8 3】

(C R')₂ 架橋の形成のための適切な開始化合物は、例えば、カルボキシレート基またはアセチル基であり、次に、それらを閉環反応において炭素橋に変換し得る。また、フェノール基またはチオフェノール基は適切であり、次に、閉環反応 (D) において酸素橋または硫黄橋に変換し得る。同様に、ニトロ基またはアミノ基は適切であり、次に、閉環反応 (E) において窒素橋に変換し得る。続いて、二価架橋は、さらなる基、例えば、アルキル基またはアリール基によって置換されていてもよい。次に、このようにして製造された架橋されたカルバゾール化合物は、さらなるステップにおいて、官能化、例えば、ハロゲン化、好ましくは臭素化され得る。

30

【 0 0 8 4】

スキーム 1 からの官能化、特に臭素化された化合物は、スキーム 2 に示されるように、さらなる官能化のための中心単位を表す。

【 0 0 8 5】

ジアリールアミンへのハートウィッグ - ブッフバルトカップリングは、本発明に係る化合物または前駆化合物に直接導き、それらは、さらに官能化され得る。このようにして、アリールアミノおよびカルバゾール基を導入することができる (スキーム 2)。

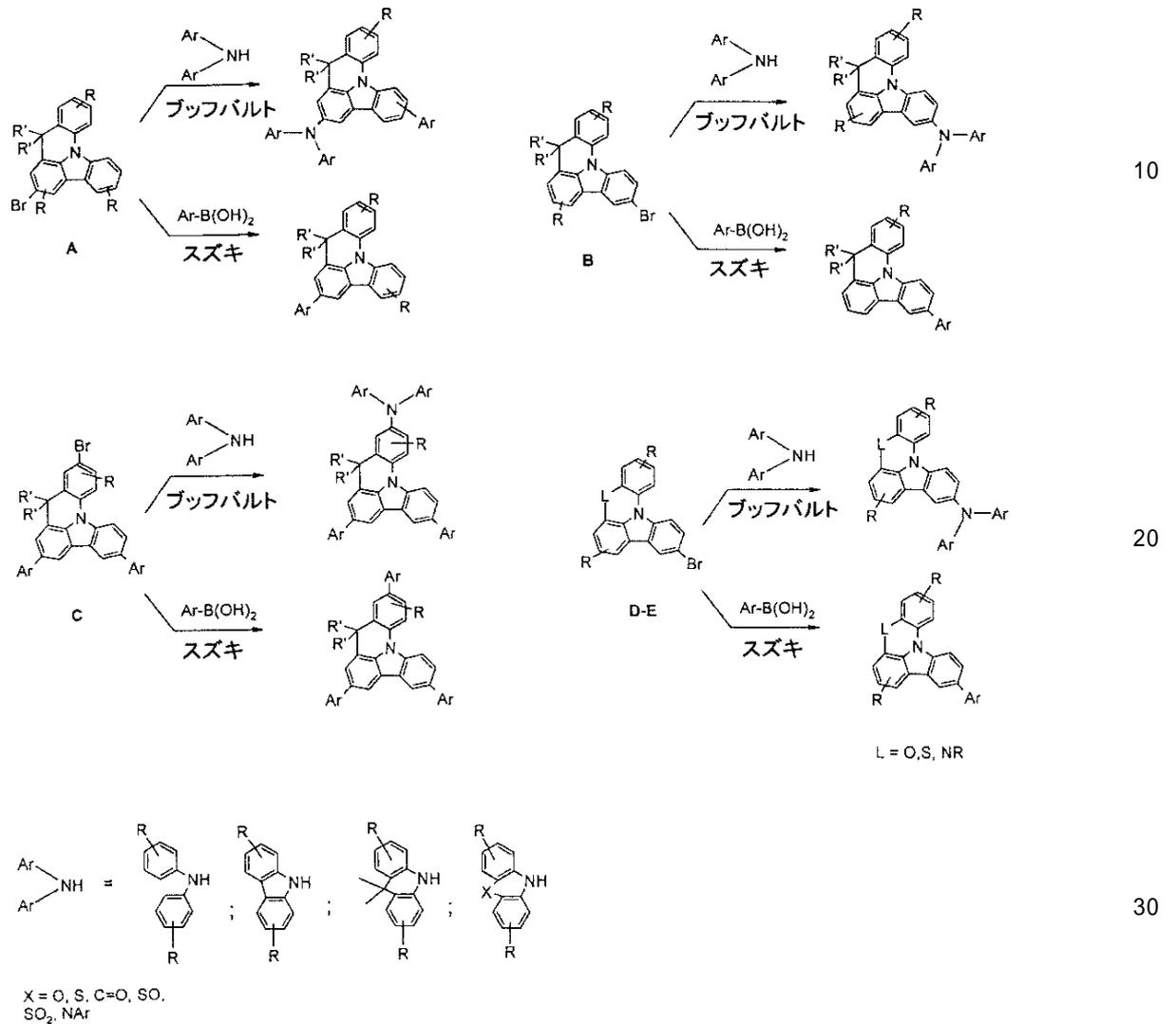
【 0 0 8 6】

あるいは、化合物 A ~ E は、対応するアリールボロン酸へのスズキ (Suzuki) カップリングによってアリール置換された化合物に変換し得る。このようにして、相対的に大きな芳香族系は、式 (I) の化合物において、基 Ar¹ の実施形態として達成され得る。これは、続いて、ハロゲン化し、アリールアミノ基またはカルバゾール基にカップリングして、再び、本発明に係る化合物を得てもよい。

40

【化39】

スキーム2



【0087】

さらに、本発明は、式(I)の化合物を製造するための方法であって、架橋基Y、T¹、T²、T³またはLを導入するために少なくとも1つの閉環反応が行われることを特徴とする方法に関する。

【0088】

閉環反応は、任意選択で、続いて、ジアリールアミノ基を導入するためのカップリング反応を行ってもよい。あるいは、前記ジアリールアミノ基は、すでに、架橋基の導入前に分子に存在していてもよい。

【0089】

上記される本発明に係る化合物、特に、臭素、ヨウ素、ボロン酸、またはボロン酸エステルなどの反応性脱離基によって置換される化合物は、対応するオリゴマー、 dend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用いることができる。ここで、オリゴマー化または重合は、好ましくは、ハロゲン官能性またはボロン酸官能性を介して行われる。

【0090】

10

20

30

40

50

したがって、本発明は、さらに、式(I)の1種以上の化合物を含むオリゴマー、ポリマーまたは dendrimer であって、ポリマー、オリゴマーまたは dendrimer への結合(単数または複数)は、式(I)における R^1 または R^2 によって置換される何れかの所望の位置に局在化されてもよいオリゴマー、ポリマーまたは dendrimer に関する。式(I)の化合物の連結に依存して、この化合物は、オリゴマーもしくはポリマーの側鎖の一部、または主鎖の一部である。本発明の意味におけるオリゴマーは、少なくとも3つのモノマー単位から構築される化合物を意味するものとする。本発明の意味におけるポリマーは、少なくとも10個のモノマー単位から構築される化合物を意味するものとされる。本発明に係るポリマー、オリゴマーまたは dendrimer は、コンジュゲートされてもよく、部分的にコンジュゲートされてもよく、またはコンジュゲートされなくてもよい。本発明に係るオリゴマーまたはポリマーは、直線状、分岐状、または樹枝状であってもよい。直線状となるように連結された構造では、式(I)の単位は、互いに直接連結されていてもよく、あるいは二価基、例えば、置換もしくは未置換のアルキレン基を介して、ヘテロ原子を介して、または二価の芳香族基もしくは複素芳香族基を介して、互いに連結されてもよい。分岐状および樹枝状の構造では、3つまたは4つの式(I)の単位が、例えば、三価または多価の基を介して、例えば、三価もしくは多価の芳香族基または複素芳香族基を介して連結されていてもよく、これにより分岐状または樹枝状のオリゴマーまたはポリマーを得る。

10

【0091】

オリゴマー、 dendrimer およびポリマーにおける式(I)の繰り返し単位については、式(I)の化合物についての上記のものと同一の優先性が適用される。

20

【0092】

オリゴマーまたはポリマーの製造のために、本発明に係るモノマーは、さらなるモノマーによってホモポリマー化またはコポリマー化される。適切であり、好ましいモノマーは、フルオレン(例えば、EP842208またはWO00/22026に従う)、スピロビフルオレン(例えば、EP707020、EP894107またはWO06/061181に従う)、パラ-フェニレン(例えば、WO92/18552に従う)、カルバゾール(例えば、WO04/070772またはWO04/113468に従う)、チオフェン(例えば、EP1028136に従う)、ジヒドロフェナントレン(例えば、WO05/014689またはWO07/006383に従う)、シス-およびトランス-インデノフルオレン(例えば、WO04/041901またはWO04/113412に従う)、ケトン(例えば、WO05/040302に従う)、フェナントレン(例えば、WO05/104264またはWO07/017066に従う)、またはこれらのユニットのうちの複数から選択される。また、ポリマー、オリゴマーおよび dendrimer は、通常、さらなるユニット、例えば、発光(蛍光またはリン光)ユニット、例えば、ピニルトリアリールアミン(例えば、WO07/068325に従う)またはリン光性金属錯体(例えば、WO06/003000に従う)、および/または電荷輸送ユニット、特にトリアリールアミンに基づくものも含有する。

30

【0093】

本発明に係るポリマー、オリゴマーおよび dendrimer は、有利な特性、特に長期寿命、高効率および良好な色座標を有する。

40

【0094】

本発明に係るポリマーおよびオリゴマーは、一般に、1つ以上のタイプのモノマーの重合によって製造され、そのうち少なくとも1種のモノマーが、ポリマーにおける式(I)の繰り返し単位をもたらす。適切な重合反応は、当業者に既知であり、文献に記載されている。C-CまたはC-N連結をもたらす特に適切であり、好ましい重合反応は、以下である：

- (A) スズキ(SUZUKI)重合；
- (B) ヤマト(YAMAMOTO)重合；
- (C) スティル(STILLE)重合；および

50

(D) ハートウィッグ - ブッフバルト (HARTWIG - BUCHWALD) 重合。

【0095】

重合がこれらの方法により行われ得る方法、および次にポリマーが反応媒体から分離され、精製され得る方法は、当業者に知られ、文献、例えば、WO03/048225、WO04/037887、およびWO04/037887に詳細に記載されている。

【0096】

したがって、本発明は、本発明に係るポリマー、オリゴマーおよび dendrimer の製造方法に関し、これは、それらがスズキ重合、ヤマト重合、スティル重合、またはハートウィッグ - ブッフバルト重合により製造されることを特徴とする。本発明に係る dendrimer は、当業者に既知の方法によりまたはそれと同様に製造され得る。適切な方法は、文献、例えば、Frechet, Jean M. J.; Hawker, Craig J., "Hyperbranched polyphenylene and hyperbranched polyesters: new soluble, three-dimensional, reactive polymers", *Reactive & Functional Polymers* (1995), 26(1-3), 127-36; Janssen, H. M.; Meijer, E. W., "The synthesis and characterization of dendritic molecules", *Materials Science and Technology* (1999), 20 (Synthesis of Polymers), 403-458; Tomalia, Donald A., "Dendrimer molecules", *Scientific American* (1995), 272(5), 62-6; WO02/067343A1 および WO2005/026144A1 に記載されている。

【0097】

本発明に係る式 (I) の化合物は、電子デバイス、特に有機エレクトロルミネッセントデバイス (OLED) における使用に適している。置換に依存して、化合物は、異なる機能および層において使用される。

【0098】

したがって、本発明は、電子デバイスにおける本発明に係る式 (I) の化合物の使用に関する。ここで、電子デバイスは、好ましくは、有機集積回路 (O-IC)、有機電界効果トランジスタ (O-FET)、有機薄膜トランジスタ (O-TFT)、有機発光トランジスタ (O-LET)、有機太陽電池 (O-SC)、有機光学検出器、有機感光体、有機電場消光デバイス (O-FQD)、発光電子化学電池 (LEC)、有機レーザーダイオード (O-laser) および特に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。

【0099】

また、本発明は、式 (I) の少なくとも1種の化合物、または式 (I) の少なくとも1つのユニットを含有する少なくとも1種のポリマー、オリゴマーもしくは dendrimer と、少なくとも1種の溶媒、好ましくは有機溶媒とを含む配合物に関する。

【0100】

本発明は、さらに、少なくとも1種の式 (I) の化合物を含む電子デバイスに関する。ここで、電子デバイスは、好ましくは、上記されるデバイスから選択される。特に好ましくは、陽極と、陰極と少なくとも1つの発光層とを含む有機エレクトロルミネッセントデバイスであり、これは、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。

【0101】

また、陰極、陽極および発光層とは別に、有機エレクトロルミネッセントデバイスは、さらなる層を含んでもよい。これらは、例えば、各々の場合において、1つ以上の正孔注入層、正孔輸送層、正孔ブロッキング層、電子輸送層、電子注入層、電子ブロッキング層、励起ブロッキング層、電荷発生層 (IDMC 2003, Taiwan; Session 21 OLED (5), T. Matsumoto, T. Nakada, J. Endo

10

20

30

40

50

, 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。しかしながら、これらの層の各々が存在する必要がないこと、層の選択は、通常、使用される化合物に依存し、特に、エレクトロルミネッセンスデバイスは蛍光性またはリン光性であるかどうかにも依存することは指摘すべきである。

【0102】

また、有機エレクトロルミネッセントデバイスは、複数の発光層を含んでもよい。これらの発光層は、この場合、特に好ましくは、380nm~750nmに合計して複数の発光極大を有し、これは、全体として白色発光をもたらす、即ち、蛍光またはリン光を発することができ、青色および黄色、橙色または赤色の光を発する様々な発光化合物が、発光層において使用される。特に好ましくは、3層系、即ち、3つの発光層を有する系であり、この場合、これらの層のうちの少なくとも1つは、少なくとも1種の式(I)の化合物を含み、3層は、青色、緑色および橙色または赤色の発光を示す(基本的な構造については、例えば、WO05/011013を参照されたい)。その代わりに、および/またはそれに加えて、本発明に係る化合物はまた、正孔輸送層に存在してもよい。広帯域発光バンドを有し、したがって、白色発光を示す発光体は、同様に、白色発光に適している。

【0103】

本発明の好ましい実施形態では、式(I)の化合物は、正孔輸送物質として用いられる。次に、これらの化合物は、好ましくは、正孔輸送層および/または正孔注入層において用いられる。本発明の意味における正孔注入層は、陽極に直接隣接する層である。本発明の目的のため、正孔輸送層は、正孔注入層と発光層との間に位置する層である。正孔輸送層は、発光層に直接隣接することができる。式(I)の化合物が正孔輸送物質として使用される場合、それは、電子受容化合物により、例えば、F₄-TCNQにより、またはEP1476881もしくはEP1596445に記載される化合物によりドーブされることが好ましい場合もある。式(I)の化合物が正孔輸送層における正孔輸送物質として用いられる場合、この化合物は、正孔輸送層において純粋な物質として、即ち、100%の割合で用いられてもよく、または、正孔輸送層においてさらなる化合物と組み合わせて用いられてもよい。

【0104】

本発明に従って、式(I)の化合物は、1つ以上のリン光性発光体を含む電子デバイスにおいて用いられることが好ましい。この化合物は、ここで、正孔輸送層、正孔注入層において、または発光層において、特に好ましくは正孔輸送層において使用されてもよい。

【0105】

本発明のさらなる実施形態では、式(I)の化合物は、発光物質用のマトリックス物質、特にリン光性ドーパントとして用いられる。この場合、式(I)の化合物は、有機エレクトロルミネッセントデバイスにおける発光物質用のマトリックス物質として用いられることが特に好ましい。

【0106】

本発明のさらに好ましい実施形態では、有機エレクトロルミネッセントデバイスはまた、複数の発光層を含んでもよく、この場合、少なくとも1つの発光層は、少なくとも1種の式(I)の化合物と、少なくとも1種の発光体、好ましくはリン光体とを含む。

【0107】

式(I)の化合物と発光層において用いられるリン光性発光体とを含む混合物は、好ましくは、発光体とマトリックス物質とを含む全混合物に対して、99~50体積%の間、好ましくは98~50体積%の間、特に好ましくは97~60体積%の間、とりわけ95~85体積%の間の式(I)の化合物を含む。対応させて、この混合物は、発光体とマトリックス物質とを含む全混合物に対して、1~50体積%の間、好ましくは2~50体積%の間、特に好ましくは3~40体積%の間、とりわけ5~15体積%の間のリン光性発光体を含む。

10

20

30

40

50

【0108】

本発明のさらに好ましい実施形態は、さらなるマトリックス物質と組み合わせた、リン光性発光体用のマトリックス物質としての本発明に係る化合物の使用である。本発明に係る化合物と組み合わせて用いられ得る特に適切なマトリックス物質は、例えばWO04/013080、WO04/093207、WO06/005627またはWO10/006680出願に従う芳香族ケトン、芳香族ホスフィンオキシドまたは芳香族スルホキシドもしくはスルホン、トリアリールアミン、カルバゾール誘導体、WO05/039246、米国特許出願公開第2005/0069729号、特開2004/288381、EP1205527またはWO08/086851に開示されている例えばCBP(N,N-ビスカルバゾリルピフェニル)またはカルバゾール誘導体、例えばWO07/063754またはWO08/056746に従うインドールカルバゾール誘導体、例えばEP1617710、EP1617711、EP1731584、特開2005/347160に従うアザカルバゾール誘導体、例えばWO07/137725に従う双極性マトリックス物質、例えばWO05/111172に従うシラン、例えばWO06/117052に従うアザポロールまたはホウ酸エステル、例えばWO10/0150306、WO07/063754またはWO08/056746出願に従うトリアジン誘導体、例えばEP652273またはWO09/062578に従う亜鉛錯体、例えばWO10/054729に従うジアザシロールまたはテトラアザシロール誘導体、例えばWO10/054730出願に従うジアザホスホール誘導体、例えば未公開出願のDE102009023155.2に従うインデノカルバゾール誘導体である。

10

20

【0109】

適切なリン光性化合物(=三重項発光体)は、具体的には、適切な励起により特に可視域で発光し、さらに、20より大きい原子番号、好ましくは38より大きく84より小さい原子番号、特に好ましくは56より大きく80より小さい原子番号を有する少なくとも1つの原子を含む化合物である。使用されるリン光性発光体は、好ましくは、銅、モリブデン、タングステン、レニウム、ルテニウム、オスミウム、ロジウム、イリジウム、パラジウム、白金、銀、金またはユウロピウムを含む化合物であり、特に、イリジウムまたは白金を含む化合物である。

【0110】

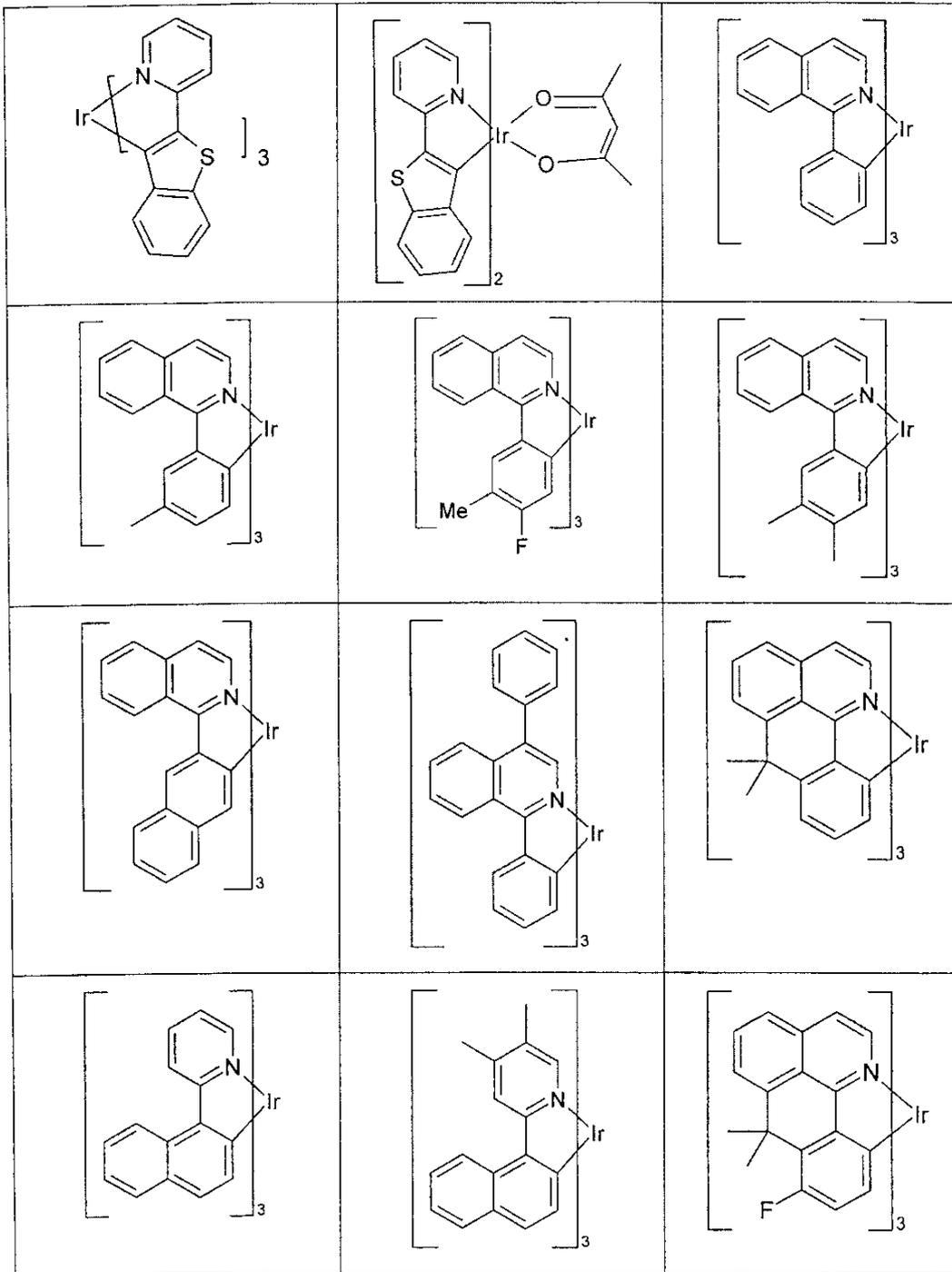
上記される発光体の例は、WO00/70655、WO01/41512、WO02/02714、WO02/15645、EP1191613、EP1191612、EP1191614、WO05/033244、WO05/019373、および米国特許出願公開第2005/0258742号出願によって示される。一般に、リン光性OLEDについての従来技術に従って使用され、有機エレクトロルミネッセンスの分野の当業者に知られているような全てのリン光性錯体が適切であり、当業者は進歩性を必要とせず、さらなるリン光性錯体を使用することができる。

30

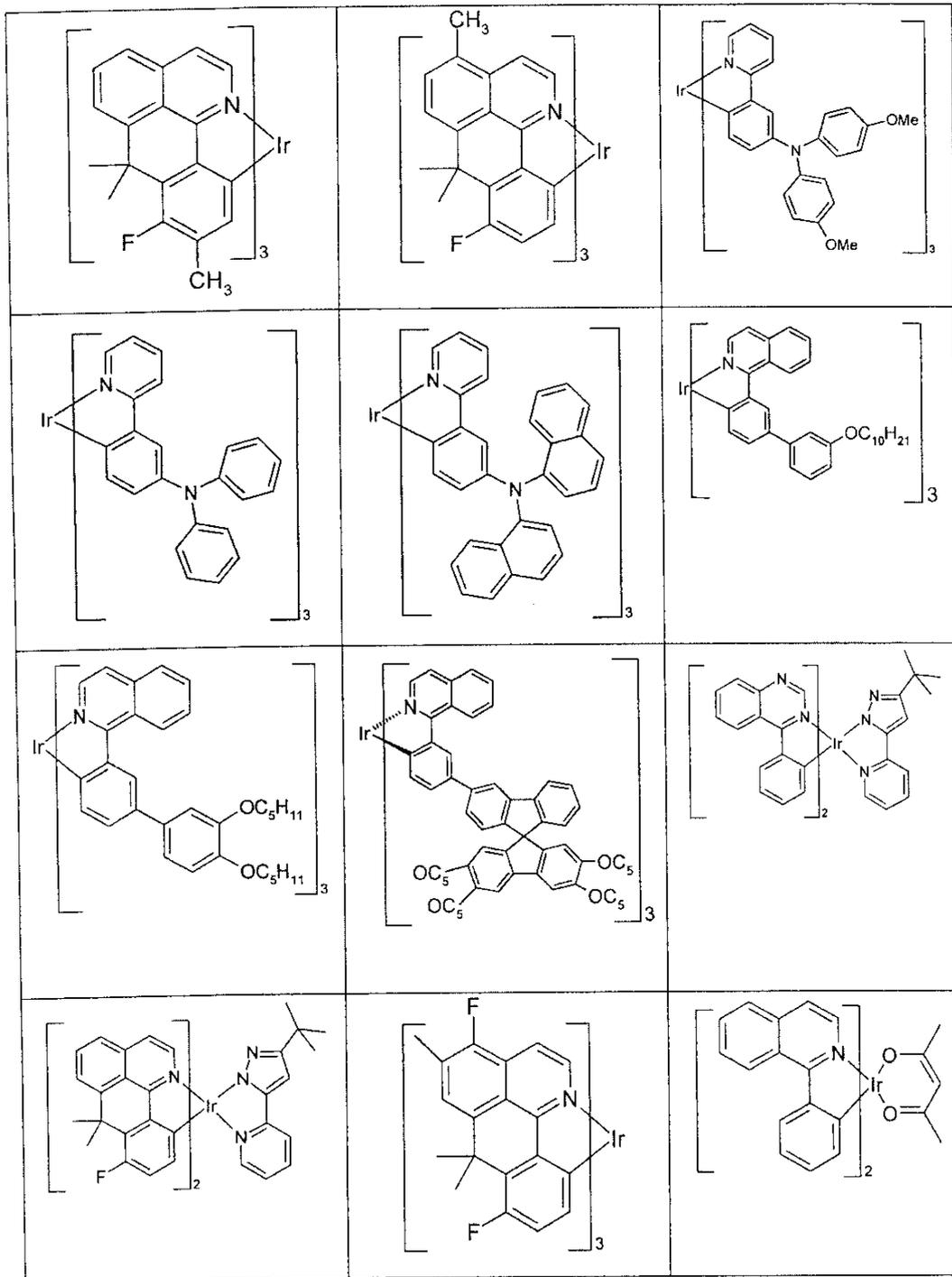
【0111】

適切なリン光性発光体化合物の例は、以下の表によって示される。

【化 4 0】



【化 4 1】



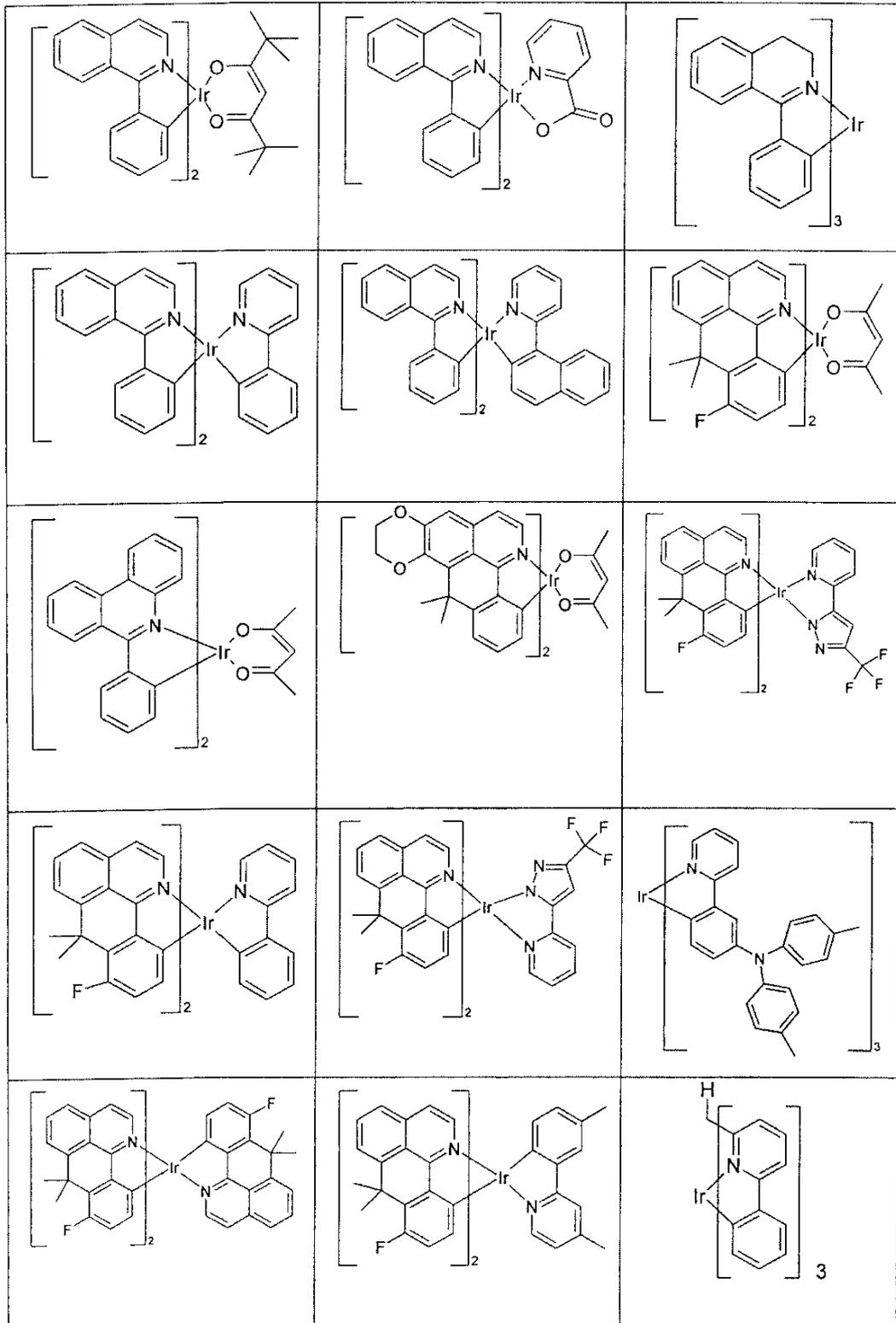
10

20

30

40

【化 4 2】



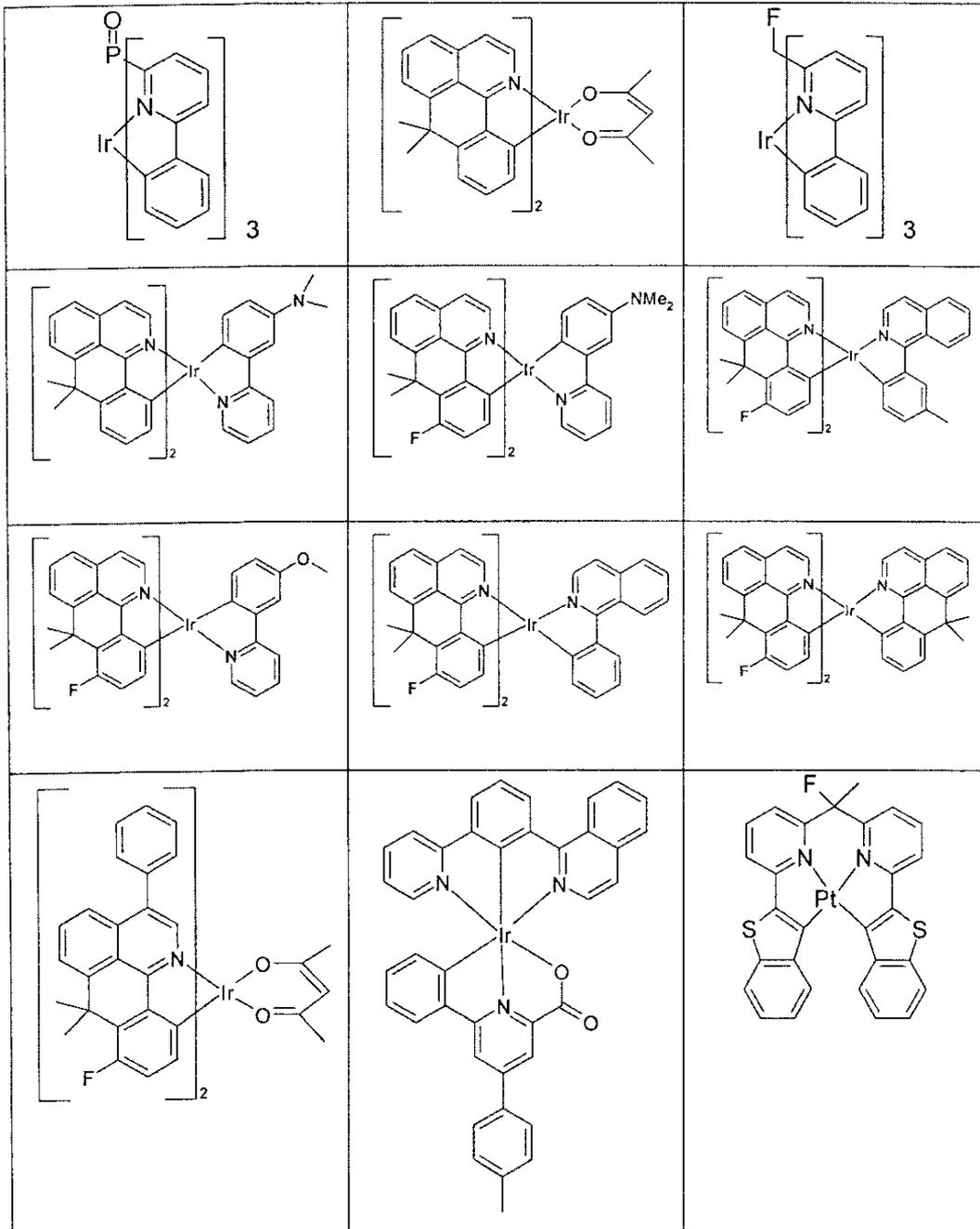
10

20

30

40

【化 4 3】



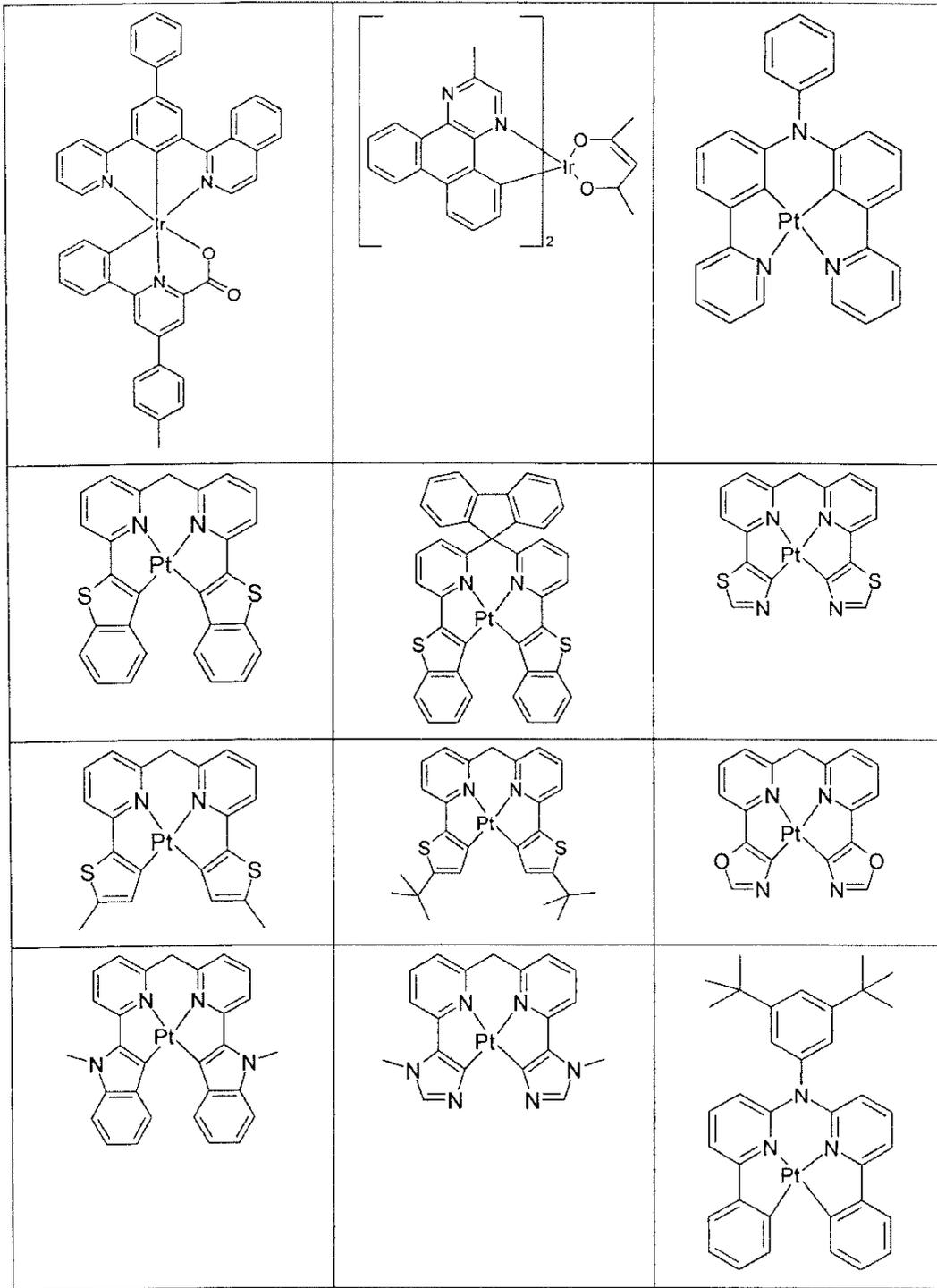
10

20

30

40

【化 4 4】



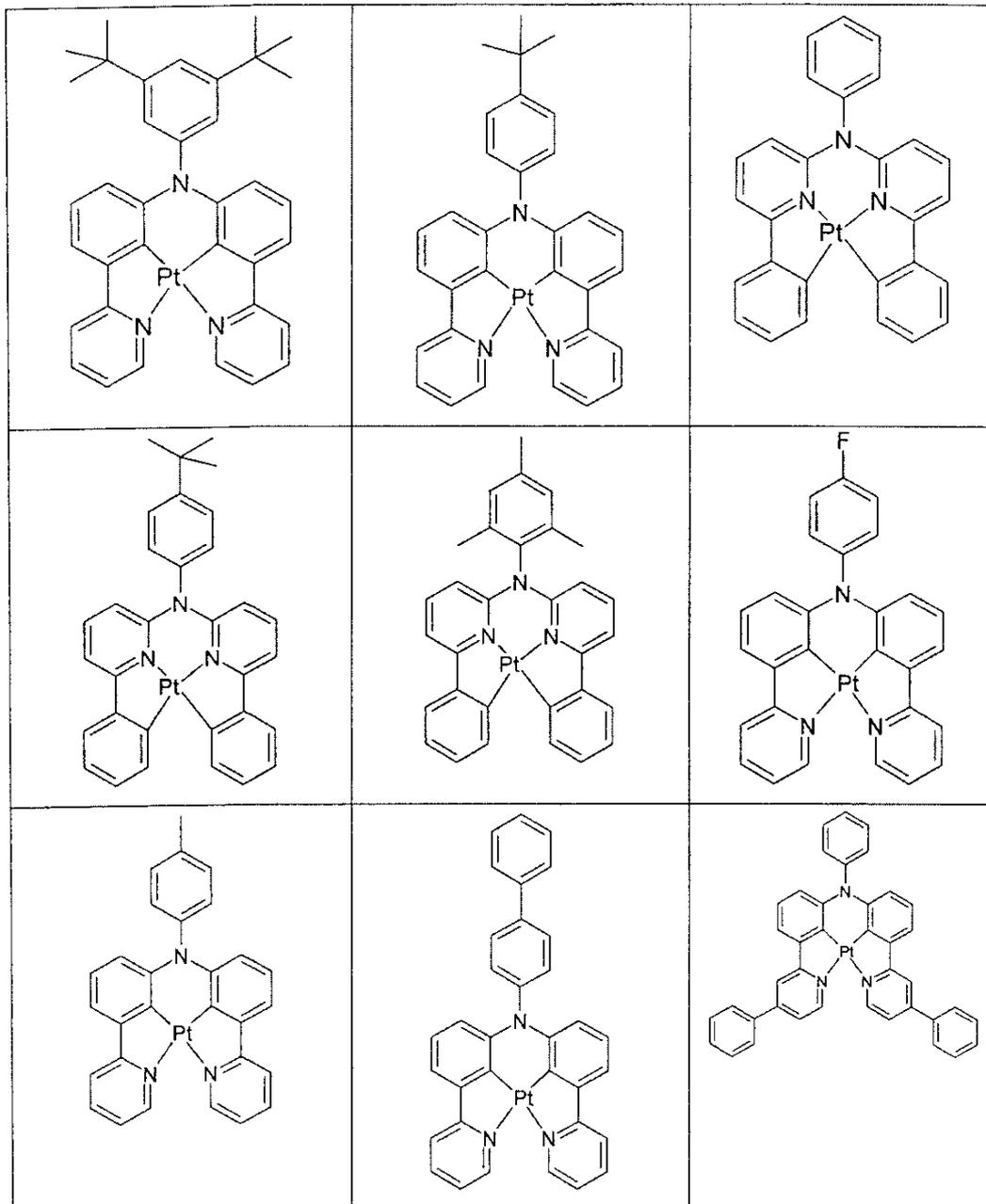
10

20

30

40

【化 4 5】

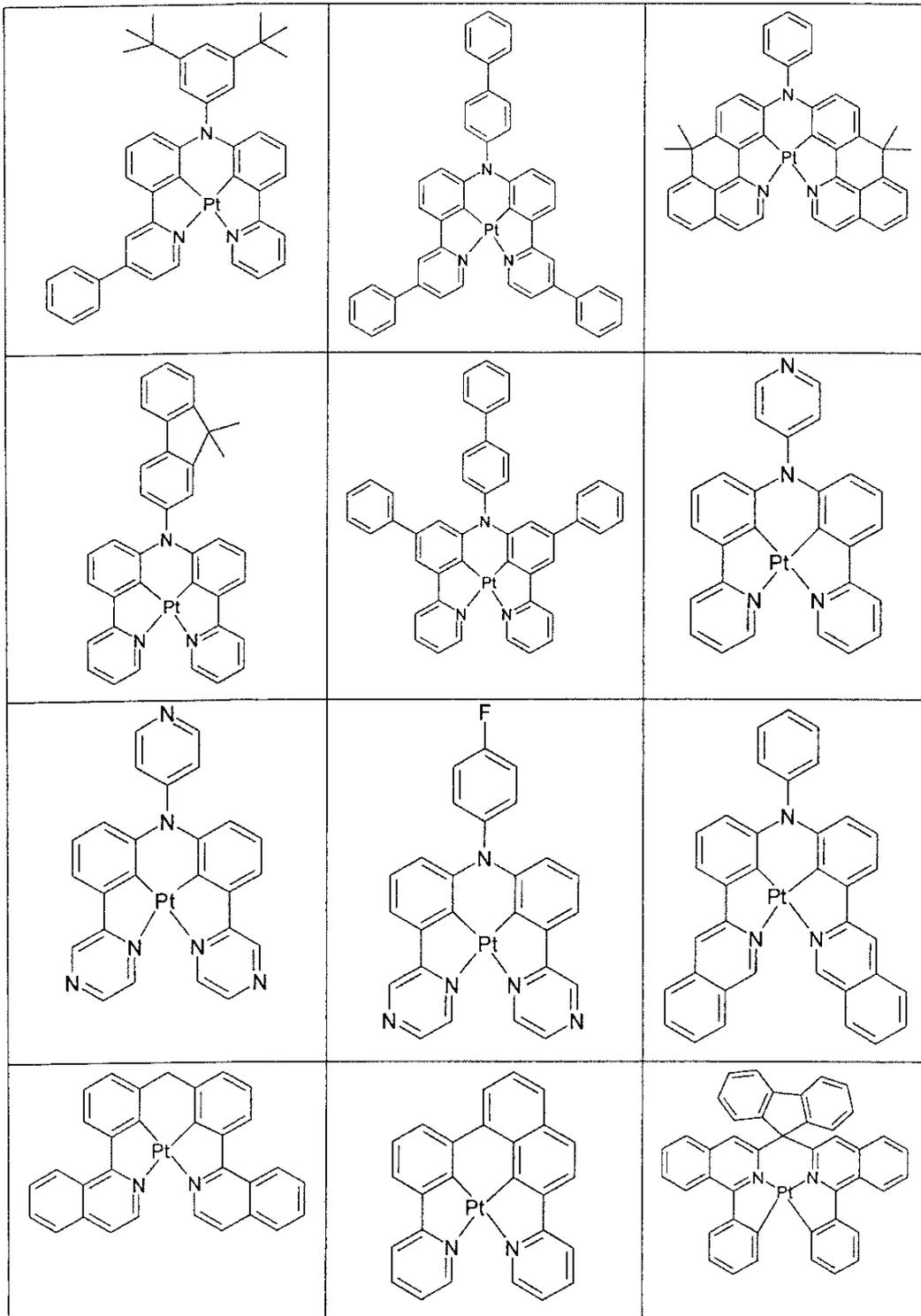


10

20

30

【化 4 6】



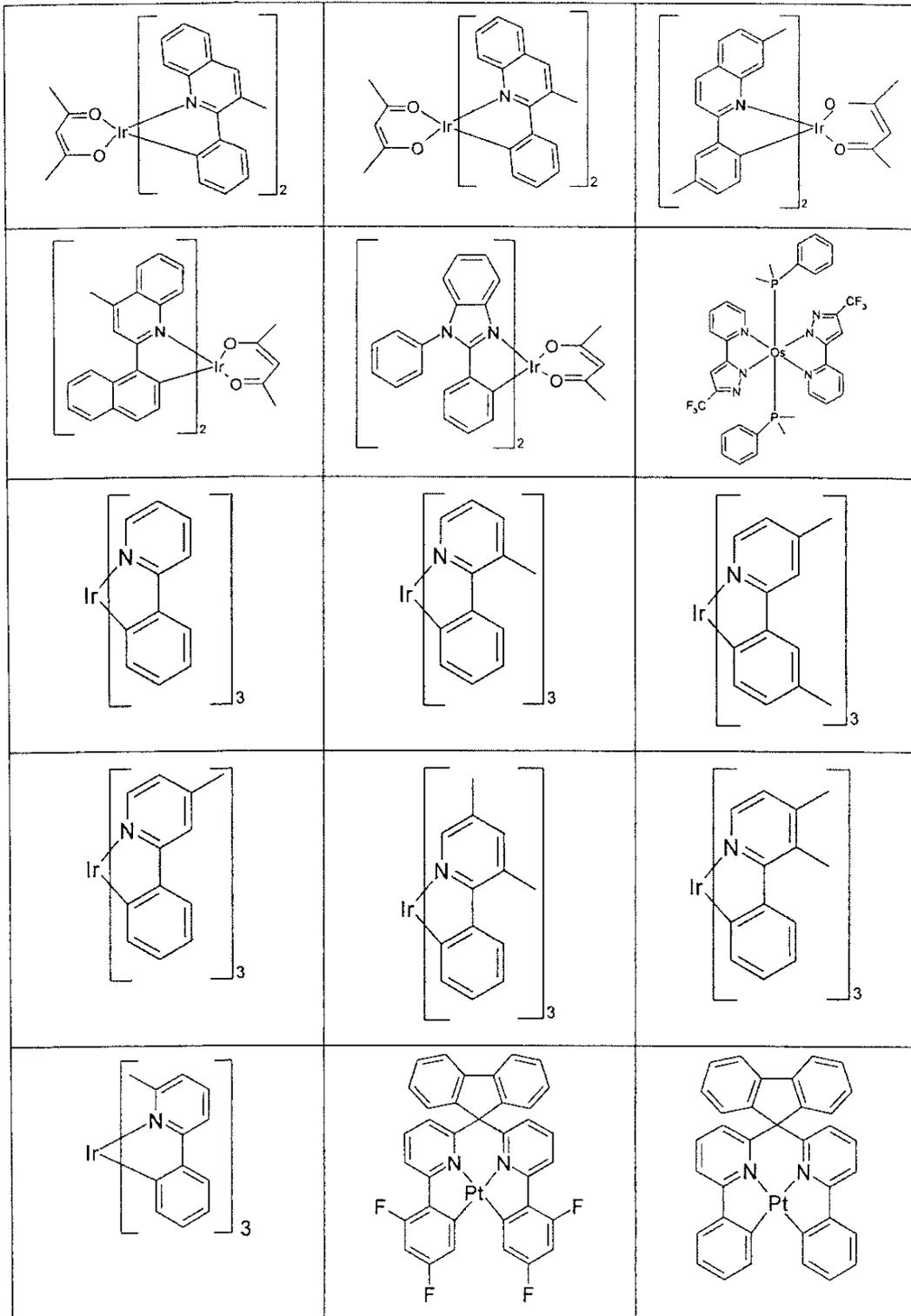
10

20

30

40

【化 47】



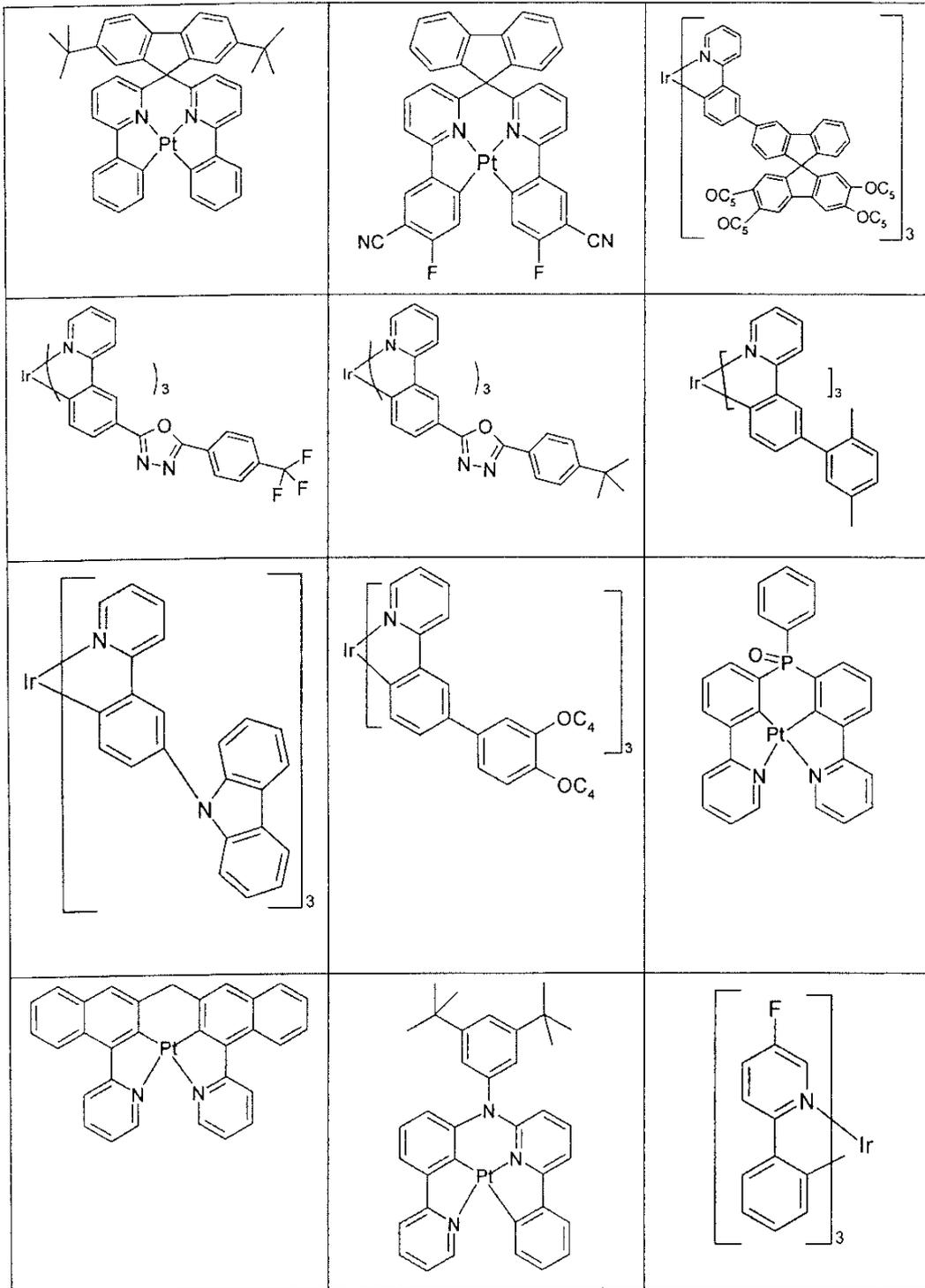
10

20

30

40

【化 4 8】



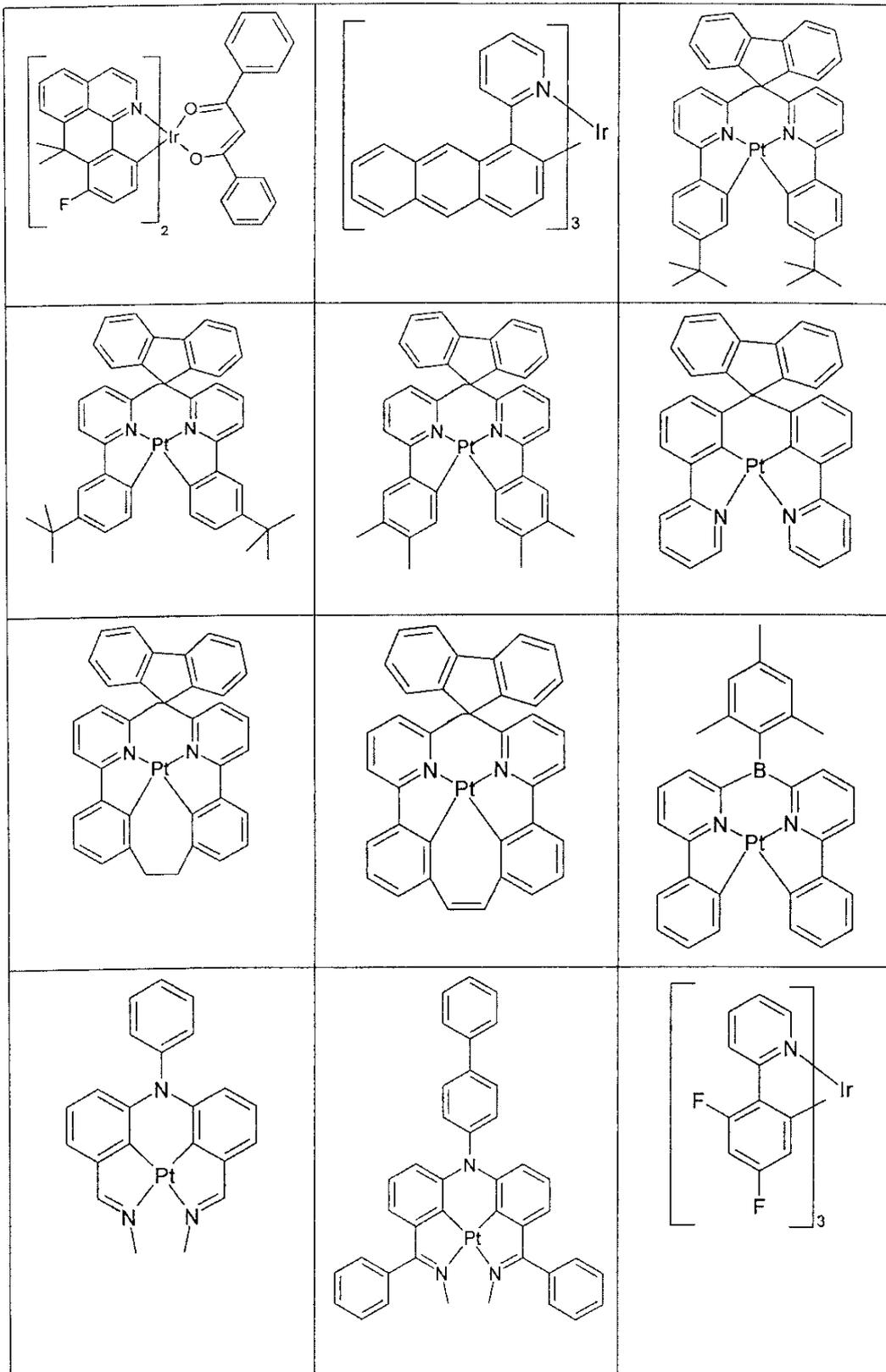
10

20

30

40

【化 4 9】



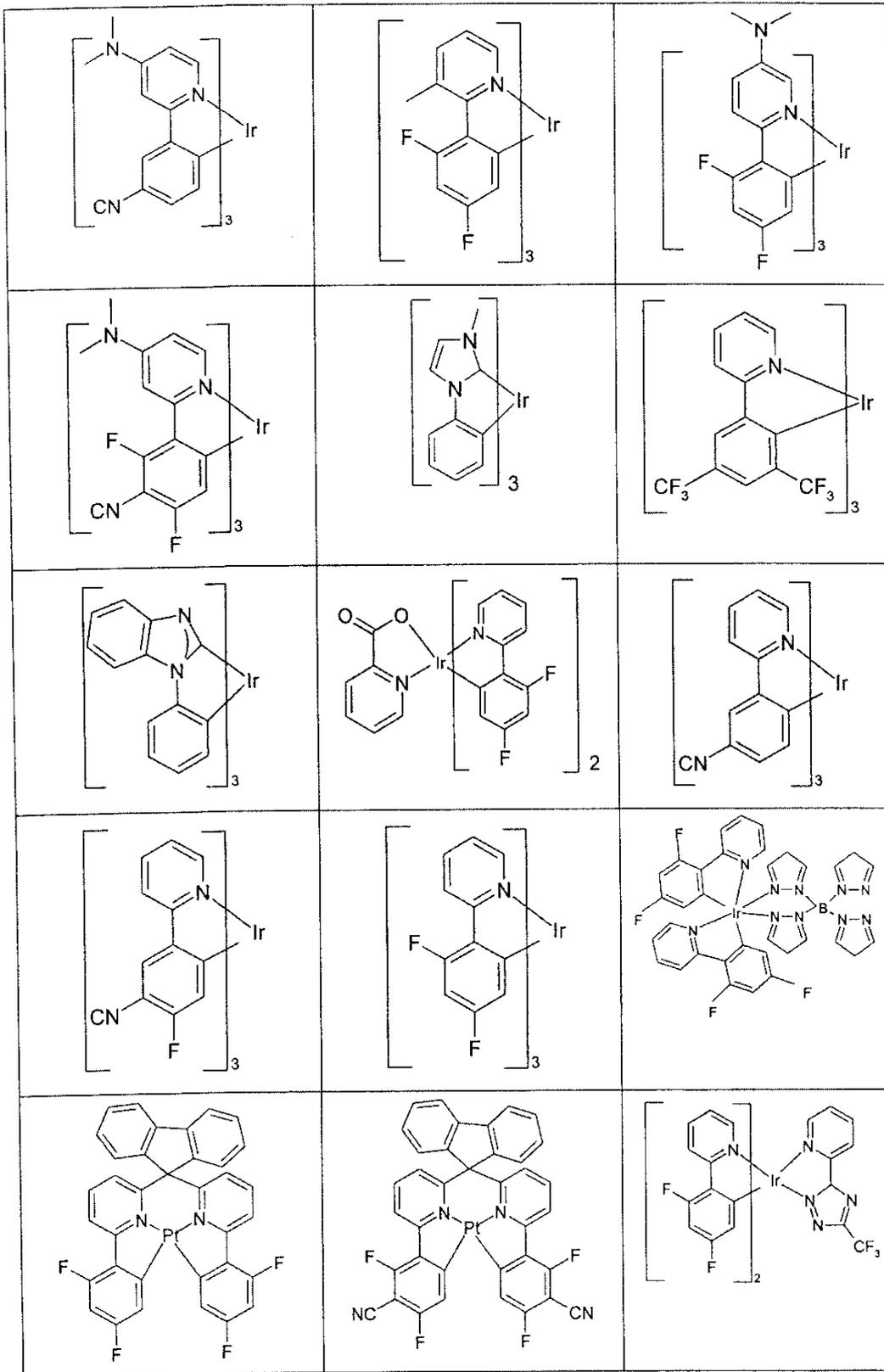
10

20

30

40

【化50】



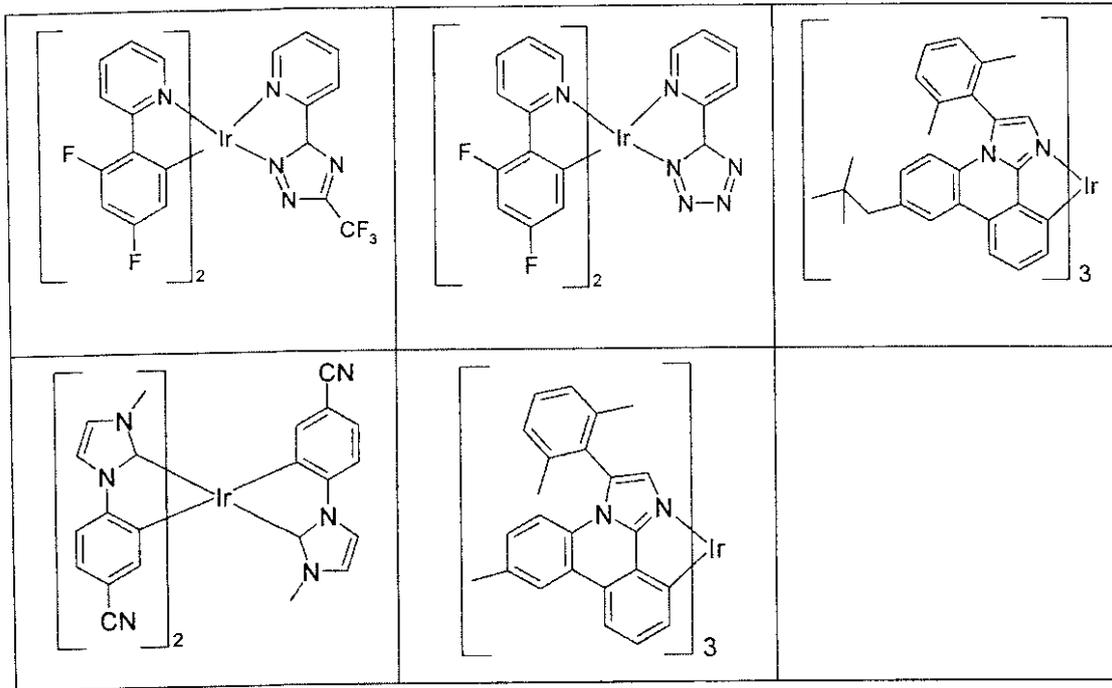
10

20

30

40

【化51】



10

20

【0112】

本発明のさらなる実施形態では、式(I)の化合物は、一重項発光化合物を含む発光層と三重項発光化合物を含む発光層との間の中間層において用いられる。これに関連して、WO10/115498が参照される。本発明に係る化合物が中間層において使用される場合、この中間層は、三重項発光化合物を含む緑色発光層と一重項発光化合物を含む青色発光層との間に3つの発光層を含む電子デバイスにおいて用いられることが好ましい。

【0113】

本発明のさらに好ましい実施形態では、式(I)の化合物は、発光層において発光物質として用いられる。式(I)の化合物は、少なくとも1つの縮合アリール基もしくはヘテロアリール基またはさらなるジアリール置換基がこの分子に存在する場合、発光物質として特に適切である。

30

【0114】

式(I)の化合物が発光層において発光物質として用いられる場合、好ましくは、マトリックス物質と組み合わせ用いられる。マトリックスとドープメントを含むシステムにおいて、マトリックス物質は、そのシステムにおいて高比率で存在する成分を意味するものである。マトリックスと複数のドープメントを含むシステムにおいて、マトリックスは、混合物中の比率が最大である成分を意味するものである。

【0115】

発光層の混合物における式(I)の化合物の比率は、0.1~50.0体積%の間であり、好ましくは0.5~20.0体積%の間、特に好ましくは1.0~10.0体積%の間である。対応させて、マトリックス物質の比率は、50.0~99.9体積%の間であり、好ましくは80.0~99.5%の間であり、特に好ましくは90.0~99.0体積%の間である。

40

【0116】

本発明に従って好ましいマトリックス物質は、以下のセクションに列挙されている。

【0117】

各機能について本発明に係る電子デバイスに好ましく用いられる物質は、以下に言及される。

【0118】

50

好ましい発光物質は、モノスチリルアミン、ジスチリルアミン、トリスチリルアミン、テトラスチリルアミン、スチリルホスフィン、スチリルエーテルおよびアリールアミンの種類から選択される。モノスチリルアミンは、1つの置換または無置換のスチリル基と、少なくとも1つの好ましくは芳香族のアミンとを含む化合物を意味するものとされる。ジスチリルアミンは、2つの置換または無置換のスチリル基と、少なくとも1つの好ましくは芳香族のアミンとを含む化合物を意味するものとされる。トリスチリルアミンは、3つの置換または無置換のスチリル基と、少なくとも1つの好ましくは芳香族のアミンを含む化合物を意味するものとされる。テトラスチリルアミンは、4つの置換または無置換のスチリル基と、少なくとも1つの好ましくは芳香族のアミンとを含む化合物を意味するものとされる。特に好ましくは、スチリル基はスチルベンであり、これはさらに置換されてい

10

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、1つのジアリールアミノ基が、好ましくは9位において、アントラセン基に直接結合されている化合物を意味するものとされる。芳香族アントラ

20

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は、それと同様に定義され、ここで、ジアリールアミノ基は、好ましくは1位または1、6位においてピレンに結合されている。さらに好ましい発光体物質は、例えばWO06/122630に従うインデノフルオレンアミンまたはインデノフルオレンジアミン、例えばWO08/006449に従うベンゾインデノフルオレンアミンまたはベンゾインデノフルオレンジアミン、および例えばWO07/140847に従うジベンゾインデノフルオレンアミンまたはジベンゾインデノフルオレンジアミンから選択される。スチリルアミンの種類からの発光体物質の例は、置換または無置換のトリスチルベンアミンまたはWO06/000388、WO06/058737、WO06/000389、WO07/065549およびWO07/1

30

15610に記載されている発光体物質である。さらに、好ましいものは、WO10/012328に開示されている縮合炭化水素である。

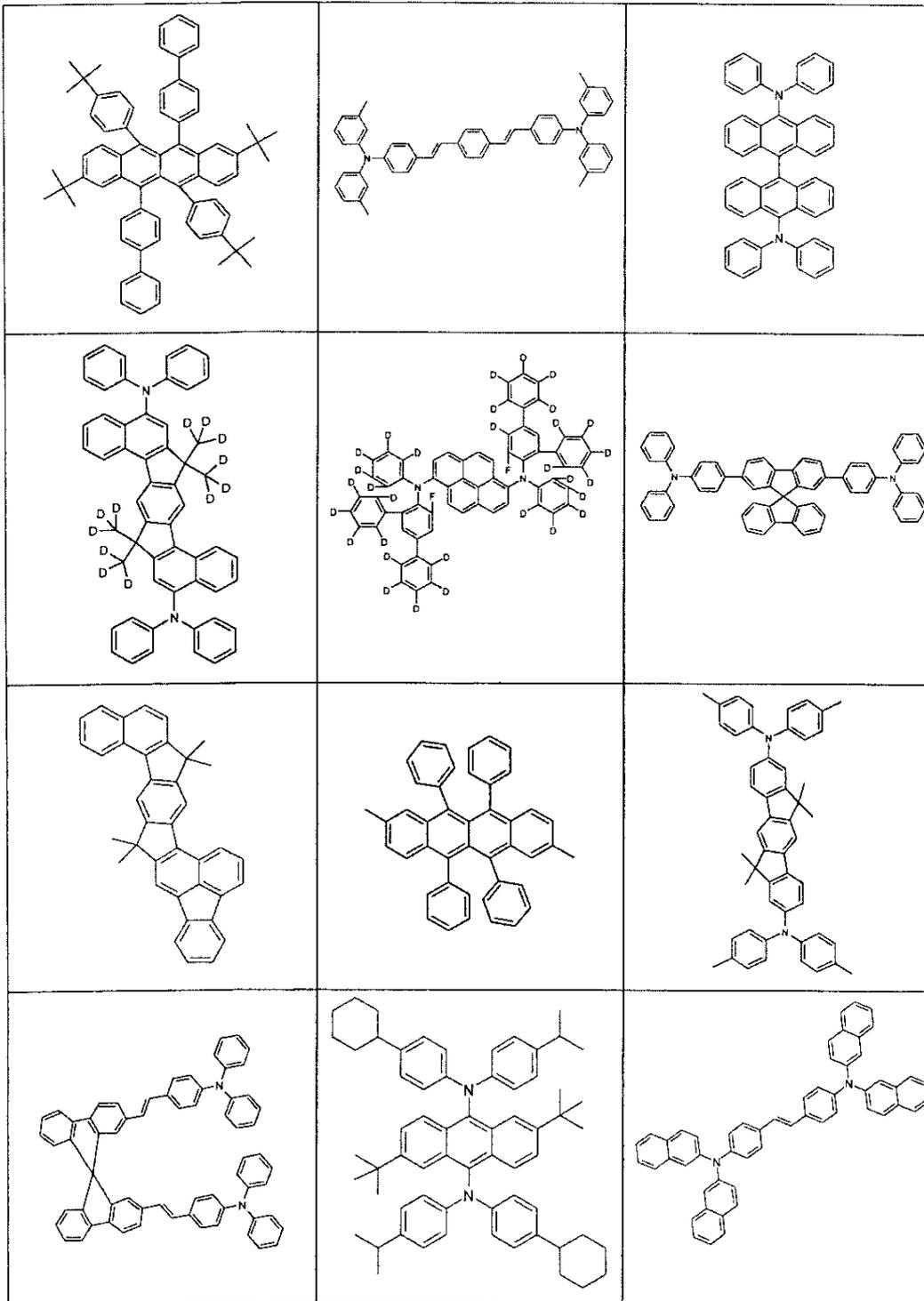
【0119】

さらに、好ましい発光体物質は、本発明に係る式(I)の化合物である。

【0120】

適切な発光体物質は、さらに、以下の表に記載の構造、ならびに特開平06/001973、WO04/047499、WO06/098080、WO07/065678、米国特許出願公開第2005/0260442号、およびWO04/092111に開示されているこれらの構造の誘導体である。

【化 5 2】



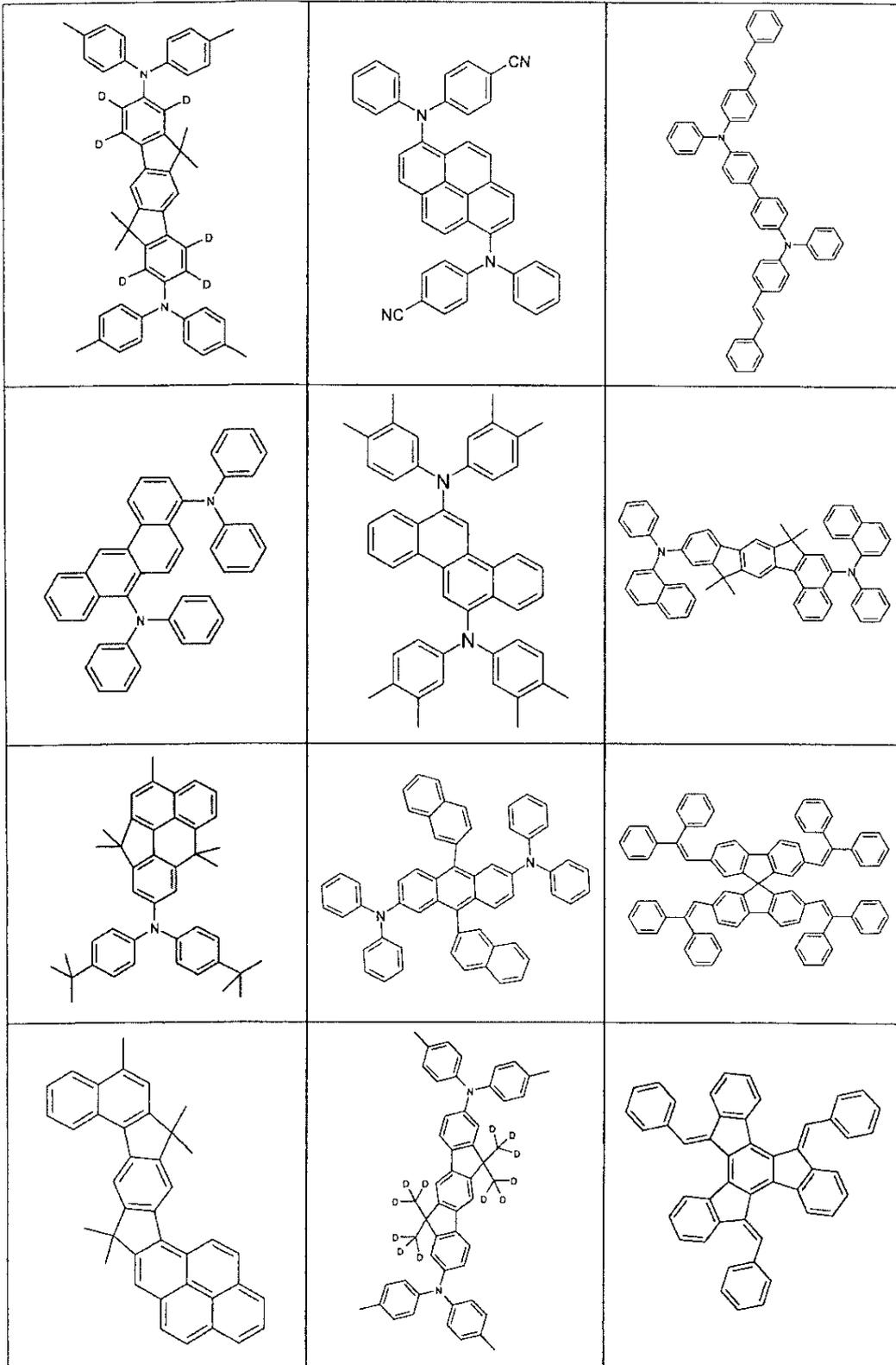
10

20

30

40

【化 5 3】



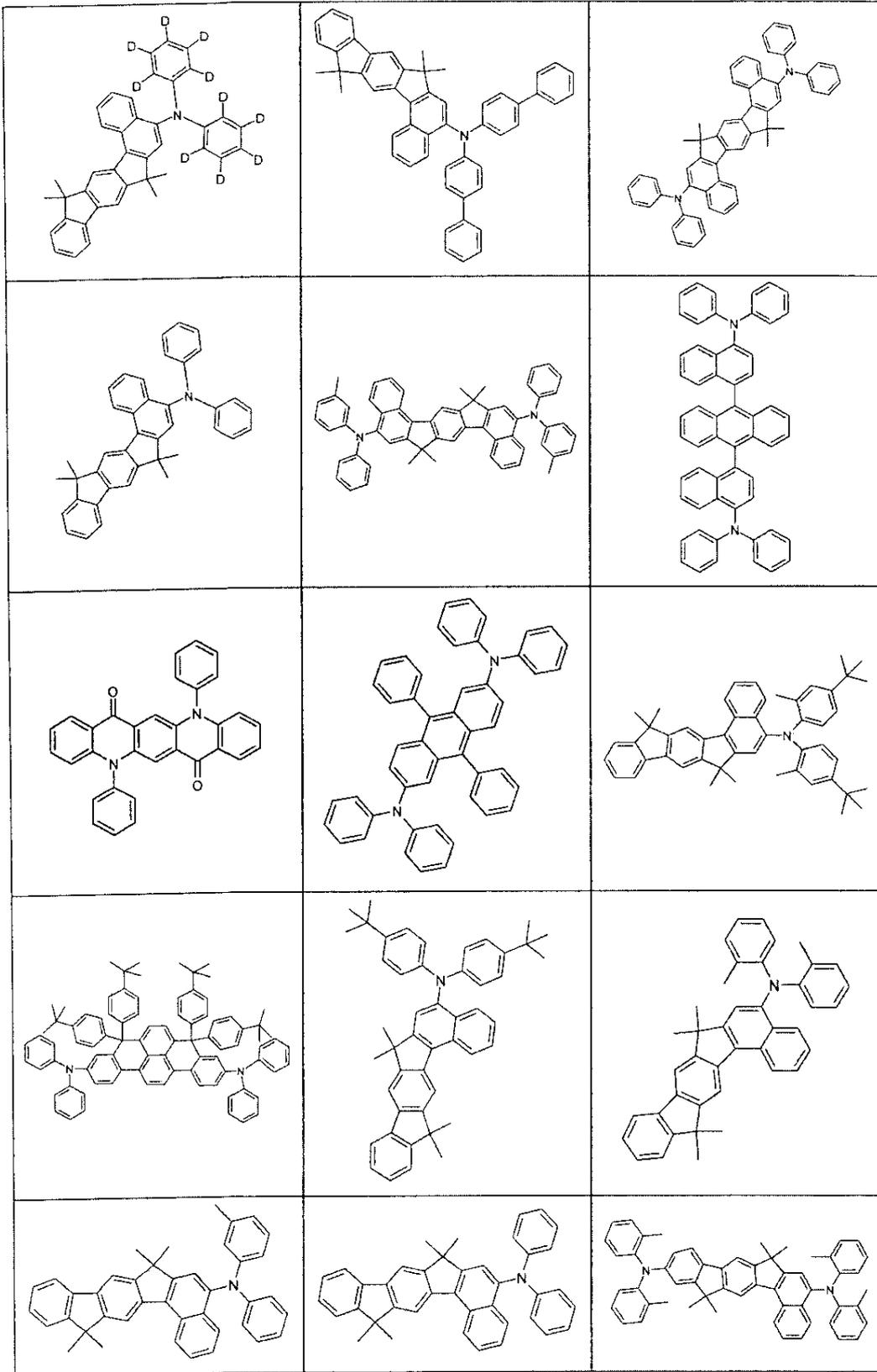
10

20

30

40

【化 5 4】



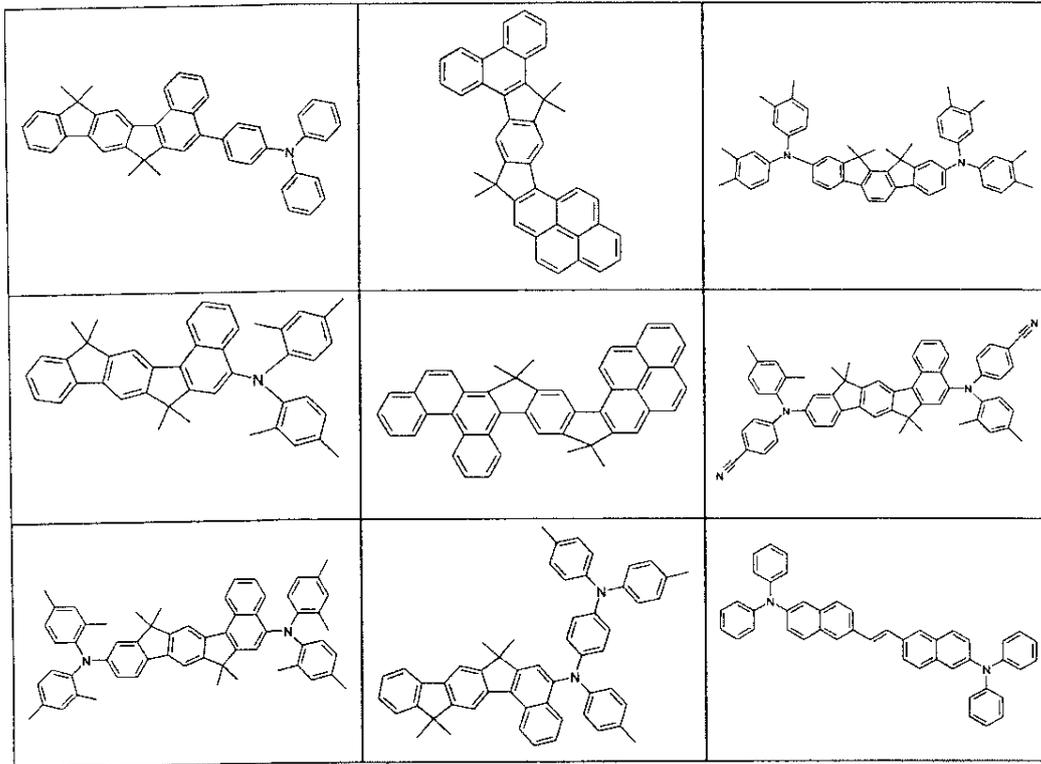
10

20

30

40

【化55】



10

20

【0121】

本発明に係る電子デバイスにおいて適切なマトリックス物質は、様々な種類の物質からの物質である。好ましいマトリックス物質は、オリゴアリーレン（例えば、EP676461に従う2, 2', 7, 7'-テトラフェニルスピロピフルオレン、またはジナフチルアントラセン）、特に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（例えば、EP676461に従うDPVBiまたはスピロDPVBi）、多足金属錯体（例えば、WO04/081017に従う）、正孔導電化合物（例えば、WO04/058911に従う）、電子導電化合物、特にケトン、ホスフィンオキシド、スルホキシドなど（例えば、WO05/084081およびWO05/084082に従う）、アトロプ異性体（例えば、WO06/048268に従う）、ボロン酸誘導体（例えば、WO06/117052に従う）またはベンズアントラセン（例えば、WO08/145239に従う）の種類から選択される。また、適切なマトリックス物質は、さらに、本発明に係る化合物である。本発明に係る化合物は別として、特に好ましいマトリックス物質は、オリゴアリーレンの種類から選択され、これは、ナフタレン、アントラセン、ベンズアントラセンおよび/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、オリゴアリーレンビニレン、ケトン、ホスフィンオキシド、ならびにスルホキシドを含む。本発明に係る化合物は別として、特に非常に好ましいマトリックス物質は、オリゴアリーレンの種類から選択され、これは、アントラセン、ベンズアントラセン、ベンゾフェンアントラセンおよび/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。本発明の意味におけるオリゴアリーレンは、少なくとも3つのアリール基またはアリーレン基が互いに結合されている化合物を意味することを意図する。

30

40

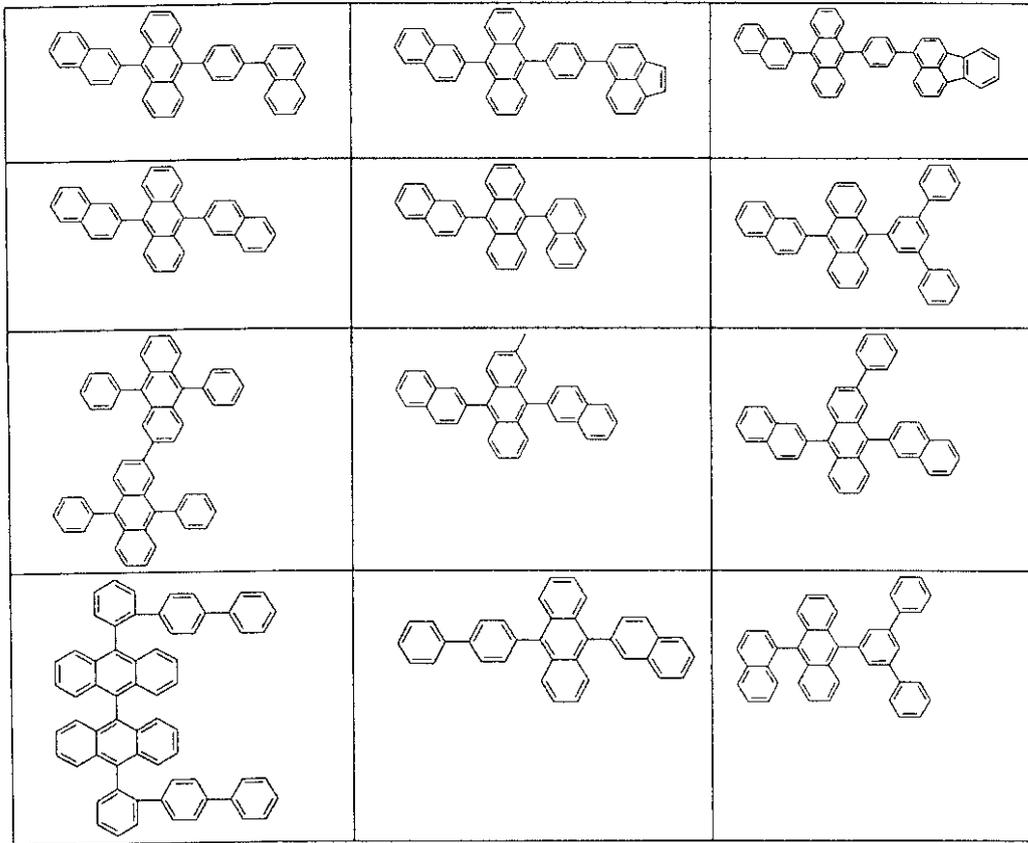
【0122】

適切なマトリックス物質は、例えば、以下の表に記載の物質、ならびにWO04/018587、WO08/006449、米国特許第5935721号、米国特許出願公開第2005/0181232号、特開2000/273056、EP681019、米国特

50

許出願公開第2004/0247937号、および米国特許出願公開第2005/0211958号に開示されているこれらの物質の誘導体である。

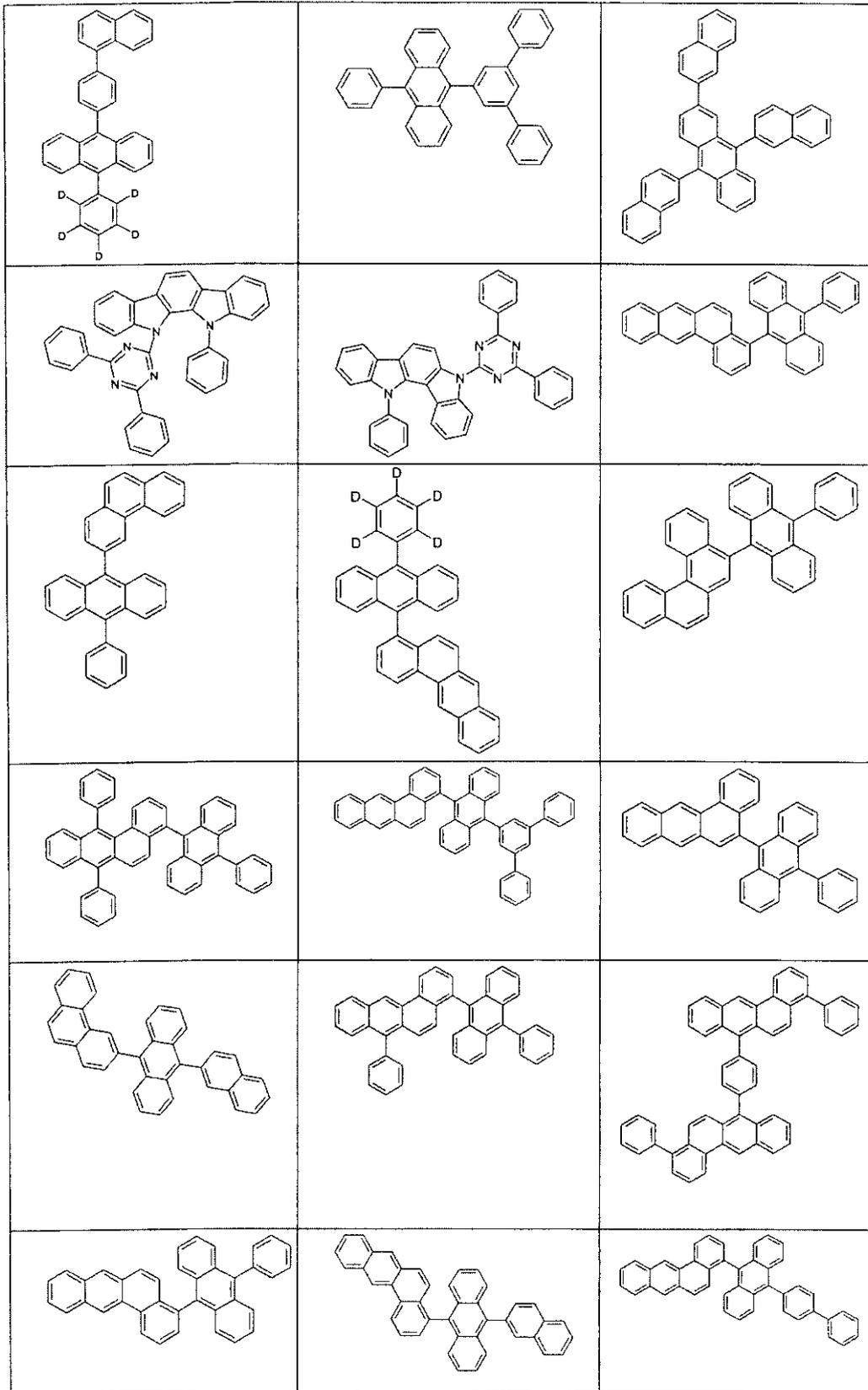
【化56】



10

20

【化 5 7】



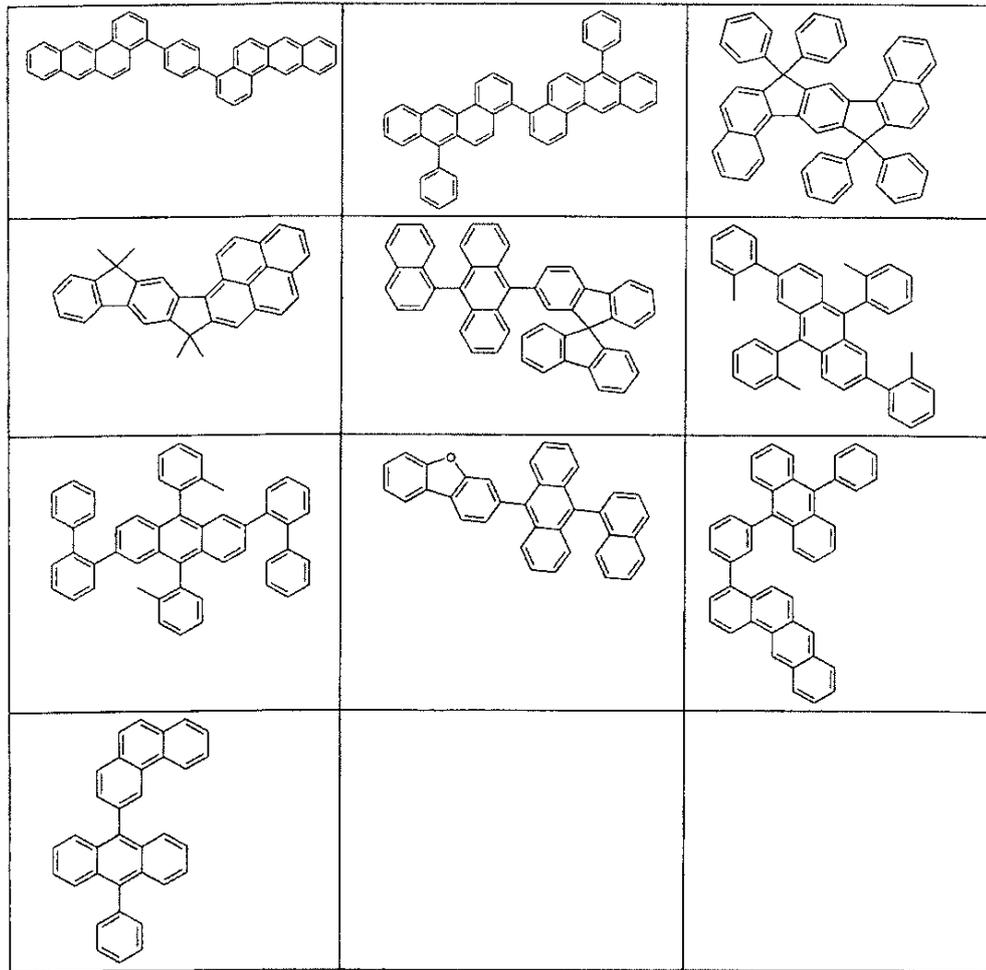
10

20

30

40

【化58】



10

20

30

【0123】

適切な電荷輸送物質は、本発明に係る有機エレクトロルミネッセントデバイスの正孔注入層もしくは正孔輸送層において、または電子輸送層において使用され得るように、例えば、Y. Shirotaら、Chem. Rev. 2007, 10(4), 953-1010に開示される化合物、または従来技術に従うこれらの層において用いられるような他の物質である。

【0124】

有機エレクトロルミネッセントデバイスの陰極は、好ましくは、低い仕事関数を有する金属、様々な金属、例えば、アルカリ土類金属、アルカリ金属、主族金属またはランタノイドなど（例えば、Ca、Ba、Mg、Al、In、Mg、Yb、Smなど）を含む金属合金または多層構造を含む。また、アルカリ金属またはアルカリ土類金属および銀を含む合金、例えば、マグネシウムおよび銀を含む合金が適切である。また、多層構造の場合、比較的高い仕事関数を有するさらなる金属、例えば、AgまたはAlは、前記金属に加えて使用することができ、この場合、金属の組合せ、例えば、Ca/AgまたはBa/Agが一般的に使用される。また、高い誘電率を有する物質の薄い中間層を、金属陰極と有機半導体との間に導入することが好ましい場合もある。この目的のために適しているのは、例えば、アルカリ金属フルオライドまたはアルカリ土類金属フルオライドだけでなく対応する酸化物または炭酸塩（例えば、LiF、Li₂O、BaF₂、MgO、NaF、CsF、Cs₂CO₃など）である。さらに、リチウムキノリネート（LiQ）をこの目的のために使用することができる。この層の層厚は、好ましくは、0.5~5nmの間である

40

50

【0125】

陽極は、好ましくは、高い仕事関数を有する物質を含む。陽極は、好ましくは、真空に対して4.5 eVよりも高い仕事関数を有する。この目的のために適しているのは、一方では、高い還元電位を有する金属、例えば、Ag、PtまたはAuなどである。他方では、金属/金属酸化物の電極（例えば、Al/Ni/NiO_x、Al/PtO_x）もまた好ましい場合がある。いくつかの用途のために、電極の少なくとも1つは、有機物質の照射（有機太陽電池）または光学的カップリングアウト（OLED、O-laser）のいずれかを促進するために透明でなければならない。好ましい構造は透明な陽極を使用する。ここで、好ましい陽極物質は、導電性の混合した金属酸化物である。特に好ましくは、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）である。さらに、好ましいのは、導電性のドーパされた有機物質、特に導電性のドーパされたポリマーである。

10

【0126】

本発明に係るデバイスの寿命は、水および/または空気の下で短縮されるため、デバイスは、適当に（用途に応じて）構造化されており、接点を具備し、最終的に密閉されている。

【0127】

好ましい実施形態では、本発明に係る有機エレクトロルミネッセントデバイスは、1つ以上の層が昇華プロセスにより適用されることを特徴とし、ここで、物質は真空昇華ユニットにおいて初期圧力10⁻⁵ mbar未満、好ましくは10⁻⁶ mbar未満で蒸着することによって適用される。しかしながら、ここでは、初期圧力はさらに低く、例えば10⁻⁷ mbar未満であることも可能である。

20

【0128】

同様に、1つ以上の層がOVPD（有機気相堆積）プロセスにより、またはキャリアガス昇華を用いて適用されることを特徴とする有機エレクトロルミネッセントデバイスが好ましく、ここで、これらの物質は10⁻⁵ mbar ~ 1 barの間の圧力で適用される。このプロセスの特別なケースは、OVJP（有機蒸気ジェット印刷）プロセスであり、ここにおいて、それらの物質がノズルを通して直接適用され、したがって、構造化される（例えば、M. S. Arnoldら、Appl. Phys. Lett. 2008, 92, 053301）。

30

【0129】

1つ以上の層が、溶液から、例えば、スピコーティングなど、またはいずれかの所望のプリンティングプロセス、例えば、スクリーンプリンティング、フレキソプリンティング、ノズルプリンティングもしくはオフセットプリンティングなど、しかし、特に好ましくはLITI（光誘起熱イメージング、熱転写プリンティング）またはインクジェットプリンティングにより生成されることを特徴とする有機エレクトロルミネッセントデバイスがさらに好ましい。式(I)の可溶性化合物が、この目的のために必要である。高い可溶性は、化合物の適切な置換によって達成され得る。

【0130】

本発明に係る有機エレクトロルミネッセントデバイスの製造のために、溶液からの1つ以上の層と、昇華プロセスによる1つ以上の層とを適用することがさらに好ましい。

40

【0131】

本発明に従って、式(I)の1種以上の化合物を含む電子デバイスは、照明用途における光源として、ならびに医療および/または化粧用途（例えば、光治療）における光源として、ディスプレイにおいて用いることができる。

【0132】

本発明に係る化合物は、優れた正孔移動度を有し、したがって、正孔輸送物質として非常によく適している。高い正孔移動度は、本発明に係る化合物を含む電子デバイスの動作電圧の低減、および動作寿命の改善を可能にする。さらに、本発明に係る化合物は、電子

50

デバイスにおける使用時に、これらのデバイスのより高い電力効率をもたらす。

【0133】

さらに、式(I)の化合物は、溶液において高い酸化安定性によって区別され、これは、化合物の精製および化合物の取扱い中において、ならびに電子デバイスにおけるそれらの使用時に有利な効果を有する。

【0134】

さらに、化合物は、混合されたマトリックスシステムにおけるマトリックス物質としての使用に非常に適し、この場合、それらは、好ましくは、電子デバイスの動作電圧の低減および寿命の増加をもたらす。

【0135】

さらに、式(I)の化合物は温度安定性であり、したがって、実質的に分解せずに昇華し得る。したがって、これらの化合物の精製は単純化され、化合物を高い純度で得ることができ、これは、上記物質を含む電子デバイスの性能データにおいてプラスの効果を有する。よって、特に、長期の動作寿命を有するデバイスを製造することができる。

【0136】

本発明を、以下の例によってより詳細に説明するが、これらによって本発明を限定することを望むものではない。

【0137】

[例]

A) 例1~30に従う本発明に係る化合物の合成

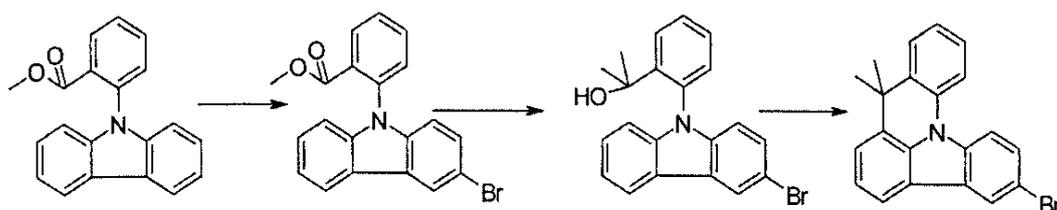
以下の合成は、特に指示がなければ、保護ガス雰囲気下で行われる。出発物質は、ALDRICHまたはABC Rから購入することができる(酢酸パラジウム(II)、トリオ-トリルホスフィン、無機物、溶媒)。8,8-ジメチルインドロ[3,2,1-de]アクリジンおよび7,7,11,11-テトラメチル-7H,11H-ベンズ[1,8]インドロ[2,3,4,5,6-de]アクリジンの合成は、文献(Chemische Berichte 1980,113(1),358-84)に従って行うことができる。8H-インドロ[3,2,1-de]フェナジン(Journal of the Chemical Society 1958,4492-4)およびB-[4-(1-フェニル-1H-ベンゾイミダゾール-2-イル)フェニル]ポロン酸(Advanced Functional Materials 2008,18(4),584-590)、2-プロモインドロ[3,2,1-jk]カルバゾールおよびインドロ[3,2,1-jk]カルバゾールポロン酸(Chemistry A European Journal,2009,15(22),5482-5490)、N-[1,1'-ビフェニル]-4-イル-9,9-ジメチル-9H-フルオレン-2-アミン(WO2006073054)および7-プロモ-2,12-ジメチル-10-フェニル-10,12-ジヒドロ-10-アザインデノ[2,1-b]フルオレン(まだ未公開出願のDE102009023155.2を参照されたい)の合成は、同様に、文献から既知である。

【0138】

[例1]

3-プロモ-8,8-ジメチル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジアクリジン

【化59】



10

【0139】

メチル2-(3-ブromo-9H-カルバゾール)ベンゾエート:

62 g (207 mmol) のメチル2-(9H-カルバゾール)ベンゾエートを200 ml のDMF中で-10℃に冷却し、37.3 g (207 mmol) のNBSを分けて添加し、その混合物を室温にて6時間攪拌する。次に、500 mlの水を混合物に添加し、その後、CH₂Cl₂で抽出する。有機相をMgSO₄上で乾燥させ、溶媒を真空中で除く。生成物を熱トルエンとともに攪拌することによって洗浄し、吸引ろ過する。

【0140】

収率: 72 g (190 mmol)、理論値の92%、¹H-NMRによる純度は約98%

20

【0141】

2-[2-(3-ブromoカルバゾール-9-イル)フェニル]プロパン-2-オール:

81 g (213 mmol) のメチル2-(3-ブromo-9H-カルバゾール)ベンゾエートを1500 mlの乾燥THFに溶解し、脱気する。混合物を-78℃に冷却し、569 ml (854 mmol) のメチルリチウムを40分かけて添加する。その混合物を1時間かけて-40℃に温め、反応をTLCによって監視する。反応が完了したとき、MeOHを用いて-30℃にて注意深くクエンチする。反応溶液を1/3になるまで蒸発させ、1 lのCH₂Cl₂を添加し、混合物を洗浄し、有機相をMgSO₄上で乾燥させ、蒸発させる。

30

【0142】

収率: 73 g (193 mmol)、理論値の91%、¹H-NMRによる純度は約94%

【0143】

6-ブromo-8,8-ジメチル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジン:

16.3 g (44 mmol) の2-[2-(3-ブromoカルバゾール-9-イル)フェニル]プロパン-2-オールを1200 mlの脱気したトルエンに溶解し、40 gのポリリン酸および28 mlのメタンスルホン酸の懸濁液を添加し、混合物を60℃にて1時間加熱する。このバッチを冷却し、水を添加する。固体が沈殿し、CH₂Cl₂/THF(1:1)に溶解する。この溶液を20% NaOHを用いて注意深くアルカリ性にし、この相を分離し、MgSO₄上で乾燥させる。得られる固体をヘプタンとともに攪拌することによって洗浄する。収率: 13.5 g (37 mmol)、理論値の87%、¹H-NMRによる純度は約95%である。

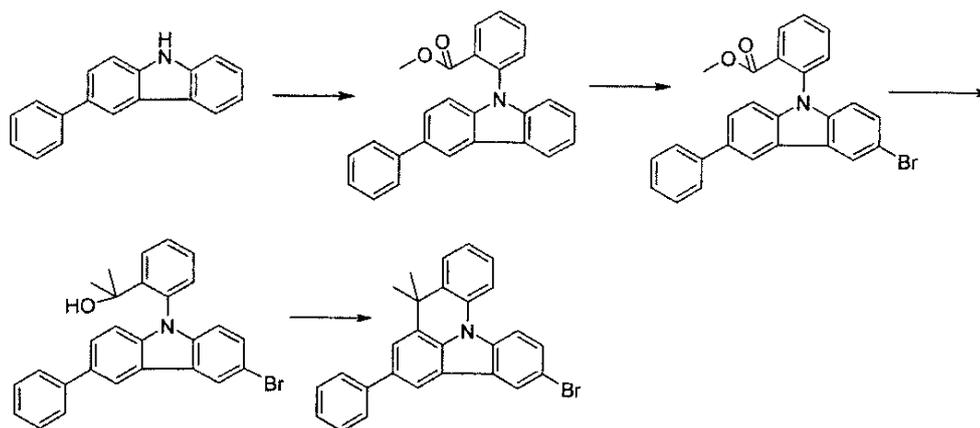
40

【0144】

[例2]

6-ブromo-8,8-ジメチル-3-フェニル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジン

【化60】



10

【0145】

メチル2-(3-フェニル-9H-カルバゾール)ベンゾエート：

85 g (350 mmol) の3-フェニル-9H-カルバゾール、63 ml (262 mmol) のメチル2-インドベンゾエート、87 g (631 mmol) の炭酸カリウムおよび9.3 g (35 mmol) の18-クラウン-6を、保護ガス下で1200 mlのDMFに初期に導入し、130℃にて86時間加熱する。次に、この混合物を蒸発させ、熱ヘプタンとともに攪拌することによって洗浄し、クロマトグラフィー(ヘプタン/CH₂Cl₂ 1:1)によって精製する。生成物を熱ヘキサンとともに攪拌することによって洗浄し、吸引ろ過する。

20

【0146】

収率：8.2 g (219 mmol)、理論値の62%、¹H-NMRによる純度は約97%である。

【0147】

メチル2-(3-ブロモ-6-フェニル-9H-カルバゾール)ベンゾエート：

78.4 g (207 mmol) のメチル2-(3-フェニル-9H-カルバゾール)ベンゾエートを2000 mlのDMF中で-10℃に冷却し、37.3 g (207 mmol) のNBSを分けて添加し、混合物を室温にて6時間攪拌する。次に、500 mlの水をこの混合物に添加し、その後、CH₂Cl₂で抽出する。有機相をMgSO₄上で乾燥させ、溶媒を真空中で除く。生成物を熱トルエンとともに攪拌することによって洗浄し、吸引ろ過する。

30

【0148】

収率：91.4 g (200 mmol)、理論値の95%、¹H-NMRによる純度は約98%である。

【0149】

2-[2-(3-ブロモ-6-フェニルカルバゾール-9-イル)フェニル]プロパン-2-オール：
97 g (213 mmol) のメチル2-(3-ブロモ-6-フェニル-9H-カルバゾール)ベンゾエートを1500 mlの乾燥THFに溶解し、脱気する。混合物を-78℃に冷却し、569 ml (854 mmol) のメチルリチウムを40分かけて添加する。その混合物を1時間かけて-40℃に温め、反応をTLCによって監視する。反応が完了したとき、MeOHを用いて-30℃にて注意深くクエンチする。反応溶液を1/3になるまで蒸発させ、1 lのCH₂Cl₂を添加し、混合物を洗浄し、有機相をMgSO₄上で乾燥させ、蒸発させる。

40

【0150】

50

収率：93.4 g (204 mmol)、理論値の96%、¹H-NMRによる純度は約96%である。

【0151】

6-プロモ-8,8-ジメチル-3-フェニル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジン：

20 g (43.6 mmol)の2-[2-(3-プロモ-6-フェニルカルバゾール-9-イル)フェニル]プロパン-2-オールを1200 mlの脱気したトルエンに溶解し、40 gのポリリン酸および28 mlのメタンスルホン酸の懸濁液を添加し、混合物を60にて1時間加熱する。このバッチを冷却し、水を添加する。固体が沈殿し、CH₂Cl₂/THF(1:1)に溶解する。この溶液を20% NaOHを用いて注意深くアルカリ性にし、この相を分離し、MgSO₄上で乾燥させる。得られる固体をヘプタンとともに撹拌することによって洗浄する。収率：16.3 g (37 mmol)、理論値の84%、¹H-NMRによる純度は約95%である。

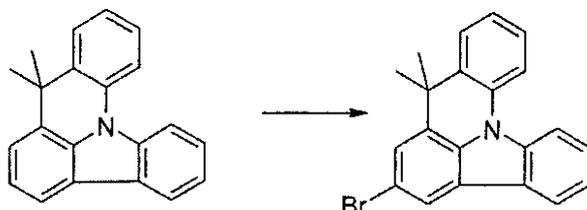
10

【0152】

[例3]

3-プロモ-8,8-ジメチル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジン

【化61】



20

【0153】

6.3 g (22.2 mmol)の8,8-ジメチルインドロ[3,2,1-de]アクリジンを150 mlのCH₂Cl₂に初期に導入する。次に、100 mlのアセトニトリル中の3.9 g (22.3 mmol)のNBSの溶液を-15にて遮光しながら滴下添加し、混合物を室温にてさらに4時間撹拌する。処理のために、150 mlの水を混合物に添加し、次に、CH₂Cl₂で抽出する。有機相をMgSO₄上で乾燥させ、溶媒を真空中で除く。生成物を熱ヘキサンとともに撹拌することによって洗浄し、吸引ろ過する。

30

【0154】

収率：4.5 g (12 mmol)、理論値の57%、¹H-NMRによる純度は約97%である。

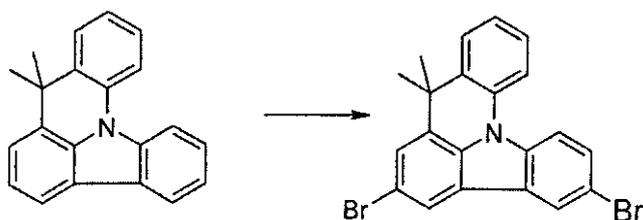
【0155】

[例4]

3,6-ジプロモ-8,8-ジメチル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジン

40

【化62】



10

【0156】

6.3 g (22.2 mmol) の 8,8 - ジメチルインドロ [3 , 2 , 1 - d e] アクリジン を 150 ml の CH_2Cl_2 に初期に導入する。次に、100 ml のアセトニトリル中の 8 g (45.1 mmol) の NBS の溶液を -15°C にて遮光しながら滴下添加し、混合物を室温にてさらに 4 時間攪拌する。処理のために、150 ml の水を混合物に添加し、次に、 CH_2Cl_2 で抽出する。有機相を MgSO_4 上で乾燥させ、溶媒を真空中で除く。生成物を熱ヘキサンとともに攪拌することによって洗浄し、吸引ろ過する。

【0157】

収率：7.3 g (16 mmol)、理論値の 75%、 $^1\text{H-NMR}$ による純度は約 97%

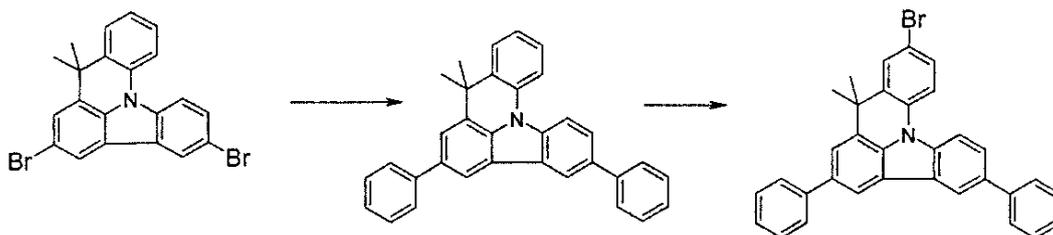
20

【0158】

[例5]

10 - プロモ - 8,8 - ジメチル - 3,6 - ジフェニル - 8H - インドロ [3 , 2 , 1 - d e] アクリジン

【化63】



30

【0159】

8,8 - ジメチル - 3,6 - ジフェニル - 8H - インドロ [3 , 2 , 1 - d e] アクリジン :

19.8 g (45 mmol) の 3,6 - ジプロモ - 8,8 - ジメチル - 8H - インドロ [3 , 2 , 1 - d e] アクリジン、11.4 g (94 mmol) のフェニルボロン酸および 164 ml の飽和 NaHCO_3 溶液を 1500 ml のトルエンおよび 150 ml のエタノールに懸濁させる。1.9 g (1.6 mmol) の $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ をこの懸濁液に添加し、反応混合物を 16 時間加熱還流する。冷却後、有機相を分離し、シリカゲルを通してろ過し、200 ml の水で 3 回洗浄し、その後、乾燥するまで蒸発させる。

40

【0160】

収率：18.5 g (42 mmol)、理論値の 95%、 $^1\text{H-NMR}$ による純度は約 98%

【0161】

10 - プロモ - 8,8 - ジメチル - 3,6 - ジフェニル - 8H - インドロ [3 , 2 , 1

50

- d e] アクリジン :

9.6 g (22.2 mmol) の 8,8 - ジメチル - 3,6 - ジフェニル - 8 H - イン
ドロ [3,2,1 - d e] アクリジンを 150 ml の CH_2Cl_2 に初期に導入する。次
に、100 ml のアセトニトリル中の 3.9 g (22.3 mmol) の NBS の溶液を -
15 にて遮光しながら滴下添加し、混合物を室温にてさらに 4 時間攪拌する。処理のた
めに、150 ml の水を混合物に添加し、次に、 CH_2Cl_2 で抽出する。有機相を MgSO_4
上で乾燥させ、溶媒を真空中で除く。生成物を熱ヘキサンとともに攪拌すること
によって洗浄し、吸引ろ過する。

【 0 1 6 2 】

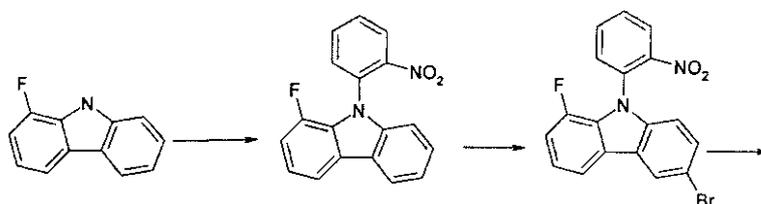
収率：10.7 g (20.8 mmol)、理論値の 94%、 $^1\text{H-NMR}$ による純度は 10
約 97% である。

【 0 1 6 3 】

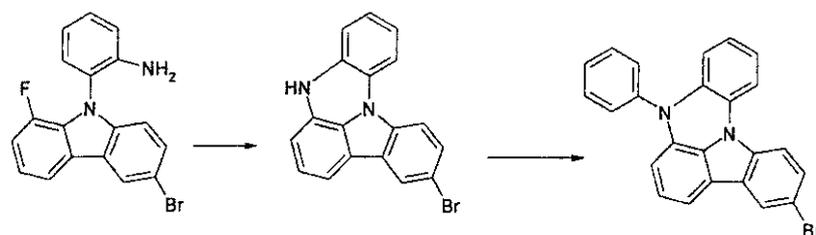
[例 6]

3 - プロモ - 8 H - 8,12 b - ジアザベンゾ [a] アセアントリレン

【 化 6 4 】



20



30

【 0 1 6 4 】

フルオロ - 9 - (2 - ニトロフェニル) - 9 H - カルバゾール :

1000 ml の NMP 中の 97 ml (990 mmol) の 2 - フルオロアニリンおよび
165 g (862 mmol) の 2 - プロモクロロベンゼンの脱気溶液を N_2 を用いて 1 時
間飽和する。次に、最初に 28.9 g (100 mmol) のトリクロロヘキシルホスフィ
ン、その後、11.2 g (50 mmol) の酢酸パラジウム (II) をこの溶液に添加し
、続いて、固体状態の 549 g (2.5 mol) の炭酸カリウムを添加する。反応混合物
を 18 時間加熱還流する。室温に冷却後、1000 ml の水を注意深く添加する。有機相
を 4 x 50 ml の水で洗浄し、 MgSO_4 上で乾燥させ、溶媒を真空中で除く。純粋な生
成物を再結晶によって得る。

40

【 0 1 6 5 】

収率：111 g (760 mmol)、理論値の 70%、 $^1\text{H-NMR}$ による純度は約 9
8% である。

【 0 1 6 6 】

6 - プロモ - 1 - フルオロ - 9 - (2 - ニトロフェニル) - 9 H - カルバゾール :

6.7 g (22.2 mmol) のフルオロ - 9 - (2 - ニトロフェニル) - 9 H - カル
バゾールを 150 ml の CH_2Cl_2 に初期に導入する。次に、100 ml のアセトニ
トリル中の 3.9 g (22.3 mmol) の NBS の溶液を -15 にて遮光しながら滴下
50

添加し、混合物を室温にてさらに4時間攪拌する。処理のために、150mlの水を混合物に添加し、次に、 CH_2Cl_2 で抽出する。有機相を MgSO_4 上で乾燥させ、溶媒を真空中で除く。生成物を熱ヘキサンとともに攪拌することによって洗浄し、吸引ろ過する。

【0167】

収率：8g(20mmol)、理論値の97%、 $^1\text{H-NMR}$ による純度は約97%である。

【0168】

2-(6-ブロモ-1-フルオロカルバゾール-9-イル)フェニルアミン：

67g(219mmol)の6-ブロモ-1-フルオロ-9-(2-ニトロフェニル)-9H-カルバゾールを820mlのEtOHに溶解し、143g(755mmol)の ZnCl_2 を室温にて添加し、混合物を6時間加熱還流する。次に、混合物を1時間かけて室温に温め、20%NaOHを添加し、相分離後、溶媒を除き、残渣をクロマトグラフィーによって精製する。

10

【0169】

収率：44g(125mmol)、理論値の72%、 $^1\text{H-NMR}$ による純度は約97%である。

【0170】

3-ブロモ-8H-8,12b-ジアザベンゾ[a]アセアントリレン：

25g(72mmol)の2-(6-ブロモ-1-フルオロカルバゾール-9-イル)フェニルアミンを保護ガス下で200mlのDMFに溶解し、2.8g(72mmol)のNaH(油中60%)を室温にて添加し、混合物を還流下で6時間沸騰させる。次に、混合物を1時間かけて室温に温め、溶媒を除き、残渣をクロマトグラフィーによって精製する。

20

【0171】

収率：19g(54mmol)、理論値の78%、 $^1\text{H-NMR}$ による純度は約98%である。

【0172】

ブロモ-8-フェニル-8H-8,12b-ジアザベンゾ[a]アセアントリレン：

1000mlのジオキサン中の30g(86.6mmol)の3-ブロモ-8H-8,12b-ジアザベンゾ[a]アセアントリレンおよび8.8g(95.9mmol)のフェニルアミンの脱気溶液を N_2 を用いて1時間飽和する。次に、最初に0.9ml(4.3mmol)の $\text{P}(\text{tBu})_3$ 、その後、0.48g(2.1mmol)の酢酸パラジウム(II)をこの溶液に添加し、続いて、固体状態の12.6g(131mmol)の NaOtBu を添加する。反応混合物を18時間加熱還流する。室温に冷却後、1000mlの水を注意深く添加する。有機相を4×50mlの水で洗浄し、 MgSO_4 上で乾燥させ、溶媒を真空中で除く。純粋な生成物を再結晶によって得る。

30

【0173】

収率：27g(64mmol)、理論値の76%、 $^1\text{H-NMR}$ による純度は約98%である。

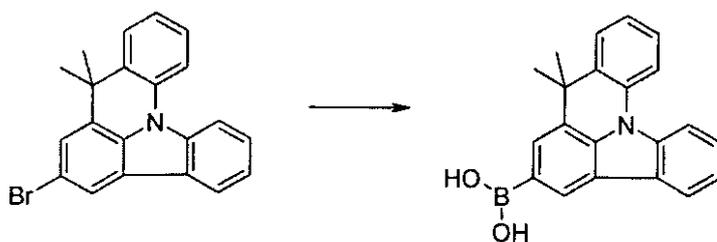
40

【0174】

[例7]

8,8-ジメチル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジン-3-ボロン酸

【化65】



10

【0175】

93.9 g (259 mmol) の 3 - ブロモ - 8 , 8 - ジメチル - 8 H - インドロ [3 , 2 , 1 - de] アクリジン を 1500 ml の 乾燥 THF に溶解し、シクロヘキサン中の n - ブチルリチウムの 2 . 5 M 溶液の 135 ml (337 mmol) を - 70 にて滴下添加し、1 時間後、37 ml のホウ酸トリメチル (336 mmol) を滴下添加し、混合物を 1 時間かけて室温に温め、溶媒を除き、¹H - NMR によって均一である残渣をさらに精製せずに次の反応に用いる。

【0176】

収率 : 77 g (235 mmol) 、理論値の 91% 、¹H - NMR による純度は約 98 % である。

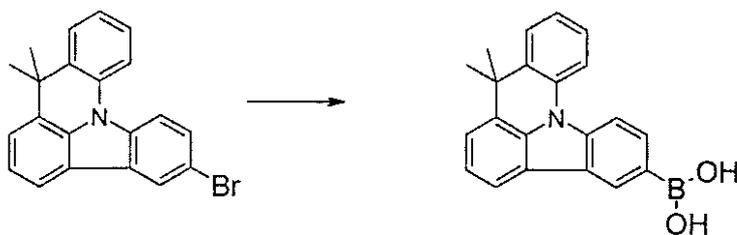
20

【0177】

[例8]

8 , 8 - ジメチル - 8 H - インドロ [3 , 2 , 1 - de] アクリジン - 6 - ボロン酸

【化66】



30

【0178】

93.7 g (259 mmol) の 6 - ブロモ - 8 , 8 - ジメチル - 8 H - インドロ [3 , 2 , 1 - de] アクリジン を 1500 ml の 乾燥 THF に溶解し、シクロヘキサン中の n - ブチルリチウムの 2 . 5 M 溶液の 135 ml (337 mmol) を - 70 にて滴下添加し、1 時間後、37 ml のホウ酸トリメチル (336 mmol) を滴下添加し、混合物を 1 時間かけて室温に温め、溶媒を除き、¹H - NMR によって均一である残渣をさらに精製せずに次の反応に用いる。

40

【0179】

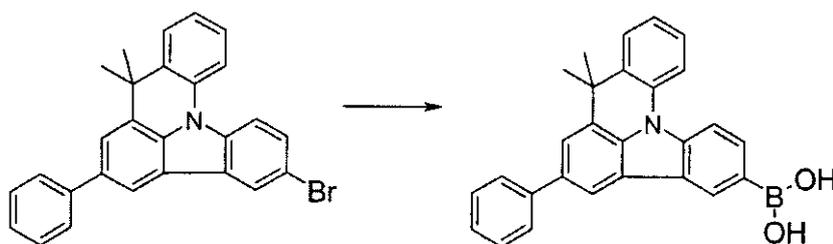
収率 : 67 g (204 mmol) 、理論値の 80% 、¹H - NMR による純度は約 96 % である。

【0180】

[例9]

8 , 8 - ジメチル - 6 - フェニル - 8 H - インドロ [3 , 2 , 1 - de] アクリジン - 3 - ボロン酸

【化67】



10

【0181】

113.4 g (259 mmol) の6-ブロモ-8,8-ジメチル-3-フェニル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジンに1500 mlの乾燥THFに溶解し、シクロヘキサン中のn-ブチルリチウムの2.5 M溶液の135 ml (337 mmol) を-70 にて滴下添加し、1時間後、37 mlのホウ酸トリメチル(336 mmol)を滴下添加し、混合物を1時間かけて室温に温め、溶媒を除き、¹H-NMRによって均一である残渣をさらに精製せずに次の反応に用いる。

【0182】

収率：92 g (229 mmol)、理論値の89%、¹H-NMRによる純度は約98%である。

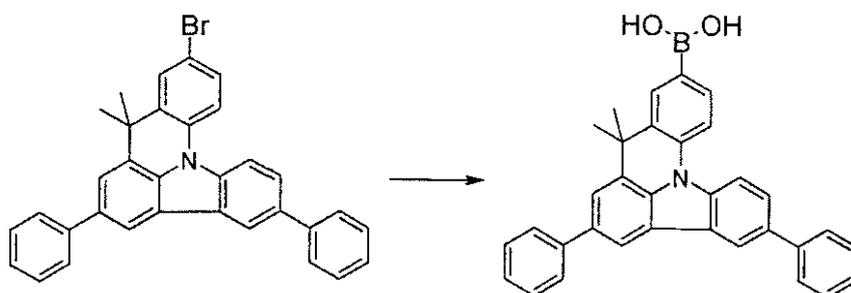
20

【0183】

[例10]

8,8-ジメチル-3,6-ジフェニル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジン-10-ボロン酸

【化68】



30

【0184】

133 g (259 mmol) の10-ブロモ-8,8-ジメチル-3,6-ジフェニル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジンに1500 mlの乾燥THFに溶解し、シクロヘキサン中のn-ブチルリチウムの2.5 M溶液の135 ml (337 mmol) を-70 にて滴下添加し、1時間後、37 mlのホウ酸トリメチル(336 mmol)を滴下添加し、混合物を1時間かけて室温に温め、溶媒を除き、¹H-NMRによって均一である残渣をさらに精製せずに次の反応に用いる。

40

【0185】

収率：111 g (233 mmol)、理論値の90%、¹H-NMRによる純度は約98%である。

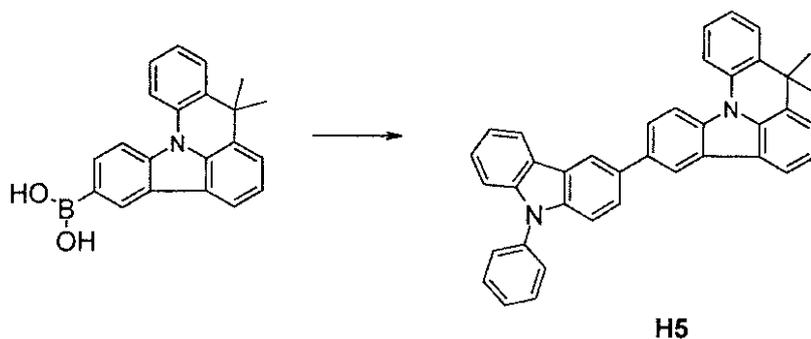
【0186】

[例11]

50

8,8-ジメチル-3-(9-フェニル-9H-カルバゾール-3-イル)-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジン(化合物H5)

【化69】



10

【0187】

36g(110mmol)の8,8-ジメチル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジン-3-ボロン酸、35g(110mmol)の3-プロモ-9-フェニル-9H-カルバゾールおよび9.7g(92mmol)の炭酸ナトリウムを350mlのトルエン、350mlのジオキサンおよび500mlの水に懸濁させる。913mg(3.0mmol)のトリ-*o*-トリルホスフィンおよび112mg(0.5mmol)の酢酸パラジウム(II)をこの懸濁液に添加し、反応混合物を16時間加熱還流する。冷却後、有機相を分離し、シリカゲルを通してろ過し、200mlの水で3回洗浄し、その後、乾燥するまで蒸発させる。残渣をトルエンから、およびCH₂Cl₂/イソプロパノールから再結晶させ、最後に高真空中で昇華させる。

20

【0188】

収率：52g(100mmol)、理論値の91%、HPLCによる純度は99.9%である。

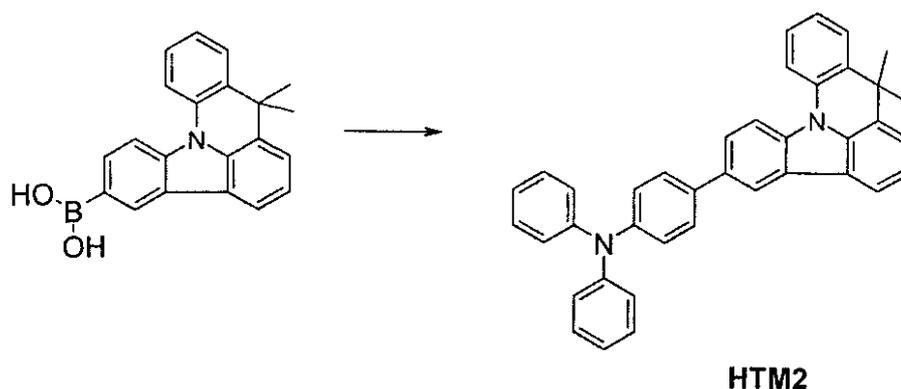
【0189】

30

[例12]

4-(8,8-ジメチル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジン-3-イル)フェニルジフェニルアミン(化合物HTM2)

【化70】



40

【0190】

化合物は、例13と同じ手法で、対応するインドロ[3,2,1-de]アクリジンボ

50

ロン酸を 35.6 g (110 mmol) の 4 - プロモフェニルジフェニルアミンと反応させることによって合成される。

【0191】

残渣をトルエンから、および CH_2Cl_2 / イソプロパノールから再結晶させ、最後に高真空中で昇華させる。

【0192】

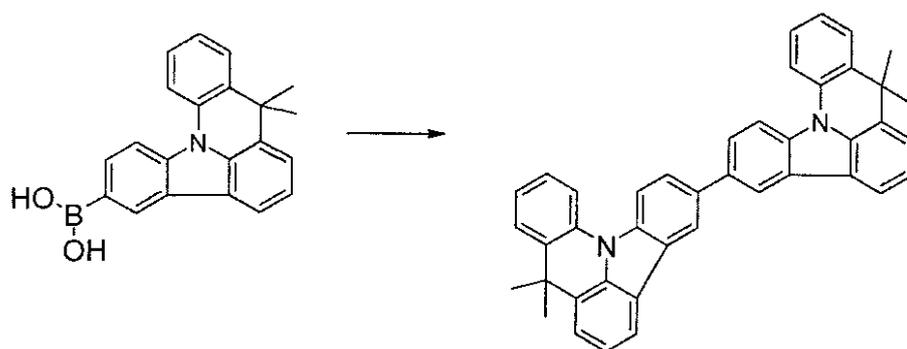
収率：51 g (97 mmol)、理論値の 89%、HPLC による純度は 99.9% である。

【0193】

[例 13]

8, 8, 8', 8' - テトラメチル - 8H, 8' H - [3, 3'] bi (インドロ [3, 2, 1 - de] アクリジニル) (化合物 H7)

【化 71】



H7

【0194】

化合物は、例 13 と同じ手法で、対応するインドロ [3, 2, 1 - de] アクリジンボロン酸を 39 g (110 mmol) の 3 - プロモ - 8, 8 - ジメチル - 8H - インドロ [3, 2, 1 - de] アクリジンと反応させることによって合成される。

【0195】

残渣をトルエンから、および CH_2Cl_2 / イソプロパノールから再結晶させ、最後に高真空中で昇華させる。

【0196】

収率：55 g (100 mmol)、理論値の 92%、HPLC による純度は 99.9% である。

【0197】

[例 14]

8, 8, 8', 8' - テトラメチル - 8H, 8' H - [3, 6'] bi (インドロ [3, 2, 1 - de] アクリジニル) (化合物 H8)

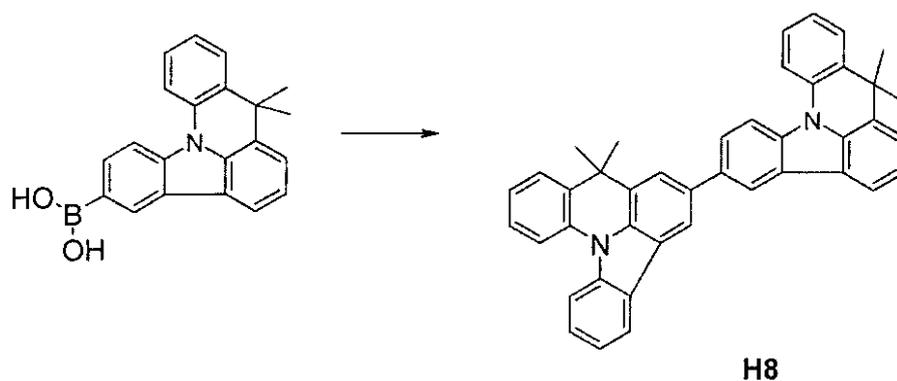
10

20

30

40

【化72】



10

【0198】

化合物は、例13と同じ手法で、対応するインドロ[3,2,1-de]アクリジンボロン酸を39g(110mmol)の6-プロモ-8,8-ジメチル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジンと反応させることによって合成される。

【0199】

残渣をトルエンから、および CH_2Cl_2 /イソプロパノールから再結晶させ、最後に高真空中で昇華させる。

20

【0200】

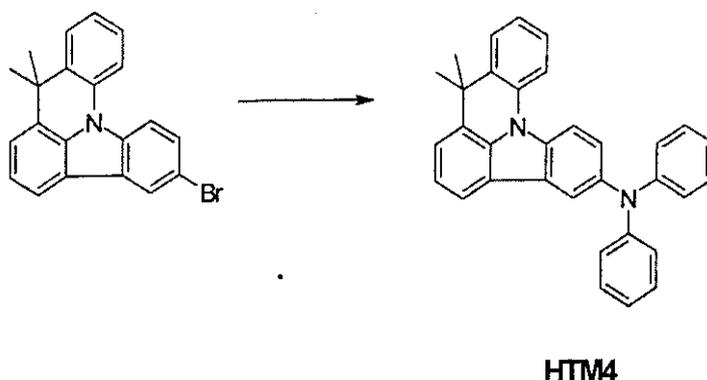
収率：49.5g(90mmol)、理論値の82%、HPLCによる純度は99.9%である。

【0201】

[例15]

(8,8-ジメチル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジン-3-イル)ジフェニルアミン(化合物HTM4)

【化73】



40

【0202】

1000mlのジオキサン中の31g(86.6mmol)の3-プロモ-8,8-ジメチル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジンおよび16g(95.9mmol)のジフェニルアミンの脱気溶液を N_2 を用いて1時間飽和する。次に、最初に0.9ml(4.3mmol)の $\text{P}(\text{tBu})_3$ 、その後、0.48g(2.1mmol)の酢酸パラジウム(II)をこの溶液に添加し、続いて、固体状態の12.6g(131mmol)

50

o 1) の NaOtBu を添加する。反応混合物を 18 時間加熱還流する。室温に冷却後、1000 ml の水を注意深く添加する。有機相を 4 × 50 ml の水で洗浄し、MgSO₄ 上で乾燥させ、溶媒を真空中で除く。純粋な生成物を再結晶および最終昇華によって得る。

【0203】

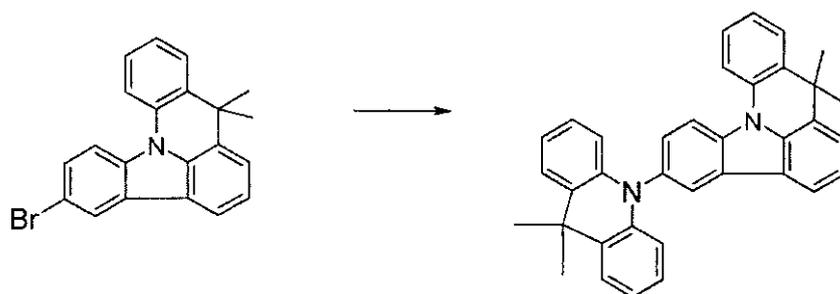
収率：3.4 g (7.6 mmol)、理論値の 89%、HPLC による純度は 99.9% である。

【0204】

[例 16]

3-(9,9-ジメチル-9H-アクリジン-10-イル)-8,8-ジメチル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジン(化合物 HTM5)

【化 74】



HTM5

20

【0205】

化合物は、例 18 と同じ手法で、3.1 g (86.6 mmol) の 3-ブロモ-8,8-ジメチル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジンと 2.0 g (95.9 mmol) の 9,9'-ジメチル-9,10-ジヒドロアクリジンの反応によって合成される。

【0206】

残渣をトルエンから再結晶させ、最後に高真空中で昇華させる。

【0207】

収率：3.7 g (7.6 mmol)、理論値の 80%、HPLC による純度は 99.9% である。

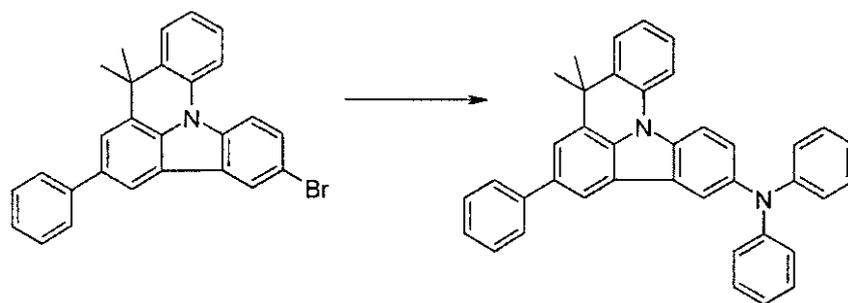
【0208】

[例 17]

(8,8-ジメチル-6-フェニル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジン-3-イル)-ジフェニルアミン(化合物 HTM6)

30

【化75】



HTM6

10

【0209】

化合物は、例18と同じ手法で、37.6g (86.6mmol)の6-ブロモ-8,8-ジメチル-3-フェニル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジンに対応するアミンと反応させることによって合成される。

【0210】

残渣をトルエンから再結晶させ、最後に高真空中で昇華させる。

20

【0211】

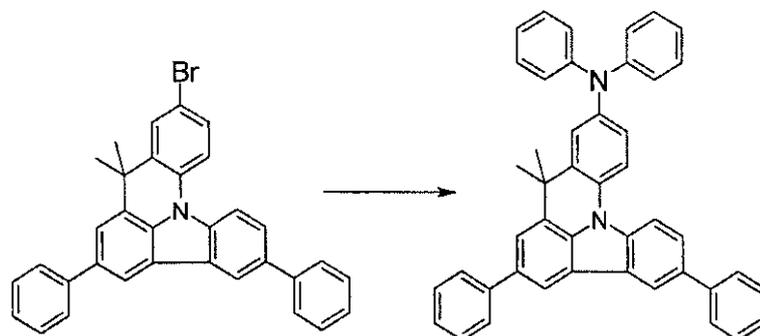
収率：39g (79mmol)、理論値の87%、HPLCによる純度は99.9%である。

【0212】

[例18]

(8,8-ジメチル-3,6-ジフェニル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジン-10-イル)-ジフェニルアミン(化合物HTM7)

【化76】



HTM7

30

【0213】

化合物は、例18と同じ手法で、44g (86.6mmol)の10-ブロモ-8,8-ジメチル-3,6-ジフェニル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジンに対応するアミンと反応させることによって合成される。

【0214】

残渣をトルエンから再結晶させ、最後に高真空中で昇華させる。

【0215】

収率：39g (64mmol)、理論値の75%、HPLCによる純度は99.9%で

50

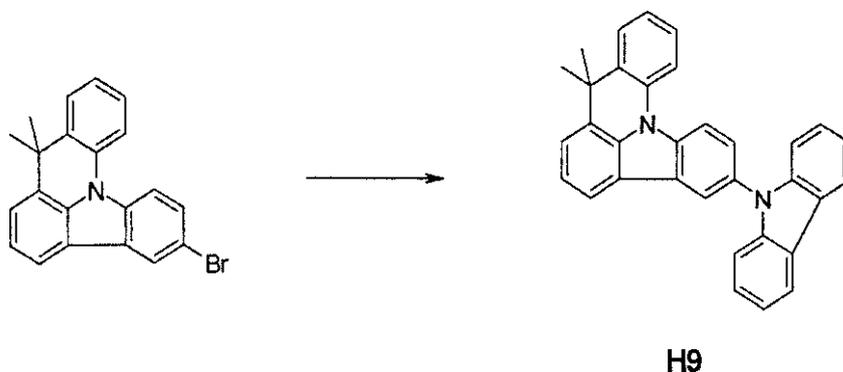
ある。

【0216】

[例19]

3-カルバゾール-9-イル-8,8-ジメチル-8H-インドロ[3,2,1-de]
]アクリジン(化合物H9)

【化77】



10

【0217】

化合物は、例18と同じ手法で、31g(86.0mmol)の3-ブromo-8,8-ジメチル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジンを16g(95.9mmol)のカルバゾールと反応させることによって合成される。

【0218】

残渣をトルエンから再結晶させ、最後に高真空中で昇華させる。

【0219】

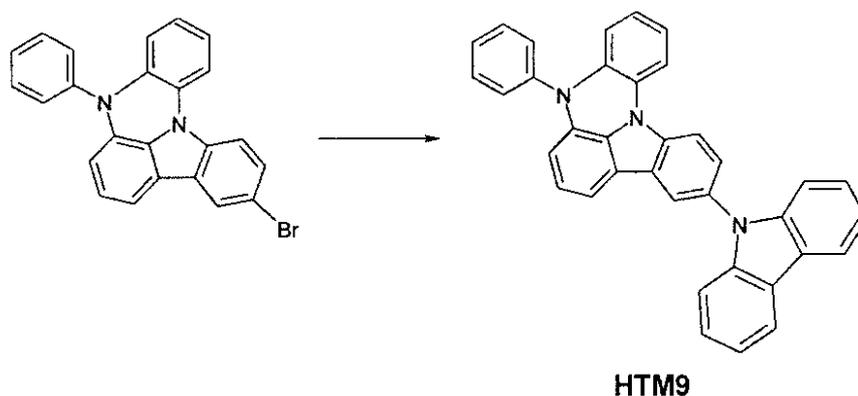
収率：38g(64mmol)、理論値の85%、HPLCによる純度は99.9%である。

【0220】

[例20]

8-カルバゾール-9-イル-エタ-(E)-イリデン-3-フェニル-1-プロパ-2-エン-(E)-イリデン-2,3-ジヒドロ-1H-ピラジノ[3,2,1-jk]
カルバゾール(化合物HTM9)

【化78】



40

【0221】

化合物は、例18と同じ手法で、37g(86.6mmol)の3-ブromo-8H-8

50

、12b-ジアザベンゾ[a]アセアントリレンを16g(95.9mmol)のカルバゾールと反応させることによって合成される。

【0222】

残渣をトルエンから再結晶させ、最後に高真空中で昇華させる。

【0223】

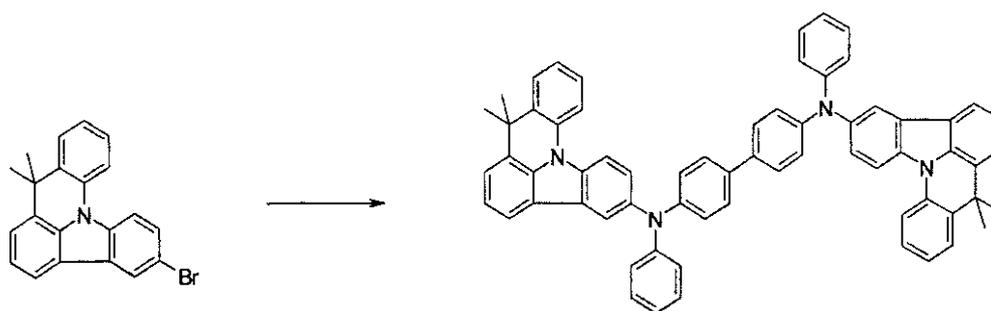
収率：31g(60mmol)、理論値の70%、HPLCによる純度は99.9%である。

【0224】

[例21]

N4,N4'-ビス-(8,8-ジメチル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジン-3-イル)-N4,N4'-ジフェニルピフェニル-4,4'-ジアミン(化合物HTM8)

【化79】



HTM8

【0225】

1000mlのジオキサン中の31g(86.6mmol)の3-ブロモ-8,8-ジメチル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジンおよび13.4g(40mmol)のN,N'-ジフェニルベンジジンの脱気溶液をN₂を用いて1時間飽和する。次に、最初に0.9ml(4.3mmol)のP(tBu)₃、その後、0.48g(2.1mmol)の酢酸パラジウム(II)をこの溶液に添加し、続いて、固体状態の12.6g(131mmol)のNaOtBuを添加する。反応混合物を18時間加熱還流する。室温に冷却後、1000mlの水を注意深く添加する。有機相を4×50mlのN₂Oで洗浄し、MgSO₄上で乾燥させ、溶媒を真空中で除く。純粋な生成物を再結晶によって得る。

【0226】

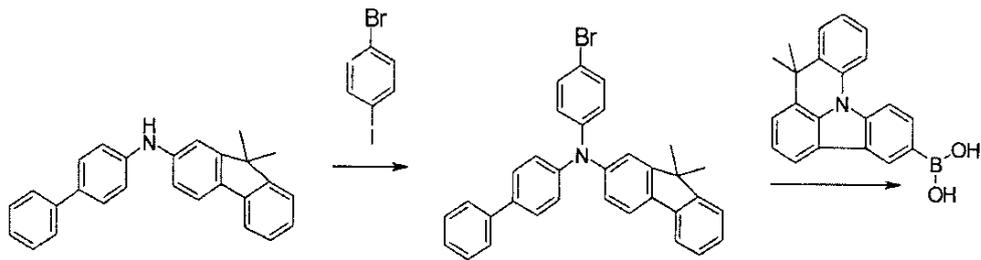
収率：29g(32mmol)、理論値の81%、HPLCによる純度は99.9%である。

【0227】

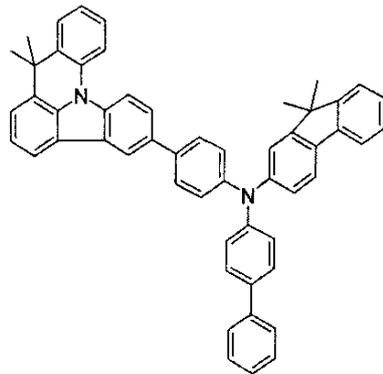
[例22]

ピフェニル-4-イル-(9,9-ジメチル-9H-フルオレン-2-イル)-[4-(8,8-ジメチル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジン-3-イル)フェニル]アミン(化合物HTM3)

【化 80】



10



20

HTM3

【0228】

ビフェニル - 4 - イル - (4 - プロモフェニル) - (9 , 9 - ジメチル - 9 H - フルオレン - 2 - イル) アミン :

100 ml のトルエン中の 490 mg (0.16 mmol) の塩化銅 (I) および 906 mg (5 mmol) の 1,10 - フェナントロリンの脱気溶液を N₂ を用いて 1 時間飽和し、130 に加熱する。次に、18 g (50 mmol) の N - [1,1' - ビフェニル] - 4 - イル - 9,9 - ジメチル - 9 H - フルオレン - 2 - アミンおよび 14 g (50 mmol) の 1 - プロモ - 4 - ヨードベンゼンをこの溶液に添加し、その後、180 にて 2 時間加熱する。冷却後、180 ml の水を混合物に添加し、有機相を分離し、溶媒を真空中で除く。生成物を n - ヘキサンから再結晶させる。

30

【0229】

収率 : 15 g (29 mmol)、理論値の 58%、¹H - NMR による純度は約 98% である。

【0230】

ビフェニル - 4 - イル - (9,9 - ジメチル - 9 H - フルオレン - 2 - イル) - [4 - (8,8 - ジメチル - 8 H - インドロ [3,2,1 - de] アクリジン - 3 - イル) フェニル] アミン :

40

化合物は、例 13 と同じ手法で、対応するインドロ [3,2,1 - de] アクリジンボロン酸を 15 g (29 mmol) のビフェニル - 4 - イル - (4 - プロモフェニル) - (9,9 - ジメチル - 9 H - フルオレン - 2 - イル) アミンと反応させることによって合成される。

【0231】

残渣を酢酸エチル / ヘプタンから再結晶させ、最後に高真空中で昇華させる。

【0232】

50

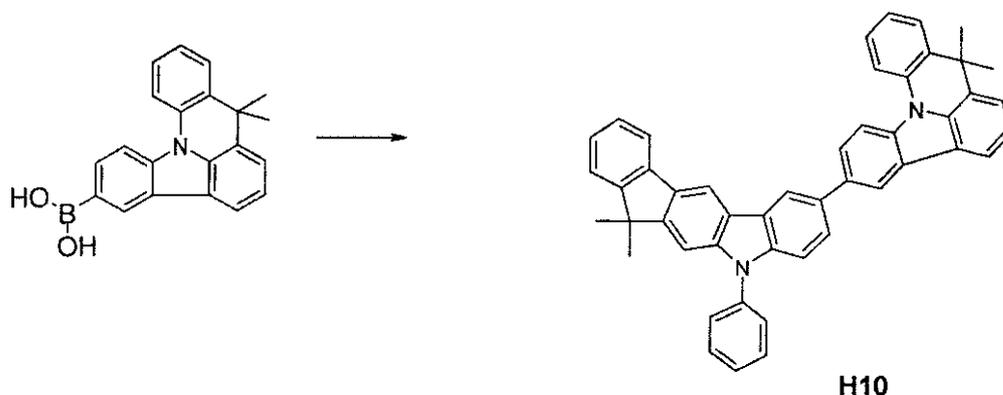
収率：14.4 g (20 mmol)、理論値の69%、HPLCによる純度は99.9%である。

【0233】

[例23]

3-(12,12-ジメチル-10-フェニル-10,12-ジヒドロ-10-アザインデノ[2,1-b]フルオレン-7-イル)-8,8-ジメチル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジン(化合物H10)

【化81】



10

20

【0234】

化合物は、例13と同じ手法で、対応するインドロ[3,2,1-de]アクリジンボロン酸を48g(110mmol)の7-プロモ-2,12-ジメチル-10-フェニル-10,12-ジヒドロ-10-アザインデノ[2,1-b]フルオレンと反応させることによって合成される。

【0235】

残渣をトルエンから、およびCH₂Cl₂/イソプロパノールから再結晶させ、最後に高真空中で昇華させる。

30

【0236】

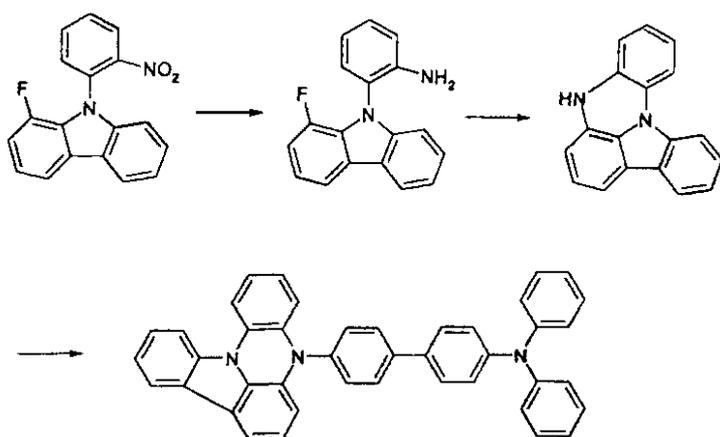
収率：54.5g(85mmol)、理論値の78%、HPLCによる純度は99.9%である。

【0237】

[比較例24]

[4'-(8,12b-ジアザベンゾ[a]アセアントリレン-8-イル)ピフェニル-4-イル]ジフェニルアミン(化合物HTM10)

【化 8 2】



HTM10

10

【0238】

1-フルオロ-9-(2-アミノフェニル)-9H-カルバゾール：
50 g (163 mmol) の 1-フルオロ-9-(2-ニトロフェニル)-9H-カルバゾールを 600 ml の EtOH に溶解し、67 g (489 mmol) の $ZnCl_2$ を室温にて添加し、混合物を 6 時間加熱還流する。次に、混合物を 1 時間かけて室温に温め、20% NaOH を添加し、相分離後、溶媒を除き、残渣をクロマトグラフィーによって精製する。

20

【0239】

収率：33 g (119 mmol)、理論値の 73%、 1H -NMR による純度は約 98% である。

【0240】

8H-8,12b-ジアザベンゾ[a]アセアントリレン：
30 g (109 mmol) の 1-フルオロ-9-(2-アミノフェニル)-9H-カルバゾールを保護ガス下で 200 ml の DMF に溶解し、4.4 g (109 mmol) の NaH (油中 60%) を室温にて添加し、混合物を 6 時間還流下で沸騰させる。室温にて添加し、混合物を還流下で 6 時間沸騰させる。次に、混合物を 1 時間かけて室温に温め、溶媒を除き、残渣をクロマトグラフィーによって精製する。

30

【0241】

収率：23.4 g (86 mmol)、理論値の 79%、 1H -NMR による純度は約 98% である。

【0242】

[4'-(8,12b-ジアザベンゾ[a]アセアントリレン-8-イル)ピフェニル-4-イル]ジフェニルアミン：

1000 ml のジオキサン中の 35.6 g (89 mmol) の (4'-プロモピフェニル-4-イル)ジフェニルアミンおよび 22.0 g (81 mmol) の 8H-8,12b-ジアザベンゾ[a]アセアントリレンの脱気溶液を N_2 を用いて 1 時間飽和する。次に、最初に 1.0 ml (4 mmol) の $P(tBu)_3$ 、その後、0.4 g (2 mmol) の酢酸パラジウム (II) をこの溶液に添加し、続いて、固体状態の 11.7 g (122 mmol) の NaOtBu を添加する。反応混合物を 18 時間加熱還流する。室温に冷却後、1000 ml の水を注意深く添加する。有機相を分離し、4 x 50 ml の水で洗浄し、 $MgSO_4$ 上で乾燥させ、溶媒を真空中で除く。純粋な生成物を再結晶および高真空中での最終昇華によって得る。

40

【0243】

収率：33.4 g (58 mmol)、理論値の 72%、HPLC による純度は 99.9

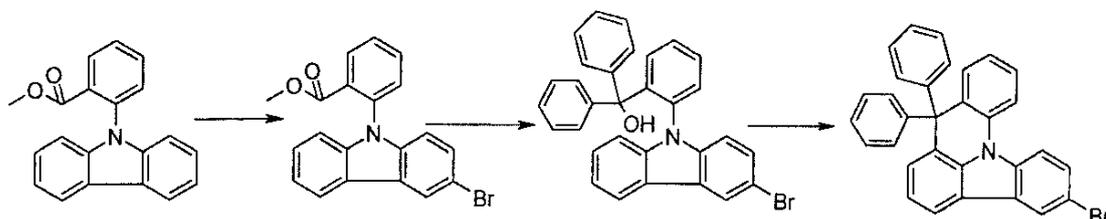
50

%である。

【0244】

[例25]

3-プロモ-8,8-ジフェニル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジン
【化83】



10

【0245】

メチル2-(3-プロモ-9H-カルバゾール)ベンゾエート:

62g (207mmol)のメチル2-(9H-カルバゾール)ベンゾエートを2000mlのDMF中で-10℃に冷却し、37.3g (207mmol)のNBSを分けて添加し、その混合物を室温にて6時間攪拌する。次に、500mlの水を混合物に添加し、その後、CH₂Cl₂で抽出する。有機相をMgSO₄上で乾燥させ、溶媒を真空中で除く。生成物を熱トルエンとともに攪拌することによって洗浄し、吸引ろ過する。

20

【0246】

収率: 72g (190mmol)、理論値の92%、¹H-NMRによる純度は約98%である。

【0247】

[2-(3-プロモカルバゾール-9-イル)フェニル]ジフェニルメタノール:

21.3g (86.7mmol)の塩化Ce(III)を250mlのTHFに初期に導入する。30g (78.9mmol)のメチル2-(3-プロモ-9H-カルバゾール)ベンゾエート(600mlの乾燥THFに溶解される)をこの溶液に室温にて滴下添加し、混合物を2.5時間攪拌する。混合物を0℃に冷却し、THF中の2Mフェニルマグネシウムプロミドの118.3ml (236mmol)を添加し、混合物を一晩攪拌する。反応が完了したとき、MeOHを用いて-30℃にて注意深くクエンチする。反応溶液を1/3になるまで蒸発させ、1lのCH₂Cl₂を添加し、混合物を洗浄する。その後、有機相をMgSO₄上で乾燥させ、蒸発させる。

30

【0248】

収率: 38.7g (76.7mmol)、理論値の97%、¹H-NMRによる純度は約94%である。

【0249】

プロモ-8,8-ジフェニル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジン:

38.7g (76.7mmol)の2-[2-(3-プロモカルバゾール-9-イル)フェニル]プロパン-2-オールを750mlの脱気したジクロロメタンに溶解し、49.6gのポリリン酸および33mlのメタンスルホン酸の懸濁液を添加し、混合物を60℃にて1時間加熱する。バッチを冷却し、水を添加する。固体が沈殿し、CH₂Cl₂/THF(1:1)に溶解する。この溶液を20%NaOHを用いて注意深くアルカリ性にし、この相を分離し、MgSO₄上で乾燥させる。得られる固体をヘプタンとともに攪拌することによって洗浄する。収率: 22g (45mmol)、理論値の59%、¹H-NMRによる純度は約95%である。

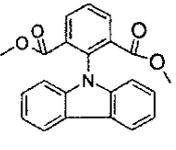
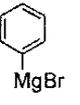
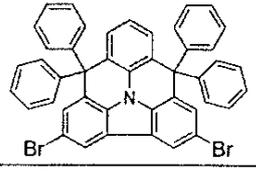
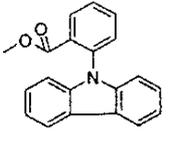
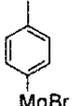
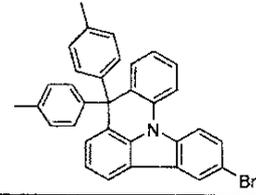
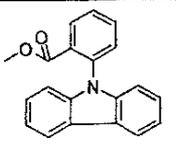
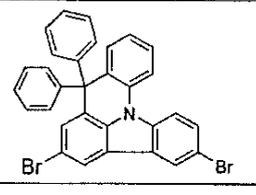
40

【0250】

以下の化合物は同様に得られる:

50

【表 A】

Ex.	出発物質1	出発物質2	生成物	収率
25a				63%
25b				74%
25c				59%

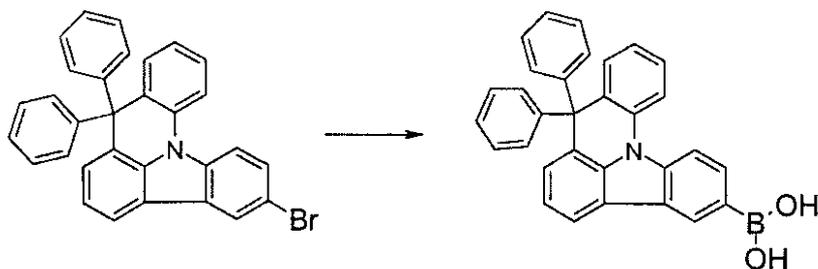
10

20

【0251】

[例26]

8,8-ジフェニル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジン-6-ボロン酸
【化84】



30

【0252】

125.9 g (259 mmol) のプロモ-8,8-ジフェニル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジンを1500 ml の乾燥THFに溶解する。シクロヘキサン中のn-ブチルリチウムの2.5 M溶液の135 ml (337 mmol) を-70 °Cにて滴下添加し、1時間後、37 ml のホウ酸トリメチル(336 mmol)を滴下添加する。混合物を1時間かけて室温に温め、溶媒を除き、¹H-NMRによって均一である残渣をさらに精製せずに次の反応に用いる。

40

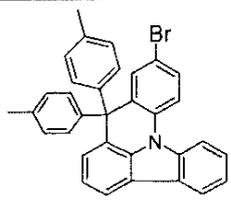
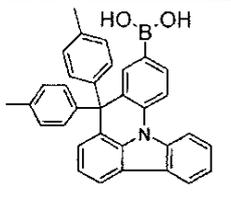
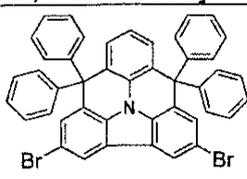
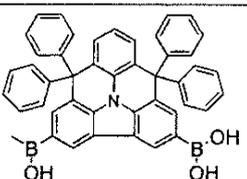
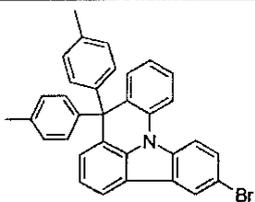
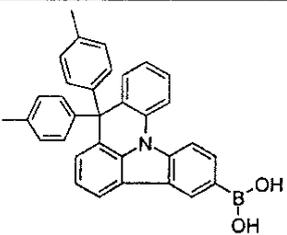
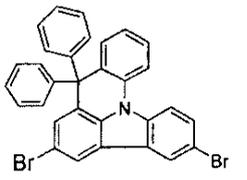
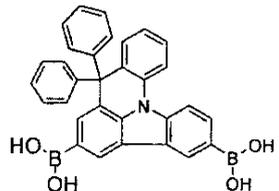
【0253】

収率：87.6 g (194 mmol)、理論値の75%、¹H-NMRによる純度は約96%である。

【0254】

以下の化合物は同様に得られる：

【表 B】

Ex.	出発物質1	生成物	収率
26a	 [J.Mater.Chem. 2009, 19, 7661-7665]		61%
26b			55%
26c			56%
26d			51%

10

20

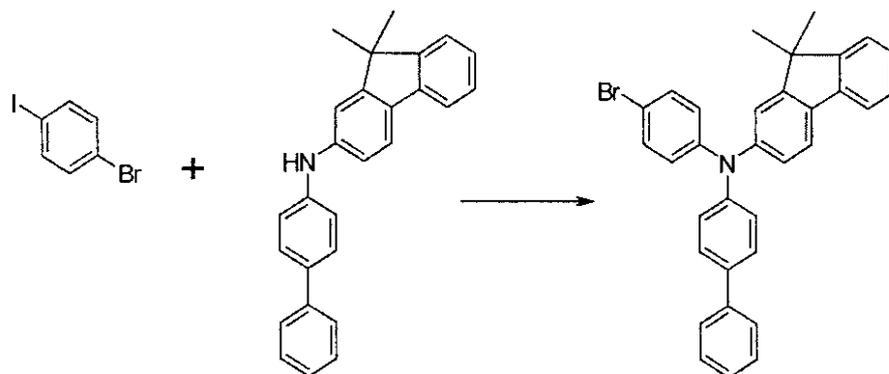
30

【 0 2 5 5 】

【 例 2 7 】

ビフェニル - 4 - イル - (4 - プロモフェニル) - (9 , 9 - ジメチル - 9 H - フルオレン - 2 - イル) アミン

【 化 8 5 】



40

50

【0256】

1000 ml のジオキサン中の 24.6 g (87 mmol) の 1-ブロモ-4-ヨードベンゼンおよび 28.8 g (80 mmol) のビフェニル-4-イル-(9,9-ジメチル-9H-フルオレン-2-イル)アミンの脱気溶液を N_2 を用いて 1 時間飽和する。次に、最初に 0.9 ml (4.3 mmol) の $P(tBu)_3$ 、その後、0.48 g (2.1 mmol) の酢酸パラジウム(II)をこの溶液に添加する。続いて、固体状態の 12.6 g (131 mmol) の $NaOtBu$ を添加する。反応混合物を 18 時間加熱還流する。室温に冷却後、1000 ml の水を注意深く添加する。有機相を 4×50 ml の水で洗浄し、 $MgSO_4$ 上で乾燥させ、溶媒を真空中で除く。純粋な生成物を再結晶および最終昇華によって得る。

10

【0257】

収率：31.5 g (61 mmol)、理論値の 70%、HPLC による純度は 98% である。

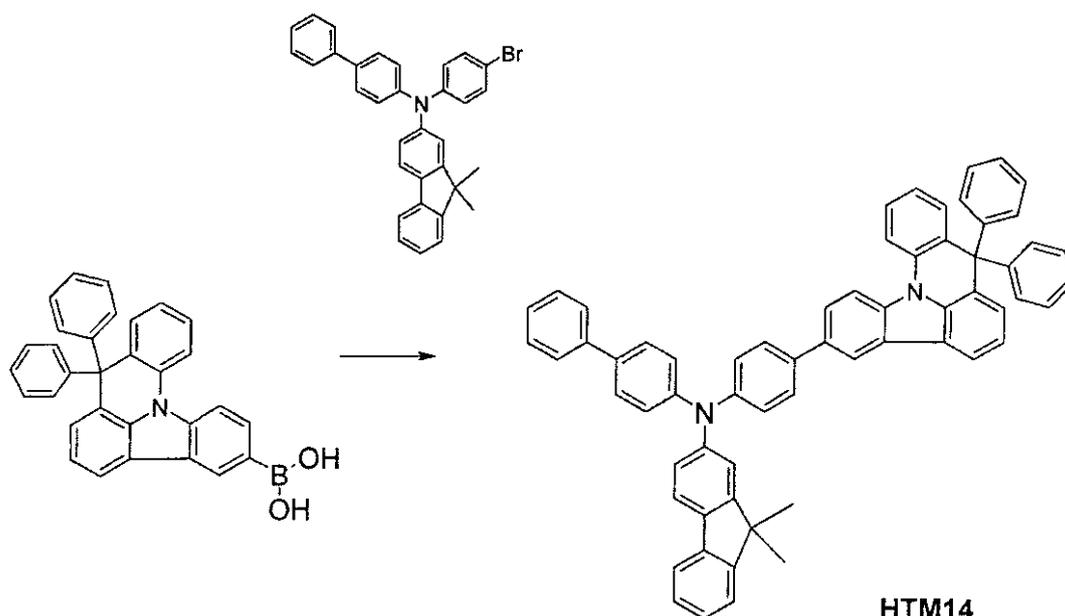
【0258】

[例 28]

ビフェニル-4-イル-(9,9-ジメチル-9H-フルオレン-2-イル)-[4-(8,8-ジフェニル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジン-3-イル)フェニル]アミン (HTM14)

【化 86】

20



30

【0259】

85 g (190 mmol) の 8,8-ジフェニル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジン-3-ボロン酸、98 g (190 mmol) のビフェニル-4-イル-(4-ブロモフェニル)-(9,9-ジメチル-9H-フルオレン-2-イル)アミン、および 13 g (123 mmol) の炭酸ナトリウムを 180 ml のトルエン、180 ml のジオキサン、および 60 ml の水に懸濁させる。3.0 mg (2.6 mmol) の $Pd(PPh_3)_4$ をこの懸濁液に添加し、反応混合物を 16 時間加熱還流する。冷却後、有機相を分離し、シリカゲルを通してろ過し、200 ml の水で 3 回洗浄し、その後、乾燥するまで蒸発させる。残渣をトルエンから、およびジクロロメタン/イソプロパノールから再結晶させ、最後に高真空下で昇華させる。純度は 99.9% である。収率は 124 g (147 mmol)、理論値の 78% に相当する。

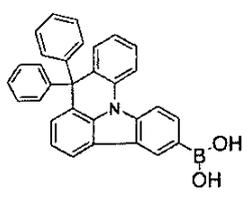
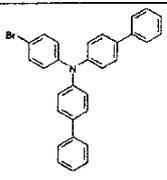
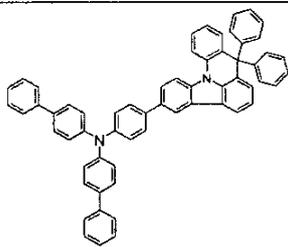
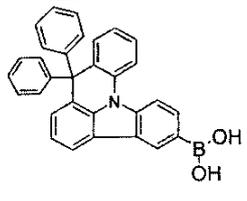
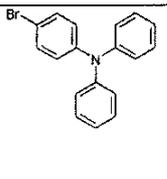
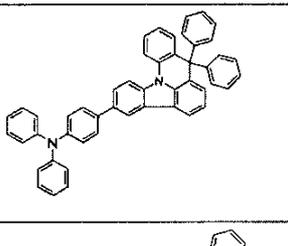
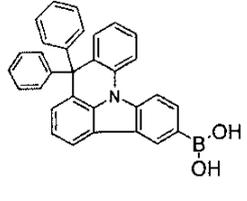
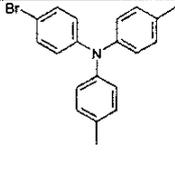
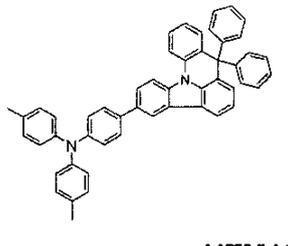
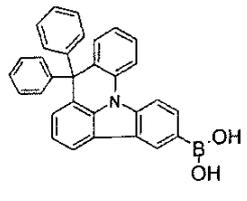
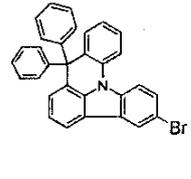
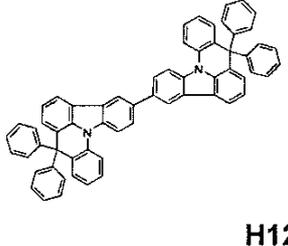
40

50

【 0 2 6 0 】

以下の化合物は同様に得られる：

【表 C - 1】

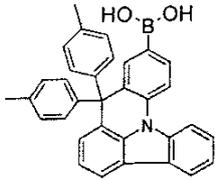
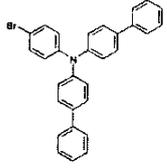
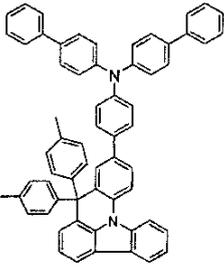
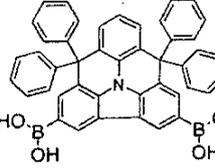
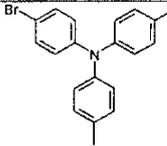
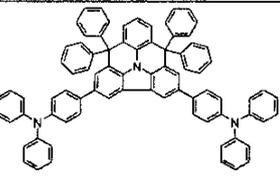
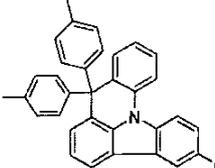
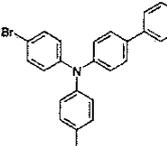
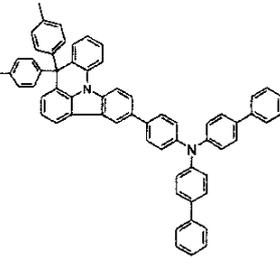
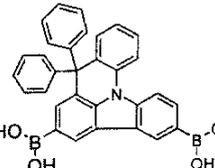
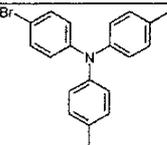
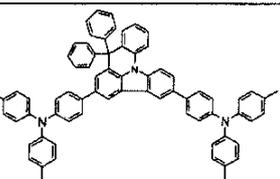
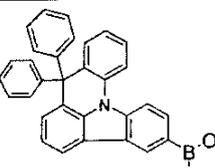
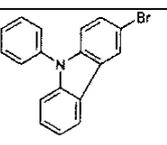
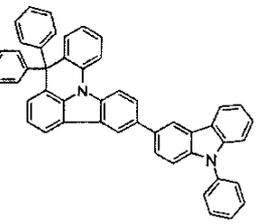
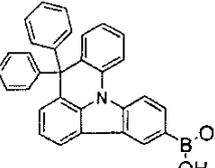
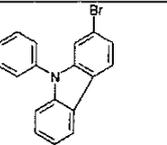
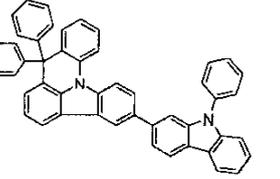
Ex.	出発物質1		生成物	収率
28a		 [499128-71-1]	 HTM13	64%
28b		 [36809-26-4]	 HTM13	62%
28c		 [58047-42-0]	 HTM15	73%
28d			 H12	68%

10

20

30

【表 C - 2】

28e		 [499128-71-1]	 HTM16	59%
28f		 [499128-71-1]	 HTM17	57%
28g		 [499128-71-1]	 HTM18	52%
28h		 [499128-71-1]	 HTM19	55%
28i		 [1153-85-1]	 H14	75%
28j		 [94994-62-4]	 H14	66%

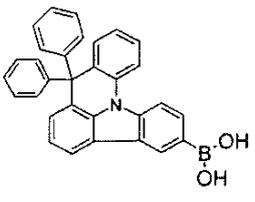
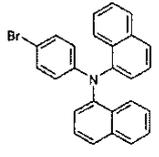
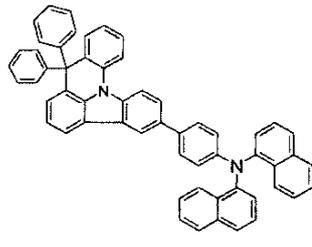
10

20

30

40

【表 C - 3】

			H16	
28k		 [690658-64-1]	 HTM20	64%

10

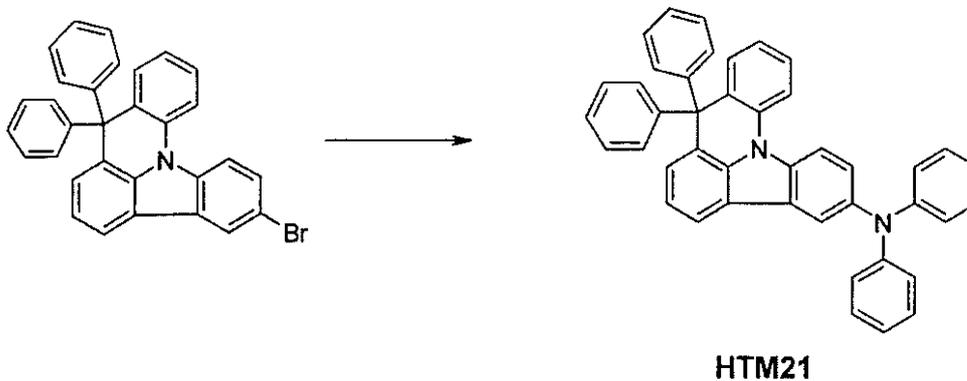
【0261】

[例29]

(8,8-ジフェニル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジン-3-イル)ジフェニルアミン(HTM21)

【化87】

20



30

【0262】

1000mlのジオキサン中の42g(86.6mmol)の3-プロモ-8,8-ジフェニル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジンおよび16g(95.9mmol)のジフェニルアミンの脱気溶液をN₂を用いて1時間飽和する。次に、最初に0.9ml(4.3mmol)のP(tBu)₃、その後、0.48g(2.1mmol)の酢酸パラジウム(II)を添加し、続いて、固体状態の12.6g(131mmol)のNaOtBuをこの溶液に添加する。反応混合物を18時間加熱還流する。室温に冷却後、1000mlの水を注意深く添加する。有機相を4×50mlの水で洗浄し、MgSO₄上で乾燥させ、溶媒を真空中で除く。純粋な生成物を再結晶および最終昇華によって得る。

40

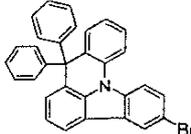
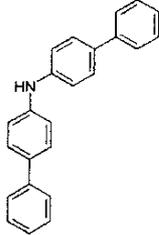
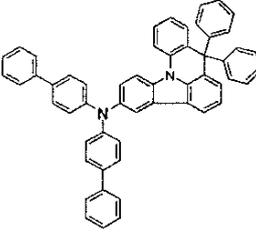
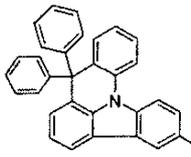
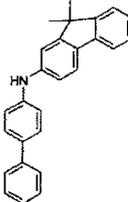
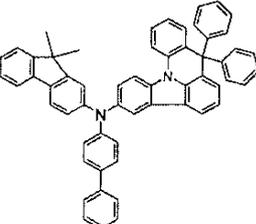
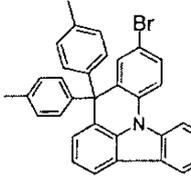
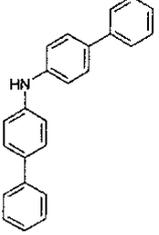
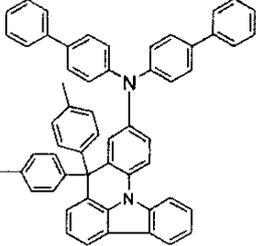
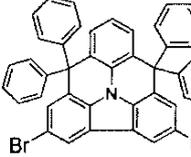
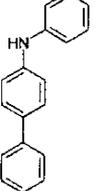
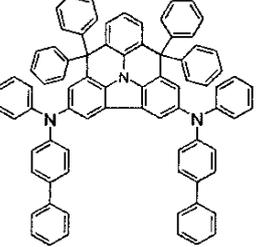
【0263】

収率：39g(68mmol)、理論値の80%、HPLCによる純度は99.9%である。

【0264】

以下の化合物は同様に得られる：

【表 D - 1】

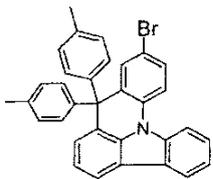
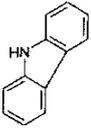
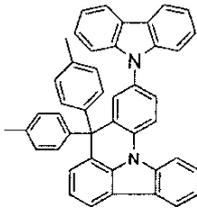
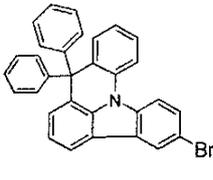
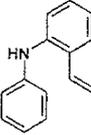
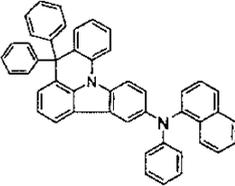
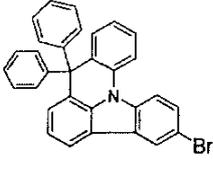
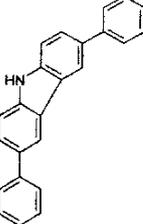
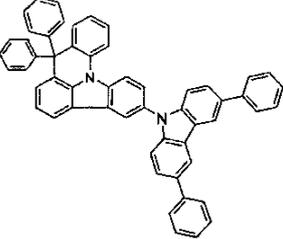
Ex.	出発物質1		生成物	収率
29a		 [102113-98-4]	 HTM22	64%
29b		 [897671-69-1]	 HTM23	72%
29c	 [J. Mater. Chem. 2009, 19, 7661-7665]		 HTM24	61%
29d		 [32228-99-2]	 HTM25	66%

10

20

30

【表 D - 2】

29e			 H17	72%	10
29f		 [90-30-2]	 HTM26	67%	
29g		 [56525-79-2]	 H11	58%	

【 0 2 6 5 】

[例 3 0]

3 - (9 , 9 - ジメチル - 10 - フェニル - 9 , 10 - ジヒドロアクリジン - 2 - イル) - 8 , 8 - ジメチル - 8 H - インドロ [3 , 2 , 1 - d e] アクリジン

2 - クロロ - 9 , 9 - ジメチル - 9 , 10 - ジヒドロアクリジン

30

【 化 8 8 】



[918163-16-3]

40

【 0 2 6 6 】

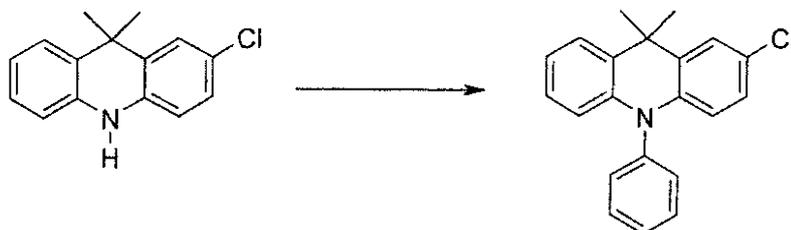
30.3 g (116 mmol) の 2 - [2 - (4 - クロロフェニルアミノ) フェニル] プロパン - 2 - オールを 700 ml の脱気したトルエンに溶解し、93 g のポリリン酸および 61.7 g のメタンスルホン酸の懸濁液を添加し、混合物を室温にて 1 時間攪拌し、50 にて 1 時間加熱する。バッチを冷却し、氷に注ぎ、酢酸エチルで 3 回抽出する。合わせた有機相を飽和塩化ナトリウム溶液で洗浄し、硫酸マグネシウム上で乾燥させ、蒸発させる。ヘプタン / 酢酸エチル (20 : 1) を用いたシリカゲルを通した粗生成物のろ過

50

により、淡黄色結晶として25.1g(89%)の2-クロロ-9,9-ジメチル-9,10-ジヒドロアクリジンを得る。

【0267】

2-クロロ-9,9-ジメチル-10-フェニル-9,10-ジヒドロアクリジン
【化89】



10

【0268】

600mlのトルエン中の16.6g(147mmol)の4-ヨードベンゼンおよび30g(123mmol)の2-クロロ-9,9-ジメチル-9,10-ジヒドロアクリジンの脱気溶液をN₂を用いて1時間飽和する。次に、最初に2.09ml(8.6mmol)のP(tBu)₃、その後、1.38g(6.1mmol)の酢酸パラジウム(II)をこの溶液に添加する。続いて、固体の17.7g(185mmol)のNaOtBuを添加する。反応混合物を1時間加熱還流する。室温に冷却後、500mlの水を注意深く添加する。水相を3×50mlのトルエンで洗浄し、MgSO₄上で乾燥させ、溶媒を真空中で除く。ヘプタン/酢酸エチル(20:1)を用いたシリカゲルを通した粗生成物のろ過により、淡黄色結晶として32.2g(81%)の2-クロロ-9,9-ジメチル-10-フェニル-9,10-ジヒドロアクリジンを得る。

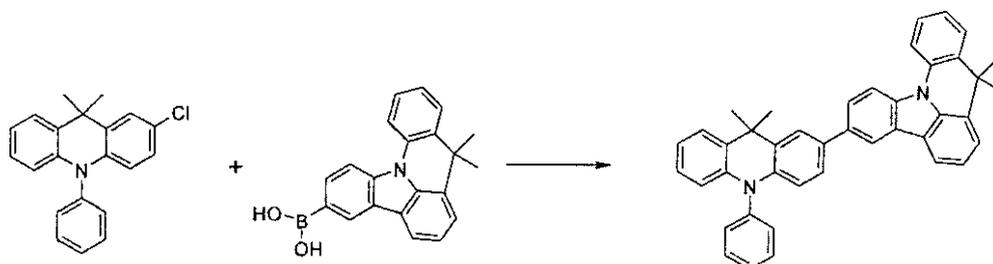
20

【0269】

3-(9,9-ジメチル-10-フェニル-9,10-ジヒドロアクリジン-2-イル)-8,8-ジメチル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジン

【化90】

30



40

【0270】

36g(110mmol)の8,8-ジメチル-8H-インドロ[3,2,1-de]アクリジン-3-ボロン酸、35.2g(110mmol)の2-クロロ-9,9-ジメチル-10-フェニル-9,10-ジヒドロアクリジン、および9.7g(92mmol)の炭酸ナトリウムを350mlのトルエン、350mlのジオキサンおよび500mlの水に懸濁させる。913mg(3.0mmol)のトリ-*o*-トリルホスフィンおよび112mg(0.5mmol)の酢酸パラジウム(II)をこの溶液に添加し、反応混合物を16時間加熱還流する。冷却後、有機相を分離し、シリカゲルを通してろ過し、200mlの水で3回洗浄し、次に、乾燥するまで蒸発させる。残渣をトルエンから、および

50

CH₂Cl₂ / イソプロパノールから再結晶させ、最後に高真空中で昇華させる。

【0271】

収率：52 g (100 mmol)、理論値の91%、HPLCによる純度は99.9%である。

【0272】

B) デバイス例C1 ~ I63 : OLEDの製造

本発明に係るOLEDおよび従来技術に従うOLEDは、W004/058911に従う一般的な方法により製造され、それは、本明細書に記載される環境(層-厚さ変化、使用された物質)に適応される。

【0273】

様々なOLEDに関するデータを以下の例C1 ~ I63に示す(表1 ~ 3を参照されたい)。150 nmの厚さを有する構造化されたITO(イリジウムスズオキシド)で被覆されたガラスプレートは、改良処理のために、20 nmのPEDOT(水からスピンコートで適用されたポリ(3,4-エチレンジオキシ-2,5-チオフェン; H.C. Starck, Goslar, Germanyから購入される)で被覆される。これらの被覆ガラスプレートは、それに対してOLEDが適用される基板を形成している。原則として、OLEDは以下の層構造を有する: 基板/任意の正孔注入層(HIL)/正孔輸送層(HTL)/任意の中間層(IL)/電子プロッキング層(EBL)/発光層(EML)/任意の正孔プロッキング層/電子輸送層(ETL)/任意の電子注入層(EIL)および最後に陰極。陰極は、100 nmの厚さのアルミニウム層によって形成される。OLEDの正確な構造を表1に示す。OLEDを製造するために必要とされる物質を表4に示す。

【0274】

全ての物質は、真空チャンバー内で熱蒸気堆積によって適用される。ここで、発光層は、通常、少なくとも1種のマトリックス物質(ホスト物質)と発光ドーパント(発光体)からなり、それは、ある体積比で共蒸着によりマトリックス物質(単数または複数)と混合される。ここで、H3 : CBP : TER1 (55% : 35% : 10%)のなどの表示は、物質H3が層において55%の体積比で存在し、CBPが35%の体積比で存在し、TER1が10%の体積比で存在することを意味する。同様に、電子輸送層はまた、2つの物質の混合物からなってもよい。

【0275】

OLEDは、標準的な方法により特徴付けられる。この目的のために、エレクトロルミネッセンススペクトル、電流効率(cd/Aで測定される)、電力効率(lm/Wで測定される)、および発光密度の関数として、電流-電圧-輝度特性線(IUL特性線)から計算される外部量子効率(EQE、パーセントで測定される)、ならびに寿命が決定される。寿命は、発光密度が、ある初期発光密度からある比率にまでに降下したことにかかる時間として定義される。記号LD80は、前記寿命が、ルミネッセンス密度が初期発光密度の80%まで、即ち、例えば4000 cd/m²から3200 cd/m²に降下した時点であることを意味する。同様に、LD50は、初期輝度が半分に降下するまでにかかる時間を指す。寿命の値は、当業者に知られている変換式を用いて、他の初期発光密度について数量に変換され得る。1000 cd/m²である初期発光密度の寿命は、ここでは通常の表現である。

【0276】

青色蛍光発光体D1を含むOLEDは、寿命を決定するために、6000 cd/m²の初期発光密度で開始される。緑色蛍光発光体D2を含むOLEDは、25,000 cd/m²の発光密度で開始される。リン光性発光体TER1とTEG1とを含むOLEDは4000 cd/m²で開始される。

【0277】

様々なOLEDに関するデータを表2と3に要約する。例C1 ~ C22は、従来技術に従う比較例であり、例I1 ~ I63は、本発明に係る物質を用いるOLEDに関するデータを示す。

10

20

30

40

50

【0278】

例のいくつかは、本発明に係る化合物の利点を例証するために、以下により詳細に説明される。しかしながら、これは、表2と3に示されるデータの選択を示すに過ぎないことが指摘されるべきである。表から分かるように、従来技術に対して有意な改善はまた、全てのパラメータのいくつかの場合において、より詳細には記載されていない本発明に係る化合物を使用するときに達成されるが、いくつかの場合においては、効率または電圧または寿命における改善だけが観察される。しかしながら、前記パラメータの1つにおける改善でさえ有意な進歩を示す。

【0279】

正孔輸送物質または電子ブロッキング物質としての本発明に係る化合物の使用

10

本発明に係る物質は、本発明に従って、とりわけ、OLEDの正孔輸送側で、より正確には正孔輸送物質または電子ブロッキング物質として用いられ得る。これは、例I1~I26、I40~I55、I57に関して示される。従来技術に従う比較例C1~C9、C11、C12およびC19~C22は、正孔輸送物質としてHTM1とHTM12と、および電子ブロッキング物質としてNPBと、EBM1と、HTM11とHTM12とを含む。

【0280】

例I1を例C3と比較した場合、動作電圧は、正孔輸送層において本発明に係る物質HTM8の使用を通じて0.2V減少することができ、それは、僅かに改良された量子効率と組み合わせて、電力効率を10.7Im/Wから12.1Im/Wに、即ち、約15%の改善をもたらすことが分かる。また、類似の改善は、厚さが200nmである正孔輸送層の場合において観察される(例C5およびI2)。さらに、厚いHTL(200nm)とより薄いHTL(110nm)との間の電圧差は、0.5V(例C3およびC5)から0.3V(例I1およびI2)に減少することは明らかである。より厚い正孔輸送層が、多くの場合、光学的カップリングアウトの最適化に望ましいため、これは重要な局面である。ここで、動作電圧はできるだけ低いままであることが望ましい。物質HTM8のさらなる利点は寿命の増加である。層が厚さ110nmである場合において、改善は10%だけであるが、従来技術に従う物質HTM1は、厚さが110nmであるHTLを有するOLEDと比較して、厚さが200nmであるHTLを有するOLEDにおいて、250,000hまでの寿命の有意な降下を示す一方で、本発明に係る200nmの物質を含むOLEDでさえ、340,000hまでの寿命の僅かな改善を示す(例C3、C5、I1およびI2)。従来技術に従うトリアリールアミン置換された化合物HTM12と比較して、物質HTM8は、性能データにおいてなおもより有意な改善を示す(例C19、C20、I1およびI2)。

20

30

【0281】

HTM3が、蛍光ドーパントD1とD2とともに電子ブロッキング物質として使用されるとき、動作電圧と効率における有意な改善がNPBと比較して得られる(例C1~3、C5、I3~I6)。しかしながら、寿命を、NPB(電子輸送物質としてのETM1とともに)での5200hと比較して、青色発光の場合においてHTM3の使用(例C1、C2、I3およびI4)を通じて約7700hに増加させることができることは非常により重要である。これは、50%の有意な増加に相当する。緑色発光の場合において、寿命の改善は幾分少なく、約25%の増加が得られる(例C3、C5、I5およびI6)。類似の改善は、本発明に係る化合物HTM2の使用を通じて達成され得る(例I7~I9)。特に、正孔輸送物質としての新規物質HTM8と電子ブロッキング物質としてのHTM3の組合せは、非常に良好な性能データを与える：従来技術と比較して、寿命が約50%改善され、電力効率が約25%改善される(例C2とI12)。

40

【0282】

さらに、本発明に係る化合物はまた、単層として用いることができ、それは、処理の複雑性に関して、HTM1とNPBの組合せに対して有意な利点を示す。これは、青色蛍光ドーパントD1と組み合わせて、物質HTM2とHTM3に関して示される。二層構造H

50

T M 1 / H T M 2 (例 I 8) または H T M 1 / H T M 3 (例 I 4) は単層 (例 I 1 0 および I 1 1) よりも良好な電圧と効率を示すが、しかしながら、単層は、寿命に関して従来技術 (例 C 2) よりもなお有意に優れている。電圧および効率はほぼ同じである。

【 0 2 8 3 】

リン光性 O L E D において、本発明に係る化合物は、特に、電子プロッキング層として使用するときの寿命における有意な改善、量子効率または電流効率の改善を示す (例 C 4、C 6 ~ C 9、C 1 1、C 1 2 および I 1 3 ~ I 2 6、I 4 1、I 4 3、I 4 4、I 4 6、I 5 0 ~ I 5 3、I 5 7)。例えば、本発明に係る化合物 H T M 3 が、緑色リン光性発光体 T E G 1 を含む O L E D において使用される場合、寿命は、従来技術に従う物質 E B M 1 と比較して、60%を超えて増加する (例 C 1 2 および I 1 7)。量子効率は約 10% 増加し、それは、事実上変化しない動作電圧に起因して、電力効率もまた約 10% 増加する結果を有する。効率の増加は、本発明に係る化合物のより大きな三重項ギャップによって説明することができる。従来技術に従う物質 H T M 1 1 および H T M 1 2 と比較して、有意な改善は、同様に、電子プロッキング物質としての H T M 3 の使用時に上昇する (例 C 2 1、C 2 2 および I 1 5)。本発明に係る他の物質は、従来技術と比較して類似の改善を示す。赤色発光の場合、本発明に係る化合物は、従来技術に従う N P B と比較して、特に、寿命の有意な改善を示す (例 C 4、C 6、I 2 5 および I 2 6)。

10

【 0 2 8 4 】

このようにして、O L E D の正孔輸送側における本発明に係る化合物の使用は、特に、寿命および動作電圧、電力効率、寿命および処理の複雑性に関して有意な改善を生じさせる。

20

【 0 2 8 5 】

混合されたマトリックスシステムにおける成分としての本発明に係る化合物の使用

混合されたマトリックスシステム、即ち、3つ以上の成分からなる発光層を有する O L E D は、いくつかの場合において、単一マトリックス物質を含むシステムに対して有意な利点を示す。前記システムは、詳細には、とりわけ、W O 1 0 / 1 0 8 5 7 9 出願に記載されている。また、これらの化合物は、本発明に従うこのようなシステムにおいて用いることができる。従来技術に従う混合されたマトリックス成分と比較して、有意な改善が、効率、電圧および寿命に関して生じる。使用される従来技術に従う化合物は、物質 C B P、T C T A および F T P h である (表 4 を参照されたい)。対応する O L E D は、C 6、C 1 0 および C 1 4 ~ C 1 8 によって示される。用いられる本発明に係る物質は、マトリックス物質 H 3、K e t 1 および D A P 1 と組み合わせる化合物 H 5 ~ H 1 7 である。対応する O L E D は I 2 7 ~ I 3 9、I 5 6、I 5 8 ~ I 6 3 によって示される。

30

【 0 2 8 6 】

最初に、緑色発光ドーパント T E G 1 を含む混合されたマトリックスシステムを比較する。本発明に係る化合物による C B P または T C T A の置換において、有意な改善は、動作電圧、電力効率、および特になお寿命において観察される。H 3 と組み合わせた本発明に係る化合物 H 1 0 の使用において、例えば、電力効率は、C B P の使用と比較して 60%、T C T A と比較して約 70% 増加する (例 C 1 0、C 1 8 および I 2 7)。寿命は、C B P と比較してほぼ 60% 増加し、事実上、4 倍の寿命が T C T A と比較して観察される。また、類似の改善は、H 1 0 と、ケトンマトリックス K e t 1 およびジアザホスホールマトリックス D A P 1 の組合せにおいて観察される (例 C 1 4 ~ C 1 7、I 2 8 および I 2 9)。また、非常に良好な寿命は、化合物 H 1 2 と H 1 4 を用いて達成することができる。そこでは、架橋原子は、フェニル環によって置換される (例 I 5 8、I 6 0)。また、本発明に係る他の化合物は、電圧、電力効率および寿命に関する有意な改善を示す。

40

【 0 2 8 7 】

赤色発光の混合されたマトリックスシステムにおいて、有意な改善は、同様に、本発明に係る化合物の使用において得られる (例 C 6 と I 3 7 ~ 3 9、I 6 2、I 6 3 を参照されたい)。H 1 0 による C B P の置換において、例えば、電圧が 1.1 V の改善、電力効率が約 50% の増加、および事実上の 2 倍の寿命が得られる (例 C 6 および I 3 7)。同

50

様に、良好な性能データは、本発明に係る化合物H7とH9を用いて達成され得る。さらに、従来技術と比較した有意な改善はまた、化合物H16とH17を用いて得られ、それらは、架橋原子においてフェニル環によって置換されている(I62、I63)。

【0288】

このようにして、混合されたマトリックスシステムにおける本発明に係る物質の使用は、OLEDの電圧、効率、および特になお寿命に関して有意な改善を生じさせる。これらの改善は、非常に異なる種類のマトリックス物質(ケトン: Ket1、スピロトリアジン: H3、ジアザホスホール: DAP1)と組み合わせることで達成することができる。このようにして、類似の改善はまた、本発明に係る化合物と他の種類の物質との組合せを通じて達成し得ることを想定することができる。

【表 1 - 1】

表1:OLEDの構造

Ex.	HIL厚さ	HTL厚さ	IL厚さ	EBL厚さ	EML厚さ	HBL厚さ	ETL厚さ	EIL厚さ
C1	HIL1 5nm	HTM1 140nm	---	NPB 20nm	H1:D1 (95%:5%) 30nm	---	Alq ₃ 20nm	LiF 1nm
C2	HIL1 5nm	HTM1 140nm	---	NPB 20nm	H1:D1 (95%:5%) 30nm	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 20nm	---
C3	HIL1 5nm	HTM1 110nm	---	NPB 20nm	H2:D2 (90%:10%) 30nm	---	Alq ₃ 20nm	LiF 1nm
C4	---	HTM1 20nm	---	NPB 20nm	H3:TER1 (85%:15%) 30nm	---	Alq ₃ 20nm	LiF 1nm
C5	HIL1 5nm	HTM1 200nm	---	NPB 20nm	H2:D2 (90%:10%) 30nm	---	Alq ₃ 20nm	LiF 1nm
C6	---	HTM1 20nm	---	NPB 20nm	H3:CBP:TER1 (45%:45%:10%) 30nm	H3 10nm	Alq ₃ 20nm	LiF 1nm
C7	---	HTM1 160nm	---	EBM1 20nm	H3:TEG1 (90%:10%) 30nm	H3 10nm	ETM1:LiQ (50%:50%) 30nm	---
C8	---	HTM1 160nm	---	EBM1 20nm	H3:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 40nm	---
C9	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	EBM1 90nm	H4:TEG1 (85%:15%) 30nm	---	H3:LiQ (50%:50%) 40nm	---
C10	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	EBM1 90nm	H3:CBP:TEG1 (30%:60%:10%) 30nm	H3 10nm	H3:LiQ (50%:50%) 30nm	---
C11	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	EBM1 90nm	H3:TEG1 (90%:10%) 30nm	H3 10nm	H3:LiQ (50%:50%) 30 nm	---
C12	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	EBM1 90nm	H3:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	H3:LiQ (50%:50%) 40nm	---
C14	HIL1 20nm	---	---	EBM1 20nm	Ket1:FTPh:TEG1 (60%:30%:10%) 30nm	Ket1 10nm	ETM2 20nm	LiF 1nm
C15	HIL1 20nm	---	---	EBM1 20nm	Ket1:TCTA:TEG1 (60%:30%:10%) 30nm	Ket1 10nm	ETM2 20nm	LiF 1nm
C16	HIL1 20nm	---	---	EBM1 20nm	Ket1:CBP:TEG1 (60%:30%:10%) 30nm	Ket1 10nm	ETM2 20nm	LiF 1nm
C17	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	EBM1 90nm	DAP1:CBP:TEG1 (30%:60%:10%) 30nm	---	H3:LiQ (50%:50%) 30nm	---
C18	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	EBM1 90nm	H3:TCTA:TEG1 (30%:60%:10%) 30nm	---	H3:LiQ (50%:50%) 30nm	---
C19	HIL1 5nm	HTM12 110nm	---	NPB 20nm	H2:D2 (90%:10%) 30nm	---	Alq ₃ 20nm	LiF 1nm
C20	HIL1 5nm	HTM12 200nm	---	NPB 20nm	H2:D2 (90%:10%) 30nm	---	Alq ₃ 20nm	LiF 1nm
C21	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	HTM11 90nm	H4:TEG1 (85%:15%) 30nm	---	H3:LiQ (50%:50%) 40nm	---
C22	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	HTM12 90nm	H4:TEG1 (85%:15%) 30nm	---	H3:LiQ (50%:50%) 40nm	---

10

20

30

40

【表 1 - 2】

I1	HIL1 5nm	HTM8 110nm	---	NPB 20nm	H2:D2 (90%:10%) 30nm	---	Alq ₃ 20nm	LiF 1nm
I2	HIL1 5nm	HTM8 200nm	---	NPB 20nm	H2:D2 (90%:10%) 30nm	---	Alq ₃ 20nm	LiF 1nm
I3	HIL1 5nm	HTM1 140nm	---	HTM3 20nm	H1:D1 (95%:5%) 30nm	---	Alq ₃ 20nm	LiF 1nm
I4	HIL1 5nm	HTM1 140nm	---	HTM3 20nm	H1:D1 (95%:5%) 30nm	---	ETM1:LIQ (50%:50%) 20nm	---
I5	HIL1 5nm	HTM1 110nm	---	HTM3 20nm	H2:D2 (90%:10%) 30nm	---	Alq ₃ 20nm	LiF 1nm
I6	HIL1 5nm	HTM1 200nm	---	HTM3 20nm	H2:D2 (90%:10%) 30nm	---	Alq ₃ 20nm	LiF 1nm
I7	HIL1 5nm	HTM1 140nm	---	HTM2 20nm	H1:D1 (95%:5%) 30nm	---	Alq ₃ 20nm	LiF 1nm
I8	HIL1 5nm	HTM1 140nm	---	HTM2 20nm	H1:D1 (95%:5%) 30nm	---	ETM1:LIQ (50%:50%) 20nm	---
I9	HIL1 5nm	HTM1 110nm	---	HTM2 20nm	H2:D2 (90%:10%) 30nm	---	Alq ₃ 20nm	LiF 1nm
I10	HIL1 5nm	---	---	HTM2 160nm	H1:D1 (95%:5%) 30nm	---	ETM1:LIQ (50%:50%) 20nm	---
I11	HIL1 5nm	---	---	HTM3 160nm	H1:D1 (95%:5%) 30nm	---	ETM1:LIQ (50%:50%) 20nm	---
I12	HIL1 5nm	HTM8 140nm	---	HTM3 20nm	H1:D1 (95%:5%) 30nm	---	ETM1:LIQ (50%:50%) 20nm	---
I13	---	HTM1 160nm	---	HTM3 20nm	H3:TEG1 (90%:10%) 30nm	H3 10nm	ETM1:LIQ (50%:50%) 30nm	---
I14	---	HTM1 160nm	---	HTM3 20nm	H3:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	ETM1:LIQ (50%:50%) 40nm	---
I15	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	HTM3 90nm	H4:TEG1 (85%:15%) 30nm	---	H3:LIQ (50%:50%) 40nm	---
I16	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	HTM3 90nm	H3:TEG1 (90%:10%) 30nm	H3 10nm	H3:LIQ (50%:50%) 30 nm	---
I17	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	HTM3 90nm	H3:TEG1 (90%:10%) 30nm	---	H3:LIQ (50%:50%) 40nm	---
I18	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	HTM2 90nm	H4:TEG1 (85%:15%) 30nm	---	H3:LIQ (50%:50%) 40nm	---
I19	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	HTM4 90nm	H4:TEG1 (85%:15%) 30nm	---	H3:LIQ (50%:50%) 40nm	---
I20	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	HTM5 90nm	H4:TEG1 (85%:15%) 30nm	---	H3:LIQ (50%:50%) 40nm	---
I21	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	HTM6 90nm	H4:TEG1 (85%:15%) 30nm	---	H3:LIQ (50%:50%) 40nm	---
I22	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	HTM7 90nm	H4:TEG1 (85%:15%) 30nm	---	H3:LIQ (50%:50%) 40nm	---

10

20

30

40

【表 1 - 3】

I23	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	HTM9 90nm	H4:TEG1 (85%:15%) 30nm	---	H3:LiQ (50%:50%) 40nm	---
I24	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	HTM10 90nm	H4:TEG1 (85%:15%) 30nm	---	H3:LiQ (50%:50%) 40nm	---
I25	---	HTM1 20nm	---	HTM3 20nm	H3:TER1 (85%:15%) 30nm	---	Alq ₃ 20nm	LiF 1nm
I26	---	HTM1 20nm	---	HTM3 20nm	H3:CBP:TER1 (45%:45%:10%) 30nm	H3 10nm	Alq ₃ 20nm	LiF 1nm
I27	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	EBM1 90nm	H3:H10:TEG1 (30%:60%:10%) 30nm	H3 10nm	H3:LiQ (50%:50%) 30nm	---
I28	HIL1 20nm	---	---	EBM1 20nm	Ket1:H10:TEG1 (60%:30%:10%) 30nm	Ket1 10nm	ETM2 20nm	LiF 1nm
I29	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	EBM1 90nm	DAP1:H10:TEG1 (30%:60%:10%) 30nm	---	H3:LiQ (50%:50%) 30nm	---
I30	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	EBM1 90nm	H3:H7:TEG1 (30%:60%:10%) 30nm	H3 10nm	H3:LiQ (50%:50%) 30nm	---
I31	HIL1 20nm	---	---	EBM1 20nm	Ket1:H7:TEG1 (60%:30%:10%) 30nm	Ket1 10nm	ETM2 20nm	LiF 1nm
I32	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	EBM1 90nm	DAP1:H7:TEG1 (30%:60%:10%) 30nm	---	H3:LiQ (50%:50%) 30nm	---
I33	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	EBM1 90nm	H3:H5:TEG1 (30%:60%:10%) 30nm	H3 10nm	H3:LiQ (50%:50%) 30nm	---
I35	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	EBM1 90nm	H3:H8:TEG1 (30%:60%:10%) 30nm	H3 10nm	H3:LiQ (50%:50%) 30nm	---
I36	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	EBM1 90nm	H3:H9:TEG1 (30%:60%:10%) 30nm	H3 10nm	H3:LiQ (50%:50%) 30nm	---
I37	---	HTM1 20nm	---	NPB 20nm	H3:H10:TER1 (45%:45%:10%) 30nm	H3 10nm	Alq ₃ 20nm	LiF 1nm
I38	---	HTM1 20nm	---	NPB 20nm	H3:H7:TER1 (45%:45%:10%) 30nm	H3 10nm	Alq ₃ 20nm	LiF 1nm
I39	---	HTM1 20nm	---	NPB 20nm	H3:H9:TER1 (45%:45%:10%) 30nm	H3 10nm	Alq ₃ 20nm	LiF 1nm
I40	HIL1 5nm	HTM1 140nm	---	HTM13 20nm	H1:D1 (95%:5%) 30nm	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 20nm	---
I41	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	HTM13 90nm	H4:TEG1 (85%:15%) 30nm	---	H3:LiQ (50%:50%) 40nm	---
I42	HIL1 5nm	HTM1 140nm	---	HTM14 20nm	H1:D1 (95%:5%) 30nm	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 20nm	---
I43	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	HTM14 90nm	H4:TEG1 (85%:15%) 30nm	---	H3:LiQ (50%:50%) 40nm	---
I44	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	HTM15 90nm	H4:TEG1 (85%:15%) 30nm	---	H3:LiQ (50%:50%) 40nm	---
I45	HIL1 5nm	HTM17 110nm	---	NPB 20nm	H2:D2 (90%:10%) 30nm	---	Alq ₃ 20nm	LiF 1nm
I46	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	HTM18 90nm	H4:TEG1 (85%:15%) 30nm	---	H3:LiQ (50%:50%) 40nm	---

10

20

30

40

【表 1 - 4】

147	HIL1 5nm	HTM19 110nm	---	NPB 20nm	H2:D2 (90%:10%) 30nm	---	Alq ₃ 20nm	LiF 1nm
148	HIL1 5nm	HTM1 140nm	---	HTM20 20nm	H1:D1 (95%:5%) 30nm	---	ETM1:LiQ (50%:50%) 20nm	---
149	HIL1 5nm	HTM1 110nm	---	HTM20 20nm	H2:D2 (90%:10%) 30nm	---	Alq ₃ 20nm	LiF 1nm
150	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	HTM21 90nm	H4:TEG1 (85%:15%) 30nm	---	H3:LiQ (50%:50%) 40nm	---
151	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	HTM22 90nm	H4:TEG1 (85%:15%) 30nm	---	H3:LiQ (50%:50%) 40nm	---
152	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	HTM23 90nm	H4:TEG1 (85%:15%) 30nm	---	H3:LiQ (50%:50%) 40nm	---
153	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	HTM24 90nm	H4:TEG1 (85%:15%) 30nm	---	H3:LiQ (50%:50%) 40nm	---
154	HIL1 5nm	HTM25 110nm	---	NPB 20nm	H2:D2 (90%:10%) 30nm	---	Alq ₃ 20nm	LiF 1nm
155	HIL1 5nm	HTM1 110nm	---	HTM26 20nm	H2:D2 (90%:10%) 30nm	---	Alq ₃ 20nm	LiF 1nm
156	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	EBM1 90nm	H3:H11:TEG1 (30%:60%:10%) 30nm	H3 10nm	H3:LiQ (50%:50%) 30nm	---
157	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	HTM16 90nm	H4:TEG1 (85%:15%) 30nm	---	H3:LiQ (50%:50%) 40nm	---
158	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	EBM1 90nm	H3:H12:TEG1 (30%:60%:10%) 30nm	H3 10nm	H3:LiQ (50%:50%) 30nm	---
160	---	HTM1 70nm	HIL1 5nm	EBM1 90nm	H3:H14:TEG1 (30%:60%:10%) 30nm	H3 10nm	H3:LiQ (50%:50%) 30nm	---
162	---	HTM1 20nm	---	NPB 20nm	H3:H16:TER1 (45%:45%:10%) 30nm	H3 10nm	Alq ₃ 20nm	LiF 1nm
163	---	HTM1 20nm	---	NPB 20nm	H3:H17:TER1 (45%:45%:10%) 30nm	H3 10nm	Alq ₃ 20nm	LiF 1nm

10

20

30

【表2】

表2:OLEDのデータ

Ex.	1000cd/cm ² についての 電圧	1000cd/cm ² での効率	1000cd/cm ² での効率	1000cd/cm ² でのEQE	1000cd/cm ² でのCIE x/y	4000cd/cm ² からのLD80
C1	6.4 V	5.1 cd/A	2.5 lm/W	4.2%	0.14/0.15	5500 h
C2	4.7 V	8.1 cd/A	5.4 lm/W	6.3%	0.14/0.16	5200 h
C3	5.0 V	17.1 cd/A	10.7 lm/W	5.0%	0.28/0.61	300000 h
C4	5.0 V	7.2 cd/A	4.5 lm/W	12.0%	0.69/0.31	14000 h
C5	5.5 V	15.9 cd/A	9.1 lm/W	4.8%	0.31/0.58	250000 h
C6	5.2 V	8.1 cd/A	4.9 lm/W	11.4%	0.68/0.32	15000 h
C19	5.2 V	16.8 cd/A	10.1 lm/W	4.9%	0.28/0.61	280000 h
C20	5.7 V	15.5 cd/A	8.5 lm/W	4.7%	0.31/0.58	220000 h
I1	4.8 V	18.5 cd/A	12.1 lm/W	5.4%	0.28/0.61	330000 h
I2	5.1 V	17.2 cd/A	10.6 lm/W	5.2%	0.30/0.59	340000 h
I3	5.8 V	5.8 cd/A	3.2 lm/W	4.8%	0.14/0.15	7800 h
I4	4.4 V	8.8 cd/A	6.3 lm/W	6.8%	0.14/0.15	7700 h
I5	4.7 V	19.5 cd/A	13.0 lm/W	5.7%	0.28/0.61	380000 h
I6	5.2 V	18.2 cd/A	11.0 lm/W	5.5%	0.31/0.58	350000 h
I7	6.0 V	5.7 cd/A	3.0 lm/W	4.7%	0.14/0.15	7100 h
I8	4.7 V	8.5 cd/A	5.7 lm/W	6.6%	0.14/0.15	6700 h
I9	4.8 V	19.1 cd/A	12.5 lm/W	5.6%	0.28/0.61	340000 h
I10	4.7 V	8.0 cd/A	5.3 lm/W	6.2%	0.14/0.16	6700 h
I11	4.6 V	8.3 cd/A	5.7 lm/W	6.5%	0.14/0.16	6300 h
I12	4.2 V	9.1 cd/A	6.8 lm/W	7.0%	0.14/0.15	7900 h
I25	4.9 V	7.5 cd/A	4.8 lm/W	12.5%	0.69/0.31	21000 h
I26	5.1 V	8.3 cd/A	5.1 lm/W	11.6%	0.68/0.32	21000 h
I37	4.1 V	9.6 cd/A	7.4 lm/W	13.3%	0.68/0.32	29000 h
I38	4.0 V	9.2 cd/A	7.2 lm/W	12.8%	0.68/0.32	27000 h
I39	4.0 V	9.3 cd/A	7.3 lm/W	13.0%	0.68/0.32	24000 h
I40	4.6 V	9.0 cd/A	6.1 lm/W	7.0%	0.14/0.15	6500 h
I42	4.6 V	8.7 cd/A	6.0 lm/W	6.7%	0.14/0.16	7200 h
I45	5.1 V	18.5 cd/A	11.3 lm/W	5.4%	0.28/0.61	280000 h
I47	4.9 V	17.5 cd/A	11.1 lm/W	5.1%	0.28/0.61	310000 h
I48	4.8 V	8.5 cd/A	5.6 lm/W	6.6%	0.14/0.16	6700 h
I49	5.0 V	17.8 cd/A	11.2 lm/W	5.2%	0.28/0.61	340000 h
I54	5.0 V	18.0 cd/A	11.3 lm/W	5.3%	0.28/0.61	320000 h
I55	4.9 V	18.8 cd/A	11.9 lm/W	5.5%	0.28/0.61	340000 h
I62	4.2 V	8.7 cd/A	6.5 lm/W	12.2%	0.68/0.32	19000 h
I63	4.4 V	7.7 cd/A	5.5 lm/W	10.8%	0.68/0.32	16000 h

10

20

30

40

【表3 - 1】

表3:OLEDのデータ

Ex.	1000cd/cm ² についての 電圧	1000cd/cm ² での効率	1000cd/cm ² での効率	1000cd/cm ² でのEQE	1000cd/cm ² でのCIE x/y	4000cd/cm ² からのLD80
C7	4.7 V	55 cd/A	37 lm/W	15.4%	0.36/0.61	350 h
C8	4.6 V	54 cd/A	37 lm/W	15.0%	0.37/0.60	320 h
C9	3.6 V	52 cd/A	45 lm/W	14.6%	0.37/0.60	430 h
C10	4.4 V	48 cd/A	34 lm/W	13.3%	0.37/0.60	450 h
C11	4.4 V	54 cd/A	39 lm/W	15.0%	0.36/0.60	320 h
C12	4.3 V	55 cd/A	40 lm/W	15.3%	0.37/0.61	300 h
C14	4.0 V	46 cd/A	36 lm/W	12.8%	0.36/0.61	430 h
C15	3.9 V	42 cd/A	34 lm/W	11.6%	0.35/0.60	160 h
C16	4.1 V	44 cd/A	34 lm/W	12.3%	0.36/0.61	320 h
C17	4.6 V	47 cd/A	32 lm/W	13.2%	0.36/0.60	480 h
C18	4.2 V	43 cd/A	32 lm/W	12.0%	0.35/0.60	190 h
C21	3.6 V	55 cd/A	48 lm/W	15.5%	0.37/0.60	450 h
C22	3.9 V	46 cd/A	38 lm/W	12.9%	0.36/0.60	360 h
I13	4.7 V	61 cd/A	41 lm/W	17.0%	0.36/0.61	460 h
I14	4.5 V	59 cd/A	41 lm/W	16.4%	0.37/0.60	440 h
I15	3.7 V	56 cd/A	48 lm/W	15.7%	0.37/0.60	670 h
I16	4.4 V	63 cd/A	45 lm/W	17.5%	0.36/0.61	510 h
I17	4.5 V	61 cd/A	43 lm/W	16.9%	0.37/0.61	500 h
I18	3.9 V	62 cd/A	50 lm/W	17.4%	0.37/0.60	570 h
I19	3.7 V	64 cd/A	54 lm/W	17.9%	0.36/0.60	520 h
I20	4.0 V	60 cd/A	47 lm/W	16.7%	0.37/0.60	540 h
I21	3.7 V	65 cd/A	52 lm/W	18.2%	0.37/0.60	550 h
I22	3.7 V	58 cd/A	49 lm/W	16.3%	0.36/0.60	490 h
I23	3.8 V	56 cd/A	46 lm/W	15.7%	0.36/0.61	470 h
I24	3.5 V	57 cd/A	51 lm/W	16.0%	0.36/0.60	510 h
I27	3.2 V	56 cd/A	55 lm/W	15.8%	0.36/0.61	710 h
I28	3.1 V	49 cd/A	50 lm/W	13.8%	0.36/0.61	630 h
I29	4.0 V	46 cd/A	36 lm/W	12.9%	0.36/0.60	640 h
I30	3.3 V	54 cd/A	52 lm/W	15.2%	0.36/0.61	680 h
I31	3.1 V	50 cd/A	51 lm/W	13.9%	0.36/0.61	590 h
I32	4.1 V	48 cd/A	37 lm/W	13.5%	0.36/0.60	620 h
I33	3.3 V	56 cd/A	53 lm/W	15.7%	0.36/0.61	640 h
I35	3.3 V	54 cd/A	52 lm/W	15.3%	0.36/0.61	660 h
I36	3.5 V	50 cd/A	45 lm/W	14.0%	0.36/0.61	620 h
I41	3.9 V	60 cd/A	49 lm/W	16.7%	0.36/0.60	640 h
I43	3.8 V	56 cd/A	46 lm/W	15.5%	0.36/0.60	610 h
I44	3.6 V	61 cd/A	53 lm/W	16.8%	0.36/0.60	520 h
I46	3.8V	60 cd/A	49 lm/W	16.5%	0.36/0.60	650 h
I50	3.8 V	62 cd/A	51 lm/W	17.2%	0.36/0.60	500 h
I51	3.8 V	63 cd/A	52 lm/W	17.4%	0.36/0.60	560 h

10

20

30

40

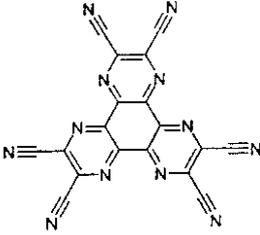
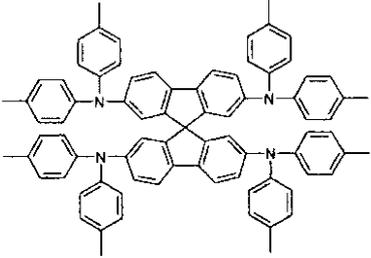
【表 3 - 2】

I52	3.7 V	60 cd/A	50 lm/W	16.6%	0.36/0.60	510 h
I53	3.9 V	55 cd/A	45 lm/W	15.3%	0.36/0.60	450 h
I56	3.7 V	49 cd/A	42 lm/W	13.7%	0.37/0.61	540 h
I57	4.0 V	57 cd/A	45 lm/W	15.8%	0.37/0.60	420 h
I58	3.4 V	54 cd/A	49 lm/W	14.8%	0.36/0.61	710 h
I60	3.8 V	51 cd/A	42 lm/W	14.0%	0.37/0.61	660 h

10

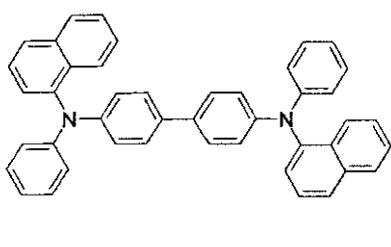
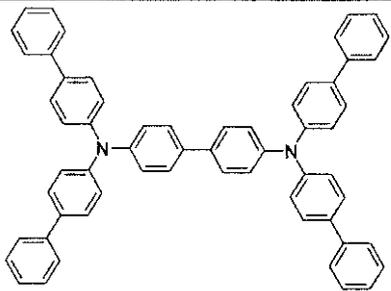
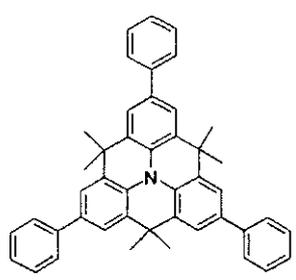
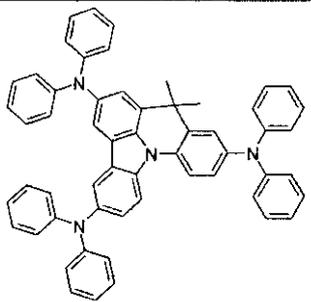
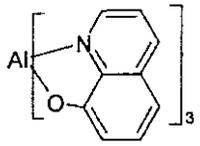
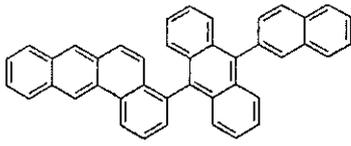
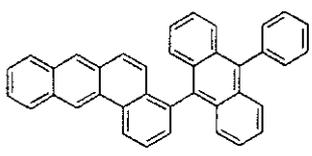
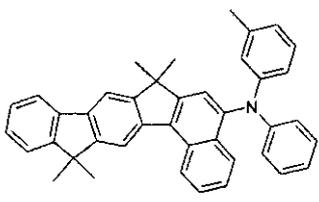
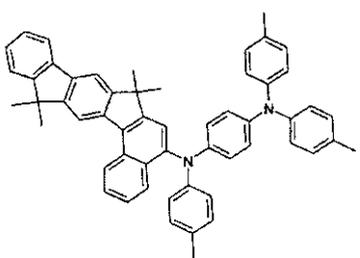
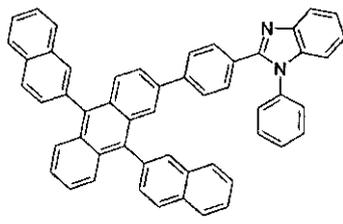
【表 4 - 1】

表4:使用される物質の構造式

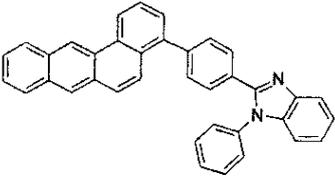
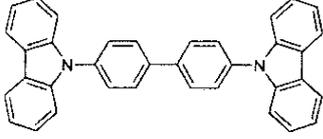
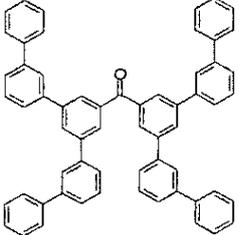
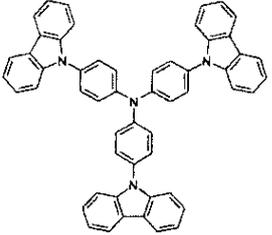
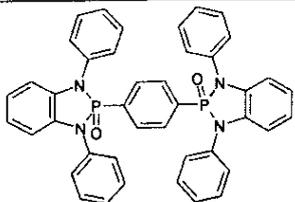
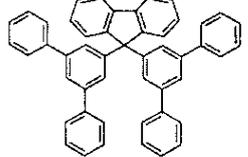
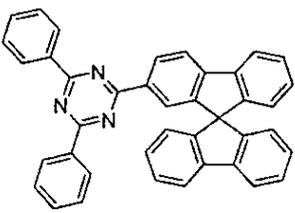
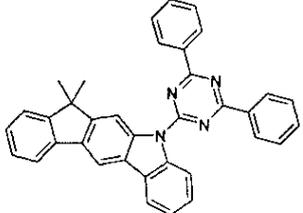
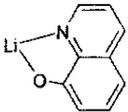
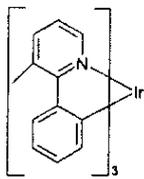
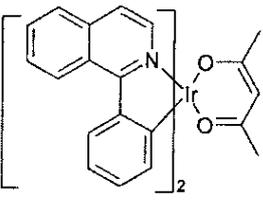
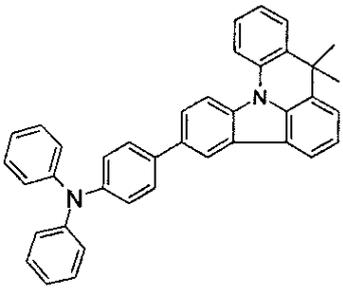
	
HIL1	HTM1 (prior art)

20

【表 4 - 2】

		10
<p>NPB (prior art)</p>	<p>EBM1 (prior art)</p>	
		20
<p>HTM11 (prior art)</p>	<p>HTM12 (prior art)</p>	
		
<p>Alq₃</p>	<p>H1</p>	
		30
<p>H2</p>	<p>D1</p>	
		40
<p>D2</p>	<p>ETM1</p>	

【表 4 - 3】

	
ETM2	CBP (prior art)
	
Ket1	TCTA (prior art)
	
DAP1	FTPPh (prior art)
	
H3	H4
	
LiQ	TEG1
	
TER1	HTM2

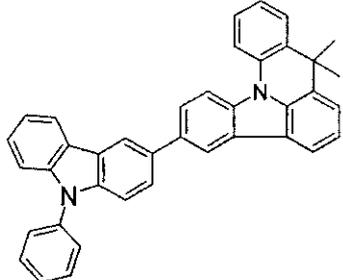
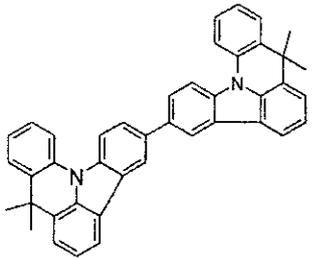
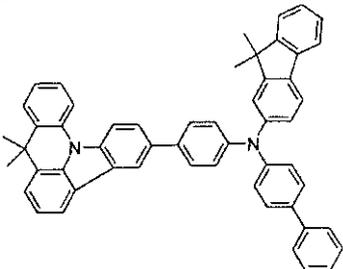
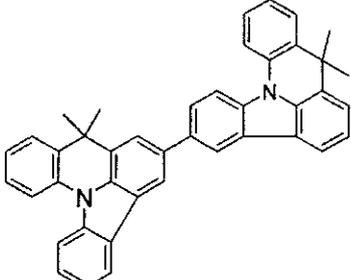
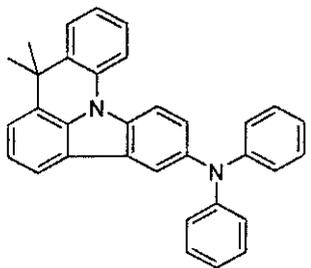
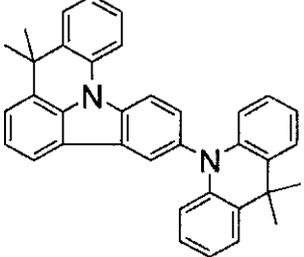
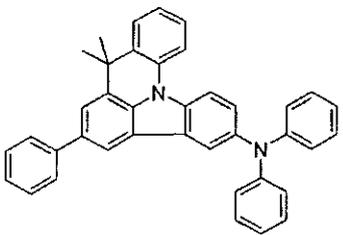
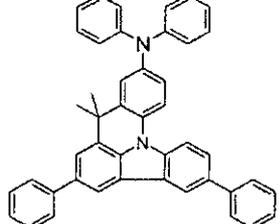
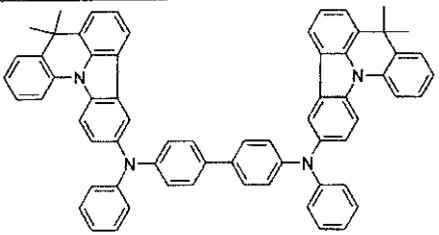
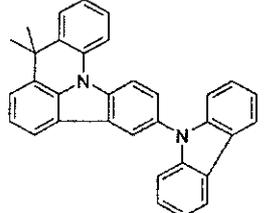
10

20

30

40

【表 4 - 4】

	
H5	H7
	
HTM3	H8
	
HTM4	H8
	
HTM5	HTM5
	
HTM6	HTM7
	
HTM8	H9

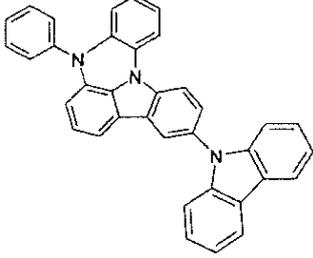
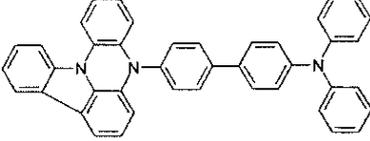
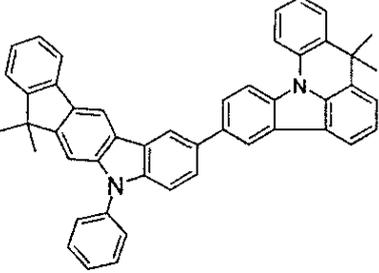
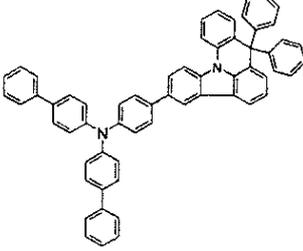
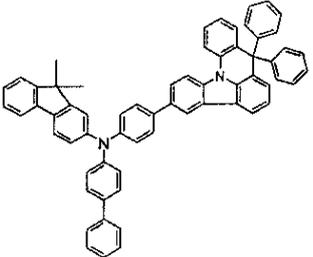
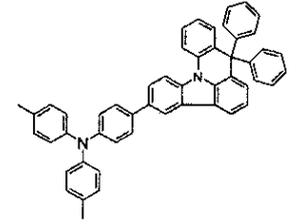
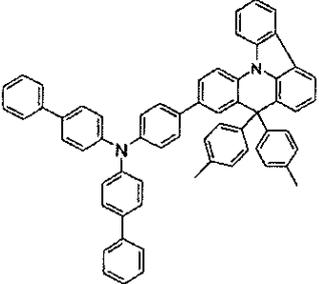
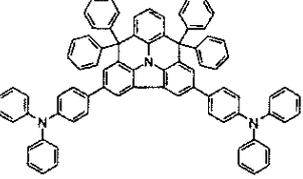
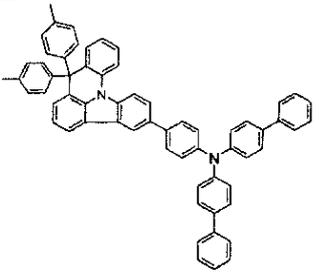
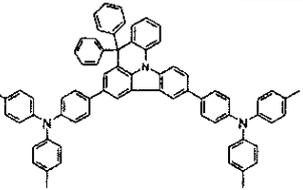
10

20

30

40

【表 4 - 5】

	
HTM9	HTM10
	
H10	HTM13
	
HTM14	HTM15
	
HTM16	HTM17
	
HTM18	HTM19

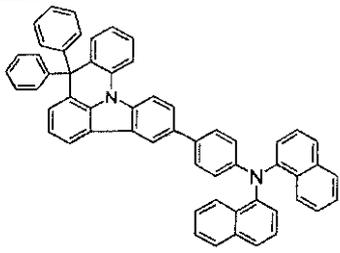
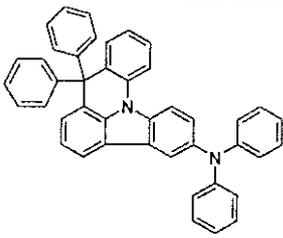
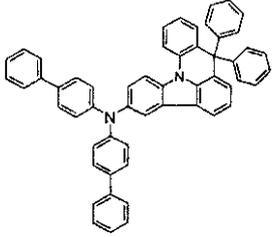
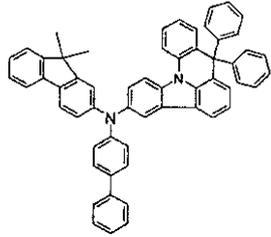
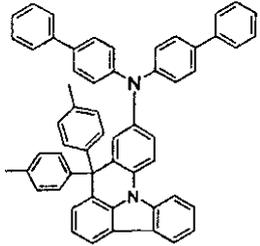
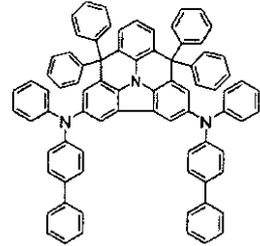
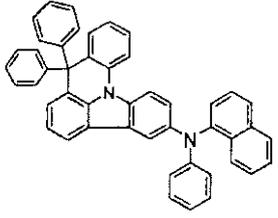
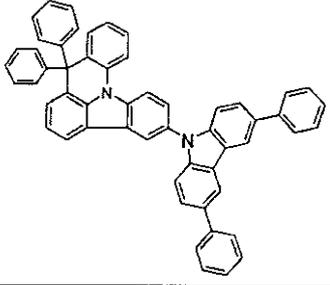
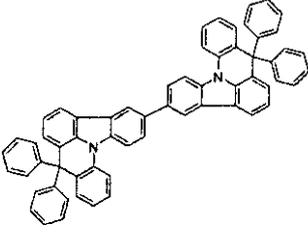
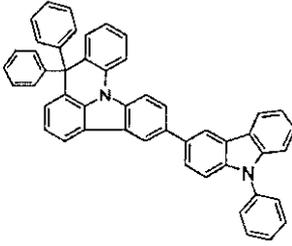
10

20

30

40

【表 4 - 6】

	
HTM20	HTM21
	
HTM22	HTM23
	
HTM24	HTM25
	
HTM26	H11
	
H12	H14

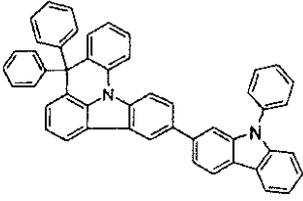
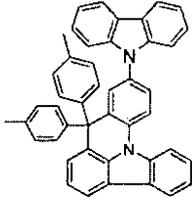
10

20

30

40

【表 4 - 7】

	
H16	H17

フロントページの続き

(51)Int.Cl.		F I		
C 0 9 K	11/06 (2006.01)	H 0 5 B	33/14	A
H 0 1 L	51/42 (2006.01)	C 0 9 K	11/06	6 9 0
H 0 1 L	51/05 (2006.01)	H 0 1 L	31/04	1 0 0
H 0 1 L	51/30 (2006.01)	H 0 1 L	29/28	1 0 0 A
H 0 1 L	29/786 (2006.01)	H 0 1 L	29/28	2 5 0 G
		H 0 1 L	29/78	6 1 8 B

(74)代理人 100124394

弁理士 佐藤 立志

(74)代理人 100112807

弁理士 岡田 貴志

(74)代理人 100111073

弁理士 堀内 美保子

(72)発明者 パルハム、アミア・ホサイン

ドイツ連邦共和国、6 5 9 2 9 フランクフルト・アム・マイン、フランツ - ヘンレ - シュトラー
セ 4

(72)発明者 プフルム、クリストフ

ドイツ連邦共和国、6 0 3 1 6 フランクフルト・アム・マイン、メリアンシュトラーセ 2 3

(72)発明者 ブロッケ、コンスタンツェ

ドイツ連邦共和国、6 4 5 2 1 グロス - ゲラオ、フランクフルター・シュトラーセ 1 5

審査官 瀬下 浩一

(56)参考文献 国際公開第 2 0 0 6 / 0 3 3 5 6 3 (W O , A 1)

特表 2 0 1 2 - 5 0 7 5 0 7 (J P , A)

特開 2 0 1 0 - 0 8 7 4 9 6 (J P , A)

特開平 0 5 - 1 0 7 7 8 4 (J P , A)

特表 2 0 1 0 - 5 1 1 6 0 5 (J P , A)

Journal of Materials Chemistry, 2 0 0 9 年, Vol.19, p.7661-7665

Chem.Eur.J., 2 0 0 9 年, Vol.15, p.5482-5490

(58)調査した分野(Int.Cl., D B 名)

C 0 7 D 4 7 1 / 0 6

C 0 7 D 4 7 1 / 1 6

C 0 7 D 4 8 7 / 0 6

C 0 7 D 5 1 9 / 0 0

C 0 9 K 1 1 / 0 6

H 0 1 L 2 9 / 7 8 6

H 0 1 L 5 1 / 0 5

H 0 1 L 5 1 / 3 0

H 0 1 L 5 1 / 4 2

H 0 1 L 5 1 / 5 0

C A p l u s / R E G I S T R Y (S T N)