

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第6655553号
(P6655553)

(45) 発行日 令和2年2月26日 (2020.2.26)

(24) 登録日 令和2年2月5日 (2020.2.5)

(51) Int. Cl.		F I	
C07C	15/38 (2006.01)	C07C	15/38 C S P
C07C	1/32 (2006.01)	C07C	1/32
C07B	37/04 (2006.01)	C07B	37/04 B
C09K	11/06 (2006.01)	C09K	11/06 6 1 0
C08G	61/10 (2006.01)	C08G	61/10

請求項の数 8 (全 59 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号	特願2016-562956 (P2016-562956)	(73) 特許権者	506427679
(86) (22) 出願日	平成27年3月17日 (2015.3.17)		メルク、パテント、ゲゼルシャフト、ミット、ベシュレンクテル、ハフツング
(65) 公表番号	特表2017-514807 (P2017-514807A)		Merck Patent GmbH
(43) 公表日	平成29年6月8日 (2017.6.8)		ドイツ連邦共和国ダルムシュタット、フランクフルター、シュトラッセ、250
(86) 国際出願番号	PCT/EP2015/000587	(74) 代理人	100091982
(87) 国際公開番号	W02015/158409		弁理士 永井 浩之
(87) 国際公開日	平成27年10月22日 (2015.10.22)	(74) 代理人	100091487
審査請求日	平成30年1月30日 (2018.1.30)		弁理士 中村 行孝
(31) 優先権主張番号	14001391.3	(74) 代理人	100082991
(32) 優先日	平成26年4月16日 (2014.4.16)		弁理士 佐藤 泰和
(33) 優先権主張国・地域又は機関	欧州特許庁 (EP)	(74) 代理人	100105153
			弁理士 朝倉 悟

最終頁に続く

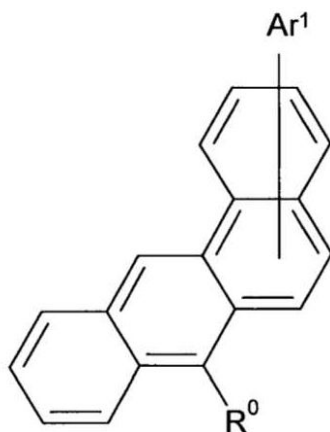
(54) 【発明の名称】 電子デバイス用材料

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

下記の式 (I-1-1) の化合物。

【化 1】



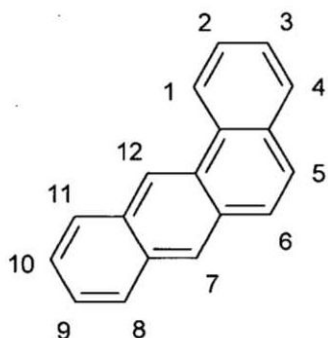
式 (I-1-1)

(式中、

Ar¹ は、一つまたは複数のラジカル R² によって置換されていてもよい芳香環原子数

14 から 18 の縮合アリール基から選ばれ、ここで、 Ar^1 は、式 (I - 1 - 1) で表されるベンズアントラセンの、下式で示される 4 または 5 位に結合し；

【化 2】



10

R^0 は、炭素数 1 から 10 の直鎖アルキル基、炭素数 3 から 10 の分枝または環状アルキル基で、これらの基はそれぞれ一つまたは複数のラジカル R^3 によって置換されていてもよく；

上記の R^2 は、同じでも、異なってもよく、それぞれ、 H 、 D 、 F 、 $C(=O)R^3$ 、 CN 、 $Si(R^3)_3$ 、 $P(=O)(R^3)_2$ 、 OR^3 、 $S(=O)R^3$ 、 $S(=O)_2R^3$ 、それぞれ一つまたは複数のラジカル R^3 によって置換されていてもよく、かつ、含まれる一つまたは複数の CH_2 基が $-R^3C=CR^3-$ 、 $-C-C-$ 、 $Si(R^3)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^3$ 、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^3-$ 、 NR^3 、 $P(=O)(R^3)$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 SO または SO_2 によって置換されていてもよい炭素数 1 から 20 の直鎖アルキルまたはアルコキシ基、炭素数 3 から 20 の分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、あるいは、炭素数 2 から 20 のアルケニルまたはアルキニル基、一つまたは複数のラジカル R^3 によって置換されていてもよい芳香環原子数 6 から 40 の芳香環系、または、一つまたは複数のラジカル R^3 によって置換されていてもよい芳香環原子数 5 から 40 のヘテロ芳香環系であり、複数の R^2 は互いに結合していてもよく；

20

上記の R^3 は、同じでも、異なってもよく、それぞれ、 H 、 D 、 F 、 $C(=O)R^4$ 、 CN 、 $Si(R^4)_3$ 、 $N(R^4)_2$ 、 $P(=O)(R^4)_2$ 、 OR^4 、 $S(=O)R^4$ 、 $S(=O)_2R^4$ 、炭素数 1 から 20 の直鎖アルキルまたはアルコキシ基、炭素数 3 から 20 の分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、または、炭素数 2 から 20 のアルケニルまたはアルキニル基で、これらの基はそれぞれ一つまたは複数のラジカル R^4 によって置換されていてもよく、これらの基に含まれる一つまたは複数の CH_2 基は $-R^4C=CR^4-$ 、 $-C-C-$ 、 $Si(R^4)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^4$ 、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^4-$ 、 NR^4 、 $P(=O)(R^4)$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 SO 、 SO_2 、一つまたは複数のラジカル R^4 によって置換されていてもよい芳香環原子数 6 から 40 の芳香環系、または、一つまたは複数のラジカル R^4 によって置換されていてもよい芳香環原子数 5 から 40 のヘテロ芳香環系で置換されていてもよく；

30

上記の R^4 は、同じでも、異なってもよく、それぞれ、 H 、 D 、 F 、 CN 、または、一つまたは複数の H 原子が D 、 F あるいは CN で置換されていてもよい炭素数 1 から 20 の脂肪族、芳香族あるいはヘテロ芳香族有機ラジカルである。)

40

【請求項 2】

Ar^1 が、それぞれ一つまたは複数の R^2 ラジカルで置換されていてもよい、アントラセン、ベンズアントラセン、フェナントレン、ベンズフェナントレン、ピレン、クリセン、フルオランテン、およびナфтаセンからなる群より選ばれることを特徴とする、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 3】

A) 下記の工程 1) から 3)、すなわち、

1) ベンズアントラセン誘導体と芳香環系またはヘテロ芳香環系とのカップリング反応によって、一つもしくは複数の芳香環系またはヘテロ芳香環系によって置換されたベンズア

50

ントラセン化合物を調製する工程、

2) 得られたベンズアントラセンをハロゲン化する工程、

3) ハロゲン化、好ましくは、臭素化した位置に置換基を導入する工程、

からなるか、あるいは

B) 下記の工程 I) から II)、すなわち、

I) ナフチル誘導体と無水フタル酸から置換ベンズアントラセン誘導体を調製する工程、

II) 得られた置換ベンズアントラセン誘導体を芳香環系またはヘテロ芳香環系とカップリング反応させる工程、

からなる、請求項 1 または 2 に記載の化合物の製造法。

【請求項 4】

請求項 1 または 2 に記載の化合物を含むオリゴマー、ポリマーまたは dendrimer であって、前記オリゴマー、ポリマーまたは dendrimer の結合が式 (I-1-1) の R² または R³ によって置換されているどの位置にあってもよいオリゴマー、ポリマーまたは dendrimer。

【請求項 5】

少なくとも一つの請求項 1 または 2 に記載の化合物あるいは少なくとも一つの請求項 4 に記載のオリゴマー、ポリマーまたは dendrimer、および、少なくとも一つの溶媒からなる塗布剤。

【請求項 6】

有機集積回路 (OIC)、有機電界効果トランジスタ (OFET)、有機薄層トランジスタ (OTFT)、有機発光トランジスタ (OLET)、有機太陽電池 (OSC)、有機光学検波器、有機光受容器、有機電場消光デバイス (OFQD)、有機発光電気化学セル (OLEC)、有機レーザーダイオード (O-laser) および有機 EL デバイス (OLED) からなる群より選ばれる電子デバイスであって、少なくとも一つの請求項 1 または 2 に記載の化合物、あるいは、少なくとも一つの請求項 4 に記載のオリゴマー、ポリマーまたは dendrimer を含有することを特徴とする、電子デバイス。

【請求項 7】

アノード、カソード、発光層、および、その他の任意の有機層からなる有機 EL デバイスであって、少なくとも一つの化合物もしくは少なくとも一つのオリゴマー、ポリマーまたは dendrimer がマトリックス材料として一つまたは複数の発光化合物と組み合わせられて発光層内に含有されていることを特徴とする、請求項 6 に記載の電子デバイス。

【請求項 8】

請求項 1 または 2 に記載の化合物、あるいは、請求項 4 に記載のオリゴマー、ポリマーまたは dendrimer の電子デバイスへの応用。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本出願は、置換ベンズアントラセン化合物からなる電子デバイスに関するものである。

【0002】

本発明における「電子デバイス」とは、一般に、有機材料からなる電子デバイスを意味し、好ましくは有機 EL デバイスを意味する。

【背景技術】

【0003】

有機 EL デバイスの一般的な構造および作動原理は当業者には公知であり、特に、US 4539507、US 5151629、EP 0676461、WO 1998/27136 などに記載されている。

【0004】

これらの電子デバイスは、性能データ、特に、ディスプレイや光源など広範囲にわたる商業的な用途への見地から、さらなる改良が必要である。この点について特に重要なのは、電子デバイスの寿命、効率、作動電圧および達成できる明度である。さらに、用途によ

10

20

30

40

50

っては、可溶性化合物が利用できることも重要である。青色発光有機ELデバイスは、デバイス寿命や発光強度に関して、特に、改良の可能性がある。

【0005】

上記の改良を達成するために重要な出発点となるのは、電子デバイスの発光層中で母体として、特に、蛍光発光体化合物と組み合わせて使われる化合物の選択である。

【0006】

本出願において、発光層中の母体（マトリックス化合物またはマトリックス材料ともいう）は、電子デバイスの発光層中に存在するが、発光体化合物ではない、すなわち、発光層からの発光それ自体には全く、あるいは、ほとんど必要のない化合物を意味する。

【0007】

また、発光体化合物とは、電子デバイスを作動させたときに発光する発光層中の化合物を意味する。本出願による蛍光発光体は、一重項状態から発光する化合物を包含するものである。

【0008】

発光層でマトリックス化合物として用いられる様々な化合物については、先行文献に記載されている。例えば、WO2007/110129には2、6、9および10位にアリーール置換基を有するアントラセン類が記載されており、WO2007/065678にはビスアントラセン化合物が、EP1553154には9および10位に異なる置換基を有するアントラセン化合物が記載されている。

【0009】

またさらに、先行文献のなかには、例えば、WO2008/145239のように、この用途に、ある一定の置換パターンを有するベンズアントラセン化合物を用いることが記載されたものもある。そこに開示されているベンズアントラセン化合物は、2、3、4、5あるいは6位のいずれか一か所にアリーール基またはヘテロアリーール基を有し、かつ、それ以外にはさらなる置換基を持たない、特に、7および12位に置換基を持たないことを特徴としている。

【発明の開示】

【発明が解決しようとする課題】

【0010】

WO2008/145239に開示されている化合物は優れた特性を持っているものの、改良は続ける必要がある。特に、新しい化合物を開発するにあたっては、発光の深青色の色調を整えること、および、電子デバイスの寿命を延ばすことに関心がもたれている。さらに、用途によっては、一般的な有機溶媒、特に、電子デバイスを製造する際のプリント工程やスピンコーティング工程で用いられる溶媒に対する溶解性が改善された化合物が利用できるようにすることに大きな関心が向けられている。

【0011】

また、先行技術で公知の化合物の代替物として使える新規の化合物にも関心が持たれている。新規の化合物の用途は母体に限定されるわけではなく、例えば、電子輸送材料、正孔輸送材料、あるいは発光体などとしての用途も含まれる。

【課題を解決するための手段】

【0012】

電子デバイスに利用される新規の化合物を調査、研究した結果、思いがけず、下記式（I）または（II）で示される特定の置換パターンを有するベンズアントラセン化合物は電子デバイスに用いるのにきわめて適していることが見出された。すなわち、この化合物は、上記した技術的課題の一つ以上、好ましくはすべてを達成して、深青色発光の色調が整えられた有機ELデバイス、長寿命を有する有機ELデバイスを提供し、さらに、有機溶媒に優れた溶解性を示す化合物を提供するものである。

【0013】

本発明は、下記式（I）または（II）の化合物に関するものである。

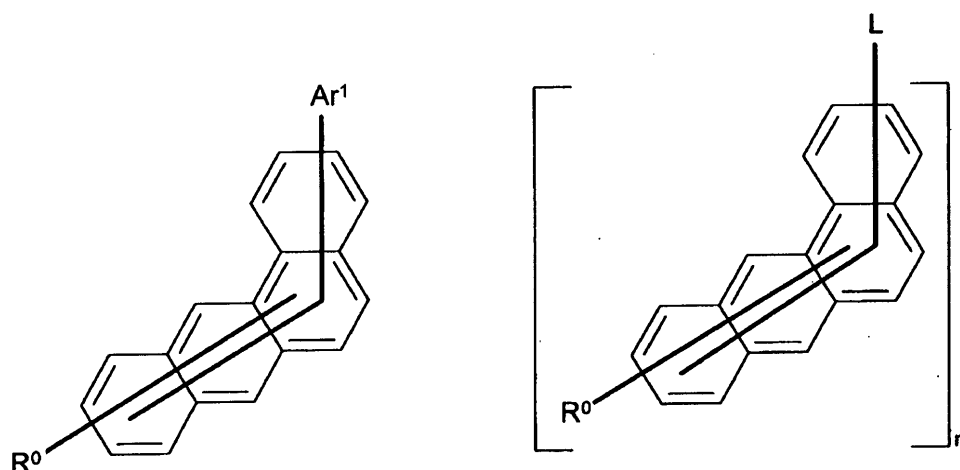
10

20

30

40

【化1】



式 (I)

式 (II)

(式中、

Ar^1 は、一つまたは複数のラジカル R^2 によって置換されていてもよい芳香環原子数 6 から 40 個の芳香環系、または、一つまたは複数のラジカル R^2 によって置換されていてもよい芳香環原子数 5 から 40 個のヘテロ芳香環系から選ばれ；

R^0 は、 $C(=O)R^3$ 、 CN 、 $Si(R^3)_3$ 、 $P(=O)(R^3)_2$ 、 OR^3 、 $S(=O)R^3$ 、 $S(=O)_2R^3$ 、炭素数 1 から 20 の直鎖アルキルまたはアルコキシ基、炭素数 3 から 20 の分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、または、炭素数 2 から 20 のアルケニルまたはアルキニル基で、これらの基はそれぞれ一つまたは複数のラジカル R^3 によって置換されていてもよく、これらの基に含まれる一つまたは複数の CH_2 基は $-R^3C=CR^3-$ 、 $-C=C-$ 、 $Si(R^3)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^3$ 、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^3-$ 、 NR^3 、 $P(=O)(R^3)$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 SO または SO_2 で置換されていてもよく、 R^0 は R^1 と結合していてもよく、さらに、環を形成していてもよく；

L は、一つまたは複数のラジカル R^2 によって置換されていてもよい芳香環原子数 6 から 40 の芳香環系から選ばれるか、または、一つまたは複数のラジカル R^2 によって置換されていてもよい芳香環原子数 5 から 40 のヘテロ芳香環系から選ばれる n 個の基であるか、あるいは、 n が 2 のとき L は化学結合であり；

上記の R^1 、 R^2 は、同じでも、異なってもよく、それぞれ、 H 、 D 、 F 、 $C(=O)R^3$ 、 CN 、 $Si(R^3)_3$ 、 $P(=O)(R^3)_2$ 、 OR^3 、 $S(=O)R^3$ 、 $S(=O)_2R^3$ 、それぞれ一つまたは複数のラジカル R^3 によって置換されていてもよく、かつ、含まれる一つまたは複数の CH_2 基が $-R^3C=CR^3-$ 、 $-C=C-$ 、 $Si(R^3)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^3$ 、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^3-$ 、 NR^3 、 $P(=O)(R^3)$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 SO または SO_2 によって置換されていてもよい炭素数 1 から 20 の直鎖アルキルまたはアルコキシ基、炭素数 3 から 20 の分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、あるいは、炭素数 2 から 20 のアルケニルまたはアルキニル基、一つまたは複数のラジカル R^3 によって置換されていてもよい芳香環原子数 6 から 40 の芳香環系、または、一つまたは複数のラジカル R^3 によって置換されていてもよい芳香環原子数 5 から 40 のヘテロ芳香環系であり、複数の R^1 または R^2 は互いに結合していてもよく、さらに、環を形成していてもよく；

上記の R^3 は、同じでも、異なってもよく、それぞれ、 H 、 D 、 F 、 $C(=O)R^4$ 、 CN 、 $Si(R^4)_3$ 、 $N(R^4)_2$ 、 $P(=O)(R^4)_2$ 、 OR^4 、 $S(=O)R^4$ 、 $S(=O)_2R^4$ 、炭素数 1 から 20 の直鎖アルキルまたはアルコキシ基、炭素数

10

30

40

50

3 から 20 の分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、または、炭素数 2 から 20 のアルケニルまたはアルキニル基で、これらの基はそれぞれ一つまたは複数のラジカル R^4 によって置換されていてもよく、これらの基に含まれる一つまたは複数の CH_2 基は $-R^4C=CR^4-$ 、 $-C=C-$ 、 $Si(R^4)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^4$ 、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^4-$ 、 NR^4 、 $P(=O)(R^4)$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 SO 、 SO_2 、一つまたは複数のラジカル R^4 によって置換されていてもよい芳香環原子数 6 から 40 の芳香環系、または、一つまたは複数のラジカル R^4 によって置換されていてもよい芳香環原子数 5 から 40 のヘテロ芳香環系で置換されていてもよく、複数の R^3 は互いに結合していてもよく、さらに、環を形成していてもよく；

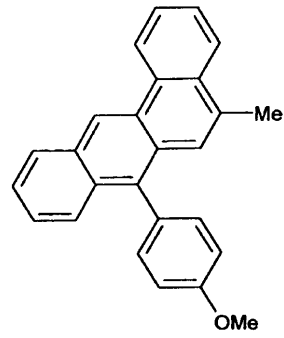
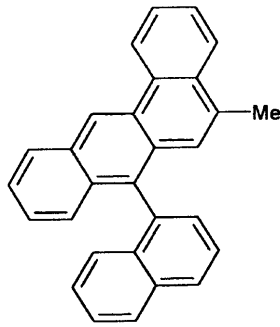
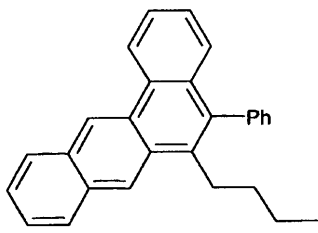
上記の R^4 は、同じでも、異なってもよく、それぞれ、H、D、F、CN、または、一つまたは複数の H 原子が D、F あるいは CN で置換されていてもよい炭素数 1 から 20 の脂肪族、芳香族あるいはヘテロ芳香族有機ラジカルであり、複数の R^4 は互いに結合していてもよく、さらに、環を形成していてもよく；

n は 2、3、4、5 または 6 であり；

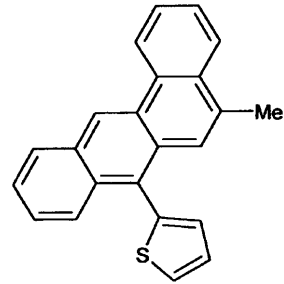
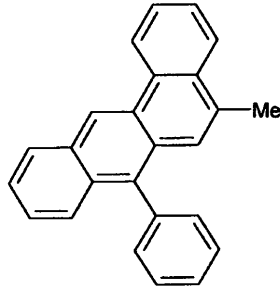
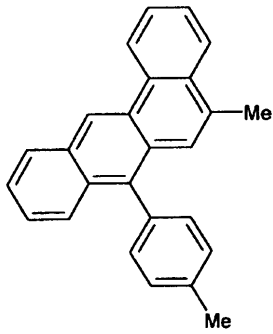
式 (I) または (II) の化合物は無置換として示している位置それぞれにラジカル R^1 を有していてもよいが；

ただし、以下の化合物は含まれない。)

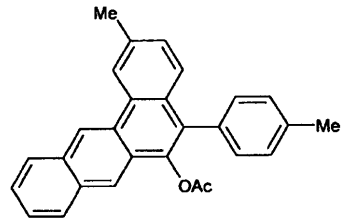
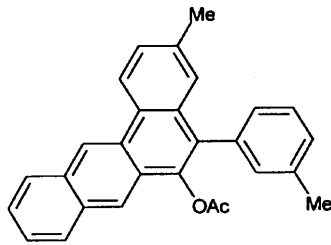
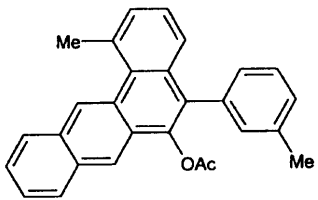
【化2】



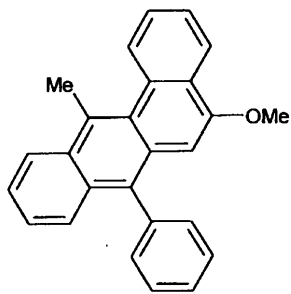
10



20



30

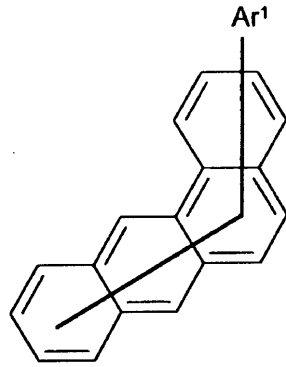


【0014】

上記の図

40

【化3】



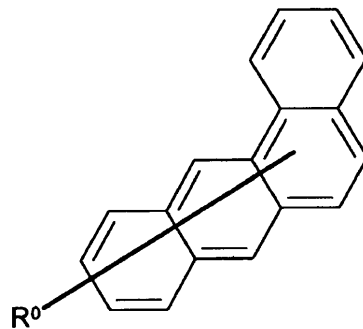
10

は、ベンズアントラセンの1から12位の位置から選ばれる任意の位置にAr¹基が結合していることを示している。これは、式(II)のL基についても同様である。

【0015】

上記の図

【化4】



20

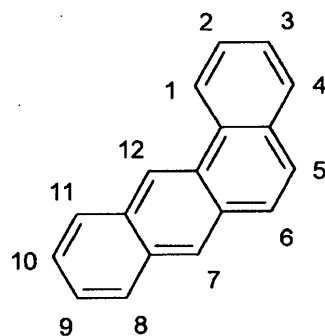
は、ベンズアントラセンの5、6、7、8、9、10、11あるいは12位の位置から選ばれる任意の位置にR⁰基が結合していることを示している。

30

【0016】

なお本出願においては、ベンズアントラセンの位置を示すのに、下記の図に示したような番号付けを使用している。

【化5】



40

【0017】

本発明において意味するアリール基は6から60個の芳香環原子からなっており、本発明におけるヘテロアリール基は少なくとも一つのヘテロ原子を含む5から60個の芳香環原子からなっている。ヘテロ原子は、N、OおよびSから選ばれることが好ましい。これは基本的な定義ではあるが、例えば、芳香環原子数やヘテロ原子について、もし本発明の記述中に他の好ましい態様を示されていれば、そちらが適用される。

50

【0018】

ここでアリール基またはヘテロアリール基は、ベンゼンのような単環芳香族基やピリジン、ピリミジン、チオフェンのような単環ヘテロ芳香族基だけでなく、ナフタレン、フェナントレン、キノリンあるいはカルバゾールなどの縮合（環紋化）芳香族またはヘテロ芳香族多環も意味する。本出願において意味する縮合（環紋化）芳香族またはヘテロ芳香族多環は、互いに縮合した複数の単環芳香族またはヘテロ芳香族環で構成される。

【0019】

アリール基またはヘテロアリール基は、上記のラジカルによって置換されていてもよく、また、芳香環系またはヘテロ芳香環系に任意の位置で結合していてもよい。特に好ましい例としては、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、ベンズフェナントレン、テトラセン、ペンタセン、ベンゾピレン、フラン、ベンゾフラン、イソベンゾフラン、ジベンゾフラン、チオフェン、ベンゾチオフェン、イソベンゾチオフェン、ジベンゾチオフェン、ピロール、インドール、イソインドール、カルバゾール、ピリジン、キノリン、イソキノリン、アクリジン、フェナントリジン、ベンゾ-5,6-キノリン、ベンゾ-6,7-キノリン、ベンゾ-7,8-キノリン、フェノチアジン、フェノキサジン、ピラゾール、インダゾール、イミダゾール、ベンズイミダゾール、ナフトイミダゾール、フェナントロイミダゾール、ピリジミダゾール、ピラジンイミダゾール、キノキサリンイミダゾール、オキサゾール、ベンゾオキサゾール、ナフトオキサゾール、アントロオキサゾール、フェナントロオキサゾール、イソオキサゾール、1,2-チアゾール、1,3-チアゾール、ベンゾチアゾール、ピリダジン、ベンゾピリダジン、ピリミジン、ベンゾピリミジン、キノキサリン、ピラジン、フェナジン、ナフチリジン、アザカルバゾール、ベンゾカルバゾール。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、インドリジンあるいはベンゾチアジアゾールから導かれる基などが挙げられる。

【0020】

本発明で意味する芳香環系は、炭素数6から60を有するものである。また、本発明で意味するヘテロ芳香環系は、少なくとも一個のヘテロ原子を含む5から60個の芳香環原子からなるものである。このヘテロ原子は、N、Oおよび/またはSから選ばれることが好ましい。本発明における芳香環系またはヘテロ芳香環系は、必ずしもアリールまたはヘテロアリール基のみを含むものばかりではなく、複数のアリールまたはヘテロアリール基が、 sp^3 混成C、Si、NまたはO原子、 sp^2 混成CまたはN原子、あるいは sp 混成C原子などの非芳香族（H以外の原子は10%未満であることが好ましい）によって結合しているものであってもよい。従って、9,9'-スピロピフルオレン、9,9'-ジアアリールフルオレン、トリアアリールアミン、ジアアリールエーテル、スチルベンなど、複数のアリール基が、例えば、直鎖または環状アルキル、アルケニルまたはアルキニル基、あるいはシリル基によって結合している系も、本発明で意味する芳香環系である。さらに、また、ビフェニル、ターフェニル、ジフェニルトリアジンなどの系のように、複数のアリールまたはヘテロアリール基が互いに単結合でつながっている系も本発明で意味する芳香環系またはヘテロ芳香環系である。

【0021】

芳香環原子数が5から60の芳香環系またはヘテロ芳香環系は、上記のラジカルによって置換されていてもよく、また、芳香族基またはヘテロ芳香族基に任意の位置で結合していてもよい。これらの特に好ましい例としては、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、ベンズフェナントレン、ピレン、クリセン、ペリ

10

20

30

40

50

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、ターフェニル、ターフェニレン、クォーターフェニル、フルオレン、スピロピフルオレン、ジヒドロフェナントレン、ジヒドロピレン、テトラヒドロピレン、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、インドロカルバゾール、インデノカルバゾール、ピリジン、キノリン、イソキノリン、アクリジン、フェナントリジン、ベンゾ - 5, 6 - キノリン、ベンゾ - 6, 7 - キノリン、ベンゾ - 7, 8 - キノリン、フェノチアジン、フェノキサジン、ピラゾール、インダゾール、イミダゾール、ベンズイミダゾール、ナフトイミダゾール、フェナントロイミダゾール、ピリジミダゾール、ピラジンイミダゾール、キノキサリンイミダゾール、オキサゾール、ベンゾオキサゾール、ナフトオキサゾール、アントロオキサゾール、フェナントロオキサゾール、イソオキサゾール、1, 2 - チアゾール、1, 3 - チアゾール、ベンゾチアゾール、ピリダジン、ベンゾピリダジン、ピリミジン、ベンゾピリミジン、キノキサリン、1, 5 - ジアザアントラセン、2, 7 - ジアザピレン、2, 3 - ジアザピレン、1, 6 - ジアザピレン、1, 8 - ジアザピレン、4, 5 - ジアザピレン、4, 5, 9, 10 - テトラアザペリレン、ピラジン、フェナジン、ファノキサジン、フェノチアジン、フルオルピン、ナフチリジン、アザカルバゾール、ベンゾカルバゾール、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、ベンゾチアジアゾール、あるいはこれらの組み合わせから導かれる基が挙げられる。

【0022】

本発明の目的のためには、炭素数1から40の直鎖アルキル基、炭素数3から40の分枝または環状アルキル基および炭素数2から40のアルケニルまたはアルキニル基は、個々のH原子あるいは CH_2 基がラジカル定義に従った上記の基によって置換されていてもよい。これらの好ましい例としては、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、トリフロロメチル、ペンタフロロエチル、2, 2, 2 - トリフロロエチル、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、オクチニルなどが挙げられる。炭素数1から40のアルコキシまたはチオアルキル基の好ましい例としては、メトキシ、トリフロロメトキシ、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、ペンタフロロエトキシ、2, 2, 2 - トリフロロエトキシ、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、トリフロロメチルチオ、ペンタフロロエチルチオ、2, 2, 2 - トリフロロエチルチオ、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

10

20

30

40

50

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、オクチニルチオなどが挙げられる。

【0023】

本出願において複数のラジカルが互いに環を形成する場合とは、特に、二つのラジカルが互いに化学結合によって結合することを意味する。しかしながら、二つのラジカルの一方が水素であるときは、他方のラジカルがその水素が結合している位置に結合して環を形成することを意味する。

【0024】

式(I)の化合物で、 Ar^1 基は7位には存在しないことが好ましい。さらに、(I)または式(II)において、芳香環系もしくはヘテロ芳香環系から選ばれた R^1 基は7位には存在しないことが好ましい。最も好ましくは、HおよびDから選ばれた R^1 基、好ましくはHである R^1 基が7位に存在するか、あるいは、 R^0 基が7位に存在することである。 R^0 基を示した好ましい態様は、これに当てはまっている。

10

【0025】

式(I)の化合物は、ベンズアントラセン骨格に加えて、少なくとも一つの縮合アリール基、好ましくは、少なくとも一つの芳香環原子数14から18の縮合アリール基を含んでいることが好ましい。この縮合アリール基は、 Ar^1 、 R^1 、 R^2 、 R^3 あるいは R^4 、好ましくは Ar^1 または R^1 のいずれか任意のものとして存在してもよい。また、式(I)中の Ar^1 、 R^1 、 R^2 、 R^3 あるいは R^4 に応じて、許容できる適切な基に置き換えてもよい。例えば、もし Ar^1 基として存在するなら、一つまたは複数の R^2 ラジカルで置き換えてもよい。

20

【0026】

Ar^1 基はベンズアントラセンの1、2、3、4、5、6、8、9、10、11、12位、より好ましくは2、3、4、5、6、8、9、10、11位、さらに好ましくは2、3、4、5、6、8、11位、さらにより好ましくは2、3、4、5、6位、最も好ましくは4および5位の位置から選ばれる位置にあることが好ましい。

【0027】

L基はベンズアントラセンの1、2、3、4、5、6、8、9、10、11、12位、より好ましくは2、3、4、5、6、8、9、10、11位、さらに好ましくは2、3、4、5、6、8、11位、さらにより好ましくは2、3、4、5、6位、最も好ましくは4および5位の位置から選ばれる位置にあることが好ましい。

30

【0028】

R^0 基はベンズアントラセンの7、8、9、10、11、12位、より好ましくは7および12位の位置から選ばれる位置にあることが好ましく、7位にあることが最も好ましい。

【0029】

式(I)または(II)の化合物は、 R^1 ラジカルを最大でも3個まで、より好ましくは2個まで、さらに好ましくは1個まで含むが、 R^1 ラジカルを含まないことが最も好ましい。

40

【0030】

Ar^1 は、一つまたは複数の R^2 ラジカルで置換されていてもよい芳香環原子数6から30の芳香環系、および、一つまたは複数の R^2 ラジカルで置換されていてもよい芳香環原子数5から30のヘテロ芳香環系から選ばれることが好ましい。 Ar^1 は、それぞれの場合、独立に、一つまたは複数の R^2 ラジカルで置換されていてもよい芳香環原子数6から30の芳香環系から選ばれることがより好ましい。さらに、 Ar^1 は、それぞれ一つまたは複数の R^2 ラジカルで置換されていてもよい、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、ベンズフェナントレン、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、ターフェニル、クォーターフェニル、フルオレン、スピロピフルオレン、フラン、ベンゾフラン

50

、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、インドール、イソインドール、カルバゾール、インドロカルバゾール、インデノカルバゾール、ピリジン、キノリン、イソキノリン、アクリジン、フェナントリジン、ベンズイミダゾール、ピリミジン、ピラジンおよびトリアジンからなる群より選ばれることが特に好ましい。

【0031】

Ar^1 に結合する R^2 ラジカルは、H、D、F、CN、それぞれ一つまたは複数の R^3 ラジカルで置換されていてもよい炭素数1から10の直鎖アルキルまたはアルコキシ基あるいは炭素数3から10の分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、それぞれ一つまたは複数の R^3 ラジカルで置換されていてもよい芳香環原子数6から24の芳香環系、一つまたは複数の R^3 ラジカルで置換されていてもよい芳香環原子数5から24のヘテロ芳香環系、から選ばれることが好ましい。この、それぞれ一つまたは複数の R^3 ラジカルで置換されていてもよい炭素数1から10の直鎖アルキルまたはアルコキシ基あるいは炭素数3から10の分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、および、一つまたは複数の R^3 ラジカルで置換されていてもよい芳香環原子数5から24のヘテロ芳香環系は、それぞれ一つまたは複数の R^3 ラジカルで置換されていてもよい、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、ベンズフェナントレン、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、ターフェニル、クォーターフェニル、フルオレン、スピロピフルオレン、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、インドール、イソインドール、カルバゾール、インドロカルバゾール、インデノカルバゾール、ピリジン、キノリン、イソキノリン、アクリジン、フェナントリジン、ベンズイミダゾール、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、ベンズイミダゾール、ピリミジン、ピラジンおよびトリアジンからなる群より選ばれることが好ましい。

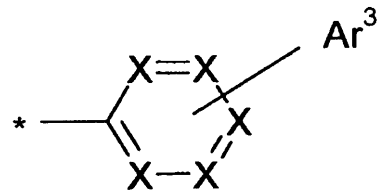
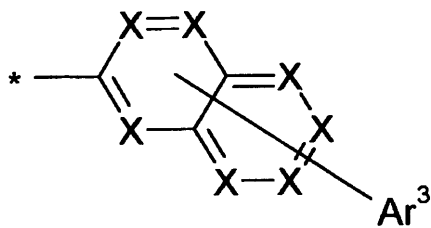
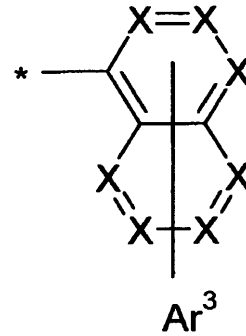
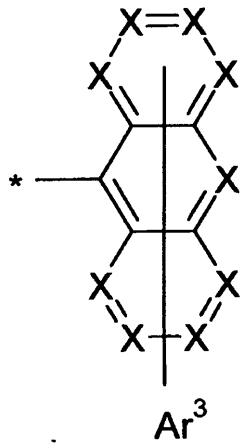
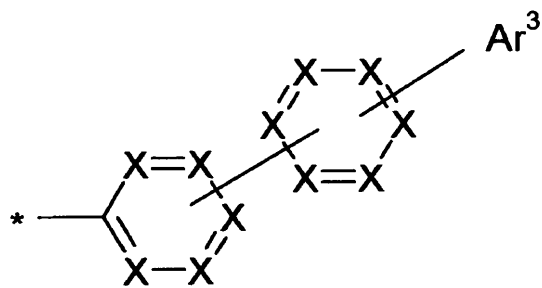
【0032】

Ar^1 基の好ましい態様としては、下記の式 ($Ar^1 - 1$) から ($Ar^1 - 8$) で示されるものが挙げられる。

10

20

【化6】

式 (Ar¹-1)式 (Ar¹-2)式 (Ar¹-3)式 (Ar¹-4)式 (Ar¹-5)式 (Ar¹-6)

【0033】

上記の式において、

Xは、それぞれ独立に、同じでも異なってもよく、N、CR²およびCからなる群から選ばれるが、Ar³基がXに結合している場合はXとしてはCのみが許され；

Ar²は、一つまたは複数のR²ラジカルで置換されていてもよい芳香環原子数6から30の芳香環系、および、一つまたは複数のR²ラジカルで置換されていてもよい芳香環原子数5から30のヘテロ芳香環系から選ばれ；

Ar³は、一つまたは複数のR³ラジカルで置換されていてもよい芳香環原子数6から24の芳香環系、および、一つまたは複数のR³ラジカルで置換されていてもよい芳香環原子数5から24のヘテロ芳香環系から選ばれ；

*の付いた結合はベンズアントラセン部分に基が結合する位置を示している。

【0034】

式(Ar¹-3)、(Ar¹-4)および(Ar¹-5)のそれぞれに対応して、Ar³基は、それぞれ場合、ナフチル誘導体あるいはアントラセニル誘導体の任意の位置に結合する。式(Ar¹-5)では、アントラセニル誘導体の9または10位に結合することが好ましい。

【0035】

X基は、CR²およびCからなる群から選ばれることが好ましいが、Ar³基がXに結合している場合はXとしてはCのみが許される。

【0036】

Ar²は、一つまたは複数のR²ラジカルで置換されていてもよい芳香環原子数10から22の縮合アリアル基、および、一つまたは複数のR²ラジカルで置換されていてもよい芳香環原子数9から22の縮合ヘテロアリアル基から選ばれることが好ましい。Ar²は、それぞれ一つまたは複数のR²ラジカルで置換されていてもよい、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、ベンズフェナントレン、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、ベンゾフラン、イソベンゾフラン、ジベンゾフラン、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、インドール、イソインドール、カルバゾール、キノリン、イソキノリン、アクリジン、フェナントリジン、ベンズイミダゾールからなる群より選ばれることがより好ましい。さらに、Ar²は、それぞれ一つまたは複数のR²ラジカルで置換されていてもよい、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、ベンズフェナントレン、ピレン、クリセン、ペリレン、フルオランテン、ナフタセンからなる群より選ばれることが特に好ましい。

【0037】

Ar³は、一つまたは複数のR³ラジカルで置換されていてもよい芳香環原子数6から22のアリアル基、および、一つまたは複数のR³ラジカルで置換されていてもよい芳香環原子数5から22のヘテロアリアル基から選ばれることが好ましい。Ar³は、それぞれ一つまたは複数のR³ラジカルで置換されていてもよい、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、ベンズフェナントレン、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、ベンゾフラン、イソベンゾフラン、ジベンゾフラン、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、インドール、イソインドール、カルバゾール、キノリン、イソキノリン、アクリジン、フェナントリジン、ベンズイミダゾールからなる群より選ばれることがより好ましい。さらに、Ar³は、それぞれ一つまたは複数のR³ラジカルで置換されていてもよい、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、ベンズフェナントレン、ピレン、クリセン、ペリレン、フルオランテン、ナフタセンからなる群より選ばれることが特に好ましい。

【0038】

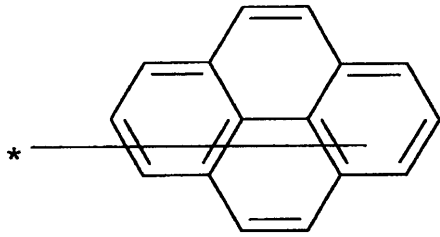
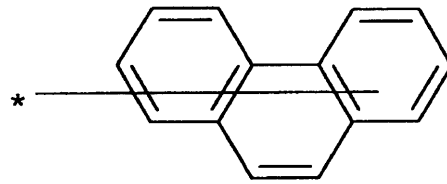
式(Ar¹-1)のAr¹基の好ましい態様としては、下記の式(Ar¹-1-1)から(Ar¹-1-8)で示されるものが挙げられる。

10

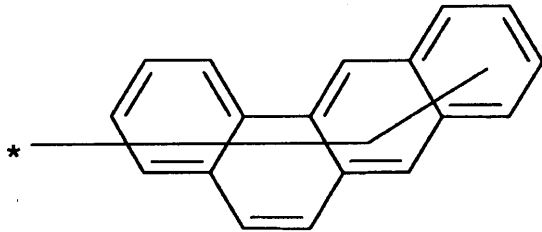
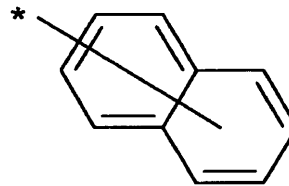
20

30

【化7-1】

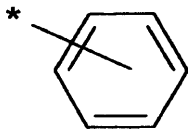
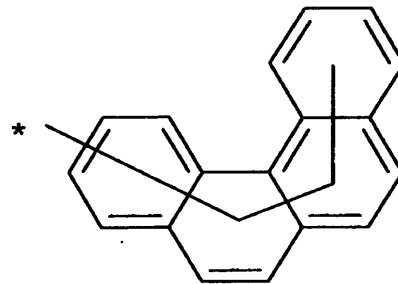
式 (Ar¹-1-1)式 (Ar¹-1-2)

10

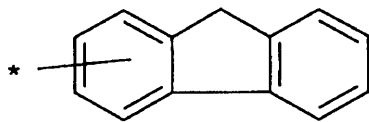
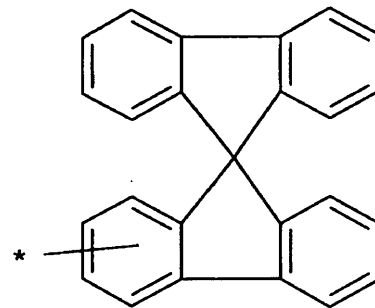
式 (Ar¹-1-3)式 (Ar¹-1-4)

20

【化7-2】

式 (Ar¹-1-5)式 (Ar¹-1-6)

30

式 (Ar¹-1-7)式 (Ar¹-1-8)

40

【0039】

上記の式において、

R²ラジカルの位置は、それぞれで自由であり；

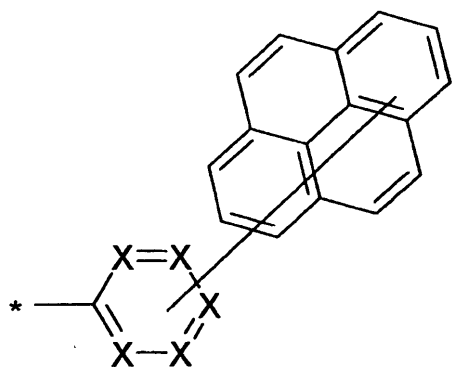
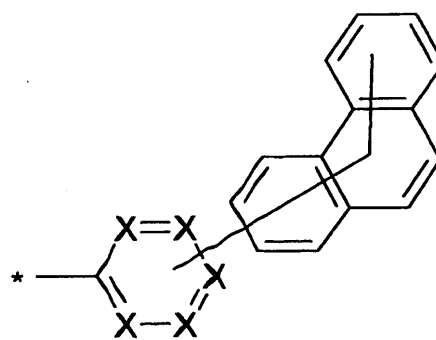
*の付いた結合はベンズアントラセン部分に基が結合する位置を示している。

【0040】

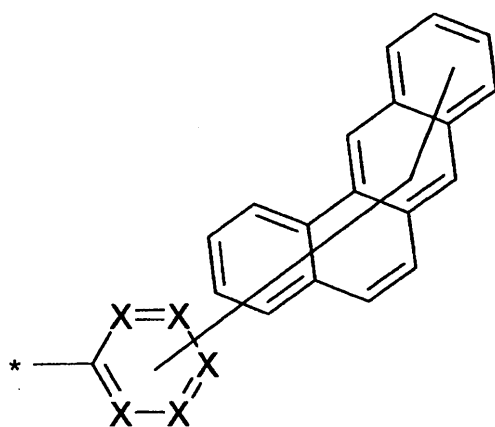
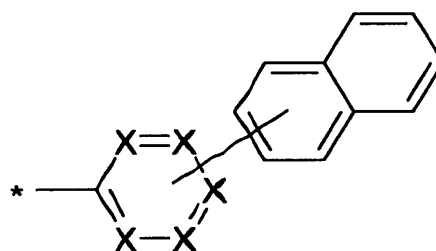
式(Ar¹-2)のAr¹基の好ましい態様としては、下記の式(Ar¹-2-1)から(Ar¹-2-6)で示されるものが挙げられる。

50

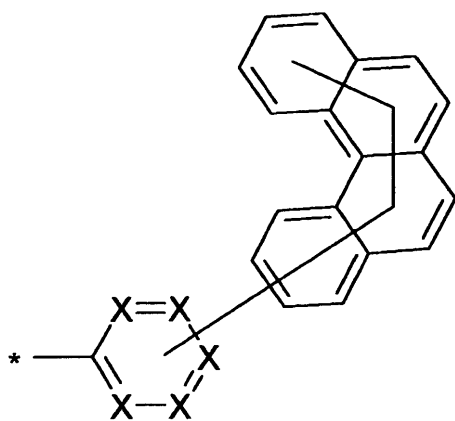
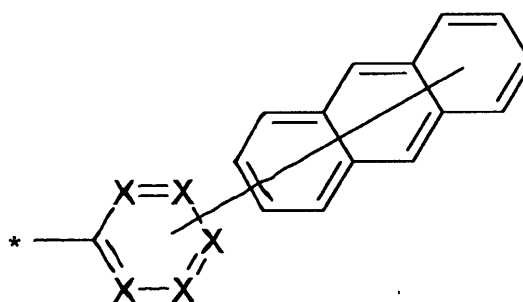
【化8】

式 (Ar¹-2-1)式 (Ar¹-2-2)

10

式 (Ar¹-2-3)式 (Ar¹-2-4)

20

式 (Ar¹-2-5)式 (Ar¹-2-6)

30

40

【0041】

上記の式において、

Xは前記と同様であり、好ましくは、それぞれ独立に、同じでも異なってもよく、C R² およびCからなる群から選ばれるが、置換基がXに結合している場合はXとしてはCのみが許され；

R³ ラジカルは、それぞれで自由であり；

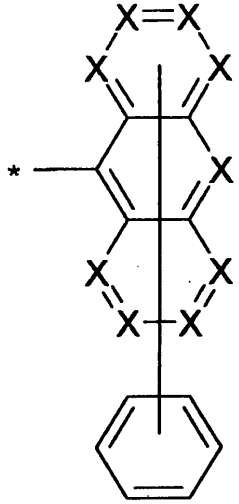
50

*の付いた結合はベンズアントラセン部分に基が結合する位置を示している。

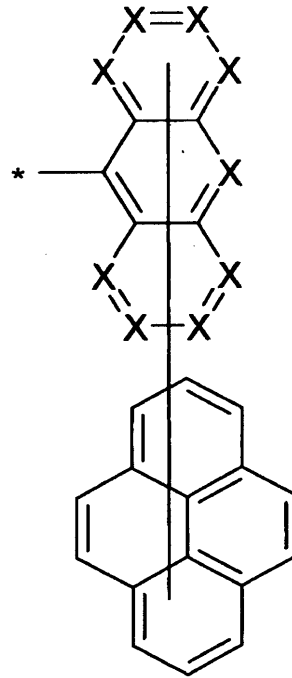
【0042】

式(Ar¹-5)のAr¹基の好ましい態様としては、下記の式(Ar¹-5-1)から(Ar¹-5-7)で示されるものが挙げられる。

【化9-1】



式 (Ar¹-5-1)

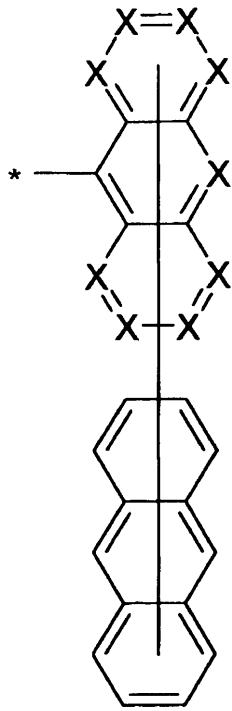
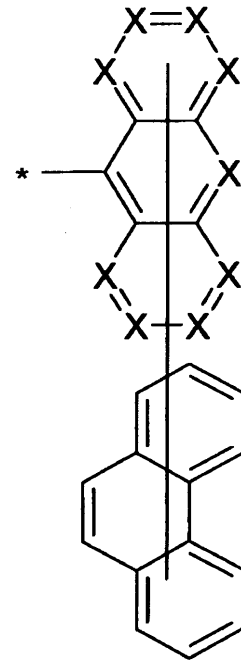
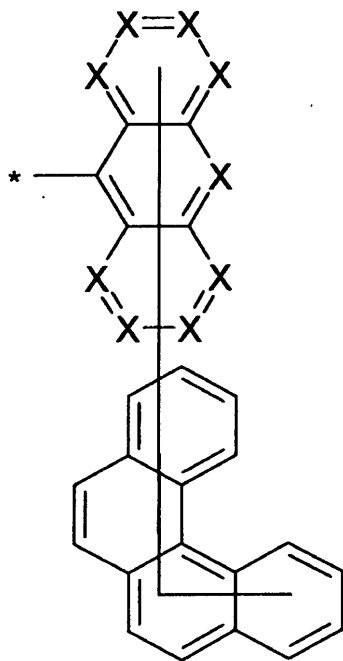
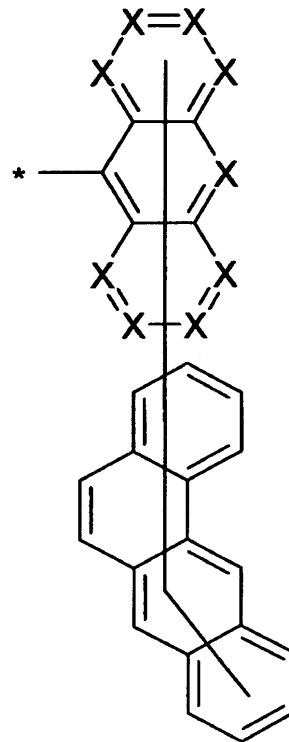


式 (Ar¹-5-2)

10

20

【化 9 - 2】

式 (Ar¹-5-3)式 (Ar¹-5-4)式 (Ar¹-5-5)式 (Ar¹-5-6)

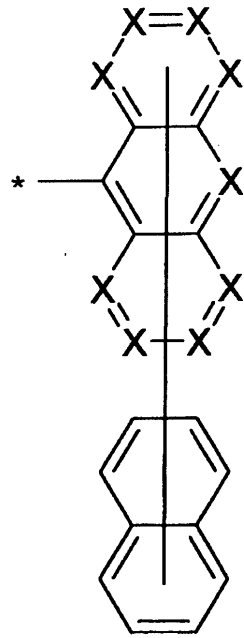
10

20

30

40

【化 9 - 3】

式 (Ar¹-5-7)

10

20

【0043】

上記の式において、

Xは前記と同様であり、好ましくは、それぞれ独立に、同じでも異なってもよく、C R² およびCからなる群から選ばれるが、置換基がXに結合している場合はXとしてはCのみが許され；

R³ラジカルは、それぞれで自由であり；

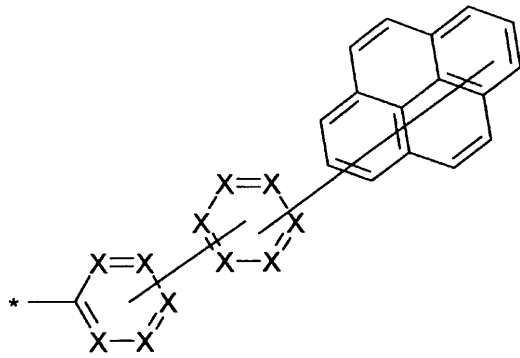
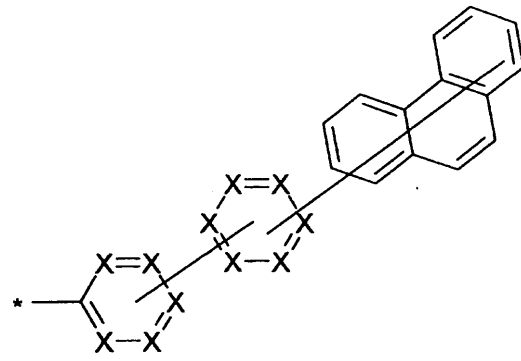
*の付いた結合はベンズアントラセン部分に基が結合する位置を示している。

30

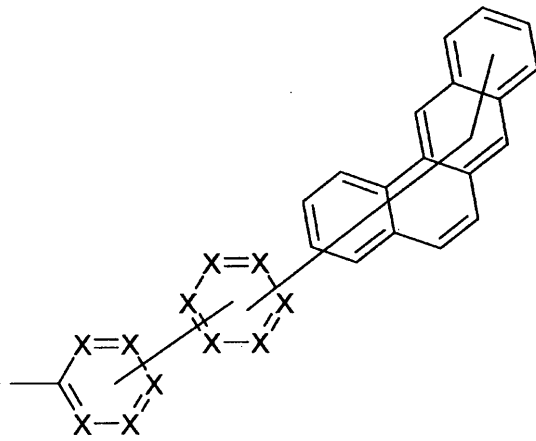
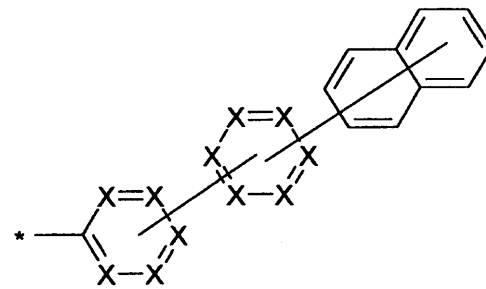
【0044】

式(Ar¹-6)のAr¹基の好ましい態様としては、下記の式(Ar¹-6-1)から(Ar¹-6-6)で示されるものが挙げられる。

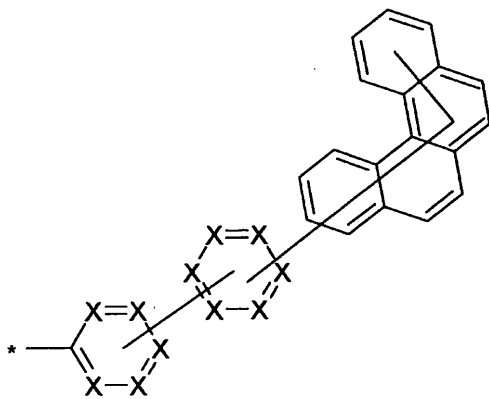
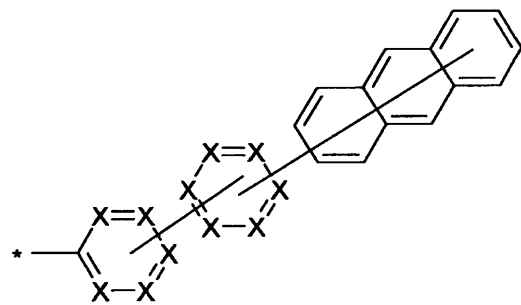
【化10】

式 (Ar¹-6-1)式 (Ar¹-6-2)

10

式 (Ar¹-6-3)式 (Ar¹-6-4)

20

式 (Ar¹-6-5)式 (Ar¹-6-6)

30

40

【0045】

上記の式において、

Xは前記と同様であり、好ましくは、それぞれ独立に、同じでも異なってもよく、C^{R2}およびCからなる群から選ばれるが、置換基がXに結合している場合はXとしてはCのみが許され；

R³ラジカルの位置は、それぞれで自由であり；

*の付いた結合はベンズアントラセン部分に基が結合する位置を示している。

50

【0046】

R^0 は、それぞれ一つまたは複数の R^3 ラジカルで置換されていてもよい、 $C(=O)$ R^3 、 CN 、 $Si(R^3)_3$ 、 OR^3 、炭素数1から10の直鎖アルキルまたはアルコキシ基、炭素数3から10の分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、炭素数2から10のアルケニルまたはアルキニル基、から選ばれることが好ましいが、これらの基に含まれる一つまたは複数の CH_2 基は、 $-R^3C=CR^3-$ 、 $-C=C-$ 、 $Si(R^3)_2$ 、 $C=O$ 、 $-O-$ あるいは $-S-$ で置換されていてもよい。さらに、 R^0 は、それぞれ一つまたは複数の R^3 ラジカルで置換されていてもよい、 $Si(R^3)_2$ 、炭素数1から10の直鎖アルキルまたはアルコキシ基、炭素数3から10の分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基から選ばれることがより好ましい。さらにまた、 R^0 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、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、トリメチルシリル、トリエチルシリル、あるいは、これらの $-Si(R^4)_3$ ラジカルによって置換された誘導体から選ばれることが特に好ましい。

10

【0047】

L は、それぞれ一つまたは複数の R^2 ラジカルで置換されていてもよい芳香環原子数6から30の芳香環系、あるいは、それぞれ一つまたは複数の R^2 ラジカルで置換されていてもよい芳香環原子数5から30のヘテロ芳香環系から選ばれることが好ましいが、 n が2の場合には L は単結合である。さらに、 L は、それぞれ一つまたは複数の R^2 ラジカルで置換されていてもよい、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、ベンズフェナントレン、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、ターフェニル、クォーターフェニル、フルオレン、スピロピフルオレン、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、インドール、イソインドール、カルバゾール、インドロカルバゾール、インデノカルバゾール、ピリジン、キノリン、イソキノリン、アクリジン、フェナントリジン、ベンズイミダゾール、ピリミジン、ピラジンおよびトリアジンから選ばれることが特に好ましいが、 n が2の場合には L は単結合である。

20

30

【0048】

n は2または3であることが好ましく。より好ましくは2である。

【0049】

R^1 は、それぞれ同じでも、異なってもよく、 H 、 D 、 F 、 CN 、 $Si(R^3)_3$ 、 $N(R^3)_2$ 、それぞれ一つまたは複数のラジカル R^3 によって置換されていてもよく、かつ含まれる一つまたは複数の CH_2 基が $-C=C-$ 、 $-R^3C=CR^3-$ 、 $Si(R^3)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^3$ 、 $-NR^3-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(=O)O-$ または $-C(=O)NR^3-$ によって置換されていてもよい炭素数1から10の直鎖アルキルまたはアルコキシ基または炭素数3から10の分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、あるいは、一つまたは複数のラジカル R^3 によって置換されていてもよい芳香環原子数6から24の芳香環系、または、一つまたは複数のラジカル R^3 によって置換されていてもよい芳香環原子数5から24のヘテロ芳香環系から選ばれることが好ましい。さらに、 R^1 は、それぞれ独立に、 H 、 D 、 F 、 CN 、 $Si(R^3)_3$ 、それぞれ一つまたは複数のラジカル R^3 によって置換されていてもよい炭素数1から10の直鎖アルキルまたはアルコキシ基あるいは炭素数3から10の分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基から選ばれることが特に好ましい。

40

【0050】

50

R^2 は、それぞれ同じでも、異なってもよく、H、D、F、CN、 $Si(R^3)_3$ 、 $N(R^3)_2$ 、それぞれ一つまたは複数のラジカル R^3 によって置換されていてもよく、かつ含まれる一つまたは複数の CH_2 基が $-C-C-$ 、 $-R^3C=CR^3-$ 、 $Si(R^3)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^3$ 、 $-NR^3-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(=O)O-$ または $-C(=O)NR^3-$ によって置換されていてもよい炭素数1から10の直鎖アルキルまたはアルコキシ基または炭素数3から10の分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、あるいは、一つまたは複数のラジカル R^3 によって置換されていてもよい芳香環原子数6から24の芳香環系、または、一つまたは複数のラジカル R^3 によって置換されていてもよい芳香環原子数5から24のヘテロ芳香環系から選ばれることが好ましい。

【0051】

10

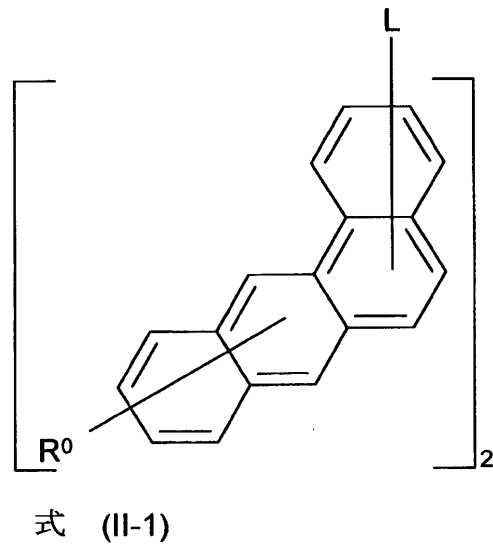
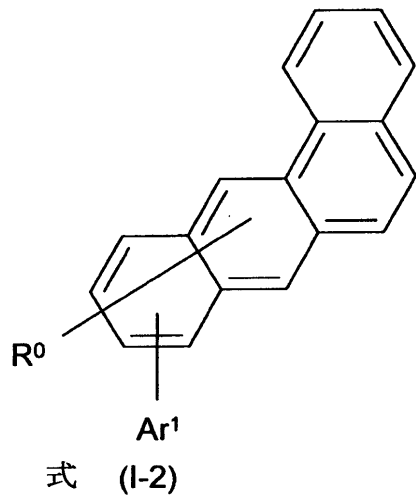
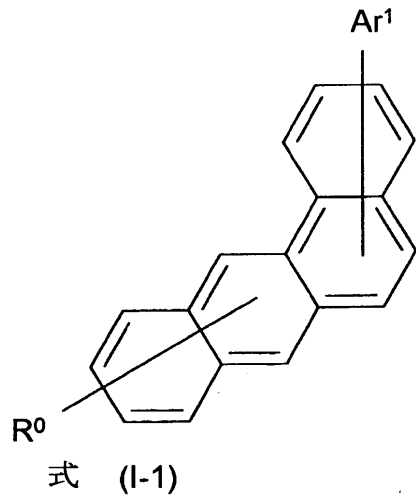
R^3 は、それぞれ同じでも、異なってもよく、H、D、F、CN、 $Si(R^4)_3$ 、 $N(R^4)_2$ 、それぞれ一つまたは複数のラジカル R^4 によって置換されていてもよく、かつ含まれる一つまたは複数の CH_2 基が $-C-C-$ 、 $-R^4C=CR^4-$ 、 $Si(R^4)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^4$ 、 $-NR^4-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(=O)O-$ または $-C(=O)NR^4-$ によって置換されていてもよい炭素数1から10の直鎖アルキルまたはアルコキシ基または炭素数3から10の分枝または環状アルキルまたはアルコキシ基、あるいは、一つまたは複数のラジカル R^4 によって置換されていてもよい芳香環原子数6から24の芳香環系、または、一つまたは複数のラジカル R^4 によって置換されていてもよい芳香環原子数5から24のヘテロ芳香環系から選ばれることが好ましい。

【0052】

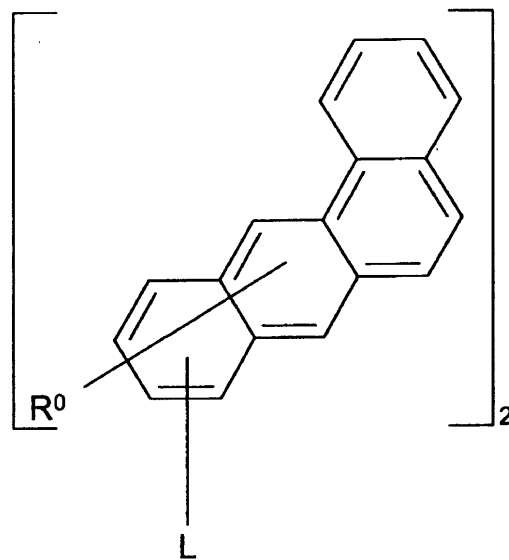
20

式(I)および(II)の化合物の好ましい態様としては、下記の式(I-1)、(I-2)、(II-1)および(II-2)で示されるものが挙げられる。

【化 1 1 - 1】



【化 1 1 - 2】



式 (II-2),

10

20

【0053】

上記の式において、L、 R^0 および Ar^1 の各基は前述のとおりである。また、 R^1 基も前述のとおりであり、それぞれ無置換の形で示しているベンズアントラセンのどの位置に存在していてもよい。

【0054】

式 (I - 1) に示したように、式 (I - 1) 中の Ar^1 基は 1、2、3、4、5 および 6 位の中から選ばれるいずれかの位置に結合するが、2、4 あるいは 5 位に結合することが好ましく、4 または 5 位に結合することが特に好ましい。

【0055】

式 (II - 1) に示したように、式 (II - 1) 中の L 基は 1、2、3、4、5 および 6 位の中から選ばれるいずれかの位置に結合するが、2、4 あるいは 5 位に結合することが好ましく、4 または 5 位に結合することが特に好ましい。

30

【0056】

式 (I - 1) および (II - 1) に示したように、式 (I - 1)、(II - 1) 中の R^0 基は 7、8、9、10、11 および 12 位の中から選ばれるいずれかの位置に結合するが、7 あるいは 12 位に結合することが好ましく、7 位に結合することが特に好ましい。

【0057】

式 (I - 2) に示したように、式 (I - 2) 中の Ar^1 基は 8、9、10 および 11 位の中から選ばれるいずれかの位置に結合する。

【0058】

式 (II - 2) に示したように、式 (II - 2) 中の L 基は 8、9、10 および 11 位の中から選ばれるいずれかの位置に結合する。

40

【0059】

式 (I - 2) および (II - 2) に示したように、式 (I - 2)、(II - 2) 中の R^0 基は 7、8、9、10、11 および 12 位の中から選ばれるいずれかの位置に結合するが、7 あるいは 12 位に結合することが好ましく、7 位に結合することが特に好ましい。

【0060】

上記した L、 Ar^1 、 R^0 、 R^1 、 R^2 および R^3 の好ましい態様は、式 (I - 1)、(I - 2)、(II - 1) および (II - 2) のそれぞれにおいても同様に好ましい。

【0061】

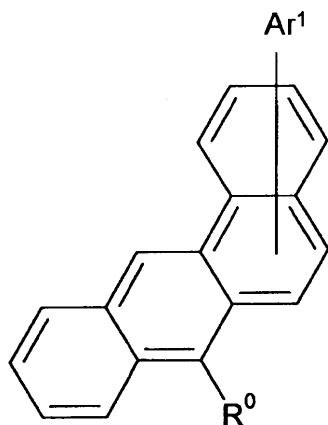
50

式 (I - 1)、(I - 2)、(I I - 1) および (I I - 2) の中でも、式 (I - 1) が特に好ましい。

【 0 0 6 2 】

式 (I - 1) の化合物の好ましい態様としては、下記の式 (I - 1 - 1) および (I - 2 - 1) で示されるものが挙げられる。

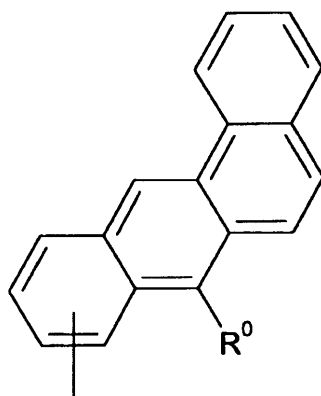
【 化 1 2 】



式 (I-1-1)

10

20



式 (I-2-1),

30

【 0 0 6 3 】

上記の式において、 R^0 および Ar^1 の各基は前述のとおりである。また、 R^1 基も前述のとおりであり、それぞれ無置換の形で示しているベンズアントラセンのどの位置に存在していてもよい。

40

【 0 0 6 4 】

上記した Ar^1 、 R^0 、 R^1 、 R^2 および R^3 の好ましい態様は、式 (I - 1 - 1) および (I - 2 - 1) においても同様に好ましい。

【 0 0 6 5 】

式 (I - 1 - 1) に示したように、式 (I - 1 - 1) 中の Ar^1 基は 1、2、3、4、5 および 6 位の中から選ばれるいずれかの位置に結合するが、2、4 あるいは 5 位に結合することが好ましく、4 または 5 位に結合することが特に好ましい。

【 0 0 6 6 】

式 (I - 2 - 1) に示したように、式 (I - 2 - 1) 中の Ar^1 基は 8、9、10 および 11 位の中から選ばれるいずれかの位置に結合する。

50

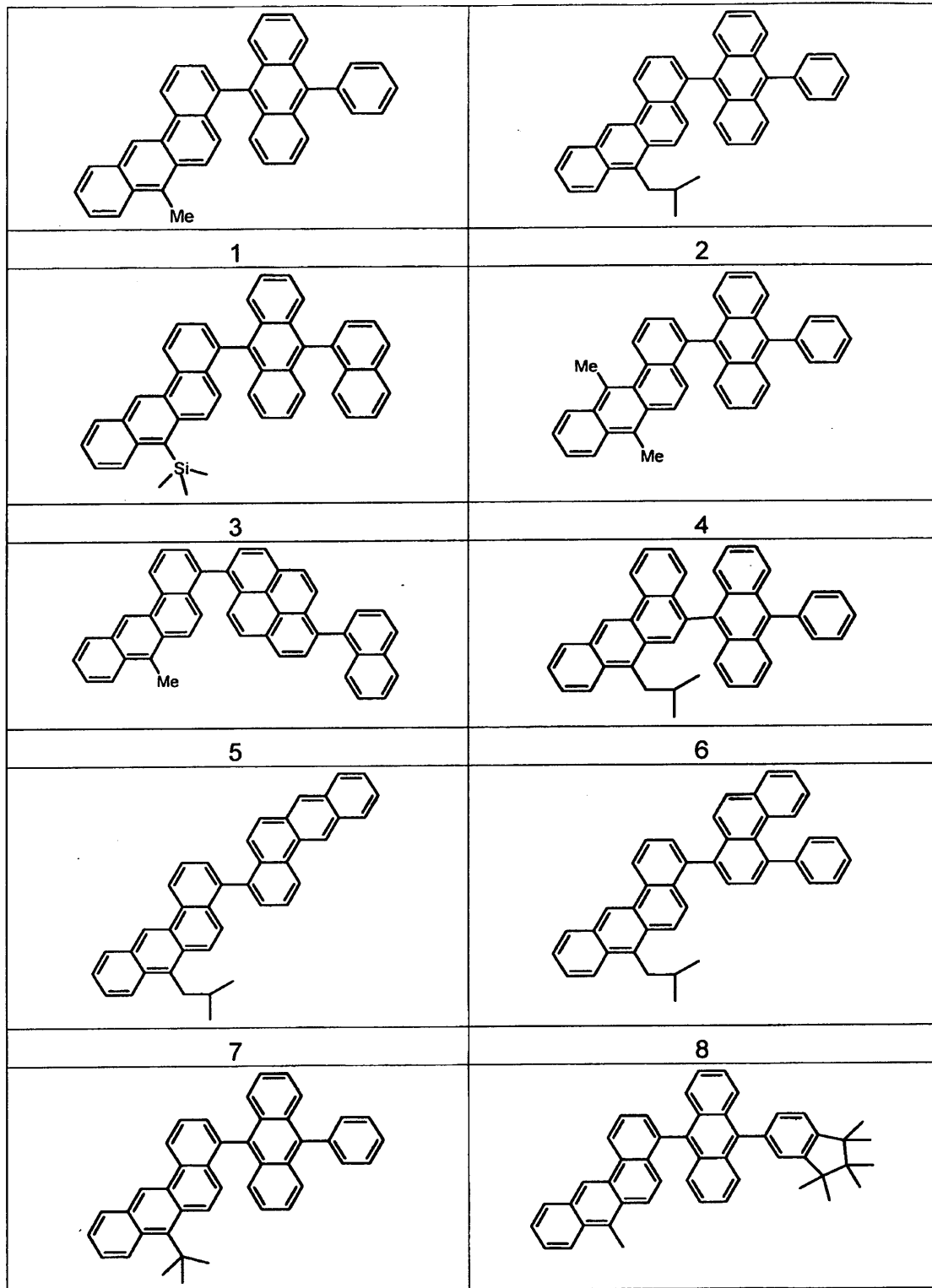
【0067】

式(I-1-1)および(I-2-1)中でも、式(I-1-1)が特に好ましい。

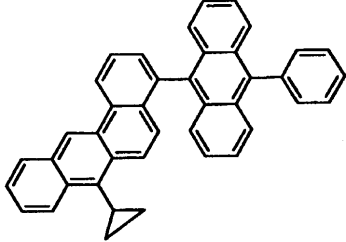
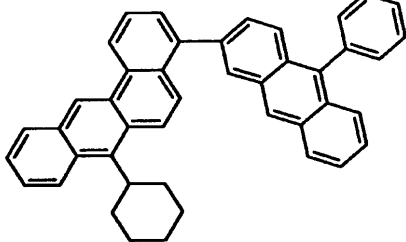
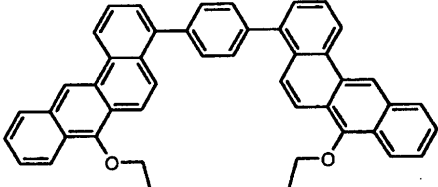
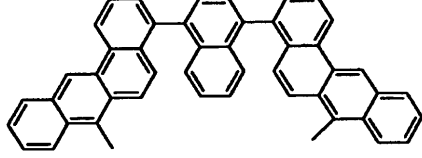
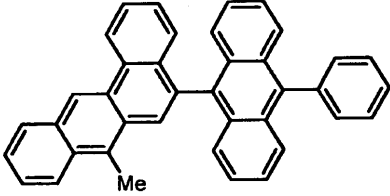
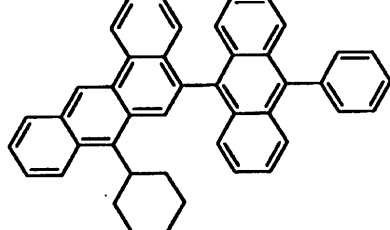
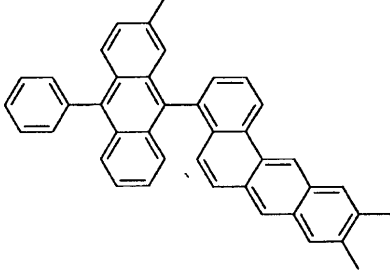
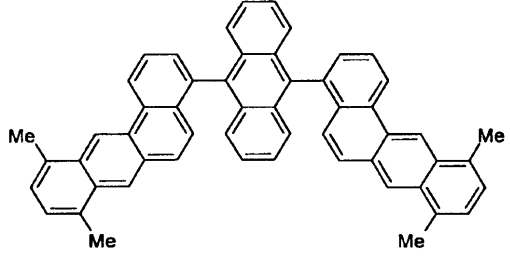
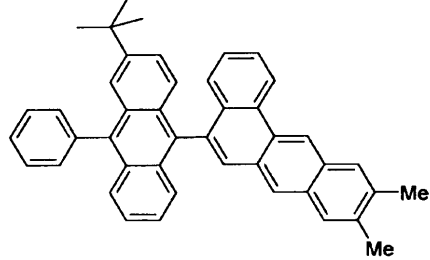
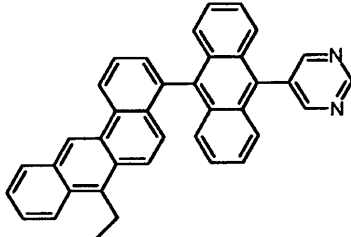
【0068】

式(I)または(II)の化合物の例を以下に示す。

【化13-1】



【化 1 3 - 2】

<p style="text-align: center;">9</p> 	<p style="text-align: center;">10</p> 
<p style="text-align: center;">11</p> 	<p style="text-align: center;">12</p> 
<p style="text-align: center;">13</p> 	<p style="text-align: center;">14</p> 
<p style="text-align: center;">15</p> 	<p style="text-align: center;">16</p> 
<p style="text-align: center;">17</p> 	<p style="text-align: center;">18</p> 
<p style="text-align: center;">19</p>	<p style="text-align: center;">20</p>

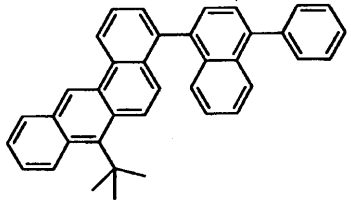
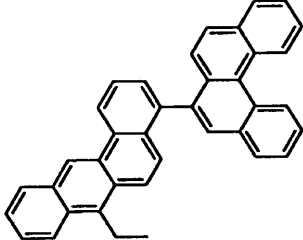
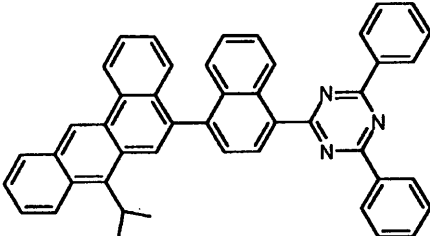
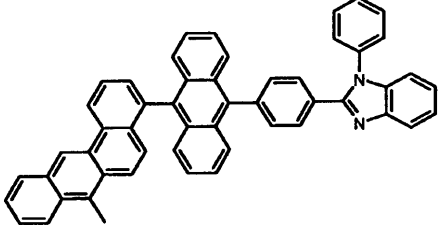
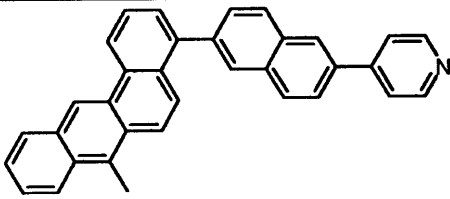
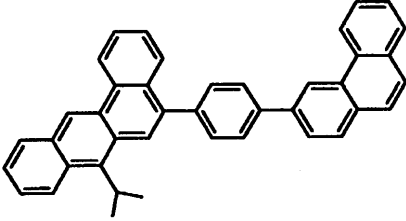
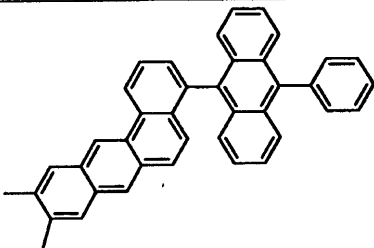
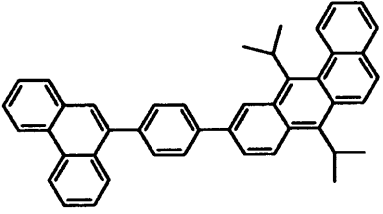
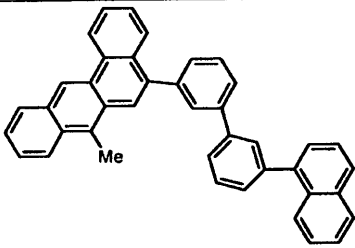
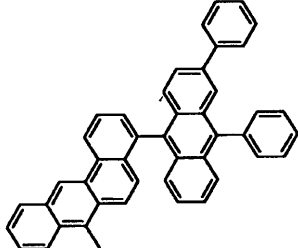
10

20

30

40

【化 1 3 - 3】

	
21	22
	
23	24
	
25	26
	
27	28
	
29	30

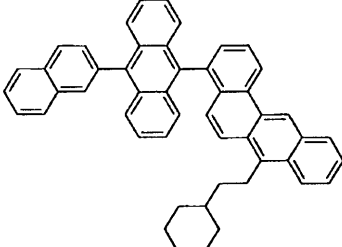
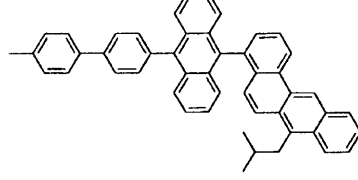
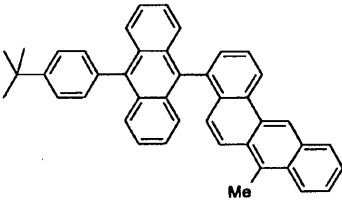
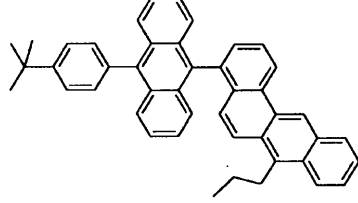
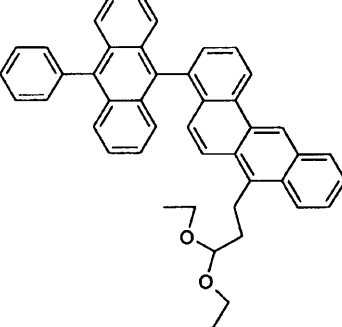
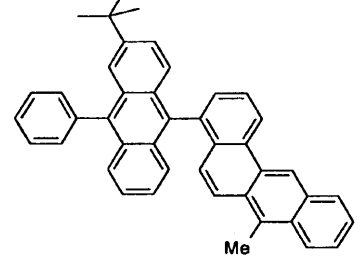
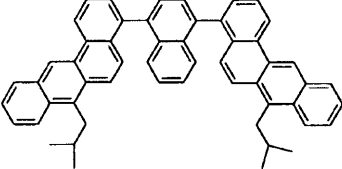
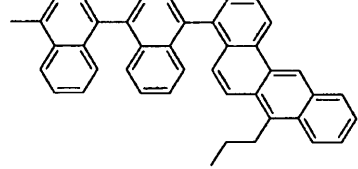
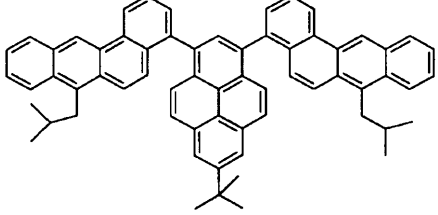
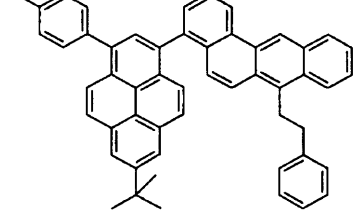
10

20

30

40

【化 1 3 - 4】

	
31	32
	
33	34
	
35	36
	
37	38
	
39	40

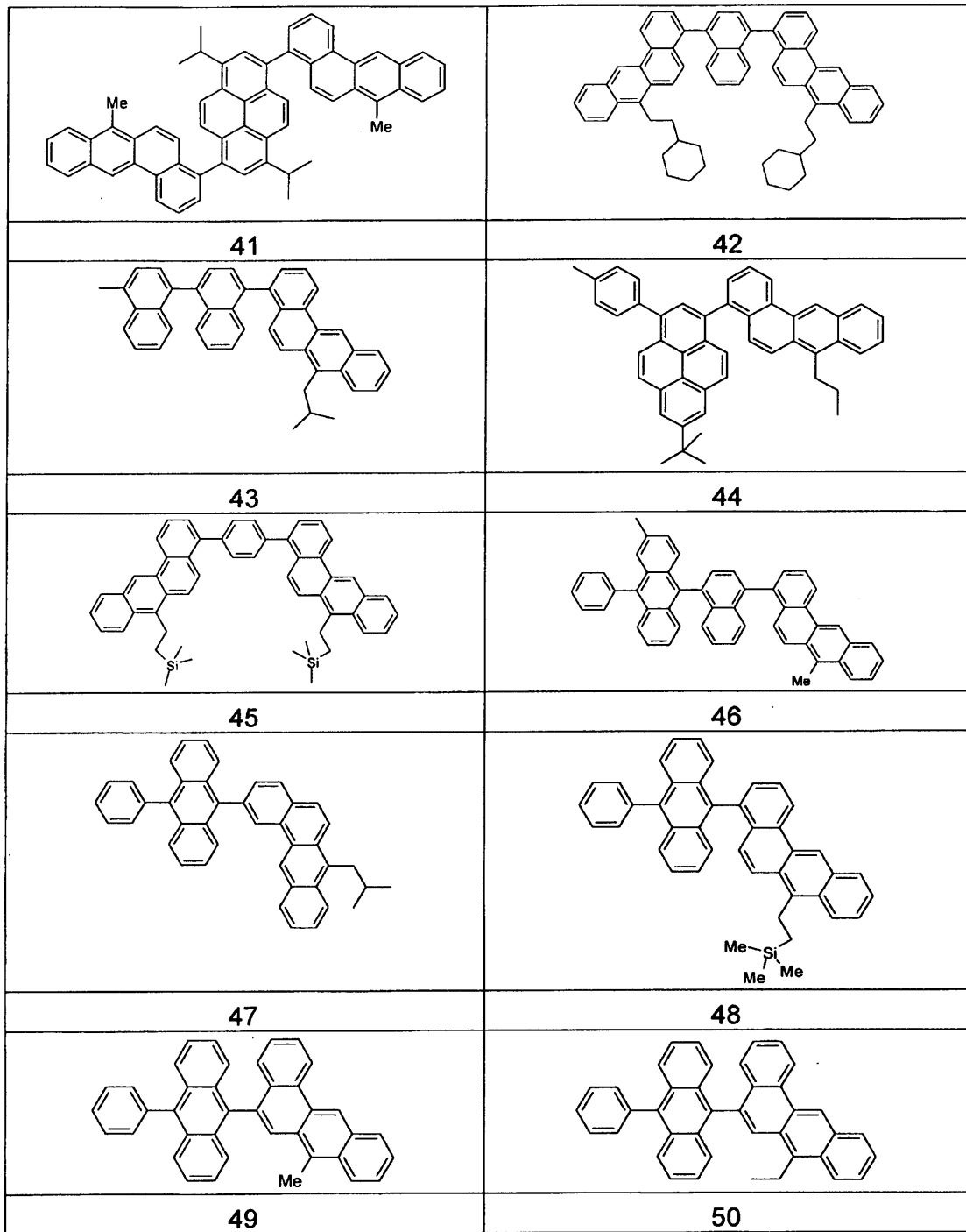
10

20

30

40

【化 1 3 - 5】



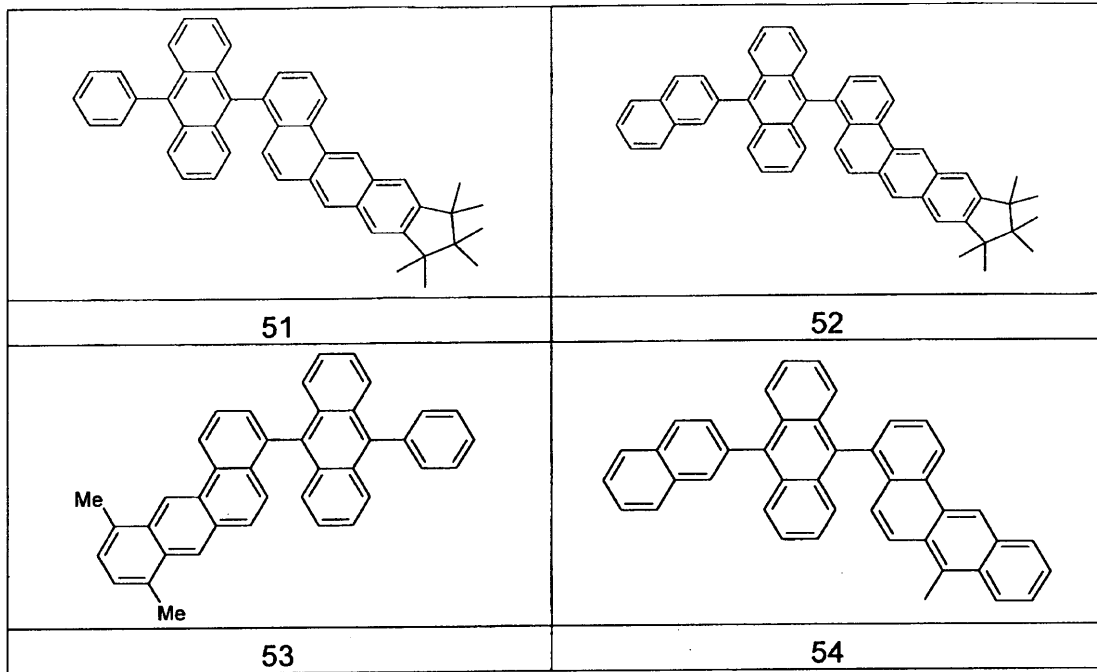
10

20

30

40

【化13-6】



10

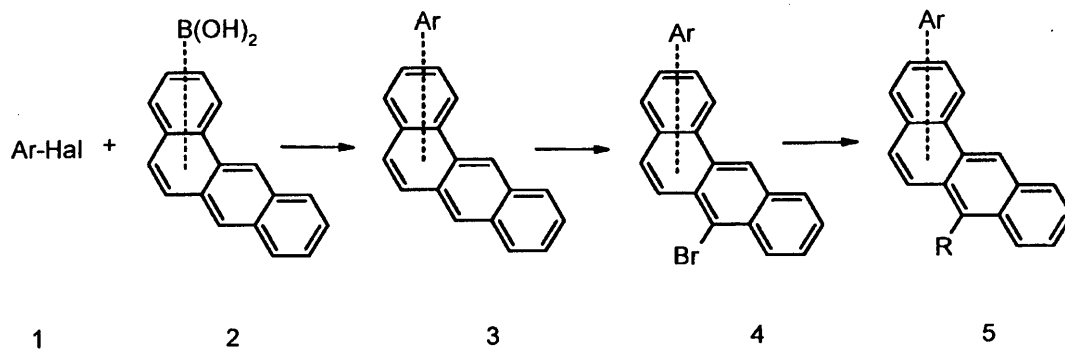
20

【0069】

本発明による化合物は、例えば、下記のような反応スキーム（スキーム1）によって得ることができる。

【化14】

スキーム1



30

【0070】

上記の式中、

Arは、任意の芳香環系もしくはヘテロ芳香環系であり、

Halは、ハロゲン原子もしくは他の反応性基であり、

Rは、任意の有機ラジカルである。

40

【0071】

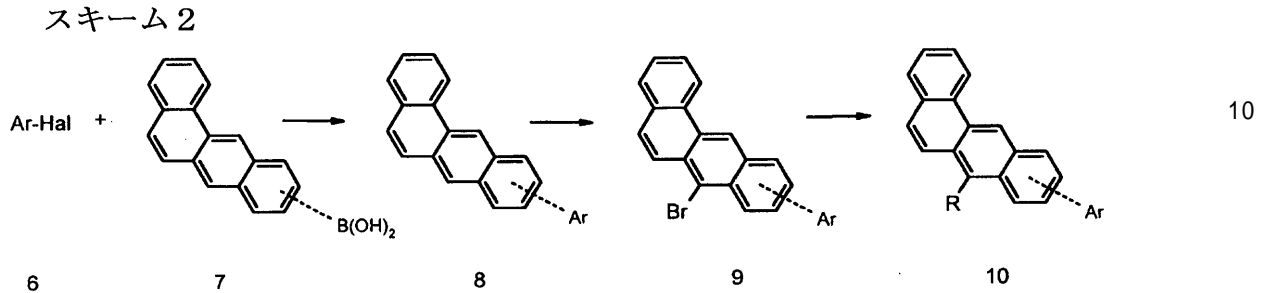
目的物を得るために、まず、原料物質としてボロン酸置換ベンズアントラセン誘導体2を用いる。このような一般構造2を有する化合物を得ることができる方法は、WO2008/145239の実施例に記載されている。このボロン酸基は、ベンズアントラセンの1から6位いずれの位置にあってもよい。次に、反応基によって置換されている任意の芳香環系またはヘテロ芳香環系とのカップリング反応を行い、一般構造3を有する化合物を得る。さらに7位を臭素化して、その7位にRラジカルを導入する。Rラジカルは、置換されていてもよいアルキル基であることが好ましい。

【0072】

50

本発明による化合物を得るための別の反応スキーム（スキーム2）は、8、9または11位がアリール基で置換されたベンズアントラセン誘導体を出発物質とするものである。このような化合物を得ることができる方法は、例えば、WO2011/012212に記載されている。スキーム2に示したように、この原料物質の7位を臭素化して、その7位に、好ましくは置換されていてもよいアルキル基であるRラジカルを導入する。

【化15】



【0073】

上記の式中、

Arは、任意の芳香環系もしくはヘテロ芳香環系であり、

Halは、ハロゲン原子もしくは他の反応性基であり、

Rは、任意の有機ラジカルである。

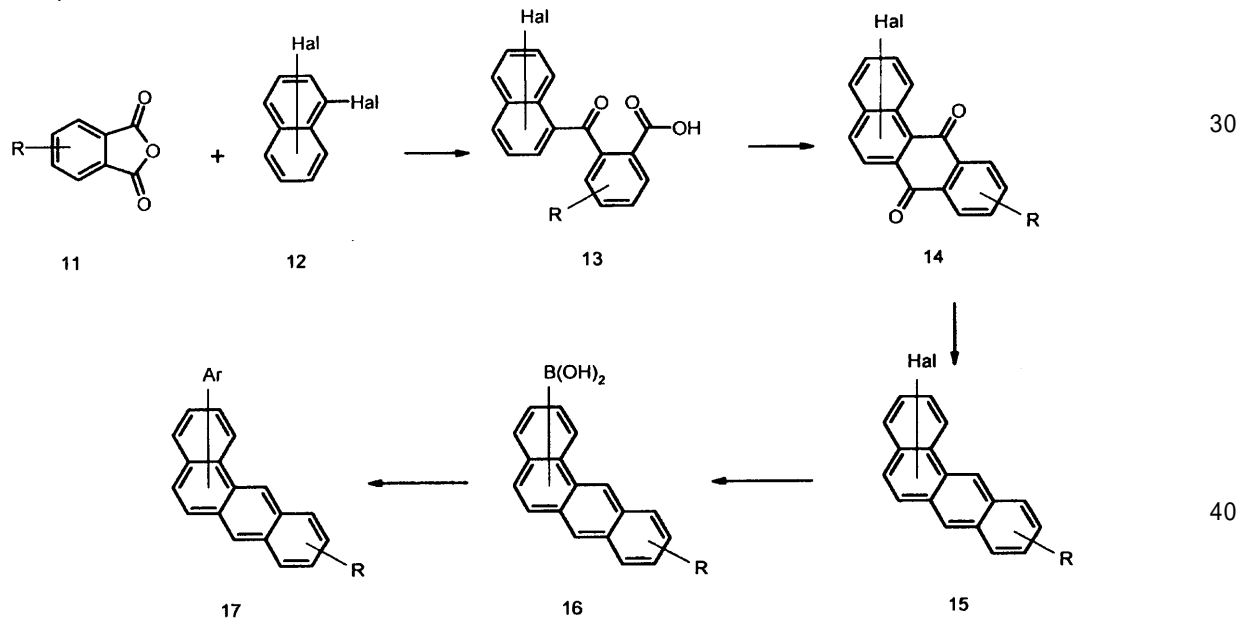
20

【0074】

本発明による化合物を得るための、さらにもう一つ別の反応スキームは、以下に示すスキーム3である。

【化16】

スキーム3



【0075】

上記の式中、

Arは、任意の芳香環系もしくはヘテロ芳香環系であり、

Halは、ハロゲン原子もしくは他の反応性基であり、

Rは、任意の有機ラジカルである。

【0076】

目的物を得るために、まず、無水フタル酸誘導体11を置換ナフチル化合物12と反応

50

させる。得られた化合物 13 から、さらにフリーデル・クラフツ分子間アシル化反応によってキノン化合物 14 を得る。これを還元して化合物 15 にして、さらに、反応性基 H a 1 の位置にボロン酸基を導入して化合物 16 にする。最後に、鈴木反応によって A r 基を導入して、ベンズアントラセンの 8 から 11 位のいずれかに R 基を有する本発明による化合物 17 を得る。

【0077】

従って、本出願は式 (I) または (II) の化合物の合成法であって、順に下記 1) から 3) の工程からなる合成法に関する。すなわち、本出願は、順に

1) ベンズアントラセン誘導体と芳香環系またはヘテロ芳香環系とのカップリング反応によって、一つまたは複数の芳香環系またはヘテロ芳香環系によって置換されたベンズアントラセン化合物を得る工程、

2) 得られたベンズアントラセン化合物をハロゲン化、好ましくは臭素化する工程、

3) ハロゲン化、好ましくは臭素化された位置に置換基を導入する工程

からなる合成法に関する。

【0078】

上記合成法の工程 2) におけるハロゲン化、好ましくは、臭素化はベンズアントラセンの 7 位で行われることが好ましい。さらに、工程 1) におけるカップリング反応によって導入される芳香環系またはヘテロ芳香環系は、ベンズアントラセンの 1 から 6 位から選ばれる位置に存在することが好ましい。

【0079】

さらに、本出願は式 (I) または (II) の化合物の合成法であって、順に

I) ナフチル誘導体と無水フタル酸から置換ベンズアントラセン化合物を得る工程、

II) 得られたベンズアントラセン化合物を芳香環系またはヘテロ芳香環系とカップリング反応させる工程、

からなる合成法にも関する。

【0080】

工程 I) では、アシル化、フリーデル・クラフツ分子間アシル化およびキノン化合物の還元が行われることが好ましい。ベンズアントラセン化合物の置換基は、ベンズアントラセンの 8 から 11 位より選ばれる位置にあることが好ましい。工程 II) におけるカップリング反応は、ベンズアントラセンの 1 から 6 位、好ましくは 4 または 5 位から選ばれる位置で行われることが好ましい。

【0081】

上記の本発明による化合物、特に、臭素、ヨウ素、塩素、ボロン酸あるいはボロン酸エステルなどの反応性基によって置換された化合物は、それぞれ対応するオリゴマー、 dendriマーあるい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。好ましい反応性離脱基の例としては、臭素、ヨウ素、塩素、ボロン酸類、ボロン酸エステル類、アミン類、末端 C - C 二重もしくは三重結合を有するアルケニルまたはアルキニル基、オキシラン類、オキサタン類、および、ジエン類やアジ化物のような環状付加、例えば、1, 3 - 双極子環状付加をする基、カルボン酸誘導体、アルコール類、およびシラン類などが挙げられる。

【0082】

従って、本発明は、さらにまた、式 (I) または (II) の一つまたは複数の化合物を含むオリゴマー、 dendriマーあるいはポリマーにも関する。この化合物のポリマー、オリゴマーあるいは dendriマーは、R¹、R² または R³ によって置換されている式 (I) または (II) のどの位置で結合していてもよい。式 (I) または (II) の化合物の連結によって、化合物はオリゴマーやポリマーの側鎖の構成要素になったり、主鎖の構成要素になったりする。本発明におけるオリゴマーは、少なくとも 3 個のモノマーで構成された化合物を意味する。また、本発明におけるポリマーは、少なくとも 10 個のモノマーで構成された化合物を意味する。本発明によるポリマー、オリゴマーあるいは dendriマーは、共役していても、部分的に共役していても、あるいは共役していなくてもよい。ま

10

20

30

40

50

た、本発明によるポリマー、オリゴマーは直鎖でも、分枝でも、樹状でもよい。直鎖状に連結した構造の場合、式(I)または(II)の単位は互いに直接結合していてもよいし、置換もしくは無置換のアルキレン基やヘテロ原子のような二価の基、あるいは二価の芳香族もしくはヘテロ芳香族基を介して連結していてもよい。また、分枝状または樹状構造の場合、3個以上の式(I)または(II)の単位が、三価または多価の基、例えば、三価または多価の芳香族もしくはヘテロ芳香族基を介して連結して分枝または樹状オリゴマーあるいはポリマーを形成してもよい。

【0083】

式(I)または(II)の化合物について上記した好ましい例は、オリゴマー、 dendritic polymer あるいはポリマーにおける式(I)または(II)の繰り返し単位にも適用できる。

10

【0084】

上記のようなオリゴマーやポリマーを得るために、本発明のモノマーを単重合させたり、あるいは他のモノマーと共重合させたりする。好ましいモノマーとしては、フルオレン類(例えば、EP842208、WO00/22026による)、スピロビフルオレン類(例えば、EP707020、EP894107、WO06/061181による)、パラフェニレン類(例えば、WO1992/18552による)、カルバゾール類(例えば、WO04/070772、WO2004/113468による)、チオフエン類(例えば、EP1028136による)、ジヒドロフェナントレン類(例えば、WO2005/014689、WO2007/006383による)、シス-およびトランス-インデノフルオレン類(例えば、WO2004/041901、WO2004/113412による)、ケトン類(例えば、WO2005/040302による)、フェナントレン類(例えば、WO2005/104264、WO2007/017066による)、および、これらの組み合わせなどが挙げられる。通常、このポリマー、オリゴマーあるいは dendritic polymer は、さらなる単位、例えば、ビニルトリアリールアミン(例えば、WO2007/068325による)や燐光性金属錯体(例えば、WO2006/003000による)といった発光性(蛍光性または燐光性)単位、および/または、電荷輸送単位、特に、トリアリールアミン類から誘導される単位などを含有している。

20

【0085】

本発明によるポリマーおよびオリゴマーは、一般的に、ポリマー中で式(I)または(II)の繰り返し単位になるような、少なくとも一つのモノマーを含む、一種類もしくは多種類のモノマーの重合によって得ることができる。好ましい重合反応は当業者には公知であり、文献等に記載されている。C-CあるいはC-N結合を生じる、特に好ましい重合反応としては、以下のようなものが挙げられる。すなわち、

30

(A) 鈴木重合;

(B) 山本重合;

(C) スティル重合; および

(D) ハートウィグ-バックワルド重合

である。

【0086】

上記の反応によって重合を行う方法や得られた反応媒体からポリマーを取り出し、精製する方法は、当業者には公知であり、例えば、WO2003/048225、WO2004/037887およびWO2004/037887などの文献に詳細に記載されている。

40

【0087】

本発明による化合物を、例えば、スピンコーティングやプリント工程によって液相から加工に用いるには、塗布剤として剤形化する必要がある。塗布剤としては、例えば、溶液、分散液、懸濁液などが可能である。この目的のために、複数の溶媒の混合物を利用することが好ましい場合もある。好ましい溶媒の例としては、トルエン、アニソール、o-、m- および p- キシレン、メチルベンゾエート、メシチレン、テトラリン、ベラトロール

50

、THF、メチルTHF、THP、クロロベンゼン、ジオキサソ、フェノキシトルエン、特に3-フェノキシトルエン、(-)-フェンコン、1,2,3,5-テトラメチルベンゼン、1,2,4,5-テトラメチルベンゼン、1-メチルナフタレン、2-メチルベンゾチアゾール、2-フェノキシエタノール、2-ピロリジノン、3-メチルアニソール、4-メチルアニソール、3,4-ジメチルアニソール、3,5-ジメチルアニソール、アセトフェノン、-テルピネオール、ベンゾチアゾール、ブチルベンゾエート、クメン、シクロヘキサノール、シクロヘキサノン、シクロヘキシルベンゼン、デカリン、ドデシルベンゼン、エチルベンゾエート、インダン、メチルベンゾエート、NMP、p-シメン、フェネトール、1,4-ジイソプロピルベンゼン、ジベンジルエーテル、ジエチレングリコールブチルメチルエーテル、トリエチレングリコールブチルメチルエーテル、ジエチレングリコールジブチルエーテル、トリエチレングリコールジメチルエーテル、ジエチレングリコールモノブチルエーテル、トリプロピレングリコールジメチルエーテル、テトラエチレングリコールジメチルエーテル、2-イソプロピルナフタレン、ペンチルベンゼン、ヘキシルベンゼン、ヘプチルベンゼン、オクチルベンゼン、1,1-ビス(3,4-ジメチルフェニル)エタン、およびこれらの混合物などが挙げられる。

【0088】

従って、本発明は、さらにまた、溶媒、好ましくは、有機溶媒を少なくとも一つ含有し、かつ、それとともに、式(I)または(II)の化合物を少なくとも一つ含有する、あるいは、少なくとも一つの式(I)または(II)の単位を含むポリマー、オリゴマーあるいは dendrimer を少なくとも一つ含有する塗布剤、特に、溶液、分散液あるいは懸濁液に関する。このような溶液を調製する方法は当業者には公知であり、例えば、WO2002/072714、WO2003/019694および、これらで引用されている文献に記載されている。

【0089】

本発明による化合物は電子デバイス、特に、有機ELデバイス(OLED)への利用に好適である。本発明の化合物は置換基によって、様々な機能を持つものとして種々の層で利用される。

【0090】

すなわち、本発明による化合物は有機ELデバイス中で、例えば、マトリックス材料、発光材料、正孔輸送材料、あるいは電子輸送材料など、いかなる機能を持つものとしても利用できる。しかしながら、有機ELデバイスの発光層中、特に、蛍光発光層中でマトリックス材料として用いたり、あるいは、発光層中で発光材料、特に、蛍光発光材料として用いたりすることが好ましい。

【0091】

従って、本発明は、さらにまた、式(I)または(II)の化合物の電子デバイスでの利用法にも関する。ここでの電子デバイスは、有機集積回路(OIC)、有機電界効果トランジスタ(OFEET)、有機薄層トランジスタ(OTFT)、有機発光トランジスタ(OLET)、有機太陽電池(OSC)、有機光学検波器、有機光受容器、有機電場消光デバイス(OEQD)、有機発光電気化学セル(OLEC)、有機レーザーダイオード(O-laser)、および、特に、有機ELデバイス(OLED)、から選ばれることが好ましい。

【0092】

さらにまた、本発明は、少なくとも一つの式(I)または(II)の化合物を用いた電子デバイスに関する。ここでの電子デバイスは上記と同様のものから選ばれることが好ましいが、特に好ましいものは、アノード、カソードおよび少なくとも一つの発光層からなる有機ELデバイスであって、少なくとも一つの有機層が少なくとも一つの式(I)または(II)の化合物を含有することを特徴とする有機ELデバイスである。従って、特に好ましい電子デバイスは、アノード、カソード、および、少なくとも一つの式(I)または(II)の化合物を含有する少なくとも一つの発光層からなる有機ELデバイスである。

【0093】

この有機ELデバイスは、アノード、カソードおよび発光層に加えて、さらに他の層を有していてもよい。このような他の層は、それぞれの場合に応じて、例えば、一つまたは複数の正孔注入層、正孔輸送層、正孔ブロック層、電子輸送層、電子注入層、電子ブロック層、励起子ブロック層、中間層、電荷発生層 (IDMC 2003, Taiwan; Session 21 OLED (5), T. Matsumoto, T. Nakada, J. Endo, K. Mori, N. Kawamura, A. Yokoi, J. Kido, Multiphoton Organic EL Device Having Charge Generation Layer) および/または、有機または無機 p/n 接合などから選ばれる。

10

【0094】

有機ELデバイス内の積層順は、以下のようなものが好ましい。すなわち、アノード - 正孔注入層 - 正孔輸送層 - 発光層 - 電子輸送層 - 電子注入層 - カソードである。これらの層はすべてが存在している必要はなく、また、これらに加えて、例えば、発光層のアノード側に隣接して電子ブロック層が存在していたり、発光層のカソード側に隣接して正孔ブロック層が存在していたりなど、さらなる層があってもよい。

【0095】

本発明による有機ELデバイスは、複数の発光層を有していてもよい。その場合、これらの発光層は、全体として380から750nmに複数の発光ピークを持ち、その結果、白色発光することが好ましく、従って、青色、黄色、オレンジ色もしくは赤色の蛍光もしくは燐光を発する種々の発光化合物を発光層に用いることが好ましい。特に好ましいものは三層タイプ、すなわち、三つの蛍光層を有し、そのうち少なくとも一層は少なくとも一つの式 (I) または (II) の化合物を含有することが好ましく、また、これら三つの蛍光層は青色、緑色、オレンジ色もしくは赤色発光することが好ましい (基本構造は、例えば、WO 2005/011013を参照のこと)。ここで注意すべきことは、白色発光を得るためには、カラー発光する複数の発光体化合物を使用する代わりに、個々に広い波長領域で発光する発光体化合物を用いることもまた有効な場合があることである。本発明による化合物は、択一的および/または付加的に、このタイプの有機ELデバイス中の正孔輸送層もしくは他の層に含有されていてもよい。

20

【0096】

本発明による化合物は、発光体化合物、特に、青色発光発光体化合物のマトリックス材料として、あるいは、発光体化合物、特に、青色発光発光体化合物として用いるのに特に適している。

30

【0097】

蛍光発光体化合物のマトリックス材料としての用途が好ましい。

【0098】

しかしながら、本発明による化合物は、熱活性化遅延蛍光 (TADF) を示す発光体化合物のマトリックス材料として用いることもできる。TADFの発光機構の基本原理はH. Uoyama et al., Nature 2012, 492, 234に開示されている。

40

【0099】

本発明による化合物をマトリックス材料として用いる際は、当業者に公知の任意の発光化合物と組み合わせることができる。以下に示した好ましい発光化合物、特に、以下に示した好ましい蛍光発光化合物と組み合わせて用いることが好ましい。

【0100】

有機ELデバイスの発光層が、発光化合物とマトリックス化合物の混合物からなる場合には、以下のことが言える。すなわち、発光層の混合物における発光化合物の割合は、0.1から50.0%が好ましく、0.5から20.0%がより好ましく、1.0から10.0%が特に好ましい。それに対応して、マトリックス材料の割合は、50.0から99.9%が好ましく、80.0から99.5%がより好ましく、90.0から99.0%が特に

50

好ましい。

【0101】

なお、本出願において内容量を示す際に用いる%単位の割合は、気相の化合物に使用する場合は平均体積%を意味し、溶液の化合物に使用する場合は平均重量%を意味する。

【0102】

本発明による化合物を発光層の発光化合物として用いる際は、一つまたは複数のマトリクス材料と組み合わせて用いることが好ましい。発光化合物とマトリクス材料との好ましい割合は上記した通りである。

【0103】

本発明による化合物は、さらにまた、電子輸送層、正孔ブロック層あるいは電子注入層内の電子輸送化合物として用いることもできる。この目的のためには、本発明による化合物は、例えば、トリアジン、ピリミジン、ベンズイミダゾールなどの電子不足ヘテロアリアル基から選ばれる一つまたは複数の置換基を有することが好ましい。

【0104】

本発明による有機ELデバイスに用いる、それぞれの機能材料として一般的に好ましいものを以下に述べる。

【0105】

燐光発光化合物として好適なものは、適切な励起によって、好ましくは可視領域に発光し、さらに、原子番号が20超、好ましくは38超84未満、さらに好ましくは56超80未満の原子を少なくとも一つ含む化合物である。燐光発光化合物として用いられる化合物は、銅、モリブデン、タングステン、レニウム、ルテニウム、オスmium、ロジウム、イリジウム、パラジウム、白金、銀、金、またはユーロピウムを含むことが好ましく、特に、イリジウム、白金、または銅を含むことが好ましい、

【0106】

なお、本発明においては、発光性のイリジウム、白金または銅錯体も燐光化合物とみなすこととする。

【0107】

上記の燐光発光化合物の例は、WO2000/70655、WO2001/41512、WO2002/02714、WO2002/15645、EP1191613、EP1191612、EP1191614、WO2005/033244、WO2005/019373、およびUS2005/0258742などの出願に開示されている。従来、一般に燐光有機ELデバイスに用いられてきた、有機ELデバイス分野の当業者には公知であるような燐光化合物は、すべて本発明によるデバイスに好適に用いられる。さらに、当業者であれば、さらなる燐光錯体を本発明による化合物と組み合わせて有機ELデバイスに用いることは、特段の進歩性を必要とせず可能である。

【0108】

本発明による化合物以外の好ましい蛍光発光体はアリアルアミン類から選ばれる。本発明におけるアリアルアミンとは、窒素に直接結合している置換もしくは無置換の芳香環系またはヘテロ芳香環系を三つ含む化合物を意味する。これら三つの置換もしくは無置換の芳香環系またはヘテロ芳香環系のうち、少なくとも一つは縮合環系であることが好ましく、芳香環原子数が少なくとも14である縮合環系であることが特に好ましい。これらの好ましい例としては、芳香族アントラセンアミン類、芳香族アントラセンジアミン類、芳香族ピレンアミン類、芳香族ピレンジアミン類、芳香族クリセンアミン類、芳香族クリセンジアミン類などが挙げられる。芳香族アントラセンアミンとは、アントラセン基の、好ましくは9位に一つのジアリアルアミノ基が直接結合している化合物を意味する。また、芳香族アントラセンジアミンとは、アントラセン基の、好ましくは9、10位に二つのジアリアルアミノ基が直接結合している化合物を意味する。芳香族ピレンアミン類、ピレンジアミン類、クリセンアミン類およびクリセンジアミン類もこれと同様であり、例えば、ジアリアルアミノ基がピレンの、好ましくは1位または1、6位に結合している化合物である。さらに好ましい発光体は、例えば、WO2006/108497あるいはWO200

10

20

30

40

50

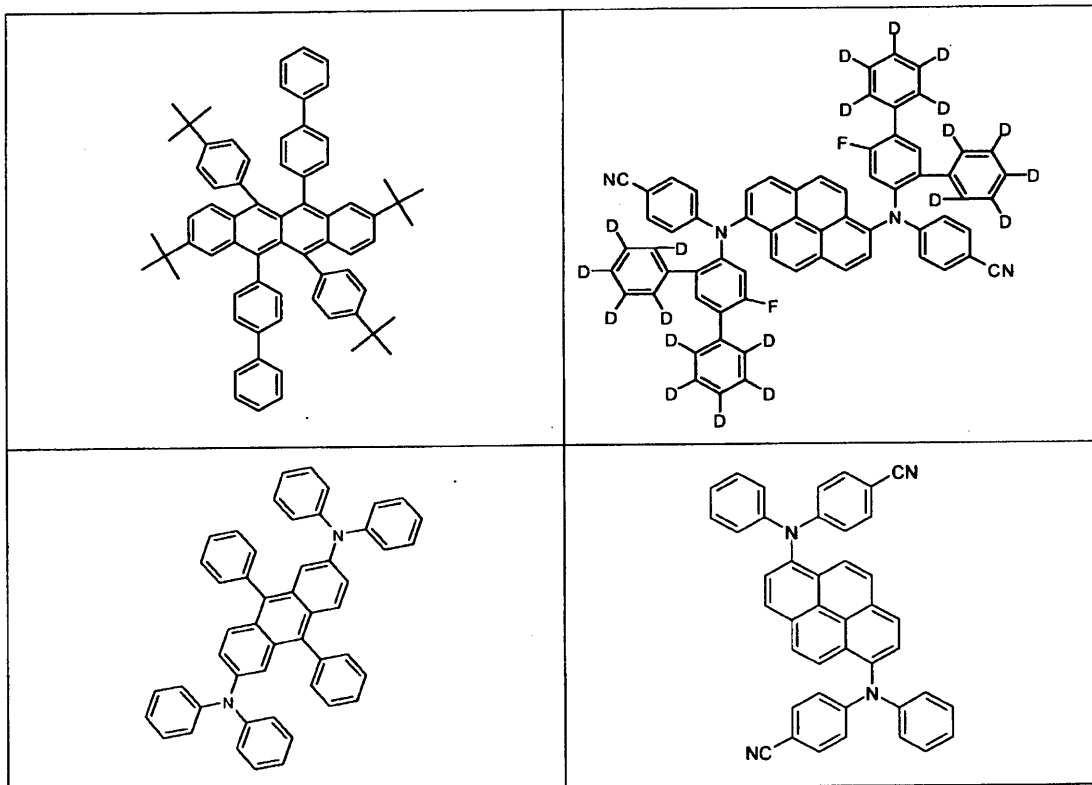
6 / 1 2 2 6 3 0 によるインデノフルオレンアミン類またはインデノフルオレンジアミン類；例えば、WO 2 0 0 8 / 0 0 6 4 4 9 によるベンゾインデノフルオレンアミン類またはベンゾインデノフルオレンジアミン類；例えば、WO 2 0 0 7 / 1 4 0 8 4 7 によるジベンゾインデノフルオレンアミン類またはジベンゾインデノフルオレンジアミン類；および、WO 2 0 1 0 / 0 1 2 3 2 8 に開示されている縮合アリール基を有するインデノフルオレン誘導体などである。同様に好ましいものとしては、WO 2 0 1 2 / 0 4 8 7 8 0 および WO 2 0 1 3 / 1 8 5 8 7 1 に開示されているピレンアリールアミン類、WO 2 0 1 4 / 0 3 7 0 7 7 に開示されているベンゾインデノフルオレンアミン類、WO 2 0 1 4 / 1 0 6 5 2 2 に開示されているベンゾフルオレンアミン類、WO 2 0 1 4 / 1 1 1 2 6 9 に開示されているインデノフルオレン拡張体類などが挙げられる。

10

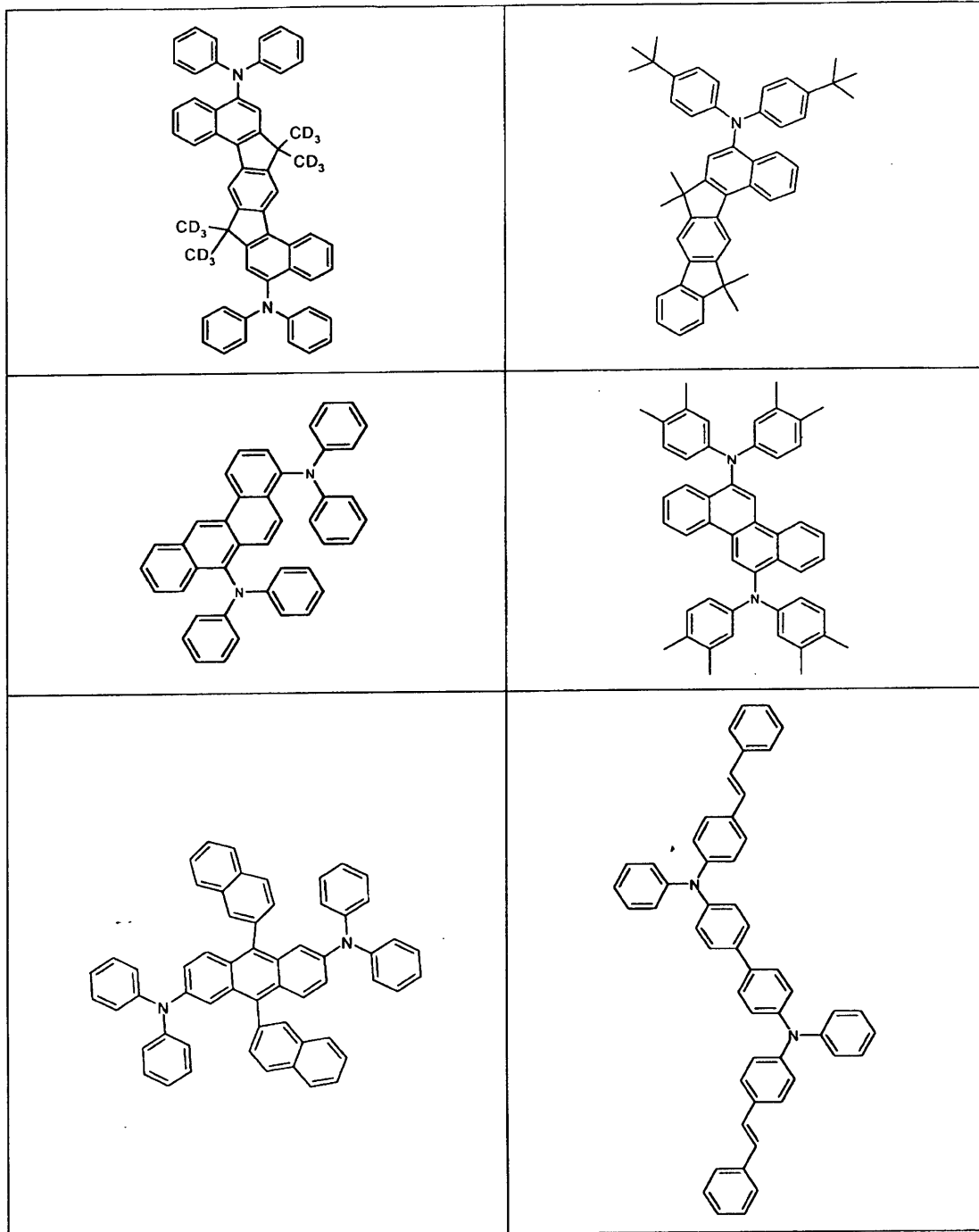
【 0 1 0 9 】

好ましい蛍光発光化合物としては以下のようなものが挙げられる。

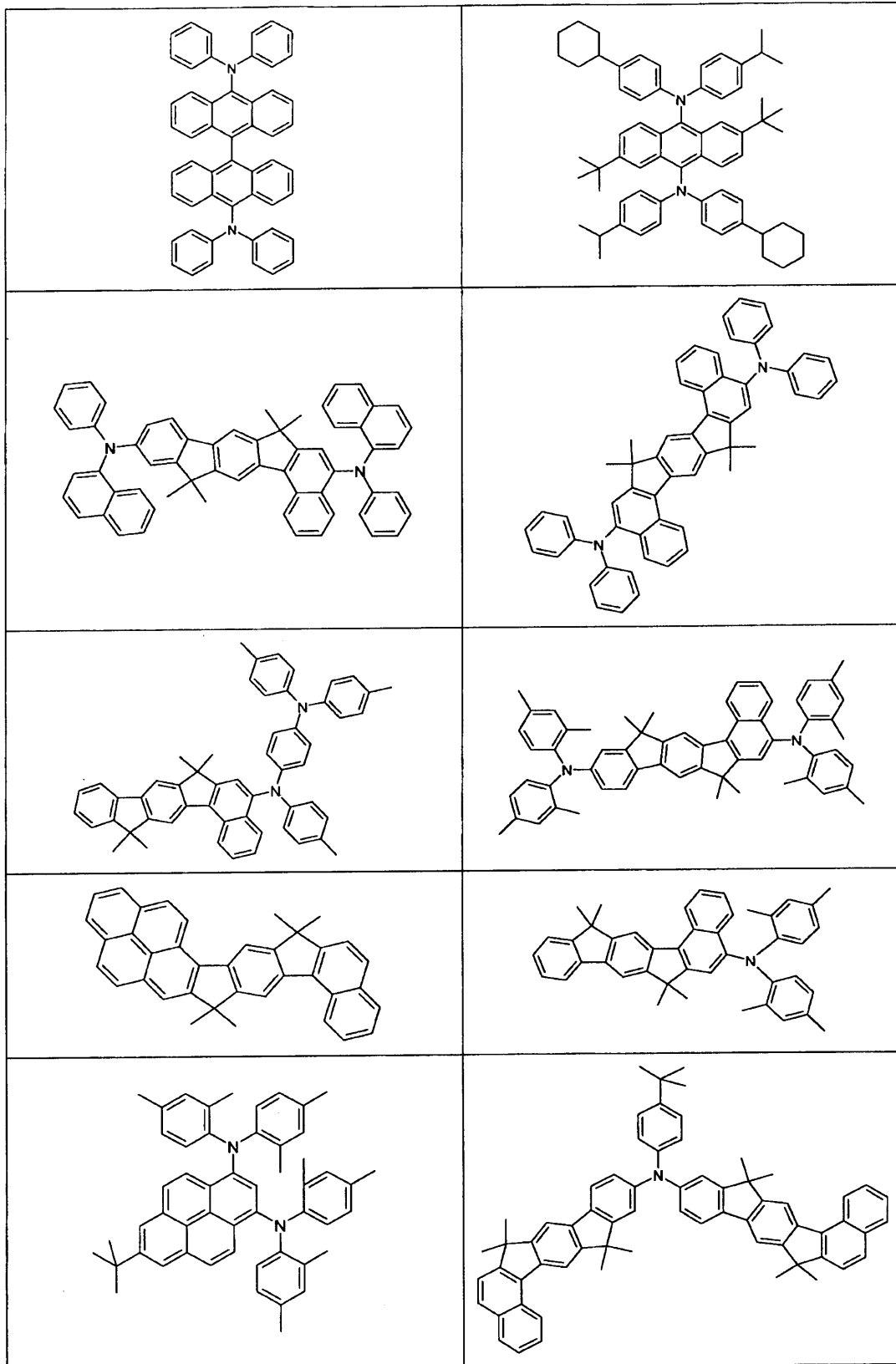
【 化 1 7 - 1 】



【化 17 - 2】



【化 17 - 3】



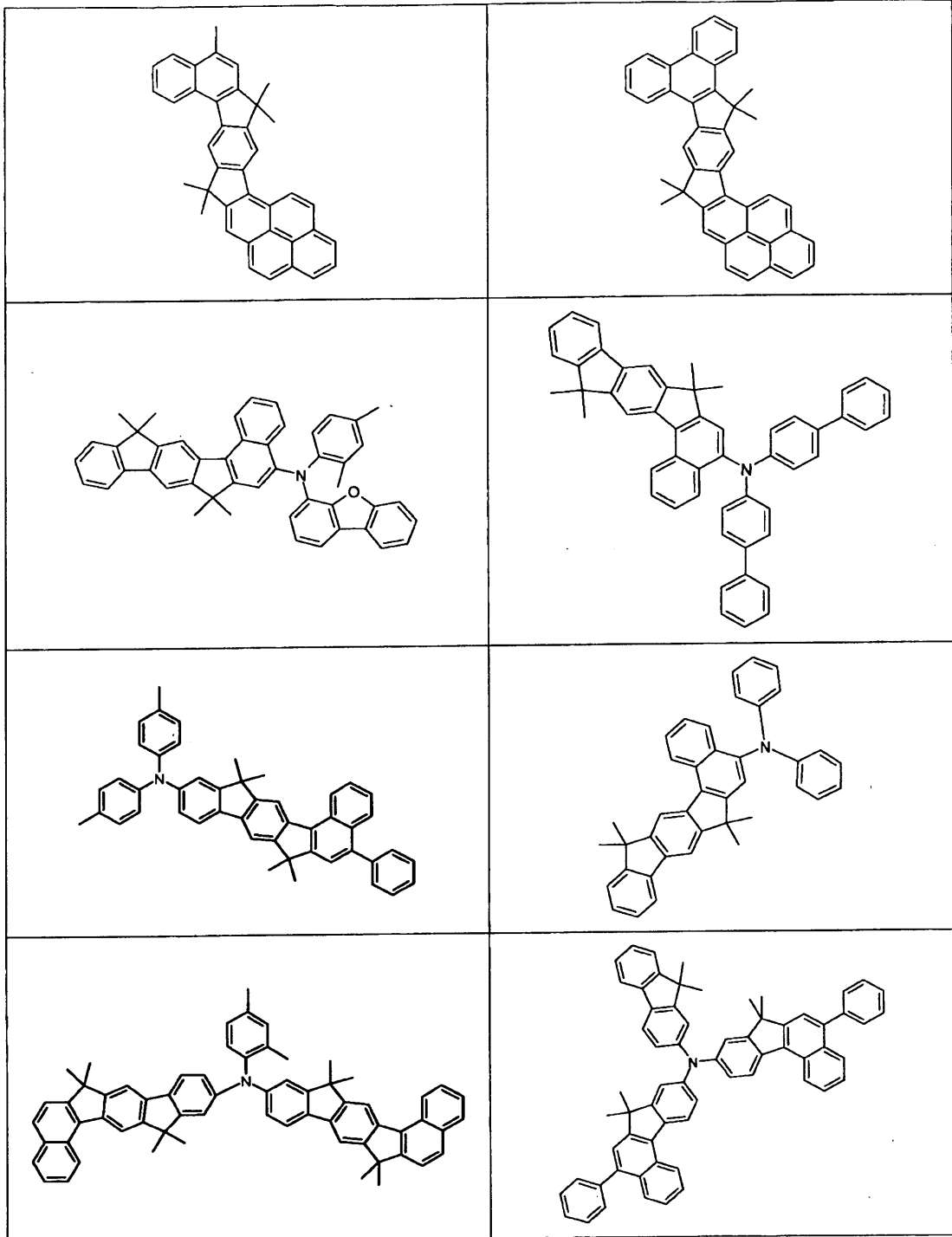
10

20

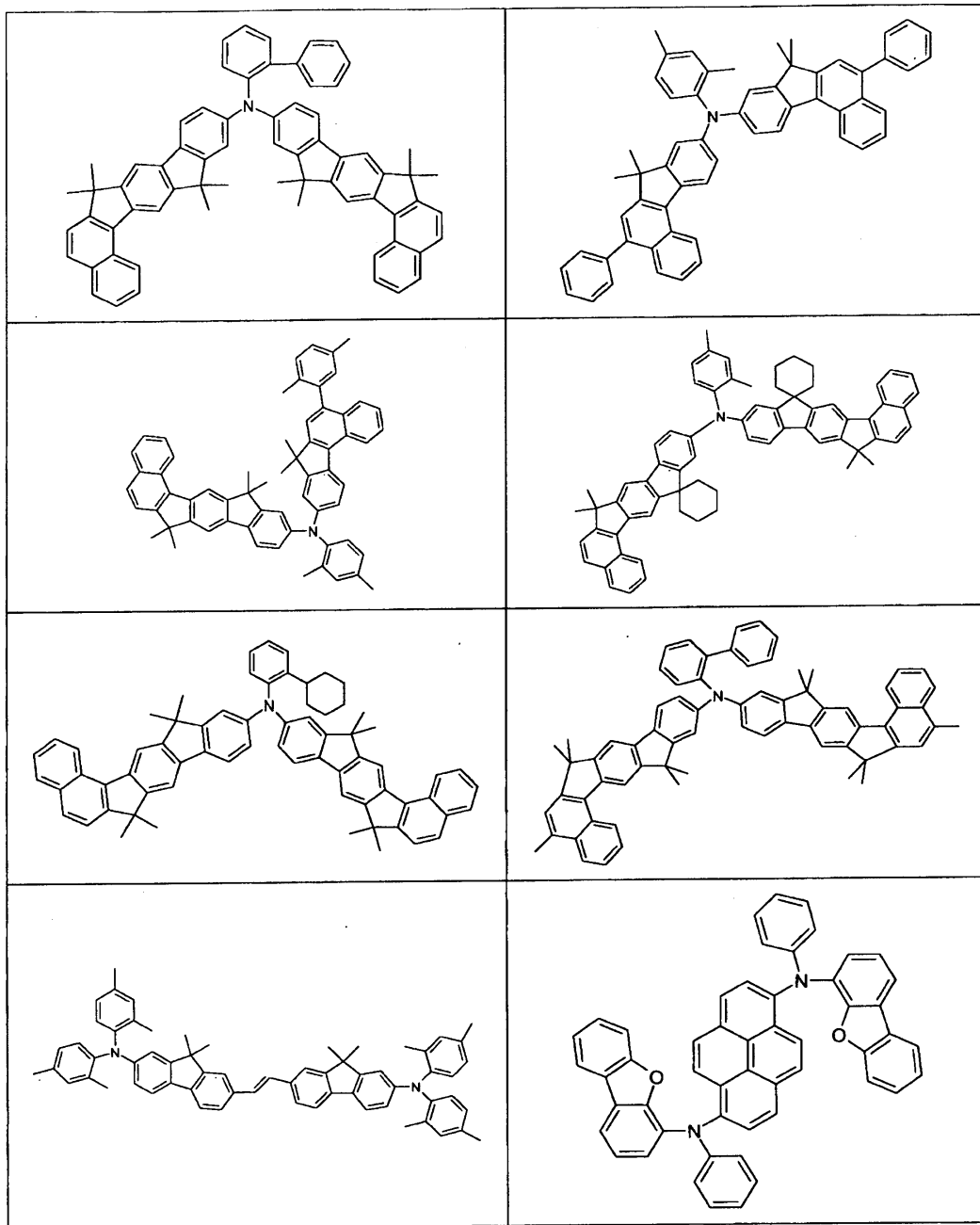
30

40

【化 17 - 4】



【化 17 - 5】

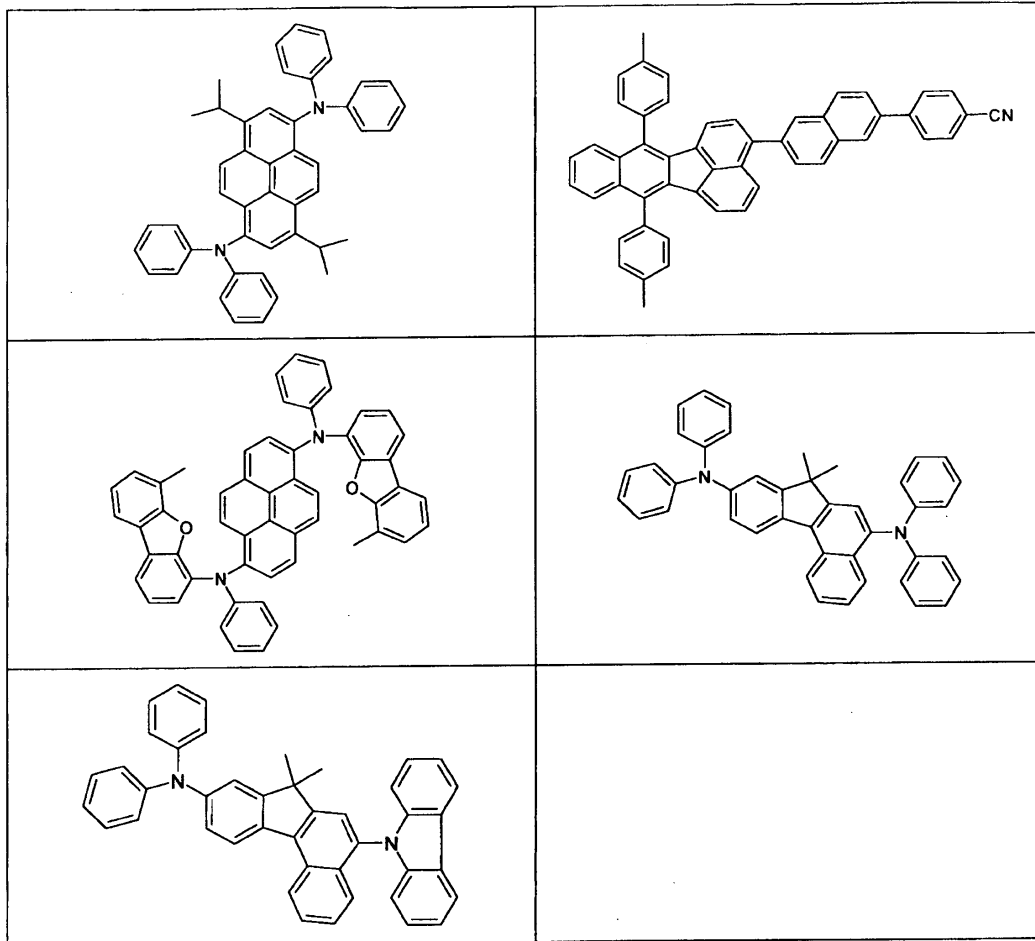


10

20

30

【化17-6】



【0110】

燐光発光化合物のマトリックス材料としては、芳香族アミン類、特に、例えば、US 2005/0069729によるトリアリールアミン類；WO 2005/039246、US 2005/0069729、JP 2004/288381、EP 1205527あるいはWO 2008/086851によるカルバゾール誘導体（例えば、CBP、N,N-ビス-カルバゾイルピフェニル）または化合物；例えば、WO 2011/088877、WO 2011/1280127による架橋カルバゾール誘導体；例えば、WO 2010/136109、WO 2011/000455によるインデノカルバゾール誘導体；例えば、EP 1617710、EP 1617711、EP 1731584、JP 2005/347160によるアザカルバゾール誘導体；例えば、WO 2007/063754あるいはWO 2008/056746によるインドロカルバゾール誘導体；例えば、WO 2004/093207あるいはWO 2010/006680によるケトン類；例えば、WO 2005/003253によるホスフィンオキシド類、スルホキシド類およびスルホン類；例えば、WO 2007/137725によるオリゴフェニレン類または双極性マトリックス材料；例えば、WO 2005/111172によるシラン類；例えば、WO 2006/1117052によるアザポロールまたはボロン酸エステル；例えば、WO 2010/015306、WO 2007/063754あるいはWO 2008/056746によるトリアジン誘導体；例えば、EP 652273あるいはWO 2009/062578による亜鉛錯体；例えば、WO 2010/054729によるBALqのようなアルミニウム錯体、ジアザシロールおよびテトラアザシロール誘導体；例えば、WO 2010/054730によるジアザホスホール誘導体などが挙げられる。

【0111】

燐光発光化合物と組み合わせて用いるマトリックス材料で、式(I)または(II)の

30

40

50

化合物以外のものとしては、オリゴアリーレン類（例えば、EP676461による2, 2', 7, 7'-テトラフェニルスピロピフルオレンあるいはジナフチルアントラセン）、特に、縮合芳香族基を有するオリゴアリーレン類、オリゴアリーレンビニレン類（例えば、EP676461によるDPVBiまたはスピロDPVBi）、ポリポダル金属錯体（例えば、WO2004/081017による）、正孔伝導性化合物（例えば、WO2004/058911による）、電子伝導性化合物、特に、ケトン類、ホスフィンオキシド類、スルホキシド類など（例えば、WO2005/084081およびWO2005/084082による）、アトロプ異性体（例えば、WO2006/048268による）、ボロン酸誘導体（例えば、WO2006/117052による）、ベンズアントラセン類（例えば、WO2008/145239による）などが挙げられる。好ましいものとしては、ナフタレン、アントラセン、ベンズアントラセンおよび/またはピレン、あるいは、これらのアトロプ異性体を含むオリゴアリーレン類、オリゴアリーレンビニレン類、ケトン類、ホスフィンオキシド類、スルホキシド類などが挙げられる。特に好ましいものは、アントラセン、ベンズアントラセン、ベンゾフェナントレンおよび/またはピレン、あるいは、これらのアトロプ異性体を含むオリゴアリーレン類である。本発明においてオリゴアリーレンとは、少なくとも三つのアリール基もしくはアリーレン基が互いに結合している化合物を意味する。

10

【0112】

本発明による有機ELデバイスの正孔注入層、正孔輸送層、電子ブロック層あるいは電子輸送層に好適に用いられる電荷輸送材料としては、例えば、Y. Shirota et al., Cem. Rev. 2007, 107(4), 953-1010に記載の化合物、あるいは、従来技術においてこれらの層に用いられている他の材料が挙げられる。

20

【0113】

本発明によるELデバイスの正孔輸送層、正孔注入層あるいは電子ブロック層に好適に用いられる正孔輸送材料で、式(I)または(II)の化合物以外のものとしては、インデノフルオレンアミン誘導体（例えば、WO06/122630あるいはWO06/100896による）、EP16618888に開示されているアミン誘導体、ヘキサザトリフェニレン誘導体（例えば、WO01/049806による）、縮合芳香環を有するアミン誘導体（例えば、US5061569による）、WO95/09147に開示されているアミン誘導体、モノベンゾインデノフルオレンアミン類（例えば、WO08/006449による）、ジベンゾインデノフルオレンアミン類（例えば、WO07/140847による）、スピロピフルオレンアミン類（例えば、WO2012/034627あるいはWO2013/120577による）、フルオレンアミン類（例えば、WO2014/015937、WO2014/015938およびWO2014/015935による）、スピロジベンゾピランアミン類（例えば、WO2013/083216による）、ジヒドロアクリジン誘導体（例えば、WO2012/150001による）などが挙げられる。

30

【0114】

有機ELデバイスのカソードは、低い仕事関数の金属あるいは合金からなるか、あるいは、例えば、アルカリ土類金属、アルカリ金属、典型金属、もしくはランタノイド（例、Ca、Ba、Mg、Al、In、Mg、Yb、Smなど）といった様々な金属からなる重層構造を有していることが好ましい。さらに、アルカリ金属あるいはアルカリ土類金属と銀からなる合金、例えば、マグネシウムと銀からなる合金も好適に用いられる。重層構造の場合、例えば、AgあるいはAlのような比較的高い仕事関数を有する金属も、上記の金属に加えて用いることができる。そのような金属の組み合わせとしては、例えば、Ca/Ag、Mg/AgあるいはAg/Agといった組み合わせが一般的に用いられる。また、金属カソードと有機半導体層の間に、高い誘電率を有する材料の中間層を挿入することも好ましい。このような目的に好適なものとして、例えば、アルカリ金属フッ化物やアルカリ土類金属フッ化物が挙げられるが、これらの金属の酸化物や炭酸塩も有効である（例、LiF、Li₂O、BaF₂、MgO、NaF、CsF、Cs₂CO₃など）。さらに

40

50

また、キノリン酸リチウム (LiQ) もこの目的に利用できる。この層の厚さは好ましくは 0.5 から 5 nm である。

【0115】

アノードは高い仕事関数を有する金属からなることが好ましい。アノードの仕事関数は真空に対して 4.5 eV 超であることが好ましい。この目的のためには、例えば、Ag、Pt あるいは Au などの高い酸化還元電位を有する1価の金属が好ましいが、金属/金属酸化物電極 (例、Al/Ni/NiO_x、Al/PtO_x) が有効な場合もある。用途によっては、有機材料が照らされることを容易にする目的 (有機太陽電池など) や、あるいは、光の放出を容易にする目的 (OLED やレーザーなど) のために。電極の少なくとも一方を透明もしくは半透明にしなければならない。このような場合に好ましいアノード材料は導電性混合金属酸化物である。それらの好ましい例としては、インジウム・スズ酸化物 (ITO) あるいはインジウム・亜鉛酸化物 (IZO) が挙げられる。さらに、導電性ドーブ有機材料も好ましく、導電性ドーブ高分子が特に好ましい。

10

【0116】

デバイスは (用途に応じて) 適切に構成され、接点を設けたのち、最後に封止される。これは水分および/または空気が存在すると本発明によるデバイスの寿命が短くなるためである。

【0117】

本発明による有機 EL デバイスは、一つまたは複数の層が真空昇華によって形成されることが好ましい。すなわち、真空昇華装置内で、初期圧が 10^{-5} mbar 未満、好ましくは 10^{-6} mbar 未満で材料を真空蒸着させることが好ましい。しかしながら、この場合、初期圧をさらに低く、例えば、 10^{-7} mbar にすることも可能である。

20

【0118】

同様に、有機 EL デバイスは、一つまたは複数の層が OVPD (有機気相蒸着) によって形成されることも好ましい。なお、この OVPD 工程ではキャリアガスを用いてもよく、 10^{-5} mbar から 1 bar の圧力のもとで材料を蒸着させる。この工程の特別な場合として、材料を直接ノズルから吹き付けることで層を形成する OVJP (有機蒸気ジェット印刷) 法がある。(例えば、M. S. Arnold et al., Appl. Phys. Lett., 2008, 92, 053301)

【0119】

さらにまた、有機 EL デバイスは、一つまたは複数の層が溶液から、例えば、スピンコーティング、あるいは、スクリーンプリンティング、フレキシグラフィックプリンティング、ノズルプリンティング、オフセットプリンティングなど所望のプリンティング工程によって形成されることも好ましい。ただし、プリンティング工程としては、特に、LIT法 (光誘起熱画像法、熱転写プリンティング) あるいはインクジェットプリンティングが好ましい。

30

【0120】

本発明による有機 EL デバイスを製造する場合、一つまたは複数の層を溶液から、他の一つまたは複数の層を蒸着によって形成することも好ましい。

【0121】

式 (I) または (II) の化合物は良好な溶解性を持つので、一つまたは複数の式 (I) または (II) の化合物を含有する層は溶液から形成することが好ましい。これは有機 EL デバイスの発光層であることが好ましい。

40

【0122】

本発明による一つまたは複数の化合物を含有する電子デバイスは、本発明によって、ディスプレイ装置に利用でき、また、照明用途での光源あるいは、医療および/または美容用途 (例、光治療) での光源としても利用できる。

【実施例】

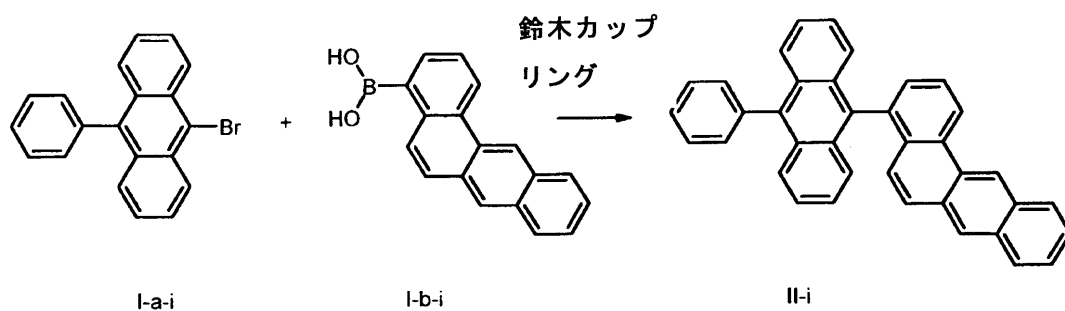
【0123】

A) 合成例

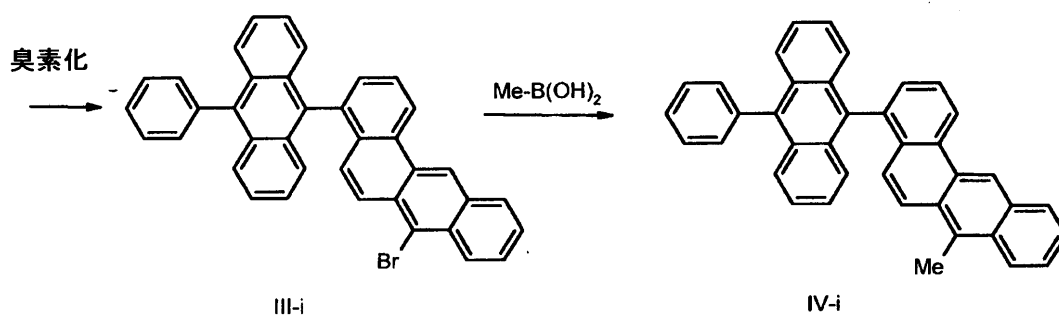
50

下記の合成スキームによって本発明による化合物を調製する。

【化 1 8】



10



20

【 0 1 2 4 】

まず、ベンズアントラセン - ボロン酸誘導体 I - b と臭化アリール I - a から鈴木カップリングによってベンズアントラセン - アリール化合物 I I を合成して（工程 1）、次に、この化合物を臭素化してプロモベンズアントラセン化合物 I I I にする（工程 2）。最後に工程 3 で、鈴木カップリングによって臭素の位置に置換基を導入して本発明による化合物 I V を得る。

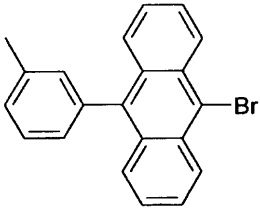
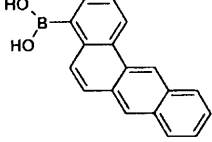
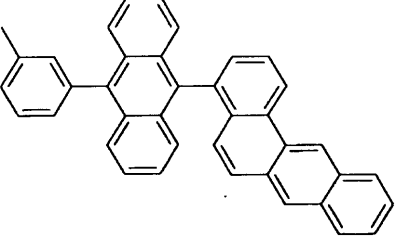
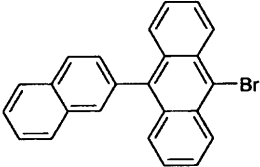
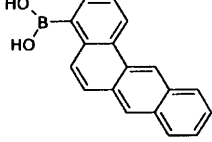
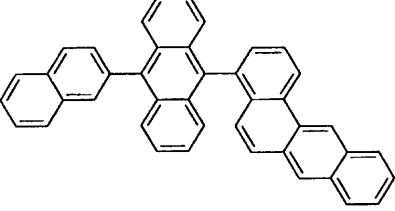
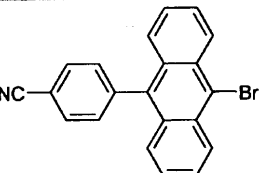
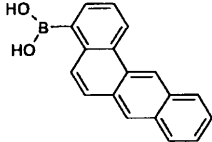
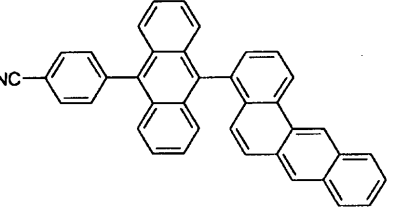
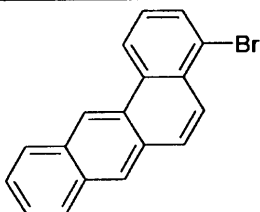
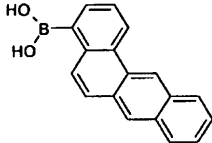
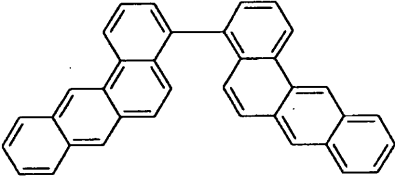
【 0 1 2 5 】

30

工程 1

WO 2008 / 145239 の実施例 8 に従って、4 - (10 - フェニルアントラセン - 9 - イル) ベンゾ [a] アントラセン I I - i を調製する。同様にして、下記の化合物も調製する。

【化19】

出発原料 I-a	出発原料 I-b	生成物 II	収率
			67%
			59%
			52%
			72%

10

20

30

【0126】

工程2

7-プロモ-4-(10-フェニルアントラセン-9-イル)ベンゾ[a]アントラセン
III-i

テトラヒドロフラン1Lを4-(10-フェニルアントラセン-9-イル)ベンゾ[a]アントラセンIII-i(50g、104.0mmol)、n-プロモスクシンイミド(24.02g、135mmol)および過酸化ベンゾイル(25%の水を含む)(12.7mL、20.8mmol)に加える。これを一晩、加熱還流したのち室温まで冷やしてから、800mLのクロロホルムと500mLの10%チオ硫酸ナトリウム溶液を加える。相分離したら、水相をクロロホルムで何度も抽出する。抽出液を有機相と合わせて、蒸留水で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥させたら、酸化アルミニウムを通してろ過する。この有機相を蒸留し、残渣をクロロベンゼンによって沈殿させ、ヘプタンから再結晶して、化合物III-iを淡黄色の固体で得る(58.2g、理論値の87%)。

40

【0127】

臭素源として、NBS/HBrあるいは臭素(触媒用)を代わりに利用することもできる。過臭素化を防ぐために、反応は低温(例えば、-10)で行った。

【0128】

同様に、下記の化合物も調製する。

【化20-1】

出発原料 II	生成物 III	収率
		53%
		64%
		68%

10

20

【化20-2】

		64%
--	--	-----

30

【0129】

工程3

7-メチル-4-(10-フェニルアントラセン-9-イル)ベンゾ[a]アントラセン IV-i

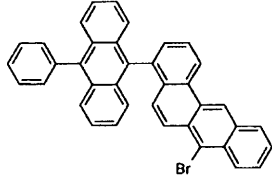
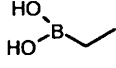
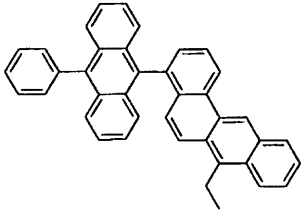
5.47 g (97%、88.6 mmol) のメチルボロン酸、25 g (44.3 mmol) の7-プロモ-4-(10-フェニルアントラセン-9-イル)ベンゾ[a]アントラセン III-i および 20.4 g (88.6 mmol) の $K_3PO_4 \cdot H_2O$ を 500 mL のトルエンに懸濁させる。この懸濁液に 1.09 g (2.66 mmol) のジシクロヘキシル(2',6'-ジメトキシビフェニル-2-イル)ホスフィン (S-Phos) と 0.3 g (1.33 mmol) の酢酸パラジウムを加え、16時間加熱還流する。反応混合物を冷却した後、水で希釈し、有機相を分離して 100 mL の水で3回洗浄してから蒸発乾固する。粗生成物をトルエンでシリカゲルを通し、残った残渣をトルエン/ヘプタンから再結晶させる。収量は 17.3 g (理論値の79%) である。

40

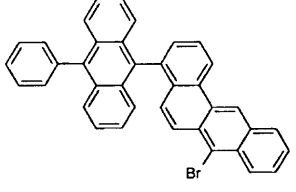
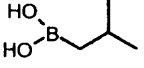
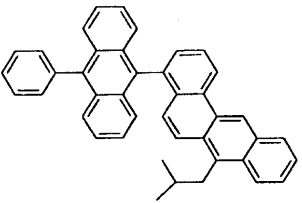
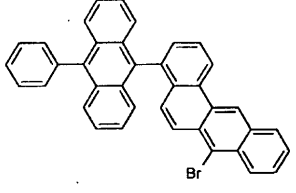
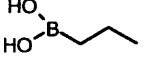
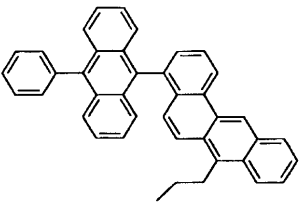
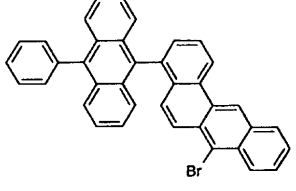
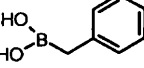
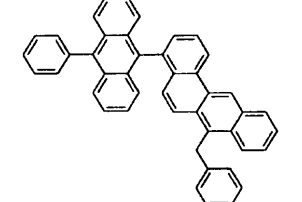
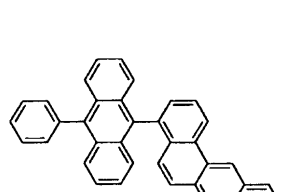
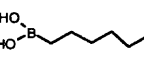
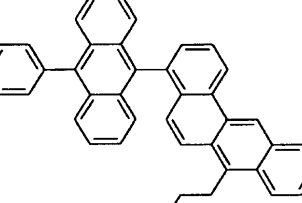
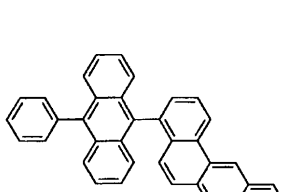
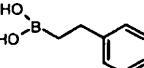
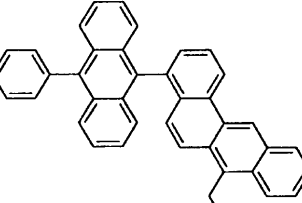
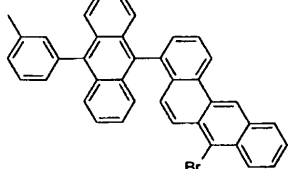
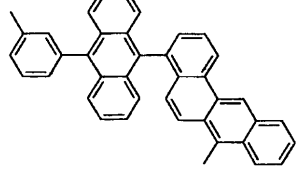
【0130】

同様にして、下記の本発明による化合物 IV も調製する。

【化 2 1 - 1】

番号	出発原料 III	ボロン酸またはボロン酸エステル	生成物 IV	収率
1				64%

【化 2 1 - 2】

2				76%
3				69%
4				58%
5				47%
6				65%
7		Me-B(OH) ₂		59%

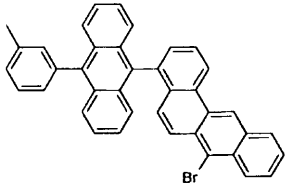
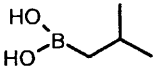
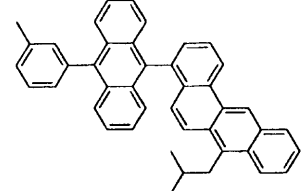
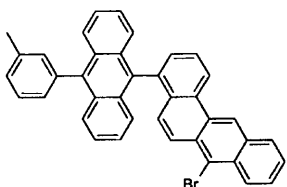
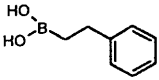
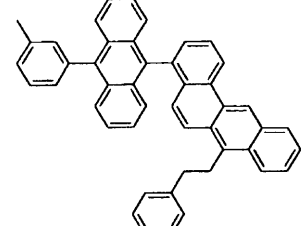
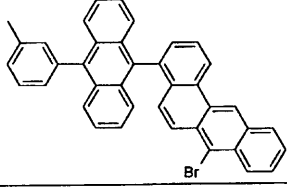
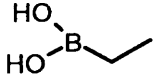
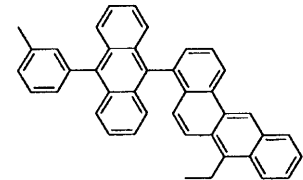
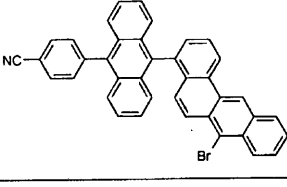
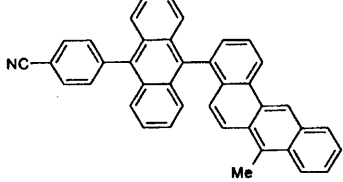
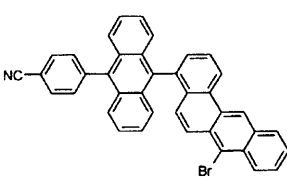
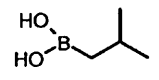
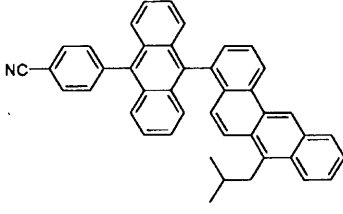
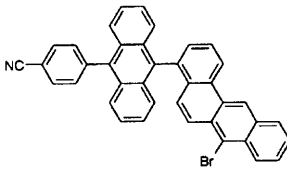
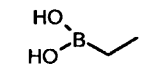
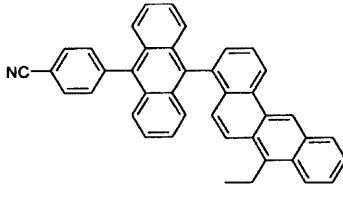
10

20

30

40

【化 2 1 - 3】

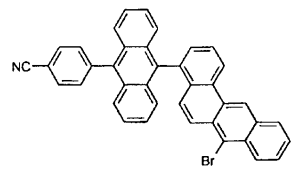
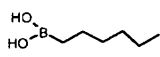
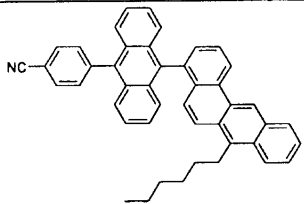
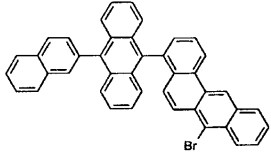
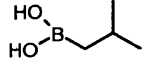
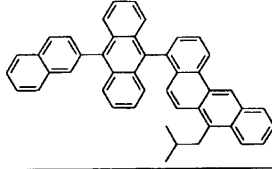
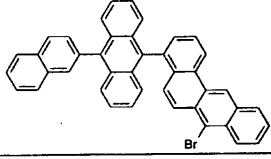
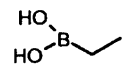
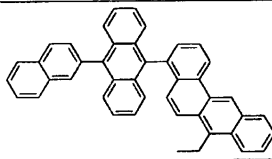
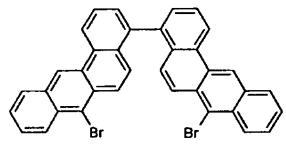
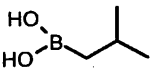
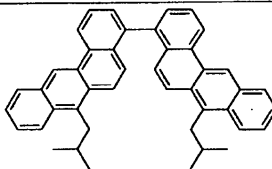
8				62%
9				72%
10				74%
11		Me-B(OH) ₂		52%
12				38%
13				47%

10

20

30

【化 2 1 - 4】

14				43%
15				76%
16				68%
17				73%

10

20

【 0 1 3 1】

B) デバイス例

B - 1) 気相からのデバイス製作例：OLEDの作成

本発明によるOLEDと従来技術によるOLEDを、WO04/058911による常法によって作成する。なお、ここで記載する種々の条件(層厚変化、材料など)にも、このWO04/058911を適用する。

【 0 1 3 2】

使用する基板は、厚さ50nmの構造ITO(酸化インジウム・スズ)で被覆されたガラス基板である。スピンドコーティングにより、層厚20nmのクレヴィオスPVP・A14083(商品名、ヘレウス・クレヴィオス社、レパークーゼン)の層を設けて、バッファ層とする。残りのすべての層は、真空チャンバー内で熱蒸着によって成膜する。

30

【 0 1 3 3】

用いられる構造Aは、以下の通りである。すなわち

- 基板、
- ITO(50nm)、
- バッファ層(20nm)、
- 正孔注入層(HTL1:95%、HIL:5%)(20nm)、
- 正孔輸送層(HTL1)(20nm)、
- 発光層(ホスト:95%、ドーパント:5%)(20nm)、
- 電子輸送層(ETL:50%+EIL:50%)(30nm)、
- 電子注入層(EIL)(3nm)、
- カソード(A1)(100nm)。

40

用いる材料は表1に示す通りである。

【 0 1 3 4】

発光層(EML)は、常に、少なくとも一つのマトリックス材料(ホストH)と発光ドーパント(ドーパントD)で構成されていて、ドーパントは共蒸着によって一定の体積比でマトリックス材料と混合されている。ここでのH-1:D1(95%:5%)との表記は、H-1材料が体積比95%、D1が体積比5%であることを意味している。

【 0 1 3 5】

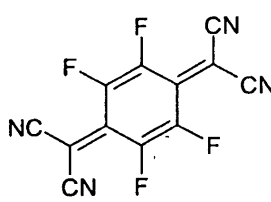
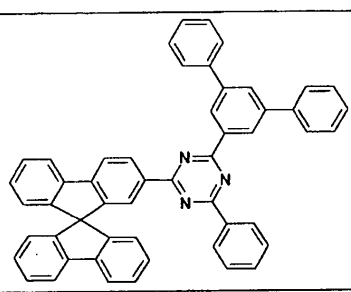
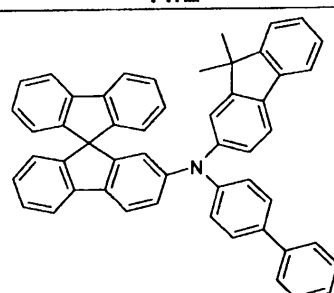
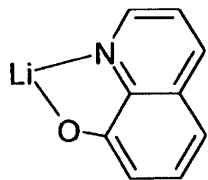
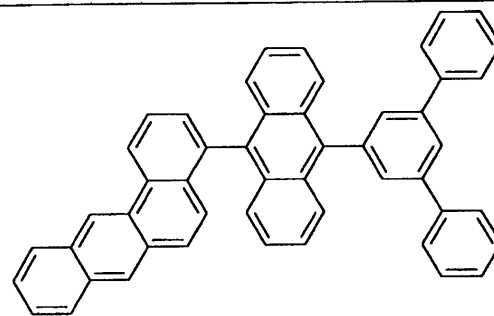
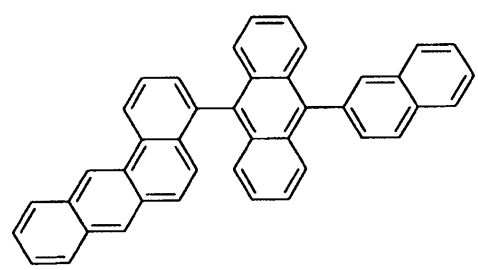
50

OLEDの特性は常法によって定める。すなわち、電界発光スペクトルを記録し、電流効率(c d / A単位で測定)および外部量子効率(EQE, %単位で測定)は、ランバート発光特性を仮定して、光度の関数として電流/電圧/光度特性曲線(IUL特性曲線)から算出して、最後に動作寿命を測定する。電界発光スペクトルは光度1000 cd / m²で記録し、そこからCIE1931x、y色座標を算出する。また、EQE@1000 cd / m²とは、作動光度1000 cd / m²での外部量子効率を意味する。さらに、寿命LT95@1000 cd / m²とは、初期輝度1000 cd / m²から5%低下するまでに経過する時間である。様々なOLEDについての値を表2にまとめた。

【0136】

本発明による化合物は、青色蛍光OLEDのマトリックス材料として特に好適である(実施例V1からV5、E6からE11参照)。比較用としては、それぞれ暗青色の蛍光を発するドーパントD1、D2およびD3を含有する2種の標準的なマトリックス材料VH-1、VH-2を用いる。母体H-1、H-2は本発明による化合物として示した。これらはドーパントD1、D2およびD3の一つと組み合わせて同様に用いる。

【表1-1】

表1：使用した素材の構造	
	
HIL	ETL
	
HTL1	EIL
	
VH-1	VH-2

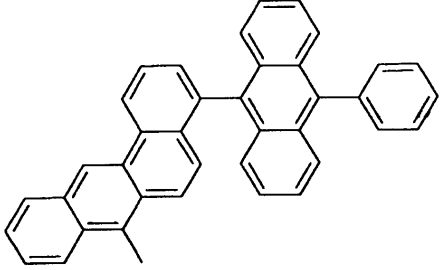
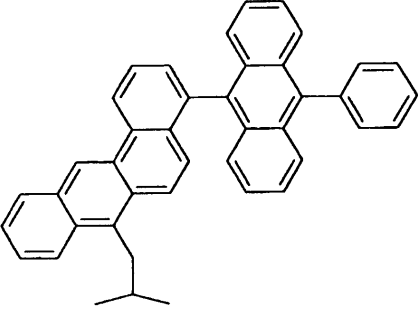
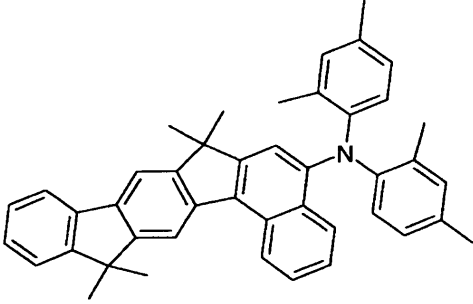
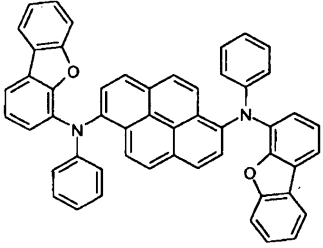
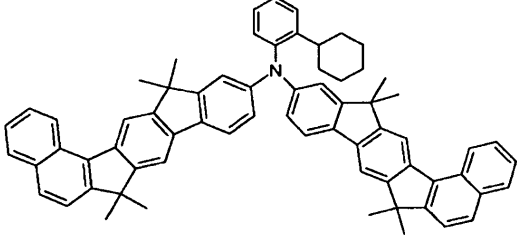
10

20

30

40

【表 1 - 2】

	
	H-1
	
H-2	D1
	
D2	D3

10

20

30

【表 2】

表2: OLEDのデータ

例	ホスト	ドーパント	EQE@ 1000cd/m ²	LT95@ 1000cd/m ²	CIE	
					x	y
	95%	5%	%	[h]		
V1	VH-1	D1	8.0	90	0.136	0.145
V2	VH-1	D2	7.5	100	0.134	0.101
V3	VH-1	D3	6.6	10	0.142	0.086
V4	VH-2	D1	7.9	100	0.135	0.160
V5	VH-2	D3	6.9	30	0.144	0.082
E6	H-1	D1	8.3	150	0.134	0.147
E7	H-1	D2	8.6	170	0.145	0.099
E8	H-1	D3	7.0	110	0.144	0.084
E9	H-2	D1	8.2	140	0.137	0.141
E10	H-2	D2	8.5	150	0.145	0.093
E11	H-2	D3	6.8	90	0.148	0.076

10

20

【0137】

比較例 V1 から V5 と比べることで、実施例 E6 から E11 より、本発明による化合物 H-1、H-2 が比較例材料 VH-1、VH-2 と同等の深青色発光をしながらも、外部量子効率 (EQE) を改善し、寿命 (LT95) を向上させることが分かる。

【0138】

B-2) 溶液からの成膜によるデバイス製作例: OLEDの作成

溶液からの OLED の製造法は、例えば、WO2004/037887、WO2010/097155 などの文献におおむね記載されている。下記の実施例においては、二つの製造法 (気相からの成膜と溶液からの成膜) を組み合わせて、発光層を形成するまでは溶液から成膜を行い、その他の層 (正孔ブロック層、電子輸送層) は真空蒸着によって形成した。なお、ここで記載する種々の条件 (層厚変化、材料など) にも、上記した一般的な方法を適用し、下記のように組み合わせて用いる。

30

【0139】

ここで用いられる構造 B は、以下の通りである。すなわち

- 基板、
- ITO (50 nm)、
- PEDOT (20 nm)、
- 正孔輸送層 (HTL2) (20 nm)、
- 発光層 (ホスト: 92%、ドーパント: 8%) (60 nm)、
- 電子輸送層 (ETL: 50% + EIL: 50%) (20 nm)、
- カソード (Al)。

40

【0140】

使用する基板は、厚さ 50 nm の構造 ITO (酸化インジウム・スズ) で被覆されたガラス基板である。良好な成膜のために、さらにクレヴィオス PVP-A14083 (商品名、ヘレウス・クレヴィオス社、レパークーゼン) で被覆して、バッファ層 (PEDOT) 層とする。空気中で水からスピンコーティングしたら、180 °C で 10 分間加熱して乾燥して成膜する。正孔輸送層、発光層も同様に成膜する。正孔輸送層は、WO2010/097155 に従って合成された表 3 に示した構造のポリマーである。このポリマーはトルエンに溶解、ここでの溶液の固体含量は、スピンコーティングによって形成されるデバ

50

イス内の層厚として一般的な20 nmの場合、約5 g/L程度である。成膜は不活性ガス雰囲気下、本実施例においてはアルゴン雰囲気下でスピニングによって行い、180 で60分間加熱して乾燥する。

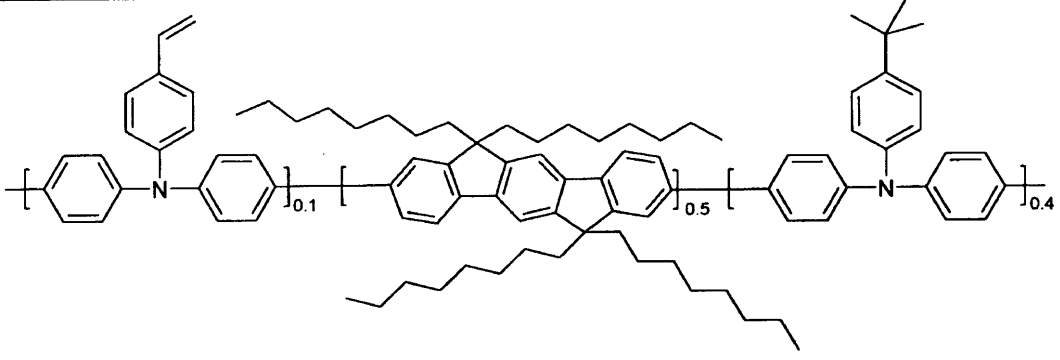
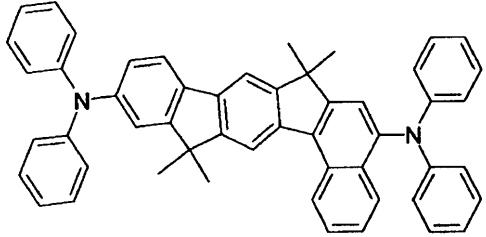
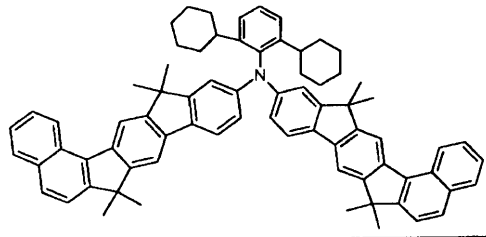
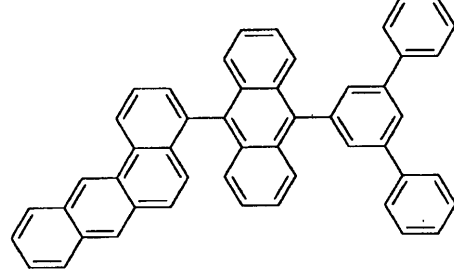
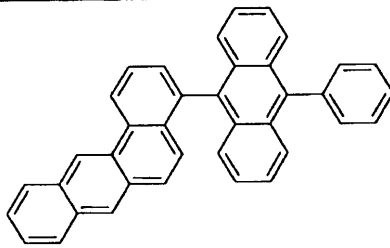
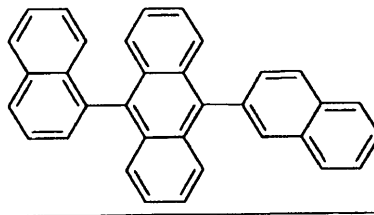
【0141】

発光層は、常に、少なくとも一つのマトリクス材料（ホスト材料）と発光ドーパント（発光体）で構成されている。ここでのH-1：D1（92%：8%）との表記は、H-1材料が体積比92%、D1が体積比8%で発光層に存在していることを意味している。発光層用の混合物はトルエンに溶解させる。そのような溶液の固体含量は、スピニングによって形成されるデバイス内の層厚として一般的な60 nmの場合、約18 g/L程度である。成膜は不活性ガス雰囲気下、本実施例においてはアルゴン雰囲気下でスピニングによって行い、140 で10分間加熱して乾燥する。用いる材料を表3に示す。

【0142】

電子輸送層およびカソードは真空チャンバー内で熱蒸着によって成膜する。例えば、電子輸送層は複数の材料を共蒸着によって一定の体積比で混合して形成してもよい。ここでのETM：EIL（50%：50%）との表記されているのは、ETM材料とEIL材料が体積比50%ずつで層内に存在していることを意味している。本実施例で使用した材料を表1に示す。

【表 3 - 1】

表 3 : 使用した素材の構造	
	
HIL2	
	
D4	
	
D5	VH-1
	
VH-3	VH-4

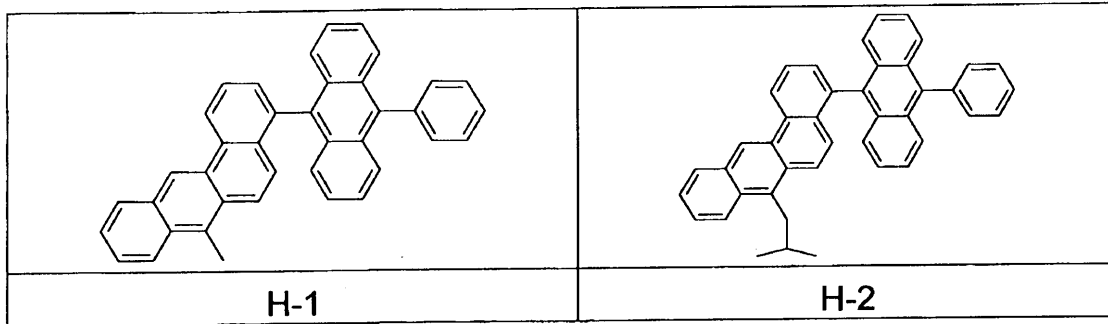
10

20

30

40

【表 3 - 2】



10

【表 4】

表4: OLEDのデータ

例	ホスト	ドーパント	EQE@ 1000 cd/ m ²	LT80@ 10 mA/m ²	CIE		Solubility g/L	T _g °C
					x	y		
	92%	8%	%	[h]	x	y	g/L	°C
V6	VH-1	D4	4.8	200	0.142	0.211	70	175
V7	VH-1	D5	3.2	40	0.142	0.111	70	175
V8	VH-3	D4/D5	x	x	x	x	<1	148
V9	VH-4	D4	4.8	210	0.136	0.195	44	125
V10	VH-4	D5	3.4	50	0.145	0.119	44	125
E11	H-1	D4	5.0	280	0.137	0.201	40	152
E12	H-1	D5	3.6	80	0.147	0.125	40	152
E13	H-2	D4	4.8	300	0.135	0.197	45	143
E14	H-2	D5	3.5	90	0.146	0.120	45	143

20

【0143】

表4に示した実施例は、ドーパントD4およびD5に対するホスト化合物としての本発明による化合物H-1およびH-2を示している。比較として、同様に、ドーパントD4およびD5と組み合わせる従来技術による化合物VH-1、VH-3およびVH-4も示している。

30

【0144】

表4の結果は、外部量子効率の向上ばかりでなく、VH-1、VH-4のいずれと比べても、深青色発光において寿命を向上できることを示している。参考材料のVH-3は溶解性が低いため、溶液から成膜することができない(実施例V8; xは測定不能を意味する)。従って、本発明のデバイスは、優れた性能を有するだけでなく、蒸着に限らず、溶液からの成膜にも好適である。

40

フロントページの続き

(51)Int.Cl.		F I		
H 0 1 L	51/50	(2006.01)	H 0 5 B	33/14 B
H 0 1 L	51/46	(2006.01)	H 0 1 L	31/04 1 5 4 A
H 0 1 L	29/786	(2006.01)	H 0 1 L	29/78 6 1 8 B

(74)代理人 100187159

弁理士 前川 英明

(72)発明者 ホルガー、ハイル

ドイツ連邦共和国フランクフルト、アム、マイン、ハルガルテンシュトラッセ、6 1

(72)発明者 ララ - イザベル、ロドリゲス

ドイツ連邦共和国ダルムシュタット、ペーダゴクシュトラッセ、2

(72)発明者 ベアテ、ブルクハルト

ドイツ連邦共和国ダルムシュタット、ビルヘルム - ロイシュナー - シュトラッセ、1 3

(72)発明者 セバ스티アン、マイヤー

ドイツ連邦共和国アシャッフエンブルク、ミュールシュトラッセ、7

審査官 伊佐地 公美

(56)参考文献 特表2010 - 528070 (JP, A)

中国特許出願公開第101125794 (CN, A)

特開2013 - 087072 (JP, A)

特表2013 - 510104 (JP, A)

国際公開第2010 / 114256 (WO, A2)

CAO, J. et al., Journal of Organic Chemistry, 2011年, Vol. 76, pp. 9329-9337

FU, P. P. et al., Organic Preparations and Procedures International, 1982年, Vol.

14, No. 3, pp. 169-175

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

C 0 7 C 1 5 / 3 8

C 0 7 B

C 0 8 G

C 0 9 K

H 0 1 L

CAplus / REGISTRY (STN)