

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公表特許公報(A)

(11) 特許出願公表番号

特表2017-531628

(P2017-531628A)

(43) 公表日 平成29年10月26日(2017.10.26)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
CO7D 209/86 (2006.01)	CO7D 209/86	3K107
HO1L 51/50 (2006.01)	HO5B 33/22 B	4C037
HO1L 51/05 (2006.01)	HO5B 33/22 D	4C050
HO1L 51/30 (2006.01)	HO5B 33/14 B	4C062
HO1L 51/46 (2006.01)	HO1L 29/28 100A	4C063
審査請求 未請求 予備審査請求 未請求 (全 107 頁) 最終頁に続く		

(21) 出願番号	特願2017-516407 (P2017-516407)	(71) 出願人	597035528
(86) (22) 出願日	平成27年8月27日 (2015. 8. 27)		メルク パテント ゲーエムベーハー
(85) 翻訳文提出日	平成29年5月23日 (2017. 5. 23)		ドイツ国, D-64293 ダルムスタット
(86) 国際出願番号	PCT/EP2015/001750		ド フランクフルター ストラッセ 25
(87) 国際公開番号	W02016/045769		O
(87) 国際公開日	平成28年3月31日 (2016. 3. 31)	(74) 代理人	100108855
(31) 優先権主張番号	14003317.6		弁理士 蔵田 昌俊
(32) 優先日	平成26年9月25日 (2014. 9. 25)	(74) 代理人	100103034
(33) 優先権主張国	欧州特許庁 (EP)		弁理士 野河 信久
		(74) 代理人	100153051
			弁理士 河野 直樹
		(74) 代理人	100179062
			弁理士 井上 正
		(74) 代理人	100189913
			弁理士 鶴飼 健
			最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 ベンゾ [c] クマリン構造をもつヘテロ環化合物

(57) 【要約】

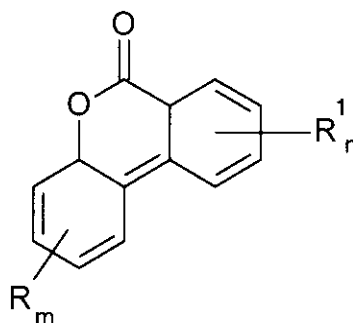
本発明は、ベンゾ[c]クマリン構造をもつヘテロ環化合物と前記化合物を含む電子素子、特に、有機エレクトロルミッセンス素子に関する。

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

式 (I) の構造を含む化合物：

【化 1】



式 (I)

式中、使用される記号には、以下が適用される：

R は、出現毎に、同一であるか異なり、H、D、F、Cl、Br、I、CHO、C(=O)Ar¹、P(=O)(Ar¹)₂、S(=O)Ar¹、S(=O)₂Ar¹、CN、NO₂、Si(R²)₃、B(OR²)₂、OSO₂R²、1~40個の炭素原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基、3~40個の炭素原子を有する分岐あるいは環式アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基（夫々は、1以上のR²基により置換されてよく、1以上の隣接しないCH₂基は、C-C、Si(R²)₂、Ge(R²)₂、Sn(R²)₂、C=O、C=S、C=Se、P(=O)(R²)、SO、SO₂、O、SもしくはCONR²で置き換えられてよく、また、1以上の水素原子は、D、F、Cl、Br、I、CNもしくはNO₂で置き換えられてよい。））、夫々、1以上のR²基で置換されてよい5~40個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、1以上のR²基で置換されてよい5~40個の芳香族環原子を有するアリアルコキシもしくはヘテロアリアルコキシ基またはこれら構造の組み合わせであり；同時に2個以上の隣接するR置換基は、互いに、Rが結合する環と共に、Rが隣接する環と共にまたはR¹基と共に、モノ-あるいはポリ環式の脂肪族もしくは芳香族環構造を形成してもよく；

R¹ は、出現毎に、同一であるか異なり、H、D、F、Cl、Br、I、CHO、C(=O)Ar¹、P(=O)(Ar¹)₂、S(=O)Ar¹、S(=O)₂Ar¹、CN、NO₂、Si(R²)₃、B(OR²)₂、OSO₂R²、1~40個の炭素原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基、3~40個の炭素原子を有する分岐あるいは環式アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基（夫々は、1以上のR²基により置換されてよく、1以上の隣接しないCH₂基は、R²C=CR²、C-C、Si(R²)₂、Ge(R²)₂、Sn(R²)₂、C=O、C=S、C=Se、P(=O)(R²)、SO、SO₂、O、SもしくはCONR²で置き換えられてよく、また、1以上の水素原子は、D、F、Cl、Br、I、CNもしくはNO₂で置き換えられてよい。））、夫々、1以上のR²基で置換されてよい5~40個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、1以上のR²基で置換されてよい5~40個の芳香族環原子を有するアリアルコキシもしくはヘテロアリアルコキシ基またはこれら構造の組み合わせであり；同時に2個以上の隣接するR¹置換基は、互いに、R¹が結合する環と共に、R¹が隣接する環と共にまたはR基と共に、モノ-あるいはポリ環式の脂肪族もしくは芳香族環構造を形成してもよく；

R² は、出現毎に、同一であるか異なり、H、D、F、Cl、Br、I、CHO、C(=O)Ar¹、P(=O)(Ar¹)₂、S(=O)Ar¹、S(=O)₂Ar¹、CN、NO₂、Si(R³)₃、B(OR³)₂、OSO₂R³、1~40個の炭素原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基、3~40個の炭素原子を有する分岐あるいは環式アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基（夫々は、1以上のR³

10

20

30

40

50

基により置換されてよく、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $\text{C}-\text{C}$ 、 $\text{Si}(\text{R}^3)_2$ 、 $\text{Ge}(\text{R}^3)_2$ 、 $\text{Sn}(\text{R}^3)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{Se}$ 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^3)$ 、 SO 、 SO_2 、 O 、 S もしくは CONR^3 で置き換えられてよく、また、1以上の水素原子は、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN もしくは NO_2 で置き換えられてよい。) 、夫々、1以上の R^3 基で置換されてよい5~40個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、1以上の R^3 基で置換されてよい5~40個の芳香族環原子を有するアリーロキシもしくはヘテロアリーロキシ基またはこれら構造の組み合わせであり；同時に2個以上の隣接する R^2 置換基は、互いに、モノ-あるいはポリ環式の脂肪族もしくは芳香族環構造を形成してもよく；

Ar^1 は、出現毎に、同一であるか異なり、1以上の R^2 基で置換されてよい5~30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり；同時に、同じ炭原子に結合する2個の Ar^1 基は、単結合または $\text{B}(\text{R}^3)$ 、 $\text{C}(\text{R}^3)_2$ 、 $\text{Si}(\text{R}^3)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^3$ 、 $\text{C}=\text{C}(\text{R}^3)_2$ 、 O 、 S 、 $\text{S}=\text{O}$ 、 SO_2 、 $\text{N}(\text{R}^3)$ 、 $\text{P}(\text{R}^3)$ および $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^3)$ から選ばれるブリッジにより互いに結合されてよく；

R^3 は、出現毎に、同一であるか異なり、 H 、 D 、 F または1~20個の炭素原子を有する脂肪族、芳香族および/または複素環式芳香族炭化水素基であり、ここで、1以上の水素原子は、 F で置き換えられてよく；同時に、2個以上の隣接する R^3 置換基は、互いに、モノ-あるいはポリ環式の脂肪族もしくは芳香族環構造を形成してもよく；

m 、 n は、夫々、独立して、0、1、2、3または4であり；

ただし、 m と n の合計は、1以上であり；

式(I)中の R および/または R^1 基の少なくとも一つは、少なくとも一つの L 基であり；および

L は、10~40個の炭素原子を有する芳香族基、または6~40個の炭素原子を有する複素環式芳香族基であって、ここで、芳香族基および/または複素環式芳香族基は、少なくとも2個の隣接する芳香族および/または複素環式芳香族基を含み、夫々、縮合または非縮合であってよく、および/または1以上の R^2 基で置換されてよい。

【請求項2】

添え字 m および n の合計は、3以下であることを特徴とする、請求項1記載の化合物。

【請求項3】

式(I)の構造は、1または2個の L 基を有することを特徴とする、請求項1または2記載の化合物。

【請求項4】

式(I)中の L 基は、縮合または非縮合であってよい少なくとも3個の芳香族もしくは複素環式芳香族環を含むことを特徴とする、請求項1~3何れか1項記載の化合物。

【請求項5】

式(I)中の L 基は、少なくとも1個のビフェニル、フルオレニルおよび/またはスピロビフルオレニル基を含むことを特徴とする、請求項1~4何れか1項記載の化合物。

【請求項6】

添え字 m は、1または2であり、少なくとも一つの R 基は L 基であり、ここで、添え字 n は、好ましくは、0であることを特徴とする、請求項1~5何れか1項記載の化合物。

【請求項7】

添え字 n は、1または2であり、少なくとも一つの R^1 基は L 基であり、ここで、添え字 m は、好ましくは、0であることを特徴とする、請求項1~6何れか1項記載の化合物。

【請求項8】

添え字 m は、1または2であり、添え字 n は、1または2であり、ここで、少なくとも一つの R 基は L 基であり、少なくとも一つの R^1 基は L 基であることを特徴とする、請求項1~7何れか1項記載の化合物。

【請求項9】

式(I)の構造において、少なくとも一つの L 基は、式(L-1)~(L-14)の基

10

20

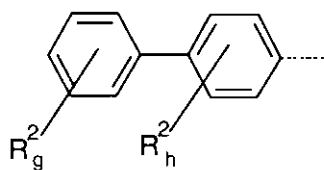
30

40

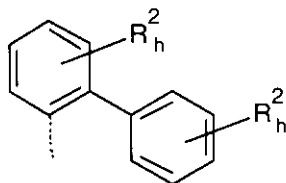
50

から選ばれることを特徴とする、請求項 1 ~ 8 何れか 1 項記載の化合物：

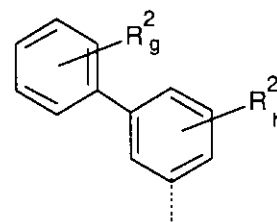
【化 2】



式 (L-1)

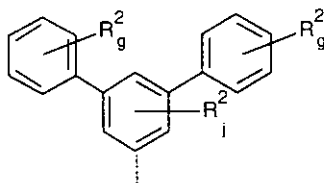


式 (L-2)

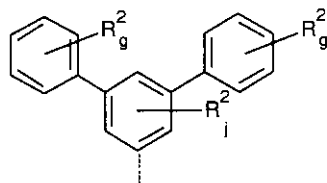


式 (L-3)

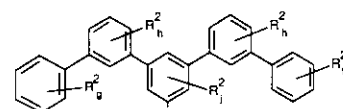
10



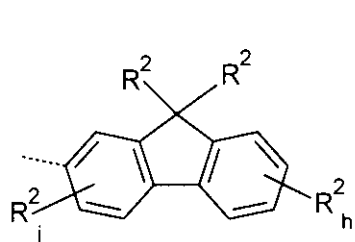
式 (L-4)



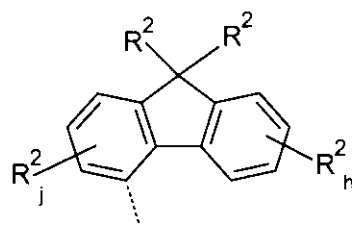
式 (L-5)



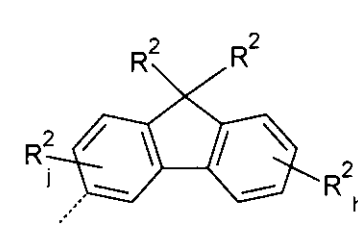
式 (L-6)



式 (L-7)

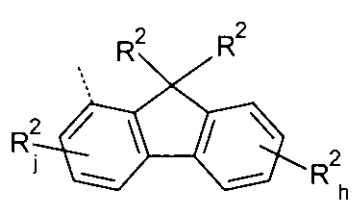


式 (L-8)

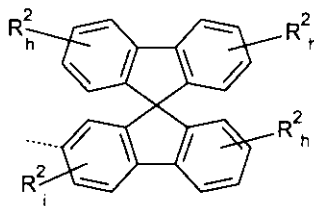


式 (L-9)

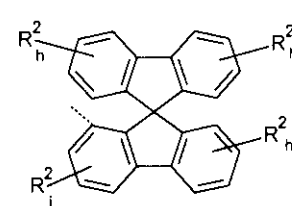
20



式 (L-10)

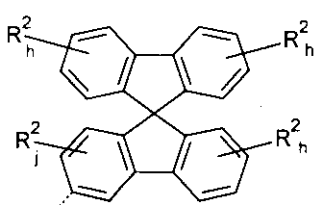


式 (L-11)

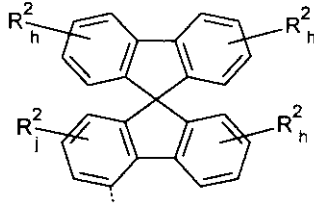


式 (L-12)

30



式 (L-13)



式 (L-14)

40

式中、破線の結合マークは、結合位置であり、g は、0、1、2、3、4 または 5 であり、h は、0、1、2、3 または 4 であり、j は、0、1、2 または 3 であり、Y は、O、S または N (R¹) であり、R¹ と R² は、請求項 1 で与えられる定義を有する。

【請求項 10】

式 (I) 中の L 基は、窒素原子を有する少なくとも 1 個のヘテロアール基を含むことを特徴とする、請求項 1 ~ 9 何れか 1 項記載の化合物。

【請求項 11】

式 (I) 中の L 基は、少なくとも 1 個のカルバゾール、ジアジン、トリアジン、ベンゾ

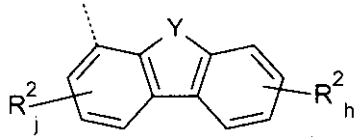
50

チオフェンおよび/またはベンゾフラン基を含むことを特徴とする、請求項 1 ~ 10 何れか 1 項記載の化合物。

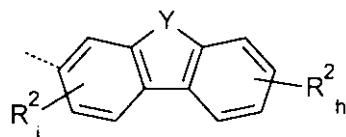
【請求項 12】

式 (I) の構造において、少なくとも一つの L 基は、式 (L-15) ~ (L-39) の基から選ばれることを特徴とする、請求項 1 ~ 11 何れか 1 項記載の化合物：

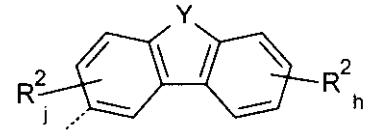
【化 3 - 1】



式 (L-15)

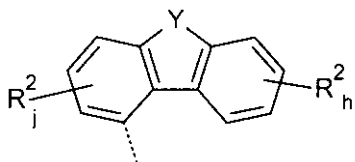


式 (L-16)

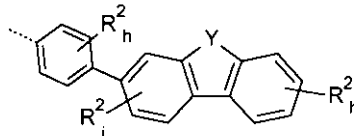


式 (R¹-17)

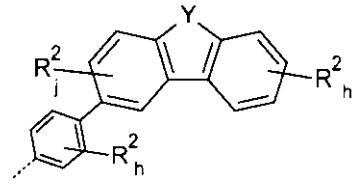
10



式 (L-18)

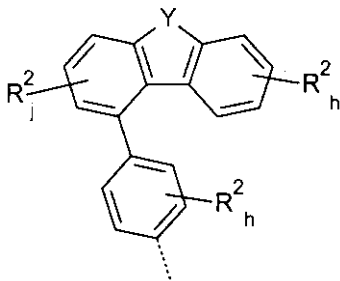


式 (L-19)

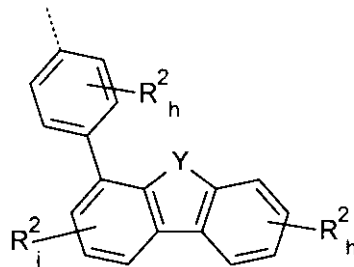


式 (R¹-20)

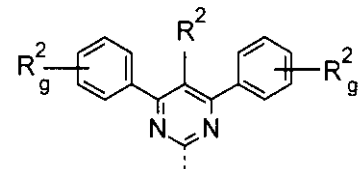
20



式 (L-21)

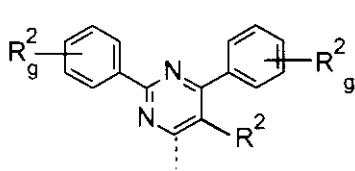


式 (L-22)

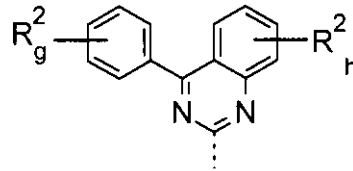


式 (L-23)

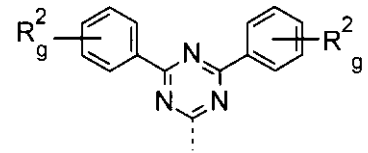
【化3-2】



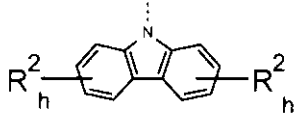
式 (L-24)



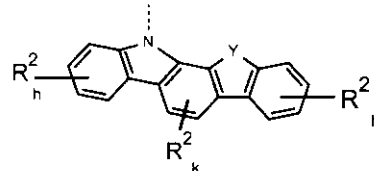
式 (L-25)



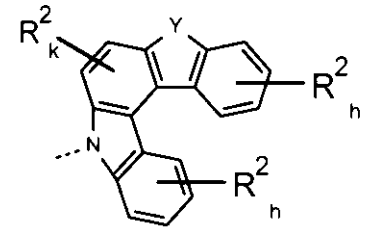
式 (L-26)



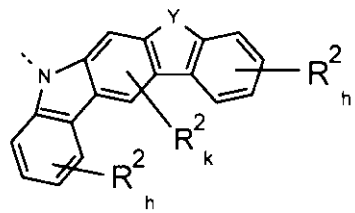
式 (L-27)



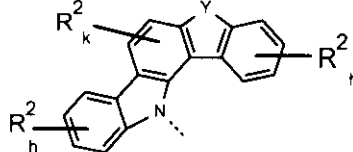
式 (L-28)



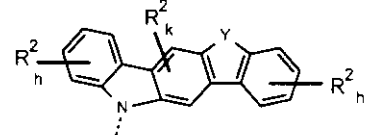
式 (L-29)



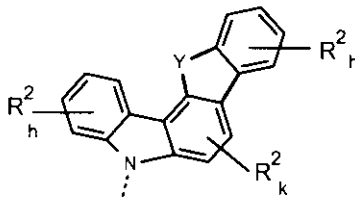
式 (L-30)



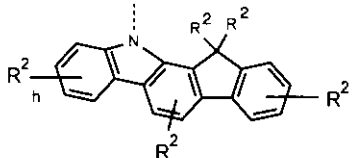
式 (L-31)



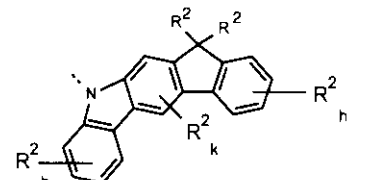
式 (L-32)



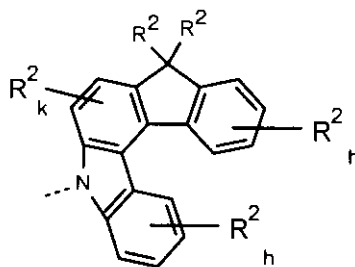
式 (L-33)



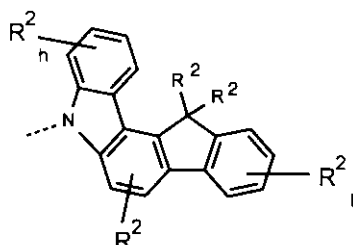
式 (L-34)



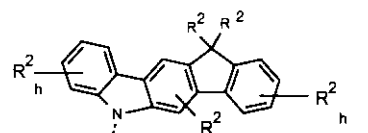
式 (L-35)



式 (L-36)

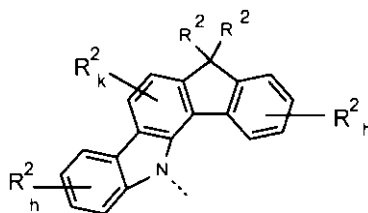


式 (L-37)



式 (L-38)

【化3-3】



式 (L-39)

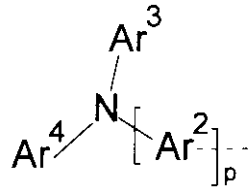
式中、破線の結合マークは、結合位置であり、g は、0、1、2、3、4 または 5 であり

、hは、0、1、2、3または4であり、jは、0、1、2または3であり、kは、0、1または2であり、Yは、O、SまたはN(R¹)であり、R¹とR²は、請求項1で与えられる定義を有する。

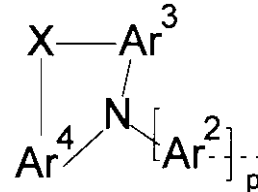
【請求項13】

式(I)の構造において、少なくとも一つのL基は、式(L-40)~(L-42)の基から選ばれることを特徴とする、請求項1~12何れか1項記載の化合物：

【化4】

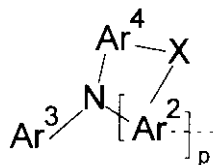


式 (L-40)



式 (L-41)

10



式 (L-42)

20

式中、破線の結合マークは、結合位置であり、および

Ar²、Ar³、Ar⁴は、夫々、独立して、夫々、1以上のR¹基で置換されてよい6~40個の炭素原子を有するアリール基もしくは3~40個の炭素原子を有するヘテロアリール基であり、

pは、0または1であり、および

Xは、結合、CR¹₂、C=O、N(R¹)、B(R¹)、SiR¹₂、OまたはSであり、ここで、R¹とAr¹基は、請求項1で与えられる定義を有する。

【請求項14】

式(I)の構造は、1個を超えない反応性基を含むことを特徴とする、請求項1~13何れか1項記載の化合物。

30

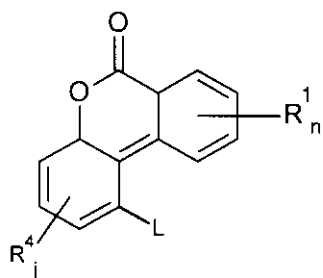
【請求項15】

式(I)の構造は、多くとも、Br、ClおよびB(OR²)₂から選ばれる反応性基を有することを特徴とする、請求項14記載の化合物。

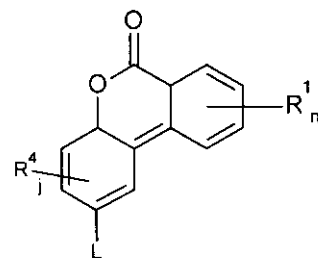
【請求項16】

化合物は、式(II)、(III)、(IV)、(V)、(VI)、(VII)、(VIII)および/または(IX)の構造を含むことを特徴とする、請求項1~15何れか1項記載の化合物：

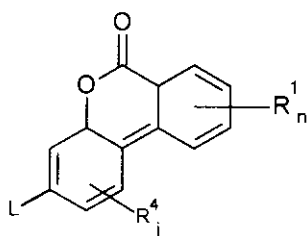
【化5】



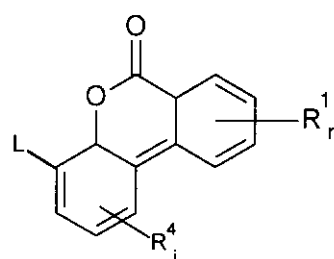
式 (II)



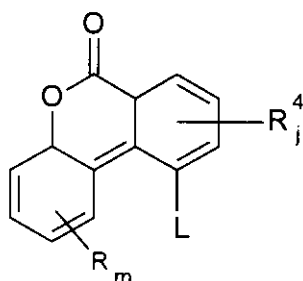
式 (III)



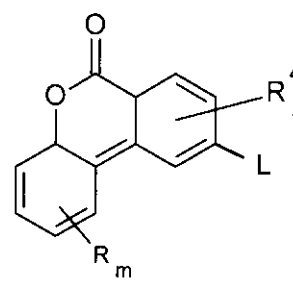
式 (IV)



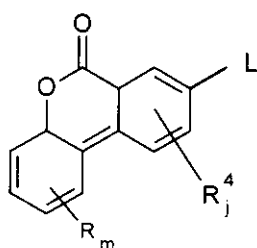
式 (V)



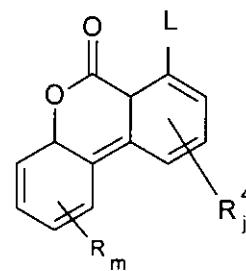
式 (VI)



式 (VII)



式 (VIII)



式 (IX)

式中、示された記号 R、R¹、L および添え字 m と n は、請求項 1 での詳細な定義を有し、添え字 j は、0、1、2 または 3 であり、および

R⁴ は、出現毎に、同一であるか異なり、H、D、F、Cl、Br、I、CHO、C(=O)Ar¹、P(=O)(Ar¹)₂、S(=O)Ar¹、S(=O)₂Ar¹、CN、NO₂、Si(R²)₃、B(OR²)₂、OSO₂R²、1~40個の炭素原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基または3~40個の炭素原子を有する分岐あるいは環式アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基(夫々は、1以上のR²基により置換されてよく、1以上の隣接しないCH₂基は、R²C=CR²、C-C、Si(R²)₂、Ge(R²)₂、Sn(R²)₂、C=O、C=S、C=Se、P(=O)(R²)、SO、SO₂、O、SもしくはCONR²で置き換えられてよく、また、1以上の水素原子は、D、F、Cl、Br、I、CNもしくはNO₂で置き換えられてよい。)、夫々、1以上のR²基で置換されてよい5~40個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、1以上のR²基で置換されてよい5~40個の芳香族環

10

20

30

40

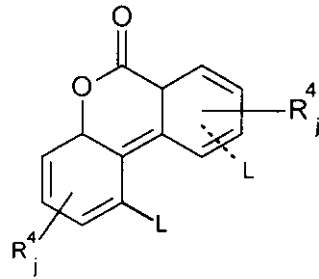
50

原子を有するアリールオキシもしくはヘテロアリールオキシ基（ここで、 R^2 と Ar^1 基は、請求項 1 で与えられる定義を有する。）またはこれらの構造の組み合わせであり；同時に 2 個以上の隣接する R^4 置換基は、互いに、 R^4 が結合する環と共に、 R^4 が隣接する環と共にまたは R もしくは R^1 基と共に、モノ-あるいはポリ環式の脂肪族もしくは芳香族環構造を形成してもよい。

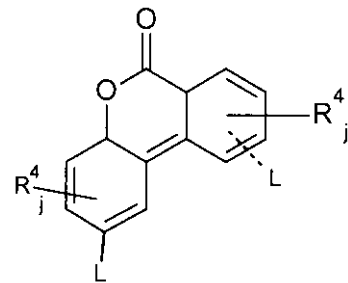
【請求項 17】

化合物は、式 (X)、(XI)、(XII)、(XIII)、(XIV)、(XV)、(XVI) および/または (XVII) の構造を含むことを特徴とする、請求項 1 ~ 16 何れか 1 項記載の化合物：

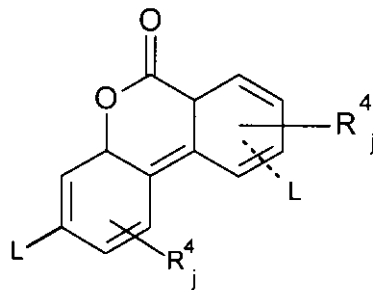
【化 6】



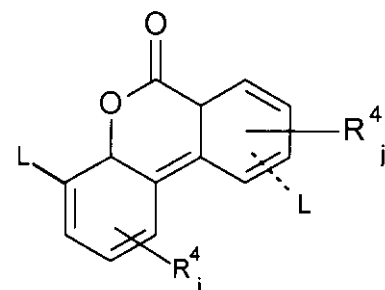
式 (X)



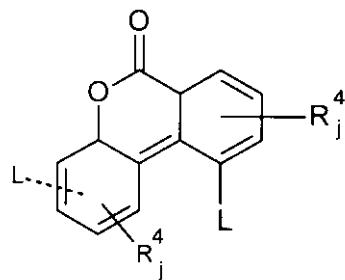
式 (XI)



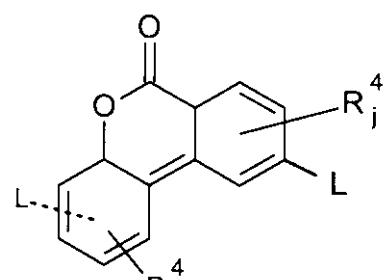
式 (XII)



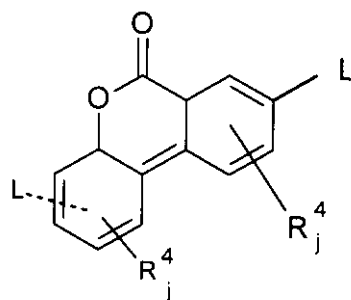
式 (XIII)



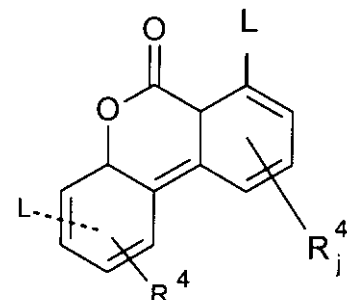
式 (XIV)



式 (XV)



式 (XVI)



式 (XVII)

10

20

30

40

50

式中、示された記号 R、 R^1 、L および添え字 m と n は、請求項 1 での詳細な定義を有し、添え字 j は、出現毎に、同一であるか異なり、0、1、2 または 3 であり、および

R^4 は、出現毎に、同一であるか異なり、H、D、F、Cl、Br、I、CHO、 $C(=O)Ar^1$ 、 $P(=O)(Ar^1)_2$ 、 $S(=O)Ar^1$ 、 $S(=O)_2Ar^1$ 、CN、 NO_2 、 $Si(R^2)_3$ 、 $B(OR^2)_2$ 、 OSO_2R^2 、1~40 個の炭素原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基または 3~40 個の炭素原子を有する分岐あるいは環式アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基（夫々は、1 以上の R^2 基により置換されてよく、1 以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^2C=CR^2$ 、 $C-C$ 、 $Si(R^2)_2$ 、 $Ge(R^2)_2$ 、 $Sn(R^2)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $P(=O)(R^2)$ 、 SO 、 SO_2 、O、S もしくは $CONR^2$ で置き換えられてよく、また、1 以上の水素原子は、D、F、Cl、Br、I、CN もしくは NO_2 で置き換えられてよい。））、夫々、1 以上の R^2 基で置換されてよい 5~40 個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、1 以上の R^2 基で置換されてよい 5~40 個の芳香族環原子を有するアリアルコキシもしくはヘテロアリアルコキシ基（ここで、 R^2 と Ar^1 基は、請求項 1 で与えられる定義を有する。））またはこれらの構造の組み合わせであり；同時に 2 個以上の隣接する R^4 置換基は、互いに、 R^4 が結合する環と共に、 R^4 が隣接する環と共に、モノ-あるいはポリ環式の脂肪族もしくは芳香族環構造を形成してもよい。

10

【請求項 18】

R^4 基は、請求項 1 での L の定義に対応する基ではないことを特徴とする、請求項 16 または 17 記載の化合物。

20

【請求項 19】

化合物は、5000 g/mol 以下の分子量を有することを特徴とする、請求項 1~19 何れか 1 項記載の化合物。

【請求項 20】

化合物のポリマー、オリゴマーもしくは dendrimer への 1 以上の結合が存在する、請求項 1~19 何れか 1 項記載の 1 以上の化合物を含む、オリゴマー、ポリマーもしくは dendrimer。

【請求項 21】

請求項 1~19 何れか 1 項記載の少なくとも一つの化合物および/または請求項 20 記載のオリゴマー、ポリマーもしくは dendrimer と、蛍光エミッター、燐光エミッター、ホスト材料、マトリクス材料、電子輸送材料、電子注入材料、正孔伝導材料、正孔注入材料、電子ブロック材料および正孔ブロック材料より成る群から選ばれる少なくとも一つのさらなる化合物とを含む組成物。

30

【請求項 22】

請求項 1~19 何れか 1 項記載の少なくとも一つの化合物、請求項 20 記載のオリゴマー、ポリマーもしくは dendrimer および/または少なくとも一つの請求項 20 記載の少なくとも一つの組成物と少なくとも一つの溶媒を含む調合物。

【請求項 23】

クマリン化合物が、カップリング反応によりアリアルおよび/またはヘテロアリアル基に結合することを特徴とする、請求項 1~19 何れか 1 項記載の化合物または請求項 20 記載のオリゴマー、ポリマーもしくは dendrimer の製造方法。

40

【請求項 24】

請求項 1~19 何れか 1 項記載の化合物、請求項 20 記載のオリゴマー、ポリマーもしくは dendrimer または請求項 21 記載の組成物の、電子素子での正孔輸送材料、正孔注入材料、正孔ブロック材料、電子注入材料、電子ブロック材料および/または電子輸送材料としての使用。

【請求項 25】

請求項 1~19 何れか 1 項記載の少なくとも一つの化合物、請求項 20 記載のオリゴマー、ポリマーもしくは dendrimer または請求項 21 記載の組成物を含む電子素子であって、電子素子が、好ましくは、有機エレクトロルミネッセンス素子、有機集積回路、有機

50

電界効果トランジスタ、有機薄膜トランジスタ、有機発光トランジスタ、有機太陽セル、有機光学検査素子、有機光受容器、有機電場消光素子、発光電子化学セルおよび有機レーザーダイオードより成る群から選ばれる電子素子。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、電子素子での使用に適するベンゾ[c]クマリン構造を有するヘテロ環化合物に関する。本発明は、さらに、その製造方法と電子素子に関する。

【0002】

有機、有機金属および/またはポリマー半導体を含む電子素子は、重要性を増しており、10
 費用的理由とその性能に基づいて多くの市販製品に使用されている。ここで、例は、複写機における有機系電荷輸送材料（たとえば、トリアリールアミン系正孔輸送体）、読み出しおよび表示素子における有機もしくはポリマー発光ダイオード（OLEDもしくはPLED）または複写機における有機光受容体である。有機太陽セル（OSC）、有機電界効果トランジスタ（OFET）、有機薄膜トランジスタ（OTFT）、有機集積回路（OIC）、有機光増幅器および有機レーザーダイオード（O-laser）が、開発の進んだ段階であり、大きな将来的意義を有する可能性がある。

【0003】

多くのこれら電子素子は、夫々の用途を問わず、以下の一般的層構造を有し、特別な用途のために適合することができる。20

(1) 基板、

(2) 電極、多くは、金属もしくは無機であるが、有機もしくはポリマー伝導性材料からも構成される、

(3) 電荷注入層もしくは中間層、たとえば、電極の不均性の補償用であり（「平坦化層」）、多くは、伝導性のドーブされたポリマーから構成される、

(4) 有機半導体、

(5) 随意に、さらなる電荷輸送層もしくは電荷注入層もしくは電荷ブロック層、

(6) 対電極、(2)で特定された材料、

(7) 外被。

【0004】

上記配置は、有機電子素子の一般的構造であり、最も単純な場合には、その間に有機層をもつ2個の電極から構成される配置となるように、種々の層を結合することができる。30
 この場合、有機層は、OLEDの場合に発光を含むすべての機能を発揮する。この種のシステムは、たとえば、ポリ(p-フェニレン)系については、WO 90/13148 A1に記載されている。

【0005】

ベンゾ[c]クマリン構造を有するポリマー化合物を含む電子素子は、JP 2009-073808 A、WO 2005/33174 A、WO 2004/39859 AおよびWO 2003/99901 Aを含む文献から知られている。

【0006】

公知の電子素子は、有益な特性プロファイルを有する。しかしながら、これら素子の特性を改善する一定の必要性が存在する。40

【0007】

これらの特性は、特別には、それにより電子素子が特定の問題を解決するエネルギー効率を含む。低分子量化合物か、ポリマー材料の何れかを基礎とし得る有機発光ダイオードの場合には、光収率は、特に、特定の光流量を実現するために最小量の電力が印加されねばならないほど十分に高くなければならない。さらに、最小電圧が、特定の輝度を達成するために必要ともならねばならない。さらなる特別な問題は、電子素子の寿命である。

【0008】

したがって、本発明の目的は、改善された特性を有する電子素子をもたらす新規な化合50

物を提供することである。効率、駆動電圧および/または寿命に関して改善された特性を示す正孔輸送材料、正孔注入材料、正孔ブロック材料、電子注入材料、電子ブロック材料および/または電子輸送材料を提供することが、特別な目的である。さらに、化合物は、非常に簡単な方法で加工可能であり、特に良好な溶解性と膜形成性を示さねばならない。

【0009】

さらなる目的は、優れた特性、極めて安価で一定の品質を有する電子素子を提供することとみなすことができる。

【0010】

さらに、電子素子を多くの目的に使用し、適合できなければならない。より特別には、電子素子の性能は、広範な温度範囲で維持されなければならない。

10

【0011】

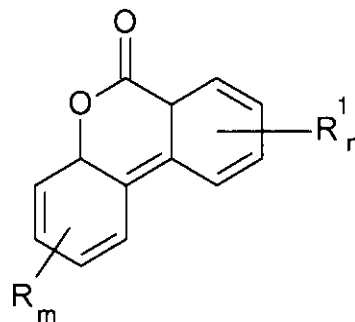
驚くべきことに、これらの目的および明確には言及されないが、この導入部で議論された点から容易に引き出されるか推論されることができさらなる目的が、請求項1の全特徴を有する化合物により実現されることが見出された。本発明の化合物の適正な改変は、請求項1に従属するクレームで保護される。

【0012】

したがって、本発明は、少なくとも一つの式(I)の構造を含む化合物を提供し；

【0013】

【化1】



20

式 (I)

【0014】

式中、使用される記号には、以下が適用される：

Rは、出現毎に、同一であるか異なり、H、D、F、Cl、Br、I、CHO、C(=O)Ar¹、P(=O)(Ar¹)₂、S(=O)Ar¹、S(=O)₂Ar¹、CN、NO₂、Si(R²)₃、B(OR²)₂、OSO₂R²、1~40個の炭素原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基、3~40個の炭素原子を有する分岐あるいは環式アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基(夫々は、1以上のR²基により置換されてよく、1以上の隣接しないCH₂基は、C-C、Si(R²)₂、Ge(R²)₂、Sn(R²)₂、C=O、C=S、C=Se、P(=O)(R²)、SO、SO₂、O、SもしくはCONR²で置き換えられてよく、また、1以上の水素原子は、D、F、Cl、Br、I、CNもしくはNO₂で置き換えられてよい。)、夫々、1以上のR²基で置換されてよい5~40個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、1以上のR²基で置換されてよい5~40個の芳香族環原子を有するアリーロキシもしくはヘテロアリーロキシ基またはこれら構造の組み合わせであり；ここで、同時に2個以上の隣接するR置換基は、互いに、Rが結合する環と共に、Rが隣接する環と共にまたはR¹基と共に、モノ-あるいはポリ環式の脂肪族もしくは芳香族環構造を形成してもよく；

30

40

R¹は、出現毎に、同一であるか異なり、H、D、F、Cl、Br、I、CHO、C(=O)Ar¹、P(=O)(Ar¹)₂、S(=O)Ar¹、S(=O)₂Ar¹、CN、NO₂、Si(R²)₃、B(OR²)₂、OSO₂R²、1~40個の炭素原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基、3~40個の炭素原子を有する分

50

岐あるいは環式アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基（夫々は、1以上の R^2 基により置換されてよく、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^2C=CR^2$ 、 $C-C$ 、 $Si(R^2)_2$ 、 $Ge(R^2)_2$ 、 $Sn(R^2)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $P(=O)(R^2)$ 、 SO 、 SO_2 、 O 、 S もしくは $CONR^2$ で置き換えられてよく、また、1以上の水素原子は、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN もしくは NO_2 で置き換えられてよい。）
、夫々、1以上の R^2 基で置換されてよい5～40個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、1以上の R^2 基で置換されてよい5～40個の芳香族環原子を有するアリアルコキシもしくはヘテロアリアルコキシ基またはこれら構造の組み合わせであり；ここで、同時に2個以上の隣接する R^1 置換基は、互いに、 R^1 が結合する環と共に、 R^1 が隣接する環と共にまたは R 基と共に、モノ-あるいはポリ環式の脂肪族もしくは芳香族環構造を形成してもよく；

10

R^2 は、出現毎に、同一であるか異なり、 H 、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CHO 、 $C(=O)Ar^1$ 、 $P(=O)(Ar^1)_2$ 、 $S(=O)Ar^1$ 、 $S(=O)_2Ar^1$ 、 CN 、 NO_2 、 $Si(R^3)_3$ 、 $B(OR^3)_2$ 、 OSO_2R^3 、1～40個の炭素原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基、3～40個の炭素原子を有する分岐あるいは環式アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基（夫々は、1以上の R^3 基により置換されてよく、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $C-C$ 、 $Si(R^3)_2$ 、 $Ge(R^3)_2$ 、 $Sn(R^3)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $P(=O)(R^3)$ 、 SO 、 SO_2 、 O 、 S もしくは $CONR^3$ で置き換えられてよく、また、1以上の水素原子は、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN もしくは NO_2 で置き換えられてよい。）
、夫々、1以上の R^3 基で置換されてよい5～40個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、1以上の R^3 基で置換されてよい5～40個の芳香族環原子を有するアリアルコキシもしくはヘテロアリアルコキシ基またはこれら構造の組み合わせであり；ここで、同時に2個以上の隣接する R^2 置換基は、互いに、モノ-あるいはポリ環式の脂肪族もしくは芳香族環構造を形成してもよく；

20

Ar^1 は、出現毎に、同一であるか異なり、1以上の R^2 基で置換されてよい5～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり、同時に、同じ炭素原子に結合する2個の Ar^1 基は、単結合または $B(R^3)$ 、 $C(R^3)_2$ 、 $Si(R^3)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^3$ 、 $C=C(R^3)_2$ 、 O 、 S 、 $S=O$ 、 SO_2 、 $N(R^3)$ 、 $P(R^3)$ および $P(=O)(R^3)$ から選ばれるブリッジにより互いに結合されてよく；

30

R^3 は、出現毎に、同一であるか異なり、 H 、 D 、 F または1～20個の炭素原子を有する脂肪族、芳香族および/または複素環式芳香族炭化水素基であり、1以上の水素原子は、 F で置き換えられてよく；同時に、2個以上の隣接する R^3 置換基は、互いに、モノ-あるいはポリ環式の脂肪族もしくは芳香族環構造を形成してもよく；

m 、 n は、夫々、独立して、0、1、2、3または4であり；

ただし、 m と n の合計は、1以上であり；

式(I)中の R および/または R^1 基の少なくとも一つは、少なくとも一つの L 基であり；および

L は、10～40個の炭素原子を有する芳香族基、好ましくは、10～20個の炭素原子を有する芳香族基、または6～40個の炭素原子を有する複素環式芳香族基、好ましくは、6～20個の炭素原子を有する複素環式芳香族基であって、ここで、芳香族基および/または複素環式芳香族基は、少なくとも2個の隣接する芳香族および/または複素環式芳香族基を含み、夫々、縮合または非縮合であってよく、および/または1以上の R^2 基で置換されてよい。

40

【0015】

この文脈で、「隣接する炭素原子」は、炭素原子が、互いに直接結合することを意味する。さらに、基の定義における「隣接する基」は、これらの基が、同じ炭素原子もしくは隣接する炭素原子に結合することを意味する。これらの定義は、用語「隣接する複数の基」と「隣接する複数の置換基」に対応してあてはまる。

【0016】

50

より好ましくは、必須基Lは、少なくとも2個の隣接する芳香族および/または複素環式芳香族環を含む芳香族および/または複素環式芳香族基を有する。したがって、環は、L基が、たとえば、ビフェニルを含んでもよいように、結合により互いに連結してよい。さらに、環は、たとえば、ナフチル基の場合のように、2個の炭素原子が少なくとも2個の芳香族および/または複素環式芳香族環に属するように、縮合してよい。

【0017】

本発明の文脈でのアリール基は、6~40個の炭素原子を含む。本発明の文脈でのヘテロアリール基は、2~40個の炭素原子と少なくとも1個のヘテロ原子を含むが、ただし、炭素原子とヘテロ原子の合計は、少なくとも5個である。ヘテロ原子は、好ましくは、N、Oおよび/またはSから選ばれる。ここで、アリール基もしくはヘテロアリール基は、単純な芳香族環、すなわち、ベンゼン、または、単純な複素環式芳香族環、たとえば、ピリジン、ピリミジン、チオフェン等、または、縮合アリールもしくはヘテロアリール基、たとえば、ナフタレン、アントラセン、フェナントレン、キノリン、イソキノリン等の何れかの意味であると理解される。

10

【0018】

本発明の文脈での芳香族環構造は、6~60個の炭素原子を環構造中に含む。本発明の文脈での複素環式芳香族環構造は、1~60個の炭素原子と少なくとも1個のヘテロ原子を環構造中に含むが、ただし、炭素原子とヘテロ原子の合計は少なくとも5個である。ヘテロ原子は、好ましくは、N、Oおよび/またはSから選ばれる。本発明の文脈での芳香族もしくは複素環式芳香族環構造は、必ずしもアリールもしくはヘテロアリール基のみを含むものではなく、加えて、2個以上のアリールもしくはヘテロアリール基は、たとえば、炭素、窒素もしくは酸素原子またはカルボニル基のような非芳香族単位(好ましくは、H以外の原子は10%未満である。)により中断されてよい構造の意味であると理解されるべきである。たとえば、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、スチルベン等の構造も、本発明の文脈での芳香族環構造とみなされるべきであり、2個以上のアリール基が、たとえば、直鎖もしくは環式アルキル基によりまたはシリル基により中断される構造も同様である。さらに、2個以上のアリールもしくはヘテロアリール基が、互いに直接結合する構造、たとえば、ビフェニルもしくはテルフェニルも、同様に芳香族もしくは複素環式芳香族環構造とみなされべきである。

20

30

【0019】

本発明の文脈での環式アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基は、単環式、二環式もしくは多環式基の意味であると理解される。

【0020】

本発明の文脈で、C₁~C₄₀-アルキル基は、ここで、個々の水素原子もしくはCH₂基は、上記した基により置換されていてよく、たとえば、メチル、エチル、n-プロピル、i-プロピル、シクロプロピル、n-ブチル、i-ブチル、s-ブチル、t-ブチル、シクロブチル、2-メチルブチル、n-ペンチル、s-ペンチル、t-ペンチル、2-ペンチル、ネオペンチル、シクロペンチル、n-ヘキシル、s-ヘキシル、t-ヘキシル、2-ヘキシル、3-ヘキシル、ネオヘキシル、シクロヘキシル、1-メチルシクロペンチル、2-メチルペンチル、n-ヘプチル、2-ヘプチル、3-ヘプチル、4-ヘプチル、シクロヘプチル、1-メチルシクロヘキシル、n-オクチル、2-エチルヘキシル、シクロオクチル、1-ビスシクロ[2.2.2]オクチル、2-ビスシクロ[2.2.2]オクチル、2-(2,6-ジメチル)オクチル、3-(3,7-ジメチル)オクチル、アダマンチル、トリフルオロメチル、ペンタフルオロエチル、2,2,2-トリフルオロエチル、1,1-ジメチル-n-ヘキサ-1-イル、1,1-ジメチル-n-ヘプタ-1-イル、1,1-ジメチル-n-オクタ-1-イル、1,1-ジメチル-n-デカ-1-イル、1,1-ジメチル-n-ドデカ-1-イル、1,1-ジメチル-n-テトラデカ-1-イル、1,1-ジメチル-n-ヘキサデカ-1-イル、1,1-ジメチル-n-オクタデカ-1-イル、1,1-ジエチル-n-ヘキサ-1-イル、1,1-ジエチル-n-ヘプタ-1-イル、1,1-ジエチル-n-オクタ-1-イル、1,1-ジエチル-n-デカ-1-イル、1,1-ジエチル-n-ドデカ-1-イル、1,1-ジエチル-n-テトラデカ-1-イル、1,1-ジエチル-n-ヘキサデカ-1-イル、1,1-ジエチル-n-オ

40

50

クタデカ-1-イル、1-(n-プロピル)シクロヘキサ-1-イル、1-(n-ブチル)シクロヘキサ-1-イル、1-(n-ヘキシル)シクロヘキサ-1-イル、1-(n-オクチル)シクロヘキサ-1-イルおよび1-(n-デシル)シクロヘキサ-1-イル基の意味であると理解される。アルケニル基は、たとえば、エテニル、プロペニル、ブテニル、ペンテニル、シクロペンテニル、ヘキセニル、シクロヘキセニル、ヘブテニル、シクロヘブテニル、オクテニル、シクロオクテニルまたはシクロオクタジエニルの意味で

あると理解される。アルキニル基は、たとえば、エチニル、プロピニル、ブチニル、ペンチニル、ヘキシニル、ヘブチニルおよびオクチニルの意味であると理解される。C₁ ~ C₄₀-アルコキシ基は、たとえば、メトキシ、トリフルオロメトキシ、エトキシ、n-プロポキシ、i-プロポキシ、n-ブトキシ、i-ブトキシ、s-ブトキシ、t-ブトキシまたは2-メチルブトキシの意味であると理解される。

10

【0021】

5 ~ 60個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造は、各場合に、上記した基により置換されていてもよく、任意の所望の位置を介して、芳香族もしくは複素環式芳香族構造に連結していてもよいが、たとえば、ベンゼン、ナフタレン、アントラセン、ベンズアントラセン、フェナントレン、ベンゾフェナントレン、ピレン、クリセン、ペリレン、フルオランテン、ベンゾフルオランテン、ナフタセン、ペンタセン、ベンゾピレン、ピフェニル、ピフェニレン、テルフェニル、テルフェニレン、フルオレン、スピロピフルオレン、ジヒドロフェナントレン、ジヒドロピレン、テトラヒドロピレン、シス-もしくはトランス-インデノフルオレン、シス-もしくはトランス-モノベンゾインデノフルオレン、シス-もしくはトランス-ジベンゾインデノフルオレン、トルクセン、イソトルクセン、スピロトルクセン、スピロイソトルクセン、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、フェナンスリイミダゾール、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、ベンゾカルボリン、フェナントロリン、1,2,3-トリアゾール、1,2,4-トリアゾール、ベンゾトリアゾール、1,2,3-オキサジアゾール、1,2,4-オキサジアゾール、1,2,5-オキサジアゾール、1,3,4-オキサジアゾール、1,2,3-チアジアゾール、1,2,4-チアジアゾール、1,2,5-チアジアゾール、1,3,4-チアジアゾール、1,3,5-トリアジン、1,2,4-トリアジン、1,2,3-トリアジン、テトラゾール、1,2,4,5-テトラジン、1,2,3,4-テトラジン、1,2,3,5-テトラジン、プリン、プテリジン、インドリジンおよびベンゾチアジアゾールから誘導される基の意味であると理解される。

20

30

40

【0022】

好ましい1態様では、添え字mおよびnの合計は、6以下、好ましくは、5以下、特別好ましくは、4以下、特に好ましくは、3以下である場合であってよい。特別好ましくは、添え字mとnの全合計は、1または2である。

【0023】

式(I)の構造は、好ましくは、4以下、より好ましくは、3以下、特別好ましくは1または2個のL基を有する場合であってよい。

【0024】

50

好ましくは、式 (I) 中の L 基は、縮合または非縮合であってよい少なくとも 3 個の芳香族もしくは複素環式芳香族環を含む。

【 0 0 2 5 】

好ましいのは、さらに、式 (I) 中の L 基は、少なくとも 1 個のビフェニル、フルオレニルおよび/またはスピロビフルオレニル基を含む化合物である。

【 0 0 2 6 】

さらに、驚くべき優位性は、添え字 m が、1 または 2 であり、少なくとも一つの R 基は L 基であり、ここで、添え字 n は、好ましくは、0 である式 (I) の化合物により示される。

【 0 0 2 7 】

さらに、添え字 n は、1 または 2 であり、少なくとも一つの R¹ 基は L 基であり、ここで、添え字 m は、好ましくは、0 である式 (I) の化合物を使用することが有利に可能である。

10

【 0 0 2 8 】

さらに、式 (I) において、添え字 m は、1 または 2 であり、添え字 n は、1 または 2 であり、ここで、少なくとも一つの R 基は L 基であり、少なくとも一つの R¹ 基は L 基である場合であってよい。

【 0 0 2 9 】

n と m が、1 以上であれば、R と R¹ 基は、同じであってよい。R と R¹ 基が異なり、これが好ましい場合が追加的であってよい。ここで、異同の基準は、構造要素が、別の位置でベンゾ[c]クマリン構造に結合することである。たとえば、R 基が、以下に示される構造 L - 2 の基であり、R¹ が式 L - 3 の構造である場合には、R 基は R¹ 基とは異なる。

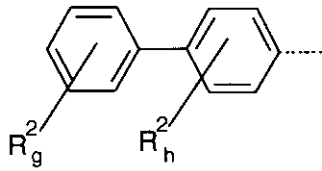
20

【 0 0 3 0 】

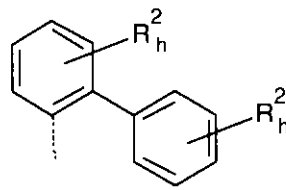
好ましいのは、式 (I) の構造において、少なくとも一つの L 基が、式 (L - 1) ~ (L - 1 4) の基から選ばれる式 (I) の構造を含む化合物であり：

【 0 0 3 1 】

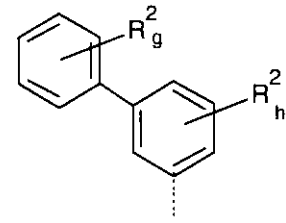
【化2】



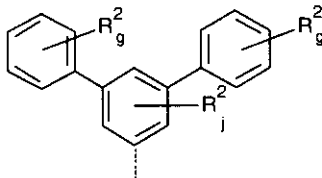
式 (L-1)



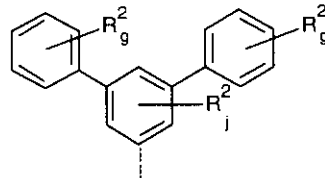
式 (L-2)



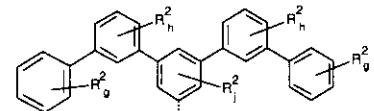
式 (L-3)



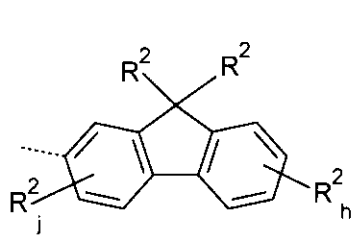
式 (L-4)



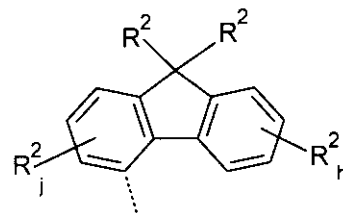
式 (L-5)



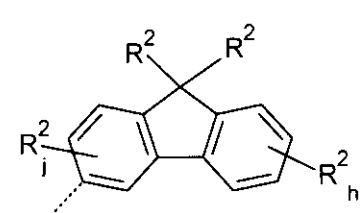
式 (L-6)



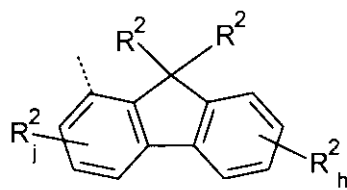
式 (L-7)



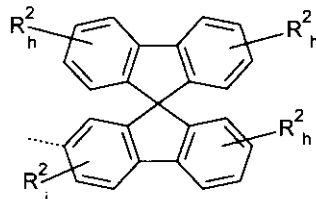
式 (L-8)



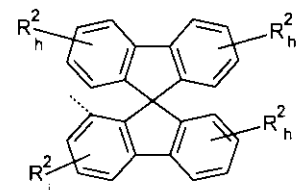
式 (L-9)



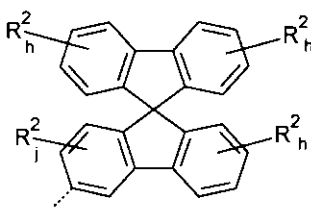
式 (L-10)



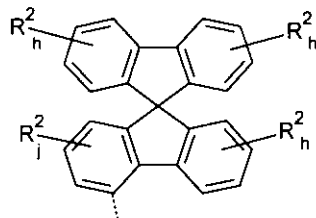
式 (L-11)



式 (L-12)



式 (L-13)



式 (L-14)

【0032】

式中、破線の結合マークは、結合位置であり、gは、0、1、2、3、4または5であり、hは、0、1、2、3または4であり、jは、0、1、2または3であり、Yは、O、SまたはN(R¹)であり、R¹とR²は、式(I)に対して上記で与えられる定義を有する。

【0033】

式(I)中のL基は、窒素原子を有する少なくとも1個のヘテロアール基を含む場合が好まれることもある。

【0034】

10

20

30

40

50

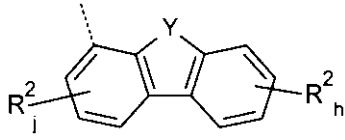
さらに好ましくは、式(I)中のL基が、少なくとも1個のカルバゾール、ジアジン、トリアジン、ベンゾチオフェンおよび/またはベンゾフラン基を含む式(I)の化合物である。

【0035】

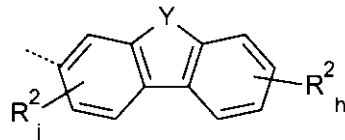
好ましくは、式(I)の構造において、少なくとも一つのL基は、式(L-15)~(L-39)の基から選ばれる式(I)の構造を含む化合物であって：

【0036】

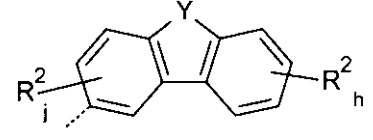
【化3-1】



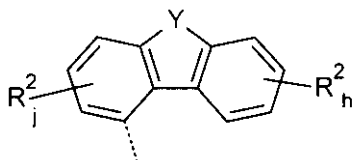
式 (L-15)



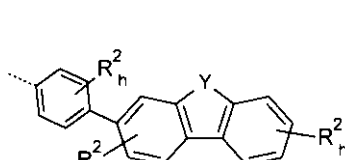
式 (L-16)



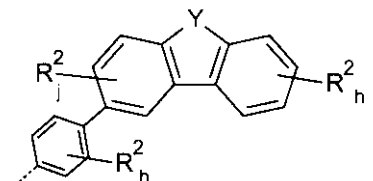
式 (R¹-17)



式 (L-18)



式 (L-19)



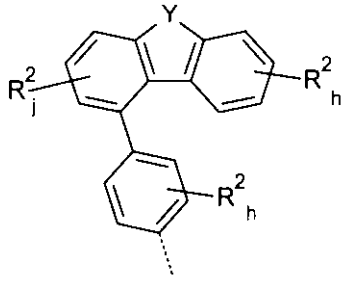
式 (R¹-20)

10

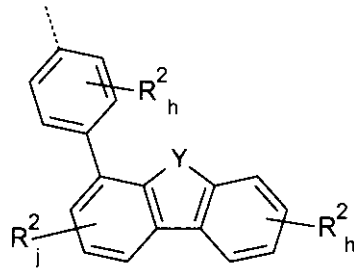
20

【0037】

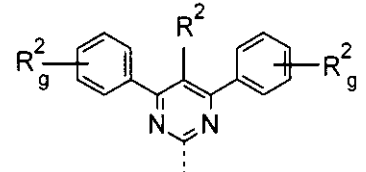
【化3-2】



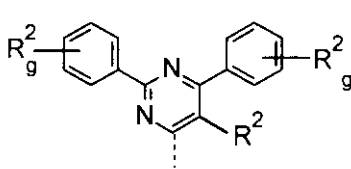
式 (L-21)



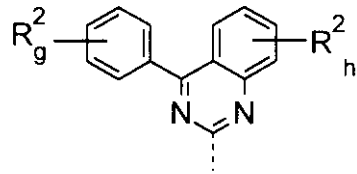
式 (L-22)



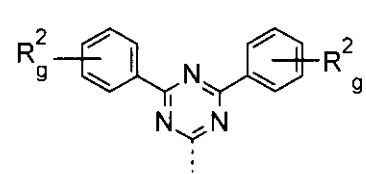
式 (L-23)



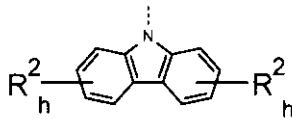
式 (L-24)



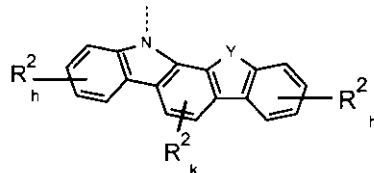
式 (L-25)



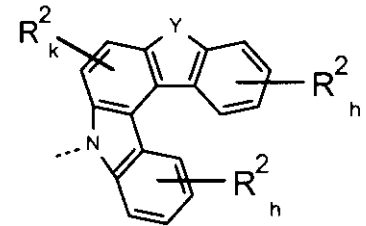
式 (L-26)



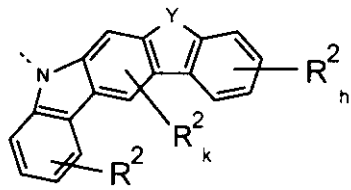
式 (L-27)



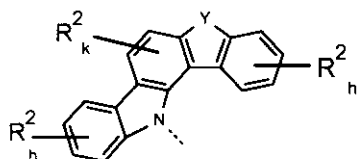
式 (L-28)



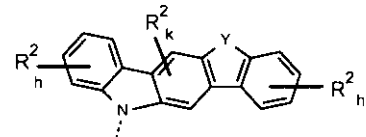
式 (L-29)



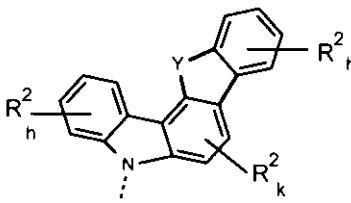
式 (L-30)



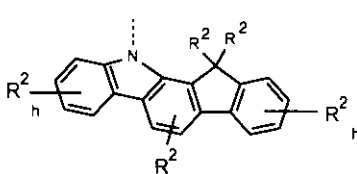
式 (L-31)



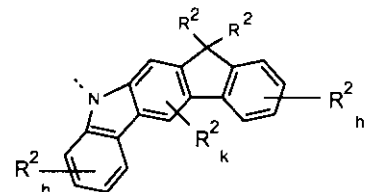
式 (L-32)



式 (L-33)



式 (L-34)



式 (L-35)

【0038】

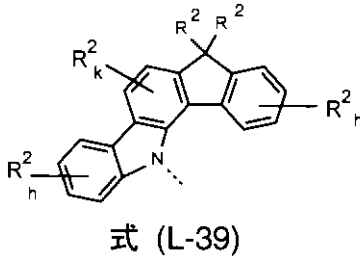
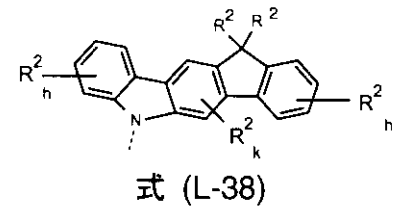
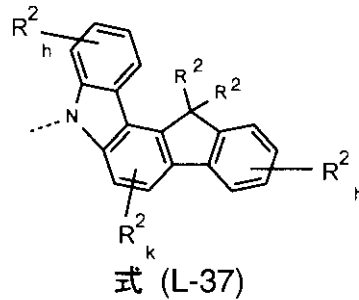
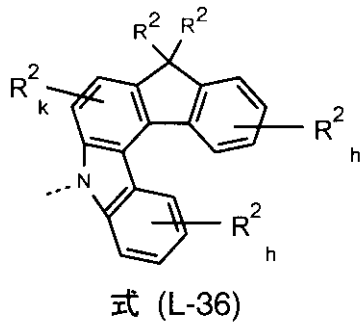
10

20

30

40

【化3-3】



【0039】

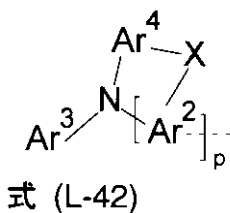
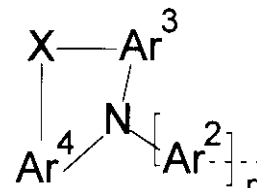
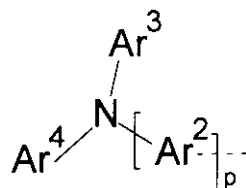
式中、破線の結合マークは、結合位置であり、gは、0、1、2、3、4または5であり、hは、0、1、2、3または4であり、jは、0、1、2または3であり、kは、0、1または2であり、Yは、O、SまたはN(R¹)であり、R¹とR²は、式(I)に対して上記で与えられる定義を有する。好ましくは、式(L-1)~(L-39)の構造中の添え字g、h、jおよびkの合計は、5以下、好ましくは、0、1、2または3、より好ましくは、0または1である。

【0040】

好ましいのは、式(I)の構造において、少なくとも一つのL基は、式(L-40)~(L-42)の基から選ばれる式(I)の構造を含む化合物であって：

【0041】

【化4】



【0042】

式中、破線の結合マークは、結合位置であり、および

Ar²、Ar³、Ar⁴は、夫々、独立して、夫々、1以上のR¹基で置換されてよい6~40個の炭素原子を有するアリール基もしくは3~40個の炭素原子を有するヘテロアリール基であり、

pは、0または1であり、および

Xは、結合、CR¹₂、C=O、N(R¹)、B(R¹)、SiR¹₂、OまたはS、

10

20

30

40

50

好ましくは、 CR^1_2 、 $C=O$ 、 $N(R^1)$ 、 O または S であり、ここで、 R^1 と Ar^1 基は、式(I)に対して上記で与えられる定義を有する。

【0043】

式(I)の構造またはこの構造の好ましい態様の一つの構造は、上記説明したとおりの少なくとも一つのL基を含む。機能性基Lのタイプは、化合物の性質に影響し、これらの性質は、広範囲で調節可能である。

【0044】

正孔輸送材料(HTM)または電子ブロック材料(EBL)として好ましく使用される化合物に対して、Lは、好ましくは、少なくとも一つのジアリアルアミノ基を有する基であってよい。L基の構造要素としてのカルバゾール誘導体の使用の場合に、得られた化合物は、三重項マトリックス材料(TMM)として優先的に、より好ましくは、電子伝導三重項マトリックス材料(e-TMM)として、または正孔ブロック層(HBL)として使用することができるものを含む。Lが芳香族構造、特別には、より好ましくは、ヘテロ原子を全く含まないアリアル基である場合には、材料は、電子輸送材料(ETM)として驚くべきことに有利に使用することができる。この文脈において、得られた化合物は、一般的に、先行技術による同等の化合物よりも、ベンゾ[c]クマリン構造要素の存在により、より顕著に良好な特性プロファイルを有する。特に好ましいのは、特別には、式(I)の構造または以前以後説明される好ましい態様を含む化合物であり、マトリックス材料としてもしくは電子輸送材料として使用することができる。

10

【0045】

本発明の特別な1態様では、式(I)の構造中のL基は、好ましくは、カルバゾール、インデノカルバゾール、インドロカルバゾール、アリアルアミンもしくはジアリアルアミン基であってよい。少なくとも一つのカルバゾール、インデノカルバゾール、インドロカルバゾール、アリアルアミンもしくはジアリアルアミン基を有する式(I)の化合物は、マトリックス材料として選好して使用することができる。

20

【0046】

さらに、式(I)の構造中のL基は、好ましくは、ピリジン、ピリミジン、ピラジン、ピリダジン、トリアジン、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフエン、フルオレン、スピロピフルオレン、アントラセンもしくはベンゾイミダゾール基であってよい。少なくとも一つのピリジン、ピリミジン、ピラジン、ピリダジン、トリアジン、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフエン、フルオレン、スピロピフルオレン、アントラセンもしくはベンゾイミダゾール基を有する式(I)の化合物は、電子輸送材料(ETM)として有利に使用することができる。

30

【0047】

少なくとも一つのL基と同様に、本発明の式(I)の構造は、Rもしくは R^1 の定義に対応するが、たとえば、式(I)に対して上記説明したLの定義には対応しないさらなる置換基を含んでよい。より好ましくは、式(I)の構造は、3個を超えない、好ましくは、2個を超えないLの定義には対応しないRおよび/または R^1 基を有する。特別に好ましくは、式(I)の構造は、1個を超えないLの定義に対応しないRおよび/または R^1 基を有する。より好ましくは、全てのRおよび/または R^1 基は、Lの定義に対応する。

40

【0048】

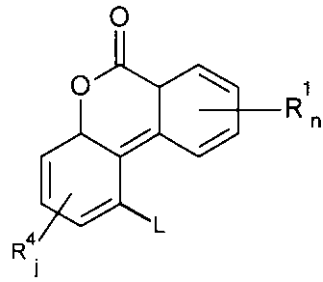
さらに好ましいのは、式(I)の構造が1個を超えない反応性基を含む式(I)の化合物である。好ましくは、反応性基は、トリフレート、臭素、ヨウ素、塩素、ボロン酸およびボロン酸エステル、より好ましくは、Br、Clおよび $B(OR^2)_2$ から選ばれる。

【0049】

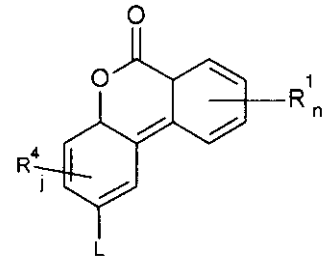
特に好ましい化合物は、以下の式(II)、(III)、(IV)、(V)、(VI)、(VII)、(VIII)および/または(IX)の構造を含み：

【0050】

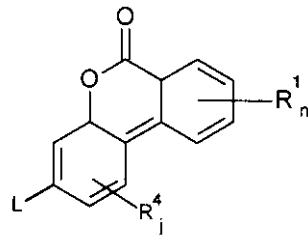
【化5】



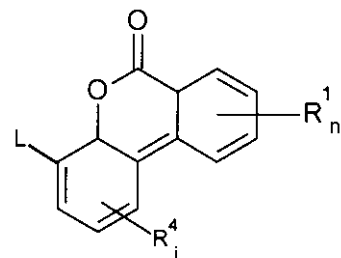
式 (II)



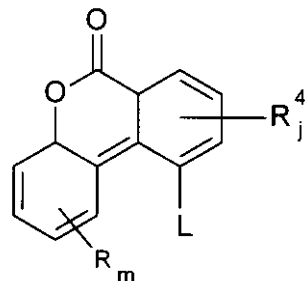
式 (III)



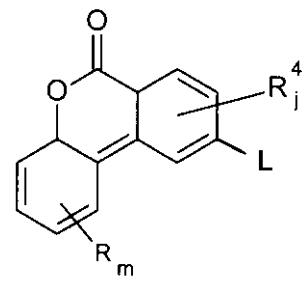
式 (IV)



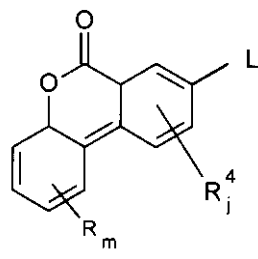
式 (V)



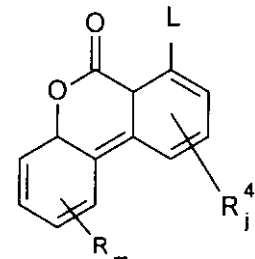
式 (VI)



式 (VII)



式 (VIII)



式 (IX)

【0051】

式中、示された記号 R、R¹、L および添え字 m と n は、式 (I) に対して上記説明される定義を有し、添え字 j は、0、1、2 または 3、好ましくは、0、1 または 2、より好ましくは、0 または 1 であり、および

R⁴ は、出現毎に、同一であるか異なり、H、D、F、Cl、Br、I、CHO、C(=O)Ar¹、P(=O)(Ar¹)₂、S(=O)Ar¹、S(=O)₂Ar¹、CN、NO₂、Si(R²)₃、B(OR²)₂、OSO₂R²、1~40個の炭素原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基または3~40個の炭素原子を有する分岐あるいは環式アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基（夫々は、1以上のR²基により置換されてよく、1以上の隣接しないCH₂基は、R²C=CR²、C-C、Si(R²)₂、Ge(R²)₂、Sn(R²)₂、C=O、C=S、C=Se、P(=O)(R²)、SO、SO₂、O、SもしくはCONR²で置き換えられてよく、また、1以上の水素原子は、D、F、Cl、Br、I、CNもしくはNO₂で置き換えられてよい

10

20

30

40

50

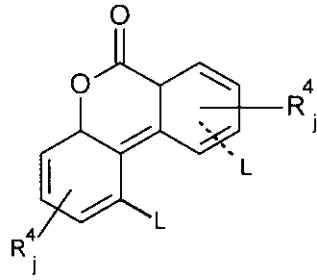
。)、夫々、1以上の R^2 基で置換されてよい5~40個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、1以上の R^2 基で置換されてよい5~40個の芳香族環原子を有するアリールオキシもしくはヘテロアリールオキシ基(ここで、 R^2 と Ar^1 基は、式(I)に対して上記与えられる定義を有する。)またはこれらの構造の組み合わせであり;同時に2個以上の隣接する R^4 置換基は、互いに、 R^4 が結合する環と共に、 R^4 が隣接する環と共にまたはRもしくは R^1 基と共に、モノ-あるいはポリ環式の脂肪族もしくは芳香族環構造を形成してもよい。

【0052】

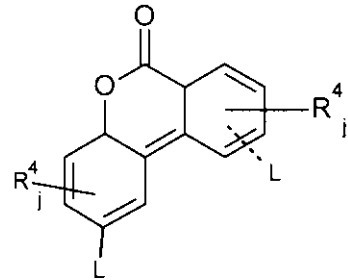
特に好ましい化合物は、以下の式(X)、(XI)(XII)、(XIII)、(XIV)、(XV)、(XVI)および/または(XVII)の構造を含む化合物であり:

【0053】

【化6】

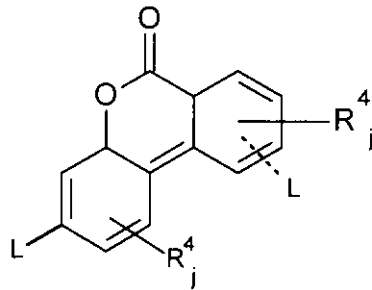


式 (X)

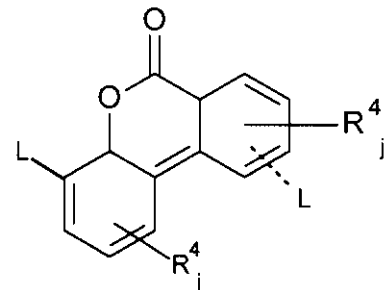


式 (XI)

10

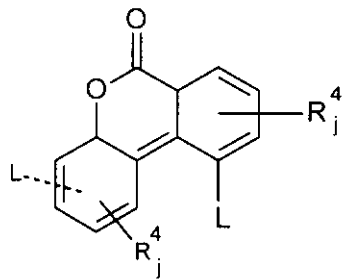


式 (XII)

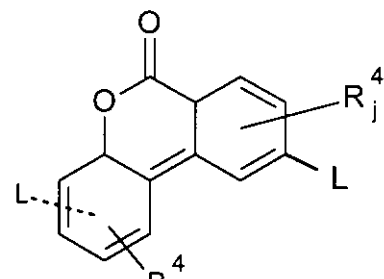


式 (XIII)

20

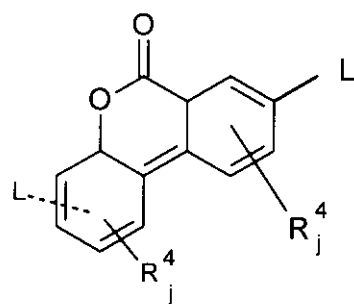


式 (XIV)

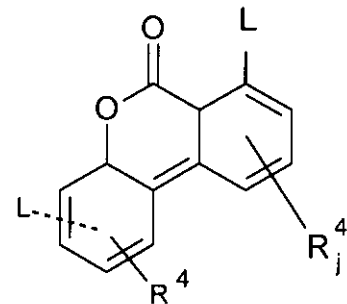


式 (XV)

30



式 (XVI)



式 (XVII)

40

【0054】

式中、示された記号 R、R¹、L および添え字 m と n は、式 (I) に対して上記説明される定義を有し、添え字 j は、出現毎に、同一であるか異なり、0、1、2 または 3 であり、および

R⁴ は、出現毎に、同一であるか異なり、H、D、F、Cl、Br、I、CHO、C(=O)Ar¹、P(=O)(Ar¹)₂、S(=O)Ar¹、S(=O)₂Ar¹、CN、NO₂、Si(R²)₃、B(OR²)₂、OSO₂R²、1~40個の炭素原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基または3~40個の炭素原子を有する分岐あるいは環式アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基(夫々は、1以上の

50

R² 基により置換されてよく、1以上の隣接しないCH₂基は、R²C=CR²、C-C、Si(R²)₂、Ge(R²)₂、Sn(R²)₂、C=O、C=S、C=Se、P(=O)(R²)、SO、SO₂、O、SもしくはCONR²で置き換えられてよく、また、1以上の水素原子は、D、F、Cl、Br、I、CNもしくはNO₂で置き換えられてよい。)、夫々、1以上のR²基で置換されてよい5~40個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、1以上のR²基で置換されてよい5~40個の芳香族環原子を有するアリアルキシもしくはヘテロアリアルキシ基(ここで、R²とAr¹基は、式(I)に対して上記与えられる定義を有する。)またはこれらの構造の組み合わせであり;同時に2個以上の隣接するR⁴置換基は、互いに、R⁴が結合する環と共に、R⁴が隣接する環と共に、モノ-あるいはポリ環式の脂肪族もしくは芳香族環構造を形成してもよい。

10

【0055】

式(II)、(III)、(IV)、(V)、(VI)、(VII)、(VIII)および/または(IX)と式(X)、(XI)、(XII)、(XIII)、(XIV)、(XV)、(XVI)および/または(XVII)が、式(I)中のL基の定義に対応する基ではない場合が好まれることがある。

【0056】

好ましくは、式(I)の構造を有する化合物は、Rおよび/またはR¹基を含み、ここで、これらのRおよび/またはR¹基は、同一であるか異なり、好ましくは、H、D、F、Br、I、CN、Si(R²)₃、B(OR²)₂、C(=O)Ar¹、1~10個の炭素原子を有する直鎖アルキル基、1~10個の炭素原子を有する直鎖アルコキシ基、2~10個の炭素原子を有するアルケニル基、3~10個の炭素原子を有する分岐あるいは環式アルコキシ基、3~10個の炭素原子を有する分岐あるいは環式アルキル基(夫々は、1以上のR²基により置換されてよく、また、1以上の水素原子は、DもしくはFで置き換えられてよい。)、各場合に、1以上のR²基で置換されてよい5~30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造より成る基から選ばれ;同時に2個の隣接するRもしくはR¹置換基は、互いに、RもしくはR¹基と一緒に、RもしくはR¹基とR²基と一緒に、モノ-あるいはポリ環式の脂肪族もしくは芳香族環構造を形成してもよい。より好ましくは、これらのRまたはR¹基は、同一であるか異なり、H、D、F、1~6個の炭素原子を有する直鎖アルコキシ基、3~10個の炭素原子を有する分岐あるいは環式アルコキシ基、1~6個の炭素原子を有する直鎖アルキル基、3~10個の炭素原子を有する分岐あるいは環式アルキル基(1以上の水素原子は、DもしくはFで置き換えられてよい。)、各場合に、1以上のR²基で置換されてよい5~24個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造より成る基から選ばれ;同時に2個の隣接するRもしくはR¹置換基は、互いに、RもしくはR¹基と一緒に、RもしくはR¹基とR²基と一緒に、モノ-あるいはポリ環式の脂肪族もしくは芳香族環構造を形成してもよい。より好ましくは、式(I)におけるRおよび/またはR¹基の少なくとも一つは、3個までのR²基で置換されてよい6~18個の炭素原子を有するアリアルもしくはヘテロアリアル基であってよい。

20

30

【0057】

好ましくは、式(I)の構造を有する化合物は、R²基を含み、ここで、これらのR²基は、出現毎に、同一であるか異なり、好ましくは、H、D、F、Cl、Br、I、CHO、C(=O)Ar¹、P(=O)(Ar¹)₂、S(=O)Ar¹、S(=O)₂Ar¹、CN、NO₂、Si(R³)₃、B(OR³)₂、OSO₂R³、1~10個の炭素原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基、3~10個の炭素原子を有する分岐あるいは環式アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基(夫々は、1以上のR³基により置換されてよく、1以上の隣接しないCH₂基は、C-C、Si(R³)₂、Ge(R³)₂、Sn(R³)₂、C=O、C=S、C=Se、P(=O)(R³)、SO、SO₂、O、SもしくはCONR³で置き換えられてよく、また、1以上の水素原子は、D、F、Cl、Br、I、CNもしくはNO₂で置き換えられてよい。)、各場合

40

50

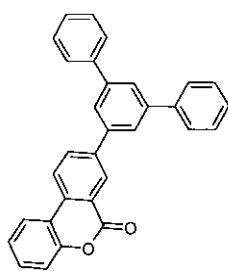
に、1以上の R^3 基で置換されてよい5～24個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、1以上の R^3 基で置換されてよい5～24個の芳香族環原子を有するアリールオキシもしくはヘテロアリールオキシ基またはこれら構造の組み合わせより成る基から選ばれ；ここで、2個以上の隣接する R^2 置換基は、互いに、モノ-あるいはポリ環式の脂肪族もしくは芳香族環構造を形成してもよい。より好ましくは、式(I)におけ R^2 基の少なくとも一つは、3個までの R^2 基で置換されてよい6～18個の炭素原子を有するアリールもしくはヘテロアリール基であってよい。

【0058】

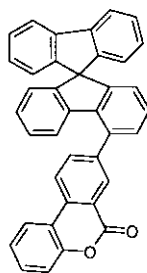
特に好ましい化合物は、以下の式1～247による構造を含む。

【0059】

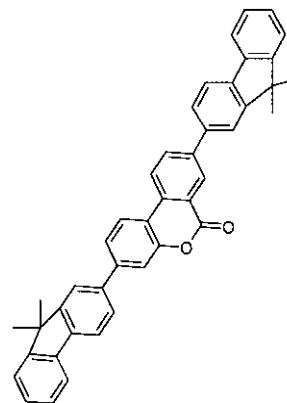
【化7-1】



式 1



式 2



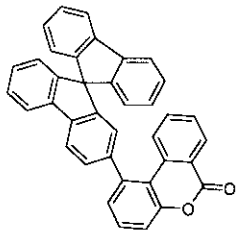
式 3

【0060】

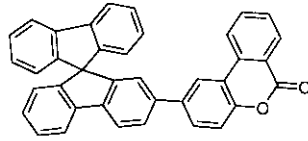
10

20

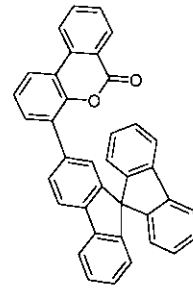
【化 7 - 2】



式 4

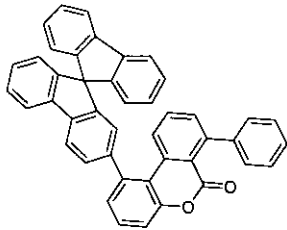


式 5

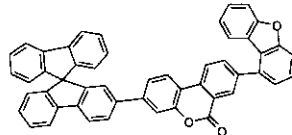


式 6

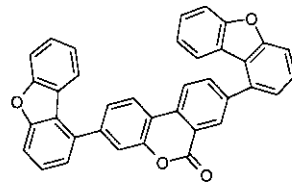
10



式 7

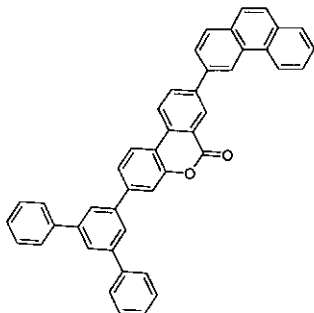


式 8

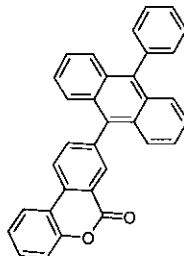


式 9

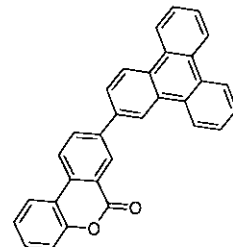
20



式 10

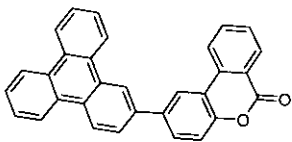


式 11

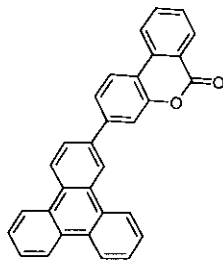


式 12

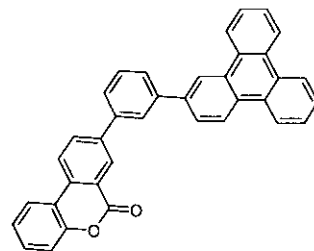
30



式 13



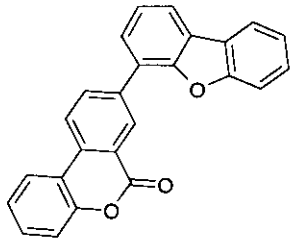
式 14



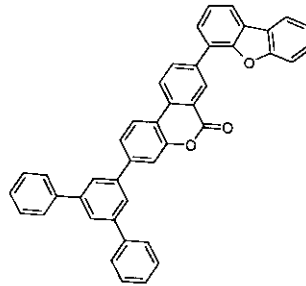
式 15

【 0 0 6 1 】

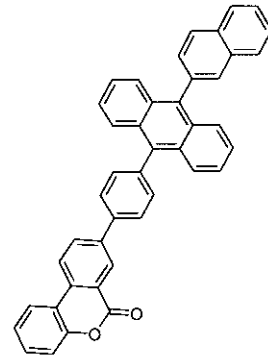
【化 7 - 3】



式 16

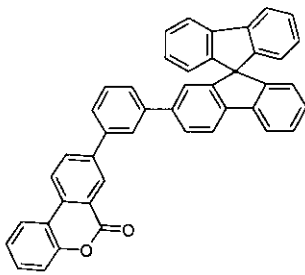


式 17

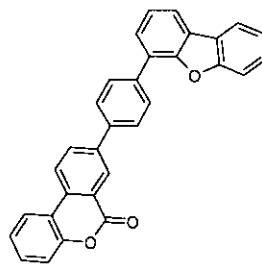


式 18

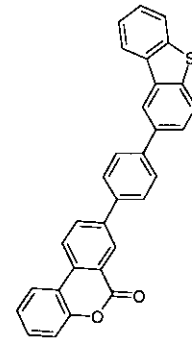
10



式 19

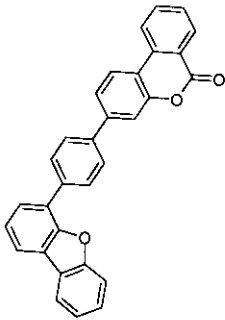


式 20

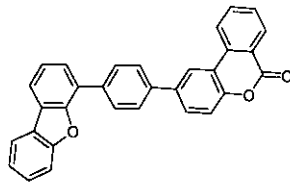


式 21

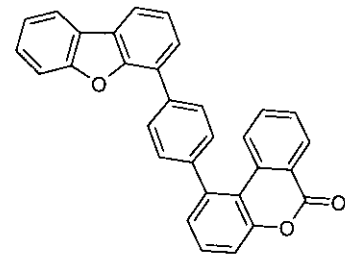
20



式 22

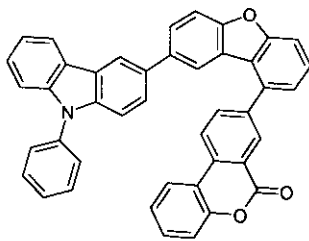


式 23

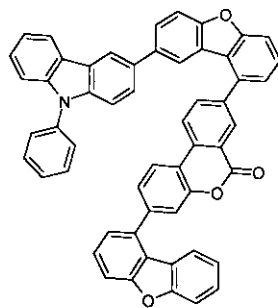


式 24

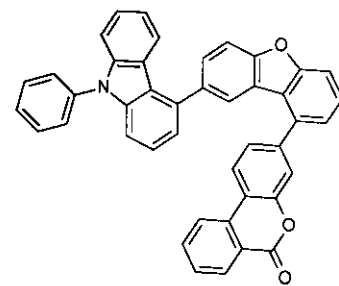
30



式 25



式 26

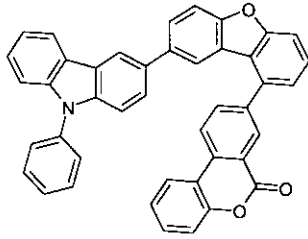


式 27

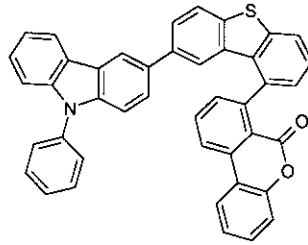
40

【 0 0 6 2 】

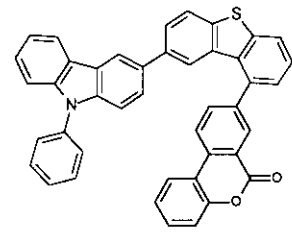
【化 7 - 4】



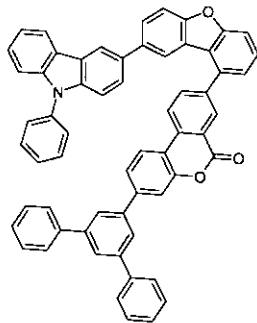
式 28



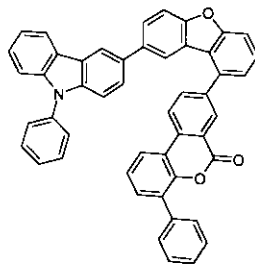
式 29



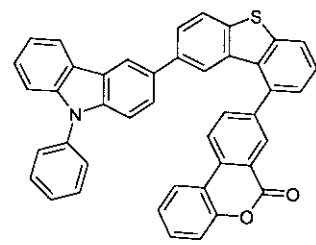
式 30



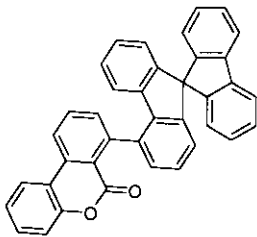
式 31



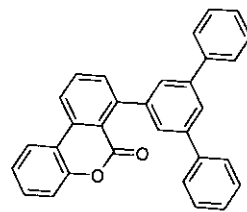
式 32



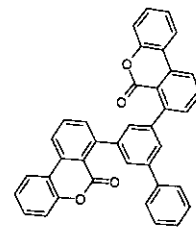
式 33



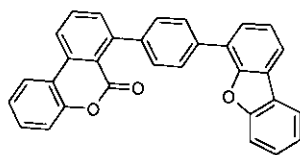
式 34



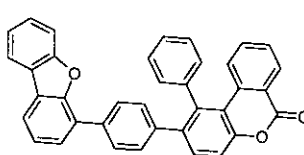
式 35



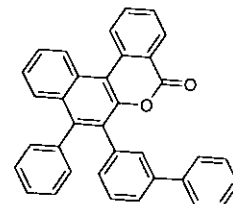
式 36



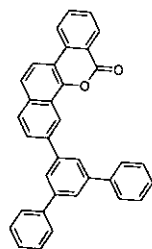
式 37



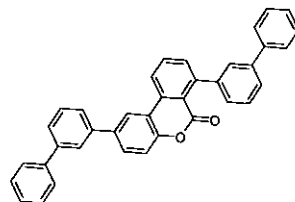
式 38



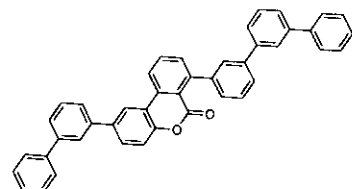
式 39



式 40



式 41



式 42

10

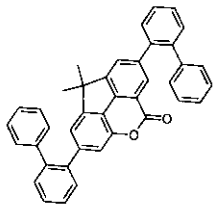
20

30

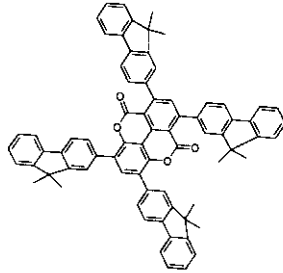
40

【 0 0 6 3 】

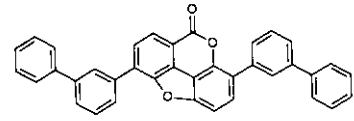
【化 7 - 5】



式 43

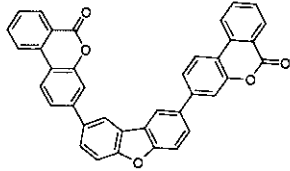


式 44

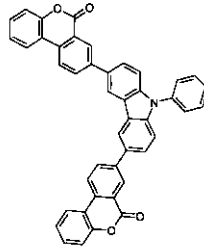


式 45

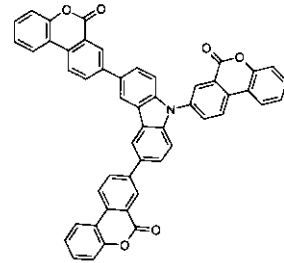
10



式 46

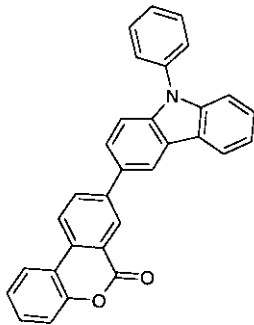


式 47

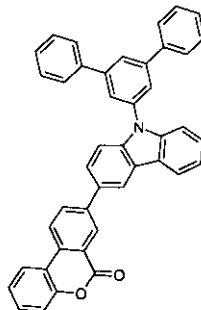


式 48

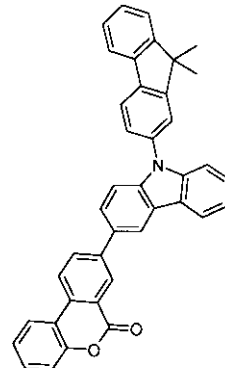
20



式 49



式 50

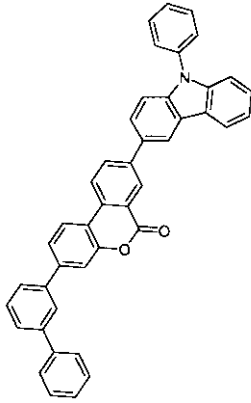


式 51

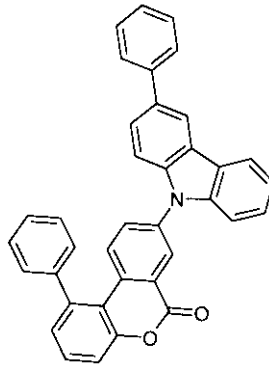
30

【 0 0 6 4 】

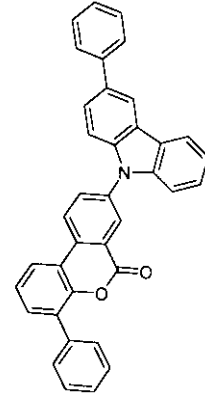
【化 7 - 6】



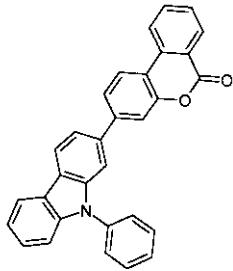
式 52



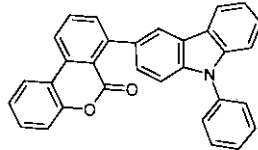
式 53



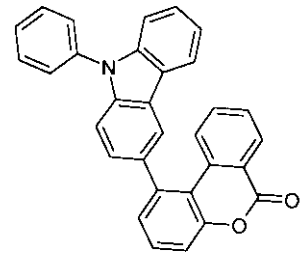
式 54



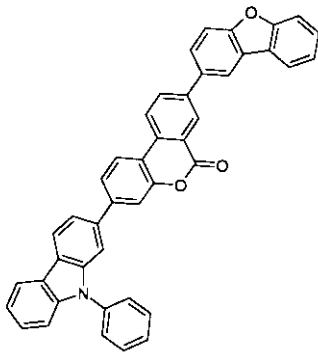
式 55



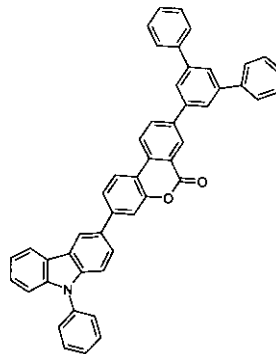
式 56



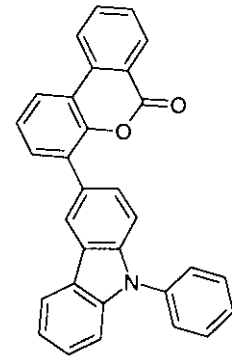
式 57



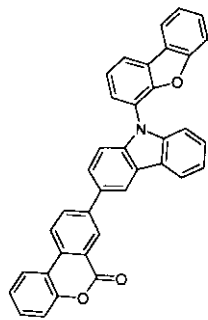
式 58



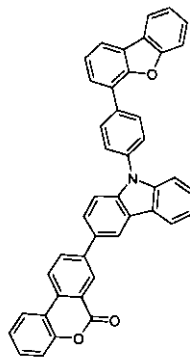
式 59



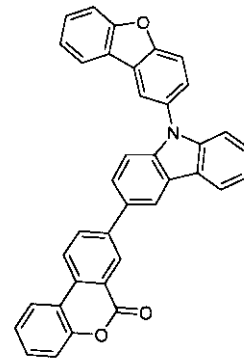
式 60



式 61



式 62



式 63

10

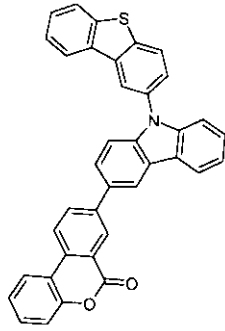
20

30

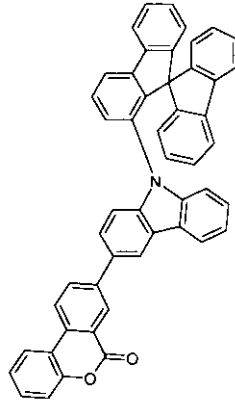
40

【 0 0 6 5 】

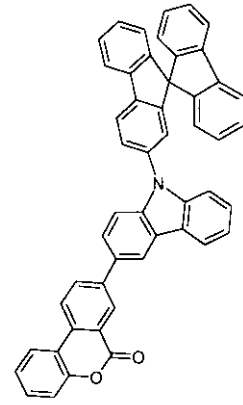
【化 7 - 7】



式 64

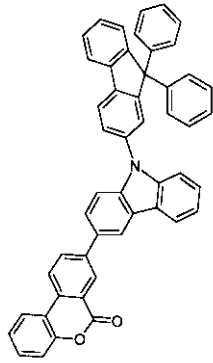


式 65

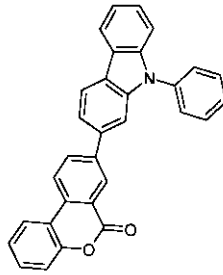


式 66

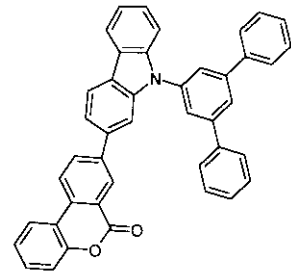
10



式 67

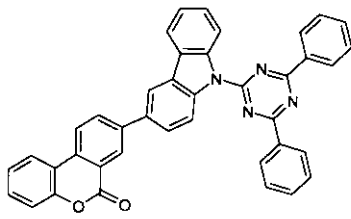


式 68

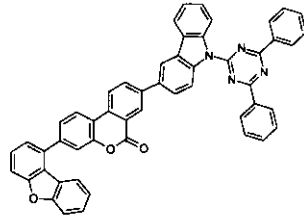


式 69

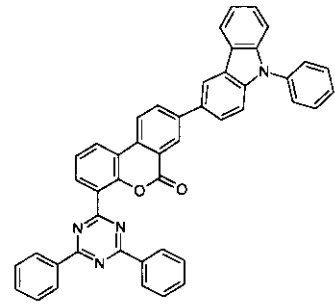
20



式 70



式 71

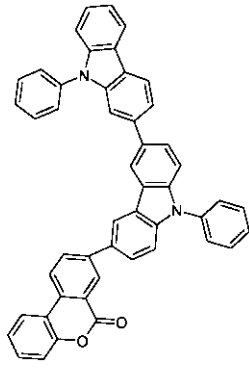


式 72

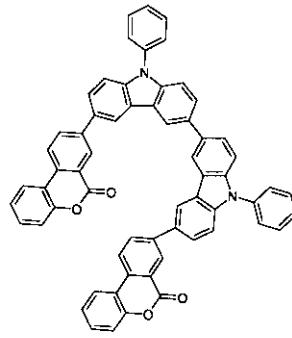
30

【 0 0 6 6 】

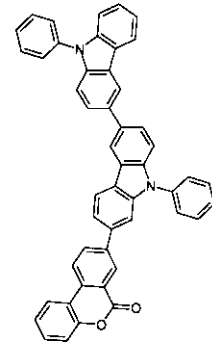
【化 7 - 8】



式 73

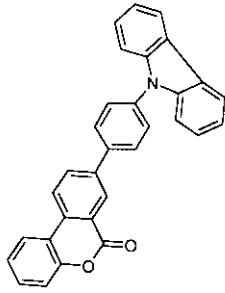


式 74

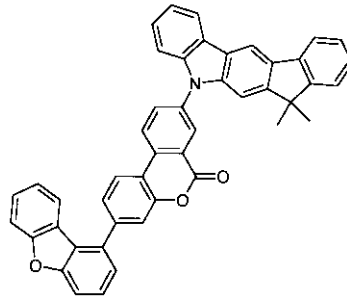


式 75

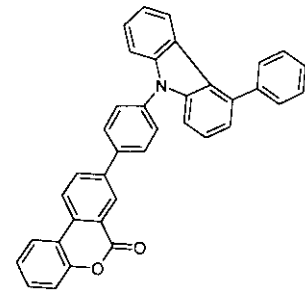
10



式 76

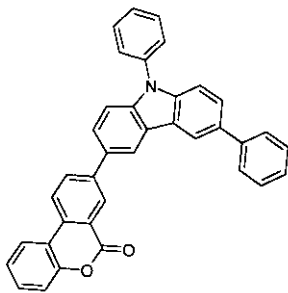


式 77

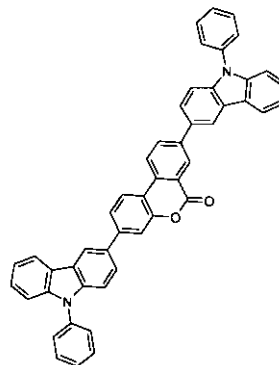


式 78

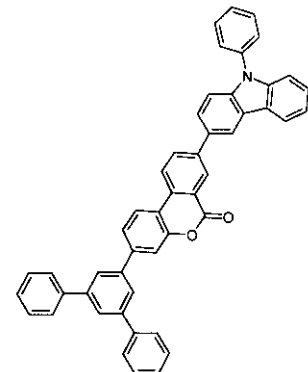
20



式 79

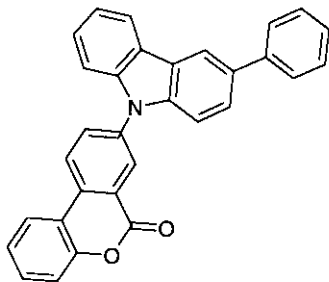


式 80

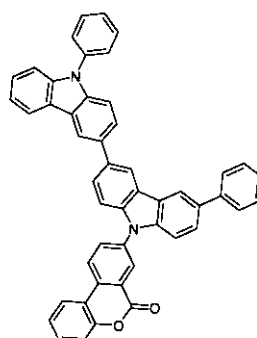


式 81

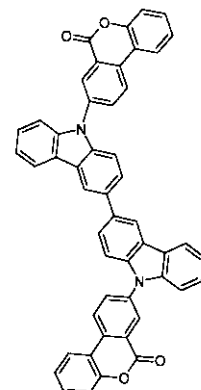
30



式 82



式 83

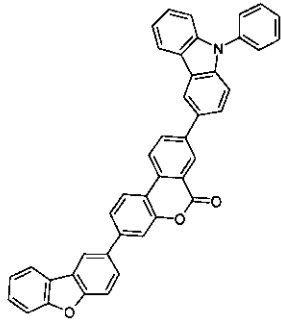


式 84

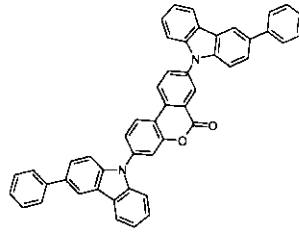
40

【 0 0 6 7 】

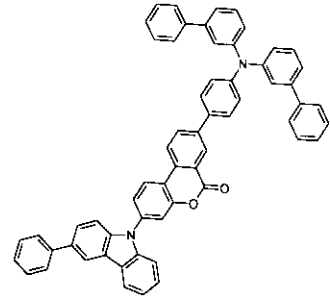
【化 7 - 9】



式 85

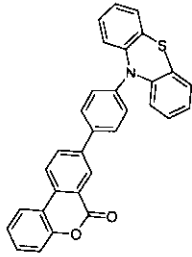


式 86

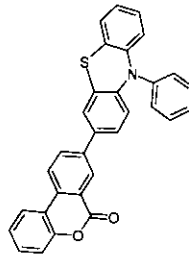


式 87

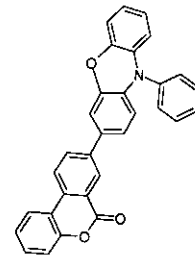
10



式 88

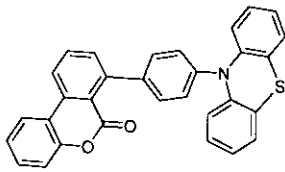


式 89

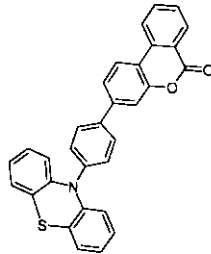


式 90

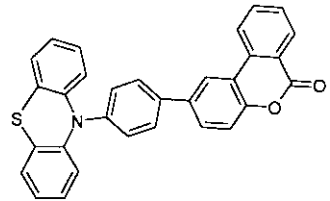
20



式 91

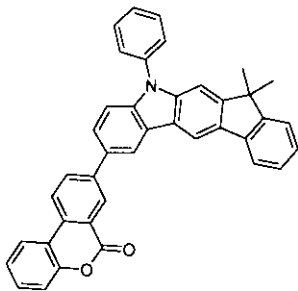


式 92

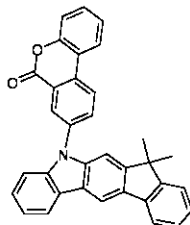


式 93

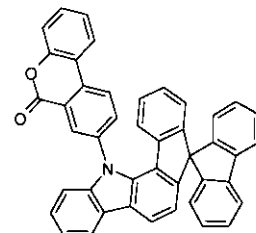
30



式 94



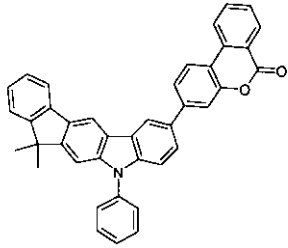
式 95



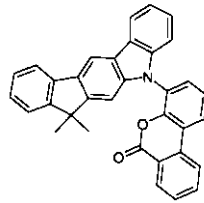
式 96

【 0 0 6 8 】

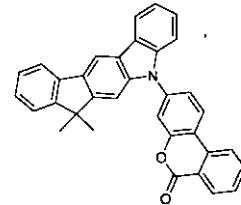
【化 7 - 1 0】



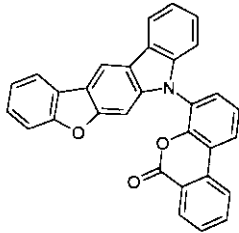
式 97



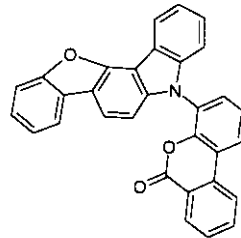
式 98



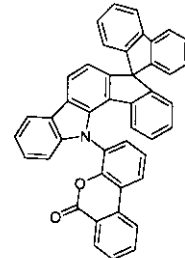
式 99



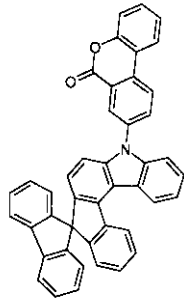
式 100



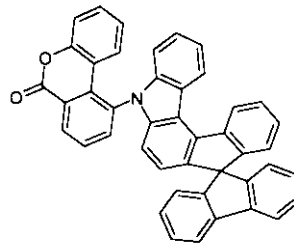
式 101



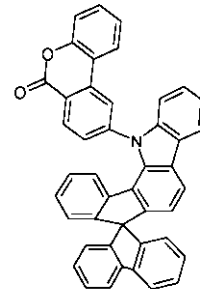
式 102



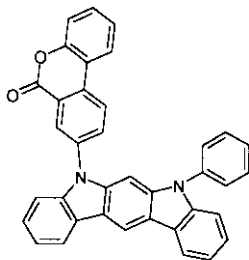
式 103



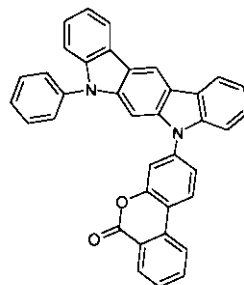
式 104



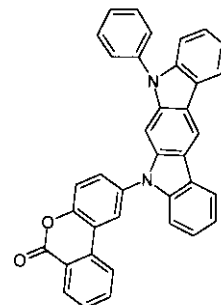
式 105



式 106



式 107



式 108

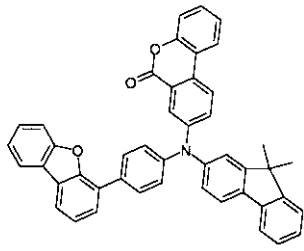
【 0 0 6 9】

10

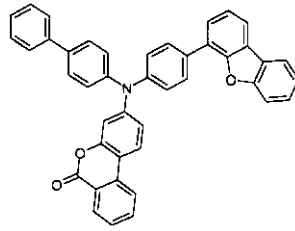
20

30

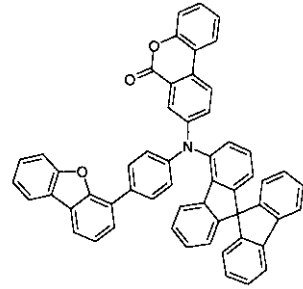
【化 7 - 1 1】



式 109

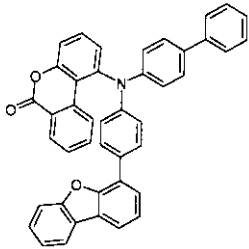


式 110

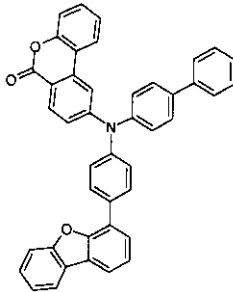


式 111

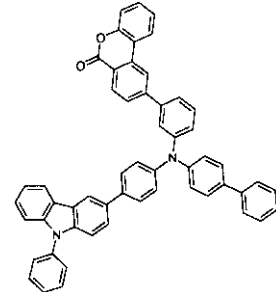
10



式 112

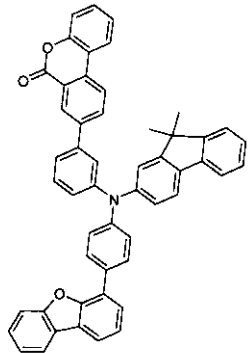


式 113

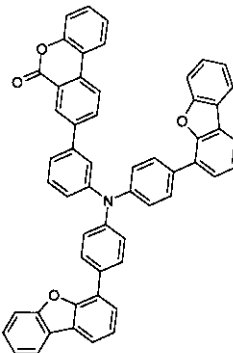


式 114

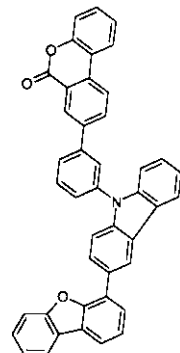
20



式 115

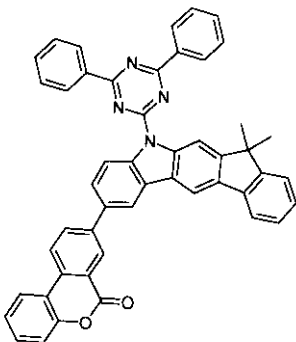


式 116

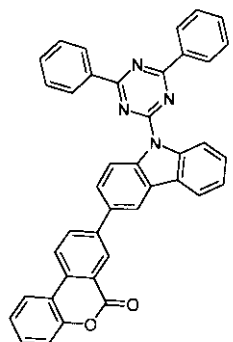


式 117

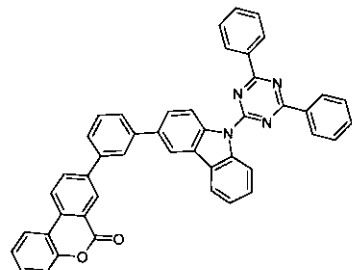
30



式 118



式 119

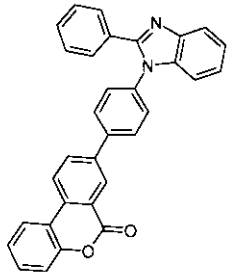


式 120

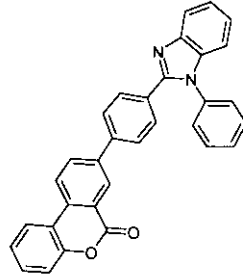
40

【 0 0 7 0 】

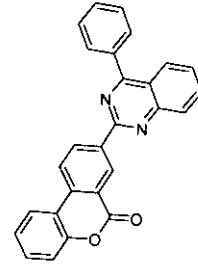
【化 7 - 1 2】



式 121

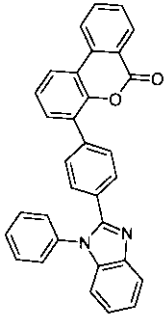


式 122

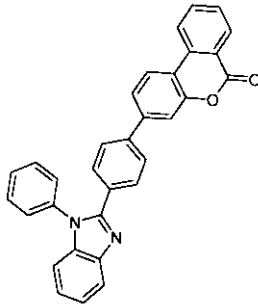


式 123

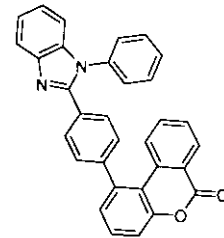
10



式 124

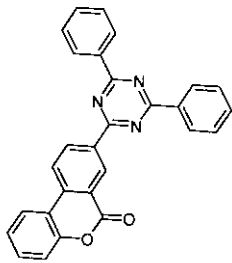


式 125

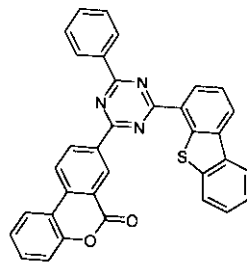


式 126

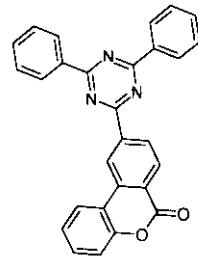
20



式 127

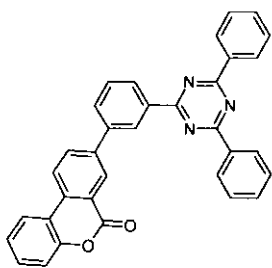


式 128

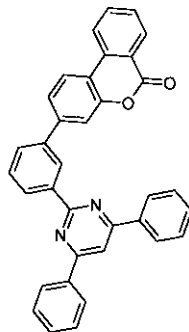


式 129

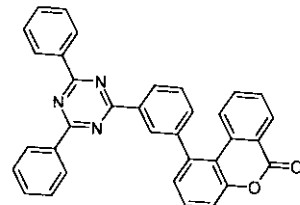
30



式 130



式 131

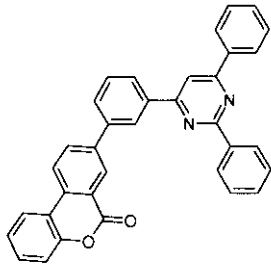


式 132

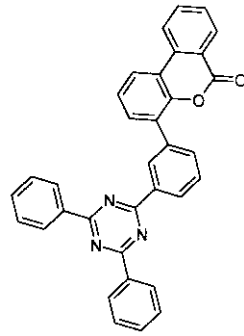
40

【 0 0 7 1】

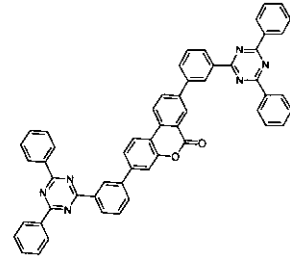
【化 7 - 1 3】



式 133

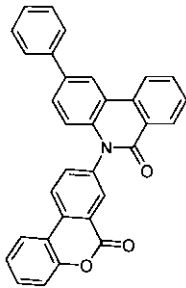


式 134

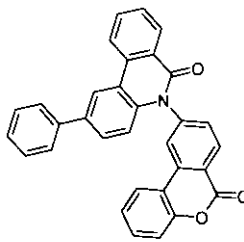


式 135

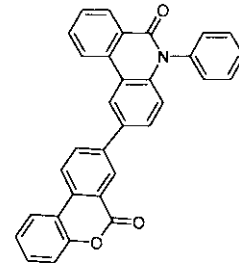
10



式 136

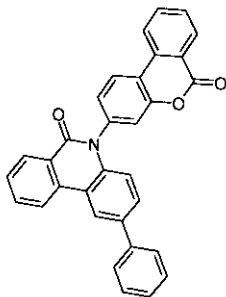


式 137

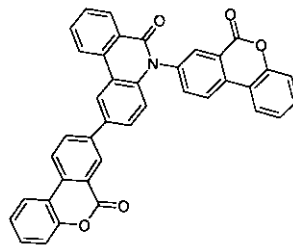


式 138

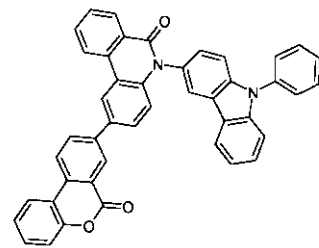
20



式 139

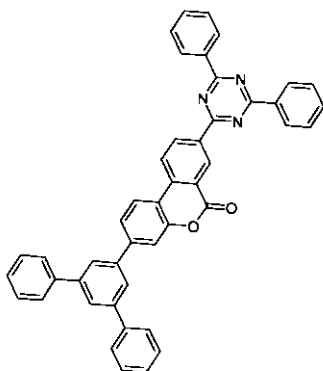


式 140

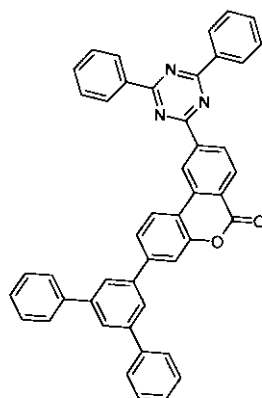


式 141

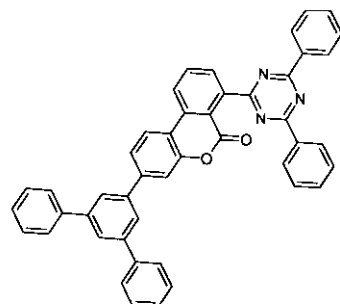
30



式 142



式 143

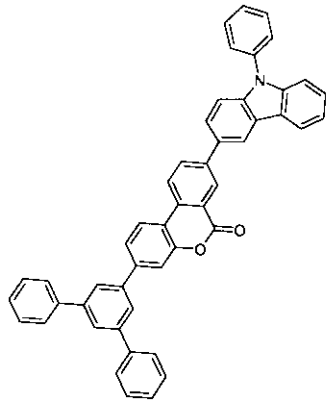


式 144

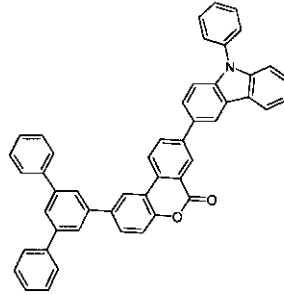
40

【 0 0 7 2】

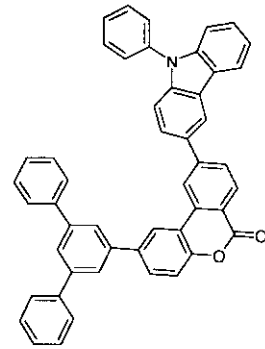
【化 7 - 1 4】



式 145

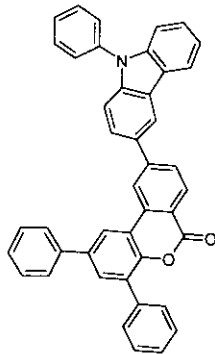


式 146

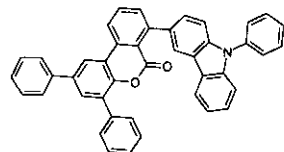


式 147

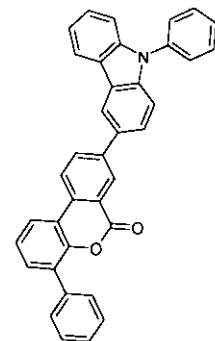
10



式 148

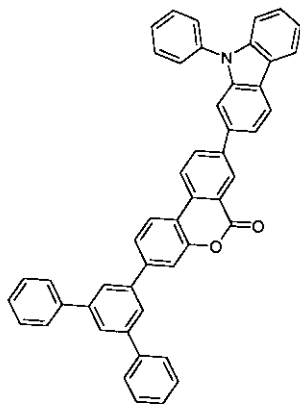


式 149

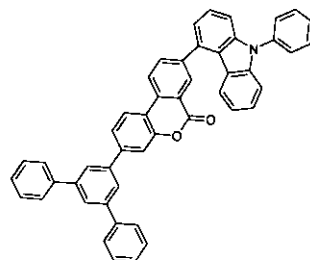


式 150

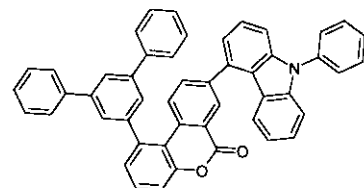
20



式 151



式 152

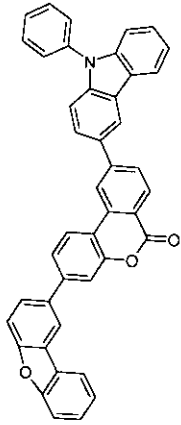


式 153

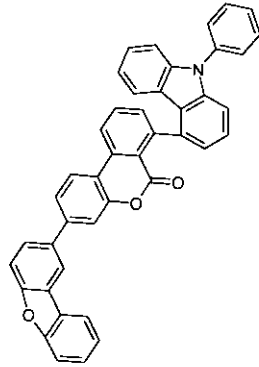
30

【 0 0 7 3】

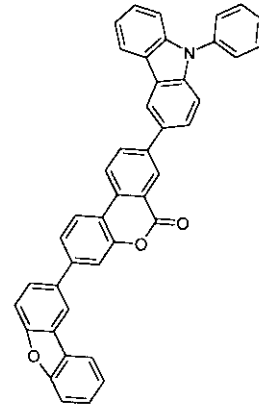
【化 7 - 1 5】



式 154

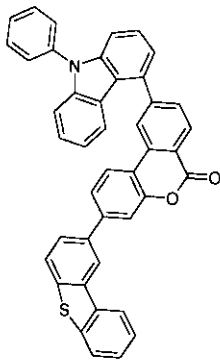


式 155

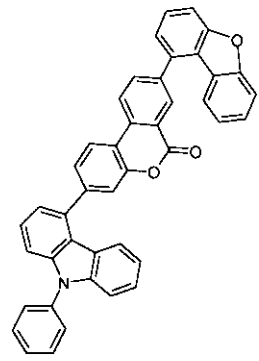


式 156

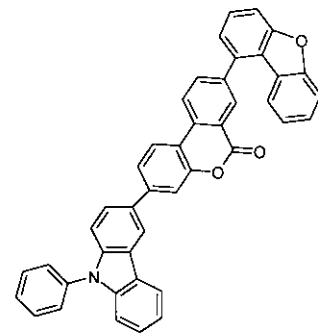
10



式 157

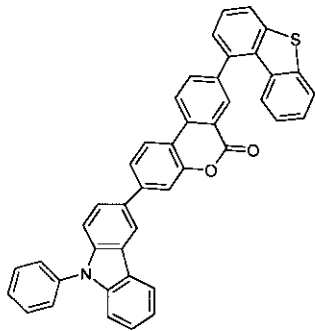


式 158

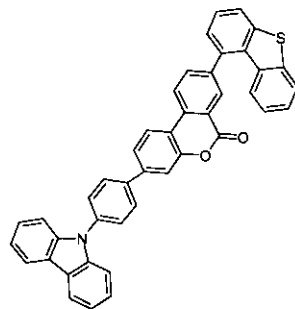


式 159

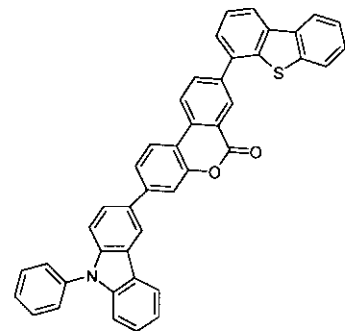
20



式 160



式 161

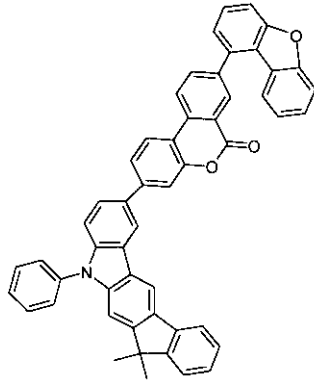


式 162

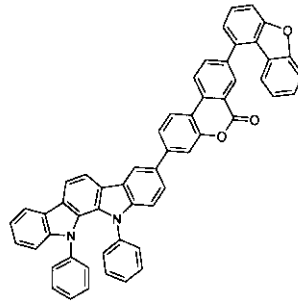
30

【 0 0 7 4】

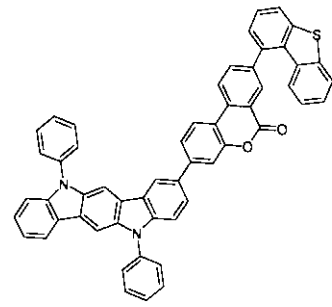
【化 7 - 1 6】



式 163

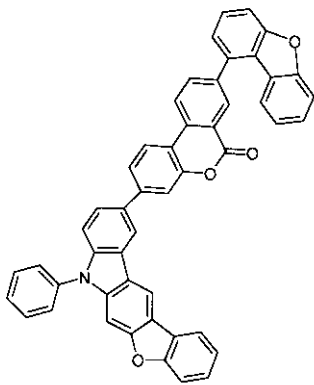


式 164

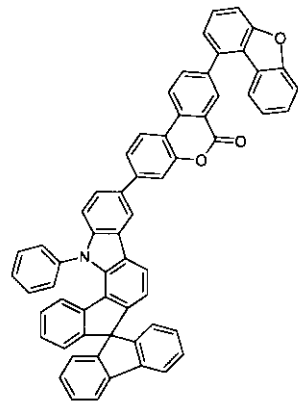


式 165

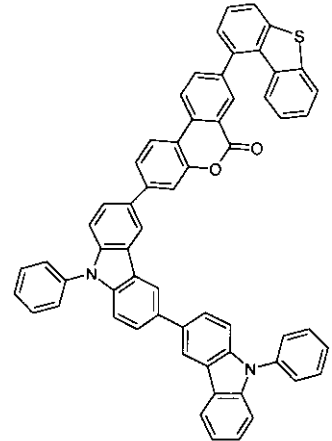
10



式 166

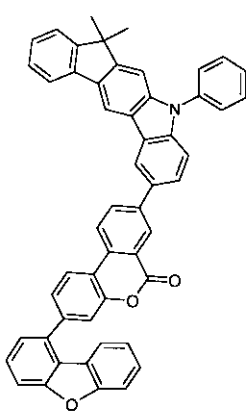


式 167

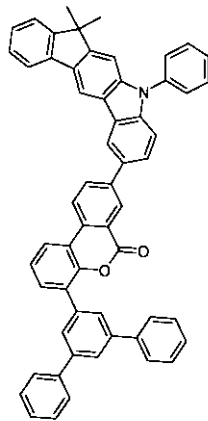


式 168

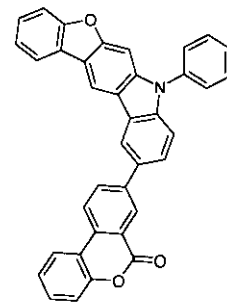
20



式 169



式 170



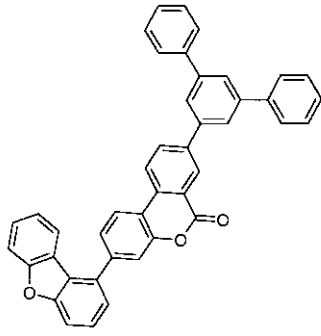
式 171

30

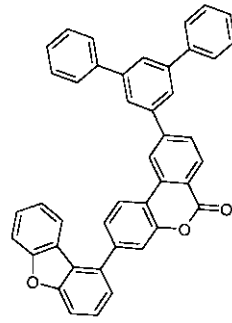
【 0 0 7 5】

40

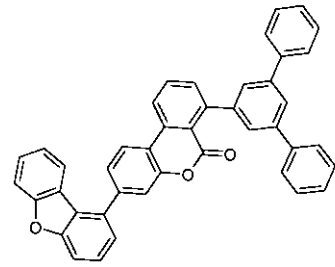
【化 7 - 1 7】



式 172

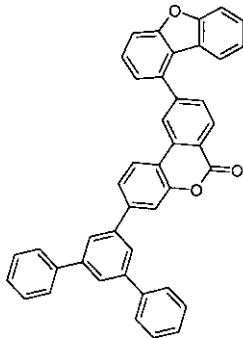


式 173

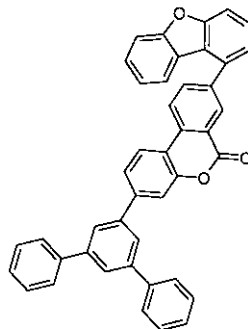


式 174

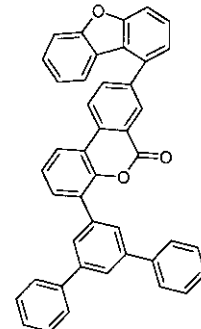
10



式 172

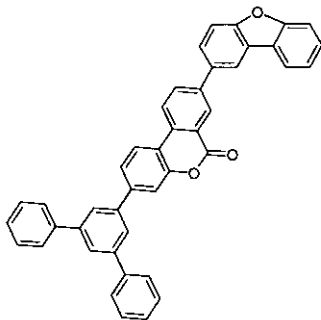


式 173

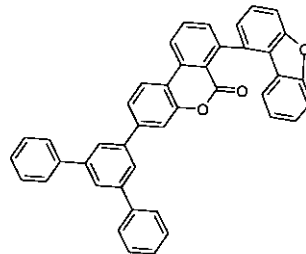


式 174

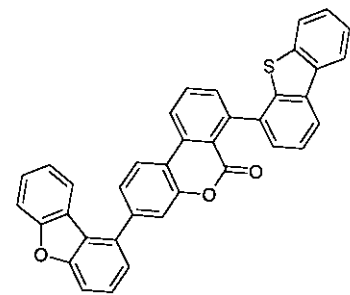
20



式 175

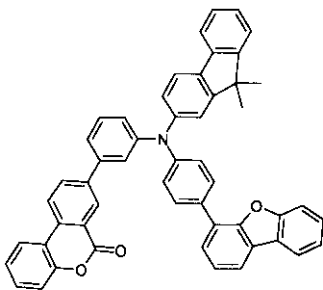


式 176

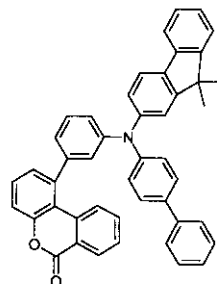


式 177

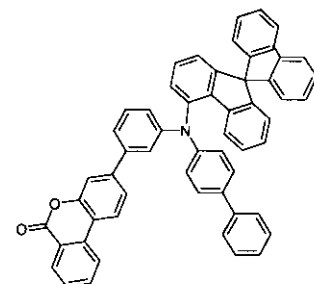
30



式 178



式 179

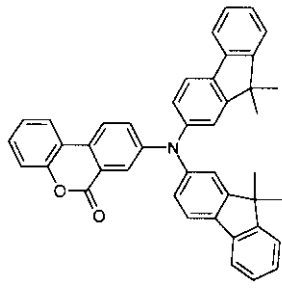


式 180

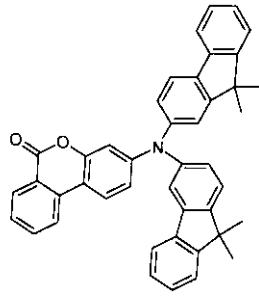
40

【 0 0 7 6】

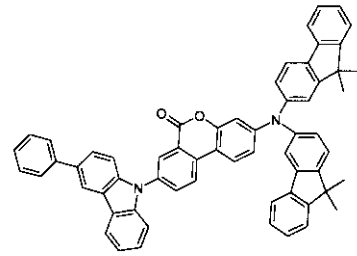
【化 7 - 1 8】



式 181

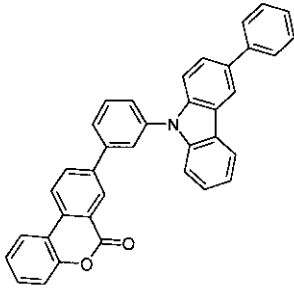


式 182

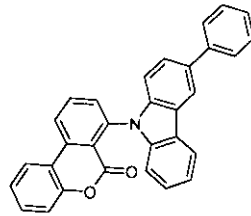


式 183

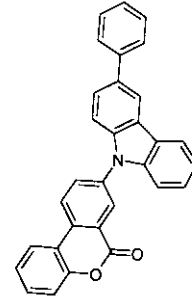
10



式 184

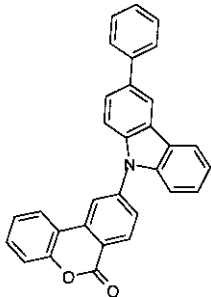


式 185

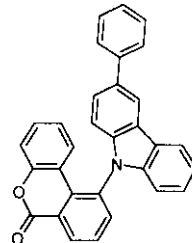


式 186

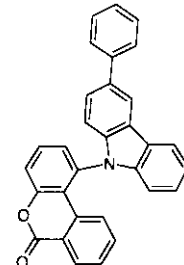
20



式 187

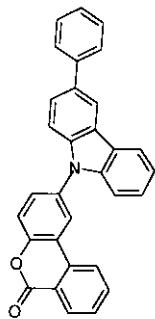


式 188

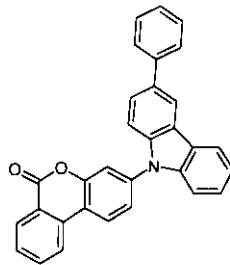


式 189

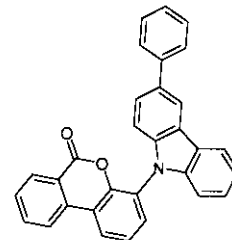
30



式 190



式 191

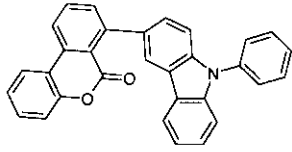


式 192

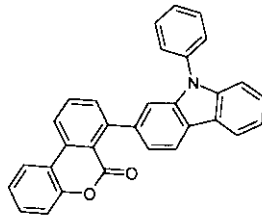
40

【 0 0 7 7 】

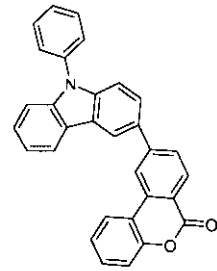
【化 7 - 1 9】



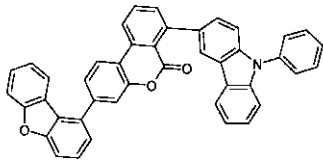
式 193



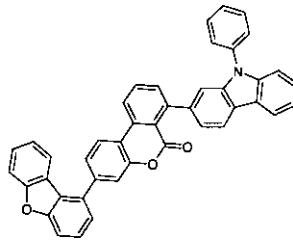
式 194



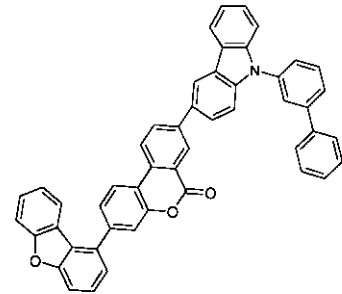
式 195



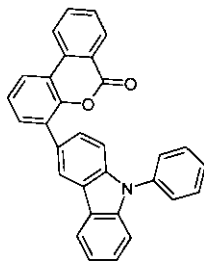
式 196



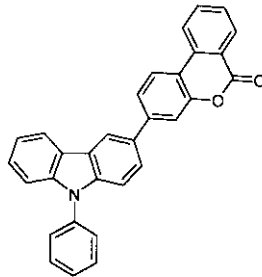
式 197



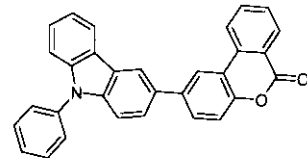
式 198



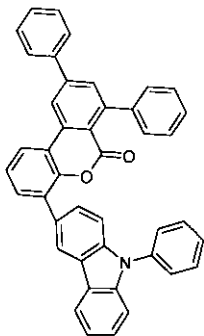
式 199



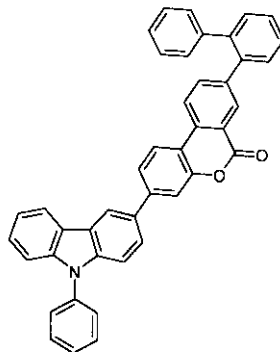
式 200



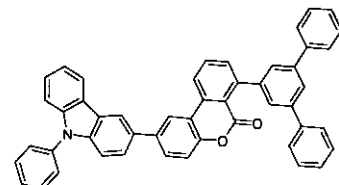
式 201



式 202



式 203



式 204

【 0 0 7 8】

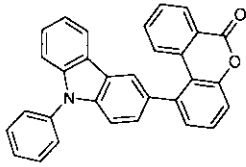
10

20

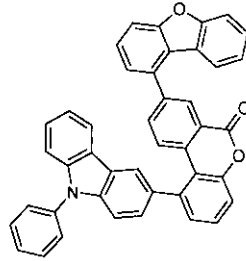
30

40

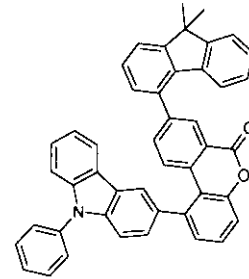
【化 7 - 2 0】



式 205

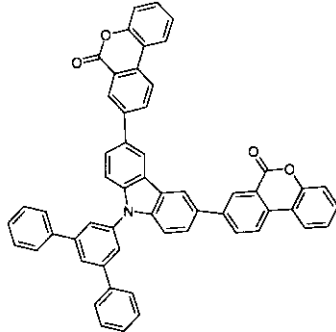


式 206

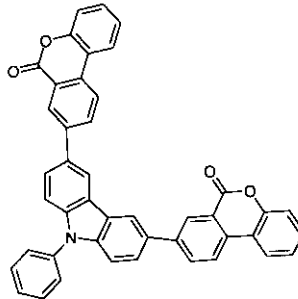


式 207

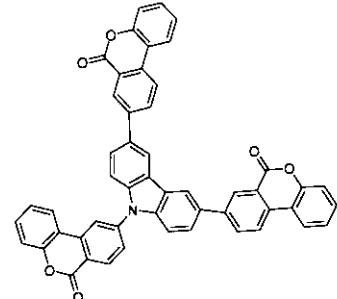
10



式 208

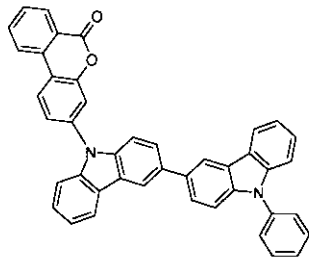


式 209

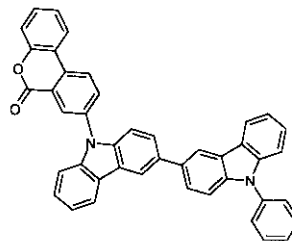


式 210

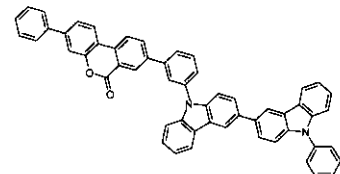
20



式 211

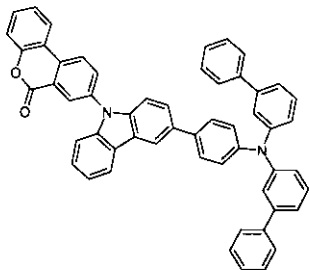


式 212

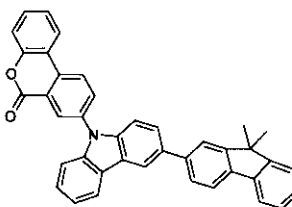


式 213

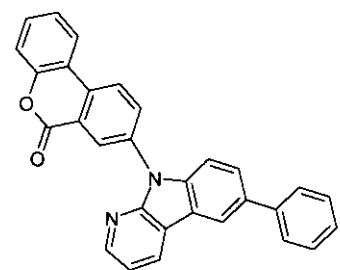
30



式 214



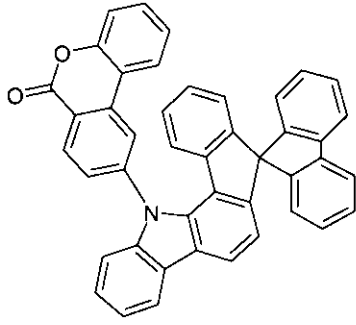
式 215



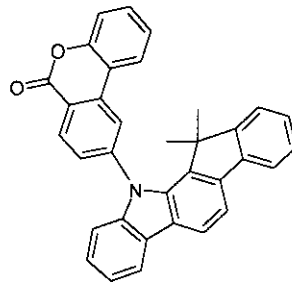
式 216

【 0 0 7 9】

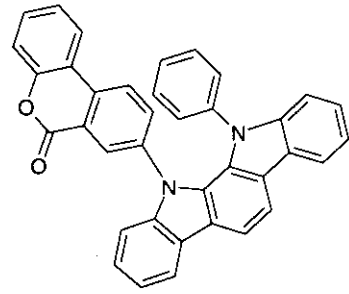
【化 7 - 2 1】



式 217

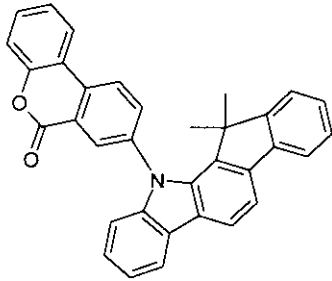


式 218

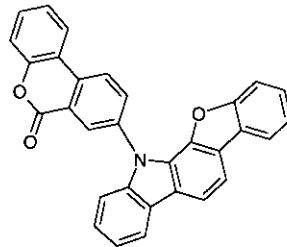


式 219

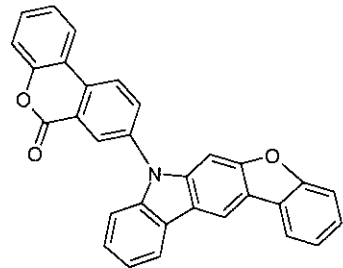
10



式 220

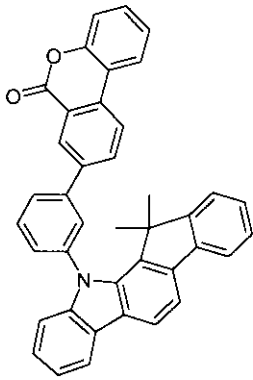


式 221

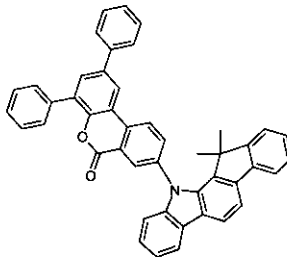


式 222

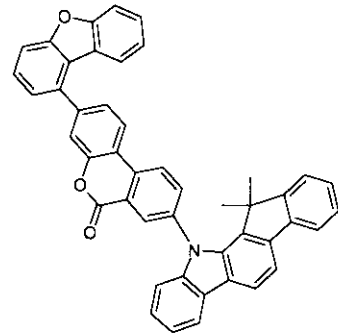
20



式 223



式 224

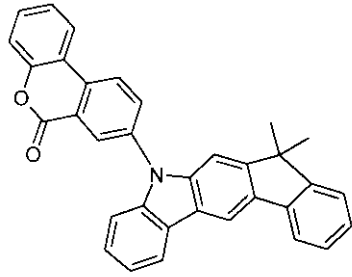


式 225

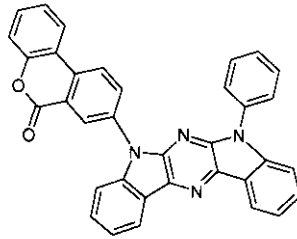
30

【 0 0 8 0 】

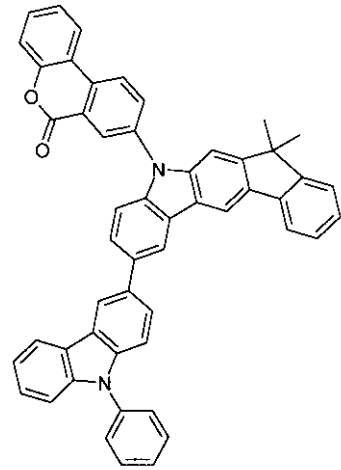
【化 7 - 2 2】



式 226

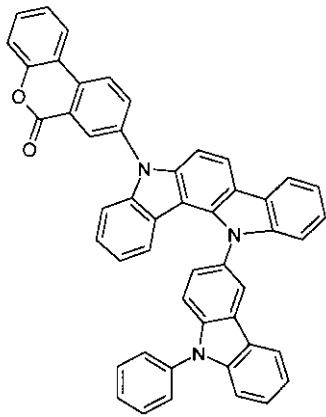


式 227

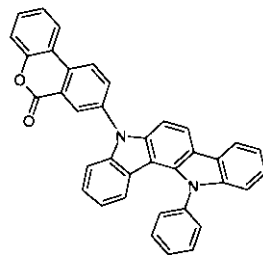


式 228

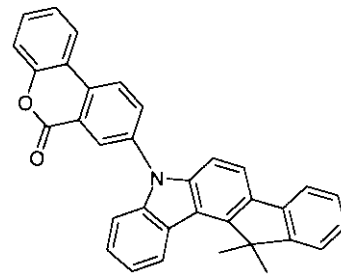
10



式 229

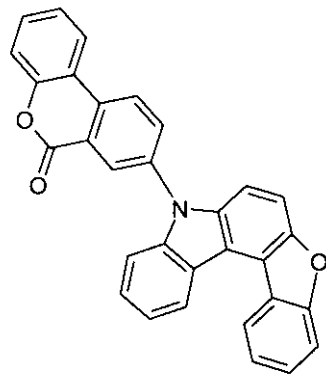


式 230

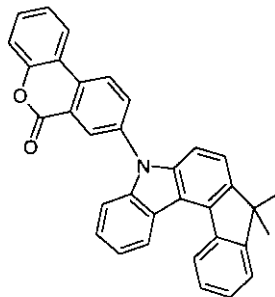


式 231

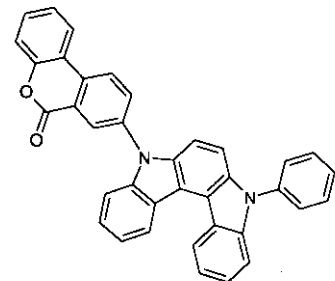
20



式 232



式 233



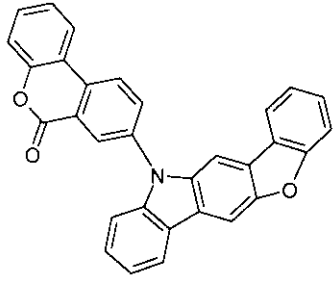
式 234

30

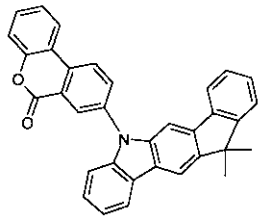
40

【 0 0 8 1】

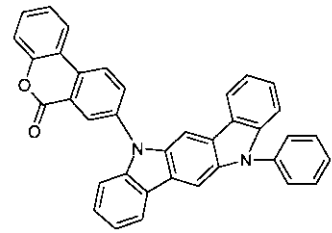
【化 7 - 2 3】



式 235

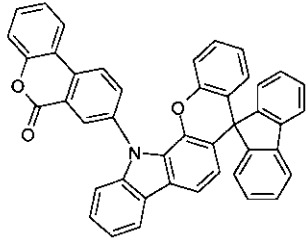


式 236

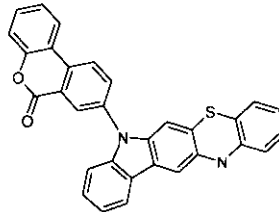


式 237

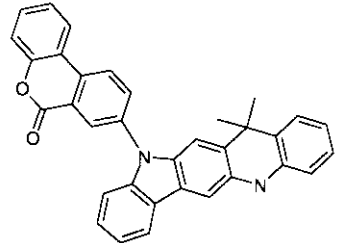
10



式 238

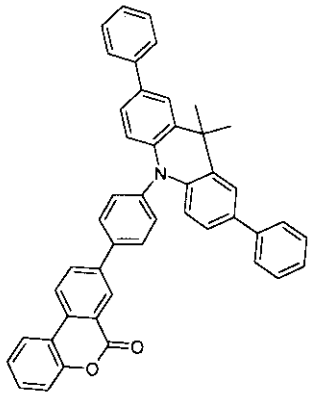


式 239

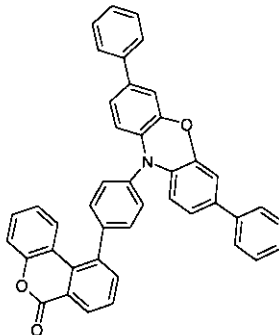


式 240

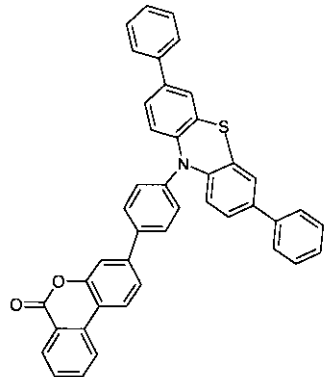
20



式 241

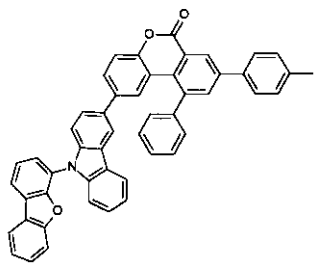


式 242

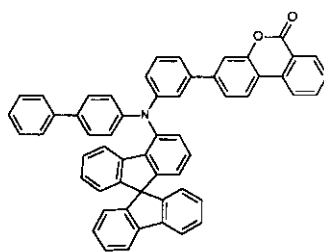


式 243

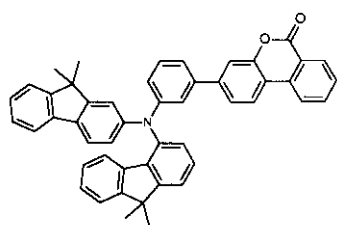
30



式 244



式 245

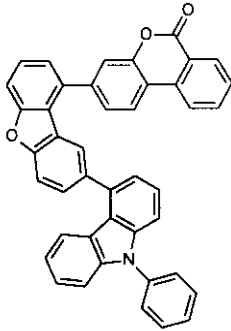


式 246

40

【 0 0 8 2】

【化 7 - 2 4】



式 247

10

【0083】

本発明の化合物の好ましい態様は、例で特に詳細に説明されており、これらの化合物は、本発明の目的のために単独でまたはさらなる化合物と組み合わせて使用することができる。

【0084】

請求項 1 で特定される条件が集められるならば、上記好ましい態様は、所望のとおり互いに組み合わせることができる。本発明の特に好ましい 1 態様では、上記好ましい態様は、同時に適用される。

【0085】

本発明の化合物は、種々のプロセスにより原則として調製することができる。しかしながら、後に説明されるプロセスが特に適していることが見出された。

20

【0086】

したがって、本発明は、さらに、クマリン化合物が、カップリング反応によりアールおよび/またはヘテロアール基に結合する、式 (I) の構造を含む化合物の製造方法を提供する。

【0087】

クマリン化合物は、好ましくは、少なくとも一つのベンゾ[c]クマリン構造要素を含み、特に、対応するジベンゾフラン化合物からの酸化により、または、たとえば、芳香族カルボン酸化合物、たとえば、安息香酸化合物とフェノール化合物との反応による閉環反応により実行することができる。このために必要な条件は、当業者に知られており、例で与えられる特定の詳細が、これらの反応を実行する当業者を支援することであろう。

30

【0088】

C-C 結合形成および/または C-N 結合形成をすべてもたらず特に適切で好ましいカップリング反応は、ブッフバルト、スズキ、ヤマモト、スチル、ヘック、ネギシ、ソノガシラおよびヒヤマによるものである。これらの反応は、広く知られており、例は、当業者にさらなる指針を提供するだろう。

【0089】

以下の全ての合成スキームにおいては、化合物は、構造を単純化するために、少数の置換基を伴って示される。これは、プロセスにおける任意の所望のさらなる置換基の存在を排除しない。

40

【0090】

例示的实施が、以下のスキームにより与えられるが、これらは限定を課すべきつもりではない。個々のスキームの成分工程は、所望のとおり互いに組み合わせられてよい。

【0091】

たとえば、スキーム 1 によれば、ジベンゾフラン化合物から進めて、たとえば、ベンゾ[c]クマリン化合物を酸化により調製することができる。その場合、酸化は、過炭酸ナトリウムにより実施することができる。代替として、反応性プロモ安息香酸から進めて、フェニルボロン酸化合物との閉環反応により反応性ベンゾ[c]クマリン化合物を得ることができる。反応性ベンゾ[c]クマリン化合物から進めて、たとえば、ブッフバルトカップリン

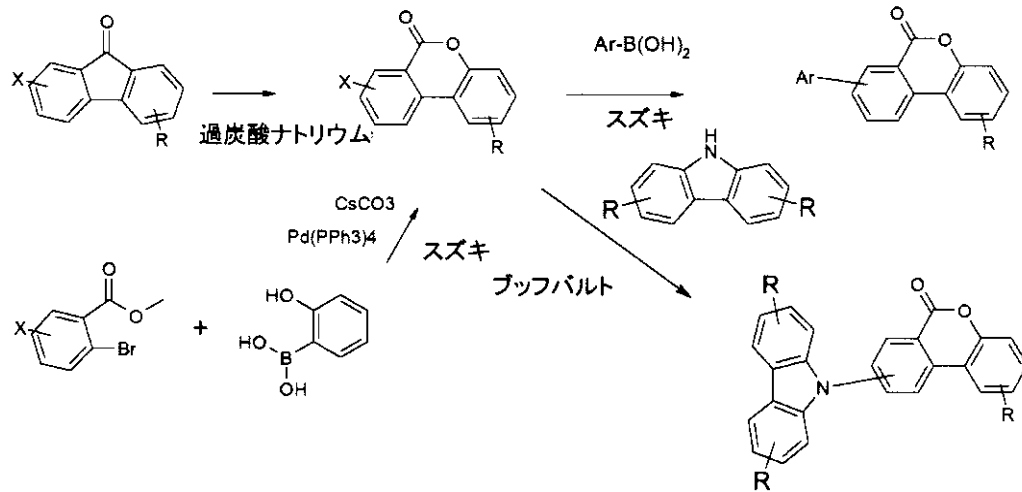
50

グによりカルバゾール構造を結合することができる。さらに、たとえば、スズキ反応により、ベンゾ[c]クマリン化合物上にアリアル基を結合することができる。

【0092】

【化8】

スキーム1



10

【0093】

X = ハロゲンまたはトリフェートであり、ここで、トリフェートは、例で詳細に明らかにされるであろうとおり、エーテルもしくはヒドロキシ基からの中間反応で得ることもできる。

20

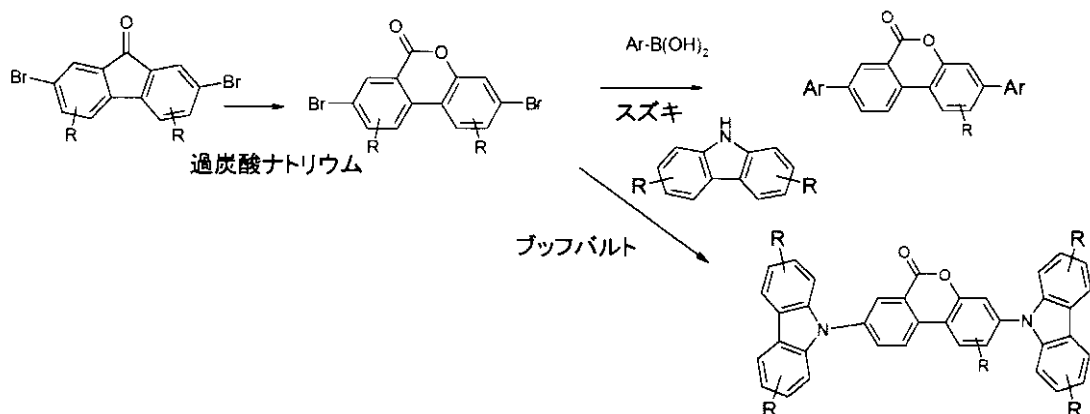
【0094】

スキーム2による反応では、対応する2臭化物から進めて、2置換誘導体の合成が示される。

【0095】

【化9】

スキーム2



30

40

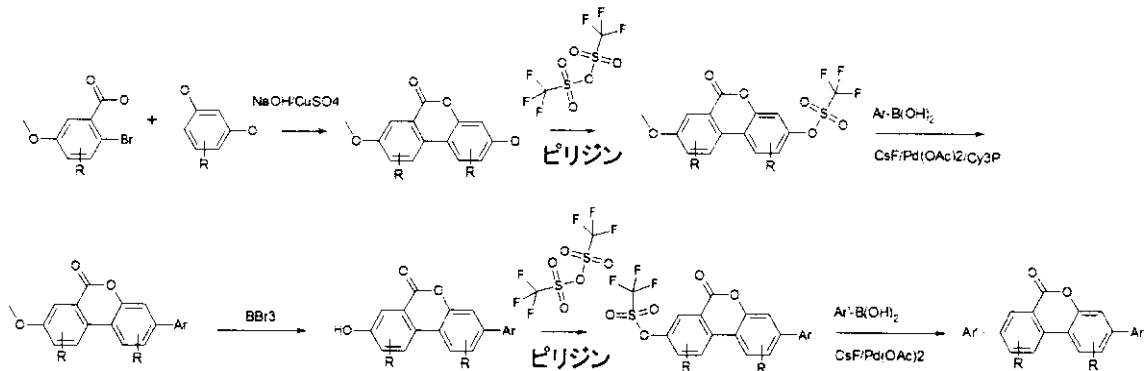
【0096】

スキーム3によれば、2以上の同一か異なる置換基を、対応して異なる反応性の基を有するベンゾ[c]クマリン化合物に段階的に結合することができる。ヒドロキシおよび/またはエーテル基を有する化合物を、好ましくは、この目的のために使用することができる。置換基の位置は、対応する出発材料により固定することができる。

【0097】

【化10】

スキーム3



10

【0098】

本発明の化合物の合成のために示されるプロセスは、例により理解されるべきである。当業者は、技術の当分野の共通知識の範囲内で代替的合成経路を開発することができるであろう。

【0099】

上記詳細な調製プロセスの原理は、主として類似化合物のための文献から知られており、本発明の化合物の調製のために当業者により、簡単に適合することができる。さらなる情報は例に見出すことができる。

20

【0100】

これらのプロセスに、必要であれば、精製、たとえば、再結晶化もしくは昇華を続けることができ、式(I)の構造を含む本発明の化合物を、高純度で、好ましくは、99%超で(^1H NMRおよび/またはHPLCにより測定される)得ることができる。

【0101】

本発明の化合物は、たとえば、比較的長いアルキル基(約4~20個の炭素原子)、特別に、分岐アルキル基または随意に置換されたアリール基、たとえば、キシリル、メチルもしくは分岐テルフェニルあるいはクアテルフェニル基による、適切な置換基を有してもよく、それらは、溶液から錯体を処理することを可能とすることを目的として、通常の有機溶媒、たとえば、トルエンもしくはキシレン中で、室温で十分な濃度で可溶性である溶解度をもたらす。これらの可溶性の化合物は、特に、溶液からの処理、たとえば、印刷法に対して特に良好に適合的である。さらに、少なくとも一つの式(I)の構造を含む本発明の化合物は、これらの溶媒中で向上した溶解度を既に有することが強調されるべきである。

30

【0102】

本発明の化合物をポリマーと混合してもよい。同様に、これらの化合物をポリマー中に共有結合的に組み込むこともできる。これは、特別には、臭素、沃素、塩素、ボロン酸もしくはボロン酸エステル等の反応性脱離基により、またはオレフィンもしくはオキセタン等の反応性重合可能基により置換された化合物により可能である。これらは、対応するオリゴマー、 dendrimer またはポリマーの製造のためのモノマーとしての使用を見出し得る。オリゴマー化もしくはポリマー化は、好ましくは、ハロゲン官能基もしくはボロン酸官能基によりまたは重合可能基によりなされる。追加的に、この種の基を介してポリマーを架橋することもできる。本発明の化合物とポリマーを、架橋もしくは非架橋層の形態で使用してよい。

40

【0103】

したがって、本発明は、さらに、一以上の式(I)の上記詳細な構造もしくは本発明の化合物を含むオリゴマー、ポリマーまたは dendrimer を提供し、ポリマー、オリゴマーまたは dendrimer への本発明の化合物または式(I)の構造の一以上の結合が存在する。式(I)の構造または化合物の結合により、これらは、かくて、オリゴマーもしくはポ

50

リマーの側鎖を形成するか、または主鎖内で結合する。ポリマー、オリゴマーまたは dendrimer は、共役、部分共役もしくは非共役であってよい。オリゴマーまたはポリマーは、直鎖、分岐もしくは樹状であってよい。オリゴマー、dendrimer およびポリマー中の本発明の化合物の反復単位に対して、上記記載したのと同じ選好があてはまる。

【0104】

オリゴマーまたはポリマーの調製のために、本発明のモノマーは、さらなるモノマーとホモ重合するか共重合する。式(I)の単位もしくは上記示した好ましい態様が、0.01~99.9モル%、好ましくは、5~90モル%、より好ましくは、20~80モル%である copolymer が好ましい。ポリマー基本骨格を形成する適切で好ましい copolymer は、フルオレン(たとえば、EP842208もしくはWO2000/22026による)、スピロビフルオレン(たとえば、EP707020、EP894107もしくはWO2006/061181による)、パラ-フェニレン(たとえば、WO92/18552による)、カルバゾール(たとえば、WO2004/070772もしくはWO2004/113468による)、チオフエン(たとえば、EP1028136による)、ジヒドロフェナントレン(たとえば、WO 2005/014689による)、シス-およびトランス-インデノフルオレン(たとえば、WO2004/041901もしくはWO2004/113412による)、ケトン(たとえば、WO2005/04032による)、フェナントレン(たとえば、WO2005/104264もしくはWO0207/017066による)または複数のこれらの単位から選ばれる。ポリマー、オリゴマーおよび dendrimer は、なおさらなる単位、たとえば、正孔輸送単位、特別には、トリアリールアミン系のもの、および/または電子輸送単位を含んでもよい。

10

20

【0105】

さらに、本発明の化合物は、比較的低い分子量を有してもよい。したがって、本発明は、さらに、好ましくは、10000 g/mol を超えない、より好ましくは、5000 g/mol を超えない、特に好ましくは、4000 g/mol を超えない、特別に好ましくは、3000 g/mol を超えない、特別好ましくは、2000 g/mol を超えない、最も好ましくは、1000 g/mol を超えない分子量を有する一以上の式(I)の構造を含む化合物を提供する。

【0106】

さらに、昇華可能であることが、本発明の好ましい化合物の特徴である。これらの化合物は、一般的に約1200 g/mol 未満のモル質量を有する。

【0107】

追加的に、特に関心のあるものは、高いガラス転移温度を特徴とする本発明の化合物である。これに関連して、好ましいものは、DIN 51005 にしたがって測定された少なくとも70 の、より好ましくは、少なくとも110 の、さらにより好ましくは、少なくとも125 のおよび、特別に好ましくは、少なくとも150 のガラス転移温度を有する一般式(I)の構造を含む本発明の化合物である。

30

【0108】

本発明は、なおさらに、本発明の化合物または本発明のオリゴマー、ポリマーもしくは dendrimer と少なくとも一種のさらなる化合物とを含む調合物を提供する。さらなる化合物は、好ましくは、溶媒であってよい。さらなる化合物は、代替として、電子素子で同様に使用されるさらなる有機もしくは無機化合物、たとえば、マトリックス材料であってよい。このさらなる化合物は、ポリマー状であってよい。

40

【0109】

適切で好ましい溶媒は、たとえば、トルエン、アニソール、o-、m-もしくはp-キシレン、メチルベンゾエート、メシチレン、テトラリン、ベラトール、THF、メチル-THF、THP、クロロベンゼン、ジオキサン、フェノキシトルエン、特別に、3-フェノキシトルエン、(-)-フェンコンヌ、1,2,3,5-テトラメチルベンゼン、1,2,4,5-テトラメチルベンゼン、1-メチルナフタレン、2-メチルベンゾチアゾール、2-フェノキシエタノール、2-ピロリジノン、3-メチルアニソール、4-メチルアニソール、3,4-ジメチルアニソール、3,5-ジメチルアニソール、アセトフェノン、-テルピネオール、ベンゾチアゾール、プチルベンゾエート、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

50

ン、デカリン、ドデシルベンゼン、エチルベンゾエート、インダン、メチルベンゾエート、NMP、p-シメン、フェネトール、1,4-ジイソプロピルベンゼン、ジベンジルエーテル、ジエチレングリコールブチルメチルエーテル、トリエチレングリコールブチルメチルエーテル、ジエチレングリコールジブチルエーテル、トリエチレングリコールジメチルエーテル、ジエチレングリコールモノブチルエーテル、トリプロピレングリコールジメチルエーテル、テトラエチレングリコールジメチルエーテル、2-イソプロピルナフタレン、ペンチルベンゼン、ヘキシルベンゼン、ヘプチルベンゼン、オクチルベンゼン、1,1-ビス(3,4-ジメチルフェニル)エタンもしくはこれら溶媒の混合物である。

【0110】

本発明は、なおさらに、本発明の化合物と少なくとも一つのさらなる有機機能性材料を含む組成物を提供する。機能性材料は、一般的にアノードとカソードとの間に導入される有機もしくは無機材料である。好ましくは、有機機能性材料は、蛍光エミッター、燐光エミッター、ホスト材料、マトリックス材料、電子輸送材料、電子注入材料、正孔伝導材料、正孔注入材料、n-ドーパント、ワイドバンドギャップ材料、電子ブロック材料および正孔ブロック材料より成る群から選ばれる。

10

【0111】

したがって、本発明は、少なくとも一つの式(I)の構造を含む化合物と少なくとも一つのさらなるマトリックス材料とを含む組成物にも関する。本発明の特別な1側面によれば、さらなるマトリックス材料は、正孔輸送特性を有する。

【0112】

本発明は、さらに、少なくとも一つの式(I)の構造を含む化合物と少なくとも一つの広バンドギャップ材料とを含む組成物を提供し、ワイドバンドギャップ材料は、US 7,294,849の開示の意味での材料を意味するものと理解される。これらシステムは、エレクトロルミッセンス素子における特に有利な性能データを示す。

20

【0113】

好ましくは、追加的化合物は、2.5 eV以上の、好ましくは、3.0 eV以上の、より非常に好ましくは、3.5 eV以上のバンドギャップを有する。バンドギャップを計算する一つの方法は、最高非占軌道(HOMO)と最低空軌道(LUMO)のエネルギー準位を介する。

【0114】

分子軌道、特別には、最高非占軌道(HOMO)と最低空軌道(LUMO)、それらのエネルギー準位および最低三重項状態 T_1 のエネルギーと最低励起一重項状態 S_1 のエネルギーは、量子化学計算によって決定される。金属を含まない有機物質を計算するために、最初に、ジオメトリーの最適化が、「基底状態/準実験的/デフォルトスピン/AM1/電荷0/一重項スピン」法を使用して実行される。続いてジオメトリーの最適化を基準にしてエネルギー計算を実施する。ここで、「6-31G(d)」ベースセット(電荷0、一重項スピン)を用いる「TD-SCF/DFT/デフォルトスピン/B3PW91」法が使用される。金属含有化合物に対しては、ジオメトリーは、「基底状態/ハートリー-フォック/デフォルトスピン/LanL2MB/電荷0/一重項スピン」法を介して最適化される。エネルギー計算は、「LanL2DZ」ベースセットが金属原子のために使用され、「6-31G(d)」ベースセットが金属原子のために使用されるということを除いて、上記記載のとおり有機物質と同じように実行される。HOMOエネルギー準位 H_{Eh} またはLUMOエネルギー準位 L_{Eh} は、ハートリー単位でのエネルギー計算から得られる。サイクリックボルタンメトリ測定により較正されたHOMOおよびLUMOの電子ボルトでのエネルギー準位は、以下のとおり決定される：

30

$$HOMO(eV) = ((HEh * 27.212) - 0.9899) / 1.1206$$

$$LUMO(eV) = ((LEh * 27.212) - 2.0041) / 1.385$$

本出願の文脈では、これらの値は、材料のHOMOおよびLUMOエネルギー準位とみなすべきである。

40

【0115】

50

最低三重項状態 T_1 を、上記量子化学計算から明らかである最低エネルギーを有する三重項状態のエネルギーとして定義する。

【0116】

最低励起一重項状態 S_1 を、上記量子化学計算から明らかである最低エネルギーを有する励起一重項状態のエネルギーとして定義する。

【0117】

ここに記載された方法は、使用されるソフトウェアパッケージとは独立しており、常に同じ結果が得られる。この目的のためによく利用されるプログラムの例は、「ガウシアン09W (Gaussian Inc.)」と「Q-Chem 4.1 (Q-Chem, Inc.)」である。

【0118】

本発明は、式(I)の構造を含む少なくとも一つの化合物と少なくとも一つの燐光エミッターとを含む組成物にも関し、用語「燐光エミッター」は、燐光ドーパントを意味するとも理解される。

【0119】

用語「燐光ドーパント」は、典型的には、発光が、スピン禁制遷移、たとえば、より高いスピン量子数を有する状態、たとえば、五重項状態からの遷移により生じる化合物を典型的には包含する。

【0120】

適切な燐光ドーパントは、特別には、適切な励起により、好ましくは、可視域で発光する化合物であり、また、20より大きい、好ましくは、38~84の、より好ましくは、56~80の原子番号を有する少なくとも一つの原子を含む。燐光ドーパントとして使用されるのは、好ましくは、銅、モリブデン、タングステン、レニウム、ルテニウム、オスミウム、ロジウム、イリジウム、パラジウム、白金、銀、金またはユウロピウムを含む化合物、特別には、イリジウム、白金または銅を含む化合物である。

【0121】

本出願の文脈では、すべてのルミネッセントイリジウム、白金または銅錯体が、燐光化合物とみなされる。燐光ドーパントの例は、次のセクションで示される。

【0122】

マトリックス材料とドーパントとを含む系中でのドーパントは、混合物中でより少ない割合を有する成分を意味するものと理解される。対応して、マトリックス材料とドーパントとを含む系中でのマトリックス材料は、混合物中でより多い割合を有する成分を意味するものと理解される。

【0123】

混合マトリックス系での使用のための好ましい燐光ドーパントは、以後特定される好ましい燐光ドーパントである。

【0124】

燐光ドーパントの例は、出願WO 2000/70655、WO 2001/41512、WO 2002/02714、WO 2002/15645、EP 1191613、EP 1191612、EP 1191614、WO 2005/033244、WO 2005/019373およびUS2005/0258742に見出され得る。一般的には、先行技術による燐光OLEDのために使用され、有機エレクトロルミネッセンス素子分野の当業者に知られるようなすべての燐光錯体が、本発明の素子での使用のために適切である。

【0125】

燐光ドーパントの明確な例は、以下の表に示される。

【0126】

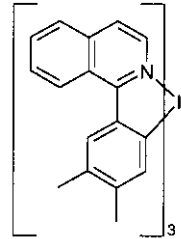
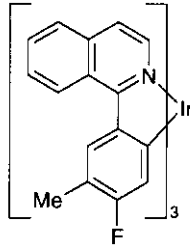
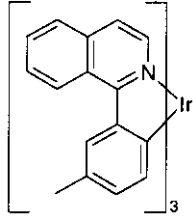
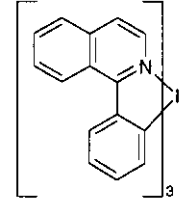
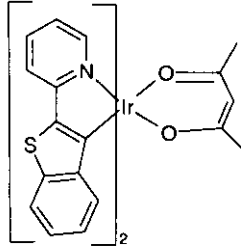
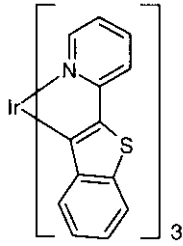
10

20

30

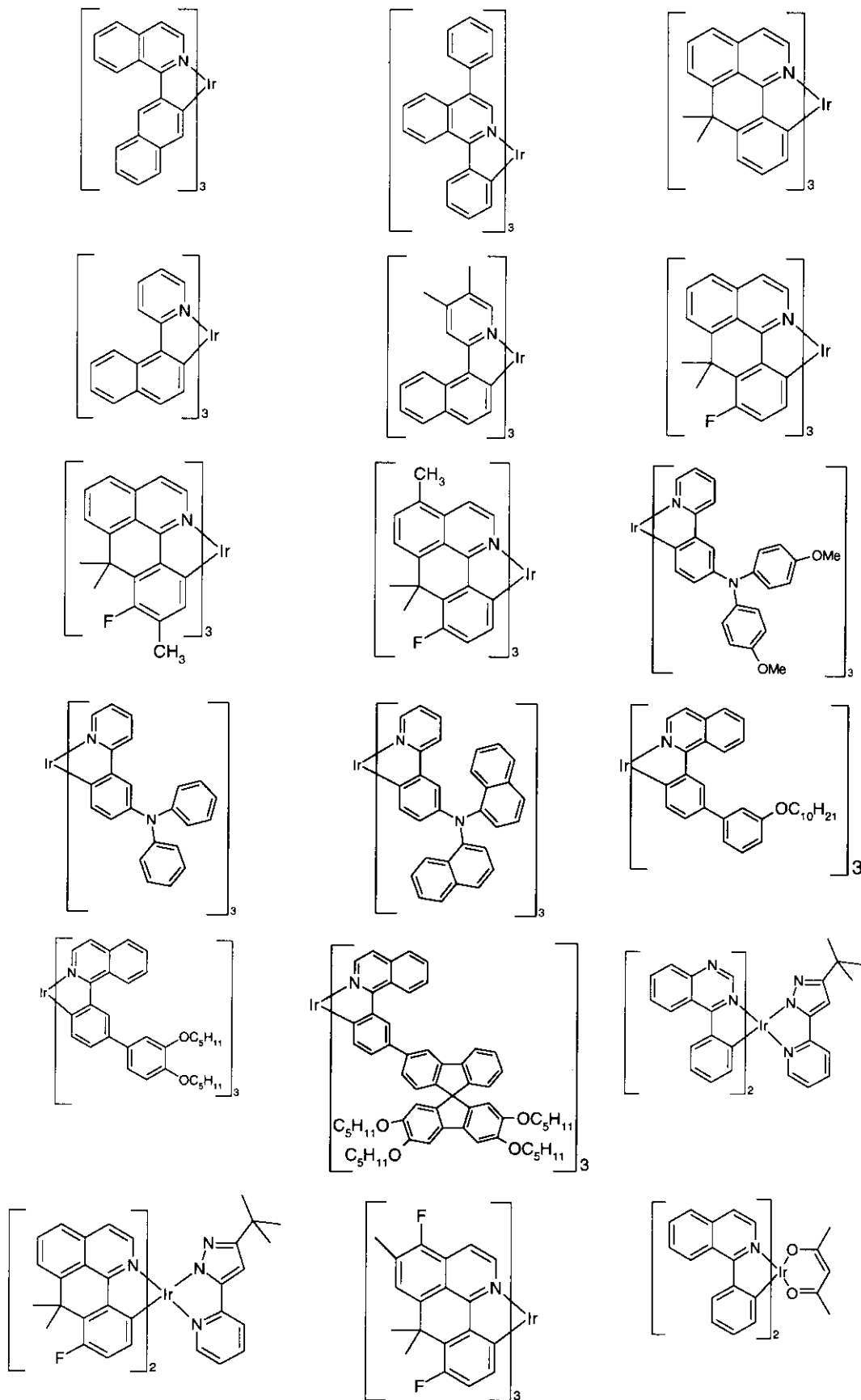
40

【化 1 1 - 1】



【 0 1 2 7 】

【化 1 1 - 2】



10

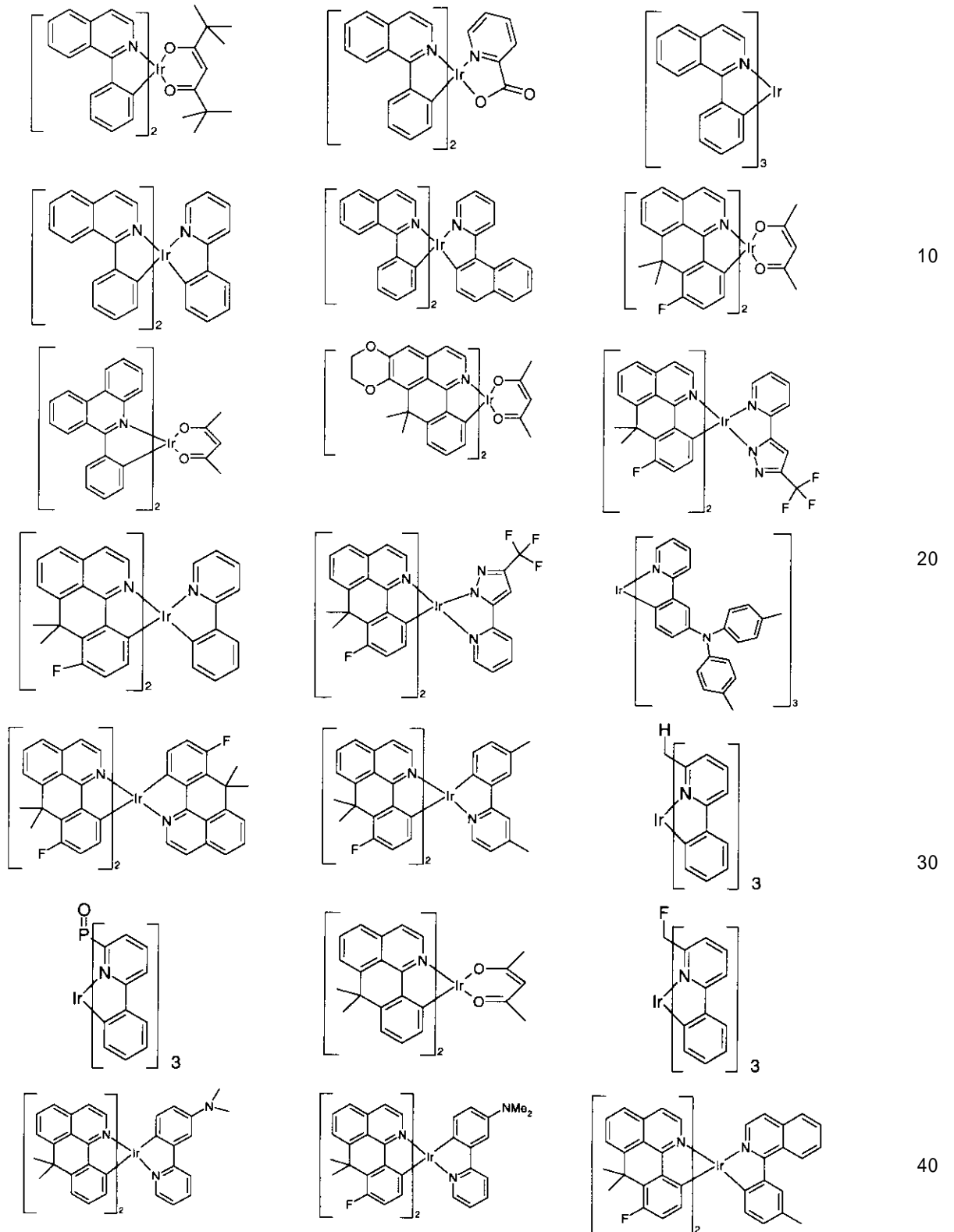
20

30

40

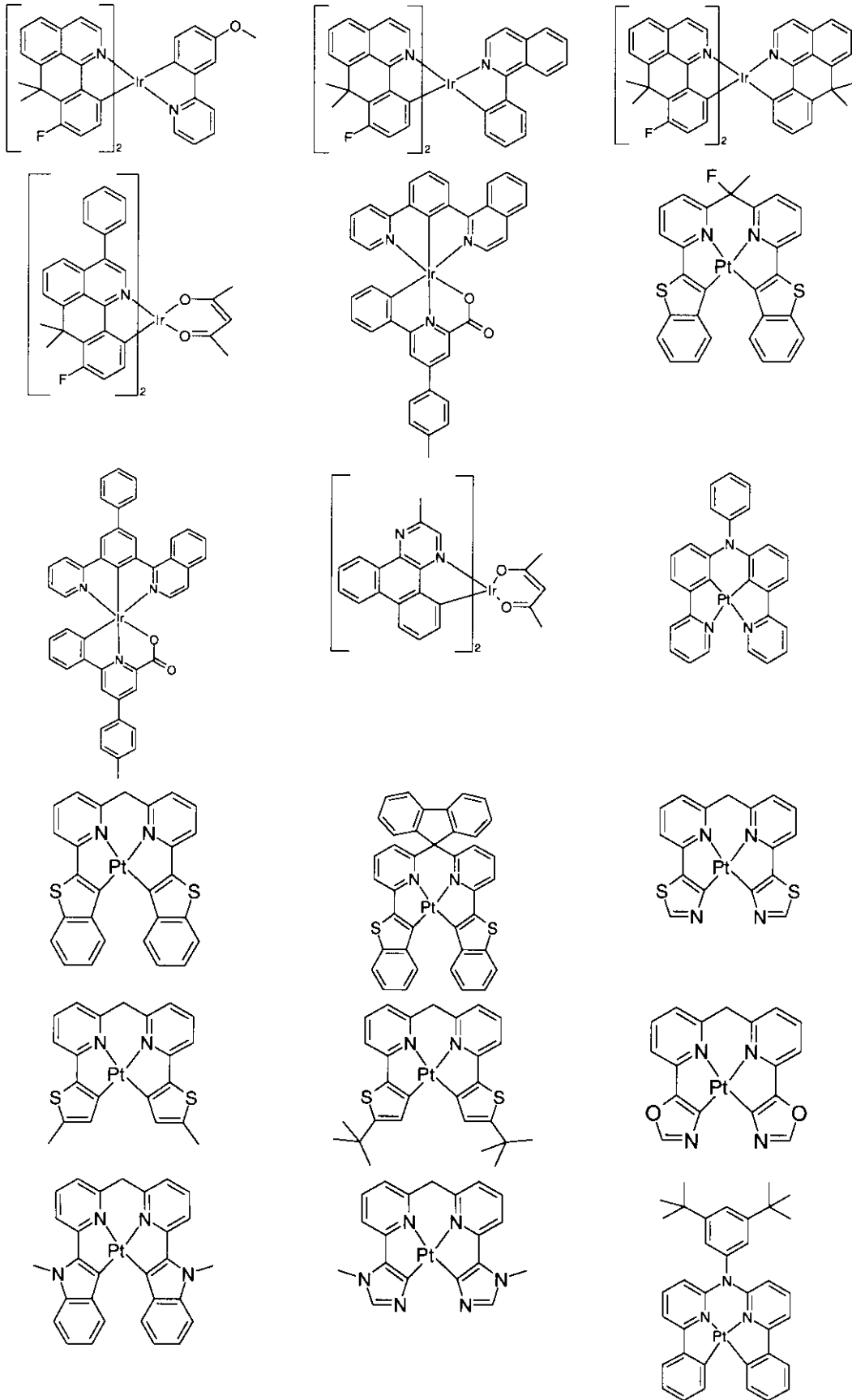
【 0 1 2 8 】

【化 1 1 - 3】

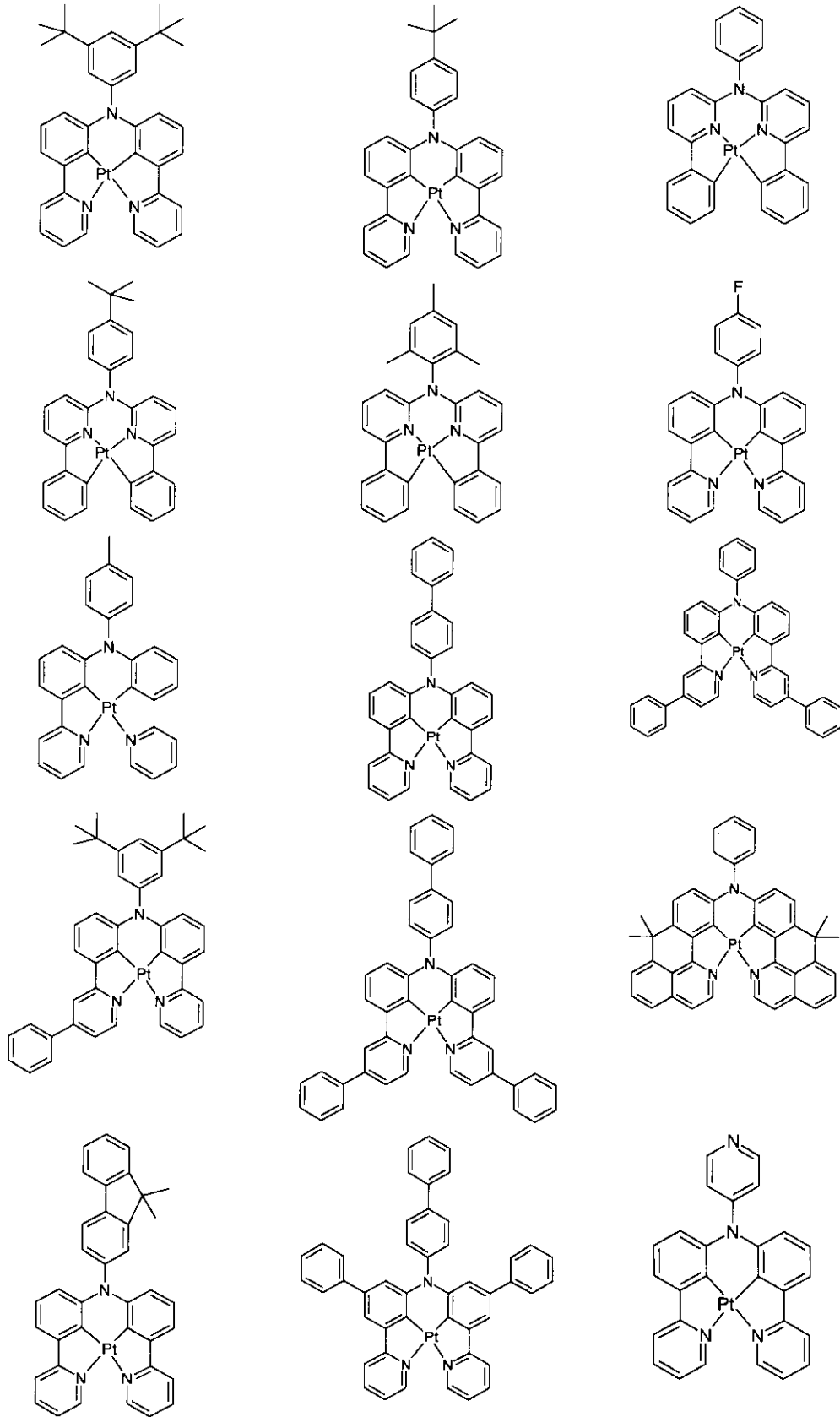


【 0 1 2 9 】

【化 1 1 - 4】

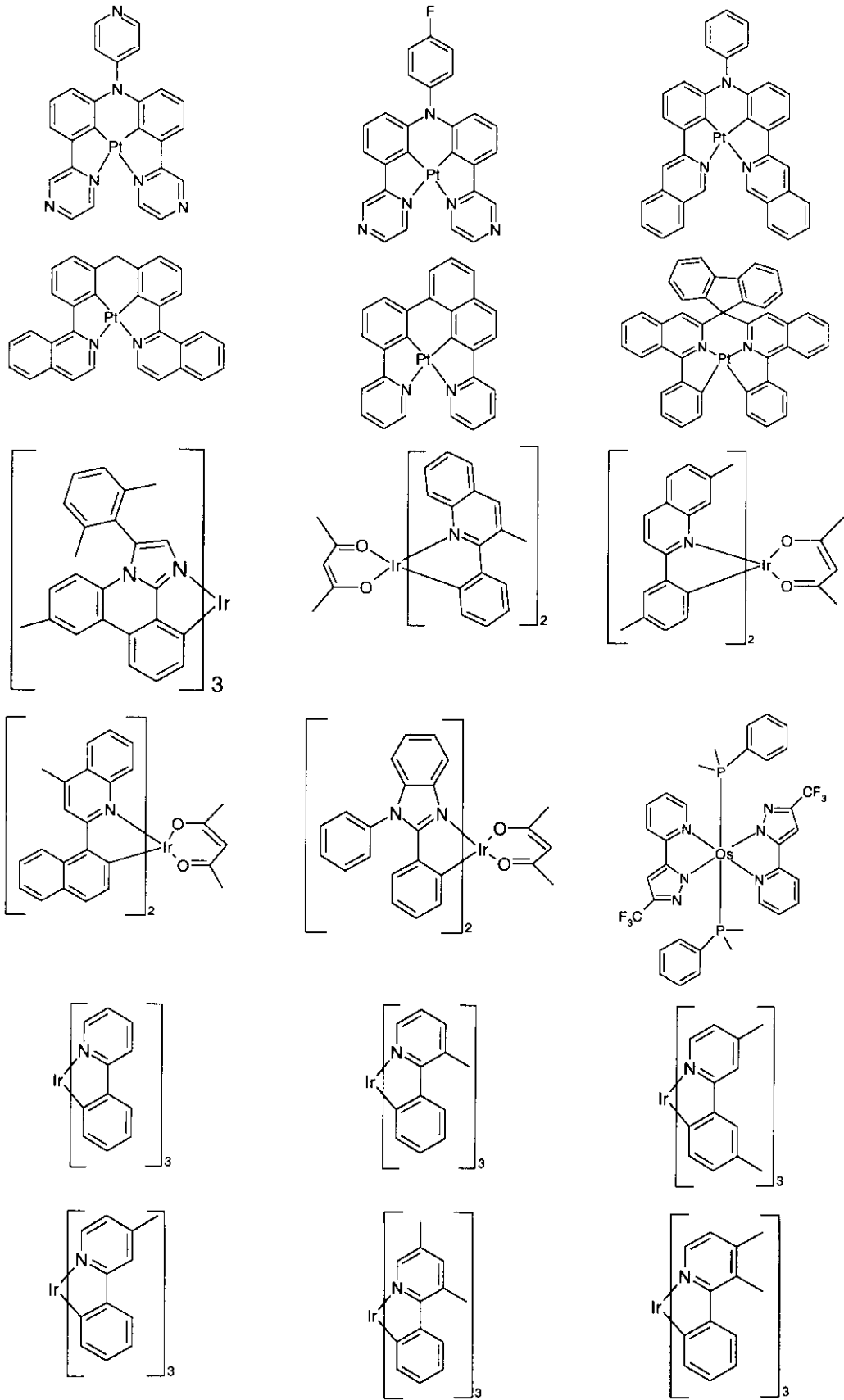


【化 1 1 - 5】



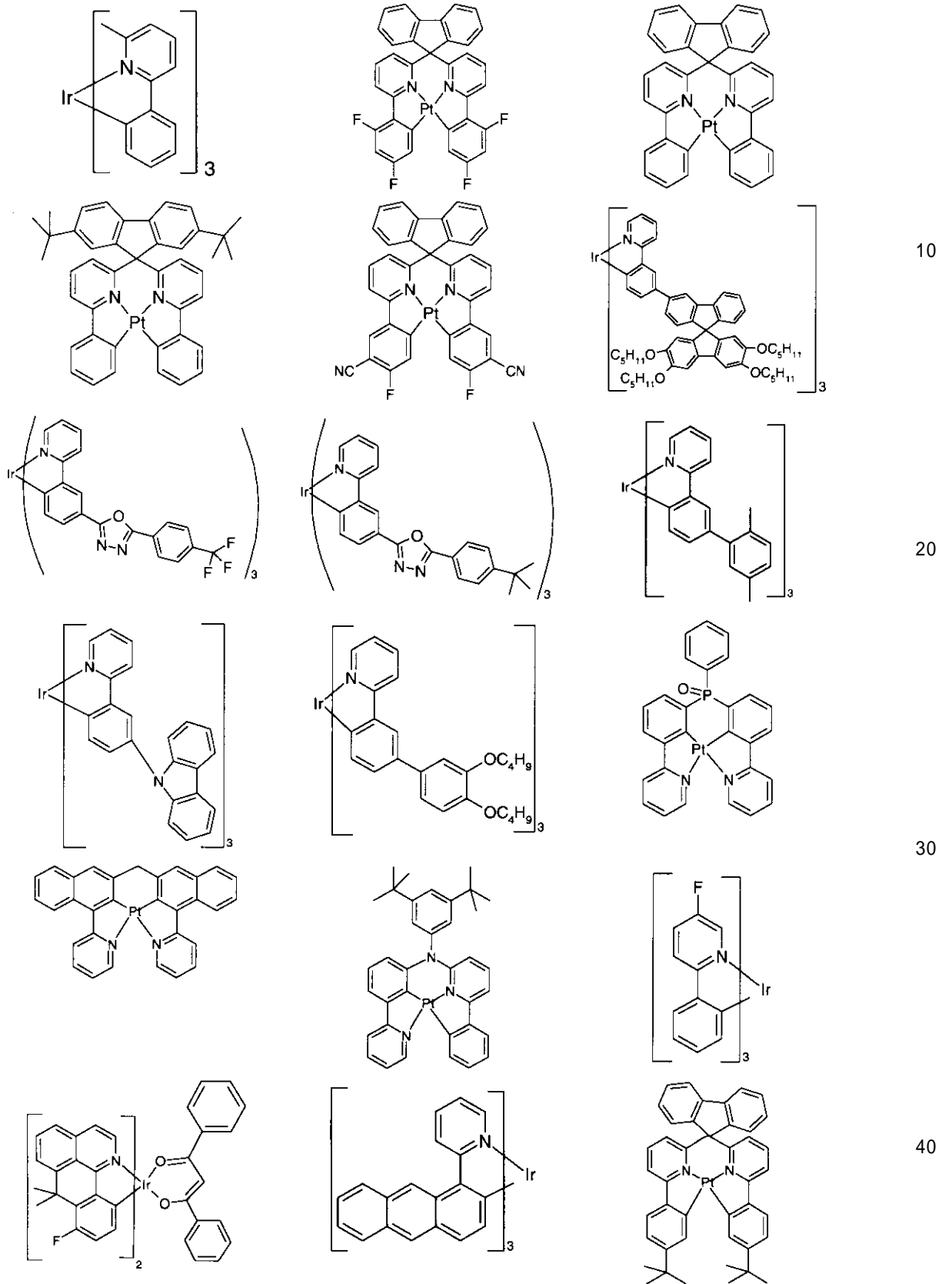
【 0 1 3 1 】

【化 1 1 - 6】



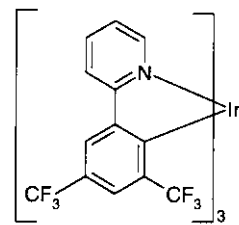
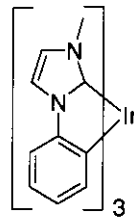
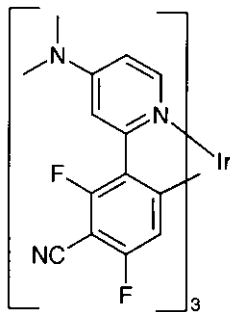
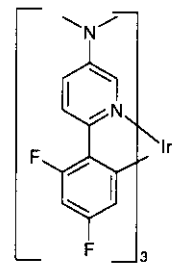
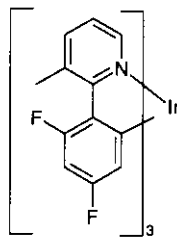
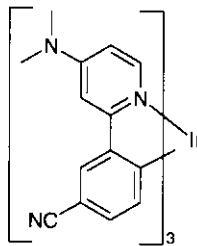
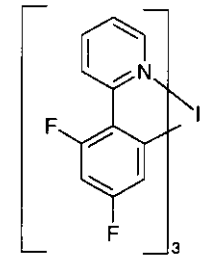
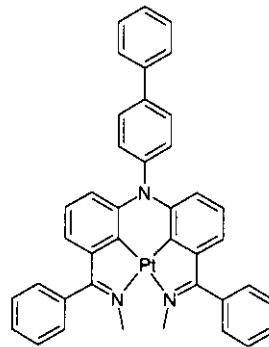
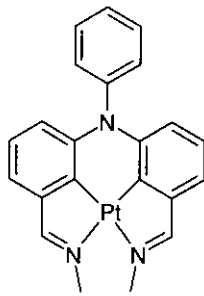
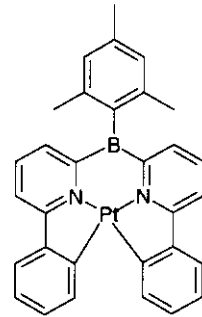
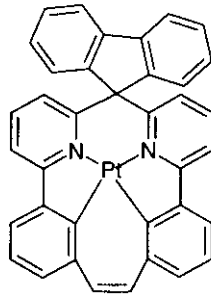
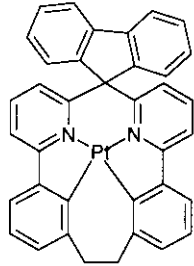
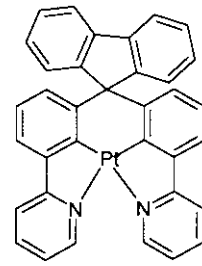
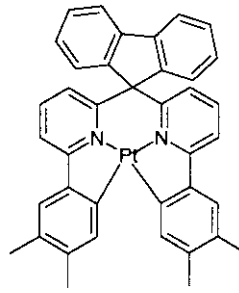
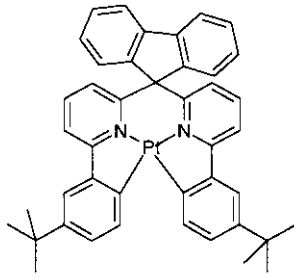
【 0 1 3 2 】

【化 1 1 - 7】



【 0 1 3 3 】

【化 1 1 - 8】



【 0 1 3 4】

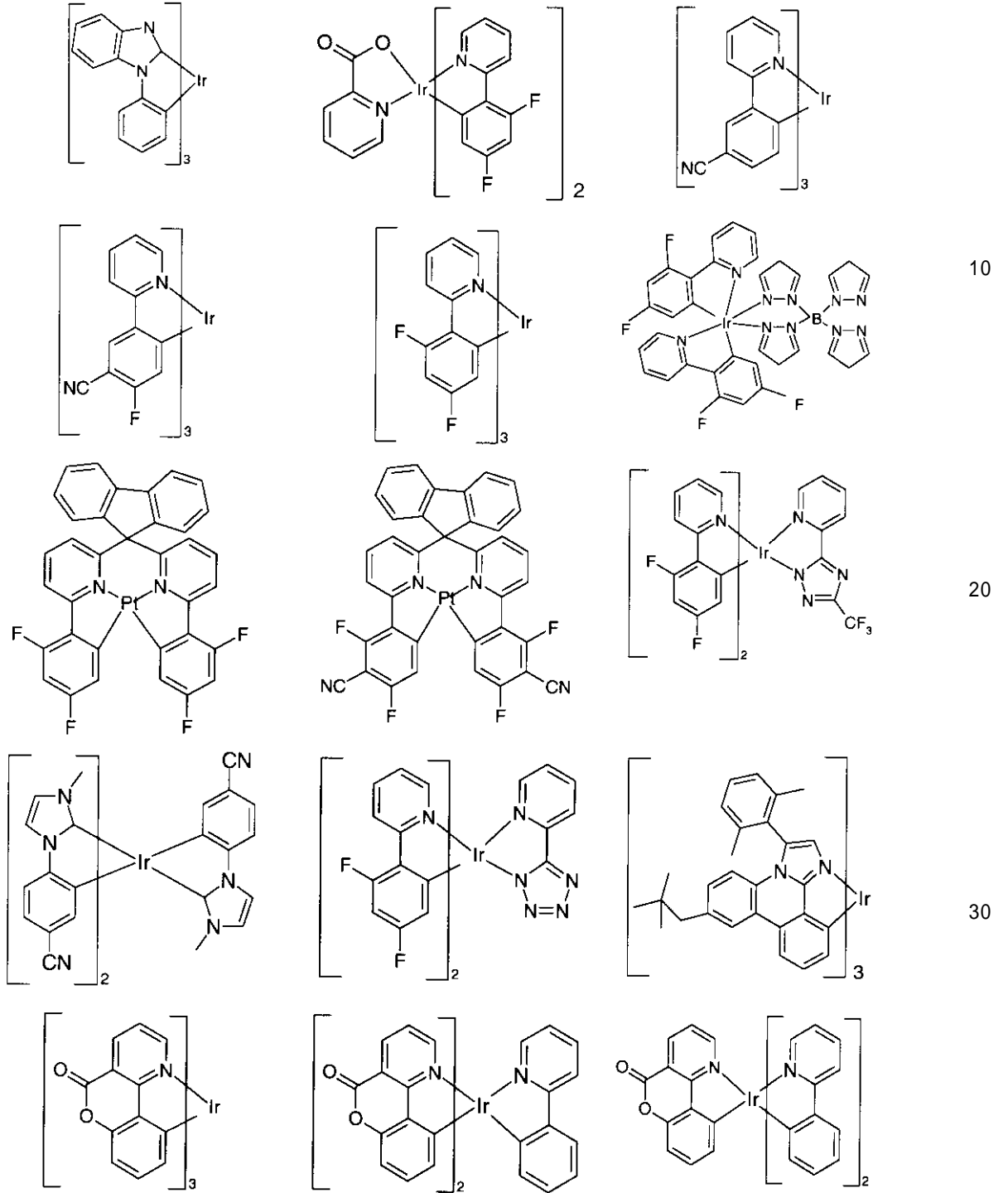
10

20

30

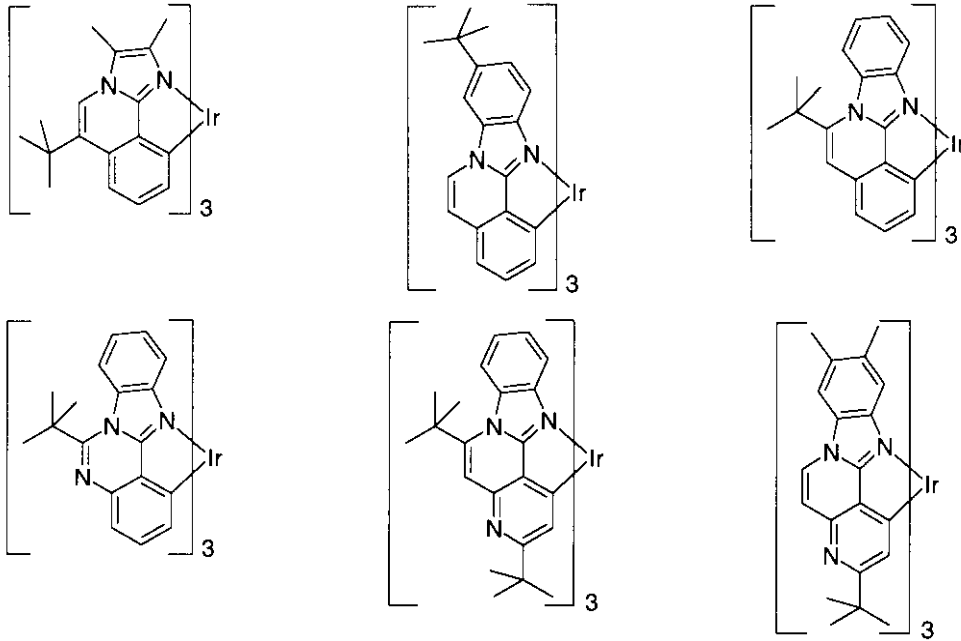
40

【化 1 1 - 9】



【 0 1 3 5 】

【化 1 1 - 1 0】



10

【0 1 3 6】

式 (I) の構造を含む上記化合物もしくは上記詳細な好ましい態様は、好ましくは、電子素子での活性成分として使用することができる。電子素子は、アノード、カソードおよび少なくとも1つの層を含む素子を意味すると理解され、前記層は、少なくとも1種の有機または有機金属化合物を含む。したがって、本発明の電子素子は、アノード、カソード、および式 (I) の構造を含む少なくとも1種の化合物を含む少なくとも1つの層を含む。ここで、好ましい電子素子は、有機エレクトロルミネッセント素子 (O L E D 、 P L E D) 、有機集積回路 (O - I C) 、有機電界効果トランジスタ (O - F E T) 、有機薄膜トランジスタ (O - T F T) 、有機発光トランジスタ (O - L E T) 、有機太陽セル (O - S C) 、有機光学検出器、有機光受容体、有機電場消光素子 (O - F Q D) 、有機電気センサー、発光電気化学セル (L E C) および有機レーザーダイオード (O - l a s e r) よりなる群から選択され、少なくとも1つの層に前述の式 (I) の構造を含む少なくとも1種の化合物を含む。有機エレクトロルミネッセント素子が、特に好ましい。活性成分は、一般に、アノードとカソードの間に導入された有機または無機材料、たとえば、電荷注入、電荷輸送または電荷ブロック材料であるが、特別には、発光材料およびマトリックス材料である。

20

30

【0 1 3 7】

本発明の好ましい1態様は、有機エレクトロルミネッセント素子である。有機エレクトロルミネッセンス素子は、カソード、アノードと少なくとも一つの発光層を含む。これらの層とは別に、なおさらなる層、たとえば、各場合に、一以上の正孔注入層、正孔輸送層、正孔ブロック層、電子輸送層、電子注入層、励起子ブロック層、電子ブロック層、電荷生成層および/または有機もしくは無機 p / n 接合を含んでもよい。同時に、一以上の正孔輸送層が、たとえば、 MoO_3 もしくは WO_3 等の金属酸化物によりまたは (過) フッ素化電子不足芳香族系により p-ドーピングされ、および/または一以上の電子輸送層が、n-ドーピングされることも可能である。たとえば、エレクトロルミネッセンス素子中で励起子ブロック機能および/または電荷バランス調節能を有する中間層も、同様に2個の発光層の間に導入されることも可能である。しかしながら、これらの層の夫々は、必ずしも存在する必要がないことに留意する必要がある。

40

【0 1 3 8】

この場合に、有機エレクトロルミネッセンス素子は、一つの発光層を含むことまたは複数の発光層を含むことができる。複数の発光層が存在するならば、これらは、好ましくは、380 nm ~ 750 nm 間に全体で複数の最大発光長を有し、全体として、白色発光が生

50

じるものであり、換言すれば、蛍光もしくは燐光を発することができる種々の発光化合物が、発光層に使用される。特別好ましいのは、三層構造であり、その三層は青色、緑色およびオレンジ色もしくは赤色発光を呈する（基本構造については、たとえば、WO 2005/011013参照。）か、または三層を超える発光層を有する構造である。システムは、一以上の層が蛍光であり、一以上の他の層が燐光であるハイブリッドシステムであってもよい。

【0139】

本発明の好ましい1態様では、有機エレクトロルミッセンス素子は、一以上の発光層に、マトリックス材料として、好ましくは、電子伝導マトリックス材料として、好ましくは、さらなるマトリックス材料、好ましくは、正孔伝導マトリックス材料と組み合わせて、式(I)の構造を含む化合物もしくは上記詳細な好ましい態様を含む。発光層は、少なくとも一つの発光化合物を含む。

10

【0140】

使用されるマトリックス材料は、一般的に、先行技術によりその目的のために知られる任意の材料であってよい。マトリックス材料の三重項準位は、好ましくは、エミッターの三重項準位よりも高い。

【0141】

本発明の化合物のために適切なマトリックス材料は、たとえば、WO2004/013080、WO2004/093207、W2006/005627もしくはWO 2010/006680によるケトン、ホスフィンオキシド、スルホキシドおよびスルホンであり、トリアリールアミン、カルバゾール誘導体、たとえば、CBP (N,N-ビスカルバゾリルピフェニル)、m-CBPまたはWO2005/039246、US2005/0069729、JP 2004/288381、EP1205527、WO2008/086851もしくはUS2009/0134784に記載されたカルバゾール誘導体、たとえば、WO2007/063754もしくはWO2008/056746によるインドロカルバゾール誘導体、たとえば、WO 2010/136109もしくはWO 2011/000455によるインデノカルバゾール誘導体、たとえば、EP1617710、EP1617711、EP1731584、JP 2005/347160によるアザカルバゾール、たとえば、WO 2007/137725によるバイポーラマトリックス材料、たとえば、WO2005/111172によるシラン、たとえば、WO 2006/117052によるアザポロールもしくはボロン酸エステル、たとえば、WO 2010/054729によるジアザシロール誘導体、たとえば、WO 2010/054730によるジアザホスホール誘導体、たとえば、WO 2010/015306、WO2007/063754もしくはWO2008/056746によるトリアジン誘導体、たとえば、EP652273もしくはWO2009/062578による亜鉛錯体、たとえば、WO 2009/148015によるジベンゾフラン誘導体、または、たとえば、US 2009/0136779、WO 2010/050778、WO 2011/042107もしくはWO 2011/088877による架橋カルバゾール誘導体である。

20

30

【0142】

複数の異なるマトリックス材料、特別に、少なくとも一つの電子伝導性マトリックス材料と少なくとも一つの正孔伝導性マトリックス材料とを混合物として使用することも好ましいこともある。好ましいのは、同様に、電荷輸送マトリックス材料と、たとえば、WO 2010/108579に記載されたとおりの、あるとしても電荷輸送に顕著な関与を有さない電氣的に不活性なマトリックス材料との混合物の使用である。

【0143】

マトリックスと一緒に2個以上の三重項エミッターの混合物を使用することがさらに好まれる。この場合に、より短い波長の発光スペクトルを有する三重項エミッターは、より長い波長の発光スペクトルを有する三重項エミッターのためのコマトリックスとしての役割を果たす。

40

【0144】

より好ましくは、好ましい1態様において、式(I)の構造を含む本発明の化合物を、有機電子素子、特別に、有機エレクトロルミッセンス素子、たとえば、OLEDもしくはOLECにおいて、発光層でのマトリックス材料として使用することができる。この場合に、式(I)の構造を含む化合物を含むマトリックス材料は、一以上のドーパント、好ましくは、燐光ドーパントと組み合わせて電子素子中に存在する。

【0145】

50

この場合に、発光層中のマトリックス材料の割合は、蛍光発光層に対して、50.0～99.9体積%、好ましくは、80.0～99.5体積%、より好ましくは、92.0～99.5体積%であり、燐光発光層に対して、85.0～97.0体積%である。

【0146】

対応して、ドーパントの割合は、蛍光発光層に対して、0.1～50.0体積%、好ましくは、0.5～20.0体積%、より好ましくは、0.5～8.0体積%であり、燐光発光層に対して、3.0～15.0体積%である。

【0147】

有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層は、また、複数のマトリックス材料（混合マトリックス系）および/または複数のドーパントを含む系を含んでもよい。この場合にも、ドーパントは、一般的には、系中でより少ない割合を有するそれらの材料であり、マトリックス材料は、系中でより多い割合を有するそれらの材料である。しかしながら、個々の場合では、系中の単一のマトリックス材料の割合は、単一のドーパントの割合よりも少なくてもよい。

【0148】

本発明のさらに好ましい態様では、式(I)の構造を含む化合物は、混合マトリックス系の1成分として使用される。混合マトリックス系は、好ましくは、2または3種の異なるマトリックス材料、より好ましくは、2種の異なるマトリックス材料を含む。この場合に、2種の材料の内の一は、好ましくは、正孔輸送特性を有する材料であり、他方の材料は電子輸送特性を有する材料である。しかしながら、混合マトリックス成分の所望の電子輸送および正孔輸送特性は、単一の混合マトリックス成分中で主としてまたは完全に結合されてもよく、この場合には、さらなる混合マトリックス成分が、他の機能を果たす。2種の異なるマトリックス材料は、1:50～1:1、好ましくは、1:20～1:1、より好ましくは、1:10～1:1、最も好ましくは、1:4～1:1の比で存在してよい。混合マトリックス系は、好ましくは、燐光有機エレクトロルミネッセンス素子中で使用される。混合マトリックス系に関するより詳細な情報源の一つは、出願WO 2010/108579である。

【0149】

本発明は、さらに、一以上の本発明の化合物および/または少なくとも一つの本発明のオリゴマー、ポリマーもしくは dendrimer を一以上の電子伝導層中に電子伝導化合物として含む電子素子、好ましくは、有機エレクトロルミネッセンス素子を提供する。

【0150】

好ましいカソードは、低仕事関数を有する金属、金属合金または、たとえば、アルカリ土類金属、アルカリ金属、主族金属もしくはランタノイド（たとえば、Ca、Ba、Mg、Al、In、Mg、Yb、Sm等）のような種々の金属を含む多層構造である。追加的に適切なものは、アルカリ金属、アルカリ土類金属および銀より成る合金、たとえば、マグネシウムと銀から成る合金である。多層構造の場合、前記金属に加えて、比較的高仕事関数を有するさらなる金属、たとえば、Agが使用されてもよく、その場合、たとえば、Mg/Ag、Ca/AgもしくはBa/Agのような金属の組み合わせが一般的に使用される。金属カソードと有機半導体との間に高誘電定数を有する材料の薄い中間層を導入することが好ましいこともある。この目的に有益な材料の例は、アルカリ金属もしくはアルカリ土類金属フッ化物だけでなく、また対応する酸化物もしくは炭酸塩（たとえば、LiF、Li₂O、BaF₂、MgO、NaF、CsF、Cs₂CO₃等）である。この目的に有益なものは、同様に有機アルカリ金属錯体、たとえば、Liq（リチウムキノリナート）である。この層の層厚は、好ましくは、0.5～5nmである。

【0151】

好ましいアノードは、高い仕事関数を有する材料である。アノードは、好ましくは、4.5eV対真空超の仕事関数を有する。第1に、たとえば、Ag、PtもしくはAuのような高レドックスポテンシャルを有する金属が、この目的に適切である。第2に、金属/金属酸化物電極（たとえば、Al/Ni/NiO_x、Al/PtO_x）が、また、好まれ

10

20

30

40

50

てもよい。幾つかの用途のために、少なくとも一つの電極は、有機材料の放射 (O-SC) もしくは発光 (OLED/PLED、O-laser) の何れかを可能にするために透明もしくは一部透明である必要がある。ここで、好ましいアノード材料は、導電性混合金属酸化物である。特に好ましいのは、イリジウム錫酸化物 (ITO) またはイリジウム亜鉛酸化物 (IZO) である。さらに、ドーパされた導電性有機材料、特にドーパされた導電性ポリマー、たとえば PEDOT、PANI またはこれらのポリマーの誘導体が好ましい。p-ドーパされた正孔輸送材料を正孔注入層としてアノードに適用することがさらに好ましく、この場合、適切な p-ドーパントは、金属酸化物、たとえば MoO_3 もしくは WO_3 または (過) フッ素化された電子不足芳香族系である。さらに適切な p-ドーパントは、HAT-CN (ヘキサシアノヘキサアザトリフェニレン) または Novaled 製の化合物 NPD9 である。このような層により、大きさの観点で、低 HOMO、すなわち高い HOMO 値を有する材料への正孔注入が簡単になる。

10

【0152】

さらなる層において、一般的に、層のために先行技術により使用されるとおりの任意の材料を使用することができ、当業者は、発明性を要さず、電子素子において、本発明の材料とこれら任意の材料を組み合わせることができるだろう。

【0153】

このような素子の寿命は、水および/または空気の存在でひどく低下することから、素子は、(用途に応じて) 対応して構造化され、接点を接続され、最後に気密シールされる。

20

【0154】

追加的に好ましいのは、電子素子、特別に、有機エレクトロルミネッセンス素子であり、1以上の層が、昇華プロセスにより被覆されることを特徴とする。この場合に、材料は、 10^{-5} mbar 未満、好ましくは 10^{-6} mbar 未満の初期圧力で、真空昇華システム中の気相堆積により適用される。初期圧力は、さらにより低くても、たとえば、 10^{-7} mbar 未満でも可能でもある。

【0155】

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

30

【0156】

追加的に好ましい電子素子、特別には、有機エレクトロルミネッセンス素子は、1以上の層が、溶液から、たとえば、スピンコーティングにより、もしくは、たとえばスクリーン印刷、フレキソ印刷、オフセット印刷もしくはノズル印刷、より好ましくは、LEIT (光誘起熱画像化、熱転写印刷) もしくはインクジェット印刷のような任意の所望の印刷プロセスにより製造されることを特徴とする。この目的では、可溶性の化合物が必要であり、それらは、たとえば適切な置換により得られる。

40

【0157】

電子素子、特別には、有機エレクトロルミネッセンス素子は、また、1以上の層を溶液から適用し、また、1以上の他の層を気相堆積により適用することによりハイブリッドシステムとしても製造され得る。たとえば、式 (I) の構造を含む本発明の化合物とマトリックス材料を含む発光層を溶液から適用し、正孔ブロック層および/または電子輸送層を減圧下気相堆積によりそこに適用することもできる。

【0158】

これらの方法は当業者に一般的に知られており、当業者により問題なく、式 (I) の構造を含む本発明の化合物または上記詳細な好ましい態様を含む電子素子、特別に、有機エレクトロルミネッセンス素子に適用することができる。

50

【0159】

本発明の電子素子、特別には、有機エレクトロルミネセンス素子は、先行技術を凌駕する一以上の以下の驚くべき優位性で注目すべきである。

【0160】

1. 式(I)の構造を有する化合物、オリゴマー、ポリマーまたは dendrimer を、特別に、電子伝導材料としておよび/または正孔伝導材料として含む電子素子、特別に、有機エレクトロルミネセンス素子は、極めて良好な寿命を有する。

【0161】

2. 式(I)の構造を有する化合物、オリゴマー、ポリマーまたは dendrimer を、電子伝導材料としておよび/または正孔伝導材料として含む電子素子、特別に、有機エレクトロルミネセンス素子は、秀れた効率を有する。より特別には、効率は、式(I)の構造単位を含まない類似化合物と比べて、遙かにより高い。

10

【0162】

3. 式(I)の構造を有する化合物、オリゴマー、ポリマーまたは dendrimer は、極めて高い安定性を示し、極めて長い寿命を有する化合物をもたらす。

【0163】

4. 式(I)の構造を有する化合物、オリゴマー、ポリマーまたは dendrimer により、電子素子、特別に、有機エレクトロルミネセンス素子におけるチャンネルの光学的損失の形成を回避することができる。結果として、これらの素子は、エミッターの高い PL 効率とそれゆえの高い EL 効率と優れたマトリックスのドープメントへのエネルギー移送を特徴とする。

20

【0164】

5. 式(I)の構造を有する化合物、オリゴマー、ポリマーまたは dendrimer の電子素子、特別に、有機エレクトロルミネセンス素子の層での使用は、電子伝導構造および/または正孔伝導構造の高い移動度をもたらす。

【0165】

6. 式(I)の構造を有する化合物、オリゴマー、ポリマーまたは dendrimer は、秀れた熱安定性を特色とし、約 1200 g/mol 未満の分子量を有する化合物は、良好な昇華性を有する。

【0166】

7. 式(I)の構造を有する化合物、オリゴマー、ポリマーまたは dendrimer は、秀れたガラス膜形成性を有する。

30

【0167】

8. 式(I)の構造を有する化合物、オリゴマー、ポリマーまたは dendrimer は、溶液から極めて良好な膜を形成する。

【0168】

9. 式(I)の構造を有する化合物、オリゴマー、ポリマーまたは dendrimer は、驚くほど高い三重項準位 T_1 をも有し、これは、電子伝導材料として使用される化合物で特に真である。

【0169】

上記したこれらの利点は、さらなる電子特性での低下を伴わない。

40

【0170】

本発明は、さらに、本発明の化合物および/または本発明のオリゴマー、ポリマーまたは dendrimer の、正孔輸送材料、正孔注入材料、正孔ブロック材料、電子注入材料、電子ブロック材料および/または電子輸送材料としての電子素子での使用を提供する。

【0171】

本発明で説明された態様の変形が、本発明の範囲に入ることが指摘されねばならない。本発明で開示された任意の特徴は、明確に除外されなければ、同じ目的か、等価か、類似する目的に役立つ代替的特徴により置き換えられてよい。したがって、特に断らなければ、本発明で開示された任意の特徴は、一般的な一連の例としてか、等価か類似する特徴と

50

みなされなければならない。

【0172】

本発明のすべての特徴は、特定の特徴および/または工程が相互に排除しないならば、とにかく互いに組み合わせてよい。これは、特別に、本発明の好ましい特徴にあてはまる。同様に、非本質的な組み合わせの特徴は、（組み合わせではなく）別に、使用されてよい。

【0173】

多くの特徴、特別に、本発明の好ましい態様の特徴は、それ自身で発明性があり、本発明の態様の単なる部分としてだけではないとみなされねばならない。現在クレームされた任意の発明に加えてまたその代替として、独立した保護が、これらの特徴のために与えられてよい。

10

【0174】

本発明で開示された技術的教示を抽出し、他の例と組み合わせてよい。

【0175】

本発明を、以下の例によってより詳細に説明するが、それにより本発明が制限されるものではない。

【0176】

当業者は、所与の説明を使用して発明性を使うことなく、本発明のさらなる電子素子を製造することができ、したがって特許請求の範囲の全般にわたって本発明を実施することができよう。

20

【0177】

例

以下の合成を、別段の指定がない限り、無水溶媒中で、保護ガス雰囲気下で実施する。金属錯体を遮光して、または黄色光下で、追加的な処理をする。溶媒および試薬を、たとえばSigma-ALDRICHまたはABCRから購入することができる。角括弧内の夫々の数字または個々の化合物について示された番号は、文献から知られた化合物のCAS番号に関する。

【0178】

調製例：

a) 1-ブロモジベンゾフラン

【0179】

30

【化12】



【0180】

111 g (416ミリモル)の6'-ブロモ-2'-フルオロピフェニル-2-オルを、2 LのDMF (最大0.003%のH₂O) SeccoSolv(登録商標)に溶解させ、5 に冷却する。20 g (449ミリモル)の水素化ナトリウム(パラフィンオイル中60%の懸濁液)を、この溶液に小分けして添加し、添加が完了後、混合物を徐々にさらに20分間攪拌し、次いで、100 で45分間加熱する。冷ました後、500 mlのエタノールをこの混合物へ徐々に添加し、これをロータリーエバポレーターで完全に濃縮し、次いでクロマトグラフィにより精製する。収率：90 g (367ミリモル)、理論値の88.5%。

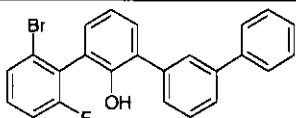
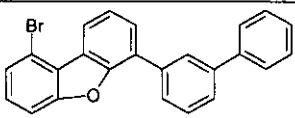
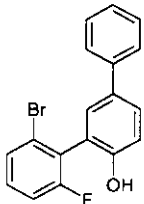
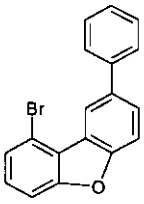
40

【0181】

同じような方法で、以下の化合物を調製する：

【0182】

【化13】

	反応物 1	生成物	収率
a1			73%
a2			79%

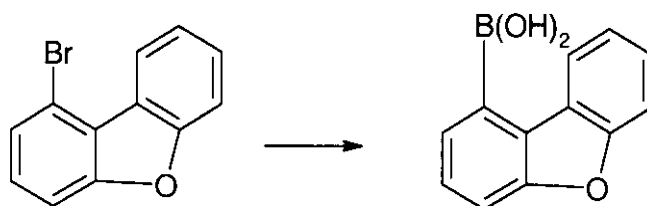
10

【0183】

b) ジベンゾフラン-1-ボロン酸

【0184】

【化14】



20

【0185】

180 g (728ミリモル)の1-ブロモジベンゾフランを1500 mlの無水THFに溶解させ、-78 に冷却する。この温度で、305 ml (764ミリモル/ヘキサン中2.5 M)のn-BuLiを約5分以内に添加し、その後、混合物を-78 でさらに2.5時間攪拌する。この温度で、151 g (1456ミリモル)のホウ酸トリメチルを非常に迅速に添加し、反応を徐々に室温までにさせておく(約18時間)。反応溶液を水で洗浄し、沈殿した固形物と有機相とをトルエンで共沸的に乾燥させる。粗生成物は、約40でトルエン/塩化メチレンから、攪拌しながら抽出され、吸引濾過される。収率: 146 g (690ミリモル)、理論値の95%。

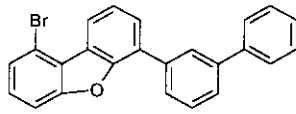
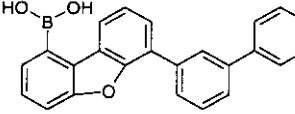
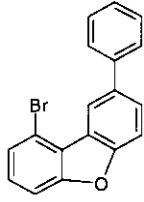
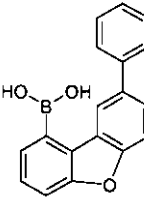
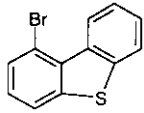
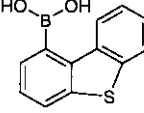
30

【0186】

同じような方法で、以下の化合物を調製する:

【0187】

【化15】

	反応物 1	生成物	収率
b1			73%
b2			79%
b3			73%

[65642-94-6]

40

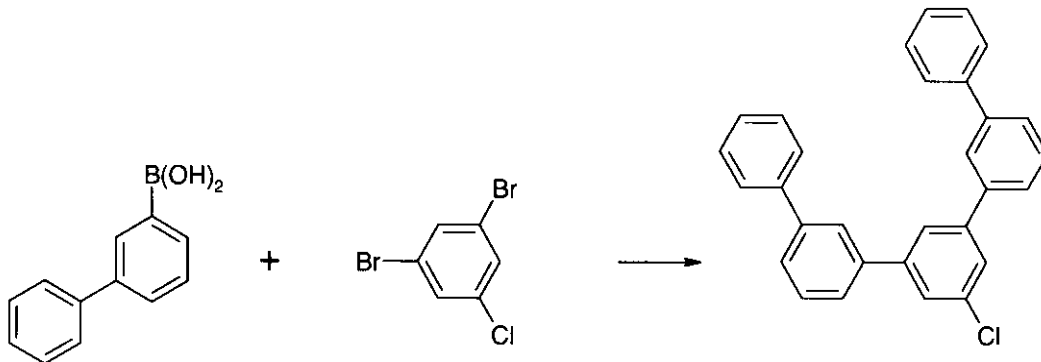
50

【0188】

c) 5'''-クロロ-[1,3';1'',1''',3''',1'''';3''''',1''''']キンケフェニルの合成

【0189】

【化16】



10

【0190】

29 g (148ミリモル)の3-ピフェニルボロン酸と、20 g (74ミリモル)の1-クロロ-3,5-ジブロモベンゼンと、60 g (596ミリモル)の炭酸ナトリウムとを、500 mLのTHFと300 mLの水とに懸濁させる。6.5 g (5.6ミリモル)のテトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)をこの懸濁液に添加し、反応混合物を還流下で16時間、加熱する。冷ました後、有機相を除去し、シリカゲルを通して濾過し、200 mLの水で三度洗浄し、次いで濃縮乾固させる。残留物をトルエンから再結晶化させる。収率は22 g (53ミリモル)であり、理論値の71%に対応する。

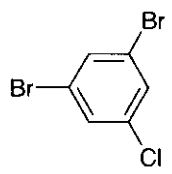
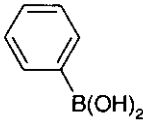
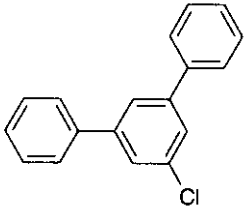
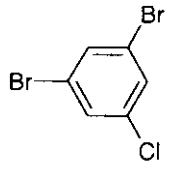
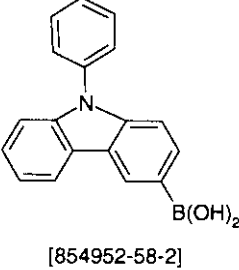
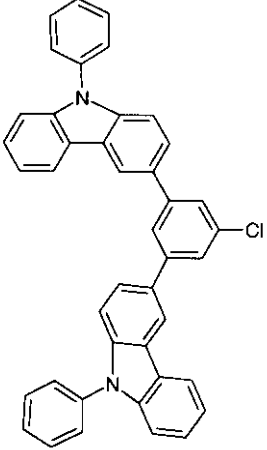
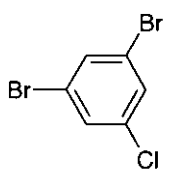
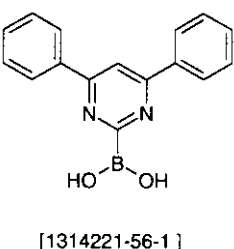
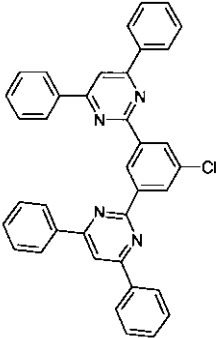
20

【0191】

同じような方法で、以下の化合物を得ることができる：

【0192】

【化17】

例	反応物 1	反応物 2	生成物	収率
c1				95%
c2		 [854952-58-2]		73%
c3		 [1314221-56-1]		83%

10

20

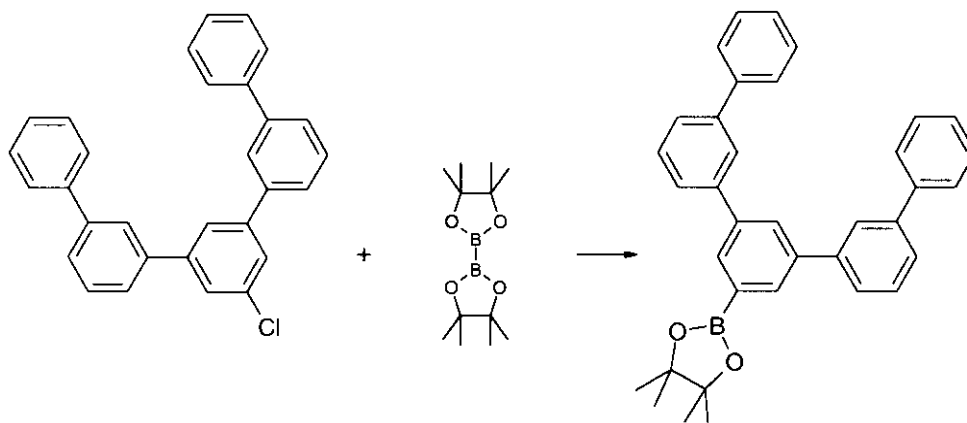
30

【0193】

d) 4,4,5,5-テトラメチル-2-[1,3';1',1'',3'',1''';3''',1''''']キンケフェニル-5''-イル-[1,3,2]ジオキサボロランの合成

【0194】

【化18】



40

【0195】

75 g (126ミリモル)の5''-クロロ-[1,3';1',1'',3'',1''';3''',1''''']キンケフェニルと、41.6 gのビス(ピナコラート)ジボロラン(163ミリモル)と、21 g(214ミリモル)の酢酸カリウムと、18 g(25ミリモル)のト

50

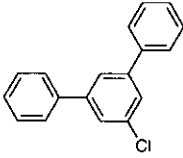
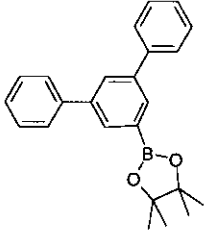
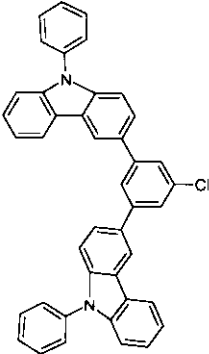
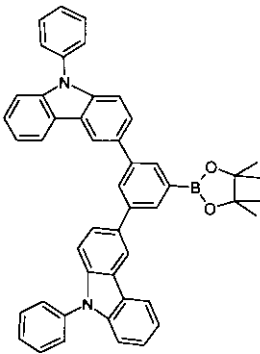
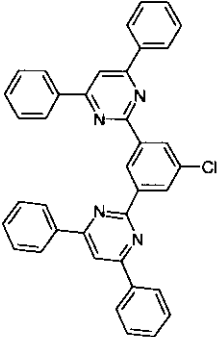
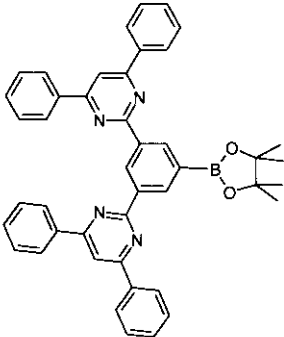
リシクロヘキシルホスフィンパラジウムジクロリドとを、二日間、激しく攪拌しながら、1 Lの1,4-ジオキサン中で加熱還流させる。反応混合物を室温でセライトを通して濾過する。溶媒を減圧下で除去し、残留する固形物をアセトニトリル中で再結晶化させる。生成した固形物を濾過し、ヘプタンで洗浄する。収率は82g(119ミリモル)であり、理論値の95%に対応する。

【0196】

同じような方法で、以下の化合物を得ることができる：

【0197】

【化19】

例	反応物 1	生成物	収率
d1			90%
d2			84%
d3			75%

10

20

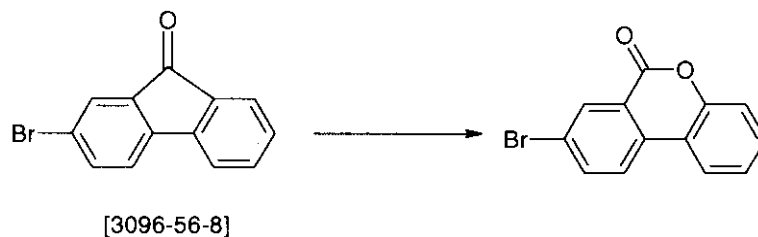
30

【0198】

e) 8-ブロモジベンゾ[b,d]ピラン-オンの合成

【0199】

【化20】



40

【0200】

100g(386ミリモル)の2-ブロモフルオレノンに最初に、1000mLのトリフルオロ酢酸に入れ、0 に冷却する。この溶液に対して、100g(637ミリモル)の

50

過炭酸ナトリウム（13% - 14%の活性酸素）を徐々に添加し、反応混合物を10 - 15 で1時間、攪拌する。その後、混合物の攪拌を室温で終夜、継続する。1000 mLの水をこの反応混合物に添加し、有機相を除去し、次いで濃縮乾固させる。残留物をヘプタンで粉末にし、吸引濾過し、減圧下で50 で乾燥させる。

【0201】

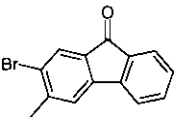
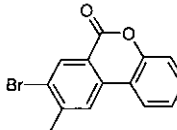
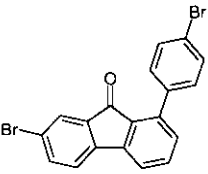
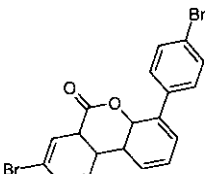
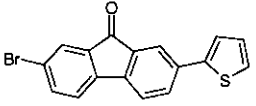
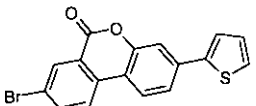
収率：92 g（334ミリモル）、理論値の86%。

【0202】

同じような方法で、以下の化合物を調製することができる：

【0203】

【化21】

例	反応物 1	生成物	収率
e1	 [52086-14-3]	 [52086-14-3]	50%
e2	 [171669-72-0]	 [171669-72-0]	63%
e3	 [1470370-96-7]	 [1470370-96-7]	61%

10

20

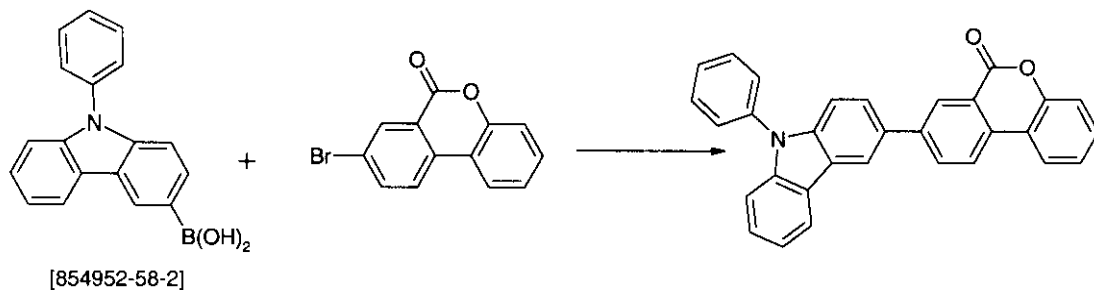
30

【0204】

f) 8-(9-フェニル-9H-カルバゾール-3-イル)ベンゾ[c]クロメン-6-オン

【0205】

【化22】



40

【0206】

17 g（67ミリモル）の9-フェニル-9H-カルバゾール-3-ボロン酸と、22.2 g（81ミリモル）の8-プロモ-6H-ジベンゾ[b,d]ピラン-6-オンと、136 g（980ミリモル）のリン酸三カリウムとを、1000 mLのTHFと300 mLの水とに懸濁させる。この懸濁液に対して、178 mg（0.67ミリモル）のトリフェニルホスフィンと、次いで152 mg（0.67ミリモル）の酢酸パラジウム(II)とを添加し、反応混合物を還流下で16時間、加熱する。冷ました後、有機相を除去し、シリカゲルを通して濾過し、200 mLの水で三度洗浄し、次いで濃縮乾固される。残留物をトルエン/ヘプタンから再結晶化させ、最後に、高真空（ $p = 5 \times 10^{-5}$ mbar、 $T = 377$ ）で昇華させる。収率は23 g（54ミリモル）であり、理論値の82%に対応する。

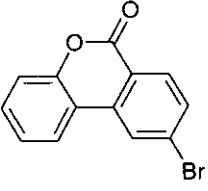
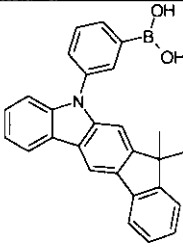
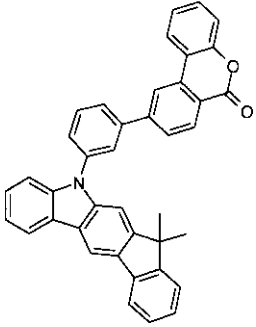
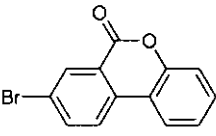
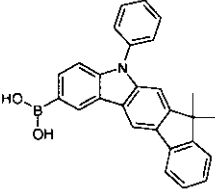
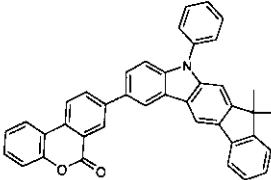
50

【 0 2 0 7 】

同じような方法で、以下の化合物を得ることができる：

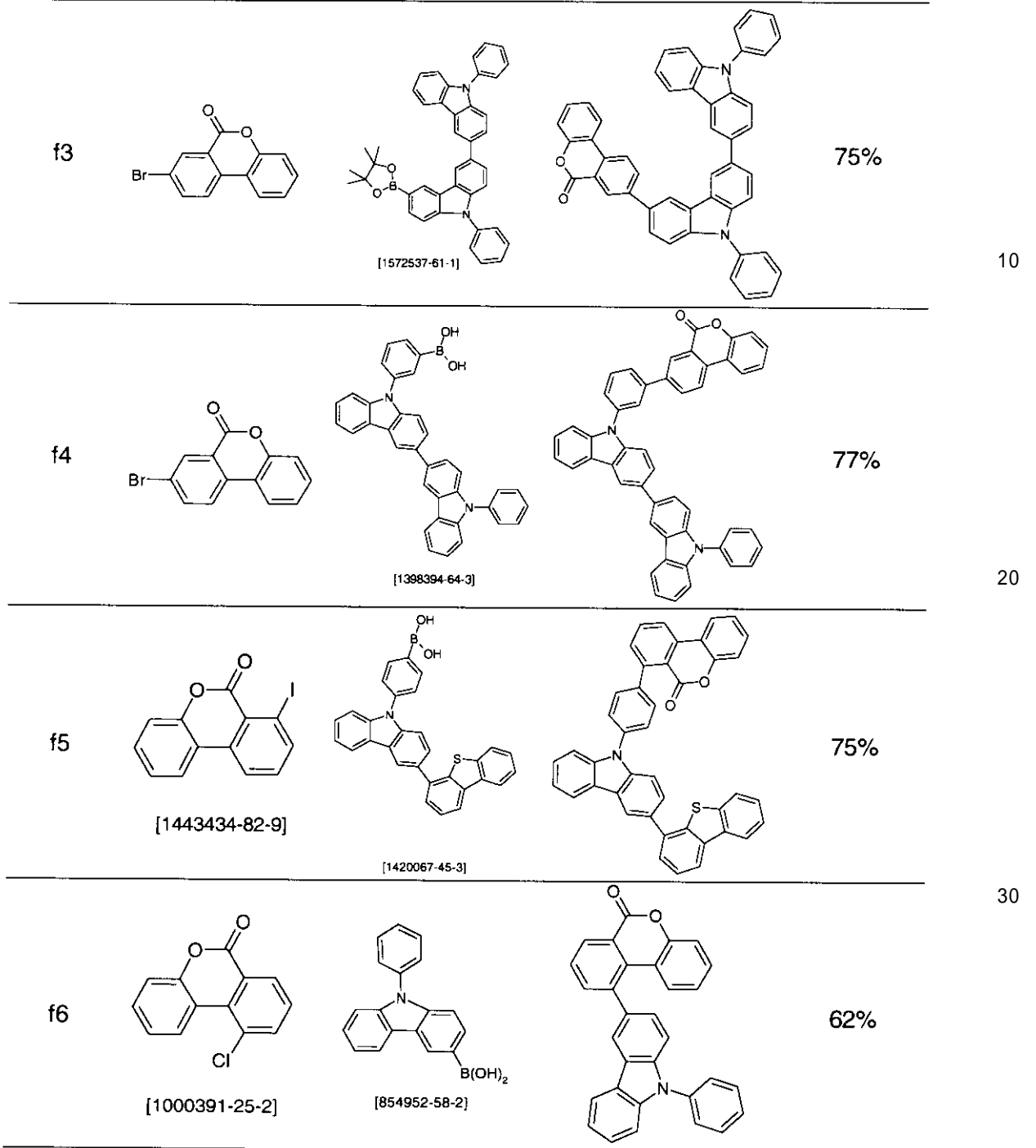
【 0 2 0 8 】

【 化 2 3 - 1 】

	反応物 1	反応物 2	生成物	収率	
f1	 [1469912-47-7]	 [1369587-64-3]		78%	10
f2		 [1379585-25-7]		70%	20

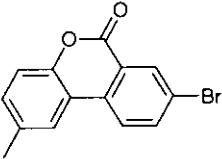
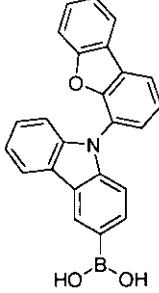
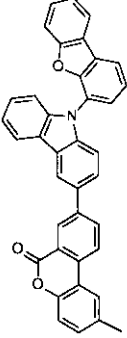
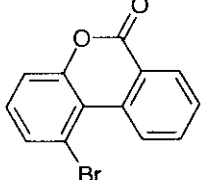
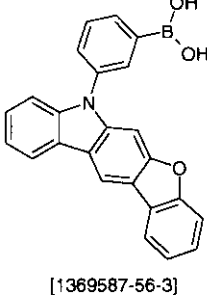
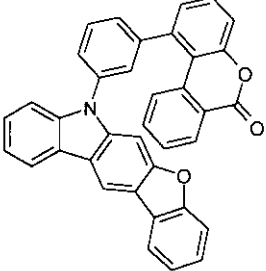
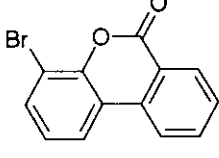
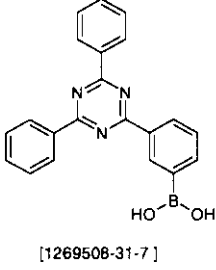
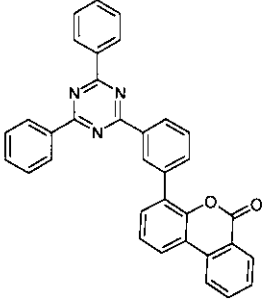
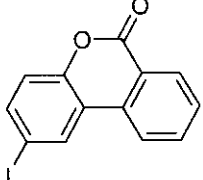
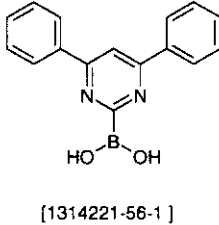
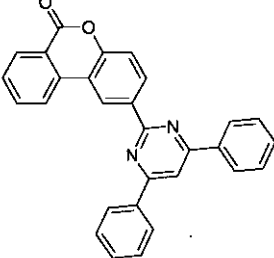
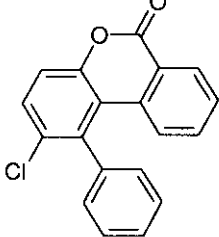
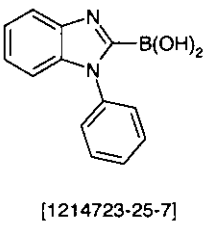
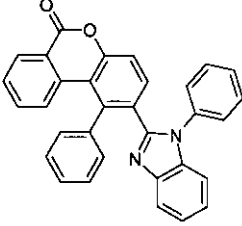
【 0 2 0 9 】

【化 2 3 - 2】



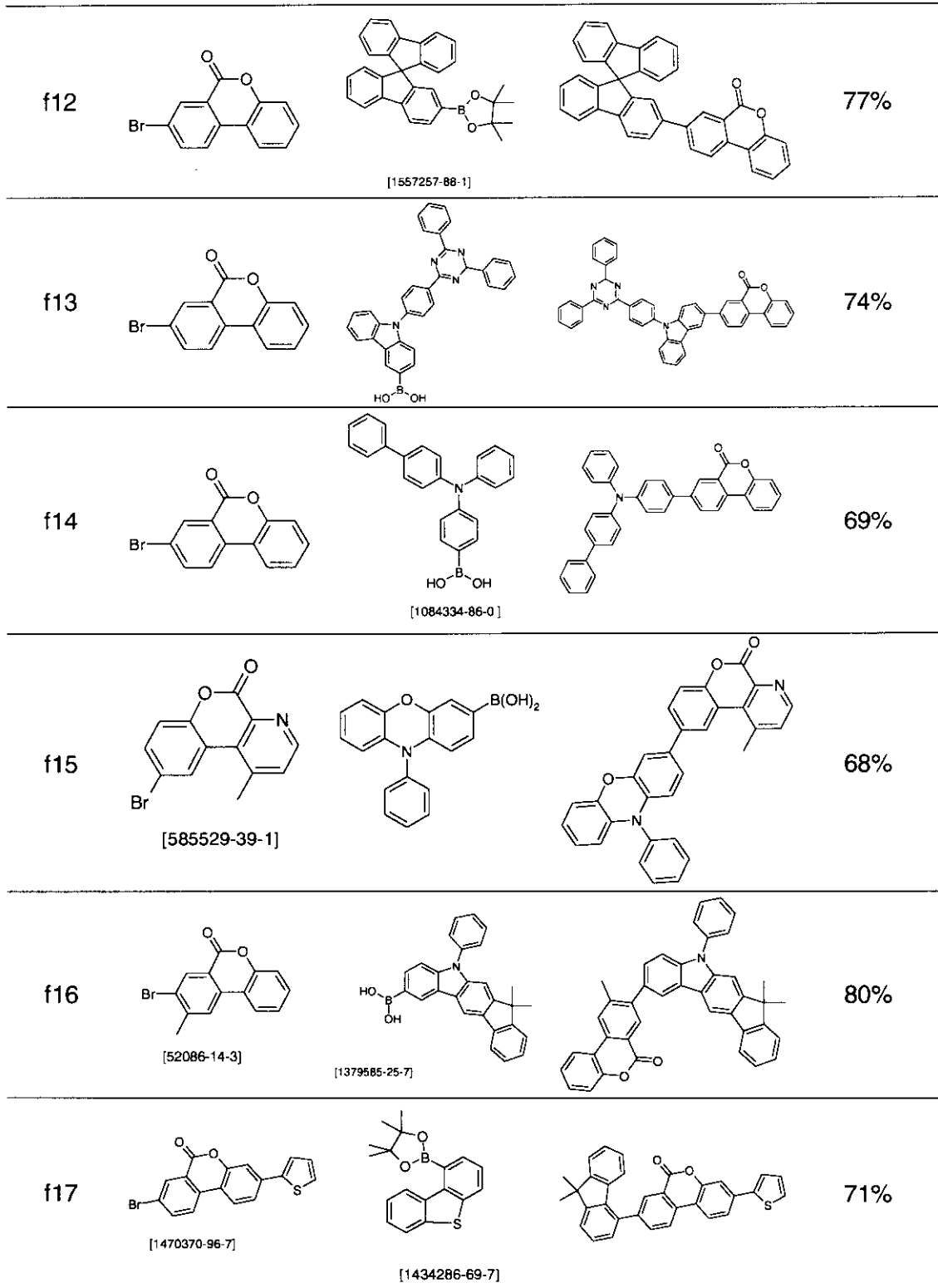
【 0 2 1 0 】

【化 2 3 - 3】

f7	 [100527-53-5]	 [1547397-15-8]		83%	10
f8	 [928307-80-6]	 [1369587-56-3]		84%	
f9	 [158097-94-0]	 [1269508-31-7]		79%	20
f10	 [151648-54-3]	 [1314221-56-1]		83%	30
f11	 [1130141-14-8]	 [1214723-25-7]		75%	40

【 0 2 1 1 】

【化 2 3 - 4】



10

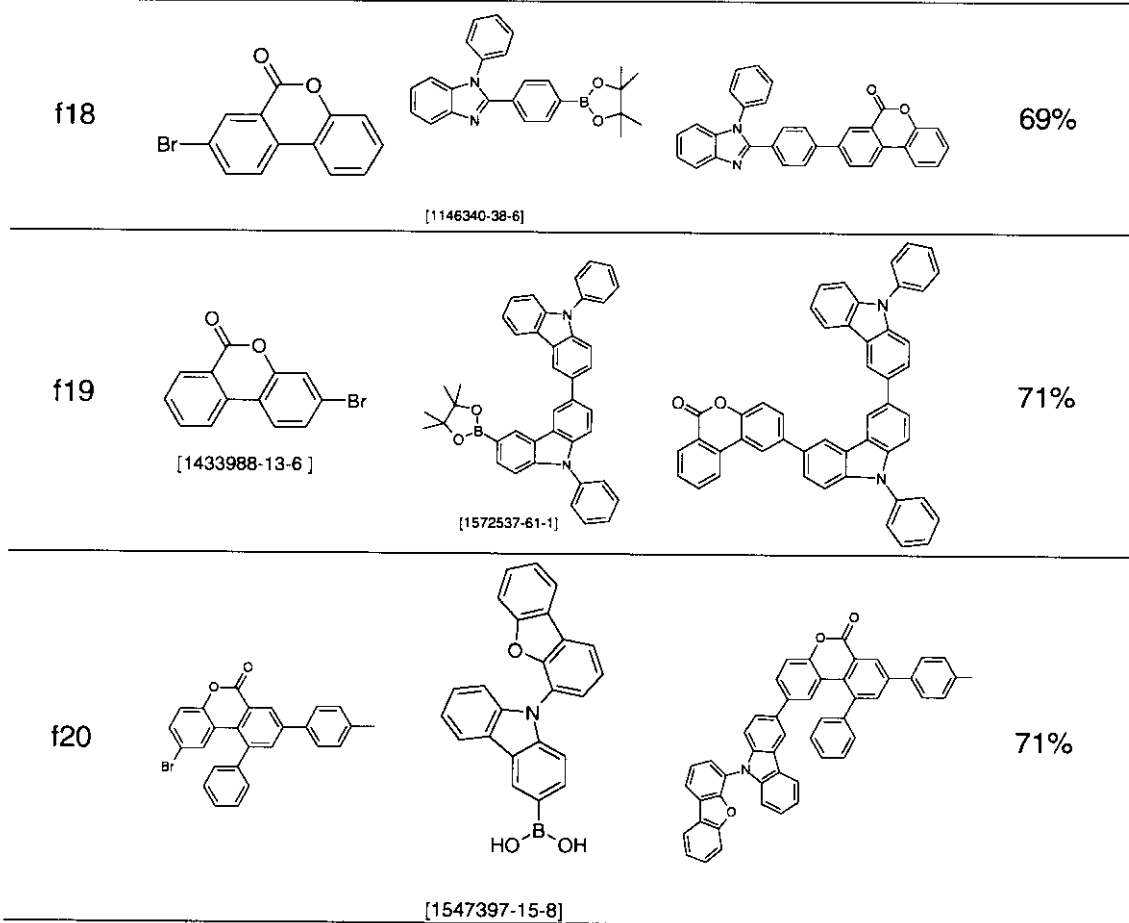
20

30

40

【 0 2 1 2 】

【化 2 3 - 5】



10

20

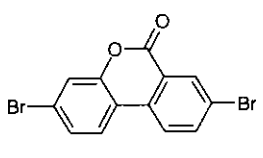
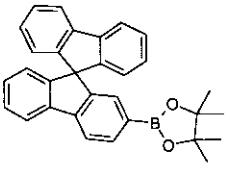
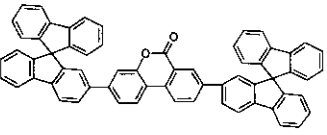
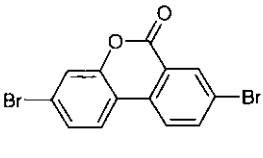
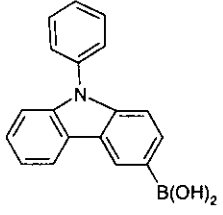
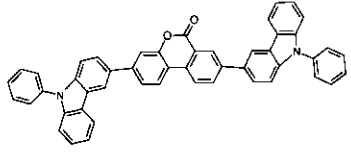
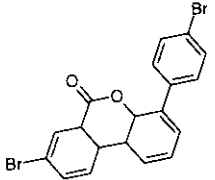
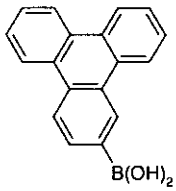
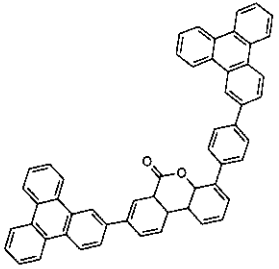
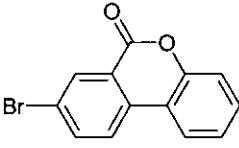
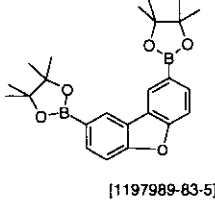
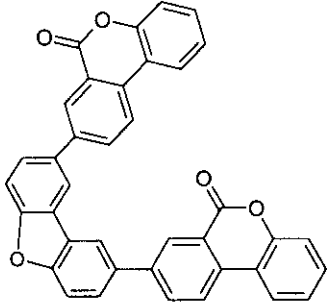
【 0 2 1 3 】

同じような方法で、0.5当量のボロン酸または臭化物により、以下の化合物を調製することができる：

【 0 2 1 4 】

30

【化24】

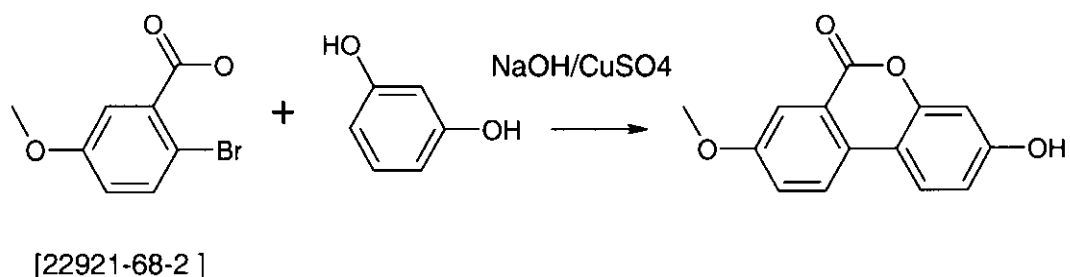
	反応物 1	反応物 2	生成物	収率
f21	 [18102-99-3]	 [1557257-88-1]		74%
f22	 [18102-99-3]	 [854952-58-2]		76%
f23	 [171669-72-0]	 [654664-63-8]		70%
f24	 [171669-72-0]	 [1197989-83-5]		72%

【0215】

g) 3-ヒドロキシ-8-メトキシベンゾ[c]クロメン-6-オン

【0216】

【化25】



【0217】

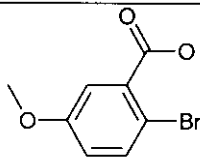
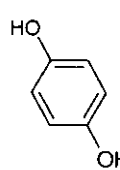
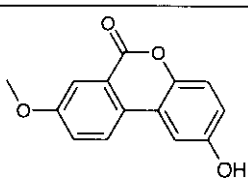
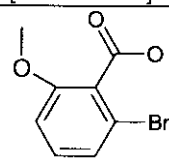
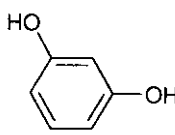
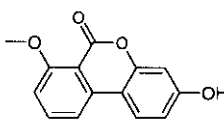
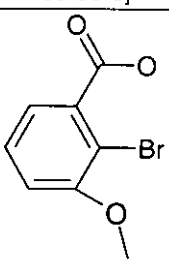
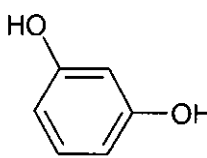
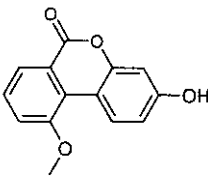
83 g (343ミリモル)の水酸化ナトリウムを1000 mLの水に溶解する。80 g (346ミリモル)の2-プロモ-5-メトキシ安息香酸と、76.5 g (695ミリモル)のベンゼン-1,3-ジオールとを添加し、混合物を還流下で30分間、沸騰させる。この懸濁液に対して、300 mLの水に溶解された7 g (28ミリモル)の硫酸銅五水和物の溶液を添加し、反応混合物を還流下で1時間、加熱する。冷ました後、固形物を濾過し、200 mLのヘプタンで一度混合洗浄し、次いで濃縮乾固させる。収率は50 g (165ミリモル)であり、理論値の80%に対応する。

【0218】

同じような方法で、以下の化合物を得ることができる：

【0219】

【化26】

	反応物 1	反応物 2	生成物	収率
g1				80%
	[22921-68-2]			
g2				87%
	[72135-36-5]			
g3				85%
	[88377-29-1]			

10

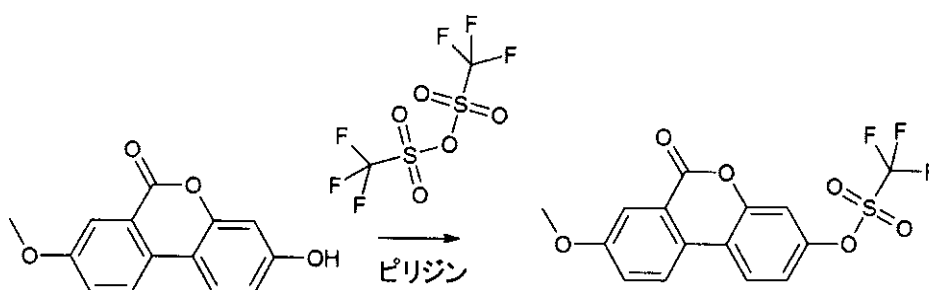
20

【0220】

h) 8-メトキシ-6-オキソ-6H-ベンゾ[c]クロメン-3-イルトリフルオロメタンスルホン酸

【0221】

【化27】



30

【0222】

83 g (343ミリモル)の3-ヒドロキシ-8-メトキシベンゾ[c]クロメン-6-オンを、0 で1200 mLのジクロロメタンに懸濁させる。250 mLのジクロロメタン中、37 mL (267ミリモル)のトリエチルアミンと、57 mL (343ミリモル)のトリフルオロメタンスルホン酸とを、温度が5 を超えないようにする。混合物を0 でさらに1時間攪拌し、次いで攪拌を室温で終夜、継続する。固形物を濾過し、200 mLの水/MeOHで一度混合洗浄し、次いで濃縮乾固させる。収率は102 g (275ミリモル)であり、理論値の80%に対応する。

40

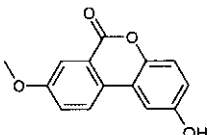
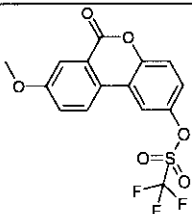
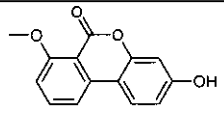
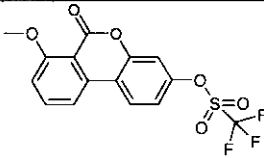
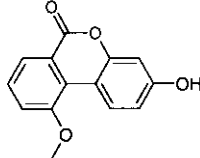
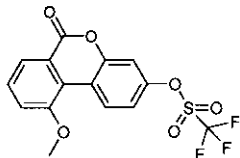
【0223】

同じような方法で、以下の化合物を得ることができる：

【0224】

50

【化28】

	反応物 1	生成物	収率
h1			81%
h2			82%
h3			79%

10

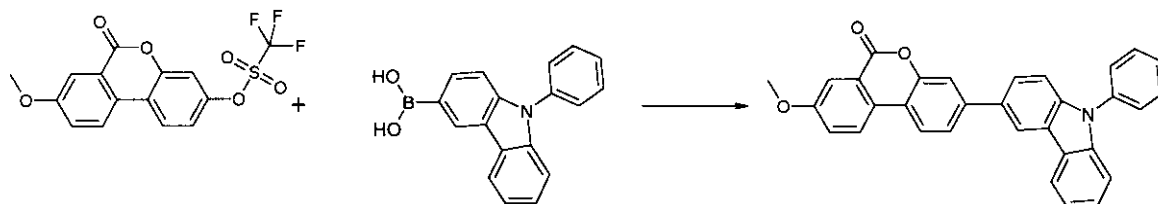
【0225】

j) 8-メトキシ-3-(9-フェニル-9H-カルバゾール-3-イル)ベンゾ[c]クロメン-6-オン

20

【0226】

【化29】



【0227】

27 g (72ミリモル)の8-メトキシ-6-オキソ-6H-ベンゾ[c]クロメン-3-イルトリフルオロメタンスルホン酸と、31 g (108ミリモル)の(9-フェニルカルバゾール-3-イル)ボロン酸と、8.3 g (7.2ミリモル)のテトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)と、25 mL (180ミリモル)のトリエチルアミンとを、700 mLの1,2-ジメトキシエタンに懸濁させ、反応混合物を還流下で110で16時間、加熱する。冷ました後、有機相を除去し、シリカゲルを通して濾過し、200 mLの水で三度洗浄し、次いで濃縮乾固させる。残留物をトルエン/ヘプタンから再結晶化させる。収率は20 g (42ミリモル)であり、理論値の60%に対応する。

30

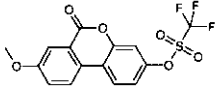
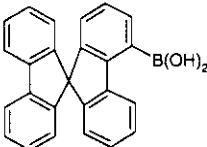
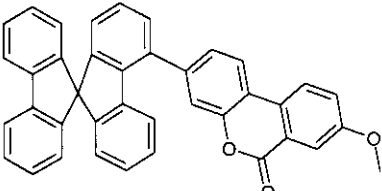
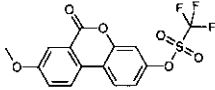
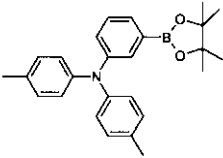
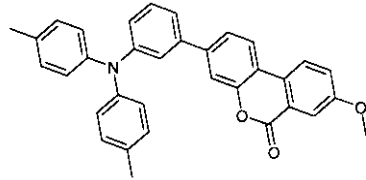
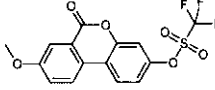
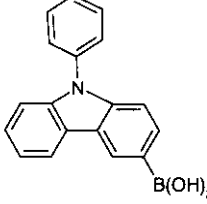
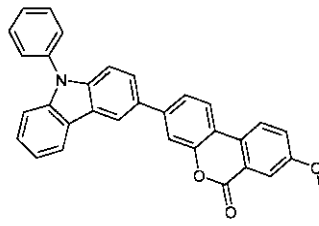
【0228】

同じような方法で、以下の化合物を得ることができる：

【0229】

40

【化 3 0 - 1】

	反応物 1	反応物 2	生成物	収率
j1		 [1421789-05-0]		63%
j2		 [1162753-18-5]		68%
j3		 [854952-58-2]		72%

10

20

【 0 2 3 0 】

【化30-2】

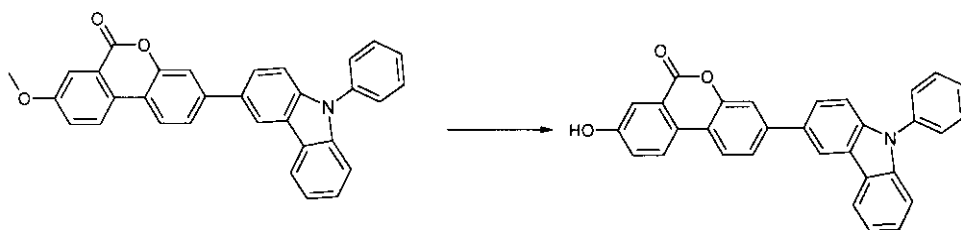
	反応物 1	反応物 2	生成物	収率
j4				75%
j5				70%
j6				76%
j7				81%
j8				82%
j9				79%
j10				78%

【0231】

i) 8-ヒドロキシ-3-(9-フェニル-9H-カルパゾール-3-イル)ベンゾ[c]クロメン-6-オン

【0232】

【化31】



【0233】

8.3 g (17.8 mmol) の8-メトキシ-3-(9-フェニル-9H-カルバゾール-3-イル)ベンゾ[c]クロメン-6-オンと、1500 mL のジクロロメタンとを0 に冷却し、100 mL (105.4 mmol) のトリプロモボランを徐々に添加し、混合物を室温で16時間、攪拌する。その後、100 mL のメタノールとともに加水分解をおこない、固形物を吸引濾過する。残留物をヘプタンから再結晶化させる。収率は4.6 g (10.3 mmol) であり、理論値の57%に対応する。

10

【0234】

同じような方法で、以下の化合物を得ることができる：

【0235】

【化32-1】

	反応物 1	生成物	収率
i1			65%
i2			64%
i3			70%

20

30

【0236】

【化32-2】

	反応物 1	生成物	収率
i4			65%
i5			60%
i6			71%
i7			69%
i8			78%
i9			73%
i10			67%

10

20

30

【0237】

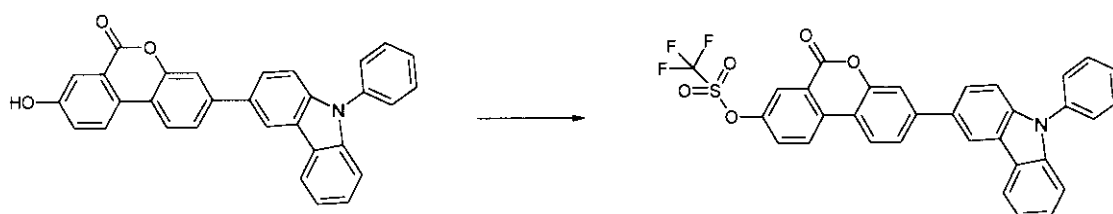
k) 6-オキソ-3-(9-フェニル-9H-カルバゾール-3-イル)-6H-ベンゾ[c]クロメン-8-イル

40

トリフルオロメタンスルホン酸

【0238】

【化33】



【0239】

50

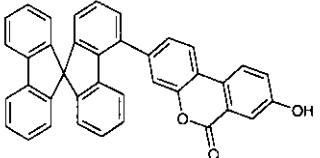
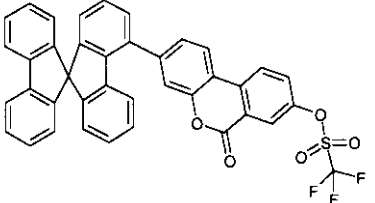
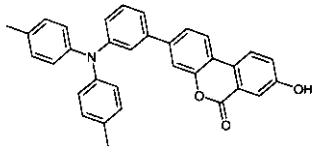
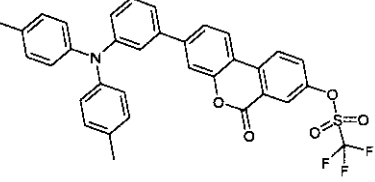
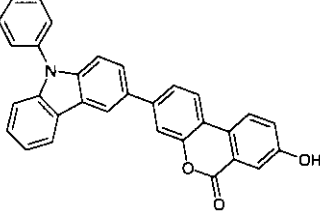
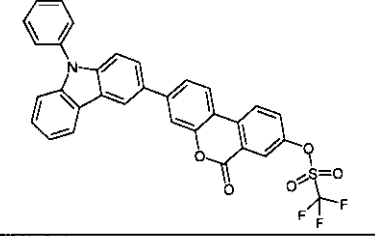
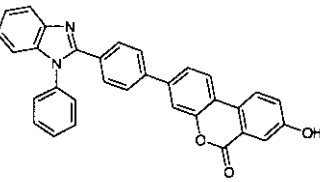
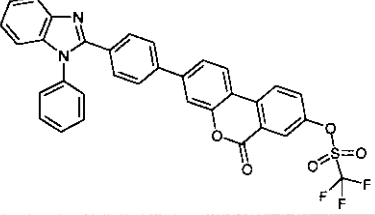
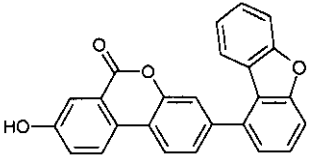
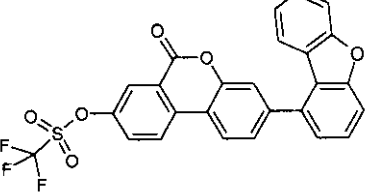
同じような方法で、方法(h)によって、以下の化合物を得ることができる。残留物はトルエンから再結晶化される。収率は理論値の81%である。

【0240】

同じような方法で、以下の化合物を得ることができる：

【0241】

【化34-1】

	反応物 1	生成物	収率	
k1			80%	10
k2			78%	
k3			84%	20
k4			73%	30
k5			72%	

【0242】

【化 3 4 - 2】

	反応物 1	生成物	収率
k6			71%
k7			79%
k8			72%
k9			75%
k10			74%

10

20

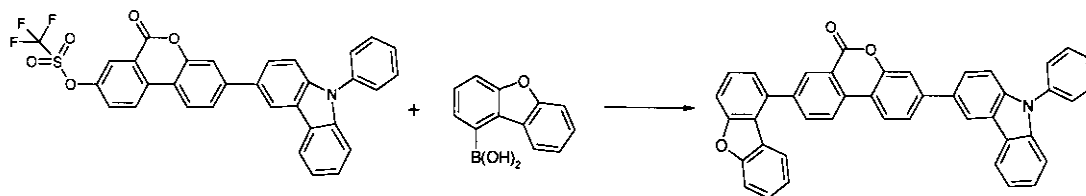
【 0 2 4 3 】

1) ジベンゾフラン-1-イル-3-(9-フェニル-9H-カルパゾール-3-イル)ベンゾ[c]クロメン-6-オン

30

【 0 2 4 4 】

【化 3 5】



【 0 2 4 5 】

40

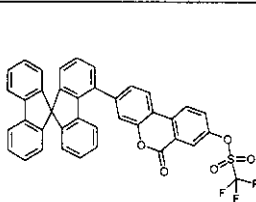
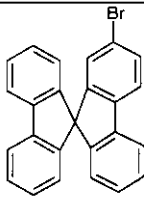
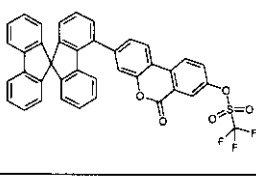
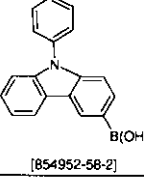
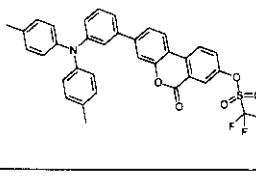
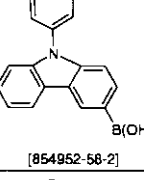
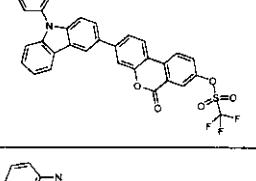
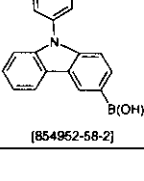
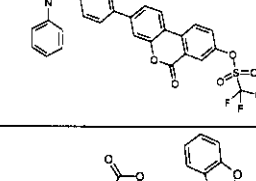
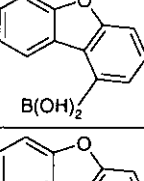
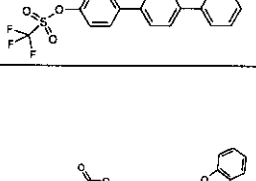
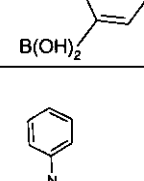
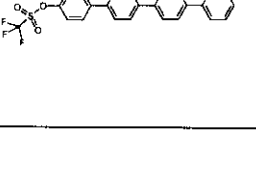
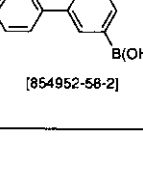
同じような方法で、方法 (j) によって、以下の化合物を得ることができる。残留物はトルエン/ヘプタンから再結晶化され、最後に高真空 ($p = 5 \times 10^{-5}$ mbar、 $T = 377$) で昇華される。収率は理論値の 75% である。

【 0 2 4 6 】

同じような方法で、以下の化合物を得ることができる :

【 0 2 4 7 】

【化 3 6 - 1】

	反応物 1	生成物	収率
11			80%
		[171408-76-7]	
12			75%
		[854952-58-2]	
13			78%
		[854952-58-2]	
14			84%
		[854952-58-2]	
15			73%
		[854952-58-2]	
16			72%
		[854952-58-2]	
17			71%
		[854952-58-2]	

10

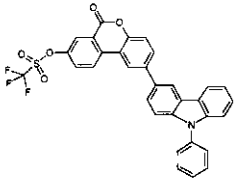
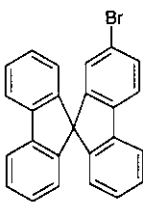
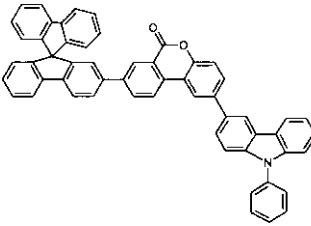
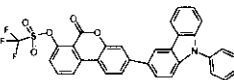
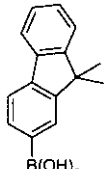
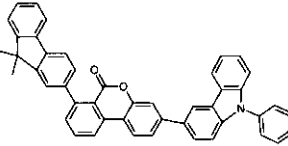
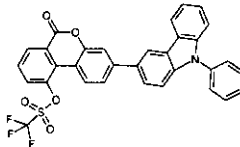
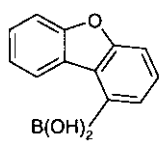
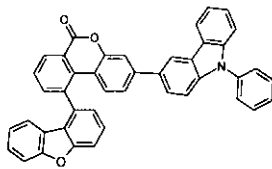
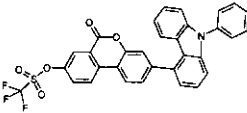
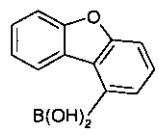
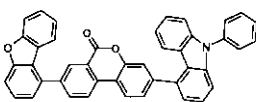
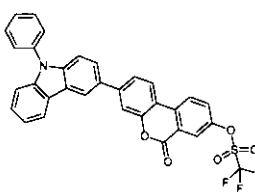
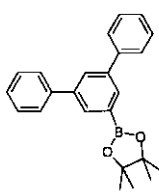
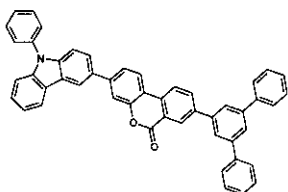
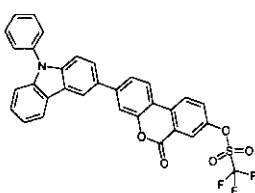
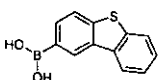
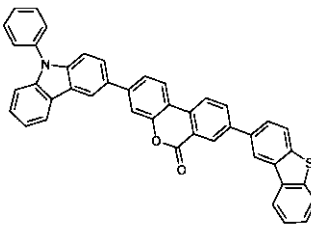
20

30

40

【 0 2 4 8 】

【化 3 6 - 2】

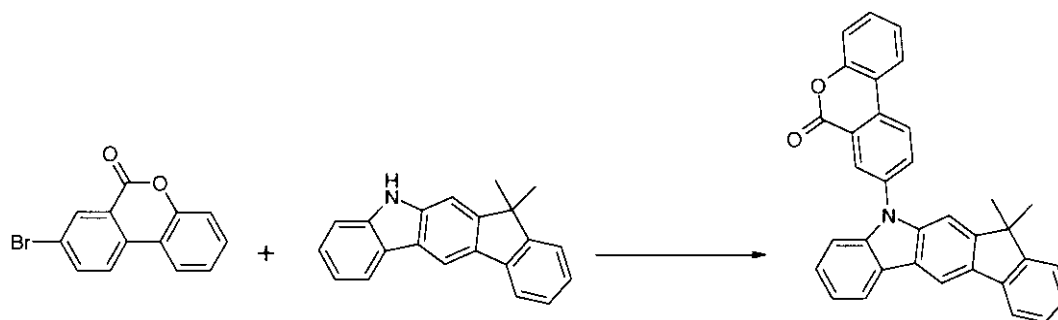
	反応物 1	生成物	収率		
18		 [171408-76-7]		79%	10
19		 B(OH) ₂ 333432-28-3		72%	
110		 B(OH) ₂		75%	20
111		 B(OH) ₂		74%	
112				73%	30
113		 HO-B(OH) ₂		74%	40

【 0 2 4 9 】

m) 8-(12,12-ジメチル-12H-10-アザインデノ[2,1-b]フルオレン-10-イル)ベンゾ[c]クロメン-6-オン

【 0 2 5 0 】

【化 3 7】



10

【0251】

31 g (115ミリモル)の8-ブromo-6H-ジベンゾ[b,d]ピラン-6-オンと、27.7 g (98ミリモル)の12,12-ジメチル-10,12-ジヒドロ-10-アザインデノ[2,1-b]フルオレンと、30.5 gのNaOtBuとを1.5 Lのp-キシレンに懸濁させる。この懸濁液に対して、0.5 g (2.11ミリモル)のPd(OAc)₂と、6 mLの1 Mトリ-tert-ブチルホスフィン(トルエン中、1 M溶液)とを添加する。反応混合物を還流下で16時間加熱する。冷ました後、有機相を除去し、その度毎に200 mLの水で三度洗浄し、次いで濃縮乾固させる。残留物をトルエンとともに熱抽出にかけ、トルエンから再結晶化させ、最後に高真空で昇華させる。純度はHPLCによれば99.9%である。収率は33 g (69ミリモル)であり、理論値の71%に対応する。

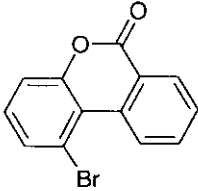
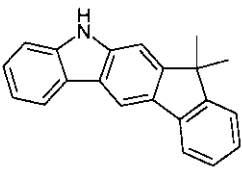
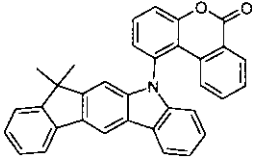
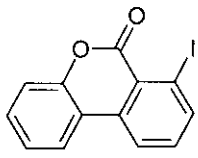
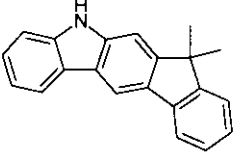
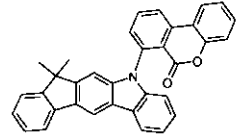
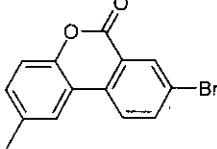
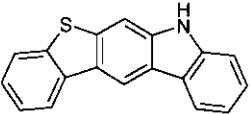
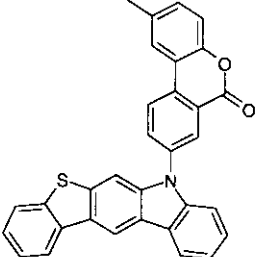
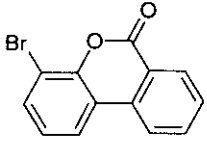
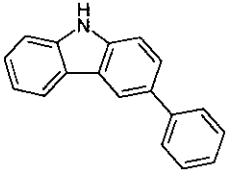
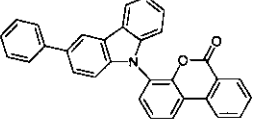
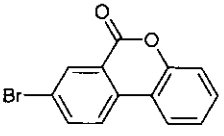
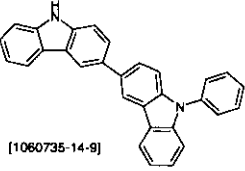
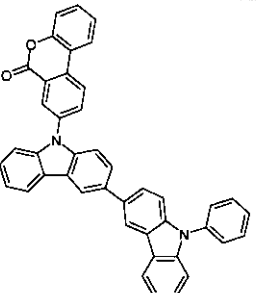
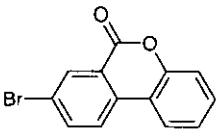
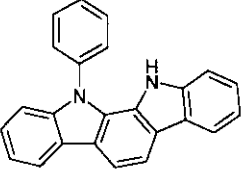
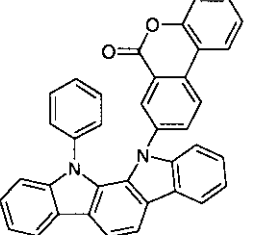
20

【0252】

同じような方法で、以下の化合物を調製することができる：

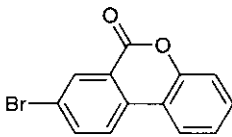
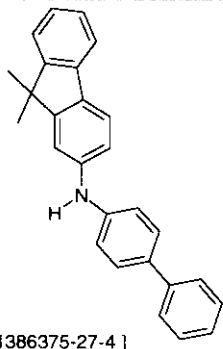
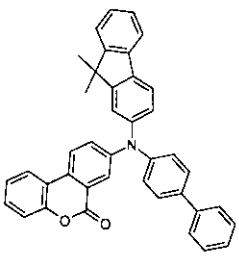
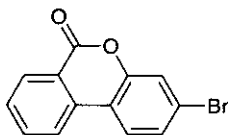
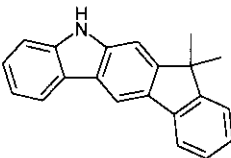
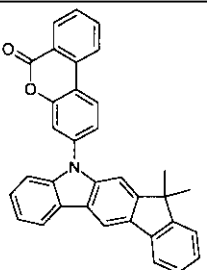
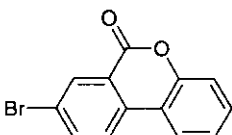
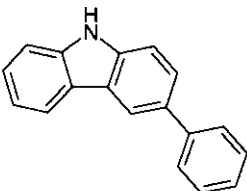
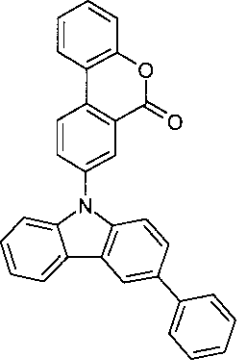
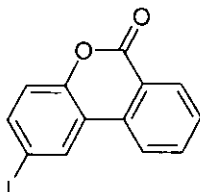
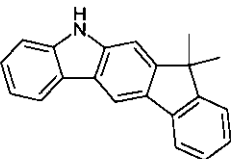
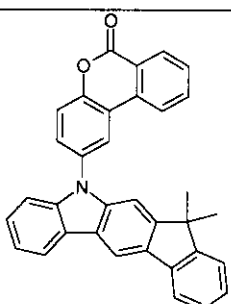
【0253】

【化 3 8 - 1】

	反応物 1	反応物 2	生成物	収率
m1	 [928307-80-6]	 [1257220-47-5]		70%
m2	 [1443434-82-9]	 [1257220-47-5]		74%
m3	 [100527-53-5]	 [1255309-04-6]		81%
m4	 [158097-94-0]	 [103012-26-6]		80%
m5		 [1060735-14-9]		79%
m6		 [1024598-06-8]		62%

【 0 2 5 4 】

【化 3 8 - 2】

	反応物 1	反応物 2	生成物	収率
m7		 [1386375-27-4]		75%
m8	 [1433988-13-6]	 [1257220-47-5]		79%
m9		 [103012-26-6]		81%
m10	 [151648-54-3]	 [1257220-47-5]		78%

【 0 2 5 5 】

O L E D の 製 造

種々の O L E D についてのデータを、以下の使用例 R 1 ~ R 1 6 で提示する（表 1 および 2 を参照）。

【 0 2 5 6 】

例 R 1 - R 1 6 の前処理：厚さ 5 0 n m の構造化された I T O（インジウム錫酸化物）で被覆されたガラス薄板が、改善された加工のために、2 0 n m の P E D O T : P S S（ポリ（3,4-エチレンジオキシチオフエン）ポリ（スチレン・スルホン酸）で水溶液からのスピコートイング、Heraeus Precious Metals GmbH 独国から CLEVIOS（登録商標）P V P A I 4083 として購入）で被覆される。これらの被覆されたガラス薄板は、O L E D が適用される基板を形成する。

【 0 2 5 7 】

10

20

30

40

50

OLEDは、基本的に、次の層構造を有する：基板／正孔輸送層（HTL）／随意に、中間層（IL）／電子ブロック層（EBL）／発光層（EML）／随意に、正孔ブロック層（HBL）／電子輸送層（ETL）／随意に、電子注入層（EIL）および最後にカソード。カソードは、100nm厚のアルミニウム層により形成される。OLEDの正確な構造を、表1に見ることができる。OLEDの製造のために必要な材料を、表3に示す。

【0258】

すべての材料は、真空室において、熱気相堆積により適用される。この場合、発光層は、常に、少なくとも一種のマトリックス材料（ホスト材料）と、共蒸発により特定の体積割合で一種または複数種のマトリックス材料に添加される発光ドーパント（エミッター）とから成る。ここでは、IC1：IC3：TEG1（55%：35%：10%）のような形で与えられている詳細は、材料IC1が55体積%の割合で層中に存在し、IC3が35体積%の割合で層中に存在し、TEG1が10体積%の割合で層中に存在することを意味する。同じように、電子輸送層も、二種の材料の混合物から成ってもよい。

10

【0259】

OLEDは、標準方法により特性決定される。この目的のために、エレクトロルミネセンススペクトル、ランベルト発光特性を仮定して、電流/電圧/輝度特性線（IUL特性線）から計算した、輝度の関数としての電流効率（cd/Aで測定）、パワー効率（Im/Wで測定）、外部量子効率（EQE、パーセントで測定）および寿命が測定される。エレクトロルミネセンススペクトルは、輝度1000cd/m²で測定され、CIE1931xおよびy色座標はそこから計算される。表2でのパラメータU1000は、輝度1000cd/m²に対して必要とされる電圧を示す。CE1000とPE1000は、1000cd/m²で達成される電流およびパワー効率をそれぞれ示す。最後に、EQE1000は、駆動輝度1000cd/m²での外部量子効率を示す。

20

【0260】

種々のOLEDについてのデータを、表2に要約する。例R1～R16は本発明のOLEDのデータを示している。本発明の構造はここでは、発光層（EML）のマトリックス材料として使用され、電子輸送層（ETL）での電子の伝導のためのものである。さらに、本発明の構造は正孔ブロック層（HBL）として使用されることができる。

【0261】

【表 1】

表1: OLEDの構造

例	HTL 厚さ	IL 厚さ	EBL 厚さ	EML 厚さ	HBL 厚さ	ETL 厚さ	EIL 厚さ
R1	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG1:TEG1 (90%:10%) 30nm	IC1 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
R2	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG2:TEG1 (90%:10%) 30nm	IC1 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
R3	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG3:TEG1 (90%:10%) 30nm	IC1 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
R4	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG4:TEG1 (90%:10%) 30nm	IC1 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
R5	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	IC1:TEG1 (90%:10%) 30nm	IC1 10nm	EG5:LiQ (50%:50%) 30nm	---
R6	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	IC1:TEG1 (90%:10%) 30nm	IC1 10nm	EG6:ST2 (60%:40%)30nm	LiF 1nm
R7	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG7:IC3:TEG1 (65%:30%:5%) 30nm	IC1 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
R8	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG8:TEG1 (90%:10%) 30nm	IC1 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
R9	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	IC1:TEG1 (90%:10%) 30nm	EG9 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
R10	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	IC1:TEG1 (90%:10%) 30nm	IC1 10nm	EG10:LiQ (50%:50%) 30nm	---
R11	HATCN 5nm	SpMA1 70nm	SpMA2 15nm	IC1:EG11:TEY1 (45%:45%:10%) 25nm	---	ST2 45nm	LiQ 3nm
R12	HATCN 5nm	SpMA1 70nm	SpMA2 15nm	L1:EG12:TEY1 (45%:45%:10%) 25nm	---	ST2 45nm	LiQ 3nm
R13	SpA1 90nm	HATCN 5nm	SpMA1 130nm	EG13:TER3 (92%:8%) 40nm	---	ST2:LiQ (50%:50%) 40nm	---
R14	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	IC1:TEG1 (90%:10%) 30nm	IC1 10nm	EG14:LiQ (50%:50%) 30nm	---
R15	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG15:TEG1 (90%:10%) 30nm	IC1 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---
R16	SpA1 70nm	HATCN 5nm	SpMA1 90nm	EG16:TEG1 (90%:10%) 30nm	IC1 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	---

10

20

【 0 2 6 2 】

【表 2】

表2: OLEDのデータ

例	U1000 (V)	CE1000 (cd/A)	PE1000 (lm/W)	EQE 1000	1000 cd/m ² における CIE x/y
R1	3.6	57	50	15.7%	0.31/0.64
R2	3.3	58	55	15.5%	0.33/0.64
R3	3.6	56	49	15.4%	0.34/0.62
R4	3.4	60	55	16.1%	0.33/0.63
R5	3.4	64	59	17.2%	0.33/0.63
R6	3.6	64	56	17.4%	0.32/0.64
R7	3.4	57	53	15.5%	0.30/0.65
R8	3.3	60	57	16.5%	0.32/0.64
R9	3.5	61	55	17.2%	0.32/0.63
R10	3.3	64	61	17.0%	0.34/0.63
R11	2.9	84	91	25.1%	0.45/0.54
R12	3.1	82	83	24.0%	0.43/0.56
R13	4.7	11	7	12.2%	0.67/0.33
R14	3.5	60	54	17.0%	0.33/0.62
R15	3.3	58	55	15.6%	0.33/0.63
R16	3.2	57	56	15.3%	0.32/0.64

10

20

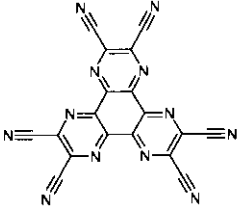
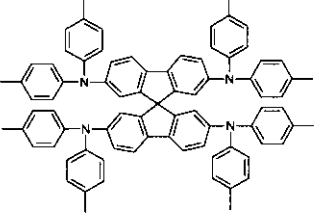
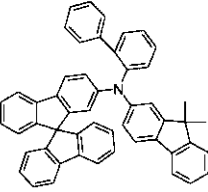
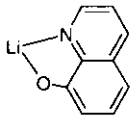
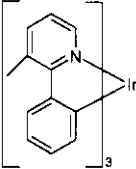
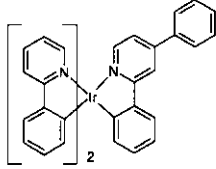
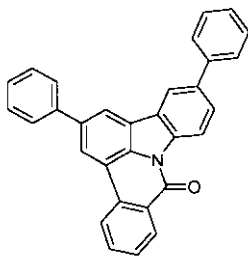
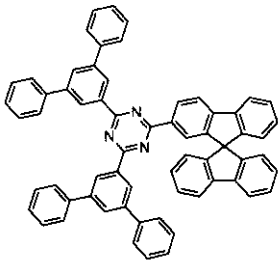
30

40

【 0 2 6 3 】

【表 3 - 1】

表3: OLEDの材料の構造式

	
HATCN	SpA1
	
SpMA1	LiQ
	
TEG1	TEY1
	
L1	ST2

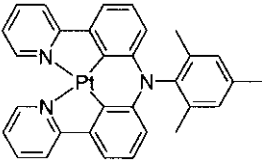
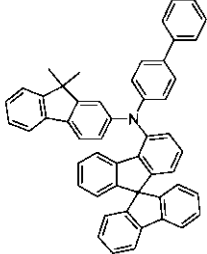
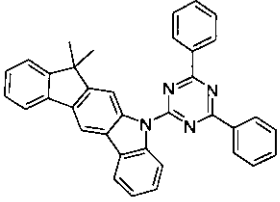
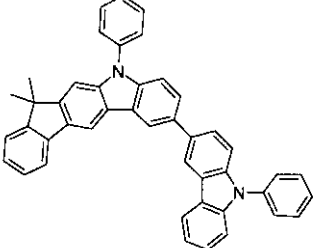
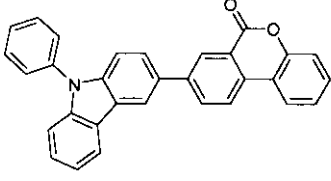
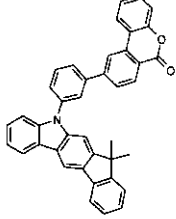
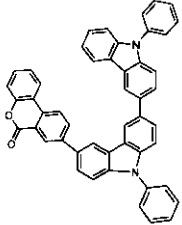
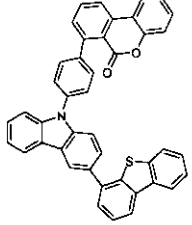
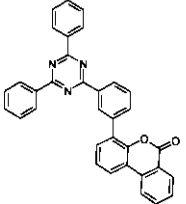
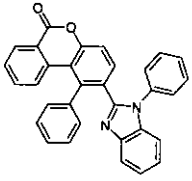
10

20

30

【 0 2 6 4 】

【表 3 - 2】

	
TER3	SpMA2
	
IC1	IC3
	
EG1	EG2
	
EG3	EG4
	
EG5	EG6

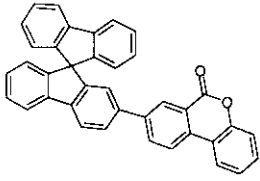
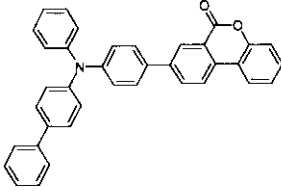
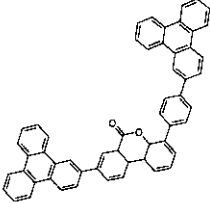
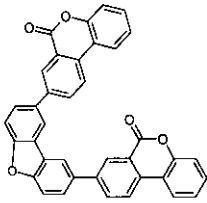
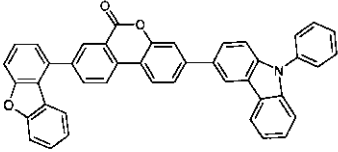
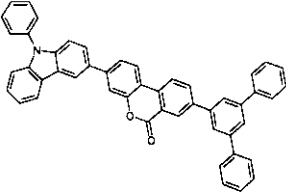
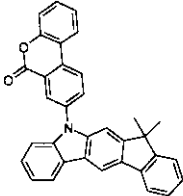
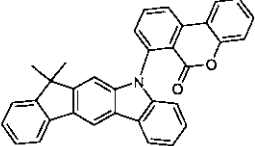
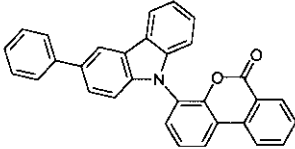
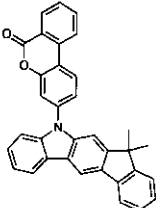
10

20

30

40

【表 3 - 3】

	
EG7	EG8
	
EG9	EG10
	
EG11	EG12
	
EG13	EG14
	
EG15	EG16

10

20

30

【国際調査報告】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No PCT/EP2015/001750

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER		
INV. C07D405/14	C07D311/80	C07D405/04
C07D407/12	C07D407/14	C07D409/10
C07D417/04	C07D417/10	C07D471/04
		C07D491/052
		C07D493/04
According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
B. FIELDS SEARCHED		
Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) C07D H01L		
Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched		
Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) EPO-Internal, BIOSIS, CHEM ABS Data, EMBASE, WPI Data, BEILSTEIN Data		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 2014/015935 A2 (MERCK PATENT GMBH [DE]) 30 January 2014 (2014-01-30) page 40 - page 41; claims page 110 - page 116 -----	1-4, 6-8, 10-14, 16-19, 23
X	WO 03/099901 A1 (SUMITOMO CHEMICAL CO [JP]; NOGUCHI TAKANOBU [JP]; TSUBATA YOSHIKI [JP] 4 December 2003 (2003-12-04) cited in the application page 52; claims page 14 - page 15 page 33 -----	1-25
Y	US 2007/051922 A1 (NAKATANI TOMOYA [JP] ET AL) 8 March 2007 (2007-03-08) page 42, left-hand column, paragraph 0061 - paragraph 0063; claims ----- -/--	1-25
<input checked="" type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex.		
* Special categories of cited documents :		
A document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance *E* earlier application or patent but published on or after the international filing date *L* document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) *O* document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means *P* document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed		*T* later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention *X* document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone *Y* document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art *&* document member of the same patent family
Date of the actual completion of the international search 3 November 2015		Date of mailing of the international search report 11/11/2015
Name and mailing address of the ISA/ European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL - 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Fax: (+31-70) 340-3016		Authorized officer Härtinger, Stefan

1

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No PCT/EP2015/001750

C(Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
Y	US 2009/039765 A1 (UETANI YASUNORI [JP] ET AL) 12 February 2009 (2009-02-12) paragraph [0036]; claims; examples -----	1-25
Y	EP 2 468 725 A1 (IDEMITSU KOSAN CO [JP]) 27 June 2012 (2012-06-27) paragraph [0032] - paragraph [0037]; claims; examples -----	1-25
X,P	WO 2015/082056 A1 (MERCK PATENT GMBH [DE]) 11 June 2015 (2015-06-11) page 97 - page 109; examples 2-4 -----	1-8, 11-19
X,P	WO 2015/106789 A1 (MERCK PATENT GMBH [DE]) 23 July 2015 (2015-07-23) page 80 - page 83; claims 1-15 -----	1-25

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International application No

PCT/EP2015/001750

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member(s)	Publication date
WO 2014015935 A2	30-01-2014	CN 104603111 A	06-05-2015
		EP 2875004 A2	27-05-2015
		JP 2015530364 A	15-10-2015
		KR 20150036654 A	07-04-2015
		TW 201425275 A	01-07-2014
		US 2015179940 A1	25-06-2015
		WO 2014015935 A2	30-01-2014
WO 03099901 A1	04-12-2003	AU 2003241788 A1	12-12-2003
		TW I287570 B	01-10-2007
		WO 03099901 A1	04-12-2003
US 2007051922 A1	08-03-2007	CN 1863838 A	15-11-2006
		DE 112004001856 T5	27-07-2006
		GB 2424895 A	11-10-2006
		KR 20060115861 A	10-11-2006
		US 2007051922 A1	08-03-2007
		WO 2005033174 A1	14-04-2005
US 2009039765 A1	12-02-2009	CN 101048465 A	03-10-2007
		DE 112005002083 T5	19-07-2007
		GB 2432838 A	06-06-2007
		KR 20070061840 A	14-06-2007
		US 2009039765 A1	12-02-2009
		WO 2006025290 A1	09-03-2006
EP 2468725 A1	27-06-2012	CN 102482215 A	30-05-2012
		EP 2468725 A1	27-06-2012
		JP 5709752 B2	30-04-2015
		KR 20120052993 A	24-05-2012
		KR 20150065944 A	15-06-2015
		US 2012146014 A1	14-06-2012
		WO 2011021520 A1	24-02-2011
WO 2015082056 A1	11-06-2015	NONE	
WO 2015106789 A1	23-07-2015	NONE	

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP2015/001750

A. KLASSIFIZIERUNG DES ANMELDUNGSGEGENSTANDES				
INV.	C07D405/14	C07D311/80	C07D405/04	C07D407/04
	C07D407/12	C07D407/14	C07D409/10	C07D409/14
	C07D417/04	C07D417/10	C07D471/04	C07D491/052
			C07D493/04	
Nach der Internationalen Patentklassifikation (IPC) oder nach der nationalen Klassifikation und der IPC				
B. RECHERCHIERTE GEBIETE				
Recherchiertes Mindestprüfobjekt (Klassifikationssystem und Klassifikationssymbole)				
C07D H01L				
Recherchierte, aber nicht zum Mindestprüfobjekt gehörende Veröffentlichungen, soweit diese unter die recherchierten Gebiete fallen				
Während der internationalen Recherche konsultierte elektronische Datenbank (Name der Datenbank und evtl. verwendete Suchbegriffe)				
EPO-Internal, BIOSIS, CHEM ABS Data, EMBASE, WPI Data, BEILSTEIN Data				
C. ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN				
Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile			Betr. Anspruch Nr.
X	WO 2014/015935 A2 (MERCK PATENT GMBH [DE]) 30. Januar 2014 (2014-01-30) Seite 40 - Seite 41; Ansprüche Seite 110 - Seite 116 -----			1-4,6-8, 10-14, 16-19,23
X	WO 03/099901 A1 (SUMITOMO CHEMICAL CO [JP]; NOGUCHI TAKANOBU [JP]; TSUBATA YOSHIKI [JP]) 4. Dezember 2003 (2003-12-04) in der Anmeldung erwähnt Seite 52; Ansprüche Seite 14 - Seite 15 Seite 33 -----			1-25
				-/--
<input checked="" type="checkbox"/> Weitere Veröffentlichungen sind der Fortsetzung von Feld C zu entnehmen <input checked="" type="checkbox"/> Siehe Anhang Patentfamilie				
* Besondere Kategorien von angegebenen Veröffentlichungen :				
A Veröffentlichung, die den allgemeinen Stand der Technik definiert, aber nicht als besonders bedeutsam anzusehen ist			*T* Spätere Veröffentlichung, die nach dem internationalen Anmeldedatum oder dem Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist und mit der Anmeldung nicht kollidiert, sondern nur zum Verständnis des der Erfindung zugrundeliegenden Prinzips oder der ihr zugrundeliegenden Theorie angegeben ist	
E frühere Anmeldung oder Patent, die bzw. das jedoch erst am oder nach dem internationalen Anmeldedatum veröffentlicht worden ist			*X* Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann allein aufgrund dieser Veröffentlichung nicht als neu oder auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden	
L Veröffentlichung, die geeignet ist, einen Prioritätsanspruch zweifelhaft erscheinen zu lassen, oder durch die das Veröffentlichungsdatum einer anderen im Recherchenbericht genannten Veröffentlichung belegt werden soll oder die aus einem anderen besonderen Grund angegeben ist (wie ausgeführt)			*Y* Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann nicht als auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden, wenn die Veröffentlichung mit einer oder mehreren Veröffentlichungen dieser Kategorie in Verbindung gebracht wird und diese Verbindung für einen Fachmann naheliegend ist	
O Veröffentlichung, die sich auf eine mündliche Offenbarung, eine Benutzung, eine Ausstellung oder andere Maßnahmen bezieht			*Z* Veröffentlichung, die Mitglied derselben Patentfamilie ist	
P Veröffentlichung, die vor dem internationalen Anmeldedatum, aber nach dem beanspruchten Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist				
Datum des Abschlusses der internationalen Recherche			Abschließendes Datum des internationalen Recherchenberichts	
3. November 2015			11/11/2015	
Name und Postanschrift der Internationalen Recherchenbehörde Europäisches Patentamt, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL - 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Fax: (+31-70) 340-3016			Bevollmächtigter Bediensteter Härtinger, Stefan	

1

Formblatt PCT/ISA/210 (Blatt 2) (April 2005)

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Internationales Aktenzeichen PCT/EP2015/001750

C. (Fortsetzung) ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN		
Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
Y	US 2007/051922 A1 (NAKATANI TOMOYA [JP] ET AL) 8. März 2007 (2007-03-08) Seite 42, linke Spalte, Absatz 0061 - Absatz 0063; Ansprüche -----	1-25
Y	US 2009/039765 A1 (UETANI YASUNORI [JP] ET AL) 12. Februar 2009 (2009-02-12) Absatz [0036]; Ansprüche; Beispiele -----	1-25
Y	EP 2 468 725 A1 (IDEMITSU KOSAN CO [JP]) 27. Juni 2012 (2012-06-27) Absatz [0032] - Absatz [0037]; Ansprüche; Beispiele -----	1-25
X,P	WO 2015/082056 A1 (MERCK PATENT GMBH [DE]) 11. Juni 2015 (2015-06-11) Seite 97 - Seite 109; Beispiele 2-4 -----	1-8, 11-19
X,P	WO 2015/106789 A1 (MERCK PATENT GMBH [DE]) 23. Juli 2015 (2015-07-23) Seite 80 - Seite 83; Ansprüche 1-15 -----	1-25

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Angaben zu Veröffentlichungen, die zur selben Patentfamilie gehören

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP2015/001750

Im Recherchenbericht angeführtes Patentedokument	Datum der Veröffentlichung	Mitglied(er) der Patentfamilie	Datum der Veröffentlichung
WO 2014015935 A2	30-01-2014	CN 104603111 A	06-05-2015
		EP 2875004 A2	27-05-2015
		JP 2015530364 A	15-10-2015
		KR 20150036654 A	07-04-2015
		TW 201425275 A	01-07-2014
		US 2015179940 A1	25-06-2015
		WO 2014015935 A2	30-01-2014
WO 03099901 A1	04-12-2003	AU 2003241788 A1	12-12-2003
		TW 1287570 B	01-10-2007
		WO 03099901 A1	04-12-2003
US 2007051922 A1	08-03-2007	CN 1863838 A	15-11-2006
		DE 112004001856 T5	27-07-2006
		GB 2424895 A	11-10-2006
		KR 20060115861 A	10-11-2006
		US 2007051922 A1	08-03-2007
		WO 2005033174 A1	14-04-2005
US 2009039765 A1	12-02-2009	CN 101048465 A	03-10-2007
		DE 112005002083 T5	19-07-2007
		GB 2432838 A	06-06-2007
		KR 20070061840 A	14-06-2007
		US 2009039765 A1	12-02-2009
		WO 2006025290 A1	09-03-2006
EP 2468725 A1	27-06-2012	CN 102482215 A	30-05-2012
		EP 2468725 A1	27-06-2012
		JP 5709752 B2	30-04-2015
		KR 20120052993 A	24-05-2012
		KR 20150065944 A	15-06-2015
		US 2012146014 A1	14-06-2012
		WO 2011021520 A1	24-02-2011
WO 2015082056 A1	11-06-2015	KEINE	
WO 2015106789 A1	23-07-2015	KEINE	

フロントページの続き

(51)Int.Cl.		F I		テーマコード(参考)	
C 0 7 D 307/91	(2006.01)	H 0 1 L	29/28	2 5 0 H	4 C 0 7 1
C 0 7 D 239/26	(2006.01)	H 0 1 L	29/28	2 5 0 G	4 C 2 0 4
C 0 7 D 311/80	(2006.01)	H 0 1 L	31/04	1 5 4 B	4 J 0 0 2
C 0 7 D 409/04	(2006.01)	H 0 1 L	31/04	1 5 4 C	5 F 1 5 1
C 0 7 D 405/04	(2006.01)	H 0 1 L	31/04	1 5 4 D	
C 0 7 D 405/10	(2006.01)	C 0 7 D	307/91	C S P	
C 0 7 D 405/14	(2006.01)	C 0 7 D	239/26		
C 0 7 D 409/14	(2006.01)	C 0 7 D	311/80		
C 0 7 D 491/052	(2006.01)	C 0 7 D	409/04		
C 0 7 D 407/14	(2006.01)	C 0 7 D	405/04		
C 0 7 D 407/04	(2006.01)	C 0 7 D	405/10		
C 0 7 D 495/04	(2006.01)	C 0 7 D	405/14		
C 0 7 D 487/04	(2006.01)	C 0 7 D	409/14		
C 0 8 L 65/00	(2006.01)	C 0 7 D	491/052		
C 0 8 L 101/02	(2006.01)	C 0 7 D	407/14		
		C 0 7 D	407/04		
		C 0 7 D	495/04	1 0 3	
		C 0 7 D	487/04	1 3 7	
		C 0 8 L	65/00		
		C 0 8 L	101/02		

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

(74)代理人 100199565

弁理士 飯野 茂

(72)発明者 パルハム、アミア・ホサイン

ドイツ連邦共和国、6 0 4 8 6 フランクフルト・アム・マイン、ロエミッシャー・リング 2 6

(72)発明者 ムジカ - フェルナウド、テレサ

ドイツ連邦共和国、6 4 2 8 3 ダルムシュタット、ハインリッヒシュトラッセ 1 1 9

(72)発明者 エベルレ、トマス

ドイツ連邦共和国、7 6 8 2 9 ランダウ、ピリー - ブラント - シュトラッセ 6

(72)発明者 ヤトシュ、アンヤ

ドイツ連邦共和国、6 0 4 8 9 フランクフルト・アム・マイン、ヨセフ - マイ - シュトラッセ 2

(72)発明者 クロエベル、ヨナス・バレンティン

ドイツ連邦共和国、6 0 3 1 1 フランクフルト・アム・マイン、ファールガッセ 4

(72)発明者 グロスマン、トビアス

ドイツ連邦共和国、6 4 2 9 7 ダルムシュタット、ロイターアレ 7 1

Fターム(参考) 3K107 AA01 AA02 BB01 CC04 CC45 DD53 DD59 DD61 DD63 DD66

DD67 DD68 DD69 DD70 DD72 DD73 DD75 DD76 DD78 DD87

4C037 SA03

4C050 AA01 AA07 AA08 BB04 BB07 CC04 CC18 DD10 EE01 EE02
FF01 FF02 GG01 GG03 HH02 HH04
4C062 HH01
4C063 AA01 AA03 BB01 BB06 CC79 CC92 CC94 DD08 DD26 DD29
DD43 DD76 DD79 EE10
4C071 AA01 AA08 BB01 BB07 CC01 CC21 DD40 EE05 FF03 GG10
JJ06 LL05 LL10
4C204 BB05 BB09 CB25 DB01 EB01 FB08 GB07
4J002 AA001 CE001 EL096 EU026 EU236 EV216 EV306 GQ02 GQ05
5F151 AA11