

(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2018-524801

(P2018-524801A)

(43) 公表日 平成30年8月30日 (2018. 8. 30)

| (51) Int. Cl.               | F I                   | テーマコード (参考)  |
|-----------------------------|-----------------------|--------------|
| <b>H01L 51/50 (2006.01)</b> | <b>H05B 33/14 B</b>   | <b>3K107</b> |
| <b>H01L 27/32 (2006.01)</b> | <b>H01L 27/32</b>     | <b>5C094</b> |
| <b>C09K 11/06 (2006.01)</b> | <b>C09K 11/06 690</b> |              |
| <b>G09F 9/30 (2006.01)</b>  | <b>G09F 9/30 365</b>  |              |

審査請求 未請求 予備審査請求 未請求 (全 76 頁)

|               |                              |          |                                                                                                                                        |
|---------------|------------------------------|----------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (21) 出願番号     | 特願2017-561860 (P2017-561860) | (71) 出願人 | 590003283<br>コモンウェルス サイエンティフィック<br>アンド インダストリアル リサーチ オ<br>ーガナイゼーション<br>オーストラリア国オーストラリアン・キャ<br>ピタル・テリトリー 2612, キャンベ<br>ル, ライムストーン・アベニュー |
| (86) (22) 出願日 | 平成28年5月27日 (2016. 5. 27)     | (74) 代理人 | 100100158<br>弁理士 鮫島 睦                                                                                                                  |
| (85) 翻訳文提出日   | 平成30年1月26日 (2018. 1. 26)     | (74) 代理人 | 100132263<br>弁理士 江間 晴彦                                                                                                                 |
| (86) 国際出願番号   | PCT/AU2016/050421            | (72) 発明者 | ジェイムズ・マシュー・マクドナルド<br>オーストラリア3188ビクトリア州ハン<br>プトン、ルドストーン・ストリート108<br>番                                                                   |
| (87) 国際公開番号   | W02016/191803                |          |                                                                                                                                        |
| (87) 国際公開日    | 平成28年12月8日 (2016. 12. 8)     |          |                                                                                                                                        |
| (31) 優先権主張番号  | 2015902002                   |          |                                                                                                                                        |
| (32) 優先日      | 平成27年5月29日 (2015. 5. 29)     |          |                                                                                                                                        |
| (33) 優先権主張国   | オーストラリア (AU)                 |          |                                                                                                                                        |

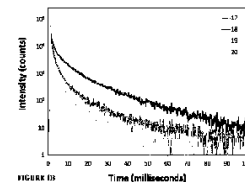
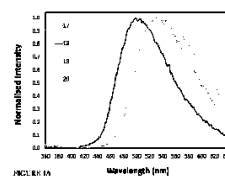
最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 熱活性化遅延蛍光発光材を有する有機発光デバイス

## (57) 【要約】

本開示は、発光層において熱活性化発光材を含んで成る有機エレクトロルミネッセンス・デバイスに関する。本開示はまた、熱活性化遅延蛍光を供することができる化合物、およびその化合物の少なくとも1つを含んで成る発光層に関する。化合物は、例えば蛍光OLEDのような有機エレクトロルミネッセンス・デバイスの発光層などの有機層に使用することができる。

【選択図】 図1A、図1B



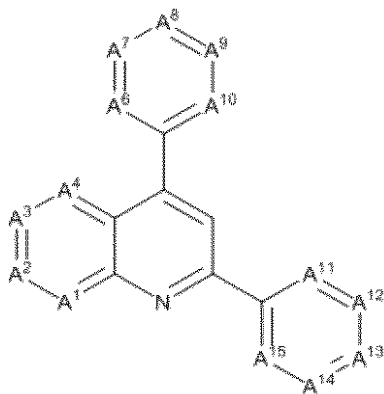
## 【特許請求の範囲】

## 【請求項 1】

アノードおよびカソードを形成する一対の電極ならびに正孔注入層、発光層、および電子輸送層を含んで成る 1 つの層または複数の層を含んで成るエレクトロルミネッセンス・デバイスであって、

前記発光層が式 1 で表される発光化合物を含んで成り、

## 【化 1】



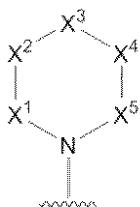
式 1

$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^3$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  が、各々独立して、C - Y および N から選択され、

Y が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、CN、 $NO_2$ 、 $C(O)R^2$ 、 $OR^2$ 、 $OS(O)_2R^2$ 、 $NR^2R^3$ 、 $SR^2$ 、任意に置換される  $C_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルキニル、任意に置換される単環式または多環式の炭素環式または複素環式、式 2 の部分から選択され、ならびに 2 またはそれよりも多い Y 基が共に、任意に式 2 の部分と置換される縮合アリール基または縮合ヘテロアリール基を形成し、

式 2 の部分が以下によって表され、

## 【化 2】



式 2

$X^1 \sim X^5$  が、各々独立して、C、 $CR^4$ 、 $CR^4R^5$ 、N、 $NR^4$ 、S、SO、 $SO_2$ 、 $SiR^4R^5$  および O から選択され、ならびに

$R^4$  および  $R^5$  が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、CN、 $NO_2$ 、 $C(O)R^2$ 、 $OR^2$ 、 $OS(O)_2R^2$ 、 $NR^2R^3$ 、 $SR^2$ 、任意に置換される  $C_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルキニル、任意に置換されるアリールまたはヘテロアリール、任意に置換される単環式または多環式の複素環式から選択され、ならびに

2 またはそれよりも多い  $R^4$  基および  $R^5$  基が共に、任意に置換される、単環式または多環式の炭素環式または複素環式を形成してよく、

$R^2$  および  $R^3$  が、各々独立して、水素、 $C_{1-10}$  アルキル、および単環式または多環式のアリールおよびヘテロアリールから選択され、ならびに

$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^3$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  の少なくとも 1 つが式 2 の部分と置換される

デバイス。

【請求項 2】

Y が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、ヒドロキシル、ニトロ、シアノ、チオール、アミノ、任意に置換される C<sub>1</sub> - 6 アルキル、請求項 1 で規定される式 2 の部分から選択され、および

2 またはそれよりも多い Y 基が共に、任意に式 2 の部分と置換される縮合アリール基または縮合ヘテロアリール基を形成する、請求項 1 に記載のデバイス。

【請求項 3】

Y が、各々独立して、水素、請求項 1 で規定される式 2 の部分から選択され、および

2 またはそれよりも多い Y 基が共に、任意に式 2 の部分と置換される縮合アリール基または縮合ヘテロアリール基を形成する、請求項 2 に記載のデバイス。

10

【請求項 4】

A<sup>1</sup>、A<sup>2</sup>、A<sup>4</sup>、A<sup>6</sup>、A<sup>7</sup>、A<sup>8</sup>、A<sup>9</sup>、A<sup>10</sup>、A<sup>11</sup>、A<sup>12</sup>、A<sup>13</sup>、A<sup>14</sup> および A<sup>15</sup> が、各々独立して、C - Y から選択され、

A<sup>3</sup> が C - Y であり、Y が式 2 の部分であり、ならびに

Y および式 2 が請求項 1 で規定されるものである、請求項 1 に記載のデバイス。

【請求項 5】

A<sup>1</sup>、A<sup>2</sup>、A<sup>4</sup>、A<sup>6</sup>、A<sup>7</sup>、A<sup>8</sup>、A<sup>9</sup>、A<sup>10</sup>、A<sup>11</sup>、A<sup>12</sup>、A<sup>13</sup>、A<sup>14</sup> および A<sup>15</sup> が、各々 CH であり、ならびに

A<sup>3</sup> が、C - Y であり、

Y が請求項 1 で規定される式 2 の部分である、請求項 1 に記載のデバイス。

20

【請求項 6】

A<sup>1</sup>、A<sup>2</sup>、A<sup>3</sup>、A<sup>4</sup>、A<sup>6</sup>、A<sup>7</sup>、A<sup>8</sup>、A<sup>9</sup>、A<sup>10</sup>、A<sup>11</sup>、A<sup>12</sup>、A<sup>14</sup> および A<sup>15</sup> が、各々独立して、C - Y から選択され、

A<sup>13</sup> が C - Y であり、Y が式 2 の部分であり、ならびに

Y および式 2 が請求項 1 で規定されるものである、請求項 1 に記載のデバイス。

【請求項 7】

A<sup>1</sup>、A<sup>2</sup>、A<sup>3</sup>、A<sup>4</sup>、A<sup>6</sup>、A<sup>7</sup>、A<sup>8</sup>、A<sup>9</sup>、A<sup>10</sup>、A<sup>11</sup>、A<sup>12</sup>、A<sup>14</sup> および A<sup>15</sup> が、各々 CH であり、ならびに

A<sup>13</sup> が C - Y であり、Y が請求項 1 で規定される式 2 の部分である、請求項 1 に記載のデバイス。

30

【請求項 8】

A<sup>1</sup>、A<sup>2</sup>、A<sup>4</sup>、A<sup>6</sup>、A<sup>7</sup>、A<sup>8</sup>、A<sup>9</sup>、A<sup>10</sup>、A<sup>11</sup>、A<sup>12</sup>、A<sup>14</sup> および A<sup>15</sup> が、各々独立して、C - Y から選択され、

A<sup>3</sup> および A<sup>13</sup> が各々 C - Y であり、Y が式 2 の部分であり、ならびに

Y および式 2 が請求項 1 で規定されるものである、請求項 1 に記載のデバイス。

【請求項 9】

A<sup>1</sup>、A<sup>2</sup>、A<sup>4</sup>、A<sup>6</sup>、A<sup>7</sup>、A<sup>8</sup>、A<sup>9</sup>、A<sup>10</sup>、A<sup>11</sup>、A<sup>12</sup>、A<sup>14</sup> および A<sup>15</sup> が、各々 CH であり、ならびに

A<sup>3</sup> および A<sup>13</sup> が各々 C - Y であり、Y が請求項 1 で規定される式 2 の部分である、請求項 1 に記載のデバイス。

40

【請求項 10】

A<sup>1</sup>、A<sup>6</sup>、A<sup>7</sup>、A<sup>8</sup>、A<sup>9</sup>、A<sup>10</sup>、A<sup>11</sup>、A<sup>12</sup>、A<sup>13</sup>、A<sup>14</sup> および A<sup>15</sup> が、各々独立して、C - Y および N から選択され、

A<sup>2</sup> および A<sup>4</sup> が各々 CH であり、

A<sup>3</sup> が C - Y であり、Y が式 2 の部分であり、ならびに

Y および式 2 が請求項 1 で規定されるものである、請求項 1 に記載のデバイス。

【請求項 11】

A<sup>1</sup> が CH または N であり、

A<sup>2</sup> および A<sup>4</sup> が各々 CH であり、

50

$A^3$  が  $C-Y$  であり、 $Y$  が請求項 1 で規定される式 2 の部分であり、  
 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  が、  
 各々独立して、 $C-Y$  から選択され、

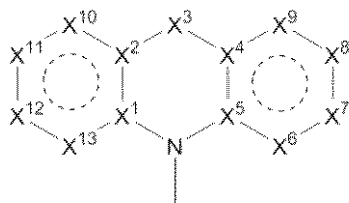
$Y$  が、各々独立して、水素、式 2 の部分から選択され、ならびに

2 またはそれよりも多い  $Y$  基が共に、任意に式 2 の部分と置換される縮合アリール基または縮合ヘテロアリール基を形成する、請求項 1 に記載のデバイス。

【請求項 12】

前記式 2 の部分が、式 2 (a) の部分であり、

【化 3】



10

式 2 (a)

$X^1 \sim X^{13}$  が、各々独立して、 $C$ 、 $CR^4$ 、 $CR^4R^5$ 、 $N$ 、 $NR^4$ 、 $S$ 、 $SO$ 、 $SO_2$ 、 $SiR^4R^5$  および  $O$  から選択され、ならびに

$R^4$  および  $R^5$  が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、 $CN$ 、 $NO_2$ 、 $C(O)R^2$ 、 $OR^2$ 、 $OS(O)_2R^2$ 、 $NR^2R^3$ 、 $SR^2$ 、任意に置換される  $C_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルキニル、任意に置換されるアリールまたはヘテロアリールから選択され、ならびに

20

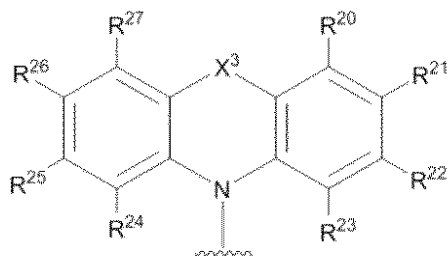
式中の点線の円が、1 またはそれよりも多い任意の二重結合を示し、ならびに

$R^2$  および  $R^3$  が、各々独立して、水素および  $C_{1-10}$  アルキルから選択される、請求項 1 に記載のデバイス。

【請求項 13】

前記式 2 の部分が、式 2 (a) (i) の部分であり、

【化 4】



30

式 2 (a) (i)

$X^3$  が、 $CR^4R^5$ 、 $NR^4$ 、 $S$ 、 $SO$ 、 $SO_2$ 、 $SiR^4R^5$  および  $O$  から選択され、ならびに

40

$R^4$  および  $R^5$  が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、 $CN$ 、 $NO_2$ 、 $C(O)R^2$ 、 $OR^2$ 、 $OS(O)_2R^2$ 、 $NR^2R^3$ 、 $SR^2$ 、任意に置換される  $C_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルキニル、および任意に置換されるアリールまたはヘテロアリールから選択され、

$R^2$  および  $R^3$  が、各々独立して、水素および  $C_{1-10}$  アルキルから選択され、ならびに

$R^{20} \sim R^{27}$  が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、 $CN$ 、 $NO_2$ 、 $C(O)R^2$ 、 $OR^2$ 、 $OS(O)_2R^2$ 、 $NR^2R^3$ 、 $SR^2$ 、任意に置換される  $C_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルキニルか

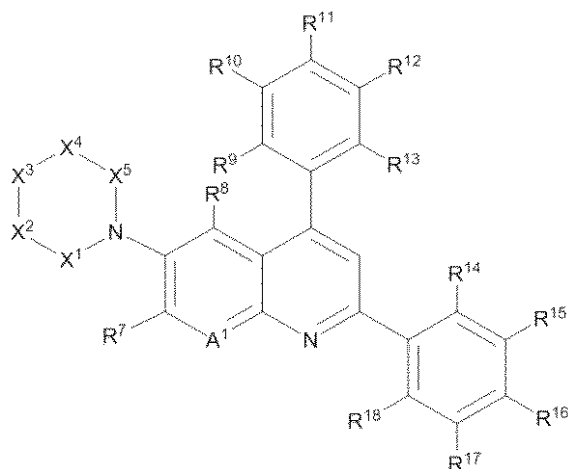
50

ら選択される、請求項 1 に記載のデバイス。

【請求項 1 4】

式 1 ( a ) の化合物から選択され、

【化 5】



式 1 ( a )

10

A<sup>1</sup> が C R<sup>6</sup> または N であり、

X<sup>1</sup> ~ X<sup>5</sup> が、各々独立して、C R<sup>4</sup>、C R<sup>4</sup> R<sup>5</sup>、N、N R<sup>4</sup>、S、S i R<sup>4</sup> R<sup>5</sup> および O から選択され、

20

R<sup>4</sup> および R<sup>5</sup> が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、C N、N O<sub>2</sub>、C ( O ) R<sup>2</sup>、O R<sup>2</sup>、O S ( O )<sub>2</sub> R<sup>2</sup>、N R<sup>2</sup> R<sup>3</sup>、S R<sup>2</sup>、任意に置換される C<sub>1</sub> - <sub>10</sub> アルキル、任意に置換される C<sub>2</sub> - <sub>10</sub> アルケニル、任意に置換される C<sub>2</sub> - <sub>10</sub> アルキニル、任意に置換されるアリールまたはヘテロアリール、任意に置換される単環式または多環式の複素環式から選択され、

2 またはそれよりも多い R<sup>4</sup> 基および R<sup>5</sup> 基が共に、任意に置換される、単環式または多環式の炭素環式または複素環式を形成してよく、

R<sup>2</sup> および R<sup>3</sup> が、各々独立して、水素、C<sub>1</sub> - <sub>10</sub> アルキル、および単環式または多環式のアリールおよびヘテロアリールから選択され、

30

R<sup>6</sup>、R<sup>7</sup> および R<sup>8</sup> が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、C N、N O<sub>2</sub>、C ( O ) R<sup>2</sup>、O R<sup>2</sup>、O S ( O )<sub>2</sub> R<sup>2</sup>、N R<sup>2</sup> R<sup>3</sup>、S R<sup>2</sup>、任意に置換される C<sub>1</sub> - <sub>10</sub> アルキル、任意に置換される C<sub>2</sub> - <sub>10</sub> アルケニル、任意に置換される C<sub>2</sub> - <sub>10</sub> アルキニルから選択され、ならびに

R<sup>9</sup> ~ R<sup>18</sup> が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、C N、N O<sub>2</sub>、C ( O ) R<sup>2</sup>、O R<sup>2</sup>、O S ( O )<sub>2</sub> R<sup>2</sup>、N R<sup>2</sup> R<sup>3</sup>、S R<sup>2</sup>、任意に置換される C<sub>1</sub> - <sub>10</sub> アルキル、任意に置換される C<sub>2</sub> - <sub>10</sub> アルケニル、任意に置換される C<sub>2</sub> - <sub>10</sub> アルキニル、任意に置換されるアリールまたはヘテロアリール、任意に置換される単環式または多環式の複素環式、請求項 1 で規定される式 2 の部分から選択され、ならびに

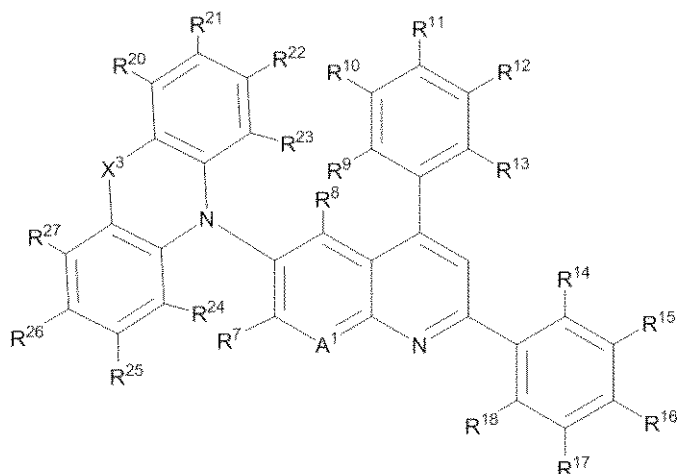
2 またはそれよりも多い基が共に、任意に式 2 の部分と置換される縮合アリール基または縮合ヘテロアリール基を形成する、請求項 1 に記載のデバイス。

40

【請求項 1 5】

式 1 ( a ) ( i ) の化合物から選択され、

## 【化 6】



10

式 1 (a) (i)

$A^1$  が  $CR^6$  または  $N$  であり、

$X^3$  が、 $CR^4R^5$ 、 $NR^4$ 、 $S$ 、 $SO$ 、 $SO_2$ 、 $SiR^4R^5$  および  $O$  から選択され、

$R^4$  および  $R^5$  が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、 $CN$ 、 $NO_2$ 、 $C(O)R^2$ 、 $OR^2$ 、 $OS(O)_2R^2$ 、 $NR^2R^3$ 、 $SR^2$ 、任意に置換される  $C_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルキニル、任意に置換されるアリールまたはヘテロアリールから選択され、

20

$R^2$  および  $R^3$  が、各々独立して、水素および  $C_{1-10}$  アルキルから選択され、ならびに

$R^{20} \sim R^{27}$  が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、 $CN$ 、 $NO_2$ 、 $C(O)R^2$ 、 $OR^2$ 、 $OS(O)_2R^2$ 、 $NR^2R^3$ 、 $SR^2$ 、任意に置換される  $C_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルキニルから選択され、

$R^6$ 、 $R^7$  および  $R^8$  が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、 $CN$ 、 $NO_2$ 、 $C(O)R^2$ 、 $OR^2$ 、 $OS(O)_2R^2$ 、 $NR^2R^3$ 、 $SR^2$ 、任意に置換される  $C_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルキニルから選択され、

30

$R^9 \sim R^{18}$  が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、 $CN$ 、 $NO_2$ 、 $C(O)R^2$ 、 $OR^2$ 、 $OS(O)_2R^2$ 、 $NR^2R^3$ 、 $SR^2$ 、任意に置換される  $C_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルキニル、任意に置換されるアリールまたはヘテロアリール、任意に置換される単環式または多環式の複素環式、請求項 1 で規定される式 2 の部分から選択され、ならびに

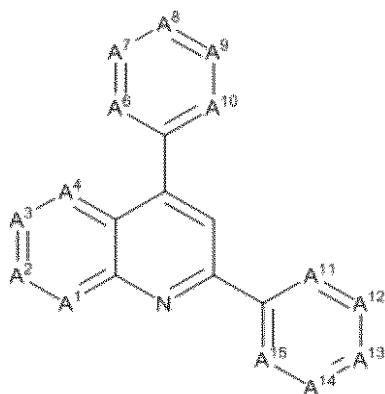
2 またはそれよりも多い基が共に、任意に式 2 の部分と置換される縮合アリール基または縮合ヘテロアリール基を形成する、請求項 1 に記載のデバイス。

40

## 【請求項 16】

式 1 で表される熱活性化遅延蛍光性の化合物であって、

## 【化 7】



式 1

10

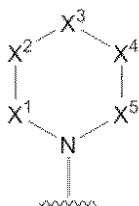
$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^3$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  が、各々独立して、C - Y および N から選択され、

Y が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、CN、 $\text{NO}_2$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{R}^2$ 、 $\text{OR}^2$ 、 $\text{OS}(\text{O})_2\text{R}^2$ 、 $\text{NR}^2\text{R}^3$ 、 $\text{SR}^2$ 、任意に置換される  $\text{C}_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $\text{C}_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $\text{C}_{2-10}$  アルキニル、任意に置換される単環式または多環式の炭素環式または複素環式、式 2 の部分から選択され、ならびに 2 またはそれよりも多い Y 基が共に、任意に式 2 の部分と置換される縮合アリール基または縮合ヘテロアリール基を形成し、

20

式 2 の部分が以下によって表され、

## 【化 8】



式 2

30

$X^1 \sim X^5$  が、各々独立して、C、 $\text{CR}^4$ 、 $\text{CR}^4\text{R}^5$ 、N、 $\text{NR}^4$ 、S、SO、 $\text{SO}_2$ 、 $\text{SiR}^4\text{R}^5$  および O から選択され、ならびに

$\text{R}^4$  および  $\text{R}^5$  が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、CN、 $\text{NO}_2$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{R}^2$ 、 $\text{OR}^2$ 、 $\text{OS}(\text{O})_2\text{R}^2$ 、 $\text{NR}^2\text{R}^3$ 、 $\text{SR}^2$ 、任意に置換される  $\text{C}_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $\text{C}_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $\text{C}_{2-10}$  アルキニル、任意に置換されるアリールまたはヘテロアリール、任意に置換される単環式または多環式の複素環式から選択され、ならびに

2 またはそれよりも多い  $\text{R}^4$  基および  $\text{R}^5$  基が共に、任意に置換される、単環式または多環式の炭素環式または複素環式を形成してよく、

40

$\text{R}^4$  および  $\text{R}^5$  が、両方とも水素であることはできず、

$\text{R}^2$  および  $\text{R}^3$  が、各々独立して、水素、 $\text{C}_{1-10}$  アルキル、および単環式または多環式のアリールおよびヘテロアリールから選択され、ならびに

$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^3$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  の少なくとも 1 つが、式 2 の部分と置換される、化合物。

## 【請求項 17】

Y が、各々独立して、水素、請求項 16 で規定される式 2 の部分から選択され、および

2 またはそれよりも多い Y 基が共に、任意に式 2 の部分と置換される縮合アリール基または縮合ヘテロアリール基を形成する、請求項 16 に記載の化合物。

## 【請求項 18】

50

$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  が、各々独立して、C - Y から選択され、

$A^3$  が C - Y であり、Y が式 2 の部分であり、ならびに

Y および式 2 が請求項 16 で規定されるものである、請求項 16 に記載の化合物。

【請求項 19】

$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  が、各々 CH であり、ならびに

$A^3$  が C - Y であり、

Y が請求項 16 で規定される式 2 の部分である、請求項 16 に記載の化合物。

10

【請求項 20】

$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^3$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  が、各々独立して、C - Y から選択され、

$A^{13}$  が C - Y であり、Y が式 2 の部分であり、ならびに

Y および式 2 が請求項 16 で規定されるものである、請求項 16 に記載の化合物。

【請求項 21】

$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^3$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  が、各々 CH であり、ならびに

$A^{13}$  が C - Y であり、Y が請求項 16 で規定される式 2 の部分である、請求項 16 に記載の化合物。

20

【請求項 22】

$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  が、各々独立して、C - Y から選択され、

$A^3$  および  $A^{13}$  が各々 C - Y であり、Y が式 2 の部分であり、ならびに

Y および式 2 が請求項 16 で規定されるものである、請求項 16 に記載の化合物。

【請求項 23】

$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  が、各々 CH であり、ならびに

$A^3$  および  $A^{13}$  が各々 C - Y であり、Y が請求項 16 で規定される式 2 の部分である、請求項 16 に記載の化合物。

30

【請求項 24】

$A^1$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  が、各々独立して、C - Y および N から選択され、

$A^2$  および  $A^4$  が各々 CH であり、

$A^3$  が C - Y であり、Y が式 2 の部分であり、ならびに

Y および式 2 が請求項 16 で規定されるものである、請求項 16 に記載の化合物。

【請求項 25】

$A^1$  が CH または N であり、

$A^2$  および  $A^4$  が各々 CH であり、

$A^3$  が C - Y であり、Y が請求項 16 で規定される式 2 の部分であり、

$A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  が、各々独立して、C - Y から選択され、

40

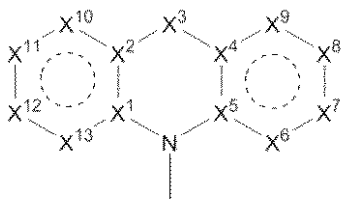
Y が、各々独立して、水素、式 2 の部分から選択され、ならびに

2 またはそれよりも多い Y 基が共に、任意に式 2 の部分と置換される縮合アリール基または縮合ヘテロアリール基を形成する、請求項 16 に記載の化合物。

【請求項 26】

前記式 2 の部分が、式 2 (a) の部分であり、

## 【化 9】



式 2 (a)

$X^1 \sim X^{13}$  が、各々独立して、C、 $CR^4$ 、 $CR^4R^5$ 、N、 $NR^4$ 、S、SO、 $SO_2$ 、 $SiR^4R^5$  および O から選択され、ならびに

$R^4$  および  $R^5$  が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、CN、 $NO_2$ 、 $C(O)R^2$ 、 $OR^2$ 、 $OS(O)_2R^2$ 、 $NR^2R^3$ 、 $SR^2$ 、任意に置換される  $C_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルキニル、任意に置換されるアリールまたはヘテロアリールから選択され、ならびに

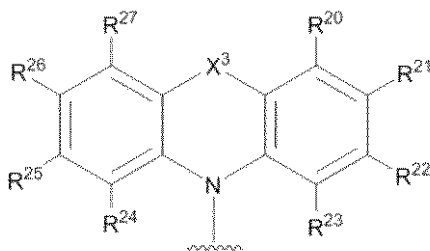
式中の点線の円が、1 またはそれよりも多い任意の二重結合を示し、ならびに

$R^2$  および  $R^3$  が、各々独立して、水素および  $C_{1-10}$  アルキルから選択される、請求項 16 に記載の化合物。

## 【請求項 27】

前記式 2 の部分が、式 2 (a) (i) の部分であり、

## 【化 10】



式 2 (a) (i)

$X^3$  が、 $CR^4R^5$ 、 $NR^4$ 、S、SO、 $SO_2$ 、 $SiR^4R^5$  および O から選択され、ならびに

$R^4$  および  $R^5$  が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、CN、 $NO_2$ 、 $C(O)R^2$ 、 $OR^2$ 、 $OS(O)_2R^2$ 、 $NR^2R^3$ 、 $SR^2$ 、任意に置換される  $C_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルキニル、および任意に置換されるアリールまたはヘテロアリールから選択され、

$R^2$  および  $R^3$  が、各々独立して、水素および  $C_{1-10}$  アルキルから選択され、ならびに

$R^{20} \sim R^{27}$  が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、CN、 $NO_2$ 、 $C(O)R^2$ 、 $OR^2$ 、 $OS(O)_2R^2$ 、 $NR^2R^3$ 、 $SR^2$ 、任意に置換される  $C_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルケニル、および任意に置換される  $C_{2-10}$  アルキニルから選択される、請求項 16 に記載の化合物。

## 【請求項 28】

請求項 16 ~ 27 のいずれか一項に記載の式 1 の化合物を含んで成る発光材。

## 【請求項 29】

請求項 28 に記載の発光材を含んで成る有機エレクトロルミネッセンス・デバイスに使用するためのホスト材。

## 【請求項 30】

材料が、前記式 1 の化合物によって供される蛍光材および 1 またはそれよりも多い追加の蛍光材を含んで成る、請求項 29 に記載のホスト材。

**【請求項 3 1】**

アノードと、カソードと、該アノードと該カソードとの間に配置された 1 またはそれよりも多い層とを含んで成り、少なくとも 1 つの層が、請求項 2 8 に記載の発光材または請求項 2 9 に記載のホスト材を含んで成る、有機エレクトロルミネッセンス・デバイス。

**【請求項 3 2】**

前記 1 またはそれよりも多い層の厚さが、1 nm ~ 1 μm である、請求項 1 または請求項 3 1 に記載のエレクトロルミネッセンス・デバイス。

**【請求項 3 3】**

前記 1 またはそれよりも多い層の厚さが、5 ~ 50 nm である、請求項 1 または請求項 3 1 に記載のエレクトロルミネッセンス・デバイス。

10

**【請求項 3 4】**

前記デバイスが、白色発光のための積層された有機エレクトロルミネッセンス・デバイスである、請求項 1 または請求項 3 1 に記載のエレクトロルミネッセンス・デバイス。

**【請求項 3 5】**

前記デバイスが、異なる発光材を各々含む 3 つの発光層を含んで成る、白色発光のための積層された有機エレクトロルミネッセンス・デバイスである、請求項 1 または請求項 3 1 に記載のエレクトロルミネッセンス・デバイス。

**【請求項 3 6】**

前記デバイスがディスプレイを有して成る、請求項 1 ~ 1 5 または請求項 3 1 ~ 3 5 のいずれか一項に記載のエレクトロルミネッセンス・デバイス。

20

**【請求項 3 7】**

前記デバイスが、医療用途で使用するための光源を有して成る、請求項 1 ~ 1 5 または請求項 3 1 ~ 3 6 のいずれか一項に記載のエレクトロルミネッセンス・デバイス。

**【請求項 3 8】**

前記デバイスが、フォトダイナミック・セラピーまたは美容整形用途で使用するための光源を有して成る、請求項 1 ~ 1 5 または請求項 3 1 ~ 3 6 のいずれか一項に記載のエレクトロルミネッセンス・デバイス。

**【請求項 3 9】**

前記デバイスが、5 . 0 % より大きい外部量子効率を有して成る、請求項 3 8 に記載のエレクトロルミネッセンス・デバイス。

30

**【発明の詳細な説明】****【技術分野】****【0001】**

( 関連出願の相互参照 )

本出願は、2015 年 5 月 29 日に提出されたオーストラリア仮特許出願第 2015902002 号の優先権を主張し、その内容は参照により本明細書に組み込まれる。

**【0002】**

本開示は、発光層中に熱活性化発光材を含んで成る有機エレクトロルミネッセンス・デバイスに関する。本開示はまた、熱活性化遅延蛍光を供することができる化合物、および該化合物の少なくとも 1 つを含んで成る発光層に関する。

40

**【背景技術】****【0003】**

有機エレクトロルミネッセンス・デバイスは、一般的に、アノードおよびカソードを構成する一対の電極ならびに、正孔注入層、発光層（蛍光材または燐光材のいずれかとホストを含んで成る層）および電子輸送層を含んで成る。有機層には、アノードおよびカソードからそれぞれ正孔および電子が注入され、発光材内にエキシトン（または励起子、exciton）が生成される。エキシトンが基底状態に遷移すると、有機ルミネッセンス・デバイスは発光する。

**【0004】**

常套的な有機エレクトロルミネッセンス・デバイスは、アルミニウム・キノリノール錯

50

体（電子輸送および蛍光発光材）およびトリフェニルアミン誘導体（ホール輸送材）の層からなる単純な構造を有するデバイスが起源である（Appl.Phys.Lett、vol.51、pp 913(1987)）。蛍光OLEDの最大内部量子収率は25%の効率限界を有し、それは広く信じられたままである。

#### 【0005】

より最近では、燐光材（phosphorescent material）は、燐光OLEDの量子収率を改善することによって、OLEDに有望なドーパント（dopants）を供することが示されている。燐光ドーパントは、基本的に重金属錯体から成り、スピン-軌道相互作用を誘発する。この場合、100%の理論的内部量子効率が可能である（Appl.Phys.Lett、vol.75、No.1、pp 4-6(1999)）。

10

#### 【0006】

それ以来、重原子を用いた効率的な燐光材の多くの例が見出されている。イリジウム重金属を含むものの以外の多くの材料は、効率および安定性に関して問題を有する。一方で、希土類金属であるイリジウムを用いた燐光発光材は、高価であり、製造上のコスト面で問題がある。さらに、錯体の配位子構造の依存性に起因して、発光色の設計に関する設計上の柔軟性も制限される。

#### 【0007】

さらに最近では、蛍光性有機発光材の分野において、有望な進歩がなされている。従来、ほとんどの有機材が電気生成三重項エキシトン（electrically-generated triplet excitons）の統計的な75%を得ることができないため、蛍光OLEDの最大内部量子収率は25%に制限されていた。この限界を克服するための新しいアプローチは、 $S_1 - T_1$  エネルギー・ギャップが小さい有機発光材を使用することである。そのような材料では、三重項エキシトンの熱励起は、周囲温度での一重項状態への効率的な逆項間交差（reverse intersystem-crossing、RISC）を可能にし、それによって蛍光有機材が一重項エキシトンおよび三重項エキシトンの両方を収集することを可能とするのに十分である。この場合、一重項エキシトンのある割合は、いわゆる「即時」蛍光を放出するのに対して、三重項エキシトンの熱的アップ・コンバージョン時に生成される一重項エキシトンからの「遅延」蛍光は、比較的長寿命である。この増強された蛍光現象は熱活性化遅延蛍光（TADF）として知られており、そのような発光材を含む蛍光OLEDが、100%の理論的内部量子効率を達成することを可能にする（Appl.Phys.Lett.vol.101、093306）。別のタイプの「遅延」蛍光は、三重項-三重項消滅（triplet-triplet annihilation、TTA）として知られている。このプロセスは、2つの三重項状態が衝突または相互作用して一重項励起状態および一重項基底状態を生成し、「遅延」蛍光をもたらす場合に生じる。

20

30

#### 【0008】

さらに、本開示は、少なくともいくつかの態様において、アノード、カソード、および熱活性化遅延蛍光を供することができる本明細書に記載の1つまたはそれよりも多く化合物を含んで成る介在有機層を含んで成る有機発光デバイスを供し、上記問題の代替法または解決策を供する。

#### 【0009】

本明細書中のあらゆる先行技術への言及は、この先行技術がオーストラリアまたは他の管轄地域における共通の一般知識の一部を形成する、またはこの先行技術が解明され、理解され、当業者によって関連性があると見なされることが合理的に予想される、承認またはいかなる形式の示唆としてではなく、また扱われるべきではない。

40

#### 【発明の概要】

#### 【0010】

本開示は、アノード（または陽極、anode）およびカソード（または陰極、cathode）を形成する一対の電極ならびに、正孔注入層（hole injection layer）、発光層（emission layer）および電子輸送層（electron transporting layer）を含んで成る1またはそれよりも多い層を含むエレクトロルミネッセンス・デバイスを供し、その発光層が、本明細書に記載の発光化合物を含んで成る。本明細書で記載される化合物は、有機発光材として

50

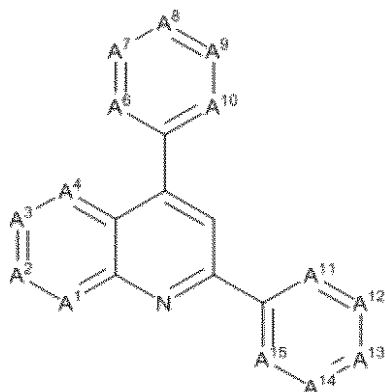
、また少なくともいくつかの態様では、蛍光発光材として使用することができる。化合物は、熱活性化遅延蛍光（または熱的に活性化された遅延蛍光、thermally-activated delayed fluorescence、TADF）を介して増強された蛍光を供することができる。化合物は、蛍光OLEDなどの有機エレクトロルミネッセンス（または電界発光、electroluminescent）・デバイス（または素子、device）の発光層のような有機層に使用することができる。

#### 【0011】

第1態様では、アノードおよびカソードを形成する一対の電極ならびに、正孔注入層、発光層および電子輸送層を含んで成る1またはそれよりも多い層を含むエレクトロルミネッセンス・デバイスが供され、発光層が式1で表される発光性化合物を含んで成る。

10

#### 【化1】



20

式1

$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^3$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$ および $A^{15}$ が、各々独立して、C-YおよびNから選択され、

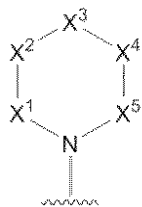
Yが、各々独立して、水素（hydrogen）、重水素（deuterium）、ハロ（halo）、CN、 $\text{NO}_2$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{R}^2$ 、 $\text{OR}^2$ 、 $\text{OS}(\text{O})_2\text{R}^2$ 、 $\text{NR}^2\text{R}^3$ 、 $\text{SR}^2$ 、任意に置換される $\text{C}_{1-10}$ アルキル、任意に置換される $\text{C}_{2-10}$ アルケニル、任意に置換される $\text{C}_{2-10}$ アルキニル、任意に置換される単環式（monocyclic）または多環式（polycyclic）の炭素環式（carbocyclic）または複素環式（heterocyclic）、式2の部分（moiety）から選択され、ならびに

30

2またはそれよりも多いY基が共に、任意に式2の部分と置換される縮合（または結合、fused）アリール（aryl）基または縮合ヘテロアリール（heteroaryl）基を形成し、

式2の部分が以下によって表され、

#### 【化2】



式2

40

$X^1 \sim X^5$ が、各々独立して、C、 $\text{CR}^4$ 、 $\text{CR}^4\text{R}^5$ 、N、 $\text{NR}^4$ 、S、SO、 $\text{SO}_2$ 、 $\text{SiR}^4\text{R}^5$ およびOから選択され、ならびに

$\text{R}^4$ および $\text{R}^5$ が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、CN、 $\text{NO}_2$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{R}^2$ 、 $\text{OR}^2$ 、 $\text{OS}(\text{O})_2\text{R}^2$ 、 $\text{NR}^2\text{R}^3$ 、 $\text{SR}^2$ 、任意に置換される $\text{C}_{1-10}$ アルキル、任意に置換される $\text{C}_{2-10}$ アルケニル、任意に置換される $\text{C}_{2-10}$ アルキニル、任意に置換されるアリールまたはヘテロアリール、任意に置換される単環式または多環式の複素環式から選択され、ならびに

50

2 またはそれよりも多い  $R^4$  基および  $R^5$  基が共に、任意に置換される、単環式または多環式の炭素環式または複素環式を形成してよく、

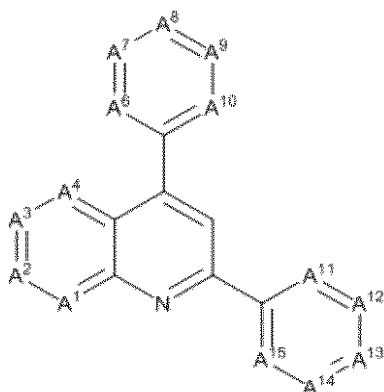
$R^2$  および  $R^3$  が、各々独立して、水素、 $C_{1-10}$  アルキル、および単環式または多環式のアリールおよびヘテロアリールから選択され、ならびに

$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^3$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  の少なくとも1つが式2の部分と置換される。

【0012】

第2態様において、式1の熱活性化遅延蛍光化合物が供される。

【化3】



式1

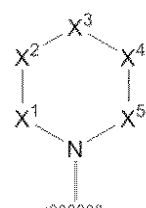
$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^3$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  が、各々独立して、 $C-Y$  および  $N$  から選択され、

$Y$  が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、 $CN$ 、 $NO_2$ 、 $C(O)R^2$ 、 $OR^2$ 、 $OS(O)_2R^2$ 、 $NR^2R^3$ 、 $SR^2$ 、任意に置換される  $C_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルキニル、任意に置換される単環式または多環式の炭素環式または複素環式、式2の部分から選択され、ならびに

2 またはそれよりも多い  $Y$  基が共に、任意に式2の部分と置換される縮合アリール基または縮合ヘテロアリール基を形成し、

式2の部分が以下によって表され、

【化4】



式2

$X^1 \sim X^5$  が、各々独立して、 $C$ 、 $CR^4$ 、 $CR^4R^5$ 、 $N$ 、 $NR^4$ 、 $S$ 、 $SO$ 、 $SO_2$ 、 $SiR^4R^5$  および  $O$  から選択され、ならびに

$R^4$  および  $R^5$  が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、 $CN$ 、 $NO_2$ 、 $C(O)R^2$ 、 $OR^2$ 、 $OS(O)_2R^2$ 、 $NR^2R^3$ 、 $SR^2$ 、任意に置換される  $C_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルキニル、任意に置換されるアリールまたはヘテロアリール、任意に置換される単環式または多環式の複素環式から選択され、ならびに

2 またはそれよりも多い  $R^4$  基および  $R^5$  基が共に、任意に置換される、単環式または多環式の炭素環式または複素環式を形成してよく、

$R^4$  および  $R^5$  が、両方とも水素であることはできず、

$R^2$  および  $R^3$  が、各々独立して、水素、 $C_{1-10}$  アルキル、および単環式または多

10

20

30

40

50

環式のアリールおよびヘテロアリールから選択され、ならびに

$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^3$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  の少なくとも1つが、式2の部分と置換される。

【0013】

第1態様のための上記したようなデバイス、または第2態様のための上記したような化合物に関して、式1は、以下のさらなる記載または本明細書において供され得る。

【0014】

Yが、各々独立して、水素、重水素、ハロ、ヒドロキシル(hydroxyl)、ニトロ(nitro)、シアノ(cyano)、チオール(thiol)、アミノ(amino)、任意に置換される $C_{1-6}$ アルキル、本明細書に記載される式2の部分から選択され、また2またはそれよりも多いY基が共に、任意に式2の部分と置換される縮合アリール基または縮合ヘテロアリール基を形成する、式1を供し得る。

10

【0015】

Yが、各々独立して、水素、本明細書に記載される式2の部分から選択され、また2またはそれよりも多いY基が共に、任意に式2の部分と置換される縮合アリール基または縮合ヘテロアリール基を形成する、式1を供し得る。

【0016】

式1は以下で供し得る。

$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  が、各々独立して、C-Yから選択され、 $A^3$  がC-Yであり、Yが式2の部分であり、ならびにYおよび式2が本明細書に記載されるものである。

20

【0017】

式1は以下で供し得る。

$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  が、各々CHであり、ならびに $A^3$  が、C-Yであり、Yが本明細書に記載される式2の部分である。

【0018】

式1は以下で供し得る。

$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^3$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  が、各々独立して、C-Yから選択され、 $A^{13}$  がC-Yであり、Yが式2の部分であり、ならびにYおよび式2が本明細書に記載されるものである。

30

【0019】

式1は以下で供し得る。

$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^3$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  が、各々CHであり、ならびに $A^{13}$  がC-Yであり、Yが本明細書に記載される式2の部分である。

【0020】

式1は以下で供し得る。

$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  が、各々独立して、C-Yから選択され、 $A^3$  および  $A^{13}$  が各々C-Yであり、Yが式2の部分であり、ならびにYおよび式2が本明細書に記載されるものである。

40

【0021】

式1は以下で供し得る。

$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  が、各々CHであり、ならびに $A^3$  および  $A^{13}$  が各々C-Yであり、Yが本明細書に記載される式2の部分である。

50

## 【 0 0 2 2 】

式 1 は以下で供し得る。

$A^1$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  が、各々独立して、C - Y および N から選択され、  
 $A^2$  および  $A^4$  が各々 CH であり、  
 $A^3$  が C - Y であり、Y が式 2 の部分であり、ならびに  
Y および式 2 が本明細書に記載されるものである。

## 【 0 0 2 3 】

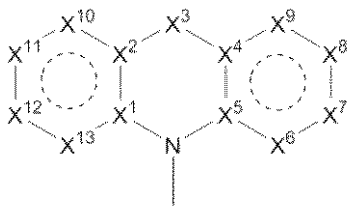
式 1 は以下で供し得る。

$A^1$  が CH または N であり、  
 $A^2$  および  $A^4$  が各々 CH であり、  
 $A^3$  が C - Y であり、Y が本明細書に記載される式 2 の部分であり、  
 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  が、  
各々独立して、C - Y から選択され、  
Y が、各々独立して、水素、式 2 の部分から選択され、ならびに  
2 またはそれよりも多い Y 基が共に、任意に式 2 の部分と置換される縮合アリール基または縮合ヘテロアリール基を形成する。

## 【 0 0 2 4 】

式 2 は、式 2 ( a ) の部分であってよく、

## 【 化 5 】



式 2 ( a )

$X^1 \sim X^{13}$  が、各々独立して、C、 $CR^4$ 、 $CR^4R^5$ 、N、 $NR^4$ 、S、SO、 $SO_2$ 、 $SiR^4R^5$  および O から選択され、ならびに

$R^4$  および  $R^5$  が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、CN、 $NO_2$ 、 $C(O)R^2$ 、 $OR^2$ 、 $OS(O)_2R^2$ 、 $NR^2R^3$ 、 $SR^2$ 、任意に置換される  $C_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルキニル、任意に置換されるアリールまたはヘテロアリールから選択され、ならびに

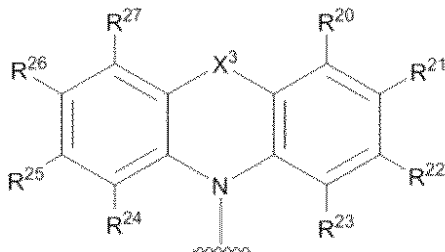
式中の点線の円が、1 またはそれよりも多い任意の二重結合を示し、ならびに

$R^2$  および  $R^3$  が、各々独立して、水素および  $C_{1-10}$  アルキルから選択される。

## 【 0 0 2 5 】

式 2 は、式 2 ( a ) ( i ) の部分であってよく、

## 【 化 6 】



式 2 ( a ) ( i )

$X^3$  が、 $CR^4R^5$ 、 $NR^4$ 、S、SO、 $SO_2$ 、 $SiR^4R^5$  および O から選択され

、ならびに

$R^4$  および  $R^5$  が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、 $CN$ 、 $NO_2$ 、 $C(O)R^2$ 、 $OR^2$ 、 $OS(O)_2R^2$ 、 $NR^2R^3$ 、 $SR^2$ 、任意に置換される  $C_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルキニル、任意に置換されるアリールまたはヘテロアリールから選択され、

$R^2$  および  $R^3$  が、各々独立して、水素および  $C_{1-10}$  アルキルから選択され、ならびに

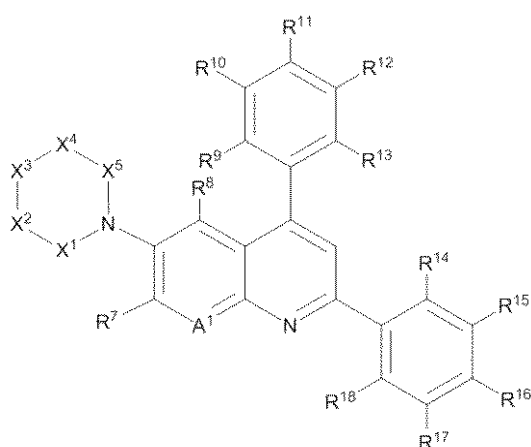
$R^{20} \sim R^{27}$  が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、 $CN$ 、 $NO_2$ 、 $C(O)R^2$ 、 $OR^2$ 、 $OS(O)_2R^2$ 、 $NR^2R^3$ 、 $SR^2$ 、任意に置換される  $C_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルキニルから選択される。

10

# 【0026】

式1は、式1(a)の化合物であってよく、

# 【化7】



20

式1(a)

$A^1$  が  $CR^6$  または  $N$  であり、

$X^1 \sim X^5$  が、各々独立して、 $C$ 、 $CR^4$ 、 $CR^4R^5$ 、 $N$ 、 $NR^4$ 、 $S$ 、 $SiR^4R^5$  および  $O$  から選択され、

30

$R^4$  および  $R^5$  が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、 $CN$ 、 $NO_2$ 、 $C(O)R^2$ 、 $OR^2$ 、 $OS(O)_2R^2$ 、 $NR^2R^3$ 、 $SR^2$ 、任意に置換される  $C_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルキニル、任意に置換されるアリールまたはヘテロアリール、任意に置換される単環式または多環式の複素環式から選択され、

2 またはそれよりも多い  $R^4$  基および  $R^5$  基が共に、任意に置換される、単環式または多環式の炭素環式または複素環式を形成してよく、

$R^2$  および  $R^3$  が、各々独立して、水素、 $C_{1-10}$  アルキル、および単環式または多環式のアリールおよびヘテロアリールから選択され、

$R^6$ 、 $R^7$  および  $R^8$  が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、 $CN$ 、 $NO_2$ 、 $C(O)R^2$ 、 $OR^2$ 、 $OS(O)_2R^2$ 、 $NR^2R^3$ 、 $SR^2$ 、任意に置換される  $C_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルキニルから選択され、ならびに

40

$R^9 \sim R^{18}$  が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、 $CN$ 、 $NO_2$ 、 $C(O)R^2$ 、 $OR^2$ 、 $OS(O)_2R^2$ 、 $NR^2R^3$ 、 $SR^2$ 、任意に置換される  $C_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルキニル、任意に置換されるアリールまたはヘテロアリール、任意に置換される単環式または多環式の複素環式、請求項1に規定される式2の部分から選択され、ならびに

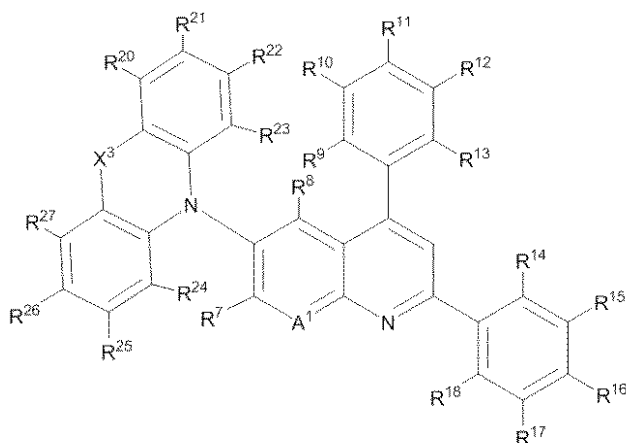
2 またはそれよりも多い基が共に、任意に式2の部分と置換される縮合アリール基または縮合ヘテロアリール基を形成する。

50

## 【 0 0 2 7 】

式 1 は、式 1 ( a ) ( i ) の化合物であってよく、

## 【 化 8 】



式 1 ( a ) ( i )

A<sup>1</sup> が C R<sup>6</sup> または N であり、

X<sup>3</sup> が、C R<sup>4</sup> R<sup>5</sup>、N R<sup>4</sup>、S、S O、S O<sub>2</sub>、S i R<sup>4</sup> R<sup>5</sup> および O から選択され、ならびに

R<sup>4</sup> および R<sup>5</sup> が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、C N、N O<sub>2</sub>、C ( O ) R<sup>2</sup>、O R<sup>2</sup>、O S ( O )<sub>2</sub> R<sup>2</sup>、N R<sup>2</sup> R<sup>3</sup>、S R<sup>2</sup>、任意に置換される C<sub>1</sub> - <sub>10</sub> アルキル、任意に置換される C<sub>2</sub> - <sub>10</sub> アルケニル、任意に置換される C<sub>2</sub> - <sub>10</sub> アルキニル、任意に置換されるアリールまたはヘテロアリールから選択され、

R<sup>2</sup> および R<sup>3</sup> が、各々独立して、水素および C<sub>1</sub> - <sub>10</sub> アルキルから選択され、ならびに

R<sup>20</sup> ~ R<sup>27</sup> が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、C N、N O<sub>2</sub>、C ( O ) R<sup>2</sup>、O R<sup>2</sup>、O S ( O )<sub>2</sub> R<sup>2</sup>、N R<sup>2</sup> R<sup>3</sup>、S R<sup>2</sup>、任意に置換される C<sub>1</sub> - <sub>10</sub> アルキル、任意に置換される C<sub>2</sub> - <sub>10</sub> アルケニル、任意に置換される C<sub>2</sub> - <sub>10</sub> アルキニルから選択され、

R<sup>6</sup>、R<sup>7</sup> および R<sup>8</sup> が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、C N、N O<sub>2</sub>、C ( O ) R<sup>2</sup>、O R<sup>2</sup>、O S ( O )<sub>2</sub> R<sup>2</sup>、N R<sup>2</sup> R<sup>3</sup>、S R<sup>2</sup>、任意に置換される C<sub>1</sub> - <sub>10</sub> アルキル、任意に置換される C<sub>2</sub> - <sub>10</sub> アルケニル、任意に置換される C<sub>2</sub> - <sub>10</sub> アルキニルから選択され、

R<sup>9</sup> ~ R<sup>18</sup> が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、C N、N O<sub>2</sub>、C ( O ) R<sup>2</sup>、O R<sup>2</sup>、O S ( O )<sub>2</sub> R<sup>2</sup>、N R<sup>2</sup> R<sup>3</sup>、S R<sup>2</sup>、任意に置換される C<sub>1</sub> - <sub>10</sub> アルキル、任意に置換される C<sub>2</sub> - <sub>10</sub> アルケニル、任意に置換される C<sub>2</sub> - <sub>10</sub> アルキニル、任意に置換されるアリールまたはヘテロアリール、任意に置換される単環式または多環式の複素環式、請求項 1 に規定される式 2 の部分から選択され、ならびに

2 またはそれよりも多い基が共に、任意に式 2 の部分と置換される縮合アリール基または縮合ヘテロアリール基を形成する。

## 【 0 0 2 8 】

第 3 態様では、上記または本明細書に記載される式 1 の化合物またはそのあらゆる態様を含んで成る発光材が供される。

## 【 0 0 2 9 】

第 4 態様では、上記第 3 態様に記載される発光材を含んで成る有機エレクトロルミネセンス・デバイスに使用するためのホスト材が供される。ホスト材は、式 1 の化合物によって供される蛍光材および 1 またはそれよりも多い追加の蛍光材を含んで成ってもよい。

## 【 0 0 3 0 】

第 5 態様では、アノードと、カソードと、アノードとカソードとの間に配置された 1 またはそれよりも多い層とを含んで成る有機エレクトロルミネセンス・デバイスが供され、

10

20

30

40

50

少なくとも１つの層は、上記第３態様に従う発光材または上記第４態様に従うホスト材を含んで成る。

【００３１】

本明細書の上記実施形態または態様のいずれかによるエレクトロルミネッセンス・デバイスは、１ｎｍ～１μｍ、２ｎｍ～５００ｎｍ、または３ｎｍ～１００ｎｍ、例えば５～５０ｎｍの厚さを有する１またはそれよりも多い層を含んで成ってもよい。このデバイスは、白色発光のための積層（stacked）有機エレクトロルミネッセンス・デバイスであってもよい。このデバイスは、それぞれ異なる発光材を含む３つの発光層を含んで成る白色発光のための積層有機エレクトロルミネッセンス・デバイスであってもよい。このデバイスは、ディスプレイを含んで成ってもよい。このデバイスは、医療用途に使用するための光源を有して成ってもよい。

10

【００３２】

第６態様では、上記または本明細書に記載される式１の化合物またはそのあらゆる態様から選択される造影剤（imaging agent）が供される。造影剤を含んで成る医薬（または薬剤、pharmaceutical）組成物組成物を供し得る。造影剤は、式１の化合物のあらゆる薬学的に許容される塩を含んで成り得る。造影剤は、診断方法において使用され得る。

【００３３】

第７態様では、上記または本明細書に記載される式１の化合物またはそのあらゆる態様を含んで成る増感（または感光、sensitizer）材が供される。増感材は、治療用または診断用のものであってもよい。増感材を含んで成る医薬組成物を供し得る。増感材は、式１の化合物のいずれかの薬学的に許容される塩を含んで成り得る。

20

【００３４】

第８態様では、上記または本明細書に記載される式１の化合物またはそのあらゆる態様を含んで成るポリマーが供される。式１の化合物をポリマーに組み込むことができる。式１の化合物は、ポリマーに共有結合していてもよい。式１の化合物は、重合性モノマーとして、または重合性モノマーにおけるペンダント基（pendant groups）として使用され得る。

【００３５】

他の態様において、上記または本明細書に記載される式１の化合物またはそのあらゆる態様を含んで成る使用、方法またはプロセスが供され得ることが理解される。

30

【図面の簡単な説明】

【００３６】

【図１Ａ】Pyd2Cz（２，６-ジ（９Ｈ-カルバゾール-９-イル）ピリジン）１０％ｗ／ｗ（ドーパント／Pyd2Cz）にドーブされた化合物１７～２０のフィルムのＰＬスペクトル

【図１Ｂ】Pyd2Cz（２，６-ジ（９Ｈ-カルバゾール-９-イル）ピリジン）１０％ｗ／ｗ（ドーパント／Pyd2Cz）にドーブされた化合物１７～２０のフィルムのＰＬ減衰曲線

【図２】（ａ）デバイス構造ＡおよびＢ（ｂ）用いた材料のＨＯＭＯ-ＬＵＭＯエネルギー準位図（エネルギー値はｅＶで示す）

40

【図３Ａ】化合物１７～１９の輝度-電圧

【図３Ｂ】化合物１７～１９の電流-電圧

【図３Ｃ】化合物１７～１９の電流効率

【図３Ｄ】化合物１７～１９の外部量子効率（external quantum efficiency、EQE）

【発明を実施するための形態】

【００３７】

本発明者らは、有機蛍光発光材として使用できる多様な窒素含有芳香族誘導体（nitrogen-containing aromatic derivatives）を確認した。窒素含有芳香族誘導体は、熱活性化遅延蛍光（TADF）を介して増強された蛍光を供し得る。窒素含有芳香族誘導体は、蛍光ＯＬＥＤのような有機エレクトロルミネッセンス・デバイスの発光層などの有機層に使

50

用し得る。

(特定の用語)

【0038】

用語「炭素環式(carbocyclic)」および「カルボシクリル(carbocyclyl)」は、環原子がすべて炭素原子、例えば約3～約30個の炭素原子であり、芳香族、非芳香族、飽和または不飽和であってよく、また置換されてもよく、および/または縮合環(fused ring)を有していてもよい、環系(ring system)を表す。そのような基の例としては、ベンゼン、シクロペンチル、シクロヘキシル、または完全にもしくは部分的に水素化されたフェニル、ナフチルおよびフルオレニルが含まれる。

【0039】

「ヘテロシクリル(heterocyclyl)」または「複素環式(heterocyclic)」は、単独で使用されようと、またはヘテロシクリルオキシ(heterocycliloxy)などの複合語で使用されようとに関わらず、(i)任意に置換されるシクロアルキル基またはシクロアルケニル基(例えば、窒素、酸素、または硫黄(例えば、ピロリジニル、モルホリノ、チオモルホリノ、または完全にもしくは部分的に水素化されたチエニル、フリル、ピロリル、チアゾリル、オキサゾリル、オキサジニル、チアジニル、ピリジルおよびアゼピニルを含むもの)などの1またはそれよりも多いヘテロ原子(heteroatom)を含み得る、約3～約30環員)、(ii)任意に置換される、部分的に飽和された多環式環系であり、アリール(またはヘテロアリール)環および複素環式基が共に縮合して環状構造(例えば、フェノキサジン、フェノチアジン、クロマニル、ジヒドロベンゾフリルおよびインドリニルを含むもの)を形成するもの、または(iii)1またはそれよりも多い架橋(例えば、キヌクリジニルおよびジヒドロ-1,4-エポキシナフチルを含むもの)を有する、任意に置換される、完全にまたは部分的に飽和された多環式縮合環系を表す。

【0040】

理解されるように、「芳香族(aromatic)」基は、 $4m+2\pi$ 電子を有する環式基を意味し、 $m$ は1以上の整数である。本明細書で使用される場合、「芳香族」は、芳香族基の価数にかかわらず、芳香族基を指すように「アリール(aryl)」と同様の意味で使用される。

【0041】

「アリール(aryl)」は、単独で使用されようと、またはアリールアルキル、アリールオキシ、アラルキルもしくはアリールチオのような複合語で使用されようとに関わらず、(i)任意に置換される単環式または多環式の芳香族の炭素環式部分(例えば、フェニル、ナフチルまたはフルオレニルのような約6～約30個の炭素原子)、または(ii)アリール基およびシクロアルキル基またはシクロアルケニル基が共に縮合して環式構造(例えば、テトラヒドロナフチル、インデニル、インダニルまたはフルオレン環)を形成する、任意に置換される部分的に飽和された多環式炭素環式芳香環系を表す。

【0042】

ヘテロ芳香族基は、N、O、S、Se、SiまたはPのような、1またはそれよりも多いヘテロ原子を含む芳香族基または芳香族環である。本明細書で使用される「ヘテロ芳香族(heteroaromatic)」は、「ヘテロアリール(heteroaryl)」と同様の意味で使用され、またヘテロアリール基は、1またはそれよりも多いヘテロ原子を含む、1価の芳香族基、2価の芳香族基およびより高い多価の芳香族基を指す。

【0043】

「ヘテロアリール(heteroaryl)」は、単独で使用されようと、ヘテロアリールオキシのような複合語で使用されようとに関わらず、(i)任意に置換される、単環式または多環式の芳香族の有機部分(例えば、約5～約30環員であり、1またはそれよりも多い環員が炭素以外の元素(例えば、窒素、酸素、硫黄またはケイ素)であるもの)を表し、環が隣接する酸素および/または硫黄原子を含まないならば、炭素環構造を遮断し、芳香族特性を供するのに十分な数の非局在化 $\pi$ 電子を有するヘテロ原子を含む。典型的な6員環ヘテロアリール基は、ピラジニル、ピリダジニル、ピラゾリル、ピリジルおよびピリミジ

10

20

30

40

50

ニルである。全ての位置イソマー（または異性体、isomer）（例えば、2 - ピリジル、3 - ピリジルおよび4 - ピリジル）が考慮される。典型的な5員環ヘテロアリアル環は、フリル、イミダゾリル、オキサゾリル、イソオキサゾリル、イソチアゾリル、オキサジアゾリル、ピロリル、1, 3, 4 - チアジアゾリル、チアゾリル、チエニル、トリアゾリルおよびシロールである。すべての位置イソマー（例えば、2 - チエニルおよび3 - チエニル）が考慮される。二環式基は、典型的には、ベンゾフリル、ベンゾイミダゾリル、ベンズチアゾリル、インドリル、インドリジニル、イソキノリル、キナゾリニル、キノリルおよびベンゾチエニルのようなヘテロアリアル基に由来するベンゾ縮合環系である。または、「ヘテロアリアル」は、単独で使用されようと、ヘテロアリアルオキシのような複合語で使用されようとに関わらず、(ii)ヘテロアリアル基およびシクロアルキル基またはシクロアルケニル基が共に縮合して、テトラヒドロキノリルまたはピリジンジイル環などの環状構造を形成する、任意に置換される、部分的に飽和された多環式ヘテロアリアル環系を表す。

10

20

30

40

50

#### 【0044】

「任意に縮合される (optionally fused)」という用語は、基が別の環系によって縮合しているか、または縮合していないことを意味し、「縮合 (fused)」は、少なくとも2つの共通する環原子を1またはそれよりも多い他の環と共有する1またはそれよりも多い環を指す。縮合は、本明細書で規定されるような、1またはそれよりも多い炭素環、複素環、アリアル環またはヘテロアリアル環によって供されてもよく、または環の置換基 (substituents) が共に、さらなる環系を形成してもよい。縮合環は、5 ~ 10個の環原子のサイズの5、6または7員環であってもよい。縮合環は、1またはそれよりも多い他の環に縮合していてもよく、例えば1 ~ 4つの環を含んでいてもよい。

#### 【0045】

「任意に置換される (optionally substituted)」という用語は、官能基が任意の可能な位置で、置換または非置換のいずれかであることを意味する。例えば、アルキル、アルケニル、アルキニル、シクロアルキル、シクロアルケニル、アリアル、ヘテロシクリル、ヘテロアリアル、ホルミル、アルカノイル、シクロアルカノイル、アロイル、ヘテロアロイル、カルボキシル、アルコキシカルボニル、シクロアルキルオキシカルボニル、アリアルオキシカルボニル、ヘテロシクロオキシカルボニル、ヘテロアリアルオキシカルボニル、アルキルアミノカルボニル、シクロアルキルアミノカルボニル、アリアルアミノカルボニル、ヘテロシクリルアミノカルボニル、ヘテロアリアルアミノカルボニル、シアノ、アルコキシ、シクロアルコキシ、アリアルオキシ、ヘテロシクリルオキシ、ヘテロアリアルオキシ、アルカノエート、シクロアルカノエート、アリーロエート、ヘテロシクリロエート、ヘテロアリーロエート、アルキルカルボニルアミノ、シクロアルキルカルボニルアミノ、アリアルカルボニルアミノ、ヘテロシクリルカルボニルアミノ、ヘテロアリアルカルボニルアミノ、ニトロ、アルキルチオ、シクロアルキルチオ、アリアルチオ、ヘテロシクリルチオ、ヘテロアリアルチオ、アルキルスルホニル、シクロアルキルスルホニル、アリアルスルホニル、ヘテロシクリルスルホニル、ヘテロアリアルスルホニル、ヒドロキシル、ハロ、ハロアルキル、ハロアリアル、ハロヘテロシクリル、ハロヘテロアリアル、ハロアルコキシ、ハロアルキルスルホニル、シリルアルキル、アルケニルシリルアルキルおよびアルキニルシリルアルキルから選択される1またはそれよりも多い官能基と置換され得る。特に記載されていない他の基も使用できることは理解されよう。

#### 【0046】

用語「ハロ (halo)」または「ハロゲン (halogen)」は、単独で使用されようと、またはハロアルキル、ハロアルコキシもしくはハロアルキルスルホニルなどの複合語で使用されようとに関わらず、フッ素、塩素、臭素またはヨウ素を表す。さらに、ハロアルキル、ハロアルコキシまたはハロアルキルスルホニルなどの複合語で 사용되는場合、アルキルは、部分的にハロゲン化されていてもよく、または独立して同じでも異なってもよいハロゲン原子で完全に置換されていてもよい。ハロアルキルの例には、 $-CH_2CH_2F$ 、 $-CF_2CF_3$  および  $-CH_2CHFCl$  が含まれるが、これらに限定されない。ハ

ロアルコキシの例には、 $-OCHF_2$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCH_2CCl_3$ 、 $-OCH_2CF_3$  および  $-OCH_2CH_2CF_3$  が含まれるが、これらに限定されない。ハロアルキルスルホニルの例には、 $-SO_2CF_3$ 、 $-SO_2CCl_3$ 、 $-SO_2CH_2CF_3$  および  $-SO_2CF_2CF_3$  が含まれるが、これらに限定されない。

#### 【0047】

「アルキル (Alkyl)」は、単独で使用されようと、またはアルコキシ、アルキルチオ、アルキルアミノ、ジアルキルアミノもしくはハロアルキルのような複合語で使用されようとに関わらず、1 から約 20 の炭素原子またはそれ以上のサイズの範囲の直鎖または分枝鎖炭化水素を表す。従って、アルキル部分には、より小さい基に明示的に限定されない限り、大きさが例えば 1 ～ 約 6 の炭素原子以上の部分 (例えば、メチル、エチル、*n*-プロピル、イソプロピルおよび / またはブチル、ペンチル、ヘキシルならびに大きいイソマー (例えば、約 6 ～ 約 20 の炭素原子またはそれ以上のサイズの範囲の直鎖または分枝鎖炭化水素を含むもの)) を含む。

10

#### 【0048】

「アルケニル (Alkenyl)」は、単独で使用されようと、またはアルケニルオキシもしくはハロアルケニルのような複合語で使用されようとに関わらず、少なくとも 1 つの炭素 - 炭素二重結合を含む直鎖または分枝鎖炭化水素を表し、より小さい基に明示的に限定されない限り、例えば大きさが 2 ～ 約 6 の炭素原子またはそれ以上のサイズの範囲の部分 (例えば、メチレン、エチレン、1-プロペニル、2-プロペニル、および / またはブテニル、ペンテニル、ヘキセニル、ならびにより大きいイソマー (例えば、約 6 ～ 約 20 の炭素原子、またはそれ以上の範囲の直鎖または分枝鎖炭化水素を含むもの)) を含む。

20

#### 【0049】

「アルキニル (Alkynyl)」は、単独で使用されようと、アルキニルオキシのような複合語で使用されようとに関わらず、少なくとも 1 つの炭素 - 炭素三重結合を含む直鎖または分枝鎖炭化水素を表し、より小さい基に明示的に限定されない限り、例えば大きさが 2 ～ 約 6 の炭素原子またはそれ以上のサイズの範囲の部分 (例えば、エチニル、1-プロピニル、2-プロピニルおよび / またはブチニル、ペンチニル、ヘキシニルならびにより大きいイソマー (例えば、約 6 ～ 約 20 の炭素原子、またはそれ以上の範囲の直鎖または分枝鎖炭化水素を含むもの)) を含む。

30

#### 【0050】

「シクロアルキル (Cycloalkyl)」は、様々なサイズ (例えば約 3 ～ 約 20 の炭素原子 (例えば、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシルもしくはシクロヘプチル)) の単環または多環炭素環式系を表す。用語「シクロアルキルオキシ (cycloalkyloxy)」は、シクロペンチルオキシおよびシクロヘキシルオキシなどの酸素原子を介して結合した同じ基を表す。用語「シクロアルキルチオ (cycloalkylthio)」は、シクロペンチルチオおよびシクロヘキシルチオなどの硫黄原子を介して結合した同じ基を表す。

#### 【0051】

「シクロアルケニル (Cycloalkenyl)」は、シクロペンテニル、シクロヘキセニルまたはシクロヘプテニルなどの、少なくとも 1 つの炭素 - 炭素二重結合を含む、約 3 ～ 約 20 の炭素原子の非芳香族の単環または多環炭素環式系を表す。用語「シクロアルケニルオキシ (cycloalkenyloxy)」は、シクロペンテニルオキシおよびシクロヘキセニルオキシなどの酸素原子を介して結合した同じ基を表す。用語「シクロアルケニルチオ (cycloalkenylthio)」は、シクロペンテニルチオおよびシクロヘキセニルチオなどの硫黄原子を介して結合した同じ基を表す。

40

#### 【0052】

「シクロアルキニル (Cycloalkynyl)」は、シクロペンテニル、シクロヘキセニルまたはシクロヘプテニルなどの、少なくとも 1 つの炭素 - 炭素二重結合を含む、約 3 ～ 約 20 の炭素原子の非芳香族の単環または多環炭素環式系を表す。用語「シクロアルケニルオキシ (cycloalkenyloxy)」は、シクロペンテニルオキシおよびシクロヘキセニルオキシの

50

ような酸素原子を介して結合した同じ基を表す。用語「シクロアルケニルチオ (cycloalkenylthio)」は、シクロペンテニルチオおよびシクロヘキセニルチオなどの硫黄原子を介して結合した同じ基を表す。

【 0 0 5 3 】

「ホルミル (formyl)」は、 $-CHO$  部分を表す。

【 0 0 5 4 】

「アルカノイル (alkanoyl)」は、 $-C(=O)-$  アルキル基を表し、アルキル基は、上記に規定した通りである。特定の態様では、アルカノイルのサイズは、約  $C_2 - C_{20}$  の範囲である。例はアシルである。

【 0 0 5 5 】

「アロイル (aroyl)」は、 $-C(=O)-$  アリール基を表し、アリール基は、上記に規定した通りである。特定の態様では、アロイルのサイズは約  $C_7 - C_{20}$  の範囲である。例には、ベンゾイルおよび 1 - ナフトイルおよび 2 - ナフトイルが含まれる。

【 0 0 5 6 】

「ヘテロシクロイル (heterocycloyl)」は、 $-C(=O)-$  ヘテロシクリル基を表し、ヘテロシクリル基は、上記に規定した通りである。特定の態様において、ヘテロシクロイルのサイズは、約  $C_4 - C_{20}$  の範囲である。

【 0 0 5 7 】

「ヘテロアロイル (heteroaroyl)」は、 $-C(=O)-$  ヘテロアリール基を表し、ヘテロアリール基は、上記に規定した通りである。特定の態様において、ヘテロアロイルのサイズは、約  $C_6 - C_{20}$  の範囲である。例はピリジルカルボニルである。

【 0 0 5 8 】

「カルボキシル (carboxyl)」は、 $-CO_2H$  部分を表す。

【 0 0 5 9 】

「オキシカルボニル (oxycarbonyl)」は、炭素原子を介して分子の残りに縮合しているカルボン酸エステル基  $-CO_2R$  を表す。

【 0 0 6 0 】

「アルコキシカルボニル (alkoxycarbonyl)」は、 $-CO_2-$  アルキル基を表し、アルキル基は、上記に規定した通りである。特定の態様では、アルコキシカルボニルのサイズは約  $C_2 - C_{20}$  の範囲である。例には、メトキシカルボニルおよびエトキシカルボニルが含まれる。

【 0 0 6 1 】

「アリールオキシカルボニル (aryloxycarbonyl)」は、 $-CO_2-$  アリール基を表し、アリール基は、上記に規定した通りである。例には、フェノキシカルボニルおよびナフトキシカルボニルが含まれる。

【 0 0 6 2 】

「ヘテロシクリルオキシカルボニル (heterocyclyloxycarbonyl)」は、 $-CO_2-$  ヘテロシクリル基を表し、複素環式基は、上記に規定したとおりである。

【 0 0 6 3 】

「ヘテロアリールオキシカルボニル (heteroaryloxycarbonyl)」は、 $-CO-$  ヘテロアリール基を表し、ヘテロアリール基は、上記に規定したとおりである。

【 0 0 6 4 】

「アミノカルボニル (aminocarbonyl)」は、カルボン酸アミド基  $-C(=O)NHR$  または  $-C(=O)NR_2$  を表し、炭素原子を介して分子の残りに縮合している。

【 0 0 6 5 】

「アルキルアミノカルボニル (alkylaminocarbonyl)」は、 $-C(=O)NHR$  または  $-C(=O)NR_2$  基を表し、R は、上記規定のアルキル基である。

【 0 0 6 6 】

「アリールアミノカルボニル (arylamino carbonyl)」は、 $-C(=O)NHR$  または  $-C(=O)NR_2$  基を表し、R は、上記規定のアリール基である。

10

20

30

40

50

## 【 0 0 6 7 】

「ヘテロシクリルアミノカルボニル (heterocyclylaminocarbonyl)」は、 $-C(=O)NHR$  または  $-C(=O)NR_2$  基を表し、R は、上記規定の複素環式基である。特定の態様では、 $NR_2$  は、任意に置換される複素環式環である。

## 【 0 0 6 8 】

「ヘテロアリアルアミノカルボニル (heteroarylaminocarbonyl)」は、 $-C(=O)NHR$  または  $-C(=O)NR_2$  基を表し、R は、上記規定のヘテロアリアル基である。特定の態様では、 $NR_2$  は、任意に置換されるヘテロアリアル環である。

## 【 0 0 6 9 】

「シアノ (cyano)」は、 $-CN$  部分を表す。

10

## 【 0 0 7 0 】

「ヒドロキシル (hydroxyl)」は、 $-OH$  部分を表す。

## 【 0 0 7 1 】

「アルコキシ (alkoxy)」は、 $-O-$  アルキル基を表し、アルキル基は、上記に規定した通りである。例には、メトキシ、エトキシ、 $n$ -プロポキシ、イソプロポキシ、および異なるブトキシ、ペントキシ、ヘキシルオキシならびにより大きいイソマーが含まれる。

## 【 0 0 7 2 】

「アリアルオキシ (aryloxy)」は、 $-O-$  アリアル基を表し、アリアル基は、上記に規定した通りである。例としては、フェノキシおよびナフトキシを含むが、これらに限定されない。

20

## 【 0 0 7 3 】

「アルケニルオキシ (alkenyloxy)」は、 $-O-$  アルケニル基を表し、アルケニル基は、上記に規定した通りである。例はアリルオキシである。

## 【 0 0 7 4 】

「ヘテロシクリルオキシ (heterocycllyoxy)」は、 $-O-$  ヘテロシクリル基を表し、複素環式基は、上記に規定した通りである。

## 【 0 0 7 5 】

「ヘテロアリアルオキシ (heteroaryloxy)」は、 $-O-$  ヘテロアリアル基を表し、ヘテロアリアル基は、上記に規定した通りである。例はピリジルオキシである。

## 【 0 0 7 6 】

「アルカノエート (alkanoate)」は、 $-OC(=O)-R$  基を表し、R は、上記規定のアルキル基である。

30

## 【 0 0 7 7 】

「アリーロエート (aryloate)」は、 $-OC(=O)-R$  基を表し、R は、上記規定のアリアル基である。

## 【 0 0 7 8 】

「ヘテロシクリロエート (heterocycllyoate)」は、 $-OC(=O)-R$  基を表し、R は、上記規定の複素環式基である。

## 【 0 0 7 9 】

「ヘテロアリーロエート (heteroaryloate)」は、 $-OC(=O)-R$  基を表し、P は、上記規定のヘテロアリアル基である。

40

## 【 0 0 8 0 】

「アミノ (amino)」は、 $-NH_2$  部分を表す。

## 【 0 0 8 1 】

「アルキルアミノ (alkylamino)」は、 $-NHR$  または  $-NR_2$  基を表し、R は、上記規定のアルキル基である。例には、メチルアミノ、エチルアミノ、 $n$ -プロピルアミノ、イソプロピルアミノ、および異なるブチルアミノ、ペンチルアミノ、ヘキシルアミノならびにより大きいイソマーが含まれるが、これらに限定されない。

## 【 0 0 8 2 】

「アリアルアミノ (arylamino)」は、 $-NHR$  または  $-NR_2$  基を表し、R は、上記

50

規定のアリール基である。例はフェニルアミノである。

【0083】

「ヘテロシクリルアミノ (heterocyclylamino)」は、 $-NHR$  または  $-NR_2$  基を表し、 $R$  は、上記規定の複素環式基である。特定の態様では、 $NR_2$  は、任意に置換される複素環式環である。

【0084】

「ヘテロアリールアミノ (heteroaryl amino)」は、 $-NHR$  または  $-NR_2$  基を表し、 $R$  は、上記規定のヘテロアリール基である。特定の態様では、 $NR_2$  は、任意に置換されるヘテロアリール環である。

【0085】

「カルボニルアミノ (carbonylamino)」は、窒素原子を介して分子の残りに縮合しているカルボン酸アミド基  $-NHC(=O)R$  を表す。

【0086】

「アルキルカルボニルアミノ (alkylcarbonylamino)」は、 $-NHC(=O)R$  基を表し、 $R$  は、上記規定のアルキル基である。

【0087】

「アリールカルボニルアミノ (arylcarbonylamino)」は、 $-NHC(=O)R$  基を表し、 $R$  は、上記規定のアリール基である。

【0088】

「ヘテロシクリルカルボニルアミノ (heterocyclylcarbonylamino)」は、 $-NHC(=O)R$  基を表し、 $R$  は、上記規定の複素環式基である。

【0089】

「ヘテロアリールカルボニルアミノ (heteroarylcarbonylamino)」は、 $-NHC(=O)R$  基を表し、 $R$  は、上記規定のヘテロアリール基である。

【0090】

「ニトロ (nitro)」は、 $-NO_2$  部分を表す。

【0091】

「アルキルチオ (alkylthio)」は、 $-S-$  アルキル基を表し、アルキル基は、上記に規定した通りである。例には、メチルチオ、エチルチオ、 $n$ -プロピルチオ、イソプロピルチオ、および異なるブチルチオ、ペンチルチオ、ヘキシルチオならびにより大きいイソマーが含まれるが、これらに限定されない。

【0092】

「アリールチオ (arylthio)」は、 $-S-$  アリール基を表し、アリール基は、上記に規定した通りである。例として、フェニルチオおよびナフチルチオが含まれる。

【0093】

「ヘテロシクリルチオ (heterocyclylthio)」は、 $-S-$  ヘテロシクリル基を表し、複素環式基は、上記に規定した通りである。

【0094】

「ヘテロアリールチオ (heteroarylthio)」は、 $-S-$  ヘテロアリール基を表し、ヘテロアリール基は、上記に規定した通りである。

【0095】

「スルホニル (sulfonyl)」は、硫黄原子を介して分子の残りに縮合している  $-SO_2R$  基を表す。

【0096】

「アルキルスルホニル (alkylsulfonyl)」は、 $-SO_2-$  アルキル基を表し、アルキル基は、上で規定した通りである。

【0097】

「アリールスルホニル (arylsulfonyl)」は、 $-SO_2-$  アリール基を表し、アリール基は、上記に規定した通りである。

【0098】

10

20

30

40

50

「ヘテロシクリルスルホニル (heterocyclylsulfonyl)」は、 $-SO_2$ -ヘテロシクリル基を表し、複素環式基は、上記に規定した通りである。

【0099】

「ヘテロアリアルスルホニル (heteroarylsulfonyl)」は、 $-SO_2$ -ヘテロアリアル基を表し、ヘテロアリアル基は、上記に規定した通りである。

【0100】

「アルデヒド (aldehyde)」は、 $-C(=O)H$ 基を表す。

【0101】

「アルカノール (alkanal)」は、アルキル- $(C=O)H$ 基を表し、アルキル基は、上記に規定した通りである。

10

【0102】

「アルキルシリル (alkylsilyl)」は、ケイ素原子を介して分子の残りに縮合しているアルキル基を表し、独立して選択される3つまでのアルキル基で置換されてもよく、各々のアルキル基は、上記に規定した通りである。

【0103】

「アルケニルシリル (alkenylsilyl)」は、ケイ素原子を介して分子の残りに縮合しているアルケニル基を表し、独立して選択される3つまでのアルケニル基で置換されてもよく、各々のアルケニル基は、上記に規定した通りである。

【0104】

「アルキニルシリル (alkynylsilyl)」は、ケイ素原子を介して分子の残りに縮合しているアルキニル基を表し、独立して選択される3つまでのアルキニル基で置換されてもよく、各々のアルケニル基は、上記に規定した通りである。

20

(一般用語)

【0105】

「薬学的に許容される塩 (Pharmaceutically acceptable salt)」または「その塩 (salts thereof)」は、薬学的に重要な分子である有機または無機の塩である。薬学的に許容される塩は、アセテート・イオン (または酢酸イオン、acetate ion)、サクシネート・イオン (またはコハク酸イオン、succinate ion) または他の対イオンのような別の分子を含んでもよい。対イオンは、親化合物の電荷を安定化させる任意の有機または無機の部分であってもよい。例えば、臭化n-ブチルアンモニウムのような対イオンを有する第四級アンモニウム基を形成するための第三級アミン基の反応によって塩を供することができる。さらに、薬学的に重要な有機分子は、その構造中に1個以上の荷電原子を有していてもよい。複数の荷電原子が分子の一部である状況は、複数の対イオンを有することができる。したがって、薬学的に許容される塩の分子は、1またはそれよりも多い荷電原子を含んでもよく、また1またはそれよりも多い対イオンを含んでもよい。所望の電荷分布は、薬物投与の方法によって決定される。薬学的に許容される塩の例は、当該分野で周知であるが、本発明の範囲を限定することなく、例示的な説明は、Physician's Desk Reference、The Merck Index、The PharmacopoeiaおよびGoodman&GilmanのThe Pharmacological Basis of Therapeuticsで確認することができる。

30

【0106】

本明細書で使用される「治療 (Treat、treatingまたはtreatment)」は、疾患に罹患しているか、または発症するリスクのある患者に利益を与えるあらゆるタイプの方法 (measure) を指し、(例えば、1またはそれよりも多い症状において) 患者の状態の改善を含み、疾患の発症または進行を遅らせる等を含む。治療は、あらゆる薬物、薬物製品、方法、手順、生活様式の変化、または対象の健康における特定の症状 (すなわち、特定の疾患、障害、または状態を指す) の変化を引き起こすために導入された他の調整を含み得る。

40

【0107】

本明細書を通して、特に断りのない限り、または文脈が他に要求しない限り、単一の工程、物質の組成物、工程群または物質の組成物群の参照は、1または複数 (すなわち、1またはそれよりも多い) の、それらの工程、物質の組成物、工程群または物質の組成物群

50

を包含すべきである。したがって、本明細書中で使用されるように、単数形「１の（a、an）」および「その、または前記の（the）」は、文脈上他に明確に指示されない限り、複数の態様を含む。例えば、「１の（a、an）」の言及は、１のものと２つ以上のものを含む。「その、または前記の（the）」の言及は、１のものと２以上のものなどを含む。

【０１０８】

当業者であれば、本明細書の開示は、具体的に記載されたもの以外の変形および修正を受け得ることを理解するであろう。本開示がそのようなすべての変形および修正を含むことを理解されたい。本開示はまた、本明細書中で、個別にまたは集合的に、言及または指示される工程、特徴、組成物および化合物の全て、ならびに、任意のおよび全ての組合せ、または任意の２もしくはそれよりも多いその工程もしくは特徴を含む。

10

【０１０９】

本明細書に記載の本開示の各実施例は、他に特に言及しない限り、各々の、および全ての他の実施例に準用して適用される。本開示は、例示のみを目的とする本明細書に記載の特定の例によって、範囲が限定されるものではない。機能的に同等の製品、組成物および方法は、本明細書に記載の開示の範囲内にあることは明らかである。

【０１１０】

用語「および／または（and/or）」（例えば、「Xおよび／またはY」）は、「XおよびY」または「XまたはY」のいずれかを意味すると理解され、また両方の意味またはいずれかの意味を明確にサポートするために供されるべきである。

【０１１１】

本明細書を通じて、「含んで成る（comprise、またはcomprises、comprisingなどの変形）」という単語は、記載された要素、整数もしくは工程、または要素、整数もしくは工程のグループを含むことを意味すると解され、いかなる他の要素、整数もしくは工程、または要素、整数もしくは工程のグループを除外するものではない。

20

【０１１２】

多数の先行技術文献が本明細書で言及されているが、この参考文献は、これらの文献のいずれかが、オーストラリアまたは他の国において、当該技術分野における共通の一般的知識の一部を構成することを認めるものではないことが、明確に理解される。

【０１１３】

他に規定されない限り、本明細書で使用される全ての技術用語および科学用語は、本発明が属する技術分野の当業者によって、一般的に理解されるのと同じ意味を有する。本明細書に記載されているものと類似または同等の方法および材料を、本発明の実施または試験に使用することができるが、適切な方法および材料を以下に記載する。紛争が生じた場合、規定を含む本明細書に従う。さらに、材料、方法、および実施例は例示的なものに過ぎず、限定することを意図するものではない。

30

（熱活性化遅延蛍光および三重項 - 三重項消滅化合物）

【０１１４】

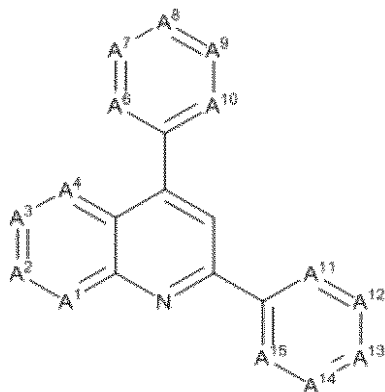
本開示は、以下に記載する式１の熱活性化遅延蛍光および三重項 - 三重項消滅化合物を供する。化合物は、発光材として、または蛍光OLEDのような電子デバイスの発光層内での使用に適し得る。

40

【０１１５】

式１の化合物は、以下の構造による化合物であってもよい。

## 【化 9】



式 1

10

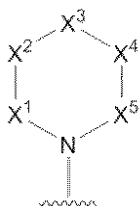
$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^3$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  が、各々独立して、C - Y および N から選択され、

Y が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、CN、 $\text{NO}_2$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{R}^2$ 、 $\text{OR}^2$ 、 $\text{OS}(\text{O})_2\text{R}^2$ 、 $\text{NR}^2\text{R}^3$ 、 $\text{SR}^2$ 、任意に置換される  $\text{C}_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $\text{C}_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $\text{C}_{2-10}$  アルキニル、任意に置換される単環式または多環式の炭素環式または複素環式、式 2 の部分から選択され、ならびに 2 またはそれよりも多い Y 基が共に、任意に式 2 の部分と置換される縮合アリール基または縮合ヘテロアリール基を形成し、

20

式 2 の部分が以下によって表され、

## 【化 10】



式 2

30

$X^1 \sim X^5$  が、各々独立して、C、 $\text{CR}^4$ 、 $\text{CR}^4\text{R}^5$ 、N、 $\text{NR}^4$ 、S、SO、 $\text{SO}_2$ 、 $\text{SiR}^4\text{R}^5$  および O から選択され、ならびに

$\text{R}^4$  および  $\text{R}^5$  が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、CN、 $\text{NO}_2$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{R}^2$ 、 $\text{OR}^2$ 、 $\text{OS}(\text{O})_2\text{R}^2$ 、 $\text{NR}^2\text{R}^3$ 、 $\text{SR}^2$ 、任意に置換される  $\text{C}_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $\text{C}_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $\text{C}_{2-10}$  アルキニル、任意に置換されるアリールまたはヘテロアリール、任意に置換される単環式または多環式の複素環式から選択され、

2 またはそれよりも多い  $\text{R}^4$  基および  $\text{R}^5$  基が共に、任意に置換される、単環式または多環式の炭素環式または複素環式を形成してよく、

40

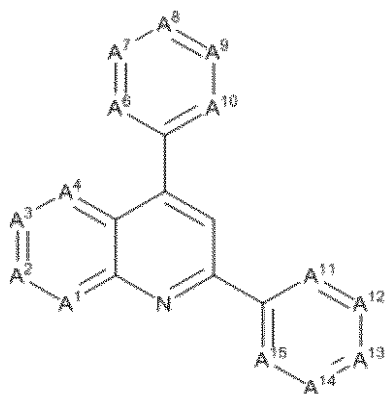
$\text{R}^2$  および  $\text{R}^3$  が、各々独立して、水素、 $\text{C}_{1-10}$  アルキル、および単環式または多環式のアリールおよびヘテロアリールから選択され、ならびに

$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^3$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  の少なくとも 1 つが式 2 の部分と置換される。

## 【0116】

式 1 の化合物は、以下の構造による化合物であってもよい。

## 【化 1 1】



式 1

10

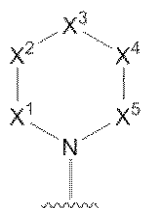
$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^3$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  が、各々独立して、C - Y および N から選択され、

Y が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、CN、 $\text{NO}_2$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{R}^2$ 、 $\text{OR}^2$ 、 $\text{OS}(\text{O})_2\text{R}^2$ 、 $\text{NR}^2\text{R}^3$ 、 $\text{SR}^2$ 、任意に置換される  $\text{C}_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $\text{C}_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $\text{C}_{2-10}$  アルキニル、任意に置換される単環式または多環式の炭素環式または複素環式、式 2 の部分から選択され、ならびに 2 またはそれよりも多い Y 基が共に、任意に式 2 の部分と置換される縮合アリール基または縮合ヘテロアリール基を形成し、

20

式 2 の部分が以下によって表され、

## 【化 1 2】



式 2

30

$X^1 \sim X^5$  が、各々独立して、C、 $\text{CR}^4$ 、 $\text{CR}^4\text{R}^5$ 、N、 $\text{NR}^4$ 、S、SO、 $\text{SO}_2$ 、 $\text{SiR}^4\text{R}^5$  および O から選択され、ならびに

$\text{R}^4$  および  $\text{R}^5$  が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、CN、 $\text{NO}_2$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{R}^2$ 、 $\text{OR}^2$ 、 $\text{OS}(\text{O})_2\text{R}^2$ 、 $\text{NR}^2\text{R}^3$ 、 $\text{SR}^2$ 、任意に置換される  $\text{C}_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $\text{C}_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $\text{C}_{2-10}$  アルキニル、任意に置換されるアリールまたはヘテロアリール、任意に置換される単環式または多環式の複素環式から選択され、ならびに

2 またはそれよりも多い  $\text{R}^4$  基および  $\text{R}^5$  基が共に、任意に置換される、単環式または多環式の炭素環式または複素環式を形成してよく、

40

$\text{R}^4$  および  $\text{R}^5$  が、両方とも水素であることはできず、

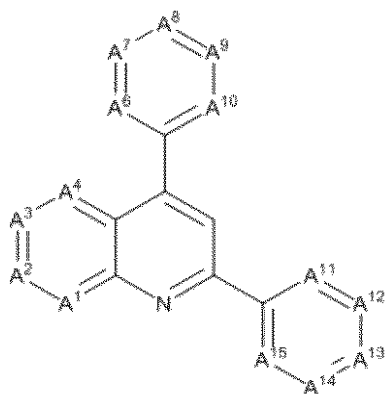
$\text{R}^2$  および  $\text{R}^3$  が、各々独立して、水素、 $\text{C}_{1-10}$  アルキル、および単環式または多環式のアリールおよびヘテロアリールから選択され、ならびに

$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^3$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  の少なくとも 1 つが、式 2 の部分と置換される。

## 【0 1 1 7】

式 1 の化合物は、以下の構造による化合物であってもよい。

## 【化 1 3】



式 1

10

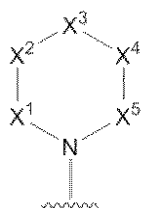
$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^3$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  が、各々独立して、C - Y および N から選択され、

Y が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、CN、 $\text{NO}_2$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{R}^2$ 、 $\text{OR}^2$ 、 $\text{OS}(\text{O})_2\text{R}^2$ 、 $\text{NR}^2\text{R}^3$ 、 $\text{SR}^2$ 、任意に置換される  $\text{C}_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $\text{C}_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $\text{C}_{2-10}$  アルキニル、任意に置換される単環式または多環式の炭素環式または複素環式、式 2 の部分から選択され、ならびに 2 またはそれよりも多い Y 基が共に、任意に式 2 の部分と置換される縮合アリール基または縮合ヘテロアリール基を形成し、

20

式 2 の部分が以下によって表され、

## 【化 1 4】



式 2

30

$X^1 \sim X^5$  が、各々独立して、C、 $\text{CR}^4$ 、 $\text{CR}^4\text{R}^5$ 、N、 $\text{NR}^4$ 、S、SO、 $\text{SO}_2$ 、 $\text{SiR}^4\text{R}^5$  および O から選択され、

$\text{R}^4$  が、独立して、水素、重水素、ハロ、CN、 $\text{NO}_2$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{R}^2$ 、 $\text{OR}^2$ 、 $\text{OS}(\text{O})_2\text{R}^2$ 、 $\text{NR}^2\text{R}^3$ 、 $\text{SR}^2$ 、任意に置換される  $\text{C}_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $\text{C}_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $\text{C}_{2-10}$  アルキニル、任意に置換されるアリールまたはヘテロアリール、任意に置換される単環式または多環式の複素環式から選択され、

$\text{R}^5$  が、独立して、重水素、ハロ、CN、 $\text{NO}_2$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{R}^2$ 、 $\text{OR}^2$ 、 $\text{OS}(\text{O})_2\text{R}^2$ 、 $\text{NR}^2\text{R}^3$ 、 $\text{SR}^2$ 、任意に置換される  $\text{C}_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $\text{C}_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $\text{C}_{2-10}$  アルキニル、任意に置換されるアリールまたはヘテロアリール、任意に置換される単環式または多環式の複素環式から選択され、

40

2 またはそれよりも多い  $\text{R}^4$  基および  $\text{R}^5$  基が共に、任意に置換される、単環式または多環式の炭素環式または複素環式を形成してよく、

$\text{R}^2$  および  $\text{R}^3$  が、各々独立して、水素、 $\text{C}_{1-10}$  アルキル、および単環式または多環式のアリールおよびヘテロアリールから選択され、ならびに

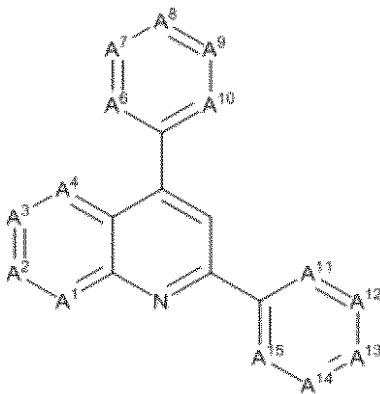
$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^3$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  の少なくとも 1 つが式 2 の部分と置換される。

## 【0 1 1 8】

50

式 1 の化合物は、以下の構造による化合物であってもよい。

【化 1 5】



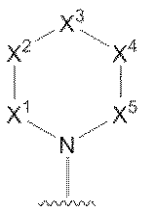
式 1

$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^3$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  が、各々独立して、C - Y および N から選択され、

Y が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、CN、 $\text{NO}_2$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{R}^2$ 、 $\text{OR}^2$ 、 $\text{OS}(\text{O})_2\text{R}^2$ 、 $\text{NR}^2\text{R}^3$ 、 $\text{SR}^2$ 、任意に置換される  $\text{C}_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $\text{C}_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $\text{C}_{2-10}$  アルキニル、任意に置換される単環式または多環式の炭素環式または複素環式、式 2 の部分から選択され、ならびに 2 またはそれよりも多い Y 基が共に、任意に式 2 の部分と置換される縮合アリール基または縮合ヘテロアリール基を形成し、

式 2 の部分が以下によって表され、

【化 1 6】



式 2

$X^1 \sim X^5$  が、各々独立して、C、 $\text{CR}^4$ 、 $\text{CR}^4\text{R}^5$ 、N、 $\text{NR}^4$ 、S、SO、 $\text{SO}_2$ 、 $\text{SiR}^4\text{R}^5$  および O から選択され、ならびに

$\text{R}^4$  および  $\text{R}^5$  が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、CN、 $\text{NO}_2$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{R}^2$ 、 $\text{OR}^2$ 、 $\text{OS}(\text{O})_2\text{R}^2$ 、 $\text{NR}^2\text{R}^3$ 、 $\text{SR}^2$ 、任意に置換される  $\text{C}_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $\text{C}_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $\text{C}_{2-10}$  アルキニル、任意に置換されるアリールまたはヘテロアリール、任意に置換される単環式または多環式の複素環式から選択され、

2 またはそれよりも多い  $\text{R}^4$  基および  $\text{R}^5$  基が共に、任意に置換される、単環式または多環式の炭素環式または複素環式を形成してよく、

$\text{R}^2$  および  $\text{R}^3$  が、各々独立して、水素、 $\text{C}_{1-10}$  アルキル、および単環式または多環式のアリールおよびヘテロアリールから選択され、ならびに

$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^3$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  の少なくとも 1 つが式 2 の部分と置換される。

但し、式 1 の化合物は以下のものではない。

(2 - (5 - クロロ - 2 - フルオロフェニル) - 4 - [8 - (1 - ピペラジニル) - 5 - イソキノリニル] - 1, 8 - ナフチリジン)、

5 - アミノ - 7 - (4 - モルホリニル) - 2, 4 - ジフェニル - 1, 6 - ナフチリジン - 8 - カルボニトリル、

10

20

30

40

50

- 5 - ( 3 - ブロモフェニル ) - 7 - [ 4 - ( 4 - モルホリニル ) フェニル ] - ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジン - 4 - アミン、
- 5 - ( 3 - ブロモフェニル ) - 7 - [ 6 - ( 4 - モルホリニル ) - 3 - ピリジニル ] - ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジン - 4 - アミン、
- 5 - ( 3 - ブロモフェニル ) - 7 - [ 2 - ( 4 - モルホリニル ) - 5 - ピリミジニル ] - ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジン - 4 - アミン、
- 5 - ( 3 - ブロモフェニル ) - 7 - [ 2 - ( 4 - モルホリニル ) - 5 - ピリミジニル ] - ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジン - 4 - アミン塩酸塩 ( 5 : 6 )、
- 5 - ( 3 - ブロモフェニル ) - 7 - [ 6 - ( 4 - モルホリニル ) - 3 - ピリダジニル ] - ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジン - 4 - アミン、
- 5 - ( 3 - ブロモフェニル ) - 7 - [ 5 - ( 4 - モルホリニル ) - 2 - ピリジニル ] - ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジン - 4 - アミン、
- 5 - ( 3 - ブロモフェニル ) - 7 - [ 5 - ( 4 - モルホリニル ) - 2 - ピリジニル ] - ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジン - 4 - アミン塩酸塩 ( 1 : 3 )、
- 5 - ( 3 - ブロモフェニル ) - 7 - [ 5 - ( 4 - モルホリニル ) - 2 - ピラジニル ] - ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジン - 4 - アミン、
- 5 - ( 3 - ブロモフェニル ) - 7 - [ 5 - ( 4 - モルホリニル ) - 2 - ピラジニル ] - ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジン - 4 - アミン塩酸塩 ( 17 : 25 )、
- 5 - ( 3 - ブロモフェニル ) - 7 - [ 6 - ( 4 - エトキシ - 1 - ピペリジニル ) - 3 - ピリダジニル ] - ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジン - 4 - アミン、
- 5 - ( 3 - ブロモフェニル ) - 7 - [ 6 - [ 4 - [ 2 - [ ( テトラヒドロ - 2 H - ピラン - 4 - イル ) オキシ ] エチル ] - 1 - ピペリジニル ] - 3 - ピリダジニル ] - ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジン - 4 - アミン、
- 3 - [ 1 - [ 5 - [ 4 - アミノ - 5 - ( 3 - ブロモフェニル ) ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジン - 7 - イル ] - 2 - ピリジニル ] - 4 - ヒドロキシ - 4 - ピペリジニル ] ジヒドロ - 2 ( 3 H ) - フラノン、
- 5 - ( 3 - ブロモフェニル ) - 7 - [ 6 - ( 1 , 3 - ジオキサ - 8 - アザスピロ [ 4 . 5 ] デカ - 8 - イル ) - 3 - ピリジニル ] - ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジン - 4 - アミン、
- 5 - ( 3 - ブロモフェニル ) - 7 - [ 6 - ( 1 , 3 - ジオキサ - 8 - アザスピロ [ 4 . 5 ] デカ - 8 - イル ) - 3 - ピリジニル ] - ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジン - 4 - アミン、
- 5 - ( 3 - ブロモフェニル ) - 7 - [ 6 - [ 4 - [ [ ( テトラヒドロ - 2 H - ピラン - 4 - イル ) オキシ ] メチル ] - 1 - ピペリジニル ] - 3 - ピリダジニル ] - ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジン - 4 - アミン、
- 5 - ( 3 - ブロモフェニル ) - 7 - [ 6 - ( 2 - オキサ - 5 - アザビシクロ [ 2 . 2 . 1 ] ヘプト - 5 - イル ) - 3 - ピリジニル ] - ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジン - 4 - アミン、
- 5 - ( 3 - ブロモフェニル ) - 7 - [ 6 - ( 1 , 4 - ジオキサ - 8 - アザスピロ [ 4 . 5 ] デカ - 8 - イル ) - 3 - ピリジニル ] - ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジン - 4 - アミン、
- 5 - ( 3 - ブロモフェニル ) - 7 - [ 6 - ( 4 - チオモルホリニル ) - 3 - ピリジニル ] - ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジン - 4 - アミン、
- 1 - [ 5 - [ 4 - アミノ - 5 - ( 3 - ブロモフェニル ) ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジン - 7 - イル ] - 2 - ピリジニル ] - 4 - ピペリジノール、
- 5 - ( 2 - ブロモフェニル ) - 7 - [ 6 - ( 4 - モルホリニル ) - 3 - ピリジニル ] - ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジン - 4 - アミン、
- 5 - ( 4 - ブロモフェニル ) - 7 - [ 6 - ( 4 - モルホリニル ) - 3 - ピリジニル ] - ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジン - 4 - アミン、
- 5 - ( 3 - クロロフェニル ) - 7 - [ 6 - ( 4 - モルホリニル ) - 3 - ピリジニル ] -

ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジン - 4 - アミン、  
 5 - ( 2 , 3 - ジクロロフェニル ) - 7 - [ 6 - ( 4 - モルホリニル ) - 3 - ピリジニ  
 ル ] - ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジン - 4 - アミン、  
 5 - ( 2 , 5 - ジクロロフェニル ) - 7 - [ 6 - ( 4 - モルホリニル ) - 3 - ピリジニ  
 ル ] - ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジン - 4 - アミン、  
 7 - [ 6 - ( 4 - モルホリニル ) - 3 - ピリジニル ] - 5 - ( 3 - ピリジニル ) - ピリ  
 ド [ 2 , 3 - d ] ピリミジン - 4 - アミン、  
 5 - ( 3 - プロモフェニル ) - 7 - [ 6 - [ ( 3 S ) - 3 - [ ( テトラヒドロ - 2 - フ  
 ラニル ) オキシ ] - 1 - ピペリジニル ] - 3 - ピリダジニル ] - ピリド [ 2 , 3 - d ] ピ  
 リミジン - 4 - アミン、  
 2 - [ 4 - ( 4 - モルホリニル ) フェニル ] - 4 - フェニル - キノリン、  
 5 - ( 3 - プロモフェニル ) - 7 - [ 4 - ( 3 - フルオロ - 4 - チオモルホリニル ) フ  
 ェニル ] - ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジン - 4 - アミン、  
 5 - アミノ - 4 - ( 4 - メトキシフェニル ) - 2 - フェニル - 7 - ( 1 - ピペリジニル  
 ) - 1 , 6 - ナフチリジン - 8 - カルボニトリル、  
 5 - ( 3 - プロモフェニル ) - 7 - [ 6 - [ ( 3 R ) - 3 - [ ( テトラヒドロ - 2 - フ  
 ラニル ) オキシ ] - 1 - ピペリジニル ] - 3 - ピリダジニル ] - ピリド [ 2 , 3 - d ] ピ  
 リミジン - 4 - アミン、  
 8 - [ 6 - [ 4 - アミノ - 5 - ( 3 - プロモフェニル ) ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジ  
 ン - 7 - イル ] - 3 - ピリダジニル ] - 1 - オキシ - 8 - アザスピロ [ 4 . 5 ] デカン -  
 3 , 4 - ジオン、  
 5 - ( 3 - プロモフェニル ) - 7 - [ 6 - ( 1 , 5 - ジオキサ - 9 - アザスピロ [ 5 .  
 5 ] ウンデカ - 9 - イル ) - 3 - ピリダジニル ] - ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジン - 4  
 - アミン、  
 4 - [ 1 - [ 6 - [ 4 - アミノ - 5 - ( 3 - プロモフェニル ) ピリド [ 2 , 3 - d ] ピ  
 リミジン - 7 - イル ] - 3 - ピリダジニル ] - 4 - ヒドロキシ - 4 - ピペリジニル ] ジヒ  
 ドロ - 2 ( 3 H ) - フラノン、  
 4 - [ 1 - [ 5 - [ 4 - アミノ - 5 - ( 3 - プロモフェニル ) ピリド [ 2 , 3 - d ] ピ  
 リミジン - 7 - イル ] - 2 - ピリジニル ] - 4 - ヒドロキシ - 4 - ピペリジニル ] - 2 ( 5  
 H ) - フラノン、  
 5 - [ 4 - アミノ - 5 - ( 3 - プロモフェニル ) ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジン - 7  
 - イル ] - 2 - [ 4 - ( ヒドロキシメチル ) - 1 - ピペリジニル ] - 4 - ピリジノール、  
 5 - ( 3 - プロモフェニル ) - 7 - [ 6 - [ ( 2 R , 6 S ) - 2 , 6 - ジメチル - 4 -  
 モルホリニル ] - 3 - ピリジニル ] - ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジン - 4 - アミン、  
 8 - [ 6 - [ 4 - アミノ - 5 - ( 3 - プロモフェニル ) ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジ  
 ン - 7 - イル ] - 3 - ピリダジニル ] - 8 - アザスピロ [ 4 . 5 ] デカン - 1 , 2 - ジオ  
 ン、  
 5 - ( 3 - プロモフェニル ) - 7 - [ 6 - ( 4 - モルホリニル ) - 2 - ピリジニル ] -  
 ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジン - 4 - アミン、および  
 5 - ( 3 - クロロフェニル ) - 7 - [ 6 - ( 1 , 4 - ジオキサ - 8 - アザスピロ [ 4 . 5  
 ] デカ - 8 - イル ) - 3 - ピリジニル ] ピリド [ 2 , 3 - d ] ピリミジン - 4 - アミン。  
**【 0 1 1 9 】**

式 1 の化合物は以下で供し得る。

$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  が、各々独立して、C - Y および N から選択され、Y が本明細書で記載  
 される Y のあらゆる態様であり、ならびに

$A^3$  が C - Y であり、Y が式 2 の部分であり、式 2 が本明細書で記載される式 2 のあ  
 らゆる態様であってよい。

**【 0 1 2 0 】**

式 1 の化合物は以下で供し得る。

10

20

30

40

50

$A^1$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  が、各々独立して、C - Y および N から選択され、Y が本明細書で記載される Y のあらゆる態様であり、ならびに

$A^2$  および  $A^4$  が各々 CH であり、

$A^3$  が C - Y であり、Y が式 2 の部分であり、ならびに式 2 が本明細書で記載される式 2 のあらゆる態様であってよい。

【0121】

式 1 の化合物は以下で供し得る。

$A^1$  が CH または N であり、

$A^2$  および  $A^4$  が各々 CH であり、

$A^3$  が C - Y であり、Y が式 2 の部分であり、式 2 が本明細書で記載される式 2 のあらゆる態様であり、

$A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  が、各々独立して、C - Y から選択され、Y が本明細書で記載される Y のあらゆる態様である。

10

【0122】

式 1 の化合物は以下で供し得る。

$A^1$  が CH または N であり、

$A^2$  および  $A^4$  が各々 CH であり、

$A^3$  が C - Y であり、Y が本明細書で記載される式 2 の部分であり、

$A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  が、各々独立して、C - Y から選択され、Y が本明細書で記載されるものであり、ならびに

$A^{13}$  が C - Y から選択され、Y が式 2 の部分から選択され、または 2 もしくはそれよりも多い Y 基が共に、任意に式 2 の部分と置換される縮合アリール基もしくは縮合ヘテロアリール基を形成する。

20

【0123】

式 1 の化合物は以下で供し得る。

$A^1$  が CH または N であり、

$A^2$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  が、各々 CH であり、

$A^3$  が C - Y であり、Y が式 2 の部分であり、また式 2 が本明細書で記載される式 2 のあらゆる態様であってよい。

30

【0124】

式 1 の化合物は以下で供し得る。

$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  が、各々 CH であり、ならびに、

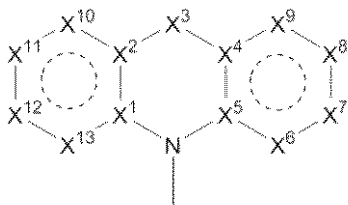
$A^3$  が C - Y であり、Y が式 2 の部分であり、また式 2 が本明細書で記載される式 2 のあらゆる態様であってよい。

【0125】

上記の態様のいずれかについて記載される式 2 の部分は、式 2 (a) の部分であってもよい。

40

【化 17】



式 2 (a)

50

$X^1 \sim X^{13}$  が、各々独立して、C、 $CR^4$ 、 $CR^4R^5$ 、N、 $NR^4$ 、S、SO、 $SO_2$ 、 $SiR^4R^5$  および O から選択され、ならびに

$R^4$  および  $R^5$  が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、CN、 $NO_2$ 、 $C(O)R^2$ 、 $OR^2$ 、 $OS(O)_2R^2$ 、 $NR^2R^3$ 、 $SR^2$ 、任意に置換される  $C_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルキニル、任意に置換されるアリールまたはヘテロアリールから選択され、ならびに

式中の点線の円が、1 またはそれよりも多い任意の二重結合を示し、ならびに

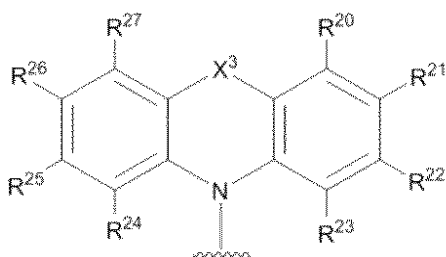
$R^2$  および  $R^3$  が、各々独立して、水素および  $C_{1-10}$  アルキルから選択される。

【0126】

上記の態様のいずれかについて記載される式2の部分は、式2(a)(i)の部分であってもよい。

10

【化18】



式2(a)(i)

20

$X^3$  が、 $CR^4R^5$ 、 $NR^4$ 、S、SO、 $SO_2$ 、 $SiR^4R^5$  および O から選択され、ならびに

$R^4$  および  $R^5$  が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、CN、 $NO_2$ 、 $C(O)R^2$ 、 $OR^2$ 、 $OS(O)_2R^2$ 、 $NR^2R^3$ 、 $SR^2$ 、任意に置換される  $C_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルキニル、任意に置換されるアリールまたはヘテロアリールから選択され、

$R^2$  および  $R^3$  が、各々独立して、水素および  $C_{1-10}$  アルキルから選択され、ならびに

30

$R^{20} \sim R^{27}$  が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、CN、 $NO_2$ 、 $C(O)R^2$ 、 $OR^2$ 、 $OS(O)_2R^2$ 、 $NR^2R^3$ 、 $SR^2$ 、任意に置換される  $C_{1-10}$  アルキル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルケニル、任意に置換される  $C_{2-10}$  アルキニルから選択される。

【0127】

式2の化合物は、例えば、フェノキサジン、フェノチアジンおよびアクリジンから選択することができる。

【0128】

式1の化合物は以下で供し得る。

$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^3$ 、 $A^4$ 、 $A^6$ 、 $A^7$ 、 $A^8$ 、 $A^9$ 、 $A^{10}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$  および  $A^{15}$  が、各々独立して、上記態様のいずれかから選択され、ならびに、

40

Y が、各々独立して、水素、重水素、ハロ、ヒドロキシル、ニトロ、シアノ、チオール、アミノ、任意に置換される  $C_{1-6}$  アルキル、任意に置換される三環式の炭素環式または複素環式から選択され、

2 またはそれよりも多い Y 基が共に、本明細書で記載される式2の部分と任意に置換される縮合フェニル基を形成する。

【0129】

他の態様において、上記または本明細書に記載される式1の化合物またはそのいずれかの態様を含んで成る使用、方法またはプロセスが供され得ることが理解される。

【0130】

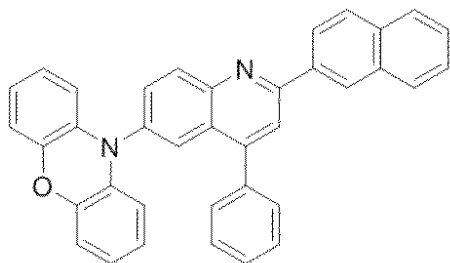
50

本明細書に記載の化合物またはその組成物は、それらの化合物の塩、溶媒和物、水和物、イソマー、互変イソマー、ラセミ体、ステレオイソマー、鏡像イソマーまたはジアステレオイソマーを含んでもよい。

【 0 1 3 1 】

式 1 で表される化合物のいくつかの具体的な例は、以下の非限定的な例を含んでもよい。

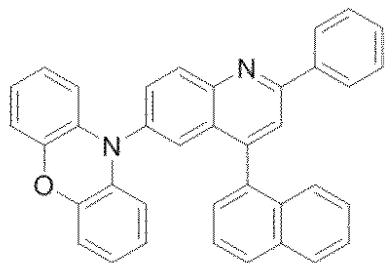
【 化 1 9 】



1

10

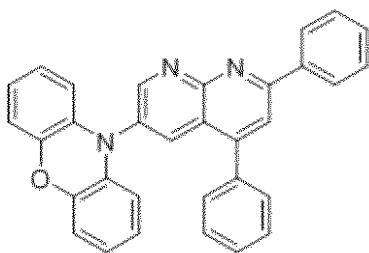
【 化 2 0 】



2

20

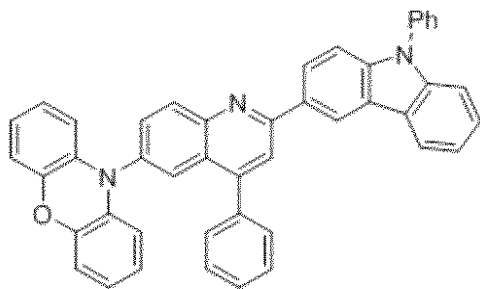
【 化 2 1 】



3

30

【 化 2 2 】

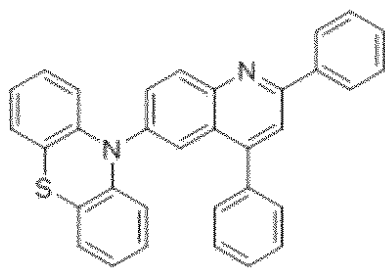


4

40

50

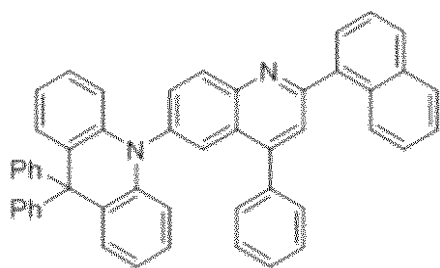
## 【化 2 3】



5

10

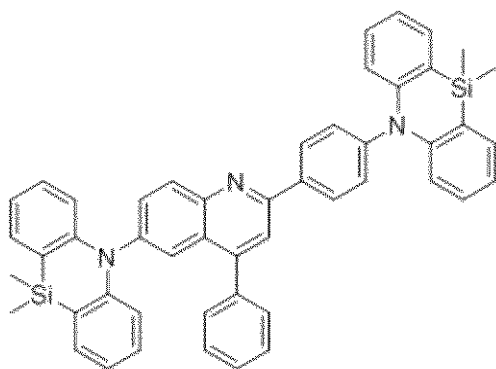
## 【化 2 4】



6

20

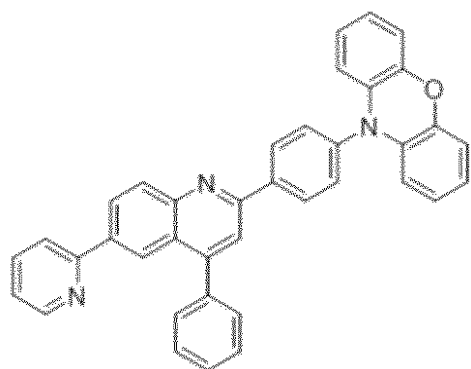
## 【化 2 5】



7

30

## 【化 2 6】

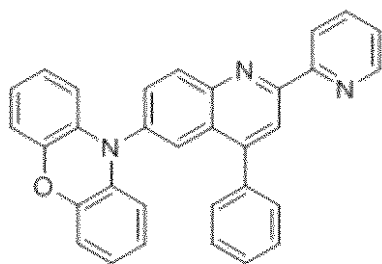


8

40

50

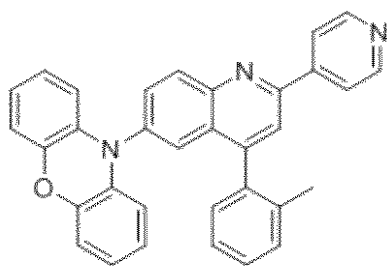
## 【化 2 7】



9

10

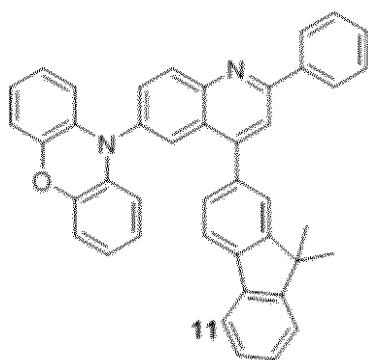
## 【化 2 8】



10

20

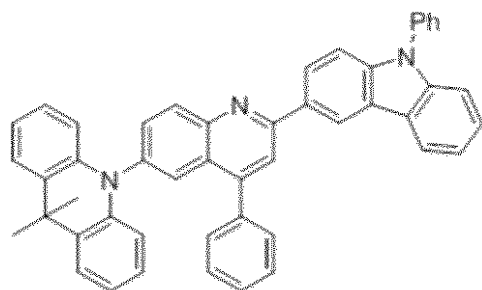
## 【化 2 9】



11

30

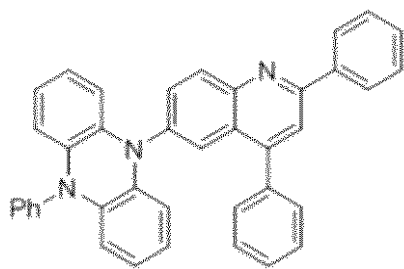
## 【化 3 0】



12

40

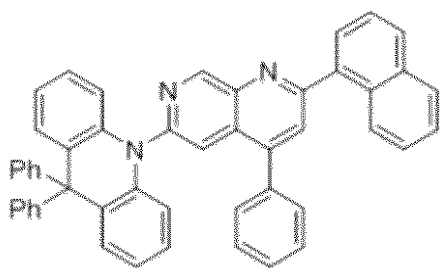
## 【化 3 1】



13

10

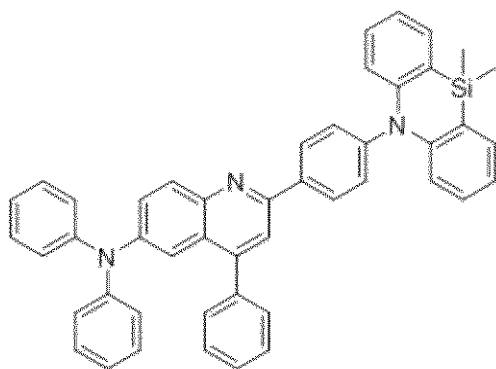
## 【化 3 2】



14

20

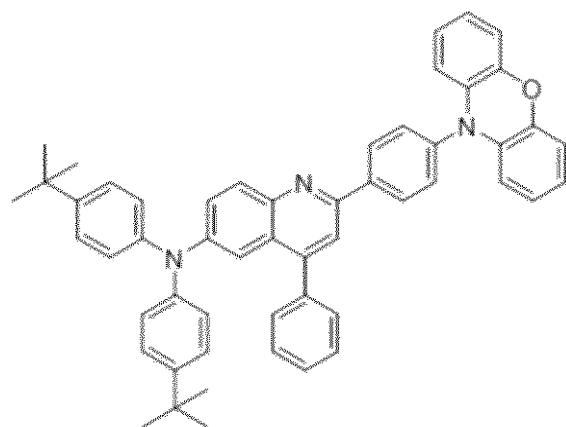
## 【化 3 3】



15

30

## 【化 3 4】

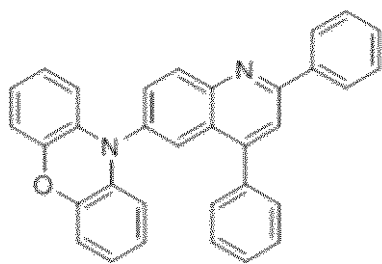


16

40

50

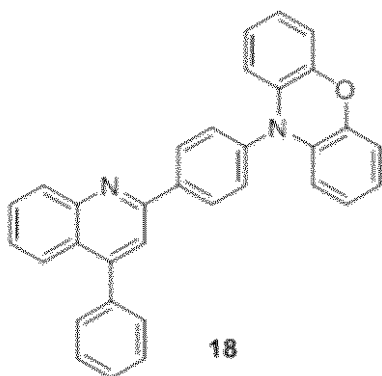
## 【化 3 5】



17

10

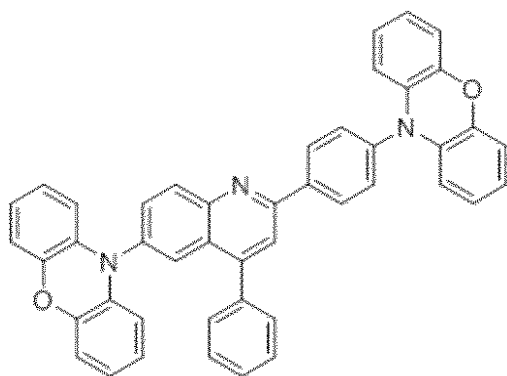
## 【化 3 6】



18

20

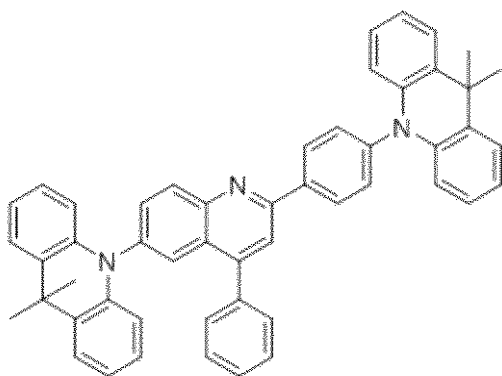
## 【化 3 7】



19

30

## 【化 3 8】

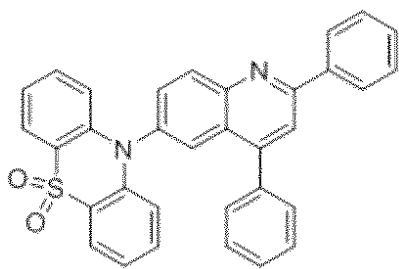


20

40

50

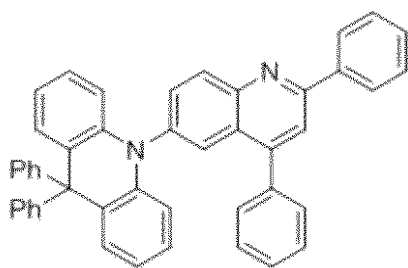
## 【化 3 9】



21

10

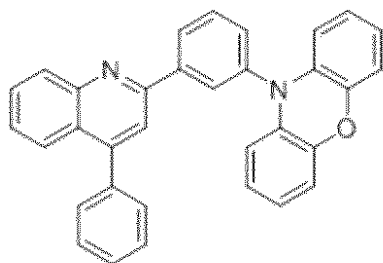
## 【化 4 0】



22

20

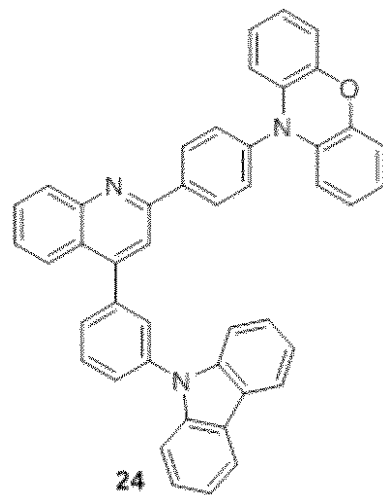
## 【化 4 1】



23

30

## 【化 4 2】

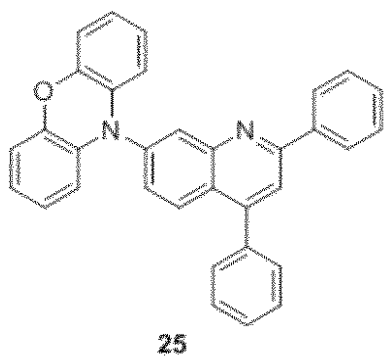


24

40

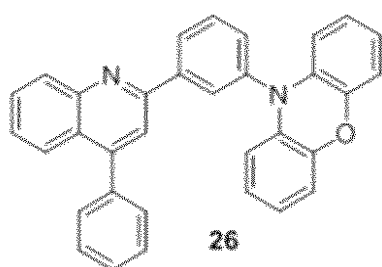
50

## 【化 4 3】



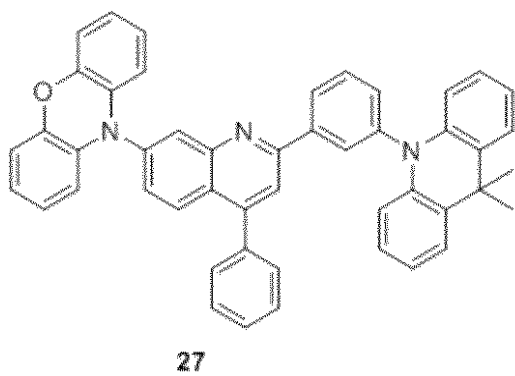
10

## 【化 4 4】



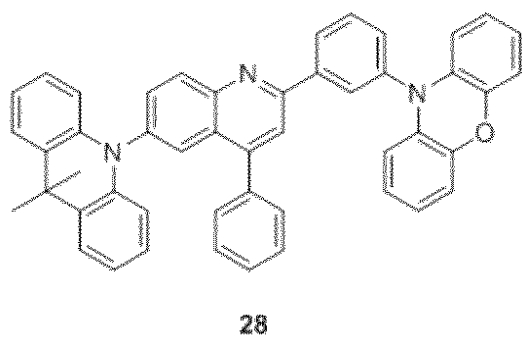
20

## 【化 4 5】



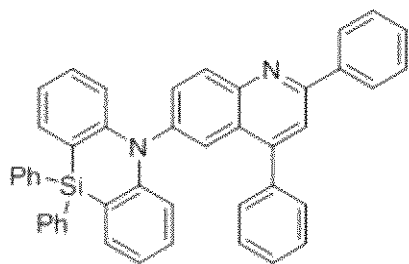
30

## 【化 4 6】

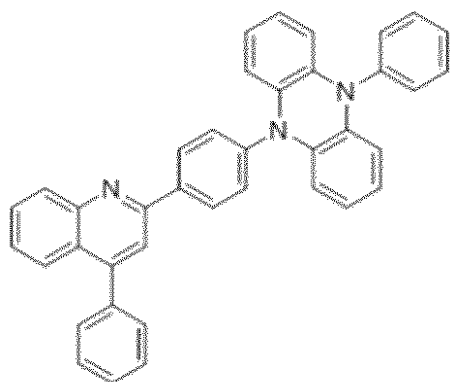


40

## 【化 4 7】



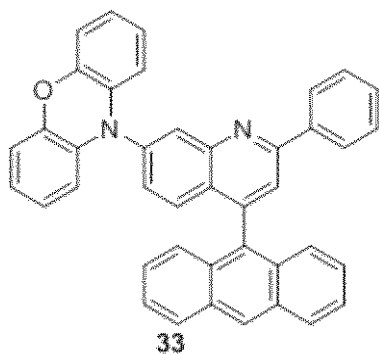
【化 5 0】



10

32

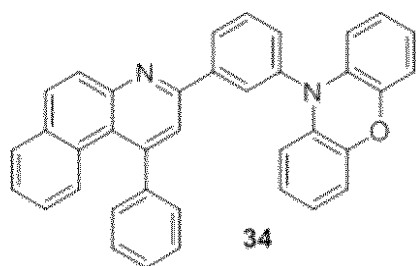
【化 5 1】



20

33

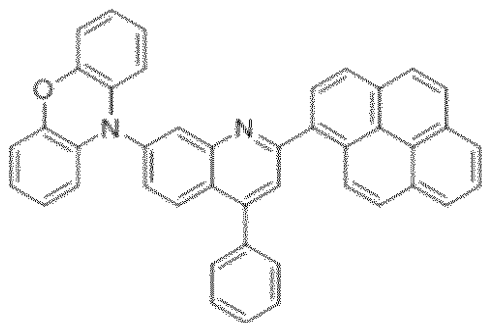
【化 5 2】



30

34

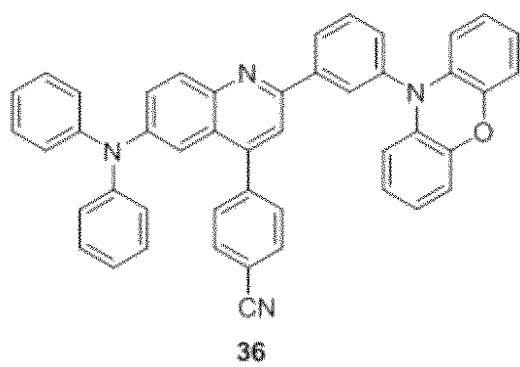
【化 5 3】



40

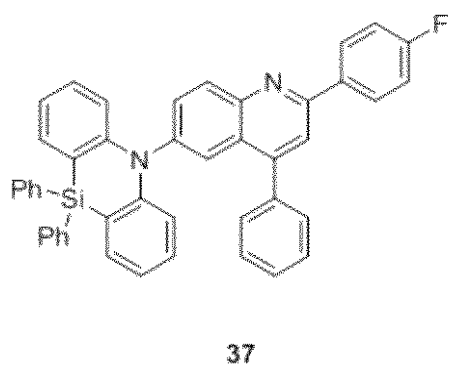
35

## 【化 5 4】



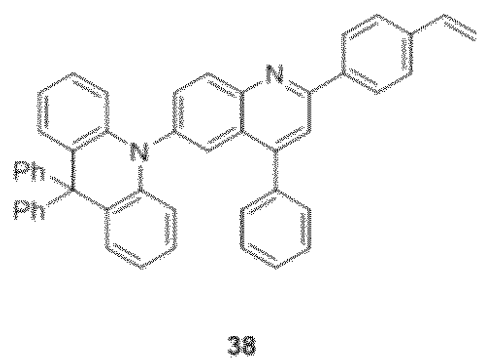
10

## 【化 5 5】



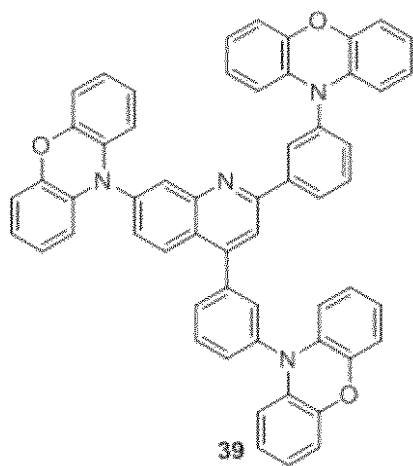
20

## 【化 5 6】



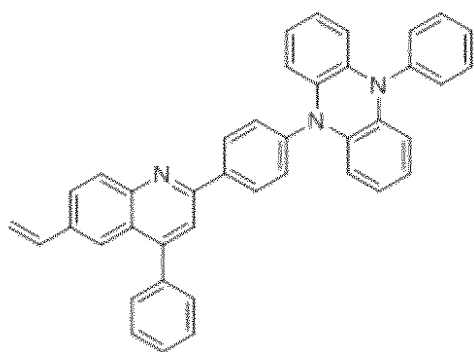
30

## 【化 5 7】



40

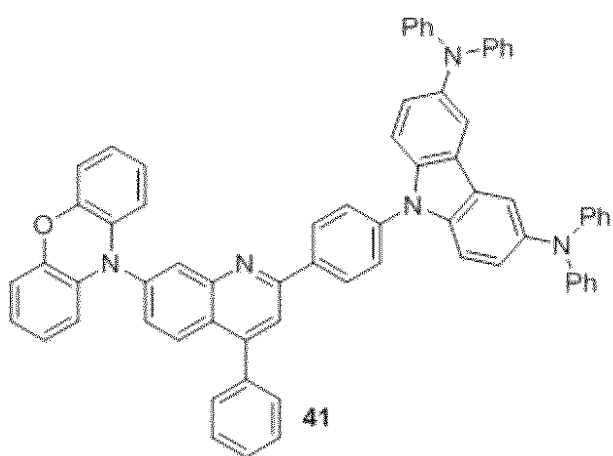
【化 5 8】



10

40

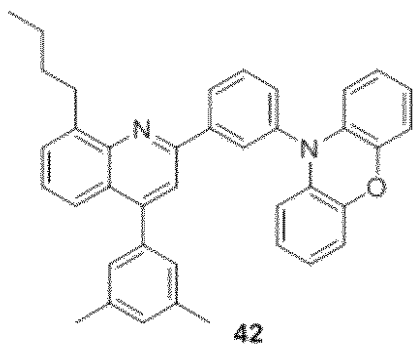
【化 5 9】



20

41

【化 6 0】

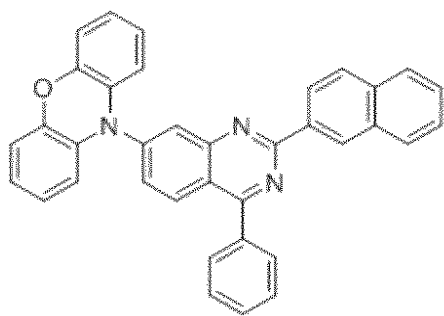


30

42

40

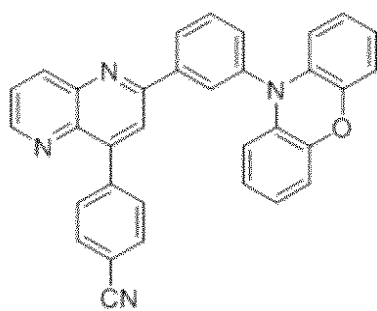
## 【化 6 1】



43

10

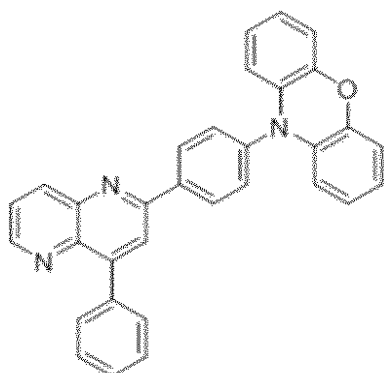
## 【化 6 2】



44

20

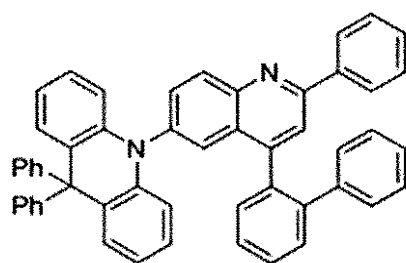
## 【化 6 3】



45

30

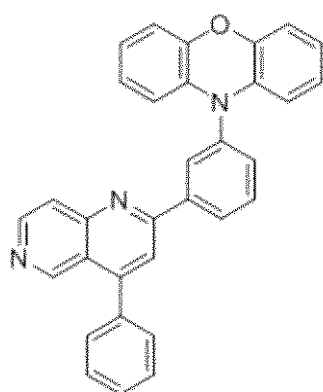
## 【化 6 4】



46

40

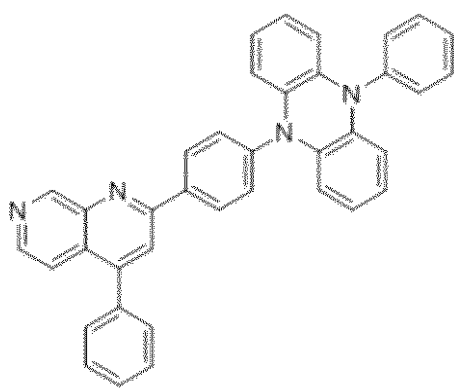
## 【化 6 5】



47

10

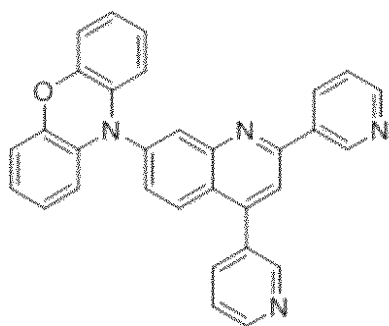
## 【化 6 6】



48

20

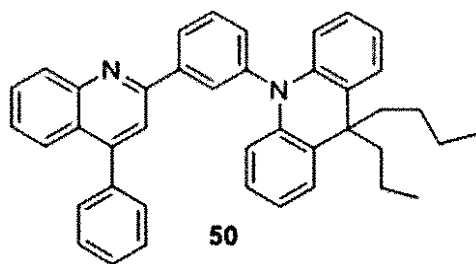
## 【化 6 7】



49

30

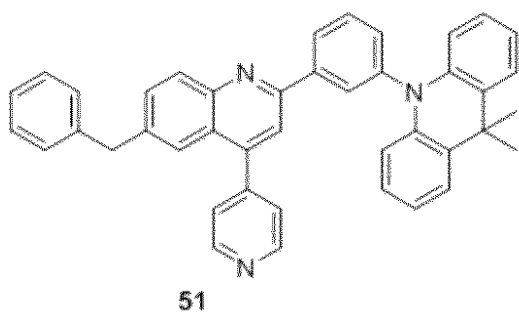
## 【化 6 8】



50

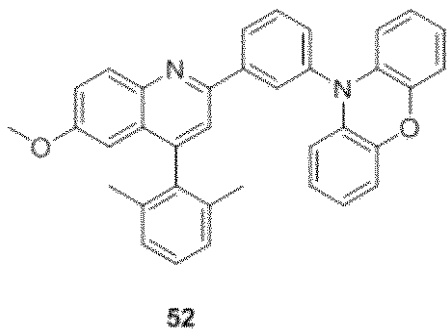
40

## 【化 6 9】



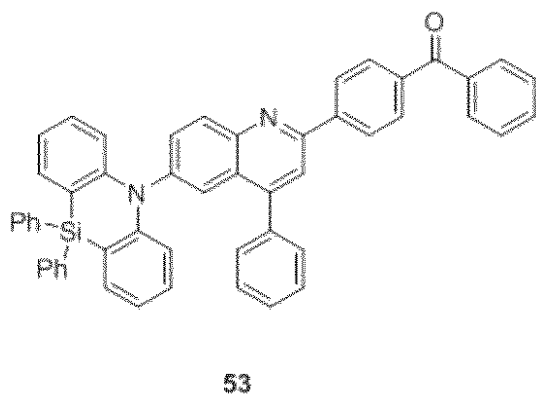
10

## 【化 7 0】



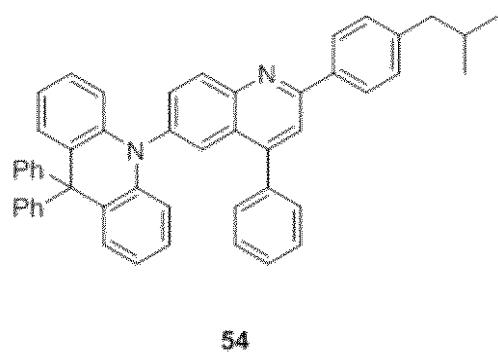
20

## 【化 7 1】



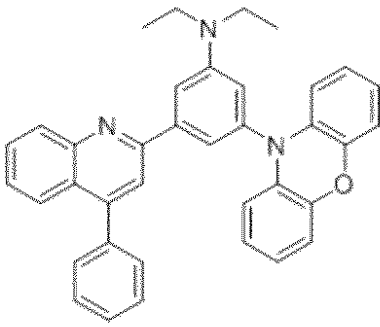
30

## 【化 7 2】



40

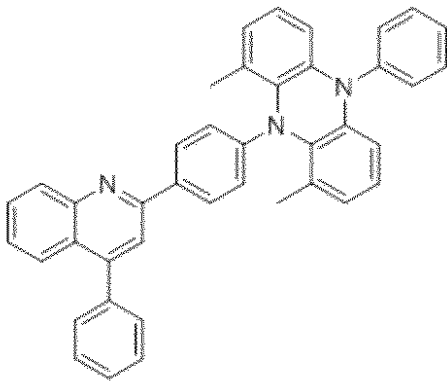
## 【化 7 3】



10

55

## 【化 7 4】



20

56

(発光材および電子デバイス)

## 【0132】

30

本明細書に記載のその態様を含む、本明細書に記載される式1の窒素含有芳香族化合物は、電子デバイスにおいて活性成分(active component)として使用することができる。

## 【0133】

本開示による電子デバイスは、アノードとカソードとの間に挿入された1またはそれよりも多い有機層を含んで成ってもよい。1またはそれよりも多い有機層は、それぞれ、電子輸送層、発光層、正孔輸送層、正孔注入層、絶縁層、およびそれらの組み合わせから選択される1またはそれよりも多い層を含んで成るか、またはそれらから成ってもよい。これらの層の少なくとも1つは、本明細書に記載のいずれかの態様を含む、本明細書に記載される式1の窒素含有芳香族誘導体を含む。

## 【0134】

40

層は、(i)式1の化合物でドーピングされた単一層、または(ii)少なくとも1つの層が式1の化合物でドーピングされ得る複数の層、または(iii)少なくとも1つの層が別個のドーパントでドーピングされた式1の化合物を含んで成る層であり、または(iv)少なくとも1つの層が完全に式1の化合物を含んで成り得る複数の層によって構成され得る。特定の層が、主に式1の化合物を含んで成り、また少なくとも1つのドーパントで層がドーピングされている状況もまた、ホスト-ゲスト(host-guest)材を指し得る。この状況では、式1の化合物はゲスト材であり、またホストはホスト材である。

## 【0135】

電子デバイスは、有機エレクトロルミネッセンス・デバイス(OLED)、有機電界効果トランジスタ(organic field-effect transistors、O-FET)、有機薄膜トランジ

50

スタ (organic thin-film transistors、O - T F T)、有機発光トランジスタ (organic light-emitting transistors、O - L E T)、有機集積回路 (organic integrated circuits、O - I C)、有機太陽電池 (organic solar cells、O - S C)、有機電界クエンチ・デバイス (organic field-quench devices、O - F Q D)、発光電気化学セル (light-emitting electrochemical cells、L E C)、有機光受容体デバイス (organic photoreceptors) および有機レーザー・ダイオード (organic laser diodes、O - レーザー)。一態様では、電子デバイスは有機エレクトロルミネッセンス・デバイスである。デバイスは、蛍光 O L E D であってもよい。

#### 【0136】

活性成分は、一般にアノードとカソードとの間に導入され、例えば電荷注入、電荷輸送または電荷ブロッキング (または阻止、blocking) 材、特に発光材およびマトリックス材に導入される。本明細書に記載の態様を含む本明細書に記載される式 1 の窒素含有芳香族化合物は、これらの機能、特に、有機エレクトロルミネッセンス・デバイスにおける T A D F または T T A 発光材として特に優れた特性を示すことができる (詳細は下記記載される)。したがって、有機エレクトロルミネッセンス・デバイスは、本発明の特定の態様である。

#### 【0137】

前記有機エレクトロルミネッセンス・デバイスは、カソード、アノードおよび少なくとも一つの発光層 (発光性 (emissive) 層ともいう) を含んで成ることができる。式 1 の窒素含有芳香族化合物は、発光層中に発光化合物として供することができる。式 1 の窒素含有芳香族化合物は、発光層における発光化合物のホスト材として供することもできる。

#### 【0138】

有機電子デバイスは、それぞれの場合において、1 またはそれよりも多い正孔注入層、正孔輸送層、正孔ブロッキング層、電子輸送層、電子注入層、電子ブロッキング層、エキシトン・ブロッキング層、電荷発生層および / または有機もしくは無機の p / n 接合などから選択される、さらなる層を含んで成り得る。

#### 【0139】

任意の中間層は、例えば、2 つの発光層の間に導入されるか、または他の層の間に導入されるエキシトン・ブロッキング機能を供するために加えられてもよい。蛍光 O L E D は、少なくとも 1 つの発光層が、式 1 の少なくとも 1 つの窒素含有芳香族化合物を含んで成る、1 またはそれよりも多い発光層を含んで成り得る。複数の発光層が存在する場合、これらは合計で 380 nm ~ 750 nm の複数の発光極大 (emission maxima) を有することができ、全体的に白色発光をもたらす (すなわち、蛍光また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用いられる)。例えば W O 0 5 / 0 1 1 0 1 3 に従って、3 つの層が青色、緑色および橙色または赤色発光を示す 3 層系が供されてもよい。

#### 【0140】

一態様では、電子デバイスは、発光層中に発光化合物として、式 1 の少なくとも 1 つの窒素含有芳香族化合物を含んで成る。デバイスにおける 1 またはそれよりも多い層の各々は、1 またはそれよりも多いマトリックス材を含んで成り得る。式 1 の窒素含有芳香族化合物とマトリックス材との混合物は、エミッター (または発光体、emitter) およびマトリックス材を全体として含んで成る混合物に基づいて、1 ~ 99 体積 %、2 ~ 90 体積 %、3 ~ 40 体積 %、または 5 ~ 15 体積 % の金属錯体を含んで成り得る。これに対応して、混合物は、エミッターおよびマトリックス材を全体として含んで成る混合物に基づいて、99 ~ 1 体積 %、98 ~ 10 体積 %、97 ~ 60 体積 %、または 95 ~ 85 体積 % のマトリックス材を含んで成り得る。

#### 【0141】

適切なホスト材は、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を含んで成り得、例えば W O 0 4 / 0 1 3 0 8 0、W O 0 4 / 0 9 3 2 0 7 もしくは W O 0 6 / 0 0 5 6 2 7 に従う、トリアリールアミン、カルバゾール誘導体、例えば C B P (N, N - ビスカルバゾリルピフェニル)、m C B P、または W O 0 5 / 0 3 9 2 4 6、U S 2 0

10

20

30

40

50

05/0069729、JP2004/288381、EP1205527もしくはWO08/086851に開示されているカルバゾール誘導体、WO09/080799に開示されているポリ-CBPまたはポリ-CBP-フルオレン、JP2004288632で開示されるポリフルオレン誘導体またはポリビニルアレーン誘導体、例えばポリ(p-フェニレンビニレン)、例えばWO07/063754もしくはWO08/056746に従うインドロカルバゾール誘導体、例えばEP1617710、EP1617711、EP1731584、JP2005/347160に従うアザカルバゾール、例えばWO07/137725に従うパイポーラ・ホスト材、例えばWO05/111172に従うシラン、例えばWO06/117052に従うアゾボロールまたはボロン酸エステル、例えばWO07/063754もしくはWO08/0567に従うトリアジン誘導体または、例えばEP652273もしくはWO09/062578に従う亜鉛錯体である。式1の窒素含有芳香族化合物はまた、ホスト材として好適であり得る。一般的に、有機エレクトロルミネッセンス・デバイスの蛍光または燐光のエミッターのための先行技術に従って使用されるすべてのホスト材も、本発明の化合物に使用することができる。これらのマトリックス材の混合物も使用することができる。

10

#### 【0142】

エレクトロルミネッセンス・デバイスは、別個の正孔輸送層を含んで成り得るか、または正孔輸送層における正孔輸送材として、発光層に用いられる化合物と同一または類似の窒素含有芳香族化合物を含んで成り得る。

20

#### 【0143】

本明細書に記載の態様を含む、式1の窒素含有芳香族化合物は、発光層における発光化合物のホスト材として使用してもよい。

#### 【0144】

エレクトロルミネッセンス・デバイスは、ホスト材と、発光層中に少なくとも2つの蛍光エミッターとを含んで成り得、2つの蛍光エミッターの少なくとも1つは、式1の窒素含有芳香族化合物である。より短い波長で発光する蛍光エミッターは、ここではより長い波長で発光するホストとして働く。式1の窒素含有芳香族化合物は、短波長で発光する化合物であってもよく、長波長で発光する化合物であってもよい。同様に、両方の蛍光化合物は、式1の窒素含有芳香族化合物であってもよい。

30

#### 【0145】

本明細書に記載の式1の窒素含有芳香族化合物は、正孔ブロッキング層中の正孔ブロッキング材として、および/または電子輸送層中の電子輸送材として使用し得る。発光層は、蛍光性または燐光性であってもよい。

#### 【0146】

有機エレクトロルミネッセンス・デバイスの1またはそれよりも多い層の各々は、昇華(sublimation)プロセスによって、または有機蒸気ジェット印刷(vapour jet printing)のような有機気相堆積(vapour phase deposition)プロセスによって調製することができる(MS Arnoldら、Appl.Phys.Lett.2008、vol.92、pp 053301)。有機エレクトロルミネッセンス・デバイスにおける1またはそれよりも多い層の各々は、例えば、スピンコーティング、または所望の印刷プロセス(例えば、スクリーン印刷、フレキソ印刷、オフセット印刷、LITI(光誘起熱転写、熱転写印刷)、インクジェット印刷またはノズル印刷などの印刷プロセス)によって、溶液から製造され得る。1またはそれよりも多い層が溶液から適用され、また1またはそれよりも多い他の層が蒸着によって適用される、ハイブリッド・プロセスも可能である。有機エレクトロルミネッセンス・デバイスにおける1またはそれよりも多い層の各々は、溶液プロセスまたは真空における蒸発プロセスによって、またはそれらを組合せて調製することができる。

40

#### 【0147】

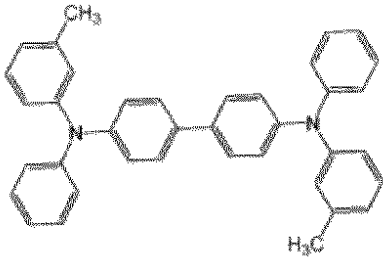
いくつかの態様では、本明細書に記載の式1の窒素含有芳香族化合物は、正孔注入材、正孔輸送化合物(または材料)、電子輸送化合物、および/または追加の発光化合物の1つまたは複数(以下記載の例が含まれ得る)と組合せて使用することができる。

50

【 0 1 4 8 】

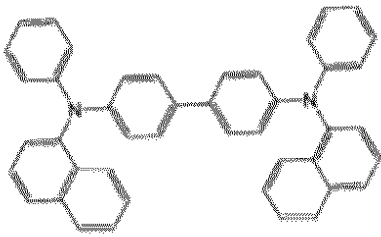
例示的な正孔輸送材 / 化合物には、以下が含まれる。

【 化 7 5 】



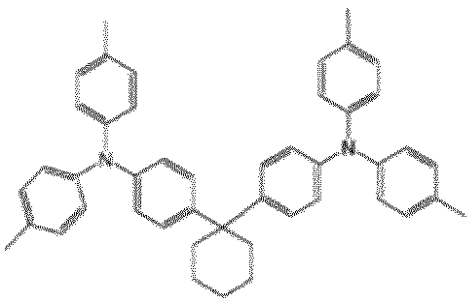
10

【 化 7 6 】



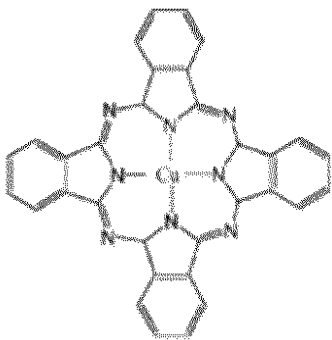
20

【 化 7 7 】



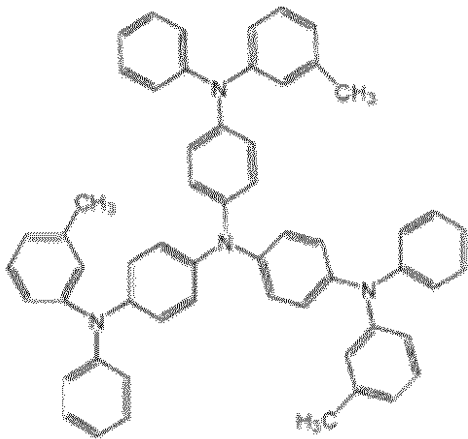
30

【 化 7 8 】



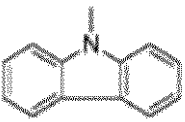
40

【化 7 9】



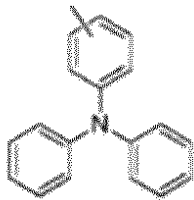
10

【化 8 0】

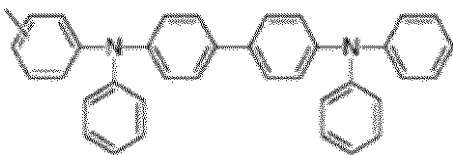


20

【化 8 1】

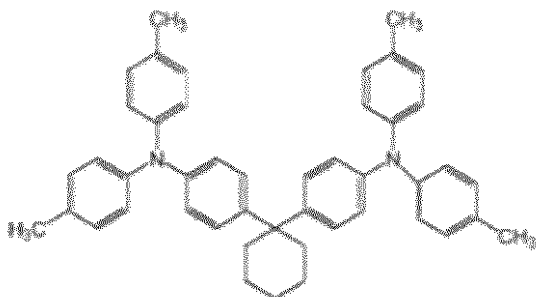


【化 8 2】



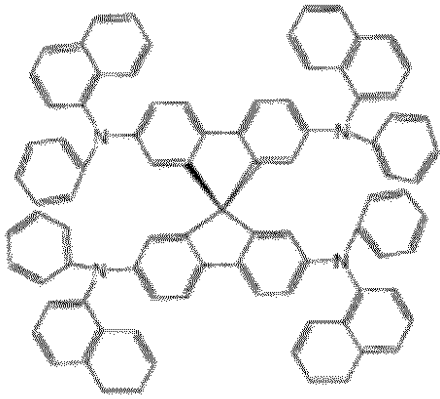
30

【化 8 3】



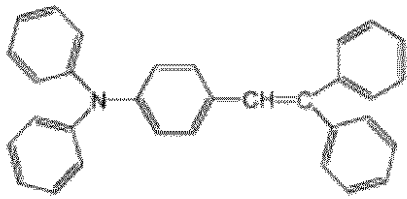
40

【化 8 4】



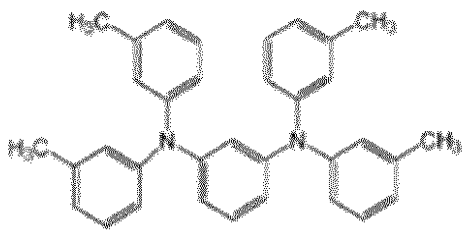
10

【化 8 5】



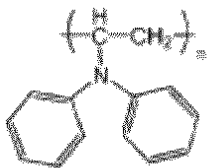
20

【化 8 6】



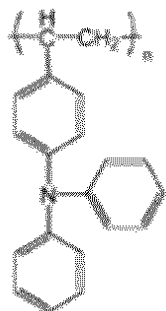
30

【化 8 7】

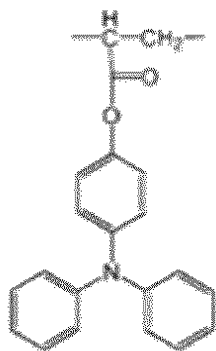


40

【化 8 8】

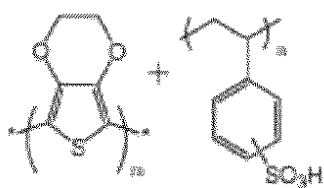


## 【化 8 9】



10

## 【化 9 0】

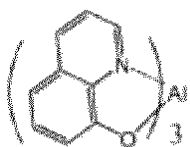


## 【 0 1 4 9】

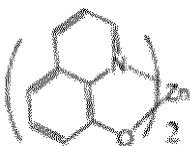
例示的な電子輸送材 / 化合物には、以下が含まれる。

20

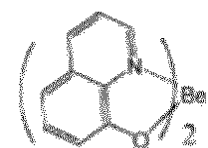
## 【化 9 1】



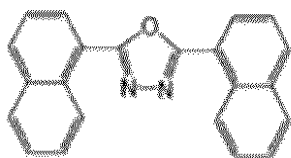
## 【化 9 2】



## 【化 9 3】

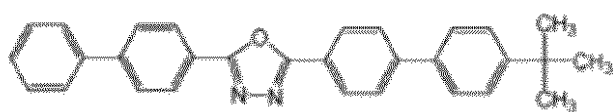


## 【化 9 4】

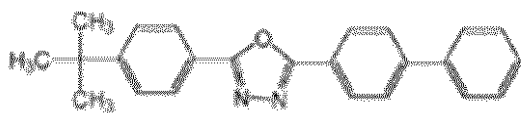


40

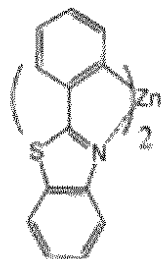
## 【化 9 5】



【化 9 6】

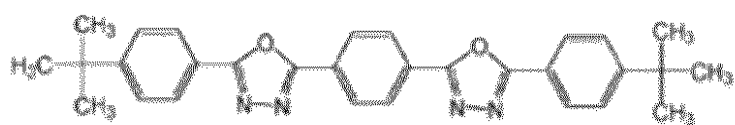


【化 9 7】

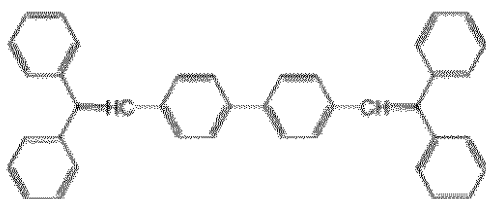


10

【化 9 8】

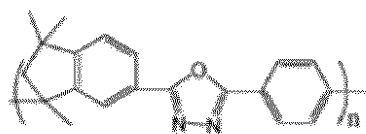


【化 9 9】



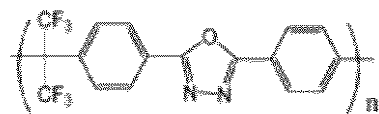
20

【化 1 0 0】

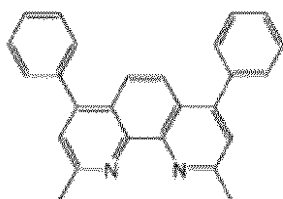


30

【化 1 0 1】

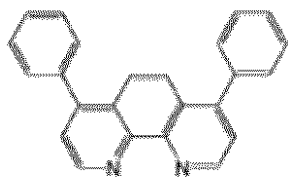


【化 1 0 2】

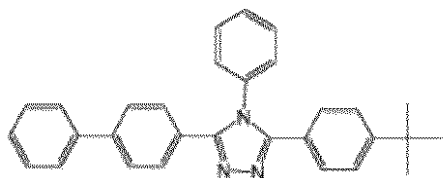


40

【化 1 0 3】

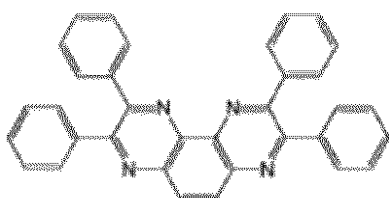


【化 1 0 4】



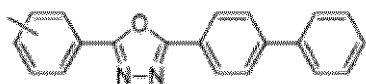
10

【化 1 0 5】

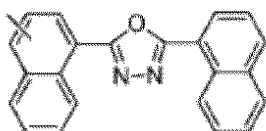


20

【化 1 0 6】

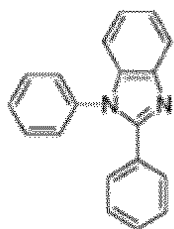


【化 1 0 7】



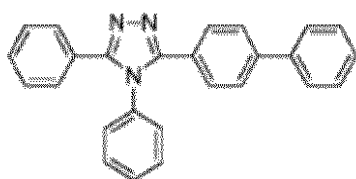
30

【化 1 0 8】

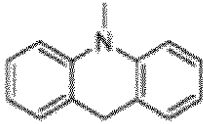


40

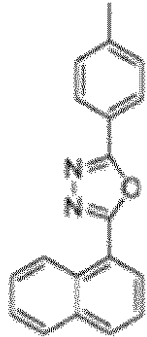
【化 1 0 9】



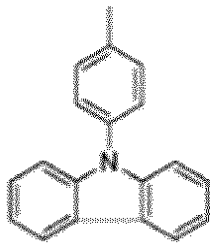
## 【化 1 1 0】



## 【化 1 1 1】



## 【化 1 1 2】



## 【0 1 5 0】

アノードは、典型的には、大きな仕事関数を有する材料から選択され、その例には、金、白金、ニッケル、パラジウム、コバルト、セレン、バナジウムおよびそれらのアロイなどの金属、酸化スズ、酸化亜鉛、酸化インジウム亜鉛（IZO）および酸化インジウムスズ（ITO）などの金属酸化物、PEDOT：PSS、ポリアニリン、ポリピロールおよびポリチオフェンなどの導電性高分子ならびにそれらの誘導体が含まれてもよい。これらの化合物は単独で用いてもよく、2種以上を組合せてもよい。有機エレクトロルミネッセンス・デバイスのアノードのための基板は、金属またはセラミックなどの適切な材料から作られた不透明基板、またはガラス、石英、プラスチックなどの適切な透明材から作られた透明基板から供され、および選択されてもよい。

## 【0 1 5 1】

カソードは、典型的には、仕事関数がより小さい、通常は4.0 eV未満の材料から選択され、その例としては、ナトリウム、マグネシウム、カルシウム、リチウム、カリウム、アルミニウム、インジウム、銀、鉛、クロムおよびそれらのアロイのような金属、または酸化物を含んでもよい。

## 【0 1 5 2】

電流遮断を避けるために、いずれかの電極に隣接して電荷ブロッキング層を設けることができる。電荷ブロッキング材は、無機化合物であってもよく、例として、酸化アルミニウム、フッ化リチウム、酸化リチウム、酸化セシウム、酸化マグネシウム、フッ化マグネシウム、酸化カルシウム、フッ化カルシウム、窒化アルミニウム、酸化チタン、酸化ケイ素、窒化ケイ素、窒化ホウ素、酸化バナジウムが含まれてもよい。

## 【0 1 5 3】

電子デバイスにおける1またはそれよりも多い有機層は、  
本出願の蛍光材でドーブされた単一層、  
少なくとも1つの層が本出願の蛍光材でドーブされ得る複数の層、または  
少なくとも1つの層が本出願の蛍光材で全体が含まんでなり得る複数の層  
によって構成されてもよい。

10

20

30

40

50

## 【 0 1 5 4 】

デバイス構造のさらなる例は、以下のように供されてもよい。

アノード / 発光層 / カソード、

アノード / 電子輸送層 / カソード、

アノード / 正孔輸送層 / 発光層 / 電子輸送層 / カソード、

アノード / 正孔注入層 / 正孔輸送層 / 発光層 / 電子輸送層 / カソード、

アノード / 正孔輸送層 / 発光層 / 電子輸送層 / 電子注入層 / カソード、

アノード / 正孔注入層 / 発光層 / 電子輸送層 / 電子注入層 / カソード、

アノード / 電荷ブロッキング層 / 正孔輸送層 / 発光層 / 電子輸送層 / カソード、

アノード / 正孔輸送層 / 発光層 / 電子輸送層 / 電荷ブロッキング層 / カソード、

アノード / 無機半導体 ( inorganic semiconductor ) / 電荷ブロッキング層 / 正孔輸送層 / 発光層 / 電荷ブロッキング層 / カソード、

アノード / 電荷ブロッキング層 / 正孔輸送層 / 発光層 / 電子輸送層 / 電荷ブロッキング層 / カソード、

アノード / 電荷ブロッキング層 / 正孔注入層 / 正孔輸送層 / 発光層 / 電子輸送層 / 電子注入層 / カソード、または

アノード / 電荷ブロッキング層 / 正孔注入層 / 正孔輸送層 / 発光層 / 電子輸送層 / 電子注入層 / 電荷ブロッキング層 / カソード。

( ポリマーおよび重合可能な剤 )

## 【 0 1 5 5 】

上記または本明細書に記載の式 1 の化合物またはその任意の態様を含んで成るポリマーが供され得る。式 1 の化合物をポリマーに組み込んでもよい。式 1 の化合物は、ポリマーに共有結合していてもよい。式 1 の化合物は、重合性モノマーとして、または重合性モノマーにおけるペンダント基として使用されてもよい。式 1 の化合物は、プレポリマーとして、例えばプレポリマー組成物において使用されてもよい。ポリマーまたはポリマー材は、他の材料と共に使用されてもよい。ポリマーまたはポリマー材は、本明細書に記載のエレクトロルミネッセンス・デバイスの 1 またはそれよりも多い層に供されてもよい。

( 造影剤および増感剤 )

## 【 0 1 5 6 】

上記または本明細書に記載の式 1 の化合物またはその任意の態様から選択される造影剤が供され得る。造影剤を含んで成る医薬組成物を供し得る。造影剤は、式 1 の化合物の薬学的に許容される塩を含んで成り得る。造影剤は、診断方法において使用され得る。

## 【 0 1 5 7 】

上記または本明細書に記載の式 1 の化合物またはその任意の態様を含んで成る増感材が供され得る。増感材は、治療用または診断用のものであってもよい。増感材を含んで成る医薬組成物を供し得る。増感材は、式 1 の化合物の薬学的に許容される塩を含んで成り得る。第 8 態様では、上記または本明細書に記載の式 1 の化合物またはその任意の態様を含んで成るポリマーが供される。式 1 の化合物をポリマーに組み込んでもよい。式 1 の化合物は、ポリマーに共有結合していてもよい。式 1 の化合物は、重合性モノマーとして、または重合性モノマー中のペンダント基として使用されてもよい。

## 【 0 1 5 8 】

他の態様において、上記または本明細書に記載の式 1 の化合物またはその任意の態様を含んで成る使用、方法またはプロセスが供され得ることが理解される。

( フォト - ダイナミック・セラピー ( P D T ) )

## 【 0 1 5 9 】

常套的なフォト - ダイナミック・セラピー ( または光力学療法、Photo-Dynamic Therapy、P D T ) は、光増感剤 ( または感光剤、photosensitive agent ) を適用した後、光増感剤を活性化する選択的光源に制御された暴露を伴う 2 段階プロセスである。光増感剤は、処理される必要がある身体の領域に、内面または外面に塗布することができる。P D T は皮膚癌の治療に使用することができ、皮膚癌には、基底細胞癌 ( B C C ) 、化学線 ( 太

10

20

30

40

50

陽)角化症(AK)およびボーエン病(その場の扁平上皮癌)が含まれる。PDTは、非メラノーマ皮膚癌、尋常性座瘡、光催促、および甲状腺炎を含む皮膚病に使用し得る。PDTはまた、乾癬、扁平苔癬、強皮苔癬、強皮症、皮膚T細胞リンパ腫、円形脱毛症、尋常性疣贅、ダリアー病および白癬感染症の治療にも使用し得る。

#### 【0160】

光増感剤は、光源によって活性化された後にのみ作用する。治療される身体の一部に応じて、光増感剤は、静脈を介して血流へと入れられるか、または皮膚にのせる(または塗布する、put)。一定時間にわたって、光増感剤が吸収される。この時間量は、使用される光増感剤に依存して、約3時間から数日間まで及び得る。次に、治療すべき領域に光を照射する。この光は光増感剤を酸素と反応させて反応性の高い中間体を形成する。これらは短い半減期(1秒の数分の1)を有し、したがって非常に局在化した組織損傷効果を有する。いくつかの光増感剤が現在入手可能である。例えば、ポルフィマーナトリウム(Photofrin(登録商標))、アミノレプリン酸(ALAまたはLevulan(登録商標))およびALAのメチルエステル(Metvixia(登録商標)クリーム)である。

10

#### 【0161】

PDTに必要な常套的な処置は、患者が病院に行き、光増感剤、例えばクリームまたは注射剤を投与されることを伴う。投与されると、患者は、適切な波長の光が光増感剤に供給される前に、数時間から数日待たなければならない。光源として、レーザーまたはフィルター付きアークランプが使用されているが、これらは扱いにくく、不便で、患者にとって高価であり、この技術は病院での使用に限定されている。

20

#### 【0162】

一態様では、本明細書に記載のエレクトロルミネッセンス・デバイスは、治療および/または美容整形(cosmetic)治療に使用するための光源を含んで成り、これらは使用中に治療すべき領域を覆い、光を放出して光増感剤を活性化し、治療を開始する。一態様では、エレクトロルミネッセンス・デバイスは、使用時に患者が自由に動くことができるように、十分にポータブルである。これは、患者に便利さと入院の回避を供する。露光時間を長くすることができ、それは低い光レベルを使用できることを意味する。より低い光レベルの結果として、治療に関連する(すなわち、高照度によって引き起こされる)痛みが低減される。エレクトロルミネッセンス・デバイスは軽量であり、ポータブルな低電圧電源で電力を供給することができる。少なくともいくつかの態様によれば、本明細書に記載の化合物は、有効な薄膜携帯デバイスを形成するための適切な処理に関して、さらなる利点を供することができる。

30

#### 【0163】

一態様では、エレクトロルミネッセンス・デバイスは、フォト・ダイナミック・セラピーまたは美容整形用途によって、ヒトまたは動物の治療に使用される。一態様では、デバイスは、約20%より大きい、約19%より大きい、約18%より大きい、約17%より大きい、約16%より大きい、約15%より大きい、約14%より大きい、約13%より大きい、約12%より大きい、約11%より大きい、約10%より大きい、約9.0%より大きい、約8.0%より大きい、約7.0%より大きい、約6.0%より大きい、約5.0%より大きい、約4.0%より大きい、約3.0%より大きい外部量子効率を含んで成る。特定の態様では、デバイスは、約5%より大きい外部量子効率を含んで成る。

40

#### 【0164】

一態様では、エレクトロルミネッセンス・デバイスは、1またはそれよりも多い透明層を含んで成り得る。例えば、カソード、アノードおよび発光層、正孔注入層、正孔輸送層、正孔ブロッキング層、電子輸送層、電子注入層、電子ブロッキング層、エキシトン・ブロッキング層、電荷発生層および/または有機もしくは無機のp/n接合の1またはそれよりも多くは、透明であってもよい。1またはそれよりも多い層の透明度(または透過率、transparency)は、約60%より大きく、約65%より大きく、約70%より大きく、約75%より大きく、約80%より大きく、約85%より大きく、約90%より大きく、

50

および約 99% よりも大きい。特定の一態様では、透明度は 80% より大きい。1 またはそれよりも多い層の透明度は、約 60 ~ 99%、約 65 ~ 95%、約 70 ~ 90%、または約 75 ~ 85% であってもよい。

#### 【0165】

一態様では、エレクトロルミネッセンス・デバイスはフレキシブル（または可撓性、もしくは柔軟性のある、flexible）である。例えば、デバイスは、それが適用される身体部分に形づくることができるように、様々な異なる構成に形成し得る。特定の例では、エレクトロルミネッセンス・デバイスは、顔面の癌治療のために、ストレッチ・バンデージ（例えば、VELCRO（登録商標））に取り付けられてもよいし、フェイスマスクの内側に設置されてもよい。

10

（窒素含有芳香族化合物の合成）

#### 【0166】

式 1 の化合物は、様々なプロセスによって調製することができるが、以下に記載するプロセスが特に適切であることが判明している。

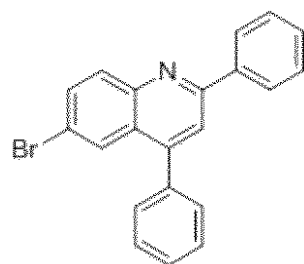
#### 【実施例】

#### 【0167】

（実施例 1 式 1 の窒素含有芳香族化合物の合成）

10 - (2, 4 - ジフェニルキノリン - 6 - イル) - 10H - フェノキサジンの合成

#### 【化 113】



20

#### 6 - ブロモ - 2, 4 - ジフェニルキノリン

一般的な、前記した手順（Chem. Eur. J. 2009, 15, 6332-6334）に続き、トルエン（10 mL）中の、フェニルアセチレン（1.65 mL、15 mmol）、4 - ブロモアニリン（1.81 g、10.5 mmol）、ベンズアルデヒド（1.02 mL、10.0 mmol）および  $\text{FeCl}_3$ （160 mg、1.0 mmol）の混合物を 100 で 24 時間加熱した。混合物を室温に冷却し、次いで EtOAc /  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  / ガソリン（5 : 20 : 75）で洗浄して、シリカゲルを通して濾過した。濾液を濃縮して固体残渣を得た。残渣をシリカゲル・カラムクロマトグラフィー（EtOAc / ガソリン 3 : 97 次いで 4 : 96）で精製して、6 - ブロモ - 2, 4 - ジフェニルキノリン（1.75 g、48%）を無色固体として得た。この物質の一部を再結晶（トルエン / ガソリン）によって、さらに精製して、無色の結晶を得た。

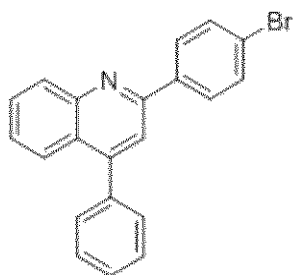
30

$^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ , 400 MHz)  $\delta$  7.45 - 7.61 (m, 8H)、7.80 (dd,  $J$  2.2, 9.0 Hz, 1H)、7.84 (s, 1H)、8.04 (d,  $J$  2.2 Hz, 1H)、8.11 (d,  $J$  9.0 Hz, 1H)、8.16 - 8.21 (m, 2H)、

40

$^{13}\text{C}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ , 100 MHz)  $\delta$  120.03、120.43、126.98、127.54、127.78、128.72、128.82、128.90、129.43、129.63、131.81、133.02、137.68、139.14、147.38、148.40、157.18。

## 【化 1 1 4】



## 2 - ( 4 - ブロモフェニル ) - 4 - フェニルキノリン

10

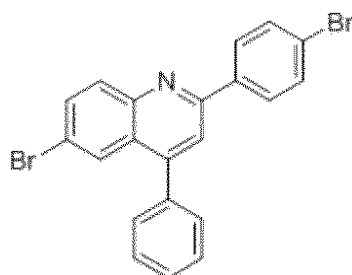
トルエン ( 1 5 m L ) 中の、フェニルアセチレン ( 2 . 4 7 m L 、 2 2 . 5 m m o l ) 、  
 アニリン ( 1 . 4 4 m L 、 1 5 . 8 m m o l ) 、 4 - ブロモベンズアルデヒド ( 2 . 7 8  
 g 、 1 5 . 0 m m o l ) および  $\text{FeCl}_3$  ( 2 4 0 m g 、 1 . 5 0 m m o l ) の混合物を  
 1 0 0 で 2 4 時間加熱した。混合物を室温に冷却し、次いで  $\text{EtOAc} / \text{CH}_2\text{Cl}_2$   
 / ガソリン ( 5 : 2 0 : 7 5 ) で洗浄して、シリカゲルを通して濾過した。濾液を濃縮し  
 て固体残渣を得た。残渣をシリカゲル・カラムクロマトグラフィー (  $\text{EtOAc} /$  ガソリ  
 ン 3 : 9 7 次いで 4 : 9 6 ) で精製して、2 - ( 4 - ブロモフェニル ) - 4 - フェニル  
 キノリン ( 1 . 5 0 g 、 2 8 % ) を無色固体として得た。この物質の一部分を再結晶 ( ト  
 ルエン / ガソリン ) によって、さらに精製して、無色の結晶を得た。

$^1\text{H NMR}$  (  $\text{CDCl}_3$  、 4 0 0 M H z )  $\delta$  7 . 4 7 - 7 . 5 8 ( m 、 6 H ) 、 7 .  
 6 4 - 7 . 6 8 ( m 、 2 H ) 、 7 . 7 5 ( d d d 、  $J$  1 . 4 、 6 . 8 8 . 4 H z 、 1 H ) 、  
 7 . 7 8 ( s 、 1 H ) 、 7 . 9 1 ( d d 、  $J$  0 . 9 、 8 . 4 H z 、 1 H ) 、 8 . 0 7  
 - 8 . 1 2 ( m 、 2 H ) 、 8 . 2 4 ( d d 、  $J$  0 . 5 、 8 . 5 H z 、 1 H ) 、

20

$^{13}\text{C NMR}$  (  $\text{CDCl}_3$  、 1 0 0 M H z )  $\delta$  1 1 8 . 8 4 、 1 2 3 . 9 6 、 1 2 5  
 . 6 8 、 1 2 5 . 8 3 、 1 2 6 . 5 7 、 1 2 8 . 5 0 、 1 2 8 . 6 2 、 1 2 9 . 1 0 、 1  
 2 9 . 5 2 、 1 2 9 . 7 2 、 1 3 0 . 0 4 、 1 3 1 . 9 5 、 1 3 8 . 2 1 、 1 3 8 . 4 2  
 、 1 4 8 . 7 1 、 1 4 9 . 4 6 、 1 5 5 . 5 4 。

## 【化 1 1 5】



30

## 6 - ブロモ - 2 - ( 4 - ブロモフェニル ) - 4 - フェニルキノリン

トルエン ( 1 5 m L ) 中の、フェニルアセチレン ( 2 . 4 7 m L 、 2 2 . 5 m m o l ) 、  
 4 - ブロモアニリン ( 2 . 7 1 g 、 1 5 . 8 m m o l ) 、 4 - ブロモベンズアルデヒド ( 2 . 7 8 g 、 1 5 . 0 m m o l ) および  $\text{FeCl}_3$  ( 2 4 0 m g 、 1 . 5 0 m m o l ) の  
 混合物を 1 0 0 で 2 4 時間加熱した。混合物を室温に冷却し、次いで  $\text{EtOAc} / \text{CH}_2\text{Cl}_2$   
 / ガソリン ( 8 : 3 0 : 6 2 ) で洗浄して、シリカゲルを通して濾過した。濾液  
 を濃縮して固体残渣を得た。残渣を再結晶化 ( トルエン / ガソリン ) して、6 - ブロモ -  
 2 - ( 4 - ブロモフェニル ) - 4 - フェニルキノリン ( 3 . 5 g 、 5 3 % ) を無色結晶と  
 して得た。

40

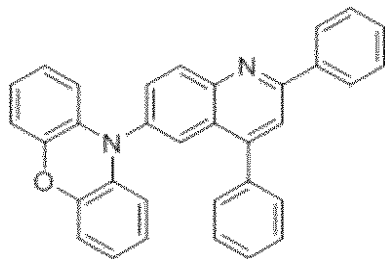
$^1\text{H NMR}$  (  $\text{CDCl}_3$  、 4 0 0 M H z )  $\delta$  7 . 5 0 - 7 . 6 1 ( m 、 5 H ) 、 7 .  
 6 3 - 7 . 6 7 ( m 、 2 H ) 、 7 . 7 9 ( s 、 1 H ) 、 7 . 8 0 ( d d 、  $J$  2 . 2 、 9 .  
 0 H z 、 1 H ) 、 8 . 0 3 ( d 、  $J$  2 . 1 H z 、 1 H ) 、 8 . 0 5 - 8 . 1 0 ( m 、 3 H ) 、

50

$^{13}\text{C NMR}$  (  $\text{CDCl}_3$  、 1 0 0 M H z )  $\delta$  1 1 9 . 5 0 、 1 2 0 . 7 0 、 1 2 4

. 27、127.03、127.81、128.81、128.86、129.03、129.39、131.76、132.02、133.20、137.51、137.96、147.33、148.61、155.83。

【化116】



17

10

10-(2,4-ジフェニルキノリン-6-イル)-10H-フェノキサジン17  
トルエン(30mL)中の、6-ブromo-2,4-ジフェニルキノリン(910mg、2.53mmol)、10H-フェノキサジン(532mg、2.91mmol)およびNaO<sup>t</sup>Bu(340mg、3.54mmol)の混合物を脱気した(N<sub>2</sub>バブリング、15分)。トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0)(20mg、0.022mmol)および1,1'-ビス(ジフェニルホスフィノ)フェロセン(24mg、0.044mmol)を加え、混合物を加熱還流した(24時間)。混合物を室温に冷却し、次いでEtOAc/CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>/ガソリン(8:30:62)で洗浄して、シリカゲルを通して濾過した。濾液を濃縮して固体残渣を得た。残渣をシリカゲル・カラムクロマトグラフィー(EtOAc/ガソリン 3:97次いで4:96)によって精製して、10-(2,4-ジフェニルキノリン-6-イル)-10H-フェノキサジン17(1.01g、86%)を無色固体として得た。この物質の一部分を、第1に再結晶化(CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>/ガソリン)、第2に(管状炉)蒸留(210、10<sup>-6</sup>mb ar)によってさらに精製した(融点は173~178であった(DSC))。

20

<sup>1</sup>H NMR(CDCl<sub>3</sub>、400MHz) δ 5.96(dd、J 1.5、7.9Hz、2H)、6.60(dt、J 1.5、6.8Hz、2H)、6.66(dt、J 1.5、7.8Hz、2H)、6.71(dd、J 1.6、7.8Hz、2H)、7.47-7.60(m、8H)、7.68(dd、J 2.3、8.9Hz、1H)、7.90(s、1H)、7.95(d、J 2.2Hz、1H)、8.22-8.26(m、2H)、8.49(d、J 8.8Hz、1H)、

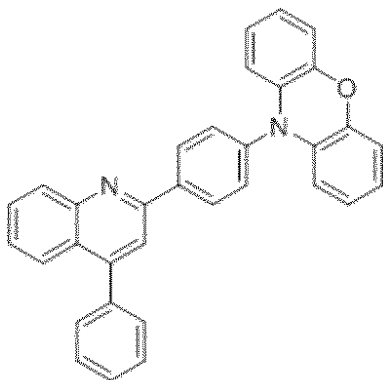
30

<sup>13</sup>C NMR(CDCl<sub>3</sub>、100MHz) δ 113.22、115.52、119.84、121.49、123.26、127.16、127.62、127.98、128.75、128.89、128.94、129.44、129.68、131.82、133.71、134.23、136.44、137.65、139.27、143.93、148.33、149.24、157.85、

HRMS(APCI)m/z 463.1801 C<sub>33</sub>H<sub>23</sub>ON<sub>2</sub>[M+H]<sup>+</sup>に  
は、463.1805が必要である。

40

## 【化 1 1 7】



18

10

10 - ( 4 - ( 4 - フェニルキノリン - 2 - イル ) フェニル ) - 10 H - フェノキサジン 18

トルエン ( 30 mL ) 中の、2 - ( 4 - ブロモフェニル ) - 4 - フェニルキノリン ( 830 mg、2.31 mmol )、10 H - フェノキサジン ( 485 mg、2.65 mmol ) および  $\text{NaO}^t\text{Bu}$  ( 310 mg、3.23 mmol ) の混合物を脱気した (  $\text{N}_2$  バブリング、15 分 )。トリス ( ジベンジリデンアセトン ) ジパラジウム ( 0 ) ( 21 mg、0.023 mmol ) および 1, 1' - ビス ( ジフェニルホスフィノ ) フェロセン ( 26 mg、0.046 mmol ) を加え、混合物を加熱還流した ( 24 時間 )。混合物を室温に冷却し、次いで EtOAc /  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  / ガソリン ( 8 : 30 : 62 ) で洗浄して、シリカゲルを通して濾過した。濾液を濃縮して固体残渣を得た。残渣をシリカゲル・カラムクロマトグラフィー ( EtOAc / ガソリン 2 : 98 次いで 3 : 97 ) によって精製して、10 - ( 4 - ( 4 - フェニルキノリン - 2 - イル ) フェニル ) - 10 H - フェノキサジン 18 ( 850 mg、80% ) を無色固体として得た。この物質の一部分を、第 1 に再結晶化 (  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  / ガソリン )、第 2 に ( 管状炉 ) 昇華 ( 220 °C、 $10^{-6}$  mBar ) により精製した ( 融点は 222 ~ 128 °C であった ( DSC ) )。

20

$^1\text{H}$  NMR (  $\text{CDCl}_3$ 、400 MHz )  $\delta$  6.05 ( d、J 7.8 Hz、2 H )、6.57 - 6.74 ( m、6 H )、7.49 - 7.63 ( m、8 H )、7.78 ( t、J 7.3 Hz、1 H )、7.88 ( s、1 H )、7.96 ( d、J 8.4 Hz、1 H )、8.29 ( d、J 8.4 Hz、1 H )、8.42 ( d、J 8.3 Hz、2 H )、

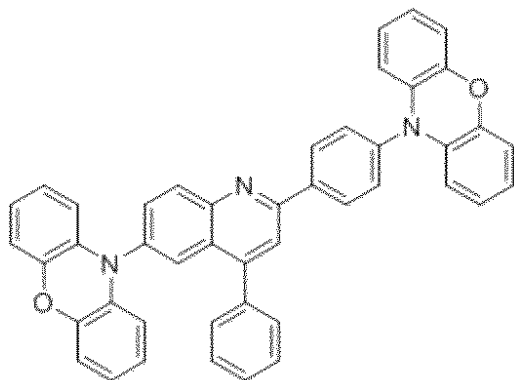
30

$^{13}\text{C}$  NMR (  $\text{CDCl}_3$ 、100 MHz )  $\delta$  113.36、115.46、119.31、121.40、123.25、125.72、125.88、126.66、128.54、128.65、129.54、129.76、130.15、130.30、131.26、134.21、138.22、139.89、140.00、143.95、148.83、149.55、155.90、

HRMS ( APCI )  $m/z$  462.1728  $\text{C}_{33}\text{H}_{22}\text{ON}_2$  [ M ]<sup>+</sup> には、462.1727 が必要である。

40

## 【化 1 1 8】



19

10

10 - (4 - (6 - (10H - フェノキサジン - 10 - イル) - 4 - フェニルキノリン - 2 - イル)フェニル) - 10H - フェノキサジン 19

トルエン (50 mL) 中の、6 - ブロモ - 2 - (4 - ブロモフェニル) - 4 - フェニルキノリン (1.40 g、3.21 mmol)、10H - フェノキサジン (1.35 g、7.39 mmol) および  $\text{NaO}^t\text{Bu}$  (860 mg、8.99 mmol) を脱気した ( $\text{N}_2$  バブリング、15 分)。トリス (ジベンジリデンアセトン) ジパラジウム (0) (29 mg、0.032 mmol) および 1, 1' - ビス (ジフェニルホスフィノ) フェロセン (36 mg、0.064 mmol) を加え、混合物を加熱還流した (24 時間)。混合物を室温に冷却し、次いで EtOAc /  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  (15 : 85) で洗浄し、シリカゲルを通して濾過した。濾液を濃縮して固体残渣を得た。残留物をシリカゲル・カラムクロマトグラフィー (EtOAc / ガソリン /  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  3 : 97 : 0、次いで 6 : 94 : 0、次いで 6 : 80 : 20、次いで 6 : 60 : 40) で精製して、10 - (4 - (6 - 10H - フェノキサジン - 10 - イル) - 4 - フェニルキノリン - 2 - イル)フェニル) - 10H - フェノキサジン 19 (900 mg、44%) を無色固体として得た。この物質の一部を、第 1 に再結晶化 (トルエン / ガソリン)、第 2 に (管状炉) 昇華 (285、 $10^{-6}$  mbar) によってさらに精製した (融点は 298 ~ 302 であった (DSC))。

20

30

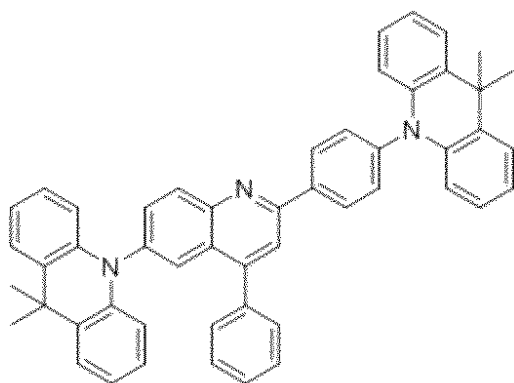
$^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ 、400 MHz)  $\delta$  5.97 (dd、J 1.5、7.9 Hz、2H)、6.06 (dd、J 1.6、7.8 Hz、2H)、6.57 - 6.74 (m、12H)、7.48 - 7.60 (m、7H)、7.72 (dd、J 2.3、8.9 Hz、1H)、7.94 (s、1H)、7.98 (d、J 2.2 Hz、1H)、8.42 - 8.47 (m、2H)、8.50 (d、J 8.9 Hz、1H)、

$^{13}\text{C}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ 、100 MHz)  $\delta$  113.22、113.34、115.52、115.59、119.83、121.48、121.58、123.26、123.28、127.28、128.10、128.90、128.96、129.44、130.35、131.41、132.12、133.75、134.16、134.18、136.80、137.47、139.52、140.34、143.95、148.36、149.61、156.90、

40

HRMS (APCI)  $m/z$  643.2255  $\text{C}_{45}\text{H}_{29}\text{O}_2\text{N}_3$   $[\text{M}]^{+}$  には、643.2254 が必要である。

## 【化 1 1 9】



20

10

10 - (4 - (6 - (9, 9 - ジメチルアクリジン - 10 (9H) - イル) - 4 - フェニルキノリン - 2 - イル)フェニル) - 9, 9 - ジメチル - 9, 10 - ジヒドロアクリジン 20

トルエン (30 mL) 中の、6 - ブロモ - 2 - (4 - ブロモフェニル) - 4 - フェニルキノリン (635 mg、1.46 mmol)、9, 9 - ジメチル - 9, 10 - ジヒドロアクリジン (670 mg、3.21 mmol) および  $\text{NaO}^t\text{Bu}$  (390 mg、4.08 mmol) の混合物を脱気した ( $\text{N}_2$  バブリング、15 分)。トリス (ジベンジリデンアセトン) ジパラジウム (0) (31 mg、0.015 mmol) および 1, 1' - ビス (ジフェニルホスフィノ) フェロセン (16 mg、0.03 mmol) を加え、混合物を加熱還流した (24 時間)。混合物を室温に冷却し、次いで  $\text{EtOAc} / \text{CH}_2\text{Cl}_2$  (15 : 85) で洗浄し、シリカゲルを通して濾過した。濾液を濃縮して固体残渣を得た。残渣をシリカゲル・カラムクロマトグラフィー ( $\text{EtOAc} / \text{ガソリン} / \text{CH}_2\text{Cl}_2$  5 : 95 : 0、次いで 5 : 85 : 10、次いで 5 : 80 : 15) で精製して、10 - (4 - (6 - (9, 9 - ジメチルアクリジン - 10 (9H) - イル) - 4 - フェニルキノリン - 2 - イル)フェニル) - 9, 9 - ジメチル - 9, 10 - ジヒドロアクリジン 20 (900 mg、89%) を無色固体として得た。この物質の一部分を、第 1 に再結晶化 ( $\text{EtOAc} / \text{ガソリン}$ )、第 2 に (管状炉) 昇華 (280 °C、 $10^{-6}$  mBar) によってさらに精製した (融点は 295 ~ 303 °C であった (DSC))。

20

30

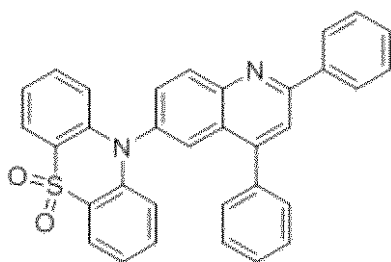
$^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ 、400 MHz)  $\delta$  1.72 (s、6H)、1.75 (s、6H)、6.32 (dd、 $J$  1.8、7.4 Hz、2H)、6.43 (dd、 $J$  1.8、8.1 Hz、2H)、6.93 - 7.05 (m、8H)、7.45 - 7.62 (m、11H)、7.71 (dd、 $J$  2.2、8.8 Hz、1H)、7.99 - 8.02 (m、2H)、8.48 - 8.52 (m、2H)、8.56 (d、 $J$  8.8 Hz、1H)、

$^{13}\text{C}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ 、100 MHz)  $\delta$  31.34、31.42、35.98、36.00、114.04、114.15、119.94、120.67、120.75、125.30、125.42、126.39、126.45、127.29、128.12、128.76、128.88、129.47、130.06、130.21、131.91、133.07、133.07、133.42、137.63、139.18、139.39、140.74、140.77、142.61、148.37、149.66、157.02、

40

HRMS (APCI)  $m/z$  695.3294  $\text{C}_{51}\text{H}_{41}\text{N}_3$   $[\text{M}]^+$  には、695.3295 が必要である。

## 【化 1 2 0】



21

10

10 - (2, 4 - ジフェニルキノリン - 6 - イル) - 10H - フェノチアジン 5, 5 - ジオキシド 21

トルエン (30 mL) 中の、6 - ブロモ - 2, 4 - ジフェニルキノリン (800 g、2.22 mmol)、10H - フェノチアジン (510 mg、2.55 mmol) および NaO<sup>t</sup>Bu (300 mg、3.11 mmol) の混合物を脱気した (N<sub>2</sub> バブリング、15 分)。トリス (ジベンジリデンアセトン) ジパラジウム (0) (20 mg、0.022 mmol) および 1, 1' - ビス (ジフェニルホスフィノ) フェロセン (25 mg、0.044 mmol) を加え、混合物を加熱還流した (24 時間)。混合物を室温に冷却し、次いで EtOAc / CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> / ガソリン (8 : 30 : 62) で洗浄して、シリカゲルを通して濾過した。濾液を濃縮して固体残渣を得た。残渣をシリカゲル・カラムクロマトグラフィー (EtOAc / ガソリン 3 : 97 次いで 4 : 96) によって精製して、推定される 10 - (2, 4 - ジフェニルキノリン - 6 - イル) - 10H - フェノチアジン (990 mg、93%) を無色固体として得た。

20

<sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>、400 MHz) δ 6.24 - 6.31 (m、2 H)、6.81 - 6.89 (m、4 H)、7.03 - 7.08 (m、2 H)、7.46 - 7.60 (m、8 H)、7.73 (dd、J 2.3、8.9 Hz、1 H)、7.89 (s、1 H)、7.96 (d、J 2.2 Hz、1 H)、8.21 - 8.25 (m、2 H)、8.48 (d、J 8.9 Hz、1 H)。

次に、CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> (30 mL) 中の、10 - (2, 4 - ジフェニルキノリン - 6 - イル) - 10H - フェノチアジン (900 mg、1.88 mmol) に 3 - クロロペルオキシ安息香酸 (970 mg、4.33 mmol) を添加した。3 時間後、混合物を飽和 NaHCO<sub>3</sub> 水溶液、次に飽和 NaCl 水溶液で洗浄し、次いで乾燥させ (MgSO<sub>4</sub>)、濾過し、次いで濃縮して残渣を得た。残渣を第 1 にシリカゲル・カラムクロマトグラフィー (EtOAc / ガソリン / トルエン 8 : 92 : 0、次いで 8 : 46 : 46、次いで 8 : 0 : 92) によって精製して、10 - (2, 4 - ジフェニルキノリン - 6 - イル) - 10H - フェノチアジン 5, 5 - ジオキシド 21 (770 mg、80%) を無色固体として得た。この物質の一部分を、第 1 に再結晶化 (トルエン / ガソリン)、第 2 に (管状炉) 蒸留 (245、10<sup>-6</sup> mbar) によって、さらに精製した (融点は 142 ~ 152 であった (DSC))。

30

<sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>、400 MHz) δ 6.65 (d、J 8.4 Hz、2 H)、7.23 - 7.28 (m、2 H)、7.38 (ddd、J 1.6、7.2、8.8 Hz、2 H)、7.44 - 7.62 (m、8 H)、7.67 (dd、J 2.3、8.8 Hz、1 H)、7.97 (s、1 H)、8.00 (d、J 2.2 Hz、1 H)、8.18 (dd、J 1.5、7.9 Hz、2 H)、8.24 - 8.28 (m、2 H)、8.57 (d、J 8.8 Hz、1 H)、

40

<sup>13</sup>C NMR (CDCl<sub>3</sub>、100 MHz) δ 117.09、120.42、122.18、122.58、123.52、127.26、127.55、127.69、129.02、129.08、129.30、129.98、131.27、132.86、133.87、136.39、137.17、138.98、140.78、148.

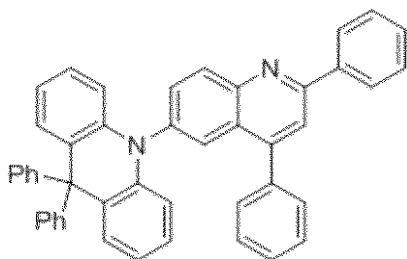
50

67、149.69、158.63、

HRMS (APCI)  $m/z$  511.1460  $C_{33}H_{23}O_2N_2S [M+H]^+$

には、511.1475が必要である。

【化121】



22

10

10-(2,4-ジフェニルキノリン-6-イル)-9,9-ジフェニル-9,10-ジヒドロアクリジン22

トルエン(30 mL)中の、6-ブロモ-2,4-ジフェニルキノリン(1.05 g、2.92 mmol)、9,9-ジフェニル-9,10-ジヒドロアクリジン(1.12 g、3.35 mmol)および $NaO^tBu$ (390 mg、4.08 mmol)を脱気した( $N_2$ バブリング、15分)。トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0)(26 mg、0.029 mmol)および1,1'-ビス(ジフェニルホスフィノ)フェロセン(32 mg、0.058 mmol)を加え、混合物を加熱還流した(3時間)。混合物を室温に冷却し、次いで $EtOAc/CH_2Cl_2$ /ガソリン(10:30:60)で洗浄して、シリカゲルを通して濾過した。濾液を濃縮して固体残渣を得た。残渣をシリカゲル・カラムクロマトグラフィー( $EtOAc$ /ガソリン/トルエン 0:50:50、次いで0:20:80、次いで2:20:80)によって精製して、10-(2,4-ジフェニルキノリン-6-イル)-9,9-ジフェニル-9,10-ジヒドロアクリジン22(1.54 g、86%)を無色固体として得た。この物質の一部を、第1に再結晶化(トルエン/ガソリン)、第2に(管状炉)蒸留(275、 $10^{-6}$  mbar)によってさらに精製した(融点は255~262であった(DSC))。

20

30

$^1H$  NMR( $CDCl_3$ 、400 MHz)  $\delta$  6.48(dd、J 0.9、8.3 Hz、2H)、6.87-6.95(m、4H)、6.99-7.08(m、6H)、7.20-7.28(m、6H)、7.43(dd、J 2.2、9.2 Hz、1H)、7.47-7.60(m、8H)、7.73(d、J 2.2 Hz、1H)、7.90(s、1H)、8.22-8.26(m、2H)、8.43(d、J 8.8 Hz、1H)、

$^{13}C$  NMR( $CDCl_3$ 、100 MHz)  $\delta$  56.74、113.99、119.79、120.30、126.27、126.84、126.87、127.59、127.62、127.91、128.52、128.78、128.92、129.39、129.60、129.71、130.01、130.32、132.72、132.85、137.68、138.47、139.36、142.06、146.19、148.23、149.26、157.67、

40

HRMS (APCI)  $m/z$  613.2632  $C_{46}H_{33}N_2 [M+H]^+$  には、613.2638が必要である。

【0168】

(実施例2 理論計算)

Gaussian 09 (B3LYP/6-31G\*)を用いた化合物17~20の密度汎関数理論(Density Functional Theory、DFT)計算は、電子供与領域(electron donating area)および電子受容コア(electron accepting core)のそれぞれに沿って、局在するHOMO準位およびLUMO準位を示した。化合物17~20は、HOMO準位とLUMO準位との間の重複を制限している。化合物17-20の $S_1-T_1$ ギャップは、

50

Gaussian 09 (TD B3LYP/6-31G\*/B3LYP/6-31G\*)を用いて計算され、およそ、550 nm、534 nm、578 nmおよび510 nmでの予測される発光を伴う、0.1 eV未満であると予測された。

【0169】

【表1】

表1：化合物17～20の理論計算

| 化合物 | S <sub>1</sub><br>(eV) | T <sub>1</sub><br>(eV) | ΔS <sub>1</sub> -T <sub>1</sub><br>(eV) | λ<br>(nm) |
|-----|------------------------|------------------------|-----------------------------------------|-----------|
| 17  | 2.24                   | 2.23                   | 0.01                                    | 552       |
| 18  | 2.32                   | 2.32                   | 0.01                                    | 534       |
| 19  | 2.15                   | 2.13                   | 0.02                                    | 578       |
| 20  | 2.43                   | 2.42                   | 0.01                                    | 510       |

10

【0170】

(実施例3 分光法)

封入された蒸着フィルム (evaporated film) (2, 6-ジ(9H-カルバゾール-9-イル)ピリジン、Pyd2Cz、マトリックスの10% w/wの同時蒸着) 中の化合物の安定した状態の、また時間分解されたフォトルミネッセンス (PL) スペクトルを、エジンバインストルメンツ FLSP-900 分光光度計を用いて測定した。500～550 nmの範囲にある優勢な高ストークス・シフト PL バンドは、この発光が励起状態の分子内電荷移動状態に関連していることと一致する強いソルバトクロミック効果 (solvatochromic effect) を示す (図1(a))。

20

【0171】

図1(b)において、非常に長寿命 (1000 ミリ秒) の PL 成分の存在が、この長寿命発光の酸素の存在下での急冷を伴って、比較的長寿命の三重項エキシトンの関与を強く示唆しており、蛍光の TADF 増強と一致する。ゲートされた、またはゲートされていない PL 発光スペクトルの比較は、これらの化合物の効率的な TADF プロセスを示す。

30

【0172】

【表2】

表2：化合物17～20の物理的および分光学的特性

| 化合物 | mp <sup>a</sup><br>(°C) | HOMO <sup>b</sup><br>(eV) | LUMO <sup>c</sup><br>(eV) | E <sub>g</sub> <sup>d</sup><br>(eV) | λ <sub>PL(max)</sub> <sup>e</sup><br>(nm) | PLQY <sup>f</sup> | τ <sup>g</sup><br>(ms) |
|-----|-------------------------|---------------------------|---------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------------|-------------------|------------------------|
| 17  | 173-178                 | 5.42                      | 2.68                      | 2.74                                | 530                                       | 0.85              | 2.3                    |
| 18  | 224-227                 | 5.44                      | 2.61                      | 2.83                                | 500                                       | 0.68              | 6.5                    |
| 19  | 296-304                 | 5.54                      | 2.91                      | 2.63                                | 542                                       | 0.95              | 1.6                    |
| 20  | 292-298                 | 5.56                      | 2.68                      | 2.88                                | 490                                       | 0.46              | 48.3                   |

<sup>a</sup>示差走査熱量測定 (DSC) 分析から融点を推定した。<sup>b</sup>最高被占軌道 (または最高占有分子軌道、HOMO) エネルギー準位は、空気中の光電子分光法 (PESA) から得られた。<sup>c</sup>最低空軌道 (または最低非占有分子軌道、LUMO) エネルギー準位は、HOMO準位からバンド・ギャップ (E<sub>g</sub>) を差し引くことによって計算した。<sup>d</sup>E<sub>g</sub>測定値は、吸収バンドのオンセットから得られた。<sup>e</sup>フォトルミネッセンス (PL) 波長の最大値。<sup>f</sup>Pyd2Cz膜におけるPL量子収率 (PLQY)。<sup>g</sup>τは、指数の合計を用いて、PL減衰曲線を適合させることによって得られる遅延蛍光寿命 (delayed-fluorescence lifetime) を意味する。

40

【0173】

(実施例4 デバイスの製造および試験)

市販材のトリス (4-カルバゾイル-9-イルフェニル) アミン (TcTa)、2, 2', 2''-(1, 3, 5-ベンジントリイル)-トリス (1-フェニル-1H-ベンゾイミダゾール) (TPBi) および Pyd2Cz (2, 6-ジ(9H-カルバゾール-9-イル)ピリジン) をLumtecから購入し、購入したままの状態で使用した。

【0174】

OLEDデバイスは、ガラス基板 (10 Ω/□) にコートされた、予めパターン化され

50

た酸化インジウムスズ (ITO) 上に製造された。基板をイソプロパノールおよび水で予め洗浄し、次いで使用直前に 25 で 15 分間 UV - オゾンで処理した。デバイスは、約  $5 \times 10^{-6}$  Pa のベース圧力を有する真空チャンバーにおける熱蒸着によって製造された。有機層の堆積速度は、エミッターのために、およそ 1 / s および 0.1 A / 秒に維持された。

#### 【0175】

デバイスは、シャドー・マスク (shadow mask) を使用して製造され、試験化合物 (17 ~ 20) でドーブされた TcTa、Pyd2Cz の連続層および TPBi を堆積させた。有機層をカソード層に堆積させた後、フッ化リチウム (1 nm) およびアルミニウム (100 nm) を、真空を破ることなく、第 2 シャドー・マスクを用いて堆積させた。デバイスの構造は図 2 (a) に、材料の相対エネルギー準位は図 2 (b) に示されている。

#### 【0176】

化合物 17 ~ 20 は、70 nm の TcTa、合計 40 nm の共蒸着された発光層 (EML) および 30 nm の TPBi (デバイス A) を用いたデバイスにおいて、すべて最初に試験された。次いで、化合物 19 を、異なる層厚みを有する直列の (または一連の、in a series of) デバイス (TcTa (30 ~ 70 nm)、EML (20 ~ 40 nm)、TPBi (20 ~ 50 nm)) で使用した。化合物 19 については、TcTa (30 nm) のより薄い層および TPBi (50 nm) のより厚い層 (デバイス B) を使用することによって、デバイス効率が改善されることが見出された。化合物 17 および 18 もまた、デバイス B を使用して調製したが、この構造を使用して化合物 17 および 18 についての有意な改善は見出されず、これらの材料の結果は、デバイス A について報告されている。化合物 20 は、デバイス A を使用した試験のみ実施した。

#### 【0177】

発光層における化合物 17 ~ 19 を含む OLED の電圧 - 電流 - 輝度 (VIL) 特性を図 3 に示し、また 1 mA / cm<sup>2</sup> でのこれらデバイスの性能中央値 (または能力中央値、median performance) を表 3 に要約する。17 および 19 は、533 および 548 nm で、エレクトロルミネッセンス (EL) 最大値を有する同様の緑黄色発光を有する。化合物 18 を用いて調製したデバイスは、508 nm で EL 最大値を有する青緑色発光を示した。

#### 【0178】

対称的な電子供与基を有する化合物 19 は、1000 cd / m<sup>2</sup> で 7.8 % の EQE を有し、また維持した。化合物 17 は、低輝度で 11.8 % のピーク EQE を、また 1000 cd / m<sup>2</sup> で 5.0 % のピーク EQE を有していた。化合物 16 は、7.8 % のより低いピーク効率を有していた。3 つの結果はすべて、分光法で観察される励起状態および TADF における三重項関与と一致する。

#### 【0179】

化合物 20 を用いて調製したデバイスは、489 nm でスカイブルー色の発光を有し、またこのデバイスの CIE<sub>1931</sub> 座標は (0.212、0.228) であった。

#### 【0180】

#### 【表 3】

表 3：化合物 17 ~ 19 を用いて調製したデバイスの 1 mA / cm<sup>2</sup> での VIL 性能中央値

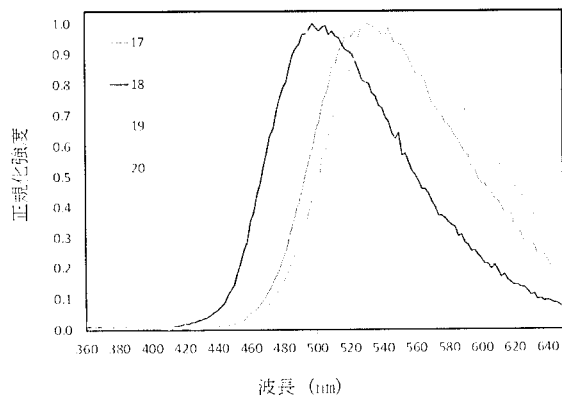
| 化合物<br>(デバイス) | 電圧<br>(V) | 輝度<br>(cd/m <sup>2</sup> ) | CIE <sub>1931</sub><br>x | CIE <sub>1931</sub><br>y | LJ<br>(cd/A) | $\lambda_{EL}$ (max)<br>(nm) | 外部量子効率<br>(%) |
|---------------|-----------|----------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------|------------------------------|---------------|
| 17(A)         | 6.1       | 258                        | 0.351                    | 0.577                    | 25.8         | 533                          | 8.1           |
| 18(A)         | 6.1       | 150                        | 0.253                    | 0.499                    | 15.0         | 508                          | 5.3           |
| 19(B)         | 5.7       | 328                        | 0.407                    | 0.557                    | 32.8         | 548                          | 10.8          |

#### 【0181】

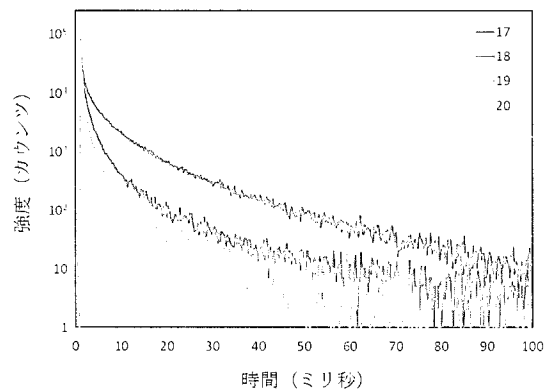
当業者であれば、本開示の広範な一般的範囲から逸脱することなく、上述の態様に多くの変形および / または改良を行うことができることを理解されたい。したがって、本態様

は、すべての点で例示的であり、限定的ではないとみなされるべきである。

【図 1 A】



【図 1 B】



【図 2 - 1】

(a)

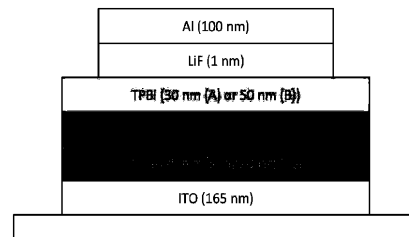


FIGURE 2

【図 2 - 2】

(b)

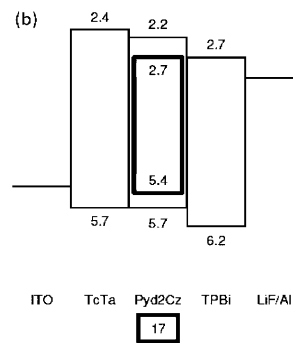
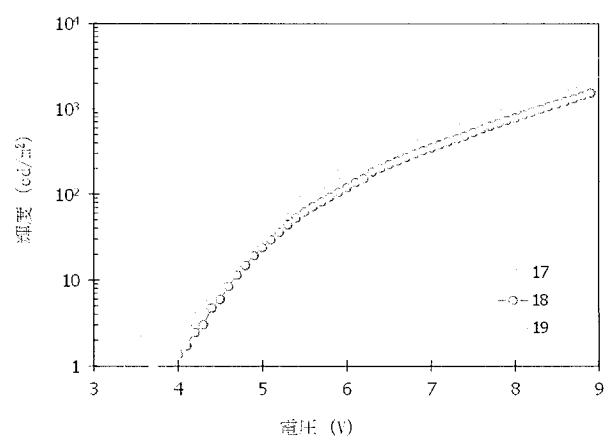
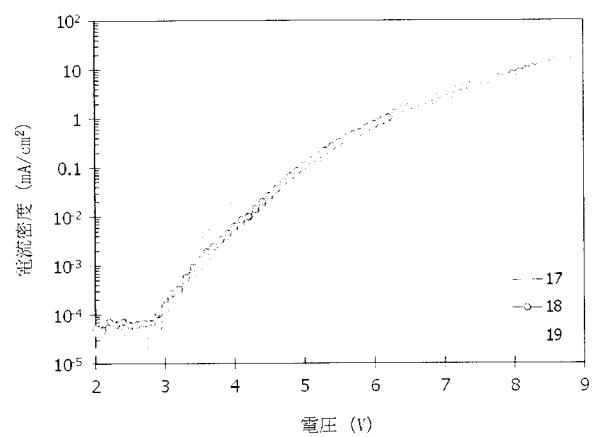


FIGURE 2 Continued

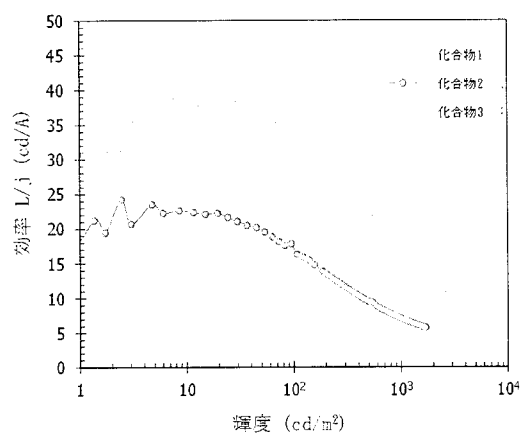
【図 3 A】



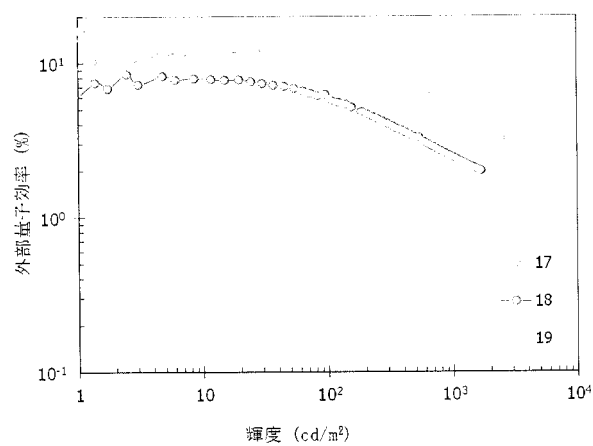
【図 3 B】



【図 3 C】



【図 3 D】



## 【 国際調査報告 】

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                                                                                                                     |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>INTERNATIONAL SEARCH REPORT</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                 |                                                                                                                                                                     | International application No.<br><b>PCT/AU2016/050421</b>                                                                                                                                                                                           |
| <b>A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER</b>                                                                                                                                                                                                                                                                         |                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                                                                                                                     |
| <b>C07D 413/04 (2006.01) C07D 401/04 (2006.01) C07D 401/10 (2006.01) C07D 401/14 (2006.01) C07D 413/10 (2006.01)</b><br><b>C07D 413/14 (2006.01) C07D 417/04 (2006.01) C07D 487/04 (2006.01) C07F 7/10 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)</b><br><b>H01L 27/32 (2006.01) H01L 51/54 (2006.01) H05B 33/14 (2006.01)</b> |                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                                                                                                                     |
| According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC                                                                                                                                                                                                                  |                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                                                                                                                     |
| <b>B. FIELDS SEARCHED</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                          |                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                                                                                                                     |
| Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)                                                                                                                                                                                                                          |                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                                                                                                                     |
| 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)                                                                                                                                                                                       |                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                                                                                                                     |
| STN: Chemical Abstracts Registry and CAplus - structure search based on compounds of formula (1).                                                                                                                                                                                                                  |                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                                                                                                                     |
| Patentscope: Applicant search with IPC mark C07D. Inventor Search with IPC mark C07D.                                                                                                                                                                                                                              |                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                                                                                                                     |
| Espacenet: Applicant search with IPC mark C07D. Inventor Search with IPC mark C07D.                                                                                                                                                                                                                                |                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                                                                                                                     |
| Applicant/ Inventors names were also searched in internal databases provided by IP Australia.                                                                                                                                                                                                                      |                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                                                                                                                     |
| <b>C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT</b>                                                                                                                                                                                                                                                                      |                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                                                                                                                     |
| Category*                                                                                                                                                                                                                                                                                                          | Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages                                                                                  | Relevant to claim No.                                                                                                                                                                                                                               |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | Documents are listed in the continuation of Box C                                                                                                                   |                                                                                                                                                                                                                                                     |
| <input checked="" type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C <input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex                                                                                                                                                          |                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                                                                                                                     |
| *<br>"A"                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | Special categories of cited documents:<br>document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance                      | "T"<br>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                                              |
| "E"                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | earlier application or patent but published on or after the international filing date                                                                               | "X"<br>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                                                                     |
| "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) | "Y"<br>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 |
| "O"                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means                                                                                            | "&"<br>document member of the same patent family                                                                                                                                                                                                    |
| "P"                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed                                                                  |                                                                                                                                                                                                                                                     |
| Date of the actual completion of the international search<br>1 September 2016                                                                                                                                                                                                                                      |                                                                                                                                                                     | Date of mailing of the international search report<br>01 September 2016                                                                                                                                                                             |
| Name and mailing address of the ISA/AU<br><br>AUSTRALIAN PATENT OFFICE<br>PO BOX 200, WODEN ACT 2606, AUSTRALIA<br>Email address: pct@ipaaustralia.gov.au                                                                                                                                                          |                                                                                                                                                                     | Authorised officer<br><br>Tina Bryant<br>AUSTRALIAN PATENT OFFICE<br>(ISO 9001 Quality Certified Service)<br>Telephone No. 0262837992                                                                                                               |

| INTERNATIONAL SEARCH REPORT                           |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | International application No. |
|-------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------|
| C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | PCT/AU2016/050421             |
| Category*                                             | Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages                                                                                                                                                                                                                                 | Relevant to claim No.         |
| A                                                     | KR 10-2012-0072785 A (SFC CO., LTD.) 04 July 2012<br>Paragraphs [0010]-[0018], [0158]-[0161], [0173], Claims 1 and 3-6.                                                                                                                                                                                            | 1-39                          |
| A                                                     | US 2013/0181196 A1 (LG CHEM, LTD.) 18 July 2013<br>Paragraphs [0008] and [0009], [0026]-[0055], page 46 compound 3-4-1-7, page 48 compound 3-5-17, Claims 1, 14 and 18-21.                                                                                                                                         | 1-39                          |
| A                                                     | EP 2182040 A2 (GRACEL DISPLAY INC.) 05 May 2010<br>Compound 53 Page 17 line 20, paragraphs [0028], [0031], [0048], Claims 1 and 4.                                                                                                                                                                                 | 1-39                          |
| A                                                     | Zhu, Y. et al., "Phenoxazine-Based Emissive Donor-Acceptor Materials for Efficient Organic Light-Emitting Diodes", Chemistry of Materials, 2005, Vol. 17, No. 21, pages 5225-5227.<br>Page 5225 left column lines 2-12, page 5225 right column lines 7-10, page 5226 Scheme 1, page 5227 right column lines 12-15. | 1-39                          |
| <p>Form PCT/ISA/210 (fifth sheet) (July 2009)</p>     |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |                               |

| INTERNATIONAL SEARCH REPORT                                                                                                                                                                                                                                           |                  | International application No. |                  |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------|-------------------------------|------------------|
| Information on patent family members                                                                                                                                                                                                                                  |                  | PCT/AU2016/050421             |                  |
| This Annex lists known patent family members relating to the patent documents cited in the above-mentioned international search report. The Australian Patent Office is in no way liable for these particulars which are merely given for the purpose of information. |                  |                               |                  |
| Patent Document/s Cited in Search Report                                                                                                                                                                                                                              |                  | Patent Family Member/s        |                  |
| Publication Number                                                                                                                                                                                                                                                    | Publication Date | Publication Number            | Publication Date |
| KR 10-2012-0072785 A                                                                                                                                                                                                                                                  | 04 July 2012     | None                          |                  |
| US 2013/0181196 A1                                                                                                                                                                                                                                                    | 18 July 2013     | US 2013181196 A1              | 18 Jul 2013      |
|                                                                                                                                                                                                                                                                       |                  | US 9000169 B2                 | 07 Apr 2015      |
|                                                                                                                                                                                                                                                                       |                  | CN 103764789 A                | 30 Apr 2014      |
|                                                                                                                                                                                                                                                                       |                  | CN 103764789 B                | 25 May 2016      |
|                                                                                                                                                                                                                                                                       |                  | EP 2730634 A2                 | 14 May 2014      |
|                                                                                                                                                                                                                                                                       |                  | JP 2014528916 A               | 30 Oct 2014      |
|                                                                                                                                                                                                                                                                       |                  | KR 20130006293 A              | 16 Jan 2013      |
|                                                                                                                                                                                                                                                                       |                  | KR 101317495 B1               | 15 Oct 2013      |
|                                                                                                                                                                                                                                                                       |                  | TW 201313711 A                | 01 Apr 2013      |
|                                                                                                                                                                                                                                                                       |                  | WO 2013009013 A2              | 17 Jan 2013      |
| EP 2182040 A2                                                                                                                                                                                                                                                         | 05 May 2010      | EP 2182040 A2                 | 05 May 2010      |
|                                                                                                                                                                                                                                                                       |                  | CN 102203212 A                | 28 Sep 2011      |
|                                                                                                                                                                                                                                                                       |                  | CN 103864789 A                | 18 Jun 2014      |
|                                                                                                                                                                                                                                                                       |                  | JP 2012507507 A               | 29 Mar 2012      |
|                                                                                                                                                                                                                                                                       |                  | KR 20100048447 A              | 11 May 2010      |
|                                                                                                                                                                                                                                                                       |                  | KR 101506919 B1               | 30 Mar 2015      |
|                                                                                                                                                                                                                                                                       |                  | TW 201114770 A                | 01 May 2011      |
|                                                                                                                                                                                                                                                                       |                  | WO 2010050778 A1              | 06 May 2010      |
| <b>End of Annex</b>                                                                                                                                                                                                                                                   |                  |                               |                  |
| <p>Due to data integration issues this family listing may not include 10 digit Australian applications filed since May 2001.<br/>Form PCT/ISA/210 (Family Annex)(July 2009)</p>                                                                                       |                  |                               |                  |

## フロントページの続き

(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

(72)発明者 ジェニー・リー・オコンネル

オーストラリア 3 1 5 0 ビクトリア州 グレン・ウェイバリー、クレスウィック・ストリート 2 6 番

(72)発明者 メリッサ・スキッドモア

オーストラリア 3 1 9 5 ビクトリア州 パークデイル、レニソン・ストリート 6 7 番

(72)発明者 アンドリュー・デイヴィッド・スカリー

オーストラリア 3 1 9 2 ビクトリア州 チェルトナム、ハイビスカス・アベニュー 3 9 番

(72)発明者 アンソニー・ウィルソン

オーストラリア 3 0 2 8 ビクトリア州 アルトナ・メドウズ、セントラル・アベニュー 1 1 6 番

(72)発明者 上野 和則

オーストラリア 3 1 5 0 ビクトリア州 グレン・ウェイバリー、エブリン・ストリート 1 / 2 番

F ターム(参考) 3K107 AA01 BB01 BB02 CC04 CC09 DD53 DD59 DD66 DD68 DD69

FF12 FF15

5C094 AA07 AA31 AA44 BA27

|                |                                                                                                                                                                                                                                                                         |         |            |
|----------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------|------------|
| 专利名称(译)        | 具有热激活延迟荧光材料的有机发光装置                                                                                                                                                                                                                                                      |         |            |
| 公开(公告)号        | <a href="#">JP2018524801A</a>                                                                                                                                                                                                                                           | 公开(公告)日 | 2018-08-30 |
| 申请号            | JP2017561860                                                                                                                                                                                                                                                            | 申请日     | 2016-05-27 |
| [标]申请(专利权)人(译) | 联邦科学和工业研究组织                                                                                                                                                                                                                                                             |         |            |
| 申请(专利权)人(译)    | 联邦科学与工业研究组织                                                                                                                                                                                                                                                             |         |            |
| [标]发明人         | ジェイムズマシューマクドナルド<br>ジェニーリーオコンネル<br>メリッサスキッドモア<br>アンドリューデイヴィッドスカリー<br>アンソニーウィルソン<br>上野和則                                                                                                                                                                                  |         |            |
| 发明人            | ジェイムズ・マシュー・マクドナルド<br>ジェニー・リー・オコンネル<br>メリッサ・スキッドモア<br>アンドリュー・デイヴィッド・スカリー<br>アンソニー・ウィルソン<br>上野 和則                                                                                                                                                                         |         |            |
| IPC分类号         | H01L51/50 H01L27/32 C09K11/06 G09F9/30                                                                                                                                                                                                                                  |         |            |
| CPC分类号         | C07D215/06 C07D215/18 C07D401/04 C07D401/10 C07D401/14 C07D413/04 C07D413/10 C07D413/14 C07D417/04 C07D471/04 C09K11/06 C09K2211/1044 C09K2211/1048 C09K2211/1059 C09K2211/1062 C09K2211/1074 C09K2211/1077 H01L51/0061 H01L51/0071 H01L51/0072 H01L51/0094 H01L51/5012 |         |            |
| FI分类号          | H05B33/14.B H01L27/32 C09K11/06.690 G09F9/30.365                                                                                                                                                                                                                        |         |            |
| F-TERM分类号      | 3K107/AA01 3K107/BB01 3K107/BB02 3K107/CC04 3K107/CC09 3K107/DD53 3K107/DD59 3K107/DD66 3K107/DD68 3K107/DD69 3K107/FF12 3K107/FF15 5C094/AA07 5C094/AA31 5C094/AA44 5C094/BA27                                                                                         |         |            |
| 代理人(译)         | 绘马晴彦                                                                                                                                                                                                                                                                    |         |            |
| 优先权            | 2015902002 2015-05-29 AU                                                                                                                                                                                                                                                |         |            |
| 外部链接           | <a href="#">Espacenet</a>                                                                                                                                                                                                                                               |         |            |

#### 摘要(译)

本公开涉及一种有机电致发光器件，其包括发光层中的热活化发光材料。本公开还涉及能够提供热活化延迟荧光的化合物和包含至少一种化合物的发光层。该化合物可用于有机层，例如有机电致发光器件的发光层，例如荧光OLED。

