

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第6695936号
(P6695936)

(45) 発行日 令和2年5月20日 (2020.5.20)

(24) 登録日 令和2年4月24日 (2020.4.24)

(51) Int.Cl.

F I

H O 1 L 51/50 (2006.01)

H O 5 B 33/22

D

C O 9 K 11/06 (2006.01)

H O 5 B 33/14

B

C O 7 C 211/61 (2006.01)

C O 9 K 11/06

6 9 0

C O 7 F 7/10 (2006.01)

C O 7 C 211/61

C O 7 F 7/10

C

請求項の数 13 外国語出願 (全 102 頁)

(21) 出願番号 特願2018-144877 (P2018-144877)

(22) 出願日 平成30年8月1日 (2018.8.1)

(62) 分割の表示 特願2015-523436 (P2015-523436)
の分割

原出願日 平成25年6月27日 (2013.6.27)

(65) 公開番号 特開2019-4156 (P2019-4156A)

(43) 公開日 平成31年1月10日 (2019.1.10)

審査請求日 平成30年8月31日 (2018.8.31)

(31) 優先権主張番号 12005369.9

(32) 優先日 平成24年7月23日 (2012.7.23)

(33) 優先権主張国・地域又は機関
欧州特許庁 (EP)

(73) 特許権者 597035528

メルク パテント ゲーエムベーハー

ドイツ国, D-64293 ダルムシュタット
フランクフルター ストラッセ 25
O

(74) 代理人 100108855

弁理士 蔵田 昌俊

(74) 代理人 100103034

弁理士 野河 信久

(74) 代理人 100153051

弁理士 河野 直樹

(74) 代理人 100179062

弁理士 井上 正

(74) 代理人 100189913

弁理士 鵜飼 健

最終頁に続く

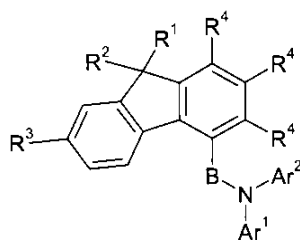
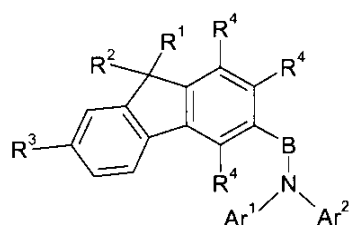
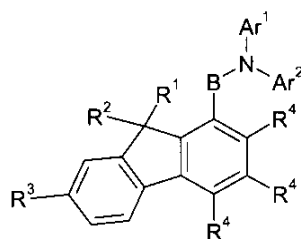
(54) 【発明の名称】 化合物および有機エレクトロルミッセンス素子

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

式 (3)、(4) または (6) の少なくとも一つの化合物を含むエレクトロルミッセンス素子；

【化 1】

式 (3)式 (4)式 (6)

以下が、使用する記号と添え字に適用される：

B は、単結合、6 ～ 30 個の環原子を有する二価のアリール基もしくは 5 ～ 30 個の環原子を有する二価のヘテロアリール基であって、それぞれ 1 以上の基 R^6 により置換されてよく、ここで、B が単結合であるならば、窒素原子は直接フルオレンに結合し；

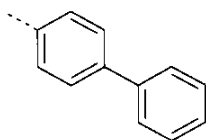
Ar^1 、 Ar^2 は、出現毎に同一であるか異なり、1 以上の基 R^6 により置換されてよい以下の式 (42) ～ (119) および (123) ～ (142) から選択され、

10

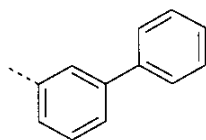
20

30

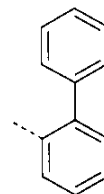
【化 2 - 1】



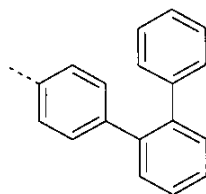
式 (42)



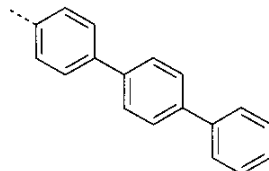
式 (43)



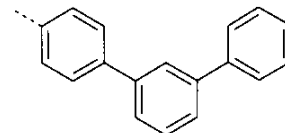
式 (44)



式 (45)

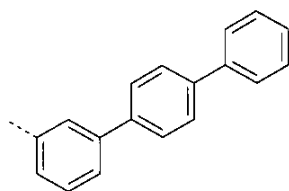


式 (46)

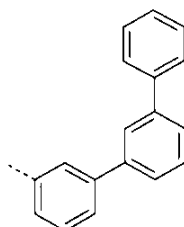


式 (47)

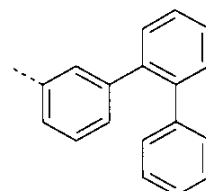
10



式 (48)

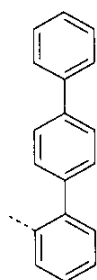


式 (49)

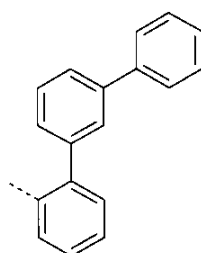


式 (50)

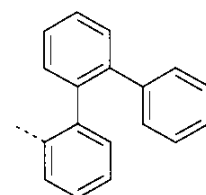
20



式 (51)



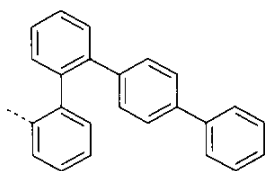
式 (52)



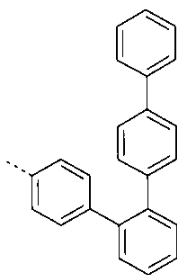
式 (53)

30

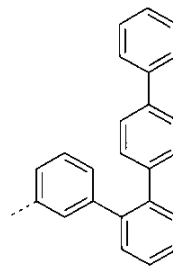
【化 2 - 2】



式 (54)

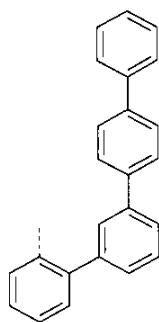


式 (55)

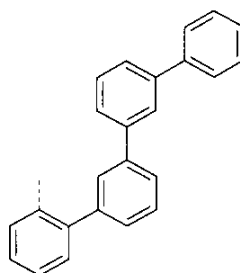


式 (56)

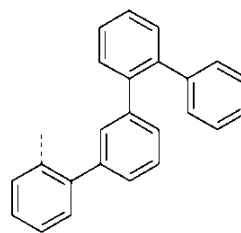
10



式 (57)

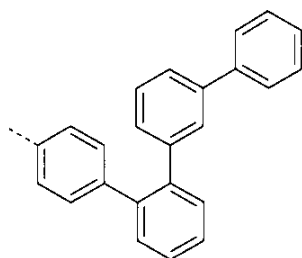


式 (58)

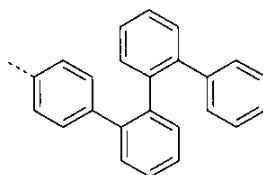


式 (59)

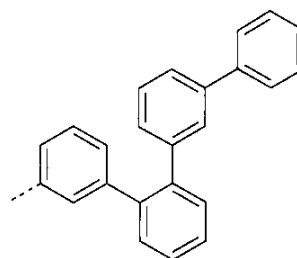
20



式 (60)

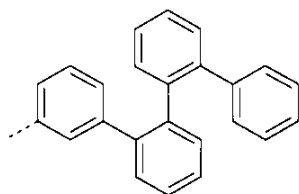


式 (61)

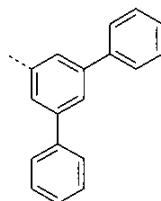


式 (62)

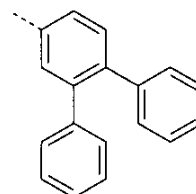
30



式 (63)

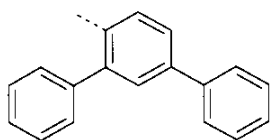


式 (64)

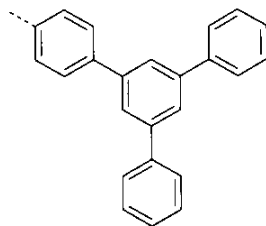


式 (65)

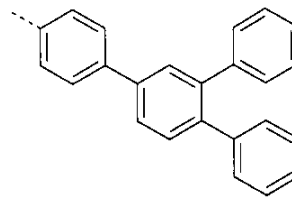
【化 2 - 3】



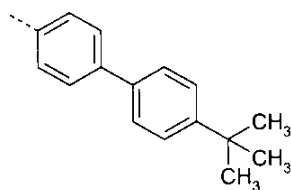
式 (66)



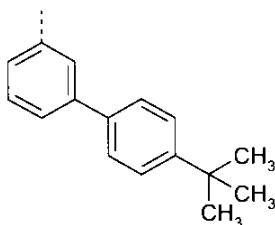
式 (67)



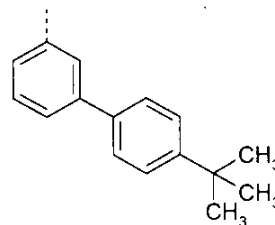
式 (68)



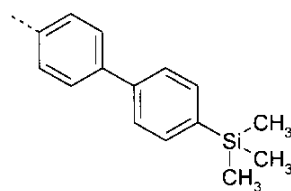
式 (69)



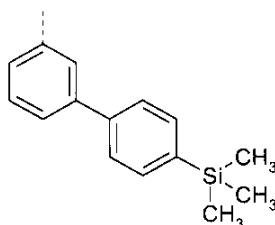
式 (70)



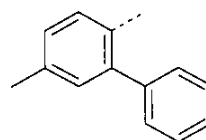
式 (71)



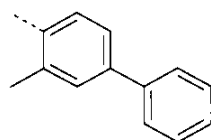
式 (72)



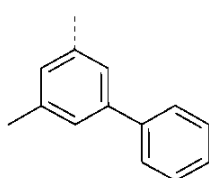
式 (73)



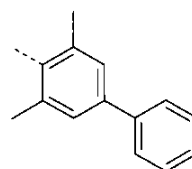
式 (74)



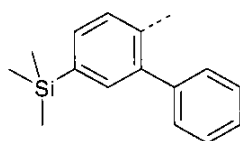
式 (75)



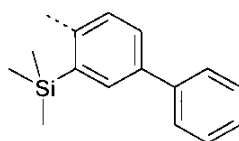
式 (76)



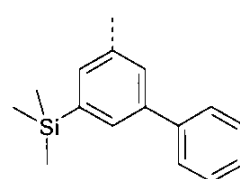
式 (77)



式 (78)



式 (79)



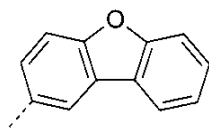
式 (80)

10

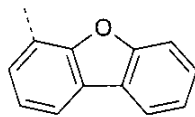
20

30

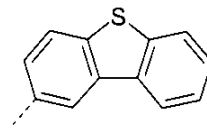
【化 2 - 4】



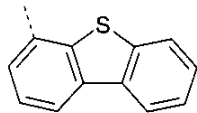
式 (81)



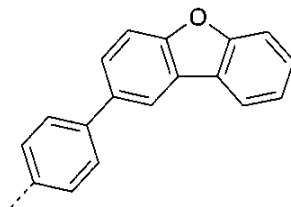
式 (82)



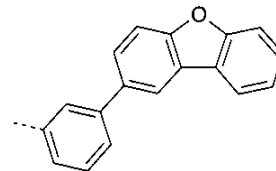
式 (83)



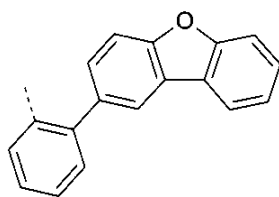
式 (84)



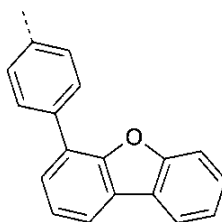
式 (85)



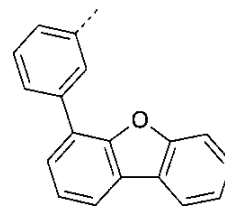
式 (86)



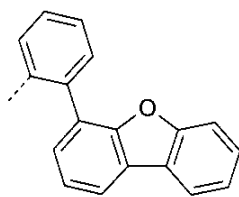
式 (87)



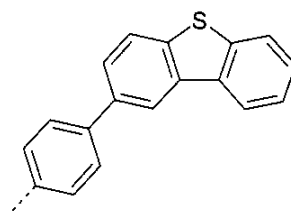
式 (88)



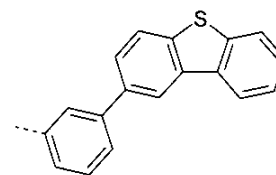
式 (89)



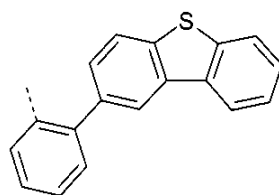
式 (90)



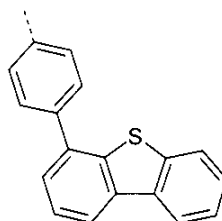
式 (91)



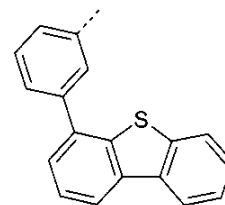
式 (92)



式 (93)



式 (94)



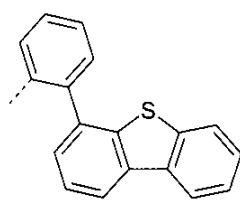
式 (95)

10

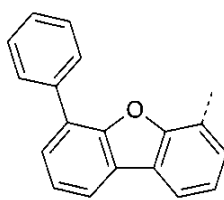
20

30

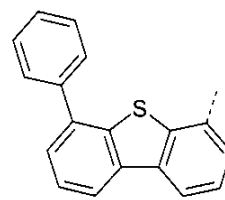
【化 2 - 5】



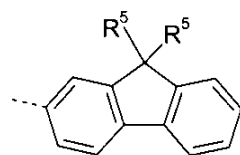
式 (96)



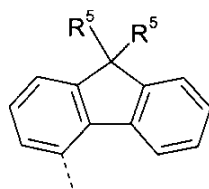
式 (97)



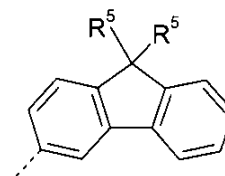
式 (98)



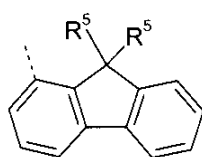
式 (99)



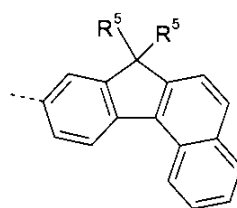
式 (100)



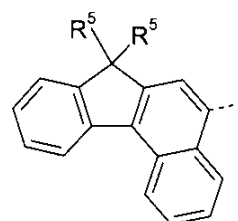
式 (101)



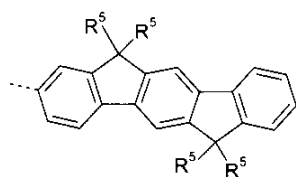
式 (102)



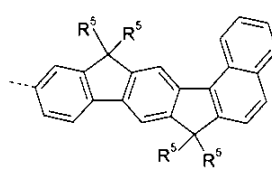
式 (103)



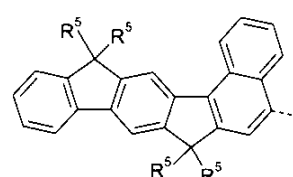
式 (104)



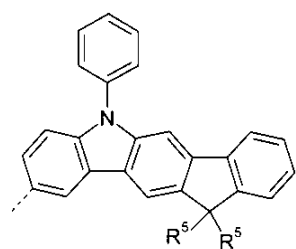
式 (105)



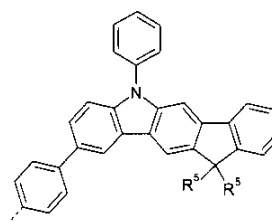
式 (106)



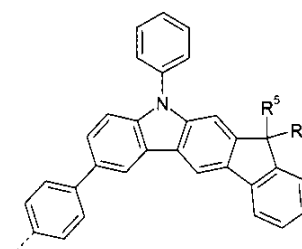
式 (107)



式 (108)



式 (109)



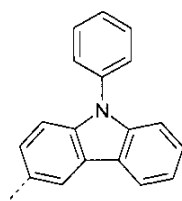
式 (110)

10

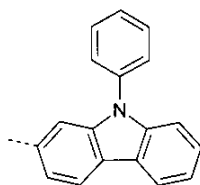
20

30

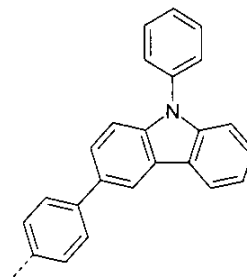
【化 2 - 6】



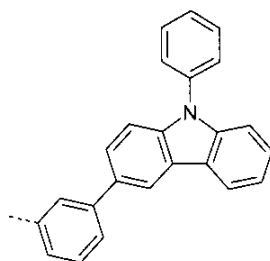
式 (111)



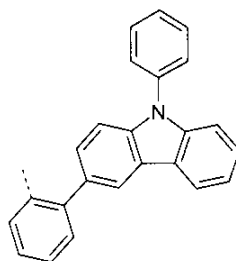
式 (112)



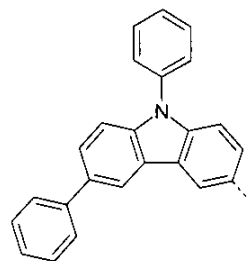
式 (113)



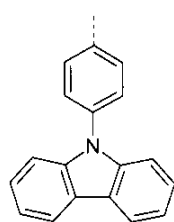
式 (114)



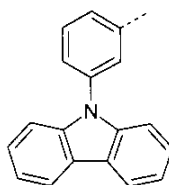
式 (115)



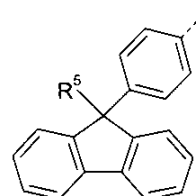
式 (116)



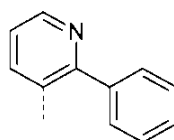
式 (117)



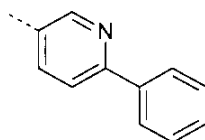
式 (118)



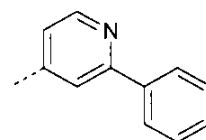
式 (119)



式 (123)



式 (124)



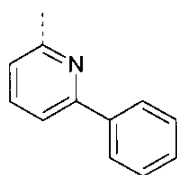
式 (125)

10

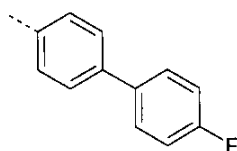
20

30

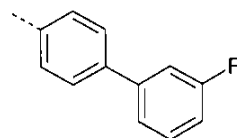
【化 2 - 7】



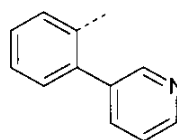
式 (126)



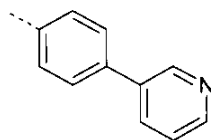
式 (127)



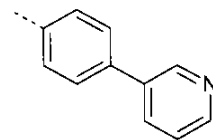
式 (128)



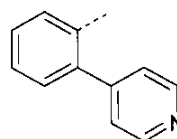
式 (129)



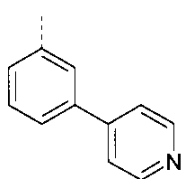
式 (130)



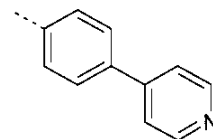
式 (131)



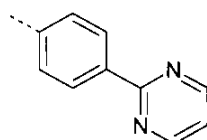
式 (132)



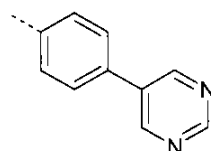
式 (133)



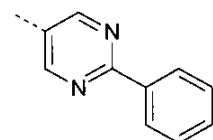
式 (134)



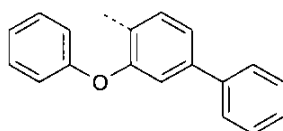
式 (135)



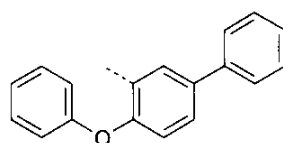
式 (136)



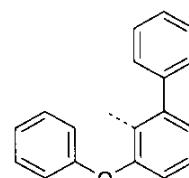
式 (137)



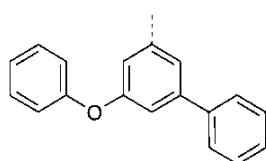
式 (138)



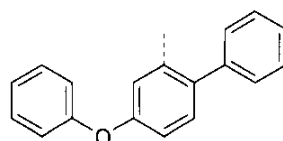
式 (139)



式 (140)



式 (141)



式 (142)

Ar¹ 中の芳香族もしくは複素環式芳香族環のうちの二個および/または Ar² 中の芳香族もしくは複素環式芳香族環のうちの二個は、縮合してよく；

および Ar¹ 中の芳香族もしくは複素環式芳香族環のうちの二個は、二価の基 -O-、-S-、-Si(R⁵)₂-、-C(R⁵)₂- もしくは -NR⁵- によりブリッジされてよく、または Ar² 中の芳香族もしくは複素環式芳香族環のうちの二個は、二価の基 -O-、-S-、-Si(R⁵)₂-、-C(R⁵)₂- もしくは -NR⁵- によりブリッジされてよく；

および Ar¹ からの芳香族もしくは複素環式芳香族環は、二価の基 -O-、-S-、-Si(R⁵)₂-、-NR⁵- もしくは -C(R⁵)₂- により、Ar² からの芳香族もしくは複素環式芳香族環にブリッジされてよく；

R¹、R²、R⁴ および R⁵ は、H、D、F、Cl、Br、I、C(=O)R⁶、CN

10

20

30

40

50

、 $\text{Si}(\text{R}^6)_3$ 、 NO_2 、 $\text{N}(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{S}(=\text{O})\text{R}^6$ 、 $\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^6$ 、1～20個のC原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基、2～20個のC原子を有するアルケニルもしくはアルキニル基（上記言及した基は、夫々1以上の基 R^6 により置換されてよく、上記言及した基中の1以上の CH_2 基は、 $-\text{R}^6\text{C}=\text{CR}^6-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $\text{Si}(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^6$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{O}-$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{NR}^6-$ 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^6)$ 、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 SO もしくは SO_2 で置き換えられてよく、ここで、上記言及した基中の1以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、CNもしくは NO_2 で置き換えられてよい。）または、各場合に、1以上の基 R^6 により置換されてよい6～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造または1以上の基 R^6 により置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有するアリールオキシ基または各場合に1以上の基 R^6 により置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有するアラルキル基であり；基 R^1 と R^2 は、同一ではあり得ず、基 R^4 および R^5 は、出現毎に同一であるか異なるとよいが、基 R^1 または R^2 のいずれかと同一であってよく；

R^3 は、D、F、Cl、Br、I、 $\text{C}(=\text{O})\text{R}^6$ 、CN、 $\text{Si}(\text{R}^6)_3$ 、 NO_2 、 $\text{N}(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{S}(=\text{O})\text{R}^6$ 、 $\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^6$ 、1～20個のC原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基、2～20個のC原子を有するアルケニルもしくはアルキニル基（上記言及した基は、夫々1以上の基 R^6 により置換されてよく、上記言及した基中の1以上の CH_2 基は、 $-\text{R}^6\text{C}=\text{CR}^6-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $\text{Si}(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^6$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{O}-$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{NR}^6-$ 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^6)$ 、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 SO もしくは SO_2 で置き換えられてよく、ここで、上記言及した基中の1以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、CNもしくは NO_2 で置き換えられてよい。）または、各場合に、1以上の基 R^6 により置換されてよい6～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造または1以上の基 R^6 により置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有するアリールオキシ基または各場合に1以上の基 R^6 により置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有するアラルキル基であり；基 R^1 と R^2 は、同一ではあり得ず、基 $\text{R}^3\sim\text{R}^5$ は、出現毎に同一であるか異なるとよいが、基 R^1 または R^2 のいずれかと同一であってよく；

R^6 は、出現毎に同一であるか異なり、H、D、F、Cl、Br、I、 $\text{C}(=\text{O})\text{R}^7$ 、CN、 $\text{Si}(\text{R}^7)_3$ 、 NO_2 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^7)_2$ 、 $\text{S}(=\text{O})\text{R}^7$ 、 $\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^7$ 、 $\text{N}(\text{R}^7)_2$ 、1～20個のC原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基、2～20個のC原子を有するアルケニルもしくはアルキニル基（上記言及した基は、夫々1以上の基 R^7 により置換されてよく、上記言及した基中の1以上の CH_2 基は、 $-\text{R}^7\text{C}=\text{CR}^7-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $\text{Si}(\text{R}^7)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^7$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{O}-$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{NR}^7-$ 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^7)$ 、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 SO もしくは SO_2 で置き換えられてよく、ここで、上記言及した基中の1以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、CNもしくは NO_2 で置き換えられてよい。）または、各場合に、1以上の基 R^7 により置換されてよい5～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、または1以上の基 R^7 により置換されてよい5～30個の芳香族環原子を有するアリールオキシもしくはヘテロアリールオキシ基であり；ここで、2個以上の隣接する置換基 R^6 は、モノあるいはポリ環式の環構造を互いに形成してよく；

R^7 は、H、D、F、1～20個のC原子を有する脂肪族炭化水素基、5～30個のC原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であって、1以上のH原子は、DもしくはFで置き換えられてよく、ここで、2個以上の隣接する置換基 R^7 は、モノあるいはポリ環式の環構造を互いに形成してよい。

【請求項2】

Bは、単結合、または、1以上の基 R^6 により置換されてよい、フェニレン、ビフェニ

10

20

30

40

50

レン、テルフェニレン、ナフチレン、ピリジニレン、ピリミジニレン、ピラジニレン、ピリダジニレン、トリアジニレン、ジベンゾフラニレンあるいはジベンゾチオフエニレンフルオレニレンもしくはカルバゾール基であることを特徴とする、請求項 1 記載の素子。

【請求項 3】

Ar^1 および Ar^2 は、出現毎に同一であるか異なり、フェニルピリジル、ピフェニル、テルフェニルもしくはクアテルフェニル基から選ばれ、同一であるか互いに異なる 1 以上の基 R^6 により置換されてよく、 Ar^1 中の芳香族もしくは複素環式芳香族環の二個は、二価の基-O-、-S-、-C(R^5)₂-もしくは-Si(R^5)₂-によりブリッジされてよく、 Ar^2 中の芳香族もしくは複素環式芳香族環の二個は、二価の基-O-、-S-、-C(R^5)₂-もしくは-Si(R^5)₂-によりブリッジされてよく、ここで、 Ar^1 からの芳香族もしくは複素環式芳香族環は、二価の基-O-、-S-、-Si(R^5)₂-、NR⁵もしくは-C(R^5)₂により Ar^2 からの芳香族もしくは複素環式芳香族環にブリッジしてよいことを特徴とする、請求項 1 または 2 記載の素子。

10

【請求項 4】

Ar^1 中の芳香族もしくは複素環式芳香族環の二個、または Ar^2 中の芳香族もしくは複素環式芳香族環の二個はブリッジされていない、請求項 3 記載の素子。

【請求項 5】

Ar^1 からの芳香族もしくは複素環式芳香族環は Ar^2 からの芳香族もしくは複素環式芳香族環にブリッジされていない、請求項 3 記載の素子。

20

【請求項 6】

式 (3)、(4) または (6) の化合物が、モノアミン化合物であることを特徴とする、請求項 1 ~ 5 何れか 1 項記載の素子。

【請求項 7】

素子が、有機発光トランジスタ (O L E T)、有機電場消光素子 (O F Q D)、有機発光電子化学電池 (O L E C、L E C、L E E C)、有機レーザーダイオード (O - l a s e r) および有機発光ダイオード (O L E D) であることを特徴とする、請求項 1 ~ 6 何れか 1 項記載の素子。

【請求項 8】

式 (3)、(4) または (6) の少なくとも一つの化合物が、素子中で以下の機能で以下の層で使用されることを特徴とする、請求項 1 ~ 7 何れか 1 項記載の素子：

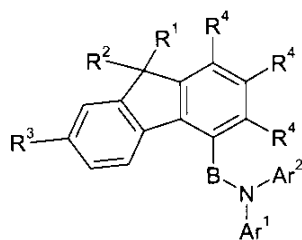
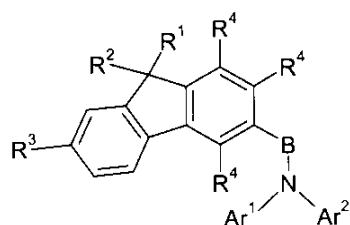
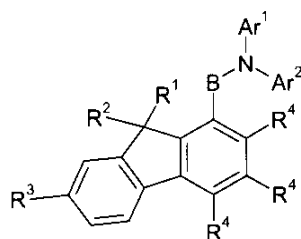
30

- ・正孔輸送もしくは正孔注入層中で正孔輸送材料として、
- ・励起子ブロック材料として、
- ・電子ブロック材料として、
- ・発光層中でマトリックス材料として、
- ・発光層中でエミッターとして。

【請求項 9】

少なくとも一つの式 (3)、(4) または (6) の化合物；

【化 3】

式 (3)式 (4)式 (6)

以下が、使用する記号と添え字に適用される：

B は、単結合、6 ～ 30 個の環原子を有する二価のアリール基もしくは 5 ～ 30 個の環原子を有する二価のヘテロアリール基であって、それぞれ 1 以上の基 R⁶ により置換されてよく、ここで、B が単結合であるならば、窒素原子は直接フルオレンに結合し；

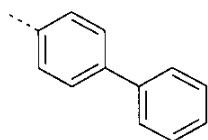
Ar¹、Ar² は、出現毎に同一であるか異なり、1 以上の基 R⁶ により置換されてよい以下の式 (42) ～ (119)、(123) ～ (142) から選択され、

10

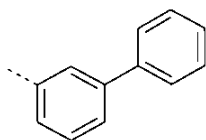
20

30

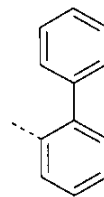
【化 4 - 1】



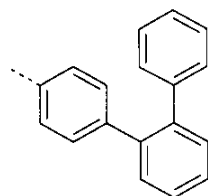
式 (42)



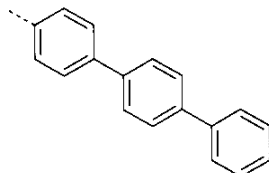
式 (43)



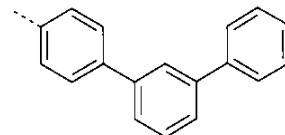
式 (44)



式 (45)

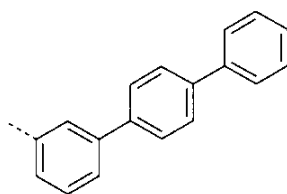


式 (46)

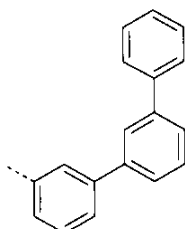


式 (47)

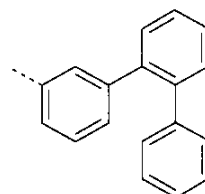
10



式 (48)

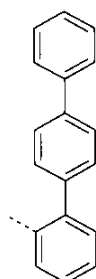


式 (49)

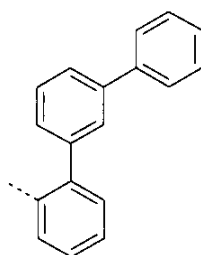


式 (50)

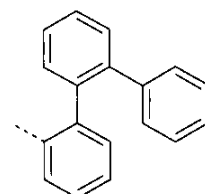
20



式 (51)



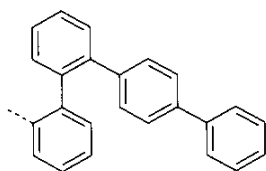
式 (52)



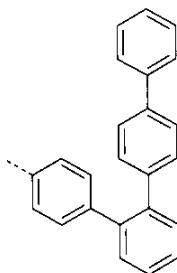
式 (53)

30

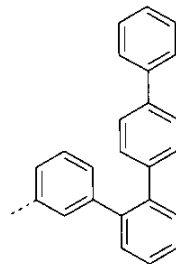
【化 4 - 2】



式 (54)

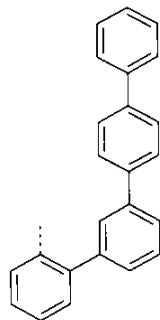


式 (55)

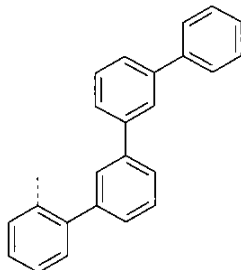


式 (56)

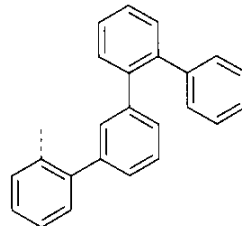
10



式 (57)

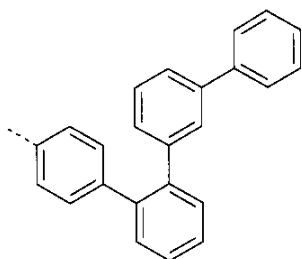


式 (58)

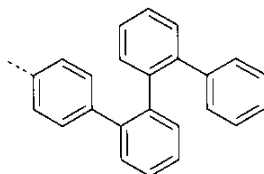


式 (59)

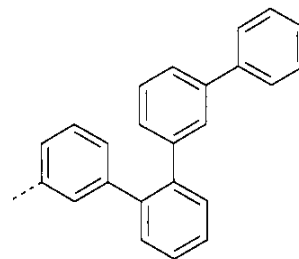
20



式 (60)

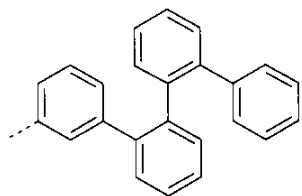


式 (61)

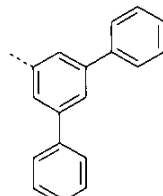


式 (62)

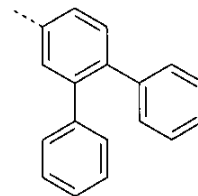
30



式 (63)

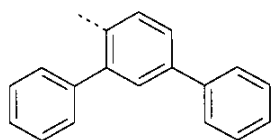


式 (64)

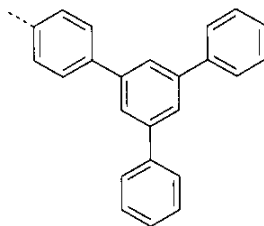


式 (65)

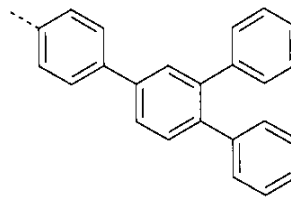
【化 4 - 3】



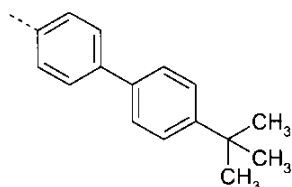
式 (66)



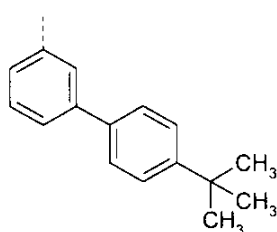
式 (67)



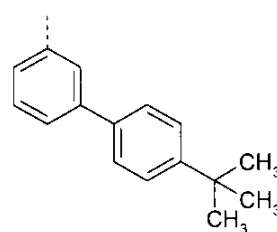
式 (68)



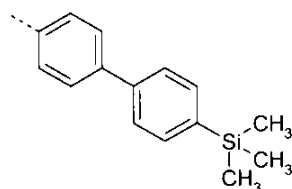
式 (69)



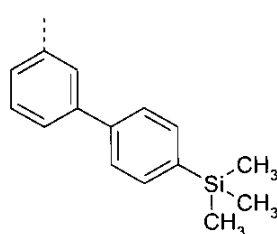
式 (70)



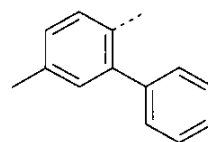
式 (71)



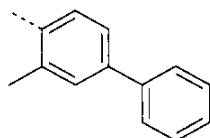
式 (72)



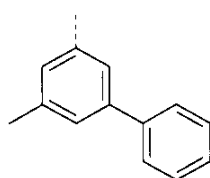
式 (73)



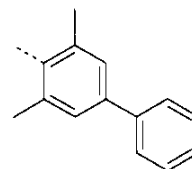
式 (74)



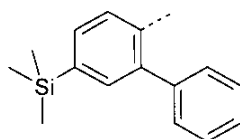
式 (75)



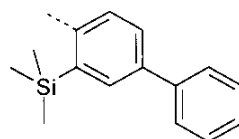
式 (76)



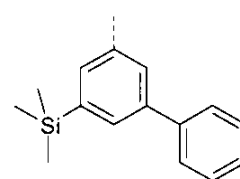
式 (77)



式 (78)



式 (79)



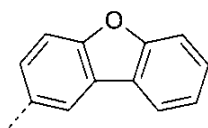
式 (80)

10

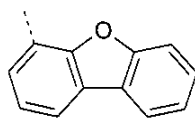
20

30

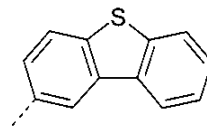
【化 4 - 4】



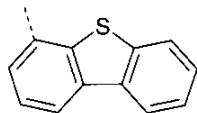
式 (81)



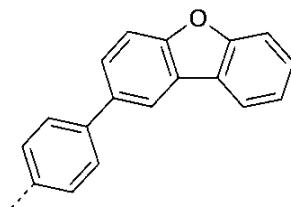
式 (82)



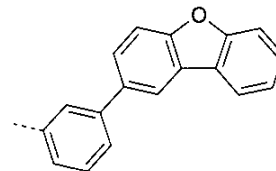
式 (83)



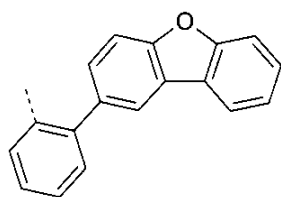
式 (84)



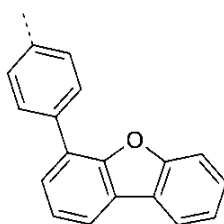
式 (85)



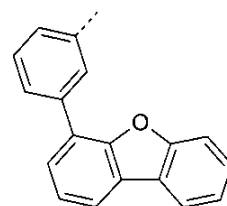
式 (86)



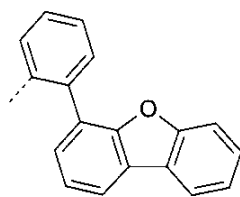
式 (87)



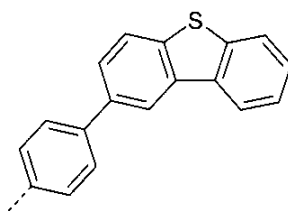
式 (88)



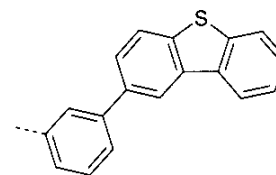
式 (89)



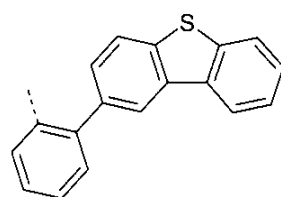
式 (90)



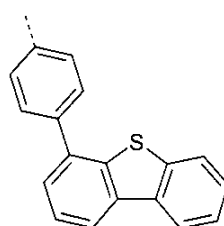
式 (91)



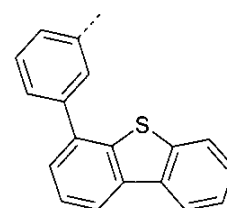
式 (92)



式 (93)



式 (94)



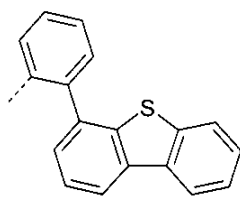
式 (95)

10

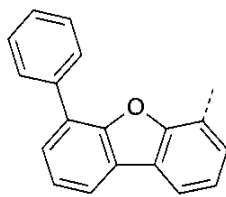
20

30

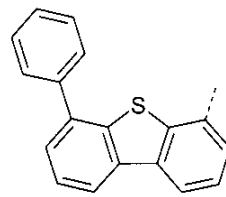
【化 4 - 5】



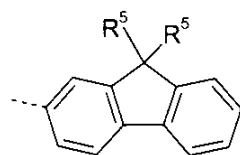
式 (96)



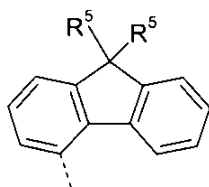
式 (97)



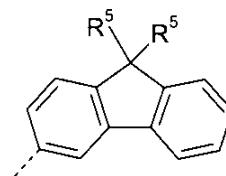
式 (98)



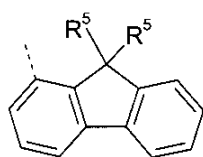
式 (99)



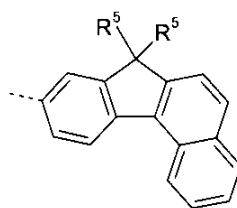
式 (100)



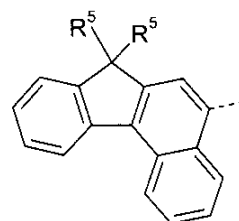
式 (101)



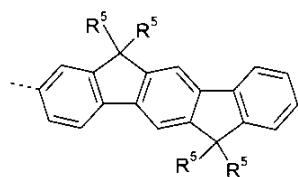
式 (102)



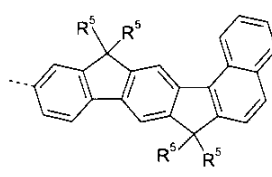
式 (103)



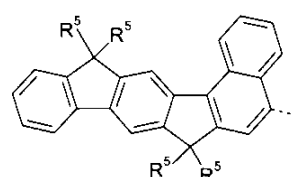
式 (104)



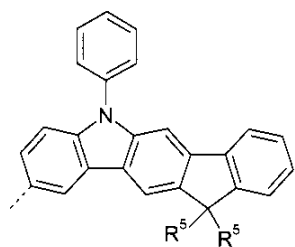
式 (105)



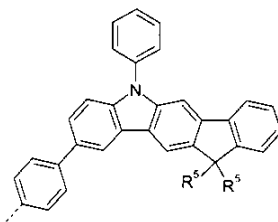
式 (106)



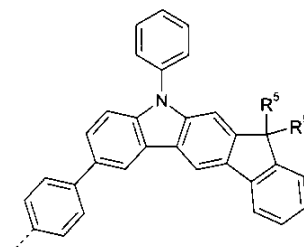
式 (107)



式 (108)



式 (109)



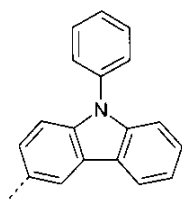
式 (110)

10

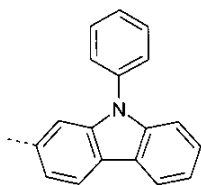
20

30

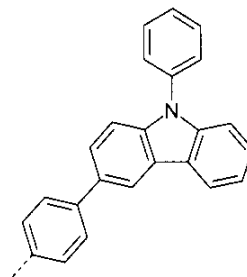
【化 4 - 6】



式 (111)

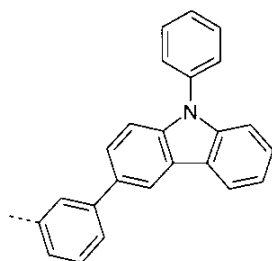


式 (112)

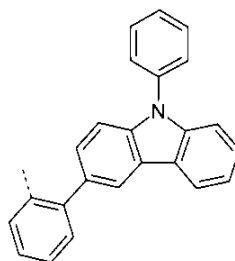


式 (113)

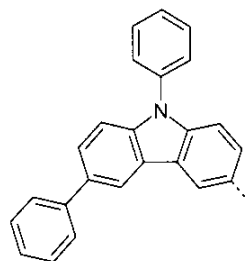
10



式 (114)

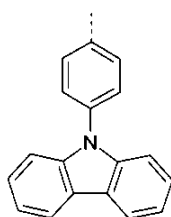


式 (115)

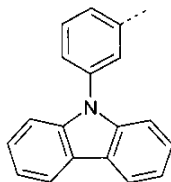


式 (116)

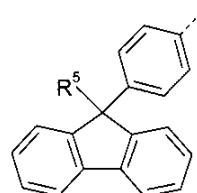
20



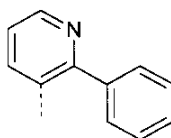
式 (117)



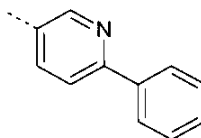
式 (118)



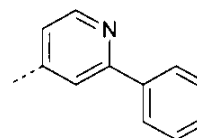
式 (119)



式 (123)



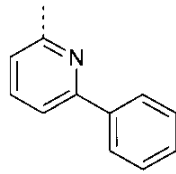
式 (124)



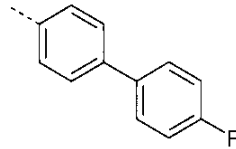
式 (125)

30

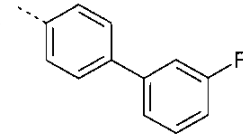
【化 4 - 7】



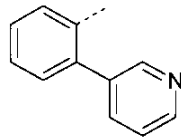
式 (126)



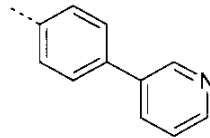
式 (127)



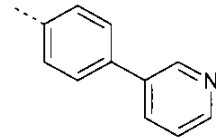
式 (128)



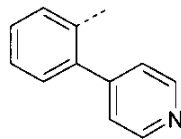
式 (129)



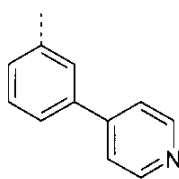
式 (130)



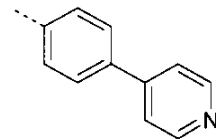
式 (131)



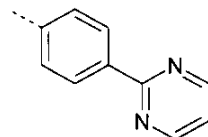
式 (132)



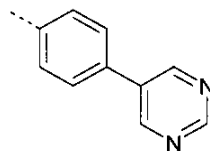
式 (133)



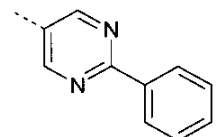
式 (134)



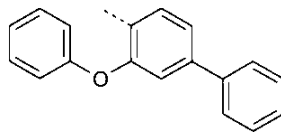
式 (135)



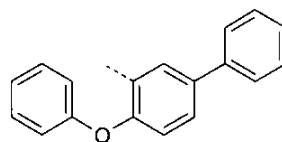
式 (136)



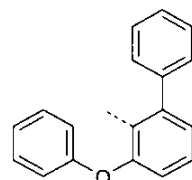
式 (137)



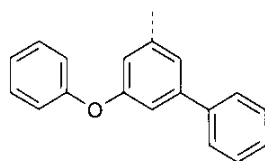
式 (138)



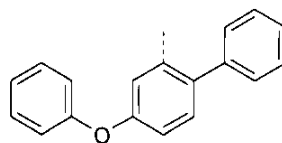
式 (139)



式 (140)



式 (141)



式 (142)

Ar¹ 中の芳香族もしくは複素環式芳香族環のうちの二個および/または Ar² 中の芳香族もしくは複素環式芳香族環のうちの二個は、縮合してよく；

および Ar¹ 中の芳香族もしくは複素環式芳香族環のうちの二個は、二価の基 -O-、-S-、-Si(R⁵)₂-、-C(R⁵)₂- もしくは -NR⁵- によりブリッジされてよく、または Ar² 中の芳香族もしくは複素環式芳香族環のうちの二個は、二価の基 -O-、-S-、-Si(R⁵)₂-、-C(R⁵)₂- もしくは -NR⁵- によりブリッジされてよく；

および Ar¹ からの芳香族もしくは複素環式芳香族環は、二価の基 -O-、-S-、-Si(R⁵)₂-、-NR⁵- もしくは -C(R⁵)₂- により、Ar² からの芳香族もしくは複素環式芳香族環にブリッジされてよく；

R¹、R²、R⁴ および R⁵ は、H、D、F、Cl、Br、I、C(=O)R⁶、CN

10

20

30

40

50

、 $\text{Si}(\text{R}^6)_3$ 、 NO_2 、 $\text{N}(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{S}(=\text{O})\text{R}^6$ 、 $\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^6$ 、1～20個のC原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基、2～20個のC原子を有するアルケニルもしくはアルキニル基（上記言及した基は、夫々1以上の基 R^6 により置換されてよく、上記言及した基中の1以上の CH_2 基は、 $-\text{R}^6\text{C}=\text{CR}^6-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $\text{Si}(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^6$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{O}-$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{NR}^6-$ 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^6)$ 、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 SO もしくは SO_2 で置き換えられてよく、ここで、上記言及した基中の1以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、CNもしくは NO_2 で置き換えられてよい。）または、各場合に、1以上の基 R^6 により置換されてよい6～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造または1以上の基 R^6 により置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有するアリールオキシ基または各場合に1以上の基 R^6 により置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有するアラルキル基であり；基 R^1 と R^2 は、同一ではあり得ず、基 R^4 および R^5 は、出現毎に同一であるか異なるとよいが、基 R^1 または R^2 のいずれかと同一であってよく；

R^3 は、D、F、Cl、Br、I、 $\text{C}(=\text{O})\text{R}^6$ 、CN、 $\text{Si}(\text{R}^6)_3$ 、 NO_2 、 $\text{N}(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{S}(=\text{O})\text{R}^6$ 、 $\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^6$ 、1～20個のC原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基、2～20個のC原子を有するアルケニルもしくはアルキニル基（上記言及した基は、夫々1以上の基 R^6 により置換されてよく、上記言及した基中の1以上の CH_2 基は、 $-\text{R}^6\text{C}=\text{CR}^6-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $\text{Si}(\text{R}^6)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^6$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{O}-$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{NR}^6-$ 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^6)$ 、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 SO もしくは SO_2 で置き換えられてよく、ここで、上記言及した基中の1以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、CNもしくは NO_2 で置き換えられてよい。）または、各場合に、1以上の基 R^6 により置換されてよい6～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造または1以上の基 R^6 により置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有するアリールオキシ基または各場合に1以上の基 R^6 により置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有するアラルキル基であり；基 R^1 と R^2 は、同一ではあり得ず、基 $\text{R}^3\sim\text{R}^5$ は、出現毎に同一であるか異なるとよいが、基 R^1 または R^2 のいずれかと同一であってよく；

R^6 は、出現毎に同一であるか異なり、H、D、F、Cl、Br、I、 $\text{C}(=\text{O})\text{R}^7$ 、CN、 $\text{Si}(\text{R}^7)_3$ 、 NO_2 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^7)_2$ 、 $\text{S}(=\text{O})\text{R}^7$ 、 $\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^7$ 、 $\text{N}(\text{R}^7)_2$ 、1～20個のC原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基、2～20個のC原子を有するアルケニルもしくはアルキニル基（上記言及した基は、夫々1以上の基 R^7 により置換されてよく、上記言及した基中の1以上の CH_2 基は、 $-\text{R}^7\text{C}=\text{CR}^7-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $\text{Si}(\text{R}^7)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^7$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{O}-$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{NR}^7-$ 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^7)$ 、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 SO もしくは SO_2 で置き換えられてよく、ここで、上記言及した基中の1以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、CNもしくは NO_2 で置き換えられてよい。）または、各場合に、1以上の基 R^7 により置換されてよい5～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、または1以上の基 R^7 により置換されてよい5～30個の芳香族環原子を有するアリールオキシもしくはヘテロアリールオキシ基であり；ここで、2個以上の隣接する置換基 R^6 は、モノあるいはポリ環式の環構造を互いに形成してよく；

R^7 は、H、D、F、1～20個のC原子を有する脂肪族炭化水素基、5～30個のC原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であって、1以上のH原子は、DもしくはFで置き換えられてよく、ここで、2個以上の隣接する置換基 R^7 は、モノあるいはポリ環式の環構造を互いに形成してよい。

【請求項10】

ブッフバルトカップリングによる、請求項9記載の化合物の製造方法。

【請求項 1 1】

請求項 9 記載の化合物の電子素子での使用。

【請求項 1 2】

請求項 9 記載の少なくとも一つの化合物を含む電子素子。

【請求項 1 3】

有機集積回路 (O-I C)、有機電界効果トランジスタ (O-F E T)、有機薄膜トランジスタ (O-T F T)、有機発光トランジスタ (O-L E T)、有機太陽電池 (O-S C)、有機光学検査器、有機光受容器、有機電場消光素子 (O-F Q D)、有機発光電子化学電池 (O-L E C)、有機レーザーダイオード (O-l a s e r) より成る群から選ばれる、請求項 1 2 記載の電子素子。

10

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0 0 0 1】

本発明は、新規な有機化合物と、化合物のエレクトロルミネッセンス素子での使用と少なくとも一つの化合物を含むエレクトロルミネッセンス素子に関する。本発明は、さらに、その化合物の製造方法と少なくとも一つのその化合物を含む組成物と調合物に関する。

【0 0 0 2】

エレクトロルミネッセンス素子用の機能性化合物の開発は、現在、集中的な研究主題である。ここで、その目的は、特に、たとえば、パワー効率、寿命または発光色座標等の一以上の関連する点について、エレクトロルミネッセンス素子の改善された特性を達成することができる化合物の開発である。

20

【0 0 0 3】

本発明にしたがうと、用語エレクトロルミネッセンス素子は、とりわけ、有機発光トランジスタ (O L E T)、有機電場消光素子 (O F Q D)、有機発光電子化学電池 (O L E C、L E C、L E E C)、有機レーザーダイオード (O-l a s e r) および有機発光ダイオード (O L E D) の意味で使用される。

【0 0 0 4】

特別な関心事は、O L E D (有機発光ダイオード) と呼ばれる最後に言及された電子素子での使用のための化合物の提供である。O L E D の一般的構造と機能原理は、当業者によく知られ、特に、US 4539507、US 5151629、EP0676461 および WO1998/27136 に記載されている。

30

【0 0 0 5】

なおさらなる改良が、O L E D の特性データに関して、特に、広範な商業的使用の面で、たとえば、表示素子または光源として、いまだ必要とされている。この点で、特に、重要なことは、O L E D の寿命、効率と駆動電圧および達成される色値である。加えて、電子素子での機能性材料としての使用のための化合物は、高い熱安定性と高いガラス転移温度を有し、分解することなく昇華することが望ましい。

【0 0 0 6】

これに関連して、特に、代替正孔輸送材料に対するニーズが存在する。先行技術にしたがう正孔輸送材料においては、電圧は、正孔輸送層の層厚の増加と共に一般的に増加する。実際に、正孔輸送層のより大きな層厚が、望ましいことが多いが、これは、より高い駆動電圧とより悪い性能データをもたらすことが多い。これに関連して、高い電荷担持移動性を有し、その結果、より厚い正孔輸送層を、ほんの僅かの駆動電圧の増加とともに達成することができる新規な正孔輸送材料に対するニーズが存在する。

40

【0 0 0 7】

先行技術は、電子およびエレクトロルミネッセンス素子での電荷輸送材料としての種々のフルオレンの使用を記載している。

【0 0 0 8】

先行技術に記載された化合物は、一般的に、フルオレンの 9-位に非対称な置換基を有する化合物である。

50

【 0 0 0 9 】

JP05303221は、2もしくは4位でアミン基により置換されてよいフルオレンを開示している。フルオレンの4位にアミン基を含む化合物は、フェニル基を含む。これらの数個の化合物は、フルオレンの9-位に非対称な置換基を有する。

【 0 0 1 0 】

すでに知られた化合物にかかわらず、O L E Dでの使用のための新規な正孔輸送および正孔注入材料に対するニーズが引き続き存在する。特に、O L E Dの性能データと特性での上記言及した極めて望ましい改善を達成することができる材料に対するニーズが存在する。

【 0 0 1 1 】

同様に、O L E Dと他の電子素子での使用のための新規なマトリックス材料に対するニーズが存在する。特に、電子素子の良好な効率、長い寿命と低い駆動電圧を好ましくは、もたらず、燐光ドーパントのためのマトリックス材料と混合マトリックス系のためのマトリックス材料に対するニーズが存在する。

【 0 0 1 2 】

したがって、本発明は、たとえば、蛍光もしくは燐光O L E D等のエレクトロルミッセンス素子での使用に適し、特に、正孔輸送もしくは励起子ブロック層中で正孔注入材料および/または正孔輸送材料として、または発光層中でマトリックス材料として使用することができるエレクトロルミッセンス素子と化合物を提供する目的を基礎としている。

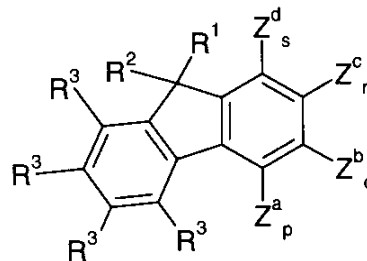
【 0 0 1 3 】

本発明を通じて、以下に示される式(1)の化合物が、エレクトロルミッセンス素子での上記用途のために極めて適していることが驚くべきことに見出された。

【 0 0 1 4 】

したがって、本発明は、少なくとも一つの式(1)の化合物を含むエレクトロルミッセンス素子に関し；

【化1】



式 (1)

【 0 0 1 5 】

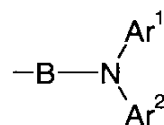
以下が、使用する記号と添え字に適用される：

p、q、r、sは、0または1であり、ここで、 $p + q + r + s = 1$ であり、好ましくは、 $p = 1$ または $r = 1$ または $s = 1$ であり、非常に、好ましくは、 $p = 1$ または $r = 1$ であり；

Z^a_0 、 Z^b_0 、 Z^c_0 、 Z^d_0 は、出現毎に同一であるか異なり、 R^4 であり；

Z^a_1 、 Z^b_1 、 Z^c_1 、 Z^d_1 は、出現毎に同一であるか異なり、以下であり；

【化2】



【 0 0 1 6 】

Bは、単結合、6～30個の環原子を有する二価のアリール基もしくは5～30個の環原子を有する二価のヘテロアリール基であって、それぞれ1以上の基 R^6 により置換され

10

20

30

40

50

てよく、

好ましくは、単結合、または、1以上の基 R^6 により置換されてよい、フェニレン、ピフェニレン、テルフェニレン、ナフチレン、ピリジニレン、ピリミジニレン、ピラジニレン、ピリダジニレン、トリアジニレン、ジベンゾフラニレンあるいはジベンゾチオフェニレンフルオレニレンもしくはカルバゾール基であり；

非常に、好ましくは、単結合、または、1以上の基 R^6 により置換されてよい、フェニレン、ピフェニレン、テルフェニレン、ナフチレン、ジベンゾフラニレンあるいはジベンゾチオフェニレンフルオレニレンもしくはカルバゾール基であり、

Bは、非常に、特に、好ましくは、単結合、または、1以上の基 R^6 により置換されてよいフェニレン基であり、

10

Bは、特別に、好ましくは、単結合であり、

ここで、Bが単結合であるならば、窒素原子は直接フルオレンに結合し；

Ar^1 、 Ar^2 は、出現毎に同一であるか異なり、10～60個の環原子を有するアリール基もしくは10～60個の環原子を有するヘテロアリール基であって、同一であるか異なる1以上の基 R^5 により置換されてよく、ここで、二個の基 Ar^1 または Ar^2 は、それぞれ少なくとも二個以上の芳香族もしくは複素環式芳香族環を含み；

Ar^1 中の芳香族もしくは複素環式芳香族環のうちの二個および/または Ar^2 中の芳香族もしくは複素環式芳香族環のうちの二個は、縮合してよく、好ましくは、非縮合形であり；

および Ar^1 中の芳香族もしくは複素環式芳香族環のうちの二個は、二価の基-O-、-S-、-Si(R^5)₂-、-C(R^5)₂-もしくは-NR⁵-によりブリッジされてよく、または Ar^2 中の芳香族もしくは複素環式芳香族環のうちの二個は、二価の基-O-、-S-、-Si(R^5)₂-、-C(R^5)₂-もしくは-NR⁵-によりブリッジされてよく；

20

および Ar^1 からの芳香族もしくは複素環式芳香族環は、二価の基-O-、-S-、-Si(R^5)₂-、-NR⁵-もしくは-C(R^5)₂-により、 Ar^2 からの芳香族もしくは複素環式芳香族環にブリッジされてよく、ここで、ブリッジされていない Ar^1 と Ar^2 が、好ましく；

R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 および R^5 は、H、D、F、Cl、Br、I、C(=O) R^5 、CN、Si(R^5)₃、NO₂、N(R^5)₂、P(=O)(R^5)₂、S(=O) R^5 、S(=O)₂ R^5 、1～20個のC原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基、2～20個のC原子を有するアルケニルもしくはアルキニル基（上記言及した基は、夫々1以上の基 R^5 により置換されてよく、上記言及した基中の1以上のCH₂基は、-R⁵C=CR⁵-、-C≡C-、Si(R^5)₂、C=O、C=S、C=NR⁵、-C(=O)O-、-C(=O)NR⁵-、P(=O)(R^5)、-O-、-S-、SOもしくはSO₂で置き換えられてよく、ここで、上記言及した基中の1以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、CNもしくはNO₂で置き換えられてよい。）または、各場合に、1以上の基 R^5 により置換されてよい6～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造または1以上の基 R^6 により置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有するアリールオキシ基または各場合に1以上の基 R^6 により置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有するアラルキル基であり；基 R^1 と R^2 は、同一ではあり得ず、基 R^3 ～ R^5 は、出現毎に同一であるか異なってよいが、基 R^1 または R^2 のいずれかと同一であってよく；

30

40

R^6 は、出現毎に同一であるか異なり、H、D、F、Cl、Br、I、C(=O) R^7 、CN、Si(R^7)₃、NO₂、P(=O)(R^7)₂、S(=O) R^7 、S(=O)₂ R^7 、N(R^7)₂、1～20個のC原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基、2～20個のC原子を有するアルケニルもしくはアルキニル基（上記言及した基は、夫々1以上の基 R^7 により置換されてよく、上記言及した基中の1以上のCH₂基は、-R⁷C=CR⁷-、-C≡C-、Si(R^7)₂、C=O、C=S、C=NR⁷

50

、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^7-$ 、 $P(=O)(R^7)$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 SO もしくは SO_2 で置き換えられてよく、ここで、上記言及した基中の1以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、CNもしくは NO_2 で置き換えられてよい。)または、各場合に、1以上の基 R^7 により置換されてよい5~30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、または1以上の基 R^7 により置換されてよい5~30個の芳香族環原子を有するアリールオキシもしくはヘテロアリールオキシ基であり;ここで、2個以上の隣接する置換基 R^6 は、モノあるいはポリ環式の環構造を互いに形成してよく;

R^7 は、H、D、F、1~20個のC原子を有する脂肪族炭化水素基、5~30個のC原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であって、1以上のH原子は、DもしくはFで置き換えられてよく、ここで、2個以上の隣接する置換基 R^7 は、モノあるいはポリ環式の環構造を互いに形成してよい。

10

【0017】

好ましい態様では、式(1)の化合物は、10個を超える環原子を有する縮合芳香族もしくは複素環式芳香族環構造を含まない。

【0018】

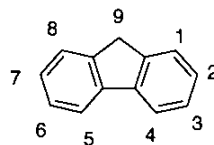
フルオレンの9位での非対称的置換は、その他の位置におけるフルオレンの適切な置換の場合に、キラル分子を生じる。本発明では、ラセミ体は、また、光学異性的に純粋なRおよびS体に加えてカバーされる。したがって、本発明のエレクトロルミッセンス素子は、少なくとも一つの式(1)の化合物を、RおよびS体の、またはラセミ体としての何れかで、好ましくは、ラセミ体として含む。

20

【0019】

ここで、フルオレン上の番号付けは、以下のとおり定義される。

【化3】



【0020】

本発明の意味での、アリール基は、6~60個の芳香族環原子を含み;本発明の意味でのヘテロアリール基は、5~60個の芳香族環原子を含み、そのうちの少なくとも1個は、ヘテロ原子である。ヘテロ原子は、好ましくは、N、OおよびSから選ばれる。これが、基本的な定義である。他の選好が、たとえば、存在する芳香族環原子もしくはヘテロ原子の数に関して本発明の明細書において示されるならば、これらがあてはまる。

30

【0021】

ここで、アリール基もしくはヘテロアリール基は、単純な芳香族環すなわちベンゼン、または、単純な複素環式芳香族環、たとえば、ピリジン、ピリミジンもしくはチオフェン、または、縮合芳香族もしくは複素環式芳香族多環、たとえば、ナフタレン、フェナントレン、キノリンもしくはカルバゾールの何れかの意味で使用される。本発明の意味での縮合芳香族もしくは複素環式芳香族多環は、互いに縮合した二以上の単純芳香族もしくは複素環式芳香族環から成る。

40

【0022】

アリールもしくはヘテロアリール基は、各場合に、上記言及した基により置換されていてもよく、任意の所望の位置を介して、芳香族または複素環式芳香族系に連結していてもよいが、特に、ベンゼン、ナフタレン、アントラセン、フェナントレン、ピレン、ジヒドロピレン、クリセン、ペリレン、フルオランテン、ベンズアントラセン、ベンズフェナントレン、テトラセン、ペンタセン、ベンゾピレン、フラン、ベンゾフラン、イソベンゾフラン、ジベンゾフラン、チオフェン、ベンゾチオフェン、イソベンゾチオフェン、ジベンゾチオフェン、ピロール、インドール、イソインドール、カルバゾール、ピリジン、キノリン、イソキノリン、アクリジン、フェナントリジン、ベンゾ-5,6-キノリン、ベンゾ-6,7-キノリン、ベンゾ-7,8-キノリン、フェノチアジン、フェノキサジン、ピラゾール、イ

50

ンダゾール、イミダゾール、ベンズイミダゾール、ナフトイミダゾール、フェナントロイミダゾール、ピリジンイミダゾール、ピラジンイミダゾール、キノキサリンイミダゾール、オキサゾール、ベンズオキサゾール、ナフトオキサゾール、アントロオキサゾール、フェナントロオキサゾール、イソオキサゾール、1,2-チアゾール、1,3-チアゾール、ベンゾチアゾール、ピリダジン、ベンゾピリダジン、ピリミジン、ベンゾピリミジン、キノキサリン、ピラジン、フェナジン、ナフチリジン、アザカルバゾール、ベンゾカルボリン、フェナントロリン、1,2,3-トリアゾール、1,2,4-トリアゾール、ベンゾトリアゾール、1,2,3-オキサジアゾール、1,2,4-オキサジアゾール、1,2,5-オキサジアゾール、1,3,4-オキサジアゾール、1,2,3-チアジアゾール、1,2,4-チアジアゾール、1,2,5-チアジアゾール、1,3,4-チアジアゾール、1,3,5-トリアジン、1,2,4-トリアジン、1,2,3-トリアジン、テトラゾール、1,2,4,5-テトラジン、1,2,3,4-テトラジン、1,2,3,5-テトラジン、プリン、プテリジン、インドリジンおよびベンゾチアジアゾールから誘導される基の意味で使用される。

10

【0023】

本発明の定義にしたがいアリールオキシ基は、酸素原子を介して結合する、上記定義のとおりのアリール基の意味で使用される。同様の定義がヘテロアリールオキシ基にあてはまる。

【0024】

本発明の意味での芳香族環構造は、環構造中に6～60個のC原子を含む。本発明の意味での複素環式芳香族環構造は、5～60個の芳香族環原子を含み、そのうちの少なくとも1個はヘテロ原子である。ヘテロ原子は、好ましくは、N、Oおよび/またはSから選ばれる。本発明の意味での芳香族もしくは複素環式芳香族環構造は、必ずしもアリールもしくはヘテロアリール基のみを含む構造ではなく、加えて、複数のアリールもしくはヘテロアリール基は、たとえば、 sp^3 混成のC、Si、NあるいはO原子、 sp^2 混成のCあるいはN原子もしくは sp 混成のC原子のような非芳香族単位（好ましくは、H以外の原子は、好ましくは、10%より少ない）により連結されていてもよい構造を意味するものと解される。このように、たとえば9,9'-スピロビフルオレン、9,9'-ジアリールフルオレン、トリアリールアミン、ジアリールエーテル、スチルベン等のような構造も、二個以上のアリール基が、たとえば、直鎖あるいは環状アルキル、アルケニルもしくはアルキニル基により、もしくはシリル基により連結される構造であるから、本発明の意味での芳香族環構造の意味で使用される。さらに、たとえば、ビフェニル、テルフェニルもしくはジフェニルトリアジン等の二個以上のアリールもしくはヘテロアリール基が、単結合を介して互いに結合する構造も、また、本発明の意味での芳香族もしくは複素環式芳香族環構造の意味で使用される。

20

30

【0025】

5～60個の芳香族環原子を有する芳香族または複素環式芳香族環構造は、各場合に、上記した基により置換されていてもよく、任意の所望の位置で、芳香族または複素環式芳香族系に連結していてもよいが、特に、ベンゼン、ナフタレン、アントラセン、ベンズアントラセン、フェナントレン、ベンズフェナントレン、ピレン、クリセン、ペリレン、フルオランテン、ナフタセン、ペンタセン、ベンゾピレン、ビフェニル、ビフェニレン、テルフェニル、テルフェニレン、クアテルフェニル、フルオレン、スピロビフルオレン、ジヒドロフェナントレン、ジヒドロピレン、テトラヒドロピレン、シス-もしくはトランス-インデノフルオレン、トルクセン、イソトルクセン、スピロトルクセン、スピロイソトルクセン、フラン、ベンゾフラン、イソベンゾフラン、ジベンゾフラン、チオフェン、ベンゾチオフェン、イソベンゾチオフェン、ジベンゾチオフェン、ピロール、インドール、イソインドール、カルバゾール、インドロカルバゾール、インデノカルバゾール、ピリジン、キノリン、イソキノリン、アクリジン、フェナントリジン、ベンゾ-5,6-キノリン、ベンゾ-6,7-キノリン、ベンゾ-7,8-キノリン、フェノチアジン、フェノキサジン、ピラゾール、インダゾール、イミダゾール、ベンズイミダゾール、ナフトイミダゾール、フェナントロイミダゾール、ピリジンイミダゾール、ピラジンイミダゾール、キノキサリンイミダ

40

50

ゾール、オキサゾール、ベンズオキサゾール、ナフトオキサゾール、アントロオキサゾール、フェナントロオキサゾール、イソオキサゾール、1,2-チアゾール、1,3-チアゾール、ベンゾチアゾール、ピリダジン、ベンゾピリダジン、ピリミジン、ベンゾピリミジン、キノキサリン、1,5-ジアザアントラセン、2,7-ジアザピレン、2,3-ジアザピレン、1,6-ジアザピレン、1,8-ジアザピレン、4,5-ジアザピレン、4,5,9,10-テトラアザペリレン、ピラジン、フェナジン、フェノキサジン、フェノチアジン、フルオルピン、ナフチリジン、アザカルバゾール、ベンゾカルボリン、フェナントロリン、1,2,3-トリアゾール、1,2,4-トリアゾール、ベンゾトリアゾール、1,2,3-オキサジアゾール、1,2,4-オキサジアゾール、1,2,5-オキサジアゾール、1,3,4-オキサジアゾール、1,2,3-チアジアゾール、1,2,4-チアジアゾール、1,2,5-チアジアゾール、1,3,4-チアジアゾール、1,3,5-トリアジン、1,2,4-トリアジン、1,2,3-トリアジン、テトラゾール、1,2,4,5-テトラジン、1,2,3,4-テトラジン、1,2,3,5-テトラジン、プリン、プテリジン、インドリジンおよびベンゾチアジアゾールまたはこれらの基の組み合わせから誘導される基の意味で使用される。

【0026】

本発明の目的のために、1～40個のC原子を有する直鎖アルキル基または3～40個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル基または2～40個のC原子を有するアルケニルもしくはアルキニル基は、ここで、加えて、個々のH原子もしくはCH₂基は、基の定義の元で上記言及した基により置換されていてよく、好ましくは、基メチル、エチル、n-プロピル、i-プロピル、n-ブチル、i-ブチル、s-ブチル、t-ブチル、2-メチルブチル、n-ペンチル、s-ペンチル、シクロペンチル、ネオペンチル、n-ヘキシル、シクロヘキシル、ネオヘキシル、n-ヘプチル、シクロヘプチル、n-オクチル、シクロオクチル、2-エチルヘキシル、トリフルオロメチル、ペンタフルオロエチル、2,2,2-トリフルオロエチル、エテニル、プロペニル、ブテニル、ペンテニル、シクロペンテニル、ヘキセニル、シクロヘキセニル、ヘプテニル、シクロヘプテニル、オクテニル、シクロオクテニル、エチニル、プロピニル、ブチニル、ペンチニル、ヘキシニルまたはオクチニルの意味で使用される。1～40個のC原子を有するアルコキシもしくはチオアルキル基は、好ましくは、メトキシ、トリフルオロメトキシ、エトキシ、n-プロポキシ、i-プロポキシ、n-ブトキシ、i-ブトキシ、s-ブトキシ、t-ブトキシ、n-ペントキシ、s-ペントキシ、2-メチルブトキシ、n-ヘキソキシ、シクロヘキシルオキシ、n-ヘプトキシ、シクロヘプチルオキシ、n-オクチルオキシ、シクロオクチルオキシ、2-エチルヘキシルオキシ、ペンタフルオロエトキシ、2,2,2-トリフルオロエトキシ、メチルチオ、エチルチオ、n-プロピルチオ、i-プロピルチオ、n-ブチルチオ、i-ブチルチオ、s-ブチルチオ、t-ブチルチオ、n-ペンチルチオ、s-ペンチルチオ、n-ヘキシルチオ、シクロヘキシルチオ、n-ヘプチルチオ、シクロヘプチルチオ、n-オクチルチオ、シクロオクチルチオ、2-エチルヘキシルチオ、トリフルオロメチルチオ、ペンタフルオロエチルチオ、2,2,2-トリフルオロエチルチオ、エテニルチオ、プロペニルチオ、ブテニルチオ、ペンテニルチオ、シクロペンテニルチオ、ヘキセニルチオ、シクロヘキセニルチオ、ヘプテニルチオ、シクロヘプテニルチオ、オクテニルチオ、シクロオクテニルチオ、エチニルチオ、プロピニルチオ、ブチニルチオ、ペンチニルチオ、ヘキシニルチオ、ヘプチニルチオまたはオクチニルチオの意味で使用される。

【0027】

式(1)の化合物中のBは、o-フェニレン、m-フェニレンもしくはp-フェニレン基、1,4-ナフチレン、2,4-ナフチレン、1,5-ナフチレンもしくは2,5-ナフチレン基、3,7-ジベンゾフラニレン基または3,7-ジベンゾチオフェニレン基であることが、さらに、好ましくは、Bは、o-フェニレン、m-フェニレンもしくはp-フェニレン基であることが、非常に、好ましくは、Bは、p-フェニレン基であることが、非常に、特に、好ましくは、ここで、基は出現毎に同一であるか異なってよい1以上の基R⁴により置換されていてよく、基は非置換であることが好ましい。

【0028】

本発明の目的のために好ましいのは、少なくとも一つの一般式(2)の化合物を含むエ

10

20

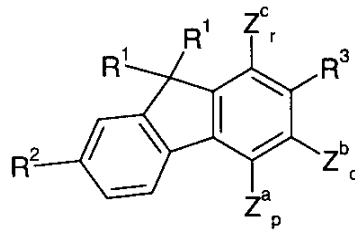
30

40

50

レクトロルミッセス素子であり：

【化 4】



式 (2)

10

【0029】

式中、使用される記号と添え字には上記定義が適用される。

【0030】

少なくとも一つの一般式(1)または(2)の化合物を含むさらに好ましいエレクトロルミッセス素子は、 R^1 および R^2 が、互いに異なり、1～20個のC原子を有する直鎖アルキルもしくはアルコキシ基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキルもしくはアルコキシ基(上記言及した基は、夫々1以上の基 R^6 により置換されてよい。)または、各場合に1以上の基 R^6 により置換されてよい5～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、または、1以上の基 R^6 により置換されてよい6～60個の芳香族環原子を有するアリールオキシ基、または、各場合に1以上の基 R^6 により置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有するアラルキル基である。

20

【0031】

R^1 および R^2 が、互いに異なり、1～20個のC原子を有する直鎖アルキル基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル基(上記言及した基は、夫々1以上の基 R^6 により置換されてよい。)または、各場合に1以上の基 R^6 により置換されてよい6～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であるならば、さらに、非常に、好ましい。

【0032】

R^1 および R^2 が、互いに異なり、1～20個のC原子を有する直鎖アルキル基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル基(上記言及した基は、夫々1以上の基 R^6 により置換されてよい。)ならば、さらに、非常に、特に、好ましく、二個の R^1 および R^2 の一方が、メチル、エチル、n-/i-プロピルまたは、n-/i-/t-ブチル基であり、二個の R^1 および R^2 の他方が、各場合に1以上の基 R^6 により置換されてよい6～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり；ここで、環構造は、特別に、好ましくは、フェニル、ピフェニル、テルフェニルもしくはピリジル基より成る群から選ばれるならば、特別に、好ましい。

30

【0033】

少なくとも一つの一般式(1)または(2)の化合物を含むさらに好ましいエレクトロルミッセス素子は、 R^3 が、出現毎に同一であるか異なり、好ましくは、同一であり、H、D、F、Cl、Br、I、 $N(R^5)_2$ 、1～20個のC原子を有する直鎖アルキルもしくはアルコキシ基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキルもしくはアルコキシ基、2～20個のC原子を有するアルケニルもしくはアルキニル基(上記言及した基は、夫々1以上の基 R^6 により置換されてよく、上記言及した基中の1以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、CNもしくは NO_2 で置き換えられてよい。)または、各場合に、1以上の基 R^6 により置換されてよい6～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、または、1以上の基 R^6 により置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有するアリールオキシ基、または、各場合に1以上の基 R^6 により置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有するアラルキル基より成る群から選ばれ；ここで、2個以上の基 R^3 は、たがいに結合してよくかつ環を形成してもよいことを特徴とする。

40

50

【 0 0 3 4 】

R^3 が、出現毎に同一であるか異なり、好ましくは、同一であり、H、D、F、Cl、Br、I、 $N(R^6)_2$ 、1～20個のC原子を有する直鎖アルキル基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル基（上記言及した基は、夫々1以上の基 R^6 により置換されてよく、上記言及した基中の1以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、CNもしくは NO_2 で置き換えられてよい。）または、各場合に、1以上の基 R^6 により置換されてよい6～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であるならば、さらに、非常に好ましい。基 R^3 のための特に、好ましい芳香族もしくは複素環式芳香族環構造のいくつかは、フェニル、ピフェニル、テルフェニル、クアテルフェニル、ピリジル基、トリアジニル、ナフチル、フルオレニル、ジベンゾチオフェニル、ジベンゾフラニル基から選ばれ、それぞれの基は、1以上の基 R^6 により置換されてよい。

10

【 0 0 3 5 】

非常に、特に、好ましい態様では、本発明は、 R^3 がHである少なくとも一つの一般式(1)の化合物を含むエレクトロルミッセンス素子に関する。

【 0 0 3 6 】

さらに、非常に、特に、好ましい態様では、本発明は、 R^3 が、1～20個のC原子を有する直鎖アルキル基または3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル基であることを特徴とする少なくとも一つの一般式(1)の化合物を含むエレクトロルミッセンス素子に関する。

20

【 0 0 3 7 】

なおさらに、非常に、特に、好ましい態様では、本発明は、 R^3 が、6～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であることを特徴とする少なくとも一つの一般式(1)の化合物を含むエレクトロルミッセンス素子に関する。

【 0 0 3 8 】

少なくとも一つの一般式(1)または(2)の化合物を含むさらに好ましいエレクトロルミッセンス素子は、 R^4 が、出現毎に同一であるか異なり、H、D、F、Cl、Br、I、 $N(R^6)_2$ 、1～20個のC原子を有する直鎖アルキルもしくはアルコキシ基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキルもしくはアルコキシ基（上記言及した基は、夫々1以上の基 R^6 により置換されてよく、上記言及した基中の1以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、CNもしくは NO_2 で置き換えられてよい。）または、各場合に、1以上の基 R^6 により置換されてよい6～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、または、1以上の基 R^6 により置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有するアリーロキシ基、または、各場合に1以上の基 R^6 により置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有するアラルキル基より成る群から選ばれ；ここで、2個以上の基 R^4 は、たがいに結合してよくかつ環を形成してもよいことを特徴とし、ここで、 R^4 が、環を形成しないならば好ましい。

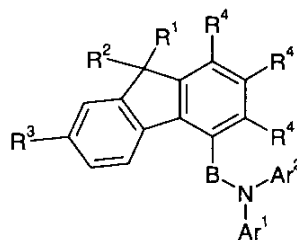
30

【 0 0 3 9 】

好ましい態様では、本発明は、少なくとも一つの一般式(3)の化合物を含むエレクトロルミッセンス素子に関し：

【 化 5 】

40



式 (3)

【 0 0 4 0 】

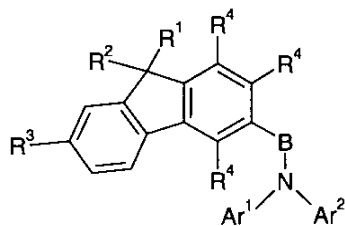
式中、使用される記号と添え字には、上記定義が適用される。

50

【 0 0 4 1 】

非常に、好ましい態様では、本発明は、少なくとも一つの一般式 (4) の化合物を含むエレクトロルミッセンス素子に関し：

【 化 6 】



式 (4)

10

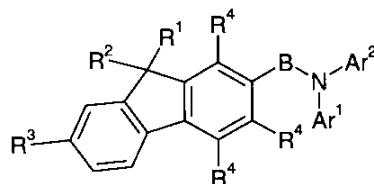
【 0 0 4 2 】

式中、使用される記号と添え字には、上記定義が適用される。

【 0 0 4 3 】

さらに、好ましい態様では、本発明は、少なくとも一つの一般式 (5) の化合物を含むエレクトロルミッセンス素子に関し：

【 化 7 】



式 (5)

20

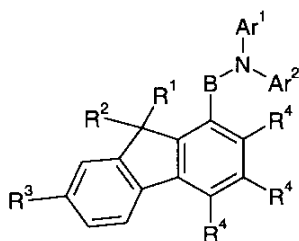
【 0 0 4 4 】

式中、使用される記号と添え字には、上記定義が適用される。

【 0 0 4 5 】

さらに、好ましい態様では、本発明は、少なくとも一つの一般式 (6) の化合物エレクトロルミッセンス素子に関し：

【 化 8 】



式 (6)

30

【 0 0 4 6 】

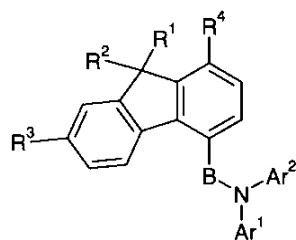
式中、使用される記号と添え字には、上記定義が適用される。

【 0 0 4 7 】

さらに、好ましい態様では、本発明は、少なくとも一つの一般式 (7) の化合物を含むエレクトロルミッセンス素子に関し：

40

【化 9】



式 (7)

【 0 0 4 8 】

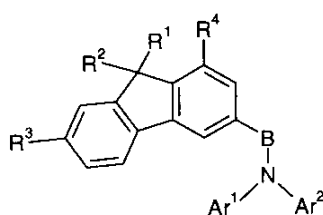
10

式中、使用される記号と添え字には、上記定義が適用される。

【 0 0 4 9 】

さらに、非常に、好ましい態様では、本発明は、少なくとも一つの一般式 (8) の化合物を含むエレクトロルミッセンス素子に関し：

【化 1 0】



式 (8)

20

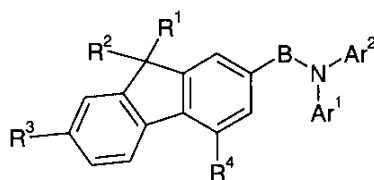
【 0 0 5 0 】

式中、使用される記号と添え字には、上記定義が適用される。

【 0 0 5 1 】

さらに、非常に、好ましい態様では、本発明は、少なくとも一つの一般式 (9) の化合物を含むエレクトロルミッセンス素子に関し：

【化 1 1】



式 (9)

30

【 0 0 5 2 】

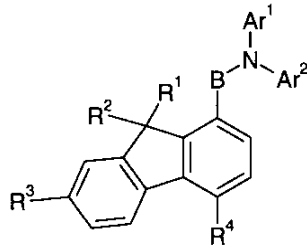
式中、使用される記号と添え字には、上記定義が適用される。

【 0 0 5 3 】

非常に、好ましい態様では、本発明は、少なくとも一つの一般式 (1 0) の化合物を含むエレクトロルミッセンス素子に関し：

40

【化 1 2】



式 (10)

10

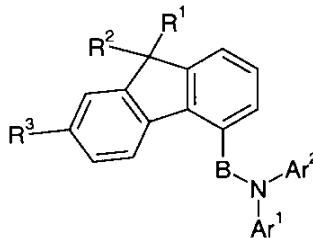
【 0 0 5 4】

式中、使用される記号と添え字には、上記定義が適用される。

【 0 0 5 5】

さらに、非常に、好ましい態様では、本発明は、少なくとも一つの一般式 (1 1) の化合物を含むエレクトロルミッセンス素子に関し：

【化 1 3】



式 (11)

20

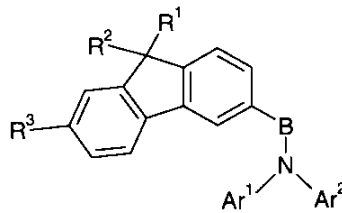
【 0 0 5 6】

式中、使用される記号と添え字には、上記定義が適用される。

【 0 0 5 7】

さらに、非常に、好ましい態様では、本発明は、少なくとも一つの一般式 (1 2) の化合物を含むエレクトロルミッセンス素子に関し：

【化 1 4】



式 (12)

30

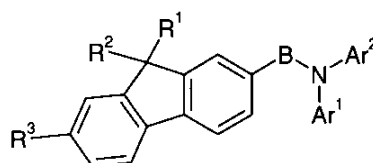
【 0 0 5 8】

式中、使用される記号と添え字には、上記定義が適用される。

【 0 0 5 9】

さらに、非常に好ましい態様では、本発明は、少なくとも一つの一般式 (1 3) の化合物を含むエレクトロルミッセンス素子に関し：

【化 1 5】



式 (13)

50

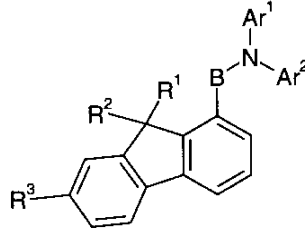
【 0 0 6 0 】

式中、使用される記号と添え字には、上記定義が適用される。

【 0 0 6 1 】

非常に、特に、好ましい態様では、本発明は、少なくとも一つの一般式 (1 4) の化合物を含むエレクトロルミッセンス素子に関し：

【 化 1 6 】



10

式 (14)

【 0 0 6 2 】

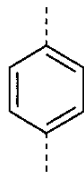
式中、使用される記号と添え字には、上記定義が適用される。

【 0 0 6 3 】

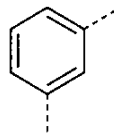
さらに、好ましいものは、B が式 (1 5) ~ (3 6) の基から選ばれ、これらの基は、互いに独立する一以上の基 R^6 により置換されてもよく、 R^6 は、上記定義されるとおりである式 (1) ~ (1 4) の化合物である。

20

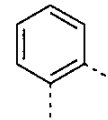
【 化 1 7 - 1 】



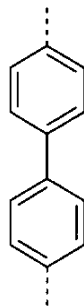
式 (15)



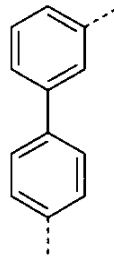
式 (16)



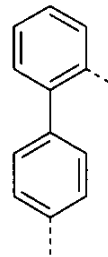
式 (17)



式 (18)



式 (19)

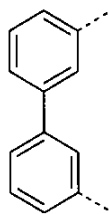


式 (20)

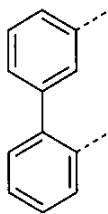
30

40

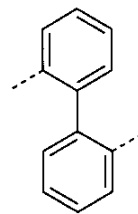
【化 17 - 2】



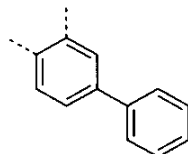
式 (21)



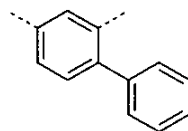
式 (22)



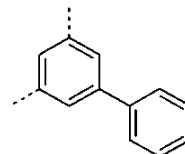
式 (23)



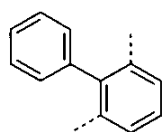
式 (24)



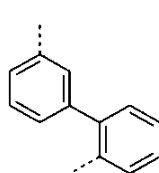
式 (25)



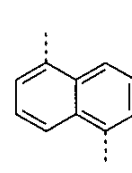
式 (26)



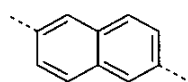
式 (27)



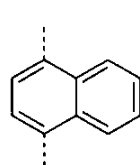
式 (28)



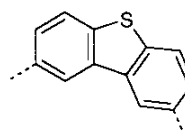
式 (29)



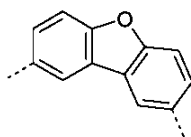
式 (30)



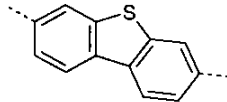
式 (31)



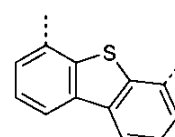
式 (32)



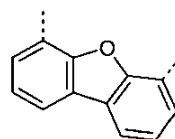
式 (33)



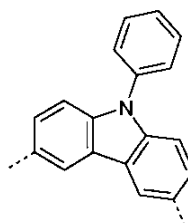
式 (34)



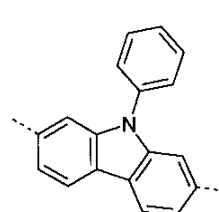
式 (35)



式 (36)

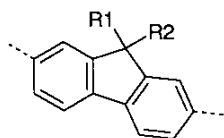


式 (37)

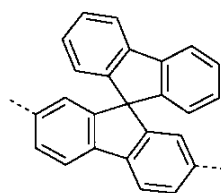


式 (38)

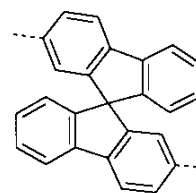
【化 17 - 3】



式 (39)



式 (40)



式 (41)

10

20

30

40

50

【0064】

式中、破線は結合位置を示す。

【0065】

特に、好ましいものは、Bが、式(15)～(41)の基から選ばれ、これらの基が非置換である上記示される式(1)～(14)の化合物である。

【0066】

非常に、特に、好ましいものは、Bが、式(15)の基に相当し、この基が非置換である上記示される式(1)～(14)の化合物である。

【0067】

特別に、好ましいものは、Bが単結合であり、そこで、窒素原子が単結合を介してフル
オレンに直接結合することを特徴とする式(1)～(14)の化合物である。

10

【0068】

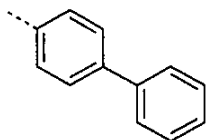
Ar^1 および Ar^2 は、好ましくは、出現毎に同一であるか異なり、フェニルピリジル、フェニルナフチル、ピフェニル、テルフェニルもしくはクアテルフェニルから選ばれ、同一であるか互いに異なってよい1以上の基 R^6 により置換されてよく、 Ar^1 中の芳香族もしくは複素環式芳香族環の二個は、二価の基-O-、-S-、-C(R^5)₂-もしくは-Si(R^5)₂-によりブリッジされてよく、または、 Ar^2 中の二個の芳香族もしくは複素環式芳香族環の二個は、二価の基-O-、-S-、-C(R^5)₂-もしくは-Si(R^5)₂-によりブリッジされてよく、ここで、ブリッジされない環が好ましく、ここで、 Ar^1 からの芳香族もしくは複素環式芳香族環は、二価の基-O-、-S-、-Si(R^6)
2-、NR⁶もしくは-C(R^6)₂により、 Ar^2 からの芳香族もしくは複素環式芳香族環にブリッジしてよく、ここで、ブリッジされない Ar^1 および Ar^2 が好ましい。

20

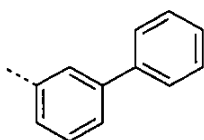
【0069】

本発明の、非常に好ましい態様では、 Ar^1 および Ar^2 は、好ましくは、出現毎に同一であるか異なり、1以上の基 R^6 により置換されてよい以下の式(42)～(142)の基から選択され、

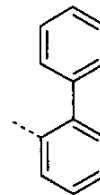
【化 18 - 1】



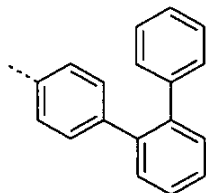
式 (42)



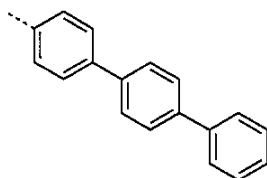
式 (43)



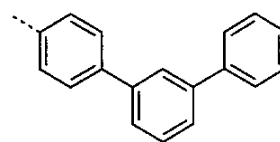
式 (44)



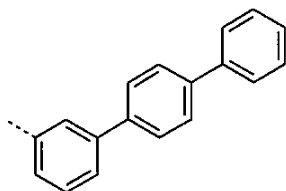
式 (45)



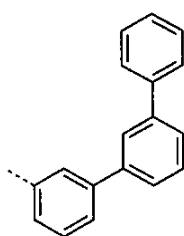
式 (46)



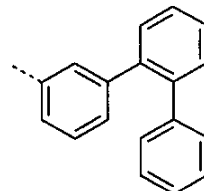
式 (47)



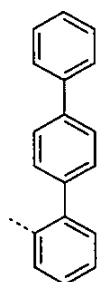
式 (48)



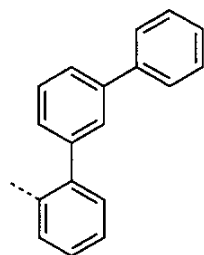
式 (49)



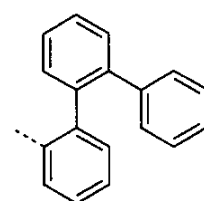
式 (50)



式 (51)



式 (52)



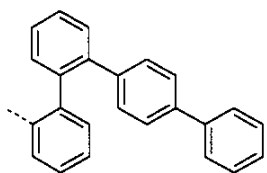
式 (53)

10

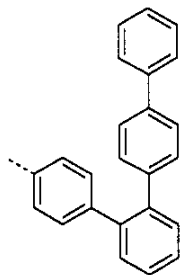
20

30

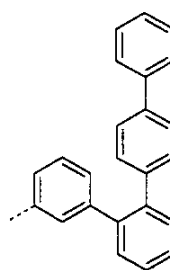
【化 1 8 - 2】



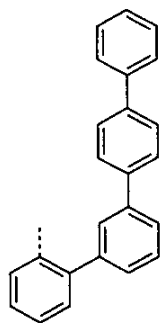
式 (54)



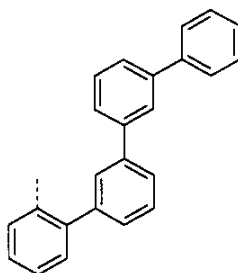
式 (55)



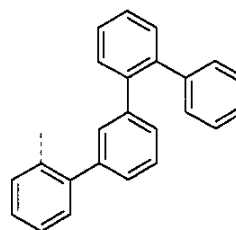
式 (56)



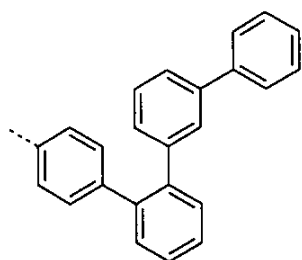
式 (57)



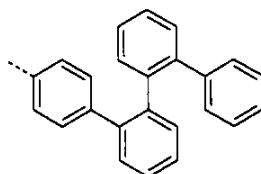
式 (58)



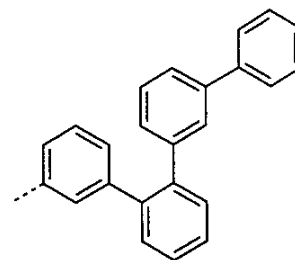
式 (59)



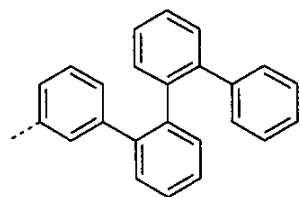
式 (60)



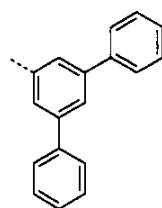
式 (61)



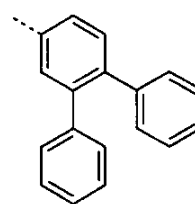
式 (62)



式 (63)



式 (64)



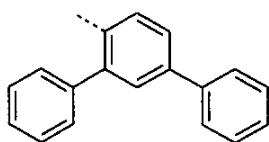
式 (65)

10

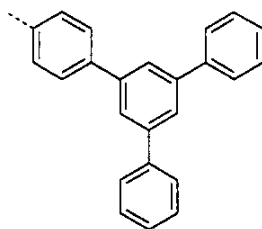
20

30

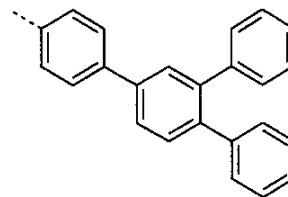
【化 18 - 3】



式 (66)

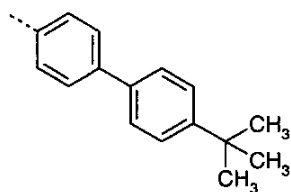


式 (67)

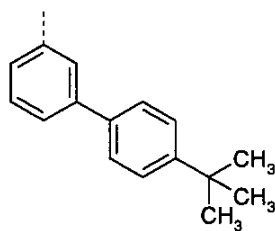


式 (68)

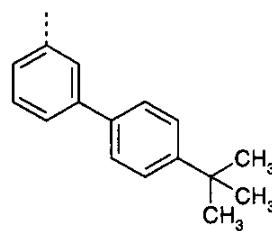
10



式 (69)

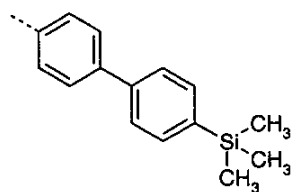


式 (70)

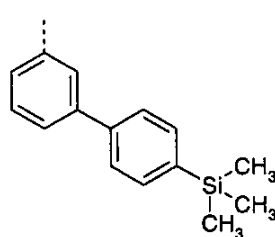


式 (71)

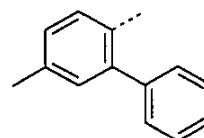
20



式 (72)

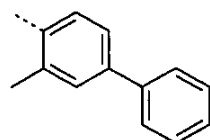


式 (73)

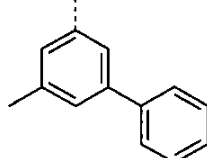


式 (74)

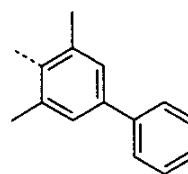
30



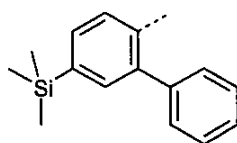
式 (75)



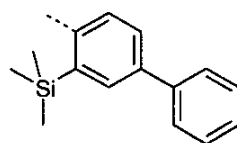
式 (76)



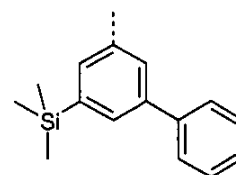
式 (77)



式 (78)



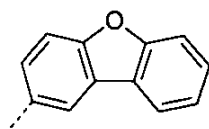
式 (79)



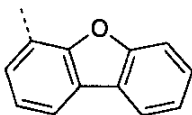
式 (80)

40

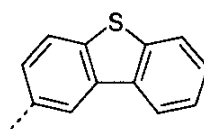
【化 18 - 4】



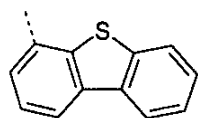
式 (81)



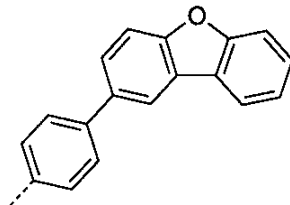
式 (82)



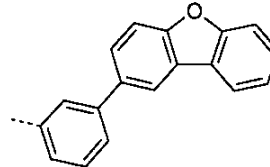
式 (83)



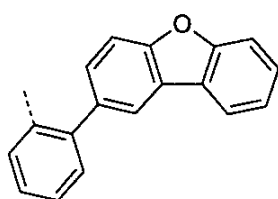
式 (84)



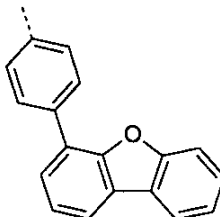
式 (85)



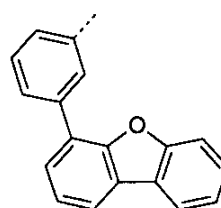
式 (86)



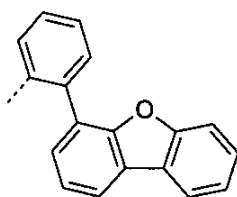
式 (87)



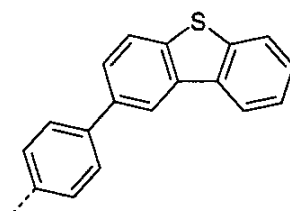
式 (88)



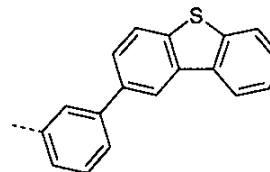
式 (89)



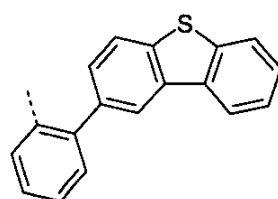
式 (90)



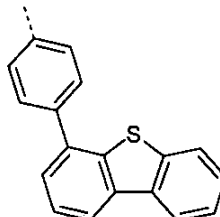
式 (91)



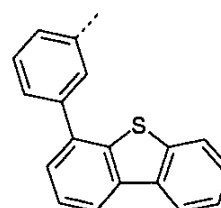
式 (92)



式 (93)



式 (94)



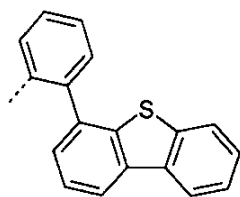
式 (95)

10

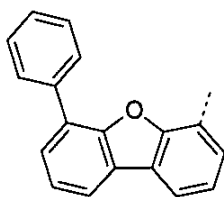
20

30

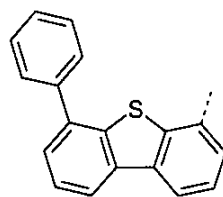
【化 18 - 5】



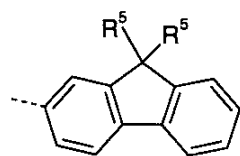
式 (96)



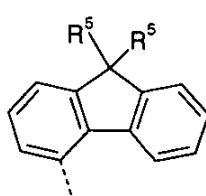
式 (97)



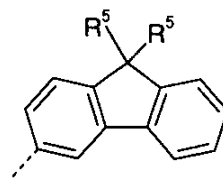
式 (98)



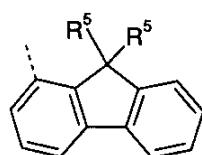
式 (99)



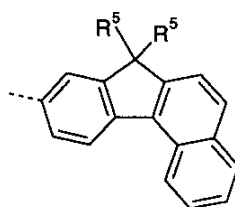
式 (100)



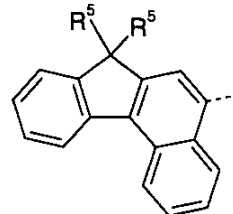
式 (101)



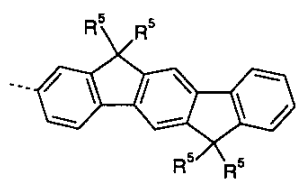
式 (102)



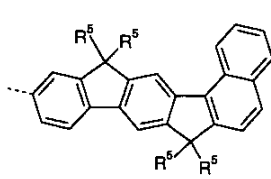
式 (103)



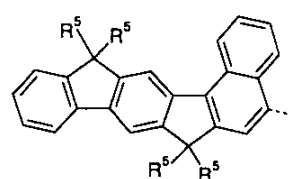
式 (104)



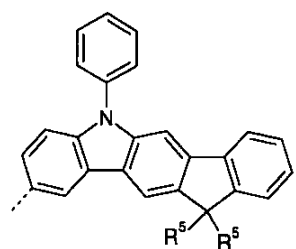
式 (105)



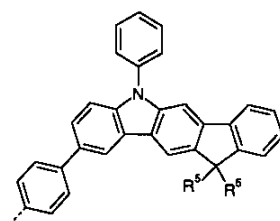
式 (106)



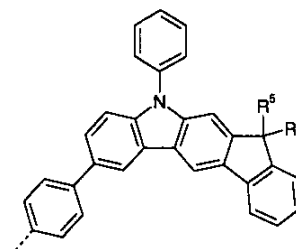
式 (107)



式 (108)



式 (109)



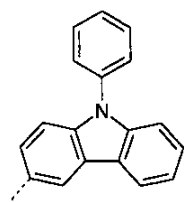
式 (110)

10

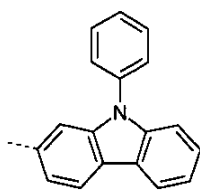
20

30

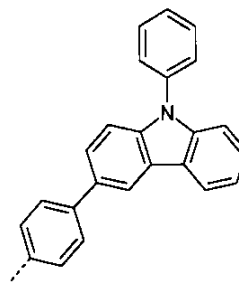
【化 18 - 6】



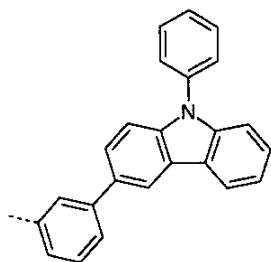
式 (111)



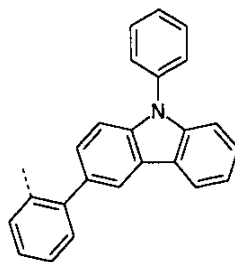
式 (112)



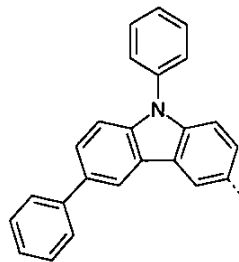
式 (113)



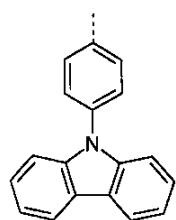
式 (114)



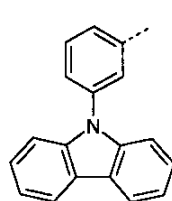
式 (115)



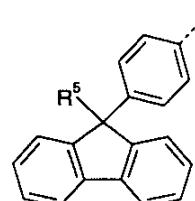
式 (116)



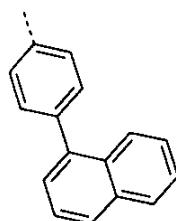
式 (117)



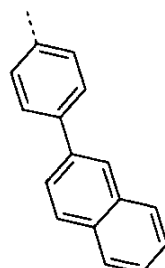
式 (118)



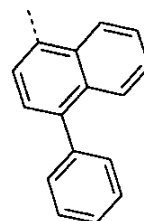
式 (119)



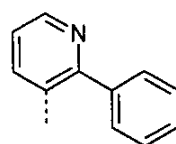
式 (120)



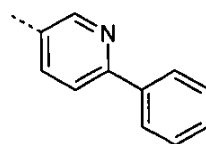
式 (121)



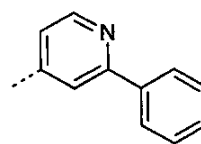
式 (122)



式 (123)



式 (124)



式 (125)

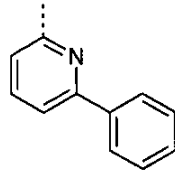
10

20

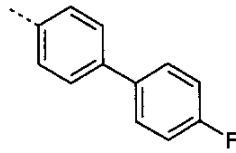
30

40

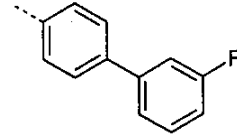
【化 18 - 7】



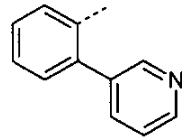
式 (126)



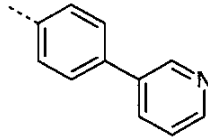
式 (127)



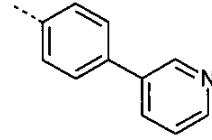
式 (128)



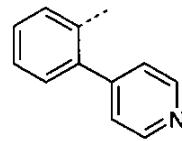
式 (129)



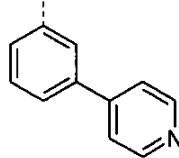
式 (130)



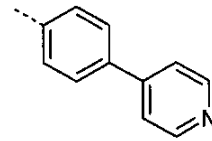
式 (131)



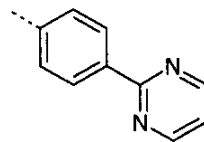
式 (132)



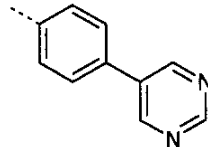
式 (133)



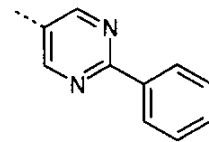
式 (134)



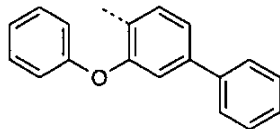
式 (135)



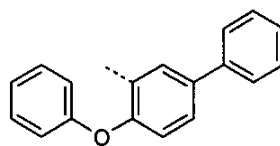
式 (136)



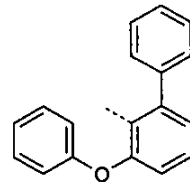
式 (137)



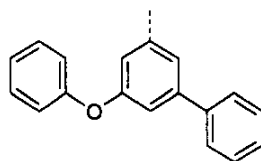
式 (138)



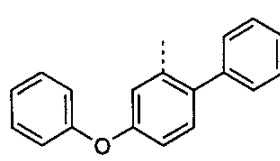
式 (139)



式 (140)



式 (141)



式 (142)

【0070】

式中、破線は、窒素原子への結合位置を示す。

【0071】

特別に、好ましい、少なくとも一つの式(143)～(145)の化合物を含むエレクトロルミッセンス素子は、上記定義が使用される記号に適用され、ここで、hとiは、互いに独立して、0、1、2、3および4であり、jとkは、互いに独立して、0、1、2、3、4および5である。

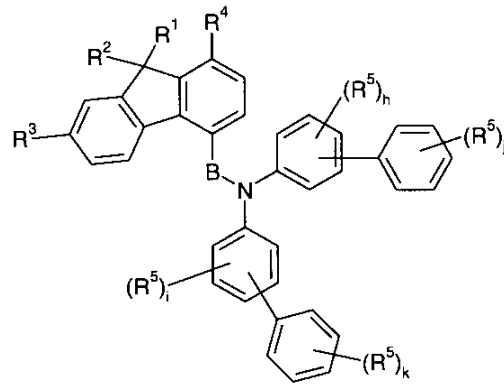
10

20

30

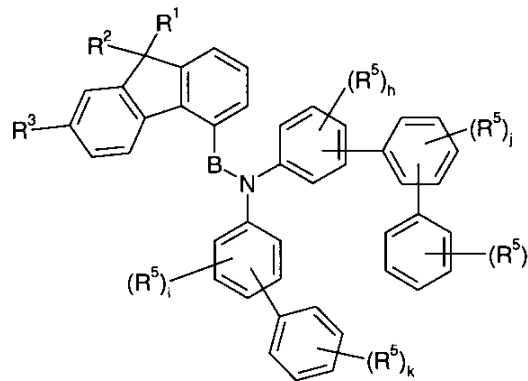
40

【化 19】



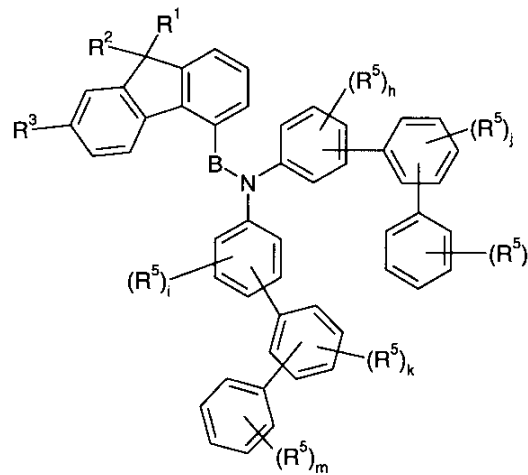
式 (143)

10



式 (144)

20



式 (145)

30

【0072】

40

式(143)～(145)の化合物で使用される記号に、以下が適用されるならば、さらに、より好ましい。

【0073】

R^1 および R^2 が、互いに異なり、1～20個のC原子を有する直鎖アルキル基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル基(上記言及した基は、夫々1以上の基 R^6 により置換されてよい。)または、各場合に1以上の基 R^6 により置換されてよい6～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり、二個の基 R^1 および R^2 の一つが、1～20個のC原子を有する直鎖アルキル基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル基(上記言及した基は、夫々1以上の基 R^6 により置換されてよい。)が、特別に、好ましく、二個の基 R^1 および R^2 の一方が、メチ

50

ル、エチル、*n*-/*i*-プロピルまたは、*n*-/*i*-/*t*-ブチル基であり、二個の基 R^1 および R^2 の他方が、各場合に 1 以上の基 R^6 により置換されてよい 6 ~ 30 個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり；ここで、環構造は、特別に、好ましくは、フェニル、ビフェニル、テルフェニルもしくはピリジル基より成る群から選ばれるならば、特別に、好ましく；

R^3 は、H、D、F、Cl、Br、I、1 ~ 20 個の C 原子を有する直鎖アルキル基、3 ~ 20 個の C 原子を有する分岐あるいは環状アルキル基（上記言及した基は、夫々 1 以上の基 R^6 により置換されてよく、上記言及した基中の 1 以上の H 原子は、D、F、Cl、Br、I、CN もしくは NO_2 で置き換えられてよい。）または、各場合に、1 以上の基 R^6 により置換されてよい 6 ~ 30 個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり；ここで、 R^3 は、好ましくは、H であり；

10

B は、単結合またはフェニレン、ビフェニレン、テルフェニレン、ナフチレン、ジベンゾフラニレンあるいはジベンゾチオフェニレンフルオレニレンもしくはカルバゾール基であり、1 以上の基 R^6 により置換されてよく、B は、特別に、好ましくは、単結合であり；

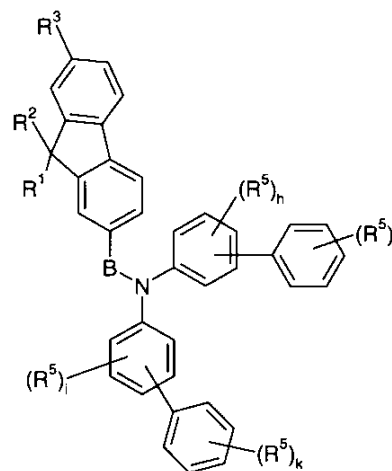
およびここで、 R^5 は上記定義されるとおりであり、 R^5 は H であることが特別に好ましい。

【0074】

特別に、好ましい、少なくとも一つの式 (146) ~ (148) の化合物を含むエレクトロルミッセンス素子は、上記定義が使用される記号に適用され、ここで、*h* と *i* は、互いに独立して、0、1、2、3 および 4 であり、*j* と *k* は、互いに独立して、0、1、2、3、4 および 5 であってよい。

20

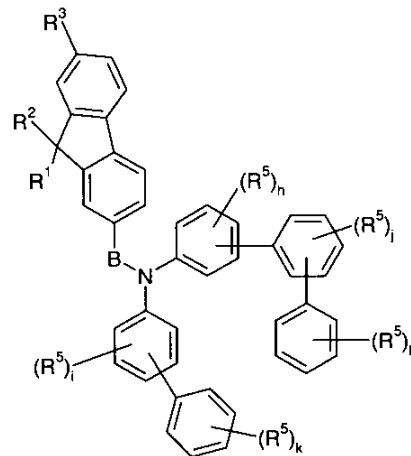
【化20-1】



30

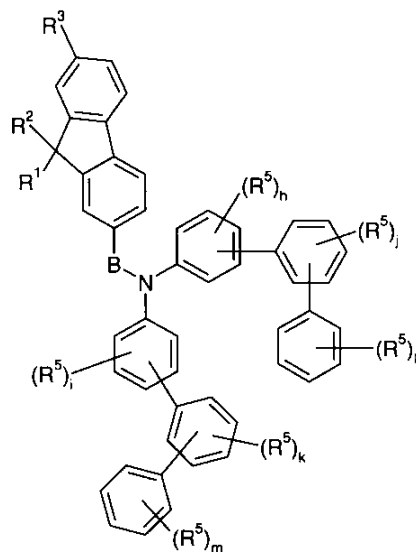
式 (146)

【化 20 - 2】



式 (147)

10



式 (148)

20

30

【0075】

式(146)～(148)の化合物中で使用される記号に以下が適用されるならば、さらに、より好ましい。

【0076】

R^1 および R^2 が、互いに異なり、1～20個のC原子を有する直鎖アルキル基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル基(上記言及した基は、夫々1以上の基 R^6 により置換されてよい。)または、各場合に1以上の基 R^6 により置換されてよい6～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり、二個の基 R^1 および R^2 の一つが、1～20個のC原子を有する直鎖アルキル基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル基(上記言及した基は、夫々1以上の基 R^6 により置換されてよい。)が、特別に、好ましく、二個の基 R^1 および R^2 の一方が、メチル、エチル、*n*-/*i*-プロピルまたは、*n*-/*i*-/*t*-ブチル基であり、二個の基 R^1 および R^2 の他方が、各場合に1以上の基 R^4 により置換されてよい6～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり；ここで、環構造は、特別に、好ましくは、フェニル、ピフェニル、テルフェニルもしくはピリジル基より成る群から選ばれる。

40

【0077】

R^3 は、H、D、F、Cl、Br、I、1～20個のC原子を有する直鎖アルキル基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル基(上記言及した基は、夫々1以上の基 R^4 により置換されてよく、上記言及した基中の1以上のH原子は、D、F、Cl

50

、Br、I、CNもしくはNO₂で置き換えられてよい。)または、各場合に、1以上の基R⁶により置換されてよい6~30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり;ここで、R³は、特別に好ましくは、Hであり;

Bは、単結合またはフェニレン、ピフェニレン、テルフェニレン、ナフチレン、ジベンゾフラニレンあるいはジベンゾチオフェニレンフルオレニレンもしくはカルバゾール基であり、1以上の基R⁶により置換されてよく、Bは、特別に、好ましくは、単結合である。

【0078】

非常に、特に、好ましい態様では、本発明は、モノアミンまたはジアミン化合物、特に、好ましくは、モノアミン化合物であることを特徴とする一般式(1)の化合物に関する。

10

【0079】

本発明の素子は、任意のエレクトロルミッセンス素子であり得る。本発明の目的のために、エレクトロルミッセンス素子は、好ましくは、有機発光トランジスタ(OLET)、有機電場消光素子(OFQD)、有機発光電子化学電池(OLEC、LEC、LEEC)、有機レーザーダイオード(O-laser)および有機発光ダイオード(OLED)である。有機発光電子化学電池(OLEC、LEC、LEEC)または有機発光ダイオード(OLED)が好ましい。本発明のエレクトロルミッセンス素子は、非常に、特に、好ましくは、有機発光ダイオード(OLED)である。

20

【0080】

一般式(1)の化合物は、特に、エレクトロルミッセンス素子中で以下の層で以下の機能で使用する:・正孔輸送もしくは正孔注入層中で正孔輸送材料として、・励起子ブロック材料として・電子ブロック材料として・発光層中でマトリックス材料として・発光層中でエミッターとして。

【0081】

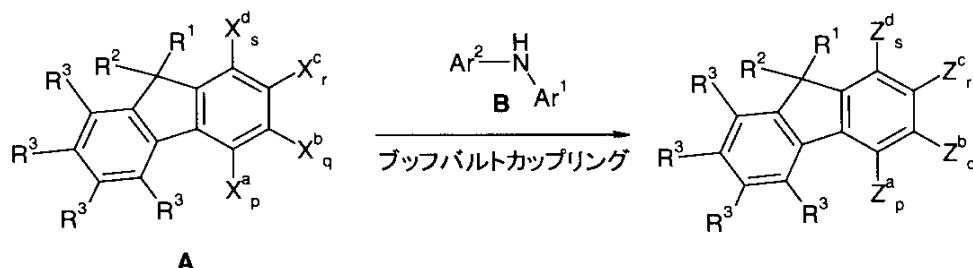
化合物の合成は、先行技術から当業者に知られたプロセスにより、実施することができる。調製は、たとえば、ハロゲン化、ブッフバルトカップリングおよびスズキカップリングにより実施することができる。

【0082】

以下の反応スキームは、式(1)の化合物の調製のための好ましい合成経路を示す。化合物の合成のために、フルオレン化合物Aは、式Ar¹-NH-Ar²のアミンBとブッフバルトカップリングで反応する。

30

【化21】



40

【0083】

式中、上記定義が使用される記号と添え字に適用され、ここで、

X^a₀、X^b₀、X^c₀、X^d₀は、出現毎に同一であるか異なり、R⁴であり、および

X^a₁、X^b₁、X^c₁、X^d₁は、-B-Yであり、Yは、脱離基、たとえば、ハロゲンである。

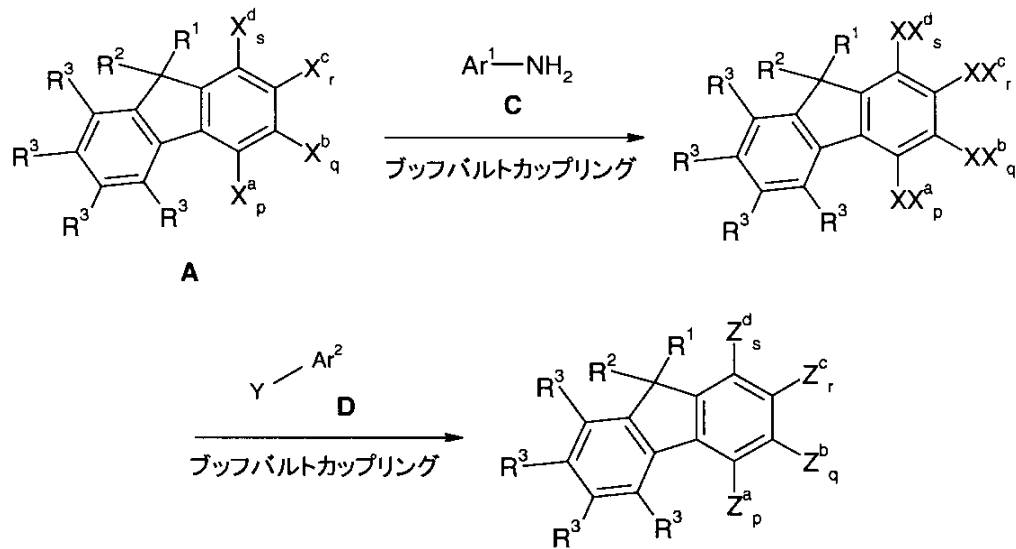
【0084】

本発明の化合物の調製のための別の好ましい合成経路は、以下の反応スキームに描かれる。合成経路は、二種のカップリング反応を含む:まず、フルオレン化合物Aは、第1のブッフバルトカップリングで式Ar¹-NH₂のアミンBと反応する。最後に第2のブッ

50

フバルトカップリングが、化合物D、たとえば、プロモアリール化合物と共に実施される。

【化22】



10

【0085】

式中、Yは、また、脱離基、たとえば、ハロゲンであり、

20

およびここで、

XX^a_0 、 XX^b_0 、 XX^c_0 、 X^d_0 は、出現毎に同一であるか異なり、 R^3 であり、および

XX^a_1 、 XX^b_1 、 XX^c_1 、 X^d_1 は、 $-\text{B}-\text{NH}-\text{Ar}^1$ である。

【0086】

化合物の調製に使用される出発化合物A、B、CおよびDのための合成経路は、当業者になじみである。さらに、いくつかの明白な合成経路が実施例に詳細に記載される。

【0087】

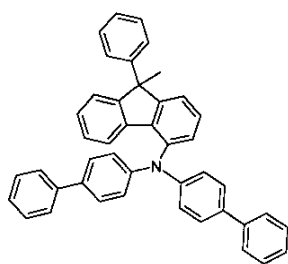
一般式(1)の化合物の調製のための好ましいカップリング反応は、ブッフバルトカップリングである。

30

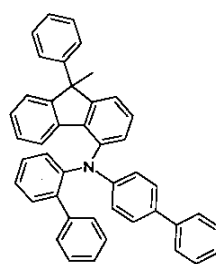
【0088】

エレクトロルミッセンス素子の好ましい化合物が、以下の表の例により示される。

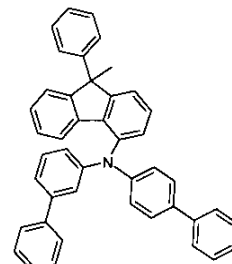
【化23-1】



式 (149)



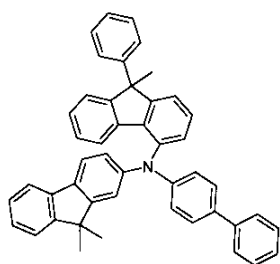
式 (150)



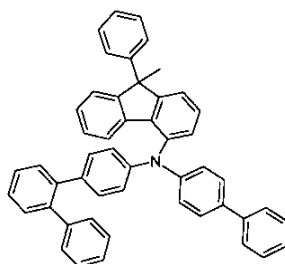
式 (151)

40

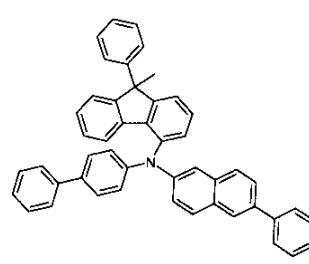
【化 2 3 - 2】



式 (152)

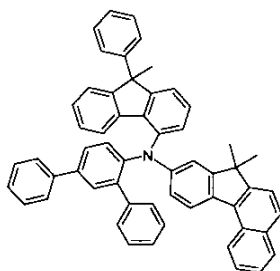


式 (153)

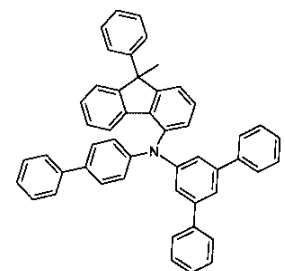


式 (154)

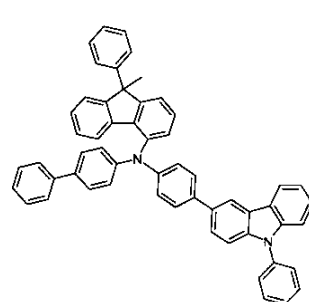
10



式 (155)

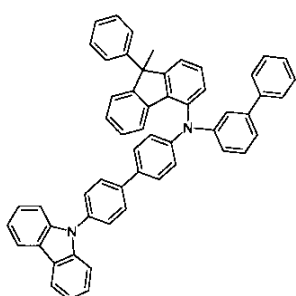


式 (156)

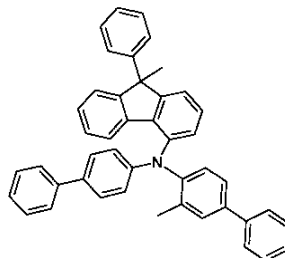


式 (157)

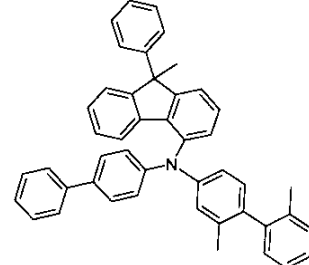
20



式 (158)

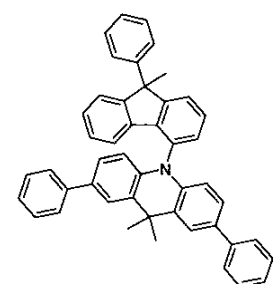


式 (159)

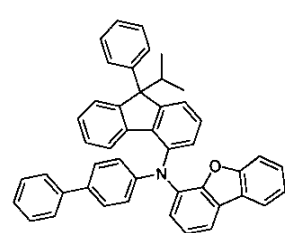


式 (160)

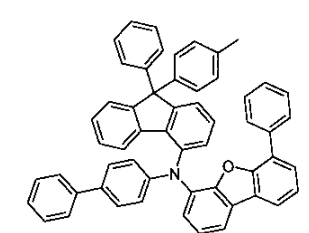
30



式 (161)



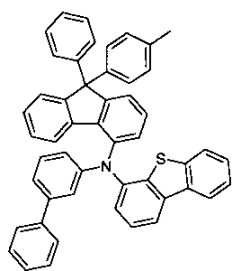
式 (162)



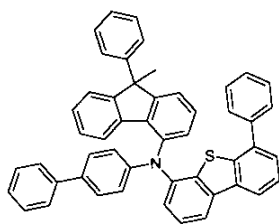
式 (163)

40

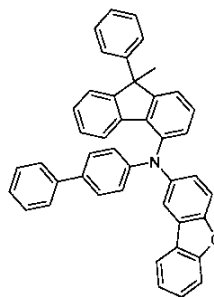
【化 2 3 - 3】



式 (164)

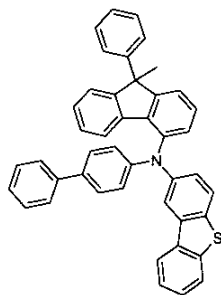


式 (165)

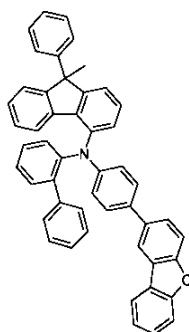


式 (166)

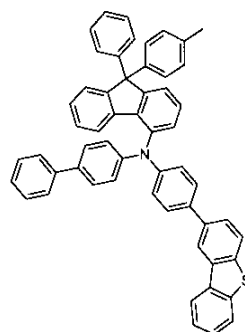
10



式 (167)

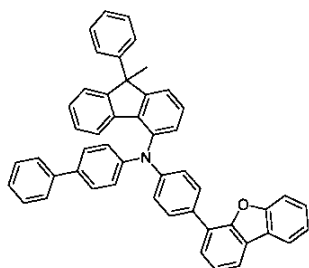


式 (168)

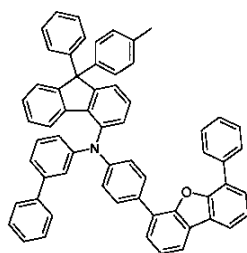


式 (169)

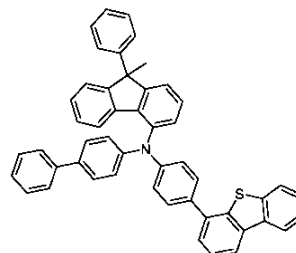
20



式 (170)

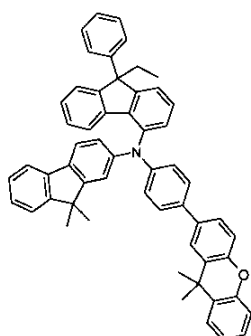


式 (171)

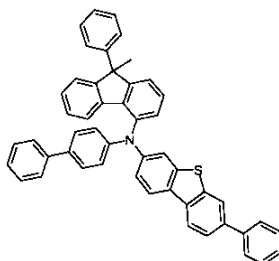


式 (172)

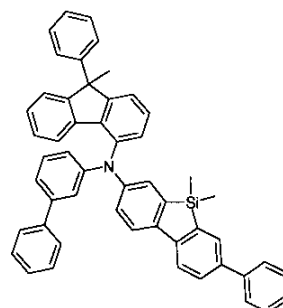
30



式 (173)



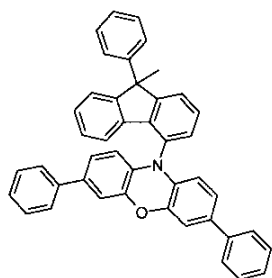
式 (174)



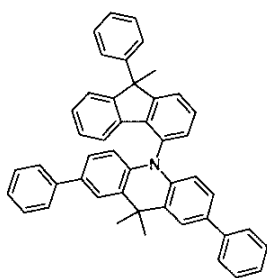
式 (175)

40

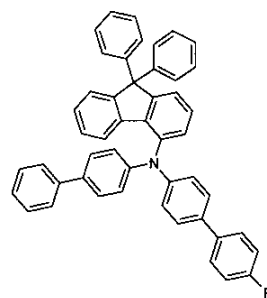
【化 2 3 - 4】



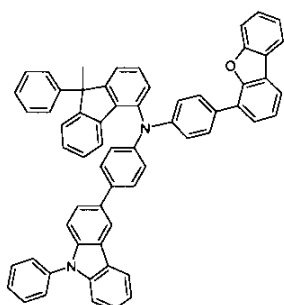
式 (176)



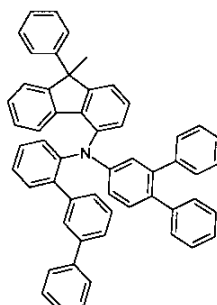
式 (177)



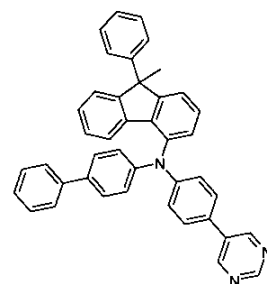
式 (178)



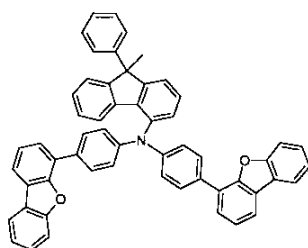
式 (179)



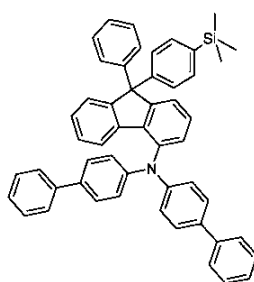
式 (180)



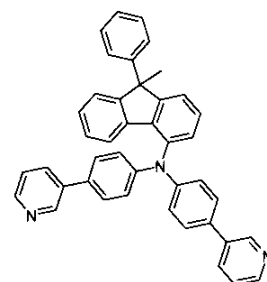
式 (181)



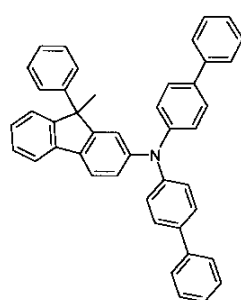
式 (182)



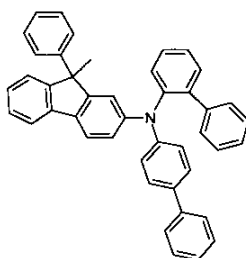
式 (183)



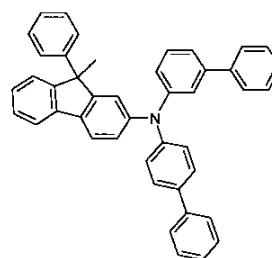
式 (184)



式 (185)



式 (186)



式 (187)

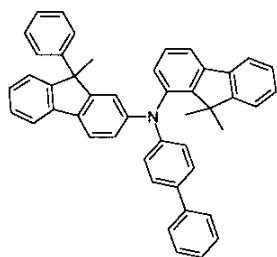
10

20

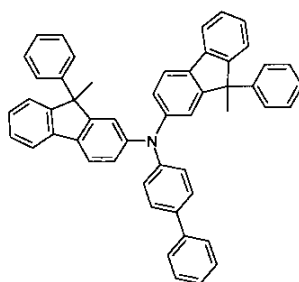
30

40

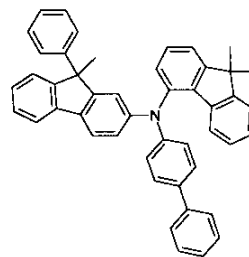
【化 2 3 - 5】



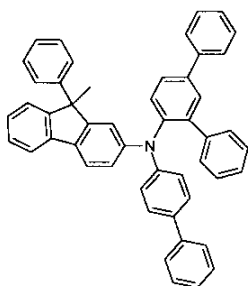
式 (188)



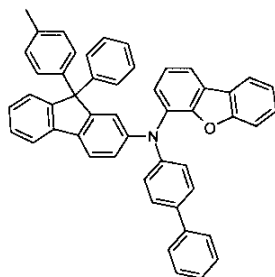
式 (189)



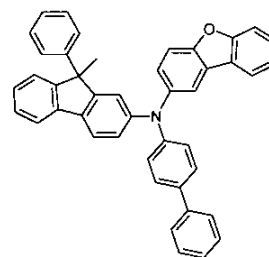
式 (190)



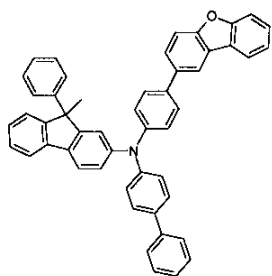
式 (191)



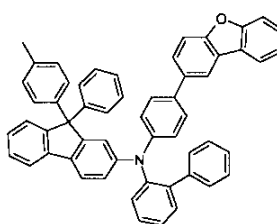
式 (192)



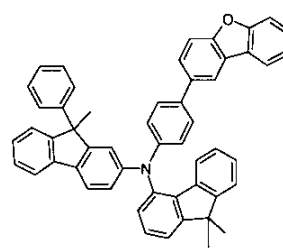
式 (193)



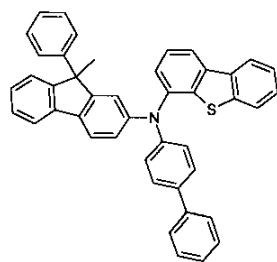
式 (194)



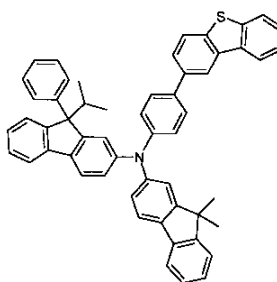
式 (195)



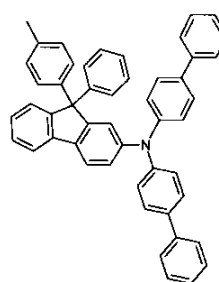
式 (196)



式 (197)



式 (198)



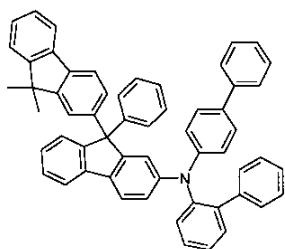
式 (199)

10

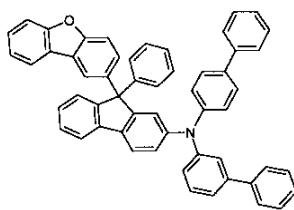
20

30

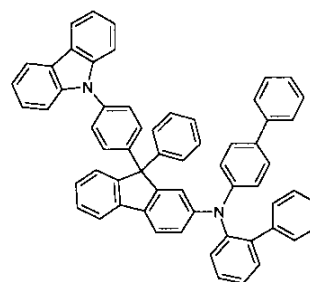
【化 2 3 - 6】



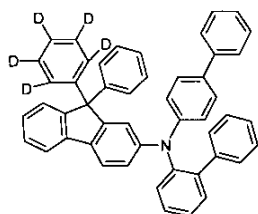
式 (200)



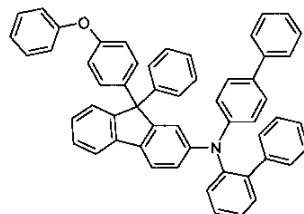
式 (201)



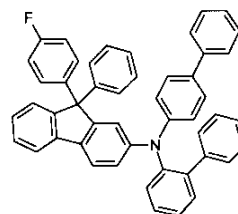
式 (202)



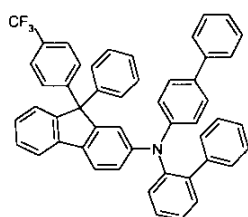
式 (203)



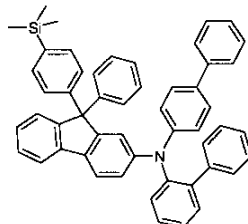
式 (204)



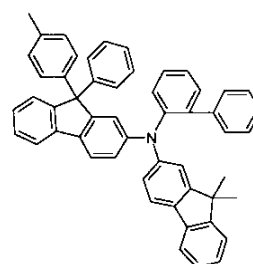
式 (205)



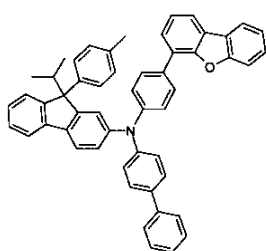
式 (206)



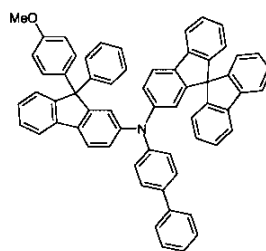
式 (207)



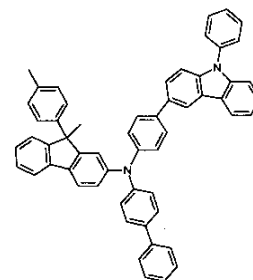
式 (208)



式 (209)



式 (210)



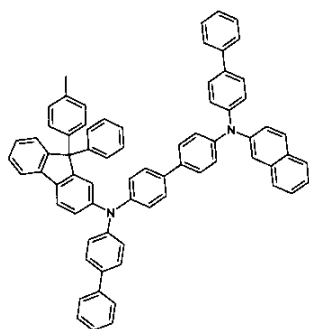
式 (211)

10

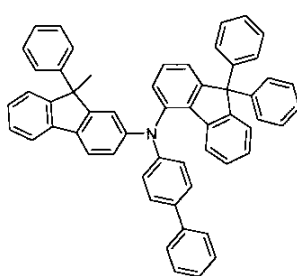
20

30

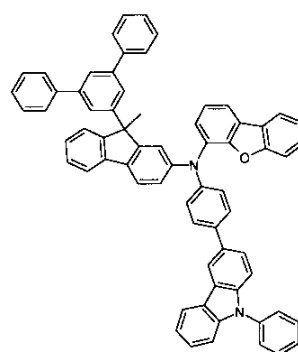
【化 2 3 - 7】



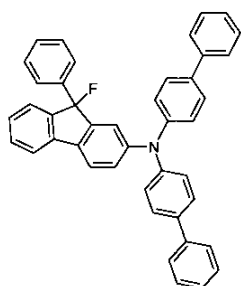
式 (212)



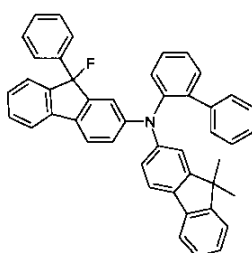
式 (213)



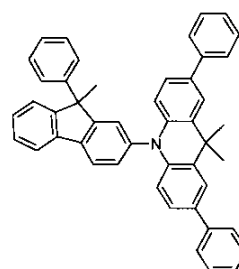
式 (214)



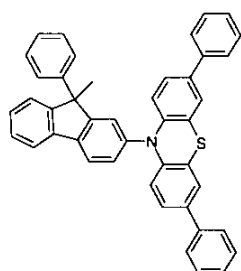
式 (215)



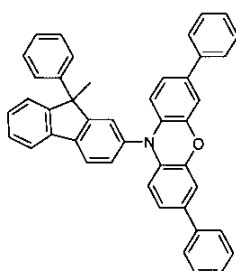
式 (216)



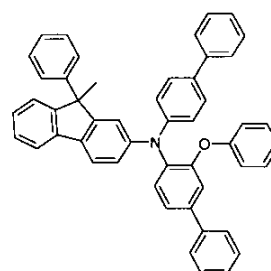
式 (217)



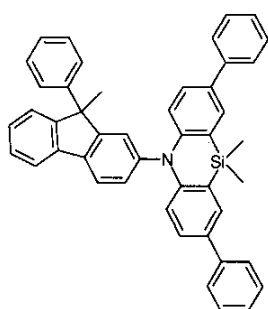
式 (218)



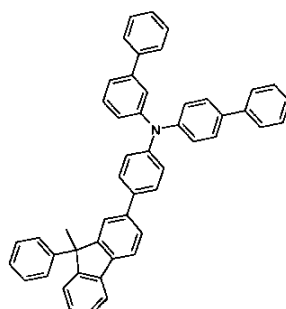
式 (219)



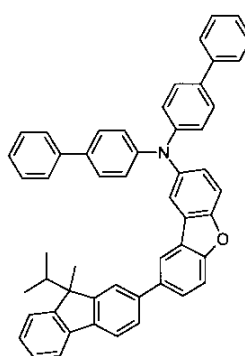
式 (220)



式 (221)



式 (222)



式 (223)

10

20

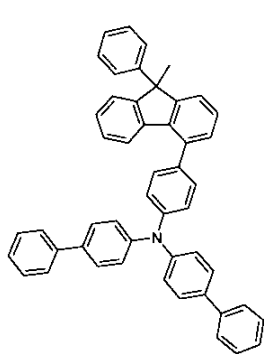
30

40

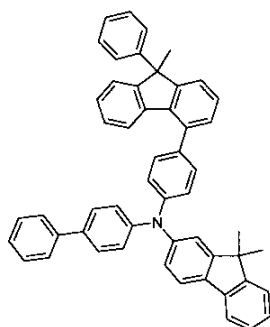
Cc1ccc2c(c1)c3ccccc3c2N(c4ccccc4)c5ccccc5

式 (235)

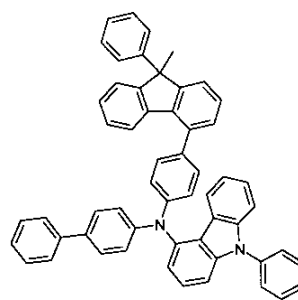
【化 2 3 - 9】



式 (236)

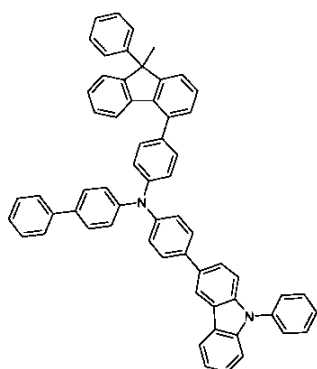


式 (237)

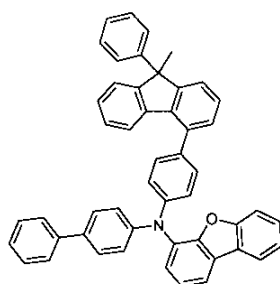


式 (238)

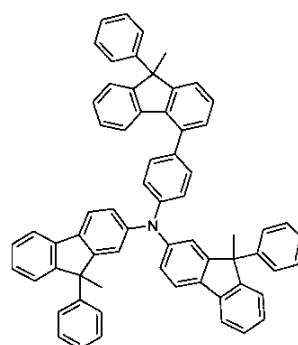
10



式 (239)

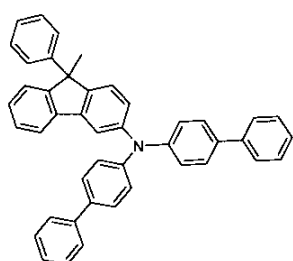


式 (240)

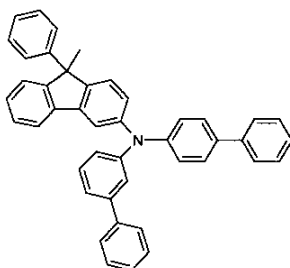


式 (241)

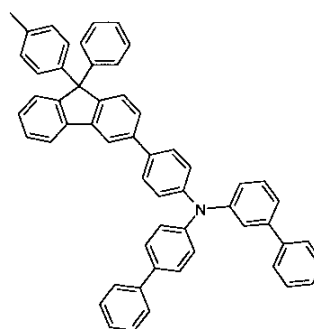
20



式 (242)



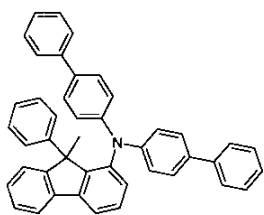
式 (243)



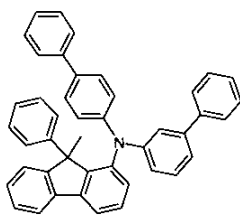
式 (244)

30

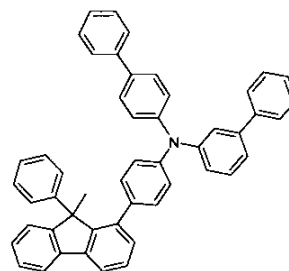
【化 2 3 - 1 0】



式 (245)

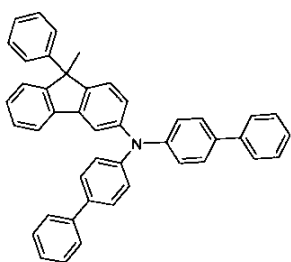


式 (246)

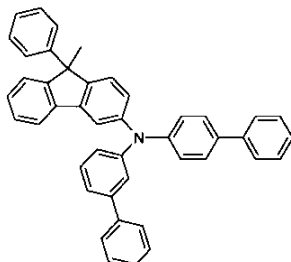


式 (247)

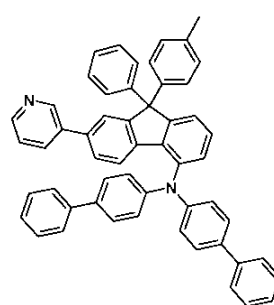
10



式 (248)

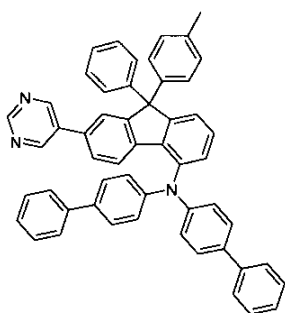


式 (249)

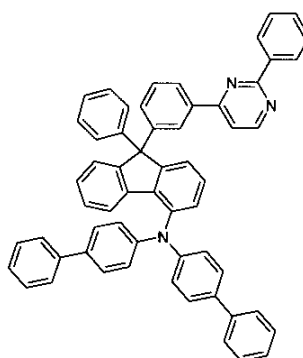


式 (250)

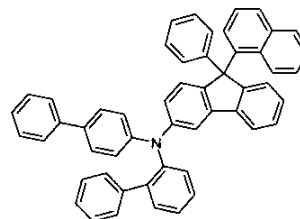
20



式 (251)

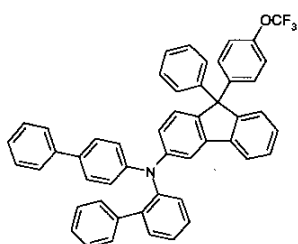


式 (252)



式 (253)

30



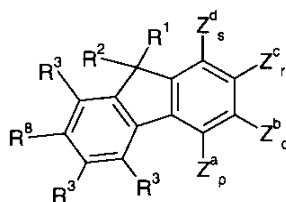
式 (254)

40

【 0 0 8 9】

本発明は、また、一般式 (2 5 5) の化合物に関する。

【化 2 4】



式 (255)

【0090】

以下が、使用する記号と添え字に適用される：

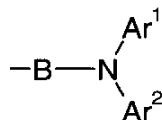
10

p、q、r、sは、0または1であり、ここで、 $p + q + r + s = 1$ であり、好ましくは、 $p = 1$ または $r = 1$ または $s = 1$ であり、非常に、好ましくは、 $p = 1$ または $r = 1$ であり；

Z^a_0 、 Z^b_0 、 Z^c_0 、 Z^d_0 は、出現毎に同一であるか異なり、 R^4 であり；

Z^a_1 、 Z^b_1 、 Z^c_1 、 Z^d_1 は、出現毎に同一であるか異なり、以下であり；

【化 2 5】



20

【0091】

Bは、単結合、6～30個の環原子を有する二価のアリール基もしくは5～30個の族環原子を有する二価のヘテロアリール基であって、それぞれ1以上の基 R^6 により置換されてよく、

好ましくは、単結合、または、1以上の基 R^6 により置換されてよい、フェニレン、ピフェニレン、テルフェニレン、ナフチレン、ピリジニレン、ピリミジニレン、ピラジニレン、ピリダジニレン、トリアジニレン、ジベンゾフラニレンあるいはジベンゾチオフェニレンフルオレニレンもしくはカルバゾール基であり；

非常に、好ましくは、単結合、または、1以上の基 R^6 により置換されてよい、フェニレン、ピフェニレン、テルフェニレン、ナフチレン、ジベンゾフラニレンあるいはジベンゾチオフェニレンフルオレニレンもしくはカルバゾール基であり、

30

Bは、非常に、特に、好ましくは、単結合、または、1以上の基 R^6 により置換されてよいフェニレン基であり、

Bは、特別に、好ましくは、単結合であり、

ここで、Bが単結合であるならば、窒素原子は直接フルオレンに結合し；

Ar^1 、 Ar^2 は、出現毎に同一であるか異なり、10～60個の環原子を有する非縮合アリール基もしくは10～60個の環原子を有するヘテロアリール基であって、同一であるか互いに異なる1以上の基 R^5 により置換されてよく、ここで、二個の基 Ar^1 または Ar^2 は、それぞれ少なくとも二個以上の芳香族もしくは複素環式芳香族環を含み；

Ar^1 中の芳香族もしくは複素環式芳香族環のうちの二個は、二価の基-O-、-S-、 $Si(R^5)_2$ 、 $C(R^5)_2$ もしくは-N R^5 -によりブリッジされてよく、または Ar^2 中の芳香族もしくは複素環式芳香族環のうちの二個は、二価の基-O-、-S-、 $Si(R^5)_2$ 、 $C(R^5)_2$ もしくは-N R^5 -によりブリッジされてよく、ここで、ブリッジされない環が好ましく；

40

および Ar^1 からの芳香族もしくは複素環式芳香族環は、二価の基-O-、-S-、 $Si(R^5)_2$ 、-N R^5 -もしくは $C(R^5)_2$ により、 Ar^2 からの芳香族もしくは複素環式芳香族環にブリッジされてよく、ここで、ブリッジされない Ar^1 と Ar^2 が、好ましく；

R^1 、 R^2 、 R^3 および R^4 は、H、D、F、Cl、Br、I、 $C(=O)R^5$ 、CN、 $Si(R^5)_3$ 、 NO_2 、 $N(R^5)_2$ 、 $P(=O)(R^5)_2$ 、 $S(=O)R^5$ 、S(

50

$=O)_2 R^5$ 、1～20個のC原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基、2～20個のC原子を有するアルケニルもしくはアルキニル基（上記言及した基は、夫々1以上の基 R^5 により置換されてよく、上記言及した基中の1以上の CH_2 基は、 $-R^5 C=CR^5-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $Si(R^5)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=NR^5$ 、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^5-$ 、 $P(=O)(R^5)$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 SO もしくは SO_2 で置き換えられてよく、ここで、上記言及した基中の1以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、CNもしくは NO_2 で置き換えられてよい。）または、各場合に、1以上の基 R^5 により置換されてよい6～30個の環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造または1以上の基 R^6 により置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有するアリールオキシ基または各場合に1以上の基 R^6 により置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有するアラルキル基であり；

10

ここで、基 R^1 と R^2 は、同一ではあり得ず、基 $R^3 \sim R^5$ は、出現毎に同一であるか異なってもよいが、基 R^1 または R^2 のいずれかと同一であってよく；

および R^1 と R^2 からの少なくとも一つの基は、各場合に1以上の基 R^5 により置換されてよい6～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり；

R^5 は、H、D、 $C(=O)R^5$ 、CN、 $Si(R^5)_3$ 、 NO_2 、 $N(R^5)_2$ 、 $P(=O)(R^5)_2$ 、 $S(=O)R^5$ 、 $S(=O)_2 R^5$ 、1～20個のC原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基、2～20個のC原子を有するアルケニルもしくはアルキニル基（上記言及した基は、夫々1以上の基 R^5 により置換されてよく、上記言及した基中の1以上の CH_2 基は、 $-R^5 C=CR^5-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $Si(R^5)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=NR^5$ 、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^5-$ 、 $P(=O)(R^5)$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 SO もしくは SO_2 で置き換えられてよく、ここで、上記言及した基中の1以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、CNもしくは NO_2 で置き換えられてよい。）または、各場合に、1以上の基 R^5 により置換されてよい6～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造または1以上の基 R^6 により置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有するアリールオキシ基または各場合に1以上の基 R^6 により置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有するアラルキル基であり；

20

30

R^6 は、出現毎に同一であるか異なり、H、D、F、Cl、Br、I、 $C(=O)R^7$ 、CN、 $Si(R^7)_3$ 、 NO_2 、 $P(=O)(R^7)_2$ 、 $S(=O)R^7$ 、 $S(=O)_2 R^7$ 、 $N(R^7)_2$ 、1～20個のC原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基、2～20個のC原子を有するアルケニルもしくはアルキニル基（上記言及した基は、夫々1以上の基 R^7 により置換されてよく、上記言及した基中の1以上の CH_2 基は、 $-R^7 C=CR^7-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $Si(R^7)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=NR^7$ 、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^7-$ 、 $P(=O)(R^7)$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 SO もしくは SO_2 で置き換えられてよく、ここで、上記言及した基中の1以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、CNもしくは NO_2 で置き換えられてよい。）または、各場合に、1以上の基 R^7 により置換されてよい5～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、または1以上の基 R^7 により置換されてよい5～30個の芳香族環原子を有するアリールオキシもしくはヘテロアリールオキシ基であり；ここで、2個以上の隣接する置換基 R^6 は、モノあるいはポリ環式の環構造を互いに形成してよく；

40

R^7 は、H、D、F、1～20個のC原子を有する脂肪族炭化水素基、5～30個のC原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であって、1以上のH原子は、DもしくはFで置き換えられてよく、ここで、2個以上の隣接する置換基 R^6 は、モノあるいはポリ環式の環構造を互いに形成してよく；

R^8 は、H、D、 $C(=O)R^9$ 、CN、 $Si(R^9)_3$ 、 NO_2 、 $N(R^9)_2$ 、 $P(=O)(R^9)_2$ 、 $S(=O)R^9$ 、 $S(=O)_2 R^9$ 、1～20個のC原子を有する直

50

鎖アルキルもしくはチオアルキル基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基、2～20個のC原子を有するアルケニルもしくはアルキニル基（上記言及した基は、夫々1以上の基 R^9 により置換されてよく、上記言及した基中の1以上の CH_2 基は、 $-R^9C=CR^9-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $Si(R^9)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=NR^9$ 、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^9-$ 、 $P(=O)(R^9)$ 、 $-S-$ 、 SO もしくは SO_2 で置き換えられてよく、ここで、上記言及した基中の1以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、CNもしくは NO_2 で置き換えられてよい。）または、各場合に、1以上の基 R^9 により置換されてよい5～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造または1以上の基 R^9 により置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有するアリーロキシ基または各場合に1以上の基 R^9 により置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有するアラルキル基であり；

R^9 は、出現毎に同一であるか異なり、H、D、F、Cl、Br、I、 $C(=O)R^{10}$ 、CN、 $Si(R^{10})_3$ 、 NO_2 、 $P(=O)(R^{10})_2$ 、 $S(=O)R^{10}$ 、 $S(=O)_2R^{10}$ 、 $N(R^{10})_2$ 、1～20個のC原子を有する直鎖アルキルもしくはチオアルキル基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基、2～20個のC原子を有するアルケニルもしくはアルキニル基（上記言及した基は、夫々1以上の基 R^{10} により置換されてよく、上記言及した基中の1以上の CH_2 基は、 $-R^{10}C=CR^{10}-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $Si(R^{10})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=NR^{10}$ 、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^{10}-$ 、 $P(=O)(R^{10})$ 、 $-S-$ 、 SO もしくは SO_2 で置き換えられてよく、ここで、上記言及した基中の1以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、CNもしくは NO_2 で置き換えられてよい。）または、各場合に、1以上の基 R^{10} により置換されてよい5～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、または1以上の基 R^{10} により置換されてよい5～30個の芳香族環原子を有するアリーロキシもしくはヘテロアリーロキシ基であり；ここで、2個以上の隣接する置換基 R^{10} は、モノあるいはポリ環式の環構造を互いに形成してよく；

R^{10} は、H、D、F、1～20個のC原子を有する脂肪族炭化水素基、5～30個のC原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であって、1以上のH原子は、DもしくはFで置き換えられてよく、2個以上の隣接する置換基 R^{10} は、モノあるいはポリ環式の環構造を互いに形成してよい。

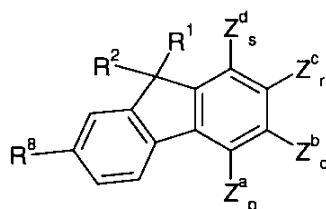
【0092】

好ましい態様では、本発明は、一般式(256)の化合物に関し、化合物は、10個を超える環原子を有する縮合芳香族もしくは複素環式芳香族環構造を含まないことを特徴とする。

【0093】

一般式(256)の化合物が好ましい。

【化26】



式 (256)

【0094】

式中、使用される記号には上記定義が適用される。

【0095】

一般式(257)～(260)の化合物が、より好ましい。

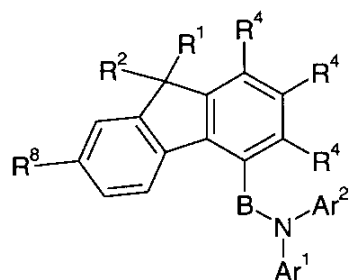
10

20

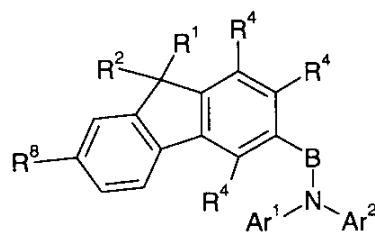
30

40

【化 27】

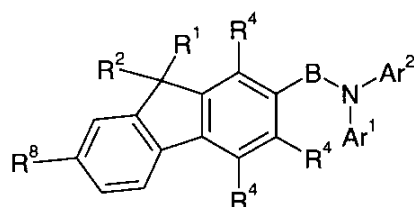


式 (257)

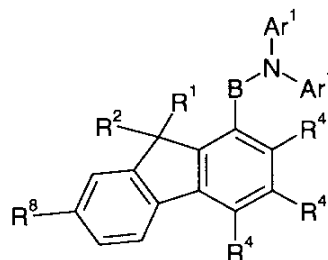


式 (258)

10



式 (259)



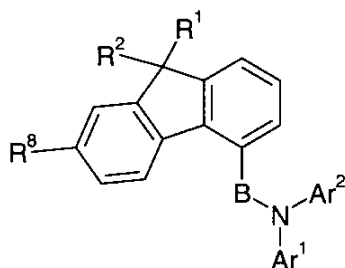
式 (260)

【0096】

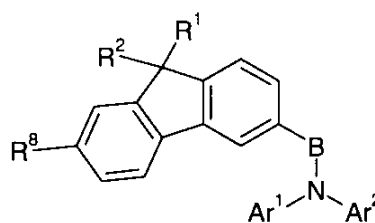
20

一般式(261)～(264)の化合物が、非常に、特に、好ましく、式(261)～(263)が、特別に好ましい。

【化 28】

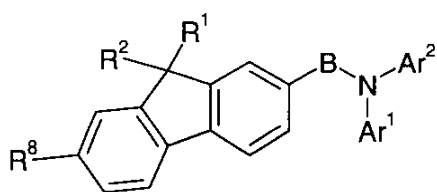


式 (261)

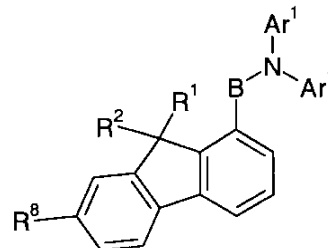


式 (262)

30



式 (263)



式 (264)

40

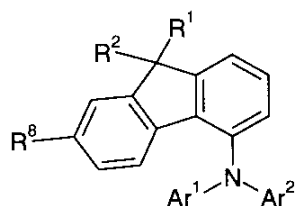
【0097】

上記定義が、BとBの好ましい態様に適用される。

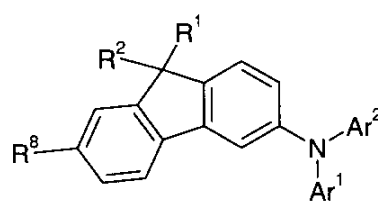
【0098】

一般式(265)～(268)の化合物が、非常に、特に、好ましく、式(265)と(267)が、特別に好ましい。

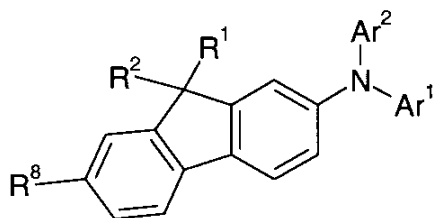
【化 29】



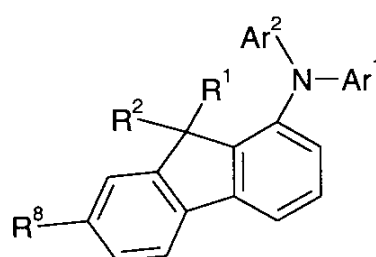
式 (265)



式 (266)



式 (267)



式 (268)

【0099】

Ar¹ および Ar² は、好ましくは、出現毎に同一であるか異なり、フェニルピリジル、
 ピフェニル、テルフェニルもしくはクアテルフェニル基から選ばれ、同一であるか互いに異
 なってよい1以上の基 R⁶ により置換されてよく、Ar¹ 中の芳香族もしくは複素環式芳香族環の二個は、二価の基-O-、-S-、-Si(R⁵)₂-、-C(R⁵)₂-もしくはNR⁵によりブリッジされてよく、または、Ar² 中の二個の芳香族もしくは複素環式芳香族環の二個は、二価の基-O-、-S-、-Si(R⁵)₂-、-C(R⁵)₂-もしくはNR⁵によりブリッジされてよく、ここで、ブリッジされない環が好ましく、ここで、Ar¹ からの芳香族もしくは複素環式芳香族環は、二価の基-O-、-S-、-Si(R⁵)₂-、NR⁵もしくは-C(R⁵)₂によりAr² からの芳香族もしくは複素環式芳香族環にブリッジしてよく、ここで、ブリッジされないAr¹ およびAr² が好ましい。

【0100】

本発明は、さらに、式(255)の化合物の製造方法に関し、ここで、上記記載のとおり、一段階または二段階ブッフバルトカップリングが使用される。

【0101】

本発明の化合物の好ましい例は、式(149)~(153)、(155)~(177)、(179)~(254)を有するものである。

【0102】

上記に記載される式(1)の化合物と本発明の式(255)の化合物は、臭素、沃素、塩素、ボロン酸もしくはボロン酸エステル等の反応性脱離基により置換されてよい。これらは、対応するオリゴマー、 dendroliマーまたはポリマーの調製のためのモノマーとして使用することができる。適切な反応性脱離基は、たとえば、臭素、沃素、塩素、ボロン酸、ボロン酸エステル、アミン、末端C-C二重結合もしくはC-C三重結合を含むアルケニルまたはアルキニル基、オキシラン、オキセタン、環化、たとえば、1,3-双極子環付加を受ける基、たとえば、ジエンもしくはアジド等、カルボン酸誘導体、アルコールおよびシランである。

【0103】

したがって、本発明は、さらに、一以上の式(1)~(255)の化合物を含むオリゴマー、ポリマーまたは dendroliマーに関し、ここで、ポリマー、オリゴマーまたは dendroliマーへの結合は、式(1)~(255)中で任意の所望の位置に位置することができる。式(1)~(255)の化合物の結合に応じて、化合物は、オリゴマーもしくはポリマーの側鎖の構成部分または主鎖の構成部分である。本発明の意味でのオリゴマーは、少なくとも三個のモノマー単位から構築される化合物の意味で使用される。本発明の意味でのポ

10

20

30

40

50

リマーは、少なくとも10個のモノマー単位から構築される化合物の意味で使用される。本発明のポリマー、オリゴマーまたはデンドリマーは、共役、部分共役もしくは非共役であってよい。本発明のオリゴマーまたはポリマーは、直鎖、分岐鎖もしくは樹状であってよい。直鎖状に結合した構造においては、式(1)~(255)の単位は、たがいに直接結合するか、または二価の基、たとえば、置換もしくは非置換アルキレン基により、ヘテロ原子により、または二価の芳香族もしくは複素環式芳香族基により、たがいに結合してよい。分岐および樹状構造においては、三個以上の式(1)~(255)の単位は、三価もしくは多価の基、たとえば、三価もしくは多価の芳香族もしくは複素環式芳香族基により結合してもよく、分岐もしくは樹状オリゴマーまたはポリマーを生じる。

【0104】

式(1)~(255)の化合物に対する上記記載したとおりの同じ選好が、オリゴマー、デンドリマーおよびポリマー中の式(1)~(255)の繰り返し単位にあてはまる。

【0105】

オリゴマーまたはポリマーの調製のために、本発明によるモノマーは、さらなるモノマーとホモ重合するか共重合する。適切で好ましいコモノマーは、フルオレン(たとえば、EP842208もしくはWO2002/22026にしたがう)、スピロビフルオレン(たとえば、EP707020、EP894107もしくはWO2006/061181にしたがう)、パラ-フェニレン(たとえば、WO1992/18552にしたがう)、カルバゾール(たとえば、WO2004/070772もしくはWO2004/113468にしたがう)、チオフェン(たとえば、EP1028136にしたがう)、ジヒドロフェナントレン(たとえば、WO 2005/014689もしくはWO 2007/006383にしたがう)、シス-およびトランス-インデノフルオレン(たとえば、WO2004/041901もしくはWO2004/113412にしたがう)、ケトン(たとえば、WO2005/040302にしたがう)、フェナントレン(たとえば、WO2005/104264もしくはWO2007/017066にしたがう)または複数のこれらの単位から選ばれる。ポリマー、オリゴマーおよびデンドリマーは、また、さらなる単位、たとえば、ビニルトリアリールアミン(たとえば、WO2007/068325にしたがう)もしくは燐光金属錯体(たとえば、WO2006/030000にしたがう)等の発光(蛍光または燐光)単位および/または電荷輸送単位、特に、トリアリールアミン系のものをも通常含む。

【0106】

本発明によるポリマー、オリゴマーおよびデンドリマーは、有利な特性、特に、長い寿命、高い効率と良好な色座標を有する。

【0107】

本発明によるポリマーおよびオリゴマーは、一以上の型のモノマーの重合により一般的に調製され、少なくとも一つのモノマーは、ポリマー中に式(1)~(255)の繰り返し単位を生じる。適切な重合反応は、当業者に知られ、文献に記載されている。C-CまたはC-N結合を生じる、特に、適切で、好ましい重合反応は、以下のものである：

(A)スズキ重合；(B)ヤマト重合；(C)スチル重合および(D)ハートウィッグ-ブッフバルト重合

重合をこれらの方法により実行することができる方法と次いでポリマーを反応媒体から分離し、精製することができる方法は、当業者に知られており、文献、たとえば、WO 2003/048225、WO 2004/037887およびWO 2004/037887に詳細に記載されている。

【0108】

したがって、本発明は、また、スズキ重合、ヤマト重合、スチル重合またはハートウィッグ-ブッフバルト重合により調製されることを特徴とする本発明によるポリマー、オリゴマーおよびデンドリマーの調製方法に関する。本発明によるデンドリマーは、当業者に知られた方法によりもしくはそれに同じように調製することができる。適切な方法は、文献、たとえば、Frechet, Jean M. J.; Hawker, Craig J., "Hyperbranched polyphenylene and hyperbranched polyesters: new soluble, three-dimensional, reactive polymers", *Reactive & Functional Polymers* (1995), 26(1-3), 127-36; Janssen, H. M.; Meijer, E. W., "The synthesis and characterization of dendritic molecules", *Materials Science and Technology* (1999), 20 (Synthesis of Polymers), 403-458; Tomali

10

20

30

40

50

a, Donald A., "Dendrimer molecules", Scientific American (1995), 272(5), 62-6、W O 2002/067343 A1およびWO 2005/026144 A1に記載されている。

【 0 1 0 9 】

本発明の化合物、ポリマー、オリゴマーおよびデンドリマーは、電子素子に使用される他の有機機能性材料とともに組成物として使用することができる。多くの可能な有機機能性材料が当業者に知られている。したがって、本発明は、また、一以上の本発明の式(255)の化合物または少なくとも一つの本発明のポリマー、オリゴマーもしくはデンドリマーと、蛍光エミッター、燐光エミッター、ホスト材料、マトリックス材料、電子輸送材料、電子注入材料、正孔伝導材料、正孔注入材料、電子ブロック材料および正孔ブロック材料より成る群から選ばれる少なくとも一つのさらなる有機機能性材料とを含む組成物に関する。

10

【 0 1 1 0 】

液相からの、たとえば、スピンコーティングによるまたは印刷プロセスによる本発明の化合物の加工のためには、本発明の化合物の調合物を必要とする。これらの調合物は、たとえば、溶液、分散液もしくはミニエマルジョンであり得る。この目的のためには、二以上の溶媒の混合物を使用することが好ましいかもしれない。適切で、好ましい溶媒は、たとえば、トルエン、アニソール、o-、m-もしくはp-キシレン、メチルベンゾエート、ジメチルアニソール、メシチレン、テトラリン、ペラトール、THF、メチル-THF、THP、クロロベンゼン、ジオキサンまたはこれら溶媒の混合物である。

【 0 1 1 1 】

20

したがって、本発明は、さらに、少なくとも一つの式(1)~(255)の単位を含む少なくとも一つのポリマー、オリゴマーもしくはデンドリマーと少なくとも一つの溶媒、好ましくは、有機溶媒を含む調合物、特に、溶液、分散液もしくはミニエマルジョンに関する。この型の溶液を調製することができる方法は、当業者に知られており、たとえば、出願WO 2002/072714、WO 2003/019694とそこに引用された文献に記載されている。

【 0 1 1 2 】

本発明の化合物は、エレクトロルミネッセンス素子、特に、有機エレクトロルミネッセンス素子(たとえば、OLEDもしくはOLEC)での使用のために適している。化合物は、置換に応じて、種々の機能および層に使用される。

【 0 1 1 3 】

30

したがって、本発明は、さらに、式(255)の化合物の電子素子での使用と一以上の式(255)の化合物を含む電子素子自体に関する。ここで、電子素子は、好ましくは、有機集積回路(OIC)、有機電界効果トランジスタ(OFEET)、有機薄膜トランジスタ(OTFT)、有機発光トランジスタ(OLET)、有機太陽電池(OSC)、有機光学検査器、有機光受容器、有機電場消光素子(OFQD)、有機発光電子化学電池(OLEC)、有機レーザーダイオード(O-laser)から選ばれ、特に、好ましくは、有機エレクトロルミネッセンス素子(OLEDもしくはOLEC)から選ばれる。

【 0 1 1 4 】

上記したとおり、本発明は、少なくとも一つの式(255)の化合物を含む電子素子に関する。ここで、電子素子は、好ましくは、上記言及した素子から選ばれる。特に、好ましくは、アノード、カソードと少なくとも一つの発光層を含む有機エレクトロルミネッセンス素子(OLED)であり、ここで、発光層、正孔輸送層もしくは他の層であり得る少なくとも一つの有機層は、少なくとも一つの式(255)の化合物を含む。

40

【 0 1 1 5 】

カソード、アノードおよび発光層に加えて、有機エレクトロルミネッセンス素子は、さらなる層を含んでよい。これらは、たとえば、各場合に、1以上の正孔注入層、正孔輸送層、正孔ブロック層、電子輸送層、電子注入層、電子ブロック層、励起子ブロック層、中間層、電荷生成層(IDMC 2003, Taiwan; Session 21 OLED (5), T. Matsumoto, T. Nakada, J.Endo, K. Mori, N. Kawamura, A. Yokoi, J.Kido, Multiphoton Organic EL Device Having Charge Generation Layer)および/または有機あるいは無機p/n接合を含んでも

50

よい。しかしながら、これら層の夫々は、必ずしも存在する必要はなく、層の選択は使用される化合物と、特に、エレクトロルミネッセンス素子が蛍光であるか燐光であるかに常に依存することが指摘されねばならない。

【 0 1 1 6 】

本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子は、複数の発光層を含んでもよい。この場合に、これらの発光層は、特に、好ましくは、380nm～750nm間に全体で複数の最大発光波長を有し、全体として、白色発光が生じるものであり、換言すれば、蛍光もしくは燐光を発し、青色および黄色、オレンジ色もしくは赤色発光することができる種々の発光化合物を、発光層に使用することができる。特に、好ましいものは、3層構造であり、すなわち、3個の発光層を有する構造であり、その3層は青色、緑色およびオレンジ色もしくは赤色発光を呈する（基本構造については、たとえば、WO 2005/011013参照。）。本発明の化合物は、このような素子中で、正孔輸送層、発光層および/または別の層中に存在してもよい。白色光の生成のためには、広波長範囲で発光する個々に使用されるエミッター化合物が、色発光する複数のエミッター化合物に代えて適するかもしれないことに注意する必要がある。

10

【 0 1 1 7 】

式(1)～(255)の化合物が、一以上の燐光ドーパントを含むエレクトロルミネッセンス素子中で使用されることが、本発明にしたがって、好ましい。ここで、化合物は、種々の層、好ましくは、正孔輸送層、正孔注入層または発光層中で使用することができる。しかしながら、式(255)の化合物は、本発明にしたがって、一以上の蛍光ドーパントを含む電子素子に使用することもできる。

20

【 0 1 1 8 】

用語燐光ドーパントは、発光が、スピン禁制遷移、たとえば、励起三重項状態または比較的高いスピン量子数を有する状態、たとえば、五重項状態からの遷移により生じる化合物を、典型的には、包含する。

【 0 1 1 9 】

適切な燐光発光ドーパント(=三重項エミッター)は、特に、適切な励起により、好ましくは、可視域で発光する化合物であり、加えて、20より大きい原子番号、好ましくは、38～84の原子番号、特に、好ましくは、56～80の原子番号を有する少なくとも一つの原子を含む。使用される燐光発光エミッターは、好ましくは、銅、モリブデン、タングステン、レニウム、ルテニウム、オスミウム、ロジウム、イリジウム、パラジウム、白金、銀、金またはユウロピウムを含む化合物、特に、イリジウム、白金または銅を含む化合物である。

30

【 0 1 2 0 】

本発明の目的のために、すべてのルミネッセントイリジウム、白金または銅錯体が、燐光化合物とみなされる。

【 0 1 2 1 】

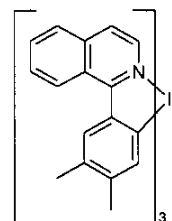
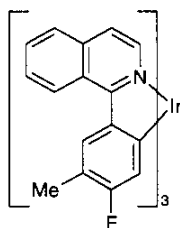
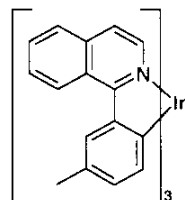
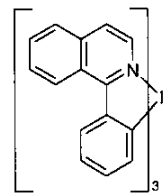
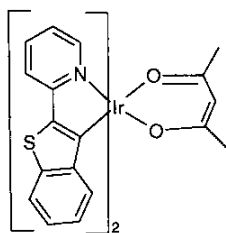
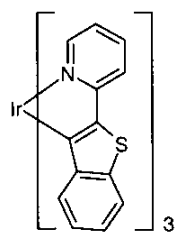
上記記載されたエミッターの例は、出願WO 00/70655、WO 01/41512、WO 02/02714、WO 02/15645、EP 1191613、EP 1191612、EP 1191614、WO 05/033244、WO 05/019373およびUS 2005/0258742により明らかにされている。一般的には、燐光発光O L E Dのために先行技術にしたがって使用され、有機エレクトロルミネッセンス素子分野の当業者に知られるようなすべての燐光発光錯体が適切である。当業者は進歩性を必要とすることなく、有機エレクトロルミネッセンス素子中で式(1)～(255)の化合物と組み合わせて更なる燐光錯体を使用することもできよう。

40

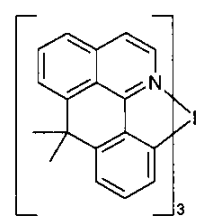
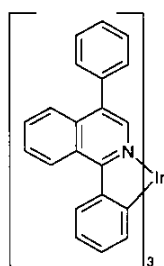
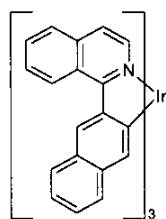
【 0 1 2 2 】

適切な燐光エミッター化合物の明確な例が、以下の表によりさらに明らかにされる。

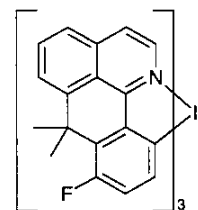
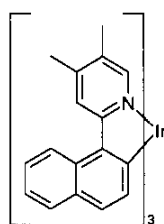
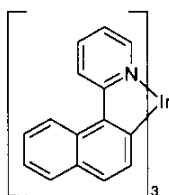
【化 30 - 1】



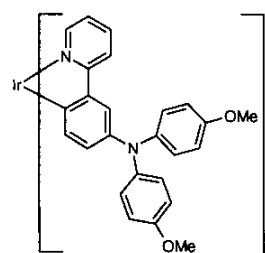
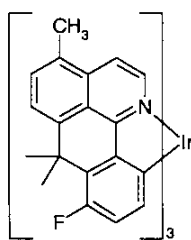
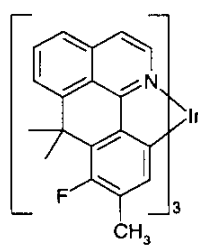
10



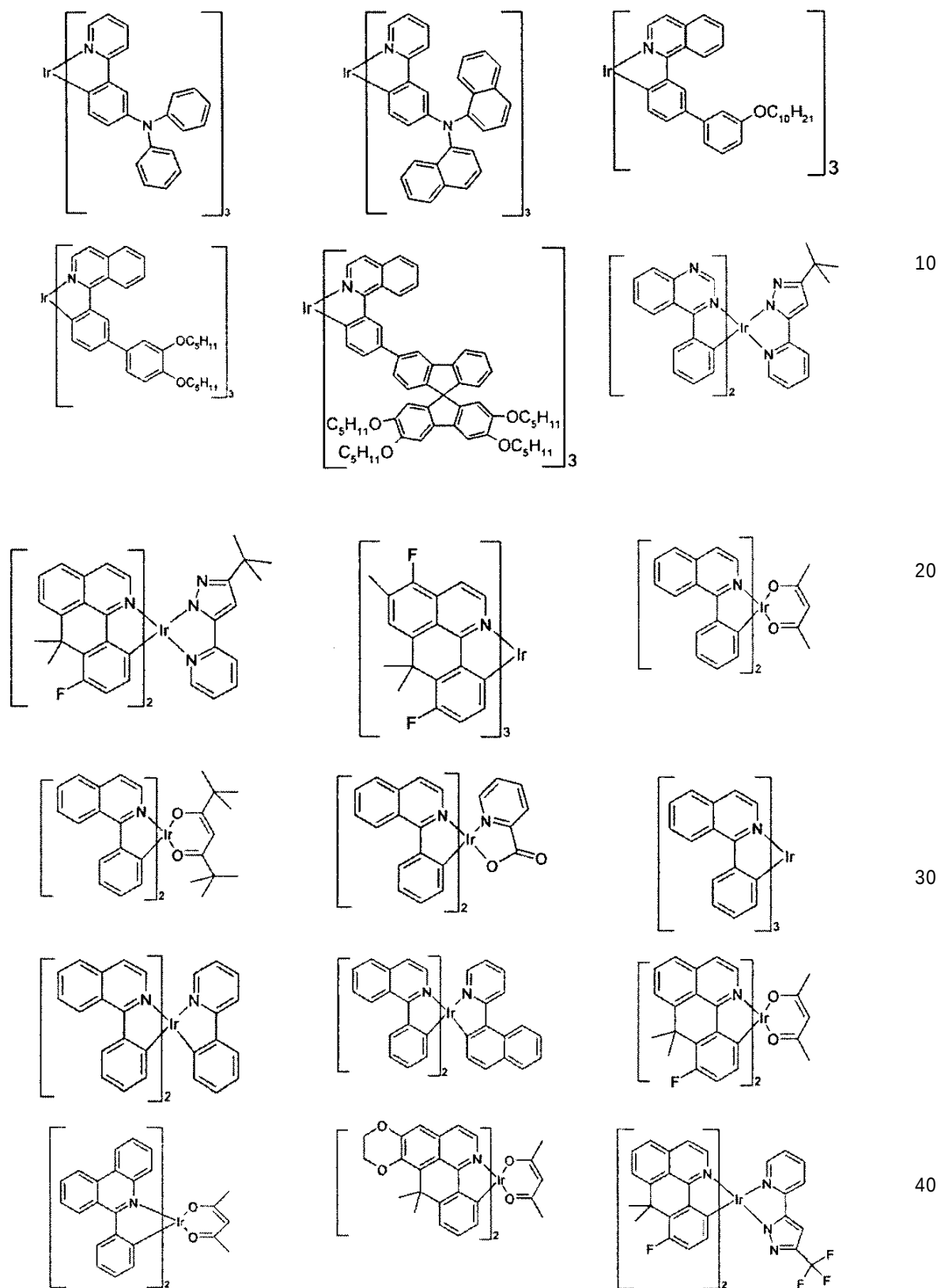
20



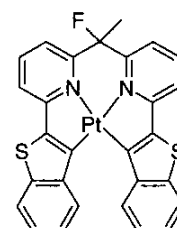
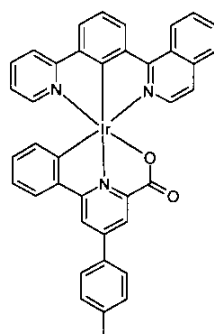
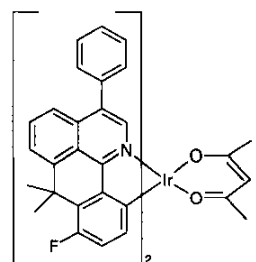
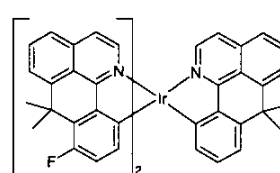
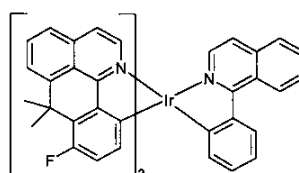
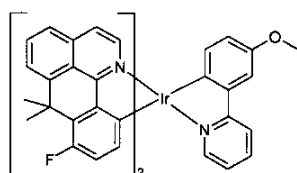
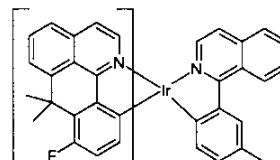
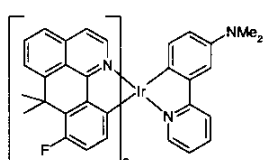
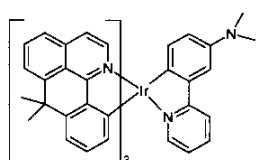
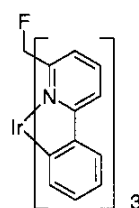
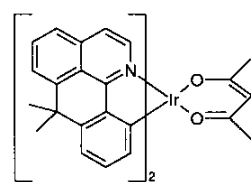
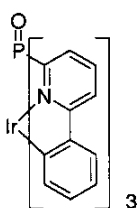
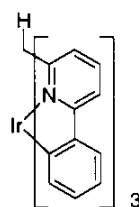
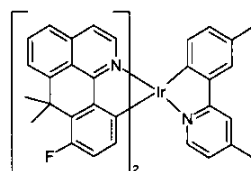
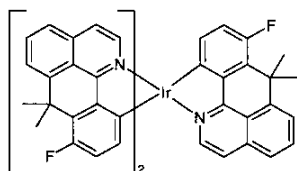
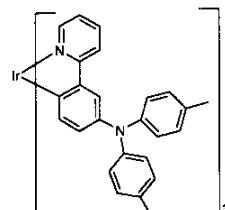
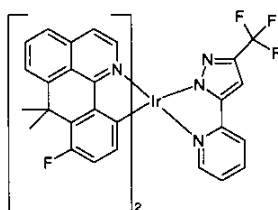
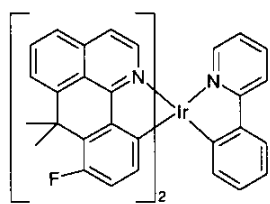
30



【化 3 0 - 2】



【化 3 0 - 3】



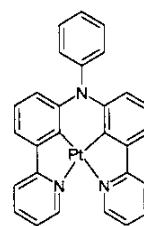
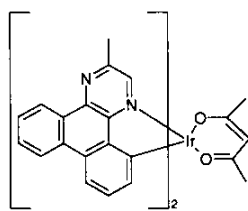
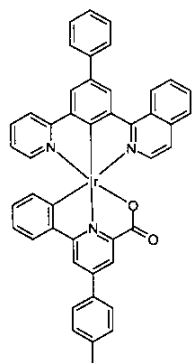
10

20

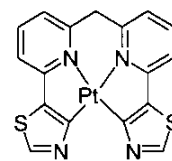
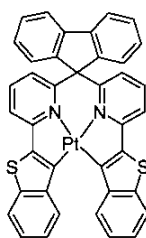
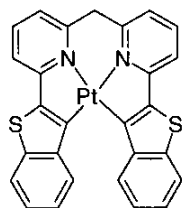
30

40

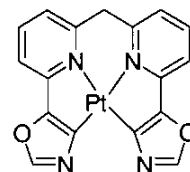
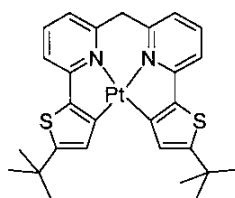
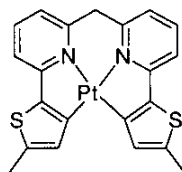
【化 3 0 - 4】



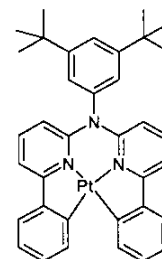
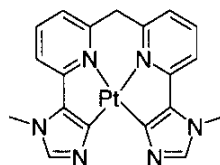
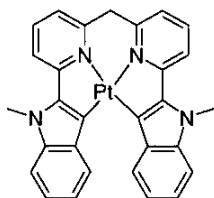
10



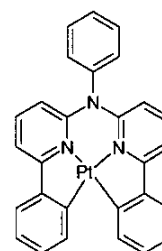
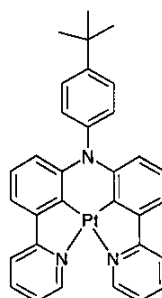
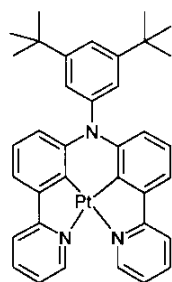
20



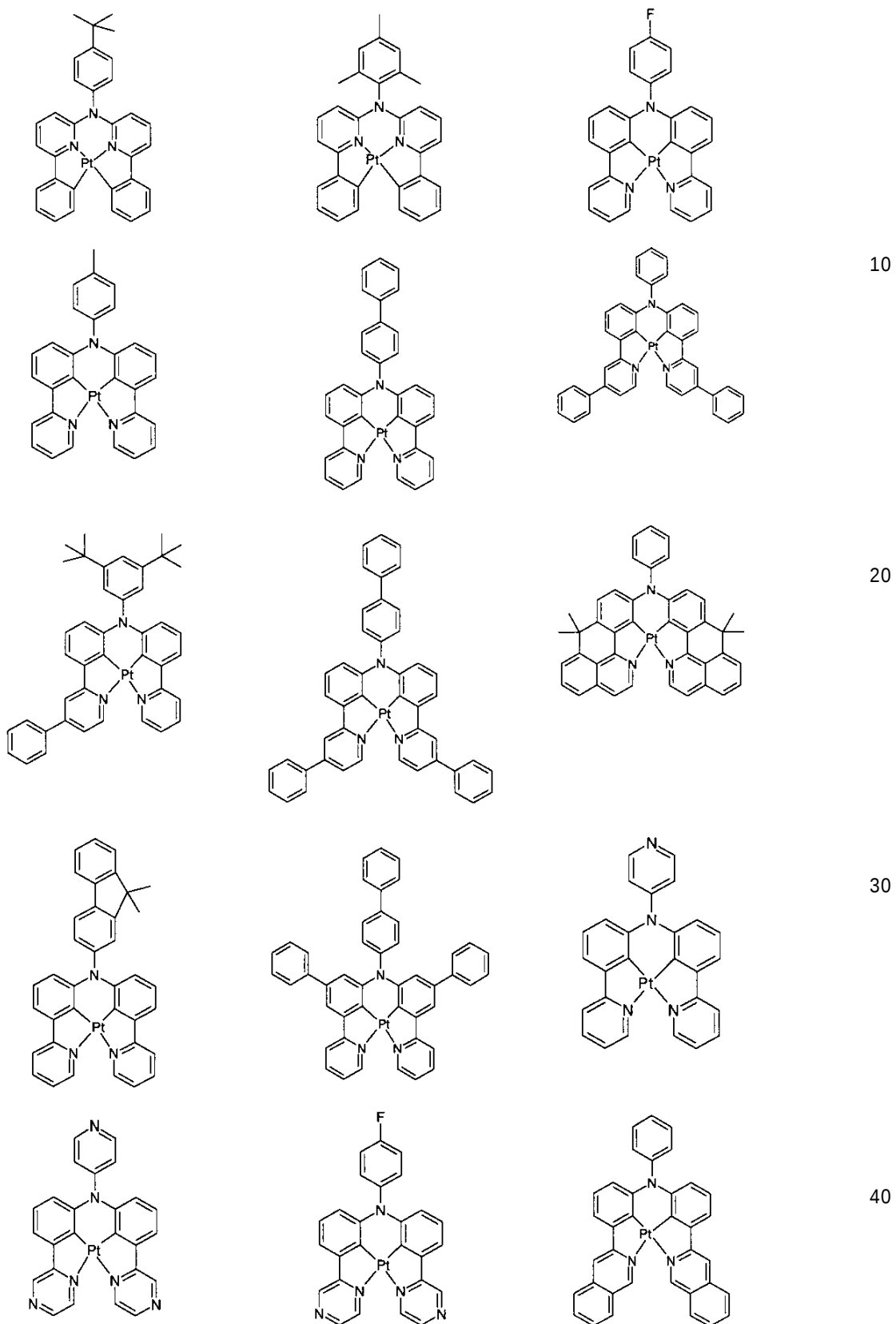
30



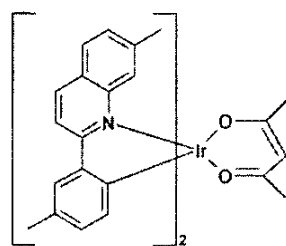
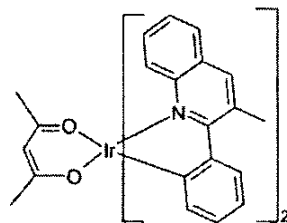
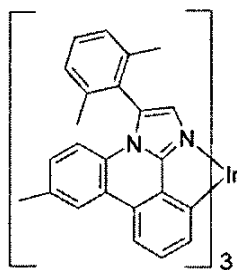
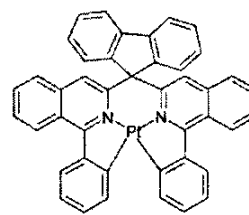
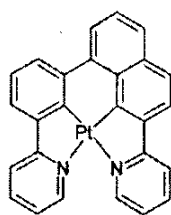
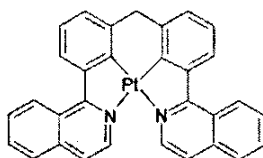
40



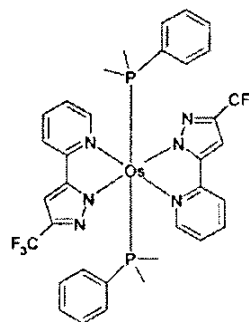
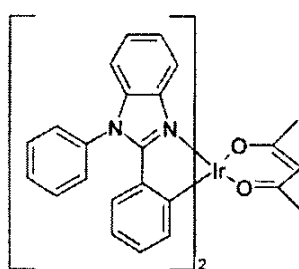
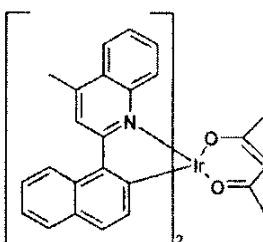
【化 30 - 5】



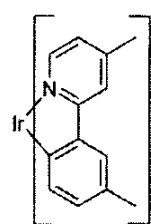
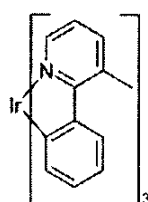
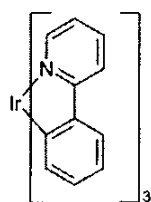
【化 3 0 - 6】



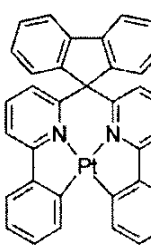
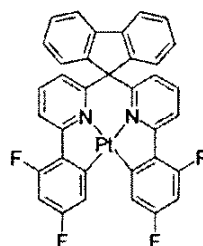
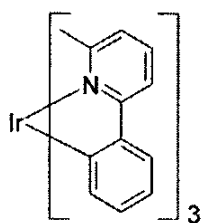
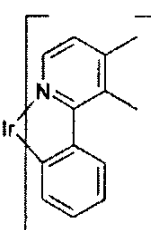
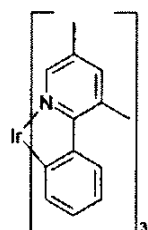
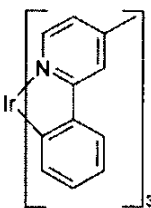
10



20

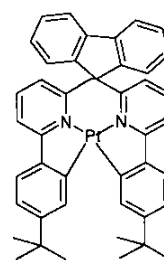
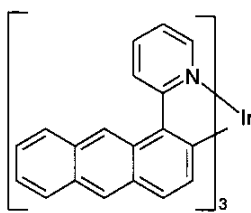
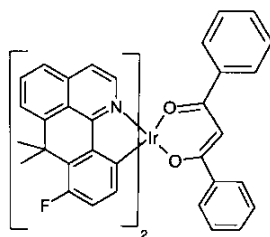
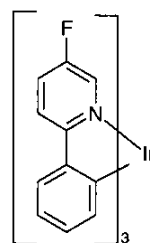
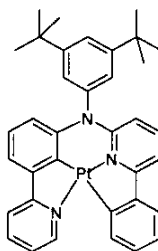
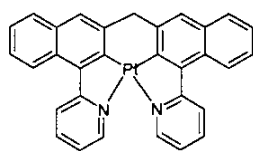
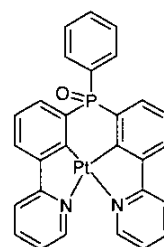
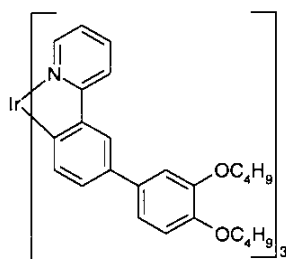
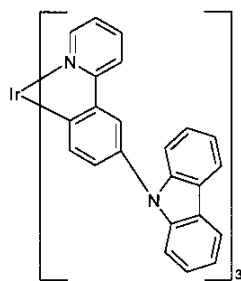
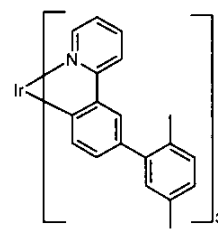
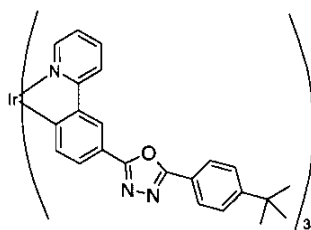
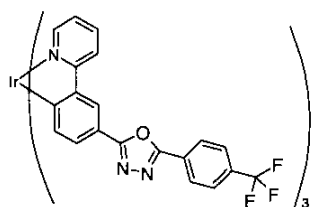
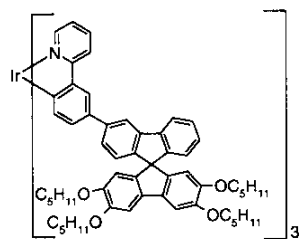
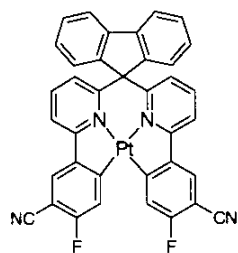
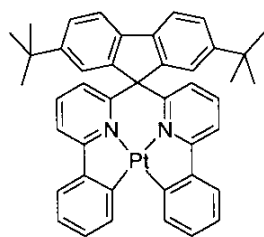


30



40

【化 30 - 7】



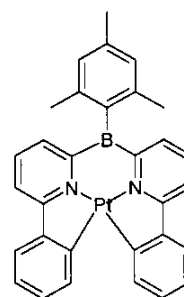
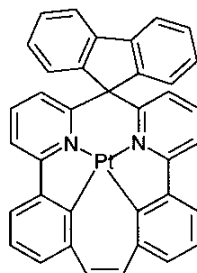
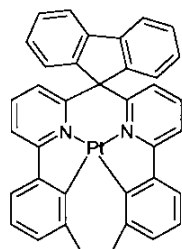
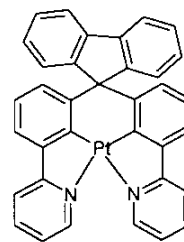
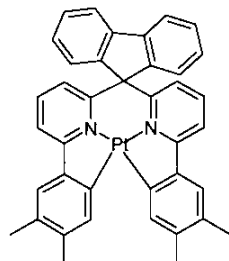
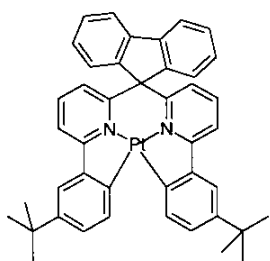
10

20

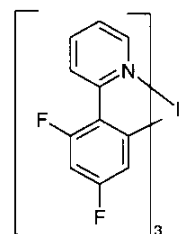
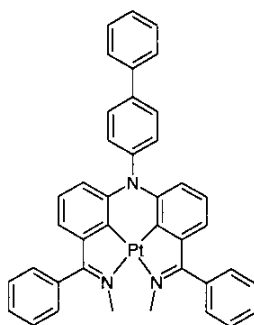
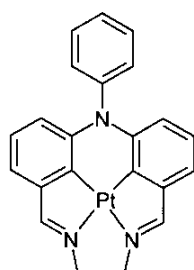
30

40

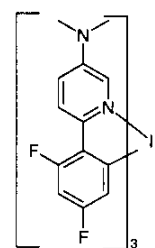
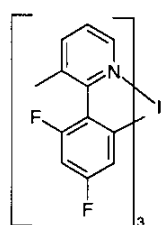
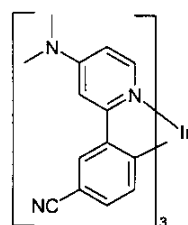
【化 30 - 8】



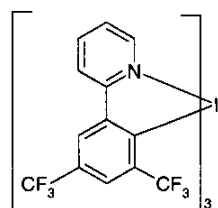
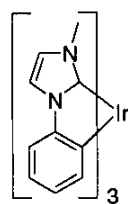
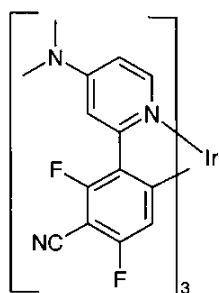
10



20

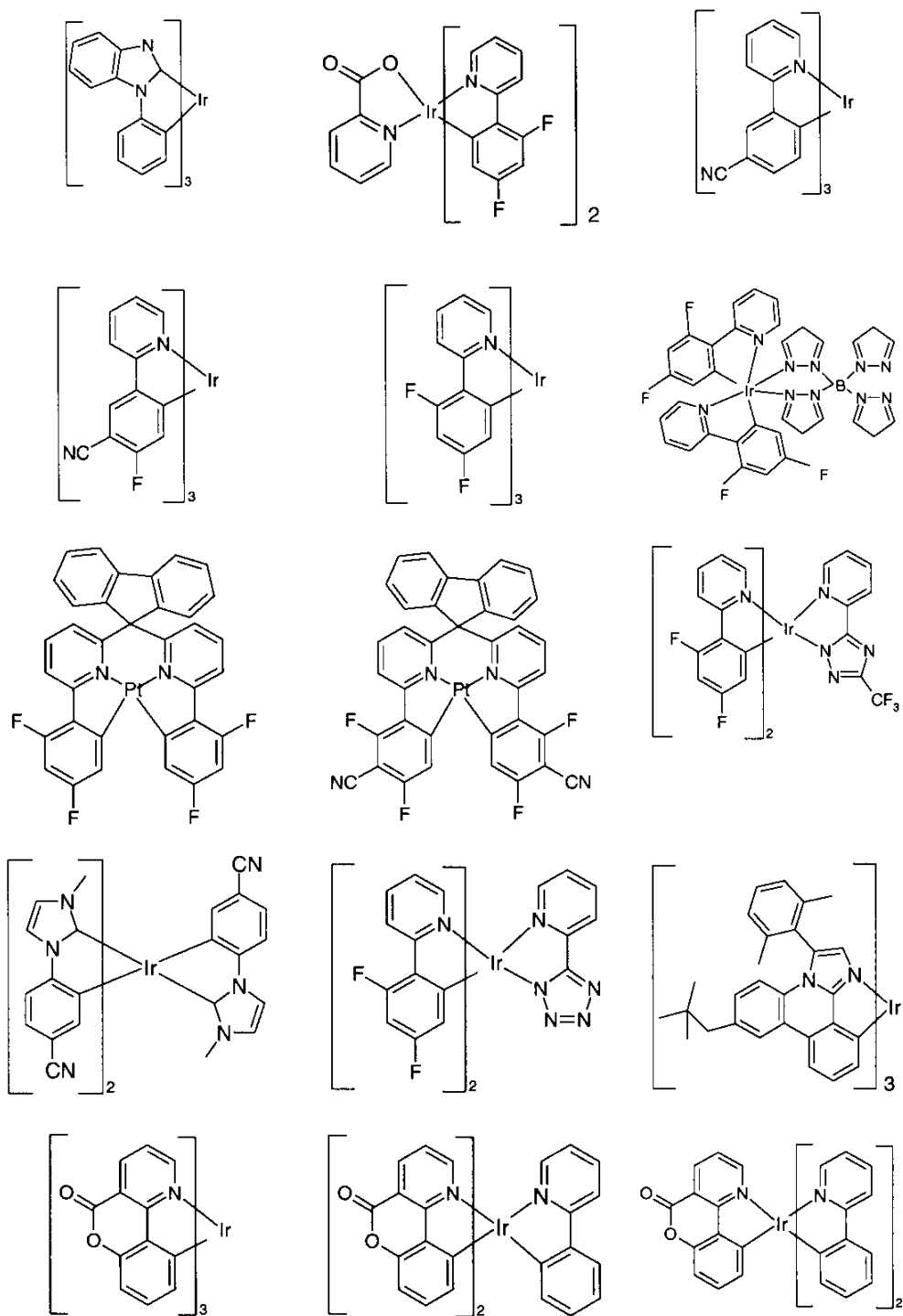


30

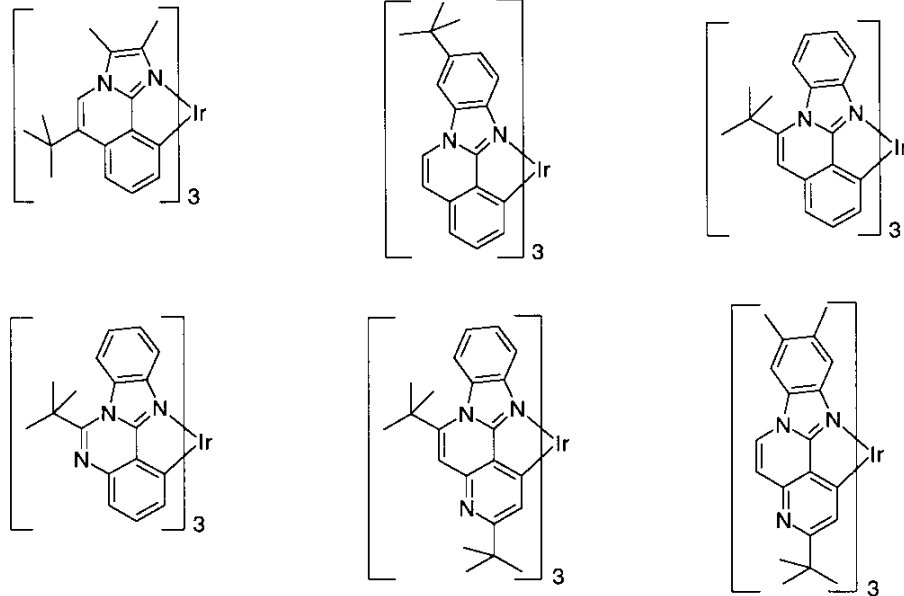


40

【化 3 0 - 9】



【化 3 0 - 1 0】



10

【 0 1 2 3】

本発明の好ましい態様では、一般式(1)～(255)の化合物は、正孔輸送材料として使用される。化合物は、ついで、好ましくは、正孔輸送層および/または正孔注入層中で使用される。本発明の意味での正孔注入層は、アノードに直接隣接する層である。本発明の意味での正孔輸送層は、正孔注入層と発光層との間に位置する層である。正孔輸送層は、発光層に直接隣接してよい。式(1)～(255)の化合物が、正孔輸送材料または正孔注入材料として使用されるならば、それらは、電子受容体化合物で、たとえば、 F_4 -TCNQ、 F_6 -TNAPとまたはEP1476881もしくはEP1596445に記載されるとおりの化合物でドーピングされるのが好ましいかもしれない(p-ドーピング)。本発明のさらに好ましい態様では、式(1)～(255)の化合物は、US2007/0092755に記載されたとおりのヘキサアザトリフェニレン誘導体と組み合わせて、正孔輸送材料として使用される。ここで、ヘキサアザトリフェニレン誘導体は、特に、好ましくは、別の層中で使用される。

20

【 0 1 2 4】

一般式(1)～(255)の化合物が、正孔輸送層中で正孔輸送材料として使用されるならば、化合物は、正孔輸送層中で純粋材料として、すなわち100%の割合で使用する事ができるか、正孔輸送層中で一以上のさらなる化合物と組み合わせて使用することができる。

30

【 0 1 2 5】

本発明のさらなる態様では、一般式(1)～(255)の化合物は発光材料として使用される。この目的のために、化合物は、好ましくは、発光層中で使用される。少なくとも一つの一般式(1)～(255)の化合物に加えて、発光層は、さらに少なくとも一つのホスト材料を含む。当業者は、何の困難性もなく進歩性を要することなく、公知のホスト材料から選択することができる。

40

【 0 1 2 6】

本発明のさらなる態様では、一般式(1)～(255)の化合物は、一以上のドーパント、好ましくは、燐光ドーパントと組み合わせてマトリックス材料として使用される。

【 0 1 2 7】

マトリックス材料とドーパントとを含む系中のドーパントは、混合物中でのその割合がより少ない成分の意味で使用される。対応して、マトリックス材料は、マトリックス材料とドーパントとを含む系中で混合物中でのその割合がより多い成分の意味で使用される。

【 0 1 2 8】

発光層中のマトリックス材料の割合は、この場合、蛍光発光層に対しては、50.0～99.9体積%、好ましくは、80.0～99.5体積%、特に、好ましくは、92.0

50

～ 99.5 体積%であり、燐光発光層に対しては、85.0～97.0 体積%である。

【0129】

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

【0130】

有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層は、また、複数のマトリックス材料（混合マトリックス系）および/または複数のドーパントを含んでもよい。この場合にも、ドーパントは、一般的には、系中でのその割合がより少ないものであり、マトリックス材料は、系中でのその割合がより多いものである。しかしながら、個々の場合では、系中の個々のマトリックス材料の割合は、個々のドーパントの割合よりも少なくてもよい。

【0131】

本発明のさらに好ましい態様では、一般式(1)～(255)の化合物は、混合マトリックス系の成分として使用される。混合マトリックス系は、好ましくは、二または三種の異なるマトリックス材料、特に、好ましくは、二種の異なるマトリックス材料を含む。ここで、二種の材料の一つは、好ましくは、正孔輸送特性を有する材料であり他方は電子輸送特性を有する材料である。しかしながら、混合マトリックス成分の所望の電子輸送および正孔輸送特性は、単一の混合マトリックス成分中で主としてまたは完全に結合されてもよく、さらなる混合マトリックス成分が他の機能を果たす。ここで、二種の異なるマトリックス材料は、1:50～1:1、好ましくは、1:20～1:1、特に、好ましくは、1:10～1:1、非常に、特に、好ましくは、1:4～1:1の比で存在してよい。混合マトリックス系は、好ましくは、燐光有機エレクトロルミネッセンス素子中で使用される。混合マトリックス系に関するより正確な情報は、特に、出願WO 2010/108579で得られる。

【0132】

混合マトリックス系は、一以上のドーパント、好ましくは、一以上の燐光ドーパントを含んでもよい。一般的に、混合マトリックス系は、好ましくは、燐光有機エレクトロルミネッセンス素子中で使用される

本発明の化合物と組み合わせて混合マトリックス系のマトリックス成分として特に適するマトリックス材料は、どの型のドーパントが混合マトリックス系に使用されるかに応じて、以下に示される燐光ドーパントのための好ましいマトリックス材料または蛍光ドーパントのための好ましいマトリックス材料から選ばれる。

【0133】

混合マトリックス系での使用のための好ましい燐光ドーパントは、上記表に示される燐光ドーパントである。

【0134】

本発明の素子中で関連する機能で好ましく使用される材料が、以下に示される。

【0135】

好ましい蛍光ドーパントは、アリールアミンのクラスから選ばれる。本発明の意味でのアリールアミンもしくは芳香族アミンは、窒素に直接結合した3個の置換あるいは非置換芳香族もしくは複素環式芳香族環構造を含む化合物の意味で使用される。これら芳香族もしくは複素環式芳香族環構造の少なくとも1個は、好ましくは、縮合環構造であり、特に、好ましくは、少なくとも14個の芳香族環原子を有する。それらの好ましい例は、芳香族アントラセンアミン、芳香族アントラセンジアミン、芳香族ピレンアミン、芳香族ピレンジアミン、芳香族クリセンアミンもしくは芳香族クリセンジアミンである。芳香族アントラセンアミンは、一個のジアリールアミノ基が、アントラセン基に直接、好ましくは、9-位で結合する化合物の意味で使用される。芳香族アントラセンジアミンは、二個のジアリールアミノ基が、アントラセン基に直接、好ましくは、9,10-位で結合する化合物の意味で使用される。芳香族ピレンアミン、ピレンジアミン、クリセンアミンおよびクリセンジアミンは、同様に定義され、ここで、ジアリールアミノ基は、好ましくは、ピレンに、1位もしくは1,6-位で結合する。

【0136】

好ましくは、蛍光ドーパントのために適したマトリックス材料は、本発明の化合物に加えて、種々のクラスの物質からである。好ましいマトリックス材料は、オリゴアリーレン（たとえば、EP 676461にしたがう2,2',7,7'-テトラフェニルスピロピフルオレンもしくはジナフチルアントラセン）、特に、縮合芳香族基を含むオリゴアリーレン、オリゴアリーレンビニレン（たとえば、D P V B i もしくはEP 676461にしたがうスピロ-D P V B i）、ポリボダル金属錯体（たとえば、WO 2004/081017にしたがう）、正孔伝導化合物（たとえば、WO 2004/058911にしたがう）、電子伝導化合物、特に、ケトン、ホスフィンオキシド、スルホキシド等（たとえば、WO 2005/084081およびWO 2005/084082にしたがう）、アトロブ異性体（たとえば、WO 2006/048268にしたがう）、ボロン酸誘導体（たとえば、WO 2006/177052にしたがう）またはベンズアントラセン（たとえば、WO2008/145239）のクラスから選択される。特に、好ましいマトリックス材料は、ナフタレン、アントラセン、ベンゾアントラセンおよび/またはピレンを含むオリゴアリーレンもしくはこれら化合物のアトロブ異性体、オリゴアリーレンビニレン、ケトン、ホスフィンオキシドおよびスルホキシドのクラスから選択される。非常に、特に、好ましいマトリックス材料は、アントラセン、ベンゾアントラセン、ベンゾフェナントレンおよび/またはピレンを含むオリゴアリーレンもしくはこれら化合物のアトロブ異性体のクラスから選択される。本発明の意味でのオリゴアリーレンは、少なくとも三個のアリールもしくはアリーレン基が互いに結合した化合物の意味で使用される。

10

【0137】

燐光ドーパントのための好ましいマトリックス材料は、本発明の化合物に加えて、芳香族アミン、特に、トリアリールアミン、たとえば、US 2005/0069729にしたがう、カルバゾール誘導体、（たとえば、C B P (N,N-ビスカルバゾリルピフェニル) またはWO2005/039246、US2005/0069729、JP 2004/288381、EP1205527もしくはWO2008/086851にしたがう化合物、たとえば、WO2011/088877およびWO2011/128017にしたがう架橋カルバゾール誘導体、たとえば、WO2010/0136109およびWO2011/000455にしたがうインデノカルバゾール誘導体、たとえば、EP1617710、EP1617711、EP1731584、JP 2005/347160にしたがうアザカルバゾール誘導体、たとえば、WO2007/063754もしくはWO2008/056746にしたがうインドロカルバゾール誘導体、たとえば、WO 2004/093207もしくは2010/006680にしたがうケトン、たとえば、WO 2005/003253にしたがうホスフィンオキシド、スルホキシドおよびスルホン、オリゴフェニレン、たとえば、WO 2007/137725にしたがうバイポーラーマトリックス材料、たとえば、WO0205/111172にしたがうシラン、たとえば、WO 2006/117052にしたがうアザボロールもしくはボロン酸エステル、たとえば、WO2010/015306、WO2007/063754もしくはWO2008/056746にしたがうトリアジン誘導体、たとえば、EP652273およびWO 2009/062578にしたがう亜鉛錯体、アルミニウム錯体、たとえば、B A l q、たとえば、WO2010/054729にしたがうジアザシロールおよびテトラアザシロール誘導体、たとえば、WO2010/054730にしたがうジアザホスホール誘導体およびアルミニウム錯体、たとえば、B A l q である

20

30

本発明の有機エレクトロルミネセンス素子の正孔注入もしくは正孔輸送層中で、または電子輸送層中で使用することができる適切な電荷輸送材料は、たとえば、Y. Shirota et al., Chem. Rev. 2007, 107(4), 953-1010に開示された化合物または先行技術によりこれらの層に使用される他の材料である。

40

【0138】

有機エレクトロルミネセンス素子のカソードは、好ましくは、低い仕事関数を有する金属、種々の金属を含む金属合金もしくは多層構造、たとえば、アルカリ土類金属、アルカリ金属、主族金属あるいはランタノイド金属（たとえば、C a、B a、M g、A l、I n、M g、Y b、S m等）を含む。また、適切なのは、アルカリ金属あるいはアルカリ土類金属と銀とを含む合金、たとえば、マグネシウムと銀とを含む合金である。多層構造の場合、たとえば、A gあるいはA lのような比較的高い仕事関数を有するさらなる金属を前記金属に加えて使用することもでき、その場合、たとえば、C a / A g、M g / A g もしく

50

は Ag / Ag のような金属の組み合わせが一般的に使用される。高い誘電定数を有する材料の薄い中間層を金属カソードと有機半導体との間に挿入することも好ましいかもしれない。この目的のために適切なものは、たとえば、アルカリ金属フッ化物もしくはアルカリ土類金属フッ化物だけでなく対応する酸化物もしくは炭酸塩である（たとえば、 LiF 、 Li_2O 、 BaF_2 、 MgO 、 NaF 、 CsF 、 Cs_2CO_3 等）。さらに、リチウムキノリナート（ LiQ ）をこの目的のために使用することができる。この層の層厚は、好ましくは、 $0.5 \sim 5 \text{ nm}$ である。

【0139】

アノードは、好ましくは、高い仕事関数を有する材料を含む。アノードは、好ましくは、真空に対して 4.5 eV より高い仕事関数を有する。この目的に適切なものは、一方で、たとえば、 Ag 、 Pt もしくは Au のような高い還元電位を有する金属である。他方で、金属/金属酸化物電極（たとえば、 $\text{Al} / \text{Ni} / \text{NiO}_x$ 、 Al / PtO_x ）も好ましいかもしれない。いくつかの用途のためには、少なくとも一つの電極は、有機材料の照射（有機太陽電池）もしくは光のアウトカップリング（ OLED 、 O-laser ）の何れかを容易にするために、透明または部分的に透明でなければならない。ここで、好ましいアノード材料は、伝導性混合金属酸化物である。特に、好ましいものは、インジウム錫酸化物（ ITO ）もしくはインジウム亜鉛酸化物（ IZO ）である。さらに好ましいものは、伝導性のドーパされた有機材料、特に、伝導性のドーパされたポリマーである。

【0140】

素子は（用途に応じて）適切に構造化され、接点を供され、本発明による素子の寿命が水および/または空気存在で短くなることから、最後に封止される。

【0141】

好ましい態様では、本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子は、1以上の層が、昇華プロセスにより適用され、材料は、 10^{-5} mbar 未満、好ましくは、 10^{-6} mbar 未満の初期圧力で、真空昇華ユニット中で真空気相堆積されることを特徴とする。しかしながら、初期圧力は、さらにより低くても、たとえば、 10^{-7} mbar 未満でも可能である。

【0142】

同様に好ましい有機エレクトロルミネッセンス素子は、1以上の層が、 OVPD （有機気相堆積）プロセスもしくはキャリアガス昇華により適用され、材料は、 $10^{-5} \text{ mbar} \sim 1 \text{ bar}$ の圧力で適用される。このプロセスの特別な場合は、 OVJP （有機気相ジェット印刷）プロセスであり、材料はノズルにより直接適用され、そしてそれにより構造化される（たとえば、*M. S. Arnold et al., Appl. Phys. Lett.* 2008, 92, 053301）。

【0143】

更に、好ましい有機エレクトロルミネッセンス素子は、1以上の層が、溶液から、たとえば、スピンコーティングにより、もしくは、たとえばスクリーン印刷、フレキソ印刷、ノズル印刷あるいはオフセット印刷、特に、好ましくは、 LITI （光誘起熱画像化、熱転写印刷）、あるいはインクジェット印刷のような任意の所望の印刷プロセスにより製造されることを特徴とする。可溶性の式（1）～（255）の化合物が、この目的のために必要である。高い溶解性は、化合物の適切な置換により成し遂げることができる。

【0144】

本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子の製造のために、一以上の層を溶液からまた一以上の層を昇華プロセスにより適用することが、さらに、好ましい。

【0145】

本発明にしたがって、一以上の一般式（1）～（255）の化合物を含む電子素子は、照明用途の光源として、医療および/または美容用途（たとえば、光治療）の光源として、表示装置において使用することができる。

【0146】

一般式（1）～（255）の化合物を含む素子を、非常に多用途で 사용할 ことができる。よって、たとえば1以上の一般式（1）～（255）の化合物を含むエレクトロルミネッセンス素子を、テレビジョン、モバイル電話機、コンピュータ、カメラ用の画面で使

10

20

30

40

50

用することができる。しかしながら、素子を照明応用にも使用することができる。さらに、たとえば、O L E DまたはO L E Cにおいて、一般式(1)~(255)の少なくとも1つの化合物を含むエレクトロルミネッセンス素子を、医学もしくは美容における光線療法に利用できる。よって、多数の病気(乾癬、アトピー性皮膚炎、炎症、にきび、皮膚癌等)もしくは皮膚の皺、皮膚の発赤、皮膚の老化の予防または低減の処置をすることができる。さらに、飲料、食物又は食品を新鮮に保つため、または装置(例えば医療機器)を滅菌するために、発光素子を利用することができる。

【0147】

本発明による化合物と本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子は先行技術より優れた以下の驚異的な利点により、特徴付けられる。

10

【0148】

1. 本発明による化合物は、たとえば有機エレクトロルミネッセンス素子のような電子素子における正孔輸送層又は正孔注入層で用いるために、特に、それらの高い正孔移動度により、非常に極めて好適である。

【0149】

2. 本発明による化合物は、比較的低い昇華温度、高い温度安定性、高い酸化安定性と高いガラス転移温度と低い結晶性を有し、このことはたとえば溶液からのまたは気相からの加工性と、電子素子での使用との両者について好都合である。

【0150】

3. 電子素子における本発明による化合物の使用、特に、正孔輸送または正孔注入材料として用いることは、高い効率、低い駆動電圧と長い寿命をもたらす。

20

【0151】

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

【0152】

本発明のすべての特長は、ある特徴および/または工程が相互に排除しないならば、とにかく互いに組み合わせることができる。これは、特に、本発明の好ましい特徴にあてはまる。同様に、非本質的な組み合わせの特徴は、(組み合わせではなく)別に、使用することができる。

30

【0153】

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

【0154】

本発明で開示された技術的機能に関する教示を抽出し、他の例と組み合わせることができる。

40

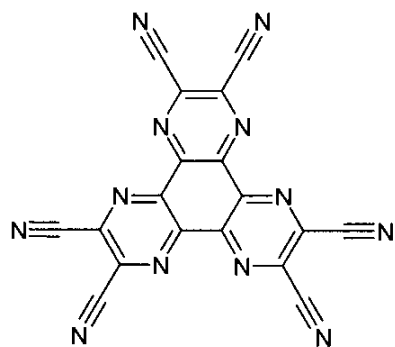
【0155】

本発明は、次の使用例により、より詳細に説明されるが、本発明は例の範囲に限定されるものではない。

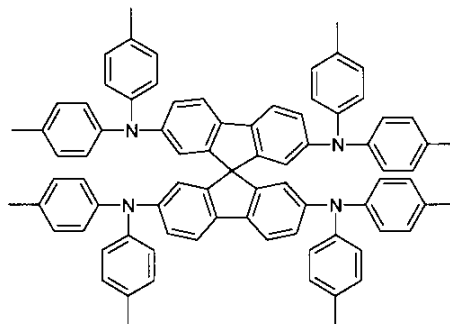
【0156】

例
材料

【化 3 1 - 1】

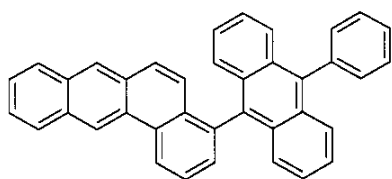


HIL1

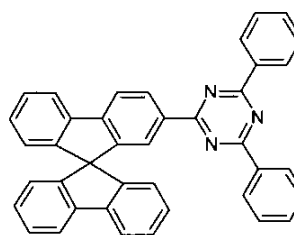


HIL2

10

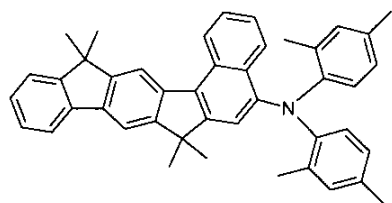


H1

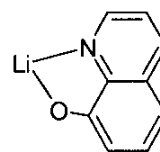


ETM1

20

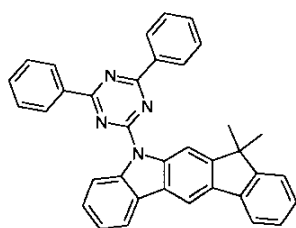


SEB1

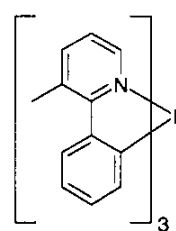


LiQ

30

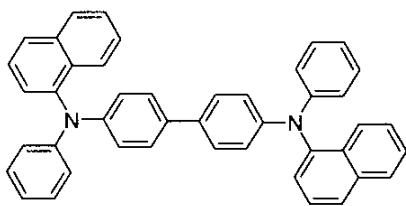


H2

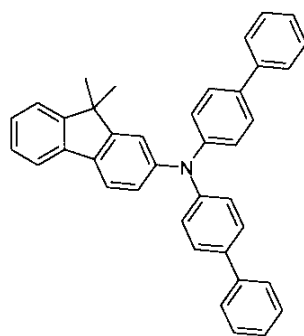


Irpy

【化 3 1 - 2】

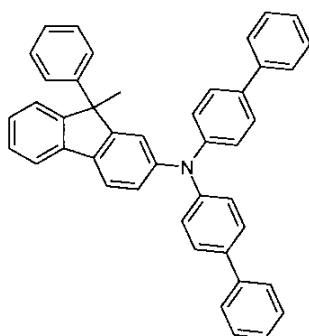


NPB

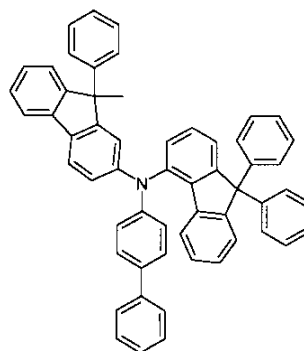


HTMV1

10

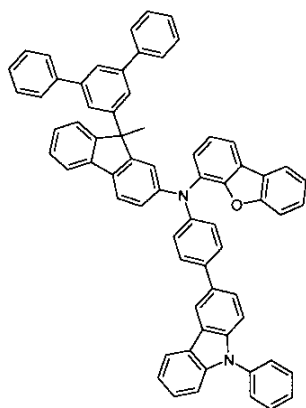


(2-7)

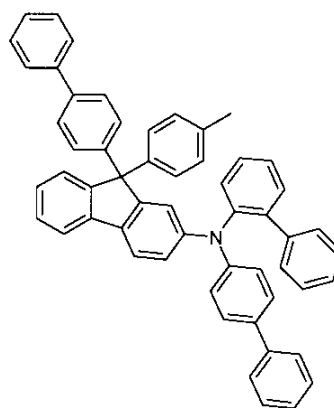


(2-4)

20



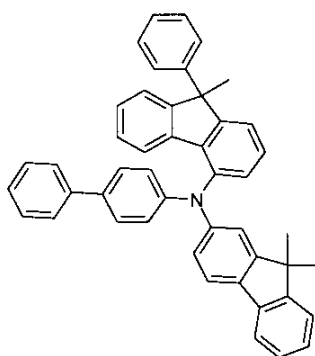
(2-5)



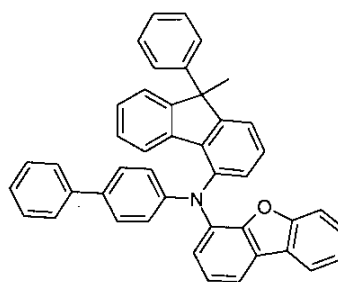
(1-11)

30

【化 3 1 - 3】



(2-1)



(2-8)

40

50

【 0 1 5 7 】

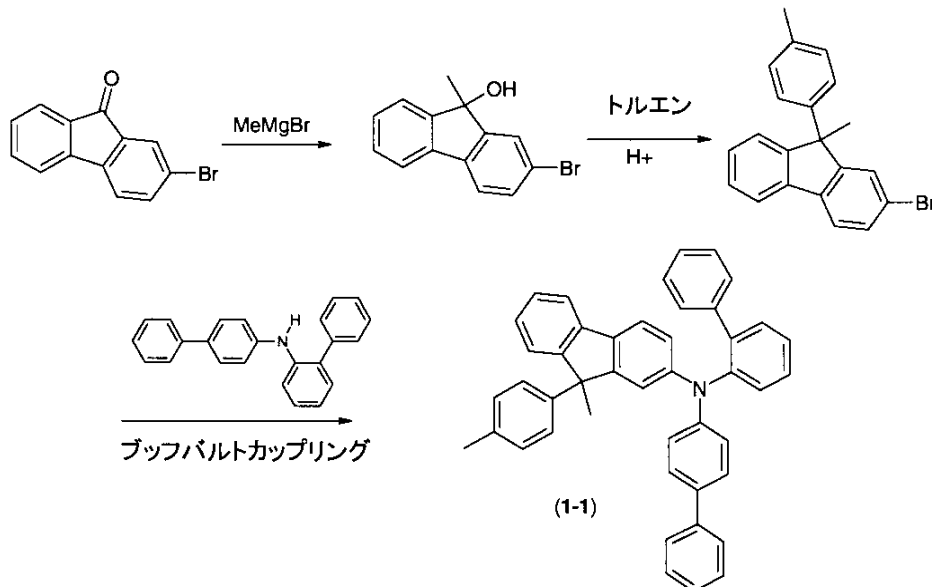
材料 H I L 1、H I L 2 (EP 0676461)、H 1 (WO 2008/145239)、E T M 1 (WO 2005/053055)、S E B 1 (WO 2088/006449)、L i Q と N P B は、先行技術から当業者によく知られている。化合物 H T M V 1 を、例 1 で示す合成と同じように調製することができ、ここで、2-ブロモ-9,9-ジメチル-9H-フルオレンは、ビスピフェニル-4-イルアミンとのブッフバルト反応で変換される。化合物 (2 - 7)、(2 - 4)、(2 - 5)、(1 - 1 1)、(2 - 1) と (2 - 8) は本発明によるものである。

【 0 1 5 8 】

例 1 化合物 ビフェニル-2-イルビフェニル-4-イル-(9-メチル-9-p-トリル-9H-フルオレン-2-イル)アミン (1 - 1) と、化合物 (1 - 2) ~ (1 - 1 1) の合成

10

【 化 3 2 】



20

【 0 1 5 9 】

2-ブロモ-9-メチル-9-p-トリル-9H-フルオレン 40 g (1 5 4 ミリモル) の 2-ブロモ-9H-フルオレンを、加熱により乾燥させたフラスコ中の 5 0 0 m l の無水 T H F 中に溶解させる。溶液を N₂ で飽和し、15.0 g (1 7 0 ミリモル) の塩化セリウム (I I I) を添加する。透明な溶液を - 1 0 まで冷却し、次いで、121 m l (1 7 0 ミリモル) の 1.4 M メチルマグネシウムブロミド溶液を添加する。反応混合物を室温までゆっくりと温め、次いで、N H₄ C l (5 0 0 m l) を使用してクエンチする。混合物をその後、酢酸エチルと水との間で分画し、有機相を水で 3 度洗浄し、N a₂ S O₄ で乾燥させ、ロータリーエバポレーター中で蒸発させる。60 m l のトルエンを、蒸発させた溶液に滴下する。バッチを 5 0 まで加熱し、27.2 m l のトリフルオロメタンスルホン酸 (3 0 8 ミリモル) をその後、滴下する。1 時間後、反応混合物を室温まで冷やし、1 l の水へ流し込む。混合物をトルエンと水との間で分画し、有機相を水で 3 度洗浄し、N a₂ S O₄ で乾燥させ、ロータリーエバポレーター中で蒸発させる。(ヘプタン：酢酸エチル、1 : 1) と共に、シリカゲルを通して粗生成物を濾過すると、32 g (理論値の 6 0 %) を得る。

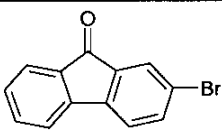
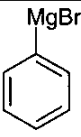
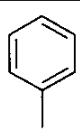
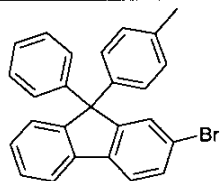
30

40

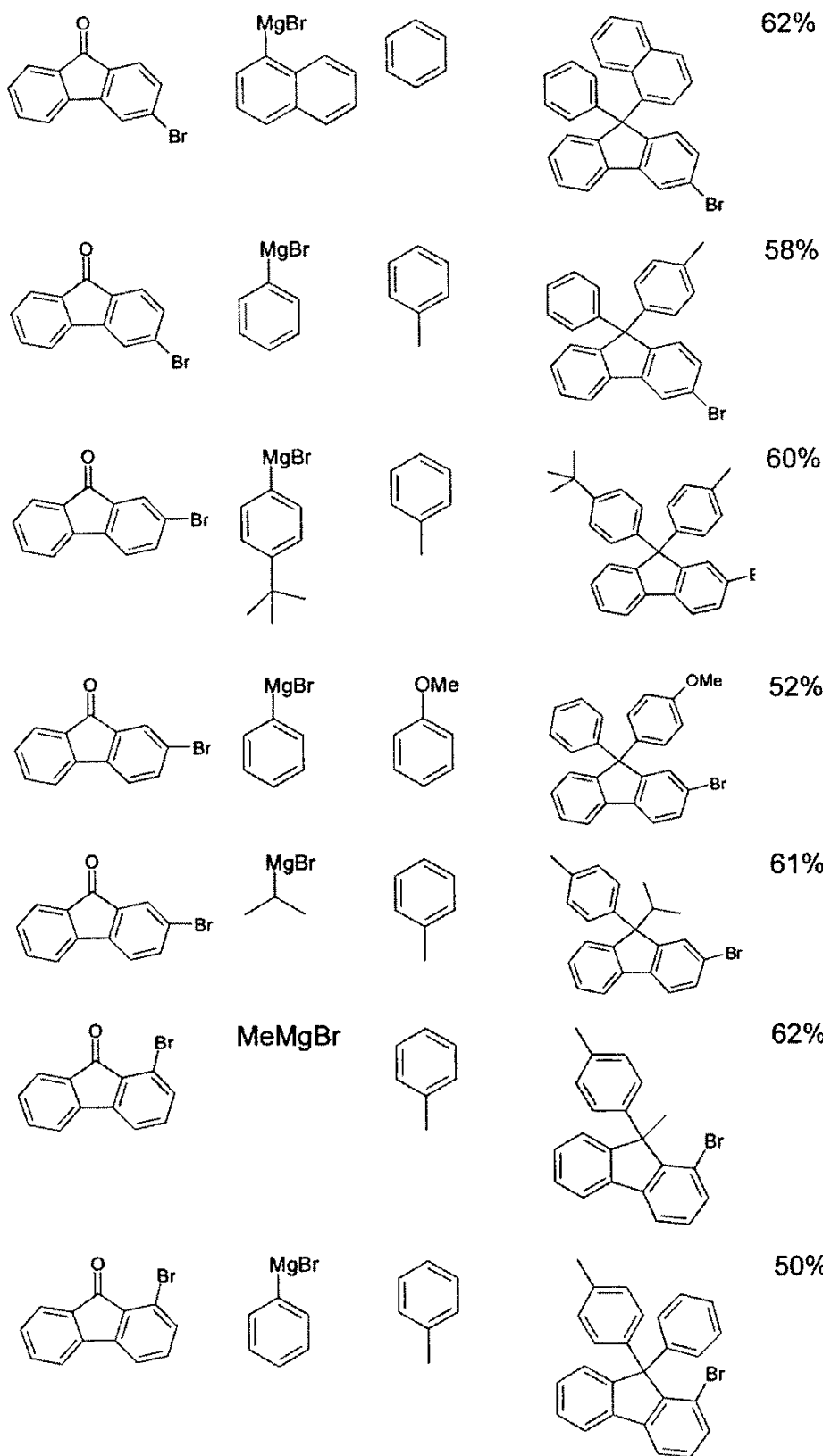
【 0 1 6 0 】

以下の臭素化化合物を同じように調製する：

【化 3 3 - 1】

出発材料 1	出発材料 2	出発材料 3	生成物	収率
				55%

【化 3 3 - 2】



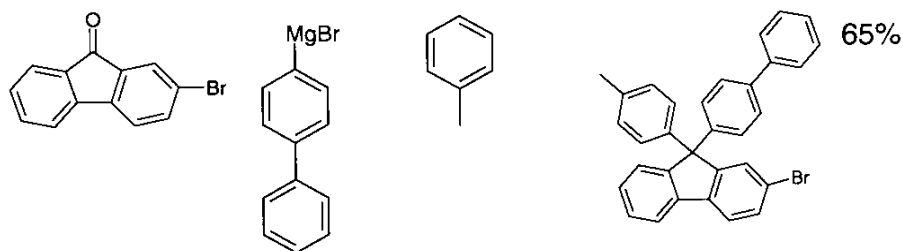
10

20

30

40

【化 3 3 - 3】



【 0 1 6 1】

ビフェニル-2-イルビフェニル-4-イル-(9-メチル-9-p-トリル-9H-フルオレン-2-イル)アミン (1-1) 27.6 g のビフェニル-2-イルビフェニル-4-イルアミン (85.9 ミリモル) と 30 g の2-ブロモフルオレン (85.9 ミリモル) とを 500 ml のトルエン中で溶解させ、溶液を脱気し、 N_2 で飽和させる。4.3 ml (4.3 ミリモル) の 1 M トリ-tert-ブチル-ホスフィン溶液と、0.48 g (2.15 ミリモル) の酢酸パラジウム (II) とを次いで添加する。20.6 g のナトリウムtert-ブトキシド (214.7 ミリモル) をその後、添加する。反応混合物を保護雰囲気下で、5 時間、沸騰させて加熱する。混合物をその後、トルエンと水との間で分画し、有機相を水で3度洗浄し、 Na_2SO_4 で乾燥させ、ロータリーエバポレーター中で蒸発させる。トルエンと共に、シリカゲルを通して粗生成物を濾過した後、残留する残留物をヘプタン/トルエンから再結晶化させ、最後に、高真空中で昇華させ、純度は99.9%である。収率は39.5 g (理論値の78%)である。

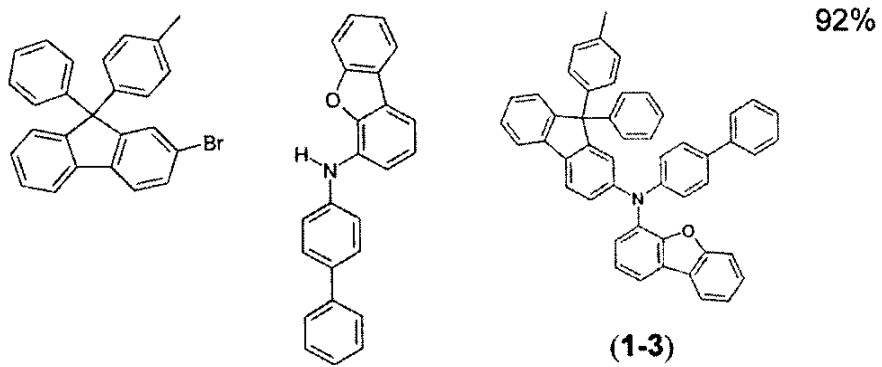
【 0 1 6 2】

化合物 (1-2) ~ (1-11) を同じように調製する：

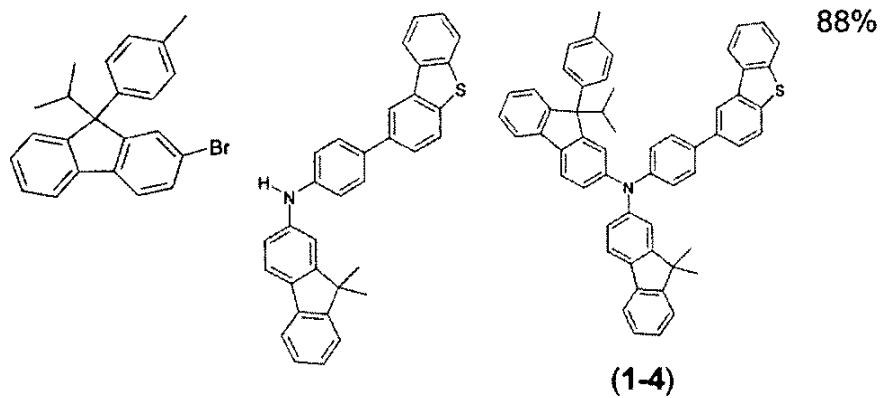
【化 3 4 - 1】

出発材料 1	出発材料 2	生成物	収率
			78%
		(1-2)	

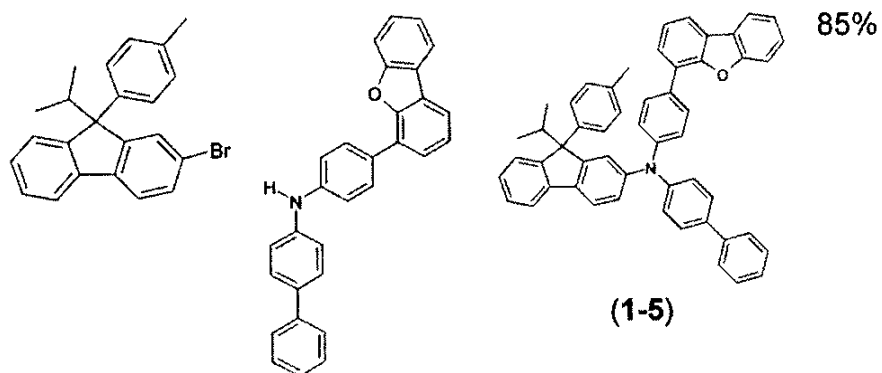
【化 3 4 - 2】



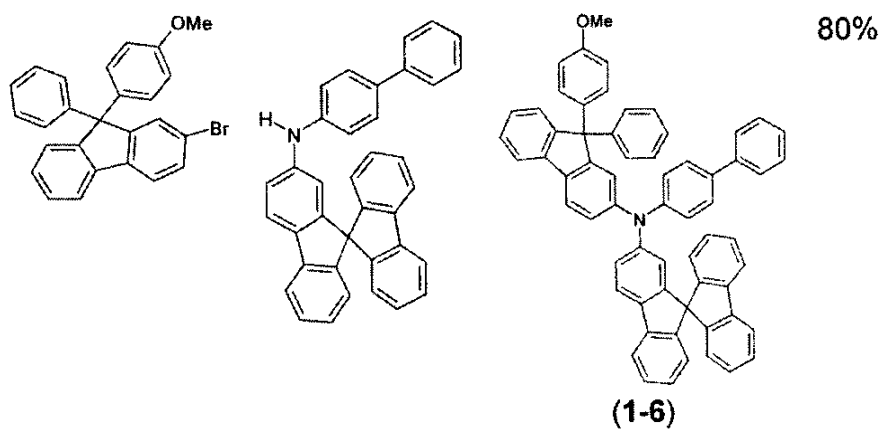
10



20

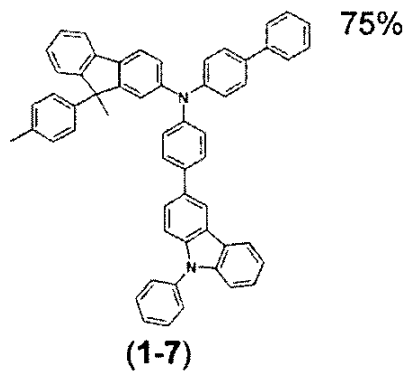
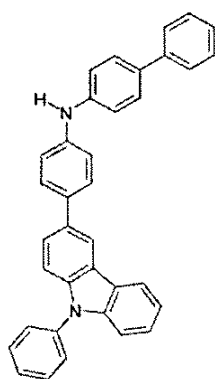
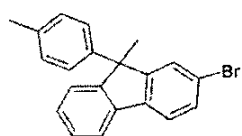


30

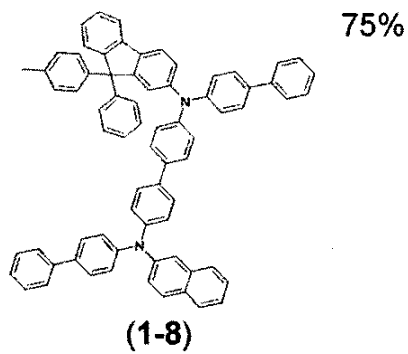
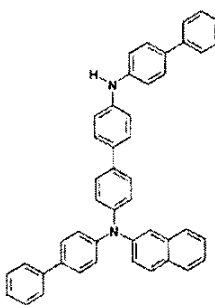
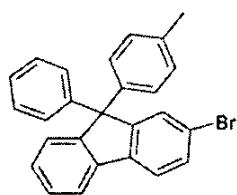


40

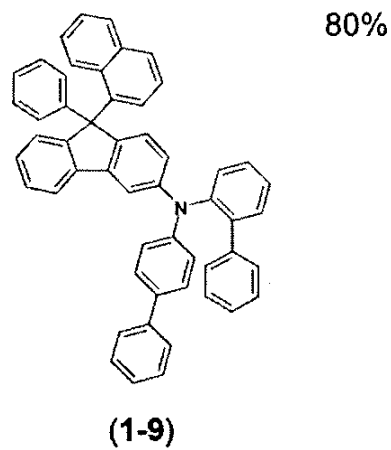
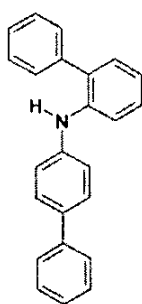
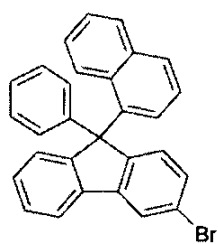
【化 3 4 - 3】



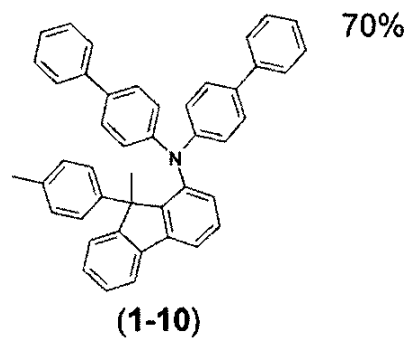
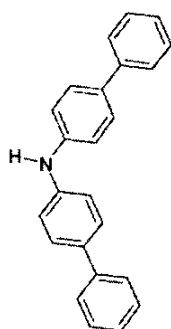
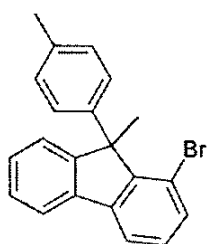
10



20

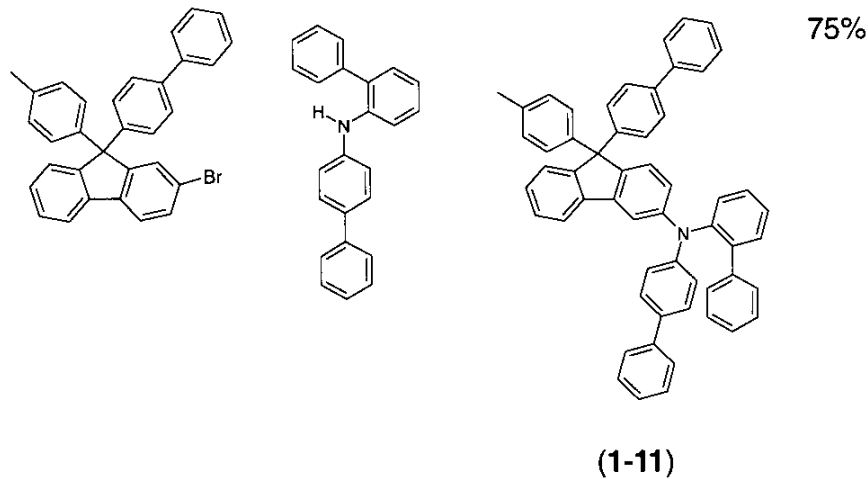


30



40

【化 3 4 - 4】

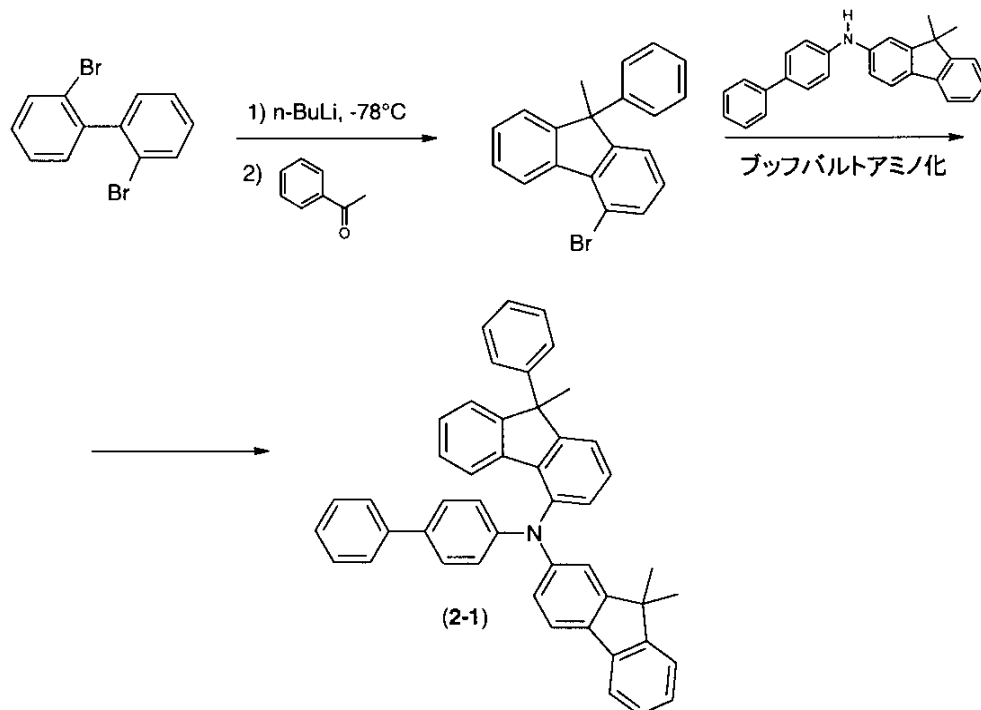


10

【 0 1 6 3】

例 2 化合物ビフェニル-4-イル-(9,9-ジメチル-9H-フルオレン-2-イル)-(9-メチル-9-フェニル-9H-フルオレン-4-イル)アミン (2-1) と、化合物 (2-2) ~ (2-8) の合成

【化 3 5】



20

30

【 0 1 6 4】

4-ブromo-9-メチル-9-フェニル-9H-フルオレン 30 g (94 ミリモル) の 2,2'-ジプロモビフェニルを、加熱により乾燥させたフラスコ中の 200 ml の無水 THF 中に溶解させる。反応混合物を -78℃ まで冷却する。ヘキサン (94 ミリモル) 中の 37.7 ml の n-BuLi の 2.5 M 溶液を、この温度でゆっくりと滴下する (期間: 約 1 時間)。バッチをさらに 1 時間、-70℃ で攪拌する。11.1 ml のアセトフェノン (94 ミリモル) をその後、100 ml の THF 中に溶解させ、-70℃ で滴下する。滴下が終わったとき、反応混合物を室温までゆっくりと温め、NH₄Cl を使用してクエンチし、その後、ロータリーエバポレーター中で蒸発させる。300 ml の酢酸を、蒸発させた溶液に慎重に添加し、50 ml の発煙 HCl をその後、添加する。バッチを 75℃ まで加熱し、その状態に 6 時間維持する。白色の固形物がこの期間に沈殿する。次いで、バッチを室温まで冷やし、沈殿した固形物を吸引濾過し、メタノールで濯ぐ。残留物を真空で 40℃ で

40

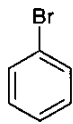
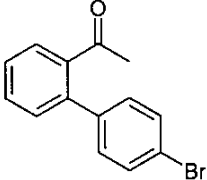
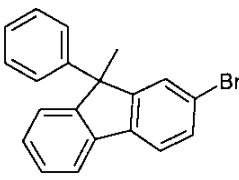
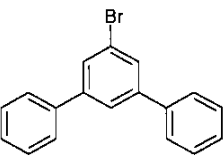
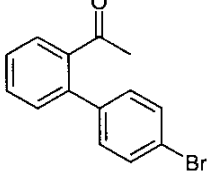
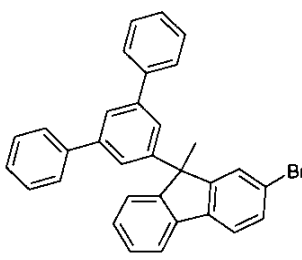
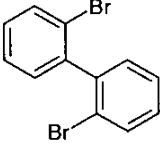
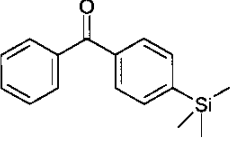
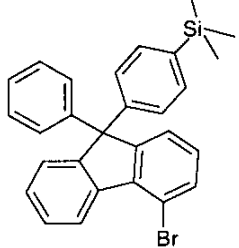
50

乾燥させる。収率は 25.3 g (75 ミリモル) (理論値の 80%) である。

【0165】

以下の臭素化化合物を同じように調製する：

【化36】

出発材料 1	出発材料 2	生成物	収率
			78%
			80%
			87%

10

20

【0166】

ビフェニル-4-イル-(9,9-ジメチル-9H-フルオレン-2-イル)-(9-メチル-9-フェニル-9H-フルオレン-4-イル)アミン (2-1) 17.8 g のビフェニル-2-イルビフェニル-4-イルアミン (49.4 ミリモル) と、18.2 g の 2-ブロモ-(9-メチル-9-フェニル-9H-フルオレン (54.3 モル) を 400 ml のトルエン中で溶解させる：溶液を脱気し、N₂ で飽和させる。2.96 ml (2.96 ミリモル) のトリ-tert-ブチルホスフィンと、0.33 g (1.48 ミリモル) の酢酸パラジウム (II) とを次いで添加し、9.8 g のナトリウム tert-ブトキシド (98.8 ミリモル) をその後、添加する。反応混合物を保護雰囲気下で、3 時間、沸騰させて加熱する。混合物をその後、トルエンと水との間で分画し、有機相を水で 3 度洗浄し、Na₂SO₄ で乾燥させ、ロータリーエバポレーター中で蒸発させる。シリカゲルを通して、トルエンと共に粗生成物を濾過した後、残留する残留物をヘプタン/トルエンから再結晶化させ、最後に、高真空中で昇華させ、純度は 99.9% である。収率は 24.3 g (理論値の 80%) である。

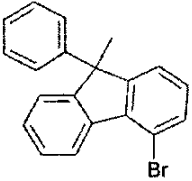
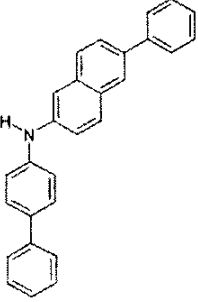
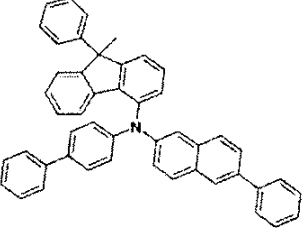
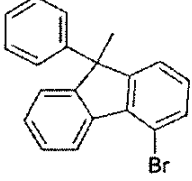
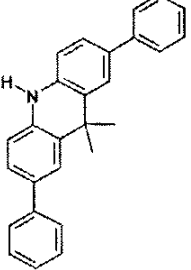
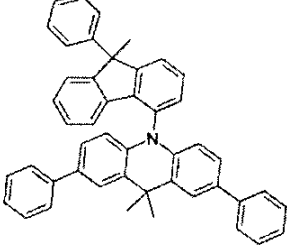
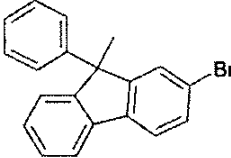
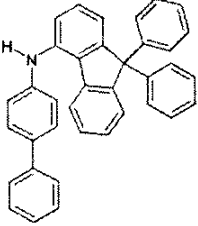
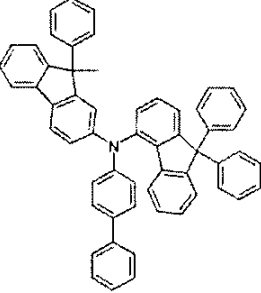
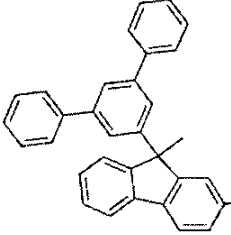
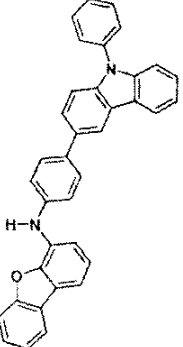
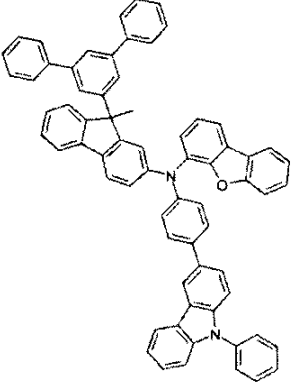
30

【0167】

化合物 (2-2) ~ (2-8) を同じように調製する：

40

【化 3 7 - 1】

出発材料1	出発材料2	生成物	収率
		 (2-2)	78%
		 (2-3)	75%
		 (2-4)	80%
		 (2-5)	80%

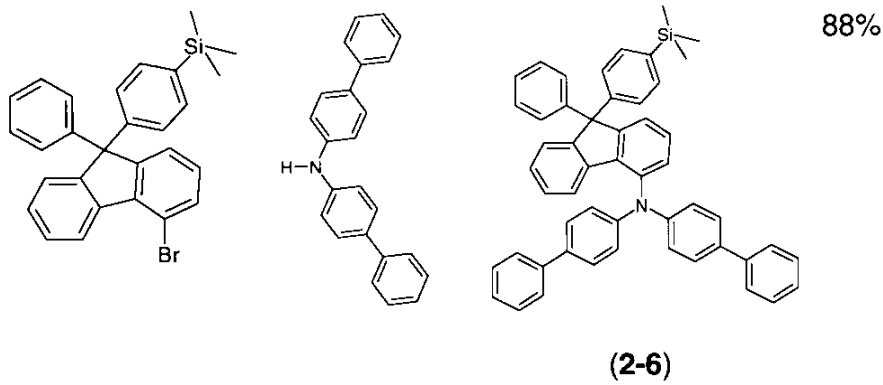
10

20

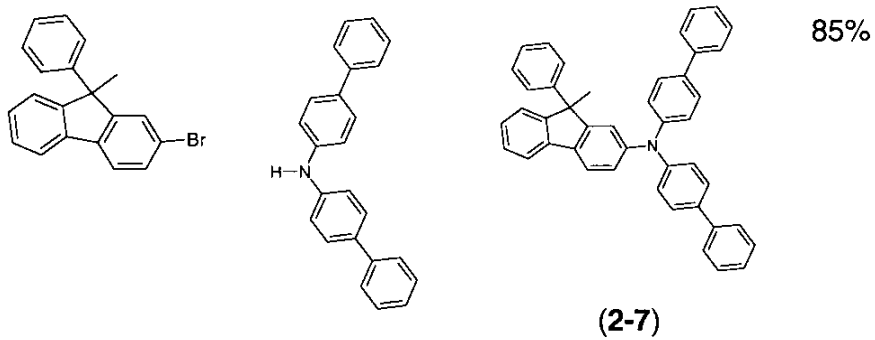
30

40

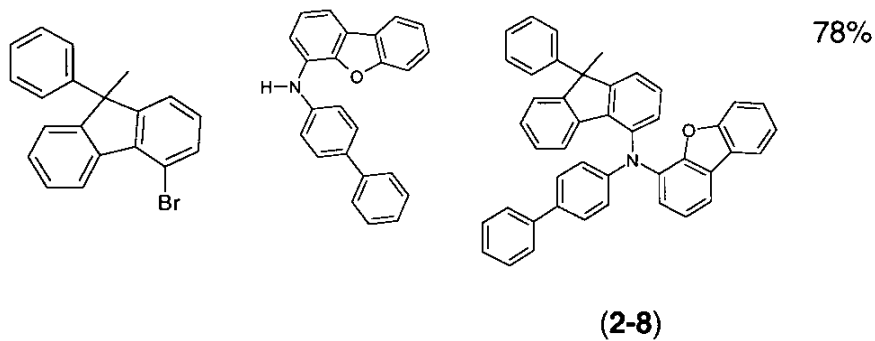
【化 3 7 - 2】



10



20



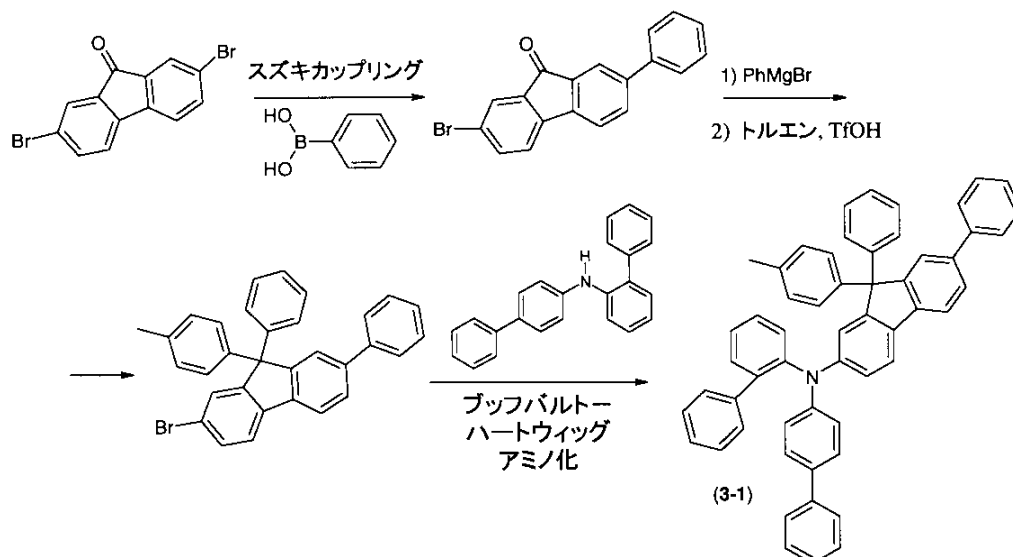
30

【 0 1 6 8 】

例 3

化合物ビフェニル-4-イルビフェニル-2-イル-(7,9-ジフェニル-9-p-トリル-9H-フルオレン-2-イル)アミン (3-1) と、化合物 (3-2) ~ (3-4) の合成

【化 3 8】



40

50

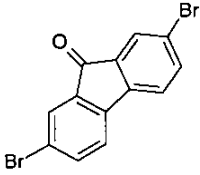
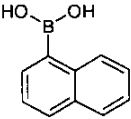
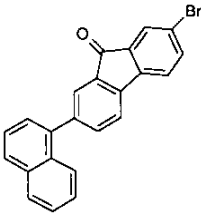
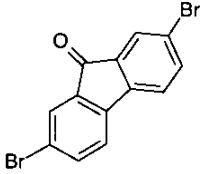
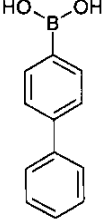
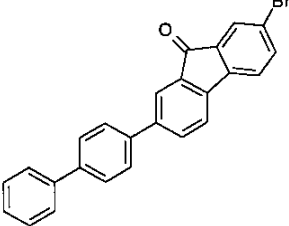
【 0 1 6 9 】

2-ブromo-7-フェニルフルオレン-9-オン 21.6 g (178ミリモル) のフェニルボロン酸と、60 g (178ミリモル) の2,7-ジブromo-フルオレンとを、800 ml のジメトキシメタンと265 ml の2 M炭酸ナトリウム溶液 (533ミリモル) に懸濁させる。6.154 g (5ミリモル) のテトラキス (トリフェニルホスフィン) パラジウムをこの懸濁液に添加し、反応混合物を還流下で18時間加熱する。反応混合物を冷却後、有機相を分離させ、シリカゲルを通して濾過し、100 ml の水で3度洗浄し、その後、蒸発乾固させる。トルエンと共に、シリカゲルを通して粗生成物を濾過すると、38.6 g (85%) の2-ブromo-7-フェニルフルオレン-9-オンを得る。

【 0 1 7 0 】

以下の臭素化化合物を同じように調製する：

【 化 3 9 】

出発材料 1	出発材料 2	生成物	収率
			85%
			90%

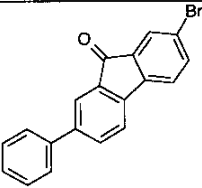
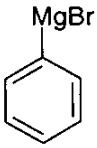
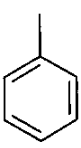
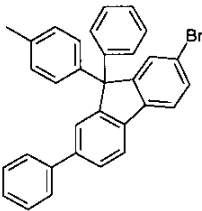
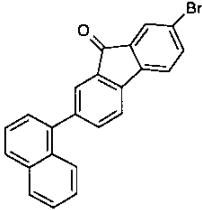
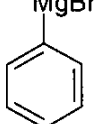
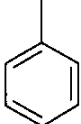
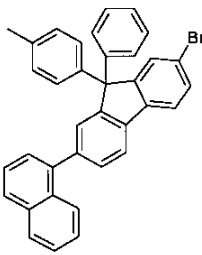
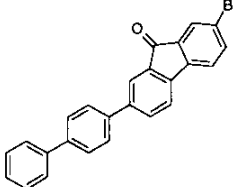
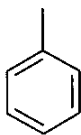
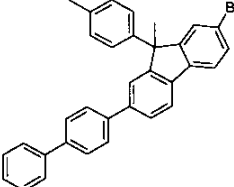
【 0 1 7 1 】

2-ブromo-7,9-ジフェニル-9-p-トリル-9H-フルオレン 35 g (104ミリモル) の2-ブromo-7-フェニルフルオレンを、加熱により乾燥させたフラスコ中の600 ml の無水THF中に溶解させる。透明な溶液を-10℃まで冷却し、次いで、38.3 ml (115ミリモル) の3 Mフェニルマグネシウムブロミド溶液を添加する。反応混合物を室温までゆっくりと温め、次いで、NH₄Cl (300 ml) を使用してクエンチする。混合物をその後、酢酸エチルと水との間で分画し、有機相を水で3度洗浄し、Na₂SO₄で乾燥させ、ロータリーエバポレーター中で蒸発させる。100 ml のトルエンを、蒸発させた溶液に添加する。パッチを50℃まで加熱し、20.4 ml のトリフルオロメタンスルホン酸 (208ミリモル) をその後、滴下する。1時間後、反応混合物を室温まで冷やし、1 l の水へ流し込む。混合物をトルエンと水との間で分画し、有機相を水で3度洗浄し、Na₂SO₄で乾燥させ、ロータリーエバポレーター中で蒸発させる。(ヘプタン：酢酸エチル、1：1) と共に、シリカゲルを通して粗生成物を濾過すると、41 g (理論値の61%) を得る。

【 0 1 7 2 】

以下の臭素化化合物を同じように調製する：

【化 4 0】

出発材料 1	出発材料 2	出発材料 3	生成物	収率
				60%
				55%
				60%

10

20

【 0 1 7 3】

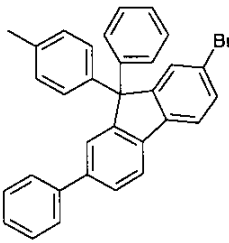
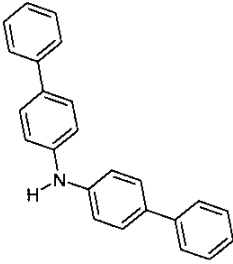
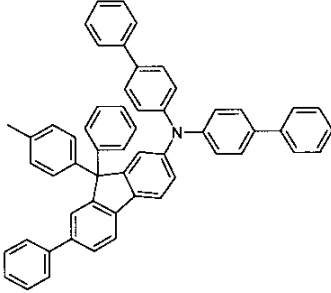
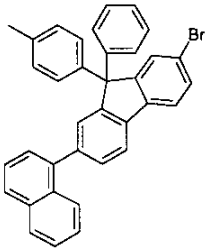
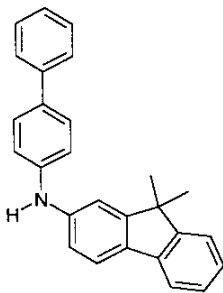
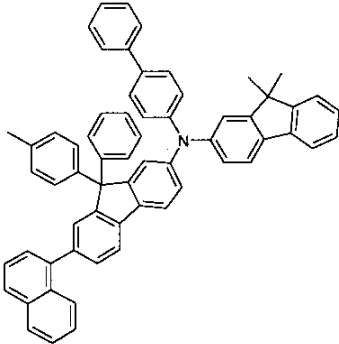
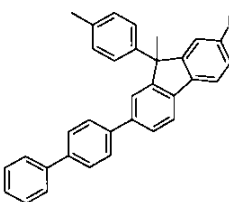
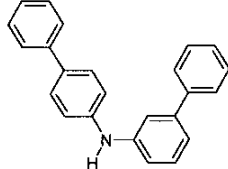
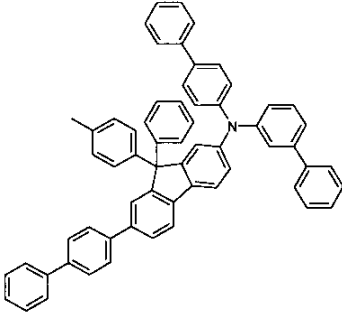
ビフェニル-4-イルビフェニル-2-イル-(7,9-ジフェニル-9-p-トリル-9H-フルオレン-2-イル)アミン (3-1) 13.18 g のビフェニル-2-イルビフェニル-4-イルアミン (41ミリモル) と、20 g の2-ブロモ-7,9-ジフェニル-9-p-トリル-9H-フルオレン (41ミリモル) を350 ml のトルエン中で溶解させ、溶液を脱気し、 N_2 で飽和させる。1.6 ml (1.6ミリモル) のトリ-tert-ブチルホスフィンと、184 mg (0.82ミリモル) の酢酸パラジウム (II) とを次いで添加する。9.86 g のナトリウムtert-ブトキシド (102ミリモル) をその後、添加する。反応混合物を保護雰囲気下で、5時間、沸騰させて加熱する。混合物をその後、トルエンと水との間で分画し、有機相を水で3度洗浄し、 Na_2SO_4 で乾燥させ、ロータリーエバポレーター中で蒸発させる。トルエンと共に、シリカゲルを通して粗生成物を濾過した後、残留する残留物をヘプタン/トルエンから再結晶化させ、最後に、高真空中で昇華させる。純度は99.9%である。収率は21.8 g (理論値の73%) である。

30

【 0 1 7 4】

以下の化合物を同じように調製する：

【化 4 1】

出発材料 1	出発材料 2	生成物	収率
			85%
		(3-2)	
			82%
		(3-3)	
			80%
		(3-4)	

【0175】

例 4 化合物の特性決定

本発明による OLED と先行技術にしたがう OLED が、WO 04/058911 にしたがう一般のプロセスにより製造されるが、ここに記載される状況（層の厚さの変化、材料）に適合される。

【0176】

種々の OLED のデータが、以下の例 V1、V2 と E1 ~ E3 で示されている（表 1 と 2 参照）。使用する基板は、厚さ 50 nm の構造化された ITO（インジウム錫酸化物）で被覆されたガラス板である。OLED は、基本的に、次の層構造を有する：基板 / 正孔注入層（HIL1） / 正孔輸送層（HTL） / 正孔注入層（HIL2） / 電子ブロック層（EBL） / 発光層（EML） / 電子輸送層（ETL） / 電子注入層（EIL）および最後にカソード。カソードは、100 nm 厚のアルミニウム層により形成される。OLED の正確な構造は、表 1 に示されている。OLED の製造のために必要とされる材料については前述した。

【0177】

10

20

30

40

50

すべての材料は、真空室において、熱気相堆積により適用される。ここで、発光層は、常に、少なくとも一つのマトリックス材料（ホスト材料）と、共蒸発により一定の体積割合で一つのまたは複数のマトリックス材料と予備混合される発光ドーパント（エミッター）とから成る。ここで、H 1 : S E B 1（95% : 5%）等の表現は、材料H 1が95体積%の割合で層中に存在し、S E B 1が5体積%の割合で層中に存在することを意味する。同じように、電子輸送層も、二種の材料の混合物から成ってもよい。

【0178】

OLEDは、標準方法により特性決定される。この目的のために、エレクトロルミネセンススペクトル、ランベルト発光特性を仮定して、電流/電圧/輝度特性線（IUL特性線）から計算した、輝度の関数としての電流効率（ cd/A で測定）、パワー効率（ Im/W で測定）、外部量子効率（EQE、パーセントで測定）ならびに寿命が測定される。エレクトロルミネセンススペクトルは、輝度 1000 cd/m^2 で測定され、CIE 1931 xおよびy色座標はそこから計算される。表現「 1000 cd/m^2 におけるEQE」は、駆動輝度 1000 cd/m^2 での外部量子効率を示す。「 6000 cd/m^2 におけるLT80」は、輝度 6000 cd/m^2 におけるOLEDが、初期強度の80%、すなわち、 4800 cd/m^2 に低下するまでの寿命である。種々のOLEDについてのデータが、表2に要約されている。

10

【0179】

蛍光OLEDでの正孔輸送材料としての、本発明による化合物の使用

特に、本発明による化合物は、OLED中で、HIL、HTLまたはEBLとして、適している。それらは、単層としてのみならず、HIL、HTL、EBLとしての混合成分として、またはEML内で適している。

20

【0180】

NPB参照素子（V1）と比べると、本発明による化合物を含む試料は、一重項青色において、より高い効率と非常に改善された寿命との両者を示す。

【0181】

参照材料HTMV1（V2）と比べると、本発明（E1 - E4）による化合物（2 - 7）、（2 - 4）、（2 - 5）、（1 - 11）、（2 - 1）および（2 - 8）は、より良好な寿命を有する。

【0182】

緑色三重項素子では、本発明による化合物（2 - 7）、（2 - 4）、（2 - 1）は、参照素子V3（NPB）およびV4（HTMV1）と比べて、より高い効率と、より良好な寿命を示す。

30

【表 1】

表 1: OLEDの構造						
(層構造: 基板/IL/HTL/IL/EBL/EML/ETL/EIL (1 nm LiQ)/陰極)						
例	HIL1	HTL	HIL2	EBL	EML	ETL
	厚さ/ nm	厚さ/ nm	厚さ/ nm	厚さ/ nm	厚さ/ nm	厚さ/ nm
V1	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	NPB 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
V2	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	HTMV1 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E1	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(2-7) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E2	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(2-4) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E3	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(2-5) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E4	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(1-11) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E5	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(2-1) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm
E6	HIL1 5 nm	HIL2 140 nm	HIL1 5 nm	(2-8) 20 nm	H1(95%):SEB1(5%) 20 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 30 nm

【表 2】

表 2: OLEDのデータ				
例	1000 cd/m ² における EQE	6000 cd/m ² における LT80	CIE	
	%	[h]	x	y
V1	4.8	70	0.14	0.17
V2	7.0	130	0.13	0.15
E1	6.1	155	0.13	0.15
E2	7.0	161	0.14	0.15
E3	6.9	158	0.13	0.14
E4	6.5	155	0.13	0.15
E5	7.0	155	0.14	0.15
E6	6.9	160	0.14	0.15

10

20

30

【表 3】

表 3: OLEDの構造 (層構造: 基板/HTL/HIL2/EBL/EML/ETL/陰極)					
例	HTL	HIL2	EBL	EML	ETL
	厚さ/ nm	厚さ/ nm	厚さ/ nm	厚さ/ nm	厚さ/ nm
V3	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	NPB 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
V4	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	HTMV1 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
E7	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	(2-7) 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
E8	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	(2-4) 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm
E9	HIL2 70 nm	HIL1 5 nm	(2-1) 20 nm	H2(88%):Irpy(12%) 30 nm	ETM1(50%):LiQ(50%) 40 nm

10

【表 4】

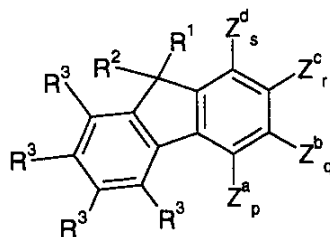
表 4: OLEDのデータ				
例	1000 cd/m ² における効率	8000 cd/m ² における LT80	CIE	
	%	[h]	x	Y
V3	13.4	85	0.36	0.61
V4	17.0	170	0.35	0.62
E7	17.5	190	0.34	0.62
E8	18,3	215	0.35	0.62
E9	18,5	225	0.37	0.60

20

30

以下に、出願当初の請求項を実施の態様として付記する。

【 1 】 少なくとも一つの一般式 (1) の化合物を含むエレクトロルミッセンス素子 ;
【化 4 2】



40

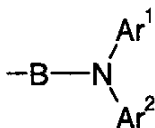
式 (1)

以下が、使用する記号と添え字に適用される：

p、q、r、sは、0または1であり、ここで、 $p + q + r + s = 1$ であり、好ましくは、 $p = 1$ または $r = 1$ または $s = 1$ であり、非常に、好ましくは、 $p = 1$ または $r = 1$ であり；

Z^a_0 、 Z^b_0 、 Z^c_0 、 Z^d_0 は、出現毎に同一であるか異なり、 R^4 であり；
 Z^a_1 、 Z^b_1 、 Z^c_1 、 Z^d_1 は、出現毎に同一であるか異なり、以下であり；

【化 4 3】



Bは、単結合、6～30個の環原子を有する二価のアリール基もしくは5～30個の環原子を有する二価のヘテロアリール基であって、それぞれ1以上の基R⁶により置換されてよく、ここで、Bが単結合であるならば、窒素原子は直接フルオレンに結合し；

Ar¹、Ar²は、出現毎に同一であるか異なり、10～60個の環原子を有するアリール基もしくは10～60個の環原子を有するヘテロアリール基であって、同一であるか異なる1以上の基R⁵により置換されてよく、ここで、二個の基Ar¹またはAr²は、それぞれ少なくとも二個以上の芳香族もしくは複素環式芳香族環を含み；

10

Ar¹中の芳香族もしくは複素環式芳香族環のうちの二個および/またはAr²中の芳香族もしくは複素環式芳香族環のうちの二個は、縮合してよく、好ましくは、非縮合形であり；

およびAr¹中の芳香族もしくは複素環式芳香族環のうちの二個は、二価の基-O-、-S-、-Si(R⁵)₂-、-C(R⁵)₂もしくは-NR⁵-によりブリッジされてよく、またはAr²中の芳香族もしくは複素環式芳香族環のうちの二個は、二価の基-O-、-S-、-Si(R⁵)₂-、-C(R⁵)₂-もしくは-NR⁵-によりブリッジされてよく；

およびAr¹からの芳香族もしくは複素環式芳香族環は、二価の基-O-、-S-、-Si(R⁵)₂-、-NR⁵-もしくは-C(R⁵)₂-により、Ar²からの芳香族もしくは複素環式芳香族環にブリッジされてよく、ここで、ブリッジされていないAr¹とAr²が、好ましく；

20

R¹、R²、R³、R⁴およびR⁵は、H、D、F、Cl、Br、I、C(=O)R⁵、CN、Si(R⁵)₃、NO₂、N(R⁵)₂、P(=O)(R⁵)₂、S(=O)R⁵、S(=O)₂R⁵、1～20個のC原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基、2～20個のC原子を有するアルケニルもしくはアルキニル基（上記言及した基は、夫々1以上の基R⁵により置換されてよく、上記言及した基中の1以上のCH₂基は、-R⁵C=CR⁵-、-C≡C-、Si(R⁵)₂、C=O、C=S、C=NR⁵、-C(=O)O-、-C(=O)NR⁵-、P(=O)(R⁵)、-O-、-S-、SOもしくはSO₂で置き換えられてよく、ここで、上記言及した基中の1以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、CNもしくはNO₂で置き換えられてよい。）または、各場合に、1以上の基R⁶により置換されてよい6～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造または1以上の基R⁶により置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有するアリールオキシ基または各場合に1以上の基R⁶により置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有するラルキル基であり；基R¹とR²は、同一ではあり得ず、基R³～R⁵は、出現毎に同一であるか異なってもよいが、基R¹またはR²のいずれかと同一であってよく；

30

R⁶は、出現毎に同一であるか異なり、H、D、F、Cl、Br、I、C(=O)R⁷、CN、Si(R⁷)₃、NO₂、P(=O)(R⁷)₂、S(=O)R⁷、S(=O)₂R⁷、N(R⁷)₂、1～20個のC原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基、2～20個のC原子を有するアルケニルもしくはアルキニル基（上記言及した基は、夫々1以上の基R⁷により置換されてよく、上記言及した基中の1以上のCH₂基は、-R⁷C=CR⁷-、-C≡C-、Si(R⁷)₂、C=O、C=S、C=NR⁷、-C(=O)O-、-C(=O)NR⁷-、P(=O)(R⁷)、-O-、-S-、SOもしくはSO₂で置き換えられてよく、ここで、上記言及した基中の1以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、CNもしくはNO₂で置き換えられてよい。）または、各場合に、1以上の基R⁷により置換されてよい5～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素

40

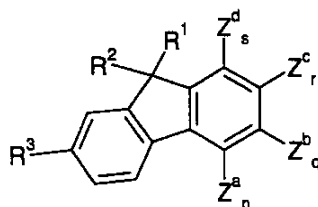
50

環式芳香族環構造、または 1 以上の基 R^7 により置換されてよい 5 ~ 30 個の芳香族環原子を有するアリールオキシもしくはヘテロアリールオキシ基であり；ここで、2 個以上の隣接する置換基 R^6 は、モノあるいはポリ環式の環構造を互いに形成してよく；

R^7 は、H、D、F、1 ~ 20 個の C 原子を有する脂肪族炭化水素基、5 ~ 30 個の C 原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であって、1 以上の H 原子は、D もしくは F で置き代えられてよく、ここで、2 個以上の隣接する置換基 R^7 は、モノあるいはポリ環式の環構造を互いに形成してよい。

[2] 化合物が、一般式 (2) を有することを特徴とする、[1] 記載の素子：

【化 4 4】

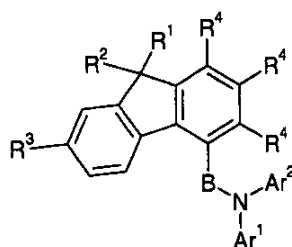


式 (2)

式中、示される記号と添え字は、[1] で示されるとおり定義される。

[3] 化合物が、一般式 (3) を有することを特徴とする、[1] または [2] 記載の素子：

【化 4 5】

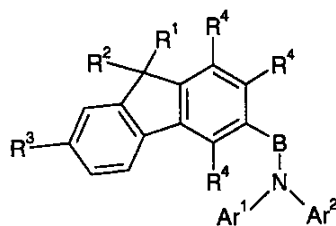


式 (3)

式中、示される記号と添え字は、[1] で示されるとおり定義される。

[4] 化合物が、一般式 (4) を有することを特徴とする、[1] または [2] 記載の素子：

【化 4 6】

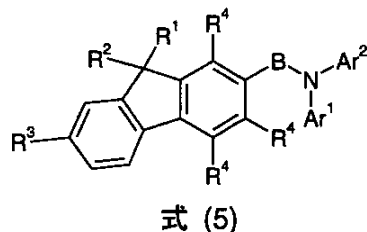


式 (4)

式中、示される記号と添え字は、[1] で示されるとおり定義される。

[5] 化合物が、一般式 (5) を有することを特徴とする、[1] または [2] 記載の素子：

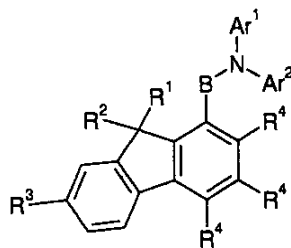
【化 4 7】



式中、示される記号と添え字は、[1] で示されるとおり定義される。

[6] 化合物が、一般式 (6) を有することを特徴とする、[1] または [2] 記載の素子：

【化 4 8】



式中、示される記号と添え字は、[1] で示されるとおり定義される。

[7] B は、単結合、または、1 以上の基 R^6 により置換されてよい、フェニレン、ビフェニレン、テルフェニレン、ナフチレン、ピリジニレン、ピリミジニレン、ピラジニレン、ピリダジニレン、トリアジニレン、ジベンゾフラニレンあるいはジベンゾチオフェニレンフルオレニレンもしくはカルバゾール基であり；B は、好ましくは、単結合、または、1 以上の基 R^6 により置換されてよい、フェニレン、ビフェニレン、テルフェニレン、ナフチレン、ジベンゾフラニレンあるいはジベンゾチオフェニレンフルオレニレンもしくはカルバゾール基であり、B は、非常に、好ましくは、単結合、または、1 以上の基 R^6 により置換されてよいフェニレンであり；B は、非常に、好ましくは、単結合であることを特徴とする、[1] ~ [6] 何れか 1 項記載の素子。

[8] Ar^1 および Ar^2 は、出現毎に同一であるか異なり、フェニルピリジル、フェニルナフチル、ビフェニル、テルフェニルもしくはクアテルフェニル基から選ばれ、同一であるか互いに異なる 1 以上の基 R^6 により置換されてよく、 Ar^1 中の芳香族もしくは複素環式芳香族環の二個は、二価の基-O-、-S-、-C(R^5)₂-もしくは-Si(R^5)₂-によりブリッジされてよく、 Ar^2 中の芳香族もしくは複素環式芳香族環の二個は、二価の基-O-、-S-、-C(R^5)₂-もしくは-Si(R^5)₂-によりブリッジされてよく、ここで、ブリッジされない環が好ましく、ここで、 Ar^1 からの芳香族もしくは複素環式芳香族環は、二価の基-O-、-S-、-Si(R^5)₂-、NR⁵もしくは-C(R^5)₂により Ar^2 からの芳香族もしくは複素環式芳香族環にブリッジしてよく、ここで、ブリッジされない基 Ar^1 および Ar^2 が好ましいことを特徴とする、[1] ~ [7] 何れか 1 項記載の素子。

[9] 式 (1) ~ (6) の化合物が、モノアミン化合物であることを特徴とする、[1] ~ [8] 何れか 1 項記載の素子。

[10] 素子が、有機発光トランジスタ (O L E T)、有機電場消光素子 (O F Q D)、有機発光電子化学電池 (O L E C、L E C、L E E C)、有機レーザーダイオード (O - l a s e r) および有機発光ダイオード (O L E D)、好ましくは、O L E Dであることを特徴とする、[1] ~ [9] 何れか 1 項記載の素子。

[11] 少なくとも一つの式 (1) ~ (6) の化合物が、素子中で以下の機能で以下の層で使用されることを特徴とする、[1] ~ [10] 何れか 1 項記載の素子：・正孔輸

10

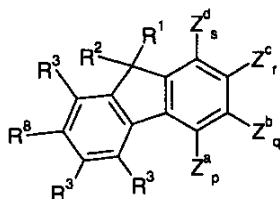
20

30

40

50

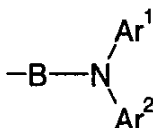
[1 2] 一般式 (2 5 5) の化合物 ;
【化 4 9】



以下が、使用する記号と添え字に適用される：

$Z^a_0, Z^b_0, Z^c_0, Z^d_0$ は、出現毎に同一であるか異なり、 R^4 であり；

【化 5 0】



Ar^1 、 Ar^2 は、出現毎に同一であるか異なり、10～60個の環原子を有する非縮アリアル基もしくは10～60個の環原子を有するヘテロアリアル基であって、同一であるか互いに異なる1以上の基 R^5 により置換されてよく、ここで、二個の基 Ar^1 または Ar^2 は、それぞれ少なくとも二個以上の芳香族もしくは複素環式芳香族環を含み；

および、ここで、 Ar^1 からの芳香族もしくは複素環式芳香族環は、二価の基-O-、-S-、-Si(R⁵)₂-、-NR⁵-もしくは-C(R⁵)₂-により、 Ar^2 からの芳香族もしくは複素環式芳香族環にブリッジされてよく、ここで、ブリッジされない Ar^1 と Ar^2 が、好ましく；

R¹、R²、R³およびR⁴は、H、D、F、Cl、Br、I、C(=O)R⁵、CN、Si(R⁵)₃、NO₂、N(R⁵)₂、P(=O)(R⁵)₂、S(=O)R⁵、S(=O)₂R⁵、1～20個のC原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基、2～20個のC原子を有するアルケニルもしくはアルキニル基(上記言及した基は、夫々1以上の基R⁵により置換されてよく、上記言及した基中の1以上のCH₂基は、-R⁵C=CR⁵-、-C≡C-、Si(R⁵)₂、C=O、C=S、C=NR⁵、-C(=O)O-、-C(=O)NR⁵-、P(=O)(R⁵)、-O-、-S-、SOもしくはSO₂で置き換えられてよく、ここで、上記言及した基中の1以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、CNもしくはNO₂で置き換えられてよい。)または、各場合に、1以上の基R⁵により置換されてよい6～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳

50

香族環構造または1以上の基 R^6 により置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有するアリールオキシ基または各場合に1以上の基 R^6 により置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有するアラルキル基であり；

ここで、基 R^1 と R^2 は、同一ではあり得ず、基 $R^3 \sim R^5$ は、出現毎に同一であるか異なってもよいが、基 R^1 または R^2 のいずれかと同一であってよく；

および R^1 と R^2 からの少なくとも一つの基は、各場合に1以上の基 R^5 により置換されてよい6～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造であり；

R^5 は、 H 、 D 、 $C(=O)R^5$ 、 CN 、 $Si(R^5)_3$ 、 NO_2 、 $N(R^5)_2$ 、 $P(=O)(R^5)_2$ 、 $S(=O)R^5$ 、 $S(=O)_2R^5$ 、1～20個のC原子を有する直鎖アルキル、アルコールもしくはチオアルキル基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル、アルコールもしくはチオアルキル基、2～20個のC原子を有するアルケニルもしくはアルキニル基（上記言及した基は、夫々1以上の基 R^5 により置換されてよく、上記言及した基中の1以上の CH_2 基は、 $-R^5C=CR^5-$ 、 $-C \equiv C-$ 、 $Si(R^5)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=NR^5$ 、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^5-$ 、 $P(=O)(R^5)$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 SO もしくは SO_2 で置き換えられてよく、ここで、上記言及した基中の1以上のH原子は、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN もしくは NO_2 で置き換えられてよい。）または、各場合に、1以上の基 R^5 により置換されてよい6～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造または1以上の基 R^6 により置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有するアリールオキシ基または各場合に1以上の基 R^6 により置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有するアラルキル基であり；

R^6 は、出現毎に同一であるか異なり、 H 、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 $C(=O)R^7$ 、 CN 、 $Si(R^7)_3$ 、 NO_2 、 $P(=O)(R^7)_2$ 、 $S(=O)R^7$ 、 $S(=O)_2R^7$ 、 $N(R^7)_2$ 、1～20個のC原子を有する直鎖アルキル、アルコールもしくはチオアルキル基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル、アルコールもしくはチオアルキル基、2～20個のC原子を有するアルケニルもしくはアルキニル基（上記言及した基は、夫々1以上の基 R^7 により置換されてよく、上記言及した基中の1以上の CH_2 基は、 $-R^7C=CR^7-$ 、 $-C \equiv C-$ 、 $Si(R^7)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=NR^7$ 、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^7-$ 、 $P(=O)(R^7)$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 SO もしくは SO_2 で置き換えられてよく、ここで、上記言及した基中の1以上のH原子は、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN もしくは NO_2 で置き換えられてよい。）または、各場合に、1以上の基 R^7 により置換されてよい5～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、または1以上の基 R^7 により置換されてよい5～30個の芳香族環原子を有するアリールオキシもしくはヘテロアリールオキシ基であり；ここで、2個以上の隣接する置換基 R^6 は、モノあるいはポリ環式の環構造を互いに形成してよく；

R^7 は、 H 、 D 、 F 、1～20個のC原子を有する脂肪族炭化水素基、5～30個のC原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造より成る基から選ばれ、1以上のH原子は、 D もしくは F で置き換えられてよく、ここで、2個以上の隣接する置換基 R^7 は、モノあるいはポリ環式の環構造を互いに形成してよく；

R^8 は、 H 、 D 、 $C(=O)R^9$ 、 CN 、 $Si(R^9)_3$ 、 NO_2 、 $N(R^9)_2$ 、 $P(=O)(R^9)_2$ 、 $S(=O)R^9$ 、 $S(=O)_2R^9$ 、1～20個のC原子を有する直鎖アルキル、アルコールもしくはチオアルキル基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル、アルコールもしくはチオアルキル基、2～20個のC原子を有するアルケニルもしくはアルキニル基（上記言及した基は、夫々1以上の基 R^9 により置換されてよく、上記言及した基中の1以上の CH_2 基は、 $-R^9C=CR^9-$ 、 $-C \equiv C-$ 、 $Si(R^9)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=NR^9$ 、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^9-$ 、 $P(=O)(R^9)$ 、 $-S-$ 、 SO もしくは SO_2 で置き換えられてよく、ここで、上記言及した基中の1以上のH原子は、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN もしくは NO_2 で置き換えられてよい。）または、各場合に、1以上の基 R^9 により置換されてよい6～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造または1以上の基 R^9 により置換されてよ

10

20

30

40

50

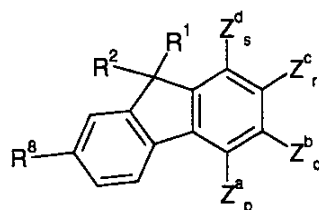
い5～60個の芳香族環原子を有するアリールオキシ基または各場合に1以上の基 R^9 により置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有するアラルキル基であり；

R^9 は、出現毎に同一であるか異なり、H、D、F、Cl、Br、I、 $C(=O)R^{10}$ 、 CN 、 $Si(R^{10})_3$ 、 NO_2 、 $P(=O)(R^{10})_2$ 、 $S(=O)R^{10}$ 、 $S(=O)_2R^{10}$ 、 $N(R^{10})_2$ 、1～20個のC原子を有する直鎖アルキルもしくはチオアルキル基、3～20個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基、2～20個のC原子を有するアルケニルもしくはアルキニル基（上記言及した基は、夫々1以上の基 R^{10} により置換されてよく、上記言及した基中の1以上の CH_2 基は、 $-R^{10}C=CR^{10}-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $Si(R^{10})_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=NR^{10}$ 、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^{10}-$ 、 $P(=O)(R^{10})$ 、 $-S-$ 、 SO もしくは SO_2 で置き換えられてよく、ここで、上記言及した基中の1以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、 CN もしくは NO_2 で置き換えられてよい。）または、各場合に、1以上の基 R^{10} により置換されてよい5～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、または1以上の基 R^{10} により置換されてよい5～30個の芳香族環原子を有するアリールオキシもしくはヘテロアリールオキシ基であり、ここで2個以上の隣接する置換基 R^{10} は、モノあるいはポリ環式の環構造を互いに形成してよく；

R^{10} は、H、D、F、1～20個のC原子を有する脂肪族炭化水素基、5～30個のC原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造より成る基から選ばれ、1以上のH原子は、DもしくはFで置き換えられてよく、2個以上の隣接する置換基 R^{10} は、モノあるいはポリ環式の環構造を互いに形成してよい。

[13] 一般式(256)を有する化合物であることを特徴とする、[12]記載の化合物；

【化51】



式 (256)

式中、示された記号と添え字は、[12]に示されるとおりに定義される。

[14] ブッフバルトカップリングによる、[12]または[13]記載の化合物の製造方法。

[15] [12]または[13]記載の化合物の電子素子での使用。

[16] [12]または[13]記載の少なくとも一つの化合物を含む電子素子であって、電子素子は、好ましくは、有機集積回路(O-IC)、有機電界効果トランジスタ(O-FET)、有機薄膜トランジスタ(O-TFT)、有機発光トランジスタ(O-LED)、有機太陽電池(O-SC)、有機光学検査器、有機光受容器、有機電場消光素子(O-FQD)、発光電子化学電池(LEC)、有機レーザーダイオード(O-laser)より成る群から選ばれる電子素子。

フロントページの続き

- (74)代理人 100199565
弁理士 飯野 茂
- (72)発明者 テレサ・ムジカ - フェルナウド
ドイツ連邦共和国、6 4 2 8 9 ダルムシュタット、グーテンベルクシュトラーク 4 1
- (72)発明者 エルピラ・モンテネグロ
ドイツ連邦共和国、6 9 4 6 9 バインハイム、ホラツベーク 5
- (72)発明者 アミア・ホサイン・パルハム
ドイツ連邦共和国、6 5 9 2 9 フランクフルト・アム・マイン、フランツ - ヘンレ - シュトラーク 4
- (72)発明者 アルネ・ブエシング
ドイツ連邦共和国、6 5 9 2 9 フランクフルト・アム・マイン、グラスミュッケンベーク 2 6
- (72)発明者 フランク・フォゲス
ドイツ連邦共和国、6 7 0 9 8 パート・デュルクハイム、バイトブラッツ 2

審査官 岩井 好子

- (56)参考文献 国際公開第 2 0 1 0 / 0 4 4 1 3 0 (W O , A 1)
特開 2 0 0 8 - 1 3 0 8 4 0 (J P , A)
特開平 1 1 - 2 1 9 7 8 7 (J P , A)
韓国登録特許第 1 0 - 1 0 7 2 8 1 7 (K R , B 1)
国際公開第 2 0 1 2 / 0 3 4 6 2 7 (W O , A 1)
国際公開第 2 0 1 2 / 0 9 6 3 8 2 (W O , A 1)
国際公開第 2 0 1 0 / 1 0 6 8 0 6 (W O , A 1)
特開 2 0 0 8 - 0 1 9 2 3 8 (J P , A)
特開 2 0 0 4 - 0 9 1 3 5 0 (J P , A)
特開 2 0 1 1 - 0 7 9 8 0 1 (J P , A)
米国特許出願公開第 2 0 1 4 / 0 3 5 3 6 5 2 (U S , A 1)
特開 2 0 0 8 - 0 3 7 7 5 5 (J P , A)
特開平 0 5 - 3 0 3 2 2 1 (J P , A)
米国特許出願公開第 2 0 1 1 / 0 1 9 8 5 8 1 (U S , A 1)
米国特許出願公開第 2 0 1 3 / 0 2 0 7 0 4 6 (U S , A 1)
米国特許出願公開第 2 0 1 3 / 0 2 9 9 8 0 6 (U S , A 1)
米国特許出願公開第 2 0 1 2 / 0 0 1 2 8 3 2 (U S , A 1)
米国特許出願公開第 2 0 0 6 / 0 1 6 6 0 3 4 (U S , A 1)
特表 2 0 1 3 - 5 4 4 7 5 7 (J P , A)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

H 0 1 L 5 1 / 5 0
C 0 7 C 2 1 1 / 6 1
C 0 7 F 7 / 1 0
C 0 9 K 1 1 / 0 6
C A p l u s / R E G I S T R Y (S T N)

专利名称(译)	化合物和有机电致发光器件		
公开(公告)号	JP6695936B2	公开(公告)日	2020-05-20
申请号	JP2018144877	申请日	2018-08-01
申请(专利权)人(译)	默克专利有限公司		
当前申请(专利权)人(译)	默克专利有限公司		
[标]发明人	テレサムジカフェルナウド エルビラモンテネグロ アミアホサインパルハム アルネブエシング フランクフォゲス		
发明人	テレサムジカフェルナウド エルビラモンテネグロ アミアホサインパルハム アルネブエシング フランクフォゲス		
IPC分类号	H01L51/50 C09K11/06 C07C211/61 C07F7/10		
CPC分类号	C07D209/86 C07D219/02 C07D307/91 C07D333/76 C07D405/12 C09K11/06 C09K2211/1011 C09K2211/1014 C07C2603/18 C07C2603/94 C07F7/081 H01L51/5056 H05B33/14 C07C13/567 C07C209/10 C07C211/61 C07C213/02 C07C217/94 H01L51/0059 H01L51/0065 H01L51/0067 H01L51/0068 H01L51/50 C07F7/083		
FI分类号	H05B33/22.D H05B33/14.B C09K11/06.690 C07C211/61 C07F7/10.C		
F-TERM分类号	3K107/AA01 3K107/BB01 3K107/BB02 3K107/CC04 3K107/CC12 3K107/CC21 3K107/CC45 3K107/DD59 3K107/DD60 3K107/DD66 3K107/DD68 3K107/DD69 3K107/DD72 3K107/DD78 4H006/AA01 4H006/AA03 4H006/AB92 4H006/AC52 4H049/VN01 4H049/VP01 4H049/VQ35 4H049/VR24 4H049/VU29		
代理人(译)	河野直树 井上 正 肯・鹤饲 饭野滋		
审查员(译)	岩井良子		
优先权	2012005369 2012-07-23 EP		
其他公开文献	JP2019004156A		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及特定的苐，该化合物在电子设备中的用途以及包含这些化合物中的至少一种的电子设备。 本发明进一步涉及制备该化合物的方法以及含有一种或多种化合物的制剂和组合物。

(5) Int. Cl.			F I		
<i>H O I L</i>	<i>51/50</i>	<i>(2006. 01)</i>	H O 5 B	33/22	D
<i>C O 9 K</i>	<i>11/06</i>	<i>(2006. 01)</i>	H O 5 B	33/14	B
<i>C O 7 C</i>	<i>211/61</i>	<i>(2006. 01)</i>	C O 9 K	11/06	6 9 O
<i>C O 7 F</i>	<i>7/10</i>	<i>(2006. 01)</i>	C O 7 C	211/61	
			C O 7 F	7/10	C
			請求項の数 13 外国語出願 (全 102 頁)		
(21) 出願番号	特願2018-144877 (P2018-144877)		(73) 特許権者	597035528	
(22) 出願日	平成30年8月1日 (2018. 8. 1)			メルク バチント ゲームベーパー	
(62) 分割の表示	特願2015-523436 (P2015-523436) の分割			ドイツ国、D-6 4 2 9 3 ダルムスタット フランクフルター ストラッセ 2 5 O	
原出願日	平成25年6月27日 (2013. 6. 27)		(74) 代理人	100108855	
(65) 公開番号	特開2019-4156 (P2019-4156A)			弁理士 蔵田 昌俊	
(43) 公開日	平成31年1月10日 (2019. 1. 10)		(74) 代理人	100103034	
審査請求日	平成30年8月31日 (2018. 8. 31)			弁理士 野河 信久	
(31) 優先権主張番号	12005369. 9		(74) 代理人	100153051	
(32) 優先日	平成24年7月23日 (2012. 7. 23)			弁理士 河野 直樹	
(33) 優先権主張国・地域又は機関	欧州特許庁 (EP)		(74) 代理人	100179062	
				弁理士 井上 正	
			(74) 代理人	100189913	
				弁理士 橋岡 健	
			最終頁に続く		

(54) 【発明の名称】 化合物および有機エレクトロルミッセンス素子