

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 公表特許公報 (A)

(11) 特許出願公表番号

特表2018-523303

(P2018-523303A)

(43) 公表日 平成30年8月16日 (2018. 8. 16)

(51) Int. Cl.	F I	テーマコード (参考)
H O 1 L 51/50 (2006. 01)	H O 5 B 33/22	D 3 K 1 O 7
C O 7 D 233/70 (2006. 01)	H O 5 B 33/14	A
	C O 7 D 233/70	

審査請求 未請求 予備審査請求 未請求 (全 32 頁)

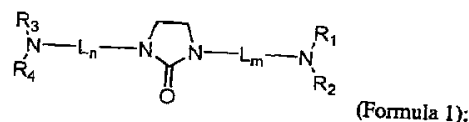
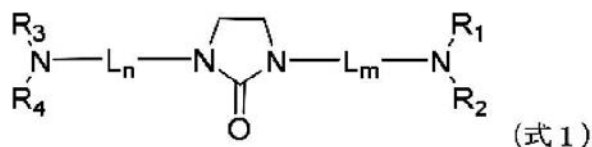
(21) 出願番号	特願2017-566276 (P2017-566276)	(71) 出願人	502141050
(86) (22) 出願日	平成28年6月28日 (2016. 6. 28)		ダウ グローバル テクノロジーズ エル
(85) 翻訳文提出日	平成30年1月26日 (2018. 1. 26)		エルシー
(86) 国際出願番号	PCT/US2016/039768		アメリカ合衆国 ミシガン州 4 8 6 7 4
(87) 国際公開番号	W02017/004014		, ミッドランド, ダウ センター 2 0 4
(87) 国際公開日	平成29年1月5日 (2017. 1. 5)		O
(31) 優先権主張番号	62/186, 475	(71) 出願人	509266480
(32) 優先日	平成27年6月30日 (2015. 6. 30)		ローム・アンド・ハース・エレクトロニッ
(33) 優先権主張国	米国 (US)		ク・マテリアルズ・コリア・リミテッド
			大韓民国 3 3 1 - 9 8 0 チュンチョン
			ナムード チョナン-シ ソブクーク 3
			コンダン 1 - ロ 5 6
		(74) 代理人	110000589
			特許業務法人センダ国際特許事務所
			最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 電子デバイス用の環状尿素化合物

(57) 【要約】

本明細書に記載される少なくとも1つの式1の環状尿素化合物を含む組成物が、提供される。本組成物は、有機電界発光デバイスなどの電子デバイスにおいて使用され得る。

【化1】



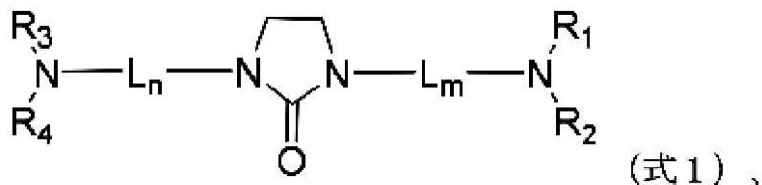
【選択図】 なし

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

以下の式 1 の少なくとも 1 つの化合物を含む組成物であって、

【化 1】



10

式中、R₁、R₂、R₃、及び R₄ が、各々独立して、非置換アルキル、置換アルキル、非置換ヘテロアルキル、置換ヘテロアルキル、非置換アリール、置換アリール、非置換ヘテロアリール、または置換ヘテロアリールから選択され、R₁ 及び R₂ が、任意に、縮合して 1 つ以上の環構造を形成していてもよく、R₃ 及び R₄ が、任意に、縮合して 1 つ以上の環構造を形成していてもよく、

L_m 及び L_n が、各々独立して、非置換アルキレン、置換アルキレン、非置換ヘテロアルキレン、置換ヘテロアルキレン、非置換アリーレン、置換アリーレン、非置換ヘテロアリーレン、または置換ヘテロアリーレンから選択され、

式 1 について、1 つ以上の水素原子が、任意に、重水素で置換されていてもよい、組成物。

20

【請求項 2】

式 1 について、L_m 及び L_n が、各々独立して、非置換（3～30 員）ヘテロアリーレン、置換（3～30 員）ヘテロアリーレン、非置換（C₆～C₃₀）アリーレン、または置換（C₆～C₃₀）アリーレンである、請求項 1 に記載の組成物。

【請求項 3】

式 1 について、L_m 及び L_n が、各々独立して、以下の構造のうちの 1 つから選択される、請求項 1 または 2 に記載の組成物。

【化 2】



30

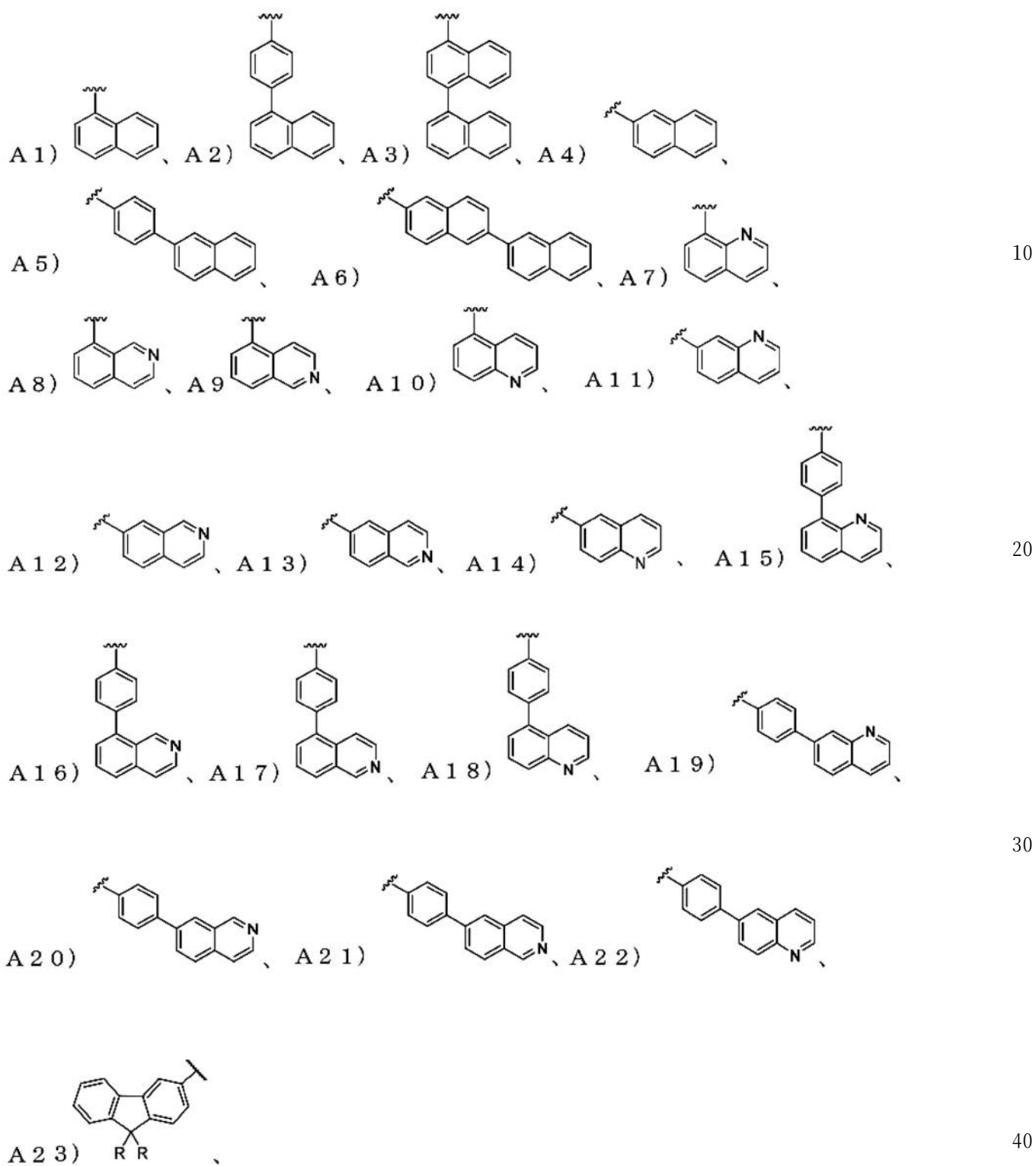
【請求項 4】

式 1 について、R₁、R₂、R₃、及び R₄ が、各々独立して、非置換（C₆～C₃₀）アリーレン、または置換（C₆～C₃₀）アリール、非置換（3～30 員）ヘテロアリール、または置換（3～30 員）ヘテロアリールから選択される、請求項 1～3 のいずれか一項に記載の組成物。

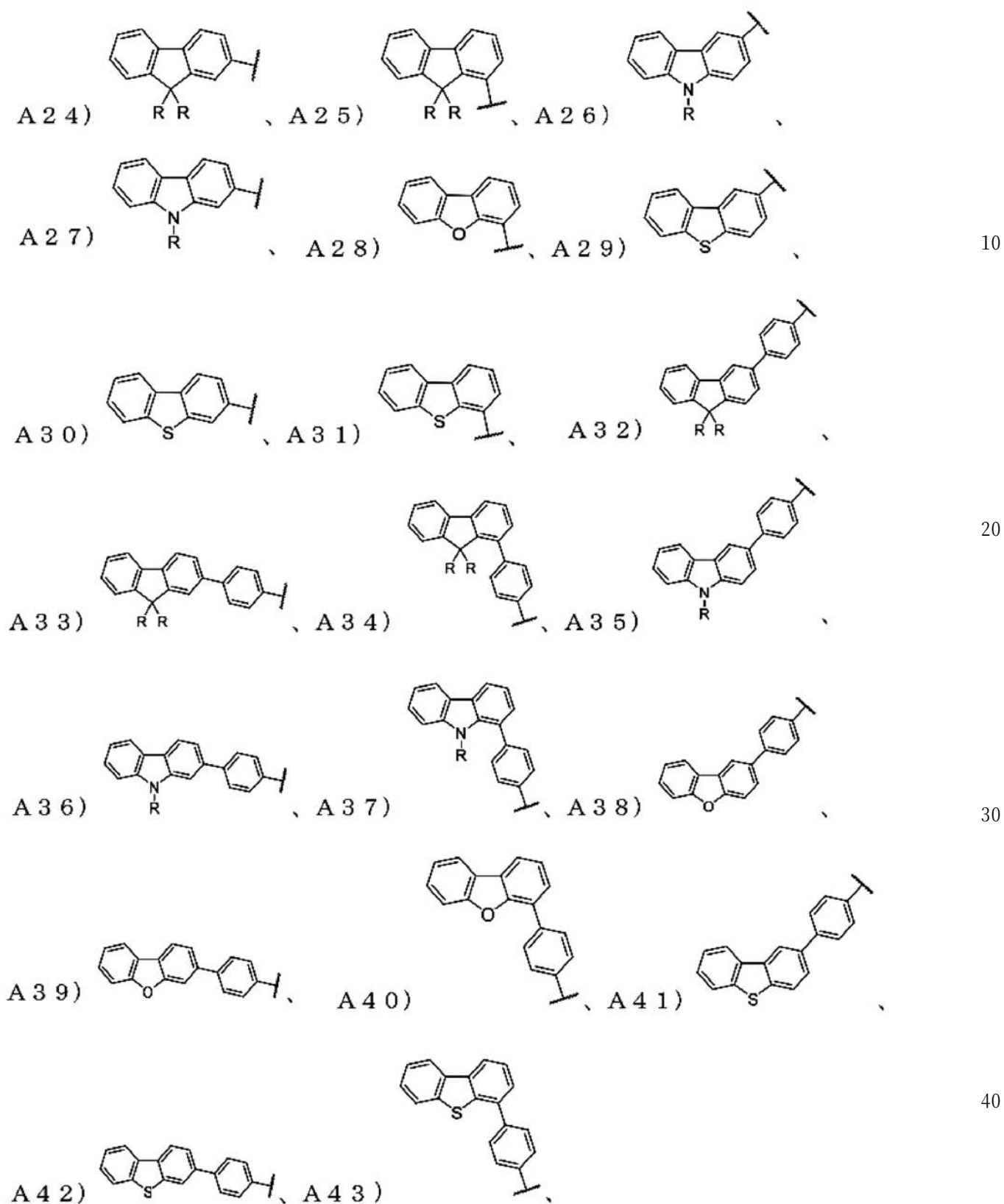
【請求項 5】

式 1 について、R₁、R₂、R₃、及び R₄ が、各々独立して、以下の A₁）～A₄₈）から選択され、

【化 3 - 1】



【化 3 - 2】



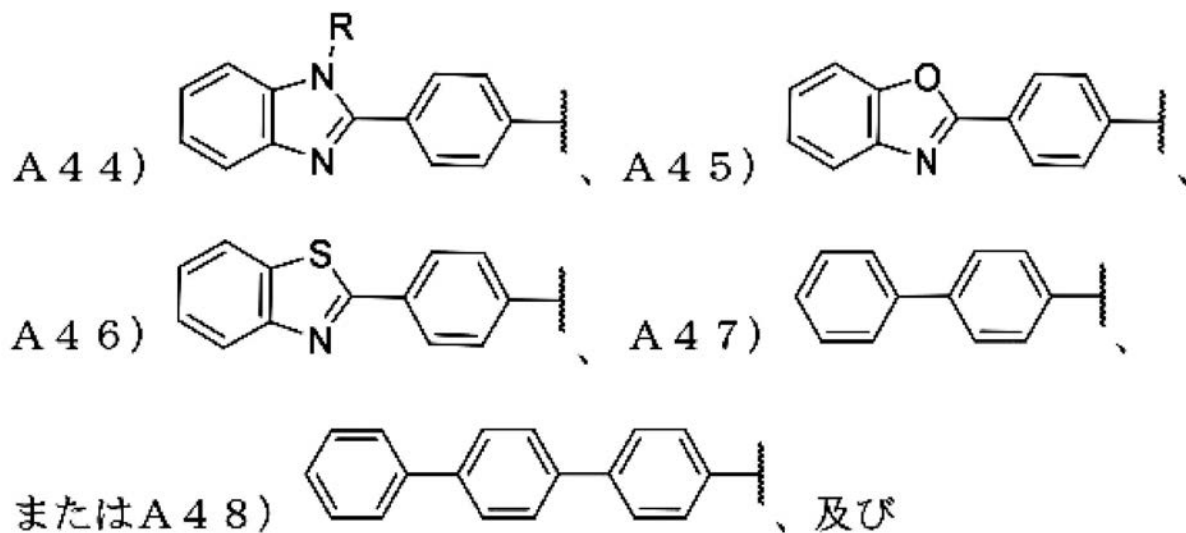
10

20

30

40

【化 3 - 3】



10

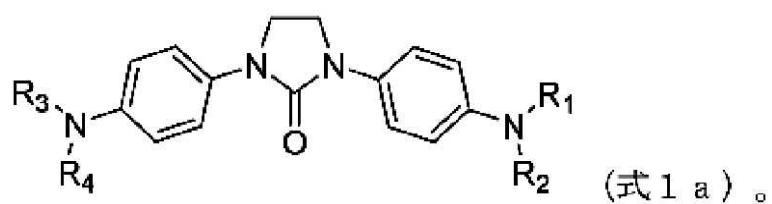
及び、式中、構造 A 2 3) ~ A 2 7)、A 3 2) ~ A 3 7)、及び A 4 4) について、各 R が、独立してアルキルである、請求項 1 ~ 4 のいずれか一項に記載の組成物。

【請求項 6】

式 1 が、式 1 a から選択される、請求項 1 ~ 5 のいずれか一項に記載の組成物。

20

【化 4】

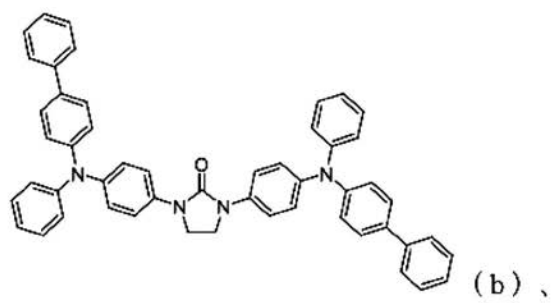
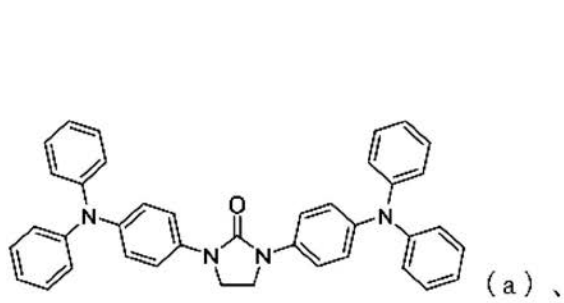


【請求項 7】

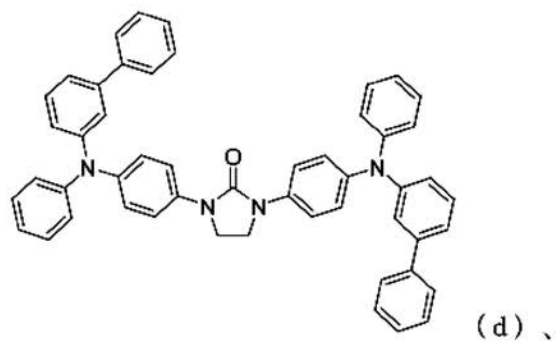
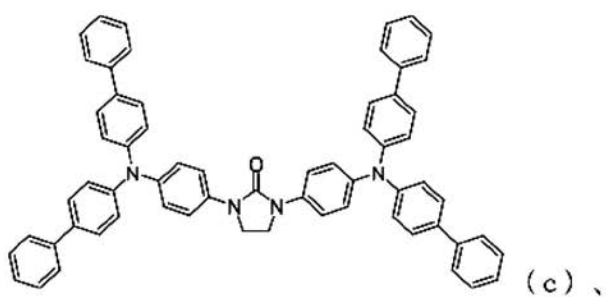
前記式 1 の化合物が、以下の (a) ~ (o) から選択される、請求項 1 ~ 6 のいずれか一項に記載の組成物。

30

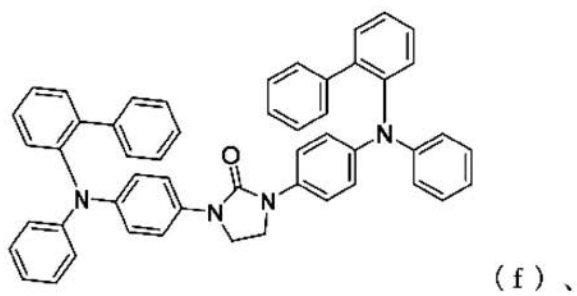
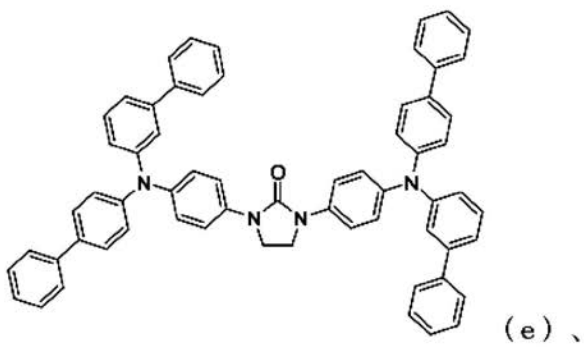
【化 5 - 1】



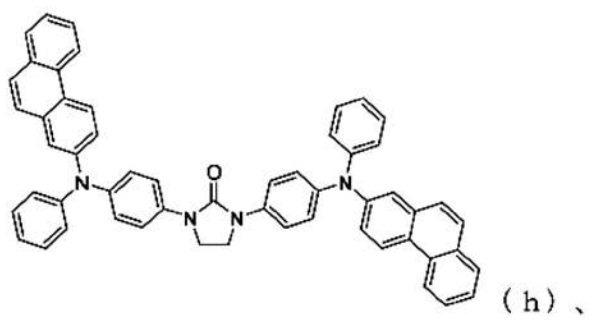
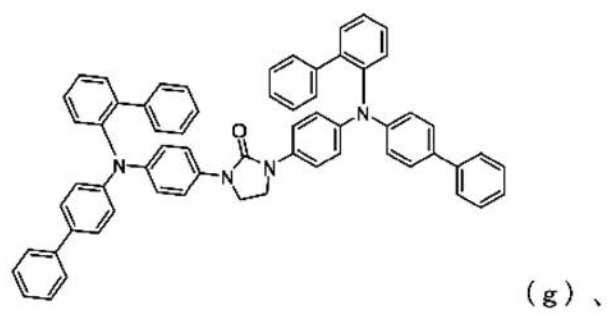
10



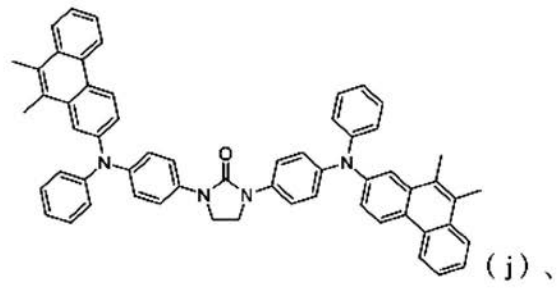
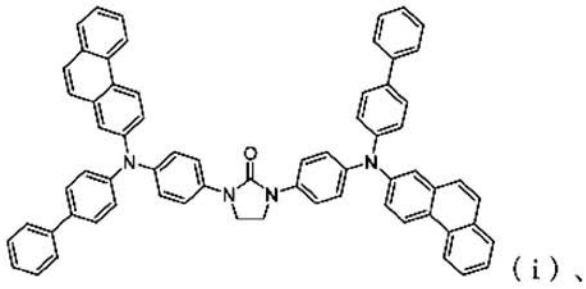
20



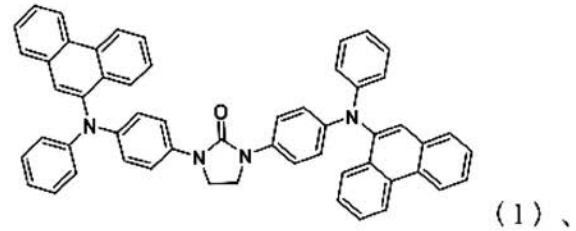
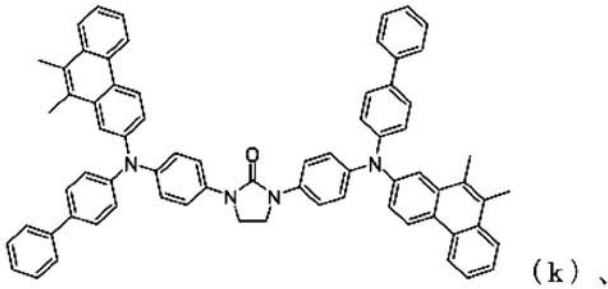
30



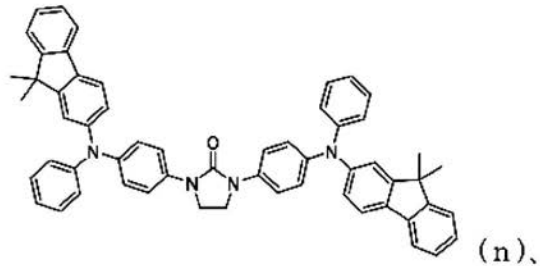
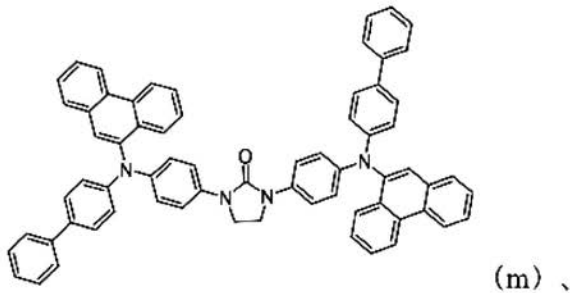
【化 5 - 2】



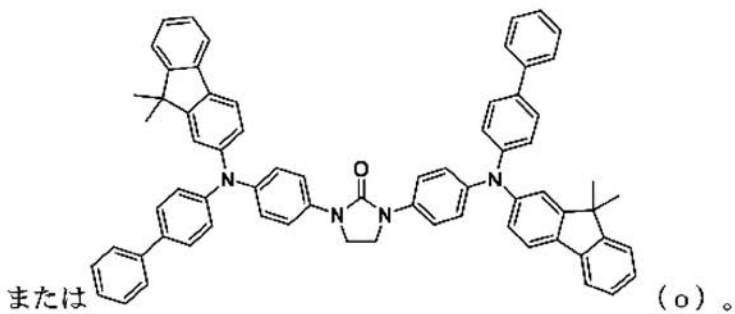
10



20



30



【請求項 8】

請求項 1～7 のいずれか一項に記載の組成物から形成される少なくとも 1 つの構成要素を含む、物品。

【請求項 9】

請求項 1～7 のいずれか一項に記載の組成物から形成される少なくとも 1 つの層を備える、膜。

40

【請求項 10】

請求項 1～7 のいずれか一項に記載の組成物から形成される少なくとも 1 つの構成要素を含む、電子デバイス。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

関連出願の参照

本出願は、2015年6月30日に提出された米国仮出願第 62 / 186, 475 号の利益を主張し、これは参照により本明細書に組み込まれる。

50

【0002】

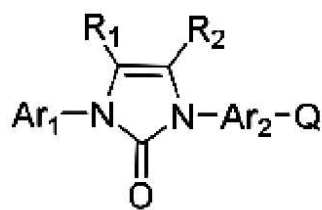
有機電界発光（EL）デバイスは、電界発光層として有機芳香族化合物を含有する大量の膜を用いるディスプレイデバイスである。かかる化合物は、一般に電界発光材料及び電荷輸送材料に分類される。かかる電界発光化合物及び電荷輸送化合物に必要な幾つかの特性としては、固体状態での高い蛍光量子収率、電子及び正孔の高い移動度、真空蒸着中の化学安定性、ならびに安定した膜を形成する能力が挙げられる。これらの望ましい特徴は、ELデバイスの寿命を延ばす。改善された電界発光化合物及びそれを含有する膜が絶えず必要とされている。

【0003】

J P 2 0 1 1 - 1 3 6 9 1 0 A（要約）は、環状ジイミド（ピペラジン-2,5-ジオン）-系ビス（トリアリールアミン）「有機電界発光要素、有機光伝導材料、光電子変換要素、太陽電池、画像センサ、及び正孔注入材料のための誘導体」を説明している。同様に、U S 8, 0 2 2, 6 1 7 B 2は、以下の式によって表される電荷輸送材料を説明している。

【0004】

【化1】



【0005】

しかしながら、かかる化合物は、改善された有機電界発光デバイスに有用な所望の範囲よりも深いHOMO値を有する。

【0006】

性能に関する改善を有する有機電界発光デバイスを調製し得る化合物、及びそれを含む有機電界発光デバイスを提供することが、引き続き必要とされている。これらの必要性は、以下の組成の化合物が紹介される以下の本発明によって満たされている。

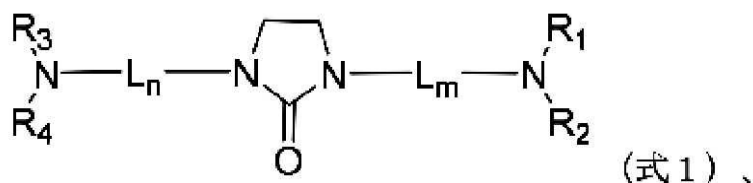
【発明の概要】

【0007】

以下の式1の少なくとも1つの化合物を含む組成物であって、

【0008】

【化2】



【0009】

式中、R1、R2、R3、及びR4は、各々独立して、非置換アルキル、置換アルキル、非置換ヘテロアルキル、置換ヘテロアルキル、非置換アリール、置換アリール、非置換ヘテロアリール、または置換ヘテロアリールから選択され、R1及びR2は、任意に、縮合して1つ以上の環構造を形成していてもよく、R3及びR4は、任意に、縮合して1つ以上の環構造を形成していてもよく、

Ln及びLmは、各々独立して、非置換アルキレン、置換アルキレン、非置換ヘテロアルキレン、置換ヘテロアルキレン、非置換アリーレン、置換アリーレン、非置換ヘテロアリーレン、または置換ヘテロアリーレンから選択され、

式1について、1つ以上の水素原子は、任意に、重水素で置換されていてもよい、組成

物、が提供される。

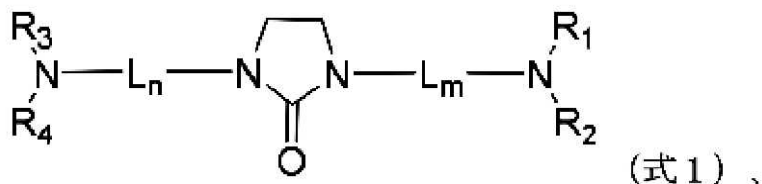
【発明を実施するための形態】

【0010】

上述の通り、組成物であって、少なくとも1つの下の式1の化合物を含み、

【0011】

【化3】



10

【0012】

式中、R1、R2、R3、及びR4は、各々独立して、非置換アルキル、置換アルキル、非置換ヘテロアルキル、置換ヘテロアルキル、非置換アリール、置換アリール、非置換ヘテロアリール、または置換ヘテロアリールから選択され、R1及びR2は、任意に、縮合して1つ以上の環構造を形成していてもよく、R3及びR4は、任意に、縮合して1つ以上の環構造を形成していてもよく、

Ln及びLmは、各々独立して、非置換アルキレン、置換アルキレン、非置換ヘテロアルキレン、置換ヘテロアルキレン、非置換アリーレン、置換アリーレン、非置換ヘテロアリーレン、または置換ヘテロアリーレンから選択され、

20

式1について、1つ以上の水素原子は、任意に、重水素で置換されていてもよい、組成物、が提供される。

【0013】

本発明の組成物は、本明細書に記載される2つ以上の実施形態の組み合わせを有してもよい。

【0014】

「少なくとも1つの式1の化合物」は、本明細書に記載される2つ以上の実施形態の組み合わせを含んでもよい。

【0015】

本明細書で使用する時、各式1～4について、R1 = R1であり、R2 = R2であり、以下同様である。

30

【0016】

一実施形態では、式1について、Ln及びLmは、各々独立して、非置換(3～30員)ヘテロアリーレン、置換(3～30員)ヘテロアリーレン、非置換(C6～C30)アリーレン、または置換(C6～C30)アリーレンである。

【0017】

一実施形態では、式1について、Ln及びLmは、各々独立して、以下の構造のうちの1つから選択される。

【0018】

【化4】



40

【0019】

一実施形態では、式1について、R1、R2、R3、及びR4は、各々独立して、非置換(C6～C30)アリーレン、または置換(C6～C30)アリール、非置換(3～30員)ヘテロアリール、または置換(3～30員)ヘテロアリールから選択される。

【0020】

一実施形態では、R1 = R3及びR2 = R4である。

50

【0021】

一実施形態では、 $R_1 = R_4$ 及び $R_2 = R_3$ である。

【0022】

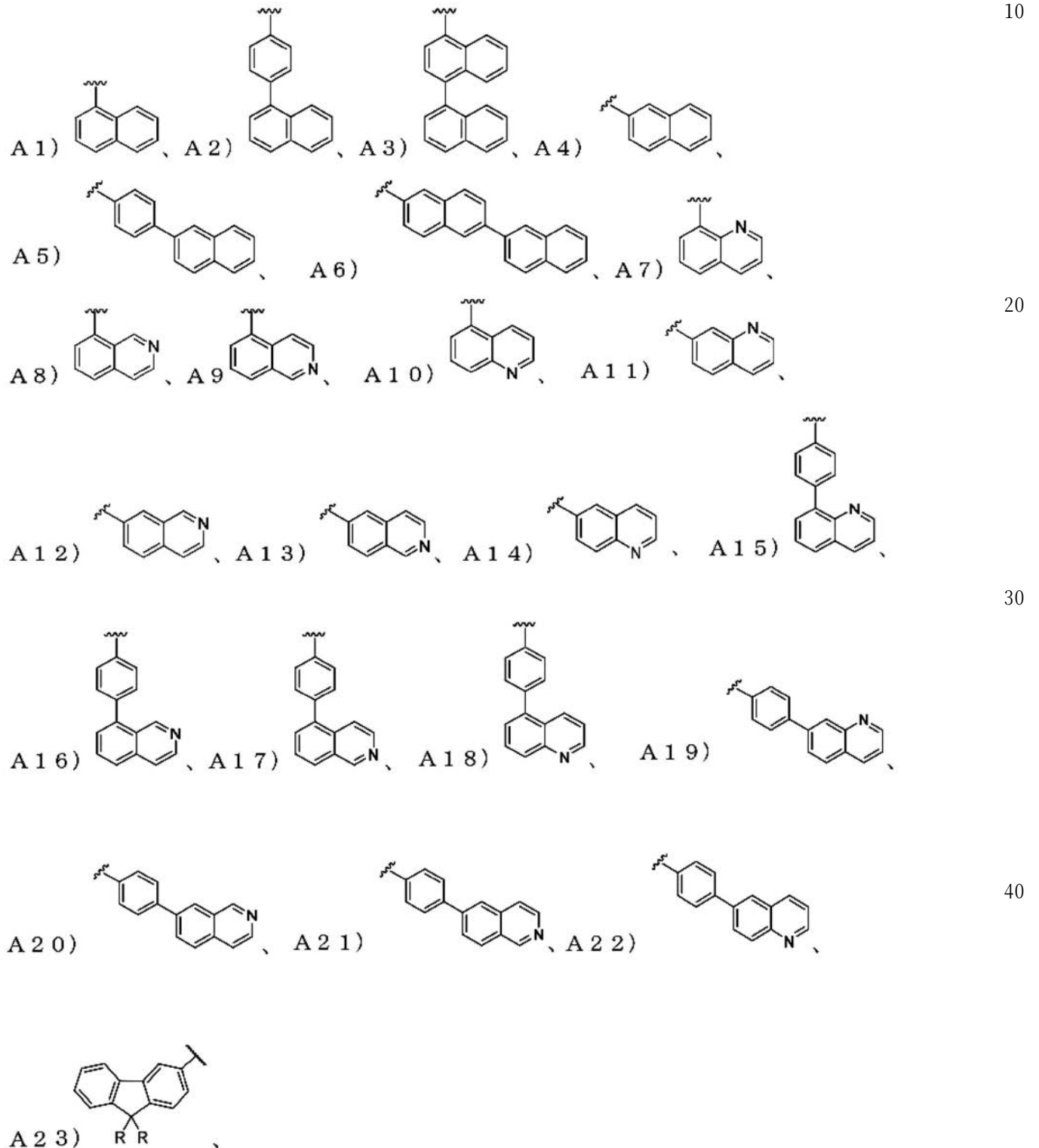
一実施形態では、 $R_1 = R_2 = R_3 = R_4$ である。

【0023】

一実施形態では、式1について、 R_1 、 R_2 、 R_3 、及び R_4 は、各々独立して、以下のA1～A48から選択され、

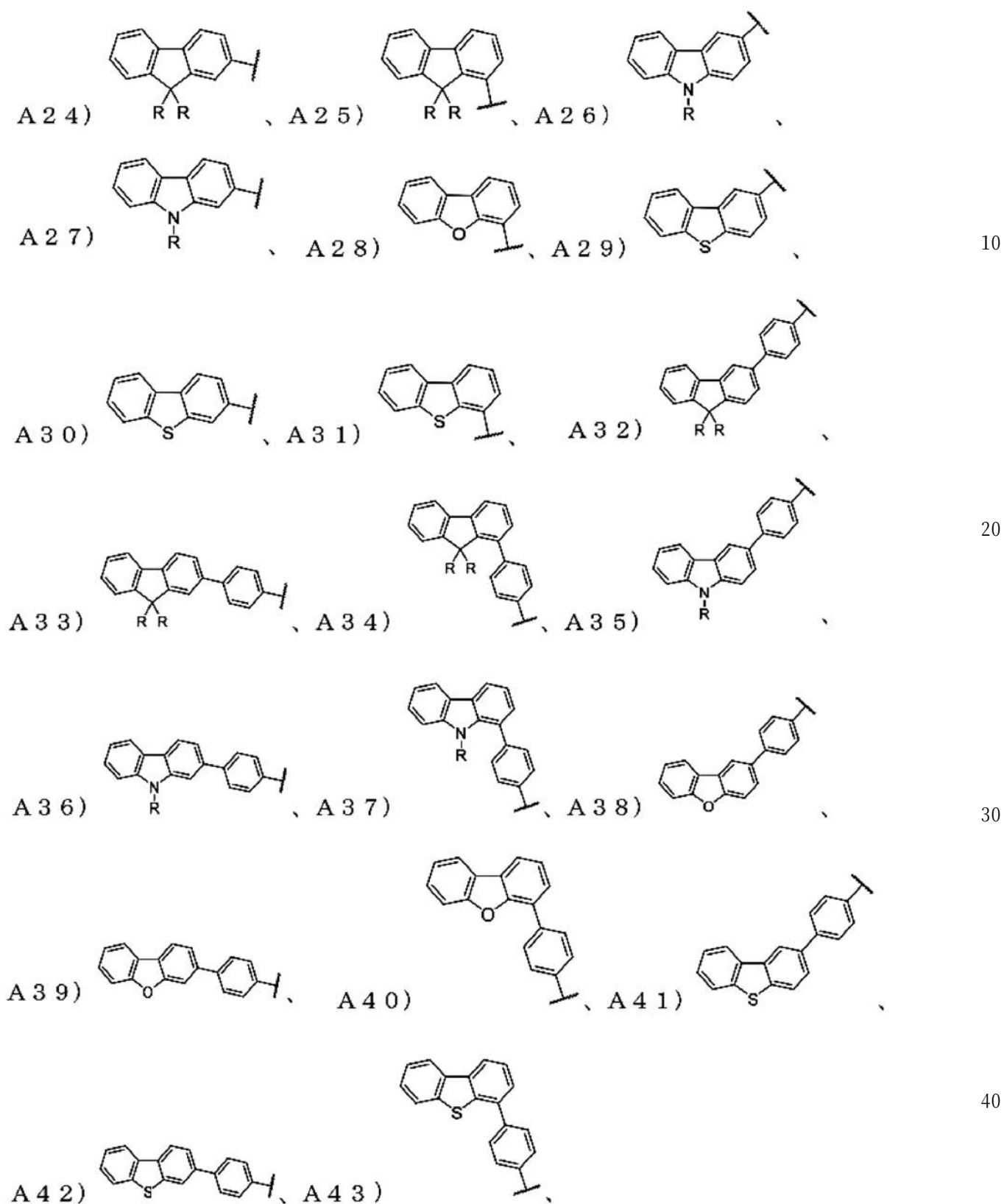
【0024】

【化5-1】



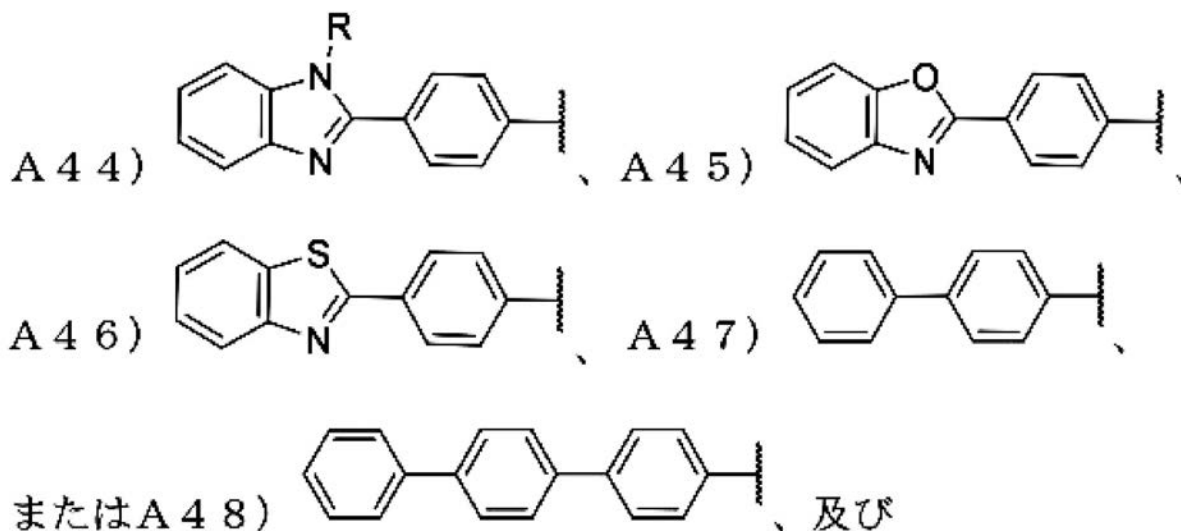
【0025】

【化 5 - 2】



【 0 0 2 6 】

【化 5 - 3】



10

【0 0 2 7】

式中、構造 A 2 4) ~ A 2 7)、A 3 2) ~ A 3 8)、及び A 4 4) について、各 R は、独立してアルキルである。一実施形態では、式 1 について、R₁、R₂、R₃、及び R₄ は、各々独立して、A 1) ~ A 6)、A 3 2) ~ A 3 7)、A 4 7)、及び A 4 8) から選択される。一実施形態では、式 1 について、R₁、R₂、R₃、及び R₄ は、各々独立して、A 1) ~ A 6)、A 4 7)、及び A 4 8) から選択される。

20

【0 0 2 8】

上記の構造及び本明細書に記される他の構造については、現行の IUPAC 標準によって推奨されるように、各置換基の外部接続点を波線で示す：Pure Appl. Chem., 2008, 80, 277 (Graphical representation standards for chemical structural diagrams)。

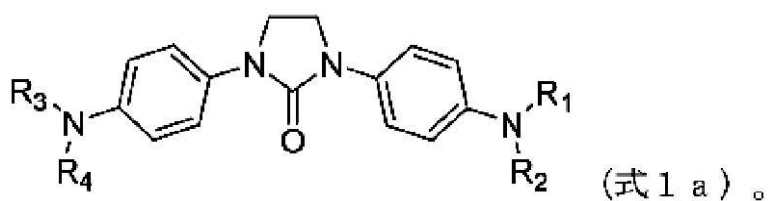
【0 0 2 9】

一実施形態では、式 1 は、式 1 a から選択される。

30

【0 0 3 0】

【化 6】



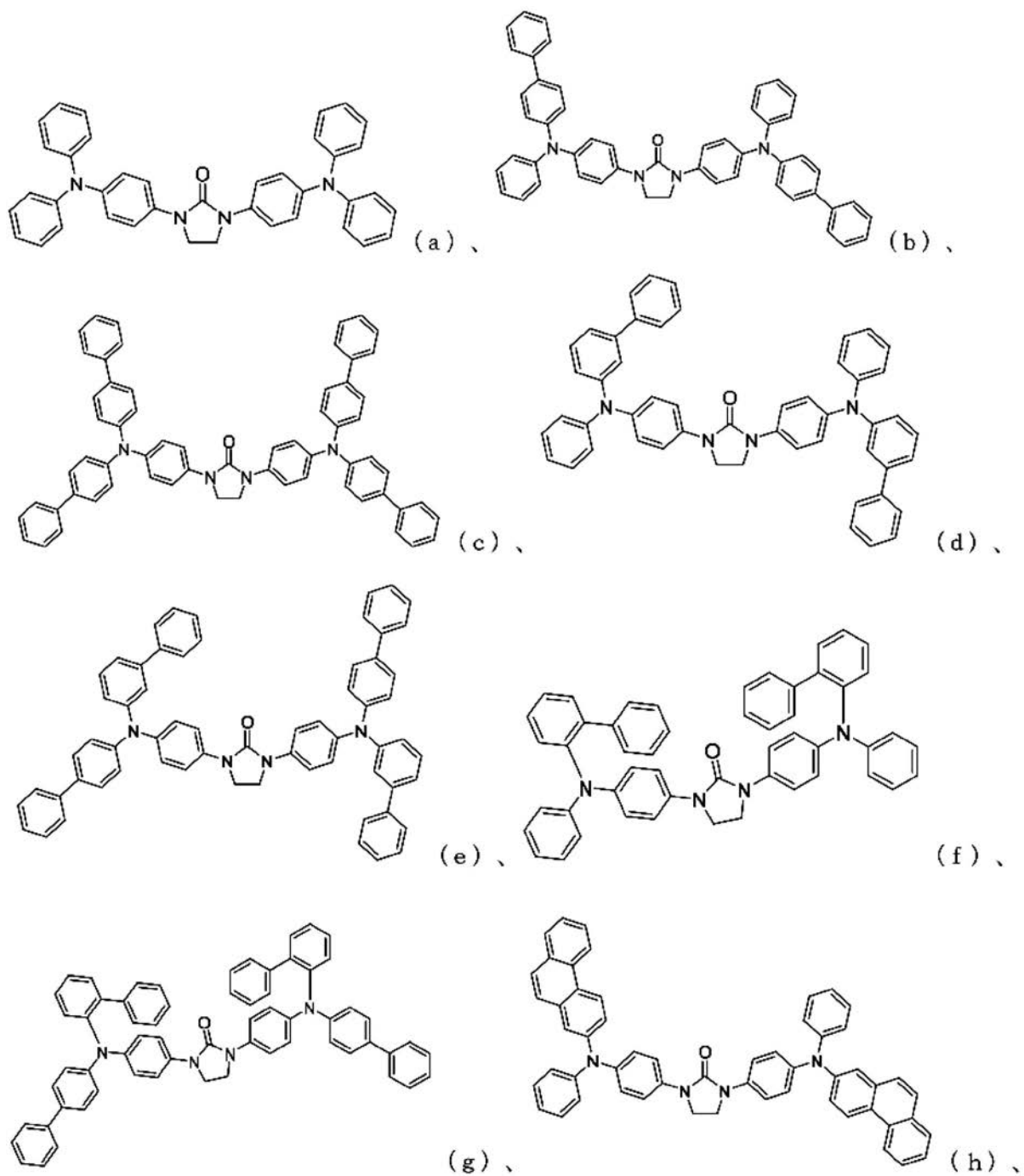
【0 0 3 1】

一実施形態では、式 1 は、以下の (a) ~ (o) から選択される。

40

【0 0 3 2】

【化 7 - 1】



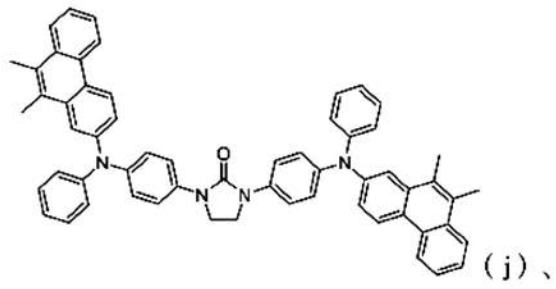
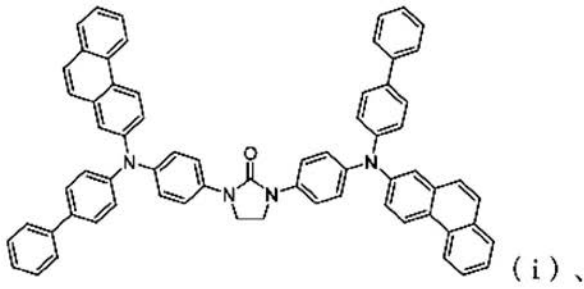
10

20

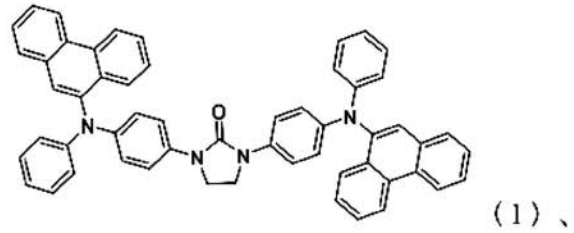
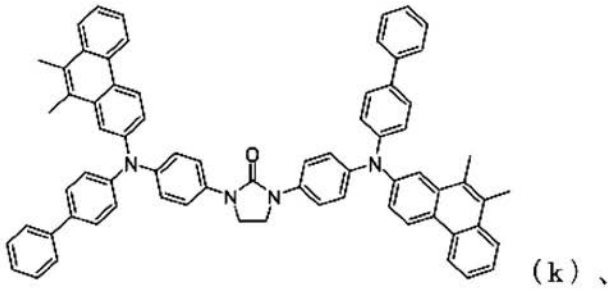
30

【 0 0 3 3】

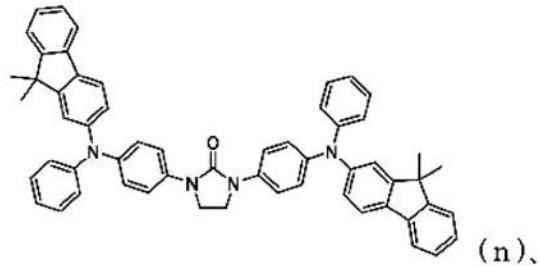
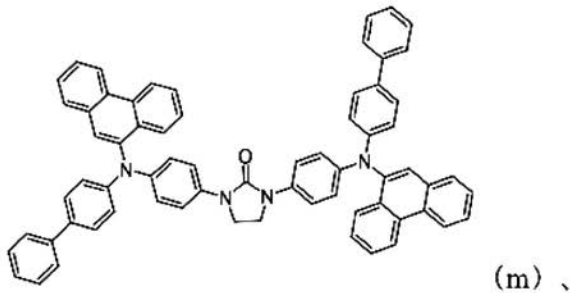
【化 7 - 2】



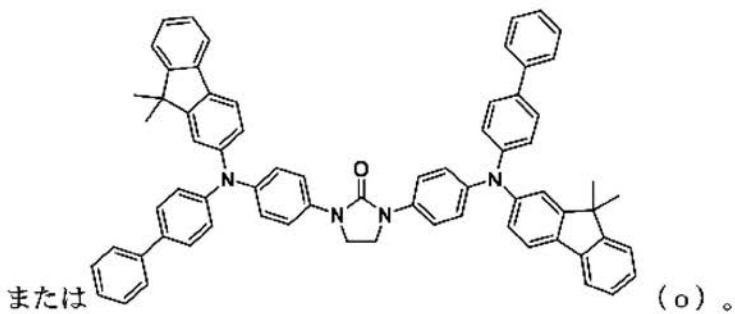
10



20



30



【0034】

一実施形態では、式 1 は、(a) ~ (i)、(m)、(n)、または (o) から選択される。

【0035】

一実施形態では、式 1 は、(a) ~ (e)、(n)、または (o) から選択される。

40

【0036】

一実施形態では、式 1 は、(a) ~ (e) から選択される。

【0037】

一実施形態では、式 1 の化合物は、450 g / モル以上の分子量を有する。

【0038】

一実施形態では、式 1 の化合物は、450 ~ 1000 g / モル、または 450 ~ 900 g / モル、または 450 ~ 800 g / モルの分子量を有する。

【0039】

一実施形態では、式 1 の化合物は、-4.60 ~ -4.75 eV、または -4.60 ~ -4.70 eV の HOMO レベルを有する。

50

【0040】

一実施形態では、式1の化合物は、 $-0.90 \sim -0.10$ eV、または $-0.90 \sim -0.20$ eV、または $-0.90 \sim -0.30$ eV、または $-0.90 \sim -0.40$ eVのLUMOレベルを有する。

【0041】

一実施形態では、式1の化合物は、 $105^{\circ}\text{C} \sim 170^{\circ}\text{C}$ のガラス転移温度 (T_g) を有する。

【0042】

式1の化合物は、本明細書に記載される2つ以上の実施形態の組み合わせを含んでもよい。

10

【0043】

本発明の化合物は、とりわけ、酸化的環化、スズキカップリング、ハートウィッグ・ブッフバルトカップリングなどの当業者に既知の合成方法によって調製され得る。

【0044】

一実施形態では、本組成物は、式1の少なくとも2つの化合物を含む。

【0045】

一実施形態では、本組成物は、式1の少なくとも3つの化合物を含む。

【0046】

一実施形態では、本組成物は、本組成物の重量を基準として、 $5 \sim 100$ 重量パーセント、さらには $10 \sim 99$ 重量パーセント、さらには $10 \sim 90$ 重量パーセントの少なくとも1つの式1の化合物を含む。

20

【0047】

一実施形態では、本組成物は、本組成物の重量を基準として、 $50 \sim 90$ 重量パーセントの式1の化合物を含む。さらなる実施形態では、本組成物は、本組成物の重量を基準として、 $50 \sim 80$ 重量パーセントの式1の化合物を含む。

【0048】

本発明の組成物から形成される少なくとも1つの構成要素を含む物品も提供される。さらなる実施形態では、本物品は、有機電界発光デバイスである。

【0049】

本明細書に記載されるいずれか1つの実施形態または2つ以上の実施形態の組み合わせの組成物から形成される少なくとも1つの構成要素を含む物品も、提供される。一実施形態では、本物品は、有機電界発光デバイスである。

30

【0050】

本明細書に記載されるいずれか1つの実施形態または2つ以上の実施形態の組み合わせの本発明の組成物から形成される少なくとも1つの層を備える膜も、提供される。

【0051】

本明細書に記載されるいずれか1つの実施形態または2つ以上の実施形態の組み合わせの本発明の組成物から形成される少なくとも1つの構成要素を含む電子デバイスも、提供される。

【0052】

本発明の組成物は、本明細書に記載される2つ以上の実施形態の組み合わせを含んでもよい。

40

【0053】

本発明の物品は、本明細書に記載される2つ以上の実施形態の組み合わせを有してもよい。

【0054】

本発明の膜は、本明細書に記載される2つ以上の実施形態の組み合わせを有してもよい。

【0055】

本発明の電子デバイスは、本明細書に記載される2つ以上の実施形態の組み合わせを有

50

してもよい。

【0056】

有機電界発光デバイスは、第1の電極、第2の電極、及び第1の電極と第2の電極との間の有機層を含む。有機層は、本発明の化合物または本発明の化合物の組み合わせと、還元ドーパントとを含む。

【0057】

第1の電極は、基板上に形成される。第1の電極は、アノードまたはカソードであってもよい。有機層は、第1の電極上に形成される。有機層は、発光層を備えてもよい。発光層に加えて、有機層は、電子輸送層をさらに備えてもよい。発光層に加えて、有機層は、正孔注入層、正孔輸送層、電子注入層、電子輸送層、中間層、正孔阻止層、及び電子阻止層から選択される少なくとも1つの層をさらに備えてもよい。例えば、有機層は、発光層と、電子輸送層と、正孔注入層、正孔輸送層、電子注入層、中間層、正孔阻止層、及び電子阻止層から選択される少なくとも1つとを備えてもよい。

10

【0058】

発光層は、第1の電極上に形成され得る。発光層は、ホスト材料及びドーパント材料を使用することによって形成され得る。ホスト材料は、蛍光性ホスト材料またはリン光性ホスト材料であってもよい。ドーパント材料は、蛍光性ドーパント材料またはリン光性ドーパント材料であってもよい。本発明の有機電界発光デバイスは、2つ以上の発光層を備えてもよい。

【0059】

電子輸送層は、発光層と第2の電極との間、または第1の電極と発光層との間に形成され得る。本発明の有機電界発光デバイスは、2つ以上の電子輸送層を備えてもよい。幾つかの既知の電子輸送化合物としては、例えば、オキサゾール系化合物、イソオキサゾール系化合物、トリアゾール系化合物、イソチアゾール系化合物、オキサジアゾール系化合物、チアジアゾール系化合物、ペリレン系化合物、アントラセン系化合物、アルミニウム錯体、及びガリウム錯体が挙げられる。

20

【0060】

第2の電極は、有機層上に形成される。第2の電極は、アノードまたはカソードであってもよい。

【0061】

本発明の有機電界発光デバイスについて、電極などの層の各々は、当該技術分野において公知である技術（複数可）によって形成され得、それらとしては、例えば、真空蒸発、スパッタリング、湿潤膜形成法、及びレーザ誘起熱画像法などが挙げられる。

30

【0062】

定義

本明細書で使用される場合、「炭化水素」という用語は、水素及び炭素原子のみを含有する化学基を指す。

【0063】

本明細書で使用される場合、「置換炭化水素」という用語は、少なくとも1つの水素原子がヘテロ原子または少なくとも1つのヘテロ原子を含有する化学基で置換された炭化水素を指す。ヘテロ原子としては、限定されるものではないが、O、N、P、及びSが挙げられる。

40

【0064】

本明細書に記載される場合、「アリール」という用語は、芳香族炭化水素から1つの水素原子を除去することによって芳香族炭化水素から誘導される有機ラジカルを指す。アリール基は、単環式及び／または縮合環系であってもよく、各環は、適切には4～7個、好ましくは5または6個の原子を含む。2つ以上のアリール基が単結合（複数可）を介して結合している構造も含まれる。具体的な例には、限定されるものではないが、フェニル、ナフチル、ピフェニル、アンスリル、インデニル、フルオレニル、ベンゾフルオレニル、フェナントリル、トリフェニレニル、ピレニル、ペリレニル、クリセニル、ナфтаセニル

50

、フルオランテニルなどが挙げられるが、これに限定されるものではない。ナフチルは1-ナフチルまたは2-ナフチルであり、アンスリルは1-アンスリル、2-アンスリルまたは9-アンスリルであり、フルオレニルは1-フルオレニル、2-フルオレニル、3-フルオレニル、4-フルオレニル及び9-フルオレニルのうちのいずれか1つであり得る。一実施形態では、アリールは、フェニル、ナフチル、ビフェニル、アンスリル、インデニル、フルオレニル、ベンゾフルオレニル、フェナントリル、トリフェニレニル、ピレニル、ペリレニル、クリセニル、ナфтаセニル、またはフルオランテニルから選択される。

【0065】

本明細書で使用される場合、「置換アリール」という用語は、少なくとも1つの水素原子がヘテロ原子または少なくとも1つのヘテロ原子を含有する化学基で置換されているアリールを指す。ヘテロ原子としては、限定されるものではないが、O、N、P、及びSが挙げられる。

【0066】

本明細書に記載される場合、「ヘテロアリール」という用語は、少なくとも1つの炭素原子またはCH基またはCH₂が、ヘテロ原子（例えば、B、N、O、S、P(=O)、Si、及びP）または少なくとも1つのヘテロ原子を含有する化学基（例えば、-N(R)-）で置換されているアリール基を指す。ヘテロアリールは、5または6員の単環式ヘテロアリール、または1つ以上のベンゼン環（複数可）と縮合した多環式ヘテロアリールであってもよく、部分的に飽和していてもよい。単結合を介して結合した1つ以上のヘテロアリール基（複数可）を有する構造も含まれる。ヘテロアリール基としては、ヘテロ原子が酸化または四級化されて、N-オキシド、四級塩などを形成する二価アリール基が挙げられ得る。具体的な例としては、限定されるものではないが、単環式ヘテロアリール基、例えば、フリル、チオフエニル、ピロリル、イミダゾリル、ピラゾリル、チアゾリル、チアジアゾリル、イソチアゾリル、イソオキサゾリル、オキサゾリル、オキサジアゾリル、トリアジニル、テトラジニル、トリアゾリル、テトラゾリル、フラザニル、ピリジニル、ピラジニル、ピリミジニル、ピリダジニルなど、多環式ヘテロアリール基、例えば、ベンゾフラニル、フルオレノ[4, 3-b]ベンゾ-フラニル、ベンゾチオフエニル、フルオレノ[4, 3-b]ベンゾチオフエニル、イソベンゾフラニル、ベンゾイミダゾリル、ベンゾチアゾリル、ベンゾイソチアゾリル、ベンゾイソオキサゾリル、ベンゾオキサゾリル、イソインドリル、インドリル、インダゾリル、ベンゾチア-ジアゾリル、キノリル、イソキノリル、シンノリニル、キナゾリニル、キノキサリニル、カルバゾリル、フェナントリジニル、及びベンゾジオキソリル、ならびに対応するN-オキシド（例えば、ピリジニルN-オキシド、キノリルN-オキシド）及びそれらの四級塩が挙げられる。一実施形態では、ヘテロアリールは、フリル、チオフエニル、ピロリル、イミダゾリル、ピラゾリル、チアゾリル、チアジアゾリル、イソチアゾリル、イソオキサゾリル、オキサゾリル、オキサジアゾリル、トリアジニル、テトラジニル、トリアゾリル、テトラゾリル、フラザニル、ピリジニル、ピラジニル、ピリミジニル、ピリダジニル；ベンゾフラニル、フルオレノ[4, 3-b]ベンゾ-フラニル、ベンゾチオフエニル、フルオレノ[4, 3-b]ベンゾチオフエニル、イソベンゾフラニル、ベンゾイミダゾリル、ベンゾチアゾリル、ベンゾイソチアゾリル、ベンゾイソオキサゾリル、ベンゾオキサゾリル、イソインドリル、インドリル、インダゾリル、ベンゾチア-ジアゾリル、キノリル、イソキノリル、シンノリニル、キナゾリニル、キノキサリニル、カルバゾリル、フェナントリジニル、またはベンゾジオキソリルから選択される。

【0067】

本明細書で使用される場合、「置換ヘテロアリール」という用語は、少なくとも1つの水素原子が、ヘテロ原子または少なくとも1つのヘテロ原子を含有する化学基で置換されているヘテロアリールを指す。ヘテロ原子としては、限定されるものではないが、O、N、P、及びSが挙げられる。

【0068】

本明細書に記載される場合、「アルキル」という用語は、脂肪族炭化水素から1個の水

10

20

30

40

50

素原子を除去することによって脂肪族炭化水素から誘導される有機ラジカルを指す。アルキル基は、線状、分岐状、及び／または環状であってもよい。具体的な例としては、限定されるものではないが、メチル、エチル、プロピル、シクロヘキシル、シクロペンチルが挙げられる。

【0069】

本明細書で使用される場合、「置換アルキル」という用語は、少なくとも1つの水素原子が、ヘテロ原子または少なくとも1つのヘテロ原子を含有する化学基で置換されているアルキルを指す。ヘテロ原子としては、限定されるものではないが、O、N、P、及びSが挙げられる。

【0070】

本明細書に記載される場合、「ヘテロアルキル」という用語は、少なくとも1つの炭素原子またはCH基またはCH₂が、ヘテロ原子（例えば、B、N、O、S、P(=O)、Si、及びP）、または少なくとも1つのヘテロ原子を含有する化学基（例えば、-N(R)-）で置換されているアルキル基を指す。

【0071】

本明細書で使用される場合、「置換ヘテロアルキル」という用語は、少なくとも1つの水素原子がヘテロ原子または少なくとも1つのヘテロ原子を含有する化学基で置換されているヘテロアリールを指す。ヘテロ原子としては、限定されるものではないが、O、N、P、及びSが挙げられる。

【0072】

実験

試薬及び試験方法

全ての溶媒及び試薬は、Sigma-Aldrich、Fisher Scientific、Acros、TCI、及びAlfa Aesarを含む商業用の供給業者から入手し、使用可能な最高純度で使用し、及び／または必要に応じて使用前に再結晶させた。乾燥溶媒は、社内の精製／分配システム（ヘキサン、トルエン、テトラヒドロフラン及びジエチルエーテル）から得たか、またはSigma-Aldrichから購入した。水に敏感な化合物を包含する全ての実験は、「オープン乾燥させた」ガラス器具内、窒素雰囲気下、またはグローブボックス内で行った。プレコートアルミニウム板（VWR 60 F254）上の分析薄層クロマトグラフィー（TLC）によって反応を監視し、UV光及び／または過マンガン酸カリウム染色により可視化した。フラッシュクロマトグラフィーは、GRACERESOLVカートリッジを備えたISCO COMBIFLASHシステムで実施した。

【0073】

別様に指定のない限り、30℃のVarian VNMR S-500またはVNMR S-400スペクトロメーターで¹H-NMRスペクトル（500 MHzまたは400 MHz）を得た。ケミカルシフトは、使用したNMR溶媒に応じて、以下のいずれかに言及される：CDCl₃のCHCl₃中のTMS（δ=0.00）、ベンゼン-d₆中のベンゼン-d₅（7.15）、またはDMSO-d₆中のDMSO-d₅（δ 2.50）。必要に応じて、構造の同一性を確認するために、COSY、HSQC、またはNOESY実験の助けを借りて、ピーク割り当てを行った。

【0074】

Varian VNMR S-500またはVNMR S-400スペクトロメーターで、¹³C-NMRスペクトル（125 MHzまたは100 MHz）を得て、使用したNMR溶媒に応じて、溶媒または標準信号（CDCl₃中の0.0-TMS、128.02-ベンゼン-d₆、39.43-DMSO-d₆）を参照した。

【0075】

ルーチンLC/MS研究は、以下のように行った。「THF中3 mg/ml溶液」として、試料の5マイクロリットルアリコート、PIモードで動作するデュアルスプレーエレクトロスプレー（ESI）インターフェースを介して、四重極飛行時間型MSシステム

のAGILENTの6520QTに連結された、AGILENTの1200SLバイナリグラジエント液体クロマトグラフィーに注入した。以下の分析条件を使用した：カラム：150×4.6mmID、3.5μm ZORBAXSB-C8、カラム温度：40℃、移動相：40分間で75/25A/B～15/85A/B、溶媒A＝水中の0.1体積%ギ酸、溶媒B＝THF、流速1.0mL/分、UV検出：ダイオードアレイ210～600nm（抽出波長250nm、280nm）、ESI条件：ガス温度365℃、ガス流速8mL/分、キャピラリー3.5kV、ネブライザー40PSI、フラグメントー145V。

【0076】

DSC測定値を、TA InstrumentsのQ2000装置で、10℃/分の走査速度で、全てのサイクルについて窒素雰囲気中で決定した。試料を室温から300℃まで走査し、-60℃に冷却し、300℃に再加熱した。第2の加熱走査で、ガラス転移温度(T_g)を測定した。TA Universal Analysisソフトウェアを用いて、データ解析を実施した。「onset-at-inflection」法を用いて、 T_g を算出した。

10

【0077】

全ての計算は、ガウス分布09のプログラム¹を利用した。計算は、ハイブリッド密度汎関数理論(DFT)法、B3LYP²、及び6-31G*(5d)基底セット³を用いて実施した。一重項状態の計算は閉じたシェル近似を使用し、三重項状態の計算は開いたシェル近似を使用した。全ての値は、電子ボルト(eV)で引用された。HOMO及びLUMO値は、基底一重項状態の最適化された幾何形状の軌道エネルギーから決定した。三重項エネルギーは、最適化された三重項状態の全エネルギーと最適化された一重項状態との間の差として決定した。

20

【0078】

1. Gaussian 09, Revision A.02, Frisch, M. J. et al.; Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.
2. (a) Becke, A. D. J. Chem. Phys. 1993, 98, 5648.
(b) Lee, C.; Yang, W.; Parr, R. G. Phys. Rev B 1988, 37, 785.
(c) Miehlich, B.; Savin, A.; Stoll, H.; Preuss, H. Chem. Phys. Lett. 1989, 157, 200.
3. (a) Ditchfield, R.; Hehre, W. J.; Pople, J. A. J. Chem. Phys. 1971, 54, 724.
(b) Hehre, W. J.; Ditchfield, R.; Pople, J. A. J. Chem. Phys. 1972, 56, 2257.
(c) Gordon, M. S. Chem. Phys. Lett. 1980, 76, 163.

30

【0079】

文献(J. Phys. Chem. A, 2003, 107, 5241-5251)に記載された手順を適用して、電子移動度の指標である各分子の再構成エネルギー(λ^-)を算出した。

【0080】

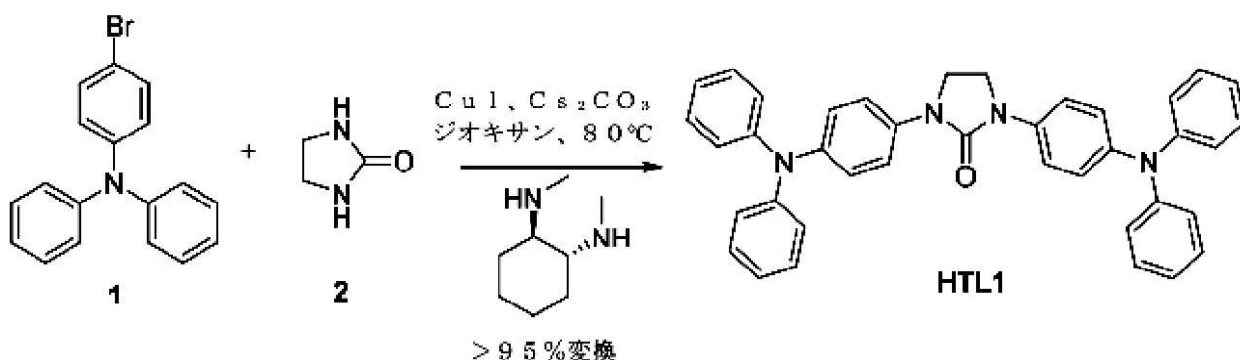
40

ここで、本発明の幾つかの実施形態を、以下の実施例において詳細に記載する。

【0081】

【化 8】

スキーム 1 : HTL 1 の合成



10

【0082】

ガラス瓶内に、2-イミダゾリジノン（0.5 g、6 mmol）、4-ブロモ-N,N-ジフェニルアニリン（3.8 g、12 mmol）、CuI（110 mg、0.58 mmol、10 mol%）、及びCs₂CO₃（3.9 g、12 mmol、2当量）を計量した。窒素スパージしたジオキサン（80 mL）を添加した後、trans-N,N'-ジメチルシクロヘキサン-1,2-ジアミン（82 mg、91 μL、0.58 mmol、10 mol%）を添加し、反応を80℃で一晩攪拌した。アリコートをしてLC-MSによって分析し、所望の生成物への約99%の変換を確認した。溶媒を真空下で除去し、結果として得られた固体をクロロホルム（150 mL）中に溶解させ、水（2×50 mL）、塩水（3×50 mL）、水（2×50 mL）で洗浄した。有機層を硫酸ナトリウムで乾燥させ、濾過し、シリカゲルを濾液に添加した。スラリーを真空下で乾燥させ、自由流動性粉末をカートリッジに充填し、ヘキサン中の30%クロロホルムのアイソクラチックグラジエントを使用し、TELEDYNEISCO精製装置を使用してフラッシュカラムクロマトグラフィーによって粗生成物を精製して、LC/MS及び¹H-NMRによって決定するときに、>99%の純度で所望の化合物（1.5 g）を得た、少量のHTL 1を、熱分解分析に関するTGA及びDSC分析用に提出した。第2のバッチ（2 g）を、同様に調製及び精製した。両バッチを純度について分析し、高分解能LC-MSによって>99.6%の純度であることを見出した。バッチを合わせ（3.2 g）、デバイス試験に使用した。¹H NMR（400 MHz, CDCl₃）δ 7.47（t, J=10.6 Hz, 4H）、7.32-6.86（m, 24H）、3.94（s, 4H）；¹³C NMR（101 MHz, CDCl₃）δ 155.16、147.80、143.07、135.40、129.14、125.42、123.57、122.33、119.29、42.21。

20

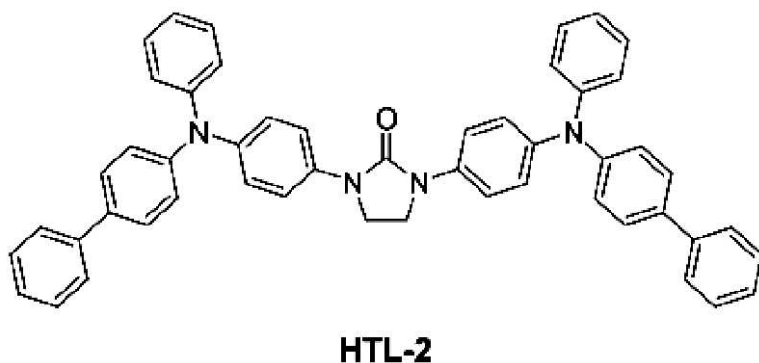
30

【0083】

【化 9】

HTL-2に関する実験

40



50

【0084】

N₂ パージした乾燥した箱内で、2, 5-ビス(4-ブロモフェニル)シクロペンタン-1-オン(1 g、2.53 mmol)、N-フェニル-4-ビフェニルアミン(1.55 g、6.34 mmol)、及びNaOtBu(0.73 g、7.61 mmol)を、250 mLの丸底フラスコにトルエン(150 mL)と共に充填した。攪拌スラリーに、tBu₃PPd(クロチル)Cl(50 mg、0.125 mmol)を一度に添加した。フラスコをStevensの凝縮器に取り付け、18時間加熱還流した。反応を冷却し、CH₂Cl₂(150 mL)及び水(100 mL)で処理した。有機層を単離し、MgSO₄で乾燥させ、濾過した。溶媒を除去して、オフホワイトの固体を得た。固体を、シリカ上で乾燥パッキングし、カラムクロマトグラフィーを使用して、ヘキサン中の0~70% CH₂Cl₂のグラジエントを用いて精製した(100 g Biotageカラム)。HTL-2を、無色の固体として単離した(1.19 g、64.8%収率)。HTL-2を、LC-MSによって示されるときに99.86%の純度に昇華させた。¹H NMR(400 MHz、クロロホルム-d) δ 7.34(t, J=1.9 Hz, 1H)、7.32(t, J=2.1 Hz, 4H)、7.26(dd, J=6.8, 2.2 Hz, 6H)、7.19(d, J=2.0 Hz, 1H)、7.17(d, J=1.7 Hz, 2H)、7.15-7.08(m, 5H)、7.04(dd, J=8.7, 7.2 Hz, 4H)、6.94-6.70(m, 8H)、3.84(s, 4H); ¹³C NMR(101 MHz, CDCl₃) δ 155.27、147.87、144.92、142.98、140.52、139.89、134.33、131.93、129.48、128.83、128.72、128.62、127.88、126.79、125.82、123.23、121.35、120.90、118.94、42.30。

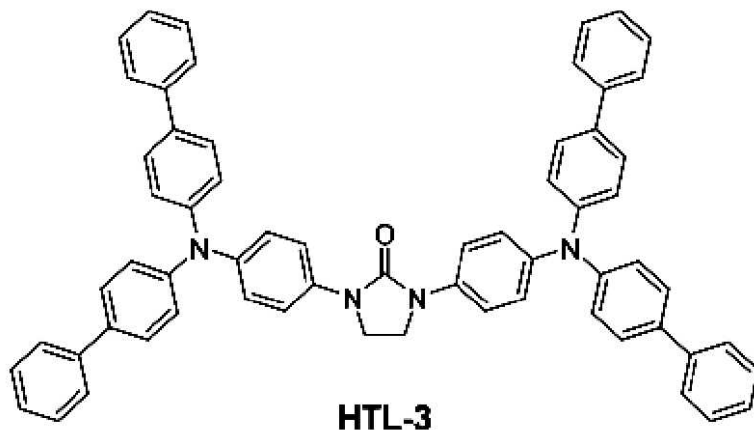
10

20

【0085】

【化10】

HTL-3の合成



30

【0086】

N₂ パージした乾燥した箱内で、2, 5-ビス(4-ブロモフェニル)シクロペンタン-1-オン(1 g、2.53 mmol)、ビス(4-ビフェニルイル)アミン(1.71 g、5.33 mmol)、及びNaOtBu(0.73 g、7.61 mmol)を、250 mLの丸底フラスコにトルエン(150 mL)と共に充填した。攪拌スラリーに、tBu₃PPd(クロチル)Cl(41 mg、0.10 mmol)を一度に添加した。フラスコをStevensの凝縮器に取り付け、18時間加熱還流した。反応を冷却し、CH₂Cl₂(1 L)及び水(100 mL)で処理した。HTL-3は低可溶性であると考えられたため、大量の溶媒を使用した。有機層を単離し、MgSO₄で乾燥させ、濾過した。溶媒を除去して、オフホワイトの固体を得た。固体を、シリカ上で乾燥パッキングし、カラムクロマトグラフィー(100 g Biotageカラム)によって、ヘキサン中の0~20% EtOAcのグラジエントを用いて4カラム長にわたり精製した。HTL-3を

40

50

、無色の固体として単離した（1.29 g、58.1%収率）。

【0087】

OLEDデバイスの製造と試験

全て有機材料は、堆積前に昇華精製した。OLEDは、アノードとして機能し、アルミニウムカソードで覆われたITO被覆ガラス基板上に製造した。全ての有機層は、化学蒸着によって、 $<10^{-7}$ トールのベース圧力を備えた真空チャンバ内に熱的に堆積させた。有機層堆積速度は、0.1~0.05 nm/秒に維持した。アルミニウムカソードを、0.5 nm/秒で堆積させた。OLEDデバイスの有効面積は、カソード堆積のシャドウマスクによって定義するとき「3 mm×3 mm」であった。

【0088】

HIL1、HIL2、HTL、EMLホスト、EMLドーパント、ETL、またはEILを含有する各セルを、真空チャンバ内に、 10^{-6} トールに達するまで置いた。各材料を蒸発させるために、材料を含有するセルに制御された電流を印加して、セルの温度を上昇させた。適切な温度を適用して、蒸発プロセス全体を通して材料の蒸発速度を一定に維持した。

【0089】

HIL1層について、N4、N4'-ジフェニル-N4、N4'-ビス（9-フェニル-9H-カルバゾール-3-イル）-[1,1'-ビフェニル]-4,4'-ジアミンを、層の厚さが800オングストロームに達するまで、一定の1 A/秒の速度で蒸発させた。同時に、ジピラジノ[2,3-f:2',3'-h]キノキサリン-2,3,6,7,10,11-ヘキサカルボニトリル層を、厚さが50オングストロームに達するまで、一定の0.5 A/秒の速度で蒸発させた。HTL層について、N-（[1,1'-ビフェニル]-4-yl）-9,9-ジメチル-N-（4-（9-フェニル-9H-カルバゾール-3-yl）フェニル）-9H-フルオレン-2-アミンを、厚さが400オングストロームに達するまで、一定の1 A/秒の速度で蒸発させた（デバイス1）。デバイス2について、HTL-2を、厚さが400オングストロームに達するまで、一定の1 A/秒の速度で堆積させた。EML層について、9-（3-（4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン-2-イル）フェニル）-9'-フェニル-9H,9'H-3,3'-ビカルバゾール（GH-1、ホスト）及びイリジウム、トリス[2-（4-メチル-5-フェニル-2-ピリジニル-κN）フェニル-κC]-（GD-1、ドーパント）を、厚さが400オングストロームに達するまで共蒸発させた。ホスト材料の堆積速度は0.85 A/秒であり、ドーパント材料の堆積は0.15 A/秒であり、ホスト材料の15%のドーピングをもたらした。ETL層について、2,4-ビス（9,9-ジメチル-9H-フルオレン-2-イル）-6-（ナフタレン-2-イル）-1,3,5-トリアジンを、厚さが300オングストロームに達するまでリチウムキノレート（液体）と一緒に共蒸発させた。ETL化合物及び液体の蒸発速度は、0.5 A/秒であった。最後に、「20オングストローム」の薄い電子注入層（液体）を、0.5 A/秒の速度で蒸発させた。表1及び2を参照されたい。

【0090】

OLEDデバイスの電流-電圧-輝度（J-V-L）特性評価を、光源測定装置（KEITHLEY 238）及び発光計器（MINOLTA CS-100A）を用いて実施した。OLEDデバイスのELスペクトルを、校正されたCCD分光器によって収集した。

【0091】

10

20

30

40

【表 1】

表 1 : デバイス 1 のデバイス材料

	名称
正孔注入材料 (H I L) 1	N 4、N 4' - ジフェニル - N 4、N 4' - ビス (9 - フェニル - 9 H - カルバゾール - 3 - イル) - [1, 1' - ビフェニル] - 4, 4' - ジアミン
正孔注入材料 (H I L 2)	ジピラジノ [2, 3 - f : 2', 3' - h] キノキサリン - 2, 3, 6, 7, 10, 11 - ヘキサカルボニトリル
正孔輸送材料 (H T L)	N - ([1, 1' - ビフェニル] - 4 - イル) - 9, 9 - ジメチル - N - (4 - (9 - フェニル - 9 H - カルバゾール - 3 - イル) フェニル) - 9 H - フルオレン - 2 - アミン
Ph Green ホスト (GH - 1)	9 - (3 - (4, 6 - ジフェニル - 1, 3, 5 - トリアジン - 2 - イル) フェニル) - 9' - フェニル - 9 H, 9' H - 3, 3' - ビカルバゾール
Ph Green ドーパント (GD - 1)	イリジウム, トリス [2 - (4 - メチル - 5 - フェニル - 2 - ピリジニル - κ N) フェニル - κ C] -
参照 E T L	2, 4 - ビス (9, 9 - ジメチル - 9 H - フルオレン - 2 - イル) - 6 - (ナフタレン - 2 - イル) - 1, 3, 5 - トリアジン
電子注入材料 (E I L)	リチウムキノレート

【 0 0 9 2 】

10

20

30

【表 2】

表 2：デバイス 2 のデバイス材料

	名称
正孔注入材料 (HIL1)	N4、N4' -ジフェニル-N4、N4' -ビス (9-フェニル-9H-カルバゾール-3-イル) - [1, 1' -ビフェニル] - 4, 4' -ジアミン
正孔注入材料 (HIL2)	ジピラジノ [2, 3-f : 2', 3'-h] キノキサリン-2, 3, 6, 7, 10, 11-ヘキサカルボニトリル
正孔輸送材料 (HTL)	HTL-2
Ph Green ホスト (GH-1)	9-(3-(4, 6-ジフェニル-1, 3, 5-トリアジン-2-イル) フェニル)-9'-フェニル-9H, 9'H-3, 3'-ビカルバゾール
Ph Green ドーパント (GD-1)	イリジウム, トリス [2-(4-メチル-5-フェニル-2-ピリジニル-κN) フェニル-κC] -
参照 ETL	2, 4-ビス (9, 9-ジメチル-9H-フルオレン-2-イル) -6-(ナフタレン-2-イル) -1, 3, 5-トリアジン
電子注入材料 (EIL)	リチウムキノレート

10

20

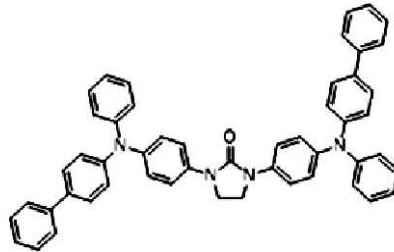
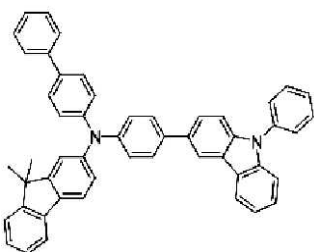
【0093】

各層を含む分子の分子構造が、下に示される。

【0094】

【化 11】

30



参照 HTL

HTL-2

【0095】

デバイスの結果 (表 3) に見られるように、HTL2 を含むデバイスは、参照化合物 HTL を含むデバイスと比較したときに、より良好な (より高い) 効率を有した。

40

【0096】

【表 3】

表 3

	効率@1000nit [cd/A]	効率@10mA/cm ² [cd/A]
参照HTLを有するデバイス1	44.4	40.8
HTL-2を有するデバイス2	50.0	48.4

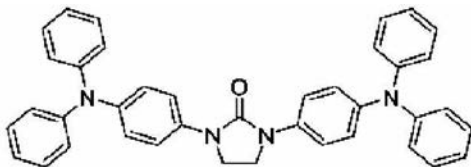
10

【0097】

本発明の化合物は、US 8,022,617を代表する化合物と比較して、HOMOエネルギーを浅くすることができる。例えば、下の化合物を参照されたい。

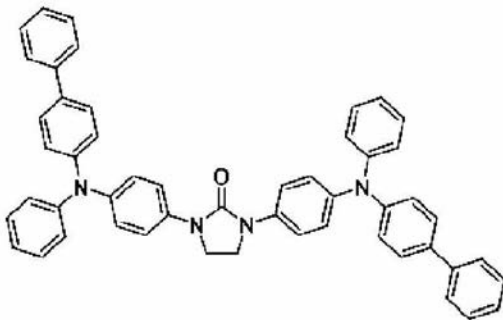
【0098】

【化12】



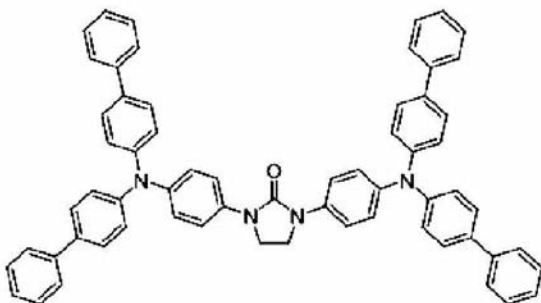
20

HOMO: -4.70 eV、LUMO: -0.46 eV、三重項: 2.99 eV、h-m
ob: 0.19 eV



30

HOMO: -4.70 eV、LUMO: -0.75 eV、三重項: 2.66 eV、h-m
ob: 0.15 eV



40

HOMO: -4.70 eV、LUMO: -0.86 eV、三重項: 2.64 eV、h-m
ob: 0.13 eV

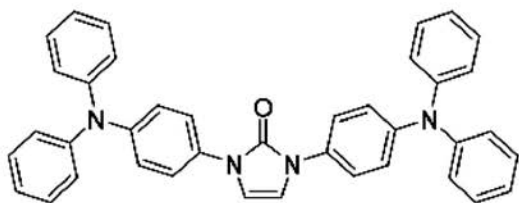
【0099】

以下の比較化合物は、上述の理想的範囲よりも深い算出HOMO値を有する。

【0100】

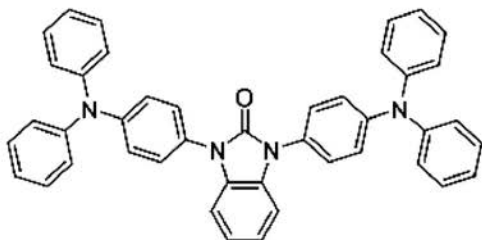
50

【化 1 3 - 1】



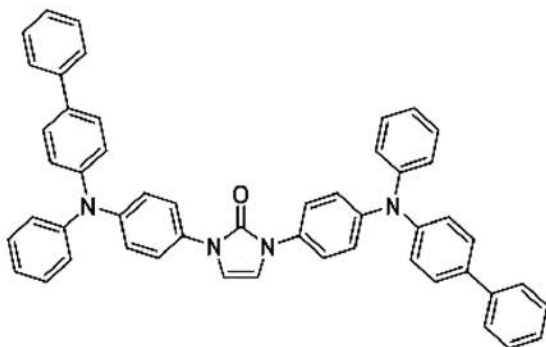
HOMO : -4.81 eV、LUMO : -0.46 eV、三重項 : 2.95 eV、h-m
ob : 0.11 eV

10



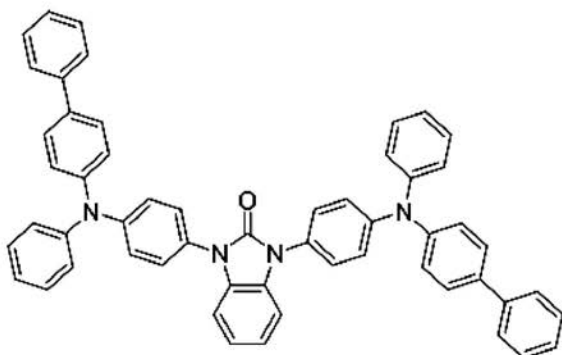
HOMO : -4.95 eV、LUMO : -0.58 eV、三重項 : 2.99 eV、h-m
ob : 0.11 eV

20



HOMO : -4.80 eV、LUMO : -0.37 eV、三重項 : 2.68 eV、h-m
ob : 0.09 eV

30

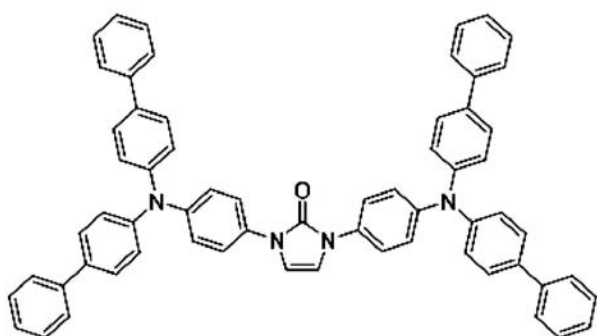


HOMO : -4.91 eV、LUMO : -0.84 eV、三重項 : 2.69 eV、h-m
ob : 0.10 eV

40

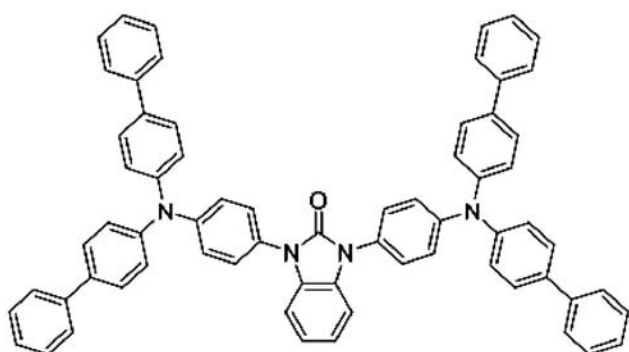
【0 1 0 1】

【化 1 3 - 2】



10

HOMO : -4.80 eV 、LUMO : -0.91 eV 、三重項 : 2.67 eV 、h-m
ob : 0.07 eV



20

HOMO : -4.90 eV 、LUMO : -0.93 eV 、三重項 : 2.67 eV 、h-m
ob : 0.07 eV

【国際調査報告】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No

PCT/US2016/039768

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

INV. C07D233/36 H01L51/50
ADD.

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C07D

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

EPO-Internal, CHEM ABS Data, WPI Data

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	GONG ET AL: "Conformation-Determined through-bond versus through-space electronic communication in mixed-valence systems with a cross conjugated urea bridge", CHEMISTRY A EUROPEAN JOURNAL, vol. 21, 24 November 2014 (2014-11-24), pages 1554-1566, XP002761105, DOI: 10.1002/chem.201405332 compound 11 ----- -/--	1-4,6

☒ Further documents are listed in the continuation of Box C.☒ See patent family annex.

* Special categories of cited documents :

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

25 August 2016

Date of mailing of the international search report

20/10/2016

Name and mailing address of the ISA/

European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2
NL - 2280 HV Rijswijk
Tel. (+31-70) 340-2040,
Fax: (+31-70) 340-3016

Authorized officer

Bakboord, Joan

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No

PCT/US2016/039768

C(Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	ICHIKAWA T ET AL: "Optically active antifungal azoles. XII. Synthesis and antifungal activity of the water-soluble prodrugs of 1-[(1R,2R)-2-(2,4-difluorophenyl)-2-hydroxy-1-methyl-3-(1H-1,2,4,-triazol-1-yl)propyl]-3-[4-(1H-1-tetrazolyl)phenyl]-2-imidazolidinone", CHEMICAL AND PHARMACEUTICAL BULLETIN, PHARMACEUTICAL SOCIETY OF JAPAN, JP, vol. 49, no. 9, 1 January 2001 (2001-01-01), pages 1102-1109, XP003024542, ISSN: 0009-2363, DOI: 10.1248/CPB.49.1102 compound 1	1,4
X	BOGATSKY ET AL: "Macroheterocycles; XIV A convenient synthesis of azacrown ether derivatives via aminomethylation", SYNTHESIS, no. 12, December 1983 (1983-12), pages 992-994, XP002761106, compound 6	1
X	ZAGIDULLIN: "REACTIONS OF N-(BETA-AMINOETHYL)PIPERAZINE AND ITS DERIVATIVES", CHEMISTRY OF HETEROCYCLIC COMPOUNDS, vol. 27, no. 3, 1 March 1991 (1991-03-01), pages 309-312, XP002761107, compound IXa	1
X	GAZIEVA G A ET AL: "1+--Ureidoalkylation of 1,3-bis(hydroxymethyl)-imidazolidin-2-one", CHEMISTRY OF HETEROCYCLIC COMPOUNDS, KLUWER ACADEMIC PUBLISHERS-PLENUM PUBLISHERS, NL, vol. 43, no. 11, 1 November 2007 (2007-11-01), pages 1406-1410, XP019571333, ISSN: 1573-8353 compound 3	1
X	TUMIATTI ET AL: "Structure-activity relationships of acetylcholinesterase noncovalent inhibitors based on a polyamine backbone.4.Further investigation on the inner space", JOURNAL OF MEDICINAL CHEMISTRY, vol. 51, no. 22, 28 October 2008 (2008-10-28), pages 7308-7312, XP002761108, compound 12	1
	----- -/--	

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No

PCT/US2016/039768

C(Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	EP 1 847 531 A1 (TAKEDA PHARMACEUTICAL [JP]) 24 October 2007 (2007-10-24) compound 141	1
A	----- EP 1 956 008 A1 (MITSUBISHI CHEM CORP [JP]) 13 August 2008 (2008-08-13) cited in the application claim 8; compounds em-7 -----	1-10

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International application No

PCT/US2016/039768

Patent document cited in search report		Publication date		Patent family member(s)		Publication date
EP 1847531	A1	24-10-2007	EP	1847531 A1		24-10-2007
			US	2009156582 A1		18-06-2009
			WO	2006085685 A1		17-08-2006

EP 1956008	A1	13-08-2008	CN	101287713 A		15-10-2008
			EP	1956008 A1		13-08-2008
			KR	20080074103 A		12-08-2008
			TW	I388549 B		11-03-2013
			US	2009284134 A1		19-11-2009
			WO	2007063760 A1		07-06-2007

フロントページの続き

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

(72)発明者 マーク・イー・オンダリ

アメリカ合衆国 ミシガン州 48674 ミッドランド ワシントン・ストリート 1776
ビルディング 1776/ディー12エイ

(72)発明者 ロバート・ジェイ・ライト

アメリカ合衆国 テキサス州 77541 フリーポート ノース・ブラゾスポーツ・ブルバード 2301

(72)発明者 ロバート・ディー・ジェイ・フローゼ

アメリカ合衆国 ミシガン州 48674 ミッドランド ワシントン・ストリート 1776
ビルディング

(72)発明者 デイヴィット・ディー・デヴォア

アメリカ合衆国 ミシガン州 48674 ミッドランド ワシントン・ストリート 1776
ビルディング ディー38

(72)発明者 ホン・ヨプ・ナ

大韓民国 331-980 チョナン ソブクーク 3-ゴンダン 1-ロ 56

Fターム(参考) 3K107 AA01 BB01 CC04 DD72 DD78

专利名称(译)	用于电子设备的环状尿素化合物		
公开(公告)号	JP2018523303A	公开(公告)日	2018-08-16
申请号	JP2017566276	申请日	2016-06-28
[标]申请(专利权)人(译)	陶氏环球技术有限责任公司 罗门哈斯电子材料有限公司		
申请(专利权)人(译)	陶氏环球技术有限责任公司 罗门哈斯电子材料有限公司韩国		
当前申请(专利权)人(译)	陶氏环球技术有限责任公司 罗门哈斯电子材料有限公司韩国		
[标]发明人	マークイーオンダリ ロバートジェイライト ロバートデージェイフローゼ デイヴィットディーデヴォア ホンヨプナ		
发明人	マーク・イー・オンダリ ロバート・ジェイ・ライト ロバート・デー・ジェイ・フローゼ デイヴィット・ディー・デヴォア ホン・ヨプ・ナ		
IPC分类号	H01L51/50 C07D233/70		
CPC分类号	H01L51/0061 C07D233/36 H01L51/0067 H01L51/5016 H01L51/5056 H01L2251/552		
FI分类号	H05B33/22.D H05B33/14.A C07D233/70		
F-TERM分类号	3K107/AA01 3K107/BB01 3K107/CC04 3K107/DD72 3K107/DD78		
优先权	62/186475 2015-06-30 US		

摘要(译)

提供组合物，其包含式1如本文所述的至少一种环脲化合物。该组合物可以在电子设备中使用，例如有机电致发光器件。 嵌入图片 【选择图】无

