

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特許公報(B2)

(11) 特許番号

特許第5722541号
(P5722541)

(45) 発行日 平成27年5月20日(2015.5.20)

(24) 登録日 平成27年4月3日(2015.4.3)

(51) Int.Cl.

F 1

H01L 51/50	(2006.01)	H05B 33/14	B
C07D 235/02	(2006.01)	C07D 235/02	C S P B
C07D 241/36	(2006.01)	C07D 241/36	
C07D 263/62	(2006.01)	C07D 263/62	
C07D 403/14	(2006.01)	C07D 403/14	

請求項の数 10 (全 96 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号	特願2009-527780 (P2009-527780)
(86) (22) 出願日	平成19年9月4日 (2007.9.4)
(65) 公表番号	特表2010-505241 (P2010-505241A)
(43) 公表日	平成22年2月18日 (2010.2.18)
(86) 國際出願番号	PCT/EP2007/059218
(87) 國際公開番号	W02008/031743
(87) 國際公開日	平成20年3月20日 (2008.3.20)
審査請求日	平成22年9月2日 (2010.9.2)
(31) 優先権主張番号	06120674.4
(32) 優先日	平成18年9月14日 (2006.9.14)
(33) 優先権主張国	歐州特許庁 (EP)

(73) 特許権者	508120547 チバ ホールディング インコーポレーテ ッド C I B A H O L D I N G I N C. スイス国, 4057 バーゼル, クリベツ クシュトラーセ 141
(74) 代理人	100078662 弁理士 津国 肇
(74) 代理人	100113653 弁理士 東田 幸四郎
(74) 代理人	100116919 弁理士 齋藤 房幸
(72) 発明者	ヴェンデボルン, フレデリック フランス国, エフ-68220 ランシュ バハール-オー、グラン・リュ 59 最終頁に続く

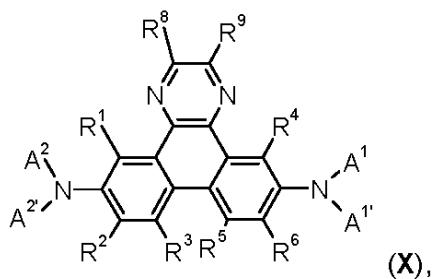
(54) 【発明の名称】複素環式架橋ビフェニルおよびそれらのOLEDにおける使用

(57) 【特許請求の範囲】

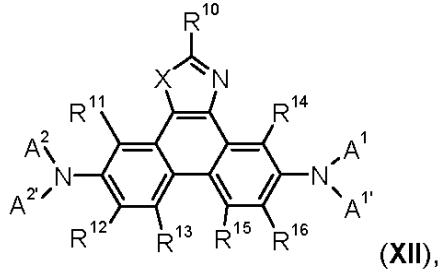
【請求項 1】

下記式:

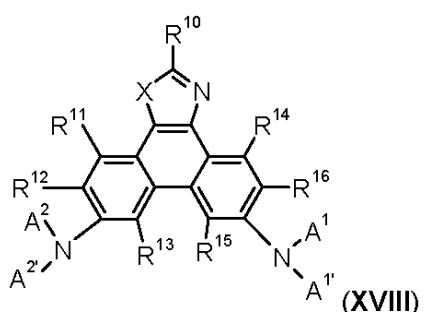
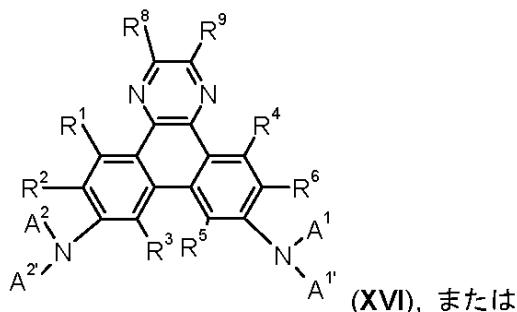
【化101】



10



20



30

〔式中、

R¹ および R⁴ は、互いに独立して、水素、ハロゲン、C₁ ~ C₁₈ アルキル、E で置換されているおよび／もしくはD で中断されているC₁ ~ C₁₈ アルキル、C₁ ~ C₁₈ ペルフルオロアルキル、C₂ ~ C₁₈ アルケニル、C₂ ~ C₁₈ アルキニル、C₁ ~ C₁₈ アルコキシ、E で置換されているおよび／もしくはD で中断されているC₁ ~ C₁₈ アルコキシ、CN または -CO -R² ~ R⁸ であり、

R²、R³、R⁵ および R⁶ は、互いに独立して、H、ハロゲン、C₁ ~ C₁₈ アルキル、E で置換されているおよび／もしくはD で中断されているC₁ ~ C₁₈ アルキル、C₁ ~ C₁₈ ペルフルオロアルキル、C₆ ~ C₂₄ アリール、G で置換されているC₆ ~ C₂₄ アリール、C₂ ~ C₂₀ ヘテロアリール、G で置換されているC₂ ~ C₂₀ ヘテロアリール、C₂ ~ C₁₈ アルケニル、C₂ ~ C₁₈ アルキニル、C₁ ~ C₁₈ アルコキシ、E で置換されているおよび／もしくはD で中断されているC₁ ~ C₁₈ アルコキシ、C₇ ~ C₂₅ アラルキル、CN または -CO -R² ~ R⁸ であり、

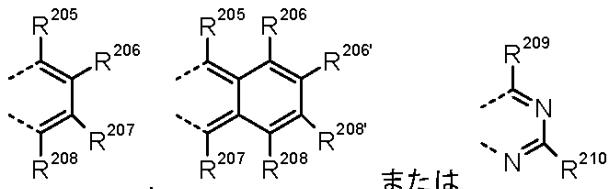
R⁸ および R⁹ は、互いに独立して、H、C₁ ~ C₁₈ アルキル、E で置換されているおよび／もしくはD で中断されているC₁ ~ C₁₈ アルキル、C₁ ~ C₁₈ ペルフルオロ

50

アルキル、C₆～C₂₄アリール、Gで置換されているC₆～C₂₄アリール、C₂～C₂₀ヘテロアリール、Gで置換されているC₂～C₂₀ヘテロアリール、C₂～C₁₈アルケニル、C₂～C₁₈アルキニル、C₁～C₁₈アルコキシ、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルコキシ、C₇～C₂₅アラルキル、CNまたは-CO-R²⁸であるか、あるいは

R⁸およびR⁹は、一緒になって、下記：

【化102】



10

の基を形成し、ここで、R^{206'}、R^{208'}、R²⁰⁵、R²⁰⁶、R²⁰⁷、R²⁰⁸、R²⁰⁹およびR²¹⁰は、互いに独立して、H、C₁～C₁₈アルキル、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈アルコキシ、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルコキシ、C₁～C₁₈ペルフルオロアルキル、C₆～C₂₄アリール、Gで置換されているC₆～C₂₄アリール、C₂～C₂₀ヘテロアリール、C₂～C₁₈アルケニル、C₂～C₁₈アルキニル、C₇～C₂₅アラルキル、CNまたは-CO-R²⁸であり、

R¹⁰は、H、C₁～C₁₈アルキル、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈ペルフルオロアルキル、C₆～C₂₄アリール、Gで置換されているC₆～C₂₄アリール、C₂～C₂₀ヘテロアリール、Gで置換されているC₂～C₂₀ヘテロアリール、C₂～C₁₈アルケニル、C₂～C₁₈アルキニル、C₁～C₁₈アルコキシ、Eで置換されているC₁～C₁₈アルコキシ、C₇～C₂₅アラルキルまたは-CO-R²⁸であり、

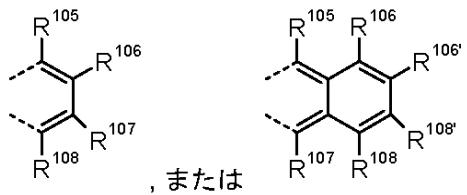
R¹¹およびR¹⁴は、互いに独立して、水素、ハロゲン、C₁～C₁₈アルキル、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈ペルフルオロアルキル、C₂～C₁₈アルケニル、C₂～C₁₈アルキニル、C₁～C₁₈アルコキシ、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルコキシ、CNまたは-CO-R²⁸であり、

R¹²、R¹³、R¹⁵およびR¹⁶は、互いに独立して、H、ハロゲン、C₁～C₁₈アルキル、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈ペルフルオロアルキル、C₆～C₂₄アリール、Gで置換されているC₆～C₂₄アリール、C₂～C₂₀ヘテロアリール、Gで置換されているC₂～C₂₀ヘテロアリール、C₂～C₁₈アルケニル、C₂～C₁₈アルキニル、C₁～C₁₈アルコキシ、Eで置換されているC₁～C₁₈アルコキシ、C₇～C₂₅アラルキル、CNまたは-CO-R²⁸であり、

Xは、O、またはNR¹⁷であり、ここでR¹⁷は、H；C₆～C₁₈アリール；C₂～C₂₀ヘテロアリール；C₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈ペルフルオロアルキルもしくはC₁～C₁₈アルコキシで置換されている、C₆～C₁₈アリールもしくはC₂～C₂₀ヘテロアリール；C₁～C₁₈アルキル；または-O-で中断されているC₁～C₁₈アルキルであるか、あるいは

互いに隣接している2つの置換基R¹とR²、R⁴とR⁶、R¹¹とR¹²および／またはR¹⁴とR¹⁶、R²とR³、R⁵とR⁶、R¹²とR¹³および／またはR¹⁵とR¹⁶は、一緒になって、下記：

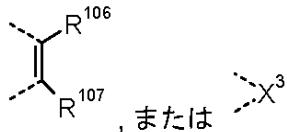
【化103】



の基を形成するか、あるいは

互いに隣接している2つの置換基R¹~⁵とR¹~³、および/またはR⁵とR³は、一緒 10 になって、下記：

【化104】



の基を形成し、ここで、X³は、O、S、C(R¹~⁹)(R¹~⁰)またはNR¹~⁷で 20 あり、R¹~⁷は、上記で定義されたとおりであり、R¹~⁰~⁵、R¹~⁰~⁶、R¹~⁰~⁷、R¹~⁰~⁸、R¹~⁰~^{6'}およびR¹~⁰~^{8'}は、互いに独立して、H、C₁~C₁~₈アルキル、Eで置換されているおよび/もしくはDで中断されているC₁~C₁~₈アルキル、C₁~C₁~₈アルコキシ、またはEで置換されているおよび/もしくはDで中断されているC₁~C₁~₈アルコキシであり、

R¹~¹~⁹およびR¹~²~⁰は、互いに独立して、C₁~C₁~₈アルキル、Eで置換されているおよび/もしくはDで中断されているC₁~C₁~₈アルキル、C₆~C₂~₄アリール、Gで置換されているC₆~C₂~₄アリール、C₂~C₂~₀ヘテロアリール、Gで置換されているC₂~C₂~₀ヘテロアリール、C₂~C₁~₈アルケニル、C₂~C₁~₈アルキニル、C₁~C₁~₈アルコキシ、Eで置換されているおよび/もしくはDで中断されているC₁~C₁~₈アルコキシ、またはC₇~C₂~₅アラルキルであるか、あるいは 30

R¹~¹~⁹およびR¹~²~⁰は、一緒になって、式：=C R¹~²~¹ R¹~²~²の基を形成し、ここで、

R¹~²~¹およびR¹~²~²は、互いに独立して、H、C₁~C₁~₈アルキル、Eで置換されているおよび/もしくはDで中断されているC₁~C₁~₈アルキル、C₆~C₂~₄アリール、Gで置換されているC₆~C₂~₄アリール、C₂~C₂~₀ヘテロアリール、またはGで置換されているC₂~C₂~₀ヘテロアリールであるか、あるいは

R¹~¹~⁹およびR¹~²~⁰は、一緒になって、C₁~C₁~₈アルキル、Eで置換されているおよび/もしくはDで中断されているC₁~C₁~₈アルキル、C₆~C₂~₄アリール、Gで置換されているC₆~C₂~₄アリール、C₂~C₂~₀ヘテロアリール、Gで置換されているC₂~C₂~₀ヘテロアリール、C₂~C₁~₈アルケニル、C₂~C₁~₈アルキニル、C₁~C₁~₈アルコキシ、Eで置換されているおよび/もしくはDで中断されているC₁~C₁~₈アルコキシ、C₇~C₂~₅アラルキルまたは-C(=O)-R¹~²~⁷で置換されていることができる5員または6員環を形成し、そして 40

R¹~²~⁷は、H；C₆~C₁~₈アリール；C₁~C₁~₈アルキルもしくはC₁~C₁~₈アルコキシで置換されているC₆~C₁~₈アリール；C₁~C₁~₈アルキル；または-O-で中断されているC₁~C₁~₈アルキルであり、

Dは、-CO-；-COO-；-S-；-SO-；-SO₂-；-O-；-NR²~⁵-；-SiR³~⁰R³~¹-；-POR³~²-；-CR²~³=CR²~⁴-；または-C-C-であり、

Eは、-OR²~⁹；-SR²~⁹；-NR²~⁵R²~⁶；-COR²~⁸；-COOR²~⁷；

- CONR² R² ; - CN ; またはハロゲンであり、

G は、E、C₁ ~ C₁₈ アルキル、D で中断されている C₁ ~ C₁₈ アルキル、C₁ ~ C₁₈ ペルフルオロアルキル、C₁ ~ C₁₈ アルコキシ、または E で置換されているおよび / もしくは D で中断されている C₁ ~ C₁₈ アルコキシであり、ここで、

R²~³、R²~⁴、R²~⁵ および R²~⁶ は、互いに独立して、H ; C₆ ~ C₁₈ アリール ; C₁ ~ C₁₈ アルキルもしくは C₁ ~ C₁₈ アルコキシで置換されている C₆ ~ C₁₈ アリール ; C₁ ~ C₁₈ アルキル ; または - O - で中断されている C₁ ~ C₁₈ アルキルであるか；あるいは

R²~⁵ および R²~⁶ は、一緒にになって 5 員または 6 員環を形成し、R²~⁷ および R²~⁸ は、互いに独立して、H ; C₆ ~ C₁₈ アリール ; C₁ ~ C₁₈ アルキルもしくは C₁ ~ C₁₈ アルコキシで置換されている C₆ ~ C₁₈ アリール ; C₁ ~ C₁₈ アルキル ; または - O - で中断されている C₁ ~ C₁₈ アルキルであり、

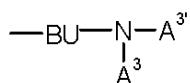
R²~⁹ は、H ; C₆ ~ C₁₈ アリール ; C₁ ~ C₁₈ アルキルもしくは C₁ ~ C₁₈ アルコキシで置換されている C₆ ~ C₁₈ アリール ; C₁ ~ C₁₈ アルキル ; または - O - で中断されている C₁ ~ C₁₈ アルキルであり、

R³~⁰ および R³~¹ は、互いに独立して、C₁ ~ C₁₈ アルキル、C₆ ~ C₁₈ アリール、または C₁ ~ C₁₈ アルキルで置換されている C₆ ~ C₁₈ アリールであり、

R³~² は、C₁ ~ C₁₈ アルキル、C₆ ~ C₁₈ アリール、または C₁ ~ C₁₈ アルキルで置換されている C₆ ~ C₁₈ アリールであり、そして

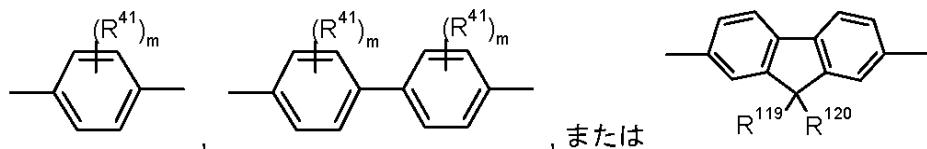
A¹、A²、A¹~¹ および A²~¹ は、互いに独立して、置換されていることができる、C₆ ~ C₂₄ アリール基、C₂ ~ C₃₀ ヘテロアリール基であるか、または下記：

【化 9 8】



の基であり、ここで BU は、下記：

【化 9 9】



から選ばれる架橋単位であり、A³ および A³~¹ は、互いに独立して、置換されていることができる、C₆ ~ C₂₄ アリール基または C₂ ~ C₃₀ ヘテロアリール基であるか、あるいは A¹ と A¹~¹ または A² と A²~¹ または A³ と A³~¹ は、それらが結合している窒素原子と一緒にになって、芳香族複素環または環系を形成し、

R⁴~¹ は、それぞれの場合に同一または異なることができる、C₁、F、CN、N R⁴~⁵ R⁴~⁵~¹、C₁ ~ C₂₅ アルキル基、C₄ ~ C₁₈ シクロアルキル基、C₁ ~ C₂₅ アルコキシ基（ここで、互いに近接していない 1 個以上の炭素原子を - NR⁴~⁵ - 、 - O - 、 - S - 、 - C (= O) - O - もしくは - O - C (= O) - O - に代えることができる、および / または 1 個以上の水素原子を F に代えることができる）、C₆ ~ C₂₄ アリール基または C₆ ~ C₂₄ アリールオキシ基（ここで、1 個以上の炭素原子を O、S もしくは N に代えることができるおよび / または 1 つ以上の非芳香族基 R⁴~¹ で置換することができる）であるか、あるいは

2 つ以上の基 R⁴~¹ は、環系を形成し；

R⁴~⁵ および R⁴~⁵~¹ は、互いに独立して、H、C₁ ~ C₂₅ アルキル基、C₄ ~ C₁₈ シクロアルキル基（ここで、互いに近接していない 1 個以上の炭素原子を - NR⁴~⁵~¹ - 、 - O - 、 - S - 、 - C (= O) - O - もしくは - O - C (= O) - O - に代えること

10

20

30

40

50

ができる、および／または1個以上の水素原子をFに代えることができる)、C₆～C₂₄アリール基またはC₆～C₂₄アリールオキシ基(ここで、1個以上の炭素原子をO、SもしくはNに代えることができるおよび／または1つ以上の非芳香族基R^{4～1}で置換することができる)であり；

R^{4～5}”は、H、C₁～C₂₅アルキル基またはC₄～C₁₈シクロアルキル基であり

、mは、それぞれの場合に同一または異なっていることができ、0、1、2または3である】

で示される化合物を含む、エレクトロルミネセンス(EL)デバイス。

【請求項2】

10

R¹およびR⁴が、水素であり、

R²、R³、R⁵およびR⁶が、互いに独立して、H、C₁～C₁₈アルキル、Dで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈ペルフルオロアルキル、C₁～C₁₈アルコキシ、Dで中断されているC₁～C₁₈アルコキシ、C₇～C₂₅アラルキルまたは基-X²-R^{1～8}であり、ここでX²はスペーサーであり、X²が、C₆～C₁₂アリールまたはC₆～C₁₂ヘテロアリールであり、これは、C₁～C₁₈アルキル、Dで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈ペルフルオロアルキル、C₁～C₁₈アルコキシまたはEで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルコキシにより1回以上置換されていることができ、R^{1～8}は、H、C₁～C₁₈アルキル、Dで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈ペルフルオロアルキル、C₁～C₁₈アルコキシ、Dで中断されているC₁～C₁₈アルコキシまたは-NR^{2～5}R^{2～6}であり

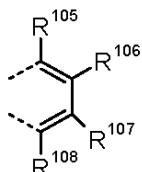
20

R⁸およびR⁹が、互いに独立して、H、C₁～C₁₈アルキル、Dで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈ペルフルオロアルキル、C₁～C₁₈アルコキシ、Dで中断されているC₁～C₁₈アルコキシ、または基-X²-R^{1～8}であるか(ここで、X²およびR^{1～8}は上記で定義されたとおりである)、あるいは

互いに隣接している2つの置換基R²とR³、および／またはR⁵とR⁶が、一緒になって、下記：

【化105】

30

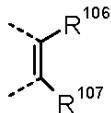


の基を形成するか、あるいは

互いに隣接している2つの置換基R⁵およびR³が、一緒になって、下記：

【化106】

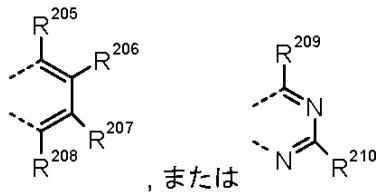
40



の基を形成し、ここで、R^{1～5}、R^{1～6}、R^{1～7}およびR^{1～8}が、互いに独立して、HまたはC₁～C₈アルキルであるか、あるいは

R⁸およびR⁹が、一緒になって、下記：

【化107】



の基を形成し、ここで、R²⁰⁵、R²⁰⁶、R²⁰⁷、R²⁰⁸、R²⁰⁹およびR²¹⁰が、互いに独立して、H、C₁～C₁₈アルキル、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈アルコキシ、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルコキシ、またはC₁～C₁₈ペルフルオロアルキルであり、

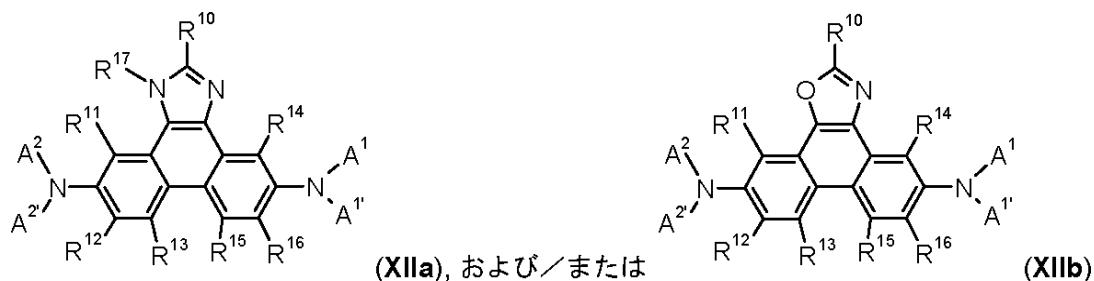
R¹⁰が、H、Gで置換されていることができるC₆～C₁₈アリール、Gで置換されていることができるC₂～C₁₈ヘテロアリール、C₁～C₁₈アルキル、Dで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈ペルフルオロアルキル、C₁～C₁₈アルコキシ、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルコキシまたは基-X²-R¹⁸であり（ここで、X²およびR¹⁸は上記で定義されたとおりである）、

Dが、-CO-；-COO-；-S-；-SO-；-SO₂-；-O-；-NR²⁵-；-CR²³=CR²⁴-；または-C=C-であり、ここでR²³、R²⁴、R²⁵およびR²⁶が、互いに独立して、H；C₆～C₁₈アリール；C₁～C₈アルキルもしくはC₁～C₈アルコキシで置換されているC₆～C₁₈アリール；C₁～C₈アルキル；または-O-で中断されているC₁～C₈アルキルであるか、あるいはR²⁵およびR²⁶が、一緒になって、5員または6員環を形成する式Xの化合物を含む、請求項1記載のELデバイス。

【請求項3】

下記式：

【化108】



〔式中、R¹⁰は、H、Gで置換されていることができるC₆～C₁₈アリール、Gで置換されていることができるC₂～C₁₈ヘテロアリール、C₁～C₁₈アルキル、Dで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈ペルフルオロアルキル、C₁～C₁₈アルコキシ、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルコキシまたは基-X²-R¹⁸であり、ここでX²はスペーサーであり、X²が、C₆～C₁₂アリールまたはC₆～C₁₂ヘテロアリールであり、これは、C₁～C₁₈アルキル、Dで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈ペルフルオロアルキル、C₁～C₁₈アルコキシまたはEで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルコキシにより1回以上置換されていることができ、R¹⁸は、H、C₁～C₁₈アルキル、Dで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈ペルフルオロアルキル、C₁～C₁₈アルコキシ、Dで中断されているC₁～C₁₈アルコキシまたは-NR²⁵-R²⁶-であり、

10

20

30

40

50

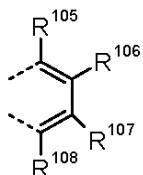
R¹¹ および R¹⁴ は、水素であり、

R¹²、R¹³、R¹⁵ および R¹⁶ は、水素であり、

R¹⁷ は、C₆ ~ C₁₈ アリール；C₁ ~ C₁₈ アルキル、C₁ ~ C₁₈ ペルフルオロアルキルもしくはC₁ ~ C₁₈ アルコキシで置換されているC₆ ~ C₁₈ アリール；C₁ ~ C₁₈ アルキル；または-O-で中断されているC₁ ~ C₁₈ アルキルであるか、あるいは

互いに隣接している2つの置換基 R¹⁵ と R¹³、R¹² と R¹³ および / または R¹⁵ と R¹⁶ は、一緒になって、下記：

【化109】

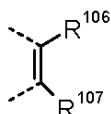


10

の基を形成するか、あるいは

互いに隣接している2つの置換基 R¹⁵ および R¹³ は、一緒になって、下記：

【化110】



20

の基を形成し、ここで、R¹⁰⁵、R¹⁰⁶、R¹⁰⁷ および R¹⁰⁸ は、互いに独立して、H または C₁ ~ C₈ アルキルであり、

D は、-S-；-O-；または -NR²⁵- であり、

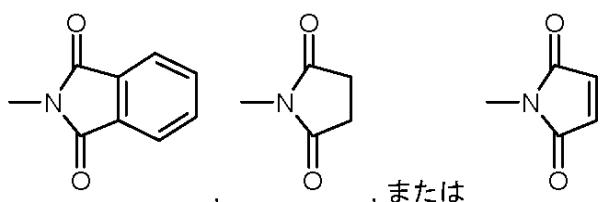
E は、-OR²⁹；-SR²⁹；-NR²⁵R²⁶；-CN；または F であり、

G は、E、C₁ ~ C₁₈ アルキル、D で中断されているC₁ ~ C₁₈ アルキル、C₁ ~ C₁₈ ペルフルオロアルキル、C₁ ~ C₁₈ アルコキシまたは E で置換されているおよび / もしくは D で中断されているC₁ ~ C₁₈ アルコキシであり、ここで、

R²⁵ および R²⁶ は、互いに独立して、H；C₆ ~ C₁₈ アリール；C₁ ~ C₈ アルキルもしくはC₁ ~ C₈ アルコキシで置換されているC₆ ~ C₁₈ アリール；C₁ ~ C₈ アルキル；または-O-で中断されているC₁ ~ C₈ アルキルであるか、あるいは

R²⁵ および R²⁶ は、一緒になって、5員または6員環、下記：

【化111】



40

を形成し、そして

R²⁹ は、C₆ ~ C₁₈ アリール；C₁ ~ C₁₈ アルキルもしくはC₁ ~ C₁₈ アルコキシで置換されているC₆ ~ C₁₈ アリール；C₁ ~ C₁₈ アルキル；または-O-で中断されているC₁ ~ C₁₈ アルキルである】

を有する化合物を含む、請求項1記載のELデバイス。

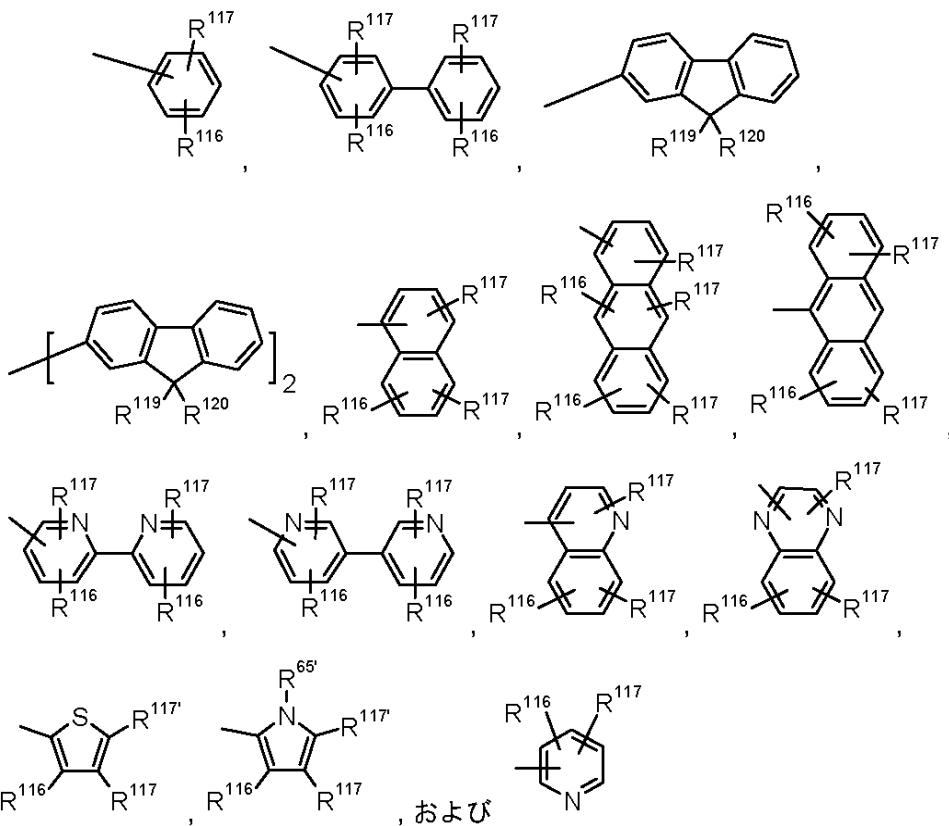
【請求項4】

A¹、A²、A¹' および A²' が、互いに独立して、フェニル、ナフチル、アントリ

50

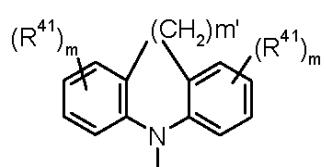
ル、ビフェニリル、2-フルオレニル、フェナントリルまたはペリレニルであり、これは置換されていることができるか、下記：

【化 1 1 2 】



であるか、あるいは A^1 および $A^{1'}$ 、または A^2 および $A^{2'}$ が、それらが結合している窒素原子と一緒にになって、下記：

【化 1 1 3 】



を形成し、 m' が、0、1 または 2 であり；

m が、それぞれの場合に同一または異なっていることができ、0、1、2 または 3 であり；

R^{4-1} が、それぞれの場合に同一または異なっていることができ、C1、F、CN、N(R^{4-5})₂、C₁~C₂₋₅アルキル基、C₄~C₁₋₈シクロアルキル基、C₁~C₂₋₅アルコキシ基(ここで、互いに近接していない1個以上の炭素原子を-NR⁴⁻⁵-、-O-、-S-もしくは-C(=O)-O-に代えることができる、および/または1個以上の水素原子をFに代えることができる)、C₆~C₂₋₄アリール基またはC₆~C₂₋₄アリールオキシ基(ここで、1個以上の炭素原子をO、SもしくはNに代えることができるおよび/または1つ以上の非芳香族基R⁴⁻¹で置換することができる)であるか、あるいは

2つ以上の基 R^{4-1} が、環系を形成し：

R^{4-5} が、H、 $C_1 \sim C_{2-5}$ アルキル基、 $C_4 \sim C_{1-8}$ シクロアルキル基、（ここで、互いに近接していない1個以上の炭素原子を $-NR^{4-5}-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(=O)-O-$ もしくは $-O-C(=O)-O-$ に代えることができる、および/または1個

以上の水素原子をFに代えることができる)、C₆～C₂₄アリール基、またはC₆～C₂₄アリールオキシ基(1個以上の炭素原子をO、SもしくはNに代えることができるおよび/または1つ以上の非芳香族基R⁴⁻¹で置換することができる)であり;

R⁴⁻⁵”が、H、C₁～C₂₅アルキル基またはC₄～C₁₈シクロアルキル基であり

、R¹⁻¹⁶、R¹⁻¹⁷およびR^{1-17'}が、互いに独立して、H、ハロゲン、-CN、C₁～C₁₈アルキル、Eで置換されているおよび/もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₆～C₂₄アリール、Gで置換されているC₆～C₂₄アリール、C₂～C₂₀ヘテロアリール、Gで置換されているC₂～C₂₀ヘテロアリール、C₂～C₁₈アルケニル、C₂～C₁₈アルキニル、C₁～C₁₈アルコキシ、Eで置換されているおよび/もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルコキシ、C₇～C₂₅アラルキル、-C(=O)-R¹⁻²⁷、-C(=O)OR¹⁻²⁷、または-C(=O)NR¹⁻²⁷R¹⁻²⁶であるか、あるいは

互いに隣接している置換基R¹⁻¹⁶、R¹⁻¹⁷およびR^{1-17'}が、環を形成することができ、

R¹⁻¹⁹およびR¹⁻²⁰が、互いに独立して、C₁～C₁₈アルキル、Eで置換されているおよび/もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₆～C₂₄アリール、Gで置換されているC₆～C₂₄アリール、C₂～C₂₀ヘテロアリール、Gで置換されているC₂～C₂₀ヘテロアリール、C₂～C₁₈アルケニル、C₂～C₁₈アルキニル、C₁～C₁₈アルコキシ、Eで置換されているおよび/もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルコキシ、またはC₇～C₂₅アラルキルであるか、あるいは

R¹⁻¹⁹およびR¹⁻²⁰が、一緒になって、式:=CR¹⁻²¹R¹⁻²²の基を形成し、ここで、

R¹⁻²¹およびR¹⁻²²が、互いに独立して、H、C₁～C₁₈アルキル、Eで置換されているおよび/もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₆～C₂₄アリール、Gで置換されているC₆～C₂₄アリール、C₂～C₂₀ヘテロアリール、またはGで置換されているC₂～C₂₀ヘテロアリールであるか、あるいは

R¹⁻¹⁹およびR¹⁻²⁰が、一緒になって、C₁～C₁₈アルキル、Eで置換されているおよび/もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₆～C₂₄アリール、Gで置換されているC₆～C₂₄アリール、C₂～C₂₀ヘテロアリール、Gで置換されているC₂～C₂₀ヘテロアリール、C₂～C₁₈アルケニル、C₂～C₁₈アルキニル、C₁～C₁₈アルコキシ、Eで置換されているおよび/もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルコキシ、C₇～C₂₅アラルキルまたは-C(=O)-R¹⁻²⁷で置換されていることができる5員または6員環を形成し、

R¹⁻²⁶およびR¹⁻²⁷が、互いに独立して、H；C₆～C₁₈アリール；C₁～C₁₈アルキルもしくはC₁～C₁₈アルコキシで置換されているC₆～C₁₈アリール；C₁～C₁₈アルキル；または-O-で中断されているC₁～C₁₈アルキルであり、

Dが、-CO-、-COO-、-S-、-SO-、-SO₂-、-O-、-NR⁶⁻⁵-、-SiR⁷⁻⁰R⁷⁻¹-、-POR⁷⁻²-、-CR⁶⁻³=CR⁶⁻⁴-、または-C-C-であり、

Eが、-OR⁶⁻⁹、-SR⁶⁻⁹、-NR⁶⁻⁵R⁶⁻⁶、-COR⁶⁻⁸、-COOR⁶⁻⁷、-CONR⁶⁻⁵R⁶⁻⁶、-CN、またはハロゲンであり、

Gが、EまたはC₁～C₁₈アルキルであり、

R⁶⁻³、R⁶⁻⁴、R⁶⁻⁵、R^{6-5'}およびR⁶⁻⁶が、互いに独立して、H；C₆～C₁₈アリール；C₁～C₁₈アルキル、もしくはC₁～C₁₈アルコキシで置換されているC₆～C₁₈アリール；C₁～C₁₈アルキル；または-O-で中断されているC₁～C₁₈アルキルであるか、あるいは

R⁶⁻⁵およびR⁶⁻⁶が、一緒になって、5員または6員環を形成し、

R⁶⁻⁷およびR⁶⁻⁸が、互いに独立して、H；C₆～C₁₈アリール；C₁～C₁₈アルキルもしくはC₁～C₁₈アルコキシで置換されているC₆～C₁₈アリール；C₁～

10

20

30

40

50

C_{1-8} アルキル；または -O- で中断されている $C_1 \sim C_{1-8}$ アルキルであり、
 R^{6-9} が、H； $C_6 \sim C_{1-8}$ アリール； $C_1 \sim C_{1-8}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{1-8}$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{1-8}$ アリール； $C_1 \sim C_{1-8}$ アルキル；または -O- で中断されている $C_1 \sim C_{1-8}$ アルキルであり、

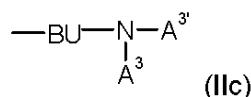
R^{7-0} および R^{7-1} が、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{1-8}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{1-8}$ アリール、または $C_1 \sim C_{1-8}$ アルキルで置換されている $C_6 \sim C_{1-8}$ アリールであり、そして

R^{7-2} が、 $C_1 \sim C_{1-8}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{1-8}$ アリール、または $C_1 \sim C_{1-8}$ アルキルで置換されている $C_6 \sim C_{1-8}$ アリールであるか、あるいは

A^1 、 A^2 、 A^{1-} および A^{2-} が、互いに独立して、下記：

【化114】

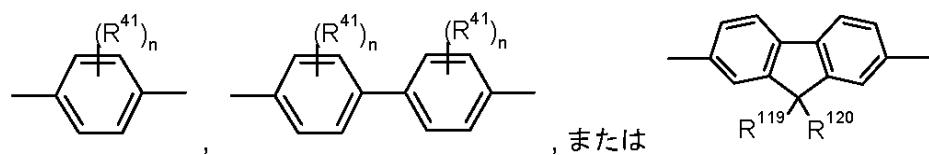
10



の基であり、ここで BU が、下記：

【化115】

20

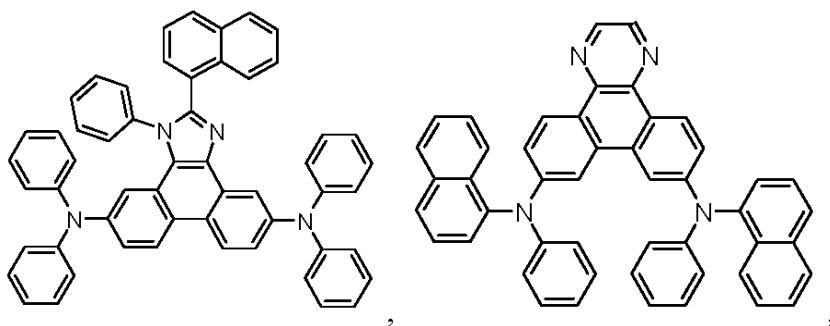


であり、ここで R^{4-1} が請求項1で定義されたとおりであり、nは、0、1又は2である請求項1～3のいずれか1項記載のELデバイス。

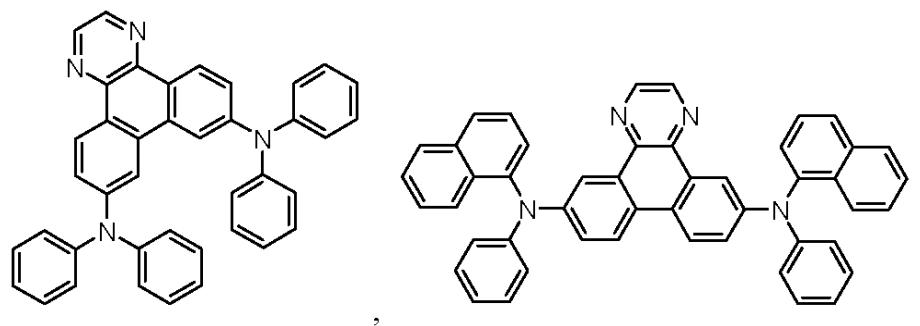
【請求項5】

下記：

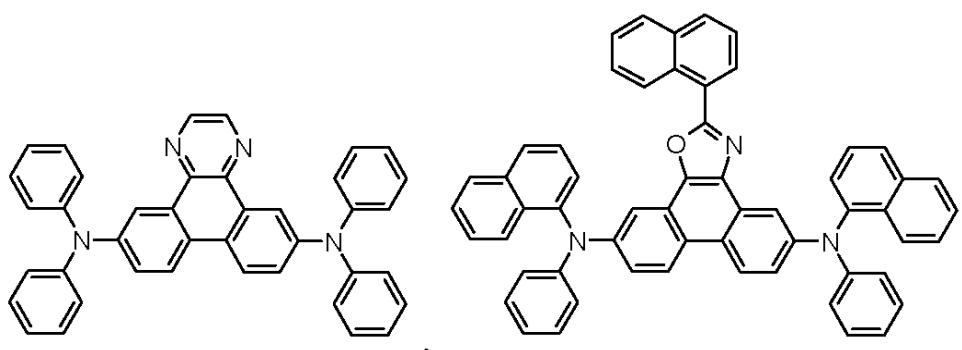
【化 116】



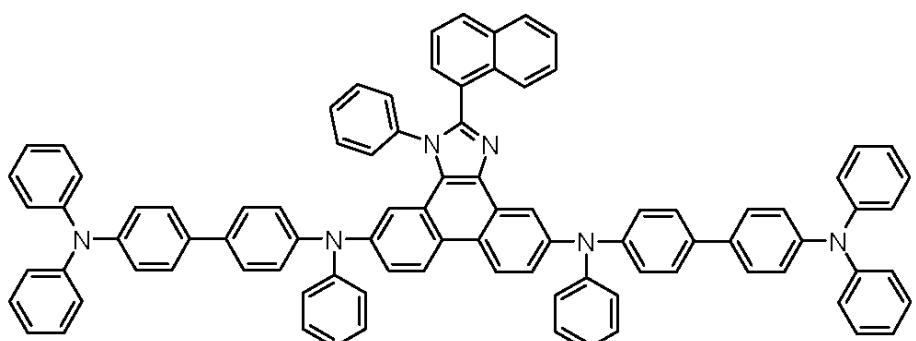
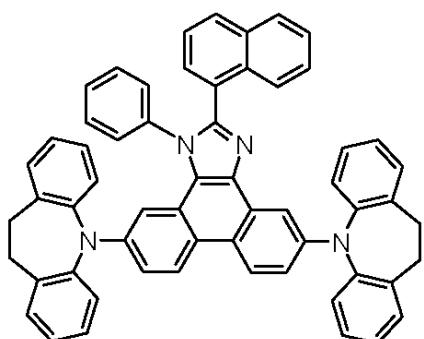
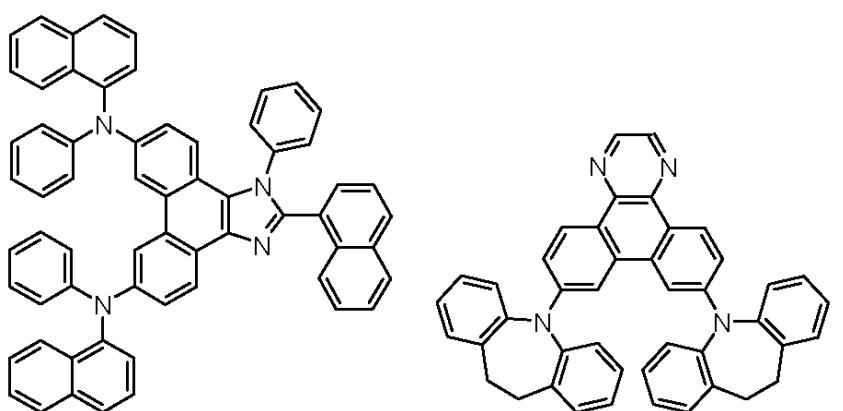
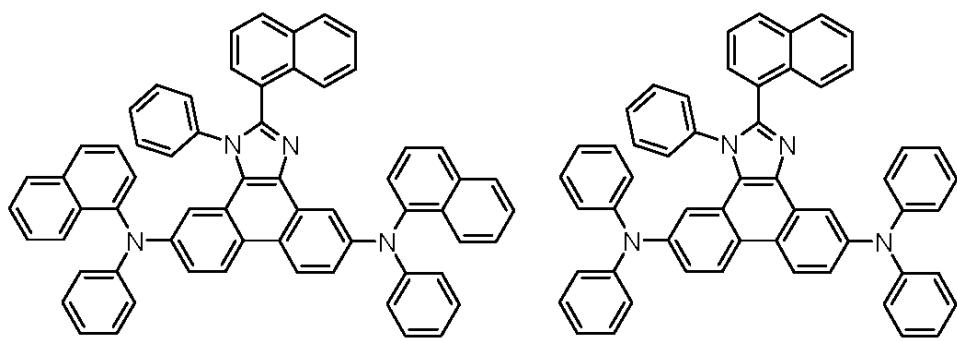
10

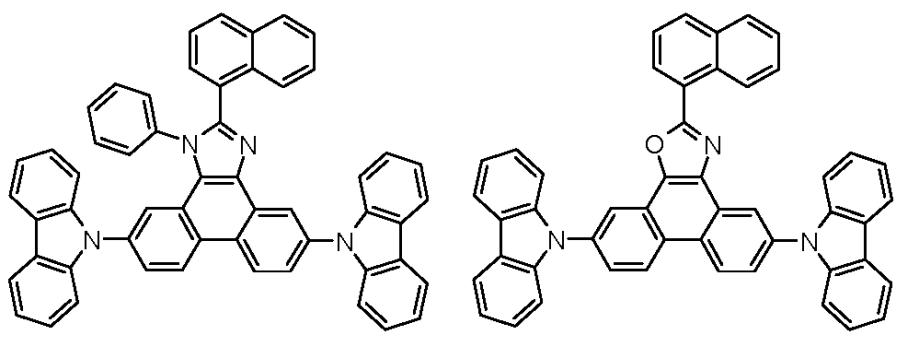


20

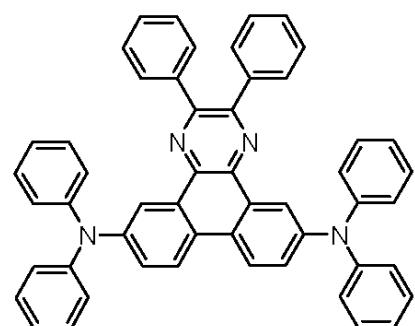


30

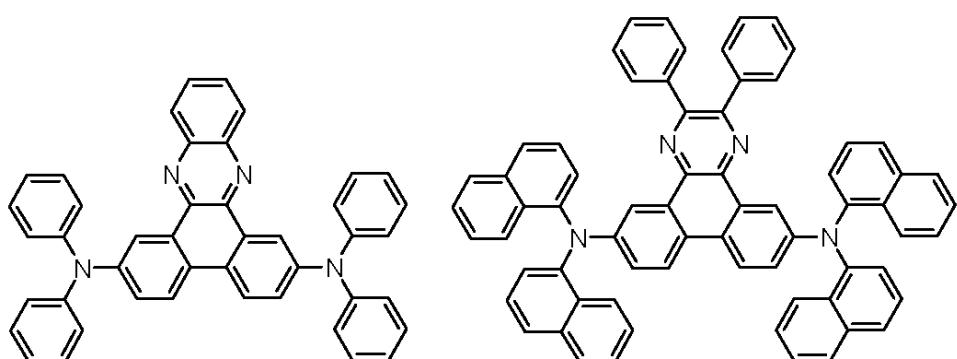




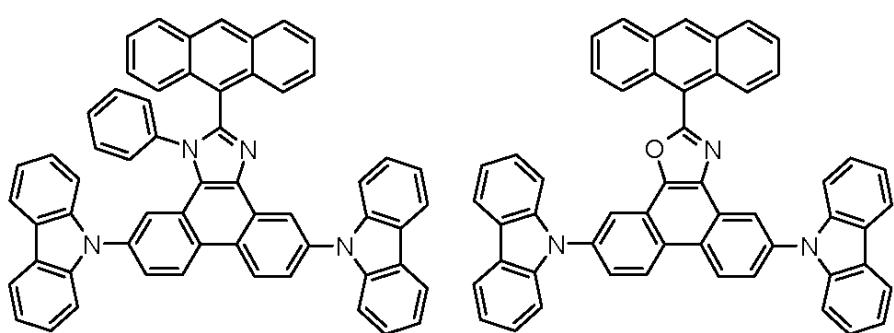
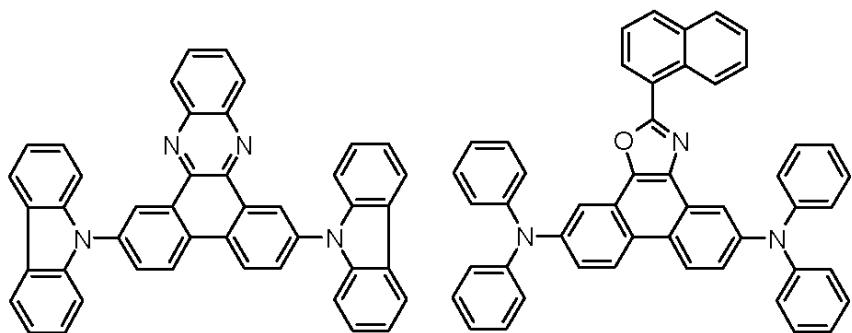
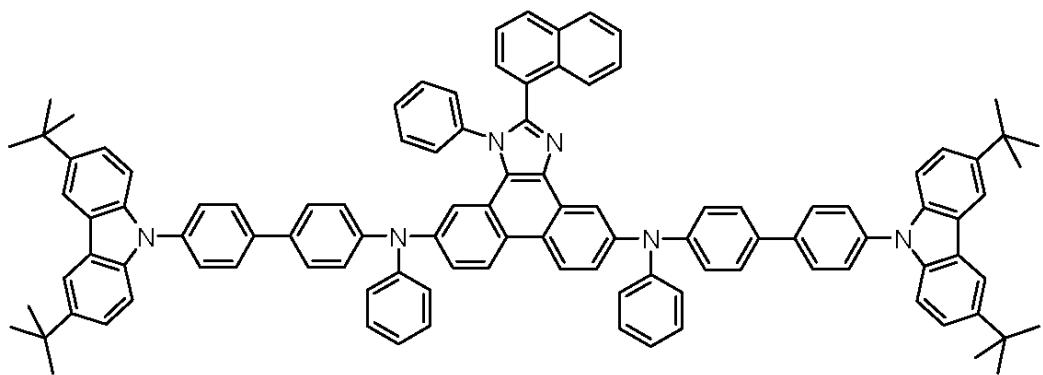
10

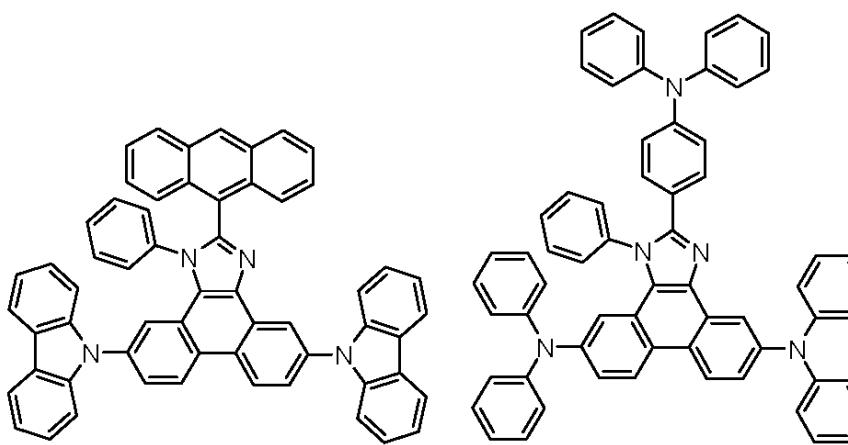


20

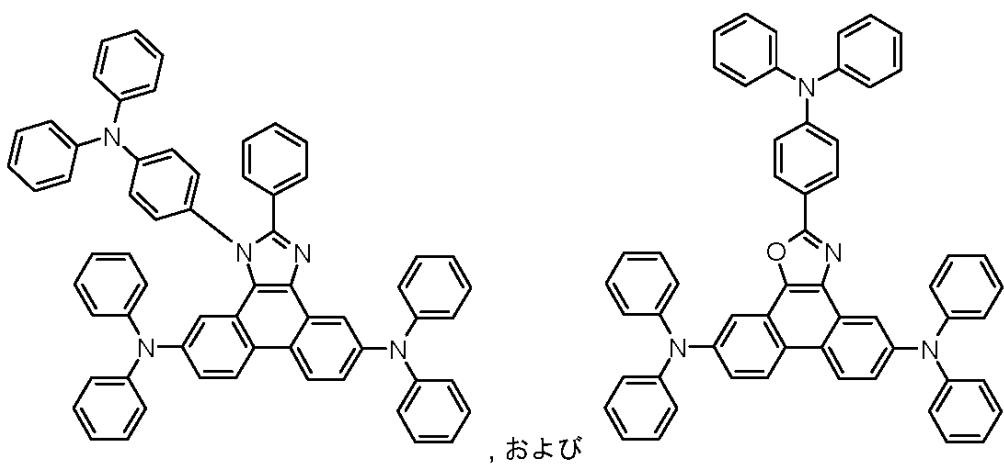


30





10



20

から選択される化合物を含む、ELデバイス。

【請求項 6】

陰極、陽極、その間に、ホスト材料を含有する発光層、およびリン光性発光材料を含み、ホスト材料が式X、X_{II}I、X_{VI}I、およびX_{VII}Iの化合物のうち少なくとも1つである、請求項1～4のいずれか1項記載のエレクトロルミネセンスデバイス。

30

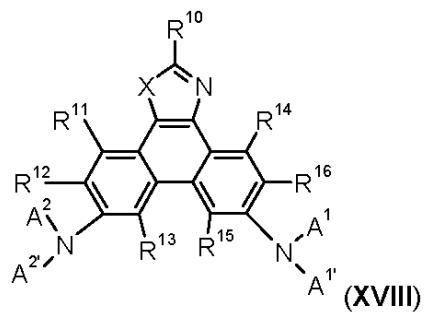
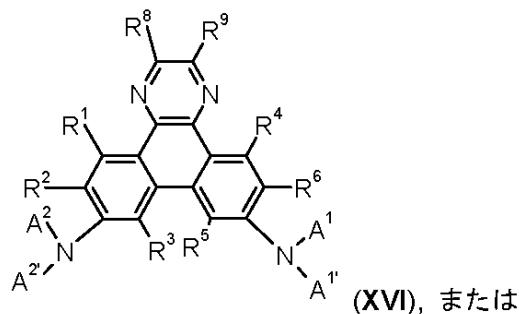
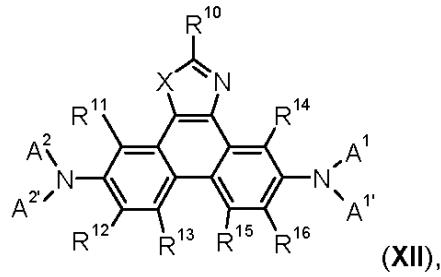
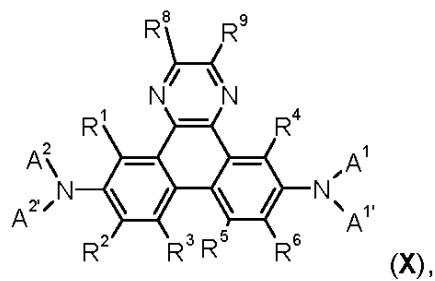
【請求項 7】

陰極、陽極、その間に、ホスト材料を含有する発光層、およびリン光性発光材料を含み、ホスト材料が請求項5で定義された化合物のうち少なくとも1つである、請求項5記載のエレクトロルミネセンスデバイス。

【請求項 8】

下記式：

【化117】



〔式中、

R¹ および R⁴ は、互いに独立して、水素、ハロゲン、C₁ ~ C₁₈ アルキル、E で置換されているおよび / もしくは D で中断されている C₁ ~ C₁₈ アルキル、C₁ ~ C₁₈ ペルフルオロアルキル、C₂ ~ C₁₈ アルケニル、C₂ ~ C₁₈ アルキニル、C₁ ~ C₁₈ アルコキシ、E で置換されているおよび / もしくは D で中断されている C₁ ~ C₁₈ アルコキシ、CN または -CO-R²⁸ であり、

R²、R³、R⁵ および R⁶ は、互いに独立して、H、ハロゲン、C₁ ~ C₁₈ アルキル、E で置換されているおよび / もしくは D で中断されている C₁ ~ C₁₈ アルキル、C₁ ~ C₁₈ ペルフルオロアルキル、C₆ ~ C₂₄ アリール、G で置換されている C₆ ~ C₂₄ アリール、C₂ ~ C₂₀ ヘテロアリール、G で置換されている C₂ ~ C₂₀ ヘテロアリール、C₂ ~ C₁₈ アルケニル、C₂ ~ C₁₈ アルキニル、C₁ ~ C₁₈ アルコキシ、E で置換されているおよび / もしくは D で中断されている C₁ ~ C₁₈ アルコキシ、C₇ ~ C₂₅ アラルキル、CN または -CO-R²⁸ であり、

R⁸ および R⁹ は、互いに独立して、H、C₁ ~ C₁₈ アルキル、E で置換されているおよび / もしくは D で中断されている C₁ ~ C₁₈ アルキル、C₁ ~ C₁₈ ペルフルオロ

10

20

30

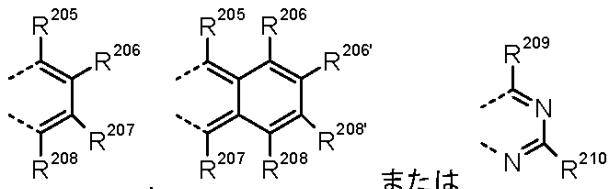
40

50

アルキル、C₆～C₂₄アリール、Gで置換されているC₆～C₂₄アリール、C₂～C₂₀ヘテロアリール、Gで置換されているC₂～C₂₀ヘテロアリール、C₂～C₁₈アルケニル、C₂～C₁₈アルキニル、C₁～C₁₈アルコキシ、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルコキシ、C₇～C₂₅アラルキル、CNまたは-CO-R²⁸であるか、あるいは

R⁸およびR⁹は、一緒にになって、下記：

【化124】



10

の基を形成し、ここで、R^{206'}、R^{208'}、R²⁰⁵、R²⁰⁶、R²⁰⁷、R²⁰⁸、R²⁰⁹およびR²¹⁰は、互いに独立して、H、C₁～C₁₈アルキル、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈アルコキシ、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルコキシ、C₁～C₁₈ペルフルオロアルキル、C₆～C₂₄アリール、Gで置換されているC₆～C₂₄アリール、C₂～C₂₀ヘテロアリール、C₂～C₁₈アルケニル、C₂～C₁₈アルキニル、C₇～C₂₅アラルキル、CNまたは-CO-R²⁸であり、

R¹⁰は、H、C₁～C₁₈アルキル、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈ペルフルオロアルキル、C₆～C₂₄アリール、Gで置換されているC₆～C₂₄アリール、C₂～C₂₀ヘテロアリール、Gで置換されているC₂～C₂₀ヘテロアリール、C₂～C₁₈アルケニル、C₂～C₁₈アルキニル、C₁～C₁₈アルコキシ、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルコキシ、C₇～C₂₅アラルキルまたは-CO-R²⁸であり、

R¹¹およびR¹⁴は、互いに独立して、水素、ハロゲン、C₁～C₁₈アルキル、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈ペルフルオロアルキル、C₂～C₁₈アルケニル、C₂～C₁₈アルキニル、C₁～C₁₈アルコキシ、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルコキシ、CNまたは-CO-R²⁸であり、

R¹²、R¹³、R¹⁵およびR¹⁶は、互いに独立して、H、ハロゲン、C₁～C₁₈アルキル、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈ペルフルオロアルキル、C₆～C₂₄アリール、Gで置換されているC₆～C₂₄アリール、C₂～C₂₀ヘテロアリール、Gで置換されているC₂～C₂₀ヘテロアリール、C₂～C₁₈アルケニル、C₂～C₁₈アルキニル、C₁～C₁₈アルコキシ、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルコキシ、C₇～C₂₅アラルキル、CNまたは-CO-R²⁸であり、

Xは、O、またはNR¹⁷であり、ここでR¹⁷は、H；C₆～C₁₈アリール；C₂～C₂₀ヘテロアリール；C₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈ペルフルオロアルキルもしくはC₁～C₁₈アルコキシで置換されている、C₆～C₁₈アリールもしくはC₂～C₂₀ヘテロアリール；C₁～C₁₈アルキル；または-O-で中断されているC₁～C₁₈アルキルであるか、あるいは

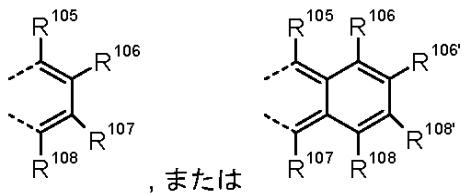
互いに隣接している2つの置換基R¹とR²、R⁴とR⁶、R¹¹とR¹²および／またはR¹⁴とR¹⁶、R²とR³、R⁵とR⁶、R¹²とR¹³および／またはR¹⁵とR¹⁶は、一緒にになって、下記：

20

30

40

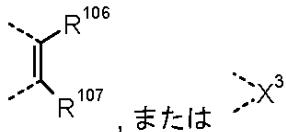
【化125】



の基を形成するか、あるいは

互いに隣接している2つの置換基R¹⁵とR¹³、および/またはR⁵とR³は、一緒
になって、下記：

【化126】



の基を形成し、ここで、X³は、O、S、C(R¹¹⁹)(R¹²⁰)またはNR¹⁷で
あり、R¹⁷は、上記で定義されたとおりであり、R¹⁰⁵、R¹⁰⁶、R¹⁰⁷、R¹⁰⁸、R¹⁰^{6'}およびR¹⁰^{8'}は、互いに独立して、H、C₁～C₁₈アルキル、E
で置換されているおよび/もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈アルコキシ、またはEで置換されているおよび/もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルコキシであり、

R¹¹⁹およびR¹²⁰は、互いに独立して、C₁～C₁₈アルキル、Eで置換されて
いるおよび/もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₆～C₂₄アリール
、Gで置換されているC₆～C₂₄アリール、C₂～C₂₀ヘテロアリール、Gで置換さ
れているC₂～C₂₀ヘテロアリール、C₂～C₁₈アルケニル、C₂～C₁₈アルキニ
ル、C₁～C₁₈アルコキシ、Eで置換されているおよび/もしくはDで中断されている
C₁～C₁₈アルコキシ、またはC₇～C₂₅アラルキルであるか、あるいは

R¹¹⁹およびR¹²⁰は、一緒になって、式：=CR¹²¹R¹²²の基を形成し、
ここで、

R¹²¹およびR¹²²は、互いに独立して、H、C₁～C₁₈アルキル、Eで置換さ
れているおよび/もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₆～C₂₄アリ
ール、Gで置換されているC₆～C₂₄アリール、C₂～C₂₀ヘテロアリール、または
Gで置換されているC₂～C₂₀ヘテロアリールであるか、あるいは

R¹¹⁹およびR¹²⁰は、一緒になって、C₁～C₁₈アルキル、Eで置換されて
いるおよび/もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₆～C₂₄アリール、
Gで置換されているC₆～C₂₄アリール、C₂～C₂₀ヘテロアリール、Gで置換さ
れているC₂～C₂₀ヘテロアリール、C₂～C₁₈アルケニル、C₂～C₁₈アルキニ
ル、C₁～C₁₈アルコキシ、Eで置換されているおよび/もしくはDで中断されているC
1～C₁₈アルコキシ、C₇～C₂₅アラルキルまたは-C(=O)-R¹²⁷で置換さ
れていることができる5員または6員環を形成し、そして

R¹²⁷は、H；C₆～C₁₈アリール；C₁～C₁₈アルキルもしくはC₁～C₁₈
アルコキシで置換されているC₆～C₁₈アリール；C₁～C₁₈アルキル；または-O
-で中断されているC₁～C₁₈アルキルであり、

Dは、-CO-；-COO-；-S-；-SO-；-SO₂-；-O-；-NR²⁵-
；-SiR³₀R³₁-；-POR³₂-；-CR²₃=CR²₄-；または-C-C-
であり、

Eは、-OR²₉；-SR²₉；-NR²₅R²₆；-COR²₈；-COOR²₇；

10

20

30

40

50

- CONR² R⁵ ; - CN ; またはハロゲンであり、

Gは、E、C₁ ~ C₁₈アルキル、Dで中断されているC₁ ~ C₁₈アルキル、C₁ ~ C₁₈ペルフルオロアルキル、C₁ ~ C₁₈アルコキシ、またはEで置換されているおよび/もしくはDで中断されているC₁ ~ C₁₈アルコキシであり、ここで、

R² R³、R² R⁴、R² R⁵およびR² R⁶は、互いに独立して、H ; C₆ ~ C₁₈アリール；C₁ ~ C₁₈アルキルもしくはC₁ ~ C₁₈アルコキシで置換されているC₆ ~ C₁₈アリール；C₁ ~ C₁₈アルキル；または-O-で中断されているC₁ ~ C₁₈アルキルであるか；あるいは

R² R⁵およびR² R⁶は、一緒になって5員または6員環を形成し、R² R⁷およびR² R⁸は、互いに独立して、H ; C₆ ~ C₁₈アリール；C₁ ~ C₁₈アルキルもしくはC₁ ~ C₁₈アルコキシで置換されているC₆ ~ C₁₈アリール；C₁ ~ C₁₈アルキル；または-O-で中断されているC₁ ~ C₁₈アルキルであり、

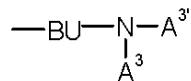
R² R⁹は、H ; C₆ ~ C₁₈アリール；C₁ ~ C₁₈アルキルもしくはC₁ ~ C₁₈アルコキシで置換されているC₆ ~ C₁₈アリール；C₁ ~ C₁₈アルキル；または-O-で中断されているC₁ ~ C₁₈アルキルであり、

R³ R⁰およびR³ R¹は、互いに独立して、C₁ ~ C₁₈アルキル、C₆ ~ C₁₈アリール、またはC₁ ~ C₁₈アルキルで置換されているC₆ ~ C₁₈アリールであり、

R³ R²は、C₁ ~ C₁₈アルキル、C₆ ~ C₁₈アリール、またはC₁ ~ C₁₈アルキルで置換されているC₆ ~ C₁₈アリールであり、そして

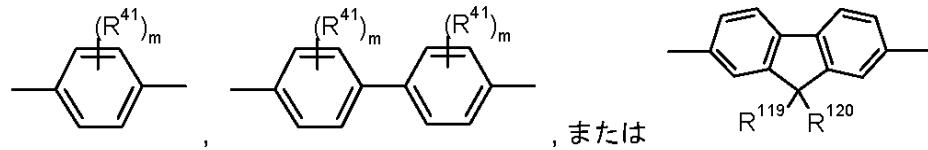
A¹、A²、A¹、およびA²は、互いに独立して、置換されていることができる、C₆ ~ C₂₄アリール基、C₂ ~ C₃₀ヘテロアリール基であるか、または下記：

【化127】



の基であり、ここでBUは、下記：

【化128】



から選ばれる架橋単位であり、A³およびA³は、互いに独立して、置換されていることができる、C₆ ~ C₂₄アリール基またはC₂ ~ C₃₀ヘテロアリール基であるか、あるいはA¹とA¹、またはA²とA²、またはA³とA³は、それらが結合している窒素原子と一緒にになって、芳香族複素環または環系を形成し、

R⁴ R¹は、それぞれの場合に同一または異なることができる、C₁、F、CN、N R⁴ R⁴、C₁ ~ C₂₅アルキル基、C₄ ~ C₁₈シクロアルキル基、C₁ ~ C₂₅アルコキシ基（ここで、互いに近接していない1個以上の炭素原子を-NR⁴-、-O-、-S-、-C(=O)-O-もしくは-O-C(=O)-O-に代えることができる、および/または1個以上の水素原子をFに代えることができる）、C₆ ~ C₂₄アリール基またはC₆ ~ C₂₄アリールオキシ基（ここで、1個以上の炭素原子をO、SもしくはNに代えることができるおよび/または1つ以上の非芳香族基R⁴で置換することができる）であるか、あるいは

2つ以上の基R⁴は、環系を形成し；

R⁴ R⁵およびR⁴ R⁵は、互いに独立して、H、C₁ ~ C₂₅アルキル基、C₄ ~ C₁₈シクロアルキル基（ここで、互いに近接していない1個以上の炭素原子を-NR⁴-、-O-、-S-、-C(=O)-O-もしくは-O-C(=O)-O-に代えること

10

20

30

40

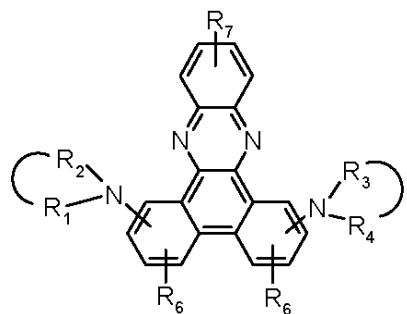
50

ができる、および／または1個以上の水素原子をFに代えることができる)、C₆～C₂₄アリール基またはC₆～C₂₄アリールオキシ基(ここで、1個以上の炭素原子をO、SもしくはNに代えることができるおよび／または1つ以上の非芳香族基R^{4～1}で置換することができる)であり；

R^{4～5}”は、H、C₁～C₂₅アルキル基またはC₄～C₁₈シクロアルキル基であり

mは、それぞれの場合に同一または異なっていることができ、0、1、2または3である]で示されるが、但し、下記式：

【化118】



10

[式中、R₁～R₄は、それぞれ、H原子、(置換)アルキル基、アラルキル基、アリール基または複素環基であり、ここでR₁とR₂およびR₃とR₄は、それぞれ、N原子と一緒にになって5員～7員環を形成してもよく、そして、R₆～R₇は、それぞれ、H原子、(置換)アルキル基、アルコキシ基、ハロゲン原子またはニトロ基である]により表されるフェナジン化合物が除外される化合物。

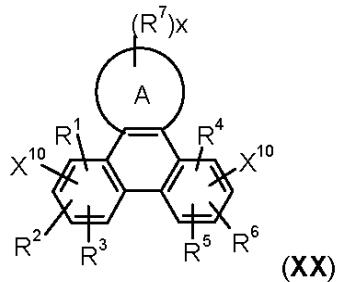
【請求項9】

太陽電池、色素レーザーおよびエレクトロルミネセンスデバイスのための、請求項8記載の式X、XII、XV I、およびXVIIの化合物のうち少なくとも1つの使用。

【請求項10】

請求項8記載の式X、XII、XV I、又はXVIIの化合物の調製方法であって、下記式：

【化120】



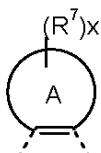
20

30

[式中、X^{1～0}は、ハロゲンを表し、

下記芳香族複素環：

【化121】

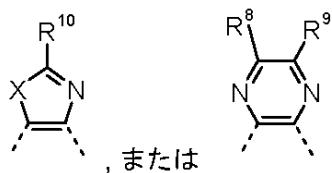


40

50

は、下記式

【化122】



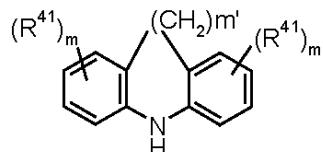
, または

を表す】

10

で示される化合物を、式：HNA¹A¹’ または下記：

【化123】



の化合物と、塩基および触媒の存在下、溶媒中で反応させることを含み、

ここでA¹、A¹’、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁸、R⁹、R¹⁰、R⁴ 20
¹、Xおよびmが請求項8で定義されたとおりであり、m’が、0、1または2である、
方法。

【発明の詳細な説明】

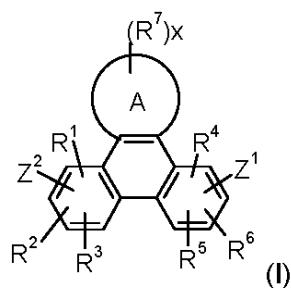
【技術分野】

【0001】

本発明は、下記式：

【0002】

【化1】



【0003】

で示される化合物を、特にリン光性化合物のホストとして含む、エレクトロルミネセンスデバイスに関する。ホストは、リン光材料と作用して、エレクトロルミネセンスデバイスの改善された効率、安定性、製造性またはスペクトル特性をもたらすことができる。

30

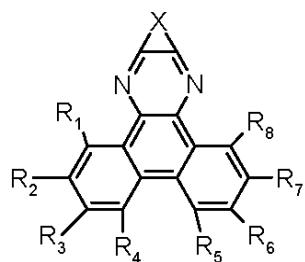
【0004】

特開平09-013025は、キノキサリン誘導体が、下記式：

【0005】

40

【化2】



【0006】

10

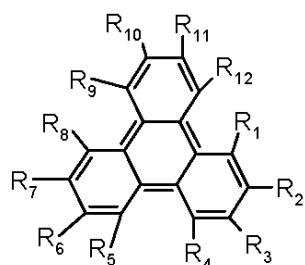
[式中、Xは、C₂～C₅アルキルなどであり、そしてR₁～R₈は、互いに独立して、それぞれH、ハロゲン、C₁～C₆アルキルなどである]により表されるエレクトロルミネセンス素子に関する。

【0007】

特開平11-251063は、有機EL素子の構成材料として使用される、下記式：

【0008】

【化3】



20

【0009】

により表されるトリフェニレン化合物を開示する。この式において、R₁～R₁₂は、それぞれ独立して、水素原子、ハロゲン原子、ヒドロキシル基、置換もしくは非置換アミノ基、ニトロ基、シアノ基、置換もしくは非置換アルキル基、置換もしくは非置換アルケニル基、置換もしくは非置換シクロアルキル基、置換もしくは非置換アルコキシ基、置換もしくは非置換芳香族炭化水素基、置換もしくは非置換芳香族複素環基、置換もしくは非置換アラルキル基、置換もしくは非置換アリールオキシ基、置換もしくは非置換アルコキシカルボニル基、またはカルボキシル基を表す。R₁～R₁₂は、これらから2つの環を形成することができる。

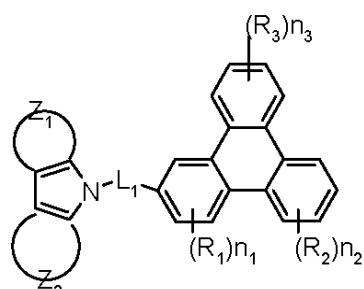
30

【0010】

特開2006-143845は、下記式：

【0011】

【化4】



40

【0012】

[式中、Z₁、Z₂は、芳香族炭化水素環、芳香族複素環であり、R₁～R₃は、H、置換基であり、n₁＝0～3であり、n₂、n₃＝0～4であり、L₁＝結合基か、単結合である]で示される化合物に関する。

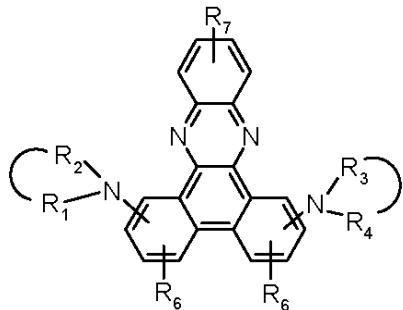
50

【0013】

特開平02-134644は、感光層にフェナジン化合物を有する電子写真用感光体に関する。フェナジン化合物は、下記式：

【0014】

【化5】



10

【0015】

〔式中、R₁～R₄は、それぞれ、H原子、(置換)アルキル基、アラルキル基、アリール基または複素環基であり、ここでR₁とR₂およびR₃とR₄は、それぞれ、N原子と一緒にになって5員～7員環を形成することができ、そして、R₅～R₇は、それぞれ、H原子、(置換)アルキル基、アルコキシ基、ハロゲン原子またはニトロ基である〕により表される。

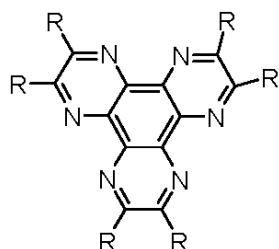
20

【0016】

米国特許出願公開第2006/0289882号は、電子抽出層が、下記：

【0017】

【化6】



30

【0018】

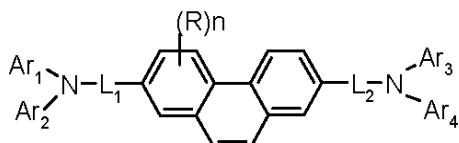
〔式中、Rは、水素、1～10の炭素数を有するアルキル基、1～10の炭素数を有するアルキルオキシ基、1～10の炭素数を有するジアルキルアミン基、F、Cl、Br、IまたはCNを表す〕で示される構造式により表されるヘキサアザトリフェニレン誘導体から形成されうる、有機エレクトロルミネンスデバイスに関する。

【0019】

米国特許出願公開第2007/0029927号は、以下の一般式(1)：

【0020】

【化7】



40

【0021】

〔式中、Ar₁～Ar₄は、それぞれ独立して、6～30個の環炭素原子を有する置換もしくは非置換アリール基、または5～30個の環炭素原子を有する置換もしくは非置換ヘテロアリール基を表し；

L₁およびL₂は、それぞれ独立して、単結合、6～30個の環炭素原子を有する置換

50

もしくは非置換アリーレン基、または5～30個の環炭素原子を有する置換もしくは非置換ヘテロアリーレン基を表すが；

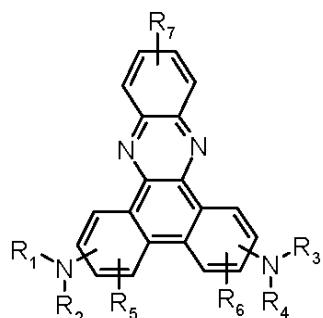
しかし、 L_1 および L_2 が両方とも単結合である場合、 Ar_1 および Ar_3 の両方が、それぞれ、置換または非置換フェニル基を表す場合、更には、 Ar_2 および Ar_4 の両方が、それぞれ、置換もしくは非置換ビフェニル基または置換もしくは非置換フェニル基を表す場合は、除外され；Rは、置換基を表し、Rが2つ以上存在する場合、これらは互いに結合して、環を形成し；そしてnは、0～8の整数を表す]により表される芳香族アミン誘導体、並びに有機エレクトロルミネセンスデバイスにおけるそれらの使用を開示する。

特開平02-134644は、下記式：

10

【0022】

【化8】



20

【0023】

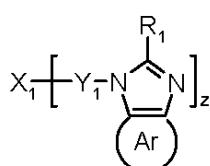
[式中、 R_1 ～ R_4 は、それぞれ、H原子、(置換)アルキル基、アラルキル基、アリール基または複素環基であり、ここで R_1 と R_2 および R_3 と R_4 は、それぞれ、N原子と一緒にになって5員～7員環を形成することができ、 R_5 ～ R_7 は、それぞれ、H原子、(置換)アルキル基、アルコキシ基、ハロゲン原子またはニトロ基である]で示されるフェナジン化合物に関する。フェナジン化合物は、電子写真用感光体の感光性層に組み込まれる。

特開2000-323278は、下記式：

30

【0024】

【化9】



【0025】

[式中、 R_1 は、それぞれ同一または異なって、水素、アルキル基、シクロアルキル基、アラルキル基、アルケニル基、シクロアルケニル基などから選択されることができ、 X_1 は、結合単位であり、置換または非置換芳香族環、複素環、飽和脂肪鎖などから選択され、 Y_1 は、単結合または単結合のいずれかの組み合わせ、アルキル鎖、アルキレン鎖、エーテル鎖などから選択され、 Ar は、置換または非置換芳香族環、複素環などから選択され、そして z は、自然数を表す]で示されるイミダゾール構造を有する有機蛍光体を含む発光体に関する。有機蛍光体は、好ましくは、ホスト材料にドープされているゲスト材料を有する発光材料である。

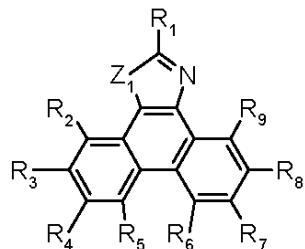
40

【0026】

特開2001-023777は、下記式：

【0027】

【化10】



【0028】

10

〔式中、R₁～R₉は、結合、水素、アルキル基、シクロアルキル基、アラルキル基、アルケニル基、シクロアルケニル基、アルコキシ基、アルキルチオ基、アリールエーテル基、アリールチオエーテル基、アリール基、複素環基、ハロゲン、シアノ基、アルデヒド基、カルボニル基、エステル基、カルバモイル基、アミノ基、ニトロ基、シリル基、シロキサニル基および隣接する置換基の間に形成された環構造を表し、そして、Z₁は、酸素、硫黄、窒素または飽和炭化水素を表す〕で示される化合物を記載する。フェナントロアゾール骨格を有する化合物は、正孔輸送層、電子輸送層および発光層の材料におけるホスト材料またはドーパント材料として適している。R₁～R₉のいずれかがアリール置換アミノ基である化合物は、開示されていない。

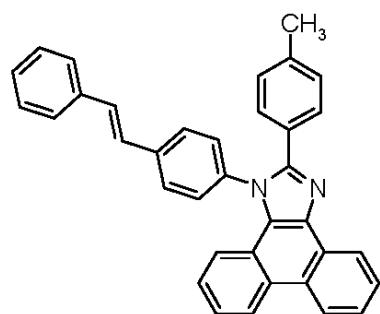
【0029】

20

特開2001-118683は、発光材料が、少なくともゲスト材料とホスト材料から構成され、ホスト材料の発光スペクトルのピークが300nm超、460nm未満である、発光素子に関する。以下のフェナントロアゾール化合物が明示的に開示されている。

【0030】

【化11】



30

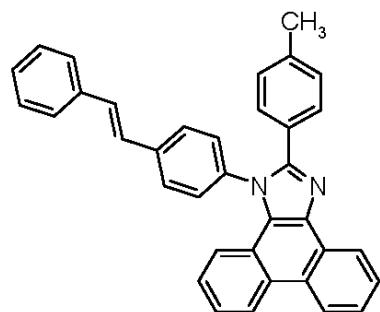
【0031】

特開2002-050473は、発光物質が陽極と陰極の間に存在し、電気エネルギーにより発光する素子を記載し、素子は、光反応により形成される少なくとも1種類の生成物を含む。以下のフェナントロアゾール化合物が明示的に開示されている。

【0032】

【化12】

40



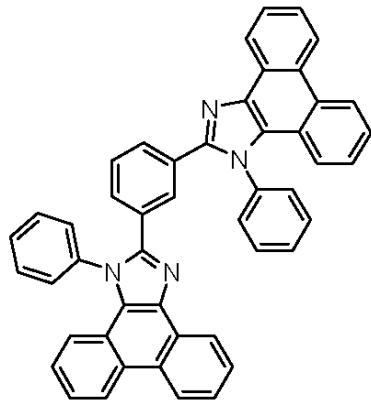
【0033】

50

特開2003-059670は、少なくとも陽極、発光層、電子伝達層および陰極が順に積層された構造を有し、電子伝達層が発光層のイオン化ポテンシャルよりも0.1eV以上大きいイオン化ポテンシャルを有し、発光層および電子伝達層を主に構成する材料が昇華性を有する有機化合物から作製され、更に、電子伝達層を主に構成する有機化合物が400以上の分子量および90以上のガラス転移温度を有する、発光素子を記載する。以下のフェナントロアゾール化合物が明示的に開示されている。

【0034】

【化13】



10

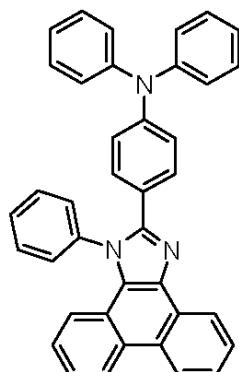
【0035】

20

特開2002-367786は、少なくとも陽極、発光層、正孔輸送層、電子輸送層および陰極が順に積層された構造を有し、発光層と電子輸送層の関係が、(Ip(ETL) - Ip(EML)) > (Ea(ETL) - Ea(EML))である、発光素子を記載する。発光層および電子輸送層を含む主な材料は、昇華性を有する有機化合物から作製され、電子輸送層を含む主な材料は、400以上の分子量を有する有機化合物である。[Ea:電子親和力(eV)、Ip:イオン化ポテンシャル(eV)、EML:発光層、ETL:電子輸送層]。以下のフェナントロアゾール化合物が明示的に開示されている。

【0036】

【化14】



30

【0037】

40

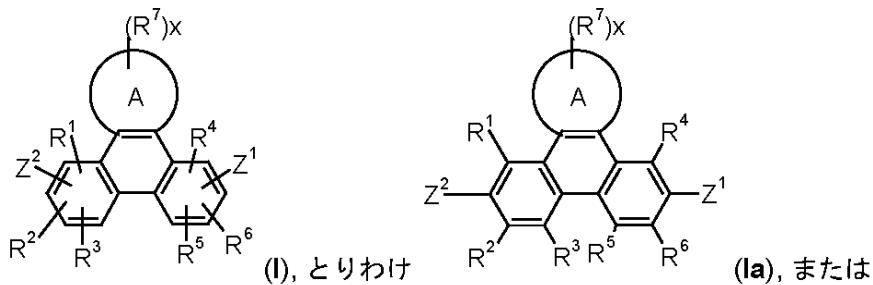
これらの進展にもかかわらず、新たなホスト材料、特に、リン光材料と作用して、エレクトロルミネセンスデバイスの改善された効率、安定性、製造性またはスペクトル特性をもたらすホストを含むELデバイスの必要性が依然として存在する。

【0038】

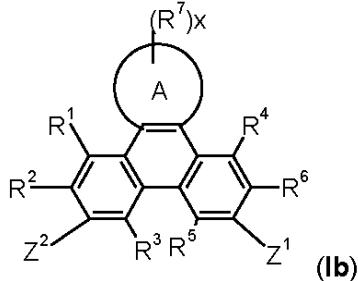
したがって、本発明は、下記式：

【0039】

【化15】



10



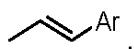
【0040】

(式中、Aは、窒素、酸素および硫黄から選択される少なくとも1個のヘテロ原子、特に1個の窒素原子と、窒素、置換窒素、酸素および硫黄から選択される少なくとも1個の異なるヘテロ原子とを含む、5員、6員または7員芳香族複素環であり、

Z¹は、下記：

【0041】

【化16】



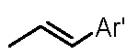
【0042】

- N A¹ A¹ '、- P (= O) A⁴ A⁴ ' または - S i A⁶ A⁷ A⁸ であり、

Z²は、下記：

【0043】

【化17】



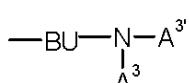
【0044】

- N A² A² '、- P (= O) A⁵ A⁵ ' または - S i A⁶ ' A⁷ ' A⁸ ' であり、

A r および A r ' は、互いに独立して、場合により、C₁ ~ C_{2~5} アルキル (場合により - O - で中断されていてもよい) または C₁ ~ C_{2~5} アルコキシ から選択される1つ以上の基で置換されていてもよい、フェニルもしくはナフチルのような C₆ ~ C_{1~4} アリールであり、

【0045】

【化18】



【0046】

の基であり、ここで B U は、架橋単位、例えば、下記：

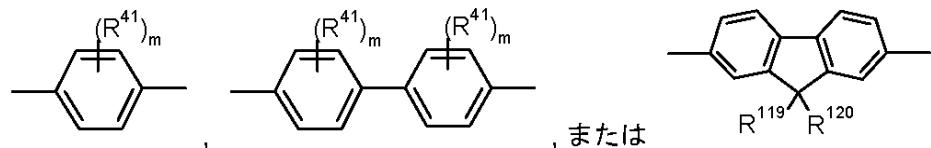
【0047】

20

30

40

【化19】



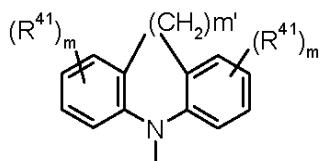
, または

【0048】

であり、A³ および A^{3'} は、互いに独立して、場合により置換されていることができる、C₆ ~ C₂₄ アリール基またはC₂ ~ C₃₀ ヘテロアリール基であるか、あるいはA¹ と A^{1'} または A² と A^{2'} または A³ と A^{3'} は、それらが結合している窒素原子と一緒にになって、芳香族複素環または環系、例えば下記：

【0049】

【化20】



【0050】

を形成し；m は、0、1 または 2 であり；

A⁴、A^{4'}、A⁶、A⁷、A⁸、A²、A^{2'}、A⁵、A^{5'}、A^{6'}、A^{7'} および A^{8'} は、互いに独立して、場合により置換されていることができる、C₆ ~ C₂₄ アリール基またはC₂ ~ C₃₀ ヘテロアリール基であり、

R⁴¹ は、それぞれの場合に同一または異なることができる、C₁、F、CN、N₂、R⁴⁵、R^{45'}、C₁ ~ C₂₅ アルキル基、C₄ ~ C₁₈ シクロアルキル基、C₁ ~ C₂₅ アルコキシ基（ここで、互いに近接していない1個以上の炭素原子を -NR⁴⁵-、-O-、-S-、-C(=O)-O- もしくは -O-C(=O)-O- に代えることができる、および / または 1個以上の水素原子を F に代えることができる）、C₆ ~ C₂₄ アリール基またはC₆ ~ C₂₄ アリールオキシ基（ここで、1個以上の炭素原子を O、S もしくは N に代えることができるおよび / または 1つ以上の非芳香族基 R⁴¹ で置換することができる）であるか、あるいは

2つ以上の基 R⁴¹ は、環系を形成し；

R⁴⁵ および R^{45'} は、互いに独立して、H、C₁ ~ C₂₅ アルキル基、C₄ ~ C₁₈ シクロアルキル基（ここで、互いに近接していない1個以上の炭素原子を -NR⁴⁵-、-O-、-S-、-C(=O)-O- もしくは -O-C(=O)-O- に代えることができる、および / または 1個以上の水素原子を F に代えることができる）、C₆ ~ C₂₄ アリール基またはC₆ ~ C₂₄ アリールオキシ基（ここで、1個以上の炭素原子を O、S もしくは N に代えることができるおよび / または 1つ以上の非芳香族基 R⁴¹ で置換することができる）であり；

R⁴⁵" は、H、C₁ ~ C₂₅ アルキル基またはC₄ ~ C₁₈ シクロアルキル基であり

、
m は、それぞれの場合に同一または異なることができる、0、1、2 または 3、特に 0、1 または 2、とりわけ 0 または 1 である】

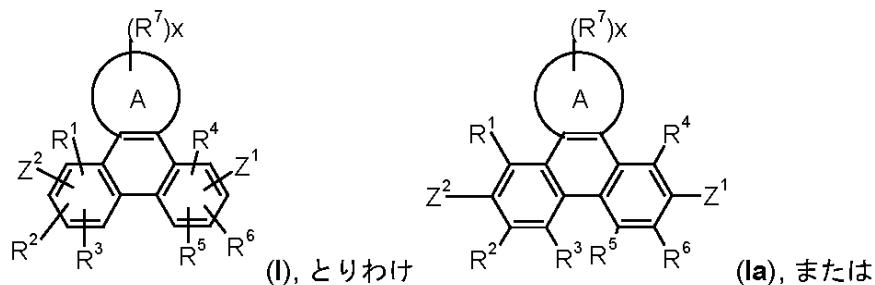
で示される化合物を含む E L デバイスを提供する。

【0051】

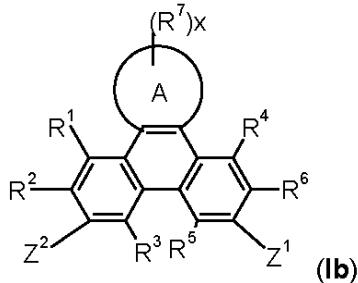
加えて、本発明は、下記式：

【0052】

【化21】



10



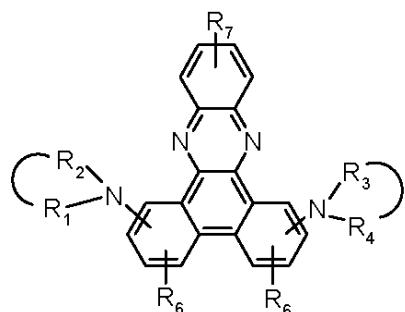
【0053】

〔式中、A、Z¹、Z²、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷および×は、請求項1で定義されたとおりである〕で示される化合物に関するが、但し、下記式：

20

【0054】

【化22】



30

【0055】

〔式中、R₁～R₄は、それぞれ、H原子、(置換)アルキル基、アラルキル基、アリール基または複素環基であり、ここでR₁とR₂およびR₃とR₄は、それぞれ、N原子と一緒にになって5員～7員環を形成してもよく、そして、R₅～R₇は、それぞれ、H原子、(置換)アルキル基、アルコキシ基、ハロゲン原子またはニトロ基である〕により表されるフェナジン化合物は除外される。

【0056】

式Iの化合物を、特にリン光性化合物のホストとして、有機発光ダイオード(OLED)において使用することができる。したがって、本発明は、陰極、陽極、その間に、ホスト材料を含有する発光層、およびリン光性発光材料を含むエレクトロルミネセンスデバイスも提供し、ここでホスト材料は、式Iの化合物である。

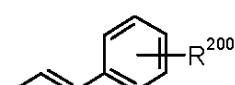
40

【0057】

Z¹およびZ²の例は、下記：

【0058】

【化23】



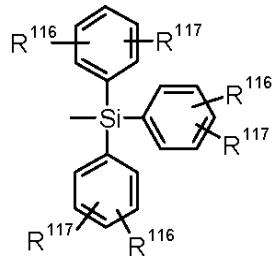
【0059】

50

であり、ここで R^{200} は、場合により -O- で中断されてもよい $C_1 \sim C_{25}$ アルキル、または $C_1 \sim C_{25}$ アルコキシ；下記：

【0060】

【化24】



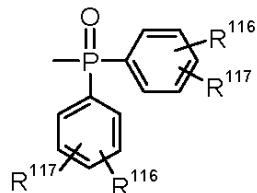
10

【0061】

および下記：

【0062】

【化25】



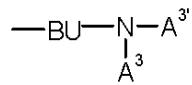
20

【0063】

であり、ここで R^{116} および R^{117} は下記に定義されているとおりである。 Z^1 は、好ましくは、下記：

【0064】

【化26】



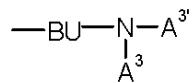
30

【0065】

の基または -NA¹A¹ である。 Z^2 は、好ましくは、下記：

【0066】

【化27】



【0067】

の基または -NA²A² である。 Z^1 および Z^2 は、異なっていてもよいが、好ましくは同一である。

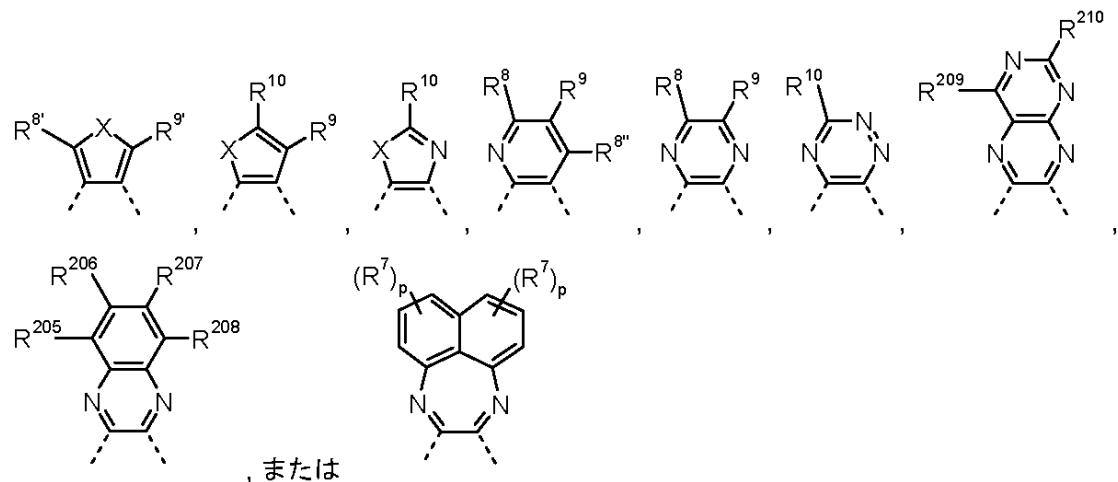
40

【0068】

A は、窒素、酸素および硫黄から選択される 1 個のヘテロ原子を含む 5 員、6 員または 7 員芳香族複素環であり、これは置換されていることができるおよび / または縮合芳香族もしくは芳香族複素環系の一部であることができる。 A の非限定例は、下記：

【0069】

【化 2 8】



10

【0070】

であり、ここで、 R^7 は、 R^8 の意味を有し、 $R^{8''}$ は、 R^8 の意味を有し、 X は、O、S、N - R¹⁷ であり、 R^{205} 、 R^{206} 、 R^{207} 、 R^{208} 、 R^{209} 、 R^{210} 、 R^8 、 R^9 、 $R^{8'}$ 、 $R^{9'}$ 、 R^{10} および R^{17} は、下記に定義されているとおりであり、p は、0、1、2 または 3 であり、そして点線 - - - は、ベンゼン環の結合を示す。

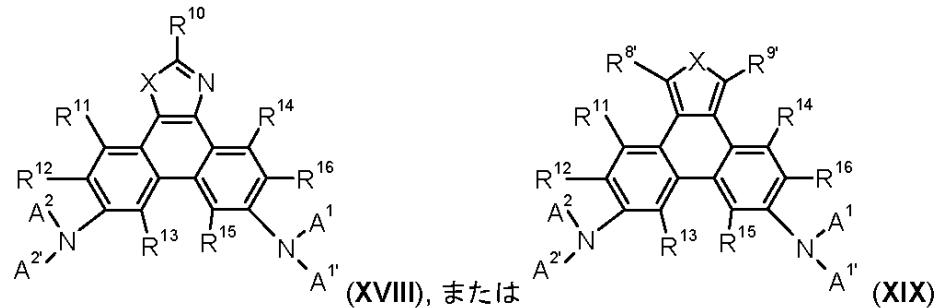
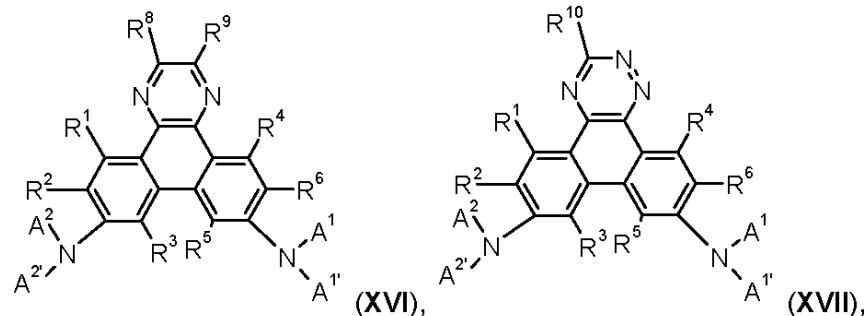
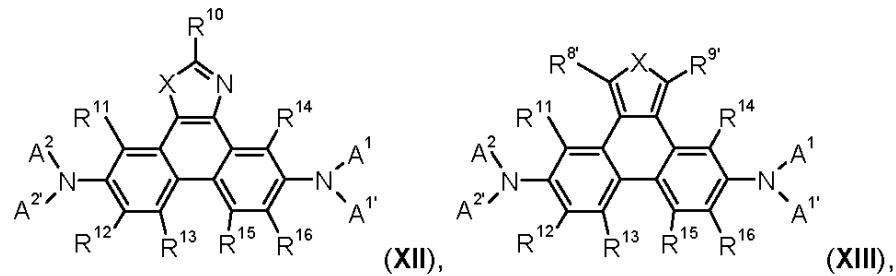
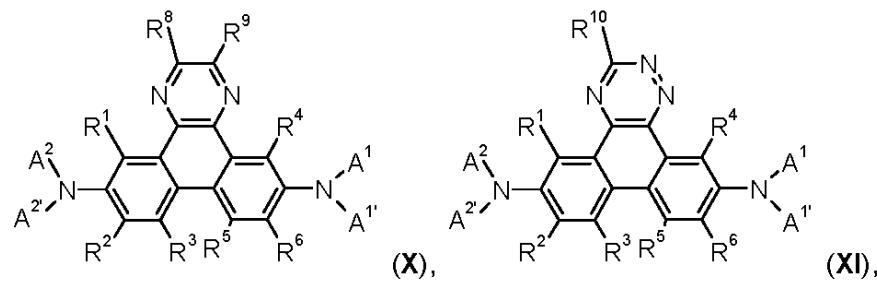
20

【0071】

好ましくは、式 I の化合物は、下記式：

【0072】

【化29】



【0073】

〔式中、

R¹ および R⁴ は、互いに独立して、水素、ハロゲン、C₁ ~ C₁₈ アルキル、E で置換されているおよび／もしくは D で中断されている C₁ ~ C₁₈ アルキル、C₁ ~ C₁₈ ペルフルオロアルキル、C₂ ~ C₁₈ アルケニル、C₂ ~ C₁₈ アルキニル、C₁ ~ C₁₈ アルコキシ、E で置換されているおよび／もしくは D で中断されている C₁ ~ C₁₈ アルコキシ、CN または -CO-R²~⁸ であり、

R²、R³、R⁵ および R⁶ は、互いに独立して、H、ハロゲン、C₁ ~ C₁₈ アルキル、E で置換されているおよび／もしくは D で中断されている C₁ ~ C₁₈ アルキル、C₁ ~ C₁₈ ペルフルオロアルキル、C₆ ~ C₂₄ アリール、G で置換されている C₆ ~ C₂₄ アリール、C₂ ~ C₂₀ ヘテロアリール、G で置換されている C₂ ~ C₂₀ ヘテロアリール、C₂ ~ C₁₈ アルケニル、C₂ ~ C₁₈ アルキニル、C₁ ~ C₁₈ アルコキシ、E で置換されているおよび／もしくは D で中断されている C₁ ~ C₁₈ アルコキシ、C₇ ~ C₂₅ アラルキル、CN または -CO-R²~⁸ であり、

R⁸ および R⁹ は、互いに独立して、H、C₁ ~ C₁₈ アルキル、E で置換されているおよび／もしくは D で中断されている C₁ ~ C₁₈ アルキル、C₁ ~ C₁₈ ペルフルオロ

10

20

30

40

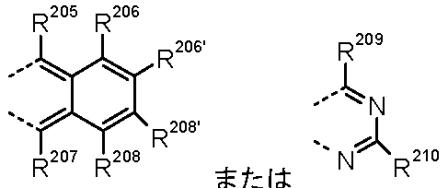
50

アルキル、C₆～C₂₄アリール、Gで置換されているC₆～C₂₄アリール、C₂～C₂₀ヘテロアリール、Gで置換されているC₂～C₂₀ヘテロアリール、C₂～C₁₈アルケニル、C₂～C₁₈アルキニル、C₁～C₁₈アルコキシ、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルコキシ、C₇～C₂₅アラルキル、CNまたは-CO-R²⁸であるか、あるいは

R⁸およびR⁹は、一緒にになって、下記：

【0074】

【化30】



10

【0075】

の基を形成し、ここで、R^{206'}、R^{208'}、R²⁰⁵、R²⁰⁶、R²⁰⁷、R²⁰⁸、R²⁰⁹およびR²¹⁰は、互いに独立して、H、C₁～C₁₈アルキル、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈アルコキシ、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルコキシ、C₁～C₁₈ペルフルオロアルキル、C₆～C₂₄アリール、Gで置換されているC₆～C₂₄アリール、C₂～C₂₀ヘテロアリール、Gで置換されているC₂～C₂₀ヘテロアリール、C₂～C₁₈アルケニル、C₂～C₁₈アルキニル、C₇～C₂₅アラルキル、CNまたは-CO-R²⁸であり、

R¹⁰は、H、C₁～C₁₈アルキル、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈ペルフルオロアルキル、C₆～C₂₄アリール、Gで置換されているC₆～C₂₄アリール、C₂～C₂₀ヘテロアリール、Gで置換されているC₂～C₂₀ヘテロアリール、C₂～C₁₈アルケニル、C₂～C₁₈アルキニル、C₁～C₁₈アルコキシ、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルコキシ、C₇～C₂₅アラルキルまたは-CO-R²⁸であり、

R⁸およびR⁹は、互いに独立して、H、CN、-COOR²⁷、-CONR²⁵、R²⁶、C₁～C₁₈アルキル、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈ペルフルオロアルキル、C₆～C₂₄アリール、Gで置換されているC₆～C₂₄アリール、C₂～C₂₀ヘテロアリール、Gで置換されているC₂～C₂₀ヘテロアリール、C₂～C₁₈アルケニル、C₂～C₁₈アルキニル、C₁～C₁₈アルコキシ、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルコキシ、C₇～C₂₅アラルキル、CNまたは-CO-R²⁸であり、

R¹¹およびR¹⁴は、互いに独立して、水素、ハロゲン、C₁～C₁₈アルキル、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈ペルフルオロアルキル、C₂～C₁₈アルケニル、C₂～C₁₈アルキニル、C₁～C₁₈アルコキシ、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルコキシ、CNまたは-CO-R²⁸であり、

R¹²、R¹³、R¹⁵およびR¹⁶は、互いに独立して、H、ハロゲン、C₁～C₁₈アルキル、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈ペルフルオロアルキル、C₆～C₂₄アリール、Gで置換されているC₆～C₂₄アリール、C₂～C₂₀ヘテロアリール、Gで置換されているC₂～C₂₀ヘテロアリール、C₂～C₁₈アルケニル、C₂～C₁₈アルキニル、C₁～C₁₈アルコキシ、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルコキシ、C₇～C₂₅アラルキル、CNまたは-CO-R²⁸であり、

Xは、O、SまたはNR¹⁷であり、ここでR¹⁷は、H；C₆～C₁₈アリール；C₂～C₂₀ヘテロアリール；C₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈ペルフルオロアルキル

30

40

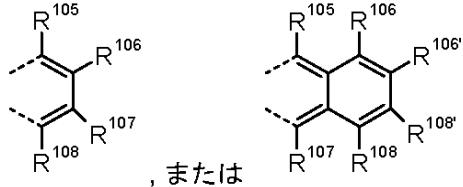
50

もしくは $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシで置換されている、 $C_6 \sim C_{18}$ アリールもしくは $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル；または -O- で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキルであるか、あるいは

互いに隣接している 2 つの置換基 R^1 と R^2 、 R^4 と R^6 、 R^{11} と R^{12} および / または R^{14} と R^{16} 、 R^2 と R^3 、 R^5 と R^6 、 R^{12} と R^{13} および / または R^{15} と R^{16} は、一緒になって、下記：

【0076】

【化31】



10

【0077】

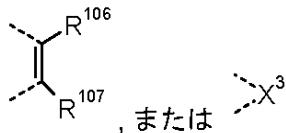
の基を形成するか、あるいは

互いに隣接している 2 つの置換基 R^{15} と R^{13} 、および / または R^5 と R^3 は、一緒になって、下記：

【0078】

【化32】

20



【0079】

の基を形成し、ここで、 X^3 は、O、S、C (R^{119}) (R^{120}) または NR^{17} であり、 R^{17} は、上記で定義されたとおりであり、 R^{105} 、 R^{106} 、 R^{107} 、 R^{108} 、 R^{106} および R^{108} は、互いに独立して、H、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、E で置換されているおよび / もしくは D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、または E で置換されているおよび / もしくは D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシであり、

30

R^{119} および R^{120} は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、E で置換されているおよび / もしくは D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール、G で置換されている $C_6 \sim C_{24}$ アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、G で置換されている $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、E で置換されているおよび / もしくは D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、または $C_7 \sim C_{25}$ アラルキルであるか、あるいは

R^{119} および R^{120} は、一緒になって、式 : = $CR^{121}R^{122}$ の基を形成し、ここで、

40

R^{121} および R^{122} は、互いに独立して、H、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、E で置換されているおよび / もしくは D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール、G で置換されている $C_6 \sim C_{24}$ アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、または G で置換されている $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリールであるか、あるいは

R^{119} および R^{120} は、一緒になって、場合により $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、E で置換されているおよび / もしくは D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール、G で置換されている $C_6 \sim C_{24}$ アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、G で置換されている $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、E で置換されているおよび / もしくは D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキルまたは -C(=O)-R¹²

50

⁷ で置換されていることができる 5 員または 6 員環を形成し、

$R^{1\ 2\ 7}$ は、 H ; $C_6 \sim C_{1\ 8}$ アリール ; $C_1 \sim C_{1\ 8}$ アルキルもしくは $C_1 \sim C_{1\ 8}$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{1\ 8}$ アリール ; $C_1 \sim C_{1\ 8}$ アルキル ; または $-O-$ で中断されている $C_1 \sim C_{1\ 8}$ アルキルであり、

D は、 $-CO-$; $-COO-$; $-S-$; $-SO-$; $-SO_2-$; $-O-$; $-NR^{2\ 5}-$; $-SiR^{3\ 0}R^{3\ 1}-$; $-POR^{3\ 2}-$; $-CR^{2\ 3}=CR^{2\ 4}-$; または $-C-C-$ であり、

E は、 $-OR^{2\ 9}$; $-SR^{2\ 9}$; $-NR^{2\ 5}R^{2\ 6}$; $-COR^{2\ 8}$; $-COOR^{2\ 7}$; $-CONR^{2\ 5}R^{2\ 6}$; $-CN$; またはハロゲンであり、 G は、 E 、 $C_1 \sim C_{1\ 8}$ アルキル、 D で中断されている $C_1 \sim C_{1\ 8}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{1\ 8}$ ペルフルオロアルキル、 $C_1 \sim C_{1\ 8}$ アルコキシまたは E で置換されているおよび／もしくは D で中断されている $C_1 \sim C_{1\ 8}$ アルコキシであり、 ここで、

$R^{2\ 3}$ 、 $R^{2\ 4}$ 、 $R^{2\ 5}$ および $R^{2\ 6}$ は、 互いに独立して、 H ; $C_6 \sim C_{1\ 8}$ アリール ; $C_1 \sim C_{1\ 8}$ アルキルもしくは $C_1 \sim C_{1\ 8}$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{1\ 8}$ アリール ; $C_1 \sim C_{1\ 8}$ アルキル ; または $-O-$ で中断されている $C_1 \sim C_{1\ 8}$ アルキルであるか； あるいは

$R^{2\ 5}$ および $R^{2\ 6}$ は、 一緒にになって 5 員または 6 員環を形成し、 $R^{2\ 7}$ および $R^{2\ 8}$ は、 互いに独立して、 H ; $C_6 \sim C_{1\ 8}$ アリール ; $C_1 \sim C_{1\ 8}$ アルキルもしくは $C_1 \sim C_{1\ 8}$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{1\ 8}$ アリール ; $C_1 \sim C_{1\ 8}$ アルキル ; または $-O-$ で中断されている $C_1 \sim C_{1\ 8}$ アルキルであり、

$R^{2\ 9}$ は、 H ; $C_6 \sim C_{1\ 8}$ アリール ; $C_1 \sim C_{1\ 8}$ アルキルもしくは $C_1 \sim C_{1\ 8}$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{1\ 8}$ アリール ; $C_1 \sim C_{1\ 8}$ アルキル ; または $-O-$ で中断されている $C_1 \sim C_{1\ 8}$ アルキルであり、

$R^{3\ 0}$ および $R^{3\ 1}$ は、 互いに独立して、 $C_1 \sim C_{1\ 8}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{1\ 8}$ アリール、 または $C_1 \sim C_{1\ 8}$ アルキルで置換されている $C_6 \sim C_{1\ 8}$ アリールであり、

$R^{3\ 2}$ は、 $C_1 \sim C_{1\ 8}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{1\ 8}$ アリール、 または $C_1 \sim C_{1\ 8}$ アルキルで置換されている $C_6 \sim C_{1\ 8}$ アリールであり、 そして

A^1 、 A^2 、 $A^{1'}$ および $A^{2'}$ は、 上記で定義されたとおりである) で示される化合物である。

【0080】

好ましくは、 $R^{1\ 1\ 6}$ および $R^{1\ 1\ 7}$ は、 互いに独立して、 H か、 メチル、 エチル、 n - プロピル、 イソ - プロピル、 n - ブチル、 イソブチル、 sec - ブチル、 t - ブチル、 2 - メチルブチル、 n - ペンチル、 イソペンチル、 n - ヘキシル、 2 - エチルヘキシルまたは n - ヘプチルのような $C_1 \sim C_{1\ 2}$ アルキル、 $-CH_2OCH_3$ 、 $-CH_2OCH_2CH_3$ 、 $-CH_2OCH_2CH_2OCH_2CH_3$ または $-CH_2OCH_2CH_2OCH_2CH_2OCH_2CH_3$ のような、 E で置換されているおよび／もしくは D で中断されている $C_1 \sim C_{1\ 2}$ アルキル、 フェニル、 ナフチルまたはビフェニリルのような $C_6 \sim C_{2\ 4}$ アリール、 シクロヘキシルのような $C_5 \sim C_{1\ 2}$ シクロアルキル、 $-C_6H_4OCH_3$ 、 $-C_6H_4OCH_2CH_3$ 、 $-C_6H_3(OCH_3)_2$ もしくは $-C_6H_3(OCH_2CH_3)_2$ 、 $-C_6H_4CH_3$ 、 $-C_6H_3(CH_3)_2$ 、 $-C_6H_2(CH_3)_3$ または $-C_6H_4tBu$ のような、 G で置換されている $C_6 \sim C_{1\ 4}$ アリールである。

【0081】

X は、 O 、 S 、 または $NR^{1\ 7}$ である。式 XII および $XVII$ の化合物の場合、 X は、 好ましくは O または $NR^{1\ 7}$ である。式 $XIII$ および XIX の化合物の場合、 X は、 好ましくは S または $NR^{1\ 7}$ である。

【0082】

$R^{1\ 7}$ は、 好ましくは、 H か、 メチル、 エチル、 n - プロピル、 イソ - プロピル、 n - ブチル、 イソブチル、 sec - ブチル、 t - ブチル、 2 - メチルブチル、 n - ペンチル、 イソペンチル、 n - ヘキシル、 2 - エチルヘキシル、 n - ヘプチルのような $C_1 \sim C_{1\ 2}$ アルキルまたはフェニル、 ナフチルもしくはビフェニリルのような $C_6 \sim C_{2\ 4}$ アリールで

10

20

30

40

50

ある。

【0083】

好ましくは、 $R^{1\sim 9}$ および $R^{1\sim 0}$ は、互いに独立して、メチル、エチル、n-プロピル、イソ-プロピル、n-ブチル、sec-ブチル、ヘキシル、オクチルまたは2-エチル-ヘキシルのような $C_1\sim C_{12}$ アルキル、 $-CH_2(OCH_2CH_2)_wOCH_3$ (ここで、 $w=1, 2, 3$ または 4 である) のような、E で置換されているおよび/もしくは D で中断されている $C_1\sim C_{12}$ アルキル、フェニル、ナフチルまたはビフェニリルのような $C_6\sim C_{14}$ アリール、 $-C_6H_4OCH_3$ 、 $-C_6H_4OCH_2CH_3$ 、 $-C_6H_3(OCH_3)_2$ 、 $-C_6H_3(OCH_2CH_3)_2$ 、 $-C_6H_4CH_3$ 、 $-C_6H_3(CH_3)_2$ 、 $-C_6H_2(CH_3)_3$ または $-C_6H_4tBu$ のような、G で置換されている $C_6\sim C_{14}$ アリールであるか、あるいは $R^{1\sim 9}$ および $R^{1\sim 0}$ は、一緒になつて、シクロヘキシルまたはシクロペンチルのような 4 員~8 員環、特に 5 員または 6 員環を形成し、これは場合により $C_1\sim C_8$ アルキルで置換されていることができる。
10

【0084】

D は、好ましくは、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、 $-S-$ 、 $-SO-$ 、 $-SO_2-$ 、 $-O-$ 、 $-NR^{2\sim 5}-$ であり、ここで $R^{2\sim 5}$ は、メチル、エチル、n-プロピル、イソ-プロピル、n-ブチル、イソブチルもしくは sec-ブチルのような $C_1\sim C_{12}$ アルキル、またはフェニル、ナフチルもしくはビフェニリルのような $C_6\sim C_{14}$ アリールである。

【0085】

E は、好ましくは、 $-OR^{2\sim 9}$ ； $-SR^{2\sim 9}$ ； $-NR^{2\sim 5}R^{2\sim 5}$ ； $-COR^{2\sim 8}$ ； $-C_2OOR^{2\sim 7}$ ； $-CONR^{2\sim 5}R^{2\sim 5}$ ；または $-CN$ であり；ここで $R^{2\sim 5}$ 、 $R^{2\sim 7}$ 、 $R^{2\sim 8}$ および $R^{2\sim 9}$ は、互いに独立して、メチル、エチル、n-プロピル、イソ-プロピル、n-ブチル、イソブチル、sec-ブチル、ヘキシル、オクチルもしくは 2-エチル-ヘキシルのような $C_1\sim C_{12}$ アルキル、またはフェニル、ナフチルもしくはビフェニリルのような $C_6\sim C_{14}$ アリールであり、これは場合により置換されていてもよい。
20

【0086】

G は、E と同じ選択肢を有するか、またはメチル、エチル、n-プロピル、イソ-プロピル、n-ブチル、イソブチル、sec-ブチル、ヘキシル、オクチルもしくは 2-エチル-ヘキシルのような、 $C_1\sim C_{18}$ アルキル、特に $C_1\sim C_{12}$ アルキルである。

【0087】

式 X、X_I および X_{II} の化合物が好ましい。

【0088】

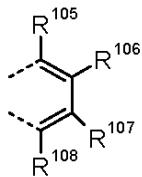
式 X または X_{II} の化合物がより好ましく、ここで、 R^1 および R^4 は水素であり、 R^2 、 R^3 、 R^5 および R^6 は、互いに独立して、H、 $C_1\sim C_{18}$ アルキル、D で中断されている $C_1\sim C_{18}$ アルキル、 $C_1\sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $C_1\sim C_{18}$ アルコキシ、D で中断されている $C_1\sim C_{18}$ アルコキシ、 $C_7\sim C_{25}$ アラルキルまたは基-X²-R¹ であり、

R^8 および R^9 は、互いに独立して、H、 $C_1\sim C_{18}$ アルキル、D で中断されている $C_1\sim C_{18}$ アルキル、 $C_1\sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、場合により $C_1\sim C_{18}$ アルキルで置換されていてもよい $C_6\sim C_{18}$ アリール、 C_{18} アルコキシもしくは D で中断されている $C_1\sim C_{18}$ アルコキシ、 $C_1\sim C_{18}$ アルコキシ、D で中断されている $C_1\sim C_{18}$ アルコキシ、または基-X²-R¹ であるか、あるいは
40

互いに隣接している 2 つの置換基 R^2 と R^3 、および/または R^5 と R^6 は、一緒になつて、下記：

【0089】

【化33】



【0090】

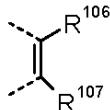
の基を形成するか、あるいは

互いに隣接している2つの置換基R⁵およびR³は、一緒になって、下記：

10

【0091】

【化34】



【0092】

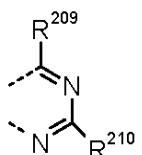
の基を形成し、ここで、R¹⁰⁵、R¹⁰⁶、R¹⁰⁷およびR¹⁰⁸は、互いに独立して、HまたはC₁～C₈アルキルであるか、あるいは

R⁸およびR⁹は、一緒になって、下記：

20

【0093】

【化35】



【0094】

の基を形成し、ここで、R²⁰⁵、R²⁰⁶、R²⁰⁷、R²⁰⁸、R²⁰⁹およびR²¹⁰は、互いに独立して、H、C₁～C₁₈アルキル、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈アルコキシ、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルコキシ、またはC₁～C₁₈ペルフルオロアルキルであり、

30

R¹⁰は、H、Gで置換されていることができるC₆～C₁₈アリール、Gで置換されていることができるC₂～C₁₈ヘテロアリール、C₁～C₁₈アルキル、Dで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈ペルフルオロアルキル、C₁～C₁₈アルコキシ、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルコキシまたは基-X²-R¹-X²であり、ここでX²はスペーサーであり、例えばC₆～C₁₂アリールまたはC₆～C₁₂ヘテロアリール、特にフェニルまたはナフチルであり、これは、C₁～C₁₈アルキル、Dで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈ペルフルオロアルキル、C₁～C₁₈アルコキシまたはEで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルコキシにより1回以上、特に1～2回置換されていることができる、R¹-X²は、H、C₁～C₁₈アルキル、Dで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈ペルフルオロアルキル、C₁～C₁₈アルコキシ、Dで中断されているC₁～C₁₈アルコキシまたは-NR²-R²-X²であり、

40

Dは、-CO-；-COO-；-S-；-SO-；-SO₂-；-O-；-NR²-；-CR²-；または-C-C-であり、ここで、

R²-X²、R²-X²、R²-X²およびR²-X²は、互いに独立して、H；C₆～C₁₈アリール；C₁～C₁₈アルキルもしくはC₁～C₁₈アルコキシで置換されているC₆～C₁₈アリール；C₁～C₁₈アルキル；または-O-で中断されているC₁～C₁₈アルキルであるか

50

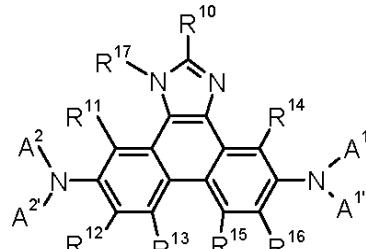
、あるいはR²～R⁵およびR²～R⁶は、一緒になって、5員または6員環を形成する。

【0095】

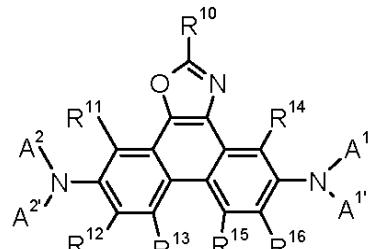
更に好ましい実施態様において、本発明は、下記式：

【0096】

【化36】



(XIIa), および／または



(XIIb)

【0097】

〔式中、R¹～R⁸は、H、Gで置換されていることができるC₆～C₁₈アリール、Gで置換されていることができるC₂～C₁₈ヘテロアリール、C₁～C₁₈アルキル、Dで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈ペルフルオロアルキル、C₁～C₁₈アルコキシ、Eで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルコキシまたは基-X²-R¹～R⁸であり、ここでX²はスペーサーであり、例えばC₆～C₁₂アリールまたはC₆～C₁₂ヘテロアリール、特にフェニルまたはナフチルであり、これは、C₁～C₁₈アルキル、Dで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈ペルフルオロアルキル、C₁～C₁₈アルコキシまたはEで置換されているおよび／もしくはDで中断されているC₁～C₁₈アルコキシにより1回以上、特に1～2回置換されていることができ、R¹～R⁸は、H、C₁～C₁₈アルキル、Dで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈ペルフルオロアルキル、C₁～C₁₈アルコキシ、Dで中断されているC₁～C₁₈アルコキシまたは-NR²～R⁵-NR²～R⁶-であり、

R¹～R⁴およびR¹～R⁴は、水素であり、

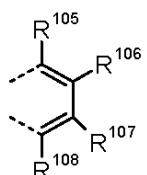
R¹～R²、R¹～R³、R¹～R⁵およびR¹～R⁶は、水素であり、

R¹～R⁷は、C₆～C₁₈アリール；C₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈ペルフルオロアルキルもしくはC₁～C₁₈アルコキシで置換されているC₆～C₁₈アリール；C₁～C₁₈アルキル；または-O-で中断されているC₁～C₁₈アルキルであるか、あるいは

互いに隣接している2つの置換基R⁵とR³、R¹～R²とR¹～R³および／またはR¹～R⁵とR¹～R⁶は、一緒になって、下記：

【0098】

【化37】



【0099】

の基を形成するか、あるいは

互いに隣接している2つの置換基R¹～R⁵およびR¹～R³は、一緒になって、下記：

【0100】

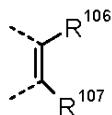
10

20

30

40

【化38】



【0101】

の基を形成し、ここで、R¹⁰⁵、R¹⁰⁶、R¹⁰⁷およびR¹⁰⁸は、互いに独立して、HまたはC₁～C₈アルキルであり、

Dは、-S-；-O-；または-NR²⁵-であり、

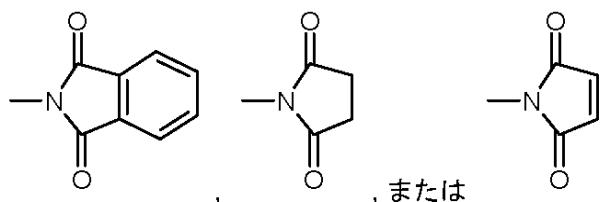
Eは、-OR²⁹；-SR²⁹；-NR²⁵R²⁶；-CN；またはFであり、Gは、
10
E、C₁～C₁₈アルキル、Dで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈ペ
ルフルオロアルキル、C₁～C₁₈アルコキシまたはEで置換されているおよび/もしく
はDで中断されているC₁～C₁₈アルコキシであり、ここで、

R²⁵およびR²⁶は、互いに独立して、H；C₆～C₁₈アリール；C₁～C₈アル
キルもしくはC₁～C₈アルコキシで置換されているC₆～C₁₈アリール；C₁～C₈
アルキル；または-O-で中断されているC₁～C₈アルキルであるか、あるいは

R²⁵およびR²⁶は、一緒になって、5員または6員環、特に下記：

【0102】

【化39】



20

【0103】

を形成し、そして

R²⁹は、C₆～C₁₈アリール；C₁～C₁₈アルキルもしくはC₁～C₁₈アルコ
キシで置換されているC₆～C₁₈アリール；C₁～C₁₈アルキル；または-O-で中
断されているC₁～C₁₈アルキルである】

30

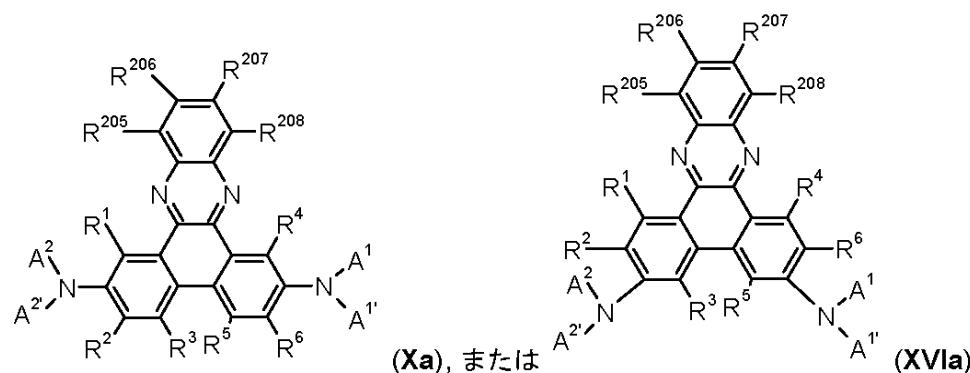
で示される化合物に関する。

【0104】

好みの実施態様において、本発明は、下記式：

【0105】

【化40】



40

【0106】

〔式中、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、A¹、A¹'、A²、A²'、R²⁰⁵
、R²⁰⁶、R²⁰⁷およびR²⁰⁸は、上記で定義されたとおりである〕で示される化
合物を含むELデバイスを対象とする。

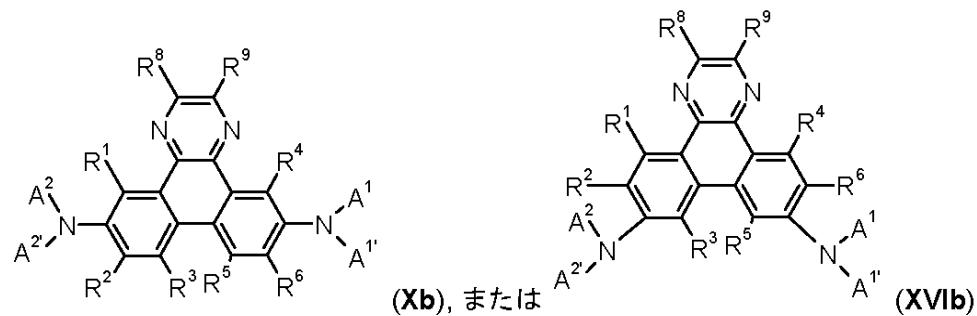
50

【 0 1 0 7 】

特に好ましい実施態様において、本発明は、下記式：

【 0 1 0 8 】

【化 4 1】



10

【 0 1 0 9 】

〔式中、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 A^1 、 $A^{1'}$ 、 A^2 、 $A^{2'}$ 、 R^8 および R^9 は、上記で定義されたとおりである〕で示される化合物を含むELデバイスを対象とする。

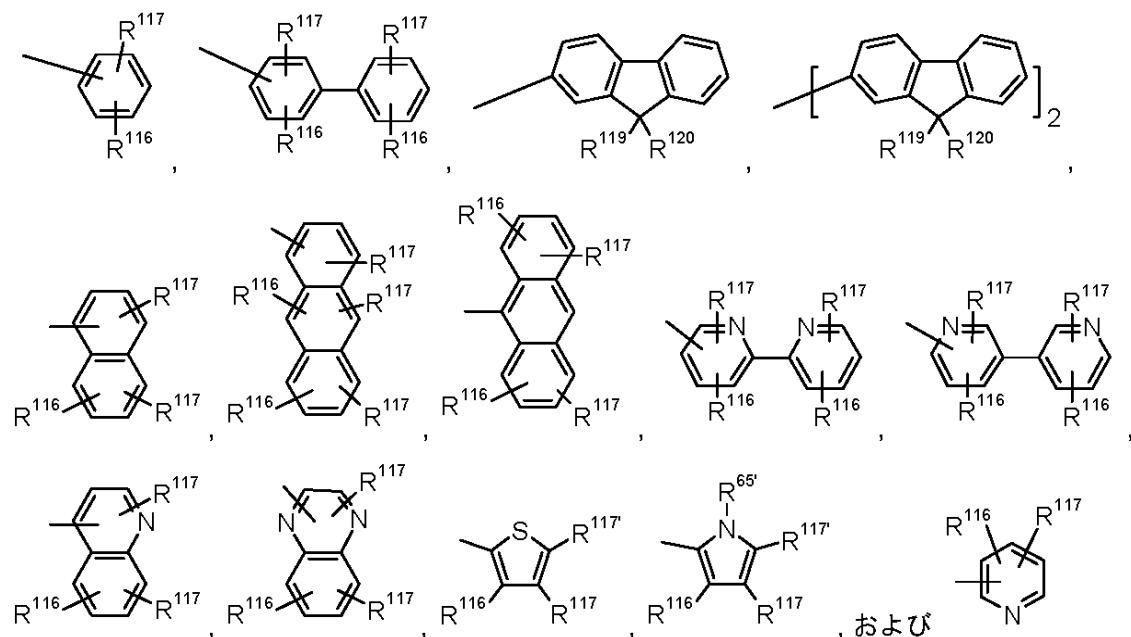
【 0 1 1 0 】

A^1 、 A^2 、 A^1' および A^2' は、互いに独立して、特に、フェニル、ナフチル、アントリル、ビフェニリル、2-フルオレニル、フェナントリルまたはペリレニルであり、これは場合により置換されていることができ、例えば下記：

20

【 0 1 1 1 】

【化 4 2】



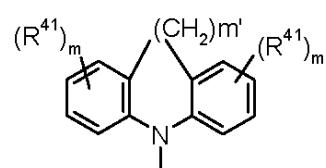
30

[0 1 1 2]

であるか、あるいは A^1 および A^1' 、または A^2 および A^2' は、それらが結合している窒素原子と一緒にになって、芳香族複素環または環系、例えば下記：

〔 0 1 1 3 〕

【化 4.3】



50

【0114】

を形成し； m' は、0、1または2であり；

m は、それぞれの場合に同一または異なっていることができ、0、1、2または3、特に0、1または2、とりわけ0または1であり；

R^{4-1} は、それぞれの場合に同一または異なっていることができ、C1、F、CN、N (R^{4-5})₂、C₁ ~ C₂₋₅ アルキル基、C₄ ~ C₁₋₈ シクロアルキル基、C₁ ~ C₂₋₅ アルコキシ基（ここで、互いに近接していない1個以上の炭素原子を -NR⁴⁻⁵-、-O-、-S- もしくは -C(=O)-O- に代えることができる、および/または1個以上の水素原子をFに代えることができる）、C₆ ~ C₂₋₄ アリール基またはC₆ ~ C₂₋₄ アリールオキシ基（ここで、1個以上の炭素原子をO、SもしくはNに代えることができるおよび/または1つ以上の非芳香族基 R^{4-1} で置換することができる）であるか、あるいは

2つ以上の基 R^{4-1} は、環系を形成し；

R^{4-5} は、H、C₁ ~ C₂₋₅ アルキル基、C₄ ~ C₁₋₈ シクロアルキル基、（ここで、互いに近接していない1個以上の炭素原子を -NR⁴⁻⁵-、-O-、-S-、-C(=O)-O- もしくは -O-C(=O)-O- に代えることができる、および/または1個以上の水素原子をFに代えることができる）、C₆ ~ C₂₋₄ アリール基、またはC₆ ~ C₂₋₄ アリールオキシ基（1個以上の炭素原子をO、SもしくはNに代えることができるおよび/または1つ以上の非芳香族基 R^{4-1} で置換することができる）であり；

$R^{4-5''}$ は、H、C₁ ~ C₂₋₅ アルキル基またはC₄ ~ C₁₋₈ シクロアルキル基であり

、
 R^{1-1-6} 、 R^{1-1-7} および $R^{1-1-7'}$ は、互いに独立して、H、ハロゲン、-CN、C₁ ~ C₁₋₈ アルキル、Eで置換されているおよび/もしくはDで中断されているC₁ ~ C₁₋₈ アルキル、C₆ ~ C₂₋₄ アリール、Gで置換されているC₆ ~ C₂₋₄ アリール、C₂ ~ C₂₋₀ ヘテロアリール、Gで置換されているC₂ ~ C₂₋₀ ヘテロアリール、C₂ ~ C₁₋₈ アルケニル、C₂ ~ C₁₋₈ アルキニル、C₁ ~ C₁₋₈ アルコキシ、Eで置換されているおよび/もしくはDで中断されているC₁ ~ C₁₋₈ アルコキシ、C₇ ~ C₂₋₅ アラルキル、-C(=O)-R¹⁻²⁻⁷、-C(=O)OR¹⁻²⁻⁷、または-C(=O)NR¹⁻²⁻⁷R¹⁻²⁻⁶ であるか、あるいは

互いに隣接している置換基 R^{1-1-6} 、 R^{1-1-7} および $R^{1-1-7'}$ は、環を形成することができ、

R^{1-1-9} および R^{1-2-0} は、互いに独立して、C₁ ~ C₁₋₈ アルキル、Eで置換されているおよび/もしくはDで中断されているC₁ ~ C₁₋₈ アルキル、C₆ ~ C₂₋₄ アリール、Gで置換されているC₆ ~ C₂₋₄ アリール、C₂ ~ C₂₋₀ ヘテロアリール、Gで置換されているC₂ ~ C₂₋₀ ヘテロアリール、C₂ ~ C₁₋₈ アルケニル、C₂ ~ C₁₋₈ アルキニル、C₁ ~ C₁₋₈ アルコキシ、Eで置換されているおよび/もしくはDで中断されているC₁ ~ C₁₋₈ アルコキシ、またはC₇ ~ C₂₋₅ アラルキルであるか、あるいは

R^{1-1-9} および R^{1-2-0} は、一緒になって、式： $=CR^{1-2-1}R^{1-2-2}$ の基を形成し、ここで、

R^{1-2-1} および R^{1-2-2} は、互いに独立して、H、C₁ ~ C₁₋₈ アルキル、Eで置換されているおよび/もしくはDで中断されているC₁ ~ C₁₋₈ アルキル、C₆ ~ C₂₋₄ アリール、Gで置換されているC₆ ~ C₂₋₄ アリール、C₂ ~ C₂₋₀ ヘテロアリール、またはGで置換されているC₂ ~ C₂₋₀ ヘテロアリールであるか、あるいは

R^{1-1-9} および R^{1-2-0} は、一緒になって、場合によりC₁ ~ C₁₋₈ アルキル、Eで置換されているおよび/もしくはDで中断されているC₁ ~ C₁₋₈ アルキル、C₆ ~ C₂₋₄ アリール、Gで置換されているC₆ ~ C₂₋₄ アリール、C₂ ~ C₂₋₀ ヘテロアリール、Gで置換されているC₂ ~ C₂₋₀ ヘテロアリール、C₂ ~ C₁₋₈ アルケニル、C₂ ~ C₁₋₈ アルキニル、C₁ ~ C₁₋₈ アルコキシ、Eで置換されているおよび/もしくはDで中断されているC₁ ~ C₁₋₈ アルコキシ、C₇ ~ C₂₋₅ アラルキルまたは-C(=O)-R¹⁻²⁻⁷ で置換されていることができる5員または6員環を形成し、

10

20

30

40

50

$R^{1,2,6}$ および $R^{1,2,7}$ は、互いに独立して、H； $C_6 \sim C_{1,8}$ アリール； $C_1 \sim C_{1,8}$ アルキルもしくは $C_1 \sim C_{1,8}$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{1,8}$ アリール； $C_1 \sim C_{1,8}$ アルキル；または-O-で中断されている $C_1 \sim C_{1,8}$ アルキルであり、
 D は、-CO-、-COO-、-S-、-SO-、-SO₂-、-O-、-NR^{6,5}-、-SiR^{7,0}R^{7,1}-、-POR^{7,2}-、-CR^{6,3}=CR^{6,4}-、または-C-C-であり、

E は、-OR^{6,9}、-SR^{6,9}、-NR^{6,5}R^{6,6}、-COR^{6,8}、-COOR^{6,7}、-CONR^{6,5}R^{6,6}、-CN、またはハロゲンであり、

G は、 E または $C_1 \sim C_{1,8}$ アルキルであり、
 $R^{6,3}$ 、 $R^{6,4}$ 、 $R^{6,5}$ および $R^{6,6}$ は、互いに独立して、H； $C_6 \sim C_{1,8}$ アリール； $C_1 \sim C_{1,8}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{1,8}$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{1,8}$ アリール； $C_1 \sim C_{1,8}$ アルキル；または-O-で中断されている $C_1 \sim C_{1,8}$ アルキルであるか；あるいは

$R^{6,5}$ および $R^{6,6}$ は、一緒になって、5員または6員環を形成し、

$R^{6,7}$ および $R^{6,8}$ は、互いに独立して、H； $C_6 \sim C_{1,8}$ アリール； $C_1 \sim C_{1,8}$ アルキルもしくは $C_1 \sim C_{1,8}$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{1,8}$ アリール； $C_1 \sim C_{1,8}$ アルキル；または-O-で中断されている $C_1 \sim C_{1,8}$ アルキルであり、

$R^{6,9}$ は、H； $C_6 \sim C_{1,8}$ アリール； $C_1 \sim C_{1,8}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{1,8}$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{1,8}$ アリール； $C_1 \sim C_{1,8}$ アルキル；または-O-で中断されている $C_1 \sim C_{1,8}$ アルキルであり、

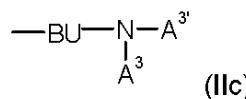
$R^{7,0}$ および $R^{7,1}$ は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{1,8}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{1,8}$ アリール、または $C_1 \sim C_{1,8}$ アルキルで置換されている $C_6 \sim C_{1,8}$ アリールであり、そして

$R^{7,2}$ は、 $C_1 \sim C_{1,8}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{1,8}$ アリール、または $C_1 \sim C_{1,8}$ アルキルで置換されている $C_6 \sim C_{1,8}$ アリールであるか、あるいは

A^1 、 A^2 、 $A^{1'}$ および $A^{2'}$ は、互いに独立して、下記：

【0115】

【化44】

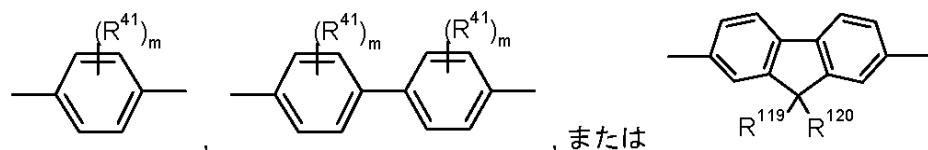


【0116】

の基であり、ここでBUは、下記：

【0117】

【化45】



【0118】

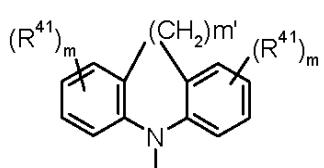
であり、ここで $R^{4,1}$ および m は、上記で定義されたとおりである。

【0119】

下記：

【0120】

【化46】



10

20

30

40

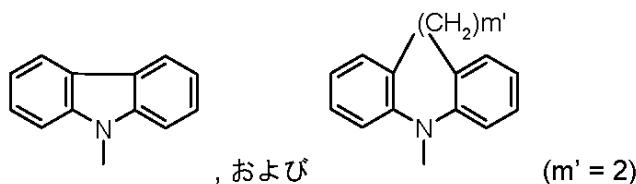
50

【0121】

の例は、下記：

【0122】

【化47】



10

【0123】

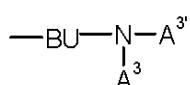
である。

【0124】

下記：

【0125】

【化48】



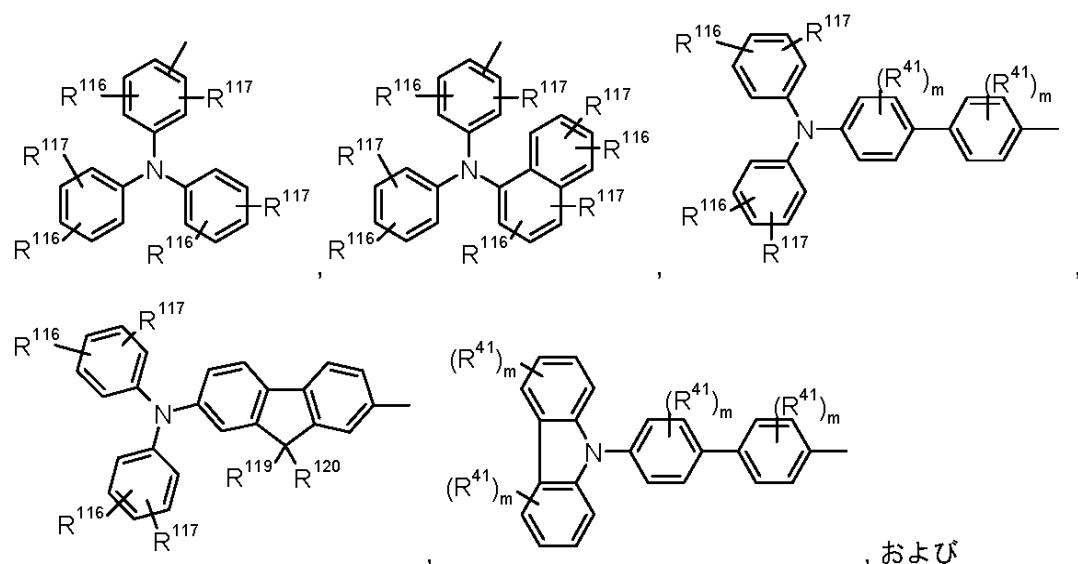
【0126】

20

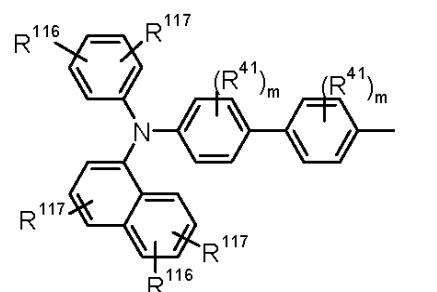
の基の例は、下記：

【0127】

【化49】



30



40

【0128】

に示されており、ここで、R⁴¹、R¹¹⁶、R¹¹⁷、R¹¹⁹、R¹²⁰およびmは、上記で定義されたとおりである。

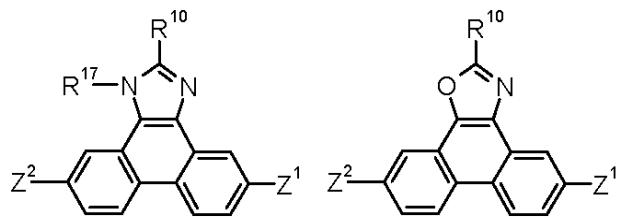
50

【0129】

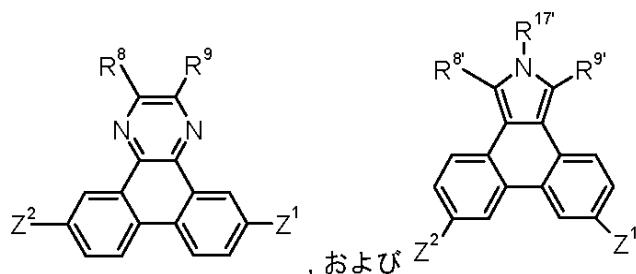
下記式：

【0130】

【化50】



10



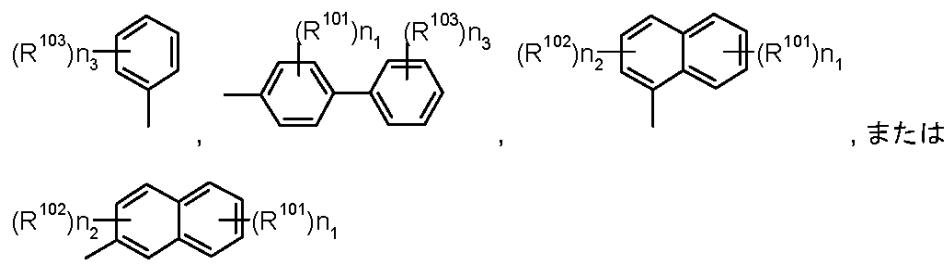
【0131】

20

の化合物が好ましく、式中、R⁸ および R⁹ は、互いに独立して、下記：

【0132】

【化51】



30

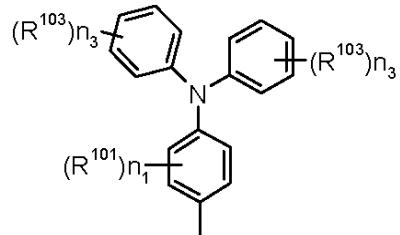
【0133】

であり、

R^{1~7} は、R⁸ または下記：

【0134】

【化52】



40

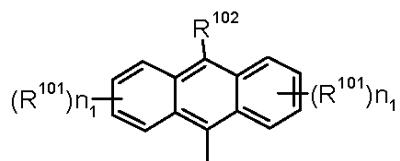
【0135】

の基であり、

R^{1~0} は、R⁸ または下記：

【0136】

【化53】



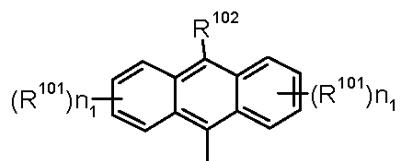
【0137】

の基であり、

R¹~⁷は、R¹~⁷または下記：

【0138】

【化54】

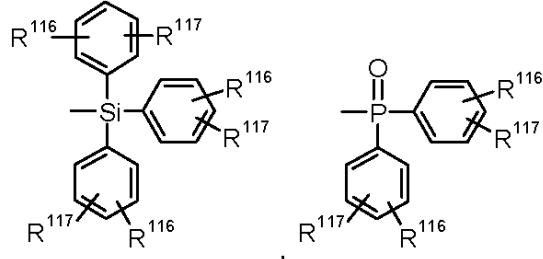


【0139】

の基であり、ここで、n₁は、0または1、2、3もしくは4の整数であり、n₂は、0または1、2もしくは3の整数であり、n₃は、0または1、2、3、4もしくは5の整数であり、R¹~⁰¹、R¹~⁰²およびR¹~⁰³は、互いに独立して、場合により-O-で中断されていてもよいC₁~C₂~C₅アルキル、またはC₁~C₂~C₅アルコキシであり；Z¹およびZ²は、上記で定義されたとおりであり、好ましくは、互いに独立して、下記：

【0140】

【化55】

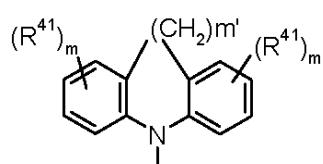


【0141】

であり、とりわけ下記式：

【0142】

【化56】

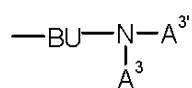


【0143】

の基であり；m'は、0、1もしくは2、-N A¹ A¹または下記：

【0144】

【化57】



10

20

30

40

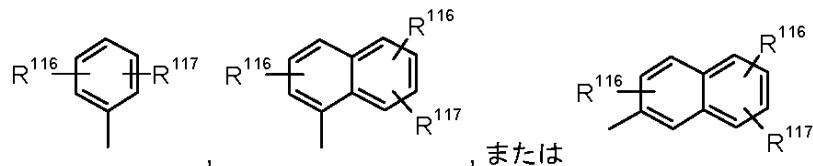
50

【0145】

の基であり、ここで、A¹、A^{1'}、A³およびA^{3'}は、互いに独立して、下記：

【0146】

【化58】



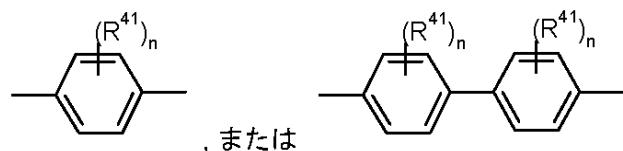
【0147】

10
であり、R¹¹¹⁶およびR¹¹¹⁷は、互いに独立して、場合により-O-で中断されていてもよいC₁～C₂～5アルキル、またはC₁～C₂～5アルコキシであり；

Buは、下記：

【0148】

【化59】



20

【0149】

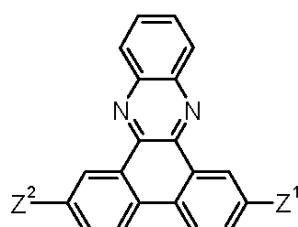
であり、ここでR⁴¹は、それぞれの場合において同一または異なっていることができ、場合により-O-で中断されていてもよいC₁～C₂～5アルキル、またはC₁～C₂～5アルコキシであり；nは、0、1または2である。

【0150】

本発明の別の実施態様において、下記式：

【0151】

【化60】



30

【0152】

[式中、Z¹およびZ²は、上記で定義されたとおりである]で示される化合物を含むELデバイスが好ましい。

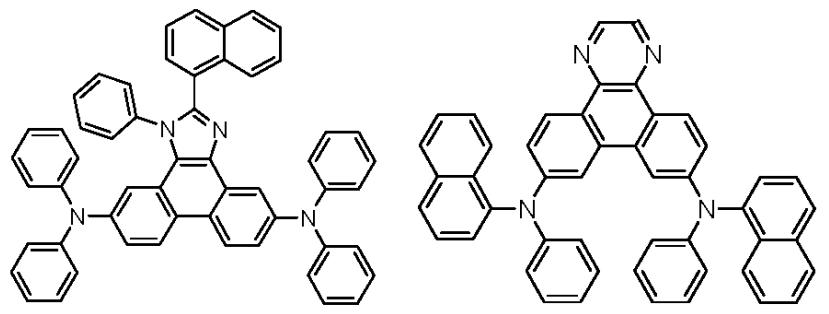
【0153】

特に好ましい化合物の例が、下記に示されている。

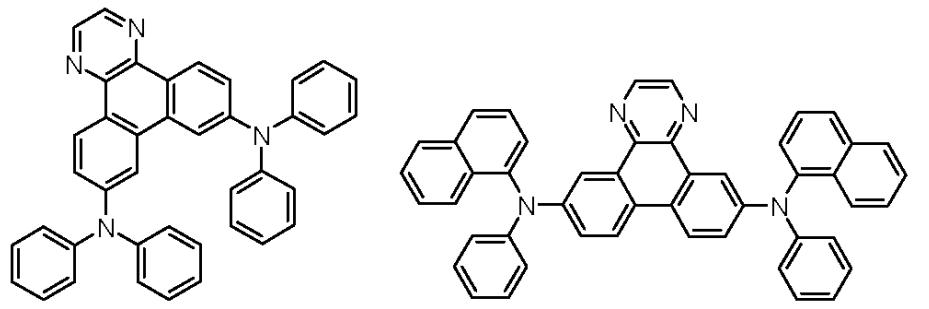
【0154】

40

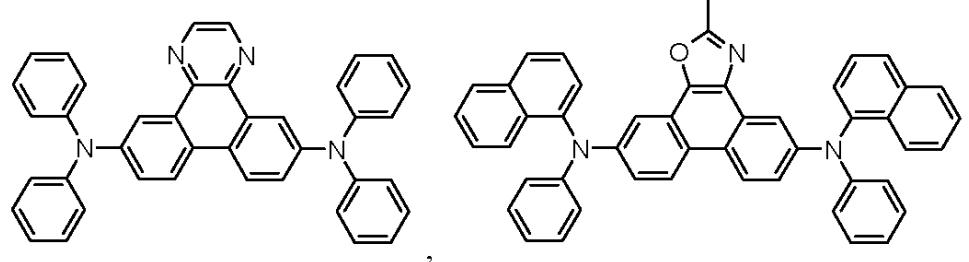
【化 6 1】



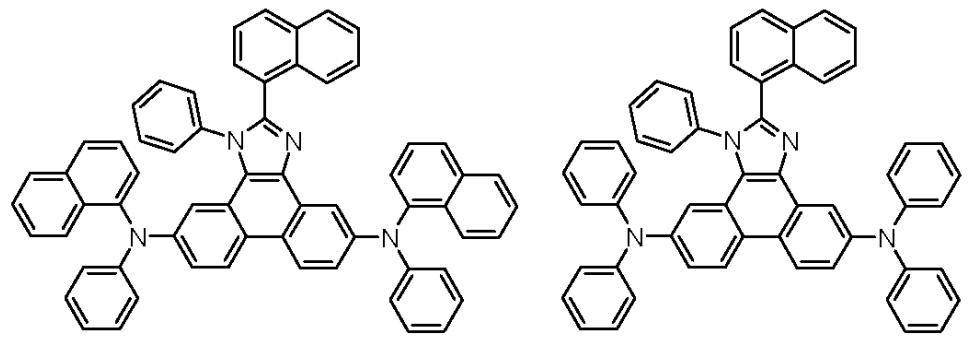
10

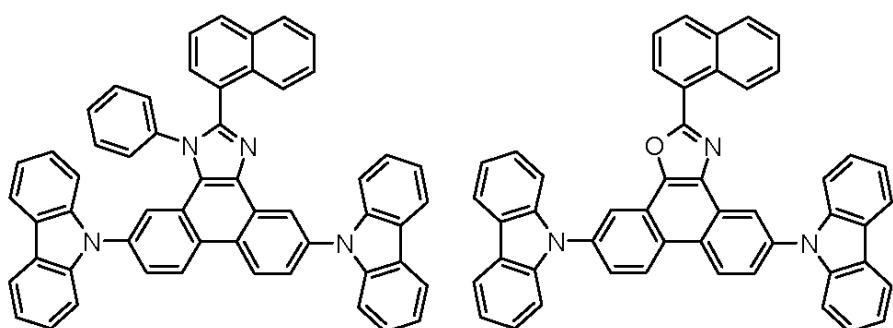
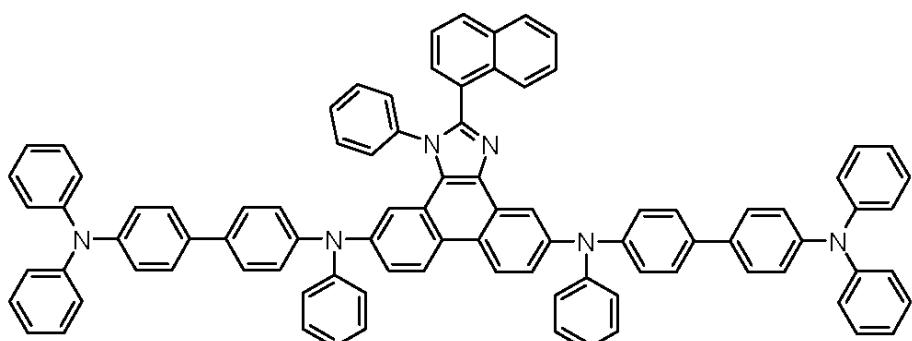
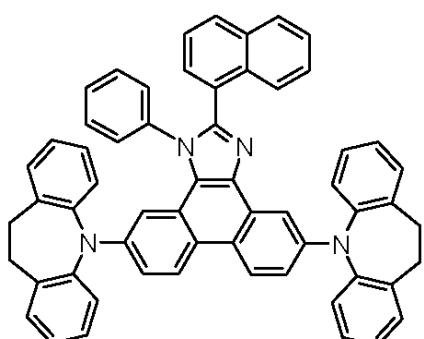
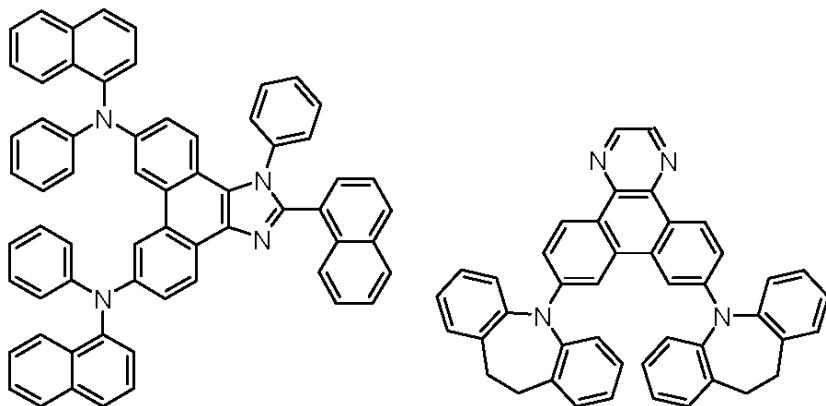


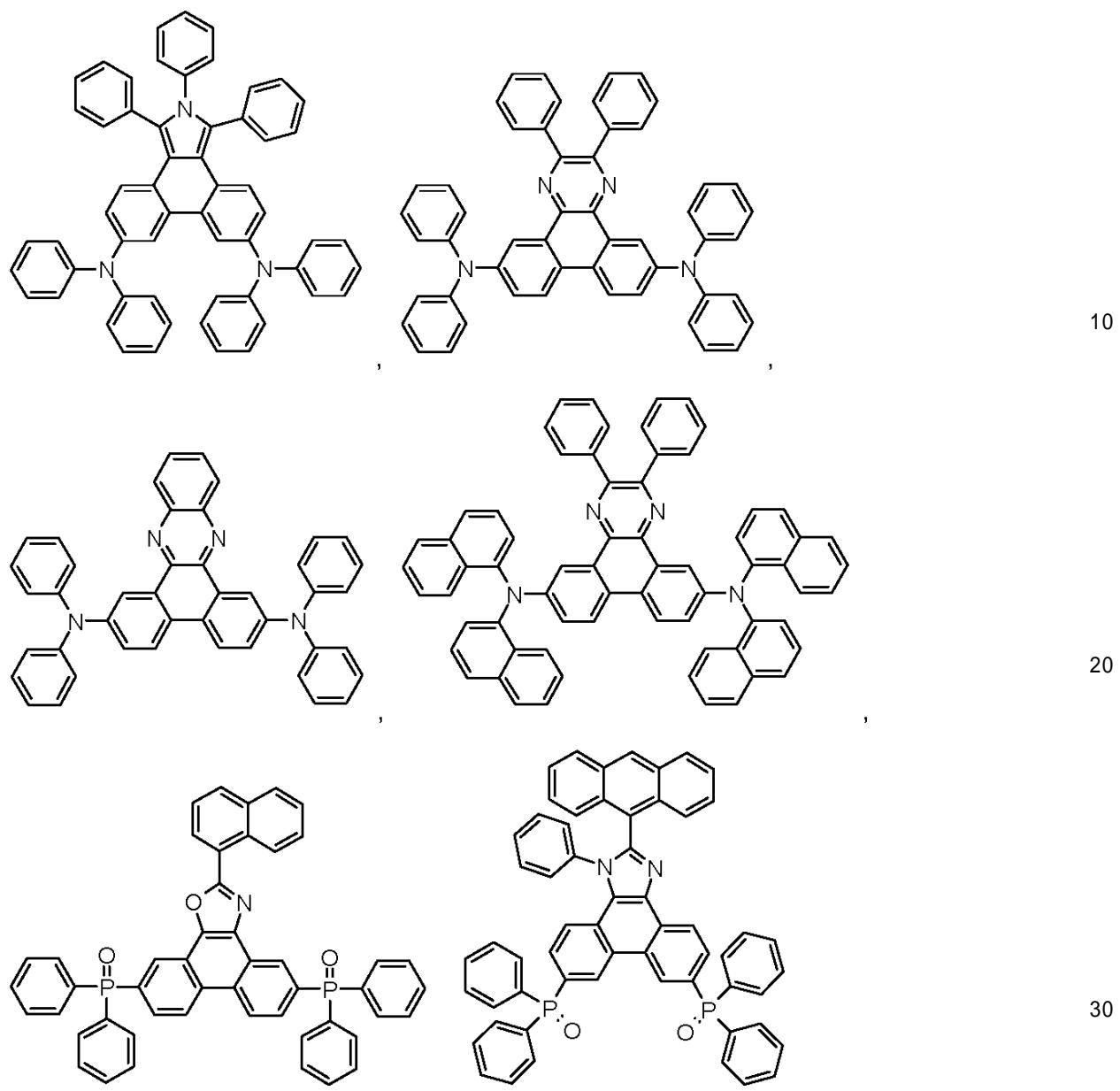
20

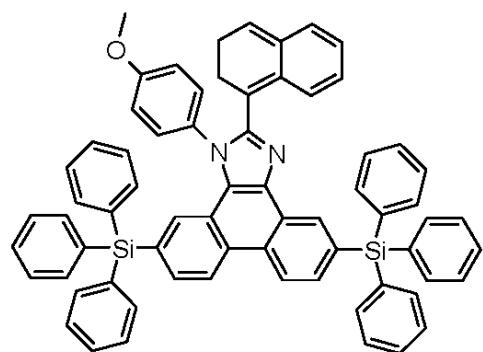


30

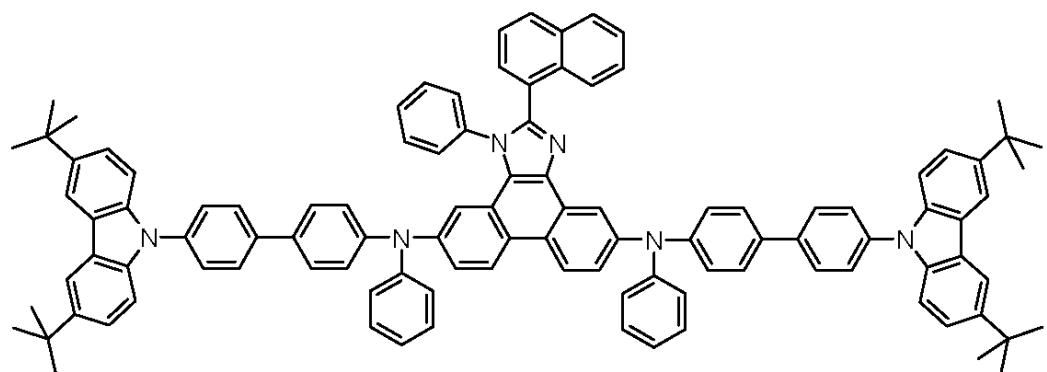




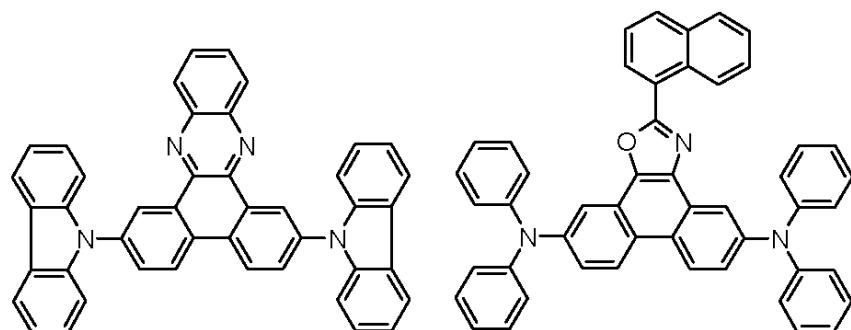




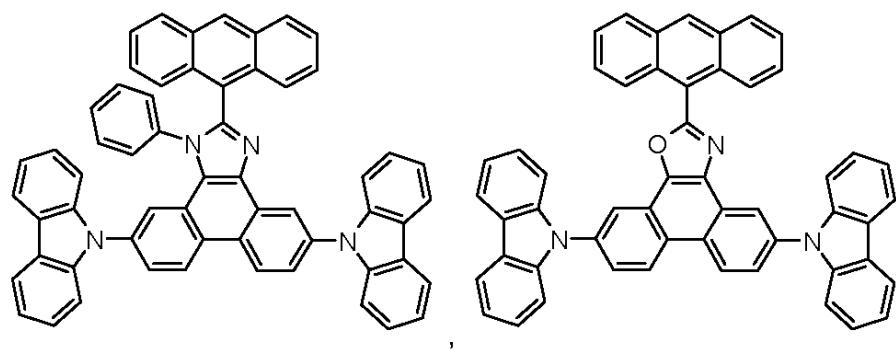
10



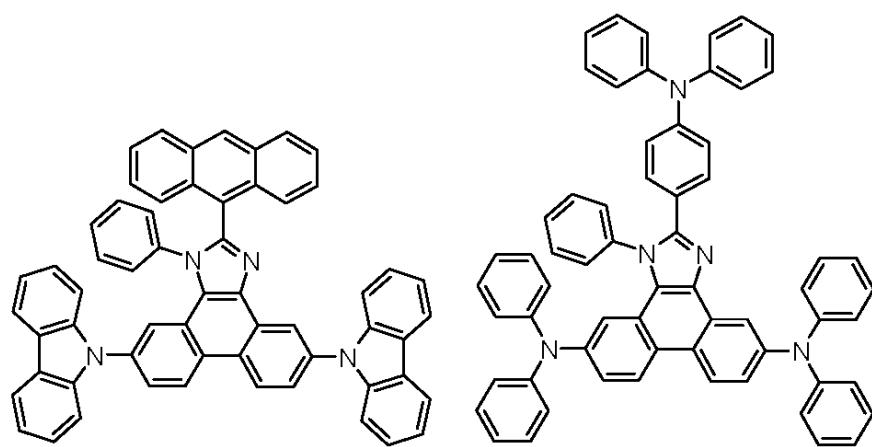
20



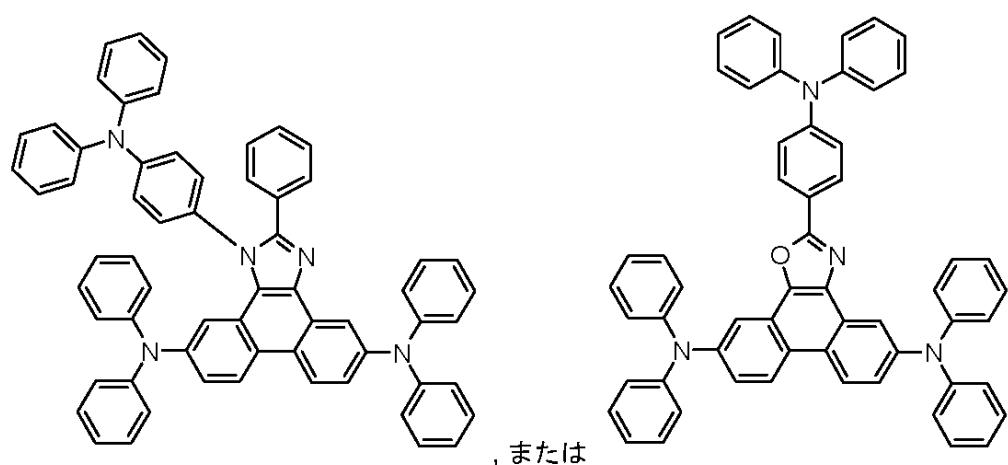
30



40



10



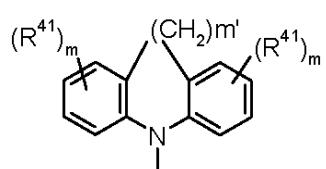
20

【0155】

Z¹ および Z² が、互いに独立して、-N A¹ A¹’ または下記：

【0156】

【化62】



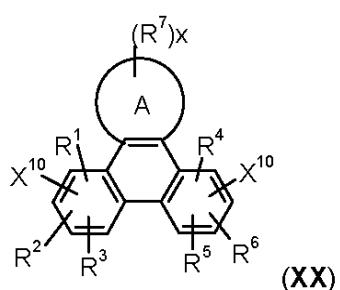
30

【0157】

である式Iの化合物は、例えば、下記式：

【0158】

【化63】



40

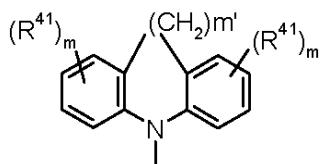
【0159】

〔式中、X¹~¹⁰ は、プロモ、ヨード、好ましくはヨードのようなハロゲンを表す〕
で示される化合物を、式：H N A¹ A¹’ または下記：

【0160】

50

【化64】



【0161】

で示される化合物と、水素化ナトリウム、炭酸カリウムまたは炭酸ナトリウムのような塩基および銅(0)または銅(I)(例えば、銅、銅-青銅、臭化ヨウ化銅または臭化銅)の存在下、トルエン、ジメチルホルムアミドまたはジメチルスルホキシドのような溶媒中で反応させる方法によって調製することができ、式中、R⁷、X、m'、A、A¹、A¹、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁴¹およびmは、上記で定義されたとおりである。Ullmann縮合と呼ばれるこの反応は、触媒として銅を使用するYamamoto & Kurata, Chem. and Industry, 737-738 (1981), J. Mater. Chem. 14 (2004) 2516, H. B. Goodbrand et al., J. Org. Chem. 64 (1999) 670 および K. D. Belfield et al., J. Org. Chem. 65 (2000) 4475において記載されている。追加的なパラジウム触媒を、M. D. Charles et al., Organic Lett. 7 (2005) 3965, A. F. Littke et al., Angew. Chem. Int. Ed. 41 (2002) 4176およびそれに引用されている文献において記載されているように、アリールハロゲン化合物とアミンとのカップリングに使用することができる。

【0162】

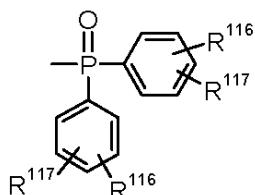
式XXの化合物は、国際公開公報第06/097419号もしくはPCT欧州特許公報第2007/056702号により知られているか、または本明細書に記載されている方法に従ってもしくは類似して調製することができる。

【0163】

Z¹およびZ²が、下記：

【0164】

【化65】



【0165】

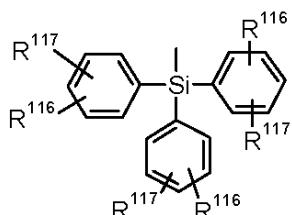
の基である化合物は、P. A. Vecchi et al., Org. Lett. 8 (2006) 4211-4214に従って調製することができる。

【0166】

Z¹およびZ²が、下記：

【0167】

【化66】



【0168】

の基である化合物は、米国特許出願公開第2005/0175857号の実施例IVに従って調製することができる。

10

20

30

40

50

【0169】

ハロゲンは、フッ素、塩素、臭素およびヨウ素である。

【0170】

$C_1 \sim C_{2,5}$ アルキルは、可能であれば、典型的には直鎖または分岐鎖である。例は、メチル、エチル、n-プロピル、イソプロピル、n-ブチル、sec.-ブチル、イソブチル、tert.-ブチル、n-ペンチル、2-ペンチル、3-ペンチル、2,2-ジメチルプロピル、1,1,3,3-テトラメチルペンチル、n-ヘキシル、1-メチルヘキシル、1,1,3,3-ヘキサメチルヘキシル、n-ヘプチル、イソヘプチル、1,1,3,3-テトラメチルブチル、1-メチルヘプチル、3-メチルヘプチル、n-オクチル、1,1,3,3-テトラメチルブチルおよび2-エチルヘキシル、n-ノニル、デシル、ウンデシル、ドデシル、トリデシル、テトラデシル、ペンタデシル、ヘキサデシル、ヘプタデシル、オクタデシル、エイコシル、ヘネイコシル、ドコシル、テトラコシルまたはペンタコシルである。 $C_1 \sim C_8$ アルキルは、典型的には、メチル、エチル、n-プロピル、イソプロピル、n-ブチル、sec.-ブチル、イソブチル、tert.-ブチル、n-ペンチル、2-ペンチル、3-ペンチル、2,2-ジメチル-プロピル、n-ヘキシル、n-ヘプチル、n-オクチル、1,1,3,3-テトラメチルブチルおよび2-エチルヘキシルである。 $C_1 \sim C_4$ アルキルは、典型的には、メチル、エチル、n-プロピル、イソプロピル、n-ブチル、sec.-ブチル、tert.-ブチルである。

【0171】

$C_1 \sim C_{2,5}$ アルコキシ基は、直鎖または分岐鎖のアルコキシ基であり、例えば、メトキシ、エトキシ、n-プロポキシ、イソプロポキシ、n-ブトキシ、sec.-ブトキシ、tert.-ブトキシ、アミルオキシ、イソアミルオキシまたはtert-アミルオキシ、ヘプチルオキシ、オクチルオキシ、イソオクチルオキシ、ノニルオキシ、デシルオキシ、ウンデシルオキシ、ドデシルオキシ、テトラデシルオキシ、ペンタデシルオキシ、ヘキサデシルオキシ、ヘプタデシルオキシおよびオクタデシルオキシである。 $C_1 \sim C_8$ アルコキシの例は、メトキシ、エトキシ、n-プロポキシ、イソプロポキシ、n-ブトキシ、sec.-ブトキシ、イソブトキシ、tert.-ブトキシ、n-ペンチルオキシ、2-ペンチルオキシ、3-ペンチルオキシ、2,2-ジメチルプロポキシ、n-ヘキシルオキシ、n-ヘプチルオキシ、n-オクチルオキシ、1,1,3,3-テトラメチルブトキシおよび2-エチルヘキシルオキシであり、好ましくは、典型的には、メトキシ、エトキシ、n-プロポキシ、イソプロポキシ、n-ブトキシ、sec.-ブトキシ、イソブトキシ、tert.-ブトキシのような $C_1 \sim C_4$ アルコキシである。用語「アルキルチオ基」は、エーテル架橋において酸素原子が硫黄原子に代えられていることを除いて、アルコキシ基と同じ基を意味する。

【0172】

$C_2 \sim C_{2,5}$ アルケニル基は、例えば、ビニル、アリル、メタリル、イソプロペニル、2-ブテニル、3-ブテニル、イソブテニル、n-ペンタ-2,4-ジエニル、3-メチル-ブタ-2-エニル、n-オクタ-2-エニル、n-ドデカ-2-エニル、イソドデセニル、n-ドデカ-2-エニルまたはn-オクタデカ-4-エニルのような、直鎖または分岐鎖のアルケニル基である。

【0173】

$C_{2,2,4}$ アルキニルは、直鎖状は分岐鎖であり、好ましくは $C_{2,2,8}$ アルキニルであり、これは、例えばエチニル、1-プロピン-3-イル、1-ブチン-4-イル、1-ペンチン-5-イル、2-メチル-3-ブチン-2-イル、1,4-ペンタジイン-3-イル、1,3-ペンタジイン-5-イル、1-ヘキシン-6-イル、シス-3-メチル-2-ペンテン-4-イン-1-イル、1,3-ヘキサジイン-5-イル、1-オクチン-8-イル、1-ノニン-9-イル、1-デシン-10-イルまたは1-テトラコシン-24-イルのように、非置換であるかまたは置換されていてもよい。

【0174】

$C_1 \sim C_{1,8}$ ペルフルオロアルキル、特に $C_1 \sim C_4$ ペルフルオロアルキルは、例えば

10

20

30

40

50

、 - C F₃、 - C F₂ C F₃、 - C F₂ C F₂ C F₃、 - C F (C F₃)₂、 - (C F₂)₃ C F₃ および - C (C F₃)₃ のような、分岐鎖または非分岐鎖のラジカルである。

【0175】

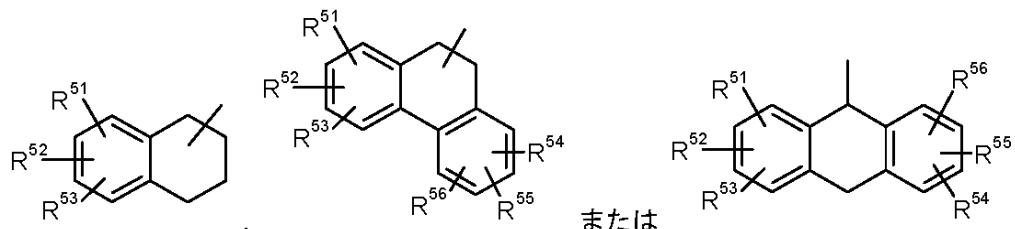
用語「ハロアルキル、ハロアルケニルおよびハロアルキニル」は、トリフルオロメチルなどのように、上記のアルキル基、アルケニル基およびアルキニル基がハロゲンにより部分的または完全に置換されている基を意味する。「アルデヒド基、ケトン基、エステル基、カルバモイル基およびアミノ基」には、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、アラルキル基または複素環基により置換されているものが含まれ、ここでアルキル基、シクロアルキル基、アリール基、アラルキル基および複素環基は、非置換であるかまたは置換されていてもよい。用語「シリル基」は、トリメチルシリル基のような、式 : - S i R⁶₂ R⁶₃ R⁶₄ の基を意味し、式中、R⁶₂、R⁶₃ および R⁶₄ は、互いに独立して、C₁ ~ C₈ アルキル基、特に C₁ ~ C₄ アルキル基、C₆ ~ C₂₄ アリール基または C₇ ~ C₁₂ アラルキル基である。用語「シロキサニル」基は、トリメチルシロキサニル基のような、式 : - O - S i R⁶₂ R⁶₃ R⁶₄ の基を意味し、式中、R⁶₂、R⁶₃ および R⁶₄ は、上記で定義されたとおりである。

【0176】

用語「シクロアルキル基」は、典型的には、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチル、シクロオクチル、シクロノニル、シクロデシル、シクロウンデシル、シクロドデシル、好ましくはシクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチルまたはシクロオクチルのような C₅ ~ C₁₂ シクロアルキルであり、これは非置換であるかまたは置換されていてもよい。用語「シクロアルケニル基」は、シクロペンテニル、シクロペンタジエニル、シクロヘキセニルなどのような、1つ以上の二重結合を含む不飽和脂環式炭化水素基を意味し、これは非置換であるかまたは置換されていてもよい。シクロアルキル基、特にシクロヘキシル基は、C₁ ~ C₄ アルキル、ハロゲンおよびシアノで1 ~ 3回置換されていることができるフェニルにより1または2回縮合ができる。そのような縮合シクロヘキシル基の例は、下記 :

【0177】

【化67】

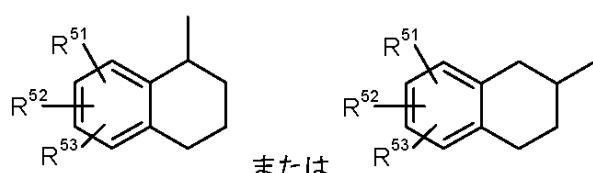


【0178】

であり、特に下記 :

【0179】

【化68】



【0180】

であり、ここで、R⁵₁、R⁵₂、R⁵₃、R⁵₄、R⁵₅ および R⁵₆ は、互いに独立して、C₁ ~ C₈ アルキル、C₁ ~ C₈ アルコキシ、ハロゲンおよびシアノであり、特に水素である。

【0181】

アリールは、通常、C₆ ~ C₃₀ アリール、好ましくは C₆ ~ C₂₄ アリールであり、

場合により置換されていることができ、例えば、フェニル、4-メチルフェニル、4-メトキシフェニル、ナフチル、特に1-ナフチルもしくは2-ナフチル、ビフェニリル、テルフェニリル、ピレニル、2-もしくは9-フルオレニル、フェナントリル、アントリル、テトラシル、ペンタシル、ヘキサシル、またはクアデルフェニリルであり、非置換であるかまたは置換されていてもよい。

【0182】

用語「アラルキル基」は、典型的には、ベンジル、2-ベンジル-2-プロピル、-フェニル-エチル、-ジメチルベンジル、-フェニル-ブチル、-ジメチル-フェニル-ブチル、-フェニル-ドデシル、-フェニル-オクタデシル、-フェニル-エイコシルまたは-フェニル-ドデシルのようなC₇~C₂₄アラルキル、好ましくは、ベンジル、2-ベンジル-2-プロピル、-フェニル-エチル、-ジメチルベンジル、-フェニル-ブチル、-ジメチル-フェニル-ブチル、-フェニル-ドデシルまたは-フェニル-オクタデシルのようなC₇~C₁₈アラルキル、特に好ましくは、ベンジル、2-ベンジル-2-プロピル、-フェニル-エチル、-ジメチルベンジル、-フェニル-ブチルまたは-ジメチル-フェニル-ブチルのようなC₇~C₁₂アラルキルであり、ここで脂肪族炭化水素基と芳香族炭化水素基は、両方とも非置換であるかまたは置換されていてもよい。

【0183】

用語「アリールエーテル基」は、典型的には、C₆~C₂₄アリールオキシ基であり、すなわち、例えばフェノキシまたは4-メトキシフェニルのようなO-C₆~C₂₄アリールである。用語「アリールチオエーテル基」は、典型的には、C₆~C₂₄アリールチオ基であり、すなわち、例えばフェニルチオまたは4-メトキシフェニルチオのようなS-C₆~C₂₄アリールである。用語「カルバモイル基」は、典型的には、C₁~C₁₈カルバモイルラジカル、好ましくはC₁~C₈カルバモイルラジカルであり、これは、例えばカルバモイル、メチルカルバモイル、エチルカルバモイル、n-ブチルカルバモイル、tert-ブチルカルバモイル、ジメチルカルバモイルオキシ、モルホリノカルバモイルまたはピロリジノカルバモイルのように、非置換であるかまたは置換されていてもよい。

【0184】

アルキルアミノ基、ジアルキルアミノ基、アルキルアリールアミノ基、アリールアミノ基およびジアリール基における用語「アリール」および「アルキル」は、典型的には、それぞれC₁~C₂₅アルキルおよびC₆~C₂₄アリールである。

【0185】

アルキルアリールは、アルキル置換アリールラジカル、特にC₇~C₁₂アルキルアリールを意味する。例は、3-メチル-もしくは4-メチルフェニルのようなトリル、または3,4-ジメチルフェニルもしくは3,5-ジメチルフェニルのようなキシリルである。

【0186】

ヘテロアリールは、典型的にはC₂~C₂₆ヘテロアリールであり、すなわち、窒素、酸素または硫黄が考えられるヘテロ原子である、5~7個の環原子を持つ環であるか、または縮合環系であり、典型的には、少なくとも6個の共役電子を有する5~30個の原子を持つ不飽和複素環基であり、例えば、チエニル、ベンゾ[b]チエニル、ジベンゾ[b,d]チエニル、チアントレニル、フリル、フルフリル、2H-ピラニル、ベンゾフラニル、イソベンゾフラニル、ジベンゾフラニル、フェノキシチエニル、ピロリル、イミダゾリル、ピラゾリル、ピリジル、ビピリジル、トリアジニル、ピリミジニル、ピラジニル、ピリダジニル、インドリジニル、イソインドリル、インドリル、インダゾリル、ブリニル、キノリジニル、キノリル、イソキノリル、フタラジニル、ナフチリジニル、キノキサリニル、キナゾリニル、シンノリニル、ブテリジニル、カルバゾリル、カルボリニル、ベンゾトリアゾリル、ベンゾオキサゾリル、フェナントリジニル、アクリジニル、ピリミジニル、フェナントロリニル、フェナジニル、イソチアゾリル、フェノチアジニル、イソオキサゾリル、フラザニルまたはフェノキサジニルであり、これらは非置換であるかまたは

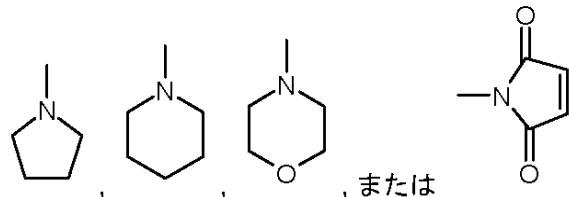
置換されていることができる。

【0187】

$R^{2,5}$ および $R^{2,6}$ によりそれぞれ形成される 5 員または 6 員環の例は、窒素、酸素および硫黄から選択される 1 つの追加のヘテロ原子を有することができる、3 ~ 5 個の炭素原子を有するヘテロシクロアルカンまたはヘテロシクロアルケンであり、例えば下記：

【0188】

【化 69】



10

【0189】

であり、これは二環式系の一部であることができ、例えば、下記：

【0190】

【化 70】



20

【0191】

である。

【0192】

上記の基のために可能である置換基は、 $C_1 \sim C_8$ アルキル、ヒドロキシリル基、メルカブト基、 $C_1 \sim C_8$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_8$ アルキルチオ、ハロゲン、ハロ- $C_1 \sim C_8$ アルキル、シアノ基、アルデヒド基、ケトン基、カルボキシリル基、エステル基、カルバモイル基、アミノ基、ニトロ基またはシリル基である。

30

【0193】

例えば R^7 のような置換基が基において 2 回以上現れる場合、それぞれの場合において異なることができる。

【0194】

語法「 G で置換されている」は、1 つまたはそれ以上、特に 1 ~ 3 つの置換基 G が存在してもよいことを意味する。

【0195】

上記に記載されているように、前述の基は、 E で置換されていてもよい、および / または、望ましい場合は、 D で中断されていてもよい。中断は、当然のことながら、基が、単一結合により互いに結合している少なくとも 2 つの炭素原子を含む場合にのみ可能であり； $C_6 \sim C_{1,8}$ アリールは中断されておらず；中断されているアリールアルキルまたはアルキルアリールは、アルキル部分に D 単位を含んでいる。1 つ以上の E で置換されているおよび / または 1 つ以上の単位 D で中断されている $C_1 \sim C_{1,8}$ アルキルは、例えば、 $(CH_2CH_2O)_{1,9}-R^x$ (ここで、 R^x は、 H または $C_1 \sim C_{1,0}$ アルキルもしくは $C_2 \sim C_{1,0}$ アルカノイル (例は、 $CO-CH(C_2H_5)C_4H_9$) である)、 $CH_2-CH(OR^y)-CH_2-O-R^y$ (ここで、 R^y は、 $C_1 \sim C_{1,8}$ アルキル、 $C_5 \sim C_{1,2}$ シクロアルキル、フェニル、 $C_7 \sim C_{1,5}$ フェニルアルキルであり、そして R^y は、 R^y と同じ定義を包含するかまたは H である)；

$C_1 \sim C_8$ アルキレン- $COOR^z$ 、例は、 CH_2COOR^z 、 $CH(CH_3)COO$

40

50

R^z 、 $C(CH_3)_2COOR^z$ （ここで、 R^z は、H、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $(CH_2CH_2O)_{1 \sim 9}$ - R^x であり、そして R^x は、上記で示された定義を包含する）；
 $CH_2CH_2-O-CO-CH=CH_2$ ； $CH_2CH(OH)CH_2-O-CO-C(CH_3)=CH_2$ である。

【0196】

好ましいアリーレンラジカルは、1,4-フェニレン、2,5-トリレン、1,4-ナフチレン、1,9-アントラシレン、2,7-フェナントリレンおよび2,7-ジヒドロフェナントリレンである。

【0197】

好ましいヘテロアリーレンラジカルは、2,5-ピラジニレン、3,6-ピリダジニレン、2,5-ピリジニレン、2,5-ピリミジニレン、1,3,4-チアジアゾール-2,5-イレン、1,3-チアゾール-2,4-イレン、1,3-チアゾール-2,5-イレン、2,4-チオフェニレン、2,5-チオフェニレン、1,3-オキサゾール-2,4-イレン、1,3-オキサゾール-2,5-イレンおよび1,3,4-オキサジアゾール-2,5-イレン、2,5-インデニレンおよび2,6-インデニレンである。

【0198】

式Iの化合物を、特にリン光性化合物のホストとして、有機発光ダイオード(OLED)において使用することができる。したがって、本発明は、式Iの化合物を含むエレクトロルミネセンスデバイスにも関する。好ましい実施態様において、エレクトロルミネセンスデバイスは、陰極、陽極、その間に、ホスト材料を含有する発光層、およびリン光性発光材料を含み、ここでホスト材料は、式Iの化合物である。

【0199】

適切には、OLEDデバイスの発光層は、ホスト材料および1つ以上のゲスト材料を発光のために含む。少なくとも1つのホスト材料は、式Iの化合物を含む化合物である。発光ゲスト材料は、通常、ホスト材料の量よりも少ない量で存在し、典型的にはホストの15重量%まで、より典型的にはホストの0.1~10重量%、一般的にはホストの2~8%の量で存在する。都合よくは、リン光性錯体ゲスト材料をリン光材料として本明細書において参照することができる。発光層は、輸送と発光の特性を組み合わせた単一材料を含んでもよい。発光材料がドーパントであるか、または主要な構成成分であるかに関わらず、発光層は、発光層の発光に同調するドーパントのような他の材料を含んでもよい。発光層は、組み合わされて所望のスペクトルの光を発光することができる複数の発光材料を含んでもよい。

【0200】

リン光材料のための他のホスト材料

本発明に有用なホスト材料は、単独でまたは他のホスト材料と組み合わせて使用することができる。他のホスト材料は、三重項励起をホスト材料からリン光材料へ効率的に移動することができるよう選択されるべきである。適切なホスト材料は、国際公開公報第00/70655号、同第01/39234号、同第01/93642号、同第02/074015号、同第02/15645号および米国特許出願公開第2002/0117662号に記載されている。適切なホストには、特定のアリールアミン、トリアゾール、インドールおよびカルバゾール化合物が含まれる。ホストの例は、4,4'-N,N'-ジカルバゾール-ビフェニル(CBP)、2,2'-ジメチル-4,4'-N,N'-ジカルバゾール-ビフェニル、m-(N,N'-ジカルバゾール)ベンゼンおよびポリ(N-ビニルカルバゾール)であり、これらの誘導体を含む。

【0201】

望ましいホスト材料は、連続皮膜を形成することができる。発光層は、デバイスの皮膜形態、電気特性、発光効率および寿命を改善するために、2つ以上のホスト材料を含有してもよい。発光層は、良好な正孔輸送特性を有する第1ホスト材料および良好な電子輸送特性を有する第2ホスト材料を含有してもよい。

【0202】

10

20

30

40

50

リン光材料

リン光材料は、単独で、または特定の場合では、同じまたは異なる層のいずれかにおいて、互いに組み合わせて使用することができる。リン光性および関連する材料の例は、国際公開公報第00/57676号、国際公開公報第00/70655号、国際公開公報第01/41512号、国際公開公報第02/15645号、米国特許出願公開第2003/0017361号、国際公開公報第01/93642号、国際公開公報第01/39234号、米国特許第6,458,475号、国際公開公報第02/071813号、米国特許第6,573,651号、米国特許出願公開第2002/0197511号、国際公開公報第02/074015号、米国特許第6,451,455号、米国特許出願公開第2003/0072964号、米国特許出願公開第2003/0068528号、米国特許第6,413,656号、同第6,515,298号、同第6,451,415号、同第6,097,147号、米国特許出願公開第2003/0124381号、米国特許出願公開第2003/0059646号、米国特許出願公開第2003/0054198号、欧州特許公報第1239526号、欧州特許公報第1238981号、欧州特許公報第1244155号、米国特許出願公開第2002/0100906号、米国特許出願公開第2003/0068526号、米国特許出願公開第2003/0068535号、特開2003-073387、特開2003-073388、米国特許出願公開第2003/0141809号、米国特許出願公開第2003/0040627号、特開2003-059667、特開2003-073665および米国特許出願公開第2002/0121638号に記載されている。10 20

【0203】

緑色発光fac-トリス(2-フェニルピリジナト-N, C²⁻)イリジウム(I II)およびビス(2-フェニルピリジナト-N, C²⁻)イリジウム(I II)(アセチルアセトネート)のような、IrL₃およびIrL₂L'型のシクロメタル化Ir(I II)錯体の発光波長は、シクロメタル化リガンドLの適切な位置において電子供与基もしくは電子求引基を置換することにより、またはシクロメタル化リガンドL'に対して異なる複素環を選択することによりシフトすることができる。発光波長は、補助リガンドL'を選択することによりシフトすることもできる。赤色発光体の例は、ビス(2-(2'-ベンゾチエニル)ピリジナト-N, C³⁻)イリジウム(E 1)(アセチルアセトネート)およびトリス(1-フェニルイソキノリナト-N, C)イリジウム(I II)である。青色発光の例は、ビス(2-(4,6-ジフロウロフェニル)-ピリジナト-N, C²⁻)イリジウム(I II)(ピコリネート)である。30

【0204】

リン光材料としてビス(2-(2'-ベンゾ[4,5-a]チエニル)ピリジナト-N, C³⁻)イリジウム(アセチルアセトネート)[Btp₂Ir(acac)]を使用して、赤色電気リン光が報告されている(Adachi, C., Lamansky, S., Baldo, M. A., Kwong, R. C., Thompson, M. E., and Forrest, S. R., App. Phys. Lett., 78, 1622 1624 (2001))。

【0205】

他の重要なリン光材料には、シス-ビス(2-フェニルピリジナト-N, C²⁻)白金(I II)、シス-ビス(2-(2'-チエニル)ピリジナト-N, C³⁻)白金(I II)、シス-ビス(2-(2'-チエニル)キノリナト-N, C⁵⁻)白金(I II)または(2-(4,6-ジフロウロフェニル)ピリジナト-N, C²⁻)白金(I II)アセチルアセトネートのようなシクロメタル化Pt(I II)錯体が含まれる。2, 3, 7, 8, 12, 13, 17, 18-オクタエチル-21H, 23H-ポルフィン白金(H)のようなPt(I II)ポルフィリン錯体も、有用なリン光材料である。40

【0206】

有用なリン光材料のさらに別の例には、Th³⁺およびEu³⁺のような三価ランタニドの配位錯体が含まれる(J. Kido et al, Appl. Phys. Lett., 65, 2124 (1994))。

【0207】

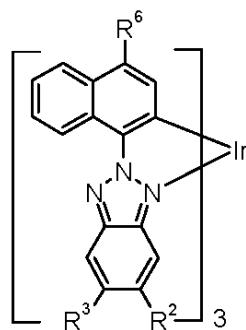
他の重要なリン光材料は、国際公開公報第06/000544号および欧州特許出願第07102949.0号に記載されている。

【0208】

リン光材料の例は、化合物のA-1～B-234、B-1～B-234、C-1～C-44およびD-1～D-234であり、これらは欧州特許出願第07102949.0号に記載されている。

【0209】

【表1】



10

化合物	R ²	R ³	R ⁶
A-1	H	H	H
A-2	H	H	OCH ₃
A-3	H	H	OCH ₂ CH ₃
A-4	H	H	O-n-ブチル
A-5	H	H	O-iso-ブチル
A-6	H	H	O-2-ブチル
A-7	H	H	O-2-エチルヘキシル
A-8	H	H	N(CH ₃) ₂
A-9	H	H	NPh ₂
A-10	H	CF ₃	H
A-11	CF ₃	H	H
A-12	H	CF ₃	OCH ₃
A-13	CF ₃	H	OCH ₃
A-14	H	CF ₃	OCH ₂ CH ₃
A-15	CF ₃	H	OCH ₂ CH ₃
A-16	H	CF ₃	O-n-ブチル
A-17	CF ₃	H	O-n-ブチル
A-18	H	CF ₃	O-iso-ブチル
A-19	CF ₃	H	O-iso-ブチル
A-20	H	CF ₃	O-2-ブチル
A-21	CF ₃	H	O-2-ブチル
A-22	H	CF ₃	O-2-エチルヘキシル
A-23	CF ₃	H	O-2-エチルヘキシル
A-24	H	CF ₃	N(CH ₃) ₂
A-25	CF ₃	H	N(CH ₃) ₂

20

30

40

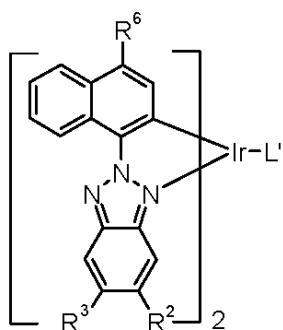
A-26	H	CF ₃	NPh ₂
A-27	CF ₃	H	NPh ₂
A-28	H	CN	H
A-29	CN	H	H
A-30	H	CN	OCH ₃
A-31	CN	H	OCH ₂ CH ₃
A-32	H	CN	OCH ₂ CH ₃
A-33	CN	H	O-n-ブチル
A-34	H	CN	O-n-ブチル
A-35	CN	H	O-iso-ブチル
A-36	H	CN	O-iso-ブチル
A-37	CN	H	O-2-ブチル
A-38	H	CN	O-2-ブチル
A-39	CN	H	O-2-エチルヘキシル
A-40	H	CN	O-2-エチルヘキシル
A-41	CN	H	N(CH ₃) ₂
A-42	H	CN	N(CH ₃) ₂
A-43	CN	H	NPh ₂
A-44	H	CN	NPh ₂

10

20

【 0 2 1 0 】

【表2】



10

化合物	L'	R ²	R ³	R ⁶
B-1	A ¹⁾	H	H	H
B-2	A ¹⁾	H	H	OCH ₃
B-3	A ¹⁾	H	H	OCH ₂ CH ₃
B-4	A ¹⁾	H	H	O-n-ブチル
B-5	A ¹⁾	H	H	O-iso-ブチル
B-6	A ¹⁾	H	H	O-2-ブチル
B-7	A ¹⁾	H	H	O-2-エチルヘキシル
B-8	A ¹⁾	H	H	N(CH ₃) ₂
B-9	A ¹⁾	H	H	NPh ₂
B-10	A ¹⁾	H	CF ₃	H
B-11	A ¹⁾	CF ₃	H	H
B-12	A ¹⁾	H	CF ₃	OCH ₃
B-13	A ¹⁾	CF ₃	H	OCH ₃
B-14	A ¹⁾	H	CF ₃	OCH ₂ CH ₃
B-15	A ¹⁾	CF ₃	H	OCH ₂ CH ₃
B-16	A ¹⁾	H	CF ₃	O-n-ブチル
B-17	A ¹⁾	CF ₃	H	O-n-ブチル
B-18	A ¹⁾	H	CF ₃	O-iso-ブチル
B-19	A ¹⁾	CF ₃	H	O-iso-ブチル
B-20	A ¹⁾	H	CF ₃	O-2-ブチル
B-21	A ¹⁾	CF ₃	H	O-2-ブチル
B-22	A ¹⁾	H	CF ₃	O-2-エチルヘキシル
B-23	A ¹⁾	CF ₃	H	O-2-エチルヘキシル
B-24	A ¹⁾	H	CF ₃	N(CH ₃) ₂
B-25	A ¹⁾	CF ₃	H	N(CH ₃) ₂

20

30

40

B-26	A ¹⁾	H	CF ₃	NPh ₂
B-27	A ¹⁾	CF ₃	H	NPh ₂
B-28	A ¹⁾	H	CN	H
B-29	A ¹⁾	CN	H	H
B-30	A ¹⁾	CN	H	OCH ₃
B-31	A ¹⁾	H	CN	OCH ₃
B-32	A ¹⁾	CN	H	OCH ₂ CH ₃
B-33	A ¹⁾	H	CN	OCH ₂ CH ₃
B-34	A ¹⁾	CN	H	O-n-ブチル
B-35	A ¹⁾	H	CN	O-n-ブチル
B-36	A ¹⁾	CN	H	O-iso-ブチル
B-37	A ¹⁾	H	CN	O-iso-ブチル
B-38	A ¹⁾	CN	H	O-2-ブチル
B-39	A ¹⁾	H	CN	O-2-ブチル
B-40	A ¹⁾	CN	H	O-2-エチルヘキシル
B-41	A ¹⁾	H	CN	O-2-エチルヘキシル
B-42	A ¹⁾	CN	H	N(CH ₃) ₂
B-43	A ¹⁾	H	CN	N(CH ₃) ₂
B-44	A ¹⁾	CN	H	NPh ₂
B-45	A ¹⁾	H	CN	NPh ₂
B-46	B ¹⁾	H	H	H
B-47	B ¹⁾	H	H	OCH ₃
B-48	B ¹⁾	H	H	OCH ₂ CH ₃
B-49	B ¹⁾	H	H	O-n-ブチル
B-50	B ¹⁾	H	H	O-iso-ブチル
B-51	B ¹⁾	H	H	O-2-ブチル
B-52	B ¹⁾	H	H	O-2-エチルヘキシル
B-53	B ¹⁾	H	H	N(CH ₃) ₂
B-54	B ¹⁾	H	H	NPh ₂
B-55	B ¹⁾	H	CF ₃	H
B-56	B ¹⁾	CF ₃	H	H
B-57	B ¹⁾	H	CF ₃	OCH ₃
B-58	B ¹⁾	CF ₃	H	OCH ₃
B-59	B ¹⁾	H	CF ₃	OCH ₂ CH ₃
B-60	B ¹⁾	CF ₃	H	OCH ₂ CH ₃

10

20

30

40

B-61	B ¹⁾	H	CF ₃	O-n-ブチル
B-62	B ¹⁾	CF ₃	H	O-n-ブチル
B-63	B ¹⁾	H	CF ₃	O-iso-ブチル
B-64	B ¹⁾	CF ₃	H	O-iso-ブチル
B-65	B ¹⁾	H	CF ₃	O-2-ブチル
B-66	B ¹⁾	CF ₃	H	O-2-ブチル
B-67	B ¹⁾	H	CF ₃	O-2-エチルヘキシル
B-68	B ¹⁾	CF ₃	H	O-2-エチルヘキシル
B-69	B ¹⁾	H	CF ₃	N(CH ₃) ₂
B-70	B ¹⁾	CF ₃	H	N(CH ₃) ₂
B-71	B ¹⁾	H	CF ₃	NPh ₂
B-72	B ¹⁾	CF ₃	H	NPh ₂
B-73	B ¹⁾	H	CN	H
B-74	B ¹⁾	CN	H	H
B-75	B ¹⁾	CN	H	OCH ₃
B-76	B ¹⁾	H	CN	OCH ₃
B-77	B ¹⁾	CN	H	OCH ₂ CH ₃
B-78	B ¹⁾	H	CN	OCH ₂ CH ₃
B-79	B ¹⁾	CN	H	O-n-ブチル
B-80	B ¹⁾	H	CN	O-n-ブチル
B-81	B ¹⁾	CN	H	O-iso-ブチル
B-82	B ¹⁾	H	CN	O-iso-ブチル
B-83	B ¹⁾	CN	H	O-2-ブチル
B-84	B ¹⁾	H	CN	O-2-ブチル
B-85	B ¹⁾	CN	H	O-2-エチルヘキシル
B-86	B ¹⁾	H	CN	O-2-エチルヘキシル
B-87	B ¹⁾	CN	H	N(CH ₃) ₂
B-88	B ¹⁾	H	CN	N(CH ₃) ₂
B-89	B ¹⁾	CN	H	NPh ₂
B-99	B ¹⁾	H	CN	NPh ₂
B-100	C ¹⁾	H	H	H
B-101	C ¹⁾	H	H	OCH ₃
B-102	C ¹⁾	H	H	OCH ₂ CH ₃
B-103	C ¹⁾	H	H	O-n-ブチル

10

20

30

40

B-104	C ¹⁾	H	H	O-iso-ブチル
B-105	C ¹⁾	H	H	O-2-ブチル
B-106	C ¹⁾	H	H	O-2-エチルヘキシル
B-107	C ¹⁾	H	H	N(CH ₃) ₂
B-108	C ¹⁾	H	H	NPh ₂
B-109	C ¹⁾	H	CF ₃	H
B-110	C ¹⁾	CF ₃	H	H
B-111	C ¹⁾	H	CF ₃	OCH ₃
B-112	C ¹⁾	CF ₃	H	OCH ₃
B-113	C ¹⁾	H	CF ₃	OCH ₂ CH ₃
B-114	C ¹⁾	CF ₃	H	OCH ₂ CH ₃
B-115	C ¹⁾	H	CF ₃	O-n-ブチル
B-116	C ¹⁾	CF ₃	H	O-n-ブチル
B-117	C ¹⁾	H	CF ₃	O-iso-ブチル
B-118	C ¹⁾	CF ₃	H	O-iso-ブチル
B-119	C ¹⁾	H	CF ₃	O-2-ブチル
B-120	C ¹⁾	CF ₃	H	O-2-ブチル
B-121	C ¹⁾	H	CF ₃	O-2-エチルヘキシル
B-122	C ¹⁾	CF ₃	H	O-2-エチルヘキシル
B-123	C1)	H	CF ₃	N(CH ₃) ₂
B-124	C ¹⁾	CF ₃	H	N(CH ₃) ₂
B-125	C ¹⁾	H	CF ₃	NPh ₂
B-126	C ¹⁾	CF ₃	H	NPh ₂
B-127	C ¹⁾	H	CN	H
B-128	C ¹⁾	CN	H	H
B-129	C ¹⁾	CN	H	OCH ₃
B-130	C1)	H	CN	OCH ₃
B-131	C ¹⁾	CN	H	OCH ₂ CH ₃
B-132	C ¹⁾	H	CN	OCH ₂ CH ₃
B-133	C ¹⁾	CN	H	O-n-ブチル
B-134	C ¹⁾	H	CN	O-n-ブチル
B-135	C ¹⁾	CN	H	O-iso-ブチル
B-136	C ¹⁾	H	CN	O-iso-ブチル
B-137	C ¹⁾	CN	H	O-2-ブチル

10

20

30

40

B-138	C ¹⁾	H	CN	O-2-ブチル
B-139	C ¹⁾	CN	H	O-2-エチルヘキシル
B-140	C ¹⁾	H	CN	O-2-エチルヘキシル
B-141	C ¹⁾	CN	H	N(CH ₃) ₂
B-142	C ¹⁾	H	CN	N(CH ₃) ₂
B-143	C ¹⁾	H	CN	NPh ₂
B-144	C ¹⁾	CN	H	NPh ₂
B-145	D ¹⁾	H	H	H
B-146	D ¹⁾	H	H	OCH ₃
B-147	D ¹⁾	H	H	OCH ₂ CH ₃
B-148	D ¹⁾	H	H	O-n-ブチル
B-149	D1)	H	H	O-iso-ブチル
B-150	D ¹⁾	H	H	O-2-ブチル
B-151	D ¹⁾	H	H	O-2-エチルヘキシル
B-152	D ¹⁾	H	H	N(CH ₃) ₂
B-153	D ¹⁾	H	H	NPh ₂
B-154	D ¹⁾	H	CF ₃	H
B-155	D ¹⁾	CF ₃	H	H
B-156	D ¹⁾	H	CF ₃	OCH ₃
B-157	D ¹⁾	CF ₃	H	OCH ₃
B-158	D ¹⁾	H	CF ₃	OCH ₂ CH ₃
B-159	D ¹⁾	CF ₃	H	OCH ₂ CH ₃
B-160	D ¹⁾	H	CF ₃	O-n-ブチル
B-161	D ¹⁾	CF ₃	H	O-n-ブチル
B-162	D ¹⁾	H	CF ₃	O-iso-ブチル
B-163	D ¹⁾	CF ₃	H	O-iso-ブチル
B-164	D ¹⁾	H	CF ₃	O-2-ブチル
B-165	D ¹⁾	CF ₃	H	O-2-ブチル
B-166	D ¹⁾	H	CF ₃	O-2-エチルヘキシル
B-167	D ¹⁾	CF ₃	H	O-2-エチルヘキシル
B-168	D ¹⁾	H	CF ₃	N(CH ₃) ₂
B-169	D ¹⁾	CF ₃	H	N(CH ₃) ₂
B-170	D ¹⁾	H	CF ₃	NPh ₂
B-171	D ¹⁾	CF ₃	H	NPh ₂

10

20

30

40

B-172	D ¹⁾	H	CN	H
B-173	D ¹⁾	CN	H	H
B-174	D ¹⁾	CN	H	OCH ₃
B-175	D ¹⁾	H	CN	OCH ₃
B-176	D ¹⁾	CN	H	OCH ₂ CH ₃
B-177	D ¹⁾	H	CN	OCH ₂ CH ₃
B-178	D ¹⁾	CN	H	O-n-ブチル
B-179	D ¹⁾	H	CN	O-n-ブチル
B-180	D ¹⁾	CN	H	O-iso-ブチル
B-181	D ¹⁾	H	CN	O-iso-ブチル
B-182	D ¹⁾	CN	H	O-2-ブチル
B-183	D ¹⁾	H	CN	O-2-ブチル
B-184	D ¹⁾	CN	H	O-2-エチルヘキシル
B-185	D ¹⁾	H	CN	O-2-エチルヘキシル
B-186	D ¹⁾	CN	H	N(CH ₃) ₂
B-187	D ¹⁾	H	CN	N(CH ₃) ₂
B-188	D ¹⁾	CN	H	NPh ₂
B-189	D ¹⁾	H	CN	NPh ₂
B-190	E ¹⁾	H	H	H
B-191	E ¹⁾	H	H	OCH ₃
B-192	E ¹⁾	H	H	OCH ₂ CH ₃
B-193	E ¹⁾	H	H	O-n-ブチル
B-194	E ¹⁾	H	H	O-iso-ブチル
B-195	E ¹⁾	H	H	O-2-ブチル
B-196	E ¹⁾	H	H	O-2-エチルヘキシル
B-197	E ¹⁾	H	H	N(CH ₃) ₂
B-198	E ¹⁾	H	H	NPh ₂
B-199	E ¹⁾	H	CF ₃	H
B-200	E ¹⁾	CF ₃	H	H
B-201	E ¹⁾	H	CF ₃	OCH ₃
B-202	E ¹⁾	CF ₃	H	OCH ₃
B-203	E ¹⁾	H	CF ₃	OCH ₂ CH ₃
B-204	E ¹⁾	CF ₃	H	OCH ₂ CH ₃
B-205	E ¹⁾	H	CF ₃	O-n-ブチル

10

20

30

40

B-206	E ¹⁾	CF ₃	H	O-n-ブチル
B-207	E ¹⁾	H	CF ₃	O-iso-ブチル
B-208	E ¹⁾	CF ₃	H	O-iso-ブチル
B-209	E ¹⁾	H	CF ₃	O-2-ブチル
B-210	E ¹⁾	CF ₃	H	O-2-ブチル
B-211	E ¹⁾	H	CF ₃	O-2-エチルヘキシル
B-212	E ¹⁾	CF ₃	H	O-2-エチルヘキシル
B-213	E ¹⁾	H	CF ₃	N(CH ₃) ₂
B-214	E ¹⁾	CF ₃	H	N(CH ₃) ₂
B-215	E ¹⁾	H	CF ₃	NPh ₂
B-216	E ¹⁾	CF ₃	H	NPh ₂
B-217	E ¹⁾	H	CN	H
B-218	E ¹⁾	CN	H	H
B-219	E ¹⁾	CN	H	OCH ₃
B-220	E ¹⁾	H	CN	OCH ₃
B-221	E ¹⁾	CN	H	OCH ₂ CH ₃
B-222	E ¹⁾	H	CN	OCH ₂ CH ₃
B-223	E ¹⁾	CN	H	O-n-ブチル
B-224	E ¹⁾	H	CN	O-n-ブチル
B-225	E ¹⁾	CN	H	O-iso-ブチル
B-226	E ¹⁾	H	CN	O-iso-ブチル
B-227	E ¹⁾	CN	H	O-2-ブチル
B-228	E ¹⁾	H	CN	O-2-ブチル
B-229	E ¹⁾	CN	H	O-2-エチルヘキシル
B-230	E ¹⁾	H	CN	O-2-エチルヘキシル
B-231	E ¹⁾	CN	H	N(CH ₃) ₂
B-232	E ¹⁾	H	CN	N(CH ₃) ₂
B-233	E ¹⁾	CN	H	NPh ₂
B-234	E ¹⁾	H	CN	NPh ₂

10

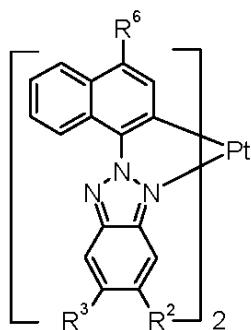
20

30

40

【 0 2 1 1 】

【表3】



10

化合物	R ²	R ³	R ⁶
C-1	H	H	H
C-2	H	H	OCH ₃
C-3	H	H	OCH ₂ CH ₃
C-4	H	H	O-n-ブチル
C-5	H	H	O-iso-ブチル
C-6	H	H	O-2-ブチル
C-7	H	H	O-2-エチルヘキシル
C-8	H	H	N(CH ₃) ₂
C-9	H	H	NPh ₂
C-10	H	CF ₃	H
C-11	CF ₃	H	H
C-12	H	CF ₃	OCH ₃
C-13	CF ₃	H	OCH ₃
C-14	H	CF ₃	OCH ₂ CH ₃
C-15	CF ₃	H	OCH ₂ CH ₃
C-16	H	CF ₃	O-n-ブチル
C-17	CF ₃	H	O-n-ブチル
C-18	H	CF ₃	O-iso-ブチル
C-19	CF ₃	H	O-iso-ブチル
C-20	H	CF ₃	O-2-ブチル
C-21	CF ₃	H	O-2-ブチル
C-22	H	CF ₃	O-2-エチルヘキシル
C-23	CF ₃	H	O-2-エチルヘキシル
C-24	H	CF ₃	N(CH ₃) ₂
C-25	CF ₃	H	N(CH ₃) ₂

20

30

40

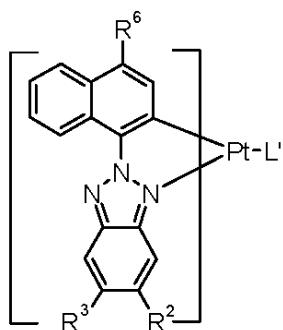
C-26	H	CF ₃	NPh ₂
C-27	CF ₃	H	NPh ₂
C-28	H	CN	H
C-29	CN	H	H
C-30	H	CN	OCH ₃
C-31	CN	H	OCH ₂ CH ₃
C-32	H	CN	OCH ₂ CH ₃
C-33	CN	H	O-n-ブチル
C-34	H	CN	O-n-ブチル
C-35	CN	H	O-iso-ブチル
C-36	H	CN	O-iso-ブチル
C-37	CN	H	O-2-ブチル
C-38	H	CN	O-2-ブチル
C-39	CN	H	O-2-エチルヘキシル
C-40	H	CN	O-2-エチルヘキシル
C-41	CN	H	N(CH ₃) ₂
C-42	H	CN	N(CH ₃) ₂
C-43	CN	H	NPh ₂
C-44	H	CN	NPh ₂

10

20

【 0 2 1 2 】

【表4】



10

化合物	L'	R ²	R ³	R ⁶
D-1	A ¹⁾	H	H	H
D-2	A ¹⁾	H	H	OCH ₃
D-3	A ¹⁾	H	H	OCH ₂ CH ₃
D-4	A ¹⁾	H	H	O-n-ブチル
D-5	A ¹⁾	H	H	O-iso-ブチル
D-6	A ¹⁾	H	H	O-2-ブチル
D-7	A ¹⁾	H	H	O-2-エチルヘキシル
D-8	A ¹⁾	H	H	N(CH ₃) ₂
D-9	A ¹⁾	H	H	NPh ₂
D-10	A ¹⁾	H	CF ₃	H
D-11	A ¹⁾	CF ₃	H	H
D-12	A ¹⁾	H	CF ₃	OCH ₃
D-13	A ¹⁾	CF ₃	H	OCH ₃
D-14	A ¹⁾	H	CF ₃	OCH ₂ CH ₃
D-15	A ¹⁾	CF ₃	H	OCH ₂ CH ₃
D-16	A ¹⁾	H	CF ₃	O-n-ブチル
D-17	A ¹⁾	CF ₃	H	O-n-ブチル
D-18	A ¹⁾	H	CF ₃	O-iso-ブチル
D-19	A ¹⁾	CF ₃	H	O-iso-ブチル
D-20	A ¹⁾	H	CF ₃	O-2-ブチル
D-21	A ¹⁾	CF ₃	H	O-2-ブチル
D-22	A ¹⁾	H	CF ₃	O-2-エチルヘキシル
D-23	A ¹⁾	CF ₃	H	O-2-エチルヘキシル
D-24	A ¹⁾	H	CF ₃	N(CH ₃) ₂
D-25	A ¹⁾	CF ₃	H	N(CH ₃) ₂

20

30

40

D-26	A ¹⁾	H	CF ₃	NPh ₂
D-27	A ¹⁾	CF ₃	H	NPh ₂
D-28	A ¹⁾	H	CN	H
D-29	A ¹⁾	CN	H	H
D-30	A ¹⁾	CN	H	OCH ₃
D-31	A ¹⁾	H	CN	OCH ₃
D-32	A ¹⁾	CN	H	OCH ₂ CH ₃
D-33	A ¹⁾	H	CN	OCH ₂ CH ₃
D-34	A ¹⁾	CN	H	O-n-ブチル
D-35	A ¹⁾	H	CN	O-n-ブチル
D-36	A ¹⁾	CN	H	O-iso-ブチル
D-37	A ¹⁾	H	CN	O-iso-ブチル
D-38	A ¹⁾	CN	H	O-2-ブチル
D-39	A ¹⁾	H	CN	O-2-ブチル
D-40	A ¹⁾	CN	H	O-2-エチルヘキシル
D-41	A ¹⁾	H	CN	O-2-エチルヘキシル
D-42	A ¹⁾	CN	H	N(CH ₃) ₂
D-43	A ¹⁾	H	CN	N(CH ₃) ₂
D-44	A ¹⁾	CN	H	NPh ₂
D-45	A ¹⁾	H	CN	NPh ₂
D-46	B ¹⁾	H	H	H
D-47	B ¹⁾	H	H	OCH ₃
D-48	B ¹⁾	H	H	OCH ₂ CH ₃
D-49	B ¹⁾	H	H	O-n-ブチル
D-50	B ¹⁾	H	H	O-iso-ブチル
D-51	B ¹⁾	H	H	O-2-ブチル
D-52	B ¹⁾	H	H	O-2-エチルヘキシル
D-53	B ¹⁾	H	H	N(CH ₃) ₂
D-54	B ¹⁾	H	H	NPh ₂
D-55	B ¹⁾	H	CF ₃	H
D-56	B ¹⁾	CF ₃	H	H
D-57	B ¹⁾	H	CF ₃	OCH ₃
D-58	B ¹⁾	CF ₃	H	OCH ₃
D-59	B ¹⁾	H	CF ₃	OCH ₂ CH ₃
D-60	B ¹⁾	CF ₃	H	OCH ₂ CH ₃

10

20

30

40

D-61	B ¹⁾	H	CF ₃	O-n-ブチル
D-62	B ¹⁾	CF ₃	H	O-n-ブチル
D-63	B ¹⁾	H	CF ₃	O-iso-ブチル
D-64	B ¹⁾	CF ₃	H	O-iso-ブチル
D-65	B ¹⁾	H	CF ₃	O-2-ブチル
D-66	B ¹⁾	CF ₃	H	O-2-ブチル
D-67	B ¹⁾	H	CF ₃	O-2-エチルヘキシル
D-68	B ¹⁾	CF ₃	H	O-2-エチルヘキシル
D-69	B ¹⁾	H	CF ₃	N(CH ₃) ₂
D-70	B ¹⁾	CF ₃	H	N(CH ₃) ₂
D-71	B ¹⁾	H	CF ₃	NPh ₂
D-72	B ¹⁾	CF ₃	H	NPh ₂
D-73	B ¹⁾	H	CN	H
D-74	B ¹⁾	CN	H	H
D-75	B ¹⁾	CN	H	OCH ₃
D-76	B ¹⁾	H	CN	OCH ₃
D-77	B ¹⁾	CN	H	OCH ₂ CH ₃
D-78	B ¹⁾	H	CN	OCH ₂ CH ₃
D-79	B ¹⁾	CN	H	O-n-ブチル
D-80	B ¹⁾	H	CN	O-n-ブチル
D-81	B ¹⁾	CN	H	O-iso-ブチル
D-82	B ¹⁾	H	CN	O-iso-ブチル
D-83	B ¹⁾	CN	H	O-2-ブチル
D-84	B ¹⁾	H	CN	O-2-ブチル
D-85	B ¹⁾	CN	H	O-2-エチルヘキシル
D-86	B ¹⁾	H	CN	O-2-エチルヘキシル
D-87	B ¹⁾	CN	H	N(CH ₃) ₂
D-88	B ¹⁾	H	CN	N(CH ₃) ₂
D-89	B ¹⁾	CN	H	NPh ₂
D-99	B ¹⁾	H	CN	NPh ₂
D-100	C ¹⁾	H	H	H
D-101	C ¹⁾	H	H	OCH ₃
D-102	C ¹⁾	H	H	OCH ₂ CH ₃
D-103	C ¹⁾	H	H	O-n-ブチル

10

20

30

40

D-104	C ¹⁾	H	H	O-iso-ブチル
D-105	C ¹⁾	H	H	O-2-ブチル
D-106	C ¹⁾	H	H	O-2-エチルヘキシル
D-107	C ¹⁾	H	H	N(CH ₃) ₂
D-108	C ¹⁾	H	H	NPh ₂
D-109	C ¹⁾	H	CF ₃	H
D-110	C ¹⁾	CF ₃	H	H
D-111	C ¹⁾	H	CF ₃	OCH ₃
D-112	C ¹⁾	CF ₃	H	OCH ₃
D-113	C ¹⁾	H	CF ₃	OCH ₂ CH ₃
D-114	C ¹⁾	CF ₃	H	OCH ₂ CH ₃
D-115	C ¹⁾	H	CF ₃	O-n-ブチル
D-116	C ¹⁾	CF ₃	H	O-n-ブチル
D-117	C ¹⁾	H	CF ₃	O-iso-ブチル
D-118	C ¹⁾	CF ₃	H	O-iso-ブチル
D-119	C ¹⁾	H	CF ₃	O-2-ブチル
D-120	C ¹⁾	CF ₃	H	O-2-ブチル
D-121	C ¹⁾	H	CF ₃	O-2-エチルヘキシル
D-122	C ¹⁾	CF ₃	H	O-2-エチルヘキシル
D-123	C ¹⁾	H	CF ₃	N(CH ₃) ₂
D-124	C ¹⁾	CF ₃	H	N(CH ₃) ₂
D-125	C ¹⁾	H	CF ₃	NPh ₂
D-126	C ¹⁾	CF ₃	H	NPh ₂
D-127	C ¹⁾	H	CN	H
D-128	C ¹⁾	CN	H	H
D-129	C ¹⁾	CN	H	OCH ₃
D-130	C ¹⁾	H	CN	OCH ₃
D-131	C ¹⁾	CN	H	OCH ₂ CH ₃
D-132	C ¹⁾	H	CN	OCH ₂ CH ₃
D-133	C ¹⁾	CN	H	O-n-ブチル
D-134	C ¹⁾	H	CN	O-n-ブチル
D-135	C ¹⁾	CN	H	O-iso-ブチル
D-136	C ¹⁾	H	CN	O-iso-ブチル
D-137	C ¹⁾	CN	H	O-2-ブチル

10

20

30

40

D-138	C ¹⁾	H	CN	O-2-ブチル
D-139	C ¹⁾	CN	H	O-2-エチルヘキシル
D-140	C ¹⁾	H	CN	O-2-エチルヘキシル
D-141	C ¹⁾	CN	H	N(CH ₃) ₂
D-142	C ¹⁾	H	CN	N(CH ₃) ₂
D-143	C ¹⁾	H	CN	NPh ₂
D-144	C ¹⁾	CN	H	NPh ₂
D-145	D ¹⁾	H	H	H
D-146	D ¹⁾	H	H	OCH ₃
D-147	D ¹⁾	H	H	OCH ₂ CH ₃
D-148	D ¹⁾	H	H	O-n-ブチル
D-149	D ¹⁾	H	H	O-iso-ブチル
D-150	D ¹⁾	H	H	O-2-ブチル
D-151	D ¹⁾	H	H	O-2-エチルヘキシル
D-152	D ¹⁾	H	H	N(CH ₃) ₂
D-153	D ¹⁾	H	H	NPh ₂
D-154	D ¹⁾	H	CF ₃	H
D-155	D ¹⁾	CF ₃	H	H
D-156	D ¹⁾	H	CF ₃	OCH ₃
D-157	D ¹⁾	CF ₃	H	OCH ₃
D-158	D ¹⁾	H	CF ₃	OCH ₂ CH ₃
D-159	D ¹⁾	CF ₃	H	OCH ₂ CH ₃
D-160	D ¹⁾	H	CF ₃	O-n-ブチル
D-161	D ¹⁾	CF ₃	H	O-n-ブチル
D-162	D ¹⁾	H	CF ₃	O-iso-ブチル
D-163	D ¹⁾	CF ₃	H	O-iso-ブチル
D-164	D ¹⁾	H	CF ₃	O-2-ブチル
D-165	D ¹⁾	CF ₃	H	O-2-ブチル
D-166	D ¹⁾	H	CF ₃	O-2-エチルヘキシル
D-167	D ¹⁾	CF ₃	H	O-2-エチルヘキシル
D-168	D ¹⁾	H	CF ₃	N(CH ₃) ₂
D-169	D ¹⁾	CF ₃	H	N(CH ₃) ₂
D-170	D ¹⁾	H	CF ₃	NPh ₂
D-171	D ¹⁾	CF ₃	H	NPh ₂

10

20

30

40

D-172	D ¹⁾	H	CN	H
D-173	D ¹⁾	CN	H	H
D-174	D ¹⁾	CN	H	OCH ₃
D-175	D ¹⁾	H	CN	OCH ₃
D-176	D ¹⁾	CN	H	OCH ₂ CH ₃
D-177	D ¹⁾	H	CN	OCH ₂ CH ₃
D-178	D ¹⁾	CN	H	O-n-ブチル
D-179	D ¹⁾	H	CN	O-n-ブチル
D-180	D ¹⁾	CN	H	O-iso-ブチル
D-181	D ¹⁾	H	CN	O-iso-ブチル
D-182	D ¹⁾	CN	H	O-2-ブチル
D-183	D ¹⁾	H	CN	O-2-ブチル
D-184	D ¹⁾	CN	H	O-2-エチルヘキシル
D-185	D ¹⁾	H	CN	O-2-エチルヘキシル
D-186	D ¹⁾	CN	H	N(CH ₃) ₂
D-187	D ¹⁾	H	CN	N(CH ₃) ₂
D-188	D ¹⁾	CN	H	NPh ₂
D-189	D ¹⁾	H	CN	NPh ₂
D-190	F ¹⁾	H	H	H
D-191	F ¹⁾	H	H	OCH ₃
D-192	F ¹⁾	H	H	OCH ₂ CH ₃
D-193	F ¹⁾	H	H	O-n-ブチル
D-194	F ¹⁾	H	H	O-iso-ブチル
D-195	F ¹⁾	H	H	O-2-ブチル
D-196	F ¹⁾	H	H	O-2-エチルヘキシル
D-197	F ¹⁾	H	H	N(CH ₃) ₂
D-198	F ¹⁾	H	H	NPh ₂
D-199	F ¹⁾	H	CF ₃	H
D-200	F ¹⁾	CF ₃	H	H
D-201	F ¹⁾	H	CF ₃	OCH ₃
D-202	F ¹⁾	CF ₃	H	OCH ₃
D-203	F ¹⁾	H	CF ₃	OCH ₂ CH ₃
D-204	F ¹⁾	CF ₃	H	OCH ₂ CH ₃
D-205	F ¹⁾	H	CF ₃	O-n-ブチル

10

20

30

40

D-206	F ¹⁾	CF ₃	H	O-n-ブチル
D-207	F ¹⁾	H	CF ₃	O-iso-ブチル
D-208	F ¹⁾	CF ₃	H	O-iso-ブチル
D-209	F ¹⁾	H	CF ₃	O-2-ブチル
D-210	F ¹⁾	CF ₃	H	O-2-ブチル
D-211	F ¹⁾	H	CF ₃	O-2-エチルヘキシル
D-212	F ¹⁾	CF ₃	H	O-2-エチルヘキシル
D-213	F ¹⁾	H	CF ₃	N(CH ₃) ₂
D-214	F ¹⁾	CF ₃	H	N(CH ₃) ₂
D-215	F ¹⁾	H	CF ₃	NPh ₂
D-216	F ¹⁾	CF ₃	H	NPh ₂
D-217	F ¹⁾	H	CN	H
D-218	F ¹⁾	CN	H	H
D-219	F ¹⁾	CN	H	OCH ₃
D-220	F ¹⁾	H	CN	OCH ₃
D-221	F ¹⁾	CN	H	OCH ₂ CH ₃
D-222	F ¹⁾	H	CN	OCH ₂ CH ₃
D-223	F ¹⁾	CN	H	O-n-ブチル
D-224	F ¹⁾	H	CN	O-n-ブチル
D-225	F ¹⁾	CN	H	O-iso-ブチル
D-226	F ¹⁾	H	CN	O-iso-ブチル
D-227	F ¹⁾	CN	H	O-2-ブチル
D-228	F ¹⁾	H	CN	O-2-ブチル
D-229	F ¹⁾	CN	H	O-2-エチルヘキシル
D-230	F ¹⁾	H	CN	O-2-エチルヘキシル
D-231	F ¹⁾	CN	H	N(CH ₃) ₂
D-232	F ¹⁾	H	CN	N(CH ₃) ₂
D-233	F ¹⁾	CN	H	NPh ₂
D-234	F ¹⁾	H	CN	NPh ₂
D-235	E ¹⁾	H	H	H
D-236	E ¹⁾	H	H	OCH ₃
D-237	E ¹⁾	H	H	OCH ₂ CH ₃
D-238	E ¹⁾	H	H	O-n-ブチル
D-239	E ¹⁾	H	H	O-iso-ブチル

10

20

30

40

D-240	E ¹⁾	H	H	O-2-ブチル
D-241	E ¹⁾	H	H	O-2-エチルヘキシル
D-242	E ¹⁾	H	H	N(CH ₃) ₂
D-243	E ¹⁾	H	H	NPh ₂
D-244	E ¹⁾	H	CF ₃	H
D-245	E ¹⁾	CF ₃	H	H
D-246	E ¹⁾	H	CF ₃	OCH ₃
D-247	E ¹⁾	CF ₃	H	OCH ₃
D-248	E ¹⁾	H	CF ₃	OCH ₂ CH ₃
D-249	E ¹⁾	CF ₃	H	OCH ₂ CH ₃
D-250	E ¹⁾	H	CF ₃	O-n-ブチル
D-251	E ¹⁾	CF ₃	H	O-n-ブチル
D-252	E ¹⁾	H	CF ₃	O-iso-ブチル
D-253	E ¹⁾	CF ₃	H	O-iso-ブチル
D-254	E ¹⁾	H	CF ₃	O-2-ブチル
D-255	E ¹⁾	CF ₃	H	O-2-ブチル
D-256	E ¹⁾	H	CF ₃	O-2-エチルヘキシル
D-257	E ¹⁾	CF ₃	H	O-2-エチルヘキシル
D-258	E ¹⁾	H	CF ₃	N(CH ₃) ₂
D-259	E ¹⁾	CF ₃	H	N(CH ₃) ₂
D-260	E ¹⁾	H	CF ₃	NPh ₂
D-261	E ¹⁾	CF ₃	H	NPh ₂
D-262	E ¹⁾	H	CN	H
D-263	E ¹⁾	CN	H	H
D-264	E ¹⁾	CN	H	OCH ₃
D-265	E ¹⁾	H	CN	OCH ₃
D-266	E ¹⁾	CN	H	OCH ₂ CH ₃
D-267	E ¹⁾	H	CN	OCH ₂ CH ₃
D-268	E ¹⁾	CN	H	O-n-ブチル
D-269	E ¹⁾	H	CN	O-n-ブチル
D-270	E ¹⁾	CN	H	O-iso-ブチル
D-271	E ¹⁾	H	CN	O-iso-ブチル
D-272	E ¹⁾	CN	H	O-2-ブチル
D-273	E ¹⁾	H	CN	O-2-ブチル

10

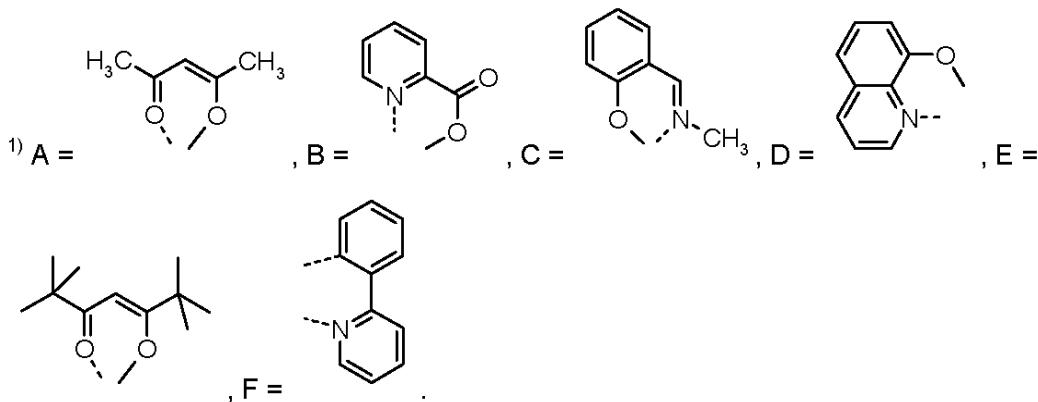
20

30

40

D-274	E ¹⁾	CN	H	O-2-エチルヘキシル
D-275	E ¹⁾	H	CN	O-2-エチルヘキシル
D-276	E ¹⁾	CN	H	N(CH ₃) ₂
D-277	E ¹⁾	H	CN	N(CH ₃) ₂
D-278	E ¹⁾	CN	H	NPh ₂
D-279	E ¹⁾	H	CN	NPh ₂

10



20

【 0 2 1 3 】

障壁層

適切なホストに加えて、リン光材料を用いるOLEDデバイスは、多くの場合、励起子もしくは電子正孔再結合中心を、ホストおよびリン光材料を含む発光層に閉じ込めるのを助けるために、または電荷担体（電子もしくは正孔）の数を減少させるために、少なくとも1つの励起子または正孔障壁層を必要とする。一つの実施対応において、そのような障壁層は、電子輸送層と発光層の間に配置される。この場合、障壁層のイオン化ポテンシャルは、ホストから電子輸送層への正孔の移動においてエネルギー障壁が存在するようなものであるべきであり、一方、電子親和性は、電子が、電子輸送層から、ホストとリン光材料を含む発光層へより容易に通過するようなものであるべきである。障壁材料の三重項エネルギーがリン光材料よりも大きいことが更に望ましいが、絶対的ではない。適切な正孔障壁材料は、国際公開公報第00/70655号および国際公開公報第01/93642号に記載されている。有用な材料の2つの例は、バソクプロイン（BCP）およびビス（2-メチル-8-キノリノナト）（4-フェニルフェノラト）アルミニウム（III）（BAIQ）である。米国特許出願公開第2003/0068528号に記載されているように、Ba1q以外の金属錯体も正孔および励起子を阻止することが知られている。米国特許出願公開第2003/0175553号は、電子/励起子障壁層におけるfac-トリス（1-フェニルピラゾラト-N₂C²）イリジウム（III）（Irppz）の使用を記載している。

30

【 0 2 1 4 】

本発明の実施態様は、動作効率、より高い輝度、色相、低い駆動電圧および改善された動作安定性のような有益な特徴をもたらすことができる。本発明において有用な有機金属化合物の実施態様は、白色光の発光に有用なものを含む広い範囲の色合いを（直接的にまたは多色表示をもたらすためにフィルターを通して）提供することができる。

【 0 2 1 5 】

一般的なデバイス構造

本発明の化合物は、小さな分子材料、オリゴマー材料、ポリマー材料またはこれらの組み合わせを使用する多くのOLEDデバイス形態に用いることができる。これらには、単一の陽極および陰極を含む極めて単純な構造から、画素を形成する陽極と陰極の直交アレ

50

イから構成されるパッシブマトリックスディスプレーおよび各画素が例えれば薄膜トランジスター（TFT）により独立して制御されているアクティブマトリックスディスプレーのようなより複雑なデバイスまで含まれる。

【0216】

多数の形態の有機層が存在する。OLEDの必須要件は、陽極、陰極および陽極と陰極の間に配置された有機発光層である。追加的な層を用いることができ、本明細書以降でさらに十分に記載される。

【0217】

特に小型分子デバイスに有用な典型的な構造は、基板、陽極、正孔注入層、正孔輸送層、発光層、正孔または励起子障壁層、電子輸送層および陰極から構成される。これらの層は下記で詳細に記載される。基板を代替的に陰極に隣接して配置することができる、または基板が実際には陽極または陰極を構成することができることに留意すること。陽極と陰極の間に有機層は、都合よくは有機EL素子と呼ばれる。また、有機層の合わせた全体の厚さは、望ましくは500nm未満である。

【0218】

基板

基板は、発光の意図される方向に応じて光透過性または不透明であることができる。基板からEL発光を見るためには光透過性が望ましい。そのような場合には、透明ガラスまたはプラスチックが一般的に用いられる。基板は、多層の材料を含む複雑な構造であることができる。このことは、TFTがOLED層の下に提供されるアクティブマトリックス基板の典型的な場合である。依然として、少なくとも発光画素化領域において、基板は、ガラスまたはポリマーのような透明な材料から大部分が構成される必要がある。EL発光が最上部の電極から見られる用途では、底支持体の透過性は、重要ではなく、したがって、光透過性、光吸収性または光反射性であることができる。この場合に使用される基板には、ガラス、プラスチック、半導体材料、ケイ素、セラミックおよび回路基板材料が含まれるが、これらに限定されない。ここでも、基材は、アクティブマトリックスTFT設計において見出されるように、多層の材料を含む複雑な構造であることができる。これらのデバイス形態において、光-透明最上部電極を提供することが必要である。

【0219】

陽極

望ましいエレクトロルミネセンス発光（EL）が陽極を通して見られる場合、陽極は、目的の発光に対して透明または実質的に透明であるべきである。本発明に使用される一般的な透明陽極材料は、インジウム-スズ酸化物（ITO）、インジウム亜鉛酸化物（IZO）および酸化スズであるが、アルミニウム-またはインジウムドープ酸化亜鉛、マグネシウム-インジウム酸化物およびニッケル-タンゲステン酸化物が含まれるが、これらに限定されない他の金属酸化物も機能することができる。これらの酸化物に加えて、窒化ガリウムのような金属窒化物、セレン化亜鉛のような金属セレン化物および硫化亜鉛のような金属硫化物を陽極として使用することができる。EL発光が陰極を通してのみ見られる用途において、陽極の透過性は重要ではなく、透明、不透明または反射性のあらゆる導電性材料を使用することができる。この用途における導体の例には、金、イリジウム、モリブデン、パラジウムおよび白金が挙げられるが、これらに限定されない。望ましい陽極材料は、一般的に、蒸発、スパッタリング、化学蒸着または電気化学的方法のような任意の適切な方法により付着される。陽極は、周知のフォトリソグラフプロセスを使用してパターン化することができる。場合により、陽極を、短絡を最小限にするまたは反射率を向上させるように、他の層へ適用する前に研磨して、表面粗さを低減してもよい。

【0220】

陰極

発光が陽極を通してのみ見られる場合、本発明で使用される陰極は、ほぼあらゆる導電性材料から構成することができる。望ましい材料は、良好な皮膜形成特性を有して、下にある有機層との良好な接触を確実にし、低電圧で電子注入を促進し、良好な安定性を有す

10

20

30

40

50

る。有用な陰極材料は、多くの場合に、低仕事関数金属（< 4.0 eV）または金属合金を含有する。一つの有用な陰極材料は、Mg : Ag 合金から構成され、銀の割合は、米国特許出願第4,885,221号に記載されているように、1~20%の範囲である。別の適切な部類の陰極材料には、陰極と、導電性金属のより厚い層で覆われている、有機層と接觸している薄い電子注入層（EIL）（例えば電子輸送層（ETL））とを含む二重層を含む。ここで、EILは、好ましくは、低仕事関数金属または金属塩を含み、そのような場合には、より厚いキャッピング層は、低仕事関数を有する必要はない。そのような陰極の一つは、米国特許出願第5,677,572号に記載されているように、LiFの薄層、続くより厚い層のAlから構成される。アルカリ金属でドープされたETL材料、例えばLiドープAlqは、有用なEILの別の例である。他の有用な陰極材料のセットには、米国特許出願第5,059,861号、同第5,059,862号および同第6,140,763号に記載されているものが含まれるが、これらに限定されない。

【0221】

発光が陰極を通して見られる場合、陰極は、透明またはほぼ透明でなければならない。そのような用途では、金属は薄くなければならないか、または透明な導電性酸化物もしくはこれらの材料の組み合わせを使用しなければならない。光学的に透明な陰極は、米国特許出願第4,885,211号、同第5,247,190号、日本国特許第3,234,963号、米国特許第5,703,436号、同第5,608,287号、同第5,837,391号、同第5,677,572号、同第5,776,622号、同第5,776,623号、同第5,714,838号、同第5,969,474号、同第5,739,545号、同第5,981,306号、同第6,137,223号、同第6,140,763号、同第6,172,459号、欧州特許公報第1076368号、米国特許出願第6,278,236号および同第6,284,393号においてより詳細に記載されている。陰極材料は、典型的には、蒸発、スパッタリングまたは化学蒸着のような任意の適切な方法により付着される。必要な場合、パターン化は、米国特許出願第5,276,380および欧州特許公報第0732868号に記載されているスルーマスク付着法や一体式シャドーマスキング法、レーザーアブレーションおよび選択的化学蒸着法が含まれるが、これらに限定されない多くの周知の方法によって達成することができる。

【0222】

正孔注入層（HIL）

正孔注入層を陽極と正孔輸送層の間に提供することができる。正孔注入材料は、その後に続く有機層の皮膜形成特性を改善すること、および正孔を正孔輸送層に注入するのを促進することに役立つことができる。正孔注入層に使用するのに適切な材料には、米国特許出願第4,720,432号に記載されているポルフィリン化合物、米国特許出願第6,208,075号に記載されているプラズマ堆積フルオロカーボンポリマー、および幾つかのアミン、例えばm-MT DATA (4,4',4"-トリス[(3-メチルフェニル)フェニルアミノ]トリフェニルアミン)が含まれるが、これらに限定されない。有機ELデバイスに有用であることが報告されている代替的な正孔注入材料は、欧州特許公報第0891121号および欧州特許公報第1029909号に記載されている。

【0223】

正孔輸送層（HTL）

有機ELデバイスの正孔輸送層は、少なくとも1つの正孔輸送化合物、例えば芳香族第三級アミンを含み、ここで後者は、少なくとも1個は芳香族環のメンバーである炭素原子のみに結合している少なくとも1個の三価窒素原子を含む化合物であることが理解されている。一つの形態において、芳香族第三級アミンは、モノアリールアミン、ジアリールアミン、トリアリールアミンのようなアリールアミン、または高分子アリールアミンであることができる。例示的な単量体トリアリールアミンが、米国特許出願第3,180,730号において説明されている。1つ以上のビニルラジカルで置換されているおよび/または少なくとも1つの活性水素含有基を含む他の適切なトリアリールアミンは、米国特許出願第3,567,450号および同第3,658,520号に開示されている。より好ま

10

20

30

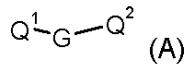
40

50

しい部類の芳香族第三級アミンは、米国特許出願第4,720,432号および同第5,061,569に記載されている少なくとも2つの芳香族第三級アミン部分を含むものである。そのような化合物には、下記の構造式：

【0224】

【化71】



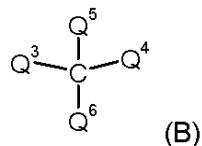
【0225】

〔式中、 Q^1 および Q^2 は、独立して、芳香族第三級アミン部分から選択され、そして G は、炭素-炭素結合のアリーレン、シクロアルキレンまたはアルキレン基のような結合基である〕により表されるものが含まれる。一つの実施態様において、 Q^1 または Q^2 のうちの少なくとも1つは、多環式縮合環構造、例えばナフタレンを含む。 G がアリール基である場合、都合よくは、フェニレン、ビフェニレンまたはナフタレン部分である。

構造式 (A) を満たし、2つのトリアリールアミン部分を含む、有用な部類のトリアリールアミンは、下記の構造式：

【0226】

【化72】



10

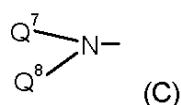
20

【0227】

〔式中、 Q^3 および Q^4 は、それぞれ独立して、水素原子、アリール基またはアルキル基を表すか、あるいは Q^3 および Q^4 は、一緒になって、シクロアルキル基を完成する原子を表し、そして Q^5 および Q^6 は、それぞれ独立して、アリール基を表し、それは次に、下記の構造式：

【0228】

【化73】



30

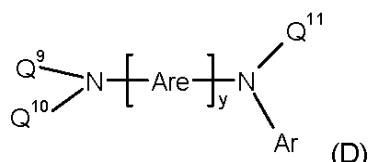
【0229】

により示されているジアリール置換アミノ基で置換されており、ここで Q^7 および Q^8 は、独立して選択されたアリール基である〕により表される。一つの実施態様において、 Q^7 および Q^8 のうちの少なくとも1つは、多環式縮合環構造、例えばナフタレンを含む。

別の部類の芳香族第三級アミンは、テトラアリールジアミンである。望ましいテトラアリールジアミンは、アリーレン基を介して結合している、式 (C) により示されるような2つのジアリールアミノ基を含む。有用なテトラアリールジアミンには、下記式：

【0230】

【化74】



40

【0231】

〔式中、 Are は、それぞれ独立して、フェニレンまたはアントラセン部分のようなアリーレン基から選択され、 y は、1~4の整数であり、そして Ar 、 Q^9 、 Q^{10} および Q

50

^{1 1} は、独立して選択されたアリール基である]により表されるものが含まれる。典型的な実施態様において、A r 、 Q ⁹ 、 Q ^{1 0} および Q ^{1 1} のうちの少なくとも1つは、多環式縮合環構造、例えばナフタレンである。前記構造式(A)、(B)、(C)、(D)の多様なアルキル、アルキレン、アリールおよびアリーレン部分は、次に置換することができる。典型的な置換基には、アルキル基、アルコキシ基、アリール基、アリールオキシ基、並びにフッ素、塩素および臭素のようなハロゲンが含まれる。多様なアルキルおよびアルキレン部分は、典型的には約1~6個の炭素原子を含む。シクロアルキル部分は、3~約10個の炭素原子を含むことができるが、典型的には5、6または7個の環炭素原子を含むことができ、例えばシクロペンチル、シクロヘキシルおよびシクロヘプチル環構造である。アリールおよびアリーレン部分は、通常フェニルおよびフェニレン部分である。

10

【0232】

正孔輸送層は、単一の芳香族第三級アミン化合物または芳香族第三級アミン化合物の混合物から形成することができる。特に、式(B)を満たすトリアリールアミンのようなトリアリールアミンを、式(D)で示されるようなテトラアリールジアミンと組み合わせて用いることができる。

【0233】

トリアリールアミンがテトラアリールジアミンと組み合わせて用いられる場合、後者は、トリアリールアミンと電子注入および輸送層との間に挟まれた層として位置している。有用な芳香族第三級アミンの例示は、以下である：1，1-ビス(4-ジ-p-トリルアミノフェニル)シクロヘキサン、1，1-ビス(4-ジ-p-トリルアミノフェニル)-4-フェニルシクロヘキサン、N，N，N'，N' - テトラフェニル-4，4'''-ジアミノ-1，1'：4'，1"：4"，1'''-クアテルフェニルビス(4-ジメチルアミノ-2-メチルフェニル)フェニルメタン、1，4-ビス[2-[4-[N，N-ジ(p-トリル)アミノ]フェニル]ビニル]ベンゼン(BDTAPVB)、N，N，N'，N' - テトラフェニル-4，4' - ジアミノビフェニル、N，N，N'，N' - テトラフェニル-4，4' - ジアミノビフェニル、N，N，N'，N' - テトラ-1-ナフチル-4，4' - ジアミノビフェニル、N，N，N'，N' - テトラ-2-ナフチル-4，4' - ジアミノビフェニル、N - フェニルカルバゾール、4，4' - ビス[N-(1-ナフチル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル(NPB)、4，4' - ビス[N-(1-ナフチル)-N-(2-ナフチル)アミノ]ビフェニル(TNB)、4，4' - ビス[N-(1-ナフチル)-N-フェニルアミノ]p-テルフェニル、4，4' - ビス[N-(2-ナフチル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル、4，4' - ビス[N-(3-アセタフニル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル、1，5-ビス[N-(1-ナフチル)-N-フェニルアミノ]ナフタレン、4，4' - ビス[N-(9-アントリル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル、4，4' - ビス[N-(1-アントリル)-N-フェニルアミノ] - p - テルフェニル、4，4' - ビス[N-(2-フェナントリル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル、4，4' - ビス[N-(8-フルオランテニル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル、4，4' - ビス[N-(2-ピレニル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル、4，4' - ビス[N-(2-ナフタセニル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル、4，4' - ビス[N-(2-ペリレニル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル、4，4' - ビス[N-(1-コロネニル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル、2，6 - ビス(ジ-p-トリルアミノ)ナフタレン、2，6 - ビス[ジ-(1-ナフチル)アミノ]ナフタレン、2，6 - ビス[N-(1-ナフチル)-N-(2-ナフチル)アミノ]ナフタレン、N，N，N'，N' - テトラ(2-ナフチル)-4，4" - ジアミノ-p - テルフェニル、4，4' - ビス{N-フェニル-N-[4-(1-ナフチル)-フェニル]アミノ}ビフェニル、2，6 - ビス[N，N-ジ(2-ナフチル)アミノ]フッ素、4，4'，4" - トリス[(3-メチルフェニル)フェニルアミノ]トリフェニルアミン(MTDATA)および4，4' - ビス[N-(3-メチルフェニル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル(TPD)。正孔輸送層を使用して、導電性を向上させることができる。NPDおよびTPDは、真性正孔輸送層の例である。pドープ正孔輸送層の例は、米国特許第6,33

20

30

40

50

7, 102号またはドイツ国特許第10058578号に記載されているように、モル比50:1でF₄-TCNQでドープされたm-MTDATAである。

【0234】

別の部類の有用な正孔輸送材料には、欧州特許公報第1009041号に記載されている多環式芳香族化合物が含まれる。2つを超えるアミン基を有する第三級芳香族アミンを使用してもよく、オリゴマー材料が含まれる。加えて、高分子正孔輸送材料を使用することができ、例えば、ポリ(N-ビニルカルバゾール)(PVK)、ポリチオフェン、ポリピロール、ポリアニリンおよびコポリマー、例えばPEDOT/PSSとも呼ばれるポリ(3,4-エチレンジオキシチオフェン)/ポリ(4-スチレンスルホネート)である。

【0235】

蛍光発光材料および層(LEL)

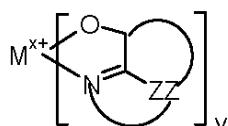
リン光材料に加えて、蛍光材料を含む他の発光材料をOLEDデバイスにおいて使用することができる。用語「蛍光」は、あらゆる発光材料を記載するのに一般的に使用されるが、この場合には、一重項励起状態で発光する材料を意味する。蛍光材料を、リン光材料と同じ層に、隣接する層に、隣接する画素にまたは任意の組み合わせに使用することができる。リン光材料の性能に悪影響を与える材料を選択しないように注意しなければならない。当業者は、リン光材料と同じ層にまたは隣接する層における材料の三重項励起状態のエネルギーは、不要な消光を防止するように適切に設定されなければならないことを理解する。米国特許出願第4,769,292号および同第5,935,721号においてより完全に記載されているように、有機EL素子の発光層(LEL)は、発光蛍光またはリン光材料を含み、エレクトロルミネセンスは、この領域における電子正孔対の組み合わせの結果として生成される。発光層は、単一の材料から構成されることが可能であるが、より一般的には、ゲスト発光材料でドープされたホスト材料または発光が主に発光材料から生じる材料からなり、任意の色ができる。発光層のホスト材料は、下記に記載される電子輸送材料、上記で定義された正孔輸送材料、または正孔電子組み合わせを支持する別の材料もしくは材料の組み合わせであることができる。蛍光発光材料は、典型的にはホスト材料の0.01~10重量%で組み込まれる。ホストおよび発光材料は、小型の非ポリマー分子またはポリフルオレンおよびポリビニルアリーレン(例えば、ポリ(p-フェニレンビニレン)、PPV)のようなポリマー材料であることができる。ポリマーの場合では、小型分子発光材料は、ポリマーホストに分子的に分散されていることができるか、または発光材料は、副構成成分をホストポリマーに共重合することによって添加することができる。ホスト材料は、皮膜形成、電気特性、発光効率、寿命または製造性を改善するために、一緒に混合することができる。ホストは、良好な正孔輸送特性を有する材料および良好な電子輸送特性を有する材料を含むことができる。

使用されることが知られているホストおよび発光材料には、米国特許出願第4,768,292号、同第5,141,671号、同第5,150,006号、同第5,151,629号、同第5,405,709号、同第5,484,922号、同第5,593,788号、同第5,645,948号、同第5,683,823号、同第5,755,999号、同第5,928,802号、同第5,935,720号、同第5,935,721号および同第6,020,078号に開示されているものが含まれるが、これらに限定されない。

8-ヒドロキシキノリンおよび同様の誘導体(式E)の金属錯体は、エレクトロルミネセンスを支持することができる有用なホスト化合物の一つの部類を構成し、500nmより長い波長、例えば緑色、黄色、橙色および赤色の発光に特に適している。

【0236】

【化75】



10

20

30

40

50

【0237】

ここで、Mは、金属を表し、vは、1～4の整数であり、そしてZZは、それぞれの場合に独立して、少なくとも2つの縮合芳香族環を有する核を完成する原子を表す。前述から、金属は、一価、二価、三価または四価の金属であることが明白である。金属は、例えば、リチウム、ナトリウムもしくはカリウムのようなアルカリ金属、マグネシウムもしくはカルシウムのようなアルカリ土類金属、アルミニウムもしくはガリウムのような土類金属、または亜鉛もしくはジルコニウムのような遷移金属であることができる。一般に、有用なキレート金属であることが知られているあらゆる一価、二価、三価または四価の金属を用いることができる。ZZは、少なくとも1つがアゾール環かアジン環である少なくとも2つの縮合芳香族環を含む複素環式の核を完成する。必要であれば、脂肪族と芳香族の両方の環を含む追加の環を、2つの必要な環と縮合することができる。機能を改善することなく分子量を加えることを避けるために、環原子の数は、通常18個以下に維持される。

有用なキレート化オキシノイド化合物の例示は、以下である：

CO-1：アルミニウムトリスオキシン〔とりわけ、トリス(8-キノリノラト)アルミニウム(II)〕

CO-2：マグネシウムビスオキシン〔とりわけ、ビス(8-キノリノラト)マグネシウム(II)〕

CO-3：ビス〔ベンゾ{f}-8-キノリノラト〕亜鉛(II)

CO-4：ビス(2-メチル-8-キノリノラト)アルミニウム(II) - μ - オキソ-ビス(2-メチル-8-キノリノラト)アルミニウム(II)

CO-5：インジウムトリスオキシン〔とりわけ、トリス(8-キノリノラト)インジウム〕

CO-6：アルミニウムトリス(5-メチルオキシン)〔とりわけ、トリス(5-メチル-8-キノリノラト)アルミニウム(II)〕

CO-7：リチウムオキシン〔とりわけ、(8-キノリノラト)リチウム(I)〕

CO-8：ガリウムオキシン〔とりわけ、トリス(8-キノリノラト)ガリウム(II)〕

CO-9：ジルコニウムオキシン〔とりわけ、テトラ(8-キノリノラト)ジルコニウム(IV)〕

【0238】

有用な蛍光発光材料には、アントラセン、テトラセン、キナンテン、ペリレン、ルブレン、クマリン、ローダミンおよびキナクリドンの誘導体、ジシアノメチレンピラン化合物、チオピラン化合物、ポリメチン化合物、ピリリウムおよびチアピリリウム化合物、フルオレン誘導体、ペリフランテン誘導体、インデノペリレン誘導体、ビス(アジニル)アミンボロン化合物、ビス(アジニル)メタン化合物、並びにカルボスチリル化合物が含まれるが、これらに限定されない。有用な材料の例示には、米国特許第7,090,930号B2に記載されている化合物L1～L52が含まれるが、これらに限定されない。

【0239】

電子輸送層(ETL)

本発明の有機ELデバイスの電子輸送層を形成するために使用するのに好ましい薄い皮膜形成材料は、オキシンそれ自体のキレートを含む金属キレート化オキシノイド化合物である(一般的に、8-キノリノールまたは8-ヒドロキシキノリンとも呼ばれる)。そのような化合物は、電子を注入および輸送することを助け、両方とも高いレベルの機能を示し、薄い皮膜の形態に容易に加工される。考慮されるオキシノイド化合物の例は、前記の構造式(ETL)を満たすものである。他の電子輸送材料には、米国特許第4,356,429号に開示されている多様なブタジエン誘導体および米国特許第4,539,507号に記載されている多様な複素環蛍光増白剤が含まれる。構造式(G)を満たすベンゾアゾールも有用な電子輸送材料である。トリアジンも電子輸送材料として有用であることが知られている。ドーピングを使用して、電導性を向上させることができる。A1q₃は、真性

10

20

30

40

50

電子輸送層の例である。n-ドープ電子輸送層の例は、米国特許第6,337,102号に開示されている、モル比1:1でLiによりドープされているBPhenである。

【0240】

有機層の付着

上記に記載された有機材料は、有機材料を形成するのに適切な任意の方法により適切に付着される。小型分子の場合では、熱蒸発により都合よく付着されるが、他の方法、例えば皮膜形成を改善するために任意の結合剤を有する溶媒により付着させることができる。材料が可溶性であるかまたはオリゴマー/ポリマー形態である場合、溶液加工が通常好ましく、例えばスピンドルコート、インクジェット印刷である。デンドリマー置換基を使用して、小型分子が溶液加工を受ける能力を向上させることができる。パターン化付着は、シャドーマスク、一体式シャドーマスク（米国特許第5,294,870号）、ドナーシートからの空間画定染料熱転写（米国特許第5,688,551号、同第5,851,709号および同第6,066,357号）、インクジェット法（米国特許第6,066,357号）を使用して達成することができる。

10

【0241】

封入

ほとんどのOLEDデバイスは、水分もしくは酸素、または両方に感受性があり、そのため、一般的に窒素またはアルゴンのような不活性雰囲気下で、アルミナ、ボーキサイト、硫酸カルシウム、粘土、シリカゲル、ゼオライト、アルカリ金属酸化物、アルカリ土類金属酸化物、硫酸塩または金属ハロゲン化物および過塩素酸塩のような乾燥剤と共に封入される。封入および乾燥の方法には、米国特許第6,226,890号に記載されているものが含まれるが、これらに限定されない。加えて、SiO_x、テフロン、無機/ポリマー交互層のような障壁層が封入の技術において知られている。

20

【0242】

本発明の実施態様によって作製されるデバイスを、フラットパネルディスプレー、コンピューターモニター、テレビジョン、大型広告掲示板、室内もしくは室外の照明および/もしくは信号指示用の明かり、完全に透明なディスプレー、フレキシブルディスプレー、レーザープリンター、携帯電話、携帯情報端末（PDA）、ラップトップコンピューター、デジタルカメラ、カメラ一体型ビデオ、ファインダー、マイクロディスプレー、乗り物用、劇場用もしくはスタジアム用のスクリーン、または標識を含む多種多様な消費者製品に組み込むことができる。多様な制御機構を使用して、パッシブマトリックスおよびアクティブマトリックスを含む、本発明により作製されたデバイスを制御することができる。

30

【0243】

本発明の多様な特徴および態様が、以下の実施例において更に説明される。これらの実施例は、当業者に本発明の範囲内でどのように操作するかを示すために提示されているが、本発明の範囲を制限するものではなく、そのような範囲は、請求項においてのみ定義されている。以下の実施例、並びに明細書および請求項の他の場所において特に指示のない限り、全ての部および率は重量に基づき、温度は摂氏であり、圧力は大気圧またはほぼ大気圧である。

【0244】

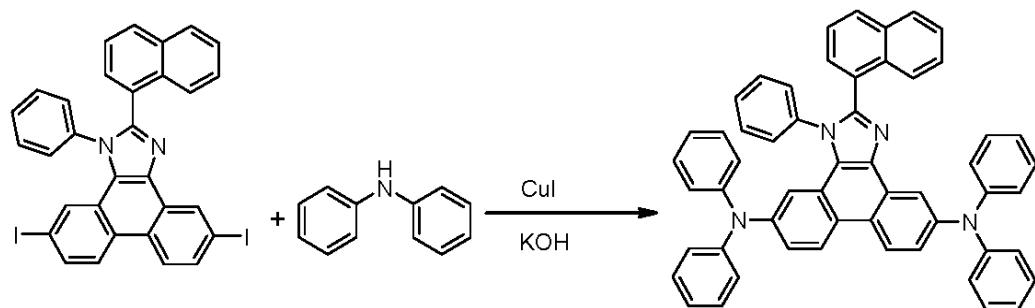
40

実施例

実施例1

【0245】

【化76】



10

【0246】

出発ヨウ化物 0.80 g、ジフェニルアミン 0.44 g、ヨウ化銅 0.01 g、1,10-フェナントロリン 0.02 g および水酸化ナトリウム 0.35 g を、この順番で、無水トルエン 10 ml にアルゴン雰囲気下で加えた。反応混合物を 125 ℃ で一晩加熱した。沈殿した生成物を濾過し、DMF 20 ml から再結晶させた。純度 90 % の生成物 0.40 g を得た。生成物を、トルエンを用いるシリカゲルのカラムクロマトグラフィーにより精製した。

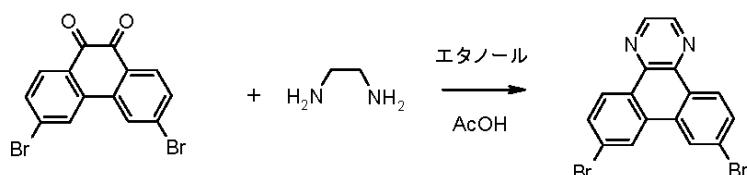
【0247】

実施例 2

【0248】

20

【化77】



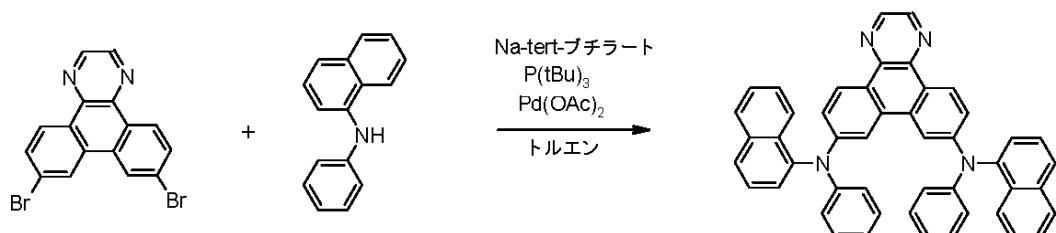
【0249】

2a) 無水エタノール 300 ml 中の 3,6-ジブロモ-フェナントレン-9,10-ジオン 12.0 g (32.8 mmol) に、エタノールジアミン 2.36 g (39.3 mmol) を加えた。反応混合物を窒素下で 8 時間還流した。氷酢酸 500 ml を加え、反応混合物を空気下で更に 9 時間環流し、25 ℃ に冷却した。生成物を濾取し、エタノールで洗浄した (融点: 278.0 ~ 282.0)。

30

【0250】

【化78】



40

【0251】

2b) トルエン 60 ml 中の実施例 2a の生成物 3.00 g (7.73 mmol) に、ナトリウム tert-ブチレート 1.60 g (16.6 mmol) を加えた。反応混合物をアルゴンで脱気した。酢酸パラジウム (II) 87 mg (0.39 mmol) を加えた。反応混合物をアルゴンで脱気した。トリ-tert-ブチルホスフィン 156 mg (0.77 mmol) を加えた。トルエン 15 ml 中の N-フェニル-1-ナフチルアミン 5.26 g (24.0 mmol) の脱気溶液を加えた。反応混合物をアルゴン下、90 ℃ で 19 時間攪拌した。反応混合物を、トルエンを用いてシリカゲルで濾過した。溶媒を真空下で除去し、生成物をジエチルエーテル

50

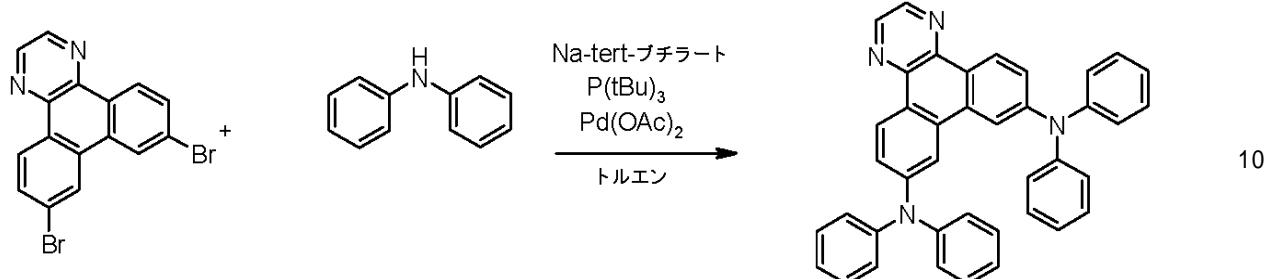
から結晶化した（融点：228～230）。

【0252】

実施例3

【0253】

【化79】



【0254】

反応は、実施例2bの生成物4.36g（11.2mmol）およびN-ジフェニルアミンを使用する以外は、実施例2bに従って実施した（融点：206）。

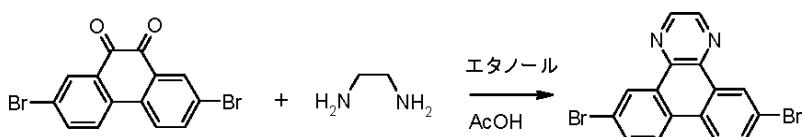
【0255】

実施例4

【0256】

【化80】

20



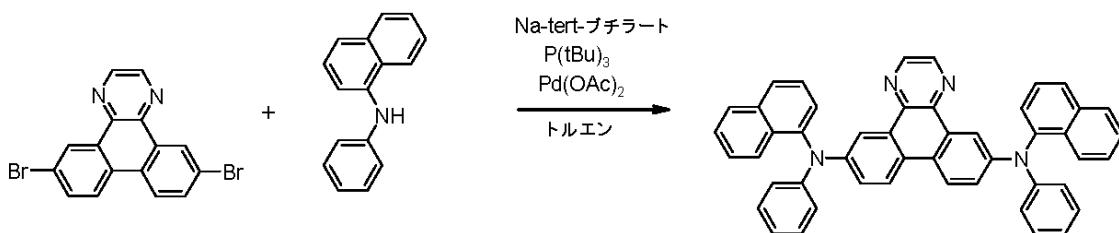
【0257】

4a) 無水エタノール300ml中の2,7-ジブロモ-フェナントレン-9,10-ジオン20.0g（54.6mmol）に、エタノールジアミン3.94g（65.6mmol）を加えた。反応混合物を窒素下で4時間還流した。冰酢酸500mlを加え、反応混合物を空気下で更に30時間環流し、25℃に冷却した。生成物を濾取し、水で洗浄し、冰酢酸で煎出し、メチルエチルケトンで2回煎出した（融点：176.0～179.0）。

30

【0258】

【化81】



【0259】

4b) 合成は実施例2bと同様に実施した。生成物は177℃の融点を有した。

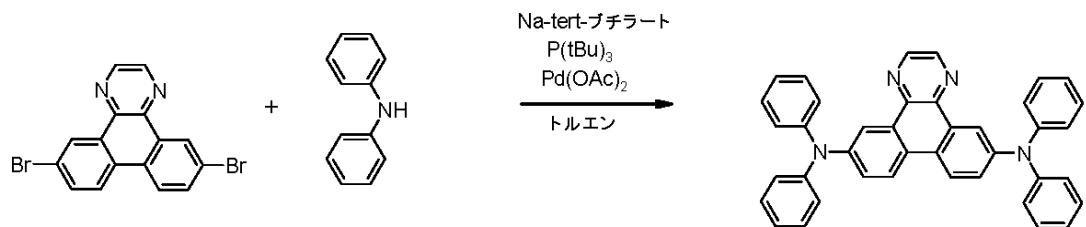
【0260】

実施例5

【0261】

40

【化82】



【0262】

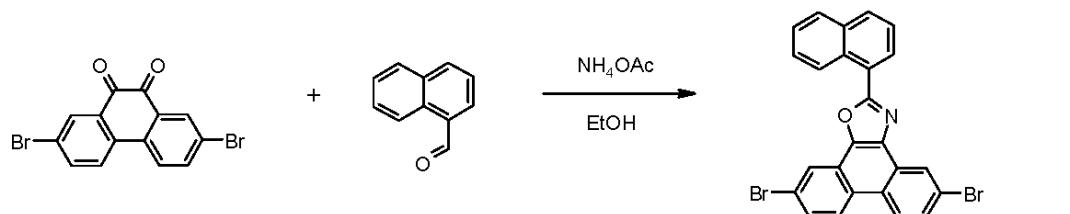
合成は実施例2bと同様に実施した。生成物は266.0~267.0の融点を有した。10

【0263】

実施例6

【0264】

【化83】



20

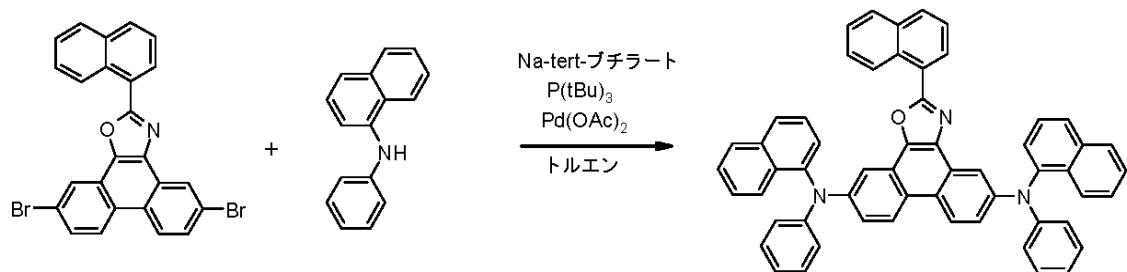
【0265】

6a) エタノール100ml中の2,7-ジブロモ-フェナントレン-9,10-ジオン5.0g(13.7mmol)、1-ナフタレンカルボキシアルデヒド2.56g(16.4mmol)および酢酸アンモニウム5.26g(68.3mmol)の混合物を窒素下で3時間環流した。生成物を濾取し、エタノール、水およびエタノールで洗浄し、トルエンから結晶化した。

【0266】

【化84】

30



【0267】

6b) 合成は実施例2bと同様に実施した(融点: 283.0~286.0)。

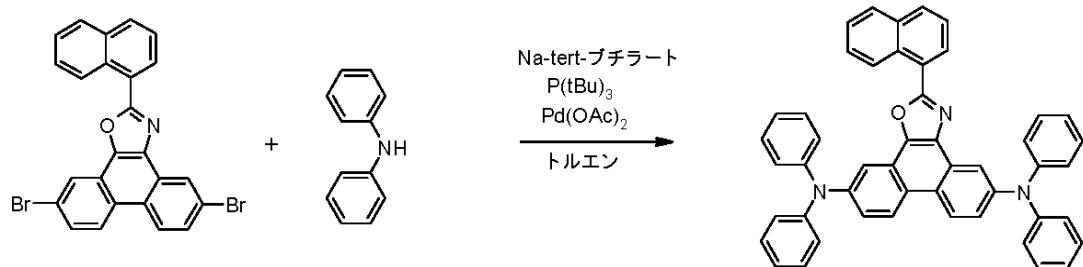
40

【0268】

実施例7

【0269】

【化 8 5】



【0270】

10

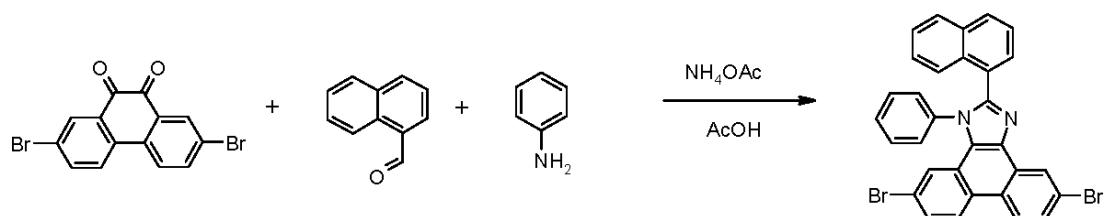
7 b) 合成は実施例 2 b と同様に実施した(分解点: 380)。

【0271】

実施例 8

【0272】

【化 8 6】



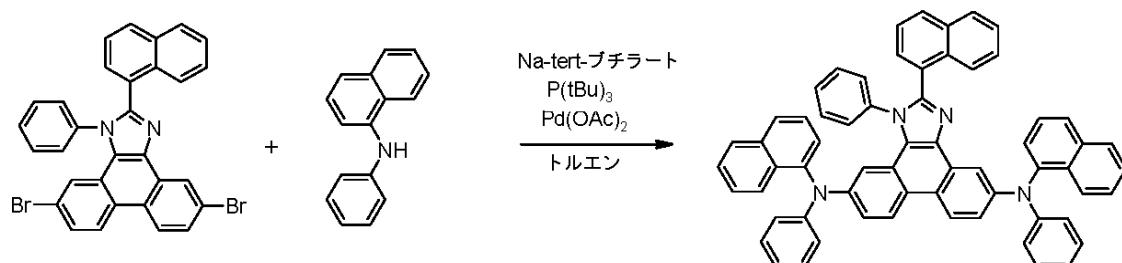
20

【0273】

8 a) 氷酢酸 500 ml 中の 2,7 -ジブロモ -フェナントレン -9,10 -ジオン 30.0 g (82.0 mmol)、1 -ナフタレンカルボキシアルデヒド 14.1 g (90.2 mmol)、アニリン 15.3 g (164 mmol) および酢酸アルミニウム 19.0 g (246 mmol) を窒素下で 4 時間環流した。生成物を濾取し、氷酢酸、水、炭酸水素ナトリウム溶液および水で洗浄し、次にトルエンおよびメチルエチルケトンで煎出した。

【0274】

【化 8 7】



30

【0275】

8 b) 反応は実施例 2 b に従って実施した。生成物は 158 のガラス移転点を有した。

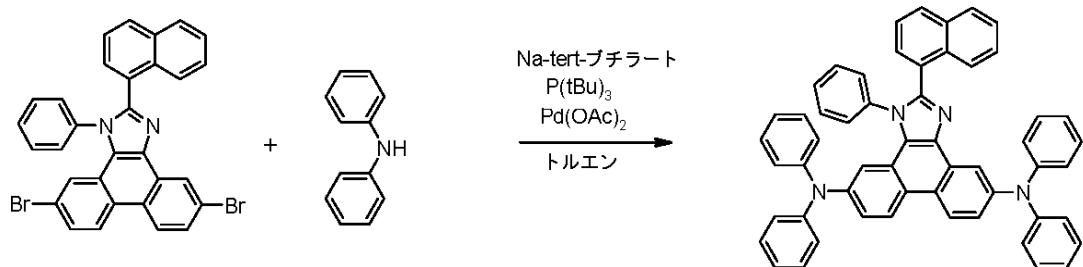
40

【0276】

実施例 9

【0277】

【化 8 8】



【0278】

10

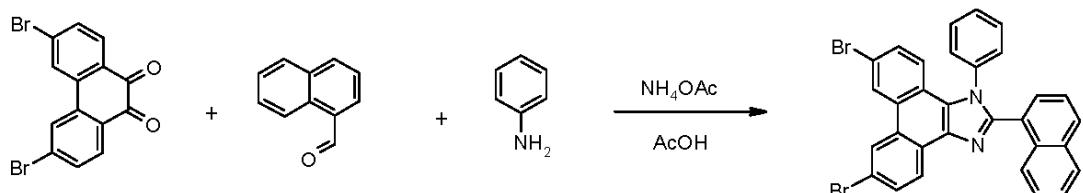
合成は実施例 2 b と同様に実施した。生成物は 334 の融点を有した。

【0279】

実施例 10

【0280】

【化 8 9】



20

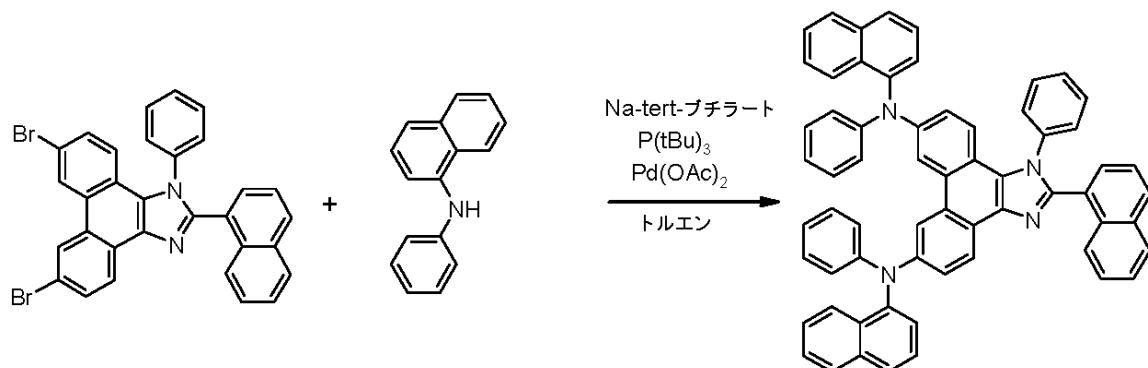
【0281】

10 a) 氷酢酸 400 ml 中の 3,6 -ジブロモ - フェナントレン - 9,10 - ジオン 20.0 g (54.6 mmol)、1 - ナフタレンカルボキシアルデヒド 10.2 g (65.6 mmol)、アニリン 21.2 g (164 mmol) および酢酸アンモニウム 12.6 g (164 mmol) を窒素下で 2 時間環流した。

生成物を濾取し、氷酢酸およびエタノールで洗浄した。

【0282】

【化 9 0】



30

【0283】

40

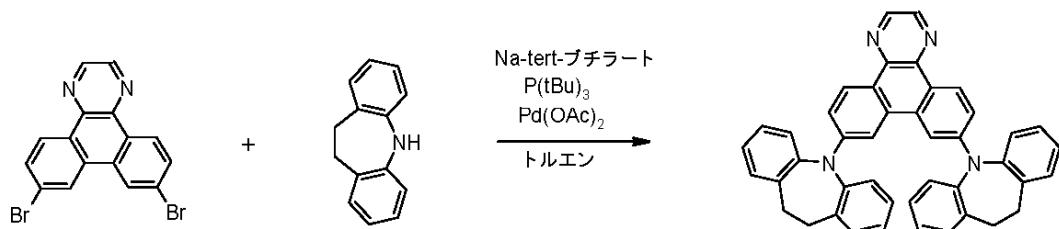
10 b) 合成は実施例 2 b と同様に実施した。生成物は、193.0 ~ 195.0 の融点を有した (ガラス移転点 153)。

【0284】

実施例 11

【0285】

【化91】



【0286】

合成は実施例2bと同様に実施した。生成物は350 の融点を有した。

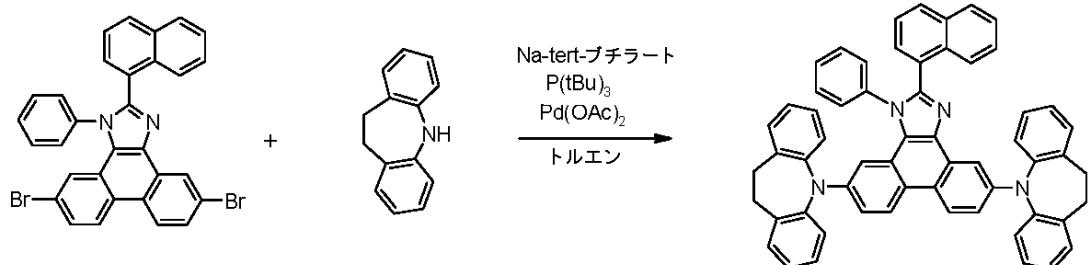
10

【0287】

実施例12

【0288】

【化92】



20

【0289】

合成は実施例2bと同様に実施した。生成物は290 の融点を有した。

【0290】

適用例1

デバイスの作製：デバイスを作製する前に、ガラス上のインジウムスズ酸化物（ITO）を2mm幅のストライプにパターン化した（シート抵抗20 /スクエア）。基板を、アセトン、イソプロパノールおよび水において、それぞれの溶媒で15分間超音波処理することにより洗浄した。その後、基板を窒素流で乾燥し、O₂ 真空プラズマで5分間処理した。OLEDの有機層を、ベース圧力2×10⁻⁷ Torr、2A/sで抵抗加熱したセラミック製るつぼから熱蒸発により連続的に付着させた。ホストおよびドーパントを異なる供給源から共蒸発させて、20nm厚の薄膜を形成した。各単一成分供給源の蒸発速度は、基板または供給源に近接した厚さモニター（Inficon）により制御した。全てのデバイスを、作製の直後に窒素グローブボックスにおいて測定した。

30

電流電圧および光学測定は、Botest装置により実施した。エレクトロルミネセンススペクトルは、Ocean Optic分光計により測定した。

【0291】

陽極から陰極まで以下の構造を有するOLEDを調製した：改善された正孔輸送層、例えばNovaled AGのNHT5:NDP2を10nm、4,4'-ビス〔N-1-ナフチル〕-N-フェニルアミノ〕-ビフェニル（-NPD）を20nm、実施例3cで得られた化合物15重量%でドープされたアルミニウム（III）ビス（2-メチル-8-キノラト）-4-フェニル-フェノレート（BA1q）を20nm/正孔障壁層として作用するBA1qを10nm使用した60nmの正孔注入層、例えばNovaled AGのNHT-5、60nmの改善された電子輸送層、例えばNovaledのNET-5:NDN-1、および最上部の電極として100nmのアルミニウム。

40

【0292】

【表5】

	EML 15重量% ドーパント	電流効率 [cd/A]@1000 cd/m ²	電力効率 [lm/W]@ 1000 Cd/m ²	電圧 [V]@1000 Cd/m ²	CIE X	CIE Y
適用例 1	ホスト実施例 8b ¹⁾	5.5	5.3	3.3	0.68	0.32
適用例 2	混合ホスト 実施例 8b:BAIq 75:10 ¹⁾	5.8	5.5	3.4	0.68	0.32
適用例 3	ホスト実施例 10b ¹⁾	4.8	4.1	3.7	0.68	0.32
適用例 4	ホスト実施例 10b ¹⁾	4.2	4.0	3.3	0.68	0.32
適用例 5	ホスト実施例 8b ¹⁾	6.8	6.2	3.4	0.68	0.32
適用例 6	ホスト実施例 5 ²⁾	6.2	5.4	3.6	0.68	0.32
適用例 7	ホスト実施例 3 ²⁾	6.1	6.5	2.90	0.65	0.35
適用例 8	混合ホスト 実施例 3: BAIq 50:50 ²⁾	8.3	8.7	3.0	0.65	0.35
適用例 9	ホスト実施例 8b ²⁾	7.9	8.8	2.82	0.65	0.35
適用例 10	混合ホスト 実施例 8b: BAIq 50:50 ²⁾	9.5	9.9	2.99	0.65	0.35

【0293】

¹⁾ 欧州特許出願第07102949.0号の実施例4bで得られたリン光性化合物を発光層(EML)のドーパントとして使用:

【0294】

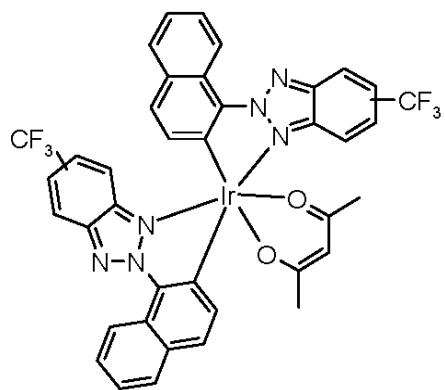
10

20

30

40

【化93】

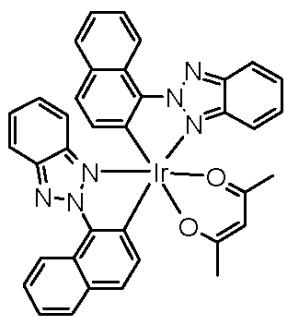


【0295】

2) 欧州特許出願第07102949.0号の実施例1bで得られたリン光性化合物を発光層(EML)のドーパントとして使用:

【0296】

【化94】



フロントページの続き

(51)Int.Cl. F I
C 0 9 K 11/06 (2006.01) C 0 9 K 11/06 6 6 0
C 0 7 B 61/00 (2006.01) C 0 7 B 61/00 3 0 0

(72)発明者 シュミッドハルター, ベアト
スイス国、ツェーハー- 4 4 1 6 ブーベンドルフ、ダーリエンシュトラーセ 2 5
(72)発明者 シェーファー, トーマス
スイス国、ツェーハー- 4 4 1 0 リースタル、ヴァイトヴェーク 1 5 テー
(72)発明者 ムーレル, ペーター
スイス国、ツェーハー- 4 1 0 4 オーバーヴィル、ホーヘシュトラーセ 1 6 6
(72)発明者 バルドン, クリストィーナ
ドイツ国、7 9 7 6 1 ヴァルツフート、カルヴァリエンベルクシュトラーセ 5

審査官 井龜 諭

(56)参考文献 特開平02-134644 (JP, A)
特開2007-189001 (JP, A)
国際公開第2005/123737 (WO, A2)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)
H 0 1 L 5 1 / 5 0
C 0 7 D 2 3 5 / 0 2
C 0 7 D 2 4 1 / 3 6
C 0 7 D 2 6 3 / 6 2
C 0 7 D 4 0 3 / 1 4
C 0 9 K 1 1 / 0 6
C 0 7 B 6 1 / 0 0
C A p l u s / R E G I S T R Y (S T N)