

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特 許 公 報(B2)

(11) 特許番号
特許第5319515号
(P5319515)

(45) 発行日 平成25年10月16日(2013.10.16)

(24) 登録日 平成25年7月19日(2013.7.19)

(51) Int.Cl.
C08G 61/12 (2006.01)

F I
C O 8 G 61/12

請求項の数 2 (全 22 頁)

(21) 出願番号	特願2009-503214 (P2009-503214)	(73) 特許権者	505005049
(86) (22) 出願日	平成19年3月27日 (2007.3.27)		スリーエム イノベイティブ プロパティ
(65) 公表番号	特表2009-532527 (P2009-532527A)		ズ カンパニー
(43) 公表日	平成21年9月10日 (2009.9.10)		アメリカ合衆国, ミネソタ州 55133
(86) 国際出願番号	PCT/US2007/065018		-3427, セント ポール, ポスト オ
(87) 国際公開番号	W02007/115021		フィス ボックス 33427, スリーエ
(87) 国際公開日	平成19年10月11日 (2007.10.11)		ム センター
審査請求日	平成22年3月24日 (2010.3.24)	(74) 代理人	100099759
(31) 優先権主張番号	11/278, 222		弁理士 青木 篤
(32) 優先日	平成18年3月31日 (2006.3.31)	(74) 代理人	100077517
(33) 優先権主張国	米国 (US)		弁理士 石田 敬
		(74) 代理人	100087413
			弁理士 古賀 哲次
		(74) 代理人	100128495
			弁理士 出野 知

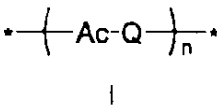
最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 アセナーチオフェンコポリマー

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

式 I のコポリマーであって、
【化 7】

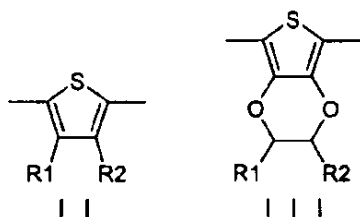


10

式中、
A c はアントラセン基であり、A c は、非置換であるか、または1～10の炭素原子を有するアルキル、1～10の炭素原子を有するアルコキシ、1～10の炭素原子を有するチオアルキル、1～10の炭素原子を有するヒドロキシアルキル、1～10の炭素原子を有するヘテロアルキル、2～10の炭素原子を有するアルケニル、またはこれらの組み合わせから選択される置換基で置換されており；
Q は式 I I または I I I の二価基であり；

20

【化 8】



10

R 1 および R 2 はそれぞれ独立して、水素、1 ~ 1 0 の炭素原子を有するアルキル、1 ~ 1 0 の炭素原子を有するアルコキシ、1 ~ 1 0 の炭素原子を有するチオアルキル、1 ~ 1 0 の炭素原子を有するヒドロキシアリル、1 ~ 1 0 の炭素原子を有するヘテロアルキル、または2 ~ 1 0 の炭素原子を有するアルケニルから選択され；および

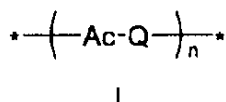
n は 4 以上の整数である、コポリマー。

【請求項 2】

溶媒および式 I の化合物を含む組成物であって、

20

【化 9】



30

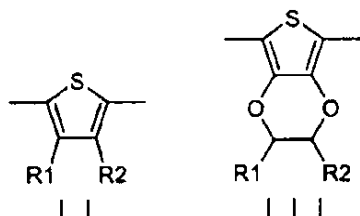
式中、

A c はアントラセン基であり、A c は、非置換であるか、または1 ~ 1 0 の炭素原子を有するアルキル、1 ~ 1 0 の炭素原子を有するアルコキシ、1 ~ 1 0 の炭素原子を有するチオアルキル、1 ~ 1 0 の炭素原子を有するヒドロキシアリル、1 ~ 1 0 の炭素原子を有するヘテロアルキル、2 ~ 1 0 の炭素原子を有するアルケニル、またはこれらの組み合わせから選択される置換基で置換されており；

Q は式 I I または I I I の基から選択される二価基であり；

【化 1 0】

40



50

R 1 および R 2 はそれぞれ独立して、水素、1 ~ 10 の炭素原子を有するアルキル、1 ~ 10 の炭素原子を有するアルコキシ、1 ~ 10 の炭素原子を有するチオアルキル、1 ~ 10 の炭素原子を有するヒドロキシアリル、1 ~ 10 の炭素原子を有するヘテロアルキル、または2 ~ 10 の炭素原子を有するアルケニルから選択され；および

n は 4 以上の整数であり、

溶液の質量を基準として式 I の化合物を少なくとも 0 . 0 5 質量パーセント含む溶液である、組成物。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

10

アセン - チオフェンコポリマーが開示される。

【背景技術】

【0002】

伝統的に、無機材料が電子デバイス業界の大半を占めてきた。例えば、砒化シリコンおよび砒化ガリウムは半導体物質として使用されており、二酸化ケイ素は絶縁体材料として使用されており、およびアルミニウムおよび銅のような金属は電極材料として使用されている。しかしながら、近年、伝統的な無機材料よりも有機材料を電子デバイスにおいて使用することを目的とした研究努力が高まってきている。特に、有機材料の使用は、電子デバイスの製造コストを削減することが可能であり、広範囲な応用を可能とし、表示装置の背面板および集積回路にフレキシブル回路を使用することを可能とする。

20

【発明の開示】

【発明が解決しようとする課題】

【0003】

さまざまな有機半導体材料が考察されてきたが、最も一般的なのは、ペンタセン含有化合物、テトラセン含有化合物、アントラセン含有化合物、ビス（アセニル）アセチレン、およびアセン - チオフェン化合物などの小分子に例示されるような縮合芳香族環化合物類である。また、ポリ（3 - アルキルチオフェン）などのレジオレギュラー（regioregular）ポリチオフェンおよび縮合チオフェン単位またはビス - チオフェン単位を有するポリマーなどのいくつかの高分子材料が考察されてきた。しかしながら、ポリマーの少なくとも一部は酸化される傾向があり、デバイス性能の低下につながる可能性がある。

30

【課題を解決するための手段】

【0004】

電子デバイスで使用可能なコポリマー材料が提供される。より詳細には、例えば、有機薄膜トランジスタ、発光ダイオード、および光起電セルなどの電子デバイスの 1 つ以上の層で使用可能なアセン - チオフェンコポリマーが開示される。

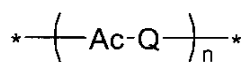
【0005】

一態様において、式 I のアセン - チオフェンコポリマーが提供される。

【0006】

【化 1】

40



I

【0007】

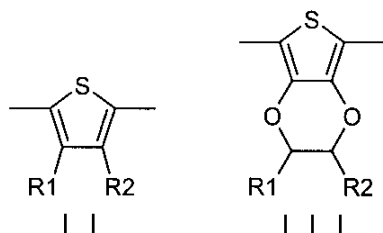
式 I において、A C は 2 ~ 5 の縮合芳香族環を有するアセン基である。アセンは非置換であるか、またはアルキル、アルコキシ、チオアルキル、アリール、アラリル、ハロ、ハロアルキル、ヒドロキシアリル、ヘテロアルキル、アルケニル、またはこれらの組み

50

合わせから選択される置換基で置換される。二価基 Q は式 I I または I I I から選択される。

【 0 0 0 8 】

【 化 2 】



10

【 0 0 0 9 】

各 R 1 および R 2 基は独立して、水素、アルキル、アルコキシ、チオアルキル、アリー
ル、アラルキル、ハロ、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、ヘテロアルキル、アルケニ
ル、またはこれらの組み合わせから選択される。下付きの n は、少なくとも 4 に等しい整
数である。アスタリスクは、式：

- A c - Q - の別の繰り返し単位のような別の基に結合する位置を示している。

【 0 0 1 0 】

別の態様において、溶媒および式 I のアセン - チオフェンコポリマーを含む組成物が提
供される。

20

【 0 0 1 1 】

本発明の上述した「課題を解決するための手段」は、本発明の開示されたすべての実施
形態またはあらゆる実施を記載しようとは意図していない。以下の発明を実施するための
最良の形態および実施例は、これらの実施形態をより具体的に例証する。

【発明を実施するための最良の形態】

【 0 0 1 2 】

本発明はアセン - チオフェンコポリマーを提供する。アセン - チオフェンコポリマーは
、電子デバイスの 1 つ以上の層に含まれ得る。例えば、アセン - チオフェンコポリマーは
、有機薄膜トランジスタなどの電子デバイスにおいて半導体材料として使用されることが
でき、または有機起電セルまたは有機発光デバイスなどの電子デバイスにおいて 2 つの電
極の間に配置され得る。

30

【 0 0 1 3 】

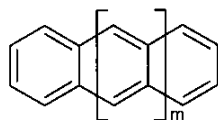
本明細書で使用する時、用語「 a 」、「 a n 」、および「 t h e 」は、「少なくとも 1
つの (a t l e a s t o n e) 」と同じ意味で用いられ、記載された要素の 1 つ以上を意味する。

【 0 0 1 4 】

「アセン」は、次の式によって示されるように、少なくとも 2 つの縮合ベンゼン環を直
線配列に有する多環式芳香族炭化水素基を言い、式中、 m は 0 以上の整数である。

【 0 0 1 5 】

【 化 3 】



40

【 0 0 1 6 】

50

アセンは、通常、2～5の縮合ベンゼン環（即ち、ナフタレン、アントラセン、テトラセン、およびペンタセン）を有する。

【0017】

「アルキル」は、飽和炭化水素であるアルカンの基である一価の基を示す。アルキルは、直鎖状、分枝状または環状の、またはこれらの組み合わせであることができ、および典型的には1～30の炭素原子を含んでいる。いくつかの実施形態において、アルキル基は4～30、1～20、4～20、1～14、1～10、4～10、4～8、1～8、1～6、または1～4の炭素原子を含む。アルキル基の例には、メチル、エチル、n-プロピル、イソ-プロピル、n-ブチル、tert-ブチル、イソ-ブチル、n-ペンチル、n-ヘキシル、シクロヘキシル、n-オクチル、n-ヘプチル、およびエチルヘキシルが挙げられるがこれらに限定されない。

10

【0018】

「アルケニル」は、少なくとも1つの炭素-炭素二重結合を有する炭化水素であるアルケンの基である一価の基を示す。アルケニルは、直鎖状、分枝状または環状の、またはこれらの組み合わせであり得、および典型的には2～30の炭素原子を含んでいる。いくつかの実施形態において、アルケニルは、2～20、2～14、2～10、4～10、4～8、2～8、2～6、または2～4の炭素原子を含む。代表的なアルケニル基は、エテニル、プロペニル、およびブテニルを含む。

【0019】

「アルコキシ」は、Rがアルキル基である、式-ORの一価の基を示す。例には、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、およびブトキシが挙げられるがこれらに限定されない。

20

【0020】

「アリール」は、芳香族炭素環式化合物の基である一価の基を示す。アリールは1つの芳香環を有することができ、または芳香環に結合または縮合する5つまでの環状炭素構造を有することができる。その他の環状構造は、芳香族、非芳香族、またはこれらの組合せであることができる。アリール基の例としては、フェニル、ビフェニル、テルフェニル、アンスリル、ナフチル、アセナフチル、アントラキノニル、フェナンスリル、アントラセニル、ピレニル、ペリレニル、およびフルオレニルが挙げられるが、これらに限定されない。

【0021】

30

「アラルキル」は、アリール基で置換されたアルキルを示す。

【0022】

「ハロ」は、ハロゲン基（即ち、-F、-Cl、-Br、または-I）を示す。

【0023】

「ハロアルキル」は、1つ以上のハロ基で置換されたアルキルを示す。

【0024】

「ヒドロキシアルキル」は1つ以上のヒドロキシ基で置換されたアルキルを示す。

【0025】

「ヘテロアルキル」は、チオ、オキシ、または-NR^a-で置き換えられた1つ以上の-CH₂-基を有するアルキルを言い、式中、R^aは水素またはアルキルである。ヘテロアルキルは直鎖状、分枝状または環状の、またはこれらの組み合わせであり得、ならびに30までの炭素原子および20までのヘテロ原子を含み得る。いくつかの実施形態において、ヘテロアルキルは、25までの炭素原子、20までの炭素原子、15までの炭素原子、または10までの炭素原子を含む。チオアルキル基およびアルコキシ基はヘテロアルキル基の部分集合である。

40

【0026】

「チオアルキル」は、式-SRの一価の基を言い、式中、Rはアルキル基である。

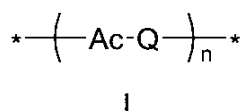
【0027】

一態様において、式Iのアセン-チオフェンコポリマーが提供される。

【0028】

50

【化 4】



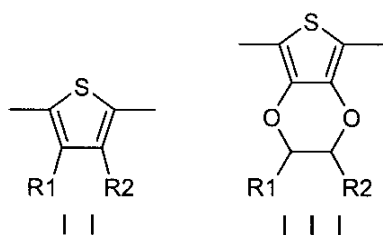
【 0 0 2 9 】

式 I において、Ac は 2 ～ 5 の縮合芳香族環を有するアセン基である。アセンは非置換であるか、またはアルキル、アルコキシ、チオアルキル、アリール、アラルキル、ハロ、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、ヘテロアルキル、アルケニル、またはこれらの組み合わせから選択される置換基で置換され得る二価基 Q は、式 II または III から選択される。

10

【 0 0 3 0 】

【化 5】



20

【 0 0 3 1 】

各 R 1 および R 2 基は、独立して、水素、アルキル、アルコキシ、チオアルキル、アリール、アラルキル、ハロ、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、ヘテロアルキル、アルケニル、またはこれらの組み合わせから選択される。下付きの n は、少なくとも 4 に等しい整数である。アスタリスクは、式 - Ac - Q - の別の繰り返し単位のような別の基に結合する位置を示している。

30

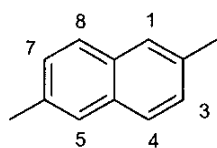
【 0 0 3 2 】

Ac 基は、アセン基（例えば、二価の基）である。アセンは、直線的なやり方で配置される 2 ～ 5 つの縮合環を有し得る（即ち、ナフタレン、アントラセン、テトラセン、およびペンタセンを含む好適なアセン）。アセンは通常連続番号が与えられており、ただ 1 つの環の員である各炭素原子に番号がつけられている。代表的なアセン - ジイル（即ち、アセンの二価の基）のさまざまな位置がナフチレン - 2, 6 - ジイルの次の構造に示されている。

【 0 0 3 3 】

【化 6】

40

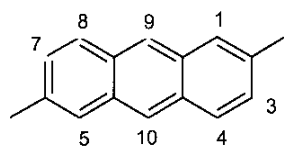


アントラセン - 2, 6 - ジイル、

【 0 0 3 4 】

50

【化 7】

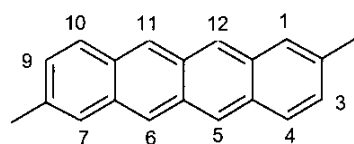


テトラセン-2, 8-ジイル、および

【 0 0 3 5 】

10

【化 8】

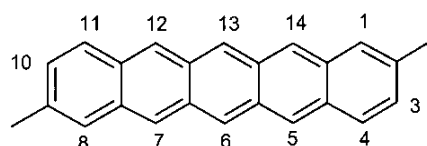


ペンタセン-2, 9-ジイル。

【 0 0 3 6 】

20

【化 9】



【 0 0 3 7 】

30

各 A c 基は非置換であるか、またはアルキル、アルコキシ、チオアルキル、アリール、アラルキル、ハロ、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、ヘテロアルキル、アルケニル、またはこれらの組み合わせから選択される置換基で置換され得る。A c 基に関連して本明細書において使用されるとき、用語「置換基」は、基 Q 以外の A c に結合する基、式 - A c - Q - の他の繰り返し単位、またはポリマーの末端基を示す。同様に、用語「非置換」は、A c が置換基を有していないことを意味する。A c 置換基に言及する場合、用語「それらの組み合わせ」は、A c 基の複数の置換基または第 2 の置換基でさらに置換される第 1 の置換基のいずれかをさすことができる。少なくともいくつかの実施形態において、1 つ以上の置換基の追加は、有機溶媒中への式 I のコポリマー溶解度を増加する傾向があり、またはコポリマーと様々なコーティング組成物との相溶性を向上させる傾向がある。

40

【 0 0 3 8 】

基 Q は A c の任意の位置に結合可能である。式 I のアセン-チオフェンコポリマーは、ピチオフェンまたはポリチオフェン基を全く欠いている。即ち、任意の 2 つの A c 基は、式 I I または I I I の 1 つの基から選択される基 Q によって分離される。多くの実施形態において、Q は A c の外部芳香環に結合する。本明細書で使用するとき、用語「外部芳香環」は、ただ 1 つの別の芳香環に縮合するアセンの芳香環を示す。一部のコポリマーにおいて、基 Q は A c の外部芳香環に結合し、例えば、ナフタレンまたはアントラセンに基づく A c 基の 1、2、3、4、5、6、7、または 8 位、テトラセンに基づく A c 基の 1、2、3、4、7、8、9、または 10 位、またはペンタセンに基づく A c 基の 1、2、3、4、8、9、10、または 11 位に結合する。その他の実施形態において、Q は A c の

50

内部芳香環に結合する。本明細書で使用する時、用語「内部芳香環」は、2つの他の芳香環に縮合するアセンの芳香環を示す。一部のコポリマーにおいて、基QはAcの内部芳香環に結合し、例えば、アントラセンに基づくAc基の9または10位、テトラセンに基づくAc基の5、6、11、または12位、またはペンタセンに基づくAc基の5、6、7、12、13、または14位に結合する。

【0039】

基Qに結合するのに加え、Ac基は、式-Ac-Q-の別の繰り返し単位などの第2の基（即ち、得られるコポリマーコポリマー材料は少なくとも5に等しい下付きのnを有する）またはポリマーの末端基に結合する。式Iの基QがAc基の内部芳香環に結合する場合、第2の基は多くの場合同じ内部芳香環に結合する。基QがAc基の外部芳香環に結合する場合、第2の基は多くの場合反対側の外部芳香環に結合する。即ち、基Qおよび第2の基は、多くの場合Ac基の反対側の遠位端に結合する。代表的なAc基には、非置換の、またはアルキル、アルコキシ、チオアルキル、アリール、アラルキル、ハロ、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、ヘテロアルキル、アルケニルまたはこれらの組み合わせから選択される置換基で置換されている、ナフタレン-2,6-ジイル、ナフタレン-2,7-ジイル、アントラセン-2,6-ジイル、アントラセン-2,7-ジイル、アントラセン-9,10-ジイル、テトラセン-2,8-ジイル、テトラセン-2,9-ジイル、ペンタセン-2,9-ジイル、ペンタセン-2,10-ジイル、またはペンタセン-6,13-ジイルが挙げられるがこれらに限定されない。位置番号は、Q基および第2の基がAc基に結合する炭素を示している。

【0040】

コポリマーが半導体材料として機能する用途などの一部の用途においては、直線方向に、延長する共役長を有するAc基を選択するのが望ましい場合がある。即ち、一部の用途においては、Q基がアセンの外部芳香環に結合するのが好ましい。代表的なAc基には、非置換の、またはアルキル、アルコキシ、チオアルキル、アリール、アラルキル、ハロ、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、ヘテロアルキル、アルケニルまたはこれらの組み合わせから選択される置換基で置換されている、ナフタレン-2,6-ジイル、アントラセン-2,6-ジイル、テトラセン-2,8-ジイル、またはペンタセン-2,9-ジイルが挙げられるがこれらに限定されないコポリマーのある特定の用途において、Ac基は、非置換の、またはアルキル、アルコキシ、チオアルキル、アリール、アラルキル、ハロ、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、ヘテロアルキル、アルケニルまたはこれらの組み合わせから選択される置換基で置換されている、アントラセン-2,6-ジイルである。

【0041】

基Qは、上述のように式IIまたはIIIから選択される。これら式中の各基R1およびR2は独立して水素、アルキル、アルコキシ、チオアルキル、アリール、アラルキル、ハロ、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、ヘテロアルキル、アルケニル、またはこれらの組み合わせから選択される。基R1およびR2に言及するとき、用語「これらの組み合わせ」は、別の基でさらに置換される第1の基を示す。

【0042】

式Iのいくつかの実施形態において、4~30の炭素原子、4~20の炭素原子、4~16の炭素原子、または4~10の炭素原子などの少なくとも4つの炭素原子を含有する、少なくとも1つの、R1基、R2基、またはAc置換基が存在する。より詳細には、少なくとも4つの炭素原子を有するアルキル、少なくとも4つの炭素原子を有するアルコキシ、少なくとも4つの炭素原子を有するチオアルキル、少なくとも6つの炭素原子を有するアリール、少なくとも10の炭素原子を有するアラルキル、少なくとも4つの炭素原子を有するハロアルキル、少なくとも4つの炭素原子を有するヒドロキシアルキル、少なくとも4つの炭素原子を有するヘテロアルキル、少なくとも4つの炭素原子を有するアルケニル、またはこれらの組み合わせから選択される少なくとも1つのR1基、R2基、またはAc置換基が存在する。少なくとも1つのかかる基の選択は、式Iのアセン-チオフェンコポリマーの通常の有機溶媒への溶解度を多くの場合増加させることができ、またはア

セン - チオフェンコポリマーと様々なコーティング組成物との相溶性を向上させる。

【 0 0 4 3 】

いくつかの代表的なコポリマーは、少なくとも4つの炭素原子を含有する、R 1、R 2、およびA c置換基から選択されるただ1つの基を有する。いくつかの代表的なコポリマーは、少なくとも4つの炭素原子を含有する、R 1、R 2、およびA c置換基から選択される2つの基を有する。さらに別の代表的なコポリマーにおいて、R 1、R 2、およびA c置換基の3つ全てが少なくとも4つの炭素原子を含有する。4つの炭素原子を有さない基は水素であり得、または4未満の炭素原子を含有し得る。

【 0 0 4 4 】

少なくとも4つの炭素原子を有する、R 1、R 2、およびA c置換基から選択される1つの基が存在しかつ当該基は8未満の炭素原子を有する場合、当該基は典型的には、分枝状、環状またはこれらの組み合わせである。少なくとも4つの炭素原子を有する、R 1、R 2、およびA c置換基から選択される1つの基が存在しかつ当該基は少なくとも8つの炭素原子を有する場合、当該基は典型的には、分枝状、環状またはこれらの組み合わせである。少なくとも4つの炭素原子を有するR 1、R 2、およびA c置換基から選択される複数の基が存在する場合、各基は独立して、直鎖状、分枝状または環状、またはこれらの組み合わせであり得る。

【 0 0 4 5 】

いくつかの代表的なコポリマーにおいて、R 1またはR 2から選択される少なくとも1つの基は少なくとも4つの炭素原子を有する（即ち、R 1は少なくとも4つの炭素原子を有する、R 2は少なくとも4つの炭素原子を有する、またはR 1およびR 2は共に少なくとも4つの炭素原子を有する）。例えば、R 1は水素または4未満の炭素原子を有する基から選択されることができ、およびR 2は、少なくとも4つの炭素原子を有するアルキル、少なくとも4つの炭素原子を有するアルコキシ、少なくとも4つの炭素原子を有するチオアルキル、少なくとも6つの炭素原子を有するアリール、少なくとも10の炭素原子を有するアラルキル、少なくとも4つの炭素原子を有するハロアルキル、少なくとも4つの炭素原子を有するヒドロキシアリル、少なくとも4つの炭素原子を有するヘテロアルキル、少なくとも4つの炭素原子を有するアルケニル、またはこれらの組み合わせから選択することができる。これら代表的なコポリマーにおいて、A c基は非置換であるかまたは置換されていてもよい。

【 0 0 4 6 】

その他の代表的なコポリマーにおいて、R 1およびR 2は共に独立して、少なくとも4つの炭素原子を有するアルキル、少なくとも4つの炭素原子を有するアルコキシ、少なくとも4つの炭素原子を有するチオアルキル、少なくとも6つの炭素原子を有するアリール、少なくとも10の炭素原子を有するアラルキル、少なくとも4つの炭素原子を有するハロアルキル、少なくとも4つの炭素原子を有するヒドロキシアリル、少なくとも4つの炭素原子を有するヘテロアルキル、少なくとも4つの炭素原子を有するアルケニル、またはこれらの組み合わせである。これら代表的なコポリマーの一部において、R 1はR 2と同一である。これら代表的なコポリマーにおいて、A c基は非置換であるかまたは置換されていてもよい。

【 0 0 4 7 】

さらにその他の代表的なコポリマーにおいて、R 1およびR 2は共に水素であり、または4未満の炭素原子を有し、および4つの炭素原子を有する少なくとも1つの置換基を有するアセンである。即ち、少なくとも1つのA c置換基は、少なくとも4つの炭素原子を有するアルキル、少なくとも4つの炭素原子を有するアルコキシ、少なくとも4つの炭素原子を有するチオアルキル、少なくとも6つの炭素原子を有するアリール、少なくとも10の炭素原子を有するアラルキル、少なくとも4つの炭素原子を有するハロアルキル、少なくとも4つの炭素原子を有するヒドロキシアリル、少なくとも4つの炭素原子を有するヘテロアルキル、少なくとも4つの炭素原子を有するアルケニル、またはこれらの組み合わせである。

10

20

30

40

50

【 0 0 4 8 】

少なくとも8つの炭素原子を有する代表的な直鎖アルキル基には、*n*-オクチル、*n*-デシル、テトラデシル、ヘキサデシル等が挙げられるがこれらに限定されない。分枝状、環状、またはこれらの組み合わせである、少なくとも4つの炭素原子を有する代表的なアルキル基には、*sec*-ブチル、2,2-ジメチルプロピル、3,5,5-トリメチルヘキシル、2,3-ジメチルペンチル、2-エチルヘキシル、2-メチルペンチル、3-メチルブチル、3-メチルペンチル、2-エチル-3-メチルブチル、2-(3,3-ジメチルシクロヘキシル)エチル、および2,5,7,7-テトラメチルオクチルが挙げられるがこれらに限定されない。これらアルキル基は、アルコキシ基、チオアルキル基、アラ

10

【 0 0 4 9 】

少なくとも8つの炭素原子を有する代表的な直鎖アルケニル基は、シス-11-ヘキサデセニル、シス-4-ヘプタデセニル、シス-13-オクタデセニル、シス-9-ヘキサデセニル、シス-8-ウンデセニル、シス-7-デセニル、シス-3-ノネニル、シス-6-ノネニル、および(E,Z)-2,6-ドデカジエニルを含むがこれらに限定されない。分枝状、環状、またはこれらの組み合わせである、少なくとも4つの炭素原子を有する代表的なアルケニル基は、2-メチル-4-(2,6,6-トリメチル-2-シクロヘキセニル)-3-ブテニル、2-(2,2,3-トリメチル-3-シクロペンテニル)エチル、2-(2,6,6-トリメチル-1-シクロヘキセニル)エチル、2-(2,2,3-トリメチル-3-シクロペンテニル)エチル、1,2,3,4,5,6,7,8-オクタヒドロ-8,8-ジメチル-2-ナフチル、3,7-ジメチル-6-オクテニル、2,6-ジメチル-5-ヘプテニル、および2-メチル-4-(2,6,6-トリメチル-1-シクロヘキセニル)ブチルを含むがこれらに限定されない。

20

【 0 0 5 0 】

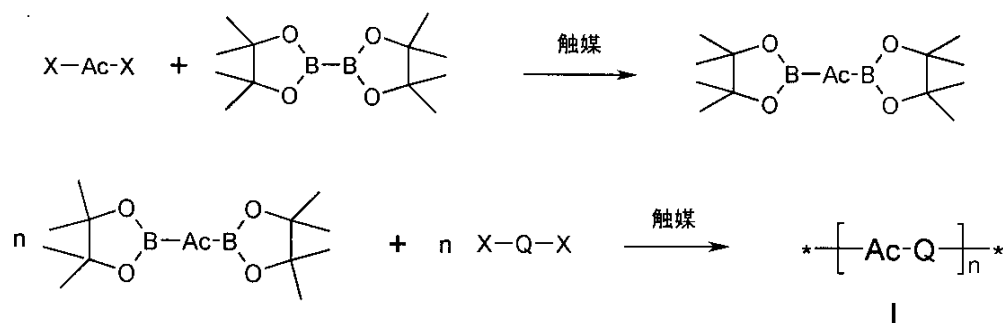
式Iのコポリマーは、スキームAに示されるようなスズキカップリング反応を用いて調製することが可能である。

30

【 0 0 5 1 】

【 化 1 0 】

反応スキームA



40

【 0 0 5 2 】

初めに、ジハロアセンをビス(ピナコラート)ジボロンなどのジオキサボロランと反応させて、2つのジオキサボロラン基(例えば、テトラメチルジオキサボロラン)を有するアセン化合物を形成する。次に、ジオキサボロラン基を有するアセン化合物をジハロチオ

50

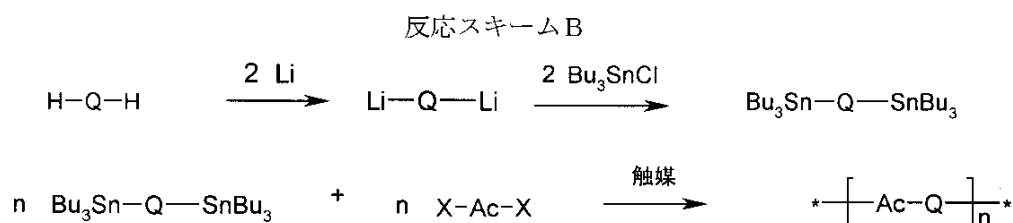
フェン化合物と反応させる。第2の反応のハロ基は第1の反応のハロ基と同じであっても、または異なってもよい。これら反応の両方は、典型的には、例えば、テトラキス(トリフェニル)ホスフィン)パラジウム(0)などのパラジウム触媒の存在下で起きる。反応スキームAの代替えとして、最初に、ジハロチオフェン化合物をジオキサボロランと反応させ、次にスズキカップリング反応を用いてジハロアセンと反応させることもできる。スズキカップリング反応は、次の文献にさらに記載されている：イトウ(Ito)ら、アンゲヴァンテ・ケミー・インターナショナル・エディション(Angew.Chem., Int.Ed.)、42、1159～1162(2003年)。

【0053】

式Iのコポリマーを合成するために、反応スキームBに示されているようにスチル(Stille)カップリング反応を用いることも可能である。

【0054】

【化11】



【0055】

チオフェン化合物をリチウム化し、次に塩化トリブチルスズのようなトリアルキルスタネートと反応させて2つのトリアルキルスタネート基で置換されたチオフェン化合物を形成することができる。得られたチオフェン化合物は、次に、パラジウム触媒の存在下でジハロアセンと反応させることが可能である。反応スキームBの代替えとして、アセンをリチウム化し、次にトリアルキルスタネートと反応させて2つのトリアルキルスタネート基で置換されたアセンを形成することができる。得られたアセン化合物は、次に、パラジウム触媒の存在下でジハロチオフェンと反応させることが可能である。スチルカップリング反応は、次の文献にさらに記載されている：ミラー(Miller)ら、有機化学ジャーナル(J. Org. Chem.)、60、6813～6819(1995年)、およびカツツ(Katz)ら、化学研究報告(Acc.Chem. Res.)、34、359～369(2001年)。

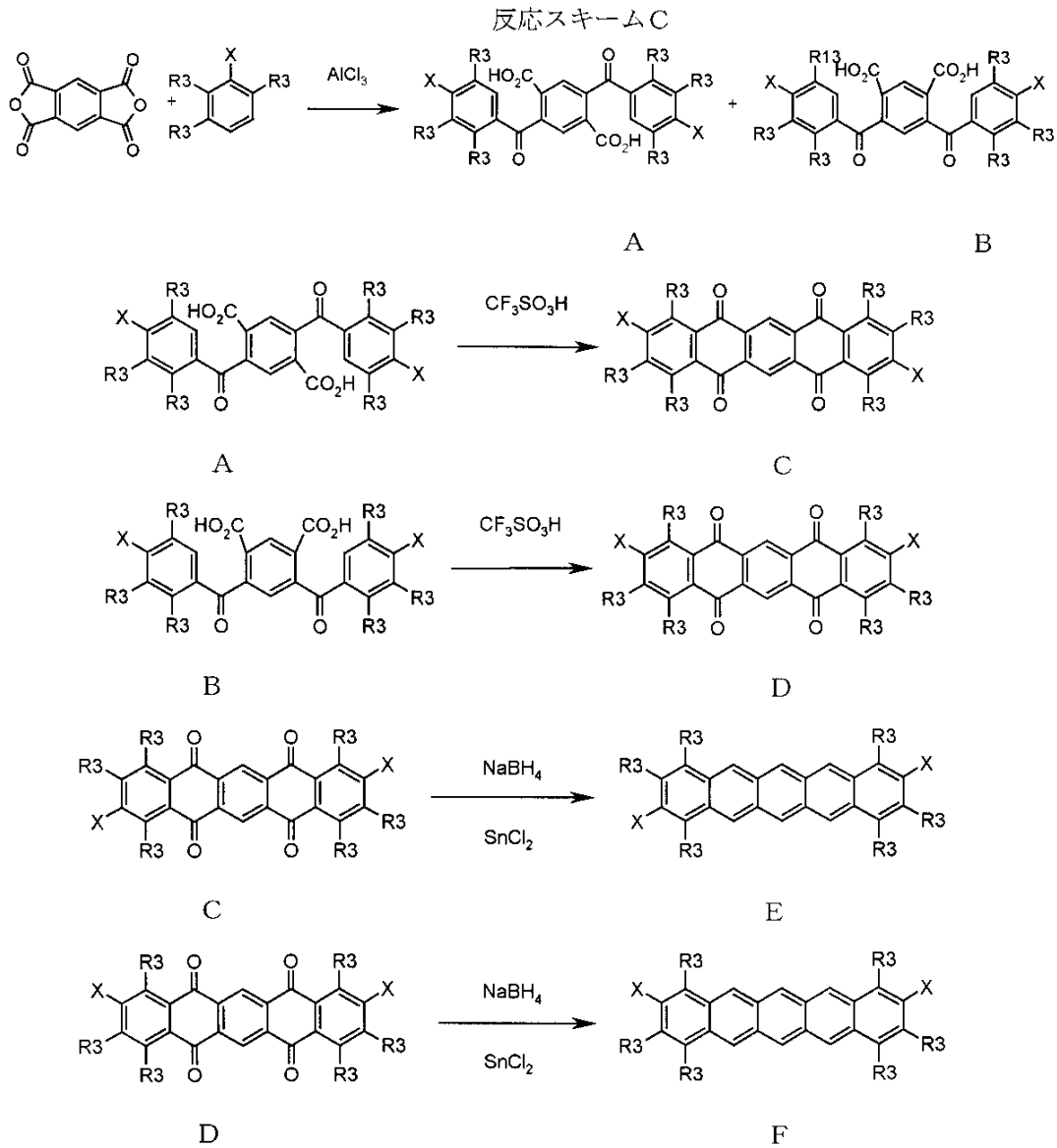
【0056】

スズキまたはスチルカップリング反応に用いられるハロゲン化アセン(即ち、ジハロアセン(dihaloacene))は、市販または市販材料から合成可能であるかのいずれかである。例えば、1,4-ジブプロモナフタレン、2,6-ジブプロモナフタレン、9,10-ジブプロモアントラセンは、アルファ・エイサー社またはシグマ・アルドリッチから入手可能である。2,6-ジブプロモアントラセンは、ホッジ(Hodge)ら(化学コミュニケーション(Chem. Comm.)73(1997年))によって記述されているように、市販の2,6-ジアミノアントラキノン(シグマ・アルドリッチ(Sigma Aldrich))から調製することができる。1,4-ジクロロテトラセン、5,12-ジクロロテトラセン、5,11-ジブプロモテトラセン、および5,11-ジクロロテトラセンは、次の文献およびその参照に記載のように調製することができる：クラーク(Clar)ら、テトラヘドロン(Tetrahedron)、28、5049(1972年)。2,9および2,10位を置換したジハロペンタセンは反応スキームCに示すようにして合成することが可能である。ハロベンゼンとピロメリット酸無水物との、不活性溶媒中または加熱をともなう溶媒であるハロベンゼンを用いた、典型的なフリーデル・クラフツ条件(例えば、強ルイス酸である AlCl_3)下での反応は、2つの異性体ビス(ハロベンゼン)フタル酸AおよびBを生じさせる。これら異

性体は、分別再結晶、クロマトグラフィーによって、または溶解度の違いによって分離され得る。さらに、個々のビス（ハロベンゼン）フタル酸 A および B の反応は別々に行われ、まずトリフルオロメタンスルホン酸を使用して対応するテトラオン（tetraone）C および D に環化し、続いて水素化ホウ素ナトリウムおよび塩化第一スズによって所望のペンタセン E および F に還元する。以下の R₃ 基は水素または置換基である。

【 0 0 5 7 】

【 化 1 2 】



【 0 0 5 8 】

式 I I a :

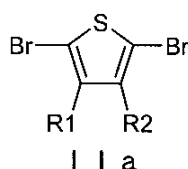
10

20

30

40

【化 1 3】



【 0 0 5 9】

10

のジプロモチオフェン化合物は、対応するチオフェン化合物の臭素化によって調製することが可能である。即ち、対応するチオフェンを、*n*-ブロモスクシンイミド (NBS) などの臭素化剤と反応させることが可能である。例えば、R 1 および R 2 がアルキル基と同じ式 I I a の化合物は、3, 4 - ジハロチオフェンを、所望のアルキル基を含有する 2 モルのグリニャール試薬と反応させ、続いて臭素化反応させることにより調製することができる。この方法は次の文献にさらに記載されている：ビダール (Vidal) ら、欧州化学誌 (Chem. Eur. J.)、6、1 6 6 3 ~ 1 6 7 3 (2 0 0 0 年)。

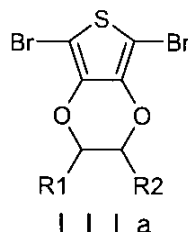
【 0 0 6 0】

同様に、式 I I I a のジハロエチレンジオキシチオフェン化合物は、対応するエチレンジオキシチオフェンの臭素化によって調製することができる。

20

【 0 0 6 1】

【化 1 4】



30

【 0 0 6 2】

対応するエチレンジオキシチオフェンは、例えば、市販の 3, 4 - ジメトキシチオフェンを 2, 3 - ブタンジオール、1, 2 - プロパンジオール等などのジェミナルジオールと、*p*-トルエンスルホン酸などの酸触媒の存在下でエーテル交換環化縮合反応 (transesterificative cyclocondensation) することにより調製することができる。得られた 3, 4 - 二置換チオフェンは、次に、2 および 5 位をブromoこはく酸イミドまたはその他の好適な臭素化剤で二臭素化され得る。この方法は次の文献にさらに記載されている：ニールソン (Nielson) ら、マクロモレキュールズ (Macromolecules)、3 8、1 0 3 7 9 (2 0 0 5 年)。

40

【 0 0 6 3】

式 I のコポリマーは、典型的には少なくとも 5, 0 0 0 g / モルの質量平均分子量を有している。いくつかの実施形態において、その質量平均分子量は、少なくとも 7, 0 0 0 g / モル、少なくとも 8, 0 0 0 g / モル、少なくとも 1 0, 0 0 0 g / モル、少なくとも 1 2, 0 0 0 g / モルまたは少なくとも 1 5, 0 0 0 g / モルである。質量平均分子量は、ゲル透過クロマトグラフィーを用いて測定することができる。

【 0 0 6 4】

所望であれば、追加的沈澱工程またはソックレー抽出などの当該技術分野において既知の技術を用いて、コポリマー材料の純度を高めることが可能である。

【 0 0 6 5】

50

別の態様において、溶媒および式 I のアセン - チオフェンコポリマーを含む組成物が提供される。好適な溶媒には、トルエン、ベンゼン、およびキシレンなどの芳香族溶媒類；テトラヒドロフランおよびジオキサンなどのエーテル類；メチルイソブチルケトンおよびメチルエチルケトンなどのケトン類；クロロホルム、ジクロロメタン、クロロベンゼン、およびジクロロベンゼンなどの塩素系溶媒類；シクロヘキサンおよびヘプタンなどのアルカン類；および N , N - ジメチルホルムアミドおよび 1 - メチルピロリドンなどのアミド類が挙げられるがこれらに限定されない。式 I のアセン - チオフェンコポリマーの少なくとも一部はこれらの溶媒に可溶性である。本明細書で使用する時、用語「可溶性」は、コポリマーが溶媒に溶解して、溶液の質量を基準として、少なくとも 0 . 0 5 質量パーセントのコポリマーを含有する溶液を提供することができることを意味する。一部のコポリマーは溶液の質量を基準として、少なくとも 0 . 0 5 質量パーセント、少なくとも 0 . 1 質量パーセント、少なくとも 0 . 2 質量パーセント、少なくとも 0 . 5 質量パーセント、少なくとも 1 質量パーセント、少なくとも 2 質量パーセント、少なくとも 3 質量パーセント、または少なくとも 5 質量パーセントの溶解度を有する。

【 0 0 6 6 】

電子デバイスにおいて、基材の表面または層の表面などの表面に組成物を塗布してコーティング物を提供するために、その組成物を用いることができる。コーティングは、例えば、スプレーコーティング、スピンコーティング、ディップコーティング、ナイフコーティング、グラビアコーティング、インクジェット印刷、および転写などの、任意の好適な施用技術を用いて適用することができる。溶媒は、塗布後に、周囲条件（例えば、約 2 0 ~ 約 2 5 ）下で蒸発させることにより、高温、例えば、最高約 2 0 0 、最高約 1 5 0 、最高約 1 2 0 、最高約 1 0 0 、または最高約 8 0 の温度などで乾燥することにより、コーティング物から除去することができる。一方、ペンタセンなどの多くのその他の既知有機半導体材料は、真空蒸着することを必要とする。

【 0 0 6 7 】

アセン - チオフェンコポリマーおよびこれらコポリマーを含有する溶液は、特別な大気の保護なしにおよび特に光から保護することなしに、少なくとも数日の間安定である傾向がある。反対に、ポリチオフェンは、溶液中でおよび / または空気に暴露したときに安定ではない。

【 0 0 6 8 】

現在予見されない本発明の実質的でない修正が、それでもなお本発明の均等物を表す可能性があるにもかかわらず、上記は、本発明者によって、可能性のあるものとして記述され得た予見される実施形態によって本発明を記載している。

【 実施例 】

【 0 0 6 9 】

全ての試薬は商業的供給源から購入し、別段の指摘がない限りさらなる精製なしに使用した。炭酸ナトリウムはシグマ・アルドリッチ（Sigma Aldrich）（ウイスコンシン州ミルウォーキー（Milwaukee, WI）から入手し；A L I Q U A T 3 3 6（相間移動触媒）はアルファ・エイサー（マサチューセッツ州ワードヒル（Ward Hill, MA））から入手し；およびテトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（0）はシグマ・アルドリッチ（ウイスコンシン州ミルウォーキー）から入手した。次の出発材料を公開されている手順を用いて以下のように調製した：

2 , 6 - ジブロモアントラセンを、市販の 2 , 6 - ジアミノアントラキノン（シグマ・アルドリッチ）から、ホッジら、ケミカル・コミュニケーション（Chem. Comm.）7 3（1 9 9 7 年）、に記載の通りに調製した。D M F から 2 , 6 - ジブロモアントラセンを再結晶によりさらに精製した。

【 0 0 7 0 】

2 , 6 - ジ（4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル）アントラセンを、2 , 6 - ジブロモアントラセンから、メン（Meng）ら、米国化学会誌（J. Am. Chem. Soc.）、1 2 7、2 4 0 6 ~ 2 4 0 7（2 0 0 5 年）に関連している支

10

20

30

40

50

援情報に公開されている手順にしたがって調製した。

【0071】

2, 5 - ジブromo - 3, 4 - ジヘキシルチオフェンを、ビダール (Vidal) ら、欧州化学誌 (Chem. Eur. J.)、6、1663 ~ 1673 (2000年) に公開されている手順にしたがって調製した。

【0072】

2, 5 - ジブromo - 3, 4 - エチレンジオキシチオフェンを、ソツツイン (Sotzing) ら、材料化学誌 (Chem. Mater.)、8、882 ~ 889 (1996年) に公開されている手順にしたがって調製した。

【0073】

製造例 1 - 2, 5 - ビス (4 - クロロベンゾイル) テレフタル酸の調製

497.6 グラム (3.732 モル、4.2 eq) の塩化アルミニウム、2000 グラム (17.77 モル、20 eq) のクロロベンゼン、および 193.8 グラム (0.8885 モル、1 eq) のベンゼン - 1, 2, 4, 5 - テトラカルボン酸二無水物 (ピロメリット酸二無水物) の混合物を撹拌し、65 °C で 3 時間加熱した。混合物を室温まで冷却し、一晚撹拌した。この混合物に 1048 グラムの 12 M 塩酸の混合物を徐々に加え、1 時間の間撹拌した。6 リットルの水を加え、有機層を分離した。水層の pH が 1 を超えるまで有機層を水で洗浄した。1429 mL のエチルアセテート、および 400 mL の THF を有機層に加え、水相を分離し、有機相を 500 mL の飽和 NaCl で洗浄して分割した。有機相を硫酸マグネシウムで乾燥し、溶媒を真空で除去して 287.9 グラムを得た。この物質を 3 リットルのアチルアセテートを用いて 75 °C で 5 時間加熱し、次に冷却した。固形物を収集し、空気乾燥して所望の生成物 95.73 グラムを得た。¹H NMR (400 MHz、DMSO-d₆): 7.951 (s、2H)、7.748 (d、J = 8.60 Hz、4H)、7.58 (d、J = 8.60 Hz、4H)。

【0074】

製造例 2 - 2, 9 - ジクロロペンタセン - 5, 7, 12, 14 - テトラオンの調製。

【0075】

50 グラムの 2, 5 - ビス (4 - クロロベンゾイル) テレフタル酸に、500 mL のトリフルオロメタンスルホン酸および 1.57 mL のトリフルオロメタンスルホン酸無水物を加え、混合物を一晚 150 °C に加熱した。混合物を室温まで冷却し、1000 グラムの氷の上に注いだ。氷が溶けるまで混合物を撹拌した。固形物を収集し、5 リットルの水で洗浄した。ろ液の pH は 4.0 であった。固形物を一晚空気乾燥し所望の生成物 46 グラムを得た。IR 1684 cm⁻¹ および 1593 cm⁻¹。¹H NMR (溶媒として T f O H、DMSO-d₆ 外部ロック): 9.225 (s、0.5H)、9.120 (s、1H)、9.002 (s、0.5H)、8.271 (dd、J = 8.65 Hz、J = 3.65 Hz、2H)、8.204 (t、J = 2.25 Hz、2H)、7.817 (dd、J = 8.60 Hz、J = 2.00 Hz、2H)。

【0076】

製造例 3 - 2, 9 - ジクロロペンタセンの調製。

【0077】

46 mL の 2 - メトキシエチルエーテルにおいて、2.0 グラム (5.9 ミリモル、1 eq) の 2, 9 - ジクロロペンタセン - 5, 7, 12, 14 - テトラオンおよび 3.0 g (322 ミリモル、54 eq) の水素化ホウ素ナトリウムの混合物を 23 °C で窒素雰囲気中 14 時間撹拌した。この反応混合物に 23 mL のメタノールを液滴方法で添加し、反応温度を 50 °C より低く維持した。水 19.7 グラム中の 18 グラム (96 ミリモル、16 eq) の塩化第一スズおよび 7.3 グラムの 12 M 塩酸の溶液を、反応温度を 23 °C と 40 °C との間に維持する速度で添加した。混合物をさらに 30 分間撹拌した。反応混合物を濾過し、残留物を 46 mL の 12 M 塩酸で洗浄し、続いて 120 mL のアセトンおよび 40 mL の THF で洗浄した。固形物を空気乾燥し、所望の生成物 0.95 グラムを得た。IR KBr 1618 cm⁻¹、906 cm⁻¹。

【 0 0 7 8 】

製造例 4 - 2 , 9 - ジ (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) ペンタセンの調製

内部を窒素置換した丸底フラスコに、2 , 9 - ジクロロペンタセン (2 2 . 4 g、6 4 , 6 7 ミリモル)、ビス (ピナコラート) ジボロン (4 1 . 0 6 g、1 6 1 . 6 7 ミリモル)、酢酸カリウム (2 5 . 9 0 g、2 6 3 , 8 5 ミリモル)、およびアルファ・エイサーから入手可能なジクロロメタンとの [1 , 1 ' - ビス (ジフェニルホスフィノ) フェロセン] ジクロロパラジウム錯体 (1 : 1) (1 . 6 4 g、2 . 0 ミリモル) を供給した。次に、ジメチルスルホキシド (D M S O、3 0 0 m L) を加え、混合物を窒素で 1 5 分間泡立てた。8 0 °C に 1 6 時間加熱した後、反応混合物を室温まで冷却し、氷水 (6 0 0 m L) の中に注いだ。続いて、塩化メチレン (2 回) で抽出し、混合有機層を無水の硫酸マグネシウム上で乾燥する。溶媒をロータリーエバポレータで除去し、残留物をフラッシュゲルクロマトグラフィーで数回精製する。

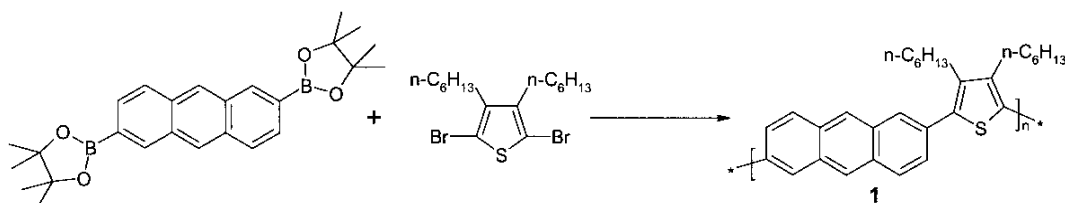
10

【 0 0 7 9 】

(実施例 1) - ポリ (3 , 4 - ジヘキシルチオフエン - アルト - 2 , 6 - アントラセン) の調製 (1) :

【 0 0 8 0 】

【 化 1 5 】



20

【 0 0 8 1 】

2 5 0 m L のシュレンク管に、2 , 6 - ジ (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) アントラセン (2 . 6 3 1 g、6 . 1 2 ミリモル)、2 , 5 - ジブromo - 3 , 4 - ジヘキシルチオフエン (2 . 5 4 4 g、6 . 2 0 ミリモル)、炭酸ナトリウム (3 . 1 8 g、3 0 . 0 ミリモル)、A L I Q U A T 3 3 6 (1 . 2 0 g)、蒸留水 (1 5 m L)、およびトルエン (1 0 0 m L) を供給した。混合物をシュレンクラインの下で 3 回脱気した。次に、テトラキス (トリフェニルホスフィン) パラジウム (0) (0 . 1 5 0 g、0 . 1 3 ミリモル) を N₂ 気流の下で添加した。もう 1 回脱気した後、混合物を N₂ 下、9 0 °C で 7 2 時間撹拌した。深緑色の沈殿物が現れた。次に、混合物を 6 0 °C に冷却し、固形物を濾過して除去した。トルエン溶液をろ液から分離し、洗浄水の pH が中性になるまで脱イオン水で洗浄した。続いて、強く撹拌しながらトルエン溶液を Me O H (5 0 0 m L) に液滴で添加した。黄色い沈殿物が現れ、濾過して収集した。固形物を C H C l₃ (5 0 m L) に再度溶解し、Me O H (2 5 0 m L) から 2 回沈殿させ、次に、Me O H で 2 4 時間洗浄した (ソックレー抽出による)。黄色固形物 (1 . 2 2 g、収率 : 4 7 %) を生成物として得た。数平均分子量 (M_n) は 1 2 0 0 0 g / モルに等しく、質量平均分子量 (M_w) は 5 2 0 0 0 g / モルに等しかった。¹ H N M R (4 0 0 M H z、C D C l₃) : 8 . 2 0 - 8 . 5 3 p p m (ブロード、2 H、A r H)、8 . 1 0 - 8 . 1 8 (ブロード、2 H、A r H)、7 . 8 7 - 8 . 1 0 (ブロード、2 H、A r H)、7 . 3 4 - 7 . 8 5 (ブロード、2 H、A r H)、2 . 5 0 - 2 . 9 1 (ブロード、4 H、C H₂)、1 . 4 9 - 1 . 8 4 (ブロード、4 H、C H₂)、1 . 0 7 - 1 . 4 9 (ブロード、1 2 H、C H₂)、0 . 6 7 - 0 . 9 7 (ブロード、6 H、C H₃)。T G A は分解温度が 4 5 5 °C であることを示した。

30

40

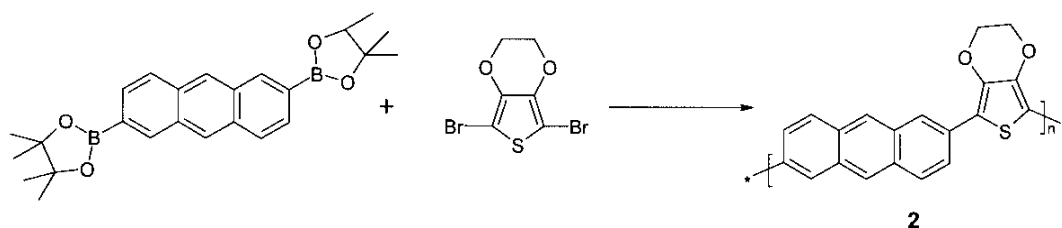
【 0 0 8 2 】

50

(実施例2) - ポリ(3,4-エチレンジオキシチオフエン-アルト-2,6-アントラセン)の調製(2):

【0083】

【化16】



10

【0084】

100 mLのシュレンク管に、2,6-ジ(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)アントラセン(0.430 g、1.00ミリモル)、2,5-ジブromo-3,4-エチレンジオキシチオフエン(0.300 g、1.00ミリモル)、炭酸ナトリウム(0.530 g、5.00ミリモル)、ALIQUAT 336(0.24 g)、蒸留水(5 mL)、およびトルエン(50 mL)を供給した。混合物をシュレンクラインの下で3回脱気して酸素を除去した。次に、テトラキス(トリフェニホスフィン)パラジウム(0)(0.025 g、0.02ミリモル)をN₂の気流の下で添加した。もう1回脱気した後、混合物をN₂下、90℃で72時間撹拌した。赤い沈澱物が現れた。混合物を室温まで冷却した後、濾過により固形物を収集し、トルエンおよび脱イオン水で洗浄した。次に、メタノールで24時間洗浄した(ソックレー抽出による)。赤い固形物(0.33 g、収率: 約100%)を生成物として得た。

20

【0085】

(実施例3) - ポリ(3,4-エチレンジオキシチオフエン-アルト-2,9-ペンタセン)調製

100 mLのシュレンク管に、2,9-ジ(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)ペンタセン(0.530 g、1.00ミリモル)、2,5-ジブromo-3,4-エチレンジオキシチオフエン(0.300 g、1.00ミリモル)、炭酸ナトリウム(0.530 g、5.00ミリモル)、ALIQUAT 336(0.24 g)、蒸留水(5 mL)、およびトルエン(50 mL)を供給した。混合物をシュレンクラインの下で3回脱気して酸素を除去した。次に、テトラキス(トリフェニホスフィン)パラジウム(0)(0.025 g、0.02ミリモル)をN₂の気流の下で添加した。もう1回脱気した後、混合物をN₂下、90℃で72時間撹拌した。混合物を室温まで冷却した後、濾過により固形物を収集し、トルエンおよび脱イオン水で洗浄した。次に、メタノールで24時間洗浄した(ソックレー抽出による)。本発明の実施態様の一部を以下の項目1-21に列記する。

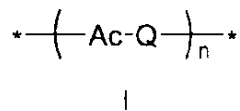
30

[1]

式Iのコポリマーであって、

40

【化 1】



10

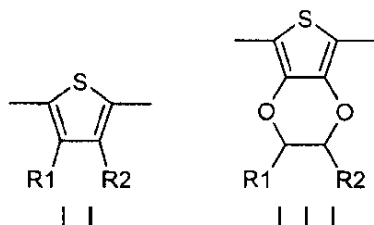
式中、

A c は 2 ～ 5 の縮合芳香族環を有するアセン基であり、A c は、非置換であるか、またはアルキル、アルコキシ、チオアルキル、アリール、アラルキル、ハロ、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、ヘテロアルキル、アルケニル、またはこれらの組み合わせから選択される置換基で置換されており；

Q は式 I I または I I I の二価基であり；

【化 2】

20



R 1 および R 2 はそれぞれ独立して、水素、アルキル、アルコキシ、チオアルキル、アリール、アラルキル、ハロ、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、ヘテロアルキル、またはアルケニルから選択され；および

30

n は 4 以上の整数である、コポリマー。

[2]

非置換であるか、またはアルキル、アルコキシ、チオアルキル、アリール、アラルキル、ハロ、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、ヘテロアルキル、アルケニル、またはこれらの組み合わせから選択される置換基で置換されている A c が、ナフタレン - 2 , 6 - ジイル、ナフタレン - 2 , 7 - ジイル、アントラセン - 2 , 6 - ジイル、アントラセン - 2 , 7 - ジイル、アントラセン - 9 , 10 - ジイル、テトラセン - 2 , 8 - ジイル、テトラセン - 2 - 9 - ジイル、ペンタセン - 2 , 9 - ジイル、ペンタセン - 2 , 10 - ジイル、またはペンタセン - 6 , 13 - ジイルから選択される、項目 1 に記載のコポリマー。

40

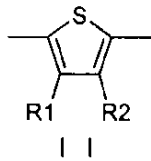
[3]

A c が、非置換であるか、またはアルキル、アルコキシ、チオアルキル、アリール、アラルキル、ハロ、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、ヘテロアルキル、アルケニル、またはこれらの組み合わせから選択される置換基で置換されているアントラセン - 2 , 6 - ジイルである、項目 1 に記載のコポリマー。

[4]

Q が式 I I である、項目 1 に記載のコポリマー

【化 3】



10

[5]

前記 R 1 基、前記 R 2 基、または前記 A c 置換基の少なくとも 1 つが少なくとも 4 つの炭素原子を有する、項目 4 に記載のコポリマー。

[6]

非置換であるか、またはアルキル、アルコキシ、チオアルキル、アリール、アラルキル、ハロ、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、ヘテロアルキル、アルケニル、またはこれらの組み合わせから選択される置換基で置換されている A c が、ナフタレン - 2 , 6 - ジイル、アントラセン - 2 , 6 - ジイル、テトラセン - 2 , 8 - ジイル、またはペンタセン - 2 , 9 - ジイルから選択される、項目 4 に記載のコポリマー。

20

[7]

A c が、非置換であるか、またはアルキル、アルコキシ、チオアルキル、アリール、アラルキル、ハロ、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、ヘテロアルキル、アルケニル、またはこれらの組み合わせから選択される置換基で置換されているアントラセン - 2 , 6 - ジイルである、項目 4 に記載のコポリマー。

[8]

R 1 または R 2 の少なくとも 1 つが、少なくとも 4 つの炭素原子を有するアルキル、少なくとも 4 つの炭素原子を有するアルコキシ、少なくとも 4 つの炭素原子を有するチオアルキル、少なくとも 6 つの炭素原子を有するアリール、少なくとも 10 の炭素原子を有するアラルキル、少なくとも 4 つの炭素原子を有するハロアルキル、少なくとも 4 つの炭素原子を有するヒドロキシアルキル、少なくとも 4 つの炭素原子を有するヘテロアルキル、少なくとも 4 つの炭素原子を有するアルケニル、またはこれらの組み合わせである、項目 4 に記載のコポリマー。

30

[9]

R 1 および R 2 の両方が独立して、少なくとも 4 つの炭素原子を有するアルキル、少なくとも 4 つの炭素原子を有するアルコキシ、少なくとも 4 つの炭素原子を有するチオアルキル、少なくとも 6 つの炭素原子を有するアリール、少なくとも 10 の炭素原子を有するアラルキル、少なくとも 4 つの炭素原子を有するハロアルキル、少なくとも 4 つの炭素原子を有するヒドロキシアルキル、少なくとも 4 つの炭素原子を有するヘテロアルキル、少なくとも 4 つの炭素原子を有するアルケニル、またはこれらの組み合わせから選択される、項目 4 に記載のコポリマー。

40

[10]

R 1 および R 2 の両方が独立して、少なくとも 4 つの炭素原子を有するアルキルである、項目 4 に記載のコポリマー。

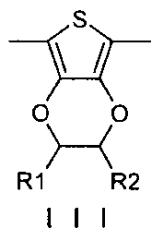
[11]

A c が、非置換であるか、またはアルキル、アルコキシ、チオアルキル、アリール、アラルキル、ハロ、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、ヘテロアルキル、アルケニル、またはこれらの組み合わせから選択される置換基で置換されているアントラセン - 2 , 6 - ジイルである、項目 8 に記載のコポリマー。

[12]

50

Q が式 I I I である、項目 1 に記載のコポリマー
【化 4】



10

[1 3]

非置換であるか、またはアルキル、アルコキシ、チオアルキル、アリール、アラルキル、ハロ、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、ヘテロアルキル、アルケニル、またはこれらの組み合わせから選択される置換基で置換されている A c が、ナフタレン - 2 , 6 - ジイル、アントラセン - 2 , 6 - ジイル、テトラセン - 2 , 8 - ジイル、またはペンタセン - 2 , 9 - ジイルから選択される、項目 1 2 に記載のコポリマー。

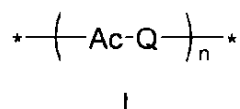
20

[1 4]

R 1 および R 2 がそれぞれ独立して水素またはアルキルである、項目 1 2 に記載のコポリマー。

[1 5]

溶媒および式 I の化合物を含む組成物であって、
【化 5】



30

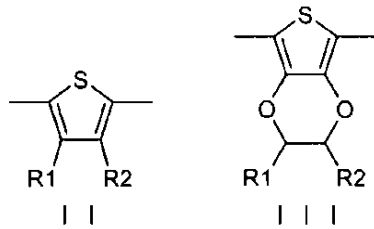
式中、

A c は 2 ~ 5 の縮合芳香族環を有するアセン基であり、前記アセンは非置換であるか、またはアルキル、アルコキシ、チオアルキル、アリール、アラルキル、ハロ、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、ヘテロアルキル、アルケニル、またはこれらの組み合わせから選択される置換基で置換されており；

40

Q は式 I I または I I I の基から選択される二価基であり；

【化 6】



10

R 1 および R 2 はそれぞれ独立して、水素、アルキル、アルコキシ、チオアルキル、アリール、アラルキル、ハロ、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、ヘテロアルキル、またはアルケニルから選択され；および

n は 4 以上の整数である、組成物。

[1 6]

R 1、R 2、または前記 A c 置換基の少なくとも 1 つが少なくとも 4 つの炭素原子を有する、項目 1 に記載の組成物。

20

[1 7]

R 1 が水素であるかまたは 4 つ未満の炭素原子を有し、および R 2 が少なくとも 4 つの炭素原子を有する、項目 1 6 に記載の組成物。

[1 8]

R 1 および R 2 の両方が少なくとも 4 つの炭素原子を有する、項目 1 6 に記載の組成物。

[1 9]

R 1 および R 2 の両方が水素であるかまたは 4 つ未満の炭素原子を有し、および前記 A c 置換基が少なくとも 4 つの炭素原子を有する、項目 1 6 に記載の組成物。

[2 0]

R 1、R 2、および前記 A C 置換基の少なくとも 2 つが、少なくとも 4 つの炭素原子を有する、項目 1 6 に記載の組成物。

30

[2 1]

前記組成物が、溶液の質量を基準として式 I の化合物を少なくとも 0 . 0 5 質量パーセント含む溶液である、項目 1 に記載の組成物。

フロントページの続き

(74)代理人 100093665

弁理士 蛭谷 厚志

(74)代理人 100146466

弁理士 高橋 正俊

(72)発明者 チュ, パイワン

アメリカ合衆国, ミネソタ 55133-3427, セント ポール, ポスト オフィス ボックス 33427, スリーエム センター

(72)発明者 リー, ツ-チェン

アメリカ合衆国, ミネソタ 55133-3427, セント ポール, ポスト オフィス ボックス 33427, スリーエム センター

(72)発明者 ボーゲル, デニス イー.

アメリカ合衆国, ミネソタ 55133-3427, セント ポール, ポスト オフィス ボックス 33427, スリーエム センター

(72)発明者 ガーラック, クリストファー ピー.

アメリカ合衆国, ミネソタ 55133-3427, セント ポール, ポスト オフィス ボックス 33427, スリーエム センター

審査官 井津 健太郎

(56)参考文献 特開2006-028055(JP, A)

特表2009-532878(JP, A)

国際公開第2005/104262(WO, A1)

国際公開第2005/019198(WO, A1)

特開昭63-219102(JP, A)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

C08G 61/00-61/12

CAplus/REGISTRY(STN)