

(19) 日本国特許庁(JP)

## (12) 特 許 公 報(B2)

(11) 特許番号

特許第5541859号  
(P5541859)

(45) 発行日 平成26年7月9日(2014.7.9)

(24) 登録日 平成26年5月16日(2014.5.16)

(51) Int.Cl.

F 1

<b>C08G 61/12</b>	<b>(2006.01)</b>	C08G 61/12
<b>C09K 11/06</b>	<b>(2006.01)</b>	C09K 11/06 69O
<b>C07D 235/02</b>	<b>(2006.01)</b>	C07D 235/02 C S P B
<b>C07D 263/54</b>	<b>(2006.01)</b>	C07D 263/54
<b>C07D 241/42</b>	<b>(2006.01)</b>	C07D 241/42

請求項の数 7 (全 156 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号	特願2008-501273 (P2008-501273)
(86) (22) 出願日	平成18年3月8日(2006.3.8)
(65) 公表番号	特表2008-538221 (P2008-538221A)
(43) 公表日	平成20年10月16日(2008.10.16)
(86) 國際出願番号	PCT/EP2006/060538
(87) 國際公開番号	W02006/097419
(87) 國際公開日	平成18年9月21日(2006.9.21)
審査請求日	平成21年3月6日(2009.3.6)
(31) 優先権主張番号	05101936.2
(32) 優先日	平成17年3月14日(2005.3.14)
(33) 優先権主張国	欧洲特許庁(EP)
(31) 優先権主張番号	05103648.1
(32) 優先日	平成17年5月2日(2005.5.2)
(33) 優先権主張国	欧洲特許庁(EP)

(73) 特許権者	396023948 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 斎藤 房幸
(72) 発明者	シェーファー, トマス スイス国、ツェーハー-4410 リース タル、ヴァイトヴェーク 15デー 最終頁に続く

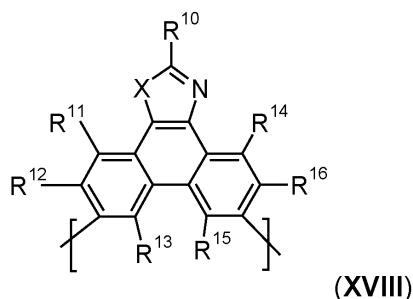
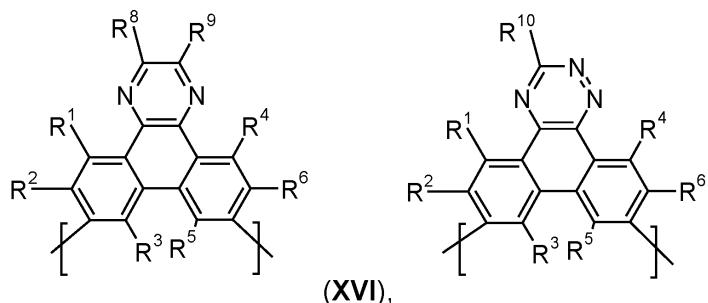
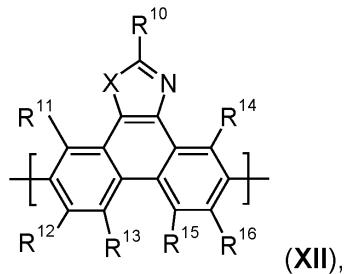
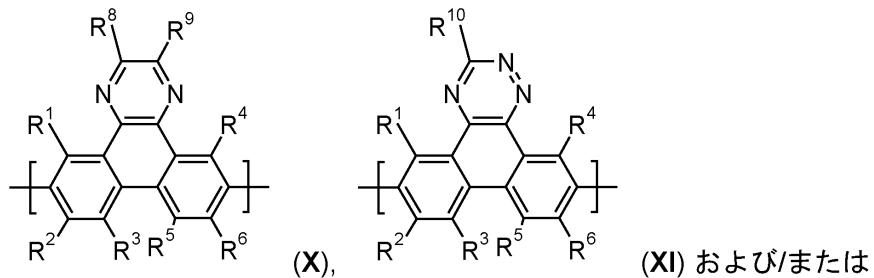
(54) 【発明の名称】新規ポリマー

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

式、

【化2】



の繰り返しユニットを含み、

式中、R<sup>1</sup> および R<sup>4</sup> は、互いに独立に、水素、ハロゲン、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルキル、E で置換されおよび/またはD で中断された C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> ペルフルオロアルキル、C<sub>2</sub> ~ C<sub>18</sub> アルケニル、C<sub>2</sub> ~ C<sub>18</sub> アルキニル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルコキシ、E で置換されおよび/またはD で中断された C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルコキシ、CN、または -CO-R<sup>2</sup><sub>8</sub> であり、

R<sup>2</sup>、R<sup>3</sup>、R<sup>5</sup>、および R<sup>6</sup> は、互いに独立に、H、ハロゲン、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルキル、E で置換されおよび/またはD で中断された C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> ペルフルオロアルキル、C<sub>6</sub> ~ C<sub>24</sub> アリール、G で置換された C<sub>6</sub> ~ C<sub>24</sub> アリール、C<sub>2</sub> ~ C<sub>20</sub> ヘテロアリール、G で置換された C<sub>2</sub> ~ C<sub>20</sub> ヘテロアリール、C<sub>2</sub> ~ C<sub>18</sub> アルケニル、C<sub>2</sub> ~ C<sub>18</sub> アルキニル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルコキシ、E で置換されおよび/またはD で中断された C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルコキシ、C<sub>7</sub> ~ C<sub>25</sub> アラルキル、CN、または -CO-R<sup>2</sup><sub>8</sub> であり、

R<sup>8</sup> および R<sup>9</sup> は、互いに独立に、H、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルキル、E で置換されおよび/またはD で中断された C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> ペルフルオロアルキル、C<sub>6</sub> ~ C<sub>24</sub> アリール、G で置換された C<sub>6</sub> ~ C<sub>24</sub> アリール、C<sub>2</sub> ~ C<sub>20</sub> ヘテロアリール

10

20

30

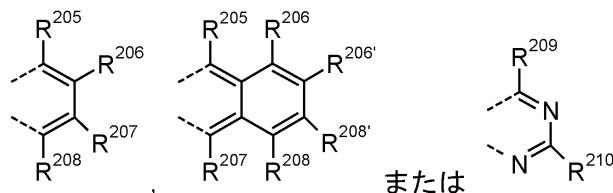
40

50

、Gで置換されたC<sub>2</sub>～C<sub>20</sub>ヘテロアリール、C<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>アルケニル、C<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>アルキニル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、C<sub>7</sub>～C<sub>25</sub>アラルキル、CN、または-CO-R<sup>28</sup>であり、または、

R<sup>8</sup>およびR<sup>9</sup>は、一緒に、基、

【化3】



10

を形成し、

式中、R<sup>206</sup>、R<sup>208</sup>、R<sup>205</sup>、R<sup>206</sup>、R<sup>207</sup>、R<sup>208</sup>、R<sup>209</sup>、およびR<sup>210</sup>は、互いに独立に、H、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、またはEで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>6</sub>～C<sub>24</sub>アリール、Gで置換されたC<sub>6</sub>～C<sub>24</sub>アリール、C<sub>2</sub>～C<sub>20</sub>ヘテロアリール、Gで置換されたC<sub>2</sub>～C<sub>20</sub>ヘテロアリール、C<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>アルケニル、C<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>アルキニル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、C<sub>7</sub>～C<sub>25</sub>アラルキル、CN、または-CO-R<sup>28</sup>であり、

R<sup>10</sup>は、H、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>6</sub>～C<sub>24</sub>アリール、Gで置換されたC<sub>6</sub>～C<sub>24</sub>アリール、C<sub>2</sub>～C<sub>20</sub>ヘテロアリール、C<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>アルケニル、C<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>アルキニル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、C<sub>7</sub>～C<sub>25</sub>アラルキル、または-CO-R<sup>28</sup>であり、

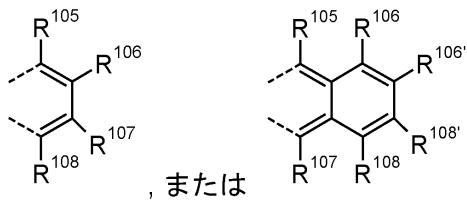
R<sup>11</sup>およびR<sup>14</sup>は、互いに独立に、水素、ハロゲン、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>アルケニル、C<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>アルキニル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、CN、または-CO-R<sup>28</sup>であり、

R<sup>12</sup>、R<sup>13</sup>、R<sup>15</sup>、およびR<sup>16</sup>は、互いに独立に、H、ハロゲン、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>6</sub>～C<sub>24</sub>アリール、Gで置換されたC<sub>6</sub>～C<sub>24</sub>アリール、C<sub>2</sub>～C<sub>20</sub>ヘテロアリール、Gで置換されたC<sub>2</sub>～C<sub>20</sub>ヘテロアリール、C<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>アルケニル、C<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>アルキニル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、C<sub>7</sub>～C<sub>25</sub>アラルキル、CN、または-CO-R<sup>28</sup>であり、

Xは、O、S、またはNR<sup>17</sup>であり、式中、R<sup>17</sup>は、H；C<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール；C<sub>2</sub>～C<sub>20</sub>ヘテロアリール；C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、またはC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシで置換されたC<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリールもしくはC<sub>2</sub>～C<sub>20</sub>ヘテロアリール；C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル；または-O-で中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキルであり、

または、互いに隣接する2個の置換基R<sup>1</sup>およびR<sup>2</sup>、R<sup>4</sup>およびR<sup>6</sup>、R<sup>11</sup>およびR<sup>12</sup>、ならびに/またはR<sup>14</sup>およびR<sup>16</sup>、R<sup>2</sup>およびR<sup>3</sup>、R<sup>5</sup>およびR<sup>6</sup>、R<sup>12</sup>およびR<sup>13</sup>、ならびに/またはR<sup>15</sup>およびR<sup>16</sup>は、一緒に基、

## 【化4】



を形成し、または互いに隣接する2個の置換基R<sup>1~5</sup>およびR<sup>1~3</sup>、ならびに/またはR<sup>5</sup>およびR<sup>3</sup>は、一緒に基、

10

## 【化5】



を形成し、

式中、X<sup>3</sup>は、O、S、C(R<sup>1~1~9</sup>)(R<sup>1~2~0</sup>)、またはNR<sup>1~7</sup>であり、式中、R<sup>1~7</sup>は、上記で定義した通りであり、R<sup>1~0~5</sup>、R<sup>1~0~6</sup>、R<sup>1~0~7</sup>、R<sup>1~0~8</sup>、R<sup>1~0~9</sup>、およびR<sup>1~0~8'</sup>は、互いに独立に、H、C<sub>1~8</sub>アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1~8</sub>アルキル、C<sub>1~8</sub>アルコキシ、またはEで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1~8</sub>アルコキシであり、R<sup>1~1~9</sup>およびR<sup>1~2~0</sup>は、一緒に式=CRR<sup>1~2~1</sup>R<sup>1~2~2</sup>の基を形成し、

20

式中、R<sup>1~2~1</sup>およびR<sup>1~2~2</sup>は、互いに独立に、H、C<sub>1~8</sub>アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1~8</sub>アルキル、C<sub>6~2~4</sub>アリール、Gで置換されたC<sub>6~2~4</sub>アリール、またはC<sub>2~2~0</sub>ヘテロアリール、またはGで置換されたC<sub>2~2~0</sub>ヘテロアリールであり、または、

R<sup>1~1~9</sup>およびR<sup>1~2~0</sup>は、一緒に5もしくは6員環を形成し、これは、場合により、C<sub>1~8</sub>アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1~8</sub>アルキル、C<sub>6~2~4</sub>アリール、Gで置換されたC<sub>6~2~4</sub>アリール、C<sub>2~2~0</sub>ヘテロアリール、Gで置換されたC<sub>2~2~0</sub>ヘテロアリール、C<sub>2~8</sub>アルケニル、C<sub>2~8</sub>アルキニル、C<sub>1~8</sub>アルコキシ、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1~8</sub>アルコキシ、C<sub>7~2~5</sub>アラルキル、または-C(=O)-R<sup>1~2~7</sup>で置換することができ、

30

R<sup>1~2~7</sup>は、H；C<sub>6~8</sub>アリール；C<sub>1~8</sub>アルキルまたはC<sub>1~8</sub>アルコキシで置換されたC<sub>6~8</sub>アリール；C<sub>1~8</sub>アルキル；または-O-で中断されたC<sub>1~8</sub>アルキルであり、

Dは、-CO-；-COO-；-S-；-SO-；-SO<sub>2</sub>-；-O-；-NR<sup>2~5</sup>-；-SiR<sup>3~0</sup>R<sup>3~1</sup>-；-POR<sup>3~2</sup>-；-CR<sup>2~3</sup>=CR<sup>2~4</sup>-；または-C-C-であり、

40

Eは、-OR<sup>2~9</sup>；-SR<sup>2~9</sup>；-NR<sup>2~5</sup>R<sup>2~6</sup>；-COR<sup>2~8</sup>；-COOR<sup>2~7</sup>；-CONR<sup>2~5</sup>R<sup>2~6</sup>；-CN；またはハロゲンであり、Gは、E、C<sub>1~8</sub>アルキル、Dで中断されたC<sub>1~8</sub>アルキル、C<sub>1~8</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>1~8</sub>アルコキシ、またはEで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1~8</sub>アルコキシであり、

式中、R<sup>2~3</sup>、R<sup>2~4</sup>、R<sup>2~5</sup>、およびR<sup>2~6</sup>は、互いに独立に、H；C<sub>6~8</sub>アリール；C<sub>1~8</sub>アルキルまたはC<sub>1~8</sub>アルコキシで置換されたC<sub>6~8</sub>アリール；C<sub>1~8</sub>アルキル；または-O-で中断されたC<sub>1~8</sub>アルキルであり、または、

50

R<sup>2</sup>~R<sup>5</sup> および R<sup>2</sup>~R<sup>6</sup> は、一緒に 5 または 6 員環を形成し、

R<sup>2</sup>~R<sup>7</sup> および R<sup>2</sup>~R<sup>8</sup> は、互いに独立に、H; C<sub>6</sub>~C<sub>18</sub> アリール; C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> アルキルまたは C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> アルコキシで置換された C<sub>6</sub>~C<sub>18</sub> アリール; C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> アルキル; または -O- で中断された C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> アルキルであり、

R<sup>2</sup>~R<sup>9</sup> は、H; C<sub>6</sub>~C<sub>18</sub> アリール; C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> アルキルまたは C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> アルコキシで置換された C<sub>6</sub>~C<sub>18</sub> アリール; C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> アルキル; または -O- で中断された C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> アルキルであり、

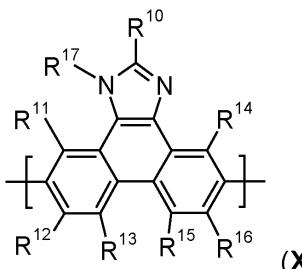
R<sup>3</sup>~R<sup>10</sup> および R<sup>3</sup>~R<sup>11</sup> は、互いに独立に、C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> アルキル、C<sub>6</sub>~C<sub>18</sub> アリール、または C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> アルキルで置換された C<sub>6</sub>~C<sub>18</sub> アリールであり、

R<sup>3</sup>~R<sup>12</sup> は、C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> アルキル、C<sub>6</sub>~C<sub>18</sub> アリール、または C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> アルキルで置換された C<sub>6</sub>~C<sub>18</sub> アリールである、ポリマー。 10

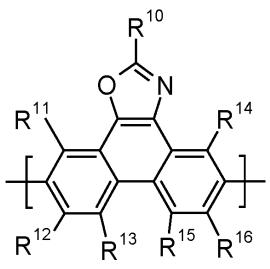
### 【請求項 2】

式、

### 【化 1 1】



(XIIa), および/または



(XIIb)

20

の繰り返しユニットを含み、

R<sup>1</sup>~R<sup>10</sup> は、H、G で置換されていてもよい C<sub>6</sub>~C<sub>18</sub> アリール、G で置換されていてもよい C<sub>2</sub>~C<sub>18</sub> ヘテロアリール、C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> アルキル、D で中断された C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> アルキル、C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> ペルフルオロアルキル、C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> アルコキシ、E で置換されおよび/または D で中断された C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> アルコキシ、または基 -X<sup>2</sup>-R<sup>1</sup>~R<sup>8</sup> であり、式中、X<sup>2</sup> は、C<sub>6</sub>~C<sub>12</sub> アリール、C<sub>6</sub>~C<sub>12</sub> ヘテロアリールなどのスペーサーであり、これは、C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> アルキル、D で中断された C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> アルキル、C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> ペルフルオロアルキル、C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> アルコキシ、または E で置換されおよび/または D で中断された C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> アルコキシで 1 回以上置換することができ、R<sup>1</sup>~R<sup>8</sup> は、H、C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> アルキル、D で中断された C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> アルキル、C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> ペルフルオロアルキル、C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> アルコキシ、D で中断された C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> アルコキシ、または -NR<sup>2</sup>~R<sup>2</sup>~R<sup>2</sup>~R<sup>6</sup>- であり、

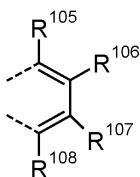
R<sup>1</sup>~R<sup>1</sup> および R<sup>1</sup>~R<sup>4</sup> は、水素であり、

R<sup>1</sup>~R<sup>2</sup>、R<sup>1</sup>~R<sup>3</sup>、R<sup>1</sup>~R<sup>5</sup>、および R<sup>1</sup>~R<sup>6</sup> は、水素であり、

R<sup>1</sup>~R<sup>7</sup> は、C<sub>6</sub>~C<sub>18</sub> アリール; C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> アルキル、C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> ペルフルオロアルキルまたは C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> アルコキシで置換された C<sub>6</sub>~C<sub>18</sub> アリール; C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> アルキル; または -O- で中断された C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub> アルキルであり、または、

互いに隣接する 2 個の置換基 R<sup>1</sup>~R<sup>2</sup> および R<sup>1</sup>~R<sup>3</sup>、ならびに/または R<sup>1</sup>~R<sup>5</sup> および R<sup>1</sup>~R<sup>6</sup> は、一緒に基、

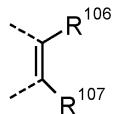
### 【化 1 2】



を形成し、または、互いに隣接する 2 個の置換基 R<sup>1</sup>~R<sup>5</sup> および R<sup>1</sup>~R<sup>3</sup> は、と一緒に基、

50

## 【化13】



を形成し、式中、R<sup>105</sup>、R<sup>106</sup>、R<sup>107</sup>、およびR<sup>108</sup>は、互いに独立に、HまたはC<sub>1</sub>～C<sub>8</sub>アルキルであり、

Dは、-S-；-O-；または-NR<sup>25</sup>-であり、

Eは、-OR<sup>29</sup>；-SR<sup>29</sup>；-NR<sup>25</sup>R<sup>26</sup>；-CN；またはFであり、Gは、  
E、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Dで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、またはEで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシであり、式中、

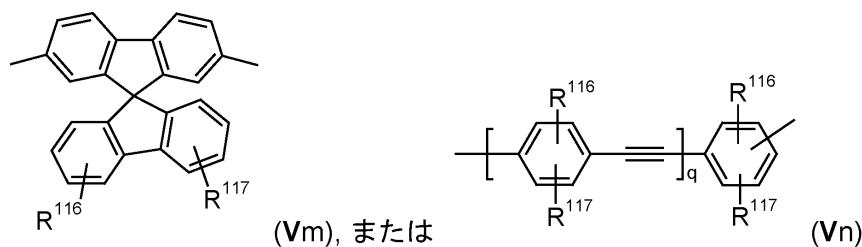
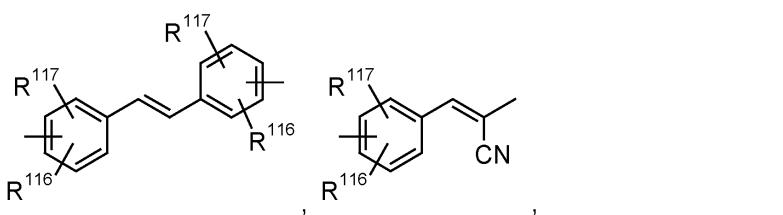
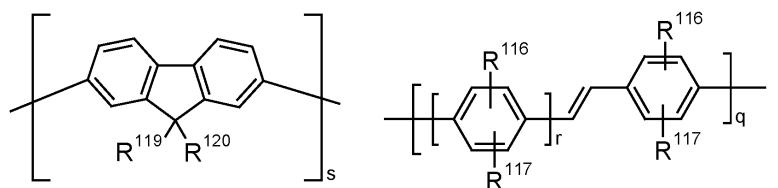
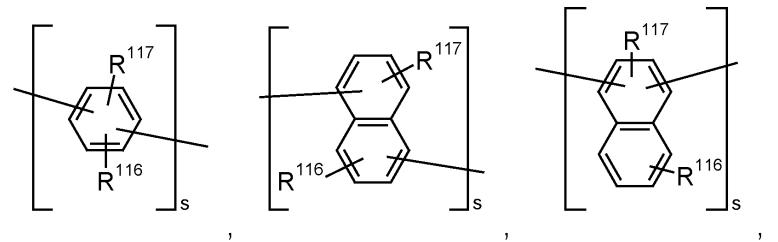
R<sup>25</sup>およびR<sup>26</sup>は、互いに独立に、H；C<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール；C<sub>1</sub>～C<sub>8</sub>アルキルまたはC<sub>1</sub>～C<sub>8</sub>アルコキシで置換されたC<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール；C<sub>1</sub>～C<sub>8</sub>アルキル；または-O-で中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>8</sub>アルキルであり、または、

R<sup>25</sup>およびR<sup>26</sup>は、一緒に5または6員環を形成し、

R<sup>29</sup>は、C<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール；C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキルまたはC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシで置換されたC<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール；C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル；または-O-で中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキルである、請求項1に記載のポリマー。

## 【請求項3】

## 【化15】



10

20

30

40

50

(式中、rは、1~10の整数であり、

qは、1~10の整数であり、

sは、1~10の整数であり、

R<sup>1~1~6</sup>およびR<sup>1~1~7</sup>は、互いに独立に、H、ハロゲン、-CN、C<sub>1~8</sub>アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1~8</sub>アルキル、C<sub>6~2~4</sub>アリール、Gで置換されたC<sub>6~2~4</sub>アリール、C<sub>2~2~0</sub>ヘテロアリール、Gで置換されたC<sub>2~2~0</sub>ヘテロアリール、C<sub>2~1~8</sub>アルケニル、C<sub>2~1~8</sub>アルキニル、C<sub>1~1~8</sub>アルコキシ、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1~1~8</sub>アルコキシ、C<sub>7~2~5</sub>アラルキル、-C(=O)-R<sup>1~2~7</sup>、-C(=O)R<sup>1~2~7</sup>、または-C(=O)NR<sup>1~2~7</sup>R<sup>1~2~6</sup>であり、

R<sup>1~1~9</sup>およびR<sup>1~2~0</sup>は、互いに独立に、H、C<sub>1~8</sub>アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1~8</sub>アルキル、C<sub>6~2~4</sub>アリール、Gで置換されたC<sub>6~2~4</sub>アリール、C<sub>2~2~0</sub>ヘテロアリール、Gで置換されたC<sub>2~2~0</sub>ヘテロアリール、C<sub>2~1~8</sub>アルケニル、C<sub>2~1~8</sub>アルキニル、C<sub>1~1~8</sub>アルコキシ、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1~1~8</sub>アルコキシ、またはC<sub>7~2~5</sub>アラルキルであり、または、

R<sup>1~1~9</sup>およびR<sup>1~2~0</sup>は、一緒に式=C R<sup>1~2~1</sup> R<sup>1~2~2</sup>の基を形成し、式中、

R<sup>1~2~1</sup>およびR<sup>1~2~2</sup>は、互いに独立に、H、C<sub>1~8</sub>アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1~8</sub>アルキル、C<sub>6~2~4</sub>アリール、Gで置換されたC<sub>6~2~4</sub>アリール、C<sub>2~2~0</sub>ヘテロアリール、またはGで置換されたC<sub>2~2~0</sub>ヘテロアリールであり、または、

R<sup>1~1~9</sup>およびR<sup>1~2~0</sup>は、一緒に5または6員環を形成し、これは、場合により、C<sub>1~8</sub>アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1~8</sub>アルキル、C<sub>6~2~4</sub>アリール、Gで置換されたC<sub>6~2~4</sub>アリール、C<sub>2~2~0</sub>ヘテロアリール、Gで置換されたC<sub>2~2~0</sub>ヘテロアリール、C<sub>2~1~8</sub>アルケニル、C<sub>2~1~8</sub>アルキニル、C<sub>1~1~8</sub>アルコキシ、C<sub>7~2~5</sub>アラルキル、または-C(=O)-R<sup>1~2~7</sup>で置換することができ、

R<sup>1~2~6</sup>およびR<sup>1~2~7</sup>は、互いに独立に、H；C<sub>6~8</sub>アリール；C<sub>1~8</sub>アルキルまたはC<sub>1~8</sub>アルコキシで置換されたC<sub>6~8</sub>アリール；C<sub>1~8</sub>アルキル；または-O-で中断されたC<sub>1~8</sub>アルキルであり、

Dは、-CO-、-COO-、-S-、-SO-、-SO<sub>2</sub>-、-O-、-NR<sup>6~5</sup>-、-SiR<sup>7~0</sup>R<sup>7~1</sup>-、-POR<sup>7~2</sup>-、-CR<sup>6~3</sup>=CR<sup>6~4</sup>-、または-C-C-であり、

Eは、-OR<sup>6~9</sup>、-SR<sup>6~9</sup>、-NR<sup>6~5</sup>R<sup>6~6</sup>、-COR<sup>6~8</sup>、-COOR<sup>6~7</sup>、-CONR<sup>6~5</sup>R<sup>6~6</sup>、-CN、またはハロゲンであり、

Gは、E、C<sub>1~8</sub>アルキル、Dで中断されたC<sub>1~8</sub>アルキル、C<sub>1~8</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>1~8</sub>アルコキシ、またはEで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1~8</sub>アルコキシであり、

R<sup>6~3</sup>、R<sup>6~4</sup>、R<sup>6~5</sup>、およびR<sup>6~6</sup>は、互いに独立に、H；C<sub>6~8</sub>アリール；C<sub>1~8</sub>アルキル、C<sub>1~8</sub>アルコキシで置換されたC<sub>6~8</sub>アリール；C<sub>1~8</sub>アルキル、または-O-で中断されたC<sub>1~8</sub>アルキルであり、または、

R<sup>6~5</sup>およびR<sup>6~6</sup>は、一緒に5または6員環を形成し、

R<sup>6~7</sup>およびR<sup>6~8</sup>は、互いに独立に、H；C<sub>6~8</sub>アリール；C<sub>1~8</sub>アルキルまたはC<sub>1~8</sub>アルコキシで置換されたC<sub>6~8</sub>アリール；C<sub>1~8</sub>アルキル；または-O-で中断されたC<sub>1~8</sub>アルキルであり、

R<sup>6~9</sup>は、H；C<sub>6~8</sub>アリール；C<sub>1~8</sub>アルキル、C<sub>1~8</sub>アルコキシで置換されたC<sub>6~8</sub>アリール；C<sub>1~8</sub>アルキル；または-O-で中断されたC<sub>1~8</sub>アルキルであり、

10

20

30

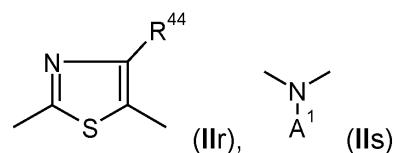
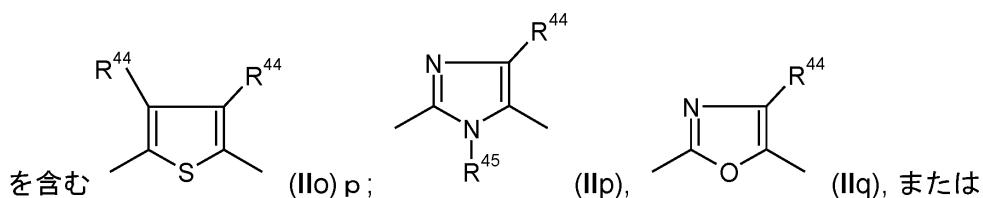
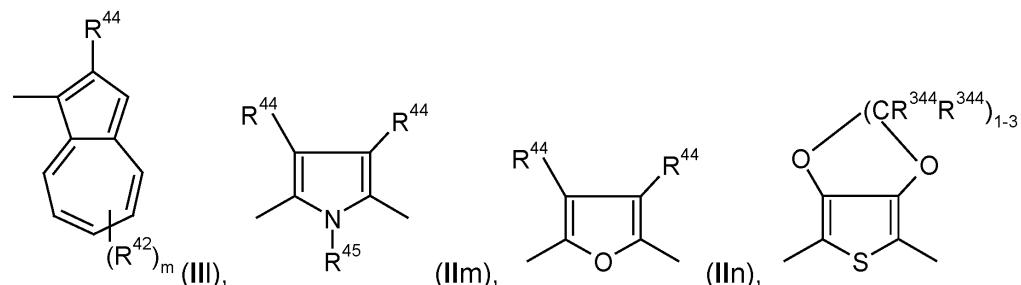
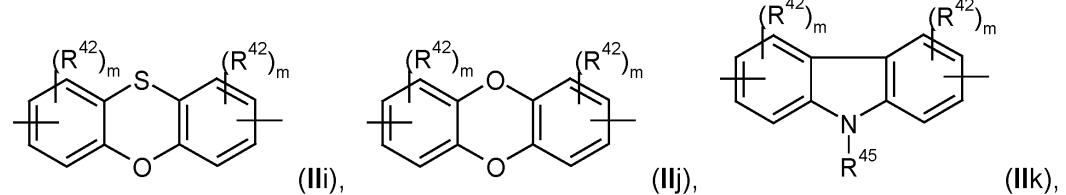
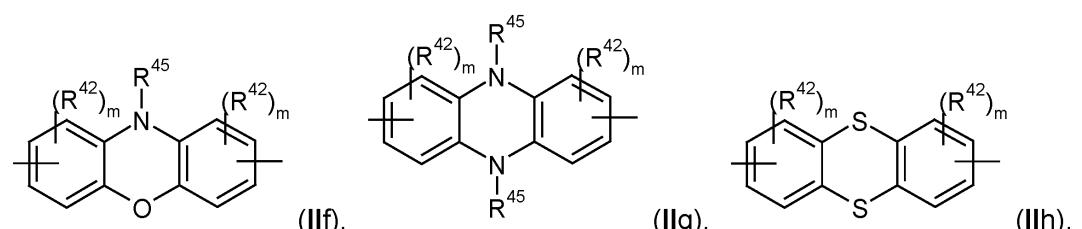
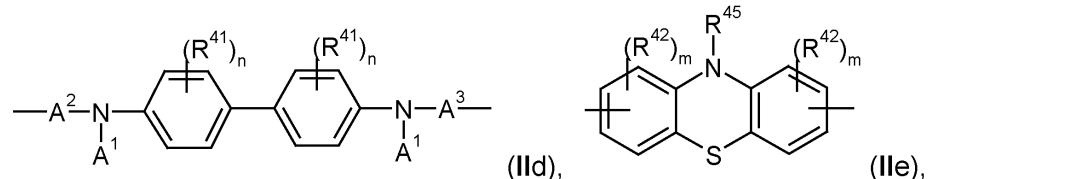
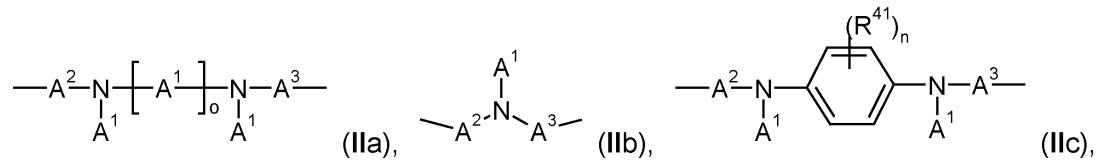
40

50

$R^{7-0}$  および  $R^{7-1}$  は、互いに独立に、 $C_1 \sim C_{1-8}$  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た  $C_6 \sim C_{1-8}$  アリールであり、

$R^{7-2}$  は、 $C_1 \sim C_{18}$  アルキル、 $C_6 \sim C_{18}$  アリール、または $C_1 \sim C_{18}$  アルキルで置換された $C_6 \sim C_{18}$  アリールである)；

【化 1 7】



(式中、 $R^{4-1}$ は、各出現で同じであるかまたは異なることができ、C<sub>1</sub>、F、CN、N( $R^{4-5}$ )<sub>2</sub>、C<sub>1</sub>~C<sub>2-5</sub>アルキル基、C<sub>4</sub>~C<sub>1-8</sub>シクロアルキル基、C<sub>1</sub>~C<sub>2-5</sub>アルコキシ基であり、互いに隣接しない1個以上の炭素原子は、-NR<sup>4-5</sup>-、-O-、-S-、-C(=O)-O-、または-O-C(=O)-O-で置換することができ、および/または1個以上の水素原子は、F、C<sub>6</sub>~C<sub>2-4</sub>アリール基、またはC<sub>6</sub>~C<sub>2-4</sub>

$R^4$  アルコキシ基で置換することができ、1個以上の炭素原子は、O、S、またはNで置換することができ、および/または1個以上の非芳香族基 $R^{4-1}$ で置換することができ、または、

2個以上の基 $R^{4-1}$ は、環系を形成し、

$R^{4-2}$ は、各出現で同じであるかまたは異なることができ、CN、 $C_1 \sim C_{2-5}$ アルキル基、 $C_4 \sim C_{1-8}$ シクロアルキル基、 $C_1 \sim C_{2-5}$ アルコキシ基であり、互いに隣接しない1個以上の炭素原子は、-NR<sup>4-5</sup>-、-O-、-S-、-C(=O)-O-、または-O-C(=O)-O-で置換することができ、および/または1個以上の水素原子は、F、 $C_6 \sim C_{2-4}$ アリール基、または $C_6 \sim C_{2-4}$ アリールオキシ基で置換することができ、1個以上の炭素原子は、O、S、またはNで置換することができ、および/または1個以上の非芳香族基 $R^{4-1}$ で置換することができ、または、

2個以上の基 $R^{4-1}$ は、環系を形成し、

$R^{3-4-4}$ は、各出現で同じであるかまたは異なることができ、水素原子、 $C_1 \sim C_{2-5}$ アルキル基、 $C_4 \sim C_{1-8}$ シクロアルキル基、または $C_1 \sim C_{2-5}$ アルコキシ基であり、

$R^{4-4}$ は、各出現で同じであるかまたは異なることができ、水素原子、 $C_1 \sim C_{2-5}$ アルキル基、 $C_4 \sim C_{1-8}$ シクロアルキル基、 $C_1 \sim C_{2-5}$ アルコキシ基であり、互いに隣接しない1個以上の炭素原子は、-NR<sup>4-5</sup>-、-O-、-S-、-C(=O)-O-、または-O-C(=O)-O-で置換することができ、および/または1個以上の水素原子は、F、 $C_6 \sim C_{2-4}$ アリール基、または $C_6 \sim C_{2-4}$ アリールオキシ基で置換することができ、1個以上の炭素原子は、O、S、またはNで置換することができ、および/または1個以上の非芳香族基 $R^{4-1}$ 、またはCNで置換することができ、または、

互いに隣接する2個以上の基 $R^{4-4}$ は、環を形成し、

$R^{4-5}$ は、H、 $C_1 \sim C_{2-5}$ アルキル基、 $C_4 \sim C_{1-8}$ シクロアルキル基であり、互いに隣接しない1個以上の炭素原子は、-NR<sup>4-5</sup>-、-O-、-S-、-C(=O)-O-、または-O-C(=O)-O-で置換することができ、および/または1個以上の水素原子は、F、 $C_6 \sim C_{2-4}$ アリール基、または $C_6 \sim C_{2-4}$ アリールオキシ基で置換することができ、1個以上の炭素原子は、O、S、またはNで置換することができ、および/または1個以上の非芳香族基 $R^{4-1}$ で置換することができ、

$R^{4-5'}$ は、H、 $C_1 \sim C_{2-5}$ アルキル基、または $C_4 \sim C_{1-8}$ シクロアルキル基であり、

mは、各出現で同じであるかまたは異なることができ、0、1、2、または3であり、

nは、各出現で同じであるかまたは異なることができ、0、1、2、または3であり、

oは、1、2、または3であり、

$A^1$ は、 $C_6 \sim C_{2-4}$ アリール基、 $C_2 \sim C_{3-0}$ ヘテロアリール基であり、これは1個以上の非芳香族基 $R^{4-1}$ 、またはNO<sub>2</sub>で置換することができ、

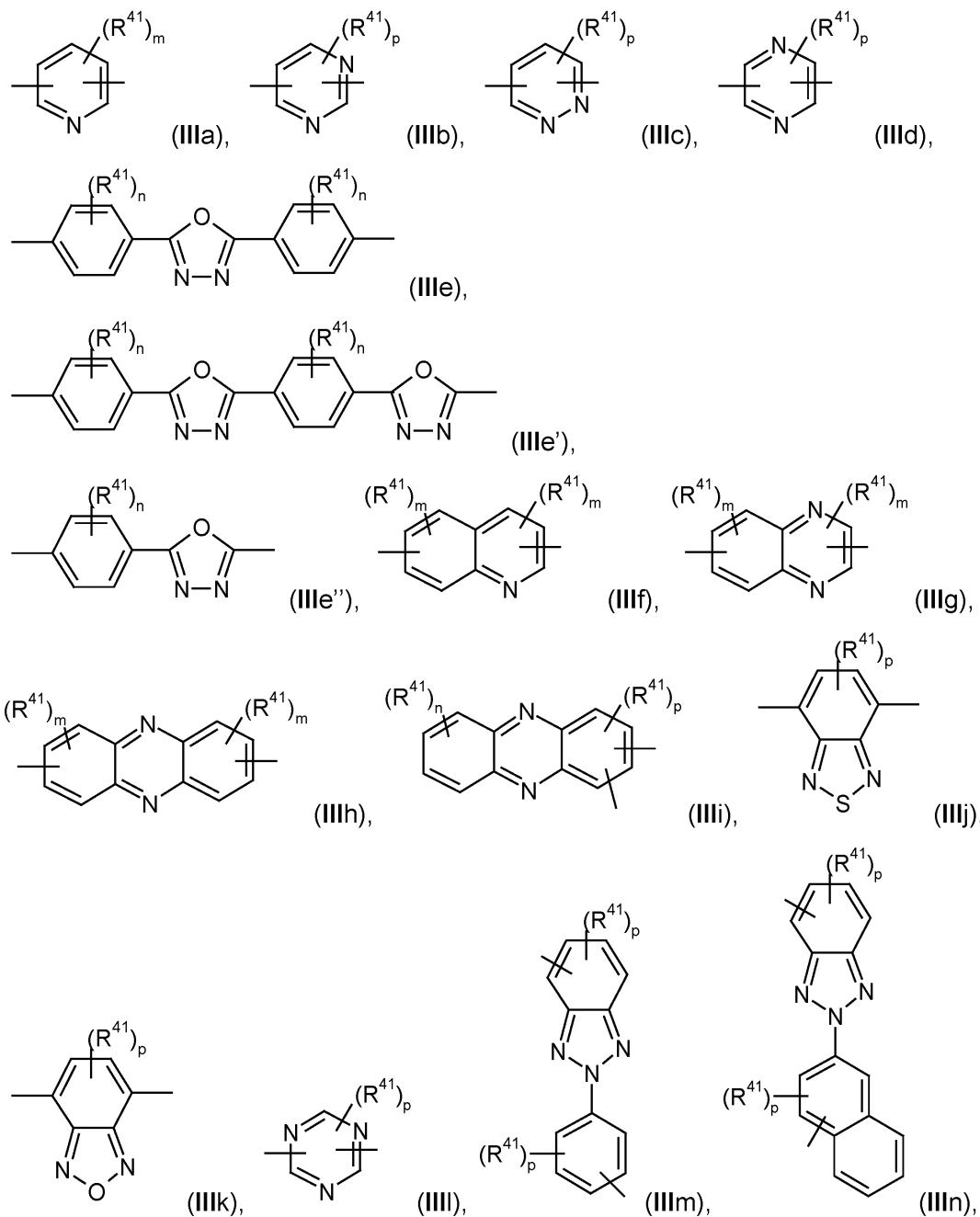
$A^2$ および $A^3$ は、互いに独立に、場合により、置換されていてもよい $C_6 \sim C_{3-0}$ アリーレン基または $C_2 \sim C_{2-4}$ ヘテロアリーレン基である)；

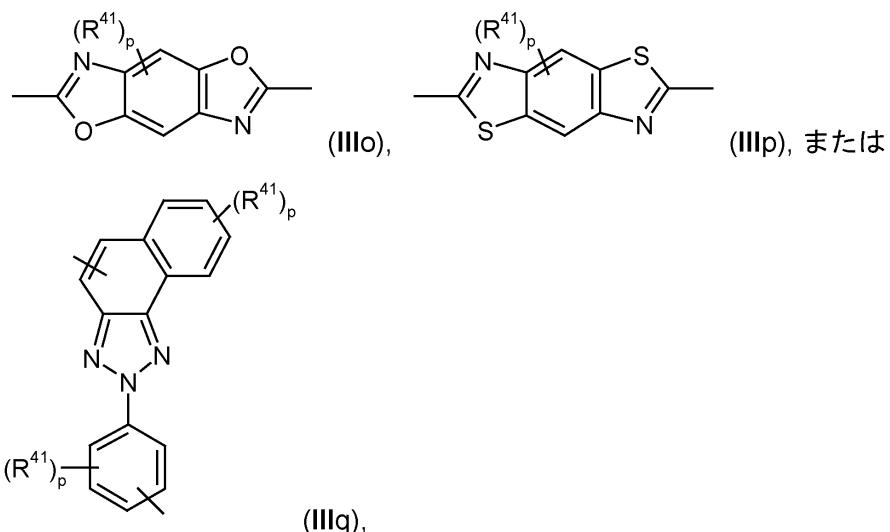
10

20

30

【化19】

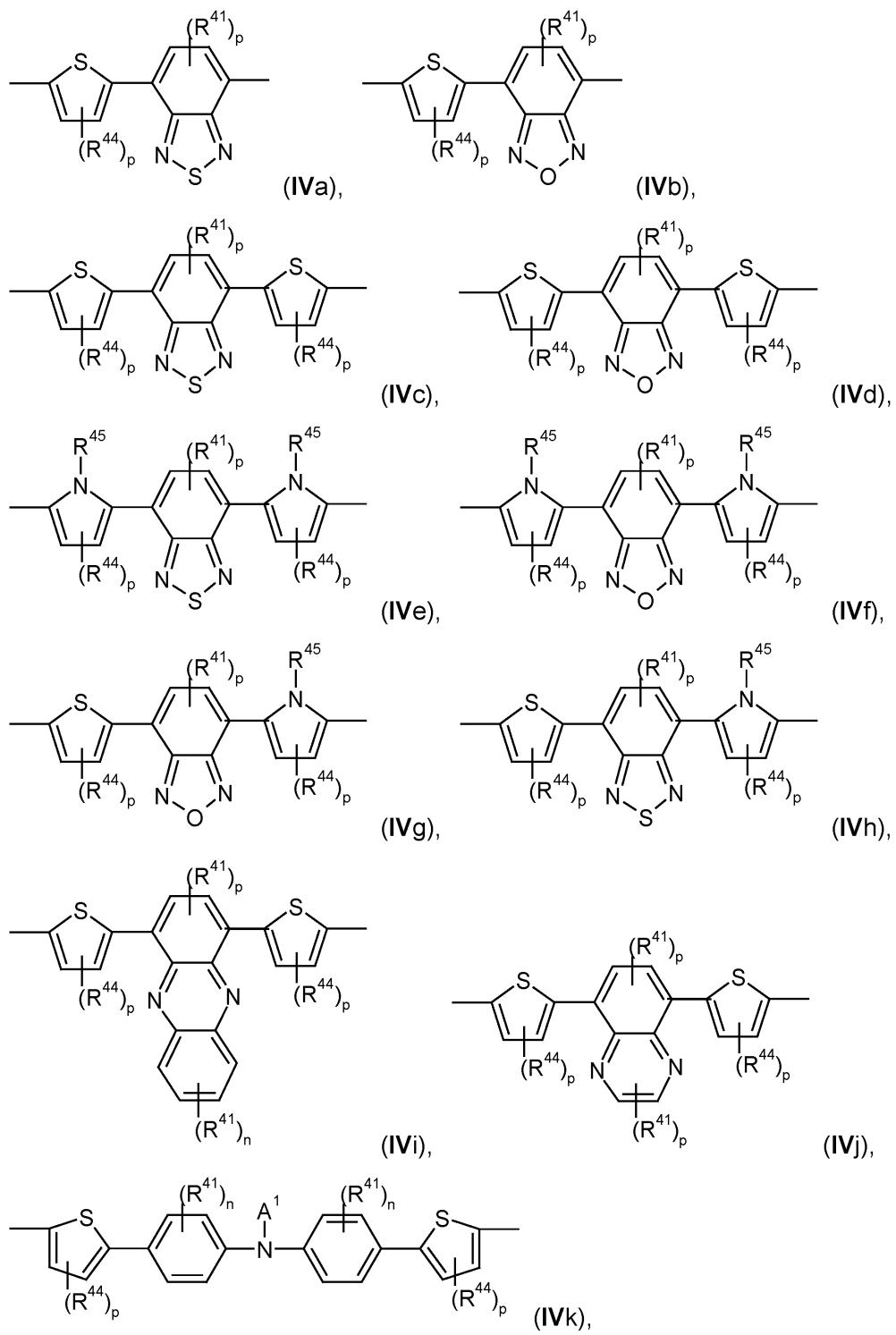


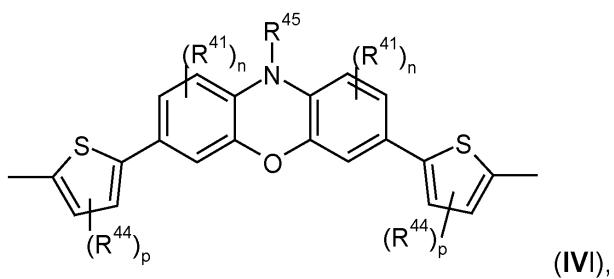


10

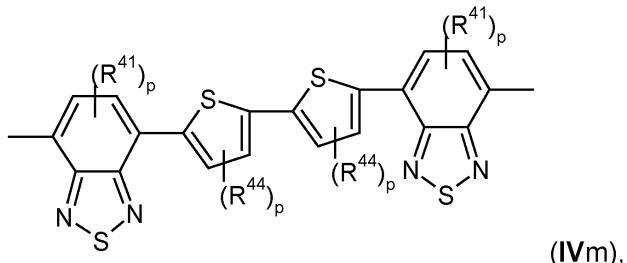
(式中、 $R^{41}$  および  $m$  および  $n$  は、上記で定義したとおりであり、 $p$  は、0、1、または2である)；

【化 2 0】

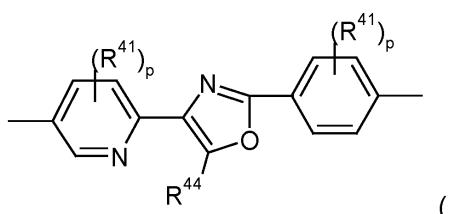




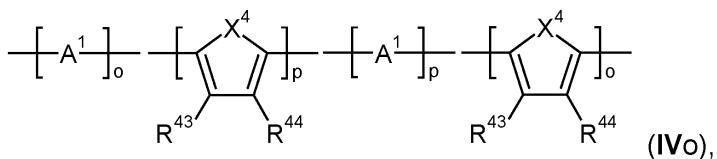
(IVl),



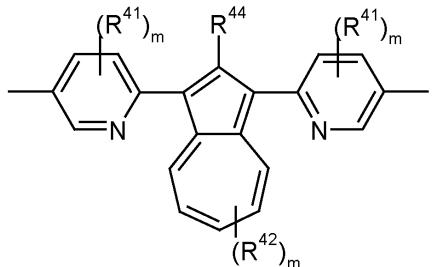
(IVm),



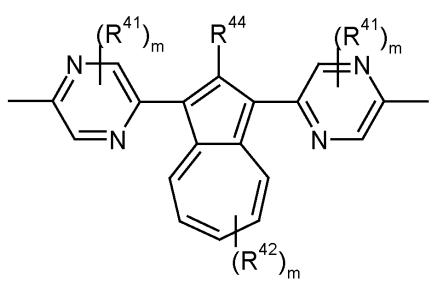
(IVn),



(IVO),



(IVp), または



(IVq)

(式中、X<sup>4</sup>は、O、S、またはN R<sup>4</sup><sub>5</sub>であり、

R<sup>4</sup><sub>3</sub>は、水素原子、C<sub>1</sub>～C<sub>2</sub>～C<sub>5</sub>アルキル基、C<sub>4</sub>～C<sub>1</sub>～C<sub>8</sub>シクロアルキル基、C<sub>1</sub>～C<sub>2</sub>～C<sub>5</sub>アルコキシ基であり、互いに隣接しない1個以上の炭素原子は、-N R<sup>4</sup><sub>5</sub>-、-O-、-S-、-C(=O)-O-、または-O-C(=O)-O-で置換することができ、および/または1個以上の水素原子は、F、C<sub>6</sub>～C<sub>2</sub>～C<sub>4</sub>アリール基、またはC<sub>6</sub>～C<sub>2</sub>～C<sub>4</sub>アリールオキシ基で置換することができ、1個以上の炭素原子は、O、S、またはNで置換することができ、および/または1個以上の非芳香族基R<sup>4</sup><sub>1</sub>またはCNで置換することができ、または、互いに隣接する2個以上の基R<sup>4</sup><sub>3</sub>および/またはR<sup>4</sup><sub>4</sub>は

10

20

30

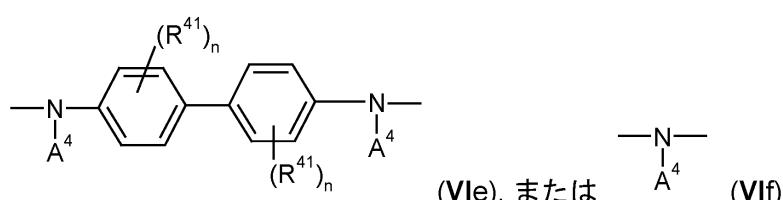
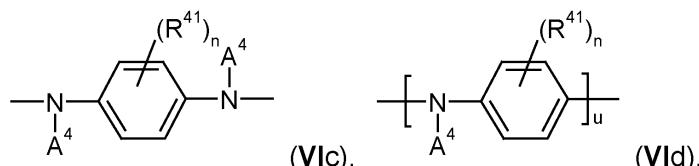
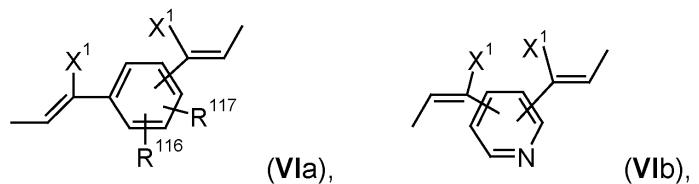
40

50

、環を形成し、 $A^{1}$ 、 $R^{4\ 1}$ 、 $R^{4\ 2}$ 、 $R^{4\ 4}$ 、 $R^{4\ 5}$ 、 $m$ 、 $n$ 、 $o$ および $p$ は、上記で定義したとおりである) ;

からなる群から選択される1個以上(少なくとも1個)の繰り返しユニット $A_r^3$ ; および/または、

**【化21】**



10

20

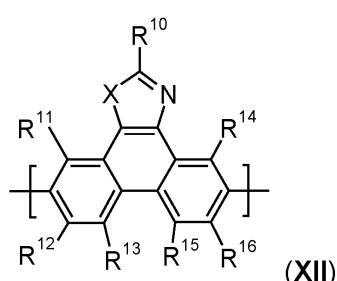
(式中、 $X^1$ は、水素原子、またはシアノ基であり、 $u$ は1、2、3、または4であり;  
 $R^{1\ 1\ 6}$ 、 $R^{1\ 1\ 7}$ 、 $R^{4\ 1}$ および $n$ は、上記で定義したとおりであり;  
 $A^4$ は、1個以上の非芳香族基 $R^{4\ 1}$ で置換されていてもよい、 $C_6 \sim C_{2\ 4}$ アリール基、 $C_2 \sim C_{3\ 0}$ ヘテロアリール基である)

からなる群から選択される、1個以上(少なくとも1個)の繰り返しユニット-T-を含む、請求項1又は2に記載のポリマー。

**【請求項4】**

前記ポリマーが、式(XII)、

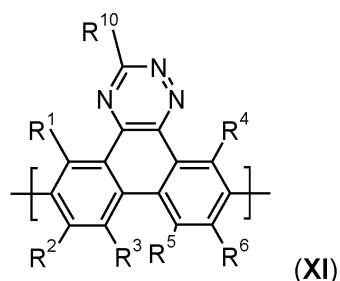
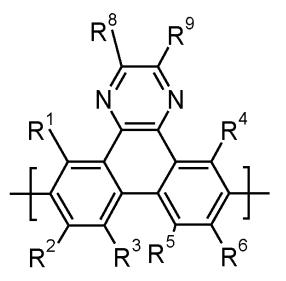
**【化22】**



30

の少なくとも1個の繰り返しユニット、ならびに式(X)および/または(XI)、

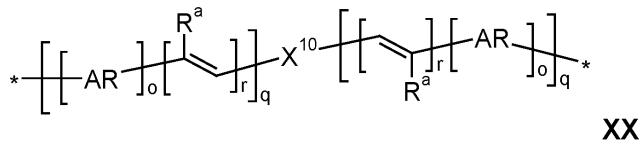
**【化23】**



40

50

の少なくとも 1 個の繰り返しユニットを含むコポリマーであって、 $X$ 、 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^6$ 、 $R^8$ 、 $R^9$ 、 $R^{10}$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、 $R^{15}$ 、 $R^{16}$ および $R^{16}$ は、請求項 1 で定義されたとおりである、コポリマーまたは、式、  
【化 24】



XX

10

の繰り返しユニットを含むポリマーであり、

式中、 $X^{10}$  は、式 X、X I および X II の繰り返しユニットであり、

$q$  は、0、1、または 2 の整数であり、 $o$  は、0、1、または 2 であり、 $r$  は、0、または 1 であり、

AR は、 $C_6 \sim C_{24}$  アリール、G で置換された  $C_6 \sim C_{24}$  アリール、 $C_2 \sim C_{20}$  ヘテロアリール、または G で置換された  $C_2 \sim C_{20}$  ヘテロアリールであり、

$R^a$  は、H、 $C_1 \sim C_{18}$  アルキル、E で置換されおよび / または D で中断された  $C_1 \sim C_{18}$  アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$  ペルフルオロアルキル、 $C_2 \sim C_{18}$  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 で置換されおよび / または D で中断された  $C_1 \sim C_{18}$  アルコキシであり、E、D、および G は請求項 1 で定義したとおりである、請求項 1 に記載のポリマー。

#### 【請求項 5】

請求項 1 記載のポリマーを含む電子デバイスまたはそのための部品。

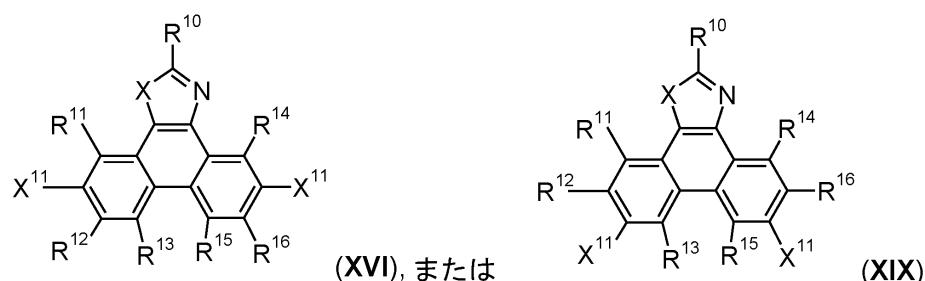
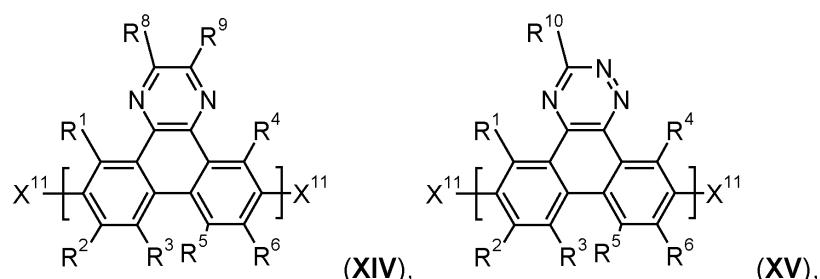
#### 【請求項 6】

請求項 1 記載のポリマーを 1 種以上含む、PLED、有機集積回路 (O-IC)、有機電界効果トランジスタ (OFET)、有機薄膜トランジスタ (OTFT)、有機太陽電池 (O-SC)、熱電子デバイス、または有機レーザーダイオード。

#### 【請求項 7】

式、

#### 【化 107】



30

40

の化合物であって、

式中、 $R^1$  および  $R^4$  は、互いに独立に、水素、ハロゲン、 $C_1 \sim C_{18}$  アルキル、E

50

で置換されおよび／またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>アルケニル、C<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>アルキニル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、Eで置換されおよび／またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、CN、または-CO-R<sup>28</sup>であり、

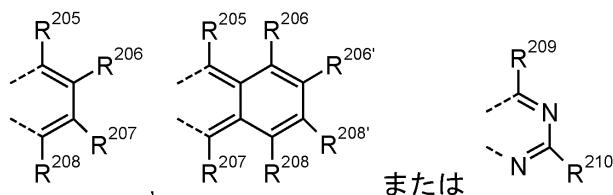
R<sup>2</sup>、R<sup>3</sup>、R<sup>5</sup>、およびR<sup>6</sup>は、互いに独立に、H、ハロゲン、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Eで置換されおよび／またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>6</sub>～C<sub>24</sub>アリール、Gで置換されたC<sub>6</sub>～C<sub>24</sub>アリール、C<sub>2</sub>～C<sub>20</sub>ヘテロアリール、Gで置換されたC<sub>2</sub>～C<sub>20</sub>ヘテロアリール、C<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>アルケニル、C<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>アルキニル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、Eで置換されおよび／またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、C<sub>7</sub>～C<sub>25</sub>アラルキル、CN、または-CO-R<sup>28</sup>であり、10

R<sup>8</sup>およびR<sup>9</sup>は、互いに独立に、H、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Eで置換されおよび／またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>6</sub>～C<sub>24</sub>アリール、Gで置換されたC<sub>6</sub>～C<sub>24</sub>アリール、C<sub>2</sub>～C<sub>20</sub>ヘテロアリール、Gで置換されたC<sub>2</sub>～C<sub>20</sub>ヘテロアリール、C<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>アルケニル、C<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>アルキニル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、Eで置換されおよび／またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、C<sub>7</sub>～C<sub>25</sub>アラルキル、CN、または-CO-R<sup>28</sup>であり、または、

R<sup>8</sup>およびR<sup>9</sup>は、一緒に、基、

【化3】

20



を形成し、

式中、R<sup>206'</sup>、R<sup>208'</sup>、R<sup>205</sup>、R<sup>206</sup>、R<sup>207</sup>、R<sup>208</sup>、R<sup>209</sup>、およびR<sup>210</sup>は、互いに独立に、H、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Eで置換されおよび／またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、またはEで置換されおよび／またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>6</sub>～C<sub>24</sub>アリール、Gで置換されたC<sub>6</sub>～C<sub>24</sub>アリール、C<sub>2</sub>～C<sub>20</sub>ヘテロアリール、Gで置換されたC<sub>2</sub>～C<sub>20</sub>ヘテロアリール、C<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>アルケニル、C<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>アルキニル、C<sub>7</sub>～C<sub>25</sub>アラルキル、CN、または-CO-R<sup>28</sup>であり、30

R<sup>10</sup>は、H、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Eで置換されおよび／またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>6</sub>～C<sub>24</sub>アリール、Gで置換されたC<sub>6</sub>～C<sub>24</sub>アリール、C<sub>2</sub>～C<sub>20</sub>ヘテロアリール、C<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>アルケニル、C<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>アルキニル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、Eで置換されおよび／またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、C<sub>7</sub>～C<sub>25</sub>アラルキル、または-CO-R<sup>28</sup>であり、40

R<sup>11</sup>およびR<sup>14</sup>は、互いに独立に、水素、ハロゲン、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Eで置換されおよび／またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>アルケニル、C<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>アルキニル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、Eで置換されおよび／またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、CN、または-CO-R<sup>28</sup>であり、

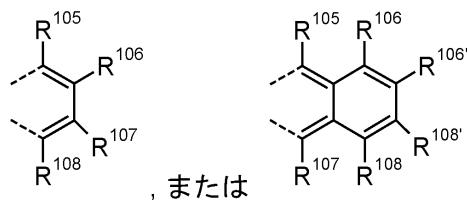
R<sup>12</sup>、R<sup>13</sup>、R<sup>15</sup>、およびR<sup>16</sup>は、互いに独立に、H、ハロゲン、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Eで置換されおよび／またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～50

$C_{1-8}$  ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{2-4}$  アリール、Gで置換された $C_6 \sim C_{2-4}$  アリール、 $C_2 \sim C_{2-0}$  ヘテロアリール、Gで置換された $C_2 \sim C_{2-0}$  ヘテロアリール、 $C_2 \sim C_{1-8}$  アルケニル、 $C_2 \sim C_{1-8}$  アルキニル、 $C_1 \sim C_{1-8}$  アルコキシ、Eで置換されおよび／またはDで中断された $C_1 \sim C_{1-8}$  アルコキシ、 $C_7 \sim C_{2-5}$  アラルキル、CN、または $-CO-R^{2-8}$  であり、

Xは、O、S、またはNR<sup>1-7</sup>であり、式中、R<sup>1-7</sup>は、H； $C_6 \sim C_{1-8}$  アリール； $C_2 \sim C_{2-0}$  ヘテロアリール； $C_1 \sim C_{1-8}$  アルキル、 $C_1 \sim C_{1-8}$  ペルフルオロアルキル、または $C_1 \sim C_{1-8}$  アルコキシで置換された $C_6 \sim C_{1-8}$  アリールもしくは $C_2 \sim C_{2-0}$  ヘテロアリール； $C_1 \sim C_{1-8}$  アルキル；または-O-で中断された $C_1 \sim C_{1-8}$  アルキルであり、

または、互いに隣接する2個の置換基R<sup>1-1</sup>およびR<sup>1-2</sup>、ならびに／またはR<sup>1-4</sup>およびR<sup>1-6</sup>、R<sup>2</sup>およびR<sup>3</sup>、R<sup>5</sup>およびR<sup>6</sup>、R<sup>1-2</sup>およびR<sup>1-3</sup>、ならびに／またはR<sup>1-5</sup>およびR<sup>1-6</sup>は、一緒に基、

#### 【化4】

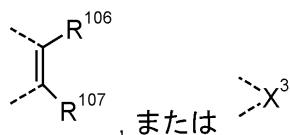


10

20

を形成し、または互いに隣接する2個の置換基R<sup>1-5</sup>およびR<sup>1-3</sup>、ならびに／またはR<sup>5</sup>およびR<sup>3</sup>は、一緒に基、

#### 【化5】



30

を形成し、

式中、X<sup>3</sup>は、O、S、C(R<sup>1-1-9</sup>)(R<sup>1-2-0</sup>)、またはNR<sup>1-7</sup>であり、式中、R<sup>1-7</sup>は、上記で定義した通りであり、R<sup>1-0-5</sup>、R<sup>1-0-6</sup>、R<sup>1-0-7</sup>、R<sup>1-0-8</sup>、R<sup>1-0-6'</sup>、およびR<sup>1-0-8'</sup>は、互いに独立に、H、 $C_1 \sim C_{1-8}$  アルキル、Eで置換されおよび／またはDで中断された $C_1 \sim C_{1-8}$  アルキル、 $C_1 \sim C_{1-8}$  アルコキシ、またはEで置換されおよび／またはDで中断された $C_1 \sim C_{1-8}$  アルコキシであり、

R<sup>1-1-9</sup>およびR<sup>1-2-0</sup>は、一緒に式=CRR<sup>1-2-1</sup>R<sup>1-2-2</sup>の基を形成し、

式中、R<sup>1-2-1</sup>およびR<sup>1-2-2</sup>は、互いに独立に、H、 $C_1 \sim C_{1-8}$  アルキル、Eで置換されおよび／またはDで中断された $C_1 \sim C_{1-8}$  アルキル、 $C_6 \sim C_{2-4}$  アリール、Gで置換された $C_6 \sim C_{2-4}$  アリール、または $C_2 \sim C_{2-0}$  ヘテロアリール、またはGで置換された $C_2 \sim C_{2-0}$  ヘテロアリールであり、または、

40

R<sup>1-1-9</sup>およびR<sup>1-2-0</sup>は、一緒に5もしくは6員環を形成し、これは、場合により、 $C_1 \sim C_{1-8}$  アルキル、Eで置換されおよび／またはDで中断された $C_1 \sim C_{1-8}$  アルキル、 $C_6 \sim C_{2-4}$  アリール、Gで置換された $C_6 \sim C_{2-4}$  アリール、 $C_2 \sim C_{2-0}$  ヘテロアリール、Gで置換された $C_2 \sim C_{2-0}$  ヘテロアリール、 $C_2 \sim C_{1-8}$  アルケニル、 $C_2 \sim C_{1-8}$  アルキニル、 $C_1 \sim C_{1-8}$  アルコキシ、Eで置換されおよび／またはDで中断された $C_1 \sim C_{1-8}$  アルコキシ、 $C_7 \sim C_{2-5}$  アラルキル、または-C(=O)-R<sup>1-2-7</sup>で置換することができ、

R<sup>1-2-7</sup>は、H； $C_6 \sim C_{1-8}$  アリール； $C_1 \sim C_{1-8}$  アルキルまたは $C_1 \sim C_{1-8}$  アルコキシで置換された $C_6 \sim C_{1-8}$  アリール； $C_1 \sim C_{1-8}$  アルキル；または-O-で中

50

断された  $C_1 \sim C_{18}$  アルキルであり、

D は、 - CO - ; - COO - ; - S - ; - SO - ; - SO<sub>2</sub> - ; - O - ; - NR<sup>2</sup><sup>5</sup> - ; - SiR<sup>3</sup><sup>0</sup>R<sup>3</sup><sup>1</sup> - ; - POR<sup>3</sup><sup>2</sup> - ; - CR<sup>2</sup><sup>3</sup> = CR<sup>2</sup><sup>4</sup> - ; または - C C - であり、

E は、 - OR<sup>2</sup><sup>9</sup> ; - SR<sup>2</sup><sup>9</sup> ; - NR<sup>2</sup><sup>5</sup>R<sup>2</sup><sup>6</sup> ; - COR<sup>2</sup><sup>8</sup> ; - COOR<sup>2</sup><sup>7</sup> ; - CONR<sup>2</sup><sup>5</sup>R<sup>2</sup><sup>6</sup> ; - CN ; またはハロゲンであり、G は、 E、  $C_1 \sim C_{18}$  アルキル、 D で中断された  $C_1 \sim C_{18}$  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、 または E で置換されおよび / または D で中断された  $C_1 \sim C_{18}$  アルコキシであり、

式中、 R<sup>2</sup><sup>3</sup>、 R<sup>2</sup><sup>4</sup>、 R<sup>2</sup><sup>5</sup>、 および R<sup>2</sup><sup>6</sup> は、 互いに独立に、 H ;  $C_6 \sim C_{18}$  アリール ;  $C_1 \sim C_{18}$  アルキルまたは  $C_1 \sim C_{18}$  アルコキシで置換された  $C_6 \sim C_{18}$  アリール ;  $C_1 \sim C_{18}$  アルキル ; または - O - で中断された  $C_1 \sim C_{18}$  アルキルであり、 または、 10

R<sup>2</sup><sup>5</sup> および R<sup>2</sup><sup>6</sup> は、 一緒に 5 または 6 員環を形成し、

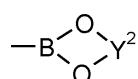
R<sup>2</sup><sup>7</sup> および R<sup>2</sup><sup>8</sup> は、 互いに独立に、 H ;  $C_6 \sim C_{18}$  アリール ;  $C_1 \sim C_{18}$  アルキルまたは  $C_1 \sim C_{18}$  アルコキシで置換された  $C_6 \sim C_{18}$  アリール ;  $C_1 \sim C_{18}$  アルキル ; または - O - で中断された  $C_1 \sim C_{18}$  アルキルであり、

R<sup>2</sup><sup>9</sup> は、 H ;  $C_6 \sim C_{18}$  アリール ;  $C_1 \sim C_{18}$  アルキルまたは  $C_1 \sim C_{18}$  アルコキシで置換された  $C_6 \sim C_{18}$  アリール ;  $C_1 \sim C_{18}$  アルキル ; または - O - で中断された  $C_1 \sim C_{18}$  アルキルであり、 20

R<sup>3</sup><sup>0</sup> および R<sup>3</sup><sup>1</sup> は、 互いに独立に、  $C_1 \sim C_{18}$  アルキル、  $C_6 \sim C_{18}$  アリール 、 または  $C_1 \sim C_{18}$  アルキルで置換された  $C_6 \sim C_{18}$  アリールであり、

R<sup>3</sup><sup>2</sup> は、  $C_1 \sim C_{18}$  アルキル、  $C_6 \sim C_{18}$  アリール、 または  $C_1 \sim C_{18}$  アルキルで置換された  $C_6 \sim C_{18}$  アリールであり、

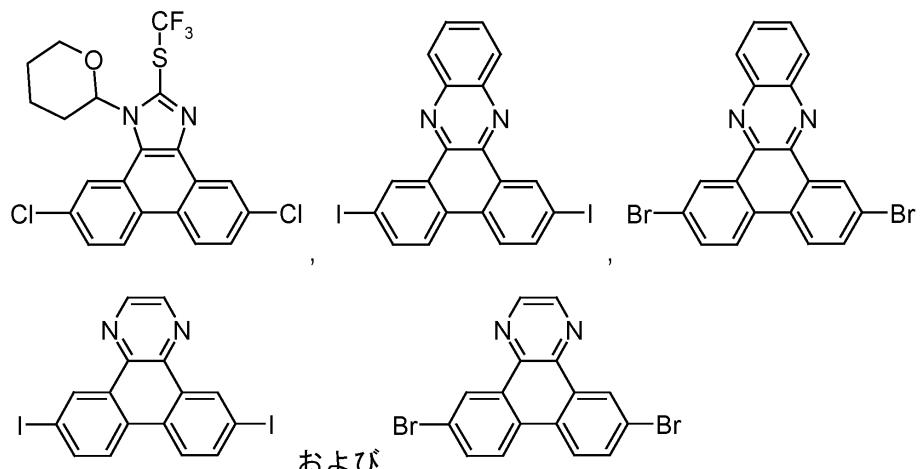
X<sup>1</sup><sup>1</sup> は、 各出現で独立に、 ハロゲン原子、 または - OS(O)<sub>2</sub>CF<sub>3</sub>、 - OS(O)<sub>2</sub>- アリール、 - OS(O)<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>、 - B(OH)<sub>2</sub>、 - B(OY<sup>1</sup>)<sub>2</sub>、 【化 27】



- BF<sub>4</sub>Na、 または - BF<sub>4</sub>K であり、 式中、 Y<sup>1</sup> は、 各出現で独立に、  $C_1 \sim C_{10}$  アルキル基であり、 Y<sup>2</sup> は、 各出現で独立に、 - CY<sup>3</sup>Y<sup>4</sup> - CY<sup>5</sup>Y<sup>6</sup> - または - CY<sup>7</sup>Y<sup>8</sup> - CY<sup>9</sup>Y<sup>10</sup> - CY<sup>11</sup>Y<sup>12</sup> - などの  $C_2 \sim C_{10}$  アルキレン基であり、 式中、 Y<sup>3</sup>、 Y<sup>4</sup>、 Y<sup>5</sup>、 Y<sup>6</sup>、 Y<sup>7</sup>、 Y<sup>8</sup>、 Y<sup>9</sup>、 Y<sup>10</sup>、 Y<sup>11</sup>、 および Y<sup>12</sup> は、 互いに独立に、 水素、 または  $C_1 \sim C_{10}$  アルキル基である、

ただし、

## 【化 2 8】



を除外する条件である、化合物。

## 【発明の詳細な説明】

## 【技術分野】

## 【0 0 0 1】

20

本発明は、式(I)の繰り返しユニットを含む新規ポリマーおよび電子装置におけるその用途に関する。本発明によるポリマーは、有機溶媒中への優れた溶解性と優れたフィルム形成特性を有する。更に、本発明によるポリマーがポリマー発光ダイオード(PLED)に使用される場合、高い電荷キャリア移動性と高い発色温度安定性を観察することができる。

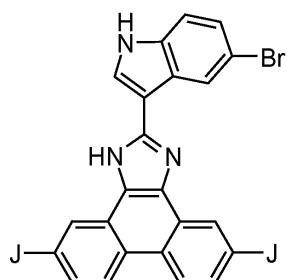
## 【0 0 0 2】

日本国特許第05273618号は、抗炎症剤として用いられるフェナントロイミダゾール化合物を開示する。国際公開公報第04016086号は、2,4,5-三置換イミダゾールの調製および抗バクテリア剤および/または抗細菌剤としてのその使用に関する。中でも、国際公開公報第04016086号には以下の化合物が明確に記載される。

30

## 【0 0 0 3】

## 【化 2 9】



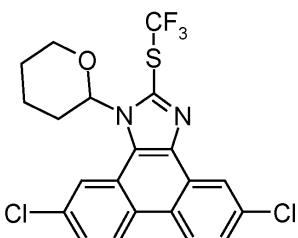
40

## 【0 0 0 4】

米国特許第4,215,135号は、抗炎症剤として有用な2-置換-1H-フェナントロ[9,10-d]-イミダゾールに関する。中でも、米国特許第4,215,135号には以下の化合物が明確に記載される。

## 【0 0 0 5】

【化30】



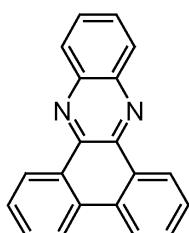
【0006】

10

米国特許第3635544号は、光吸収化合物としての以下の化合物を含む光互変性ポリマー・マトリックスに関する。

【0007】

【化31】



20

【0008】

日本国特許第09188874号、日本国特許第09013025号、日本国特許第07026255号、日本国特許第06207169号、米国特許第2004076853号、国際公開公報第2004043937号、米国特許第6713781号、国際公開公報第2004006352号、国際公開公報第2003058667号、および国際公開公報第2004006355号は、フェナントレン縮合またはフェナントロリン縮合フェナジンおよびELデバイスにおけるその用途を開示する。

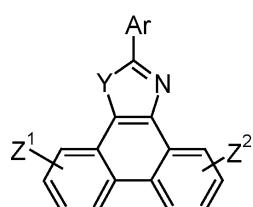
【0009】

30

米国特許第2004209117号は、以下の式、

【0010】

【化32】



【0011】

40

のアゾール化合物を含むELデバイスに関し、式中、Yは、O、S、および-N(R)-からなる群から選択される原子または基であり、Rは、炭素数1~約30のヒドロカルビル基であり、Z<sup>1</sup>およびZ<sup>2</sup>は、各々、水素、1~約25炭素原子のアルキル基、6~約30炭素原子のアリール基、1~約25炭素原子のアルコキシ基、ハロゲン、およびシアノ基からなる群から選択される置換基であり、Arは、芳香族成分である。日本国特許第2004161892号、日本国特許第2002050473号、および日本国特許第2001023777号は、フェナントロイミダゾールおよびそのELデバイスにおける用途を開示する。

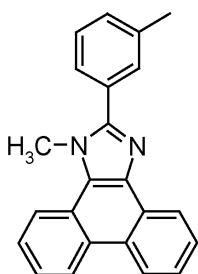
【0012】

国際公開公報第04/030029号は、以下の基、

【0013】

50

【化33】



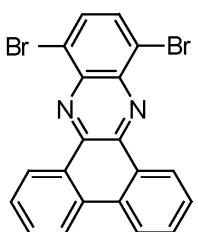
【0014】

10

を含有するポリマーを含む光起電EL電池に関する。国際公開公報第03/020790号は、スピロビフルオレンユニットを含む共役ポリマーに関する。ポリマーは、以下の化合物、

【0015】

【化34】



20

【0016】

から誘導される繰り返しユニットを含むことができる。

【0017】

欧洲特許第0757035A1号は、以下の一般式、

【0018】

【化35】



30

【0019】

で表されるフェナントリエンジアミン誘導体に関し、これらは、電荷輸送能力、結合樹脂との相溶性、および安定性に優れ、よって高感度で耐久性に優れた感光性材料を提供する。

40

【0020】

米国特許第2001008711号は、一対の電極間に形成された発光層を含んで、発光層または複数の有機化合物の薄い層を含む有機発光デバイスに関し、少なくとも1層は、以下の式  $N R_{1,1} R_{1,2} R_{1,3}$  で表される少なくとも1種の化合物を含み、式中、  $R_{1,1}$ 、  $R_{1,2}$ 、 および  $R_{1,3}$  は、各々3個以上の環が環状に縮合した環状縮合多環式炭化水素構造を有する基、および新規な環状縮合多環式炭化水素化合物を表す。

【0021】

米国特許第2004/0028944号は、一般式  $N(Ar_1)(Ar_2)(Ar_3)$  で表されるトリアリールアミン誘導体を含む有機エレクトロルミネセンスデバイスに関し、式中、  $Ar_1$  ~  $Ar_3$  は、置換または非置換アリール基であり、  $Ar_1$  ~  $Ar_3$  の少な

50

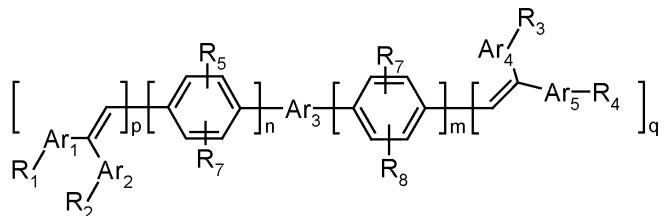
くとも 1 個は、 9 - フェナントリル基である。

【 0 0 2 2 】

欧洲特許第 1 4 4 0 9 5 9 A 1 号は、 式、

【 0 0 2 3 】

【 化 3 6 】



10

【 0 0 2 4 】

の新規な溶解性化合物、 および電界発光デバイスにおけるその用途に関し、 式中、 Ar<sub>3</sub> は、 置換もしくは非置換アントラセンジイル基、 または置換もしくは非置換フルオレンジイル基を表す。

【 0 0 2 5 】

国際公開公報第 0 3 / 0 6 4 3 7 3 号は、 トリアリールアミン誘導体および有機エレクトロルミネセンスおよび電子写真デバイスにおけるホール輸送材料としてのその用途に関する。

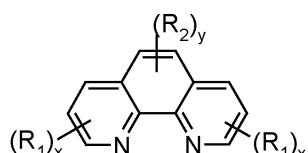
20

【 0 0 2 6 】

国際公開公報第 0 4 / 0 0 5 2 8 8 号は、 式、

【 0 0 2 7 】

【 化 3 7 】



30

を有するフェナントロリン誘導体を含む電荷輸送組成物に関し、 式中、 R<sub>1</sub> および R<sub>2</sub> は、 各出現で同じであるかまたは異なり、 H、 F、 C<sub>1</sub>、 Br、 アルキル、 ヘテロアルキル、 アルケニル、 アルキニル、 アリール、 ヘテロアリール、 C<sub>n</sub>H<sub>a</sub>F<sub>b</sub>、 OC<sub>n</sub>H<sub>a</sub>F<sub>b</sub>、 C<sub>6</sub>H<sub>c</sub>F<sub>d</sub>、 および OC<sub>6</sub>H<sub>c</sub>F<sub>d</sub> から選択され、 F、 C<sub>n</sub>H<sub>a</sub>F<sub>b</sub>、 OC<sub>n</sub>H<sub>a</sub>F<sub>b</sub>、 C<sub>g</sub>H<sub>c</sub>F<sub>d</sub>、 および OC<sub>6</sub>H<sub>c</sub>F<sub>d</sub> から選択される少なくとも 1 種の置換基が芳香族基上に存在する場合、 a、 b、 c、 および d は、 0、 または a + b = 2n + 1 であり、 c + d = 5 であるような整数であり、 n は整数であり、 x は 0 または 1 ~ 3 の整数であり、 y は 0、 1、 または 2 である。

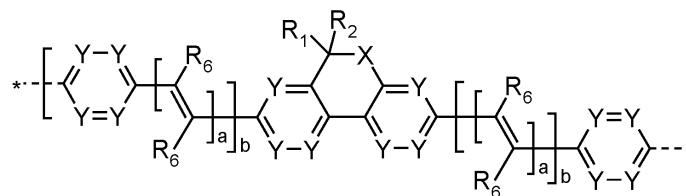
【 0 0 2 9 】

国際公開公報第 0 5 / 0 1 4 6 8 9 号は、 式、

40

【 0 0 3 0 】

【 化 3 8 】



【 0 0 3 1 】

のジヒドロフェナントレンユニットを含有する共役ポリマーおよびポリマー有機発光ダイ

50

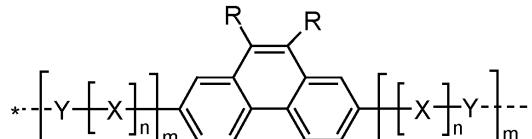
オードにおける用途に関する。

【0032】

本発明よりも早い優先権日付を有するが本発明の優先権日付の後に公開された国際公開公報第05/104264号は、式、

【0033】

【化39】



10

【0034】

の構造ユニットを含むポリマーに関し、中でも両方のR基は、一緒に単環式または多環式、脂肪族環系を形成することができる。

【0035】

その性能を既存技術と比較すると、有機ELディスプレーの導入の際に多くの課題が存在する。特定のガイドライン（すなわちNTSC）に必要とされる正確な色座標を得ることは問題であった。ELデバイスの動作寿命は、カソードレイ管用の既存の無機技術および液晶ディスプレー（LCD）と比べると、まだ低い。更に、純粋な青色と長い寿命を有する材料の製造は、この産業の最大の課題である。

20

【0036】

したがって、本発明の目的は、電気光学デバイスに組み込まれるとき、色の純度、デバイス効率および／または動作寿命に顕著な利点を示す新規な材料を提供することである。

【0037】

該目的は、式Iの繰り返しユニットを含む本発明のポリマーによって解決される。本発明のポリマーを含む有機発光デバイス（OLED）は、色の純度、デバイス効率および／または動作寿命に顕著な利点を示す。更に、ポリマーは、良好な溶解特性および比較的高いガラス転移点を有し、そのコーティングおよび薄膜への製造を容易にし、熱的および機械的に安定であり、比較的欠陥が少ない。ポリマーが架橋することのできる末端基を含有するならば、フィルムまたはコーティングが形成された後、それらの基の架橋は、その耐溶媒性を高め、これは、1種以上の溶媒系材料層がその上に堆積される用途において有益である。

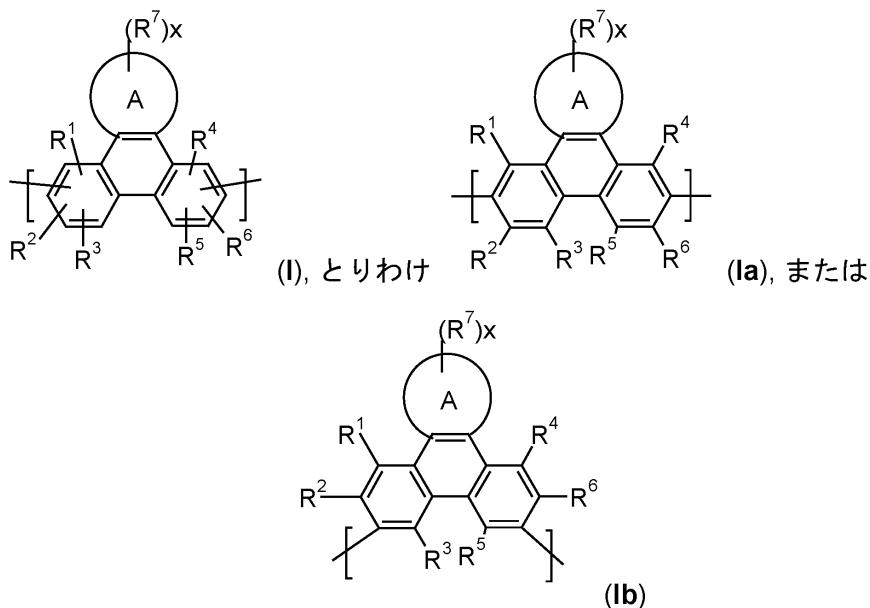
30

【0038】

したがって、本発明は、式、

【0039】

## 【化40】



10

## 【0040】

の繰り返しユニットを含むポリマーに関し、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、ならびに窒素、置換窒素、酸素、および硫黄から選択される少なくとも1個の更に他のヘテロ原子を含有する5、6、または7員のヘテロ芳香族環であり、

20

$R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、および $R^6$ は、互いに独立に水素、ハロゲン、または有機置換基であり、または

互いに隣接する $R^1$ および $R^2$ 、 $R^4$ および $R^6$ 、 $R^2$ および $R^3$ 、 $R^5$ および $R^3$ 、ならびに/または $R^5$ および $R^6$ は、一緒に任意選択的に置換されていてもよい、芳香族環またはヘテロ芳香族環または環系を形成し、

$R^7$ は、有機置換基であり、同じ分子中の2個以上の置換基 $R^7$ は、異なる意味を有することができ、または一緒に芳香族またはヘテロ芳香族環または環系を形成することができ、

30

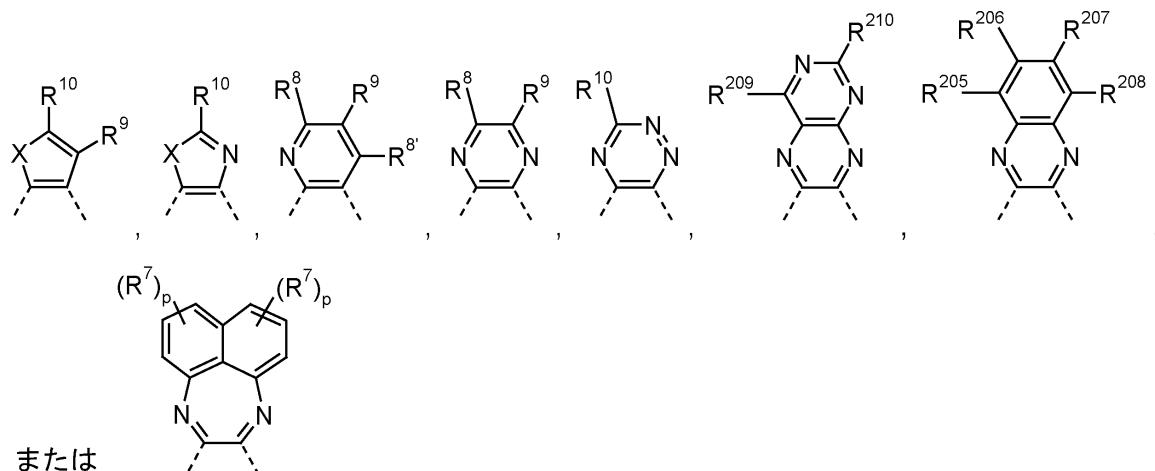
そしてxは、0または1~5の整数である。

## 【0041】

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有する5、6、または7員のヘテロ芳香族環であり、これは、置換することができ、および/または縮合芳香族またはヘテロ芳香族環系の部分とすることができます。Aの非制限的な例は、

## 【0042】

## 【化41】



10

## 【0043】

であり、式中、R<sup>7</sup>は、R<sup>8</sup>の意味を有し、R<sup>8'</sup>は、R<sup>8</sup>の意味を有し、Xは、O、S、N-R<sup>1-7</sup>であり、R<sup>205</sup>、R<sup>206</sup>、R<sup>207</sup>、R<sup>208</sup>、R<sup>209</sup>、R<sup>210</sup>、R<sup>8</sup>、R<sup>9</sup>、R<sup>10</sup>、およびR<sup>1-7</sup>は、以下に定義するとおりであり、pは、0、1、2、または3であり、点線---は、ベンゼン環への結合を示す。

20

## 【0044】

好ましくは、Aは、1個の窒素、ならびに窒素、酸素、および硫黄から選択される少なくとも更に他のヘテロ原子を含有する上記5、6、または7員のヘテロ芳香族環である。ヘテロ原子が窒素である場合、それは、=N-または-NR-、特に-NR<sup>1-0</sup>-とすることができ、式中、Rは、有機置換基であり、R<sup>1-0</sup>は、以下に定義するとおりである。

## 【0045】

本発明のポリマーは、100以上、特に150以上のガラス転移温度を有するべきである。

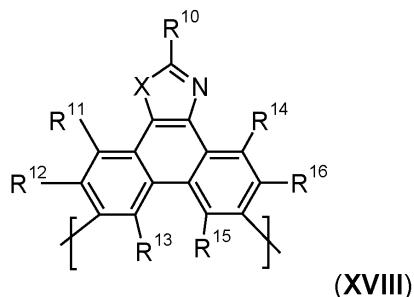
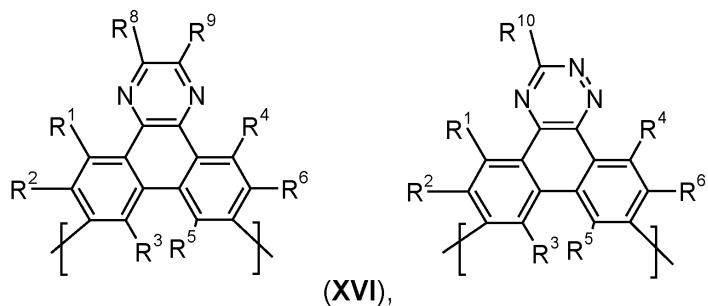
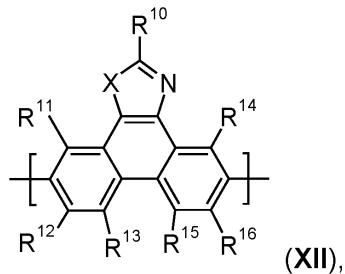
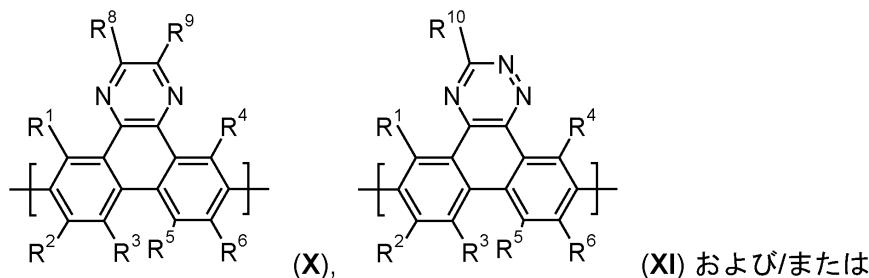
## 【0046】

好ましくは、本発明のポリマーは、式、

30

## 【0047】

## 【化42】



## 【0048】

の繰り返しユニットを含み、式中、R<sup>1</sup> および R<sup>4</sup> は、互いに独立に、水素、ハロゲン、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> ペルフルオロアルキル、C<sub>2</sub> ~ C<sub>18</sub> アルケニル、C<sub>2</sub> ~ C<sub>18</sub> アルキニル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルコキシ、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルコキシ、CN、または-CO-R<sup>2</sup>~R<sup>8</sup> であり、

R<sup>2</sup>、R<sup>3</sup>、R<sup>5</sup>、およびR<sup>6</sup> は、互いに独立に、H、ハロゲン、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> ペルフルオロアルキル、C<sub>6</sub> ~ C<sub>24</sub> アリール、Gで置換されたC<sub>6</sub> ~ C<sub>24</sub> アリール、C<sub>2</sub> ~ C<sub>20</sub> ヘテロアリール、Gで置換されたC<sub>2</sub> ~ C<sub>20</sub> ヘテロアリール、C<sub>2</sub> ~ C<sub>18</sub> アルケニル、C<sub>2</sub> ~ C<sub>18</sub> アルキニル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルコキシ、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルコキシ、C<sub>7</sub> ~ C<sub>25</sub> アラルキル、CN、または-CO-R<sup>2</sup>~R<sup>8</sup> であり、

R<sup>8</sup> およびR<sup>9</sup> は、互いに独立に、H、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> ペルフルオロアルキル、C<sub>6</sub> ~ C<sub>24</sub> アリール、Gで置換されたC<sub>6</sub> ~ C<sub>24</sub> アリール、C<sub>2</sub> ~ C<sub>20</sub> ヘテロアリール、Gで置換されたC<sub>2</sub> ~ C<sub>20</sub> ヘテロアリール、C<sub>2</sub> ~ C<sub>18</sub> アルケニル、C<sub>2</sub> ~ C<sub>18</sub> アルキニル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルコキシ、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルコキシ、CN、または-CO-R<sup>2</sup>~R<sup>8</sup> であり、

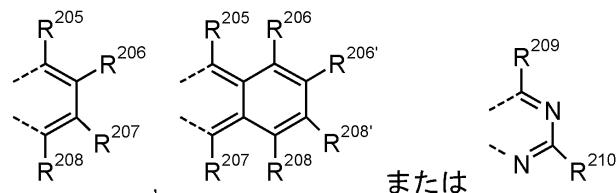
JP 5541859 B2 2014.7.9 50

アルキニル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、C<sub>7</sub>～C<sub>25</sub>アラルキル、CN、または-CO-R<sup>28</sup>であり、または、

R<sup>8</sup>およびR<sup>9</sup>は、一緒に、基、

【0049】

【化43】



10

【0050】

を形成し、

式中、R<sup>206'</sup>、R<sup>208'</sup>、R<sup>205</sup>、R<sup>206</sup>、R<sup>207</sup>、R<sup>208</sup>、R<sup>209</sup>、およびR<sup>210</sup>は、互いに独立に、H、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、または、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>6</sub>～C<sub>24</sub>アリール、Gで置換されたC<sub>6</sub>～C<sub>24</sub>アリール、C<sub>2</sub>～C<sub>20</sub>ヘテロアリール、Gで置換されたC<sub>2</sub>～C<sub>20</sub>ヘテロアリール、C<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>アルケニル、C<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>アルキニル、C<sub>7</sub>～C<sub>25</sub>アラルキル、CN、または-CO-R<sup>28</sup>であり、

R<sup>10</sup>は、H、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>6</sub>～C<sub>24</sub>アリール、Gで置換されたC<sub>6</sub>～C<sub>24</sub>アリール、C<sub>2</sub>～C<sub>20</sub>ヘテロアリール、C<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>アルケニル、C<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>アルキニル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、C<sub>7</sub>～C<sub>25</sub>アラルキル、または-CO-R<sup>28</sup>であり、

R<sup>11</sup>およびR<sup>14</sup>は、互いに独立に、水素、ハロゲン、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>アルケニル、C<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>アルキニル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、CN、または-CO-R<sup>28</sup>であり、

R<sup>12</sup>、R<sup>13</sup>、R<sup>15</sup>、およびR<sup>16</sup>は、互いに独立に、H、ハロゲン、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>6</sub>～C<sub>24</sub>アリール、Gで置換されたC<sub>6</sub>～C<sub>24</sub>アリール、C<sub>2</sub>～C<sub>20</sub>ヘテロアリール、Gで置換されたC<sub>2</sub>～C<sub>20</sub>ヘテロアリール、C<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>アルケニル、C<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>アルキニル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、C<sub>7</sub>～C<sub>25</sub>アラルキル、CN、または-CO-R<sup>28</sup>であり、

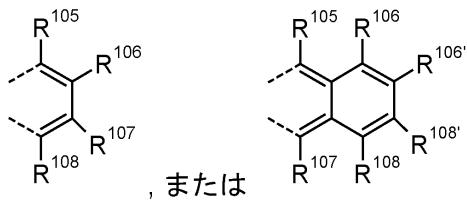
Xは、O、S、またはNR<sup>17</sup>であり、式中、R<sup>17</sup>はH、C<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール、C<sub>2</sub>～C<sub>20</sub>ヘテロアリール、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、またはC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシで置換されたC<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリールまたはC<sub>2</sub>～C<sub>20</sub>ヘテロアリール、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、または-O-で中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキルであり、

または、互いに隣接する2個の置換基R<sup>2</sup>およびR<sup>3</sup>、R<sup>5</sup>およびR<sup>6</sup>、R<sup>12</sup>およびR<sup>13</sup>、ならびに/またはR<sup>15</sup>およびR<sup>16</sup>、R<sup>1</sup>およびR<sup>2</sup>、R<sup>4</sup>およびR<sup>6</sup>、R<sup>1</sup>およびR<sup>12</sup>、ならびに/またはR<sup>14</sup>およびR<sup>16</sup>は、一緒に基、

【0051】

50

## 【化44】



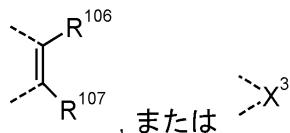
## 【0052】

を形成し、または互いに隣接する2個の置換基R<sup>1~5</sup>およびR<sup>1~3</sup>、ならびに/またはR<sup>5</sup>およびR<sup>3</sup>は、一緒に基、

10

## 【0053】

## 【化45】



## 【0054】

を形成し、式中、X<sup>3</sup>は、O、S、C(R<sup>1~1~9</sup>)(R<sup>1~2~0</sup>)、またはNR<sup>1~7</sup>であり、式中、R<sup>1~7</sup>は、上記で定義したとおりであり、R<sup>1~0~5</sup>、R<sup>1~0~6</sup>、R<sup>1~0~7</sup>、R<sup>1~0~8</sup>、R<sup>1~0~6'</sup>、およびR<sup>1~0~8'</sup>は、互いに独立に、H、C<sub>1~C<sub>1~8</sub>アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1~C<sub>1~8</sub>アルキル、C<sub>1~C<sub>1~8</sub>アルコキシ、またはEで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1~C<sub>1~8</sub>アルコキシであり、R<sup>1~1~9</sup>およびR<sup>1~2~0</sup>は、一緒に式=C R<sup>1~2~1</sup>R<sup>1~2~2</sup>を形成し、式中、

20

R<sup>1~2~1</sup>およびR<sup>1~2~2</sup>は、互いに独立に、H、C<sub>1~C<sub>1~8</sub>アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1~C<sub>1~8</sub>アルキル、C<sub>6~C<sub>2~4</sub>アリール、Gで置換されたC<sub>6~C<sub>2~4</sub>アリール、またはC<sub>2~C<sub>2~0</sub>ヘテロアリール、またはGで置換されたC<sub>2~C<sub>2~0</sub>ヘテロアリールであり、または、

R<sup>1~1~9</sup>およびR<sup>1~2~0</sup>は、一緒に5または6員環を形成し、これは任意選択的にC<sub>1~C<sub>1~8</sub>アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1~C<sub>1~8</sub>アルキル、C<sub>6~C<sub>2~4</sub>アリール、Gで置換されたC<sub>6~C<sub>2~4</sub>アリール、C<sub>2~C<sub>2~0</sub>ヘテロアリール、Gで置換されたC<sub>2~C<sub>2~0</sub>ヘテロアリール、C<sub>2~C<sub>1~8</sub>アルケニル、C<sub>2~C<sub>1~8</sub>アルキニル、C<sub>1~C<sub>1~8</sub>アルコキシ、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1~C<sub>1~8</sub>アルコキシ、C<sub>7~C<sub>2~5</sub>アラルキル、または-C(=O)-R<sup>1~2~7</sup>で置換することができ、

30

R<sup>1~2~7</sup>は、H、C<sub>6~C<sub>1~8</sub>アリール、C<sub>1~C<sub>1~8</sub>アルキルまたはC<sub>1~C<sub>1~8</sub>アルコキシで置換されたC<sub>6~C<sub>1~8</sub>アリール、C<sub>1~C<sub>1~8</sub>アルキル、または-O-で中断されたC<sub>1~C<sub>1~8</sub>アルキルであり、

Dは、-CO-、-COO-、-S-、-SO-、-SO<sub>2</sub>-、-O-、-NR<sup>2~5</sup>-、-SiR<sup>3~0</sup>R<sup>3~1</sup>-、-POR<sup>3~2</sup>-、-CR<sup>2~3</sup>=CR<sup>2~4</sup>-、または-C-C-であり、

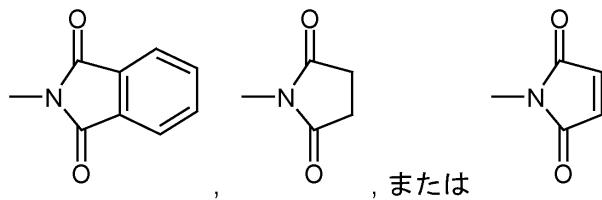
40

Eは、-OR<sup>2~9</sup>、-SR<sup>2~9</sup>、-NR<sup>2~5</sup>R<sup>2~6</sup>、-COR<sup>2~8</sup>、-COOR<sup>2~7</sup>、-CONR<sup>2~5</sup>R<sup>2~6</sup>、-CN、またはハロゲンであり、Gは、E、C<sub>1~C<sub>1~8</sub>アルキル、Dで中断されたC<sub>1~C<sub>1~8</sub>アルキル、C<sub>1~C<sub>1~8</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>1~C<sub>1~8</sub>アルコキシ、またはEで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1~C<sub>1~8</sub>アルコキシであり、式中、

R<sup>2~3</sup>、R<sup>2~4</sup>、R<sup>2~5</sup>、およびR<sup>2~6</sup>は、互いに独立に、H、C<sub>6~C<sub>1~8</sub>アリール、C<sub>1~C<sub>1~8</sub>アルキルまたはC<sub>1~C<sub>1~8</sub>アルコキシで置換されたC<sub>6~C<sub>1~8</sub>アリール、C<sub>1~C<sub>1~8</sub>アルキル、または-O-で中断されたC<sub>1~C<sub>1~8</sub>アルキルであり、または、

50

R<sup>2</sup>～R<sup>5</sup>およびR<sup>2</sup>～R<sup>6</sup>は、一緒に5または6員環、特に、  
【0055】  
【化46】



10

## 【0056】

を形成し、

R<sup>2</sup>～R<sup>7</sup>およびR<sup>2</sup>～R<sup>8</sup>は、互いに独立に、H、C<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキルまたはC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシで置換されたC<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、または-O-で中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキルであり、

R<sup>2</sup>～R<sup>9</sup>は、H、C<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキルまたはC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシで置換されたC<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、または-O-で中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキルであり、

R<sup>3</sup>～R<sup>10</sup>およびR<sup>3</sup>～R<sup>11</sup>は、互いに独立に、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール、またはC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキルで置換されたC<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリールであり、

R<sup>3</sup>～R<sup>12</sup>は、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール、またはC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキルで置換されたC<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリールである。

## 【0057】

式XVI、XVII、およびXVIIIの繰り返しユニットは、熒光化合物のためのホストマトリックス材料として適している。式X、XI、およびXIIの繰り返しユニットは、ELデバイスのための共役ポリマーとして適している。

## 【0058】

式X、XI、およびXIIの繰り返しユニットが好ましい。

## 【0059】

式XおよびXI(XVIおよびXVII)の繰り返しユニットは、更に好ましく、式中、R<sup>1</sup>およびR<sup>4</sup>は、水素であり、

R<sup>2</sup>、R<sup>3</sup>、R<sup>5</sup>、およびR<sup>6</sup>は、互いに独立に、H、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Dで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、Dで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、C<sub>7</sub>～C<sub>25</sub>アラルキル、または基-X<sup>2</sup>-R<sup>1</sup>～R<sup>8</sup>であり、

R<sup>8</sup>およびR<sup>9</sup>は、互いに独立に、H、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Dで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、Dで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、または基-X<sup>2</sup>-R<sup>1</sup>～R<sup>8</sup>であり、式中、X<sup>2</sup>は、C<sub>6</sub>～C<sub>12</sub>アリール、C<sub>6</sub>～C<sub>12</sub>ヘテロアリール、特にフェニル、またはナフチルなどのスペーサーであり、これは、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Dで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、またはEで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシで1回以上、特に1～2回置換することができ、R<sup>1</sup>～R<sup>8</sup>はH、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Dで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、Dで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、または-NR<sup>2</sup>～R<sup>5</sup>-R<sup>2</sup>～R<sup>6</sup>-であり、または、

互いに隣接する2個の置換基R<sup>2</sup>およびR<sup>3</sup>、ならびに/またはR<sup>5</sup>およびR<sup>6</sup>は、一緒に、基、

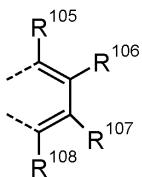
## 【0060】

20

30

40

## 【化47】



## 【0061】

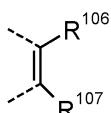
を形成し、または、

互いに隣接する2個の置換基R<sup>5</sup>およびR<sup>3</sup>は、一緒に、基、

## 【0062】

10

## 【化48】



## 【0063】

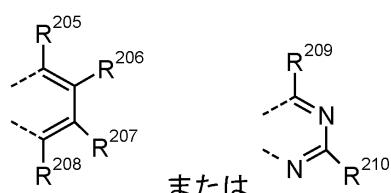
を形成し、式中、R<sup>105</sup>、R<sup>106</sup>、R<sup>107</sup>、およびR<sup>108</sup>は、互いに独立に、H、またはC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキルであり、または、

R<sup>8</sup>およびR<sup>9</sup>は、一緒に、基、

## 【0064】

20

## 【化49】



## 【0065】

を形成し、式中、R<sup>205</sup>、R<sup>206</sup>、R<sup>207</sup>、R<sup>208</sup>、R<sup>209</sup>、およびR<sup>210</sup>は、互いに独立に、H、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、またはEで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキルであり、

30

R<sup>10</sup>は、H、Gで置換されていてもよいC<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール、Gで置換されていてもよいC<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>ヘテロアリール、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Dで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、または基-X<sup>2</sup>-R<sup>18</sup>であり、式中、X<sup>2</sup>は、C<sub>6</sub>～C<sub>12</sub>アリール、C<sub>6</sub>～C<sub>12</sub>ヘテロアリール、特にフェニル、またはナフチルなどのスペーサーであり、これはC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Dで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、またはEで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシで1回以上、特に1～2回置換することができ、R<sup>18</sup>は、H、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Dで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、Dで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、または-NR<sup>25</sup>R<sup>26</sup>であり、

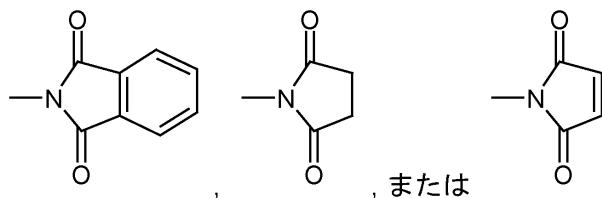
40

Dは、-CO-、-COO-、-S-、-SO-、-SO<sub>2</sub>-、-O-、-NR<sup>25</sup>-、-CR<sup>23</sup>=CR<sup>24</sup>-、または-C=C-であり、式中、R<sup>23</sup>、R<sup>24</sup>、R<sup>25</sup>、およびR<sup>26</sup>は、互いに独立に、H、C<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール、C<sub>1</sub>～C<sub>8</sub>アルキルまたはC<sub>1</sub>～C<sub>8</sub>アルコキシで置換されたC<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール、C<sub>1</sub>～C<sub>8</sub>アルキル、または-O-で中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>8</sub>アルキルであり、または、R<sup>25</sup>およびR<sup>26</sup>は、一緒に5または6員環、特に、

## 【0066】

50

【化50】



【0067】

を形成する。

10

【0068】

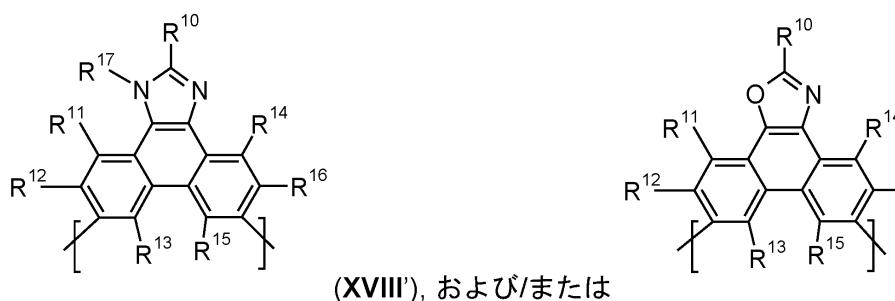
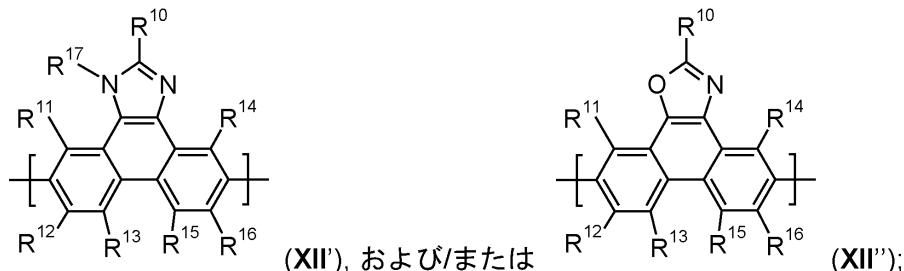
式Xの繰り返しユニットは、式XⅠの繰り返しユニットよりも好ましい。

【0069】

式XⅡとXVIIの繰り返しユニットの中で、式、

【0070】

【化51】



【0071】

の繰り返しユニットが好ましく、

式中、R<sup>10</sup>は、H、Gで置換されてもよいC<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール、Gで置換されてもよいC<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>ヘテロアリール、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Dで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、または基-X<sup>2</sup>-R<sup>1</sup><sup>8</sup>であり、式中、X<sup>2</sup>は、C<sub>6</sub>～C<sub>12</sub>アリール、C<sub>6</sub>～C<sub>12</sub>ヘテロアリール、特にフェニル、またはナフチルなどのスペーサーであり、これは、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Dで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、またはEで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシで1回以上、特に1～2回置換することができ、R<sup>18</sup>は、H、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Dで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、Dで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、または-NR<sup>2</sup><sup>5</sup>R<sup>2</sup><sup>6</sup>であり、R<sup>11</sup>およびR<sup>14</sup>は、水素であり、

R<sup>12</sup>、R<sup>13</sup>、R<sup>15</sup>、およびR<sup>16</sup>は、水素であり、

R<sup>17</sup>は、C<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、またはC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシで置換されたC<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、または-O-で中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキルであり、または、

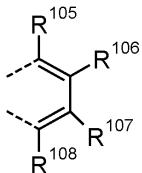
40

50

互いに隣接する 2 個の置換基  $R^{1\ 1}$  および  $R^{1\ 2}$  、ならびに / または  $R^{1\ 4}$  および  $R^{1\ 6}$  、 $R^{1\ 2}$  および  $R^{1\ 3}$  、ならびに / または  $R^{1\ 5}$  および  $R^{1\ 6}$  は、一緒に基、

【0072】

【化52】



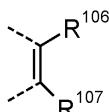
【0073】

10

を形成し、または、互いに隣接する 2 個の置換基  $R^{1\ 5}$  および  $R^{1\ 3}$  は、一緒に基、

【0074】

【化53】



【0075】

を形成し、式中、 $R^{1\ 0\ 5}$ 、 $R^{1\ 0\ 6}$ 、 $R^{1\ 0\ 7}$ 、および  $R^{1\ 0\ 8}$  は、互いに独立に、H 20  
、または  $C_1 \sim C_8$  アルキルであり、

D は、-S-、-O-、または -NR<sup>2\ 5</sup>- であり、

E は、-OR<sup>2\ 9</sup>、-SR<sup>2\ 9</sup>、-NR<sup>2\ 5</sup>R<sup>2\ 6</sup>、-CN、または F であり、G は、  
E、 $C_1 \sim C_{1\ 8}$  アルキル、D で中断された  $C_1 \sim C_{1\ 8}$  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 で置換されおよび / または D で中断  
された  $C_1 \sim C_{1\ 8}$  アルコキシであり、式中、

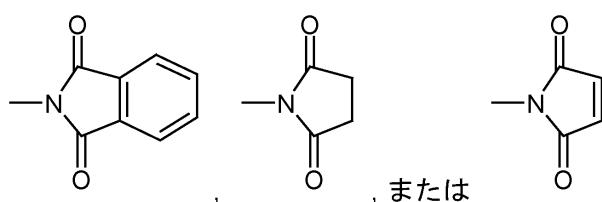
$R^{2\ 5}$  および  $R^{2\ 6}$  は、互いに独立に、H、 $C_6 \sim C_{1\ 8}$  アリール、 $C_1 \sim C_8$  アルキ  
ルまたは  $C_1 \sim C_8$  アルコキシで置換された  $C_6 \sim C_{1\ 8}$  アリール、 $C_1 \sim C_8$  アルキ  
ル、または -O- で中断された  $C_1 \sim C_8$  アルキルであり、または、

$R^{2\ 5}$  および  $R^{2\ 6}$  は、一緒に 5 または 6 員環、特に、

【0076】

30

【化54】



, または

【0077】

を形成し、

40

$R^{2\ 9}$  は、 $C_6 \sim C_{1\ 8}$  アリール、 $C_1 \sim C_{1\ 8}$  アルキルまたは  $C_1 \sim C_{1\ 8}$  アルコキ  
シで置換された  $C_6 \sim C_{1\ 8}$  アリール、 $C_1 \sim C_{1\ 8}$  アルキル、または -O- で中断され  
た  $C_1 \sim C_{1\ 8}$  アルキルである。

【0078】

式 X、X I、および X I I (X V I、X V I I、および X V I I I) の繰り返しユニッ  
トは、好ましく、式中、 $R^{1\ 0}$  および  $R^8$  ならびに / または  $R^9$  は、水素原子とは異なり  
、特に、G で置換されていてもよい  $C_6 \sim C_{1\ 8}$  アリール、G で置換されていてもよい  $C_2 \sim C_{1\ 8}$  ヘテロアリール、 $C_1 \sim C_{1\ 8}$  アルキル、D で中断することのできる  $C_1 \sim C_{1\ 8}$  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  
で置換されおよび / または D で中断された  $C_1 \sim C_{1\ 8}$  アルコキシから選択された溶解性

50

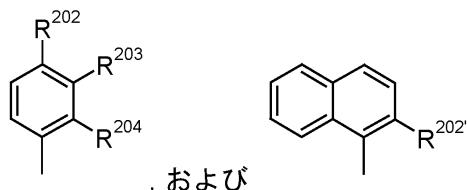
置換基である。

【0079】

アリールおよびヘテロアリール基は、置換されたまたは置換されないアリール、またはフェニル、ビフェニル、ナフチル、アントリル、フェナントリル、ピリジル、ビピリジル、インジル、およびキノリニルからなる群から選択されるヘテロアリール部であるのが好ましい。用語「置換された」は、アリール部が同じであるかまたは異なることのできる1個以上の基、詳細には1～3個の基で置換することができることを意味する。置換基は、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Dで中断することのできるC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、またはEで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシから選択されるのが好ましい。アリールとヘテロアリールの中で最も好ましいのは、

【0080】

【化55】



【0081】

であり、式中、R<sup>202'</sup>は、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Dで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、またはEで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、特にC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシであり、

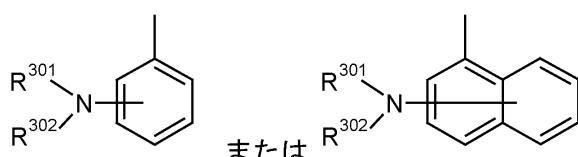
基R<sup>202</sup>、R<sup>203</sup>、およびR<sup>204</sup>の1つはR<sup>202'</sup>であり、他の基は、HまたはR<sup>202'</sup>である。

【0082】

本発明の好ましい実施態様において、R<sup>10</sup>は、基、

【0083】

【化56】



【0084】

であり、式中、R<sup>301</sup>およびR<sup>302</sup>は、互いに独立に、フェニル、1-ナフチル、2-ナフチル、4-ビフェニル、フェナントリル、ターフェニル、ピレニル、2-または9-フルオレニルまたはアントラセニルなどのC<sub>6</sub>～C<sub>24</sub>アリール、好ましくはフェニル、1-ナフチル、2-ナフチル、4-ビフェニルなどのC<sub>6</sub>～C<sub>12</sub>アリール、であり、これは、例えば、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、またはC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシで置換されていてもよい。

【0085】

本発明の他の好ましい実施態様において、R<sup>10</sup>は、フェニル、ビフェニル、ペンタレニル、インデニル、アズレニル、ナフチル、ビフェニレニル、a s - インダセニル、s - インダセニル、アセナフチレニル、フルオレニル、フェナントリル、アントラセニル、フルオランテニル、アセフェナントリレニル、アセアントレニル、トリフェニレニル、ピレニル、クリセニル、ナフタセニル、ピセニル、ペリレニル、ペンタセニル、ペンタフェニル、ヘキサセニル、またはヘキサフェニルなどのC<sub>6</sub>～C<sub>30</sub>アリール基であり、これは、任意選択的に1個、2個、または3個の、好ましくはC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル基またはC

10

20

30

40

50

$C_1 \sim C_{18}$  アルコキシ基で置換することができる。

【0086】

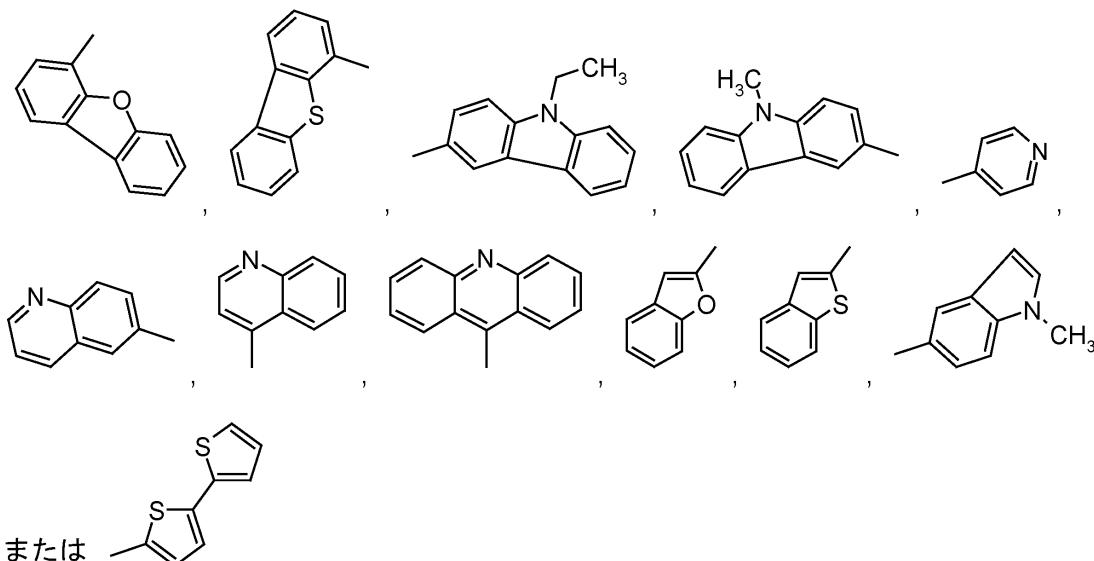
本発明の他の好ましい実施態様において、 $R^{10}$  は、チエニル、ベンゾ [ b ] チエニル、ジベンゾ [ b , d ] チエニル、チアントレニル、フリル、フルフリル、2H - ピラニル、ベンゾフラニル、イソベンゾフラニル、ジベンゾフラニル、フェノキシチエニル、ピロリル、イミダゾリル、ピラゾリル、ピリジル、ビピリジル、トリアジニル、ピリミジニル、ピラジニル、ピリダジニル、インドリジニル、イソインドリル、インドリル、インダゾリル、ブリニル、キノリジニル、キノリル、イソキノリル、フタラニジル、ナフチリジニル、キノキサリニル、キナゾニリル、シンノリニル、ブテリジニル、カルバゾリル、カルボリニル、ベンゾトリアゾリル、ベンゾキサゾリル、フェナントリジニル、アクリジニル、ペリミジニル、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、イソキサゾリル、フラザニル、2 - フェニル - 1 , 2 , 4 - オキサジアジル、2 , 4 - ジフェニル - 1 , 2 , 4 - トリアジル、またはフェノキサジルなどの $C_2 \sim C_{20}$  ヘテロアリール基であり、これは、任意選択的に 1 個、2 個、または 3 個の、好ましくは $C_1 \sim C_8$  アルキル基または $C_1 \sim C_8$  アルコキシ基で置換することができる。

【0087】

$R^{10}$  がヘテロアリール基から誘導される場合、それは式、

【0088】

【化57】



【0089】

の基であるのが好ましい。

【0090】

式 X および X I ( X V I および X V I I ) の繰り返しユニットの場合、 $R^8$  および / または $R^9$  は、水素原子と異なり、 $C_1 \sim C_{18}$  アルキル、D で中断された $C_1 \sim C_{18}$  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、または E で置換されおよび / または D で中断された $C_1 \sim C_{18}$  アルコキシから選択されるのが好ましい。式 X I I ( X V I I I ) の繰り返しユニットの場合、溶解性基は、置換されたアリールもしくはヘテロアリール部であるのが好ましい。

【0091】

式 X I I の繰り返しユニットは、ポリマーのホール注入またはホール輸送特性を増加する繰り返しユニットと組み合わせて用いるのが好ましい。式 X および X I の繰り返しユニットは、ポリマーの電子注入または電子輸送特性を高める繰り返しユニットと組み合わせて用いるのが好ましい。

【0092】

10

20

30

40

50

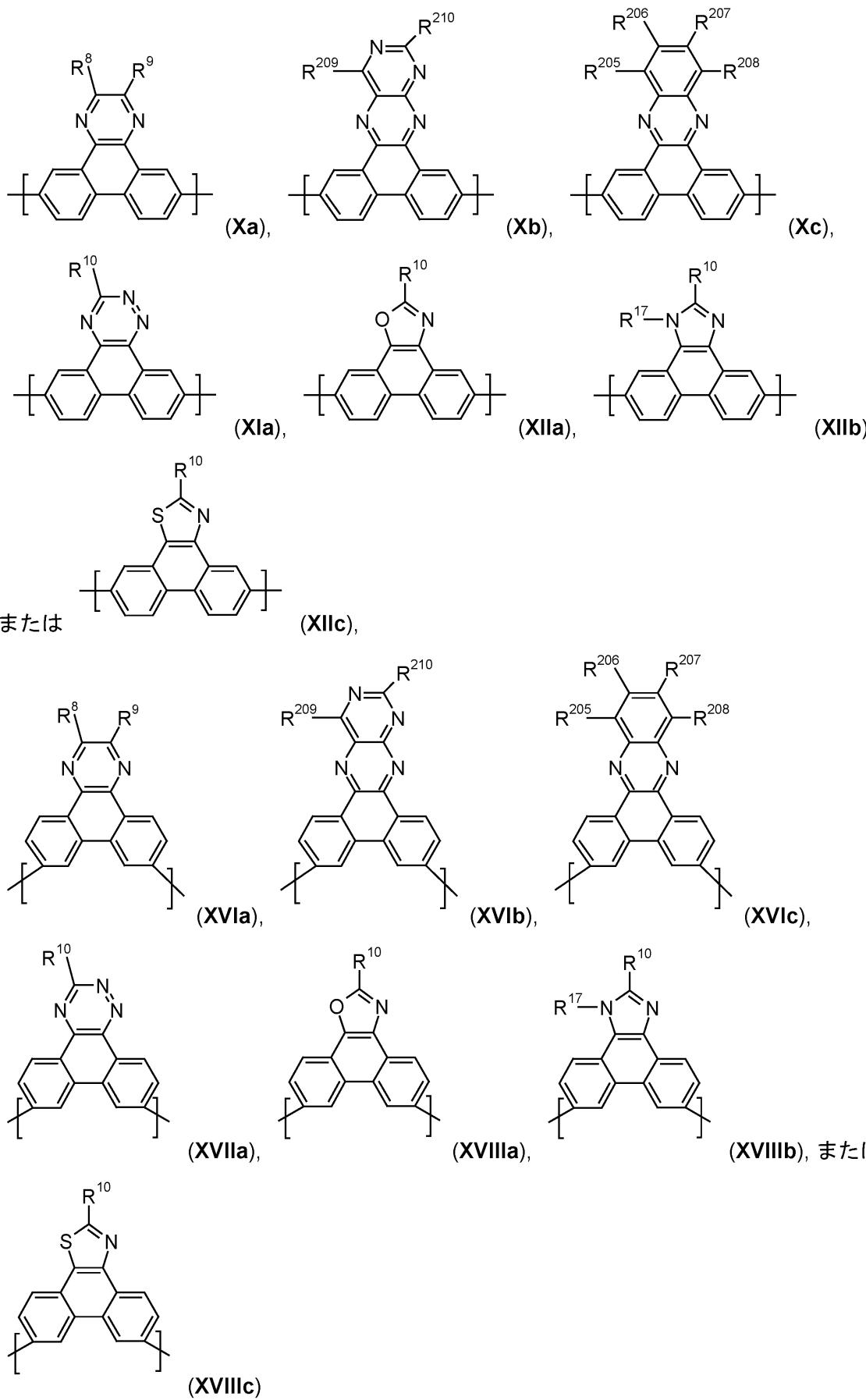
R<sup>1~7</sup>は、メチル、エチル、n-プロピル、イソ-プロピル、n-ブチル、イソブチル、sec-ブチル、ヘキシル、オクチル、または2-エチル-ヘキシルなどのC<sub>1</sub>~C<sub>8</sub>アルキルであるのが好ましい。

【0093】

式X、XI、およびXII、XVI、XVII、およびXVIIIの中でも、式、

【0094】

## 【化 5 8】



## 【0095】

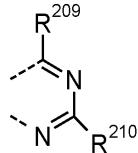
の化合物が最も好ましく、式中、R<sup>8</sup> および R<sup>9</sup> は、互いに独立に、H、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルキル基

ルキル、Dで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、Dで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、または-X<sup>2</sup>-R<sup>1</sup><sup>8</sup>であり、または、

R<sup>8</sup>およびR<sup>9</sup>は、一緒に、基、

【0096】

【化59】



10

【0097】

を形成し、式中、R<sup>209</sup>およびR<sup>210</sup>は、互いに独立に、H、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、またはEで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキルであり、

R<sup>10</sup>は、H、Gで置換されていてもよいC<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール、Gで置換されていてもよいC<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>ヘテロアリール、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Dで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、または-X<sup>2</sup>-R<sup>1</sup><sup>8</sup>であり、式中、X<sup>2</sup>は、C<sub>6</sub>～C<sub>12</sub>アリール、またはC<sub>6</sub>～C<sub>12</sub>ヘテロアリール、特にフェニルまたはナフチルなどのスペーサーであり、これは、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Dで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、またはEで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシで1回以上、特に1～2回置換することができ、

R<sup>17</sup>は、C<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、またはC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシで置換されたC<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、または-O-で中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキルであり、

R<sup>18</sup>は、H、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Dで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、Dで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシであり、

R<sup>205</sup>、R<sup>206</sup>、R<sup>207</sup>、R<sup>208</sup>、R<sup>209</sup>、およびR<sup>210</sup>は、互いに独立に、H、Dで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、Dで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシである。

【0098】

本明細書に用いられる用語「本発明のポリマー」は、式Iの繰り返しユニット、詳細には式X、XIおよび/またはXII(XVI、XVII、およびXVIII)、特に詳細には式Xa、XIa、XIIaおよび/またはXIIIBの繰り返しユニットを有するポリマーを指す。

【0099】

本発明は、式X、XIおよび/またはXIIの繰り返しユニットを基に更に詳細に示されるが、それに制限されるものではない。

【0100】

第1の態様において、本発明は、式Iの繰り返しユニット、詳細には式X、XIおよび/またはXIIの繰り返しユニット、特に詳細には式Xa、XIa、XIIaおよび/またはXIIIBの繰り返しユニットを含むポリマーに関する。

【0101】

式Iのポリマーは、式Iの繰り返しユニット(再現するユニット)に加えて1個以上の繰り返しユニットAr<sup>3</sup>および/またはTを含有することができる。Ar<sup>3</sup>は以下の基から選択される。

40

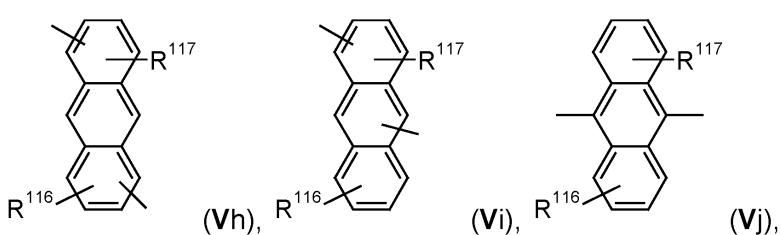
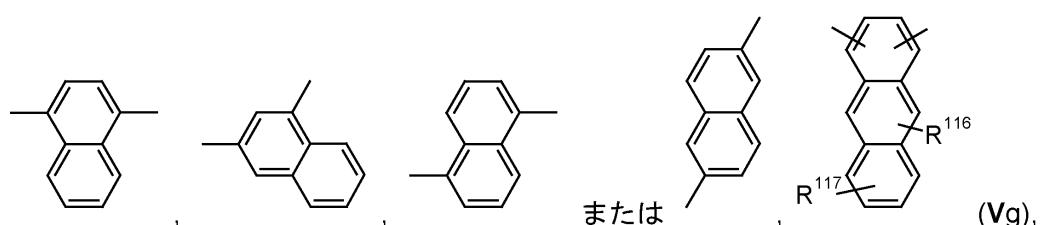
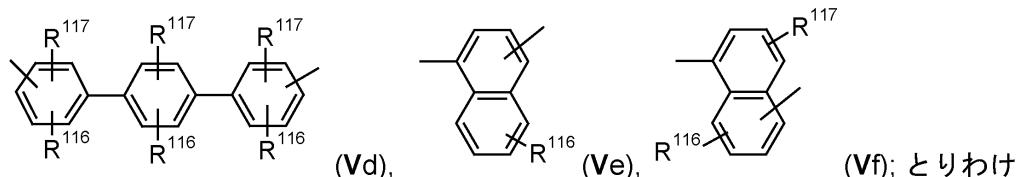
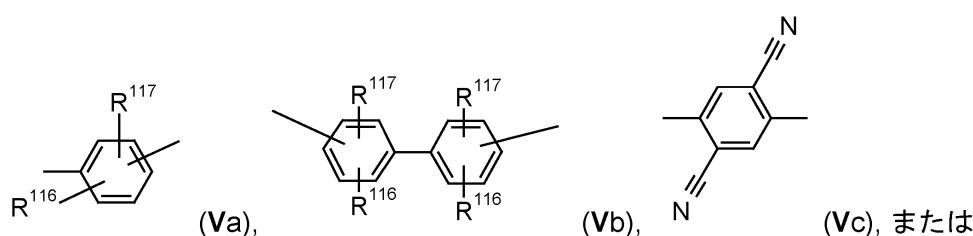
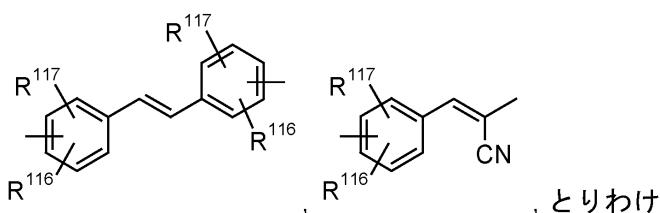
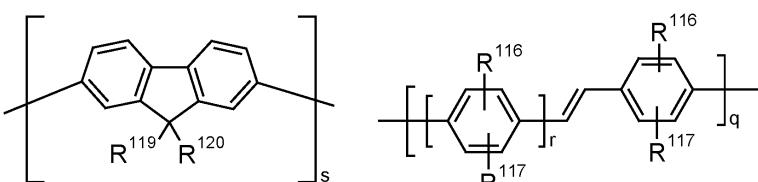
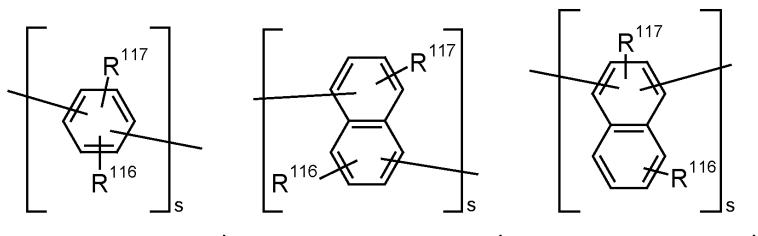
50

## 【0102】

ポリマーのホール注入またはホール輸送特性を向上させる基I I ユニット、  
ポリマーの電子注入または電子輸送特性を向上させる基I I I ユニット、  
基I I とI I I のユニットの組み合わせである基I V、  
基V、

## 【0103】

## 【化60】



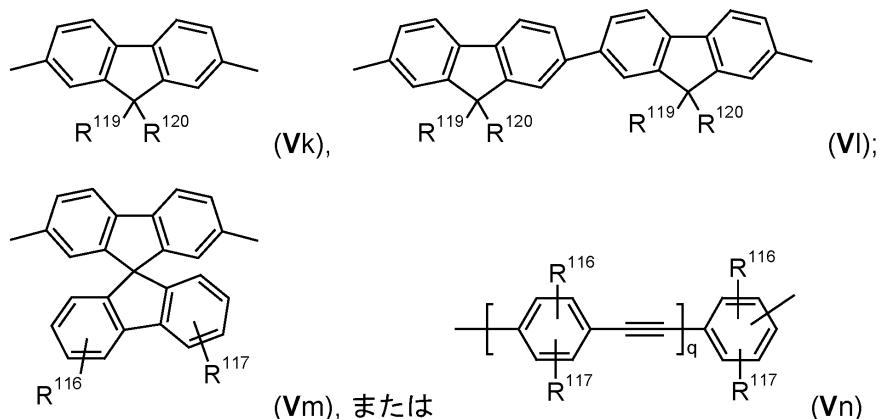
10

20

30

40

50



## 【0104】

式中、rは、1~10の整数、特に1、2、または3であり、

qは、1~10の整数、特に1、2、または3であり、

sは、1~10の整数、特に1、2、または3であり、

$R^{111}^6$ および $R^{111}^7$ は、互いに独立に、H、ハロゲン、-CN、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断された $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール、Gで置換された $C_6 \sim C_{24}$ アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、Gで置換された $C_2 \sim C_{20}$ 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で置換されおよび/またはDで中断された $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、-C(=O)-R<sup>127</sup>、-C(=O)R<sup>127</sup>、または-C(=O)NR<sup>127</sup>R<sup>126</sup>であり、

$R^{111}^9$ および $R^{112}^0$ は、互いに独立に、H、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断された $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール、Gで置換された $C_6 \sim C_{24}$ アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、Gで置換された $C_2 \sim C_{20}$ 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、および/またはDで中断された $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、または $C_7 \sim C_{25}$ アラルキルであり、または、

$R^{111}^9$ および $R^{112}^0$ は、一緒に式=C<sub>r</sub>R<sup>121</sup>R<sup>122</sup>の基を形成し、式中、

$R^{121}$ および $R^{122}$ は、互いに独立に、H、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断された $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール、Gで置換された $C_6 \sim C_{24}$ アリール、または $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、またはGで置換された $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリールであり、または、

$R^{111}^9$ および $R^{112}^0$ は、一緒に5または6員環を形成し、これは、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断された $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール、Gで置換された $C_6 \sim C_{24}$ アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、Gで置換された $C_2 \sim C_{20}$ 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で置換されおよび/またはDで中断された $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、または $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、または-C(=O)-R<sup>127</sup>で任意選択的に置換することができ、

$R^{126}$ および $R^{127}$ は、互いに独立に、H、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール、 $C_1 \sim C_{18}$ または $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシで置換された $C_6 \sim C_{18}$ アリール、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、または-O-で中断された $C_1 \sim C_{18}$ アルキルであり、

Dは、-CO-、-COO-、-S-、-SO-、-SO<sub>2</sub>-、-O-、-NR<sup>65</sup>-、-SiR<sup>70</sup>R<sup>71</sup>-、-POR<sup>72</sup>-、-CR<sup>63</sup>=CR<sup>64</sup>-、または-C-C-であり、

Eは、-OR<sup>69</sup>、-SR<sup>69</sup>、-NR<sup>65</sup>R<sup>66</sup>、-COR<sup>68</sup>、-COOR<sup>67</sup>、-CONR<sup>65</sup>R<sup>66</sup>、-CN、またはハロゲンであり、

Gは、E、またはC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキルであり

【0105】

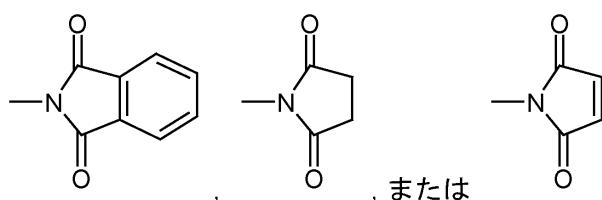
R<sup>63</sup>、R<sup>64</sup>、R<sup>65</sup>、およびR<sup>66</sup>は、互いに独立に、H、C<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシで置換されたC<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、または-O-で中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキルであり、または

R<sup>65</sup>およびR<sup>66</sup>は、一緒に5または6員環、特に、

【0106】

【化61】

10



, または

【0107】

を形成し、

R<sup>67</sup>およびR<sup>68</sup>は、互いに独立に、H、C<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキルまたはC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシで置換されたC<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、または-O-で中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキルであり、

R<sup>69</sup>は、H、C<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシで置換されたC<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、または-O-で中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキルであり、

R<sup>70</sup>およびR<sup>71</sup>は、互いに独立に、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール、またはC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキルで置換されたC<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリールであり、

R<sup>72</sup>は、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール、またはC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキルで置換されたC<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリールである。

【0108】

基Vの上記ユニットの中で、式Veのユニット、特にVa、Vb、Vmは、更に好ましい。

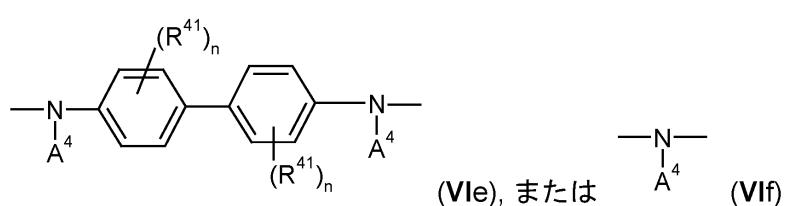
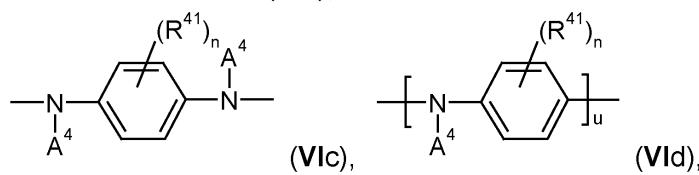
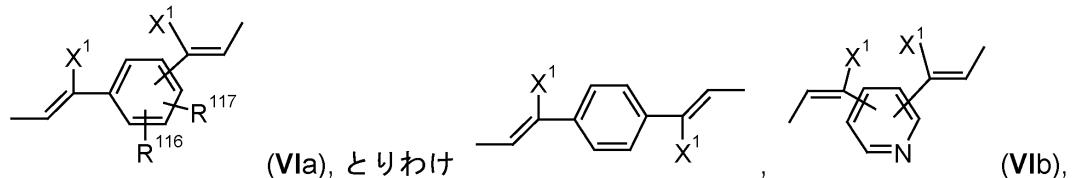
30

【0109】

繰り返しユニットTは、以下の基VI、

【0110】

【化62】



40

50

## 【0111】

から選択され、式中、

$X^1$  は、水素原子またはシアノ基であり、

$R^{116}$  および  $R^{117}$  は、上記定義したとおりであり、

$R^{41}$  は、各出現で同じであるかまたは異なることができ、C1、F、CN、N( $R^4$   
 $^5$ )<sub>2</sub>、C<sub>1</sub>~C<sub>25</sub>アルキル基、C<sub>4</sub>~C<sub>18</sub>シクロアルキル基、C<sub>1</sub>~C<sub>25</sub>アルコ  
 キシ基であり、互いに隣接しない1個以上の炭素原子は、-NR<sup>45</sup>-、-O-、-S-  
 、-C(=O)-O-、または-O-C(=O)-O-で置換することができ、および/  
 または1個以上の水素原子は、F、C<sub>6</sub>~C<sub>24</sub>アリール基、またはC<sub>6</sub>~C<sub>24</sub>アルコ  
 キシ基で置換することができ、1個以上の炭素原子は、O、S、またはNで置換する  
 ことができ、および/または1個以上の非芳香族基R<sup>41</sup>で置換することができ、または2個  
 以上の基R<sup>41</sup>は環系を形成し、

$R^{45}$  は、H、C<sub>1</sub>~C<sub>25</sub>アルキル基、C<sub>4</sub>~C<sub>18</sub>シクロアルキル基であり、互い  
 に隣接しない1個以上の炭素原子は、-NR<sup>45</sup>-、-O-、-S-、-C(=O)-  
 O-、または-O-C(=O)-O-で置換することができ、および/または1個以上の  
 水素原子は、F、C<sub>6</sub>~C<sub>24</sub>アリール基、またはC<sub>6</sub>~C<sub>24</sub>アルコキシ基で置換する  
 ことができ、1個以上の炭素原子は、O、S、またはNで置換することができ、および/  
 または1個以上の非芳香族基R<sup>41</sup>で置換することができ、

$R^{45'}$  は、H、C<sub>1</sub>~C<sub>25</sub>アルキル基、またはC<sub>4</sub>~C<sub>18</sub>シクロアルキル基であ  
 り、

nは、各出現で同じであるかまたは異なることができ、0、1、2、または3、特に0  
 、1、または2、更に特に0または1であり、uは1、2、3、または4であり、

A<sup>4</sup>は、C<sub>6</sub>~C<sub>24</sub>アリール基、C<sub>2</sub>~C<sub>30</sub>ヘテロアリール基、特にフェニル、ナ  
 フチル、アントリル、ビフェニル、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1個以上の非芳香族基R<sup>41</sup>で置換することができる。

## 【0112】

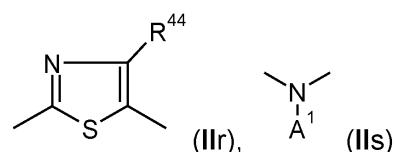
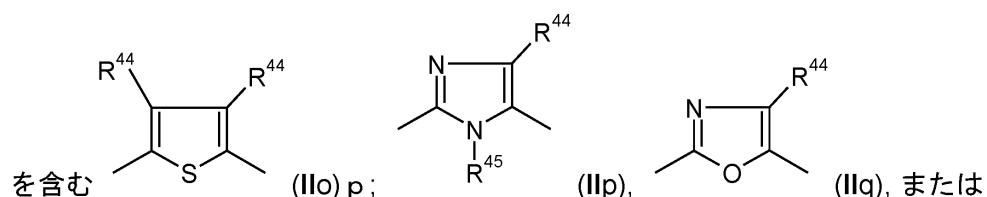
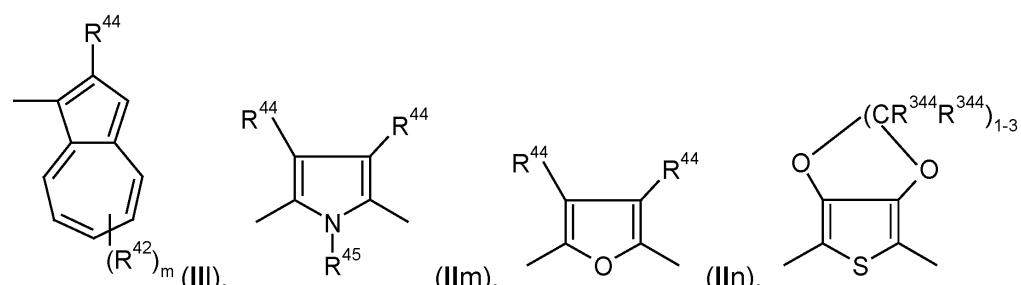
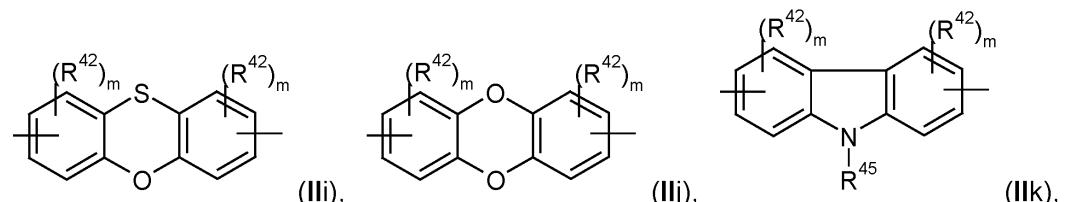
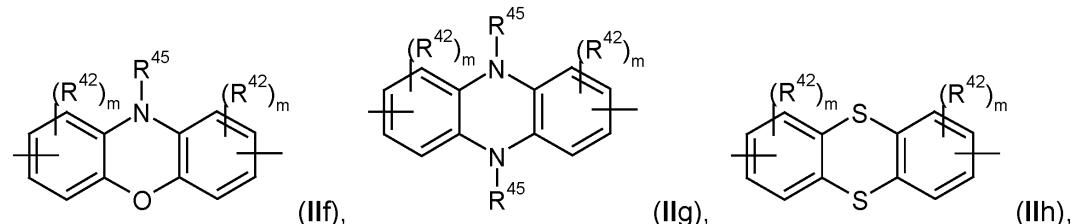
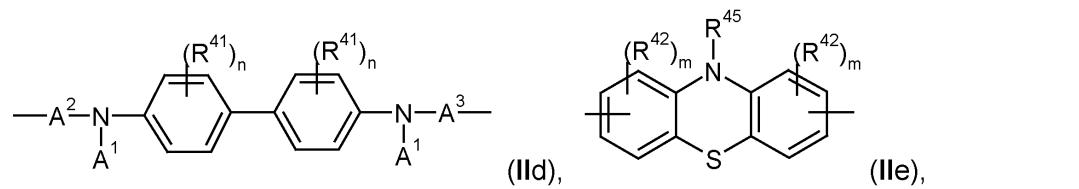
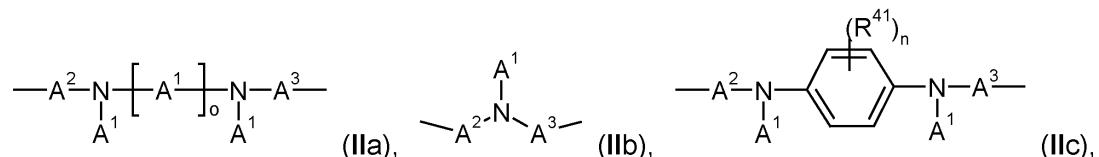
ポリマーのホール注入またはホール輸送特性を高める基IIの好ましいユニットは、

## 【0113】

10

20

## 【化 6 3】



## 【 0 1 1 4 】

であり、式中、

$R^{4-1}$  は、各出現で同じであるかまたは異なることができ、C<sub>1</sub>、F、CN、N( $R^{4-5}$ )<sub>2</sub>、C<sub>1</sub>~C<sub>2-5</sub>アルキル基、C<sub>4</sub>~C<sub>1-8</sub>シクロアルキル基、C<sub>1</sub>~C<sub>2-5</sub>アルコキシ基であり、互いに隣接しない1個以上の炭素原子は、-NR<sup>4-5</sup>-、-O-、-S-、-C(=O)-O-、または-O-C(=O)-O-で置換することができ、および/または1個以上の水素原子は、F、C<sub>6</sub>~C<sub>2-4</sub>アリール基、またはC<sub>6</sub>~C<sub>2-4</sub>アルコキシ基で置換することができ、1個以上の炭素原子は、O、S、またはNで置換することができ、および/または1個以上の非芳香族基R<sup>4-1</sup>で置換することができ、または2個以上の基R<sup>4-1</sup>は環系を形成し、

10

20

30

40

50

$R^{4-2}$  は、各出現で同じであるかまたは異なることができ、 $CN$ 、 $C_1 \sim C_{2-5}$  アルキル基、 $C_4 \sim C_{1-8}$  シクロアルキル基、 $C_1 \sim C_{2-5}$  アルコキシ基であり、互いに隣接しない1個以上の炭素原子は、 $-NR^{4-5}-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(=O)-O-$ 、または $-O-C(=O)-O-$  で置換することができ、および/または1個以上の水素原子は、 $F$ 、 $C_6 \sim C_{2-4}$  アリール基、または $C_6 \sim C_{2-4}$  アリールオキシ基で置換することができ、1個以上の炭素原子は、 $O$ 、 $S$ 、または $N$ で置換することができ、および/または1個以上の非芳香族基 $R^{4-1}$  で置換することができ、または2個以上の基 $R^{4-1}$  は環系を形成し、

$R^{3-4-4}$  は、各出現で同じであるかまたは異なることができ、水素原子、 $C_1 \sim C_{2-5}$  アルキル基、 $C_4 \sim C_{1-8}$  シクロアルキル基、 $C_1 \sim C_{2-5}$  アルコキシ基であり、

10

$R^{4-4}$  は、各出現で同じであるかまたは異なることができ、水素原子、 $C_1 \sim C_{2-5}$  アルキル基、 $C_4 \sim C_{1-8}$  シクロアルキル基、 $C_1 \sim C_{2-5}$  アルコキシ基であり、互いに隣接しない1個以上の炭素原子は、 $-NR^{4-5}-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(=O)-O-$ 、または $-O-C(=O)-O-$  で置換することができ、および/または1個以上の水素原子は、 $F$ 、 $C_6 \sim C_{2-4}$  アリール基、または $C_6 \sim C_{2-4}$  アリールオキシ基で置換することができ、1個以上の炭素原子は、 $O$ 、 $S$ 、または $N$ で置換することができ、および/または1個以上の非芳香族基 $R^{4-1}$ 、または $CN$ で置換することができ、または、互いに隣接する2個以上の基 $R^{4-4}$  は、環を形成し、

$R^{4-5}$  は、 $H$ 、 $C_1 \sim C_{2-5}$  アルキル基、 $C_4 \sim C_{1-8}$  シクロアルキル基であり、互いに隣接しない1個以上の炭素原子は、 $-NR^{4-5}-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(=O)-O-$ 、または $-O-C(=O)-O-$  で置換することができ、および/または1個以上の水素原子は、 $F$ 、 $C_6 \sim C_{2-4}$  アリール基、または $C_6 \sim C_{2-4}$  アリールオキシ基で置換することができ、1個以上の炭素原子は、 $O$ 、 $S$ 、または $N$ で置換することができ、および/または1個以上の非芳香族基 $R^{4-1}$  で置換することができ、

20

$m$  は、各出現で同じであるかまたは異なることができ、0、1、2、または3、特に0、1、または2、更に特に0または1であり、

$n$  は、各出現で同じであるかまたは異なることができ、0、1、2、または3、特に0、1、または2、更に特に0または1であり、

$o$  は、1、2、または3、特に1または2であり、

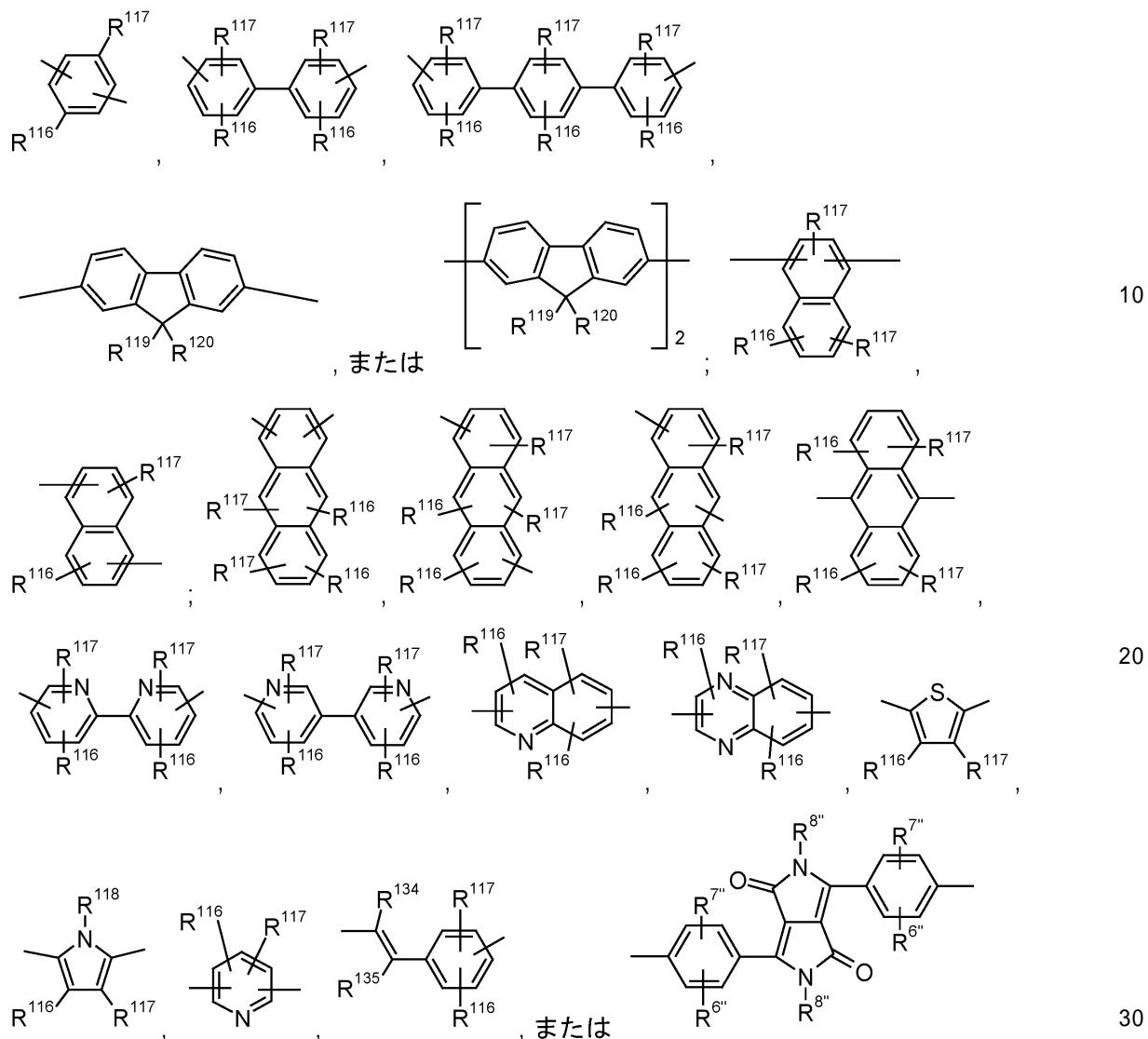
$A^1$  は、 $C_6 \sim C_{2-4}$  アリール基、 $C_2 \sim C_{3-0}$  ヘテロアリール基であり、これは1個以上の非芳香族基 $R^{4-1}$ 、または $NO_2$ 、特にフェニル、ナフチル、アントリル、ビフェニリル、2-フルオレニル、フェナントリル、またはペリレニルで置換することができ、

30

$A^2$  および $A^3$  は、互いに独立に、 $C_6 \sim C_{3-0}$  アリーレン基または $C_2 \sim C_{2-4}$  ヘテロアリーレン基であり、これは、特に、

【0115】

## 【化 6 4】



## 【0 1 1 6】

で任意選択的に置換することができ、式中、R<sup>1 1 6</sup>、R<sup>1 1 7</sup>、R<sup>1 1 9</sup>、R<sup>1 2 0</sup>は、上記で定義したとおりであり、

R<sup>6"</sup>およびR<sup>7"</sup>は、互いに独立にR<sup>1 1 6</sup>の意味を有し、

R<sup>1 1 8</sup>およびR<sup>8"</sup>は、H、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>6</sub>～C<sub>24</sub>アリール、C<sub>7</sub>～C<sub>25</sub>アラルキルであり、これは、任意選択的にGで置換され、

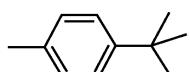
R<sup>1 3 4</sup>およびR<sup>1 3 5</sup>は、互いに独立に、H、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>6</sub>～C<sub>24</sub>アリール、Eで置換されたC<sub>6</sub>～C<sub>24</sub>アリール、またはC<sub>2</sub>～C<sub>20</sub>ヘテロアリール、Eで置換されたC<sub>2</sub>～C<sub>20</sub>ヘテロアリールであり、D、E、およびGは、上記で定義したとおりである。基IIの上記ユニットの中で、式IIa、IIb、およびIIkは、更に好ましい。

## 【0 1 1 7】

A<sup>1</sup>は、C<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルで置換されたフェニル基、特に、

## 【0 1 1 8】

## 【化 6 5】



## 【0119】

またはアントリル基、特にアントリル-2-イル基であるのが好ましい。

## 【0120】

$R^{1\sim 6}$  および  $R^{1\sim 7}$  は、互いに独立に、H、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-ヘプチルなどのC<sub>1</sub>~C<sub>18</sub>アルキルであり、-CH<sub>2</sub>OCH<sub>3</sub>、-CH<sub>2</sub>OCH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>、-CH<sub>2</sub>OCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>OCH<sub>3</sub>、または-CH<sub>2</sub>OCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>OCH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>など、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>~C<sub>18</sub>アルキル、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、イソブトキシ、sec-ブトキシ、t-ブトキシ、2-メチルブトキシ、n-ペンチロキシ、イソペンチロキシ、n-ヘキシロキシ、2-エチルヘキシロキシ、またはn-ヘプチロキシなどのC<sub>1</sub>~C<sub>18</sub>アルコキシ、フェニル、ナフチル、またはビフェニリルなどのC<sub>6</sub>~C<sub>14</sub>アリール、シクロヘキシルなどのC<sub>5</sub>~C<sub>12</sub>シクロアルキル、-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>OCH<sub>3</sub>、-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>OCH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>、-C<sub>6</sub>H<sub>3</sub>(OCH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>、または-C<sub>6</sub>H<sub>3</sub>(OCH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>、-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>CH<sub>3</sub>、-C<sub>6</sub>H<sub>3</sub>(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>、-C<sub>6</sub>H<sub>2</sub>(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>、-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>OtBu、または-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>ttBuなど、Gで置換されたC<sub>6</sub>~C<sub>14</sub>アリールであるのが好ましい。  
10

## 【0121】

$R^{1\sim 8}$  は、H、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-ヘプチルなどのC<sub>1</sub>~C<sub>18</sub>アルキル、またはフェニル、ナフチル、またはビフェニリルなどのC<sub>6</sub>~C<sub>14</sub>アリールであるのが好ましい。  
20

## 【0122】

$R^{1\sim 9}$  および  $R^{1\sim 0}$  は、好ましくは、互いに独立に、H、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-エチルヘキシルなどのC<sub>1</sub>~C<sub>12</sub>アルキル、または、-CH<sub>2</sub>(OCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>)<sub>w</sub>OCH<sub>3</sub>など、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>~C<sub>12</sub>アルキルであり、w=1、2、3、または4であり、フェニル、ナフチル、またはビフェニリルなどのC<sub>6</sub>~C<sub>14</sub>アリール、C<sub>1</sub>~C<sub>12</sub>アルキルまたはC<sub>1</sub>~C<sub>12</sub>アルコキシで1回または3回置換されたC<sub>6</sub>~C<sub>14</sub>アリールであり、これは、-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>OCH<sub>3</sub>、-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>OCH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>、-C<sub>6</sub>H<sub>3</sub>(OCH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>、-C<sub>6</sub>H<sub>3</sub>(OCH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>、-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>CH<sub>3</sub>、-C<sub>6</sub>H<sub>3</sub>(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>、-C<sub>6</sub>H<sub>2</sub>(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>、または-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>ttBuなど、任意選択的に-O-で中断することができ、またはR<sup>1~9</sup>およびR<sup>1~0</sup>は、一緒に4~8員環、特にシクロヘキシル、またはシクロペンチルなどの5または6員環を形成し、これは、C<sub>1</sub>~C<sub>8</sub>アルキルで任意選択的に置換することができる。  
30

## 【0123】

$R_{1\sim 4}$  および  $R_{1\sim 5}$  は、互いに独立に、H、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、またはsec-ブチルなどのC<sub>1</sub>~C<sub>12</sub>アルキル、またはフェニル、ナフチル、またはビフェニリルなどのC<sub>6</sub>~C<sub>14</sub>アリールであるのが好ましい。  
40

## 【0124】

Dは、-CO-、-COO-、-S-、-SO-、-SO<sub>2</sub>-、-O-、-NR<sup>6~5</sup>-であるのが好ましく、R<sup>6~5</sup>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、またはsec-ブチルなどのC<sub>1</sub>~C<sub>12</sub>アルキルであり、またはフェニル、ナフチル、またはビフェニリルなどのC<sub>6</sub>~C<sub>14</sub>アリールである。

## 【0125】

Eは、-OR<sup>6~9</sup>、-SR<sup>6~9</sup>、-NR<sup>6~5</sup>R<sup>6~5</sup>、-COR<sup>6~8</sup>、-COOR<sup>6~7</sup>、-CONR<sup>6~5</sup>R<sup>6~5</sup>、またはCNであるのが好ましく、式中、R<sup>6~5</sup>、R<sup>6~7</sup>、R<sup>6~8</sup>、およびR<sup>6~9</sup>は、互いに独立に、メチル、エチル、n-プロピル、イソプロピル、n-  
50

ブチル、イソブチル、sec-ブチル、ヘキシル、オクチル、または2-エチルヘキシルなどのC<sub>1</sub> ~ C<sub>12</sub>アルキル、または、フェニル、ナフチル、またはビフェニリルなどのC<sub>6</sub> ~ C<sub>14</sub>アリールである。

## 【0126】

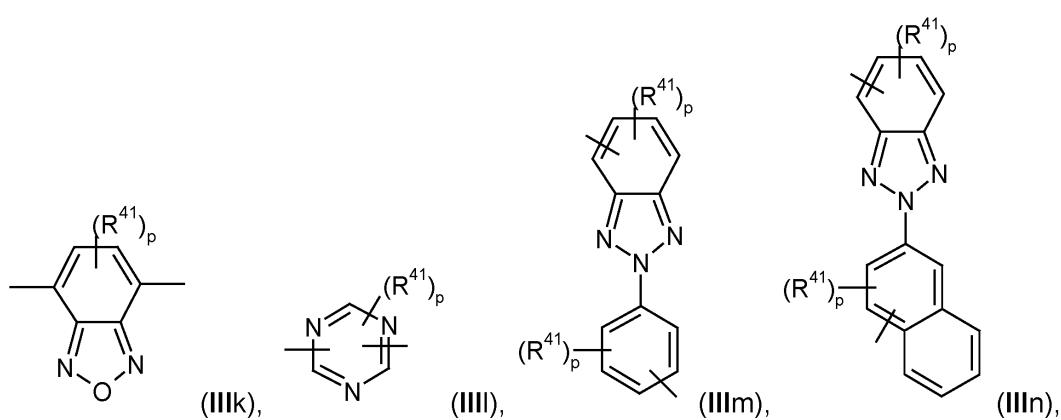
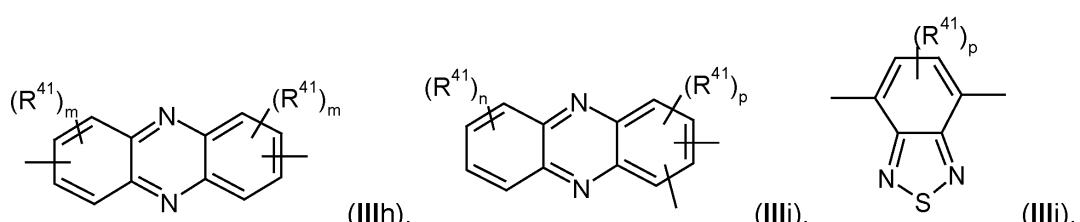
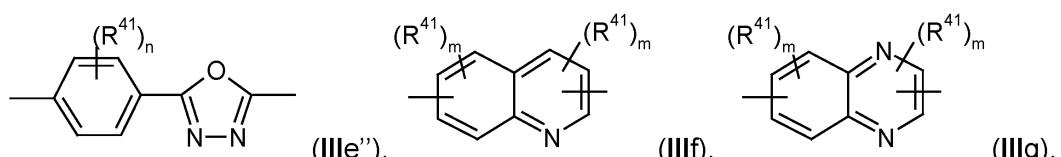
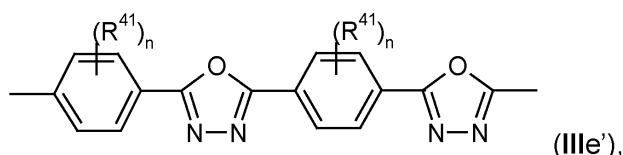
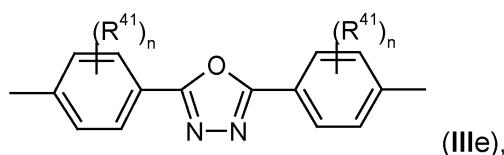
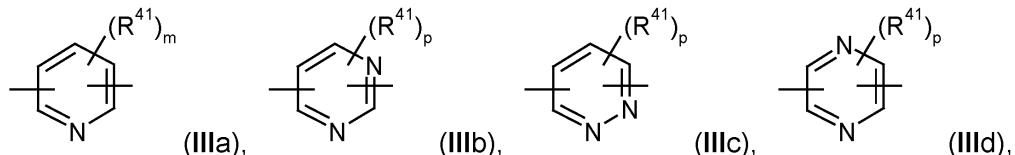
Gは、Eと同じ選択肢、またはC<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub>アルキル、特に、メチル、エチル、n-ブロピル、イソブロピル、n-ブチル、イソブチル、sec-ブチル、ヘキシル、オクチル、または2-エチルヘキシルなどのC<sub>1</sub> ~ C<sub>12</sub>アルキルである。

## 【0127】

ポリマーの電子注入または電子輸送特性を高める基IIIの好ましいユニットは、

## 【0128】

## 【化66】

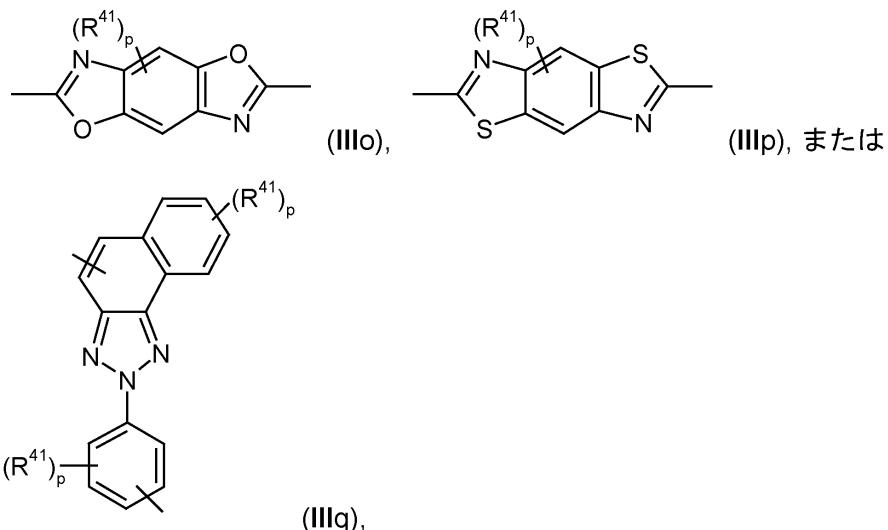


10

20

30

40



10

## 【0129】

であり、式中、 $R^{41}$ 、ならびにmおよびnは、上記で定義したとおりであり、pは、0、1、または2、特に0または1である。基I I Iの上記ユニット中、式I I I e、I I I j、およびI I I kは、更に好ましい。

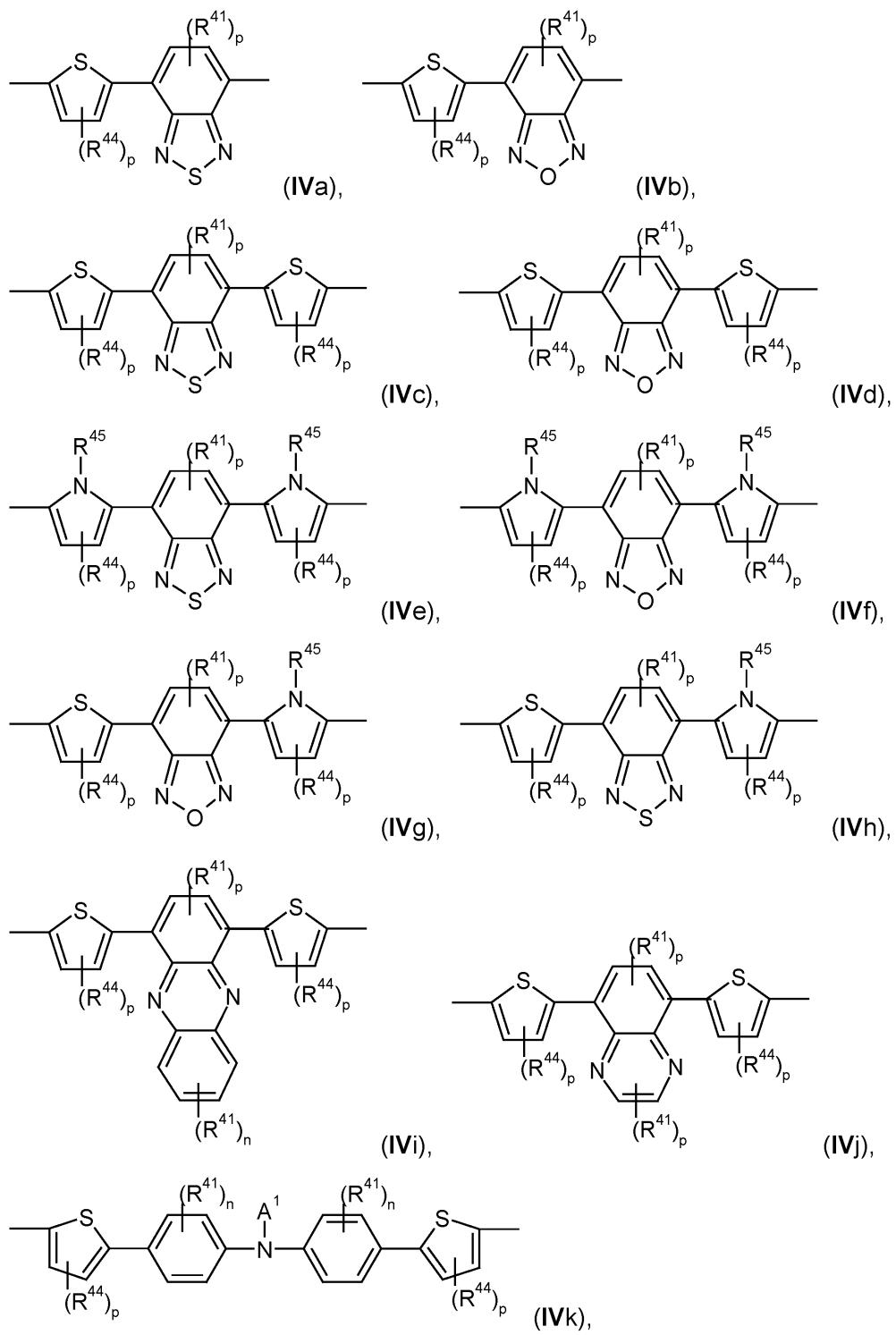
## 【0130】

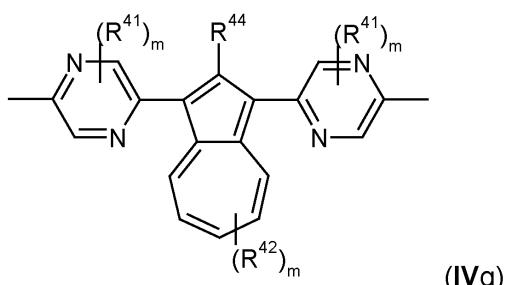
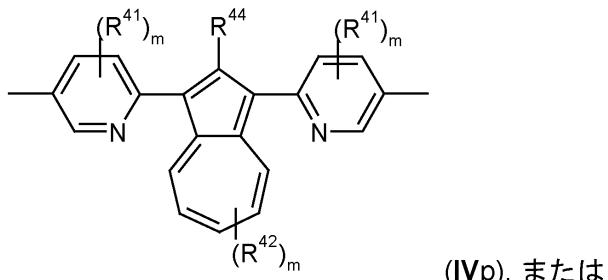
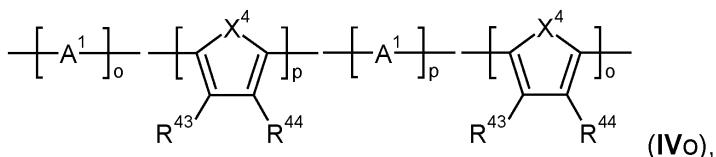
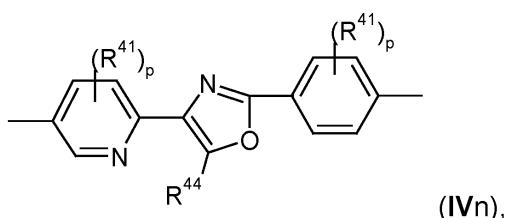
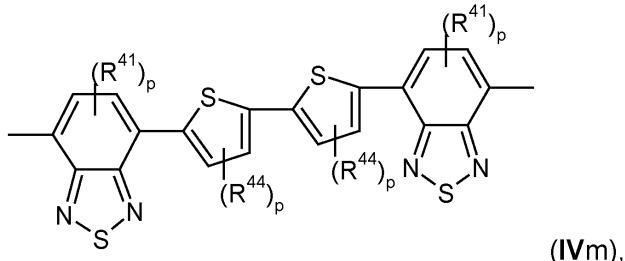
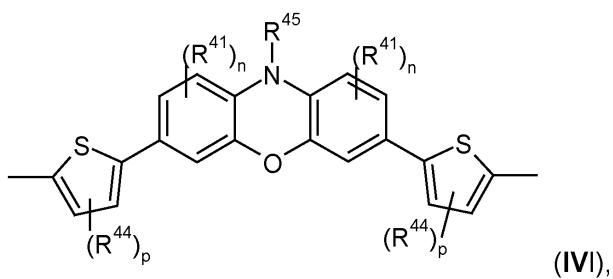
20

式I IとI I Iのユニットの組み合わせである基I Vの好ましいユニットは、

## 【0131】

【化 6 7】





【 0 1 3 2 】

であり、式中、

X<sup>4</sup> は、O、S、またはN R<sup>4~5</sup> であり、

R<sup>4~3</sup> は、水素原子、C<sub>1</sub> ~ C<sub>2~5</sub> アルキル基、C<sub>4</sub> ~ C<sub>1~8</sub> シクロアルキル基、C<sub>1</sub> ~ C<sub>2~5</sub> アルコキシ基であり、互いに隣接しない1個以上の炭素原子は、- N R<sup>4~5</sup> -、- O -、- S -、- C (= O) - O -、または- O - C (= O) - O - で置換することができ、および/または1個以上の水素原子は、F、C<sub>6</sub> ~ C<sub>2~4</sub> アリール基、またはC<sub>6</sub> ~ C<sub>2~4</sub> アルコキシ基で置換することができ、1個以上の炭素原子は、O、S、またはNで置換することができ、および/または1個以上の非芳香族基R<sup>4~1</sup> またはCNで置換す

10

20

30

40

50

ることができ、または、

互いに隣接する 2 個以上の基  $R^{4-3}$  および / または  $R^{4-4}$  は、環を形成し、  
o は、1、2、または 3、特に 1 または 2 であり、u は、1、2、3、または 4 あり  
、  
 $A^1$ 、 $R^{4-1}$ 、 $R^{4-2}$ 、 $R^{4-5}$ 、m、n、および p は、上記で定義したとおりである。

#### 【0133】

式 II ~ V の繰り返しユニットの存在は以下の利点をもたらすことができる。

#### 【0134】

基 II の構造、例えば、式 II a ~ II r の繰り返しユニットが存在するならば、ポリマーのホール注入および / またはホール輸送特性の向上を観察することができる。 PLE 10 D に用いられる場合、PLED は、所与の電圧でより高い電流密度とエレクトロルミネンスを示す。この特性は、電力消費を低減することができるとき、例えば、携帯電話および PDA などの携帯用途に非常に重要である。

#### 【0135】

基 III の構造、例えば、式 III I a ~ III I k の繰り返しユニットが存在するならば、ポリマーの電子注入または電子輸送特性の向上を観察することができる。基 IV の構造、例えば、式 IV a ~ IV p の繰り返しユニットの存在は、電子バンドギャップの変化を可能にし、したがって、色特性の変化を可能にする。

#### 【0136】

基 II、III、IV、および V のユニットが誘導されるモノマーの調製は、例えば、国際公開公報第 03/020790 号に記載される。 20

#### 【0137】

一実施態様において、本発明によるポリマーは、1種以上の式 I の繰り返しユニットのみから成る。好ましい実施態様において、本発明によるポリマーは、正確に 1 種の式 I の繰り返しユニットから成る（ホモポリマー）。

#### 【0138】

本発明によれば、用語「ポリマー」は、ポリマーならびにオリゴマーを含み、ポリマーは、相対分子質量の高い分子であり、その構造は、本質的に低い相対分子質量の分子から実際にまたは概念的に誘導されたユニットの繰り返しを含み、オリゴマーは、中間分子質量の分子であり、その構造は、本質的に低い相対分子質量の分子から実際にまたは概念的に誘導された小さな複数のユニットを含む。分子は、それが 1 個または小数のユニットを除去した際に特性が大きく変化しないならば、高い相対分子質量を有するものと考えられる。分子は、それが 1 個または小数のユニットを除去した際に特性が大きく変化するならば、中間の分子質量を有するものと考えられる。 30

#### 【0139】

本発明によれば、ホモポリマーは、1種類の（実際の、潜在的な、仮想的な）モノマーから誘導されたポリマーである。多くのポリマーは、補完モノマーの相互反応によって作られる。これらのモノマーは、「潜在的なモノマー」を与える反応として容易に可視化することができ、そのホモポリメリゼーションは、実際の生成品を与え、それは、ホモポリマーと考えることができる。いくつかのポリマーは、他のポリマーの化学的修飾によって得られ、得られるポリマーを構成するマクロ分子の構造は、仮想的モノマーのホモポリメリゼーションによって形成されたと考えることができる。 40

#### 【0140】

したがって、コポリマーは、例えば、二元ポリマー、三元ポリマー、四元ポリマーなど 1 種類以上のモノマーから誘導されたポリマーである。

#### 【0141】

本発明のオリゴマーは、<2,000 ダルトンの重量平均分子量を有する。本発明のポリマーは、2,000 ダルトン以上、特に 2,000 ~ 2,000,000 ダルトンの重量平均分子量を有することが好ましく、10,000 ~ 1,000,000 ダルトンが更に好ましく、20,000 ~ 750,000 ダルトンの重量平均分子量を有するのが最も 50

好ましい。分子量は、ポリスチレン標準を用いるゲル浸透クロマトグラフィに従って求められる。

【0142】

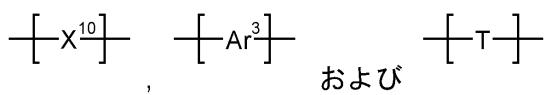
本発明の一態様において、式Iの繰り返しユニット以外に、同時に、基II～VIから選択される少なくとも1種の追加の繰り返しユニットAr<sup>3</sup>またはTを有するのが好ましい。上記態様において、本発明によるポリマーは、式Iの繰り返しユニット1～99モル%、および好ましくは基II～VIの繰り返しユニット5～95モル%、更に好ましくは基II～VIの繰り返しユニット10～90モル%、最も好ましくは基II～VIの繰り返しユニット25～75モル%とを含む。本発明の上記態様において、式Iの繰り返しユニット以外に、同時に、少なくとも2種の異なる基II～VIから選択される少なくとも2種の追加の繰り返しユニットAr<sup>3</sup>またはTを有するポリマーが好ましい。基II～VIおよびVII、IVおよびVI、またはIIおよびIIIおよびVIの繰り返しユニットが同時に存在するのが最も好ましい。

【0143】

したがって、本発明の好ましい一実施態様において、本発明は、式、

【0144】

【化68】



10

20

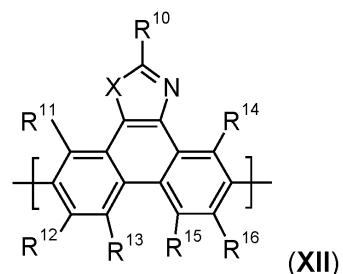
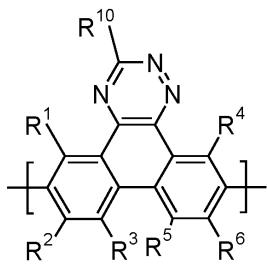
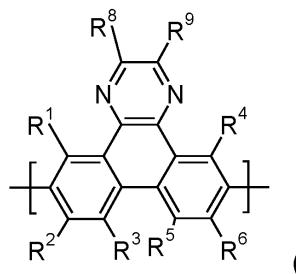
【0145】

の繰り返しユニットを含むポリマーに関し、式中、

X<sup>10</sup>は、式Iの繰り返しユニット、特に、

【0146】

【化69】



30

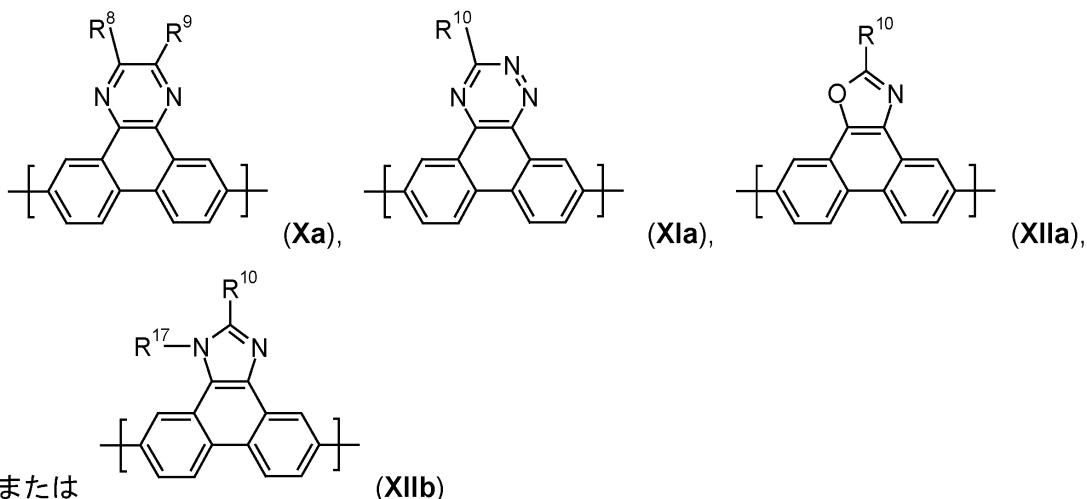
【0147】

であり、式中、

X、R<sup>1</sup>、R<sup>2</sup>、R<sup>3</sup>、R<sup>4</sup>、R<sup>5</sup>、R<sup>6</sup>、R<sup>8</sup>、R<sup>9</sup>、R<sup>10</sup>、R<sup>11</sup>、R<sup>12</sup>、R<sup>13</sup>、R<sup>14</sup>、R<sup>15</sup>、R<sup>16</sup>、R<sup>1</sup><sub>3</sub>、R<sup>1</sup><sub>4</sub>、R<sup>1</sup><sub>5</sub>、およびR<sup>1</sup><sub>6</sub>は、上記で定義したとおりであり、非常に特に、

【0148】

## 【化70】



## 【0149】

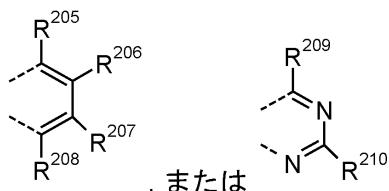
であり、式中、

R<sup>8</sup> および R<sup>9</sup> は、互いに独立に、H、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルキル、Dで中断されたC<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> ペルフルオロアルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルコキシ、Dで中断されたC<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルコキシ、または基-X<sup>2</sup>-R<sup>18</sup> であり、

R<sup>8</sup> および R<sup>9</sup> は、一緒に基、

## 【0150】

## 【化71】



## 【0151】

を形成し、式中、

R<sup>205</sup>、R<sup>206</sup>、R<sup>207</sup>、R<sup>208</sup>、R<sup>209</sup>、およびR<sup>210</sup> は、互いに独立に、H、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルコキシ、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルコキシ、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> ペルフルオロアルキルであり、

R<sup>10</sup> は、H、Gで置換されていてもよいC<sub>6</sub> ~ C<sub>18</sub> アリール、Gで置換されていてもよいC<sub>2</sub> ~ C<sub>18</sub> ヘテロアリール、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルキル、Dで中断されたC<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> ペルフルオロアルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルコキシ、Eで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルコキシ、または基-X<sup>2</sup>-R<sup>18</sup> であり、式中、X<sup>2</sup> は、C<sub>6</sub> ~ C<sub>12</sub> アリール、C<sub>6</sub> ~ C<sub>12</sub> ヘテロアリール、特にフェニル、またはナフチルなどのスペーサーであり、これはC<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルキル、Dで中断されたC<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> ペルフルオロアルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルコキシ、またはEで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルコキシで1回以上、特に1 ~ 2回置換することができ、

R<sup>17</sup> は、C<sub>6</sub> ~ C<sub>18</sub> アリール、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> ペルフルオロアルキル、またはC<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルコキシで置換されたC<sub>6</sub> ~ C<sub>18</sub> アリール、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルキル、または-O-で中断されたC<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルキルであり、

R<sup>18</sup> は、H、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルキル、Dで中断されたC<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> ペルフルオロアルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルコキシ、Dで中断されたC<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub> アルコキシである。

10

20

30

40

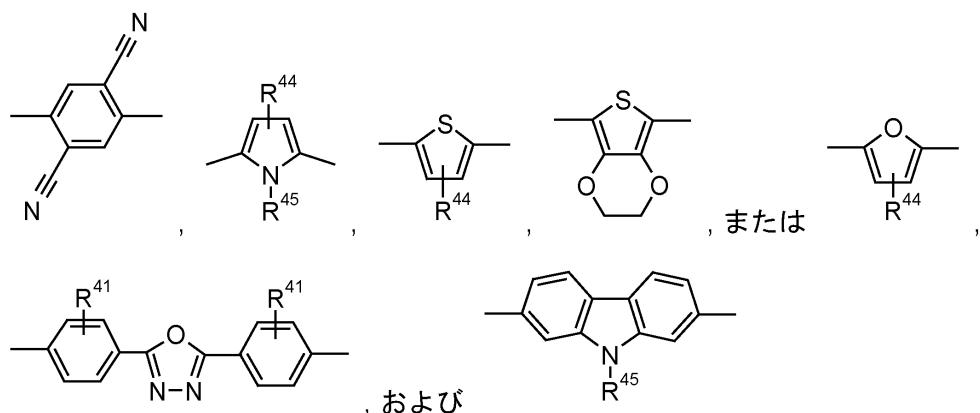
50

## 【0152】

上記実施態様において、Tは、式V I aまたはV I bの繰り返しユニットであるのが好ましく、A r<sup>3</sup>は、式、

## 【0153】

## 【化72】



10

## 【0154】

の繰り返しユニットから選択されるのが好ましく、式中、

R<sup>4-4</sup>およびR<sup>4-1</sup>は、水素、C<sub>1</sub>～C<sub>1-8</sub>アルキル、またはC<sub>1</sub>～C<sub>1-8</sub>アルコキシであり、

20

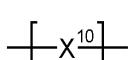
R<sup>4-5</sup>は、H、C<sub>1</sub>～C<sub>1-8</sub>アルキル、またはEで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>1-8</sub>アルキル、特に-O-で中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>1-8</sub>アルキルであり、DおよびEは上記で定義したとおりである。

## 【0155】

本発明の上記実施態様において、式、

## 【0156】

## 【化73】



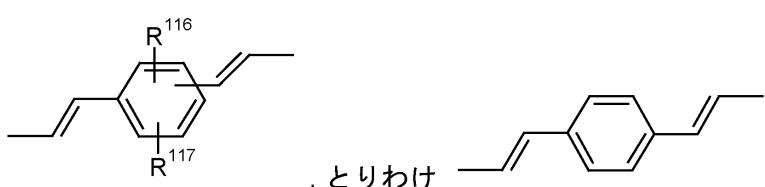
30

## 【0157】

の繰り返しユニット、式、

## 【0158】

## 【化74】



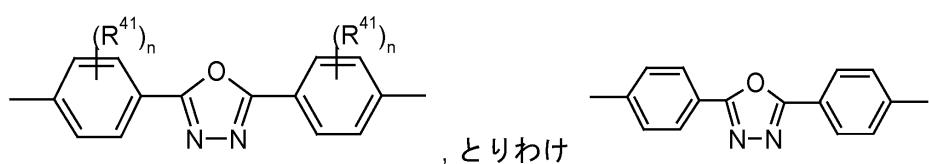
40

## 【0159】

の繰り返しユニット、および式、

## 【0160】

## 【化75】



50

## 【0161】

の繰り返しユニットを含むターポリマーが最も好ましく、式中、

$X^{10}$  は、式Iの繰り返しユニット、特にX、XI、およびXII、更に特別にXa、XIa、XIa、およびXIIbの繰り返しユニットである。

## 【0162】

$R^{116}$  および  $R^{117}$  は、上記で定義したとおりであり、好ましくは、H、ハロゲン、CN、C<sub>1</sub>～C<sub>12</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>12</sub>アルコキシ、またはC<sub>6</sub>～C<sub>14</sub>アリールであり、更に好ましくは、H、C<sub>1</sub>～C<sub>12</sub>アルキル、またはC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシであり、

$R^{41}$  は、Cl、F、CN、N(R<sup>45</sup>)<sub>2</sub>、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、またはC<sub>6</sub>～C<sub>14</sub>アリールであり、  
10

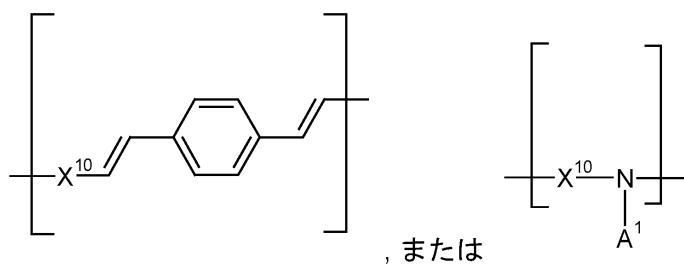
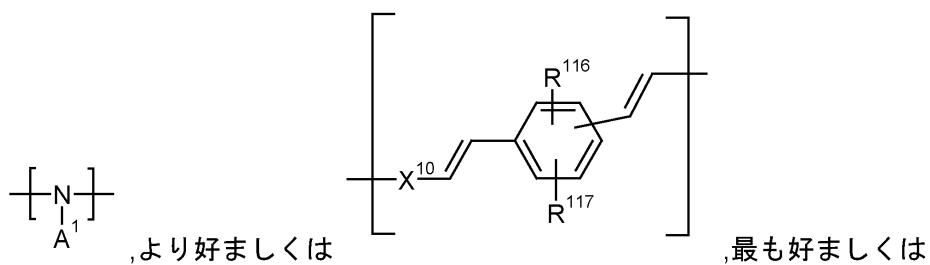
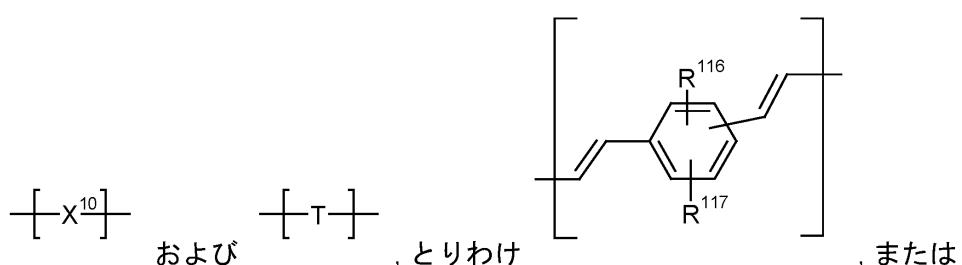
nは、0、1、または2である。

## 【0163】

他の好ましい実施態様において、本発明は、式、

## 【0164】

## 【化76】



## 【0165】

の繰り返しユニットを含むポリマーに関し、式中、

$X^{10}$  は、式Iの繰り返しユニット、特にX、XI、およびXII、更に特別にXa、XIa、XIa、およびXIIbの繰り返しユニットである。

## 【0166】

$R^{116}$  および  $R^{117}$  は、上記で定義したとおりであり、特に、H、ハロゲン、CN、C<sub>1</sub>～C<sub>12</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>12</sub>アルコキシ、またはC<sub>6</sub>～C<sub>14</sub>アリールであり、

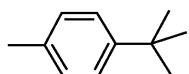
$A^1$  は、C<sub>6</sub>～C<sub>24</sub>アリール基、1個以上の非芳香族基R<sup>41</sup>で置換されていてもよいC<sub>2</sub>～C<sub>30</sub>ヘテロアリール基、好ましくはC<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキルで置換されたフェニル基、特に、

40

50

【0167】

【化77】



【0168】

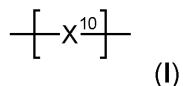
またはアントリル基、特にアントリ - 2 - イル基である。

【0169】

他の好ましい実施態様において、ポリマーは、式、

【0170】

【化78】

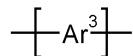


【0171】

の繰り返しユニット( I )、および

【0172】

【化79】



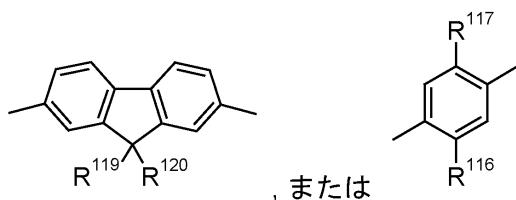
【0173】

の繰り返しユニットを含み、式中、

$X^{10}$  は、式 I の繰り返しユニット、特に X、XI、および XII ( XVII、XVIII )、および XVIIII )、更に特別に Xa、XIa、XIIa、および XIIb ( XVIIa、XVIIIA、XVIIIIa、および XVIIIIb ) の繰り返しユニットであり、  
- Ar<sup>3</sup> - は、式、

【0174】

【化80】



【0175】

の基であり、式中、

$R^{111-116}$  および  $R^{117-120}$  は、互いに独立に、H、任意選択的にOで中断することのできるC<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub>アルキル、または任意選択的にOで中断することのできるC<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub>アルコキシであり、

$R^{111-119}$  および  $R^{120-120}$  は、互いに独立に、H、任意選択的にOで中断することのできるC<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub>アルキルであり、

$R^{111-119}$  および  $R^{120-120}$  は、一緒に式 = CR<sup>100</sup>R<sup>101</sup> を形成し、式中、

$R^{100}$  および  $R^{101}$  は、互いに独立に、H、C<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub>アルキルであり、または

、  
 $R^{111-119}$  および  $R^{120-120}$  は、一緒に 5 または 6 員環を形成し、これは任意選択的にC<sub>1</sub> ~ C<sub>18</sub>アルキルで置換することができる。

【0176】

本発明は、以下の特に好ましい実施態様を基に更に詳細に示されるが、それに制限されるものではない。

【0177】

10

20

30

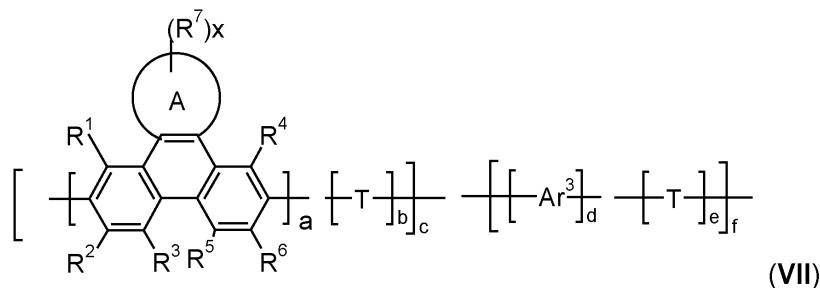
40

50

上記実施態様において、ポリマーは、式、

【0178】

【化81】



【0179】

のポリマーであり、式中、

A、R<sup>1</sup>、R<sup>2</sup>、R<sup>3</sup>、R<sup>4</sup>、R<sup>5</sup>、R<sup>6</sup>、R<sup>7</sup>、および×は、上記で定義したとおりであり、TおよびAr<sup>3</sup>は、上記で定義されたとおりであり、

aは、1であり、

bは、0、または1であり、

cは、0.005~1であり、

dは、0、または1であり、

eは、0、または1であり、dが0である場合にeは1ではなく、

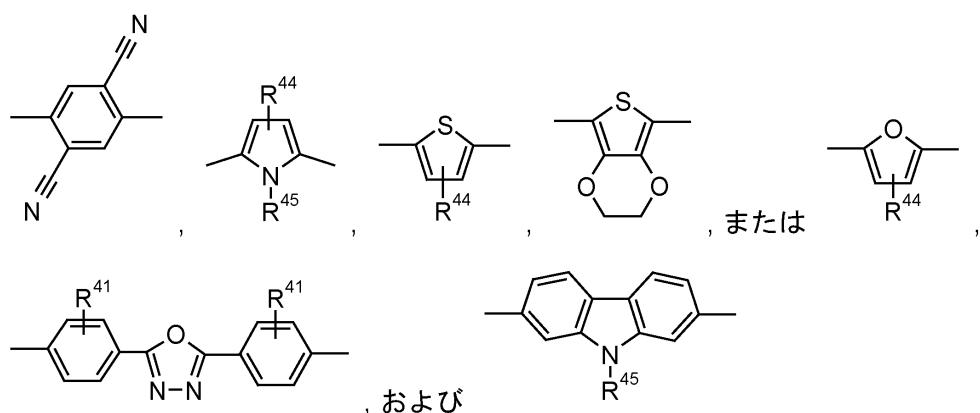
fは、0.995~0であり、cとfの和は1である。

【0180】

Tは、式VIa、VIb、またはVI fの繰り返しユニットであるのが好ましく、Ar<sup>3</sup>は、式、

【0181】

【化82】



【0182】

の繰り返しユニットから選択されるのが好ましく、式中、

R<sup>4-4</sup>およびR<sup>4-1</sup>はハロゲン、C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub>アルキル、またはC<sub>1</sub>~C<sub>18</sub>アルコキシであり、

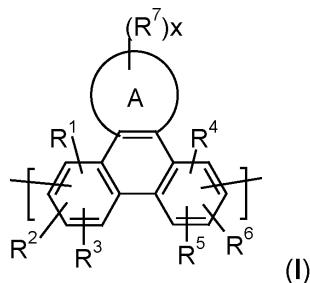
R<sup>4-5</sup>は、H、C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub>アルキル、またはEで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>~C<sub>18</sub>アルキル、特に、-O-で中断されたC<sub>1</sub>~C<sub>18</sub>アルキルであり、DおよびEは、上記で定義したとおりである。

【0183】

a=1、b=0、c=1、d=0、e=0、f=0である式VIのホモポリマーは、例えば、ニッケル結合反応、特に、

【0184】

## 【化 8 3】



## 【0185】

10

の Yamamoto 反応によって得られ、式中、

A、R<sup>1</sup>、R<sup>2</sup>、R<sup>3</sup>、R<sup>4</sup>、R<sup>5</sup>、R<sup>6</sup>、R<sup>7</sup>、およびxは、上記で定義したとおりである。

## 【0186】

前記態様において、式X、XI、またはXIIの繰り返しユニットからなるホモポリマーが好ましく、式Xa、XIa、XIJa、およびXIIbの繰り返しユニットからなるホモポリマーが最も好ましい。

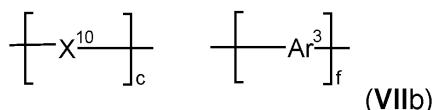
## 【0187】

式Iと-Ar<sup>3</sup>- (a = 1、c = 0.995 ~ 0.005、b = 0、d = 1、e = 0、f = 0.005 ~ 0.995) の繰り返しユニットを包含する式XIのコポリマーは、ニッケル結合反応によって得ることができ、

20

## 【0188】

## 【化 8 4】



## 【0189】

式中、X<sup>10</sup>、c、f、およびAr<sup>3</sup>は、上記で定義したとおりである。

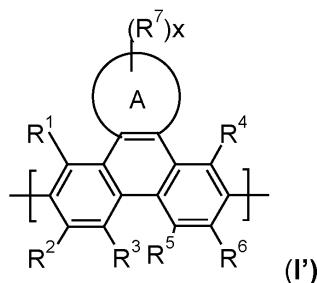
## 【0190】

30

特に好ましい実施態様において、本発明は、式、

## 【0191】

## 【化 8 5】



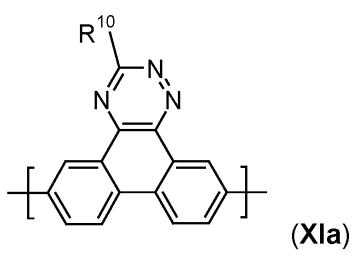
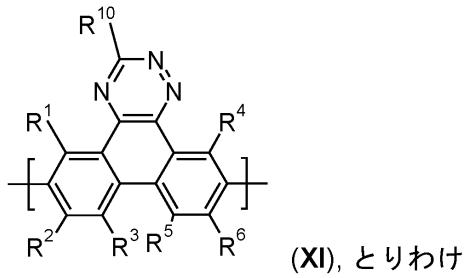
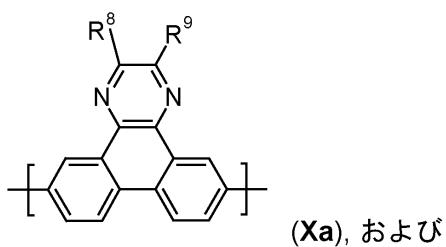
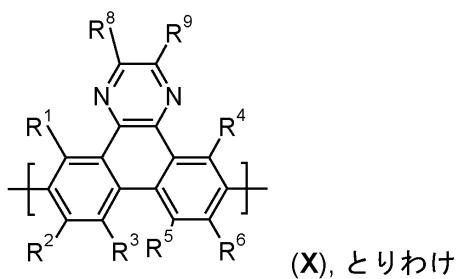
40

## 【0192】

の少なくとも2種の異なる繰り返しユニットを含有するコポリマーに関する。前記実施態様において、Aが5員ヘテロ芳香族環である少なくとも1種の式I'の繰り返しユニットおよびAが6員ヘテロ芳香族環である少なくとも1種の式I''の繰り返しユニットを含むコポリマーが更に好ましい。6員ヘテロ芳香族環を含む繰り返しユニットの適切な例は、式、

## 【0193】

【化86】



10

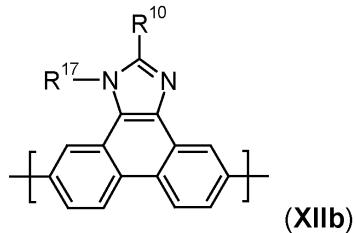
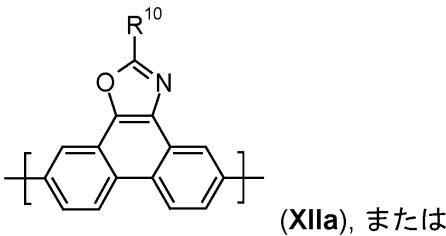
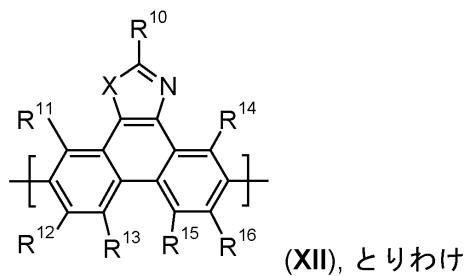
【0194】

の化合物であり、5員ヘテロ芳香族環を含む繰り返しユニットの適切な例は、式、

【0195】

【化87】

20



30

【0196】

の化合物であり、式中、

R<sup>1</sup>、R<sup>2</sup>、R<sup>3</sup>、R<sup>4</sup>、R<sup>5</sup>、R<sup>6</sup>、R<sup>8</sup>、R<sup>9</sup>、R<sup>10</sup>、R<sup>11</sup>、R<sup>12</sup>、R<sup>13</sup>、R<sup>14</sup>、R<sup>15</sup>、R<sup>16</sup>、R<sup>17</sup>は、上記で定義したとおりである。本発明の前記態様において、式XaおよびXIaならびに/またはXIIa(XaおよびXIa、XaおよびXIa、XaおよびXIIa、XaおよびXIIb)、またはXIaおよびXIIa(XIaおよびXIIa、XIaおよびXIIa、XIaおよびXIIb)の繰り返しユニットを含むコポリマーが最も好ましい。

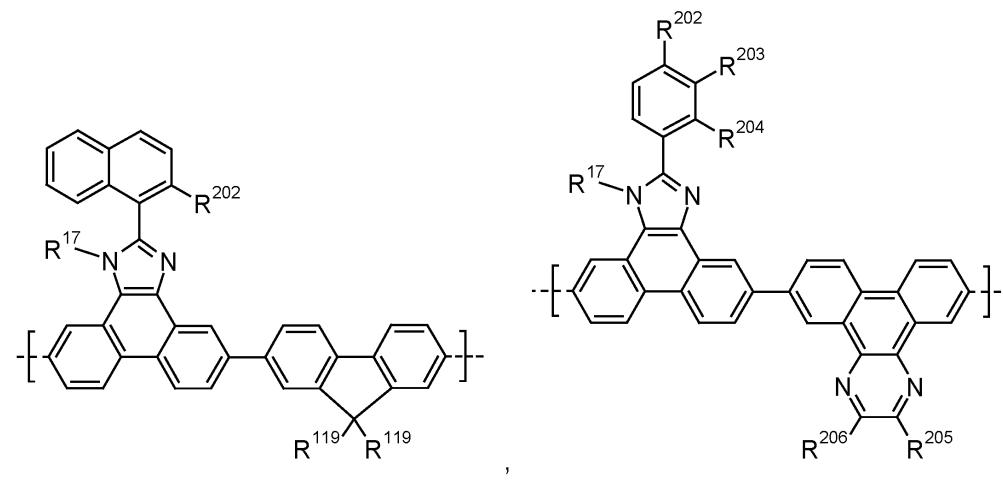
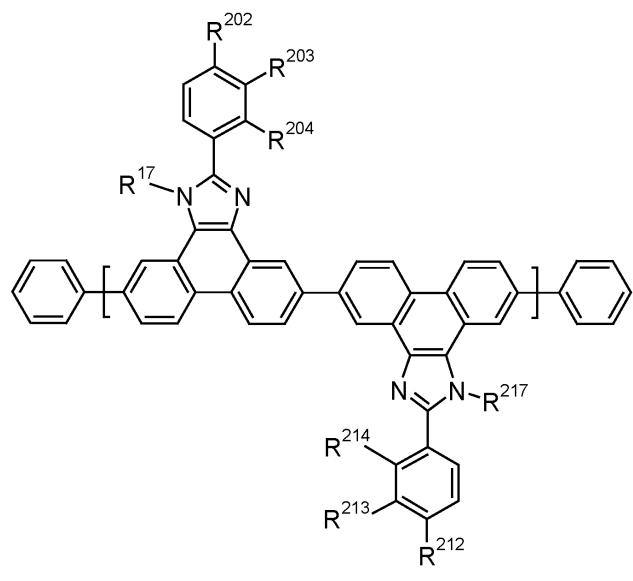
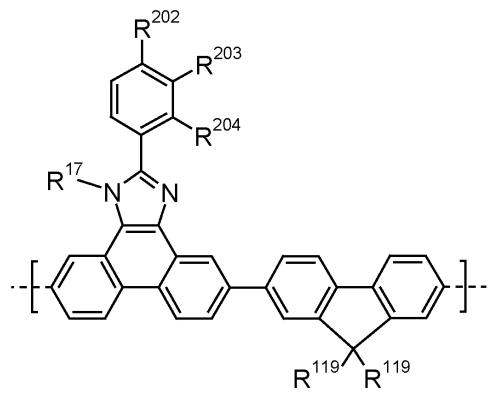
40

【0197】

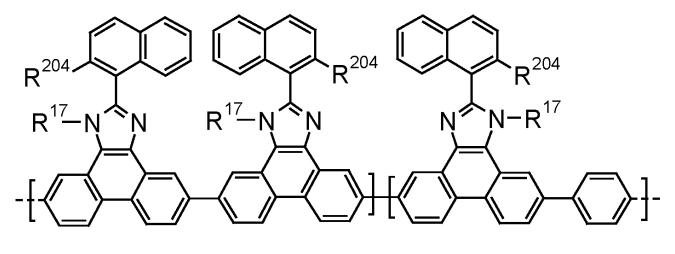
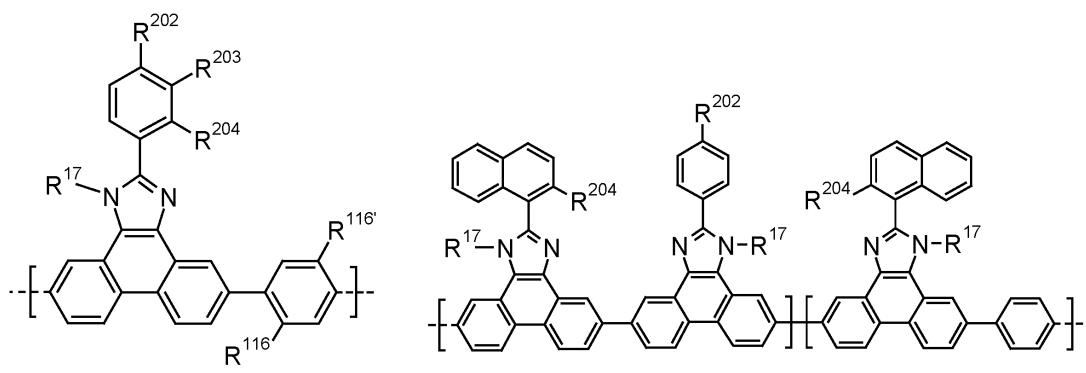
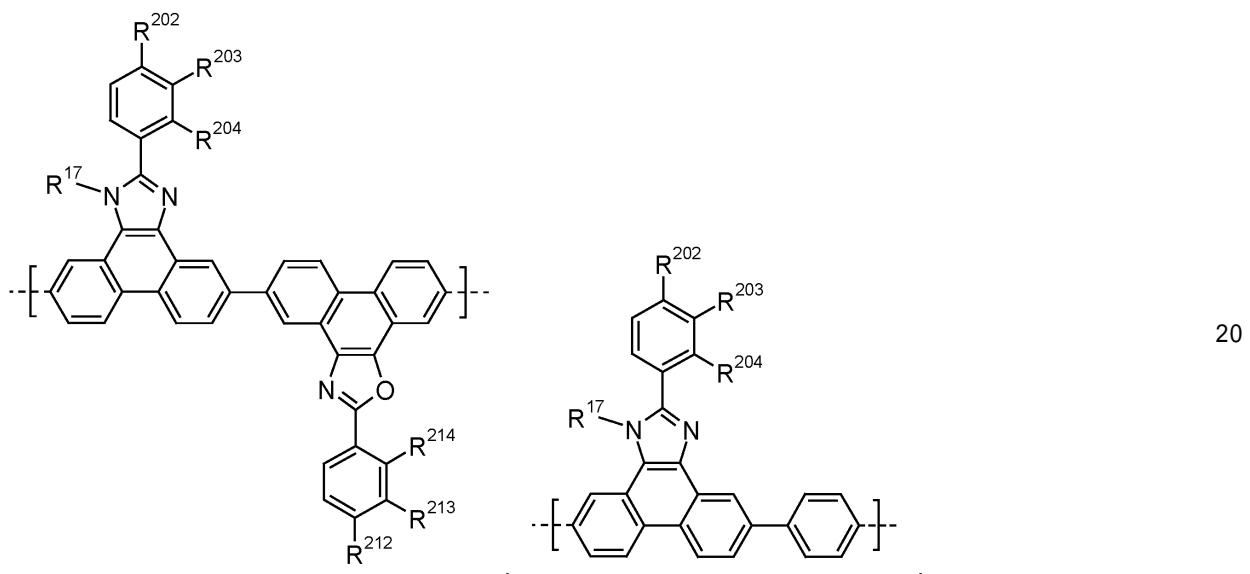
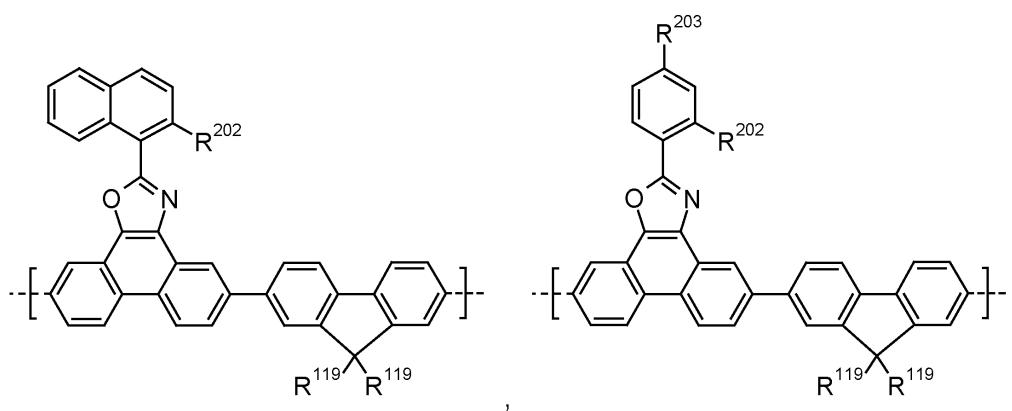
以下のポリマー、

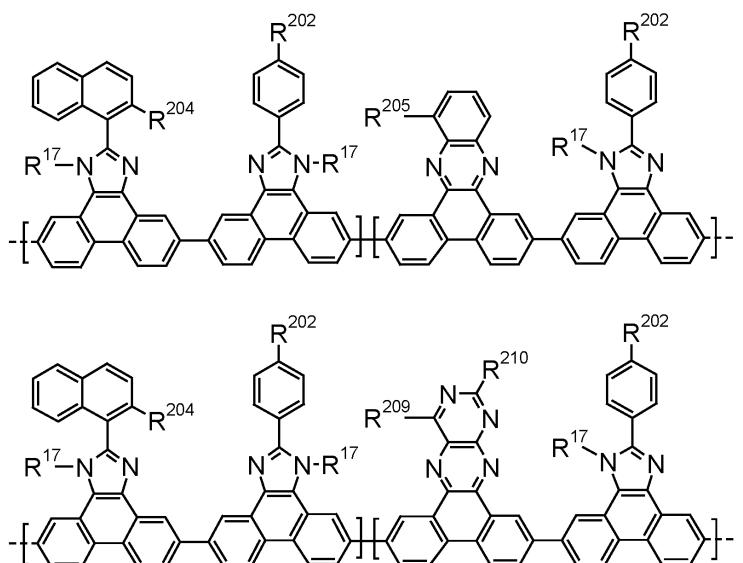
【0198】

【化 8 8】



40





## 【0199】

は、特に好ましく、式中、

$R^{1\sim 7}$  および  $R^{2\sim 1\sim 7}$  は、互いに独立に、 $C_1 \sim C_{1\sim 8}$  アルキル、特に、例えば、 $n$ -ブチル、 $n$ -ヘキシル、 $n$ -オクチル、2-エチルヘキシル、および2-ヘキサデシルなどの $C_4 \sim C_{1\sim 2}$  アルキルであり、

$R^{2\sim 0\sim 2}$ 、 $R^{2\sim 0\sim 3}$ 、 $R^{2\sim 0\sim 4}$ 、 $R^{2\sim 1\sim 2}$ 、 $R^{2\sim 1\sim 3}$ 、および $R^{2\sim 1\sim 4}$  は、互いに独立に、 $H$ 、 $C_1 \sim C_{1\sim 8}$  アルコキシ、特に、例えば、 $n$ -ブトキシ、 $n$ -ヘキシロキシ、 $n$ -オクチロキシ、2-エチルヘキシロキシ、および2-ヘキサデシロキシなどの $C_1 \sim C_{1\sim 8}$  アルコキシであり、

$R^{2\sim 0\sim 9}$  および  $R^{2\sim 1\sim 0}$  は、互いに独立に、 $H$ 、または $C_1 \sim C_{1\sim 8}$  アルコキシであり、

$R^{2\sim 0\sim 5}$  および  $R^{2\sim 0\sim 6}$  は、互いに独立に、 $H$ 、または $C_1 \sim C_{1\sim 8}$  アルコキシ、特に $C_1 \sim C_8$  アルキルであり、

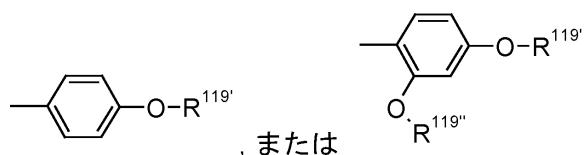
$R^{1\sim 1\sim 6}$  は、 $H$  または  $C_1 \sim C_{1\sim 8}$  アルコキシであり、

$R^{1\sim 1\sim 6'}$  は  $R^{1\sim 1\sim 6}$  であり、

$R^{1\sim 1\sim 9}$  は、 $C_1 \sim C_{1\sim 8}$  アルキル、特に、例えば、 $n$ -ブチル、 $n$ -ヘキシル、 $n$ -オクチル、2-エチルヘキシル、または

## 【0200】

## 【化89】



30

## 【0201】

などの $C_4 \sim C_{1\sim 2}$  アルキル、 $C_1 \sim C_{1\sim 8}$  アルキル、特に、 $C_1 \sim C_8$  アルキルであり、式中、

$R^{1\sim 1\sim 9'}$  および  $R^{1\sim 1\sim 9''}$  は、互いに独立に、 $C_1 \sim C_{1\sim 8}$  アルキル（示したすべてのポリマーは概念的な構造である）である。

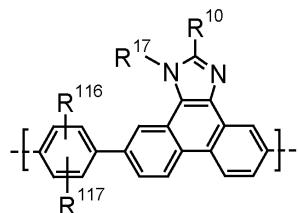
## 【0202】

更に他の好ましい実施態様において、本発明は、式、

## 【0203】

40

## 【化90】



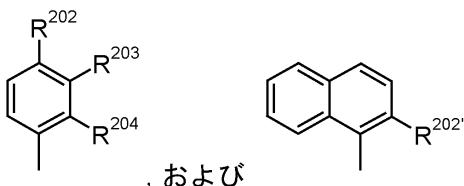
## 【0204】

のポリマーに関し、式中、

R<sup>1</sup>~R<sup>8</sup>は、C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub>アルキル、Dで中断されたC<sub>1</sub>~C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub>アルコキシ、またはEで置換されおよび／またはDで中断されたC<sub>1</sub>~C<sub>18</sub>アルコキシから選択される1~3個の基で置換されていてよいC<sub>6</sub>~C<sub>12</sub>アリール、特に、

## 【0205】

## 【化91】



## 【0206】

であり、式中、

R<sup>202'</sup>は、C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub>アルキル、Dで中断されたC<sub>1</sub>~C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub>アルコキシ、またはEで置換されおよび／またはDで中断されたC<sub>1</sub>~C<sub>18</sub>アルコキシ、特にC<sub>1</sub>~C<sub>18</sub>アルコキシであり、

R<sup>202</sup>、R<sup>203</sup>、およびR<sup>204</sup>の1つはR<sup>202'</sup>であり、他の基は、HまたはR<sup>202'</sup>であり、

R<sup>116</sup>およびR<sup>117</sup>は、H、C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub>アルキル、Dで中断されたC<sub>1</sub>~C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub>アルコキシ、またはEで置換されおよび／またはDで中断されたC<sub>1</sub>~C<sub>18</sub>アルコキシ、特にC<sub>1</sub>~C<sub>18</sub>アルコキシであり、

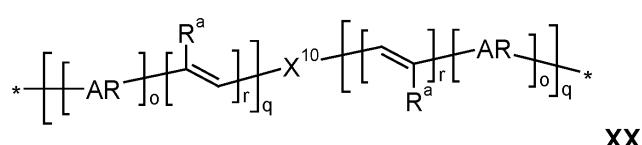
R<sup>1</sup>~R<sup>8</sup>は、C<sub>1</sub>~C<sub>18</sub>アルキル、またはC<sub>6</sub>~C<sub>12</sub>アリールであり、これは、任意選択的に1~3個のC<sub>1</sub>~C<sub>18</sub>アルコキシ基で置換することができる。

## 【0207】

更に他の好ましい実施態様において、本発明は、式、

## 【0208】

## 【化92】



## 【0209】

の繰り返しユニットを含むポリマーに関し、式中、

X<sup>1</sup>~X<sup>10</sup>は、式Iの繰り返しユニット、特にX、XI、およびXII(XVII、XVIII)、およびXVII(IX)、更に特に、Xa、XIa、XIIa、およびXIIb(XVIIa、XVIIa、XVIIa、およびXVIIb)の繰り返しユニットであり、

qは、0、1、または2の整数であり、oは、0、1、または2であり、rは、0、ま

10

20

30

40

50

たは 1 であり、

A R は、 C<sub>6</sub> ~ C<sub>2~4</sub> アリール、 G で置換された C<sub>6</sub> ~ C<sub>1~2</sub> アリール、 C<sub>2</sub> ~ C<sub>2~0</sub> ヘテロアリール、または G で置換された C<sub>2</sub> ~ C<sub>2~0</sub> ヘテロアリールであり、

R<sup>a</sup> は、 H、 C<sub>1</sub> ~ C<sub>1~8</sub> アルキル、 E で置換されおよび / または D で中断された C<sub>1</sub> ~ C<sub>1~8</sub> アルキル、 C<sub>1</sub> ~ C<sub>1~8</sub> ペルフルオロアルキル、 C<sub>2</sub> ~ C<sub>1~8</sub> アルケニル、 C<sub>2</sub> ~ C<sub>1~8</sub> アルキニル、 C<sub>1</sub> ~ C<sub>1~8</sub> アルコキシ、 E で置換されおよび / または D で中断された C<sub>1</sub> ~ C<sub>1~8</sub> アルコキシであり、 E、 D、 および G は、上記で定義したとおりである。

#### 【 0 2 1 0 】

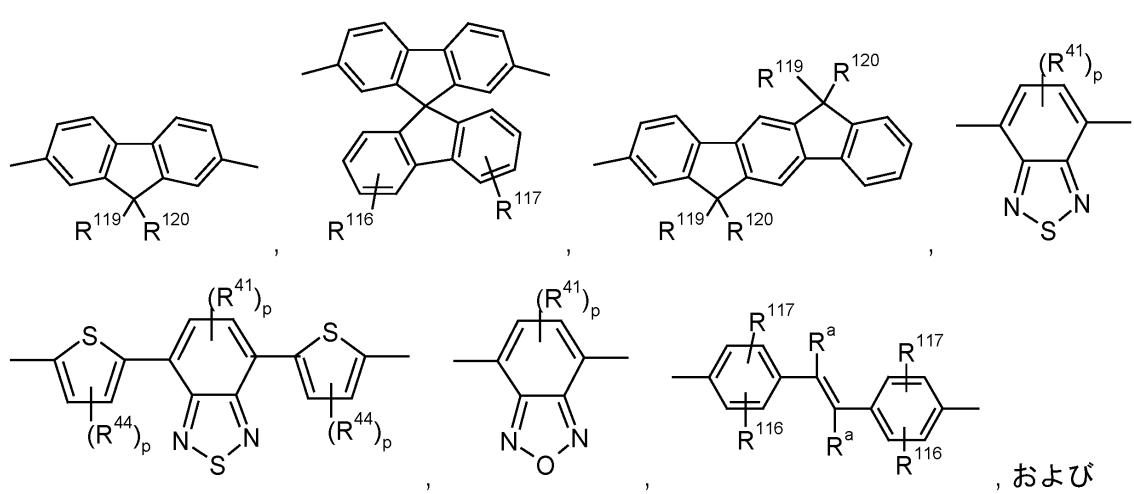
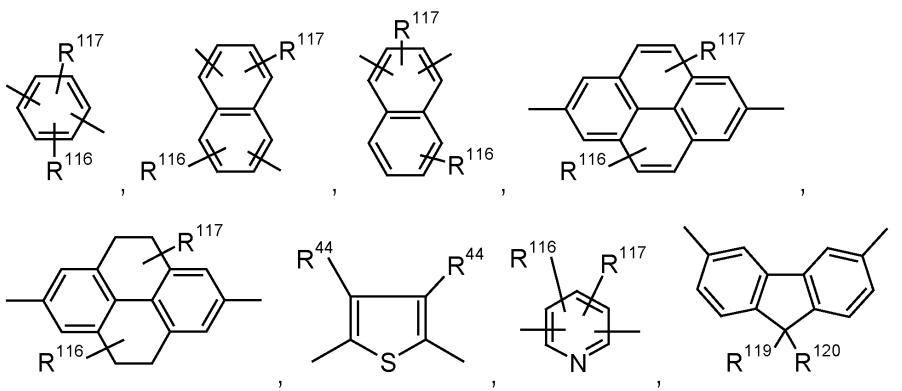
A R は、各出現で同じまであるかまたは異なる。 A R は、チオフェン、 2 , 7 - N - アルキルカルバゾール、 2 , 7 - N - アリールカルバゾール、 3 , 6 - N - アルキルカルバゾール、 3 , 6 - N - アリールカルバゾール、ベンゼン、ピリジン、フルオレン、スピロビフルオレン、アントラセン、フェナントレン、ピレン、キノリン、またはナフタレンから誘導することができ、これは、0 ~ 2 個の置換基 R<sup>a</sup> で置換することができる。 10

#### 【 0 2 1 1 】

追加の繰り返しユニットの例は、ポリマーのホール注入またはホール輸送特性を高める基 I I のユニットである。追加の繰り返しユニットの例は、特に、オルト - 、メタ - 、またはパラ - フェニレン、 1 , 4 - ナフチレン、 9 , 10 - アントラセニレン、 2 , 7 - フェナントレニレン、 1 , 6 - 、 2 , 7 - 、 4 , 9 - ピレン、 2 , 7 - テトラヒドロピレン、オキサジアゾリレン、 2 , 5 - チオフェニレン、 2 , 5 - ピロリレン、 2 , 5 - フラニレン、 2 , 5 - ピリジレン、 2 , 5 - ピリミジニレン、 5 , 8 - キノリニレン、フルオレン、スピロ - 9 , 9' - ピフルオレン、インデノフルオレン、ヘテロインデノフルオレン、 2 , 7 - N - アルキルカルバゾール、 2 , 7 - N - アリールカルバゾール、 3 , 6 - N - アルキルカルバゾール、および 3 , 6 - N - アリールカルバゾールから選択される。追加の繰り返しユニットの好みの例は、 20

#### 【 0 2 1 2 】

## 【化93】



## 【0213】

である。

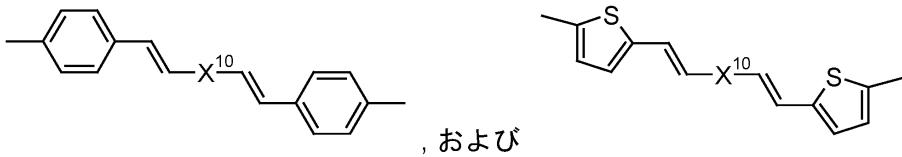
## 【0214】

式XXの繰り返しユニットの例は、

## 【0215】

## 【化94】

40



## 【0216】

であり、式中、

$X^{10}$ は、式Iの繰り返しユニット、特にX、XI、およびXII(XVII、XVIII、およびXVIIII)、更に特に、Xa、XIa、XIa、およびXIb(XVIIa、XVIIIIa、およびXVIIIB)の繰り返しユニットである。

50

## 【0217】

本発明のポリマーは、高いフォトルミネセンスおよび／またはエレクトロルミネセンスを示すことができる。

## 【0218】

ニッケル結合反応を用いて、ジハロ官能基反応物だけが関与する重合工程を行ふことができる。それらの反応の1つは、J. Pol. Sci., Part A, Polymer Chemistry Edition 28 (1990) 367においてColonら、およびJ. Org. Chem. 51 (1986) 2627においてColonらによって述べられた。反応は、典型的に極性非プロトン性溶媒（例えば、ジメチルアセトアミド）中で触媒量のニッケル塩と大量のトリフェニルホスフィンと過剰量の亜鉛粉で行った。この工程の変形例は、Bull. Chem. Soc. Jpn. 63 (1990) 80においてIoyodaらによって述べられ、促進剤として有機溶解性ヨー化物が用いられた。10

## 【0219】

他のニッケル結合反応は、Progress in Polymer Science 17 (1992) 1153においてYamamotoによって開示され、ジハロ芳香族化合物の混合物が不活性溶媒中で過剰量のニッケル（1,5-シクロオクタジエン）錯体で処理された。2種以上の芳香族ジハライドの反応混合物に用いられるとき、すべてのニッケル結合反応は、本質的に不規則コポリマーを生成する。それらの重合反応は、重合反応混合物に少量の水を加え、末端のハロゲン基を水素基で置換することによって停止することができる。または、末端アリール基を形成する単官能性ハロゲン化アリールをそれらの反応の連鎖停止として用いることができる。20

## 【0220】

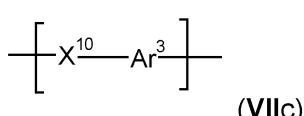
ニッケル結合重合は、ホモポリマーまたは式Ⅰと他のコモノマーから誘導されたユニットを含む不規則コポリマーを生成する。

## 【0221】

$a = 1, c = 1, b = 0, d = 1, e = 0, f = 1$  である式VIIのホモポリマーは、例えば、Suzuki反応、30

## 【0222】

## 【化95】



## 【0223】

によって得ることができ、式中、

$X^{10}$  および  $Ar^3$  は、上記で定義したとおりである。

## 【0224】

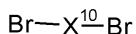
通常「Suzuki反応」と呼ばれる、芳香族ボロナートとハロゲン化物、特にブロミドの縮合反応は、Chemical Reviews, Vol. 95, pp 457~2483 (1995) においてN. MiyauraおよびA. Suzukiによって報告されたように、様々な有機官能基の存在に許容性がある。この反応は、高分子量のポリマーおよびコポリマーの調製に用いることができる。好ましい触媒は、2-ジシクロヘキシルホスフィノ-2', 6'-ジ-アルコキシビフェニル／酢酸パラジウム(II)である。特に好ましい触媒は、2-ジシクロヘキシルホスフィノ-2', 6'-ジ-メトキシビフェニル(sPhos)／酢酸パラジウム(II)である。40

## 【0225】

ジブロミドまたはジクロリド、特に式、

## 【0226】

## 【化96】

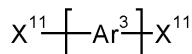


## 【0227】

に相当するジブロミドなどのジハロゲン化物を、Pdおよびホスフィンリガンド、特にトリフェニルホスフィンの触媒作用の下で、等量のジボロン酸または、式、

## 【0228】

## 【化97】



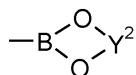
10

## 【0229】

に相当するジボロン酸塩と反応させて、式VIIcに相当するポリマーを調製し、式中、  
 $\text{X}^{11}$ は、独立に各出現で $-\text{B}(\text{OH})_2$ 、 $-\text{B}(\text{OY}^1)_2$ 、または、

## 【0230】

## 【化98】



## 【0231】

20

であり、式中、

$\text{Y}^1$ は、独立に各出現で、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{10}$ アルキル基であり、 $\text{Y}^2$ は、独立に各出現で、  
 $-\text{CY}^3\text{Y}^4-\text{CY}^5\text{Y}^6-$ 、または $-\text{CY}^7\text{Y}^8-\text{CY}^9\text{Y}^{10}-\text{Y}^{11}\text{Y}^{12}-$ などの  
 $\text{C}_2 \sim \text{C}_{10}$ アルキレン基であり、式中、

$\text{Y}^3$ 、 $\text{Y}^4$ 、 $\text{Y}^5$ 、 $\text{Y}^6$ 、 $\text{Y}^7$ 、 $\text{Y}^8$ 、 $\text{Y}^9$ 、 $\text{Y}^{10}$ 、 $\text{Y}^{11}$ 、および $\text{Y}^{12}$ は、互いに独立に、水素、または $\text{C}_1 \sim \text{C}_{10}$ アルキル基、特に $-\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{C}(\text{CH}_3)_2-$ 、または $-\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_2-$ である。反応は、典型的にトルエンなどの芳香族炭化水素溶媒中で約70～180で行った。ジメチルホルムアミドおよびテトラヒドロフランなどの他の溶媒も単独で、または芳香族炭化水素と混合して用いることができる。水性塩基、好ましくは炭酸ナトリウム、炭酸カリウム、 $\text{K}_3\text{PO}_4$ 、または重炭酸塩は、HBrのスカベンジャーとして用いられる。反応物の反応性に応じて、重合反応は、2～100時間かかり得る。例えば、水酸化テトラアルキルアンモニウムなどの有機塩基、および、例えば、TBA<sub>B</sub>などの移相触媒は、ホウ素の活性を促進することができる（例えば、Leadbeater & Macro；Angew. Chem. Int. Ed. Eng. 42 (2003) 1407およびその中に記載された文献を参照されたい）。反応条件の他の変形は、J. Org. Chem. 59 (1994) 5034～5037におけるT. I. WallenおよびB. M. Novak；およびMacromol. Rapid Commun. 17 (1996) 239～252中のM. Remmers、M. Schulze、およびG. Wegnerによって与えられる。

30

## 【0232】

40

所望されれば、末端アリール基の形成をもたらす单一官能基アリールハロゲン化物またはアリールボロナートをそれらの反応の連鎖停止剤として用いることができる。

## 【0233】

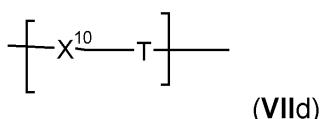
Suzuki反応のモノマー供給の順序と組成物を制御することによって、得られるコポリマーのモノマーユニットの順序を制御することが可能である。

## 【0234】

$a = 1$ 、 $c = 1$ 、 $b = 1$ 、 $d = 0$ 、 $e = 0$ 、 $f = 0$ である式VIIのホモポリマーは、  
 例えば、Heck反応、

## 【0235】

## 【化99】



## 【0236】

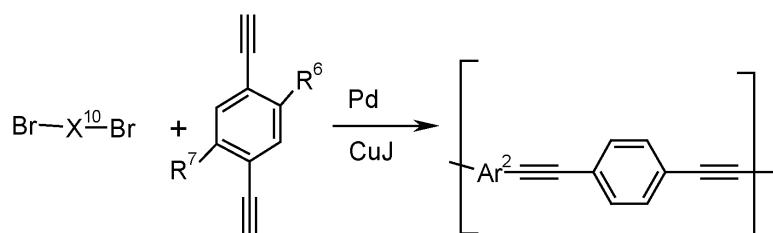
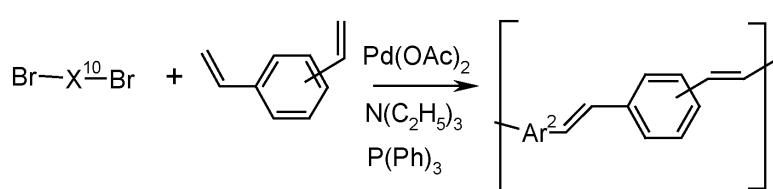
によって得ることができ、式中、 $X^{10}$  および T は、上記で定義したとおりである。

## 【0237】

ポリフェニレンエテニレン誘導体およびポリフェニレンエチニレン誘導体は、Heck 反応 (R. F. Heck, Palladium Reagents in Organic Synthesis, Academic Press, New York 1985, pp. 179、L. S. Hegedus, Organometallics in Synthesis, Ed. M. Schlosser, Wiley, Chichester, UK 1994, pp. 383、Z. Bao, Y. Chen, R. Cai, L. Yu, Macromolecules 26 (1993) pp. 5281、W.-K. Chan, L. Yu, Macromolecules 28 (1995) pp. 6410、A. Hieberer, H.-J. Brouwer, B.-J. van der Scheer, J. Wildeman, G. Hadzioannou, Macromolecules 1995, 28, 4525)、および Sonogashira 反応 (Dmitri Gelman and Stephen L. Buchwald, Angew. Chem. Int. Ed. 42 (2003) 5993~5996、Rik R. Tykwiński, Angew. Chem. 115 (2003) 1604~1606、Jason M. Nolan and Daniel L. Comins, J. Org. Chem. 68 (2003) 3736~3738、Jiang Cheng et al., J. Org. Chem. 69 (2004) 5428~5432、Zolta'n Nova'k et al., Tetrahedron 59 (2003) 7509~7513) によるジビニルまたはジエチニル化合物のジハロゲン化物との重合によって得ることができる。

## 【0238】

## 【化100】

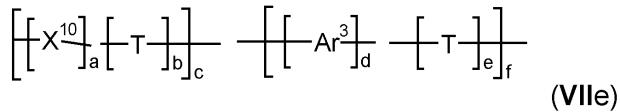


## 【0239】

a が 1 であり、b が 1 であり、c が 0.005 ~ 0.995 であり、d が 1 であり、e が 1 であり、f が 0.995 ~ 0.005 である式 VII の (不規則) コポリマーも、Heck 反応、

## 【0240】

## 【化101】



## 【0241】

によって得ることができ、式中、a、b、c、d、e、f、 $X^{10}$ 、 $Ar^3$ 、およびTは、上記で定義したとおりである。

## 【0242】

式(I)の基を含むポリマーは、任意の適切な工程によって調製することができるが、  
10 上記工程によって調製するのが好ましい。

## 【0243】

本発明のポリマーは、任意選択的に末端部分 $E^1$ を含み、式中、 $E^1$ は、任意選択的に鎖延長、または架橋を行うことの可能な反応基、またはトリ( $C_1 \sim C_{18}$ )アルキルシリキシ基で置換されていてもよいアリール部である。本明細書に用いられる、鎖延長、または架橋を行うことの可能な反応基は、ポリマー調製の結合を形成するために他の同じ基、または他の基と反応することのできる任意の基を指す。それらの反応基は、ヒドロキシ、グリシジルエーテル、アクリラートエステル、メタクリレートエステル、エテニル、エチニル、マレイミド、ナフトイミド、トリフルオロビニルエーテル部、または $E^1$ の芳香族環に縮合したシクロブテン部であるのが好ましい。  
20

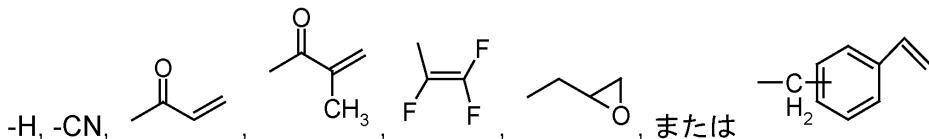
## 【0244】

$E^1$ が上記定義の反応基である本発明のポリマーは、架橋して、100以上、更に好ましくは150以上で耐溶媒性と耐熱性のあるフィルムを形成することができる。それらの架橋は、350以下で行われるのが好ましく、更に好ましくは300以下、最も好ましくは250以下で行われる。本発明の架橋可能なポリマーは、100以上で安定であり、更に好ましくは150以上で安定である。本明細書に用いられる「安定」は、それらのポリマーが、上記温度以下で架橋または重合反応を行わないことを意味する。架橋可能な材料が所望されれば、 $E^1$ は、ビニルフェニル、エチニルフェニル、または4-(または3-)ベンゾシクロブテニルラジカルであるのが好ましい。他の実施態様において、 $E^1$ は、式-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>-O-Yのフェノール誘導体の群から選択され、式中、Yは  
30

、

## 【0245】

## 【化102】



## 【0246】

である。所望されれば、架橋可能な基は、ポリマー鎖の他の部分に存在することができる。例えば、コポリマーTの置換基の1つを架橋可能な基 $E^1$ とすることができる。  
40

## 【0247】

末端キャッピング剤 $E^1-X^{12}$ ( $E^1$ は上記で定義したとおりであり、 $X^{12}$ はC1またはBrのいずれかである)は、得られるポリマーが実質上反応性基 $E^1$ でキャップされる条件下で本発明のポリマー中に組み込まれる。この目的のために有用な反応は、上記のニッケル結合、Heck反応、およびSuzuki反応である。平均の重合程度は、末端キャッピング剤に対するモノマーのモル比によって制御される。

## 【0248】

本発明によるポリマーは、例えば、D.Braun, H.Cherdron, H.Ritter, Praktikum der makromolekularen Sto  
50

ffe, 1<sup>st</sup> Edn, Wiley VCH, Weinheim 1999, p. 68 ~ 79、または、R. J. Young, P. A. Lovell, Introduction to Polymers, Chapman & Hall, London 1991に記載されたように、当業者にとって既知の方法によって作業することができる。例えば、反応混合物は、濾過し、水性酸で希釈し、抽出することができ、乾燥および溶媒の除去の後に得られる粗生成物は、沈殿剤の添加によって適切な溶媒から沈殿させることによって更に精製することができる。残留パラジウムは活性炭、クロマトグラフィなどを用いて除去することができる。有利なことに、残留パラジウムは、ポリマーを含有する粗有機溶媒層を室温~有機溶媒の沸点の温度でL-システインの水性溶液で洗浄することによって、特に、ポリマーを含有するトルエン層を85~90でL-システインの水性溶液で78~82で洗浄し、任意選択的にL-システインとチオ硫酸ナトリウムの溶液で洗浄することによって、<3 ppmまで低減することができる(Mahavir Prashad, Yugang Liu, Oljan Repicoe, Adv. Synth. Catal. 2003, 345, 533~536, Christine E. Garrett, Kapila Prasad, Adv. Synth. Catal. 2004, 346, 889~900)。更に、米国特許第6,956,095号に記載されたように、Pdは、ポリマーを水性NaCN溶液で洗浄することによって除去することができる。続いて、ポリマーを更に官能化するために、ポリマー類似反応を行うことができる。したがって、例えば、末端ハロゲン原子は、例えばLiAlH<sub>4</sub>での還元によって還元的に除去することができる(例えば、J. March, Advanced Organic Chemistry, 3<sup>rd</sup> Edn. McGraw-Hill, p. 510を参照されたい)。

## 【0249】

本発明の他の態様は、式Iのユニットを含む少なくとも1つのポリマーを1~99%含むポリマーブレンドに関する。ブレンドの1~99%の残りは、ポリスチレン、ポリブタジエン、ポリ(メチルメタクリラート)、およびポリ(エチレンオキシド)などの連鎖成長ポリマー、フェノキシ樹脂、ポリカーボナート、ポリアミド、ポリエステル、ポリウレタン、およびポリイミドなどの段階成長ポリマー、ならびに架橋エポキシ樹脂、架橋フェノール樹脂、架橋アクリラート樹脂、および架橋ウレタン樹脂などの架橋ポリマーの中から選択される1種以上のポリマー材料から構成される。これらのポリマーの例は、Preparative Methods of Polymer Chemistry, W. R. Sorenson and T. W. Campbell, Second Edition, Interscience Publishers (1968)に見出すことができる。また、ブレンドに用いることのできるのは、ポリ(フェニレンビニレン)、置換ポリ(フェニレンビニレン)、置換ポリフェニレン、およびポリチオフェンなどの共役ポリマーである。これらの共役ポリマーの例は、Greenham and Friend in Solid State Physics, Vol. 49, pp. 1~149 (1995)によって与えられる。

## 【0250】

本発明の更に他の実施態様は、式、

## 【0251】

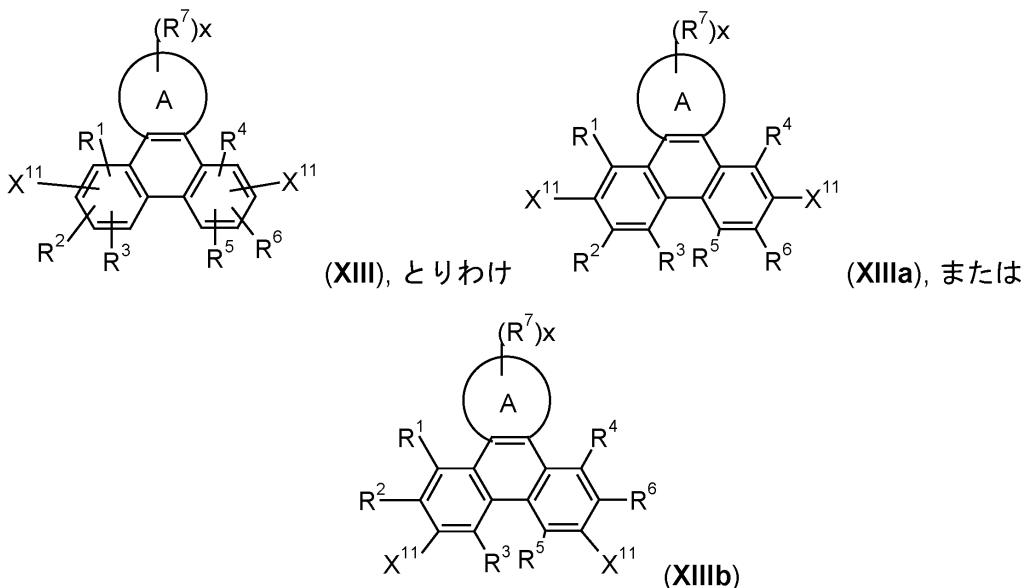
10

20

30

40

## 【化103】



10

## 【0252】

のモノマーによって表され、式中、

Aは、窒素、酸素、および硫黄、特に1個の窒素原子、ならびに窒素、置換された窒素、酸素、および硫黄から選択される少なくとも1個の更に他のヘテロ原子から選択される1個のヘテロ原子を含む5、6、または7員ヘテロ芳香族環であり、

R<sup>1</sup>、R<sup>2</sup>、R<sup>3</sup>、R<sup>4</sup>、R<sup>5</sup>、およびR<sup>6</sup>は、互いに独立に、水素、ハロゲン、または有機置換基であり、または、

互いに隣接する2個の置換基R<sup>1</sup>およびR<sup>2</sup>、R<sup>4</sup>およびR<sup>6</sup>、R<sup>2</sup>およびR<sup>3</sup>、R<sup>5</sup>およびR<sup>3</sup>、ならびに/またはR<sup>5</sup>およびR<sup>6</sup>は、一緒に芳香族またはヘテロ芳香族環、または環系を形成し、これは任意選択的に置換することができ、

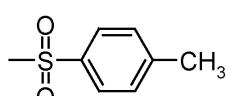
R<sup>7</sup>は、有機置換基であり、同じ分子中の2個以上の置換基R<sup>7</sup>は異なる意味を有することができ、または一緒に芳香族、またはヘテロ芳香族環、または環系を形成することができ、

xは、0または1~5の整数であり、

X<sup>1~1</sup>は、各出現で独立に、ハロゲン原子、または-O-S(=O)<sub>2</sub>-CF<sub>3</sub>、-O-S(=O)=O<sub>2</sub>-アリール、特に、

## 【0253】

## 【化104】

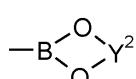


## 【0254】

-O-S(=O)<sub>2</sub>-CH<sub>3</sub>、-B(OH)<sub>2</sub>、-B(OY<sup>1</sup>)<sub>2</sub>、

## 【0255】

## 【化105】



## 【0256】

-BF<sub>4</sub>Na、または-BF<sub>4</sub>Kであり、式中、Y<sup>1</sup>は、各出現で独立に、C<sub>1~10</sub>アルキル基であり、Y<sup>2</sup>は、各出現で独立に、-CY<sup>3</sup>Y<sup>4</sup>-CY<sup>5</sup>Y<sup>6</sup>-または-CY<sup>7</sup>Y<sup>8</sup>-CY<sup>9</sup>Y<sup>10</sup>-CY<sup>11</sup>Y<sup>12</sup>-などのC<sub>2~10</sub>アルキレン基であり、式中

20

30

30

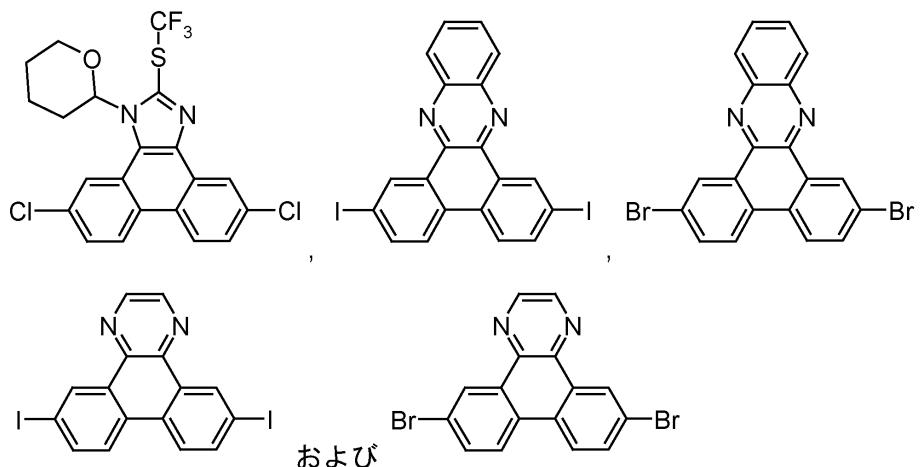
40

50

Y<sup>3</sup>、Y<sup>4</sup>、Y<sup>5</sup>、Y<sup>6</sup>、Y<sup>7</sup>、Y<sup>8</sup>、Y<sup>8</sup>、Y<sup>10</sup>、Y<sup>11</sup>、およびY<sup>12</sup>は、互いに独立に、水素、またはC<sub>1</sub>~C<sub>10</sub>アルキル基、特に-C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>-、または-C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>-であり、式中、ヘテロ原子としての窒素原子は、=N-または-NR<sup>10</sup>基を含み、式中、R<sup>10</sup>は、請求項2で定義されるとおりである、ただし、

【0257】

【化106】



10

20

【0258】

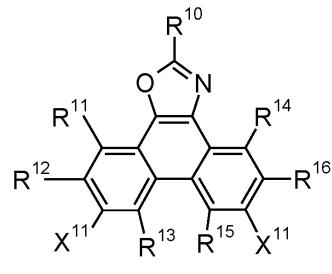
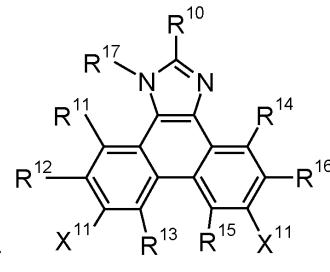
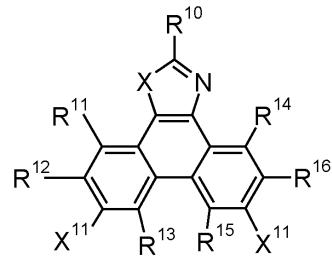
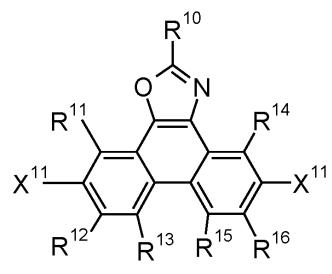
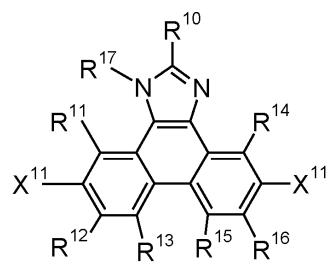
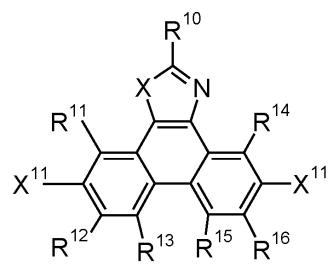
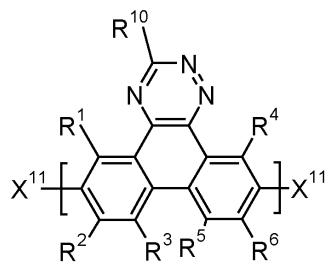
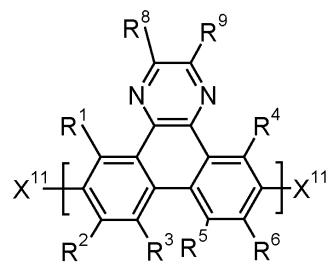
を除外する条件である。

【0259】

式、

【0260】

## 【化107】



## 【0261】

40

のモノマーが好ましく、

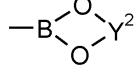
式中、 $X^{1-1}$  は、各出現で独立に、ハロゲン、特に Br、または I、特に Br または

## 【0262】

-OS(O)<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>、-B(OH)<sub>2</sub>、-B(OY<sup>1</sup>)<sub>2</sub>、または、

## 【0263】

## 【化108】



## 【0264】

50

であり、式中、Y<sup>1</sup>は、各出現で独立に、C<sub>1</sub>～C<sub>10</sub>アルキル基であり、Y<sup>2</sup>は各出現で独立に、-CY<sup>3</sup>Y<sup>4</sup>-CY<sup>5</sup>Y<sup>6</sup>-または-CY<sup>7</sup>Y<sup>8</sup>-CY<sup>9</sup>Y<sup>10</sup>-CY<sup>11</sup>Y<sup>12</sup>-などのC<sub>2</sub>～C<sub>10</sub>アルキレン基であり、式中、Y<sup>3</sup>、Y<sup>4</sup>、Y<sup>5</sup>、Y<sup>6</sup>、Y<sup>7</sup>、Y<sup>8</sup>、Y<sup>9</sup>、Y<sup>10</sup>、Y<sup>11</sup>、およびY<sup>12</sup>は、互いに独立に、水素、またはC<sub>1</sub>～C<sub>10</sub>アルキル基、特に-C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>-、または-C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>-である。

## 【0265】

少なくとも1個の置換基R<sup>8</sup>、ならびに/またはR<sup>9</sup>およびR<sup>10</sup>が水素原子と異なり、特に溶解性置換基が、特にGで置換されていてもよいC<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール、特にGで置換されていてもよいC<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>ヘテロアリール、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Dで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、またはEで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシであるモノマーが好ましい。  
10

## 【0266】

R<sup>1</sup>～<sup>7</sup>は、水素原子とは異なり、更に特に、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキルであるのが好ましい。

## 【0267】

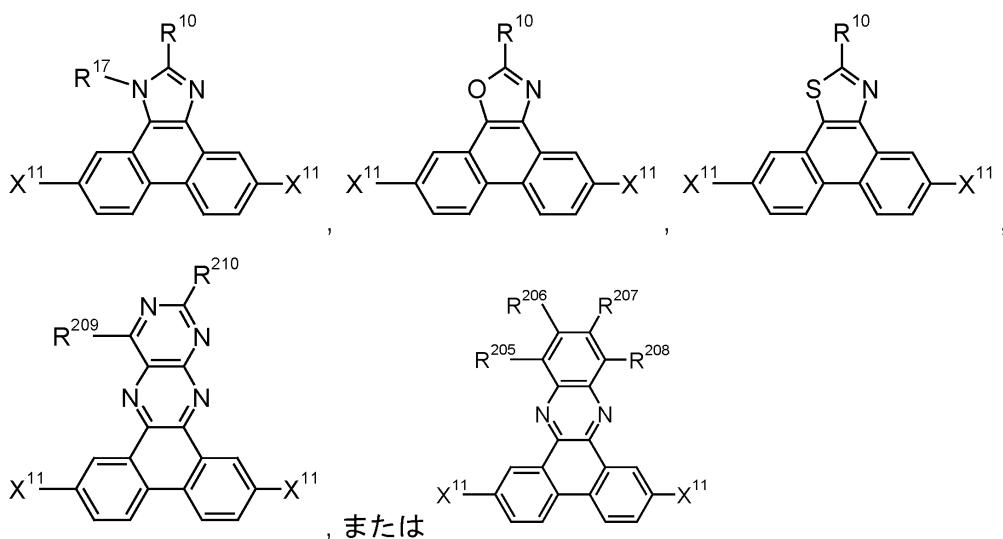
詳細にはR<sup>8</sup>および/またはR<sup>9</sup>およびR<sup>10</sup>は、溶解性置換基であり、詳細にはGで置換されていてもよいC<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール、Gで置換されていてもよいC<sub>2</sub>～C<sub>18</sub>ヘテロアリール、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、Dで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシ、またはEで置換されおよび/またはDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルコキシから選択される。  
20

## 【0268】

以下のモノマーは、特に好ましく、

## 【0269】

## 【化109】



30

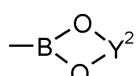
40

## 【0270】

式中、X<sup>1</sup>～<sup>11</sup>は、各出現で独立に、Br、I、-B(OH)<sub>2</sub>、-B(OY<sup>1</sup>)<sub>2</sub>、または、

## 【0271】

## 【化110】



## 【0272】

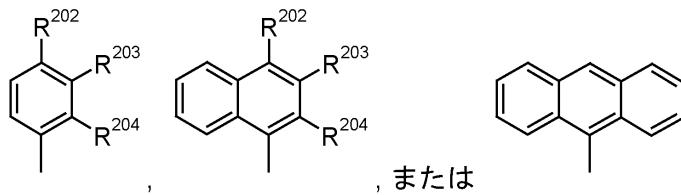
50

であり、式中  $Y^1$  および  $Y^2$  は、上記で定義されたとおりであり、

$R^{10}$  は、式、

【0273】

【化111】



10

【0274】

の基であり、式中、

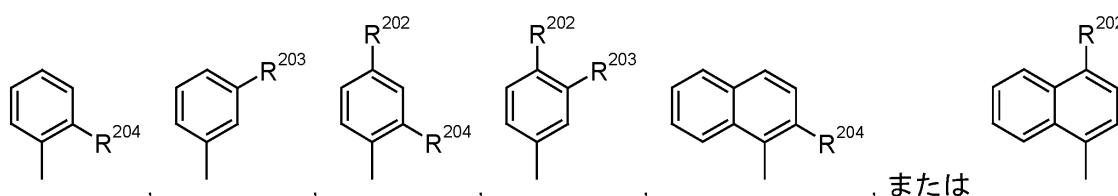
$R^{202}$ 、 $R^{203}$ 、 $R^{204}$ 、 $R^{205}$ 、 $R^{206}$ 、 $R^{207}$ 、 $R^{208}$ 、 $R^{209}$ 、および  $R^{210}$  は、互いに独立に、H、または  $C_1 \sim C_{18}$  アルコキシであり、

$R^{17}$  は、 $C_1 \sim C_{18}$  アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$  ペルフルオロアルキル、または  $C_1 \sim C_{18}$  アルコキシで置換されたフェニル、または  $C_1 \sim C_{18}$  アルキルであり、

$R^{10}$  は、式、

【0275】

【化112】



20

【0276】

の基であるのが好ましく、式中、 $R^{202}$ 、 $R^{203}$ 、および  $R^{204}$  は、互いに独立に、 $C_4 \sim C_{18}$  アルコキシであり、

$R^{209}$  および  $R^{210}$  は、 $C_4 \sim C_{18}$  アルコキシであるのが好ましい。 $R^{205}$ 、 $R^{206}$ 、 $R^{207}$ 、および  $R^{208}$  の少なくとも 1 つは、 $C_4 \sim C_{18}$  アルコキシであるのが好ましい。それらのモノマーから誘導されたポリマーは、特に好ましい。

30

【0277】

ハロゲンはフッ素、塩素、臭素、およびヨウ素である。

【0278】

$C_1 \sim C_{25}$  アルキルは、可能であるならば、典型的に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-ジメチルブロピル、1,1,3,3-テトラメチルペンチル、n-ヘキシリル、1-メチルヘキシリル、1,1,3,3,5,5-ヘキサメチルヘキシリル、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-エチルヘキシリル、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、エイコシリル、ヘンエイコシリル、ドコシリル、テトラコシリル、またはペンタコシリルである。 $C_1 \sim C_8$  アルキルは、典型的に、メチル、エチル、n-ブロピル、イソブロピル、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-ジメチルブロピル、n-ヘキシリル、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-エチルヘキシリルである。 $C_1 \sim C_4$  アルキルは、典型的に、メチル、エチル、n-ブロピル、イソブロピル、n-ブチル、sec-ブチル、イソブチル、tert-ブチルである。

40

【0279】

50

$C_1 \sim C_{2,5}$  アルコキシ基は、直鎖または分岐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、アミロキシ、イソアミロキシまたはtert-アミロキシ、ヘプチロキシ、オクチロキシ、イソオクチロキシ、ノニロキシ、デシロキシ、ウンデシロキシ、ドデシロキシ、テトラデシロキシ、ペンタデシロキシ、ヘキサデシロキシ、ヘプタデシロキシ、およびオクタデシロキシである。 $C_1 \sim C_8$  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-ペンチロキシ、2-ペンチロキシ、3-ペンチロキシ、2,2-ジメチルプロポキシ、n-ヘキシロキシ、n-ヘプチロキシ、n-オクチロキシ、1,1,3,3-テトラメチルブトキシ、および2-エチルヘキシロキシ、好ましくは、典型的にメトキシ、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-ブトキシなどの $C_1 \sim C_4$  アルコキシである。用語「アルキルチオ基」は、いずれの連結の酸素原子も硫黄原子で置換されていることを除き、アルコキシ基と同じ基を意味する。

#### 【0280】

$C_2 \sim C_{2,5}$  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-ブテ-2-エニル、n-オクテ-2-ニル、n-ドセ-2-ニル、イソドデセニル、n-ドセ-2-ニル、またはn-オクタデセ-4-ニルなどの直鎖または分岐鎖のアルケニル基である。

#### 【0281】

$C_2 \sim C_{2,4}$  アルキニル基は、直鎖または分岐鎖の好ましくは $C_2 \sim C_8$  アルキニル基であり、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-ペントン-4-イン-1-イル、トランス-3-メチル-2-ペンテ-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-イルなどの、置換されず、または置換されていてもよいアルキニル基である。

#### 【0282】

$C_1 \sim C_{1,8}$  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、-CF<sub>3</sub>、-CF<sub>2</sub>CF<sub>3</sub>、-CF<sub>2</sub>CF<sub>2</sub>CF<sub>3</sub>、-CF(CF<sub>3</sub>)<sub>2</sub>、-(CF<sub>2</sub>)<sub>3</sub>CF<sub>3</sub>、-C(CF<sub>3</sub>)<sub>3</sub>などの分岐または非分岐のラジカルである。

#### 【0283】

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、上述のアルキル基、アルケニル基、およびアルキニル基をトリフルオロメチルなどのハロゲンで部分的にまたは全体的に置換して与えられる基を意味する。「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」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、またはヘテロ環基によって置換されたものを含み、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、アラルキル基、またはヘテロ環基は、置換されていても、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など、式-SiR<sup>6,2</sup>R<sup>6,3</sup>R<sup>6,4</sup>の基を意味し、R<sup>6,2</sup>、R<sup>6,3</sup>、およびR<sup>6,4</sup>は、互いに独立に、 $C_1 \sim C_8$  アルキル基、特に $C_1 \sim C_4$  アルキル基、 $C_6 \sim C_{2,4}$  アリール基、または $C_7 \sim C_{1,2}$  アラルキル基を意味する。用語「シロキサン基」は、トリメチルシロキサン基など、式-O-SiR<sup>6,2</sup>R<sup>6,3</sup>R<sup>6,4</sup>の基を意味し、R<sup>6,2</sup>、R<sup>6,3</sup>、およびR<sup>6,4</sup>は、上記で定義したとおりである。

#### 【0284】

用語「シクロアルキル基」は、典型的に、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

10

20

30

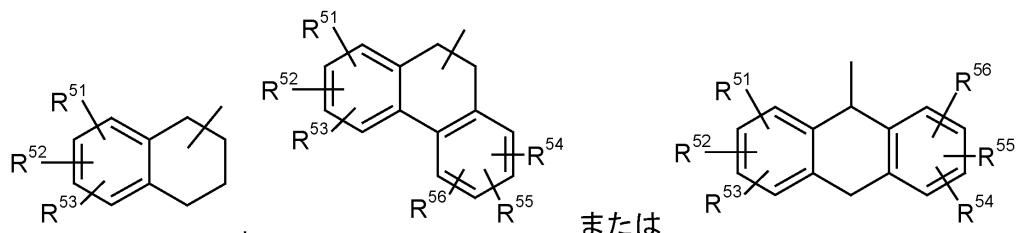
40

50

チルなどのC<sub>5</sub>～C<sub>12</sub>シクロアルキルであり、これらは、置換されていなくても、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、シクロペントジエニル、シクロヘキセニルなど、1個以上の二重結合を含む不飽和脂肪族環式炭化水素基であり、これらは、置換されていなくても、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、フェニルによって1回または2回縮合することができ、これは、1～3回C<sub>1</sub>～C<sub>4</sub>アルキル、ハロゲン、およびシアノで置換することができる。それらの縮合シクロヘキシル基の例は、

【0285】

【化113】

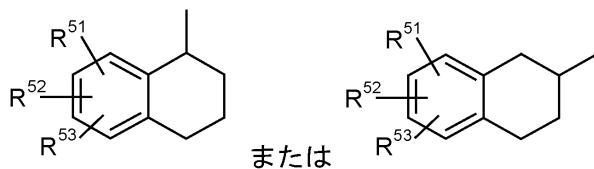


【0286】

特に、

【0287】

【化114】



【0288】

であり、式中、

R<sup>51</sup>、R<sup>52</sup>、R<sup>53</sup>、R<sup>54</sup>、R<sup>55</sup>、およびR<sup>56</sup>は、互いに独立に、C<sub>1</sub>～C<sub>8</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>8</sub>アルコキシ、ハロゲン、およびシアノ、特に水素である。

【0289】

アリールは、通常C<sub>6</sub>～C<sub>30</sub>アリール、好ましくは任意選択的に置換されていてよいC<sub>6</sub>～C<sub>24</sub>アリールであり、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、または2-ナフチル、ビフェニリル、ターフェニリル、ピレニル、2-または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、またはクアダフェニリルイル(quaderphenyl)であり、これらは、置換されていなくても、置換されていてもよい。

【0290】

用語「アラルキル基」は、典型的に、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-ドコシルなどのC<sub>7</sub>～C<sub>24</sub>アラルキル基、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-オクタデシルなどのC<sub>7</sub>～C<sub>18</sub>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-ブチルなどのC<sub>7</sub>～C<sub>12</sub>アラルキルであり、脂肪族炭化水素基および芳香族炭化水素基の両方とも置換されていなくても、置換されていてもよい。

【0291】

用語「アリールエーテル基」は、典型的に、例えば、フェノキシまたは4-メトキシフ

10

20

30

40

50

エニルなどのC<sub>6</sub>～C<sub>2～4</sub>アリーロキシ基、すなわちO-C<sub>6</sub>～C<sub>2～4</sub>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、例えば、フェニルチオまたは4-メトキシフェニルチオなどのC<sub>6</sub>～C<sub>2～4</sub>アリールチオ基、すなわちS-C<sub>6</sub>～C<sub>2～4</sub>アリールである。用語「カルバモイ基」は、典型的に、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ロキシ、モルフォリノカルバモイル、またはピロリジノカルバモイルなどの、置換されていても、置換されていてもよいC<sub>1～1～8</sub>カルバモイルラジカルである。

## 【0292】

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、それぞれC<sub>1～C<sub>2～5</sub></sub>アルキルおよびC<sub>6～C<sub>2～4</sub></sub>アリールである。

10

## 【0293】

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C<sub>7～C<sub>1～2</sub></sub>アルキルアリールを指す。例は、3-メチルまたは4-メチルフェニルなどのトリル、または3,4-ジメチルフェニルまたは3,5-ジメチルフェニルなどのキシリルである。

## 【0294】

ヘテロアリールは、典型的に、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、フタラニジル、ナフチリジニル、キノキサリニル、キナゾニリル、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、イソキサゾリル、フラザニル、またはフェノキサジニルなどのC<sub>2～C<sub>2～6</sub></sub>ヘテロアリール、すなわち、可能なヘテロ原子が窒素、酸素または硫黄である5～7環原子の環または縮合環系であり、および、典型的に、少なくとも6個の共役電子を有する5～30原子の不飽和ヘテロ環基であり、これらは、置換されていてもよい。

20

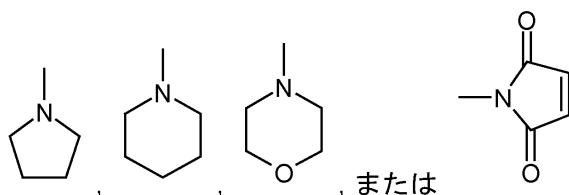
## 【0295】

30

例えば、それぞれR<sup>1～6</sup>およびR<sup>1～7</sup>、またはR<sup>6～5</sup>およびR<sup>6～6</sup>で形成される5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個の追加のヘテロ原子を有することのできる3～5炭素原子のヘテロシクロアルカンまたはヘテロシクロアルケン、例えば、

## 【0296】

## 【化115】



40

## 【0297】

であり、これは、二環式、例えば、

## 【0298】

## 【化116】



## 【0299】

の一部とすることができます。

10

## 【0300】

上述の基として可能な置換基は、C<sub>1</sub>～C<sub>8</sub>アルキル、ヒドロキシリル基、メルカプト基、C<sub>1</sub>～C<sub>8</sub>アルコシキ、C<sub>1</sub>～C<sub>8</sub>アルキルチオ、ハロゲン、ハロ-C<sub>1</sub>～C<sub>8</sub>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。

## 【0301】

例えば、R<sup>7</sup>などの置換基が基の中で1回以上出現するならば、それは各出現で異なることができる。

## 【0302】

表現「Gで置換された」は、1個、またはそれ以上、特に1～3個の置換基Gが存在し得ることを意味する。

20

## 【0303】

上述のように、前述の基は、Eで置換しある／または、所望されれば、Dで中断することができる。中断は、無論、互いに単結合で接続されている少なくとも2個の炭素原子を含有する基の場合に可能であり、C<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリールは中断されず、中断されたアラルキルまたはアルキルアリールはアルキル部にユニットDを含む。1個以上のEで置換されある／または1個以上のユニットDで中断されたC<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキルは、例えば、(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>1～9</sub>-R<sup>X</sup>(R<sup>X</sup>はHまたはC<sub>1</sub>～C<sub>10</sub>アルキル、またはC<sub>2</sub>～C<sub>10</sub>アルカノイル(例えば、CO-CH(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>である)、CH<sub>2</sub>-CH(O R<sup>Y</sup>)-CH<sub>2</sub>-O-R<sup>Y</sup>(R<sup>Y</sup>は、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、C<sub>5</sub>～C<sub>12</sub>シクロアルキル、フェニル、C<sub>7</sub>～C<sub>15</sub>フェニルアルキルであり、そしてR<sup>Y</sup>は、R<sup>Y</sup>と同じ定義、またはHである)、C<sub>1</sub>～C<sub>8</sub>アルキレン-COO-R<sup>Z</sup>、例えば、CH<sub>2</sub>COOR<sup>Z</sup>、CH(CH<sub>3</sub>)COOR<sup>Z</sup>、C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>COOR<sup>Z</sup>(R<sup>Z</sup>はH、C<sub>1</sub>～C<sub>18</sub>アルキル、(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>1～9</sub>R<sup>X</sup>であり、R<sup>X</sup>は上に示す定義のとおりである)、CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>-O-CO-CH=CH<sub>2</sub>、CH<sub>2</sub>CH(OH)CH<sub>2</sub>-O-CO-C(CH<sub>3</sub>)=CH<sub>2</sub>である。

30

## 【0304】

好み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。

40

## 【0305】

好み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、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。

## 【0306】

本発明の他の態様は、本発明のポリマーから形成されたフィルムである。これらのフィルムは、ポリマー発光ダイオード(PLED)に用いることができる。好みしくは、それ

50

らのフィルムは、発光層として用いられる。また、これらのフィルムは、電子装置の保護コーティングとしておよび蛍光コーティングとして用いられる。コーティングまたはフィルムの厚さは、最終用途に依存する。一般に、それらの厚さは、0.01～200ミクロンとすることができます。コーティングが蛍光コーティングとして用いられる実施態様において、コーティングまたはフィルムの厚さは、10～200ミクロンである。コーティングが電子機器保護コーティングとして用いられる実施態様において、コーティングの厚さは、5～20ミクロンである。コーティングがポリマー発光ダイオードとして用いられる実施態様において、形成された層の厚さは、0.01～0.5ミクロンである。本発明のポリマーは、ピンホールおよび欠陥のない良好なフィルムを形成する。それらのフィルムは、スピンドルコーティング、スプレーコーティング、ディップコーティングおよびローラーコーティングを含む当技術分野において周知の手段によって調製することができます。それらのコーティングを、組成物を基板に塗工し、塗工した組成物をフィルムが形成される条件に暴露するステップを含む工程によって調製する。フィルムを形成する条件は、塗工技術に依存する。溶液はポリマー0.1～10重量%を含むのが好ましい。この組成物は、所望の方法によって適切な基板に塗工され、溶媒が揮発される。残りの溶媒は、真空乾燥および／または熱乾燥によって除去することができます。フィルムは、厚さが実質上均一であり実質上ピンホールのないことが好ましい。他の実施態様において、ポリマーは、部分的に硬化することができます。これは、Bステージ化として公知である。

### 【0307】

したがって、本発明の更に他の実施態様は、基板および本発明によるポリマーを含む電子機器デバイスまたは部分に関する。

### 【0308】

それらのデバイスにおいて、本発明によるポリマーは、電界発光材料として用いられる。本発明の目的のために用語「電界発光材料」は、電界発光デバイス中の活性層として、またはその中に用いることのできる材料を意味する。用語「活性層」は、電場を加えると層が発光する（発光層）ことができ、および／または正および／または負の電荷の注入および／または輸送を向上する層（電荷注入または電荷輸送層）を意味する。したがって、本発明は、本発明のポリマーを電界発光材料として使用することにも関する。更に、本発明は、本発明のポリマーを含む電界発光に関する。例えば、電界発光デバイスは、制御ランプ、英数字ディスプレー、標識、および光電子カプラーなどの自己発光ディスプレー要素として用いられる。

### 【0309】

本発明によるデバイスは、国際公開公報第99/48160号の開示に従って調製することができます。その内容は、参照として組み入れられる。本発明によるポリマーは、発光ポリマー全体として、またはホールおよび／または電子輸送ポリマーを更に含むブレンド中の成分として、デバイス中に存在することができます。替わりに、デバイスは本発明のポリマー層、ホール輸送ポリマーおよび／または電子輸送ポリマーの個別の層を含むことができる。

### 【0310】

一実施態様において、電子機器デバイスは、電界発光デバイスを含み、これは、  
 (a) 正の電荷キャリアを注入するための電荷注入層、  
 (b) 負の電荷キャリアを注入するための電荷注入層、および  
 (c) 層(a)と(b)の間に配置された本発明によるポリマーを含む発光層とを含む。

### 【0311】

層(a)は、発光層(c)とアノード電極層の間に配置された正電荷キャリア輸送層、またはアノード電極層とすることができます。層(b)は、発光層(c)とカソード電極層の間に配置された負電荷キャリア輸送層、またはカソード電極層とすることができます。任意選択的に、有機電荷輸送層は、発光層(c)と電荷キャリア注入層(a)および(b)の1つの間に配置することができます。

10

20

30

40

50

## 【0312】

E L デバイスは、400 nm ~ 780 nm、好ましくは青色用の430 nm ~ 470 nm、好ましくは緑色用の520 nm ~ 560 nm、好ましくは赤色用の600 nm ~ 650 nmの可視電磁スペクトル光を発する。特定の繰り返しユニットをポリマー主鎖に組み込むことによって発光は、近赤外（N R、> 780 nm）まで移動することができる。

## 【0313】

発光層は、1種以上の本発明によるポリマー、および任意選択的に更に異なるポリマーを含む材料のブレンドまたは混合物から形成することができることが理解されるであろう。更に他の異なるポリマーは、いわゆるホール輸送ポリマー（すなわち、発光層へのホール輸送効率を高めるため）または電子輸送ポリマー（すなわち、発光層への電子輸送効率を高めるため）とすることができます。好ましくは、ブレンドまたは混合物は、本発明によるポリマーを少なくとも0.1重量%、好ましくは0.2 ~ 50重量%、更に好ましくは0.5 ~ 30重量%含むであろう。10

## 【0314】

有機E L デバイスは、正のバイアスをデバイスに加えるとき、ホールがアノードから有機フィルムに注入され、電子がカソードから有機フィルムに注入されるように、典型的に、アノードとカソードの間に挟まれた有機フィルムから成る。ホールと電子の組み合わせは、励起子を発生することができ、フォトンを解放することによって発光しながら接地状態へ減衰することができる。実際には、アノードは、その伝導性と透明性のために、通常スズとインジウムの酸化物の混合物である。混合酸化物（ITO）は、ガラスまたはプラスチックなどの透明基板上に堆積されるので、有機フィルムによって発せられる光を観察することができる。有機フィルムは、各々個別の機能に設計したいくつかの個々の層の複合体とすることができます。ホールは、アノードから注入されるので、アノードに隣接する層は、ホール輸送の機能を有する必要がある。同様に、カソードに隣接する層は、電子輸送の機能を有する必要がある。多くの場合、ホール（電子）輸送層は、発光層としても機能する。いくつかの場合において、1つの層がホールと電子の輸送および発光の組み合わせ機能を行うことができる。個別の有機フィルム層は、本質的にすべてポリマー系であるか、またはポリマーフィルムおよび熱蒸発によって堆積された小分子フィルムの組み合わせとすることができます。有機フィルムの総厚さは、1000ナノメートル（nm）未満であるのが好ましい。総厚さは、500 nm未満であるのが更に好ましい。総厚さは、300 nm未満であるのが最も好ましい。活性（発光）層は、400ナノメートル（nm）未満であるのが好ましい。厚さは、40 ~ 160 nmであるのが更に好ましい。20

## 【0315】

基板およびアノードとして働くITO - ガラスは、洗剤、有機溶媒およびUV - オゾン処理による通常の洗浄の後、コーティング用に用いることができる。ホール注入を促進するために、最初に伝導性物質の薄い層でコーティングすることもできる。それらの物質は、フタロシアニン銅、ポリアニリン（PANI）およびポリ（3,4-エチレンジオキシ-チオフェン）（PEDOT）を含み、最後の2つは、例えば、FeCl<sub>3</sub>またはNa<sub>2</sub>S<sub>2</sub>O<sub>8</sub>でドープされた、（ドープされた）伝導性形態を含む。それらは、水への溶解性を確実にするために、対イオンとしてポリ（スチレンスルホン酸）（PSS）を含有する。この層の厚さは、200 nm以下であるのが好ましく、厚さは100 nm以下であるのが更に好ましい。40

## 【0316】

ホール輸送層が用いられる場合、米国特許第5,728,801号に記載されたポリマー系アリールアミンを用いることができる。ポリビニルカルバゾールなど、他の公知のホール伝導性ポリマーを用いることもできる。次に塗工されるコポリマーフィルムの溶液による腐食に対するこの層の抵抗性は、多層デバイスの製作の成否にとって明らかに重要である。この層の厚さは、500 nm以下であり、好ましくは300 nm以下、最も好ましくは150 nm以下である。

## 【0317】

10

20

30

40

50

電子輸送層が用いられる場合、それは、低分子量材料の熱蒸発によって、または下地フィルムに大きな損傷を与えない溶液を含むポリマーの溶液コーティングによって塗工することができる。

#### 【0318】

低分子量材料の例は、8-ヒドロキシキノリンの金属錯体 (Appl. Phys. Lett. 64 (1994) 2718~2720にBurrowsらによって記載された)、10-ヒドロキシベンゾキノリンの金属錯体 (Chem. Lett. (1993) 906~906にHamadaらによって記載された)、1,3,4-オキサジアゾール (Optoelectronics - Device and Technologies 7 (1992) 83~93にHamadaらによって記載された)、1,3,4-トリアゾール (Chem. Lett. (1996) 47~48にKidoらによって記載された)、およびペリレンのジカルボキシイミド (Appl. Phys. Lett. 69 (1996) 734~736にYoshidaらによって記載された)を含む。 10

#### 【0319】

ポリマー系電子輸送材料の例は、1,3,4-オキサジアゾール含有ポリマー (J. Chem. Soc. (1995) 2211~2212にLiらによって記載され、J. Appl. Phys. 77 (1995) 4807~4809にYangおよびPeiによって記載された)、1,3,4-トリアゾール含有ポリマー (Science 267 (1995) 1969~1972にStrukeljらによって記載された)、キノキサリン含有ポリマー (Jpn. J. Appl. Phys. 33 (1994) L250~L253にYamamotoらによって記載され、Synth. Met. 76 (1996) 105~108にO'Brienらによって記載された)、およびシアノ-PPV (Thin Solid Films 273 (1996) 39~47にWeaverらによって記載された)である。この層の厚さは、500nm以下とすることができます、好ましくは300nm以下、最も好ましくは150nmである。 20

#### 【0320】

カソード材料は、熱蒸発またはスパッタのいずれでも堆積することができます。カソードの厚さは、1nm~10,000nmとすることができます、好ましくは5nm~500nmである。

#### 【0321】

本発明によって作られたOELDは、デバイスの発光層に分散された燐光ドーパントを含み得、100%に近い内部量子効率を達成することが可能である。本明細書に用いられる用語「燐光」は、有機または金属-有機分子の三重項励起状態からの発光を指す。燐光ドーパントを用いる高効率の有機発光デバイスは、いくつかの異なる伝導性ホスト材料を用いて示された (M. A. Baldoら、Nature, Vol. 395, 151 (1998)、C. Adachiら、Appl. Phys. Lett., Vol. 77, 904 (2000))。 30

#### 【0322】

好ましい実施態様において、電界発光デバイスは、アノード材料とカソード材料の間に配置された少なくとも1層のホール輸送ポリマーフィルムおよび本発明のポリマーを含む発光ポリマーフィルムを含み、デバイスが順方向にバイアスされるとき、印加された電圧の下で、アノード材料からホール輸送ポリマーフィルム中にホールが注入され、カソード材料から発光ポリマーフィルム中に電子が注入され、発光層から光が発する。 40

#### 【0323】

他の好ましい実施態様において、ホール輸送ポリマーの層は、アノードに最も近い層が低い励起電位を有し、隣接層が漸進的に高い励起電位を有するように配置される。これらの方針によって、単位電圧あたり比較的高い光出力を有する電界発光デバイスを調製することができます。

#### 【0324】

本明細書に用いられる用語「ホール輸送ポリマーフィルム」は、電場が加えられる2個の電極間に配置されて、ホールがアノードから注入されるとき発光層へ十分なホールの輸 50

送が可能なポリマーフィルムの層を指す。ホール輸送ポリマーは、典型的にトリアリールアミン部から構成される。本明細書に用いられる用語「発光ポリマーフィルム」は、その励起状態が、好ましくは可視範囲の波長に一致するフォトンを発することによって接地状態へ緩和することのできるポリマーフィルムの層を指す。本明細書に用いられる用語「アノード材料」は、4.5電子ボルト(eV)～5.5eVの仕事関数を有する半透明または透明な伝導性フィルムを指す。例は、金、銀、銅、アルミニウム、インジウム、鉄、亜鉛、スズ、クロム、チタン、バナジウム、コバルト、ニッケル、鉛、マンガン、タングステンなど、マグネシウム／銅、マグネシウム／銀、マグネシウム／アルミニウム、アルミニウム／インジウムなどの金属合金、Si、Ge、GaAsなどの半導体、インジウム-スズ酸化物(ITO)、ZnOなどの金属酸化物、CuIなどの金属化合物、更に、ポリアセチレン、ポリアニリン、ポリチオフェン、ポリピロール、ポリパラフェニレンなどの導電性ポリマーである。インジウムとスズの酸化物および混合酸化物、および金が好ましい。ITO、特に基板として、ガラス上またはポリエチレンなどのプラスチック材料、例えば、ポリエチレンテレフタラート(PET)上のITOが最も好ましい。

### 【0325】

本明細書に用いられる用語「カソード材料」は、2.0電子ボルト(eV)～4.5eVの仕事関数を有する伝導性フィルムを指す。例は、アルカリ金属、土類アルカリ金属、13族元素、銀、および銅、ならびにナトリウム、リチウム、カリウム、カルシウム、フッ化リチウム(LiF)、ナトリウム-カリウム合金、マグネシウム、マグネシウム-銀合金、マグネシウム-銅合金、マグネシウム-アルミニウム合金、マグネシウム-インジウム合金、アルミニウム、アルミニウム-アルミニウム酸化物合金、アルミニウム-リチウム合金、インジウム、カルシウムなどの合金または混合物、およびポリピロール、ポリチオフェン、ポリアニリン、ポリアセチレンなど、欧州特許第499,011号に例示された材料である。リチウム、カルシウム、マグネシウム、インジウム、銀、アルミニウム、または上記のブレンドおよび合金を用いるのが好ましい。電極用材料として金属または金属合金を用いる場合、電極は、真空堆積法によって形成することもできる。電極形成材料として金属または金属合金を用いる場合、電極は、更に化学的めっき法によって形成することができる(例えばHandbook of Electrochemistry, pp 383～387, Maruzen, 1985を参照されたい)。導電性ポリマーを用いる場合、電極は、事前に導電性コーティングを設けた基板上に、アノード酸化重合法によってそれをフィルムに形成することによって作ることができる。

### 【0326】

上記薄いフィルムを形成する方法として、例えば、真空堆積法、スピンドルコート法、キャスティング法、ラングミュアプロジェクト(「LB」)法、インクジェット印刷法などがある。これらの方法の中で、真空堆積法、スピンドルコート法、インクジェット印刷法、およびキャスティング法が作業の容易さとコストの点で特に好ましい。

### 【0327】

スピンドルコート法、キャスティング法、およびインクジェット印刷法を用いて層を形成する場合、コーティングは、組成物を適切な有機溶媒、例えば、ベンゼン、トルエン、キシレン、テトラヒドロフラン、メチルテトラヒドロフラン、N,N'-ジメチルホルムアミド、アセトン、アセトニトリル、アニソール、ジクロロメタン、ジメチルスルホキシド、およびその混合物に0.0001～90重量%の濃度に溶解して調製した溶液を用いて行うことができる。

### 【0328】

本発明の有機ELデバイスは、壁掛けテレビジョンのフラットパネルディスプレー、壁紙などのフラット発光デバイス、コピー機またはプリンタ用光源、液晶ディスプレーまたは計数機用光源、表示看板および信号灯の将来の置き換え技術として、および白熱灯や蛍光灯の置き換えとして考えられる。本発明のポリマーおよび組成物は、有機ELデバイス、光起電デバイス、電子写真受光器、光電子変換器、太陽電池、像センサーなどの分野に用いることができる。

## 【0329】

したがって、本発明は、P L E D、有機集積回路（O - I C）、有機電界効果トランジスタ（O F E T）、有機薄膜トランジスタ（O T F T）、有機太陽電池（O - S C）、熱電子デバイス、または本発明によるポリマーの1種以上を含む有機レーザーダイオードにも関する。

## 【0330】

以下の実施例は、説明目的のためにのみ含まれ、請求の範囲を制限するものではない。特記しない限り、すべての部およびパーセントは、重量基準である。重量平均分子量（M<sub>w</sub>）および多分散性（M<sub>w</sub> / M<sub>n</sub> = P D）は、ゲル浸透クロマトグラフィ（G P C）[装置、Viscotek (Houston, TX, USA) 製 G P C m a x + T D A 3 0 2]で測定され、応答形態の屈折率（R I）、低角度光散乱（L A L S）、直角光散乱（R A L S）、および示差粘度（D P）測定を行う。クロマトグラフ条件、カラム、約 1 × 10<sup>3</sup> ~ 約 2.5 × 10<sup>6</sup> Da の範囲の分子量を包含する、Polymer Laboratories (Church Stretton, UK) 製の P L g e l 混合 C (300 × 7.5 mm、5 μm粒子)、移動相、トリフルオロ酢酸ナトリウム 5 g / l を含むテトラヒドロフラン、移動相流量、0.5 または 0.7 ml / 分のいずれか、溶質濃度、約 1 ~ 2 mg / ml、注入容積、100 μl、検出、R I、L A L S、R A L S、D P である。分子量較正手順、相対較正は、Polymer Laboratories (Church Stretton, UK) から得た 1'930'000 Da ~ 5'050 Da の分子量範囲に及ぶ 10 個のポリスチレン較正標準セット、すなわち、P S 1'930'000、P S 1'460'000、P S 1'075'000、P S 560'000、P S 330'000、P S 96'000、P S 52'000、P S 30'300、P S 10'100、P S 5'050 Da である。絶対較正は、L A L S、R A L S、および D P の応答に基づいて行った。多くの研究において経験したように、この組み合わせは、分子量データの最適計算を提供する。通常、P S 96'000 は分子量較正標準として用いられるが、一般に、測定される分子量範囲にある 1 つおきの P S 標準をこの目的のために選択することができる。

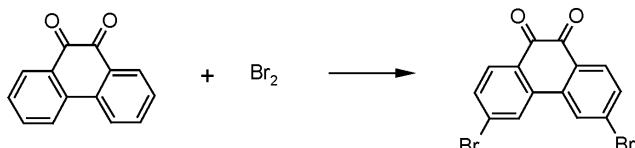
## 【0331】

以下の実施例に与えられるすべてのポリマー構造は、説明した重合手順によって得られるポリマー生成物の理想的表現である。2 個以上の成分が互いに共重合される場合、ポリマー中の順序は、重合条件に応じて交互または不規則のいずれかである。

## 【0332】

## 実施例 1

## 【化 117】



## 【0333】

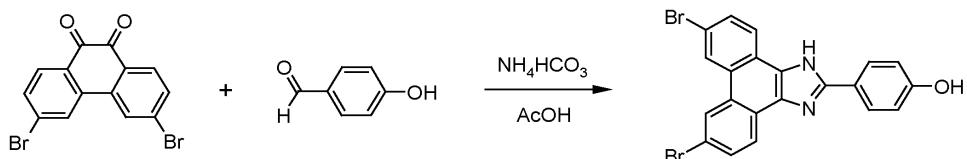
(a) Yuk i Gosei Kagaku Kyokaishi 1957, 15, 84 ~ 87 に従って 9,10-フェナントレンキノンを調製した。

## 【0334】

ニトロベンゼン 230 ml 中、9,10-フェナントレンキノン 42.2 g (0.203 モル) に、塩化アルミニウム約 300 mg を加えた。反応混合物を窒素下で攪拌し 105 に加熱した。ニトロベンゼン 40 ml 中、臭素 84.2 g (0.527 モル) を 40 分間かけて加えた。3 時間後、反応混合物を 25 に冷却して生成物を濾過した。生成物は、キシリレンから再結晶化によって更に精製することができた(収量 46.9 g (63%))。

## 【0335】

## 【化118】



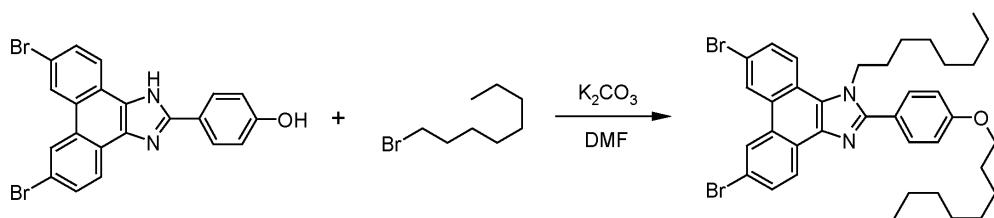
## 【0336】

(b) 酢酸 250ml (>99%) 中、3,6-ジブロモフェナントレン-9,10-キノン 10g (27.3ミリモル) に、4-ヒドロキシベンズアルデヒド 5.00g (41.0ミリモル) と重炭酸アンモニウム 10.8g (0.136モル) を窒素下で加えた。  
反応混合物を還流しながら4時間加熱した。反応混合物を25℃に冷却して生成物を濾過した。生成物をTHF(テトラヒドロフラン)に溶解し、Hyflo(登録商標)で濾過した。(CAS 91053-39-3; Fukukawa 56678)。溶媒を真空下で除去した。生成物を酢酸100ml (>99%) 中で還流させながら加熱した。生成物を25℃に冷却した後濾過した。この手順を1回繰り返し、生成物をエタノールで洗浄した(収量: 8.60g (67%))。

## 【0337】

## 実施例2

## 【化119】



20

## 【0338】

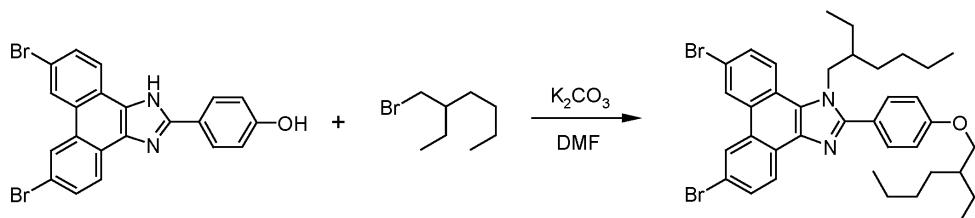
実施例1bからの生成物 6.00g (12.8ミリモル) を、水を含まないDMF(ジメチルホルムアミド) 70ml に窒素下で溶解した。1-ブロモオクタン 7.43g (38.5ミリモル) と炭酸カリウム 7.97g (57.7ミリモル) を加えた。反応混合物を120℃で30時間加熱した。反応混合物を25℃に冷却し、無機塩を濾過した。溶媒を真空下で除去した。生成物をシリカゲル上で最初にヘキサンで溶出し、次いでTHFで溶出することによって濾過した。粗生成物をカラムクロマトグラフィ(SiO<sub>2</sub>、ジクロロメタン)によって更に精製し、次いでジエチルエーテルから再結晶化して表題の化合物を得た。(収量: 3.34g (38%))。融点: 135.5~137。

30

## 【0339】

## 実施例3

## 【化120】



40

## 【0340】

実施例1bからの生成物 1.00g (2.14ミリモル) を、水を含まないDMF(ジメチルホルムアミド) 20ml に窒素下で溶解した。1-ブロモ-2-エチルヘキサン 1.24g (6.41ミリモル) と炭酸カリウム 1.03g (7.48ミリモル) を加えた。反応混合物を120℃で17時間加熱し、次いでジクロロメタンで希釈し、水で洗浄した

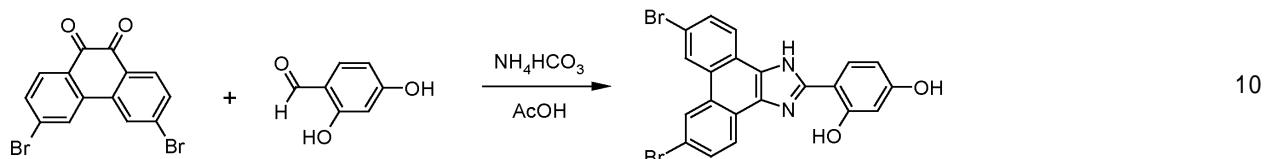
50

。溶媒を真空中で除去した。生成物をシリカゲル上で最初にヘキサンで溶出し、次いでジクロロメタンで溶出することによって濾過した。粗生成物をカラムクロマトグラフィ（SiO<sub>2</sub>、トルエン）によって更に精製し、表題の化合物を得た。（収量：420mg（28%））。

## 【0341】

## 実施例4

## 【化121】



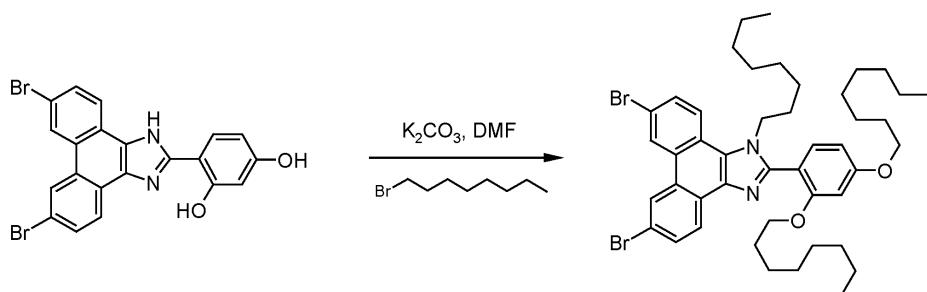
## 【0342】

(a) 酢酸100ml（>99%）中、3,6-ジブロモフェナントレン-9,10-キノン8.04g（20.0ミリモル）に、2,4-ジヒドロキシベンズアルデヒド3.59g（26.0ミリモル）および重炭酸アンモニウム7.91g（0.100モル）を窒素下で加えた。反応混合物を還流しながら最初に4時間加熱し、次いで25℃に冷却し、次いで水を加えた。生成物を濾過し、精製しないで次のステップに用いた。

## 【0343】

## 【化122】

20



## 【0344】

30

(b) 実施例4aからの生成物4.84g（10.0ミリモル）を、水を含まないDMF（ジメチルホルムアミド）50mlに窒素下で溶解した。1-ブロモオクタン6.37g（33.0ミリモル）と炭酸カリウム6.22g（45.0ミリモル）を加えた。反応混合物を140℃で18時間加熱し、ジエチルエーテルで希釈し、水で洗浄した。溶媒を真空中で除去した。粗生成物をカラムクロマトグラフィ（SiO<sub>2</sub>、トルエン）によって更に精製し、次いで他のカラムクロマトグラフィ（SiO<sub>2</sub>、トルエン）を行う。得られた固体をn-ヘプタンから再結晶化し、表題の化合物を得た（収量：1.2g（15%））。融点：99.5～101℃。

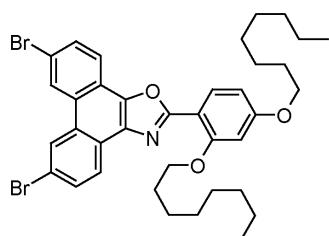
## 【0345】

以下の生成物が少量形成された。

40

## 【0346】

## 【化123】



50

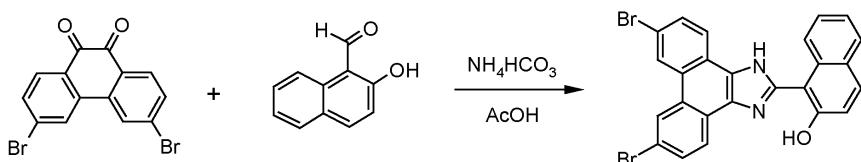
## 【0347】

融点：87～88.5。

## 【0348】

実施例5

## 【化124】



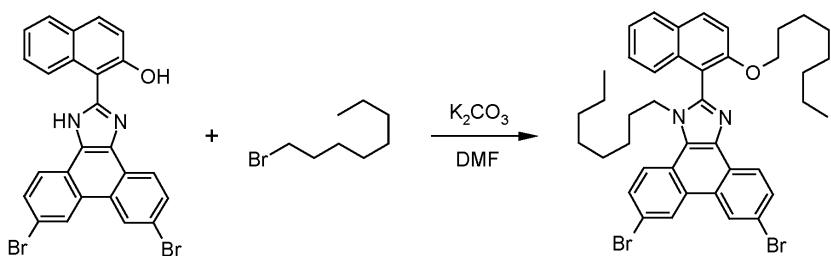
10

## 【0349】

(a) 酢酸120ml(>99%)中、3,6-ジブロモフェナントレン-9,10-キノン5.00g(13.7ミリモル)に、2-ヒドロキシ-ナフタレン-1-カルブアルデヒド3.53g(20.5ミリモル)と重炭酸アンモニウム5.40g(68.3ミリモル)を窒素下で加えた。反応混合物を還流しながら5時間加熱した。反応混合物を25℃に冷却した。生成物を濾過し、酢酸およびエタノール／水1:5で洗浄した。生成物は精製しないで次のステップに用いた。

## 【0350】

## 【化125】



20

## 【0351】

(b) 実施例5aからの生成物4.50g(8.68ミリモル)を、DMF100mlに窒素下で溶解した。1-ブロモオクタン5.03g(26.1ミリモル)と炭酸カリウム4.80g(34.7ミリモル)を加えた。反応混合物を120～26時間加熱し、ジクロロメタンで希釈し、水で洗浄した。有機相を硫酸マグネシウムで乾燥し、溶媒を真空下で除去した。粗生成物をカラムクロマトグラフィ(SiO<sub>2</sub>、ジクロロメタン)によって精製し、n-ヘプタンから2回再結晶化した(収量：1.29g(20%))。NMR分析によれば2種のアトロブ異性体が形成された。融点：95.5～97.5。

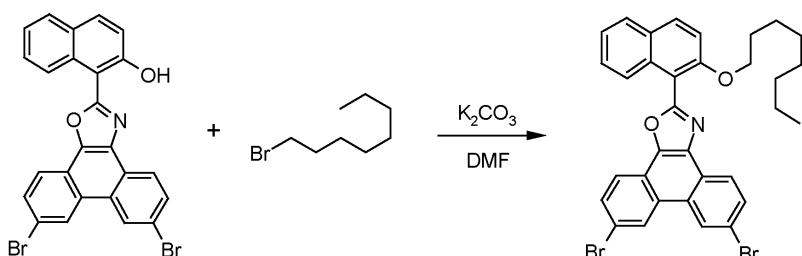
30

## 【0352】

ステップ(5a)で得られたオキサゾールのアルキル化によって、副生成物として以下の生成物も形成させた。

## 【0353】

## 【化126】



40

## 【0354】

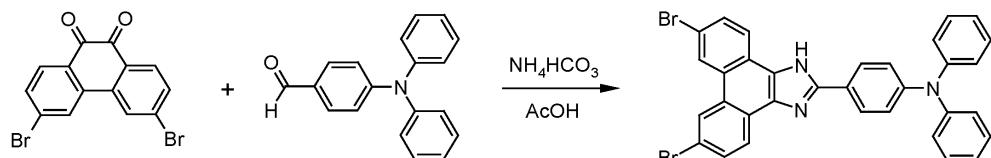
融点：125～126.5。

50

## 【0355】

## 実施例 6

## 【化127】

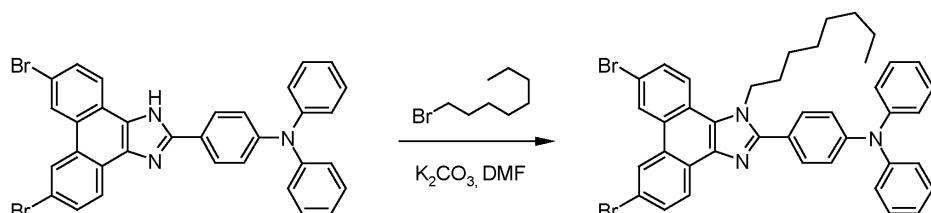


## 【0356】

酢酸 180ml (>99%) 中、3,6-ジブロモフェナントレン-9,10-キノン 5.00g (12.4ミリモル) に、4-ジフェニルアミノ-ベンズアルデヒド 4.42g (16.2ミリモル) と重炭酸アンモニウム 4.92g (62.2ミリモル) を窒素下で加えた。反応混合物を還流しながら3時間加熱し、25℃に冷却した。生成物を濾過し、酢酸およびエタノール／水 1:5 で洗浄した。生成物は精製しないで次のステップに用いた。

## 【0357】

## 【化128】



10

20

## 【0358】

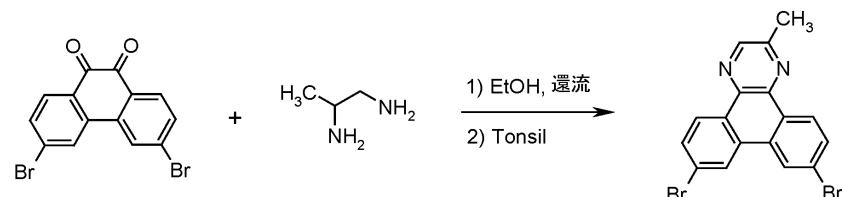
(b) 実施例 6 a の生成物を実施例 5 b に述べたようにして 1 - ブロモオクタンと反応させ、表題の化合物を黄色粉として得た(収量: 70%)。融点: 175 ~ 176℃。

## 【0359】

## 実施例 7

## 【化129】

30



## 【0360】

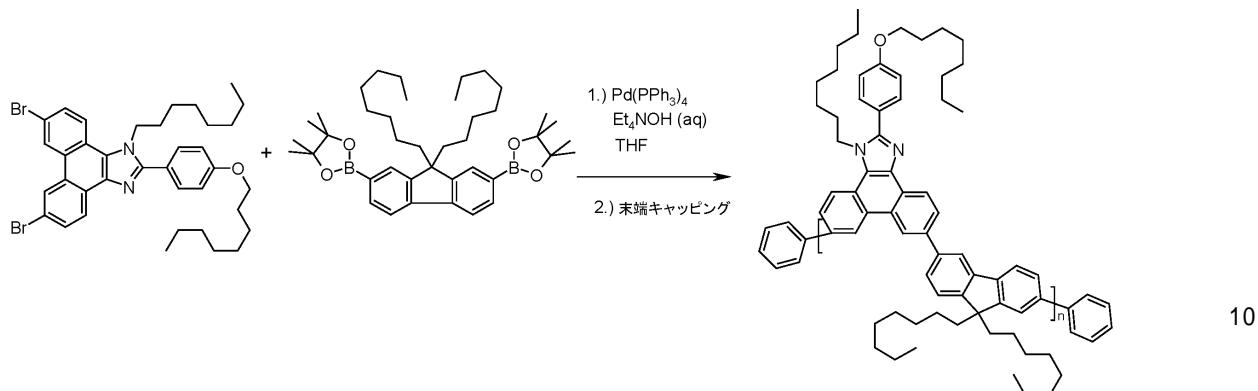
エタノール 50ml (99%) 中、3,6-ジブロモフェナントレン-9,10-キノン 4.11g (11.2ミリモル) の懸濁物に、1,2-ジアミノプロパン 1.00g (13.5ミリモル) を加えた。反応混合物を還流しながら6時間加熱し、25℃に冷却した。生成物を濾過し、クロロホルムに溶解し、続いてトンシリル(モンモリロナイト、Sued-Chemie、pH 7) 5g を加えた。反応混合物を2時間還流した。トンシリルを濾過し、溶媒を真空下で除去した。生成物を還流しながらエチルメチルケトン(MEK) 中で加熱し、25℃に冷却した後濾過した。生成物を THF 500ml とジクロロメタン 1l に溶解し、シリカゲル上で濾過した(収量: 2.11g (47%))。白色粉として表題の化合物が得られた。融点: 280 ~ 305℃。

40

## 【0361】

## 実施例 8

## 【化130】



## 【0362】

実施例2のジブロミド生成物1.0455g(1.51ミリモル)と2,7-ビス(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)-9,9-ジオクチフルオレン1.0000g(1.56ミリモル)をTHF20mlに溶解した。この溶液をアルゴンで脱気した。Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>180mgを加え、反応混合物をアルゴンで脱気した。Et<sub>4</sub>NOHの脱気した溶液6ml(水中20%)を加えた。脱気の後、反応混合物を44時間還流した。脱気したプロモベンゼン370mg(2.33ミリモル)を加え、反応混合物を還流下で2時間加熱した。フェニルボロン酸470mg(3.89ミリモル)を加え、反応混合物を2時間攪拌した。反応混合物をトルエン40mlで希釈し、次いでメタノール300mlに注いだ。GPC(ポリスチレン標準)、M<sub>w</sub>=20187g/mol、多分散性(PD)=2.24。

20

## 【0363】

粗ポリマーをトルエン100mlに溶解し、水250ml中、L-システイン溶液25gを加えた。この混合物を還流下で2時間加熱した。混合物を25℃に冷却し、2つの相に分離した。有機相をL-システイン15gと水250ml中のNa<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>10gで再び還流させた。有機相を分離し、水相を水で2回洗浄した。有機相を硫酸マグネシウムで乾燥し、シリカゲル上トルエンで濾過した。溶媒は50mlが残るまで除去した。溶液をメタノール200ml中に注いだ。ポリマーを濾過した。GPC(ポリスチレン標準)、M<sub>w</sub>=21372、PD=2.07。

30

## 【0364】

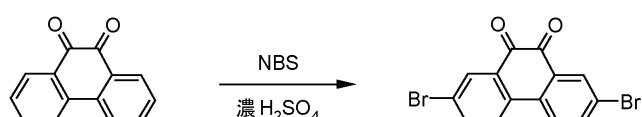
実施例8の生成物1.0重量%をトルエンに溶解した。この溶液を孔幅0.2μmのテフロンフィルターで濾過し、石英基板上に250rpmでスピンドルティングした。フィルムの特性をUV-VISおよびフォトルミネセント測定(Perkin Elmer LS50B)で測定し、固体フィルムの吸収スペクトルにおいて358nmの<sub>m a x</sub>、およびフォトルミネセントスペクトルにおいて439nm(励起波長368nm)の最大発光を示す。フィルムの相対薄膜量子効率は、約40±5%であった。

## 【0365】

実施例9

40

## 【化131】



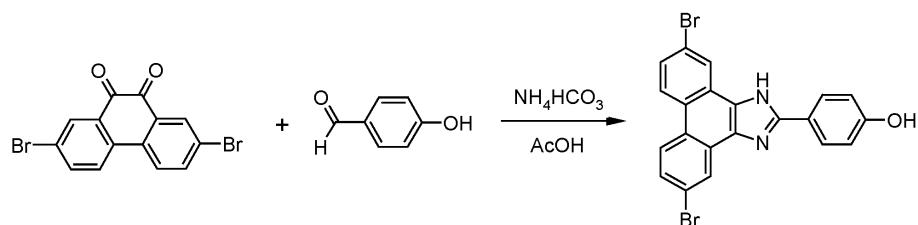
## 【0366】

(a)国際公開公報第2005/014689号の実施例A1.2.2に従って、9,10-フェナントレンキノンから2,7-ジブロモフェナントレン-9,10-キノンを合成した。

## 【0367】

50

## 【化132】

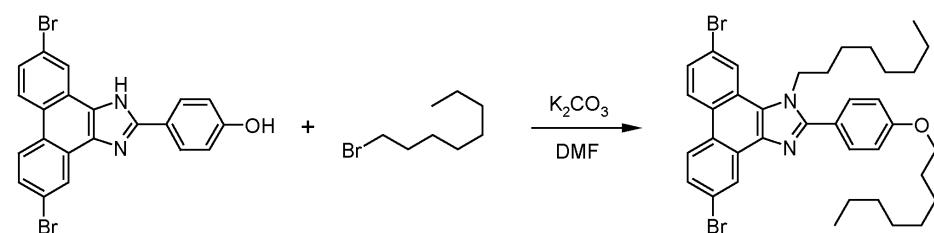


## 【0368】

(b) 酢酸 100ml 中、2,7-ジプロモフェナントレンキノン 2.00g (5.46 ミリモル) の懸濁物に、4-ヒドロキシベンズアルデヒド 1.00g (820ミリモル) と重炭酸アンモニウム 2.16g (27.3ミリモル) を加えた。反応混合物を還流下で 7 時間加熱した。粗生成物を濾過し、更に酢酸とエタノールで洗浄し、表題の化合物を得た(收量: 2.55g (99.7%))。

## 【0369】

## 【化133】



## 【0370】

(c) 乾燥 DMF 25ml 中、実施例 9 b の生成物 1.60g (3.42ミリモル) に、窒素下で炭酸カリウム 2.13g (15.4ミリモル) と 1-ブロモ-オクタン 2.64g (13.7ミリモル) を加えた。反応混合物を 120 度で 29 時間攪拌した。ジメチルエーテルと水を加えた。有機相を分離し、水で洗浄した。有機相を硫酸マグネシウムで乾燥させた。溶媒を真空下で除去した。生成物をヘプタンから再結晶化し、HPLC 純度 > 99 % の表題の化合物を得た。融点: 97 ~ 98。

30

## 【0371】

## 実施例 10

## 【化134】



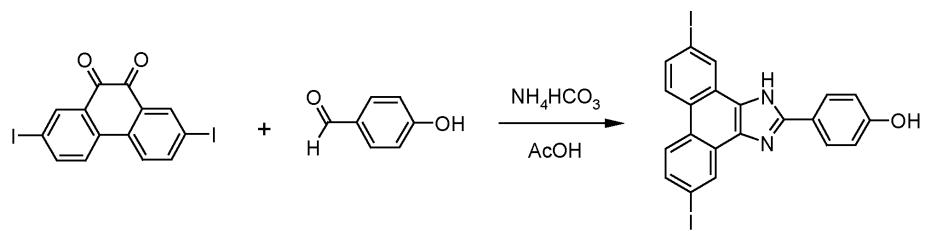
## 【0372】

(a) 2,7-ジヨードフェナントレン-9,10-キノンを B u l l . C h e m . S o c . J p n . 1999 , 72 , 115 に従って 9,10-フェナントレンキノンから合成した。より高い收量のためには過剰の KMnO<sub>4</sub>、H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>、Ac<sub>2</sub>O、AcOH が必要である。また、2,7-ジヨードフェナントレン-9,10-キノンを、Tetrahedron Letters 2004 , 45 , 2801 (支援情報)、または Tetrahedron 2004 , 60 , 9113 に従って調製した。

40

## 【0373】

## 【化135】

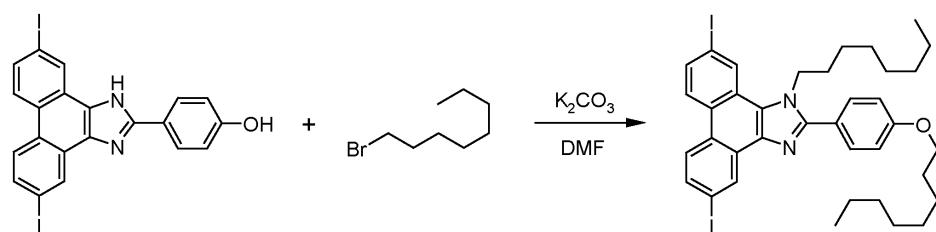


## 【0374】

(b) 酢酸 100ml 中、2,7-ジヨードフェナントレン-9,10-キノン 2.00 g (4.35 ミリモル) の懸濁物に、4-ヒドロキシベンズアルデヒド 800 mg (6.52 ミリモル) と重炭酸アンモニウム 1.72 g (21.7 ミリモル) を加えた。反応混合物を還流下で 7 時間加熱した。粗生成物を濾過し、酢酸とエタノールで洗浄し、表題の化合物を得た (収量: 2.34 g (95.5 %))。 10

## 【0375】

## 【化136】



20

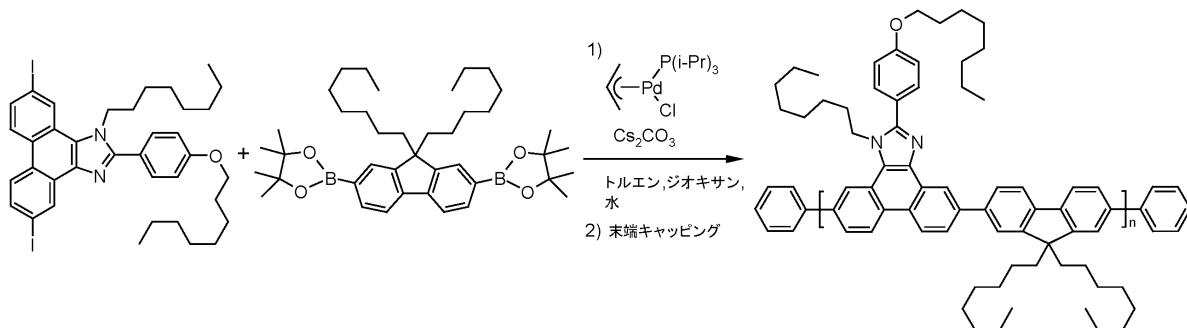
## 【0376】

(c) 乾燥 DMF 25ml 中、実施例 10 b の生成物 2.00 g (3.56 ミリモル) に、炭酸カリウム 1.97 g (14.2 ミリモル) と 1-ブロモオクタン 2.40 g (12.5 ミリモル) を加えた。反応混合物を窒素下 120 °C で 22 時間攪拌した。ジクロロメタンを加え、混合物をシリカゲル上で濾過した。シリカゲルを追加のジクロロメタンで洗浄した。ジクロロメタンを真空下で除去し、沈殿した生成物を濾過した。生成物をシクロヘキサンから 2 回再結晶し、表題の化合物を得た (収量: 1.18 g (42 %))。融点: 121 ~ 122.5 °C。 30

## 【0377】

## 実施例 11

## 【化137】



40

## 【0378】

実施例 10 c のジヨード化物 1.1500 g (1.46 ミリモル) および 2,7-ビス (4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)-9,9-ジオクチルフルオレン 0.9395 g (1.46 ミリモル) を、ジオキサン 15ml とトルエン 5ml に溶解した。この溶液をアルゴンで脱気した。アリル (トリイソ-プロピルホスフィン) パラジウムクロリド 50 mg を加え、反応混合物を再びアルゴンで脱気した。水 5ml 中、炭酸セシウム 2.38 g (7.31 ミリモル) を脱気し、反応混合物に加えた。 50

脱気の後、反応混合物を還流下で18時間加熱した。脱気したプロモベンゼン340mg(2.19ミリモル)を加え、反応混合物を2時間還流した。ルエン5ml中、4,4,5,5-テトラメチル-2-フェニル-1,3,2-ジオキサボロラン(3.66ミリモル)の脱気した溶液750mgを加え、反応混合物を2時間攪拌した。反応混合物をメタノール300mlに注いだ。GPC(ポリスチレン標準)、Mw=24486g/mol、PD=3.10。

## 【0379】

ポリマーをトルエン100mlに溶解し、水250ml中、L-システイン25gの溶液を加えた。この混合物を還流下で3時間加熱した。有機相を分離して水で2回洗浄した。L-システイン15gの溶液および水250ml中のチオ硫酸溶液10gを有機相に加えた。この混合物を還流下で2時間加熱した。有機相を分離して水で2回洗浄した。有機相を溶出剤としてトルエンでシリカゲルと硫酸マグネシウム上で濾過した。溶媒を真空下で50ml残るまで除去した。この溶液をメタノール200mlに注いだ。ポリマーを濾過した。GPC(ポリスチレン標準)：Mw=27547g/mol、多分散性(PD)=2.84。

10

## 【0380】

実施例11の生成物1.0重量%をトルエンに溶解した。この溶液を孔幅0.2μmのテフロンフィルターで濾過し、石英基板上に150rpmでスピンドルコートィングした。フィルムの特性をUV-VISおよびフォトルミネセント測定(Perkin Elmer LS50B)で測定し、固体フィルムの吸収スペクトルにおいて383nmの<sub>m a x</sub>、およびフォトルミネセントスペクトルにおいて430nmの最大発光および460nm(励起波長368nm)で明確な肩を示した。

20

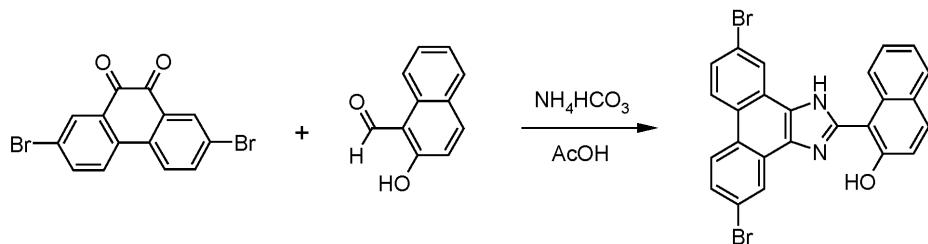
## 【0381】

ポリフルオレンホモポリマー標準に対してフィルムの固体量子収量30%が得られた。

## 【0382】

実施例12

## 【化138】



30

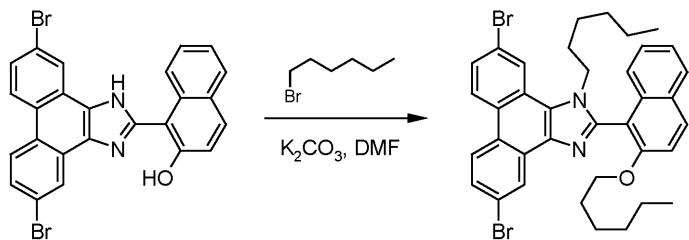
## 【0383】

(a)酢酸50ml中、2,7-ジプロモフェナントレン-9,10-キノン4.02g(10.0ミリモル)の懸濁物に、2-ヒドロキシ-ナフタレン-1-カルブアルデヒド2.24g(13.0ミリモル)と重炭酸アンモニウム3.95g(50.0ミリモル)を加えた。反応混合物を還流下で3時間加熱した。2-ヒドロキシ-ナフタレン-1-カルブアルデヒド220mgと重炭酸アンモニウム100mgを加えた。反応混合物を還流下で更に2時間加熱した。生成物を濾過し、酢酸とエタノールで洗浄した。生成物をエチルメチルケトン(MEK)でソックスレー抽出した。オキサゾール副生成物の大部分をこのようにして除去し、表題の化合物を得た(収量：4.81g(93%))。融点：分解を伴つて311～314。

40

## 【0384】

## 【化139】



## 【0385】

(b) 乾燥 DMF 40ml 中、実施例 12 a からの生成物 3.89g (7.50ミリモル) に、炭酸カリウム 3.11g (22.5ミリモル) と 1-ブロモヘキサン 3.62g (18.8ミリモル) を加えた。反応混合物を 130°C で 8 時間攪拌した。ジエチルエーテルと水を加えた。有機相を分離して水で洗浄した。有機相を硫酸マグネシウムで乾燥させた。溶媒を真空下で除去した。粗生成物をカラムクロマトグラフィ (SiO<sub>2</sub>、トルエン) によって精製し、更にシクロヘキサンから再結晶化して表題の化合物を得た。(収量: 700mg (14%))。NMR 分析によれば 2 種のアトロブ異性体が形成されている。融点: 122 ~ 123°C。

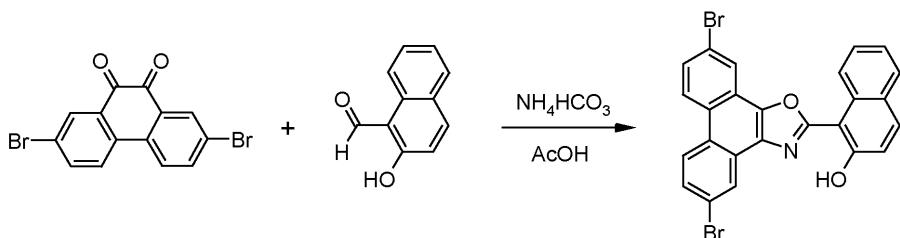
## 【0386】

実施例 13

## 【化140】

10

20



## 【0387】

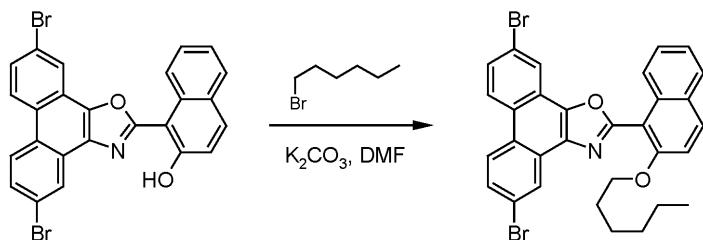
(a) 酢酸 100ml 中、2,7-ジブロモフェナントレン-9,10-キノン 4.02g (10.0ミリモル) の懸濁物に、2-ヒドロキシ-ナフタレン-1-カルブアルデヒド 2.24g (13.0ミリモル) と重炭酸アンモニウム 470mg (6.00ミリモル) を加えた。反応混合物を還流した。3 時間後、2-ヒドロキシ-ナフタレン-1-カルブアルデヒド 220mg と重炭酸アンモニウム 160mg を加えた。2 時間後、2-ヒドロキシ-ナフタレン-1-カルブアルデヒド 220mg と重炭酸アンモニウム 160mg を加えた。反応混合物を更に 2 時間還流した。生成物を濾過し、酢酸とエタノールで洗浄した。生成物をエチル-メチル-ケトン (MEK) 100ml で煮詰めた。イミダゾール副生成物の大部分をこのようにして除去し、表題の化合物を得た(収量: 3.71g (72%))。

## 【0388】

## 【化141】

30

40



## 【0389】

(b) 乾燥 DMF 30ml 中、実施例 13 a からの生成物 3.11g (6.00ミリモル) に、炭酸カリウム 1.66g (12.0ミリモル) と 1-ブロモヘキサン 1.74g (12.0ミリモル) を加えた。反応混合物を 130°C で 8 時間攪拌した。ジエチルエーテルと水を加えた。有機相を分離して水で洗浄した。有機相を硫酸マグネシウムで乾燥させた。溶媒を真空下で除去した。粗生成物をカラムクロマトグラフィ (SiO<sub>2</sub>、トルエン) によって精製し、更にシクロヘキサンから再結晶化して表題の化合物を得た。(収量: 700mg (14%))。NMR 分析によれば 2 種のアトロブ異性体が形成されている。融点: 122 ~ 123°C。

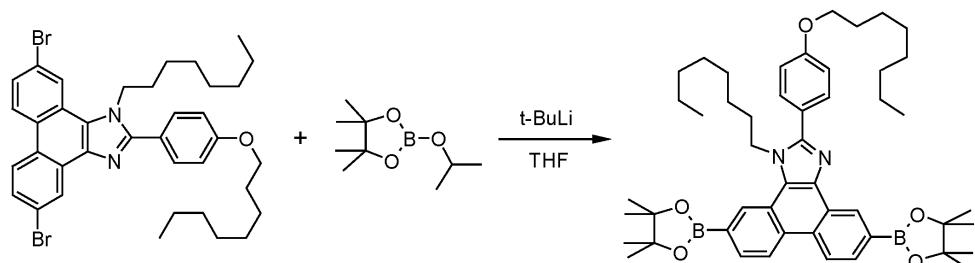
50

9.00ミリモル)を加えた。反応混合物を130℃で8時間攪拌した。ジエチルエーテルと水を加えた。有機相を分離して水で洗浄した。有機相を硫酸マグネシウムで乾燥させた。溶媒を真空下で除去した。粗生成物をカラムクロマトグラフィ( $\text{SiO}_2$ 、トルエン/シクロヘキサン2:1)によって精製し、次いでシクロヘキサンから再結晶化して表題の化合物を得た。(収量: 1.23g (33%))。

## 【0390】

## 実施例14

## 【化142】



10

## 【0391】

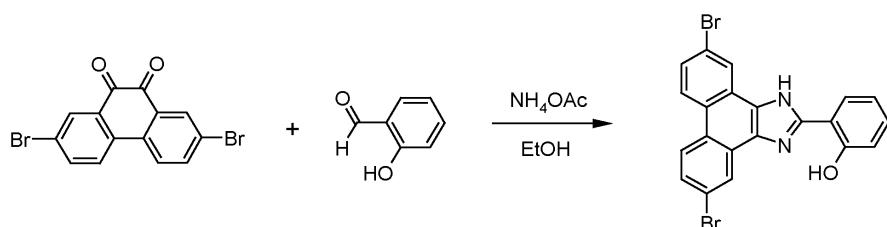
乾燥テトラヒドロフラン(THF)90ml中、実施例9cの生成物2.08g (3.00ミリモル)の溶液をアルゴン下で-78℃に冷却した。ペンタン中tert-ブチル-リチウム1.5M溶液10ml (15ミリモル)を加えた。反応混合物を-78℃で1時間攪拌した。この反応混合物に2-イソプロポキシ-4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン1.67g (9.00ミリモル)をできるだけ迅速に加えた。反応混合物を-78℃で30分間攪拌し、25℃に暖め、1時間攪拌を続けた。反応混合物をジエチルエーテルで希釈し、水で洗浄した。有機相を硫酸マグネシウムで乾燥し、溶媒を真空下で除去した。生成物をシクロヘキサンから再結晶化して表題の化合物を得た。(収量: 1.40g (59%))。融点: 179~181℃。

20

## 【0392】

## 実施例15

## 【化143】



30

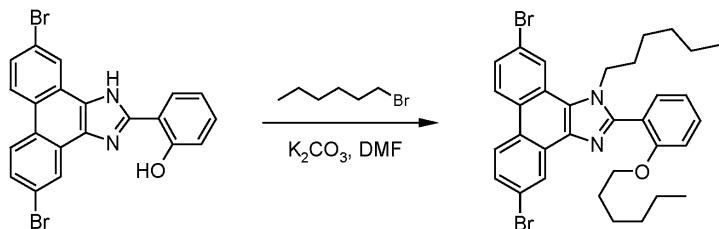
## 【0393】

(a) エタノール(>98%)165ml中、2,7-ジブロモフェナントレン-9,10-キノン4.03g (11.0ミリモル)に、2-ヒドロキシベンズアルデヒド2.35g (19.3ミリモル)と酢酸アンモニウム8.48g (0.11モル)を窒素下で加えた。反応混合物を還流下で5時間加熱した。反応混合物を25℃に冷却し、生成物を濾過し、エタノールで洗浄した(収量5.90g)。

40

## 【0394】

## 【化144】

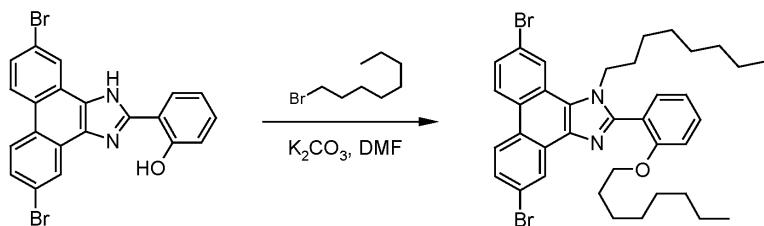


## 【0395】

(b) 乾燥 DMF 25ml 中、実施例 15a からの生成物 4.68g (10.0ミリモル)<sup>10</sup> に、1-ブロモヘキサン 4.31g (25.0ミリモル) と炭酸カリウム 4.15g (30.0ミリモル) を窒素下で加えた。反応混合物を 130 度攪拌した。3 時間後、炭酸カリウム 2.07g (15.0ミリモル) と 1-ブロモヘキサン 1.82g (15.0ミリモル) を加えた。5 時間後、反応混合物を水中に注ぎ、水相をジエチルエーテルで抽出した。有機相を硫酸マグネシウムで乾燥し、溶媒を真空下で除去した。粗生成物をカラムクロマトグラフィ ( $\text{SiO}_2$ 、トルエン) によって精製し、油状の生成物が得られ、これはゆっくり結晶化した (收量: 5.1g (80%))。

## 【0396】

## 【化145】



20

## 【0397】

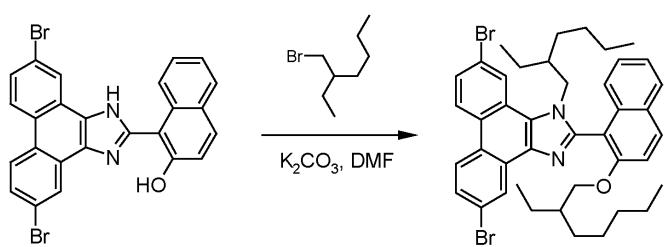
(c) 表題の化合物を上記サンプルから調製した。融点: 86~88°。

## 【0398】

実施例 16

30

## 【化146】



## 【0399】

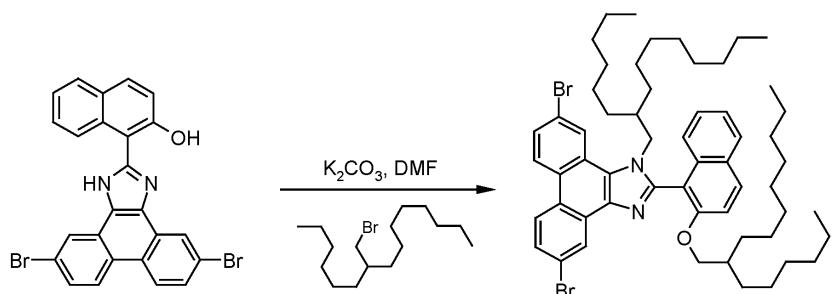
(a) 乾燥 DMF 50ml 中、実施例 12a からの生成物 5.18g (10.00ミリモル)<sup>40</sup> に、1-ブロモ-2-エチルヘキサン 5.79g (30.0ミリモル) と炭酸カリウム 4.84g (35.0ミリモル) を窒素下で加えた。反応混合物を 130 度攪拌した。更に、炭酸カリウム 2.07g (1.50ミリモル) と 1-ブロモ-2-エチルヘキサン 1.93g (10.0ミリモル) をそれぞれ 4 回加えた。7 時間後、反応混合物を水中に注ぎ、水相をジエチルエーテルで抽出した。粗生成物を更にカラムクロマトグラフィ ( $\text{SiO}_2$ 、トルエン) によって精製し、黄色の粘性のある油として表題の化合物が得られ、これを静置によって固化させた (收量: 5.98g (79%))。融点: 60.5~66.5°。

## 【0400】

実施例 17

50

## 【化147】



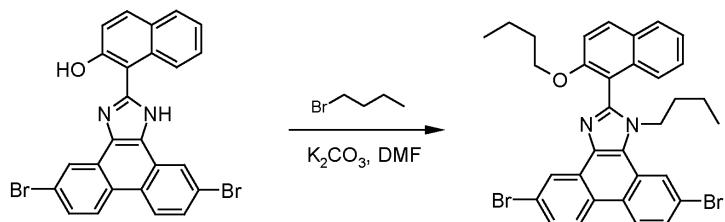
## 【0401】

実施例12aからの生成物10.4g(20.1ミリモル)に、1-ブロモ-2-エチルヘキサン21.4g(70.1ミリモル)、炭酸カリウム11.1g(80ミリモル)、および乾燥DMF100mlを窒素下で加えた。反応混合物を120℃で攪拌した。22時間後、混合物を室温まで冷却し、CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>150mlで希釈し、次いで濾過し、水200mlで3回抽出した。有機相をNa<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>上で乾燥し、濾過し、真空下で濃縮して明るい茶色の粘性のある油28gを得た。粗生成物を更にカラムクロマトグラフィ(SiO<sub>2</sub>、シクロヘキサン/酢酸エチル20:1)、次いで、他のカラムクロマトグラフィによって精製した(シクロヘキサン/酢酸エチル40:1)。表題の化合物17.2gが、黄色の粘性のある油として得られ、HPLC純度は>99%である(収量:89%)。

## 【0402】

## 実施例18

## 【化148】



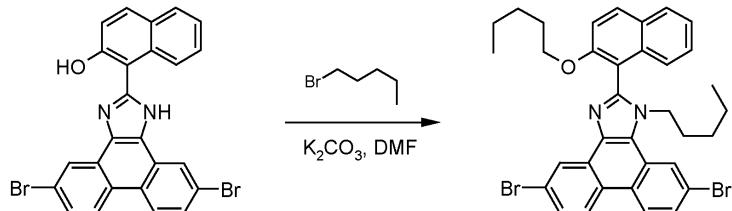
## 【0403】

生成物を実施例15bに従って調製し、エーテル中で煮詰め、DMFから再結晶化した(収量:34%)。融点:86~87℃。

## 【0404】

## 実施例19

## 【化149】



## 【0405】

生成物を実施例15bに従って調製し、エーテル中で煮詰め、エタノールで洗浄した(収量:87%)。融点:132.5~134.5℃。

## 【0406】

## 実施例20

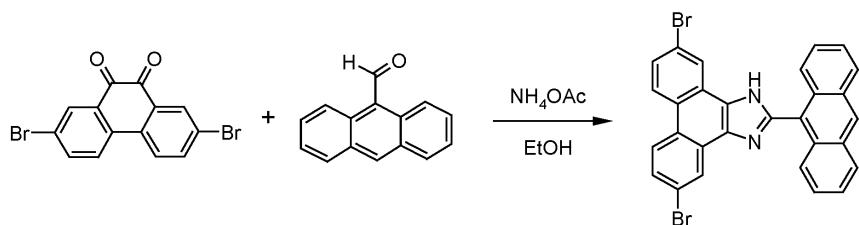
10

20

30

40

【化150】



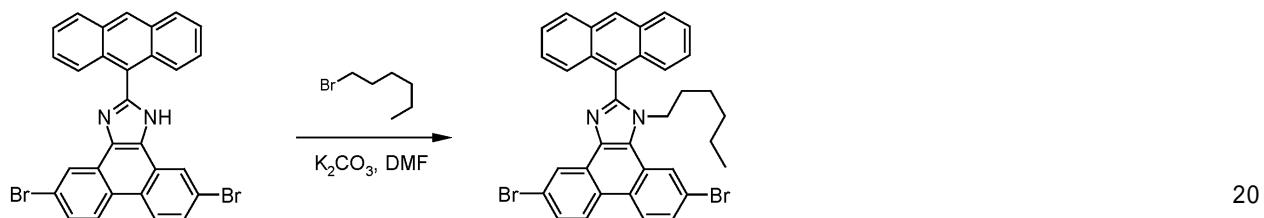
【0407】

生成物を実施例15aに従って9-アントラゼンカルブアルデヒドで調製した（収量：10  
95%）。

【0408】

実施例21

【化151】



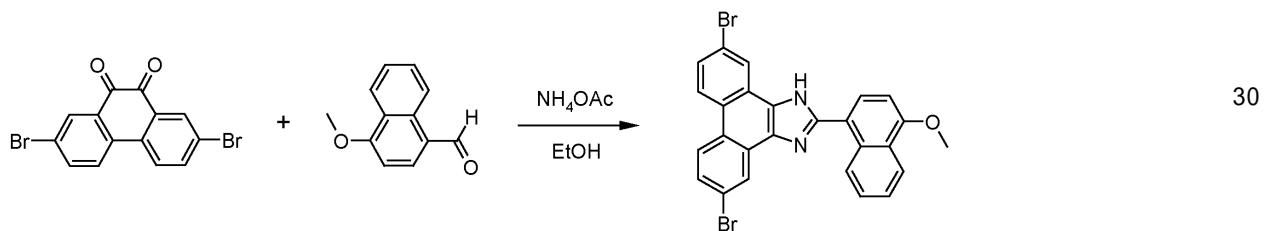
【0409】

生成物を実施例15bに従って調製し、DMF中で煮詰めた（収量：66%）。融点：  
209.5~211。

【0410】

実施例22

【化152】



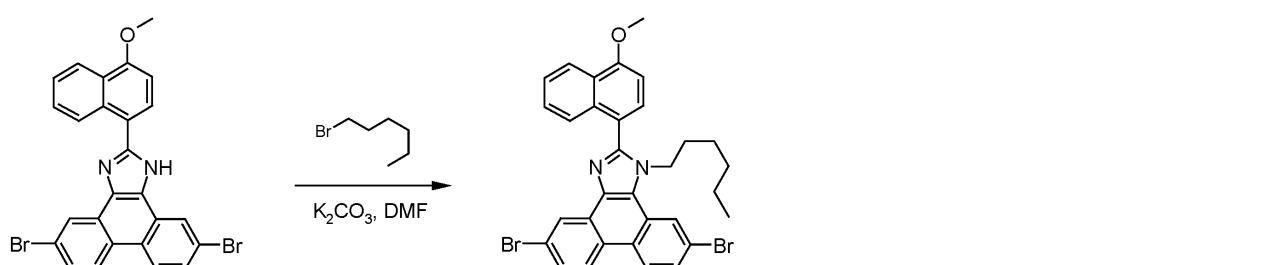
【0411】

生成物を実施例15aに従って4-メトキシ-1-ナフトアルデヒドで調製した（収量：  
84%）。

【0412】

実施例23

【化153】



【0413】

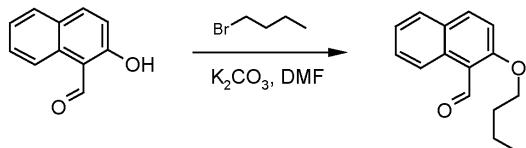
生成物を実施例15bに従って調製し、n-ヘキサンから再結晶化させた（収量：69  
50

%)。融点：162～164。

**【0414】**

**実施例24**

**【化154】**

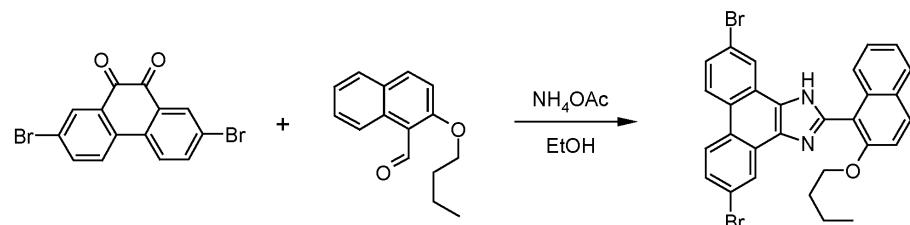


**【0415】**

(a) 乾燥DMF 30ml中、2-ヒドロキシ-ナフタレン-1-カルブアルデヒド 5.00g (29.0ミリモル)に、1-ブロモブタン 5.97g (43.6ミリモル)と炭酸カリウム 12.8g (87.1ミリモル)を窒素下で加えた。反応混合物を130℃で攪拌した。7時間後、固体を濾過した。濾過物をジクロロメタンで希釈し、有機相を水で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥させた。溶媒を真空下で除去し、生成物をメタノールから再結晶して表題の化合物を得た(収量：66%)。

**【0416】**

**【化155】**



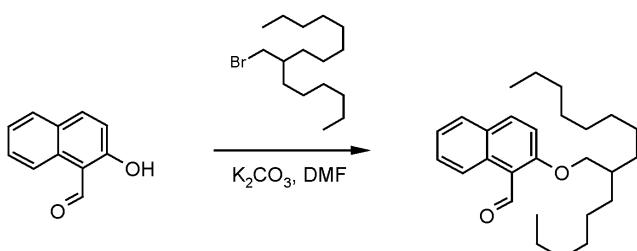
**【0417】**

(b) 生成物を実施例15aに従って実施例24aのアルデヒド生成物で調製した(収量：82%)。融点：268.5～270。

**【0418】**

**実施例25**

**【化156】**



**【0419】**

(a) 乾燥DMF 40ml中、2-ヒドロキシ-ナフタレン-1-カルブアルデヒド 10.00g (58.0ミリモル)に、1-ブロモ-2-ヘキシリデカン 21.3g (69.7ミリモル)および炭酸カリウム 20.1g (145ミリモル)を窒素下で加えた。反応混合物を130℃で攪拌した。1時間後、固体を濾過した。濾過物をジクロロメタンで希釈し、有機相を水で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥させた。溶媒を真空下で除去した。生成物をシリカゲル上でトルエン/シクロヘキサン 1:1 で濾過した(収量：96%)。

**【0420】**

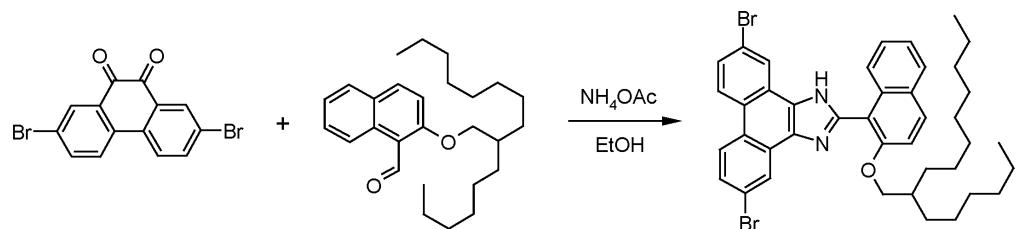
10

20

30

40

## 【化157】



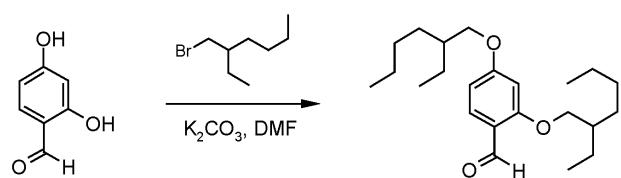
## 【0421】

(b) 生成物を実施例15aに従って実施例25aのアルデヒド生成物で調製した(収量: 68%)。

## 【0422】

実施例26

## 【化158】



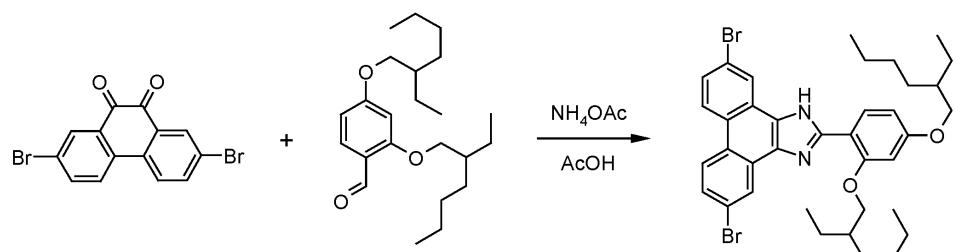
20

## 【0423】

(a) 生成物を実施例25aに従って2,4-ジヒドロキシベンズアルデヒドで調製した(収量: 80%)。

## 【0424】

## 【化159】



30

## 【0425】

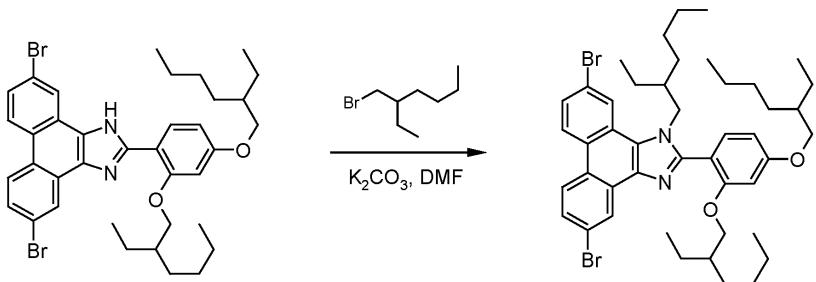
(b) 酢酸60ml中、2,7-ジブロモフェナントレン-9,10-キノン2.00g(5.46ミリモル)に、実施例26aからの生成物2.97g(8.20ミリモル)を窒素下で加えた。この混合物に、酢酸アンモニウム2.11g(27.3ミリモル)を加えた。反応混合物を130℃で攪拌した。1.5時間後、反応混合物を20℃に冷却し、生成物はゆっくり結晶化を始めた。生成物を濾過し、酢酸で洗浄し、n-ヘキサンからの再結晶化を3回行う(収量: 1.96g(51%))。

40

## 【0426】

実施例27

## 【化160】



## 【0427】

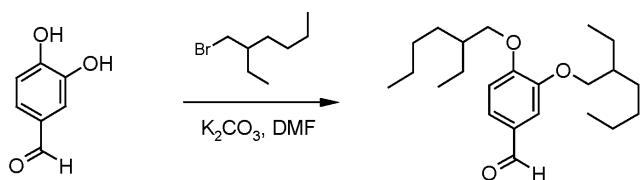
10

DMF 20ml中、実施例26bからの生成物2.10g(2.96ミリモル)に、1-ブロモ-2-エチルヘキサン2.86g(14.8ミリモル)および炭酸カリウム2.46g(17.8ミリモル)を窒素下で加えた。反応混合物を130℃で攪拌した。5日後、固体を濾過した。濾過物をジクロロメタンで希釈し、有機相を水で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥させた。溶媒を真空下で除去した。シリカゲル上のトルエンによる濾過は油の形の生成物を与えた(収量: 2.36g(97%))。

## 【0428】

実施例28

## 【化161】



20

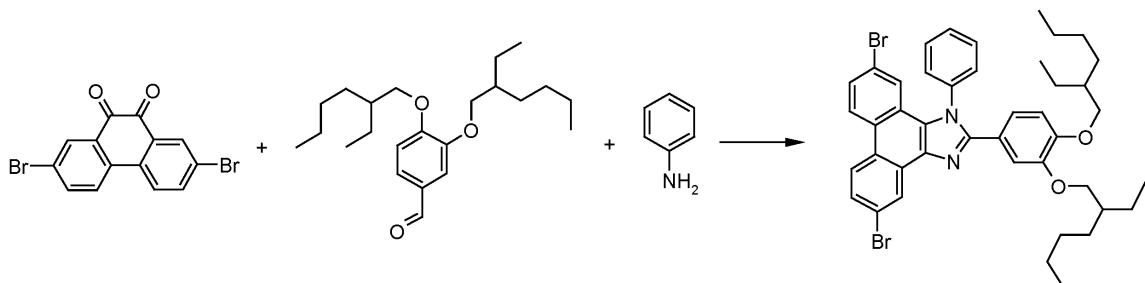
## 【0429】

生成物を実施例25aに従って3,4-ジヒドロキシベンズアルデヒドで調製した(収量: 100%)。

## 【0430】

## 【化162】

30



## 【0431】

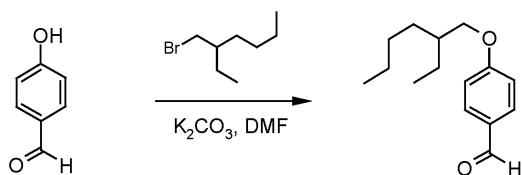
(b)酢酸(>98%)80ml中、2,7-ジブロモフェナントレン-9,10-キノン5.00g(13.7ミリモル)に、実施例28aの生成物5.45g(15.0ミリモル)、アニリン2.54g(27.3ミリモル)、および酢酸アンモニウム5.26g(68.3ミリモル)を窒素下で加えた。反応混合物を還流下で3時間加熱し、25℃に冷却した。生成物を濾過し、水、水性炭酸水素ナトリウム溶液、および水で洗浄し、イソプロパノールから数回再結晶した(収量: 54%)。融点: 117~118℃。

40

## 【0432】

実施例29

## 【化163】



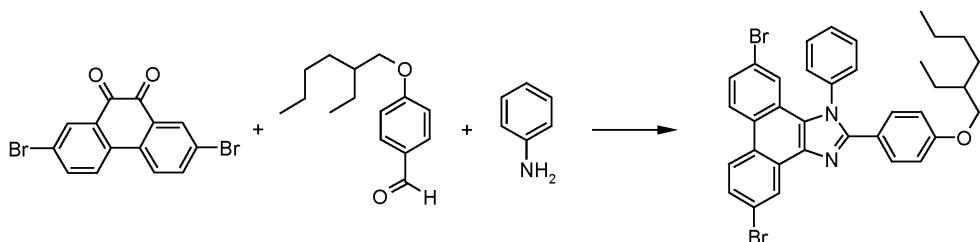
## 【0433】

(a) 生成物を実施例25aに従って4-ジヒドロキシベンズアルデヒドから出発して調製した(収量: 96%)。

10

## 【0434】

## 【化164】



## 【0435】

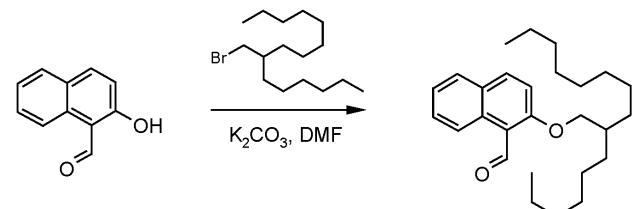
20

(b) 生成物を実施例28bに従って、実施例29aのアルデヒド生成物で調製し、白色の固体を得た(収量: 69%)。融点: 161.5 ~ 162.5。

## 【0436】

## 実施例30

## 【化165】



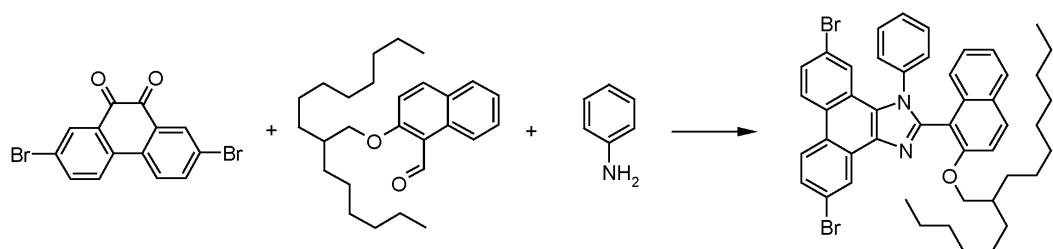
30

## 【0437】

(a) 生成物を実施例25aに従って調製した(収量: 96%)。

## 【0438】

## 【化166】



40

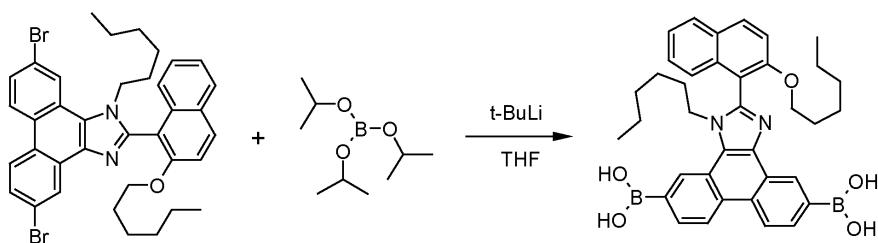
## 【0439】

(b) 生成物を実施例28bに従って、実施例25aのアルデヒド生成物で調製し、樹脂としての化合物を得た(収量: 27%)。

## 【0440】

## 実施例31

## 【化167】

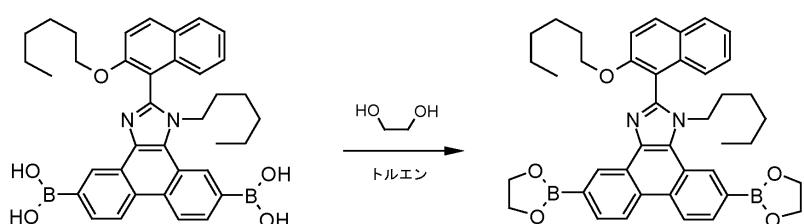


## 【0441】

(a) テトラヒドロフラン (THF) 150ml 中、実施例 12 b からの生成物 2.06 g (3.00ミリモル) に、*tert*-ブチルリチウム 10ml (15ミリモル) を -78 ℃ でアルゴン下で加えた。2 時間後、ホウ酸トリイソプロピル 1.69 g (9.00ミリモル) を加えた。反応混合物を -78 ℃ で 2 時間攪拌し、25 ℃ に暖め、2 時間攪拌を継続した。溶媒を真空下で除去した。生成物を THF 40ml に溶解し、水性 HCl 120ml を 0 ℃ で加えた。溶媒を真空下で除去した。生成物は精製することなく次のステップで用いた。

## 【0442】

## 【化168】



20

## 【0443】

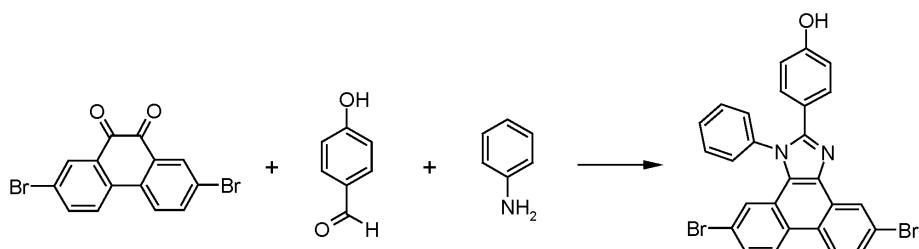
(b) トルエン 140ml 中、実施例 31 a の生成物 4.30 g (6.98ミリモル) に、エチレングリコール 520 mg (8.37ミリモル) を加えた。反応混合物を還流下で数時間加熱し、共沸によって水を除去した。トルエンを真空下で除去し、生成物をジエチルエーテル 4ml、n-ヘキサン 4ml、およびトルエン 2ml で洗浄し、表題の化合物を得た (収量: 1.73 g (37%))。融点: >200 ℃ (生成物は 200 ℃ で分解した)。

30

## 【0444】

## 実施例 32

## 【化169】



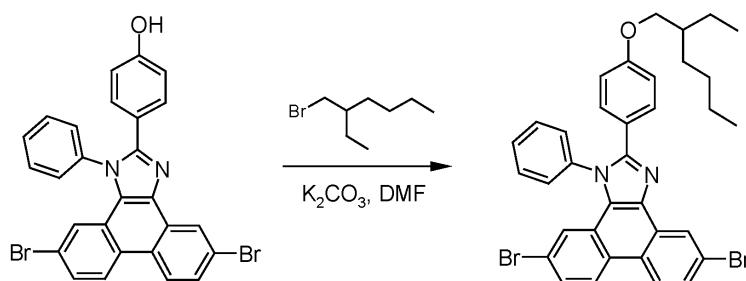
40

## 【0445】

(a) 酢酸 (>98%) 100ml 中、2,7-ジブロモフェナントレン-9,10-キノン 3.66 g (10.0ミリモル) に、4-ヒドロキシベンズアルデヒド 1.34 g (11.0ミリモル)、アニリン 1.03 g (11.0ミリモル)、および酢酸アンモニウム 3.08 g (40.0ミリモル) を窒素下で加えた。反応混合物を還流下で 4 時間加熱した。反応混合物を 25 ℃ に冷却し、生成物を濾過した。生成物を、水、水性炭酸水素ナトリウム溶液および水で洗浄し、メチルエチルケトン (MEK) から再結晶した (収量: 3.70 g (67%))。

## 【0446】

## 【化170】



## 【0447】

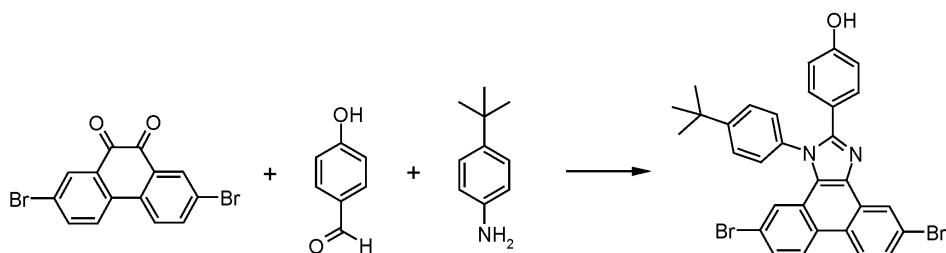
10

(b) DMF 12 モル中、実施例 32 a の生成物 3.20 g (6.00 ミリモル) に、1 - ブロモ - 2 - エチルヘキサン 2.32 g (12.0 ミリモル) と炭酸カリウム 2.49 g (18.0 ミリモル) を窒素下で加えた。反応混合物を 130 度で 4 時間攪拌した。反応混合物を水に注ぎ、水相をジクロロメタンで抽出した。生成物をジブチルエーテルから数回再結晶化した(収量: 2.90 g (74%))。融点: 161.5 ~ 162.5°。

## 【0448】

実施例 33

## 【化171】



20

## 【0449】

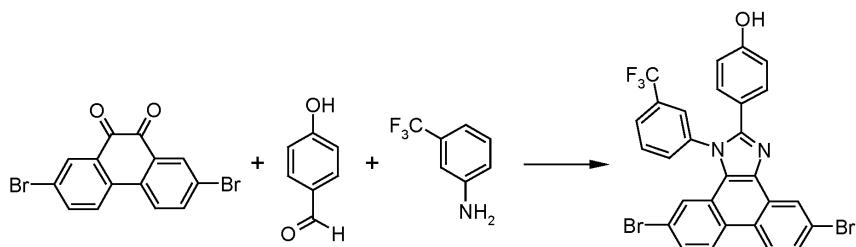
生成物を実施例 32 a に従って調製した(収量: 83%)。

## 【0450】

30

実施例 34

## 【化172】



## 【0451】

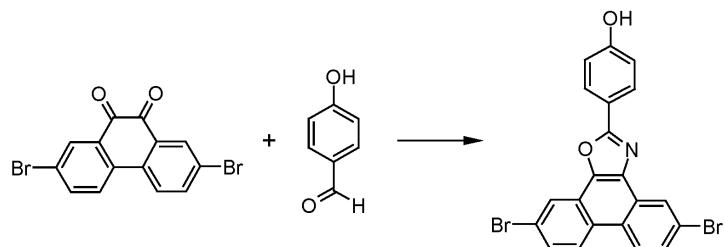
40

生成物を実施例 32 a に従って調製した(収量: 77%)。

## 【0452】

実施例 35

## 【化173】

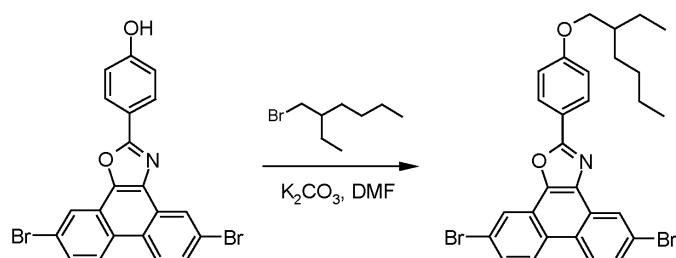


## 【0453】

(a) 酢酸 ( $> 98\%$ ) 100ml中、2,7-ジブロモフェナントレン-9,10-キノン3.66g (10.0ミリモル)に、4-ヒドロキシベンズアルデヒド1.34g (11.0ミリモル)、2-エチルヘキシリルアミン1.42g (11.0ミリモル)、および酢酸アンモニウム3.08g (0.10ミリモル)を窒素下で加えた。反応混合物を還流下で反応が完了するまで加熱し、25℃に冷却した。生成物を濾過し、酢酸、水性炭酸水素ナトリウム溶液と水で洗浄し、メチルエチルケトン50ml中で煮詰めた(収量: 2.50g (43%))。

## 【0454】

## 【化174】



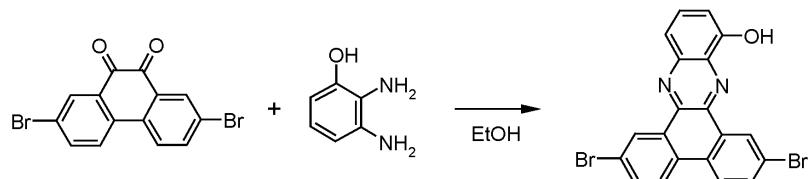
## 【0455】

(b) 生成物を実施例32bに従って調製し、ジ-n-ブチルエーテルから再結晶化した(収量: 1.5g (51%))。

## 【0456】

## 実施例36

## 【化175】



## 【0457】

(a) エタノール200ml中、2,7-ジブロモフェナントレン-9,10-キノン5g (13.7ミリモル)に、2,3-ジアミノフェノール2.04g (16.4ミリモル)を加えた。反応混合物を2時間還流した。反応混合物を25℃に冷却した。生成物を濾過し、エタノールで洗浄し、精製することなく次のステップに用いた。

## 【0458】

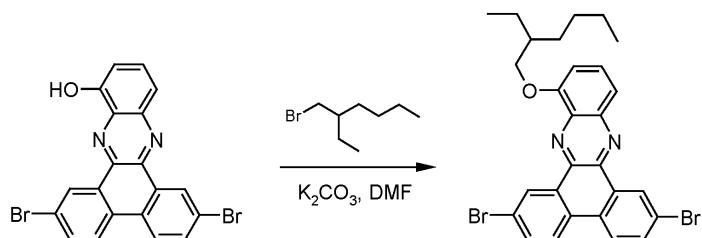
10

20

30

40

## 【化176】



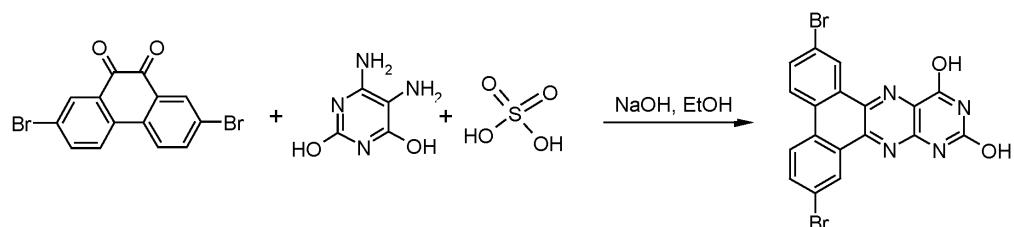
## 【0459】

(b) 生成物を実施例32bに従って調製し、DMFから再結晶化した(収量: 27%)  
10  
。融点: 171.5 ~ 172.5。

## 【0460】

## 実施例37

## 【化177】



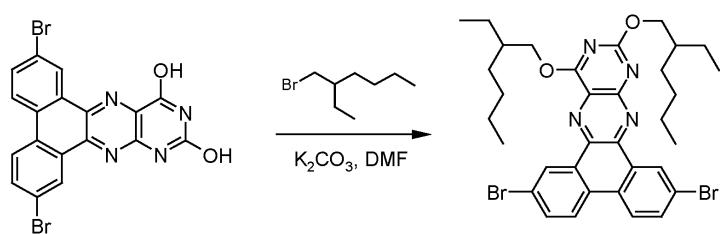
20

## 【0461】

(a) エタノール250ml中、2,7-ジブロモフェナントレン-9,10-キノン5g(13.7ミリモル)に、5,6-ジアミノ-2,4-ジヒドロキシピリミジン硫酸塩3.94g(16.4ミリモル)およびNaOH 1.09g(27.3ミリモル)を加えた。反応混合物を還流下で5時間還流し、25℃に冷却した。生成物を濾過し、エタノールと水で洗浄し、精製することなく次のステップに用いた。

## 【0462】

## 【化178】



30

## 【0463】

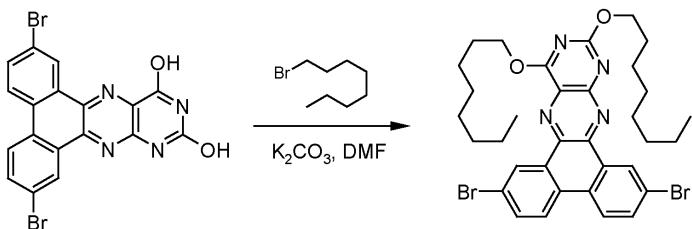
(b) 生成物を実施例32bに従って調製した。生成物をDMFから再結晶化し、カラムクロマトグラフィ(SiO<sub>2</sub>、トルエン/シクロヘキサン2:1)によって更に精製し、表題の化合物を得た(収量: 1.13g(13%))。融点: 157.5 ~ 159.5

40

## 【0464】

## 実施例38

## 【化179】



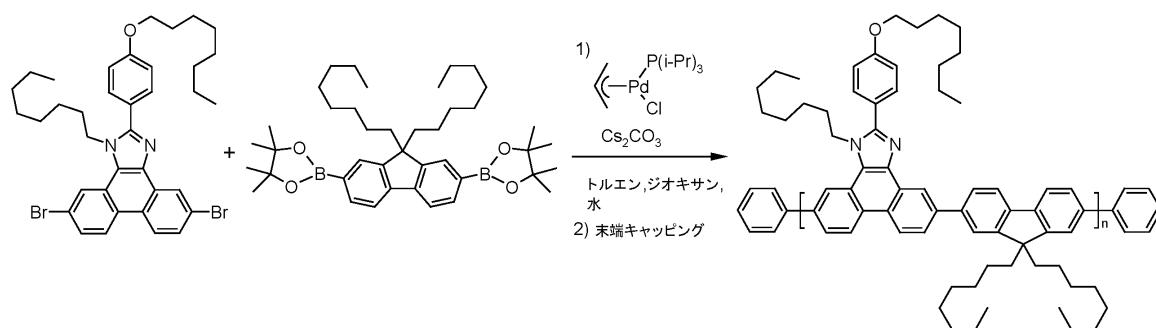
## 【0465】

生成物を実施例37bに従って調製し、ジエチルエーテルとDMFから再結晶化した(10  
収量: 40%)。融点: 173.5 ~ 174.5。

## 【0466】

実施例39

## 【化180】



10

20

30

30

## 【0467】

実施例9cのジブロミド生成物1.0778g(1.56ミリモル)および2,7-ビス(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)-9,9-ジオクチルフルオレン1.0000g(1.56ミリモル)を、ジオキサン15mlとトルエン5mlに溶解した。この溶液をアルゴンで脱気した。アリル(トリイソ-プロピルホスフィン)パラジウムクロリド50mgを加え、反応混合物をアルゴンで脱気した。水5ml中の炭酸セシウム2.5352g(7.78ミリモル)を脱気し、反応混合物に加えた。脱気の後、反応混合物を還流下で総計18時間加熱した。2時間の反応後、脱気ジオキサン3mlと脱気トルエン3mlを加えた。更に30分間の反応後、脱気トルエン6mlを加えた。更に4時間の反応後、トルエン8mlを加えた。脱気プロモベンゼン370mg(2.33ミリモル)を加え、反応混合物を還流下で2時間加熱した。トルエン5ml中、4,4,5,5-テトラメチル-2-フェニル-1,3,2-ジオキサボロラン789mg(3.89ミリモル)の脱気溶液を加え、反応混合物を2時間攪拌した。反応混合物をメタノール300ml中に注いだ。GPC(ポリスチレン標準) $M_w = 201828\text{ g/mol}$ 、 $PD = 4.96$ 。

## 【0468】

40

このポリマーを実施例11に述べたようにして精製した。精製の後、ポリマーは、以下のGPCデータ(ポリスチレン標準)を示す( $M_w = 135084\text{ g/mol}$ 、 $PD = 3.24$ )。

## 【0469】

実施例39の生成物0.8重量%をトルエンに溶解した。この溶液を孔幅0.2μmのテフロンフィルターで濾過し、石英基板上に150rpmでスピンドルティングした。フィルムの特性をUV-VISおよびフォトルミネセント測定(Perkin Elmer LS50B)で測定し、固体フィルムの吸収スペクトルにおいて392nmの<sub>max</sub>、およびフォトルミネセントスペクトルにおいて434nm(励起波長368nm)の最大発光を示す。フィルムはポリフルオレンホモポリマー標準に対して固体量子収率75%が得られ

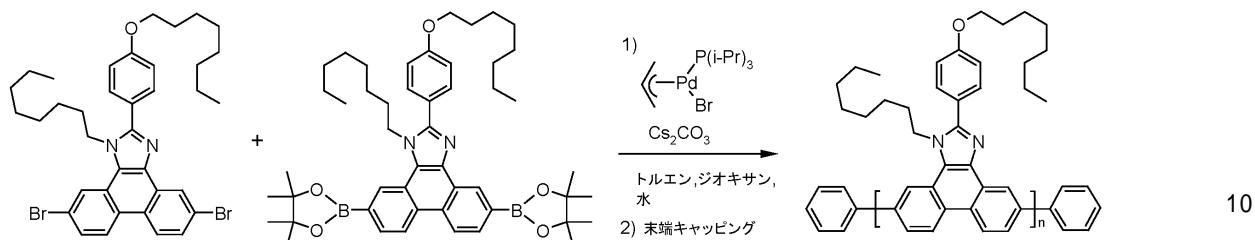
50

た。

**【0470】**

**実施例 40**

**【化181】**



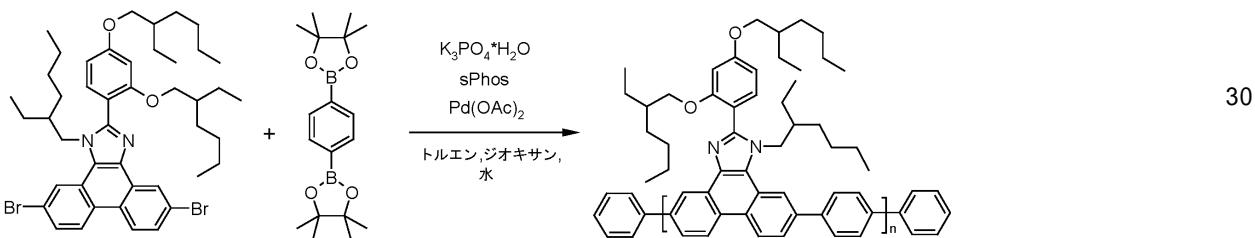
**【0471】**

実施例 9c のジブロミド生成物 1.0564 g (1.53 ミリモル) および実施例 14 のジブロミド生成物 1.2000 g (1.53 ミリモル) を、ジオキサン 15 ml およびトルエン 5 ml に溶解した。この溶液をアルゴンで脱気した。アリル (トリイソプロピルホスフィン) パラジウムプロミド (CAS 244159-80-6) 61 mg を加え、反応混合物をアルゴンで脱気した。水 5 ml 中の炭酸セシウム 2.4849 g (7.63 ミリモル) を脱気し、反応混合物に加えた。脱気の後、反応混合物を還流下で総計 18 時間加熱した。40 分間の反応後、脱気トルエン 2 ml を加えた。反応の間、脱気トルエン 2 ml を更に 6 回加えた。脱気プロモベンゼン 360 mg (2.29 ミリモル) を加え、反応混合物を還流下で 2 時間加熱した。トルエン 5 ml 中、4,4,5,5-テトラメチル-2-フェニル-1,3,2-ジオキサボロラン 780 mg (3.81 ミリモル) の脱気溶液を加え、反応混合物を 2 時間攪拌した。反応混合物をメタノール 300 ml 中に注いだ。GPC (ポリスチレン標準)  $M_w = 6120 \text{ g/mol}$ 、PD = 1.77。

**【0472】**

**実施例 41**

**【化182】**



**【0473】**

1,4-ビス(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)ベンゼン 0.9290 g (2.8148 ミリモル) および実施例 27 のジブロミド生成物 2.3104 g (2.8148 ミリモル) の混合物を、トルエン 15 ml およびジオキサン 15 ml に溶解した。この溶液を脱気し、アルゴンで 3 回再装填した。2-ジシクロヘキシリホスフィノ-2',6'-ジメトキシビフェニル (sPhos) 69.3 mg (0.169 ミリモル) 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) 63 mg (0.028 ミリモル) を加え、反応混合物をアルゴンで脱気した。水 4.5 ml 中、硫酸カリウム三塩基一水和物 3.41 g (14.1 ミリモル) を脱気し、反応混合物に加えた。脱気の後、反応混合物を還流下で 20 時間加熱した。脱気プロムベンゼン 663 mg (4.22 ミリモル) を加え、反応混合物を還流下で 2 時間加熱した。トルエン 3 ml 中、4,4,5,5-テトラメチル-2-フェニル-[1,3,2]ジオキサボロラン 1.44 g (7.037 ミリモル) の脱気溶液を加えた。反応混合物を還流下で 2 時間加熱し、25℃ に冷却し、1% 水性 NaCN 溶液 100 ml で処理した。この混合物を室温で 8 時間攪拌し、トルエンで抽出した。溶媒を真空下で 30 ml 残るまで除去した。得られた溶液をメタノール 100 ml 中に注いだ。ポリマーを濾過し、トルエン 30 ml に溶解し、1%

40

50

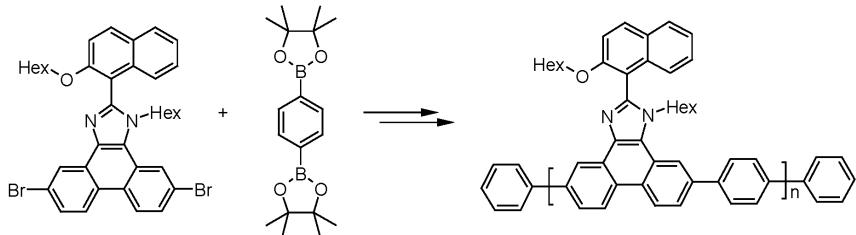
水性 NaCN 溶液 100ml で処理した。この混合物を再び室温で 8 時間攪拌し、トルエンで抽出した。溶媒を真空下で 30ml 残るまで除去した。得られた溶液をメタノール 100ml に注いだ。ポリマーを濾過し、THF 40ml に溶解した。溶液をメタノール 100ml に注ぎ、ポリマーを濾過した。THF からの沈殿を再度繰り返す（収率：1.38g (67%)）。GPC（ポリスチレン標準） $M_w = 32859$  g / モル、PD = 1.93。ポリマー生成物のフォトルミネセント測定を実施例 39 に述べたようにして行った。450 nm で最大発光。

## 【0474】

## 実施例 4 2

## 【化 183】

10



## 【0475】

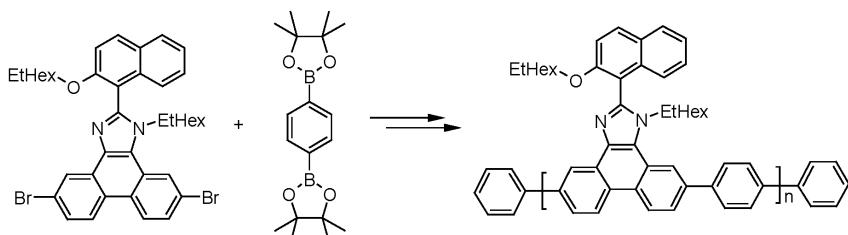
上記ポリマーを、実施例 4 1 に従って、実施例 12 b のジブロミド生成物および 1,4 - ビス (4,4',5,5' - テトラメチル - 1,3,2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) ベンゼンで調製した。GPC（ポリスチレン標準） $M_w = 66775$  g / モル、PD = 2.85、EtHex = n - ヘキシル。

20

## 【0476】

## 実施例 4 3

## 【化 184】



30

## 【0477】

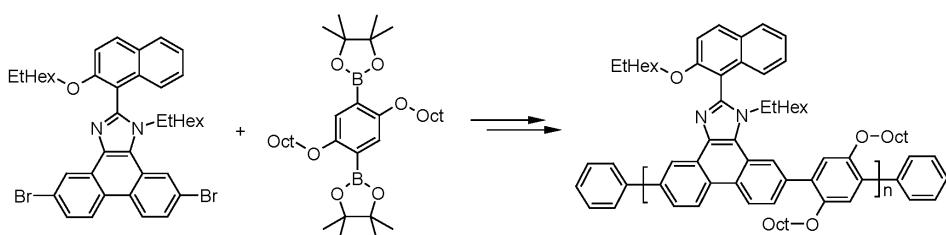
上記ポリマーを、実施例 4 1 に従って、実施例 16 のジブロミド生成物および 1,4 - ビス (4,4',5,5' - テトラメチル - 1,3,2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) ベンゼンで調製した。GPC（ポリスチレン標準） $M_w = 110216$  g / モル、PD = 3.36、EtHex = 2 - エチルヘキシル。ポリマー生成物のフォトルミネセント測定を実施例 39 に記載したようにして行った。440 nm で最大発光。

## 【0478】

## 実施例 4 4

40

## 【化 185】



## 【0479】

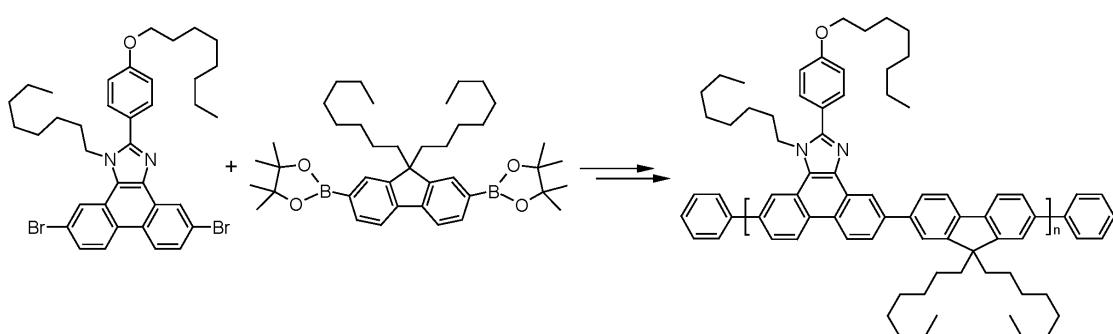
50

上記ポリマーを、実施例 4 1 に従って、実施例 1 6 のジブロミド生成物および 1 , 4 - ビス [ 4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - ( 1 , 3 , 2 ) ジオキサボロラン - 2 - イル ] - 2 , 5 - ジオクチルオキシフェニレン ( C A S 4 5 7 9 3 1 - 2 6 - 9 ) で調製した。 G P C ( ポリスチレン標準 )  $M_w = 9 5 0 0$  g / モル、 P D = 1 . 2 0 、 E t H e x = 2 - エチルヘキシリ。ポリマー生成物のフォトルミネセント測定を実施例 3 9 に記載したようにして行った。 4 2 8 nm で最大発光。

## 【 0 4 8 0 】

実施例 4 5

## 【 化 1 8 6 】



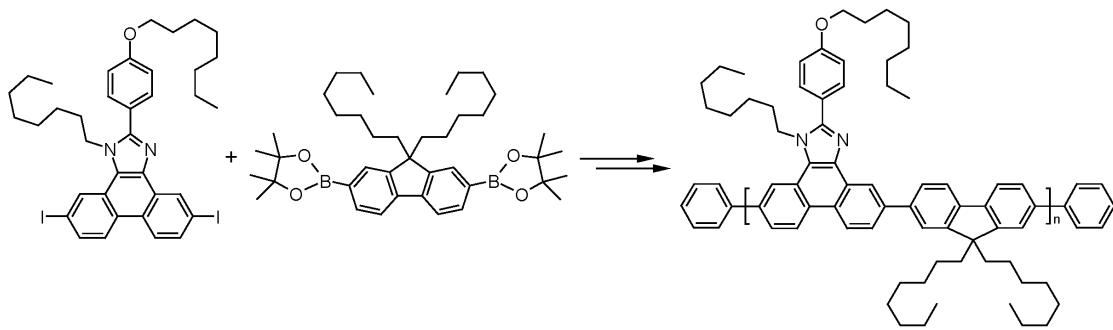
## 【 0 4 8 1 】

上記ポリマーを、実施例 4 1 に従って、実施例 9 c のジブロミド生成物および 2 , 7 - ビス ( 4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル ) - 9 , 9 - ジオクチルフルオレンで調製した。 G P C ( ポリスチレン標準 )  $M_w = 1 6 2 1 4$  5 g / モル、 P D = 3 . 8 7 、 O c t = n - オクチル。ポリマー生成物のフォトルミネセント測定を実施例 3 9 に記載したようにして行った。 4 3 3 nm で最大発光。

## 【 0 4 8 2 】

実施例 4 6

## 【 化 1 8 7 】



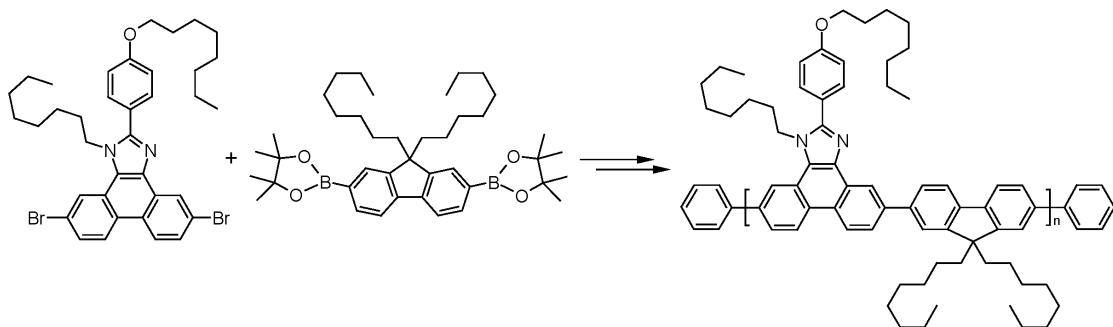
## 【 0 4 8 3 】

上記ポリマーを、実施例 8 5 に従って、実施例 1 0 c のジブロミド生成物および 2 , 7 - ビス ( 4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル ) - 9 , 9 - ジオクチルフルオレンで調製した。 G P C ( ポリスチレン標準 )  $M_w = 3 9 4 3$  8 g / モル、 P D = 2 . 2 3 、 O c t = n - オクチル。

## 【 0 4 8 4 】

実施例 4 7

## 【化188】



## 【0485】

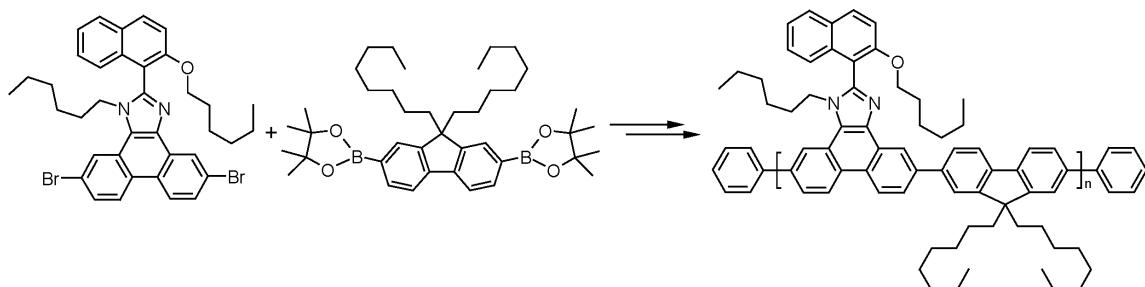
上記ポリマーを、実施例41に従って、実施例9cのジブロミド生成物および2,7-ビス(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)-9,9-ジオクチルフルオレンで調製した。GPC(ポリスチレン標準) $M_w = 16214$ 5 g / モル、PD = 3.87、Oct = n-オクチル。ポリマー生成物の蛍光強度測定を実施例39に記載したようにして行った。433 nmで最大発光。

## 【0486】

## 実施例48

## 【化189】

20



## 【0487】

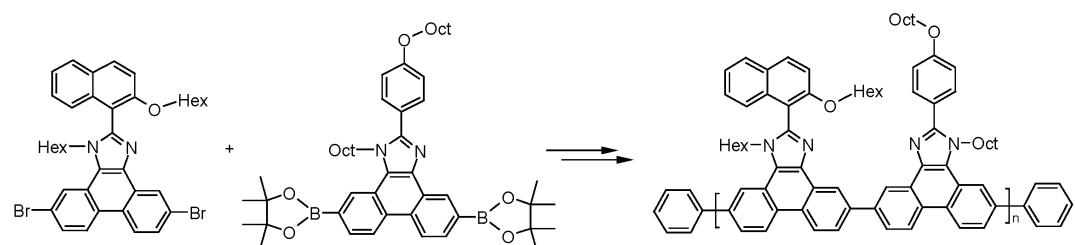
上記ポリマーを、実施例85に従って、実施例12bのジブロミド生成物および2,7-ビス(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)-9,9-ジオクチルフルオレンで調製した。GPC(ポリスチレン標準) $M_w = 1533$ 10 g / モル、PD = 2.59、Oct = n-オクチル。ポリマー生成物の蛍光強度測定を実施例39に記載したようにして行った。431 nmで最大発光。

30

## 【0488】

## 実施例49

## 【化190】



## 【0489】

上記ポリマーを、実施例41に従って、実施例12bのジブロミド生成物および実施例14のジブロモ生成物で調製した。GPC(ポリスチレン標準) $M_w = 196000$  g / モル、PD = 4.70、Oct = n-オクチル、Hex = n-ヘキシル。ポリマー生成物の蛍光強度測定を実施例39に記載したようにして行った。465 nmで最大発光。

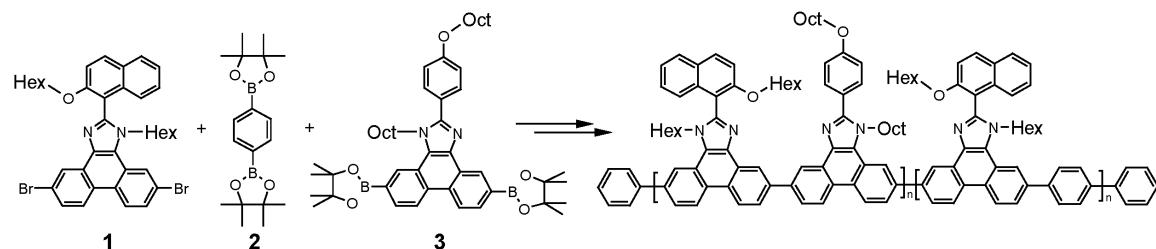
50

光。

**【0490】**

**実施例 50**

**【化191】**



**【0491】**

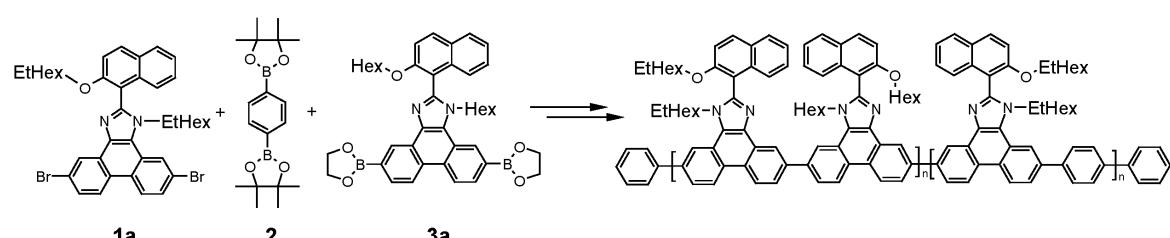
上記ポリマーを、実施例41に従って、実施例12bのジブロミド生成物(1)、1,4-ビス(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)ベンゼン(2)、および実施例14のジボロナート生成物(3)で調製した。モノマー1/2/3を2:1:1の比率で用いた。GPC(ポリスチレン標準) $M_w = 741100$ g/モル、PD=7.0、Oct=n-オクチル、Hex=n-ヘキシル。ポリマー生成物のフォトルミネセント測定を実施例39に記載したようにして行った。458 nmで最大発光。

10

**【0492】**

**実施例 51**

**【化192】**



**【0493】**

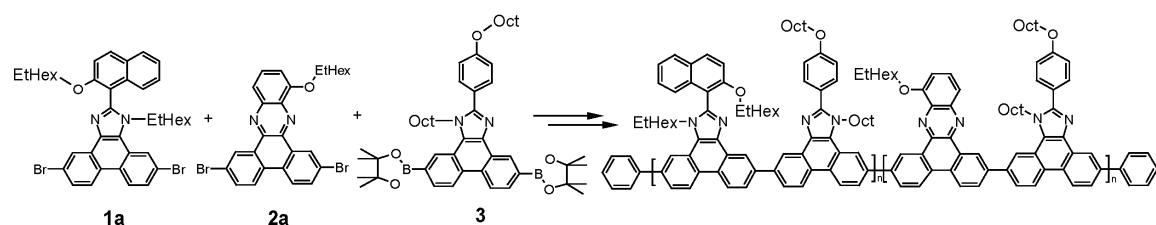
上記ポリマーを、実施例41に従って、実施例16のジブロミド生成物(1a)、1,4-ビス(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)ベンゼン(2)、および実施例31bのジボロナート生成物(3)で調製した。モノマー1a/2/3を2:1:1の比率で用いた。GPC(ポリスチレン標準) $M_w = 53180$ g/モル、PD=2.38、EthHex=2-エチルヘキシル。

30

**【0494】**

**実施例 52**

**【化193】**



**【0495】**

上記ポリマーを、実施例41に従って、実施例16のジブロミド生成物(1a)、実施例36bのジブロミド生成物(2a)、および実施例14のジボロナート生成物(3)で調製した。モノマー1a/2a/3を1:1:2の比率で用いた。GPC(ポリスチレン

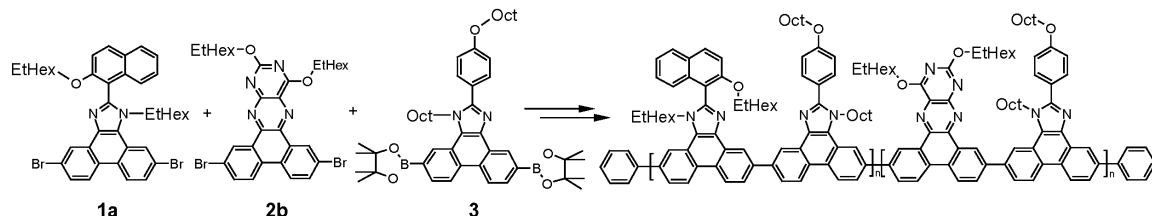
50

標準)  $M_w = 48558$  g / モル、  $PD = 2.00$ 、  $E_{t\text{HeX}} = 2$  - エチルヘキシル、  $Oct = n$  - オクチル。ポリマー生成物のフォトルミネセント測定を実施例 39 に記載したようにして行った。525 nm で最大発光。

## 【0496】

## 実施例 53

## 【化194】



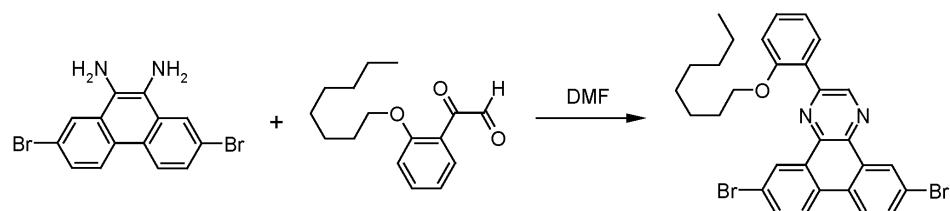
## 【0497】

上記ポリマーを、実施例 41 に従って、実施例 16 のジブロミド生成物 (1a)、実施例 37b のジブロミド生成物 (2b)、および実施例 14 のジボロナート生成物 (3) で調製した。モノマー 1a / 2b / 3 を 1 : 1 : 2 の比率で用いた。GPC (ポリスチレン標準)  $M_w = 332100$  g / モル、  $PD = 6.10$ 、 GPC (絶対較正)  $M_w = 255100$ 、  $PD = 2.70$ 、  $E_{t\text{HeX}} = 2$  - エチルヘキシル、  $Oct = n$  - オクチル。ポリマー生成物のフォトルミネセント測定を実施例 39 に記載したようにして行った。547 nm で最大発光。

## 【0498】

## 実施例 54

## 【化195】



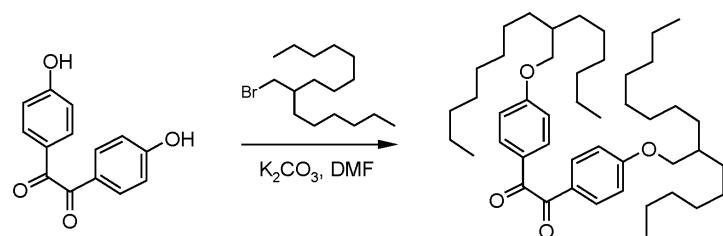
## 【0499】

ジメチルホルムアミド 50 ml 中、2,7-ジブロモ-フェナントレン-9,10-ジアミン 3.00 g (8.2 ミリモル) に、2-オクチルオキシフェニルグリオキサル 2.90 g (11.1 ミリモル) を加えた。反応混合物を 120 °C で 14 時間加熱し、次いで 25 °C に冷却した。EtOAc (250 ml) および水 (200 ml) を加え、相を分離し、有機相を水と塩水で洗浄 (3 × 250 ml) し、 $\text{Na}_2\text{SO}_4$  上で乾燥し、シリカの詰め物でfiltration し、減圧下で蒸発させた。シリカゲル上のカラムクロマトグラフィ (ヘキサン / EtOAc 20 : 1)、続いて結晶化 (EtOAc) によって黄色固体の形の生成物を得た (収量、19%)。融点、113.5 ~ 116 °C。

## 【0500】

## 実施例 55

## 【化196】

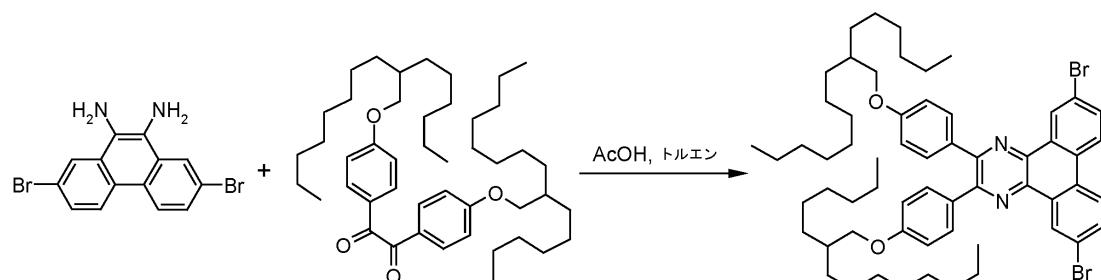


## 【0501】

(a) ジメチルホルムアミド(30ml)中、4,4'-ジヒドロキシベンジル3.00g(12.4ミリモル)と炭酸カリウム8.56g(61.9ミリモル)に、1-ブロモ-2-ヘキシリデカン11.34g(37.2ミリモル)を加えた。反応混合物を120度22時間加熱し、次いでH<sub>2</sub>O中に注ぎ、CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>で抽出した。シリカゲル上のカラムクロマトグラフィ(ヘキサン/EtOAc 20、1)によって黄色液体の形の生成物を得た(収量、100%)。

## 【0502】

## 【化197】



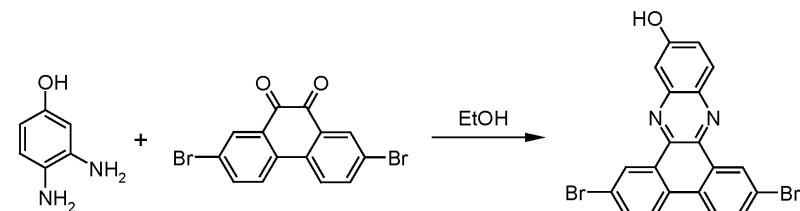
## 【0503】

(b) AcOH 50mlおよびトルエン25ml中、2,7-ジブロモフェナントレン-9,10-ジアミン1.85g(5.05ミリモル)に、4,4'-ビス-(2-ヘキシリデシロキシ)ベンジル4.19g(6.06ミリモル)を加えた。反応混合物を還流下で18時間加熱し、溶媒を減圧下で蒸発させた。シリカゲル上のカラムクロマトグラフィ(ヘキサン/EtOAc 30、1)、続いて粉碎(EtOH)によって黄色固体の形の生成物を得た(収量、75%)。融点、66~67°。

## 【0504】

## 実施例 5 6

## 【化198】

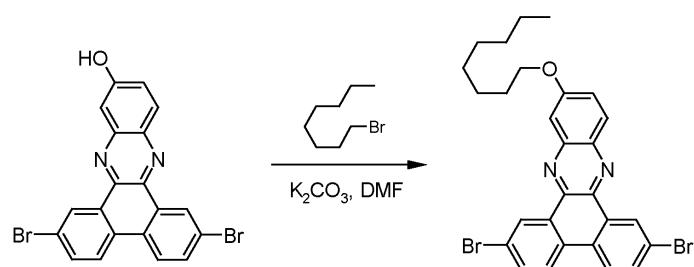


## 【0505】

(a) EtOH(250ml)中、2,7-ジブロモフェナントレン-9,10-キノン10.98g(30.0ミリモル)の懸濁物に、3,4-ジアミノフェノール4.47g(36.0ミリモル)を加えた。反応混合物を還流下で3時間攪拌し、水(100ml)を加え、反応混合物を室温に冷却し、濾過し、EtOHで洗浄してオリーブ緑色の固体として生成物を得た(収量、87%)。

## 【0506】

## 【化199】



## 【0507】

40

50

40

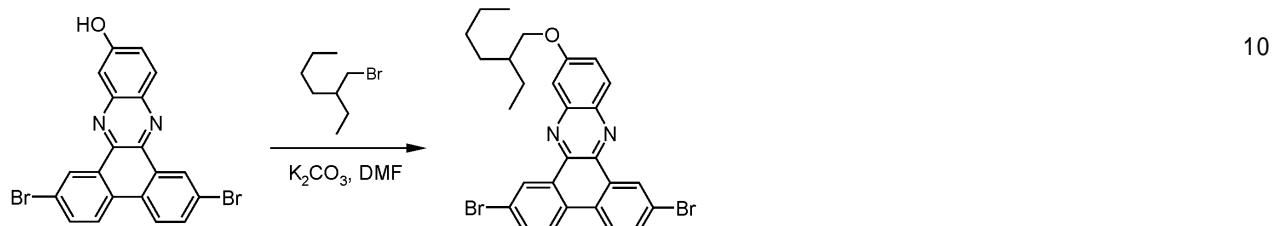
50

(b) 実施例 56 a の生成物 0.23 g (0.50 ミリモル) に、1-ブロモオクタン 0.14 g (0.75 ミリモル)、炭酸カリウム 0.21 g (1.50 ミリモル)、およびジメチルホフムアミド 5 ml を加えた。反応混合物を窒素下で 120 度攪拌した。2 時間後、EtOH (20 ml) と水 (20 ml) を加え、混合物を室温まで冷却し、濾過して褐色固体として生成物を得た(収量、88%)。融点、150 ~ 152。

## 【0508】

## 実施例 57

## 【化 200】



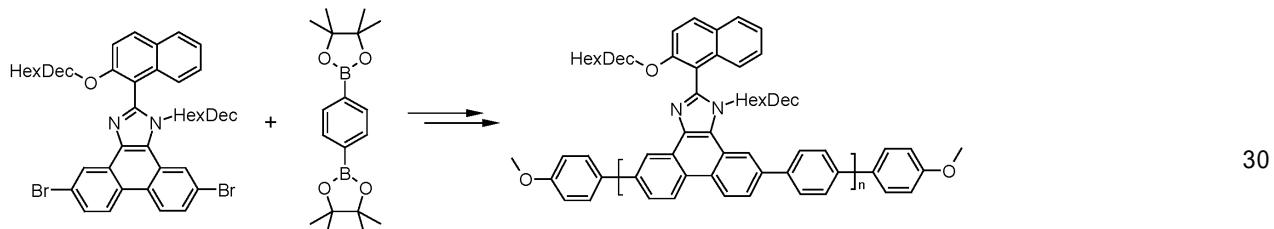
## 【0509】

実施例 56 a の生成物 6.81 g (15 ミリモル) に、1-ブロモ - 2 - エチルヘキサン 4.35 g (22.5 ミリモル)、炭酸カリウム 6.22 g (45 ミリモル)、およびジメチルホフムアミド 100 ml を加えた。反応混合物を窒素下 120 度攪拌した。3.5 時間後、水 (150 ml) を加え、混合物を室温まで冷却して濾過した。粗生成物をジメチルホフムアミドとヘキサン / トルエンから再結晶によって精製し、黄褐色固体を得た(収量、55%)。融点、146.5 ~ 148。

## 【0510】

## 実施例 58

## 【化 201】



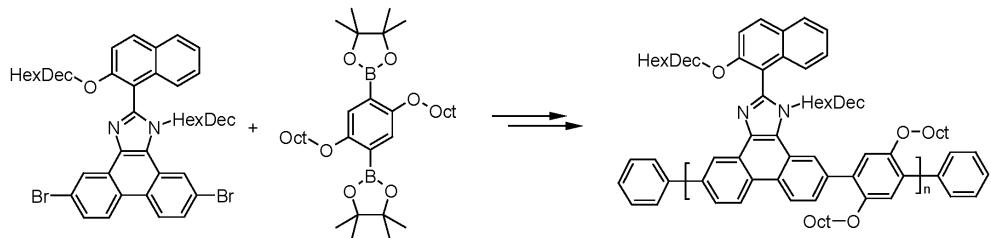
## 【0511】

上記ポリマーを、実施例 41 に従って、実施例 17 のジブロミド生成物および 1,4-ビス(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)ベンゼンで調製した。1,4-ビス-(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)ベンゼン、2-(4-メトキシフェニル)-4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン、および 4-メトキシフェニル-ブロミドを末端キャッピング剤として用いた。GPC (ポリスチレン標準)  $M_w = 250200$  g / モル、PD = 4.3。GPC (絶対較正)  $M_w = 165300$  g / モル、PD = 2.9。HexDec = 2-ヘキシリルデシル。ポリマー生成物のフォトルミネセント測定を実施例 39 に述べたようにして行った。439 nm で最大発光。

## 【0512】

## 実施例 59

## 【化202】



## 【0513】

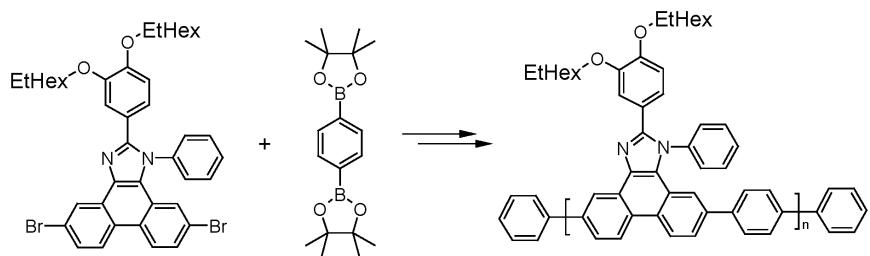
上記ポリマーを、実施例41に従って、実施例17のジブロミド生成物および1,4-ビス[4,4',5,5'-テトラメチル-(1,3,2)-ジオキサボロラン-2-イル]-2,5-ジオクチルオキシフェニレン(CAS 457931-26-9)で調製した。GPC(ポリスチレン標準) $M_w = 1000000$  g / モル、PD = 2.1。GPC(絶対較正) $M_w = 42700$  g / モル、PD = 1.7。HexDec = 2-ヘキシリデシル。 $M_w = 165300$  g / モル、PD = 2.9。HexDec = 2-ヘキシリデシル。ポリマー生成物のフォトルミネセント測定を実施例39に述べたようにして行った。423 nmで最大発光。

## 【0514】

## 実施例60

## 【化203】

20



## 【0515】

上記ポリマーを、実施例41に従って、実施例28のジブロミド生成物および1,4-ビス(4,4',5,5'-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)ベンゼンで調製した。GPC(絶対較正) $M_w = 1061000$  g / モル、PD = 1.9。EtHex = 2-エチルヘキシリデシル。ポリマー生成物のフォトルミネセント測定を実施例39に述べたようにして行った。471 nmで最大発光。

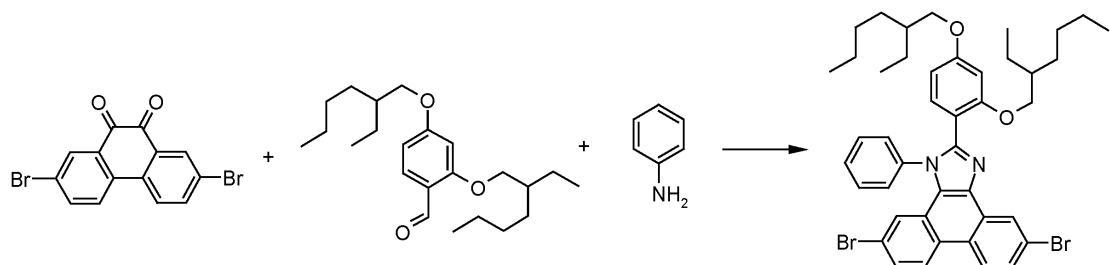
30

## 【0516】

## 実施例61

## 【化204】

40



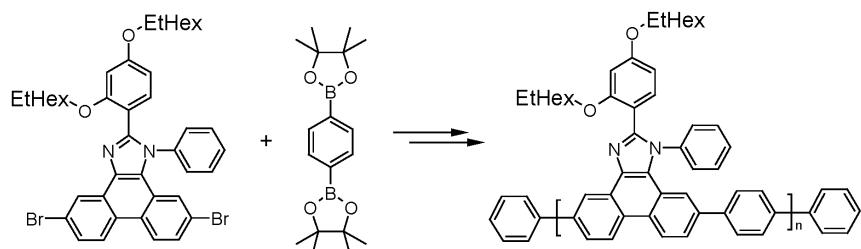
## 【0517】

上記ポリマーを、実施例28bに従って調製した。(収量、34%)

## 【0518】

## 実施例62

## 【化205】



## 【0519】

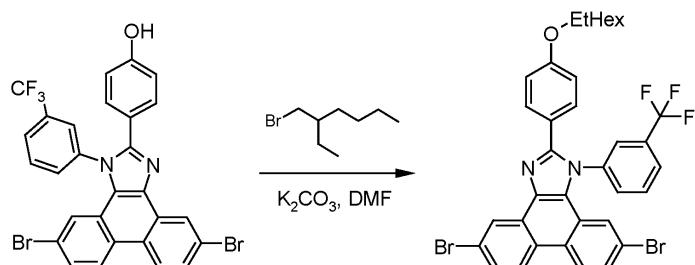
10

上記ポリマーを、実施例41に従って、実施例61のジブロミド生成物および1,4-ビス(4,4',5,5'-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)ベンゼンで調製した。GPC(絶対較正)  $M_w = 560000$  g / モル、PD = 2.4。EtHex = 2-エチルヘキシル。ポリマー生成物のフォトルミネセント測定を実施例39に述べたようにして行った。459 nmで最大発光。

## 【0520】

## 実施例63

## 【化206】



20

## 【0521】

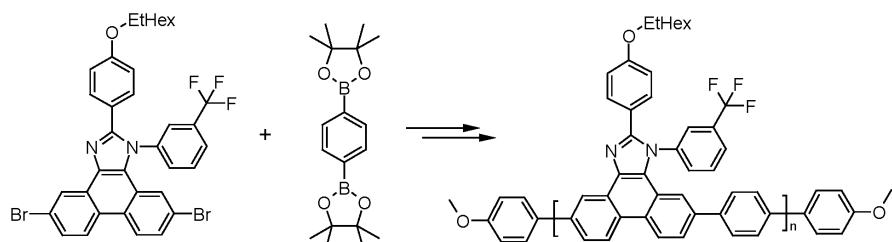
上記生成物は、実施例32bに従って調製した(収量、45%)。融点、144~145。EtHex = 2-エチルヘキシル。

## 【0522】

30

## 実施例64

## 【化207】



## 【0523】

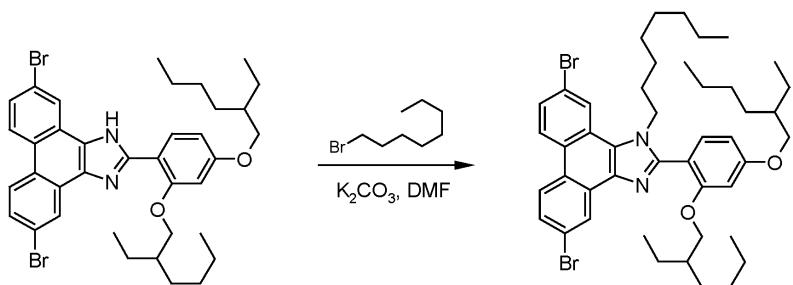
40

上記ポリマーを、実施例41に従って、実施例63のジブロミド生成物および1,4-ビス(4,4',5,5'-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)ベンゼンで調製した。2-(4-メトキシフェニル)-4,4',5,5'-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロランと4-メトキシフェニル-ブロミドを末端キャッピング剤として用いた。GPC(絶対較正)  $M_w = 1794000$  g / モル、PD = 2.5。EtHex = 2-エチルヘキシル。ポリマー生成物のフォトルミネセント測定を実施例39に述べたようにして行った。472 nmで最大発光。

## 【0524】

## 実施例65

## 【化208】



## 【0525】

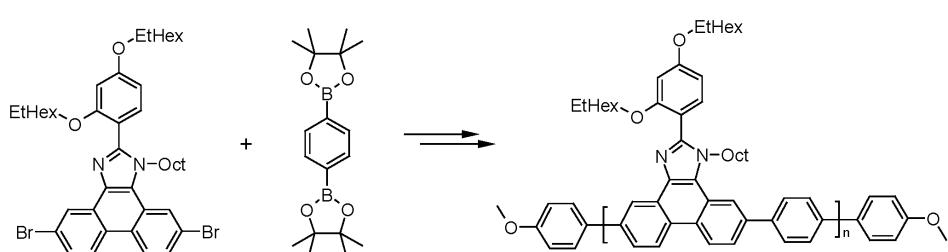
10

上記生成物を、実施例27に従って調製し、油としての生成物を得た（収量、26%）。

## 【0526】

## 実施例66

## 【化209】



20

## 【0527】

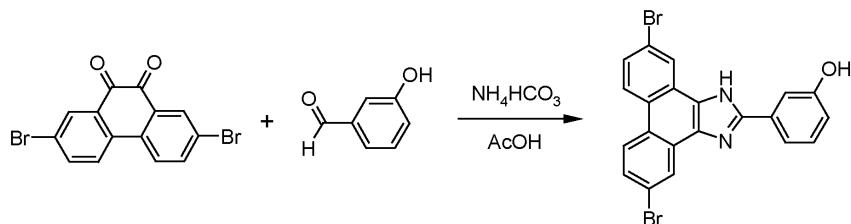
上記ポリマーを、実施例41に従って、実施例65のジブロミド生成物および1,4-ビス(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)ベンゼンで調製した。2-(4-メトキシ-フェニル)-4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロランおよび4-メトキシフェニル-ブロミドを末端キャッピング剤として用いた。GPC(絶対較正)  $M_w = 604000$  g/mol、PD = 2.10。EtHex = 2-エチルヘキシリ。ポリマー生成物のフォトルミネセント測定を実施例39に述べたようにして行った。435 nmで最大発光。

30

## 【0528】

## 実施例67

## 【化210】



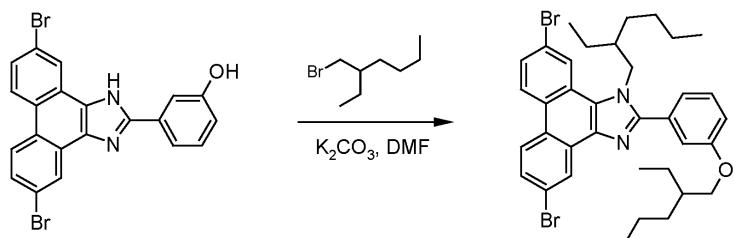
40

## 【0529】

(a) 生成物を実施例9bに従って調製した（収量、100%）。

## 【0530】

## 【化211】



## 【0531】

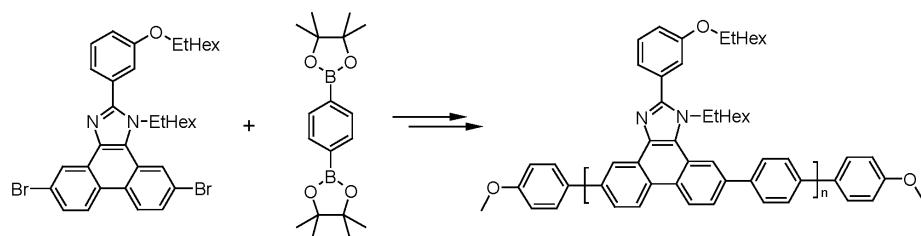
(b) 生成物を実施例9cに従って調製し、油としての生成物を得た(収量、84%) 10

。

## 【0532】

## 実施例68

## 【化212】



20

## 【0533】

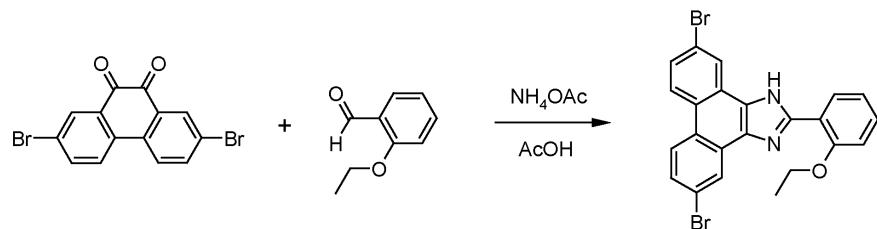
上記ポリマーを、実施例41に従って、実施例67のジブロミド生成物および1,4-ビス(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)ベンゼンで調製した。2-(4-メトキシ-フェニル)-4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロランおよび4-メトキシフェニル-ブロミドを末端キャッピング剤として用いた。GPC(絶対較正)  $M_w = 1108000$  g / モル、PD = 2.1。EtHex = 2-エチルヘキシル。ポリマー生成物のフォトルミネセント測定を実施例39に述べたようにして行った。460nmで最大発光。

## 【0534】

30

## 実施例69

## 【化213】



## 【0535】

40

酢酸150ml中、2,7-ジブロモフェナントレン-9,10-キノン21.9g(55.0ミリモル)の懸濁物に、2-エトキシベンズアルデヒド12.8g(82.5ミリモル)および酢酸アンモニウム43.7g(0.55ミリモル)を窒素雰囲気下で加えた。赤色懸濁物を還流しながら22時間加熱した。得られたベージュ色の懸濁物を濾過し、固体を酢酸で洗浄し、ベージュ色の固体として粗生成物を得た。湿った生成物を酢酸150mlで還流しながら30分間煮詰めた。懸濁物を室温まで冷却し、濾過し、酢酸100mlで再び煮詰めた。懸濁物を濾過し、得られた固体を酢酸とエタノールで洗浄し、次いで、真空下60°で乾燥させた。表題の化合物27.0gがベージュ色の固体として得られた(収量、96%)。

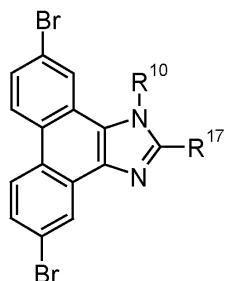
## 【0536】

50

以下の表に示される化合物を上記実施例と同様に調製した。

【0537】

【表1】



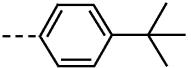
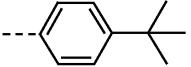
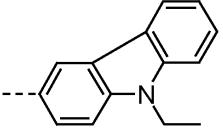
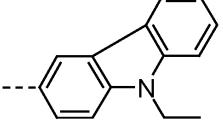
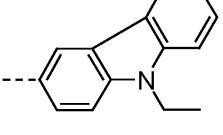
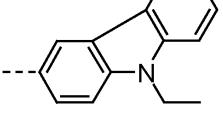
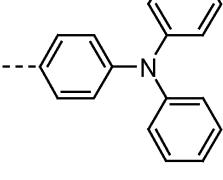
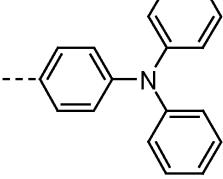
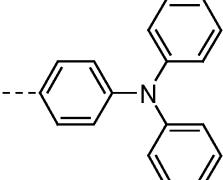
10

実施例	R¹⁰	R¹⁷	収率 [%]	融点 [°C]
70		2-エチルヘキシル	80	105-108
71		2-ヘキシルデシル	55	淡黄色の粘性油状物
72		2-ヘキシルデシル	89	淡黄色の粘性油状物
73		1-オクチル	67	100-103
74		H	定量的	黄色の固体 >300
75		H	84	白色の固体 270-273

20

30

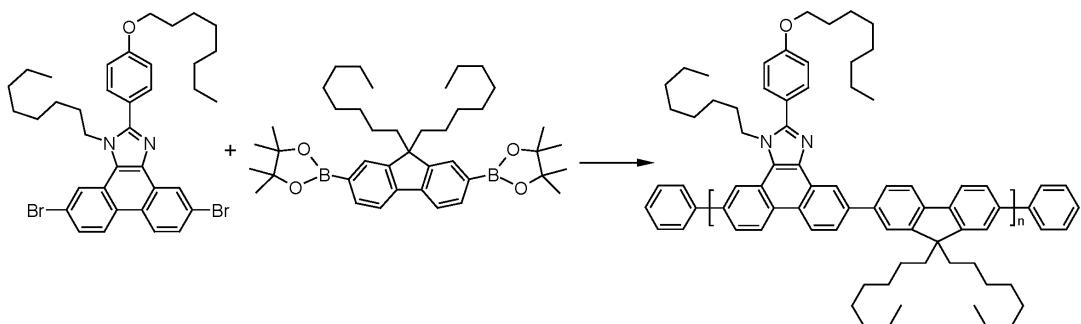
40

76		H	定量的	白色の固体 >300
77		1-オクチル	47	淡黄色の固体 114.5-116
78		H	99	淡灰色の固体 >300
79		1-オクチル	20	白色の固体 165-168
80		2-エチルヘキシリル	82	黄色の粘性油 状物
81		2-ヘキシリルデシル	56	黄色のわずかに 粘性のある固体
82		H	定量的	淡ベージュ色の 固体 >300
83		2-エチルヘキシリル	78	淡ベージュ色の 固体 70-73
84		2-ヘキシリルデシル	57	放置すると即座 に固まる淡黄色 の粘性油状物

【0538】

実施例 85

## 【化214】



10

## 【0539】

(a) 実施例9cのジブロミド生成物1.0590g(1.53ミリモル)および2,7-ビス(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)-9,9-ジオクチルフルオレン1.0000g(1.56ミリモル)を、乾燥シュレンク管中のアルゴン雰囲気下で、ジオキサン15mlおよびトルエン5ml中に入れた。溶液をアルゴンで脱気した。トリ(o-トリル)ホスфин28.5mg(0.094ミリモル)を加え、反応混合物を脱気した。酢酸パラジウム(I I)3.5mg(0.016ミリモル)を加え、反応混合物を脱気した。リン酸カリウム三塩基一水和物1.89g(7.80ミリモル、5.0当量)および水3mlの溶液を脱気し、反応混合物に加えた。得られた懸濁物を90の油浴温度で加熱した。2時間後、反応混合物の粘度の上昇および青色蛍光の外観を観察した。粘度を下げるために、追加の脱気トルエンを加えた。20時間後、油浴温度を100まで高めた。脱気プロモベンゼン367mg(2.34ミリモル)を加え、反応混合物を2時間加熱した。トルエン3ml中、4,4,5,5-テトラメチル-2-フェニル-1,3,2-ジオキサボロラン796mg(3.89ミリモル)の脱気溶液を加えた。反応混合物を2時間加熱し、室温まで冷却し、トルエン65mlで希釈した。1%水性NaCN溶液32mlを加え、混合物を室温で3時間攪拌した。有機相を水100mlで3回洗浄し、集めた水相をトルエン100mlで2回洗浄した。結合した有機相が65ml残るまで真空下で濃縮した。得られた溶液をメタノール160ml中に注いだ。ポリマーを濾過し、THF190mlに溶解した。溶液をメタノール380ml中に注ぎ、ポリマーを濾過し、黄色固体1.33gを得た。GPC(ポリスチレン標準) $M_w = 223765$ g/mol、PD=2.37。

20

## 【0540】

## 実施例86

共重合反応を、油浴温度が90の替わりに110であることを除いて、実施例85に従って行った。黄色固体1.42gが得られた。GPC(ポリスチレン標準) $M_w = 136477$ 、PD=2.71。

30

## 【0541】

## 実施例87

共重合反応を、トリ(o-トリル)ホスфин/酢酸パラジウム(I I)の替わりにアリル(トリイソプロピルホスphin)パラジウムブロミド(CAS244159-80-6)0.01当量を用い、リン酸カリウム三塩基一水和物の替わりに炭酸カリウム5.0当量を用い、油浴温度が90の替わりに120である除いて、実施例85に従って行った。黄色固体1.54gが得られた。GPC(ポリスチレン標準) $M_w = 159393$ g/mol、PD=2.43。

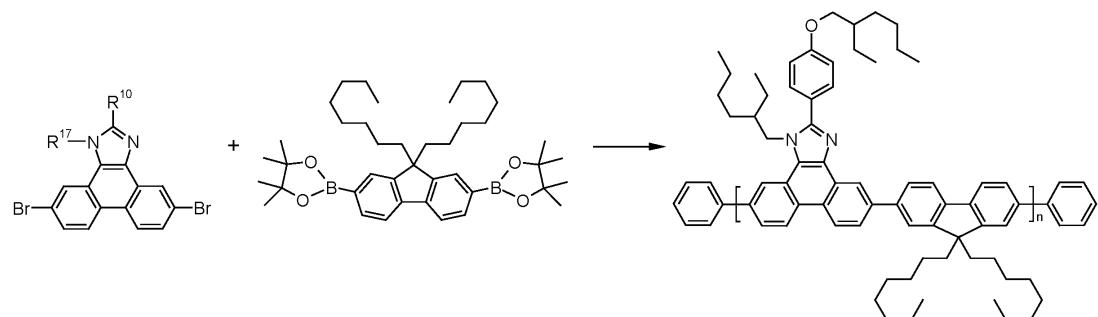
40

## 【0542】

以下の表に示されるポリマーを上記実施例と同様に調製した。

## 【0543】

【表2】



10

実施例	R <sup>10</sup>	R <sup>17</sup>	M <sub>w</sub> [g/mol, GPC]	PD
88		2-エチルヘキシル	171 224	3.81
89		1-オクチル	184 764	3.75
90		1-ヘキシル	138 987	3.03
91		2-エチルヘキシル	74 866	2.94
92		1-オクチル	151 200	2.46

20

30

40

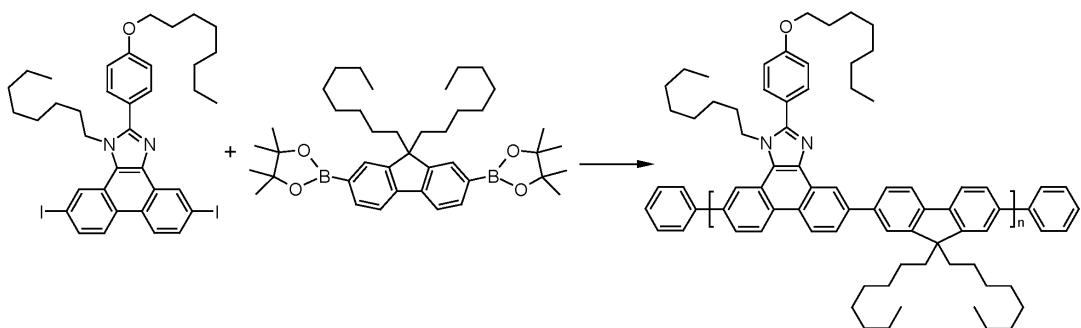
## 【0544】

ポリマー生成物のフォトルミネセント測定を実施例39に述べたようにして行った。最大発光は、90が428 nm、91が424 nm、92が430 nmである。

## 【0545】

実施例93

## 【化215】



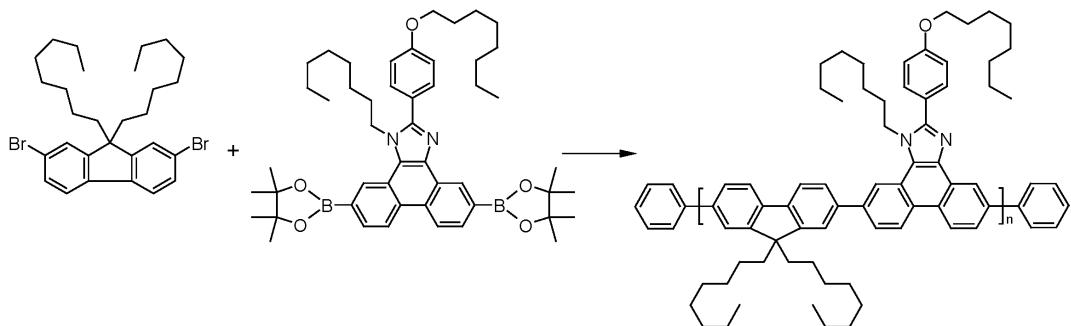
## 【0546】

共重合反応を、実施例85の手順に従って、実施例11のジブロミド生成物1.0当量および2,7-ビス(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)-9,9-ジオクチルフルオレン1.0当量で行った。黄色固体が得られた。GPC(ポリスチレン標準)  $M_w = 83917\text{ g/mol}$ 、PD = 2.78。ポリマー生成物のフォトルミネセント測定を実施例39に述べたようにして行った。433nmで最大発光。

## 【0547】

## 実施例94

## 【化216】



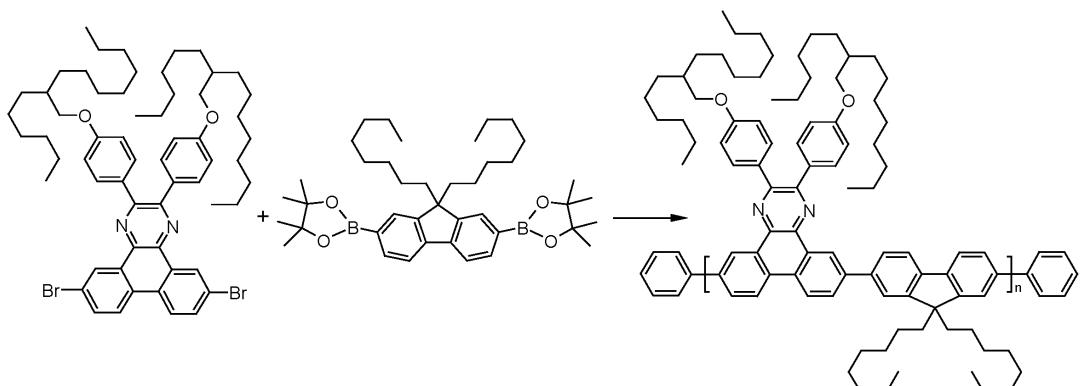
## 【0548】

共重合反応を、実施例85の手順に従って、9,9-ジオクチル-2,7-ジブロモフルオレン1.0当量および実施例14のジボロナート生成物1.0当量で行った。黄色固体が得られた。GPC(ポリスチレン標準)  $M_w = 62674\text{ g/mol}$ 、PD = 2.99。ポリマー生成物のフォトルミネセント測定を実施例39に述べたようにして行った。434nmで最大発光。

## 【0549】

## 実施例95

## 【化217】



## 【0550】

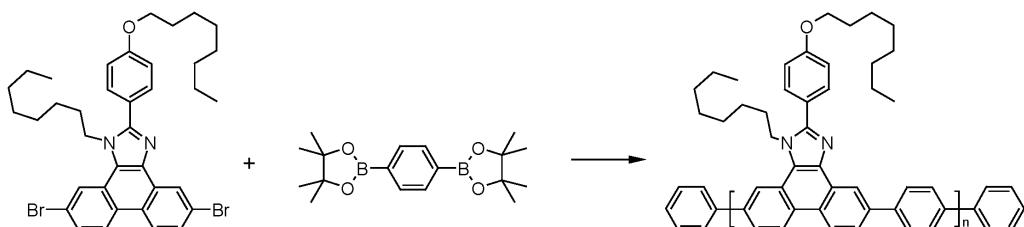
50

共重合反応を、実施例 8 5 の手順に従って、実施例 5 5 b のジブロミド生成物 1 . 0 当量および 2 , 7 - ビス ( 4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル ) - 9 , 9 - ジオクチルフルオレン 1 . 0 当量で行った。黄色固体が得られた。G P C ( ポリスチレン標準 )  $M_w = 20174$  g / モル、P D = 2 . 8 0 。

## 【 0 5 5 1 】

## 実施例 9 6

## 【 化 2 1 8 】



10

## 【 0 5 5 2 】

共重合反応を、実施例 8 5 の手順に従って、実施例 9 c のジブロミド生成物 1 . 0 当量および 1 , 4 - ビス ( 4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル ) ベンゼン 1 . 0 当量で行った。黄色固体が得られた。G P C ( ポリスチレン標準 )  $M_w = 51760$  g / モル、P D = 2 . 1 5 。

20

## 【 0 5 5 3 】

## 実施例 9 7

共重合反応を、リン酸カリウム三塩基一水和物の替わりに炭酸カリウム 5 . 0 当量を用い、油浴温度 9 0 を替わりに 1 2 0 を用いることを除いて、実施例 9 6 の手順に従つて行った。黄色固体が得られた。 $M_w = 50982$ 、P D = 2 . 1 4 。

## 【 0 5 5 4 】

## 実施例 9 8

共重合反応を、トリ ( o - トリル ) ホスフィン / 酢酸パラジウム ( I I ) の替わりにアリル ( トライソプロピルホスフィン ) パラジウムブロミド ( C A S 2 4 4 1 5 9 - 8 0 - 6 ) 0 . 0 1 当量を用い、リン酸カリウム三塩基一水和物の替わりに炭酸セシウム 5 . 0 当量を用い、油浴温度 9 0 の替わりに 1 2 0 を用いることを除いて、実施例 9 6 の手順に従つて行った。黄色固体が得られた。G P C ( ポリスチレン標準 )  $M_w = 14535$  、P D = 1 . 2 8 。

30

## 【 0 5 5 5 】

## 実施例 9 8

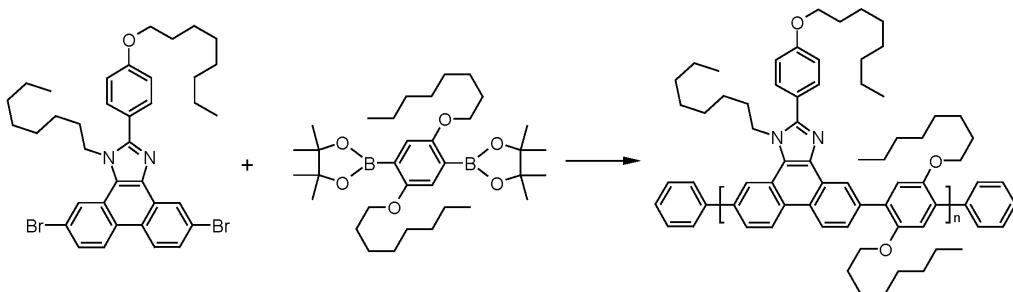
共重合反応を、トリ ( o - トリル ) ホスフィン / 酢酸パラジウム ( I I ) の替わりに 2 - ( ジメチルアミノ ) - 2 - ビフェニル - 塩化パラジウム ( I I ) ジノルボミルホスフィン - 錯体 ( C A S 3 5 9 8 0 3 - 5 3 - 5 ) 0 . 0 1 当量を用い、リン酸カリウム三塩基一水和物の替わりに炭酸セシウム 5 . 0 当量を用い、ジオキサンおよび水 3 ml の替わりにトルエン 1 5 ml と A l i q u a t ( 登録商標 ) 3 3 6 0 . 2 7 g を用い、油浴温度 9 0 の替わりに 1 2 0 を用いることを除いて、実施例 9 6 の手順に従つて行った。黄色固体が得られた。 $M_w = 48804$ 、P D = 1 . 8 6 。

40

## 【 0 5 5 6 】

## 実施例 1 0 0

## 【化219】



10

## 【0557】

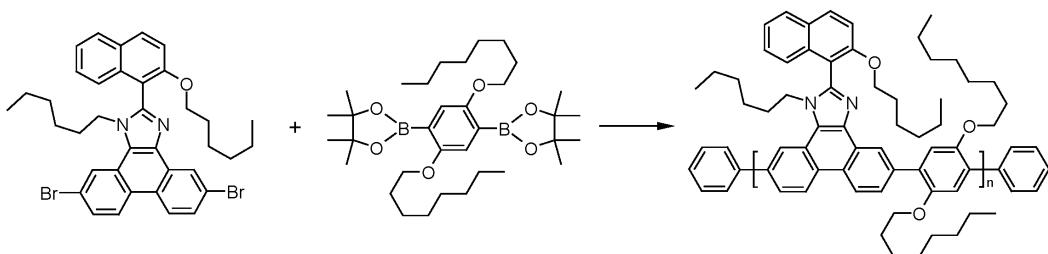
共重合反応を、実施例85の手順に従って、実施例9cのジブロミド生成物1.0当量および1,4-ビス[4,4,5,5-テトラメチル-(1,3,2)-ジオキサボロラン-2-イル]-2,5-ジオクチルオキシフェニレン(CAS457931-26-9)1.0当量で行った。黄色固体が得られた。GPC(ポリスチレン標準) $M_w = 84017$ 、 $PD = 4.58$ 。ポリマー生成物のフォトルミネセント測定を実施例39に述べたようにして行った。 $435\text{ nm}$ で最大発光。

## 【0558】

実施例101

## 【化220】

20



## 【0559】

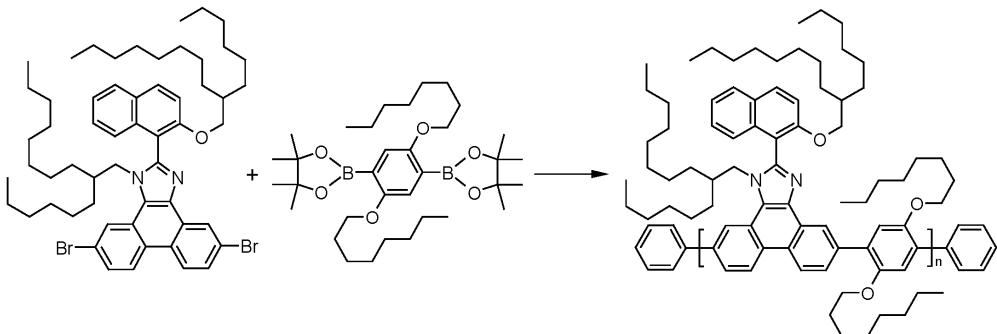
共重合反応を、実施例85の手順に従って、実施例12bのジブロミド生成物1.0当量および1,4-ビス[4,4,5,5-テトラメチル-(1,3,2)-ジオキサボロラン-2-イル]-2,5-ジオクチルオキシフェニレン(CAS457931-26-9)1.0当量で行った。黄色固体が得られた。GPC(ポリスチレン標準) $M_w = 46509$ 、 $PD = 2.82$ 。ポリマー生成物のフォトルミネセント測定を実施例39に述べたようにして行った。 $430\text{ nm}$ で最大発光。

30

## 【0560】

実施例102

## 【化221】



40

## 【0561】

共重合反応を、実施例85の手順に従って、実施例71のジブロミド生成物1.0当量

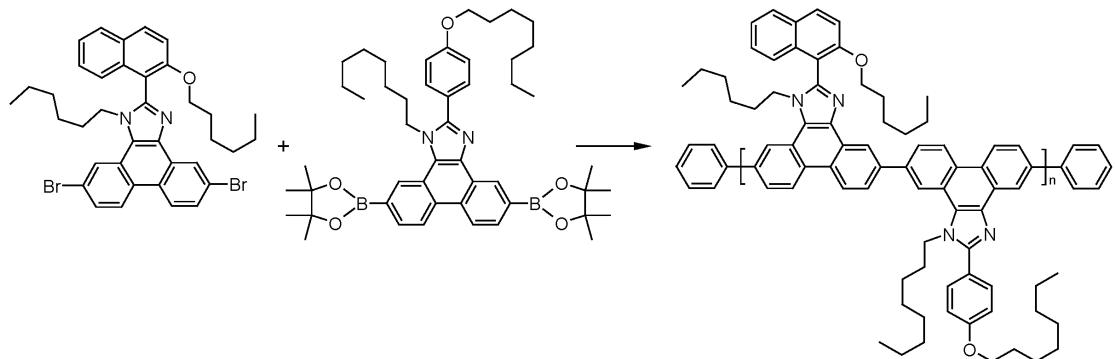
50

および 1 , 4 - ビス [ 4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - ( 1 , 3 , 2 ) - ジオキサボロラン - 2 - イル ] - 2 , 5 - ジオクチルオキシフェニレン ( C A S 4 5 7 9 3 1 - 2 6 - 9 ) 1 . 0 当量で行った。黄色固体が得られた。G P C ( ポリスチレン標準 )  $M_w = 9 0 0$  7 5 、 P D = 5 . 8 5 。ポリマー生成物のフォトルミネセント測定を実施例 3 9 に述べたようにして行った。4 2 7 nmで最大発光。

## 【 0 5 6 2 】

## 実施例 1 0 3

## 【 化 2 2 2 】



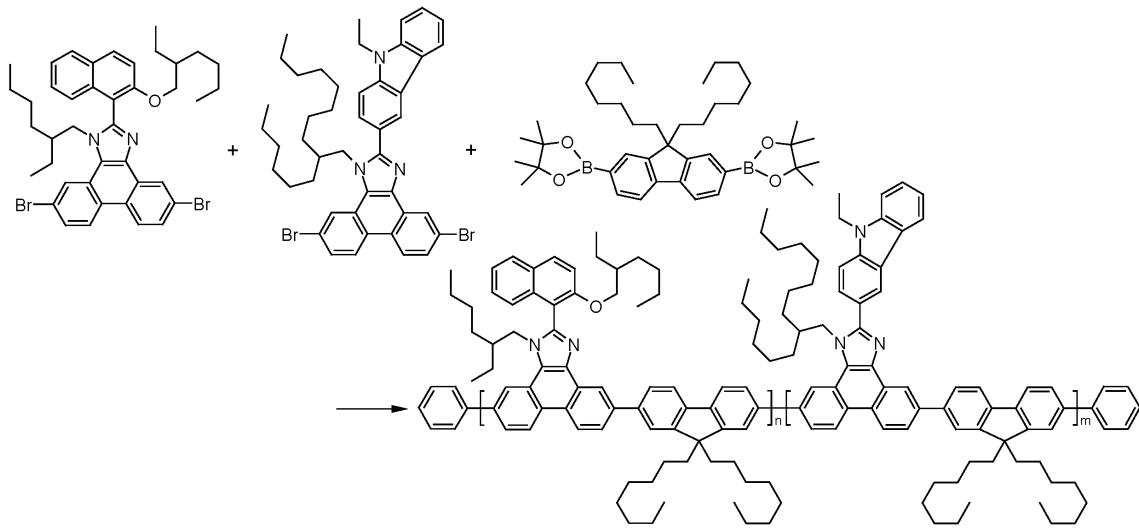
## 【 0 5 6 3 】

共重合反応を、実施例 8 5 の手順に従って、実施例 1 2 b のジブロミド生成物 1 . 0 当量および実施例 1 4 のジボロナート生成物 1 . 0 当量で行った。黄色固体が得られた。G P C ( ポリスチレン標準 )  $M_w = 2 1 3 5 6$  、 P D = 3 . 6 6 。ポリマー生成物のフォトルミネセント測定を実施例 3 9 に述べたようにして行った。4 6 9 nmで最大発光。

## 【 0 5 6 4 】

## 実施例 1 0 4

## 【 化 2 2 3 】



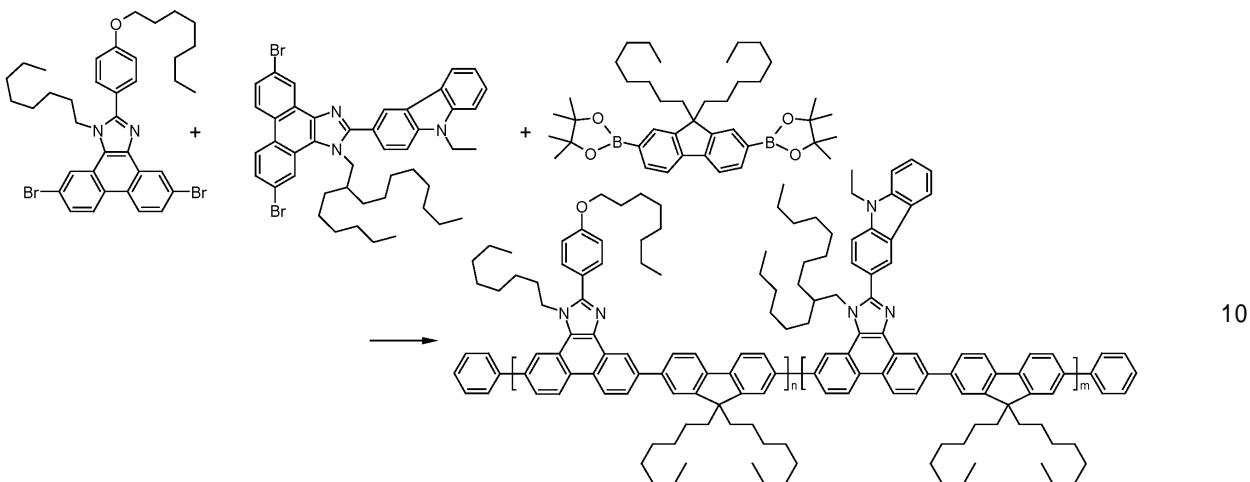
## 【 0 5 6 5 】

共重合反応を、実施例 8 5 の手順に従って、実施例 1 6 のジブロミド生成物 0 . 6 5 当量、実施例 8 1 のジブロミド生成物 0 . 3 5 当量、および 2 , 7 - ビス ( 4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル ) - 9 , 9 - ジオクチルフルオレン 1 . 0 当量で行った。黄色固体が得られた。G P C ( ポリスチレン標準 )  $M_w = 8 4 1 0 1$  、 P D = 3 . 3 8 。ポリマー生成物のフォトルミネセント測定を実施例 3 9 に述べたようにして行った。4 4 6 nmで最大発光。

## 【 0 5 6 6 】

## 実施例 1 0 5

【化 2 2 4】



【 0 5 6 7 】

共重合反応を、実施例 8-5 の手順に従って、実施例 9-c のジブロミド生成物 0.6 当量、実施例 8-1 のジブロミド生成物 0.4 当量、および 2,7-ビス(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)-9,9-ジオクチルフルオレン 1.0 当量で行った。黄色固体が得られた。GPC (ポリスチレン標準)  $M_w = 491$  20  
 $M_n = 77$ 、PD = 3.10。ポリマー生成物のフォトルミネセント測定を実施例 3-9 に述べたようにして行った。430 nm で最大発光。

〔 0 5 6 8 〕

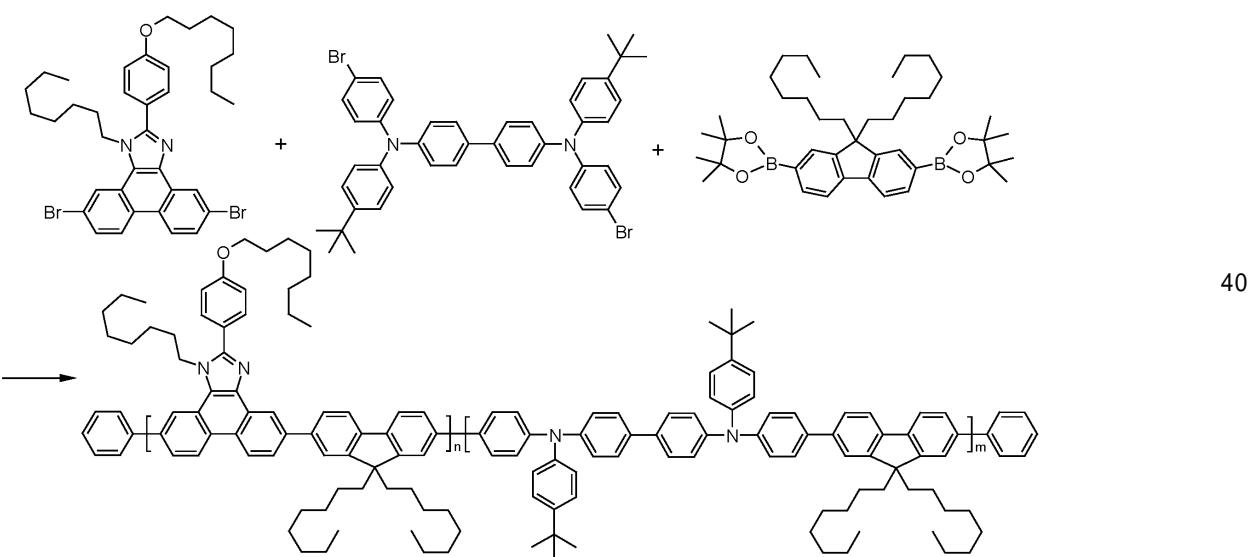
実施例 106

共重合反応を、実施例 8-5 の手順に従って、実施例 9-c のジブロミド生成物 0.8 当量、実施例 8-1 のジブロミド生成物 0.2 当量、および 2,7-ビス(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)-9,9-ジオクチルフルオレン 1.0 当量で行った。黄色固体が得られた。GPC(ポリスチレン標準)  $M_w = 7777$  6.0、 $PD = 3.41$ 。

( 0 5 6 9 )

寒施例 107

【化 2 2 5】



【 0 5 7 0 】

共重合反応を、実施例 8-5 の手順に従って、実施例 9-c のジブロミド生成物 0.8 当量、N,N'-ビス(4-ブロモフェニル)-N,N'-ビス(4-tert-ブチルフェニル) 50

) ベンジジン (C A S 4 6 3 9 4 4 - 3 6 - 7、国際公開公報第 0 2 / 0 7 7 0 6 0 に従つて調製) 0 . 2 当量、および 2 , 7 - ビス (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 9 , 9 - ジオクチルフルオレン 1 . 0 当量で行った。黄色固体が得られた。G P C (ポリスチレン標準)  $M_w = 1 5 4 9 4 6$ 、P D = 3 . 2 5。

### 【 0 5 7 1 】

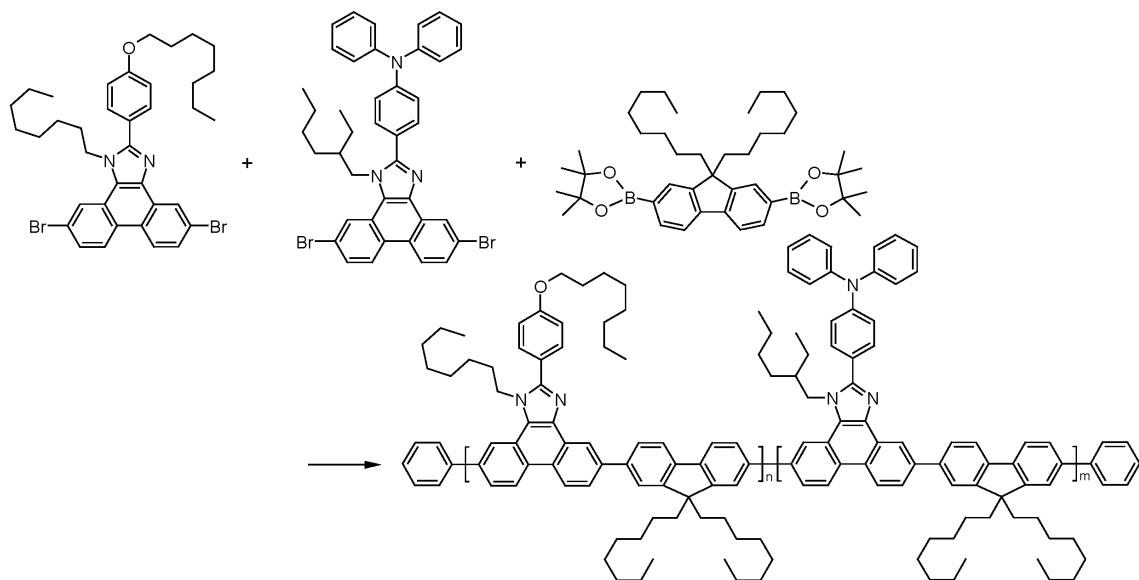
#### 実施例 1 0 8

共重合反応を、実施例 8 5 の手順に従つて、実施例 9 c のジブロミド生成物 0 . 6 当量、N , N ' - ビス (4 - ブロモフェニル) - N , N ' - ビス (4 - tert - ブチルフェニル) ベンジジン 0 . 4 当量、および 2 , 7 - ビス (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 9 , 9 - ジオクチルフルオレン 1 . 0 当量で行った。黄色固体が得られた。G P C (ポリスチレン標準)  $M_w = 1 3 7 5 5 7$ 、P D = 3 . 6 4。

### 【 0 5 7 2 】

#### 実施例 1 0 9

#### 【 化 2 2 6 】



### 【 0 5 7 3 】

共重合反応を、実施例 8 5 の手順に従つて、実施例 9 c のジブロミド生成物 0 . 8 当量、実施例 8 3 のジブロミド生成物 0 . 2 当量、および 2 , 7 - ビス (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 9 , 9 - ジオクチルフルオレン 1 . 0 当量で行った。黄色固体が得られた。G P C (ポリスチレン標準)  $M_w = 1 4 3 5 9 5$ 、P D = 3 . 4 2。

### 【 0 5 7 4 】

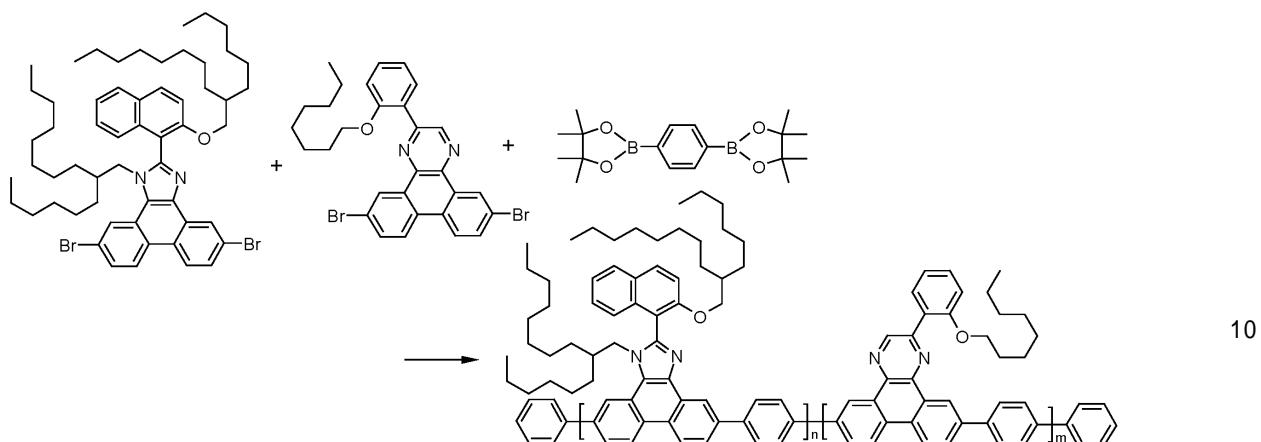
#### 実施例 1 1 0

共重合反応を、実施例 8 5 の手順に従つて、実施例 9 c のジブロミド生成物 0 . 6 当量、実施例 8 3 のジブロミド生成物 0 . 4 当量、および 2 , 7 - ビス (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - 9 , 9 - ジオクチルフルオレン 1 . 0 当量で行った。黄色固体が得られた。G P C (ポリスチレン標準)  $M_w = 8 7 9 2 4$ 、P D = 3 . 2 3。

### 【 0 5 7 5 】

#### 実施例 1 1 1

## 【化227】



## 【0576】

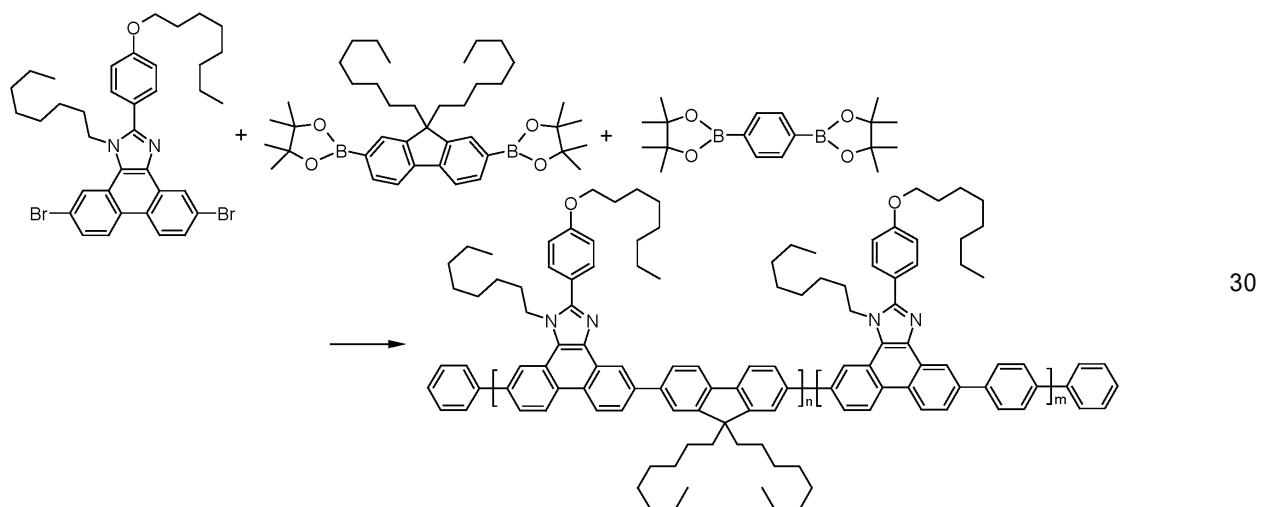
共重合反応を、実施例85の手順に従って、実施例17のジブロミド生成物0.65当量、実施例54のジブロミド生成物0.35当量、および1,4-ビス(4,4',5,5'-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)ベンゼン1.0当量で行った。黄色固体が得られた。GPC(ポリスチレン標準)  $M_w = 45868$ 、PD = 4.72。

## 【0577】

実施例112

20

## 【化228】



## 【0578】

共重合反応を、実施例85の手順に従って、実施例9cのジブロミド生成物1.0当量、2,7-ビス(4,4',5,5'-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)-9,9-ジオクチルフルオレン0.75当量、および1,4-ビス(4,4',5,5'-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)ベンゼン0.25当量で行った。黄色固体が得られた。GPC(ポリスチレン標準)  $M_w = 49635$ 、PD = 5.08。

40

## 【0579】

実施例113

共重合反応を、実施例85の手順に従って、実施例9cのジブロミド生成物1.0当量、2,7-ビス(4,4',5,5'-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)-9,9-ジオクチルフルオレン0.5当量、および1,4-ビス(4,4',5,5'-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)ベンゼン0.5当量で行った。黄色固体が得られた。GPC(ポリスチレン標準)  $M_w = 132849$ 、PD = 1

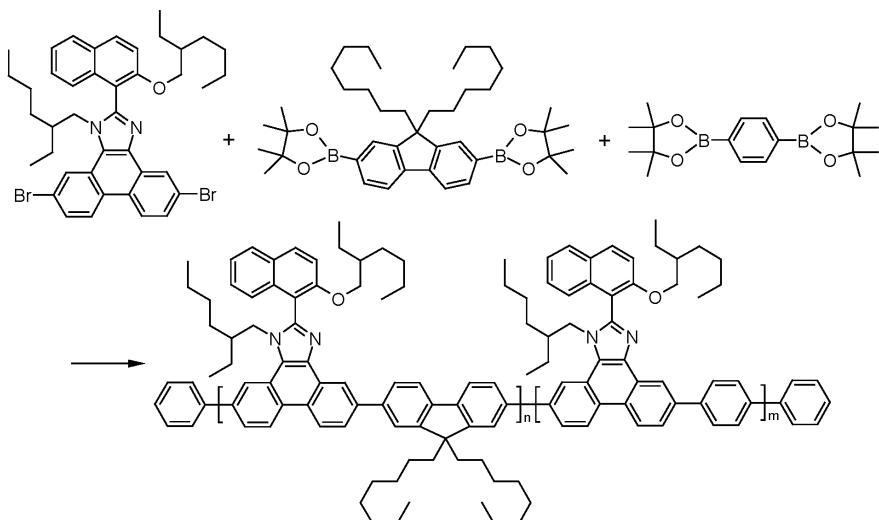
50

3 . 5。

**【 0 5 8 0 】**

実施例 1 1 4

**【 化 2 2 9 】**



**【 0 5 8 1 】**

20

共重合反応を、実施例 8 5 の手順に従って、実施例 1 6 のジブロミド生成物 1 . 0 当量、2 , 7 - ビス ( 4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル ) - 9 , 9 - ジオクチルフルオレン 0 . 2 5 当量、および 1 , 4 - ビス ( 4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル ) ベンゼン 0 . 7 5 当量で行った。黄色固体が得られた。G P C ( ポリスチレン標準 )  $M_w = 135369$  、 P D = 8 . 3 。ポリマー生成物のフォトルミネセント測定を実施例 3 9 に述べたようにして行った。448 nm で最大発光。

**【 0 5 8 2 】**

実施例 1 1 5

共重合反応を、実施例 8 5 の手順に従って、実施例 1 6 のジブロミド生成物 1 . 0 当量、2 , 7 - ビス ( 4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル ) - 9 , 9 - ジオクチルフルオレン 0 . 2 当量、および 1 , 4 - ビス ( 4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル ) ベンゼン 0 . 8 当量で行った。黄色固体が得られた。G P C ( ポリスチレン標準 )  $M_w = 145597$  、 P D = 8 . 0 。

30

**【 0 5 8 3 】**

実施例 1 1 6

共重合反応を、実施例 8 5 の手順に従って、実施例 1 6 のジブロミド生成物 1 . 0 当量、2 , 7 - ビス ( 4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル ) - 9 , 9 - ジオクチルフルオレン 0 . 4 当量、および 1 , 4 - ビス ( 4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル ) ベンゼン 0 . 6 当量で行った。黄色固体が得られた。G P C ( ポリスチレン標準 )  $M_w = 51272$  、 P D = 5 . 3 。

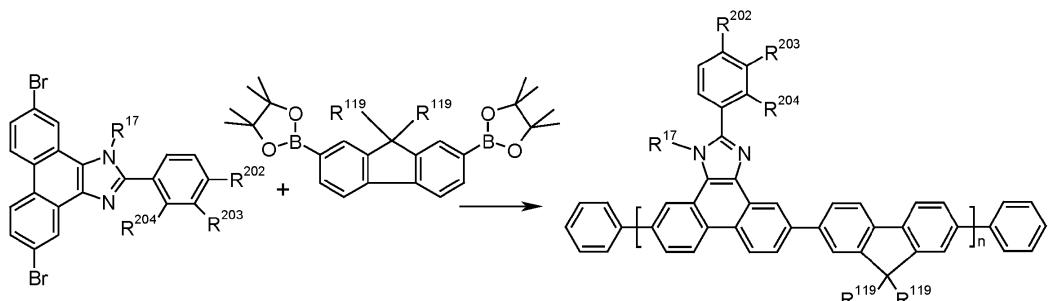
40

**【 0 5 8 4 】**

以下のポリマーを実施例 8 、 1 1 、 3 9 、 4 0 、 4 1 、または 8 5 と同様にして調製した。X<sup>1</sup> が Br である化合物を用いた替わりに、以下のポリマー化合物の調製には X<sup>1</sup> が I である化合物も用いることができた。

**【 0 5 8 5 】**

【表3】



ポリマー番号	R <sup>17</sup>	R <sup>202</sup>	R <sup>203</sup>	R <sup>204</sup>	R <sup>119</sup>	
1-1	n-オクチル	-O-n-オクチル	H	H	n-オクチル	10
1-2	n-オクチル	-O-n-オクチル	H	H	n-ヘキシル	
1-3	n-オクチル	-O-n-オクチル	H	H	2-エチルヘキシル	
1-4	n-オクチル	-O-n-オクチル	H	-O-n-オクチル	n-オクチル	
1-5	n-オクチル	-O-n-オクチル	H	-O-n-オクチル	n-ヘキシル	
1-6	n-オクチル	-O-n-オクチル	H	-O-n-オクチル	2-エチルヘキシル	
1-7	n-オクチル	H	H	-O-n-オクチル	n-オクチル	20
1-8	n-オクチル	H	H	-O-n-オクチル	n-ヘキシル	
1-9	n-オクチル	H	H	-O-n-オクチル	2-エチルヘキシル	
1-10	n-オクチル	H	-O-n-オクチル	-O-n-オクチル	n-オクチル	
1-11	n-オクチル	H	-O-n-オクチル	-O-n-オクチル	n-ヘキシル	
1-12	n-オクチル	H	-O-n-オクチル	-O-n-オクチル	2-エチルヘキシル	
1-13	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	H	H	n-オクチル	30
1-14	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	H	H	n-ヘキシル	
1-15	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	H	H	2-エチルヘキシル	
1-16	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	H	-O-n-ヘキシル	n-オクチル	
1-17	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	H	-O-n-ヘキシル	n-ヘキシル	
1-18	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	H	-O-n-ヘキシル	2-エチルヘキシル	
1-19	n-ヘキシル	H	H	-O-n-ヘキシル	n-オクチル	
1-20	n-ヘキシル	H	H	-O-n-ヘキシル	n-ヘキシル	
1-21	n-ヘキシル	H	H	-O-n-ヘキシル	2-エチルヘキシル	
1-22	n-ヘキシル	H	-O-n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	n-オクチル	40
1-23	n-ヘキシル	H	-O-n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	n-ヘキシル	

1-24	n-ヘキシル	H	-O-n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	2-エチルヘキシル
1-25	n-ブチル	-O-n-ブチル	H	H	n-オクチル
1-26	n-ブチル	-O-n-ブチル	H	H	n-ヘキシル
1-27	n-ブチル	-O-n-ブチル	H	H	2-エチルヘキシル
1-28	n-ブチル	-O-n-ブチル	H	-O-n-ブチル	n-オクチル
1-29	n-ブチル	-O-n-ブチル	H	-O-n-ブチル	n-ヘキシル
1-30	n-ブチル	-O-n-ブチル	H	-O-n-ブチル	2-エチルヘキシル
1-31	n-ブチル	H	H	-O-n-ブチル	n-オクチル
1-32	n-ブチル	H	H	-O-n-ブチル	n-ヘキシル
1-33	n-ブチル	H	H	-O-n-ブチル	2-エチルヘキシル
1-34	n-ブチル	H	-O-n-ブチル	-O-n-ブチル	n-オクチル
1-35	n-ブチル	H	-O-n-ブチル	-O-n-ブチル	n-ヘキシル
1-36	n-ブチル	H	-O-n-ブチル	-O-n-ブチル	2-エチルヘキシル
1-37	2-エチルヘキシル	-O-2- エチルヘキシル	H	H	n-オクチル
1-38	2-エチルヘキシル	-O-2- エチルヘキシル	H	H	n-ヘキシル
1-39	2-エチルヘキシル	-O-2- エチルヘキシル	H	H	2-エチルヘキシル
1-40	2-エチルヘキシル	-O-2- エチルヘキシル	H	2-エチルヘキシル	n-オクチル
1-41	2-エチルヘキシル	-O-2- エチルヘキシル	H	2-エチルヘキシル	n-ヘキシル
1-42	2-エチルヘキシル	-O-2- エチルヘキシル	H	2-エチルヘキシル	2-エチルヘキシル
1-43	2-エチルヘキシル	H	H	2-エチルヘキシル	n-オクチル
1-44	2-エチルヘキシル	H	H	2-エチルヘキシル	n-ヘキシル
1-45	2-エチルヘキシル	H	H	2-エチルヘキシル	2-エチルヘキシル
1-46	2-エチルヘキシル	H	-O-2- エチルヘキシル	2-エチルヘキシル	n-オクチル
1-47	2-エチルヘキシル	H	-O-2- エチルヘキシル	2-エチルヘキシル	n-ヘキシル

10

20

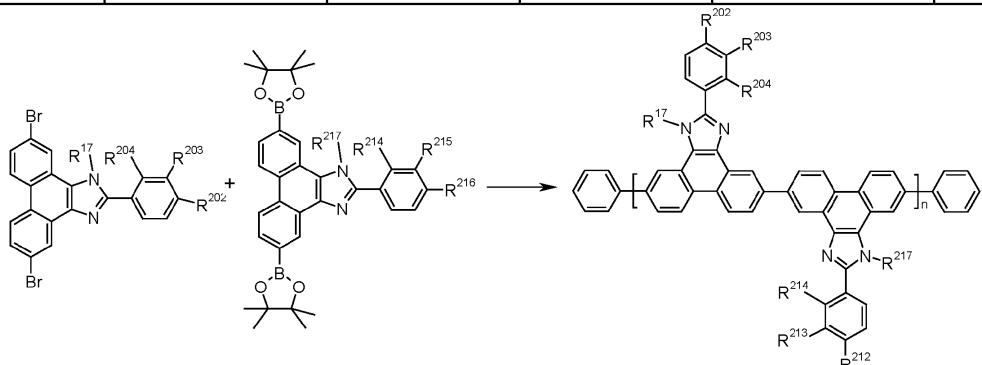
30

40

1-48	2-エチルヘキシル	H	-O-2- エチルヘキシル	2-エチルヘキシル	2-エチルヘキシル
2-1	n-オクチル	O-n-オクチル	H	H	4-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> OMe
2-2	n-オクチル	O-n-オクチル	H	H	4-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> OEt
2-3	n-オクチル	O-n-オクチル	H	H	4-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> OBu
2-4	n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル	4-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> OMe
2-5	n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル	4-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> OEt
2-6	n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル	4-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> OBu
2-7	n-オクチル	H	H	O-n-オクチル	4-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> OMe
2-8	n-オクチル	H	H	O-n-オクチル	4-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> OEt
2-9	n-オクチル	H	H	O-n-オクチル	4-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> OBu
2-10	n-オクチル	H	O-n-オクチル	O-n-オクチル	4-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> OMe
2-11	n-オクチル	H	O-n-オクチル	O-n-オクチル	4-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> OEt
2-12	n-オクチル	H	O-n-オクチル	O-n-オクチル	4-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> OBu

10

20



【 0 5 8 6 】

30

ポリマー鎖中の5員ヘテロ芳香族環の配列は、不規則である。

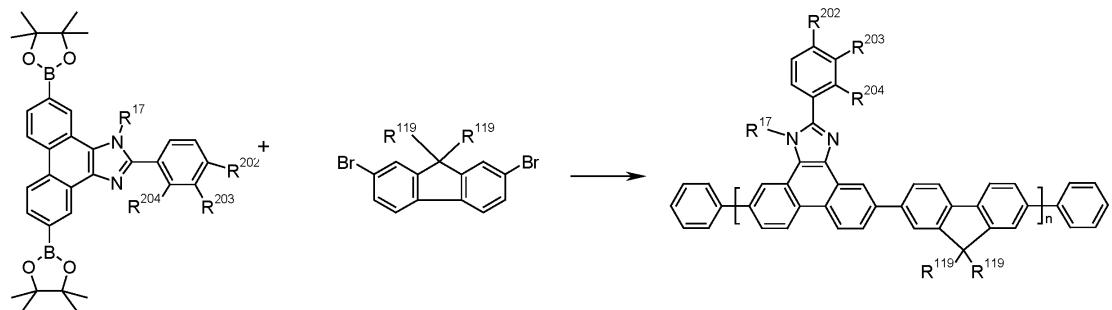
【 0 5 8 7 】

【表4】

ポリマー 番号	R <sup>17</sup>	R <sup>202</sup>	R <sup>203</sup>	R <sup>204</sup>	R <sup>217</sup>	R <sup>212</sup>	R <sup>213</sup>	R <sup>214</sup>
3-1	n-オクチル	O-R <sup>17</sup>	H	H	n-ヘキシル	O-R <sup>217</sup>	H	H
3-2	n-オクチル	O-R <sup>17</sup>	H	H	n-ブチル	O-R <sup>217</sup>	H	H
3-3	n-オクチル	O-R <sup>17</sup>	H	H	n-オクチル	O-R <sup>217</sup>	H	H
3-4	n-オクチル	O-R <sup>17</sup>	H	H	n-ヘキシル	O-R <sup>217</sup>	H	O-R <sup>217</sup>
3-5	n-オクチル	O-R <sup>17</sup>	H	H	n-ブチル	O-R <sup>217</sup>	H	O-R <sup>217</sup>
3-6	n-オクチル	O-R <sup>17</sup>	H	H	n-オクチル	O-R <sup>217</sup>	H	O-R <sup>217</sup>
3-7	n-オクチル	O-R <sup>17</sup>	H	H	n-ヘキシル	H	H	O-R <sup>217</sup>
3-8	n-オクチル	O-R <sup>17</sup>	H	H	n-ブチル	H	H	O-R <sup>217</sup>
3-9	n-オクチル	O-R <sup>17</sup>	H	H	n-オクチル	H	H	O-R <sup>217</sup>
3-10	n-オクチル	O-R <sup>17</sup>	H	O-R <sup>17</sup>	n-ヘキシル	O-R <sup>217</sup>	H	H
3-11	n-オクチル	O-R <sup>17</sup>	H	O-R <sup>17</sup>	n-ブチル	O-R <sup>217</sup>	H	H
3-12	n-オクチル	O-R <sup>17</sup>	H	O-R <sup>17</sup>	n-オクチル	O-R <sup>217</sup>	H	H
3-13	n-オクチル	O-R <sup>17</sup>	H	O-R <sup>17</sup>	n-ヘキシル	O-R <sup>217</sup>	H	O-R <sup>217</sup>
3-14	n-オクチル	O-R <sup>17</sup>	H	O-R <sup>17</sup>	n-ブチル	O-R <sup>217</sup>	H	O-R <sup>217</sup>
3-15	n-オクチル	O-R <sup>17</sup>	H	O-R <sup>17</sup>	n-オクチル	O-R <sup>217</sup>	H	O-R <sup>217</sup>
3-16	n-オクチル	O-R <sup>17</sup>	H	O-R <sup>17</sup>	n-ヘキシル	H	H	O-R <sup>217</sup>
3-17	n-オクチル	O-R <sup>17</sup>	H	O-R <sup>17</sup>	n-ブチル	H	H	O-R <sup>217</sup>
3-18	n-オクチル	O-R <sup>17</sup>	H	O-R <sup>17</sup>	n-オクチル	H	H	O-R <sup>217</sup>
3-19	n-オクチル	H	H	O-R <sup>17</sup>	n-ヘキシル	O-R <sup>217</sup>	H	H
3-20	n-オクチル	H	H	O-R <sup>17</sup>	n-ブチル	O-R <sup>217</sup>	H	H
3-21	n-オクチル	H	H	O-R <sup>17</sup>	n-オクチル	O-R <sup>217</sup>	H	H
3-22	n-オクチル	H	H	O-R <sup>17</sup>	n-ヘキシル	O-R <sup>217</sup>	H	O-R <sup>217</sup>
3-23	n-オクチル	H	H	O-R <sup>17</sup>	n-ブチル	O-R <sup>217</sup>	H	O-R <sup>217</sup>
3-24	n-オクチル	H	H	O-R <sup>17</sup>	n-オクチル	O-R <sup>217</sup>	H	O-R <sup>217</sup>
3-25	n-オクチル	H	H	O-R <sup>17</sup>	n-ヘキシル	H	H	O-R <sup>217</sup>
3-26	n-オクチル	H	H	O-R <sup>17</sup>	n-ブチル	H	H	O-R <sup>217</sup>
3-27	n-オクチル	H	H	O-R <sup>17</sup>	n-オクチル	H	H	O-R <sup>217</sup>
3-28	n-オクチル	H	O-R <sup>17</sup>	O-R <sup>17</sup>	n-ヘキシル	O-R <sup>217</sup>	H	H

【0588】

【表5】



ポリマー番号	R <sup>17</sup>	R <sup>202</sup>	R <sup>203</sup>	R <sup>204</sup>	R <sup>119</sup>
4-1	n-オクチル	-O-n-オクチル	H	H	n-オクチル
4-2	n-オクチル	-O-n-オクチル	H	H	n-ヘキシル
4-3	n-オクチル	-O-n-オクチル	H	H	2-エチルヘキシル
4-4	n-オクチル	-O-n-オクチル	H	-O-n-オクチル	n-オクチル
4-5	n-オクチル	-O-n-オクチル	H	-O-n-オクチル	n-ヘキシル
4-6	n-オクチル	-O-n-オクチル	H	-O-n-オクチル	2-エチルヘキシル
4-7	n-オクチル	H	H	-O-n-オクチル	n-オクチル
4-8	n-オクチル	H	H	-O-n-オクチル	n-ヘキシル
4-9	n-オクチル	H	H	-O-n-オクチル	2-エチルヘキシル
4-10	n-オクチル	H	-O-n-オクチル	-O-n-オクチル	n-オクチル
4-11	n-オクチル	H	-O-n-オクチル	-O-n-オクチル	n-ヘキシル
4-12	n-オクチル	H	-O-n-オクチル	-O-n-オクチル	2-エチルヘキシル
4-13	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	H	H	n-オクチル
4-14	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	H	H	n-ヘキシル
4-15	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	H	H	2-エチルヘキシル
4-16	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	H	-O-n-ヘキシル	n-オクチル
4-17	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	H	-O-n-ヘキシル	n-ヘキシル
4-18	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	H	-O-n-ヘキシル	2-エチルヘキシル
4-19	n-ヘキシル	H	H	-O-n-ヘキシル	n-オクチル
4-20	n-ヘキシル	H	H	-O-n-ヘキシル	n-ヘキシル
4-21	n-ヘキシル	H	H	-O-n-ヘキシル	2-エチルヘキシル
4-22	n-ヘキシル	H	-O-n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	n-オクチル

20

30

40

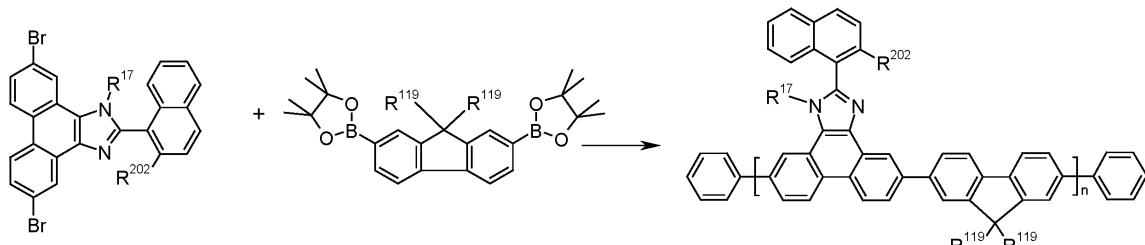
4-23	n-ヘキシル	H	-O-n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	n-ヘキシル
4-24	n-ヘキシル	H	-O-n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	2-エチルヘキシル
4-25	n-ブチル	-O-n-ブチル	H	H	n-オクチル
4-26	n-ブチル	-O-n-ブチル	H	H	n-ヘキシル
4-27	n-ブチル	-O-n-ブチル	H	H	2-エチルヘキシル
4-28	n-ブチル	-O-n-ブチル	H	-O-n-ブチル	n-オクチル
4-29	n-ブチル	-O-n-ブチル	H	-O-n-ブチル	n-ヘキシル
4-30	n-ブチル	-O-n-ブチル	H	-O-n-ブチル	2-エチルヘキシル
4-31	n-ブチル	H	H	-O-n-ブチル	n-オクチル
4-32	n-ブチル	H	H	-O-n-ブチル	n-ヘキシル
4-33	n-ブチル	H	H	-O-n-ブチル	2-エチルヘキシル
4-34	n-ブチル	H	-O-n-ブチル	-O-n-ブチル	n-オクチル
4-35	n-ブチル	H	-O-n-ブチル	-O-n-ブチル	n-ヘキシル
4-36	n-ブチル	H	-O-n-ブチル	-O-n-ブチル	2-エチルヘキシル

10

20

## 【0589】

【表6】



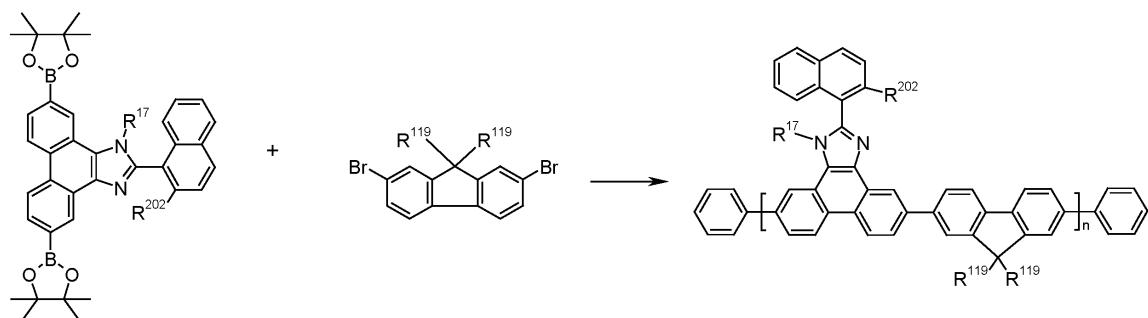
30

ポリマー番号	R <sup>17</sup>	R <sup>202</sup>	R <sup>119</sup>
5-1	n-オクチル	-O-n-オクチル	n-オクチル
5-2	n-オクチル	-O-n-オクチル	n-ヘキシル
5-3	n-オクチル	-O-n-オクチル	2-エチルヘキシル
5-4	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	n-オクチル
5-5	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	n-ヘキシル
5-6	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	2-エチルヘキシル
5-7	n-ブチル	-O-n-ブチル	n-オクチル
5-8	n-ブチル	-O-n-ブチル	n-ヘキシル
5-9	n-ブチル	-O-n-ブチル	2-エチルヘキシル

40

## 【0590】

【表7】



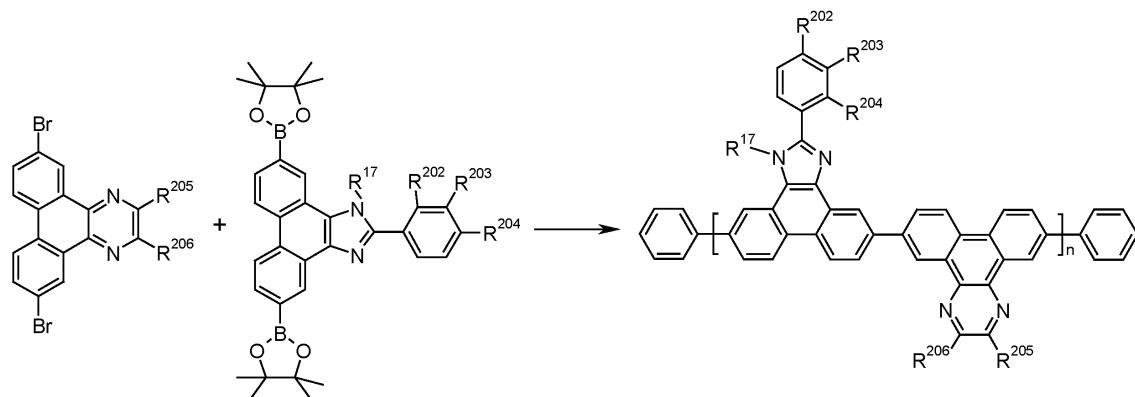
10

ポリマー番号	R <sup>17</sup>	R <sup>202</sup>	R <sup>119</sup>
6-1	n-オクチル	-O-n-オクチル	n-オクチル
6-2	n-オクチル	-O-n-オクチル	n-ヘキシル
6-3	n-オクチル	-O-n-オクチル	2-エチルヘキシル
6-4	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	n-オクチル
6-5	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	n-ヘキシル
6-6	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	2-エチルヘキシル
6-7	n-ブチル	-O-n-ブチル	n-オクチル
6-8	n-ブチル	-O-n-ブチル	n-ヘキシル
6-9	n-ブチル	-O-n-ブチル	2-エチルヘキシル

20

【0591】

【表8】



10

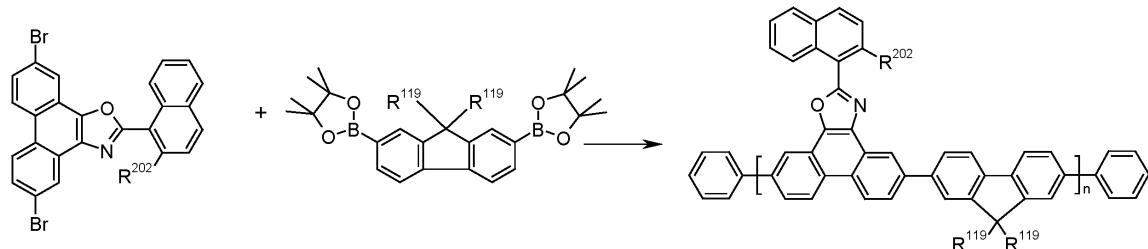
ポリマー番号	R<sup>17</sup>	R<sup>202</sup>	R<sup>203</sup>	R<sup>204</sup>	R<sup>205</sup>	R<sup>206</sup>
7-1	n-オクチル	O-R<sup>17</sup>	H	H	H	H
7-2	n-オクチル	O-R<sup>17</sup>	H	H	t-ブチル	t-ブチル
7-3	n-オクチル	O-R<sup>17</sup>	H	O-R<sup>17</sup>	H	H
7-4	n-オクチル	O-R<sup>17</sup>	H	O-R<sup>17</sup>	t-ブチル	t-ブチル
7-5	n-オクチル	H	H	O-R<sup>17</sup>	H	H
7-6	n-オクチル	H	H	O-R<sup>17</sup>	t-ブチル	t-ブチル
7-7	n-オクチル	H	O-R<sup>17</sup>	O-R<sup>17</sup>	H	H
7-8	n-オクチル	H	O-R<sup>17</sup>	O-R<sup>17</sup>	t-ブチル	t-ブチル
7-9	n-ヘキシル	O-R<sup>17</sup>	H	H	H	H
7-10	n-ヘキシル	O-R<sup>17</sup>	H	H	t-ブチル	t-ブチル
7-11	n-ヘキシル	O-R<sup>17</sup>	H	O-R<sup>17</sup>	H	H
7-12	n-ヘキシル	O-R<sup>17</sup>	H	O-R<sup>17</sup>	t-ブチル	t-ブチル
7-13	n-ヘキシル	H	H	O-R<sup>17</sup>	H	H
7-14	n-ヘキシル	H	H	O-R<sup>17</sup>	t-ブチル	t-ブチル
7-15	n-ヘキシル	H	O-R<sup>17</sup>	O-R<sup>17</sup>	H	H
7-16	n-ヘキシル	H	O-R<sup>17</sup>	O-R<sup>17</sup>	t-ブチル	t-ブチル
7-17	n-ブチル	O-R<sup>17</sup>	H	H	H	H
7-18	n-ブチル	O-R<sup>17</sup>	H	H	t-ブチル	t-ブチル
7-19	n-ブチル	O-R<sup>17</sup>	H	O-R<sup>17</sup>	H	H
7-20	n-ブチル	O-R<sup>17</sup>	H	O-R<sup>17</sup>	t-ブチル	t-ブチル
7-21	n-ブチル	H	H	O-R<sup>17</sup>	H	H
7-22	n-ブチル	H	H	O-R<sup>17</sup>	t-ブチル	t-ブチル
7-23	n-ブチル	H	O-R<sup>17</sup>	O-R<sup>17</sup>	H	H
7-24	n-ブチル	H	O-R<sup>17</sup>	O-R<sup>17</sup>	t-ブチル	t-ブチル

20

30

40

【表 9】



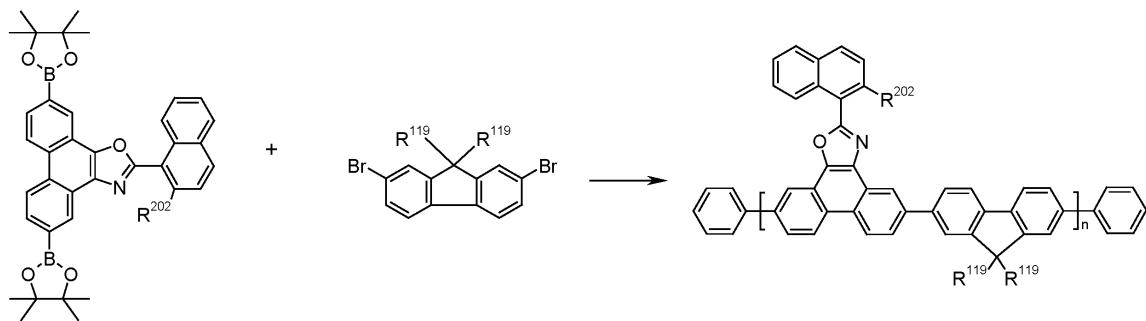
ポリマー番号	R <sup>202</sup>	R <sup>119</sup>
8-1	-O-n-オクチル	n-オクチル
8-2	-O-n-オクチル	n-ヘキシル
8-3	-O-n-オクチル	2-エチルヘキシル
8-4	-O-n-ヘキシル	n-オクチル
8-5	-O-n-ヘキシル	n-ヘキシル
8-6	-O-n-ヘキシル	2-エチルヘキシル
8-7	-O-n-ブチル	n-オクチル
8-8	-O-n-ブチル	n-ヘキシル
8-9	-O-n-ブチル	2-エチルヘキシル

【0593】

10

20

【表 1 0】



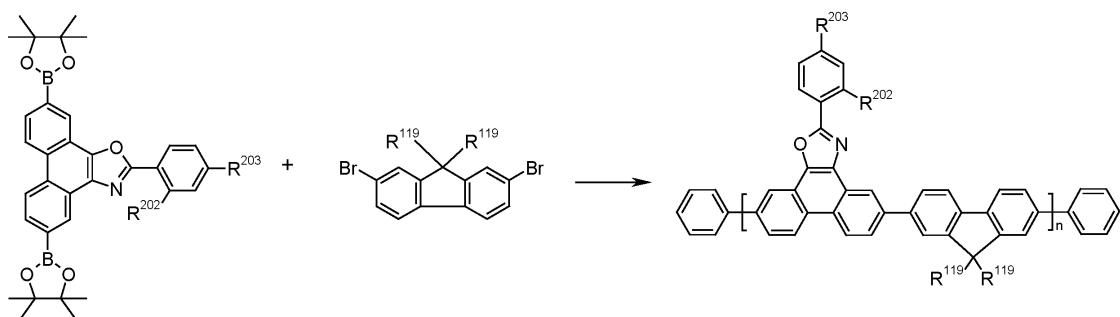
10

ポリマー番号	R <sup>202</sup>	R <sup>119</sup>
9-1	-O-n-オクチル	n-オクチル
9-2	-O-n-オクチル	n-ヘキシル
9-3	-O-n-オクチル	2-エチルヘキシル
9-4	-O-n-ヘキシル	n-オクチル
9-5	-O-n-ヘキシル	n-ヘキシル
9-6	-O-n-ヘキシル	2-エチルヘキシル
9-7	-O-n-ブチル	n-オクチル
9-8	-O-n-ブチル	n-ヘキシル
9-9	-O-n-ブチル	2-エチルヘキシル

20

【0 5 9 4】

【表 1 1】



10

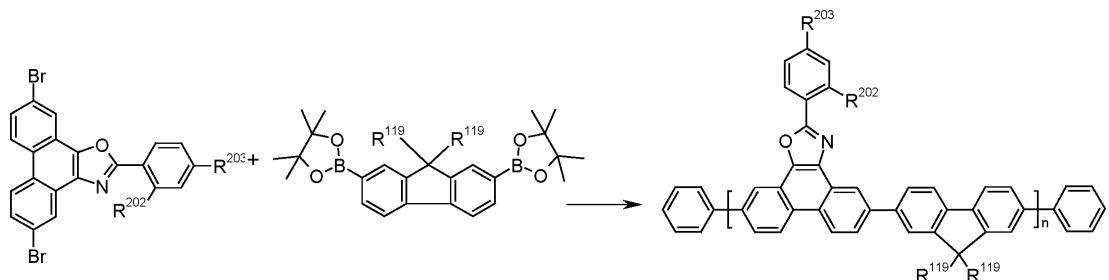
ポリマー番号	$\text{R}^{202}$	$\text{R}^{203}$	$\text{R}^{119}$
10-1	-O-n-オクチル	-O-n-オクチル	n-オクチル
10-2	-O-n-オクチル	-O-n-オクチル	n-ヘキシル
10-3	-O-n-オクチル	-O-n-オクチル	2-エチルヘキシル
10-4	-O-n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	n-オクチル
10-5	-O-n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	n-ヘキシル
10-6	-O-n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	2-エチルヘキシル
10-7	-O-n-ブチル	-O-n-ブチル	n-オクチル
10-8	-O-n-ブチル	-O-n-ブチル	n-ヘキシル
10-9	-O-n-ブチル	-O-n-ブチル	2-エチルヘキシル
10-10	-O-n-オクチル	H	n-オクチル
10-11	-O-n-オクチル	H	n-ヘキシル
10-12	-O-n-オクチル	H	2-エチルヘキシル
10-13	-O-n-ヘキシル	H	n-オクチル
10-14	-O-n-ヘキシル	H	n-ヘキシル
10-15	-O-n-ヘキシル	H	2-エチルヘキシル
10-16	-O-n-ブチル	H	n-オクチル
10-17	-O-n-ブチル	H	n-ヘキシル
10-18	-O-n-ブチル	H	2-エチルヘキシル

20

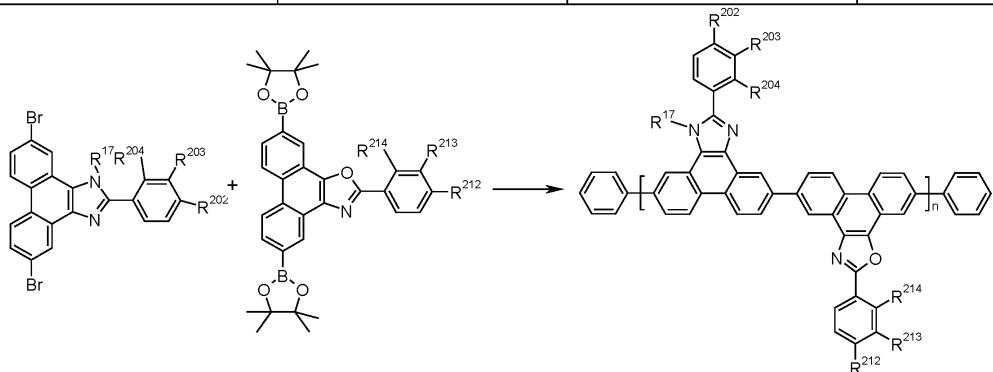
30

【0595】

【表 1 2】



ポリマー番号	R<sup>202</sup>	R<sup>203</sup>	R<sup>119</sup>
11-1	-O-n-オクチル	-O-n-オクチル	n-オクチル
11-2	-O-n-オクチル	-O-n-オクチル	n-ヘキシル
11-3	-O-n-オクチル	-O-n-オクチル	2-エチルヘキシル
11-4	-O-n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	n-オクチル
11-5	-O-n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	n-ヘキシル
11-6	-O-n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	2-エチルヘキシル
11-7	-O-n-ブチル	-O-n-ブチル	n-オクチル
11-8	-O-n-ブチル	-O-n-ブチル	n-ヘキシル
11-9	-O-n-ブチル	-O-n-ブチル	2-エチルヘキシル
11-10	-O-n-オクチル	H	n-オクチル
11-11	-O-n-オクチル	H	n-ヘキシル
11-12	-O-n-オクチル	H	2-エチルヘキシル
11-13	-O-n-ヘキシル	H	n-オクチル
11-14	-O-n-ヘキシル	H	n-ヘキシル
11-15	-O-n-ヘキシル	H	2-エチルヘキシル
11-16	-O-n-ブチル	H	n-オクチル
11-17	-O-n-ブチル	H	n-ヘキシル
11-18	-O-n-ブチル	H	2-エチルヘキシル



【0596】

ポリマー鎖中の 5員ヘテロ芳香族環の配列は、不規則である。

【0597】

【表 1 3】

ポリマ 一番号	$R^{17}$	$R^{202}$	$R^{203}$	$R^{204}$	$R^{212}$	$R^{213}$	$R^{214}$
12-1	n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル
12-2	n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル	O-n-ヘキシル	H	O-n-ヘキシル
12-3	n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル	O-n-ブチル	H	O-n-ブチル
12-4	n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル	H	O-n- オクチル	O-n-オクチル
12-5	n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル	H	O-n- ヘキシル	O-n-ヘキシル
12-6	n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル	H	O-n-ブ チル	O-n-ブチル
12-7	n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル	H	H	O-n-オクチル
12-8	n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル	H	H	O-n-ヘキシル
12-9	n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル	H	H	O-n-ブチル
12-10	n-オクチル	H	H	O-n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル
12-11	n-オクチル	H	H	O-n-オクチル	O-n-ヘキシル	H	O-n-ヘキシル
12-12	n-オクチル	H	H	O-n-オクチル	O-n-ブチル	H	O-n-ブチル
12-13	n-オクチル	H	H	O-n-オクチル	H	O-n- オクチル	O-n-オクチル
12-14	n-オクチル	H	H	O-n-オクチル	H	O-n- ヘキシル	O-n-ヘキシル
12-15	n-オクチル	H	H	O-n-オクチル	H	O-n- ブチル	O-n-ブチル
12-16	n-オクチル	H	H	O-n-オクチル	H	H	O-n-オクチル
12-17	n-オクチル	H	H	O-n-オクチル	H	H	O-n-ヘキシル
12-18	n-オクチル	H	H	O-n-オクチル	H	H	O-n-ブチル
12-19	n-オクチル	H	O-n- オクチル	O-n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル
12-20	n-オクチル	H	O-n- オクチル	O-n-オクチル	O-n-ヘキシル	H	O-n-ヘキシル
12-21	n-オクチル	H	O-n- オクチル	O-n-オクチル	O-n-ブチル	H	O-n-ブチル
12-22	n-オクチル	H	O-n- オクチル	O-n-オクチル	H	O-n- オクチル	O-n-オクチル

10

20

30

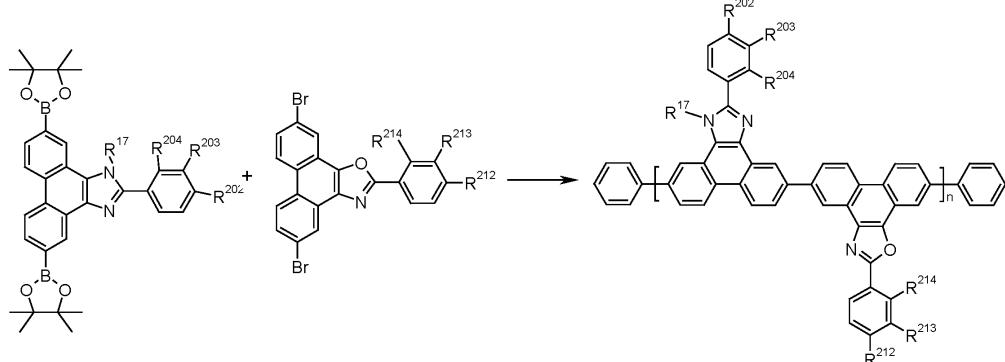
40

12-23	n-オクチル	H	O-n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-ヘキシル	O-n-ヘキシル
12-24	n-オクチル	H	O-n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-ブチル	O-n-ブチル
12-25	n-オクチル	H	O-n-オクチル	O-n-オクチル	H	H	O-n-オクチル
12-26	n-オクチル	H	O-n-オクチル	O-n-オクチル	H	H	O-n-ヘキシル
12-27	n-オクチル	H	O-n-オクチル	O-n-オクチル	H	H	O-n-ブチル
12-28	n-オクチル	O-n-オクチル	H	H	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル
12-29	n-オクチル	O-n-オクチル	H	H	O-n-ヘキシル	H	O-n-ヘキシル
12-30	n-オクチル	O-n-オクチル	H	H	O-n-ブチル	H	O-n-ブチル
12-31	n-オクチル	O-n-オクチル	H	H	H	O-n-オクチル	O-n-オクチル
12-32	n-オクチル	O-n-オクチル	H	H	H	O-n-ヘキシル	O-n-ヘキシル
12-33	n-オクチル	O-n-オクチル	H	H	H	O-n-ブチル	O-n-ブチル
12-34	n-オクチル	O-n-オクチル	H	H	H	H	O-n-オクチル
12-35	n-オクチル	O-n-オクチル	H	H	H	H	O-n-ヘキシル
12-36	n-オクチル	O-n-オクチル	H	H	H	H	O-n-ブチル

10

20

30



【 0 5 9 8 】

40

ポリマー鎖中の5員ヘテロ芳香族環の配列は、不規則である。

【 0 5 9 9 】

【表 1 4】

ポリマー 一番号	$R^{17}$	$R^{202}$	$R^{203}$	$R^{204}$	$R^{212}$	$R^{213}$	$R^{214}$
13-1	n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル	O-n-オクチル	H	n-オクチル
13-2	n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル	O-n-ヘキシル	H	n-ヘキシル
13-3	n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル	O-n-ブチル	H	n-ブチル
13-4	n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル	H	O-n- オクチル	n-オクチル
13-5	n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル	H	O-n- ヘキシル	n-ヘキシル
13-6	n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル	H	O-n- ブチル	n-ブチル
13-7	n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル	H	H	n-オクチル
13-8	n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル	H	H	n-ヘキシル
13-9	n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル	H	H	n-ブチル
13-10	n-オクチル	H	H	O-n-オクチル	O-n-オクチル	H	n-オクチル
13-11	n-オクチル	H	H	O-n-オクチル	O-n-ヘキシル	H	n-ヘキシル
13-12	n-オクチル	H	H	O-n-オクチル	O-n-ブチル	H	n-ブチル
13-13	n-オクチル	H	H	O-n-オクチル	H	O-n- オクチル	n-オクチル
13-14	n-オクチル	H	H	O-n-オクチル	H	O-n- ヘキシル	n-ヘキシル
13-15	n-オクチル	H	H	O-n-オクチル	H	O-n- ブチル	n-ブチル
13-16	n-オクチル	H	H	O-n-オクチル	H	H	n-オクチル
13-17	n-オクチル	H	H	O-n-オクチル	H	H	n-ヘキシル
13-18	n-オクチル	H	H	O-n-オクチル	H	H	n-ブチル
13-19	n-オクチル	H	O-n- オクチル	O-n-オクチル	O-n-オクチル	H	n-オクチル
13-20	n-オクチル	H	O-n- オクチル	O-n-オクチル	O-n-ヘキシル	H	n-ヘキシル
13-21	n-オクチル	H	O-n- オクチル	O-n-オクチル	O-n-ブチル	H	n-ブチル
13-22	n-オクチル	H	O-n- オクチル	O-n-オクチル	H	O-n- オクチル	n-オクチル

10

20

30

40

13-23	n-オクチル	H	O-n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-ヘキシル	n-ヘキシル
13-24	n-オクチル	H	O-n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-ブチル	n-ブチル
13-25	n-オクチル	H	O-n-オクチル	O-n-オクチル	H	H	n-オクチル
13-26	n-オクチル	H	O-n-オクチル	O-n-オクチル	H	H	n-ヘキシル
13-27	n-オクチル	H	O-n-オクチル	O-n-オクチル	H	H	n-ブチル
13-28	n-オクチル	O-n-オクチル	H	H	O-n-オクチル	H	n-オクチル
13-29	n-オクチル	O-n-オクチル	H	H	O-n-ヘキシル	H	n-ヘキシル
13-30	n-オクチル	O-n-オクチル	H	H	O-n-ブチル	H	n-ブチル
13-31	n-オクチル	O-n-オクチル	H	H	H	O-n-オクチル	n-オクチル
13-32	n-オクチル	O-n-オクチル	H	H	H	O-n-ヘキシル	n-ヘキシル
13-33	n-オクチル	O-n-オクチル	H	H	H	O-n-ブチル	n-ブチル
13-34	n-オクチル	O-n-オクチル	H	H	H	H	n-オクチル
13-35	n-オクチル	O-n-オクチル	H	H	H	H	n-ヘキシル
13-36	n-オクチル	O-n-オクチル	H	H	H	H	n-ブチル

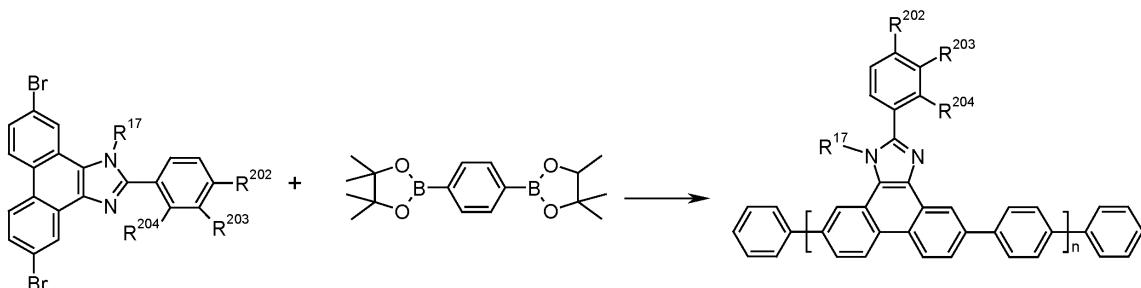
10

20

【 0 6 0 0 】

30

【表 1 5】



ポリマー番号	R <sup>17</sup>	R <sup>202</sup>	R <sup>203</sup>	R <sup>204</sup>
14-1	n-オクチル	-O-n-オクチル	H	H
14-2	n-オクチル	-O-n-オクチル	H	H
14-3	n-オクチル	-O-n-オクチル	H	H
14-4	n-オクチル	-O-n-オクチル	H	-O-n-オクチル
14-5	n-オクチル	-O-n-オクチル	H	-O-n-オクチル
14-6	n-オクチル	-O-n-オクチル	H	-O-n-オクチル
14-7	n-オクチル	H	H	-O-n-オクチル
14-8	n-オクチル	H	H	-O-n-オクチル
14-9	n-オクチル	H	H	-O-n-オクチル
14-10	n-オクチル	H	-O-n-オクチル	-O-n-オクチル
14-11	n-オクチル	H	-O-n-オクチル	-O-n-オクチル
14-12	n-オクチル	H	-O-n-オクチル	-O-n-オクチル
14-13	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	H	H
14-14	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	H	H
14-15	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	H	H
14-16	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	H	-O-n-ヘキシル
14-17	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	H	-O-n-ヘキシル
14-18	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	H	-O-n-ヘキシル
14-19	n-ヘキシル	H	H	-O-n-ヘキシル
14-20	n-ヘキシル	H	H	-O-n-ヘキシル
14-21	n-ヘキシル	H	H	-O-n-ヘキシル
14-22	n-ヘキシル	H	-O-n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル
14-23	n-ヘキシル	H	-O-n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル
14-24	n-ヘキシル	H	-O-n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル

10

20

30

40

14-25	n-ブチル	-O-n-ブチル	H	H
14-26	n-ブチル	-O-n-ブチル	H	H
14-27	n-ブチル	-O-n-ブチル	H	H
14-28	n-ブチル	-O-n-ブチル	H	-O-n-ブチル
14-29	n-ブチル	-O-n-ブチル	H	-O-n-ブチル
14-30	n-ブチル	-O-n-ブチル	H	-O-n-ブチル
14-31	n-ブチル	H	H	-O-n-ブチル
14-32	n-ブチル	H	H	-O-n-ブチル
14-33	n-ブチル	H	H	-O-n-ブチル
14-34	n-ブチル	H	-O-n-ブチル	-O-n-ブチル
14-35	n-ブチル	H	-O-n-ブチル	-O-n-ブチル
14-36	n-ブチル	H	-O-n-ブチル	-O-n-ブチル
14-37	2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル	H	H
14-38	2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル	H	H
14-39	2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル	H	H
14-40	2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル
14-41	2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル
14-42	2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル
14-43	2-エチルヘキシル	H	H	-O-2-エチルヘキシル
14-44	2-エチルヘキシル	H	H	-O-2-エチルヘキシル
14-45	2-エチルヘキシル	H	H	-O-2-エチルヘキシル
14-46	2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル
14-47	2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル
14-48	2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル
14-49	n-オクチル	O-n-オクチル	H	H
14-50	n-オクチル	O-n-オクチル	H	H
14-51	n-オクチル	O-n-オクチル	H	H
14-52	n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル
14-53	n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル
14-54	n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル
14-55	n-オクチル	H	H	O-n-オクチル
14-56	n-オクチル	H	H	O-n-オクチル

10

20

30

40

14-57	n-オクチル	H	H	O-n-オクチル
14-58	n-オクチル	H	O-n-オクチル	O-n-オクチル
14-59	n-オクチル	H	O-n-オクチル	O-n-オクチル
14-60	n-オクチル	H	O-n-オクチル	O-n-オクチル
14-61	Ph	-O-2-エチルヘキシル	H	H
14-62	Ph	-O-2-エチルヘキシル	H	H
14-63	Ph	-O-2-エチルヘキシル	H	H
14-64	Ph	-O-2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル
14-65	Ph	-O-2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル
14-66	Ph	-O-2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル
14-67	Ph	H	H	-O-2-エチルヘキシル
14-68	Ph	H	H	-O-2-エチルヘキシル
14-69	Ph	H	H	-O-2-エチルヘキシル
14-70	Ph	H	-O-2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル
14-71	Ph	H	-O-2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル
14-72	Ph	H	-O-2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル
14-73	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	-O-2-エチルヘキシル	H	H
14-73	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	-O-2-エチルヘキシル	H	H
14-75	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	-O-2-エチルヘキシル	H	H
14-76	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	-O-2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル
14-77	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	-O-2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル
14-78	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	-O-2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル
14-79	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	H	H	-O-2-エチルヘキシル
14-80	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	H	H	-O-2-エチルヘキシル
14-81	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	H	H	-O-2-エチルヘキシル
14-82	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	H	-O-2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル
14-83	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	H	-O-2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル
14-84	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	H	-O-2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル

【 0 6 0 1 】

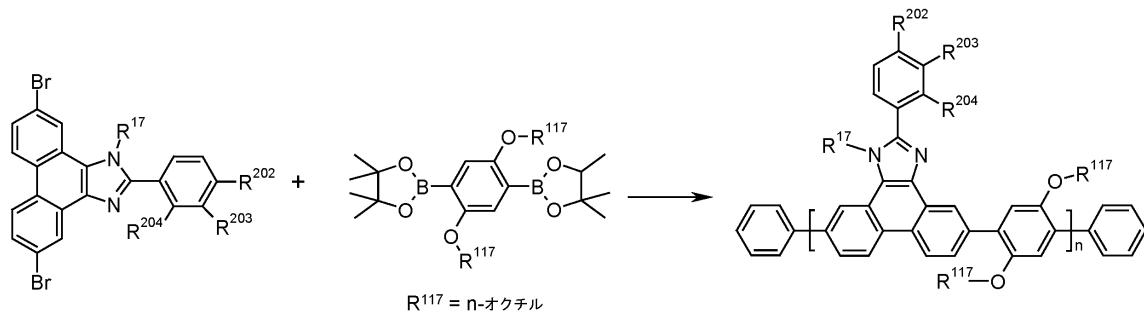
10

20

30

40

【表 1 6】



ポリマー番号	$R^{17}$	$R^{202}$	$R^{203}$	$R^{204}$
15-1	n-オクチル	-O-n-オクチル	H	H
15-2	n-オクチル	-O-n-オクチル	H	H
15-3	n-オクチル	-O-n-オクチル	H	H
15-4	n-オクチル	-O-n-オクチル	H	-O-n-オクチル
15-5	n-オクチル	-O-n-オクチル	H	-O-n-オクチル
15-6	n-オクチル	-O-n-オクチル	H	-O-n-オクチル
15-7	n-オクチル	H	H	-O-n-オクチル
15-8	n-オクチル	H	H	-O-n-オクチル
15-9	n-オクチル	H	H	-O-n-オクチル
15-10	n-オクチル	H	-O-n-オクチル	-O-n-オクチル
15-11	n-オクチル	H	-O-n-オクチル	-O-n-オクチル
15-12	n-オクチル	H	-O-n-オクチル	-O-n-オクチル
15-13	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	H	H
15-14	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	H	H
15-15	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	H	H
15-16	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	H	-O-n-ヘキシル
15-17	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	H	-O-n-ヘキシル
15-18	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	H	-O-n-ヘキシル
15-19	n-ヘキシル	H	H	-O-n-ヘキシル
15-20	n-ヘキシル	H	H	-O-n-ヘキシル
15-21	n-ヘキシル	H	H	-O-n-ヘキシル
15-22	n-ヘキシル	H	-O-n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル
15-23	n-ヘキシル	H	-O-n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル
15-24	n-ヘキシル	H	-O-n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル

10

20

30

40

15-25	n-ブチル	-O-n-ブチル	H	H
15-26	n-ブチル	-O-n-ブチル	H	H
15-27	n-ブチル	-O-n-ブチル	H	H
15-28	n-ブチル	-O-n-ブチル	H	-O-n-ブチル
15-29	n-ブチル	-O-n-ブチル	H	-O-n-ブチル
15-30	n-ブチル	-O-n-ブチル	H	-O-n-ブチル
15-31	n-ブチル	H	H	-O-n-ブチル
15-32	n-ブチル	H	H	-O-n-ブチル
15-33	n-ブチル	H	H	-O-n-ブチル
15-34	n-ブチル	H	-O-n-ブチル	-O-n-ブチル
15-35	n-ブチル	H	-O-n-ブチル	-O-n-ブチル
15-36	n-ブチル	H	-O-n-ブチル	-O-n-ブチル
15-37	2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル	H	H
15-38	2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル	H	H
15-39	2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル	H	H
15-40	2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル
15-41	2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル
15-42	2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル
15-43	2-エチルヘキシル	H	H	-O-2-エチルヘキシル
15-44	2-エチルヘキシル	H	H	-O-2-エチルヘキシル
15-45	2-エチルヘキシル	H	H	-O-2-エチルヘキシル
15-46	2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル
15-47	2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル
15-48	2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル
15-49	n-オクチル	O-n-オクチル	H	H
15-50	n-オクチル	O-n-オクチル	H	H
15-51	n-オクチル	O-n-オクチル	H	H
15-52	n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル
15-53	n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル
15-54	n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル
15-55	n-オクチル	H	H	O-n-オクチル
15-56	n-オクチル	H	H	O-n-オクチル

10

20

30

40

15-57	n-オクチル	H	H	O-n-オクチル
15-58	n-オクチル	H	O-n-オクチル	O-n-オクチル
15-59	n-オクチル	H	O-n-オクチル	O-n-オクチル
15-60	n-オクチル	H	O-n-オクチル	O-n-オクチル
15-61	Ph	-O-2-エチルヘキシル	H	H
15-62	Ph	-O-2-エチルヘキシル	H	H
15-63	Ph	-O-2-エチルヘキシル	H	H
15-64	Ph	-O-2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル
15-65	Ph	-O-2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル
15-66	Ph	-O-2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル
15-67	Ph	H	H	-O-2-エチルヘキシル
15-68	Ph	H	H	-O-2-エチルヘキシル
15-69	Ph	H	H	-O-2-エチルヘキシル
15-70	Ph	H	-O-2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル
15-71	Ph	H	-O-2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル
15-72	Ph	H	-O-2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル
15-73	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	-O-2-エチルヘキシル	H	H
15-73	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	-O-2-エチルヘキシル	H	H
15-75	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	-O-2-エチルヘキシル	H	H
15-76	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	-O-2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル
15-77	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	-O-2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル
15-78	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	-O-2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル
15-79	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	H	H	-O-2-エチルヘキシル
15-80	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	H	H	-O-2-エチルヘキシル
15-81	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	H	H	-O-2-エチルヘキシル
15-82	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	H	-O-2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル
15-83	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	H	-O-2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル
15-84	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	H	-O-2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル

【 0 6 0 2 】

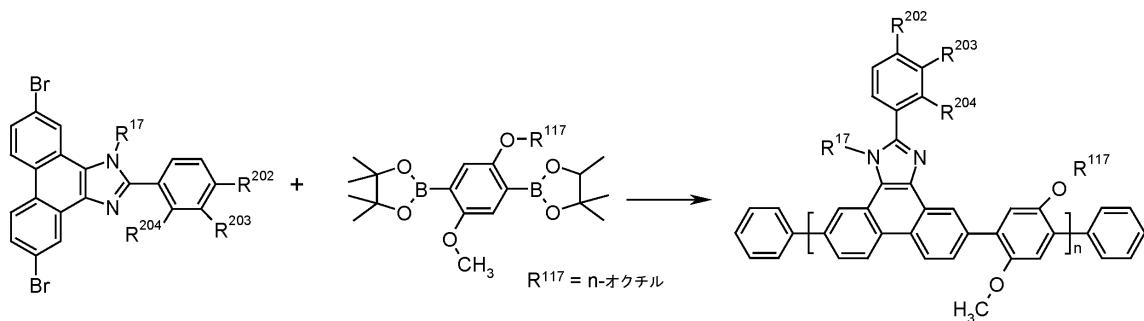
10

20

30

40

【表 1 7】



ポリマー番号	$R^{17}$	$R^{202}$	$R^{203}$	$R^{204}$
16-1	n-オクチル	-O-n-オクチル	H	H
16-2	n-オクチル	-O-n-オクチル	H	H
16-3	n-オクチル	-O-n-オクチル	H	H
16-4	n-オクチル	-O-n-オクチル	H	-O-n-オクチル
16-5	n-オクチル	-O-n-オクチル	H	-O-n-オクチル
16-6	n-オクチル	-O-n-オクチル	H	-O-n-オクチル
16-7	n-オクチル	H	H	-O-n-オクチル
16-8	n-オクチル	H	H	-O-n-オクチル
16-9	n-オクチル	H	H	-O-n-オクチル
16-10	n-オクチル	H	-O-n-オクチル	-O-n-オクチル
16-11	n-オクチル	H	-O-n-オクチル	-O-n-オクチル
16-12	n-オクチル	H	-O-n-オクチル	-O-n-オクチル
16-13	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	H	H
16-14	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	H	H
16-15	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	H	H
16-16	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	H	-O-n-ヘキシル
16-17	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	H	-O-n-ヘキシル
16-18	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル	H	-O-n-ヘキシル
16-19	n-ヘキシル	H	H	-O-n-ヘキシル
16-20	n-ヘキシル	H	H	-O-n-ヘキシル
16-21	n-ヘキシル	H	H	-O-n-ヘキシル
16-22	n-ヘキシル	H	-O-n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル
16-23	n-ヘキシル	H	-O-n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル

10

20

30

40

16-24	n-ヘキシル	H	-O-n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル
16-25	n-ブチル	-O-n-ブチル	H	H
16-26	n-ブチル	-O-n-ブチル	H	H
16-27	n-ブチル	-O-n-ブチル	H	H
16-28	n-ブチル	-O-n-ブチル	H	-O-n-ブチル
16-29	n-ブチル	-O-n-ブチル	H	-O-n-ブチル
16-30	n-ブチル	-O-n-ブチル	H	-O-n-ブチル
16-31	n-ブチル	H	H	-O-n-ブチル
16-32	n-ブチル	H	H	-O-n-ブチル
16-33	n-ブチル	H	H	-O-n-ブチル
16-34	n-ブチル	H	-O-n-ブチル	-O-n-ブチル
16-35	n-ブチル	H	-O-n-ブチル	-O-n-ブチル
16-36	n-ブチル	H	-O-n-ブチル	-O-n-ブチル
16-37	2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル	H	H
16-38	2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル	H	H
16-39	2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル	H	H
16-40	2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル
16-41	2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル
16-42	2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル
16-43	2-エチルヘキシル	H	H	-O-2-エチルヘキシル
16-44	2-エチルヘキシル	H	H	-O-2-エチルヘキシル
16-45	2-エチルヘキシル	H	H	-O-2-エチルヘキシル
16-46	2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル
16-47	2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル
16-48	2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル
16-49	n-オクチル	O-n-オクチル	H	H
16-50	n-オクチル	O-n-オクチル	H	H
16-51	n-オクチル	O-n-オクチル	H	H
16-52	n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル
16-53	n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル
16-54	n-オクチル	O-n-オクチル	H	O-n-オクチル
16-55	n-オクチル	H	H	O-n-オクチル

10

20

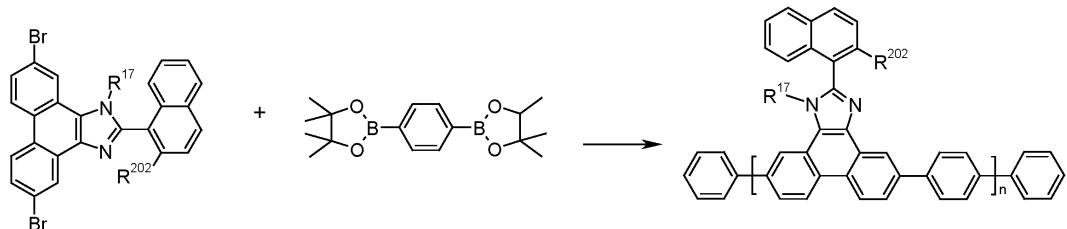
30

40

16-56	n-オクチル	H	H	O-n-オクチル
16-57	n-オクチル	H	H	O-n-オクチル
16-58	n-オクチル	H	O-n-オクチル	O-n-オクチル
16-59	n-オクチル	H	O-n-オクチル	O-n-オクチル
16-60	n-オクチル	H	O-n-オクチル	O-n-オクチル
16-61	Ph	-O-2-エチルヘキシル	H	H
16-62	Ph	-O-2-エチルヘキシル	H	H
16-63	Ph	-O-2-エチルヘキシル	H	H
16-64	Ph	-O-2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル
16-65	Ph	-O-2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル
16-66	Ph	-O-2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル
16-67	Ph	H	H	-O-2-エチルヘキシル
16-68	Ph	H	H	-O-2-エチルヘキシル
16-69	Ph	H	H	-O-2-エチルヘキシル
16-70	Ph	H	-O-2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル
16-71	Ph	H	-O-2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル
16-72	Ph	H	-O-2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル
16-73	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	-O-2-エチルヘキシル	H	H
16-73	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	-O-2-エチルヘキシル	H	H
16-75	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	-O-2-エチルヘキシル	H	H
16-76	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	-O-2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル
16-77	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	-O-2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル
16-78	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	-O-2-エチルヘキシル	H	-O-2-エチルヘキシル
16-79	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	H	H	-O-2-エチルヘキシル
16-80	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	H	H	-O-2-エチルヘキシル
16-81	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	H	H	-O-2-エチルヘキシル
16-82	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	H	-O-2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル
16-83	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	H	-O-2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル
16-84	<i>m</i> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	H	-O-2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル

【 0 6 0 3 】

【表 1 8】



ポリマー番号	R <sup>17</sup>	R <sup>202</sup>
16-1	n-オクチル	-O-n-オクチル
16-2	n-ヘキシル	-O-n-ヘキシル
16-3	n-ブチル	-O-n-ブチル
16-4	-O-2-エチルヘキシル	-O-2-エチルヘキシル
16-5	Ph	-O-2-エチルヘキシル
16-6	Ph	-O-n-オクチル
16-7	Ph	-O-n-ヘキシル
16-8	m-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	-O-2-エチルヘキシル
16-9	m-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	-O-n-オクチル
16-10	m-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CF <sub>3</sub>	-O-n-ヘキシル

## 【0604】

## (用途実施例 1)

単一の有機層を有する有機蛍光デバイスを以下のようにして調製した。ガラス基板上に厚さ 100 nm の ITO フィルムがスパッタによって形成され、続いてパターン形成させた。酸素プラズマ処理された ITO フィルム上に、PEDOT、PSS ( Baytron P ) を用いて、厚さ 80 nm のホール注入層を、スピンドーティング、続いて 200 °C での加熱 (5 分間) によって形成させた。厚さ 80 nm を得るために、トルエン 1 mL 中ホール輸送材料としてジアミン誘導体 (TPD) 4 mg および実施例 3 9 の化合物 6 mg を含有する溶液をスピンドーティング (1500 rpm, 10 秒) によって塗工した。次いで、このようにして処理された基板を真空堆積チャンバーに設置し、5 nm のバリウム、続いて 100 nm のアルミニウムの堆積によって 2 層の電極構造を有するカソードを形成させた。デバイスが電流密度 10 mA / cm<sup>2</sup> (4 V で) で駆動するとき、得られた発光は、効率 0.6 cd / A で深い青色 (CIE 0.19, 0.14) を示す。

## 【0605】

## (用途実施例 2)

デバイスを、実施例 6 8 の化合物を用いることを除いて、実施例 1 に述べたようにして作製する。得られた効率はデバイスを 10 mA / cm<sup>2</sup> で駆動するとき、0.2 cd / A である。

10

20

30

40

---

 フロントページの続き

(51)Int.Cl.	F I
C 0 7 D 475/12	(2006.01) C 0 7 D 475/12
C 0 7 D 403/04	(2006.01) C 0 7 D 403/04
H 0 1 L 51/05	(2006.01) H 0 1 L 29/28 1 0 0 A
H 0 1 L 27/28	(2006.01) H 0 1 L 29/28 5 0 0
H 0 1 L 51/30	(2006.01) H 0 1 L 29/28 2 5 0 G
H 0 1 L 29/786	(2006.01) H 0 1 L 29/78 6 1 8 B

- (72)発明者 シュミットハルター, 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 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, クリストイーナ  
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
- (72)発明者 ヒンターマン, トビアス  
スイス国、ツェーハー - 4 1 0 6 テルヴィル、レームグルベンヴェーク 1 2

審査官 井津 健太郎

- (56)参考文献 国際公開第2 0 0 4 / 0 9 9 2 8 5 (WO, A 1)  
国際公開第2 0 0 5 / 0 1 4 6 8 9 (WO, A 1)  
国際公開第0 3 / 0 5 7 6 7 9 (WO, A 1)  
特開平0 8 - 1 2 7 5 5 9 (JP, A)  
米国特許出願公開第2 0 0 4 / 0 2 0 9 1 1 7 (US, A 1)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

C 0 8 G 6 1 / 0 0 - 6 1 / 1 2  
C A p l u s / R E G I S T R Y ( S T N )