

(19)日本国特許庁(JP)

(12)公表特許公報(A)

(11)公表番号

特表2023-530915

(P2023-530915A)

(43)公表日 令和5年7月20日(2023.7.20)

(51)国際特許分類		F I		テーマコード(参考)	
C 0 7 F	5/02 (2006.01)	C 0 7 F	5/02	A	3 K 1 0 7
C 0 7 D	498/22 (2006.01)	C 0 7 D	498/22	C S P	4 C 0 6 5
C 0 7 D	471/22 (2006.01)	C 0 7 D	471/22		4 C 0 7 2
C 0 9 K	11/06 (2006.01)	C 0 9 K	11/06	6 6 0	4 H 0 4 8
H 1 0 K	50/12 (2023.01)	H 1 0 K	50/12		
		審査請求	未請求	予備審査請求	未請求 (全222頁) 最終頁に続く

(21)出願番号	特願2022-576219(P2022-576219)	(71)出願人	591032596
(86)(22)出願日	令和3年6月25日(2021.6.25)		メルク パテント ゲゼルシャフト ミット
(85)翻訳文提出日	令和4年12月9日(2022.12.9)		ベシュレンクテル ハフツング
(86)国際出願番号	PCT/EP2021/067453		Merck Patent Gesell
(87)国際公開番号	WO2022/002771		schaft mit beschræ
(87)国際公開日	令和4年1月6日(2022.1.6)		nkter Haftung
(31)優先権主張番号	20182888.6		ドイツ連邦共和国 デー - 6 4 2 9 3 ダ
(32)優先日	令和2年6月29日(2020.6.29)		ルムシュタット フランクフルター シュ
(33)優先権主張国・地域又は機関	欧州特許庁(EP)		トラーゼ 2 5 0
(81)指定国・地域	AP(BW,GH,GM,KE,LR,LS,MW,MZ,NA ,RW,SD,SL,ST,SZ,TZ,UG,ZM,ZW),EA(AM,AZ,BY,KG,KZ,RU,TJ,TM),EP(AL,A T,BE,BG,CH,CY,CZ,DE,DK,EE,ES,FI,FR ,GB,GR,HR,HU,IE,IS,IT,LT,LU,LV,MC, 最終頁に続く	(74)代理人	100120031 弁理士 宮嶋 学 最終頁に続く

(54)【発明の名称】 有機エレクトロルミネッセンス素子のためのヘテロ環式化合物

(57)【要約】

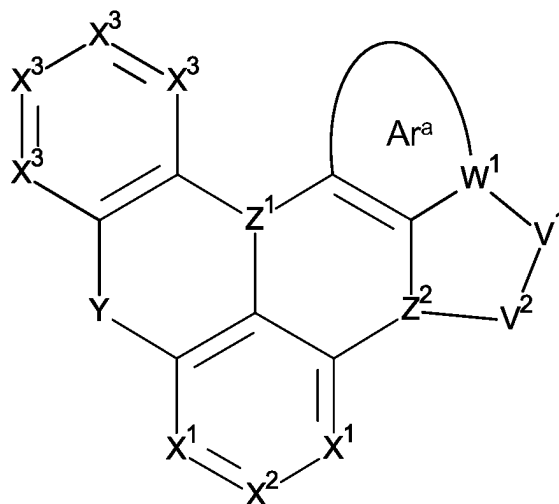
本発明は、電子素子における使用に好適なヘテロ環式化合物、および前記化合物を含む、電子素子、特に有機エレクトロルミネッセンス素子に関する

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

式 (I) の構造を少なくとも 1 つ含む化合物。

【化 1】



式 (I)

10

20

(ここで、環 Ar^a は、出現毎に同一であるかまたは異なり、5 ~ 60 の芳香族環原子を有し、1 以上の Ar または R ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族またはヘテロ芳香族環系であり；

かつ、ここで、使用されるさらなる記号および添え字は以下のとおりである：

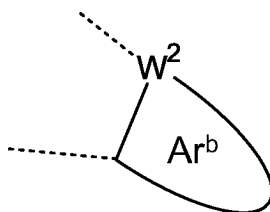
Z^1 、 Z^2 は、出現毎に同一であるかまたは異なり、 N または B であり；

W^1 は、出現毎に同一であるかまたは異なり、 N 、 B 、 $C=C(Ar)$ 、 $C=C(R)$ または $C=N$ であり、ここで $C=C(Ar)$ または $C=C(R)$ 基の両方の炭素原子、または $C=N$ 基の炭素原子および窒素原子が、それぞれ、環 Ar^a の部分であり、ここで、 $C=N$ 基の炭素原子は、 V^1 基に結合し；

30

V^1 、 V^2 は、出現毎に同一であるかまたは異なり、 $-N=$ 、 $-B=$ 、 $=C(Ar)-$ または $=C(R)-$ であり、ここで、 V^1 、 V^2 基の 1 以下が、 $-N=$ または $-B=$ であるか、または V^1 、 V^2 基が、以下の式の環を形成し

【化 2】



40

ここで、環 Ar^b は、出現毎に同一であるかまたは異なり、5 ~ 60 の芳香族環原子を有し、1 以上の Ar または R ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族またはヘテロ芳香族環系であり、ここで、環 Ar^b が、 X^1 基と共に環系を形成してもよく、または環 Ar^a および Ar^b が、共に環系を形成していてもよく、ここで、 W^2 は、 W^1 基に結合し、出現毎に同一であるかまたは異なり、 N 、 B 、 $C=C(Ar)$ 、 $C=C(R)$ または $C=N$ であり、ここで、 $C=C(Ar)$ または $C=C(R)$ 基の両方の炭素原子、または $C=N$ 基の炭素原子および窒素原子が、それぞれ、 Ar^b 環の部分であり、ここで、 $C=N$ 基の炭素原子が、 W^1 基に結合し、点線は、 W^1 または Z^2 基への結合を示し；

50

Yは、出現毎に同一であるかまたは異なり、結合、N(Ar)、N(R)、P(Ar)、P(R)、P(=O)Ar、P(=O)R、P(=S)Ar、P(=S)R、B(Ar)、B(R)、Al(Ar)、Al(R)、Ga(Ar)、Ga(R)、C=O、C(R)₂、Si(R)₂、Ge(R)₂、C=NR、C=NAr、C=C(R)₂、C=C(R)(Ar)、O、S、Se、S=O、またはSO₂であり；

Arは、出現毎に同一であるかまたは異なり、5～60の芳香族環原子を有し、1以上のRラジカルによって置換されていてもよい、芳香族またはヘテロ芳香族環系であり；ここで、Ar基は、少なくとも1つのAr、X¹、X³、R基、またはさらなる基と共に、環系を形成していてもよく；

X¹は、出現毎に同一であるかまたは異なり、N、CR^a、または環Ar^bもしくはさらなる基への結合によって環系が形成される場合にCであり、ただし、1つの環あたりX¹、X²基のうちの2以下がNであり；

X²は、出現毎に同一であるかまたは異なり、NまたはCR^bであり、ただし、1つの環あたりX¹、X²基のうちの2以下がNであり；

X³は、出現毎に同一であるかまたは異なり、N、CR^c、またはArもしくはR基、環Ar^aまたはさらなる基への結合によって環系が形成される場合にCであり、ただし、1つの環あたりX³基のうちの2以下がNであるか、または2つの隣接するX³基が共にSまたはOであり、ここで、少なくとも1つのX³基は、CR^cまたはCであり；

R、R^a、R^b、R^cは、出現毎に同一であるかまたは異なり、H、D、OH、F、Cl、Br、I、CN、NO₂、N(Ar')₂、N(R¹)₂、C(=O)N(Ar')₂、C(=O)N(R¹)₂、C(Ar')₃、C(R¹)₃、Si(Ar')₃、Si(R¹)₃、B(Ar')₂、B(R¹)₂、C(=O)Ar'、C(=O)R¹、P(=O)(Ar')₂、P(=O)(R¹)₂、P(Ar')₂、P(R¹)₂、S(=O)Ar'、S(=O)R¹、S(=O)₂Ar'、S(=O)₂R¹、OSO₂Ar'、OSO₂R¹、1～40の炭素原子を有する、直鎖のアルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基または2～40の炭素原子を有する、アルケニルもしくはアルキニル基または3～20の炭素原子を有する、分岐もしくは環状の、アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基(ここで、アルキル、アルコキシ、チオアルコキシ、アルケニルもしくはアルキニル基が、それぞれのケースにおいて、1以上のR¹ラジカルによって置換されていてもよく、ここで、1以上の隣接しないCH₂基が、R¹C=CR¹、C=C、Si(R¹)₂、C=O、C=S、C=Se、C=NR¹、-C(=O)O-、-C(=O)NR¹-、NR¹、P(=O)(R¹)、-O-、-S-、SOまたはSO₂によって置き換えられていてもよい)、または5～60の芳香族環原子を有し、それぞれのケースにおいて、1以上のR¹ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族もしくはヘテロ芳香族環系、または5～60の芳香族環原子を有し、1以上のR¹ラジカルによって置換されていてもよい、アリールオキシもしくはヘテロアリールオキシ基であり；同時に、2つのR、R^a、R^b、R^cラジカルも、共に、またはさらなる基と、環系を形成していてもよく；

Ar'は、出現毎に同一であるかまたは異なり、5～60の芳香族環原子を有し、1以上のR¹ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族またはヘテロ芳香族環系であり；同時に、同一の炭素原子、ケイ素原子、窒素原子、リン原子またはホウ素原子に結合された2つのAr'ラジカルが、単結合によるブリッジ、またはB(R¹)、C(R¹)₂、Si(R¹)₂、C=O、C=NR¹、C=C(R¹)₂、O、S、S=O、SO₂、N(R¹)、P(R¹)およびP(=O)R¹から選択されるブリッジを介して、共に結合されることも可能であり；

R¹は、出現毎に同一であるかまたは異なり、H、D、F、Cl、Br、I、CN、NO₂、N(Ar'')₂、N(R²)₂、C(=O)Ar''、C(=O)R²、C(=O)OAr''、C(=O)OR²、P(=O)(Ar'')₂、P(Ar'')₂、B(Ar'')₂、B(R²)₂、C(Ar'')₃、C(R²)₃、Si(Ar'')₃、Si(R²)₃、1～40の炭素原子を有する、直鎖のアルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基または3～40の炭素原子を有する、分岐もしくは環状の、アルキル、アルコキシもしくはチオ

10

20

30

40

50

アルコキシ基または2～40の炭素原子を有するアルケニル基（これらのそれぞれは、1以上のR²ラジカルによって置換されていてもよく、ここで、1以上の隣接しないCH₂基が、-R²C=CR²-、-C=C-、Si(R²)₂、C=O、C=S、C=Se、C=NR²、-C(=O)O-、-C(=O)NR²-、NR²、P(=O)(R²)、-O-、-S-、SOまたはSO₂によって置き換えられていてもよく、かつ、ここで、1以上の水素原子が、D、F、Cl、Br、I、CNまたはNO₂によって置き換えられていてもよい）、または5～60の芳香族環原子を有する、芳香族もしくはヘテロ芳香族環系（これらのそれぞれは、1以上のR²ラジカルによって置換されていてもよい）、または5～60の芳香族環原子を有し、1以上のR²ラジカルによって置換されていてもよい、アリーロキシもしくはヘテロアリーロキシ基、または5～60の芳香族環原子を有し、1以上のR²ラジカルによって置換されていてもよい、アラルキルもしくはヘテロアラルキル基、またはこれらの系の組み合わせであり；同時に、2以上の、好ましくは隣接する、R¹ラジカルが、共に、環系を形成していてもよく；同時に、1以上のR¹ラジカルが、化合物のさらなる部分と共に、環系を形成していてもよく；

Ar'は、出現毎に同一であるかまたは異なり、5～30の芳香族環原子を有し、1以上のR²ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族またはヘテロ芳香族環系であり；同時に、同一の炭素原子、ケイ素原子、窒素原子、リン原子またはホウ素原子に結合された2つのAr'ラジカルが、単結合によるブリッジ、またはB(R)、C(R²)₂、Si(R²)₂、C=O、C=NR²、C=C(R²)₂、O、S、S=O、SO₂、N(R²)、P(R²)およびP(=O)R²から選択されるブリッジを介して、共に結合されることも可能であり；

R²は、出現毎に同一であるかまたは異なり、H、D、F、CN、1～20の炭素原子を有する脂肪族ヒドロカルビルラジカル、または5～30の芳香族環原子を有し、1以上の水素原子がD、F、Cl、Br、IまたはCNに置き換えられていてもよく、かつ1以上のそれぞれ1～4の炭素原子を有する1以上のアルキル基によって置換されていてもよい、芳香族もしくはヘテロ芳香族環系からなる群から選択され；同時に、2以上の置換基R²が、共に、環系を形成していてもよく；

ここで、少なくとも1つのV¹、V²、W¹、W²基は、NまたはBである）

【請求項2】

式(II-1)、(II-2)、(II-3)および/または(II-4)の構造を少なくとも1つ含む、請求項1に記載の化合物。

10

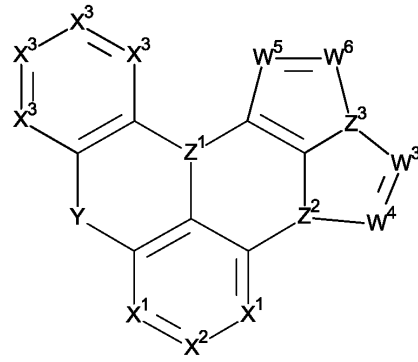
20

30

40

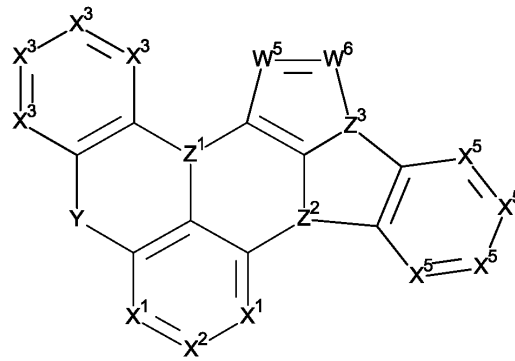
50

【化 3 - 1】



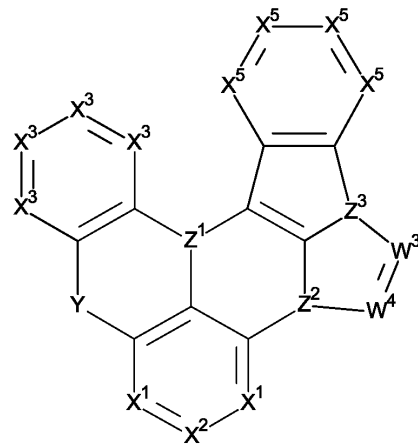
式 (II-1)

10



式 (II-2)

20



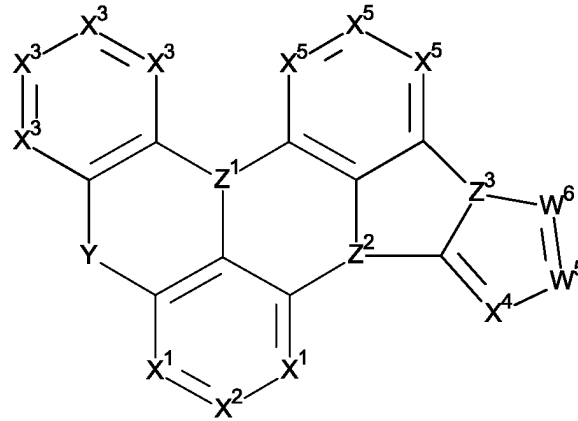
式 (II-3)

30

40

50

【化 3 - 2】



式 (II-4)

10

(ここで、Z¹、Z²、Y、X¹、X²およびX³は、請求項1に記載の意味を有し、かつ、さらなる記号は以下のとおりである：

Z³は、出現毎に同一であるかまたは異なり、NまたはBであり；

W³、W⁴、W⁵、W⁶は、出現毎に同一であるかまたは異なり、C(Ar)またはX⁶であり；

X⁴は、出現毎に同一であるかまたは異なり、N、CR^d、またはX¹基への結合によって環系が形成される場合にCであり、ただし、1つの環あたりX⁴、X⁶基のうちの2以下がNであり；

X⁵は、出現毎に同一であるかまたは異なり、N、CR^e、またはAr基、X¹基またはX³基への結合によって環系が形成される場合にCであり、ただし、1つの環あたり2以下のX⁵基がNであり；

X⁶は、出現毎に同一であるかまたは異なり、NまたはCR^fCであり、ただし、1つの環あたりX⁴、X⁶基の2以下がNであり；

R^d、R^e、R^fは、出現毎に同一であるかまたは異なり、H、D、OH、F、Cl、Br、I、CN、NO₂、N(Ar')₂、N(R¹)₂、C(=O)N(Ar')₂、C(=O)N(R¹)₂、C(Ar')₃、C(R¹)₃、Si(Ar')₃、Si(R¹)₃、B(Ar')₂、B(R¹)₂、C(=O)Ar'、C(=O)R¹、P(=O)(Ar')₂、P(=O)(R¹)₂、P(Ar')₂、P(R¹)₂、S(=O)Ar'、S(=O)R¹、S(=O)₂Ar'、S(=O)₂R¹、OSO₂Ar'、OSO₂R¹、1~40の炭素原子を有する、直鎖のアルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基または2~40の炭素原子を有する、アルケニルもしくはアルキニル基または3~20の炭素原子を有する、分岐もしくは環状の、アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基、(ここで、アルキル、アルコキシ、チオアルコキシ、アルケニルもしくはアルキニル基が、それぞれのケースにおいて、1以上のR¹ラジカルによって置換されていてもよく、ここで、1以上の隣接しないCH₂基がR¹C=CR¹、C-C、Si(R¹)₂、C=O、C=S、C=Se、C=NR¹、-C(=O)O-、-C(=O)NR¹-、NR¹、P(=O)(R¹)、-O-、-S-、SOまたはSO₂によって置き換えられていてもよい)、または5~60の芳香族環原子を有し、それぞれのケースにおいて、1以上のR¹ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族もしくはヘテロ芳香族環系、または5~60の芳香族環原子を有し、1以上のR¹ラジカルによって置換されていてもよい、アリーロキシもしくはヘテロアリーロキシ基であり；同時に、2つのR^d、R^e、R^fラジカルが、共に、またはさらなる基と、環系を形成していてもよく；ここで、記号Ar'およびR¹は、請求項1に記載の意味を有する)

【請求項3】

20

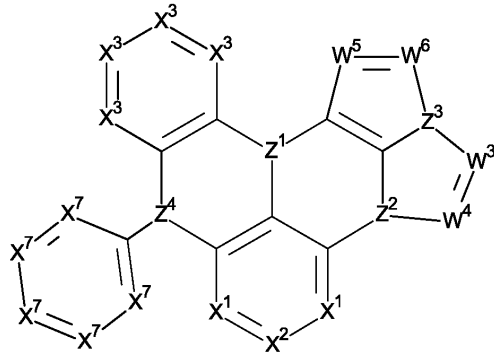
30

40

50

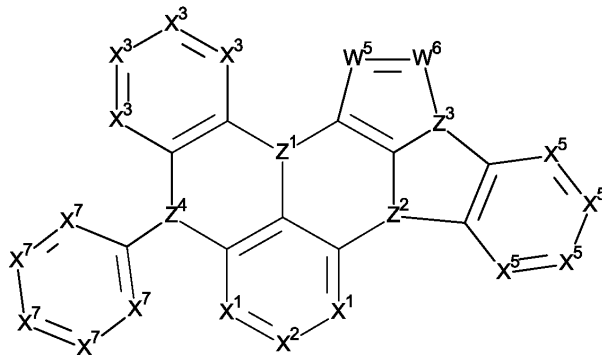
式 (I I a - 1)、(I I a - 2)、(I I a - 3)、(I I a - 4)、(I I b - 1)、(I I b - 2)、(I I b - 3)、(I I b - 4)、(I I c - 1)、(I I c - 2)、(I I c - 3)、(I I c - 4)、(I I d - 1)、(I I d - 2)、(I I d - 3) および / または (I I d - 4) の構造を少なくとも 1 つ含む、請求項 1 または 2 に記載の化合物。

【化 4 - 1】



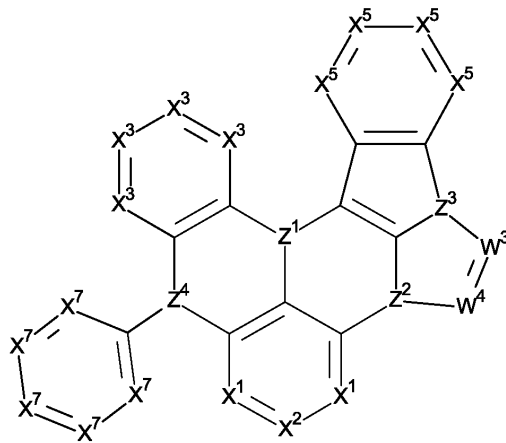
式 (IIa-1)

10



式 (IIa-2)

20



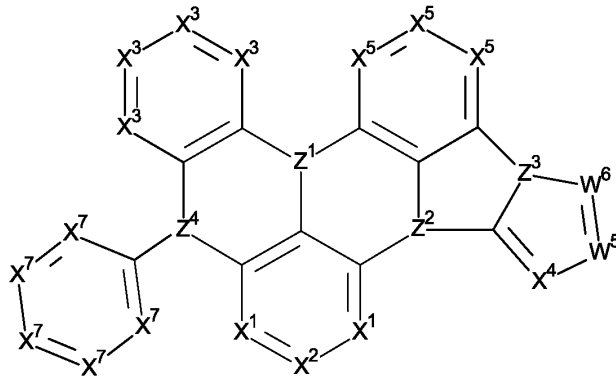
式 (IIa-3)

30

40

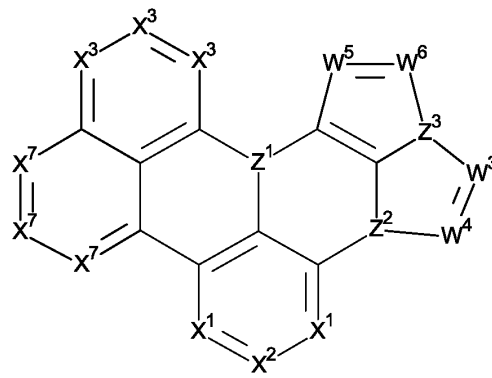
50

【化 4 - 2】



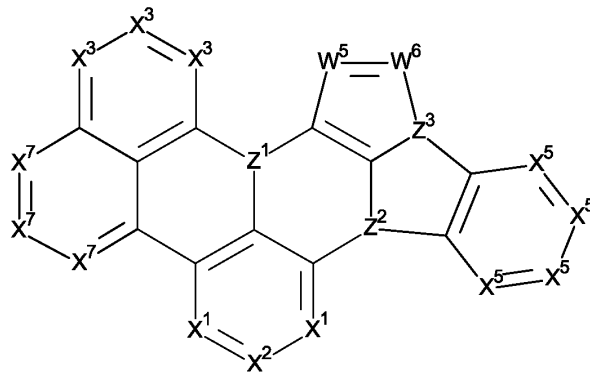
式 (IIa-4)

10



式 (IIb-1)

20



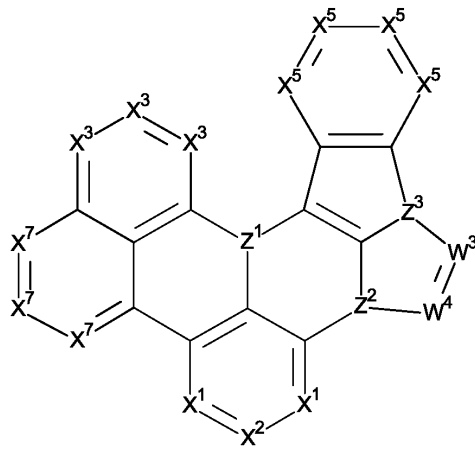
式 (IIb-2)

30

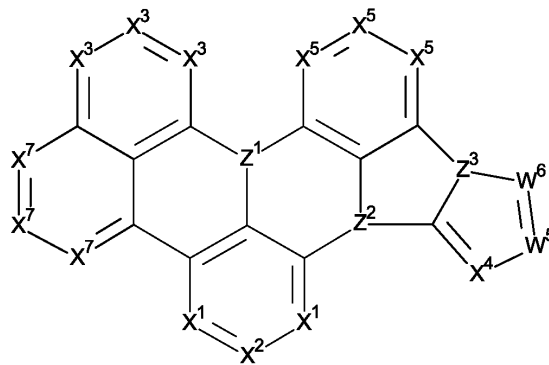
40

50

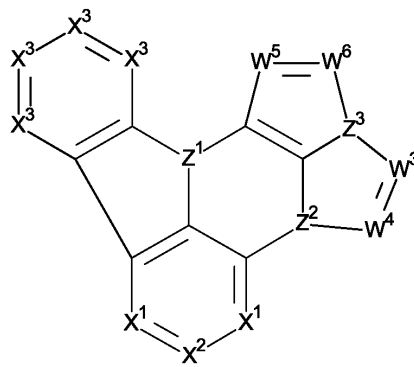
【化 4 - 3】



式 (IIb-3)



式 (IIb-4)



式 (IIc-1)

10

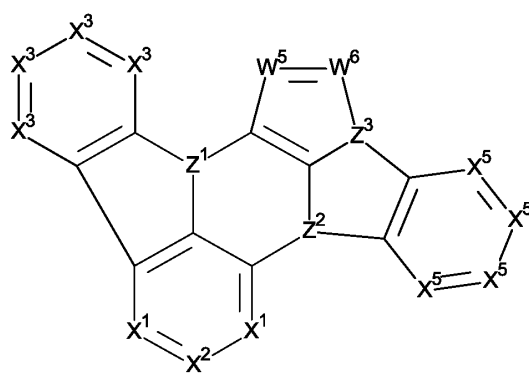
20

30

40

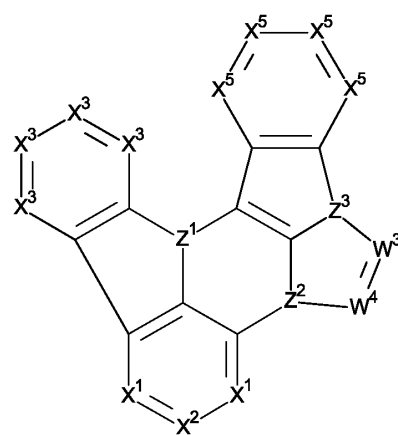
50

【化 4 - 4】



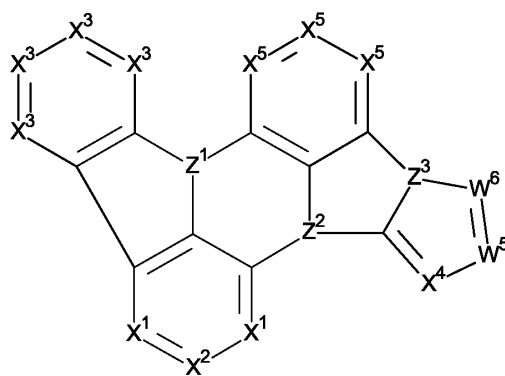
式 (IIc-2)

10



式 (IIc-3)

20



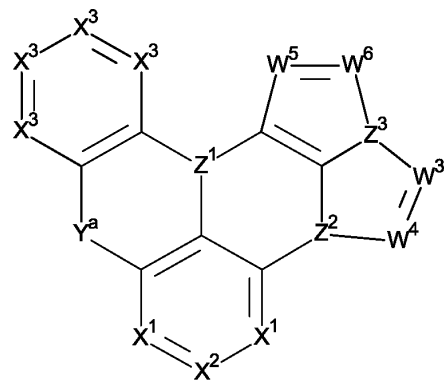
式 (IIc-4)

30

40

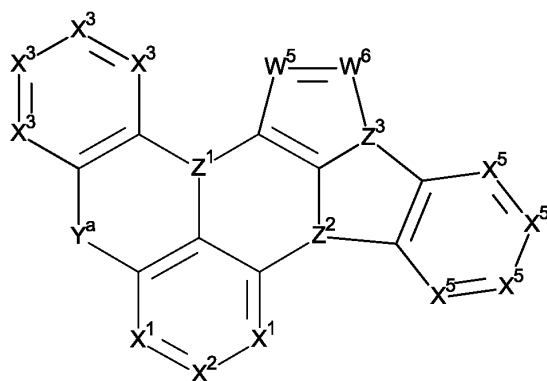
50

【化 4 - 5】



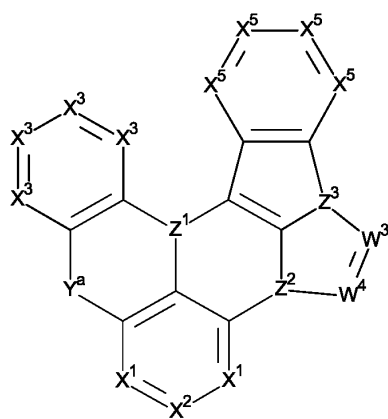
式 (IId-1)

10



式 (IId-2)

20



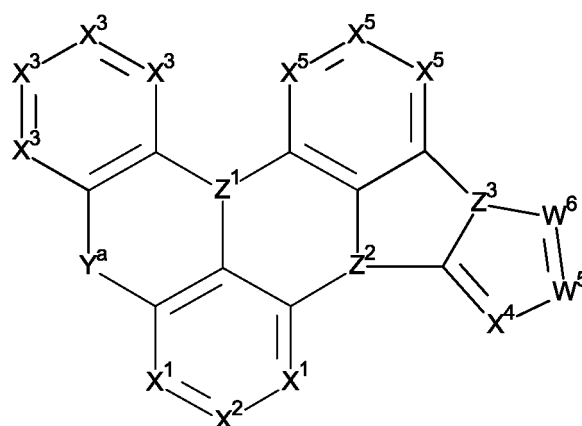
式 (IId-3)

30

40

50

【化 4 - 6】



式 (IId-4)

(ここで、記号 Z^1 、 Z^2 、 X^1 および X^2 および X^3 は、請求項 1 に記載の意味を有し、記号 W^3 、 W^4 、 W^5 、 W^6 、 Z^3 、 X^4 および X^5 は、請求項 2 に記載の意味を有し、さらなる記号は以下のとおりである：

Z^4 は、N、B または Al、好ましくは N または B であり；

X^7 は、出現毎に同一であるかまたは異なり、N、 CR^8 または X^1 、 X^3 もしくは R 基またはさらなる基への結合によって環系が形成される場合に C であり、ただし、1 つの環あたり 2 以下の X^7 基が N であり；

Y^a は、出現毎に同一であるかまたは異なり、 $C=O$ 、 $C(R)_2$ 、 $Si(R)_2$ 、 $C=NR$ 、 $C=NAr$ 、 $C=C(R)_2$ 、O、S、Se、 $S=O$ 、または SO_2 であり；

R^8 は、出現毎に同一であるかまたは異なり、および H、D、OH、F、Cl、Br、I、CN、 NO_2 、 $N(Ar')_2$ 、 $N(R^1)_2$ 、 $C(=O)N(Ar')_2$ 、 $C(=O)N(R^1)_2$ 、 $C(Ar')_3$ 、 $C(R^1)_3$ 、 $Si(Ar')_3$ 、 $Si(R^1)_3$ 、 $B(Ar')_2$ 、 $B(R^1)_2$ 、 $C(=O)Ar'$ 、 $C(=O)R^1$ 、 $P(=O)(Ar')_2$ 、 $P(=O)(R^1)_2$ 、 $P(Ar')_2$ 、 $P(R^1)_2$ 、 $S(=O)Ar'$ 、 $S(=O)R^1$ 、 $S(=O)_2Ar'$ 、 $S(=O)_2R^1$ 、 OSO_2Ar' 、 OSO_2R^1 、1 ~ 40 の炭素原子を有する、直鎖のアルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基または 2 ~ 40 の炭素原子を有する、アルケニルもしくはアルキニル基または 3 ~ 20 の炭素原子を有する、分岐もしくは環状の、アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基、(ここで、アルキル、アルコキシ、チオアルコキシ、アルケニルもしくはアルキニル基が、それぞれのケースにおいて、1 以上の R^1 ラジカルによって置換されていてもよく、ここで、1 以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^1C=CR^1$ 、 $C-C$ 、 $Si(R^1)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^1$ 、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^1-$ 、 NR^1 、 $P(=O)(R^1)$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、SO または SO_2 によって置き換えられていてもよい)、または 5 ~ 60 の芳香族環原子を有し、それぞれのケースにおいて、1 以上の R^1 ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族もしくはヘテロ芳香族環系、または 5 ~ 60 の芳香族環原子を有し、1 以上の R^1 ラジカルによって置換されていてもよい、アリーロキシもしくはヘテロアリーロキシ基であり；同時に、2 つの R^8 ラジカルが、共に、またはさらなる基と、環系を形成していてもよく、ここで、記号 Ar' および R^1 は、請求項 1 に記載の意味を有する)

【請求項 4】

式 (III-1) ~ (III-15) の構造を少なくとも 1 つ含む、請求項 1 ~ 3 のいずれか一項に記載の化合物。

10

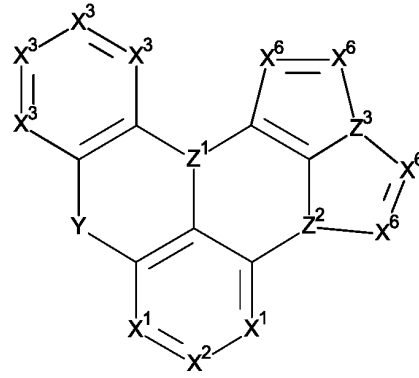
20

30

40

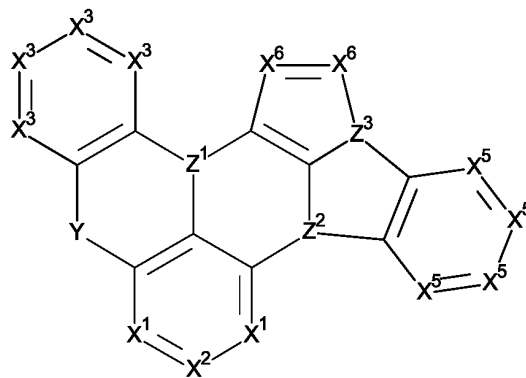
50

【化 5 - 1】



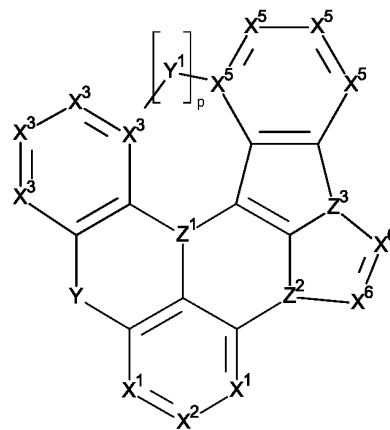
式 (III-1)

10



式 (III-2)

20



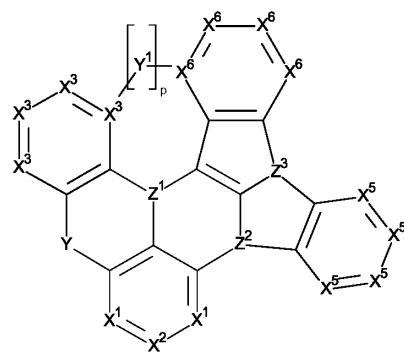
式 (III-3)

30

40

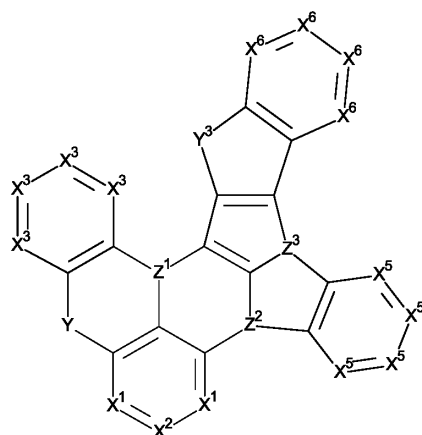
50

【化 5 - 2】



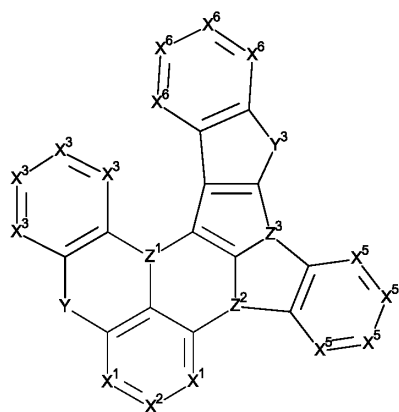
式 (III-4)

10



式 (III-5)

20



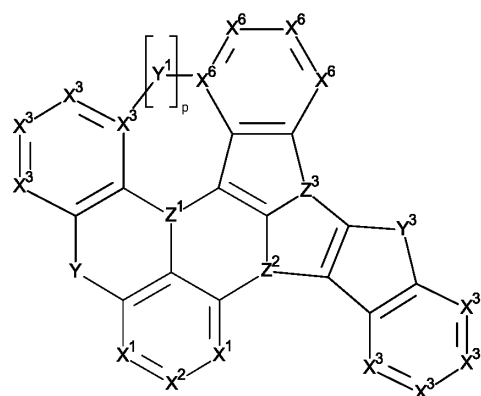
式 (III-6)

30

40

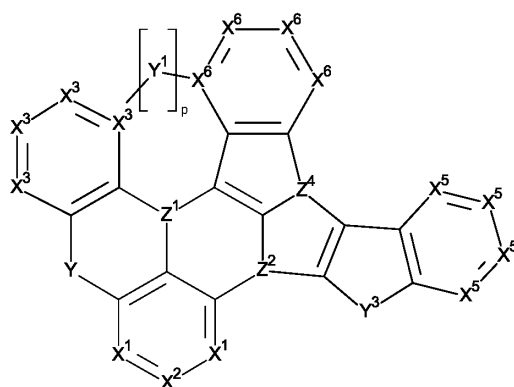
50

【化 5 - 3】



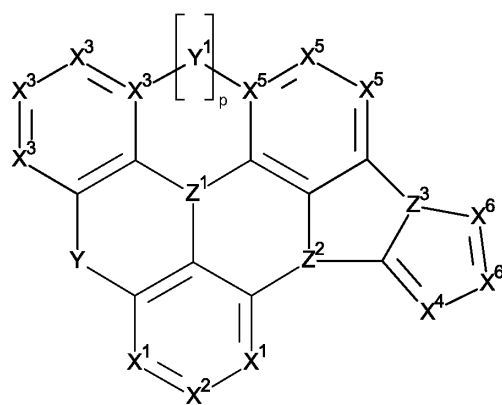
式 (III-7)

10



式 (III-8)

20



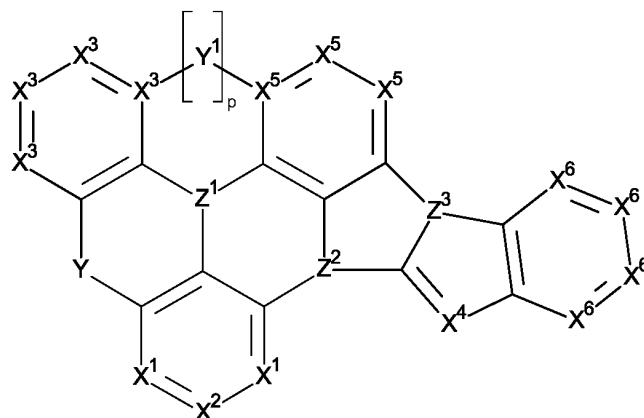
式 (III-9)

30

40

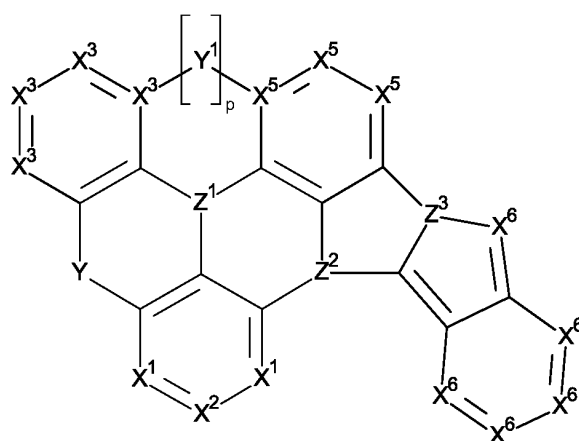
50

【化 5 - 4】



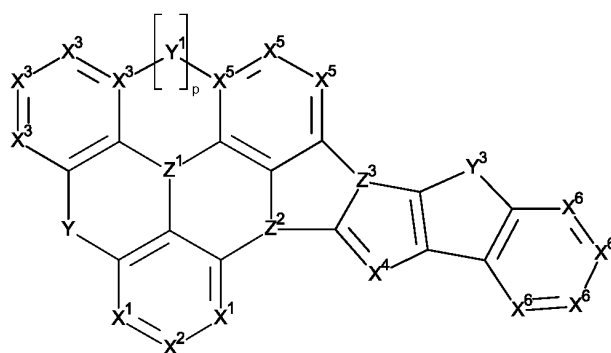
式 (III-10)

10



式 (III-11)

20



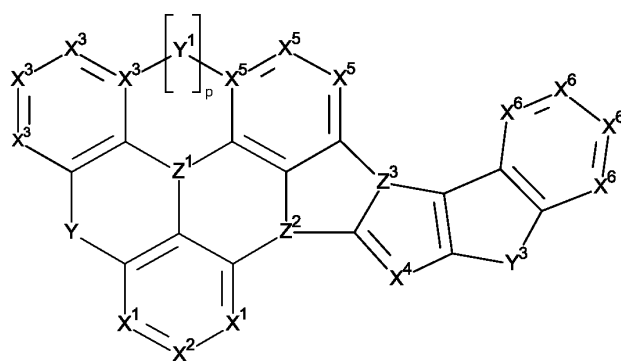
式 (III-12)

30

40

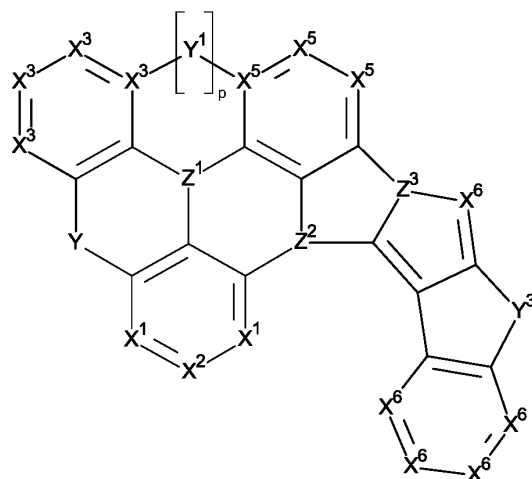
50

【化 5 - 5】



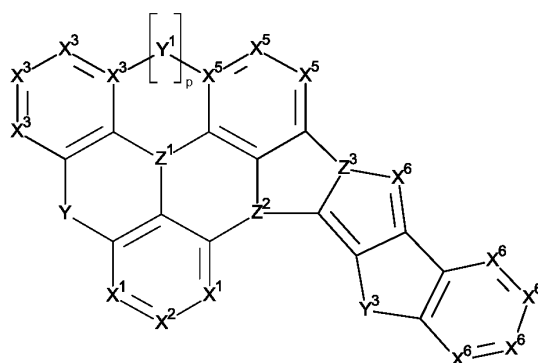
式 (III-13)

10



式 (III-14)

20



式 (III-15)

30

(ここで、記号 Z^1 、 Z^2 、 Y 、 X^1 、 X^2 および X^3 は、請求項 1 に記載の意味を有し、記号 Z^3 、 X^4 、 X^5 および X^6 は、請求項 2 に記載の意味を有し、さらなる記号は以下のとおりである：

p は、0 または 1 であり、ここで、 $p = 0$ は、 Y^1 基が存在しないことを意味し；

Y^1 は、出現毎に同一であるかまたは異なり、結合、 $N(Ar')$ 、 $N(R)$ 、 $P(Ar')$ 、 $P(R)$ 、 $P(=O)Ar'$ 、 $P(=O)R$ 、 $P(=S)Ar'$ 、 $P(=S)R$ 、 $B(Ar')$ 、 $B(R)$ 、 $Al(Ar')$ 、 $Al(R)$ 、 $Ga(Ar')$ 、 $Ga(R)$ 、 $C=O$ 、 $C(R)_2$ 、 $Si(R)_2$ 、 $C=NR$ 、 $C=NAr'$ 、 $C=C(R)_2$ 、 O 、 S 、 Se 、 $S=O$ 、または SO_2 であり、ここで、記号 R および Ar' は、請求項 1 に記載の

40

50

意味を有し；

Y³は、出現毎に同一であるかまたは異なり、N(Ar'), N(R)、P(Ar'), P(R)、P(=O)Ar', P(=O)R、P(=S)Ar', P(=S)R、B(Ar'), B(R)、Al(Ar'), Al(R)、Ga(Ar'), Ga(R)、C=O、C(R)₂、Si(R)₂、C=NR、C=NAr'、C=C(R)₂、O、S、Se、S=O、またはSO₂であり、ここで、記号RおよびAr'は請求項1に記載の意味を有する)

【請求項5】

式(IIIIa-1)~(IIIIa-15)、(IIIIb-1)~(IIIIb-15)、(IIIIc-1)~(IIIIc-15)および/または(IIII d-1)~(IIII d-15)の構造を少なくとも1つ含む、請求項1~4のいずれか一項に記載の化合物。 10

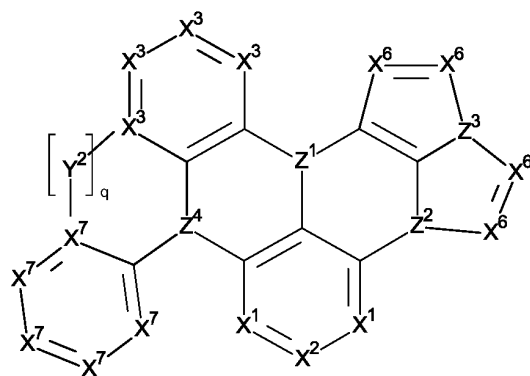
20

30

40

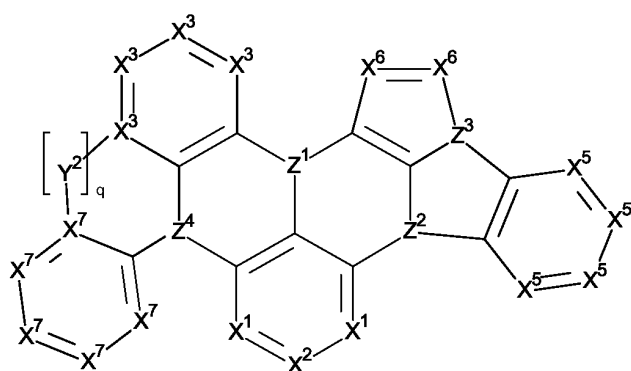
50

【化 6 - 1】



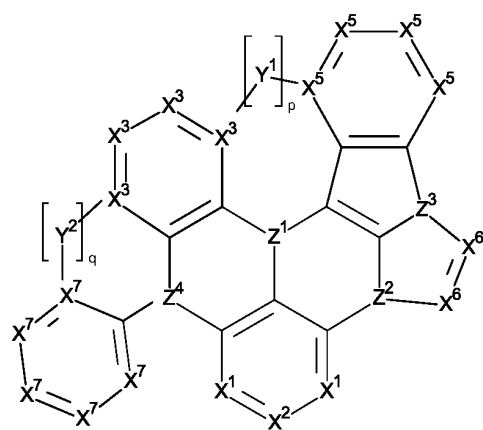
式 (IIIa-1)

10



式 (IIIa-2)

20



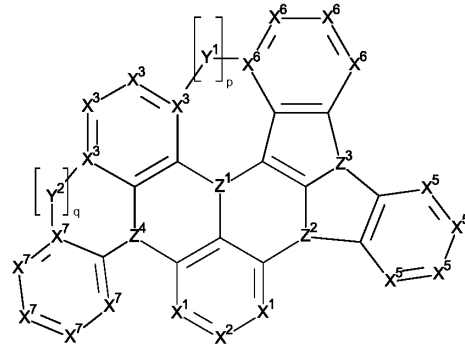
式 (IIIa-3)

30

40

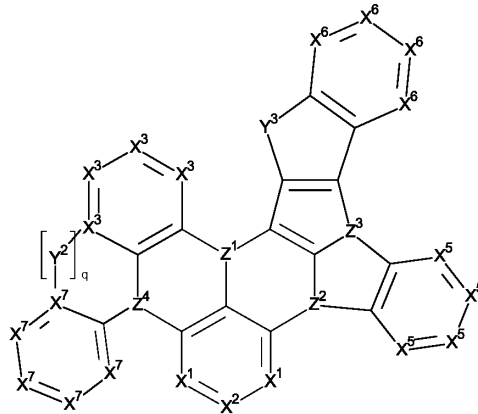
50

【化 6 - 2】



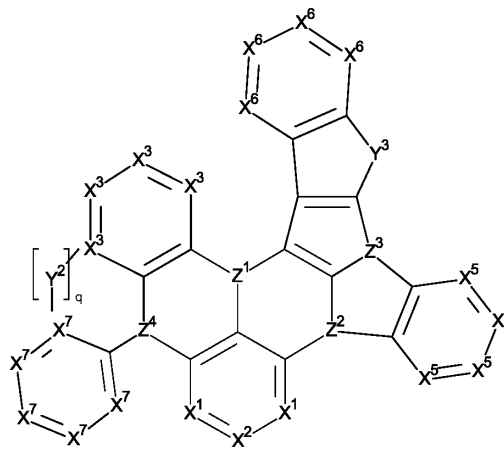
式 (IIIa-4)

10



式 (IIIa-5)

20



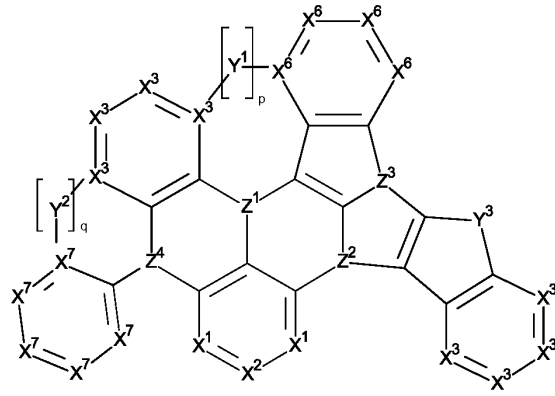
式 (IIIa-6)

30

40

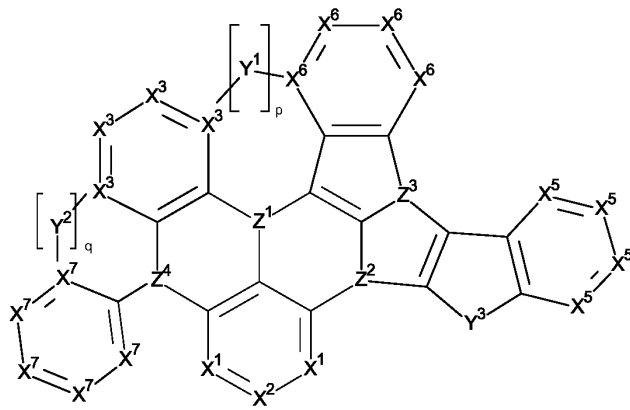
50

【化 6 - 3】



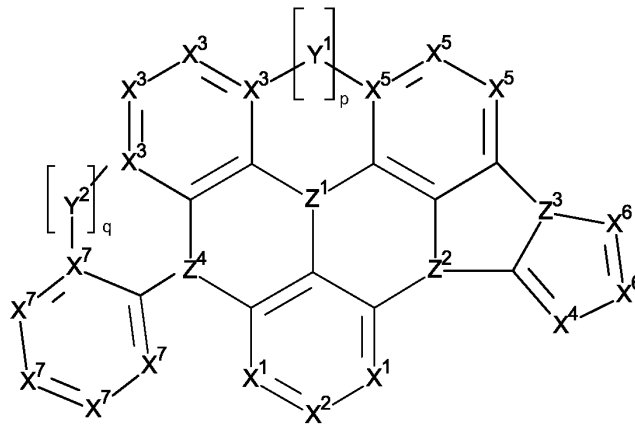
式 (IIIa-7)

10



式 (IIIa-8)

20



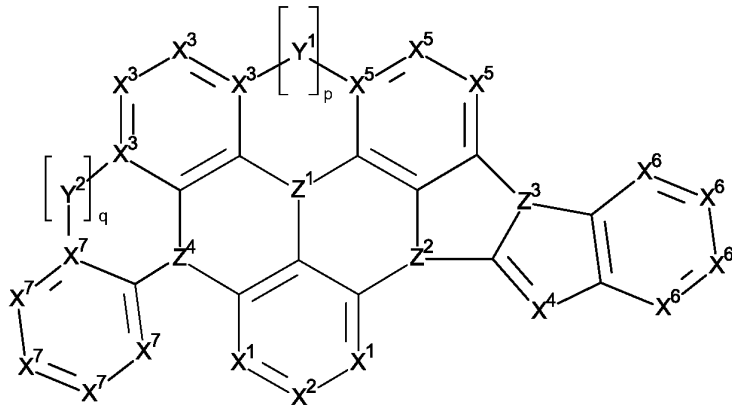
式 (IIIa-9)

30

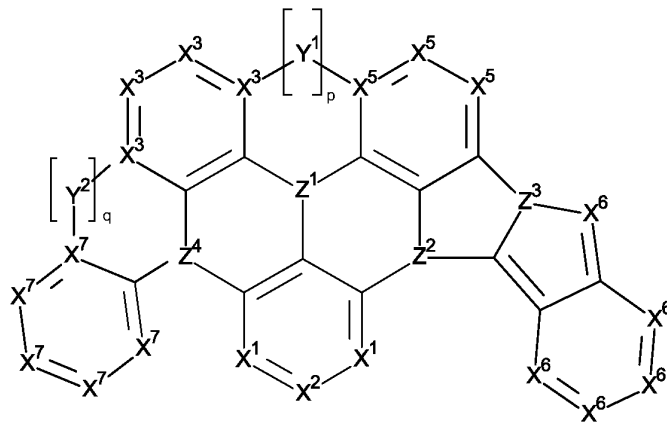
40

50

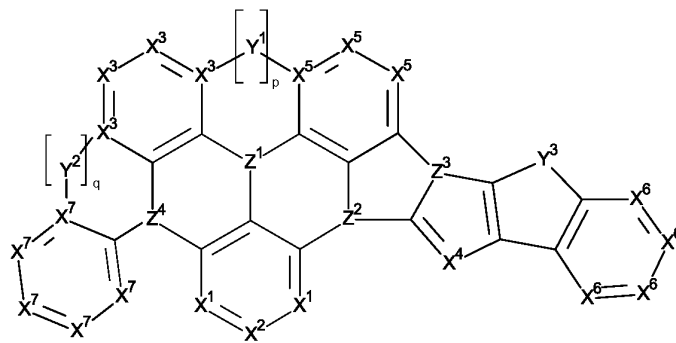
【化 6 - 4】



式 (IIIa-10)



式 (IIIa-11)



式 (IIIa-12)

10

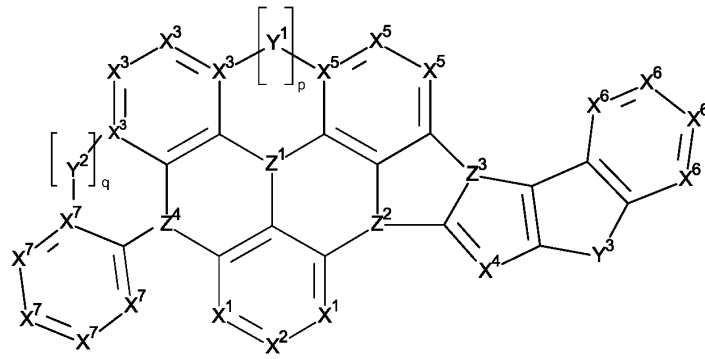
20

30

40

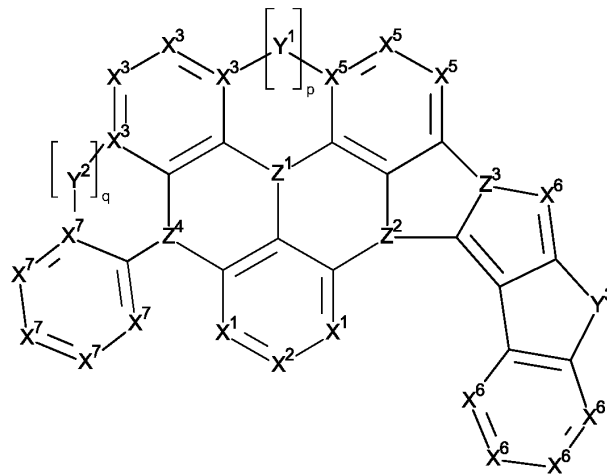
50

【化 6 - 5】



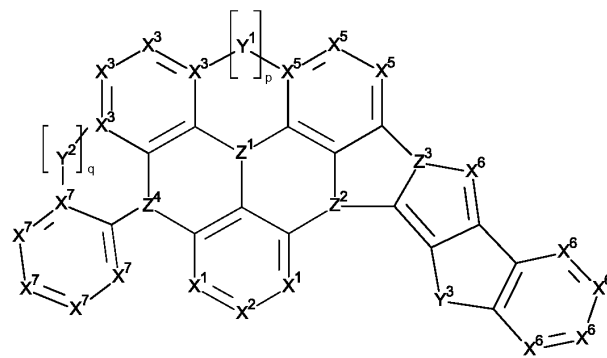
式 (IIIa-13)

10



式 (IIIa-14)

20



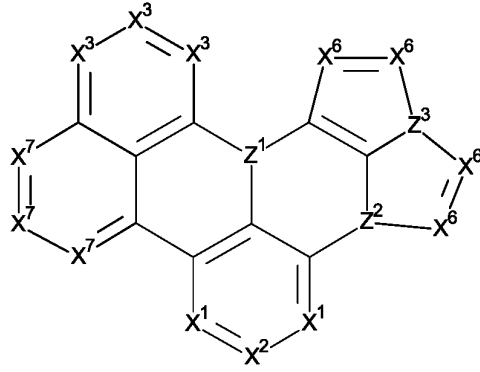
式 (IIIa-15)

30

40

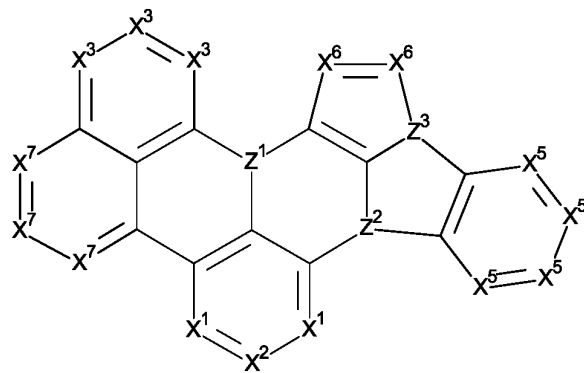
50

【化 6 - 6】



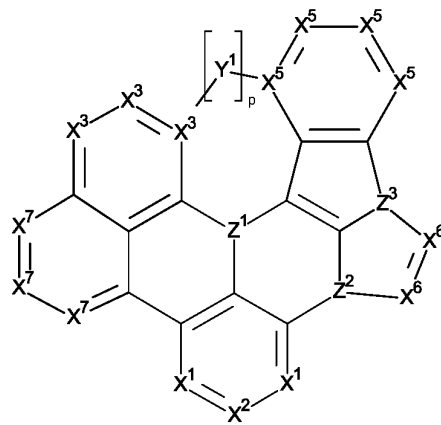
式 (IIIb-1)

10



式 (IIIb-2)

20



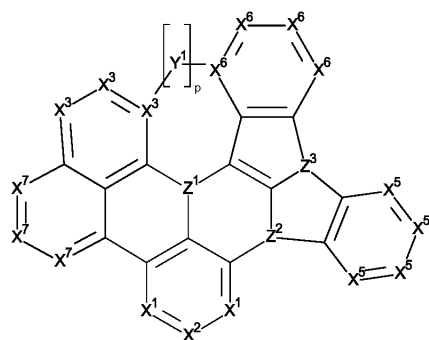
式 (IIIb-3)

30

40

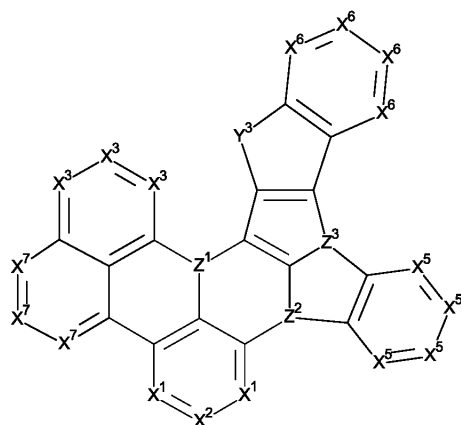
50

【化 6 - 7】



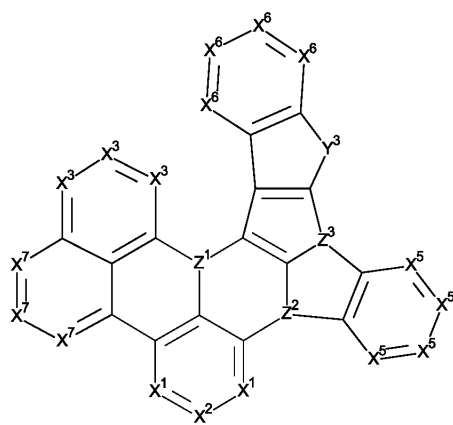
式 (IIIb-4)

10



式 (IIIb-5)

20



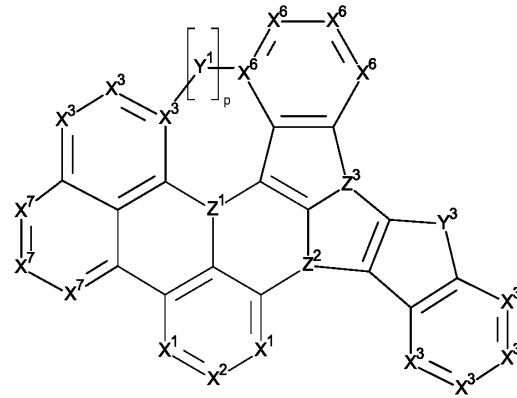
式 (IIIb-6)

30

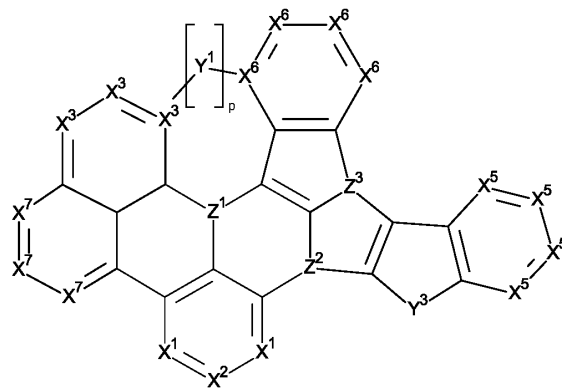
40

50

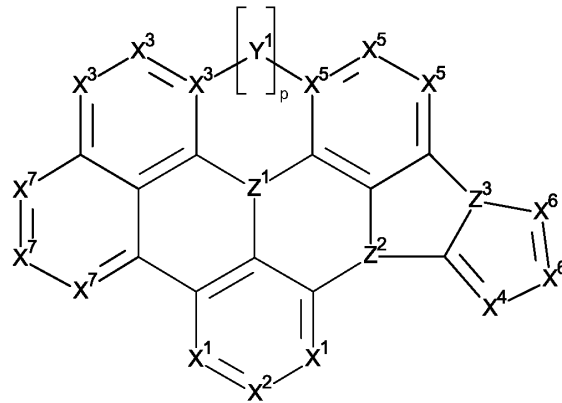
【化 6 - 8】



式 (IIIb-7)



式 (IIIb-8)



式 (IIIb-9)

10

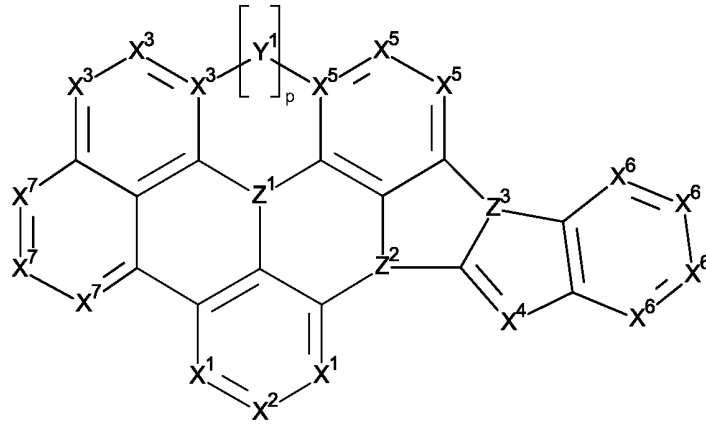
20

30

40

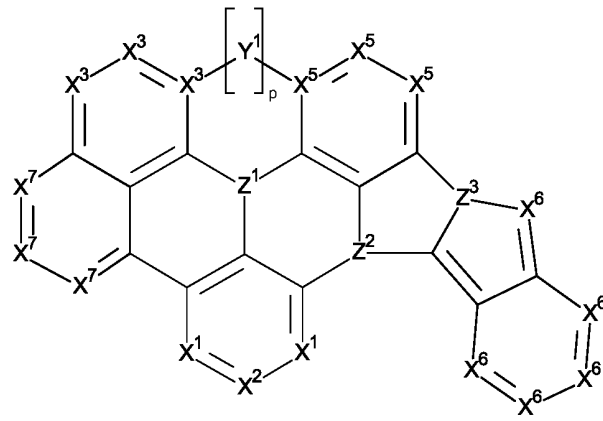
50

【化 6 - 9】



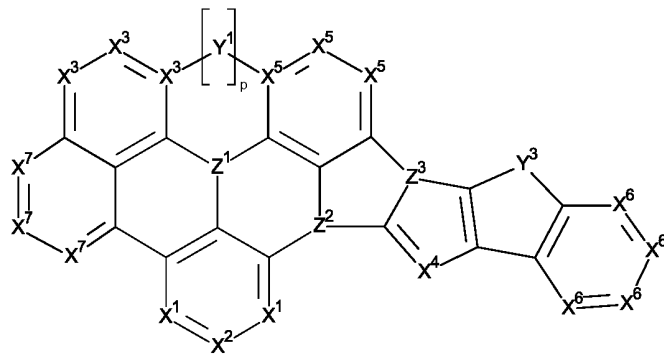
式 (IIIb-10)

10



式 (IIIb-11)

20



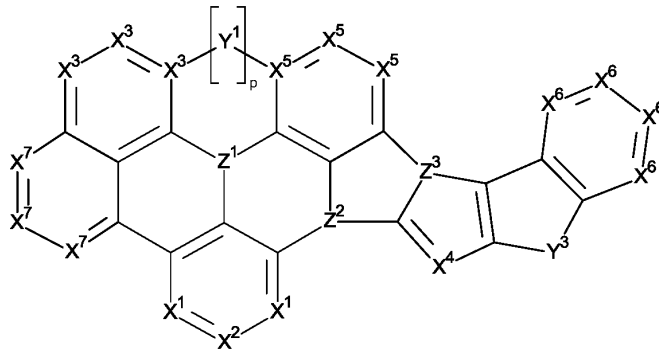
式 (IIIb-12)

30

40

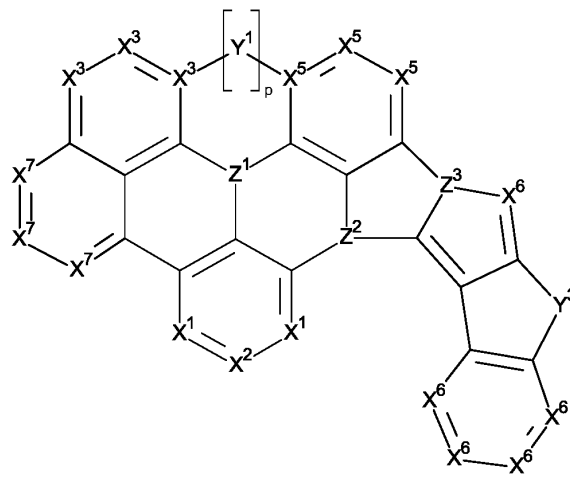
50

【化 6 - 1 0】



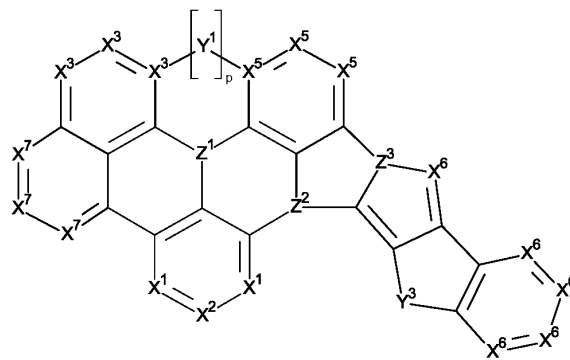
式 (IIIb-13)

10



式 (IIIb-14)

20



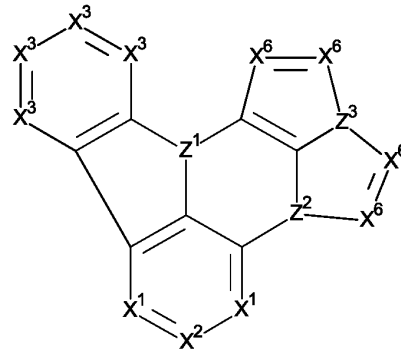
式 (IIIb-15)

30

40

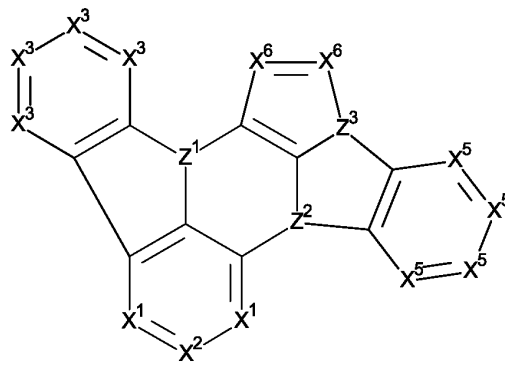
50

【化 6 - 1 1】



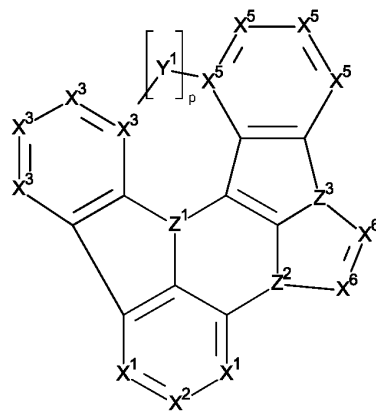
式 (IIIc-1)

10



式 (IIIc-2)

20



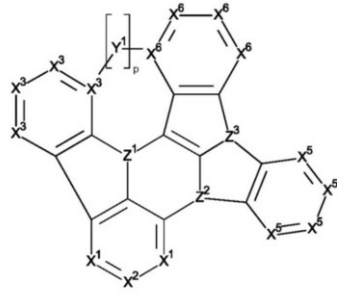
式 (IIIc-3)

30

40

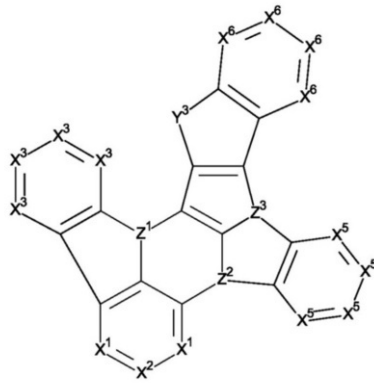
50

【化 6 - 1 2】



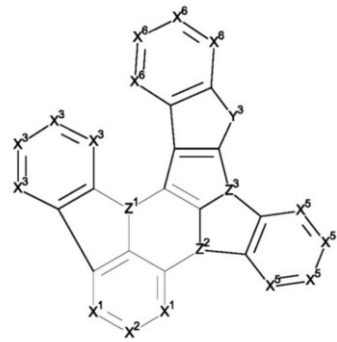
式 (IIIc-4)

10



式 (IIIc-5)

20



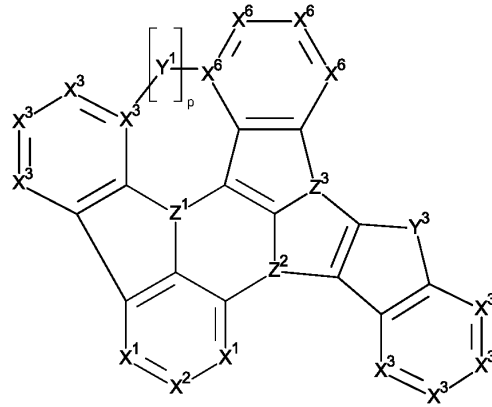
式 (IIIc-6)

30

40

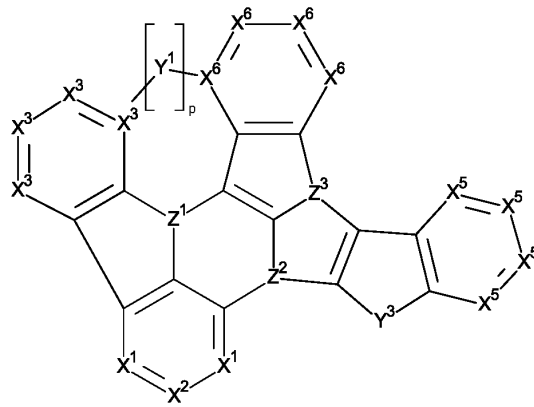
50

【化 6 - 1 3】



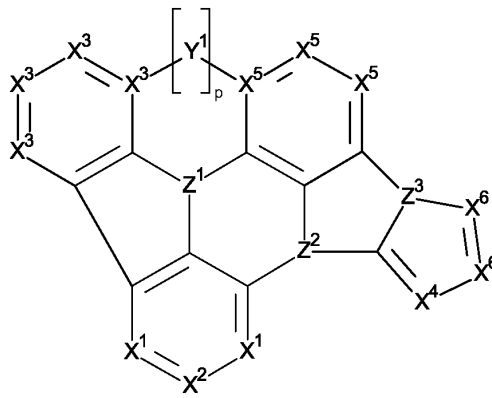
式 (IIIc-7)

10



式 (IIIc-8)

20



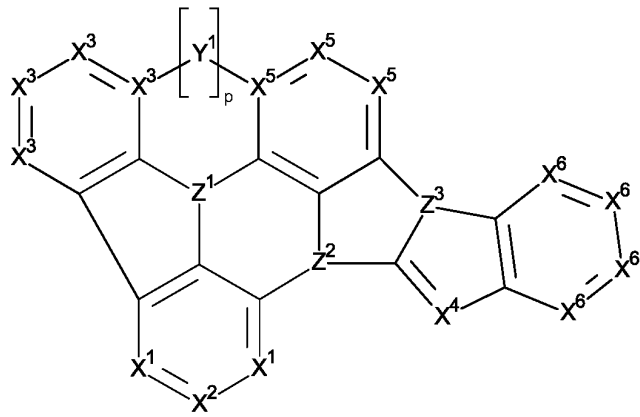
式 (IIIc-9)

30

40

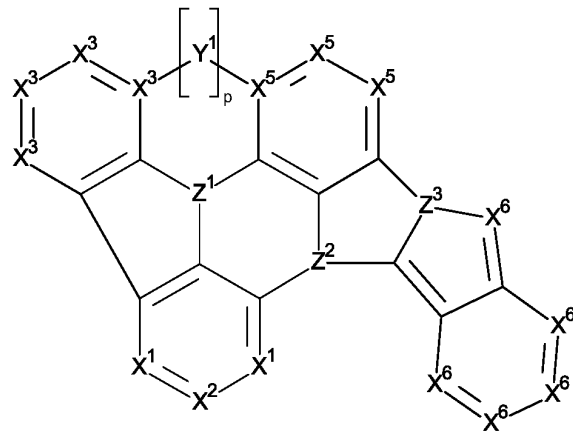
50

【化 6 - 1 4】



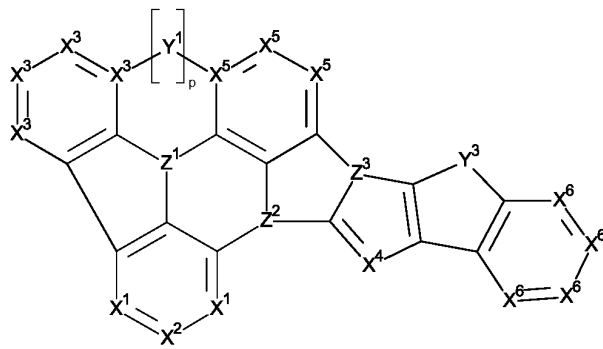
式 (IIIc-10)

10



式 (IIIc-11)

20



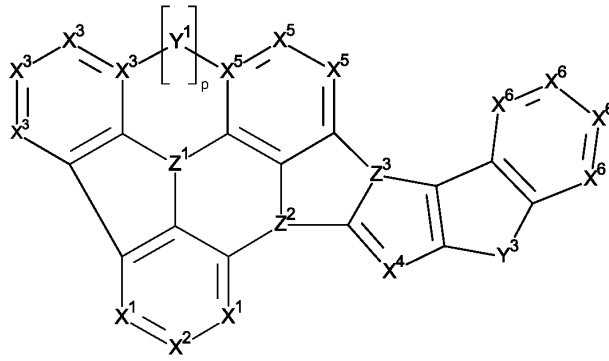
式 (IIIc-12)

30

40

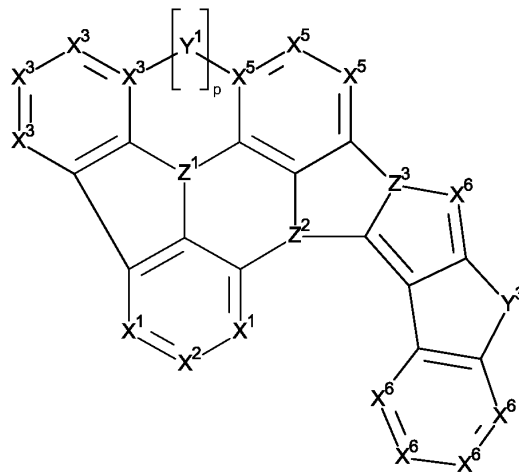
50

【化 6 - 1 5】



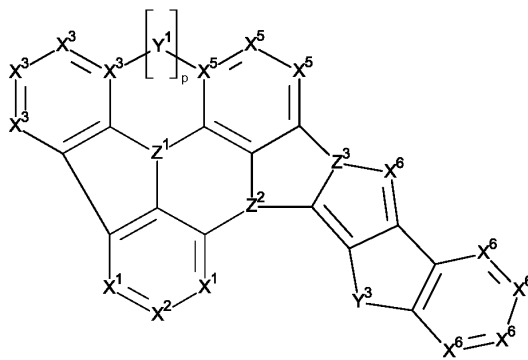
式 (IIIc-13)

10



式 (IIIc-14)

20



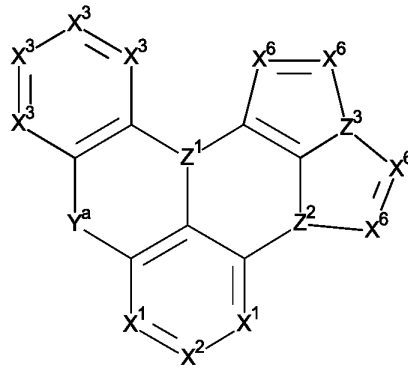
式 (IIIc-15)

30

40

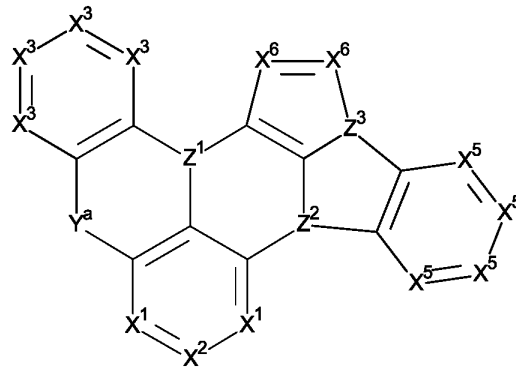
50

【化 6 - 1 6】



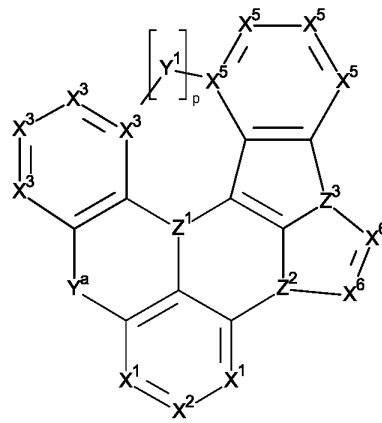
式 (III d-1)

10



式 (III d-2)

20



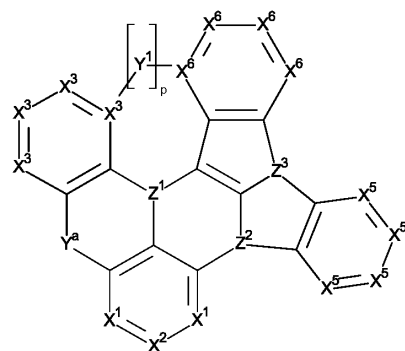
式 (III d-3)

30

40

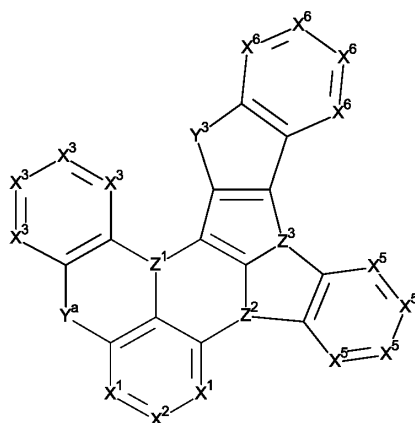
50

【化 6 - 1 7】



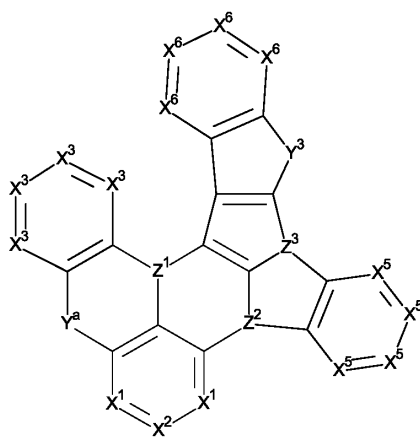
式 (IIIId-4)

10



式 (IIIId-5)

20



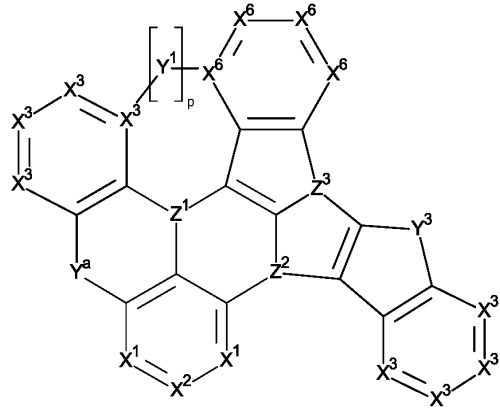
式 (IIIId-6)

30

40

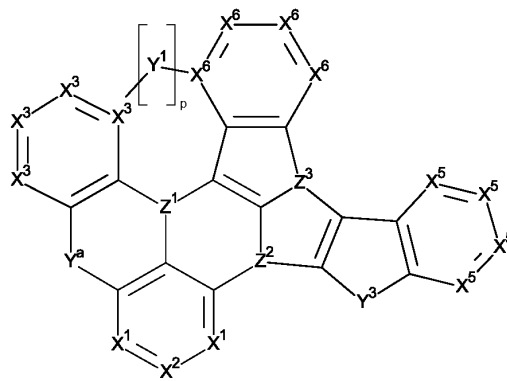
50

【化 6 - 1 8】



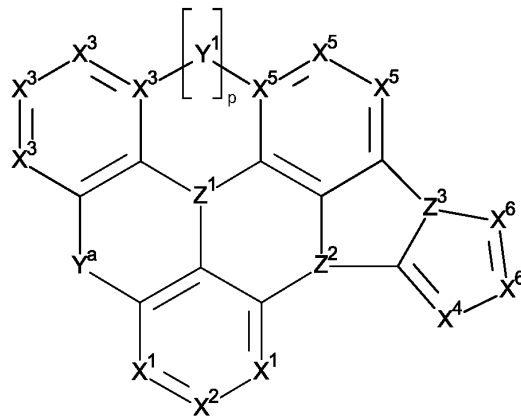
式 (III d-7)

10



式 (III d-8)

20



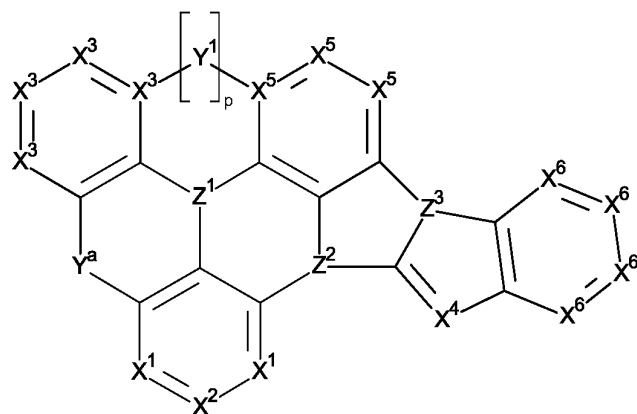
式 (III d-9)

30

40

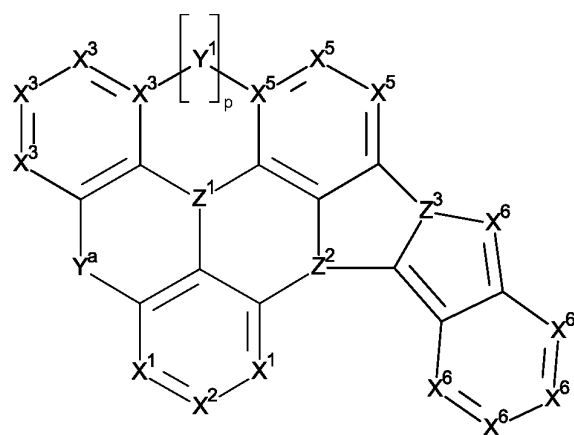
50

【化 6 - 1 9】



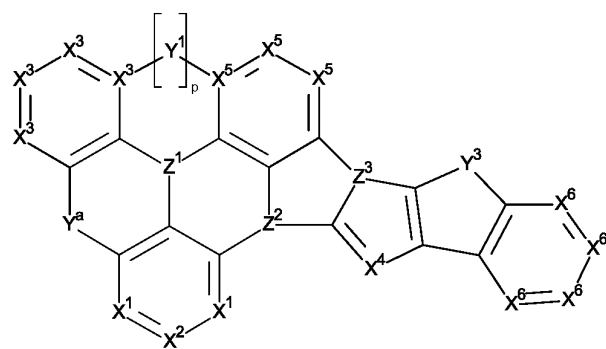
式 (IIIId-10)

10



式 (IIIId-11)

20



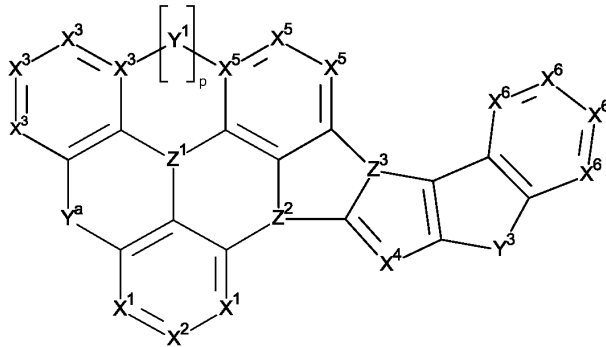
式 (IIIId-12)

30

40

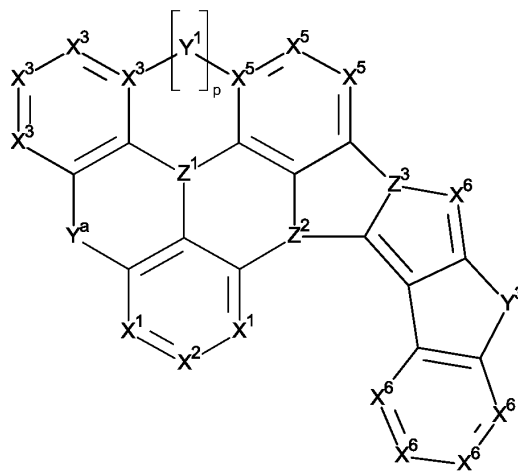
50

【化 6 - 2 0】



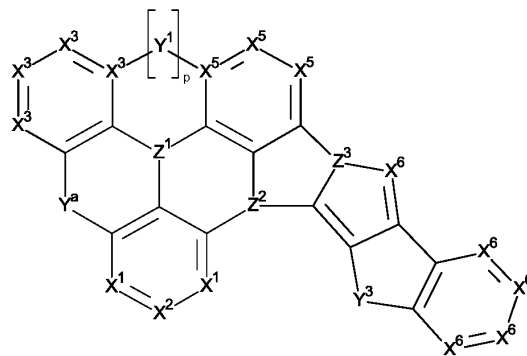
式 (IIIId-13)

10



式 (IIIId-14)

20



式 (IIIId-15)

30

40

(ここで、記号 Z¹、Z²、Y、X¹、X² および X³ は、請求項 1 に記載の意味を有し、記号 Z³、X⁴、X⁵ および X⁶ は、請求項 2 に記載の意味を有し、記号 Z⁴、X⁷ および Y^a は、請求項 3 に記載の意味を有し、記号 p、Y¹、Y³ は、請求項 4 に記載の意味を有し、さらなる記号は以下のとおりである：

q は、0 または 1 であり、ここで、q = 0 は、Y² 基が存在しないことを意味し；

Y² は、出現毎に同一であるかまたは異なり、結合、N(Ar'), N(R)、P(Ar'), P(R)、P(=O)Ar', P(=O)R、P(=S)Ar', P(=S)R、B(Ar'), B(R)、Al(Ar'), Al(R)、Ga(Ar'), Ga(R)、C=O、C(R)₂、Si(R)₂、C=NR、C=NAr'、C=C(R)₂、O、S、

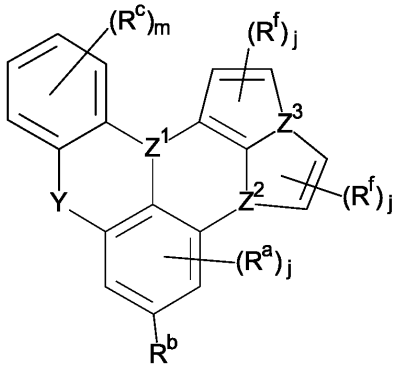
50

S e、S = O、またはS O₂であり、ここで、記号RおよびA r 'は、請求項1に記載の意味を有する)

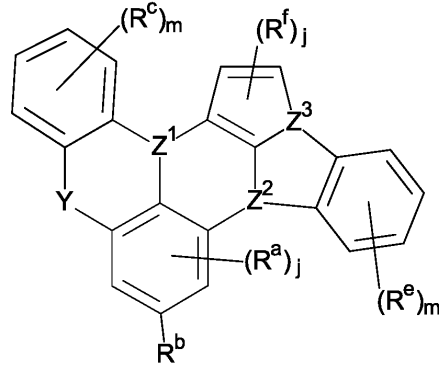
【請求項6】

式(IV-1)~(IV-28)の構造を少なくとも1つ含む、請求項1~5のいずれか一項に記載の化合物。

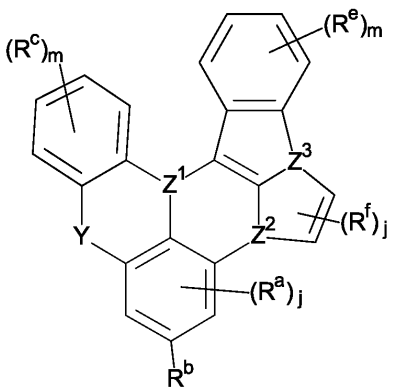
【化7-1】



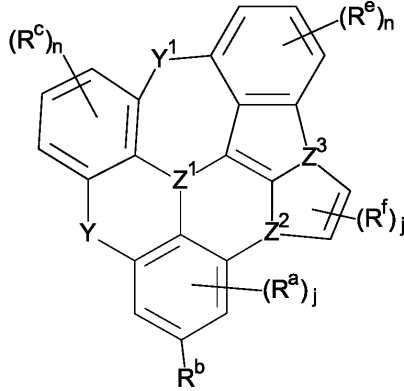
式(IV-1)



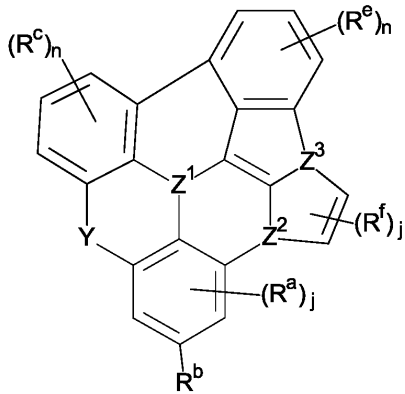
式(IV-2)



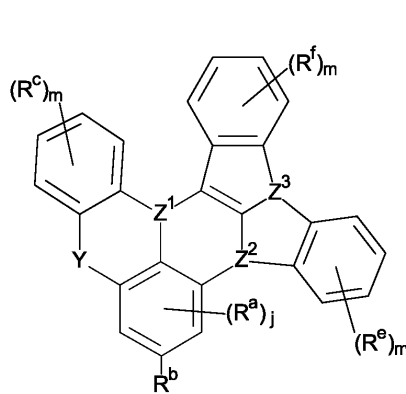
式(IV-3)



式(IV-4)



式(IV-5)



式(IV-6)

10

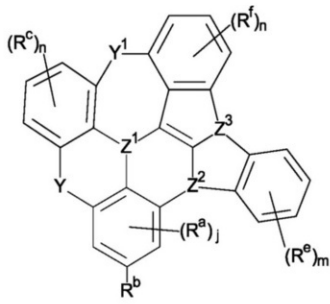
20

30

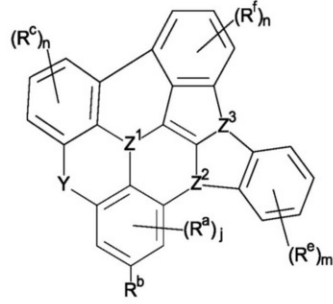
40

50

【化 7 - 2】

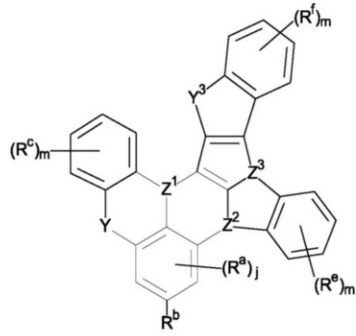


式 (IV-7)



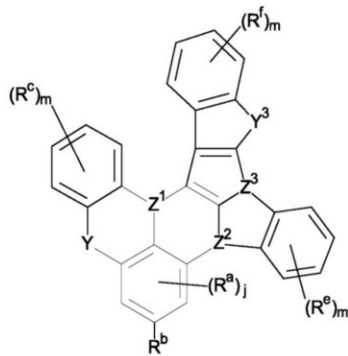
式 (IV-8)

10



式 (IV-9)

20



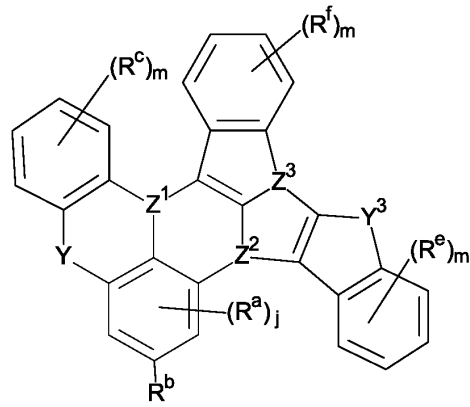
式 (IV-10)

30

40

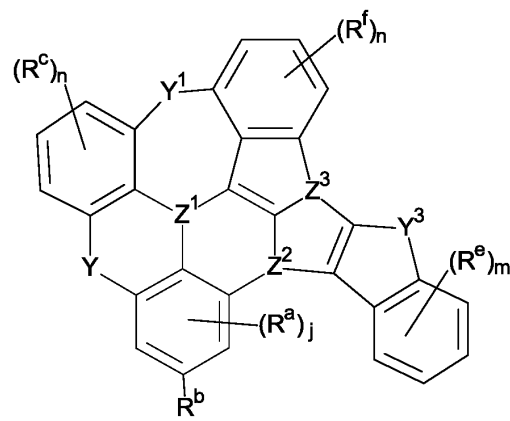
50

【化 7 - 3】



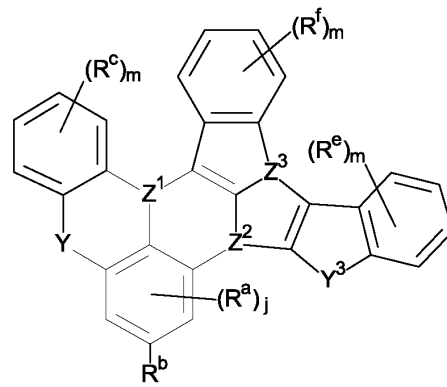
式 (IV-11)

10



式 (IV-12)

20



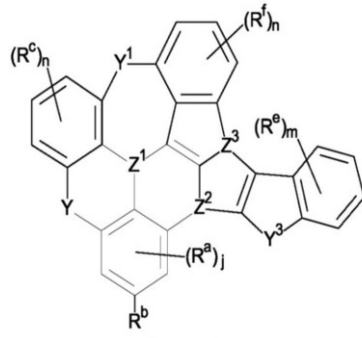
式 (IV-13)

30

40

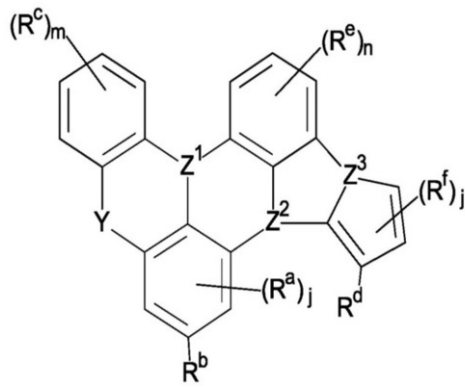
50

【化 7 - 4】



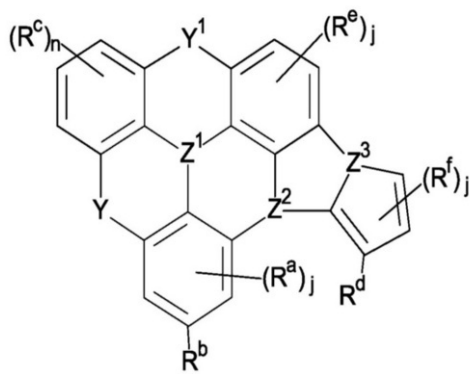
式 (IV-14)

10



式 (IV-15)

20



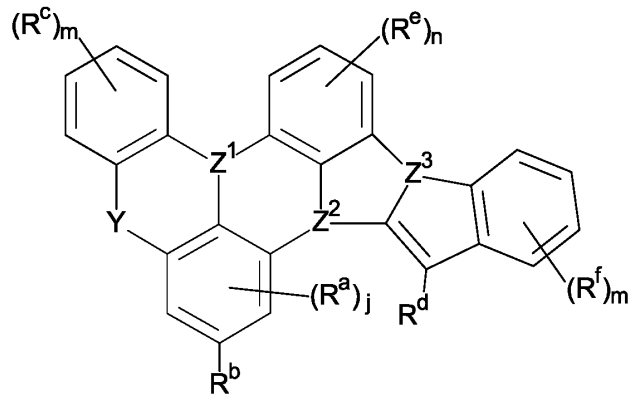
式 (IV-16)

30

40

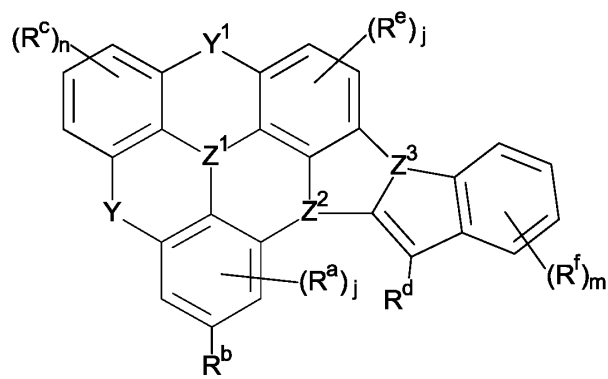
50

【化 7 - 5】



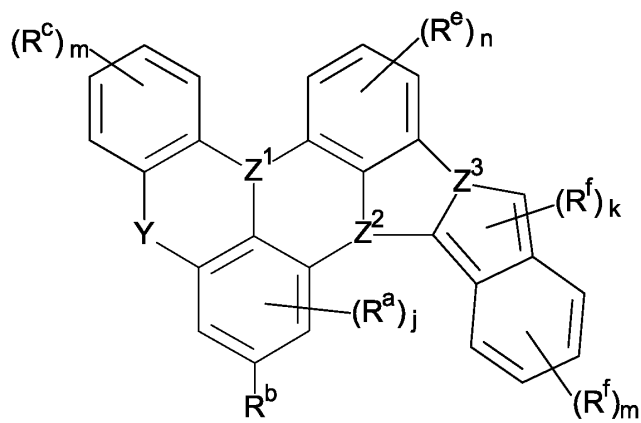
式 (IV-17)

10



式 (IV-18)

20



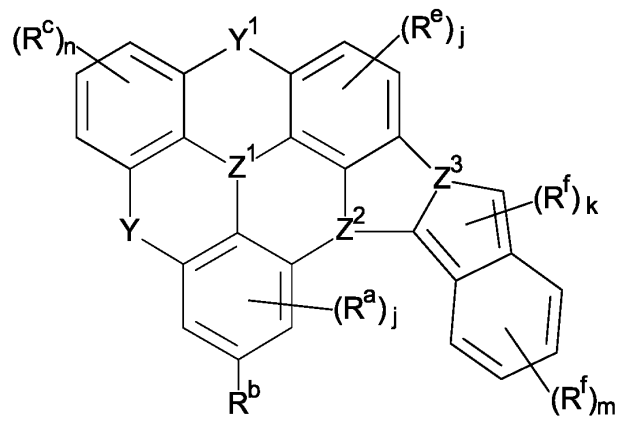
式 (IV-19)

30

40

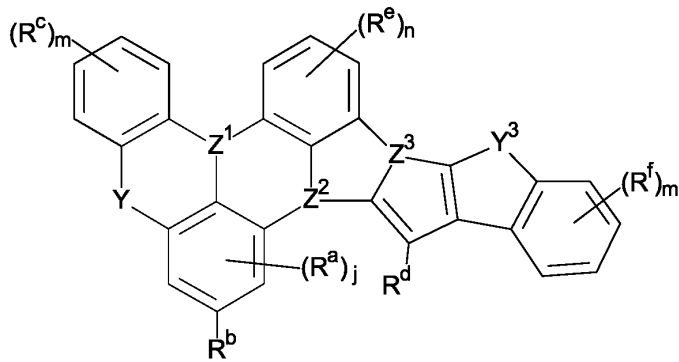
50

【化 7 - 6】



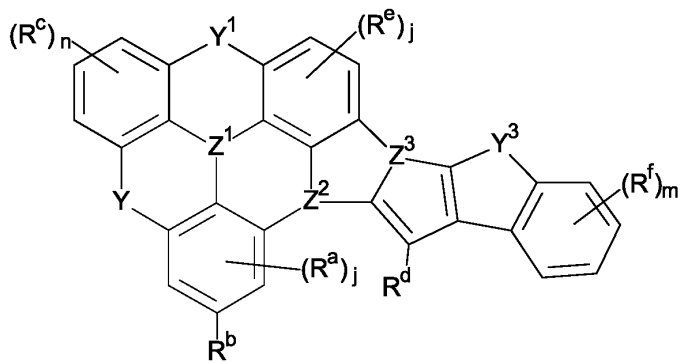
式 (IV-20)

10



式 (IV-21)

20



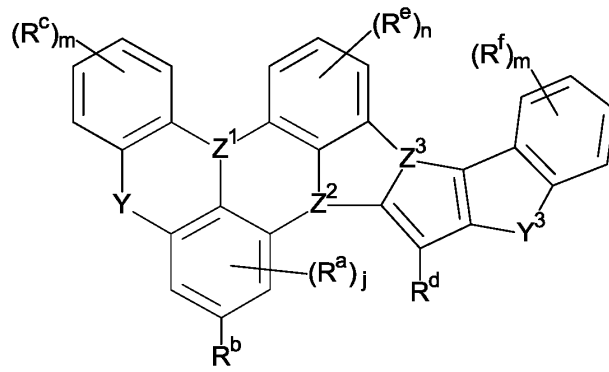
式 (IV-22)

30

40

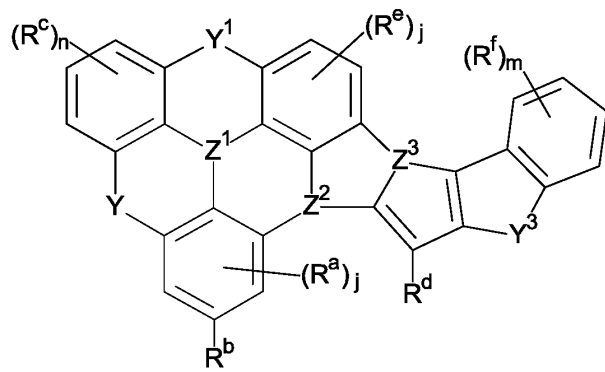
50

【化 7 - 7】



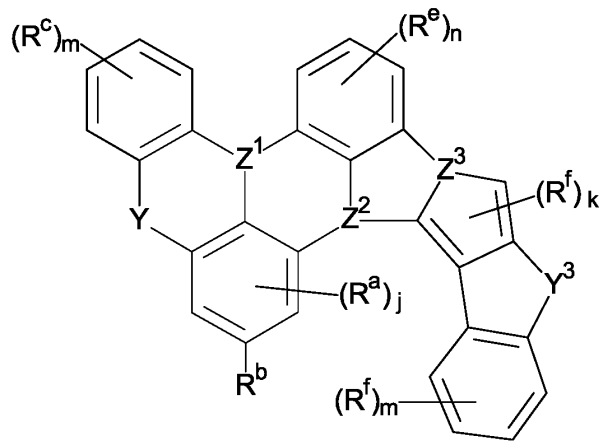
式 (IV-23)

10



式 (IV-24)

20



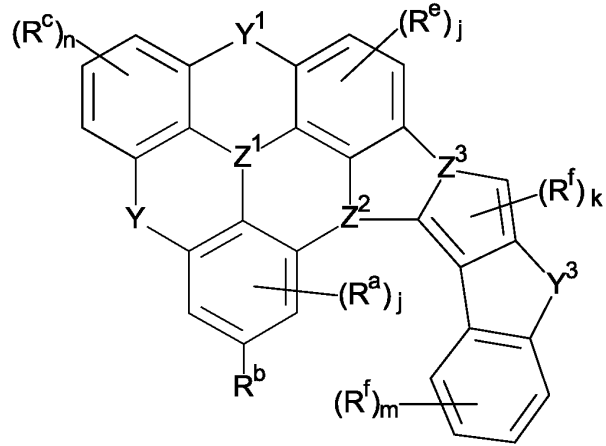
式 (IV-25)

30

40

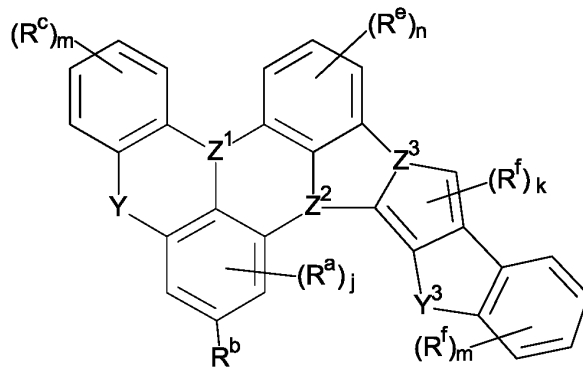
50

【化 7 - 8】



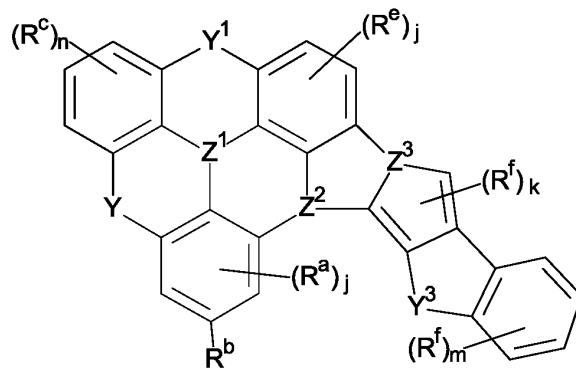
式 (IV-26)

10



式 (IV-27)

20



式 (IV-28)

30

40

(ここで、記号 Z^1 、 Z^2 、 Y 、 R^a 、 R^b および R^c は、請求項 1 に記載の意味を有し、記号 Z^3 、 R^d 、 R^e および R^f は、請求項 2 に記載の意味を有し、記号 R^g は、請求項 3 に記載の意味を有し、記号 Y^1 および Y^3 は、請求項 4 に記載の意味を有し、さらなる記号は以下のとおりである：

m は、0、1、2、3 または 4 であり；

n は、0、1、2 または 3 であり；

j は、0、1 または 2 であり；

k は、0 または 1 である)

【請求項 7】

50

Z^1 が N であり、 Z^2 、 Z^3 基の少なくとも 1 つが B であることを特徴とする、請求項 2 ~ 6 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 8】

Z^1 が N であり、 Z^2 、 Z^3 基の少なくとも 1 つが N であることを特徴とする、請求項 2 ~ 7 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 9】

Z^1 が B であり、 Z^2 、 Z^3 基の少なくとも 1 つが N であることを特徴とする、請求項 2 ~ 6 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 10】

Z^1 が B であり、 Z^2 、 Z^3 基の少なくとも 1 つが B であることを特徴とする、請求項 2 ~ 6 および 9 のいずれか一項に記載の化合物。

10

【請求項 11】

少なくとも 2 つの R 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g ラジカルが、2 つの R 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g ラジカルが結合するさらなる基と共に、縮合環を形成する（ここで、2 つの R 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g ラジカルは、式 (RA - 1) ~ (RA - 12) の構造の少なくとも 1 つを形成する）ことを特徴とする、請求項 1 ~ 10 のいずれか一項に記載の化合物。

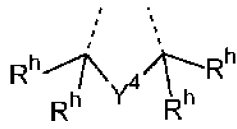
20

30

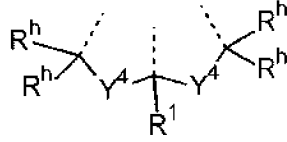
40

50

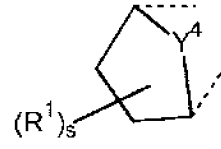
【化 8】



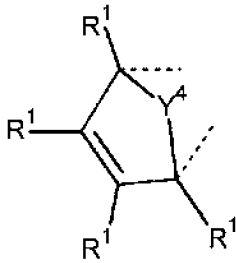
式 RA-1



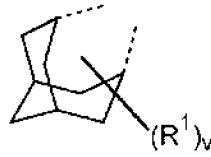
式 RA-2



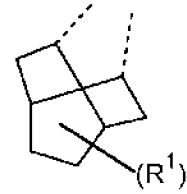
式 RA-3



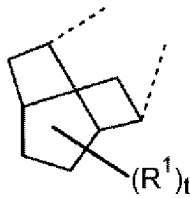
式 RA-4



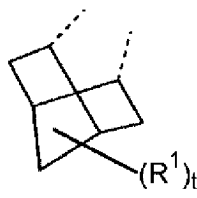
式 RA-5



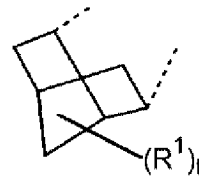
式 RA-6



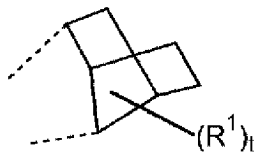
式 RA-7



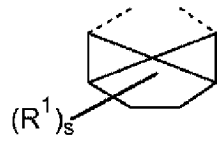
式 RA-8



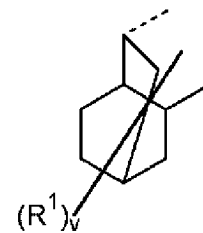
式 RA-9



式 RA-10



式 RA-11



式 RA-12

(ここで、 R^1 は上記に記載の意味を有し、点線の結合は、2つの R 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g ラジカルが結合する基の原子への結合サイトを示し、さらなる記号は以下の意味を有し：

Y^4 は、出現毎に同一であるかまたは異なり、 $C(R^1)_2$ 、 $(R^1)_2C-C(R^1)_2$ 、 $(R^1)C=C(R^1)$ 、 NR^1 、 NAr^1 、 O または S であり；

R^h は、出現毎に同一であるかまたは異なり、 F 、1～40の炭素原子を有する、直鎖のアルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基または2～40の炭素原子を有する、アルケニルもしくはアルキニル基または3～20の炭素原子を有する、分岐もしくは環状の、アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基（ここで、アルキル、アルコキシ、チオアルコキシ、アルケニルまたはアルキニル基は、それぞれのケースにおいて、 R^2 ラジカルによって置換されていてもよく、ここで、1以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^2C=$

10

20

30

40

50

CR^2 、 $C-C$ 、 $Si(R^2)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^2$ 、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^2-$ 、 NR^2 、 $P(=O)(R^1)$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 SO または SO_2 によって置き換えられていてもよい)、または5~60の芳香族環原子を有し、それぞれのケースにおいて、1以上の R^2 ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族もしくはヘテロ芳香族環系、または5~60の芳香族環原子を有し、1以上の R^2 ラジカルによって置換されていてもよい、アリールオキシもしくはヘテロアリールオキシ基であり;同時に、2つの R^h ラジカルが共に、または1つの R^h ラジカルが R^1 ラジカルと共にまたはさらなる基と共に、環系を形成することも可能であり;

sは、0、1、2、3、4、5または6であり;

tは、0、1、2、3、4、5、6、7または8であり;

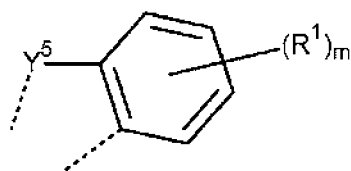
vは、0、1、2、3、4、5、6、7、8または9である)

10

【請求項12】

少なくとも2つの R 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g ラジカルが、2つの R 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g ラジカルが結合するさらなる基と共に、縮合環を形成する(ここで、2つの R 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g ラジカルは、式(RB)の構造を形成する)ことを特徴とする、請求項1~11のいずれか一項に記載の化合物。

【化9】



式 RB

20

(ここで、 R^1 は、請求項1に記載の意味を有し、点線の結合は、2つの R 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g ラジカルが結合する基の原子への接続サイトを示し、添え字mは、0、1、2、3または4であり、 Y^5 は、 $C(R^1)_2$ 、 NR^1 、 NAr' 、 BR^1 、 BAr' 、 O または S である)

30

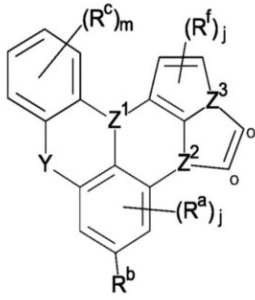
【請求項13】

式(VI-1)~(VI-9)の構造を少なくとも1つ含む(ここで、前記化合物は少なくとも1つの縮合環を有する)、請求項1~12のいずれか一項に記載の化合物。

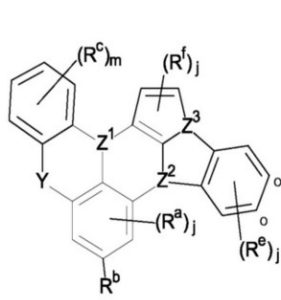
40

50

【化 1 0 - 1】

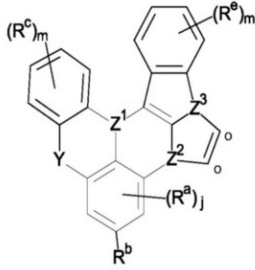


式 (VI-1)

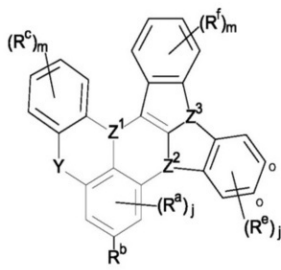


式 (VI-2)

10

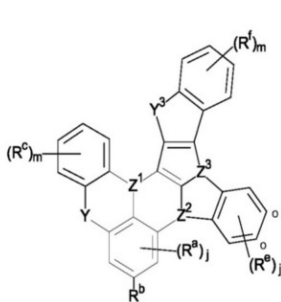


式 (VI-3)

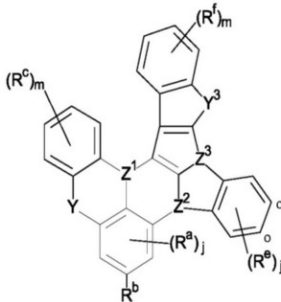


式 (VI-4)

20

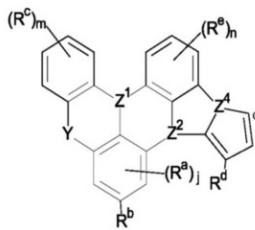


式 (VI-5)

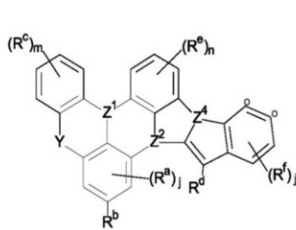


式 (VI-6)

30

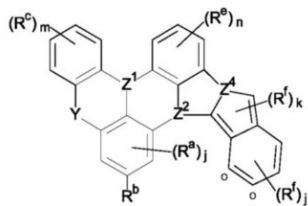


式 (VI-7)



式 (VI-8)

【化 1 0 - 2】



式 (VI-9)

40

(ここで、記号 Z^1 、 Z^2 、 Y 、 R^a 、 R^b および R^c は、請求項 1 に記載の意味を有し、記号 Z^3 、 R^d 、 R^e および R^f は、請求項 2 に記載の意味を有し、記号 Y^3 は、請求項 4 に記載の意味を有し、記号 \circ は、接続サイトを示し、さらなる記号は以下のとおりである：

50

mは、0、1、2、3または4であり；

nは、0、1、2または3であり；

jは、0、1または2である）

【請求項14】

請求項1～13のいずれか一項に記載の1以上の化合物を含む、オリゴマー、ポリマーまたは dendrimer であって、水素原子または置換基とは別に、前記ポリマー、オリゴマーまたは dendrimer への化合物の1以上の結合が存在する、オリゴマー、ポリマーまたは dendrimer。

【請求項15】

請求項1～13のいずれか一項に記載の少なくとも1つの化合物、または請求項14に記載のオリゴマー、ポリマーもしくは dendrimer、および少なくとも1つのさらなる化合物（ここで、さらなる化合物は、好ましくは1以上の溶媒から選択される）を含む、配合物。

10

【請求項16】

請求項1～13のいずれか一項に記載の少なくとも1つの化合物、または請求項14に記載のオリゴマー、ポリマーもしくは dendrimer、および蛍光発光体、燐光発光体、TADFを示す発光体、ホスト材料、電子輸送材料、電子注入材料、正孔伝導材料、正孔注入材料、電子ブロック材料および正孔ブロック材料からなる群から選択される少なくとも1つのさらなる化合物を含む、組成物。

【請求項17】

少なくとも1つのZ²基を有する基本骨格またはZ²基のうちの1つの前駆体が合成され、Z¹基がメタル化反応、芳香族求核置換反応またはカップリング反応によって導入されることを特徴とする、請求項1～13のいずれか一項に記載の化合物の調製方法。

20

【請求項18】

請求項1～13のいずれか一項に記載の化合物、または請求項14に記載のオリゴマー、ポリマーもしくは dendrimer の、電子素子における使用。

【請求項19】

請求項1～13のいずれか一項に記載の少なくとも1つの化合物、または請求項14に記載のオリゴマー、ポリマーもしくは dendrimer を含む、電子素子。

【発明の詳細な説明】

30

【0001】

本発明は、電子素子、特に有機エレクトロルミネッセンス素子での使用のためのヘテロ環式化合物、およびこれらのヘテロ環式化合物を含む電子素子、特に有機エレクトロルミネッセンス素子に関する。

【0002】

有機エレクトロルミネッセンス素子に使用される発光材料は、しばしば、燐光有機金属錯体または蛍光化合物である。一般的に、エレクトロルミネッセンス素子において、いまだ改善が必要とされる。

【0003】

WO2010/104047A1、WO2015/102118A1およびWO2019/132506A1は、有機エレクトロルミネッセンス素子で使用される多環式化合物を開示する。これには、本発明による化合物は開示されていない。さらに、Nature Communications | 8 : 1948で、Wangらによって、化合物の反芳香族特性が調べられている。しかしながら、Wangらは、有機エレクトロルミネッセンス素子におけるそれらの化合物の使用については、開示していない。

40

【0004】

一般に、これらのヘテロ環式化合物について、例えば、発光体として、特に蛍光発光体としての使用のための、特に寿命および色純度に関して、素子の効率や作動電圧に関して、改善がいまだ求められている。

【0005】

50

したがって、本発明の目的は、有機電子素子、特に有機エレクトロルミネッセンス素子での使用に好適であり、この素子に使用される場合に良好な素子特性をもたらす化合物を提供すること、および対応する電子素子を提供することである。

【0006】

より特には、本発明によって対処される課題は、長寿命、良好な効率および低作動電圧をもたらす化合物を提供することである。

さらに、化合物は、優れた加工性を有するべきであり、化合物は、特に良好な溶解性を示すべきである。

【0007】

本発明によって対処されるさらなる課題は、燐光および蛍光エレクトロルミネッセンス素子において、特に発光体としての使用に好適な化合物を提供することとみなされうる。

より特には、本発明によって対処される課題は、赤色、緑色または青色エレクトロルミネッセンス素子に好適な発光体を提供することである。

【0008】

さらに、化合物は、特に有機エレクトロルミネッセンス素子で発光体として使用される場合に、優れた色純度を有する素子をもたらすべきである。

【0009】

本発明によって対処されるさらなる課題は、燐光または蛍光エレクトロルミネッセンス素子における、特にマトリックス材料としての使用に好適な化合物を提供することとみなされうる。より特には、本発明によって対処される課題は、赤色、黄色、青色の燐光エレクトロルミネッセンス素子を提供することである。

【0010】

さらに、この化合物が、有機エレクトロルミネッセンス素子において、マトリックス材料、正孔輸送材料または電子輸送材料として使用される場合に特に、優れた色純度を有する素子をもたらすであろう。

【0011】

さらなる課題は、非常に安価でかつ一定の品質で、優れたパフォーマンスを有する電子素子を提供することにある。

【0012】

さらに、電子素子は、多くの目的のために使用する、または適合させることができなければならない。より特に、電子素子のパフォーマンスは、広い温度範囲で維持されなければならない。

【0013】

驚くべきことに、以下に詳細に記載される特定の化合物が、この課題を解決し、エレクトロルミネッセンス素子での使用にとても好適であり、特に寿命、色純度、効率および作動電圧に関して、非常に良好な特性を示す有機エレクトロルミネッセンス素子をもたらすことがわかった。したがって、本発明は、それらの化合物、およびそれらの化合物を含む電子素子、特に有機エレクトロルミネッセンス素子を提供する。

【0014】

本発明は、式(I)の構造を少なくとも1つ含む化合物、好ましくは式(I)の化合物を提供する。

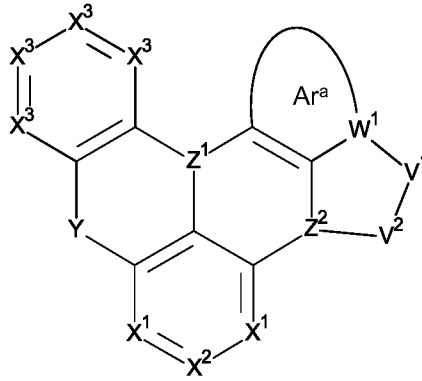
10

20

30

40

【化 1】



式 (I)

10

ここで、環 Ar^a は、出現毎に同一であるかまたは異なり、5 ~ 60 の芳香族環原子を有し、1 以上の Ar または R ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族またはヘテロ芳香族環系であり；

かつ、ここで、使用されるさらなる記号および添え字は以下のとおりである：

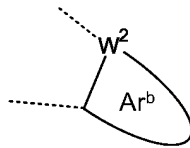
Z^1 、 Z^2 は、出現毎に同一であるかまたは異なり、 N または B であり；

W^1 は、出現毎に同一であるかまたは異なり、 N 、 B 、 $C=C(Ar)$ 、 $C=C(R)$ または $C=N$ であり、ここで $C=C(Ar)$ または $C=C(R)$ 基の両方の炭素原子、または $C=N$ 基の炭素原子および窒素原子が、それぞれ、環 Ar^a の部分であり、ここで、 $C=N$ 基の炭素原子は、 V^1 基に結合し；

20

V^1 、 V^2 は、出現毎に同一であるかまたは異なり、 $-N=$ 、 $-B=$ 、 $=C(Ar)-$ または $=C(R)-$ であり、ここで、 V^1 、 V^2 基の 1 以下が、 $-N=$ または $-B=$ であるか、または V^1 、 V^2 基が、以下の式の環を形成し

【化 2】



30

ここで、環 Ar^b は、出現毎に同一であるかまたは異なり、5 ~ 60 の芳香族環原子を有し、1 以上の Ar または R ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族またはヘテロ芳香族環系であり、ここで、環 Ar^b が、 X^1 基と共に環系を形成してもよく、または環 Ar^a および Ar^b が、共に環系を形成していてもよく、ここで、 W^2 は、 W^1 基に結合し、出現毎に同一であるかまたは異なり、 N 、 B 、 $C=C(Ar)$ 、 $C=C(R)$ または $C=N$ であり、ここで、 $C=C(Ar)$ または $C=C(R)$ 基の両方の炭素原子、または $C=N$ 基の炭素原子および窒素原子が、それぞれ、 Ar^b 環の部分であり、ここで、 $C=N$ 基の炭素原子が、 W^1 基に結合し、点線は、 W^1 または Z^2 基への結合を示し；

40

Y は、出現毎に同一であるかまたは異なり、結合、 $N(Ar)$ 、 $N(R)$ 、 $P(Ar)$ 、 $P(R)$ 、 $P(=O)Ar$ 、 $P(=O)R$ 、 $P(=S)Ar$ 、 $P(=S)R$ 、 $B(Ar)$ 、 $B(R)$ 、 $Al(Ar)$ 、 $Al(R)$ 、 $Ga(Ar)$ 、 $Ga(R)$ 、 $C=O$ 、 $C(R)_2$ 、 $Si(R)_2$ 、 $Ge(R)_2$ 、 $C=NR$ 、 $C=NAr$ 、 $C=C(R)_2$ 、 $C=C(R)(Ar)$ 、 O 、 S 、 Se 、 $S=O$ 、または SO_2 であり、好ましくは、結合、 $N(Ar)$ 、 $N(R)$ 、 $B(Ar)$ 、 $B(R)$ 、 $P(=O)R$ 、 $P(=O)Ar$ 、 $C=O$ 、 $C(R)_2$ 、 $C=C(R)_2$ 、 $C=C(R)(Ar)$ 、 $Si(R)_2$ 、 O 、 S 、 Se 、 $S=O$ または SO_2 、より好ましくは、結合、 $C=C(R)_2$ 、 $C=C(R)(Ar)$ 、 $C(R)$

50

)₂、O、S、SO₂、N(Ar)またはB(Ar)であり；

Arは、出現毎に同一であるかまたは異なり、5～60の芳香族環原子を有し、1以上のRラジカルによって置換されているか、芳香族またはヘテロ芳香族環系であり；ここで、Ar基は、少なくとも1つのAr、X¹、X³、R基、またはさらなる基と共に、環系を形成していてもよく；

X¹は、出現毎に同一であるかまたは異なり、N、CR^a、または環Ar^bもしくはさらなる基への結合によって環系が形成される場合にCであり、好ましくは、CR^aまたはCであり、ただし、1つの環あたりX¹、X²基のうちの2以下がNであり；

X²は、出現毎に同一であるかまたは異なり、NまたはCR^b、好ましくはCR^bであり、ただし、1つの環あたりX¹、X²基のうちの2以下がNであり；

X³は、出現毎に同一であるかまたは異なり、N、CR^c、またはArもしくはR基、環Ar^aまたはさらなる基への結合によって環系が形成される場合にCであり、好ましくはCR^cまたはCであり、ただし、1つの環あたりX³基のうちの2以下がNであるか、または2つの隣接するX³基が共にSまたはOであり、ここで、少なくとも1つのX³基、好ましくは少なくとも2つのX³基は、CR^cまたはCであり；

R、R^a、R^b、R^cは、出現毎に同一であるかまたは異なり、H、D、OH、F、Cl、Br、I、CN、NO₂、N(Ar')₂、N(R¹)₂、C(=O)N(Ar')₂、C(=O)N(R¹)₂、C(Ar')₃、C(R¹)₃、Si(Ar')₃、Si(R¹)₃、B(Ar')₂、B(R¹)₂、C(=O)Ar'、C(=O)R¹、P(=O)(Ar')₂、P(=O)(R¹)₂、P(Ar')₂、P(R¹)₂、S(=O)Ar'、S(=O)R¹、S(=O)₂Ar'、S(=O)₂R¹、OSO₂Ar'、OSO₂R¹、1～40の炭素原子を有する、直鎖のアルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基または2～40の炭素原子を有する、アルケニルもしくはアルキニル基または3～20の炭素原子を有する、分岐もしくは環状の、アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基（ここで、アルキル、アルコキシ、チオアルコキシ、アルケニルもしくはアルキニル基が、それぞれのケースにおいて、1以上のR¹ラジカルによって置換されているか、ここで、1以上の隣接しないCH₂基が、R¹CC=CR¹、C₂C、Si(R¹)₂、C=O、C=S、C=Se、C=NR¹、-C(=O)O-、-C(=O)NR¹-、NR¹、P(=O)(R¹)、-O-、-S-、SOまたはSO₂によって置き換えられているか、または5～60の芳香族環原子を有し、それぞれのケースにおいて、1以上のR¹ラジカルによって置換されているか、芳香族もしくはヘテロ芳香族環系、または5～60の芳香族環原子を有し、1以上のR¹ラジカルによって置換されているか、アリールオキシもしくはヘテロアリールオキシ基であり；同時に、2つのR、R^a、R^b、R^cラジカルも、共に、またはさらなる基と、環系を形成していてもよく；

Ar'は、出現毎に同一であるかまたは異なり、5～60の芳香族環原子を有し、1以上のR¹ラジカルによって置換されているか、芳香族またはヘテロ芳香族環系であり；同時に、同一の炭素原子、ケイ素原子、窒素原子、リン原子またはホウ素原子に結合された2つのAr'ラジカルが、単結合によるブリッジ、またはB(R¹)、C(R¹)₂、Si(R¹)₂、C=O、C=NR¹、C=C(R¹)₂、O、S、S=O、SO₂、N(R¹)、P(R¹)およびP(=O)R¹から選択されるブリッジを介して、共に結合されることも可能であり；

R¹は、出現毎に同一であるかまたは異なり、H、D、F、Cl、Br、I、CN、NO₂、N(Ar'')₂、N(R²)₂、C(=O)Ar''、C(=O)R²、C(=O)OAr''、C(=O)OR²、P(=O)(Ar'')₂、P(Ar'')₂、B(Ar'')₂、B(R²)₂、C(Ar'')₃、C(R²)₃、Si(Ar'')₃、Si(R²)₃、1～40の炭素原子を有する、直鎖のアルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基または3～40の炭素原子を有する、分岐もしくは環状の、アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基（これらのそれぞれは、1以上のR²ラジカルによって置換されているか、ここで、1以上の隣接しないCH₂基が、-R²CC=CR²-、-C₂C-、Si(R²)₂、C=O、C=S、C=Se、C=NR²、-C(=O)O-、-C(=O)N

10

20

30

40

50

R^2 -、 NR^2 、 $P(=O)(R^2)$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 SO または SO_2 によって置き換えられていてもよく、かつ、ここで、1以上の水素原子が、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN または NO_2 によって置き換えられていてもよい)、または5~60の芳香族環原子を有する、芳香族もしくはヘテロ芳香族環系(これらのそれぞれは、1以上の R^2 ラジカルによって置換されていてもよい)、または5~60の芳香族環原子を有し、1以上の R^2 ラジカルによって置換されていてもよい、アリールオキシもしくはヘテロアリールオキシ基、または5~60の芳香族環原子を有し、1以上の R^2 ラジカルによって置換されていてもよい、アラルキルもしくはヘテロアラルキル基、またはこれらの系の組み合わせであり;同時に、2以上の、好ましくは隣接する、 R^1 ラジカルが、共に、環系を形成していてもよく;同時に、1以上の R^1 ラジカルが、化合物のさらなる部分と共に、環系を形成していてもよく;

Ar' は、出現毎に同一であるかまたは異なり、5~30の芳香族環原子を有し、1以上の R^2 ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族またはヘテロ芳香族環系であり;同時に、同一の炭素原子、ケイ素原子、窒素原子、リン原子またはホウ素原子に結合された2つの Ar' ラジカルが、単結合によるブリッジ、または $B(R)$ 、 $C(R^2)_2$ 、 $Si(R^2)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=NR^2$ 、 $C=C(R^2)_2$ 、 O 、 S 、 $S=O$ 、 SO_2 、 $N(R^2)$ 、 $P(R^2)$ および $P(=O)R^2$ から選択されるブリッジを介して、共に結合されることも可能であり;

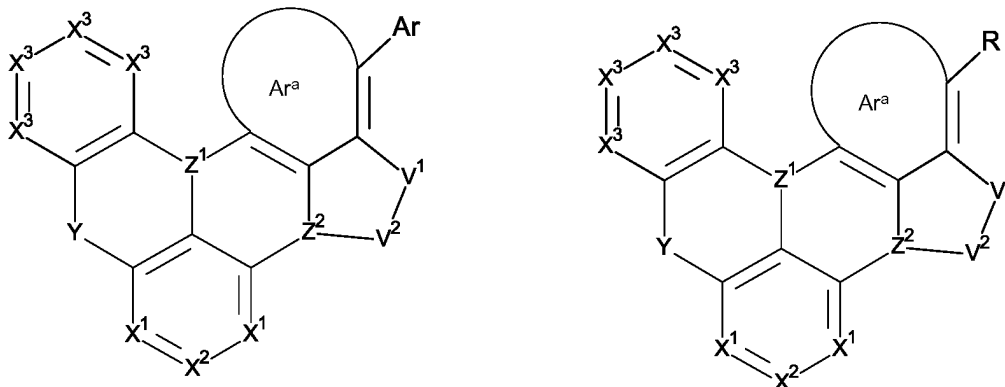
R^2 は、出現毎に同一であるかまたは異なり、 H 、 D 、 F 、 CN 、1~20の炭素原子を有する脂肪族ヒドロカルビルラジカル、または5~30の芳香族環原子を有し、1以上の水素原子が D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I または CN に置き換えられていてもよく、かつ1以上のそれぞれ1~4の炭素原子を有する1以上のアルキル基によって置換されていてもよい、芳香族もしくはヘテロ芳香族環系からなる群から選択され;同時に、2以上の、好ましくは隣接する、置換基 R^2 が、共に、環系を形成していてもよく;

ここで、少なくとも1つの V^1 、 V^2 、 W^1 、 W^2 基は、 N または B である。

【0015】

本発明によれば、 W^1 は、 $C=C(Ar)$ 、 $C=C(R)$ または $C=N$ であってよく、ここで、 $C=C(Ar)$ もしくは $C=C(R)$ 基の両方の炭素原子、または $C=N$ 基の炭素原子および窒素原子が、それぞれ、環 Ar^a の部分であり、ここで、 $C=N$ 基の炭素原子は、 V^1 基に結合する。これは、 W^1 が $C=C(Ar)$ または $C=C(R)$ の場合に、式(I)の化合物に従うことを意味し、

【化3】



W^1 が $C=N$ の場合に、式(I)の化合物が、以下の式に従う。

10

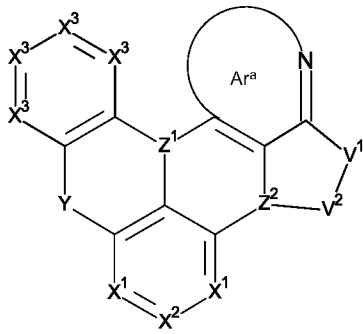
20

30

40

50

【化 4】



10

【0016】

さらに、V¹、W¹、W²基のちょうど1つがNまたはBであるケースであってよい。

【0017】

好ましくは、環 Ar^a および / または Ar^b が、5 - または 6 - 員環に従うケースであってよい。

【0018】

好ましくは、式 (I) において、少なくとも1つの Z¹ または Z² 基がNであるケースであってよい。

20

【0019】

好ましくは、式 (I) において、Z¹ がNであり、Z² がBであるケースであってよい。

【0020】

さらに、式 (I) において、Z¹ がNであり、Z² がNであるケースであってよい。

【0021】

好ましくは、式 (I) において、Z¹ または Z² 基がBであるケースであってよい。

【0022】

好ましくは、式 (I) において、Z¹ がBであり、Z² がNであるケースであってよい。

30

【0023】

さらに、式 (I) において、Z¹ がBであり、Z² がBであるケースであってよい。

【0024】

記号 W¹、W² が、C = C (Ar)、C = C (R) または C = N である場合に、C = C (Ar)、C = C (R) または C = N ラジカルが、環 Ar^a または Ar^b の部分を形成する。W¹ が C = C (Ar) または C = C (R) であり、1つの環 Ar^a が6員環である場合に、環 Ar^a は、Z¹ 基または W¹ および Z² 基に結合する炭素原子および C = C (Ar) または C = C (R) 基からの2つの炭素原子の他に、2つのさらなる原子を含む。

【0025】

さらなる説明のために、式 (II - 2)、(II - 3) および (II - 4) を参照して詳細に説明し、対応するポイントを示す。式 (II - 2) において、W² 基は、Z³ 基に結合した炭素原子およびその炭素原子に結合した X⁵ ラジカルを示す。さらに、式 (II - 1) において、Z³ 基は W¹ ラジカルに対応し、ここで、式 (I) に示される環 Ar^a が、式 (II - 2) に示される W⁵、W⁶ 基を含む。

40

【0026】

式 (II - 3) において、式 (I) の V¹ 基は、W³ ラジカルで示される。対応して、式 (II - 3) の W⁴ ラジカルは、V² 基を示す。さらに、式 (II - 3) において、Z³ 基は、式 (I) に示される W¹ ラジカルに対応し、ここで、環 Ar^a は、W¹ または Z³ 基に結合し、式 (II - 3) に示される X⁵ 基および X⁵ および Z³ 基に結合する炭素原子を含む。

50

【0027】

式(II-4)において、式(I)に示される W^1 基は、 Z^3 基に結合する炭素原子およびその炭素原子に結合する X^5 ラジカルを示す。さらに、式(II-4)において、 V^1 、 V^2 基は、環 Ar^b を形成し、式(II-4)において Z^3 基は、式(I)の W^2 ラジカルに対応し、ここで、環 Ar^b は、 X^4 、 W^5 、 W^6 基を含む。

【0028】

好ましくは、環 Ar^a および/または Ar^b が5-または6-員環を形成するケースであってよい。好ましくは、1つの W^1 、 V^1 基が、 $C=C(Ar)$ または $C=C(R)$ 、または $=C(Ar)$ -または $=C(R)$ -を示す。好ましくは、1つの W^1 、 W^2 基が、 $C=C(Ar)$ または $C=C(R)$ を示す。

10

【0029】

N-N結合は、好ましくは除外され、 V^1 、 W^1 、 W^2 基のうちの1以下がNである。より好ましくは、 V^1 、 V^2 、 W^1 、 W^2 基の1以下がNである。

【0030】

B-B結合は、好ましくは除外され、 V^1 、 W^1 、 W^2 基のうちの1以下がBである。好ましくは、 V^1 、 V^2 、 W^1 、 W^2 基のうちの1以下がBである。

【0031】

B-N結合は、好ましくは除外され、 V^1 、 W^1 、 W^2 基のうちの1以下がNまたはBである。より好ましくは、 V^1 、 V^2 、 W^1 、 W^2 基のうちの1以下がNまたはBである。

20

【0032】

さらなる形態において、 V^1 、 W^1 、 W^2 基の好ましくはちょうど1つがNであり、 V^1 、 V^2 、 W^1 、 W^2 基のいずれもがBでない。さらに、 V^1 、 W^1 、 W^2 基のちょうど1つがBであり、 V^1 、 V^2 、 W^1 、 W^2 基のいずれもがBではないケースであってよい。

【0033】

本発明の意味において、アリール基は、6~40の炭素原子を含み；本発明の意味において、ヘテロアリール基は、2~40の炭素原子と少なくとも1つのヘテロ原子を含み、ただし、炭素原子とヘテロ原子の合計が少なくとも5である。ヘテロ原子は、好ましくは、N、Oおよび/またはSから選択される。アリール基またはヘテロアリール基は、ここでは単一の芳香環、すなわちベンゼン、または単一のヘテロ芳香族環、例えばピリジン、ピリミジン、チオフェン等、または縮合アリールもしくはヘテロアリール基、例えばナフタレン、アントラセン、フェナントレン、キノリン、イソキノリン等を意味するものと解される。単結合によって互いに結合される芳香族(例えばビフェニル)は、対照的に、アリールまたはヘテロアリール基とは称さず、芳香族環系である。

30

【0034】

本発明の意味において、電子欠損ヘテロアリール基は、少なくとも1つの窒素原子を有するヘテロ芳香族6員環を少なくとも1つ有するヘテロアリール基である。さらなる芳香族もしくはヘテロ芳香族5員環または6員環が、この6員環に縮合されていてもよい。電子欠損ヘテロアリール基の例は、ピリジン、ピリミジン、ピラジン、ピリダジン、トリアジン、キノリン、キナゾリンまたはキノキサリンである。

40

【0035】

本発明の意味において、芳香族環系は、環系中に6~60の炭素原子を有する。本発明の意味において、ヘテロ芳香族環系は、環系中に、2~60の炭素原子と少なくとも1つのヘテロ原子を含み、ただし、炭素原子とヘテロ原子の合計が少なくとも5である。ヘテロ原子は、好ましくは、N、Oおよび/またはSから選択される。本発明の意味において、芳香族もしくはヘテロ芳香族環系は、必ずしもアリールまたはヘテロアリール基のみを含むのではなく、その中で2以上のアリールまたはヘテロアリール基が非芳香族単位、例えば、炭素、窒素または酸素原子によって結合されていることもできる系を意味するものと解されるべきである。例えば、フルオレン、9,9'-スピロピフルオレン、9,9'-ジ

50

アリーールフルオレン、トリアアリーールアミン、ジアアリーールエーテル、スチルベン等の系もまた、本発明の意味において、芳香族環系とみなされ、また、その中に2以上のアリーール基が、例えば、短いアルキル基で結合されている系も同様である。好ましくは、芳香族環系は、フルオレン、9, 9'-スピロビフルオレン、9, 9'-ジアアリーールフルオレンまたは2以上のアリーールおよび/またはヘテロアリーール基が単結合によって互いに結合された基から選択される。

【0036】

本発明の意味において、1~20の炭素原子を有し、それぞれの水素原子または CH_2 基が上記の基によって置換されていてもよい、脂肪族ヒドロカルビルラジカルまたはアルキル基またはアルケニルもしくはアルキニル基は、好ましくは、メチル、エチル、n-プロピル、i-プロピル、n-ブチル、i-ブチル、s-ブチル、t-ブチル、2-メチルブチル、n-ペンチル、s-ペンチル、ネオペンチル、シクロペンチル、n-ヘキシル、ネオヘキシル、シクロヘキシル、n-ヘプチル、シクロヘプチル、n-オクチル、シクロオクチル、2-エチルヘキシル、トリフルオロメチル、ペンタフルオロエチル、2, 2, 2-トリフルオロエチル、エテニル、プロベニル、ブテニル、ペンテニル、シクロペンテニル、ヘキセニル、シクロヘキセニル、ヘプテニル、シクロヘプテニル、オクテニル、シクロオクテニル、エチニル、プロピニル、ブチニル、ペンチニル、ヘキシニルまたはオクチニルラジカルを意味するものと解される。1~40の炭素原子を有するアルコキシ基は、好ましくは、メトキシ、トリフルオロメトキシ、エトキシ、n-プロポキシ、i-プロポキシ、n-ブトキシ、i-ブトキシ、s-ブトキシ、t-ブトキシ、n-ペントキシ、s-ペントキシ、2-メチルブトキシ、n-ヘキソキシ、シクロヘキシルオキシ、n-ヘプトキシ、シクロヘプチルオキシ、n-オクチルオキシ、シクロオクチルオキシ、2-エチルヘキシルオキシ、ペンタフルオロエトキシおよび2, 2, 2-トリフルオロエトキシを意味するものと解される。1~40の炭素原子を有するチオアルキル基は、特に、メチルチオ、エチルチオ、n-プロピルチオ、i-プロピルチオ、n-ブチルチオ、i-ブチルチオ、s-ブチルチオ、t-ブチルチオ、n-ペンチルチオ、s-ペンチルチオ、n-ヘキシルチオ、シクロヘキシルチオ、n-ヘプチルチオ、シクロヘプチルチオ、n-オクチルチオ、シクロオクチルチオ、2-エチルヘキシルチオ、トリフルオロメチルチオ、ペンタフルオロエチルチオ、2, 2, 2-トリフルオロエチルチオ、エテニルチオ、プロベニルチオ、ブテニルチオ、ペンテニルチオ、シクロペンテニルチオ、ヘキセニルチオ、シクロヘキセニルチオ、ヘプテニルチオ、シクロヘプテニルチオ、オクテニルチオ、シクロオクテニルチオ、エチニルチオ、プロピニルチオ、ブチニルチオ、ペンチニルチオ、ヘキシニルチオ、ヘプチニルチオまたはオクチニルチオを意味するものと解される。一般に、本発明によるアルキル、アルコキシまたはチオアルキル基は、直鎖、分岐または環状であってよく、ここで、1以上の隣接する CH_2 基が上記の基によって置き換えられていてもよく；さらに、1以上の水素原子が、D、F、Cl、Br、I、CNまたは NO_2 、好ましくはF、ClまたはCN、さらに好ましくはFまたはCN、特に好ましくはCNによって置き換えられることも可能である。

【0037】

5~60または5~40の芳香族環原子を有し、それぞれのケースにおいて上述のラジカルによって置換されていてもよく、また任意の所望の位置で、芳香族もしくはヘテロ芳香族系に結合していてもよい、芳香族もしくはヘテロ芳香族環系は、特に、ベンゼン、ナフタレン、アントラセン、ベンズアントラセン、フェナントレン、ピレン、クリセン、ペリレン、フルオランテン、ナフタセン、ペンタセン、ベンゾピレン、ビフェニル、ビフェニレン、トリフェニレン、ターフェニレン、フルオレン、スピロビフルオレン、ジヒドロフェナントレン、ジヒドロピレン、テトラヒドロピレン、シス-もしくはトランス-インデノフルオレン、シス-もしくはトランス-インデノカルバゾール、シス-もしくはトランス-インドロカルバゾール、トルキセン、イソトルキセン、スピロトルキセン、スピロイソトルキセン、フラン、ベンゾフラン、イソベンゾフラン、ジベンゾフラン、チオフエン、ベンゾチオフエン、イソベンゾチオフエン、ジベンゾチオフエン、ピロール、インド

10

20

30

40

50

ール、イソインドール、カルバゾール、ピリジン、キノリン、イソキノリン、アクリジン、フェナントリジン、ベンゾ - 5 , 6 - キノリン、ベンゾ - 6 , 7 - キノリン、ベンゾ - 7 , 8 - キノリン、フェノチアジン、フェノキサジン、ピラゾール、インダゾール、イミダゾール、ベンゾイミダゾール、ナフトイミダゾール、フェナントリミダゾール、ピリジミダゾール、ピラジニミダゾール、キノキサリニミダゾール、オキサゾール、ベンゾオキサゾール、ナフトオキサゾール、アントロキサゾール、フェナントロキサゾール、イソオキサゾール、1 , 2 - チアゾール、1 , 3 - チアゾール、ベンゾチアゾール、ピリダジン、ヘキサアザトリフェニレン、ベンゾピリダジン、ピリミジン、ベンゾピリミジン、キノキサリン、1 , 5 - ジアザアントラセン、2 , 7 - ジアザピレン、2 , 3 - ジアザピレン、1 , 6 - ジアザピレン、1 , 8 - ジアザピレン、4 , 5 - ジアザピレン、4 , 5 , 9 , 10 - テトラアザペリレン、ピラジン、フェナジン、フェノキサジン、フェノチアジン、フルオルピン、ナフチリジン、アザカルバゾール、ベンゾカルボリン、フェナントロリン、1 , 2 , 3 - トリアゾール、1 , 2 , 4 - トリアゾール、ベンゾトリアゾール、1 , 2 , 3 - オキサジアゾール、1 , 2 , 4 - オキサジアゾール、1 , 2 , 5 - オキサジアゾール、1 , 3 , 4 - オキサジアゾール、1 , 2 , 3 - チアジアゾール、1 , 2 , 4 - チアジアゾール、1 , 2 , 5 - チアジアゾール、1 , 3 , 4 - チアジアゾール、1 , 3 , 5 - トリアジン、1 , 2 , 4 - トリアジン、1 , 2 , 3 - トリアジン、テトラゾール、1 , 2 , 4 , 5 - テトラジン、1 , 2 , 3 , 4 - テトラジン、1 , 2 , 3 , 5 - テトラジン、プリン、プテリジン、インドリジン、およびベンゾチアジアゾールから誘導された基、またはこれらの系の組み合わせから誘導された基を意味するものと解される。

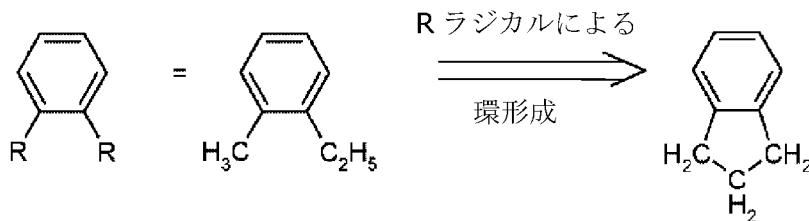
10

20

【 0 0 3 8 】

本発明の意味において、2以上のラジカルが共に環を形成してもよいという用語は、とりわけ、2つのラジカルが、2つの水素原子が形式的に除去され、化学結合によって互いに結合されることを意味するものと解される。これは、以下のスキームによって示される。

【 化 5 】

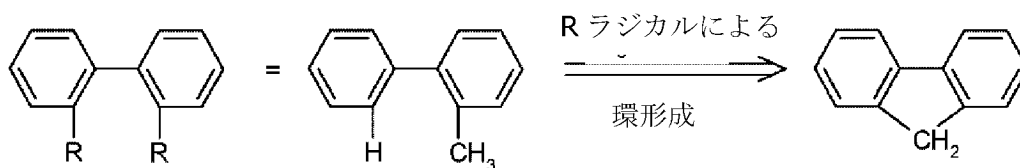


30

【 0 0 3 9 】

さらに、しかしながら、上記の用語はまた、2つのラジカルの中の1つが水素である場合、2つ目のラジカルが水素原子の結合された位置に結合し、環を形成することを意味するものと解される。これは、以下のスキームにより例示される。

【 化 6 】



40

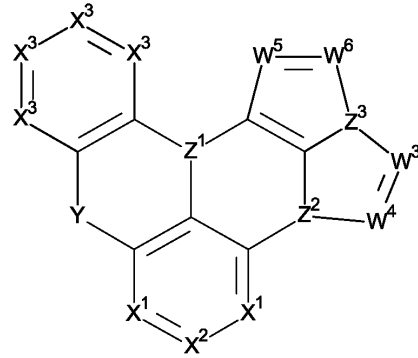
【 0 0 4 0 】

好ましい形態において、本発明の化合物は、式 (I I - 1)、(I I - 2)、(I I - 3) および / または (I I - 4) の構造を含んでもよく ; より好ましくは、本発明の

50

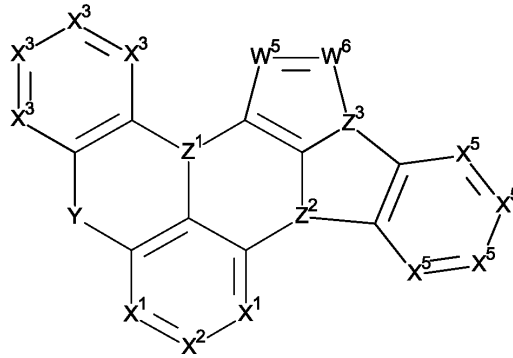
化合物は、式 (II-1)、(II-2)、(II-3) および / または (II-4) の化合物から選択されてもよい。

【化 7 - 1】



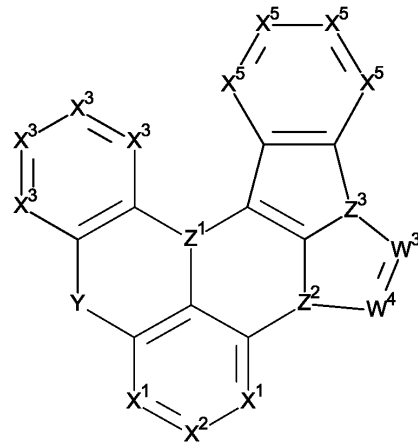
式 (II-1)

10



式 (II-2)

20



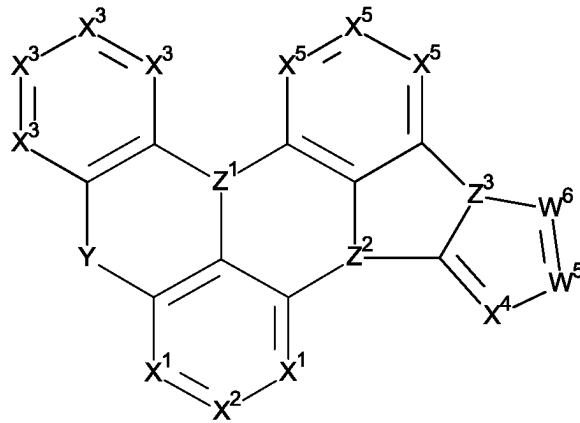
式 (II-3)

30

40

50

【化 7 - 2】



式 (II-4)

ここで、Z¹、Z²、Y、X¹、X²およびX³は、上記、特に式(I)、に記載の意味を有し、さらなる記号は以下のとおりである。

Z³は、出現毎に同一であるかまたは異なり、NまたはBであり；

W³、W⁴、W⁵、W⁶は、出現毎に同一であるかまたは異なり、C(Ar)またはX⁶であり、ここで、Arは、上記、特に式(I)、に記載の意味を有し；

X⁴は、出現毎に同一であるかまたは異なり、N、CR^d、またはX¹基への結合によって環系が形成される場合にCであり、好ましくはCR^dまたはCであり、ただし、1つの環あたりX⁴、X⁶基の2以下がNであり；

X⁵は、出現毎に同一であるかまたは異なり、N、CR^e、Ar基、X¹基またはX³基への結合によって環系が形成される場合にCであり、好ましくはCR^eまたはCであり、ただし、1つの環あたりX⁵基の2以下がNであり；

X⁶は、出現毎に同一であるかまたは異なり、NまたはCR^f、好ましくはCR^fであり、ただし、1つの環あたりX⁴、X⁶基の2以下がNであり；

R^d、R^e、R^fは、出現毎に同一であるかまたは異なり、H、D、OH、F、Cl、Br、I、CN、NO₂、N(Ar')₂、N(R¹)₂、C(=O)N(Ar')₂、C(=O)N(R¹)₂、C(Ar')₃、C(R¹)₃、Si(Ar')₃、Si(R¹)₃、B(Ar')₂、B(R¹)₂、C(=O)Ar'、C(=O)R¹、P(=O)(Ar')₂、P(=O)(R¹)₂、P(Ar')₂、P(R¹)₂、S(=O)Ar'、S(=O)R¹、S(=O)₂Ar'、S(=O)₂R¹、OSO₂Ar'、OSO₂R¹、1~40の炭素原子を有する、直鎖のアルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基または2~40の炭素原子を有する、アルケニルもしくはアルキニル基または3~20の炭素原子を有する、分岐もしくは環状のアルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基(ここで、アルキル、アルコキシ、チオアルコキシ、アルケニルもしくはアルキニル基が、それぞれのケースにおいて、1以上のR¹ラジカルによって置換されていてもよく、ここで、1以上の隣接しないCH₂基が、R¹C=CR¹、C=C、Si(R¹)₂、C=O、C=S、C=Se、C=NR¹、-C(=O)O-、-C(=O)NR¹-、NR¹、P(=O)(R¹)、-O-、-S-、SOまたはSO₂によって置き換えられていてもよい)、または5~60の芳香族環原子を有し、それぞれのケースにおいて1以上のR¹ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族もしくはヘテロ芳香族環系、または5~60の芳香族環原子を有し、1以上のR¹ラジカルによって置換されていてもよい、アリーロキシもしくはヘテロアリーロキシ基であり；同時に、2つのR^d、R^e、R^fラジカルが、共に、またはさらなる基と共に、環系を形成していてもよく、ここで、記号Ar'およびR¹は、上記、特に式(I)、に記載の意味を有する。

10

20

30

40

50

【 0 0 4 1 】

好ましくは、式 (I I - 2)、(I I - 3) および / または (I I - 4) の構造である。

【 0 0 4 2 】

さらに好ましい形態において、本発明の化合物が、式 (I I a - 1)、(I I a - 2)、(I I a - 3)、(I I a - 4)、(I I b - 1)、(I I b - 2)、(I I b - 3)、(I I b - 4)、(I I c - 1)、(I I c - 2)、(I I c - 3)、(I I c - 4)、(I I d - 1)、(I I d - 2)、(I I d - 3) および / または (I I d - 4) の構造を含むケースであってよく、ここで、本発明の化合物は、より好ましくは、式 (I I a - 1)、(I I a - 2)、(I I a - 3)、(I I a - 4)、(I I b - 1)、(I I b - 2)、(I I b - 3)、(I I b - 4)、(I I c - 1)、(I I c - 2)、(I I c - 3)、(I I c - 4)、(I I d - 1)、(I I d - 2)、(I I d - 3) および / または (I I d - 4) の化合物から選択されてもよい。

10

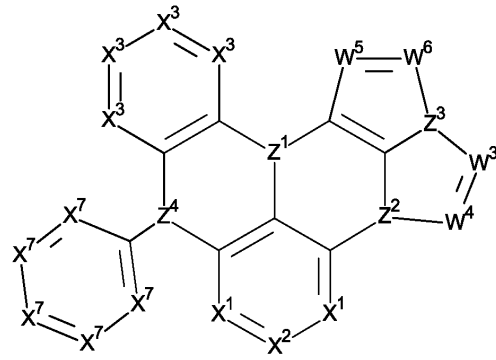
20

30

40

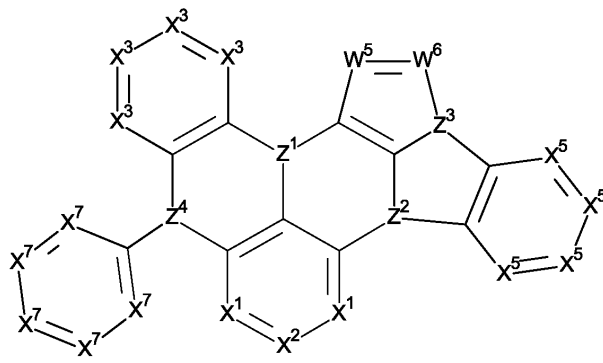
50

【化 8 - 1】



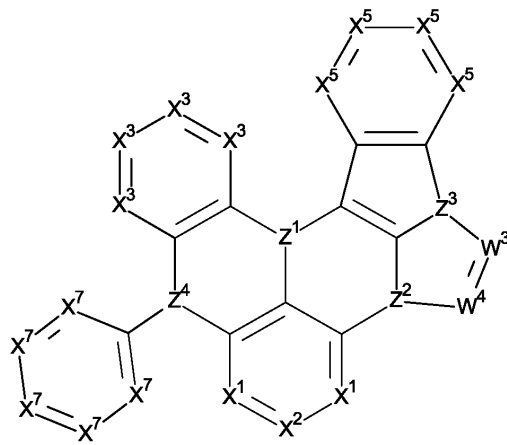
式 (IIa-1)

10



式 (IIa-2)

20



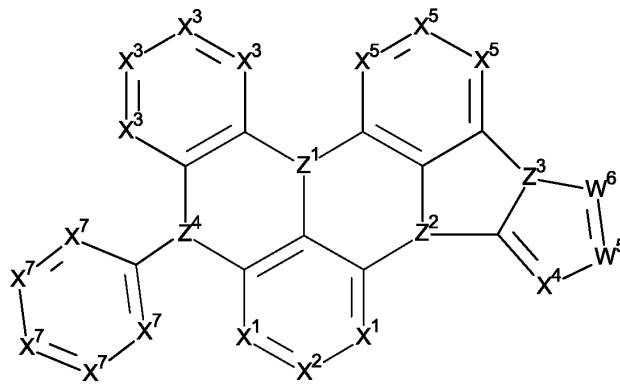
式 (IIa-3)

30

40

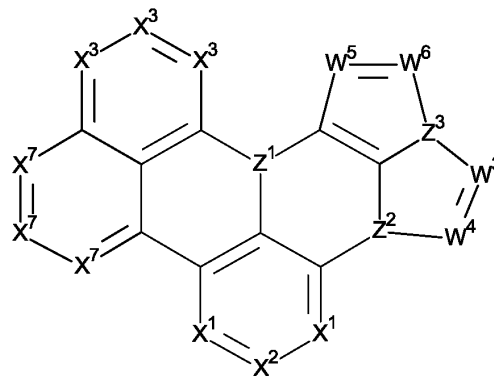
50

【化 8 - 2】



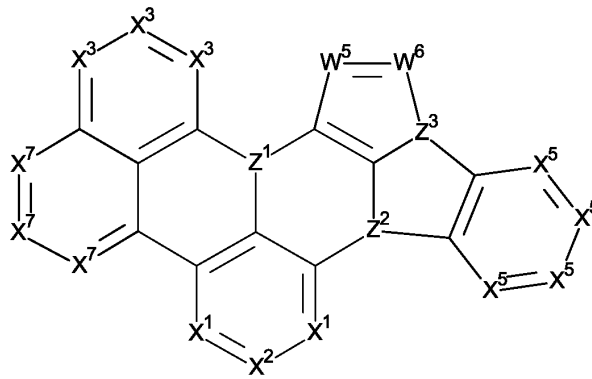
式 (IIa-4)

10



式 (IIb-1)

20



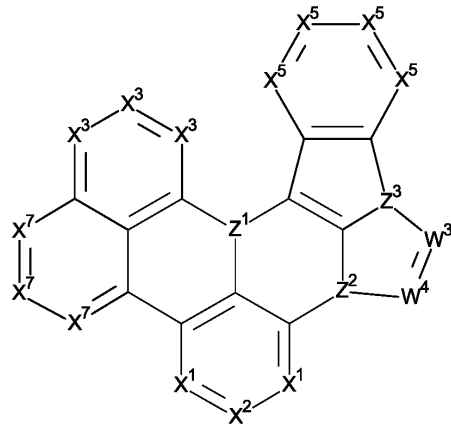
式 (IIb-2)

30

40

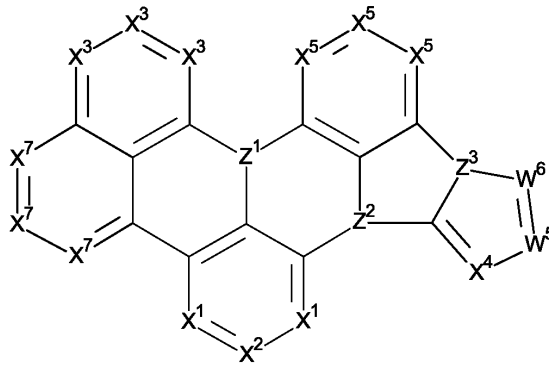
50

【化 8 - 3】



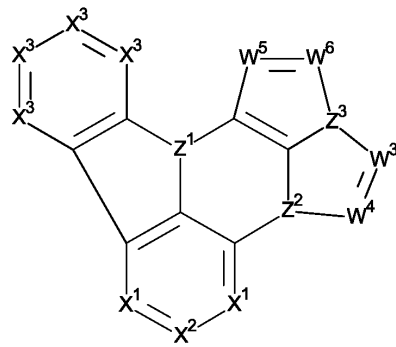
式 (IIb-3)

10



式 (IIb-4)

20



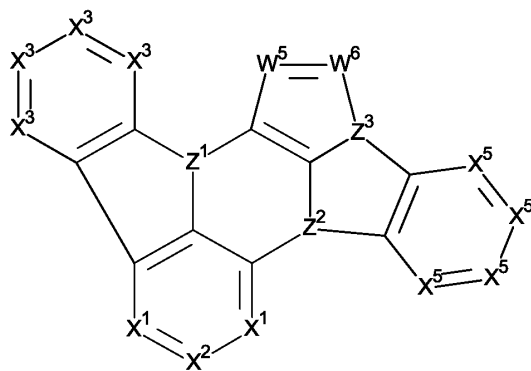
式 (IIc-1)

30

40

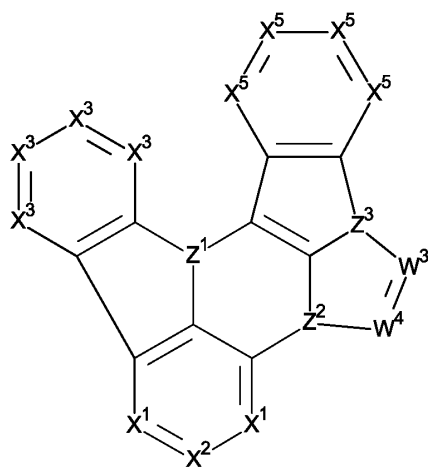
50

【化 8 - 4】



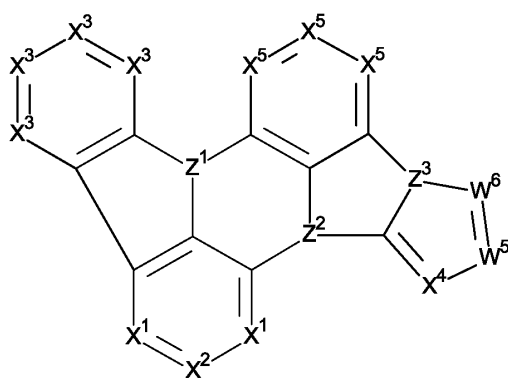
式 (IIc-2)

10



式 (IIc-3)

20



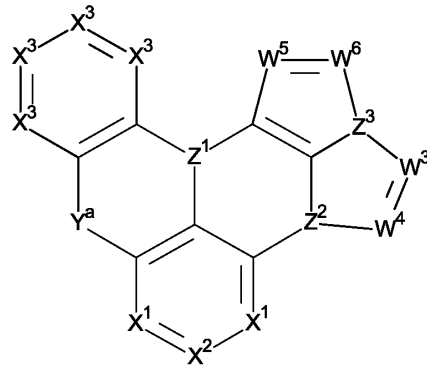
式 (IIc-4)

30

40

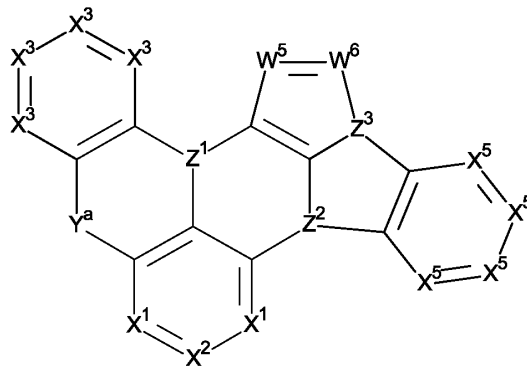
50

【化 8 - 5】



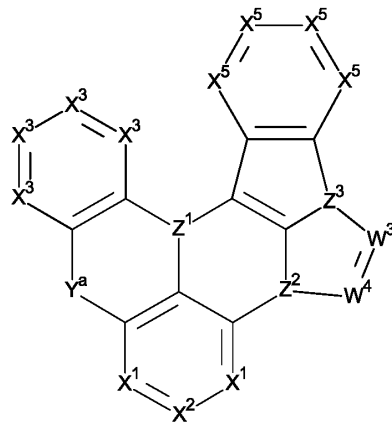
式 (IId-1)

10



式 (IId-2)

20



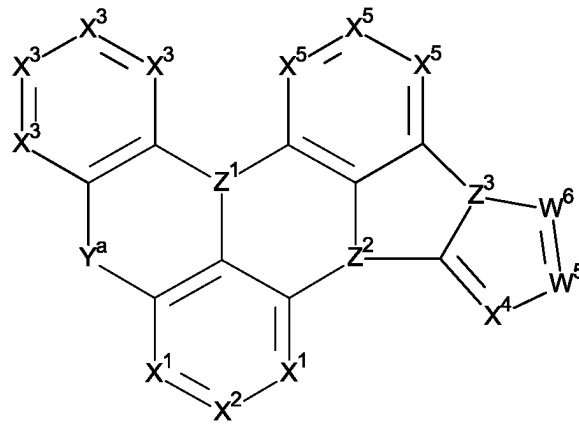
式 (IId-3)

30

40

50

【化 8 - 6】



式 (IId-4)

ここで、記号 Z^1 、 Z^2 、 X^1 、 X^2 および X^3 は、上記、特に式 (I)、に記載の意味を有し、記号 W^3 、 W^4 、 W^5 、 W^6 、 Z^3 、 X^4 および X^5 は、上記、特に式 (II - 1) ~ (II - 4)、に記載の意味を有し、さらなる記号は以下のとおりである：

Z^4 は、N、B または Al、好ましくは N または B であり；

X^7 は、出現毎に同一であるかまたは異なり、N、CR^g であるか、または X^1 、 X^3 もしくは R 基またはさらなる基に結合によって環系が形成される場合に C であり、好ましくは CR^g または C であり、ただし、1つの環あたり 2 以下の X^7 基が N であり；

Y^a は、出現毎に同一であるかまたは異なり、C=O、C(R)₂、Si(R)₂、C=NR、C=NAr、C=C(R)₂、O、S、Se、S=O、または SO₂ であり、好ましくは C=O、C(R)₂、Si(R)₂、O、S、Se、S=O、または SO₂、より好ましくは C(R)₂、O、S または SO₂ であり；

R^g は、出現毎に同一であるかまたは異なり、H、D、OH、F、Cl、Br、I、CN、NO₂、N(Ar')₂、N(R¹)₂、C(=O)N(Ar')₂、C(=O)N(R¹)₂、C(Ar')₃、C(R¹)₃、Si(Ar')₃、Si(R¹)₃、B(Ar')₂、B(R¹)₂、C(=O)Ar'、C(=O)R¹、P(=O)(Ar')₂、P(=O)(R¹)₂、P(Ar')₂、P(R¹)₂、S(=O)Ar'、S(=O)R¹、S(=O)₂Ar'、S(=O)₂R¹、OSO₂Ar'、OSO₂R¹、1~40の炭素原子を有する、直鎖のアルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基または2~40の炭素原子を有する、アルケニルもしくはアルキニル基または3~20の炭素原子を有する、分岐もしくは環状のアルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基（ここで、アルキル、アルコキシ、チオアルコキシ、アルケニルもしくはアルキニル基が、それぞれのケースにおいて、1以上のR¹ラジカルによって置換されているもよく、ここで、1以上の隣接しないCH₂基は、R¹C=CR¹、C-C、Si(R¹)₂、C=O、C=S、C=Se、C=NR¹、-C(=O)O-、-C(=O)NR¹-、NR¹、P(=O)(R¹)、-O-、-S-、SOまたはSO₂によって置き換えられているもよい）、または5~60の芳香族環原子を有し、それぞれのケースにおいて1以上のR¹ラジカルによって置換されているもよい、芳香族もしくはヘテロ芳香族環系、または5~60の芳香族環原子を有し、1以上のR¹ラジカルによって置換されているもよい、アリーロキシもしくはヘテロアリーロキシ基であり；同時に、2つのR^gラジカルが、共に、またはさらなる基と共に、環系を形成しているもよく、ここで、記号 Ar' および R¹ は、請求項 1 に記載の意味を有する。

【0043】

ここで、式 (IIa - 2)、(IIa - 3)、(IIa - 4)、(IIb - 2)、(I

10

20

30

40

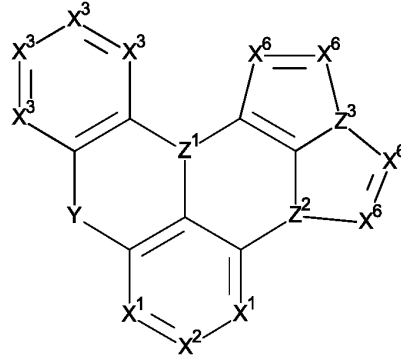
50

I b - 3)、(I I b - 4)、(I I d - 2)、(I I d - 3) および (I I d - 4) の構造が好ましい。

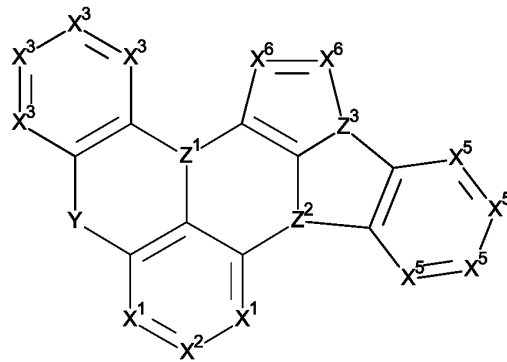
【 0 0 4 4 】

さらに好ましい形態において、本発明の化合物は、式 (I I I - 1) ~ (I I I - 1 5) の構造を含み、ここで、本発明の化合物は、より好ましくは式 (I I I - 1) ~ (I I I - 1 5) の化合物から選択されてもよい。

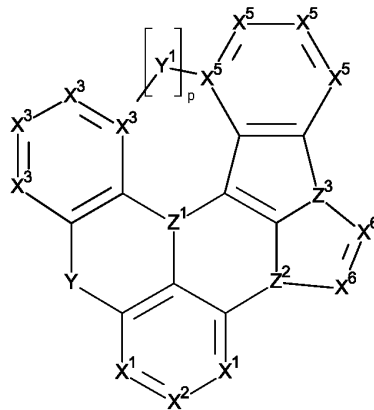
【 化 9 - 1 】



式 (III-1)



式 (III-2)



式 (III-3)

10

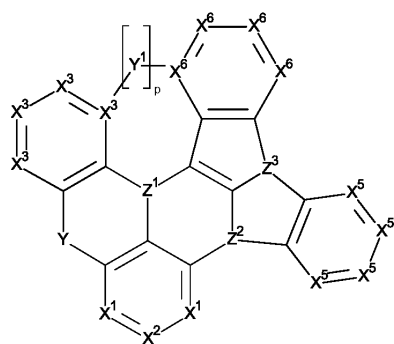
20

30

40

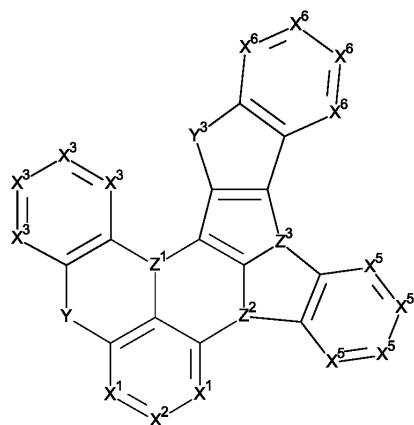
50

【化 9 - 2】



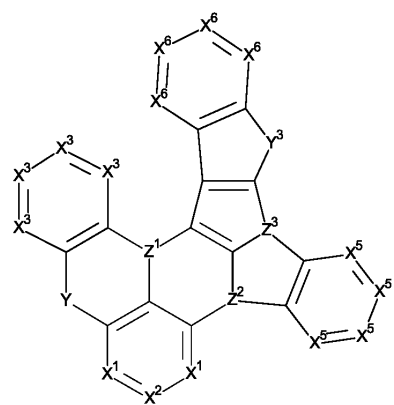
式 (III-4)

10



式 (III-5)

20



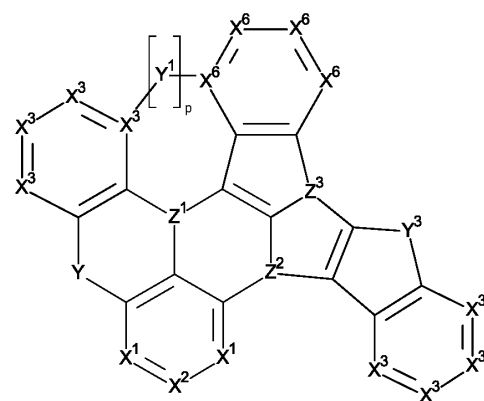
式 (III-6)

30

40

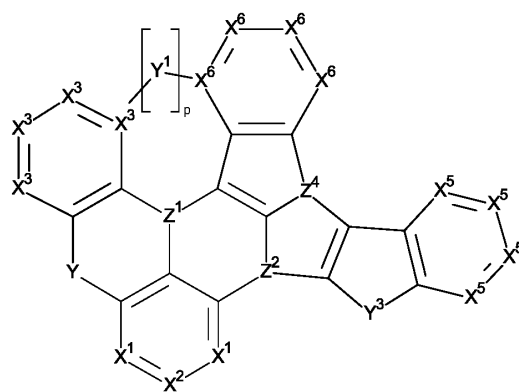
50

【化 9 - 3】



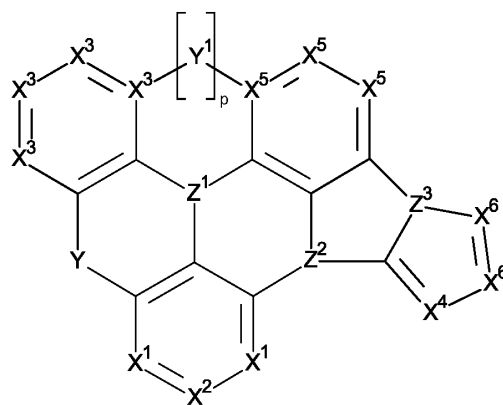
式 (III-7)

10



式 (III-8)

20



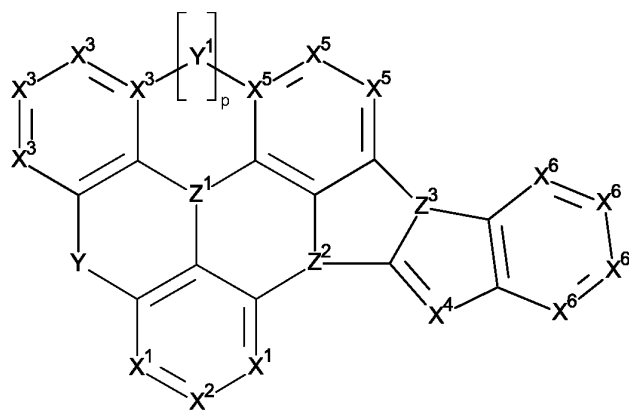
式 (III-9)

30

40

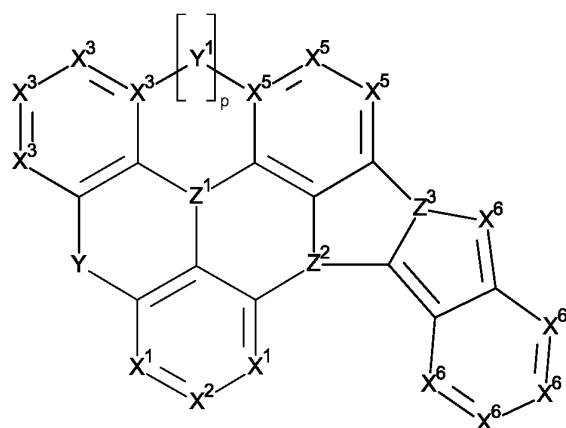
50

【化 9 - 4】



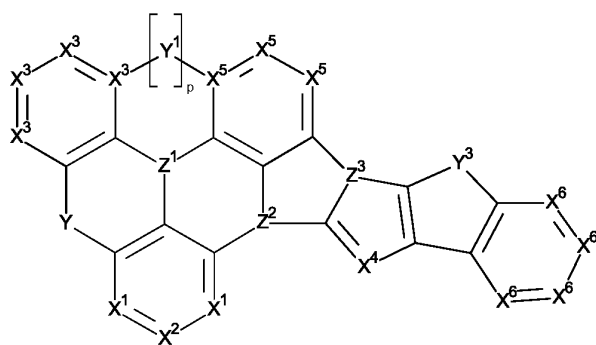
式 (III-10)

10



式 (III-11)

20



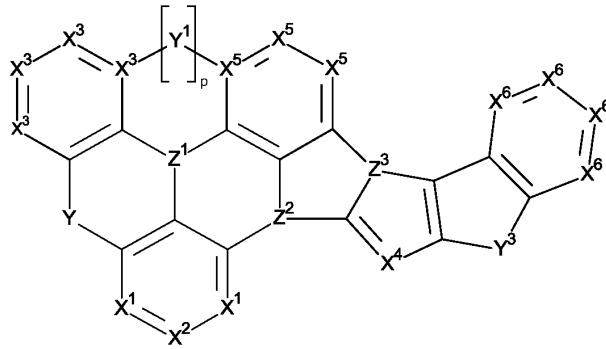
式 (III-12)

30

40

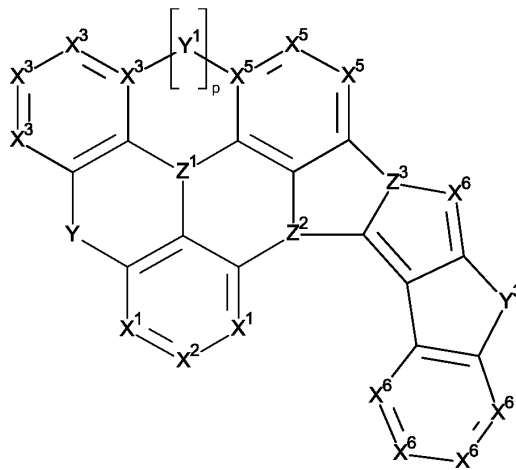
50

【化 9 - 5】



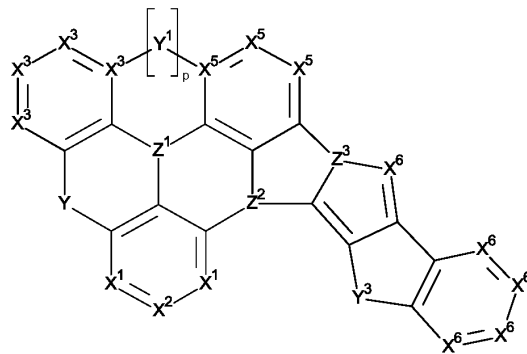
式 (III-13)

10



式 (III-14)

20



式 (III-15)

30

40

ここで、記号 Z^1 、 Z^2 、 Y 、 X^1 、 X^2 および X^3 は、上記、特に式 (I)、に記載の意味を有し、記号 Z^3 、 X^4 、 X^5 および X^6 は、上記、特に式 (II-1) ~ (II-4)、に記載の意味を有し、さらなる記号は以下に記載の通りである：

p は、0 または 1 であり、ここで、 $p = 0$ は、 Y^1 基が存在しないことを意味し；

Y^1 は、出現毎に同一であるかまたは異なり、結合、 $N(Ar')$ 、 $N(R)$ 、 $P(Ar')$ 、 $P(R)$ 、 $P(=O)Ar'$ 、 $P(=O)R$ 、 $P(=S)Ar'$ 、 $P(=S)R$ 、 $B(Ar')$ 、 $B(R)$ 、 $Al(Ar')$ 、 $Al(R)$ 、 $Ga(Ar')$ 、 $Ga(R)$ 、 $C=O$ 、 $C(R)_2$ 、 $Si(R)_2$ 、 $C=NR$ 、 $C=NAr'$ 、 $C=C(R)_2$ 、 O 、 S 、 Se 、 $S=O$ 、または SO_2 であり、好ましくは、結合、 $N(Ar')$ 、 $N(R)$ 、 B (

50

Ar'), B(R)、P(=O)R、P(=O)Ar'、C=O、C(R)₂、Si(R)₂、O、S、Se、S=O、またはSO₂であり、より好ましくは、C(R)₂、Si(R)₂、O、S、N(Ar')またはB(Ar')であり、ここで、記号RおよびAr'は、上記、特に式(I)、に記載の意味を有し；

Y³は、出現毎に同一であるかまたは異なり、N(Ar')、N(R)、P(Ar')、P(R)、P(=O)Ar'、P(=O)R、P(=S)Ar'、P(=S)R、B(Ar')、B(R)、Al(Ar')、Al(R)、Ga(Ar')、Ga(R)、C=O、C(R)₂、Si(R)₂、C=NR、C=NAr'、C=C(R)₂、O、S、Se、S=O、またはSO₂であり、好ましくは、N(Ar')、N(R)、B(Ar')、B(R)、P(=O)R、P(=O)Ar'、C=O、C(R)₂、Si(R)₂、O、S、Se、S=O、またはSO₂であり、より好ましくはC(R)₂、Si(R)₂、O、S、N(Ar')またはB(Ar')であり、ここで、記号RおよびAr'は、上記、特に式(I)、に記載の意味を有する。

【0045】

好ましくは、式(III-2)、(III-3)、(III-4)、(III-5)、(III-9)および(III-10)の構造/化合物である。

【0046】

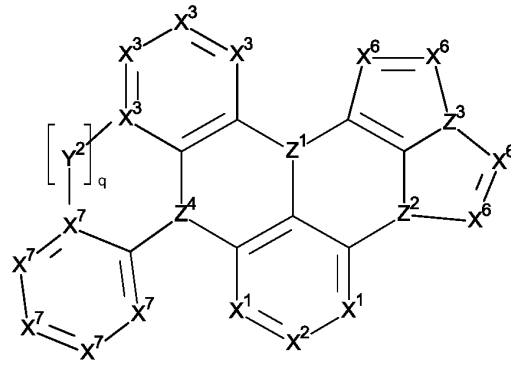
さらに好ましい形態において、本発明の化合物は、式(IIIa-1)~(IIIa-15)、(IIIb-1)~(IIIb-15)、(IIIc-1)~(IIIc-15)および/または(IIId-1)~(IIId-15)の構造を含むケースであってよく、ここで、本発明の化合物は、より好ましくは、式(IIIa-1)~(IIIa-15)、(IIIb-1)~(IIIb-15)、(IIIc-1)~(IIIc-15)および/または(IIId-1)~(IIId-15)の化合物から選択されてもよい。

30

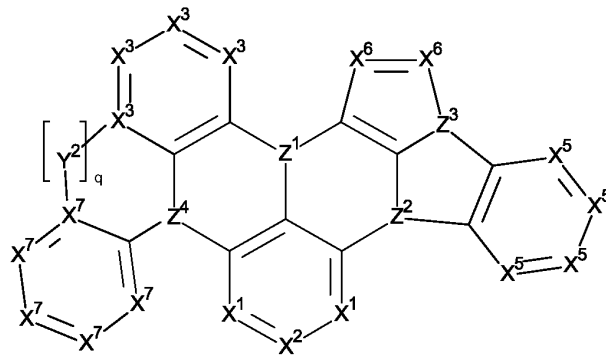
40

50

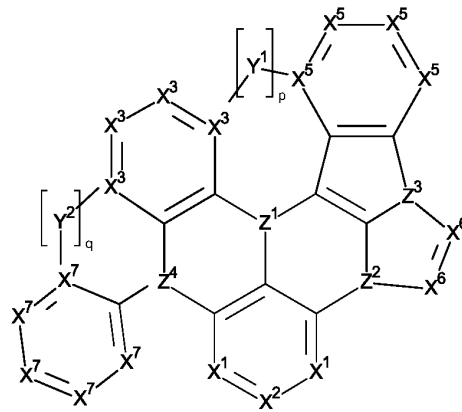
【化 1 0 - 1】



式 (IIIa-1)



式 (IIIa-2)



式 (IIIa-3)

10

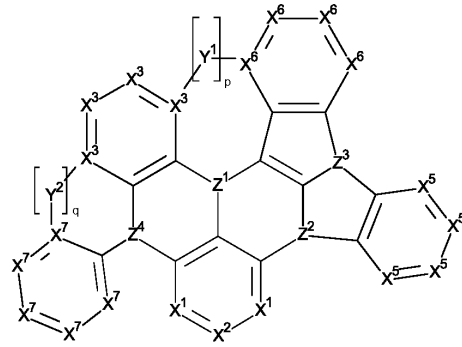
20

30

40

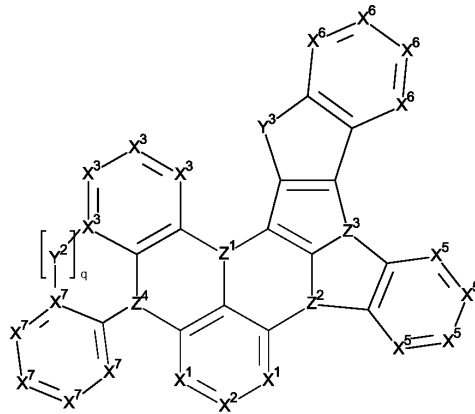
50

【化 1 0 - 2】



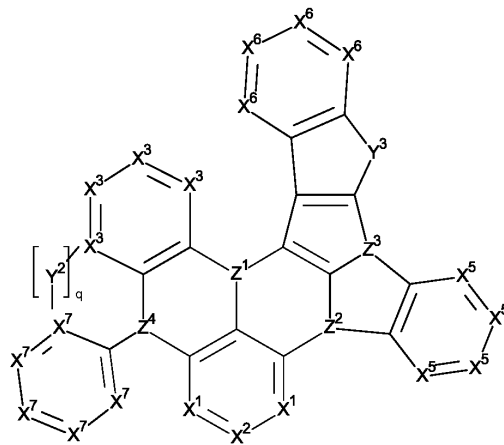
式 (IIIa-4)

10



式 (IIIa-5)

20



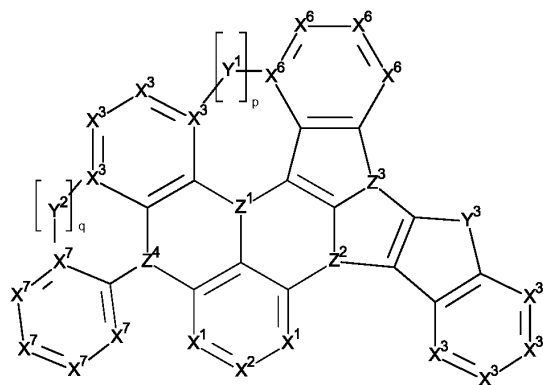
式 (IIIa-6)

30

40

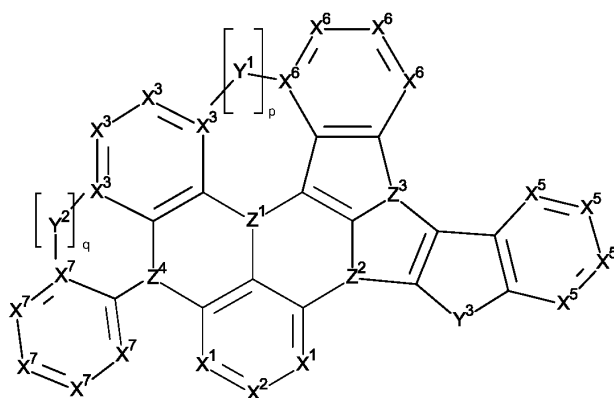
50

【化 1 0 - 3】



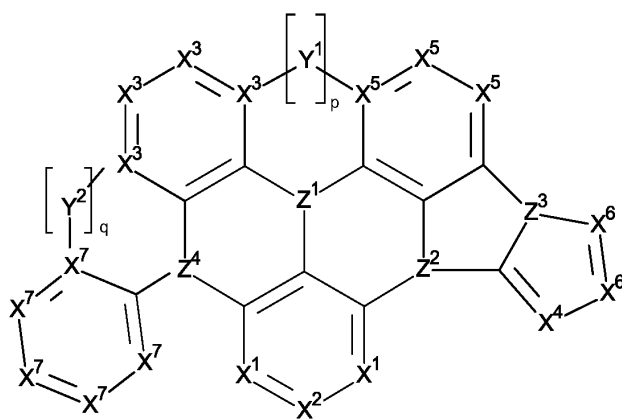
式 (IIIa-7)

10



式 (IIIa-8)

20



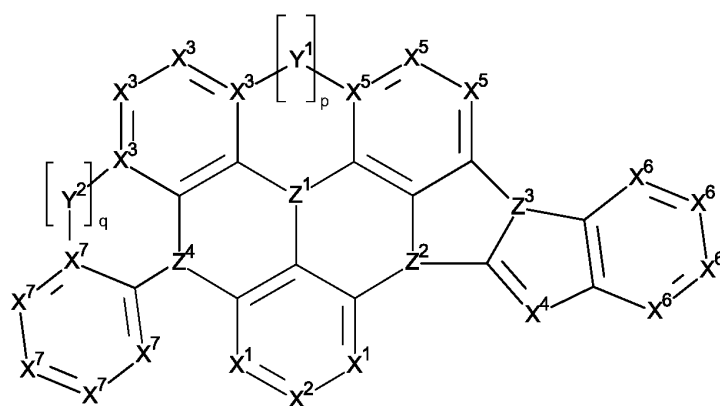
式 (IIIa-9)

30

40

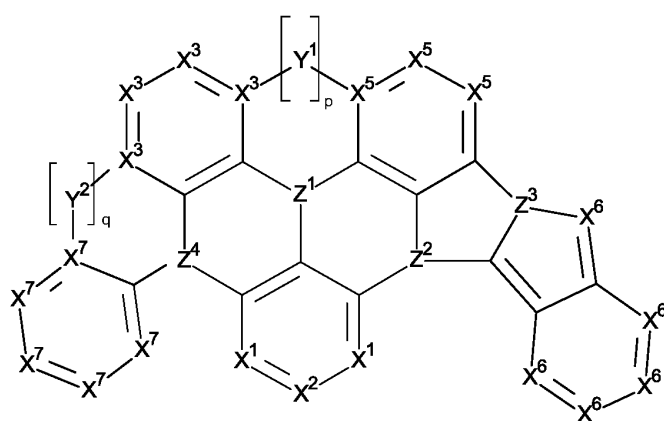
50

【化 1 0 - 4】



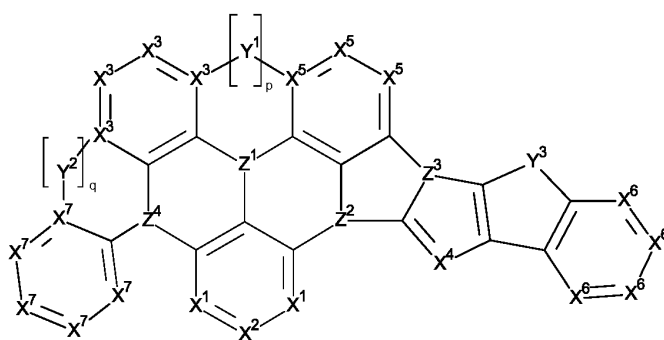
式 (IIIa-10)

10



式 (IIIa-11)

20



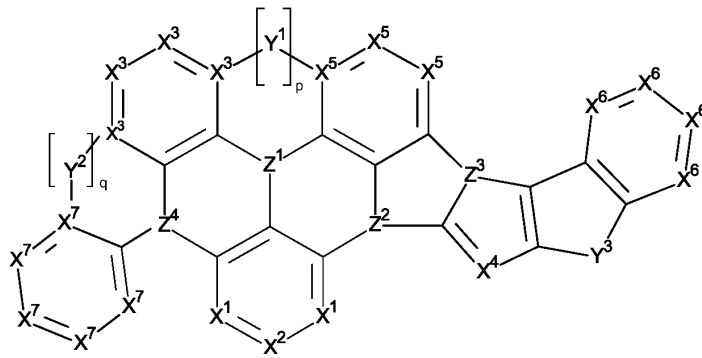
式 (IIIa-12)

30

40

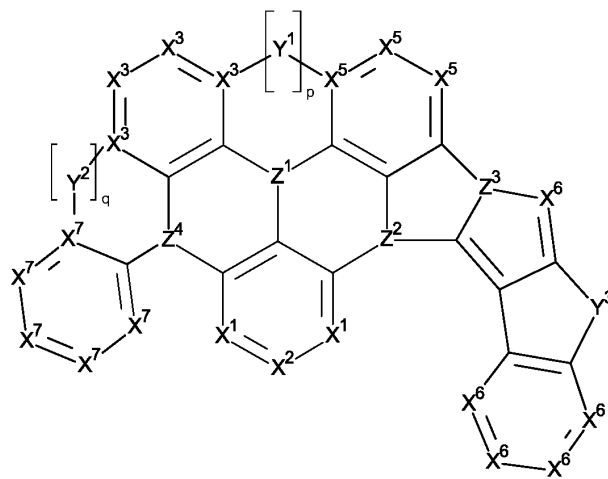
50

【化 1 0 - 5】



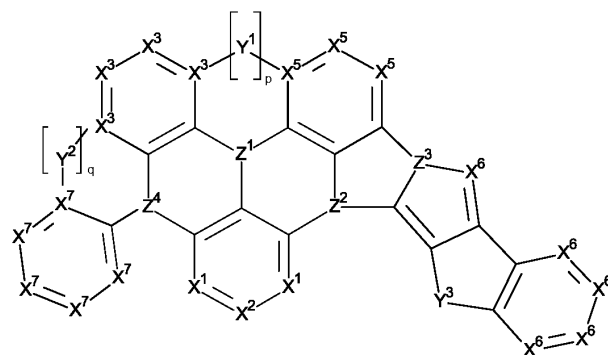
式 (IIIa-13)

10



式 (IIIa-14)

20



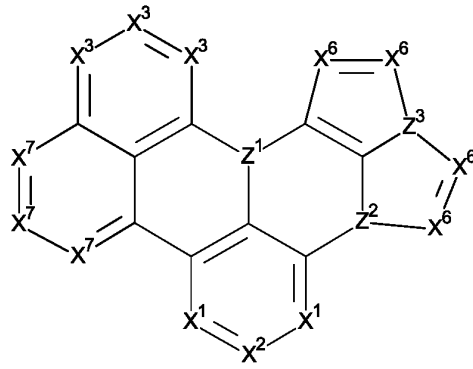
式 (IIIa-15)

30

40

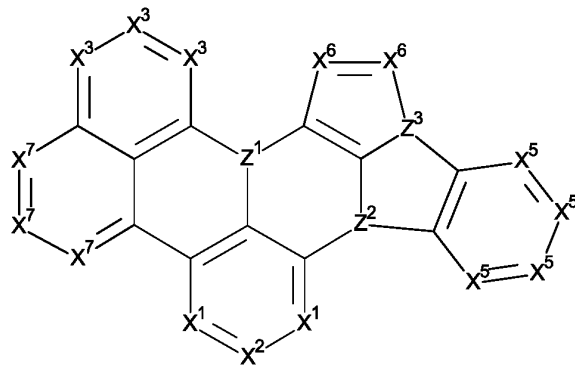
50

【化 1 0 - 6】



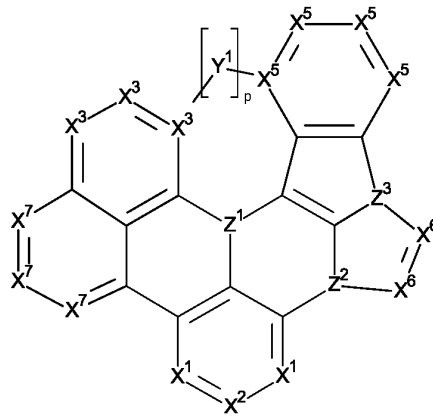
式 (IIIb-1)

10



式 (IIIb-2)

20



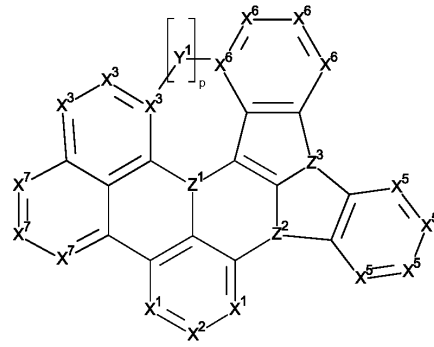
式 (IIIb-3)

30

40

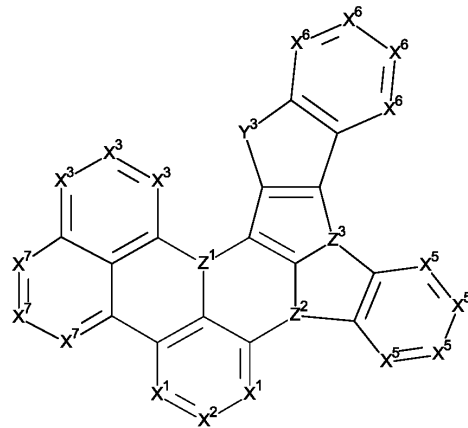
50

【化 1 0 - 7】



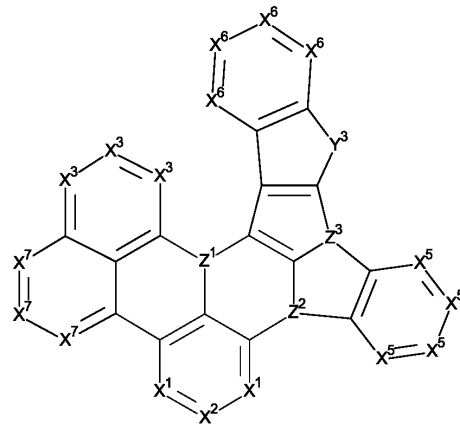
式 (IIIb-4)

10



式 (IIIb-5)

20



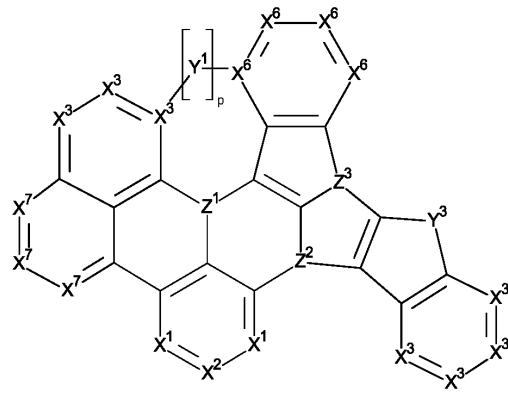
式 (IIIb-6)

30

40

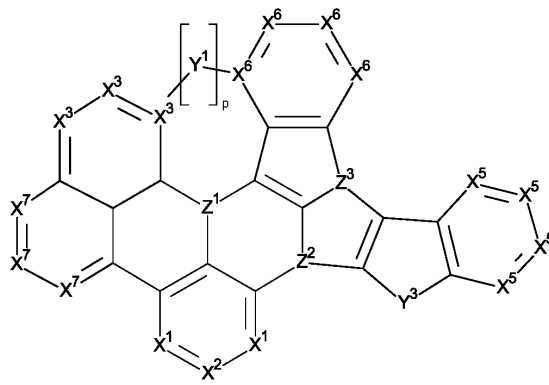
50

【化 1 0 - 8】



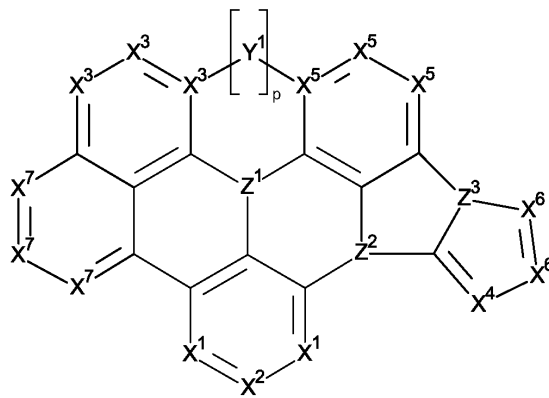
式 (IIIb-7)

10



式 (IIIb-8)

20



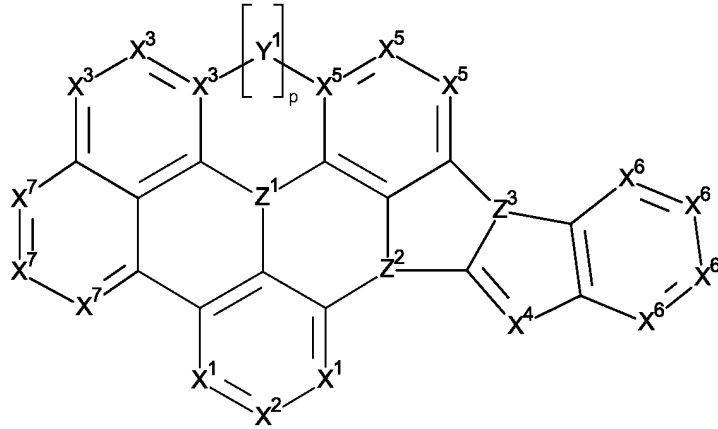
式 (IIIb-9)

30

40

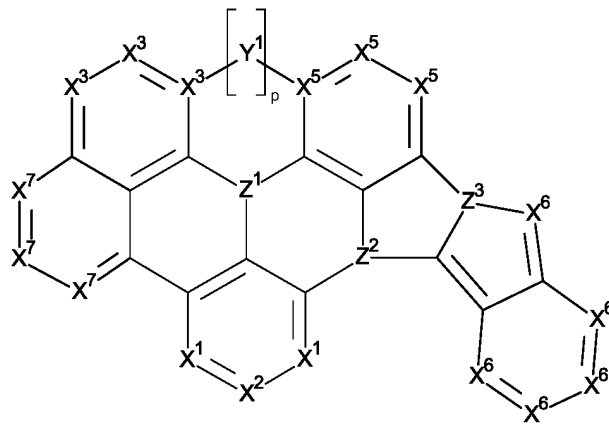
50

【化 1 0 - 9】



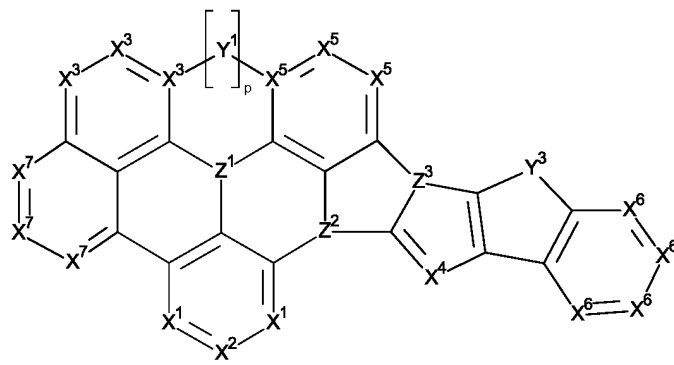
式 (IIIb-10)

10



式 (IIIb-11)

20



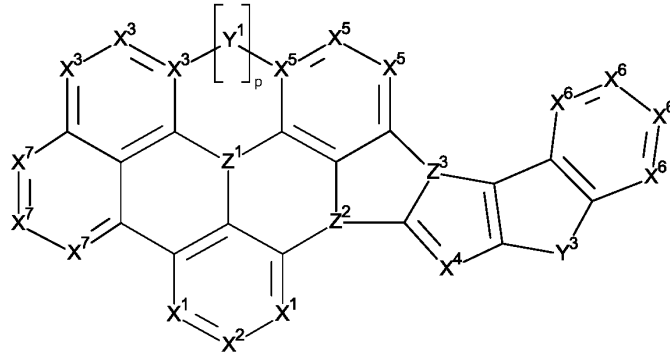
式 (IIIb-12)

30

40

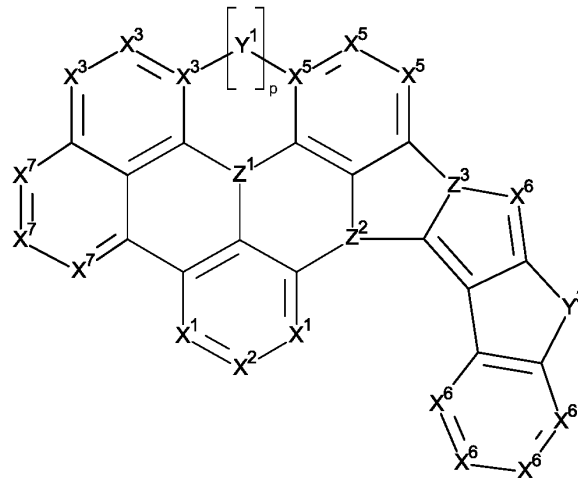
50

【化 1 0 - 1 0】



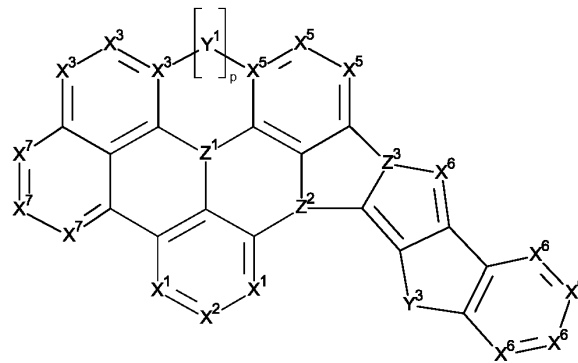
式 (IIIb-13)

10



式 (IIIb-14)

20



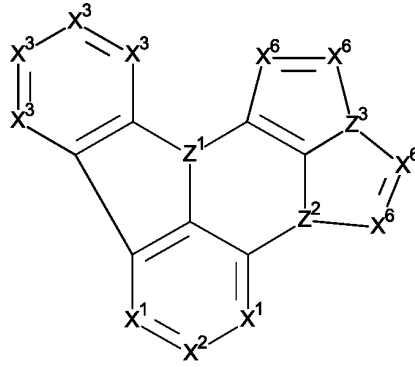
式 (IIIb-15)

30

40

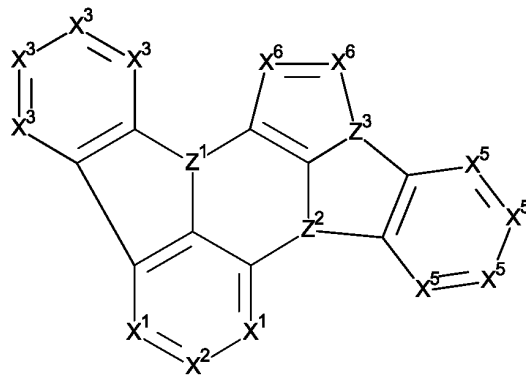
50

【化 1 0 - 1 1】



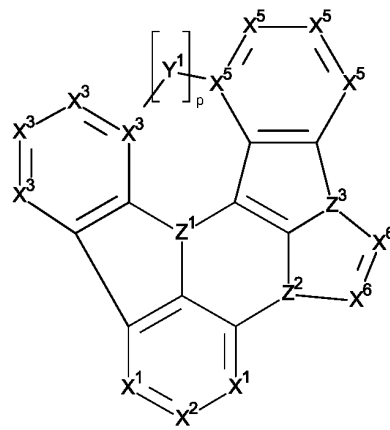
式 (IIIc-1)

10



式 (IIIc-2)

20



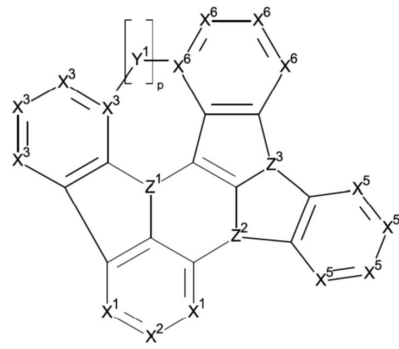
式 (IIIc-3)

30

40

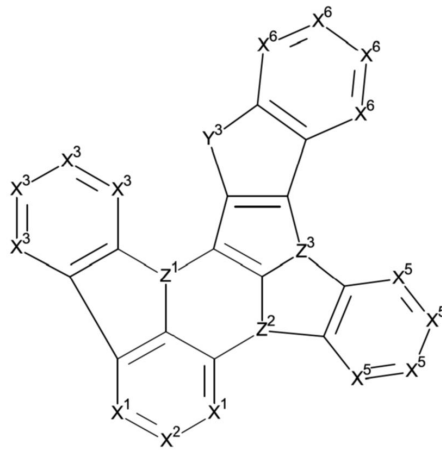
50

【化 1 0 - 1 2】



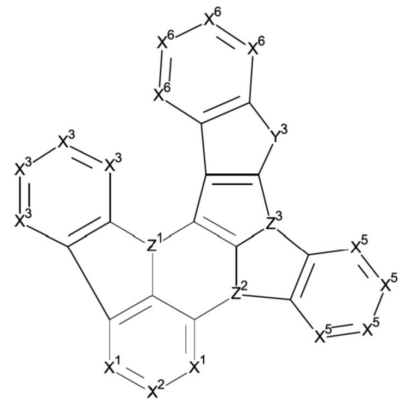
式 (IIIc-4)

10



式 (IIIc-5)

20



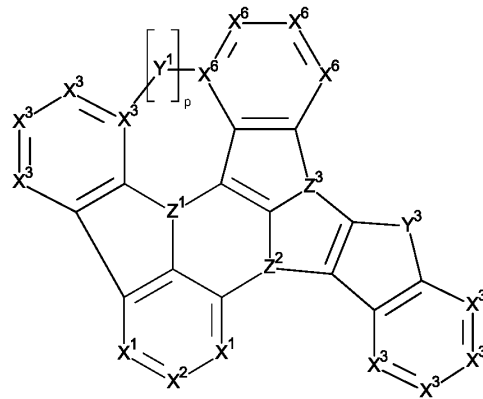
式 (IIIc-6)

30

40

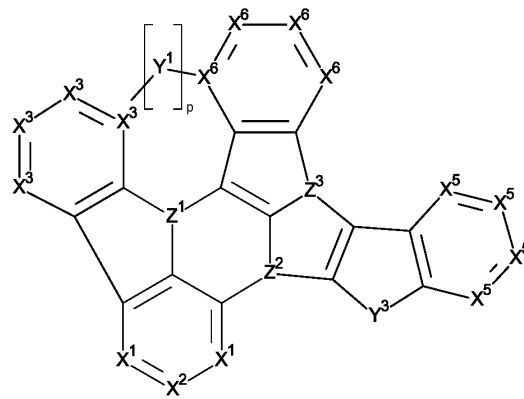
50

【化 1 0 - 1 3】



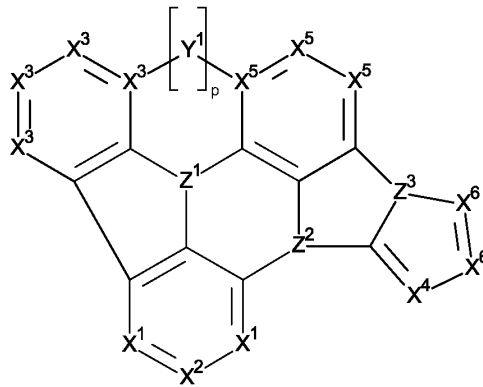
式 (IIIc-7)

10



式 (IIIc-8)

20



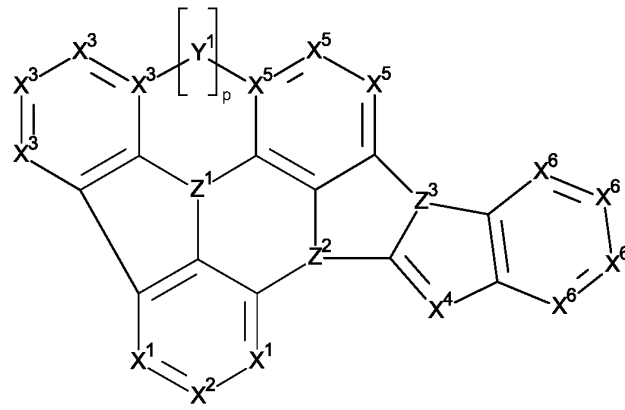
式 (IIIc-9)

30

40

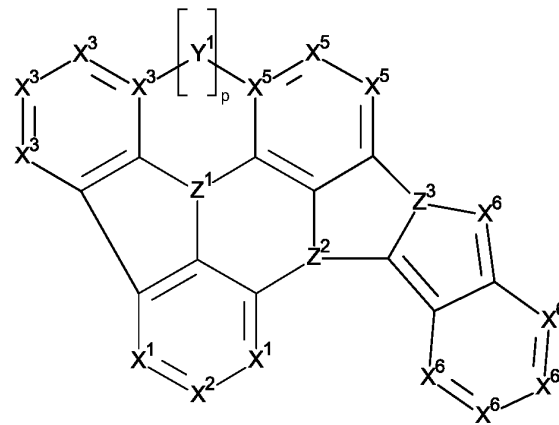
50

【化 1 0 - 1 4】



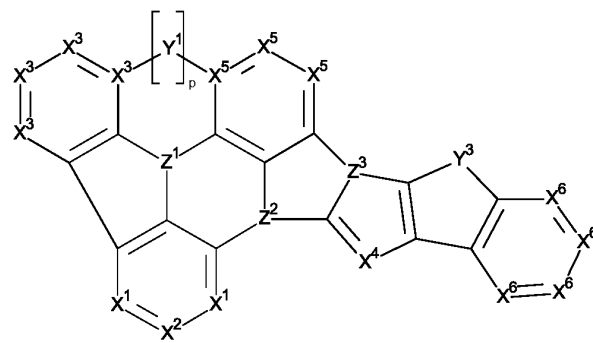
式 (IIIc-10)

10



式 (IIIc-11)

20



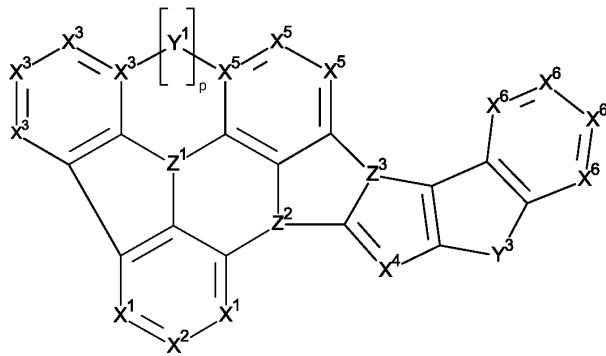
式 (IIIc-12)

30

40

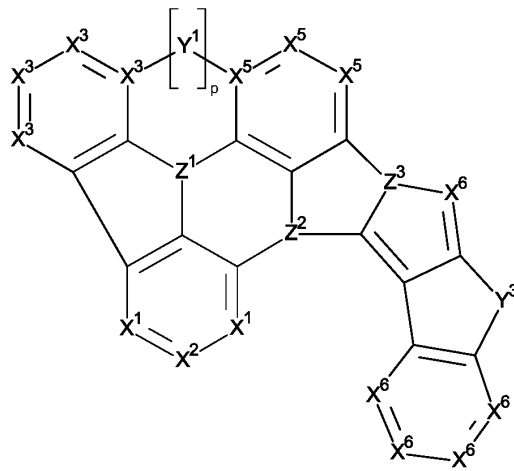
50

【化 1 0 - 1 5】



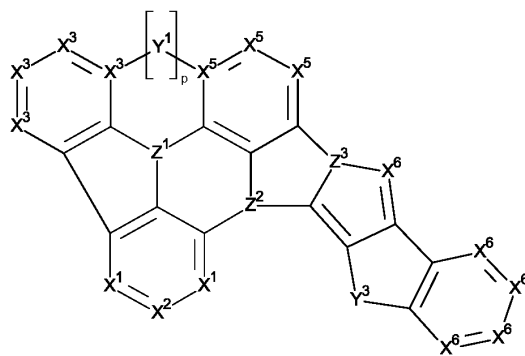
式 (IIIc-13)

10



式 (IIIc-14)

20



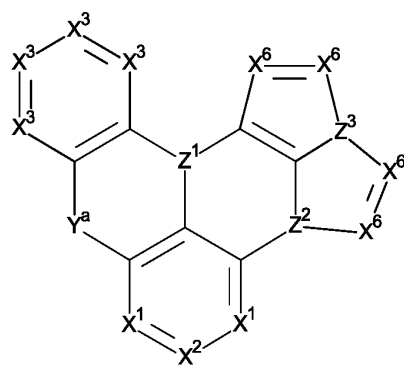
式 (IIIc-15)

30

40

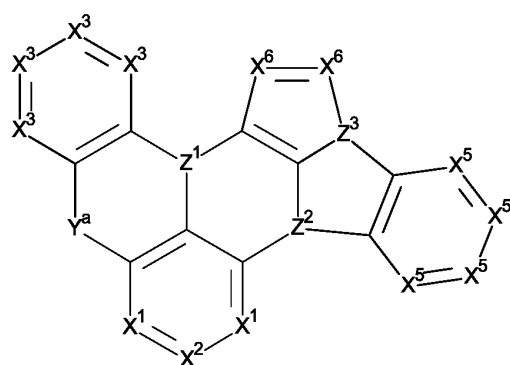
50

【化 1 0 - 1 6】



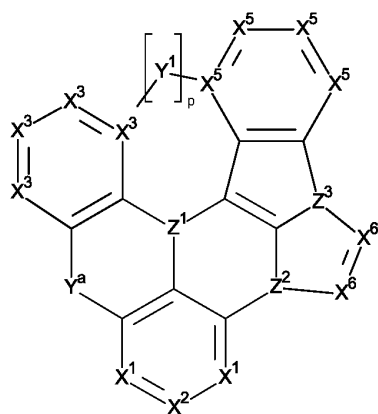
式 (IIIId-1)

10



式 (IIIId-2)

20



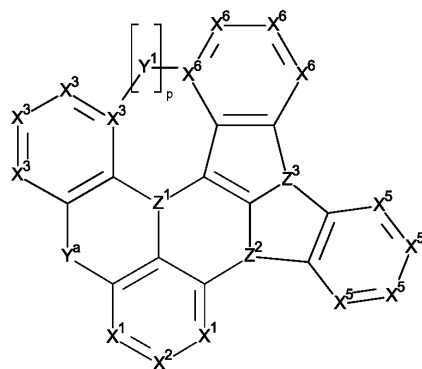
式 (IIIId-3)

30

40

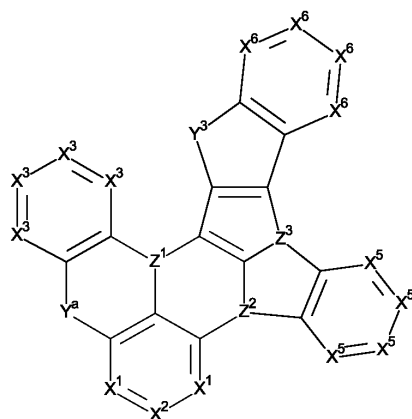
50

【化 1 0 - 1 7】



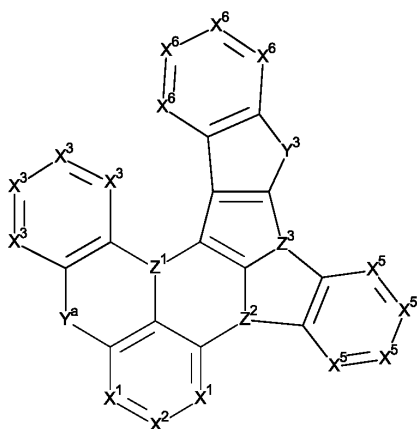
式 (III d-4)

10



式 (III d-5)

20



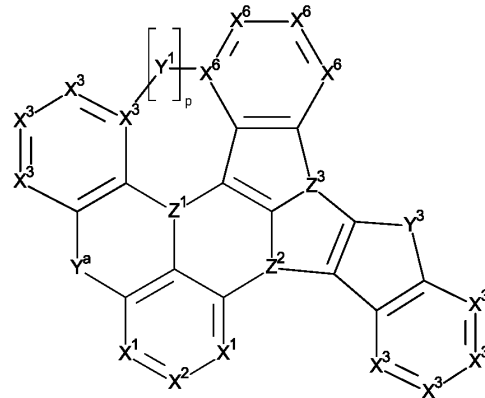
式 (III d-6)

30

40

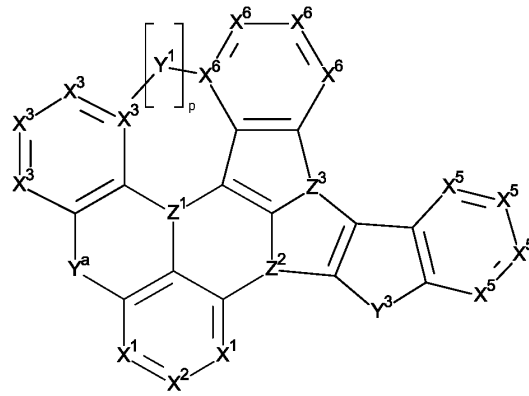
50

【化 1 0 - 1 8】



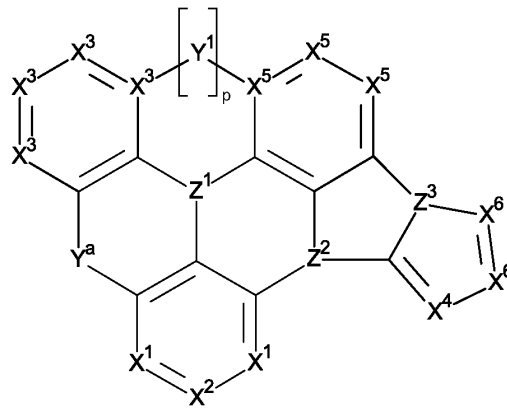
式 (III d-7)

10



式 (III d-8)

20



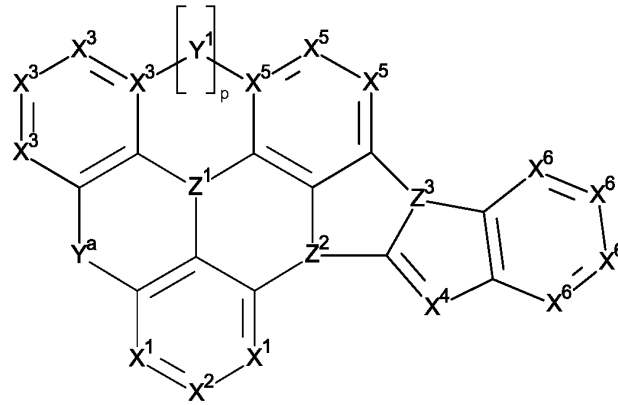
式 (III d-9)

30

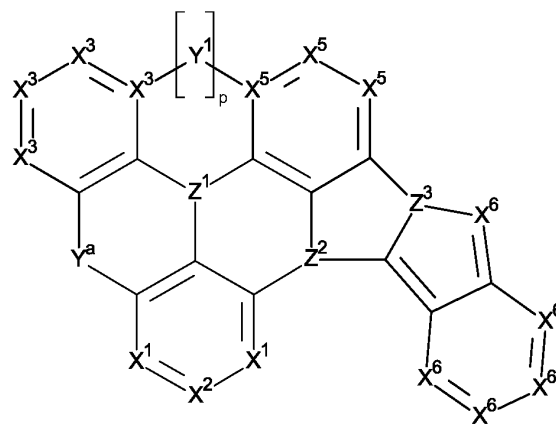
40

50

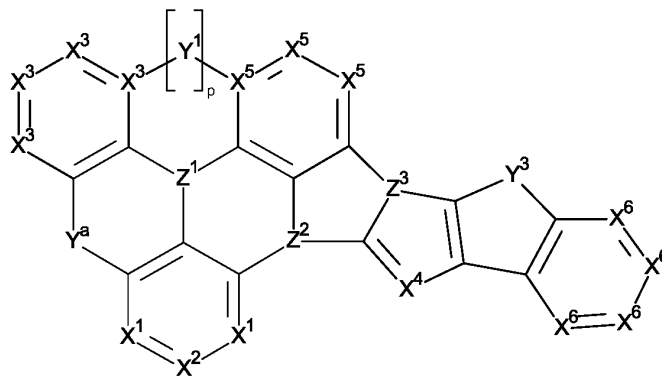
【化 1 0 - 1 9】



式 (III d-10)



式 (III d-11)



式 (III d-12)

10

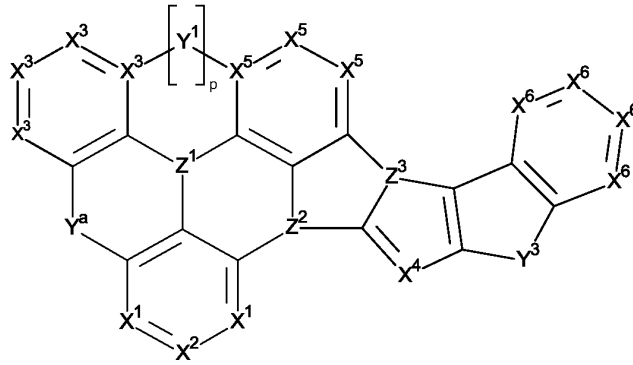
20

30

40

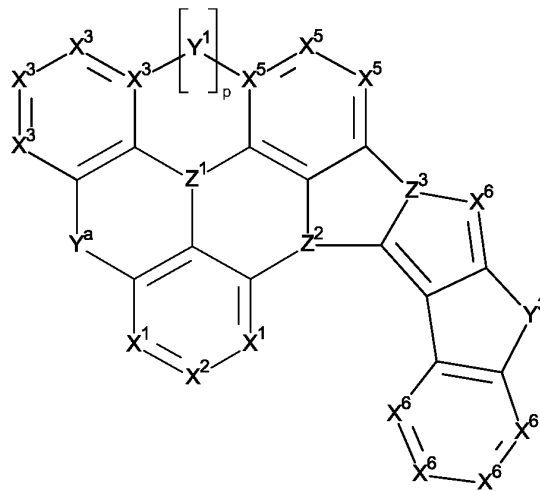
50

【化 1 0 - 2 0】



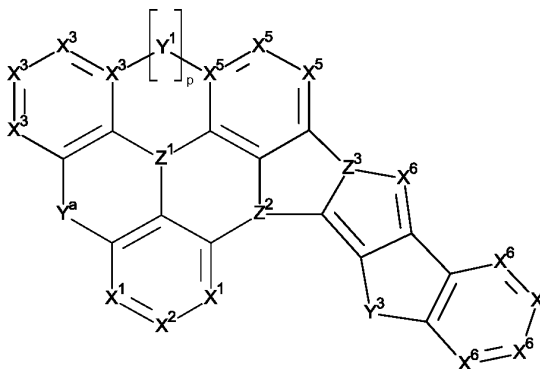
式 (III d-13)

10



式 (III d-14)

20



式 (III d-15)

30

40

ここで、記号 Z^1 、 Z^2 、 Y 、 X^1 、 X^2 および X^3 は、上記、特に式 (I)、に記載の意味を有し、記号 Z^3 、 X^4 、 X^5 および X^6 は、上記、特に式 (II - 1) ~ (II - 4)、に記載の意味を有し、記号 Z^4 、 X^7 および Y^a は、上記、特に式 (II a - 1) ~ (II d - 4)、に記載の意味を有し、記号 p 、 Y^1 、 Y^3 は、上記、特に式 (III - 1) ~ (III - 15)、に記載の意味を有し、さらなる記号は以下に記載のとおりである：

q は、0 または 1 であり、ここで、 $q = 0$ は、 Y^2 基が存在しないことを意味し；

Y^2 は、出現毎に同一であるかまたは異なり、結合、 $N(Ar')$ 、 $N(R)$ 、 $P(Ar')$ 、 $P(R)$ 、 $P(=O)Ar'$ 、 $P(=O)R$ 、 $P(=S)Ar'$ 、 $P(=S)R$ 、 50

B (Ar'), B (R), Al (Ar'), Al (R), Ga (Ar'), Ga (R), C = O, C (R)₂, Si (R)₂, C = NR, C = NAr', C = C (R)₂, O, S, Se, S = O, または SO₂ であり、好ましくは、結合、N (Ar'), N (R), B (Ar'), B (R), P (=O)R, P (=O)Ar', C = O, C (R)₂, Si (R)₂, O, S, Se, S = O, または SO₂ であり、より好ましくは、C (R)₂, Si (R)₂, O, S, N (Ar') または B (Ar') であり、ここで、記号 R および Ar' は、上記、特に式 (I)、に記載の意味を有する。

【0047】

好ましくは、式 (II Ia - 2)、(II Ia - 3)、(II Ia - 4)、(II Ia - 5)、(II Ia - 7)、(II Ia - 8)、(II Ia - 10)、(II Ib - 2)、(II Ib - 3)、(II Ib - 4)、(II Ib - 5)、(II Ib - 7)、(II Ib - 8)、(II Ib - 10)、(II Id - 2)、(II Id - 3)、(II Id - 4)、(II Id - 5)、(II Id - 7)、(II Id - 8) および (II Id - 10) の構造 / 化合物である

【0048】

好ましくは、式 (I)、(II - 1) ~ (II - 4)、(II a - 1) ~ (II d - 4)、(III - 1) ~ (III - 15) および / または (II Ia - 1) ~ (II Id - 15) において、4 以下、好ましくは 2 以下の、X¹、X²、X³、X⁴、X⁵、X⁶ および X⁷ 基が N であり、より好ましくは X¹、X²、X³、X⁴、X⁵、X⁶ および X⁷ 基の全てが CR、CR^a、CR^b、R^c、R^d、R^e、R^f、R^g であるか、または X¹、X⁵ および X⁶ 基のケースにおいて、X¹、X⁵ および X⁶ 基が結合を介して環系を形成する場合に C であってよい。

【0049】

実施例に示されるように、本発明の化合物の調製のためのいくつかのプロセスは、混合物を利用してよく、これによって、通常、広い発光スペクトルとなり、それゆえ、好ましくない。この理由で、これらの混合物を分離してもよい。狭い発光スペクトルの利点は、実施例に示されるように、適切な置換によって達成される。この場合、特に、X⁴ または X⁵ 位での置換が好適である。さらに、この利点は、この位置の X⁴ または X⁵ が N であることによって達成することができる。

【0050】

好ましくは、X⁴ 基が N であるか、または X⁴ 基が R^d であり、R^d が H または D であり、好ましくは 1 ~ 40 の炭素原子を有する、直鎖のアルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基または 2 ~ 40 の炭素原子を有する、アルケニルもしくはアルキニル基または 3 ~ 20 の炭素原子を有する、分岐もしくは環状のアルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基 (ここで、アルキル、アルコキシ、チオアルコキシ、アルケニル、またはアルキニル基が、それぞれのケースにおいて、1 以上の R¹ ラジカルによって置換されていてもよく、ここで、1 以上の隣接しない CH₂ 基が、R¹C = CR¹、C - C、Si (R¹)₂、C = O、C = S、C = Se、C = NR¹、- C (=O)O -、- C (=O)NR¹ -、NR¹、P (=O) (R¹)、- O -、- S -、SO または SO₂ によって置き換えられていてもよい)、または 5 ~ 60 の芳香族環原子を有し、それぞれのケースにおいて 1 以上の R¹ ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族もしくはヘテロ芳香族環系、または 5 ~ 60 の芳香族環原子を有し、1 以上の R¹ ラジカルによって置換されていてもよい、アリーロキシもしくはヘテロアリーロキシ基であるケースであってよい。さらに好ましくは、X⁴ 基が N であるケースであってよい。

【0051】

さらに、少なくとも 1 つの X⁵ 基が N であるか、またはすくなくとも 1 つの X⁵ 基が R^e であり、R^e が H または D ではなく、好ましくは 1 ~ 40 の炭素原子を有する、直鎖のアルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基または 2 ~ 40 の炭素原子を有する、アルケニルもしくはアルキニル基または 3 ~ 20 の炭素原子を有する、分岐もしくは環状のアルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基 (ここで、アルキル、アルコキシ、チオア

ルコキシ、アルケニルもしくはアルキニル基は、それぞれのケースにおいて、 R^1 ラジカルによって置換されていてもよく、ここで、1以上の隣接しない CH_2 基が、 $R^1C=C$
 R^1 、 $C-C$ 、 $Si(R^1)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^1$ 、 $-C(=O)$
 $O-$ 、 $-C(=O)NR^1-$ 、 NR^1 、 $P(=O)(R^1)$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 SO または
 SO_2 によって置き換えられていてもよい)、または5~60の芳香族環原子を有し、
それぞれのケースにおいて1以上の R^1 ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族
もしくはヘテロ芳香族環系、または5~60の芳香族環原子を有し、1以上の R^1 ラジカル
によって置換されていてもよい、アリーロキシもしくはヘテロアリーロキシ基であ
るケースであってよい。好ましくは、 X^5 基(これは、 N または CR^e であり、 R^e が H
または D である)が、 Z^2 基に対してオルト位に存在する。好ましくは、さらに、 X^5 基
が N であり、 N である X^5 基が、好ましくは、 Z^2 基に対してオルト位に存在するケース
である。

10

【0052】

さらに好ましい形態において、本発明の化合物が、式(IV-1)~(IV-28)の
構造を含むケースであってよく、ここで、本発明の化合物が、より好ましくは、式(IV
-1)~(IV-28)の化合物から選択される。

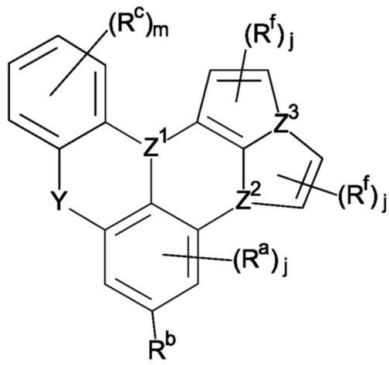
20

30

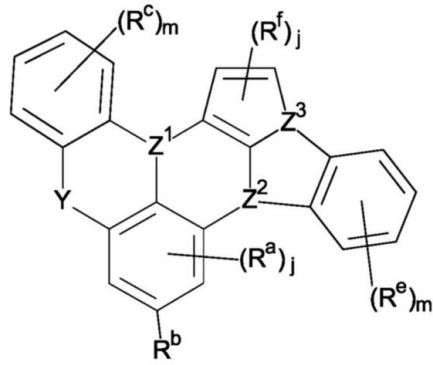
40

50

【化 1 1 - 1】

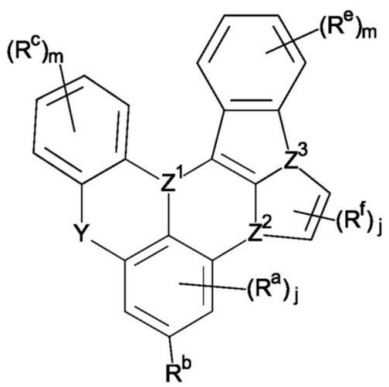


式 (IV-1)

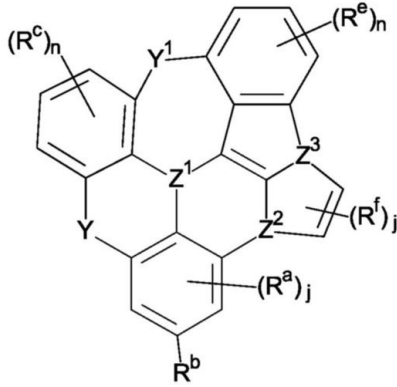


式 (IV-2)

10

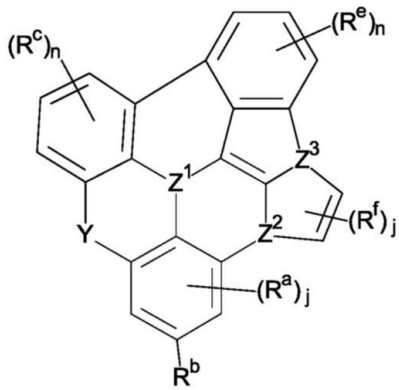


式 (IV-3)

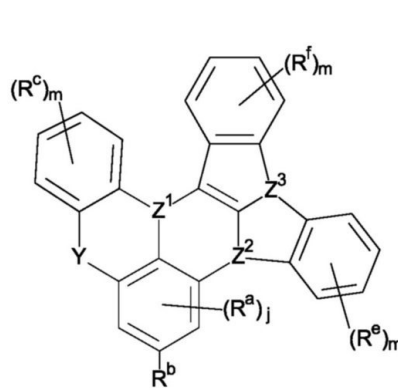


式 (IV-4)

20



式 (IV-5)



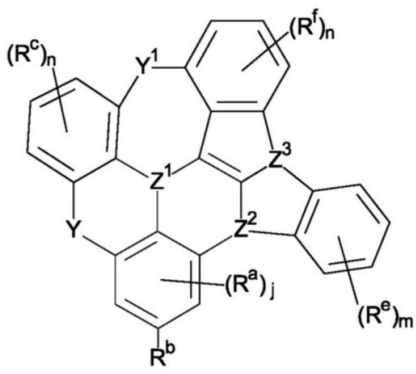
式 (IV-6)

30

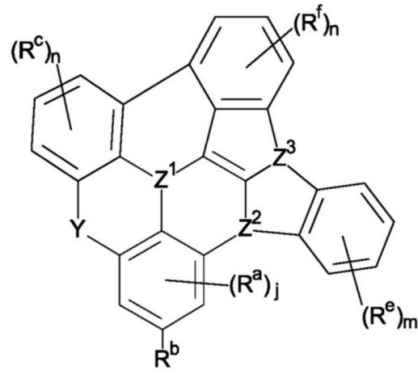
40

50

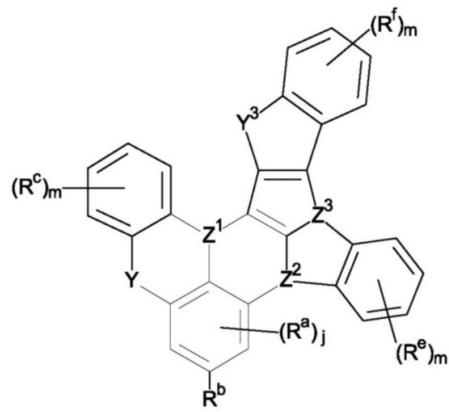
【化 1 1 - 2】



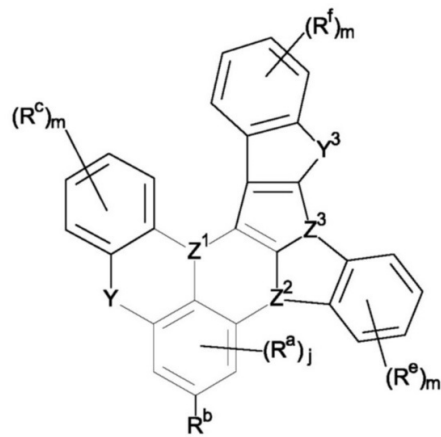
式 (IV-7)



式 (IV-8)



式 (IV-9)



式 (IV-10)

10

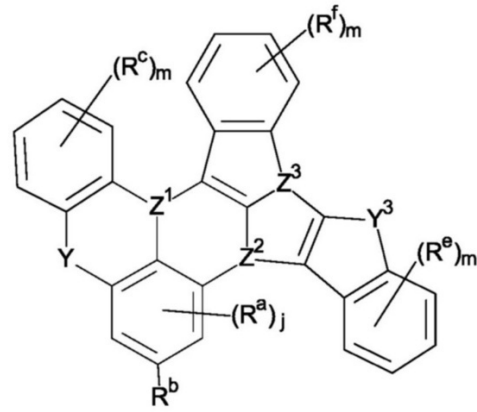
20

30

40

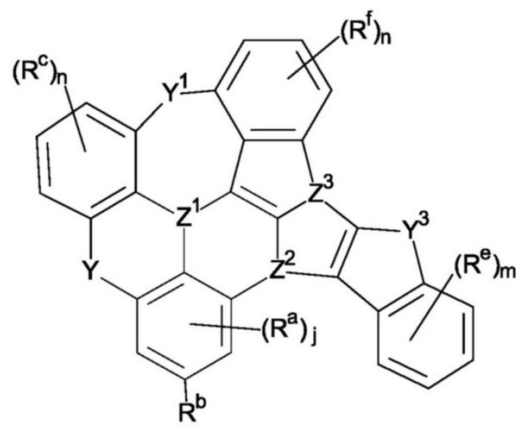
50

【化 1 1 - 3】



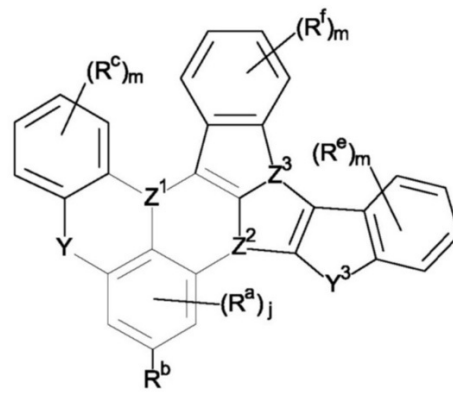
式 (IV-11)

10



式 (IV-12)

20



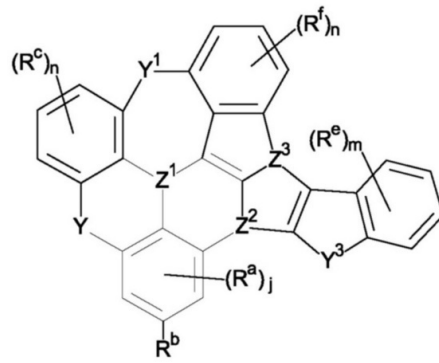
式 (IV-13)

30

40

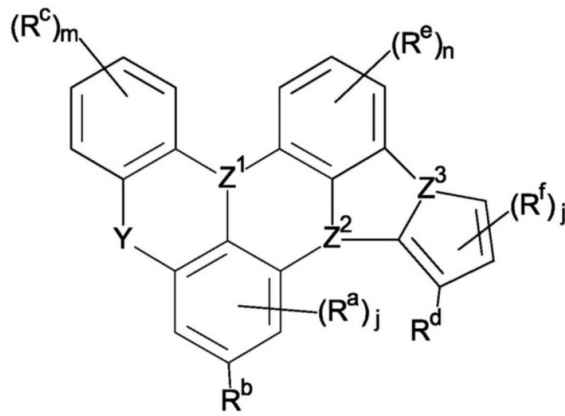
50

【化 1 1 - 4】



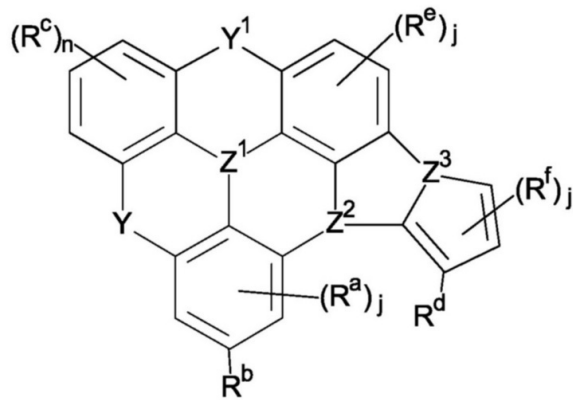
式 (IV-14)

10



式 (IV-15)

20



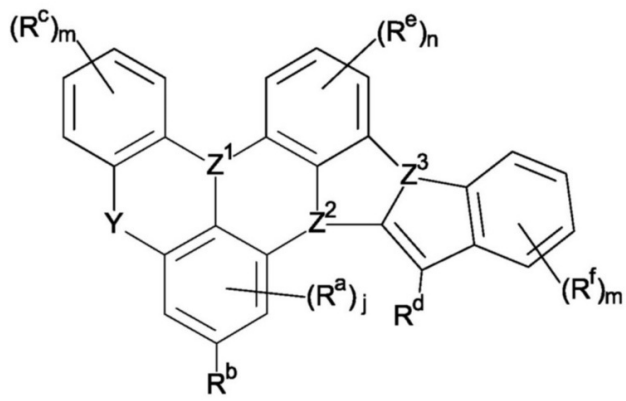
式 (IV-16)

30

40

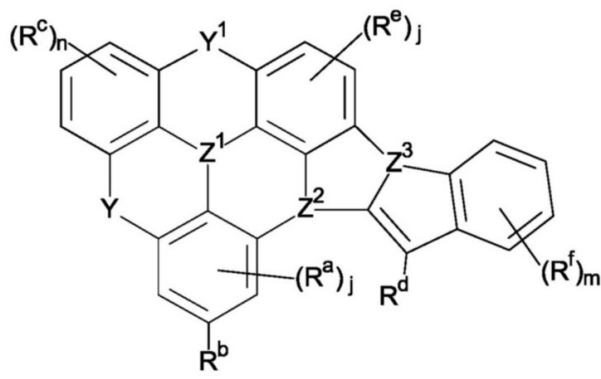
50

【化 1 1 - 5】



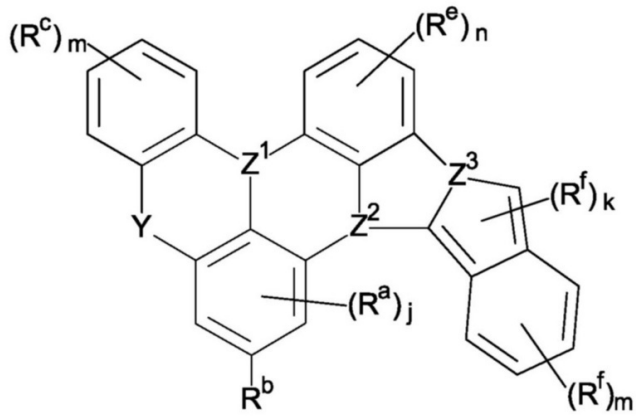
式 (IV-17)

10



式 (IV-18)

20



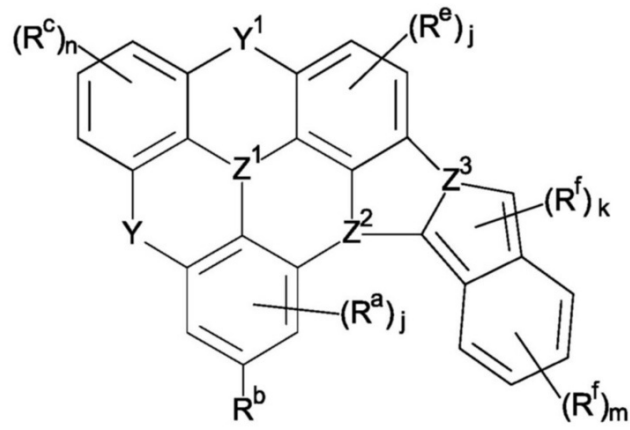
式 (IV-19)

30

40

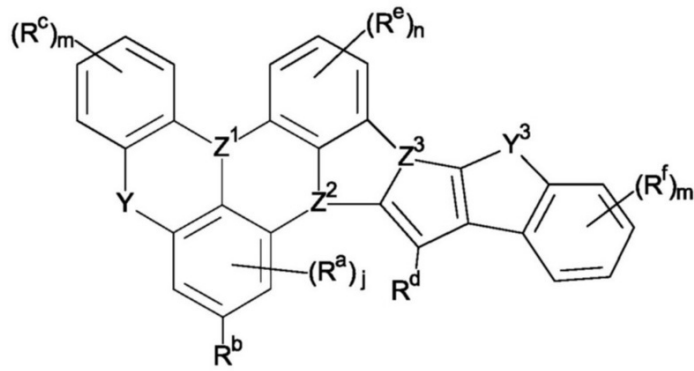
50

【化 1 1 - 6】



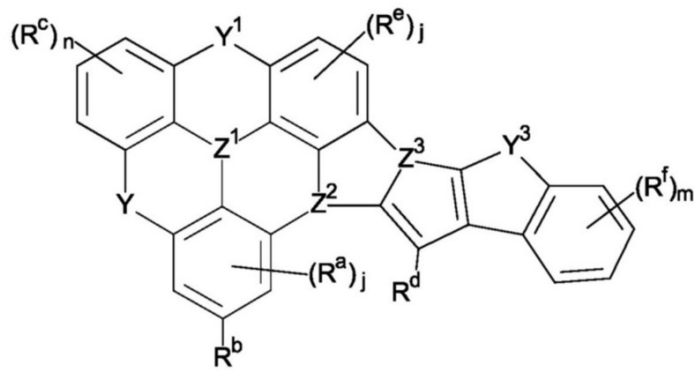
式 (IV-20)

10



式 (IV-21)

20



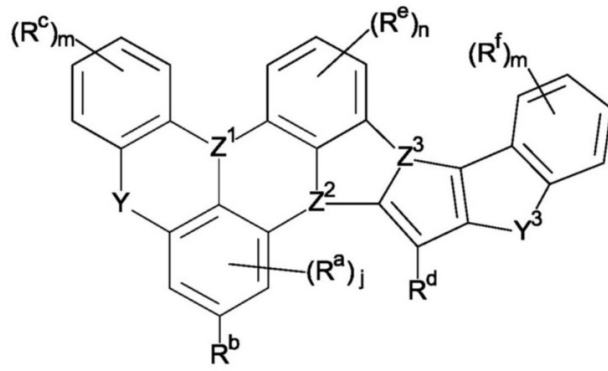
式 (IV-22)

30

40

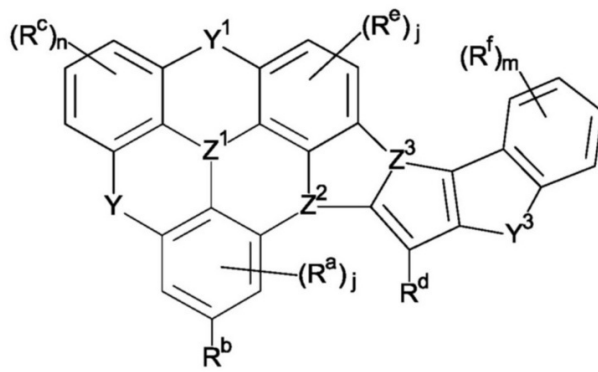
50

【化 1 1 - 7】



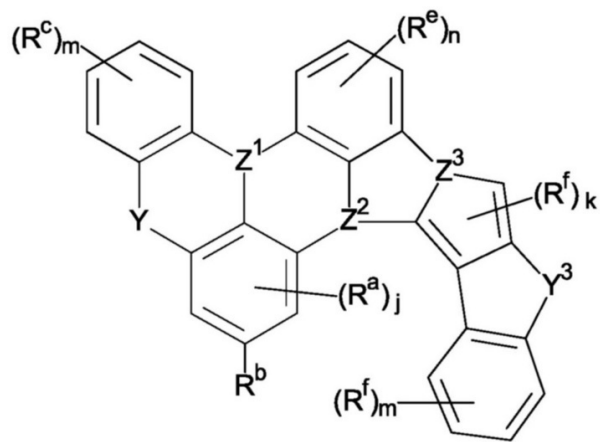
式 (IV-23)

10



式 (IV-24)

20



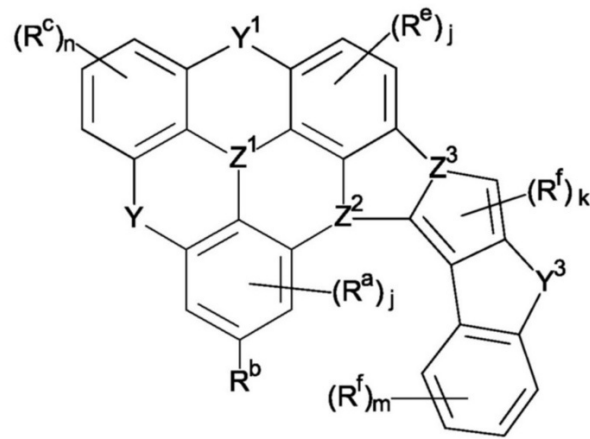
式 (IV-25)

30

40

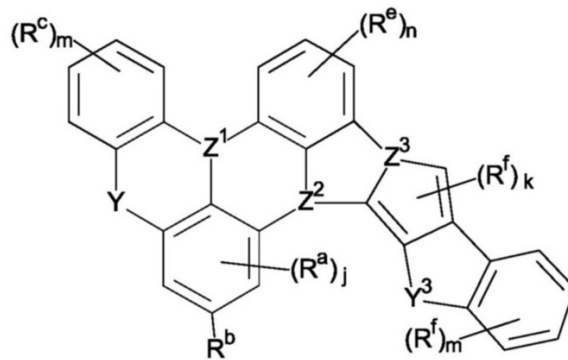
50

【化 1 1 - 8】



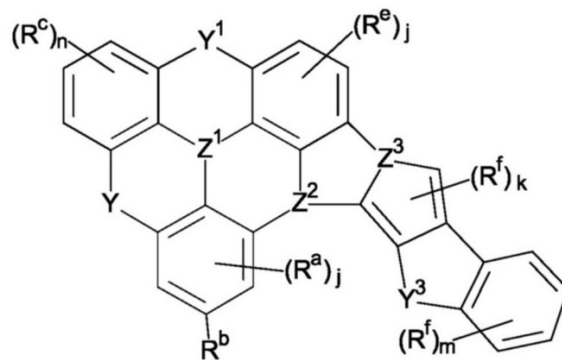
式 (IV-26)

10



式 (IV-27)

20



式 (IV-28)

30

40

ここで、記号 Z^1 、 Z^2 、 Y 、 R^a 、 R^b および R^c は、上記、特に式 (I)、に記載の意味を有し、記号 Z^3 、 R^d 、 R^e および R^f は、上記、特に式 (II-1) ~ (II-4)、に記載の意味を有し、記号 R^g は、上記、特に式 (IIa-1) ~ (II d-4)、に記載の意味を有し、記号 Y^1 および Y^3 は、上記、特に式 (III-1) ~ (III-15)、に記載の意味を有し、さらなる記号は以下に記載のとおりである：

m は、0、1、2、3 または 4 であり、好ましくは 0、1 または 2 であり；

n は、0、1、2 または 3 であり、好ましくは 0、1 または 2 であり；

j は、0、1 または 2 であり、好ましくは 0 または 1 であり；

k は、0 または 1 である。

50

【0053】

好ましくは、式(IV-6)、(IV-9)、(IV-11)、(IV-13)、(IV-17)、(IV-18)、(IV-21)および(IV-22)の構造/化合物である。

【0054】

さらに好ましい形態において、本発明の化合物は、式(IVa-1)~(IVa-28)、(IVb-1)~(IVb-28)、(IVc-1)~(IVc-28)、(IVd-1)~(IVd-28)、(IVe-1)~(IVe-28)および/または(IVf-1)~(IVf-28)の構造を含むケースであってよく、ここで、本発明の化合物は、より好ましくは、式(IVa-1)~(IVa-28)、(IVb-1)~(IVb-28)、(IVc-1)~(IVc-28)、(IVd-1)~(IVd-28)、(IVe-1)~(IVe-28)および/または(IVf-1)~(IVf-28)の化合物から選択されてもよい。

10

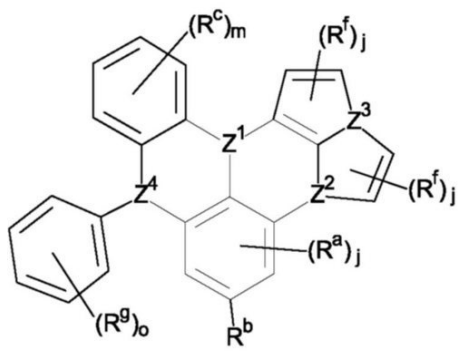
20

30

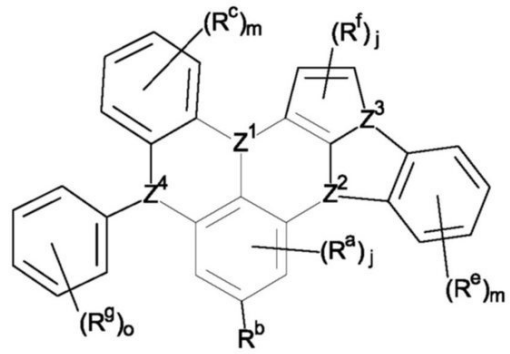
40

50

【化 1 2 - 1】

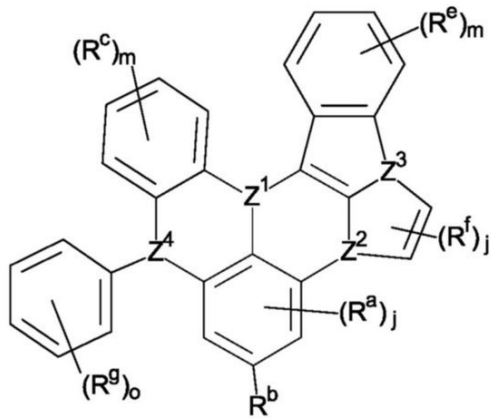


式 (IVa-1)

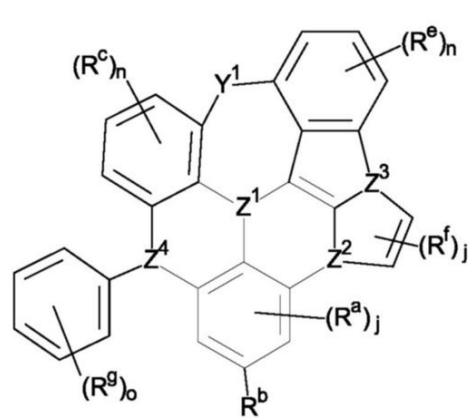


式 (IVa-2)

10

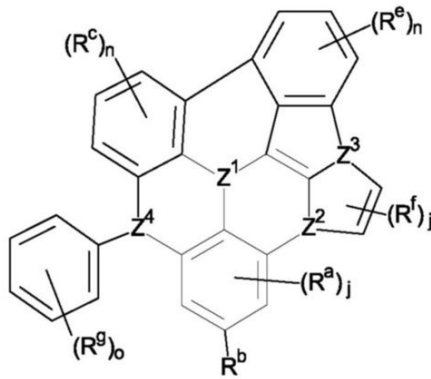


式 (IVa-3)

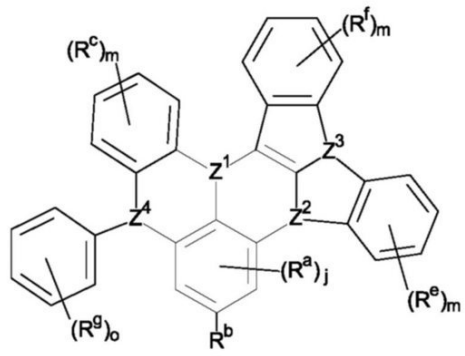


式 (IVa-4)

20



式 (IVa-5)



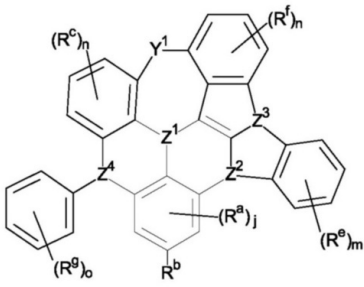
式 (IVa-6)

30

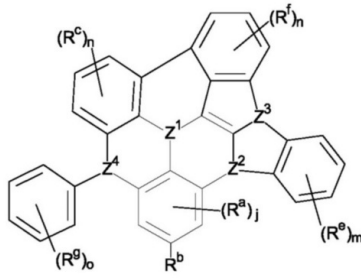
40

50

【化 1 2 - 2】

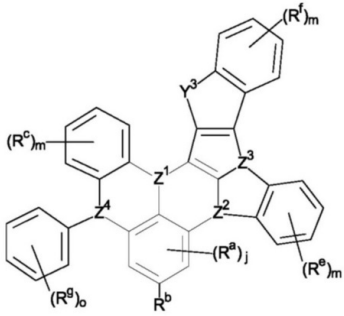


式 (IVa-7)

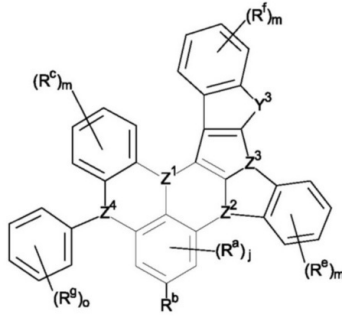


式 (IVa-8)

10

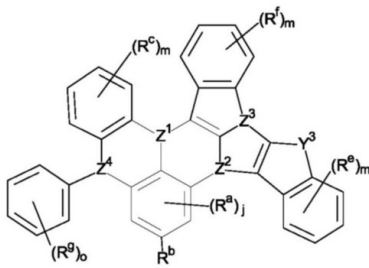


式 (IVa-9)

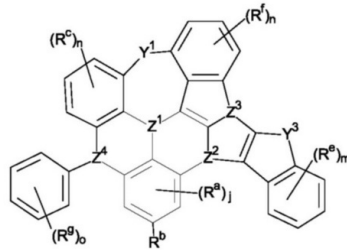


式 (IVa-10)

20

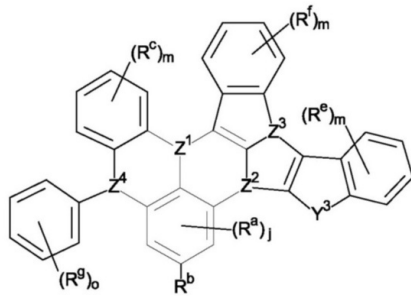


式 (IVa-11)



式 (IVa-12)

30

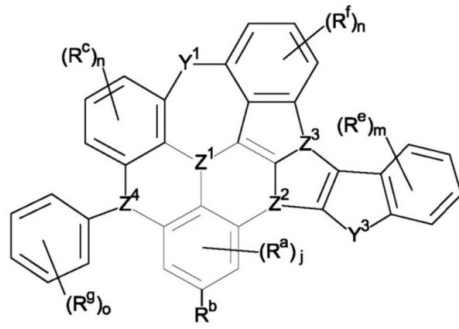


式 (IVa-13)

40

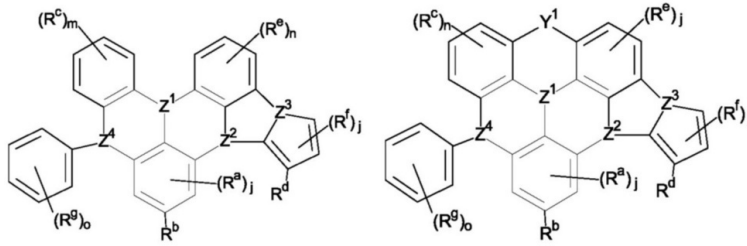
50

【化 1 2 - 3】



式 (IVa-14)

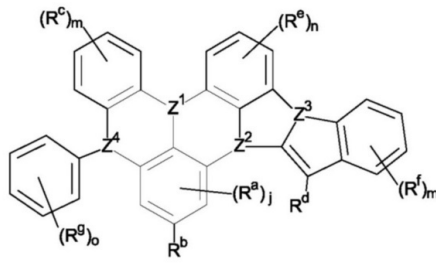
10



式 (IVa-15)

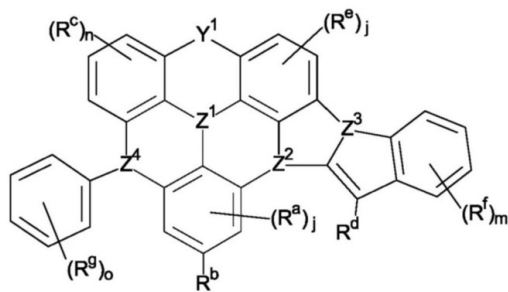
式 (IVa-16)

20



式 (IVa-17)

30

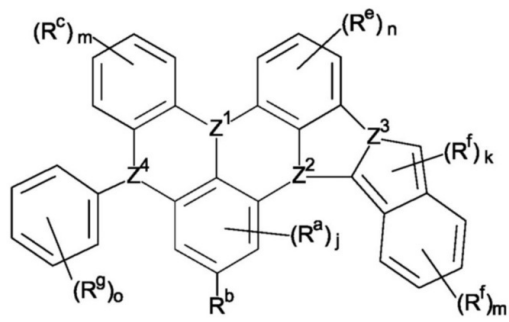


式 (IVa-18)

40

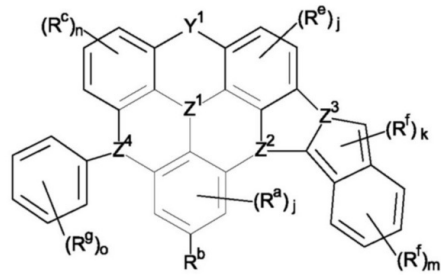
50

【化 1 2 - 4】



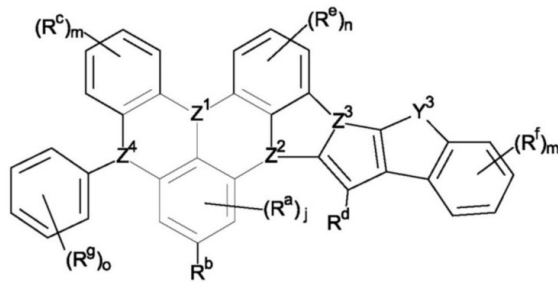
式 (IVa-19)

10



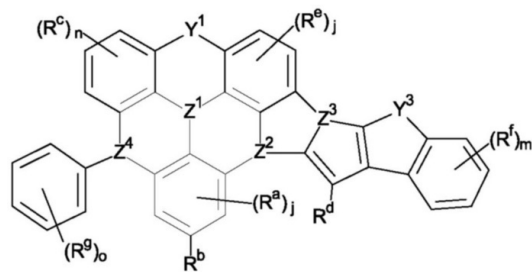
式 (IVa-20)

20



式 (IVa-21)

30

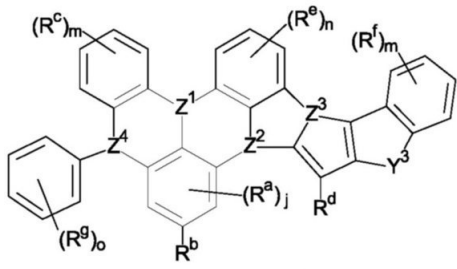


式 (IVa-22)

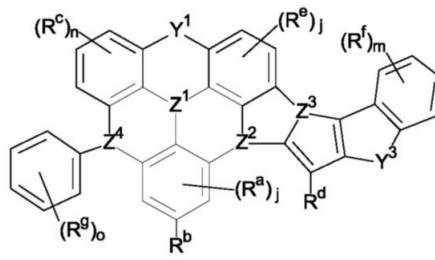
40

50

【化 1 2 - 5】

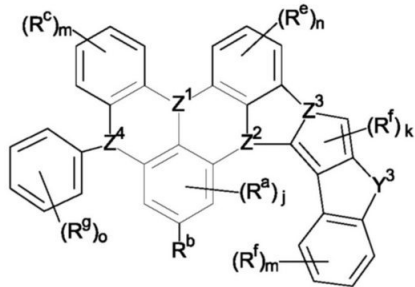


式 (IVa-23)

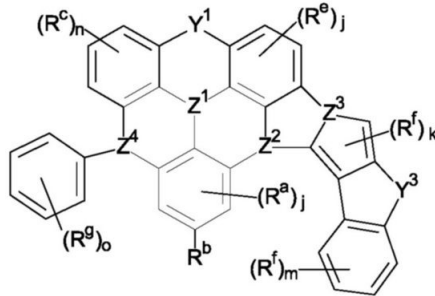


式 (IVa-24)

10

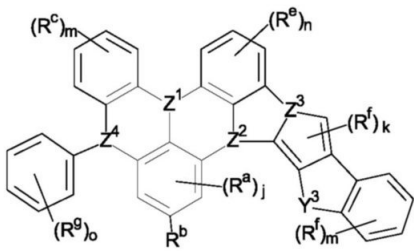


式 (IVa-25)

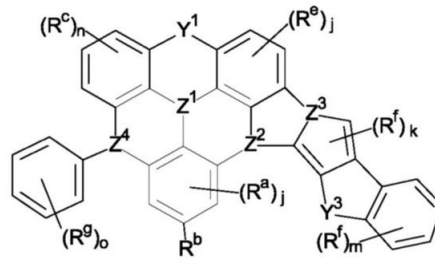


式 (IVa-26)

20

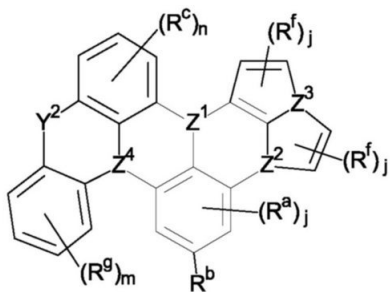


式 (IVa-27)

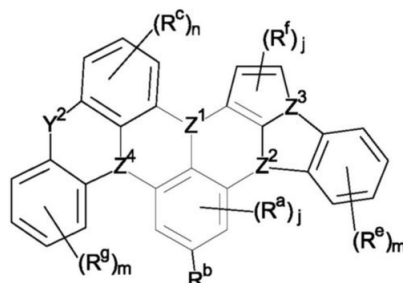


式 (IVa-28)

30



式 (IVb-1)

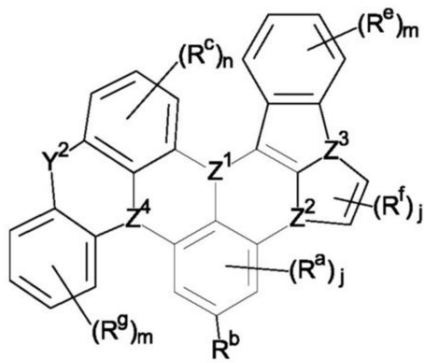


式 (IVb-2)

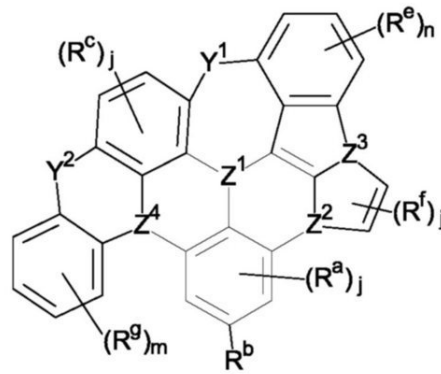
40

50

【化 1 2 - 6】

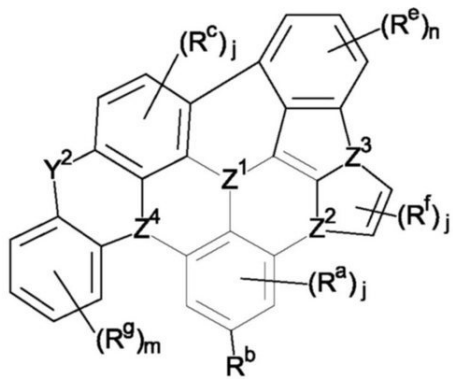


式 (IVb-3)

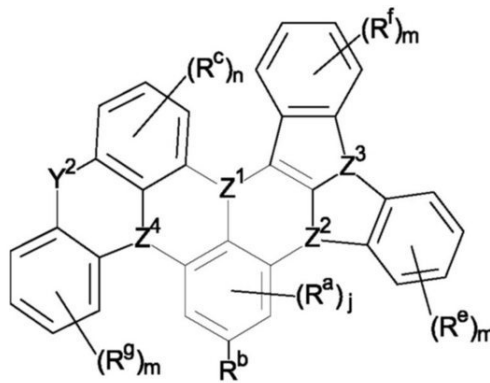


式 (IVb-4)

10

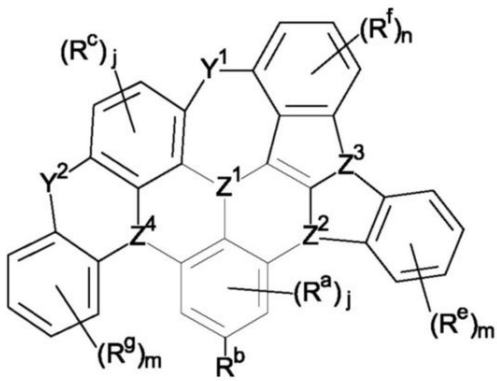


式 (IVb-5)

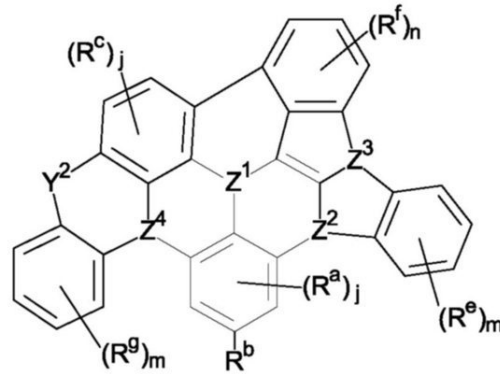


式 (IVb-6)

20



式 (IVb-7)



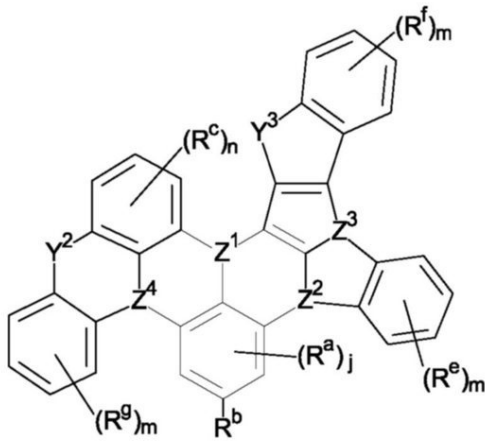
式 (IVb-8)

30

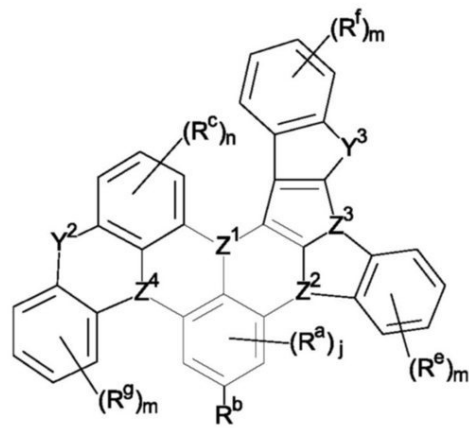
40

50

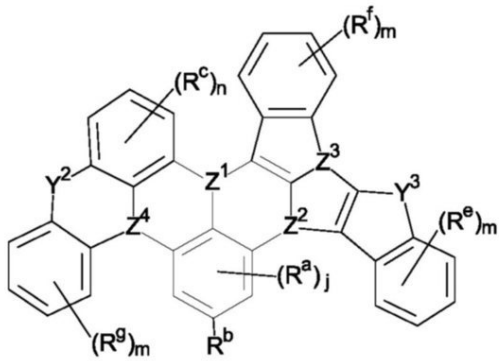
【化 1 2 - 7】



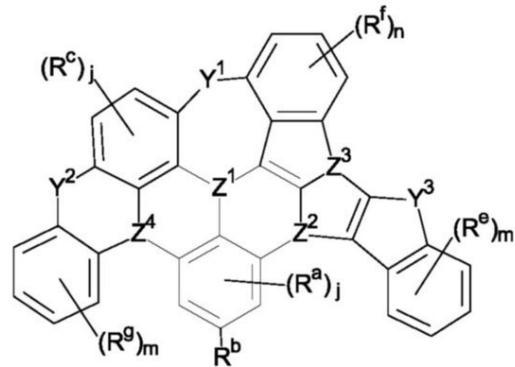
式 (IVb-9)



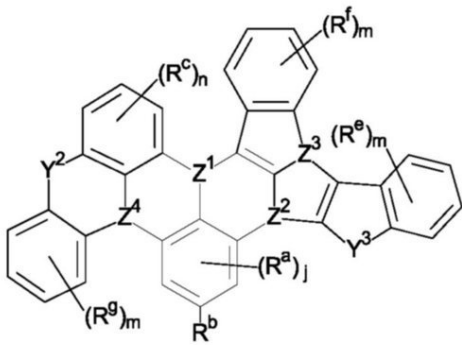
式 (IVb-10)



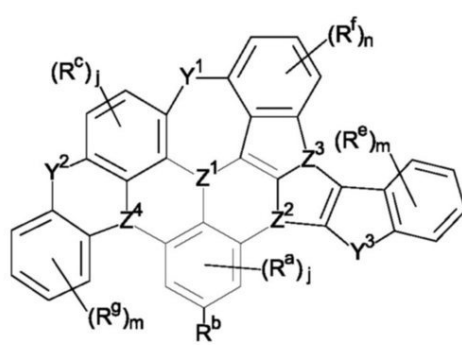
式 (IVb-11)



式 (IVb-12)



式 (IVb-13)



式 (IVb-14)

10

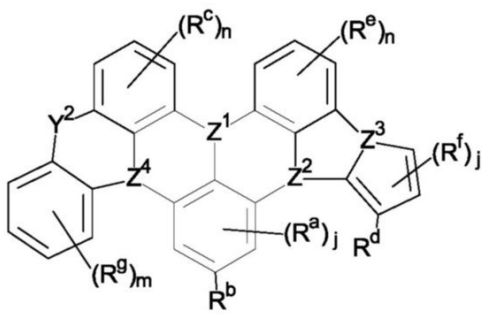
20

30

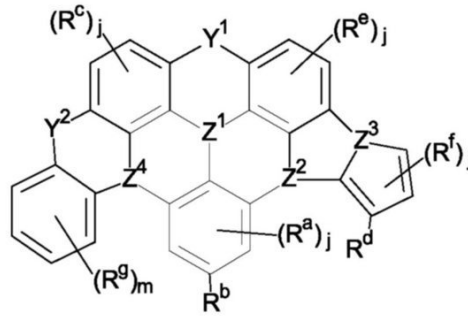
40

50

【化 1 2 - 8】

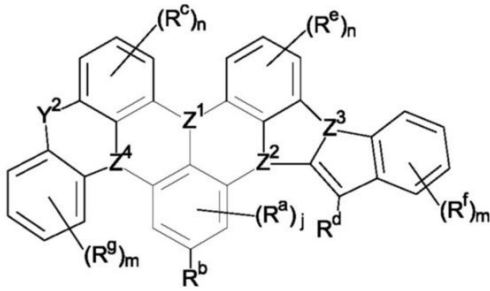


式 (IVb-15)

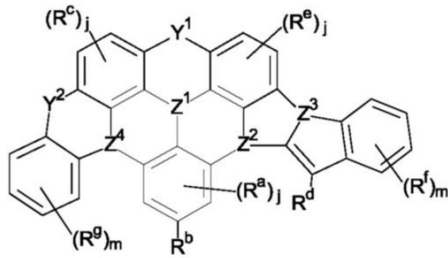


式 (IVb-16)

10

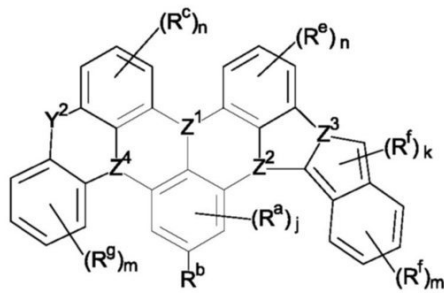


式 (IVb-17)

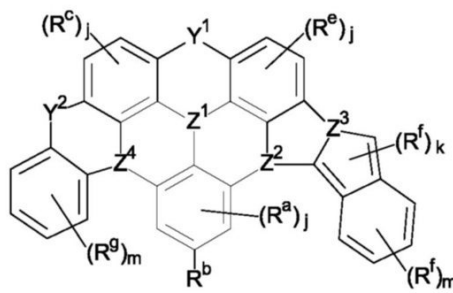


式 (IVb-18)

20



式 (IVb-19)



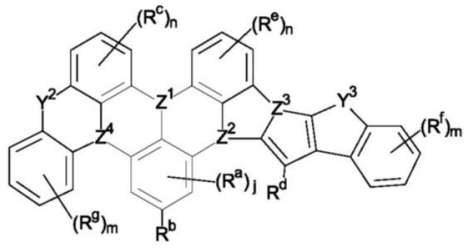
式 (IVb-20)

30

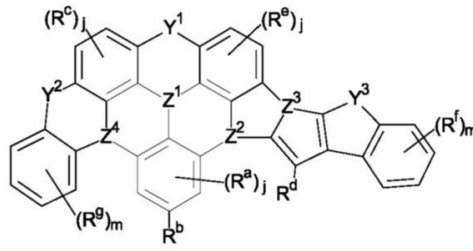
40

50

【化 1 2 - 9】

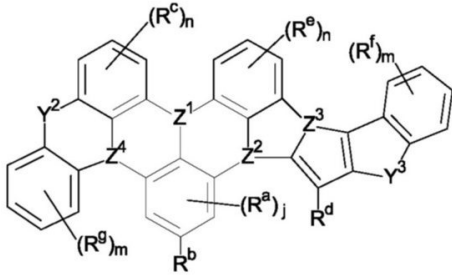


式 (IVb-21)

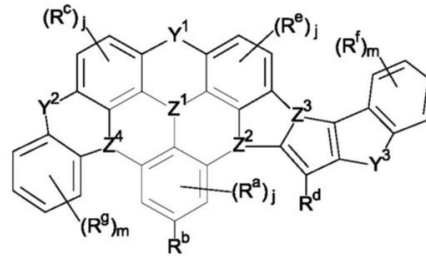


式 (IVb-22)

10

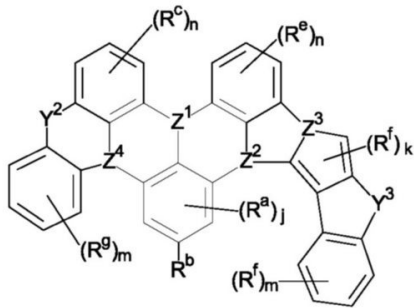


式 (IVb-23)

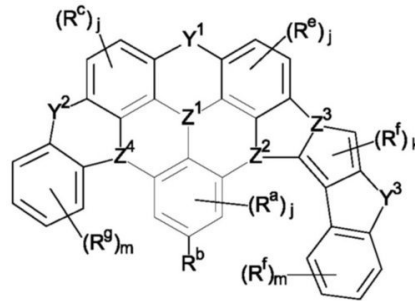


式 (IVb-24)

20

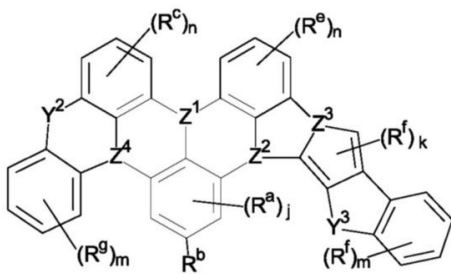


式 (IVb-25)

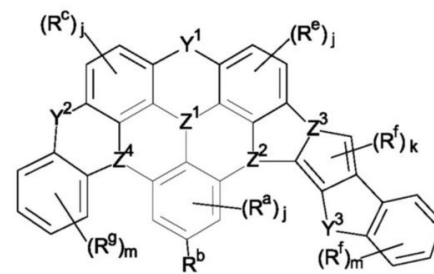


式 (IVb-26)

30



式 (IVb-27)

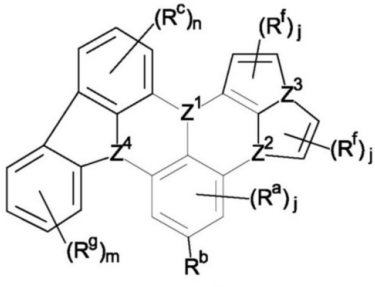


式 (IVb-28)

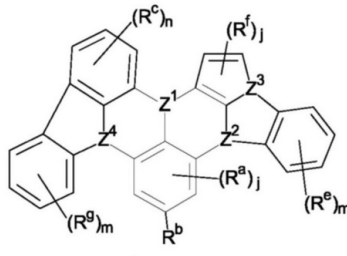
40

50

【化 1 2 - 1 0】

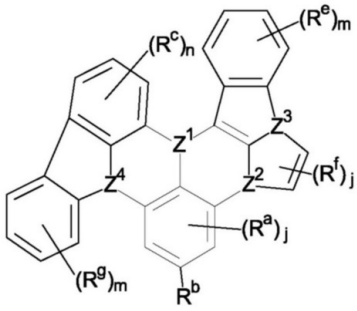


式 (IVc-1)

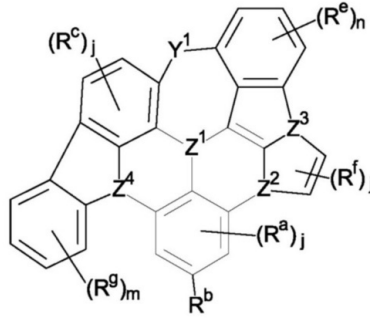


式 (IVc-2)

10

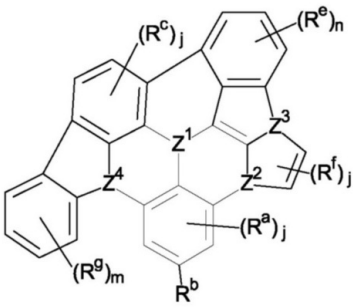


式 (IVc-3)

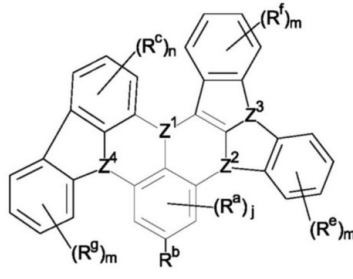


式 (IVc-4)

20

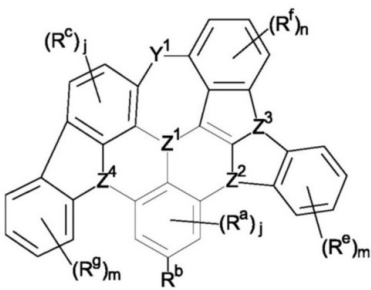


式 (IVc-5)

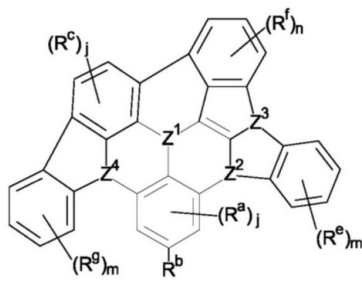


式 (IVc-6)

30



式 (IVc-7)

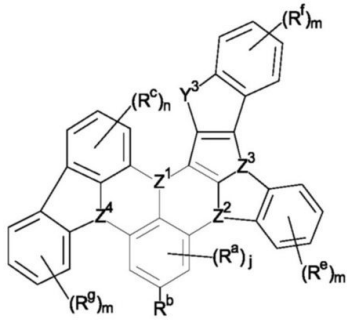


式 (IVc-8)

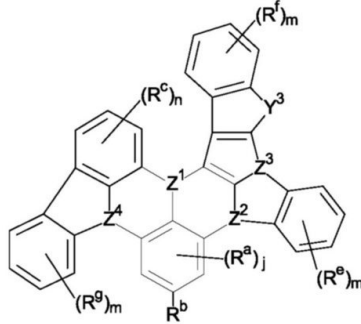
40

50

【化 1 2 - 1 1】

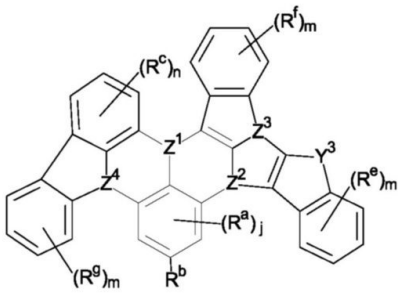


式 (IVc-9)

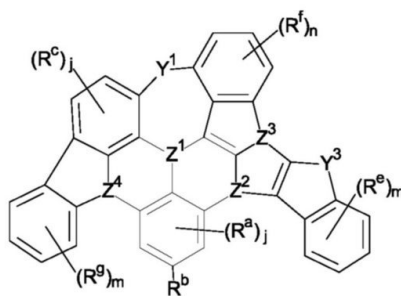


式 (IVc-10)

10

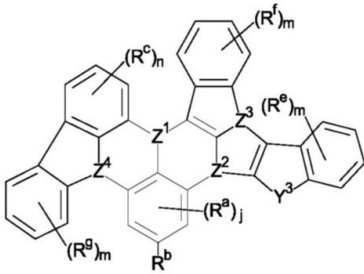


式 (IVc-11)

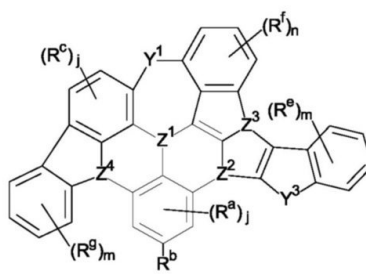


式 (IVc-12)

20

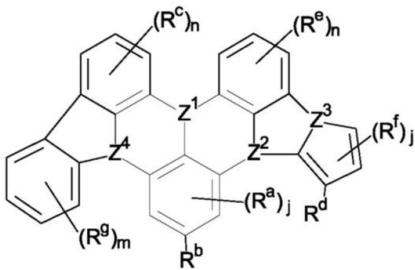


式 (IVc-13)

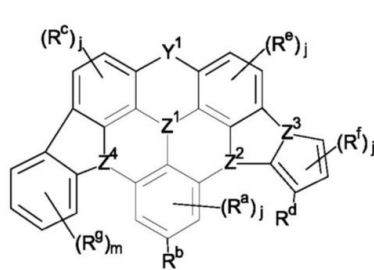


式 (IVc-14)

30



式 (IVc-15)

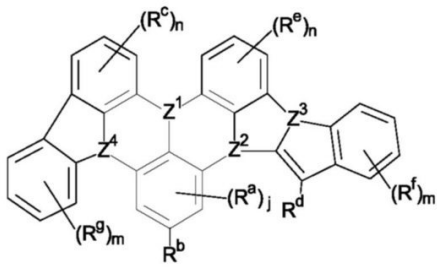


式 (IVc-16)

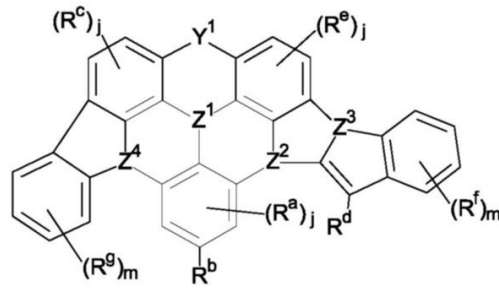
40

50

【化 1 2 - 1 2】

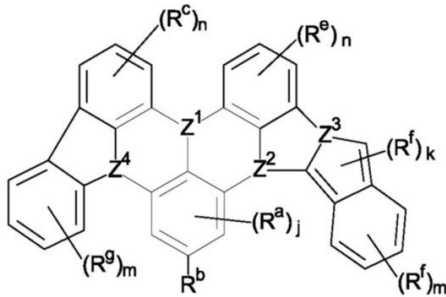


式 (IVc-17)

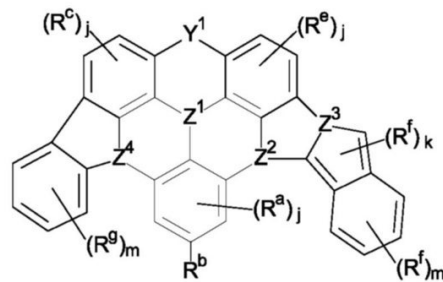


式 (IVc-18)

10

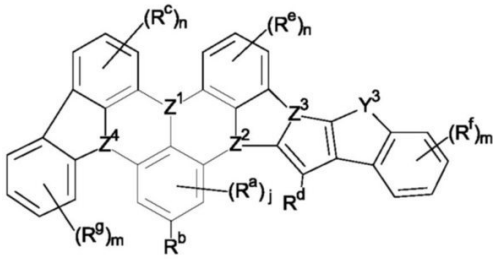


式 (IVc-19)

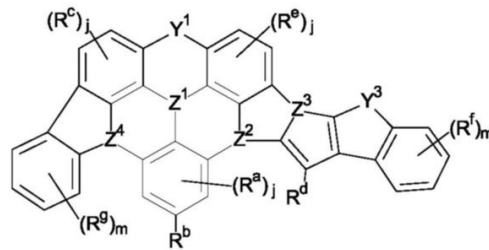


式 (IVc-20)

20

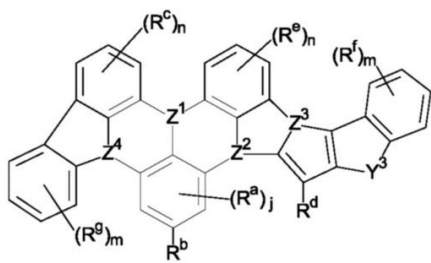


式 (IVc-21)

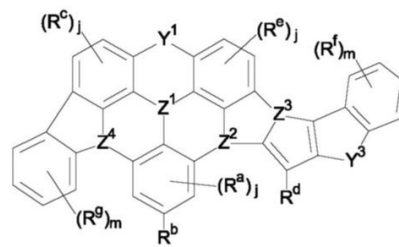


式 (IVc-22)

30



式 (IVc-23)

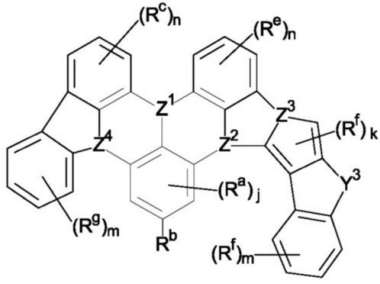


式 (IVc-24)

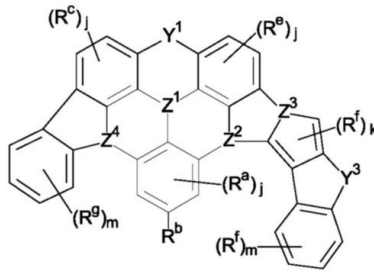
40

50

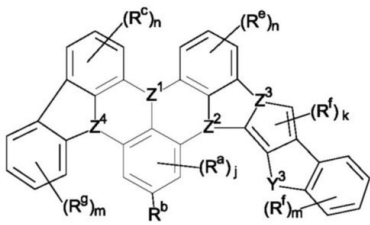
【化 1 2 - 1 3】



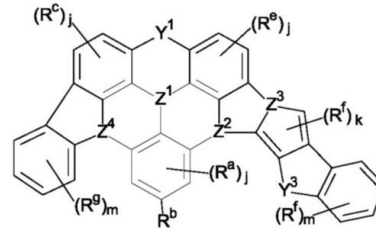
式 (IVc-25)



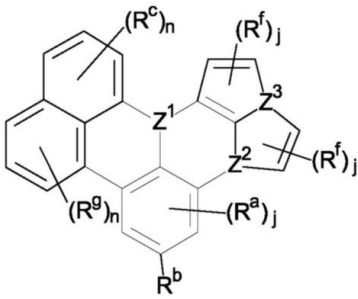
式 (IVc-26)



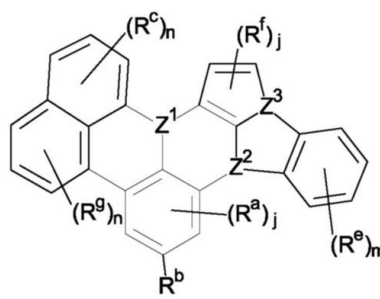
式 (IVc-27)



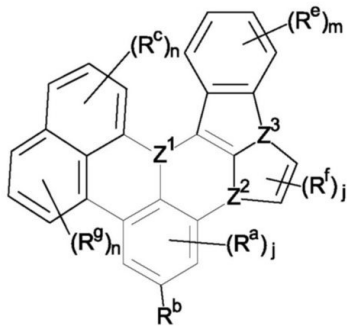
式 (IVc-28)



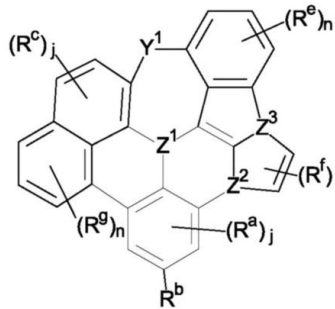
式 (IVd-1)



式 (IVd-2)



式 (IVd-3)



式 (IVd-4)

10

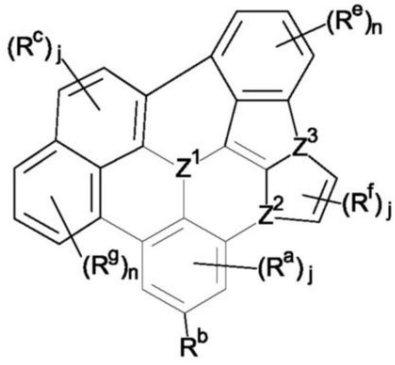
20

30

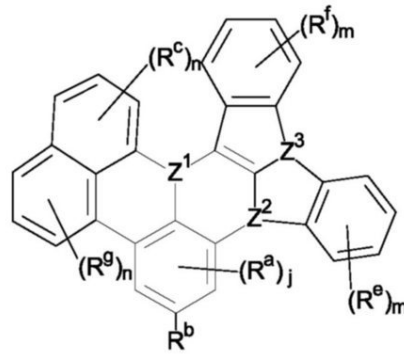
40

50

【化 1 2 - 1 4】

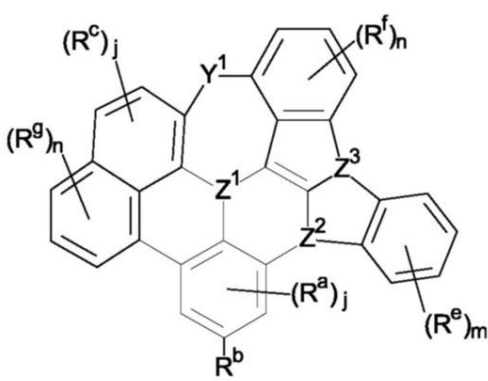


式 (IVd-5)

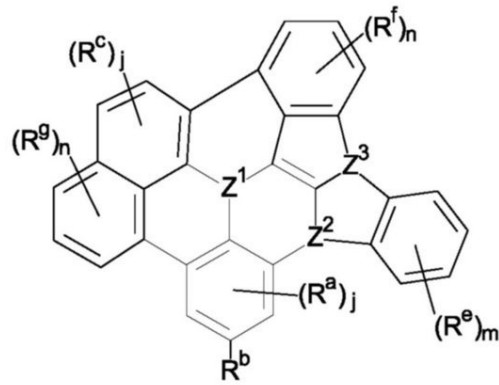


式 (IVd-6)

10

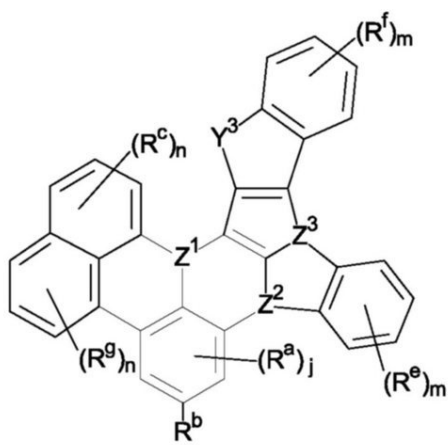


式 (IVd-7)

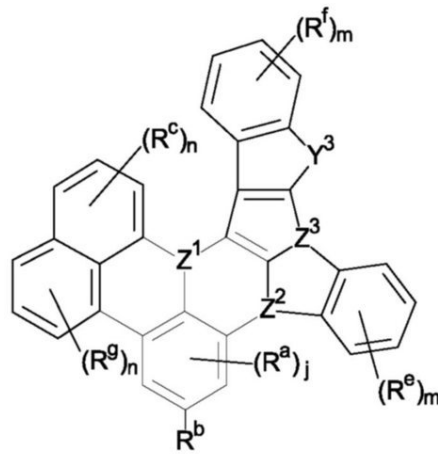


式 (IVd-8)

20



式 (IVd-9)



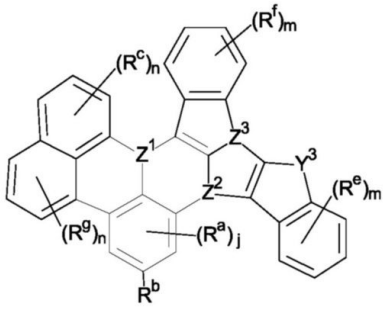
式 (IVd-10)

30

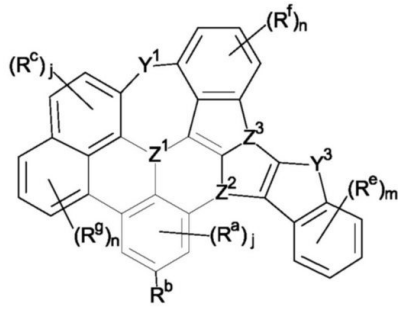
40

50

【化 1 2 - 1 5】

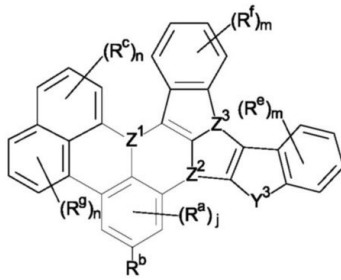


式 (IVd-11)

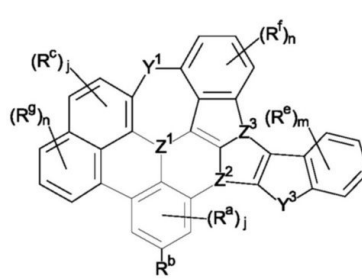


式 (IVd-12)

10

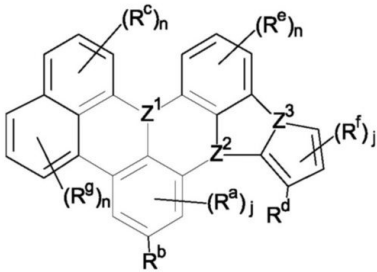


式 (IVd-13)

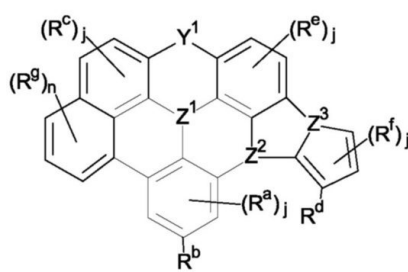


式 (IVd-14)

20

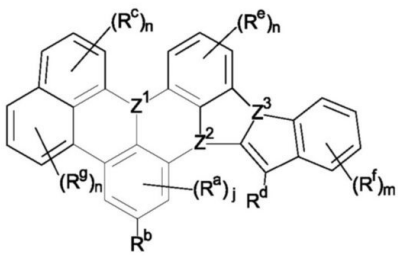


式 (IVd-15)

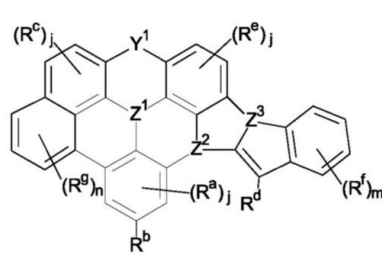


式 (IVd-16)

30



式 (IVd-17)

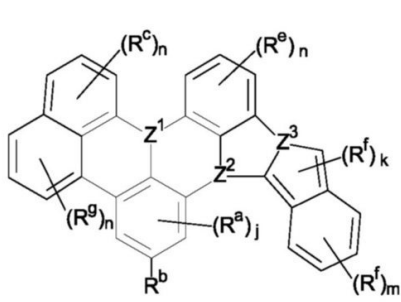


式 (IVd-18)

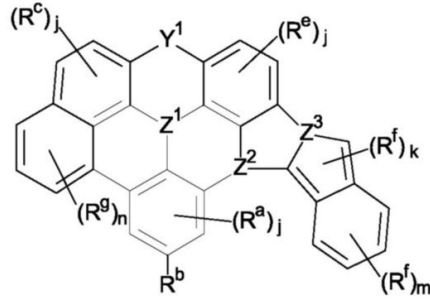
40

50

【化 1 2 - 1 6】

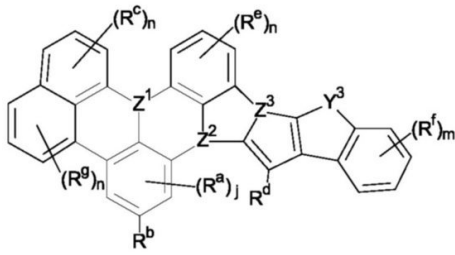


式 (IVd-19)

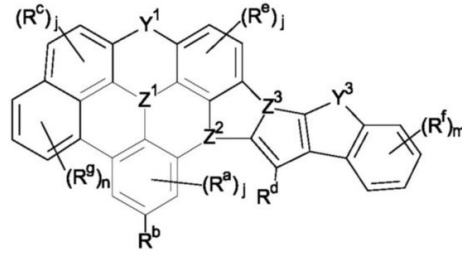


式 (IVd-20)

10

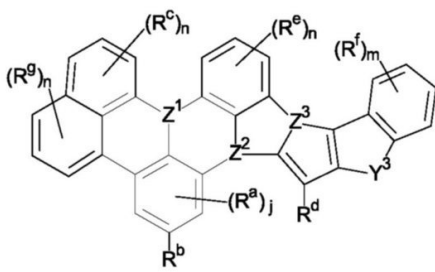


式 (IVd-21)

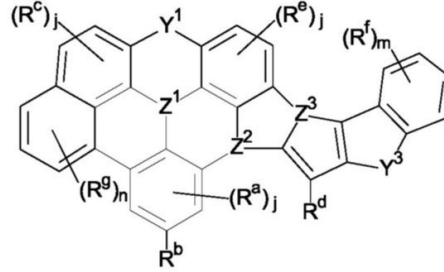


式 (IVd-22)

20

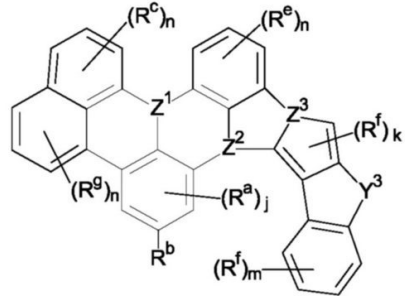


式 (IVd-23)

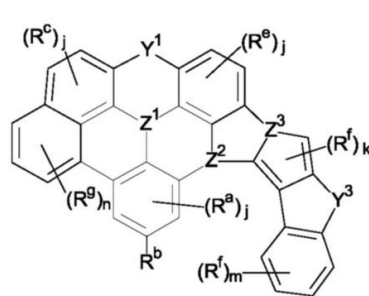


式 (IVd-24)

30



式 (IVd-25)

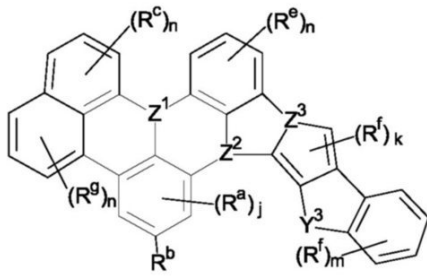


式 (IVd-26)

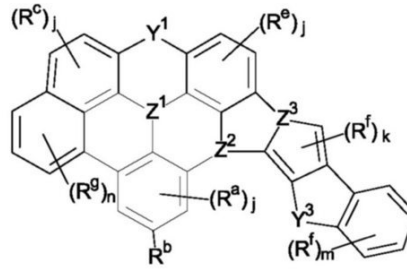
40

50

【化 1 2 - 1 7】

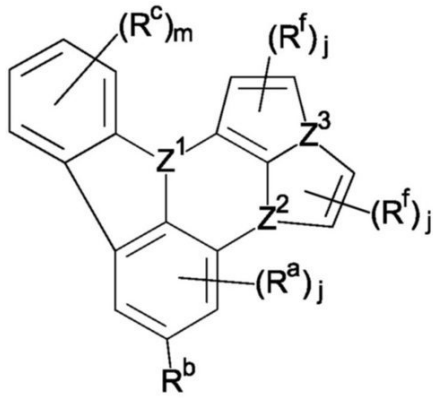


式 (IVd-27)

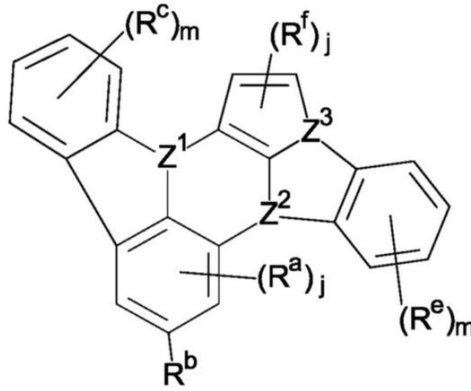


式 (IVd-28)

10

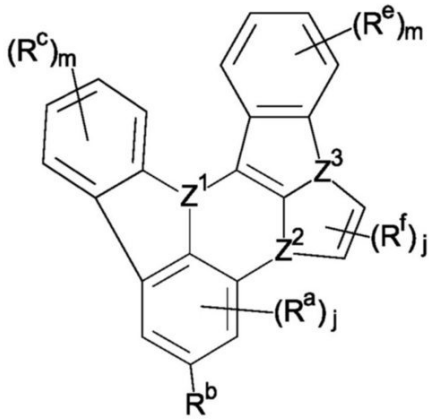


式 (IVe-1)

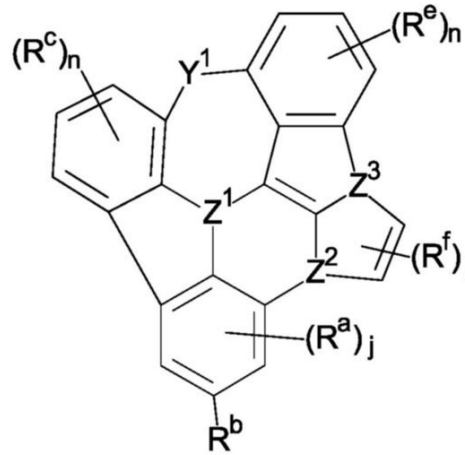


式 (IVe-2)

20



式 (IVe-3)



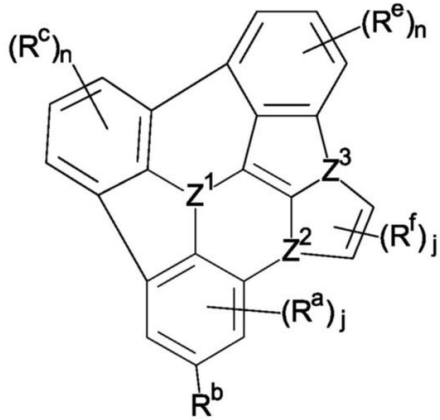
式 (IVe-4)

30

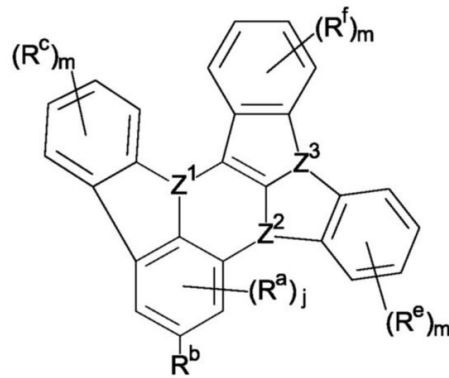
40

50

【化 1 2 - 1 8】

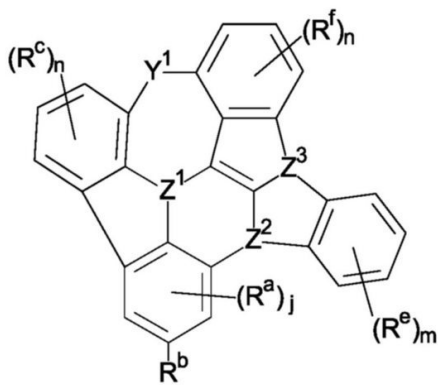


式 (Ive-5)

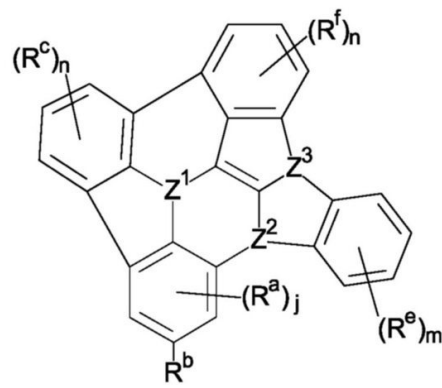


式 (Ive-6)

10

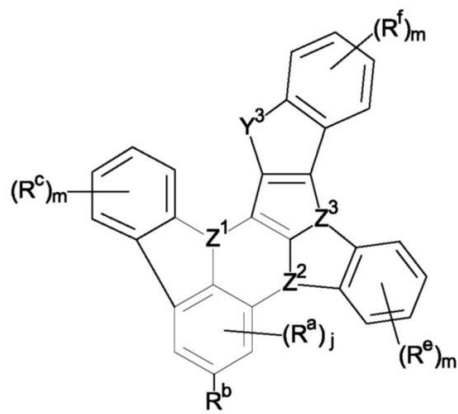


式 (Ive-7)

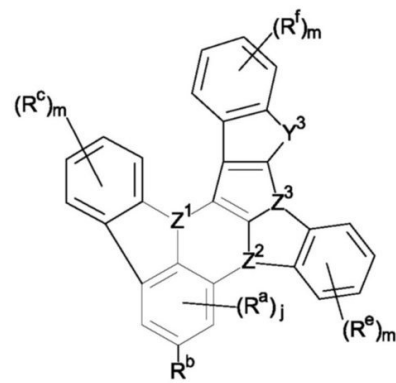


式 (Ive-8)

20



式 (Ive-9)



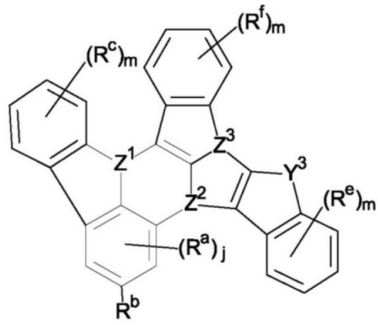
式 (Ive-10)

30

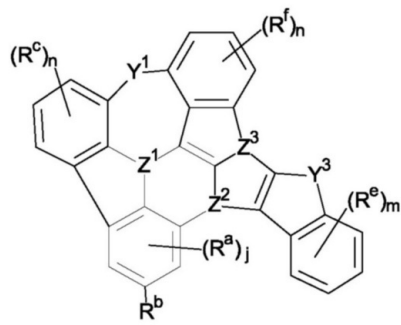
40

50

【化 1 2 - 1 9】

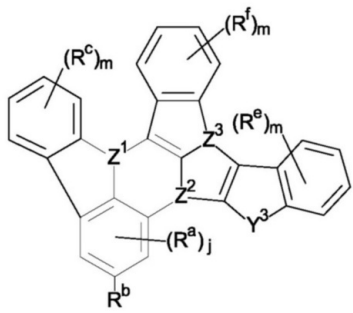


式 (Ive-11)

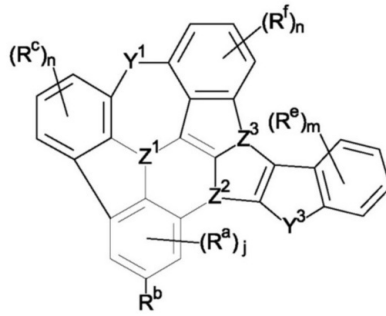


式 (Ive-12)

10

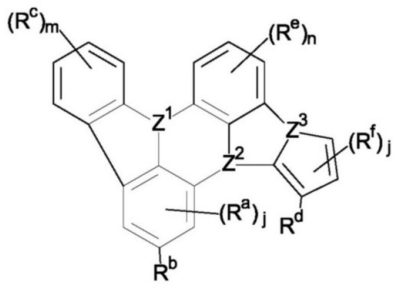


式 (Ive-13)

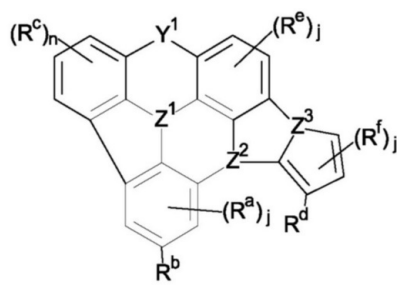


式 (Ive-14)

20

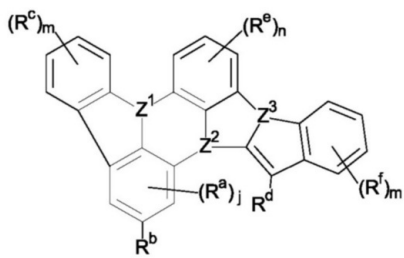


式 (Ive-15)

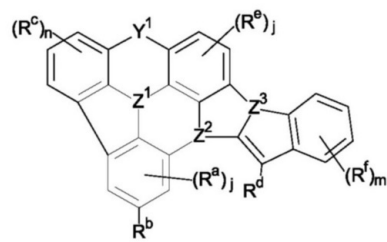


式 (Ive-16)

30



式 (Ive-17)

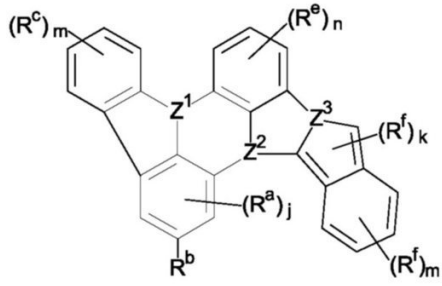


式 (Ive-18)

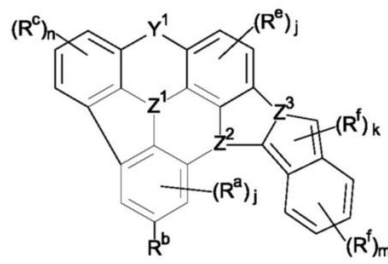
40

50

【化 1 2 - 2 0】

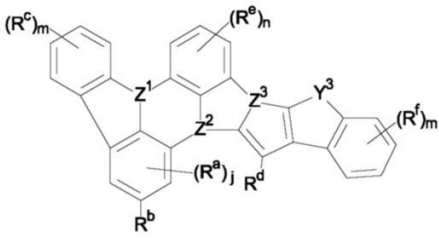


式 (Ive-19)

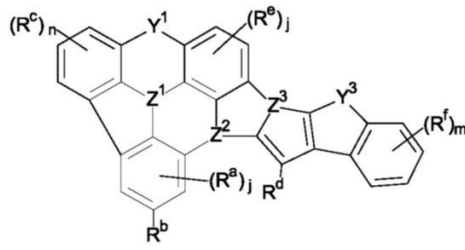


式 (Ive-20)

10

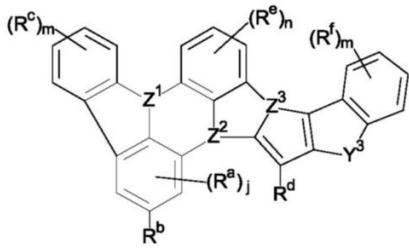


式 (Ive-21)

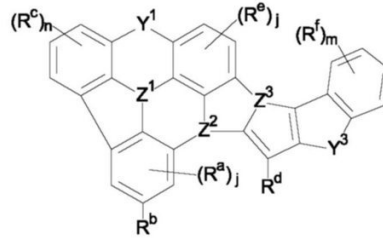


式 (Ive-22)

20

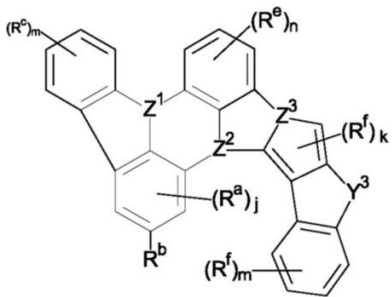


式 (Ive-23)

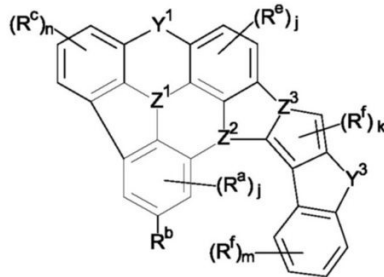


式 (Ive-24)

30



式 (Ive-25)

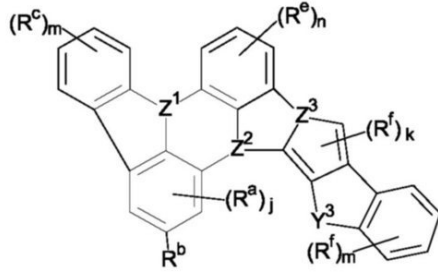


式 (Ive-26)

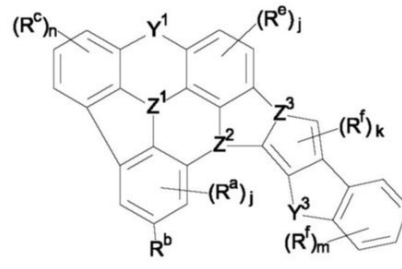
40

50

【化 1 2 - 2 1】

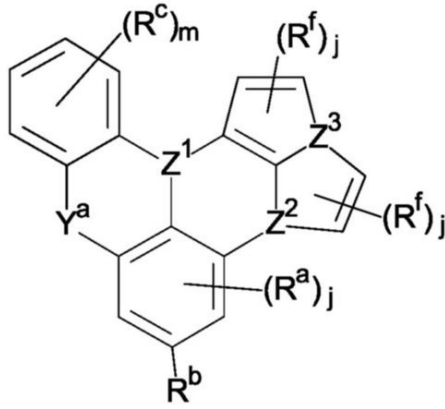


式 (IVe-27)

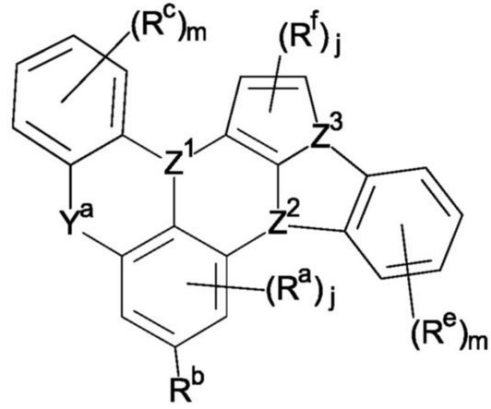


式 (IVe-28)

10

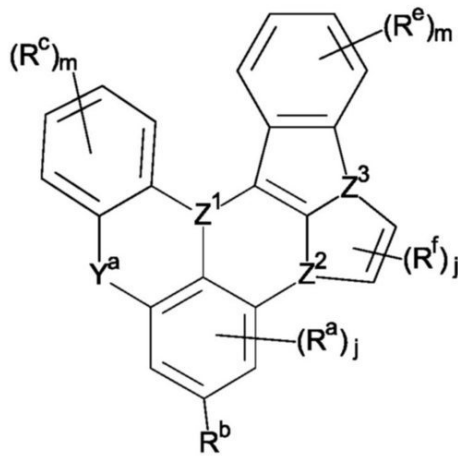


式 (IVf-1)

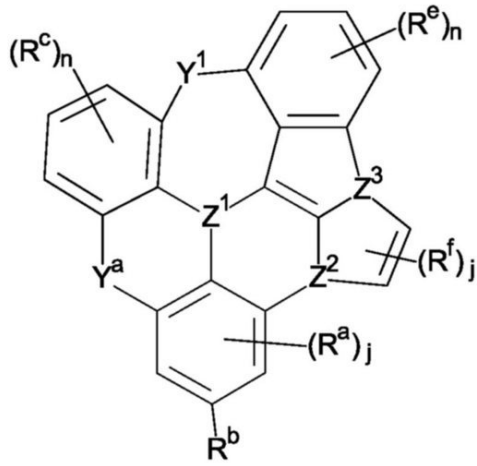


式 (IVf-2)

20



式 (IVf-3)



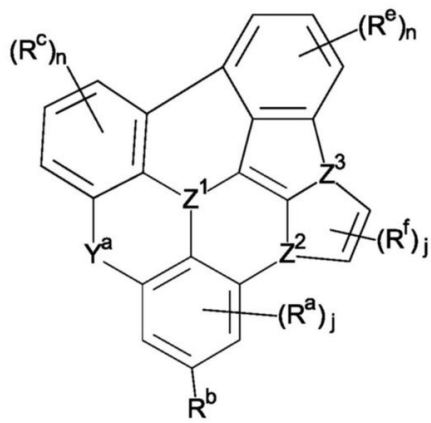
式 (IVf-4)

30

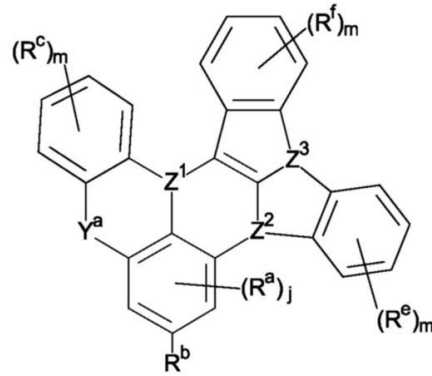
40

50

【化 1 2 - 2 2】

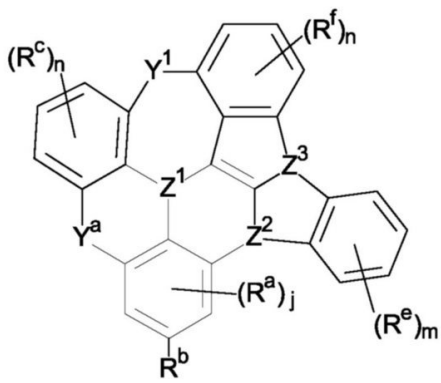


式 (IVf-5)

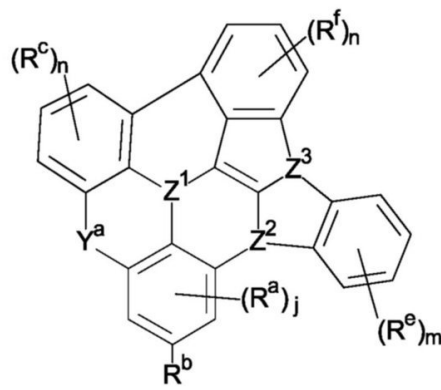


式 (IVf-6)

10

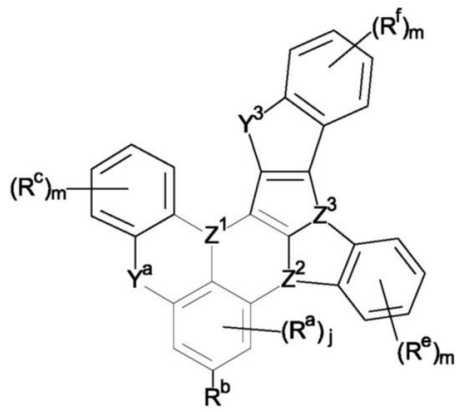


式 (IVf-7)

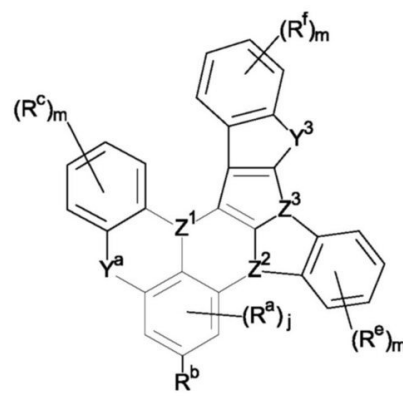


式 (IVf-8)

20



式 (IVf-9)



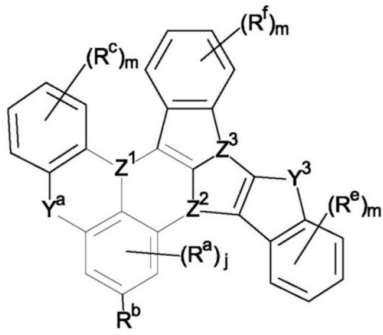
式 (IVf-10)

30

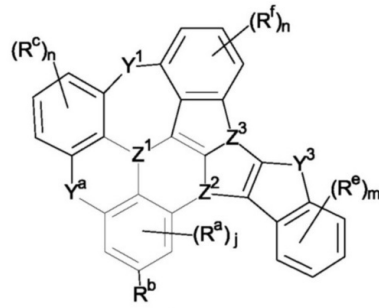
40

50

【化 1 2 - 2 3】

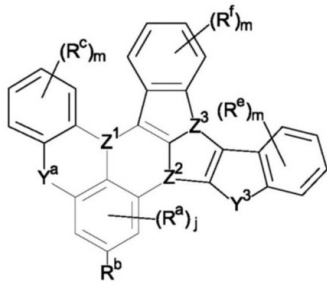


式 (IVf-11)

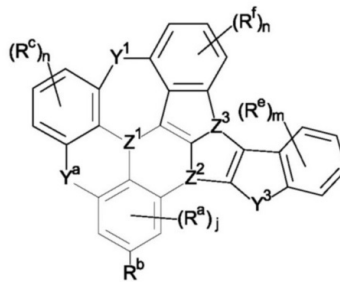


式 (IVf-12)

10

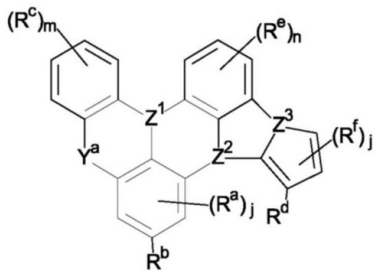


式 (IVf-13)

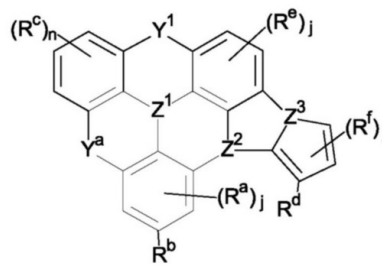


式 (IVf-14)

20

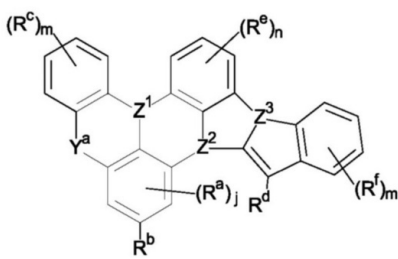


式 (IVf-15)

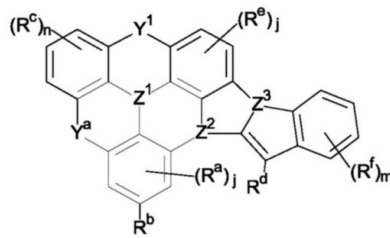


式 (IVf-16)

30



式 (IVf-17)

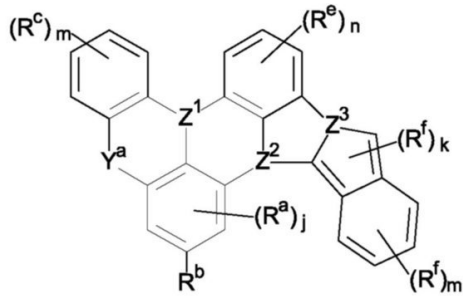


式 (IVf-18)

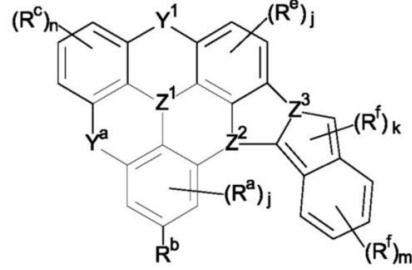
40

50

【化 1 2 - 2 4】

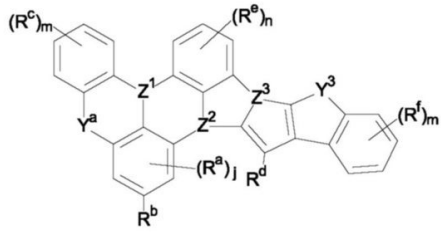


式 (IVf-19)

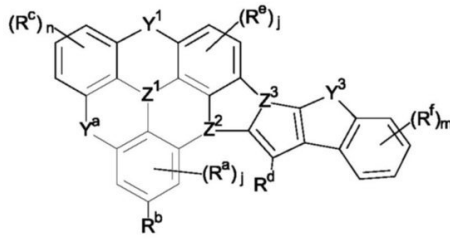


式 (IVf-20)

10

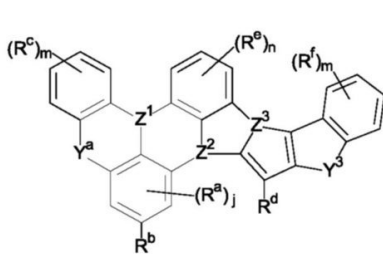


式 (IVf-21)

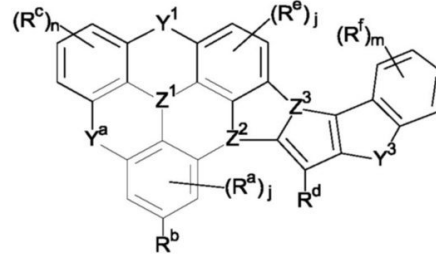


式 (IVf-22)

20

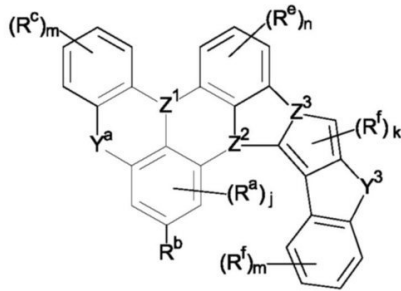


式 (IVf-23)

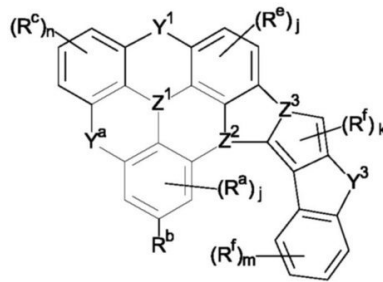


式 (IVf-24)

30



式 (IVf-25)

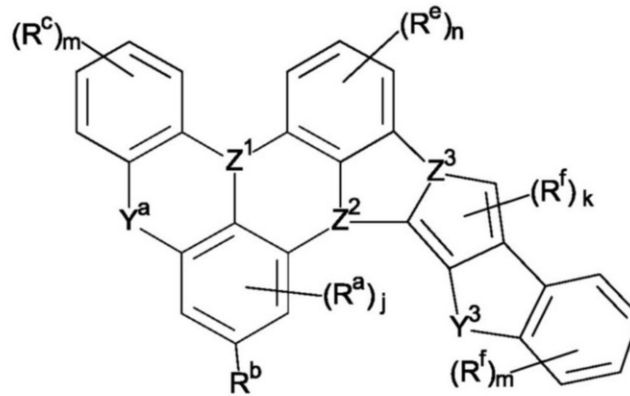


式 (IVf-26)

40

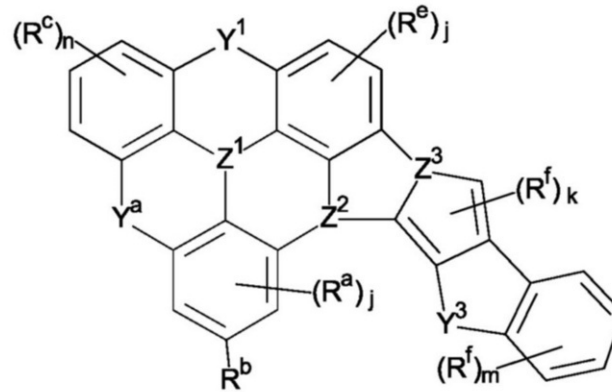
50

【化 1 2 - 2 5】



式 (IVf-27)

10



式 (IVf-28)

20

30

ここで、記号 Z^1 、 Z^2 、 Y 、 R^a 、 R^b および R^c は、上記、特に式 (I)、に記載の意味を有し、記号 Z^3 、 R^d 、 R^e および R^f は、上記、特に式 (II-1) ~ (II-4)、に記載の意味を有し、記号 Z^4 、 Y^a および R^g は、上記、特に式 (IIa-1) ~ (II d-4)、に記載の意味を有し、記号 Y^1 および Y^3 は、上記、特に式 (III-1) ~ (III-15)、に記載の意味を有し、記号 Y^2 は、上記、特に式 (IIIa-1) ~ (III d-15)、に記載の意味を有し、さらなる記号は以下に記載のとおりである：

m は、0、1、2、3 または 4 であり、好ましくは 0、1 または 2 であり；

n は、0、1、2 または 3 であり、好ましくは 0、1 または 2 であり；

j は、0、1 または 2 であり、好ましくは 0 または 1 であり；

k は、0 または 1 である。

40

【0055】

好ましくは、式 (Iva-6)、(Iva-9)、(Iva-11)、(Iva-13)、(Iva-17)、(Iva-18)、(Iva-21)、(Iva-22)、(Ivb-6)、(Ivb-9)、(Ivb-11)、(Ivb-13)、(Ivb-17)、(Ivb-18)、(Ivb-21)、(Ivb-22)、(Ivc-6)、(Ivc-9)、(Ivc-11)、(Ivc-13)、(Ivc-17)、(Ivc-18)、(Ivc-21)、(Ivc-22)、(Ivd-6)、(Ivd-9)、(Ivd-11)、(Ivd-13)、(Ivd-17)、(Ivd-18)、(Ivd-21)、(Ivd-22)、(Ive-6)、(Ive-9)、(Ive-11)、(Ive-13)

50

)、(Ive-17)、(Ive-18)、(Ive-21)、(Ive-22)、(Ivf-6)、(Ivf-9)、(Ivf-11)、(Ivf-13)、(Ivf-17)、(Ivf-18)、(Ivf-21)、(Ivf-22)の構造/化合物である。

【0056】

添え字k、j、mおよびnの合計は、特に、式(IV-1)~(IV-28)の構造/化合物および/または式(IVa-1)~(IVa-28)、(IVb-1)~(IVb-28)、(IVc-1)~(IVc-28)、(IVd-1)~(IVd-28)、(IVe-1)~(IVe-28)および/または(Ivf-1)~(Ivf-28)の構造/化合物において、好ましくは10以下、より好ましくは8以下、特に好ましくは6以下、より好ましくは4以下である。

10

【0057】

さらに、式(II-1)~(II-4)、(IIa-1)~(II d-4)、(III-1)~(III-15)、(IIIa-1)~(III d-15)、(IV-1)~(IV-28)、(IVa-1)~(IVf-28)および/またはとりわけ以下のこれらの式の詳細の好ましい形態において、 Z^1 がNであり、少なくとも1つ、好ましくは2つの、 Z^2 、 Z^3 基がBであるケースであってよい。 Z^1 がNであり、少なくとも1つ、好ましくは2つの Z^2 、 Z^3 がBである形態は、発光体として、有利に使用されるであろう。

【0058】

さらに、式(II-1)~(II-4)、(IIa-1)~(II d-4)、(III-1)~(III-15)、(IIIa-1)~(III d-15)、(IV-1)~(IV-28)、(IVa-1)~(IVf-28)および/またはとりわけ以下のこれらの式の詳細の好ましい形態において、 Z^1 がNであり、少なくとも1つ、好ましくは2つの、 Z^2 、 Z^3 基がNであるケースであってよい。

20

【0059】

多くの、好ましくは全ての、 Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、 Z^4 基がNである形態は、正孔伝導材料として特に有利に使用されるであろう。

【0060】

さらなる形態において、式(II-1)~(II-4)、(IIa-1)~(II d-4)、(III-1)~(III-15)、(IIIa-1)~(III d-15)、(IV-1)~(IV-28)、(IVa-1)~(IVf-28)および/またはとりわけ以下のこれらの式の詳細の好ましい形態において、 Z^1 がBであり、少なくとも1つ、好ましくは2つの、 Z^2 、 Z^3 基がNであるケースであってよい。 Z^1 がBであり、少なくとも1つ、好ましくは2つの、 Z^2 、 Z^3 基がNである形態は、発光体として、有利に使用されるであろう。

30

【0061】

さらなる形態において、式(II-1)~(II-4)、(IIa-1)~(II d-4)、(III-1)~(III-15)、(IIIa-1)~(III d-15)、(IV-1)~(IV-28)、(IVa-1)~(IVf-28)および/またはとりわけ以下のこれらの式の詳細の好ましい形態において、 Z^1 がBであり、少なくとも1つ、好ましくは2つの、 Z^2 、 Z^3 基がBであるケースであってよい。

40

【0062】

多くの、好ましくは全ての、 Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、 Z^4 基がBである形態は、特に電子輸送材料として有利に使用することができる。

【0063】

さらなる形態において、式(IIa-1)~(II d-4)、(IIIa-1)~(III d-15)、(IVa-1)~(IVf-28)および/またはとりわけ以下のこれらの式の詳細の好ましい形態において、 Z^1 がNであり、 Z^4 がBであるケースであってよい。

【0064】

50

さらに、式 (I I a - 1) ~ (I I d - 4)、(I I I a - 1) ~ (I I I d - 1 5)、(I V a - 1) ~ (I V f - 2 8) および / またはとりわけ以下のこれらの式の詳細の好ましい形態において、 Z^1 が N でありおよび Z^4 が N であるケースであってよい。

【 0 0 6 5 】

さらに、式 (I I a - 1) ~ (I I d - 4)、(I I I a - 1) ~ (I I I d - 1 5)、(I V a - 1) ~ (I V f - 2 8) および / またはとりわけ以下のこれらの式の詳細の好ましい形態において、 Z^1 が B であり、 Z^4 が N であるケースであってよい。

【 0 0 6 6 】

さらなる形態において、式 (I I a - 1) ~ (I I d - 4)、(I I I a - 1) ~ (I I I d - 1 5)、(I V a - 1) ~ (I V f - 2 8) および / またはとりわけ以下のこれらの式の詳細の好ましい形態において、 Z^1 が B であり、 Z^4 が B であるケースであってよい。

10

【 0 0 6 7 】

さらなる形態において、式 (I I a - 1) ~ (I I d - 4)、(I I I a - 1) ~ (I I I d - 1 5)、(I V a - 1) ~ (I V f - 2 8) および / またはとりわけ以下のこれらの式の詳細の好ましい形態において、 Z^1 が N であり、 Y^a が $C = O$ 、 $S = O$ または $S O_2$ であるケースであってよい。

【 0 0 6 8 】

さらなる形態において、式 (I I a - 1) ~ (I I d - 4)、(I I I a - 1) ~ (I I I d - 1 5)、(I V a - 1) ~ (I V f - 2 8) および / またはとりわけ以下のこれらの式の詳細の好ましい形態において、 Z^1 が N であり、 Y^a が O または S であるケースであってよい。

20

【 0 0 6 9 】

さらなる形態において、式 (I I a - 1) ~ (I I d - 4)、(I I I a - 1) ~ (I I I d - 1 5)、(I V a - 1) ~ (I V f - 2 8) および / またはとりわけ以下のこれらの式の詳細の好ましい形態において、 Z^1 が B であり、 Y^a が O または S であるケースであってよい。

【 0 0 7 0 】

さらなる形態において、式 (I I a - 1) ~ (I I d - 4)、(I I I a - 1) ~ (I I I d - 1 5)、(I V a - 1) ~ (I V f - 2 8) および / またはとりわけ以下のこれらの式の詳細の好ましい形態において、 Z^1 が B であり、 Y^a が $C = O$ 、 $S = O$ または $S O_2$ であるケースであってよい。

30

【 0 0 7 1 】

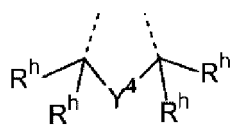
さらに、式 (I I I - 1) ~ (I I I - 1 5)、(I I I a - 1) ~ (I I I d - 1 5)、(I V - 1) ~ (I V - 2 8) および / またはとりわけ以下のこれらの式の詳細の好ましい形態において、 $p = 1$ であり、 Y^1 基が結合であるケースであってよい。

【 0 0 7 2 】

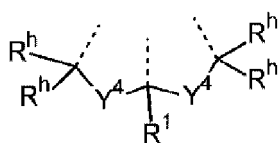
本発明の好ましい形態において、少なくとも 2 つの R 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g ラジカルが、2 つの R 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g ラジカルが結合するさらなる基と共に、縮合環を形成するケースであってよく、ここで、2 つの R 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g ラジカルは、式 (R A - 1) ~ (R A - 1 2) の少なくとも 1 つの構造を形成する。

40

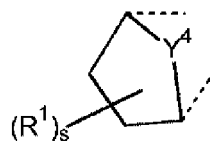
【化 1 3】



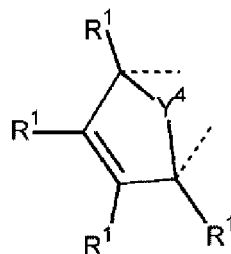
式 RA-1



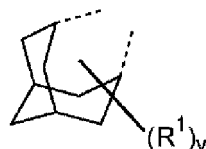
式 RA-2



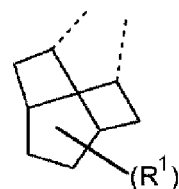
式 RA-3



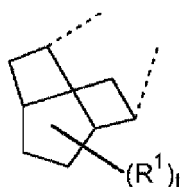
式 RA-4



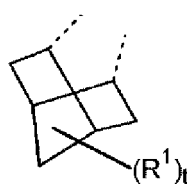
式 RA-5



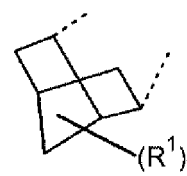
式 RA-6



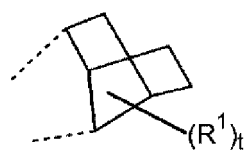
式 RA-7



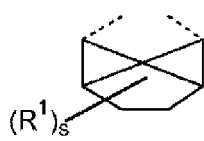
式 RA-8



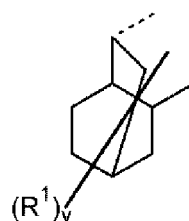
式 RA-9



式 RA-10



式 RA-11



式 RA-12

10

20

30

ここで、 R^1 は、上記に記載の意味を有し、点線は、接続サイトを示し、それを介して、2つの R 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g ラジカルが結合し、さらなる記号は以下の意味を有する：

Y^4 が、出現毎に同一であるかまたは異なり、 $C(R^1)_2$ 、 $(R^1)_2C-C(R^1)_2$ 、 $(R^1)C=C(R^1)$ 、 NR^1 、 NAr^1 、 O または S 、好ましくは $C(R^1)_2$ 、 $(R^1)_2C-C(R^1)_2$ 、 $(R^1)C=C(R^1)$ 、 O または S であり；

R^h が、出現毎に同一であるかまたは異なり、 F 、1～40の炭素原子を有する、直鎖の、アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基または2～40の炭素原子を有する、アルケニルもしくはアルキニル基または3～20の炭素原子を有する、分岐もしくは環状の、アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基（ここで、アルキル、アルコキシ、チオアルコキシ、アルケニルまたはアルキニル基は、それぞれのケースにおいて、1以

40

50

上の R^2 ラジカルによって置換されていてもよく、ここで、1以上の隣接しない CH_2 基が、 $R^2C=CR^2$ 、 $C-C$ 、 $Si(R^2)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^2$ 、 $-C(=O)O-$ 、 $-C(=O)NR^2-$ 、 NR^2 、 $P(=O)(R^1)$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 SO または SO_2 によって置き換えられていてもよい)、または5~60の芳香族環原子を有し、それぞれのケースにおいて1以上の R^2 ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族もしくはヘテロ芳香族環系、または5~60の芳香族環原子を有し、1以上の R^2 ラジカルによって置換されていてもよい、アリーロキシもしくはヘテロアリーロキシ基であり；同時に、2つの R^h ラジカルが共に、または1つの R^h ラジカルが、 R^1 ラジカルと共に、またはさらなる基と共に、環系を形成することも可能であり；

s は、0、1、2、3、4、5または6、好ましくは0、1、2、3または4、より好ましくは0、1または2であり； 10

t は、0、1、2、3、4、5、6、7または8、好ましくは0、1、2、3または4、より好ましくは0、1または2であり；

v は、0、1、2、3、4、5、6、7、8または9、好ましくは0、1、2、3または4、より好ましくは0、1または2である。

【0073】

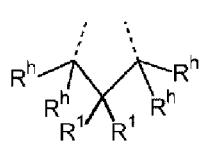
本発明の好ましい形態において、少なくとも2つの R 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g ラジカルが、2つの R 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g ラジカルが結合するさらなる基と共に、縮合環を形成し、ここで、2つの R 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g ラジカルは、好ましくは、式 $(RA-1a) \sim (RA-4f)$ の構造のうちの少なくとも1つを形成する。 20

30

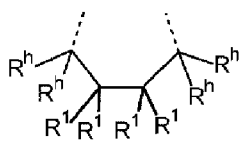
40

50

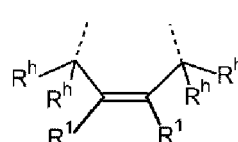
【化 1 4】



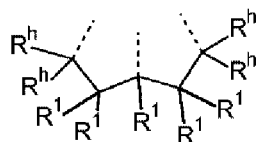
式 RA-1a



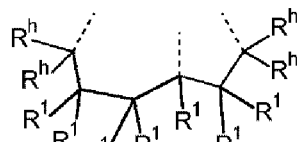
式 RA-1b



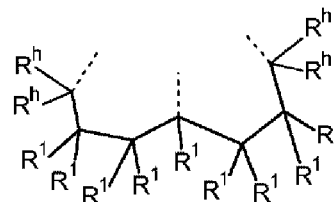
式 RA-1c



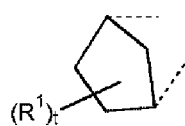
式 RA-2a



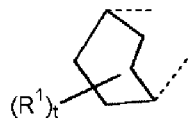
式 RA-2b



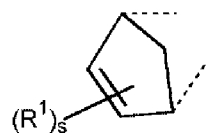
式 RA-2c



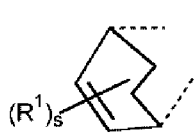
式 RA-3a



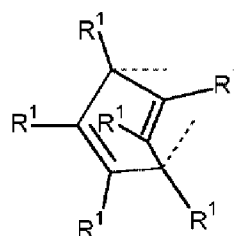
式 RA-3b



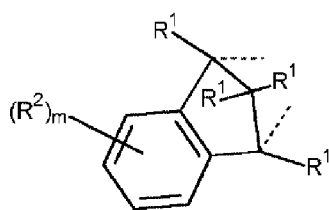
式 RA-4a



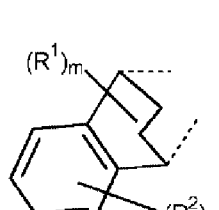
式 RA-4b



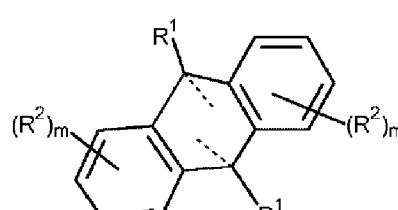
式 RA-4c



式 RA-4d



式 RA-4e



式 RA-4f

10

20

30

ここで、点線の結合は、接続サイトを示し、それを介して、2つの R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g ラジカルが結合し、添え字 m は、0、1、2、3または4、好ましくは0、1または2であり、記号 R^1 、 R^2 、 R^h および添え字 s および t は、上記、特に、式(I)および/または式(RA-1)~(RA-12)に記載の意味を有する。

40

【0074】

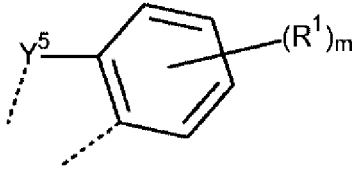
さらに、少なくとも2つの R 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g ラジカルが、式(RA-1)~(RA-12)および/または(RA-1a)~(RA-4f)の構造を形成し、かつ縮合環を形成し、隣接する X^1 、 X^2 、 X^3 、 X^4 、 X^5 、 X^6 、 X^7 基からの R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g ラジカルを示すか、またはそれぞれ隣接する炭素原子に結合する R ラジカルを示すケースであってよく、ここで、これらの炭素原子は、好ましくは結合を介して接続される。

50

【0075】

さらに好ましい形態において、少なくとも2つの R 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g ラジカルが、2つの R 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g ラジカルが結合するさらなる基と共に、縮合環を形成し、ここで、2つの R 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g ラジカルは、式(RB)の構造を形成する。

【化15】



式 RB

10

ここで、 R^1 は、上記、特に式(I)、に記載の意味を有し、点線の結合は、2つの R 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g ラジカルがそれを介して結合する接続サイトを示し、添え字 m は、0、1、2、3または4であり、好ましくは0、1または2であり、 Y^5 は、 $C(R^1)_2$ 、 NR^1 、 NAr^1 、 BR^1 、 BAr^1 、 O または S であり、好ましくは $C(R^1)_2$ 、 NAr^1 または O である。

20

【0076】

少なくとも2つの R 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g ラジカルが、式(RB)の構造を形成し、縮合環を形成し、隣接する X^1 、 X^2 、 X^3 、 X^4 、 X^5 、 X^6 、 X^7 基からの R 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g ラジカルを示すか、またはそれぞれ隣接する炭素原子に結合する R ラジカルを示すケースであってよく、ここで、これらの炭素原子は、好ましくは結合を介して互いに接続される。

【0077】

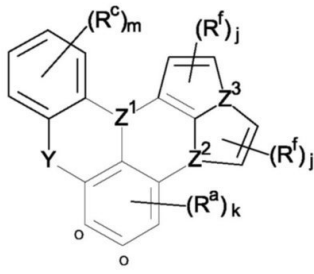
より好ましくは、本化合物は、式(V-1)~(V-16)の構造のうちの少なくとも1つを含み；より好ましくは、本化合物は、式(V-1)~(V-16)の化合物から選択され、ここで、本化合物は、少なくとも1つの縮合環を有する。

30

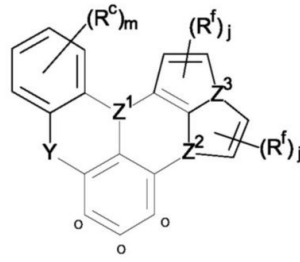
40

50

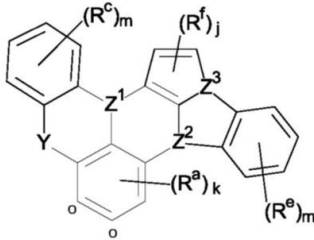
【化 1 6 - 1】



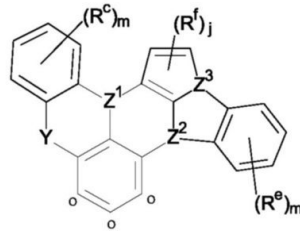
式 (V-1)



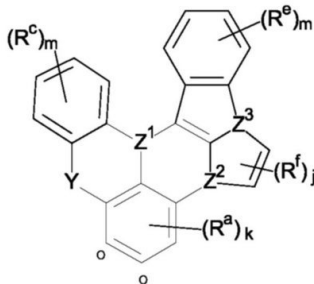
式 (V-2)



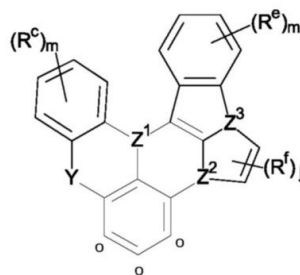
式 (V-3)



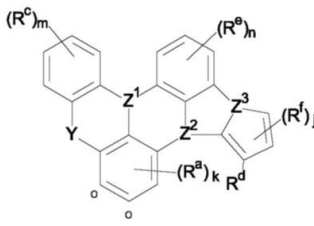
式 (V-4)



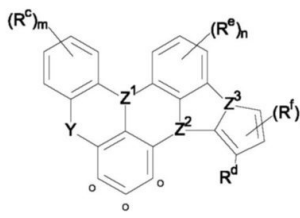
式 (V-5)



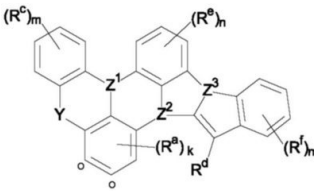
式 (V-6)



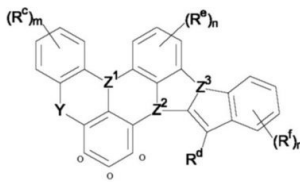
式 (V-7)



式 (V-8)



式 (V-9)



式 (V-10)

10

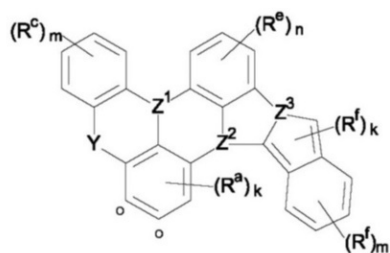
20

30

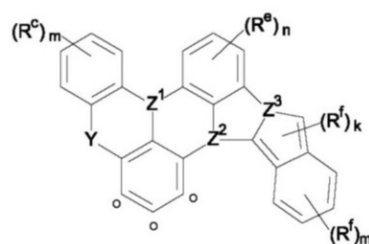
40

50

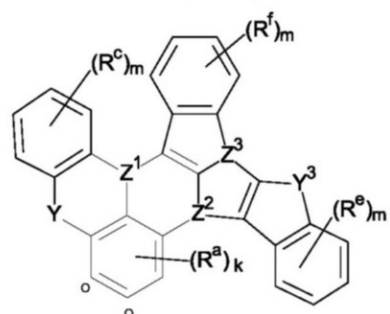
【化 1 6 - 2】



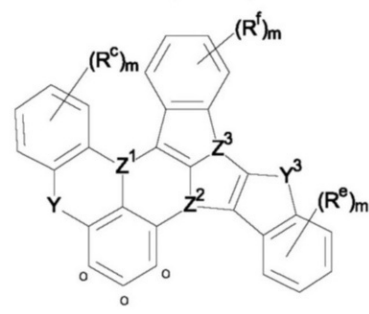
式 (V-11)



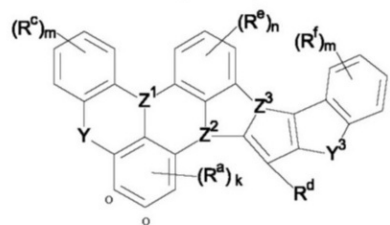
式 (V-12)



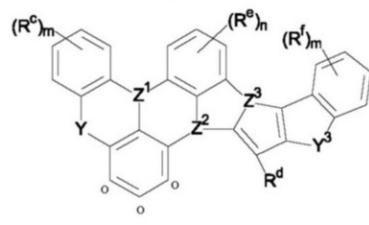
式 (V-13)



式 (V-14)



式 (V-15)



式 (V-16)

ここで、記号 Z^1 、 Z^2 、 Y 、 R^a 、 R^b および R^c は、上記、特に式 (I)、に記載の意味を有し、記号 Z^3 、 R^d 、 R^e および R^f は、上記、特に式 (II-1) ~ (II-4)、に記載の意味を有し、記号 Y^3 は、上記、特に式 (III-1) ~ (III-15)、に記載の意味を有し、記号 o は、接続サイトを示し、さらなる記号は以下に記載のとおりである。

m は、0、1、2、3 または 4 であり、好ましくは 0、1 または 2 であり；

n は、0、1、2 または 3 であり、好ましくは 0、1 または 2 であり；

j は、0、1 または 2 であり、好ましくは 0 または 1 であり；

k は、0 または 1 である。

【0078】

好ましくは、式 (V-9)、(V-11)、(V-13)、(V-14)、(V-15) および (V-16) の構造 / 化合物である。

【0079】

より好ましくは、本化合物は、式 (VI-1) ~ (VI-9) の少なくとも 1 つの構造を含み、；より好ましくは、本化合物は、式 (VI-1) ~ (VI-9) の化合物から選択され、ここで、本化合物は、少なくとも 1 つの縮合環を有し；

10

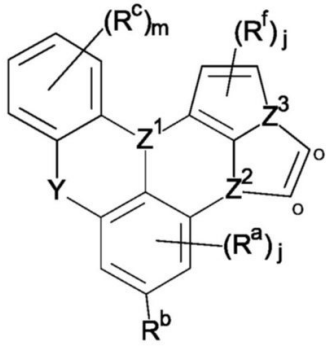
20

30

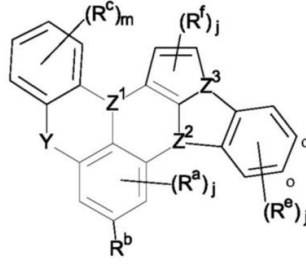
40

50

【化 1 7 - 1】

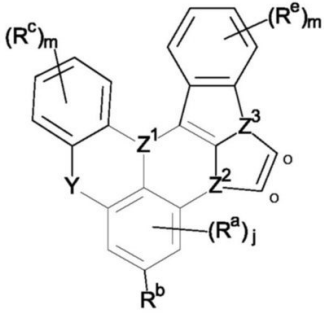


式 (VI-1)

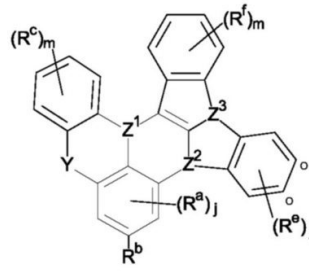


式 (VI-2)

10

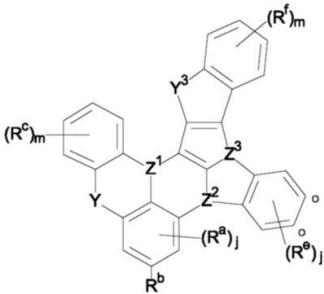


式 (VI-3)

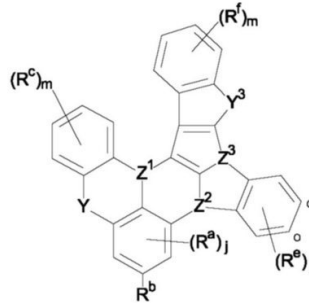


式 (VI-4)

20

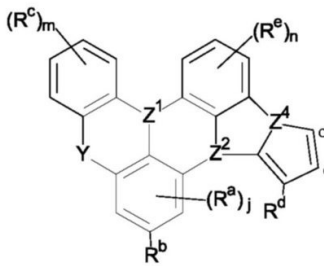


式 (VI-5)

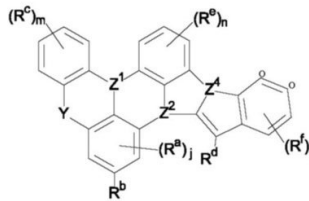


式 (VI-6)

30



式 (VI-7)

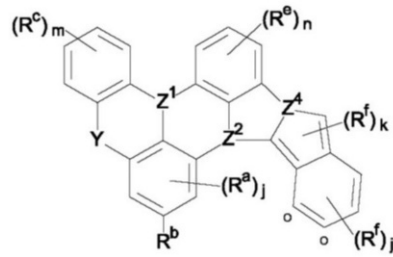


式 (VI-8)

40

50

【化 17 - 2】



式 (VI-9)

10

ここで、記号 Z^1 、 Z^2 、 Y 、 R^a 、 R^b および R^c は、上記、特に式 (I)、に記載の意味を有し、記号 Z^3 、 R^d 、 R^e および R^f は、上記、特に式 (II-1) ~ (II-4)、に記載の意味を有し、記号 Y^3 は、上記、特に式 (III-1) ~ (III-15)、に記載の意味を有し、記号 o は、縮合環の接続サイトを示し、さらなる記号は以下に記載のとおりである：

m は、0、1、2、3 または 4 であり、好ましくは 0、1 または 2 であり；

n は、0、1、2 または 3 であり、好ましくは 0、1 または 2 であり；

j は、0、1 または 2 であり、好ましくは 0 または 1 である。

20

【0080】

好ましくは、式 (VI-4)、(VI-5) および (VI-8) の構造 / 化合物である。

【0081】

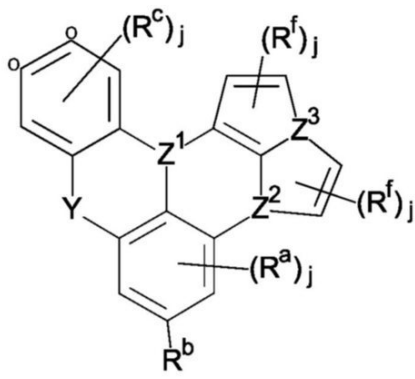
より好ましくは、本化合物は、式 (VII-1) ~ (VII-14) の少なくとも 1 つの構造を含み；より好ましくは、本化合物は、式 (VII-1) ~ (VII-14) の化合物から選択され、ここで、本化合物は、少なくとも 1 つの縮合環を有する。

30

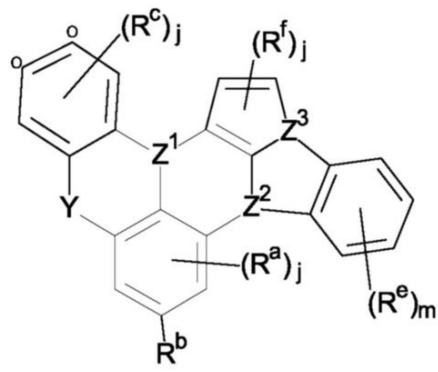
40

50

【化 1 8 - 1】

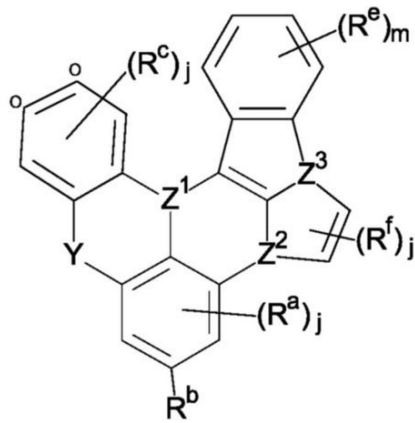


式 (VII-1)

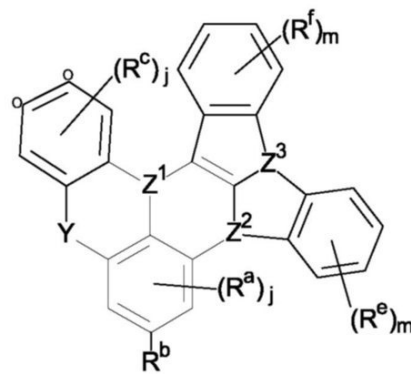


式 (VII-2)

10

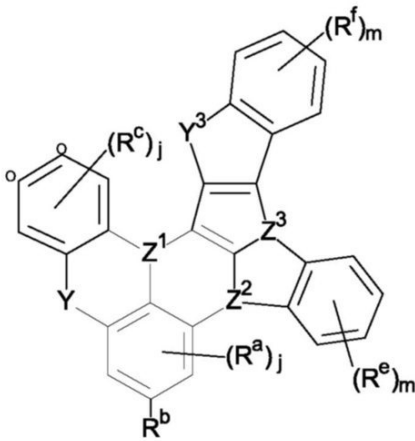


式 (VII-3)

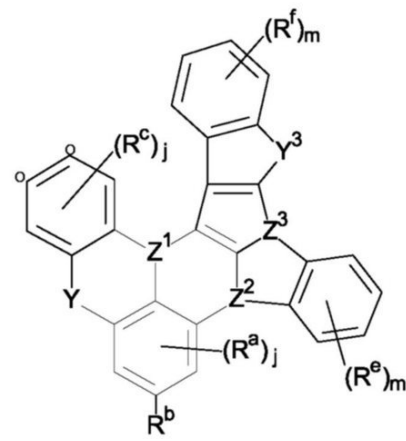


式 (VII-4)

20



式 (VII-5)



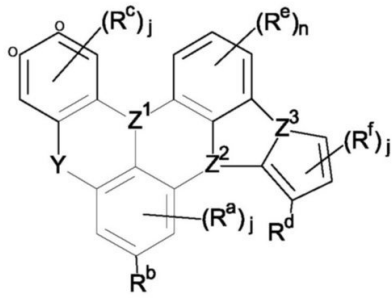
式 (VII-6)

30

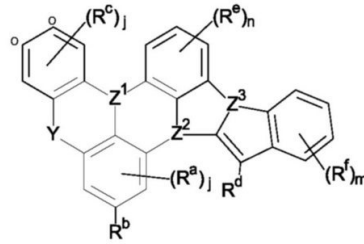
40

50

【化 1 8 - 2】

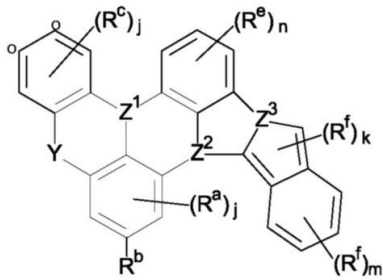


式 (VII-7)

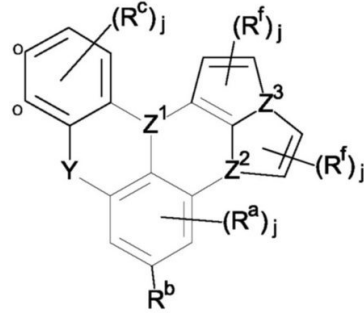


式 (VII-8)

10

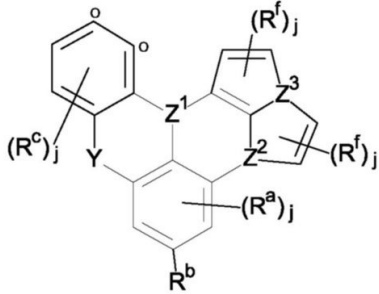


式 (VII-9)

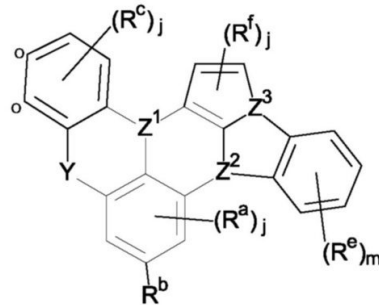


式 (VII-10)

20

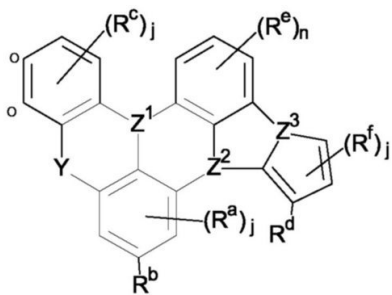


式 (VII-11)

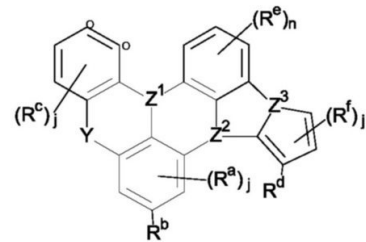


式 (VII-12)

30



式 (VII-13)



式 (VII-14)

40

ここで、記号 Z^1 、 Z^2 、 Y 、 R^a 、 R^b および R^c は、上記、特に式 (I)、に記載の意味を有し、記号 Z^3 、 R^d 、 R^e および R^f は、上記、特に式 (II-1) ~ (II-4)、に記載の意味を有し、記号 Y^3 は、上記、特に式 (III-1) ~ (III-15) に記載の意味を有し、記号 \circ は、接続サイトを示し、さらなる記号は以下に記載のとおりである。

m は、0、1、2、3 または 4 であり、好ましくは 0、1 または 2 であり；

n は、0、1、2 または 3 であり、好ましくは 0、1 または 2 であり；

j は、0、1 または 2 であり、好ましくは 0 または 1 である。

【0082】

50

好ましくは、式(VII-4)、(VII-5)および(VII-8)の構造/化合物である。

【0083】

好ましくは、縮合環は、特に式(V-1)~(V-16)、(VI-1)~(VI-9)および/または(VII-1)~(VII-14)において、少なくとも2つのR、R^a、R^b、R^c、R^d、R^e、R^f、R^gラジカルおよび2つのR、R^a、R^b、R^c、R^d、R^e、R^f、R^gラジカルが結合するさらなる基によって形成され、ここで、少なくとも2つのR、R^a、R^b、R^c、R^d、R^e、R^f、R^gラジカルは、式(RA-1)~(RA-12)および/または式(RB)の構造、好ましくは式(RA-1)~(RA-12)の構造を形成する。

10

【0084】

好ましくは、本発明の化合物が少なくとも2つの縮合環を有するケースであってよく、ここで、少なくとも1つの環が、式(RA-1)~(RA-12)および/または(RA-1a)~(RA-4f)の構造によって形成され、さらなる環が、式(RA-1)~(RA-12)、(RA-1a)~(RA-4f)または(RB)の構造によって形成される。

【0085】

特に、式(V-1)~(V-16)、(VI-1)~(VI-9)および/または(VII-1)~(VII-14)において、添え字k、j、mおよびnの合計が、好ましくは0、1、2または3、より好ましくは1または2である。

20

【0086】

さらに、上記式による置換基R、R^a、R^b、R^c、R^d、R^e、R^f、R^g、R^h、R¹およびR²が、置換基R、R^a、R^b、R^c、R^d、R^e、R¹およびR²が結合する環系の環原子と共に、縮合芳香族またはヘテロ芳香族環系を形成しない。これは、R、R^a、R^b、R^c、R^d、R^e、R^f、R^g、R^hおよびR¹ラジカルに結合されていてもよい、可能な置換基R¹およびR²との縮合芳香族またはヘテロ芳香族環系の形成を含む。

【0087】

特にR、R^a、R^b、R^c、R^d、R^e、R^f、R^g、R^h、R¹および/またはR²から選択されていてもよい2つのラジカルが互いに環系を形成する場合、この環系は、単環状または多環状の、脂肪族、ヘテロ脂肪族、芳香族またはヘテロ芳香族であってよい。このケースにおいて、共に環系を形成するラジカルは、隣接していてもよく、つまり、これらのラジカルは、同一の炭素原子に、または互いに直接結合される炭素原子に、結合されているか、またはそれらが互いからさらに除去されていてもよい。さらに、置換基R、R^a、R^b、R^c、R^d、R^e、R^f、R^g、R^h、R¹および/またはR²で提供される環系は、互いに単結合によって結合されていてもよく、これは閉環をもたらす。このケースにおいて、それぞれの対応する結合サイトは、好ましくはR、R^a、R^b、R^c、R^d、R^e、R^f、R^g、R^h、R¹および/またはR²で提供される。

30

【0088】

好ましい形態において、本発明の化合物は、式(I)、(II-1)~(II-4)、(IIa-1)~(II d-4)、(III-1)~(III-15)、(IIIa-1)~(III d-15)、(IV-1)~(IV-28)、(IVa-1)~(IV d-28)、(V-1)~(V-16)、(VI-1)~(VI-9)および/または(VII-1)~(VII-14)の構造の少なくとも1つによって表されうる。好ましくは、式(I)、(II-1)~(II-4)、(IIa-1)~(II d-4)、(III-1)~(III-15)、(IIIa-1)~(III d-15)、(IV-1)~(IV-28)、(IVa-1)~(IV d-28)、(V-1)~(V-16)、(VI-1)~(VI-9)および/または(VII-1)~(VII-14)の構造を含む、本発明の化合物が、5000g/モル以下、好ましくは4000g/モル以下、特に好ましくは3000g/モル以下、特別に好ましくは2000g/モル以下、最も好ましくは1200g/モル以下の分子量を有する。

40

50

【0089】

さらに、本発明の好ましい化合物の特徴は、それらが昇華性であることである。これらの化合物は一般に、約1200g/mol未満のモル質量を有する。

【0090】

好ましい芳香族またはヘテロ芳香族環系R、R^a、R^b、R^c、R^d、R^e、R^f、R^g、Ar'および/またはArは、フェニル、ビフェニル、特にオルト-、メタ-もしくはパラ-ビフェニル、ターフェニル、特にオルト-、メタ-もしくはパラ-ターフェニルもしくは分岐ターフェニル、クォーターフェニル、特にオルト-、メタ-もしくはパラクォーターフェニルもしくは分岐クォーターフェニル、1、2、3もしくは4位を介して結合されているもよいフルオレン、1、2、3もしくは4位を介して結合されているもよいスピロピフルオレン、ナフタレン、特に1-もしくは2-結合されたナフタレン、インドール、ベンゾフラン、ベンゾチオフエン、1、2、3、4もしくは9位を介して結合されているもよいカルバゾール、1、2、3もしくは4位を介して結合されているもよいジベンゾフラン、1、2、3もしくは4位を介して結合されているもよいジベンゾチオフエン、インデノカルバゾール、インドロカルバゾール、ピリジン、ピリミジン、ピラジン、ピリダジン、トリアジン、キノリン、イソキノリン、キナゾリン、キノキサリン、フェナントレンまたはトリフェニレン(これらのそれぞれは、1以上のR¹またはRラジカルによって置換されているもよい)から選択される。

10

【0091】

好ましくは、少なくとも1つの置換基R、R^a、R^b、R^c、R^d、R^e、R^f、R^gは、出現毎に同一であるかまたは異なり、H、D、3~20の炭素原子を有する、分岐もしくは環状の、アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基、または以下の式Ar-1~Ar-75の基から選択される芳香族もしくはヘテロ芳香族環系からなる群から選択され、好ましくは、置換基R、R^a、R^b、R^c、R^d、R^e、R^f、R^gは、式(RA-1)~(RA-12)、または(RB)の構造による縮合環を形成するか、または置換基R、R^a、R^b、R^c、R^d、R^e、R^f、R^gは、出現毎に同一であるかまたは異なり、H、D、または以下の式Ar-1~Ar-75の基から選択される芳香族もしくはヘテロ芳香族環系からなる群から選択され、および/またはAr'基は、出現毎に同一であるかまたは異なり、以下の式Ar-1~Ar-75の基から選択される。

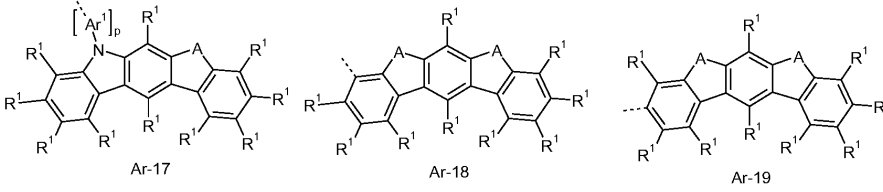
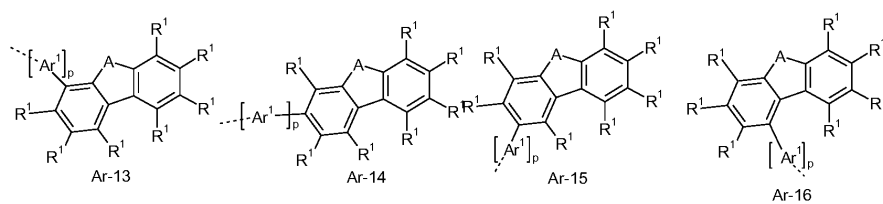
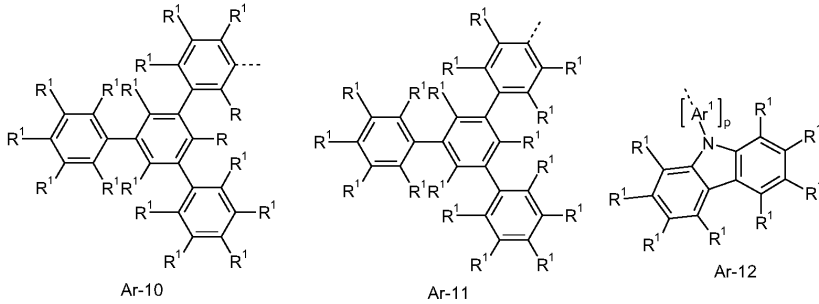
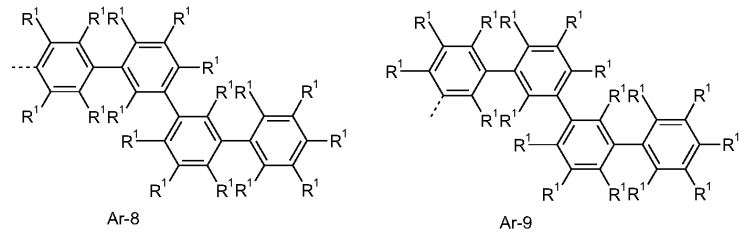
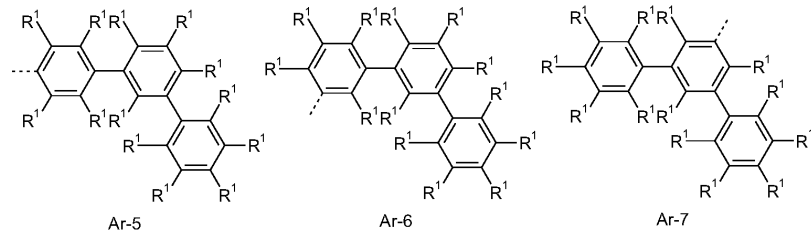
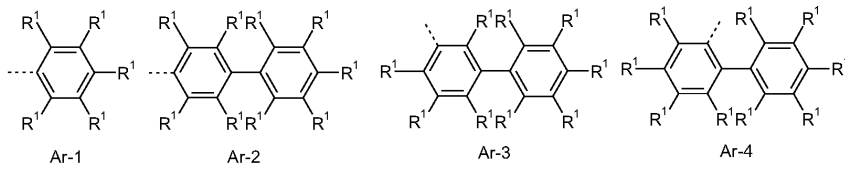
20

30

40

50

【化 1 9 - 1】



10

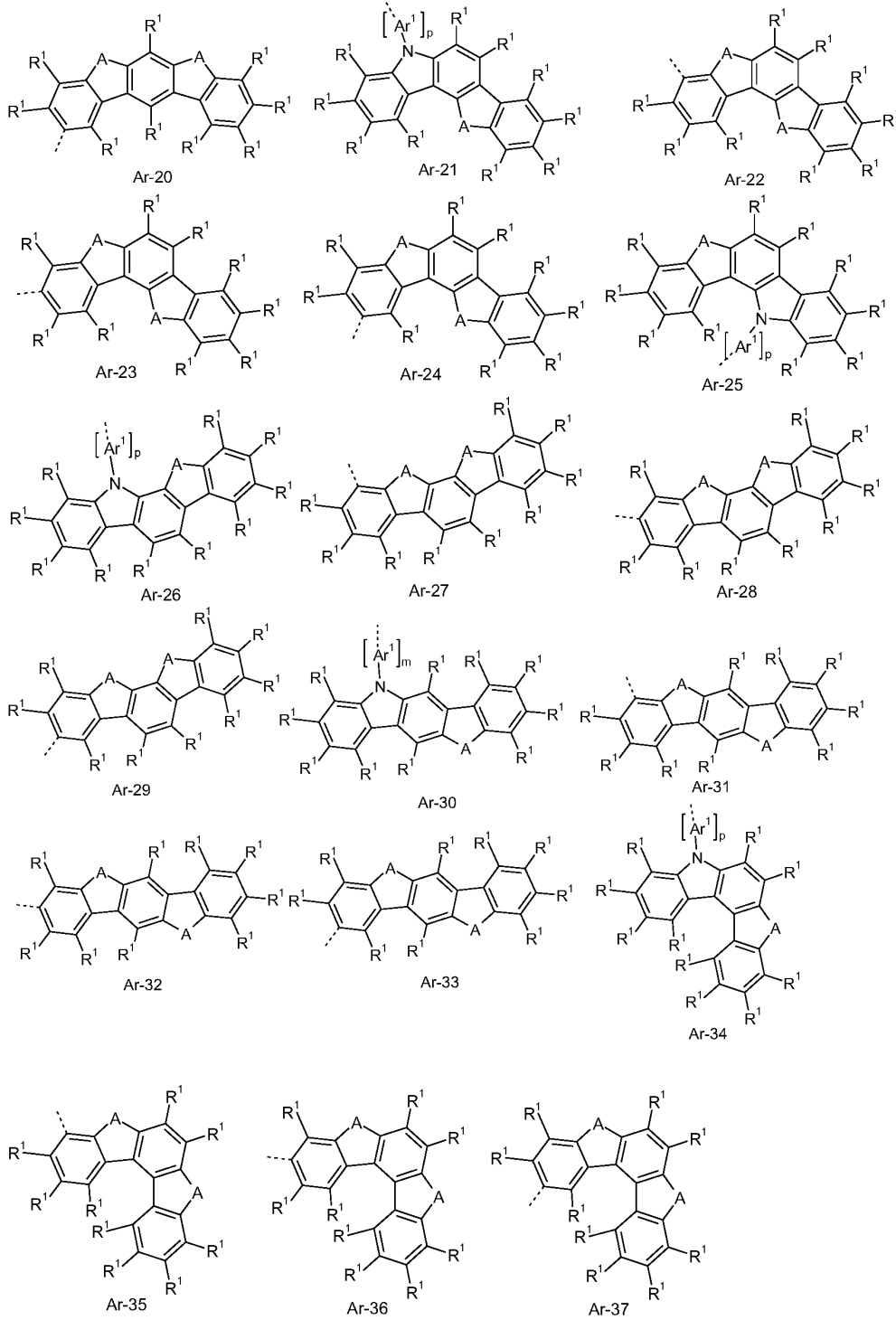
20

30

40

50

【化 1 9 - 2】



10

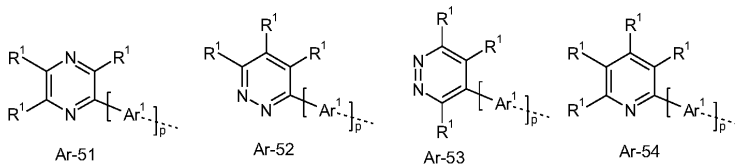
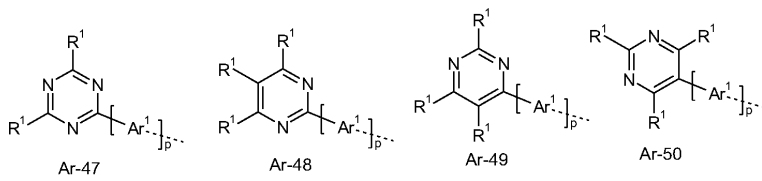
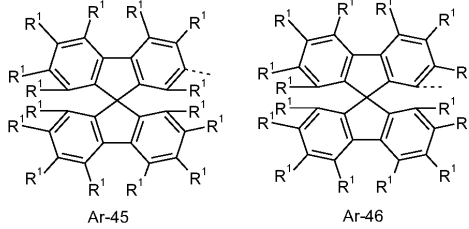
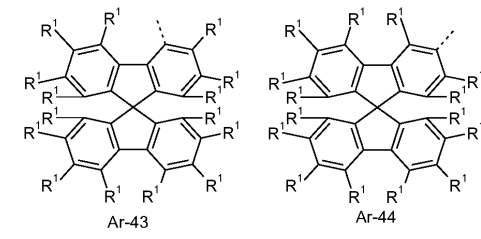
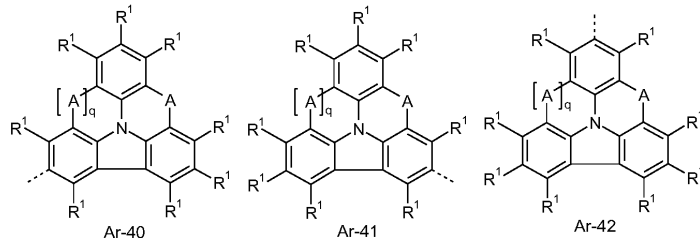
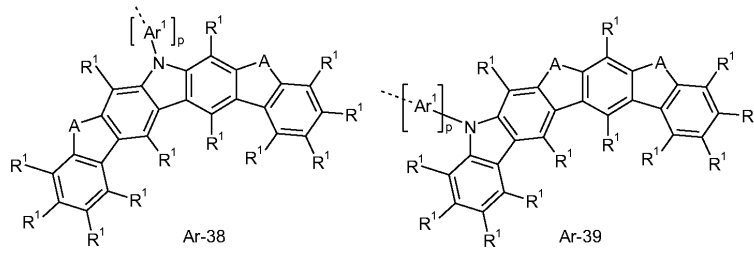
20

30

40

50

【化 19 - 3】



10

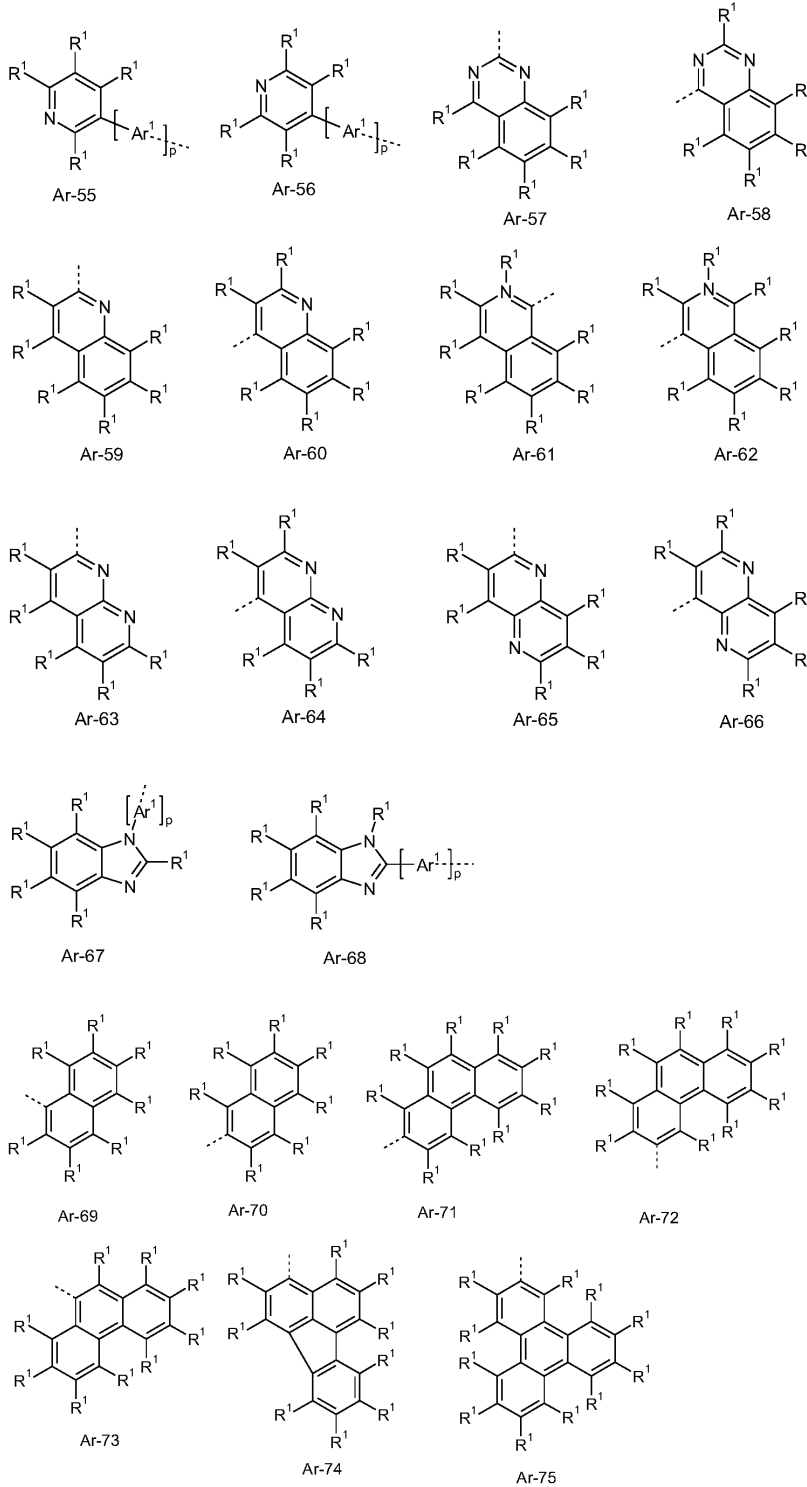
20

30

40

50

【化 1 9 - 4】



10

20

30

40

50

ここで、 R^1 は、上記に記載のとおりであり、点線は、接続サイトを示し、さらに：

Ar^1 は、出現毎に同一であるかまたは異なり、6 ~ 18 の芳香族環原子を有し、それぞれのケースにおいて、1 以上の R^1 ラジカルによって置換されているか、二価の芳香族もしくはヘテロ芳香族環系であり；

A は、出現毎に同一であるかまたは異なり、 $C(R^1)_2$ 、 NR^1 、O または S であり；

p は、0 または 1 であり、ここで、 $p = 0$ は、 Ar^1 基が存在せず、対応する芳香族またはヘテロ芳香族基が対応するラジカルに直接結合されていることを意味し；

q は、0 または 1 であり、ここで、 $q = 0$ は、この位置で結合される A 基が存在せず、

R¹ラジカルが代わりに対応する炭素原子に結合されていることを意味する。

【0092】

Arのための上記の基が2以上のA基を有し、これらの可能なオプションは、Aの定義の全ての組み合わせを含む。このケースの好ましい形態は、1つのA基がNR¹であり、かつ他のA基がC(R¹)₂であるか、または両方のA基がNR¹であるか、または両方のA基がOである好ましい形態である。

【0093】

AがNR¹である場合、窒素原子に結合される置換基R¹は、好ましくは、5～24の芳香族環原子を有し、1以上のR²ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族またはヘテロ芳香族である。特に好ましい形態において、このR¹置換基は、出現毎に同一であるかまたは異なり、6～24の芳香族環原子、特に6～18の芳香族環原子を有する芳香族またはヘテロ芳香族環系であり、これは縮合アリール基を有さず、かつ、縮合ヘテロアリール基を有さず、2以上の芳香族またはヘテロ芳香族6員環基が互いに結合されており、それぞれのケースにおいて1以上のR²ラジカルによって置換されていてもよい。好ましくは、上記のAr-1～Ar-11に示される結合パターンを有する、フェニル、ピフェニル、ターフェニルおよびクォーターフェニルであり、これらの構造は、R¹の他に、1以上のR²ラジカルによって置換されていてもよく、かつ、好ましくは非置換である。さらに好ましくは、Ar-47～Ar-50、Ar-57およびAr-58で上記に示される、トリアジン、ピリミジンおよびキナゾリンであり、これらの構造は、R¹の他に、1以上のR²ラジカルによって置換されていてもよい。

10

20

【0094】

好ましい置換基R、R^a、R^b、R^c、R^d、R^e、R^f、R^gおよびR^hに関して、以下に記載する。

【0095】

本発明の好ましい形態において、R、R^a、R^b、R^c、R^d、R^e、R^f、R^gは、出現毎に同一であるかまたは異なり、H、D、F、CN、NO₂、Si(R¹)₃、B(OR¹)₂、1～20の炭素原子を有する、直鎖のアルキル基または3～20の炭素原子を有する、分岐もしくは環状のアルキル基（ここで、アルキル基は、それぞれのケースにおいて、1以上のR¹ラジカルによって置換されていてもよい）、または5～60の芳香族環原子、好ましくは5～40の芳香族環原子を有し、それぞれのケースにおいて、1以上のR¹ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族またはヘテロ芳香族からなる群から選択される。

30

【0096】

本発明のさらに好ましい形態において、R、R^a、R^b、R^c、R^d、R^e、R^f、R^gは、出現毎に同一であるかまたは異なり、H、D、F、1～20の炭素原子を有する、直鎖のアルキル基または3～20の炭素原子を有する、分岐もしくは環状のアルキル基（ここで、アルキル基は、それぞれのケースにおいて、1以上のR¹ラジカルによって置換されていてもよい）、または5～60の芳香族環原子、好ましくは5～40の芳香族環原子を有し、それぞれのケースにおいて、1以上のR¹ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族またはヘテロ芳香族環系からなる群から選択される。

40

【0097】

さらに、少なくとも1つ置換基R、R^a、R^b、R^c、R^d、R^e、R^f、R^gが、出現毎に同一であるかまたは異なり、H、D、6～30の芳香族環原子を有し、1以上のR¹ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族またはヘテロ芳香族環系、およびN(Ar')₂基からなる群から選択されるケースであってよい。本発明のさらなる好ましい形態において、置換基Rのいずれかが、式(RA-1)～(RA-12)、(RA-1a)～(RA-4f)または(RB)の構造による環を形成するか、または置換基R、R^a、R^b、R^c、R^d、R^e、R^f、R^gが、出現毎に同一であるかまたは異なり、H、D、6～30の芳香族環原子を有し、1以上のR¹ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族もしくはヘテロ芳香族環系、またはN(Ar')₂基からなる群から選択される

50

。より好ましくは、置換基 R 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g が、出現毎に同一であるかまたは異なり、 H または 6 ~ 24 の芳香族環原子、好ましくは 6 ~ 18 の芳香族環原子、より好ましくは 6 ~ 13 の芳香族環原子を有する、芳香族もしくはヘテロ芳香族環系（これらのそれぞれは、1 以上の R^1 ラジカルによって置換されていてもよい）からなる群から選択される。

【0098】

本発明の好ましい形態において、 R^h は、出現毎に同一であるかまたは異なり、1 ~ 20 の炭素原子を有する、直鎖のアルキル基または 3 ~ 20 の炭素原子を有する、分岐もしくは環状のアルキル基（ここで、アルキル基は、それぞれのケースにおいて、1 以上の R^1 ラジカルによって置換されていてもよい）、また 5 ~ 60 の芳香族環原子、好ましくは 5 ~ 40 の芳香族環原子を有し、それぞれのケースにおいて、1 以上の R^2 ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族またはヘテロ芳香族環系からなる群から選択される。

10

【0099】

本発明のさらに好ましい形態において、 R^h は、出現毎に同一であるかまたは異なり、1 ~ 10 の炭素原子を有する直鎖のアルキル基または 3 ~ 10 の炭素原子を有する、分岐もしくは環状のアルキル基（ここで、アルキル基は、それぞれのケースにおいて、1 以上の R^2 ラジカルによって置換されていてもよい）、6 ~ 30 の芳香族環原子を有し、1 以上の R^2 ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族もしくはヘテロ芳香族環系からなる群から選択される。より好ましくは、 R^h は、出現毎に同一であるかまたは異なり、1 ~ 5 の炭素原子を有する直鎖のアルキル基または 3 ~ 5 の炭素原子を有する、分岐もしくは環状のアルキル基（ここで、アルキル基は、それぞれのケースにおいて、1 以上の R^2 ラジカルによって置換されていてもよい）、または 6 ~ 24 の芳香族環原子、好ましくは 6 ~ 18 の芳香族環原子、より好ましくは 6 ~ 13 の芳香族環原子を有し、それぞれのケースにおいて、1 以上の R^2 ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族もしくはヘテロ芳香族環系からなる群から選択される。

20

【0100】

本発明の好ましい形態において、 R^h は、出現毎に同一であるかまたは異なり、1 ~ 6 の炭素原子を有する直鎖のアルキル基または 3 ~ 6 の炭素原子を有する環状のアルキル基（ここで、アルキル基は、それぞれのケースにおいて、1 以上の R^2 ラジカルによって置換されていてもよい）、または 6 ~ 24 の芳香族環原子を有し、それぞれのケースにおいて、1 以上の R^2 ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族またはヘテロ芳香族環系からなる群から選択され；同時に、2 つの R^h ラジカルが、共に、環系を形成していてもよい。より好ましくは、 R^h は、出現毎に同一であるかまたは異なり、1、2、3 または 4 の炭素原子を有する直鎖のアルキル基または 3 ~ 6 の炭素原子を有する、分岐もしくは環状のアルキル基（ここで、アルキル基は、それぞれのケースにおいて、1 以上の R^2 ラジカルによって置換されていてもよいが、好ましくは非置換である）、または 6 ~ 12 の芳香族環原子、特に 6 の芳香族環原子を有し、それぞれのケースにおいて 1 以上の好ましくは非芳香族、 R^2 ラジカルによって置換されていてもよいが好ましくは非置換である、芳香族環系からなる群から選択され；同時に、2 つの R^e ラジカルが共に環系を形成していてもよい。最も好ましくは、 R^h は、出現毎に同一であるかまたは異なり、1、2、3 または 4 の炭素原子を有する直鎖のアルキル基または 3 ~ 6 の炭素原子を有する分岐のアルキル基からなる群から選択される。最も好ましくは、 R^h は、メチル基であるか、またはフェニル基であり、ここで、2 つのフェニル基が共に環系を形成していてもよく、好ましくはフェニル基よりもメチル基である。

30

40

【0101】

好ましい芳香族またはヘテロ芳香族環系の置換基 R 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g 、 R^h または A_r または A_r' は、フェニル、ピフェニル、特にオルト -、メタ - もしくはパラ - ピフェニル、ターフェニル、特にオルト -、メタ - もしくはパラ - ターフェニルもしくは分岐ターフェニル、クォーターフェニル、特にオルト -、メタ - もしくはパラ - クォーターフェニルもしくは分岐クォーターフェニル、1、2、3 もしくは 4

50

位を介して結合されていてもよいフルオレン、1、2、3もしくは4位を介して結合されていてもよいスピロピフルオレン、ナフタレン、特に1-もしくは2-結合されたナフタレン、インドール、ベンゾフラン、ベンゾチオフェン、1、2、3または4位を介して結合されていてもよいカルバゾール、1、2、3もしくは4位を介して結合されていてもよいジベンゾフラン、1、2、3もしくは4位を介して結合されていてもよいジベンゾチオフェン、インデノカルバゾール、インドロカルバゾール、ピリジン、ピリミジン、ピラジン、ピリダジン、トリアジン、キノリン、イソキノリン、キナゾリン、キノキサリン、フェナントレンまたはトリフェニレン（これらのそれぞれは、1以上のR、R¹またはR²ラジカルによって置換されていてもよい）から選択される。上記に示される構造Ar-1 ~ Ar-75が特に好ましく、好ましくは式(Ar-1)、(Ar-2)、(Ar-3)、(Ar-12)、(Ar-13)、(Ar-14)、(Ar-15)、(Ar-16)、(Ar-69)、(Ar-70)、(Ar-75)の構造であり、特に好ましくは式(Ar-1)、(Ar-2)、(Ar-3)、(Ar-12)、(Ar-13)、(Ar-14)、(Ar-15)、(Ar-16)の構造である。Ar-1 ~ Ar-75の構造に関して、これらは置換基R¹と共に示されることが述べられるべきである。環系Arのケースにおいて、これらの置換基R¹は、Rによって置き換えられるべきであり、R^hのケースにおいては、これらの置換基R¹は、R²によって置き換えられるべきである。

【0102】

さらに好適なR、R^a、R^b、R^c、R^d、R^e、R^f、R^g基は、式-Ar⁴-N(Ar²)(Ar³)の基であり、ここで、Ar²、Ar³およびAr⁴は、出現毎に同一であるかまたは異なり、5 ~ 24の芳香族環原子を有し、それぞれのケースにおいて、1以上のR¹ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族またはヘテロ芳香族環系である。Ar²、Ar³およびAr⁴中の芳香族環原子の総数は、60以下であり、好ましくは40以下である。

【0103】

このケースにおいて、Ar⁴およびAr²は、互いに結合されていてもよく、および/またはAr²およびAr³は、C(R¹)₂、NR¹、OおよびSから選択される基によって互いに結合されていてもよい。好ましくは、窒素原子に対して結合に対してそれぞれオルト位で、Ar⁴およびAr²が互いに結合され、Ar²およびAr³が互いに結合される。本発明のさらなる形態において、Ar²、Ar³およびAr⁴基のいずれも互いに結合されない。

【0104】

好ましくは、Ar⁴は、6 ~ 24の芳香族環原子、好ましくは6 ~ 12の芳香族環原子を有し、それぞれのケースにおいて、1以上のR¹ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族またはヘテロ芳香族環系である。より好ましくは、Ar⁴は、オルト-、メタ-もしくはパラ-フェニレンまたはオルト-、メタ-もしくはパラ-ピフェニル（これらのそれぞれは、1以上のR¹ラジカルによって置換されていてもよいが、好ましくは非置換である）からなる群から選択される。最も好ましくは、Ar⁴は、非置換のフェニレン基である。

【0105】

好ましくは、Ar²およびAr³は、出現毎に同一であるかまたは異なり、6 ~ 24の芳香族環原子を有し、それぞれのケースにおいて、1以上のR¹ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族またはヘテロ芳香族環系である。特に好ましいAr²およびAr³基は、出現毎に同一であるかまたは異なり、ベンゼン、オルト-、メタ-もしくはパラ-ピフェニル、オルト-、メタ-もしくはパラ-ターフェニルもしくは分岐のターフェニル、オルト-、メタ-もしくはパラ-クォーターフェニルもしくは分岐のクォーターフェニル、1-、2-、3-もしくは4-フルオレニル、1-、2-、3-もしくは4-スピロピフルオレニル、1-もしくは2-ナフチル、インドール、ベンゾフラン、ベンゾチオフェン、1-、2-、3-もしくは4-カルバゾール、1-、2-、3-もしくは4-ジベンゾフラン、1-、2-、3-もしくは4-ジベンゾチオフェン、インデノカルバゾー

ル、インドロカルバゾール、2 -、3 - もしくは4 - ピリジン、2 -、4 - または5 - ピリミジン、ピラジン、ピリダジン、トリアジン、フェナントレンまたはトリフェニレン（これらのそれぞれは、1以上のR¹ラジカルによって置換されていてもよい）からなる群から選択される。最も好ましくは、Ar²およびAr³は、出現毎に同一であるかまたは異なり、ベンゼン、ピフェニル、特にオルト -、メタ - もしくはパラ - ピフェニル、ターフェニル、特にオルト -、メタ - もしくはパラ - ターフェニルもしくは分岐のターフェニル、クォーターフェニル、特にオルト -、メタ - もしくはパラ - クォーターフェニルもしくは分岐のクォーターフェニル、フルオレン、特に1 -、2 -、3 - もしくは4 - フルオレン、またはスピロピフルオレン、特に1 -、2 -、3 - もしくは4 - スピロピフルオレンからなる群から選択される。

10

【0106】

本発明のさらに好ましい形態において、R¹は、出現毎に同一であるかまたは異なり、H、D、F、CN、1~10の炭素原子を有する直鎖のアルキル基または3~10の炭素原子を有する、分岐もしくは環状のアルキル基（ここで、アルキル基は、それぞれのケースにおいて、1以上のR²ラジカルによって置換されていてもよい）、または6~24の芳香族環原子を有し、それぞれのケースにおいて、1以上のR²ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族もしくはヘテロ芳香族環系からなる群から選択される。本発明の特に好ましい形態において、R¹は、出現毎に同一であるかまたは異なり、H、1~6の炭素原子、特に1、2、3または4の炭素原子を有する直鎖のアルキル基、または3~6の炭素原子を有する、分岐もしくは環状のアルキル基（ここで、アルキル基は1以上のR⁵ラジカルによって置換されていてもよいが、好ましくは非置換である）、または6~13の芳香族環原子を有し、それぞれのケースにおいて、1以上のR⁵ラジカルによって置換されていてもよいが、好ましくは非置換である、芳香族またはヘテロ芳香族環系からなる群から選択される。

20

【0107】

本発明のさらに好ましい形態において、R²は、出現毎に同一であるかまたは異なり、H、1~4の炭素原子を有するアルキル基、または6~10の炭素原子を有するアリール基（これは、1~4の炭素原子を有するアルキル基によって置換されていてもよいが、好ましくは非置換である）である。

【0108】

同時に、真空蒸着によって処理される本発明の化合物において、アルキル基は、好ましくは5以下の炭素原子、より好ましくは4以下の炭素原子、最も好ましくは1以下の炭素原子を有する。溶液から処理される化合物では、好適な化合物は、10までの炭素原子を有するアルキル基、特に分岐アルキル基によって置換された化合物、またはオリゴアリーレン基、例えばオルト -、メタ - もしくはパラ - ターフェニルもしくは分岐のターフェニルまたはクォーターフェニル基によって置換された化合物である。

30

【0109】

さらに、Y基がN(Ar)、N(R)、B(Ar)またはB(R)を表し、窒素またはホウ素原子に結合されたArまたはRラジカルが、X³基に結合された窒素またはホウ素原子を有するヘテロ芳香族5員環を形成しないケースであってよい。

40

【0110】

さらに、Y基がN(Ar)、N(R)、B(Ar)またはB(R)を表し、窒素またはホウ素原子に結合されたArまたはRラジカルが、窒素またはホウ素原子を有するヘテロ芳香族5員環を構成しないケースであってよい。

【0111】

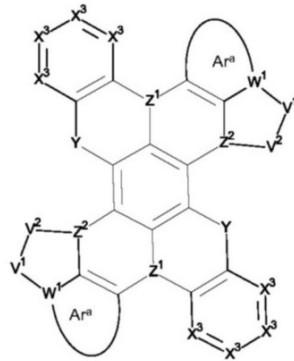
さらに、本化合物が、式(I)、(IIa)~(II d)、(III-1)~(III-15)、(IIIa-1)~(III d-15)、(IV-1)~(IV-28)、(IVa-1)~(IVf-28)、(V-1)~(V-16)、(VI-1)~(VI-9)および/または(VII-1)~(VII-14)の構造をちょうど2つまたはちょうど3つ含むケースであってよい。

50

【 0 1 1 2 】

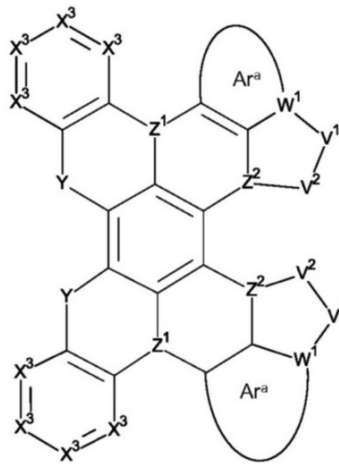
好ましい形態において、本化合物は、式 (D - 1)、(D - 2) および (D - 3) の化合物から選択される。

【 化 2 0 】



式 (D-1)

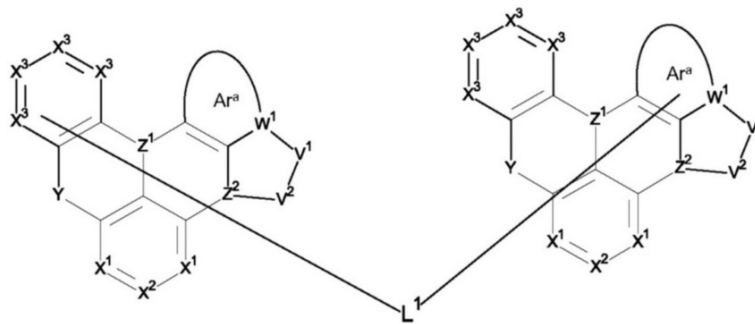
10



式 (D-2)

20

30



式 (D-3)

40

ここで、 L^1 基は連結基を示し、好ましくは、結合、または 5 ~ 40、好ましくは 5 ~ 30 の芳香族環原子を有し、1 以上の R^1 ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族もしくはヘテロ芳香族環系であり、使用されるさらなる記号および添え字は、上記、特に式 (I) に記載の意味を有する。

【 0 1 1 3 】

本発明のさらに好ましい形態において、 L^1 は、結合、または 5 ~ 14 の芳香族もしくは

50

はヘテロ芳香族環原子を有する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系、好ましくは6～12の炭素原子を有する芳香族環系であり、これは1以上のR¹ラジカルによって置換されていてもよいが、好ましくは非置換であり、ここで、R¹は、上記、特に式(I)に記載の意味を有していてもよい。より好ましくは、L¹は、6～10の芳香族環原子を有する芳香族環系、または6～13のヘテロ芳香族環原子を有する芳香族環系(これらのそれぞれは、1以上のR²ラジカルによって置換されていてもよいが、好ましくは非置換であり、ここで、R²は、上記、特に式(I)に記載の意味を有していてもよい)である。

【0114】

さらに好ましくは、とりわけ(D3)を含む式に示される記号L¹は、出現毎に同一であるかまたは異なり、結合、または5～24の環原子、好ましくは6～13の環原子、より好ましくは6～10の環原子を有する、アリールもしくはヘテロアリールラジカルであり、芳香族またはヘテロ芳香族環系の芳香族またはヘテロ芳香族基が、直接、つまり芳香族またはヘテロ芳香族基の原子を介して、さらなる基のそれぞれの原子に結合される。

10

【0115】

さらに、式(D3)に示されるL¹基は、2以下の縮合芳香族および/またはヘテロ芳香族6員環を有し、好ましくは縮合芳香族またはヘテロ芳香族環系を含まない、芳香族環系を含むケースであってよい。したがって、ナフチル構造はアントラセン構造よりも好ましい。さらに、フルオレニル、スピロピフルオレニル、ジベンゾフラニルおよび/またはジベンゾチエニル構造は、ナフチル構造よりも好ましい。

【0116】

特に好ましくは、縮合しない構造、例えば、フェニル、ピフェニル、ターフェニルおよび/またはクォーターフェニル構造である。

20

【0117】

好適な芳香族またはヘテロ芳香族環系L¹の例は、オルト-、メタ-もしくはパラ-フェニレン、オルト-、メタ-もしくはパラ-ピフェニレン、ターフェニレン、特に分岐ターフェニレン、クォーターフェニレン、特に分岐クォーターフェニレン、フルオレニレン、スピロピフルオレニレン、ジベンゾフラニレン、ジベンゾチエニレン、およびカルバゾリレンからなる群から選択され、これらのそれぞれは、1以上のR¹ラジカルによって置換されていてもよいが、好ましくは非置換である。

【0118】

上記の好ましい形態は、請求項1に記載の制限下で、互いに所望により組み合わせられてもよい。本発明の特に好ましい形態において、上記の好ましい形態は同時に起こる。

30

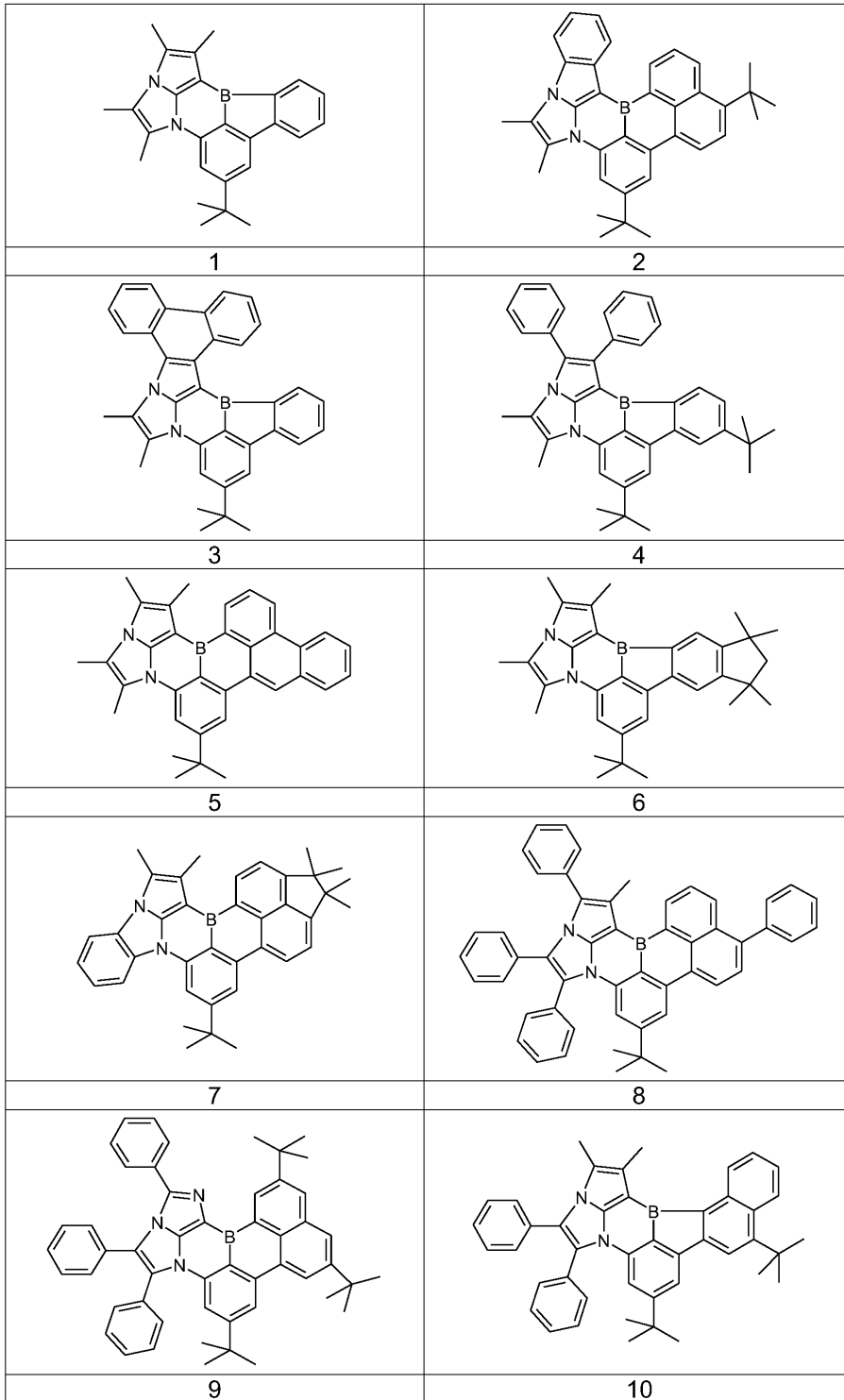
【0119】

上記の形態による好ましい化合物の例は、以下の表に示される化合物である。

40

50

【化 2 1 - 1】



10

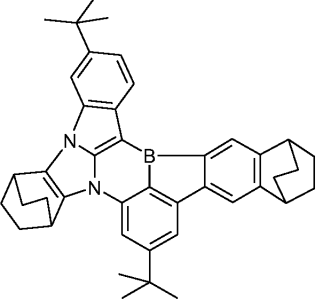
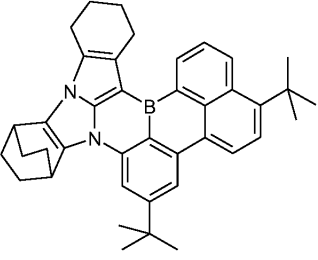
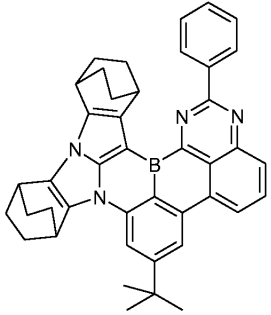
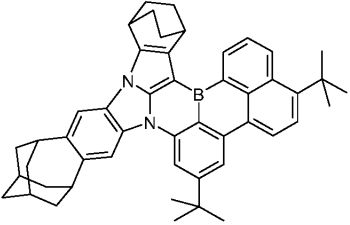
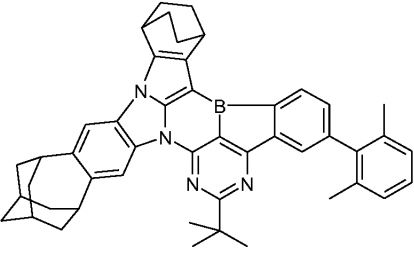
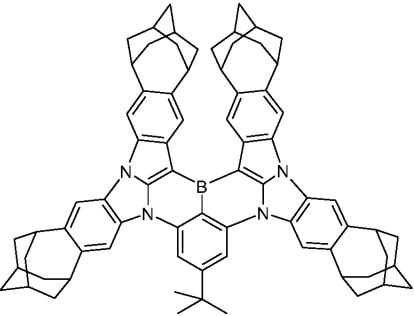
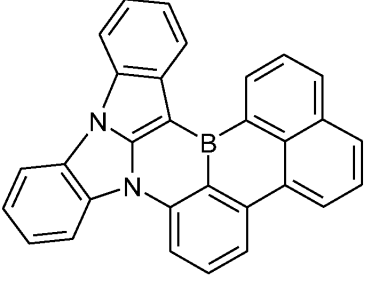
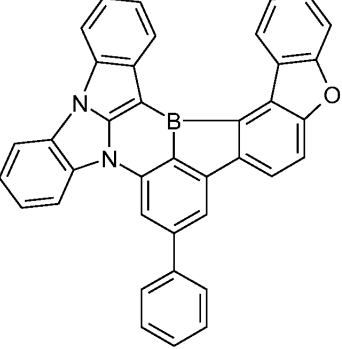
20

30

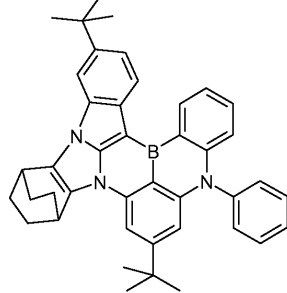
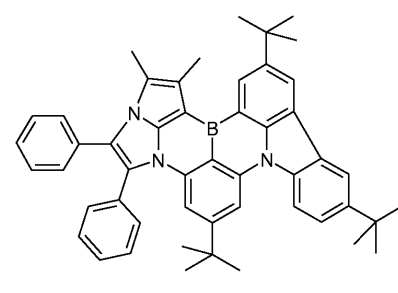
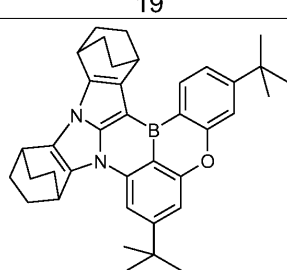
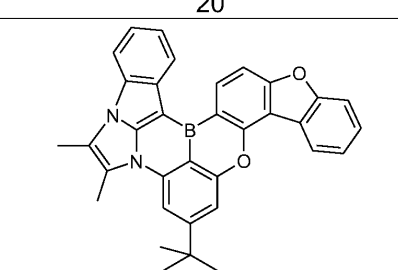
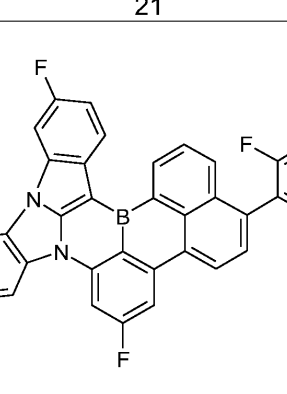
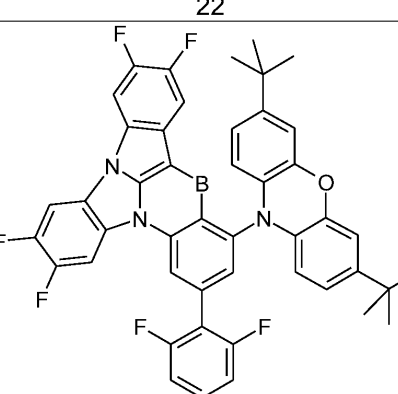
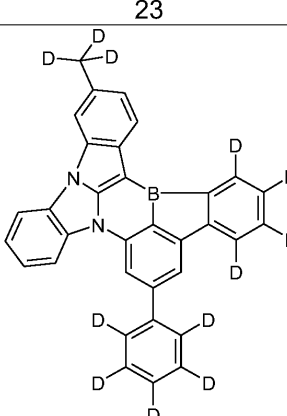
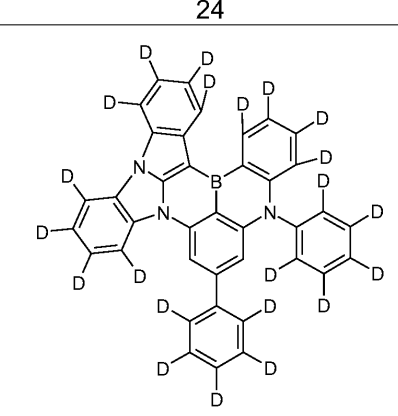
40

50

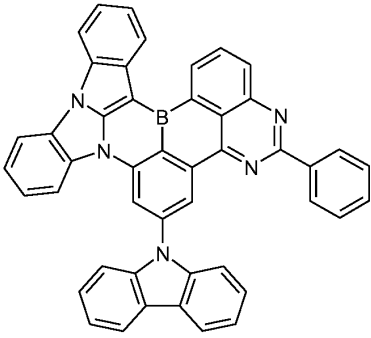
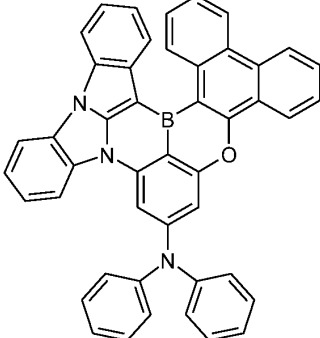
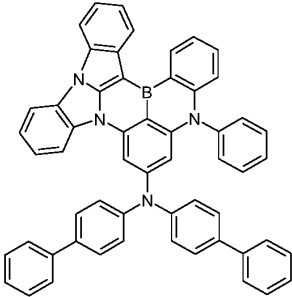
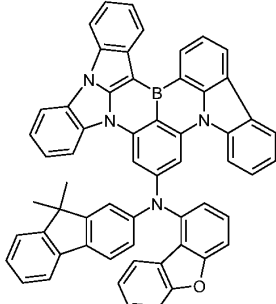
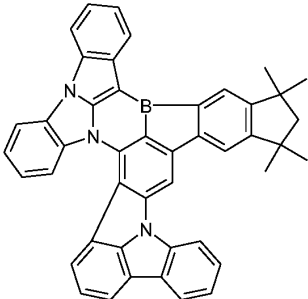
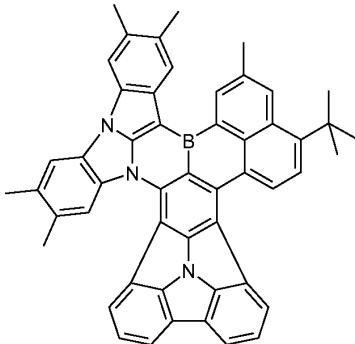
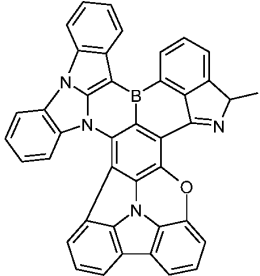
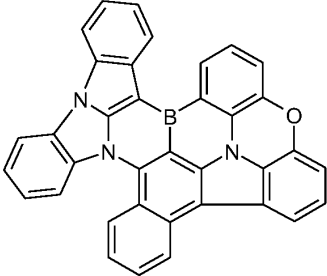
【化 2 1 - 2】

 <p>11</p>	 <p>12</p>	10
 <p>13</p>	 <p>14</p>	20
 <p>15</p>	 <p>16</p>	30
 <p>17</p>	 <p>18</p>	40

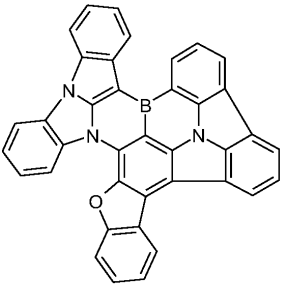
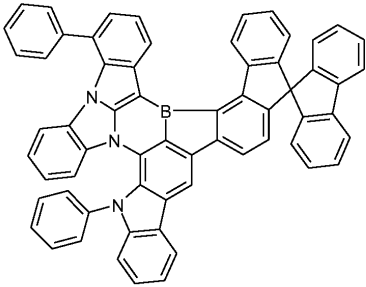
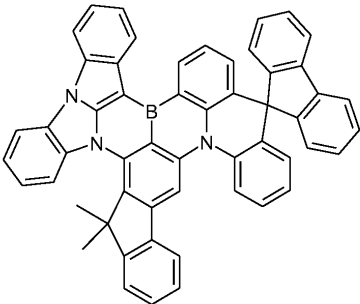
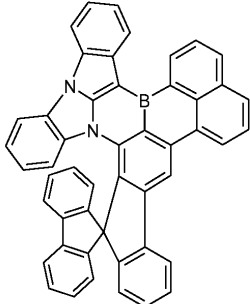
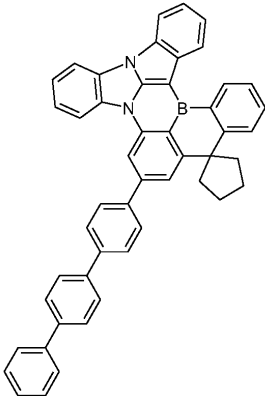
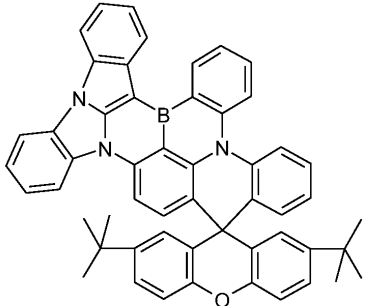
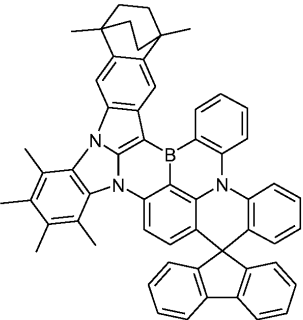
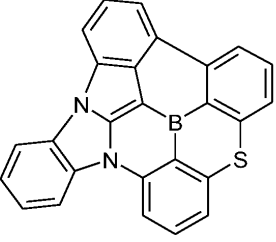
【化 2 1 - 3】

		10
		20
		30
		40

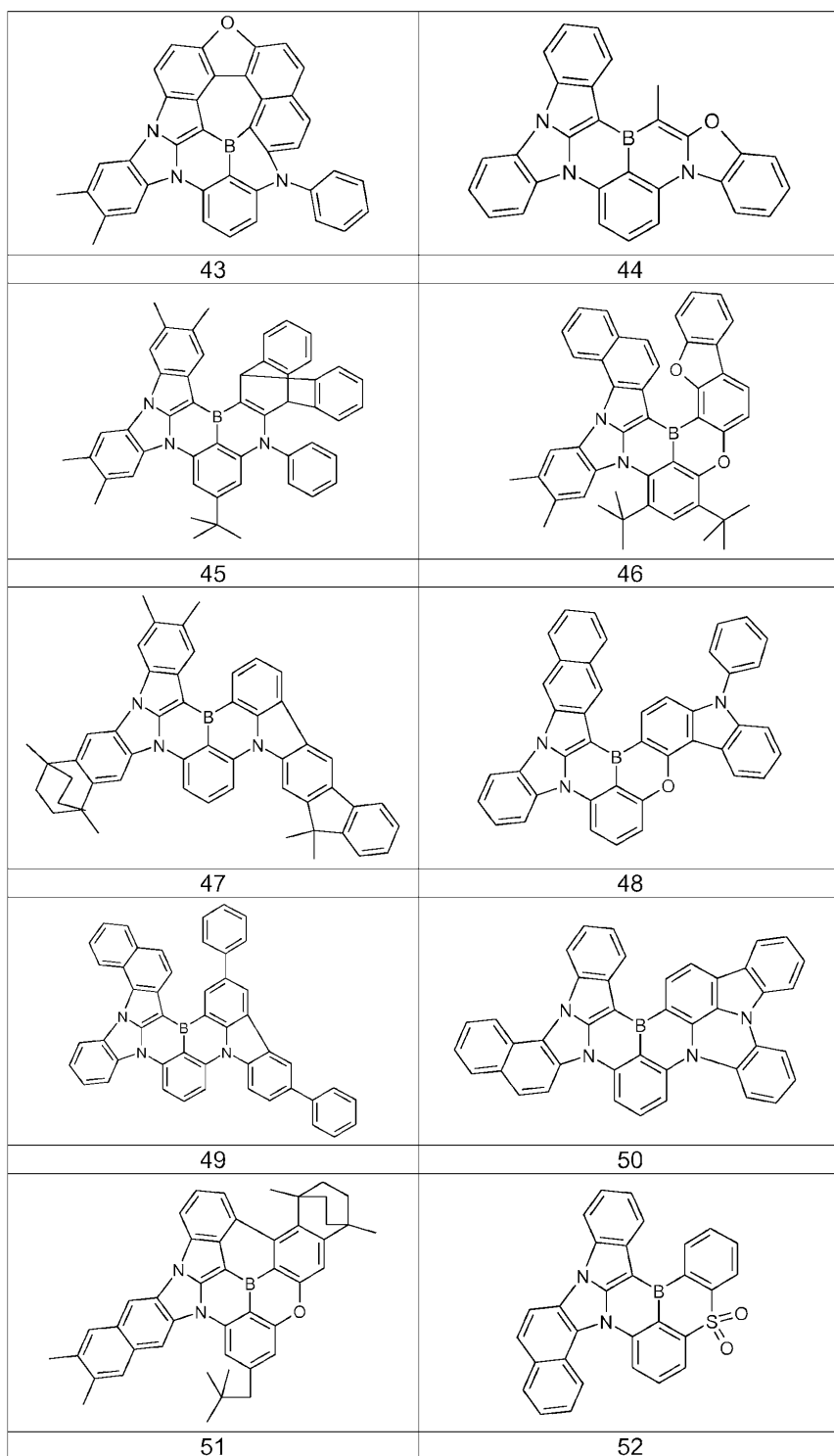
【化 2 1 - 4】

 <p>27</p>	 <p>28</p>	10
 <p>29</p>	 <p>30</p>	20
 <p>31</p>	 <p>32</p>	30
 <p>33</p>	 <p>34</p>	40

【化 2 1 - 5】

 35	 36	10
 37	 38	20
 39	 40	30
 41	 42	40

【化 2 1 - 6】



10

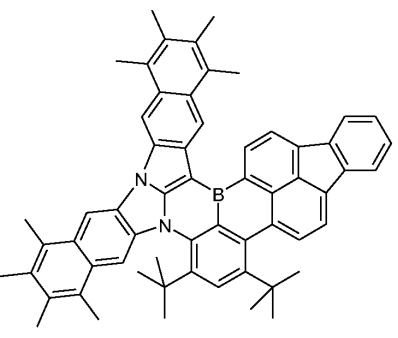
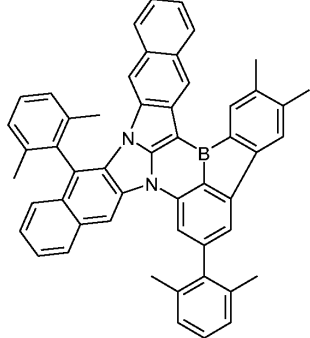
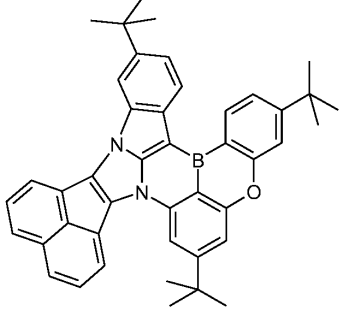
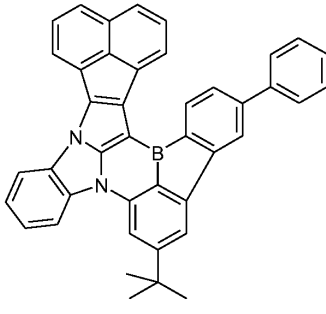
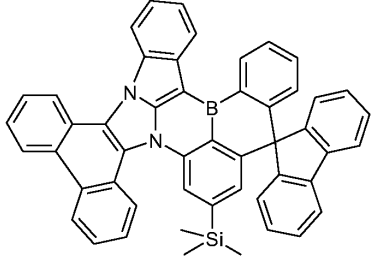
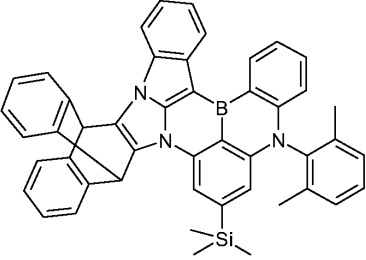
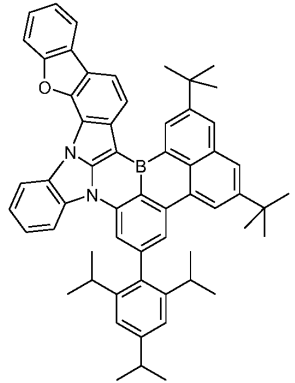
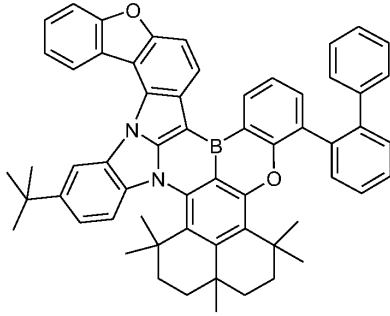
20

30

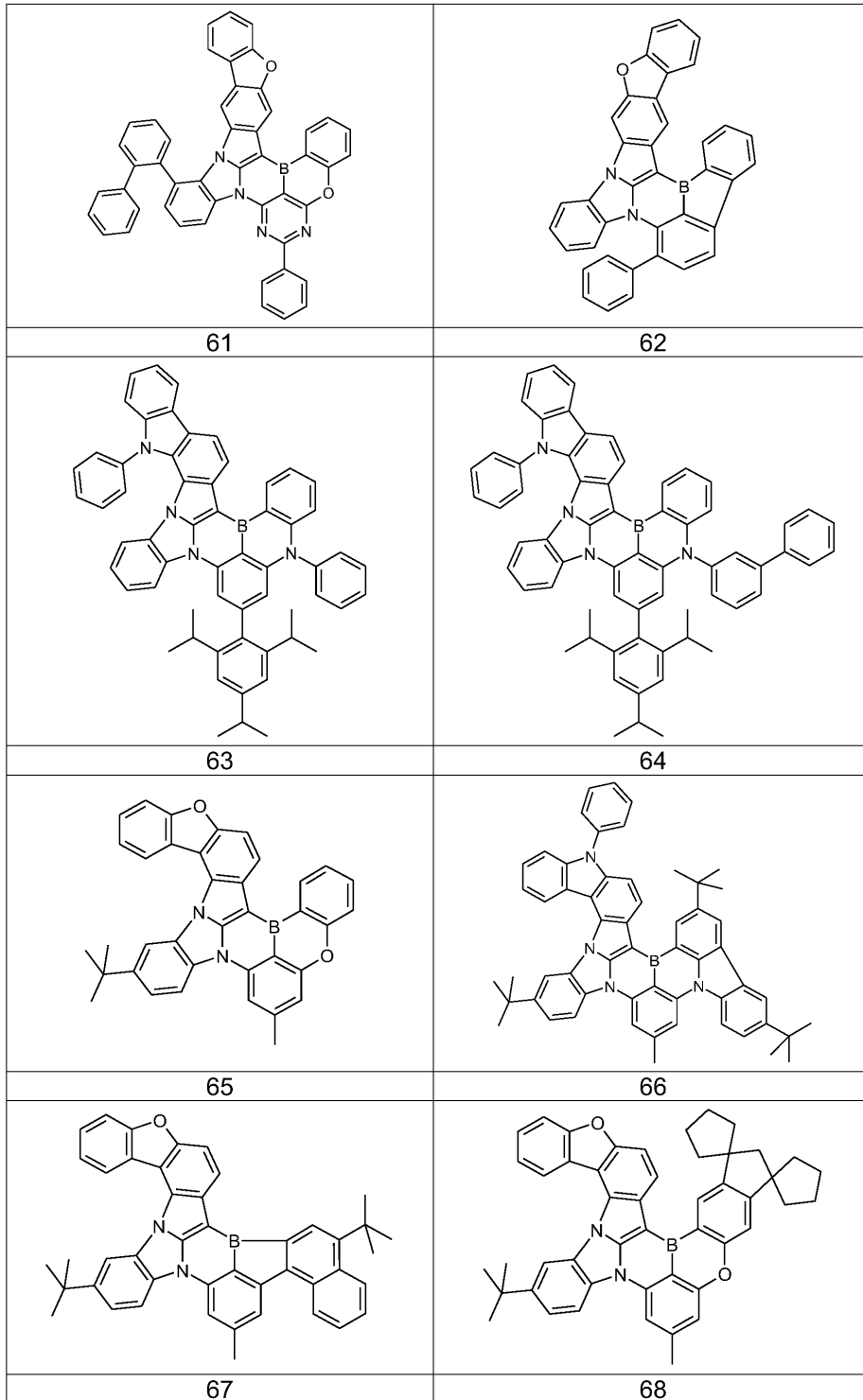
40

50

【化 2 1 - 7】

 <p>53</p>	 <p>54</p>	10
 <p>55</p>	 <p>56</p>	20
 <p>57</p>	 <p>58</p>	30
 <p>59</p>	 <p>60</p>	40

【化 2 1 - 8】



10

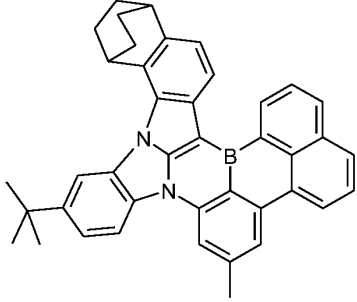
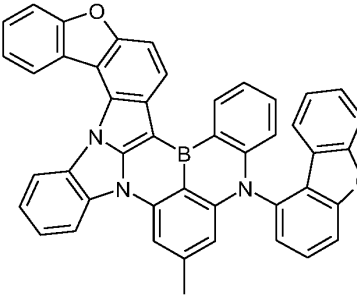
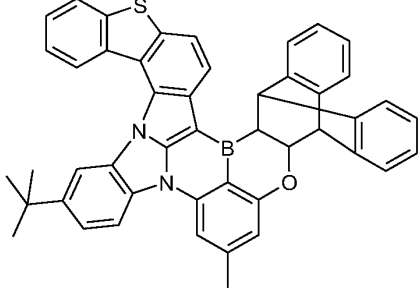
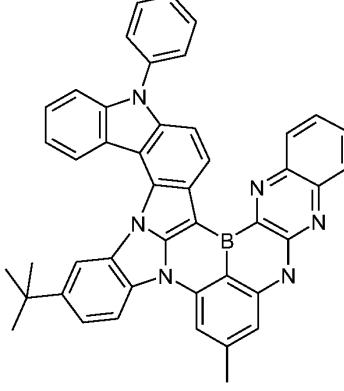
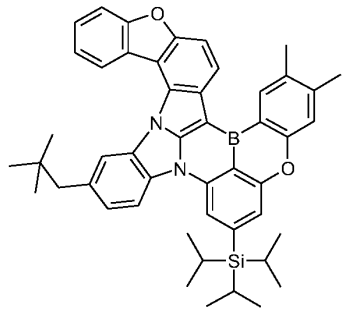
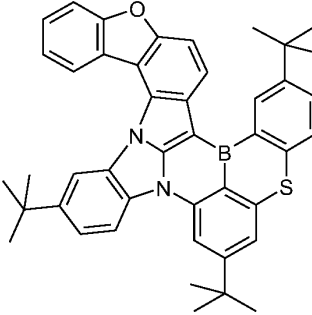
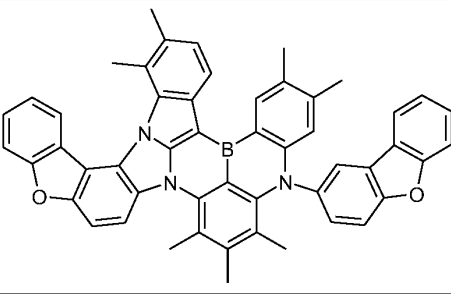
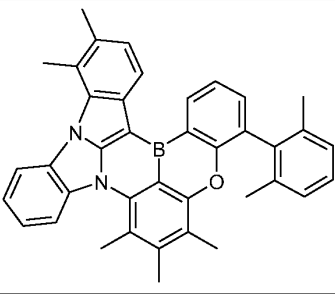
20

30

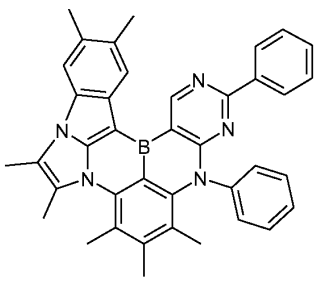
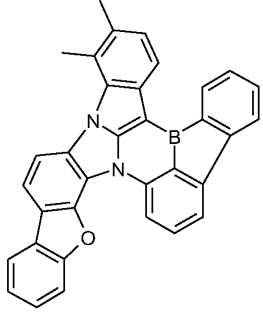
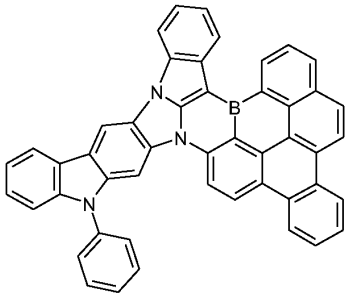
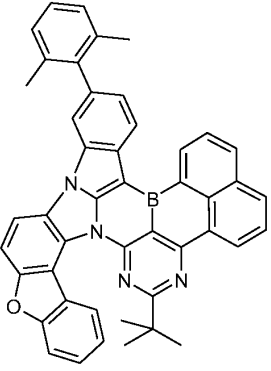
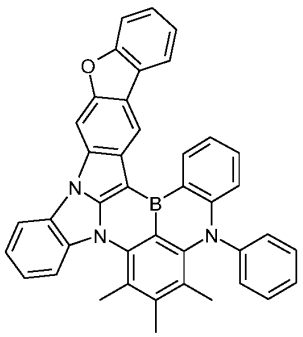
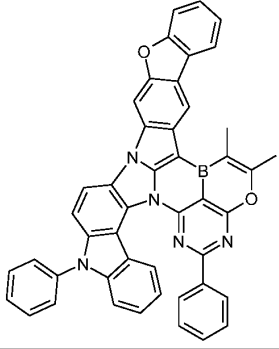
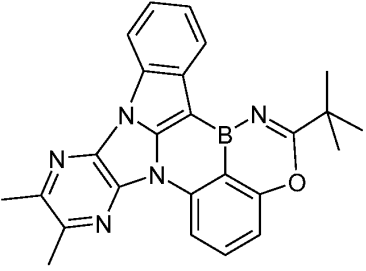
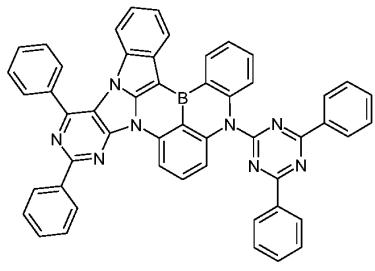
40

50

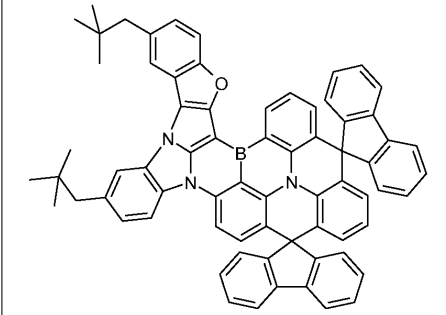
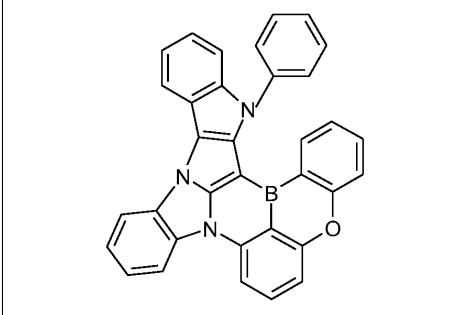
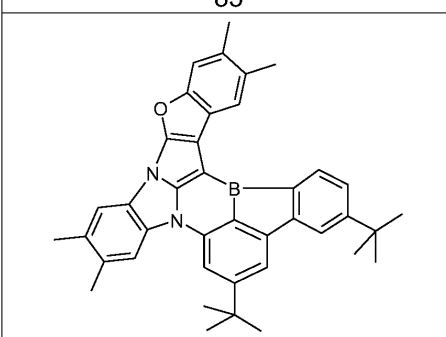
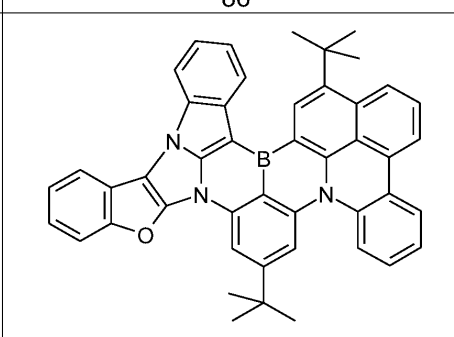
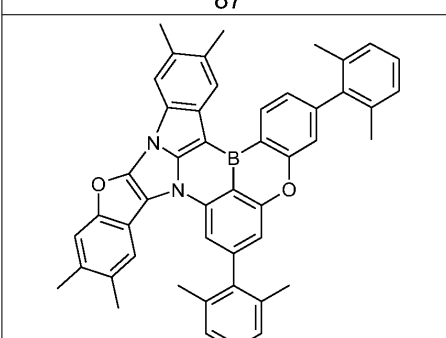
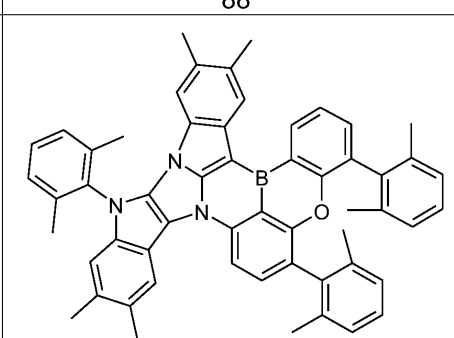
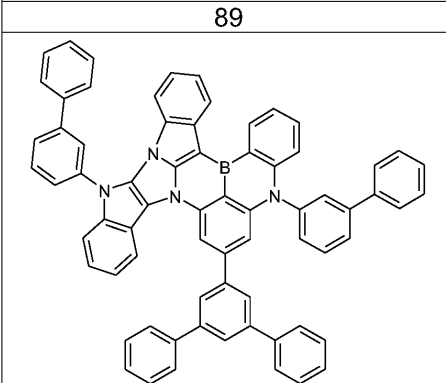
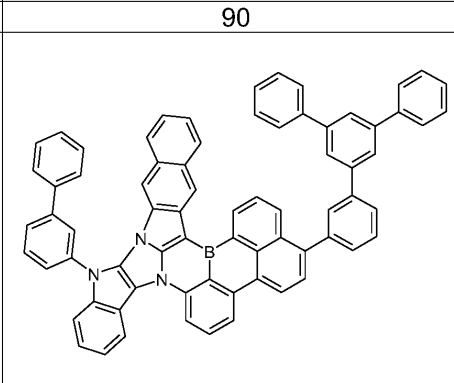
【化 2 1 - 9】

		10
		20
		30
		40

【化 2 1 - 1 0】

		10
77	78	
		20
79	80	
		30
81	82	
		40
83	84	

【化 2 1 - 1 1】

	
85	86
	
87	88
	
89	90
	
91	92

10

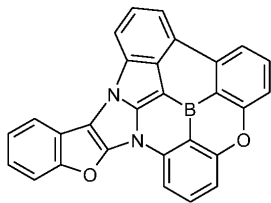
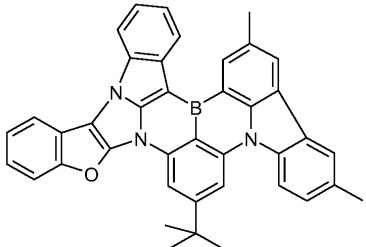
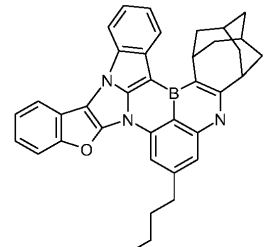
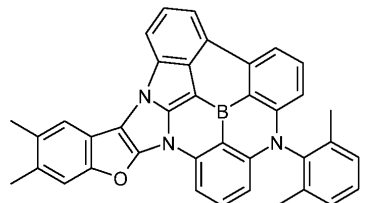
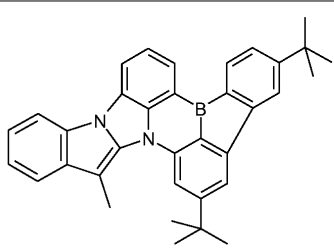
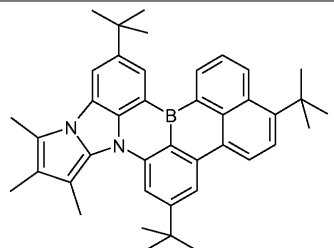
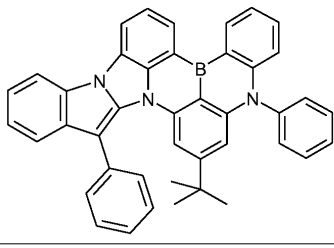
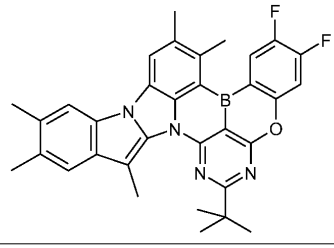
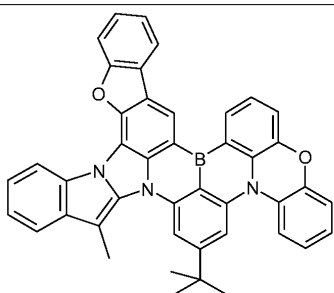
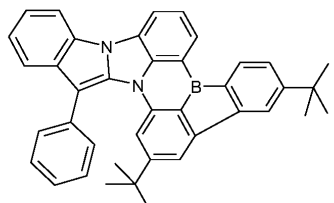
20

30

40

50

【化 2 1 - 1 2】

	
93	94
	
95	96
	
97	98
	
99	100
	
101	102

10

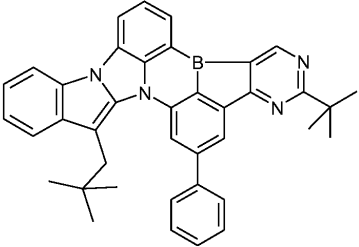
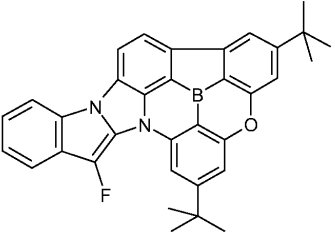
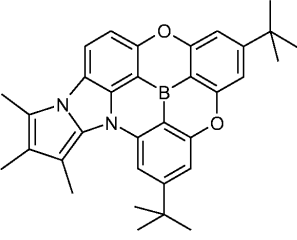
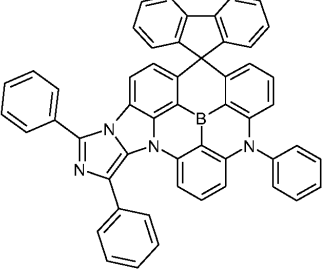
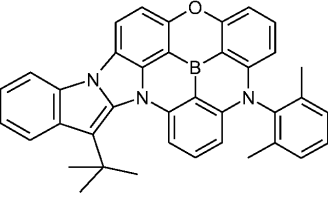
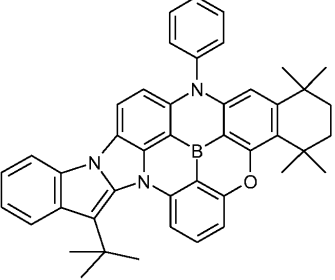
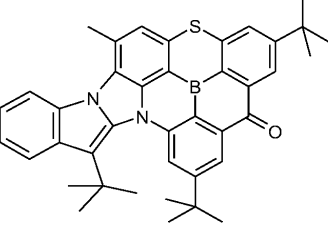
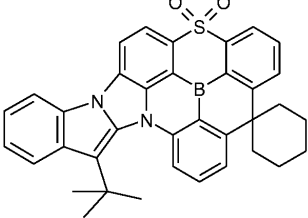
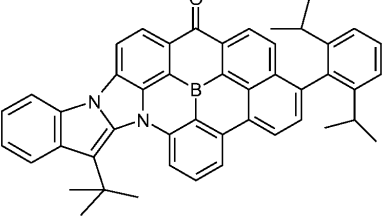
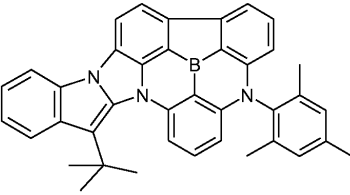
20

30

40

50

【化 2 1 - 1 3】

		103	104
		105	106
		107	108
		109	110
		111	112

10

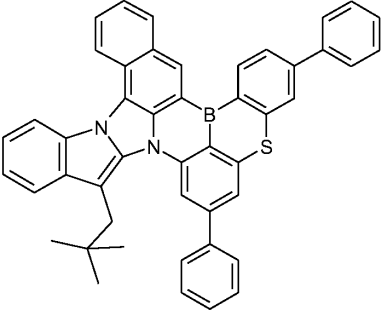
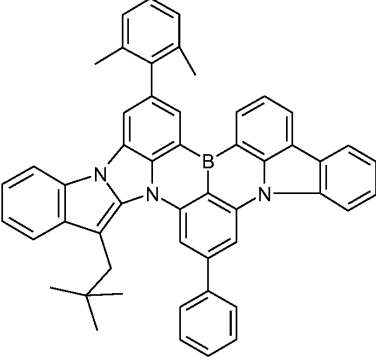
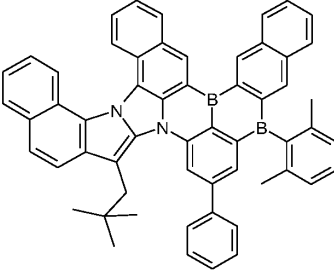
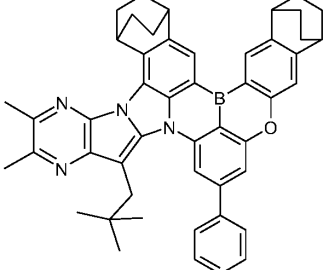
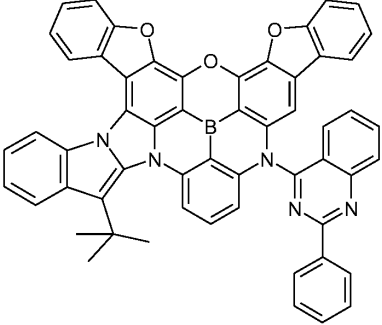
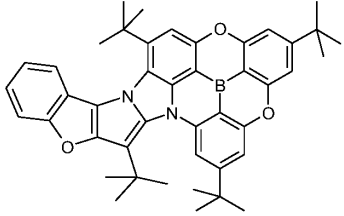
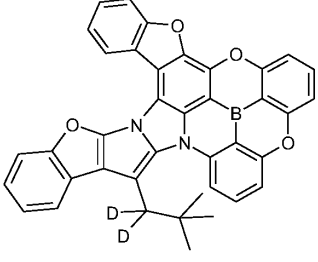
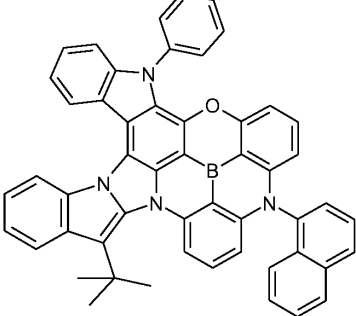
20

30

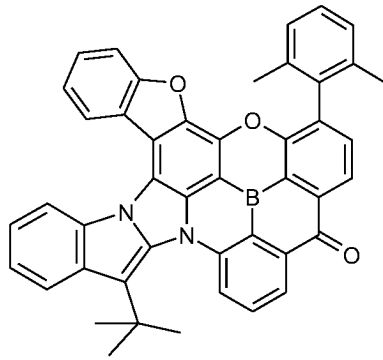
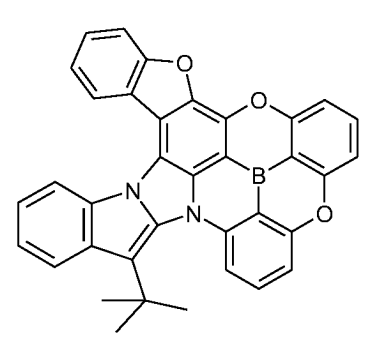
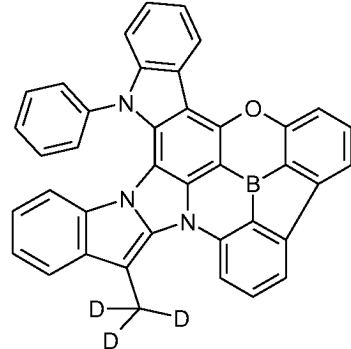
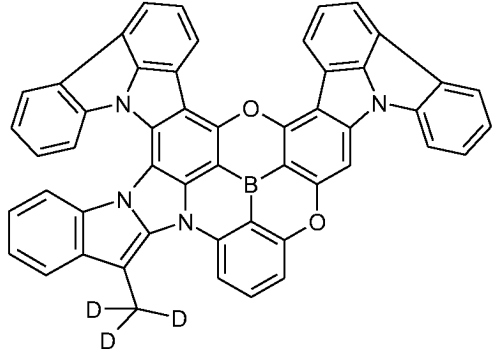
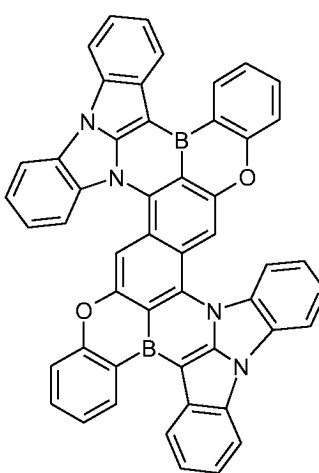
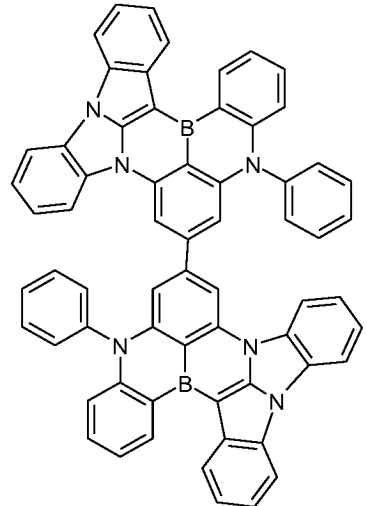
40

50

【化 2 1 - 1 4】

 <p>113</p>	 <p>114</p>	10
 <p>115</p>	 <p>116</p>	20
 <p>117</p>	 <p>118</p>	30
 <p>119</p>	 <p>120</p>	40

【化 2 1 - 1 5】

	
121	122
	
123	124
	
125	126

10

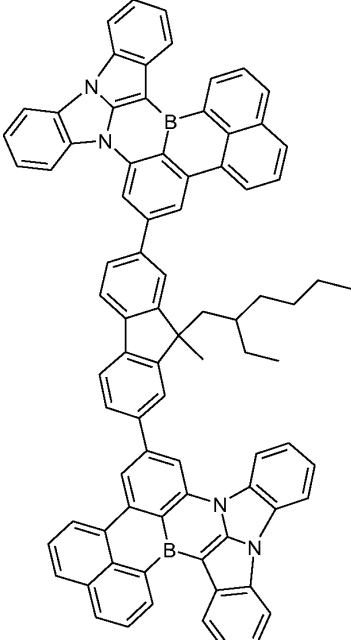
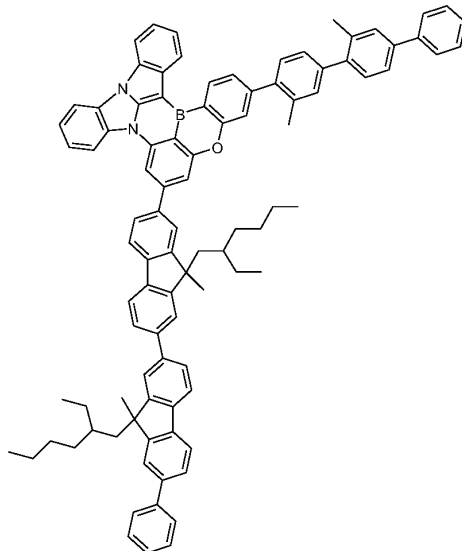
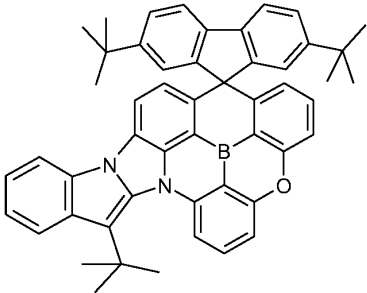
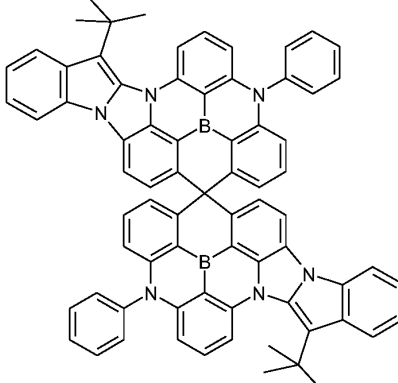
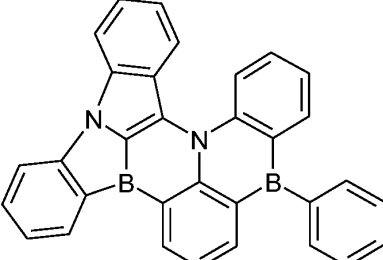
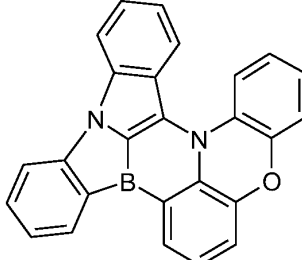
20

30

40

50

【化 2 1 - 1 6】

	
127	128
	
129	130
	
131	132

10

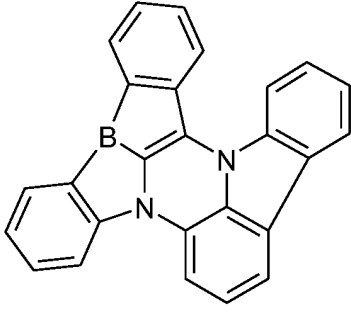
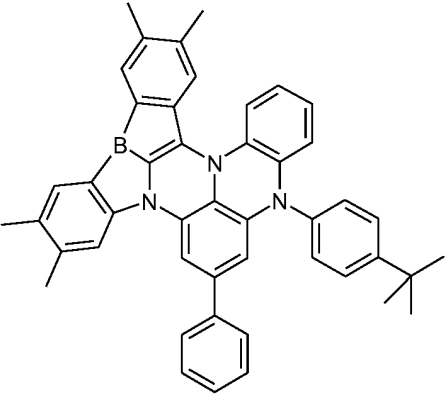
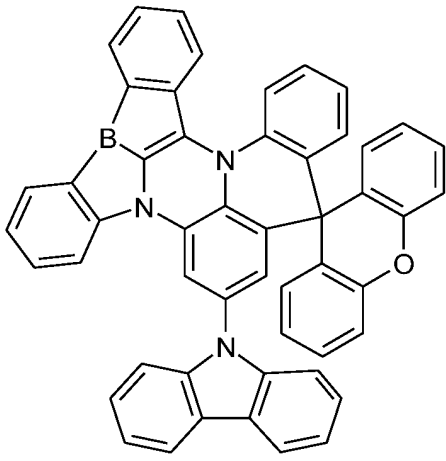
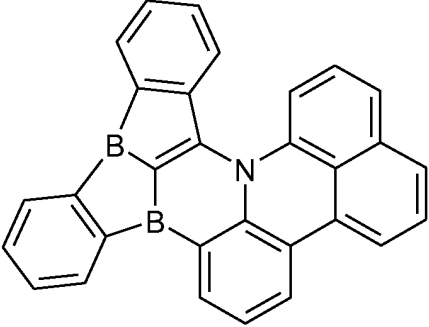
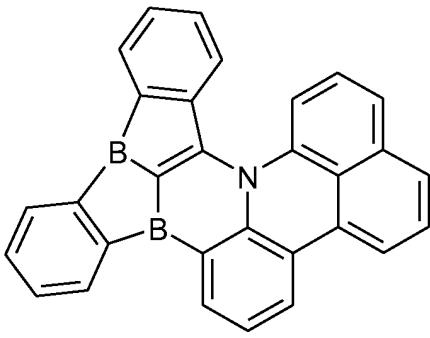
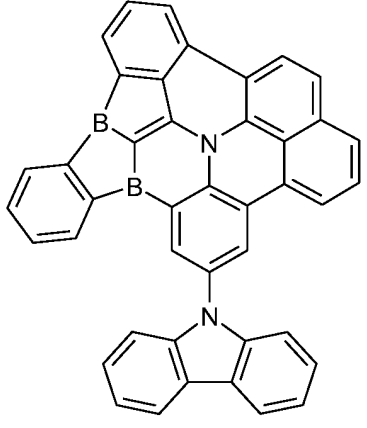
20

30

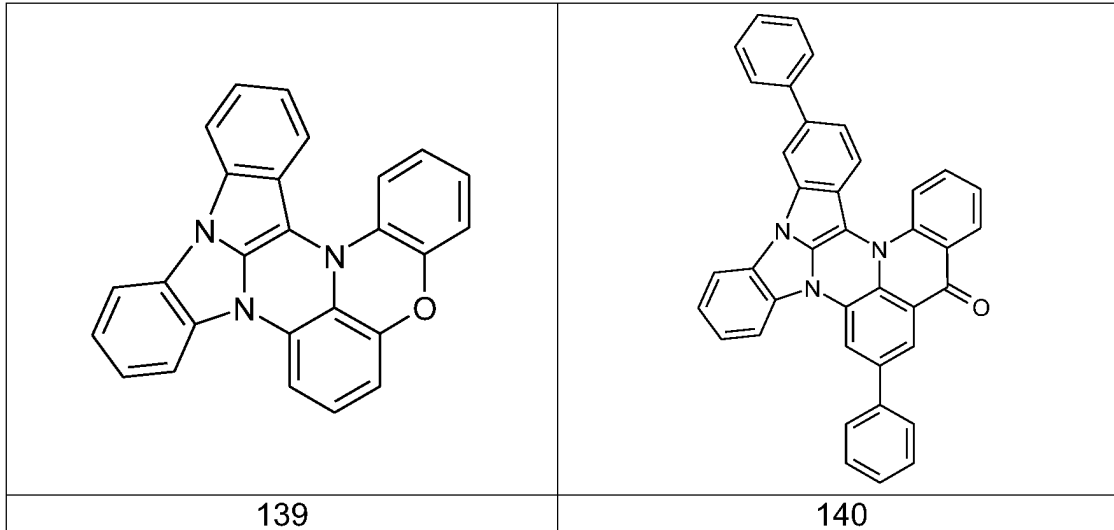
40

50

【化 2 1 - 1 7】

		10
133	134	
		20
135	136	
		30
137	138	40

【化 2 1 - 1 8】



10

【0 1 2 0】

本発明の化合物の好ましい形態は、具体的に実施例において説明され、これらの化合物は、本発明の全ての目的のために単独またはさらなる化合物と組み合わせて使用することができる。

20

【0 1 2 1】

請求項 1 で規定された条件が満たされるのであれば、上記の好ましい形態は、所望により、互いに組み合わせることができる。本発明の特に好ましい形態において、上記の好ましい形態は、同時に適用される。

【0 1 2 2】

本発明の化合物は、原則的として、種々の方法により製造することができる。しかし、これ以下に記載する方法が特に好適であることが見出されている。

【0 1 2 3】

したがって、本発明は、少なくとも 1 つの Z^2 基を有する基本骨格または Z^2 基のうちの 1 つの前駆体が合成され、そして、 Z^1 基が、メタル化反応、求核芳香族置換反応またはカップリング反応によって導入される、本発明の化合物の調製方法をさらに提供する。

30

【0 1 2 4】

Z^2 基を有する基本骨格を含む好適な化合物は、多くの場合、商業的に入手することができ、その際、実施例で詳記された出発化合物は、そこで参照されているように、公知の方法によって得ることができる。

【0 1 2 5】

これらの化合物は、さらなる化合物と、公知のカップリング反応で、反応させることができ、この目的のために必要な条件は当業者に周知であり、また実施例における詳細な説明は、当業者がこれらの反応を実行することを支援する。

【0 1 2 6】

C - C 結合形成および / または C - N 結合形成をもたらす、特に適切でかつ好ましいカップリング反応は、ブッフパルト、スズキ、ヤマモト、スティレ、ヘック、ネギシ、ソノガシラおよびヒヤマによるものである。これらの反応はよく知られており、また実施例は、当業者にさらなる指針を提供する。

40

【0 1 2 7】

上で詳述した製造方法の基本は、原則的に類似の化合物に対する文献から知られており、当業者によって容易に本発明の化合物の製造に適用することができる。さらなる情報は、実施例に見出すことができる。

【0 1 2 8】

これらの方法により、必要に応じて、精製、例えば再結晶または昇華を伴って、本発明

50

の化合物を、高純度で、好ましくは99%より高く ($^1\text{H-NMR}$ および / または HPLC により測定) で得ることができる。

【0129】

本発明の化合物はまた、ポリマーと混合することができる。同様に、これらの化合物をポリマーに共有結合的に組み込むことも可能である。これは特に、臭素、ヨウ素、塩素、ボロン酸もしくはボロン酸エステルなどの反応性脱離基により、またはオレフィンもしくはオキセタンなどの反応性の重合性基により置換された化合物について可能である。これらは、対応するオリゴマー、 dendrimer もしくはポリマーを製造するためのモノマーとしての使用が見出される。オリゴマー化もしくは重合は、好ましくはハロゲン官能基もしくはボロン酸官能基を介して、または重合性基を介して行われる。このような基を介して、さらにポリマーを架橋することが可能である。本発明の化合物およびポリマーは、架橋した、もしくは架橋していない層の形で使用できる。

10

【0130】

本発明は、さらに、上で詳述した式 (I) の構造およびこの式の好ましい形態または本発明の化合物を1以上含む、ポリマー、オリゴマーまたは dendrimer であって、本発明の化合物または式 (I) の構造およびこの式の好ましい形態への、ポリマー、オリゴマーまたは dendrimer への1以上の結合が存在するものを提供する。(I) の構造およびこの式の好ましい形態または化合物の連結により、これらは、従って、ポリマーまたはオリゴマーの側鎖を形成しているか、または主鎖内で結合されている。ポリマー、オリゴマーまたは dendrimer は、共役している、部分的に共役している、または共役していてもよい。オリゴマーまたはポリマーは、直鎖状、分岐状もしくは樹枝状であってもよい。オリゴマー、 dendrimer およびポリマー中の、本発明の化合物の繰り返し単位については、同じ好ましい形態が上述したように適用される。

20

【0131】

オリゴマーまたはポリマーを製造するにあたり、本発明のモノマーは、ホモ重合またはさらなるモノマーと共重合される。式 (I) の単位、または、上記および後記されている、好ましい形態の単位が、0.01~99.9モル%、好ましくは5~90モル%、より好ましくは20~80モル%の範囲に存在することが好ましい。適切でかつ好ましい、ポリマー基本骨格を形成するコモノマーは、フルオレン (例えば、EP842208またはWO2000/022026による)、スピロビフルオレン (例えば、EP707020、EP894107またはWO2006/061181による)、パラフェニレン (例えば、WO92/18552による)、カルバゾール (例えば、WO2004/070772またはWO2004/113468による)、チオフエン (例えば、EP1028136による)、ジヒドロフェナントレン (例えば、WO2005/014689)、シス-およびトランス-インデノフルオレン (例えば、WO2004/041901またはWO2004/113412による)、ケトン (例えば、WO2005/040302による)、フェナントレン (例えば、WO2005/104264またはWO2007/017066による)、またはこれらの単位の複数から選択される。ポリマー、オリゴマーおよび dendrimer はまた、さらなる単位、例えば、正孔輸送単位、特にトリアリールアミンを基本とするもの、および / または電子輸送単位を含んでいてもよい。

30

40

【0132】

さらに、特に興味深いのは、高いガラス転移温度によって特徴付けられる本発明の化合物である。これに関連して、好ましいのは、少なくとも70、より好ましくは少なくとも110、さらにより好ましくは少なくとも125、特に好ましくは150のガラス転移温度 (DIN51005 (2005-08版) により測定) を有する、式 (I) の、または、上記および後記されている好ましい形態の構造を含む本発明の化合物である。

【0133】

液相での本発明の化合物を、例えば、スピンコーティングもしくは印刷法によって、処理するためには、本発明に係る化合物の配合物が必要とされる。これらの配合物は、例えば、溶液、分散液またはエマルジョンであってもよい。この目的のために、2以上の溶媒

50

の混合物を使用することが好ましい。適当で好ましい溶媒は、例えば、トルエン、アニソール、*o*-、*m*-もしくは*p*-キシレン、安息香酸メチル、メシチレン、テトラリン、ペラトロール、THF、メチル-THF、THP、クロロベンゼン、ジオキサン、フェノキシトルエン、特に3-フェノキシトルエン、(-)-フェンコン、1,2,3,5-テトラメチルベンゼン、1,2,4,5-テトラメチルベンゼン、1-メチルナフタレン、2-メチルベンゾチアゾール、2-フェノキシエタノール、2-ピロリジノン、3-メチルアニソール、4-メチルアニソール、3,4-ジメチルアニソール、3,5-ジメチルアニソール、アセトフェノン、 α -テルピネオール、ベンゾチアゾール、安息香酸ブチル、クメン、シクロヘキサノール、シクロヘキサノン、シクロヘキシルベンゼン、デカリン、ドデシルベンゼン、安息香酸エチル、インダン、NMP、*p*-シメン、フェネトール、1,4-ジイソプロピルベンゼン、ジベンジルエーテル、ジエチレングリコールブチルメチルエーテル、トリエチレングリコールブチルメチルエーテル、ジエチレングリコールジブチルエーテル、トリエチレングリコールジメチルエーテル、ジエチレングリコールモノブチルエーテル、トリプロピレングリコールジメチルエーテル、テトラエチレングリコールジメチルエーテル、2-イソプロピルナフタレン、ベンチルベンゼン、ヘキシルベンゼン、ヘプチルベンゼン、オクチルベンゼン、1,1-ビス(3,4-ジメチルフェニル)エタン、2-メチルビフェニル、3-メチルビフェニル、1-メチルナフタレン、1-エチルナフタレン、オクタン酸エチル、セバシン酸ジエチル、オクタン酸オクチル、ヘプチルベンゼン、イソ吉草酸メンチル、ヘキサン酸シクロヘキシル、またはこれらの溶媒の混合物である。

10

20

【0134】

したがって、本発明はさらに、少なくとも1つの本発明の化合物および少なくとも1つのさらなる化合物を含む配合物または組成物に関する。さらなる化合物は、例えば、溶媒であり、特に上記の溶媒の1つか、またはこれらの溶媒の混合物である。さらなる化合物が溶媒を含む場合、ここで、この混合物は配合物と称される。あるいは、さらなる化合物は、電子素子に同様に使用される、少なくとも1つのさらなる有機もしくは無機化合物であってよく、例えば、発光体および/またはマトリックス材料であり、ここで、これらの化合物は本発明の化合物とは異なる。好適な発光体およびマトリックス材料は、有機エレクトロルミネッセンス素子との関連で、後述される。このさらなる化合物は、ポリマーであってよい。

30

【0135】

したがって、本発明はさらに、本発明の化合物および少なくとも1つのさらなる有機機能材料を含む組成物を提供する。機能材料は、一般に、アノードとカソードとの間に導入された、有機もしくは無機材料である。好ましくは、有機機能材料は、蛍光発光体、燐光発光体、TADF(熱活性化遅延蛍光)を示す発光体、ホスト材料、電子輸送材料、電子注入材料、正孔伝導材料、正孔注入材料、電子ブロック材料、正孔ブロック材料、ワイドギャップ材料および*n*-ドーパントからなる群から選択される。

【0136】

本発明は、本発明の化合物の電子素子、特に有機エレクトロルミネッセンス素子における、好ましくは発光体として、より好ましくは緑色、赤色または青色発光体としての使用をさらに提供する。このケースにおいて、本発明の化合物は、好ましくは蛍光特性を示し、よって選択的な蛍光発光体を提供する。さらに、本発明の化合物は、ホスト材料、電子輸送材料および/または正孔伝導材料として使用されてもよい。ここで、特に、 Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、およびいずれの Z^4 基の多く、好ましくは全てが、*N*である本発明の化合物を正孔伝導材料として有利に使用することが可能である。特に、 Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、およびいずれの Z^4 基のうちの多く、好ましくは全てが、*B*である、本発明の化合物を電子輸送材料として有利に使用することも可能である。

40

【0137】

本発明は、本発明の化合物を少なくとも1つ含む電子素子をさらに提供する。本発明の意味において、電子素子は、少なくとも1つの有機化合物を含む少なくとも1つの層を含

50

む素子である。この部品は、無機材料または全体的に無機材料から形成される他の層を含むものであってもよい。

【0138】

電子素子は、好ましくは有機エレクトロルミネッセンス素子（OLED、sOLED、PLED、LEC等）からなる群から選択され、好ましくは、有機発光ダイオード（OLEDs）、小分子に基づく有機発光ダイオード（sOLED）、ポリマーに基づく有機発光ダイオード（PLED）、発光電子化学セル（LEC）、有機レーザーダイオード（O-laser）、有機プラズマ発光素子（D.M.Koller et al., Nature Photonics 2008, 1-4）、有機集積回路（O-IC）、有機電界効果トランジスタ（O-FET）、有機薄膜トランジスタ（O-TFT）、有機発光トランジスタ（O-LET）、有機太陽電池（O-SC）、有機光検出器、有機光受容器、有機電場消光素子（O-FQD）、有機電子センサであり、好ましくは有機エレクトロルミネッセンス素子（OLED、sOLED、PLED、LEC等）であり、より好ましくは有機発光ダイオード（OLED）、小分子に基づく有機発光ダイオード（sOLED）、ポリマーに基づく有機発光ダイオード（PLED）であり、特には燐光OLEDである。

10

【0139】

有機エレクトロルミネッセンス素子は、カソード、アノード、および少なくとも一つの発光層を具備してなる。これらの層以外に、それはまた、さらなる層、例えば、それぞれのケースにおいて、1つ以上の正孔注入層、正孔輸送層、正孔ブロック層、電子輸送層、電子注入層、励起子ブロック層、電子ブロック層、および/または電荷発生層を含んでもよい。例えば、励起子ブロック機能を有する中間層が、同様に2つの発光層の間に導入されてもよい。同様に、例えば2つの発光層の間に導入される、励起子ブロック機能を有する中間層も可能である。しかし、これらの層の各々は、必ずしも存在しなければならないとは限らないということが、指摘されるべきである。このケースにおいて、有機エレクトロルミネッセンス素子が発光層、または複数の発光層を含むことが可能である。複数の発光層が存在する場合、これらは、好ましくは、全体として、380nm~750nmに複数の発光極大を有し、その結果、全体として白色発光を生じる、すなわち、蛍光または燐光を発することができる様々な発光化合物が、発光層中に用いられる。特に好ましくは、3つの発光層（3つの層が青色、緑色、および橙色または赤色発光を示す）を有する系である。本発明による有機エレクトロルミネッセンス素子は、特に白色発光のための、直列OLEDであってよい。

20

30

【0140】

本発明の化合物は、正確な構造によって、異なる層に使用されていてもよい。好ましくは、式(I)または上記の好ましい形態の化合物の、発光層における、発光体として、好ましくは赤色、緑色または青色発光体として、含む有機エレクトロルミネッセンス素子である。

【0141】

本発明の化合物が発光層中で発光体として使用される場合、好ましくは、既知の好適なマトリックス材料を用いる。

40

【0142】

本発明の化合物およびマトリックス材料の好ましい混合物は、発光体およびマトリックス材料の混合物全体を基準として、99体積%~1体積%、好ましくは98体積%~10体積%、より好ましくは97体積%~60体積%、特に95体積%~80体積%のマトリックス材料を含む。対応して、混合物は、発光体およびマトリックス材料の混合物全体を基準として、1体積%~99体積%、好ましくは2体積%~90体積%、より好ましくは3体積%~40体積%、特に5体積%~20体積%の発光体を含む。

【0143】

本発明の化合物と組み合わせで使用されうる好適なマトリックス材料は、芳香族ケトン、芳香族ホスフィンオキシド、または芳香族スルホキシドもしくはスルホン、例えばWO

50

2004/013080、WO2004/093207、WO2006/005627またはWO2010/006680による、トリアリールアミン、カルバゾール誘導体、例えばCBP(N,N-ビスカルバゾリルピフェニル)またはWO2005/039246、US2005/0069729、JP2004/288381、EP1205527、WO2008/086851またはWO2013/041176に開示されるカルバゾール誘導体、インドロカルバゾール誘導体、例えばWO2007/063754またはWO2008/056746による、インデノカルバゾール誘導体、例えばWO2010/136109、WO2011/000455、WO2013/041176またはWO2013/056776による、アザカルバゾール誘導体、例えばEP1617710、EP1617711、EP1731584、JP2005/347160による、双極性マトリックス材料、例えばWO2007/137725による、シラン、例えばWO2005/111172による、アザポロールまたはポロン酸エステル、例えばWO2006/117052による、トリアジン誘導体、例えばWO2007/063754、WO2008/056746、WO2010/015306、WO2011/057706、WO2011/060859またはWO2011/060877による、亜鉛錯体、例えばEP652273またはWO2009/062578による、ジアザシロールまたはテトラアザシロール誘導体、例えばWO2010/054729による、ジアザホスホール誘導体、例えばWO2010/054730による、架橋カルバゾール誘導体、例えばWO2011/042107、WO2011/060867、WO2011/088877およびWO2012/143080による、トリフェニレン誘導体、例えばWO2012/048781による、ジベンゾフラン誘導体、例えばWO2015/169412、WO2016/015810、WO2016/023608、WO2017/148564またはWO2017/148565による、またビスカルバゾール、例えばJP3139321B2による。

【0144】

さらに、使用される共ホスト(c o - h o s t)は、あったとしてもかなりの程度において電荷輸送に関与しない化合物であってよく、例えばWO2010/108579に開示される。共マトリックス(c o - m a t r i x)材料として本発明の化合物との組み合わせにおいて特に好適であるのは、大きなバンドギャップを有し、あったとしてもかなりの程度において発光層の電荷輸送に関与しない化合物である。そのような材料は、好ましくは純粋な炭化水素である。そのような材料の例は、例えばWO2009/124627またはWO2010/006680に見出すことができる。

【0145】

好ましい形態において、発光体として使用される本発明の化合物は、好ましくは、1以上の燐光発光材料(三重項発光体)および/またはTADF(熱活性化遅延蛍光)ホスト材料である化合物との組み合わせで使用される。ここで、好ましくは、ハイパーフルオレッセンスおよび/またはハイパーホスホレッセンス系を形成する。

【0146】

WO2015/091716A1およびWO2016/193243A1は、燐光化合物および蛍光発光体の両方を発光層に含むOLEDを開示し、エネルギーは燐光化合物から蛍光発光体へ移動する(ハイパーホスホレッセンス)。この意味において、燐光化合物は、したがって、ホスト材料としてふるまう。当業者が知っているとおり、ホスト材料からのエネルギーが最大効率で発光体へ移動することが可能とするために、発光体と比較して、ホスト材料は、より高い一重項および三重項エネルギーを有する。従来技術で開示される系は、ちょうどそのようなエネルギー関係を有する。

【0147】

本発明の意味において、燐光(ホスホレッセンス)は、より高いスピン多重度、すなわちスピン状態 > 1 、を有する励起状態、特に励起三重項状態からの、発光を意味するものと解される。本願の意味において、遷移金属またはランタニド、特に全てのイリジウム、白金および銅錯体を含む全ての発光錯体は、燐光化合物とみなされることとする。

10

20

30

40

50

【0148】

好適な燐光化合物 (= 三重項発光体) は、特に、好ましくは可視領域において、適切に励起された時、発光し、かつ、さらに、原子番号が20より大きい、好ましくは、38より大きくかつ84未満の、より好ましくは、56より大きくかつ80未満の原子を、特にこの原子番号を有する金属を、少なくとも1つ含む化合物である。用いられる好ましい燐光発光体は、銅、モリブデン、タングステン、レニウム、ルテニウム、オスミウム、ロジウム、イリジウム、パラジウム、白金、銀、金またはユーロピウムを含む化合物であり、特に、イリジウムまたは白金を含む化合物である。

【0149】

上記の発光体の例は、出願WO00/70655、WO2001/41512、WO2002/02714、WO2002/15645、EP1191613、EP1191612、EP1191614、WO05/033244、WO05/019373、US2005/0258742、WO2009/146770、WO2010/015307、WO2010/031485、WO2010/054731、WO2010/054728、WO2010/086089、WO2010/099852、WO2010/102709、WO2011/032626、WO2011/066898、WO2011/157339、WO2012/007086、WO2014/008982、WO2014/023377、WO2014/094961、WO2014/094960、WO2015/036074、WO2015/104045、WO2015/117718、WO2016/015815、WO2016/124304、WO2017/032439、WO2018/011186、WO2018/001990、WO2018/019687、WO2018/019688、WO2018/041769、WO2018/054798、WO2018/069196、WO2018/069197、WO2018/069273、WO2018/178001、WO2018/177981、WO2019/020538、WO2019/115423、WO2019/158453およびWO2019/179909に見出すことができる。一般に、燐光エレクトロルミネッセンス素子の分野で従来技術で使用されており、有機エレクトロルミネッセンス素子の分野で当業者に知られているような、燐光錯体の全ては、好適であり、そして当業者は、発明的工夫をなすことなく、さらなる燐光錯体を使用することができる。

【0150】

本発明の化合物は、好ましくは、上記に記載のTADFホスト材料および/またはTADF発光体との組み合わせで使用されてもよい。

【0151】

熱活性化遅延蛍光(TADF)に関するプロセスは、例えばB. H. Uoyama et al., Nature 2012, Vol. 492, 234に開示される。このプロセスを可能にするために、例えば約2000 cm⁻¹未満の比較的低い一重項-三重項分離E(S₁-T₁)が発光体に必要とされる。原則としてスピン禁制であるT₁-S₁遷移を広げるために、発光体と同様、マトリックスにスピン軌道結合を有するさらなる化合物を提供することができ、それによって項間格差が空間的近接または分子間で可能となる相互作用によって達成されるか、またはスピン軌道結合が発光体に存在する金属原子によって発生する。

【0152】

本発明のさらなる形態において、本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子は、それぞれの、正孔注入層および/または正孔輸送層および/または正孔ブロック層および/または電子輸送層を含まないが、このことは、例えば、WO2005/053051に記載されるように、発光層が正孔注入層もしくはアノードに直接隣接する、および/または発光層が電子輸送層もしくは電子注入層もしくはカソードに直接隣接することを意味する。さらに、例えば、WO2009/030981に記載されるように、発光層中の金属錯体と、同一もしくは類似の金属錯体を、発光層に直接隣接する、正孔輸送もしくは正孔注入材料として使用することもできる。

【0153】

好ましくは、正孔伝導層の正孔伝導材料として、式(I)、(Ia)または上記の好ましい形態の化合物を含む有機エレクトロルミネッセンス素子でもある。ここで、好ましくは、特に、 Z^1 がNであり、少なくとも1つ、好ましくは2つの Z^2 、 Z^3 およびいずれの Z^4 基が、Nである化合物である。

【0154】

好ましくは、電子伝導層の電子輸送材料として、式(I)または上記の好ましい形態の化合物を含む有機エレクトロルミネッセンス素子でもある。ここで、好ましくは、特に、 Z^1 が、Bであり、少なくとも1つ、好ましくは2つの Z^2 、 Z^3 およびいずれの Z^4 基が、Bである化合物である。

10

【0155】

本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子のさらなる層において、従来技術に従って通常使用されるような任意の材料を使用することができる。従って、当業者は、発明的工夫をなすことなく、有機エレクトロルミネッセンス素子に対して知られた任意の材料を、式(I)、または上記の好ましい形態に従う、本発明の化合物と組み合わせて使用することができる。

【0156】

さらに好ましくは、1つ以上の層が昇華プロセスより被覆される有機エレクトロルミネッセンス素子である。このケースにおいて、材料は、 10^{-5} mbar未満、好ましくは 10^{-6} mbar未満の初期圧力で、真空昇華系で蒸着により適用される。初期圧力は、より低くてもよく、例えば、 10^{-7} mbar未満でもよい。

20

【0157】

同様に、1つ以上の層がOVPD(有機気相堆積)法を用いることによって、またはキャリアガス昇華を利用して被覆されることを特徴とする、有機エレクトロルミネッセンス素子も好ましい。このケースにおいて、材料は、 10^{-5} mbar ~ 1 barの圧力で適用される。この方法の特別な方法は、OVJP(有機蒸気ジェット印刷)法であり、その材料は、ノズルを介して直接適用され、したがって構造化される。

【0158】

さらに、1つ以上の層が、例えばスピニングによって、または任意の印刷法、例えばスクリーン印刷、フレキソ印刷、オフセット印刷もしくはノズル印刷などによって、特に好ましくはLITI(光誘導熱画像化、熱転写印刷)またはインクジェット印刷によって、溶液から生成されることを特徴とする有機エレクトロルミネッセンス素子が好ましい。この目的では、可溶性化合物が必要であり、この化合物は、例えば適切な置換を介して得られる。

30

【0159】

式(I)または上記のこれらの好ましい形態の化合物を適用する配合物は、新規である。したがって、本発明は、少なくとも1つの溶媒、および式(I)または上記のこれらの好ましい形態の化合物を含む配合物をさらに提供する。

【0160】

さらに、例えば、1つ以上の層が溶液から適用され、かつ1以上のさらなる層が蒸着によって適用されるハイブリッド法も可能である。

40

【0161】

これらの方法は、当業者に一般的に知られており、本発明の化合物を含む有機エレクトロルミネッセンス素子に、発明的なスキルを必要とすることなく、適用することができる。

【0162】

本発明の化合物および本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子は、従来技術に対して寿命が改善されるという特別な特徴を有する。同時に、効率または作動電圧のような、エレクトロルミネッセンス素子のさらなる電子特性は、少なくとも同様に良好なままである。さらなるバリエーションにおいて、本発明の化合物および本発明の有機エレクトロルミネ

50

ッセンス素子は、従来技術と比較して、特に、改善された効率および/または作動電圧およびより長い寿命を特徴とする。

【0163】

本発明の電子素子、特に有機エレクトロルミネッセンス素子は、従来技術に対して1以上の以下の驚くべき利点により注目に値する：

1. 式(I)または上記および後記されている好ましい形態の化合物を発光体として含む、電子素子、特に有機エレクトロルミネッセンス素子はFWHM(半値全幅(Full Width Half Maximum))値を有する非常に狭い発光バンドを有し、y値によって認識される、特に純粋な色発光をもたらす。ここで、特に驚くべきことに、低FWHM値を有する青色発光体、および緑、黄、または赤色領域の発光スペクトルで発光する低FWHM値を有する発光体の両方が提供される。

2. 式(I)または上記および後記されている好ましい形態の化合物を、特に発光体、電子伝導材料および/または電子輸送材料として含む、電子素子、特に有機エレクトロルミネッセンス素子は、非常に良好な寿命を有する。この文脈において、これらの化合物は、特に、低ロールオフ、つまり、高輝度で素子の電力効率の小さな下落、をもたらす。

3. 式(I)または上記および後記されている好ましい形態の化合物を含む、電子素子、特に有機エレクトロルミネッセンス素子は、発光体として、正孔伝導材料および/または電子輸送材料として、優れた効率を有する。この文脈において、式(I)または上記および後記されている好ましい形態の化合物は、電子素子に使用される場合に、低作動電圧をもたらす。

4. 式(I)または上記および後記されている好ましい形態の本発明の化合物は、非常に高い安定性と寿命を示す。

5. 式(I)または上記および後記されている好ましい形態の化合物を用いて、電子素子、特に有機エレクトロルミネッセンス素子において、光損失チャンネルの形成を避けることができる。結果として、これらの素子は、高PL効率、そして発光体の高EL効率、および材料のドーパントへの優れたエネルギー伝達を特徴とする。

6. 式(I)および/または(Ia)または上記および後記されている好ましい形態の化合物は、優れたガラス膜形成を有する。

7. 式(I)または上記および後記されている好ましい形態の化合物は、溶液から非常に良好な膜を形成し、優れた溶解性を示す。

【0164】

上記の利点は、さらなる電子特性の過度に高い劣化を伴わない。

【0165】

本発明に記載の形態の変形は、本発明の範囲内に包含されることに留意すべきである。本発明に開示された各特徴は、これが明示的に除外されない限り、同じ目的を、または同等もしくは類似の目的を満たす、代替的な特徴と交換され得る。したがって、本発明に開示された各特徴は、特に明記しない限り、一般的なシリーズの例、または同等もしくは類似の特徴であるとみなされるべきである。

【0166】

本発明の全ての特徴は、特別な特徴および/または手順が相互に排他的でない限り、互いに任意の方法で組み合わせることができる。これは、本発明の好ましい特徴に特に言えることである。同様に、本質的でない組み合わせの特徴は、分離して(そして、組み合わせずに)用いることができる。

【0167】

多くの特徴、特に本発明の好ましい形態の特徴は、それ自体で、発明的であるとみなされるべきであり、本発明の形態の一部であるとのみ考えられるべきではないことに留意すべきである。これらの特徴については、現在特許請求の範囲に記載されている発明に加えて、または代替として、独立した保護を求めることができる。

【0168】

本発明と共に開示された技術的教示は、抽象化され、そして他の実施例と組み合わせる

10

20

30

40

50

ことができる。

【0169】

本発明は、以下の実施例に詳細に説明するが、それにより本発明を制限するものではない。当業者は、記載される詳細を用いて、発明的工夫をなさずして、本発明に係る更なる化合物を調製し、それらを電子素子に使用し、かつそのことにより請求された範囲の全体にわたり本発明を実施することができるであろう。

【0170】

実施例：

以下の合成は、特に明記しない限り、保護ガス雰囲気下、乾燥溶媒中で行われる。金属錯体は、さらに、遮光して、または黄色の光の下で取り扱われる。溶媒および試薬は、例えば、シグマ・アルドリッチ社 (Sigma-Aldrich) またはエービーシーアール社 (ABCR) から購入できる。角括弧内の各々の数字または個々の化合物に対して示されている番号は、文献既知の化合物のCAS番号に関する。化合物が、複数のエナンチオマー、ジアステレオマーまたは互変体の形態を有する場合、1つの形態が代表的な方法で示される。

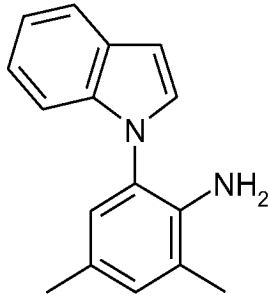
10

【0171】

シントンスの合成：

例S1：

【化22】



20

30

インドール [120-72-9] および 2-ヨード-4,6-ジメチルアニリン [4102-54-9] を用いて、W. Wu et al., *Organic Chemistry Frontiers*, 2019, 6(13), 2200 による調製、収率：64%；純度：約95% ¹H NMRによる。

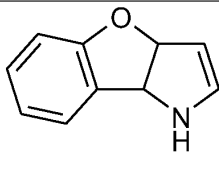
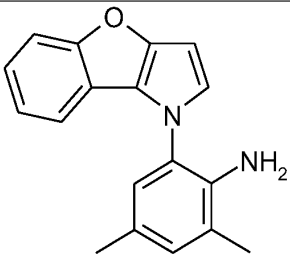
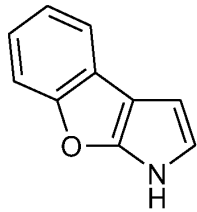
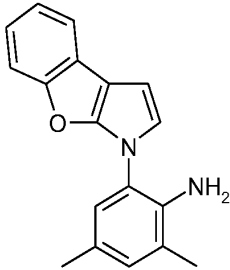
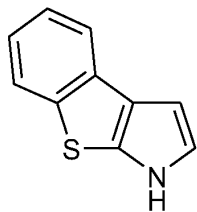
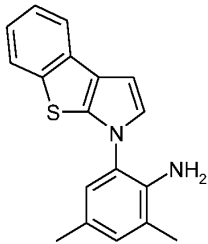
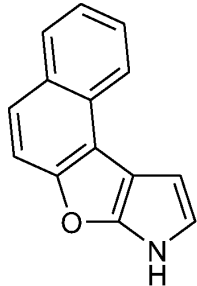
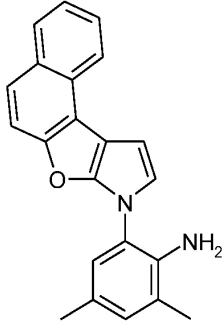
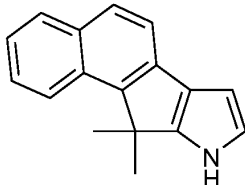
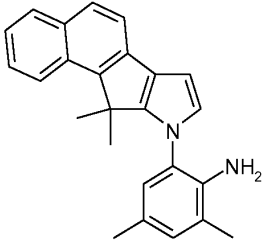
【0172】

以下の化合物は、同様に調製される。

40

50

【化 2 3 - 1】

例	反応物質	生成物	収率
S2	 40554-71-0	 	59%
S3	 42120-17-2	 	69%
S4	 40368-97-6	 	56%
S5	 1962132-43-9	 	60%
S6	 1962132-28-0	 	67%

10

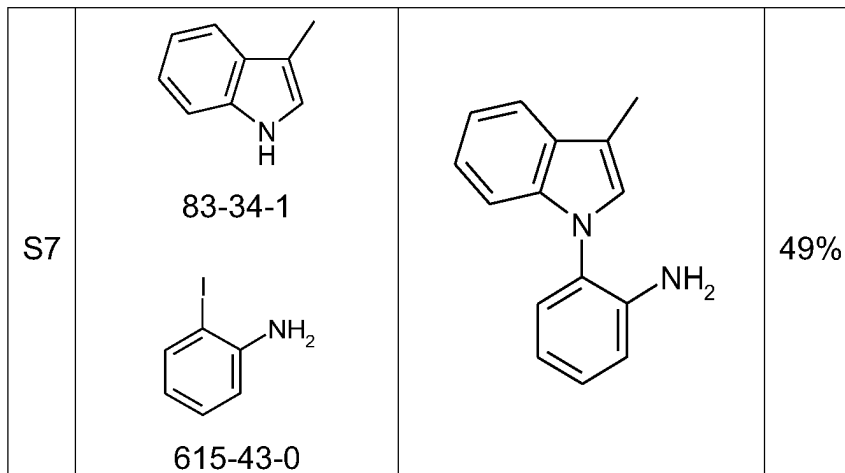
20

30

40

50

【化 2 3 - 2】



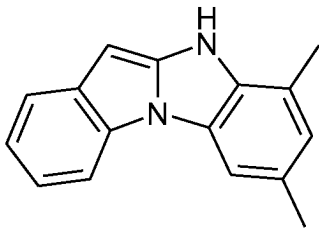
10

【 0 1 7 3 】

例 S 1 0 :

【化 2 4】

20



US 2019 / 0252623、p . 62 による調製。化合物の A に代えて S 1 を使用、ステップ 1 ~ 3 の手順、収率 : 38% ; 純度 : 約 95% ¹H NMR による。

30

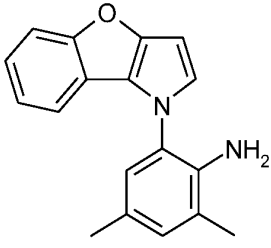
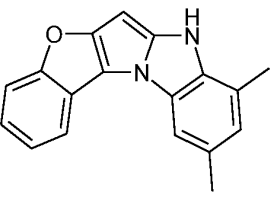
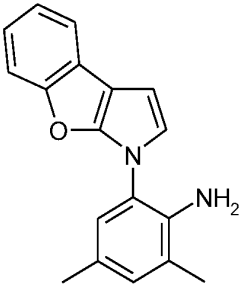
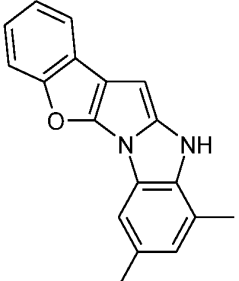
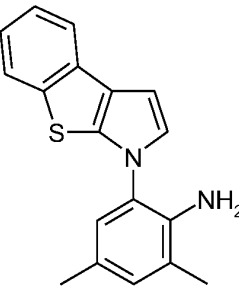
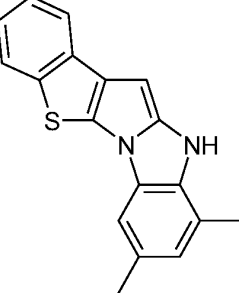
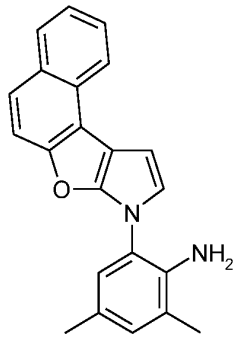
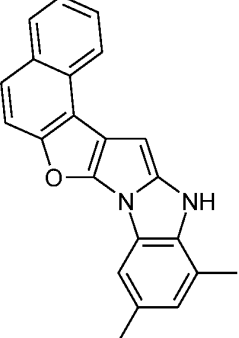
【 0 1 7 4 】

以下の化合物は、同様に調製される。

40

50

【化 2 5 - 1】

例	反応物質	生成物	収率
S11	 <p>S2</p>		40%
S12	 <p>S3</p>		40%
S13	 <p>S4</p>		35%
S14	 <p>S5</p>		38%

10

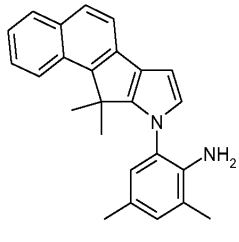
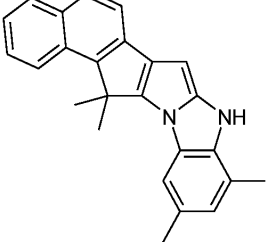
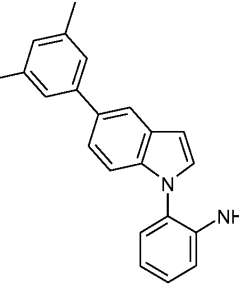
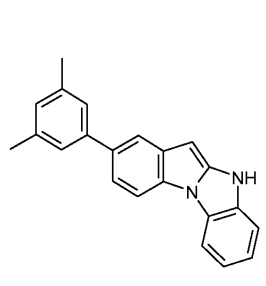
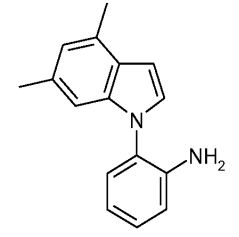
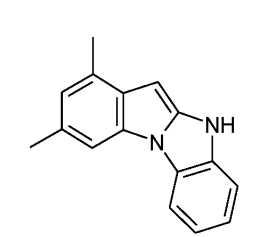
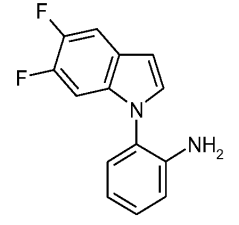
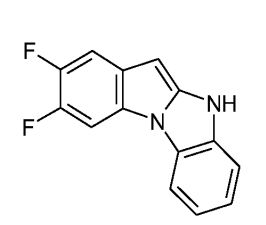
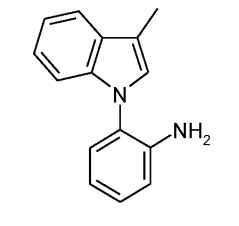
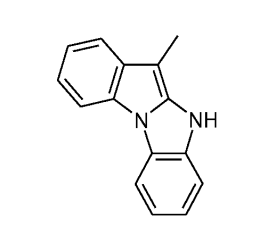
20

30

40

50

【化 2 5 - 2】

S15	 <p>S6</p>		42%
S16	 <p>1638609-72-9</p>		35%
S17	 <p>2299208-60-7</p>		38%
S18	 <p>2271024-24-7</p>		41%
S19	 <p>S7</p>		50%

10

20

30

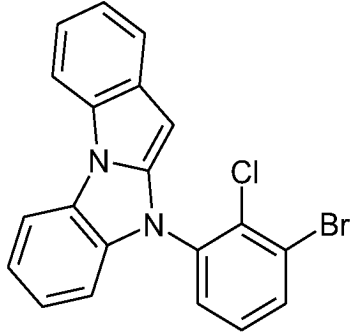
40

【 0 1 7 5 】

例 S 1 0 0 :

50

【化 2 6】



10

20.6 g (100 mmol) の 10H - インドロ [1 , 2 - a] ベンゾイミダゾール [2 3 4 5 6 3 0 - 1 0 - 4]、31.7 g (100 mmol) の 1 - ブロモ - 2 - クロロ - 3 - ヨードベンゼン [5 7 0 1 2 - 5 0 - 7]、48.9 g (150 mmol) の炭酸セシウム、無水物 [5 3 4 - 1 7 - 8]、1.2 g (10 mmol) の S - プロリン [1 4 7 - 8 5 - 3]、952 mg (5 mmol) のヨウ化銅 [7 6 8 1 - 6 5 - 4]、50 g のガラスビーズ (直径 3 mm) および 250 ml の DMSO の混合物が、100 で 14 時間攪拌される。冷却後、反応混合物は、500 ml の酢酸エチルおよび 500 ml の水と混合され、有機相は、除去され 500 ml の水で 1 回、300 ml のそれぞれ飽和塩化ナトリウム溶液で 2 回洗浄され、硫酸マグネシウムで乾燥される。混合物は酢酸エチルスラリー形態のシリカゲル床を通してろ過され、ろ液は濃縮乾燥され、残留物は 50 ml のエタノールで煮沸され、固体は吸引ろ過され、そして、これらは 10 ml のエタノールで 2 回洗浄され、減圧下で乾燥され、トルエンから再結晶化されるか、またはフラッシュクロマトグラフに付される (A. Semrau のトレント自動カラムシステム)。収量 : 19.8 g (45 mmol) 45 % ; 純度 : 約 95 % ¹H NMR による。

20

【 0 1 7 6】

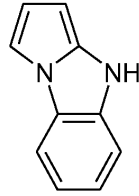
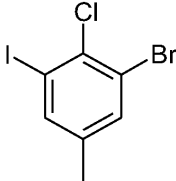
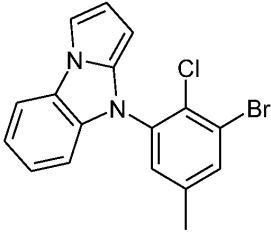
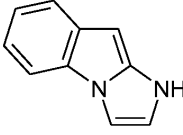
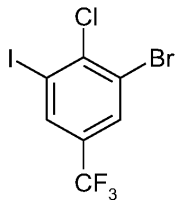
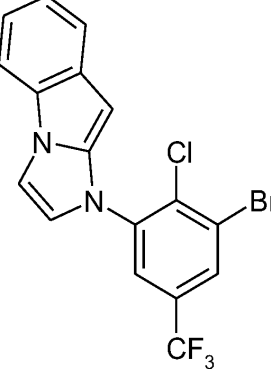
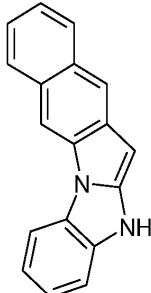
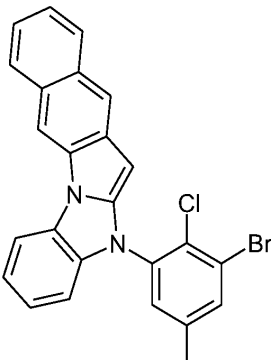
以下の化合物は、同様に調製される。

30

40

50

【化 2 7 - 1】

例	反応物質	生成物	収率
S101	 <p>24990-52-1</p>  <p>289038-10-4</p>		22%
S102	 <p>247-72-3</p>  <p>2386350-63-4</p>		26%
S103	 <p>185738-60-7</p> <p>289038-10-4</p>		44%

10

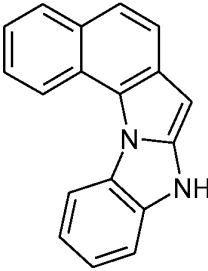
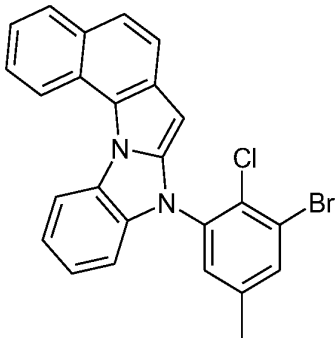
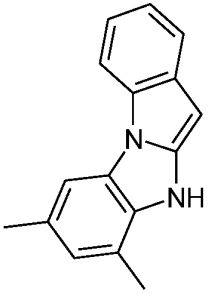
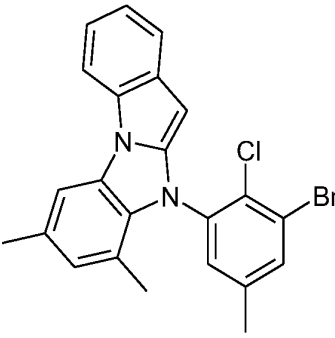
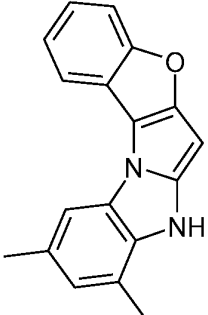
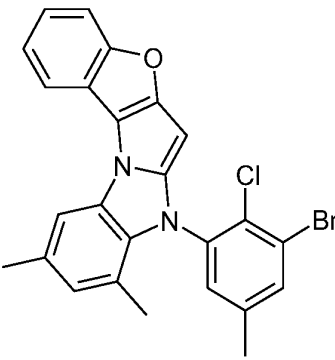
20

30

40

50

【化 2 7 - 2】

S104	 1318031-88-7 289038-10-4	 40%	
S105	 S10 289038-10-4	 43%	
S106	 S11 289038-10-4	 47%	

10

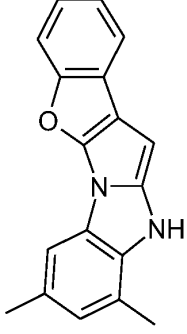
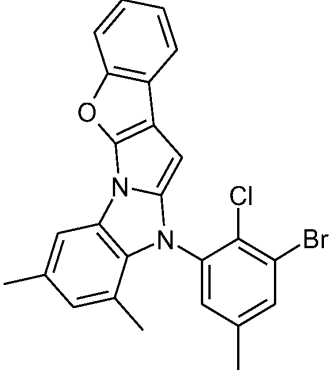
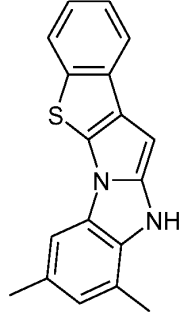
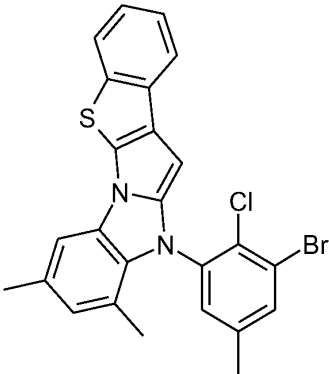
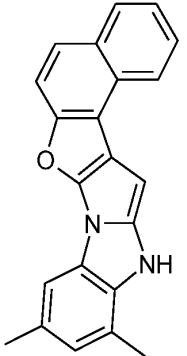
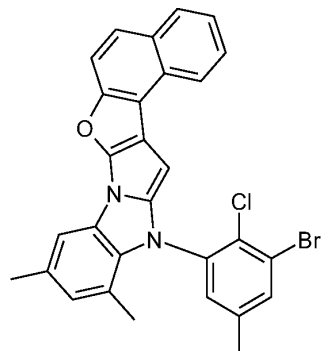
20

30

40

50

【化 2 7 - 3】

S107	 S12 289038-10-4	 45%	
S108	 S13 289038-10-4	 38%	
S109	 S14 289038-10-4	 45%	

10

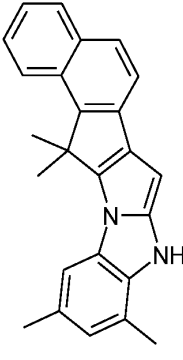
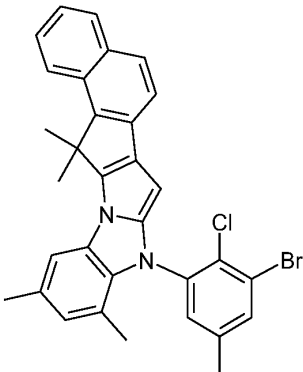
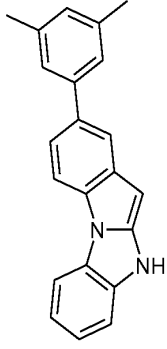
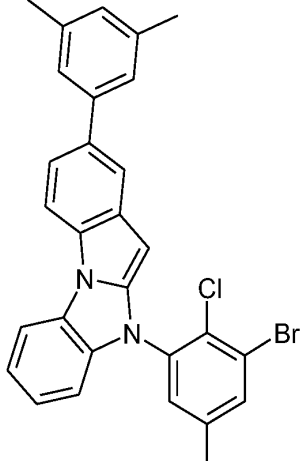
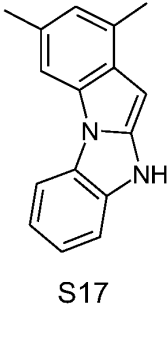
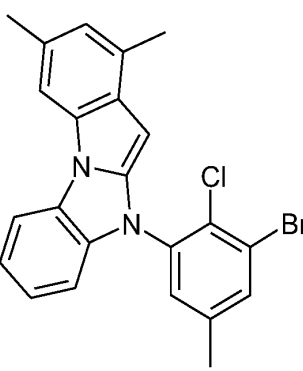
20

30

40

50

【化 2 7 - 4】

S110	 <p>S15</p> <p>289038-10-4</p>	 <p>45%</p>	
S111	 <p>S16</p> <p>289038-10-4</p>	 <p>48%</p>	
S112	 <p>S17</p> <p>289038-10-4</p>	 <p>50%</p>	

10

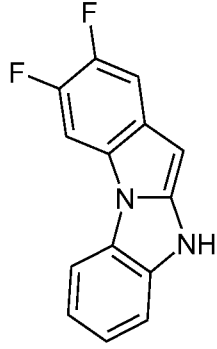
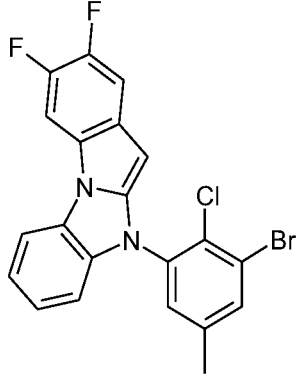
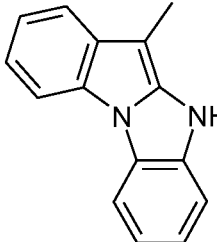
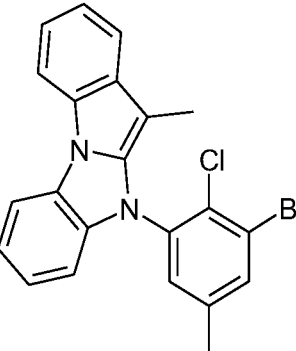
20

30

40

50

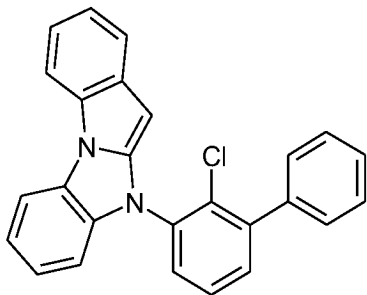
【化 27 - 5】

S113	 <p style="text-align: center;">S18</p> <p style="text-align: center;">289038-10-4</p>		43%	10
S114	 <p style="text-align: center;">S19</p> <p style="text-align: center;">289038-10-4</p>		51%	

【0177】

例 S200 :

【化 28】



30

40

39.6 g (100 mmol) の S100、13.4 g (110 mmol) のフェニルボロン酸 [98-80-6]、42.5 g (200 mmol) のリン酸三カリウム、無水物 [7778-53-2]、1.83 g (6 mmol) のトリ-*o*-トリルホスフィン [6163-58-2]、225 mg (1 mmol) の酢酸パラジウム (II) [3375-31-3]、300 ml のトルエン、100 ml のジオキサンおよび 300 ml の水の混合物が、還流下で 16 時間攪拌される。冷却後、反応混合物は、300 ml の酢酸エチルおよび 300 ml の水と混合され、有機相は除去され、300 ml の水で 1 回、それぞれ 200 ml の飽和塩化ナトリウム溶液で 2 回洗浄され、硫酸マグネシウムで乾燥される。混合物は酢酸エチルスラリー形態のシリカゲル床を通してろ過され、ろ液は濃縮乾燥さ

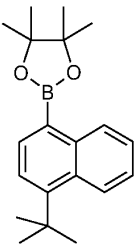
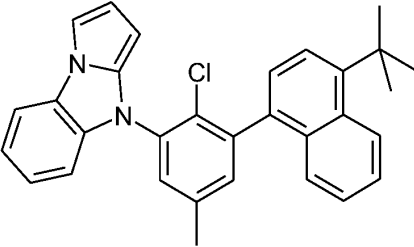
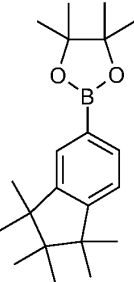
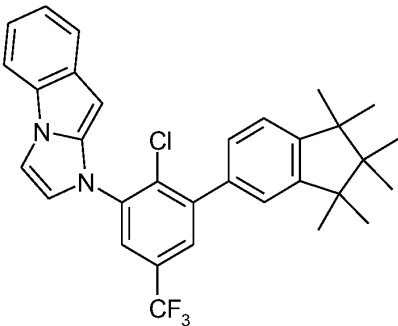
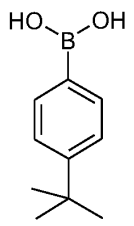
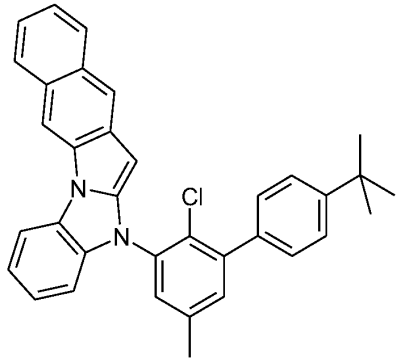
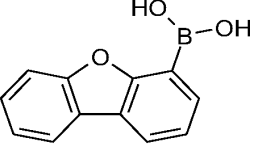
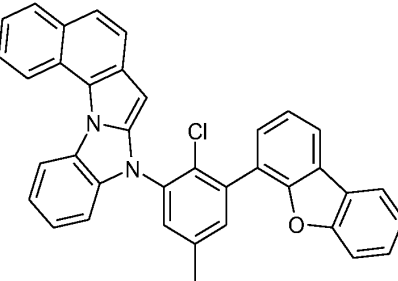
50

れ、残留物は50mlのエタノールで煮沸され、固体は吸引ろ過され、そして、これらは20mlのエタノールで2回洗浄され、減圧下で乾燥され、アセトニトリルから再結晶化されるか、またはフラッシュクロマトグラフに付される(A. Semrauのトレント自動カラムシステム)。収量：26.3g(67mmol)67%；純度：約95% ¹H NMRによる。

【0178】

以下の化合物は、同様に調製される。

【化29-1】

例	反応物質	生成物	収率
S201	<p>S101</p>  <p>1501954-18-2</p>		46%
S202	<p>S102</p>  <p>1562418-16-9</p>		40%
S203	<p>S103</p>  <p>123324-71-0</p>		60%
S204	<p>S104</p>  <p>100124-06-9</p>		64%

10

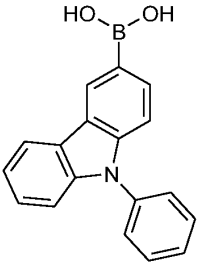
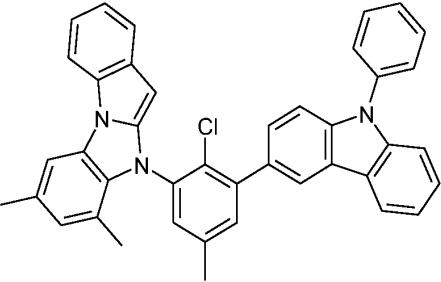
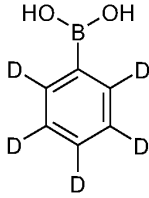
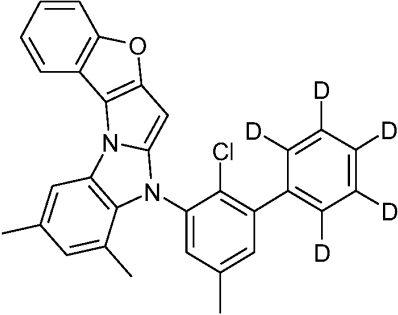
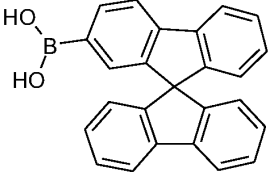
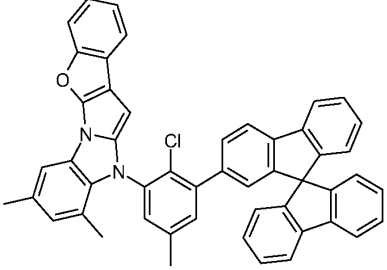
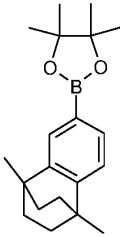
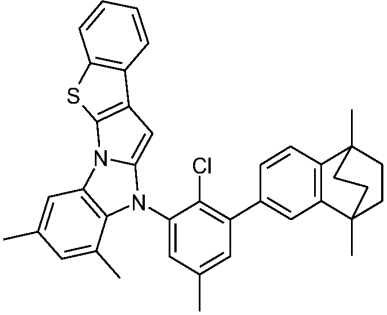
20

30

40

50

【化 2 9 - 2】

S205	<p>S105</p>  <p>854952-58-2</p>	 <p>71%</p>	
S206	<p>S106</p>  <p>215527-70-1</p>	 <p>68%</p>	
S207	<p>S107</p>  <p>236389-21-2</p>	 <p>65%</p>	
S208	<p>S108</p>  <p>1801624-61-2</p>	 <p>66%</p>	

10

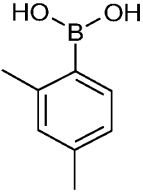
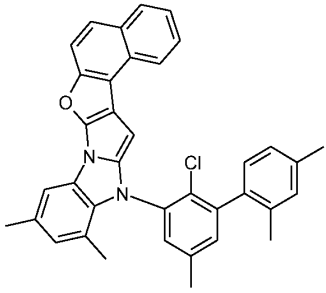
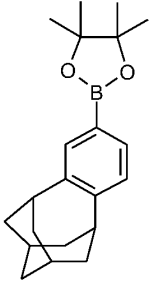
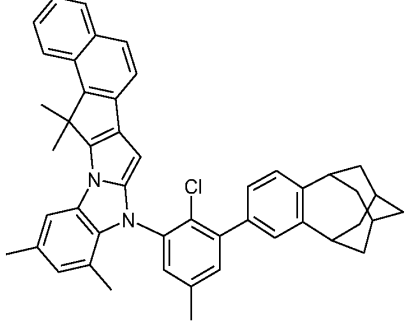
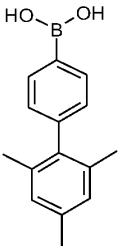
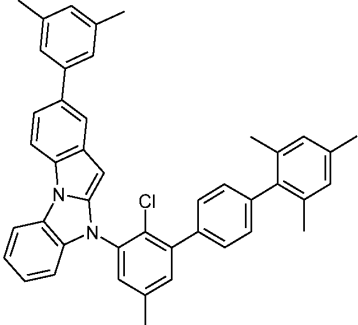
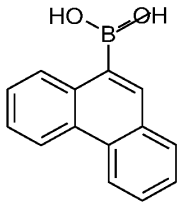
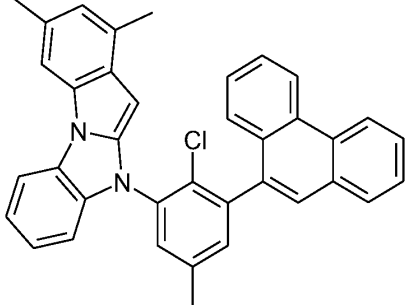
20

30

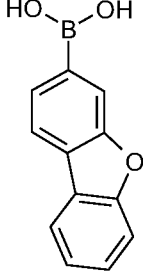
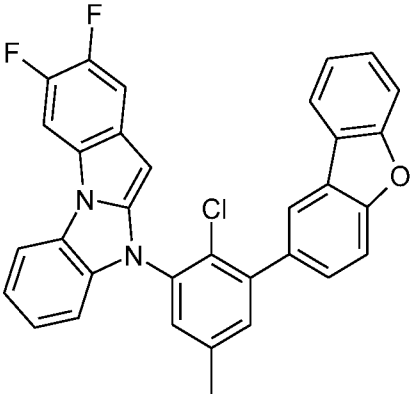
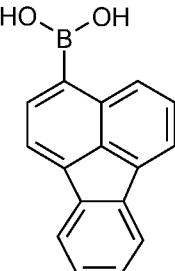
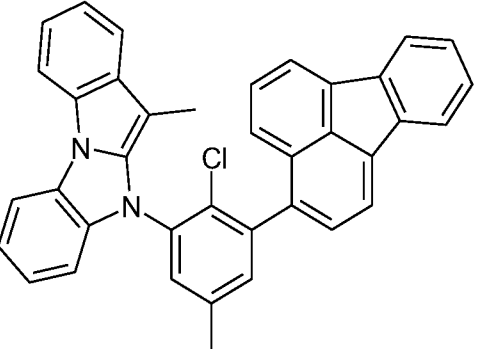
40

50

【化 2 9 - 3】

S209	<p>S109</p>  <p>55499-44-0</p>		70%	10
S210	<p>S110</p>  <p>1801624-63-4</p>		58%	20
S211	<p>S111</p>  <p>1207728-17-3</p>		55%	30
S212	<p>S112</p>  <p>68572-87-2</p>		73%	40

【化 2 9 - 4】

S213	<p style="text-align: center;">S113</p>  <p style="text-align: center;">395087-89-5</p>		71%
S214	<p style="text-align: center;">S114</p>  <p style="text-align: center;">359012-63-8</p>		67%

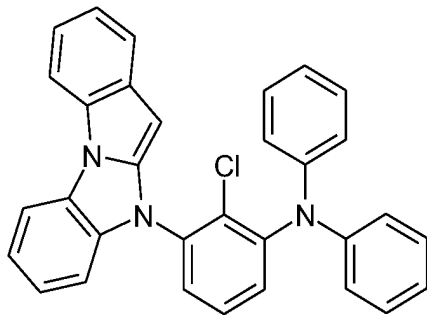
10

20

【 0 1 7 9 】

例 S 3 0 0 :

【化 3 0】



30

39.6 g (100 mmol) の S 1 0 0、18.6 g (110 mmol) のジフェニルアミン [1 2 2 - 3 9 - 4]、14.4 g (150 mmol) のナトリウム tert - ブトキシド [8 6 5 - 4 8 - 5]、809 mg (4 mmol) のトリ - tert - ブチルホスフィン [1 3 7 1 6 - 1 2 - 6]、449 mg (2 mmol) の酢酸パラジウム (I I) [3 3 7 5 - 3 1 - 3] および 400 ml のトルエンの混合物が、100 で 12 時間攪拌される。冷却後、300 ml の水は、反応混合物に加えられ、有機相は除去され、300 ml の水で 1 回、それぞれ 200 ml の飽和塩化ナトリウム溶液で 2 回洗浄され、硫酸マグネシウムで乾燥される。混合物は濃縮され、残留物は 300 ml の酢酸エチルで採取され、酢酸エチルスラリー形態でシリカゲル床を通してろ過され、ろ液は濃縮乾燥され、残留物は 70 ml のエタノールで煮沸され、固体は吸引ろ過され、これらは、20 ml のエタノールで 2 回洗浄され、減圧下で乾燥され、アセトニトリルから再結晶化される

40

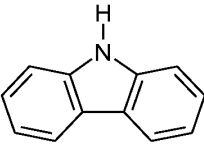
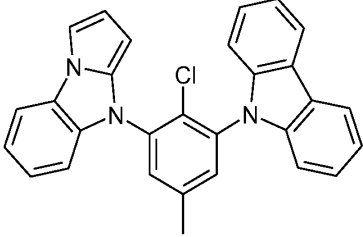
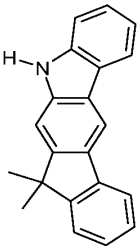
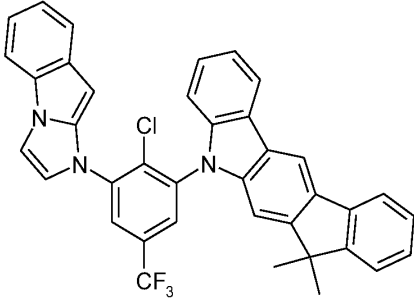
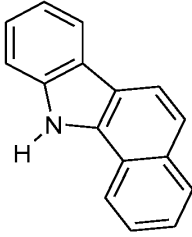
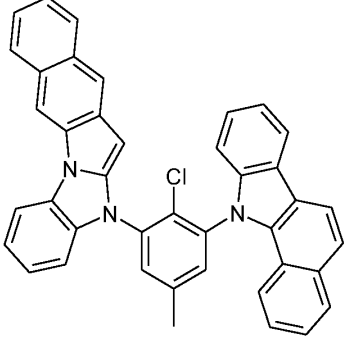
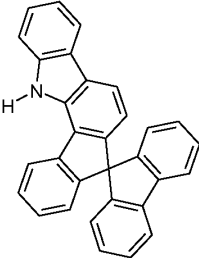
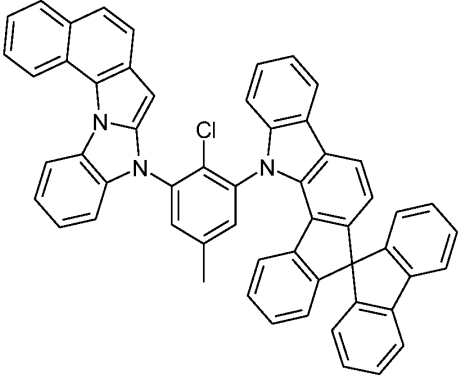
50

か、またはフラッシュクロマトグラフに付される (A. Semrau のトレント自動カラムシステム)。収量: 33.5 g (69 mmol) 69%; 純度: 約 95% ¹H NMR による。

【0180】

以下の化合物は、同様に調製される。

【化31-1】

例	反応物質	生成物	収率
S301	S101  86-74-8		33%
S302	S102  1257220-47-5		30%
S303	S103  239-01-0		64%
S304	S104  1615703-28-0		58%

10

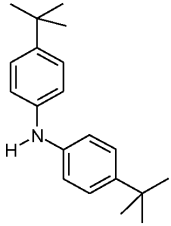
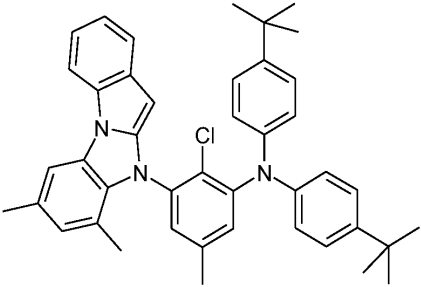
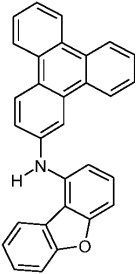
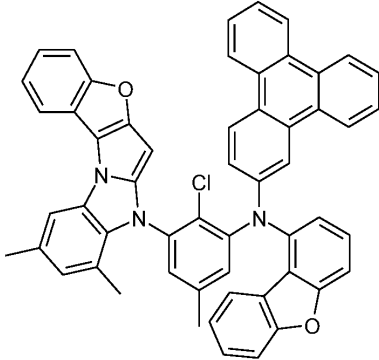
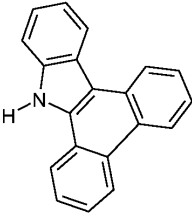
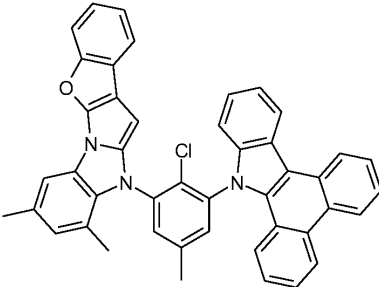
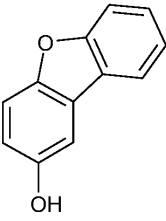
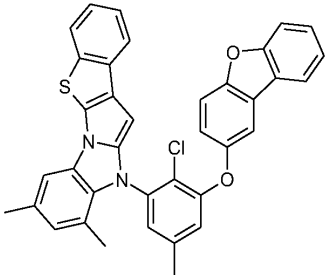
20

30

40

50

【化 3 1 - 2】

S305	<p>S105</p>  <p>4627-22-9</p>	 <p>67%</p>	10
S306	<p>S106</p>  <p>2055969-73-6</p>	 <p>65%</p>	20
S307	<p>S107</p>  <p>201-67-2</p>	 <p>70%</p>	30
S308	<p>S108</p>  <p>OH</p> <p>86-77-1</p>	 <p>100 mmol Na-O-t-Bu ジ-tert-ブチル-2-ビフェニルホスフィン トリ-tert-ブチルホスフィンに代えて</p> <p>68%</p>	40

10

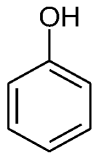
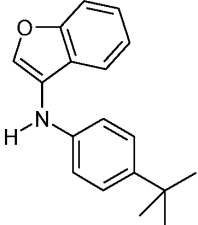
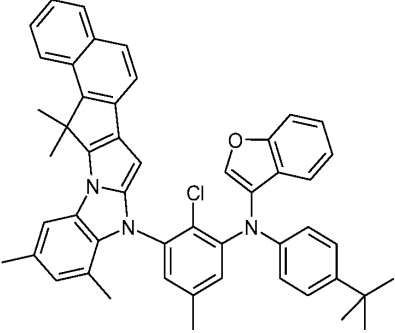
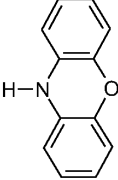
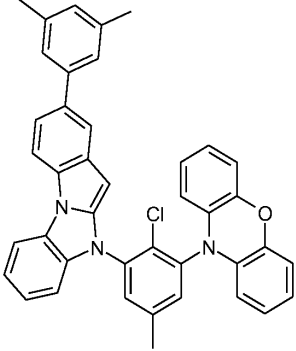
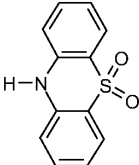
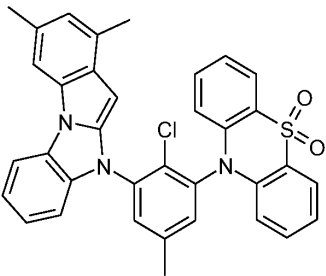
20

30

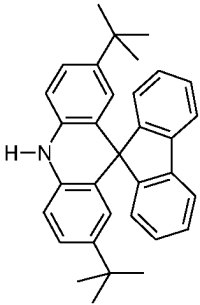
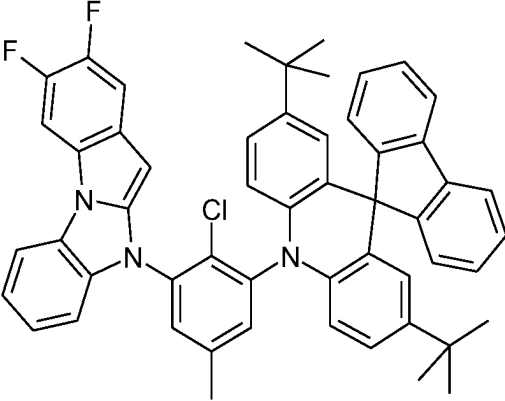
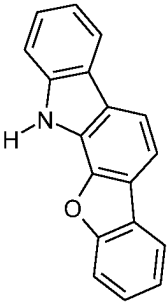
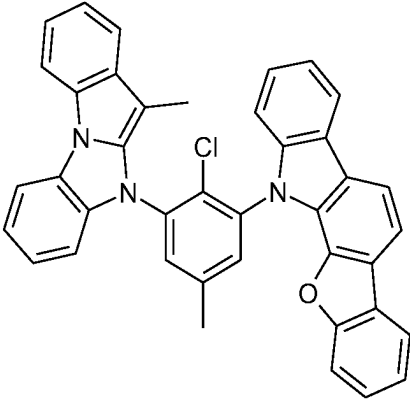
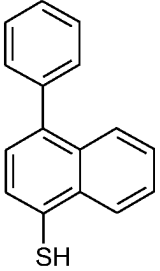
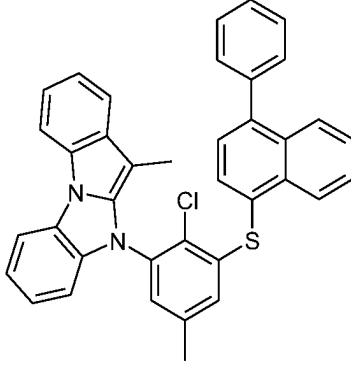
40

50

【化 3 1 - 3】

S309	<p>S109</p>  <p>108-95-2</p>	 <p>100 mmol Na-O-t-Bu ジ-tert-ブチル-2-ピフェニルホスフィン トリ-tert-ブチルホスフィンに代えて</p>	69%	10
S310	<p>S110</p>  <p>2375415-86-2</p>		36%	20
S311	<p>S111</p>  <p>135-67-1</p>		48%	30
S312	<p>S112</p>  <p>1209-66-1</p>		34%	40

【化 3 1 - 4】

S313	<p>S113</p>  <p>2408441-61-0</p>		55%	10
S314	<p>S114</p>  <p>1338919-70-2</p>		45%	20
S315	<p>S114</p>  <p>SH</p> <p>203113-63-7</p>	 <p>C. Eichman et al.による調製 JOC 74(10), 4005-4008, 2009; 溶媒: THF (トルエンに代えて) 1等量の塩化亜鉛 (II)の添加</p>	50%	30

40

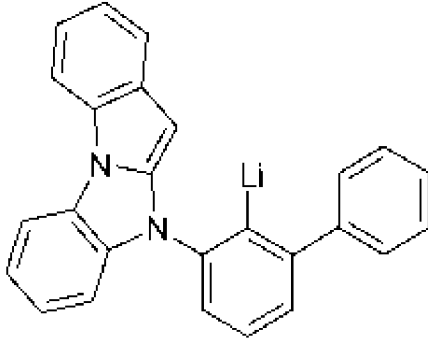
【 0 1 8 1 】

例：位置異性体ドーパント D 1 A および D 1 B :

ステップ 1 : S 2 0 0 のリチオ化

50

【化 3 2】



中間体 分離されていない

10

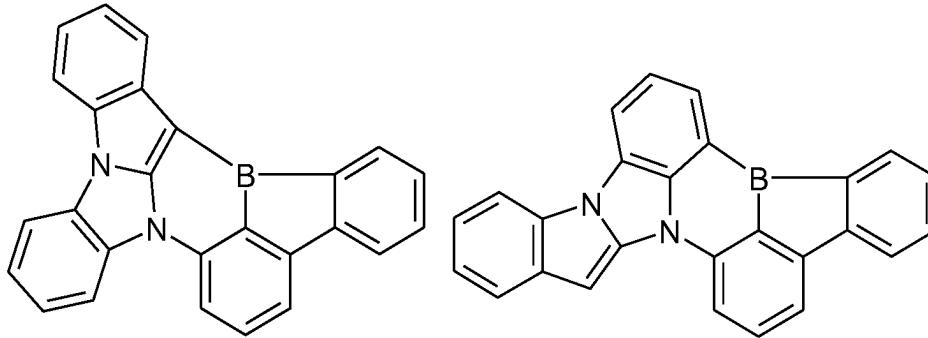
マグネチックスターラー、滴下漏斗、水分離器、還流冷却器、アルゴンブランケットを備える、ベークアウトされ、アルゴンで不活性化された四つ口フラスコに、19.7 g (50 mmol) の S200 および 200 ml の tert-ブチルベンゼンが投入され、-40 に冷却される。64.7 ml (110 mmol) の tert-ブチルリチウム (n-ペンタン中に 1.7 M) が、10 分にわたり滴下される。反応混合物は、室温に温められ、60 でさらに 3 時間攪拌され、その間、n-ペンタンは、水分離器を介して除去される。

20

【0182】

ステップ 2：金属交換反応および環化

【化 3 3】



D1A

D1B

30

反応混合物は、-40 に冷却される。5.7 ml (60 mmol) の三臭化ホウ素が約 10 分にわたり滴下される。添加完了後、反応混合物は、室温で 1 時間攪拌される。その後、反応混合物は 0 に冷却され 21.0 ml (120 mmol) のジ-イソ-プロピルエチルアミンが、約 30 分にわたり滴下される。その後、反応混合物は、130 で 5 時間攪拌される。冷却後、混合物は 500 ml のトルエンで希釈され、300 ml の 10 重量%の酢酸カリウム水溶液の添加により加水分解され、有機相は除去され、減圧下で濃縮される。油性の残留物は、ISOLUTE (登録商標) に DCM を用いて吸収され、n-ペンタン-DCM 混合物 (10:1) を用いて、シリカゲル床を通して熱ろ過される。ろ液は、濃縮乾燥される。残留物は、フラッシュクロマトグラフ、シリカゲル、n-ヘプタン/酢酸エチル、グラジエント、A. Semrau のトレント自動カラムシステムに付される。分離された位置異性体のさらなる精製は、DCM/アセトニトリル混合物を用いた繰り返しの熱抽出再結晶、および最終分別昇華または減圧下での熱処理によって行われる。収量：D1A：2.39 g (6.5 mmol) 13% / D1B：3.30 (9 mmol) 18%；純度：約 99.9% ¹H NMR による。

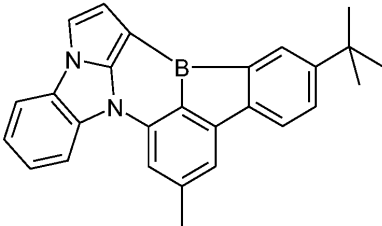
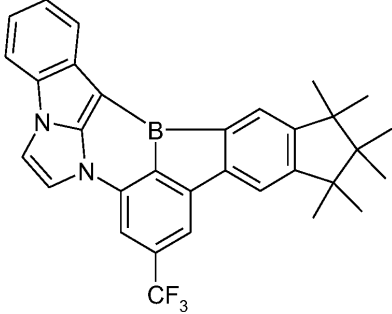
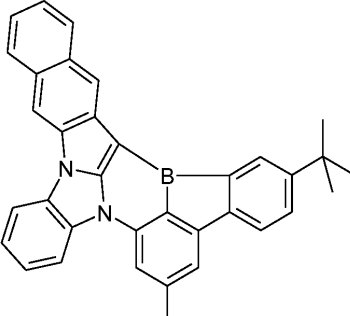
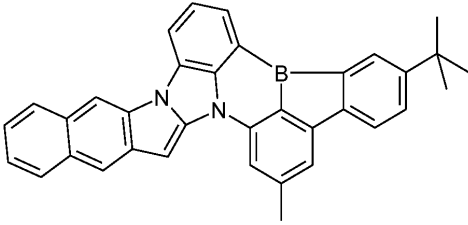
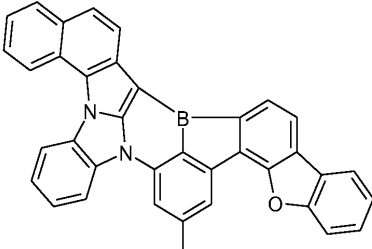
40

【0183】

50

以下の化合物は、同様に調製される。

【化 3 4 - 1】

例	反応物質	生成物	収率
D2	S201		11%
D3	S202		9%
D4A	S203		17%
D4B	S203		13%
D5A	S204		15%

10

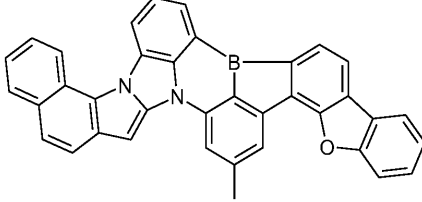
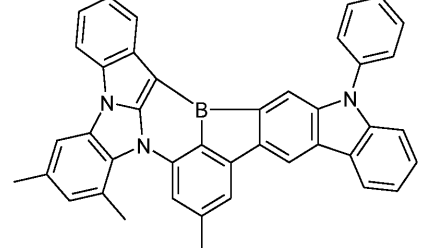
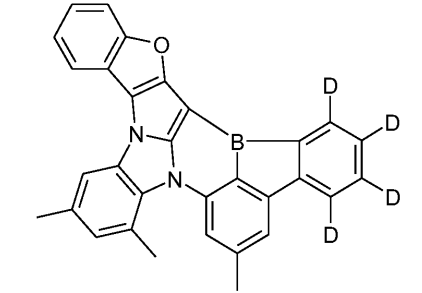
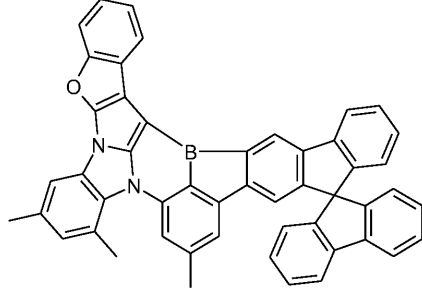
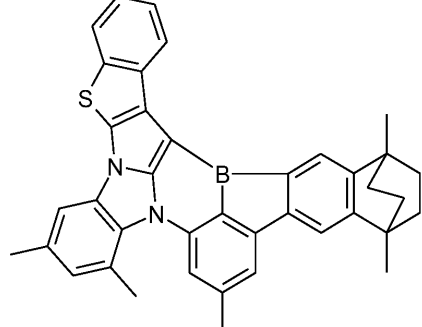
20

30

40

50

【化 3 4 - 2】

D5B	S204		13%
D6	S205		32%
D7	S206		29%
D8	S207		26%
D9	S208		30%

10

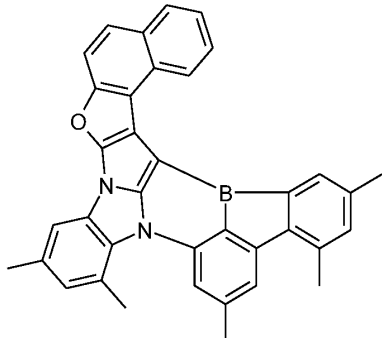
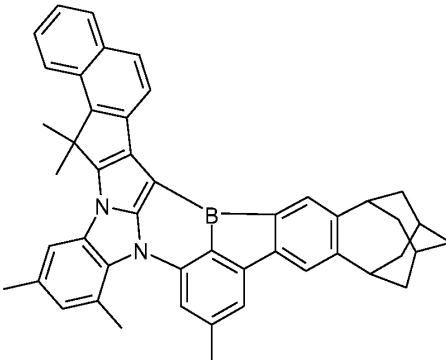
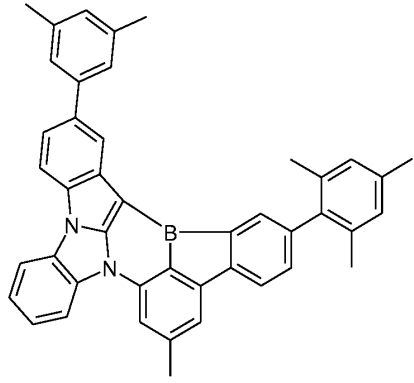
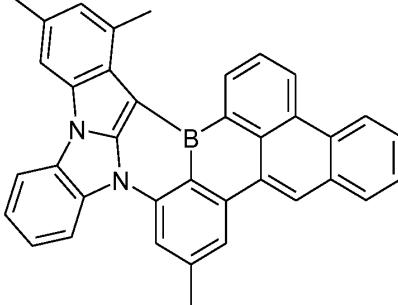
20

30

40

50

【化 3 4 - 3】

D10	S209		28%
D11	S210		32%
D12	S211		22%
D13A	S212		20%

10

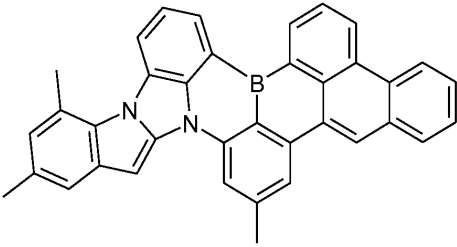
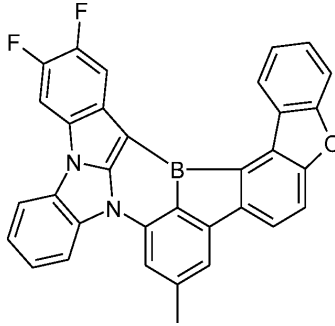
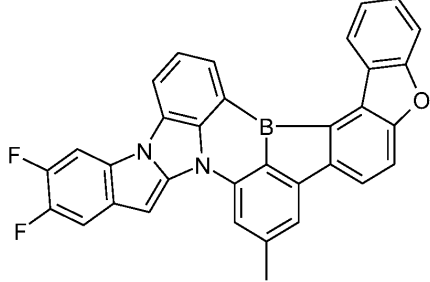
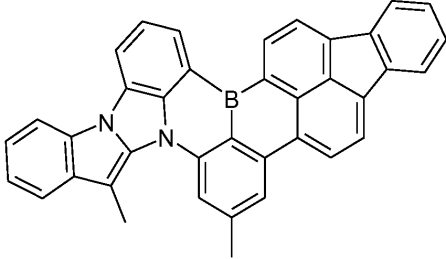
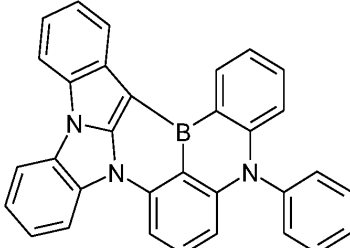
20

30

40

50

【化 3 4 - 4】

D13B	S212		19%
D14A	S213		18%
D14B	S213		16%
D15	S214		24%
D100A	S300		20%

10

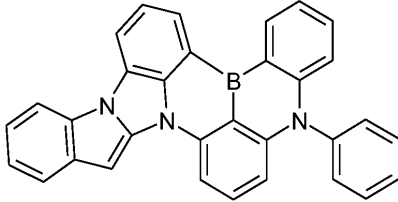
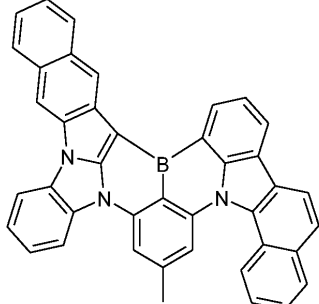
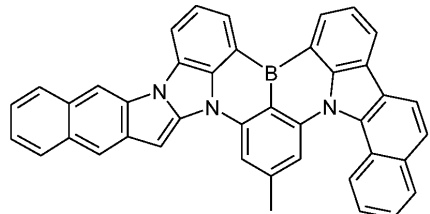
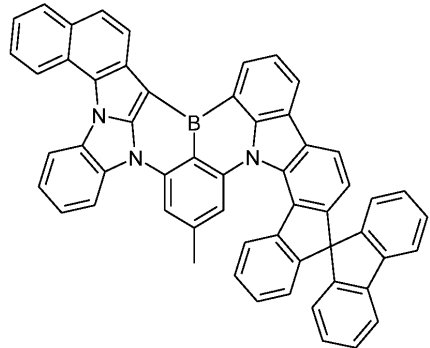
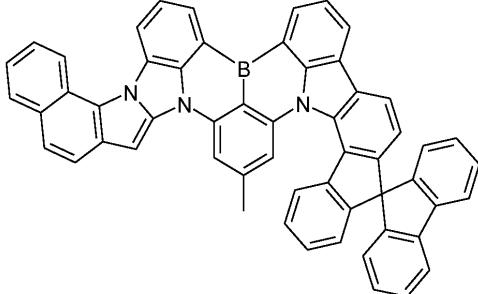
20

30

40

50

【化 3 4 - 5】

D100B	S300		23%
D101A	S303		18%
D101B	S301		24%
D102A	S304		15%
D102B	S304		17%

10

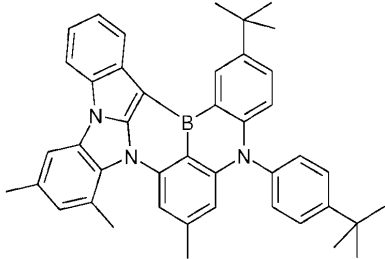
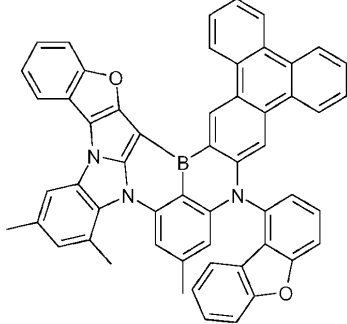
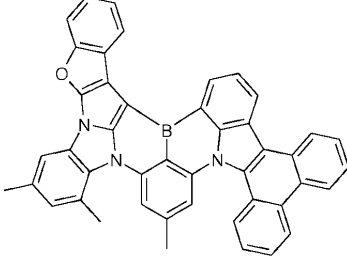
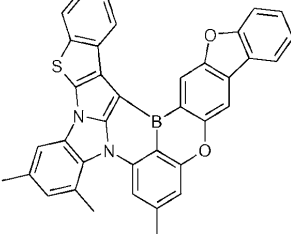
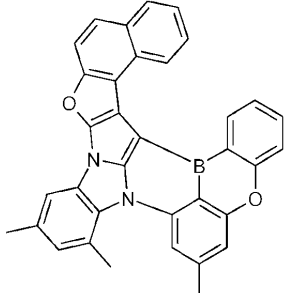
20

30

40

50

【化 3 4 - 6】

D103	S305		26%
D104	S306		29%
D105	S307		28%
D106	S308		33%
D107	S309		11%

10

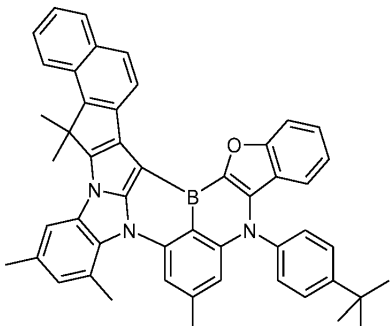
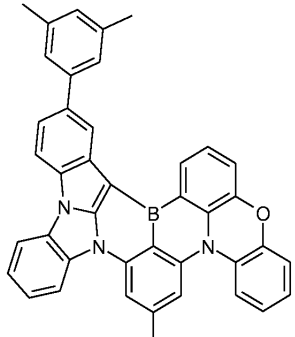
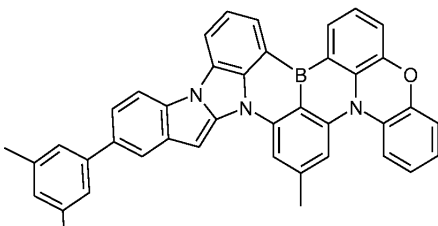
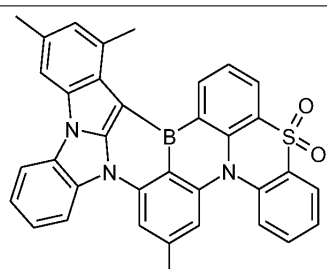
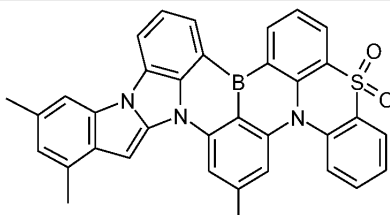
20

30

40

50

【化 3 4 - 7】

D108	S310		17%
D109A	S311		23%
D109B	S311		21%
D110A	S312		13%
D110B	S312		9%

10

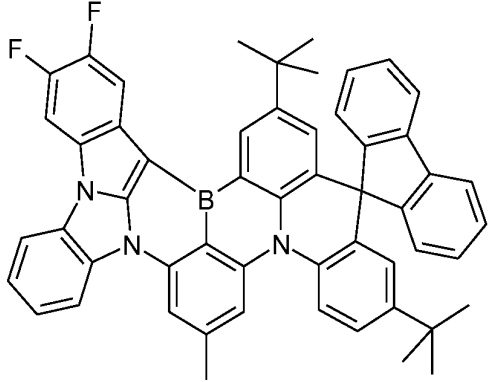
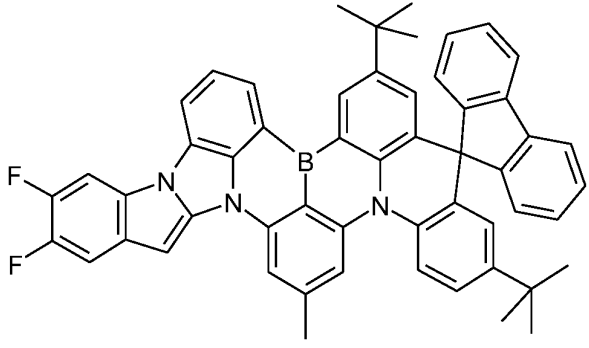
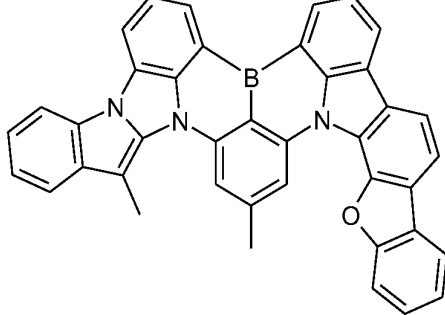
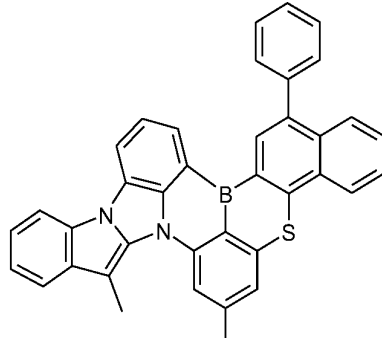
20

30

40

50

【化 3 4 - 8】

D111A	S313		19%
D111B	S313		21%
D112	S314		28%
D113	S315		16%

10

20

30

40

【 0 1 8 4 】

例 D 1 0 3 ~ D 1 0 7 は、混合物の形成が、適当な置換によって回避されることを示し、ここで、例として、特に X⁵ 基は、Z² 基に対してオルト位にアルキル基を含む。もちろん、他の適切な置換基を選択することも可能である。

【 0 1 8 5 】

例 D 1 1 2 および D 1 1 3 は、混合物の形成が、適当な置換基によって回避されることを示し、ここで、例として、特に X⁴ 基が、アルキル基および / またはフェニル基を含む。もちろん、他の適切な置換基を選択することも可能である。

【 0 1 8 6 】

50

OLED 部品の製造

1) 真空処理された部品：

本発明による OLED および従来技術による OLED を、ここに記載する状況（層厚範囲、使用材料）に適応させた、WO 2004 / 058911 に記載の一般的方法によって製造する。

【0187】

続く例において、さまざまな OLED の結果が示される。膜厚 50 nm 構造化 ITO（酸化インジウムスズ）で被覆されたガラス板（Miele laboratory のガラス洗浄機での洗浄、Merck の Extrane 洗剤）が、25 分間の UV オゾンで前処理される（UVP の PR - 100 UV オゾン発生機）そして、30 分以内に、プロセスの改善のために、20 nm の PEDOT : PSS（ポリ（3,4-エチレンジオキシチオフェン）ポリ（スチレンスルホネート）、これは Heraeus Precious Metals GmbH（ドイツ）から CLEVIOS（商標名）PVP AI 4083 として購入され、水溶液からスピンコートされる）で被覆され、そして 180 で 10 分間ベークされる。これらの被覆されたガラス板は OLED が適用される基板を形成する。

【0188】

OLED は、基本的に、以下の層構造を有する：基板 / 5% NDP - 9（Novaled から市販されている）でドーブされた Ref - HTM1 からなる正孔注入層 1（HIL1）、20 nm / 160 nm HTM1 で構成される UV & 青色 OLED、緑および黄の OLED では 50 nm；赤の OLED では 110 nm、のための正孔輸送層 1 / 青の OLED では 10 nm；緑 & 黄の OLED では 20 nm；赤の OLED では 10 nm で構成される正孔輸送層 2（HTL2） / 発光層（EML）：青の OLED では 25 nm；緑 & 黄の OLED では 40 nm；赤の OLED では 35 nm / 正孔ブロック層（HBL）10 nm / 電子輸送層（ETL）30 nm / 1 nm ETM2 で構成される電子注入層（EIL） / および最後にカソード。カソードは膜厚 100 nm のアルミニウム層によって形成される。

【0189】

最初に、真空処理された OLED について記載する。この目的では、すべての材料は、真空チャンバにおける熱蒸着によって適用される。このケースにおいて、発光層は、常に、少なくとも 1 つのマトリックス材料（ホスト材料）と、共蒸着によって特定の体積比でマトリックス材料に混合される発光ドーパント（発光体）とからなる。SMB1 : D1（95 : 5%）のような形で示される詳細は、ここで、材料 SMB1 が 95% の体積比でその層に存在し、D1 が 5% の割合でその層に存在することを意味する。同様に、電子輸送層も 2 つの材料の混合物からなってもよい。OLED の正確な構造は表 1 に見ることができる。OLED の製造に使用される材料は表 4 に示されている。

【0190】

OLED は、標準的な方法によって特徴づけられる。この目的では、エレクトロルミネッセンススペクトル、電流効率（cd / A で測定）、電力効率（lm / W で測定）および外部量子効率（EQE、パーセントで測定）は、ランベルト発光特性を仮定して、電流 - 電圧 - 輝度特性（IUL 特性）から計算された、光束密度関数として計算される。エレクトロルミネッセンススペクトルは、光束密度 1000 cd / m² で決定される。

【0191】

OLED の材料としての本発明の化合物の使用

本発明の化合物の一つの使用は、OLED の発光層でのドーパントおよび輸送またはブロック材料（HBL）である。表 4 による化合物 D - Ref . 1 は、従来技術による比較として使用される。OLED の結果は表 2 にまとめられる。

10

20

30

40

【表 1 - 1】

表 1: OLED の構造

例	EML	HBL	ETL
青色 OLED (400 – 499 nm)			
D-Ref.1	SMB1:D-Ref.1 (95%:5%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)
D-D1A	SMB1:D1A (95%:5%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)
D-D3	SMB1:D3 (95%:5%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)
D-D4A	SMB1:D4A (95%:5%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)
D-D5A	SMB1:D5A (95%:5%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)
D-D7	SMB1:D7 (95%:5%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)
D-D9	SMB1:D9 (97%:3%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)
D-D10	SMB1:D10 (92%:8%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)
D-D11	SMB1:D11 (95%:5%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)
D-D13A	SMB1:D13A (95%:5%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)
D-D15	SMB1:D15 (95%:5%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)
D-D100A	SMB1:D100A (95%:5%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)
D-D101A	SMB1:D101A (95%:5%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)
D-D103	SMB1:D103 (95%:5%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)
D-D104	SMB1:D104 (95%:5%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)
D-D105	SMB1:D105 (95%:5%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)
D-D106	SMB1:D106	ETM1	ETM1:ETM2

10

20

30

40

50

【表 1 - 2】

	(95%:5%)		(50%:50%)
D-D107	SMB2:D107 (95%:5%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)
D-D108	SMB1:D108 (95%:5%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)
D-D109A	SMB1:D109A (95%:5%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)
D-D110A	SMB1:D110A (95%:5%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)
緑色 OLED (500 – 549 nm)			
黄色 OLED (550 – 600 nm)			
D-D100B	SMB1:D100B (95%:5%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)
D-D109B	SMB1:D109B (95%:5%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)
D-D112	SMB1:D (95%:5%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)
D-D113	SMB1:D113 (95%:5%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)
D-D1B	SMB1:D1B (92%:8%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)
D-D13B	SMB1:D13B (95%:5%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)
D-D101B	SMB1:D101B (95%:5%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)
D-D110B	SMB1:D110B (95%:5%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)
赤色 OLED (601 – 800 nm)			
D-D4B	SMB1:D4B (95%:5%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)
D-D5B	SMB1:D5B (95%:5%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)
D-D14B	SMB1:D14B (95%:5%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)
D-D15	SMB1:D15 (95%:5%)	ETM1	ETM1:ETM2 (50%:50%)

10

20

30

40

50

【表 2 - 1】

表 2:真空処理された OLED の結果 at 1000 cd/m²

例	EQE (%)	電圧(V)	色
青色 OLED (430 – 499 nm)			
Ref.1	5.9	4.7	青色
D-D1A	5.9	4.5	青色
D-D3	6.2	4.3	青色
D-D4A	6.5	4.3	青色
D-D5A	6.4	4.4	青色
D-D7	6.5	4.1	青色
D-D9	6.8	4.3	青色
D-D10	6.4	4.0	青色
D-D11	6.3	4.3	青色
D-D13A	6.5	4.3	青色
D-D100A	6.7	4.2	青色
D-D101A	7.0	4.2	青色
D-D103	6.9	4.4	青色
D-D104	6.2	4.5	青色
D-D105	6.4	4.3	青色
D-D106	6.5	4.3	青色
D-D107	6.5	4.4	青色
D-D108	6.5	4.2	青色
D-D109A	6.7	4.2	青色
D-D110A	6.3	4.1	青色
緑色 OLED (500 – 549 nm)			
黄色 OLED (550 – 600 nm)			
D-D100B	6.4	4.2	緑色
D-D109B	6.6	4.1	緑色
D-D112	6.6	4.2	緑色
D-D113	6.2	4.2	緑色
D-D1B	7.0	4.3	黄色
D-D13B	6.7	4.3	黄色

10

20

30

40

50

【表 2 - 2】

D-D101B	6.8	4.2	黄色
D-D110B	6.5	4.1	黄色
赤色 OLED (601 – 800 nm)			
D-D4B	5.6	3.7	赤色
D-D5B	5.8	3.8	赤色
D-D14B	5.4	4.0	赤色
D-D15	5.9	4.1	赤色

10

2) 溶液処理された部品：

【0192】

溶液ベースのOLEDの製造は、文献（例えばWO2004/037887およびWO2010/097155）に基本的に開示される。以下の例において、2つの製造方法（ガス層および溶液処理からの適用）が組み合わせられ、発光層を含むそれまでの層が溶液から製造され、その後の層（正孔ブロック層/電子輸送層）が減圧下で蒸着により適用された。この目的のために、上記の一般的な方法は、以下のように組み合わせられ、ここで記載される状況に適合される（層厚の変化、材料）。

20

【0193】

使用される構造は以下である：

- 基板、
- ITO (50 nm)、
- PEDOT (20 nm)、
- 正孔輸送層 (HIL2) (20 nm)、
- 発光層 (ホストH192%、ドーパント8%) (60 nm)、
- 電子輸送層 (ETM150% + ETM250%) (20 nm)、
- カソード (Al)。

30

【0194】

使用される基板は、膜厚50 nmの構造化ITO（インジウムスズ酸化物）で被覆されたガラス基板である。よりよい方法のために、これらはバッファ（PEDOT）Clevious PVP AI 4083（Heraeus Clevious GmbH、Leverkusen）によって被覆される；PEDOTは、表面にある。スピコートは、空気下で水から行われる。層は、引き続き180 で10分間ベークされる。正孔輸送および発光層は、このようにガラス基板に適用され、被覆される。正孔輸送層は構造は表4に示される構造のポリマーである。これはWO2010/097155に従って構成された。ポリマーはトルエンに溶解され、溶液は典型的には約5 g/Lの固形分を有し、スピコートによって典型的に20 nmの層厚を達成する。層は、不活性ガス、今回のケースではアルゴン、雰囲気下で塗布され、180 で60分間ベークされる。

40

【0195】

発光層 (EML) は、常に、少なくとも1つのマトリックス材料 (ホスト材料) および発光ドーパント (発光体) から構成される。H1 (92%) : D (8%) の形で与えられる場合、ここでは、材料H1が発光層中に92%の重量比率で存在し、ドーパントDは8%の重量割合で存在することを意味する。発光層の混合物はトルエンまたはクロロベンゼ

50

ンに溶解している。そのような溶液の典型的な固形分は、素子の典型である 60 nm の層厚がスピコートによって達成される場合に、約 18 g / L である。層は不活性ガス雰囲気、今回のケースではアルゴン、でスピコートされ、140 ~ 160 で 10 分間ベークされる。使用される材料は表 4 に示される。

【 0 1 9 6 】

電子輸送層およびカソードの材料は、真空チャンバー内で熱的蒸着によって適用される。例えば、電子輸送層は、1 より多い材料からなってもよく、材料は互いに共蒸着により特定の体積比で加えられる。ETM1 : ETM2 (50 % : 50 %) の形で与えられる場合、ここでは、ETM1 および ETM2 材料がそれぞれ 50 % の体積比で存在することを意味する。使用される材料は、表 4 に示される。

10

【表 3】

表 3: 溶液処理された OLED の結果 at 1000 cd/m²

例	ドーパント	EQE (%)	電圧 (V)	色
青色 OLEDs (430 – 499 nm)				
Ref.-Sol.	Ref.-D1	4.4	4.9	青色
Sol.-D12	D12	4.8	4.5	青色
Sol.-D102A	D102A	4.9	4.6	青色
緑色 OLEDs (500 – 549 nm)				
黄色 OLEDs (550 – 600 nm)				
Sol.-D102B	D102B	5.7	4.2	黄色

20

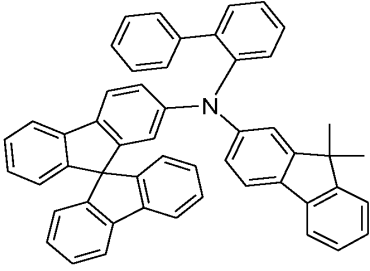
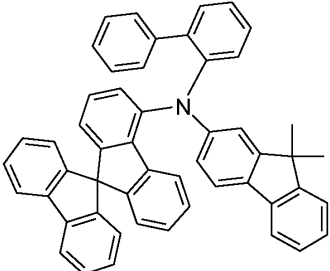
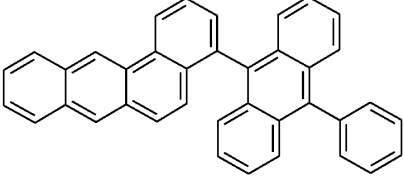
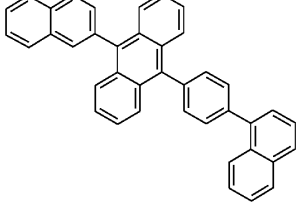
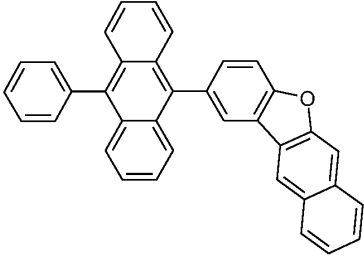
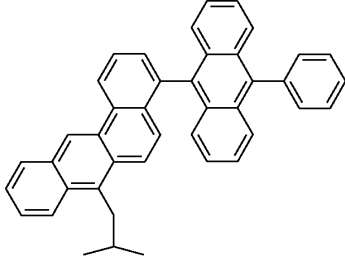
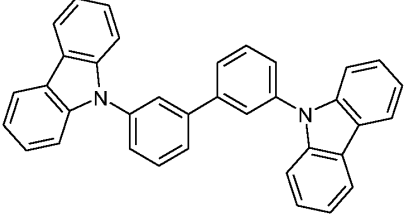
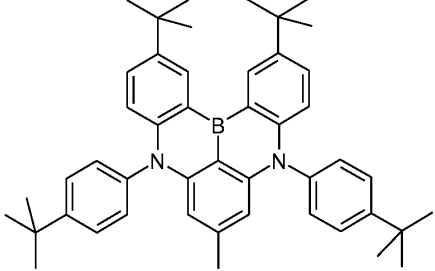
30

40

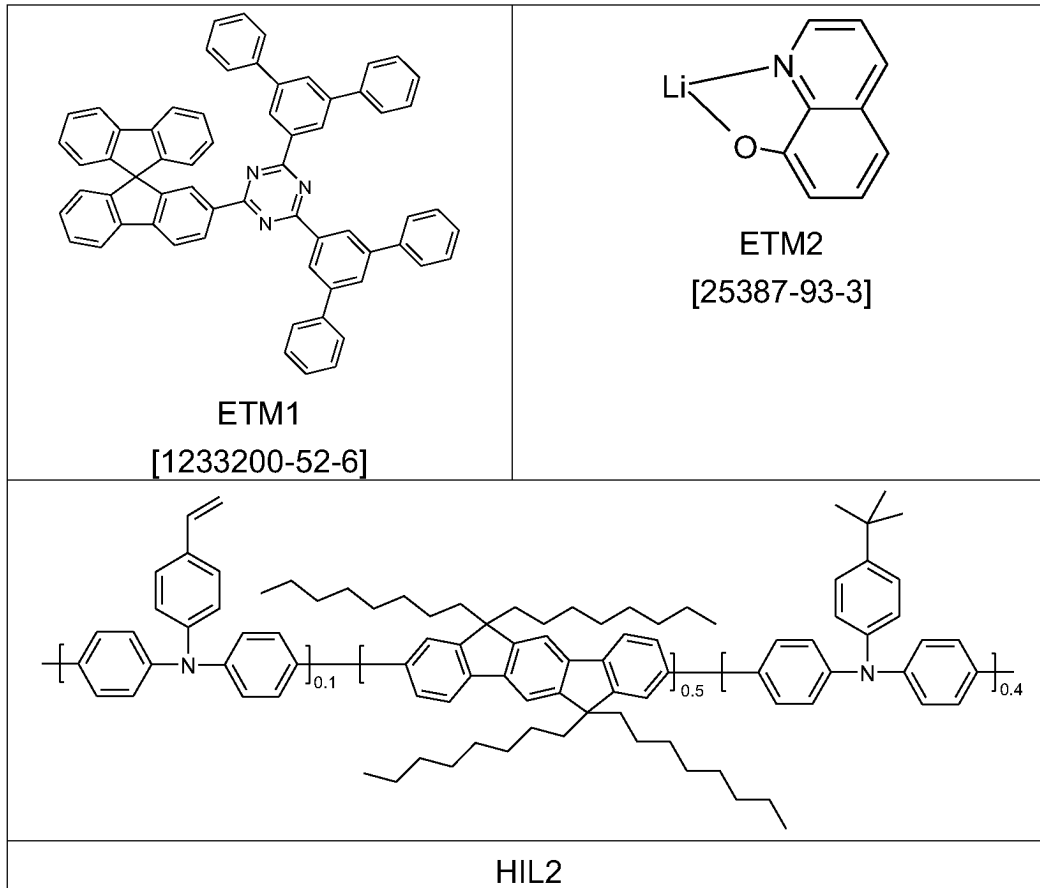
50

【表 4 - 1】

表 4: 使用される材料の構造

 <p>HTM1 [136463-07-5]</p>	 <p>HTM2 [1450933-44-4]</p>	10
 <p>SMB1 [1087346-88-0]</p>	 <p>SMB2 [667940-34-3]</p>	20
 <p>SMB3 [1627916-48-6]</p>	 <p>H1 [1818872-85-3]</p>	30
 <p>SMB4 [342638-54-4]</p>	 <p>Ref.-D1 [1805802-42-9]</p>	40

【表 4 - 2】



【0197】

本発明の化合物は、参照と比較して、小さい作動電圧で、より高いEQE値（外部量子効率）を示す。これによって、素子の電力効率の顕著な改善をもたらし、それによって、より低い電力消費となる。

30

40

50

【 国際調査報告 】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT		International application No. PCT/EP2021/067453
A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER <i>C07F 5/02</i> (2006.01)i; <i>C09K 11/06</i> (2006.01)i; <i>H01L 51/00</i> (2006.01)i According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
B. FIELDS SEARCHED Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) C07F; C09K; H01L Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) EPO-Internal, CHEM ABS Data, WPI Data		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	Pubchem. "9-Phenyl-2,8,10,16-tetrazanonacyclo[14.14.1.12,11.13,7.017,26.020,25.027,31.010,33.015,32]trtriaconta-1(30),3,5,7(33),8,11,13,15(32),17(36),18,20,22-pentadecaene C35H20N4 - PubChem" <i>US-10032997-B2</i> , 15 December 2018 (2018-12-15), pages 1-8, Retrieved from the Internet: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/13524310 8#section=3D-Conformer [retrieved on 2021-08-16] XP055832141 abstract	1-19
X	& Pubchem. "21-Phenyl-2,14,20,22-tetrazaoctacyclo[12.12.1.12,9.115,19.03,8.023,27.013,29.022,28]nonacosa-1(27),3,5,7,9(29),10,12,15,17,19(28),20,23,25-tridecaene C31H18N4 - PubChem" <i>US-10032997-B2</i> , 15 December 2018 (2018-12-15), pages 1-8, Retrieved from the Internet: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/13524310 7 [retrieved on 2021-08-16] XP055832142 abstract	1-19
<input checked="" type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex.		
* Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed		"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art "&" document member of the same patent family
Date of the actual completion of the international search 17 August 2021		Date of mailing of the international search report 26 August 2021
Name and mailing address of the ISA/EP European Patent Office p.b. 5818, Patentlaan 2, 2280 HV Rijswijk Netherlands Telephone No. (+31-70)340-2040 Facsimile No. (+31-70)340-3016		Authorized officer Eberhard, Michael Telephone No.

Form PCT/ISA/210 (second sheet) (January 2015)

10

20

30

40

50

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/EP2021/067453

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
	& US 10032997 B2 (LG CHEMICAL LTD [KR]) 24 July 2018 (2018-07-24) abstract	
X,P	WO 2020217229 A1 (IDEMITSU KOSAN CO [JP]) 29 October 2020 (2020-10-29) the whole document	1-19
X,P	WO 2021071345 A2 (SFC CO LTD [KR]) 15 April 2021 (2021-04-15) the whole document	1-19
X,P	WO 2021075856 A1 (SFC CO LTD [KR]) 22 April 2021 (2021-04-22) the whole document	1-19

10

20

30

40

50

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/EP2021/067453

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)			Publication date (day/month/year)
US	10032997	B2	24 July 2018	CN	105722946	A	29 June 2016
				CN	105722947	A	29 June 2016
				CN	105722948	A	29 June 2016
				CN	105765029	A	13 July 2016
				EP	3053982	A1	10 August 2016
				EP	3053983	A1	10 August 2016
				EP	3053984	A1	10 August 2016
				EP	3053985	A1	10 August 2016
				JP	6174819	B2	02 August 2017
				JP	6178518	B2	09 August 2017
				JP	6194121	B2	06 September 2017
				JP	6211710	B2	11 October 2017
				JP	2016535077	A	10 November 2016
				JP	2016535078	A	10 November 2016
				JP	2016535461	A	10 November 2016
				JP	2016540032	A	22 December 2016
				KR	20150037623	A	08 April 2015
				KR	20150037624	A	08 April 2015
				KR	20150037625	A	08 April 2015
				KR	20150037626	A	08 April 2015
				TW	201522346	A	16 June 2015
				TW	201527299	A	16 July 2015
				TW	201527301	A	16 July 2015
				TW	201527303	A	16 July 2015
				US	2016218301	A1	28 July 2016
				US	2016233431	A1	11 August 2016
				US	2016233432	A1	11 August 2016
				US	2016240793	A1	18 August 2016
				US	2019237681	A1	01 August 2019
				WO	2015046986	A1	02 April 2015
				WO	2015046987	A1	02 April 2015
				WO	2015046988	A1	02 April 2015
				WO	2015046990	A1	02 April 2015
WO	2020217229	A1	29 October 2020	NONE			
WO	2021071345	A2	15 April 2021	KR	20210042840	A	20 April 2021
				WO	2021071345	A2	15 April 2021
WO	2021075856	A1	22 April 2021	KR	20210044175	A	22 April 2021
				WO	2021075856	A1	22 April 2021

Form PCT/ISA/210 (patent family annex) (January 2015)

10

20

30

40

50

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP2021/067453

A. KLASSIFIZIERUNG DES ANMELDUNGSGEGENSTANDES INV. C07F5/02 C09K11/06 H01L51/00 ADD.		
Nach der Internationalen Patentklassifikation (IPC) oder nach der nationalen Klassifikation und der IPC		
B. RESEARCHIERTE GEBIETE Recherchiertes Mindestprüfstoff (Klassifikationssystem und Klassifikationssymbole) C07F C09K H01L		
Recherchierte, aber nicht zum Mindestprüfstoff gehörende Veröffentlichungen, soweit diese unter die recherchierten Gebiete fallen		
Während der internationalen Recherche konsultierte elektronische Datenbank (Name der Datenbank und evtl. verwendete Suchbegriffe) EPO-Internal, CHEM ABS Data, WPI Data		
C. ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN		
Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
X	Pubchem: "9-Phenyl-2,8,10,16-tetrazanonacyclo[14.14.1.12,11.13,7.017,26.020,25.027,31.010,33.015,32]tritriaconta-1(30),3,5,7(33),8,11,13,15(32),17(26),18,20,22,24,27(31),28-pentadecaene C35H20N4 - PubChem", US-10032997-B2, 15. Dezember 2018 (2018-12-15), Seiten 1-8, XP055832141, Gefunden im Internet: URL: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/135243108#section=3D-Conformer [gefunden am 2021-08-16] Zusammenfassung	1-19
	-/--	
<input checked="" type="checkbox"/> Weitere Veröffentlichungen sind der Fortsetzung von Feld C zu entnehmen <input checked="" type="checkbox"/> Siehe Anhang Patentfamilie		
* Besondere Kategorien von angegebenen Veröffentlichungen : *A* Veröffentlichung, die den allgemeinen Stand der Technik definiert, aber nicht als besonders bedeutsam anzusehen ist *E* frühere Anmeldung oder Patent, die bzw. das jedoch erst am oder nach dem internationalen Anmeldedatum veröffentlicht worden ist *L* Veröffentlichung, die geeignet ist, einen Prioritätsanspruch zweifelhaft erscheinen zu lassen, oder durch die das Veröffentlichungsdatum einer anderen im Recherchenbericht genannten Veröffentlichung belegt werden soll oder die aus einem anderen besonderen Grund angegeben ist (wie ausgeführt) *O* Veröffentlichung, die sich auf eine mündliche Offenbarung, eine Benutzung, eine Ausstellung oder andere Maßnahmen bezieht *P* Veröffentlichung, die vor dem internationalen Anmeldedatum, aber nach dem beanspruchten Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist *T* Spätere Veröffentlichung, die nach dem internationalen Anmeldedatum oder dem Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist und mit der Anmeldung nicht kollidiert, sondern nur zum Verständnis des der Erfindung zugrundeliegenden Prinzips oder der ihr zugrundeliegenden Theorie angegeben ist *X* Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann allein aufgrund dieser Veröffentlichung nicht als neu oder auf erfindersicher Tätigkeit beruhend betrachtet werden *Y* Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann nicht als auf erfindersicher Tätigkeit beruhend betrachtet werden, wenn die Veröffentlichung mit einer oder mehreren Veröffentlichungen dieser Kategorie in Verbindung gebracht wird und diese Verbindung für einen Fachmann naheliegend ist *&* Veröffentlichung, die Mitglied derselben Patentfamilie ist		
Datum des Abschlusses der internationalen Recherche		Absenddatum des internationalen Recherchenberichts
17. August 2021		26/08/2021
Name und Postanschrift der Internationalen Recherchenbehörde Europäisches Patentamt, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL - 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Fax: (+31-70) 340-3016		Bevollmächtigter Bediensteter Eberhard, Michael

1

Formblatt PCT/ISA210 (Blatt 2) (April 2005)

Seite 1 von 2

10

20

30

40

50

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP2021/067453

C. (Fortsetzung) ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN		
Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anpruch Nr.
X	-& Pubchem: "21-Phenyl-2,14,20,22-tetrazaocyclo[12.12.1.12,9.115,19.03,8.023,27.013,29.022,28]nonacosa-1(27),3,5,7,9(29),10,12,15,17,19(28),20,23,25-tridecaene C31H18N4 - PubChem", US-10032997-B2, 15. Dezember 2018 (2018-12-15), Seiten 1-8, XP055832142, Gefunden im Internet: URL: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/135243107 [gefunden am 2021-08-16] Zusammenfassung -& US 10 032 997 B2 (LG CHEMICAL LTD [KR]) 24. Juli 2018 (2018-07-24) Zusammenfassung	1-19
X, P	----- WO 2020/217229 A1 (IDEMITSU KOSAN CO [JP]) 29. Oktober 2020 (2020-10-29) das ganze Dokument	1-19
X, P	----- WO 2021/071345 A2 (SFC CO LTD [KR]) 15. April 2021 (2021-04-15) das ganze Dokument	1-19
X, P	----- WO 2021/075856 A1 (SFC CO LTD [KR]) 22. April 2021 (2021-04-22) das ganze Dokument -----	1-19

10

20

30

40

1

Formblatt PCT/ISA210 (Fortsetzung von Blatt 2) (April 2005)

50

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Angaben zu Veröffentlichungen, die zur selben Patentfamilie gehören

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP2021/067453

Im Recherchenbericht angeführtes Patentdokument	Datum der Veröffentlichung	Mitglied(er) der Patentfamilie	Datum der Veröffentlichung	
US 10032997	B2	24-07-2018	CN 105722946 A	29-06-2016
			CN 105722947 A	29-06-2016
			CN 105722948 A	29-06-2016
			CN 105765029 A	13-07-2016
			EP 3053982 A1	10-08-2016
			EP 3053983 A1	10-08-2016
			EP 3053984 A1	10-08-2016
			EP 3053985 A1	10-08-2016
			JP 6174819 B2	02-08-2017
			JP 6178518 B2	09-08-2017
			JP 6194121 B2	06-09-2017
			JP 6211710 B2	11-10-2017
			JP 2016535077 A	10-11-2016
			JP 2016535078 A	10-11-2016
			JP 2016535461 A	10-11-2016
			JP 2016540032 A	22-12-2016
			KR 20150037623 A	08-04-2015
			KR 20150037624 A	08-04-2015
			KR 20150037625 A	08-04-2015
			KR 20150037626 A	08-04-2015
			TW 201522346 A	16-06-2015
			TW 201527299 A	16-07-2015
			TW 201527301 A	16-07-2015
			TW 201527303 A	16-07-2015
			US 2016218301 A1	28-07-2016
			US 2016233431 A1	11-08-2016
			US 2016233432 A1	11-08-2016
			US 2016240793 A1	18-08-2016
			US 2019237681 A1	01-08-2019
			WO 2015046986 A1	02-04-2015
WO 2015046987 A1	02-04-2015			
WO 2015046988 A1	02-04-2015			
WO 2015046990 A1	02-04-2015			

WO 2020217229	A1	29-10-2020	KEINE	

WO 2021071345	A2	15-04-2021	KR 20210042840 A	20-04-2021
			WO 2021071345 A2	15-04-2021

WO 2021075856	A1	22-04-2021	KR 20210044175 A	22-04-2021
			WO 2021075856 A1	22-04-2021

Formblatt PCT/ISA210 (Anhang Patentfamilie) (April 2005)

10

20

30

40

50

フロントページの続き

(51)国際特許分類

F I

テーマコード (参考)

H 1 0 K 85/60 (2023.01) H 1 0 K 85/60
 H 1 0 K 85/10 (2023.01) H 1 0 K 85/10

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

(74)代理人 100187159

弁理士 前川 英明

(74)代理人 100206265

弁理士 遠藤 逸子

(72)発明者 フィリップ、ステッセル

ドイツ連邦共和国ダルムシュタット、フランクフルター、シュトラッセ、250、ケアオブ、メル
 ク、コマンディトゲゼルシャフト、アウフ、アクチエン

Fターム (参考) 3K107 AA01 CC04 CC12 CC21 DD53 DD59 DD60 DD66 DD67 DD68
 DD69 DD70
 4C065 AA07 BB06 CC06 DD03 EE04 HH01 JJ04 KK01 LL01 PP03
 QQ02
 4C072 AA02 BB04 BB08 CC03 CC11 EE07 FF05 GG01 JJ02 UU05
 4H048 AA01 AA03 AB92 VA11 VA22 VA32 VA42