

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第6954833号
(P6954833)

(45) 発行日 令和3年10月27日 (2021. 10. 27)

(24) 登録日 令和3年10月4日 (2021. 10. 4)

(51) Int. Cl.

F I

C O 7 D 209/86 (2006. 01)

C O 7 D 209/86 C S P

C O 7 D 209/88 (2006. 01)

C O 7 D 209/88

C O 7 D 413/04 (2006. 01)

C O 7 D 413/04

H O 1 L 51/50 (2006. 01)

H O 5 B 33/14

B

C O 9 K 11/06 (2006. 01)

H O 5 B 33/22

B

請求項の数 3 (全 79 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2017-514891 (P2017-514891)
 (86) (22) 出願日 平成27年9月17日 (2015. 9. 17)
 (65) 公表番号 特表2017-530969 (P2017-530969A)
 (43) 公表日 平成29年10月19日 (2017. 10. 19)
 (86) 国際出願番号 PCT/EP2015/071309
 (87) 国際公開番号 W02016/042070
 (87) 国際公開日 平成28年3月24日 (2016. 3. 24)
 審査請求日 平成30年8月21日 (2018. 8. 21)
 (31) 優先権主張番号 14185118.8
 (32) 優先日 平成26年9月17日 (2014. 9. 17)
 (33) 優先権主張国・地域又は機関
 欧州特許庁 (EP)
 (31) 優先権主張番号 14193686.4
 (32) 優先日 平成26年11月18日 (2014. 11. 18)
 (33) 優先権主張国・地域又は機関
 欧州特許庁 (EP)

(73) 特許権者 513284771
 サイノーラ・ゲゼルシャフト・ミト・ベシ
 ユレンクテル・ハフツング
 ドイツ連邦共和国、7 6 6 4 6 ブルッフ
 ザール、ヴェルナー・フォン・ジーメンス
 ストラッセ、2-6
 (74) 代理人 100069556
 弁理士 江崎 光史
 (74) 代理人 100111486
 弁理士 鍛冶澤 實
 (74) 代理人 100139527
 弁理士 上西 克礼
 (74) 代理人 100164781
 弁理士 虎山 一郎

最終頁に続く

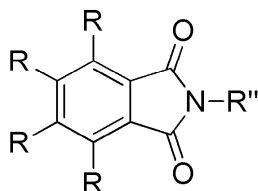
(54) 【発明の名称】 エミッタとして使用するための有機分子

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

式 D の構造を有する有機分子。

【化 1】

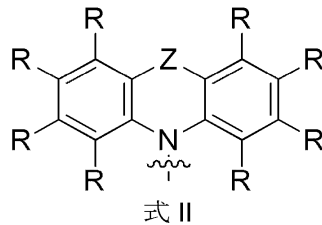


式 D

(式中、

アリール環の少なくとも一つの R は、ドナー D であり、該ドナー D は、次の式 I I の構造を有し、

【化 2】



Z = 直接結合又は - O - であり、その際、波線は、それを介してドナー D が式 D のフェニル環に結合する位置を示し、

式 D 中の R は、いずれの場合においても H であり、但し、少なくとも一つの R はドナー D であり、

式 (II) 中の R は、いずれの場合においても、同一又は異なって、H、Br、1 ~ 40 C 原子を有する線状のアルコキシ基、又は、3 ~ 40 C 原子を有する分岐状のアルキル基であり、

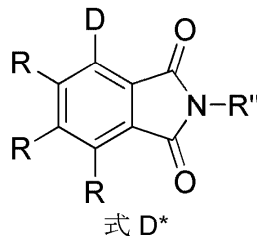
R² は、いずれの場合においても、同一又は異なって、F、CF₃、1 ~ 40 C 原子を有する線状のアルキル基、又は 3 ~ 40 C 原子を有する分岐状のアルキル基であり、

R' は、1 ~ 40 C 原子を有する線状のアルキル基又は 3 ~ 40 C 原子を有する分岐状のアルキル基（これらは、それぞれ、一つ又は二つ以上の残基 R² で置換されることができる）、あるいはそれぞれが、一つ又は二つ以上の残基 R² で置換されることができる、フェニル基または 2 - 、3 - もしくは 4 - ピリジニル基である。）

【請求項 2】

次の式 D* の構造を有する、請求項 1 に記載の有機分子。

【化 3】



(式中、R、R' および D は請求項 1 と同じ定義であり、但し、R はドナー基ではない。)

【請求項 3】

Z が直接結合に等しい、請求項 1 または 2 に記載の有機分子。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、一般式 A の金属中心を有さない純粋な有機分子（着色料）、及び OLED（有機発光ダイオード）及び他の光電子デバイスにおけるエミッタとしてのその使用に関する。

【背景技術】

【0002】

光電子デバイスは、電気エネルギーが光子に変換される（OLED、LEEC）か又は逆のプロセスが行われる（OPV）ことを特徴とする。それにより、このプロセスが可能な限り効率的に進行することが重要である。それ故、OLED の領域に関して、可能な限り高いフォトルミネッセンス量子収率を有する理想的な材料を使用しなければならない。しかしながら、同様に、当業者が知るように、OLED に、25% の一重項励起子及び 75% の三重項励起子が形成されることを考慮しなければならない。これは、標準的な蛍光発光体が 25% の最大内部量子効率に達し得る事態を招く。同様に、形成された長寿命の

10

20

30

40

50

、非発光三重項状態によって、高電流において急速に減少する効率（効率ロールオフと呼ばれる。）という問題が起こる。

【0003】

これらの欠点を回避し、可能な限り全ての電荷キャリアを利用するために、当業者に公知の三重項 - ハーベストのコンセプトを使用することができる。このためには、一般に、高価な重原子錯体（例えば、イリジウム又は白金）を使用しなければならない（例えば、M. A. Baldo, D. F. O'Brien, M. E. Thompson, S. R. Forrest, Phys. Rev. B 1999, 60, 14422 and H. Yersin, Top. Curr. Chem. 2004, 241, 1（非特許文献1）を参照）。 10

【0004】

別の方法としては、熱活性化遅延蛍光を示す（TADF）材料の使用である。この場合は、得られる三重項励起子を一重項励起子に変換することもでき、それからその状態から、光子を放出させることができる。その場合、そのような熱フィードバックのための前提条件は、最低励起一重項レベル（S1）と三重項レベル（T1）との間の小さなエネルギーギャップである。これは、例えば、銅 - (I) - 錯体（例えば、H. Yersin, U. Monkowius, T. Fischer, T. Hofbeck, WO 2010/149748 A1, 2010（非特許文献2）を参照）の使用によっても、純粋な有機材料の使用（例えば、K. Shizu, H. Tanaka, H. Nakanotani, C. Adachi, WO 2013/172255 A1; H. Uoyama, K. Goushi, K. Shizu, H. Nomura, C. Adachi, Nature 2012, 492, 234（非特許文献3）を参照）によっても達成できる。 20

【0005】

この分野での集中的な研究は、このような発光材料のためのいくつかの既存の概念にもかかわらず、新しい材料のための大きな必要性が依然として存在していることを示している。とりわけ、異なる用途分野（スクリーン技術、照明、スマートパッケージングなど）並びに様々な製造方法（真空、液体又はハイブリッド処理）の存在がこの原因となっている。特に、液体処理の分野については、同様に、特定の溶媒中での選択的溶解性又は不溶性を観察しなければならず、それにより、事前に施用された層を再度溶解せずに、後続して層を適用することができる。これらの材料の前述の特性に加えて、同様に、商業化のために入手可能性も関連している。これは、合成のビルディングブロックだけでなく、機能性材料の本来の合成、特にその精製のための費用も含む。 30

【先行技術文献】

【特許文献】

【0006】

【特許文献1】国際公開第2010/066245 A1号パンフレット

【特許文献2】国際公開第2011/033023 A1号パンフレット

【特許文献3】国際公開第2011/120709 A1号パンフレット

【特許文献4】国際公開第2010/066245 A1号パンフレット 40

【特許文献5】ドイツ国特許出願公開第10 2012 209 523 A1号明細書

【特許文献6】ドイツ国特許出願公開第10 2012 209 520 A1号明細書

【特許文献7】国際公開第2011/039323 A2号パンフレット

【特許文献8】国際公開第2009/095006 A1号パンフレット

【特許文献9】国際公開第2010/108894 A1号パンフレット

【非特許文献】

【0007】

【非特許文献1】M. A. Baldo, D. F. O'Brien, M. E. Thompson, S. R. Forrest, Phys. Rev. B 1999, 60, 14422 and H. Yersin, Top. Curr 50

. Chem. 2004, 241, 1

【非特許文献2】H. Yersin, U. Monkowius, T. Fischer, T. Hofbeck, WO 2010/149748 A1, 2010

【非特許文献3】K. Shizu, H. Tanaka, H. Nakanotani, C. Adachi, WO 2013/172255 A1; H. Uoyama, K. Goushi, K. Shizu, H. Nomura, C. Adachi, Nature 2012, 492, 234

【非特許文献4】M. E. Thompson et al., Chem. Mater. 2004, 16, 4743

【非特許文献5】LiF/Al) (Xie, Z. T., Zhang, W. H., Ding, B. F., Gao, X. D., You, Y. T., Sun, Z. Y., ... Hou, X. Y. (2009). Interfacial reactions at Al/LiF and LiF/Al. Applied Physics Letters, 94(6), 063302. doi: 10.1063/1.3077167

10

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

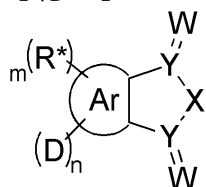
【0008】

本発明は、一つの態様において、次の一般式Aの構造を含むか又はそれからなる分子を提供することに関する。

20

【0009】

【化1】



式A

【0010】

式中、

30

Y = 互いに独立して、C、PR、S、S(=O)からなる群から選択され、その際、C及びS(PO)が好ましい；

W = 互いに独立して、C(CN)₂、NR、O、Sからなる群から選択され、その際、O及びSが好ましい；

X = CR²、C=C(CN)₂、NR、O、Sからなる群から選択され、その際、NR及びOが好ましい；及び

その際、特に、X、Y及びWについては次の組み合わせが可能である。

【0011】

【表 1】

X	Y	W
NR	C	O
NR	PR	O
NR	S (=O)	O
O	C	O
O	PR	O
O	S (=O)	O
NR	C	C (CN) ₂
O	C	C (CN) ₂
NR	S	O
O	S	O
O	C	S
S	C	S
S	C	O
CR ²	C	O
CR ²	PR	O
CR ²	S (=O)	O
C=C (CN) ₂	C	O
C=C (CN) ₂	PR	O
C=C (CN) ₂	S (=O)	O

10

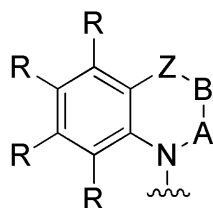
20

【0012】

Ar = 5 ~ 40 個の芳香族の環原子を有する、置換されたアリール基又はヘテロアリール基であり、該基は、m 個の同一又は異なる残基 R^{*}、及び、n 個の同一又は異なる電子供与特性を有するドナー基 D で置換されており、その際、m + n は、置換可能な環の原子の数に等しく、そしてその際、D は、次の式 I の構造を有する。

【0013】

【化 2】



式 I

30

【0014】

式中、

A 及び B = 互いに独立して、CRR'、CR、NR、N からなる群から選択され、その際、A と B との間には、単結合又は二重結合が存在しており、そして、B と Z との間には単結合又は二重結合が存在している；

40

Z = 直接結合又は二価の有機架橋であり、これは、置換された又は置換されていない C1 - C9 - アルキレン基、C2 - C8 - アルケニレン基、C2 - C8 - アルキニレン基又はアリーレン基又はこれらの組み合わせ、- CRR'、- C=CRR'、- C=NR、- NR-、- O-、- SiRR'-、- S-、- S(O)-、- S(O)₂-、O で中断された、置換された又は置換されていない C1 - C9 - アルキレン基、C2 - C8 - アルケニレン基、C2 - C8 - アルキニレン基又はアリーレン基、フェニル単位又は置換されたフェニル単位であり、その際、波線は、それを介して D が Ar に結合する位置を示し；

その際、

R^{*}、R 及び R' は、それぞれ、いずれの場合においても、同一又は異なって、H、重水素、F、Cl、Br、I、N(R²)₂、CN、CF₃、NO₂、OH、COOH、CO

50

OR^2 、 $CO(NR^2)_2$ 、 $Si(R^2)_3$ 、 $B(OR^2)_2$ 、 $C(=O)R^2$ 、 $P(=O)(R^2)_2$ 、 $S(=O)R^2$ 、 $S(=O)_2R^2$ 、 OSO_2R^2 、1～40C原子を有する線状のアルキル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基、又は、2～40C原子を有する線状のアルケニル基又はアルキニル基、又は、3～40C原子を有する分岐状又は環状のアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基であり、それぞれ一つ又は二つ以上の残基 R^2 で置換されることができ、その際、一つ又は二つ以上の隣接していない CH_2 -基は、 $R^2C=CR^2$ 、 $C-C$ 、 $Si(R^2)_2$ 、 $Ge(R^2)_2$ 、 $Sn(R^2)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^2$ 、 $P(=O)(R^2)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^2 、 O 、 S 又は $CONR^2$ で置き換えることができ、かつ、その際、一つ又は二つ以上のH原子は、重水素、F、Cl、Br、I、CN、 CF_3 又は NO_2 で置き換えることができるか、又は一つ又は二つ以上の残基 R^2 で置換されることができ、5～60個の芳香族の環原子を有する芳香族又はヘテロ芳香族の環系で置き換えることができ、それらは一つ又は二つ以上の残基 R^2 で置換されることができ、又は、一つ又は二つ以上の残基 R^2 で置換されることができ、5～60個の芳香族の環原子を有するアリールオキシ基又はヘテロアリールオキシ基、又は10～40個の芳香族の環原子を有する、一つ又は二つ以上の残基 R^2 で置換されることができ、ジアリールアミノ基、ジヘテロアリールアミノ基又はアリールヘテロアリールアミノ基、又はこれらの系の組み合わせ、又は、酸触媒架橋法により、熱架橋法又はUV架橋法により架橋できる、光開始剤の存在下又は不存在下で、又はマイクロ波の照射によって架橋可能な単位QEであり、その際、二つ又は三つ以上の置換基 R^* 、 R 及び R' は互いに単環式、多環式、脂肪族、芳香族及び/又はベンゾ縮合環系を形成することもでき；

R^2 は、いずれの場合においても、同一又は異なって、H、重水素、F、Cl、Br、I、 $N(R^3)_2$ 、CN、 CF_3 、 NO_2 、OH、COOH、 $COOR^3$ 、 $CO(NR^3)_2$ 、 $Si(R^3)_3$ 、 $B(OR^3)_2$ 、 $C(=O)R^3$ 、 $P(=O)(R^3)_2$ 、 $S(=O)R^3$ 、 $S(=O)_2R^3$ 、 OSO_2R^3 、1～40C原子を有する線状のアルキル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基、又は、2～40C原子を有する線状のアルケニル基又はアルキニル基、又は3～40C原子を有する分岐状又は環状のアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基であり、それぞれ、一つ又は二つ以上の残基 R^3 で置換されることができ、その際、一つ又は二つ以上の隣接していない CH_2 -基は、 $R^3C=CR^3$ 、 $C-C$ 、 $Si(R^3)_2$ 、 $Ge(R^3)_2$ 、 $Sn(R^3)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^3$ 、 $P(=O)(R^3)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^3 、 O 、 S 又は $CONR^3$ で置換されることができ、かつ、その際、一つ又は二つ以上のH原子は、重水素、F、Cl、Br、I、CN、 CF_3 又は NO_2 で置換されることができ、又は、一つ又は二つ以上の残基 R^3 で置換されることができ、一つ又は二つ以上の残基 R^3 で置換されることができ、5～60個の芳香族の環原子を有する芳香族又はヘテロ芳香族の環系、又は一つ又は二つ以上の残基 R^3 で置換されることができ、5～60個の芳香族の環原子を有するアリールオキシ基又はヘテロアリールオキシ基、又は、10～40個の芳香族の環原子を有する、一つ又は二つ以上の残基 R^3 で置換されることができ、ジアリールアミノ基、ジヘテロアリールアミノ基又はアリールヘテロアリールアミノ基、又は、これらの系の組み合わせであり；その際、これらの二つ又は三つ以上の置換基 R^2 は互いに、単環又は多環の芳香族及び/又はベンゾ縮合環系を形成することもでき；

R^3 は、いずれの場合においても、同一又は異なって、H、重水素、F、 CF_3 、又は、1～20C原子を有する、脂肪族炭化水素残基、芳香族炭化水素残基及び/又はヘテロ芳香族炭化水素残基であり、その際、一つ又は二つ以上のH原子は、F又は CF_3 で置き換えることができ；その際、二つ又は三つ以上の置換基 R^3 は互いに、単環又は多環の脂肪族の環系を形成することもできる。

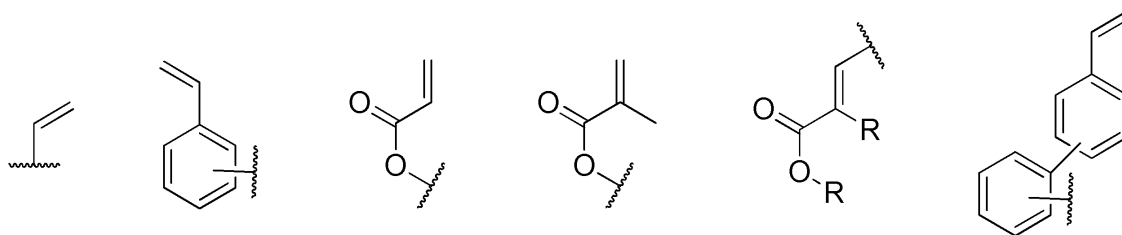
【0015】

一実施形態において、架橋可能な単位QEは、オキセタン、アルキン及びアジドからなる群から選択される、特に、クリック反応を遂行するための化合物、並びに以下のアルケ

ン誘導体である：

【 0 0 1 6 】

【 化 3 】



【 0 0 1 7 】

代替的な実施形態において、Zは、共有結合の単結合か、又は置換された又は置換されていないアルキレン基（分岐状又は環状）、アルケニレン基、アルキニレン基、アリーレン基及びヘテロアリーレン基、O、NR、C = CR₂、C = NR、SiR₂、S、S(O)、S(O)₂、BR、PR、P(O)Rから選択される二価の有機架橋であり、その際、これらの単位の組み合わせも可能である（例えば、Oで中断されたアルキレン基（分岐状又は環状も可）、アルケニレン基、アルキニレン基、アリーレン基及びヘテロアリーレン基）。

【 0 0 1 8 】

さらなる実施形態において、Y = C、W = O及びX = NRである。

【 0 0 1 9 】

一実施形態において、Arは、5～40個の芳香族の環原子を有する、m個の同一又は異なる残基R^{*}、及び、電子供与特性を有するn個のドナー基Dで置換されたアリール基又はヘテロアリール基であり、その際、m + nは、置換可能な環の原子の数に等しい。特に、該ドナー基Dは、置換された及び置換されていないカルバゾール、置換された及び置換されていないインドール、置換された及び置換されていないインドリン、置換された及び置換されていないジヒドロアクリジン、置換された及び置換されていないベンズイミダゾール、置換された及び置換されていない2,3,4,9-テトラヒドロカルバゾール、置換された及び置換されていない1,2,3,4-テトラヒドロキノリン、置換された及び置換されていないフェノチアジン、置換された及び置換されていないフェノキサジン、置換された及び置換されていないジヒドロフェナジン、置換された及び置換されていないスピロ化合物からなる群から選択される。

【 0 0 2 0 】

本発明の分子は、残基R¹、R²、R³及び特に、いくつかの特性のR^{*}及びRの導入によって、可能性を提供し：様々な溶媒における溶解性を調節することができ：架橋のために、容易に基を導入でき（例えば、アルケン、アルキン、オキセタン）、そのアクセプターの強さを、多かれ少なかれ電子求引性または電子供与性置換基によって変えることができ、それによって、分子全体の発光色に影響を及ぼすことができる。

【 0 0 2 1 】

アリール基は、6～40C原子を含み；ヘテロアリール基は、2～40C原子及び少なくとも一つのヘテロ原子を含み、但し、炭素原子とヘテロ原子の合計は少なくとも5になる。ヘテロ原子は、好ましくは、N、O及び/又はSから選択される。その場合、アリール基又は経てロアリール基は、単一の芳香族環、つまりベンゾールであるか、又は、単一のヘテロ芳香族環、例えば、ピリジン、ピリミジン、チオフェン等であるか、又は、縮合したアリール基又はヘテロアリール基、例えば、ナフタリン、アントラセン、フェナントレン、キノリン、イソキノリン等であると理解される。

【 0 0 2 2 】

本発明の意味において、芳香族の環系は、その環系に6～60C原子を含む。本発明の意味において、ヘテロ芳香族の環系は、その環系に1～60C原子及び少なくとも一つのヘテロ原子を含むが、C原子とヘテロ原子の合計は少なくとも5になる。ヘテロ原子は、好ましくは、N、O及び/又はSから選択される。本発明の意味において、芳香族又はヘ

10

20

30

40

50

テロ芳香族の環系は、必ずしもアリール基だけ、又は経てロアリール基だけを含むのではなく、非芳香族単位（例えば、好ましくは10%未満のH以外の原子）、例えば、C原子、N原子又はO原子又はカルボニル基で中断することができるいくつかのアリール基又はヘテロアリール基であると理解すべきである。そのため、例えば、9,9'-スピロフルオレン、9,9'-ジアリールフルオレン、トリアリールアミン、ジアリールエーテル、スチルベン等の系も、本発明の意味において、芳香族の環系と理解され、そして、同様に、二つ又は三つ以上のアリール基が、例えば、線状又は環状のアルキル基によって、又は、シリル基によって中断された系もまた、芳香族の環系と理解される。さらに、二つ又は三つ以上のアリール基又はヘテロアリール基が、直接互いに結合する系、例えば、ピフェニル又はターフェニルも同様に、芳香族又はヘテロ芳香族の環系であると理解される。

10

【0023】

環状のアルキル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基は、単環式、二環式、又は多環式の基であると理解される。

【0024】

本発明の範囲において、一つのH原子又はCH₂基が、上述の基で置換されることのできる、C₁ - ~ C₄₀ - アルキル基は、例えば、残基メチル、エチル、n - プロピル、i - プロピル、シクロプロピル、n - ブチル、i - ブチル、s - ブチル、t - ブチル、シクロブチル、2 - メチルブチル、n - ペンチル、s - ペンチル、t - ペンチル、2 - ペンチル、ネオ - ペンチル、シクロペンチル、n - ヘキシル、s - ヘキシル、t - ヘキシル、2 - ヘキシル、3 - ヘキシル、ネオ - ヘキシル、シクロヘキシル、1 - メチルシクロペンチル、2 - メチルペンチル、n - ヘプチル、2 - ヘプチル、3 - ヘプチル、4 - ヘプチル、シクロヘプチル、1 - メチルシクロヘキシル、n - オクチル、2 - エチルヘキシル、シクロオクチル、1 - ビシクロ[2, 2, 2]オクチル、2 - ビシクロ[2, 2, 2] - オクチル、2 - (2, 6 - ジメチル)オクチル、3 - (3, 7 - ジメチル)オクチル、アダマンチル、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、1, 1 - ジメチル - n - ヘキサ - 1 - イル - 、1, 1 - ジメチル - n - ヘプタ - 1 - イル - 、1, 1 - ジメチル - n - オクタ - 1 - イル - 、1, 1 - ジメチル - n - デカ - 1 - イル - 、1, 1 - ジメチル - n - ドデカ - 1 - イル - 、1, 1 - ジメチル - n - テトラデカ - 1 - イル - 、1, 1 - ジメチル - n - ヘキサデカ - 1 - イル - 、1, 1 - ジメチル - n - オクタデカ - 1 - イル - 、1, 1 - ジエチル - n - ヘキサ - 1 - イル - 、1, 1 - ジエチル - n - ヘプタ - 1 - イル - 、1, 1 - ジエチル - n - オクタ - 1 - イル - 、1, 1 - ジエチル - n - デカ - 1 - イル - 、1, 1 - ジエチル - n - ドデカ - 1 - イル - 、1, 1 - ジエチル - n - テトラデカ - 1 - イル - 、1, 1 - ジエチル - n - n - ヘキサデカ - 1 - イル - 、1, 1 - ジエチル - n - オクタデカ - 1 - イル - 、1 - (n - プロピル) - シクロヘキサ - 1 - イル - 、1 - (n - ブチル) - シクロヘキサ - 1 - イル - 、1 - (n - ヘキシル) - シクロヘキサ - 1 - イル - 、1 - (n - オクチル) - シクロヘキサ - 1 - イル - 及び1 - (n - デシル) - シクロヘキサ - 1 - イル - であると理解される。アルケニル基は、例えば、エテニル、プロペニル、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、シクロオクテニル又はシクロオクタジエニルと理解される。アルキニル基は、例えば、エチニル、プロピニル、ブチニル、ペンチニル、ヘキシニル、ヘプチニル又はオクチニルであると理解される。C₁ ~ C₄₀ - アルコキシ基は、例えば、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 - ブトキシ又は2 - メチルブトキシであると理解される。

20

30

40

【0025】

それぞれが、上述の残基で置換されることができ、かつ、芳香族物質又はヘテロ芳香族物質の任意の位置で結合することができる、5 ~ 60個の芳香族の環原子を有する芳香族又はヘテロ芳香族の環系は、例えば、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、ベンゾフェナントレン、ピレン、クリセン、ペリレン、フルオランテン、ベンズフルオランテン、ナフタセン、ペンタセン、ベンズピレン、ピフェニ

50

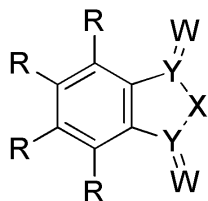
ル、ビフェニレン、ターフェニル、ターフェニレン、フルオレン、スピロビフルオレン、ジヒドロフェナントレン、ジヒドロピレン、テトラヒドロピレン、シス - 又はトランス - インデノフルオレン、シス - 又はトランス - モノベンゾインデノフルオレン、シス - 又はトランス - ジベンゾインデノフルオレン、トルキセン、イソトルキセン、スピロトルキセン、スピロイソ - トルキセン、フラン、ベンゾフラン、イソベンゾフラン、ジベンゾフラン、チオフェン、ベンゾチオフェン、イソベンゾチオフェン、ジベンゾチオフェン、ピロール、インドール、イソインドール、カルバゾール、インドロカルバゾール、インデノカルバゾール、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、ベンズイミダゾール、ナフトイミダゾール、フェナントロイミダゾール (Phenanthrimidazole)、ピリドイミダゾール、ピラジンイミダゾール、キノキサリンイミダゾール、オキサゾール、ベンゾオキサゾール、ナフトオキサゾール、アントロオキサゾール (Anthroxazole)、フェナントロオキサゾール (Phenanthroxazole)、イソキサゾール、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、ベンゾピリダジン、ピリミジン、ベンズピリミジン、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、フルオルビン (Fluorubin)、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、インドリジン及びベンゾチアジアゾールから誘導される。

【0026】

本発明の一実施形態において、有機分子は、式 B の構造を有する：

【0027】

【化 4】



式 B

【0028】

式中、

Y = 互いに独立して、C、PR、S、S (= O) からなる群から選択され、その際、C 及び S (= O) が好ましい；

W = 互いに独立して、C(CN)₂、NR、O、S からなる群から選択され、その際、O 及び S が好ましい；

X = CR²、C = C(CN)₂、NR、O、S からなる群から選択され、その際、CR²、NR 及び O が好ましい；及び

その際、特に X、Y 及び W に関しては、次の組み合わせが可能である：

【0029】

10

20

30

40

【表 2】

X	Y	W
NR	C	O
NR	P R	O
NR	S (=O)	O
O	C	O
O	P R	O
O	S (=O)	O
NR	C	C (CN) ₂
O	C	C (CN) ₂
NR	S	O
O	S	O
O	C	S
S	C	S
S	C	O
C R ²	C	O
C R ²	P R	O
C R ²	S (=O)	O
C = C (CN) ₂	C	O
C = C (CN) ₂	P R	O
C = C (CN) ₂	S (=O)	O

10

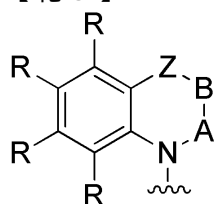
20

【0030】

そしてその際、アリール環の少なくとも一つのRはドナーDであり（D = 電子供与特性を有する一つ又は二つ以上の、同一又は異なるドナー基）、その際、Dは、上記の式Iの構造を有する。

【0031】

【化5】



式I

【0032】

式中、

A及びB = 互いに独立して、C R R'、C R、N R、Nからなる群から選択され、その際、AとBとの間には、単結合又は二重結合が存在しており、そして、BとZとの間には単結合又は二重結合が存在している；

Z = 直接結合又は二価の有機架橋であり、これは、置換された又は置換されていないC 1 - C 9 - アルキレン基、C 2 - C 8 - アルケニレン基、C 2 - C 8 - アルキニレン基又はアリーレン基又はこれの組み合わせ、- C R R'、- C = C R R'、- C = N R、- N R -、- O -、- S i R R' -、- S -、- S (O) -、- S (O)₂ -、Oで中断された、置換された又は置換されていないC 1 - C 9 - アルキレン基、C 2 - C 8 - アルケニレン基、C 2 - C 8 - アルキニレン基又はアリーレン基、フェニル単位又は置換されたフェニル単位であり、その際、波線は、それを介してDが、式Bにおけるフェニル環に結合する位置を示し；

40

それぞれのR及びR'は、いずれの場合においても、同一又は異なって、H、重水素、F、Cl、Br、I、N (R²)₂、CN、CF₃、NO₂、OH、COOH、COOR²、CO (NR²)₂、Si (R²)₃、B (OR²)₂、C (=O) R²、P (=O) (R²)₂、S (=O) R²、S (=O)₂ R²、OSO₂ R²、1 ~ 40 C原子を有する

50

線状のアルキル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基、又は2～40C原子を有する線状のアルケニル基又はアルキニル基、又は、3～40C原子を有する分岐状又は環状のアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基であり、それぞれ、一つ又は二つ以上の残基 R^2 で置換されることができ、その際、一つ又は二つ以上の隣接しない CH_2 -基は、 $R^2C=CR^2$ 、 $C-C$ 、 $Si(R^2)_2$ 、 $Ge(R^2)_2$ 、 $Sn(R^2)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^2$ 、 $P(=O)(R^2)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^2 、 O 、 S 又は $CONR^2$ で置き換えることができ、かつ、その際、一つ又は二つ以上のH原子は、重水素、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 、 CF_3 又は NO_2 で置き換えることができ、又は、それぞれが、一つ又は二つ以上の残基 R^2 で置換されることができる、5～60個の芳香族の環原子を有する芳香族又はヘテロ芳香族の環系、又は、一つ又は二つ以上の残基 R^2 で置換されることができる、5～60個の芳香族の環原子を有するアリールオキシ基又はヘテロアリールオキシ基、又は、一つ又は二つ以上の残基 R^2 で置換されることができる、10～40個の芳香族の環原子を有するジアリールアミノ基、ジヘテロアリールアミノ基又はアリールヘテロアリールアミノ基、又は、これらの系の組み合わせ、又は、酸触媒架橋法により、光開始剤の存在下又は不存在下で、又は、マイクロ波の照射によって、熱架橋法又はUV架橋法により架橋できる、架橋可能な単位QEであり、その際、二つ又は三つ以上のこれらの置換基 R 及び R' は、互いに単環式、多環式、脂肪族、芳香族及び/又はベンゾ縮合環系を形成することもでき、

R^2 は、いずれの場合においても、同一又は異なって、 H 、重水素、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 $N(R^3)_2$ 、 CN 、 CF_3 、 NO_2 、 OH 、 $COOH$ 、 $COOR^3$ 、 $CO(NR^3)_2$ 、 $Si(R^3)_3$ 、 $B(OR^3)_2$ 、 $C(=O)R^3$ 、 $P(=O)(R^3)_2$ 、 $S(=O)R^3$ 、 $S(=O)_2R^3$ 、 OSO_2R^3 、1～40C原子を有する線状のアルキル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基、又は、2～40C原子を有する線状のアルケニル基又はアルキニル基、又は3～40C原子を有する分岐状又は環状のアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基であり、それぞれ、一つ又は二つ以上の残基 R^3 で置換されることができ、その際、一つ又は二つ以上の隣接しない CH_2 -基は、 $R^2C=CR^2$ 、 $C-C$ 、 $Si(R^3)_2$ 、 $Ge(R^3)_2$ 、 $Sn(R^3)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^3$ 、 $P(=O)(R^3)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^3 、 O 、 S 又は $CONR^3$ で置き換えることができ、その際、一つ又は二つ以上のH原子は、重水素、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 、 CF_3 又は NO_2 で置換されることができ、又は、それぞれが、一つ又は二つ以上の残基 R^3 で置換されることができる、5～60個の芳香族の環原子を有する芳香族又はヘテロ芳香族の環系、又は一つ又は二つ以上の残基 R^3 で置換されることができる、5～60個の芳香族の環原子を有するアリールオキシ基又はヘテロアリールオキシ基、又は、10～40個の芳香族の環原子を有する、一つ又は二つ以上の残基 R^3 で置換されることができる、ジアリールアミノ基、ジヘテロアリールアミノ基又はアリールヘテロアリールアミノ基、又は、これらの系の組み合わせであり；その際、これらの二つ三つ又は置換基 R^2 は、互いに、単環又は多環の芳香族及び/又はベンゾ縮合環系を形成することもでき；

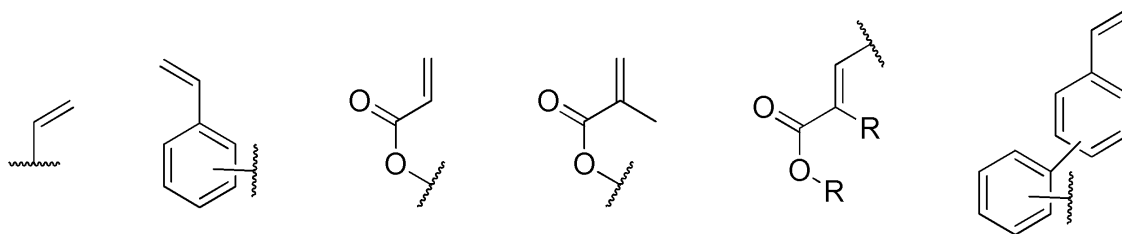
R^3 は、いずれの場合においても、同一又は異なって、 H 、重水素、 F 、 CF_3 、又は、1～20C原子を有する、脂肪族炭化水素残基、芳香族炭化水素残基及び/又はヘテロ芳香族炭化水素残基であり、その際、一つ又は二つ以上のH原子は、 F 又は CF_3 で置き換えることができ；その際、二つ又は三つ以上の置換基 R^3 は、互いに、単環又は多環の脂肪族の環系を形成することもできる。

【0033】

一実施形態において、架橋可能な単位QEは、オキセタン、アルキン及びアジドからなる群から選択される、特に、クリック反応を遂行するための化合物、並びに以下のアルケン誘導体である。

【0034】

【化 6】



【 0 0 3 5 】

代替的な実施形態において、Zは、共有結合の単結合か、又は置換された又は置換されていないアルキレン基（線状、分岐状又は環状）、アルケニレン基、アルキニレン基、アリーレン基及びヘテロアリーレン基、O、NR、C=CR₂、C=NR、SiR₂、S、S(O)、S(O)₂、BR、PR、P(O)Rから選択される二価の有機架橋であり、その際、これらの単位の組み合わせも可能である（例えば、Oで中断されたアルキレン基（線状、分岐状又は環状）、アルケニレン基、アルキニレン基、アリーレン基及びヘテロアリーレン基）。

10

【 0 0 3 6 】

好ましい実施形態において、Dは、互いに独立して、それぞれ、電子供与特性を有するドナー基であり、置換された及び置換されていないカルバゾール、置換された及び置換されていないインドール、置換された及び置換されていないインドリン、置換された及び置換されていないジヒドロアクリジン、置換された及び置換されていないベンズイミダゾール、置換された及び置換されていない2,3,4,9-テトラヒドロカルバゾール、置換された及び置換されていない1,2,3,4-テトラヒドロキノリン、置換された及び置換されていないフェノチアジン、置換された及び置換されていないフェノキサジン、置換された及び置換されていないジヒドロフェナジン、置換された及び置換されていないスピロ化合物からなる群から選択される。

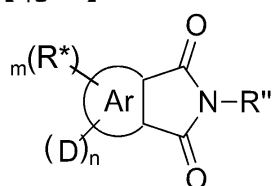
20

【 0 0 3 7 】

本発明の別の実施形態において、有機分子は、式Cの構造を有する。

【 0 0 3 8 】

【化 7】



30

式 C

【 0 0 3 9 】

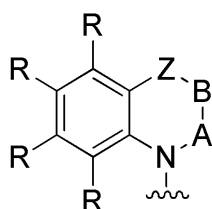
式中、

Ar = 5 ~ 40 個の芳香族の環原子を有する置換されたアリール基又はヘテロアリール基であり、これは、m個の同一又は異なる残基 R* 及び n個の同一又は異なる、電子供与特性を有するドナー基 D で置換され、その際、m + n は、置換可能な環原子の数に等しく、そしてその際、ドナー基 D は、それぞれ、次の式 I の構造を有する。

40

【 0 0 4 0 】

【化 8】



式 I

50

【 0 0 4 1 】

式中、

A 及び B = 互いに独立して、C R R'、C R、N R、N からなる群から選択され、その際、A と B との間には、単結合又は二重結合が存在しており、そして、B と Z との間には単結合又は二重結合が存在している；

Z = 直接結合又は二価の有機架橋であり、これは、置換された又は置換されていない C 1 - C 9 - アルキレン基、C 2 - C 8 - アルケニレン基、C 2 - C 8 - アルキニレン基又はアリーレン基又はこれの組み合わせ、- C R R'、- C = C R R'、- C = N R、- N R -、- O -、- S i R R' -、- S -、- S (O) -、- S (O) ₂ -、O で中断された、置換された又は置換されていない C 1 - C 9 - アルキレン基、C 2 - C 8 - アルケニレン基、C 2 - C 8 - アルキニレン基又はアリーレン基、フェニル単位又は置換されたフェニル単位であり、その際、波線は、それを介して D が A r に結合する位置を示し、

その際、それぞれの R^{*}、R 及び R' は、いずれの場合においても、同一又は異なって、H、重水素、アジド、F、Cl、Br、I、N (R²)₂、CN、CF₃、NO₂、OH、COOH、COOR²、CO (NR²)₂、Si (R²)₃、B (OR²)₂、C (= O) R²、P (= O) (R²)₂、S (= O) R²、S (= O)₂ R²、OSO₂ R²、1 ~ 40 C 原子を有する線状のアルキル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基、又は、2 ~ 40 C 原子を有する線状のアルケニル基又はアルキニル基、又は、3 ~ 40 C 原子を有する分岐状又は環状のアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基であり、それぞれ一つ又は二つ以上の残基 R² で置換されることができ、その際、一つ又は二つ以上の隣接していない CH₂ - 基は、R² C = C R²、C - C、Si (R²)₂、Ge (R²)₂、Sn (R²)₂、C = O、C = S、C = Se、C = NR²、P (= O) (R²)、SO、SO₂、NR²、O、S 又は CONR² で置き換えることができ、かつ、その際、一つ又は二つ以上の H 原子は、重水素、F、Cl、Br、I、CN、CF₃ 又は NO₂ で置き換えることができ、又は、それぞれが、一つ又は二つ以上の残基 R² で置換されることができる、5 ~ 60 個の芳香族の環原子を有する芳香族又はヘテロ芳香族の環系、又は、それぞれが一つ又は二つ以上の残基 R² で置換されることができる、5 ~ 60 個の芳香族の環原子を有するアリーールオキシ基又はヘテロアリーールオキシ基、又は 10 ~ 40 個の芳香族の環原子を有する、一つ又は二つ以上の残基 R² で置換されることができるジアリーールアミノ基、ジヘテロアリーールアミノ基又はアリーールヘテロアリーールアミノ基、又はこれらの系の組み合わせ、又は、酸触媒架橋法により、光開始剤の存在下又は不存在下で、又はマイクロ波の照射によって、熱架橋法又は UV 架橋法により架橋できる、架橋可能な単位 Q E であり、その際、二つ又は三つ以上のこれらの置換基 R^{*}、R 及び R' は互いに単環式、多環式、脂肪族、芳香族及び / 又はベンゾ縮合環系を形成することもでき、

R² は、いずれの場合においても、同一又は異なって、H、重水素、F、Cl、Br、I、N (R³)₂、CN、CF₃、NO₂、OH、COOH、COOR³、CO (NR³)₂、Si (R³)₃、B (OR³)₂、C (= O) R³、P (= O) (R³)₂、S (= O) R³、S (= O)₂ R³、OSO₂ R³、1 ~ 40 C 原子を有する線状のアルキル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基、又は、2 ~ 40 C 原子を有する線状のアルケニル基又はアルキニル基、又は 3 ~ 40 C 原子を有する分岐状又は環状のアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基であり、それぞれ、一つ又は二つ以上の残基 R³ で置換されることができ、その際、一つ又は二つ以上の隣接していない CH₂ - 基は、R³ C = C R³、C - C、Si (R³)₂、Ge (R³)₂、Sn (R³)₂、C = O、C = S、C = Se、C = NR³、P (= O) (R³)、SO、SO₂、NR³、O、S 又は CONR³ で置換されることができ、かつ、その際、一つ又は二つ以上の H 原子は、重水素、F、Cl、Br、I、CN、CF₃ 又は NO₂ で置換されることができ、又は、それぞれが、一つ又は二つ以上の残基 R³ で置換されることができる、5 ~ 60 個の芳香族の環原子を有する芳香族又はヘテロ芳香族の環系、又は一つ又は二つ以上の残基 R³ で置換されることができる、5 ~ 60 個の芳香族の環原子を有するアリーール

10

20

30

40

50

オキシ基又はヘテロアリールオキシ基、又は、一つ又は二つ以上の残基 R^3 で置換されることができる、10～40個の芳香族の環原子を有するジアリールアミノ基、ジヘテロアリールアミノ基又はアリールヘテロアリールアミノ基、又は、これらの系の組み合わせであり；その際、これらの置換基 R^2 の二つ又は三つ以上は互いに、単環又は多環の芳香族及び／又はベンゾ縮合環系を形成することもでき；

R^3 は、いずれの場合においても、同一又は異なって、H、重水素、F、 CF_3 、又は、1～20C原子を有する、脂肪族炭化水素残基、芳香族炭化水素残基及び／又はヘテロ芳香族炭化水素残基であり、その際、一つ又は二つ以上のH原子は、F又は CF_3 で置き換えることができ；その際、二つ又は三つ以上の置換基 R^3 は互いに、単環又は多環の脂肪族の環系を形成することもでき、そして、 R' は、Rと同じ意味を有するか、又は、一実施形態において、有機架橋であり、それを介して、式Cの第二の同一又は異なる単位が結合され、そしてそれにより、二量体系が形成されるか、又は、別の実施形態においては、架橋可能な単位であり、これは、光開始剤の存在下又は不存在下で、又はマイクロ波の照射によって、酸触媒、熱架橋法又はUV架橋法により、架橋することができる。

10

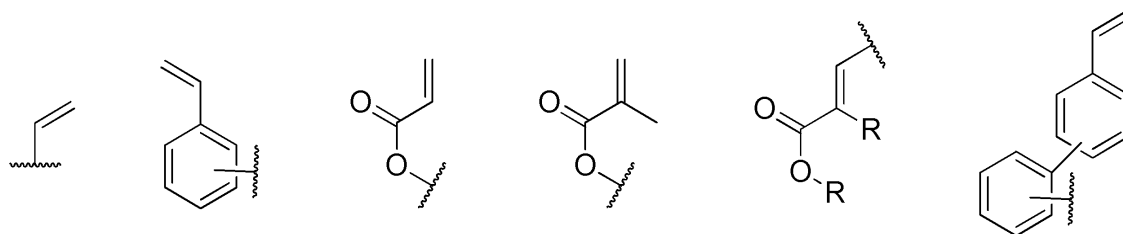
【0042】

架橋可能な単位QEは、一実施形態において、オキセタン、アルキン及びアジドからなる群から選択される、特に、クリック反応を遂行するための化合物、並びに以下のアルケン誘導体である。

【0043】

【化9】

20



【0044】

代替的な実施形態において、Zは、共有結合の単結合か、又は置換された又は置換されていないアルキレン基（分岐状又は環状）、アルケニレン基、アルキニレン基、アリーレン基及びヘテロアリーレン基、O、NR、 $C=CR_2$ 、 $C=NR$ 、 SiR_2 、S、 $S(O)$ 、 $S(O)_2$ 、BR、PR、 $P(O)R$ から選択される二価の有機架橋であり、その際、これらの単位の組み合わせも可能である（例えば、Oで中断されたアルキレン基（分岐状又は環状も可）、アルケニレン基、アルキニレン基、アリーレン基及びヘテロアリーレン基）。

30

【0045】

一実施形態において、Arは、5～40個の芳香族の環原子を有する、m個の同一又は異なる残基 R^* 、及び、電子供与特性を有するn個のドナー基Dで置換されたアリール基又はヘテロアリール基であり、その際、 $m+n$ は、置換可能な環の原子の数に等しく、そして、特に、該ドナー基Dは、置換された及び置換されていないカルバゾール、置換された及び置換されていないインドール、置換された及び置換されていないインドリン、置換された及び置換されていないジヒドロアクリジン、置換された及び置換されていないベンズイミダゾール、置換された及び置換されていない2,3,4,9-テトラヒドロカルバゾール、置換された及び置換されていない1,2,3,4-テトラヒドロキノリン、置換された及び置換されていないフェノチアジン、置換された及び置換されていないフェノキサジン、置換された及び置換されていないジヒドロフェナジン、置換された及び置換されていないスピロ化合物からなる群から選択される。

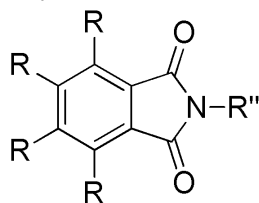
40

【0046】

本発明のさらなる実施形態において、有機分子は、式Dの構造を有する。

【0047】

【化 10】



式 D

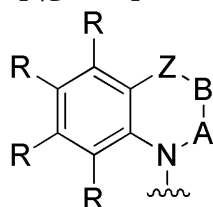
【0048】

式中、アリアル環の少なくとも一つの R は、ドナー D であり（D = 電子供与特性を有する一つ又は二つ以上の、同一又は異なるドナー基）、その際、D は、式 I の構造を有する。

10

【0049】

【化 11】



式 I

20

【0050】

式中、

A 及び B = 互いに独立して、CRR'、CR、NR、N からなる群から選択され、その際、A と B との間には、単結合又は二重結合が存在しており、そして、B と Z との間には単結合又は二重結合が存在している；

Z = 直接結合又は二価の有機架橋であり、これは、置換された又は置換されていない C1 - C9 - アルキレン基、C2 - C8 - アルケニレン基、C2 - C8 - アルキニレン基又はアリーレン基又はこれの組み合わせ、-CRR'、-C=CRR'、-C=NR、-NR-、-O-、-SiRR'-、-S-、-S(O)-、-S(O)₂-、O で中断された、置換された又は置換されていない C1 - C9 - アルキレン基、C2 - C8 - アルケニレン基、C2 - C8 - アルキニレン基又はアリーレン基、フェニル単位又は置換されたフェニル単位であり、その際、波線は、それを介して D が式 D のフェニル基に結合する位置を示し；その際、それぞれの R^{*}、R 及び R' は、いずれの場合においても、同一又は異なって、H、重水素、アジド、F、Cl、Br、I、N(R²)₂、CN、CF₃、NO₂、OH、COOH、COOR²、CO(NR₂)₂、Si(R₂)₃、B(OR²)₂、C(=O)R²、P(=O)(R²)₂、S(=O)R²、S(=O)₂R²、OSO₂R²、1 ~ 40 C 原子を有する線状のアルキル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基、又は、2 ~ 40 C 原子を有する線状のアルケニル基又はアルキニル基、又は、3 ~ 40 C 原子を有する分岐状又は環状のアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基であり、それぞれ一つ又は二つ以上の残基 R² で置換されることができ、その際、一つ又は二つ以上の隣接していない CH₂-基は、R²C=CR²、C=C、Si(R²)₂、Ge(R²)₂、Sn(R²)₂、C=O、C=S、C=Se、C=NR²、P(=O)(R²)、SO、SO₂、NR²、O、S 又は CONR² で置き換えることができ、かつ、その際、一つ又は二つ以上の H 原子は、重水素、F、Cl、Br、I、CN、CF₃ 又は NO₂ で置き換えることができ、又は、それぞれが、一つ又は二つ以上の残基 R² で置換されることができる、5 ~ 60 個の芳香族の環原子を有する芳香族又はヘテロ芳香族の環系、又は、5 ~ 60 個の芳香族の環原子を有する、それぞれが一つ又は二つ以上の残基 R² で置換されることができるアリアルオキシ基又はヘテロアリアルオキシ基、又は 10 ~ 40 個の芳香族の環原子を有する、一つ又は二つ以上の残基 R² で置換されることができるジアリアルアミノ基、ジヘテロアリアルアミノ基又はアリアル

30

40

50

ヘテロアリールアミノ基、又はこれらの系の組み合わせ、又は、酸触媒架橋法、光開始剤の存在下又は不存在下で、又はマイクロ波の照射によって、熱架橋法又はUV架橋法により架橋できる、架橋可能な単位QEであり、その際、二つ又は三つ以上のこれらの置換基 R^* 、 R 及び R' は互いに単環式、多環式、脂肪族、芳香族及び/又はベンゾ縮合環系を形成することもでき、

R^2 は、いずれの場合においても、同一又は異なって、H、重水素、F、Cl、Br、I、 $N(R^3)_2$ 、CN、 CF_3 、 NO_2 、OH、COOH、 $COOR^3$ 、 $CO(NR^3)_2$ 、 $Si(R^3)_3$ 、 $B(OR^3)_2$ 、 $C(=O)R^3$ 、 $P(=O)(R^3)_2$ 、 $S(=O)R^3$ 、 $S(=O)_2R^3$ 、 OSO_2R^3 、1~40C原子を有する線状のアルキル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基、又は、2~40C原子を有する線状のアルケニル基又はアルキニル基、又は3~40C原子を有する分岐状又は環状のアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基であり、それぞれ、一つ又は二つ以上の残基 R^3 で置換されることができ、その際、一つ又は二つ以上の隣接していない CH_2 -基は、 $R^3C=CR^3$ 、 $C-C$ 、 $Si(R^3)_2$ 、 $Ge(R^3)_2$ 、 $Sn(R^3)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^3$ 、 $P(=O)(R^3)$ 、SO、 SO_2 、 NR^3 、O、S又は $CONR^3$ で置換されることができ、かつ、その際、一つ又は二つ以上のH原子は、重水素、F、Cl、Br、I、CN、 CF_3 又は NO_2 で置換されることができ、又は、一つ又は二つ以上の残基 R^3 で置換されることができ、5~60個の芳香族の環原子を有する芳香族又はヘテロ芳香族の環系、又は一つ又は二つ以上の残基 R^3 で置換されることができ、5~60個の芳香族の環原子を有するアリールオキシ基又はヘテロアリールオキシ基、又は、10~40個の芳香族の環原子を有する、一つ又は二つ以上の残基 R^3 で置換されることができ、ジアリールアミノ基、ジヘテロアリールアミノ基又はアリールヘテロアリールアミノ基、又は、これらの系の組み合わせであり；その際、これらの二つ又は三つ以上の置換基 R^2 は、互いに、単環又は多環の芳香族及び/又はベンゾ縮合環系を形成することもでき；

R^3 は、いずれの場合においても、同一又は異なって、H、重水素、F、 CF_3 、又は、1~20C原子を有する、脂肪族炭化水素残基、芳香族炭化水素残基及び/又はヘテロ芳香族炭化水素残基であり、その際、一つ又は二つ以上のH原子は、F又は CF_3 で置き換えることができ；その際、二つ又は三つ以上の置換基 R^3 は互いに、単環又は多環の脂肪族の環系を形成することもでき、そして、

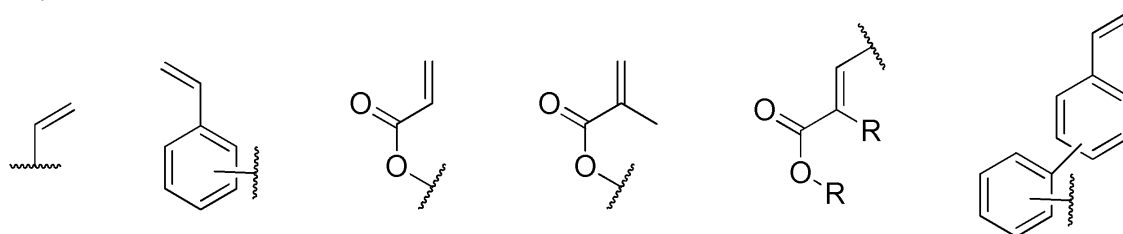
R'' は、 R と同じ意味を有するか、又は、一実施形態において、有機架橋であり、それを介して、式Dの第二の同一又は異なる単位が結合され、そしてそれにより、二量体系が形成されるか、又は、別の実施形態においては、架橋可能な単位であり、これは、酸触媒架橋法により、光開始剤の存在下又は不存在下で、又はマイクロ波の照射によって、熱架橋法又はUV架橋法により、架橋することができる。

【0051】

架橋可能な単位QEは、一実施形態において、オキセタン、アルキン及びアジドからなる群から選択される、特に、クリック反応を遂行するための化合物、並びに以下のアルケン誘導体である。

【0052】

【化12】



【0053】

代替的な実施形態において、Zは、共有結合の単結合か、又は置換された及び置換されていないアルキレン基（線状、分岐状又は環状）、アルケニレン基、アルキニレン基、ア

10

20

30

40

50

リーレン基及びヘテロアリーレン基、 O 、 NR 、 $C=CR_2$ 、 $C=NR$ 、 SiR_2 、 S 、 $S(O)$ 、 $S(O)_2$ 、 BR 、 PR 、 $P(O)R$ から選択される二価の有機架橋であり、その際、これらの単位の組み合わせも可能である（例えば、 O で中断されたアルキレン基（線状、分岐状又は環状）、アルケニレン基、アルキニレン基、アリーレン基及びヘテロアリーレン基）。

【0054】

一実施形態において、 D は、互いに独立して、それぞれ、電子供与特性を有するドナー基であり、置換された及び置換されていないカルバゾール、置換された及び置換されていないインドール、置換された及び置換されていないインドリン、置換された及び置換されていないジヒドロアクリジン、置換された及び置換されていないベンズイミダゾール、置換された及び置換されていない2,3,4,9-テトラヒドロカルバゾール、置換された及び置換されていない1,2,3,4-テトラヒドロキノリン、置換された及び置換されていないフェノチアジン、置換された及び置換されていないフェノキサジン、置換された及び置換されていないジヒドロフェナジン、置換された及び置換されていないスピロ化合物からなる群から選択される。

10

【0055】

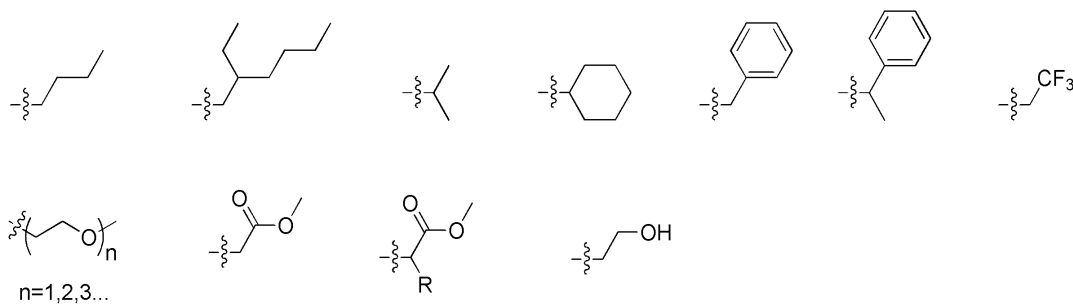
一実施形態において、 R'' は、次の群から選択される。

- アルキル残基（線状、分岐状、部分的にフッ素化された、（ヘテロ-）アリール置換、（ポリ-）エーテル、エステル、アルコール置換）、例えば、

【0056】

20

【化13】



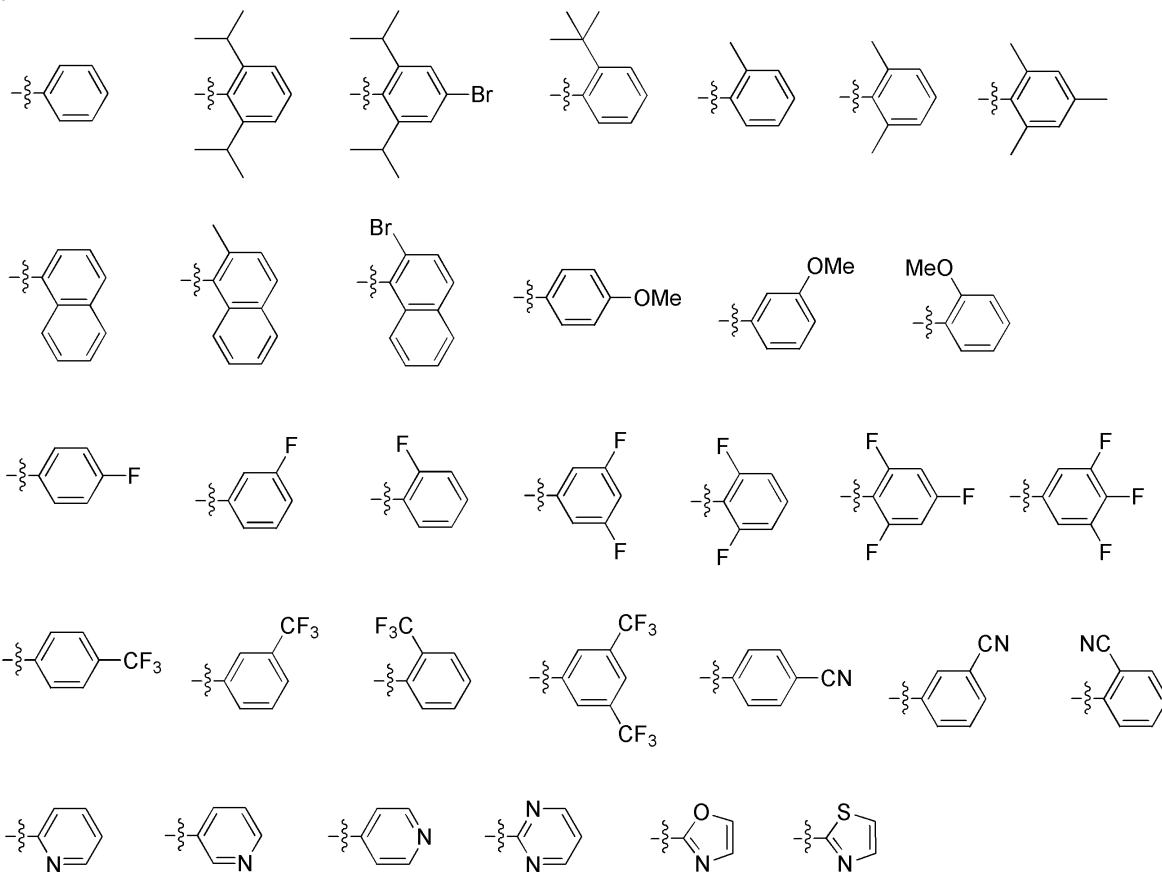
30

【0057】

- （ヘテロ-）アリール残基（電子求核性及び／又は電子供与性の基で置換されたアルキル置換）、例えば、

【0058】

【化 1 4】



10

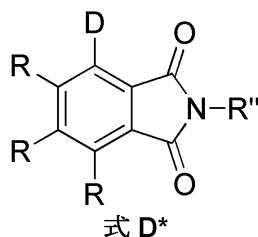
20

【0059】

好ましい一実施形態において、有機分子は、式 D^{*} の構造を有する。

【0060】

【化 1 5】



30

【0061】

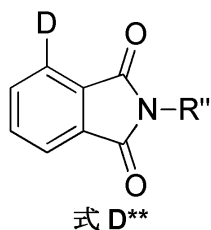
式中、R、R' 及び D は、式 D において定義されたのと同じであるが、但し、R はドナーを有さなくてもよい。

【0062】

特に好ましい一実施形態において、有機分子は式 D^{**} の構造を有する。

【0063】

【化 1 6】



40

【0064】

式中、R' 及び D は、式 D において定義されたのと同じである。

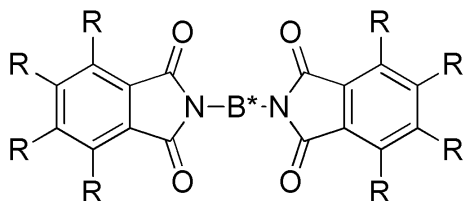
【0065】

50

本発明のさらなる実施形態において、有機分子は、式 E の構造を有する。

【 0 0 6 6 】

【 化 1 7 】



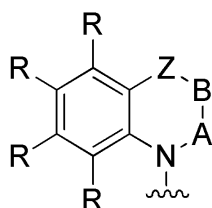
式 E

【 0 0 6 7 】

式中、アリール環の少なくとも一つの R はドナー D であり、(D = 式 I の構造を有する電子供与特性を有するドナー基)。

【 0 0 6 8 】

【 化 1 8 】



式 I

【 0 0 6 9 】

式中、

A 及び B = 互いに独立して、C R R'、C R、N R、N からなる群から選択され、その際、A と B との間には、単結合又は二重結合が存在しており、そして、B と Z との間には単結合又は二重結合が存在している；

Z = 直接結合又は二価の有機架橋であり、これは、置換された又は置換されていない C 1 - C 9 - アルキレン基、C 2 - C 8 - アルケニレン基、C 2 - C 8 - アルキニレン基又はアリーレン基又はこれらの組み合わせ、- C R R'、- C = C R R'、- C = N R、- N R -、- O -、- S i R R' -、- S -、- S (O) -、- S (O) 2 -、O で中断された、置換された又は置換されていない C 1 - C 9 - アルキレン基、C 2 - C 8 - アルケニレン基、C 2 - C 8 - アルキニレン基又はアリーレン基、フェニル単位又は置換されたフェニル単位であり、その際、波線は、それを介して D が、式 E におけるフェニル環に結合する位置を示し；

B* = 置換された又は置換されていないアルキレン基、アルケニレン基、アルキニレン基又はアリーレン基又はこれらの組み合わせ、又は - O -、- N R -、- C = C R 2、- C = N R、- S i R 2 -、- S -、- S (O) -、- S (O) 2 -、O で中断されたアルキル基 (分岐状又は環状)、ヘテロアルキル基、アリール基、ヘテロアリール基、アルケニル基、フェニル単位及び置換されたフェニル単位である、有機架橋、

その際、それぞれの R 及び R' は、いずれの場合においても、同一又は異なって、H、重水素、アジド、F、C l、B r、I、N (R 2) 2、C N、C F 3、N O 2、O H、C O O H、C O O R 2、C O (N R 2) 2、S i (R 2) 3、B (O R 2) 2、C (= O) R 2、P (= O) (R 2) 2、S (= O) R 2、S (= O) 2 R 2、O S O 2 R 2、1 ~ 4 0 C 原子を有する線状のアルキル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基、又は 2 ~ 4 0 C 原子を有する線状のアルケニル基又はアルキニル基、又は、3 ~ 4 0 C 原子を有する分岐状又は環状のアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基であり、それぞれ、一つ又は二つ以上の残基 R 2 で置換されることができ、その際、一つ又は二つ以上の隣接しない C H 2 - 基は、R 2 C = C R 2、C - C、S i (R 2) 2、G e (R 2) 2、S n (R 2) 2、C = O、C = S、C = S e、C = N R 2、P (= O) (R 2)、S O、S O 2、N R 2、O、S 又は C O N R 2 で置き換えることができ、

10

20

30

40

50

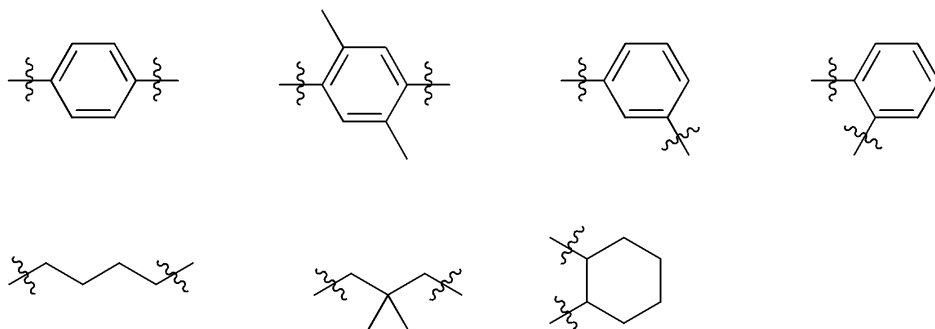
かつ、その際、一つ又は二つ以上のH原子は、重水素、F、Cl、Br、I、CN、CF₃又はNO₂で置き換えることができ、又は、それぞれが、一つ又は二つ以上の残基R²で置換されることができる、5～60個の芳香族の環原子を有する芳香族又はヘテロ芳香族の環系、又は、一つ又は二つ以上の残基R²で置換されることができる、5～60個の芳香族の環原子を有するアリールオキシ基又はヘテロアリールオキシ基、又は、一つ又は二つ以上の残基R²で置換されることができる、10～40個の芳香族の環原子を有するジアリールアミノ基、ジヘテロアリールアミノ基又はアリールヘテロアリールアミノ基、又は、これらの系の組み合わせ、又は、酸触媒架橋法により、光開始剤の存在下又は不存在下で、又は、マイクロ波の照射によって、熱架橋法又はUV架橋法により架橋できる、架橋可能な単位QEであり、その際、二つ又は三つ以上のこれらの置換基R及びR'は互いに単環式、多環式、脂肪族、芳香族及び/又はベンゾ縮合環系を形成することもでき、R²は、いずれの場合においても、同一又は異なって、H、重水素、F、Cl、Br、I、N(R³)₂、CN、CF₃、NO₂、OH、COOH、COOR³、CO(NR³)₂、Si(R³)₃、B(OR³)₂、C(=O)R³、P(=O)(R³)₂、S(=O)R³、S(=O)₂R³、OSO₂R³、1～40C原子を有する線状のアルキル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基、又は、2～40C原子を有する線状のアルケニル基又はアルキニル基、又は3～40C原子を有する分岐状又は環状のアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基であり、それぞれ、一つ又は二つ以上の残基R³で置換されることができ、その際、一つ又は二つ以上の隣接しないCH₂-基は、R²C=CR²、C≡C、Si(R³)₂、Ge(R³)₂、Sn(R³)₂、C=O、C=S、C=Se、C=NR³、P(=O)(R³)、SO、SO₂、NR³、O、S又はCONR³で置き換えることができ、その際、一つ又は二つ以上のH原子は、重水素、F、Cl、Br、I、CN、CF₃又はNO₂で置換されることができ、又は、それぞれが、一つ又は二つ以上の残基R³で置換されることができる、5～60個の芳香族の環原子を有する芳香族又はヘテロ芳香族の環系、又は一つ又は二つ以上の残基R³で置換されることができる、5～60個の芳香族の環原子を有するアリールオキシ基又はヘテロアリールオキシ基、又は、10～40個の芳香族の環原子を有する、一つ又は二つ以上の残基R³で置換されることができる、ジアリールアミノ基、ジヘテロアリールアミノ基又はアリールヘテロアリールアミノ基、又は、これらの系の組み合わせであり；その際、これらの置換基R²の二つ又は三つ以上は互いに、単環又は多環の芳香族及び/又はベンゾ縮合環系を形成することもでき；R³は、いずれの場合においても、同一又は異なって、H、重水素、F、CF₃、又は、1～20C原子を有する、脂肪族炭化水素残基、芳香族炭化水素残基及び/又はヘテロ芳香族炭化水素残基であり、その際、一つ又は二つ以上のH原子は、F又はCF₃で置き換えることができ；その際、二つ又は三つ以上の置換基R³は互いに、単環又は多環の脂肪族の環系を形成することもできる。

【0070】

B*の例を挙げるが、これに限定されない。

【0071】

【化19】



【0072】

10

20

30

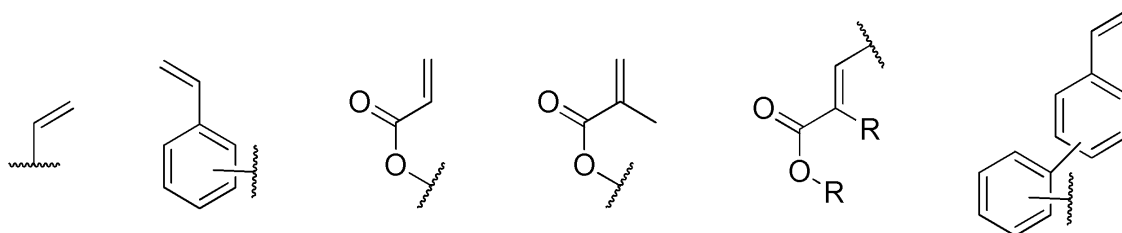
40

50

一実施形態において、架橋可能な単位 Q E は、特に、クリック反応のために、オキセタン、アルキン及びアジドからなる群から選択され、並びに次のアルケン誘導体から選択される：

【 0 0 7 3 】

【 化 2 0 】



10

【 0 0 7 4 】

代替的な実施形態において、Z は、共有結合の単結合か、又は置換された又は置換されていないアルキレン基（分岐状又は環状）、アルケニレン基、アルキニレン基、アリーレン基及びヘテロアリーレン基、O、NR、C = CR₂、C = NR、SiR₂、S、S(O)、S(O)₂、BR、PR、P(O)R から選択される二価の有機架橋であり、その際、これらの単位の組み合わせも可能である（例えば、O で中断されたアルキレン基（分岐状又は環状も可）、アルケニレン基、アルキニレン基、アリーレン基及びヘテロアリーレン基）。

【 0 0 7 5 】

代替的な一実施形態において、B は、置換された又は置換されていないアルキレン基（分岐状又は環状）、アルケニレン基、アルキニレン基、アリーレン基及びヘテロアリーレン基、O、NR、C = CR₂、C = NR、SiR₂、S、S(O)、S(O)₂、BR、PR、P(O)R から選択される二価の有機架橋であり、その際、これらの単位の組み合わせも可能である（例えば、O で中断されたアルキレン基（分岐状又は環状も可）、アルケニレン基、アルキニレン基、アリーレン基及びヘテロアリーレン基）。

20

【 0 0 7 6 】

一実施形態において、D は、互いに独立して、それぞれ、電子供与特性を有するドナー基であり、置換された及び置換されていないカルバゾール、置換された及び置換されていないインドール、置換された及び置換されていないインドリン、置換された及び置換されていないジヒドロアクリジン、置換された及び置換されていないベンズイミダゾール、置換された及び置換されていない2,3,4,9-テトラヒドロカルバゾール、置換された及び置換されていない1,2,3,4-テトラヒドロキノリン、置換された及び置換されていないフェノチアジン、置換された及び置換されていないフェノキサジン、置換された及び置換されていないジヒドロフェナジン、置換された及び置換されていないスピロ化合物からなる群から選択される。

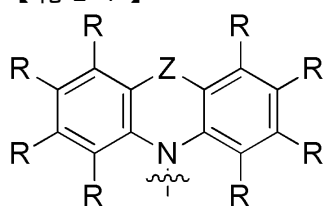
30

【 0 0 7 7 】

本発明のさらなる実施形態において、式 I の電子供与特性を有するドナー基は、式 II の構造を有する。

【 0 0 7 8 】

【 化 2 1 】



式 II

【 0 0 7 9 】

式中、

Z = 直接結合又は二価の有機架橋であり、これは、置換された又は置換されていない C 1

40

50

- C₉ - アルキレン基、C₂ - C₈ - アルケニレン基、C₂ - C₈ - アルキニレン基又はアリーレン基、又はこれらの組み合わせ、- CRR'、- C = CRR'、- C = NR、- NR -、- O -、SiRR' -、- S -、- S(O) -、- S(O)₂ -、Oで中断された置換された又は置換されていないC₁ - C₉ - アルキレン基、C₂ - C₈ - アルケニレン基、C₂ - C₈ - アルキニレン基又はアリーレン基、フェニル単位又は置換されたフェニル単位であり、その際、波線は、それを介してDがArに結合する結合位置を示し；

それぞれのR及びR'は、いずれの場合においても、同一又は異なって、H、重水素、F、Cl、Br、I、N(R²)₂、CN、CF₃、NO₂、OH、COOH、COOR²、CO(NR²)₂、Si(R²)₃、B(OR²)₂、C(=O)R²、P(=O)(R²)₂、S(=O)R²、S(=O)₂R²、OSO₂R²、1～40C原子を有する線状のアルキル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基、又は2～40C原子を有する線状のアルケニル基又はアルキニル基、又は、3～40C原子を有する分岐状又は環状のアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基であり、それぞれ、一つ又は二つ以上の残基R²で置換されることができ、その際、一つ又は二つ以上の隣接しないCH₂-基は、R²C = CR²、C-C、Si(R²)₂、Ge(R²)₂、Sn(R²)₂、C = O、C = S、C = Se、C = NR²、P(=O)(R²)、SO、SO₂、NR²、O、S又はCONR²で置き換えることができ、かつ、その際、一つ又は二つ以上のH原子が、重水素、F、Cl、Br、I、CN、CF₃又はNO₂で置き換えることができ、又は、それぞれが、一つ又は二つ以上の残基R²で置換されることができ、5～60個の芳香族の環原子を有する芳香族又はヘテロ芳香族の環系、又は、一つ又は二つ以上の残基R²で置換されることができ、5～60個の芳香族の環原子を有するアリールオキシ基又はヘテロアリールオキシ基、又は、一つ又は二つ以上の残基R²で置換されることができ、10～40個の芳香族の環原子を有するジアリールアミノ基、ジヘテロアリールアミノ基又はアリールヘテロアリールアミノ基、又は、これらの系の組み合わせ、又は、酸触媒、塩基触媒により、光開始剤の存在下又は不存在下で、又はマイクロ波の照射によって、熱架橋法又はUV架橋法により架橋できる、架橋可能な単位QEであり、その際、二つ又は三つ以上のこれらの置換基R及びR'は互いに単環式、多環式、脂肪族、芳香族及び/又はベンゾ縮合環系を形成することもでき、

R²は、いずれの場合においても、同一又は異なって、H、重水素、F、Cl、Br、I、N(R³)₂、CN、CF₃、NO₂、OH、COOH、COOR³、CO(NR³)₂、Si(R³)₃、B(OR³)₂、C(=O)R³、P(=O)(R³)₂、S(=O)R³、S(=O)₂R³、OSO₂R³、1～40C原子を有する線状のアルキル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基、又は、2～40C原子を有する線状のアルケニル基又はアルキニル基、又は3～40C原子を有する分岐状又は環状のアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基であり、それぞれ、一つ又は二つ以上の残基R³で置換されることができ、その際、一つ又は二つ以上の隣接しないCH₂-基は、R³C = CR³、C-C、Si(R³)₂、Ge(R³)₂、Sn(R³)₂、C = O、C = S、C = Se、C = NR³、P(=O)(R³)、SO、SO₂、NR³、O、S又はCONR³で置き換えることができ、かつ、その際、一つ又は二つ以上のH原子が、重水素、F、Cl、Br、I、CN、CF₃又はNO₂で置き換えることができ、又は、それぞれが、一つ又は二つ以上の残基R³で置換されることができ、5～60個の芳香族の環原子を有する芳香族又はヘテロ芳香族の環系、又は、一つ又は二つ以上の残基R³で置換されることができ、5～60個の芳香族の環原子を有するアリールオキシ基又はヘテロアリールオキシ基、又は、一つ又は二つ以上の残基R³で置換されることができ、10～40個の芳香族の環原子を有するジアリールアミノ基、ジヘテロアリールアミノ基又はアリールヘテロアリールアミノ基、又は、これらの系の組み合わせであり；その際、これらの置換基R²の二つ又は三つ以上は互いに、単環又は多環の芳香族及び/又はベンゾ縮合環系を形成することもでき；

R³は、いずれの場合においても、同一又は異なって、H、重水素、F、CF₃、又は、1～20C原子を有する、脂肪族炭化水素残基、芳香族炭化水素残基及び/又はヘテロ芳

10

20

30

40

50

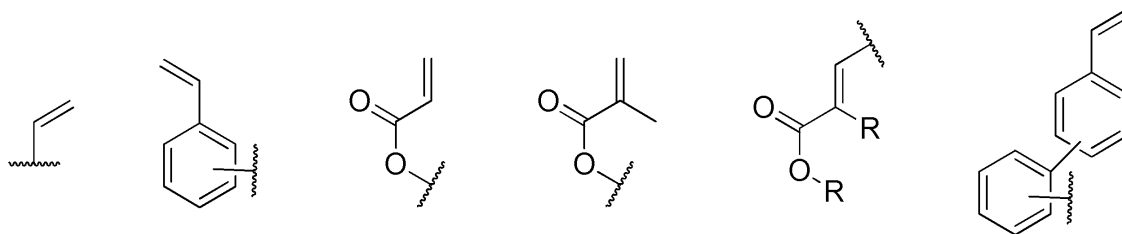
香族炭化水素残基であり、その際、一つ又は二つ以上のH原子は、F又は CF_3 で置き換えることができ；その際、二つ又は三つ以上の置換基 R^3 は互いに、単環又は多環の脂肪族の環系を形成することもできる。

【0080】

架橋可能な単位QEは、特に、クリック反応のために、オキセタン、アルキン及びアジドからなる群から選択される化合物、並びに次のアルケン誘導体から選択される：

【0081】

【化22】



10

【0082】

代替的な一実施形態において、Zは、共有結合の単結合か、又は置換された又は置換されていないアルキレン基（分岐状又は環状）、アルケニレン基、アルキニレン基、アリーレン基及びヘテロアリーレン基、O、NR、 $\text{C}=\text{CR}_2$ 、 $\text{C}=\text{NR}$ 、 SiR_2 、S、 $\text{S}(\text{O})$ 、 $\text{S}(\text{O})_2$ 、BR、PR、 $\text{P}(\text{O})\text{R}$ から選択される二価の有機架橋であり、その際、これらの単位の組み合わせも可能である（例えば、Oで中断されたアルキレン基（分岐状又は環状も可）、アルケニレン基、アルキニレン基、アリーレン基及びヘテロアリーレン基）。

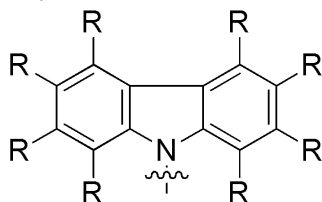
20

【0083】

本発明のさらなる実施形態において、式Iの電子供与特性を有するドナー基は、式II Iの構造を有する。

【0084】

【化23】



30

式III

【0085】

式中、

それぞれのRは、いずれの場合においても、同一又は異なって、H、重水素、F、Cl、Br、I、 $\text{N}(\text{R}^2)_2$ 、CN、 CF_3 、 NO_2 、OH、COOH、 COOR^2 、 $\text{CO}(\text{NR}^2)_2$ 、 $\text{Si}(\text{R}^2)_3$ 、 $\text{B}(\text{OR}^2)_2$ 、 $\text{C}(=\text{O})\text{R}^2$ 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^2)_2$ 、 $\text{S}(=\text{O})\text{R}^2$ 、 $\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^2$ 、 OSO_2R^2 、1～40C原子を有する線状のアルキル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基、又は2～40C原子を有する線状のアルケニル基又はアルキニル基、又は、3～40C原子を有する分岐状又は環状のアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基であり、それぞれ、一つ又は二つ以上の残基 R^2 で置換されることができ、その際、一つ又は二つ以上の隣接しない CH_2 -基は、 $\text{R}^2\text{C}=\text{CR}^2$ 、 $\text{C}-\text{C}$ 、 $\text{Si}(\text{R}^2)_2$ 、 $\text{Ge}(\text{R}^2)_2$ 、 $\text{Sn}(\text{R}^2)_2$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{S}$ 、 $\text{C}=\text{Se}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^2$ 、 $\text{P}(=\text{O})(\text{R}^2)$ 、SO、 SO_2 、 NR^2 、O、S又は CONR^2 で置き換えることができ、かつ、その際、一つ又は二つ以上のH原子は、重水素、F、Cl、Br、I、CN、 CF_3 又は NO_2 で置き換えることができ、又は、それぞれが、一つ又は二つ以上の残基 R^2 で置換されることができ、5～60個の芳香族の環原子を有する芳香族又はヘテロ芳香族の環系、又は、一つ又は二つ以上の残基 R^2 で置換されることができ、5～60個の芳香族の環原子を有するア

40

50

リールオキシ基又はヘテロアリールオキシ基、又は、一つ又は二つ以上の残基 R^2 で置換されることができる、10～40個の芳香族の環原子を有するジアリールアミノ基、ジヘテロアリールアミノ基又はアリールヘテロアリールアミノ基、又は、これらの系の組み合わせ、又は、酸触媒、塩基触媒により、光開始剤の存在下又は不存在下で、又はマイクロ波の照射によって、熱架橋法又はUV架橋法により架橋できる、架橋可能な単位QEであり、その際、二つ又は三つ以上のこれらの置換基R及びR'は互いに単環式、多環式、脂肪族、芳香族及び/又はベンゾ縮合環系を形成することもでき、

R^2 は、いずれの場合においても、同一又は異なって、H、重水素、F、Cl、Br、I、 $N(R^3)_2$ 、CN、 CF_3 、 NO_2 、OH、COOH、 $COOR^3$ 、 $CO(NR^3)_2$ 、 $Si(R^3)_3$ 、 $B(OR^3)_2$ 、 $C(=O)R^3$ 、 $P(=O)(R^3)_2$ 、 $S(=O)R^3$ 、 $S(=O)_2R^3$ 、 OSO_2R^3 、1～40C原子を有する線状のアルキル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基、又は、2～40C原子を有する線状のアルケニル基又はアルキニル基、又は3～40C原子を有する分岐状又は環状のアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基であり、それぞれ、一つ又は二つ以上の残基 R^3 で置換されることができ、その際、一つ又は二つ以上の隣接しない CH_2 -基は、 $R^3C=CR^3$ 、 $C-C$ 、 $Si(R^3)_2$ 、 $Ge(R^3)_2$ 、 $Sn(R^3)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^3$ 、 $P(=O)(R^3)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^3 、O、S又は $CONR^3$ で置き換えることができ、かつ、その際、一つ又は二つ以上のH原子が、重水素、F、Cl、Br、I、CN、 CF_3 又は NO_2 で置き換えることができ、又は、それぞれが、一つ又は二つ以上の残基 R^3 で置換されることができ、5～60個の芳香族の環原子を有する芳香族又はヘテロ芳香族の環系、又は、一つ又は二つ以上の残基 R^3 で置換されることができ、5～60個の芳香族の環原子を有するアリールオキシ基又はヘテロアリールオキシ基、又は、一つ又は二つ以上の残基 R^3 で置換されることができ、10～40個の芳香族の環原子を有するジアリールアミノ基、ジヘテロアリールアミノ基又はアリールヘテロアリールアミノ基、又は、これらの系の組み合わせであり；その際、これらの置換基 R^2 の二つ又は三つ以上は互いに、単環又は多環の芳香族及び/又はベンゾ縮合環系を形成することもでき；

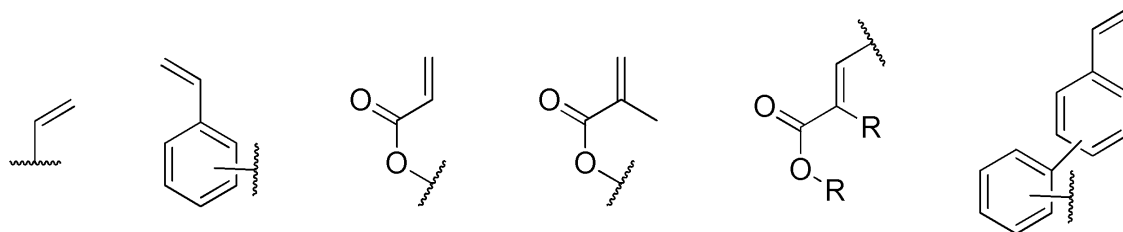
R^3 は、いずれの場合においても、同一又は異なって、H、重水素、F、 CF_3 、又は、1～20C原子を有する、脂肪族炭化水素残基、芳香族炭化水素残基及び/又はヘテロ芳香族炭化水素残基であり、その際、一つ又は二つ以上のH原子は、F又は CF_3 で置き換えることができ；その際、二つ又は三つ以上の置換基 R^3 は互いに、単環又は多環の脂肪族の環系を形成することもできる。

【0086】

一実施形態において、架橋可能な単位QEは、オキセタン、アルキン及びアジドからなる群から選択される、特に、クリック反応を遂行するための化合物、並びに以下のアルケン誘導体である：

【0087】

【化24】



【0088】

本発明のドナーの例

【0089】

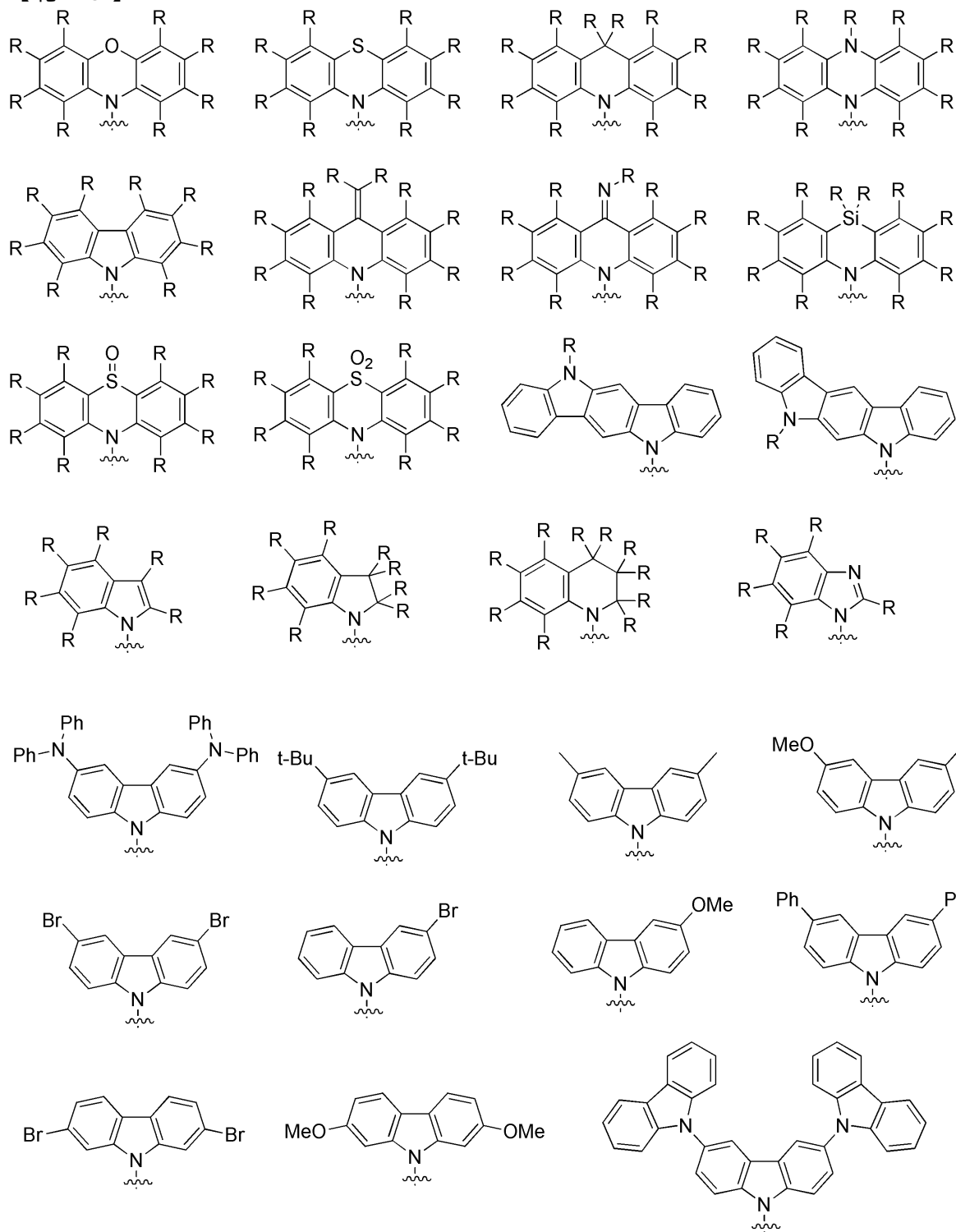
10

20

30

40

【化 25】



【0090】

式 A 又は式 B の基本構造の異なる置換パターンの例

【0091】

10

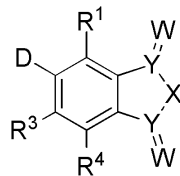
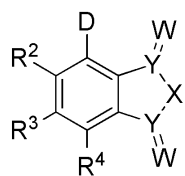
20

30

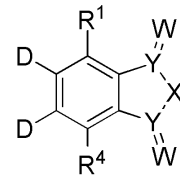
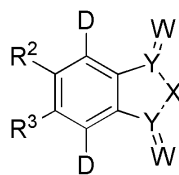
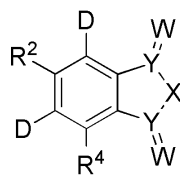
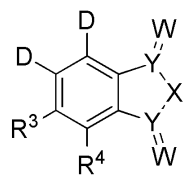
40

【化 2 6】

一つのドナー

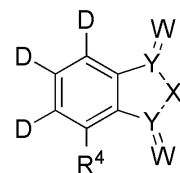
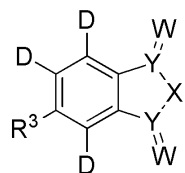


二つのドナー

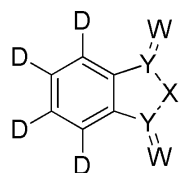


10

三つのドナー



四つのドナー



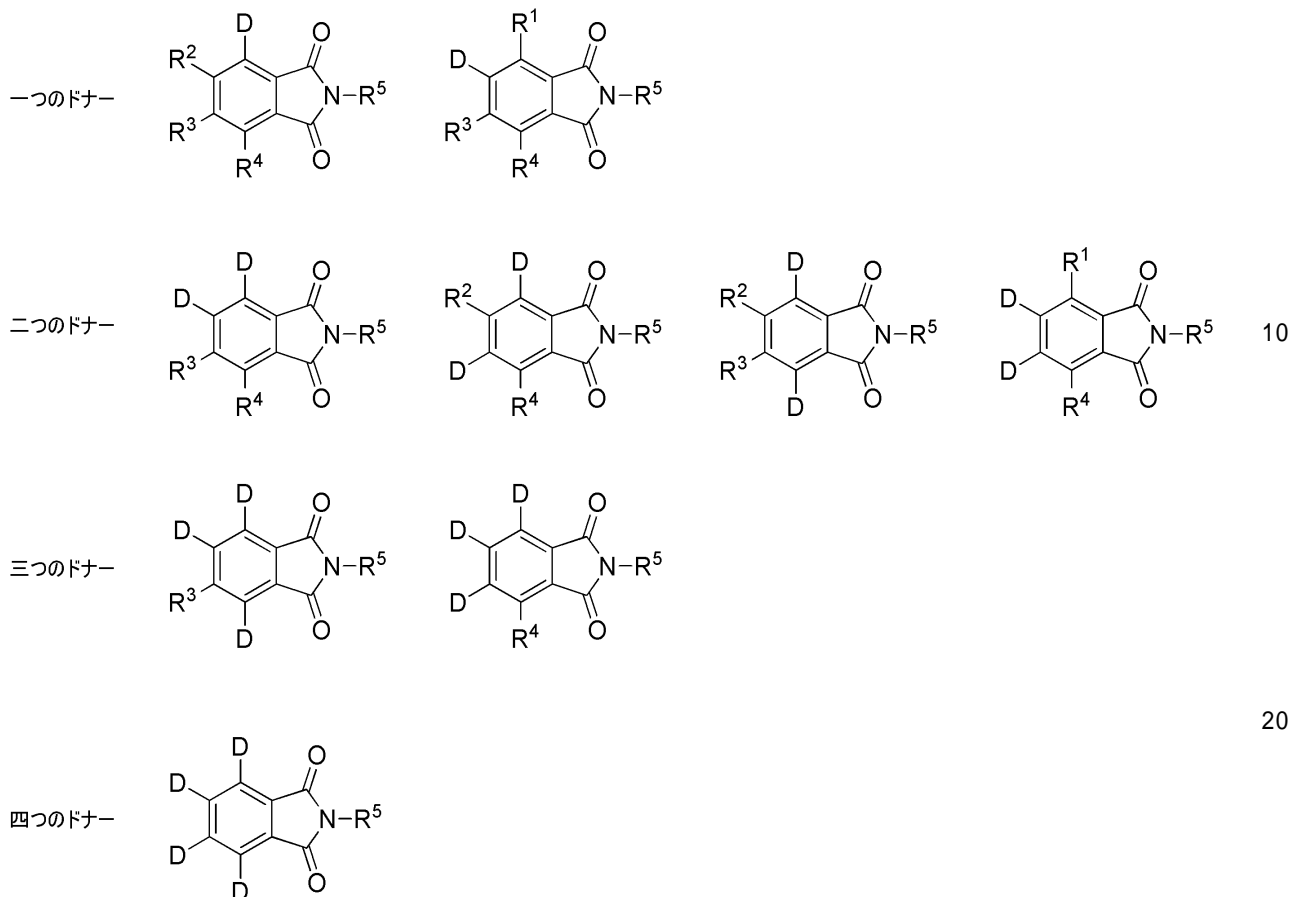
20

【 0 0 9 2 】

式 D の基本構造の異なる置換パターンの例：

【 0 0 9 3 】

【化 2 7】



【 0 0 9 4 】

本発明の分子は、一実施形態において、一つ、二つ又は四つのドナー基で置換されている。

【 0 0 9 5 】

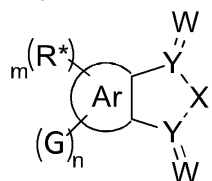
本発明は、本発明の有機分子を製造する方法にも関する。

【 0 0 9 6 】

一実施形態において、該方法は、式 A * の構造を有する化合物を有する N - 求核試薬の求核芳香族置換 (S _N A r) の工程を有する。

【 0 0 9 7 】

【化 2 8】



式 A *

【 0 0 9 8 】

式中、A r = 5 ~ 4 0 個の芳香族の環原子を有する置換されたアリール基又はヘテロアリール基であり、これは、m 個の同一又は異なる残基 R * 及び n 個の同一又は異なる基 G で置換され、その際、m + n は、置換可能な環原子の数に等しく；

その際、G = C l 又は F であり、及び

その他は、式 A で与えられた定義が有効である。

【 0 0 9 9 】

一実施形態において、本発明の方法は、塩素又はフッ素で置換されたフタルイミドを有する N - 求核試薬の求核芳香族置換 (S _N A r) を有する。

【 0 1 0 0 】

20

30

40

50

本発明の方法は、別の実施形態において、追加的に、適当な第一アミンによる、塩素 / フッ素置換のフタルイミドの対応する無水物への変換による合成を有する。

【 0 1 0 1 】

さらなる実施形態において、本発明の方法は、少なくとも一つの A r 基及び / 又は電子供与特性を有するドナー基を、少なくとも一つの置換基で置換し、溶解性を高める工程を追加的に有し、これは、次からなる群から選択される。

- C 1 ~ C 3 0 の長さの、長鎖の、分岐状又は非分岐状、又は環状のアルキル鎖
- C 1 ~ C 3 0 の長さの、長鎖の、分岐状又は非分岐状、又は環状のアルコキシル鎖
- C 1 ~ C 3 0 の長さの、分岐状又は非分岐状、又は環状のパーフルオロアルコキシル鎖、及び
- 3 ~ 5 0 個の繰り返し単位の鎖長を有する、短鎖のポリエーテル。

10

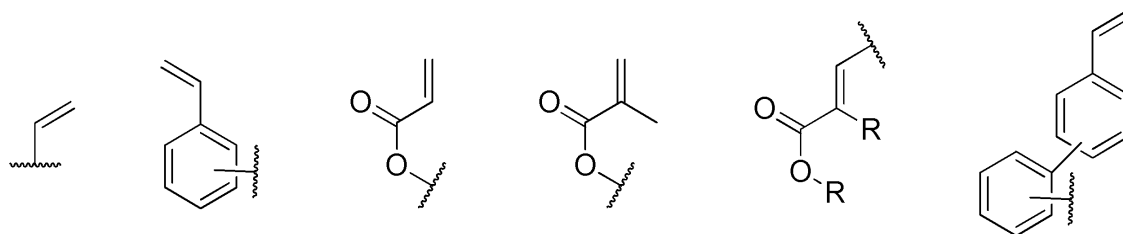
【 0 1 0 2 】

別の実施形態において、本発明の方法は、A r 基及び / 又は電子供与特性を有するドナー基及び / 又は式 C 及び / 又は D の残基 R ' のうちの少なくとも一つを、酸触媒法、塩基触媒法、熱又は光開始剤の存在下又は不存在下での UV 架橋方法によって、又はマイクロ波照射によって架橋可能な、クリック反応のためのオキセタン、アジデン及びアルキネン、並びに次のアルケン誘導体からなる群から選択される、少なくとも一つの架橋可能な単位で置換する工程をさらに有する。

【 0 1 0 3 】

【 化 2 9 】

20



【 0 1 0 4 】

本発明はまた、本発明の分子の、真空蒸着法によって、又は溶液から製造される光電子デバイスにおけるエミッタ又はアブゾーバーとしての使用に関し、その際、該光電子デバイスは、特に、次からなる群から選択される。

30

- 有機発光ダイオード素子 (O L E D)
- 発光電気化学セル
- O L E D センサー、特に、外部から密閉されないガスセンサー及び蒸気センサー、
- 有機太陽セル、
- 有機電界効果トランジスタ、
- 有機レーザー、
- ダウンコンバージョンデバイス

【 0 1 0 5 】

少なくとも一つの実施形態によれば、有機発光デバイスは、基板上に少なくとも二つの電極を有し、それらうちの少なくとも一方は透明であり、そして、それらの間に有機機能層のスタックが配置されている。その有機機能層は、有機エレクトロルミネッセンス層の形態の少なくとも一つの有機発光層を有し、これは、該有機発光デバイスの運転時に光を発生させる。有機発光デバイスは、特に、有機発光ダイオード (O L E D) として形成することもできる。

40

【 0 1 0 6 】

本明細書において“半透過性”とは、可視光に対して透過性であることを表す。それ故、半透過層は透過性である、つまり、クリアに透明であるか、又は少なくとも部分的に光散乱性及び / 又は部分的に光吸収性であることができ、そのため、半透明層は、例えば、拡散状又は乳白状に透過性であることができる。特に好ましくは、この場合、半透過性と呼ばれる層は、可能な限り透明に形成され、そのため、特に、光の吸収は可能な限り低減

50

される。

【0107】

有機機能層のスタックは、有機ポリマー、有機オリゴマー、有機モノマー、有機の非ポリマーの低分子（“小さい分子”）又はその組み合わせを有することができる。有機発光層の材料として適している材料は、蛍光又はリン光に起因する放射線放出を示す、例えば、ポリフルオレン、ポリチオフェン又はポリフェニレン、又はその誘導体、化合物、混合物又はコポリマーである。有機機能層は、多数の有機発光層を有することもでき、これらは、電極の間に配置される。さらに、該有機機能層は、これは、少なくとも一つの発光層への効果的な正孔注入を可能にするための正孔輸送層として形成された機能層を有することができる。正孔輸送層の材料としては、例えば、第三アミン、カルバゾール誘導体、カンファースルホン酸でドーピングされたポリアニリン、又はポリスチレンスルホン酸でドーピングされたポリエチレンジオキシチオフェンが有利であると実証されている。さらに、有機機能層は、電子輸送層として形成された機能層を有することができる。加えて、層のスタックは、電子及び/又は正孔ブロック層を有することもできる。

10

【0108】

基板（固体の支持体）は、例えば、層、プレート、フィルム又はラミネートの形態の一種又は二種以上の材料を有することができ、これは、ガラス、石英、プラスチック、金属、シリコンウェハから選択される。特に好ましくは、該基板は、例えば、ガラス層、ガラスフィルム又はガラスプレートの形態のガラスを有するか又はそれからなる。有機発光デバイスの基本構造の観点から、例えば、有機機能層スタックの構造、層の組成及び材料に関して、文献、国際公開第2010/066245 A1号パンフレット（特許文献1）が参照され、特に、有機発光デバイスの構造に関して、本明細書に明示的に援用される。

20

【0109】

有機機能層スタックがそれらの間に配置される二つの電極は、例えば、両方とも半透過性に形成することもでき、それにより、二つの電極の間の少なくとも一つの発光層に生じた光が、両方向、つまり、基板の方向及び基板に対向する方向に放射することができる。さらに、例えば、有機発光デバイスの全ての層を半透過性に形成することもでき、それにより、有機発光デバイスは半透過性の、そして、特に、透明なOLEDに形成される。加えて、それらの間に有機機能層が配置される二つの電極は、非半透過性、かつ、好ましくは反射性に形成することも可能であり、それにより、該二つの電極の間の少なくとも一つの発光層に生じた光は、該半透過性の電極を通して一方向にだけ放射することができる。基板上に配置された電極が半透過性であり、かつ、基板も半透過性に形成されている場合、いわゆる、“ボトムエミッタ”という語が用いられ、また、基板に対向して配置された電極が半透過性に形成されている場合、“トップエミッタ”という語が用いられる。さらなる実施形態によれば、半透過性の電極は、透明な導電性酸化物を有するか、又は透明な導電性酸化物からなる。透明な導電性酸化物（TCO：“transparent conductive oxide”）は、透明な導電性の材料であり、一般に、金属酸化物、例えば、酸化亜鉛、酸化スズ、酸化カドミウム、酸化チタン、酸化インジウム、インジウムスズ酸化物（ITO）又はアルミニウム亜鉛酸化物（AZO）である。二成分系の金属酸素化合物、例えば、 ZnO 、 SnO_2 又は In_2O_3 以外にも、三成分系の金属酸素化合物、例えば、 Zn_2SnO_4 、 $CdSnO_3$ 、 $ZnSnO_3$ 、 $MgIn_2O_4$ 、 $GaInO_3$ 、 $Zn_2In_2O_5$ 又は $In_4Sn_3O_{12}$ 又は、様々な透明な導電性酸化物が、該TCOのグループに属する。さらには、該TCOは、化学量論量の組成に対応させる必要はなく、また、p-ドーピング又はn-ドーピングすることもできる。

30

40

【0110】

さらに、半透過性の電極は、金属又は合金、例えば、一種又は二種以上の以下の材料： Ag 、 Pt 、 Au 、 Mg 、 $Ag:Mg$ による金属層を有することができる。さらに、その他の金属も可能である。特に好ましくは、空気に安定である及び/又は、例えば、薄い保護酸化物層を形成することによって自己不動態である一種又は二種以上の金属が使用される。その際、該金属相は、少なくとも一つの発光層から作動時に発生した光に少なくとも

50

部分的に透過性であるように低減された厚さ、例えば、50 nm以下の厚さを有する。

【0111】

半透過性の電極はまた、少なくとも一つ又は二つ以上のTCO層及び少なくとも一つの半透過性の金属層からなる組み合わせを有することができる。

【0112】

該電極は、それぞれを、大きい面積に形成することもできる。それにより、少なくとも一つの有機発光層において生じた光の大面积の放射が可能になる。ここで、“大面积”という語は、有機発光デバイスが、数平方ミリメートル以上の面積、好ましくは、1平方ミリメートル以上、そして特に好ましくは1平方デシメートルの面積を有することを意味する。

10

【0113】

さらなる実施形態によれば、有機機能層スタックは、二つの電極の両方の境界に直接隣接してそれら電極間に配置された、それぞれが電荷発生層である有機機能層スタックを有する。この場合、電子伝導層は、アノードとして形成された電極に隣接し、そして、正孔伝導層はカソードとして形成された電極に隣接している。この場合、二つの電極を備える有機機能層スタックは、いわゆる逆構造OLEDであり、この場合、対応する電荷キャリアタイプの注入は、それぞれ上記の逆のプロセスによって置き換えられる。

【0114】

さらなる実施形態によれば、有機機能層スタックは、電極間に、少なくとも二つの有機発光層を有し、それらの間には、さらに、別の電荷発生層を配置することができる。そのような電極を有する有機機能層スタックは、いわゆるSOLEID(stacked OLED)とも呼ばれ、この場合、複数の有機OLEDユニットは、それらの間に配置された電荷発生層を介して互いに垂直に設けられている。上下に積層された複数の有機発光層によって、混合光を発生させることが可能となる。加えて、多積層OLEDにおいて、一つの発光層だけを有するOLEDに匹敵するほぼ同じ効率かつ著しく長い寿命が達成できる。というのも、同じ電流密度で、複数の輝度が可能となるからである。さらなる実施形態によれば、二つの電極を介してそれらの間に配置された有機機能層スタック及び少なくとも一つの電荷発生層を有する、該二つの電極の上に、さらなる有機機能層スタック及びその上のさらなる電極が配置される。換言すれば、有機発光デバイスは、上記の少なくとも三つの電極を有し、その際、隣接する電極それぞれの間には有機機能層スタックが配置される。これによって、有機機能層スタックと、さらなる有機機能層スタックとの間に配置された電極は、いわゆる、中間電極として仕上げられ、これは、有機発光デバイスの発光色を制御するために、例えば、様々な光を発光する層の場合に、有機機能層スタックで直接制御できる。特に、さらなる有機機能層スタックは、二つの電極のうちの少なくとも一方に直接接することができ、それらの間にはさらなる有機機能層スタックが配置され、さらなる電荷発生層を有する。

20

30

【0115】

さらなる実施形態において、それぞれの電極に直接接する有機発光デバイスは、有機発光層に対して対向する面の上に電荷発生層を有する。

【0116】

40

例えば、その電荷発生層は、正孔輸送層としてp-ドープ層を有することができ、これは、有機正孔導電マトリックス中に無機又は有機ドーパントを有する。無機ドーパントとしては、例えば、遷移金属酸化物、例えば、酸化バナジウム、酸化モリブデン又は酸化タングステンが挙げられる。有機ドーパントとしては、例えば、テトラフルオロテトラシアノキノジメタン(F4-TCNQ)又は銅-ペンタフルオロベンゾエート(Cu(I)PF₆z)が挙げられる。さらに、有機ドーパントとして、例えば、遷移金属錯体が挙げられる。これらは、好ましくは、配位子を有する中心原子、例えば、Cuを有することができ、例えば、アセチルアセトナート(acac)であることができる。さらに、例えば、銅錯体、例えば、銅-カルボキシレートが挙げられる。そのような、そしてさらなるドーパントは、文献、国際公開第2011/033023 A1号パンフレット(特許文献2

50

）及び国際公開第2011/120709 A1号パンフレット（特許文献3）に記載されており、そのそれぞれの開示は、そこに記載されたドーパントに関して、参照により本明細書に完全に組み込まれる。

【0117】

さらに、例えば、ドイツ国特許出願公開第10 2012 209 523 A1号明細書（特許文献5）及びドイツ国特許出願公開第10 2012 209 520 A1号明細書（特許文献6）に記載されているようなビスマス及び／又はクロムを有する金属錯体も挙げられ、そのそれぞれの開示は、そこに記載されたドーパントに関して、参照により本明細書に完全に組み込まれる。

【0118】

電子伝導層として、電荷発生層は、例えば、有機電子伝導マトリックス中にn - ドーパントを有するnドープ層を有し、例えば、低い仕事関数を有する金属、例えば、Cs、Li、Ca、Na、Ba又はMg又はその化合物、例えば、Cs₂CO₃又はCs₃PO₄である。そのような、そしてさらなるドーパントは、例えば、文献、国際公開第2011/039323 A2号パンフレット（特許文献7）に記載されており、そのそれぞれの開示は、そこに記載されたドーパントに関して、参照により本明細書に完全に組み込まれる。

【0119】

さらに、有機p - ドーパント及びn - ドーパントは、商品名NDP - 2（登録商標）、NDP - 9（登録商標）、NDN - 1（登録商標）、NDN - 26（登録商標）（Novaled GmbH）でも得られる。

【0120】

電極と有機層の上には、カプセル化アッセンブリをさらに配置することができる。そのカプセル化アッセンブリは、例えば、ガラスカバーの形態、又は、例えば、薄層カプセル化物の形態に作り上げることができる。

【0121】

例えば、空洞を有することのできるガラス基板の形態ガラスカバーは、接着層又はガラスはんだを使って、基板上の上で接着させることができ、例えば、基板と溶融させることができる。その空洞には、さらに、接着剤を貫通できる湿気又は酸素を結合させるために、湿気を吸収する、例えば、ゼオライトからなる物質（ゲッター）を接着することができる。さらに、ゲッター材料を含む接着剤もまた、基板上にカバーを固定するために使用することができる。

【0122】

薄層カプセル化物として形成されたカプセル化アッセンブリは、大気物質に対する、特に、湿気及び酸素に対する及び／又はさらなる有害物質、例えば腐食性ガス、例えば、硫化水素に対する障壁を形成するのに適した装置であると本明細書では理解される。このために、該カプセル化アッセンブリは、それぞれが、数100 nm以下の厚さを有する一つ又は二つ以上の層を有することができる。

【0123】

特に、薄層カプセル化物は、薄い層を有するか又はそれからなり、これは、例えば、原子層成長法（“atomic layer deposition”、ALD）を用いて設けることができる。カプセル化アッセンブリの層に適した材料は、例えば、酸化アルミニウム、酸化亜鉛、酸化ジルコニウム、酸化チタン、酸化ハフニウム、酸化ランタン、酸化タンタルである。好ましくは、該カプセル化アッセンブリは、多数の薄層を有する層配列を有し、該薄層のそれぞれは、原子層～10 nmの厚さを有、その際、制限が含まれている。

【0124】

薄膜カプセル化物は、例えば、文献、国際公開第2009/095006 A1号パンフレット（特許文献8）及び国際公開第2010/108894 A1号パンフレット（特許文献9）から公知であり、そのそれぞれの開示は、この点について、参照により本明

10

20

30

40

50

細書に完全に組み込まれる。

【 0 1 2 5 】

ここで説明する有機発光デバイスは、例えば、照明装置として、O L E Dランプの形態で実施することができ、有利には、少なくとも一方の電極、特に、半透過性の電極の有機機能層スタックへの電荷キャリアの注入は、上述の逆のプロセスで置き換えられる。それによって、そのような境界面での電圧降下の低減を達成することができる。結果として、透過性の導電性酸化物、例えば、I T O又はA Z Oは、半透過性の電極の材料として、単独又は、A gのような金属を組み合わせで使用することができる。特に、半透過性電極は、基板に対向する、いわゆるカバー電極を形成することもできる。これによって、O L E Dを、非常に高い透過値で実現することがで、それにより、そのような透過性デバイスの効率を制御することが可能となる。それによって、有機発光デバイスの寿命に好ましい影響を及ぼすこともでき、そして、新規なO L E Dデバイスを実現することが可能である。

10

【 0 1 2 6 】

この場合、一実施形態において、エミッタ又はアブゾーバーにおける有機分子の割合は1 ~ 9 9 %、好ましくは、有機発光デバイス、特に、O L E Dにおけるエミッタとしての有機分子の割合は、5 % ~ 8 0 %である。代替的な実施形態において、エミッタ又はアブゾーバーにおける有機分子の割合は1 0 0 %である。

【 0 1 2 7 】

本発明は、本発明の有機分子を有する光電子デバイスにも関し、その際、該光電子デバイスは、特に、有機発光デバイス、有機ダイオード、有機太陽セル、有機トランジスタ、有機発光ダイオード、光 - 発光電気化学セル、有機電界効果トランジスタ、有機レーザーからなる群から選択されるデバイスとして形成される。

20

【 0 1 2 8 】

本発明の光電子デバイスの一実施形態において、本発明の化合物は、発光層における発光材料として使用され、その際、それは純粋な層として、又はマトリックス材料と組み合わせて使用される。

【 0 1 2 9 】

さらなる実施形態では、光学的発光デバイス、特にO L E Dの発光層における本発明有機分子の発光材料としての割合は5 % ~ 8 0 %である。本発明の光電子デバイスの一実施形態では、発光層は基板上に設けられ、その際、好ましくは、アノード及びカソードが基板上に設けられ、そして、該アノードとカソードとの間に発光層が設けられる。

30

【 0 1 3 0 】

発光層は、本発明の有機分子だけを1 0 0 %の濃度で有することができ、その際、アノード及びカソードは基板上に設けられ、そして発光層は、アノードとカソードとの間に設けられる。

【 0 1 3 1 】

一実施形態において、発光層は、本発明の有機分子以外に、ホスト材料を有し、それらの三重項 (T 1) - 及び一重項 (S 1) - エネルギーレベルは、該有機分子の三重項 (T 1) - 及び一重項 (S 1) - エネルギーレベルよりもエネルギー的に高い。

【 0 1 3 2 】

本発明の光電子デバイスの一実施形態において、正孔注入層及び電子注入層はアノードとカソードとの間に、及び正孔輸送層及び電子輸送層は正孔注入層及び電子注入層の間に、及び発光層は、正孔輸送層及び電子輸送層の間に設けられる。

40

【 0 1 3 3 】

本発明のさらなる一実施形態において、光電子デバイスは、基板、アノード、カソード及び少なくともそれぞれ一つの正孔注入層及び電子注入層、及び少なくともそれぞれ一つの正孔輸送層及び電子輸送層、及び、本発明の有機分子及びホスト材料を有し、該ホスト材料の三重項 (T 1) - 及び一重項 (S 1) - エネルギーレベルが、該有機分子の三重項 (T 1) - 及び一重項 (S 1) - エネルギーレベルよりもエネルギー的に高い、少なくとも一つの発光層を有し、その際、アノード及びカソードは基板の上に設けられ、そして、

50

正孔注入層及び電子注入層はアノードとカソードとの間に、及び正孔輸送層及び電子輸送層は正孔注入層及び電子注入層の間に、及び発光層は、正孔輸送層及び電子輸送層の間に設けられる。

【0134】

本発明によれば、発光材料はまた、本発明の有機分子及びホスト材料を有し、その際、該ホスト材料の三重項（T1）-及び一重項（S1）-エネルギーレベルが、該有機分子の三重項（T1）-及び一重項（S1）-エネルギーレベルよりもエネルギー的に高く、そしてその際、発光材料は、蛍光又は熱活性化遅延蛍光を放出し、そして、最低励起一重項（S1）状態～その下の三重項（T1）状態のデルタE（S1-T1）値は、3000 cm⁻¹未満を示す。

10

【0135】

本発明は、光電子デバイスの製造方法にも関し、その際、本発明の有機分子が使用される。

【0136】

本発明の方法の一実施形態において、本発明の有機分子は支持体上に施用され、その際、その施用は、特に、湿式化学的に、コロイド懸濁液を用いるか又は昇華を使って行われる。

【0137】

本発明によれば、本発明の光電子デバイスの製造方法は、光電子デバイスの少なくとも一つの層が、

20

- 昇華法によってコーティングされ、
- OVPD（有機気相堆積）法によってコーティングされ、
- キャリアガス昇華によってコーティングされ、及び/又は、
- 溶液から又は印刷法を使って、製造される。

【0138】

本発明は、同様に、光電子デバイスにおいて電子又は正孔を伝導させるためのマトリックス材料に本発明の有機分子を導入することを特徴とする、電子部品の放出及び/又は吸収特性を変更するための方法に関する。

【0139】

さらに、本発明は、請求項1～9に記載の有機分子の使用、特に、光電子デバイス、UV放射線又は青色光を可視光に、特に、緑色、黄色又は赤色の光に変換する（ダウンコンバージョン）ための使用に関する。

30

【図面の簡単な説明】

【0140】

【図1】図1は、ジクロロメタン中の2の吸収スペクトルを示す図である。

【図2】図2は、2のフィルム発光（PMMMA中10%）を示す図である。

【図3】図3は、ジクロロメタン中の3の吸収スペクトルを示す図である。

【図4】図4は、3のフィルム発光（PMMMA中10%）を示す図である。

【図5】図5は、ジクロロメタン中の4の吸収スペクトルを示す図である。

【図6】図6は、4のフィルム発光（PMMMA中10%）を示す図である。

40

【図7】図7は、ジクロロメタン中の5の吸収スペクトルを示す図である。

【図8】図8は、5のフィルム発光（PMMMA中10%）を示す図である。

【図9】図9は、ジクロロメタン中の6の吸収スペクトルを示す図である。

【図10】図10は、6のフィルム発光（PMMMA中10%）を示す図である。

【図11】図11は、ジクロロメタン中の7の吸収スペクトルを示す図である。

【図12】図12は、7のフィルム発光（PMMMA中10%）を示す図である。

【図13】図13は、ジクロロメタン中の8の吸収スペクトルを示す図である。

【図14】図14は、8のフィルム発光（PMMMA中10%）を示す図である。

【図15】図15は、ジクロロメタン中の9の吸収スペクトルを示す図である。

【図16】図16は、9のフィルム発光（PMMMA中10%）を示す図である。

50

【図 17】図 17 は、ジクロロメタン中の 10 の吸収スペクトルを示す図である。
 【図 18】図 18 は、10 のフィルム発光 (P M M A 中 10 %) を示す図である。
 【図 19】図 19 は、ジクロロメタン中の 11 の吸収スペクトルを示す図である。
 【図 20】図 20 は、11 のフィルム発光 (P M M A 中 10 %) を示す図である。
 【図 21】図 21 は、ジクロロメタン中の 12 の吸収スペクトルを示す図である。
 【図 22】図 22 は、12 のフィルム発光 (P M M A 中 10 %) を示す図である。
 【図 23】図 23 は、ジクロロメタン中の 13 の吸収スペクトルを示す図である。
 【図 24】図 24 は、13 のフィルム発光 (P M M A 中 10 %) を示す図である。
 【図 25】図 25 は、ジクロロメタン中の 14 の吸収スペクトルを示す図である。
 【図 26】図 26 は、14 のフィルム発光 (P M M A 中 10 %) を示す図である。
 【図 27】図 27 は、ジクロロメタン中の 15 の吸収スペクトルを示す図である。
 【図 28】図 28 は、15 のフィルム発光 (P M M A 中 10 %) を示す図である。
 【図 29】図 29 は、ジクロロメタン中の 16 の吸収スペクトルを示す図である。
 【図 30】図 30 は、16 のフィルム発光 (P M M A 中 10 %) を示す図である。
 【図 31】図 31 は、2 - メチルテトラヒドロフラン中の 19 の吸収スペクトルを示す図である。

10

【図 32】図 32 は、19 のフィルム発光 (P M M A 中 10 %) を示す図である。
 【図 33】図 33 は、21 のフィルム発光 (P M M A 中 10 %) を示す図である。
 【図 34】図 34 は、22 のフィルム発光 (P M M A 中 10 %) を示す図である。
 【図 35】図 35 は、4 のエレクトロルミネッセンススペクトルを示しており、その際、
 符号は表 1 及び表 2 の O L E D デバイスが参照される。

20

【図 36】図 36 は、8 のエレクトロルミネッセンススペクトルを示しており、その際、
 符号は表 1 及び表 2 の O L E D デバイスが参照される。
 【図 37】図 37 は、4 及び 8 についての電圧 (白抜きの記号) に応じた U - I - 特性曲
 線 (ベタの記号) 及び輝度を示しており、その際、符号は表 1 及び表 2 の O L E D デバ
 イスが参照される。

【図 38】図 38 は、4 及び 8 についての電流効率 (ベタの記号) 及び能力効率 (白抜き
 の記号) を輝度に対してプロットされた図を示し、その際、符号は表 1 及び表 2 の O L E
 D デバイスが参照される。

【図 39】図 39 は、O L E D デバイスの概略的な構造を示す図である。

30

【図 40】図 40 は、3 の H O M O 及び L U M O を示しており、算出方法は : D F T、関
 数 : B P 8 6、ベースレート : d e f 2 - S V (P)、算出ソフトウェア : T u r b o m
 o l e 6 . 5。電子基底状態のための構造最適化が行われた。

【発明を実施するための形態】

【実施例】

【0141】

実施例で与えられる延長された寿命は、長寿の成分の励起子減衰時間 (= 自発的な蛍光
 のない) である。その際に与えられる値は、二次指数関数適合又は三次指数関数適合の計
 量測定値を示す。

【0142】

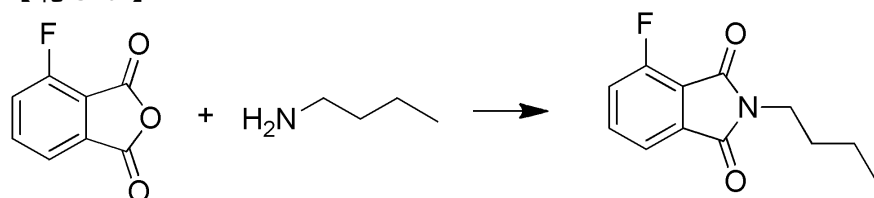
40

例 1

工程 1 :

【0143】

【化30】



1

【0144】

還流冷却器を備えた50 mLの丸底フラスコで、無水3-フルオロフタル酸(3.32 g、20ミリモル)を20 mLの氷酢酸中に懸濁させた。1-ブチルアミン(2.17 mL、22ミリモル)を添加した後に、最初に、90 で1時間、その後、さらに100 で1時間撹拌する。冷却後、反応溶液を150 mLの飽和Na₂CO₃-溶液に注ぎ、そして、2×75 mLのEtOAcで抽出する。合わせた有機相を、MgSO₄で乾燥させる。溶媒は、ロータリーエバポレーターで除去する。乾燥後、高真空で、生成物1(3.9 g、17.6ミリモル、88%)をわずかに黄色いオイルとして得る。

10

【0145】

¹H-NMR(500 MHz, CDCl₃): = 7.72 - 7.66 (m, 1H), 7.65 - 7.60 (m, 1H), 7.34 (td, J = 8.5, 1.7 Hz, 1H), 3.64 (td, J = 7.4, 3.1 Hz, 2H), 1.67 - 1.58 (m, 2H), 1.38 - 1.27 (m, 2H), 0.91 (td, J = 7.4, 3.0 Hz, 3H)

20

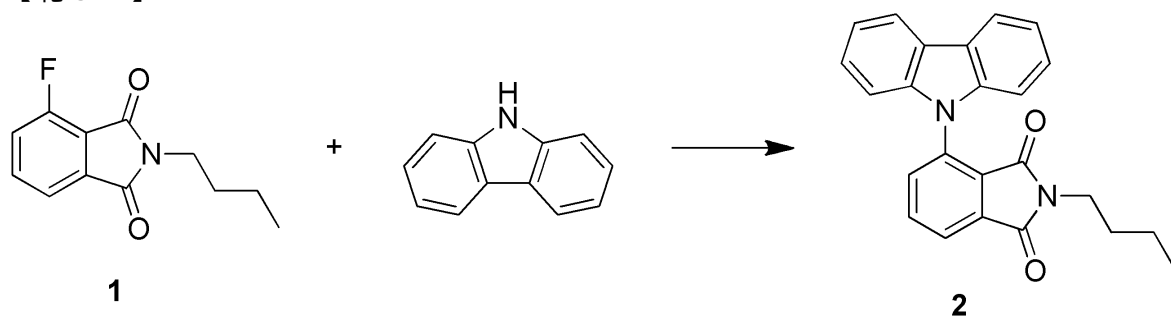
¹⁹F-NMR(471 MHz, CDCl₃): = -113.2

【0146】

工程2:

【0147】

【化31】



1

2

30

【0148】

50 mLの丸底フラスコに、イミド1(1.55 g、7ミリモル)、カルバゾール(1.17 g、7ミリモル)及びK₃PO₄(2.97 g、14ミリモル)を仕込み、5分間排気した。不活性ガス供給後、15 mLのDMSO(乾燥)を添加し、そして、100 で3 h加熱する。反応溶液を、200 mLの水に注ぎ、そして、200 mLのEtOAcで抽出する。100 mLのEtOAcで新たに抽出した後、合わせた有機相を2×それぞれ50 mLの水及び飽和NaCl溶液で洗浄する。引き続いて、MgSO₄で乾燥させ、そして、溶媒をロータリーエバポレーターで除去する。EtOHからの再結晶により、生成物2(1.21 g、47%)をわずかに黄色い固体として得る。該生成物は、昇華によってさらに精製することができる。

40

【0149】

¹H-NMR(500 MHz, CDCl₃): = 8.16 (d, J = 7.9 Hz, 2H), 7.98 (dd, J = 7.2, 1.0 Hz, 1H), 7.91 (t, J = 7.6 Hz, 1H), 7.85 (dd, J = 8.0, 1.0 Hz, 1H), 7.42 - 7.37 (m, 2H), 7.32 (t, J = 7.5 Hz, 2H), 7.16 (d, J = 8.1 Hz, 2H), 3.62 (t, J = 7.3 Hz, 2H), 1.63 - 1.54 (m, 2H), 1.

50

3.0 (h, $J = 7.4$ Hz, 2H), 0.89 (t, $J = 7.3$ Hz, 3H)
 ^{13}C NMR (126 MHz, CDCl_3): δ = 167.8, 165.7, 140.7, 135.6, 134.8, 134.4, 134.4, 127.0, 126.1, 124.0, 122.6, 120.8, 120.7, 110.0, 38.1, 30.6, 20.2, 13.7

【0150】

ジクロロメタン中での2の吸収スペクトルを図1に示す。

【0151】

2 (PMMA中10%)のフィルム発光を、図2に示す。

【0152】

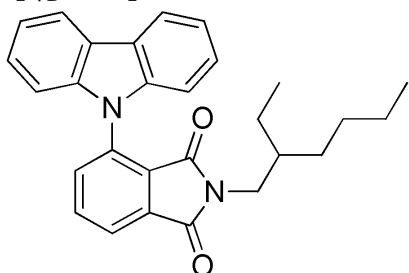
上記の合成工程後に、以下のさらなる例を製造した。

【0153】

例2

【0154】

【化32】



3

【0155】

^1H NMR (500 MHz, CDCl_3): δ = 8.16 (d, $J = 7.7$ Hz, 2H), 7.98 (d, $J = 7.2$ Hz, 1H), 7.91 (t, $J = 7.6$ Hz, 1H), 7.85 (d, $J = 8.0$ Hz, 2H), 7.39 (t, $J = 7.7$ Hz, 2H), 7.32 (t, $J = 7.4$ Hz, 2H), 7.17 (d, $J = 8.1$ Hz, 2H), 3.52 (d, $J = 7.3$ Hz, 2H), 1.78 (hept, $J = 6.3$ Hz, 1H), 1.35 - 1.16 (m, 8H), 0.89 - 0.82 (m, 6H)

^{13}C NMR (126 MHz, CDCl_3): δ = 168.0, 165.9, 140.7, 135.6, 134.7, 134.4, 126.9, 126.1, 124.1, 122.6, 120.9, 120.7, 110.1, 42.2, 38.2, 30.6, 28.6, 23.9, 23.1, 14.2

【0156】

ジクロロメタン中の3の吸収スペクトルを図3に示す。

【0157】

3 (PMMA中10%)のフィルム発光を、図4に示す。

【0158】

例3

【0159】

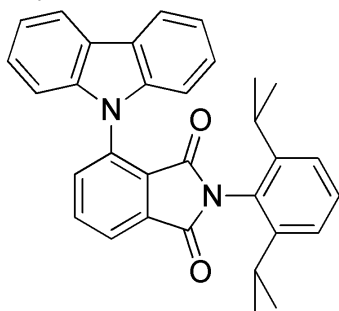
10

20

30

40

【化 3 3】



4

10

【 0 1 6 0 】

^1H NMR (500 MHz, CDCl_3): δ = 8.13 (d, J = 7.7 Hz, 2H), 8.10 (dd, J = 4.7, 3.6 Hz, 1H), 8.03 - 8.00 (m, 2H), 7.42 - 7.35 (m, 3H), 7.30 (td, J = 7.4, 1.0 Hz, 2H), 7.28 - 7.25 (m, 2H), 7.23 (d, J = 7.8 Hz, 2H), 2.76 (hept, J = 6.9 Hz, 2H), 1.21 (d, J = 6.8 Hz, 6H), 1.12 (d, J = 6.8 Hz, 6H)

^{13}C NMR (126 MHz, CDCl_3): δ = 167.5, 165.3, 147.3, 140.4, 136.0, 134.9, 134.5, 134.3, 130.3, 126.8, 126.1, 126.0, 124.2, 124.0, 123.0, 121.0, 120.7, 110.2, 29.6, 24.2

20

【 0 1 6 1 】

ジクロロメタン中の4の吸収スペクトルを図5に示す。

【 0 1 6 2 】

4 (PMMA中10%)のフィルム発光を、図6に示す。

【 0 1 6 3 】

4のフォトルミネッセンス量子収率 (PMMA中10%) は48%である。延長された4 (PMMA中10%) の寿命は6.2 μ 秒である。

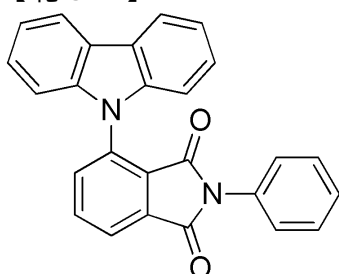
【 0 1 6 4 】

例 4

30

【 0 1 6 5 】

【化 3 4】



5

40

【 0 1 6 6 】

^1H NMR (500 MHz, CDCl_3): δ = 8.15 (dt, J = 7.7, 0.9 Hz, 2H), 8.11 (dd, J = 7.3, 1.0 Hz, 1H), 8.00 (t, J = 7.6 Hz, 1H), 7.94 (dd, J = 8.1, 1.0 Hz, 1H), 7.45 - 7.37 (m, 6H), 7.36 - 7.29 (m, 3H), 7.21 (dt, J = 8.2, 0.9 Hz, 2H)

^{13}C NMR (126 MHz, CDCl_3): δ = 166.6, 164.4, 140.8, 136.1, 135.1, 135.0, 134.4, 131.5, 129.1, 128.2, 126.7, 126.5, 126.2, 124.1, 123.3, 120.9, 120.7, 110.0

50

【 0 1 6 7 】

ジクロロメタン中の 5 の吸収スペクトルを図 7 に示す。

【 0 1 6 8 】

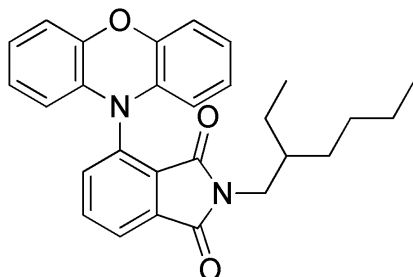
5 のフィルム発光 (P M M A 中 1 0 %) を図 8 に示す。

【 0 1 6 9 】

例 5

【 0 1 7 0 】

【 化 3 5 】



10

6

【 0 1 7 1 】

^1H NMR (5 0 0 M H z , C D C l ₃) : = 7 . 9 6 (d d , J = 7 . 5 , 1 . 2 H z , 1 H) , 7 . 9 3 (t , J = 7 . 5 H z , 1 H) , 7 . 7 0 (d d , J = 7 . 6 , 1 . 2 H z , 1 H) , 6 . 7 4 (d d , J = 8 . 0 , 1 . 5 H z , 2 H) , 6 . 6 8 (t , J = 8 . 0 H z , 2 H) , 6 . 5 7 (t d , J = 7 . 7 , 1 . 5 H z , 2 H) , 5 . 8 3 (d , J = 7 . 9 H z , 2 H) , 3 . 5 0 (d , J = 7 . 3 H z , 2 H) , 1 . 7 6 (h e p t , J = 6 . 3 H z , 1 H) , 1 . 3 3 - 1 . 0 9 (m , 8 H) , 0 . 8 7 - 0 . 7 9 (m , 6 H)

20

^{13}C NMR (1 2 6 M H z , C D C l ₃) : = 1 6 7 . 9 , 1 6 5 . 7 , 1 4 4 . 1 , 1 3 8 . 4 , 1 3 6 . 7 , 1 3 5 . 7 , 1 3 3 . 2 , 1 2 3 . 5 , 1 2 3 . 2 , 1 2 2 . 2 , 1 1 6 . 1 , 1 1 2 . 9 , 4 2 . 2 , 3 8 . 2 , 3 0 . 6 , 2 8 . 5 , 2 4 . 0 , 2 3 . 1 , 1 4 . 1 , 1 0 . 6

【 0 1 7 2 】

ジクロロメタン中の 6 の吸収スペクトルを図 9 に示す。

30

【 0 1 7 3 】

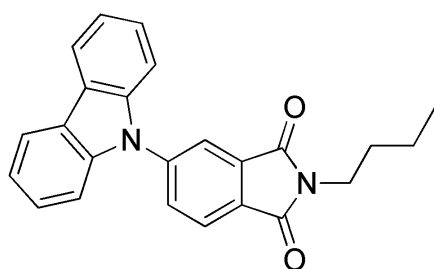
6 のフィルム発光 (P M M A 中 1 0 %) を図 1 0 に示す。

【 0 1 7 4 】

例 6

【 0 1 7 5 】

【 化 3 6 】



40

7

【 0 1 7 6 】

^1H NMR (5 0 0 M H z , C D C l ₃) : = 8 . 1 5 (d , J = 7 . 7 H z , 2 H) , 8 . 0 9 (d , J = 1 . 8 H z , 1 H) , 8 . 0 6 (d , J = 7 . 9 H z , 1 H) , 7 . 9 3 (d d , J = 7 . 9 , 1 . 8 H z , 1 H) , 7 . 4 8 (d t , J = 8 . 3 , 1 . 1 H z , 2 H) , 7 . 4 4 (d d d , J = 8 . 2 , 6 . 7 , 1 . 2 H z , 2 H) , 7 . 3 4 (d d d , J = 8 . 0 , 6 . 7 , 1 . 4 H z , 2 H) , 3 . 7 5 (t , J = 7 . 3 H z

50

, 2 H), 1.77 - 1.68 (m, 2 H), 1.48 - 1.37 (m, 2 H), 0.99 (t, J = 7.4 Hz, 3 H)

^{13}C NMR (126 MHz, CDCl_3): = 167.8, 167.7, 143.5, 140.1, 134.5, 131.5, 129.9, 126.6, 125.0, 124.2, 121.2, 121.2, 120.7, 109.7, 38.2, 30.8, 20.2, 13.8

【0177】

ジクロロメタン中の7の吸収スペクトルを図11に示す。

【0178】

7のフィルム発光(PMMA中10%)を図12に示す。

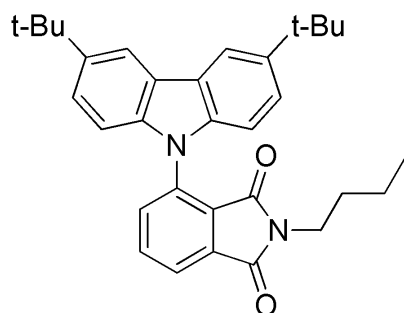
10

【0179】

例7

【0180】

【化37】



20

8

【0181】

^1H NMR (500 MHz, CDCl_3): = 8.15 (d, J = 1.8 Hz, 2 H), 7.94 (dd, J = 7.2, 1.0 Hz, 1 H), 7.86 (t, J = 7.6 Hz, 1 H), 7.80 (dd, J = 8.0, 1.1 Hz, 1 H), 7.43 (dd, J = 8.6, 1.9 Hz, 2 H), 7.08 (d, J = 8.6 Hz, 2 H), 3.65 (t, J = 7.3 Hz, 2 H), 1.66 - 1.56 (m, 2 H), 1.46 (s, 18 H), 1.38 - 1.26 (m, 2 H), 0.90 (t, J = 7.4 Hz, 3 H)

30

^{13}C NMR (126 MHz, CDCl_3): = 167.9, 165.8, 143.7, 139.2, 135.4, 135.1, 134.7, 134.2, 126.6, 124.2, 123.7, 122.2, 116.7, 109.6, 38.1, 34.9, 32.1, 30.6, 20.2, 13.8

【0182】

ジクロロメタン中の8の吸収スペクトルを図13に示す。

【0183】

8のフィルム発光(PMMA中10%)を図14に示す。

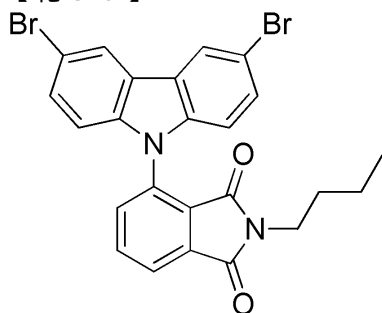
【0184】

例8

40

【0185】

【化 38】



9

10

【0186】

^1H NMR (500 MHz, CDCl_3): δ = 8.21 (d, J = 1.9 Hz, 2H), 8.02 (dd, J = 7.4, 0.9 Hz, 1H), 7.94 (t, J = 7.7 Hz, 1H), 7.80 (dd, J = 8.0, 0.9 Hz, 1H), 7.49 (dd, J = 8.7, 1.9 Hz, 2H), 7.01 (d, J = 8.7 Hz, 2H), 3.60 (t, J = 7.3 Hz, 2H), 1.62 - 1.53 (m, 2H), 1.35 - 1.23 (m, 2H), 0.89 (t, J = 7.3 Hz, 3H)

^{13}C NMR (126 MHz, CDCl_3): δ = 167.4, 165.5, 139.8, 135.9, 134.9, 134.2, 133.3, 129.6, 127.2, 124.6, 123.6, 123.4, 114.0, 111.7, 38.2, 30.6, 20.2, 13.7

20

【0187】

ジクロロメタン中の9の吸収スペクトルを図15に示す。

【0188】

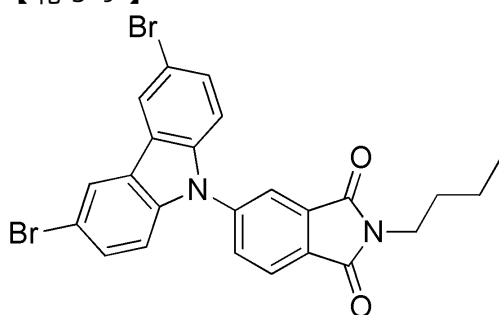
9のフィルム発光 (PMMA中10%) を図16に示す。

【0189】

例 9

【0190】

【化 39】



30

10

【0191】

^1H NMR (500 MHz, CDCl_3): δ = 8.20 (d, J = 1.9 Hz, 2H), 8.08 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 8.01 (d, J = 1.8 Hz, 1H), 7.87 (dd, J = 7.9, 1.9 Hz, 1H), 7.54 (dd, J = 8.7, 1.9 Hz, 2H), 7.30 (d, J = 8.7 Hz, 2H), 3.75 (t, J = 7.3 Hz, 2H), 1.76 - 1.66 (m, 2H), 1.41 (h, J = 7.4 Hz, 2H), 0.98 (t, J = 7.4 Hz, 3H)

40

^{13}C NMR (126 MHz, CDCl_3): δ = 167.6, 167.5, 142.5, 139.2, 134.7, 131.6, 130.7, 130.1, 125.3, 124.7, 123.7, 121.2, 114.4, 111.4, 38.3, 30.8, 20.3, 13.8

【0192】

50

ジクロロメタン中の 10 の吸収スペクトルを図 17 に示す。

【 0 1 9 3 】

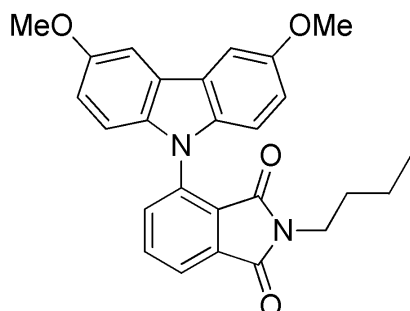
10 のフィルム発光 (P M M A 中 1 0 %) を図 1 8 に示す。

【 0 1 9 4 】

例 10

【 0 1 9 5 】

【 化 4 0 】



10

11

【 0 1 9 6 】

^1H NMR (5 0 0 M H z , C D C l ₃) : = 7 . 9 3 (d d , J = 7 . 2 , 1 . 2 H z , 1 H) , 7 . 8 7 (t , J = 7 . 5 H z , 1 H) , 7 . 8 3 (d d , J = 8 . 0 , 1 . 2 H z , 1 H) , 7 . 5 6 (d , J = 2 . 5 H z , 2 H) , 7 . 0 7 (d , J = 8 . 9 H z , 2 H) , 7 . 0 1 (d d , J = 8 . 9 , 2 . 5 H z , 2 H) , 3 . 9 5 (s , 6 H) , 3 . 6 2 (t , J = 7 . 3 H z , 2 H) , 1 . 6 5 - 1 . 5 3 (m , 2 H) , 1 . 3 1 (d t , J = 1 5 . 1 , 7 . 4 H z , 2 H) , 0 . 8 9 (t , J = 7 . 3 H z , 3 H)

20

^{13}C NMR (1 2 6 M H z , C D C l ₃) : = 1 6 7 . 8 , 1 6 5 . 8 , 1 5 4 . 7 , 1 3 6 . 1 , 1 3 5 . 5 , 1 3 4 . 9 , 1 3 4 . 8 , 1 3 4 . 0 , 1 2 6 . 4 , 1 2 4 . 5 , 1 2 2 . 1 , 1 1 5 . 2 , 1 1 1 . 1 , 1 0 3 . 3 , 5 6 . 2 , 3 8 . 1 , 3 0 . 6 , 2 0 . 2 , 1 3 . 7

【 0 1 9 7 】

ジクロロメタン中の 11 の吸収スペクトルを図 19 に示す。

30

【 0 1 9 8 】

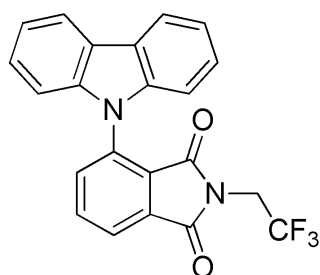
11 のフィルム発光 (P M M A 中 1 0 %) を図 20 に示す。

【 0 1 9 9 】

例 11

【 0 2 0 0 】

【 化 4 1 】



40

12

【 0 2 0 1 】

^1H NMR (5 0 0 M H z , C D C l ₃) : = 8 . 1 6 (d , J = 7 . 7 H z , 2 H) , 8 . 0 6 (d d , J = 7 . 2 , 1 . 2 H z , 1 H) , 7 . 9 9 (t , J = 7 . 6 H z , 1 H) , 7 . 9 5 (d d , J = 7 . 9 , 1 . 2 H z , 1 H) , 7 . 4 0 (d d d , J = 8 . 3 , 7 . 2 , 1 . 3 H z , 2 H) , 7 . 3 3 (t d , J = 7 . 4 , 1 . 0 H z , 2 H) , 7 . 1 6 (d , J = 8 . 3 H z , 2 H) , 4 . 2 4 (q , J = 8 . 5 H z , 2 H) .

50

^{19}F NMR (471 MHz, CDCl_3): δ = -70.48.

【0202】

ジクロロメタン中の12の吸収スペクトルを図21に示す。

【0203】

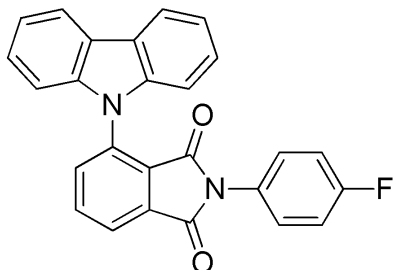
12のフィルム発光(PMMA中10%)を図22に示す。

【0204】

例12

【0205】

【化42】



10

13

【0206】

^1H NMR (500 MHz, CDCl_3): δ = 8.16 (d, J = 7.9 Hz, 2H), 8.11 (d, J = 7.3 Hz, 1H), 8.01 (t, J = 7.6 Hz, 1H), 7.95 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.43 - 7.34 (m, 4H), 7.32 (t, J = 7.5 Hz, 2H), 7.20 (d, J = 8.1 Hz, 2H), 7.15 - 7.07 (m, 2H).

20

^{19}F NMR (471 MHz, CDCl_3): δ = -113.0

【0207】

ジクロロメタン中の13の吸収スペクトルを図23に示す。

【0208】

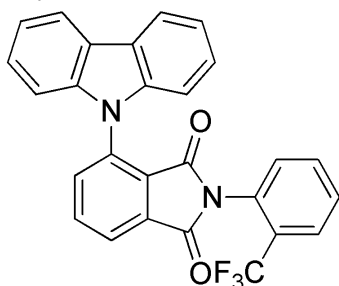
13のフィルム発光(PMMA中10%)を図24に示す。

【0209】

例13

【0210】

【化43】



30

14

【0211】

^1H NMR (500 MHz, CDCl_3): δ = 8.13 (t, J = 7.5 Hz, 2H), 8.10 (dd, J = 7.0, 1.4 Hz, 1H), 8.01 (t, J = 7.5 Hz, 1H), 7.98 (dd, J = 8.0, 1.4 Hz, 1H), 7.79 (t, J = 7.9 Hz, 1H), 7.63 (t, J = 7.7 Hz, 1H), 7.56 (t, J = 7.7 Hz, 1H), 7.43 - 7.37 (m, 2H), 7.35 - 7.27 (m, 4H), 7.16 (d, J = 8.2 Hz, 1H).

40

^{19}F NMR (471 MHz, CDCl_3): δ = -61.2

【0212】

ジクロロメタン中の14の吸収スペクトルを図25に示す。

50

【 0 2 1 3 】

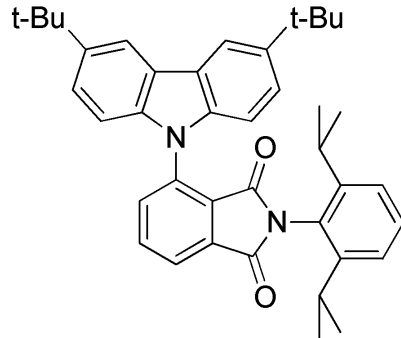
1 4 のフィルム発光 (P M M A 中 1 0 %) を図 2 6 に示す。

【 0 2 1 4 】

例 1 4

【 0 2 1 5 】

【 化 4 4 】



10

15

【 0 2 1 6 】

^1H NMR (5 0 0 M H z , C D C l ₃) : = 8 . 1 2 (d , J = 1 . 9 H z , 2 H) , 8 . 0 5 (d d , J = 6 . 2 , 2 . 1 H z , 1 H) , 8 . 0 0 - 7 . 9 5 (m , 2 H) , 7 . 4 4 - 7 . 3 8 (m , 3 H) , 7 . 2 5 (d , J = 7 . 8 H z , 2 H) , 7 . 1 9 (d , J = 8 . 6 H z , 2 H) , 2 . 7 9 (h e p t , J = 6 . 8 H z , 2 H) , 1 . 4 4 (s , 1 8 H) , 1 . 2 2 (d , J = 6 . 8 H z , 6 H) , 1 . 1 5 (d , J = 6 . 8 H z , 6 H)

20

^{13}C NMR (1 2 6 M H z , C D C l ₃) : = 1 6 7 . 7 , 1 6 5 . 5 , 1 4 7 . 3 , 1 4 3 . 9 , 1 3 8 . 7 , 1 3 5 . 8 , 1 3 5 . 5 , 1 3 4 . 4 , 1 3 4 . 0 , 1 3 0 . 3 , 1 2 6 . 8 , 1 2 5 . 5 , 1 2 4 . 3 , 1 2 4 . 0 , 1 2 3 . 6 , 1 2 2 . 5 , 1 1 6 . 7 , 1 0 9 . 9 , 3 4 . 9 , 3 2 . 1 , 2 9 . 6 , 2 4 . 2

【 0 2 1 7 】

ジクロロメタン中の 1 5 の吸収スペクトルを図 2 7 に示す。

【 0 2 1 8 】

30

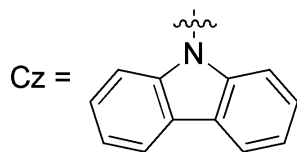
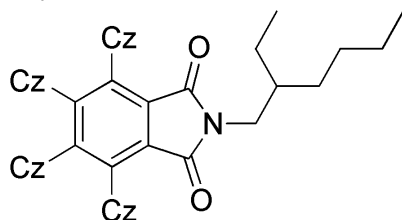
1 5 のフィルム発光 (P M M A 中 1 0 %) を図 2 8 に示す。

【 0 2 1 9 】

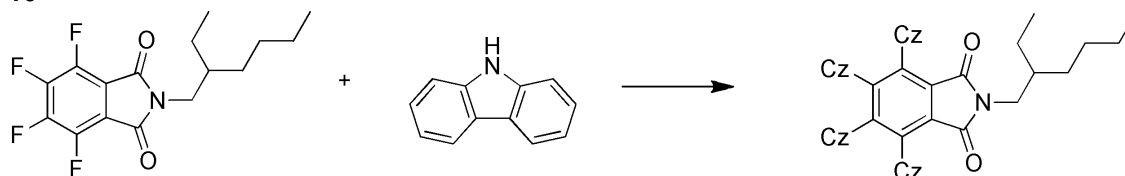
例 1 5

【 0 2 2 0 】

【化 4 5】



16



16a

16

【 0 2 2 1】

分子 16 は、上記の合成過程ではなく、以下の合成過程に従って製造した。250 mL の窒素フラスコで、 N_2 雰囲気下に、4.18 g (25 ミリモル) のカルバゾールを 100 mL の無水 THF 中に溶解した。1.2 g の水酸化ナトリウム (鉱油中に 60%、30 ミリモル) を添加し、それから、15 分、RT で撹拌する。20 mL の無水 THF に溶解したイミド 16a を添加する。室温での 2 h の撹拌後、溶媒は、ロータリーエバポレーターで除去する。その残滓を、150 mL の EtOAc に取り、そして、100 mL の水で洗浄する。水性相を、それぞれ 50 mL の EtOAc でさらに 2 × 抽出する。合わせた有機相は、飽和 NaCl 溶液で洗浄し、そして、 $MgSO_4$ で乾燥させる。その後、溶媒をロータリーエバポレーターで除去し、残滓を、少量のシリカゲルでろ過する (溶離液：ペンタン / EtOAc 1 : 1)。溶媒を、ロータリーエバポレーターで除去し、そして、残滓を、50 mL の $CHCl_3$ に溶解し、そして、200 mL の EtOH を添加することによって沈殿させる。そのようにして得られた固形分を、シリカゲルによるカラムクロマトグラフィ (溶離液：ペンタン / DCM) により精製する。1.45 g の生成物 16 (1.58 ミリモル、32%) を、橙色の固体として得る。

【 0 2 2 2】

1H NMR (500 MHz, $CDCl_3$) : δ = 7.75 (d, J = 8.2 Hz, 4H), 7.29 (d, J = 7.9 Hz, 4H), 7.11 - 7.02 (m, 8H), 7.02 - 6.92 (m, 8H), 6.74 (t, J = 7.4 Hz, 4H), 6.59 - 6.40 (m, 4H), 3.53 (d, J = 7.4 Hz, 2H), 1.77 (hept, J = 6.5 Hz, 1H), 1.39 - 1.14 (m, 8H), 0.90 - 0.81 (m, 6H)
 ^{13}C NMR (126 MHz, $CDCl_3$) : δ = 164.3, 141.2, 139.4, 137.8, 133.3, 129.2, 125.2, 125.2, 124.5, 124.1, 123.8, 120.8, 120.6, 120.2, 119.5, 110.4, 110.3, 42.6, 38.0, 30.5, 28.6, 23.8, 23.2, 14.3, 10.5

【 0 2 2 3】

ジクロロメタン中の 16 の吸収スペクトルを図 29 に示す。

【 0 2 2 4】

16 のフィルム発光 (PMMA 中 10%) を図 30 に示す。

【 0 2 2 5】

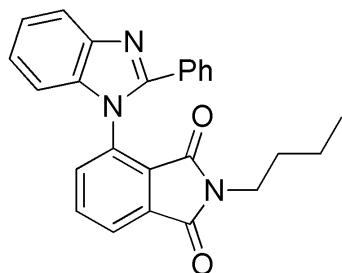
16のフォトルミネッセンス量子収率(PMMA中10%)は、28%である。16の延長された寿命(PMMA中10%)は、3.0μ秒である。

【0226】

例16

【0227】

【化46】



10

17

【0228】

^1H NMR (500 MHz, CDCl_3): δ = 7.96 (dd, J = 7.4, 1.1 Hz, 1H), 7.93 (dt, J = 8.0, 0.9 Hz, 1H), 7.91 (t, J = 7.6 Hz, 1H), 7.80 (dd, J = 7.7, 1.1 Hz, 1H), 7.52 - 7.47 (m, 2H), 7.36 (ddd, J = 8.2, 7.2, 1.1 Hz, 1H), 7.34 - 7.24 (m, 4H), 7.13 (dt, J = 8.2, 0.9 Hz, 1H), 3.54 - 3.36 (m, 2H), 1.50 - 1.30 (m, 2H), 1.07 (hept, J = 6.8 Hz, 2H), 0.82 (t, J = 7.3 Hz, 3H)

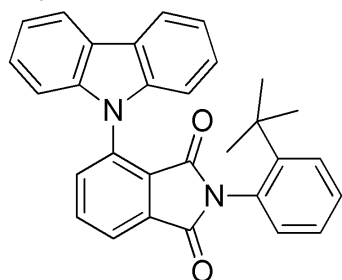
20

【0229】

例17

【0230】

【化47】



30

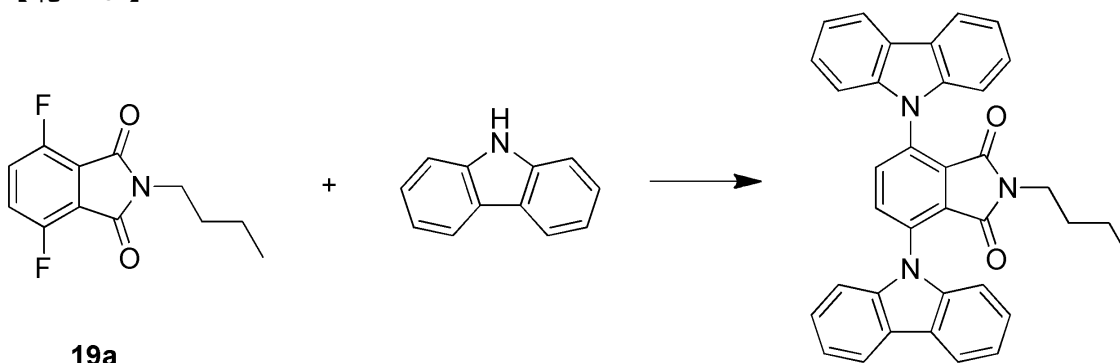
18

【0231】

例18

【0232】

【化48】



40

19a

19

【0233】

50

50 mL の丸底フラスコに、イミド 19 a (599 mg、2.5 ミリモル)、カルバゾール (1.05 g、6.25 ミリモル) 及び K_3PO_4 (2.65 g、12.5 ミリモル) を仕込み、そして、5 分間排気する。不活性ガス供給後、10 mL の DMSO (乾燥) を添加し、そして、100 で 16 h 加熱する。反応溶液を、100 mL の水に注ぎ、そして、ろ過する。その固形分を、100 mL の CH_2Cl_2 に取り、20 mL の水で洗浄する。水性相を 50 mL の CH_2Cl_2 で抽出する。合わせた有機を、飽和 NaCl 溶液で洗浄し、 $MgSO_4$ で乾燥する。引き続いて、溶媒をロータリーエバポレーターで除去する。引き続いて、 $MgSO_4$ によって乾燥し、そして、溶媒をロータリーエバポレーターで除去する。EtOH と $CHCl_3$ 混合物からの再結晶により、生成物 19 (365 mg、27%) が黄色い固体として得られる。

10

【0234】

1H NMR (500 MHz, $CDCl_3$): δ = 8.20 (d, J = 7.9, 4H), 8.06 (s, 2H), 7.47 (ddd, J = 8.3, 7.2, 1.2 Hz, 4H), 7.43 - 7.35 (m, 4H), 7.33 (d, J = 8.1 Hz, 4H), 3.54 (t, J = 7.4 Hz, 2H), 1.58 - 1.46 (m, 2H), 1.32 - 1.17 (m, 2H), 0.83 (t, J = 7.4 Hz, 3H)

^{13}C NMR (126 MHz, $CDCl_3$): δ = 164.9, 140.7, 136.0, 133.6, 128.9, 126.2, 124.2, 121.2, 120.8, 110.1, 38.3, 30.4, 20.1, 13.7

【0235】

20

2 - メチルテトラヒドロフラン中の 19 の吸収スペクトルを図 31 に示す。

【0236】

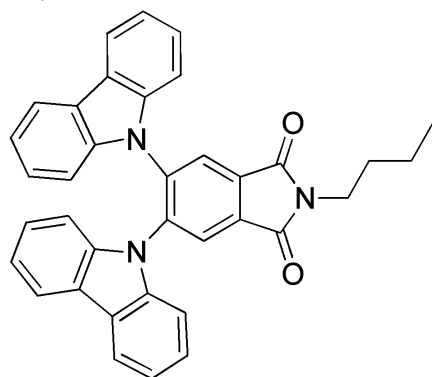
19 のフィルム発光 (PMMA 中 10%) を図 32 に示す。

【0237】

例 19

【0238】

【化 49】



30

20

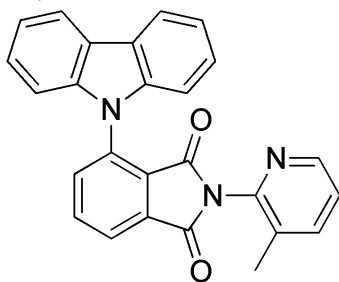
【0239】

例 20

40

【0240】

【化50】



21

10

【0241】

合成は、2に類似して行った。

【0242】

^1H NMR (500 MHz, CDCl_3): δ 8.44 (dd, $J = 4.7, 1.7$ Hz, 1H), 8.17 - 8.09 (m, 3H), 8.01 (t, $J = 7.6$ Hz, 1H), 7.96 (dd, $J = 7.9, 1.1$ Hz, 1H), 7.64 (ddd, $J = 7.8, 1.7, 0.8$ Hz, 1H), 7.40 (dddd, $J = 8.3, 7.3, 2.7, 1.2$ Hz, 2H), 7.34 - 7.26 (m, 3H), 7.23 (dd, $J = 16.2, 8.2$ Hz, 2H), 2.23 (s, 3H)

20

【0243】

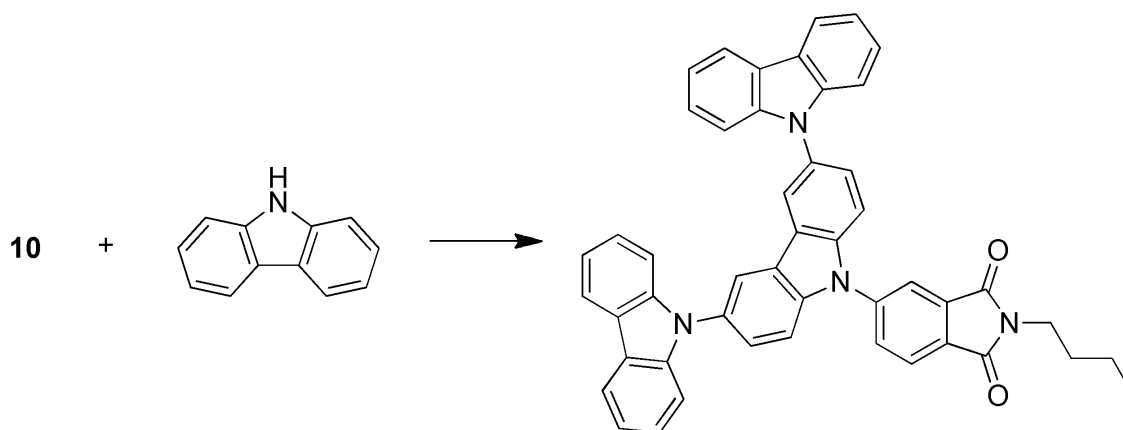
21のフィルム発光(PMMA中10%)を、図33に示す。21のフォトルミネッセンス量子収率(PMMA中10%)は54%である。延長された21(PMMA中10%)の寿命は6.4 μ 秒である。

【0244】

例21

【0245】

【化51】



22

30

40

【0246】

50 mLの丸底フラスコに、10 (1.58 g、3ミリモル)、カルバゾール (1.25 g、7.5ミリモル)、 K_3PO_4 (2.55 g、12ミリモル) 及びヨウ化銅 (I) (286 mg、1.5ミリモル) を仕込み、5分間排気する。不活性ガス供給後、10 mLのジオキサン (乾燥) 及び(±)トランス-1,2-ジアミノシクロヘキサン (0.54 mL、4.5ミリモル) を添加し、そして100 で2日間攪拌する。室温に冷却した後に、50 mLの CH_2Cl_2 を添加し、そして、少量のシリカゲルで過する(溶離液: CH_2Cl_2)。引き続いて、溶媒をロータリーエバポレーターで除去する。残滓を、カラムクロマトグラフィ(溶離液: シクロヘキサン/ CH_2Cl_2)で精製する。引き続いて、生成物を、追加的な再結晶化($\text{EtOH}/\text{CHCl}_3$)によってさらに精製する。

50

生成物 22 を、黄色い固体 (220 mg、11%) として得る。

【 0247 】

^1H NMR (500 MHz, CDCl_3) : δ = 8.31 (d, J = 1.9 Hz, 2 H), 8.26 (d, J = 1.8 Hz, 1 H), 8.19 (d, J = 7.9 Hz, 1 H), 8.17 (d, J = 7.9 Hz, 4 H), 8.12 (dd, J = 7.9, 1.8 Hz, 1 H), 7.72 (d, J = 8.7 Hz, 2 H), 7.67 (dd, J = 8.7, 2.0 Hz, 2 H), 7.44 - 7.38 (m, 8 H), 7.30 (ddd, J = 8.0, 6.0, 2.1 Hz, 4 H), 3.80 (t, J = 7.3 Hz, 2 H), 1.81 - 1.70 (m, 2 H), 1.49 - 1.39 (m, 2 H), 1.01 (t, J = 7.3 Hz, 3 H)

【 0248 】

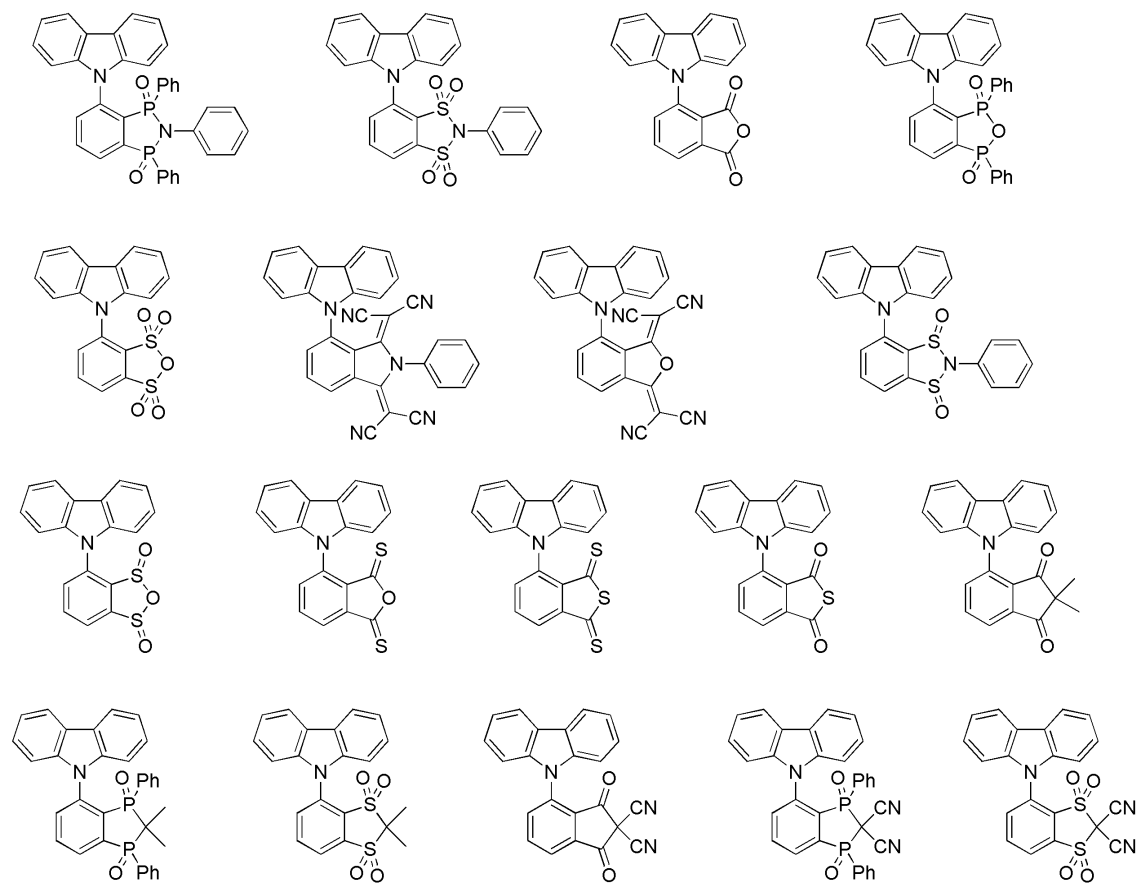
22 のフィルム発光 (PMMA 中 10%) を図 34 に示す。

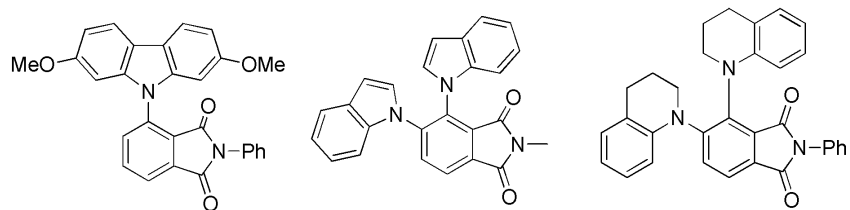
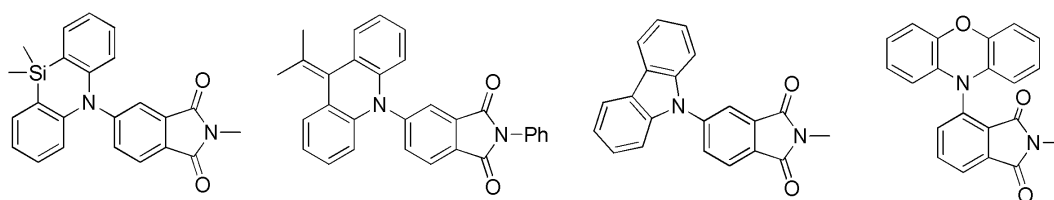
【 0249 】

さらなる例

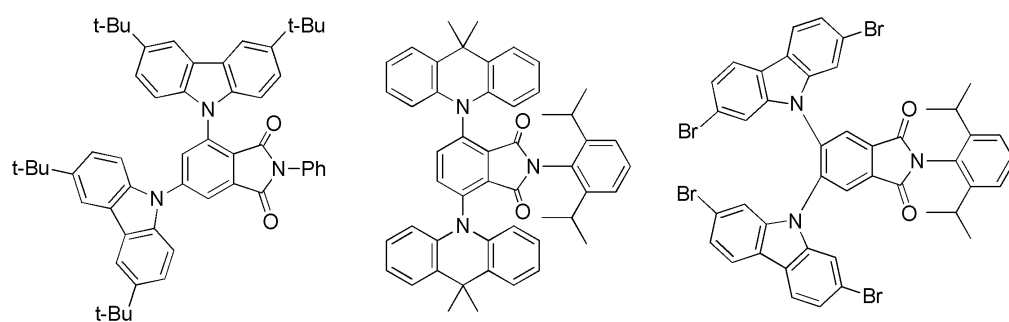
【 0250 】

[illegible]

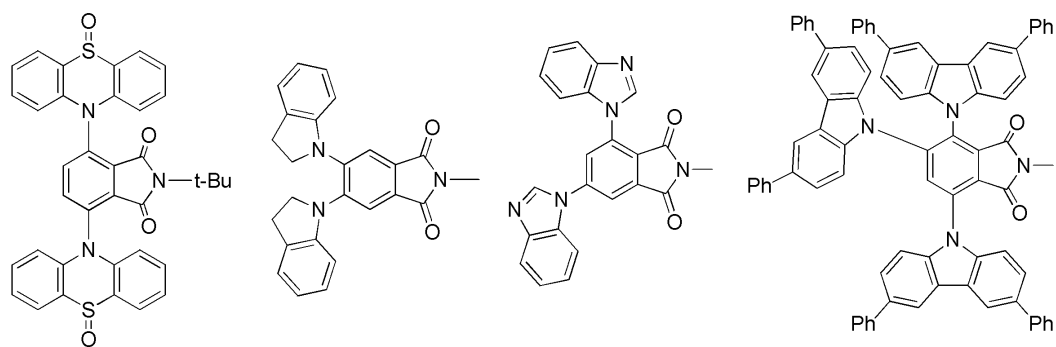




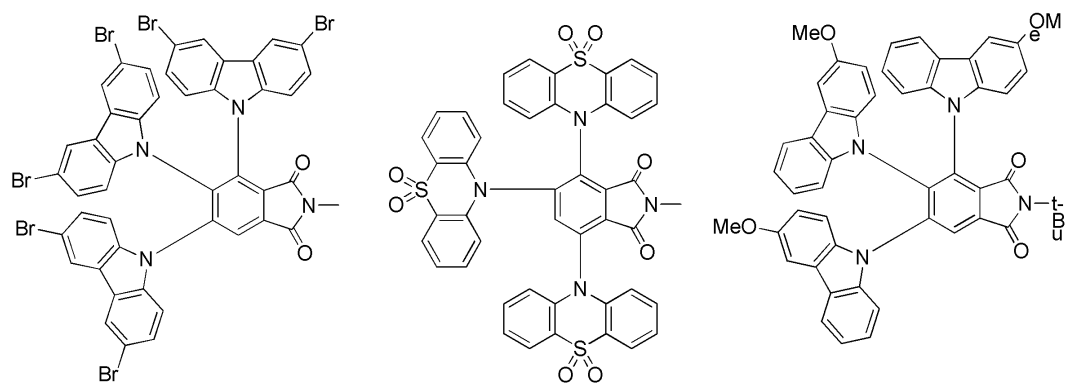
10



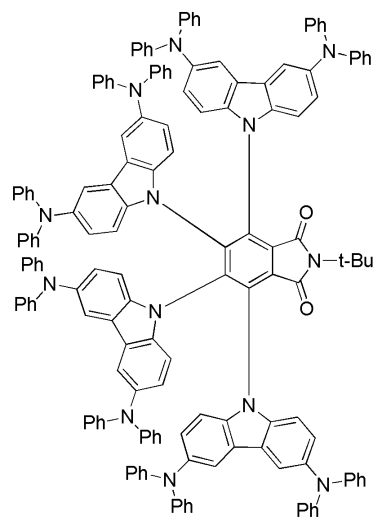
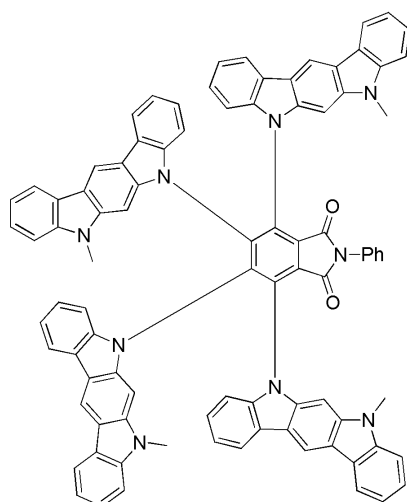
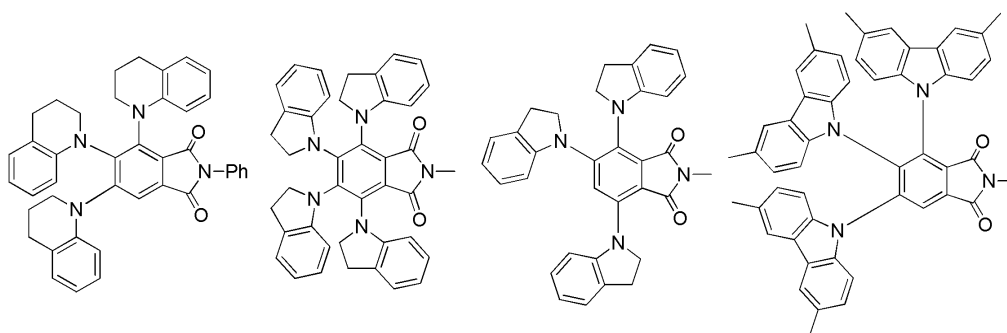
20



30

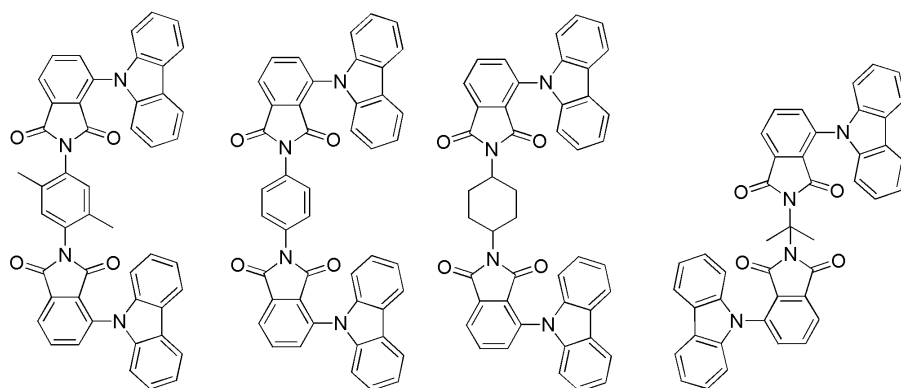


40

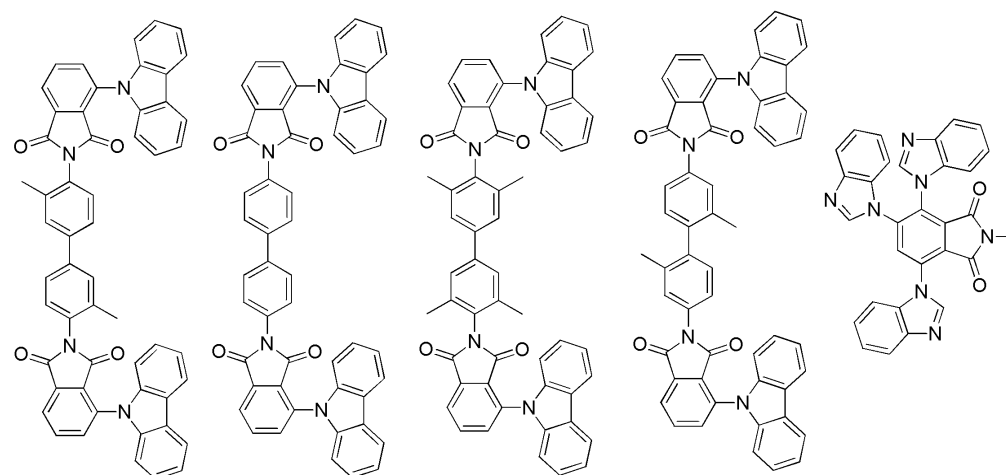


10

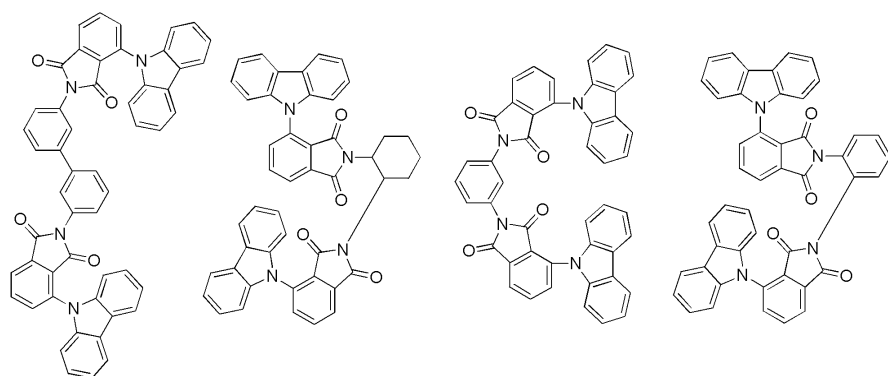
20



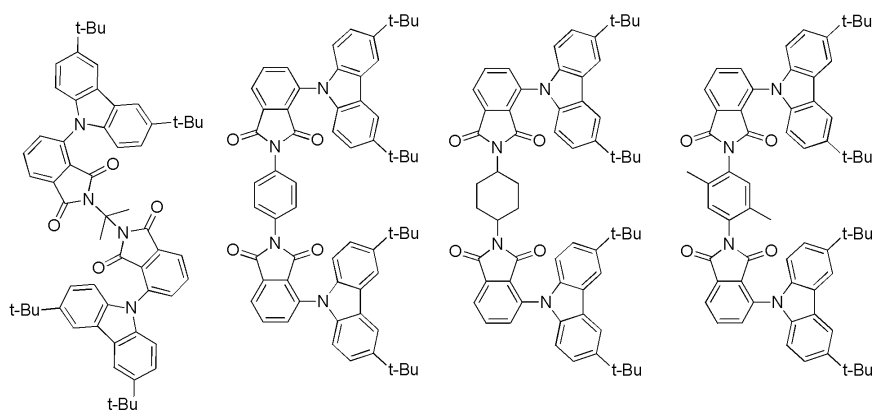
30



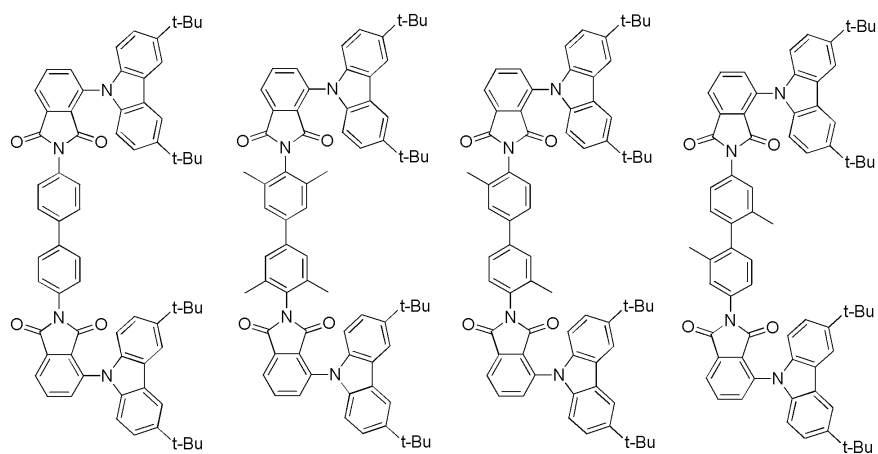
40



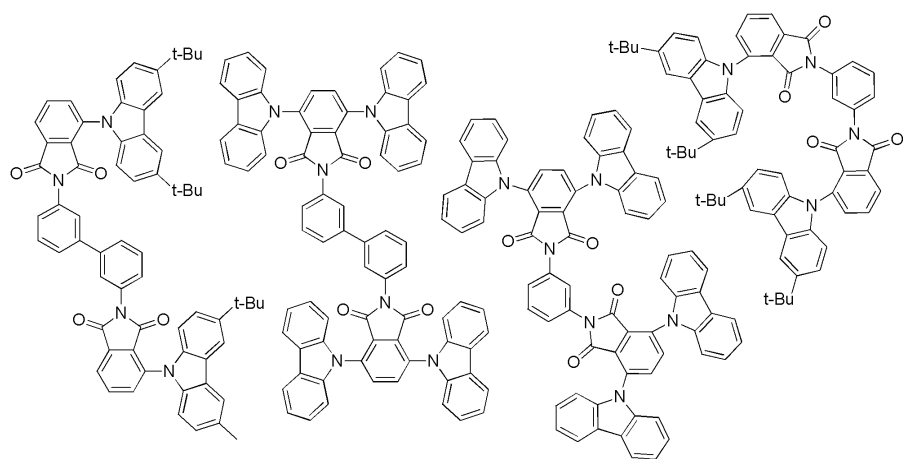
10



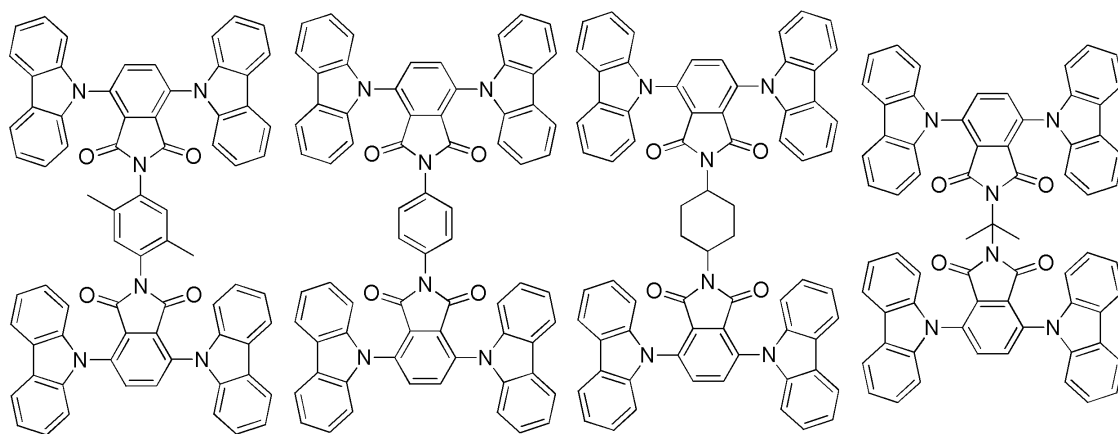
20



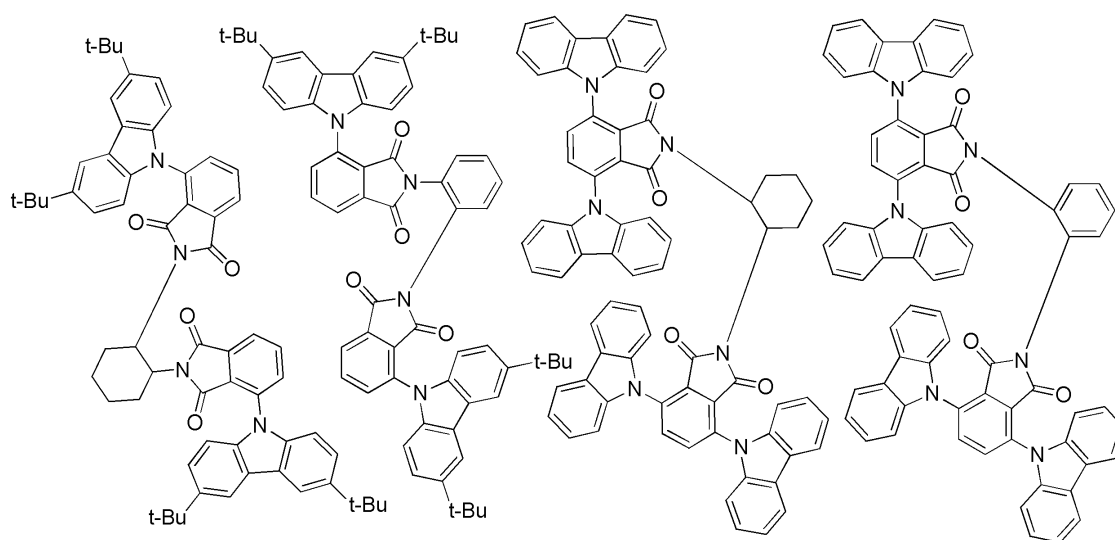
30



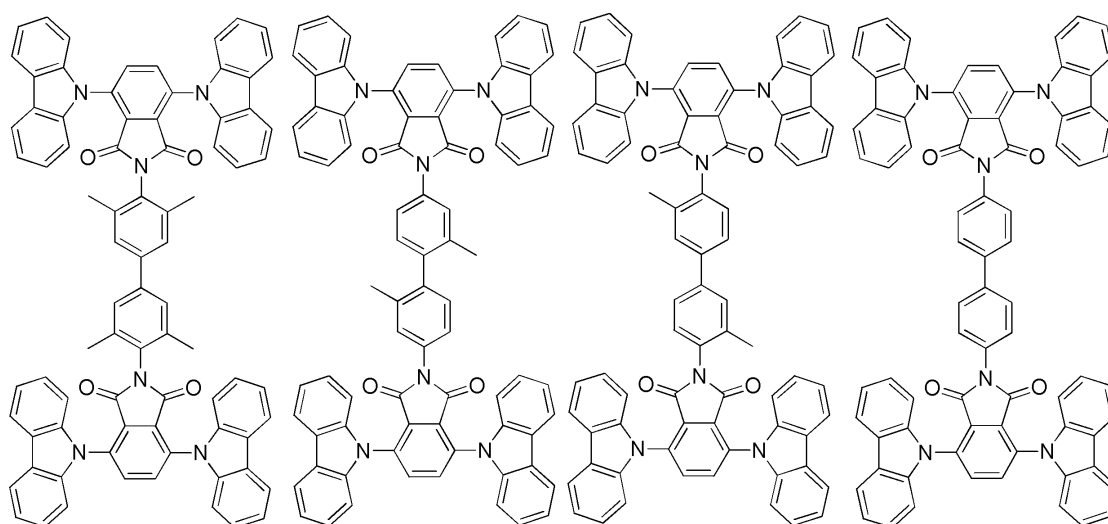
40



10

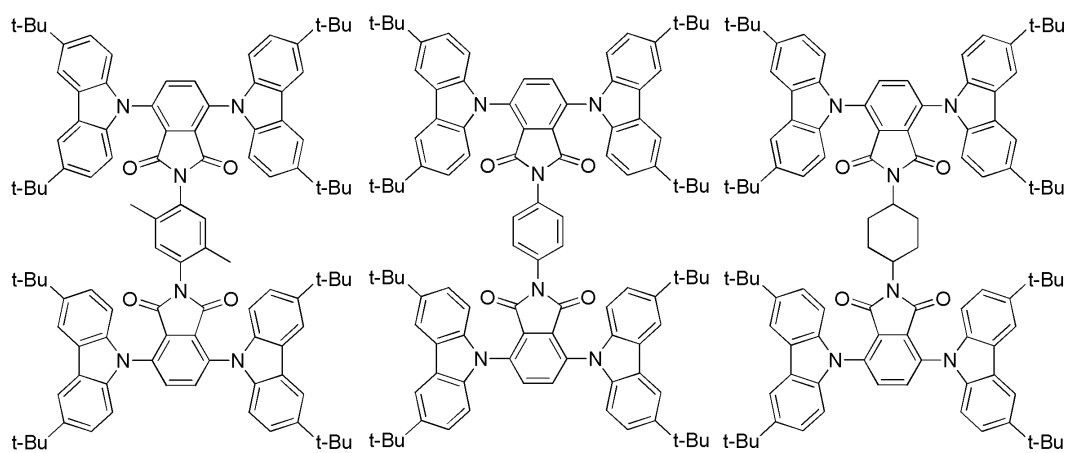


20

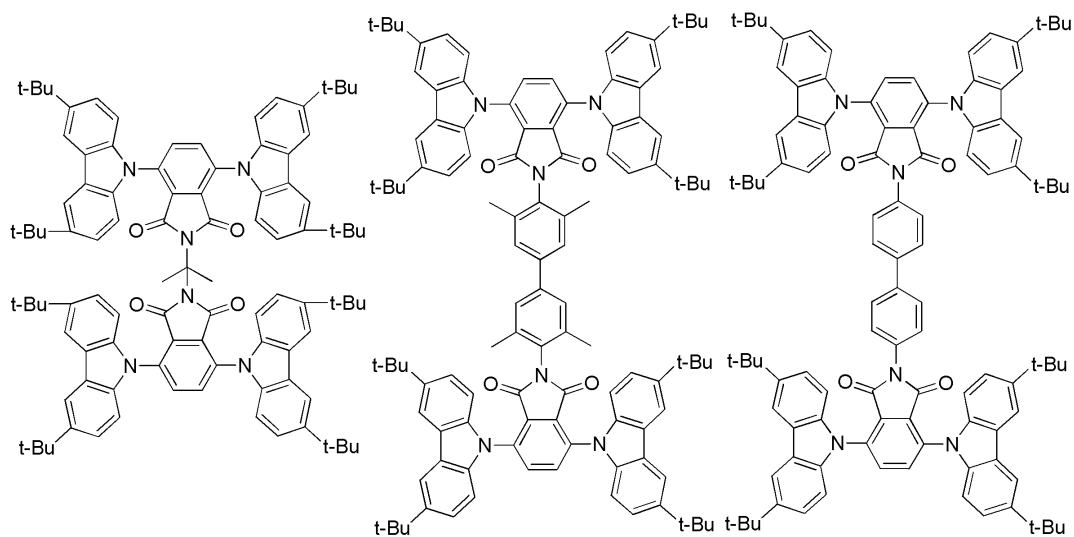


30

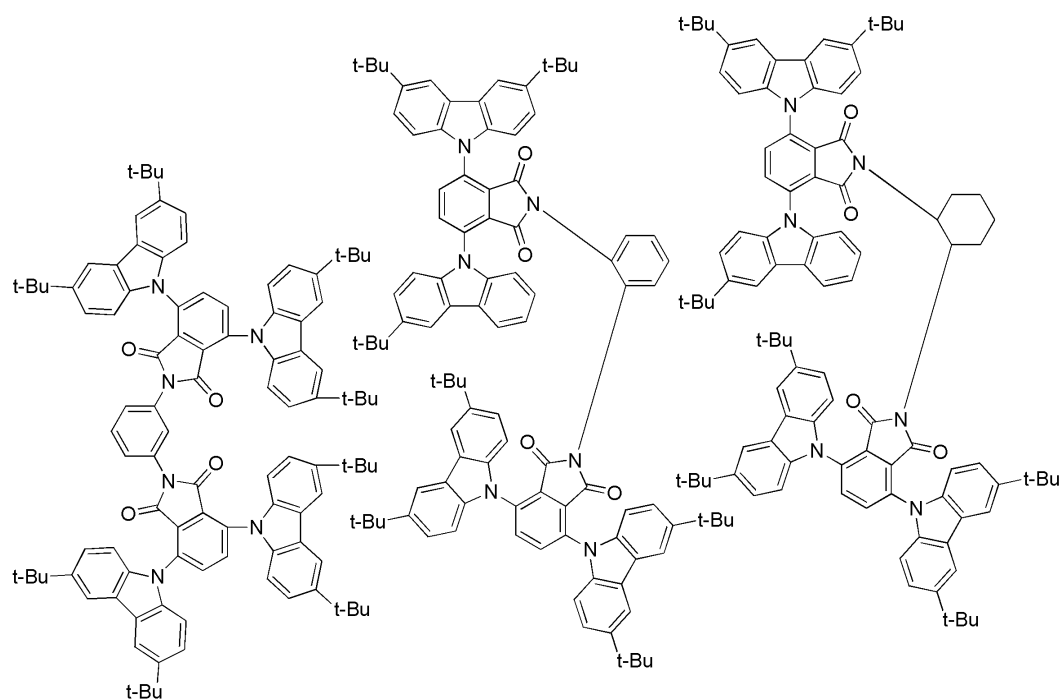
40



10

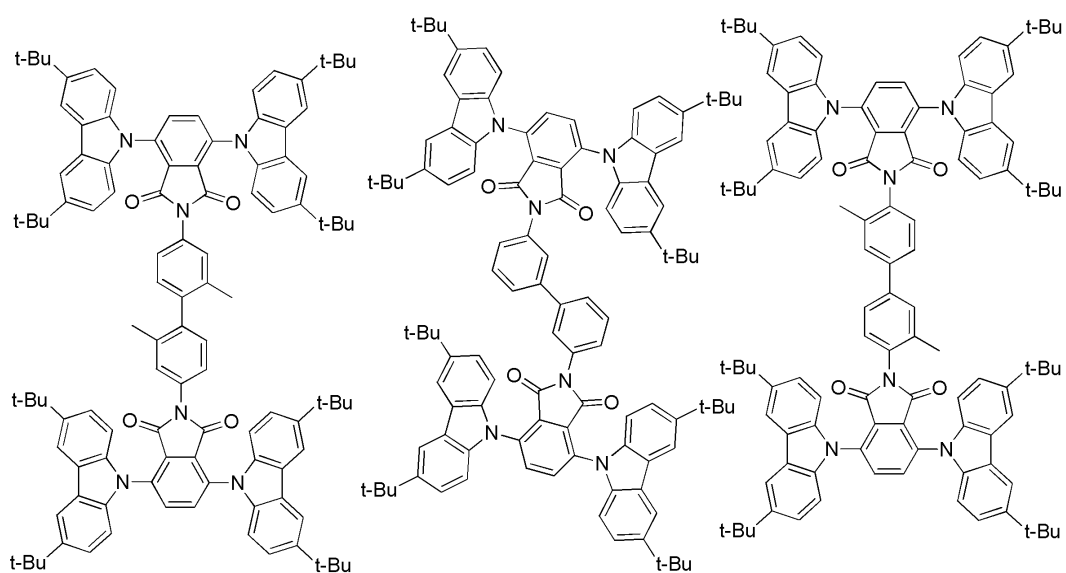


20

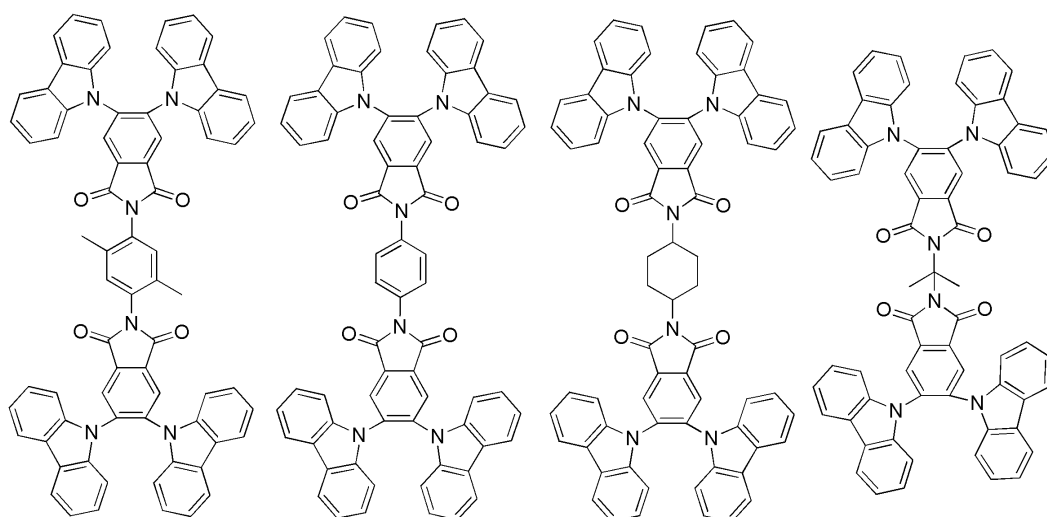


30

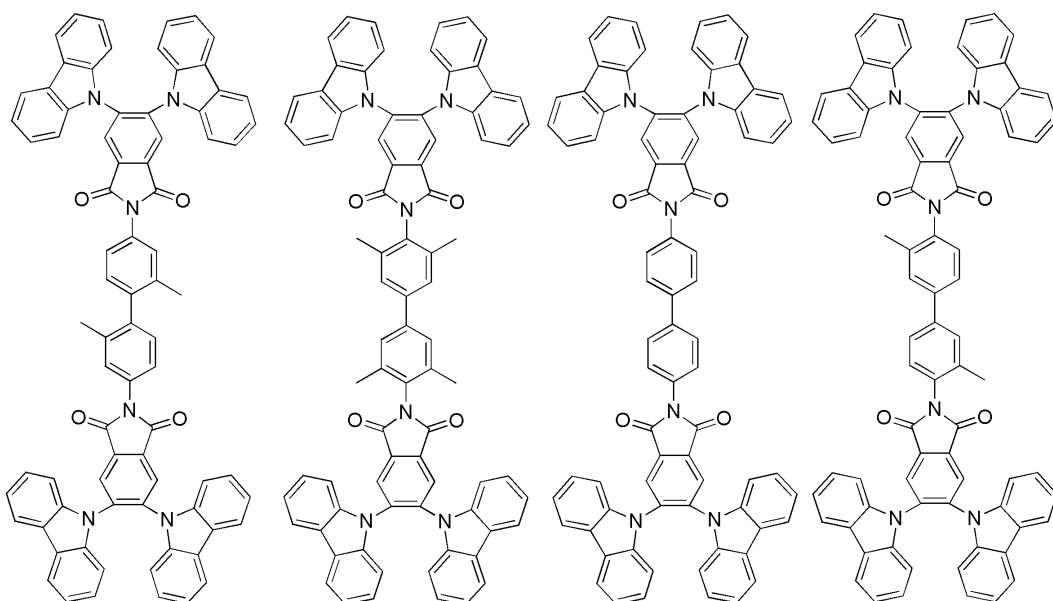
40



10

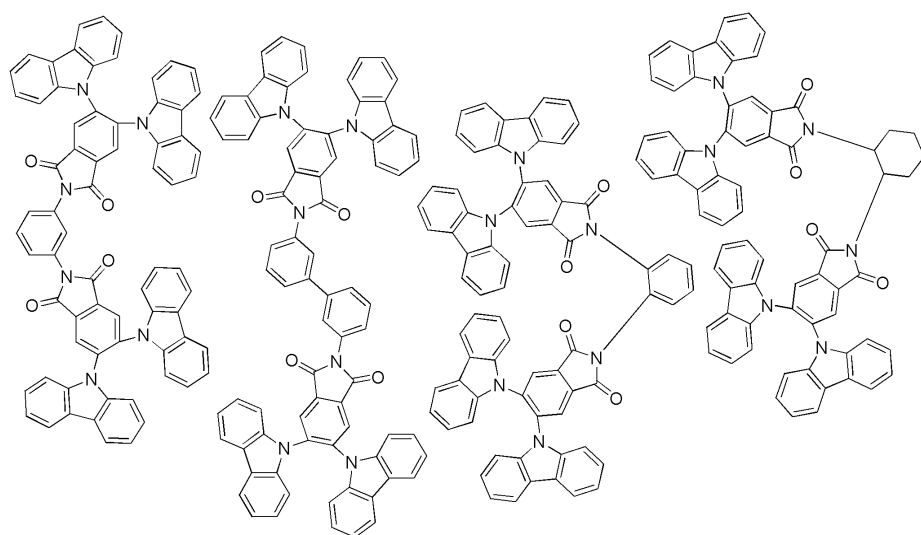


20

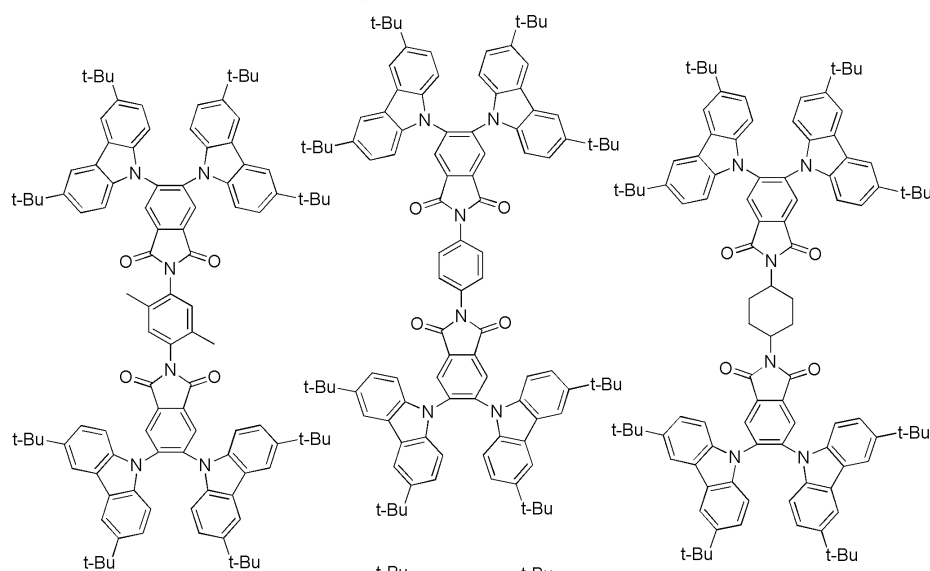


30

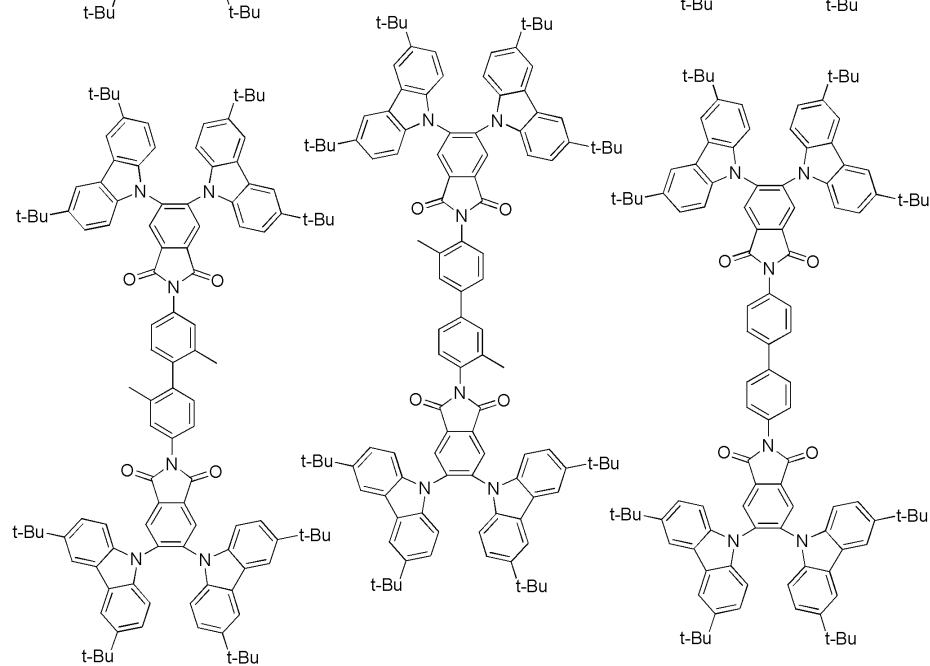
40



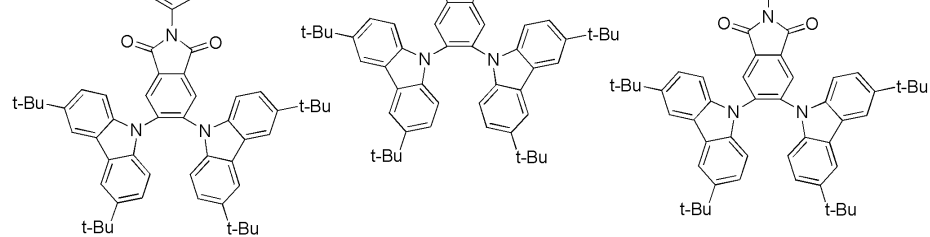
10



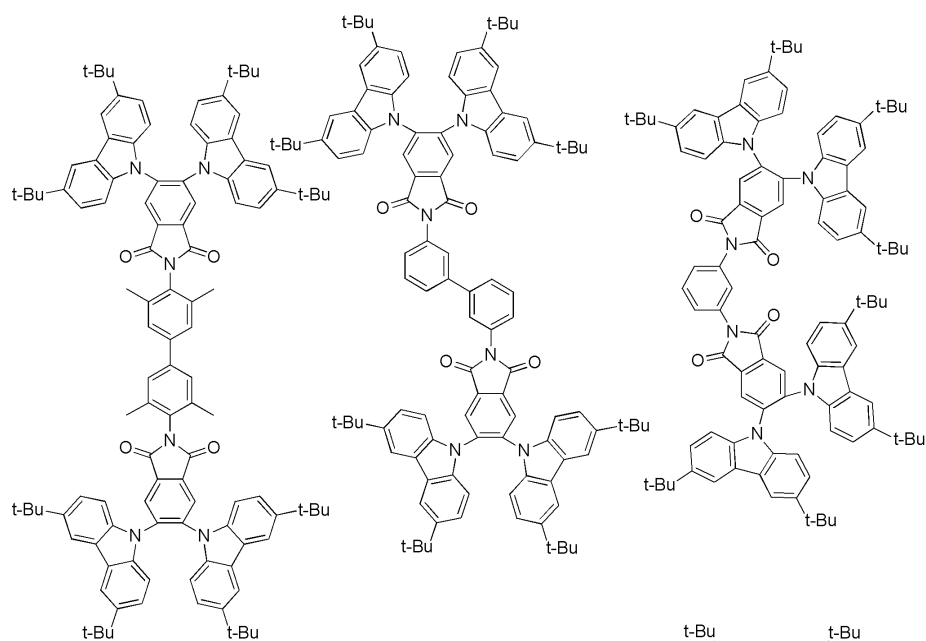
20



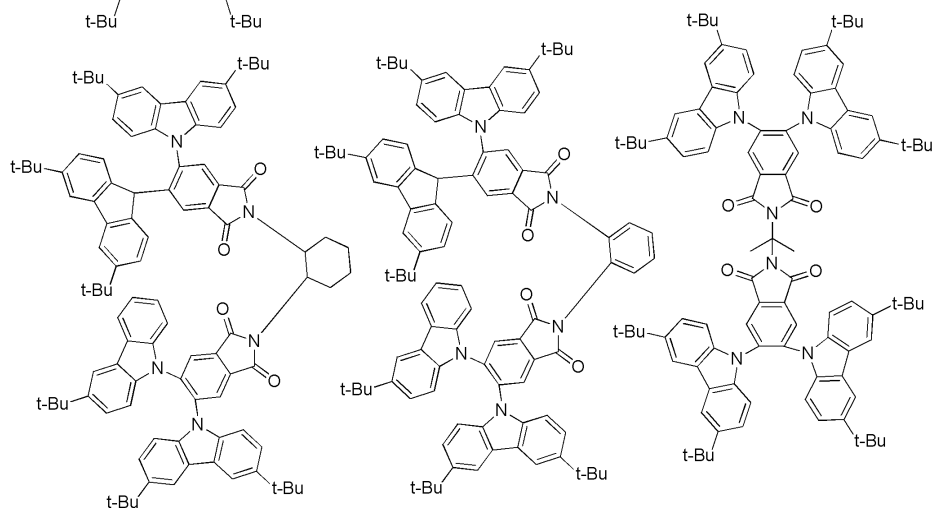
30



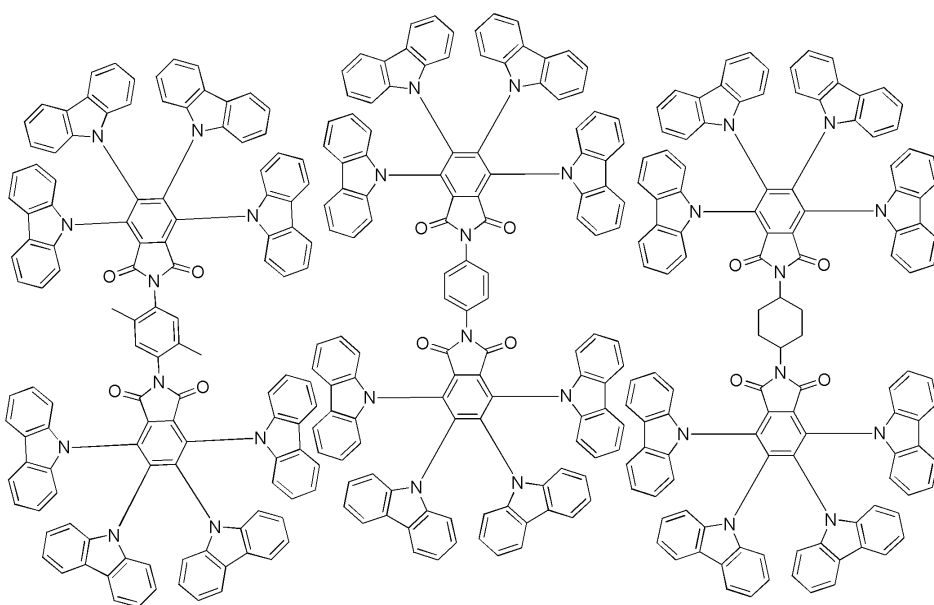
40



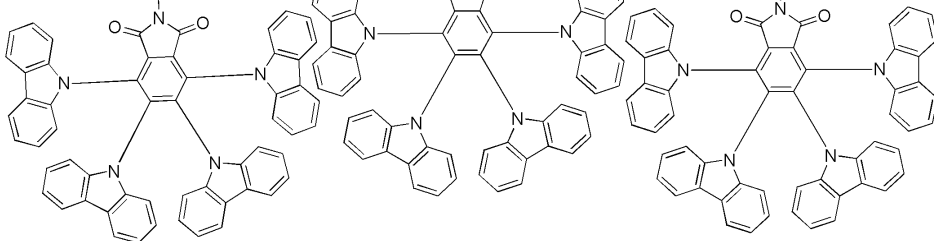
10



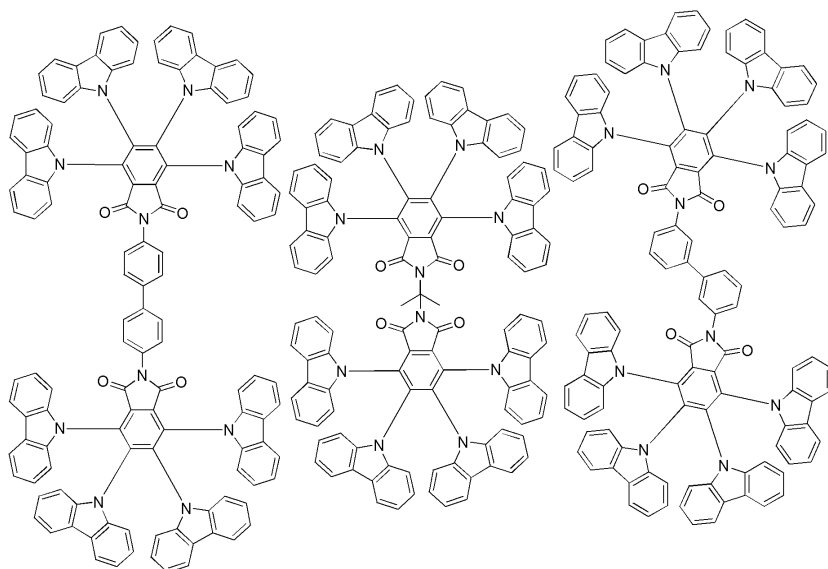
20



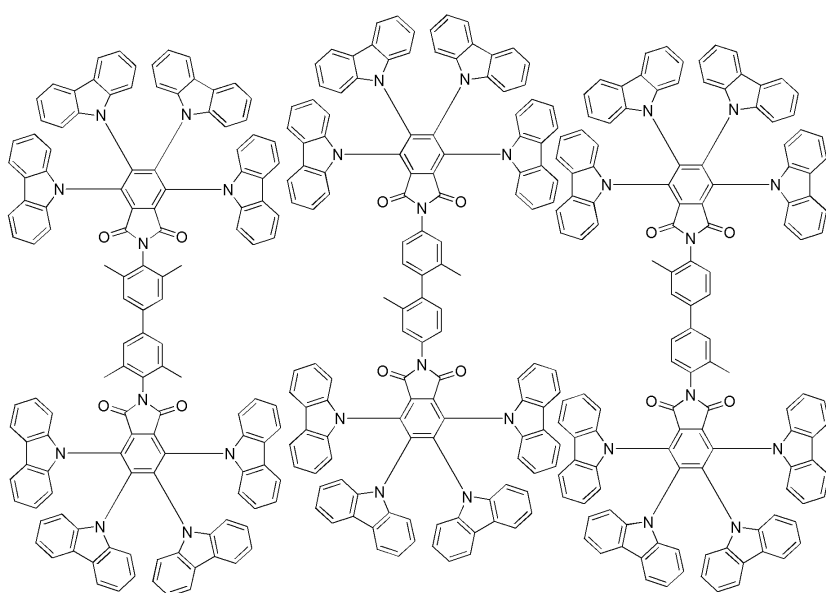
30



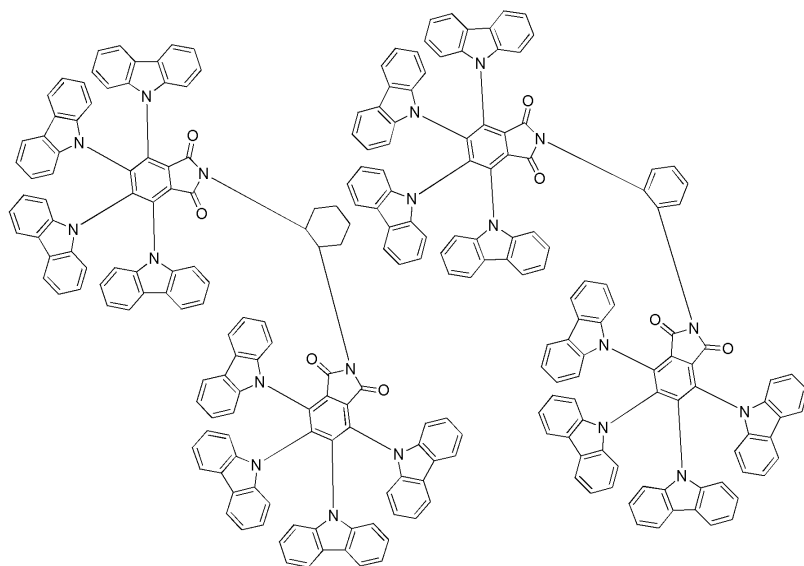
40



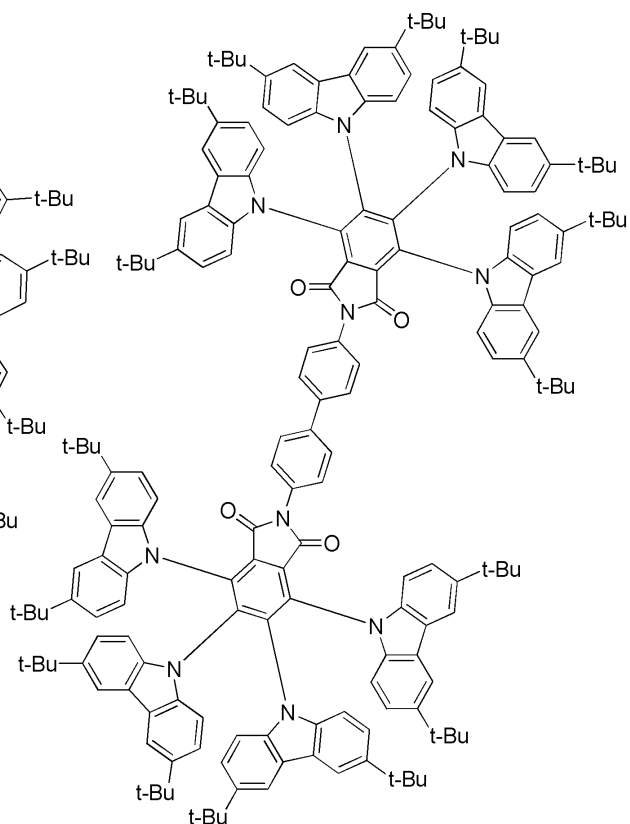
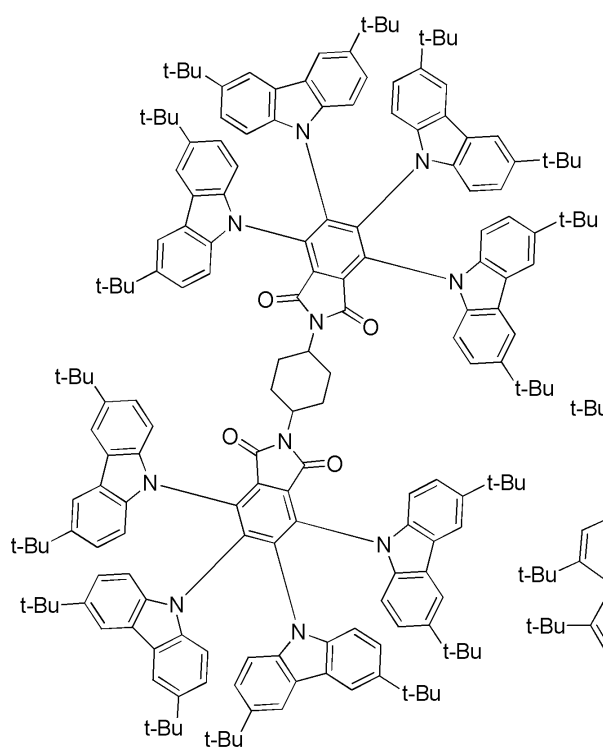
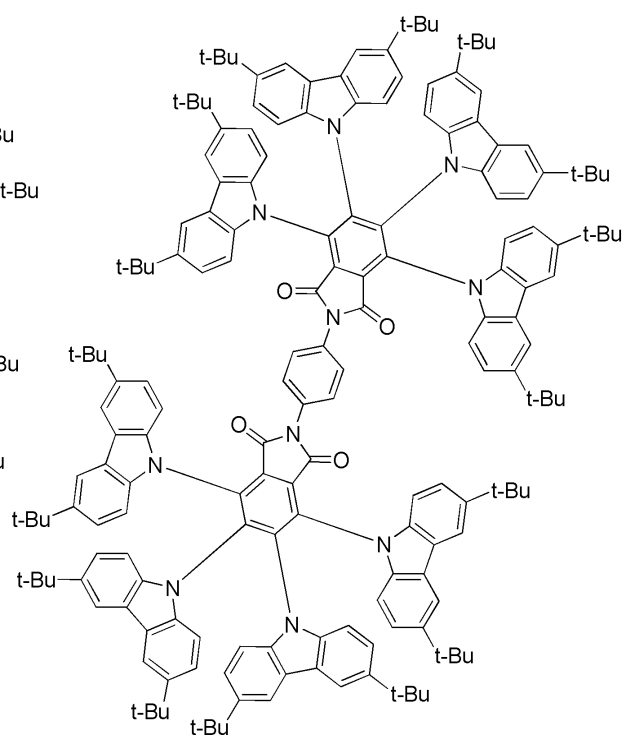
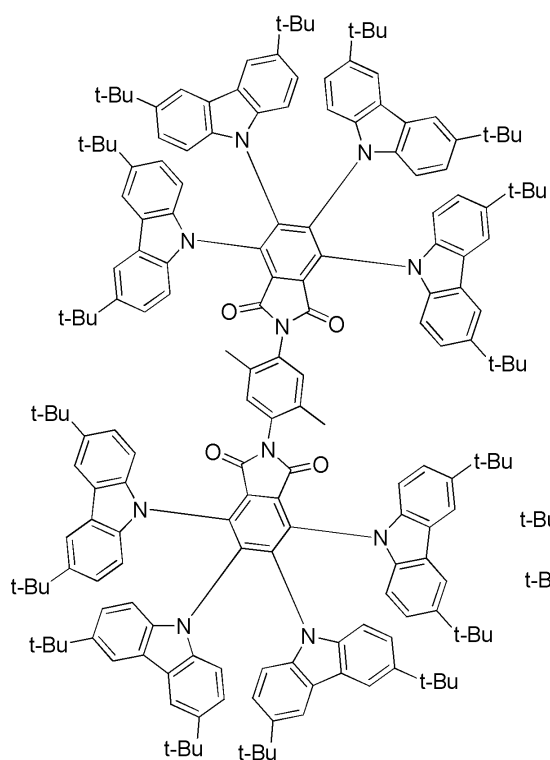
10

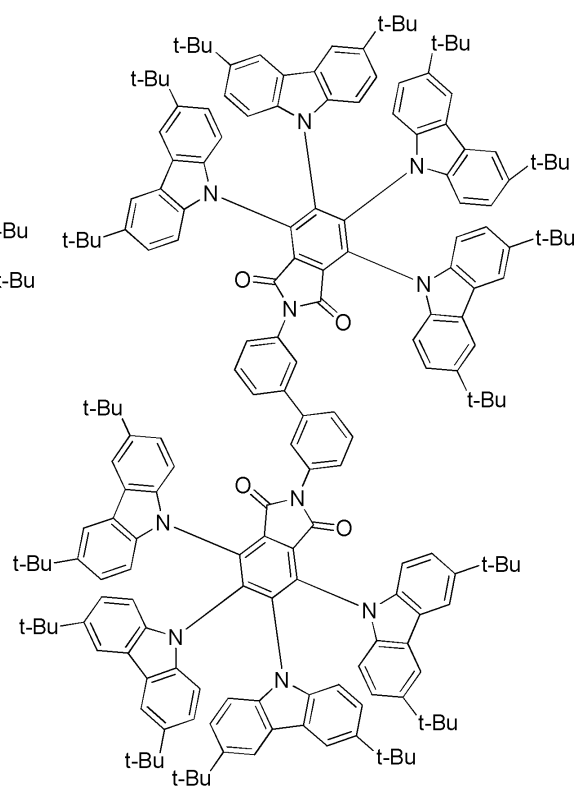
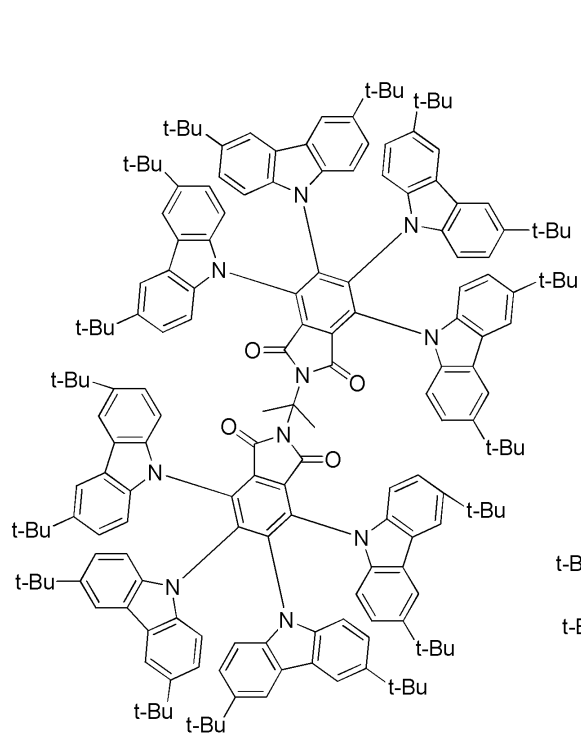


20



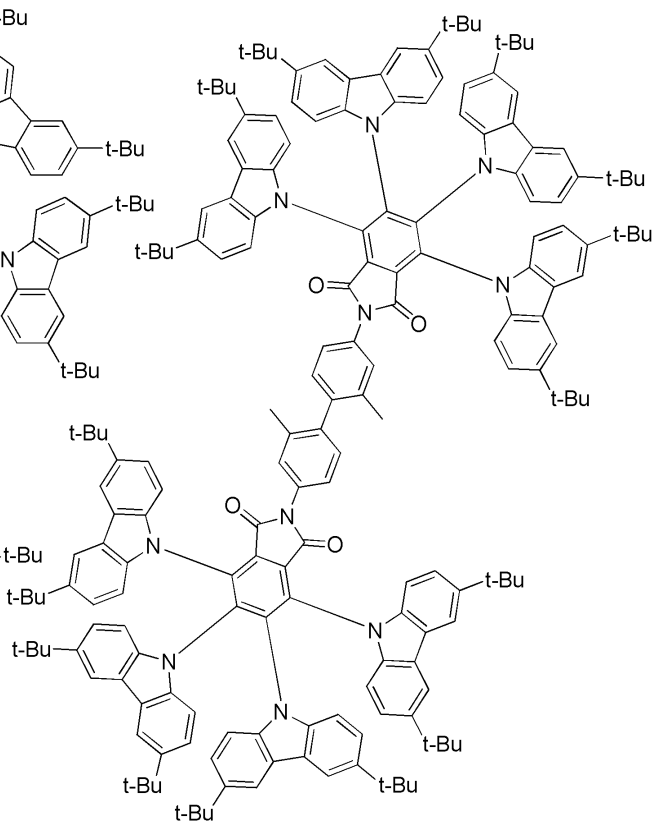
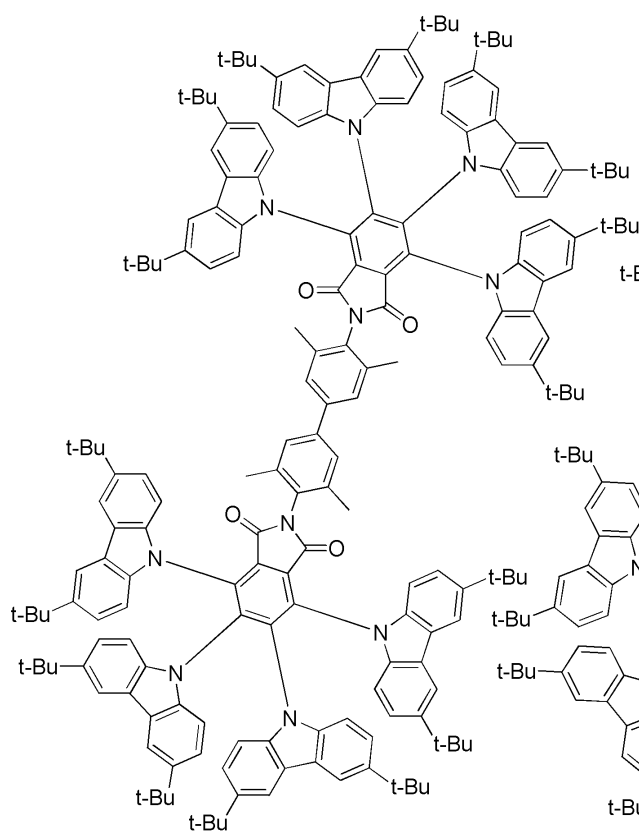
40





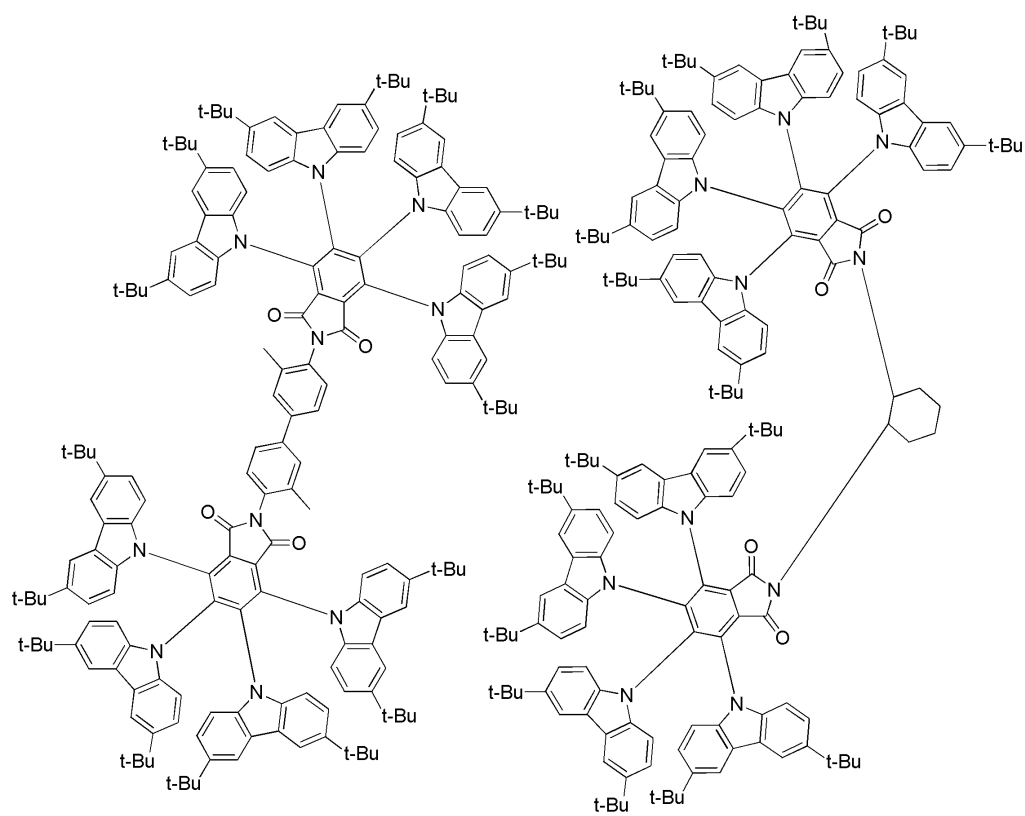
10

20



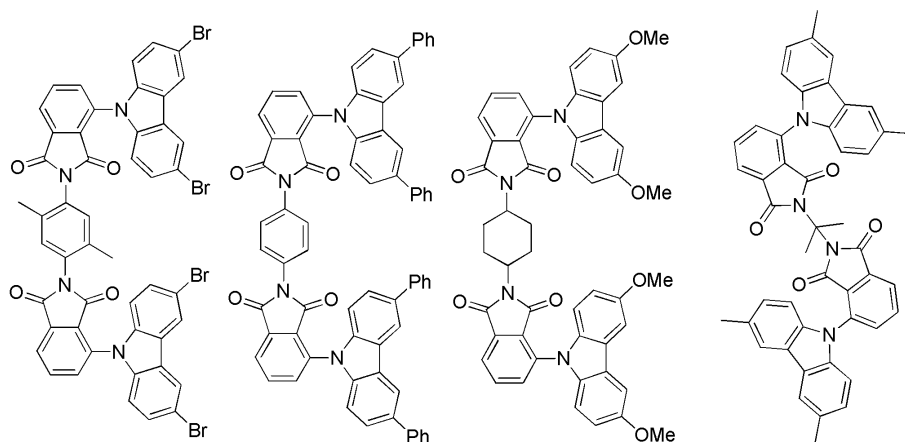
30

40

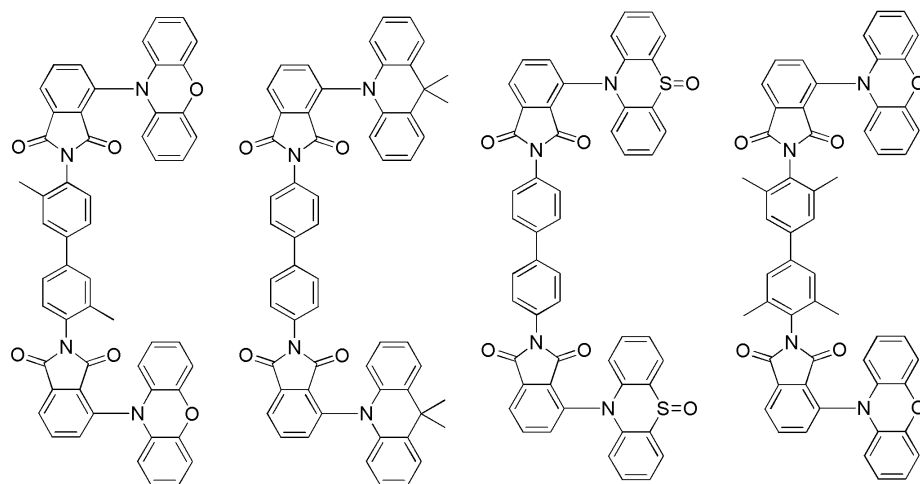


10

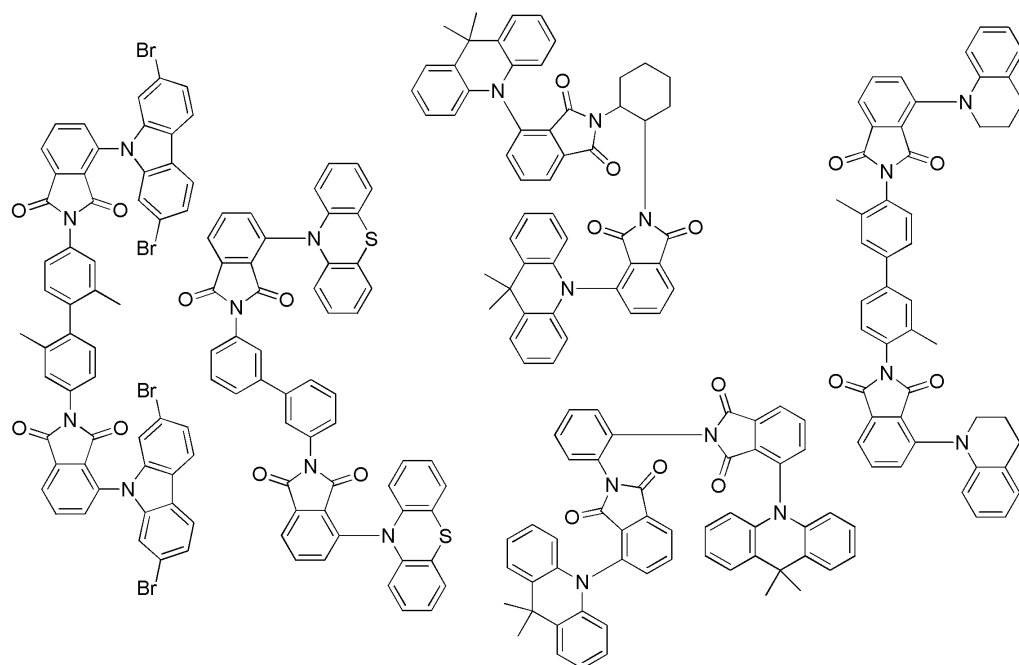
20



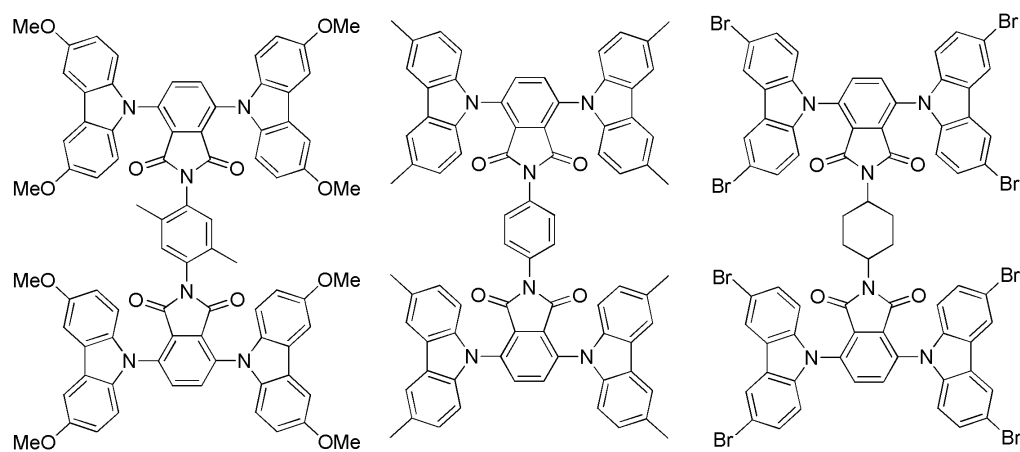
30



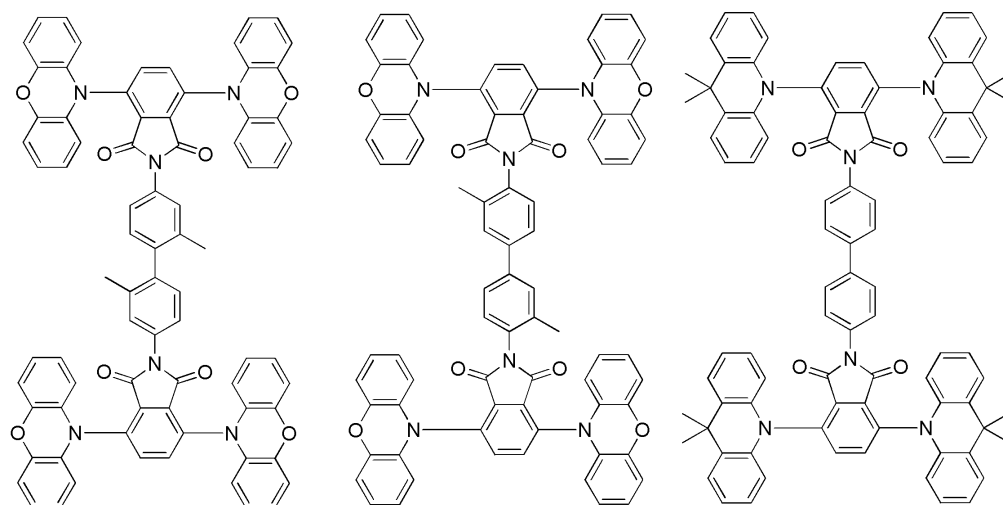
40



10

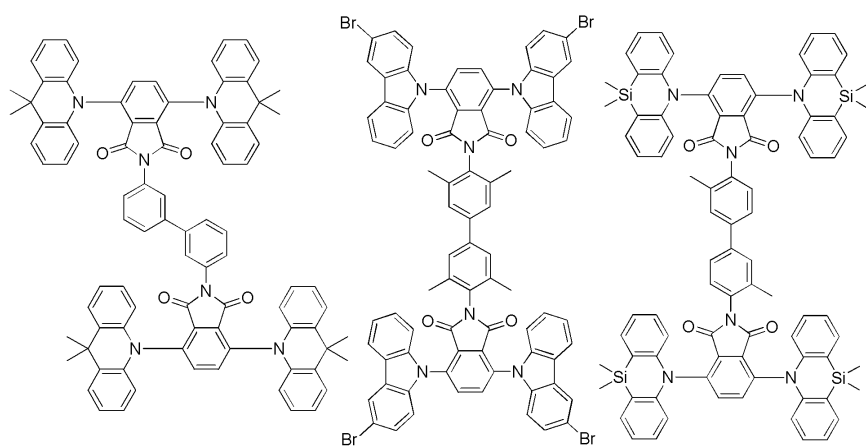


20

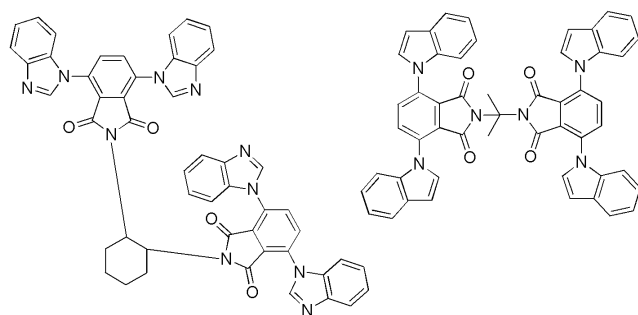


30

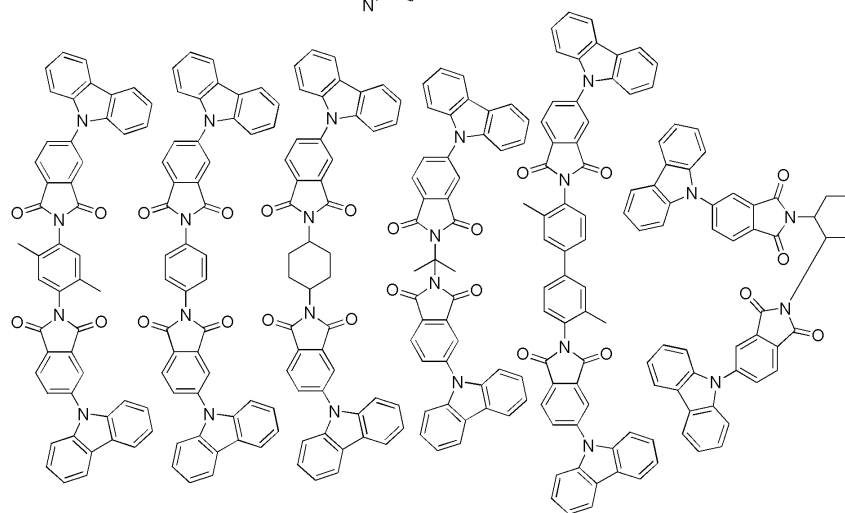
40



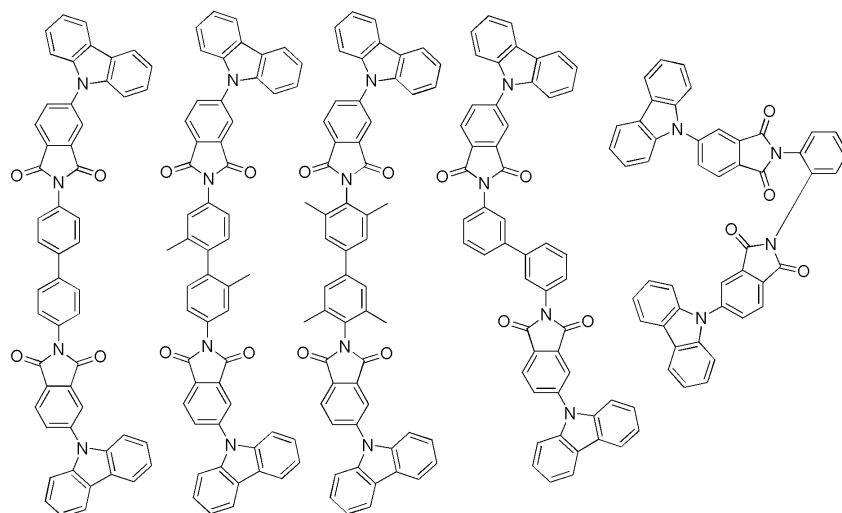
10



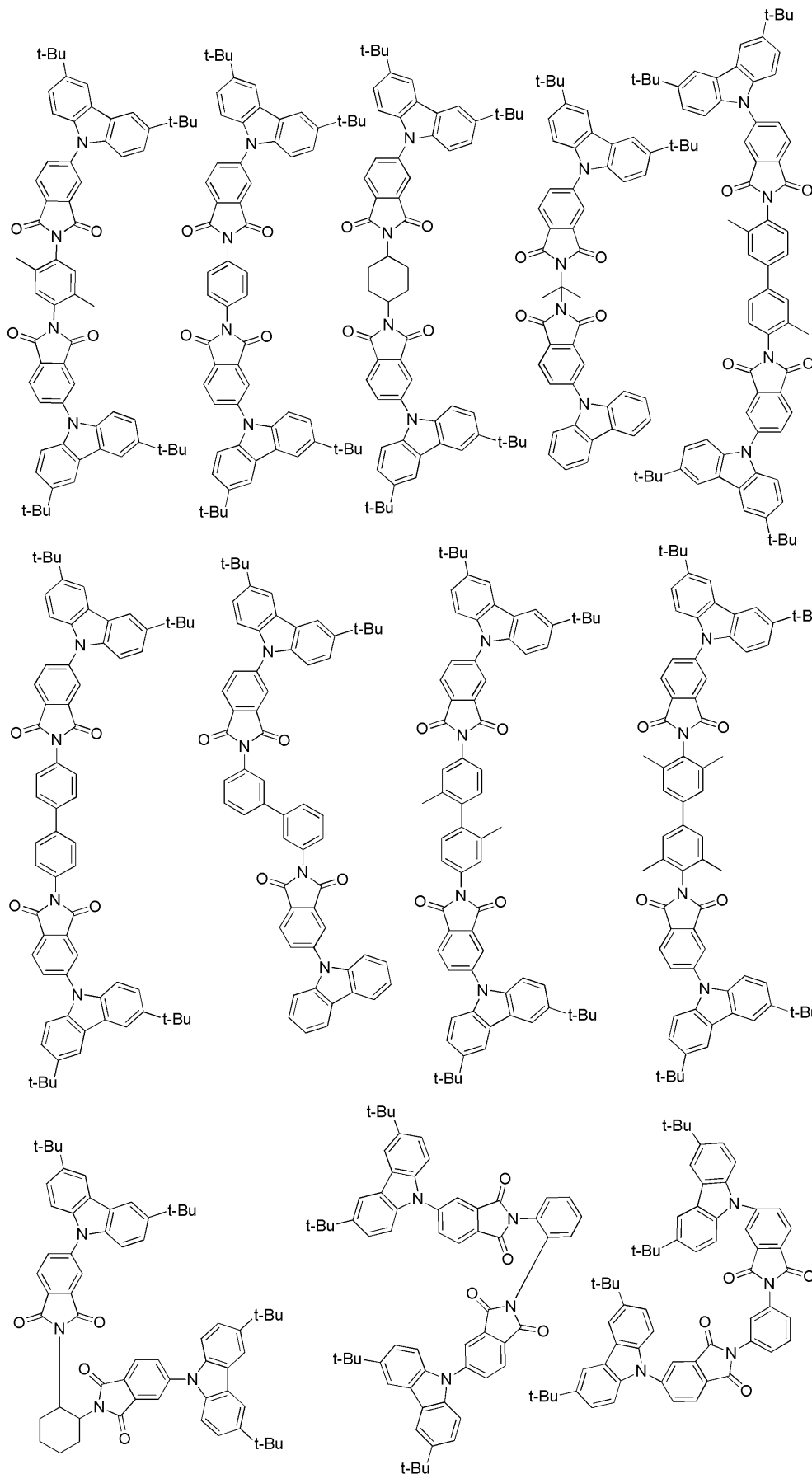
20



30



40



【 0 2 5 1 】

ガス相からの有機エレクトロルミネッセンス装置の製造及び特徴付け

本発明の有機分子 4 及び 8 を、エミッタ基板として用いて、真空昇華法を使って OLED 素子を製造した。

10

20

30

40

50

【 0 2 5 2 】

依然として最適化されていないOLEDであるこれらを、標準的に特徴づけた；このために、エレクトロルミネッセンススペクトル、輝度に応じて、検出されたフォトダイオードからの光により算出された外部量子効率（％で測定）を、エレクトロルミネッセンススペクトル及び電流を記録した。

【 0 2 5 3 】

図39に示した層の意味は次のとおりである：

1．支持材料として、ガラス又は任意の他の適した固体又は可撓性の透過性材料が使用される。

2．アノード＝ITO＝インジウム - スズ - 酸化物

10

3．HIL＝hole injection layer＝正孔注入層。このために、例えば、市場から入手化可能なPEDOT：PSSを使用することができる。典型的な層の厚さ：20～80nm。小さい分子を使用することもできる（例えば、銅 - フタロシアニン（CuPc、例えば、10nm厚））又は金属酸化物、例えばMoO₃、V₂O₅等。HILは、アノードとしても考慮することができる。

4．HTL＝hole transport layer＝正孔輸送層。この層は、以下に説明するように任意であるが、構造物の特性を改善するために使用できる。このために、例えば、[アルファ] - NPD（N，N'ジ（1 - ナフチル） - N，N' - ジフェニル - （1，1 - ビフェニル） - 4，4' - ジアミン）、TAPC（4，4' - シクロヘキシリデン - ビス[N，N - ビス（4 - メチルフェニル）ベンゼンアミン]）、CTTA（トリス（4 - カルバゾイル - 9 - イルフェニル）アミン）、mCP（1，3 - ビス（N - カルバゾイル）ベンゼン）又はトリスPCz（9，9'ジフェニル - 6 - （9 - フェニル - 9H - カルバゾール - 3 - イル） - 9H，9'H - 3，3' - ビカルバゾール）を、例えば、20nmの厚さで使用することができる。

20

5．EBL＝電子ブロック層（任意）は、アノードへの電子輸送を確実に抑制することが期待される。というのも、電荷担体がエミッタ層に保持され、正孔輸送層が電子によって劣化されないからである（厚さ、例えば、30nm）。HTLが、正孔輸送層及び電子ブロック層として良好な特性を有する場合、層4及び層5は、単一の材料であることができる。

6．EML＝本発明のエミッタ材料を含むか、又はそれからなるエミッタ層である。これは、昇華可能な本発明の材料のために、昇華によって適用することができる。その層の厚さは、例えば、10nm～200nmであることができる。緑色又は赤色で発光可能な本発明の発光材料に適しているのは、一般に流通しているマトリックス材料、例えば、CBP（4，4' - ビス - （N - カルバゾイル） - ビフェニル）である。青色で発光する本発明の発光材料には、UGH - マトリックス材料（例えば、M．E．Thompson et al．，Chem．Mater．2004，16，4743（非特許文献4）を参照）又は、他の、いわゆるワイドギャップマトリックス材料を使用することができる。

30

7．HBL＝Hole Blocking Layer＝正孔ブロック層は、電荷担体をエミッタ層中に保持すべきである（任意）。この層は、例えば、10nmの厚さであることができる。材料として適しているのは、例えば、BCP（4，7 - ジフェニル - 2，9 - ジメチル - フェナントロリン＝バソクプロイン）又はTSPO1（ジフェニル - 4 - トリフェニルシリルフェニル - ホスフィンオキシド）である。

40

8．ETL＝Electron Transport Layer＝電子輸送層。例えば、蒸着可能なAlq₃（アルミニウム - トリス（8 - ヒドロキシキノリン）又はTPBi（1，3，5 - トリス（1 - フェニル - 1H - ベンズイミダゾール - 2 - イル）ベンゼン）を使用することができる。厚さは、例えば、25nmである。層7及び層8は、ETLが、電子輸送層及び正孔ブロック層として良好な特性を有する場合に、単一の材料であることができる。

9．カソード。この層は、一般に、蒸着され、そして、例えば、LiF、Ca、Mg、B

50

aである。場合によっては、E T L層及びC s F層を省くことができる。その層の厚さは0.5～30 nmである。

10. 反応性のカソードを保護するために、Al又は他の安定な金属(Cu、Ag...)を蒸着させる。Alはまた、下層と反応することもできる(例えば、LiF/Al)(Xie, Z. T., Zhang, W. H., Ding, B. F., Gao, X. D., You, Y. T., Sun, Z. Y., ... Hou, X. Y. (2009). Interfacial reactions at Al/LiF and LiF/Al. Applied Physics Letters, 94(6), 063302. doi:10.1063/1.3077167(非特許文献5)。典型的な層の厚さは100 nmである。

10

【0254】

素子に印加される電圧は、例えば、2.5 V～15 Vである。

【0255】

蒸着した有機エミッタのプロトタイプ

使用したのは、上述のエミッタ4及び8であった。

【0256】

【表3】

表1：デバイスの結果。TCTAの厚さは、15～35 nm、mCPは15～35 nm、EMLは15～45 nm、TSPO1は15～35 nm、TPBは15～35 nm。

OLED No.	層1	層2	層3	層4	層5	層6	層7	層8	層9
1	ITO	PEDOT:PSS	TCTA	mCP	エミッタ4	TSPO1	TPBi	LiF	Al
2	ITO	PEDOT:PSS	TCTA	mCP	エミッタ4: SiMCP2 20重量%	TSPO1	TPBi	LiF	Al
3	ITO	PEDOT:PSS	TCTA	mCP	エミッタ8	TSPO1	TPBi	LiF	Al
4	ITO	PEDOT:PSS	TCTA	mCP	エミッタ8: SiMCP2 20重量%	TSPO1	TPBi	LiF	Al
5	ITO	V2O5	TCTA	mCP	エミッタ4	TSPO1	TPBi	LiF	Al

20

30

【0257】

【表4】

表2：表1の続き

OLED No.	波長 (nm)	(CIE _x , CIE _y)	輝度 (cd/m ²)	能力効率 (lm/W)	電流効率 (cd/A)	EQE (%)
1	515	(0.32, 0.51)	8570	7.9	25.2	8.5
2	498	(0.26, 0.45)	3200	4.7	12	4.3
3	530	(0.35, 0.52)	8900	3.8	10.7	3.4
4	510/515	(0.30, 0.49)	3440	5.0	14.2	4.8
5	507	(0.28, 0.48)	3750	8.2	26.3	9.3

40

【0258】

【表 5】

表 3：デバイスの結果

OLED No.	層 1	層 2	層 3	層 4	層 5	層 6	層 7	層 8
6	ITO	HAT-CN	Tris-Pcz	エミッタ 4 : mCBP	T2T	BpyTP2	Liq	Al
7	ITO	HAT-CN	Tris-Pcz	4 : mCBP	T2T	BpyTP2	Lif	Al
8	ITO	HAT-CN	Tris-Pcz	エミッタ 8 : mCBP	T2T	BpyTP2	Liq	Al

【0259】

10

【表 6】

表 4：表 3 の続き

OLED No.	波長 (nm)	(CIE _x , CIE _y)	輝度 (cd/m ²)	能力効率 (lm/W)	電流効率 (cd/A)	EQE (%)
6	512	(0.29, 0.49)	24066	10.8	29.7	9.9
7	502	(0.26, 0.47)	21951	21.7	28.8	10
8	524	(0.33, 0.52)	23962	11.6	22.5	7.5

【0260】

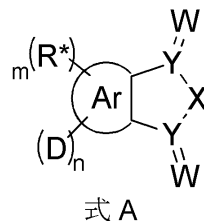
上記に示した構造物のエレクトロルミネッセンススペクトルを図 35 及び図 36 に示す。

20

本発明の特徴は次の通りである。

1. 式 A の構造を有する有機分子。

【化 53】



(式中、

30

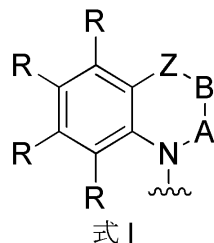
Y = 互いに独立して、C、PR、S、S(=O) からなる群から選択される；

W = 互いに独立して、C(CN)₂、NR、O、S からなる群から選択される；

X = CR²、C=C(CN)₂、NR、O、S からなる群から選択される；

Ar = 5 ~ 40 個の芳香族の環原子を有する、置換されたアリール基又はヘテロアリール基であり、該基は、m 個の同一又は異なる残基 R*、及び、n 個の同一又は異なる電子供与特性を有するドナー基 D で置換されており、その際、m + n は、置換可能な環原子の数に等しく、そしてその際、D は、次の式 I の構造を有する。

【化 54】



40

(式中、

A 及び B = 互いに独立して、CRR'、CR、NR、N からなる群から選択され、その際、A と B との間には、単結合又は二重結合が存在しており、そして、B と Z との間には単結合又は二重結合が存在している；

Z = 直接結合又は二価の有機架橋であり、これは、置換された又は置換されていない C 1

50

- C₉ - アルキレン基、C₂ - C₈ - アルケニレン基、C₂ - C₈ - アルキニレン基又はアリーレン基又はこれの組み合わせ、- CRR'、- C = CRR'、- C = NR、- NR、- O -、- SiRR'、- S -、- S(O) -、- S(O)₂ -、Oで中断された、置換された又は置換されていないC₁ - C₉ - アルキレン基、C₂ - C₈ - アルケニレン基、C₂ - C₈ - アルキニレン基又はアリーレン基、フェニル単位又は置換されたフェニル単位であり、その際、波線は、それを介してDがArに結合する位置を示し；)

その際、R^{*}、R及びR'は、それぞれ、いずれの場合においても、同一又は異なって、H、重水素、アジド(N₃⁻)、F、Cl、Br、I、N(R²)₂、CN、CF₃、NO₂、OH、COOH、COOR²、CO(NR²)₂、Si(R²)₃、B(OR²)₂、C(=O)R²、P(=O)(R²)₂、S(=O)R²、S(=O)₂R²、OSO₂R²、1~40C原子を有する線状のアルキル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基、又は、2~40C原子を有する線状のアルケニル基又はアルキニル基、又は、3~40C原子を有する分岐状又は環状のアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基であり、それぞれ一つ又は二つ以上の残基R²で置換されることができ、その際、一つ又は二つ以上の隣接していないCH₂-基は、R²C = CR²、C-C、Si(R²)₂、Ge(R²)₂、Sn(R²)₂、C=O、C=S、C=Se、C=NR²、P(=O)(R²)、SO、SO₂、NR²、O、S又はCONR²で置き換えることができ、かつ、その際、一つ又は二つ以上のH原子は、重水素、F、Cl、Br、I、CN、CF₃又はNO₂で置き換えることができ、又は、それぞれ一つ又は二つ以上の残基R²で置換されることができ、5~60個の芳香族の環原子を有する芳香族又はヘテロ芳香族の環系、又は、一つ又は二つ以上の残基R²で置換されることができ、5~60個の芳香族の環原子を有するアリールオキシ基又はヘテロアリールオキシ基、又は一つ又は二つ以上の残基R²で置換されることができ、10~40個の芳香族の環原子を有するジアリールアミノ基、ジヘテロアリールアミノ基又はアリールヘテロアリールアミノ基、又はこれらの系の組み合わせ、又は、酸触媒架橋法、熱架橋法又はUV架橋法により架橋できる、架橋可能な単位であり、その際、これらの二つ又は三つ以上の置換基R及びR'はまた、互いに単環式、多環式、脂肪族、芳香族及び/又はベンゾ縮合環系を形成することもでき、

R²は、いずれの場合においても、同一又は異なって、H、重水素、F、Cl、Br、I、N(R³)₂、CN、CF₃、NO₂、OH、COOH、COOR³、CO(NR³)₂、Si(R³)₃、B(OR³)₂、C(=O)R³、P(=O)(R³)₂、S(=O)R³、S(=O)₂R³、OSO₂R³、1~40C原子を有する線状のアルキル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基、又は、2~40C原子を有する線状のアルケニル基又はアルキニル基、又は3~40C原子を有する分岐状又は環状のアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基であり、それぞれ、一つ又は二つ以上の残基R³で置換されることができ、その際、一つ又は二つ以上の隣接していないCH₂-基は、R³C = CR³、C-C、Si(R³)₂、Ge(R³)₂、Sn(R³)₂、C=O、C=S、C=Se、C=NR³、P(=O)(R³)、SO、SO₂、NR³、O、S又はCONR³で置換されることができ、かつ、その際、一つ又は二つ以上のH原子は、重水素、F、Cl、Br、I、CN、CF₃又はNO₂で置換されることができ、又は、一つ又は二つ以上の残基R³で置換されることができ、5~60個の芳香族の環原子を有する芳香族又はヘテロ芳香族の環系、又は一つ又は二つ以上の残基R³で置換されることができ、5~60個の芳香族の環原子を有するアリールオキシ基又はヘテロアリールオキシ基、又は、10~40個の芳香族の環原子を有する、一つ又は二つ以上の残基R³で置換されることができ、ジアリールアミノ基、ジヘテロアリールアミノ基又はアリールヘテロアリールアミノ基、又は、これらの系の組み合わせであり；その際、二つ又は三つ以上のこれらの置換基R²は、互いに、単環又は多環の芳香族及び/又はベンゾ縮合環系を形成することもでき；

R³は、いずれの場合においても、同一又は異なって、H、重水素、F、CF₃、又は、1~20C原子を有する、脂肪族炭化水素残基、芳香族炭化水素残基及び/又はヘテロ芳

10

20

30

40

50

香族炭化水素残基であり、その際、一つ又は二つ以上のH原子は、F又は CF_3 で置き換えることができ；その際、二つ又は三つ以上の置換基 R^3 はまた、互いに、単環又は多環の脂肪族の環系を形成することもできる。）

2. 前記有機分子が、

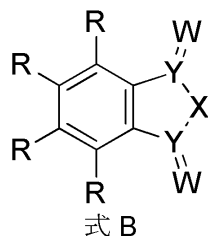
- 最低励起一重項 (S_1) 状態と、その下の三重項 (T_1) 状態との間の、 3000 cm^{-1} 未満のDE ($S_1 - T_1$) 値；及び/又は

- 最大で100マイクロ秒の発光寿命、

を有する、上記の特徴1に記載の有機分子。

3. 次の式Bの構造を有する、上記の特徴1又は2に記載の有機分子。

【化55】



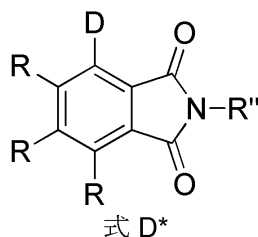
(式中、アリール環における少なくとも一つのRはドナーDを意味し、及びその他は、上記の特徴1で与えられた定義が有効である。)

4. 式中、 $Y = \text{C}$ 、 $W = \text{O}$ 及び $X = \text{NR}'$ であり、かつ、その際、 R' が、上記の特徴1におけるRと同じ意味を有するか又は有機架橋であり、その際、式Dの第二の同一又は異なる単位は有機架橋を介して結合され、そしてそれにより、二量体の系が形成される、上記の特徴1又は2に記載の有機分子。

5. 式中、 $Y = \text{C}$ 、 $W = \text{O}$ 及び $X = \text{NR}'$ であり、かつ、その際、 R' が、上記の特徴1におけるRと同じ意味を有するか又は有機架橋であり、その際、式Dの第二の同一又は異なる式Dの単位が架橋を介して結合され、そしてそれにより、二量体の系が形成される、上記の特徴3に記載の有機分子。

6. 次の式D*の構造を有する、上記の特徴4に記載の有機分子。

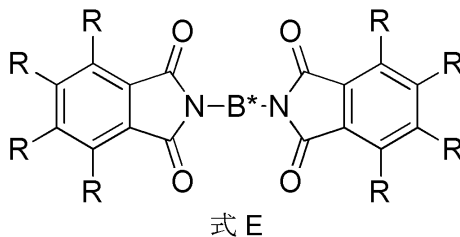
【化56】



(式中、Rは上記の特徴1と同じ定義であり、かつ、 R' は上記の特徴4と同じ定義であり、その際、Rはドナーでなく、特に、Hに等しい。)

7. 次の式Eの構造を有する、上記の特徴5又は6に記載の有機分子。

【化57】



(式中、

アリール環における少なくとも一つのRがドナーDを意味し；

$B^* =$ 有機架橋であり、これは、置換された又は置換されていないアルキレン基、アルケニレン基、アルキニレン基又はアリーレン基又はこれらの組み合わせであるか、又は、
 $-\text{O}-$ 、 $-\text{NR}-$ 、 $-\text{C}=\text{CR}_2$ 、 $-\text{C}=\text{NR}$ 、 $-\text{SiR}_2-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{S}(\text{O})-$ 、 $-\text{S}(\text{O})_2-$ 、 O で中断されているアルキル基(分岐状又は環状の)、ヘテロアルキル単

10

20

30

40

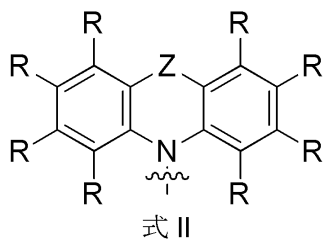
50

位、アリール単位、ヘテロアリール単位、アルケニル単位、フェニル単位及び置換されたフェニル単位であり；及びその他は、上記の特徴 1 で与えられた定義が有効である。）

8. D が、置換された及び置換されていないカルバゾール、置換された及び置換されていないインドール、置換された及び置換されていないインドリン、置換された及び置換されていないジヒドロアクリジン、置換された及び置換されていないベンズイミダゾール、置換された及び置換されていない 2, 3, 4, 9 - テトラヒドロカルバゾール、置換された及び置換されていない 1, 2, 3, 4 - テトラヒドロキノリン、置換された及び置換されていないフェノチアジン、置換された及び置換されていないフェノキサジン、置換された及び置換されていないジヒドロフェナジン、置換された及び置換されていないスピロ化合物からなる群から選択される、上記の特徴 1 ~ 7 のいずれか一つに記載の有機分子。

9. 式 I の電子供与特性を有するドナー基が、次の式 I I の構造を有する、上記の特徴 1 ~ 8 のいずれか一つに記載の有機分子。

【化 5 8】



(式中、

Z = 直接結合又は二価の有機架橋であり、これは、置換された又は置換されていない C 1 - C 9 - アルキレン基、C 2 - C 8 - アルケニレン基、C 2 - C 8 - アルキニレン基又はアリーレン基、又はこれらの組み合わせ、- C R R'、- C = C R R'、- C = N R、- N R -、- O -、- Si R R' -、- S -、- S (O) -、- S (O)₂ -、O で中断された置換された又は置換されていない C 1 - C 9 - アルキレン基、C 2 - C 8 - アルケニレン基、C 2 - C 8 - アルキニレン基又はアリーレン基、フェニル単位又は置換されたフェニル単位であり、

その際、波線は、D の結合位置を示し；

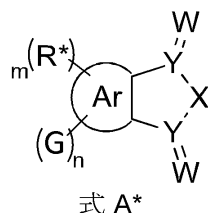
それぞれの R 及び R' は、いずれの場合においても、同一又は異なって、H、重水素、F、Cl、Br、I、N (R²)₂、CN、CF₃、NO₂、OH、COOH、COOR²、CO (NR²)₂、Si (R²)₃、B (OR²)₂、C (=O) R²、P (=O) (R²)₂、S (=O) R²、S (=O)₂ R²、OSO₂ R²、1 ~ 40 C 原子を有する線状のアルキル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基、又は 2 ~ 40 C 原子を有する線状のアルケニル基又はアルキニル基、又は、3 ~ 40 C 原子を有する分岐状又は環状のアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基であり、それぞれ、一つ又は二つ以上の残基 R² で置換されることができ、その際、一つ又は二つ以上の隣接しない CH₂ - 基は、R² C = C R²、C - C、Si (R²)₂、Ge (R²)₂、Sn (R²)₂、C = O、C = S、C = Se、C = N R²、P (=O) (R²)、SO、SO₂、N R²、O、S 又は CON R² で置き換えることができ、かつ、その際、一つ又は二つ以上の H 原子が、重水素、F、Cl、Br、I、CN、CF₃ 又は NO₂ で置き換えることができ、又は、それぞれが、一つ又は二つ以上の残基 R² で置換されることができ、5 ~ 60 個の芳香族の環原子を有する芳香族又はヘテロ芳香族の環系、又は、一つ又は二つ以上の残基 R² で置換されることができ、5 ~ 60 個の芳香族の環原子を有するアリールオキシ基又はヘテロアリールオキシ基、又は、一つ又は二つ以上の残基 R² で置換されることができ、10 ~ 40 個の芳香族の環原子を有するジアリールアミノ基、ジヘテロアリールアミノ基又はアリールヘテロアリールアミノ基、又は、これらの系の組み合わせ、又は、酸触媒架橋法、熱架橋法又は UV 架橋法により架橋できる、架橋可能な単位であり、その際、二つ又は三つ以上のこれらの置換基 R 及び R' はまた、互いに単環式、多環式、脂肪族、芳香族及び/又はベンゾ縮合環系を形成することもでき、R² は、いずれの場合においても、同一又は異なって、H、重水素、F、Cl、Br、I

、 $N(R^3)_2$ 、 CN 、 CF_3 、 NO_2 、 OH 、 $COOH$ 、 $COOR^3$ 、 $CO(NR^3)_2$ 、 $Si(R^3)_3$ 、 $B(OR^3)_2$ 、 $C(=O)R^3$ 、 $P(=O)(R^3)_2$ 、 $S(=O)R^3$ 、 $S(=O)_2R^3$ 、 OSO_2R^3 、1～40C原子を有する線状のアルキル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基、又は、2～40C原子を有する線状のアルケニル基又はアルキニル基、又は3～40C原子を有する分岐状又は環状のアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アルコキシ基又はチオアルコキシ基であり、それぞれ、一つ又は二つ以上の残基 R^3 で置換されることができ、その際、一つ又は二つ以上の隣接しない CH_2 -基は、 $R^3C=CR^3$ 、 $C-C$ 、 $Si(R^3)_2$ 、 $Ge(R^3)_2$ 、 $Sn(R^3)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^3$ 、 $P(=O)(R^3)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^3 、 O 、 S 又は $CONR^3$ で置き換えることができ、かつ、その際、一つ又は二つ以上のH原子が、重水素、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 、 CF_3 又は NO_2 で置き換えることができ、又は、それぞれが、一つ又は二つ以上の残基 R^3 で置換されることができ、5～60個の芳香族の環原子を有する芳香族又はヘテロ芳香族の環系、又は、一つ又は二つ以上の残基 R^3 で置換されることができ、5～60個の芳香族の環原子を有するアリールオキシ基又はヘテロアリールオキシ基、又は、一つ又は二つ以上の残基 R^3 で置換されることができ、10～40個の芳香族の環原子を有するジアリールアミノ基、ジヘテロアリールアミノ基又はアリールヘテロアリールアミノ基、又は、これらの系の組み合わせであり；その際、これらの二つ又は三つ以上の置換基 R^2 は、互いに、単環又は多環の芳香族及び/又はベンゾ縮合環系を形成することもでき；

R^3 は、いずれの場合においても、同一又は異なって、 H 、重水素、 F 、 CF_3 、又は、1～20C原子を有する、脂肪族炭化水素残基、芳香族炭化水素残基及び/又はヘテロ芳香族炭化水素残基であり、その際、一つ又は二つ以上のH原子は、 F 又は CF_3 で置き換えることができ；その際、二つ又は三つ以上の置換基 R^3 は、互いに、単環又は多環の脂肪族の環系を形成することもできる。）

10. Zが直接結合に等しい、上記の特徴9に記載の有機分子。

11. 次の式 A^* の構造を有する化合物を有するN求核の求核芳香族置換基(S_NAr)を特徴とする、上記の特徴1～10のいずれか一つに記載の有機分子を製造する方法。
【化59】



(式中、 Ar = 5～40個の芳香族の環原子を有する置換されたアリール基又はヘテロアリール基であり、これは、 m 個の同一又は異なる残基 R^* 及び n 個の同一又は異なる基 G で置換され、

その際、 $m+n$ は、置換可能な環原子の数と同じであり；

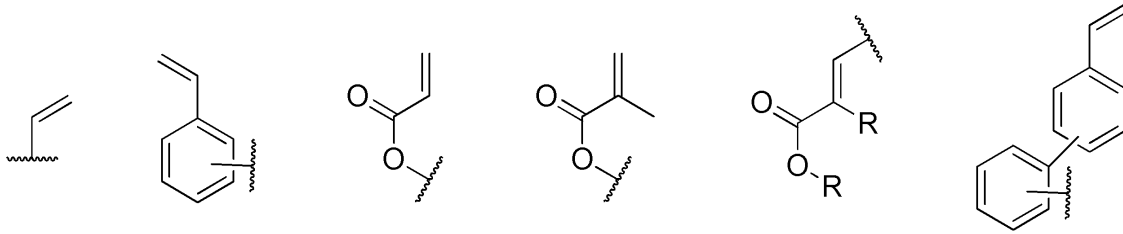
その際、 $G = Cl$ 又は F であり、及び

その他は上記の特徴1で与えられた定義が有効である。)

12. 前記式 A^* の化合物が、塩素又は、特に、フッ素で置換されたフタルイミドである、上記の特徴11に記載の方法。

13. 前記 Ar 基及び/又は電子供与特性を有するドナー基及び/又は式C及び/又はDの残基 R' のうちの少なくとも一つを、酸触媒法、塩基触媒法、熱又は光開始剤の存在下又は不存在下でのUV架橋方法によって、又はマイクロ波照射によって架橋可能な、クリック反応のためのオキセタン、アジデン及びアルキネン、並びに次のアルケン誘導体からなる群から選択される、少なくとも一つの架橋可能な単位で置換する工程をさらに有する、上記の特徴11又は12に記載の方法。

【化 60】



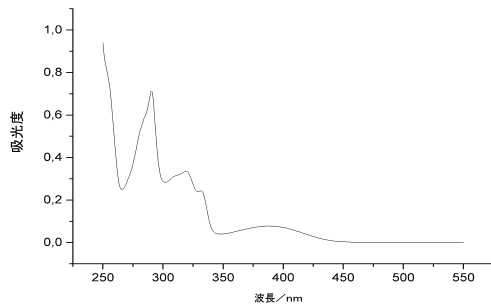
14. 上記の特徴 1 ~ 10 のいずれか一つに記載の有機分子の、真空蒸着法によって、又は溶液から製造される光電子デバイスにおけるエミッタ又はアブソーバーとしての使用。

15. 上記の特徴 1 ~ 10 のいずれか一つに記載の有機分子を有する光電子デバイス。

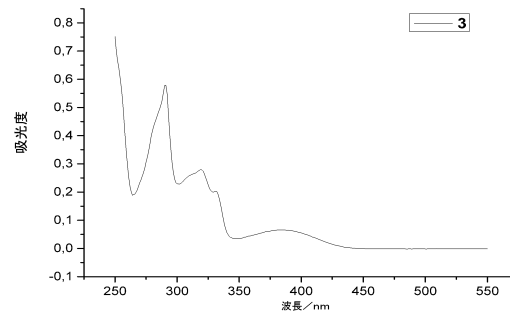
16. 上記の特徴 1 ~ 10 のいずれか一つに記載の有機分子が使用される、光電子デバイスの製造方法。

10

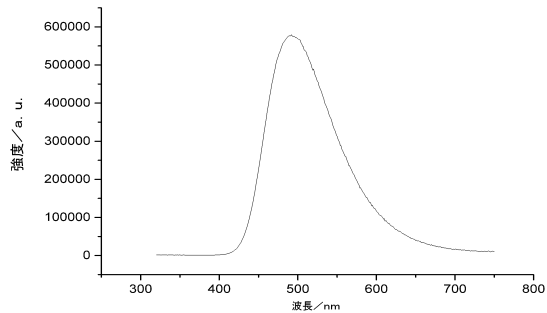
【図 1】



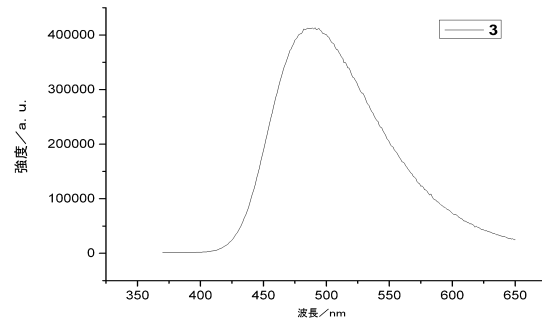
【図 3】



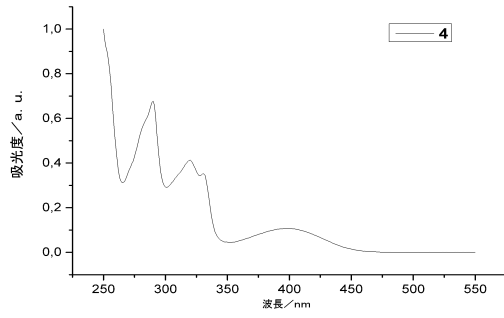
【図 2】



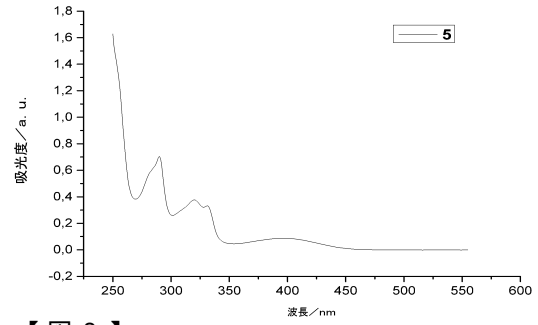
【図 4】



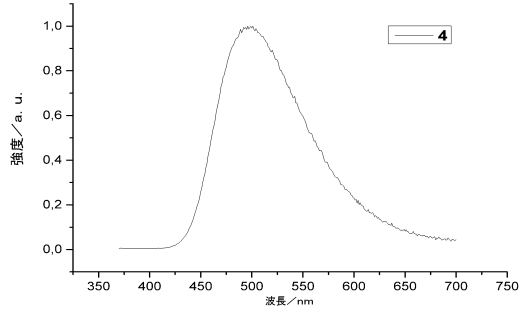
【図 5】



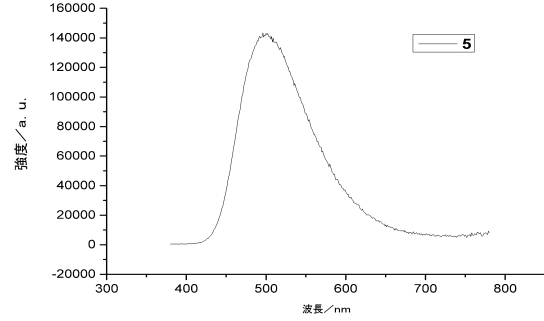
【図 7】



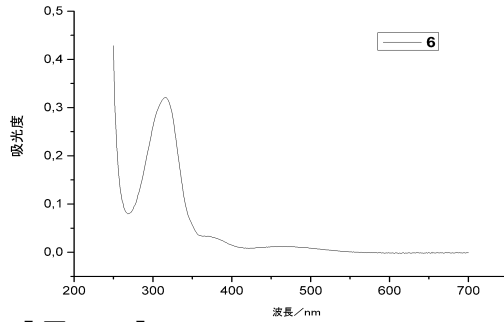
【図 6】



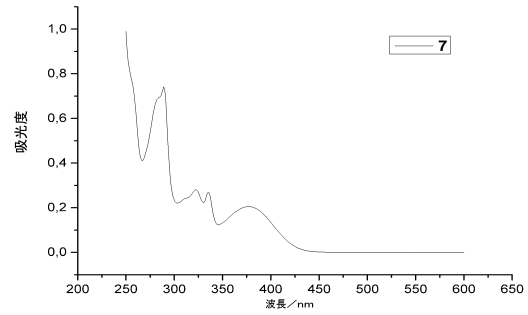
【図 8】



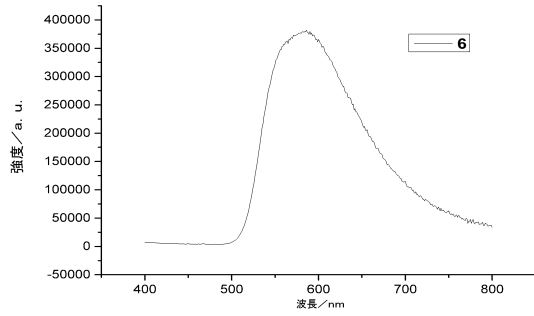
【図 9】



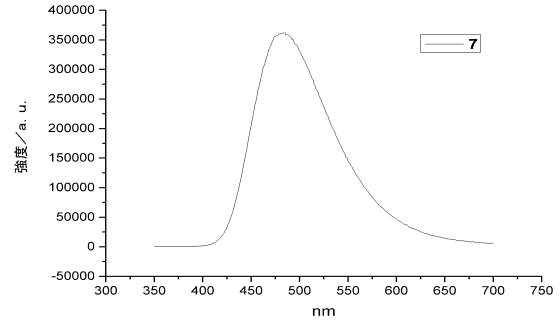
【図 11】



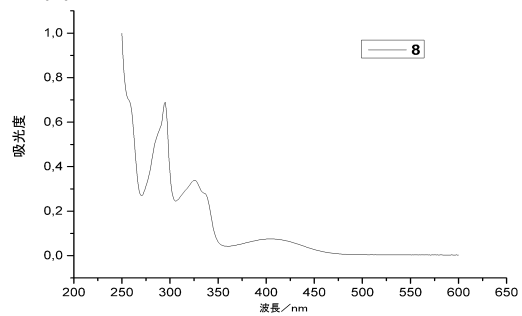
【図 10】



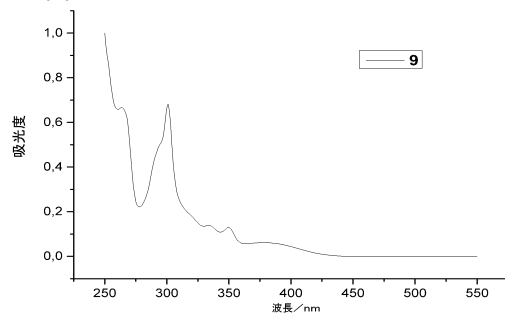
【図 12】



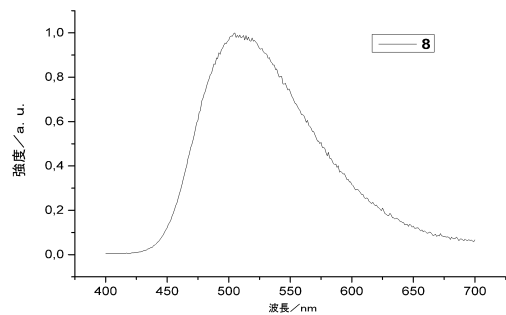
【図 13】



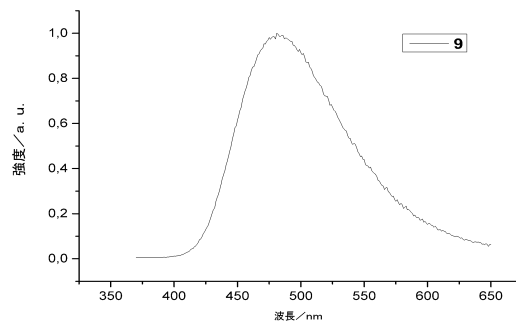
【図 15】



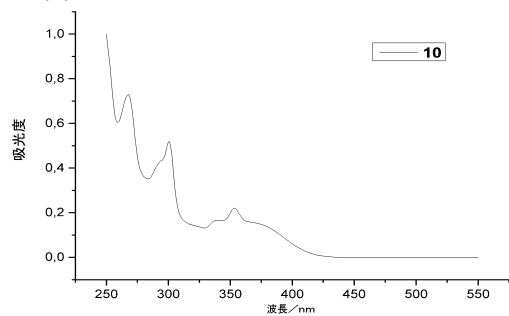
【図 14】



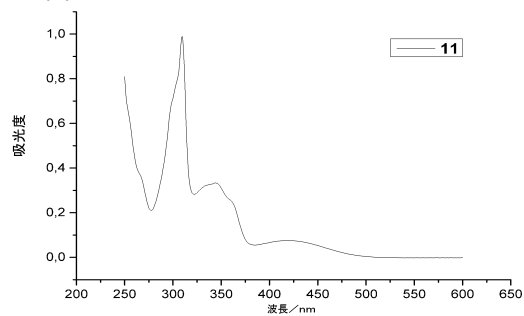
【図 16】



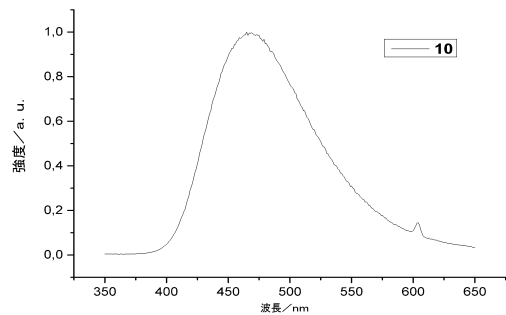
【図 17】



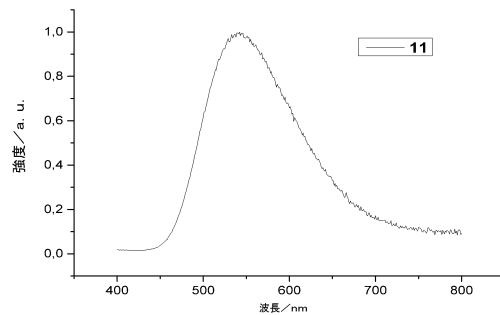
【図 19】



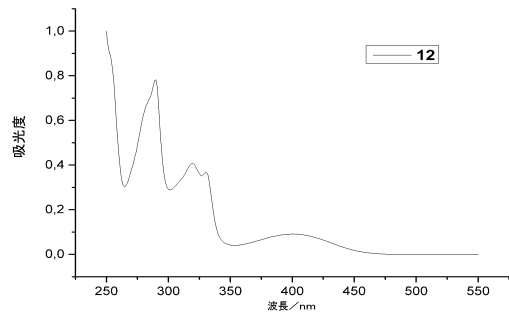
【図 18】



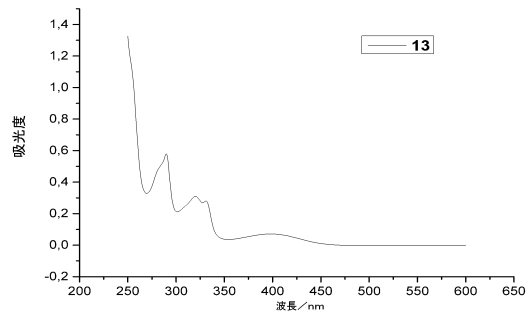
【図 20】



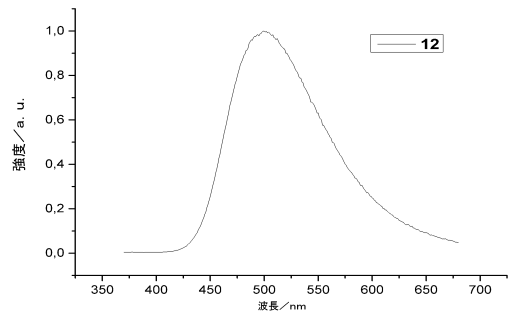
【図 2 1】



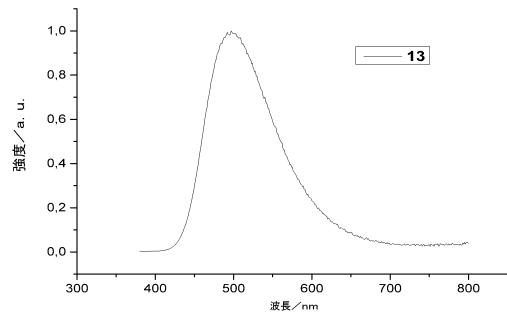
【図 2 3】



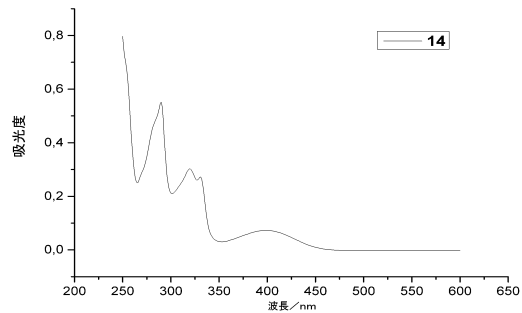
【図 2 2】



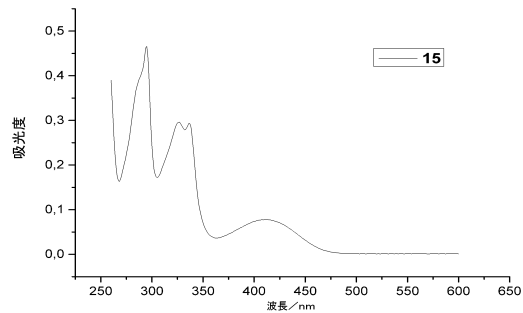
【図 2 4】



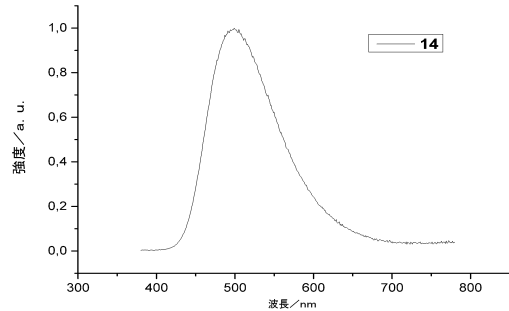
【図 2 5】



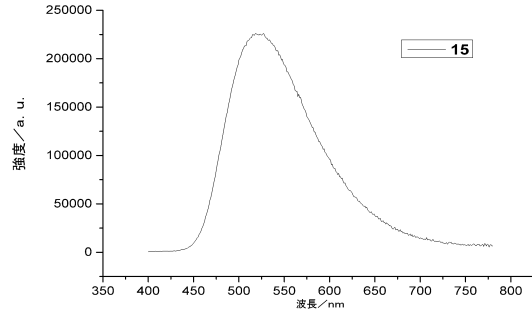
【図 2 7】



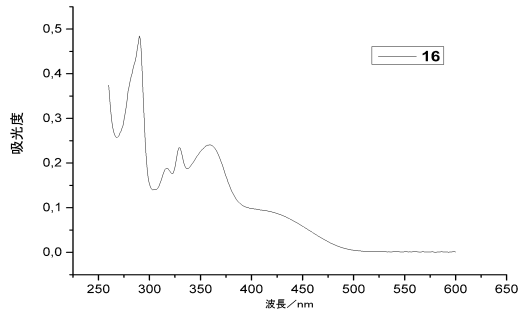
【図 2 6】



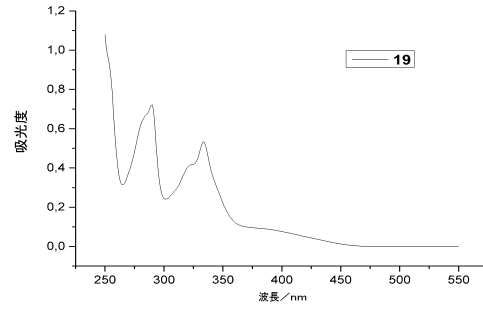
【図 2 8】



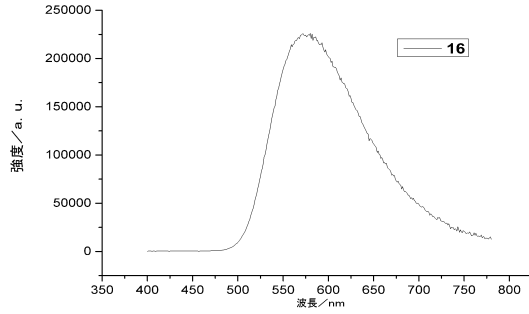
【図 29】



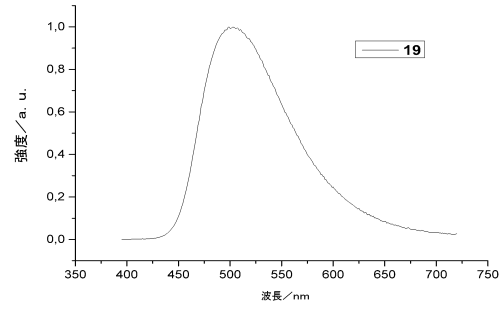
【図 31】



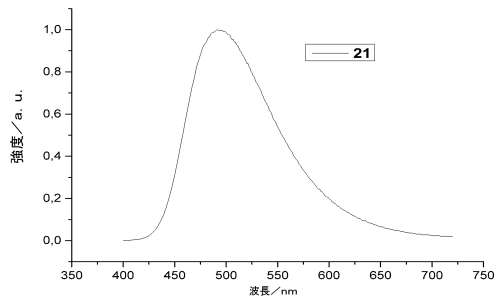
【図 30】



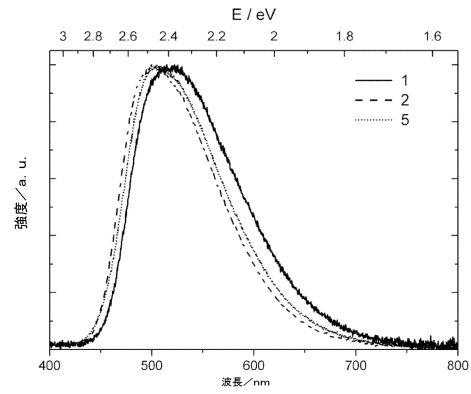
【図 32】



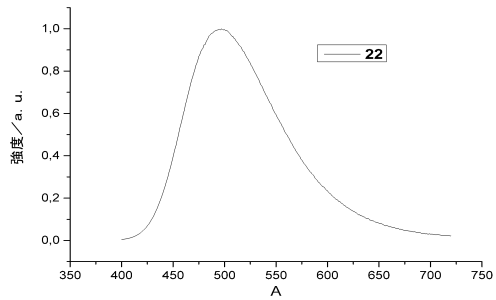
【図 33】



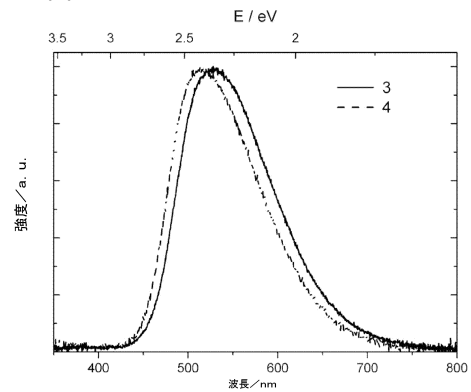
【図 35】



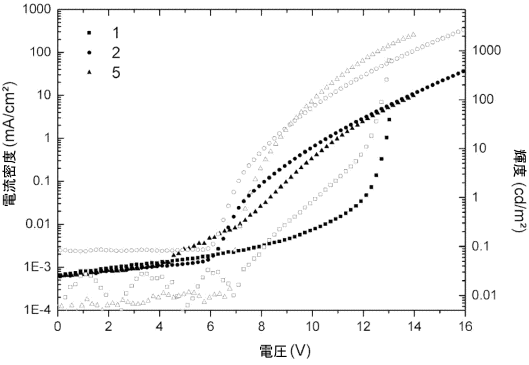
【図 34】



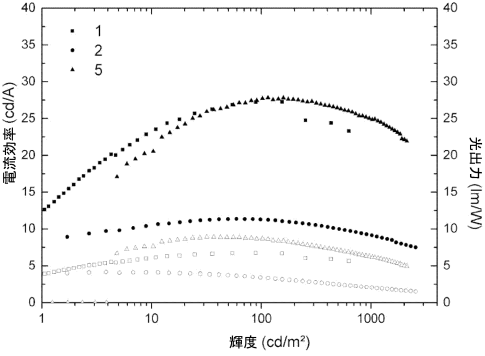
【図 36】



【図 37】



【図 38】

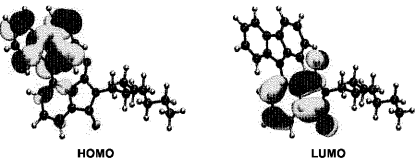


【図 39】

10	カソード
9	EIL / カソード
8	ETL
7	HBL
6	EML
5	EBL
4	HTL
3	HIL / アノード
2	アノード, ITO
1	支持材料, ガラス

【図 40】

Figur 40



フロントページの続き

(51)Int.Cl. F I
H 0 5 B 33/22 D
C 0 9 K 11/06 6 9 0

前置審査

(74)代理人 100221981
弁理士 石田 大成
(72)発明者 ダンツ・ミヒャエル
ドイツ連邦共和国、7 6 3 4 4 エッゲンシュタイン - レオポルトスハーフェン、ナーゴルトスト
ラーゼ、7 ゲー

審査官 安藤 倫世

(56)参考文献 中国特許出願公開第1 0 2 3 4 4 4 0 4 (C N , A)
特開2 0 0 7 - 0 9 1 8 7 7 (J P , A)
特開2 0 0 7 - 1 9 1 6 3 6 (J P , A)
国際公開第2 0 0 1 / 0 4 4 2 4 7 (W O , A 2)
中国特許出願公開第1 0 2 0 8 6 1 8 1 (C N , A)
中国特許出願公開第1 0 1 7 8 7 1 2 9 (C N , A)
米国特許出願公開第2 0 1 0 / 0 1 4 8 6 6 2 (U S , A 1)
Journal of Heterocyclic Chemistry, 1993年, 30(4), 1073-1077
DATABASE REGISTRY [online] CHEMICAL ABSTRACT SERVICE, US;CAS登録番号 1477945-35-9, 20
13年11月21日, 5-(5-amino-1H-benzimidazol-1-yl)-1H-Isoindole-1,3(2H)-dione
DATABASE REGISTRY [online] CHEMICAL ABSTRACT SERVICE, US;CAS登録番号 1038303-03-5, 20
08年08月04日, 1038303-03-5、5-(2-amino-1H-benzimidazol-1-yl)-1H-Isoindole-1,3(2H)-dion
e
DATABASE REGISTRY [online] CHEMICAL ABSTRACT SERVICE, US;CAS登録番号 1038302-16-7, 20
08年08月04日, 5-(2,3-dihydro-2-thioxo-1H-benzimidazol-1-yl)-1H-Isoindole-1,3(2H)-dione
DATABASE REGISTRY [online] CHEMICAL ABSTRACT SERVICE, US;CAS登録番号 440663-18-3, 200
2年07月29日, 5-(2,3-dihydro-1H-indol-1-yl)-2-(4-methylphenyl)-6-nitro-1H-Isoindole-1,3
(2H)-dione

(58)調査した分野(Int.Cl., D B 名)

C 0 7 D
H 0 1 L
H 0 5 B
C 0 9 K
C A p l u s / R E G I S T R Y (S T N)