

【公報種別】特許法第 17 条の 2 の規定による補正の掲載

【部門区分】第 3 部門第 3 区分

【発行日】平成20年8月7日(2008.8.7)

【公表番号】特表2008-505240(P2008-505240A)

【公表日】平成20年2月21日(2008.2.21)

【年通号数】公開・登録公報2008-007

【出願番号】特願2007-519763(P2007-519763)

【国際特許分類】

C 0 9 B 48/00 (2006.01)

C 0 9 K 11/06 (2006.01)

C 0 7 D 471/04 (2006.01)

H 0 1 L 51/50 (2006.01)

H 0 5 B 33/12 (2006.01)

C 0 9 B 57/00 (2006.01)

C 0 9 B 67/20 (2006.01)

A 6 1 K 8/49 (2006.01)

【 F I 】

C 0 9 B 48/00 C S P A

C 0 9 K 11/06 6 5 0

C 0 9 K 11/06 6 9 0

C 0 7 D 471/04 1 1 2 X

H 0 5 B 33/14 B

H 0 5 B 33/12 E

C 0 9 B 57/00 Z

C 0 9 B 67/20 F

A 6 1 K 8/49

【手続補正書】

【提出日】平成20年6月18日(2008.6.18)

【手続補正 1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

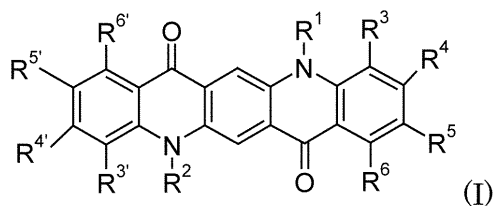
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

式 (I) :

【化 1】



〔式中、

R¹およびR²は、同一または異なっているとしてもよく、C₁～C₂₅アルキル基（フッ素、塩素または臭素により置換されていてもよい）、アリル基（C₁～C₄アルキルで1～3回置換されていてもよい）、シクロアルキル基、シクロアルキル基（C₁～C₄アルキル、八口

ゲン、ニトロ、またはシアノで 1 ~ 3 回置換されていてもよいフェニルにより 1 または 2 回縮合されていてもよい)、アルケニル基、シクロアルケニル基、アルキニル基、ハロアルキル基、ハロアルケニル基、ハロアルキニル基、ケトン基、アルデヒド基、エステル基、カルバモイル基、ケトン基、シリル基、シロキサニル基、 A^3 または $-CR^7R^8-$ (C_1H_2)_m - A^3 [式中、

R^7 および R^8 は、互いに独立して、水素、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、またはフェニル ($C_1 \sim C_4$ アルキルで 1 ~ 3 回置換されていてもよい)を表し、

A^3 は、アリールまたはヘテロアリール、特にフェニルまたは 1 - もしくは 2 - ナフチル ($C_1 \sim C_8$ アルキルおよび / または $C_1 \sim C_8$ アルコキシで 1 ~ 3 回置換されていてもよい)を表し、

m は、0、1、2、3 または 4 を表す) から選択され、

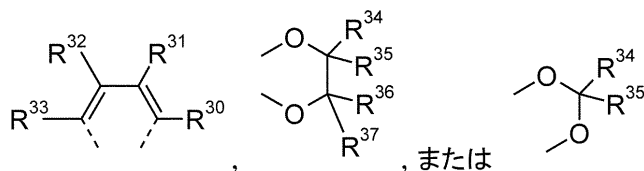
R^3 、 $R^{3'}$ 、 R^6 および $R^{6'}$ は、互いに独立して、水素、ハロゲン、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、ハロゲン置換された $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキルチオ、シクロアルキル、場合により置換されたアリールもしくはアリールアルキルを表し、ここで、置換基は、アルコキシ、ハロゲンもしくはアルキルであり、

R^4 および $R^{4'}$ は、互いに独立して、 R^3 、もしくは基： $-NAr^1Ar^2$ であり、

R^5 および $R^{5'}$ は、互いに独立して、 R^3 、もしくは基： $-NAr^3Ar^4$ であるか、または

$R^{3'}$ と $R^{4'}$ 、ならびに / もしくは R^3 と R^4 は、一緒に、基：

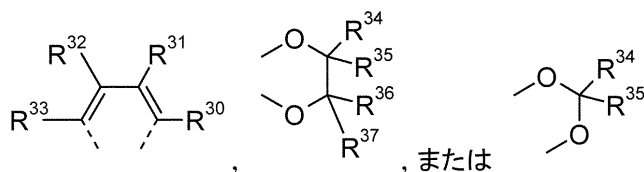
【化 2】



であるか、または

$R^{5'}$ と $R^{6'}$ 、ならびに / もしくは R^5 と R^6 は、一緒に、基：

【化 3】



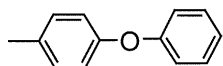
であり、ここで、

R^{30} 、 R^{31} 、 R^{32} および R^{33} は、互いに独立して、水素、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、ハロゲン置換された $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、または $C_1 \sim C_{28}$ アルキルチオであり、

R^{34} 、 R^{35} 、 R^{36} および R^{37} は、互いに独立して、水素、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、ハロゲン置換された $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、または $C_1 \sim C_{28}$ アルキルチオであり、

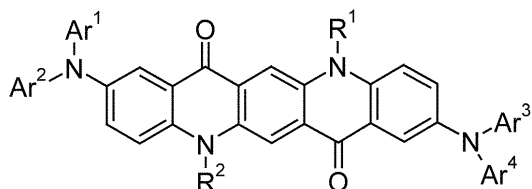
Ar^1 、 Ar^2 、 Ar^3 および Ar^4 は、互いに独立して、場合により置換されていてもよいアリール基、または場合により置換されていてもよいヘテロアリール基であるが、ただし、基： R^4 、 $R^{4'}$ 、 R^5 および $R^{5'}$ の少なくとも 1 つが、基： $-NAr^1Ar^2$ または $-NAr^3Ar^4$ であること、ならびに $R^1 = R^2$ が C_2H_5 であり、 $Ar^1 = Ar^2 = Ar^3 = Ar^4$ が、

【化 5】

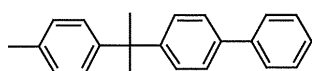


である、式：

【化 4】

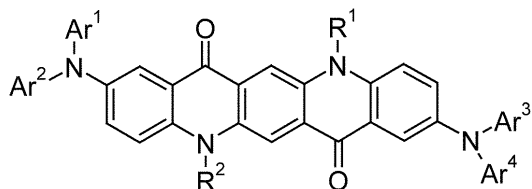
で示される化合物、および $R^1 = R^2$ が Ph であり、 $Ar^1 = Ar^2 = Ar^3 = Ar^4$ が、

【化 6】



である、式：

【化 4】

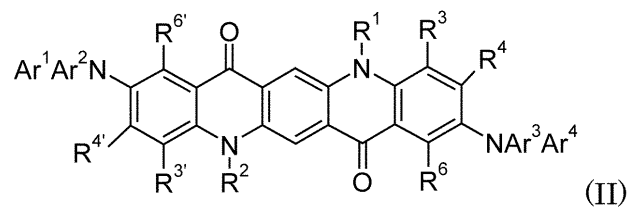


で示される化合物が除外されること、を条件とする〕で示される化合物。

【請求項 2】

式 (II)：

【化 7】



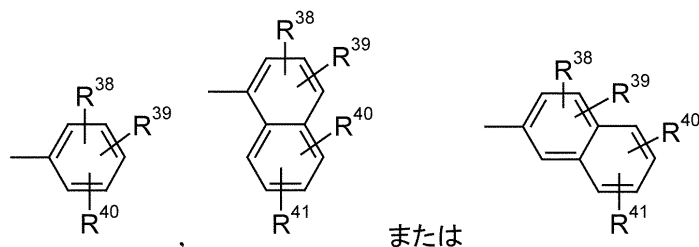
(II)

〔式中、

R^1 、 R^2 、 R^3 、 $R^{3'}$ 、 R^4 、 $R^{4'}$ 、 R^6 および $R^{6'}$ は、請求項 1 に定義したとおりであり、

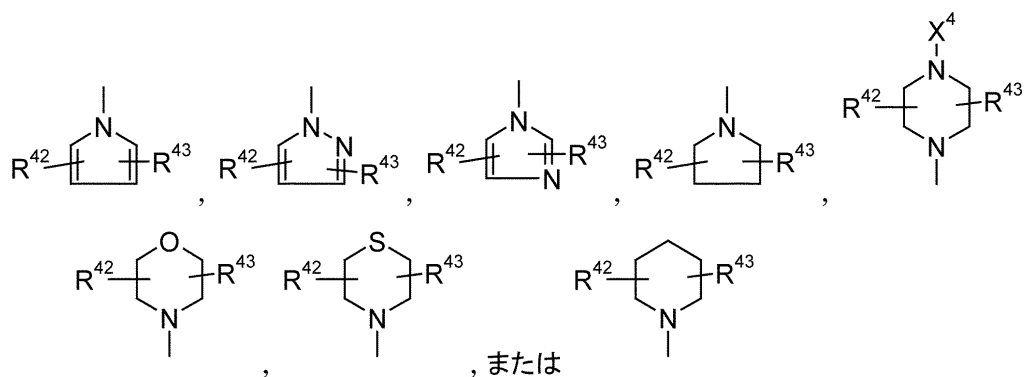
Ar^1 、 Ar^2 、 Ar^3 および Ar^4 は、互いに独立して、基： $-Ar^5-X^1-Ar^6$ 、

【化 8】



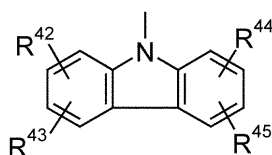
であるか、または Ar^1 と Ar^2 、ならびに / もしくは Ar^3 と Ar^4 は、結合した窒素原子と一緒に、5 もしくは 6 員環複素環、例えば

【化 9】



を形成しており、場合により置換されたフェニル基で、例えば下基のように、

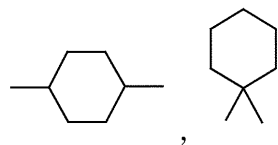
【化 10】



1 もしくは 2 個で縮合されていてもよく、ここで、

X^1 は、 $-C(X^2)(X^3)-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-SO_2-$ 、 $-C(=O)-$ 、

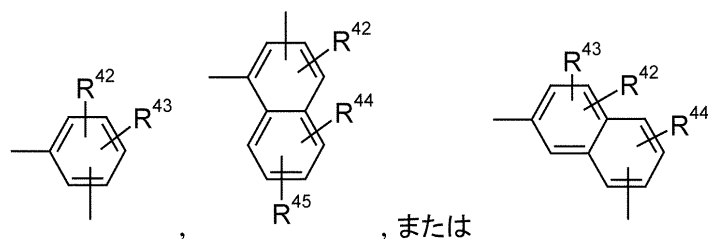
【化 11】



$-(C_xH_{2x})-O-(C_yH_{2y})-$ (式中、 x および y のそれぞれは、0 ~ 20 の整数であるが、 $x + y$ が、0 になる例はない)、炭素原子を少なくとも 2 個有する置換もしくは非置換のアルキレン基、炭素原子を少なくとも 2 個有する置換もしくは非置換のアルキリデン基、または炭素原子を少なくとも 2 個有する置換もしくは非置換の脂環基であり、

Ar^5 は、

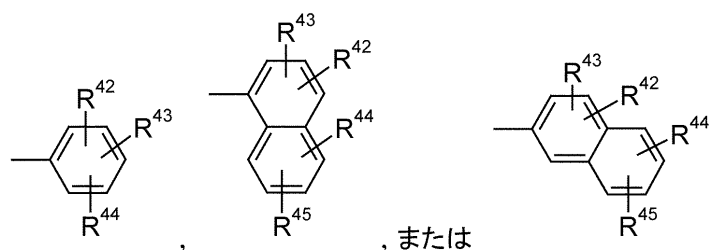
【化 1 2】



であり、

Ar⁶は、

【化 1 3】



であり、

X²およびX³は、互いに独立して、水素、C₁～C₁₈アルキル、ハロゲン置換されたC₁～C₁₈アルキル、またはフェニル（C₁～C₈アルキルおよび/またはC₁～C₈アルコキシで1～3回置換されていてもよい）を表し、

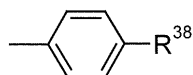
X⁴は、C₁～C₁₈アルキル、ハロゲン置換されたC₁～C₁₈アルキル、またはフェニル（C₁～C₈アルキルおよび/またはC₁～C₈アルコキシで1～3回置換されていてもよい）を表し、

R³⁸、R³⁹、R⁴⁰、R⁴¹、R⁴²、R⁴³、R⁴⁴およびR⁴⁵は、互いに独立して、水素、C₁～C₈アルキル、C₁～C₈アルコキシまたはフェニルを表す〕で示される、請求項1記載の化合物。

【請求項3】

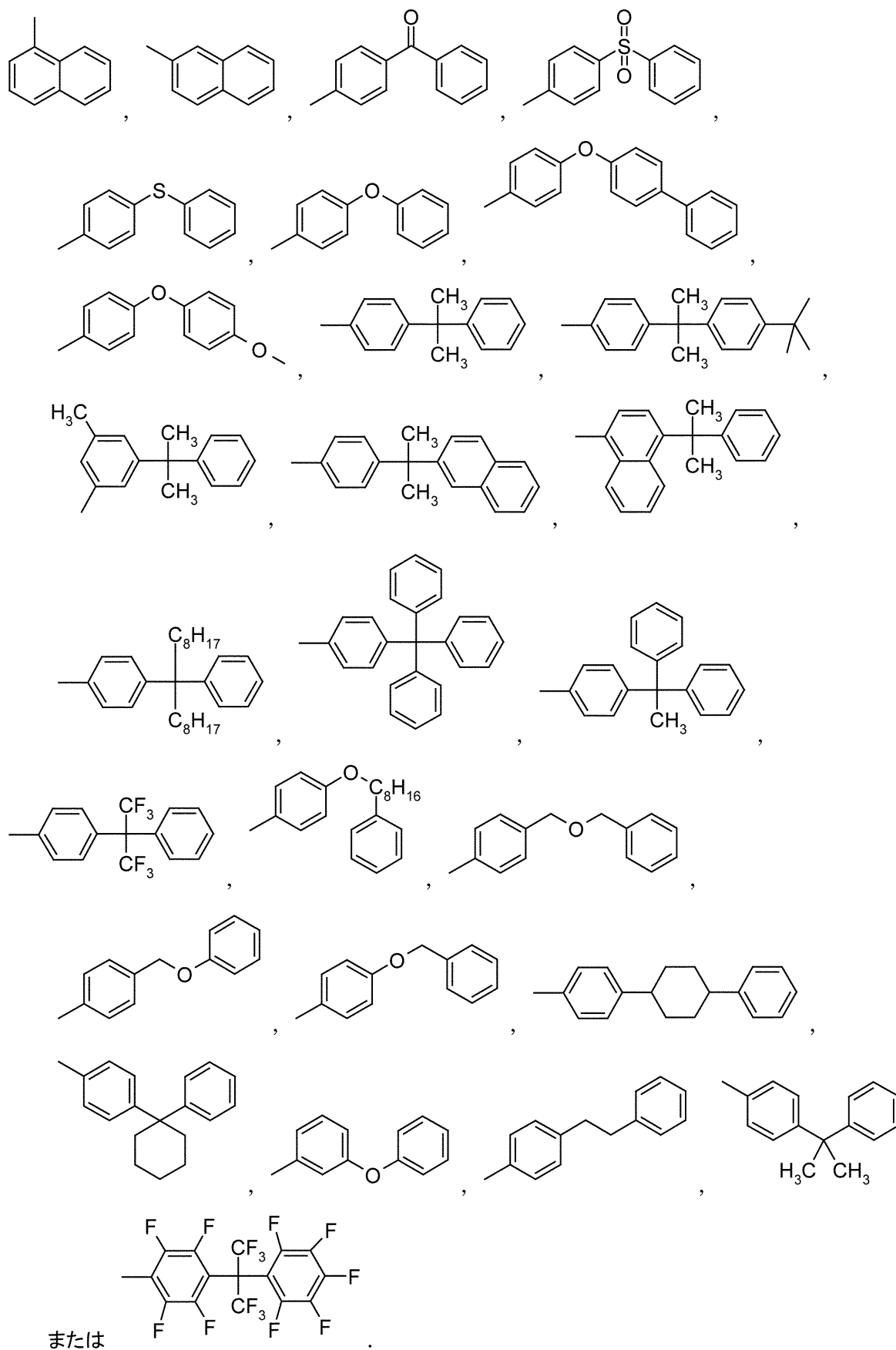
Ar¹、Ar²、Ar³およびAr⁴が、互いに独立して、基：

【化 1 4】



（式中、R³⁸は、水素またはC₁～C₄アルキルである、

【化 15】

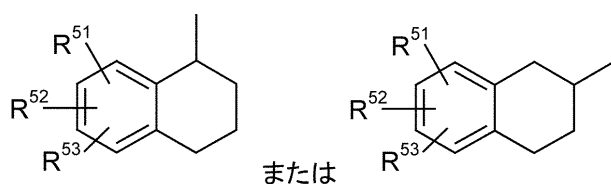


である)である、請求項 2 記載の化合物。

【請求項 4】

R^1 および R^2 が、同一または異なっているとしてもよく、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル基（例えば、メチル、エチル、*n*-プロピル、イソプロピル、*n*-ブチル、*sec*-ブチル、イソブチル、*tert*-ブチル、*n*-ペンチル、2-ペンチル、3-ペンチル、2,2-ジメチルプロピル、*n*-ヘキシル、*n*-ヘプチル、*n*-オクチル、1,1,3,3-テトラメチルブチル及び2-エチルヘキシル、*n*-ノニル、デシル、ウンデシル、ドデシル、テトラデシル、ペンタデシル、ヘキサデシル、ヘプタデシル、オクタデシル）； $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル基、特にシクロヘキシル（ $C_1 \sim C_4$ アルキルまたは $C_1 \sim C_4$ アルコキシで1～3回置換されているとしてもよい）；シクロアルキル基、特にシクロヘキシル（ $C_1 \sim C_8$ アルキル、 $C_1 \sim C_8$ アルコキシ、ハロゲンおよびシアノで1～3回置換されているとしてもよいフェニルで1または2回縮合されているとしてもよい）、特に

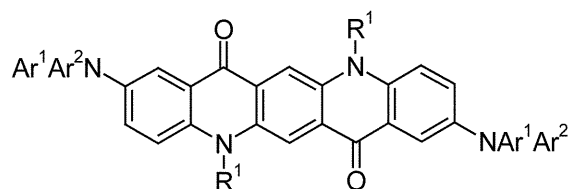
【化16】



（式中、 R^{51} 、 R^{52} および R^{53} は、互いに独立して、水素、 $C_1 \sim C_8$ アルキル、 $C_1 \sim C_8$ アルコキシ、ハロゲンおよびシアノである）； $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルケニル基、特にシクロヘキセニル（ $C_1 \sim C_4$ アルキルまたは $C_1 \sim C_4$ アルコキシで1～3回置換されているとしてもよい）； $C_6 \sim C_{14}$ アリール基、特に、フェニル、ビフェニリル、1-もしくは2-ナフチル（ $C_1 \sim C_8$ アルキルまたは $C_1 \sim C_8$ アルコキシで1～3回置換されているとしてもよい）；または $-CR^7R^8-(CH_2)_m-A^3$ （式中、 R^7 および R^8 は、水素または $C_1 \sim C_4$ アルキルを表し、 A^3 は、 $C_1 \sim C_8$ アルキルまたは $C_1 \sim C_8$ アルコキシで1～3回置換されているとしてもよい、フェニルまたは1-もしくは2-ナフチルを表し、 m は、0または1を表す）、から選択される、請求項1～3のいずれか1項記載の化合物。

【請求項5】

【表 1】



化合物	R ¹	Ar ¹	Ar ²
QA-2	n-C ₆ H ₁₃	フェニル	フェニル
QA-3	n-C ₆ H ₁₃		
QA-4	n-C ₆ H ₁₃	トリル	トリル
QA-5	n-C ₆ H ₁₃	2-ナフチル	フェニル
QA-7	CH ₃	フェニル	フェニル
QA-10	CH ₃	2-ナフチル	フェニル
QA-11	C ₂ H ₅	フェニル	フェニル
QA-12	フェニル	フェニル	フェニル
QA-13	2-シクロヘキセン	フェニル	フェニル
QA-14	2-シクロヘキセン	1-ナフチル	フェニル
QA-15	2-シクロヘキセン	4-トリル	4-トリル
QA-16	2-シクロヘキセン	2-ナフチル	フェニル
QA-17	シクロヘキサン	フェニル	フェニル
QA-18	シクロヘキサン	1-ナフチル	フェニル
QA-19	シクロヘキサン	4-トリル	4-トリル
QA-20	シクロヘキサン	2-ナフチル	フェニル

から選択される、請求項 1 記載の化合物。

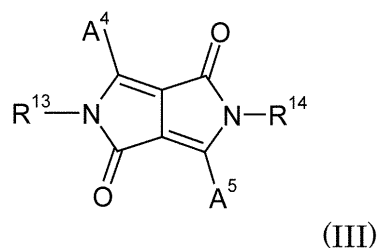
【請求項 6】

ゲスト発色団およびホスト発色団を含む組成物であって、ゲスト発色団の吸収スペクトルがホスト発色団の蛍光発光スペクトルと重複しており、ここで、ホスト発色団が、500～720、好ましくは520～630 nm、より好ましくは540～600 nmにホトルミネセンス発光ピークを有するジケトピロロピロールであり、ゲスト発色団が、請求項 1～5 のいずれか 1 項記載の式 I で示される化合物である組成物。

【請求項 7】

ホスト発色団が、式 (III)：

【化 17】

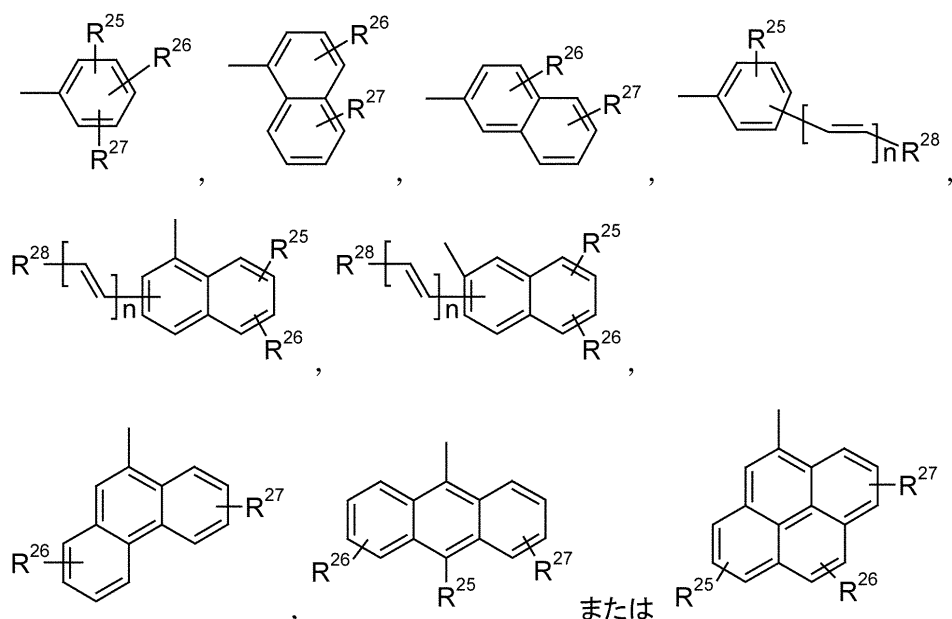


〔式中、

R^{13} および R^{14} は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{25}$ アルキル（フッ素、塩素、または臭素により置換されていてもよい）； $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル； $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル（ $C_1 \sim C_4$ アルキル、ハロゲン、ニトロまたはシアノで1～3回置換されていてもよい）フェニルにより1または2回縮合されていてもよい）；シリル； A^6 ；または $-CR^{11}R^{12}-(CH_2)_m-A^6$ 〔式中、 R^{11} および R^{12} は、互いに独立して、水素、フッ素、塩素、臭素、シアノ、もしくは $C_1 \sim C_4$ アルキル（フッ素、塩素または臭素で置換されていてもよい）、またはフェニル（ $C_1 \sim C_4$ アルキルで1～3回置換されていてもよい）を表し、 A^6 は、フェニルまたは1 - もしくは2 - ナフチル（ $C_1 \sim C_8$ アルキル、 $C_1 \sim C_8$ アルコキシ、ハロゲン、ニトロ、シアノで1～3回置換されていてもよい）；フェニル（ $C_1 \sim C_8$ アルキルまたは $C_1 \sim C_8$ アルコキシで1～3回置換されていてもよい）； $NR^{23}R^{24}$ （式中、 R^{23} および R^{24} は、水素、 $C_1 \sim C_{25}$ アルキル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキルまたは $C_6 \sim C_{24}$ アリールを表す）を表し、特に、フェニルまたは1 - もしくは2 - ナフチル（ $C_1 \sim C_8$ アルキル、 $C_1 \sim C_8$ アルコキシ、ハロゲンまたはシアノで1～3回置換されていてもよい）；フェニル（ $C_1 \sim C_8$ アルキルまたは $C_1 \sim C_8$ アルコキシで1～3回置換されていてもよい）を表し、 m は、0、1、2、3または4を表す〕を表し、

A^4 および A^5 は、互いに独立して、

【化 18】



〔式中、 R^{25} 、 R^{26} および R^{27} は、互いに独立して、水素、 $C_1 \sim C_{25}$ アルキル、 $-CR^{11}R^{12}-(CH_2)_m-A^6$ 、シアノ、ハロゲン、 $-OR^{29}$ 、 $-S(O)_pR^{30}$ 、またはフェニル（ $C_1 \sim C_8$ アルキルまたは $C_1 \sim C_8$ アルコキシで1～3回置換されていてもよい）を表し、ここで、 R^{29} は、 $C_1 \sim C_{25}$ アルキル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、 $-CR^{11}R^{12}-$

(CH_2)_m - Ph、 $\text{C}_6 \sim \text{C}_{24}$ アリール、または飽和もしくは不飽和複素環基（環内原子を5～7個含み、炭素原子と、窒素、酸素および硫黄からなる群から選択されるヘテロ原子1～3個とからなる）を表し、 R^{30} は、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{25}$ アルキル、 $\text{C}_5 \sim \text{C}_{12}$ シクロアルキル、または $-\text{CR}^{11}\text{R}^{12}-$ (CH_2)_m-Phを表し、 R^{28} は、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_{20}$ ヘテロアリールまたは $\text{C}_6 \sim \text{C}_{24}$ アリールを表し、pは、0、1、2または3を表し、mおよびnは、0、1、2、3または4を表す）により表されるジケトピロロピロール（DPP）である、請求項6記載の組成物。

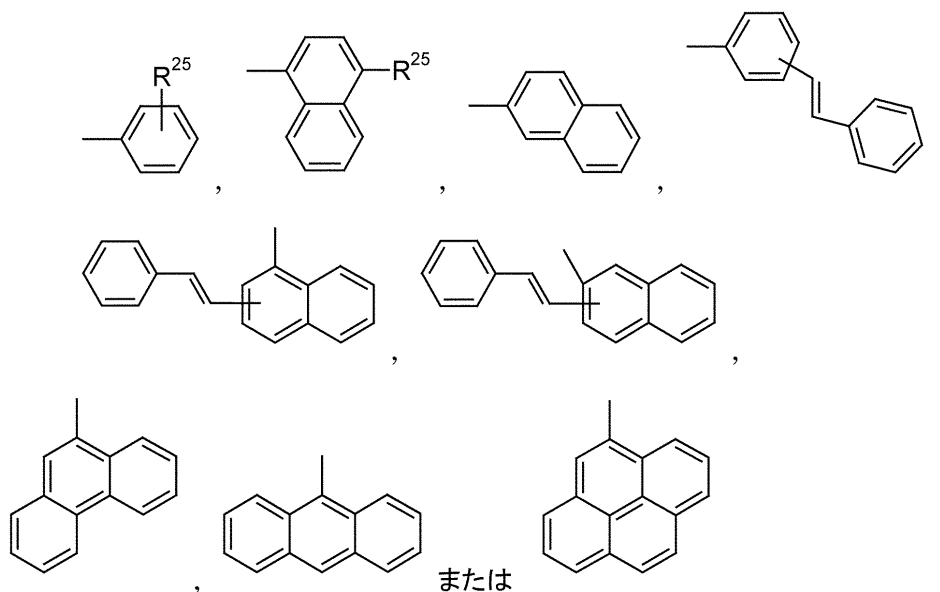
【請求項8】

R^{13} および R^{14} が、互いに独立して、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_8$ アルキル、 $\text{C}_5 \sim \text{C}_{12}$ シクロアルキル（ $\text{C}_1 \sim \text{C}_8$ アルキルおよび/または $\text{C}_1 \sim \text{C}_8$ アルコキシで1～3回置換されていてもよい）、フェニルまたは1-もしくは2-ナフチル（ $\text{C}_1 \sim \text{C}_8$ アルキルおよび/または $\text{C}_1 \sim \text{C}_8$ アルコキシで1～3回置換されていてもよい）、あるいは $-\text{CR}^{11}\text{R}^{12}-$ (CH_2)_m- A^6 （式中、 R^{11} および R^{12} は、水素または $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキルを表し、 A^6 は、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_8$ アルキルおよび/または $\text{C}_1 \sim \text{C}_8$ アルコキシで1～3回置換されていてもよいフェニルまたは1-もしくは2-ナフチルを表し、mは、0または1を表す）を表す、請求項6または7記載の組成物。

【請求項9】

A^4 および A^5 は、互いに独立して、

【化19】

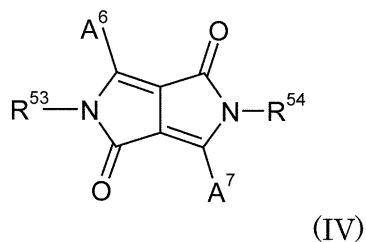


（式中、 R^{25} は、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_8$ アルキル、フェニル、1-または2-ナフチルである）を表す、請求項6～8のいずれか1項記載の組成物。

【請求項10】

ホスト発色団が、式（IV）：

【化20】



〔式中、

R^{53} および R^{54} は、同一または異なっているもよく、 $C_1 \sim C_{25}$ アルキル基（フッ素、塩素または臭素により置換されていてもよい）、アリル基（ $C_1 \sim C_4$ アルキルで1～3回置換されていてもよい）、シクロアルキル基、シクロアルキル基（ $C_1 \sim C_4$ アルキル、ハロゲン、ニトロ、またはシアノで1～3回置換されていてもよいフェニルにより1または2回縮合されていてもよい）、アルケニル基、シクロアルケニル基、アルキニル基、ハロアルキル基、ハロアルケニル基、ハロアルキニル基、ケトン基、アルデヒド基、エステル基、カルバモイル基、ケトン基、シリル基、シロキサニル基、 A^8 または $-CR^{60}R^{61}-$ （ CH_2 ） $_m - A^8$ 〔式中、

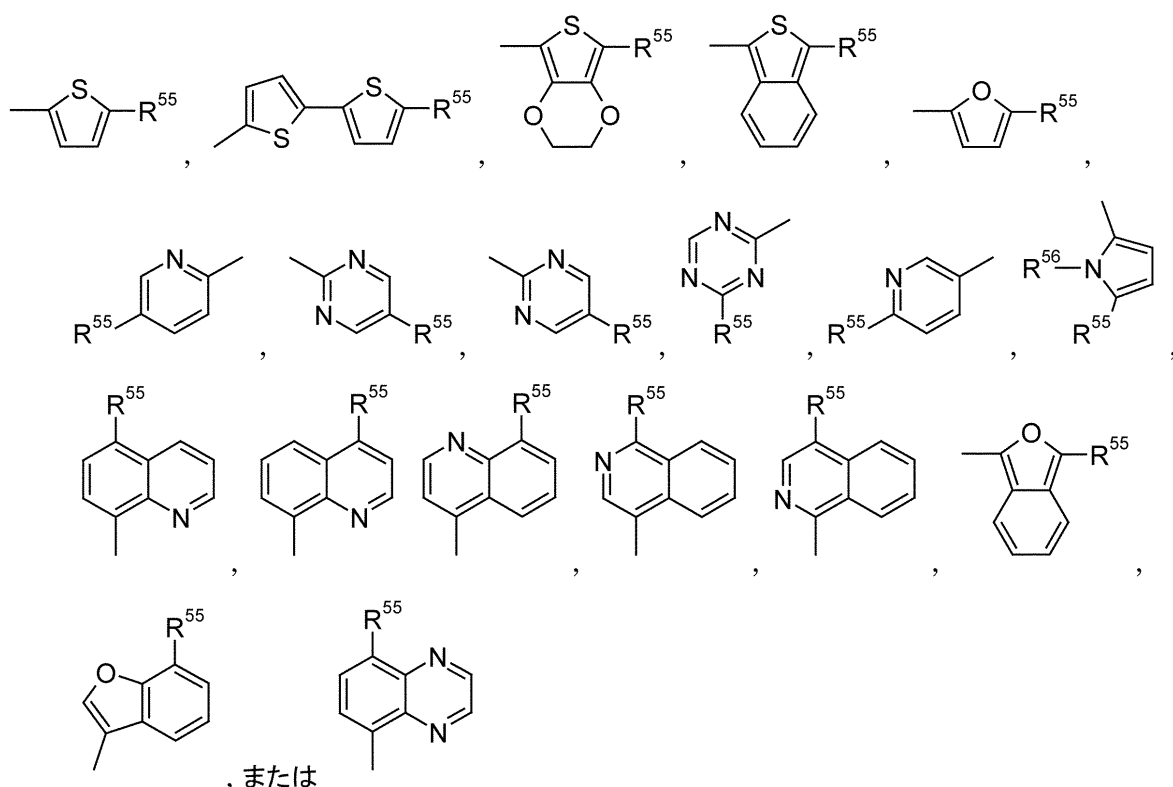
R^{60} および R^{61} は、互いに独立して、水素、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、またはフェニル（ $C_1 \sim C_4$ アルキルで1～3回置換されていてもよい）を表し、

A^8 は、アリールまたはヘテロアリール、特にフェニルまたは1 - もしくは2 - ナフチル（ $C_1 \sim C_8$ アルキルおよび / または $C_1 \sim C_8$ アルコキシで1～3回置換されていてもよい）を表し、

m は、0、1、2、3または4を表す〕から選択され、

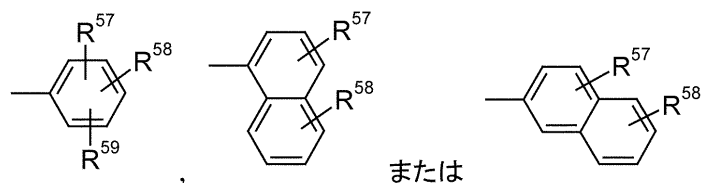
A^6 および A^7 は、互いに独立して、

【化21】



〔式中、 R^{55} は、水素原子、 $C_1 \sim C_{12}$ アルキル基、 $C_1 \sim C_8$ アルコキシ基、または式：

【化22】



（式中、 R^{57} 、 R^{58} および R^{59} は、互いに独立して、水素、 $C_1 \sim C_8$ アルキルまたは $C_1 \sim C_8$ アルコキシを表す）で示される基であり、

R^{56} は、水素または $C_1 \sim C_8$ アルキルを表す〕から選択される〕により表されるジケトピロロピロールである、請求項6記載の組成物。

【請求項11】

請求項1～5のいずれか1項記載の化合物、または請求項6～10のいずれか1項記載の組成物を含むEL装置。

【請求項12】

(a) 請求項1～5のいずれか1項記載の化合物または請求項6～10のいずれか1項記載の組成物を、着色した高分子量有機材料の全重量に基づいて0.01～50重量%、

(b) 高分子量有機材料を、着色した高分子量有機材料の全重量に基づいて99.99～50重量%、および

(c) 所望なら、慣用的な添加剤を効果的な量で、含む組成物。

【請求項13】

高分子量有機材料の着色用、蛍光トレーサとして、色変換媒体、固体色素レーザ、ELレーザ、およびEL装置中での、請求項1～5のいずれか1項記載の蛍光ジケトピロロピロールの使用、または請求項6～10のいずれか1項記載の組成物の使用。

【手続補正2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0031

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0031】

を形成しており、場合により置換されたフェニル基で、例えば下基のように、

【手続補正3】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0053

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0053】

(式中、 R^{38} は、水素または $C_1 \sim C_4$ アルキルである；

【手続補正4】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0055

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0055】

である)である。