

【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

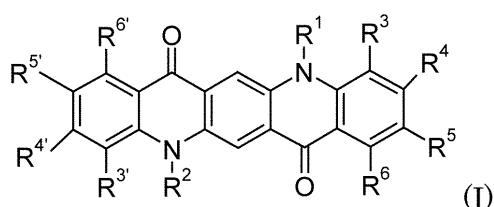
【補正の内容】

【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、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、シロキサン基、A³または-CR⁷R⁸- (C₂H₂)_m-A³ [式中、

R⁷およびR⁸は、互いに独立して、水素、C₁～C₄アルキル、またはフェニル(C₁～C₄アルキルで1～3回置換されていてもよい)を表し、

A³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(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、

mは、0、1、2、3または4を表す]から選択され、

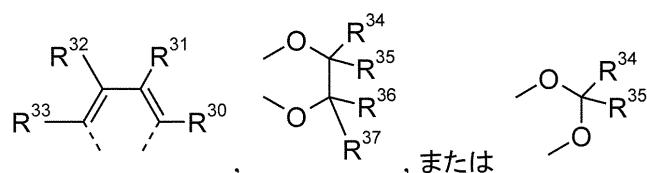
R³、R^{3'}、R⁶およびR^{6'}は、互いに独立して、水素、ハロゲン、C₁～C₁₈アルキル、ハロゲン置換されたC₁～C₁₈アルキル、C₁～C₁₈アルコキシ、C₁～C₁₈アルキルチオ、シクロアルキル、場合により置換されたアリールもしくはアリールアルキルを表し、ここで、置換基は、アルコキシ、ハロゲンもしくはアルキルであり、

R⁴およびR^{4'}は、互いに独立して、R³、もしくは基：-NAr¹Ar²であり、

R⁵およびR^{5'}は、互いに独立して、R³、もしくは基：-NAr³Ar⁴であるか、または

R^{3'}とR^{4'}、ならびに/もしくはR³とR⁴は、一緒に、基：

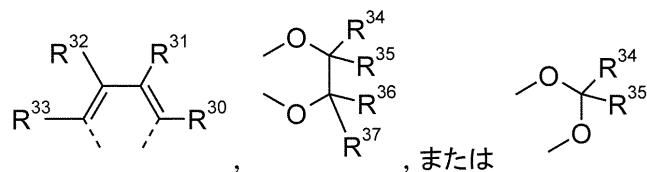
【化2】



であるか、または

R^{5'}とR^{6'}、ならびに/もしくはR⁵とR⁶は、一緒に、基：

【化3】



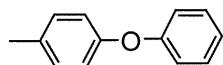
であり、ここで、

R³⁰、R³¹、R³²およびR³³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、C₁～C₁₈アルコキシ、またはC₁～C₂₈アルキルチオであり、

R³⁴、R³⁵、R³⁶およびR³⁷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、C₁～C₁₈アルコキシ、またはC₁～C₂₈アルキルチオであり、

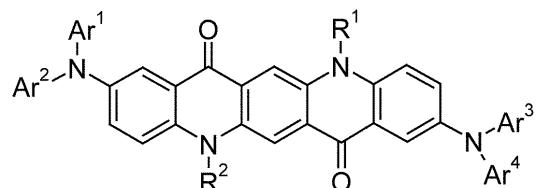
Ar¹、Ar²、Ar³およびAr⁴は、互いに独立して、場合により置換されていてもよいアリール基、または場合により置換されていてもよいヘテロアリール基であるが、ただし、基：R⁴、R^{4'}、R⁵およびR^{5'}の少なくとも1つが、基：-NAr¹Ar²または-NAr³Ar⁴であること、ならびにR¹=R²がC₂H₅であり、Ar¹=Ar²=Ar³=Ar⁴が、

【化5】

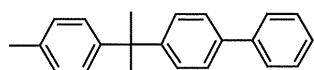


である、式：

【化4】

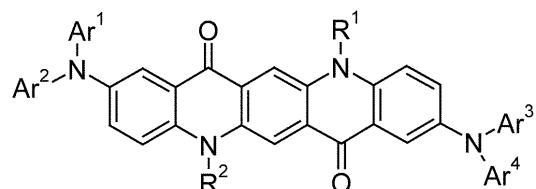
で示される化合物、およびR¹ = R²がP-hであり、Ar¹ = Ar² = Ar³ = Ar⁴が、

【化6】



である、式：

【化4】

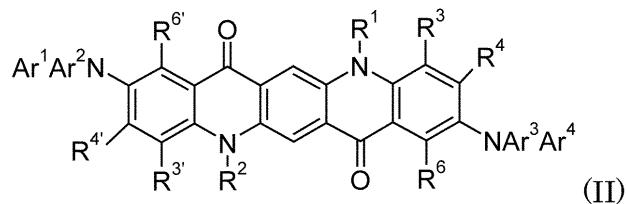


で示される化合物が除外されること、を条件とする]で示される化合物。

【請求項2】

式(II)：

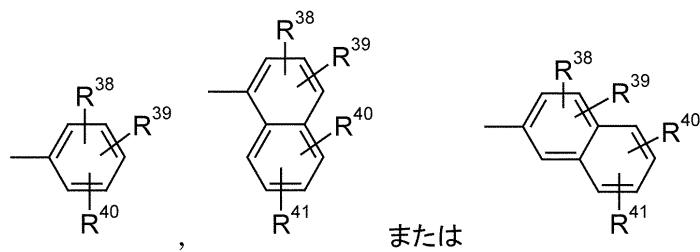
【化7】



〔式中、

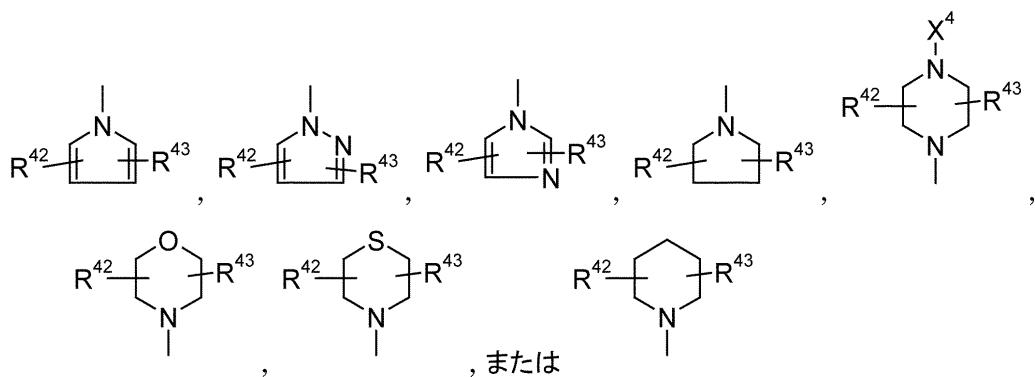
R¹、R²、R³、R^{3'}、R⁴、R^{4'}、R⁶およびR^{6'}は、請求項1に定義したとおりであり、Ar¹、Ar²、Ar³およびAr⁴は、互いに独立して、基：-Ar⁵-X¹-Ar⁶、

【化 8】



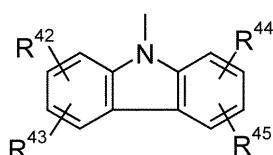
であるか、または A_r¹と A_r²、ならびに / もしくは A_r³と A_r⁴は、結合した窒素原子と一緒にになって、5 もしくは 6 員環複素環、例えば

【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、

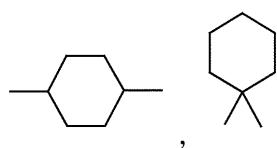
【化 10】



1 もしくは 2 個で縮合されていてもよく、ここで、

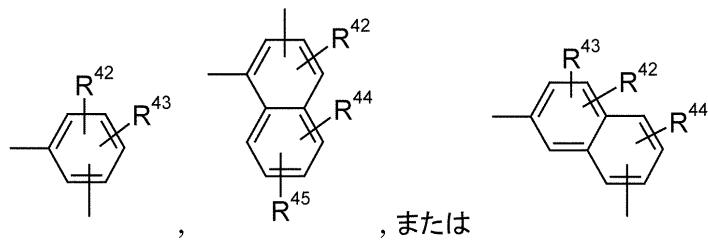
X¹は、 - C (X²) (X³) - 、 - O - 、 - S - 、 - SO₂ - 、 - C (= O) - 、

【化 11】



- (C_x H_{2x}) - O - (C_y H_{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、A_r⁵は、

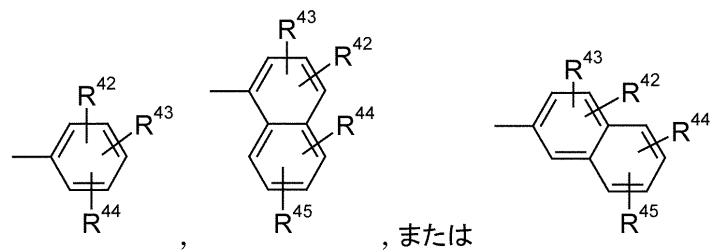
【化12】



であり、

A r⁶は、

【化13】



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、

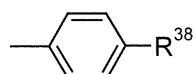
X⁴は、C₁～C₁₈アルキル、ハロゲン置換されたC₁～C₁₈アルキル、またはフェニル（C₁～C₈アルキルおよび/またはC₁～C₈アルコキシで1～3回置換されていてもよい）を表し、

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】

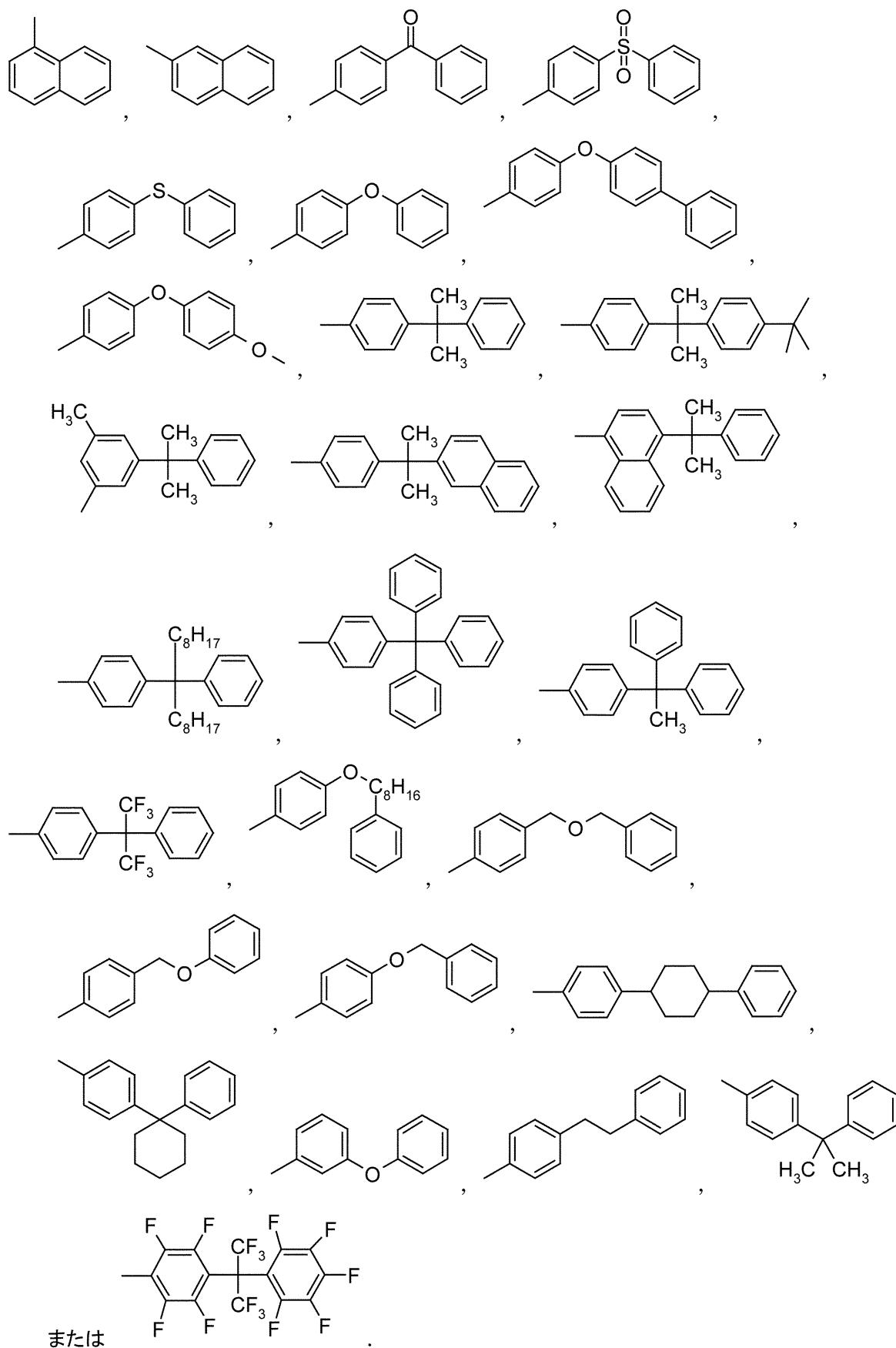
A r¹、A r²、A r³およびA r⁴が、互いに独立して、基：

【化14】



(式中、R³⁸は、水素またはC₁～C₄アルキルである、

【化15】

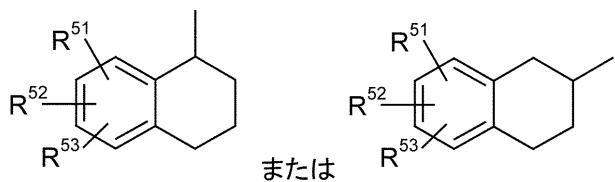


である)である、請求項2記載の化合物。

【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-ヘキシリ、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-エチルヘキシリ、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、特にシクロヘキシリ（ $C_1 \sim C_4$ アルキルまたは $C_1 \sim C_4$ アルコキシで1～3回置換されていてもよい）；シクロアルキル基、特にシクロヘキシリ（ $C_1 \sim C_8$ 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回置換されていてもよいフェニルで1または2回縮合されていてもよい）、特に

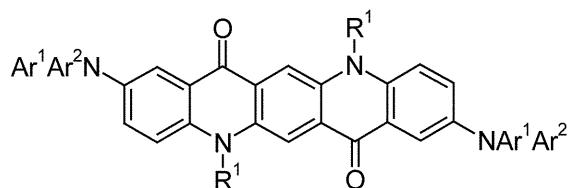
【化16】



（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。

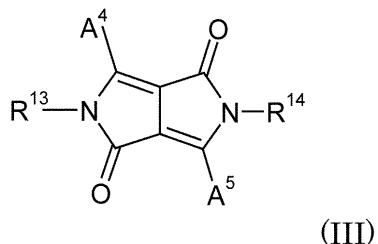
【請求項6】

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520～630nm、より好ましくは540～600nmにホタルミネセンス発光ピークを有するジケトイ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】

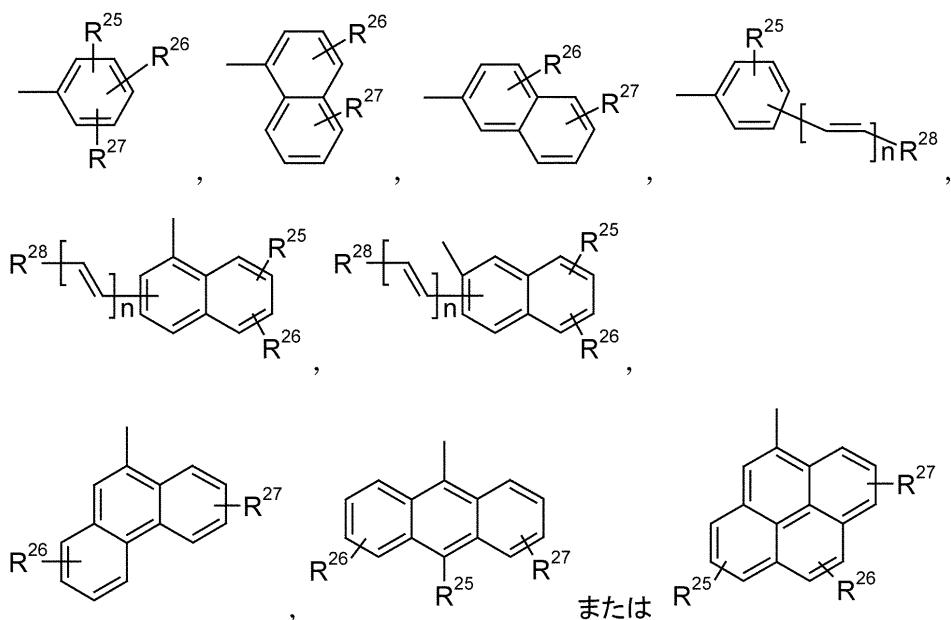


〔式中、

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、 $-CR^1R^2-$ （ 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、 $-CR^{11}R^{12}-$

$(C_2H_2)_m - Ph$ 、 $C_6 \sim C_{24}$ 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、 $C_1 \sim C_{25}$ アルキル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、または $-CR^{11}R^{12}-$ 、 $(C_2H_2)_m - Ph$ を表し、 R^{28} は、 $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリールまたは $C_6 \sim C_{24}$ 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。

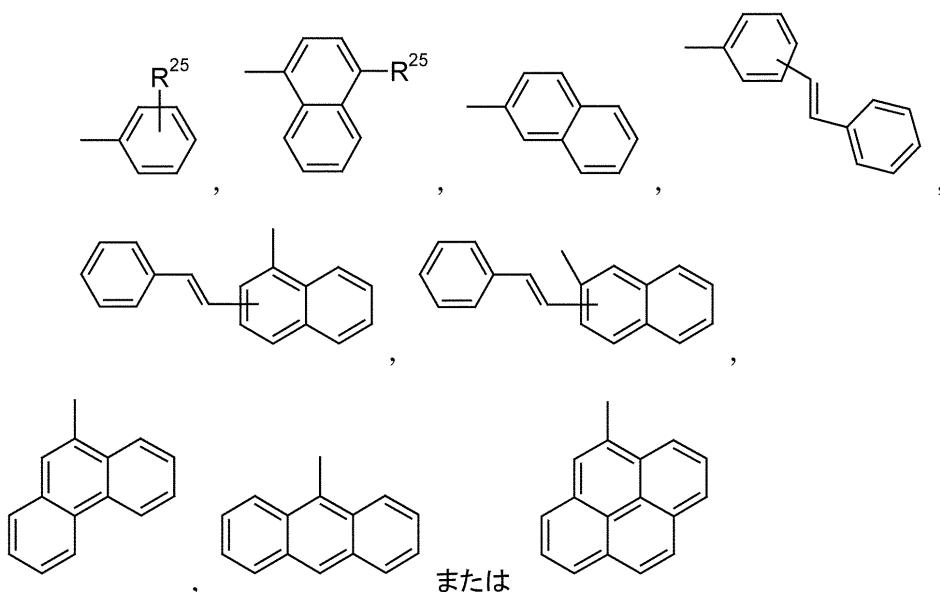
【請求項8】

R^{13} および R^{14} が、互いに独立して、 $C_1 \sim C_8$ アルキル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル（ $C_1 \sim C_8$ アルキルおよび/または $C_1 \sim C_8$ アルコキシで1~3回置換されていてよい）、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回置換されていてよい）、あるいは $-CR^{11}R^{12}-$ 、 $(C_2H_2)_m - A^6$ （式中、 R^{11} および R^{12} は、水素または $C_1 \sim C_4$ アルキルを表し、 A^6 は、 $C_1 \sim C_8$ 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】

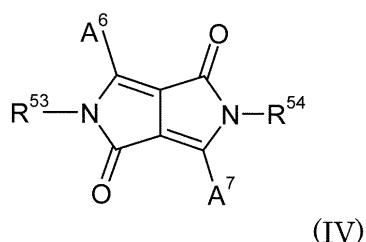


（式中、 R^{25} は、 $C_1 \sim C_8$ アルキル、フェニル、1-または2-ナフチルである）を表す、請求項6~8のいずれか1項記載の組成物。

【請求項10】

ホスト発色団が、式(IV)：

【化20】



[式中、

R⁵³およびR⁵⁴は、同一または異なっていてもよい、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、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、A⁸または-CR⁶⁰R⁶¹-（CH₂)_m-A⁸〔式中、

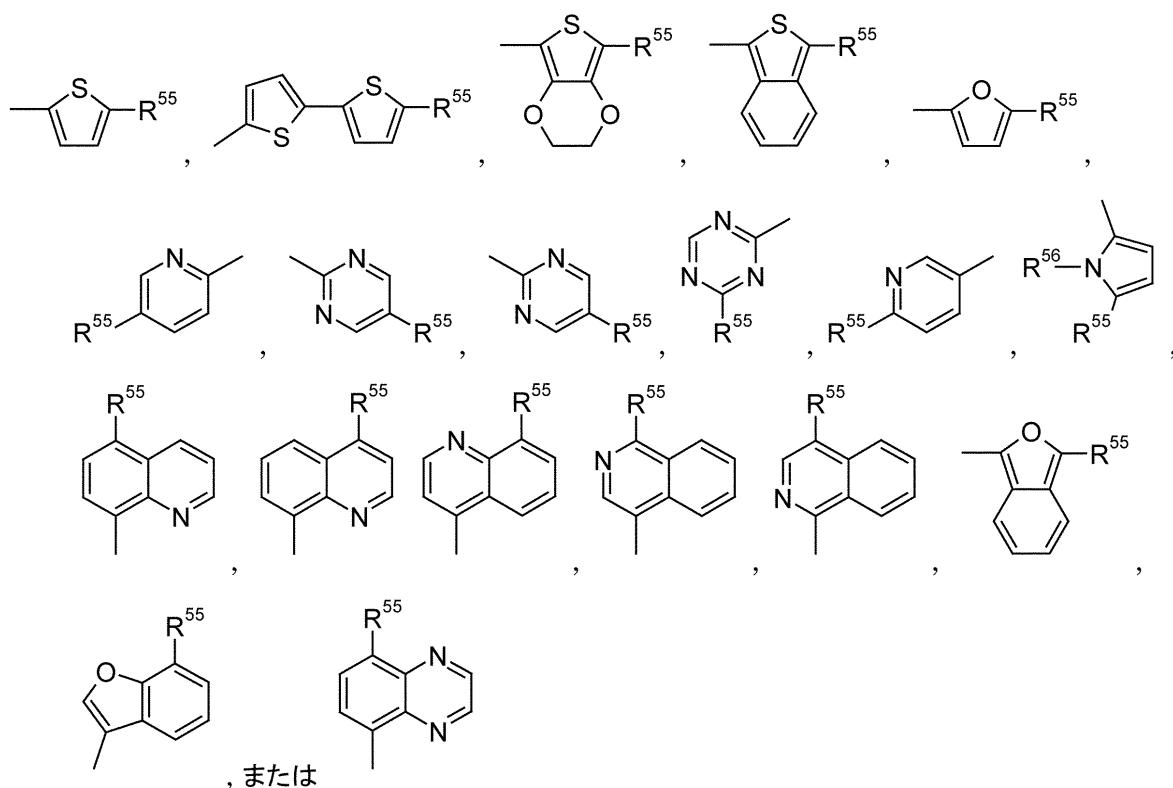
R⁶⁰およびR⁶¹は、互いに独立して、水素、C₁～C₄アルキル、またはフェニル（C₁～C₄アルキルで1～3回置換されていてもよい）を表し、

A⁸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（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、

mは、0、1、2、3または4を表す〕から選択され、

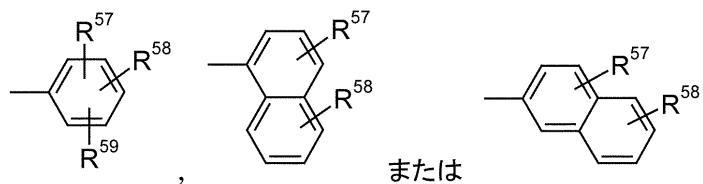
A⁶およびA⁷は、互いに独立して、

【化21】



〔式中、R⁵⁵は、水素原子、C₁～C₁₂アルキル基、C₁～C₈アルコキシ基、または式：

【化22】



〔式中、R⁵⁷、R⁵⁸およびR⁵⁹は、互いに独立して、水素、C₁～C₈アルキルまたはC₁～C₈アルコキシを表す〕で示される基であり、

R⁵⁶は、水素またはC₁～C₈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、R³⁸は、水素またはC₁～C₄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。