

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号

特許第7547342号

(P7547342)

(45)発行日 令和6年9月9日(2024.9.9)

(24)登録日 令和6年8月30日(2024.8.30)

(51)国際特許分類

F I

C 0 7 D 471/06 (2006.01)

C 0 7 D 471/06

C S P

C 0 9 K 11/06 (2006.01)

C 0 9 K 11/06

6 9 0

H 1 0 K 50/10 (2023.01)

H 0 5 B 33/14

B

H 1 0 K 50/16 (2023.01)

H 0 5 B 33/22

B

H 1 0 K 50/15 (2023.01)

H 0 5 B 33/22

D

請求項の数 15 (全177頁)

(21)出願番号 特願2021-535741(P2021-535741)

(86)(22)出願日 令和1年12月17日(2019.12.17)

(65)公表番号 特表2022-514617(P2022-514617
A)

(43)公表日 令和4年2月14日(2022.2.14)

(86)国際出願番号 PCT/EP2019/085506

(87)国際公開番号 WO2020/127165

(87)国際公開日 令和2年6月25日(2020.6.25)

審査請求日 令和4年11月29日(2022.11.29)

(31)優先権主張番号 18213861.0

(32)優先日 平成30年12月19日(2018.12.19)

(33)優先権主張国・地域又は機関
欧州特許庁(EP)

(73)特許権者 597035528

メルク パテント ゲーエムベーハー
ドイツ国, D-6 4 2 9 3 ダルムスタ
ッド フランクフルター ストラッセ 2
5 0

(74)代理人 110003708

弁理士法人鈴榮特許総合事務所

(74)代理人 100108855

弁理士 蔵田 昌俊

(74)代理人 100103034

弁理士 野河 信久

(74)代理人 100179062

弁理士 井上 正

(74)代理人 100199565

弁理士 飯野 茂

最終頁に続く

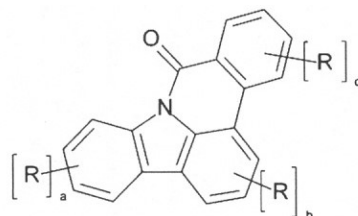
(54)【発明の名称】 有機エレクトロルミネッセントデバイスのための材料

(57)【特許請求の範囲】

【請求項1】

式(1)の化合物

【化1】

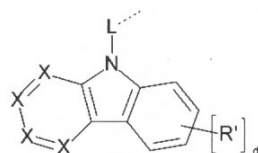


式(1)

(ただし、Y基を表す少なくとも1つのRラジカルが存在し、ここで、使用されている記号および添え字は、下記の通りであり：

Yは、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、式(2)の基であり、

【化2】

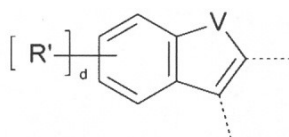


式(2)

(式中、点線の結合は、前記式(1)中のこの基の連結を示す)；

Xは、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、CR'である、または2つの隣接するXは式(3)の基であり、残りのXは、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、CR'であり、

【化3】



式(3)

(式中、点線の結合は、前記式(2)中のこの基の連結を示す)；

Vは、NR'、C(R')₂、OまたはSであり；

Lは、5～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系であり、1つ以上のR'ラジカルにより置換されていてもよく；

R、R'は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、H、D、F、Cl、Br、I、N(Ar')₂、N(R¹)₂、OAr'、SAr'、CN、N₂O、OR¹、SR¹、COOR¹、C(=O)N(R¹)₂、Si(R¹)₃、B(OR¹)₂、C(=O)R¹、P(=O)(R¹)₂、S(=O)R¹、S(=O)₂R¹、OSO₂R¹、1～20個の炭素原子を有する直鎖アルキル基または2～20個の炭素原子を有するアルケニルもしくはアルキニル基または3～20個の炭素原子を有する分枝もしくは環状アルキル基(ここで、前記アルキル、アルケニルもしくはアルキニル基は、各場合において1つ以上のR¹ラジカルにより置換されていてもよい)(ここで、1つ以上の隣接していないCH₂基は、Si(R¹)₂、C=O、NR¹、O、SもしくはCONR¹により置きかえられていてもよい)、または5～60個の芳香族環原子、好ましくは5～40個の芳香族環原子を有する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系であり、各場合において1つ以上のR¹ラジカルにより置換されていてもよく；同時に、2つのRラジカルは共に脂肪族、ヘテロ脂肪族、芳香族もしくはヘテロ芳香族環系を形成してもよく；加えて、2つのR'ラジカルは共に脂肪族、ヘテロ脂肪族、芳香族もしくはヘテロ芳香族環系を形成してもよく；ただし少なくとも1つのRラジカルは、Y基であり；

Ar'は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、5～40個の芳香族環原子を有する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系であり、1つ以上のR¹ラジカルにより置換されていてもよく；

R¹は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、H、D、F、Cl、Br、I、N(R²)₂、CN、NO₂、OR²、SR²、Si(R²)₃、B(OR²)₂、C(=O)R²、P(=O)(R²)₂、S(=O)R²、S(=O)₂R²、OSO₂R²、1～20個の炭素原子を有する直鎖アルキル基または2～20個の炭素原子を有するアルケニルもしくはアルキニル基または3～20個の炭素原子を有する分枝もしくは環状アルキル基(ここで、前記アルキル、アルケニルもしくはアルキニル基は、それぞれ1つ以上のR²ラジカルにより置換されていてもよい)(ここで、1つ以上の隣接していないCH₂基は、Si(R²)₂、C=O、NR²、O、SもしくはCONR²により置きかえられていてもよく、ここで、アルキル、アルケニルもしくはアルキニル基中の1つ以上の水素原子は、D、F、Cl、Br、IもしくはCNにより置きかえられていてもよい)、

10

20

30

40

50

または5～40個の芳香族環原子を有する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系であり、各場合において1つ以上の R^2 ラジカルにより置換されていてもよく；同時に、2個以上の R^1 ラジカルは共に脂肪族、ヘテロ脂肪族、芳香族もしくはヘテロ芳香族環系を形成してもよく；

R^2 は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、H、D、F、CNまたは1～20個の炭素原子を有する脂肪族、芳香族もしくはヘテロ芳香族有機ラジカル、とりわけヒドロカルビルラジカルであり、ここで1個以上の水素原子も、Fにより置きかえられていてもよく；

aは、0、1、2、3または4であり；

bは、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、0、1、2または3であり；

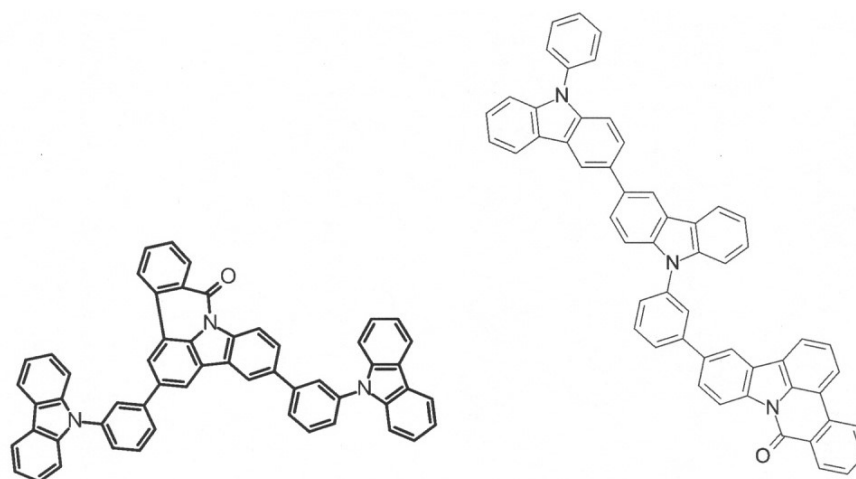
cは、0、1、2、3または4であり；

dは、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、0、1、2、3または4であり；

ただし、 $a + b + c \geq 1$ であり；

本発明から以下の化合物：

【化4】

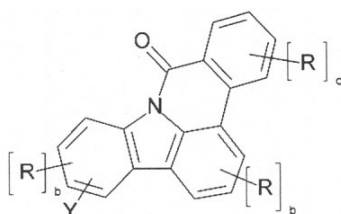


を除外する)。

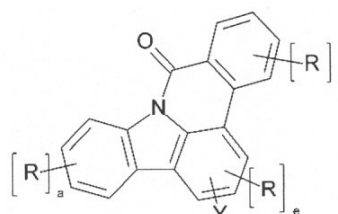
【請求項2】

式(4)～(6)の化合物

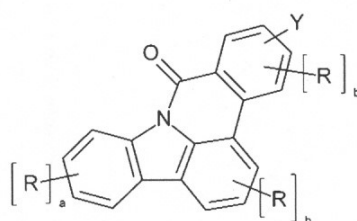
【化5】



式(4)



式(5)



式(6)

10

20

30

40

50

(式中、記号および添え字は、請求項 1 に記載の定義を有し、これに加えて：

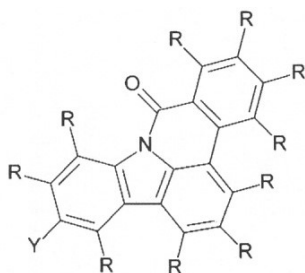
e は、0、1 または 2 である)

から選択される、請求項 1 に記載の化合物。

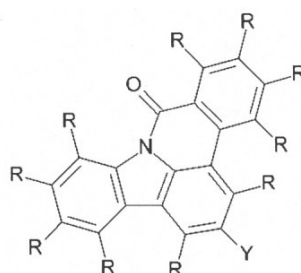
【請求項 3】

式 (4 a) ~ (6 a) の化合物

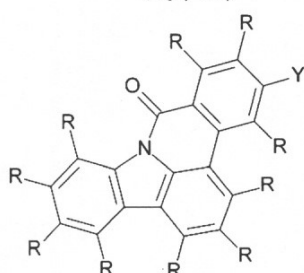
【化 6】



式(4a)



式(5a)



式(6a)

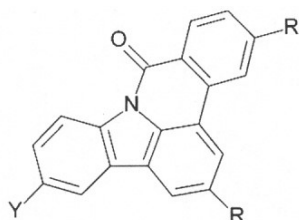
(式中、記号は、請求項 1 に記載の定義を有する)

から選択される、請求項 1 または 2 に記載の化合物。

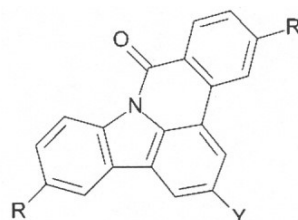
【請求項 4】

式 (4 b) ~ (6 b) の化合物

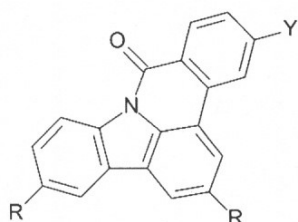
【化 7】



式(4b)



式(5b)



式(6b)

(式中、記号は、請求項 1 に記載の定義を有する)

から選択される、請求項 1 ~ 3 の何れか 1 項に記載の化合物。

【請求項 5】

正確に 1 つまたは 2 つの R ラジカルが Y 基であることを特徴とする、請求項 1 ~ 4 の何れか 1 項に記載の化合物。

【請求項 6】

L が、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、6 ～ 24 個の芳香族環原子を有する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系であり、1 つ以上の R' ラジカルにより置換されていてもよく、ここで、L がヘテロ芳香族環系の場合、L が電子不足ヘテロアリアル基を含有しないことを特徴とする、請求項 1 ～ 5 の何れか 1 項に記載の化合物。

【請求項 7】

L が、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、ベンゼン、ビフェニル、テルフェニル、クアテルフェニル、フルオレン、スピロビフルオレン、ナフタレン、カルバゾール、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフエン、インデノカルバゾール、インドロカルバゾール、フェナントレン、トリフェニレンまたは 2 つもしくは 3 つのこれらの基の組合せからなる群から選択され、ここで、これらの基が、それぞれ 1 つ以上の R' ラジカルにより置換されていてもよいことを特徴とする、請求項 1 ～ 6 の何れか 1 項に記載の化合物。

10

【請求項 8】

前記 Y 基が、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、以下の式 (Y-1) ～ (Y-8) :

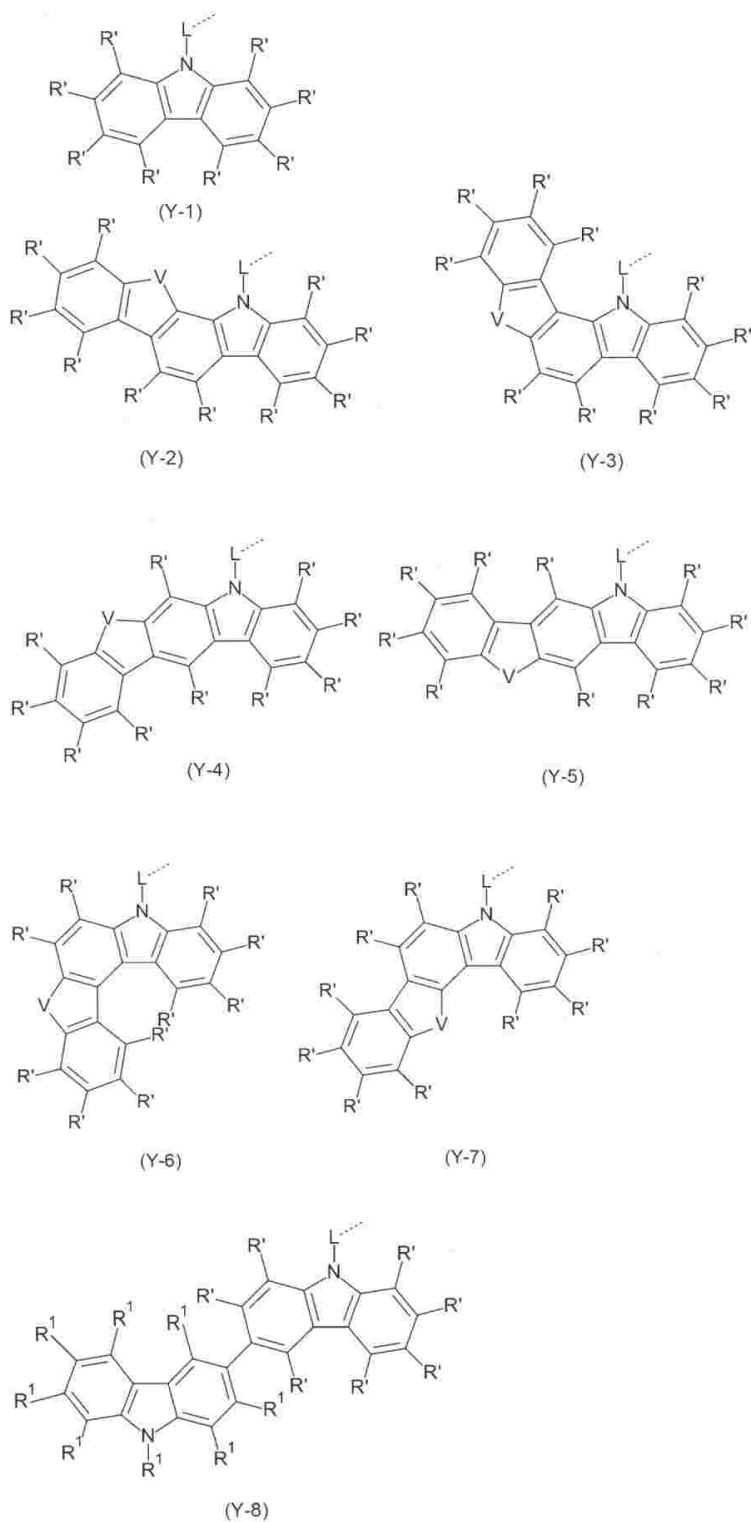
20

30

40

50

【化 8】



(式中、記号は、請求項 1 に記載の定義を有する)
 の基から選択されることを特徴とする、請求項 1 ～ 7 の何れか 1 項に記載の化合物。

【請求項 9】

前記 Y 基が、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、式 (Y-1 a) ～ (Y-8 a)

10

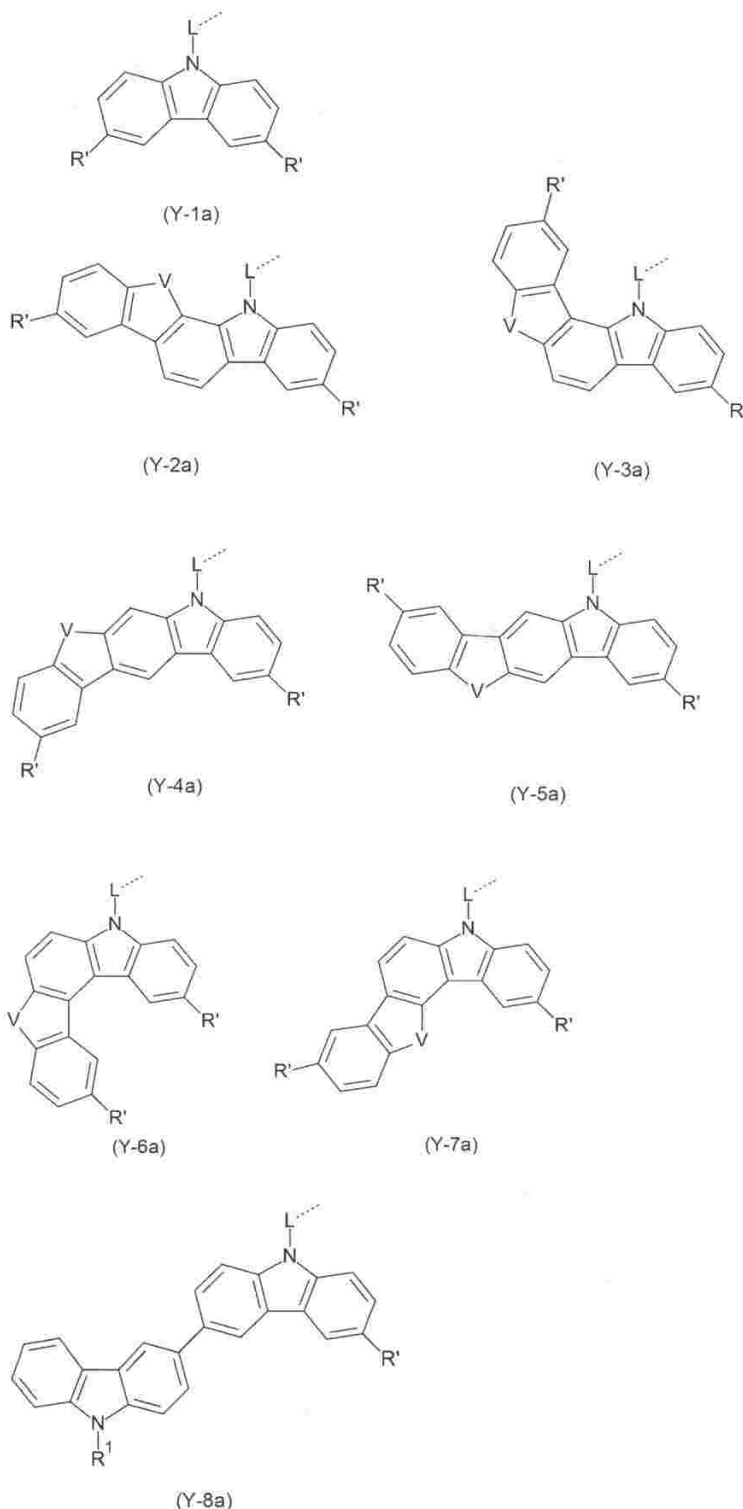
20

30

40

50

【化 9】



(式中、記号は、請求項 1 に記載の定義を有する)

の構造から選択されることを特徴とする、請求項 1 ～ 8 の何れか 1 項に記載の化合物。

【請求項 10】

R および R' が、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、H、D、F、N (Ar')₂、CN、OR¹、1～10 個の炭素原子を有する直鎖アルキル基または 2～10 個の炭素原子を有するアルケニル基または 3～10 個の炭素原子を有する分枝もしくは環状アルキル基 (ここで、アルキルもしくはアルケニル基は、それぞれ 1 つ以上の R¹ ラジカルにより置換されていてもよいが、好ましくは無置換である) (ここで、1 つ以上の隣接していない CH₂ 基は、O により置きかえられていてもよい)、または 6～30 個の芳

香族環原子を有する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系からなる群から選択され、各場合において1つ以上の R^1 ラジカルにより置換されていてもよく；同時に、2つの R ラジカルは共に脂肪族環系を形成してもよく；加えて、2つの R' ラジカルは共に脂肪族もしくは芳香族環系を形成してもよいことを特徴とする、請求項1～9の何れか1項に記載の化合物。

【請求項11】

以下の合成工程：

a) 前記 Y 基ではなく、反応性脱離基をもつラクタム基本骨格を合成する工程；およびb) カップリング反応によって前記 Y 基を導入する工程
を特徴とする、請求項1～10の何れか1項に記載の化合物を調製するための方法。

【請求項12】

請求項1～10の何れか1項に記載の少なくとも1つの化合物および少なくとも1つのさらなる化合物および／または少なくとも1つの溶媒を含む調合物。

【請求項13】

電子デバイスにおける請求項1～10の何れか1項に記載の化合物の使用。

【請求項14】

請求項1～10の何れか1項に記載の少なくとも1つの化合物を含む電子デバイス。

【請求項15】

請求項1～10の何れか1項に記載の化合物が、リン光発光体またはTADFを示す発光体のマトリックス材料として発光層で使用される、かつ／または電子輸送層および／または正孔阻止層および／または正孔輸送層および／または励起子阻止層で使用されることを特徴とする、有機エレクトロルミネッセントデバイスである、請求項14に記載の電子デバイス。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、電子デバイス、とりわけ有機エレクトロルミネッセントデバイスに使用するための材料、およびこれらの材料を含む電子デバイス、とりわけ有機エレクトロルミネッセントデバイスに関する。

【0002】

有機エレクトロルミネッセントデバイス(OLED)に使用される発光材料は、しばしばリン光性の有機金属錯体である。一般的には、たとえば効率、作動電圧および寿命に関して、OLED、とりわけ三重項発光(リン光)を示すOLEDも改善の必要性が依然としてある。リン光性のOLEDの特性は、使用する三重項発光体だけで決定されない。より詳細には、使用する他の材料、たとえばマトリックス材料も、ここで特に重要である。したがって、これらの材料の改善はまた、OLED特性の改善をもたらす可能性がある。

【0003】

本発明によって対処される問題は、とりわけリン光発光体のためのマトリックス材料としてだが、電子輸送材料、正孔阻止材料または励起子阻止材料としても、OLEDに使用するのに適しており、寿命の改善をもたらす化合物を提供することである。

【0004】

驚くべきことに、以下に詳細に記載されている特定の化合物が、この問題を解決し、OLEDで使用するのに適していることが見出されている。これらのOLEDは、とりわけ、明確に改善された寿命、高効率および低作動電圧を有する。したがって、本発明は、これらの化合物およびこのような化合物を含む電子デバイス、とりわけ有機エレクトロルミネッセントデバイスを提供する。

【0005】

WO 2011/137951は、リン光発光体のためのマトリックス材料としてのラクタムの使用について開示している。後述されているような置換パターンを有するラクタム誘導体の開示はない。

【0006】

10

20

30

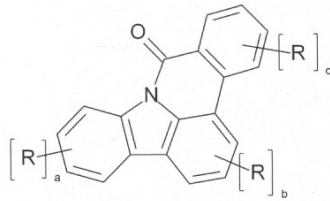
40

50

本発明は、式（１）の化合物

【０００７】

【化１】



式(1)

10

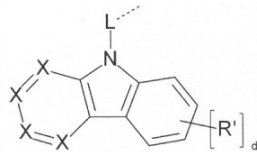
【０００８】

（ただし、Y基を表す少なくとも1つのRラジカルが存在し、ここで、使用されている記号および添え字は、下記の通りであり：

Yは、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、以下の式（２）の基であり：

【０００９】

【化２】



式(2)

20

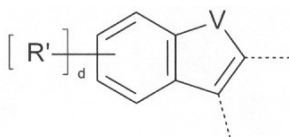
【００１０】

（式中、点線の結合は、式（１）中のこの基の連結を示す）；

Xは、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、CR'である、または2つの隣接するXは以下の式（３）の基であり、残りのXは、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、CR'であり：

【００１１】

【化３】



式(3)

30

【００１２】

（式中、点線の結合は、式（２）中のこの基の連結を示す）；

Vは、NR'、C(R')₂、OまたはSであり；

Lは、5～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系であり、1つ以上のR'ラジカルにより置換されていてもよく；

40

R、R'は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、H、D、F、Cl、Br、I、N(Ar')₂、N(R¹)₂、OAr'、SAr'、CN、N₂O、OR¹、SR¹、COOR¹、C(=O)N(R¹)₂、Si(R¹)₃、B(OR¹)₂、C(=O)R¹、P(=O)(R¹)₂、S(=O)R¹、S(=O)₂R¹、OSO₂R¹、1～20個の炭素原子を有する直鎖アルキル基または2～20個の炭素原子を有するアルケニルもしくはアルキニル基または3～20個の炭素原子を有する分枝もしくは環状アルキル基（ここで、アルキル、アルケニルもしくはアルキニル基は、各場合において1つ以上のR¹ラジカルにより置換されていてもよい）（ここで、1つ以上の隣接していないCH₂基は、Si(R¹)₂、C=O、NR¹、O、SもしくはCONR¹により置きかえられていてもよい）、または5～60個の芳香族環原子、好ましくは5～40個の芳香族環原子を有

50

する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系であり、各場合において1つ以上の R^1 ラジカルにより置換されていてもよく；同時に、2つの R ラジカルも共に脂肪族、ヘテロ脂肪族、芳香族もしくはヘテロ芳香族環系を形成してもよく；加えて、2つの R' ラジカルも共に脂肪族、ヘテロ脂肪族、芳香族もしくはヘテロ芳香族環系を形成してもよく；ただし少なくとも1つの R ラジカルは、 Y 基であり；

Ar' は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、5～40個の芳香族環原子を有する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系であり、1つ以上の R^1 ラジカルにより置換されていてもよく；

R^1 は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、 H 、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 $N(R^2)_2$ 、 CN 、 NO_2 、 OR^2 、 SR^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 、1～20個の炭素原子を有する直鎖アルキル基または2～20個の炭素原子を有するアルケニルもしくはアルキニル基または3～20個の炭素原子を有する分枝もしくは環状アルキル基（ここで、アルキル、アルケニルもしくはアルキニル基は、それぞれ1つ以上の R^2 ラジカルにより置換されていてもよい）（ここで、1つ以上の隣接していない CH_2 基は、 $Si(R^2)_2$ 、 $C=O$ 、 NR^2 、 O 、 S もしくは $CONR^2$ により置きかえられていてもよく、ここで、アルキル、アルケニルもしくはアルキニル基中の1つ以上の水素原子は、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I もしくは CN により置きかえられていてもよい）、または5～40個の芳香族環原子を有する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系であり、各場合において1つ以上の R^2 ラジカルにより置換されていてもよく；同時に、2つ以上の R^1 ラジカルは共に脂肪族、ヘテロ脂肪族、芳香族もしくはヘテロ芳香族環系を形成してもよく；

R^2 は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、 H 、 D 、 F 、 CN または1～20個の炭素原子を有する脂肪族、芳香族もしくはヘテロ芳香族有機ラジカル、とりわけヒドロカルビルラジカルであり、ここで1個以上の水素原子も、 F により置きかえられていてもよく；

a は、0、1、2、3または4であり；

b は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、0、1、2または3であり；

c は、0、1、2、3または4であり；

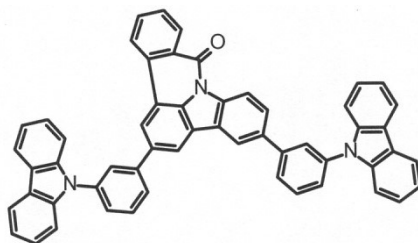
d は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、0、1、2、3または4であり；

ただし、 $a + b + c \geq 1$ であり；

本発明から以下の化合物：

【0013】

【化4】



【0014】

を除外する)

を提供する。

【0015】

本発明に関するアリール基は、6～40個の炭素原子を含有し；本発明に関するヘテロアリール基は、2～40個の炭素原子および少なくとも1個のヘテロ原子を含有し、ただし炭素原子とヘテロ原子の総和は、少なくとも5である。ヘテロ原子は、好ましくは N 、 O および/または S から選択される。アリール基またはヘテロアリール基は、本明細書では、単純な芳香族環、即ちベンゼン、または単純なヘテロ芳香族環、たとえばピリジン、

ピリミジン、チオフェンなど、または縮合（縮環）アリールもしくはヘテロアリール基、たとえばナフタレン、アントラセン、フェナントレン、キノリン、イソキノリンなどの何れかを意味するものと理解される。単結合によって互いに結合している芳香族系、たとえばビフェニルは、それに反して、アリールもしくはヘテロアリール基と呼ばれないが、芳香族環系と呼ばれる。

【0016】

本発明に関する芳香族環系は、環系に、6～60個の炭素原子、好ましくは6～40個の炭素原子を含有する。本発明に関するヘテロ芳香族環系は、環系に、2～60個の炭素原子、好ましくは2～40個の炭素原子、および少なくとも1個のヘテロ原子を含有し、ただし炭素原子とヘテロ原子の総和は、少なくとも5である。ヘテロ原子は、好ましくはN、Oおよび／またはSから選択される。本発明に関する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系は、必ずしもアリールもしくはヘテロアリール基のみを含有しないが、2個以上のアリールもしくはヘテロアリール基が、非芳香族単位、たとえば炭素、窒素または酸素原子によって結合されることも可能である系を意味すると当然に理解される。これらは同様に、2個以上のアリールもしくはヘテロアリール基、たとえばビフェニル、テルフェニル、ビピリジンまたはフェニルピリジンが互いに直接結合している系を意味すると当然に理解される。たとえば、系、たとえばフルオレン、9,9'-スピロビフルオレン、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、スチルベンなども、本発明に関する芳香族環系と当然見なされ、同様に2個以上のアリール基が、たとえば、短いアルキル基によって結合されている系も、本発明に関する芳香族環系と当然見なされる。

【0017】

本発明に関して、1～40個の炭素原子を含有していてもよく、個々の水素原子またはCH₂基が上述の基により置換されていてもよい、脂肪族ヒドロカルビルラジカルまたはアルキル基またはアルケニルもしくはアルキニル基は、好ましくはメチル、エチル、n-プロピル、i-プロピル、n-ブチル、i-ブチル、s-ブチル、t-ブチル、2-メチルブチル、n-ペンチル、s-ペンチル、ネオペンチル、シクロペンチル、n-ヘキシル、ネオヘキシル、シクロヘキシル、n-ヘプチル、シクロヘプチル、n-オクチル、シクロオクチル、2-エチルヘキシル、トリフルオロメチル、ペンタフルオロエチル、2,2,2-トリフルオロエチル、エテニル、プロペニル、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、エチニル、プロピニル、ブチニル、ペンチニル、ヘキシニル、ヘプチニルまたはオクチニルラジカルを意味するものと理解される。1～40個の炭素原子を有するアルコキシ基OR¹は、好ましくはメトキシ、トリフルオロメトキシ、エトキシ、n-プロポキシ、i-プロポキシ、n-ブトキシ、i-ブトキシ、s-ブトキシ、t-ブトキシ、n-ペントキシ、s-ペントキシ、2-メチルブトキシ、n-ヘキソキシ、シクロヘキシルオキシ、n-ヘプトキシ、シクロヘプチルオキシ、n-オクチルオキシ、シクロオクチルオキシ、2-エチルヘキシルオキシ、ペンタフルオロエトキシおよび2,2,2-トリフルオロエトキシを意味するものと理解される。1～40個の炭素原子を有するチオアルキル基SR¹は、特にメチルチオ、エチルチオ、n-プロピルチオ、i-プロピルチオ、n-ブチルチオ、i-ブチルチオ、s-ブチルチオ、t-ブチルチオ、n-ペンチルチオ、s-ペンチルチオ、n-ヘキシルチオ、シクロヘキシルチオ、n-ヘプチルチオ、シクロヘプチルチオ、n-オクチルチオ、シクロオクチルチオ、2-エチルヘキシルチオ、トリフルオロメチルチオ、ペンタフルオロエチルチオ、2,2,2-トリフルオロエチルチオ、エテニルチオ、プロペニルチオ、ブテニルチオ、ペンテニルチオ、シクロペンテニルチオ、ヘキセニルチオ、シクロヘキセニルチオ、ヘプテニルチオ、シクロヘプテニルチオ、オクテニルチオ、シクロオクテニルチオ、エチニルチオ、プロピニルチオ、ブチ

ニルチオ、ペンチニルチオ、ヘクシニルチオ、ヘプチニルチオまたはオクチニルチオを意味するものと理解される。一般に、本発明によるアルキル、アルコキシもしくはチオアルキル基は、直鎖、分枝または環状であってもよく、ここで、1つ以上の隣接していないC_H₂基は、上述の基によって置きかえられていてもよく；加えて、1つ以上の水素原子がD、F、Cl、Br、I、CNまたはNO₂、好ましくはF、ClまたはCN、より好ましくはFまたはCNによって置きかえられることも可能である。

【0018】

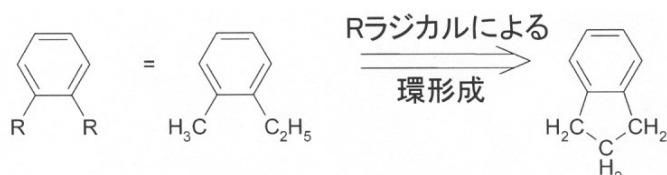
5～60個の芳香族環原子を有し、各場合において上述のR²ラジカルまたはヒドロカルビルラジカルによって置換されていてもよく、任意所望の位置を介して芳香族もしくはヘテロ芳香族系と結合していてもよい、芳香族もしくはヘテロ芳香族環系は、とりわけ、ベンゼン、ナフタレン、アントラセン、ベンズアントラセン、フェナントレン、ピレン、クリセン、ペリレン、フルオランテン、ナフタセン、ペンタセン、ベンゾピレン、ビフェニル、ビフェニレン、テルフェニル、トリフェニレン、フルオレン、スピロビフルオレン、ジヒドロフェナントレン、ジヒドロピレン、テトラヒドロピレン、cis-またはtrans-インデノフルオレン、cis-またはtrans-インデノカルバゾール、cis-またはtrans-インドロカルバゾール、トルキセン、イソトルキセン、スピロトルキセン、スピロイソトルキセン、フラン、ベンゾフラン、イソベンゾフラン、ジベンゾフラン、チオフエン、ベンゾチオフエン、イソベンゾチオフエン、ジベンゾチオフエン、ピロール、インドール、イソインドール、カルバゾール、ピリジン、キノリン、イソキノリン、アクリジン、フェナントリジン、ベンゾ-5, 6-キノリン、ベンゾ-6, 7-キノリン、ベンゾ-7, 8-キノリン、フェノチアジン、フェノキサジン、ピラゾール、インダゾール、イミダゾール、ベンズイミダゾール、ナフトイミダゾール、フェナントロイミダゾール、ピリジイミダゾール、ピラジニイミダゾール、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、フェナントロオキサゾール、イソオキサゾール、1, 2-チアゾール、1, 3-チアゾール、ベンゾチアゾール、ピリダジン、ヘキサアザトリフェニレン、ベンゾピリダジン、ピリミジン、ベンゾピリミジン、キノキサリン、1, 5-ジアザアントラセン、2, 7-ジアザピレン、2, 3-ジアザピレン、1, 6-ジアザピレン、1, 8-ジアザピレン、4, 5-ジアザピレン、4, 5, 9, 10-テトラアザペリレン、ピラジン、フェナジン、フェノキサジン、フェノチアジン、フルオルビン、ナフチリジン、アザカルバゾール、ベンゾカルボリン、フェナントロリン、1, 2, 3-トリアゾール、1, 2, 4-トリアゾール、ベンゾトリアゾール、1, 2, 3-オキサジアゾール、1, 2, 4-オキサジアゾール、1, 2, 5-オキサジアゾール、1, 3, 4-オキサジアゾール、1, 2, 3-チアジアゾール、1, 2, 4-チアジアゾール、1, 2, 5-チアジアゾール、1, 3, 4-チアジアゾール、1, 3, 5-トリアジン、1, 2, 4-トリアジン、1, 2, 3-トリアジン、テトラゾール、1, 2, 4, 5-テトラジン、1, 2, 3, 4-テトラジン、1, 2, 3, 5-テトラジン、プリン、プテリジン、インドリジンおよびベンゾチアジアゾール、またはこれらの系の組合せによって誘導される基を意味するものと理解される。

【0019】

2つ以上のラジカルが共に環を形成してもよいという表現は、本明細書に関して、とりわけ、2つのラジカルが化学結合により互いに結合し、2つの水素原子を形式的に除去されることを意味すると当然に理解される。これは、以下のスキームによって示される：

【0020】

【化5】



10

20

30

40

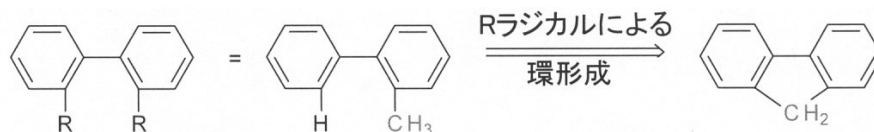
50

【0021】

ただし、これに加えて、上述の表現は、2つのラジカルのうち的一方が水素である場合、第2のラジカルは水素原子が結合している位置に結合して環を形成することを意味するものとも当然に理解すべきである。これは、以下のスキームによって示される：

【0022】

【化6】



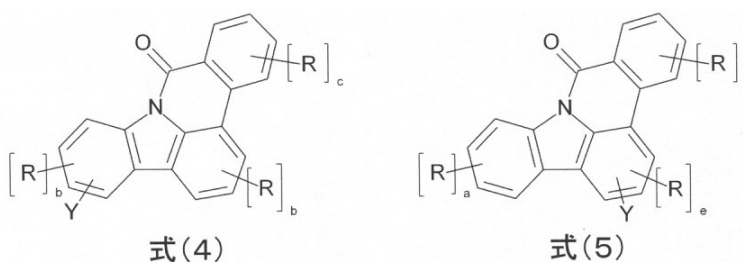
10

【0023】

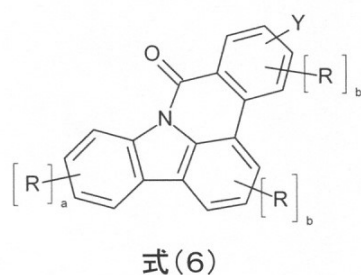
Y基の位置によって種々の異性体が生じる。これらを式(4)～(6)によって以下に表す

【0024】

【化7】



20



30

【0025】

(ここで、使用されている記号および添え字は、上記の定義を有し、これに加えて：
eは、0、1または2である)。

【0026】

式(4)または(5)の化合物が好ましく、式(4)の化合物が特に好ましい。

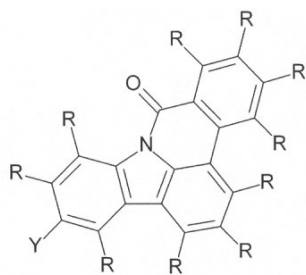
【0027】

式(4)～(6)の化合物の好ましい態様は、以下の式(4a)～(6a)の化合物である：

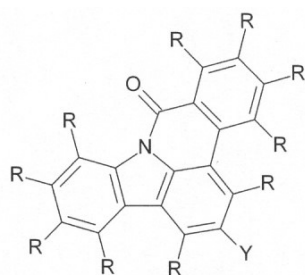
40

【0028】

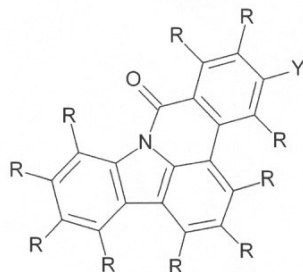
【化 8】



式(4a)



式(5a)



式(6a)

【0029】

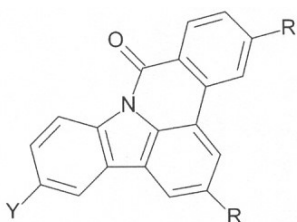
(ここで、使用されている記号は、上記の意味を有している)。

【0030】

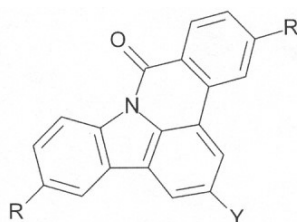
以下の式(4b)～(6b)の化合物が特に好ましい：

【0031】

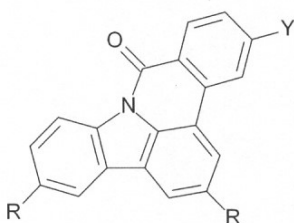
【化 9】



式(4b)



式(5b)



式(6b)

【0032】

(ここで、使用されている記号は、上記の意味を有している)。

【0033】

本発明のさらに好ましい態様において、式(1)の化合物中の正確に1つまたは2つのRラジカルは、Y基であり、より好ましくは正確に1つのRラジカルは、Y基である。

【0034】

Y基の好ましい態様は、以下に記載されている。

【0035】

本発明の好ましい態様において、Lは、それぞれの場合において同じであるかまたは異

10

20

30

40

50

なり、6～24個の芳香族環原子を有する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系であり、1つ以上のR'ラジカルにより置換されていてもよい。Lがヘテロ芳香族環系の場合、好ましくは電子不足ヘテロアリール基を含有せず、ここで、電子不足ヘテロアリール基は、少なくとも1つの窒素原子を有するヘテロ芳香族6員環および／または少なくとも2個のヘテロ原子を有し、少なくともその1個が窒素原子である芳香族5員環を含有することを特徴とし、ここで、芳香族またはヘテロ芳香族基も、これらの基に縮合していてもよい。より好ましくは、Lは、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、6～24個の芳香族環原子を有する芳香族環系であり、あるいはジベンゾフラン、ジベンゾチオフェンまたはカルバゾールであり、ここで、これらの基は、それぞれ1つ以上のR'ラジカルにより置換されていてもよい。最も好ましくは、Lは、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、6～12個の芳香族環原子を有する芳香族環系、とりわけフェニレンであり、ここで、これらの基は、それぞれ1つ以上のR'ラジカルにより置換されていてもよいが、好ましくは無置換である。

10

【0036】

好ましいL基の例は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、ベンゼン、ビフェニル、とりわけオルト、メタもしくはパラビフェニル、テルフェニル、とりわけオルトテルフェニル、メタテルフェニル、パラテルフェニルもしくは分枝テルフェニル、クアテルフェニル、とりわけオルトクアテルフェニル、メタクアテルフェニル、パラクアテルフェニルもしくは分枝クアテルフェニル、フルオレン、スピロビフルオレン、ナフタレン、カルバゾール、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、インデノカルバゾール、インドロカルバゾール、フェナントレン、トリフェニレンまたは2もしくは3つのこれらの基の組合せから選択され、それぞれは、1つ以上のR'ラジカル、好ましくは非芳香族R'ラジカルにより置換されていてもよい。

20

【0037】

適するL基の例は、以下の式(L-1)～(L-67)の構造であり、ここで、点線の結合は、基の連結を示し、構造は、それぞれ、1つ以上のR'ラジカルにより置換されていてもよい：

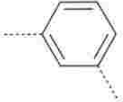
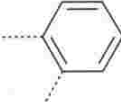
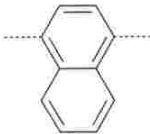
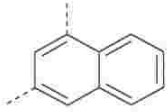
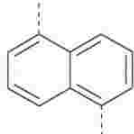
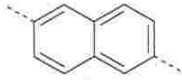
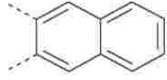
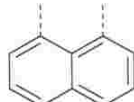
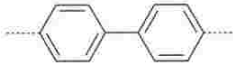
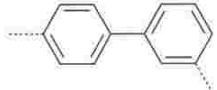
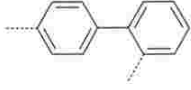
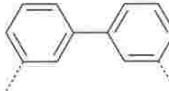
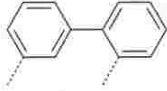
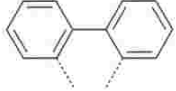
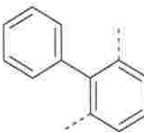
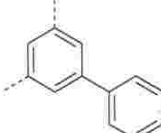
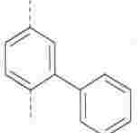
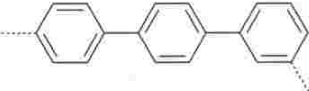
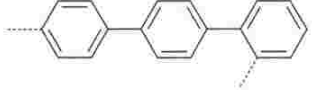
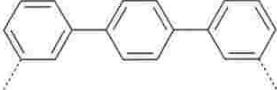
【0038】

30

40

50

【化 1 0 - 1】

		
(L-1)	(L-2)	(L-3)
		
(L-4)	(L-5)	(L-6)
		
(L-7)	(L-8)	(L-9)
		
(L-10)	(L-11)	(L-12)
		
(L-13)	(L-14)	(L-15)
		
(L-16)	(L-17)	(L-18)
		
(L-19)	(L-20)	
		
(L-21)	(L-22)	

【 0 0 3 9】

10

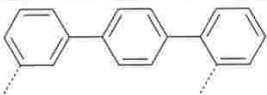
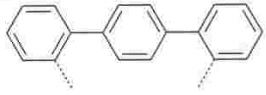
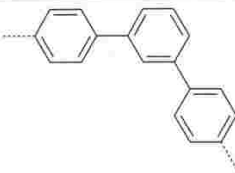
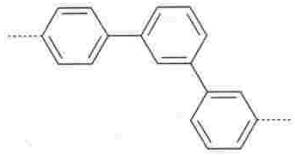
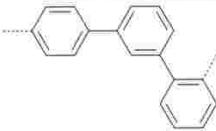
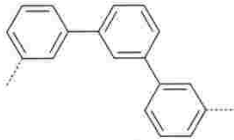
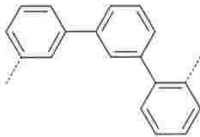
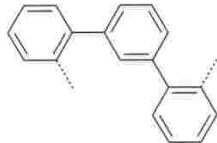
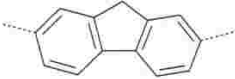
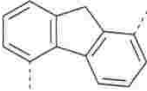
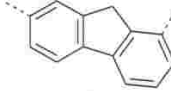
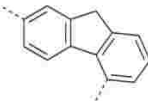
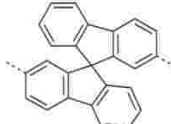
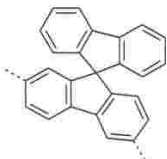
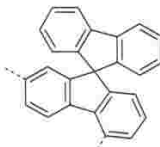
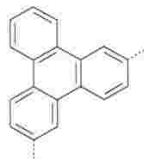
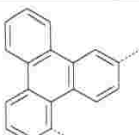
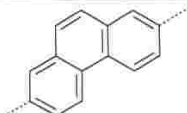
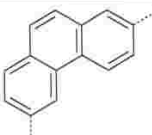
20

30

40

50

【化 1 0 - 2】

			
(L-23)		(L-24)	
			
(L-25)		(L-26)	
			
(L-27)		(L-28)	
			
(L-29)		(L-30)	
			
(L-31)	(L-32)	(L-33)	
			
(L-34)	(L-35)	(L-36)	
			
(L-37)	(L-38)	(L-39)	
			
(L-40)	(L-41)	(L-42)	

【 0 0 4 0】

10

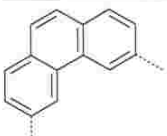
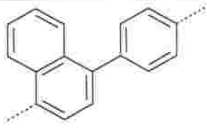
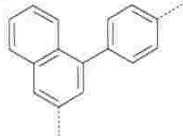
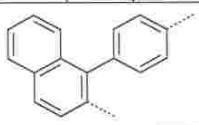
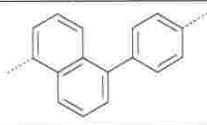
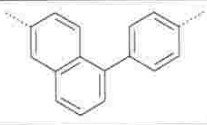
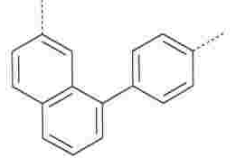
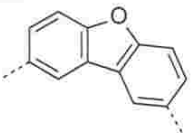
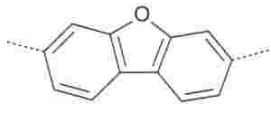
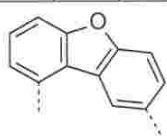
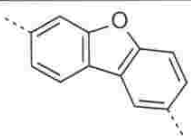
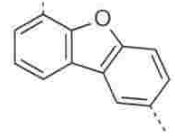
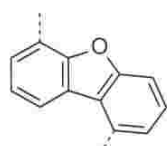
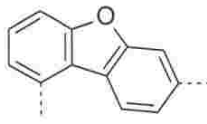
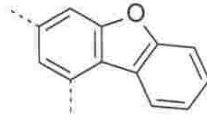
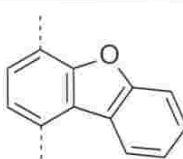
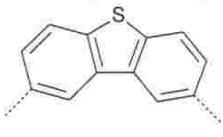
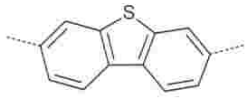
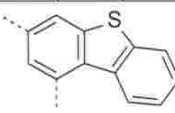
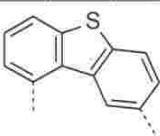
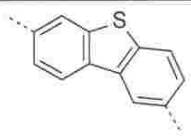
20

30

40

50

【化 1 0 - 3】

		
(L-43)	(L-44)	(L-45)
		
(L-46)	(L-47)	(L-48)
		
(L-49)	(L-50)	(L-51)
		
(L-52)	(L-53)	(L-54)
		
(L-55)	(L-56)	(L-57)
		
(L-58)	(L-59)	(L-60)
		
(L-61)	(L-62)	(L-63)

【 0 0 4 1】

10

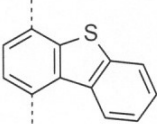
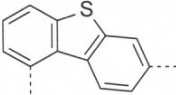
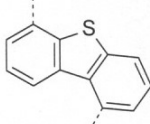
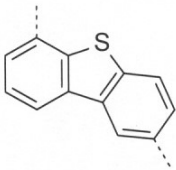
20

30

40

50

【化 1 0 - 4】

		
(L-64)	(L-65)	(L-66)
		
(L-67)		

10

【 0 0 4 2】

構造（L-1）～（L-3）、（L-10）～（L-18）、（L-50）、（L-52）、（L-59）および（L-62）が特に好ましい。

【 0 0 4 3】

Y基は、好ましくは以下の式（Y-1）～（Y-7）の基から選択され：

【 0 0 4 4】

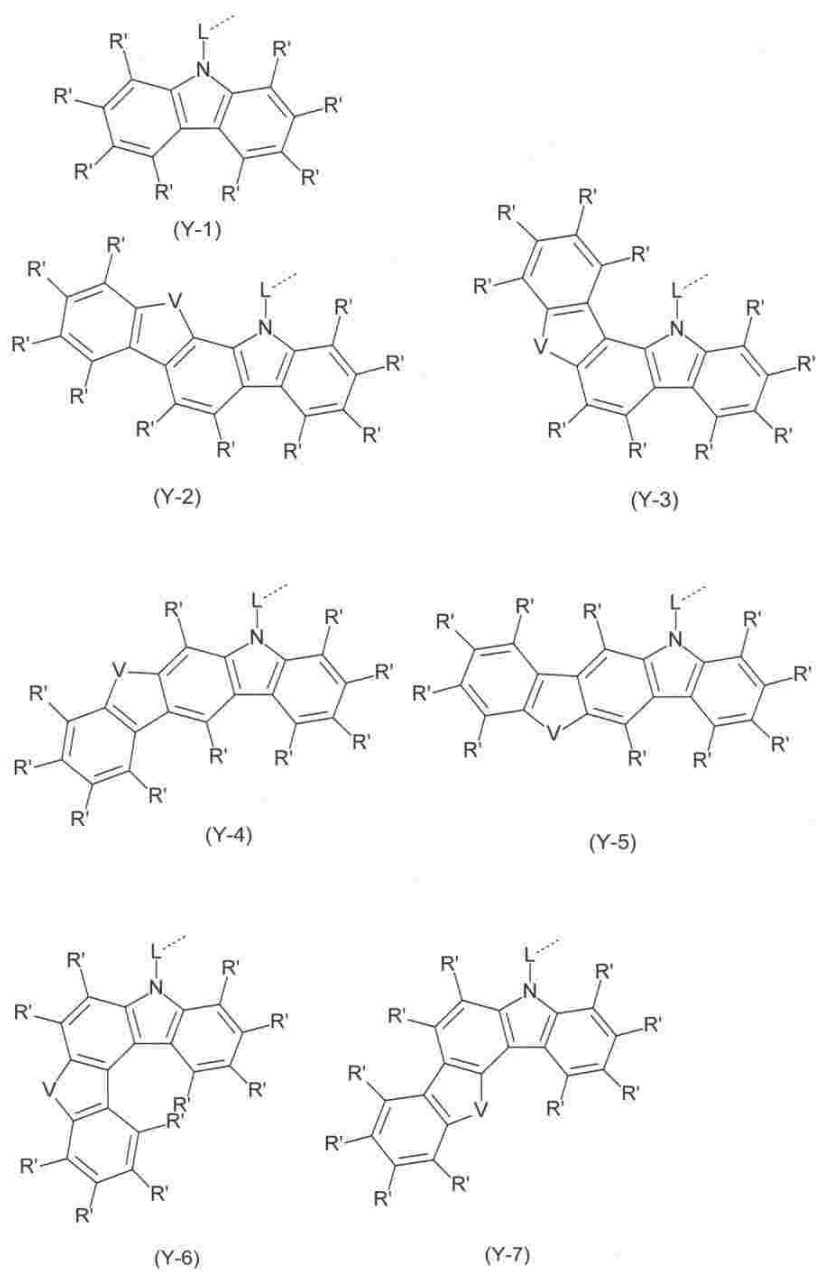
20

30

40

50

【化 1 1】



10

20

30

【 0 0 4 5】

ここで、使用されている記号は、上記の意味を有している。

【 0 0 4 6】

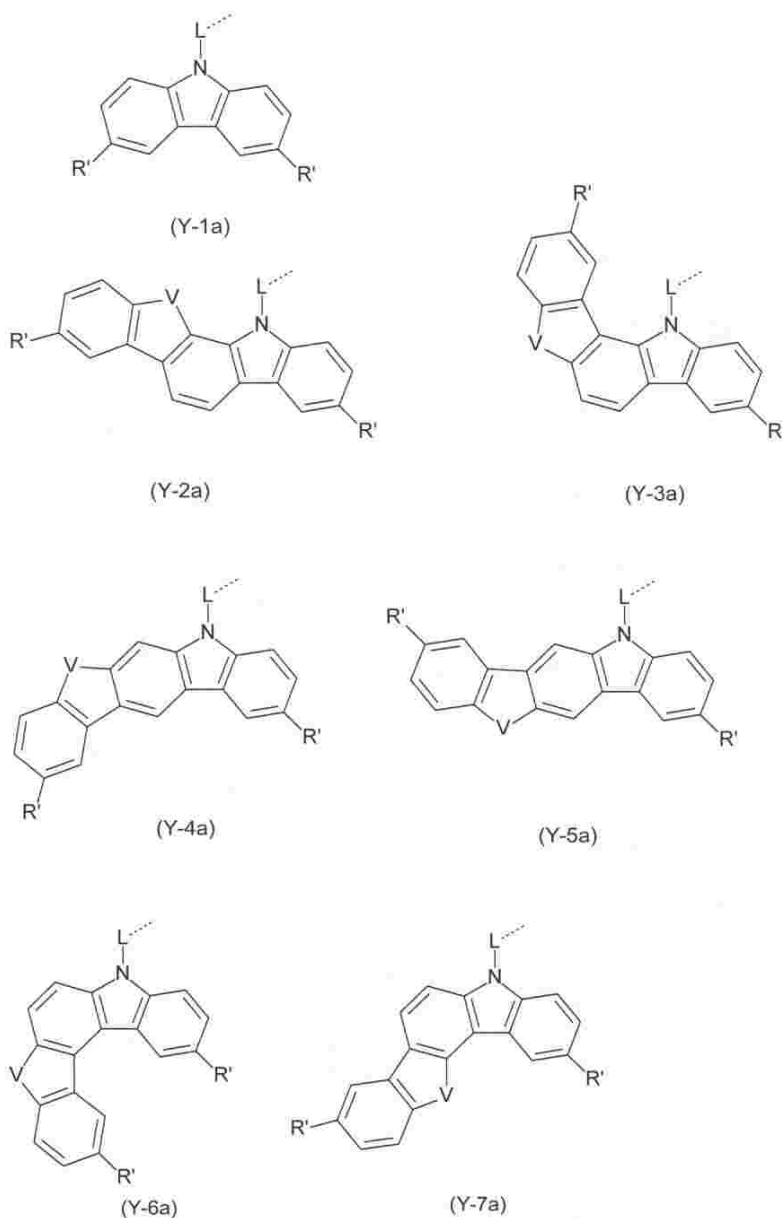
より好ましくは、Y 基は、以下の式 (Y-1 a) ~ (Y-7 a) の構造から選択され：

【 0 0 4 7】

40

50

【化 1 2】



10

20

30

【0048】

ここで、使用されている記号は、上記の意味を有している。

【0049】

式 (Y-2) ~ (Y-7) および (Y-2a) ~ (Y-7a) において、全ての R' ラジカルは、好ましくは H である。

【0050】

加えて、式 (Y-1) または (Y-1a) において、パラ位で窒素原子と結合している少なくとも 1 つの R' ラジカルは、好ましくは水素以外の基である。ここでのこれらの R' ラジカルは、好ましくはそれぞれの場合において同じであるかまたは異なり、6 ~ 24 個の芳香族環原子、より好ましくは 6 ~ 13 個の芳香族環原子を有する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系であり、各場合において 1 つ以上の R¹ ラジカルにより置換されていてもよい。

40

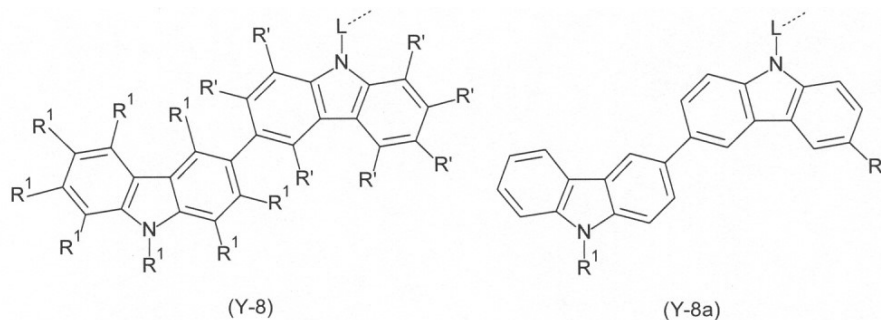
【0051】

基 (Y-1) は、より好ましくは以下の式 (Y-8) の基であり、基 (Y-1a) は、より好ましくは以下の式 (Y-8a) の基である：

【0052】

50

【化13】



10

【0053】

(ここで、窒素原子と結合している R^1 ラジカルは、好ましくは6～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系であり、1つ以上の R^2 ラジカルにより置換されていてもよく、ここで、式(Y-8a)中の R' は、好ましくはHである)。

【0054】

本発明の好ましい態様において、式(1)の化合物または上記の詳細な好ましい構造中、Y基を表すラジカルの他に、合計で3つ以下のRおよび R' ラジカル、より好ましくは合計で2つ以下のRおよび R' ラジカル、最も好ましくは1つ以下のRまたは R' ラジカルは、水素以外の基である。

【0055】

本発明の化合物における好ましい置換基R、 R' 、 Ar' 、 R^1 および R^2 の説明が以下に続く。本発明の特に好ましい態様において、以下でR、 R' 、 Ar' 、 R^1 および R^2 について指定される選択は、同時に起こり、式(1)の構造および上記の詳細な全ての好ましい態様に適用可能である。

20

【0056】

本発明の好ましい態様において、Rおよび R' は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、H、D、F、 $N(Ar')_2$ 、CN、 OR^1 、1～10個の炭素原子を有する直鎖アルキル基または2～10個の炭素原子を有するアルケニル基または3～10個の炭素原子を有する分枝もしくは環状アルキル基(ここで、アルキルもしくはアルケニル基は、それぞれ1つ以上の R^1 ラジカルにより置換されていてもよいが、好ましくは無置換である)(ここで、1つ以上の隣接していない CH_2 基は、Oにより置き換えられていてもよい)、または6～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系からなる群から選択され、各場合において1つ以上の R^1 ラジカルにより置換されていてもよく；同時に、2つのRラジカルも共に脂肪族環系を形成してもよく；加えて、2つの R' ラジカルも共に脂肪族もしくは芳香族環系を形成してもよい。より好ましくは、Rおよび R' は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、H、 $N(Ar')_2$ 、1～6個の炭素原子、とりわけ1、2、3もしくは4個の炭素原子を有する直鎖アルキル基、または3～6個の炭素原子を有する分枝もしくは環状アルキル基(ここで、アルキル基は、各場合において1つ以上の R^1 ラジカルにより置換されていてもよいが、好ましくは無置換である)、または6～24個の芳香族環原子を有する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系からなる群から選択され、各場合において1つ以上の R^1 ラジカル、好ましくは非芳香族 R^1 ラジカルにより置換されていてもよい。最も好ましくは、Rおよび R' は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、Hまたは6～24個の芳香族環原子、好ましくは6～13個の芳香族環原子を有する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系からなる群から選択され、各場合において1つ以上の R^1 ラジカル、好ましくは非芳香族 R^1 ラジカルにより置換されていてもよい。さらに、Rおよび R' が、1つ以上の R^1 ラジカルにより置換されていてもよいトリアリールまたはヘテロアリールアミン基である場合、より好ましいかもしれない。この基は、芳香族もしくはヘテロ芳香族環系の一態様であり、その場合、2つ以上のアリールもしくはヘテロアリール基は、窒素原子により互いに結合している。Rまたは R' が、トリアリールまたはヘテロアリールアミン基である場合、この基は、好

30

40

50

ましくは18～30個の芳香族環原子を有しており、1つ以上の R^1 ラジカル、好ましくは非芳香族 R^1 ラジカルにより置換されていてもよい。

【0057】

本発明のさらに好ましい態様において、 Ar' は、6～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系であり、1つ以上の R^1 ラジカルにより置換されていてもよい。本発明の特に好ましい態様において、 Ar' は、6～24個の芳香族環原子、とりわけ6～13個の芳香族環原子を有する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系であり、1つ以上の好ましくは非芳香族 R^1 ラジカルにより置換されていてもよい。

【0058】

本発明のさらに好ましい態様において、 R^1 は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、H、D、F、CN、 OR^2 、1～10個の炭素原子を有する直鎖アルキル基または2～10個の炭素原子を有するアルケニル基または3～10個の炭素原子を有する分枝もしくは環状アルキル基（ここで、アルキルもしくはアルケニル基は、各場合において1つ以上の R^2 ラジカルにより置換されていてもよい）（ここで、1つ以上の隣接していない CH_2 基は、Oにより置きかえられていてもよい）、または6～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系からなる群から選択され、各場合において1つ以上の R^2 ラジカルにより置換されていてもよく；同時に、2個以上の R^1 ラジカルも共に脂肪族環系を形成してもよい。本発明の特に好ましい態様において、 R^1 は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、H、1～6個の炭素原子、とりわけ1、2、3もしくは4個の炭素原子を有する直鎖アルキル基、または3～6個の炭素原子を有する分枝もしくは環状アルキル基（ここで、アルキル基は、1つ以上の R^2 ラジカルにより置換されていてもよいが、好ましくは無置換である）、または6～24個の芳香族環原子を有する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系からなる群から選択され、各場合において1つ以上の R^2 ラジカルにより置換されていてもよいが、好ましくは無置換である。

【0059】

本発明のさらに好ましい態様において、 R^2 は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、H、F、1～4個の炭素原子を有するアルキル基または6～10個の炭素原子を有するアリール基であり、それは1～4個の炭素原子を有するアルキル基により置換されていてもよいが、好ましくは無置換である。

【0060】

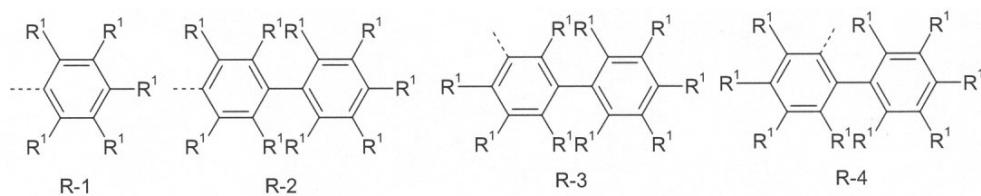
適する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系 R 、 R' または Ar' は、フェニル、ビフェニル、とりわけオルト、メタもしくはパラビフェニル、テルフェニル、とりわけオルト、メタもしくはパラテルフェニルまたは分枝テルフェニル、クアテルフェニル、とりわけオルト、メタもしくはパラクアテルフェニルまたは分枝クアテルフェニル、1、2、3もしくは4位を介して結合していてもよいフルオレン、1、2、3もしくは4位を介して結合していてもよいスピロビフルオレン、1もしくは2位を介して結合していてもよいナフタレン、インドール、ベンゾフラン、ベンゾチオフェン、1、2、3もしくは4位を介して結合していてもよいカルバゾール、1、2、3もしくは4位を介して結合していてもよいジベンゾフラン、1、2、3もしくは4位を介して結合していてもよいジベンゾチオフェン、インドノカルバゾール、インドロカルバゾール、ピリジン、ピリミジン、ピラジン、ピリダジン、トリアジン、キノリン、キナゾリン、ベンズイミダゾール、フェナントレン、トリフェニレンまたは2もしくは3つのこれらの基の組合せから選択され、それぞれは、1つ以上の R^1 ラジカルにより置換されていてもよい。 R または R' または Ar' がヘテロアリール基、とりわけトリアジン、ピリミジン、キナゾリンまたはカルバゾールの場合、このヘテロアリール基上の芳香族もしくはヘテロ芳香族 R^1 ラジカルも選択してもよい。

【0061】

ここでの R もしくは R' 基（芳香族またはヘテロ芳香族環系の場合）、または Ar' は、好ましくは以下の式 $R-1 \sim R-83$ の基から選択される：

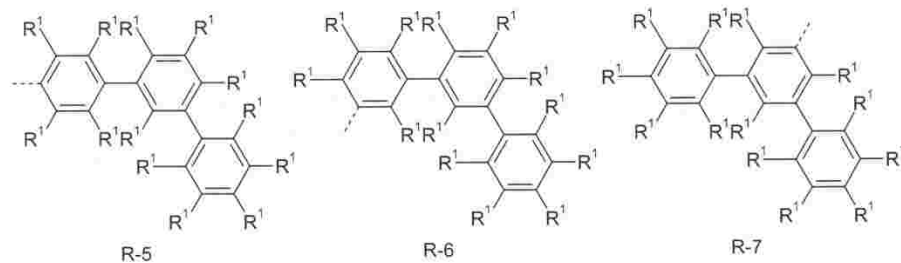
【0062】

【化 1 4 - 1】

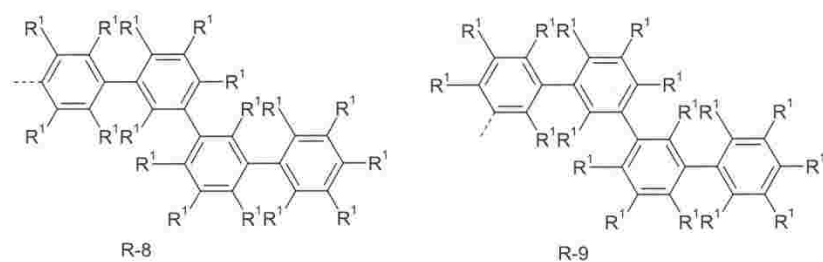


【 0 0 6 3】

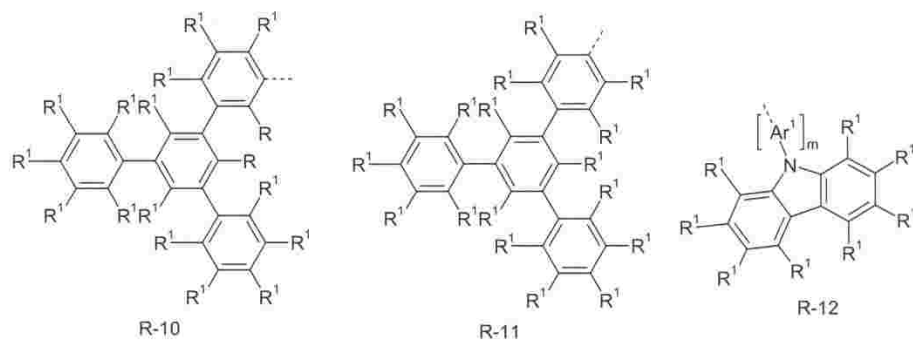
【化 1 4 - 2】



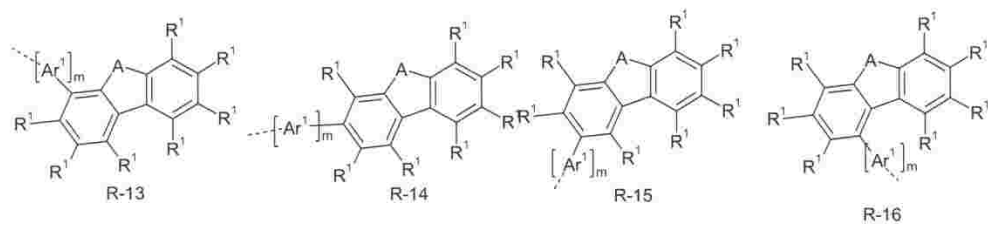
10



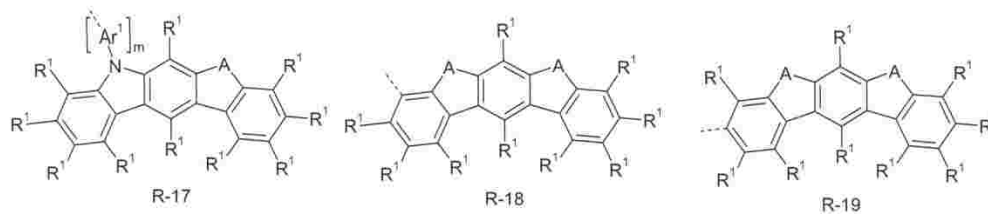
20



30



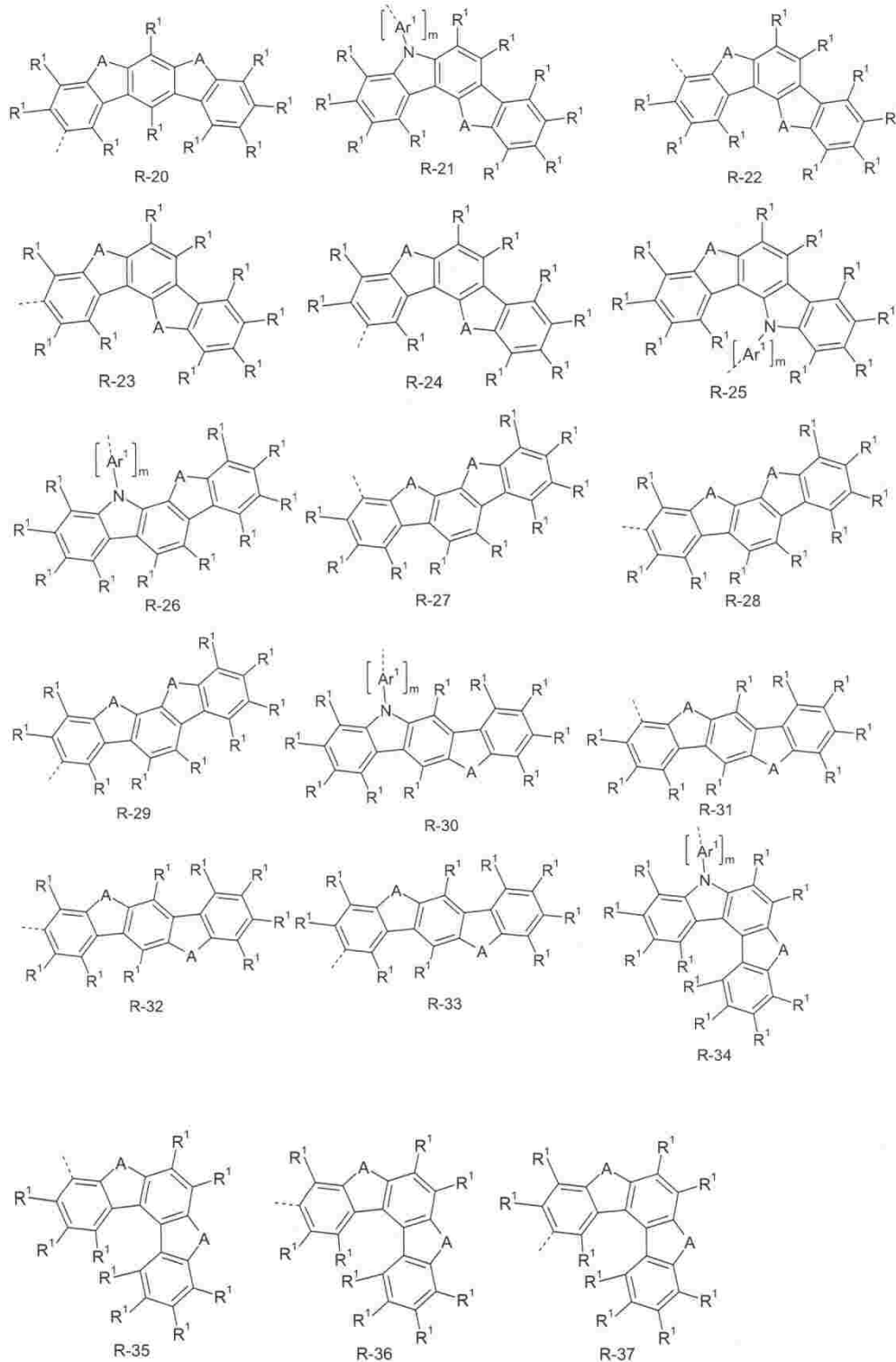
40



【 0 0 6 4】

50

【化 1 4 - 3】



【0 0 6 5】

10

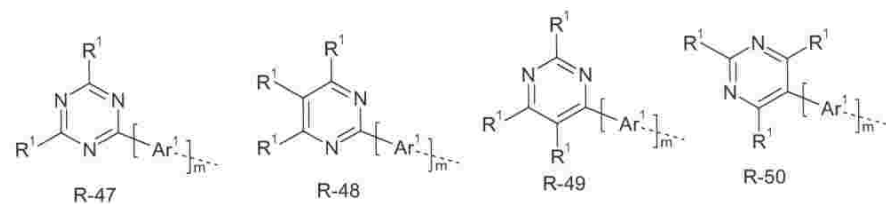
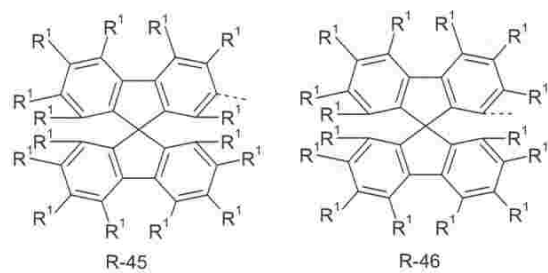
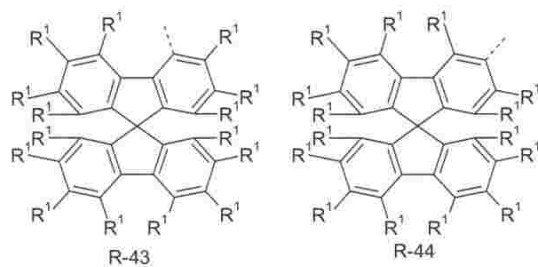
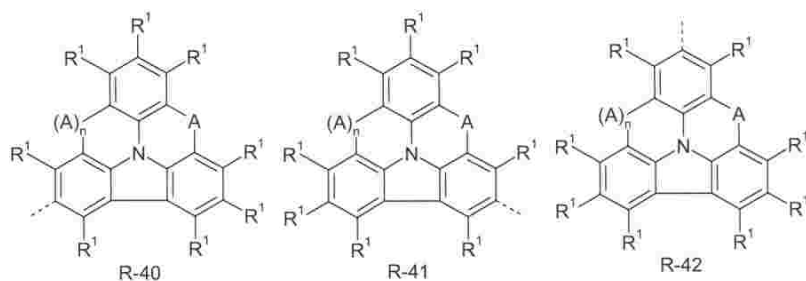
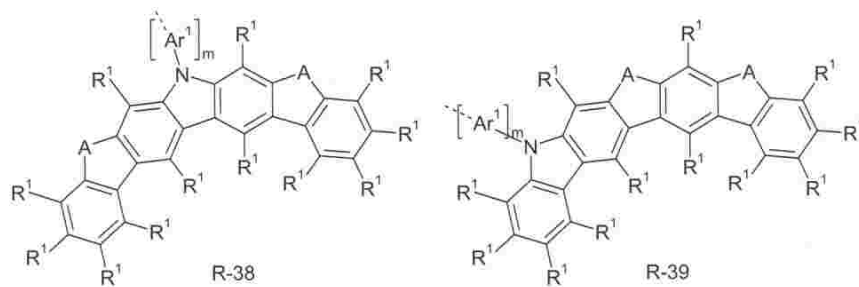
20

30

40

50

【化 1 4 - 4】



【 0 0 6 6】

10

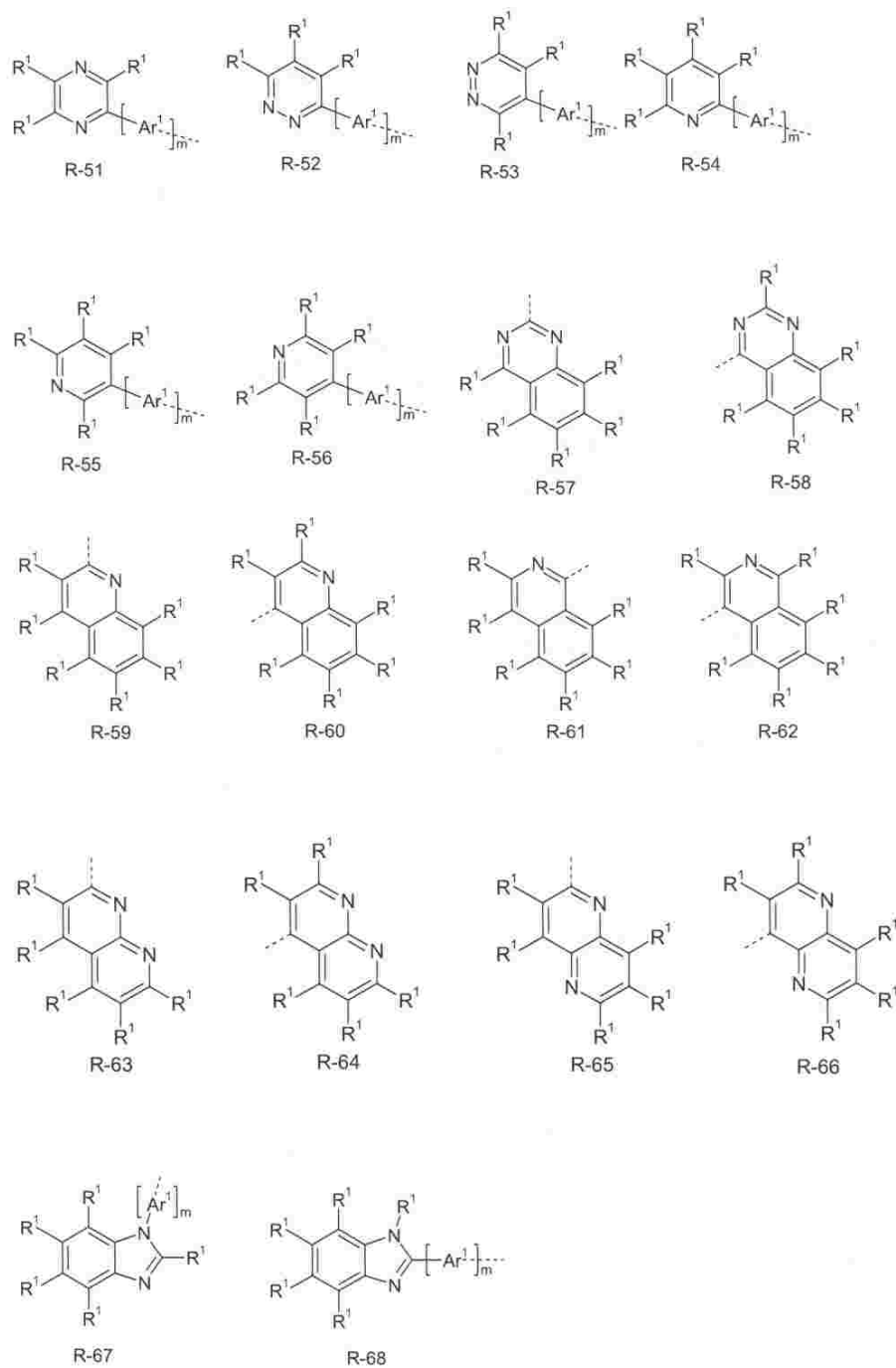
20

30

40

50

【化 1 4 - 5】



【0 0 6 7】

10

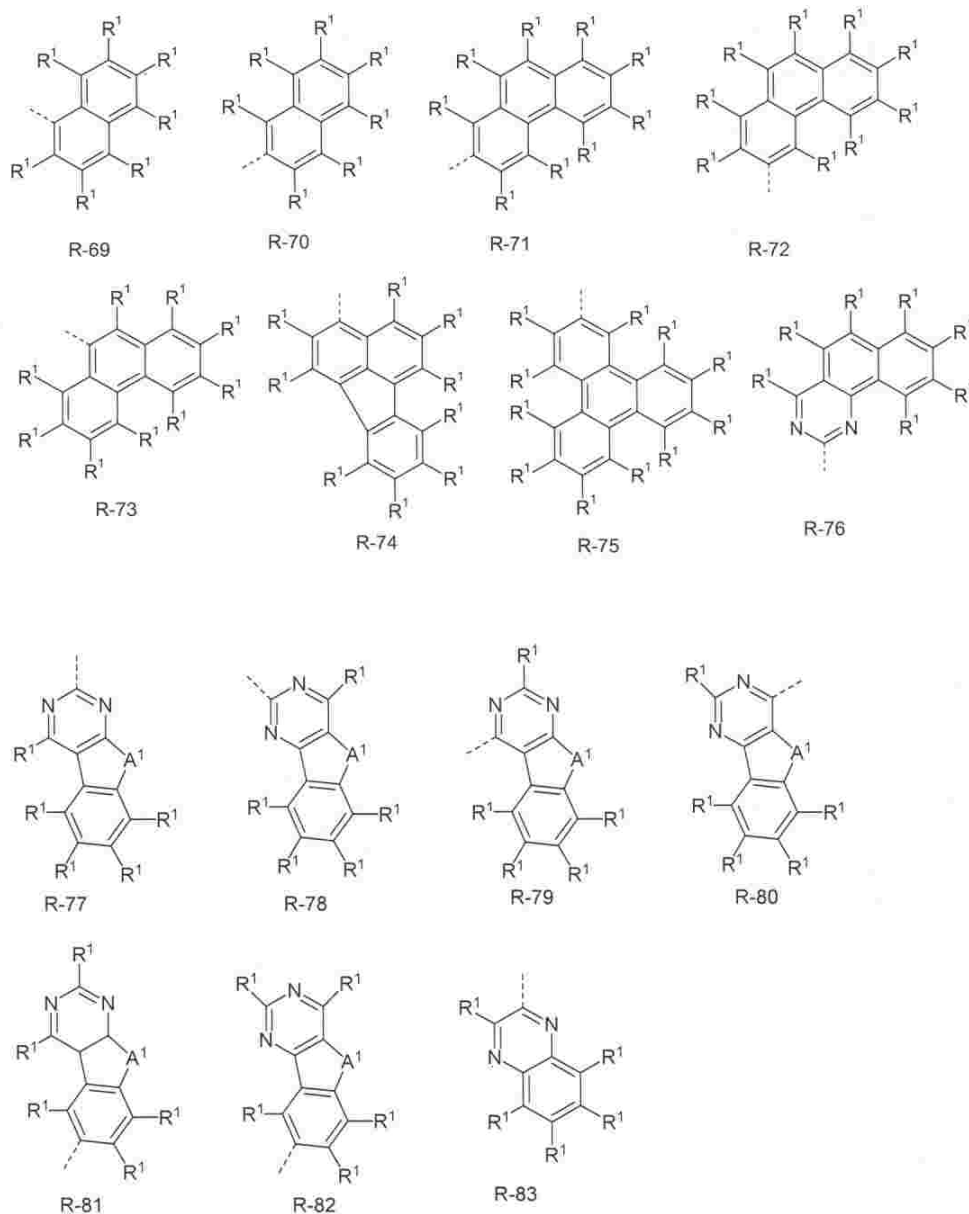
20

30

40

50

【化 1 4 - 6】



【0068】

(ここで、 R^1 は、上記の定義を有しており、点線の結合は、式(1)、(2)および(3)もしくは好ましい態様における基本骨格の炭素原子への、または $N(Ar')$ ₂基の窒素原子への結合を表し、加えて：

Ar^1 は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、6～18個の芳香族環原子を有する二価の芳香族もしくはヘテロ芳香族環系であり、各場合において1つ以上の R^1 ラジカルにより置換されていてもよく；

Aは、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、 $C(R^1)_2$ 、 NR^1 、OまたはSであり；

nは、0または1であり、ここで、 $n=0$ は、A基がこの位置で結合しておらず、代わりに R^1 ラジカルが対応する炭素原子に結合していることを意味し；

mは、0または1であり、ここで、 $m=0$ は、 Ar^1 基が不在であり、対応する芳香族もしくはヘテロ芳香族基が、式(1)もしくは好ましい態様における基本骨格の炭素原子と、または $N(Ar')$ ₂基の窒素原子と直接結合していることを意味し；ただしこれらの基が Ar' の態様である場合、構造(R-12)、(R-17)、(R-21)、(R-25)、(R-26)、(R-30)、(R-34)、(R-38)および(R-39)について $m=1$ である)。

【0069】

R、R' または Ar' について上述の R-1 ~ R-83 基が 2 つ以上の A 基を有している場合、これらの可能な選択肢には、A の定義から全ての組合せが含まれる。その場合における好ましい態様は、一方の A 基が NR¹ であり、もう一方の A 基が C(R¹)₂ であるか、または両方の A 基が NR¹ であるか、または両方の A 基が O であるものである。本発明の特に好ましい態様において、2 つ以上の A 基を有する Ar、R または Ar' 基では、少なくとも 1 つの A 基は、C(R¹)₂ または NR¹ である。

【0070】

A が NR¹ の場合、窒素原子と結合している置換基 R¹ は、好ましくは 5 ~ 24 個の芳香族環原子を有する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系であり、また 1 つ以上の R² ラジカルにより置換されていてもよい。特に好ましい態様において、この R¹ 置換基は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、6 ~ 24 個の芳香族環原子、好ましくは 6 ~ 12 個の芳香族環原子を有する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系であり、2 つ以上の芳香族もしくはヘテロ芳香族 6 員環基が互いに直接縮合した縮合アリール基またはヘテロアリール基を含まず、各場合において 1 つ以上の R² ラジカルにより置換されていてもよい。R-1 ~ R-11 について上記に列挙されたような結合パターンを有するフェニル、ビフェニル、テルフェニルおよびクアテルフェニルが特に好ましく、ここで、これらの構造は、1 つ以上の R² ラジカルにより置換されていてもよいが、好ましくは無置換である。

【0071】

A が C(R¹)₂ の場合、この炭素原子と結合している置換基 R¹ は、好ましくはそれぞれの場合において同じであるかまたは異なり、1 ~ 10 個の炭素原子を有する直鎖状アルキル基または 3 ~ 10 個の炭素原子を有する分枝もしくは環状アルキル基または 5 ~ 24 個の芳香族環原子を有する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系であり、また 1 つ以上の R² ラジカルにより置換されていてもよい。最も好ましくは、R¹ は、メチル基またはフェニル基である。この場合、R¹ ラジカルも共に環系を形成してもよく、それはスピロ系をもたらす。

【0072】

さらに適する R、R' または Ar' 基は、式 -Ar-N(Ar²)(Ar³) の基であり（ここで、Ar²、Ar³ および Ar⁴ は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なる）、5 ~ 24 個の芳香族環原子を有する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系であり、各場合において 1 つ以上の R¹ ラジカルにより置換されていてもよい。ここでの Ar²、Ar³ および Ar⁴ の芳香族環原子の総数は、60 以下、好ましくは 40 以下である。

【0073】

この場合、C(R¹)₂、NR¹、O および S から選択される基を介して、Ar⁴ および Ar² も互いに、かつ／または Ar² および Ar³ も互いに結合していてもよい。好ましくは、窒素原子への結合に対してそれぞれのオルト位で、Ar⁴ および Ar² は互いに結合し、Ar² および Ar³ は互いに結合している。本発明の他の態様において、Ar²、Ar³ および Ar⁴ 基のいずれも互いに結合していない。

【0074】

好ましくは、Ar⁴ は、6 ~ 24 個の芳香族環原子、とりわけ 6 ~ 12 個の芳香族環原子を有する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系であり、各場合において 1 つ以上の R¹ ラジカルにより置換されていてもよい。より好ましくは、Ar⁴ は、オルトー、メターもしくはパラフェニレンまたはオルトー、メターもしくはパラビフェニルからなる群から選択され、それぞれ 1 つ以上の R¹ ラジカルにより置換されていてもよいが、好ましくは無置換である。最も好ましくは、Ar⁴ は、無置換のフェニレン基である。これは、とりわけ、Ar⁴ が、単結合を介して Ar² と結合している場合に正しい。

【0075】

好ましくは、Ar² および Ar³ は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、6 ~ 24 個の芳香族環原子を有する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系であり、各場合において 1 つ以上の R¹ ラジカルにより置換されていてもよい。特に好ましい Ar² およ

10

20

30

40

50

び Ar^3 基は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、ベンゼン、オルトー、メターもしくはパラービフェニル、オルトー、メターもしくはパラーテルフェニルまたは分枝テルフェニル、オルトー、メターもしくはパラークアテルフェニルまたは分枝クアテルフェニル、1ー、2ー、3ーもしくは4ーフルオレニル、1ー、2ー、3ーもしくは4ースピロビフルオレニル、1ーまたは2ーナフチル、インドール、ベンゾフラン、ベンゾチオフエン、1ー、2ー、3ーもしくは4ーカルバゾール、1ー、2ー、3ーもしくは4ージベンゾフラン、1ー、2ー、3ーもしくは4ージベンゾチオフエン、インデノカルバゾール、インドロカルバゾール、2ー、3ーもしくは4ーピリジン、2ー、4ーもしくは5ーピリミジン、ピラジン、ピリダジン、トリアジン、フェナントレン、トリフェニレンまたは2、3もしくは4つのこれらの基の組合せからなる群から選択され、それぞれ1つ以上の R^1 ラジカルにより置換されていてもよい。より好ましくは、 Ar^2 および Ar^3 基は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、6～24個の芳香族環原子を有する芳香族環系であり、とりわけベンゼン、ビフェニル、とりわけオルトー、メターもしくはパラービフェニル、テルフェニル、とりわけオルトー、メターもしくはパラーテルフェニルまたは分枝テルフェニル、クアテルフェニル、とりわけオルトー、メターもしくはパラークアテルフェニルまたは分枝クアテルフェニル、フルオレン、とりわけ1ー、2ー、3ーもしくは4ーフルオレン、またはスピロビフルオレン、とりわけ1ー、2ー、3ーもしくは4ースピロビフルオレンからなる群から選択される1つ以上の R^1 ラジカルにより置換されていてもよい。

【0076】

同時に、真空蒸発によって処理される化合物のアルキル基は、好ましくは5個以下の炭素原子、より好ましくは4個以下の炭素原子、最も好ましくは1個以下の炭素原子を有する。溶液から処理する化合物では、適する化合物はまた、10個以下の炭素原子を有するアルキル基、とりわけ分枝アルキル基により置換されているもの、あるいはオリゴアリーレン基、たとえばオルトー、メターもしくはパラーテルフェニルまたは分枝テルフェニルまたはクアテルフェニル基により置換されているものである。

【0077】

式(1)の化合物または好ましい態様が、リン光発光体のマトリックス材料として、またはリン光層に直接隣接する層で使用されるとき、化合物が2つ超の6員環が互いに直接縮合した縮合アリールもしくはヘテロアリール基を含有しない場合にさらに好ましい。これは、 R 、 R' 、 Ar' 、 R^1 および R^2 ラジカルが、2個以上の6員環が互いに直接縮合した縮合アリールもしくはヘテロアリール基を含有しない場合にとりわけ好ましい。この例外はフェナントレン、トリフェニレンおよびキナゾリンによって形成され、それらの三重項エネルギーが高いために、縮合芳香族6員環の存在にもかかわらずより好ましいかもしれない。

【0078】

上述の好ましい態様は、請求項1に定義された制限内で要望通りに互いに組み合わせることができる。本発明の特に好ましい態様において、上述の選択は、同時に起こる。

【0079】

上記の詳細な態様による好ましい化合物の例は、以下の表に詳述されている化合物である：

【0080】

10

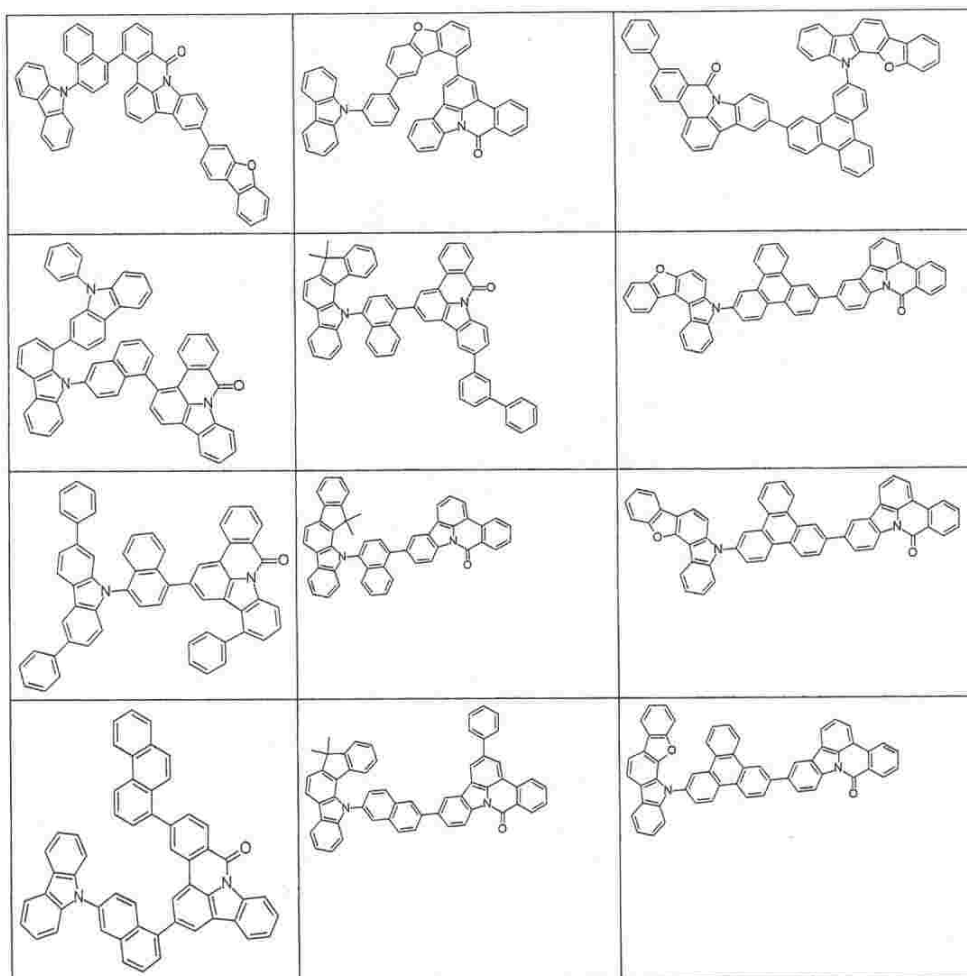
20

30

40

50

【化 1 5 - 1】



10

20

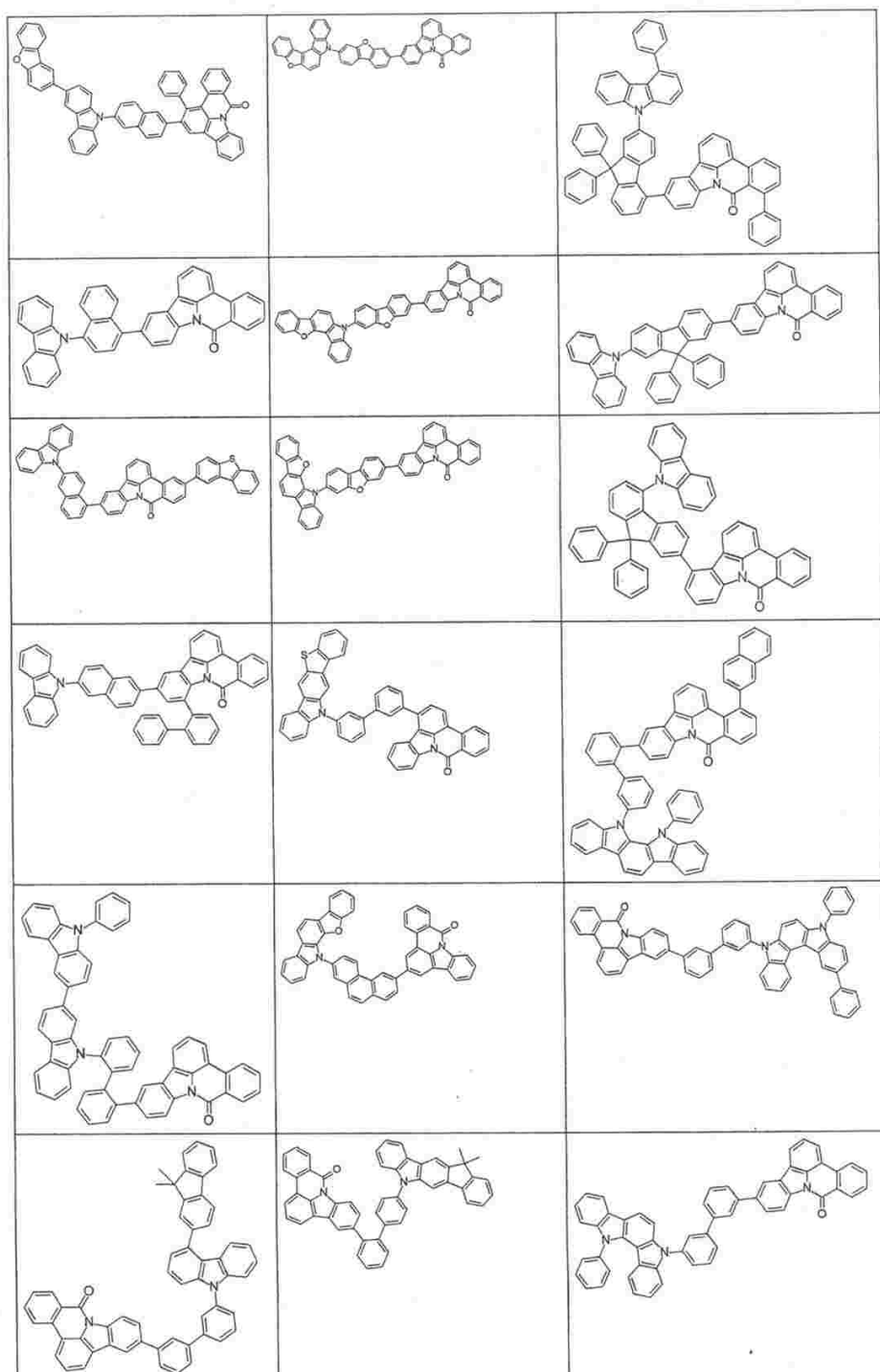
【 0 0 8 1】

30

40

50

【化 1 5 - 2】



10

20

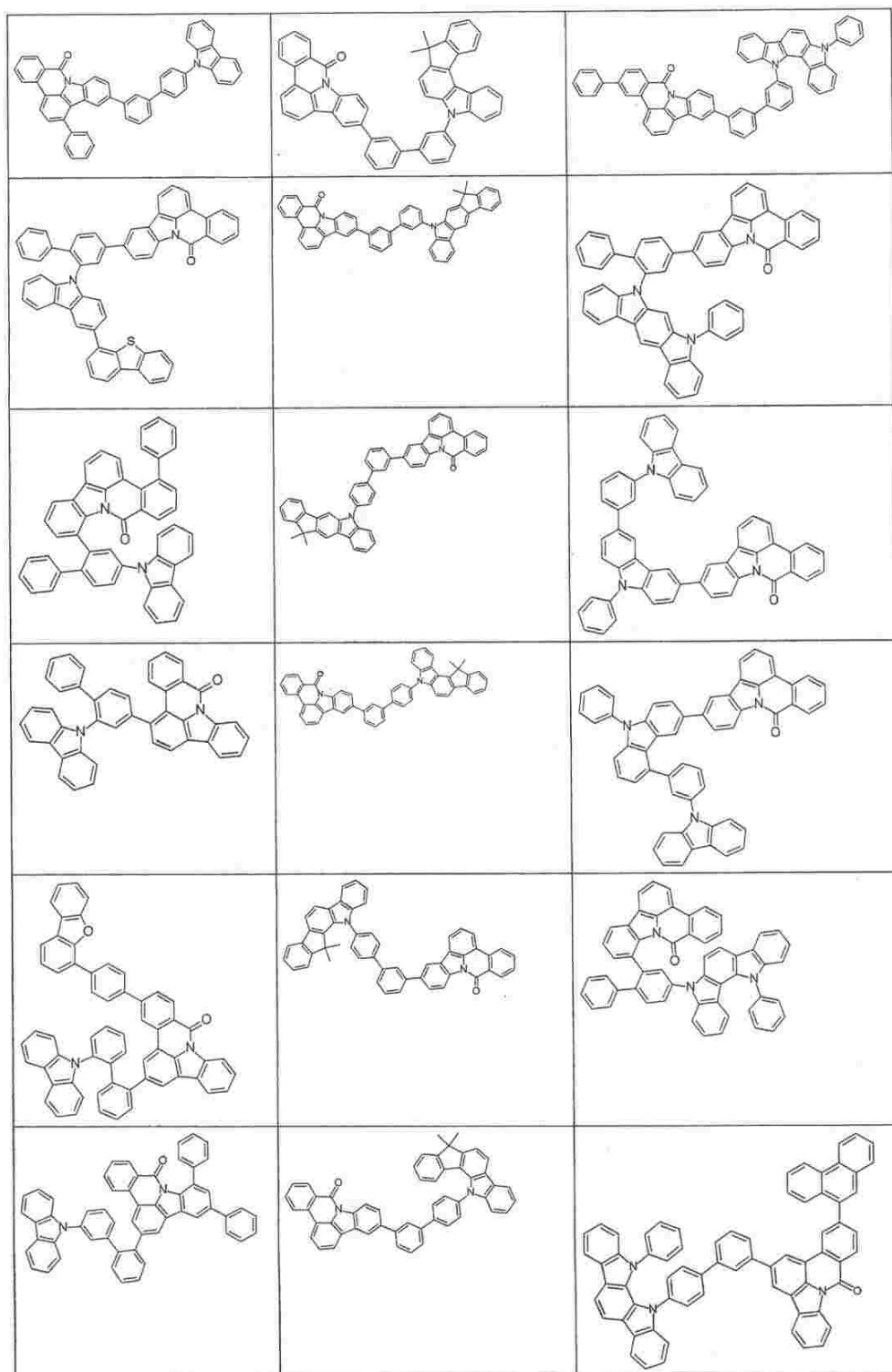
30

40

【 0 0 8 2】

50

【化 1 5 - 3】



10

20

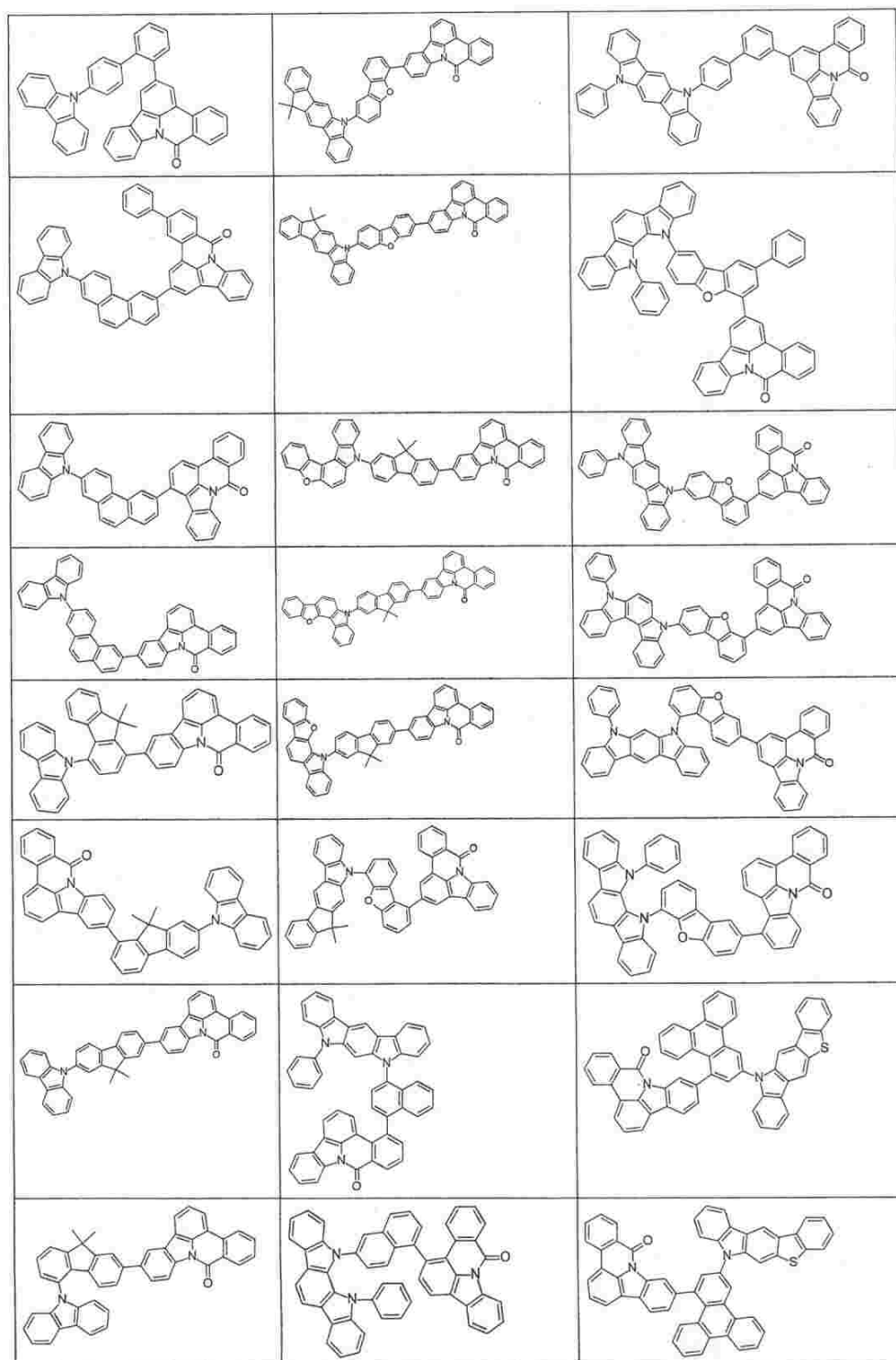
30

40

【 0 0 8 3】

50

【化 1 5 - 4】



【 0 0 8 4】

10

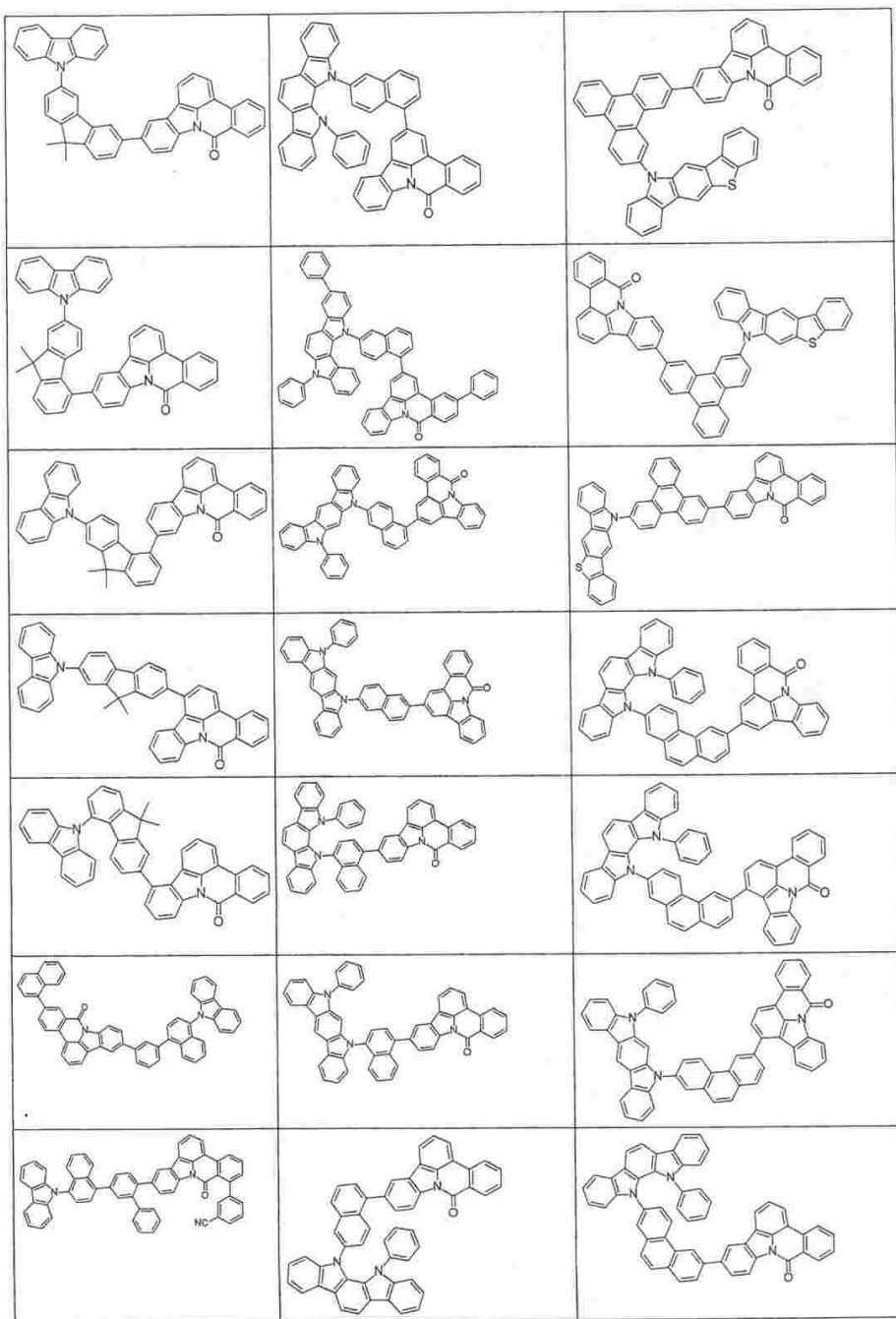
20

30

40

50

【化 1 5 - 5】



10

20

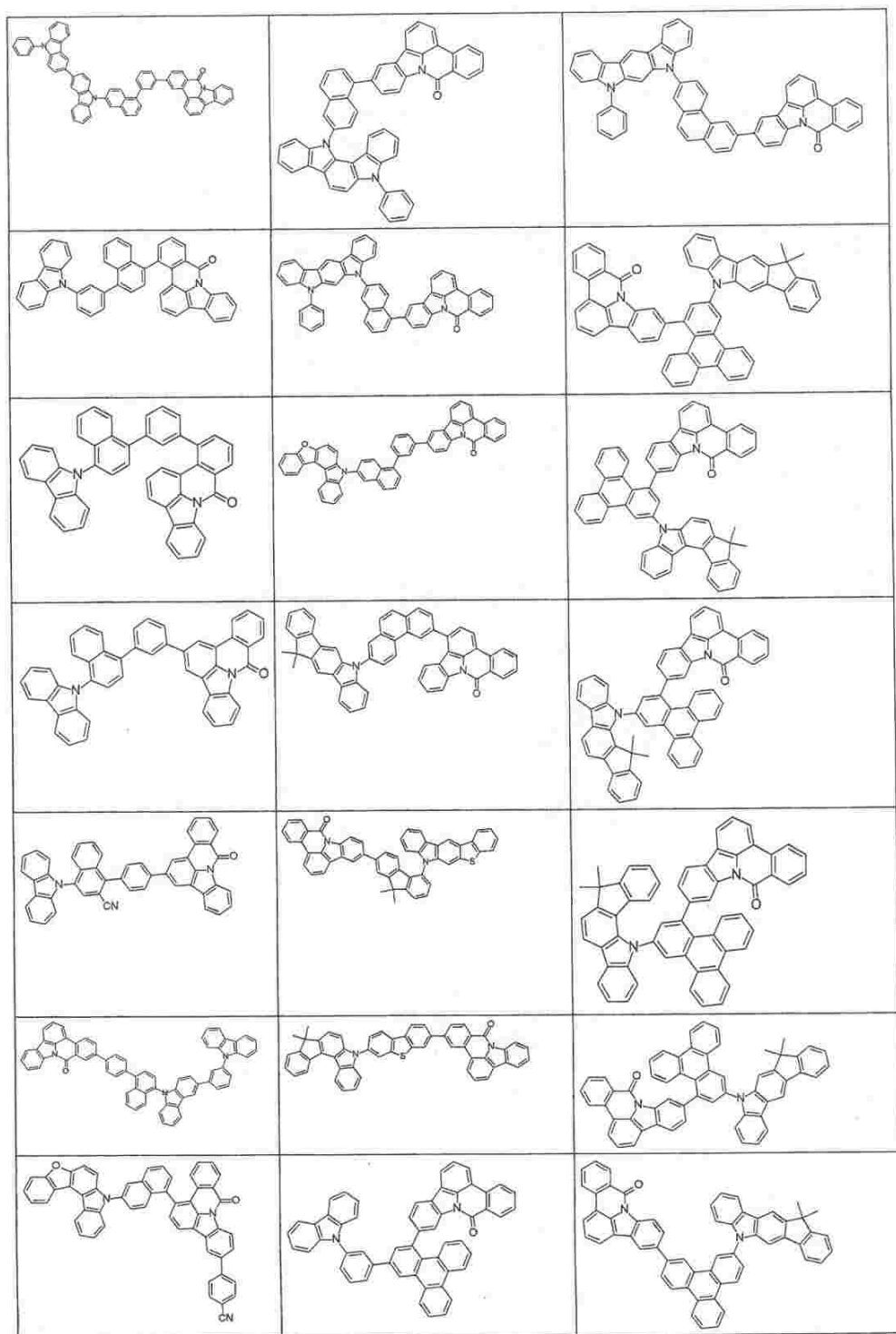
30

40

【 0 0 8 5】

50

【化 1 5 - 6】



10

20

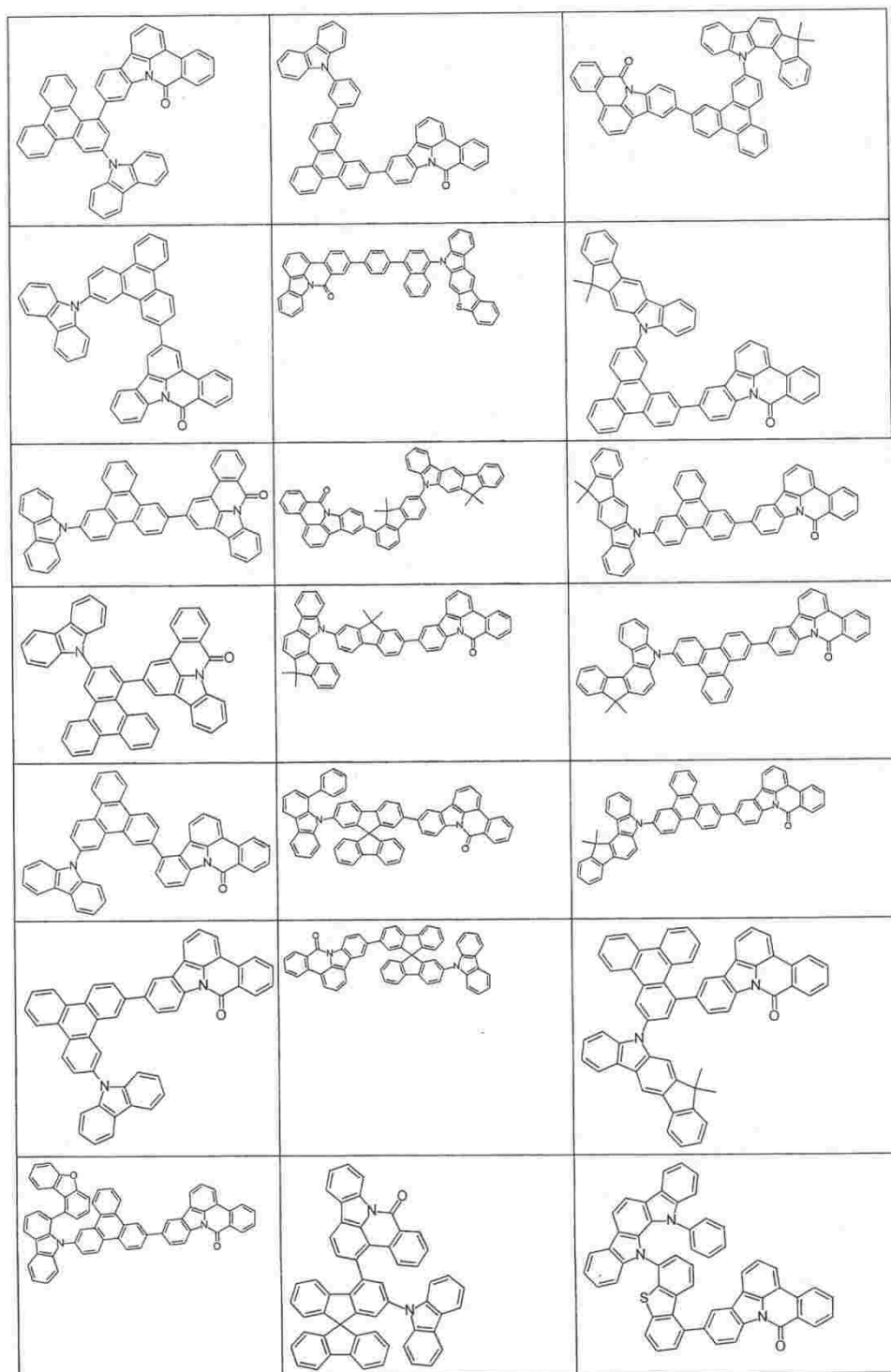
30

40

【 0 0 8 6】

50

【化 1 5 - 7】



10

20

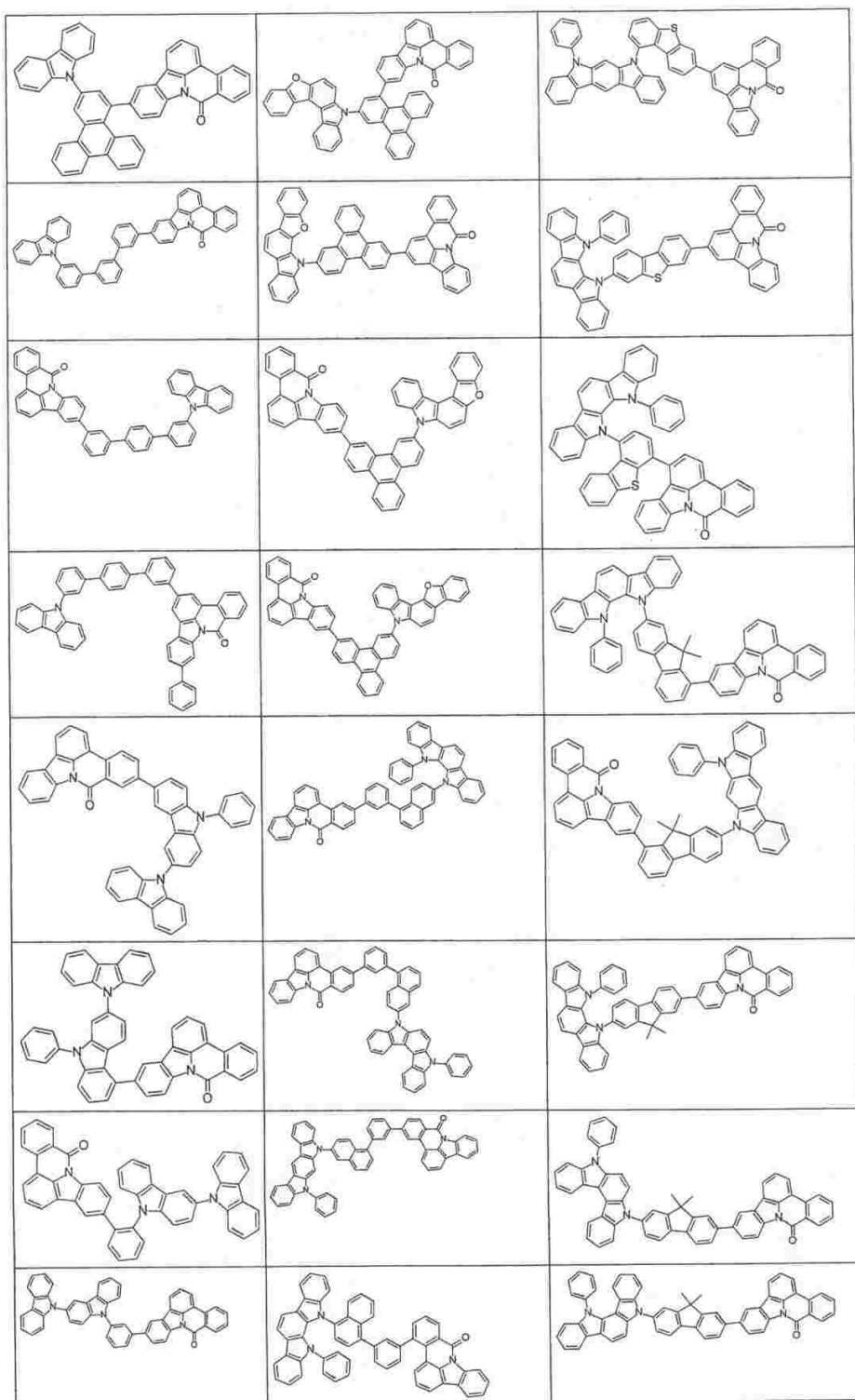
30

40

【 0 0 8 7】

50

【化 1 5 - 8】



10

20

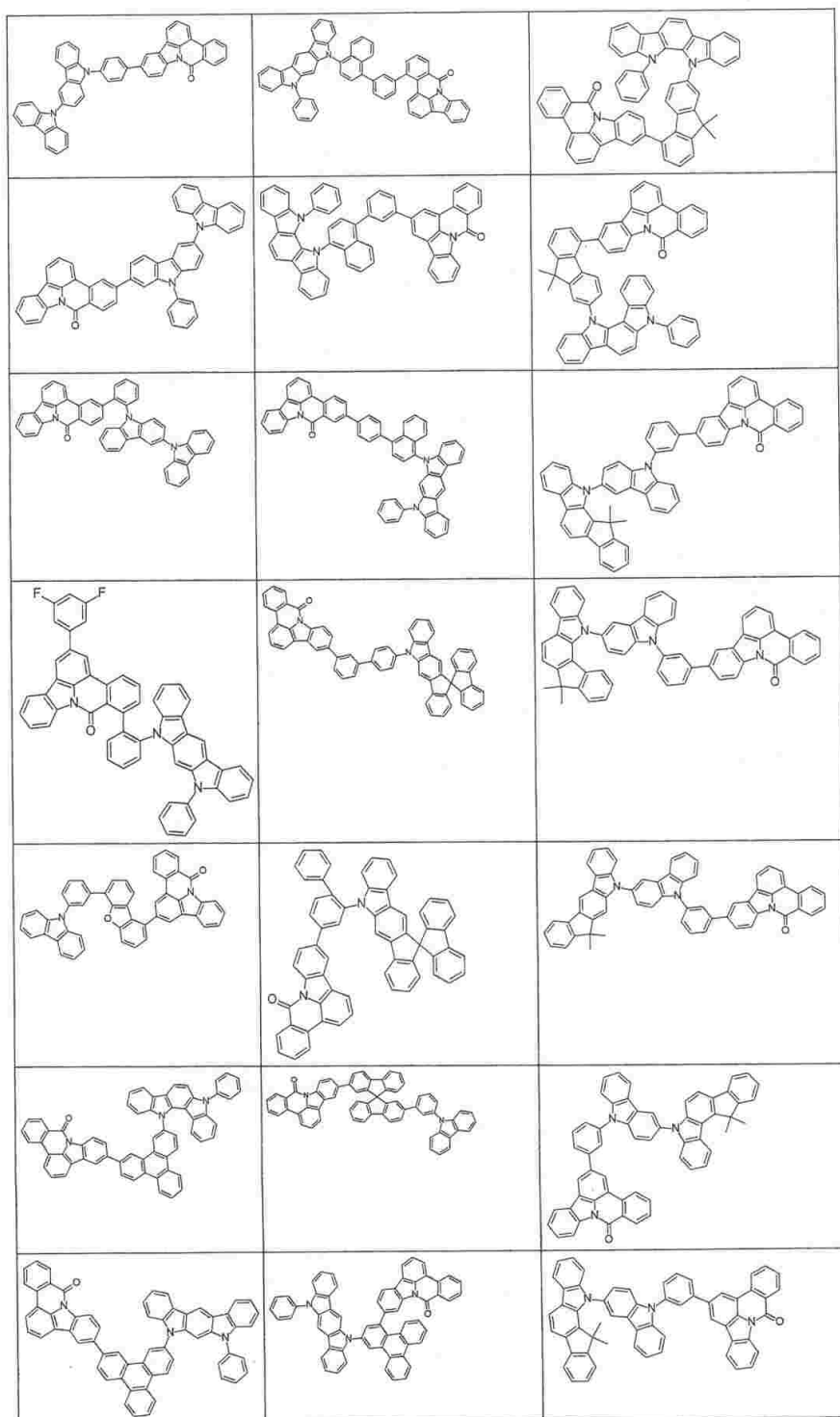
30

40

【 0 0 8 8】

50

【化 1 5 - 9】



10

20

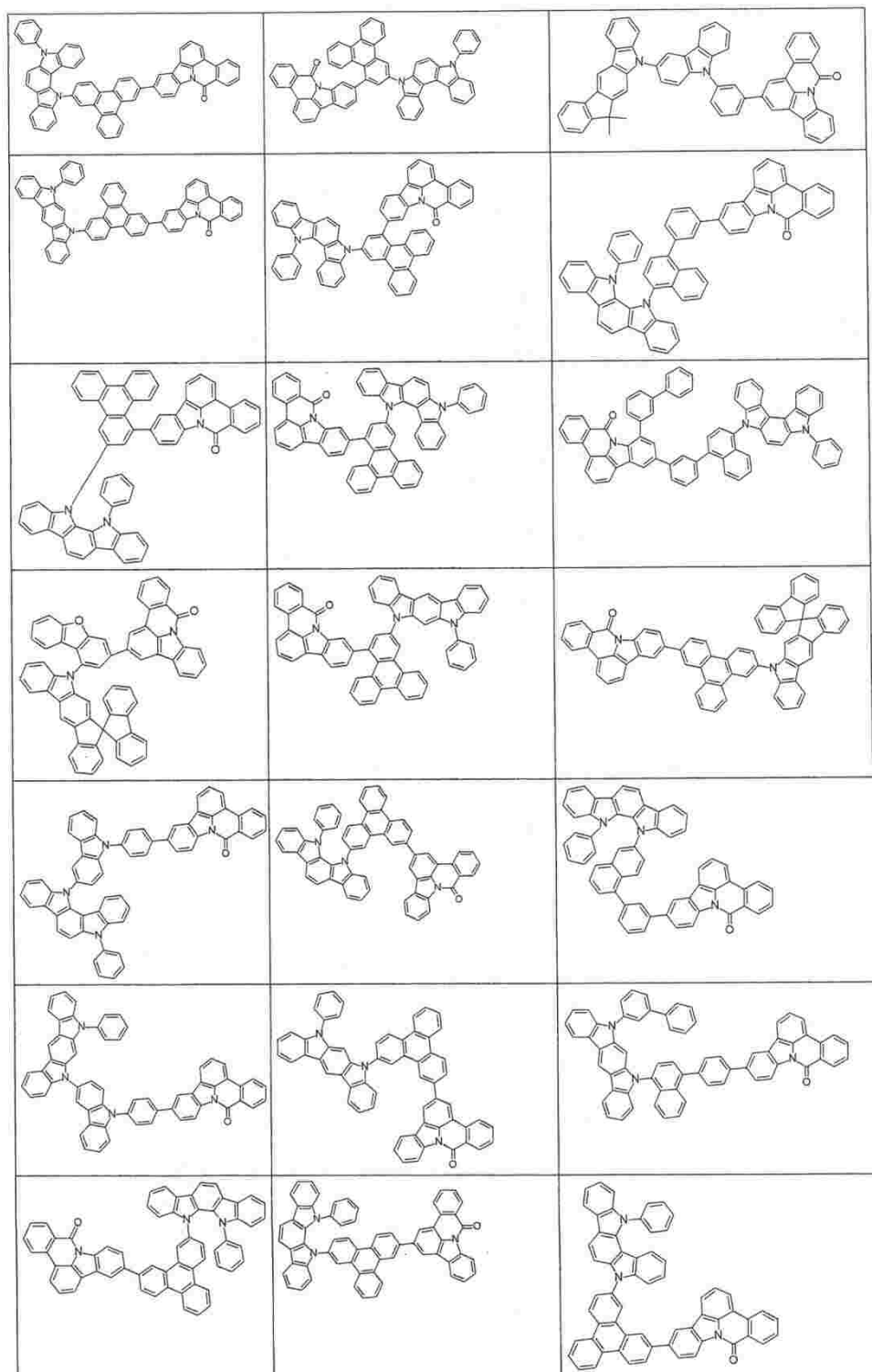
30

40

【 0 0 8 9】

50

【化 1 5 - 1 0】



10

20

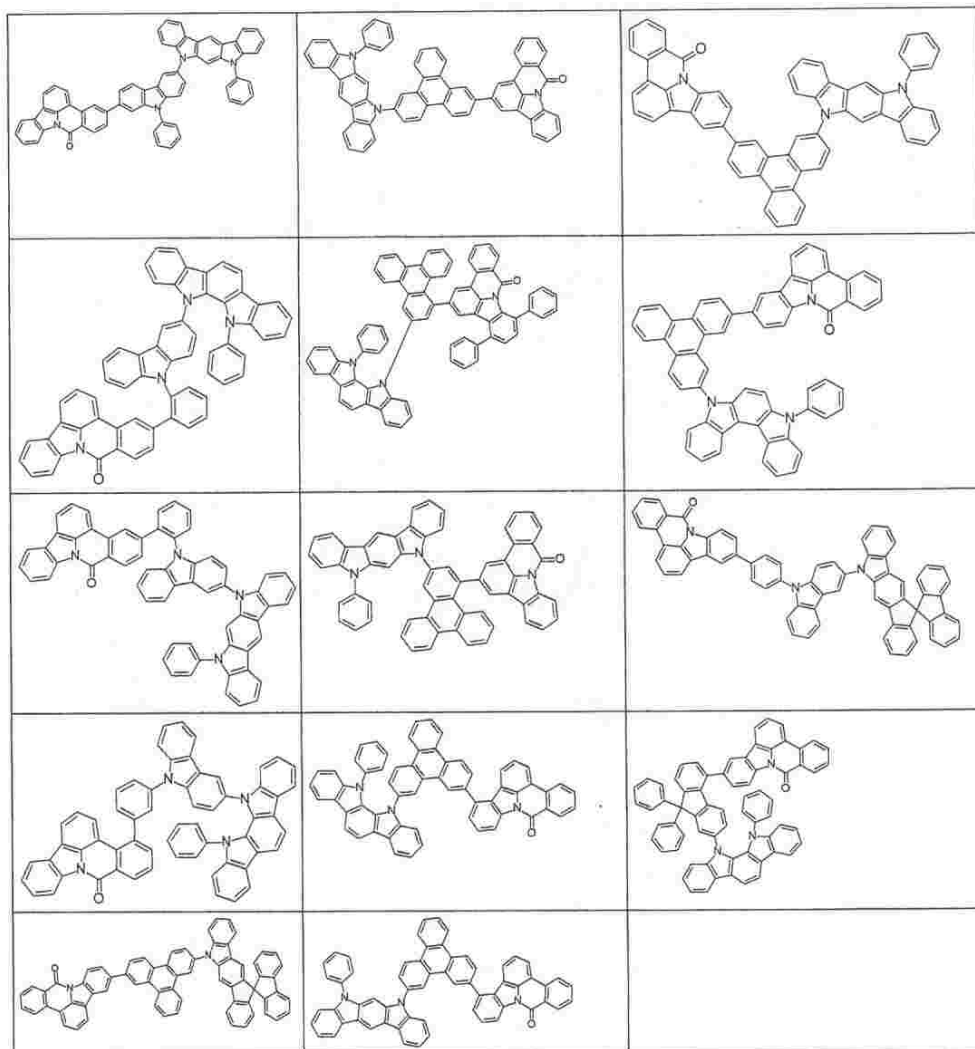
30

40

【 0 0 9 0】

50

【化 1 5 - 1 1】



10

20

30

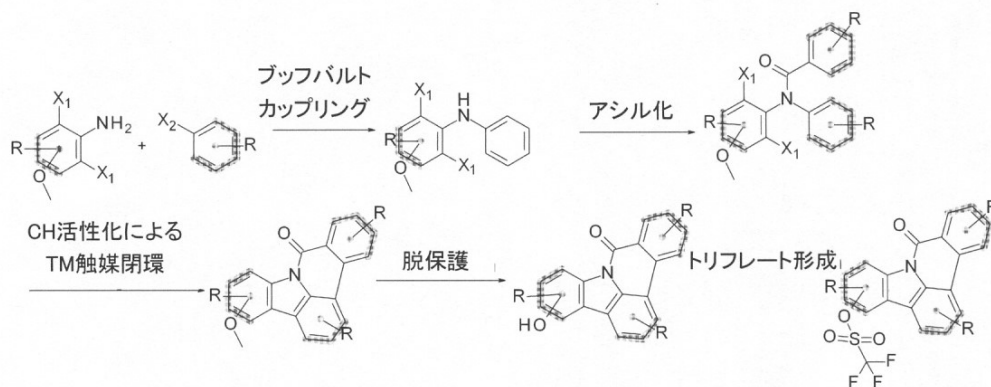
【0091】

本発明の化合物の基本構造は、スキーム1～3に概説された経路によって調製することができる。

【0092】

【化 1 6】

スキーム1;



40

【0093】

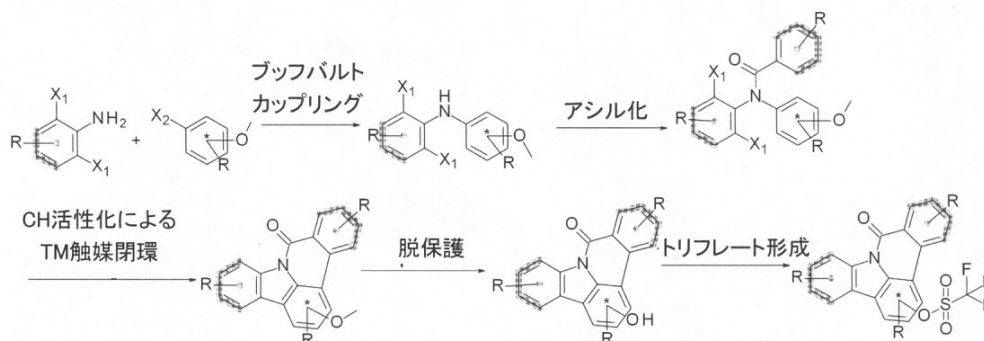
他の2つの基本構造も同様に調製することができる（スキーム2および3）。

50

【0094】

【化17】

スキーム2;

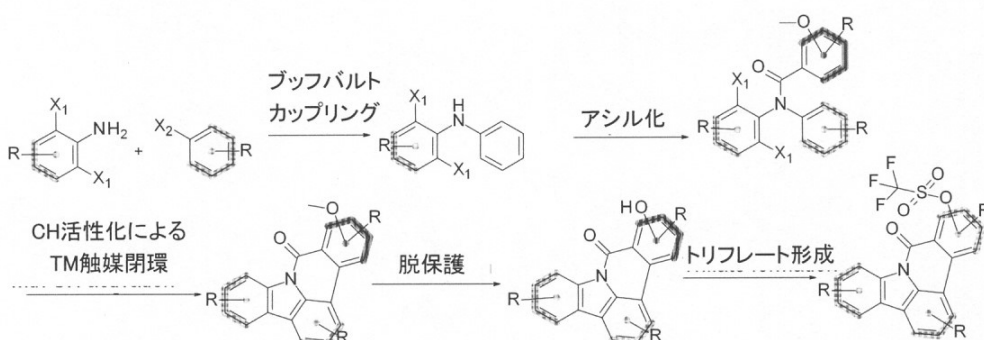


10

【0095】

【化18】

スキーム3;



20

【0096】

スキーム1～3において、 $X_1 = \text{Cl}$ または Br 、 $X_2 = \text{Br}$ または I であり、条件は、 $X_1 = \text{Cl}$ のとき、 $X_2 = \text{Br}$ であり、 $X_1 = \text{Br}$ のとき、 $X_2 = \text{I}$ である。

【0097】

したがって、本発明はさらに、以下の合成工程：

- Y基ではなく、反応性脱離基、たとえばトリフレートまたはハロゲンをもつラクタム基本骨格を合成する工程；および
 - カップリング反応、たとえば鈴木カップリングによってY基を導入する工程
- を特徴とする、本発明の化合物を調製するための方法を提供する。

【0098】

本発明の化合物を、たとえばスピンコーティングまたは印刷法によって、液相から処理するために、本発明の化合物の調合物が必要とされる。これらの調合物は、たとえば、溶液、分散液または乳濁液であってもよい。このために、2つ以上の溶媒の混合物を使用することが好ましいかもしれない。適する好ましい溶媒は、たとえば、トルエン、アニソール、*o*-、*m*-もしくは*p*-キシレン、安息香酸メチル、メシチレン、テトラリン、ペラトロール、THF、メチル-THF、THP、クロロベンゼン、ジオキサン、フェノキシトルエン、とりわけ3-フェノキシトルエン、(−)-フェンコン、1,2,3,5-テトラメチルベンゼン、1,2,4,5-テトラメチルベンゼン、1-メチルナフタレン、2-メチルベンゾチアゾール、2-フェノキシエタノール、2-ピロリジノン、3-メチルアニソール、4-メチルアニソール、3,4-ジメチルアニソール、3,5-ジメチルアニソール、アセトフェノン、 α -テルピネオール、ベンゾチアゾール、安息香酸ブチル、クメン、シクロヘキサノール、シクロヘキサノン、シクロヘキシルベンゼン、デカリン、ドデシルベンゼン、安息香酸エチル、インダン、NMP、*p*-シメン、フェネトール、1,4-ジイソプロピルベンゼン、ジベンジルエーテル、ジエチレングリコールブチル

30

40

50

メチルエーテル、トリエチレングリコールブチルメチルエーテル、ジエチレングリコールジブチルエーテル、トリエチレングリコールジメチルエーテル、ジエチレングリコールモノブチルエーテル、トリプロピレングリコールジメチルエーテル、テトラエチレングリコールジメチルエーテル、2-イソプロピルナフタレン、ペンチルベンゼン、ヘキシルベンゼン、ヘプチルベンゼン、オクチルベンゼン、1, 1-ビス(3, 4-ジメチルフェニル)エタン、2-メチルビフェニル、3-メチルビフェニル、1-メチルナフタレン、1-エチルナフタレン、オクタン酸エチル、セバシン酸ジエチル、オクタン酸オクチル、ヘプチルベンゼン、イソ吉草酸メチル、ヘキサン酸シクロヘキシルまたはこれらの溶媒の混合物である。

【0099】

したがって、本発明はさらに、本発明の化合物および少なくとも1つのさらなる化合物を含む調合物を提供する。さらなる化合物は、たとえば、溶媒、とりわけ上述の溶媒の1つまたはこれらの溶媒の混合物であってもよい。さらなる化合物は、あるいは、電子デバイスで同様に使用される少なくとも1つのさらなる有機もしくは無機化合物、たとえば発光化合物および／またはさらなるマトリックス材料であってもよい。適する発光化合物およびさらなるマトリックス材料は、有機エレクトロルミネッセントデバイスに関連して後方に列挙されている。このさらなる化合物はまた、ポリマーであってもよい。

【0100】

本発明の化合物は、電子デバイス、とりわけ有機エレクトロルミネッセントデバイスで使用するのに適している。

【0101】

したがって、本発明はさらに、電子デバイス、とりわけ有機エレクトロルミネッセントデバイスにおける本発明の化合物の使用を提供する。

【0102】

本発明はまたさらに、本発明の少なくとも1つの化合物を含む電子デバイスを提供する。

【0103】

本発明に関する電子デバイスは、少なくとも1つの有機化合物を含む少なくとも1つの層を含むデバイスである。この成分はまた、無機材料あるいは完全に無機材料から形成された層を含んでいてもよい。電子デバイスは、好ましくは有機エレクトロルミネッセントデバイス(OLED)、有機集積回路(O-IC)、有機電界効果トランジスタ(O-FET)、有機薄膜トランジスタ(O-TFT)、有機発光トランジスタ(O-LET)、有機太陽電池(O-SC)、色素増感有機太陽電池(DSSC)、有機光検出器、有機感光体、有機電場消光デバイス(O-FQD)、発光電気化学セル(LEC)、有機レーザーダイオード(O-laser)および有機プラズモン発光デバイス、好ましくは有機エレクトロルミネッセントデバイス(OLED)、より好ましくはリン光性のOLEDからなる群から選択される。

【0104】

有機エレクトロルミネッセントデバイスは、カソード、アノードおよび少なくとも1つの発光層を含む。これらの層の他に、さらなる層、たとえば各場合において1つ以上の正孔注入層、正孔輸送層、正孔阻止層、電子輸送層、電子注入層、励起子阻止層、電子阻止層および／または電荷発生層も含んでいてよい。同様に、励起子阻止機能を有する中間層を、たとえば、2つの発光層の間に導入することも可能である。しかしながら、これらの層の全てが必ずしも存在している必要がないことを指摘しておくべきである。この場合、有機エレクトロルミネッセントデバイスが発光層を含有すること、またはそれが複数の発光層を含有することが可能である。複数の発光層が存在する場合、これらは、好ましくは、全体として380nm〜750nmにいくつかの発光極大を有しているので、全体的な結果は白色発光であり；言い換えれば、蛍光またはリン光を発し得る種々の発光化合物が発光層で使用される。特に好ましいのは、3つの発光層を有する系であり、ここで、3つの層は、青色、緑色および橙色または赤色発光を示す。本発明の有機エレクトロルミネッセントデバイスはまた、とりわけ白色発光OLEDの場合は、タンデム式OLEDであっ

10

20

30

40

50

てもよい。

【0105】

上記の詳細な態様による本発明の化合物は、正確な構造に基づいて異なる層で使用してもよい。式(1)の化合物または上記に列挙した好ましい態様を、リン光発光体またはTADF(熱活性化遅延蛍光)を示す発光体、とりわけリン光発光体のマトリックス材料として発光層に含む有機エレクトロルミネッセントデバイスが好ましい。この場合、有機エレクトロルミネッセントデバイスは、発光層を含有していてもよく、またはそれは複数の発光層を含有していてもよく、ここで、少なくとも1つの発光層は、マトリックス材料として少なくとも1つの本発明の化合物を含有する。加えて、本発明の化合物はまた、電子輸送層および／または正孔阻止層および／または正孔輸送層および／または励起子阻止層

10

【0106】

本発明の化合物が発光層のリン光性化合物のマトリックス材料として使用される場合、好ましくは1つ以上のリン光性の材料(三重項発光体)と組み合わせて使用される。本発明に関するリン光は、スピン多重度がより高い励起状態、即ちスピン状態>1、とりわけ励起三重項状態からのルミネセンスを意味するものと理解される。本出願に関して、遷移金属またはランタニドを含む全てのルミネッセント錯体、とりわけ全てのイリジウム、白金および銅錯体は、リン光性化合物と見なされるだろう。

【0107】

本発明の化合物と発光化合物の混合物は、発光体とマトリックス材料の混合物全体に基づいて、本発明の化合物を99%~1体積%、好ましくは98%~10体積%、より好ましくは97%~60体積%、とりわけ95%~80体積%含有している。これに対して、混合物は、発光体とマトリックス材料の混合物全体に基づいて、発光体を1%~99体積%、好ましくは2%~90体積%、より好ましくは3%~40体積%、とりわけ5%~20体積%含有する。

20

【0108】

本発明のさらに好ましい態様は、さらなるマトリックス材料と組み合わせた、リン光発光体のためのマトリックス材料としての本発明の化合物の使用である。本発明の化合物と組み合わせて使用できる適するマトリックス材料は、たとえばWO 2004/013080、WO 2004/093207、WO 2006/005627もしくはWO 2010/006680による芳香族ケトン、芳香族ホスフィンオキシドまたは芳香族スルホキシドもしくはスルホン、トリアリールアミン、カルバゾール誘導体、たとえばCBP(N,N-ビスカルバゾリルピフェニル)、またはWO 2005/039246、US 2005/0069729、JP 2004/288381、EP 1205527、WO 2008/086851もしくはWO 2013/041176に開示されたカルバゾール誘導体、たとえばWO 2007/063754もしくはWO 2008/056746によるインドロカルバゾール誘導体、たとえばWO 2010/136109、WO 2011/000455、WO 2013/041176もしくはWO 2013/056776によるインデノカルバゾール誘導体、たとえばEP 1617710、EP 1617711、EP 1731584、JP 2005/347160によるアザカルバゾール誘導体、たとえばWO 2007/137725によるバイポーラーマトリックス材料、たとえばWO 2005/111172によるシラン、たとえばWO 2006/117052によるアザボロールもしくはボロン酸エステル、たとえばWO 2007/063754、WO 2008/056746、WO 2010/015306、WO 2011/057706、WO 2011/060859もしくはWO 2011/060877によるトリアジン誘導体、たとえばEP 652273もしくはWO 2009/062578による亜鉛錯体、たとえばWO 2010/054729によるジアザシロールもしくはテトラアザシロール誘導体、たとえばWO 2010/054730によるジアザホスホール誘導体、たとえばWO 2011/042107、WO 2011/060867、WO 2011/088877およびWO 2012/143080による架橋カルバゾール誘

30

40

50

導体、たとえばWO 2012/048781によるトリフェニレン誘導体、またはたとえばWO 2015/169412、WO 2016/015810、WO 2016/023608、WO 2017/148564もしくはWO 2017/148565によるジベンゾフラン誘導体である。たとえば、WO 2010/108579に記載されているように、実際の発光体よりも短い波長発光を有するさらなるリン光発光体が、混合物中に共ホスト、またはもしあってもかなりの程度まで電荷輸送に関与しない化合物として存在することが同様に可能である。このような材料は、好ましくは純粋な炭化水素である。このような材料の例は、たとえば、WO 2006/130598、WO 2009/021126、WO 2009/124627およびWO 2010/006680に見つけることができる。

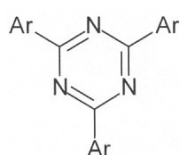
10

【0109】

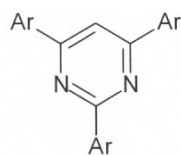
本発明の化合物と一緒に混合物として使用できる好ましいマトリックス材料は、以下の式(7)および(8)の化合物であり：

【0110】

【化19】



式(7)



式(8)

20

【0111】

ここで、Arは、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、5～40個の芳香族環原子を有する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系であり、1つ以上のRラジカルにより置換されていてもよく、ここで、Rは、上記の定義を有している。

【0112】

式(7)のトリアジン誘導体が特に好ましい。

【0113】

本発明の好ましい態様において、Ar基は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、6～30個の芳香族環原子を有する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系からなる群から選択され、各場合において1つ以上のRラジカルにより置換されていてもよい。より好ましくは、Ar基は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、6～24個の芳香族環原子、好ましくは6～20個の芳香族環原子を有する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系からなる群から選択され、各場合において1つ以上のRラジカル、好ましくは非芳香族Rラジカルにより置換されていてもよい。

30

【0114】

適する芳香族もしくはヘテロ芳香族環系Arは、フェニル、ビフェニル、とりわけオルトー、メターもしくはパラービフェニル、テルフェニル、とりわけオルトー、メターもしくはパラーテルフェニルまたは分枝テルフェニル、クアテルフェニル、とりわけオルトー、メターもしくはパラークアテルフェニルまたは分枝クアテルフェニル、1、2、3もしくは4位を介して結合していてもよいフルオレン、1、2、3もしくは4位を介して結合していてもよいスピロビフルオレン、1または2位を介して結合していてもよいナフタレン、インドール、ベンゾフラン、ベンゾチオフエン、1、2、3もしくは4位を介して結合していてもよいカルバゾール、1、2、3もしくは4位を介して結合していてもよいジベンゾフラン、1、2、3もしくは4位を介して結合していてもよいジベンゾチオフエン、インデノカルバゾール、インドロカルバゾール、ピリジン、ピリミジン、ピラジン、ピリダジン、トリアジン、キノリン、キナゾリン、ベンズイミダゾール、フェナントレン、トリフェニレンまたは2つもしくは3つのこれらの基の組合せから選択され、それぞれは、1つ以上のRラジカルにより置換されていてもよい。

40

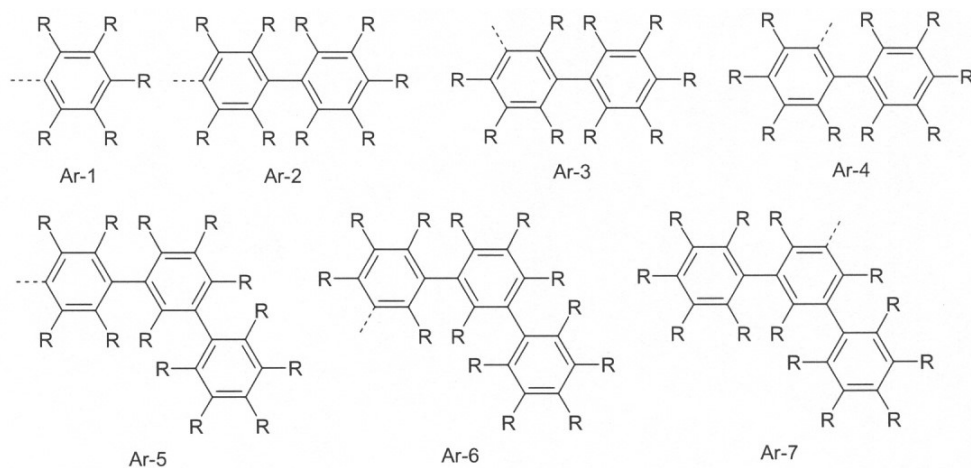
【0115】

50

ここでのAr基は、好ましくは以下の式Ar-1～Ar-83の基から選択される：

【0116】

【化20-1】



10

【0117】

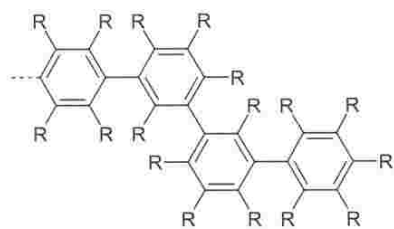
20

30

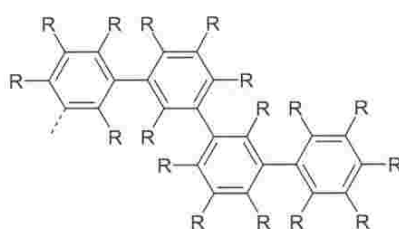
40

50

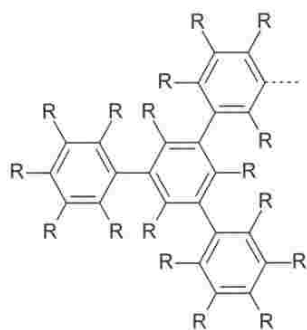
【化 20 - 2】



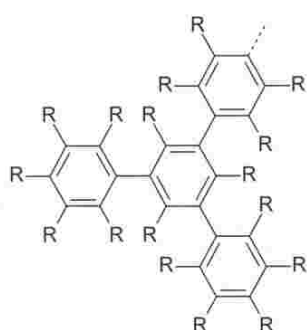
Ar-8



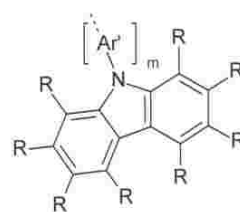
Ar-9



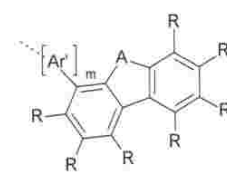
Ar-10



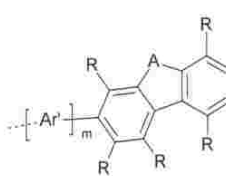
Ar-11



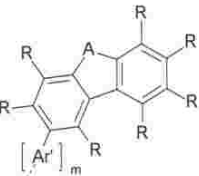
Ar-12



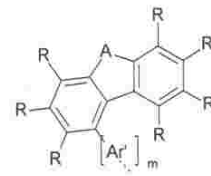
Ar-13



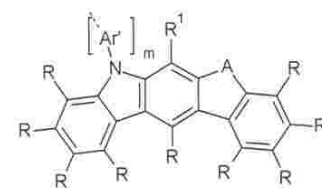
Ar-14



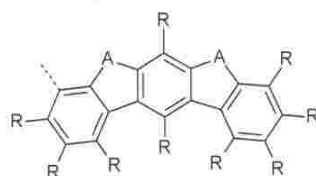
Ar-15



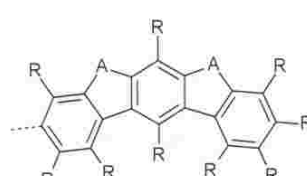
Ar-16



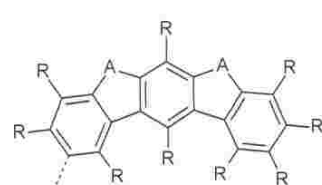
Ar-17



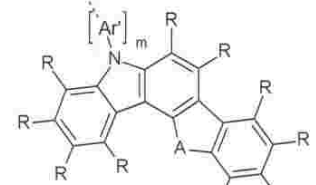
Ar-18



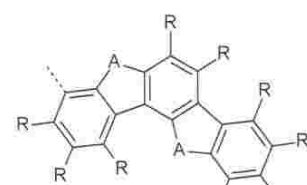
Ar-19



Ar-20



Ar-21



Ar-22

【0118】

10

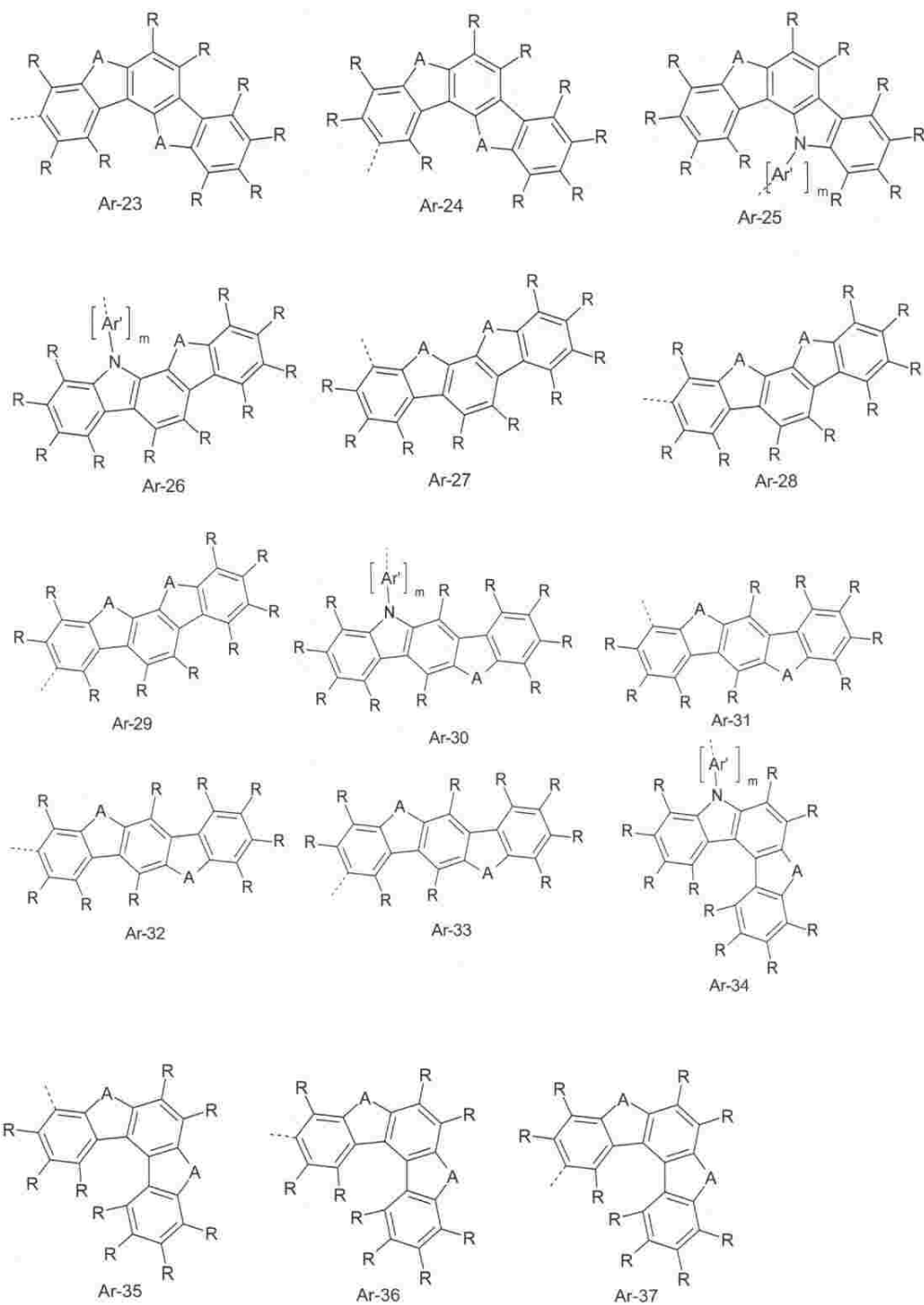
20

30

40

50

【化 20 - 3】



【0119】

10

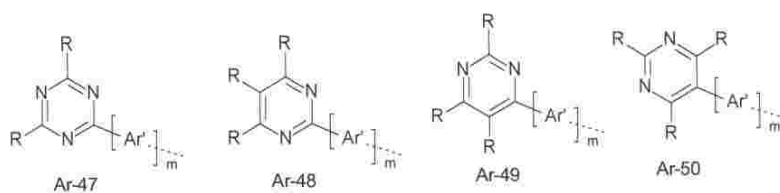
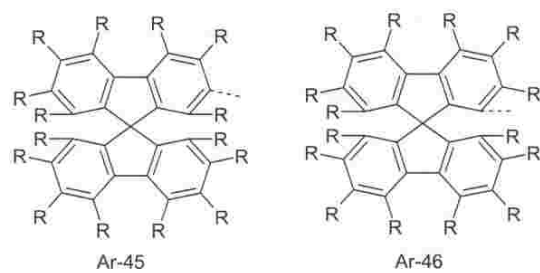
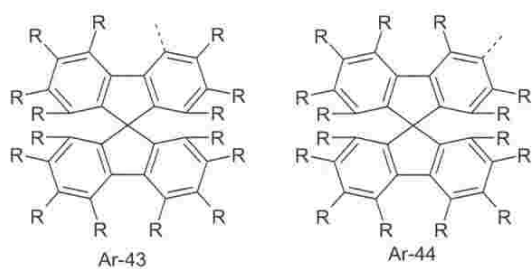
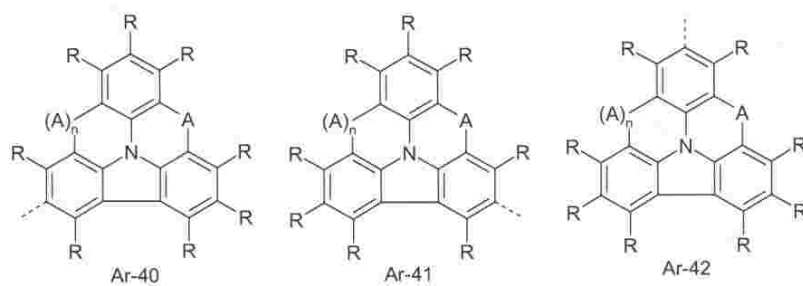
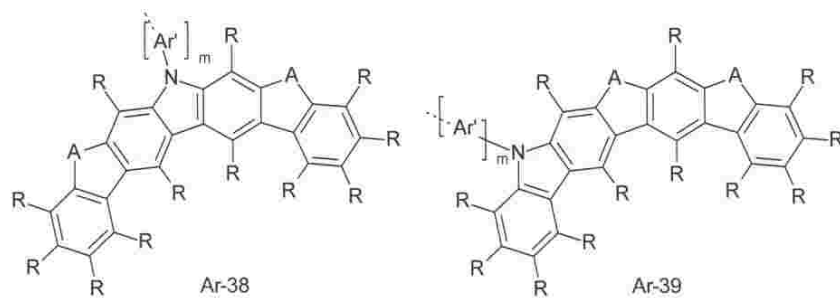
20

30

40

50

【化 20 - 4】



【 0 1 2 0】

10

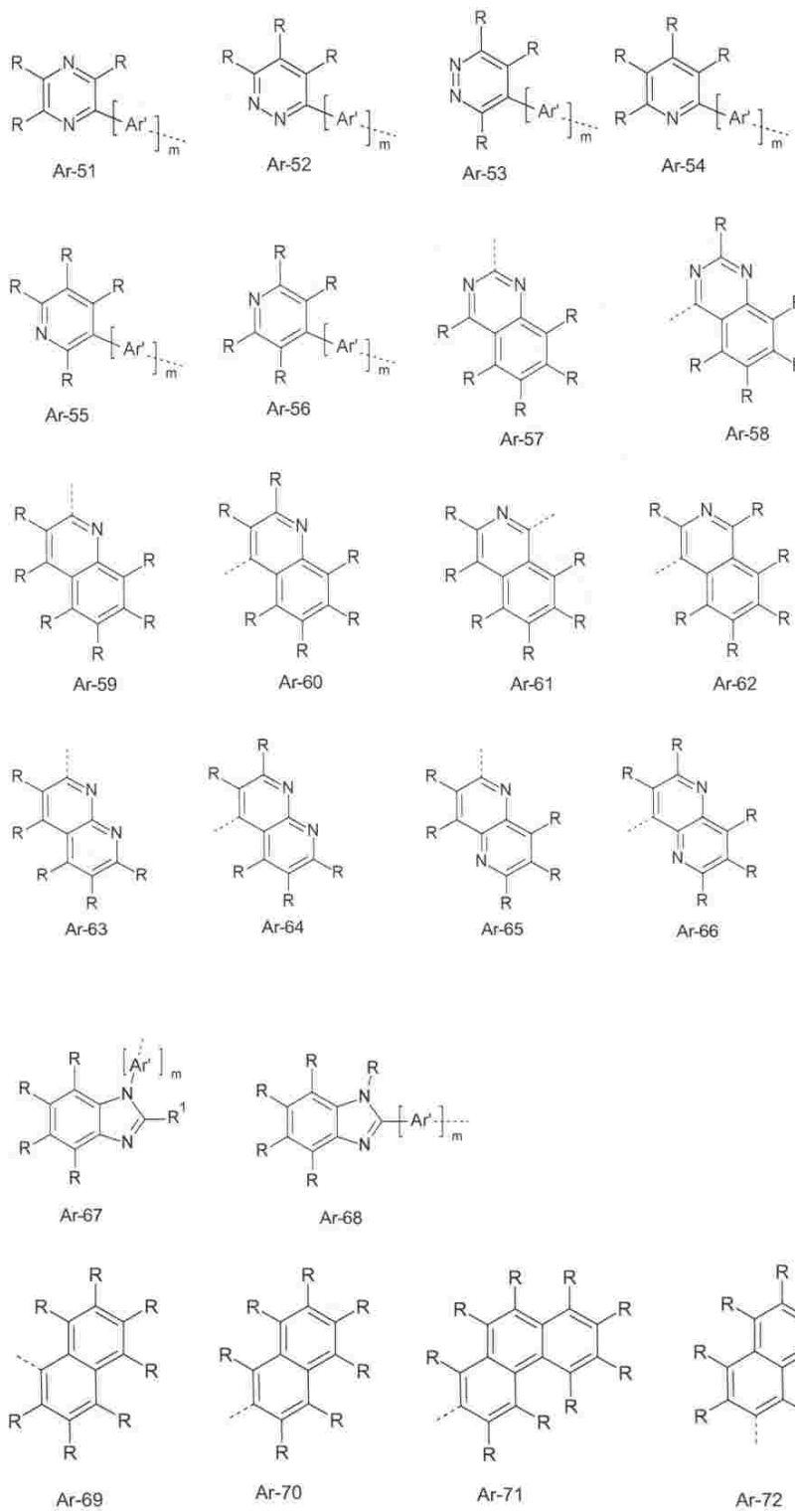
20

30

40

50

【化 2 0 - 5】



【 0 1 2 1 】

10

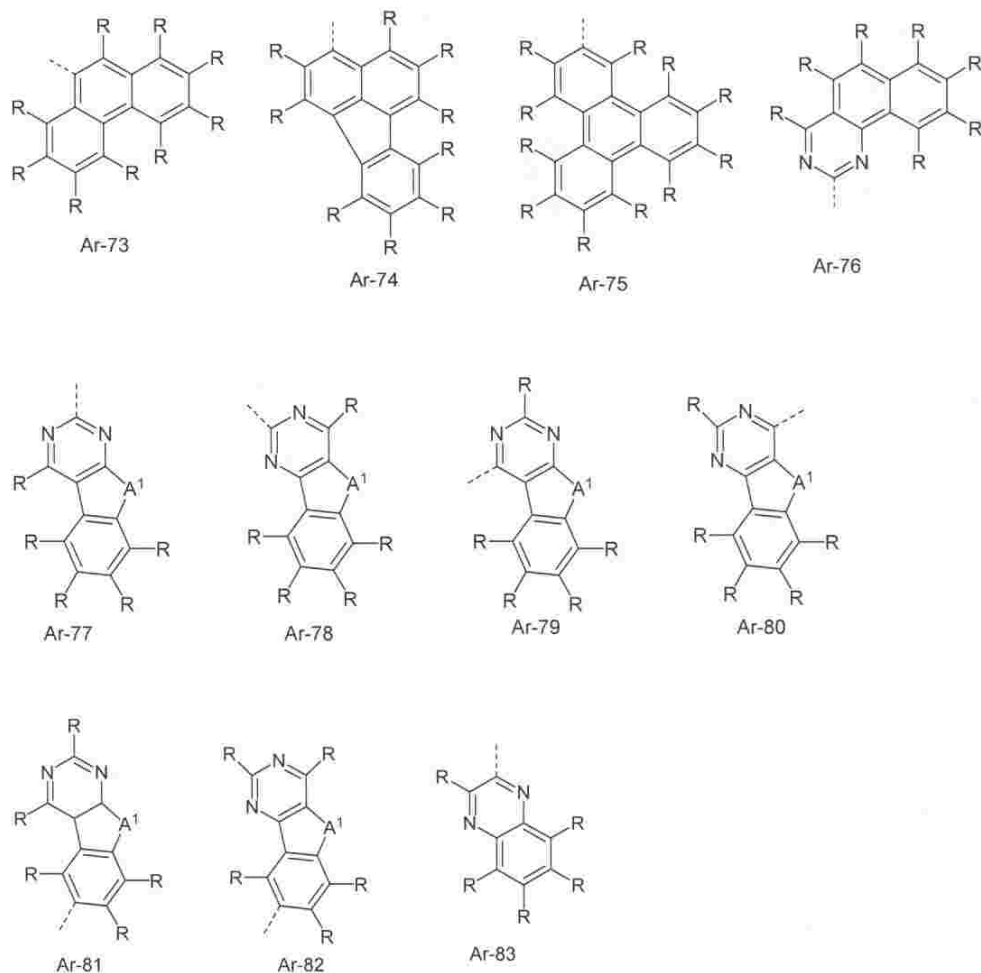
20

30

40

50

【化 20-6】



【0122】

(ここで、Rは、上記の定義を有しており、点線の結合は、トリアジンまたはピリミジンへの結合を表し、加えて：

Ar'は、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、6～18個の芳香族環原子を有する二価の芳香族もしくはヘテロ芳香族環系であり、各場合において1つ以上のRラジカルにより置換されていてもよく；

Aは、それぞれの場合において同じであるかまたは異なり、CR₂、NR、OまたはSであり；

nは、0または1であり、ここで、n=0は、A基がこの位置で結合しておらず、代わりにRラジカルが対応する炭素原子に結合していることを意味し；

mは、0または1であり、ここで、m=0は、Ar'基が不在であり、対応する芳香族もしくはヘテロ芳香族基が、トリアジンまたはピリミジンと直接結合していることを意味する)。

【0123】

次の表は、本発明の材料と一緒に使用できる適する電子輸送性マトリックス材料の例を示す。

【0124】

10

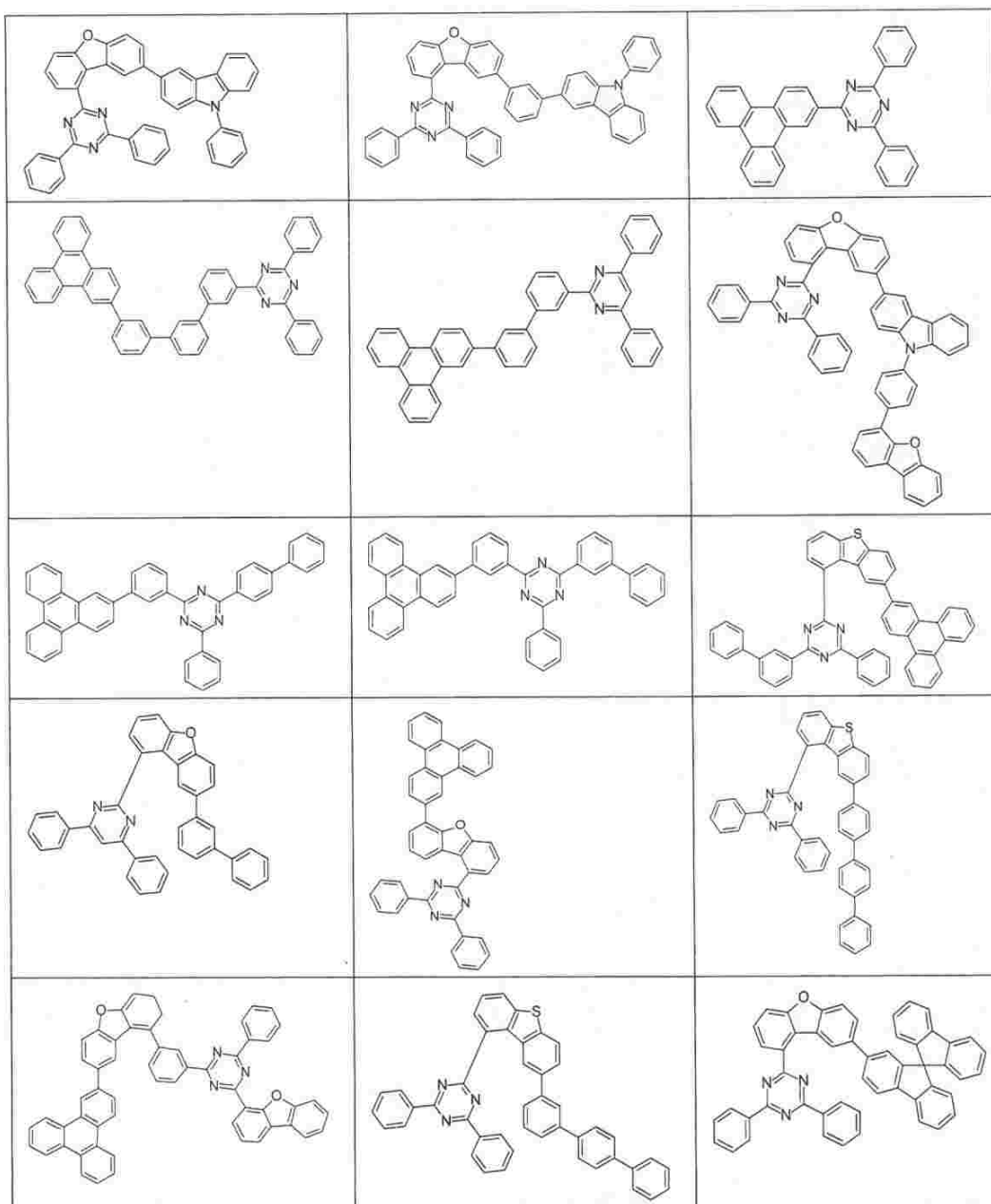
20

30

40

50

【化 2 1 - 1】



10

20

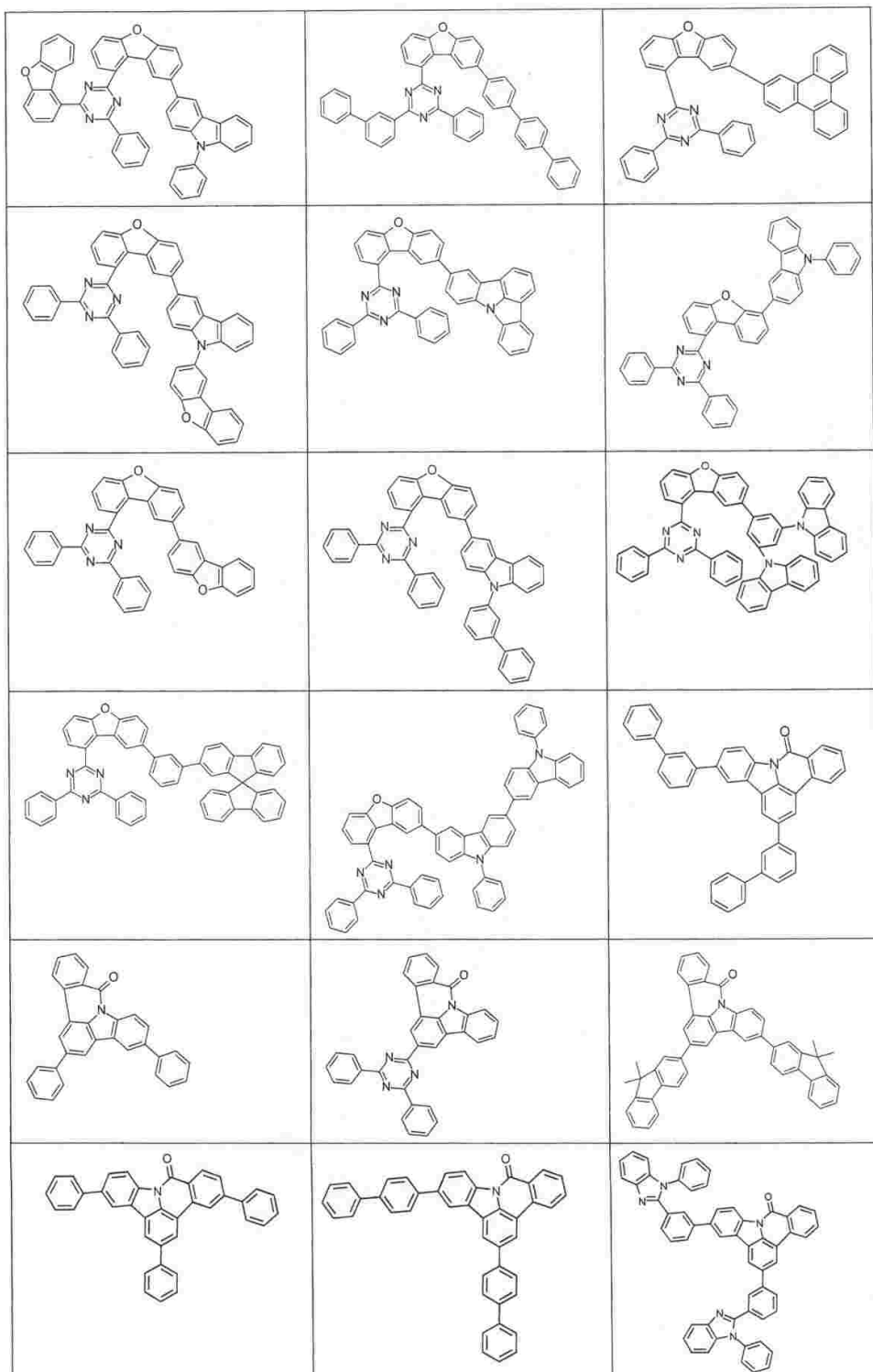
30

【 0 1 2 5】

40

50

【化 2 1 - 2】



10

20

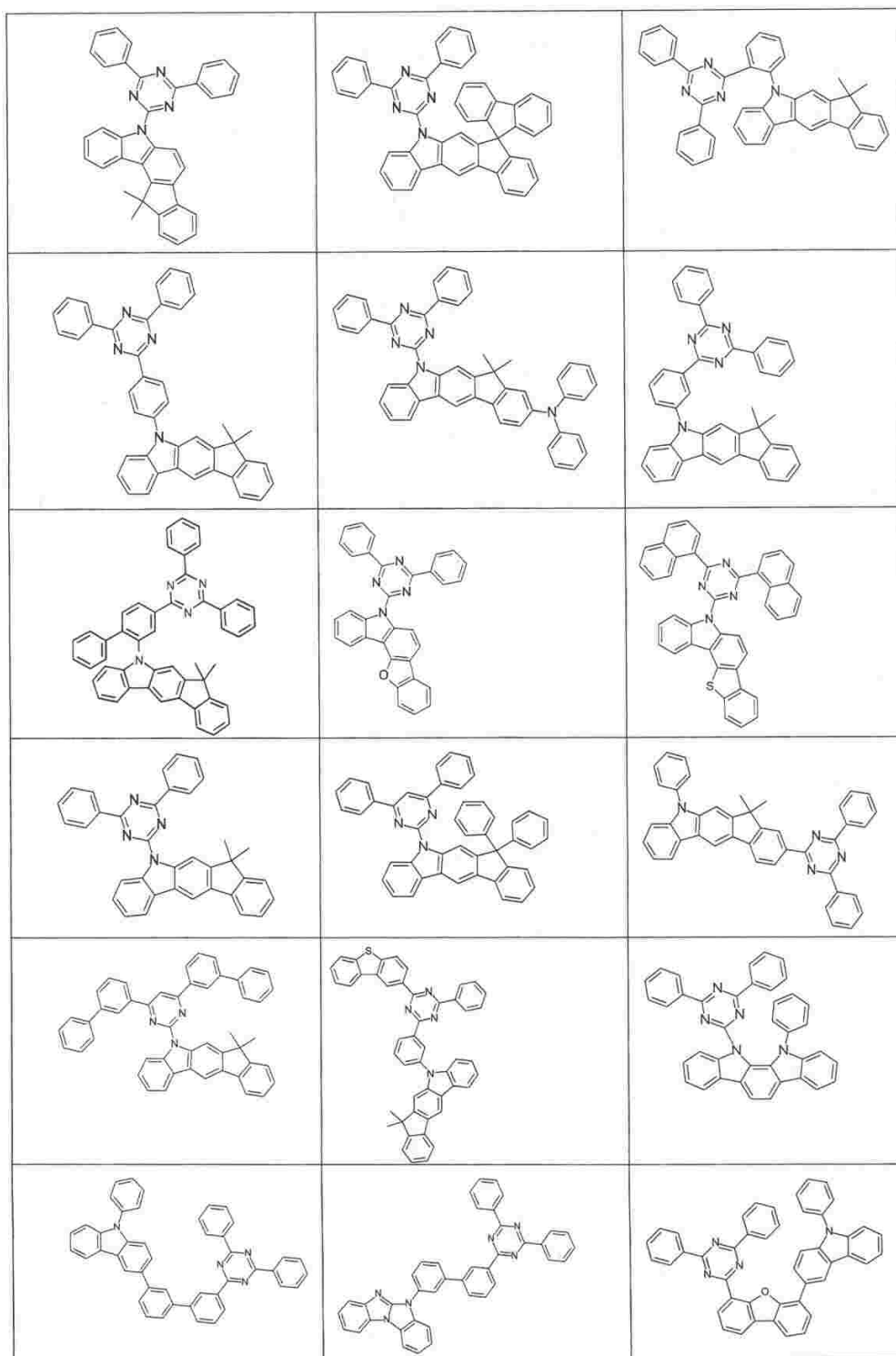
30

40

【 0 1 2 6】

50

【化 2 1 - 3】



10

20

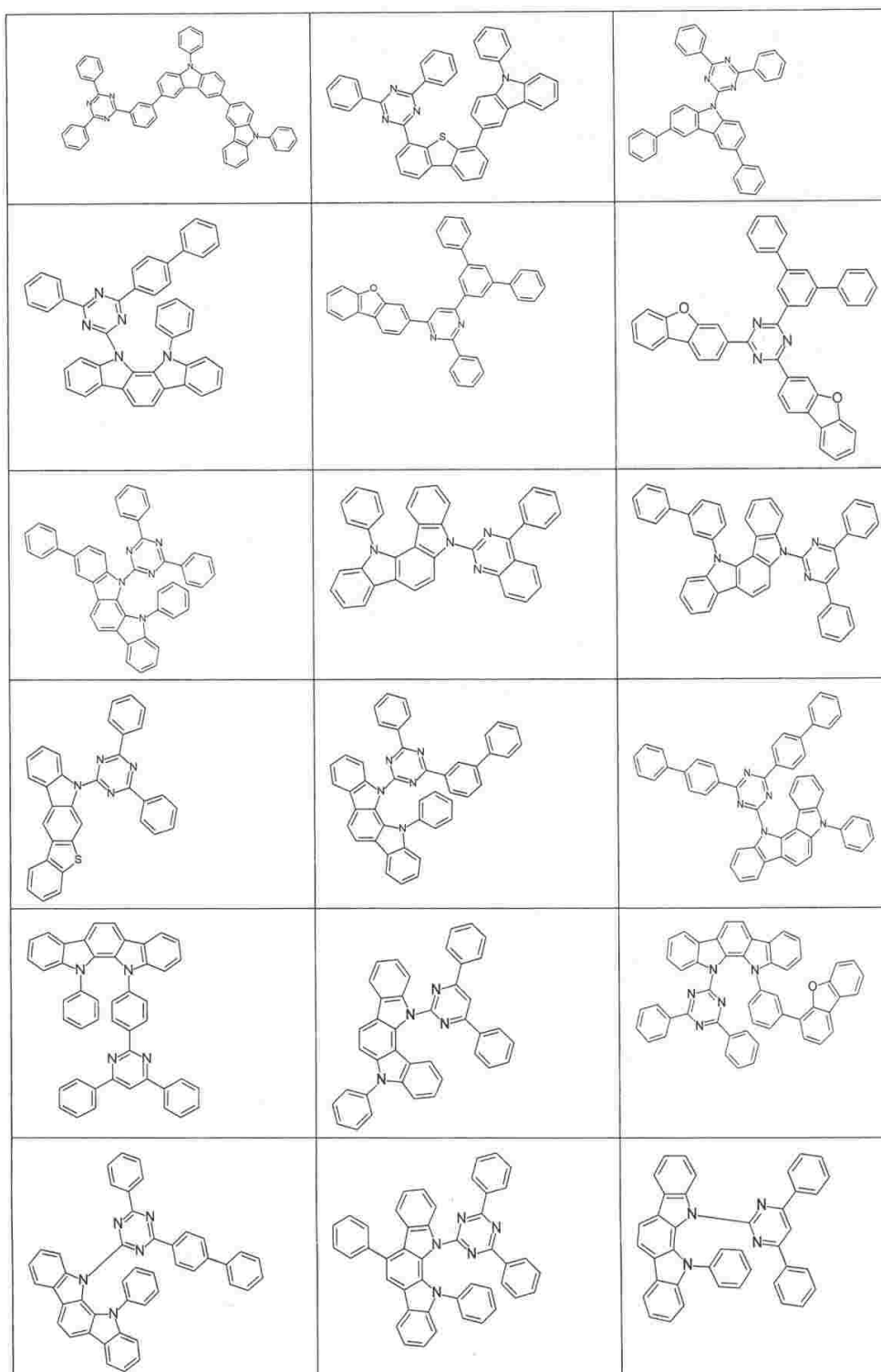
30

40

【 0 1 2 7】

50

【化 2 1 - 4】



10

20

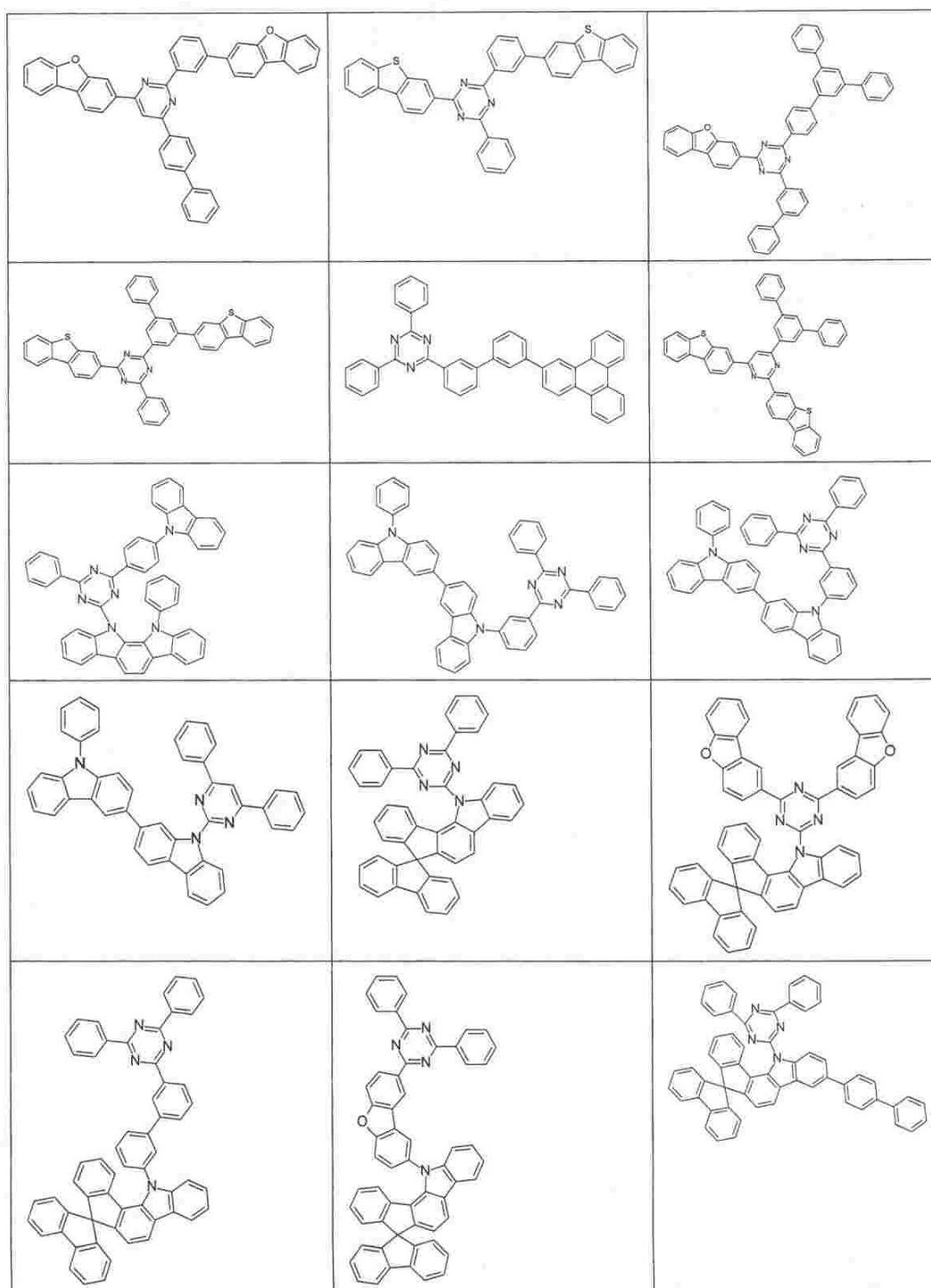
30

40

【 0 1 2 8】

50

【化 2 1 - 5】



10

20

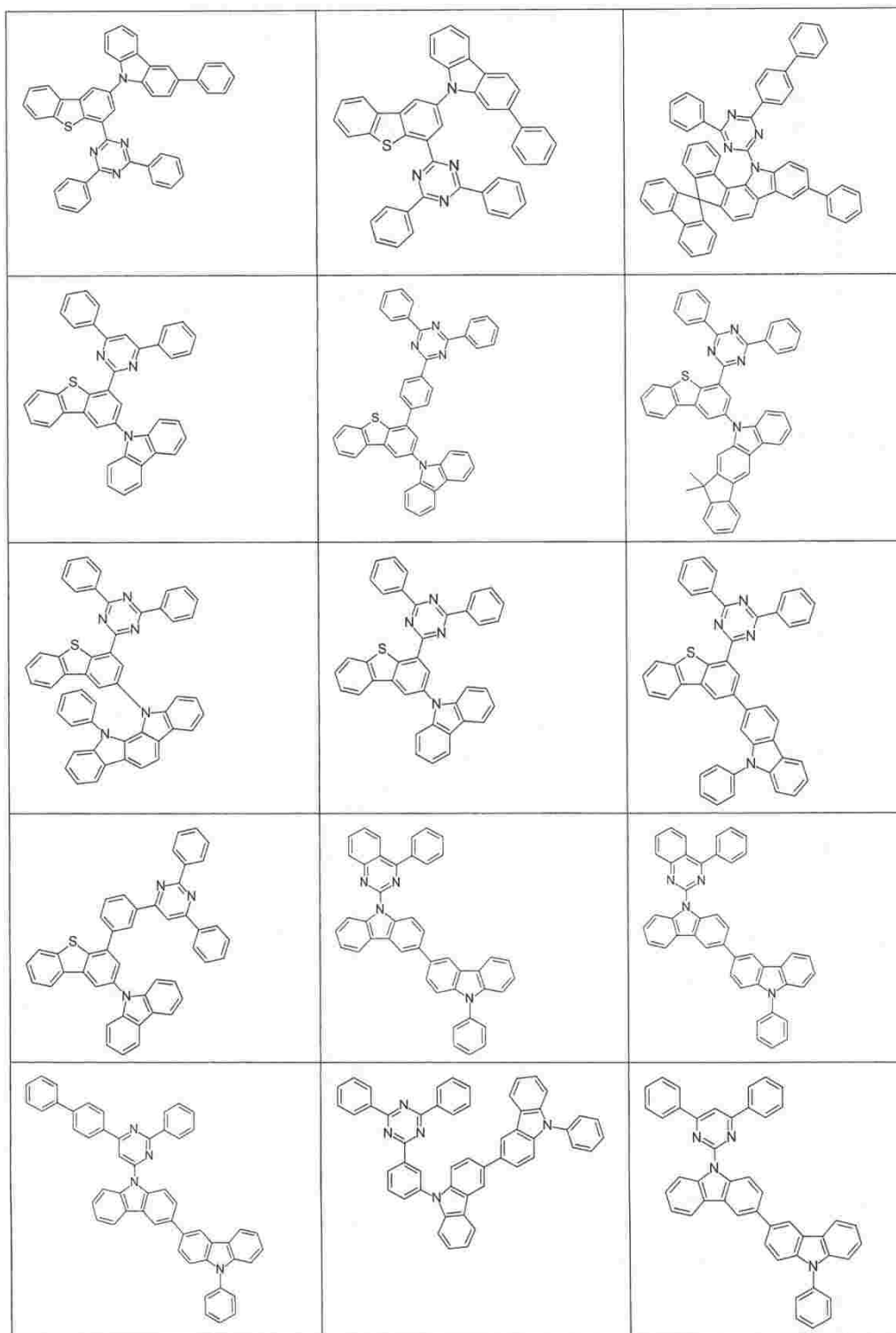
30

40

【 0 1 2 9】

50

【化 2 1 - 6】



10

20

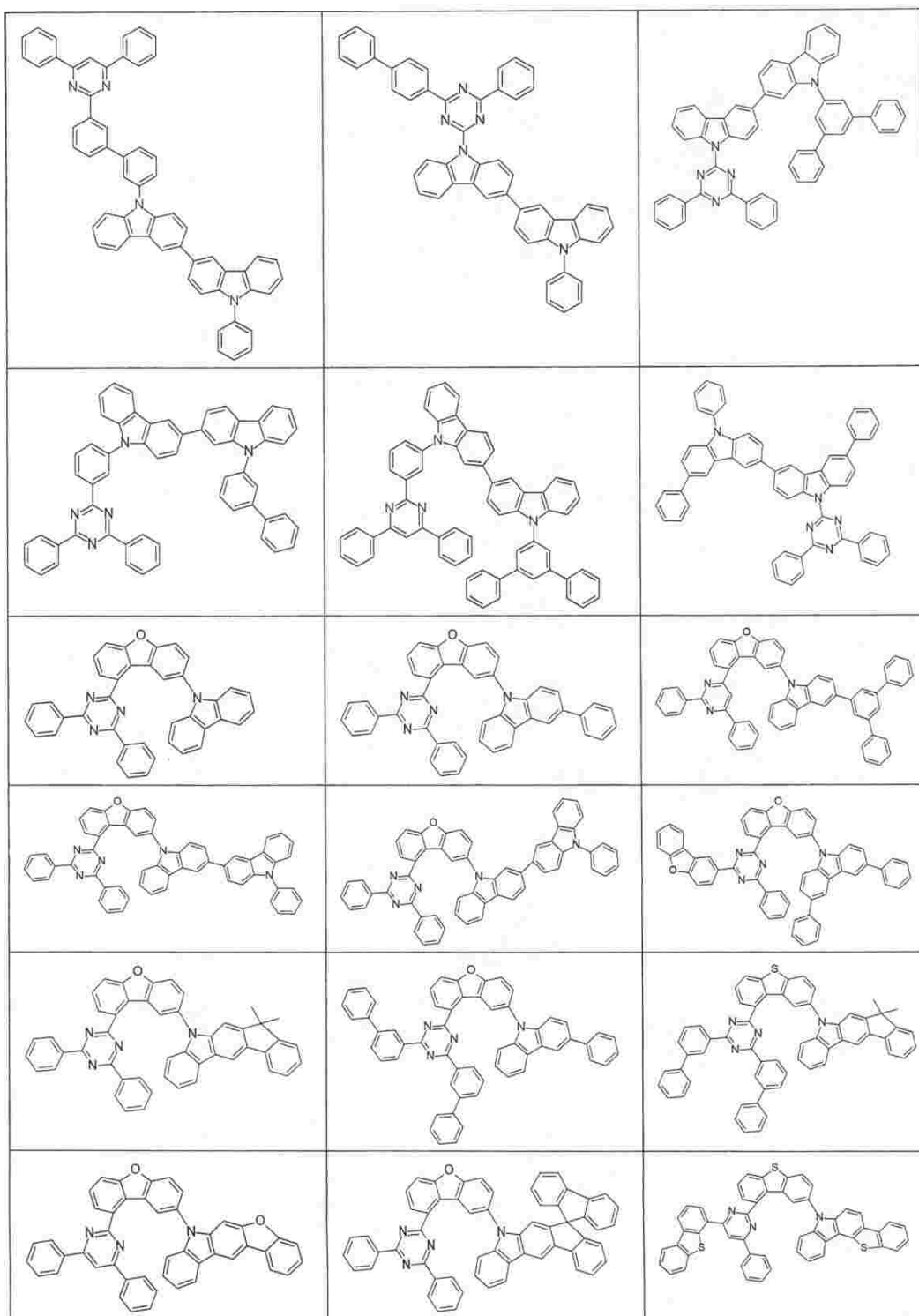
30

40

【 0 1 3 0】

50

【化 2 1 - 7】



【 0 1 3 1】

10

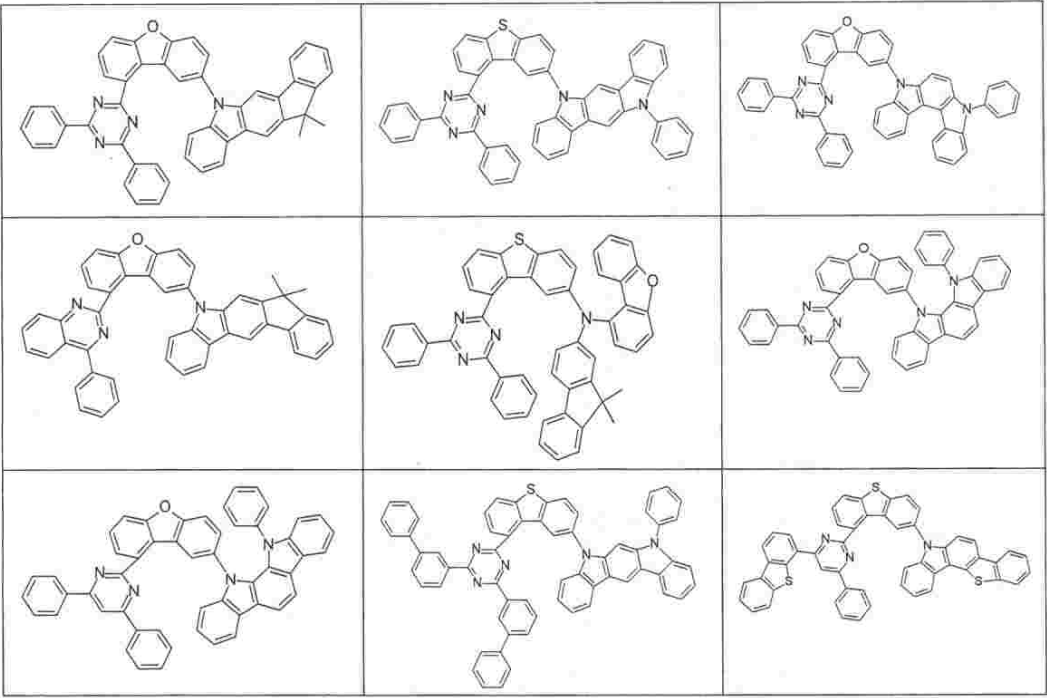
20

30

40

50

【化 2 1 - 8】



10

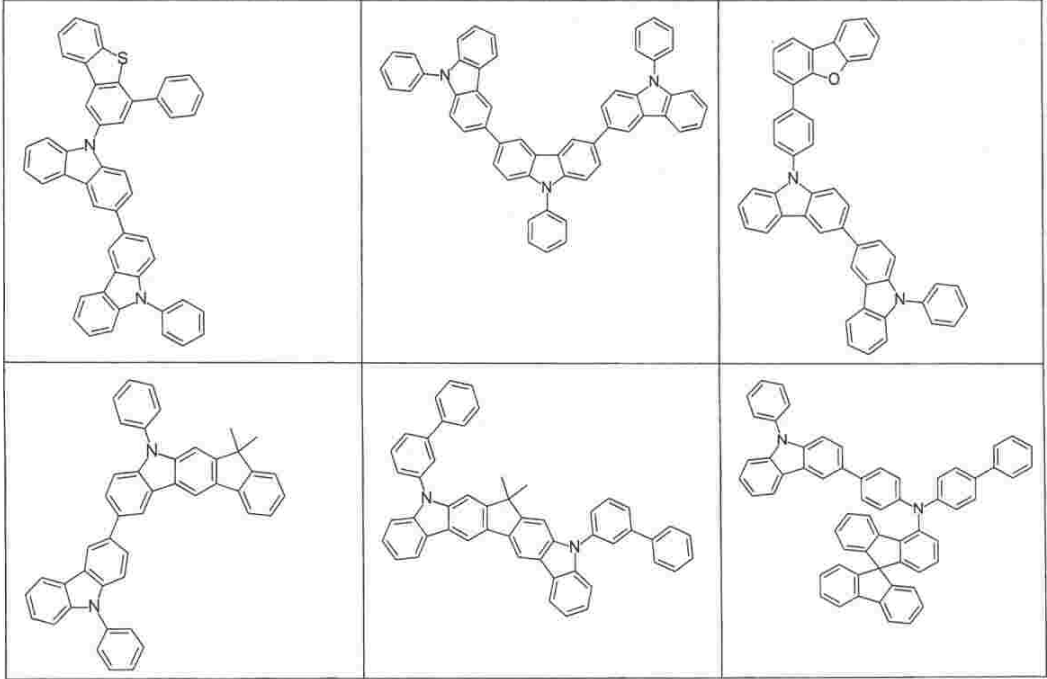
20

【 0 1 3 2】

次の表は、本発明の材料と一緒に使用できる適する正孔輸送性マトリックス材料の例を示す。

【 0 1 3 3】

【化 2 2 - 1】



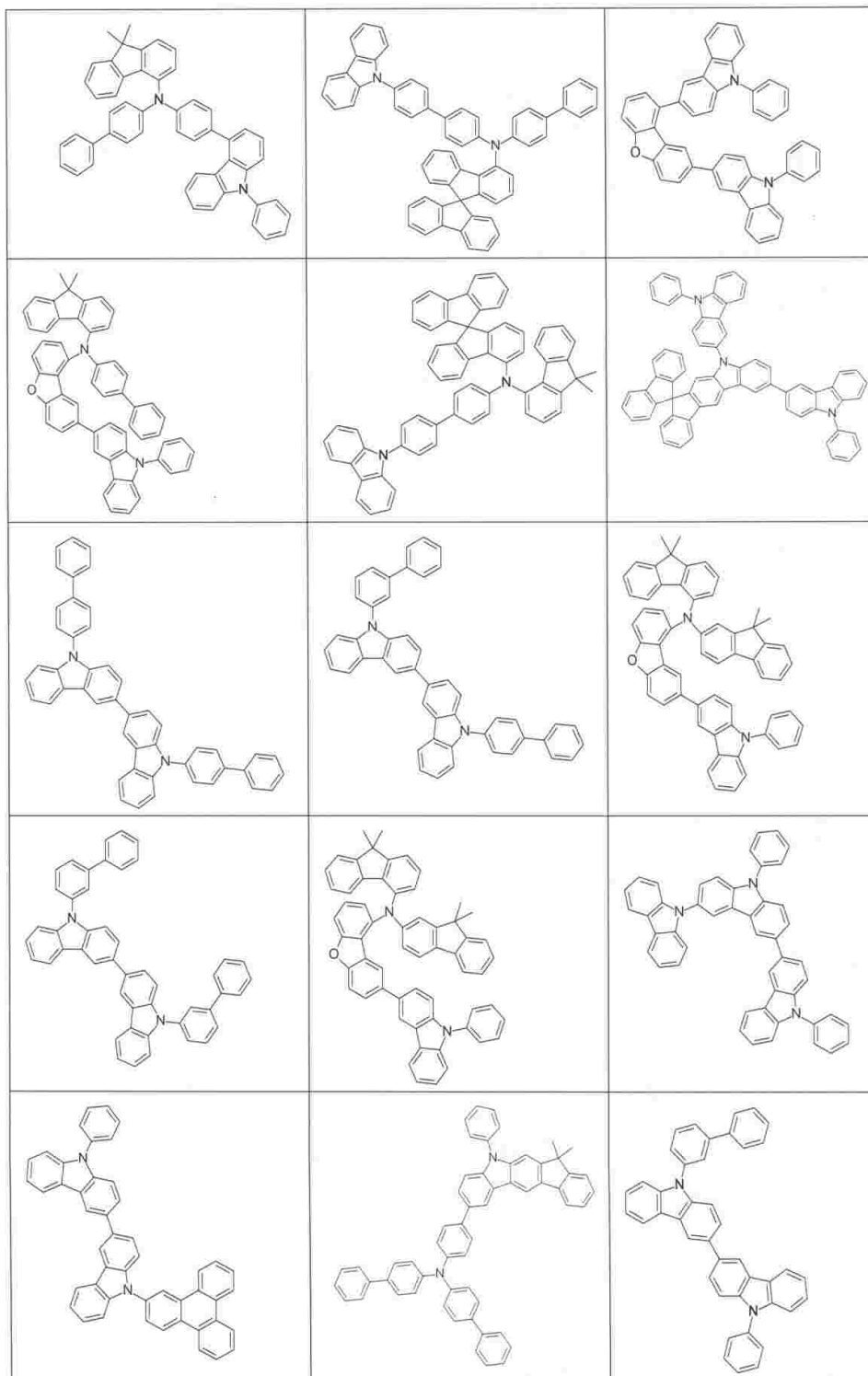
30

40

【 0 1 3 4】

50

【化 2 2 - 2】



10

20

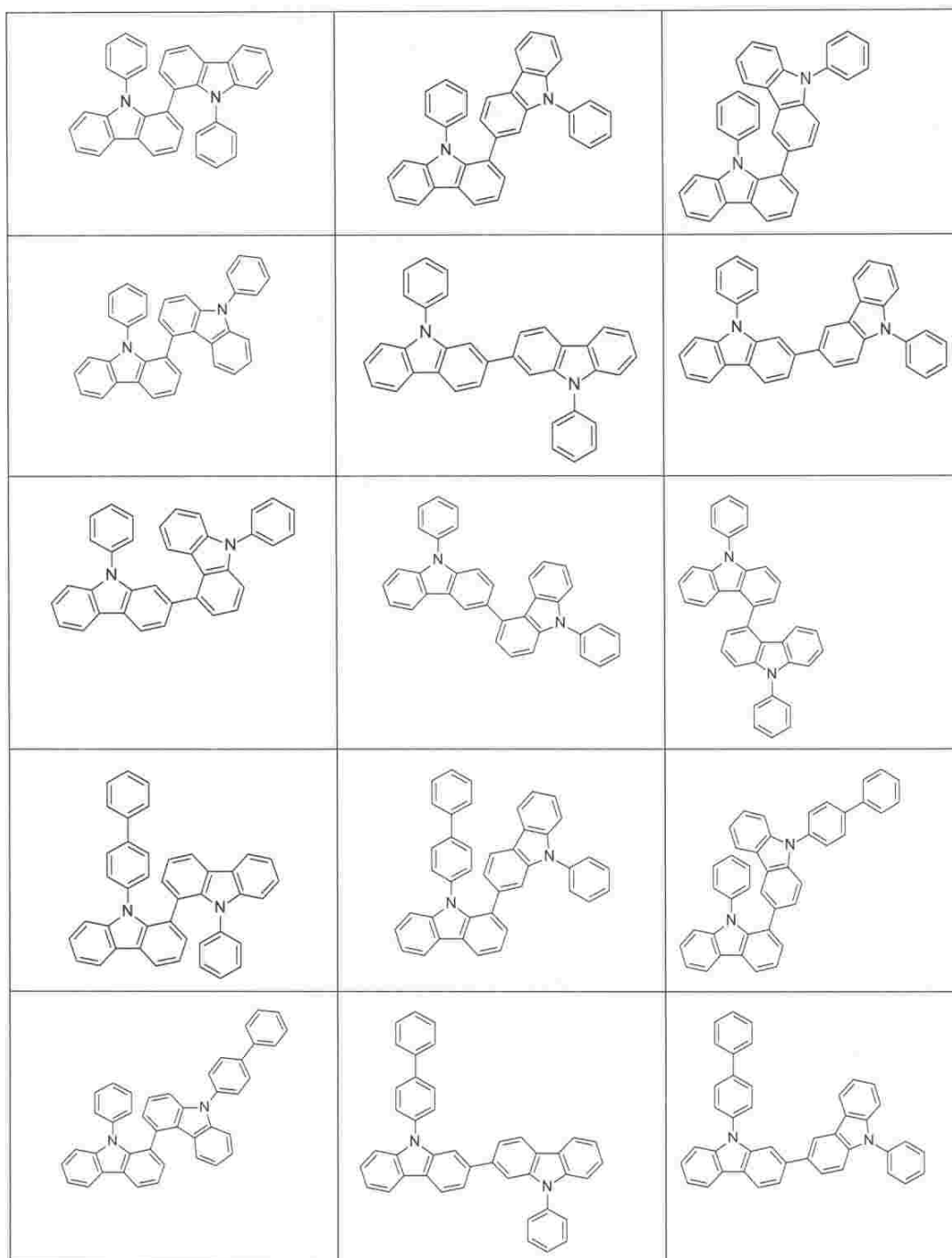
30

40

【 0 1 3 5】

50

【化 2 2 - 3】



10

20

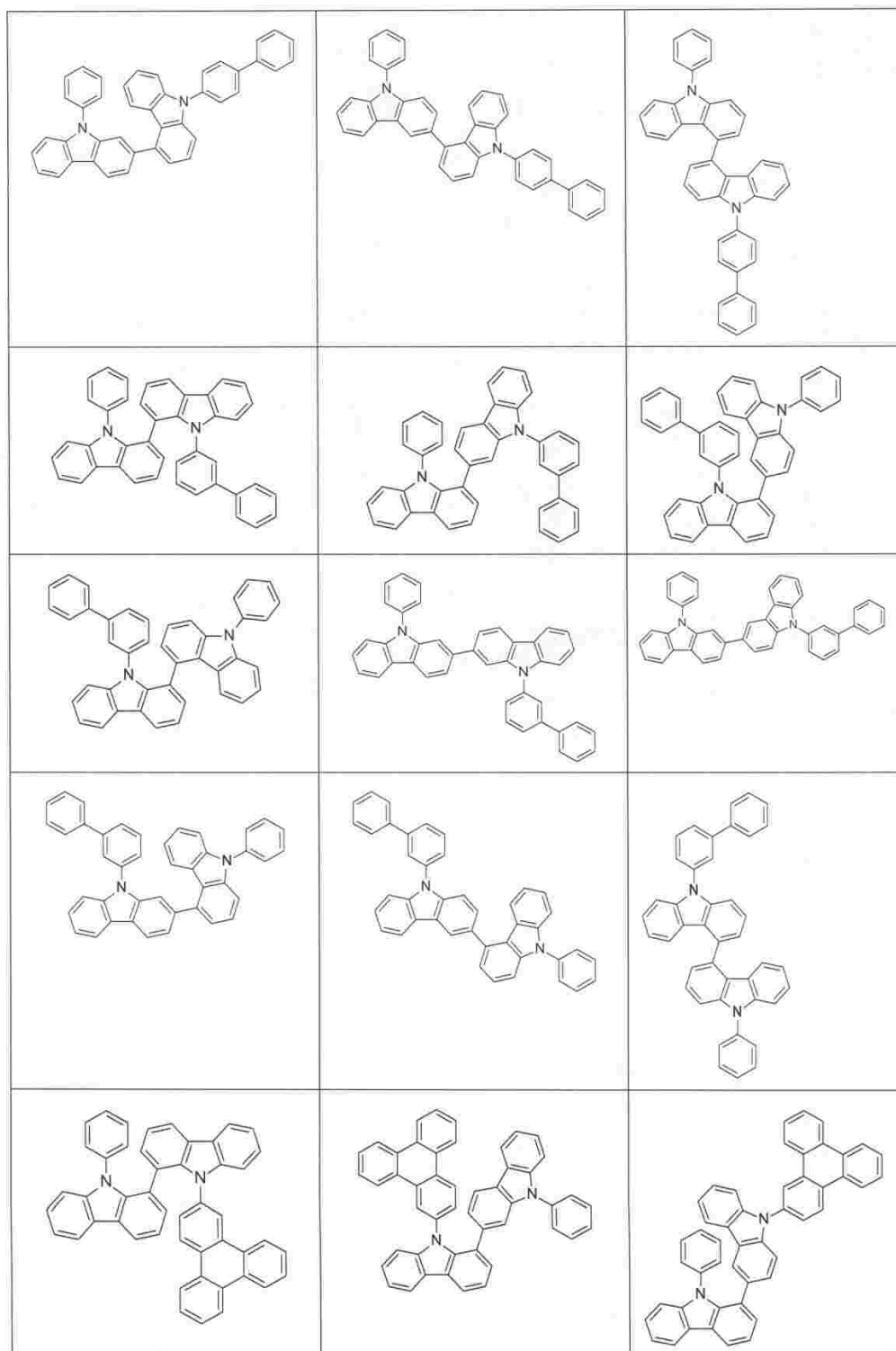
30

【 0 1 3 6】

40

50

【化 2 2 - 4】



10

20

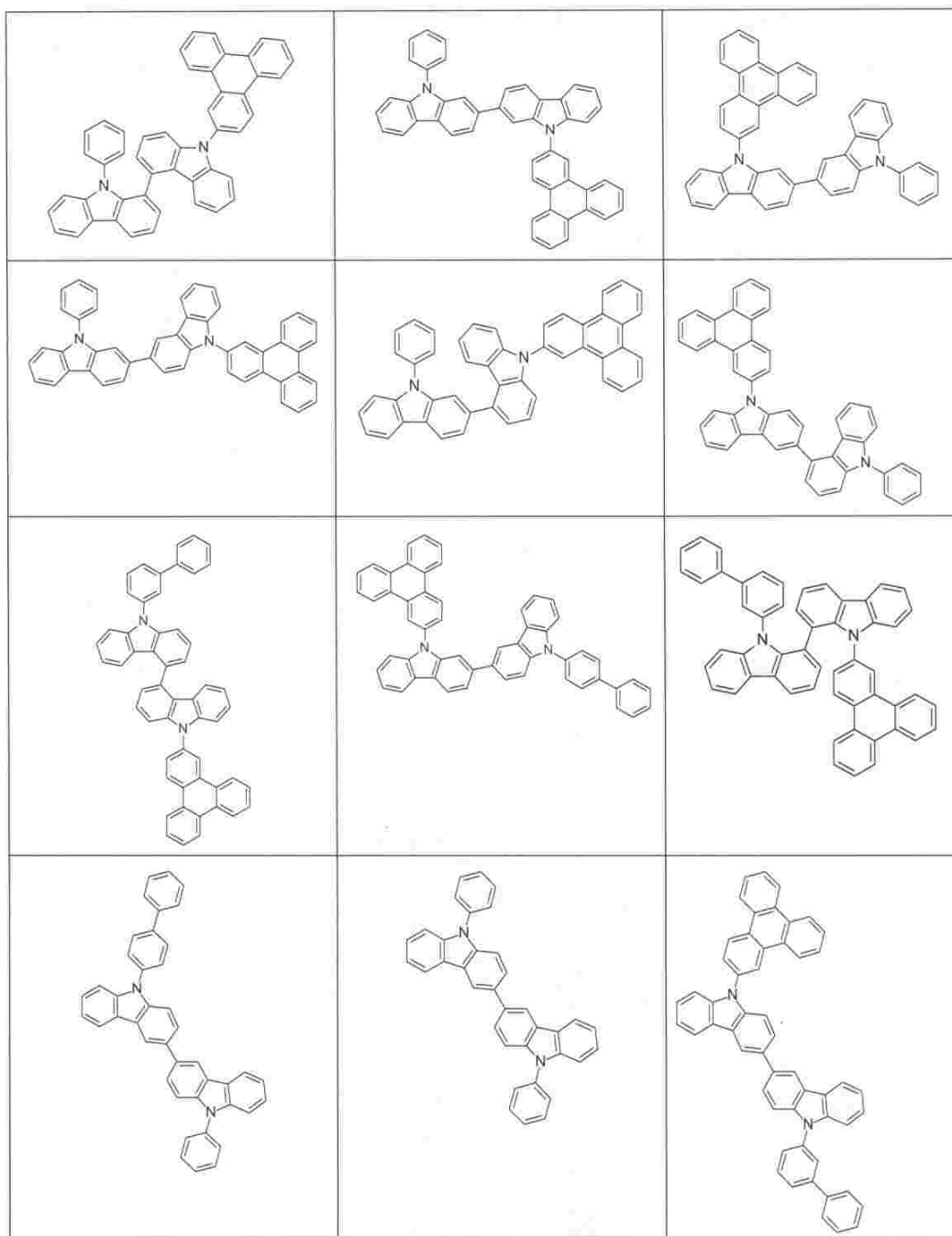
30

40

【 0 1 3 7】

50

【化 2 2 - 5】



10

20

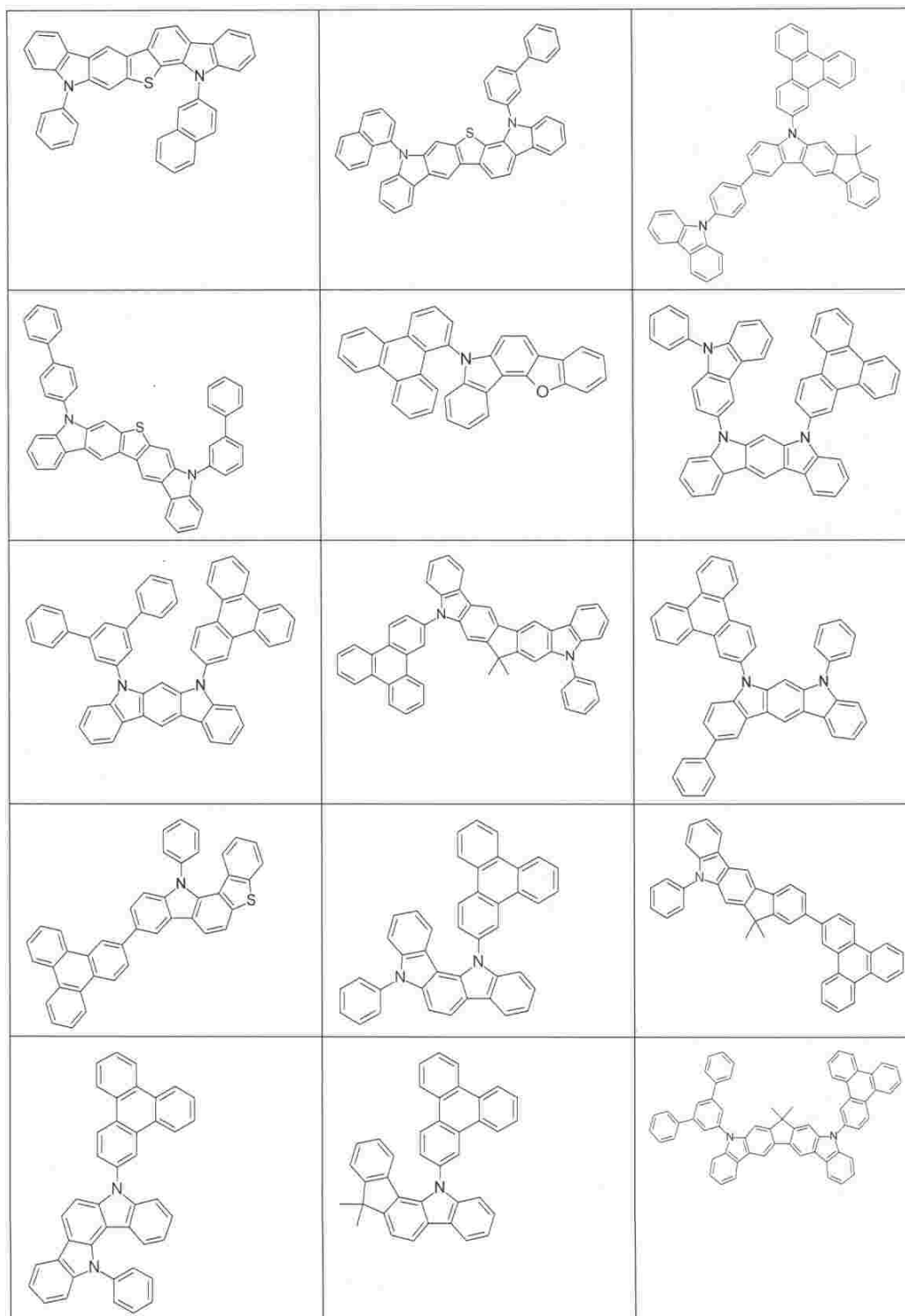
30

【 0 1 3 8】

40

50

【化 2 2 - 6】



10

20

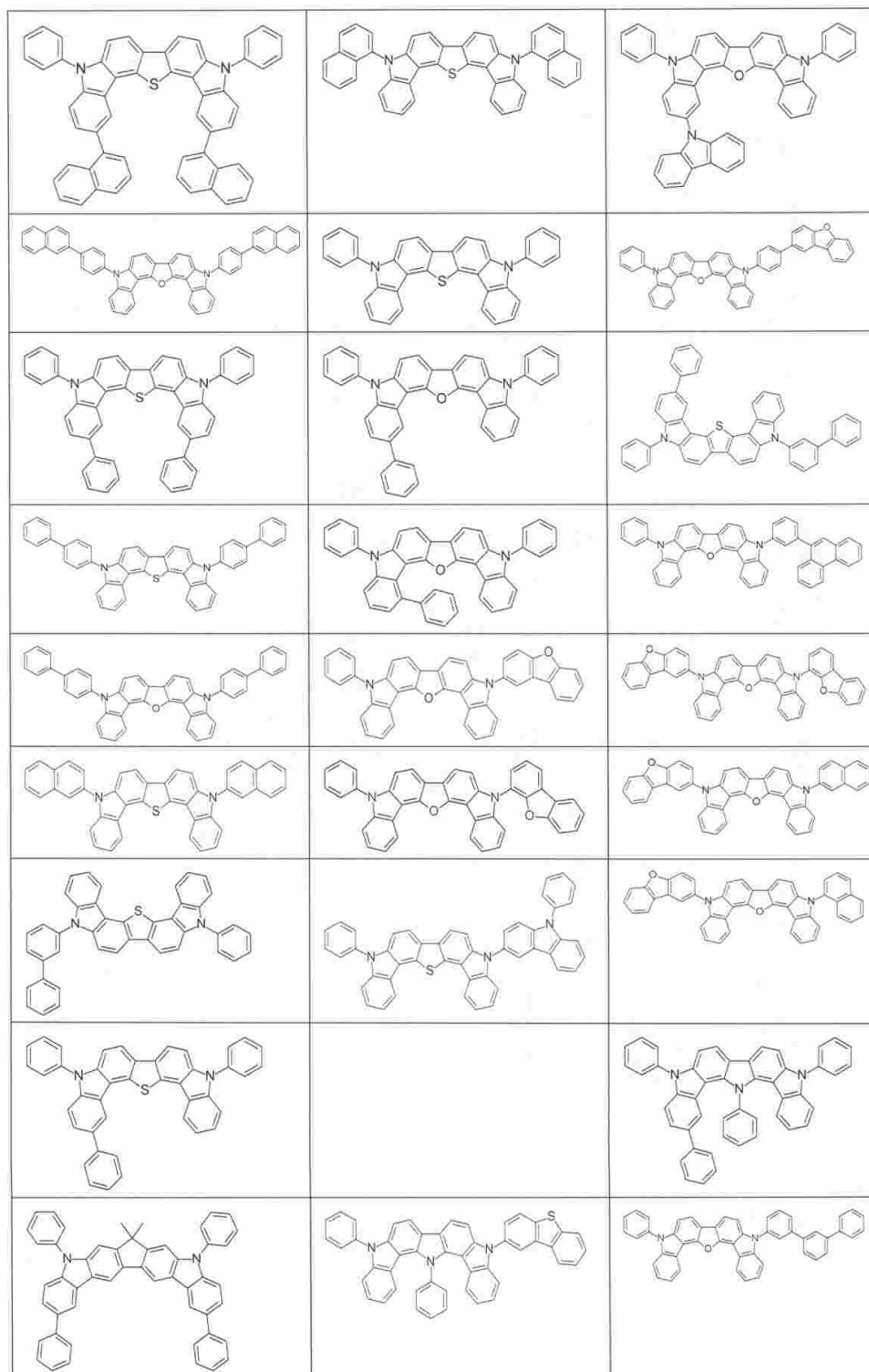
30

40

【 0 1 3 9】

50

【化 2 2 - 7】



10

20

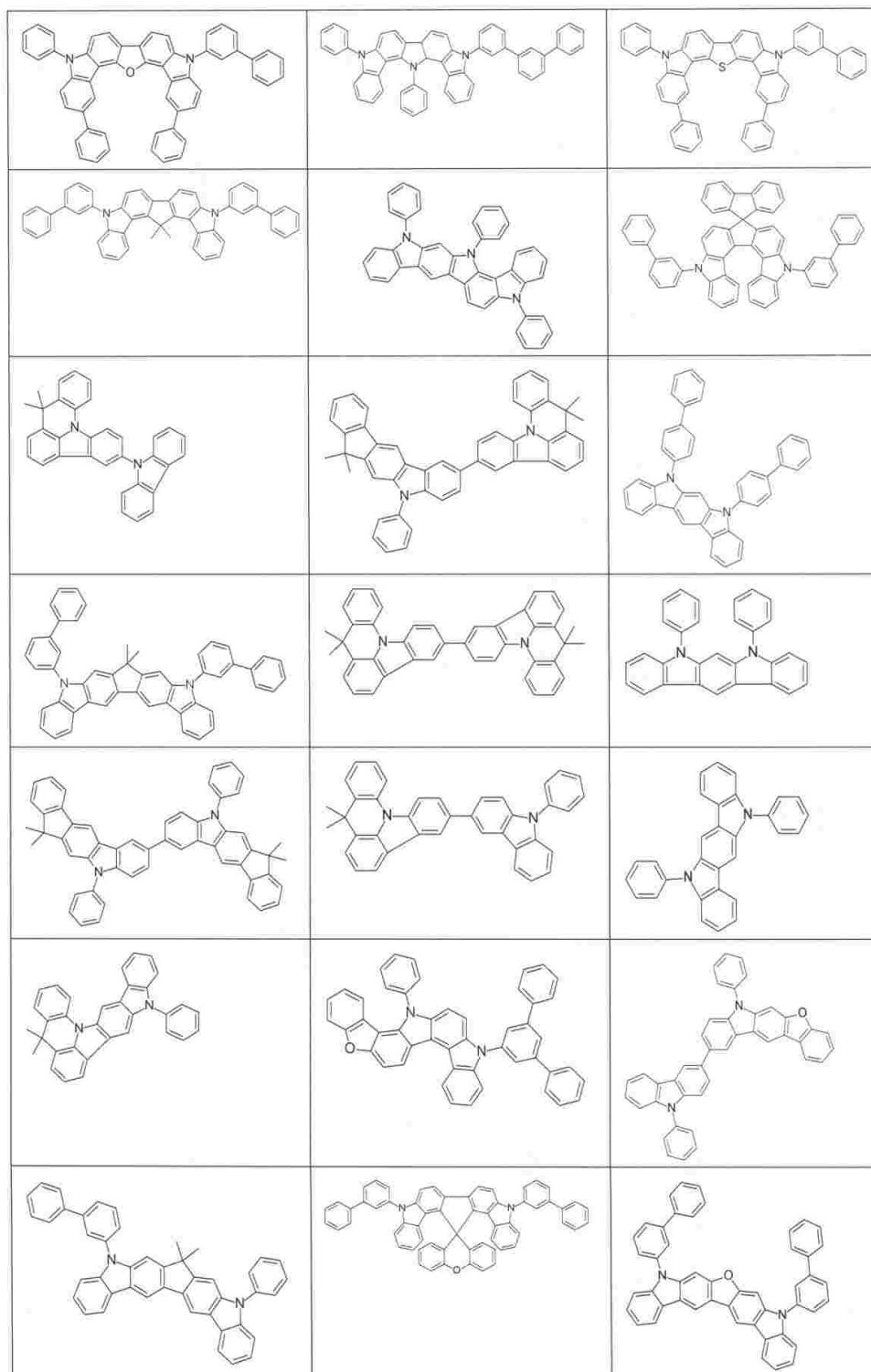
30

40

【 0 1 4 0】

50

【化 2 2 - 8】



10

20

30

40

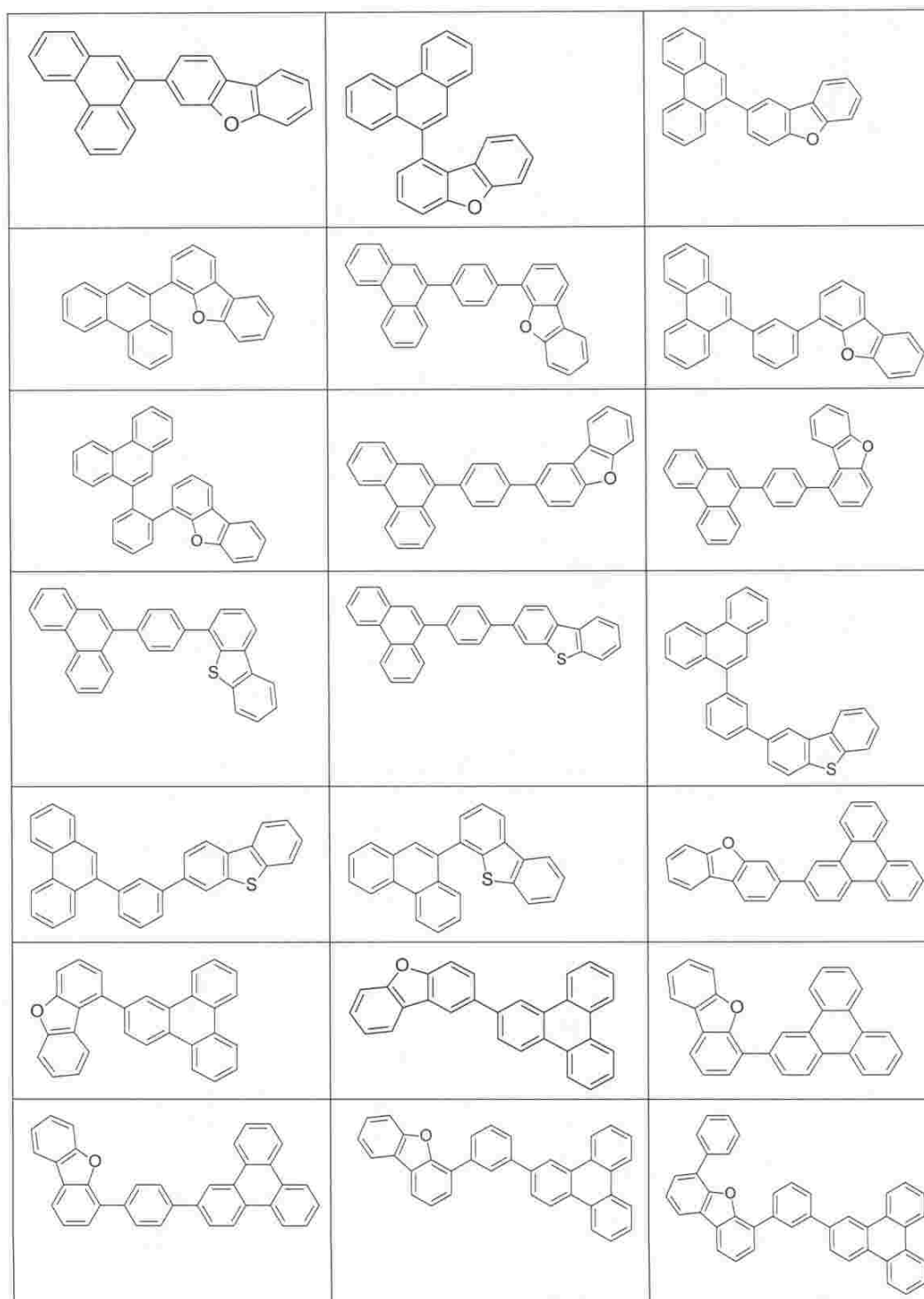
【 0 1 4 1】

次の表は、本発明の材料と一緒に使用できる適するワイドバンドギャップマトリックス材料の例を示す。

【 0 1 4 2】

50

【化 2 3 - 1】



10

20

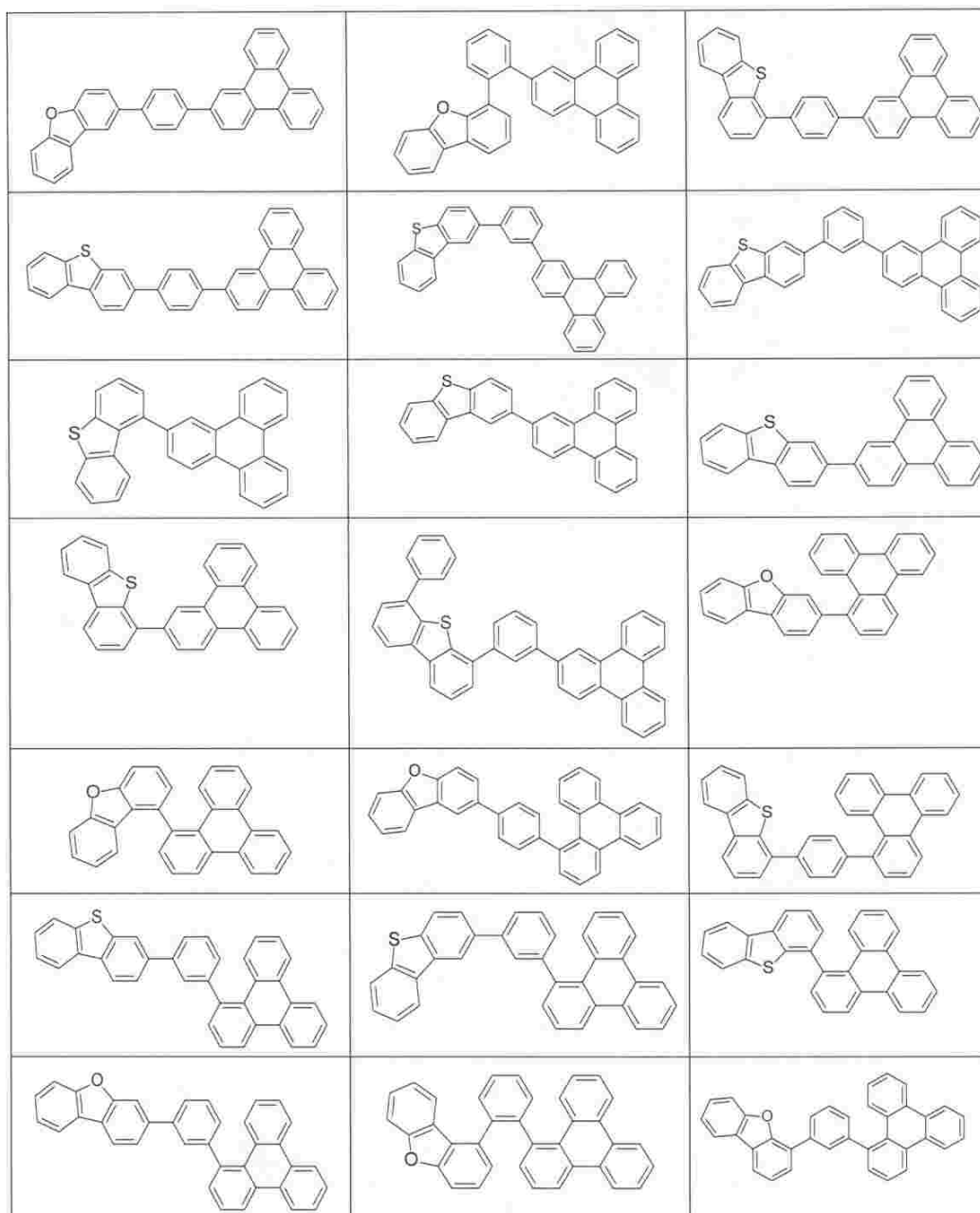
30

40

【 0 1 4 3】

50

【化 2 3 - 2】



10

20

30

【0 1 4 4】

適するリン光性化合物（＝三重項発光体）は、とりわけ、適切な励起の際に、好ましくは可視領域で発光する化合物であり、また、20より大きい、好ましくは38より大きく84より小さい、より好ましくは56より大きく80より小さい原子番号を有する原子、とりわけこの原子番号を有する金属を少なくとも1つ含有する。使用される好ましいリン光発光体は、銅、モリブデン、タングステン、レニウム、ルテニウム、オスミウム、ロジウム、イリジウム、パラジウム、白金、銀、金またはユウロピウムを含有する化合物、とりわけイリジウムまたは白金を含有する化合物である。

40

【0 1 4 5】

上記の発光体の例は、出願WO 00/70655、WO 2001/41512、WO 2002/02714、WO 2002/15645、EP 1191613、EP 1191612、EP 1191614、WO 05/033244、WO 05/019373、US 2005/0258742、WO 2009/146770、WO 2010/015307、WO 2010/031485、WO 2010/054731、WO 2010/054728、WO 2010/086089、WO 2010/099852、

50

WO 2010/102709、WO 2011/032626、WO 2011/066898、WO 2011/157339、WO 2012/007086、WO 2014/008982、WO 2014/023377、WO 2014/094961、WO 2014/094960、WO 2015/036074、WO 2015/104045、WO 2015/117718、WO 2016/015815、WO 2016/124304、WO 2017/032439、WO 2018/011186およびWO 2018/041769、ならびに未公開の特許出願EP 17182995.5、EP 17205103.9、EP 17206950.2およびEP 18156388.3に見つけることができる。一般に、先行技術に従ってリン光性OLEDに使用され、有機エレクトロルミネッセンスの分野の当業者に知られているような全てのリン光性錯体が適切であり、当業者は本発明の技術を使うことなくさらなるリン光性錯体を使用することができるであろう。

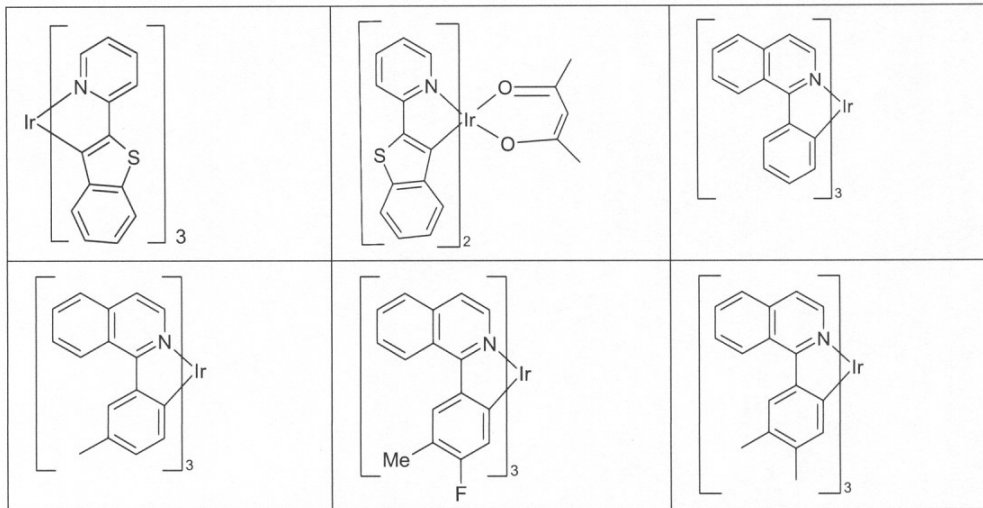
10

【0146】

リン光性ドーパントの例を以下に挙げる。

【0147】

【化24-1】



20

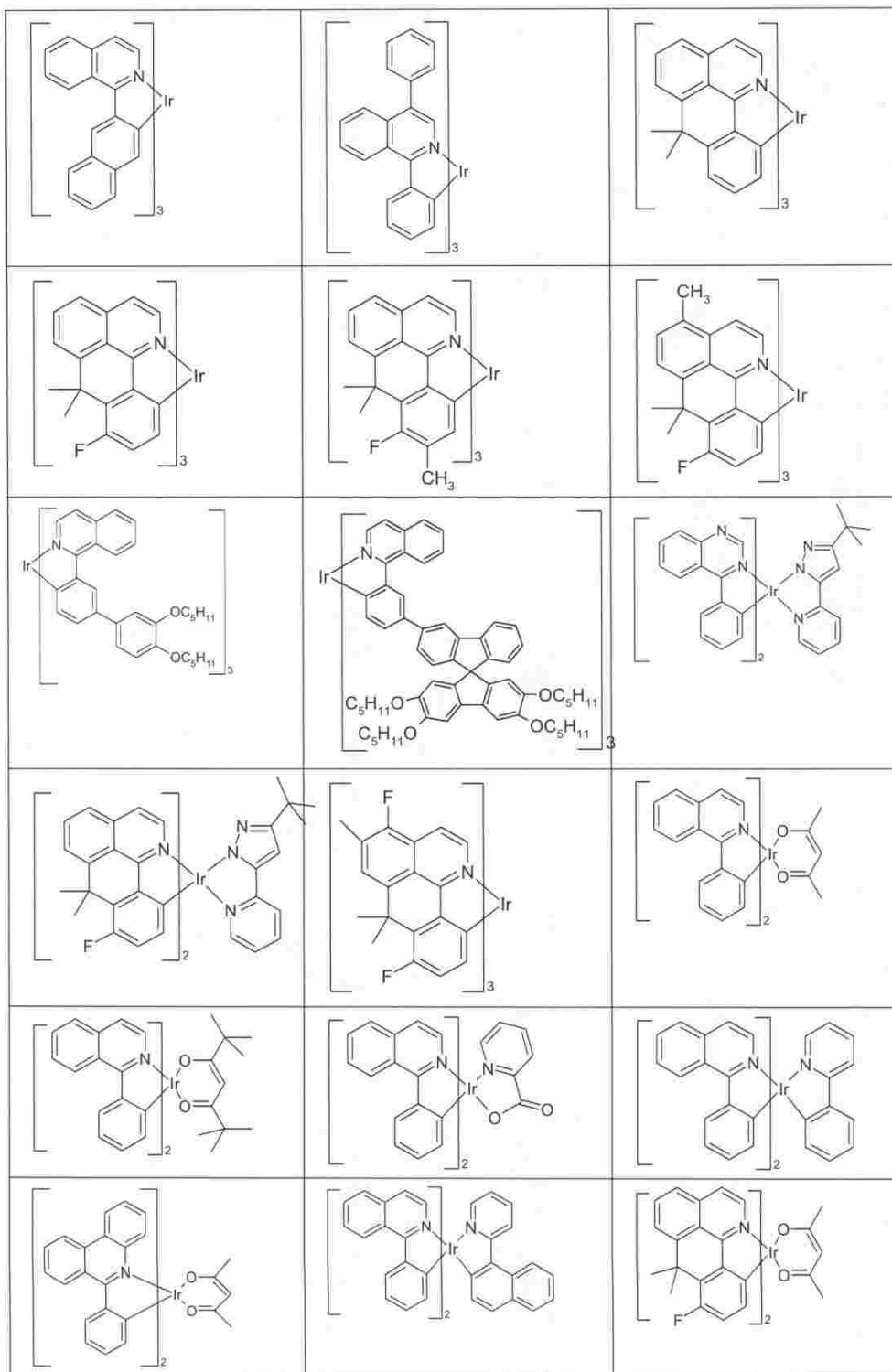
30

【0148】

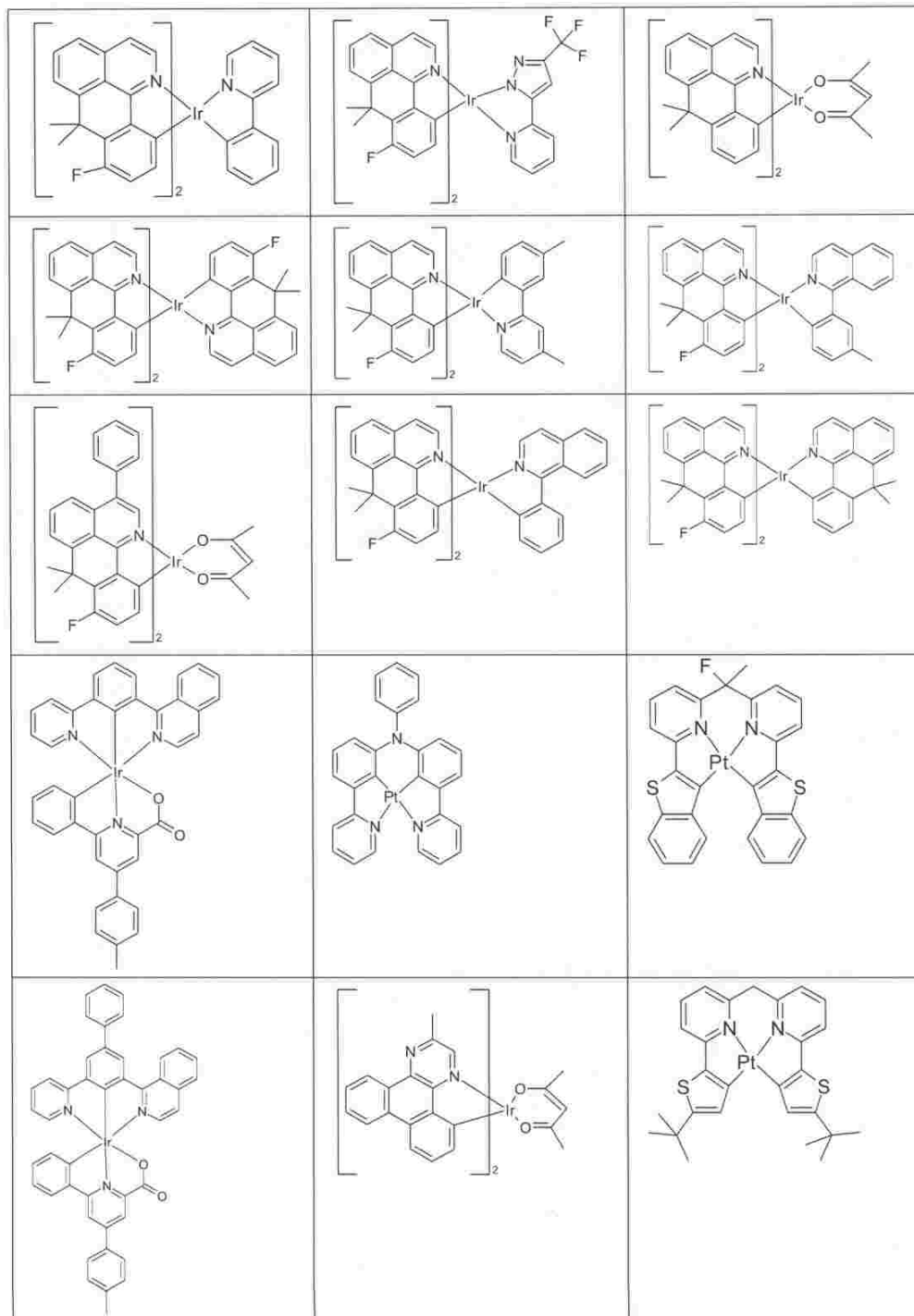
40

50

【化 2 4 - 2】



【化 2 4 - 3】



10

20

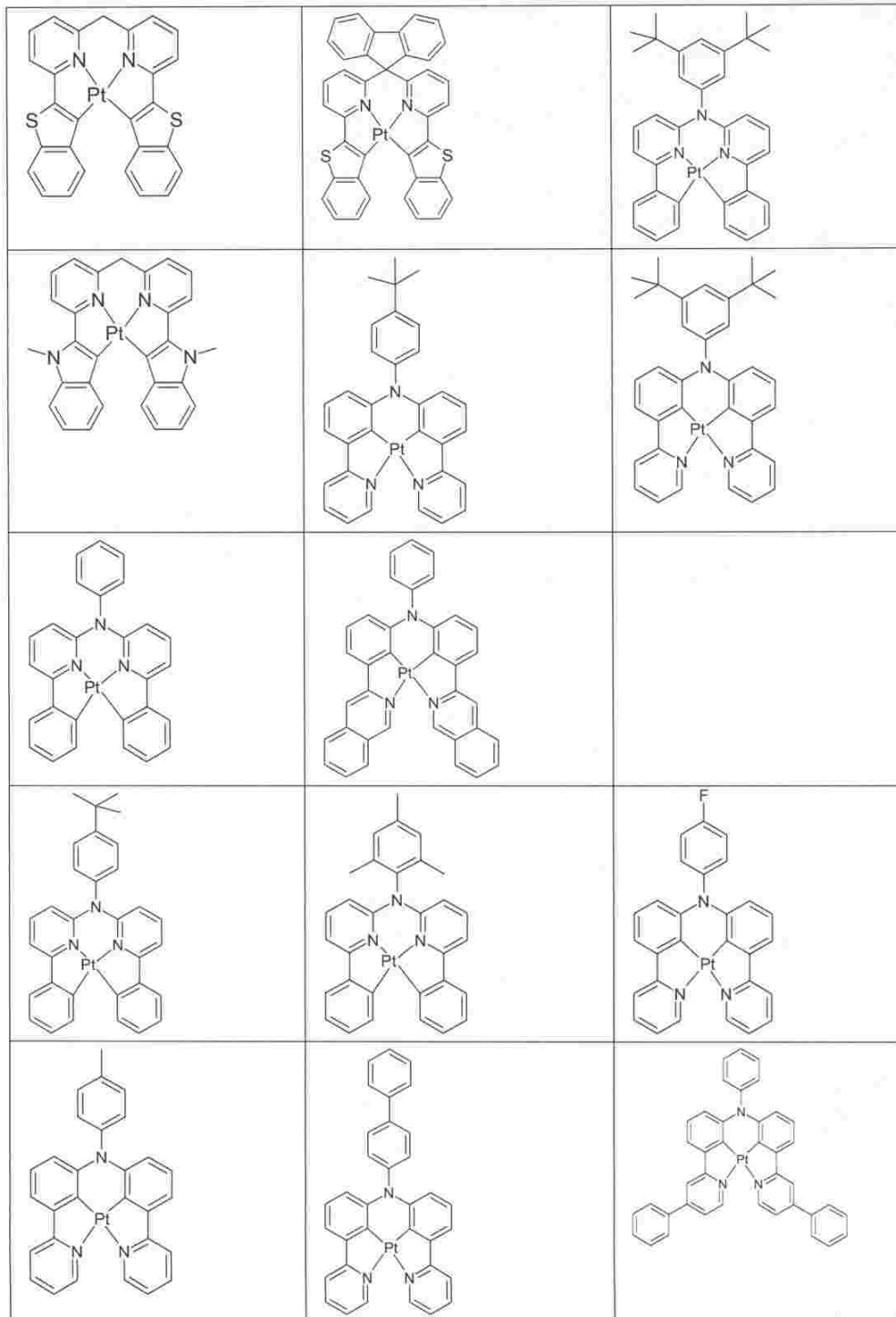
30

【 0 1 5 0】

40

50

【化 2 4 - 4】



10

20

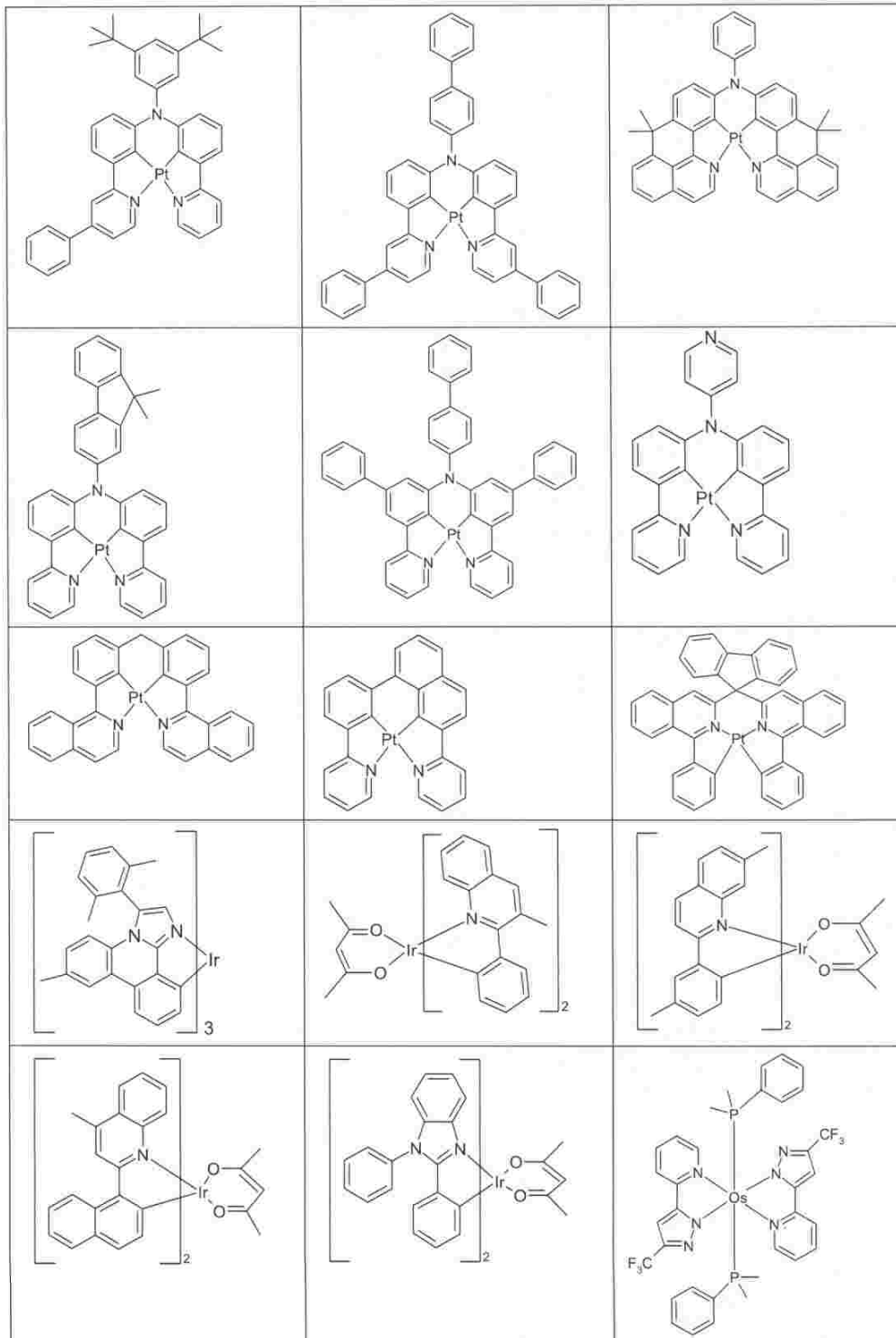
30

40

【 0 1 5 1】

50

【化 2 4 - 5】



【 0 1 5 2】

10

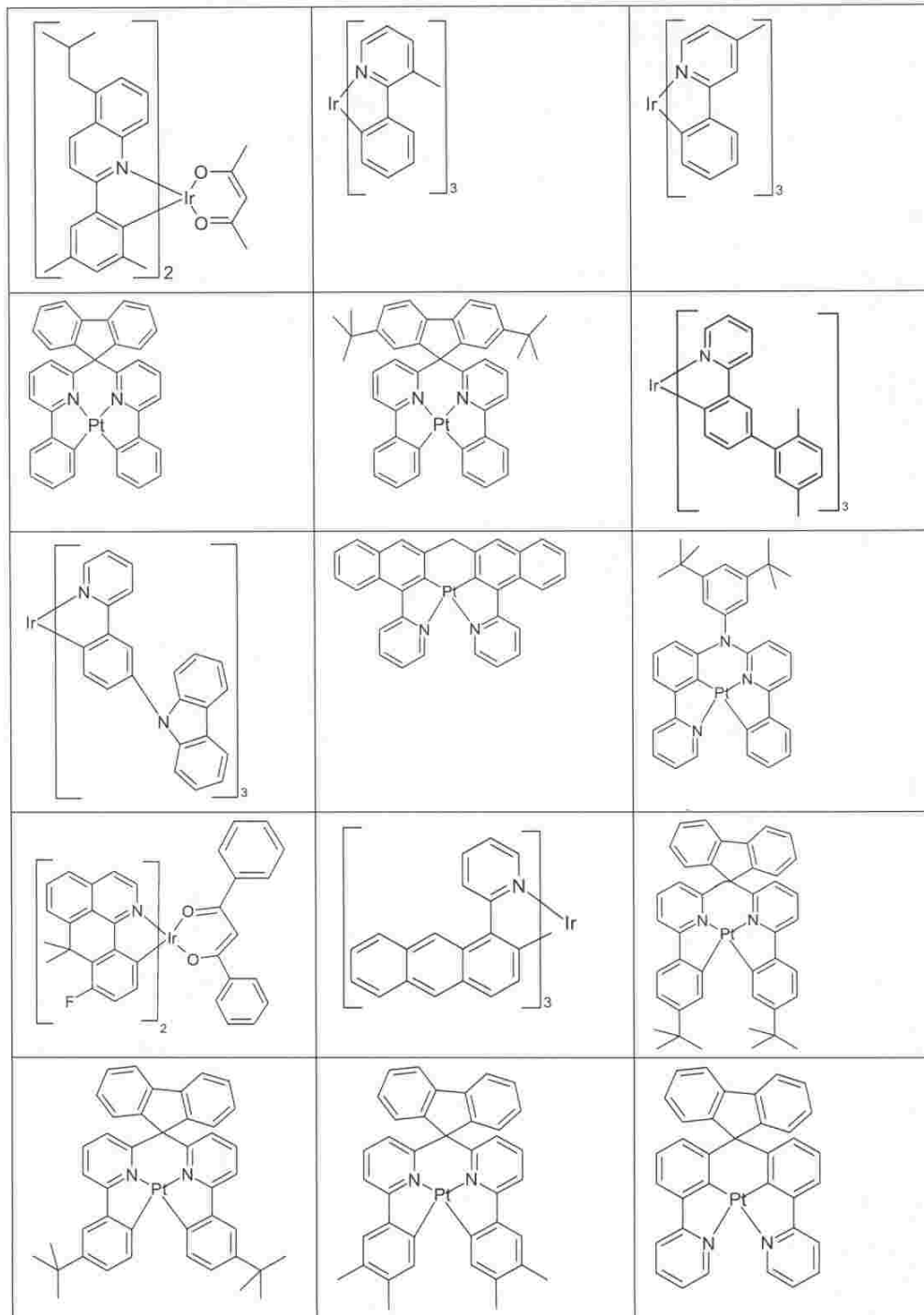
20

30

40

50

【化 2 4 - 6】



【 0 1 5 3】

10

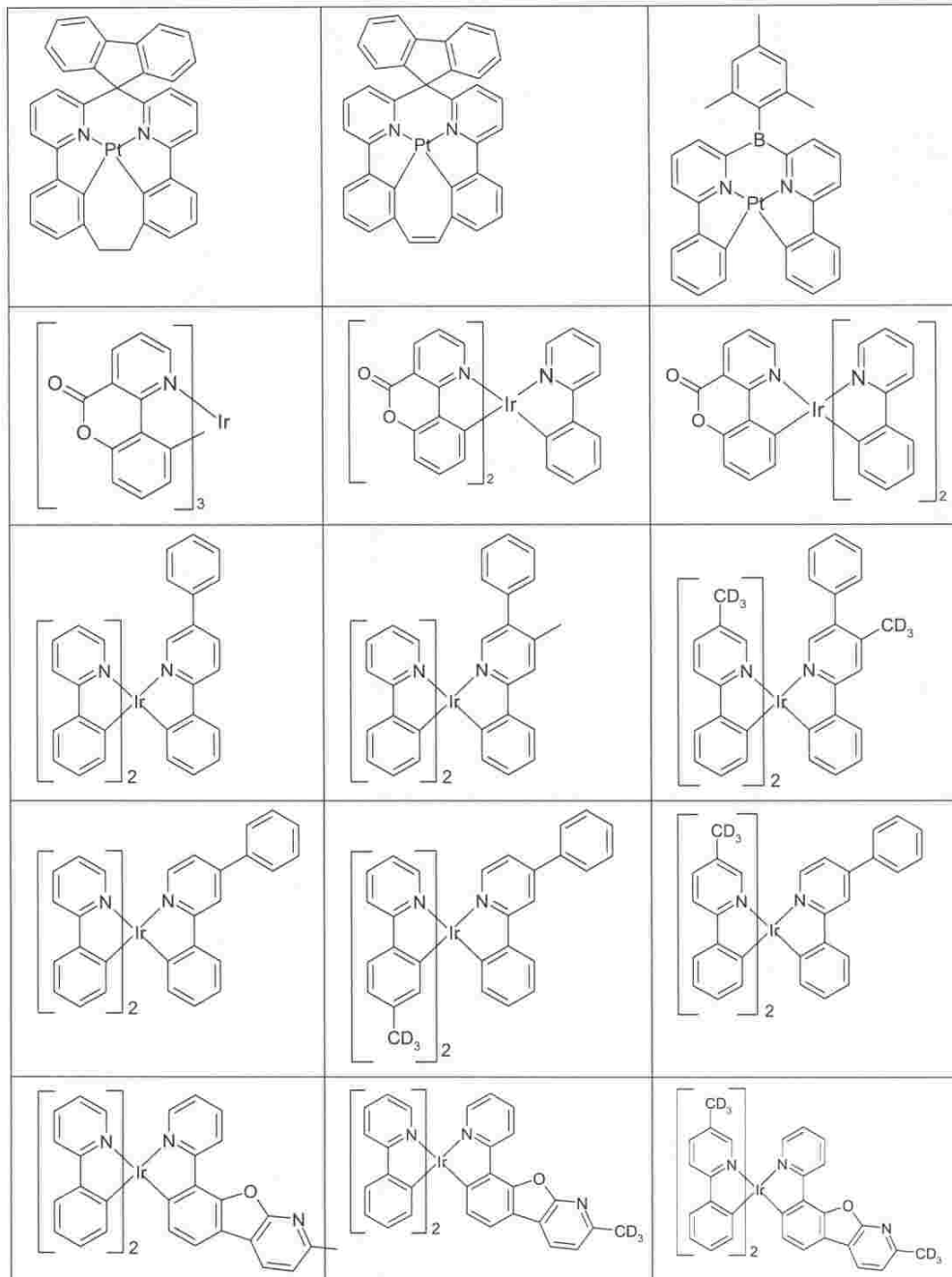
20

30

40

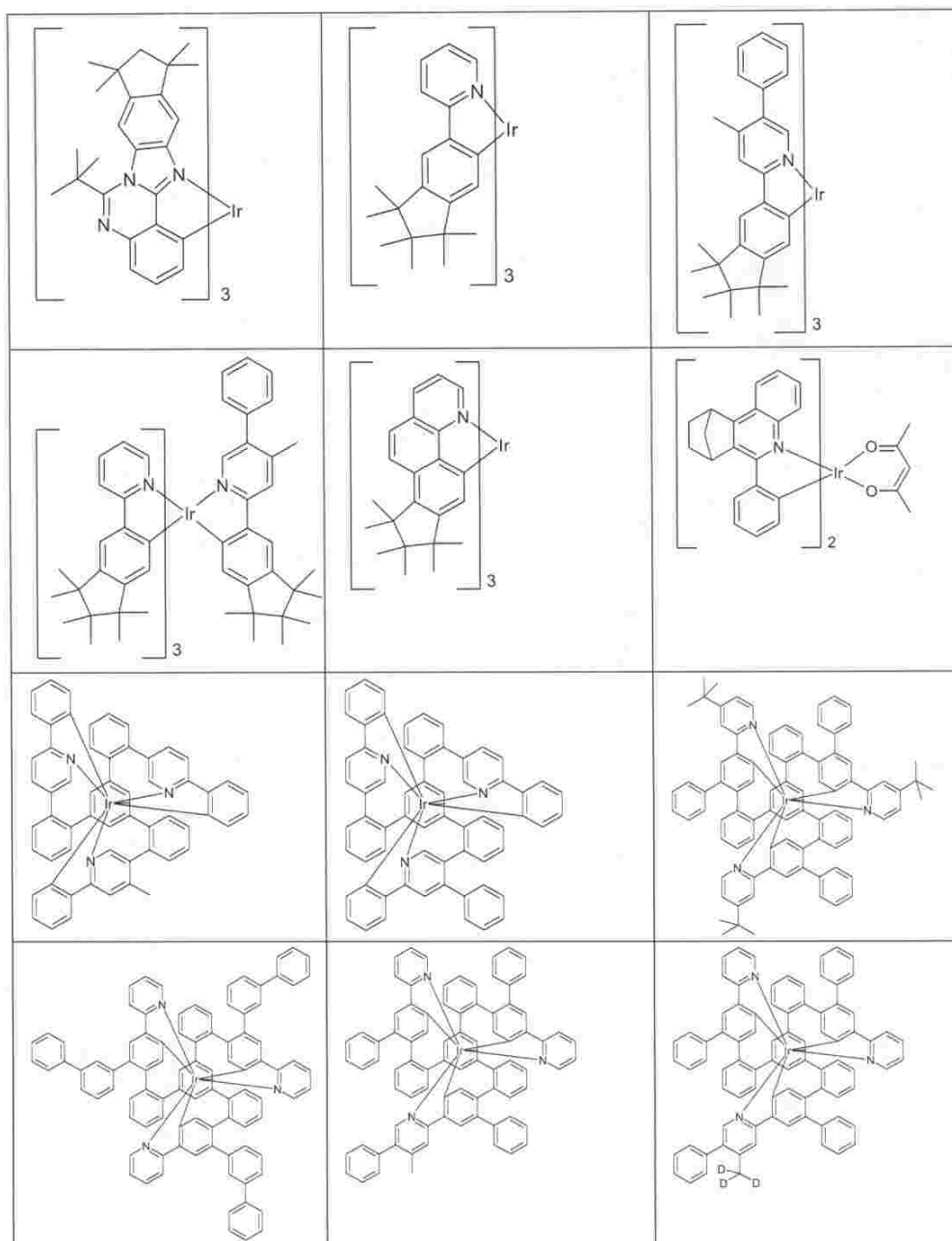
50

【化 2 4 - 7】



【 0 1 5 4】

【化 2 4 - 8】



【 0 1 5 5】

本発明の化合物は、たとえば、WO 98/24271、US 2011/0248247およびUS 2012/0223633に記載されているように、とりわけ有機エレクトロルミネッセントデバイスのリン光発光体のためのマトリックス材料としても適している。これらのマルチカラーディスプレイ部品において、追加の青色発光層は、蒸着によって、全域にわたって青色以外の色を有するものを含む全てのピクセルに適用される。

【 0 1 5 6】

本発明の他の態様において、本発明の有機エレクトロルミネッセントデバイスは、個々の正孔注入層および／または正孔輸送層および／または正孔阻止層および／または電子輸送層を含有せず、これは、たとえば、WO 2005/053051に記載されているように、発光層が正孔注入層もしくはアノードに直接隣接すること、および／または発光層が電子輸送層もしくは電子注入層もしくはカソードに直接隣接することを意味する。さらに、たとえば、WO 2009/030981に記載されているように、発光層に直接隣接する正孔輸送もしくは正孔注入材料として、発光層の金属錯体と同一または類似の金属錯体を使用することが可能である。

【0157】

本発明の有機エレクトロルミネッセントデバイスのさらなる層において、先行技術に従って通常使用される任意の材料を使用することが可能である。したがって、当業者は、本発明の技術を使うことなく、有機エレクトロルミネッセントデバイスで知られている任意の材料を、本発明の式(1)の化合物または上記に列挙した好ましい態様と組み合わせて使用することができるであろう。

【0158】

さらに好ましいのは、1つ以上の層が昇華プロセスによりコーティングされることを特徴とする、有機エレクトロルミネッセントデバイスである。この場合、材料は、真空昇華系において 10^{-5} mbar未満、好ましくは 10^{-6} mbar未満の初期圧力で蒸着により付与される。しかしながら、初期圧力をさらに低く、たとえば 10^{-7} mbar未満とすることも可能である。

10

【0159】

1つ以上の層がOVPD(有機気相堆積)法により、またはキャリアガス昇華の助力によりコーティングされることを特徴とする、有機エレクトロルミネッセントデバイスが同様に好ましい。この場合、材料は、 10^{-5} mbar~1 barの圧力で付与される。この方法の特殊なケースがOVJP(有機蒸気ジェット印刷)法であり、この方法では、材料がノズルにより直接付与され、したがって構造化される。

【0160】

1つ以上の層が、溶液から、たとえばスピンコーティングにより、または任意の印刷法、たとえばスクリーン印刷、フレキソ印刷、オフセット印刷、LEITI(光誘起熱イメージング、熱転写印刷)、インクジェット印刷もしくはノズル印刷により生成されることを特徴とする、有機エレクトロルミネッセントデバイスがさらに好ましい。このために、たとえば、適する置換によって得られる可溶性化合物が必要である。

20

【0161】

加えて、たとえば、1つ以上の層を溶液から付与し、1つ以上のさらなる層を蒸着により付与するハイブリッド法が可能である。

【0162】

これらの方法は、一般的に当業者に知られており、本発明の化合物を含む有機エレクトロルミネッセントデバイスに本発明の技術を使うことなく当業者によって付与することができる。

30

【0163】

本発明の化合物および本発明の有機エレクトロルミネッセントデバイスは、1つ以上の先行技術に対する以下の驚くべき利点について注目すべきである：

1. リン光発光体のためのマトリックス材料としての本発明の化合物の使用は、寿命の改善をもたらす。これはとりわけ、本発明の化合物と類似の構造を有するがY基を含有しない、マトリックス材料としてのラクタムの使用に関して当てはまる。

【0164】

2. 本発明の化合物は、高効率をもたらす。これはとりわけ、化合物がリン光発光体のためのマトリックス材料として使用される場合に当てはまる。

40

【0165】

3. 本発明の化合物は、低作動電圧をもたらす。これはとりわけ、化合物がリン光発光体のためのマトリックス材料として使用される場合に当てはまる。

【0166】

本発明は、それにより本発明を限定するといういかなる意図もなしに、以下の例によってより詳細に例示されている。当業者は、開示された全範囲にわたって本発明を使うために与えられた情報を使用することができ、本発明の技術を使うことなく本発明のさらなる化合物を調製することができ、それらを電子デバイスで使用することまたは本発明の方法を使用することができる。

【0167】

50

〔例〕

合成例：

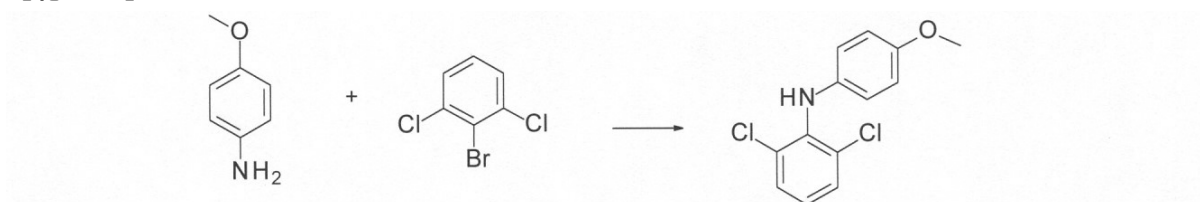
次の合成は、特に指定のない限り、乾燥溶媒中の保護ガス雰囲気下で実施される。溶媒および試薬は、たとえば、Sigma-AldrichまたはABC Rから購入することができる。角括弧内のそれぞれの数字または個々の化合物について引用されている番号は、文献から知られている化合物のCAS番号に関連している。

シントンの調製：

S 1：

〔0168〕

〔化25〕



10

〔0169〕

4 l 四つ口フラスコ中のトルエン（1500 ml）と一緒にパラアニシジン〔104-94-9〕（136.2 g、1.11 mol）、1-ブromo-2,6-ジクロロベンゼン〔19393-92-1〕（250.2 g、1.11 mol）およびナトリウムtert-ブトキシド（214.7 g、2.23 mol）の初期投入は、アルゴンで30分間不活性化させる。続いて、Pd(dppf)Cl₂×DCM〔95464-05-4〕（4.51 g、5.53 mmol）を添加し、反応混合物を18時間還流させながら攪拌する。次いで混合物を、水およびトルエンを用いた抽出によって処理し、有機相をNa₂SO₄で乾燥させ、シリカゲル床でろ過する。ろ液を回転蒸発によって濃縮し、得られた粗製生成物を減圧蒸留によってさらに精製する。収量：218.3 g（813 mmol、74%）、黄色の半結晶性油性固体。

20

〔0170〕

類似の方法で、以下の化合物を調製することが可能である：ここで使用する触媒系は、Pd(dppf)Cl₂×DCMよりも、Pd(OAc)₂/S-Phos〔657408-07-6〕であってもよい。精製は、蒸留によってだけでなく、カラムクロマトグラフィーを使用して行うこともでき、または再結晶は、標準的な溶媒、たとえばエタノール、ブタノール、アセトン、酢酸エチル、アセトニトリル、トルエン、キシレン、ジクロロメタン、メタノール、テトラヒドロフラン、酢酸n-ブチル、1,4-ジオキサン、ジメチルスルホキシド、N,N-ジメチルホルムアミド、N,N-ジメチルアセトアミド、N-メチルピロリドンなどを使用して行うことができる。収率は、通常40%~85%の範囲である。

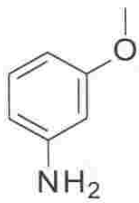
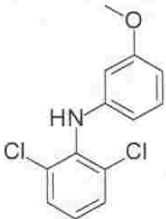
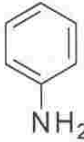
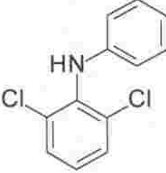
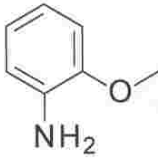
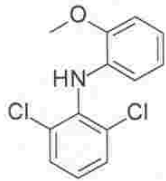
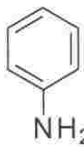
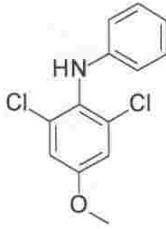
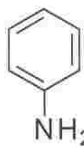
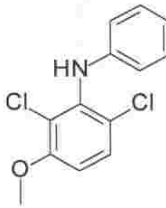
30

〔0171〕

40

50

【化 2 6 - 1】

反応物 1	反応物 2	生成物
 CAS-536-90-3	 CAS-19393-92-1	 S2
 CAS-62-53-3	 CAS-19393-92-1	 S3
 CAS-90-04-0	 CAS-19393-92-1	 S4
 CAS-62-53-3	 CAS-174913-20-3	 S5
 CAS-62-53-3	 CAS-174913-16-7	 S6

【 0 1 7 2】

10

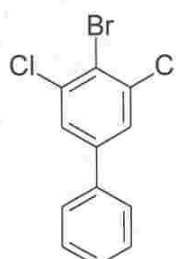
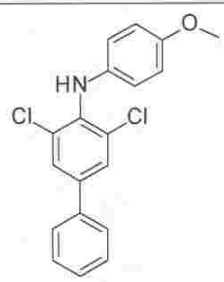
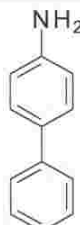
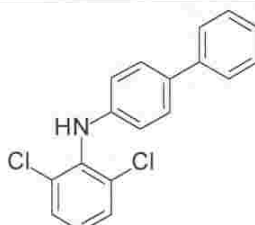
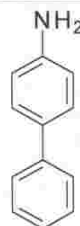
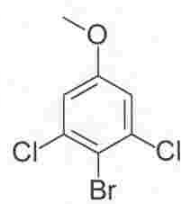
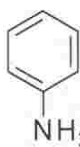
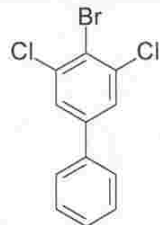
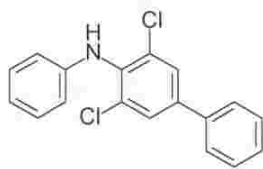
20

30

40

50

【化 2 6 - 2】

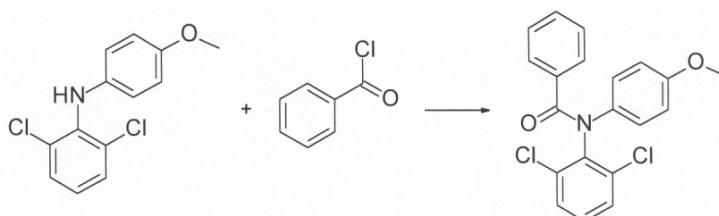
 CAS-104-94-9		 S7
 CAS-92-67-1	 CAS-19393-92-1	 S8
 CAS-92-67-1	 CAS-174913-20-3	 S9
 CAS-62-53-3		 S10

【 0 1 7 3】

S 2 5 :

【 0 1 7 4】

【化 2 7】



【 0 1 7 5】

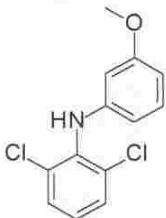
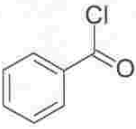
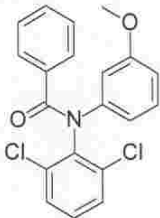
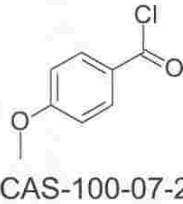
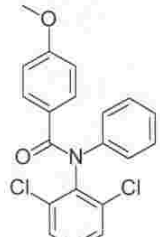
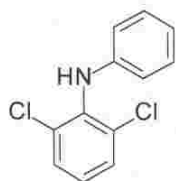
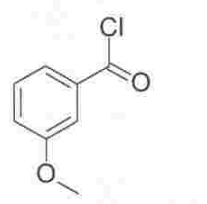
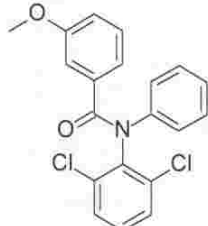
ピリジン (1000 ml) 中の S1 (217.7 g、812 mmol) の初期投入は、アルゴンで不活性化させる。続いて、塩化ベンゾイル [98-88-4] (150 ml、1.29 mol) を1滴ずつ添加する。添加が終了した後、混合物を15時間還流させながら攪拌する。混合を室温まで冷ましておき、沈殿した固体を吸引ろ過し、水で4回洗浄する。粗製生成物をエタノール中に懸濁させ、3時間還流させながら攪拌する。冷却後、沈殿した固体を吸引ろ過し、エタノールで洗浄する。収量：284 g (763 mmol、94%) の白色固体；¹H NMRにより98%。

【0176】

類似の方法で、以下の化合物を調製することが可能である：精製は、カラムクロマトグラフィーを使用して行うこともでき、または再結晶は、標準的な溶媒、たとえばエタノール、ブタノール、アセトン、酢酸エチル、アセトニトリル、トルエン、キシレン、ジクロロメタン、メタノール、テトラヒドロフラン、酢酸n-ブチル、1,4-ジオキサン、ジメチルスルホキシド、N,N-ジメチルホルムアミド、N,N-ジメチルアセトアミド、N-メチルピロリドンなどを使用して行うことができる。収率は、通常40%～85%の範囲である。

【0177】

【化28-1】

反応物 1	反応物 2	生成物
 S2		 S26
 S3	 CAS-100-07-2	 S27
 S3	 CAS-1711-05-3	 S28

【0178】

10

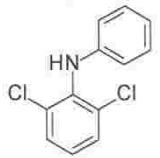
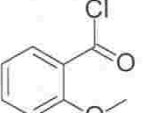
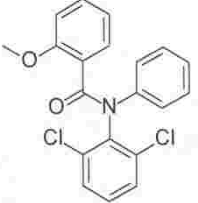
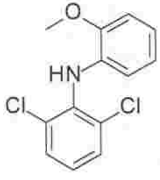
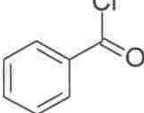
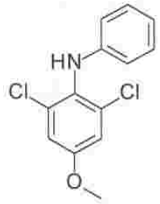
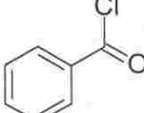
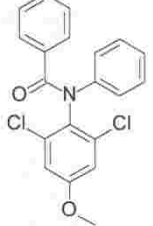
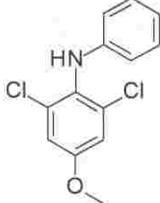
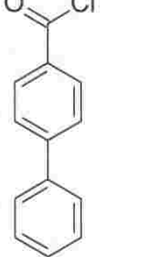
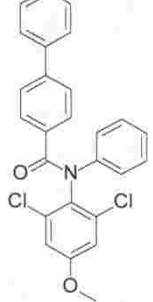
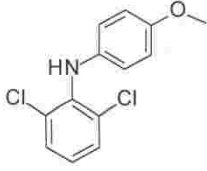
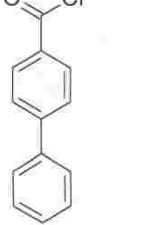
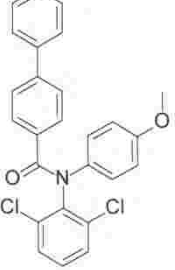
20

30

40

50

【化 2 8 - 2】

 S3	 CAS-21615-34-9	 S29
 S4		 S30
 S5		 S31
 S5	 CAS-14002-51-8	 S32
 S1	 CAS-14002-51-8	 S33

【 0 1 7 9】

10

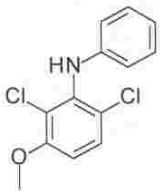
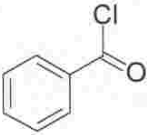
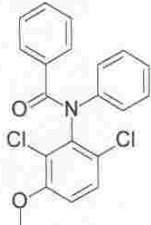
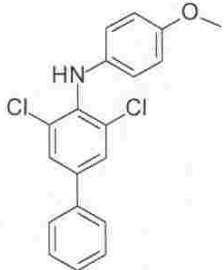
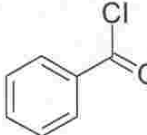
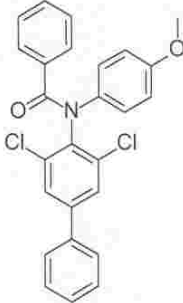
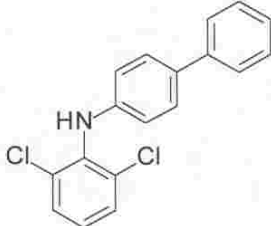
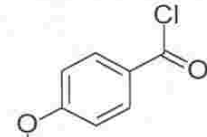
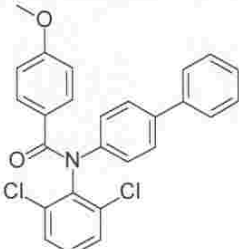
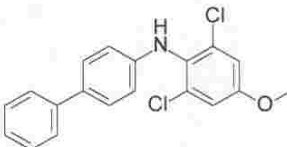
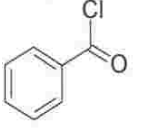
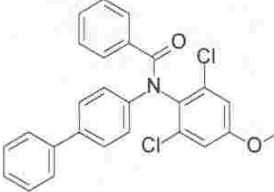
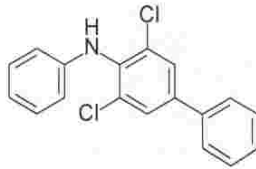
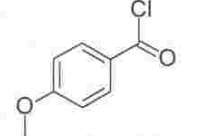
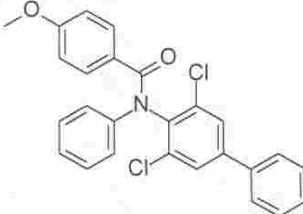
20

30

40

50

【化 2 8 - 3】

 S6		 S34
 S7		 S35
 S8	 CAS-100-07-2	 S36
 S9		 S37
 S10	 CAS-100-07-2	 S38

【 0 1 8 0】

S 5 0 :

【 0 1 8 1】

10

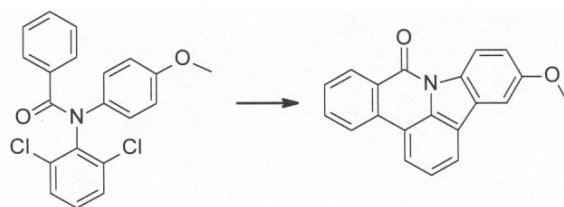
20

30

40

50

【化 29】



【0182】

N, N-ジメチルアセトアミド (1800 ml) 中の S25 (181.2 g、486.8 mmol) および炭酸カリウム (202.5 g、1.46 mol) の初期投入は、アルゴンで30分間不活性化させる。続いて、1, 3-ビス (2, 6-ジイソプロピルフェニル) イミダゾリウムクロリド [CAS-250285-32-6] (8.55 g、19.47 mmol) および酢酸パラジウム (II) (2.18 g、9.69 mmol) を添加し、反応混合物を加熱還流し、この温度で72時間攪拌する。室温まで冷却した後、溶媒を回転蒸発装置で取り除き、残留物をエタノール／水 (1:1; 1000 ml) と共に攪拌し、固体を吸引ろ過し、水およびエタノールで洗浄する。粗製生成物を酢酸エチルから再結晶させる。収量: 49.4 g (165 mmol、34%) の茶色固体; ^1H NMR により約95%。

【0183】

類似の方法で、以下の化合物を調製することが可能である: ここで使用するリガンドは、1, 3-ビス (2, 6-ジイソプロピルフェニル) イミダゾリウムクロリド [CAS-250285-32-6] よりも、1, 3-ビス (2, 4, 6-トリメチルフェニル) イミダゾリウムクロリド [141556-45-8]、トリシクロヘキシルホスフィン [2622-14-2] またはトリ-tert-ブチルホスフィン [13716-12-6] であってもよい。精製は、蒸留によってだけでなく、カラムクロマトグラフィーを使用しても行うことができ、または再結晶は、標準的な溶媒、たとえばエタノール、ブタノール、アセトン、酢酸エチル、アセトニトリル、トルエン、キシレン、ジクロロメタン、メタノール、テトラヒドロフラン、酢酸n-ブチル、1, 4-ジオキサン、ジメチルスルホキシド、N, N-ジメチルホルムアミド、N, N-ジメチルアセトアミド、N-メチルピロリドンなどを使用して行うことができる。収率は、通常10%~50%の範囲である。

【0184】

10

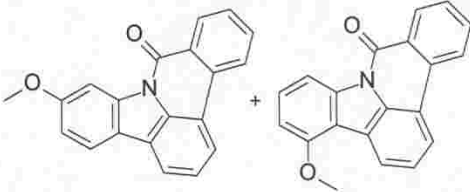
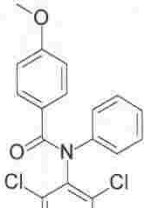
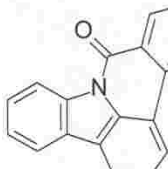
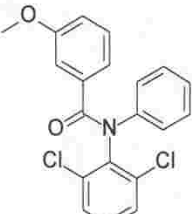
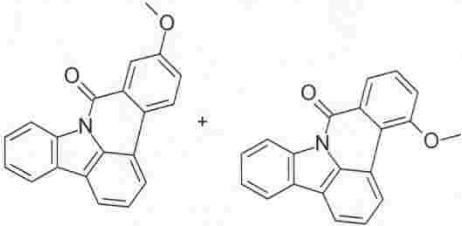
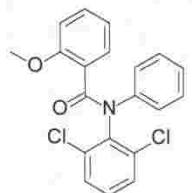
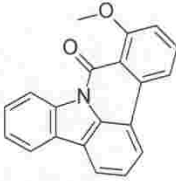
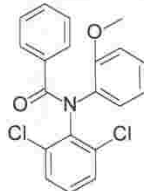
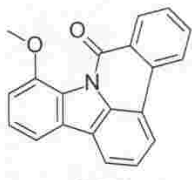
20

30

40

50

【化 3 0 - 1】

反応物	生成物(複数可)
 S26	 S51 S52 カラムクロマトグラフィーによる異性体の分離
 S27	 S53
 S28	 S54 S55 カラムクロマトグラフィーによる異性体の分離
 S29	 S56
 S30	 S57

【 0 1 8 5】

10

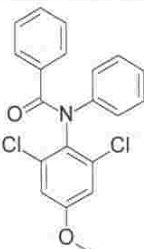
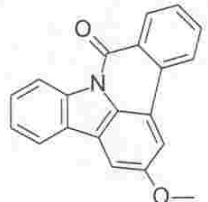
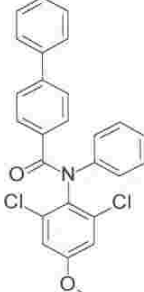
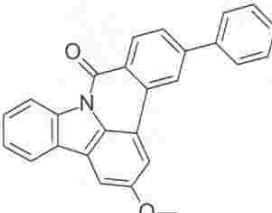
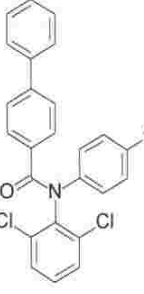
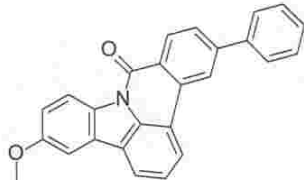
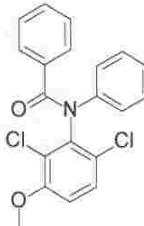
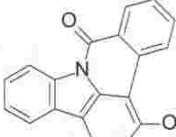
20

30

40

50

【化 3 0 - 2】

 S31	 S58
 S32	 S59
 S33	 S60
 S34	 S61

【 0 1 8 6】

10

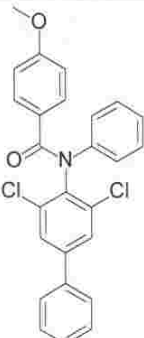
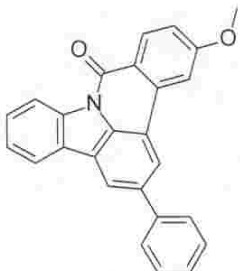
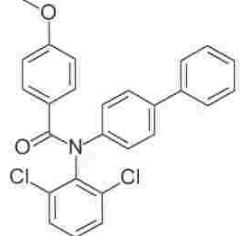
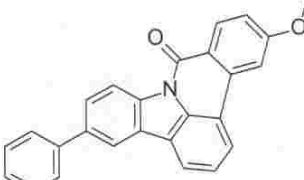
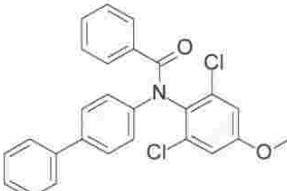
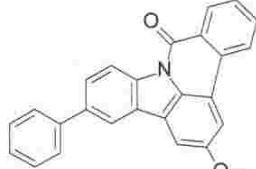
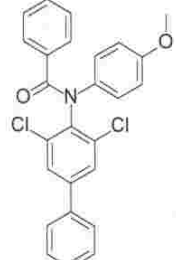
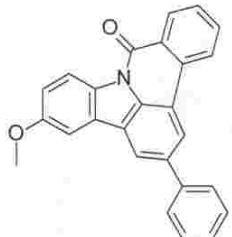
20

30

40

50

【化 3 0 - 3】

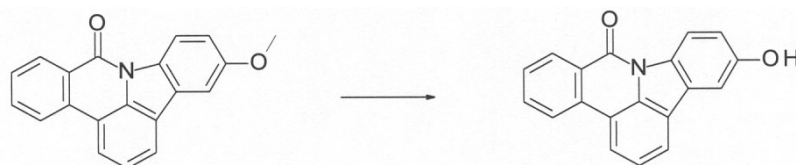
 S38	 S62
 S36	 S63
 S37	 S64
 S35	 S65

【 0 1 8 7】

S 7 5 :

【 0 1 8 8】

【化 3 1】



【 0 1 8 9】

アルゴン雰囲気下のフラスコ中のジクロロメタン（1200ml）中のS50（36.84g、123.1mmol）の初期投入は、氷浴中で0℃まで冷却する。続いて、三臭化ホウ素〔10294-33-4〕（24.0ml、252.9mmol）を1滴ずつ添加し、次いで混合物を徐々に室温まで暖める。続いて、混合物を、メタノールを1滴ずつ添加することによって反応停止させ、溶媒を回転蒸発装置で取り除く。メタノール（30

0 m l) を 2 回 添加 し、回 転 蒸 発 に よ っ て 再 度 除 去 す る。茶 色 固 体 を メ タ ノ ール 4 0 0 m l と 混 合 し、還 流 さ せ な が ら 加 熱 す る。冷 却 後、固 体 を 吸 引 ろ 過 し、メ タ ノ ール で 洗 浄 す る。粗 製 生 成 物 を、酢 酸 n - ブ チ ル を 用 い る 熱 抽 出 に か け る。

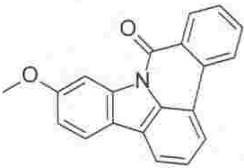
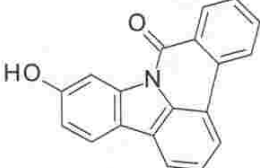
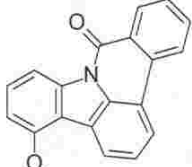
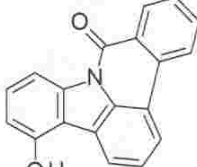
収 量：2 8 . 5 g (1 0 0 m m o l ; 8 1 %) の ベ ー ジ ュ 色 固 体； ^1H N M R に よ り 9 5 %。

【 0 1 9 0 】

類 似 の 方 法 で、以 下 の 化 合 物 を 調 製 す る こ と が 可 能 で あ る：精 製 は、カ ラ ム ク ロ マ ト グ ラ フ ィ ー を 使 用 し て 行 う こ と も で き、ま た は 再 結 晶 は、標 準 的 な 溶 媒、た と え ば エ タ ノ ール、ブ タ ノ ール、ア セ ト ン、酢 酸 エ チ ル、ア セ ト ニ ト リ ル、ト ル エ ン、キ シ レ ン、ジ ク ロ ロ メ タ ン、メ タ ノ ール、テ ト ラ ヒ ド ロ フ ラ ン、酢 酸 n - ブ チ ル、1 , 4 - ジ オ キ サ ン、ジ メ チ ル ス ル ホ キ シ ド、N , N - ジ メ チ ル ホ ル ム ア ミ ド、N , N - ジ メ チ ル ア セ ト ア ミ ド、N - メ チ ル ピ ロ リ ド ン な ど を 使 用 し て 行 う こ と が で き る。収 率 は、通 常 5 0 % ~ 9 0 % の 範 囲 で あ る。

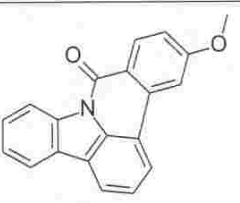
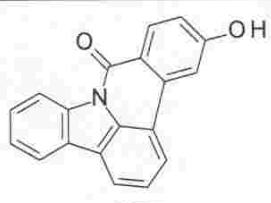
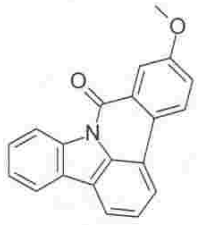
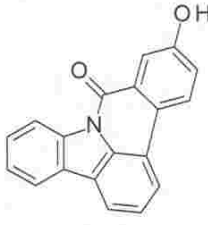
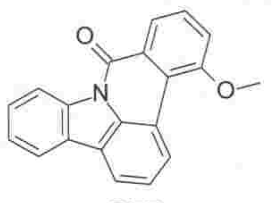
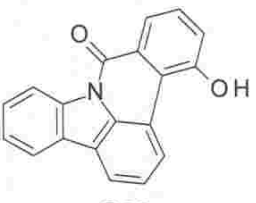
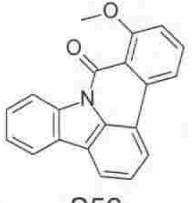
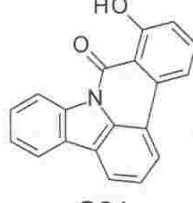
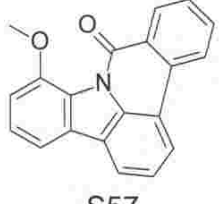
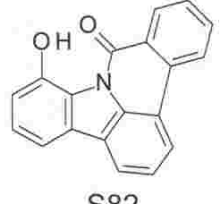
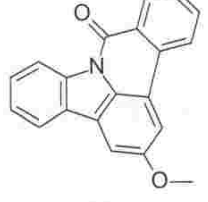
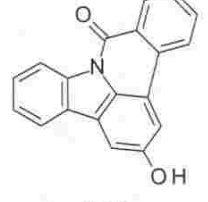
【 0 1 9 1 】

【 化 3 2 - 1 】

反 応 物	生 成 物 (複 数 可)
 S51	 S76
 S52	 S77

【 0 1 9 2 】

【化 3 2 - 2】

 S53	 S78
 S54	 S79
 S55	 S80
 S56	 S81
 S57	 S82
 S58	 S83

【 0 1 9 3】

10

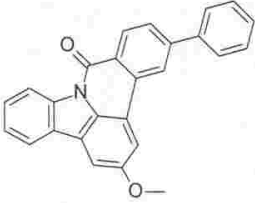
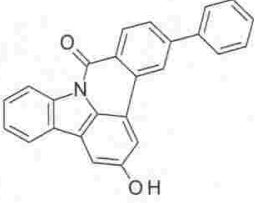
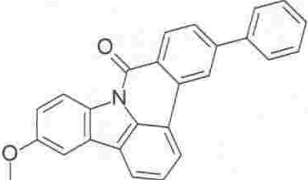
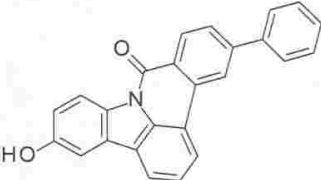
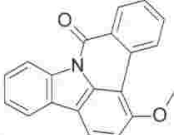
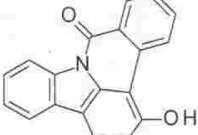
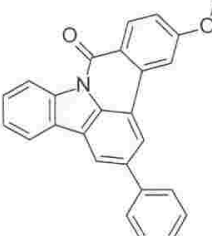
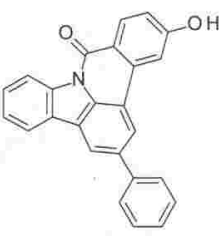
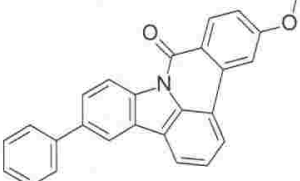
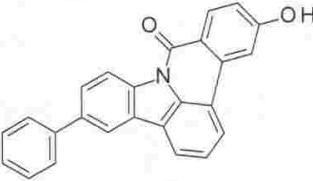
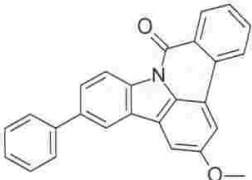
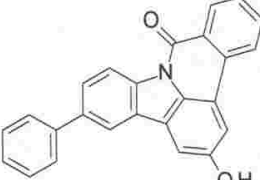
20

30

40

50

【化 3 2 - 3】

 S59	 S84
 S60	 S85
 S61	 S86
 S62	 S87
 S63	 S88
 S64	 S89

【 0 1 9 4】

10

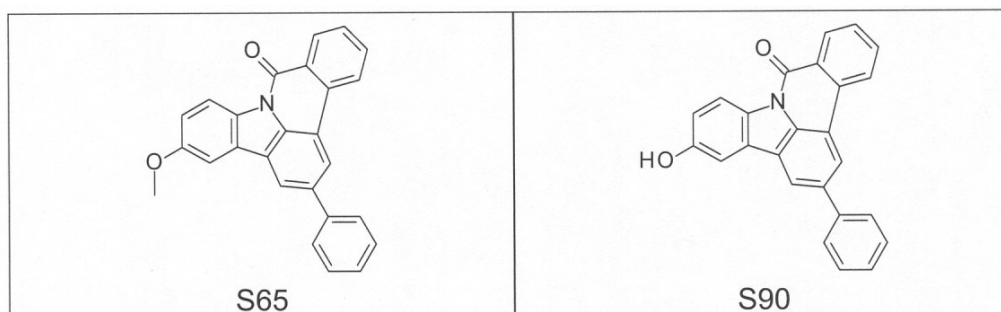
20

30

40

50

【化 3 2 - 4】



10

【 0 1 9 5】

S 1 0 0 :

【 0 1 9 6】

【化 3 3】



【 0 1 9 7】

ピリジン (500 ml) 中の S 7 5 (27.84 g、97.6 mmol) の初期投入は、氷浴中で 0℃まで冷却する。続いて、トリフルオロメタンスルホン酸無水物 [358-23-6] (50.4 ml、293.4 mmol) を、内部温度が 10℃を超えないような速度で徐々に 1 滴ずつ添加する。続いて、混合物を、室温まで暖まるように終夜放置する。ピリジンを回転蒸発装置で取り除き、残留物を、ジクロロメタンおよび 1 mol/l HCl を用いた抽出によって処理する。有機相を水で 4 回洗浄し、Na₂SO₄ で乾燥させ、300 ml まで濃縮する。沈殿した固体を吸引ろ過し、ジクロロメタンおよびエタノールで洗浄する。収量：38.7 g (92.7 mmol、95%) のベージュ色固体；¹H NMR により 95%。

20

【 0 1 9 8】

類似の方法で、以下の化合物を調製することが可能である：精製は、カラムクロマトグラフィーを使用して行うこともでき、または再結晶は、標準的な溶媒、たとえばエタノール、ブタノール、アセトン、酢酸エチル、アセトニトリル、トルエン、キシレン、ジクロロメタン、メタノール、テトラヒドロフラン、酢酸 n-ブチル、1,4-ジオキサン、ジメチルスルホキシド、N,N-ジメチルホルムアミド、N,N-ジメチルアセトアミド、N-メチルピロリドンなどを使用して行うことができる。収率は、通常 55%~97% の範囲である。

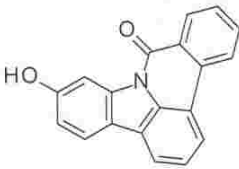
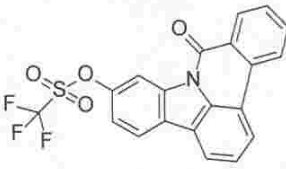
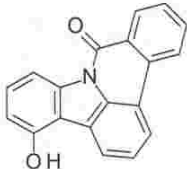
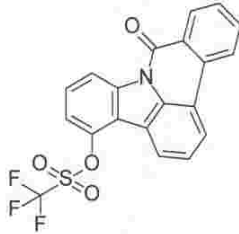
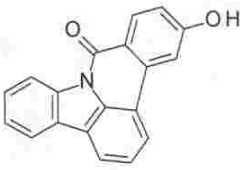
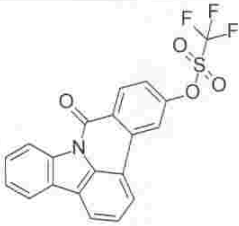
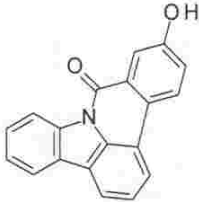
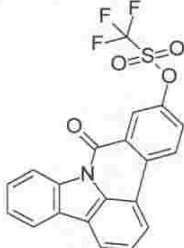
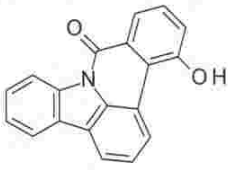
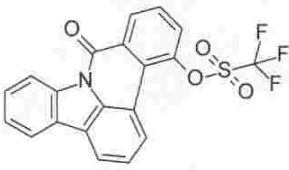
30

【 0 1 9 9】

40

50

【化 3 4 - 1】

反応物	生成物(複数可)
 S76	 S101
 S77	 S102
 S78	 S103
 S79	 S104
 S80	 S105

【 0 2 0 0】

10

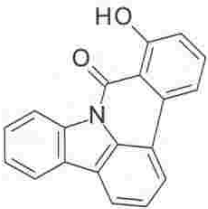
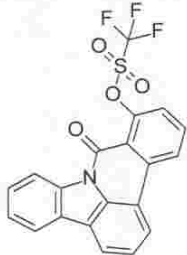
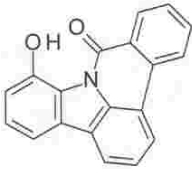
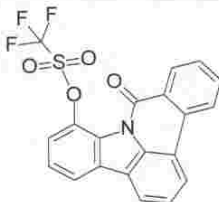
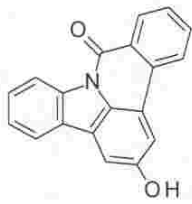
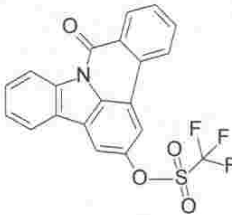
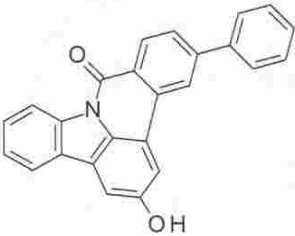
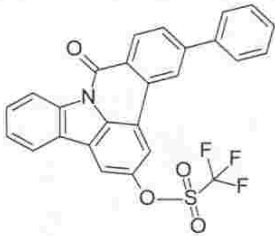
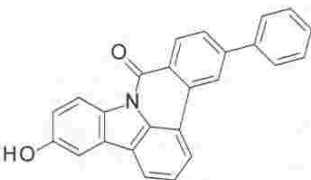
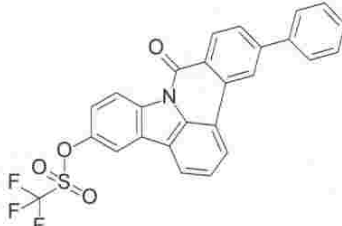
20

30

40

50

【化 3 4 - 2】

 S81	 S106
 S82	 S107
 S83	 S108
 S84	 S109
 S85	 S110

【 0 2 0 1】

10

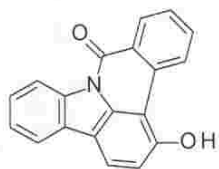
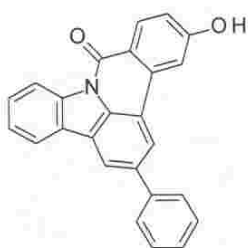
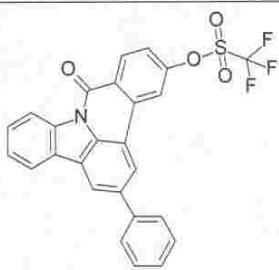
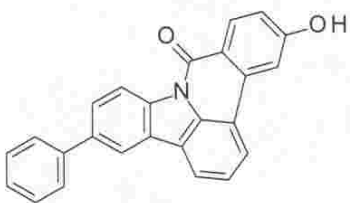
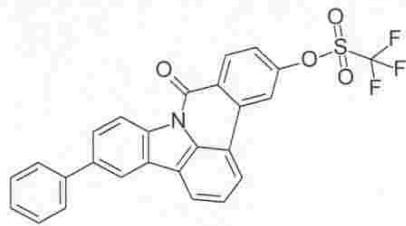
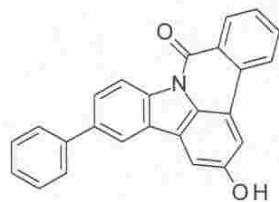
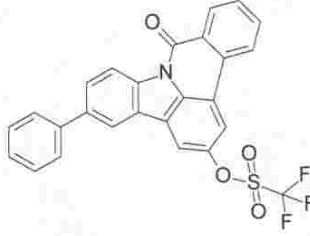
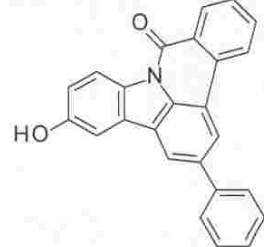
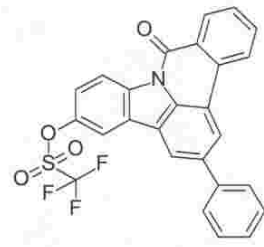
20

30

40

50

【化 3 4 - 3】

 S86	 S111
 S87	 S112
 S88	 S113
 S89	 S114
 S90	 S115

【 0 2 0 2】

S 1 2 5 :

【 0 2 0 3】

10

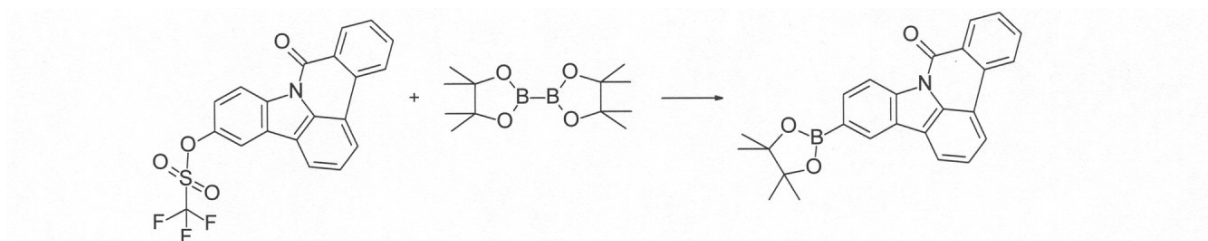
20

30

40

50

【化 3 5】



【0204】

1, 4-ジオキサン (600 ml) 中の S1 (40.2 g、96.2 mmol)、ビス (ピナコラート) ジボロン [73183-34-3] (26.93 g、105.0 mmol) および酢酸カリウム (28.82 g、293.6 mmol) の初期投入は、アルゴンで2分間不活性化させる。続いて、X-Phos [564483-18-7] (456 mg、0.96 mmol) および Pd₂(dba)₃ [51364-51-3] (435 mg、0.48 mmol) を添加し、反応混合物を16時間還流させながら攪拌する。冷却後、溶媒を回転蒸発によって除去し、残留物を、ジクロロメタン／水を用いた抽出によって処理する。有機相を Na₂SO₄ で乾燥させ、酢酸エチルを添加し、回転蒸発装置で 500 mbar まで下げてジクロロメタンを回転蒸発によって除去する。沈殿した固体を吸引ろ過し、酢酸エチルで洗浄する。収量：30.8 g (77.9 mmol、81%) のベージュ色固体；¹H NMRにより98%。

【0205】

類似の方法で、以下の化合物を調製することが可能である：ここで使用するリガンドはまた、X-Phos よりも S-Phos であってもよい。精製は、カラムクロマトグラフィーを使用して行うことができ、または再結晶は、標準的な溶媒、たとえばエタノール、ブタノール、アセトン、酢酸エチル、アセトニトリル、トルエン、キシレン、ジクロロメタン、メタノール、テトラヒドロフラン、酢酸 n-ブチル、1, 4-ジオキサン、ジメチルスルホキシド、N, N-ジメチルホルムアミド、N, N-ジメチルアセトアミド、N-メチルピロリドンなどを使用して行うことができる。収率は、通常60%～95%の範囲である。

【0206】

【化 3 6-1】

反応物	生成物(複数可)
 S101	 S126

【0207】

10

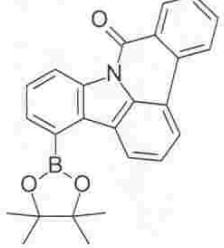
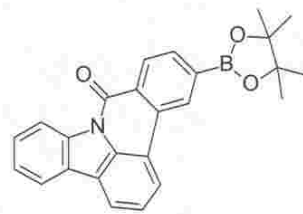
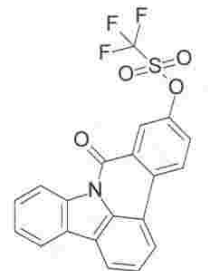
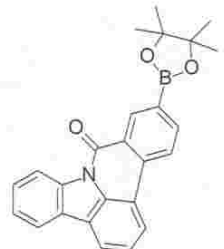
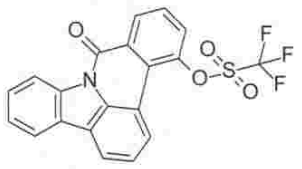
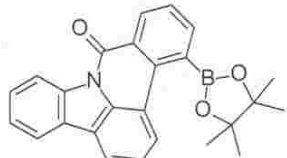
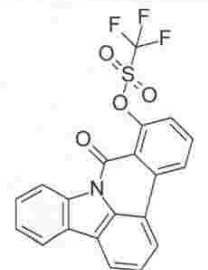
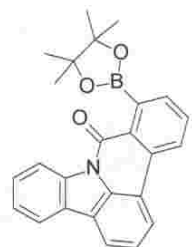
20

30

40

50

【化 3 6 - 2】

 S102	 S127
 S103	 S128
 S104	 S129
 S105	 S130
 S106	 S131

【 0 2 0 8】

10

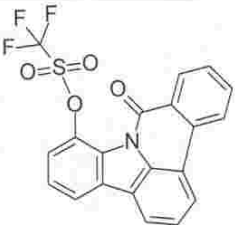
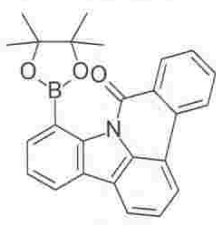
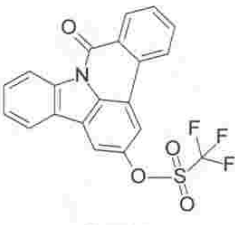
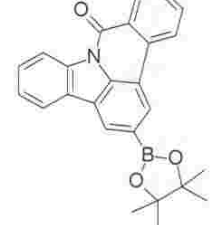
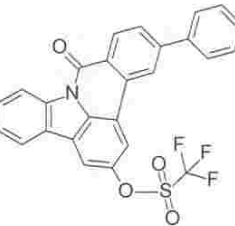
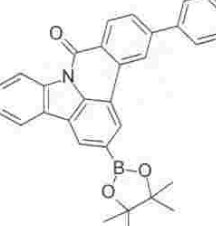
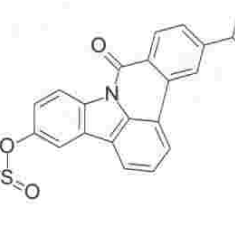
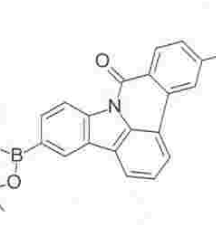
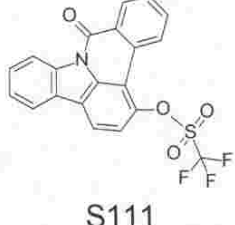
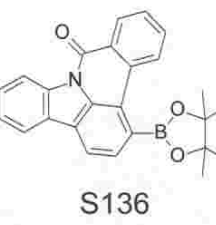
20

30

40

50

【化 3 6 - 3】

 S107	 S132
 S108	 S133
 S109	 S134
 S110	 S135
 S111	 S136

【 0 2 0 9】

10

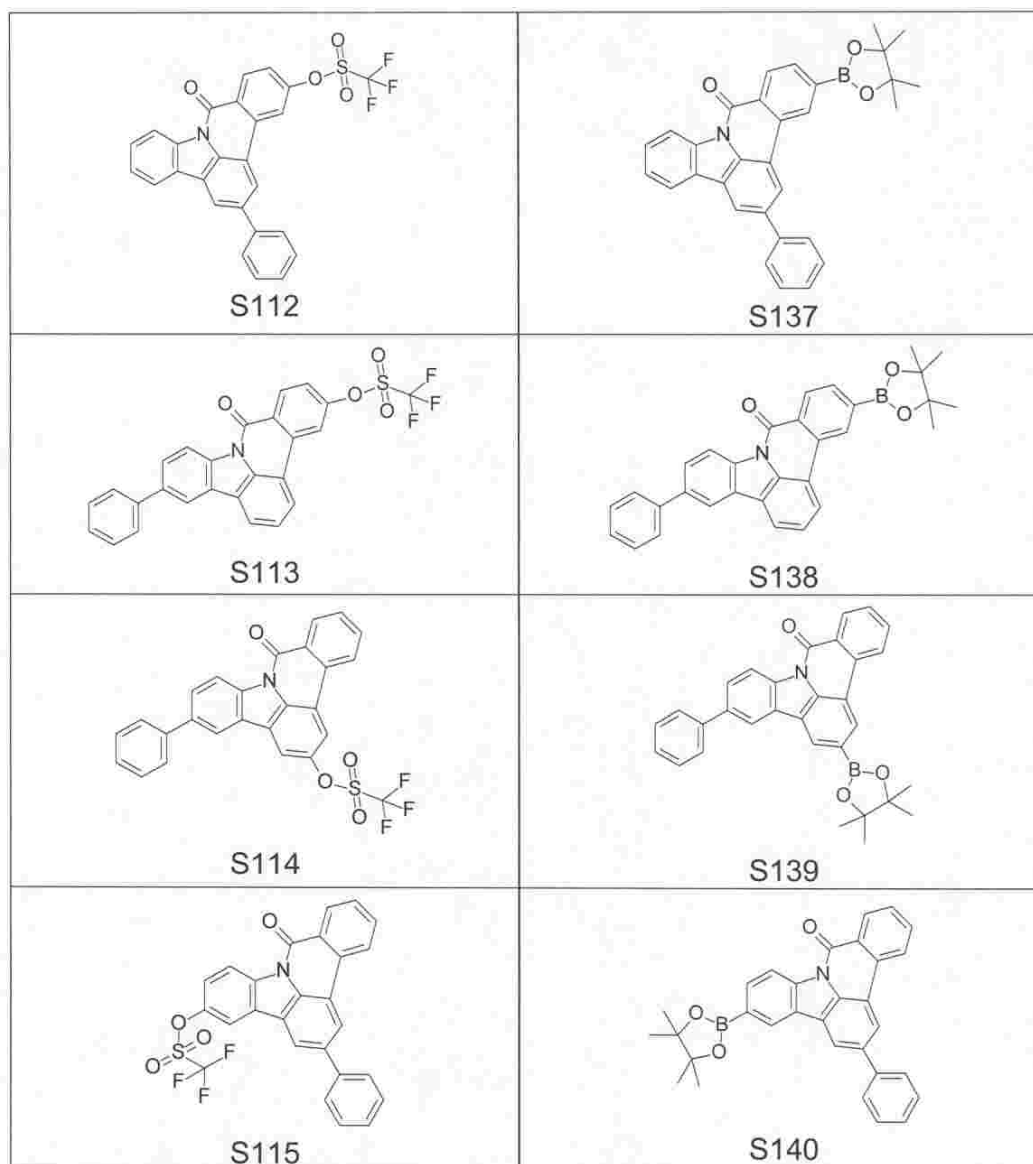
20

30

40

50

【化 3 6 - 4】

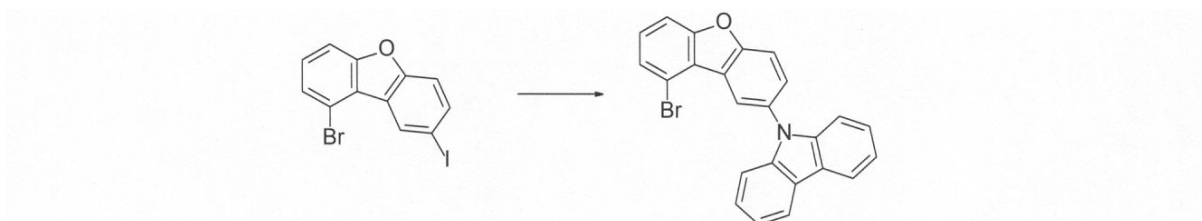


【 0 2 1 0】

S 1 5 0 :

【 0 2 1 1】

【化 3 7】



【 0 2 1 2】

不活性雰囲気下で、DMF（350ml）中の1-ブロモ-8-ヨードジベンゾフラン〔CAS-1822311-11-4〕（37.28g、100mmol）、炭酸カリウム（34.55g、250mmol）のカルバゾール〔86-74-8〕（16.71g、100mmol）および銅粉末（1.27g、20.0mmol）の初期投入は、アルゴンでさらに15分間不活性化させ、次いで130℃で32時間攪拌する。混合を室温まで冷ましておき、セライト床でろ過し、DMF 200mlで2回洗い流し、ろ液を回転蒸

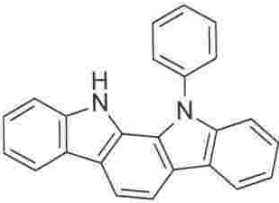
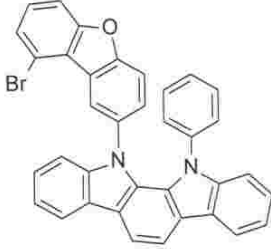
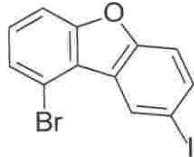
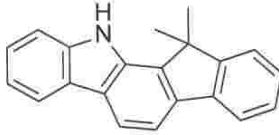
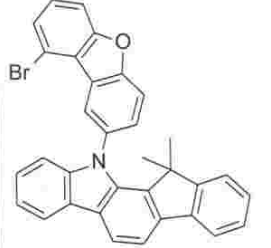
発装置で濃縮乾固する。残留物を、ジクロロメタン／水を用いた抽出によって処理し、有機相を水で2回および飽和NaCl溶液で1回洗浄し、 Na_2SO_4 で乾燥させる。エタノール150mlを添加し、回転蒸発装置で500mbarまで下げてジクロロメタンを取り除き、沈殿した固体を吸引ろ過し、エタノールで洗浄する。収量：29.2g (71.1mmol, 71%)の灰色の固体； ^1H NMRにより97%。

【0213】

類似の方法で、以下の化合物を調製することが可能である：精製は、カラムクロマトグラフィーを使用して行うことができ、または再結晶は、標準的な溶媒、たとえばエタノール、ブタノール、アセトン、酢酸エチル、アセトニトリル、トルエン、キシレン、ジクロロメタン、メタノール、テトラヒドロフラン、酢酸n-ブチル、1,4-ジオキサン、ジメチルスルホキシド、N,N-ジメチルホルムアミド、N,N-ジメチルアセトアミド、N-メチルピロリドンなどを使用して行うことができる。収率は、通常20%～80%の範囲である。

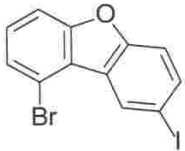
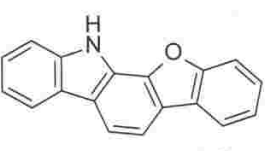
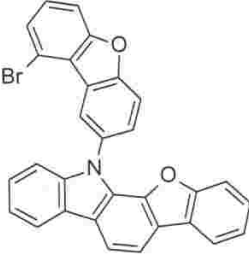
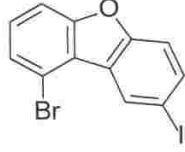
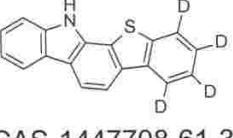
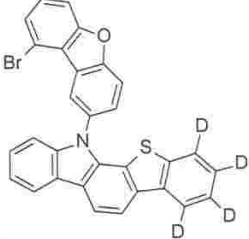
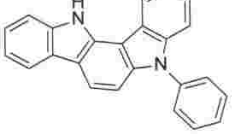
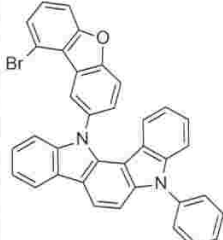
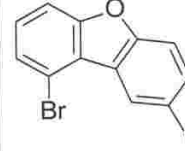
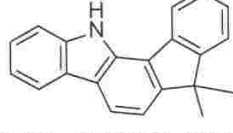
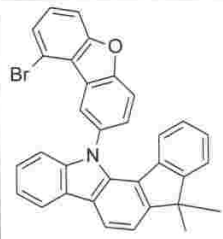
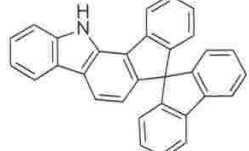
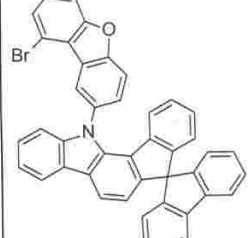
【0214】

【化38-1】

反応物 1	反応物 2	生成物
 CAS-1822311-11-4	 CAS-1024598-06-8	 S151
 CAS-1822311-11-4	 CAS-1329054-41-2	 S152

【0215】

【化 3 8 - 2】

 CAS-1822311-11-4	 CAS-1338919-70-2	 S153
 CAS-1822311-11-4	 CAS-1447708-61-3	 S154
 CAS-1822311-11-4	 CAS-1247053-55-9	 S155
 CAS-1822311-11-4	 CAS-1616231-39-0	 S156
 CAS-1822311-11-4	 CAS-1615703-28-0	 S157

【 0 2 1 6】

10

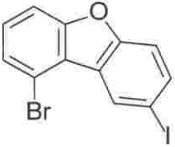
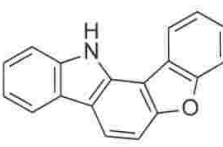
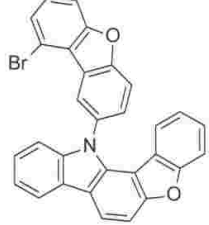
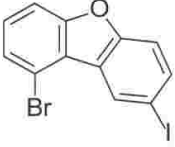
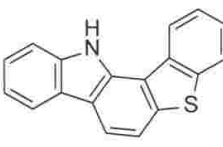
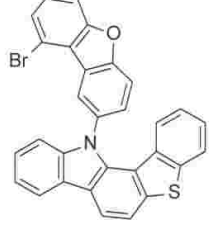
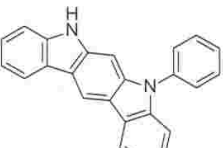
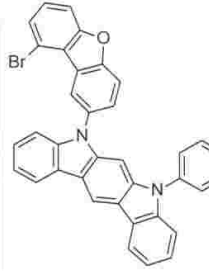
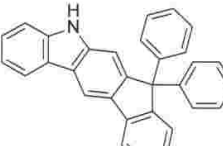
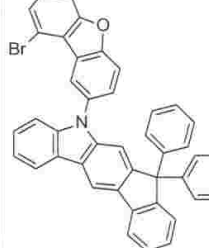
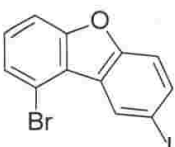
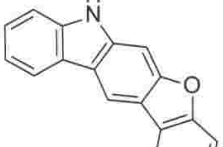
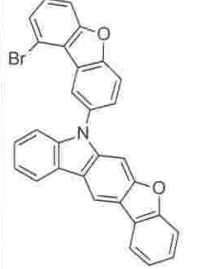
20

30

40

50

【化 3 8 - 3】

 CAS-1822311-11-4	 CAS-1246308-85-9	 S158
 CAS-1822311-11-4	 CAS-206447-68-9	 S159
 CAS-1822311-11-4	 CAS-1448296-00-1	 S160
 CAS-1822311-11-4	 CAS-1257220-52-2	 S161
 CAS-1822311-11-4	 CAS-1246308-83-7	 S162

【 0 2 1 7】

10

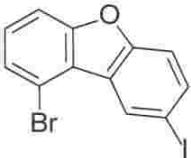
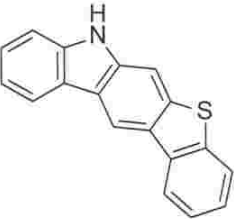
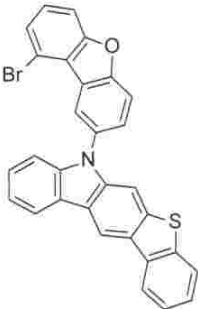
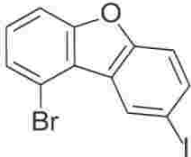
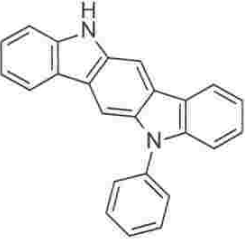
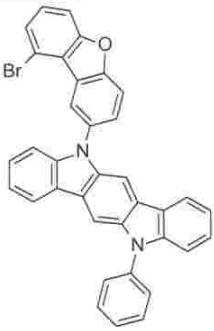
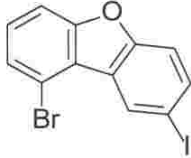
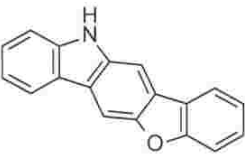
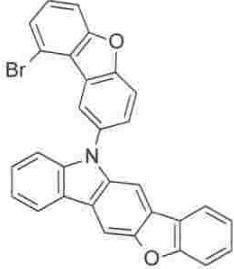
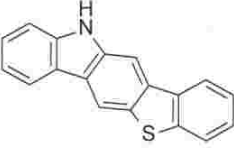
20

30

40

50

【化 3 8 - 4】

 CAS-1822311-11-4	 CAS-1255309-04-6	 S163
 CAS-1822311-11-4	 CAS-1316311-27-9	 S164
 CAS-1822311-11-4	 CAS-1199350-22-5	 S165
 CAS-1822311-11-4	 CAS-1255309-10-4	 S166

【 0 2 1 8 】

10

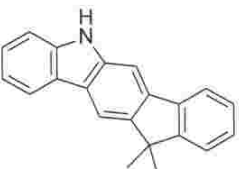
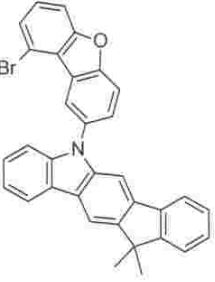
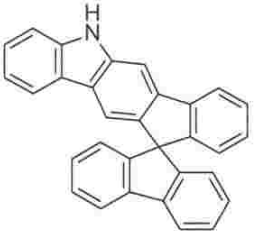
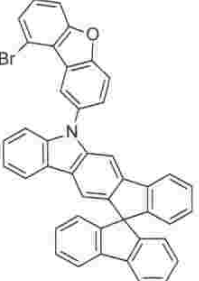
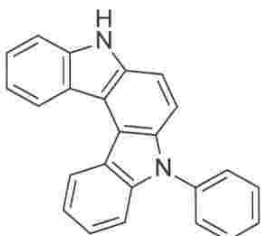
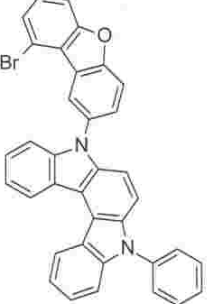
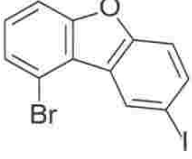
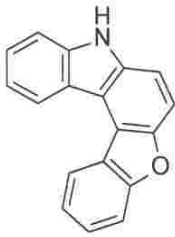
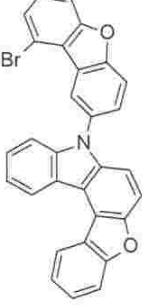
20

30

40

50

【化 3 8 - 5】

 CAS-1822311-11-4	 CAS-1260228-95-2	 S167
 CAS-1822311-11-4	 CAS-1219841-59-4	 S168
 CAS-1822311-11-4	 CAS-1637752-63-6	 S169
 CAS-1822311-11-4	 CAS-1622290-43-0	 S170

【 0 2 1 9】

10

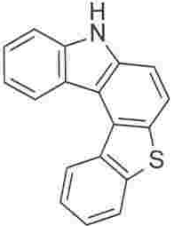
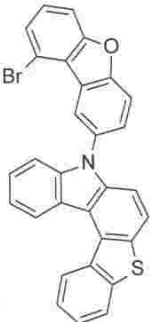
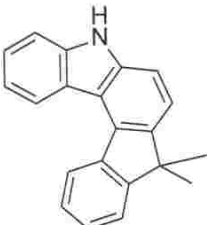
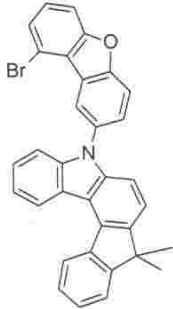
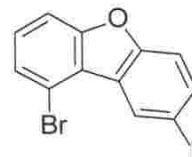
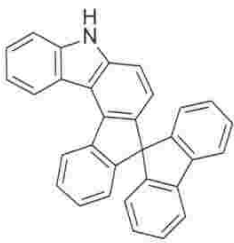
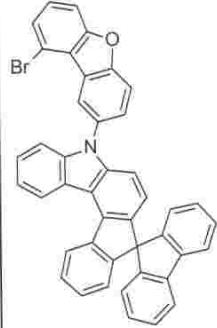
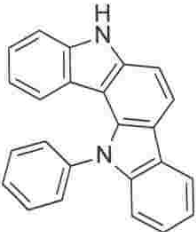
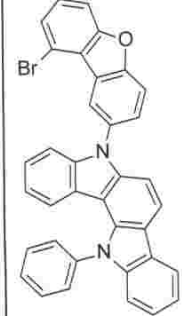
20

30

40

50

【化 3 8 - 6】

 CAS-1822311-11-4	 CAS-1255309-17-1	 S171
 CAS-1822311-11-4	 CAS-1623813-70-6	 S172
 CAS-1822311-11-4	 CAS-1936530-01-6	 S173
 CAS-1822311-11-4	 CAS-1346571-68-3	 S174

【 0 2 2 0】

10

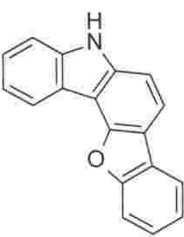
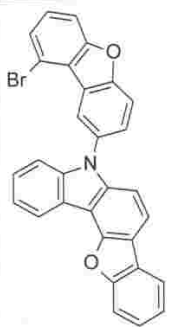
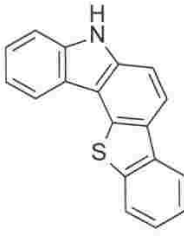
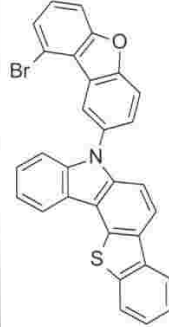
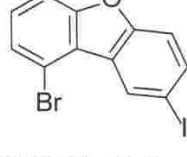
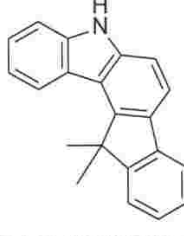
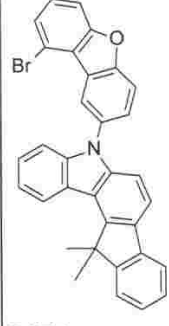
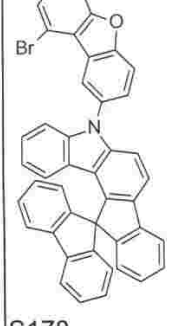
20

30

40

50

【化 3 8 - 7】

 CAS-1822311-11-4	 CAS-1199616-66-4	 S175
 CAS-1822311-11-4	 CAS-1255308-97-4	 S176
 CAS-1822311-11-4	 CAS-1346645-54-2	 S177
 CAS-1822311-11-4	 CAS-2055578-08-8	 S178

【 0 2 2 1】

10

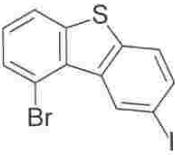
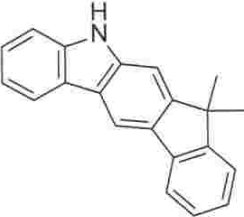
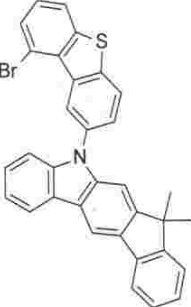
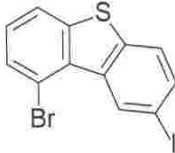
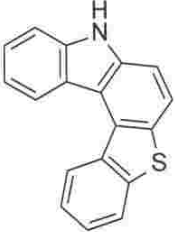
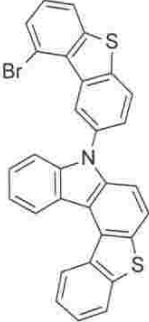
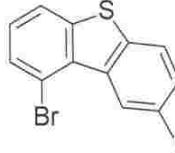
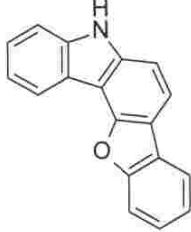
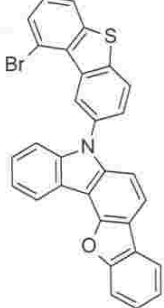
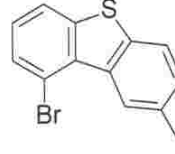
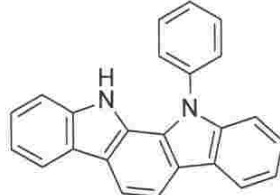
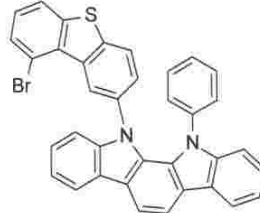
20

30

40

50

【化 3 8 - 8】

 CAS-1822311-12-5	 CAS-1257220-47-5	 S179
 CAS-1822311-12-5	 CAS-1255309-17-1	 S180
 CAS-1822311-12-5	 CAS-1199616-66-4	 S181
 CAS-1822311-12-5	 CAS-1024598-06-8	 S182

【 0 2 2 2】

10

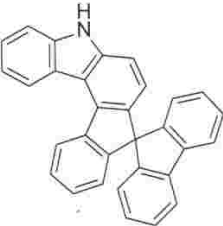
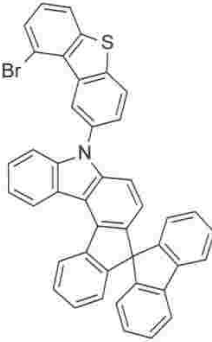
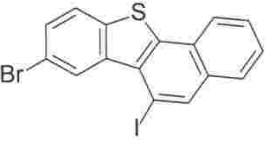
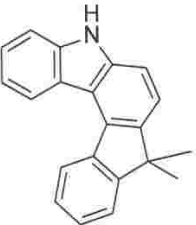
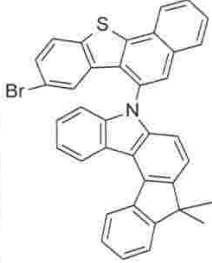
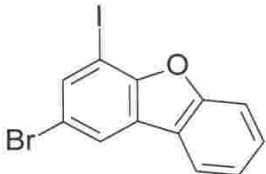
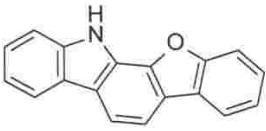
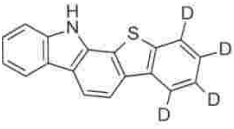
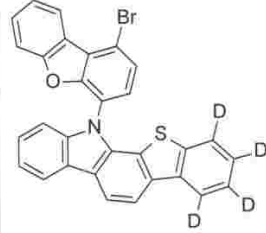
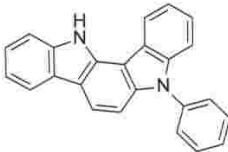
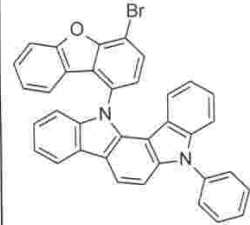
20

30

40

50

【化 3 8 - 9】

 CAS-1822311-12-5	 CAS-1936530-01-6	 S183
 CAS-1883821-22-4	 CAS-1623813-70-6	 S184
 CAS-1401068-25-4	 CAS-1338919-70-2	 S185
 CAS-1923736-35-9	 CAS-1447708-61-3	 S186
 CAS-2096506-51-1	 CAS-1247053-55-9	 S187

【 0 2 2 3】

10

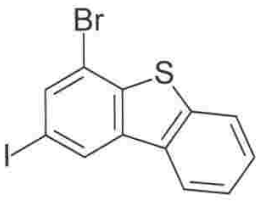
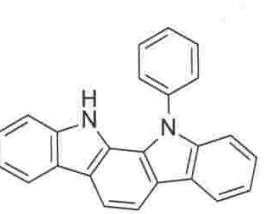
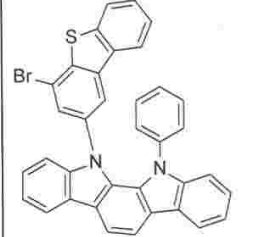
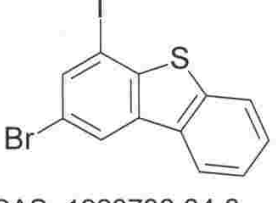
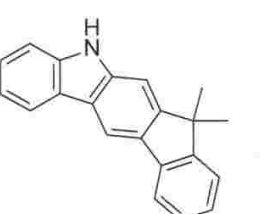
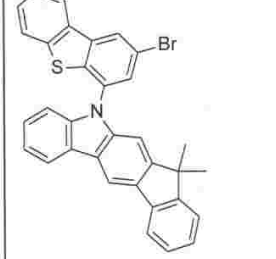
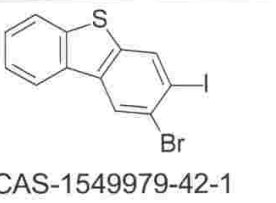
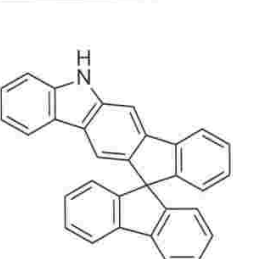
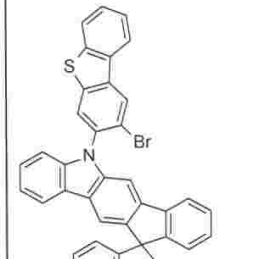
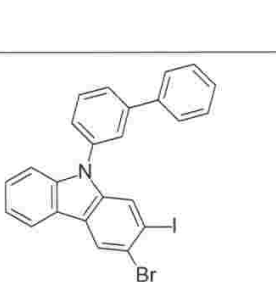
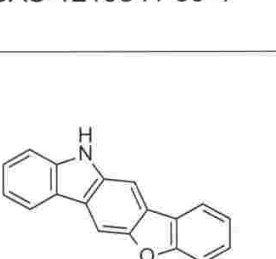
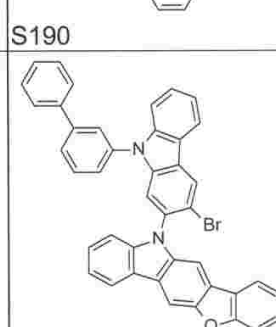
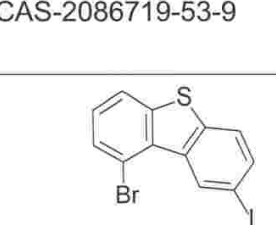
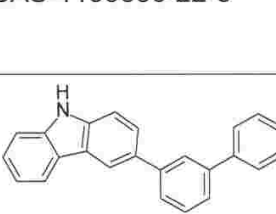
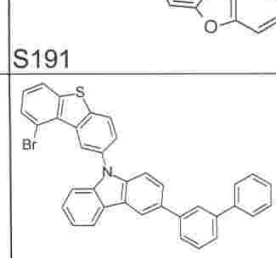
20

30

40

50

【化 3 8 - 1 0】

 CAS- 1913276-15-9	 CAS-1024598-06-8	 S188
 CAS- 1923736-34-8	 CAS-1257220-47-5	 S189
 CAS-1549979-42-1	 CAS-1219841-59-4	 S190
 CAS-2086719-53-9	 CAS-1199350-22-5	 S191
 CAS-1822311-12-5	 CAS-1643526-99-1	 S192

【 0 2 2 4】

10

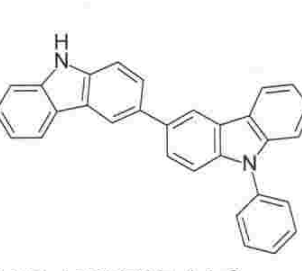
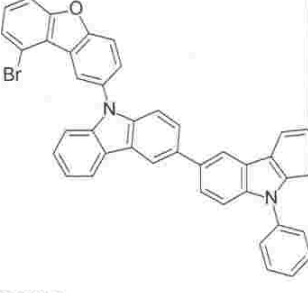
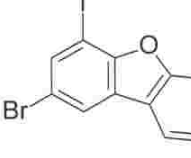
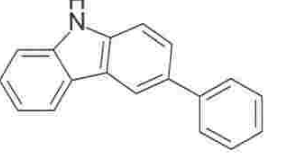
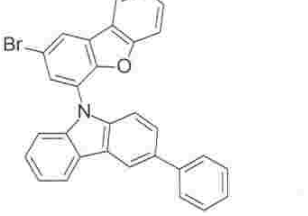
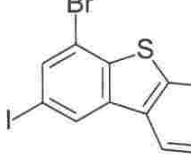
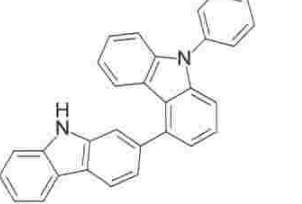
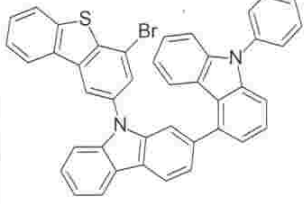
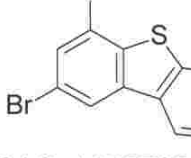
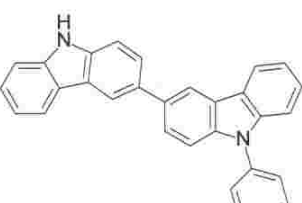
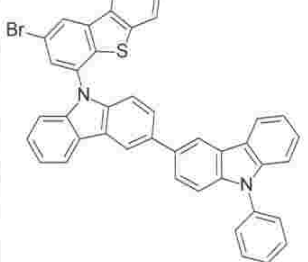
20

30

40

50

【化 3 8 - 1 1】

 CAS-1822311-11-4	 CAS-1060735-14-9	 S193
 CAS-1401068-25-4	 CAS-103012-26-6	 S194
 CAS-1913276-15-9	 CAS-2160600-08-6	 S195
 CAS-1923736-34-8	 CAS-1060735-14-9	 S196

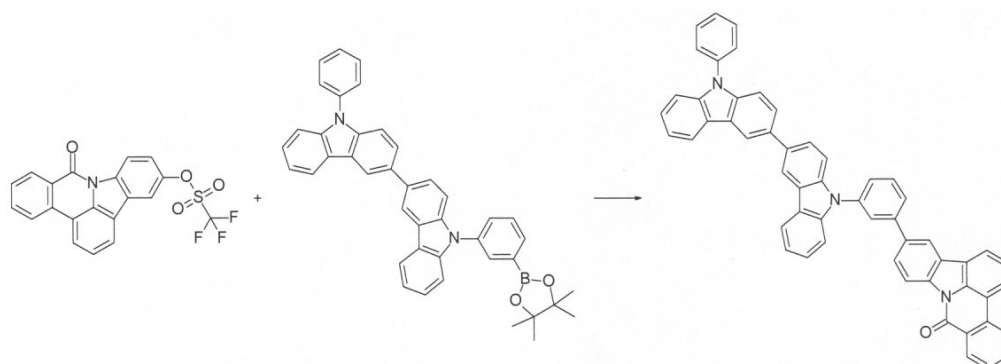
【 0 2 2 5】

生成物の調製：

P 1：

【 0 2 2 6】

【化 3 9】



【 0 2 2 7】

フラスコ中のS100 (15.02 g、36.0 mmol)、9-フェニル-9'-[3-(4,4,5,5-テトラメチル-[1,3,2]ジオキサボロラン-2-イル)-フェニル]-9H,9'-H-[3,3']ビカルバゾリル[2088364-11-6] (26.41 g、43.3 mmol) およびリン酸三カリウム (15.54 g) の初期投入に、テトラヒドロフラン (400 ml) および水 (100 ml) を添加し、混合物をアルゴンで30分間不活性化させる。続いて、酢酸パラジウム (II) [3375-31-3] (204.3 mg) およびX-Phos [564483-18-7] (905 mg) を添加し、混合物を20時間還流させながら加熱する。冷却後、沈殿した固体を吸引ろ過し、水で2回、THFで2回洗浄する。粗製生成物を、トルエンを用いる熱抽出に4回かけ、最終的に高真空下で昇華させる。収量：15.6 g (20.7 mmol、58%) の黄色固体；純度：HPLCにより>99.9%。

10

【0228】

類似の方法で、以下の化合物を調製することが可能である：ここで使用するホスフィンリガンドはまた、X-PhosよりもS-Phos [657408-07-6] であってもよく、または使用する触媒系（パラジウム源およびリガンド）は、ビス（トリフェニルホスフィン）パラジウムクロリド [13965-03-2] であってもよい。精製は、カラムクロマトグラフィーを使用して、または再結晶もしくは熱抽出は、他の標準的な溶媒、たとえばエタノール、ブタノール、アセトン、酢酸エチル、アセトニトリル、トルエン、キシレン、ジクロロメタン、メタノール、テトラヒドロフラン、酢酸n-ブチル、1,4-ジオキサンを使用して、または再結晶は高沸点物質、たとえばジメチルスルホキシド、N,N-ジメチルホルムアミド、N,N-ジメチルアセトアミド、N-メチルピロリドンなどを使用して行うこともできる。収率は、通常15%~75%の範囲である。

20

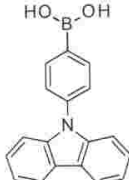
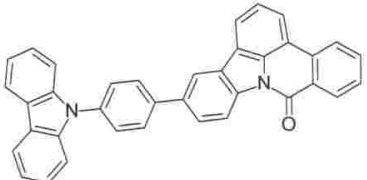
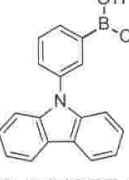
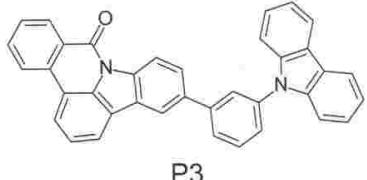
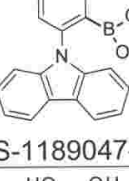
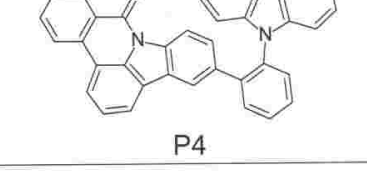
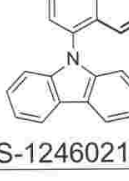
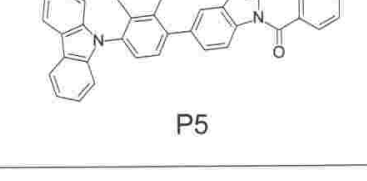
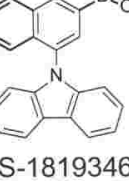
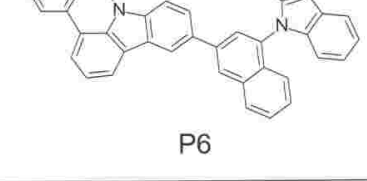
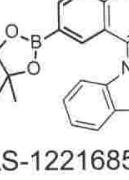
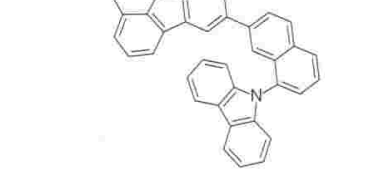
【0229】

30

40

50

【化 4 0 - 1】

反応物 1	反応物 2	生成物
S100	 CAS-419536-33-7	 P2
S100	 CAS-864377-33-3	 P3
S100	 CAS-1189047-28-6	 P4
S100	 CAS-1246021-50-0	 P5
S100	 CAS-1819346-26-3	 P6
S100	 CAS-1221685-92-2	 P7

【 0 2 3 0】

10

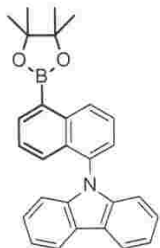
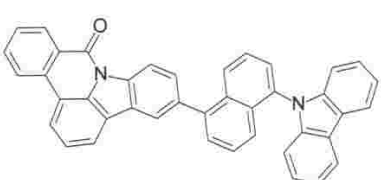
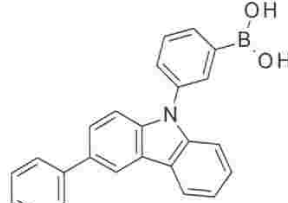
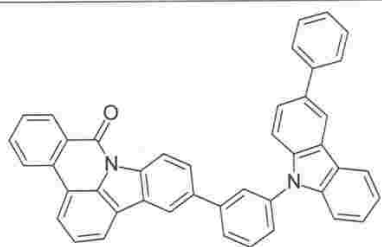
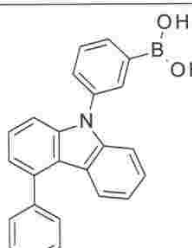
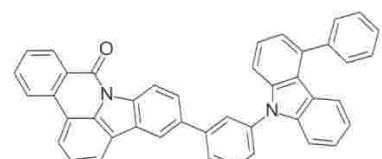
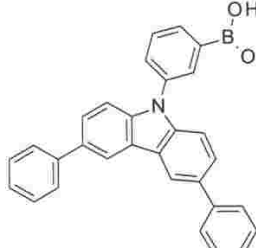
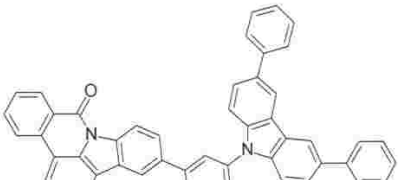
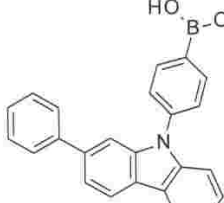
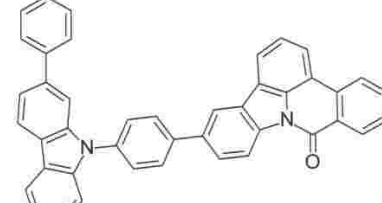
20

30

40

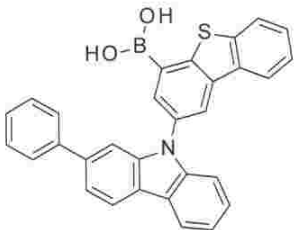
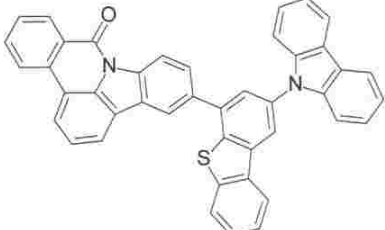
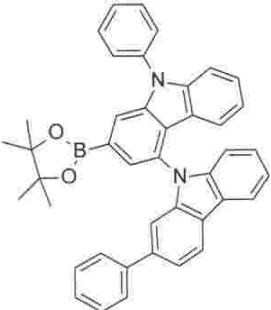
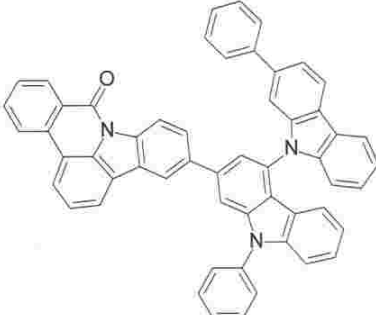
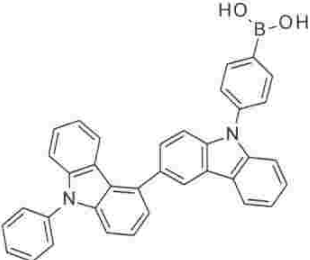
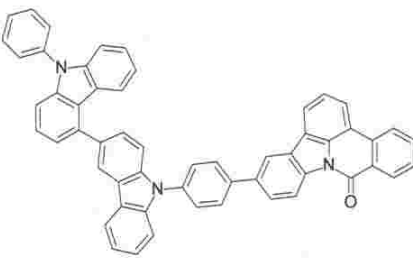
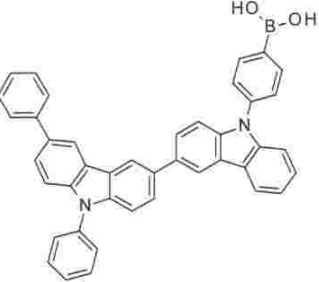
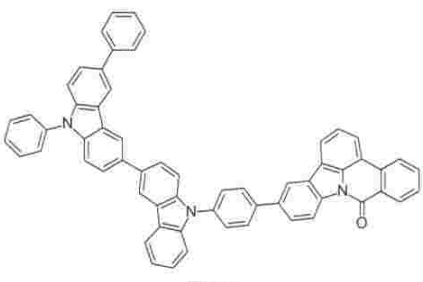
50

【化 4 0 - 2】

S100	 CAS-1820789-13-6	 P8	
S100	 CAS-1801285-73-3	 P9	10
S100	 CAS-1801285-68-6	 P10	20
S100	 CAS-1332748-66-9	 P11	30
S100	 CAS-2075740-65-5	 P12	40

【 0 2 3 1】

【化 4 0 - 3】

S100	 CAS-2177306-79-3	 P13
S100	 CAS-2231201-17-3	 P14
S100	 CAS-1885113-59-6	 P15
S100	 CAS-1398395-86-2	 P16

【 0 2 3 2】

10

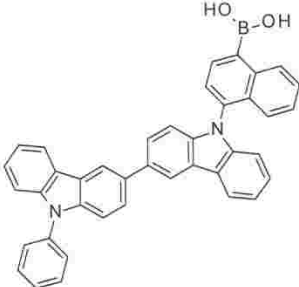
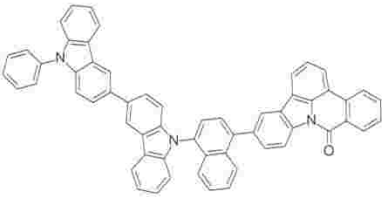
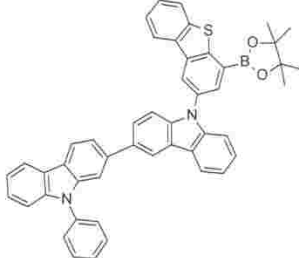
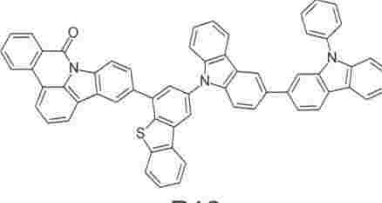
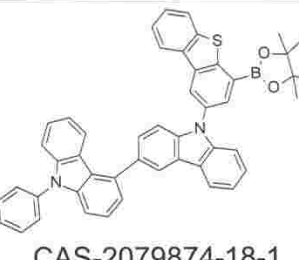
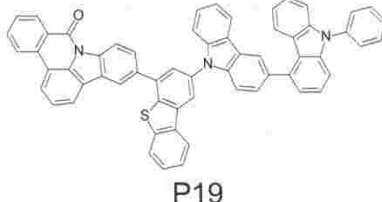
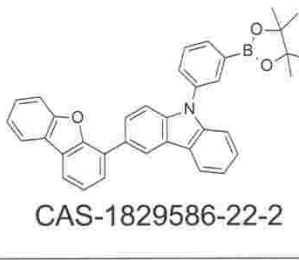
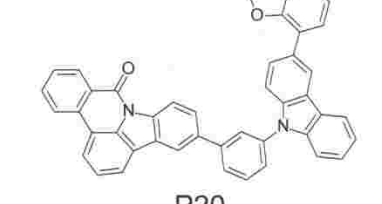
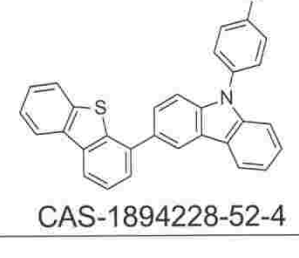
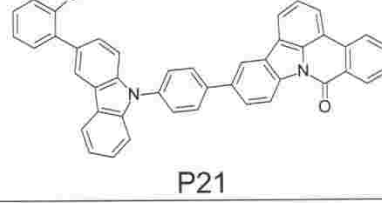
20

30

40

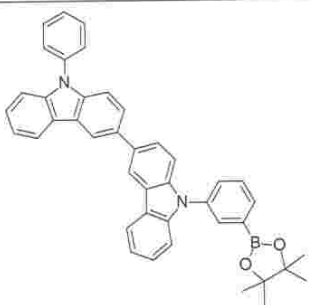
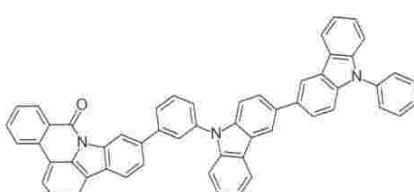
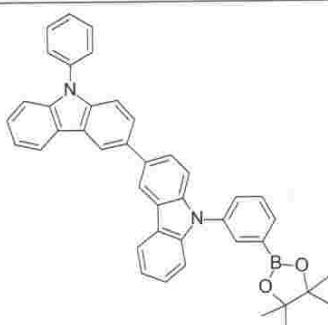
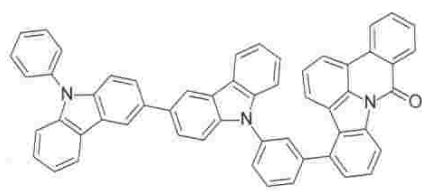
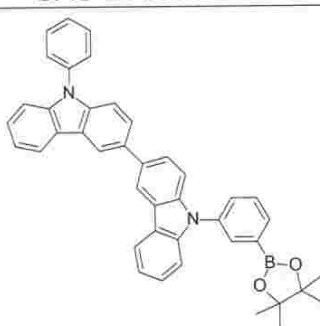
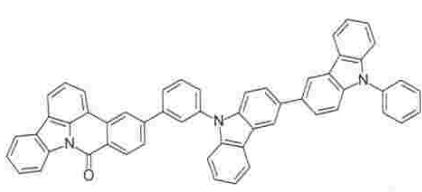
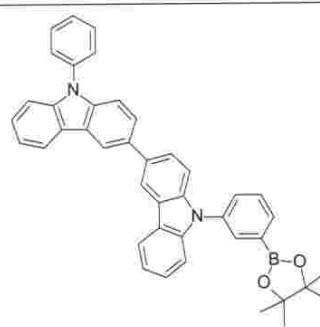
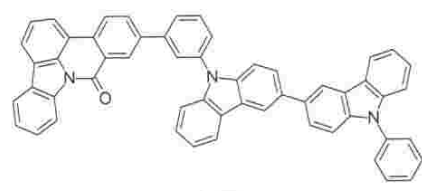
50

【化 4 0 - 4】

S100	 CAS-1398395-43-1	 P17	10
S100	 CAS-2079874-17-0	 P18	20
S100	 CAS-2079874-18-1	 P19	30
S100	 CAS-1829586-22-2	 P20	40
S100	 CAS-1894228-52-4	 P21	

【 0 2 3 3】

【化 4 0 - 5】

S101	 CAS-2088364-11-6	 P22
S102	 CAS-2088364-11-6	 P23
S103	 CAS-2088364-11-6	 P24
S104	 CAS-2088364-11-6	 P25

【 0 2 3 4】

10

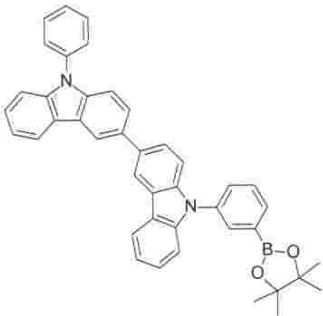
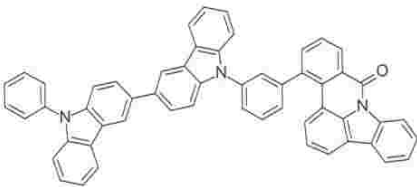
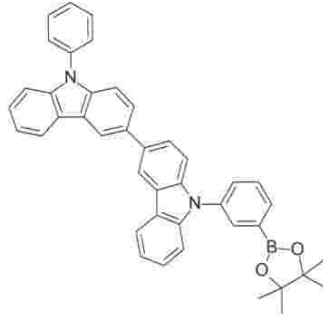
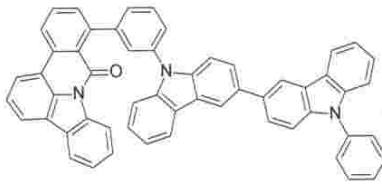
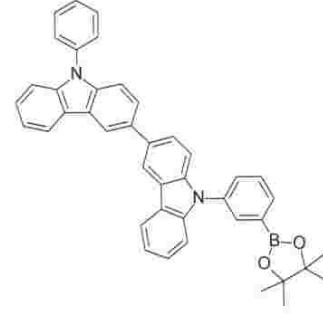
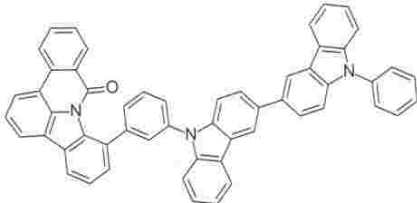
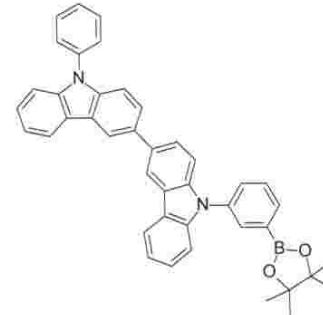
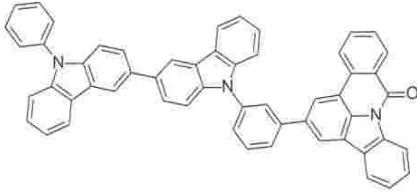
20

30

40

50

【化 4 0 - 6】

S105	 CAS-2088364-11-6	 P26
S106	 CAS-2088364-11-6	 P27
S107	 CAS-2088364-11-6	 P28
S108	 CAS-2088364-11-6	 P29

【 0 2 3 5】

10

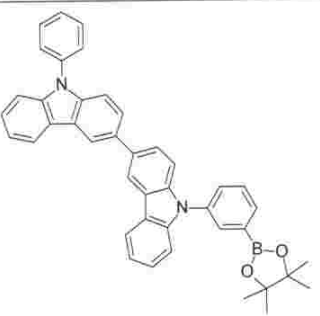
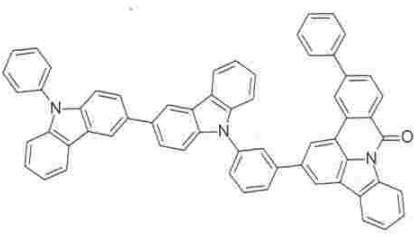
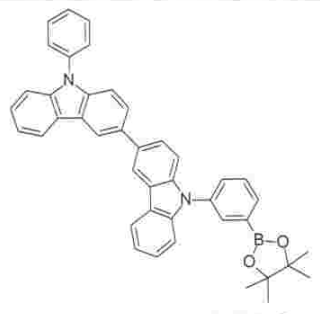
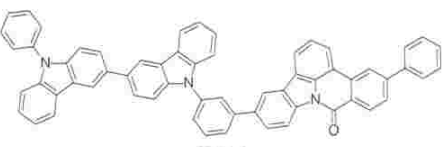
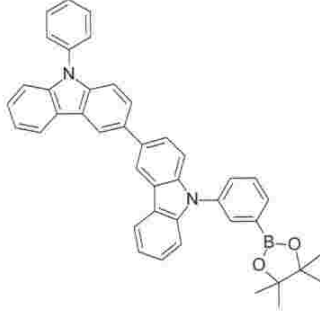
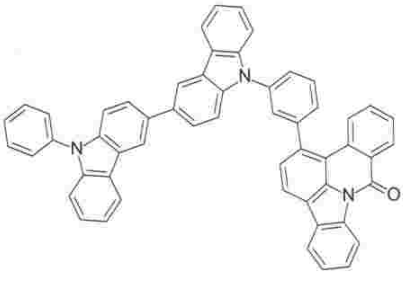
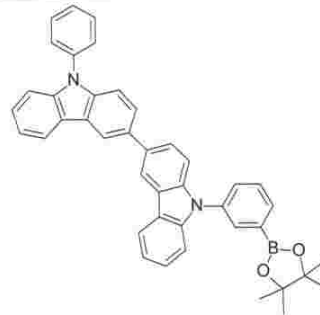
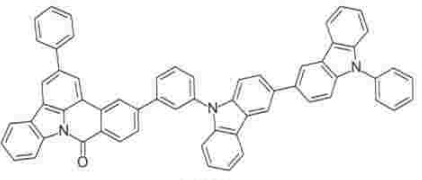
20

30

40

50

【化 4 0 - 7】

S109	 CAS-2088364-11-6	 P30
S110	 CAS-2088364-11-6	 P31
S111	 CAS-2088364-11-6	 P32
S112	 CAS-2088364-11-6	 P33

【 0 2 3 6】

10

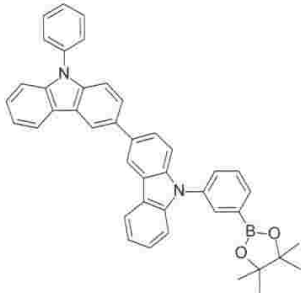
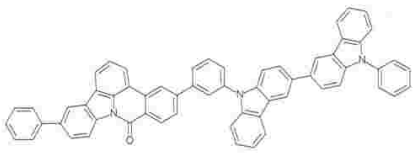
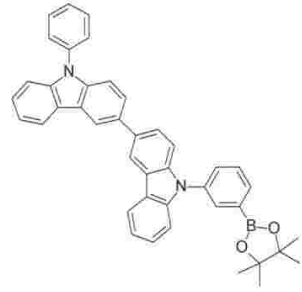
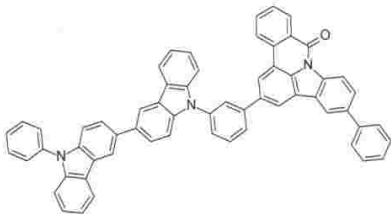
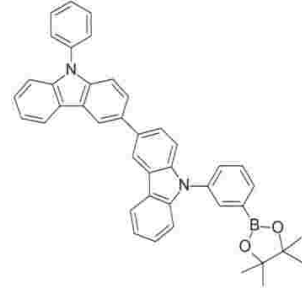
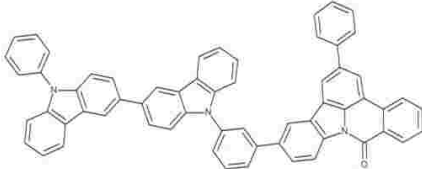
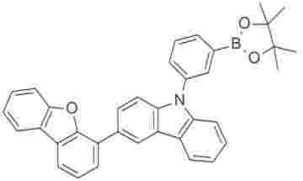
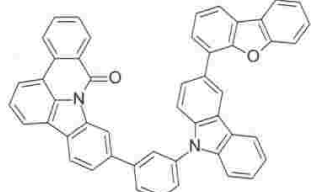
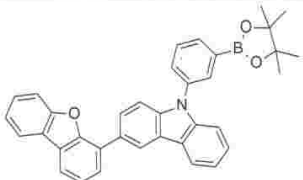
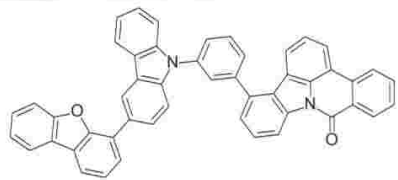
20

30

40

50

【化 4 0 - 8】

S113	 CAS-2088364-11-6	 P34
S114	 CAS-2088364-11-6	 P35
S115	 CAS-2088364-11-6	 P36
S101	 CAS-1829586-22-2	 P37
S102	 CAS-1829586-22-2	 P38

【 0 2 3 7】

10

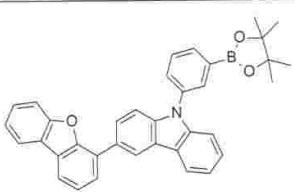
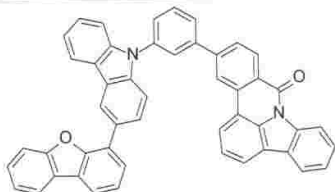
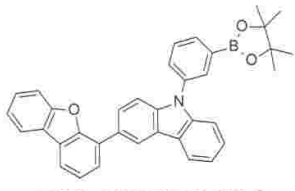
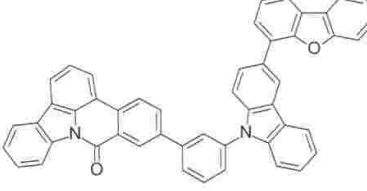
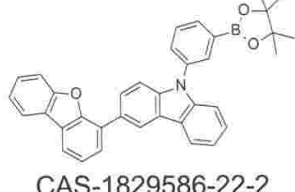
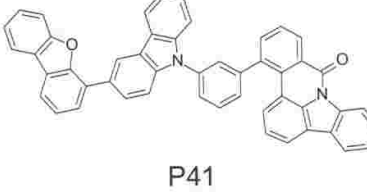
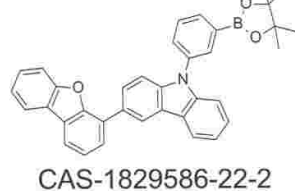
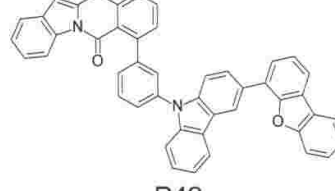
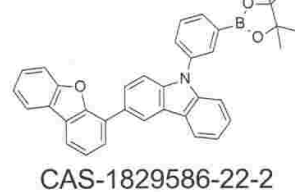
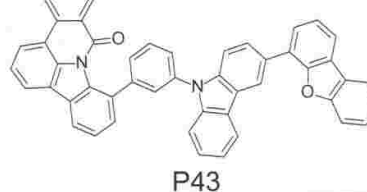
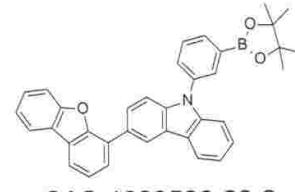
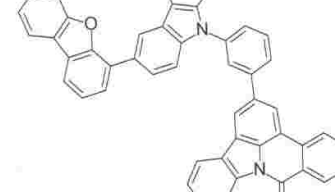
20

30

40

50

【化 40 - 9】

S103	 CAS-1829586-22-2	 P39
S104	 CAS-1829586-22-2	 P40
S105	 CAS-1829586-22-2	 P41
S106	 CAS-1829586-22-2	 P42
S107	 CAS-1829586-22-2	 P43
S108	 CAS-1829586-22-2	 P44

【 0 2 3 8】

10

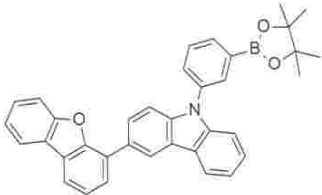
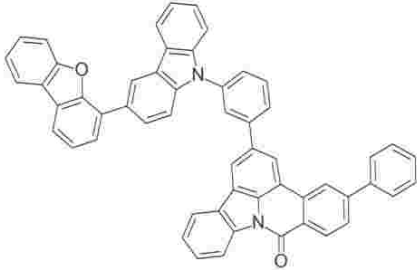
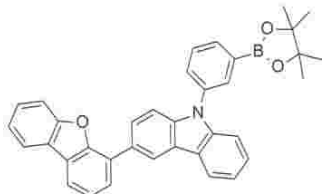
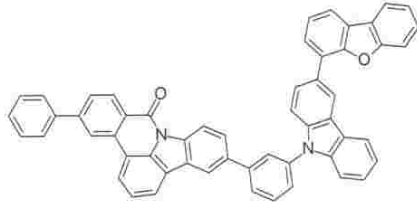
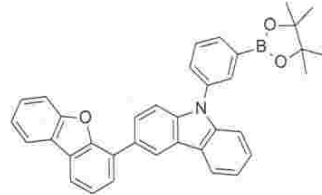
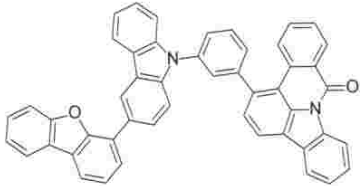
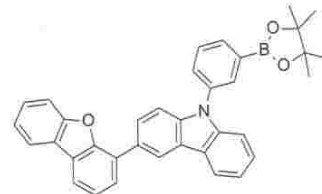
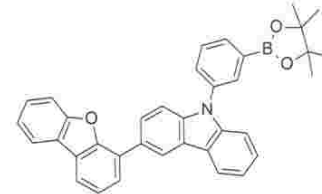
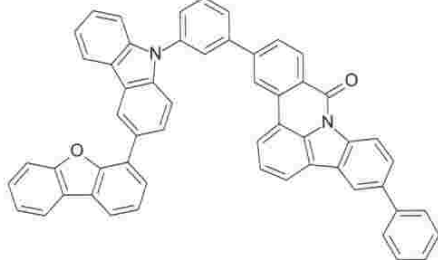
20

30

40

50

【化 4 0 - 1 0】

S109	 CAS-1829586-22-2	 P45
S110	 CAS-1829586-22-2	 P46
S111	 CAS-1829586-22-2	 P47
S112	 CAS-1829586-22-2	 P48
S113	 CAS-1829586-22-2	 P49

【 0 2 3 9】

10

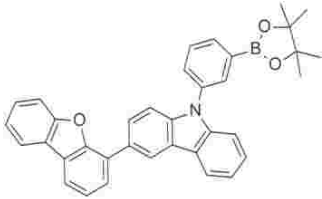
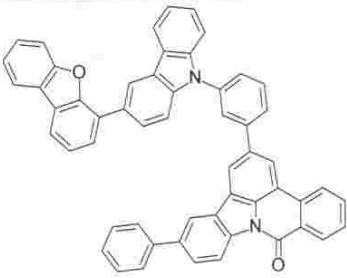
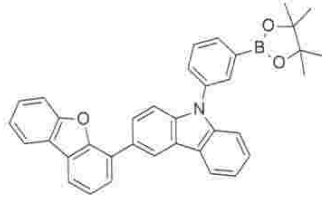
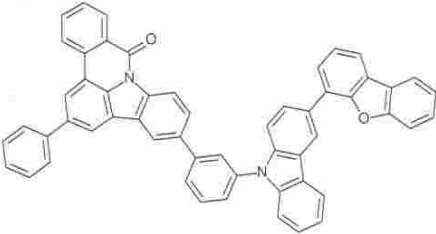
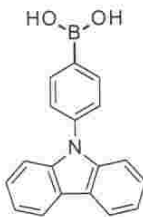
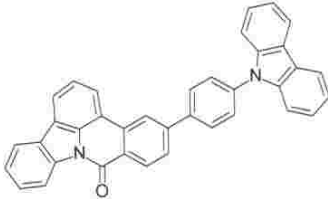
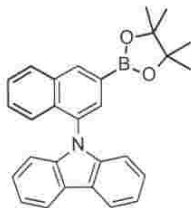
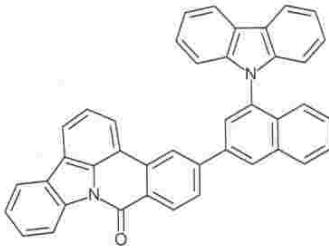
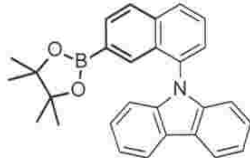
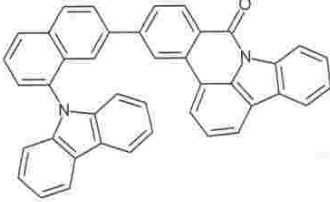
20

30

40

50

【化 4 0 - 1 1】

S114	 CAS-1829586-22-2	 P50
S115	 CAS-1829586-22-2	 P51
S103	 CAS-419536-33-7	 P52
S103	 CAS-1819346-26-3	 P53
S103	 CAS-1221685-92-2	 P54

【 0 2 4 0 】

10

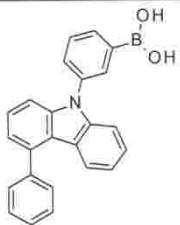
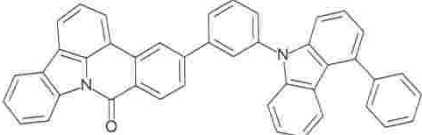
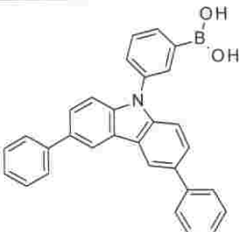
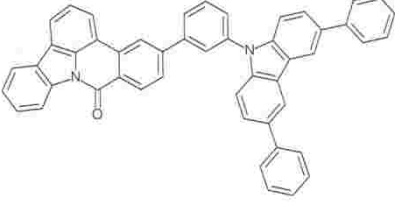
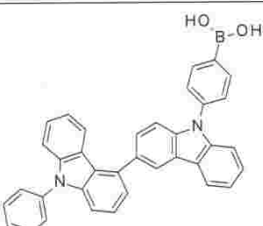
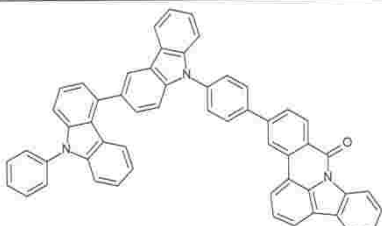
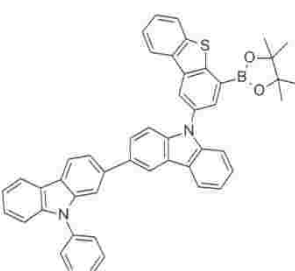
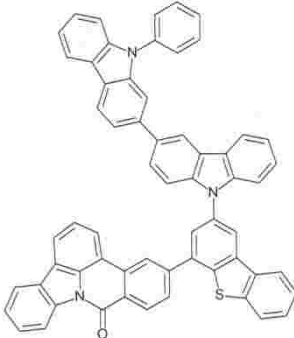
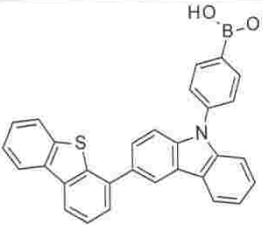
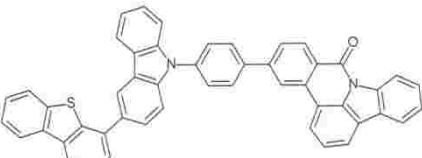
20

30

40

50

【化 4 0 - 1 2】

S103	 CAS-1801285-68-6	 P55
S103	 CAS-1332748-66-9	 P56
S103	 CAS-1885113-59-6	 P57
S103	 CAS-2079874-17-0	 P58
S103	 CAS-1894228-52-4	 P59

10

20

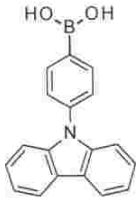
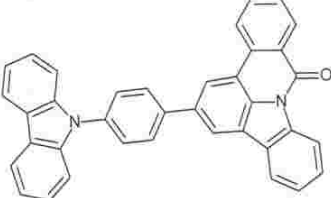
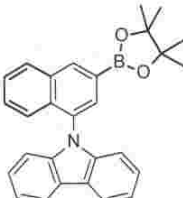
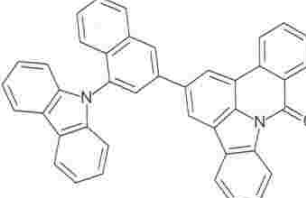
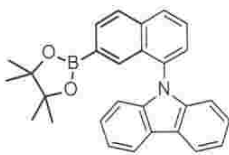
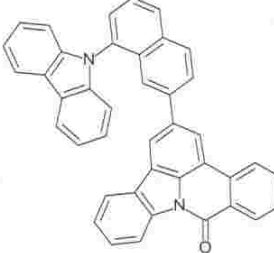
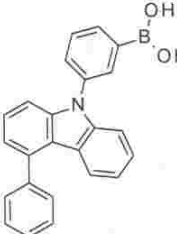
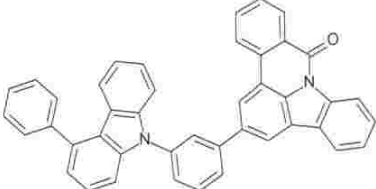
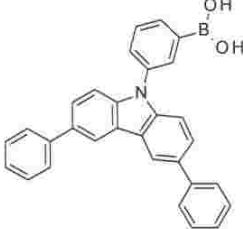
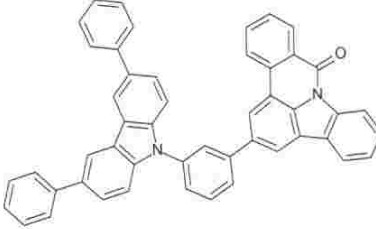
30

40

【 0 2 4 1】

50

【化 4 0 - 1 3】

S108	 CAS-419536-33-7	 P60
S108	 CAS-1819346-26-3	 P61
S108	 CAS-1221685-92-2	 P62
S108	 CAS-1801285-68-6	 P63
S108	 CAS-1332748-66-9	 P64

【 0 2 4 2】

10

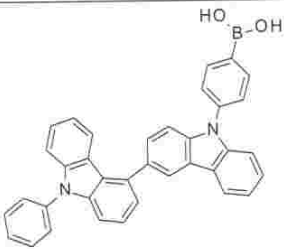
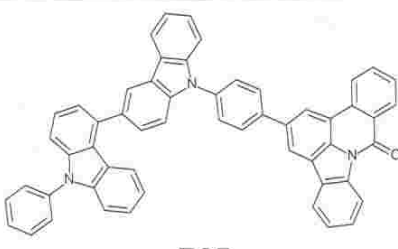
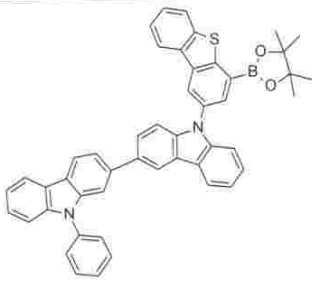
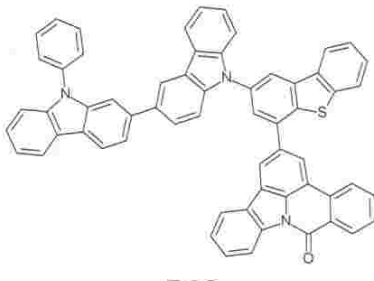
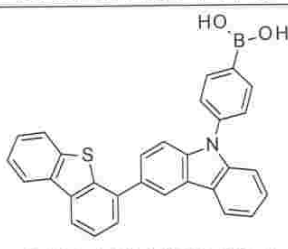
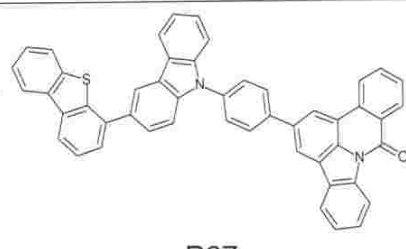
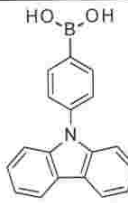
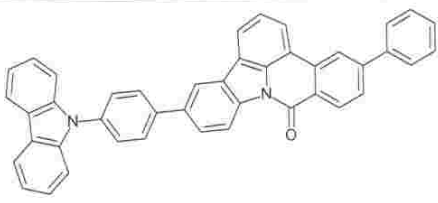
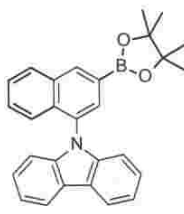
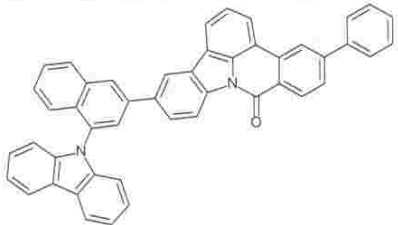
20

30

40

50

【化 4 0 - 1 4】

S108	 CAS-1885113-59-6	 P65
S108	 CAS-2079874-17-0	 P66
S108	 CAS-1894228-52-4	 P67
S110	 CAS-419536-33-7	 P68
S110	 CAS-1819346-26-3	 P69

【 0 2 4 3】

10

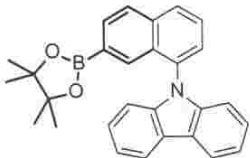
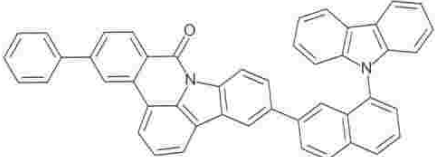
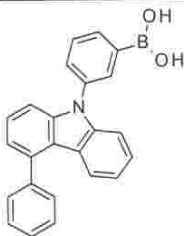
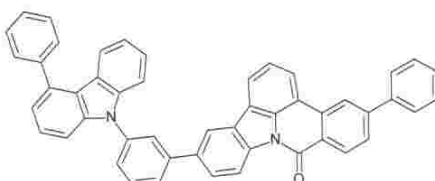
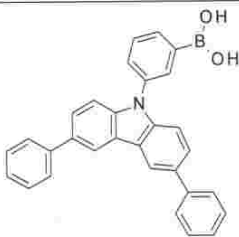
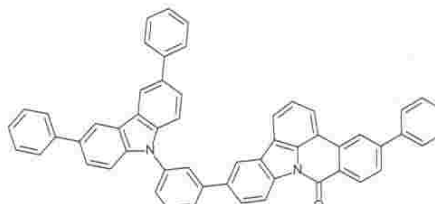
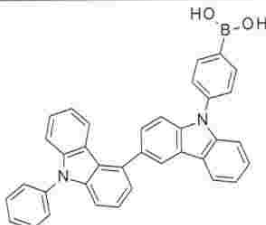
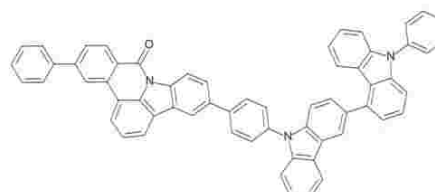
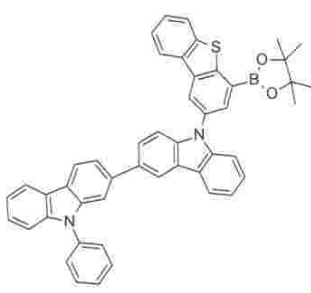
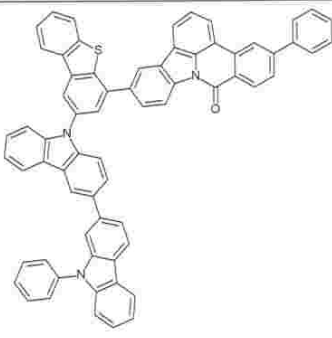
20

30

40

50

【化 4 0 - 1 5】

S110	 CAS-1221685-92-2	 P70
S110	 CAS-1801285-68-6	 P71
S110	 CAS-1332748-66-9	 P72
S110	 CAS-1885113-59-6	 P73
S110	 CAS-2079874-17-0	 P74

【 0 2 4 4】

10

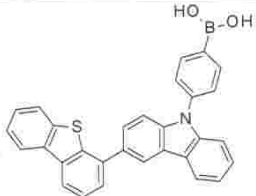
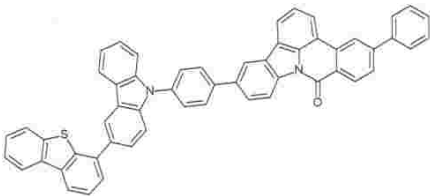
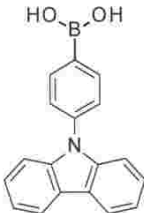
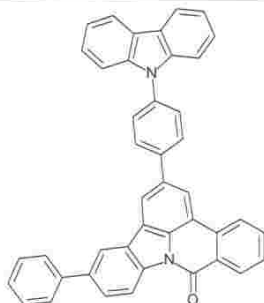
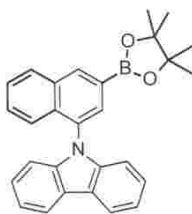
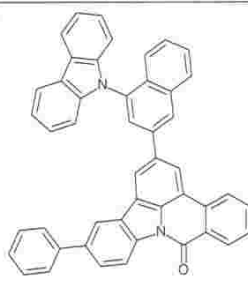
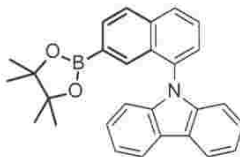
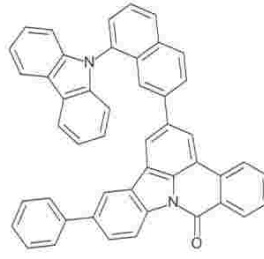
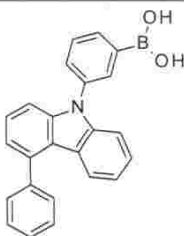
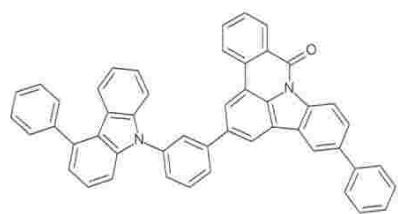
20

30

40

50

【化 4 0 - 1 6】

S110	 CAS-1894228-52-4	 P75
S114	 CAS-419536-33-7	 P76
S114	 CAS-1819346-26-3	 P77
S114	 CAS-1221685-92-2	 P78
S114	 CAS-1801285-68-6	 P79

【 0 2 4 5】

10

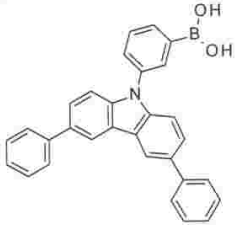
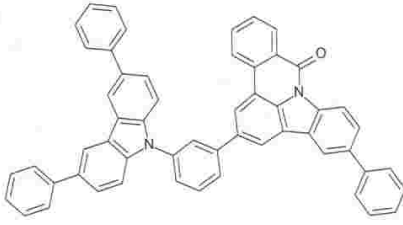
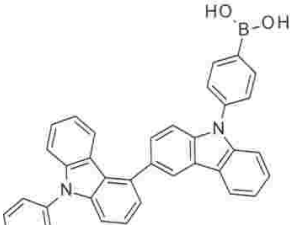
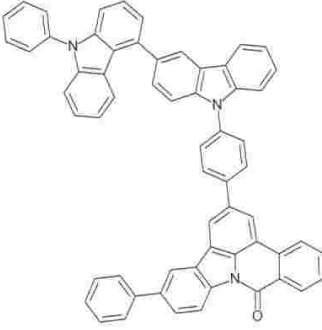
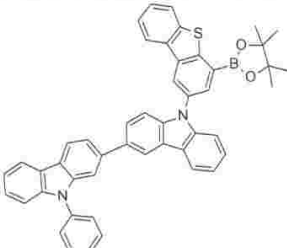
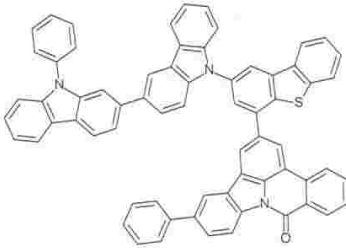
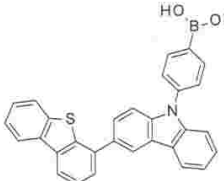
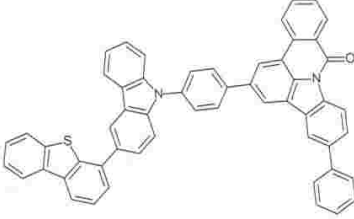
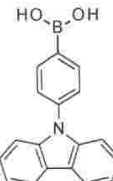
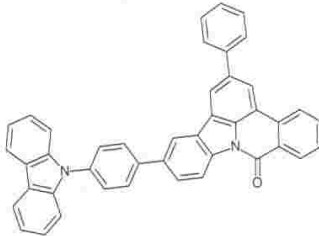
20

30

40

50

【化 4 0 - 1 7】

S114	 CAS-1332748-66-9	 P80
S114	 CAS-1885113-59-6	 P81
S114	 CAS-2079874-17-0	 P82
S114	 CAS-1894228-52-4	 P83
S115	 CAS-419536-33-7	 P84

【 0 2 4 6】

10

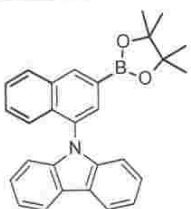
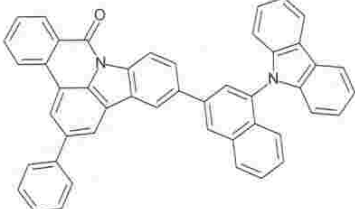
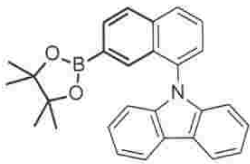
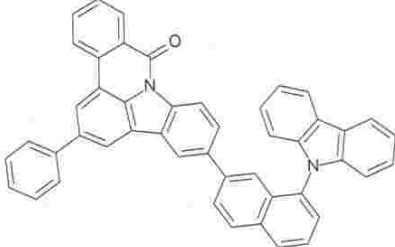
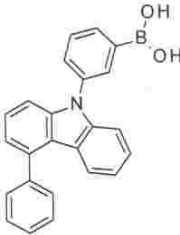
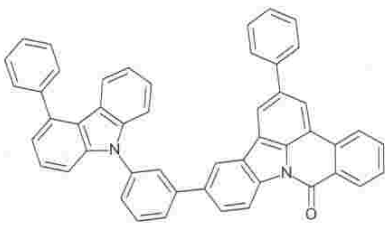
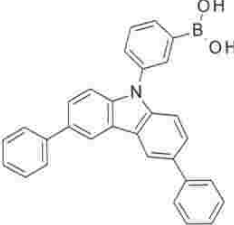
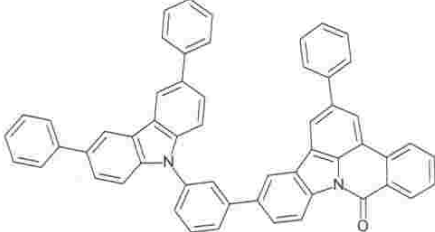
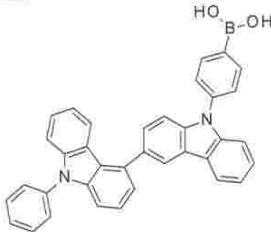
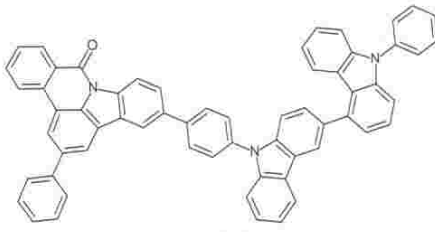
20

30

40

50

【化 40 - 18】

S115	 CAS-1819346-26-3	 P85
S115	 CAS-1221685-92-2	 P86
S115	 CAS-1801285-68-6	 P87
S115	 CAS-1332748-66-9	 P88
S115	 CAS-1885113-59-6	 P89

【0247】

10

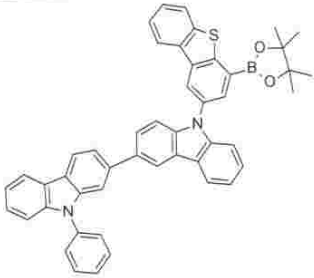
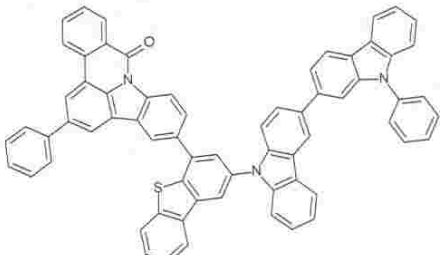
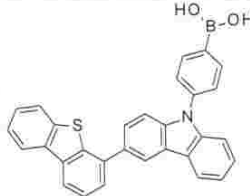
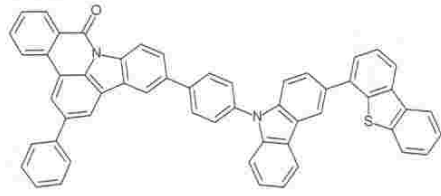
20

30

40

50

【化 4 0 - 1 9】

S115	 CAS-2079874-17-0	 P90
S115	 CAS-1894228-52-4	 P91

10

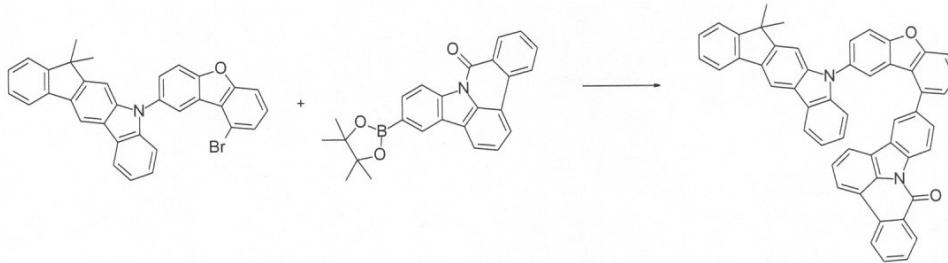
【 0 2 4 8】

P 2 0 0

【 0 2 4 9】

20

【化 4 1】



【 0 2 5 0】

30

トルエン (200 ml)、1, 4-ジオキサン (200 ml) および水 (100 ml) 中の 5-(9-ブロモ-2-ジベンゾフラニル)-5, 7-ジヒドロ-7, 7-ジメチルインデノ [2, 1-b] カルバゾール [2226483-41-4] (21.24 g、40.2 mmol)、S125 (15.89 g、40.2 mmol) および炭酸ナトリウム (8.51 g、80.3 mmol) の初期投入は、アルゴンで20分間不活性化させる。続いて、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) (928 mg、0.80 mmol) を添加し、反応混合物を32時間還流させながら攪拌する。冷却後、沈殿した固体を吸引ろ過し、エタノールで洗浄する。粗製生成物を、トルエンを用いる熱抽出に2回かけ、次いでジメチルアセトアミドから3回再結晶させ、最終的に高真空下で昇華させる。収量：15.8 g (22.1 mmol、55%) の黄色固体；純度：>HPLCにより99.9%。

40

BrよりもClの転化のための触媒系：

臭素よりもClの転化のためには、使用するホスフィンリガンドは、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)よりもX-Phos [564483-18-7] もしくはS-Phos [657408-07-6] であり、または使用するパラジウム源は、Pd(OAc)₂ [3375-31-3] もしくはPd₂(dba)₃ [51364-51-3] である。あるいは、使用する触媒系はまた、Pd-X-Phos-G3 [1445085-55-1] であってもよい。また、臭素の転化に後者の触媒系の1つを使用するのは有利であり得る。

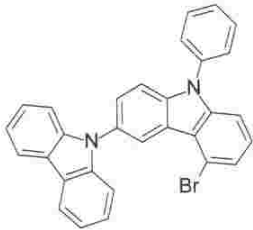
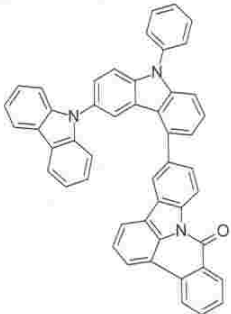
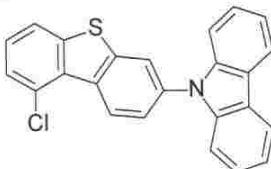
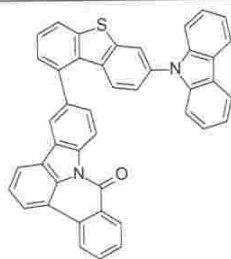
【 0 2 5 1】

50

精製は、カラムクロマトグラフィーを使用して、または再結晶もしくは熱抽出は、他の標準的な溶媒、たとえばエタノール、ブタノール、アセトン、酢酸エチル、アセトニトリル、トルエン、キシレン、ジクロロメタン、メタノール、テトラヒドロフラン、酢酸 *n*-ブチル、1,4-ジオキサンを使用して、または再結晶は、高沸点物質、たとえばジメチルスルホキシド、*N,N*-ジメチルホルムアミド、*N,N*-ジメチルアセトアミド、*N*-メチルピロリドンなどを使用して行うこともできる。収率は、通常 13%~75% の範囲である。

【0252】

【化42-1】

反応物 1	反応物 2	生成物
S125	 CAS-1801420-73-4	 P201
S125	 CAS-1622440-74-7	 P202

【0253】

10

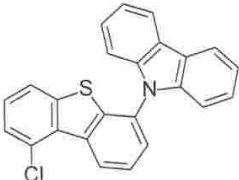
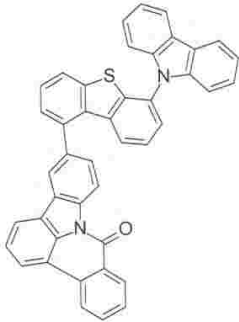
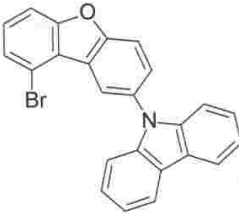
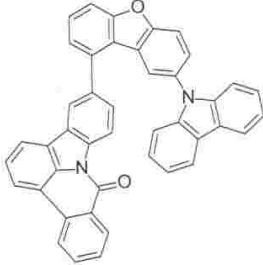
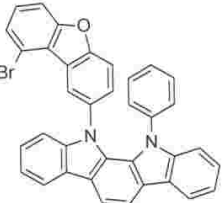
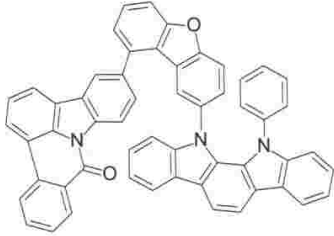
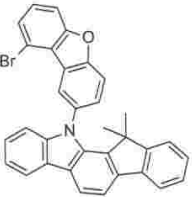
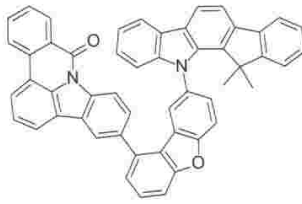
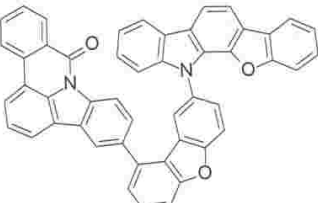
20

30

40

50

【化 4 2 - 2】

S125	 CAS-1622440-71-4	 P203
S125		 P204
S125	 S151	 P205
S125	 S152	 P206
S125	 S153	 P207

【 0 2 5 4】

10

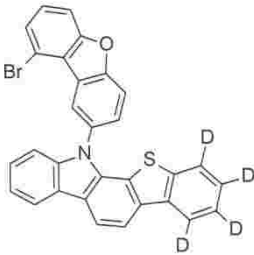
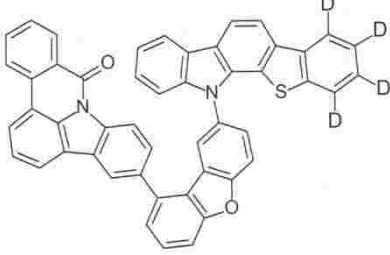
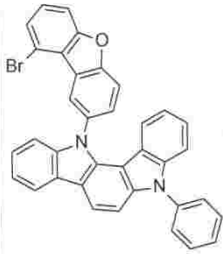
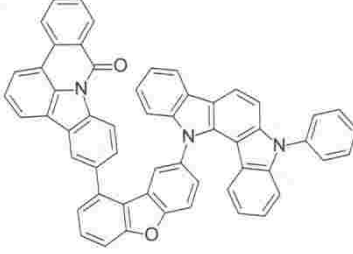
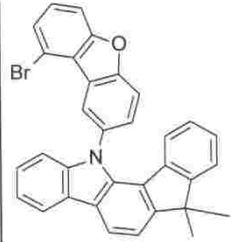
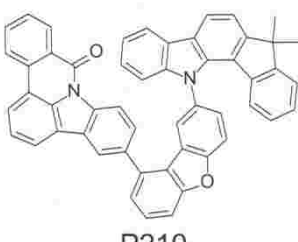
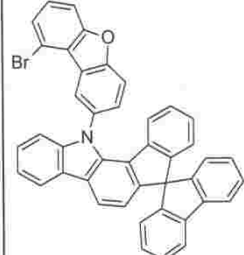
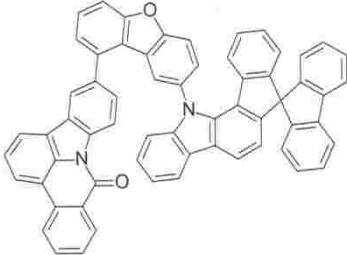
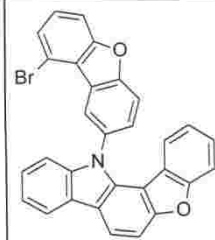
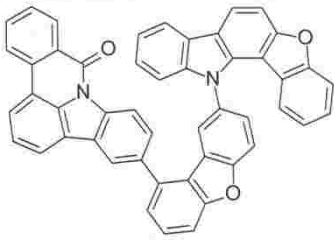
20

30

40

50

【化 4 2 - 3】

S125	 S154	 P208
S125	 S155	 P209
S125	 S156	 P210
S125	 S157	 P211
S125	 S158	 P212

【 0 2 5 5】

10

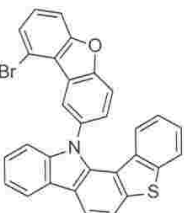
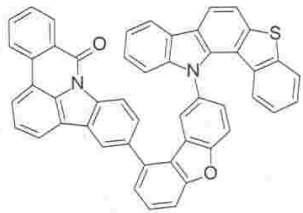
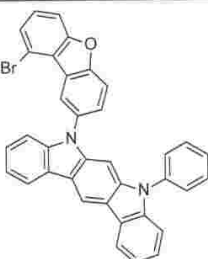
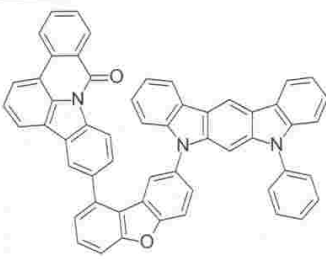
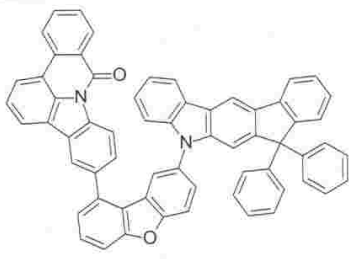
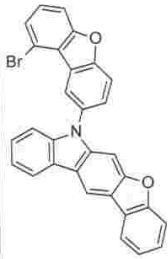
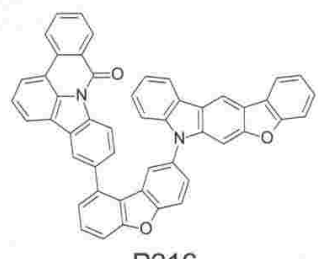
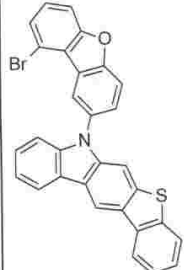
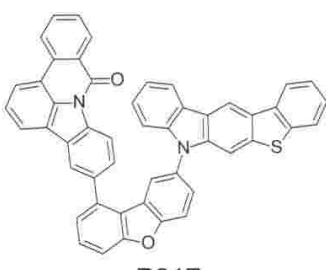
20

30

40

50

【化 4 2 - 4】

S125	 S159	 P213
S125	 S160	 P214
S125	 S161	 P215
S125	 S162	 P216
S125	 S163	 P217

【 0 2 5 6】

10

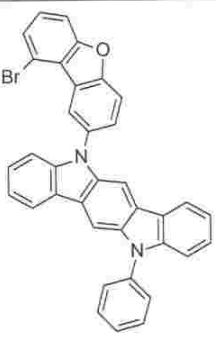
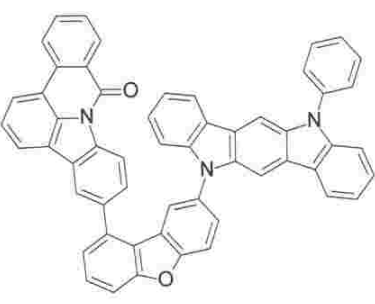
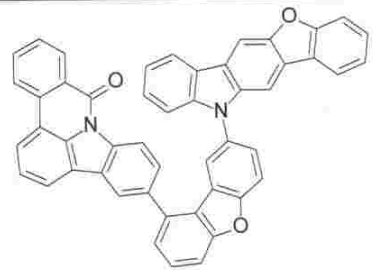
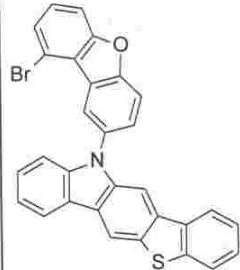
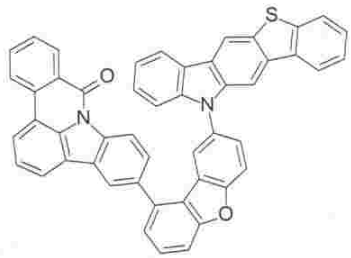
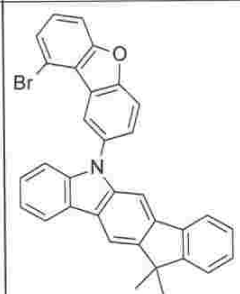
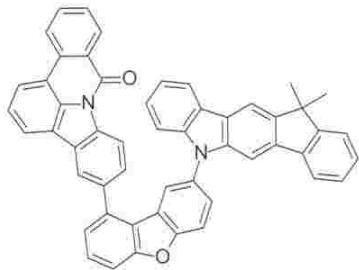
20

30

40

50

【化 4 2 - 5】

S125	 S164	 P218
S125	 S165	 P219
S125	 S166	 P220
S125	 S167	 P221

【 0 2 5 7】

10

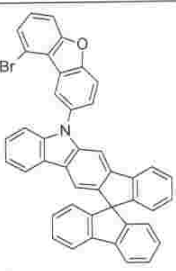
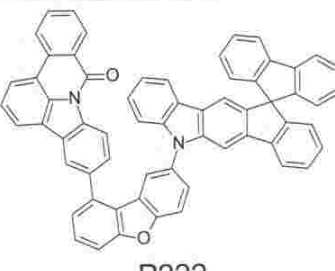
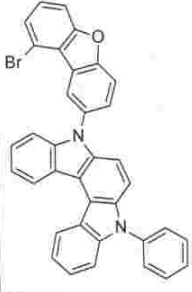
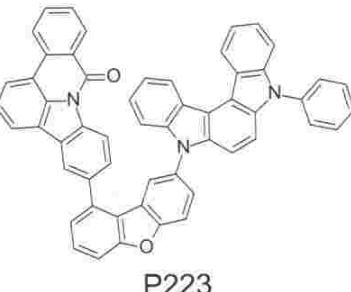
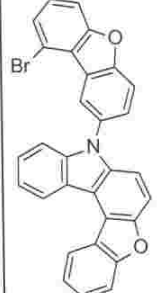
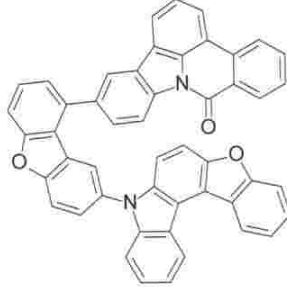
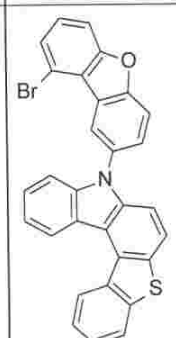
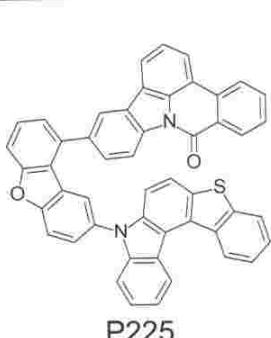
20

30

40

50

【化 4 2 - 6】

S125	 S168	 P222
S125	 S169	 P223
S125	 S170	 P224
S125	 S171	 P225

【 0 2 5 8】

10

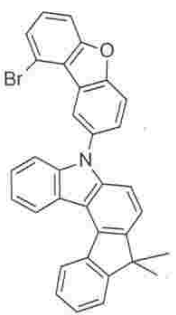
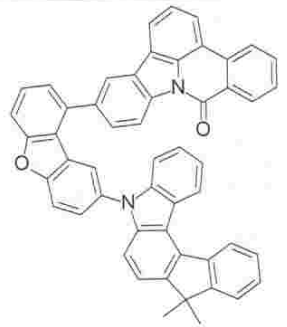
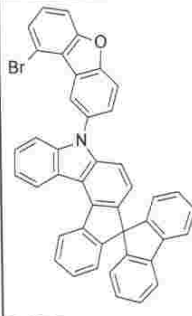
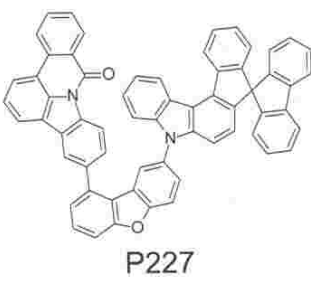
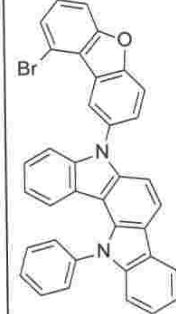
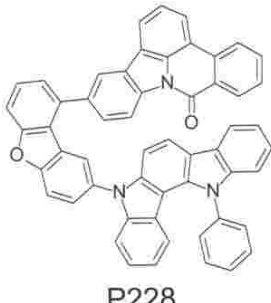
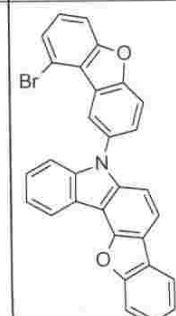
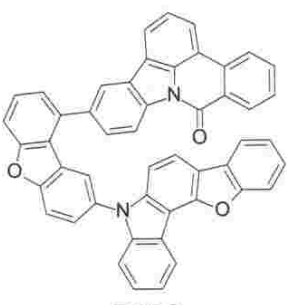
20

30

40

50

【化 4 2 - 7】

S125	 S172	 P226
S125	 S173	 P227
S125	 S174	 P228
S125	 S175	 P229

【 0 2 5 9】

10

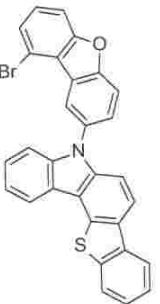
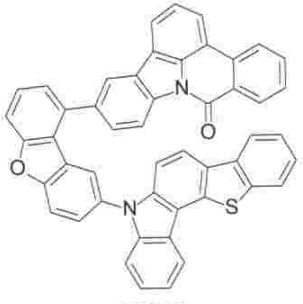
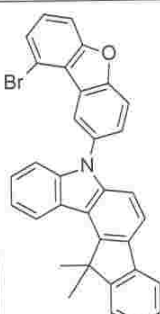
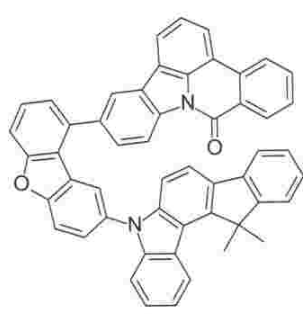
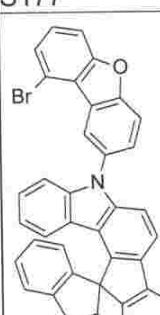
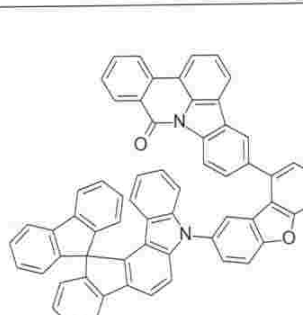
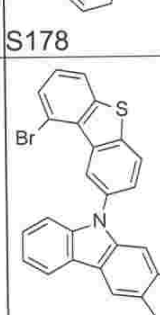
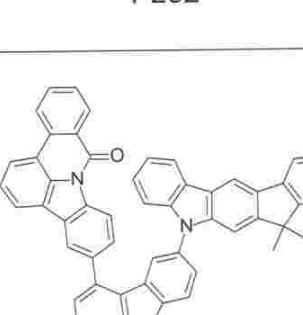
20

30

40

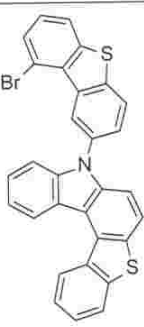
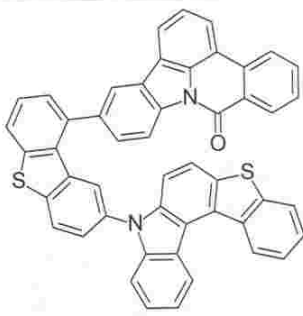
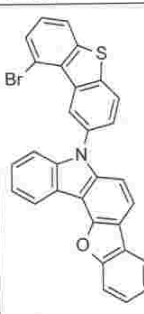
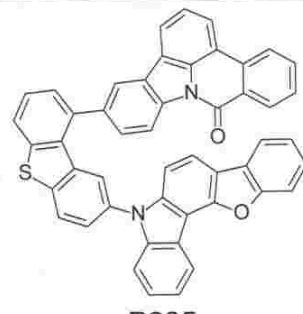
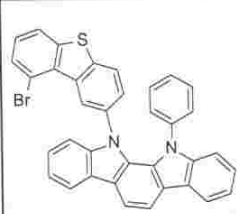
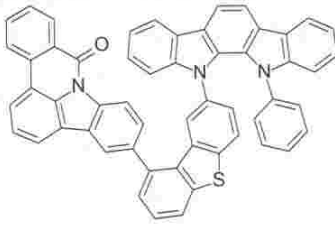
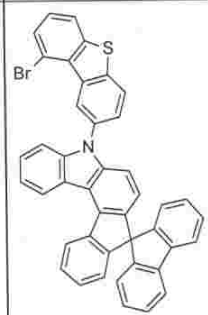
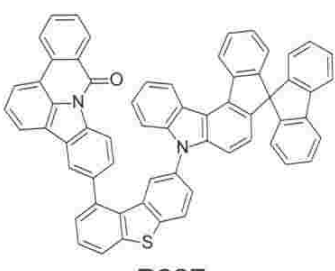
50

【化 4 2 - 8】

S125	 S176	 P230	10
S125	 S177	 P231	20
S125	 S178	 P232	30
S125	 S179	 P233	40

【 0 2 6 0】

【化 4 2 - 9】

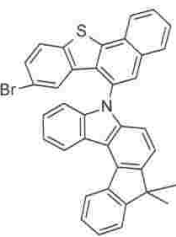
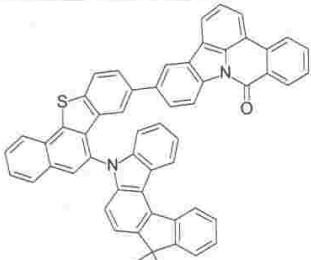
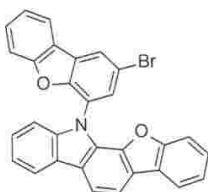
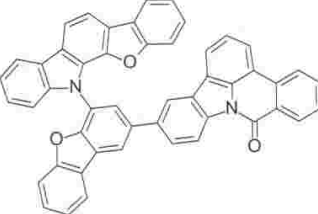
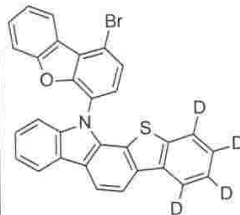
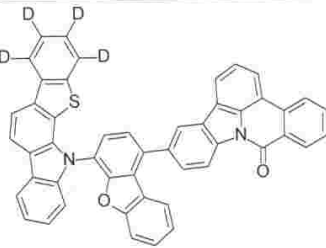
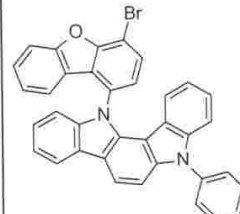
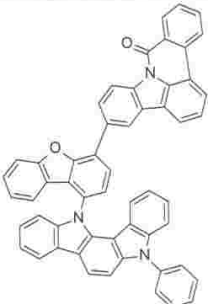
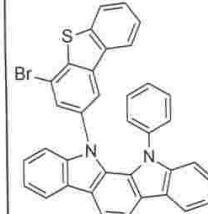
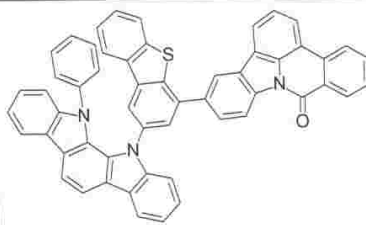
S125	 S180	 P234	10
S125	 S181	 P235	20
S125	 S182	 P236	30
S125	 S183	 P237	40

【 0 2 6 1】

40

50

【化 4 2 - 1 0】

S125	 S184	 P238
S125	 S185	 P239
S125	 S186	 P240
S125	 S187	 P241
S125	 S188	 P242

【 0 2 6 2 】

10

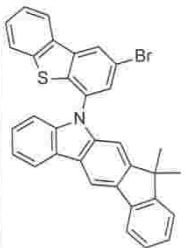
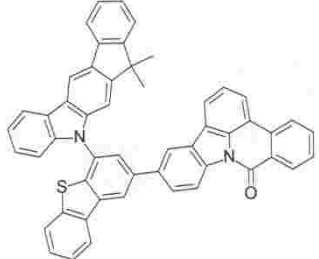
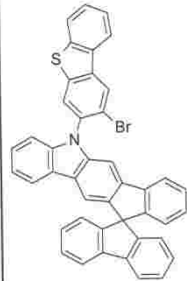
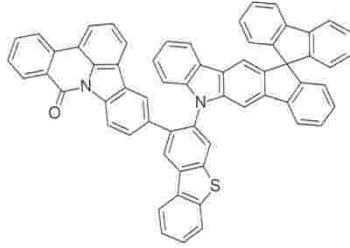
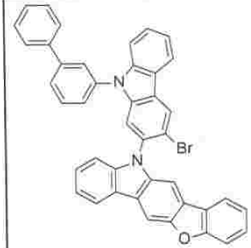
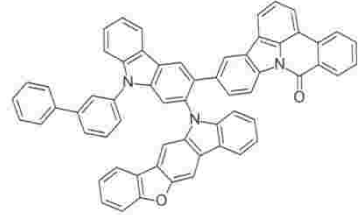
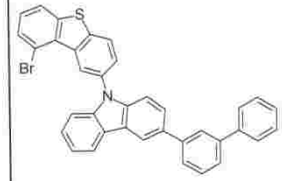
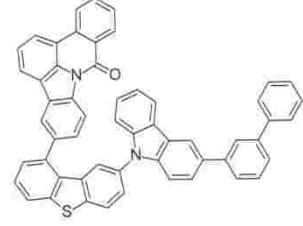
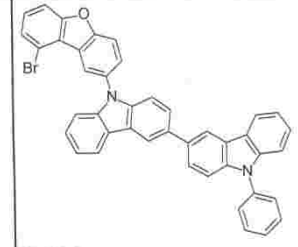
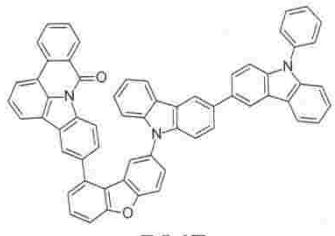
20

30

40

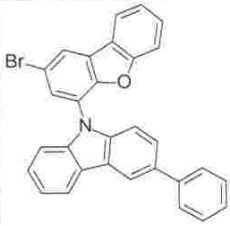
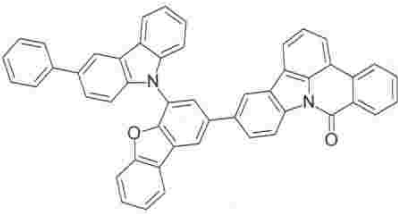
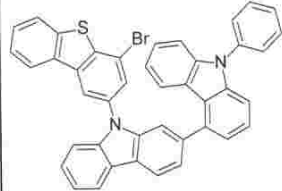
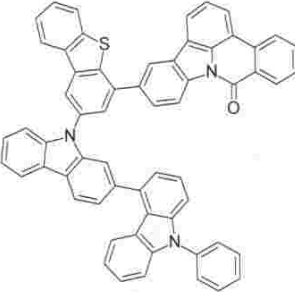
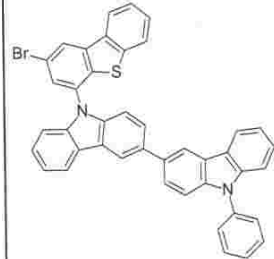
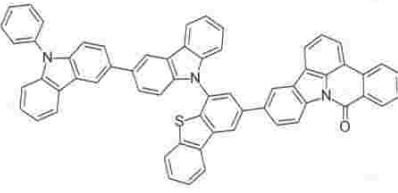
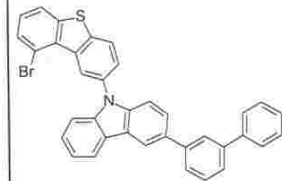
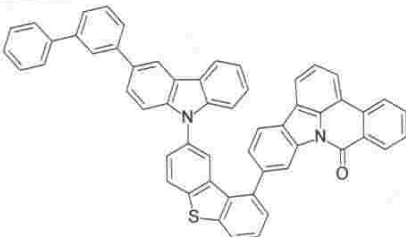
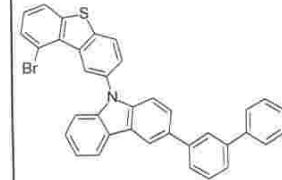
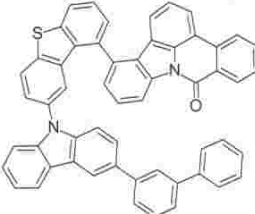
50

【化 4 2 - 1 1】

S125	 S189	 P243	10
S125	 S190	 P244	20
S125	 S191	 P245	30
S125	 S192	 P246	40
S125	 S193	 P247	

【 0 2 6 3】

【化 4 2 - 1 2】

S125	 S194	 P248
S125	 S195	 P249
S125	 S196	 P250
S126	 S192	 P251
S127	 S192	 P252

【 0 2 6 4】

10

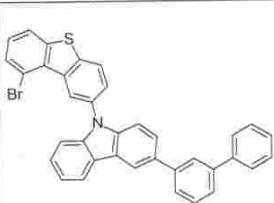
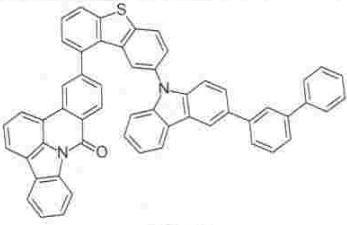
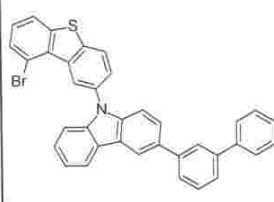
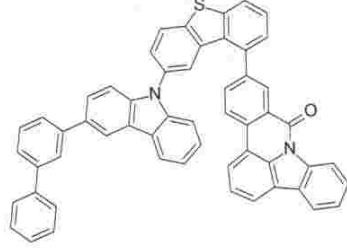
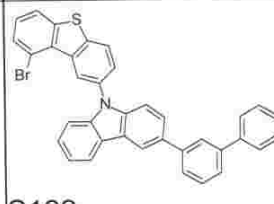
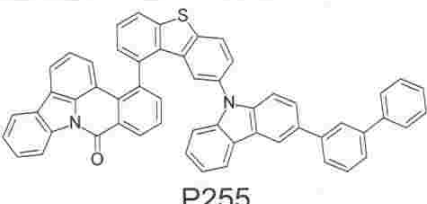
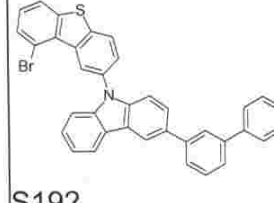
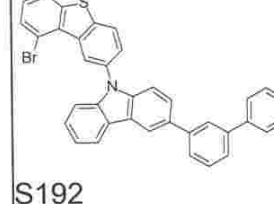
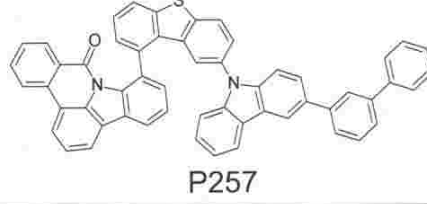
20

30

40

50

【化 4 2 - 1 3】

S128	 S192	 P253
S129	 S192	 P254
S130	 S192	 P255
S131	 S192	 P256
S132	 S192	 P257

【 0 2 6 5】

10

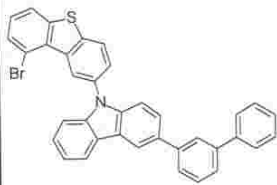
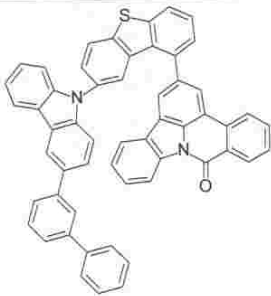
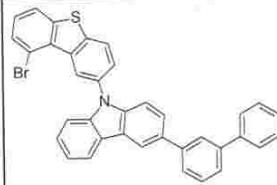
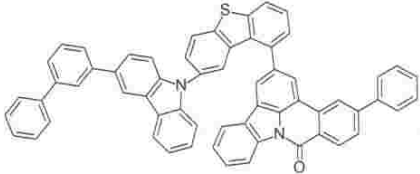
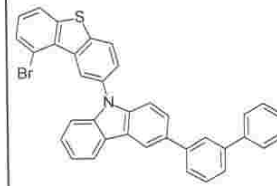
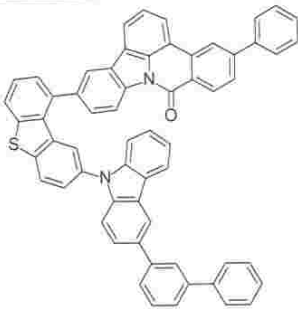
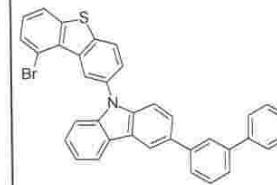
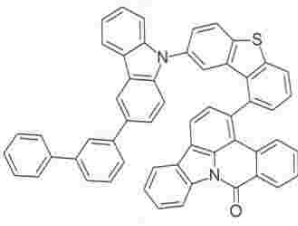
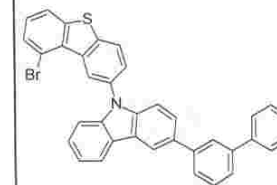
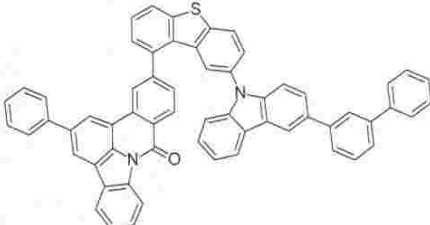
20

30

40

50

【化 4 2 - 1 4】

S133	 S192	 P258
S134	 S192	 P259
S135	 S192	 P260
S136	 S192	 P261
S137	 S192	 P262

【 0 2 6 6】

10

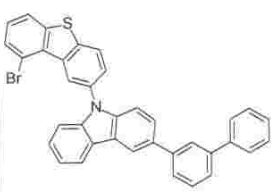
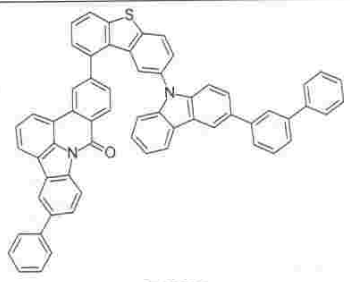
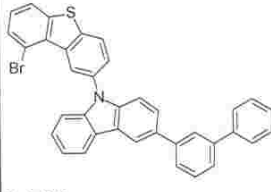
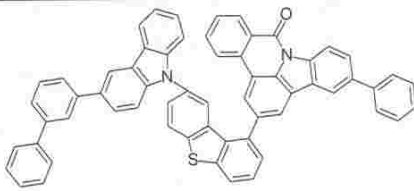
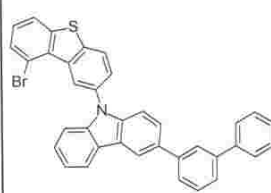
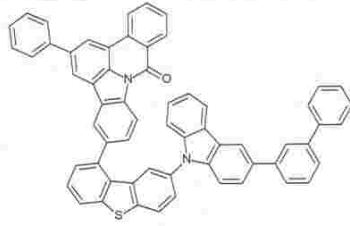
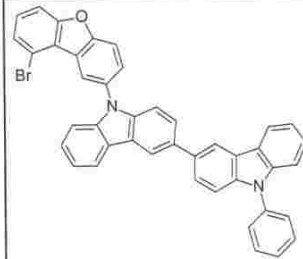
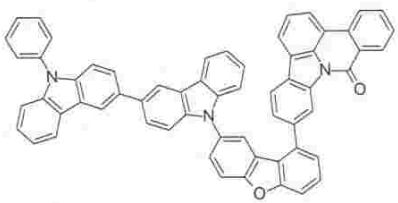
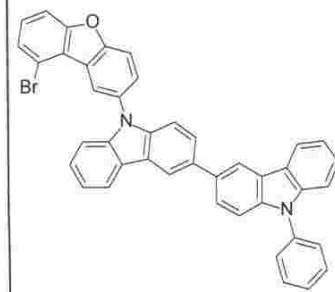
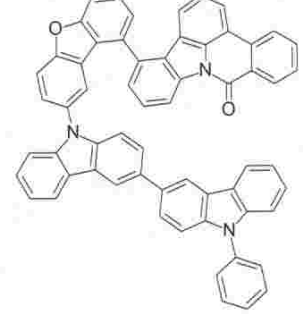
20

30

40

50

【化 4 2 - 1 5】

S138	 S192	 P263
S139	 S192	 P264
S140	 S192	 P265
S126	 S193	 P266
S127		 P267

【 0 2 6 7】

10

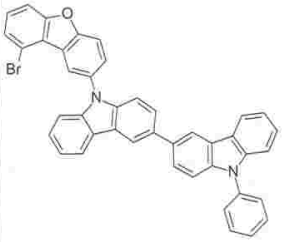
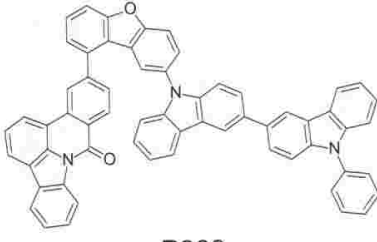
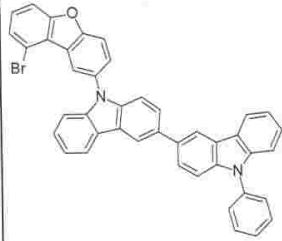
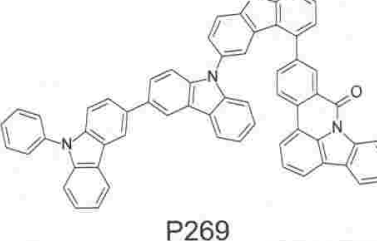
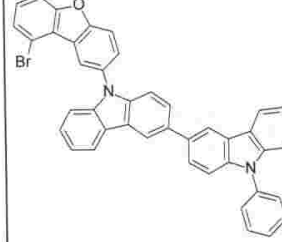
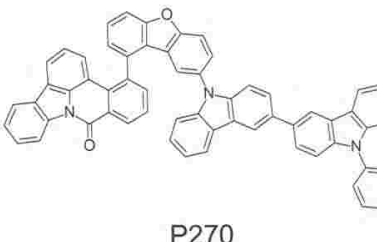
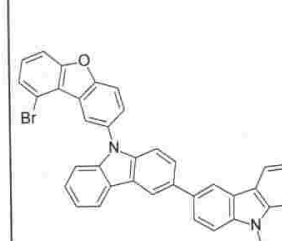
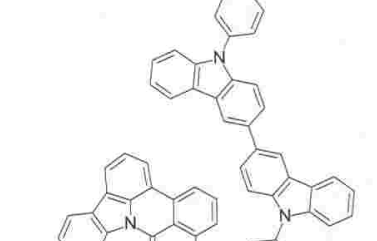
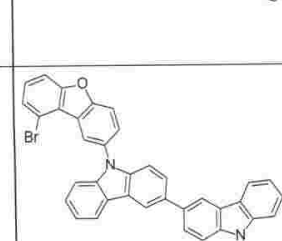
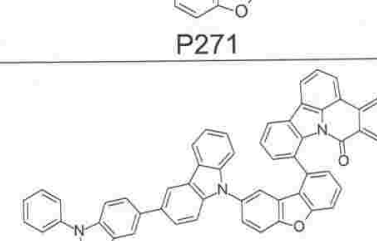
20

30

40

50

【化 4 2 - 1 6】

S128	 S193	 P268
S129	 S193	 P269
S130	 S193	 P270
S131	 S193	 P271
S132	 S193	 P272

【 0 2 6 8】

10

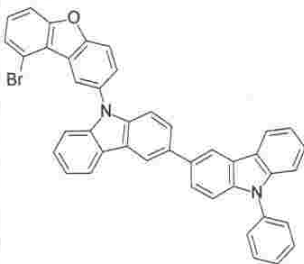
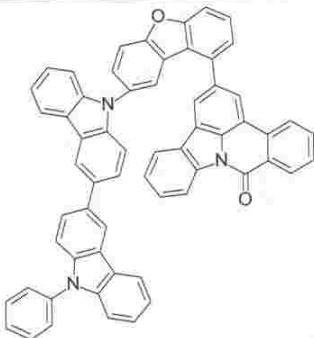
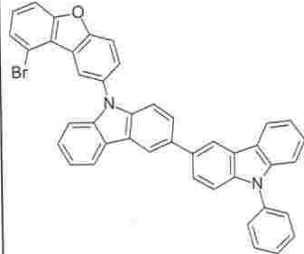
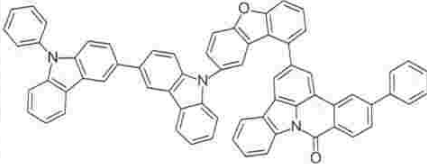
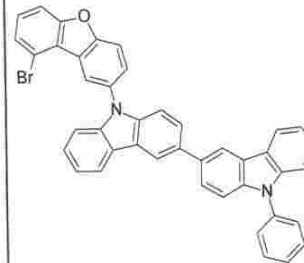
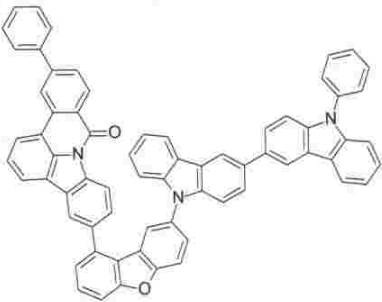
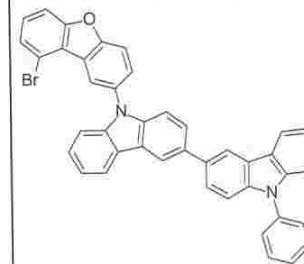
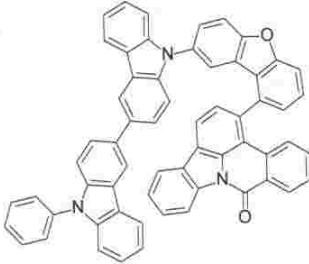
20

30

40

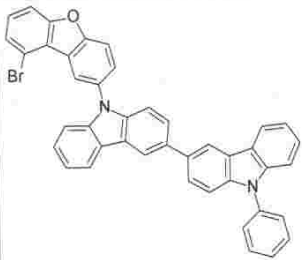
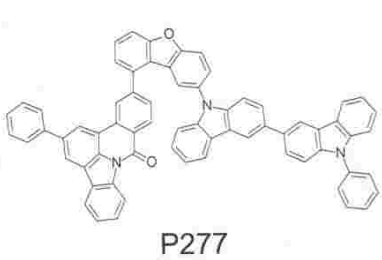
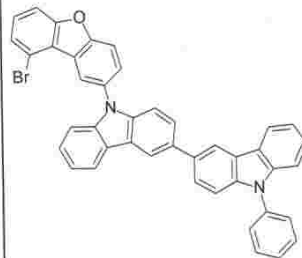
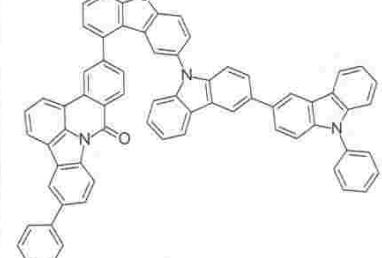
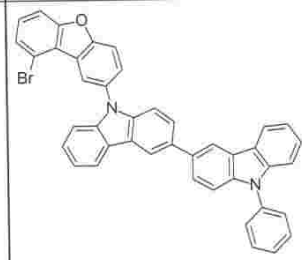
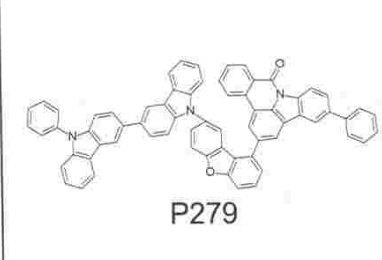
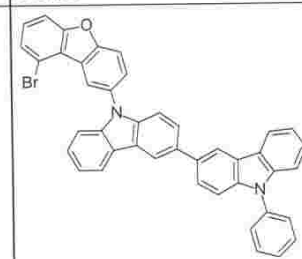
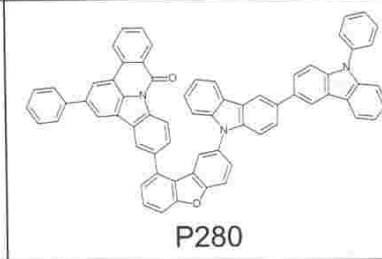
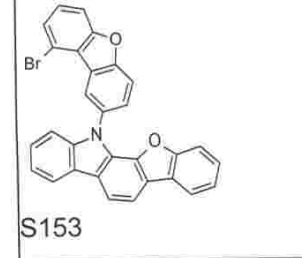
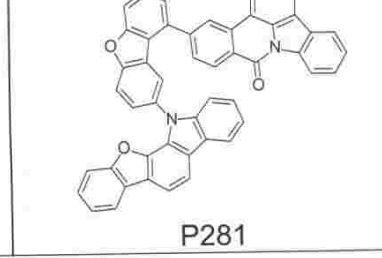
50

【化 4 2 - 1 7】

S133		 P273
S134		 P274
S135		 P275
S136		 P276

【 0 2 6 9】

【化 4 2 - 1 8】

S137	 S193	 P277
S138	 S193	 P278
S139	 S193	 P279
S140	 S193	 P280
S128	 S153	 P281

【 0 2 7 0】

10

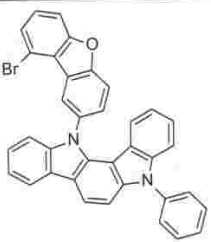
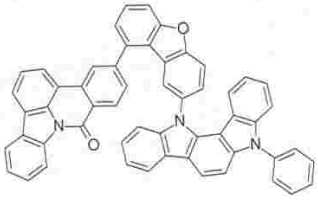
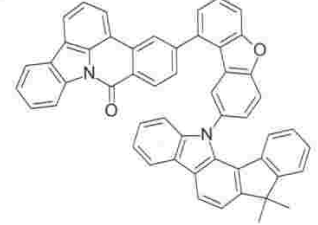
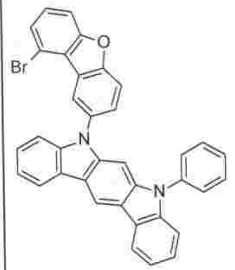
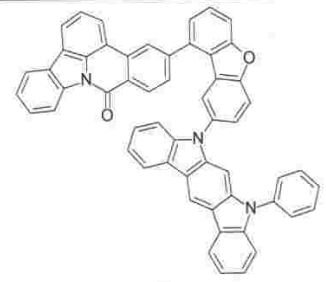
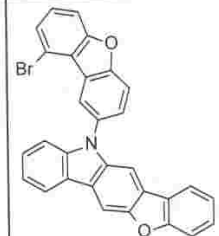
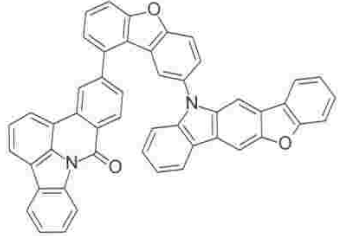
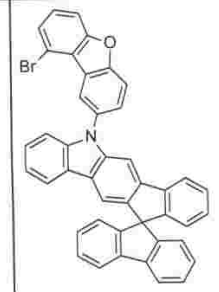
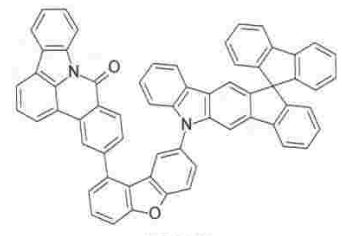
20

30

40

50

【化 4 2 - 1 9】

S128	 S155	 P282
S128	 S156	 P283
S128	 S160	 P284
S128	 S165	 P285
S128	 S168	 P286

【 0 2 7 1】

10

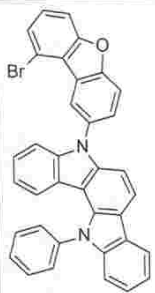
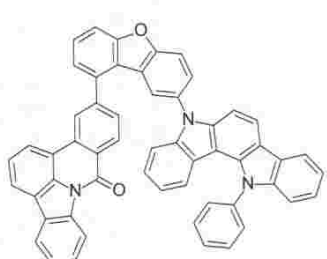
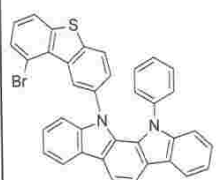
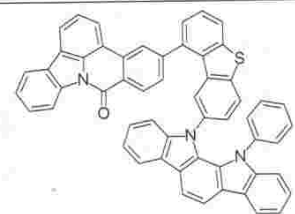
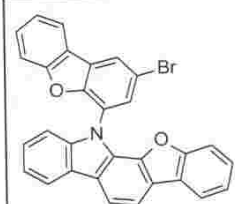
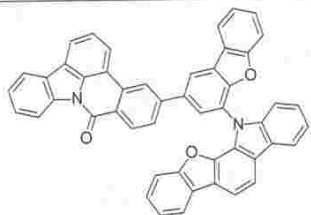
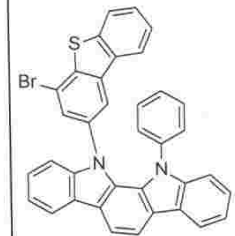
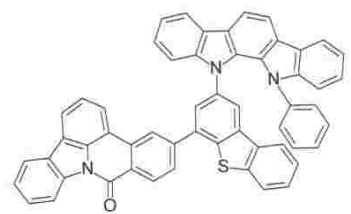
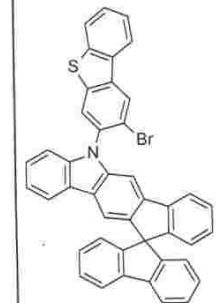
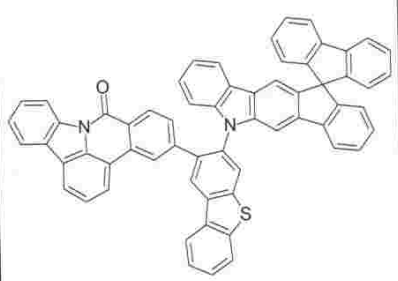
20

30

40

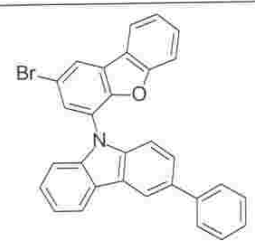
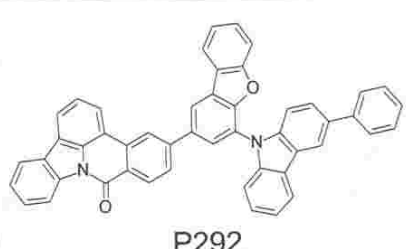
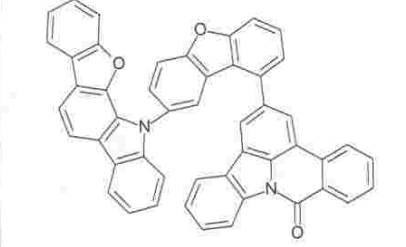
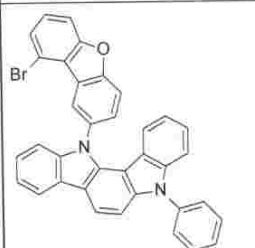
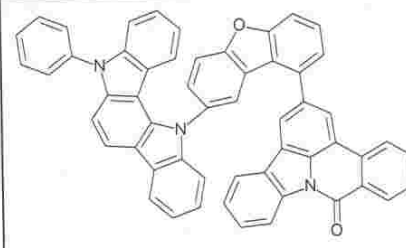
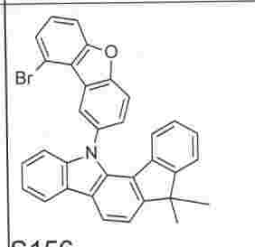
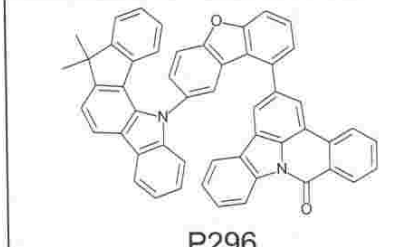
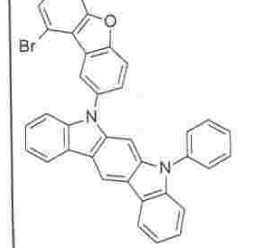
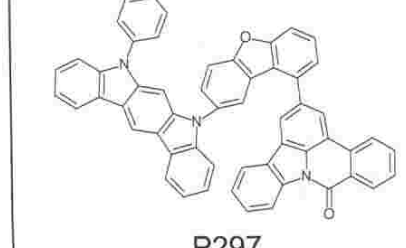
50

【化 4 2 - 2 0】

S128	 S174	 P287	10
S128	 S182	 P288	20
S128	 S185	 P289	30
S128	 S188	 P290	40
S128	 S190	 P291	

【 0 2 7 2】

【化 4 2 - 2 1】

S128	 S194	 P292
S133	 S153	 P293
S133	 S155	 P295
S133	 S156	 P296
S133	 S160	 P297

【 0 2 7 3 】

10

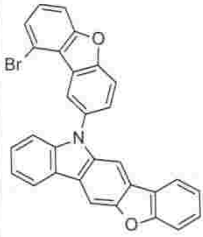
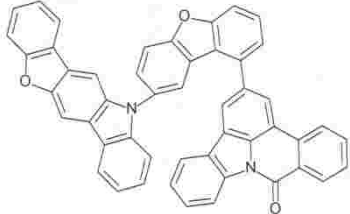
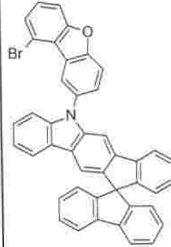
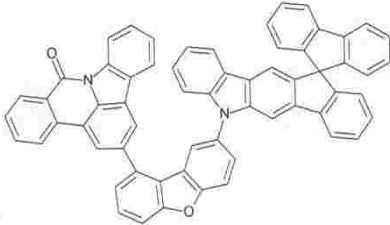
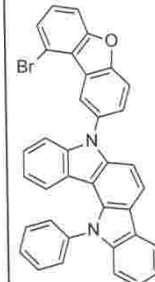
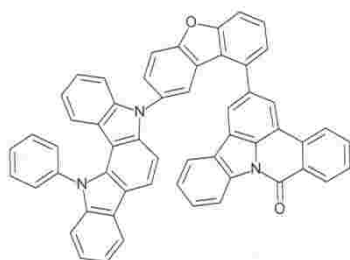
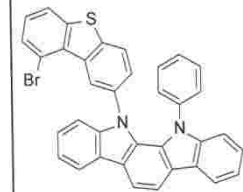
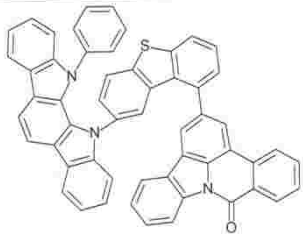
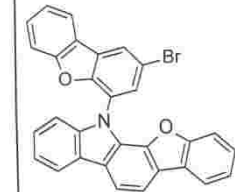
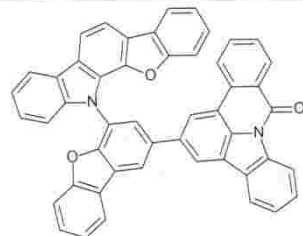
20

30

40

50

【化 4 2 - 2 2】

S133	 S165	 P298
S133	 S168	 P299
S133	 S174	 P300
S133	 S185	 P301
S133	 S185	 P302

【 0 2 7 4】

10

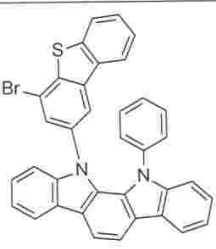
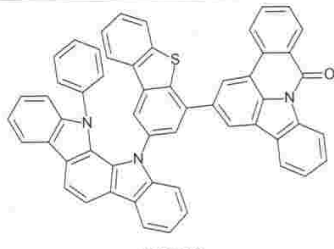
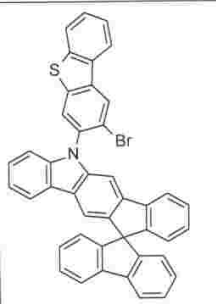
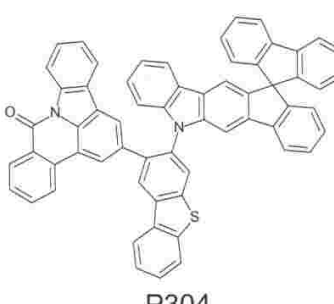
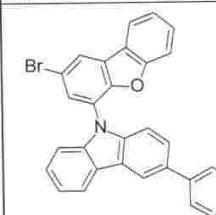
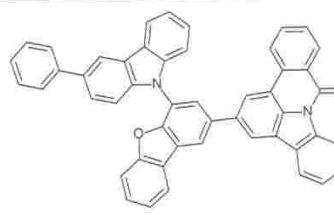
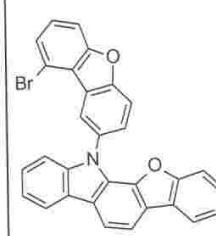
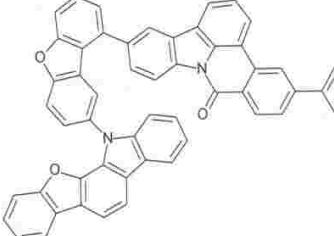
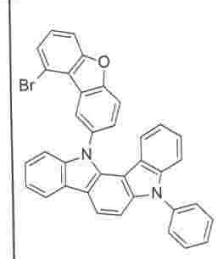
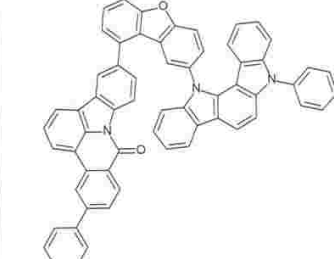
20

30

40

50

【化 4 2 - 2 3】

S133	 S188	 P303
S133	 S190	 P304
S133	 S194	 P305
S135	 S153	 P306
S135	 S155	 P307

【 0 2 7 5】

10

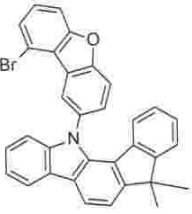
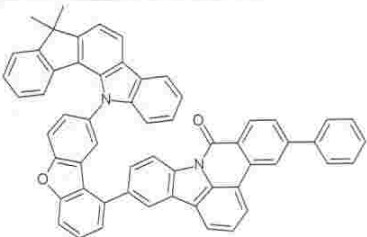
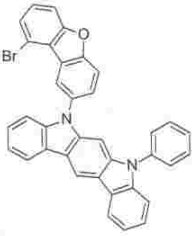
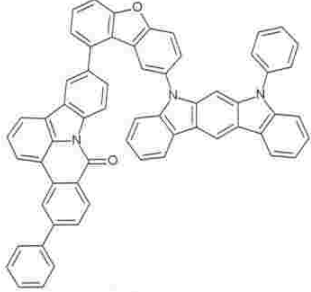
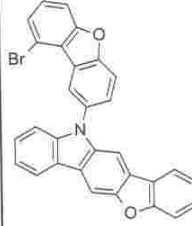
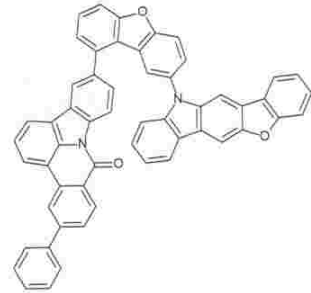
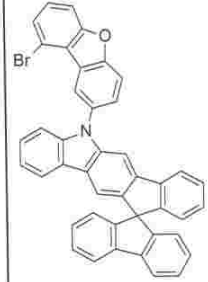
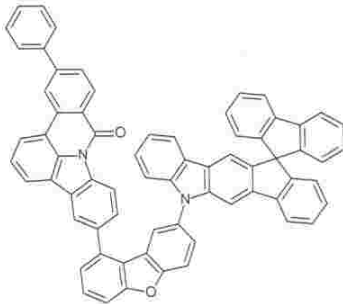
20

30

40

50

【化 4 2 - 2 4】

S135	 S156	 P308
S135	 S160	 P309
S135	 S165	 P310
S135	 S168	 P311

【 0 2 7 6 】

10

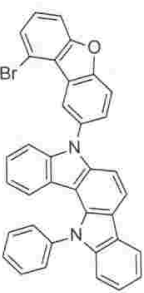
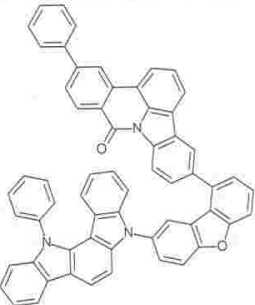
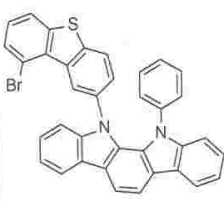
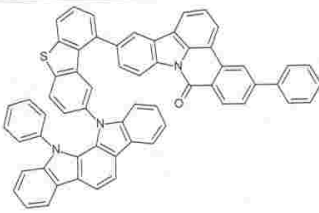
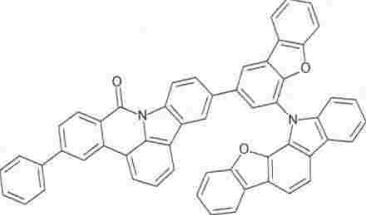
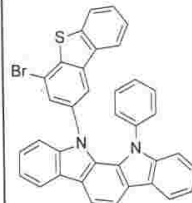
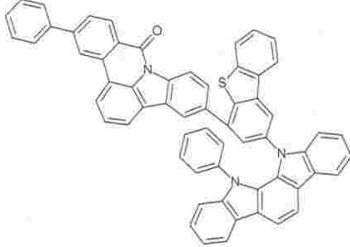
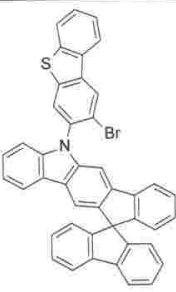
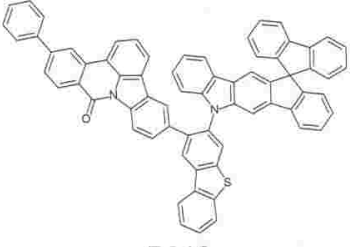
20

30

40

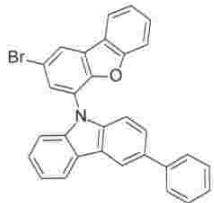
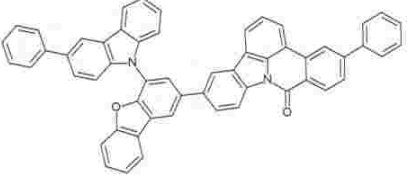
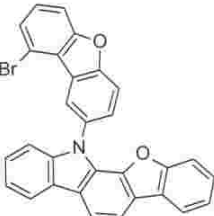
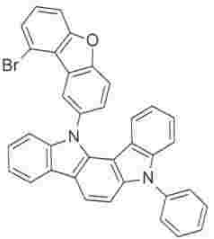
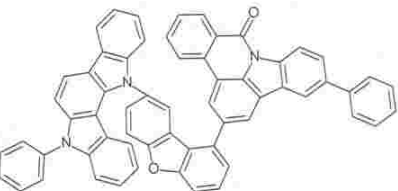
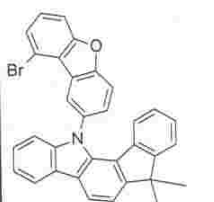
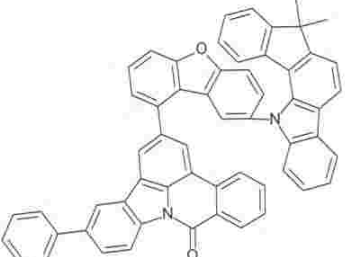
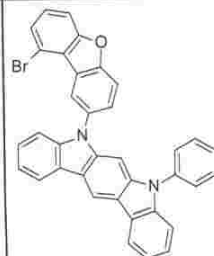
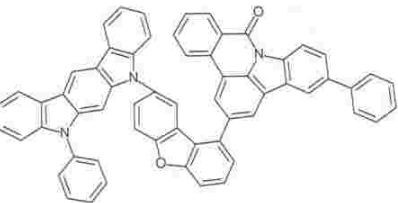
50

【化 4 2 - 2 5】

S135	 S174	 P312	10
S135	 S182	 P313	
S135	 S185	 P314	20
S135	 S188	 P315	30
S135	 S190	 P316	40

【 0 2 7 7 】

【化 4 2 - 2 6】

S135	 S194	 P317
S139	 S153	 P318
S139	 S155	 P319
S139	 S156	 P320
S139	 S160	 P321

【 0 2 7 8】

10

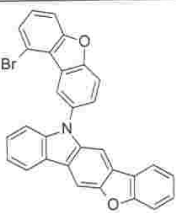
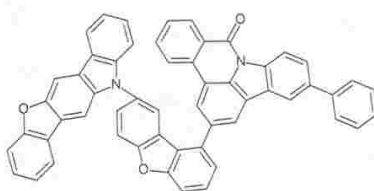
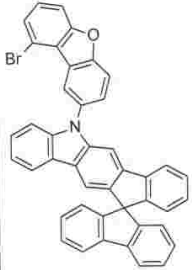
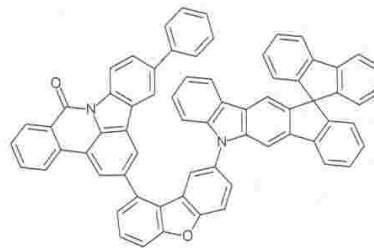
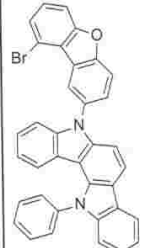
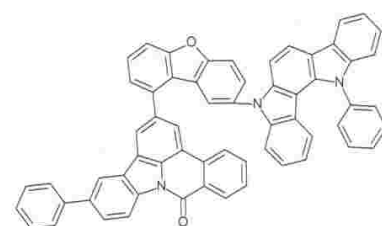
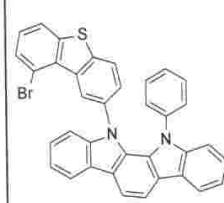
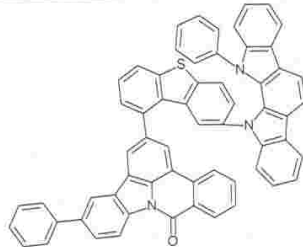
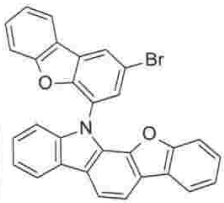
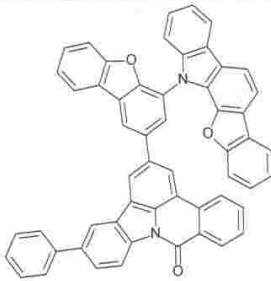
20

30

40

50

【化 4 2 - 2 7】

S139	 S165	 P322
S139	 S168	 P323
S139	 S174	 P324
S139	 S182	 P325
S139	 S185	 P326

【 0 2 7 9】

10

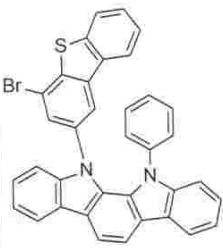
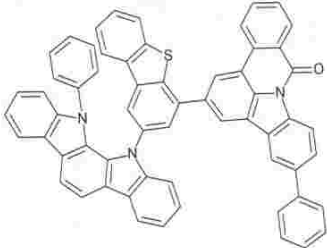
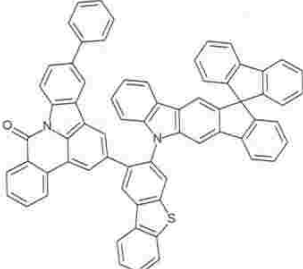
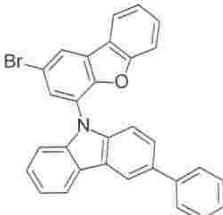
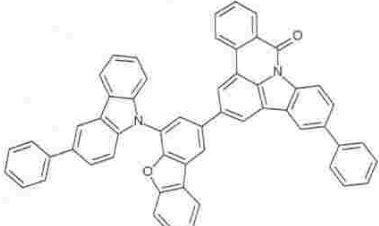
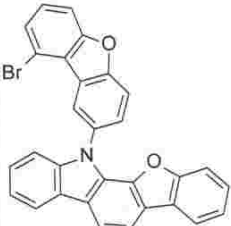
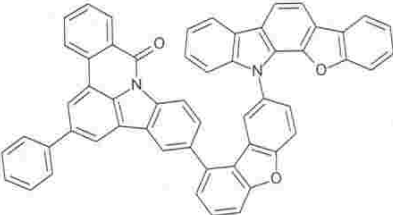
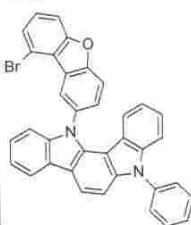
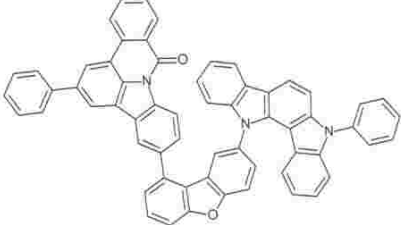
20

30

40

50

【化 4 2 - 2 8】

S139	 S188	 P327
S139	 S190	 P328
S139	 S194	 P329
S140	 S153	 P330
S140	 S155	 P331

【 0 2 8 0】

10

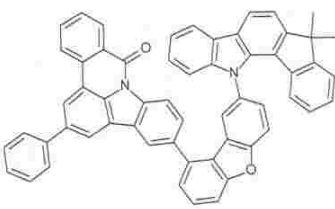
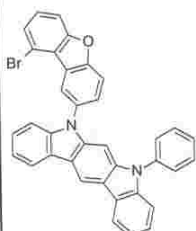
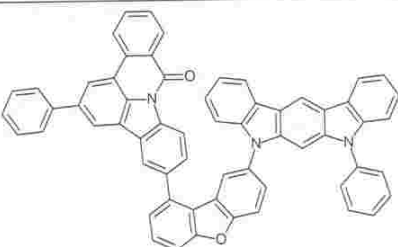
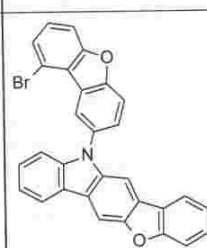
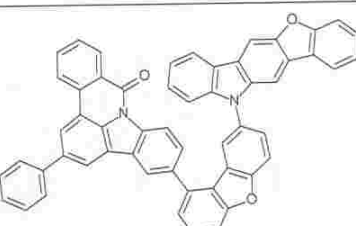
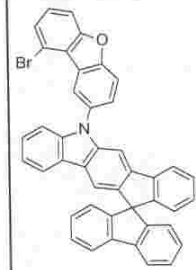
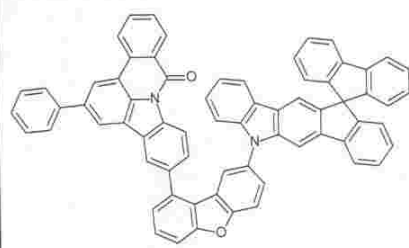
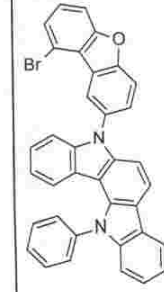
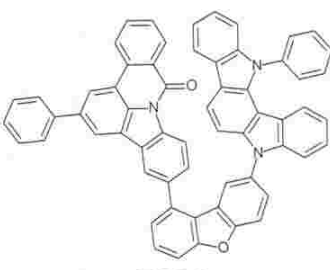
20

30

40

50

【化 4 2 - 2 9】

S140	 S156	 P332
S140	 S160	 P333
S140	 S165	 P334
S140	 S168	 P335
S140	 S174	 P336

【 0 2 8 1】

10

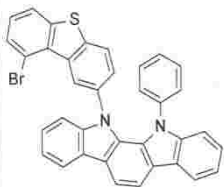
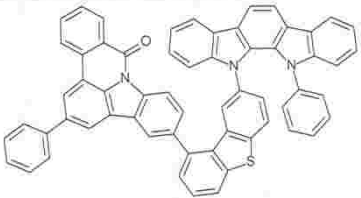
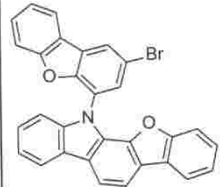
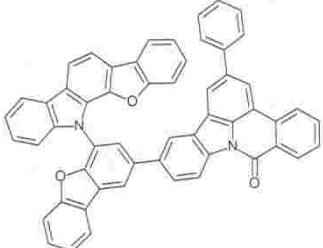
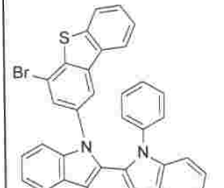
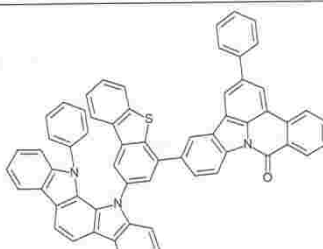
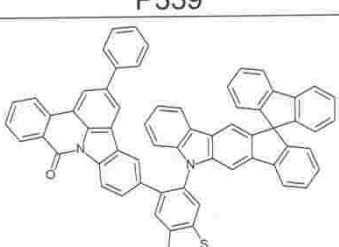
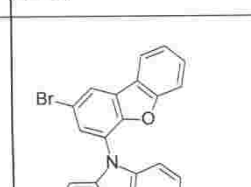
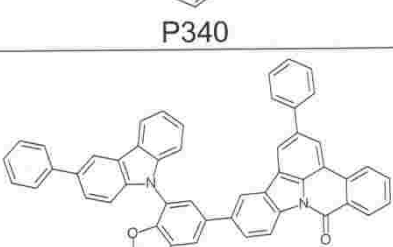
20

30

40

50

【化 4 2 - 3 0】

S140	 S182	 P337
S140	 S185	 P338
S140	 S188	 P339
S140	 S190	 P340
S140	 S194	 P341

【 0 2 8 2】

10

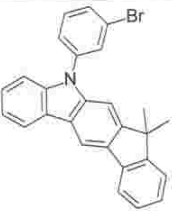
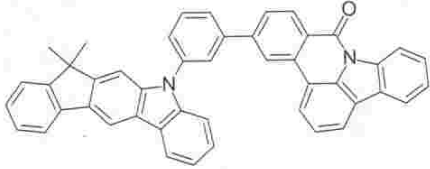
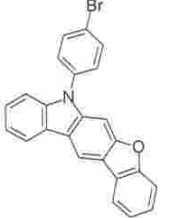
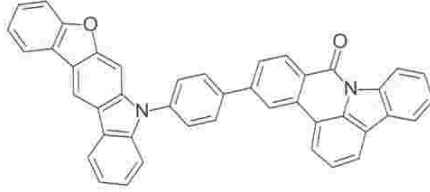
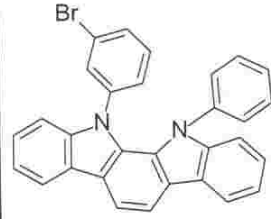
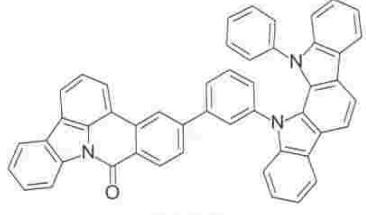
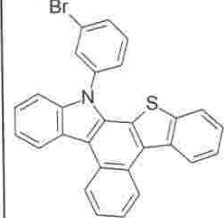
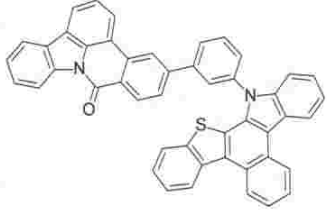
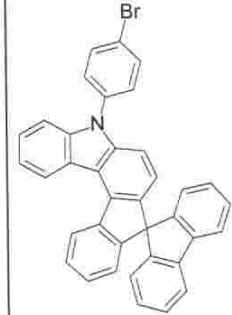
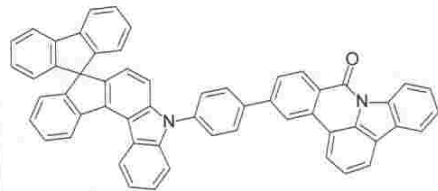
20

30

40

50

【化 4 2 - 3 1】

S128	 CAS-1369587-63-2	 P342
S128	 CAS-2079877-31-7	 P343
S128	 CAS-1260032-02-7	 P344
S128	 CAS-1644466-89-6	 P345
S128	 CAS-2095194-33-3	 P346

【 0 2 8 3 】

10

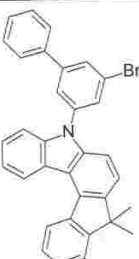
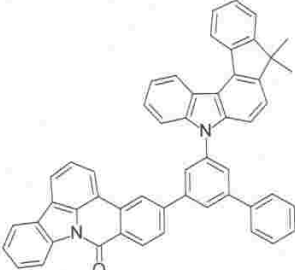
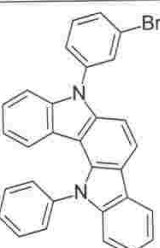
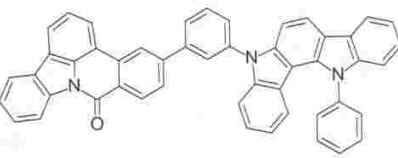
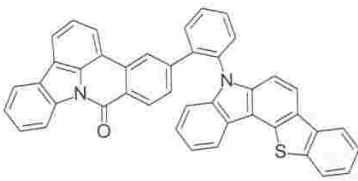
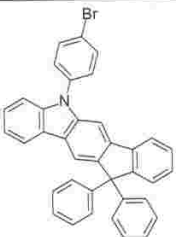
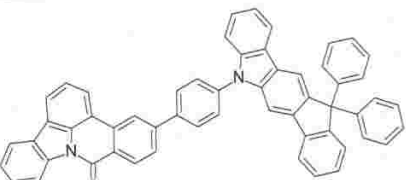
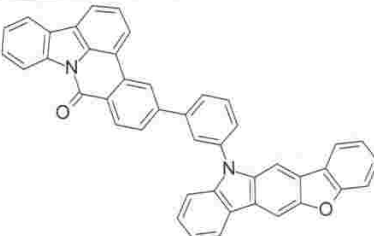
20

30

40

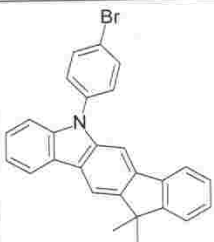
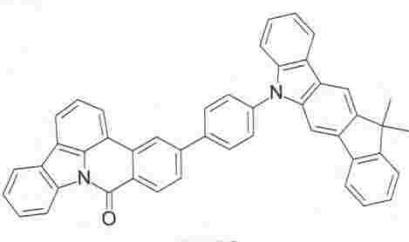
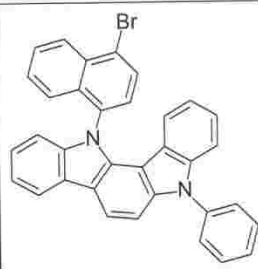
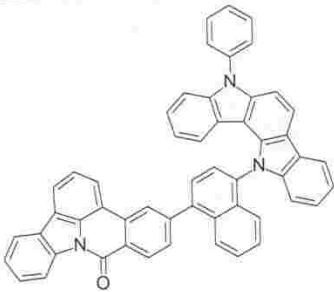
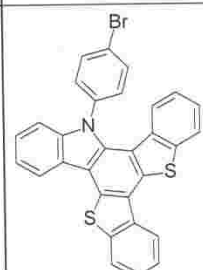
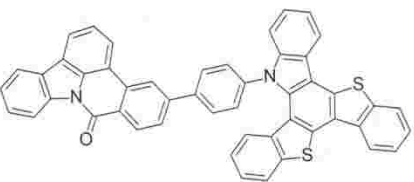
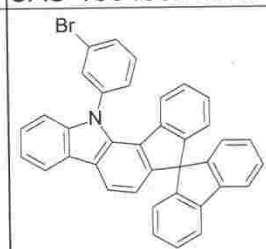
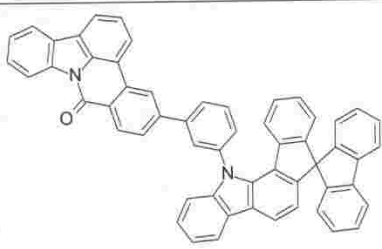
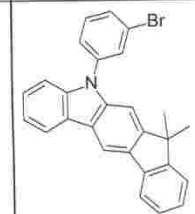
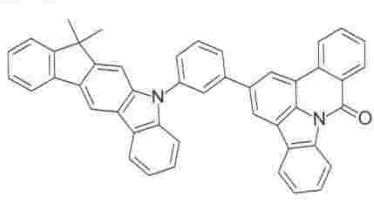
50

【化 4 2 - 3 2】

S128	 CAS-2134579-41-0	 P347	10
S128	 CAS-1782949-43-2	 P348	
S128	 CAS-1622084-14-3	 P349	20
S128	 CAS-2249834-37-3	 P350	30
S128	 CAS-2109712-47-0	 P351	40

【 0 2 8 4】

【化 4 2 - 3 3】

S128	 CAS-2249834-37-3	 P352
S128	 CAS-1632353-57-1	 P353
S128	 CAS-1534332-59-6	 P354
S128	 CAS-2101865-23-8	 P355
S133	 CAS-1369587-63-2	 P356

【 0 2 8 5】

10

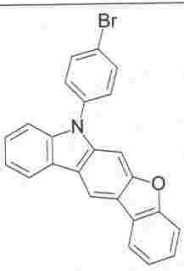
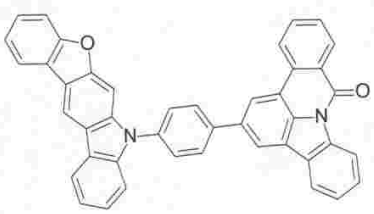
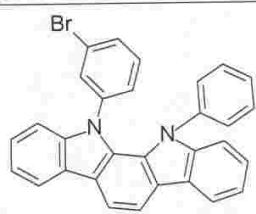
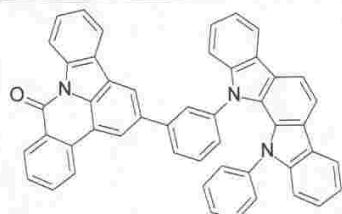
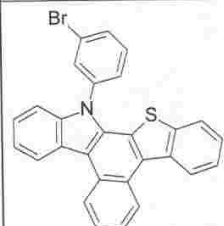
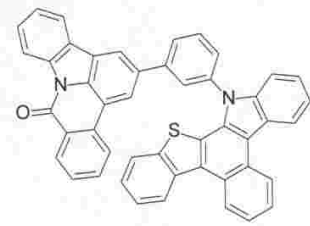
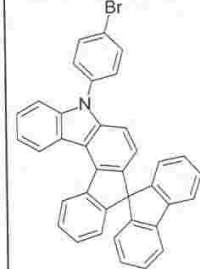
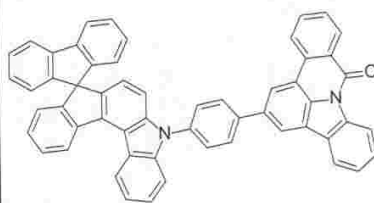
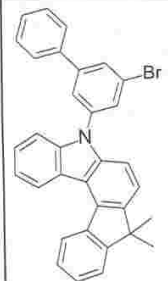
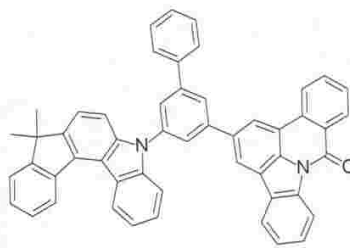
20

30

40

50

【化 4 2 - 3 4】

S133	 CAS-2079877-31-7	 P357
S133	 CAS-1260032-02-7	 P358
S133	 CAS-1644466-89-6	 P359
S133	 CAS-2095194-33-3	 P360
S133	 CAS-2134579-41-0	 P361

【 0 2 8 6】

10

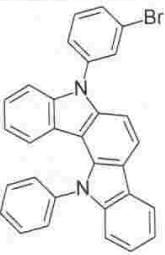
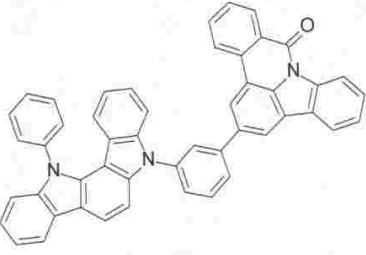
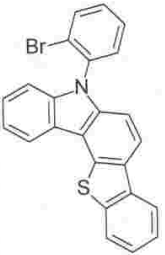
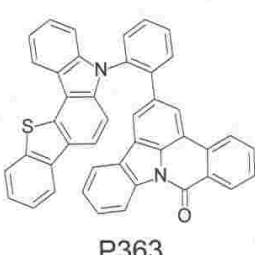
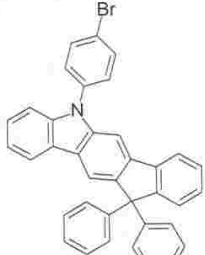
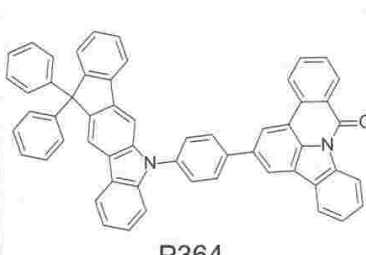
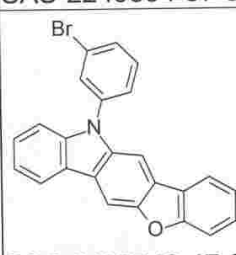
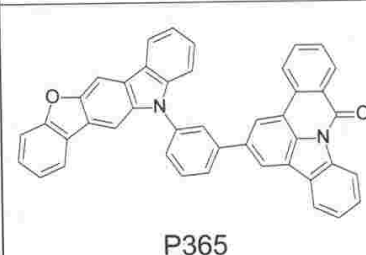
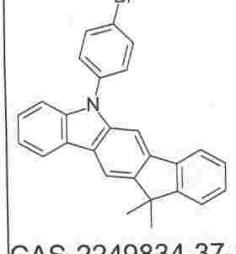
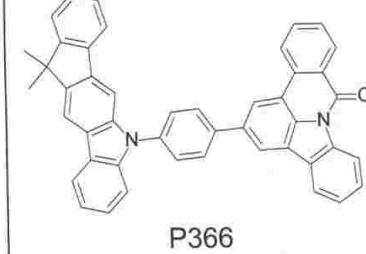
20

30

40

50

【化 4 2 - 3 5】

S133	 CAS-1782949-43-2	 P362
S133	 CAS-1622084-14-3	 P363
S133	 CAS-2249834-37-3	 P364
S133	 CAS-2109712-47-0	 P365
S133	 CAS-2249834-37-3	 P366

10

20

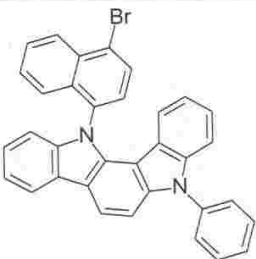
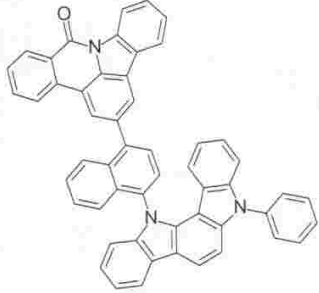
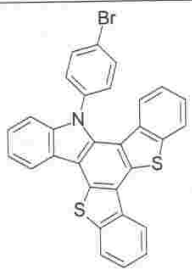
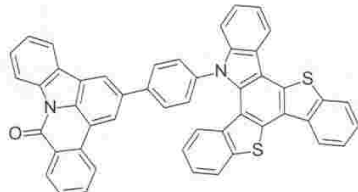
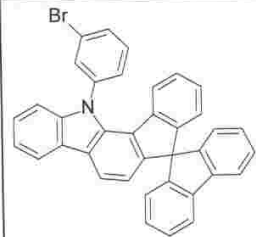
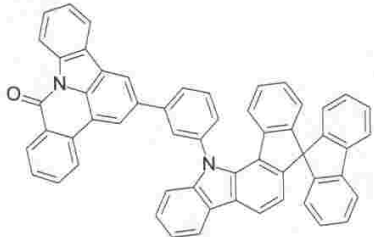
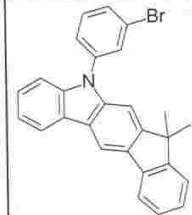
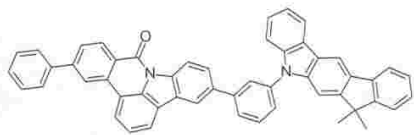
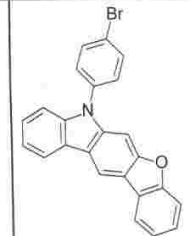
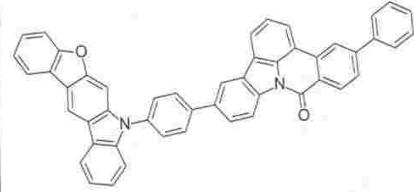
30

40

【 0 2 8 7 】

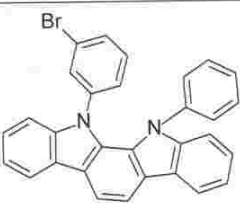
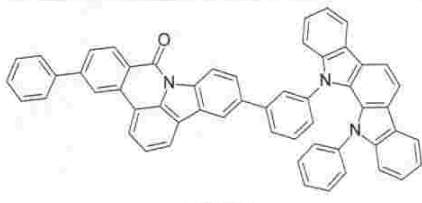
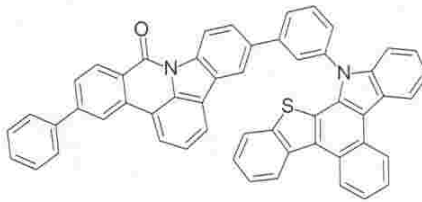
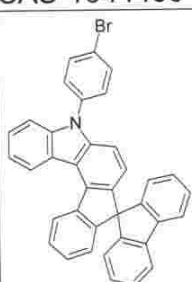
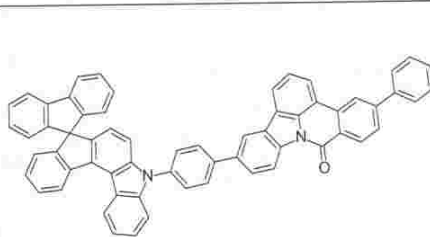
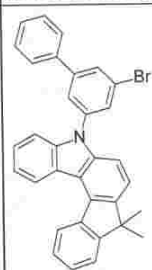
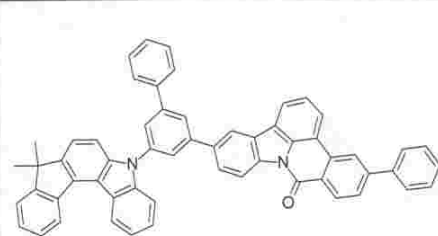
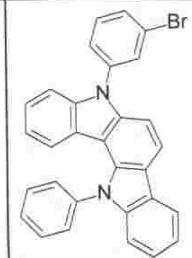
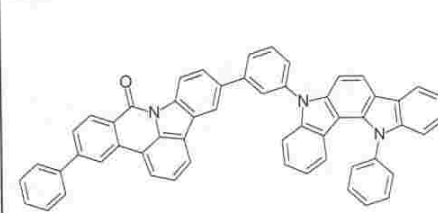
50

【化 4 2 - 3 6】

S133	 CAS-1632353-57-1	 P367	10
S133	 CAS-1534332-59-6	 P368	
S133	 CAS-2101865-23-8	 P369	20
S135	 CAS-1369587-63-2	 P370	30
S135	 CAS-2079877-31-7	 P371	40

【 0 2 8 8】

【化 4 2 - 3 7】

S135	 CAS-1260032-02-7	 P372
S135	 CAS-1644466-89-6	 P373
S135	 CAS-2095194-33-3	 P374
S135	 CAS-2134579-41-0	 P375
S135	 CAS-1782949-43-2	 P376

【 0 2 8 9 】

10

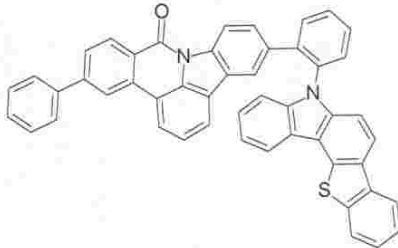
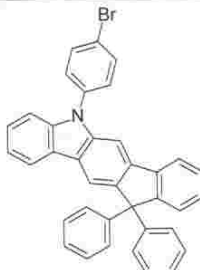
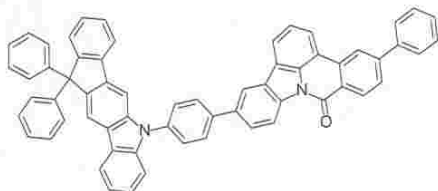
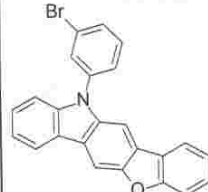
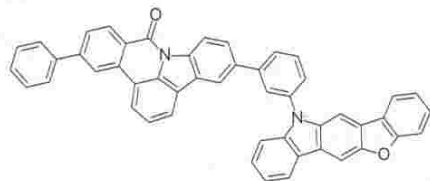
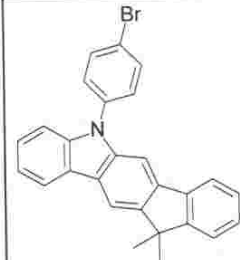
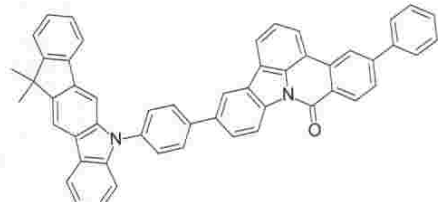
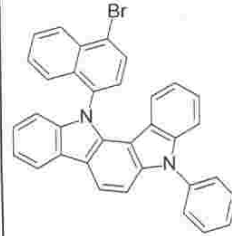
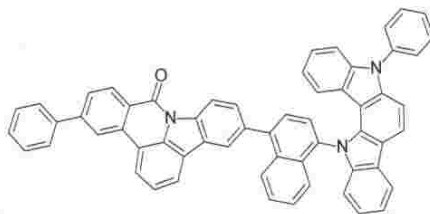
20

30

40

50

【化 4 2 - 3 8】

S135	 CAS-1622084-14-3	 P377
S135	 CAS-2249834-37-3	 P378
S135	 CAS-2109712-47-0	 P379
S135	 CAS-2249834-37-3	 P380
S135	 CAS-1632353-57-1	 P381

【 0 2 9 0】

10

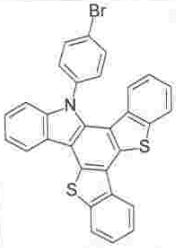
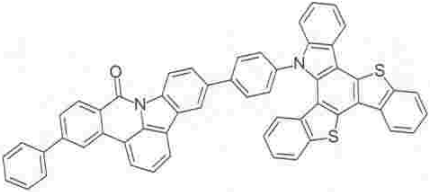
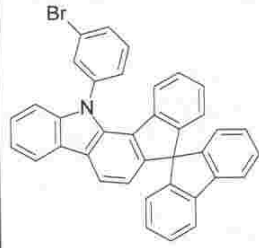
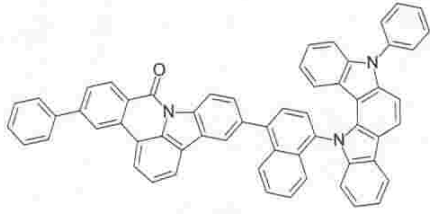
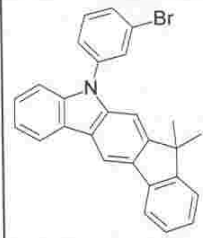
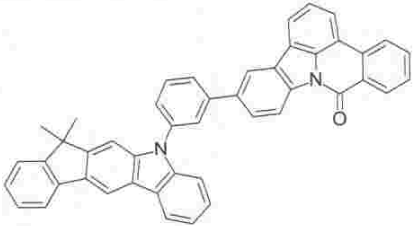
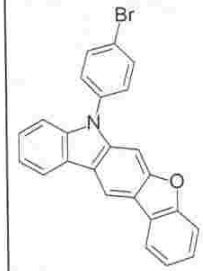
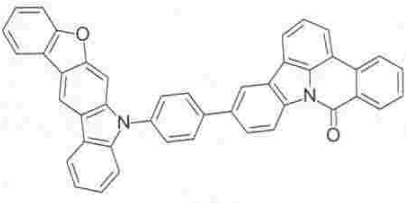
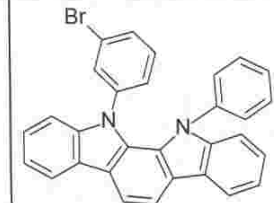
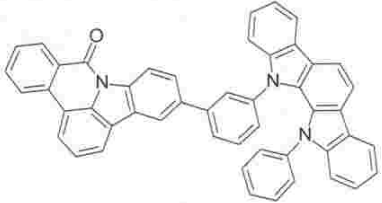
20

30

40

50

【化 4 2 - 3 9】

S135	 CAS-1534332-59-6	 P382
S135	 CAS-2101865-23-8	 P383
S125	 CAS-1369587-63-2	 P384
S125	 CAS-2079877-31-7	 P385
S125	 CAS-1260032-02-7	 P386

【 0 2 9 1】

10

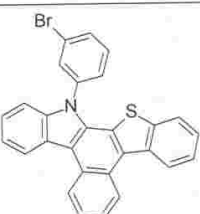
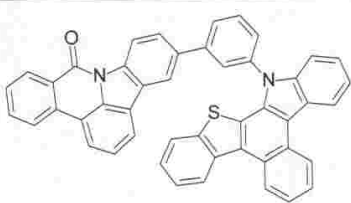
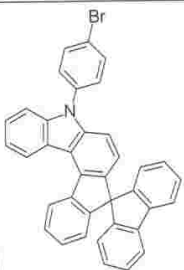
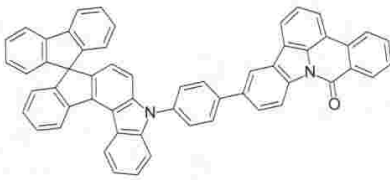
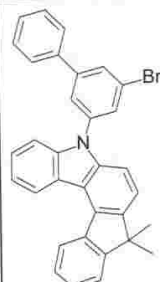
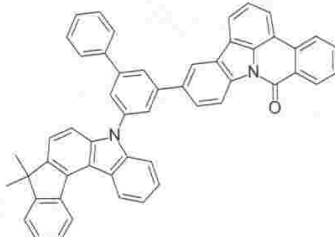
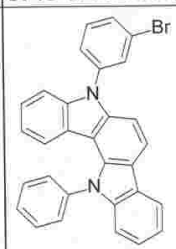
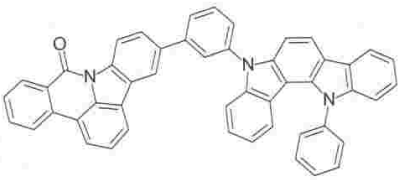
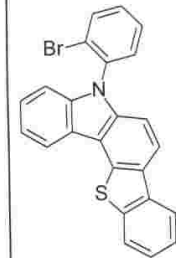
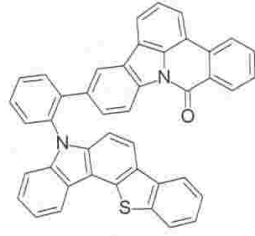
20

30

40

50

【化 4 2 - 4 0】

S125	 CAS-1644466-89-6	 P387
S125	 CAS-2095194-33-3	 P388
S125	 CAS-2134579-41-0	 P389
S125	 CAS-1782949-43-2	 P390
S125	 CAS-1622084-14-3	 P391

10

20

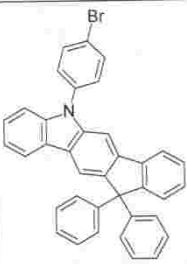
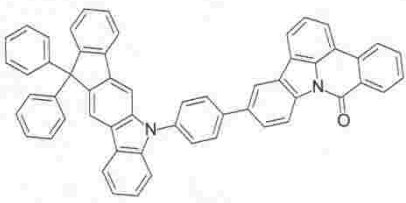
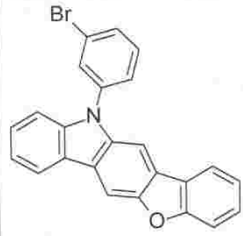
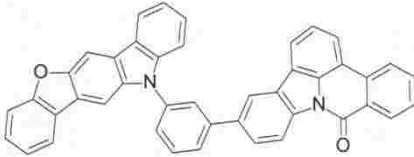
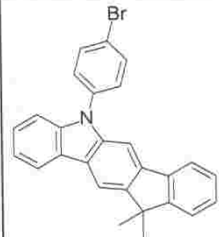
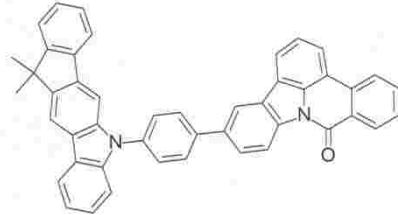
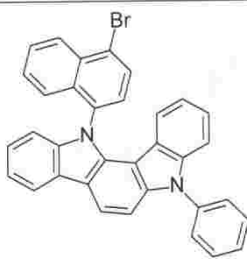
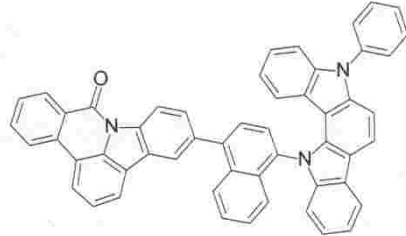
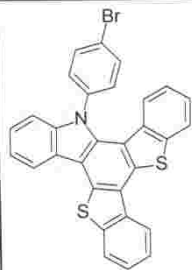
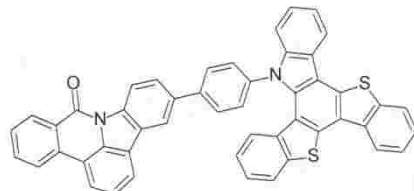
30

40

【 0 2 9 2】

50

【化 4 2 - 4 1】

S125	 CAS-2249834-37-3	 P392
S125	 CAS-2109712-47-0	 P393
S125	 CAS-2249834-37-3	 P394
S125	 CAS-1632353-57-1	 P395
S125	 CAS-1534332-59-6	 P396

10

20

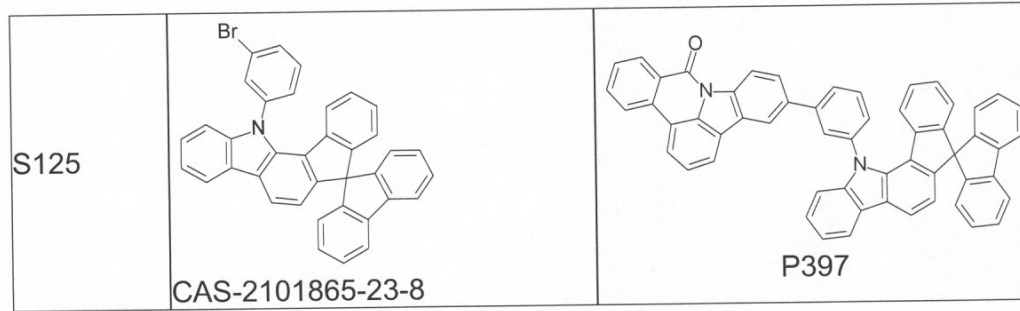
30

40

【 0 2 9 3 】

50

【化 4 2 - 4 2】



10

【 0 2 9 4】

O L E D の生成

次の例 C 1 ~ I 1 8 (表 1 参照) は、O L E D における本発明の材料の使用を表す。
例 C 1 ~ I 1 8 の前処理：厚さ 5 0 n m の構造化された I T O (インジウムスズ酸化物) をコーティングしたガラスプラークを、コーティングより前に、最初に酸素プラズマ、続いてアルゴンプラズマで処理する。これらのプラズマ処理ガラスプラークは、O L E D が適用される基板を形成する。

【 0 2 9 5】

O L E D は基本的に、下記の層構造を有する：基板／正孔注入層 (H I L)／正孔輸送層 (H T L)／電子阻止層 (E B L)／発光層 (E M L)／任意選択の正孔阻止層 (H B L)／電子輸送層 (E T L)／任意選択の電子注入層 (E I L) および最終的にカソード。カソードは、厚さ 1 0 0 n m のアルミニウム層により形成される。O L E D の正確な構造は、表 1 に見出すことができる。O L E D の生成に必要なとされる材料を表 3 に示す。O L E D のデバイスデータを表 2 に列挙する。例 C 1 ~ C 4 は、先行技術による比較例であり；例 I 1 ~ I 1 8 は、本発明の O L E D のデータを示す。

20

【 0 2 9 6】

全ての材料は、真空チャンバーにおいて熱蒸着により付与される。この場合、発光層は常に、少なくとも 1 種のマトリックス材料 (ホスト材料) と、共蒸着により特定の体積割合でマトリックス材料 (複数可) に添加される発光ドーパント (発光体) からなる。ここで、S o A 1 : C o H 1 : T E G 1 (4 5 % : 4 5 % : 1 0 %) のような形態で与えられる詳細は、材料 S o A 1 が 4 5 % の体積割合で、C o H 1 が 4 5 % の体積割合で、T E G 1 が 1 0 % の体積割合で層中に存在することを意味する。同様に、電子輸送層も、2 種の材料の混合物からなってもよい。

30

【 0 2 9 7】

O L E D は、標準的な方法により特徴付けされる。このために、エレクトロルミネッセンススペクトル、およびランバート放射特性を仮定する電流-電圧-輝度特性から計算される輝度の関数としての電流効率 (S E、c d / A 単位で測定)、および寿命を測定する。エレクトロルミネッセンススペクトルを 1 0 m A / c m ² の電流密度で判定し、それから C I E 1 9 3 1 x および y 色座標を計算する。寿命 L T は、定電流密度 j ₀ での動作中に、輝度が、開始輝度から特定の割合 L 1 に低下するまでの時間と定義される。表 2 中の L 1 = 8 0 % の数字は、L T カラムで報告されていた寿命が、輝度がその開始値の 8 0 % に落ちた後の時間に対応することを意味する。

40

O L E D における本発明の材料の使用

本発明の材料は、リン光性の緑色 O L E D の発光層に使用することができる。C o H 1 または C o H 2 の有無にかかわらず本発明の化合物 P 1、P 9、P 1 3、P 2 8、P 3 5、P 6 7、P 8 8、P 2 0 5、P 2 1 3、P 2 1 8、P 2 2 9、P 2 4 7、P 2 5 1、P 3 3 2、P 3 9 3 は、発光層のマトリックス材料として例 I 1 ~ I 1 8 に使用する。本発明の O L E D の利点を例示するために、例を以下に詳細に説明する。

リン光性の O L E D の発光層における本発明の材料の使用

発光層 (例 I 1 ~ I 4) のマトリックス材料としての本発明の化合物 P 1 および P 9 の

50

使用は、先行技術の化合物（例 C 1 ～ C 4 ）と比較して寿命の明確な改善を達成させることができる。P 1、P 9、P 13、P 28、P 35、P 67、P 88、P 205、P 213、P 218、P 229、P 247、P 251、P 332、P 393とC o H 1またはC o H 2とT E G 1またはT E G 2を組み合わせることにより、さらに明確に寿命を延ばすことがさらに可能である。

【 0 2 9 8 】

【表 1】

表 1: OLED の構造

例	HIL 厚さ	HTL 厚さ	EBL 厚さ	EML 厚さ	HBL 厚さ	ETL 厚さ	EIL 厚さ
C1	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	SoA1:TEG1 (88%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
C2	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	SoA2:TEG1 (88%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I1	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	P1:TEG1 (88%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I2	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	P9:TEG1 (88%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
C3	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	SoA1:CoH1:TEG1 (59%:29%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
C4	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	SoA2:CoH1:TEG1 (59%:29%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I3	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	P1:CoH1:TEG1 (59%:29%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I4	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	P9:CoH1:TEG1 (59%:29%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I5	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	P1:CoH2:TEG2 (44%:44%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I6	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	P13:CoH1:TEG1 (59%:29%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I7	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	P28:CoH2:TEG2 (44%:44%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I8	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	P35:CoH2:TEG2 (44%:44%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I9	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	P67:CoH1:TEG1 (59%:29%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I10	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	P88:CoH1:TEG1 (59%:29%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I11	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	P205:CoH2:TEG2 (44%:44%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I12	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	P213:CoH1:TEG1 (59%:29%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I13	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	P218:CoH2:TEG2 (44%:44%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I14	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	P229:CoH1:TEG1 (59%:29%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I15	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	P247:CoH2:TEG2 (44%:44%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I16	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	P251:CoH1:TEG1 (59%:29%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I17	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	P332:CoH2:TEG2 (44%:44%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm
I18	HATCN 5nm	SpMA1 230nm	SpMA2 20nm	P393:CoH1:TEG1 (59%:29%:12%) 30nm	ST2 10nm	ST2:LiQ (50%:50%) 30nm	LiQ 1nm

【 0 2 9 9 】

【表 2】

表 2: OLED のデバイスデータ

例	10 mA/cm2 における CIE x/y	j0 (mA/cm ²)	L1 (%)	LT (h)
C1	0.34/0.62	40	80	100
C2	0.34/0.62	40	80	105
I1	0.34/0.62	40	80	260
I2	0.36/0.61	40	80	130
C3	0.34/0.62	40	80	180
C4	0.35/0.62	40	80	140
I3	0.34/0.62	40	80	400
I4	0.35/0.62	40	80	240
I5	0.35/0.63	40	80	520
I6	0.35/0.62	40	80	220
I7	0.35/0.63	40	80	480
I8	0.35/0.63	40	80	500
I9	0.35/0.62	40	80	210
I10	0.35/0.62	40	80	220
I11	0.35/0.63	40	80	420
I12	0.35/0.62	40	80	205
I13	0.35/0.63	40	80	450
I13	0.35/0.62	40	80	210
I15	0.35/0.63	40	80	495
I16	0.35/0.62	40	80	230
I17	0.35/0.63	40	80	490
I18	0.35/0.62	40	80	210

【 0 3 0 0 】

10

20

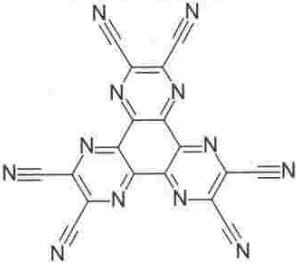
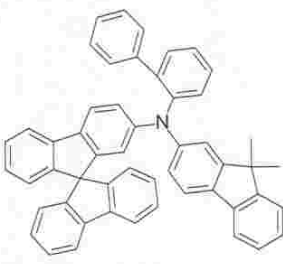
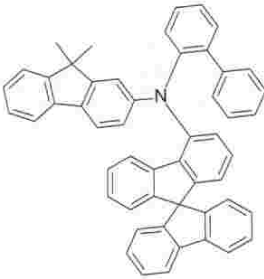
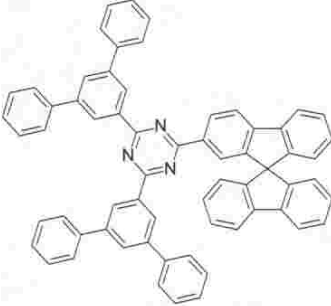
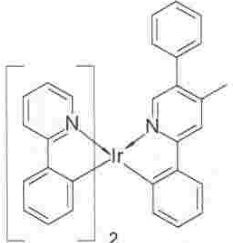
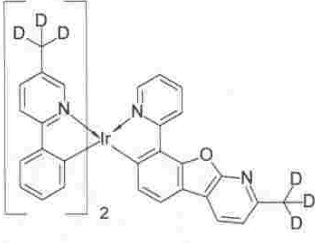
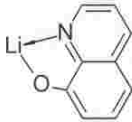
30

40

50

【表 3 - 1】

表 3: OLED のための材料の構造式

	
HATCN	SpMA1
	
SpMA2	ST2
	
TEG1	TEG2
	
LiQ	

【 0 3 0 1 】

10

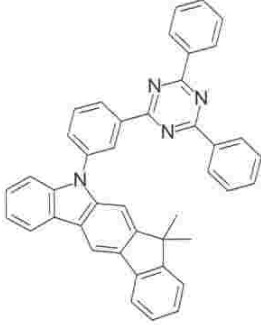
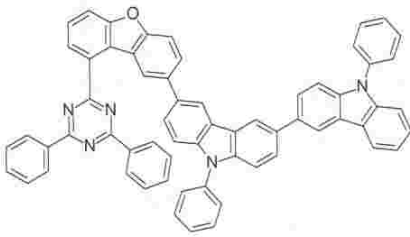
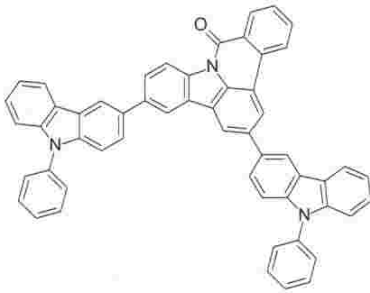
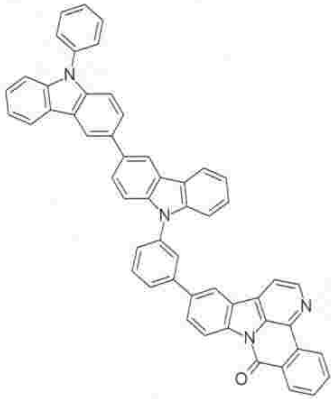
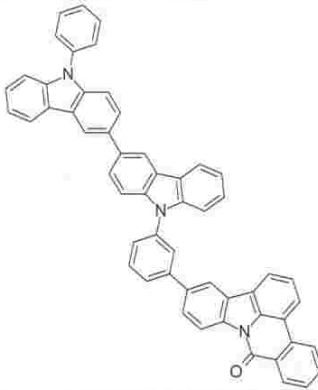
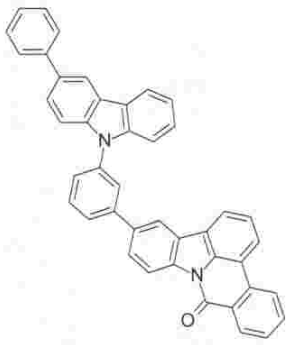
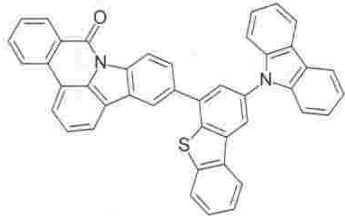
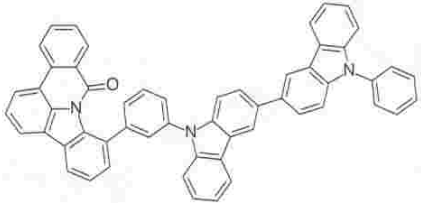
20

30

40

50

【表 3 - 2】

	
CoH1	CoH2
	
SoA1	SoA2
	
P1	P9
	
P13	P28

【 0 3 0 2】

10

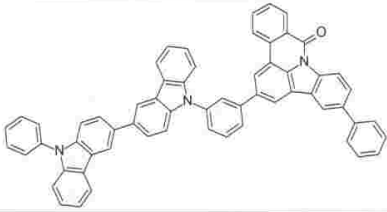
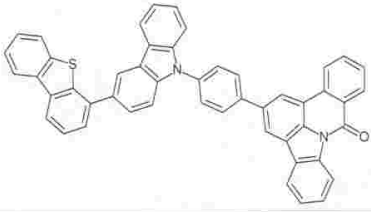
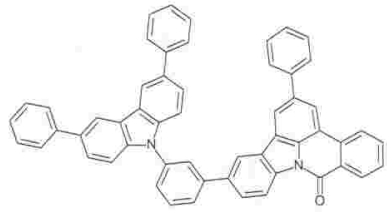
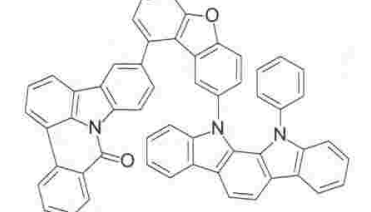
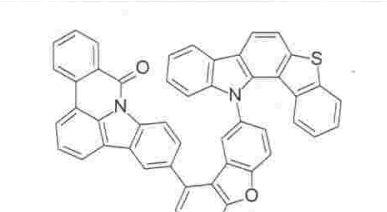
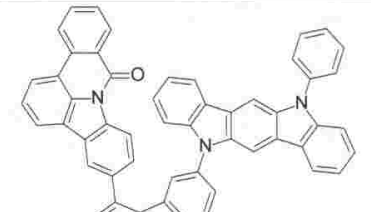
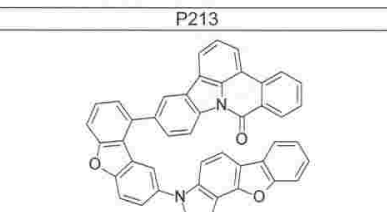
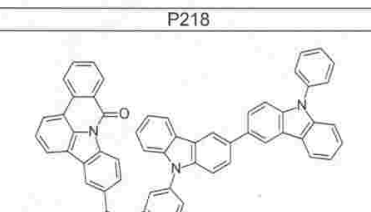
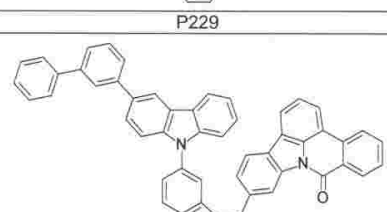
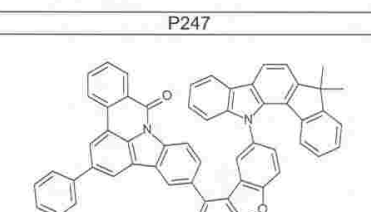
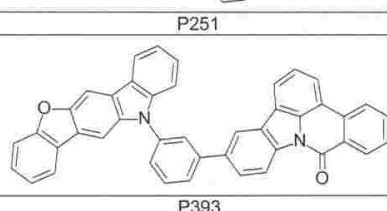
20

30

40

50

【表 3 - 3】

	
P35	P67
	
P88	P205
	
P213	P218
	
P229	P247
	
P251	P332
	
P393	

10

20

30

40

50

フロントページの続き

- (74)代理人 100219542
弁理士 大宅 郁治
- (74)代理人 100153051
弁理士 河野 直樹
- (74)代理人 100162570
弁理士 金子 早苗
- (72)発明者 パルハム、アミア
ドイツ連邦共和国、6 0 4 8 6 フランクフルト・アム・マイン、ロエミッシャー・リング 2 6
- (72)発明者 クロエベル、ヨナス
ドイツ連邦共和国、6 0 3 1 1 フランクフルト・アム・マイン、ファールガッセ 4
- (72)発明者 エーレンライヒ、クリスティアン
ドイツ連邦共和国、6 4 2 8 5 ダルムシュタット、アイヒベルクシュトラッセ 2 2
- (72)発明者 エンゲルハルト、イエンス
ドイツ連邦共和国、6 4 2 8 5 ダルムシュタット、ハイデルベルガー・シュトラッセ 1 4 8
- (72)発明者 アイクホフ、クリスティアン
ドイツ連邦共和国、6 8 2 5 9 マンハイム、プファイルクラウトベーク 1 2
- (72)発明者 プファルツグラフ、イエンス
ドイツ連邦共和国、6 4 8 5 3 オツベルク、クレーテンガッセ 3 1
- 審査官 岩田 行剛
- (56)参考文献 国際公開第2 0 1 8 / 1 8 9 1 3 4 (WO, A 1)
特表2 0 1 6 - 5 0 7 8 9 0 (JP, A)
特表2 0 1 7 - 5 2 3 2 7 0 (JP, A)
特表2 0 1 3 - 5 3 1 6 1 7 (JP, A)
- (58)調査した分野 (Int.Cl., DB名)
C 0 7 D 4 7 1 / 0 6
C 0 9 K 1 1 /
H 1 0 K 5 0 /