

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公表特許公報(A)

(11) 特許出願公表番号

**特表2007-518705****(P2007-518705A)**

(43) 公表日 平成19年7月12日(2007.7.12)

|                                      |                  |                |       |             |
|--------------------------------------|------------------|----------------|-------|-------------|
| (51) Int. Cl.                        |                  | F I            |       | テーマコード (参考) |
| <b>C O 7 D 249/20</b>                | <b>(2006.01)</b> | C O 7 D 249/20 | C S P | 2 H O 6 8   |
| <b>C O 7 D 403/14</b>                | <b>(2006.01)</b> | C O 7 D 403/14 |       | 3 K 1 0 7   |
| <b>C O 9 K 11/06</b>                 | <b>(2006.01)</b> | C O 9 K 11/06  | 6 4 0 | 4 C O 6 3   |
| <b>H O 1 L 51/50</b>                 | <b>(2006.01)</b> | C O 9 K 11/06  | 6 4 5 |             |
| <b>G O 3 G 5/06</b>                  | <b>(2006.01)</b> | C O 9 K 11/06  | 6 5 5 |             |
| 審査請求 未請求 予備審査請求 未請求 (全 102 頁) 最終頁に続く |                  |                |       |             |

|               |                              |          |                                       |
|---------------|------------------------------|----------|---------------------------------------|
| (21) 出願番号     | 特願2006-541940 (P2006-541940) | (71) 出願人 | 396023948                             |
| (86) (22) 出願日 | 平成16年11月26日 (2004.11.26)     |          | チバ スペシャルティ ケミカルズ ホールディング インコーポレーテッド   |
| (85) 翻訳文提出日   | 平成18年8月7日 (2006.8.7)         |          | Ciba Specialty Chemicals Holding Inc. |
| (86) 国際出願番号   | PCT/EP2004/053111            |          | スイス国, 4057 バーゼル, クリベツクシュトラーセ 141      |
| (87) 国際公開番号   | W02005/054212                | (74) 代理人 | 100078662                             |
| (87) 国際公開日    | 平成17年6月16日 (2005.6.16)       |          | 弁理士 津国 肇                              |
| (31) 優先権主張番号  | 03104562.8                   | (74) 代理人 | 100075225                             |
| (32) 優先日      | 平成15年12月5日 (2003.12.5)       |          | 弁理士 篠田 文雄                             |
| (33) 優先権主張国   | 欧州特許庁 (EP)                   |          |                                       |
| (31) 優先権主張番号  | 04104279.7                   |          |                                       |
| (32) 優先日      | 平成16年9月6日 (2004.9.6)         |          |                                       |
| (33) 優先権主張国   | 欧州特許庁 (EP)                   |          |                                       |

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 エレクトロルミネセントデバイス

## (57) 【要約】

所定の 2 H - ベンゾトリアゾール化合物を含有する有機層を含むエレクトロルミネセントデバイスが開示されている。2 H - ベンゾトリアゾール化合物は、耐久性を有する青色発光有機 - エレクトロルミネセント層の適切な成分である。エレクトロルミネセントデバイスは、例えば携帯電話、テレビ及びパーソナルコンピュータの画面内のフルカラーディスプレイパネル用に使用してよい。

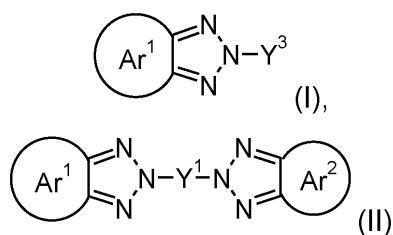


## 【特許請求の範囲】

## 【請求項 1】

式：

## 【化 1】



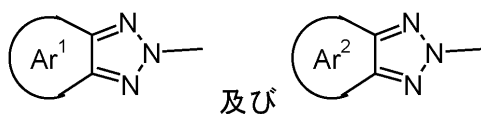
10

(式中、

 $Y^1$  は、二価結合基であり、

$Y^3$  は、場合により置換されることが出来る  $C_1 \sim C_{25}$  アルキル、とりわけ  $C_1 \sim C_4$  アルキル、アリール又はヘテロアリール、とりわけ場合により置換されることが出来る  $C_6 \sim C_{30}$  アリール、又は  $C_2 \sim C_{26}$  ヘテロアリールであり、

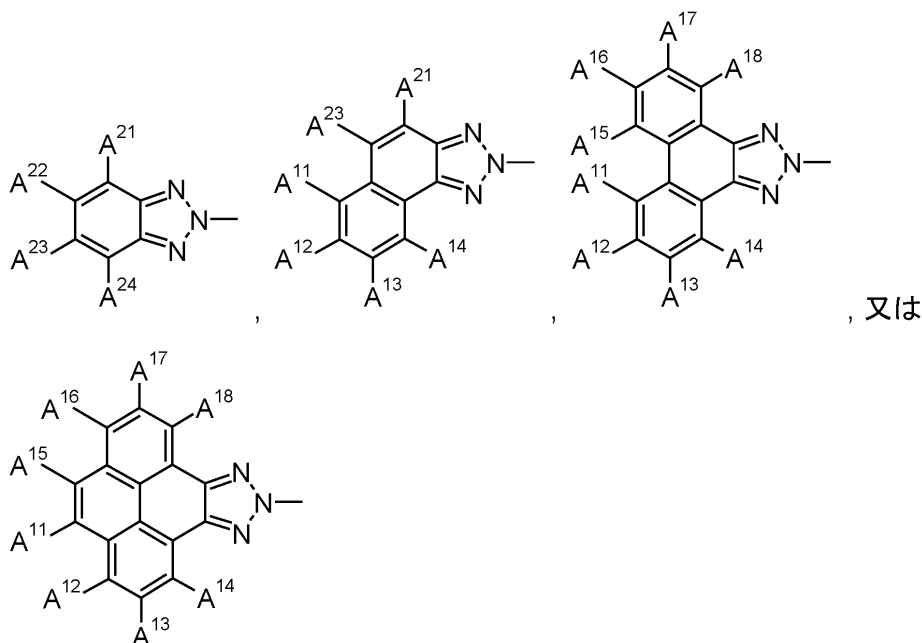
## 【化 2】



20

は、互いに独立して、式：

## 【化 3】



30

40

の基であり、

式中、

$A^{21}$ 、 $A^{22}$ 、 $A^{23}$ 、 $A^{24}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$ 、 $A^{15}$ 、 $A^{16}$ 、 $A^{17}$  及び  $A^{18}$  は、互いに独立して、H、ハロゲン、とりわけフッ素、ヒドロキシ、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、Eで置換され、及び/又はDで中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_1 \sim C_{24}$  ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$  ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、 $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、Gで置換され、及び/又はS-、-O-、又は-NR<sup>25</sup>-で中断されて

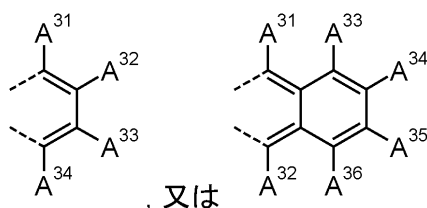
50



いる  $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキルチオ、 $-PR^{32}R^{32}$ 、 $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルコキシ、G で置換されている  $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルコキシ、 $C_6 \sim C_{24}$  アリール、G で置換されている  $C_6 \sim C_{24}$  アリール、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、 $C_7 \sim C_{25}$  アラルキル、 $C_1 \sim C_{24}$  ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$  ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、又は  $C_1 \sim C_{24}$  ハロアルキル； $C_2 \sim C_{20}$  ヘテロアリール、G、フッ素、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、 $C_7 \sim C_{25}$  アラルキル、 $C_1 \sim C_{24}$  ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$  ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、又は  $C_1 \sim C_{24}$  ハロアルキルで置換されている  $C_2 \sim C_{20}$  ヘテロアリール； $C_2 \sim C_{24}$  アルケニル、 $C_2 \sim C_{24}$  アルキニル、 $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、E で置換され、及び / 又は D で中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、 $C_7 \sim C_{25}$  アラルキル、G で置換されている  $C_7 \sim C_{25}$  アラルコキシ、G で置換されている  $C_7 \sim C_{25}$  アラルコキシ、又は  $-CO-R^{28}$  であるか、或いは

$A^{22}$  及び  $A^{23}$  又は  $A^{11}$  及び  $A^{23}$  は基：

【化 4】

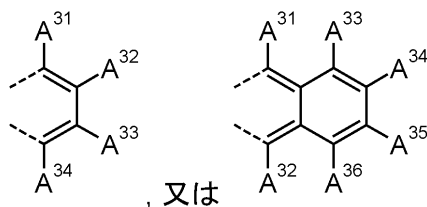


20

であるか、或いは

互いに隣接する 2 個の基  $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$ 、 $A^{15}$ 、 $A^{16}$ 、 $A^{17}$  及び  $A^{18}$  は、基：

【化 5】



30

であり、

ここで、

$A^{31}$ 、 $A^{32}$ 、 $A^{33}$ 、 $A^{34}$ 、 $A^{35}$  及び  $A^{36}$  は互いに独立して、H、ハロゲン、ヒドロキシ、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、E で置換され、及び / 又は D で中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_1 \sim C_{24}$  ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$  ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、 $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、G で置換され、及び / 又は S -、-O -、又は  $-NR^{25}$  - で中断されている  $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、 $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルコキシ、G で置換されている  $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルコキシ、 $C_6 \sim C_{24}$  アリール、G で置換されている  $C_6 \sim C_{24}$  アリール、 $C_2 \sim C_{20}$  ヘテロアリール、G で置換されている  $C_2 \sim C_{20}$  ヘテロアリール、 $C_2 \sim C_{24}$  アルケニル、 $C_2 \sim C_{24}$  アルキニル、 $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、E で置換され、及び / 又は D で中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、 $C_7 \sim C_{25}$  アラルキル、G で置換されている  $C_7 \sim C_{25}$  アラルコキシ、G で置換されている  $C_7 \sim C_{25}$  アラルコキシ、又は  $-CO-R^{28}$  であり、

40

ここで、好ましくは置換基  $A^{21}$ 、 $A^{22}$ 、 $A^{23}$ 、 $A^{24}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$ 、 $A^{15}$ 、 $A^{16}$ 、 $A^{17}$  及び  $A^{18}$  のうちの少なくとも 1 個が、フッ素、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、 $C_7 \sim C_{25}$  アラルキル、 $C_1 \sim C_{24}$  ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$  ペルフルオ

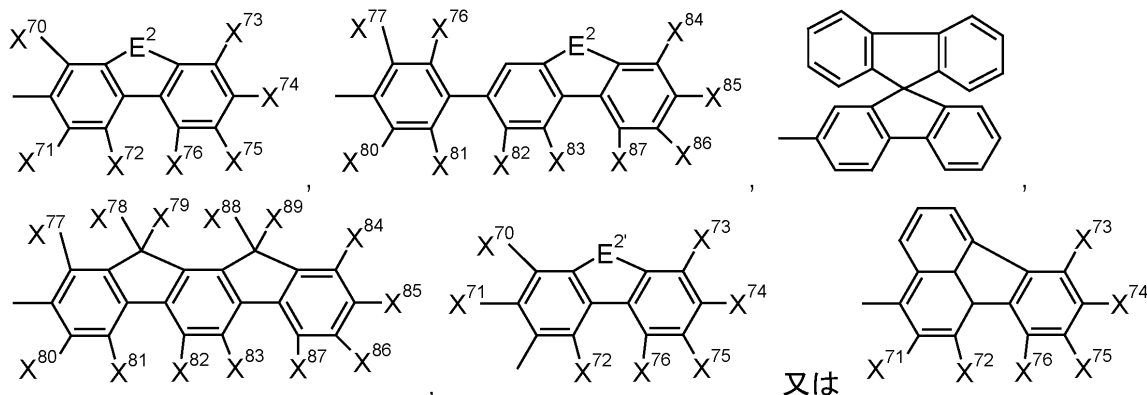
50



ロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、又は $C_1 \sim C_{24}$ ハロアルキルで置換されている $C_6 \sim C_{24}$ アリールであるか；或いはフッ素、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$ ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、又は $C_1 \sim C_{24}$ ハロアルキルで置換されている $C_2 \sim C_{26}$ ヘテロアリール、とりわけチオフェニル、ピロリル、フラニル、ベンゾオキサゾリル、又はベンゾチアゾリルであり、

或いは式：

【化6】



10

20

の基であり、

式中、

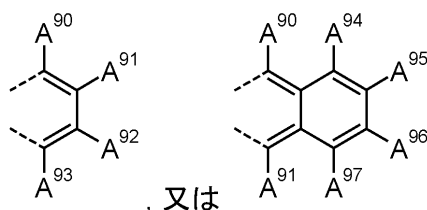
$X^{70}$ 、 $X^{71}$ 、 $X^{72}$ 、 $X^{73}$ 、 $X^{74}$ 、 $X^{75}$ 、 $X^{76}$ 、 $X^{77}$ 、 $X^{80}$ 、 $X^{81}$ 、 $X^{82}$ 、 $X^{83}$ 、 $X^{84}$ 、 $X^{85}$ 、 $X^{86}$ 及び $X^{87}$ は、互いに独立して、E、及び/又はDで中断されているものであり、 $C_1 \sim C_{24}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$ ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、Gで置換され、及び/又はS-、-O-、又は-NR<sup>25</sup>-で中断されている $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、-NR<sup>25</sup>R<sup>26</sup>、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキルチオ、-PR<sup>32</sup>R<sup>32</sup>、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルコキシ、Gで置換されている $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルコキシ、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール、G、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$ ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、又は $C_1 \sim C_{24}$ ハロアルキルで置換されている $C_6 \sim C_{24}$ アリール； $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、G、フッ素、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$ ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、又は $C_1 \sim C_{24}$ ハロアルキルで置換されている $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール； $C_2 \sim C_{24}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{24}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、Eで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、Gで置換されている $C_7 \sim C_{25}$ アラルコキシ、又は-CO-R<sup>28</sup>であるか、或いは

30

互いに隣接する2個の基 $X^{70}$ 、 $X^{71}$ 、 $X^{72}$ 、 $X^{73}$ 、 $X^{74}$ 、 $X^{75}$ 、 $X^{76}$ 、 $X^{77}$ 、 $X^{80}$ 、 $X^{81}$ 、 $X^{82}$ 、 $X^{83}$ 、 $X^{84}$ 、 $X^{85}$ 、 $X^{86}$ 及び $X^{87}$ は、基：

40

【化7】



50



であり、

ここで、

$A^{90}$ 、 $A^{91}$ 、 $A^{92}$ 、 $A^{93}$ 、 $A^{94}$ 、 $A^{95}$ 、 $A^{96}$ 及び $A^{97}$ は互いに独立して、H、ハロゲン、とりわけフッ素、ヒドロキシ、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、Eで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$ ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、Gで置換され、及び/又はS-、-O-、又は-NR<sup>25</sup>-で中断されている $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルコキシ、Gで置換されている $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルコキシ、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール、Gで置換されている $C_6 \sim C_{24}$ アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、Gで置換されている $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、 $C_2 \sim C_{24}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{24}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、Eで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、Gで置換されている $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルコキシ、Gで置換されている $C_7 \sim C_{25}$ アラルコキシ、又は-CO-R<sup>28</sup>であり、

E<sup>2</sup>は、-CR<sup>23</sup>=CR<sup>24</sup>-、とりわけ-CX<sup>68</sup>X<sup>69</sup>-であり、

E<sup>2'</sup>は、-SiR<sup>30</sup>R<sup>31</sup>-；-POR<sup>32</sup>-；とりわけS-、-O-、又は-NR<sup>25'</sup>-

であり、

ここで、

R<sup>25'</sup>は、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、又は $C_6 \sim C_{10}$ アリールであり、

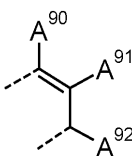
ここで、

X<sup>68</sup>、X<sup>69</sup>、X<sup>78</sup>、X<sup>79</sup>、X<sup>88</sup>及びX<sup>89</sup>は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール、Gで置換されている $C_6 \sim C_{24}$ アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、Gで置換されている $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、 $C_2 \sim C_{24}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{24}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、Eで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、又は $C_7 \sim C_{25}$ アラルキルであるか、或いは

X<sup>78</sup>及びX<sup>79</sup>、及び/又はX<sup>88</sup>及びX<sup>89</sup>は環、とりわけ5員環又は6員環を形成するか、或いは

X<sup>68</sup>及びX<sup>70</sup>、X<sup>69</sup>及びX<sup>73</sup>、X<sup>77</sup>及びX<sup>78</sup>、及び/又はX<sup>84</sup>及びX<sup>89</sup>は、基：

【化8】



であり、

Dは、-CO-；-COO-；-S-；-SO-；-SO<sub>2</sub>-；-O-；-NR<sup>25</sup>-；-SiR<sup>30</sup>R<sup>31</sup>-；-POR<sup>32</sup>-；-CR<sup>23</sup>=CR<sup>24</sup>-；又は-C-C-であり；並びに

Eは、-OR<sup>29</sup>；-SR<sup>29</sup>；-NR<sup>25</sup>R<sup>26</sup>；-COR<sup>28</sup>；-COOR<sup>27</sup>；-CONR<sup>25</sup>R<sup>26</sup>；-CN；-OCOOR<sup>27</sup>；又はハロゲン；であり、

Gは、E、又は $C_1 \sim C_{24}$ アルキルであり、

ここで、

R<sup>23</sup>、R<sup>24</sup>、R<sup>25</sup>及びR<sup>26</sup>は、互いに独立して、H； $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、又は $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{24}$ アルキル；又は-O-で中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルキルであり；或いは

R<sup>25</sup>及びR<sup>26</sup>は、一緒になって、5員環又は6員環、特に

10

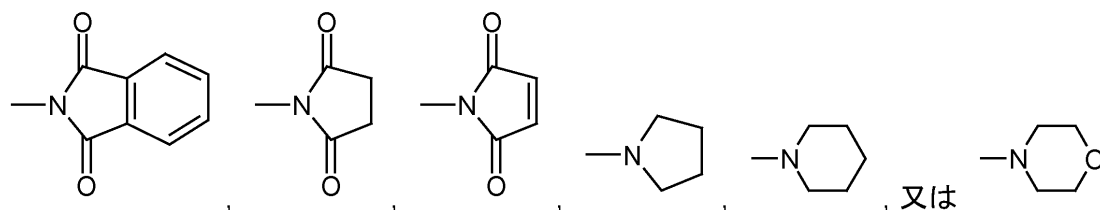
20

30

40



## 【化 9】



を形成し、

$R^{27}$  及び  $R^{28}$  は、互いに独立して、H； $C_6 \sim C_{18}$  アリール； $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、又は  $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシで置換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリール； $C_1 \sim C_{24}$  アルキル；又は - O - で中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであり、

$R^{29}$  は、H； $C_6 \sim C_{18}$  アリール； $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、又は  $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシで置換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリール； $C_1 \sim C_{24}$  アルキル；又は - O - で中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであり、

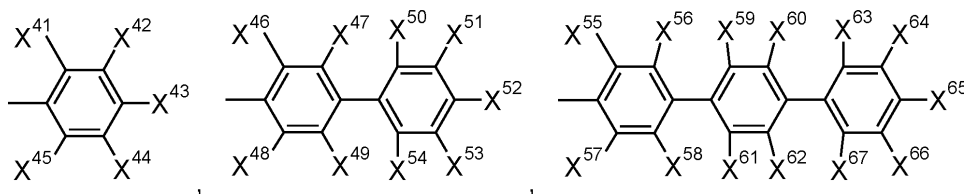
$R^{30}$  及び  $R^{31}$  は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_6 \sim C_{18}$  アリール、又は  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルで置換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリールであり、並びに

$R^{32}$  は、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_6 \sim C_{18}$  アリール、又は  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルで置換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリールである) の 2 H - ベンゾトリアゾール化合物。

## 【請求項 2】

置換基  $A^{21}$ 、 $A^{22}$ 、 $A^{23}$ 、 $A^{24}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$ 、 $A^{15}$ 、 $A^{16}$ 、 $A^{17}$  及び  $A^{18}$  の内の少なくとも 1 個、とりわけ  $A^{12}$ 、 $A^{21}$ 、及び / 又は  $A^{23}$  が、式：

## 【化 10】



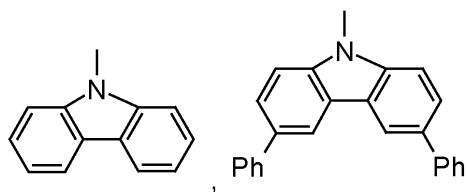
( 式中、

$X^{41}$ 、 $X^{42}$ 、 $X^{43}$ 、 $X^{44}$ 、 $X^{45}$ 、 $X^{46}$ 、 $X^{47}$ 、 $X^{48}$ 、 $X^{49}$ 、 $X^{50}$ 、 $X^{51}$ 、 $X^{52}$ 、 $X^{53}$ 、 $X^{54}$ 、 $X^{55}$ 、 $X^{56}$ 、 $X^{57}$ 、 $X^{58}$ 、 $X^{59}$ 、 $X^{60}$ 、 $X^{61}$ 、 $X^{62}$ 、 $X^{63}$ 、 $X^{64}$ 、 $X^{65}$ 、 $X^{66}$  及び  $X^{67}$  は、互いに独立して、H、フッ素、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、 $C_7 \sim C_{25}$  アラルキル、 $C_1 \sim C_{24}$  ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$  ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、又は  $C_1 \sim C_{24}$  ハロアルキル、場合により E で置換され、及び / 又は D で中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、場合により E で置換されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルケニル、場合により G で置換されている  $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、場合により G で置換されている  $C_5 \sim C_{12}$  シクロアル、場合により G で置換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリール、場合により E で置換され、及び / 又は D で中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、場合により G で置換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリールオキシ、場合により G で置換されている  $C_7 \sim C_{18}$  アリールアルコキシ、場合により E で置換され、及び / 又は D で中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルチオ、場合により G で置換されている  $C_2 \sim C_{20}$  ヘテロアリール、又は場合により G で置換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アラルキルであるか、或いは

$X^{43}$ 、 $X^{65}$  又は  $X^{52}$  は、式：



## 【化 1 1】

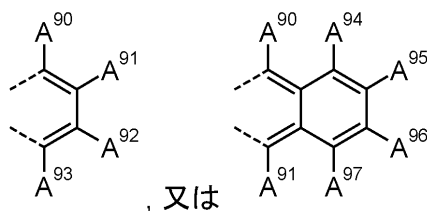


の基であるか、或いは

互いに隣接する 2 個の基  $X^{41}$ 、 $X^{42}$ 、 $X^{43}$ 、 $X^{44}$ 、 $X^{45}$ 、 $X^{46}$ 、 $X^{47}$ 、 $X^{48}$ 、 $X^{49}$ 、 $X^{50}$ 、 $X^{51}$ 、 $X^{52}$ 、 $X^{53}$ 、 $X^{54}$ 、 $X^{55}$ 、 $X^{56}$ 、 $X^{57}$ 、 $X^{58}$ 、 $X^{59}$ 、 $X^{60}$ 、 $X^{61}$ 、 $X^{62}$ 、 $X^{63}$ 、 $X^{64}$ 、 $X^{65}$ 、 $X^{66}$ 、及び  $X^{67}$  は基：

10

## 【化 1 2】



20

であり、

ここで、

$A^{90}$ 、 $A^{91}$ 、 $A^{92}$ 、 $A^{93}$ 、 $A^{94}$ 、 $A^{95}$ 、 $A^{96}$  及び  $A^{97}$  は互いに独立して、H、ハロゲン、ヒドロキシ、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、E で置換され、及び / 又は D で中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_1 \sim C_{24}$  ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$  ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、 $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、G で置換され、及び / 又は S -、- O -、又は -  $NR^{25}$  - で中断されている  $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、 $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルコキシ、G で置換されている  $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルコキシ、 $C_6 \sim C_{24}$  アリール、G で置換されている  $C_6 \sim C_{24}$  アリール、 $C_2 \sim C_{20}$  ヘテロアリール、G で置換されている  $C_2 \sim C_{20}$  ヘテロアリール、 $C_2 \sim C_{24}$  アルケニル、 $C_2 \sim C_{24}$  アルキニル、 $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、E で置換され、及び / 又は D で中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、 $C_7 \sim C_{25}$  アラルキル、G で置換されている  $C_7 \sim C_{25}$  アラルキル、 $C_7 \sim C_{25}$  アラルコキシ、E で置換されている  $C_7 \sim C_{25}$  アラルコキシ、又は - CO -  $R^{28}$  であり、

30

ここで、

$R^{25}$ 、 $R^{26}$  及び  $R^{28}$ 、D、E 及び G は請求項 2 と同義であり、

好ましくは置換基  $X^{41}$ 、 $X^{42}$ 、 $X^{43}$ 、 $X^{44}$ 、 $X^{45}$ 、 $X^{46}$ 、 $X^{47}$ 、 $X^{48}$ 、 $X^{49}$ 、 $X^{50}$ 、 $X^{51}$ 、 $X^{52}$ 、 $X^{53}$ 、 $X^{54}$ 、 $X^{55}$ 、 $X^{56}$ 、 $X^{57}$ 、 $X^{58}$ 、 $X^{59}$ 、 $X^{60}$ 、 $X^{61}$ 、 $X^{62}$ 、 $X^{63}$ 、 $X^{64}$ 、 $X^{65}$ 、 $X^{66}$ 、及び  $X^{67}$  の内の少なくとも 1 個が、フッ素、-  $NR^{25}R^{26}$ 、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、 $C_7 \sim C_{25}$  アラルキル、 $C_1 \sim C_{24}$  ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$  ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、又は  $C_1 \sim C_{24}$  ハロアルキルである) の基である、請求項 1 に記載の 2 H - ベンゾトリアゾール化合物。

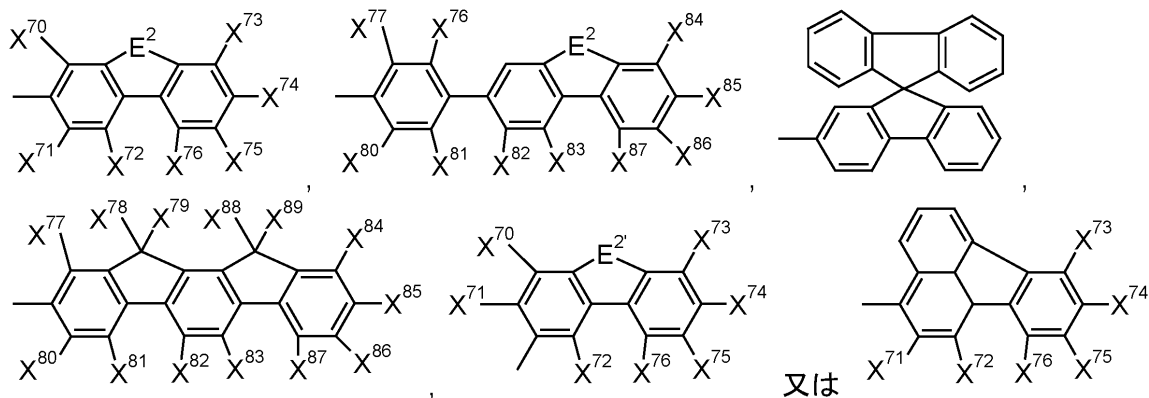
40

## 【請求項 3】

置換基  $A^{21}$ 、 $A^{22}$ 、 $A^{23}$ 、 $A^{24}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$ 、 $A^{15}$ 、 $A^{16}$ 、 $A^{17}$  及び  $A^{18}$  の内の少なくとも 1 個、とりわけ  $A^{12}$ 、及び / 又は  $A^{23}$  が、式：



## 【化 1 3】



10

(式中、

$X^{68}$ 、 $X^{69}$ 、 $X^{78}$ 、 $X^{79}$ 、 $X^{88}$  及び  $X^{89}$  は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、とりわけ 1 個若しくは 2 個の酸素原子で中断されることが出来る  $C_1 \sim C_{12}$  アルキルであり、

$X^{70}$ 、 $X^{71}$ 、 $X^{72}$ 、 $X^{73}$ 、 $X^{74}$ 、 $X^{75}$ 、 $X^{76}$ 、 $X^{77}$ 、 $X^{80}$ 、 $X^{81}$ 、 $X^{82}$ 、 $X^{83}$ 、 $X^{84}$ 、 $X^{85}$ 、 $X^{86}$  及び  $X^{87}$  は、互いに独立して、H、CN、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_6 \sim C_{10}$  アリール、 $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキルチオ、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $-CONR^{25}R^{26}$ 、又は  $-COOR^{27}$  であり、

20

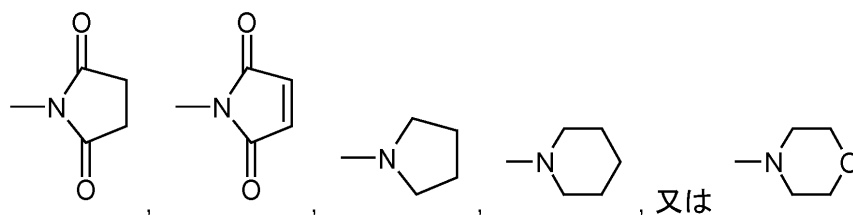
ここで

$R^{25}$  及び  $R^{26}$  は、互いに独立して、H、 $C_6 \sim C_{18}$  アリール、 $C_7 \sim C_{18}$  アラルキル、又は  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであり、並びに

$R^{27}$  は、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであるか、或いは

$R^{25}$  及び  $R^{26}$  は、一緒になって、5 員環又は 6 員環、とりわけ

## 【化 1 4】



30

を形成し、並びに

$E^2$  は、 $-S-$ 、 $-O-$ 、又は  $-NR^{25'}$  であり、

ここで、

$R^{25'}$  は、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、又は  $C_6 \sim C_{10}$  アリールである) の基である、請求項 1 に記載の 2 H - ベンゾトリアゾール化合物。

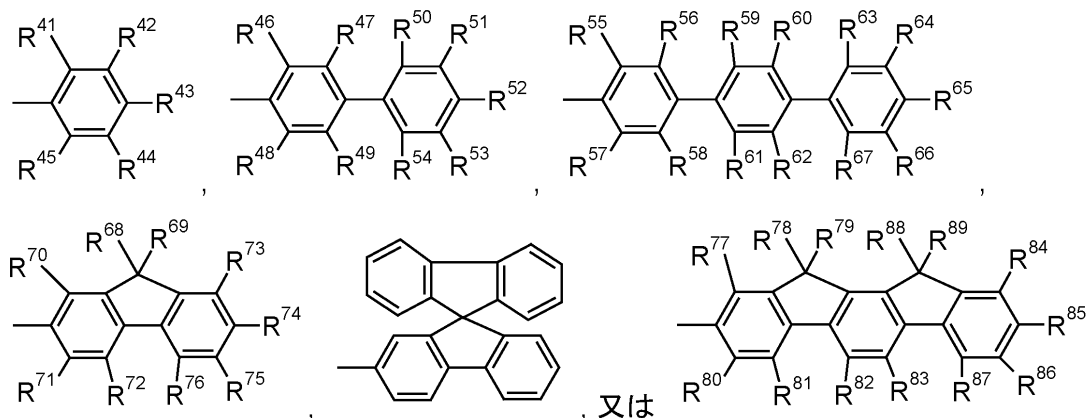
40

## 【請求項 4】

$Y^3$  が、式：



## 【化 1 5】



10

(式中、

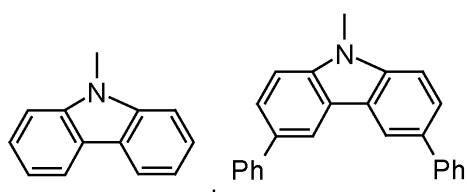
$R^{41}$ 、 $R^{42}$ 、 $R^{43}$ 、 $R^{44}$ 、 $R^{45}$ 、 $R^{46}$ 、 $R^{47}$ 、 $R^{48}$ 、 $R^{49}$ 、 $R^{50}$ 、 $R^{51}$ 、 $R^{52}$ 、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ 、 $R^{55}$ 、 $R^{56}$ 、 $R^{57}$ 、 $R^{58}$ 、 $R^{59}$ 、 $R^{60}$ 、 $R^{61}$ 、 $R^{62}$ 、 $R^{63}$ 、 $R^{64}$ 、 $R^{65}$ 、 $R^{66}$ 、 $R^{67}$ 、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$ 、 $R^{72}$ 、 $R^{73}$ 、 $R^{74}$ 、 $R^{75}$ 、 $R^{76}$ 、 $R^{77}$ 、 $R^{80}$ 、 $R^{81}$ 、 $R^{82}$ 、 $R^{83}$ 、 $R^{84}$ 、 $R^{85}$ 、 $R^{86}$ 、及び $R^{87}$ は、互いに独立して、H、フッ素、 $C_1 \sim C_{24}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$ ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、 $-NR^{25}R^{26}$ 、場合によりEで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、場合によりEで置換されている $C_1 \sim C_{24}$ アルケニル、場合によりGで置換されている $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、場合によりGで置換されている $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルコキシ、場合によりGで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール、場合によりEで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、場合によりGで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリールオキシ、場合によりGで置換されている $C_7 \sim C_{18}$ アリールアルコキシ、場合によりEで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルキルチオ、Gで置換されている $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、又は場合によりGで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アラルキルであるか、或いは

20

$R^{43}$ 、 $R^{65}$ 又は $R^{52}$ は、式

30

## 【化 1 6】



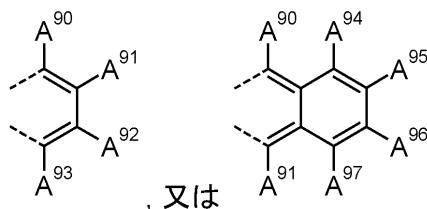
の基であるか、或いは

互いに隣接する2個の基 $R^{41}$ 、 $R^{42}$ 、 $R^{43}$ 、 $R^{44}$ 、 $R^{45}$ 、 $R^{46}$ 、 $R^{47}$ 、 $R^{48}$ 、 $R^{49}$ 、 $R^{50}$ 、 $R^{51}$ 、 $R^{52}$ 、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ 、 $R^{55}$ 、 $R^{56}$ 、 $R^{57}$ 、 $R^{58}$ 、 $R^{59}$ 、 $R^{60}$ 、 $R^{61}$ 、 $R^{62}$ 、 $R^{63}$ 、 $R^{64}$ 、 $R^{65}$ 、 $R^{66}$ 、 $R^{67}$ 、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$ 、 $R^{72}$ 、 $R^{73}$ 、 $R^{74}$ 、 $R^{75}$ 、 $R^{76}$ 、 $R^{77}$ 、 $R^{80}$ 、 $R^{81}$ 、 $R^{82}$ 、 $R^{83}$ 、 $R^{84}$ 、 $R^{85}$ 、 $R^{86}$ 、及び $R^{87}$ は、基：

40



## 【化 17】



であり、

10

ここで、

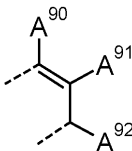
$A^{90}$ 、 $A^{91}$ 、 $A^{92}$ 、 $A^{93}$ 、 $A^{94}$ 、 $A^{95}$ 、 $A^{96}$ 及び $A^{97}$ は互いに独立して、H、ハロゲン、とりわけフッ素、 $-NR^{25}R^{26}$ 、ヒドロキシ、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、Eで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$ ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、Gで置換され、及び/又は $S-$ 、 $-O-$ 、又は $-NR^{25}-$ で中断されている $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルコキシ、Gで置換されている $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルコキシ、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール、Gで置換されている $C_6 \sim C_{24}$ アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、Gで置換されている $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、 $C_2 \sim C_{24}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{24}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、Eで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、Gで置換されている $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルコキシ、Gで置換されている $C_7 \sim C_{25}$ アラルコキシ、又は $-CO-R^{28}$ であり、

$R^{68}$ 、 $R^{69}$ 、 $R^{78}$ 、 $R^{79}$ 、 $R^{88}$ 及び $R^{89}$ は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール、Gで置換されている $C_6 \sim C_{24}$ アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、Gで置換されている $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、 $C_2 \sim C_{24}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{24}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、Eで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、又は $C_7 \sim C_{25}$ アラルキルであるか、或いは

$R^{68}$ 及び $R^{69}$ 、 $R^{78}$ 及び $R^{79}$ 、及び/又は $R^{88}$ 及び $R^{89}$ は、環、とりわけ5員環又は6員環を形成し、或いは

$R^{68}$ 及び $R^{70}$ 、 $R^{69}$ 及び $R^{73}$ 、 $R^{77}$ 及び $R^{78}$ 、及び/又は $R^{84}$ 及び $R^{89}$ は、基：

## 【化 18】



であり、

40

ここで、

Dは、 $-CO-$ ； $-COO-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-O-$ ； $-NR^{25}-$ ； $-SiR^{30}R^{31}-$ ； $-POR^{32}-$ ； $-CR^{23}=CR^{24}-$ ；又は $-C-C-$ であり；並びに  
Eは、 $-OR^{29}$ ； $-SR^{29}$ ； $-NR^{25}R^{26}$ ； $-COR^{28}$ ； $-COOR^{27}$ ； $-CONR^{25}R^{26}$ ； $-CN$ ； $-OCOOR^{27}$ ；又はハロゲン；であり、

Gは、E、又は $C_1 \sim C_{24}$ アルキルであり、

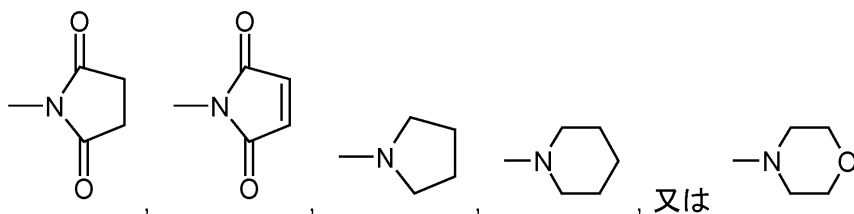
ここで、

$R^{23}$ 、 $R^{24}$ 、 $R^{25}$ 及び $R^{26}$ は、互いに独立して、H； $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、又は $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{24}$ アルキル；又は $-O-$ で中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルキルであり；或いは

50



$R^{25}$  及び  $R^{26}$  は、一緒になって、5員環又は6員環、特に  
【化19】



10

を形成し、

$R^{27}$  及び  $R^{28}$  は、互いに独立して、 $H$ ； $C_6 \sim C_{18}$  アリール； $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、又は  
 $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシで置換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリール； $C_1 \sim C_{24}$  アルキル；又は -  
O - で中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであり、

$R^{29}$  は、 $H$ ； $C_6 \sim C_{18}$  アリール； $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、又は  $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシで置  
換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリール； $C_1 \sim C_{24}$  アルキル；又は - O - で中断されている  $C_1$   
 $\sim C_{24}$  アルキルであり、

$R^{30}$  及び  $R^{31}$  は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_6 \sim C_{18}$  アリール、又は  $C_1$   
 $\sim C_{24}$  アルキルで置換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリールであり、並びに

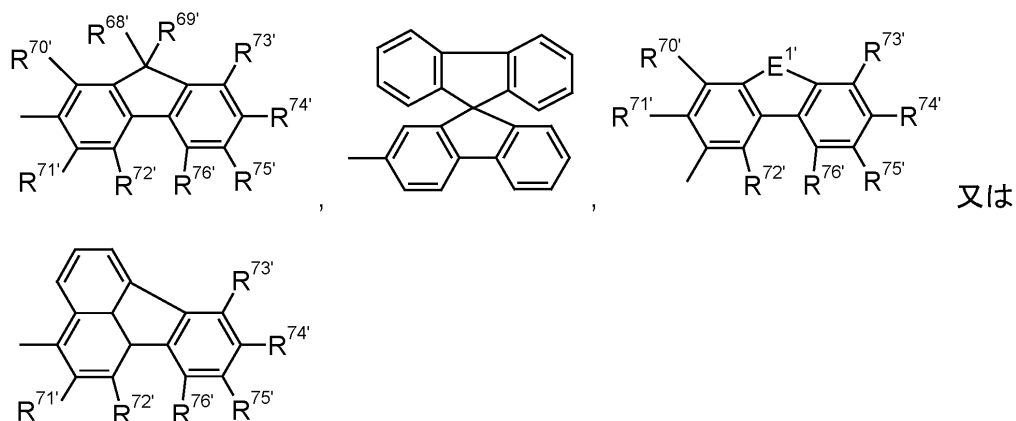
$R^{32}$  は、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_6 \sim C_{18}$  アリール、又は  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルで置換され  
ている  $C_6 \sim C_{18}$  アリールであり、

20

或いは、

$R^{43}$ 、又は  $R^{52}$  は、式：

【化20】



30

の基であり、

式中、

$R^{68'}$  及び  $R^{69'}$  は、互いに独立して、1個若しくは2個の酸素原子で中断されることが  
できる  $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、とりわけ  $C_1 \sim C_{12}$  アルキルであり、

$R^{70'}$ 、 $R^{71'}$ 、 $R^{72'}$ 、 $R^{73'}$ 、 $R^{74'}$ 、 $R^{75'}$  及び  $R^{76'}$  は、互いに独立して、 $H$ 、 $CN$   
、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_6 \sim C_{10}$  アリール、 $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキルチ  
オ、 $-NR^{25'}$ 、 $-CONR^{25'}$ 、又は  $-COOR^{27'}$  であり、

ここで、

$R^{25'}$  及び  $R^{26'}$  は、互いに独立して、 $H$ 、 $C_6 \sim C_{18}$  アリール、 $C_7 \sim C_{18}$  アラルキル、  
又は  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであり、並びに

$R^{27'}$  は、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであり、並びに

$E^{1'}$  は、 $-S-$ 、 $-O-$ 、又は  $-NR^{25'}$  - であり、

ここで、

50

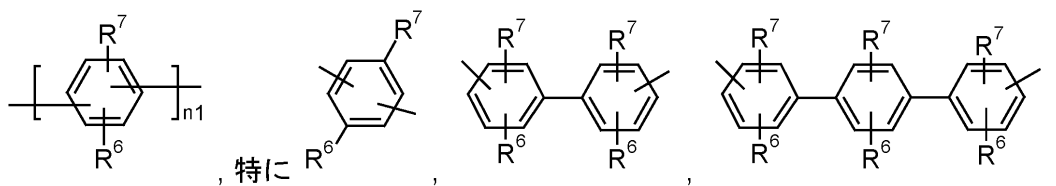


$R^{2,5'}$  は、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、又は  $C_6 \sim C_{10}$  アリールである ) の基である、請求項 1 に記載の 2H-ベンゾトリアゾール化合物。

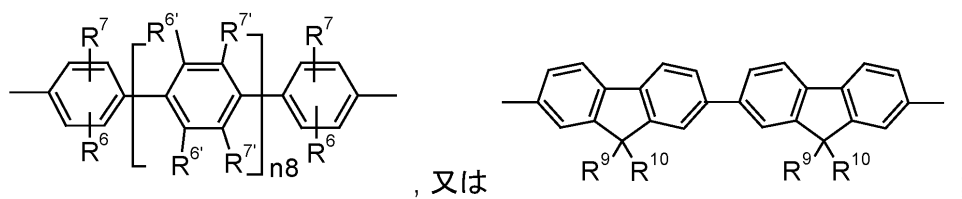
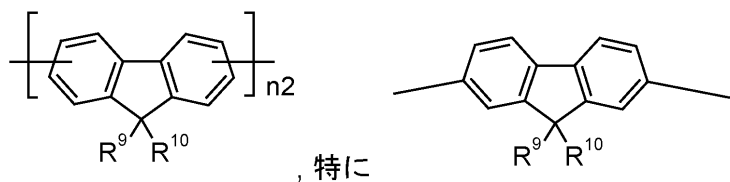
【請求項 5】

$Y^1$  が、式：

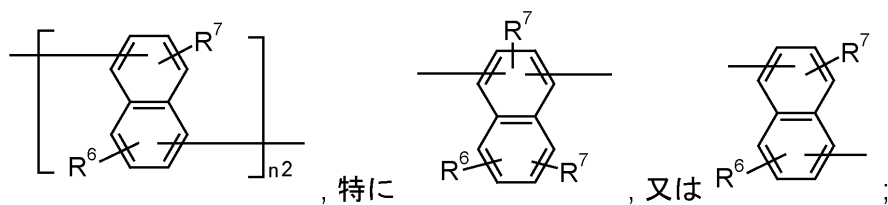
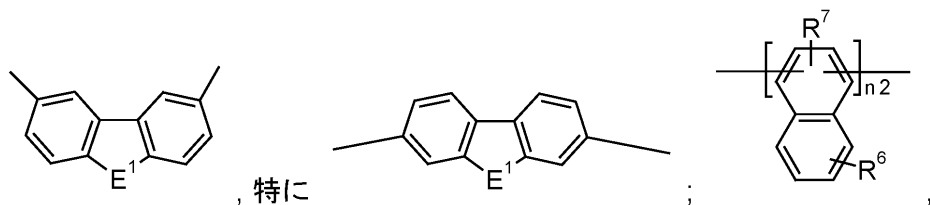
【化 2 1】



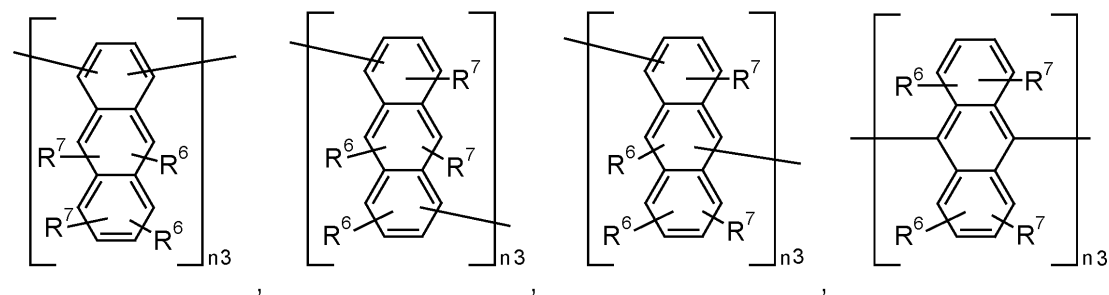
10



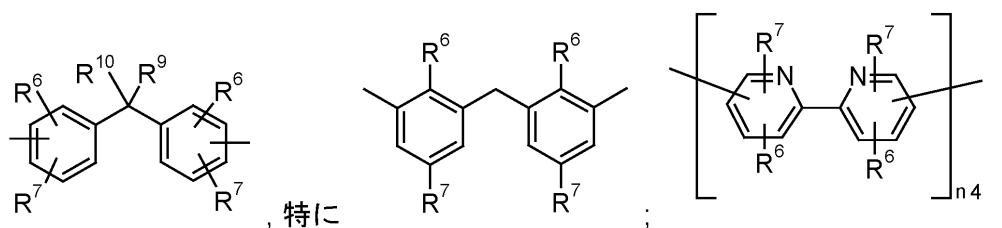
20



30

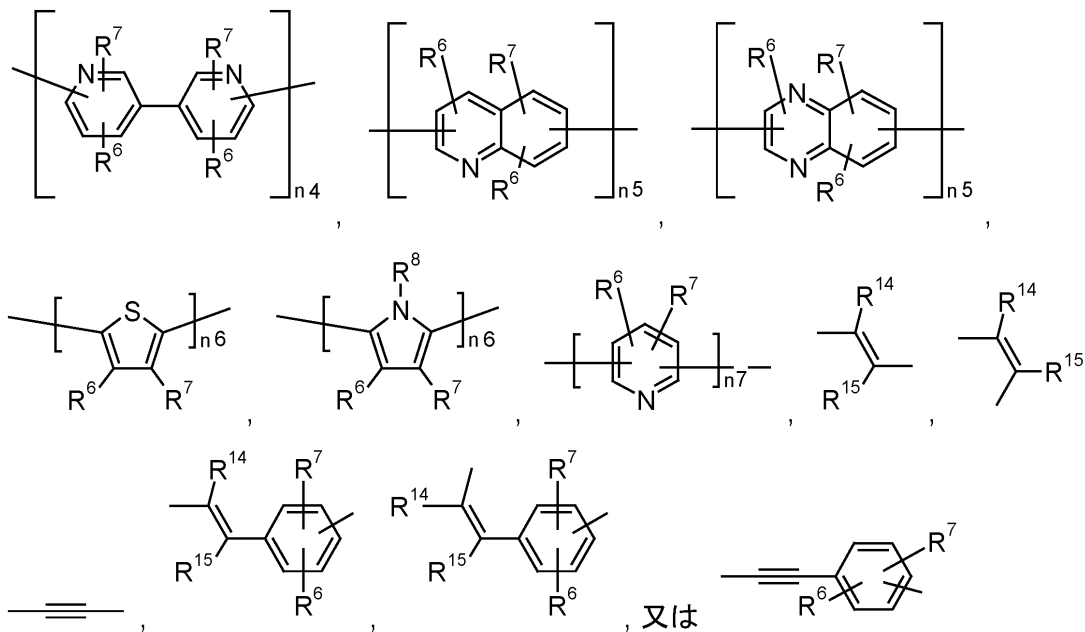


40



50





10

(式中、

$n_1$ 、 $n_2$ 、 $n_3$ 、 $n_4$ 、 $n_5$ 、 $n_6$ 、 $n_7$ 及び $n_8$ は、1、2、又は3、特に1であり、

$E^1$ は、 $-S-$ 、 $-O-$ 、又は $-NR^{25'}$ であり、

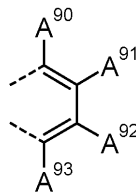
ここで、

$R^{25'}$ は、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、又は $C_6 \sim C_{10}$ アリールであり、

$R^6$ 及び $R^7$ は、互いに独立して、H、ハロゲン、とりわけフッ素、 $-NR^{25}R^{26}$ 、ヒドロキシ、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、Eで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$ ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、Gで置換され、及び/又は $S-$ 、 $-O-$ 、又は $-NR^{25}-$ で中断されている $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルコキシ、Gで置換されている $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルコキシ、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール、Gで置換されている $C_6 \sim C_{24}$ アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、Gで置換されている $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、 $C_2 \sim C_{24}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{24}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、Eで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、Gで置換されている $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルコキシ、Gで置換されている $C_7 \sim C_{25}$ アラルコキシであるか、又は $-CO-R^{28}$ であり、

$R^{6'}$ 及び $R^{7'}$ は、 $R^6$ の意味を有するか、或いは一緒になって、基：

【化22】



40

を形成し、

ここで、

$A^{90}$ 、 $A^{91}$ 、 $A^{92}$ 及び $A^{93}$ は、互いに独立して、H、ハロゲン、ヒドロキシ、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、Eで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$ ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、Gで置換され、及び/又は $S-$ 、 $-O-$ 、又は $-NR^{25}$

50



<sup>5</sup> - で中断されている  $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、 $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルコキシ、G で置換されている  $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルコキシ、 $C_6 \sim C_{24}$  アリール、G で置換されている  $C_6 \sim C_{24}$  アリール、 $C_2 \sim C_{20}$  ヘテロアリール、G で置換されている  $C_2 \sim C_{20}$  ヘテロアリール、 $C_2 \sim C_{24}$  アルケニル、 $C_2 \sim C_{24}$  アルキニル、 $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、E で置換され、及び / 又は D で中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、 $C_7 \sim C_{25}$  アラルキル、G で置換されている  $C_7 \sim C_{25}$  アラルキル、 $C_7 \sim C_{25}$  アラルコキシ、E で置換されている  $C_7 \sim C_{25}$  アラルコキシ、又は  $-CO-R^{28}$  であり、

$R^8$  は、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、E で置換され、及び / 又は D で中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_6 \sim C_{24}$  アリール、又は  $C_7 \sim C_{25}$  アラルキルであり、

$R^9$  及び  $R^{10}$  は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、E で置換され、及び / 又は D で中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_6 \sim C_{24}$  アリール、G で置換されている  $C_6 \sim C_{24}$  アリール、 $C_2 \sim C_{20}$  ヘテロアリール、G で置換されている  $C_2 \sim C_{20}$  ヘテロアリール、 $C_2 \sim C_{24}$  アルケニル、 $C_2 \sim C_{24}$  アルキニル、 $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、E で置換され、及び / 又は D で中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、又は  $C_7 \sim C_{25}$  アラルキルであるか、或いは

$R^9$  及び  $R^{10}$  は、環、とりわけ 5 員環又は 6 員環を形成し、

$R^{14}$  及び  $R^{15}$  は、互いに独立して、H、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、E で置換され、及び / 又は D で中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_6 \sim C_{24}$  アリール、G で置換されている  $C_6 \sim C_{24}$  アリール、 $C_2 \sim C_{20}$  ヘテロアリール、又は G で置換されている  $C_2 \sim C_{20}$  ヘテロアリールであり、

ここで、

D は、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、 $-S-$ 、 $-SO-$ 、 $-SO_2-$ 、 $-O-$ 、 $-NR^{25}-$ 、 $-SiR^{30}R^{31}-$ 、 $-POR^{32}-$ 、 $-CR^{23}=CR^{24}-$ 、又は  $-C-C-$  であり、

G は、E、又は  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであり、並びに

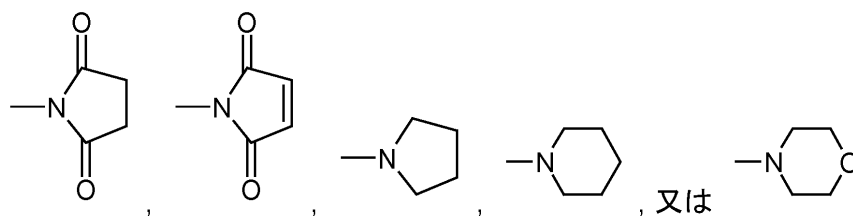
E は、 $-OR^{29}$ 、 $-SR^{29}$ 、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $-COR^{28}$ 、 $-COOR^{27}$ 、 $-CONR^{25}R^{26}$ 、 $-CN$ 、 $-OCOOR^{27}$ 、又はハロゲン、であり、

ここで、

$R^{23}$ 、 $R^{24}$ 、 $R^{25}$  及び  $R^{26}$  は、互いに独立して、H、 $C_6 \sim C_{18}$  アリール、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキルで置換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリール、 $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、又は  $-O-$  で中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであるか、

$R^{25}$  及び  $R^{26}$  は、一緒になって、5 員環又は 6 員環、特に

【化 2 3】



を形成し、

$R^{27}$  及び  $R^{28}$  は、互いに独立して、H、 $C_6 \sim C_{18}$  アリール、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、又は  $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシで置換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリール、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、又は  $-O-$  で中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであり、

$R^{29}$  は、H、 $C_6 \sim C_{18}$  アリール、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキルで置換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリール、 $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、又は  $-O-$  で中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであり、

$R^{30}$  及び  $R^{31}$  は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_6 \sim C_{18}$  アリール、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキルで置換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリールであり、並びに

$R^{32}$  は、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_6 \sim C_{18}$  アリール、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキルで置換されてい

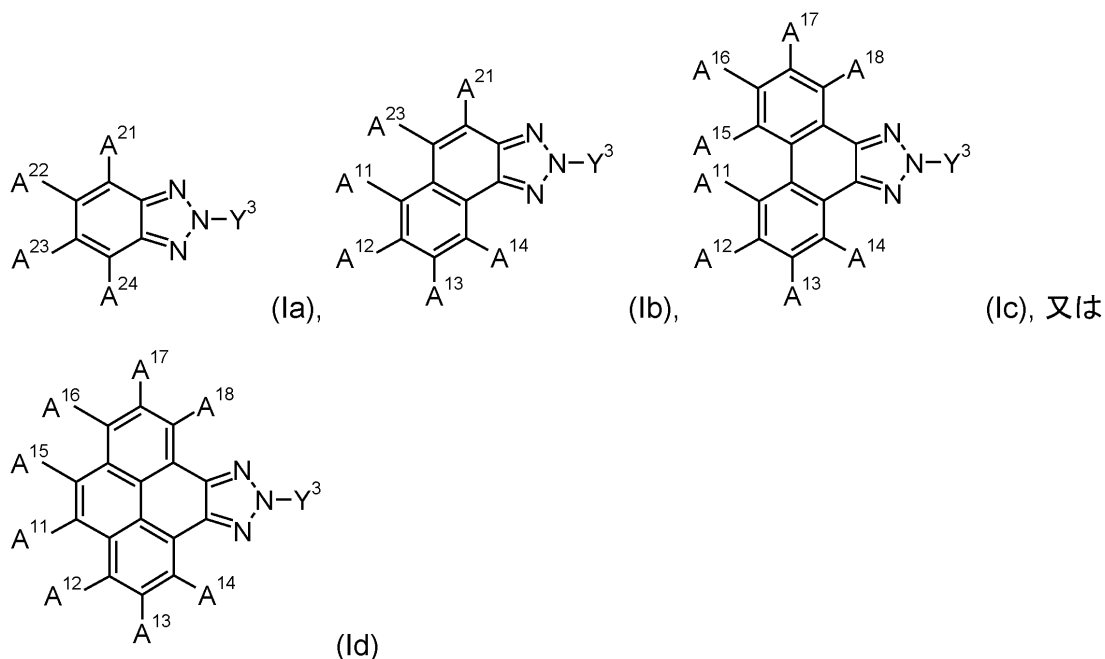


る  $C_6 \sim C_{18}$  アリールである) の基である、請求項 1 に記載の 2 H - ベンゾトリアゾール化合物。

【請求項 6】

2 H - ベンゾトリアゾール化合物が、式：

【化 2 4】



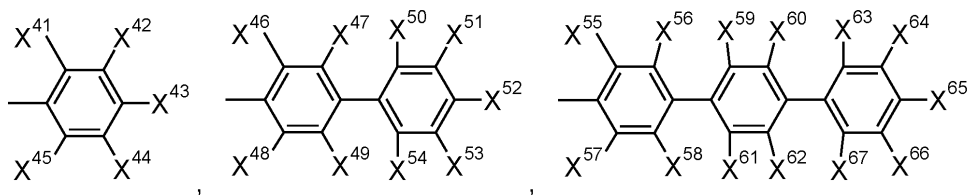
10

20

(式中、

$A^{12}$  又は  $A^{23}$  は、式：

【化 2 5】



30

の基であり、

式中、

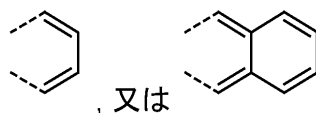
$X^{41}$ 、 $X^{42}$ 、 $X^{43}$ 、 $X^{44}$ 、 $X^{45}$ 、 $X^{46}$ 、 $X^{47}$ 、 $X^{48}$ 、 $X^{49}$ 、 $X^{50}$ 、 $X^{51}$ 、 $X^{52}$ 、 $X^{53}$ 、 $X^{54}$ 、 $X^{55}$ 、 $X^{56}$ 、 $X^{57}$ 、 $X^{58}$ 、 $X^{59}$ 、 $X^{60}$ 、 $X^{61}$ 、 $X^{62}$ 、 $X^{63}$ 、 $X^{64}$ 、 $X^{65}$ 、 $X^{66}$ 、及び  $X^{67}$  は、互いに独立して、H、CN、フッ素、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、 $C_7 \sim C_{25}$  アラルキル、 $C_1 \sim C_{24}$  ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$  ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、 $C_1 \sim C_{24}$  ハロアルキル、場合により 1 個以上の  $C_1 \sim C_8$  アルキル、又は  $C_1 \sim C_8$  アルコキシ基で置換されることができる  $C_6 \sim C_{10}$  アリール； $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキルチオ、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $-CONR^{25}R^{26}$ 、又は  $-COOR^{27}$  であるか、或いは

40

互いに隣接する 2 個の基  $X^{41}$ 、 $X^{42}$ 、 $X^{43}$ 、 $X^{44}$ 、 $X^{45}$ 、 $X^{46}$ 、 $X^{47}$ 、 $X^{48}$ 、 $X^{49}$ 、 $X^{50}$ 、 $X^{51}$ 、 $X^{52}$ 、 $X^{53}$ 、 $X^{54}$ 、 $X^{55}$ 、 $X^{56}$ 、 $X^{57}$ 、 $X^{58}$ 、 $X^{59}$ 、 $X^{60}$ 、 $X^{61}$ 、 $X^{62}$ 、 $X^{63}$ 、 $X^{64}$ 、 $X^{65}$ 、 $X^{66}$ 、及び  $X^{67}$  は、基：



## 【化 2 6】

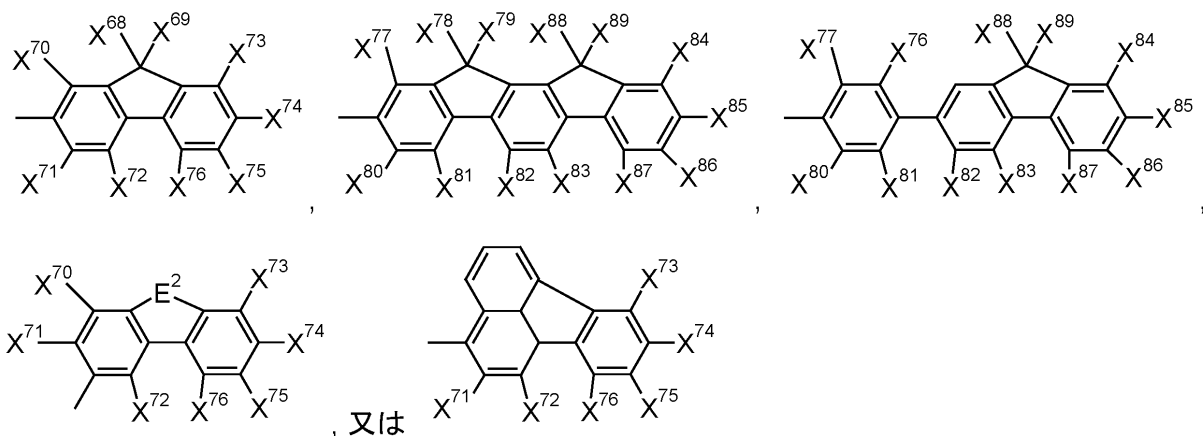


であり、  
ここで、

好ましくは、置換基  $X^{41}$ 、 $X^{42}$ 、 $X^{43}$ 、 $X^{44}$ 、 $X^{45}$ 、 $X^{46}$ 、 $X^{47}$ 、 $X^{48}$ 、 $X^{49}$ 、 $X^{50}$ 、 $X^{51}$ 、 $X^{52}$ 、 $X^{53}$ 、 $X^{54}$ 、 $X^{55}$ 、 $X^{56}$ 、 $X^{57}$ 、 $X^{58}$ 、 $X^{59}$ 、 $X^{60}$ 、 $X^{61}$ 、 $X^{62}$ 、 $X^{63}$ 、 $X^{64}$ 、 $X^{65}$ 、 $X^{66}$ 、及び  $X^{67}$  の内の少なくとも 1 個が、フッ素、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、 $C_7 \sim C_{25}$  アラルキル、 $C_1 \sim C_{24}$  ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$  ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、又は  $C_1 \sim C_{24}$  ハロアルキルであり、或いは

$A^{12}$  及び  $A^{23}$  は式：

## 【化 2 7】



の基であり、  
式中、

$X^{68}$ 、 $X^{69}$ 、 $X^{78}$ 、 $X^{79}$ 、 $X^{88}$ 、及び  $X^{89}$  は、互いに独立して、1 個若しくは 2 個の酸素原子で中断されることができる  $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、とりわけ  $C_1 \sim C_{12}$  アルキルであり、

$X^{70}$ 、 $X^{71}$ 、 $X^{72}$ 、 $X^{73}$ 、 $X^{74}$ 、 $X^{75}$ 、 $X^{76}$ 、 $X^{77}$ 、 $X^{80}$ 、 $X^{81}$ 、 $X^{82}$ 、 $X^{83}$ 、 $X^{84}$ 、 $X^{85}$ 、 $X^{86}$  及び  $X^{87}$  は、互いに独立して、H、CN、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、場合により 1 個以上の  $C_1 \sim C_8$  アルキル、又は  $C_1 \sim C_8$  アルコキシ基で置換されることができる  $C_6 \sim C_{10}$  アリール； $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキルチオ、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $-CONR^{25}R^{26}$ 、又は  $-COOR^{27}$  であり

$E^2$  は、 $-S-$ 、 $-O-$ 、又は  $-NR^{25'}$  - であり、

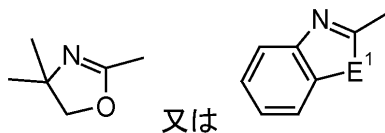
ここで、

$R^{25'}$  は  $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、又は  $C_6 \sim C_{10}$  アリールであり、

$A^{21}$ 、 $A^{22}$  及び  $A^{24}$  は、互いに独立して、水素、ハロゲン、とりわけフッ素、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_1 \sim C_{24}$  ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$  ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、 $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、 $C_7 \sim C_{25}$  アラルキル、 $C_1 \sim C_{24}$  ハロアルキル、場合により 1 個以上の  $C_1 \sim C_8$  アルキル、又は  $C_1 \sim C_8$  アルコキシ基で置換されることができる  $C_6 \sim C_{18}$  アリール； $-NR^{25}R^{26}$ 、 $-CONR^{25}R^{26}$ 、又は  $-COOR^{27}$ 、或いは  $C_2 \sim C_{10}$  ヘテロアリール、とりわけ式：



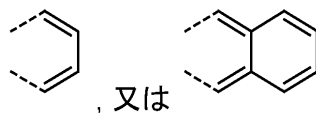
## 【化 2 8】



の基であるか、或いは

$A^{22}$  及び  $A^{23}$  又は  $A^{11}$  及び  $A^{23}$  は、式：

## 【化 2 9】



10

の基であり、

$A^{11}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$ 、 $A^{15}$ 、 $A^{16}$ 、 $A^{17}$ 、及び  $A^{18}$  は、互いに独立して、H、CN、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、 $C_7 \sim C_{25}$  アラルキル、 $C_1 \sim C_{24}$  ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$  ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、 $C_1 \sim C_{24}$  ハロアルキル、 $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキルチオ、 $C_6 \sim C_{18}$  アリール、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $-CONR^{25}R^{26}$ 、又は  $-COOR^{27}$ 、或いは  $C_2 \sim C_{10}$  ヘテロアリールであり、

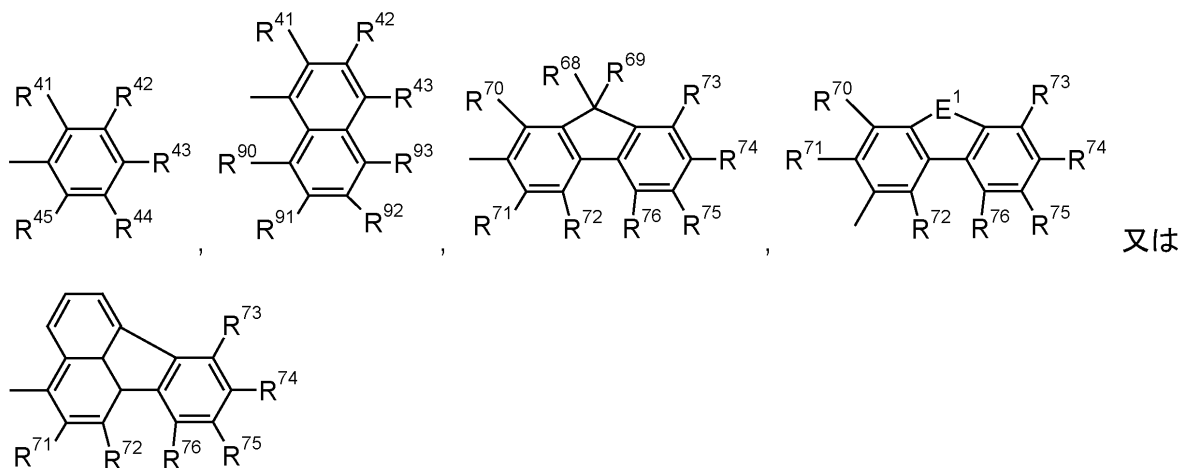
20

ここで、

$R^{25}$  及び  $R^{26}$  は、互いに独立して、H、 $C_6 \sim C_{18}$  アリール、 $C_7 \sim C_{18}$  アラルキル、又は  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであり、 $R^{27}$  は、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであり、並びに

$Y^3$  は、式：

## 【化 3 0】



30

の基であり、

式中、

$R^{41}$  は、水素、 $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、又は  $-OC_7 \sim C_{18}$  アラルキルであり、

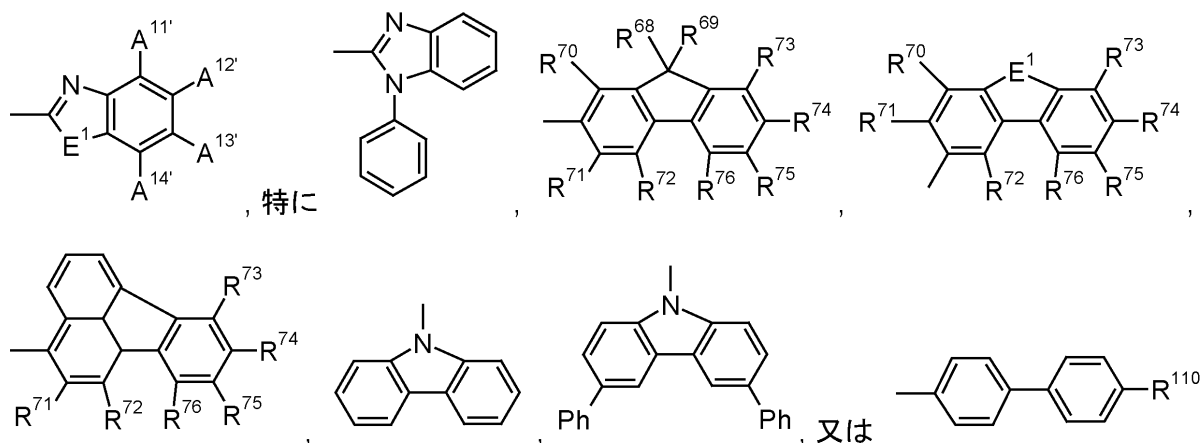
$R^{42}$  は、水素、又は  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであり、

$R^{43}$  は、水素、ハロゲン、 $-CONR^{25}R^{26}$ 、 $-COOR^{27}$ 、

40



## 【化 3 1】



10

であり、

ここで、

$A^{11'}$ 、 $A^{12'}$ 、 $A^{13'}$ 、及び  $A^{14'}$  は、互いに独立して、H、CN、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキルチオ、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $-CONR^{25}R^{26}$ 、又は  $-COOR^{27}$  であり、

$E^1$  は、 $-S-$ 、 $-O-$ 、又は  $-NR^{25'}$  - であり、

20

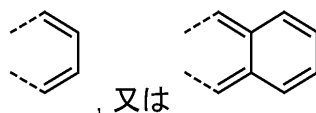
ここで、

$R^{25'}$  は、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、又は  $C_6 \sim C_{10}$  アリールであり、

$R^{110}$  は、H、CN、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキルチオ、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $-CONR^{25}R^{26}$ 、又は  $-COOR^{27}$  であり、或いは、

$R^{42}$  及び  $R^{43}$  は、式：

## 【化 3 2】



30

の基であり、

$R^{44}$  は、水素、又は  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであり、

$R^{45}$  は、水素、又は  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであり、

$R^{68}$  及び  $R^{69}$  は、互いに独立して、1 個若しくは 2 個の酸素原子で中断されることがで  
きる  $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、とりわけ  $C_1 \sim C_{12}$  アルキルであり、

$R^{70}$ 、 $R^{71}$ 、 $R^{72}$ 、 $R^{73}$ 、 $R^{74}$ 、 $R^{75}$ 、 $R^{76}$ 、 $R^{90}$ 、 $R^{91}$ 、 $R^{92}$ 、及び  $R^{93}$  は、互いに  
独立して、H、CN、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_6 \sim C_{10}$  アリール、 $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、  
 $C_1 \sim C_{24}$  アルキルチオ、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $-CONR^{25}R^{26}$ 、又は  $-COOR^{27}$  であり、

$R^{25}$  及び  $R^{26}$  は、互いに独立して、H、 $C_6 \sim C_{18}$  アリール、 $C_7 \sim C_{18}$  アラルキル、又  
は  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであり、並びに

40

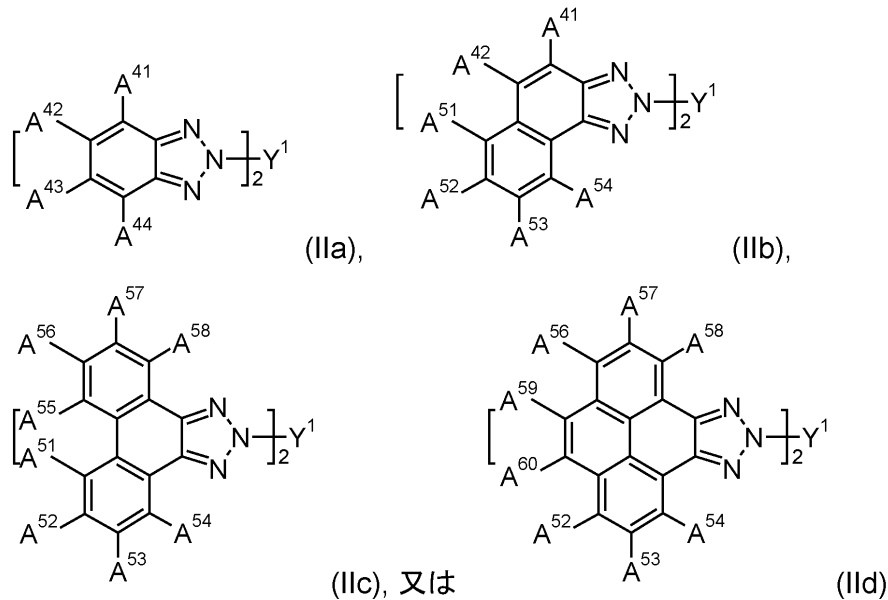
$R^{27}$  は、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキルである) の化合物である、請求項 1 に記載の 2 H - ベンゾ  
トリアゾール化合物。

## 【請求項 7】

2 H - ベンゾトリアゾール化合物が、式：



## 【化 3 3】



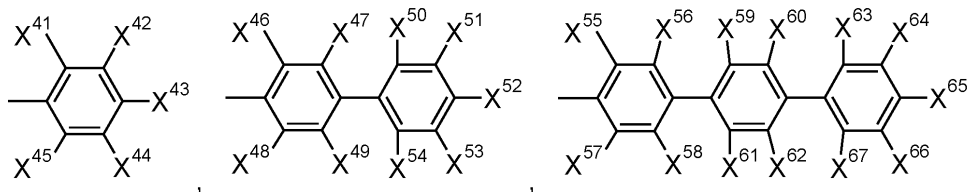
10

(式中、

 $A^{52}$  又は  $A^{43}$  は、式：

20

## 【化 3 4】



の基であり、

式中、

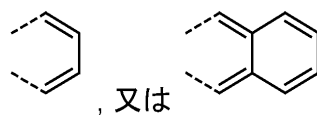
30

$X^{41}$ 、 $X^{42}$ 、 $X^{43}$ 、 $X^{44}$ 、 $X^{45}$ 、 $X^{46}$ 、 $X^{47}$ 、 $X^{48}$ 、 $X^{49}$ 、 $X^{50}$ 、 $X^{51}$ 、 $X^{52}$ 、 $X^{53}$ 、 $X^{54}$ 、 $X^{55}$ 、 $X^{56}$ 、 $X^{57}$ 、 $X^{58}$ 、 $X^{59}$ 、 $X^{60}$ 、 $X^{61}$ 、 $X^{62}$ 、 $X^{63}$ 、 $X^{64}$ 、 $X^{65}$ 、 $X^{66}$ 、及び  $X^{67}$  は、互いに独立して、H、フッ素、CN、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$ ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、又は  $C_1 \sim C_{24}$ ハロアルキル、場合により 1 個以上の  $C_1 \sim C_8$ アルキル、又は  $C_1 \sim C_8$ アルコキシ基で置換されることができる  $C_6 \sim C_{10}$ アリール； $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキルチオ、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $-CONR^{25}R^{26}$ 、又は  $-COOR^{27}$ であるか、或いは

互いに隣接する 2 個の基  $X^{41}$ 、 $X^{42}$ 、 $X^{43}$ 、 $X^{44}$ 、 $X^{45}$ 、 $X^{46}$ 、 $X^{47}$ 、 $X^{48}$ 、 $X^{49}$ 、 $X^{50}$ 、 $X^{51}$ 、 $X^{52}$ 、 $X^{53}$ 、 $X^{54}$ 、 $X^{55}$ 、 $X^{56}$ 、 $X^{57}$ 、 $X^{58}$ 、 $X^{59}$ 、 $X^{60}$ 、 $X^{61}$ 、 $X^{62}$ 、 $X^{63}$ 、 $X^{64}$ 、 $X^{65}$ 、 $X^{66}$ 、及び  $X^{67}$  は基

40

## 【化 3 5】



であり、

ここで、

好ましくは置換基  $X^{41}$ 、 $X^{42}$ 、 $X^{43}$ 、 $X^{44}$ 、 $X^{45}$ 、 $X^{46}$ 、 $X^{47}$ 、 $X^{48}$ 、 $X^{49}$ 、 $X^{50}$ 、 $X$

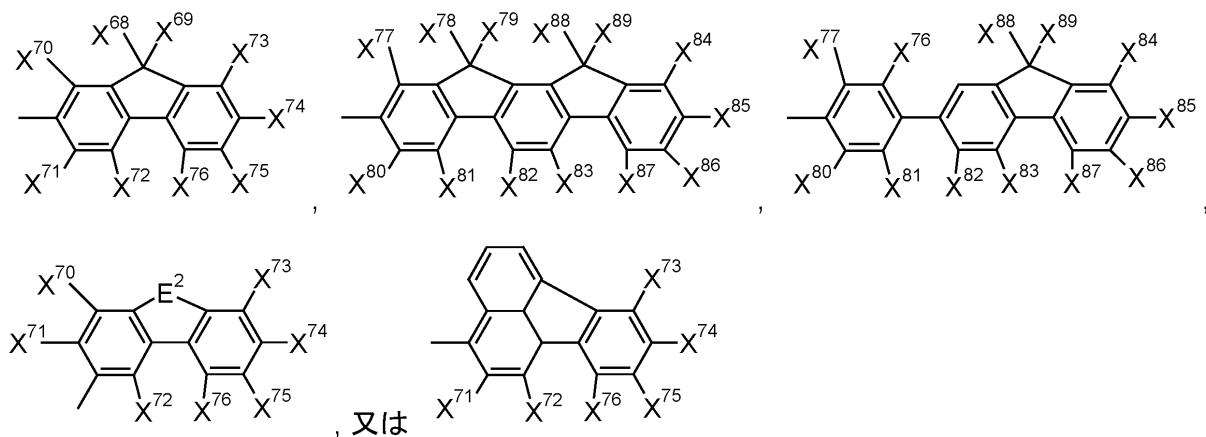
50



$X^{51}$ 、 $X^{52}$ 、 $X^{53}$ 、 $X^{54}$ 、 $X^{55}$ 、 $X^{56}$ 、 $X^{57}$ 、 $X^{58}$ 、 $X^{59}$ 、 $X^{60}$ 、 $X^{61}$ 、 $X^{62}$ 、 $X^{63}$ 、 $X^{64}$ 、 $X^{65}$ 、 $X^{66}$ 、及び $X^{67}$ の内の少なくとも1個が、フッ素、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$ ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、又は $C_1 \sim C_{24}$ ハロアルキルであり、或いは

$A^{43}$ 又は $A^{52}$ は式：

【化36】



10

20

の基であり、

式中、

$X^{68}$ 、 $X^{69}$ 、 $X^{78}$ 、 $X^{79}$ 、 $X^{88}$ 、及び $X^{89}$ は、互いに独立して、1個若しくは2個の酸素原子で中断されることができる $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、とりわけ $C_1 \sim C_{12}$ アルキルであり

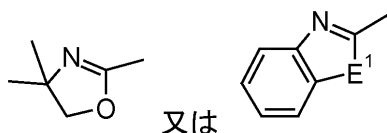
、 $X^{70}$ 、 $X^{71}$ 、 $X^{72}$ 、 $X^{73}$ 、 $X^{74}$ 、 $X^{75}$ 、 $X^{76}$ 、 $X^{77}$ 、 $X^{80}$ 、 $X^{81}$ 、 $X^{82}$ 、 $X^{83}$ 、 $X^{84}$ 、 $X^{85}$ 、 $X^{86}$ 及び $X^{87}$ は、互いに独立して、H、CN、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{10}$ アリール、 $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキルチオ、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $-CONR^{25}R^{26}$ 、又は $-COOR^{27}$ であり

$E^2$ は、 $-S-$ 、 $-O-$ 、又は $-NR^{25'}$ であり、

30

$A^{41}$ 、 $A^{42}$ 及び $A^{44}$ は、互いに独立して、水素、ハロゲン、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$ ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ ハロアルキル、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $-CONR^{25}R^{26}$ 、又は $-COOR^{27}$ 、或いは $C_2 \sim C_{10}$ ヘテロアリール、とりわけ式：

【化37】



40

の基であるか、或いは

$A^{51}$ 、 $A^{53}$ 、 $A^{54}$ 、 $A^{55}$ 、 $A^{56}$ 、 $A^{57}$ 、 $A^{58}$ 、 $A^{59}$ 及び $A^{60}$ は、互いに独立して、H、フッ素、CN、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキルチオ、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$ ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、 $C_1 \sim C_{24}$ ハロアルキル、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $-CONR^{25}R^{26}$ 、又は $-COOR^{27}$ 、或いは $C_2 \sim C_{10}$ ヘテロアリールであり、

50

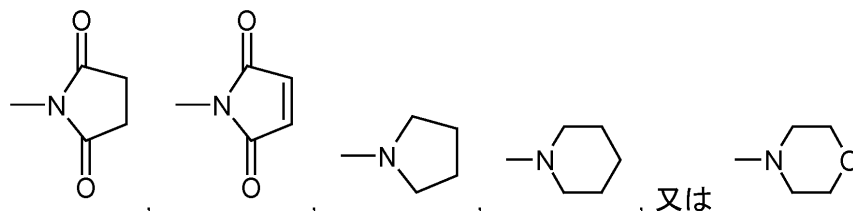


$E^1$  は、O、S、又は  $-NR^{25'}$  - であり、  
ここで、

$R^{25}$  及び  $R^{26}$  は、互いに独立して、H、 $C_6 \sim C_{18}$  アリール、 $C_7 \sim C_{18}$  アラルキル、又は  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであるか、或いは

$R^{25}$  及び  $R^{26}$  は、一緒になって、5員環又は6員環、特に

【化38】



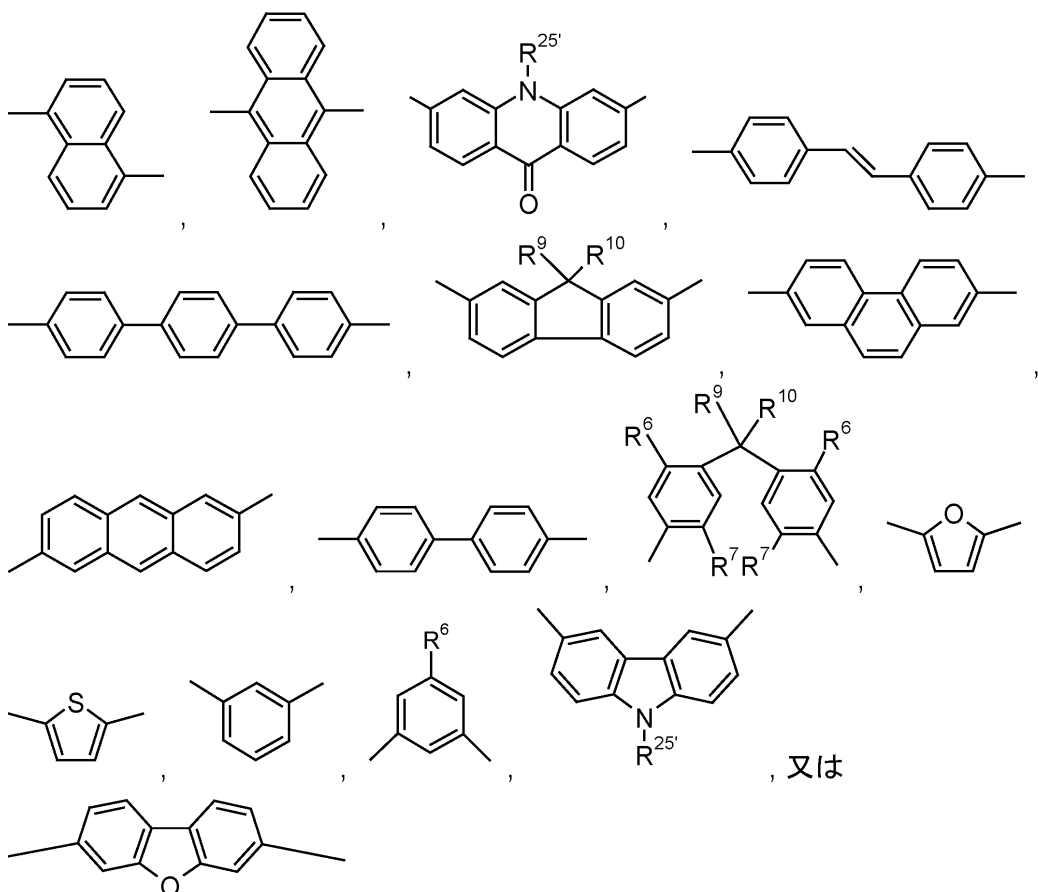
10

を形成し、

$R^{27}$  は、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであり、並びに

$Y^1$  は、式：

【化39】



20

30

40

の基であり、

式中、

$R^6$  は、 $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、又は  $-O-C_7 \sim C_{25}$  アラルキル、 $R^7$  は、H、又は  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであり、

$R^9$  及び  $R^{10}$  は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、とりわけ1個若しくは2個の酸素原子で中断されることが出来る  $C_4 \sim C_{12}$  アルキルであり、並びに

$R^{25'}$  は、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、又は  $C_6 \sim C_{10}$  アリールである) の化合物である、請求

50

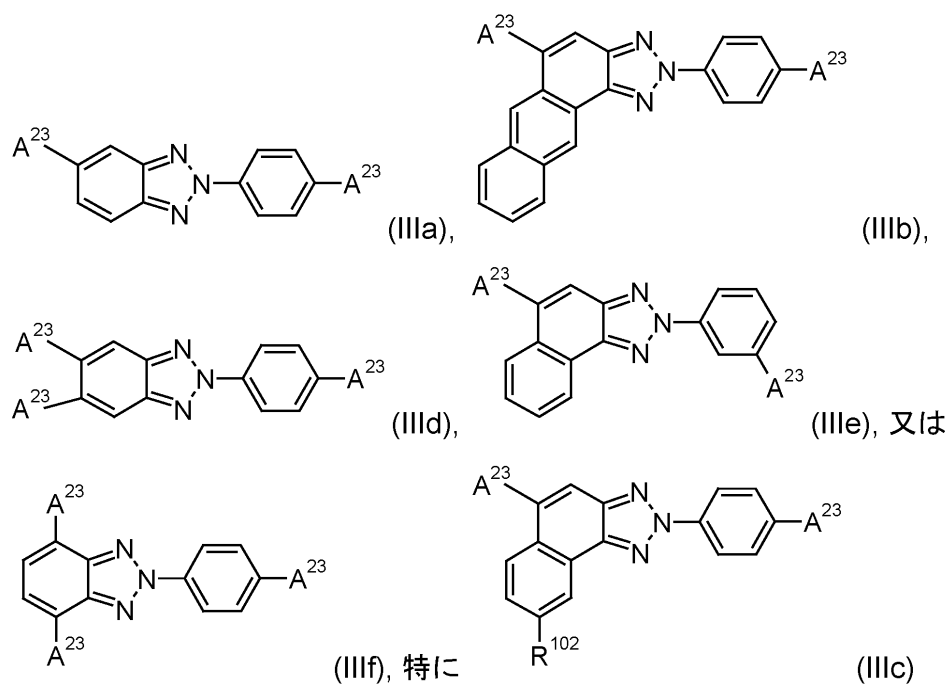


項 1 に記載の 2 H - ベンゾトリアゾール化合物。

【請求項 8】

2 H - ベンゾトリアゾールが、式：

【化 4 0】



10

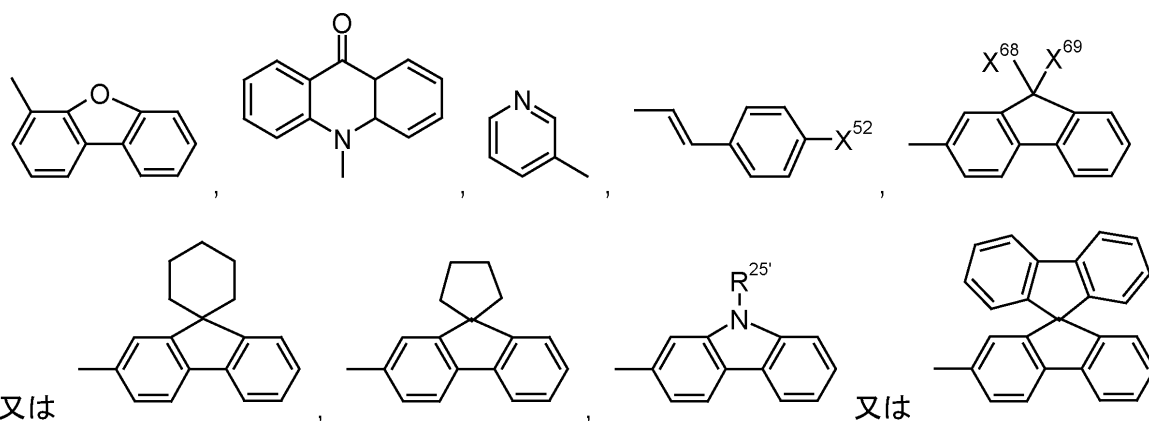
20

(式中、

$R^{102}$  は、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、とりわけ  $C_1 \sim C_{12}$  アルキルであり、特に H であり、

$A^{23}$  は、式：

【化 4 1】



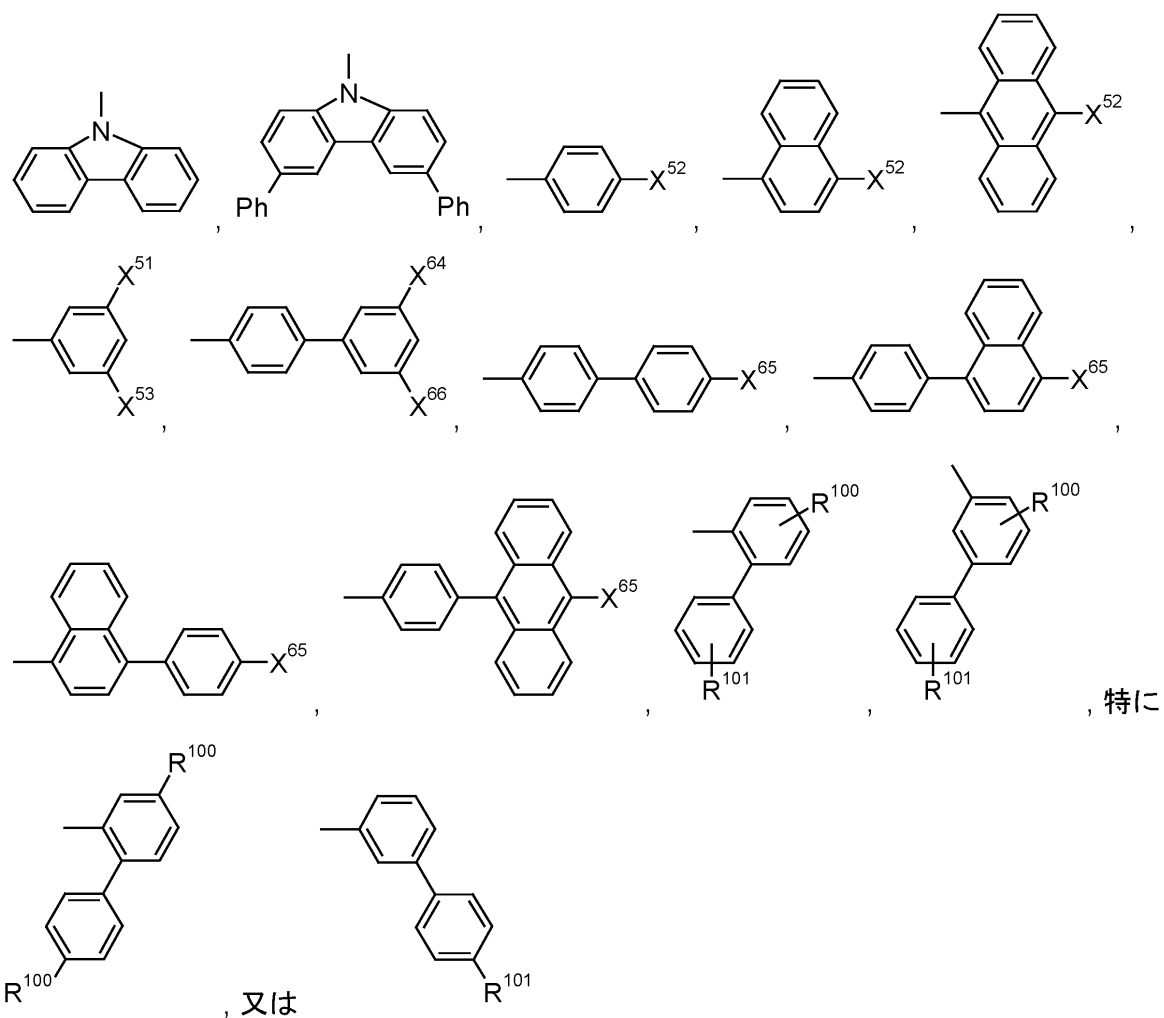
30

40

の基であるか、或いは式：



## 【化 4 2】



10

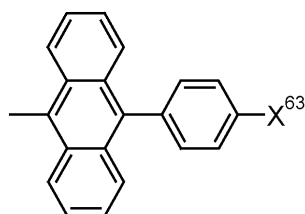
20

の基であり、

式中、

$R^{100}$  及び  $R^{101}$  は、互いに独立して、H、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、とりわけ  $C_1 \sim C_{12}$  アルキル、極めて殊に tert - ブチル、又は

## 【化 4 3】



40

であり、

ここで、

$X^{51}$ 、 $X^{52}$ 、 $X^{53}$ 、 $X^{63}$ 、 $X^{64}$ 、 $X^{65}$ 、及び  $X^{66}$  は、互いに独立して、フッ素、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、とりわけ  $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、極めて殊に tert - ブチル、場合により 1 個若しくは 2 個の  $C_1 \sim C_8$  アルキル基、又は 1 - アダマンチルにより置換されることが出来る  $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、とりわけシクロヘキシル、 $C_1 \sim C_{24}$  ペルフルオロアルキル、とりわけ  $CF_3$  のような  $C_1 \sim C_{12}$  ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$  ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、 $NR^{25}R^{26}$  であり、

50

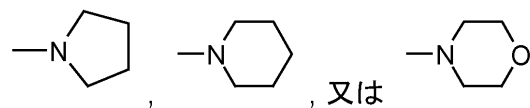


ここで、

$R^{25}$  及び  $R^{26}$  は、1 個若しくは 2 個の  $C_1 \sim C_{24}$  アルキル基により置換されることが  
 できる  $C_6 \sim C_{14}$  アリール、とりわけフェニルであるか、或いは

$R^{25}$  及び  $R^{26}$  は、一緒になって、5 員環又は 6 員複素環、とりわけ

【化 4 4】

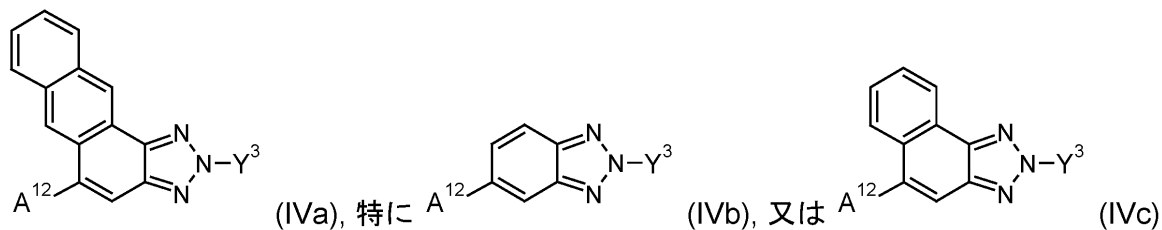


10

を形成する) の化合物であるか、或いは

式：

【化 4 5】

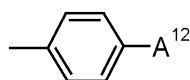


20

(式中、

$Y^3$  は、上記と同義であるか、あるいは

【化 4 6】

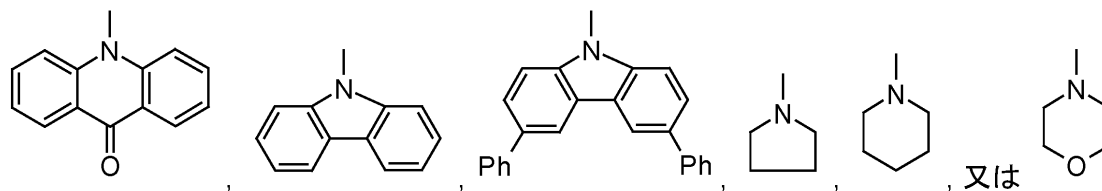


であり、

$A^{12}$  は、 $NR^{25}R^{26}$ 、

30

【化 4 7】



であり、

ここで、

$R^{25}$  及び  $R^{26}$  は、場合により 1 個若しくは 2 個の  $C_1 \sim C_8$  アルキル基、又は  $C_1 \sim C_8$  アルコキシ基により置換されることが  
 できる  $C_6 \sim C_{14}$  アリール、とりわけ、フェニル、1 - ナフチル、2 - ナフチルである) の化合物であるか、或いは

式 I V a、I V b、又は I V c

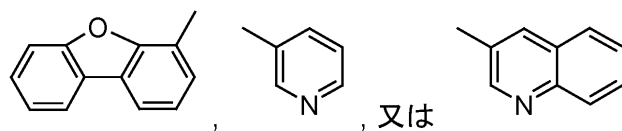
(式中、

$A^{12}$  は、

40

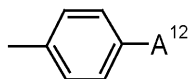


【化 4 8】



であり、  
Y<sup>3</sup>は、

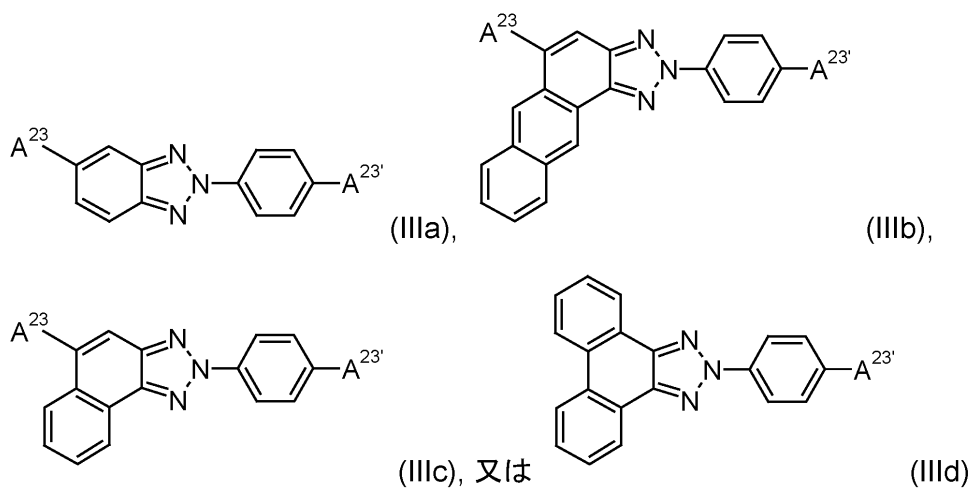
【化 4 9】



10

である)の化合物であるか、或いは  
式：

【化 5 0】

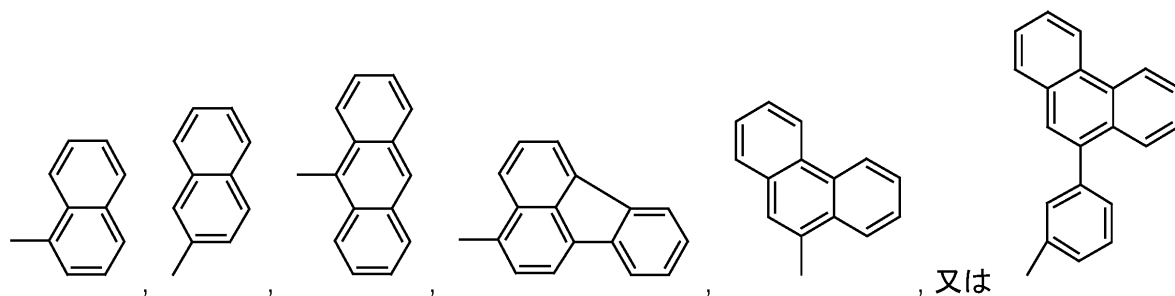


20

30

(式中、  
A<sup>23</sup>及びA<sup>23'</sup>は、互いに独立して、式：

【化 5 1】

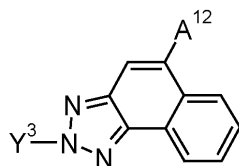


40

の基である)の化合物であるか、或いは  
式 I a、I b、I c 又は I d の化合物、とりわけ



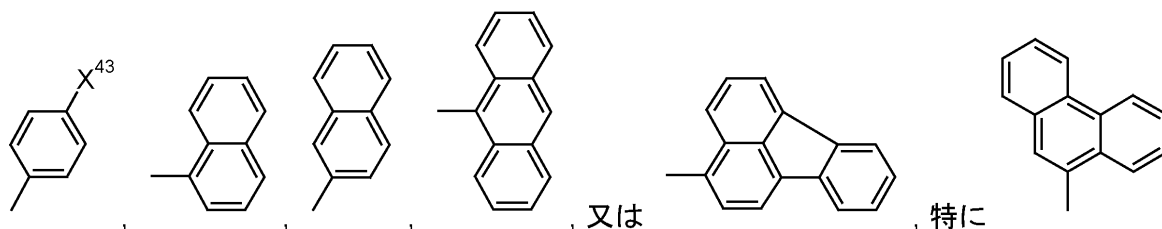
【化 5 2】



(ここで、  
A<sup>12</sup>は、H、式：

【化 5 3】

10



の基であり、

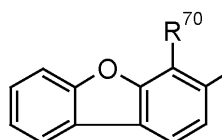
式中、

20

X<sup>43</sup>は、C<sub>1</sub>～C<sub>24</sub>アルキル、とりわけC<sub>1</sub>～C<sub>12</sub>アルキルであり、

Y<sup>3</sup>は、式：

【化 5 4】



の基であり、

30

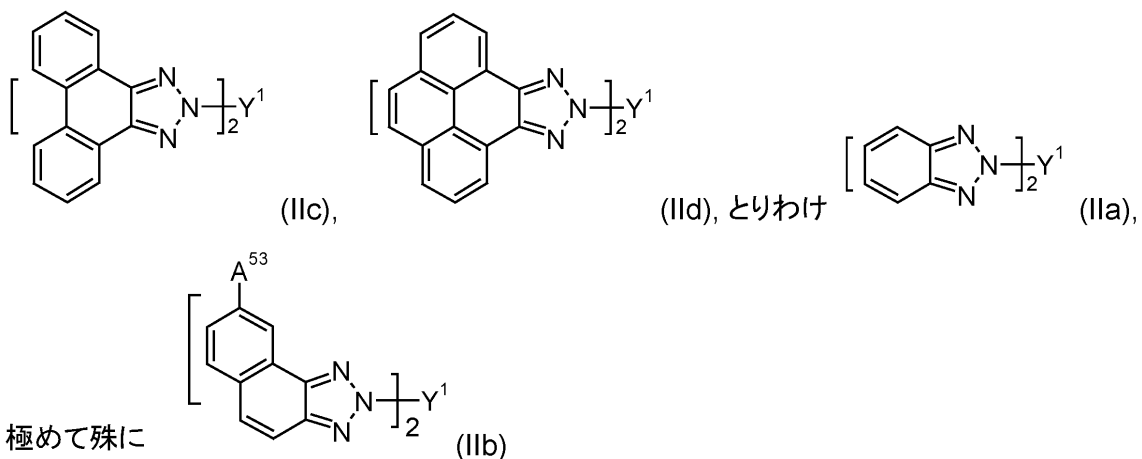
式中、

R<sup>70</sup>は、C<sub>1</sub>～C<sub>24</sub>アルキル、とりわけC<sub>1</sub>～C<sub>24</sub>アルコキシである)である、請求項1に記載の2H-ベンゾトリアゾール化合物。

【請求項9】

2H-ベンゾトリアゾールが、式：

【化 5 5】



40

50

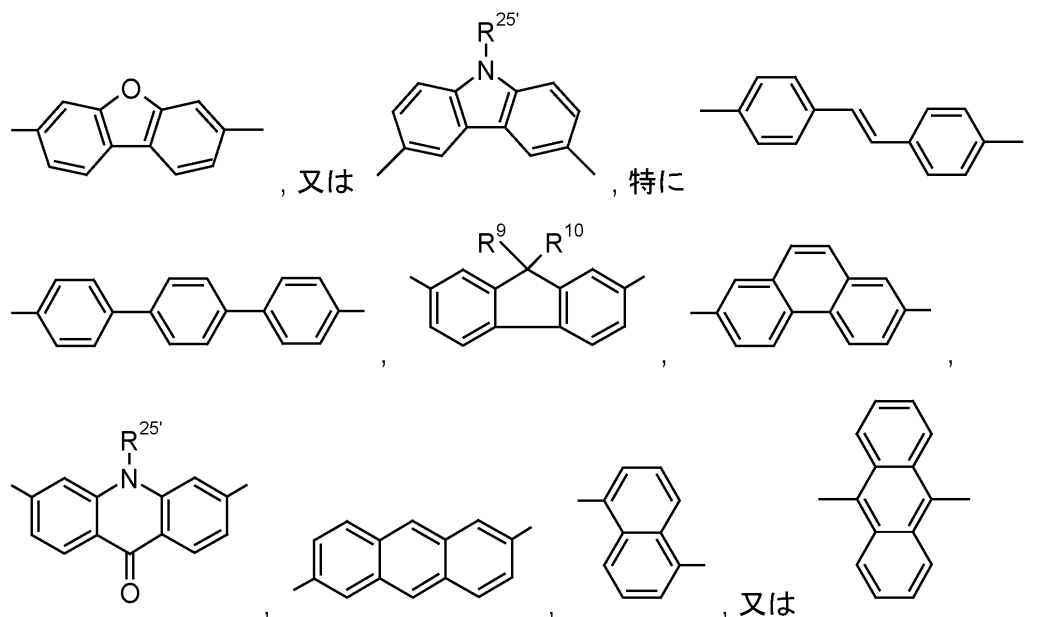


(式中、

$A^{53}$  は、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、とりわけ  $C_4 \sim C_{12}$  アルキル、特に H であり、

$Y^1$  は、式：

【化 56】



10

20

の基であり、

式中、

$R^9$  及び  $R^{10}$  は、互いに独立して、1 個若しくは 2 個の酸素原子により中断されることができる  $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、とりわけ  $C_4 \sim C_{12}$  アルキルであり、

$R^{25'}$  は、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、とりわけ  $C_4 \sim C_{12}$  アルキルである) の化合物である、請求項 8 に記載の 2H-ベンゾトリアゾール化合物。

【請求項 10】

請求項 1 ～ 9 のいずれかに記載の 2H-ベンゾトリアゾール化合物を含む、エレクトロルミネセントデバイス。 30

【請求項 11】

エレクトロルミネセントデバイスが、

- (a) 陽極
- (b) 正孔注入層及び / 又は正孔輸送層
- (c) 発光層
- (d) 場合により電子輸送層並びに
- (e) 陰極

を、この順序で含む、請求項 10 に記載のエレクトロルミネセントデバイス。

【請求項 12】

2H-ベンゾトリアゾール化合物が発光層を形成する、請求項 11 に記載のエレクトロルミネセントデバイス。

【請求項 13】

電子写真光受信機、光電変換器、太陽電池、イメージセンサ、色素レーザー及びエレクトロルミネセントデバイスのための、請求項 1 ～ 9 のいずれかに記載の 2H-ベンゾトリアゾール化合物の使用。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、有機-エレクトロルミネセント (EL) デバイス、特に耐久性を有する青色 50



発光有機 - エレクトロルミネセント層を含む E L デバイスに関する。有機 - エレクトロルミネセント層は、所定の 2 H - ベンゾトリアゾールを含む。

【 0 0 0 2 】

フルカラーディスプレイに適した有機系エレクトロルミネセントデバイスの開発に向けての進歩がなされてきた。一般に、E L デバイスは、1 個又は複数個の発光層、及び発光層を挟む一対の対向電極で構成される。電極の間に電界を印加することにより、システムへ電子及び正孔が注入され、その結果、光としてのエネルギーが放出される。

しかし、連続操作の下で適切な安定性を有する有機 E L デバイスは開発されていなかった。特に、青色発光の安定的な有機 E L デバイスについての要求が存続している。

U S - B - 5 , 1 0 4 , 7 4 0 は、クマリン又はアザクマリン誘導体及び正孔輸送層（両者とも有機化合物からなり、他方の上面上に積層されている）を含有する蛍光層を含むエレクトロルミネセント要素を教示している。開示されたクマリン化合物のいくつかは 2 H - ベンゾトリアゾール置換基を有する。

10

U S - B - 6 , 2 8 0 , 8 5 9 は、有機エレクトロルミネセントデバイス中の発光物質として使用する所定の多環芳香族有機化合物を開示している。2 H - ベンゾトリアゾール部分は、可能な二価の芳香族結合基の長いリストの中に載っている。

U S - B - 5 , 1 1 6 , 7 0 8 は、E L デバイス用の正孔輸送材料を目的としている。

U S - B - 5 , 5 1 8 , 8 2 4 は、少なくとも 1 個の層が熱架橋又は放射線照射架橋により得られる、1 個以上の有機層を含む E L デバイスを教示している。所定のベンゾトリアゾールが、適切な電荷輸送化合物として開示されている。

20

U S - B - 4 , 5 3 3 , 6 1 2 は、所定の 2 H - ベンゾトリアゾールを電荷担体 - 輸送化合物として含む電子写真記録物質を開示している。

J P 5 8 0 0 9 1 5 1 は、電子写真光受信機の電荷輸送層内での多環芳香族ベンゾトリアゾールシステムの使用を開示している。

U S - B - 5 , 6 2 9 , 3 8 9 は、2 - ( 2 H - ベンゾトリアゾール - 2 - イル ) - 4 , 6 - ビス ( 1 - メチル - 1 - フェニルエチル ) フェノールを含む層を有するエレクトロルミネセントデバイスを開示している。

E P 7 6 4 7 1 2 は、E L デバイス内の安定剤としてオルトヒドロキシフェニル - 2 H - ベンゾトリアゾールを開示している。

Tsutsui, et al., in Synthetic Metals, 1997 ( 85 ) 1201-1204 は、電子輸送層内の蛍光消光剤として 2 - ( 2 - ヒドロキシ - 5 - メチルフェニル ) - 2 H - ベンゾトリアゾールを開示している。

30

U S - B - 2 , 7 8 4 , 1 8 3 , 2 , 7 1 3 , 0 5 6 , 2 , 7 8 4 , 1 9 7 , 3 , 2 8 8 , 7 8 6 , 3 , 3 4 1 , 5 3 0 , 5 , 0 0 6 , 6 6 2 , G B - A - 1 1 5 0 4 0 8 , D E - A - 1 0 5 2 4 0 5 , 及び D E - A - 1 9 1 9 1 8 1 は、蛍光増白剤として使用されるナフトベンゾトリアゾールを開示している。

U S - B - 3 , 7 9 3 , 3 1 5 は、蛍光増白剤としてスチルベニルベンゾトリアゾール誘導体を教示している。

Woessner, et al., in J. Phys. Chem., 1985 ( 89 ) , 3629-3636 は、2 - ( 2 - ヒドロキシ - 5 - メチルフェニル ) - 2 H ベンゾトリアゾール、及びそのメトキシ類似物の発光を研究した。

40

U S - B - 5 , 4 8 6 , 4 0 6 は、有機光発光デバイス内でのオルトヒドロキシフェニル - 2 H - ベンゾトリアゾールの金属錯体の使用を教示している。

J P 0 0 2 5 6 6 6 7 及び J P 9 8 1 4 0 1 4 5 は、エレクトロルミネセントデバイス内で使用するオルトヒドロキシフェニル - 2 H - ベンゾトリアゾールの金属錯体を開示している。

【 0 0 0 3 】

所定の 2 H - ベンゾトリアゾール誘導体が有機エレクトロルミネセントデバイス内で使用するのに適していることが見いだされている。特に、所定の 2 H - ベンゾトリアゾール誘導体は、耐久性が良好な適切な青色発光体である。

50

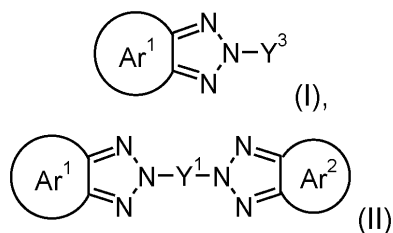


【 0 0 0 4 】

従って、本発明は、式：

【 0 0 0 5 】

【 化 5 7 】



10

【 0 0 0 6 】

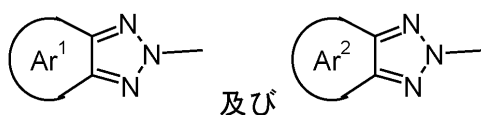
(式中、

 $Y^1$ は、二価結合基であり、

$Y^3$ は、場合により置換されることができ  $C_1 \sim C_{25}$  アルキル、とりわけ  $C_1 \sim C_4$  アルキル、アリール又はヘテロアリール、とりわけ場合により置換されることができ  $C_6 \sim C_{30}$  アリール、又は  $C_2 \sim C_{26}$  ヘテロアリールであり、

【 0 0 0 7 】

【 化 5 8 】



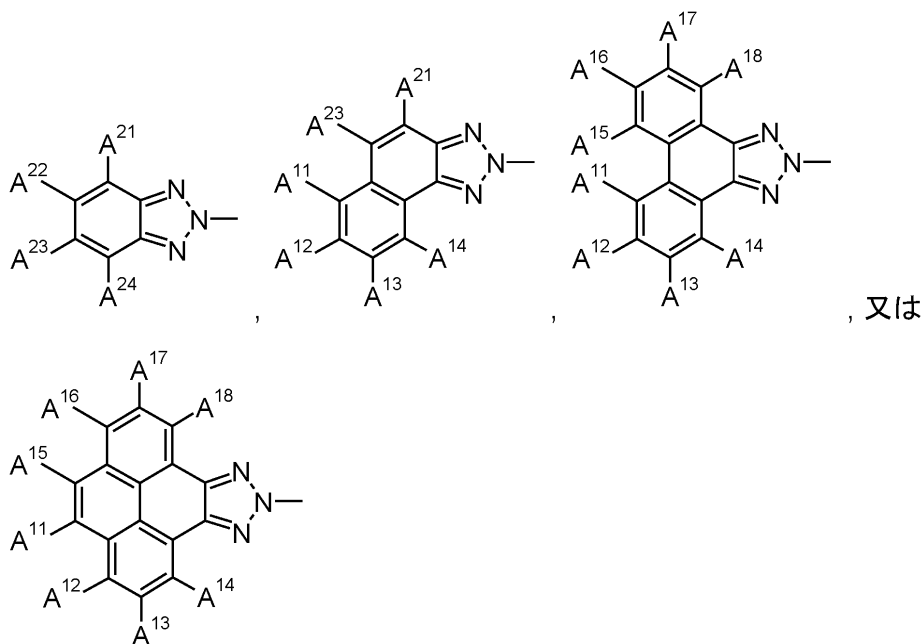
20

【 0 0 0 8 】

は、互いに独立して、式：

【 0 0 0 9 】

【 化 5 9 】



30

40

【 0 0 1 0 】

の基であり、

式中、

$A^{21}$ 、 $A^{22}$ 、 $A^{23}$ 、 $A^{24}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$ 、 $A^{15}$ 、 $A^{16}$ 、 $A^{17}$  及び  $A^{18}$  は、互いに独立して、H、ハロゲン、とりわけフッ素、ヒドロキシ、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、Eで置換され、及び/又はDで中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_1 \sim C_{24}$  ペルフルオロア

50

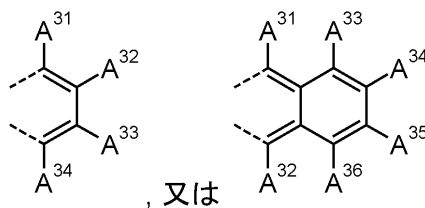


ルキル、 $C_6 \sim C_{14}$ ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、Gで置換され、及び/又はS -、- O -、又は-  $NR^{25}$  - で中断されている $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、-  $NR^{25}R^{26}$ 、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキルチオ、-  $PR^{32}R^{32}$ 、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルコキシ、Gで置換されている $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルコキシ、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール、Gで置換されている $C_6 \sim C_{24}$ アリール、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$ ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、又は $C_1 \sim C_{24}$ ハロアルキル； $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、G、フッ素、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$ ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、又は $C_1 \sim C_{24}$ ハロアルキルで置換されている $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール； $C_2 \sim C_{24}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{24}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、Eで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、Gで置換されている $C_7 \sim C_{25}$ アラルコキシ、Gで置換されている $C_7 \sim C_{25}$ アラルコキシ、又は-  $CO-R^{28}$ であるか、或いは

$A^{22}$ 及び $A^{23}$ 又は $A^{11}$ 及び $A^{23}$ は基：

【0011】

【化60】



20

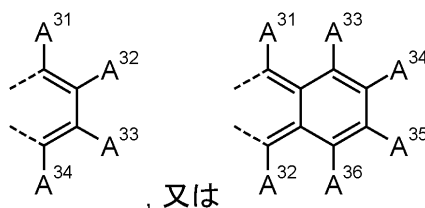
【0012】

であるか、或いは

互いに隣接する2個の基 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$ 、 $A^{15}$ 、 $A^{16}$ 、 $A^{17}$ 及び $A^{18}$ は、基：

【0013】

【化61】



30

【0014】

であり、

ここで、

$A^{31}$ 、 $A^{32}$ 、 $A^{33}$ 、 $A^{34}$ 及び $A^{36}$ は互いに独立して、H、ハロゲン、ヒドロキシ、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、Eで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$ ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、Gで置換され、及び/又はS -、- O -、又は-  $NR^{25}$  - で中断されている $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルコキシ、Gで置換されている $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルコキシ、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール、Gで置換されている $C_6 \sim C_{24}$ アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、Gで置換されている $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、 $C_2 \sim C_{24}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{24}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、Eで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、Gで置換されている $C_7 \sim C_{25}$ アラルコキシ、Gで置換されている $C_7 \sim C_{25}$ アラルコキシ、又は-  $CO-R^{28}$ であり、

50



ここで、

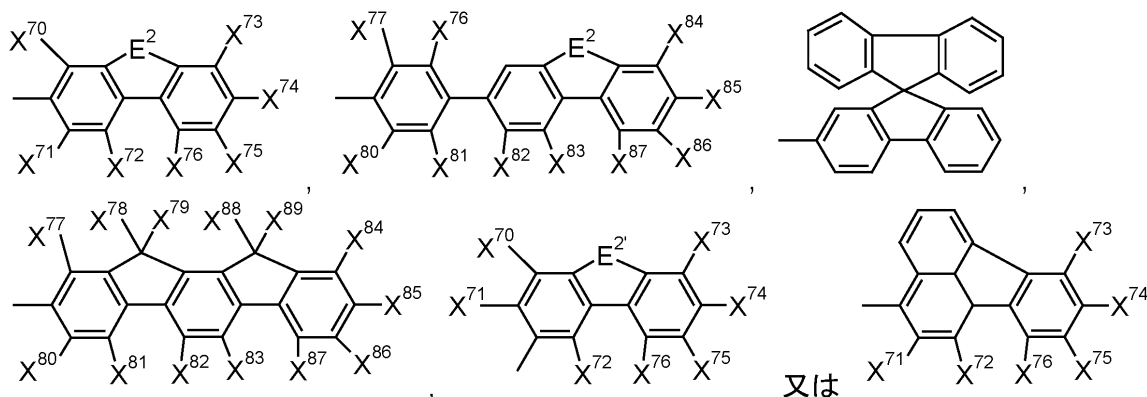
好ましくは置換基  $A^{21}$ 、 $A^{22}$ 、 $A^{23}$ 、 $A^{24}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$ 、 $A^{15}$ 、 $A^{16}$ 、 $A^{17}$  及び  $A^{18}$  のうちの少なくとも 1 個が、フッ素、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、 $C_7 \sim C_{25}$  アラルキル、 $C_1 \sim C_{24}$  ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$  ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、又は  $C_1 \sim C_{24}$  ハロアルキルで置換されている  $C_6 \sim C_{24}$  アリールであるか；或いはフッ素、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、 $C_7 \sim C_{25}$  アラルキル、 $C_1 \sim C_{24}$  ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$  ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、又は  $C_1 \sim C_{24}$  ハロアルキルで置換されている  $C_2 \sim C_{26}$  ヘテロアリール、とりわけチオフェニル、ピロリル、フラニル、ベンゾオキサゾリル、又はベンゾチアゾリルであり、

10

或いは式：

【0015】

【化62】



20

【0016】

の基であり、

式中、

$X^{70}$ 、 $X^{71}$ 、 $X^{72}$ 、 $X^{73}$ 、 $X^{74}$ 、 $X^{75}$ 、 $X^{76}$ 、 $X^{77}$ 、 $X^{80}$ 、 $X^{81}$ 、 $X^{82}$ 、 $X^{83}$ 、 $X^{84}$ 、 $X^{85}$ 、 $X^{86}$  及び  $X^{87}$  は、互いに独立して、E、及び / 又は D で中断されているものであり、 $C_1 \sim C_{24}$  ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$  ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、 $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、G で置換され、及び / 又は S -、- O -、又は - NR<sup>25</sup> - で中断されている  $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、- NR<sup>25</sup> R<sup>26</sup>、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキルチオ、- PR<sup>32</sup> R<sup>32</sup>、 $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルコキシ、G で置換されている  $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルコキシ、 $C_6 \sim C_{24}$  アリール、G、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、 $C_7 \sim C_{25}$  アラルキル、 $C_1 \sim C_{24}$  ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$  ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、又は  $C_1 \sim C_{24}$  ハロアルキルで置換されている  $C_6 \sim C_{24}$  アリール； $C_2 \sim C_{20}$  ヘテロアリール、G、フッ素、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、 $C_7 \sim C_{25}$  アラルキル、 $C_1 \sim C_{24}$  ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$  ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、又は  $C_1 \sim C_{24}$  ハロアルキルで置換されている  $C_2 \sim C_{20}$  ヘテロアリール； $C_2 \sim C_{24}$  アルケニル、 $C_2 \sim C_{24}$  アルキニル、 $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、E で置換され、及び / 又は D で中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、 $C_7 \sim C_{25}$  アラルキル、G で置換されている  $C_7 \sim C_{25}$  アラルキル、 $C_7 \sim C_{25}$  アラルコキシ、G で置換されている  $C_7 \sim C_{25}$  アラルコキシ、又は - CO - R<sup>28</sup> であるか、或いは

30

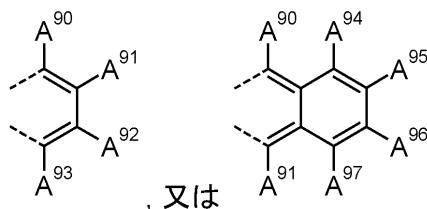
40

互いに隣接する 2 個の基  $X^{70}$ 、 $X^{71}$ 、 $X^{72}$ 、 $X^{73}$ 、 $X^{74}$ 、 $X^{75}$ 、 $X^{76}$ 、 $X^{77}$ 、 $X^{80}$ 、 $X^{81}$ 、 $X^{82}$ 、 $X^{83}$ 、 $X^{84}$ 、 $X^{85}$ 、 $X^{86}$  及び  $X^{87}$  は、基：

【0017】



## 【化 6 3】



## 【 0 0 1 8 】

であり、

10

ここで、

$A^{90}$ 、 $A^{91}$ 、 $A^{92}$ 、 $A^{93}$ 、 $A^{94}$ 、 $A^{95}$ 、 $A^{96}$ 及び $A^{97}$ は互いに独立して、H、ハロゲン、とりわけフッ素、ヒドロキシ、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、Eで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$ ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、Gで置換され、及び/又はS-、-O-、又は $-NR^{25}-$ で中断されている $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルコキシ、Gで置換されている $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルコキシ、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール、Gで置換されている $C_6 \sim C_{24}$ アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、Gで置換されている $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、 $C_2 \sim C_{24}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{24}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、Eで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、Gで置換されている $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルコキシ、Gで置換されている $C_7 \sim C_{25}$ アラルコキシ、又は $-CO-R^{28}$ であり、 $E^2$ は、 $-CR^{23}=CR^{24}-$ 、とりわけ $-CX^{68}X^{69}-$ であり、

20

$E^{2'}$ は、 $-SiR^{30}R^{31}-$ ； $-POR^{32}-$ ；とりわけS-、-O-、又は $-NR^{25'}-$ （式中、 $R^{25'}$ は、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、又は $C_6 \sim C_{10}$ アリールであり、ここで、

$X^{88}$ 、 $X^{89}$ 、 $X^{78}$ 、 $X^{79}$ 、 $X^{88}$ 及び $X^{89}$ は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール、Gで置換されている $C_6 \sim C_{24}$ アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、Gで置換されている $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、 $C_2 \sim C_{24}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{24}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、Eで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、又は $C_7 \sim C_{25}$ アラルコキシであるか、或いは

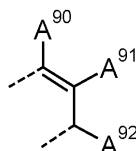
30

$X^{78}$ 及び $X^{79}$ 、及び/又は $X^{88}$ 及び $X^{89}$ は環、とりわけ5員環又は6員環を形成し、或いは

$X^{68}$ 及び $X^{70}$ 、 $X^{69}$ 及び $X^{73}$ 、 $X^{77}$ 及び $X^{78}$ 、及び/又は $X^{84}$ 及び $X^{89}$ は、基：

## 【 0 0 1 9 】

## 【化 6 4】



40

## 【 0 0 2 0 】

であり、

Dは、 $-CO-$ ； $-COO-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-O-$ ； $-NR^{25}-$ ； $-SiR^{30}R^{31}-$ ； $-POR^{32}-$ ； $-CR^{23}=CR^{24}-$ ；又は $-C-C-$ であり；並びにEは、 $-OR^{29}$ ； $-SR^{29}$ ； $-NR^{25}R^{26}$ ； $-COR^{28}$ ； $-COOR^{27}$ ； $-CONR^{25}R^{26}$ ； $-CN$ ； $-COOR^{27}$ ；又はハロゲン；であり、

Gは、E、又は $C_1 \sim C_{24}$ アルキルであり、

ここで、

50

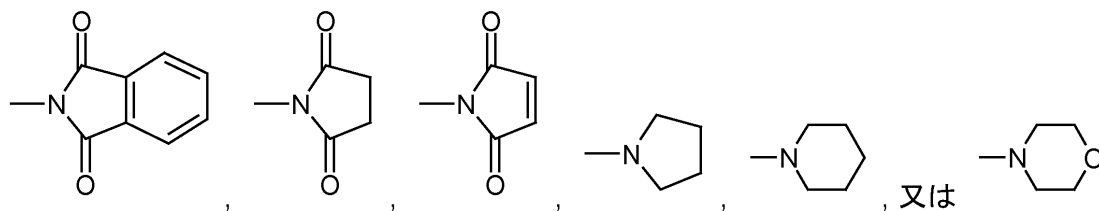


$R^{23}$ 、 $R^{24}$ 、 $R^{25}$  及び  $R^{26}$  は、互いに独立して、 $H$ ； $C_6 \sim C_{18}$  アリール； $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、又は  $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシで置換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリール； $C_1 \sim C_{24}$  アルキル；又は  $-O-$  で中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであり；或いは

$R^{25}$  及び  $R^{26}$  は、一緒になって、5員環又は6員環、特に

【0021】

【化65】



10

【0022】

を形成し、

$R^{27}$  及び  $R^{28}$  は、互いに独立して、 $H$ ； $C_6 \sim C_{18}$  アリール； $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、又は  $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシで置換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリール； $C_1 \sim C_{24}$  アルキル；又は  $-O-$  で中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであり、

$R^{29}$  は、 $H$ ； $C_6 \sim C_{18}$  アリール； $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、又は  $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシで置換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリール； $C_1 \sim C_{24}$  アルキル；又は  $-O-$  で中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであり、

20

$R^{30}$  及び  $R^{31}$  は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_6 \sim C_{18}$  アリール、又は  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルで置換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリールであり、並びに

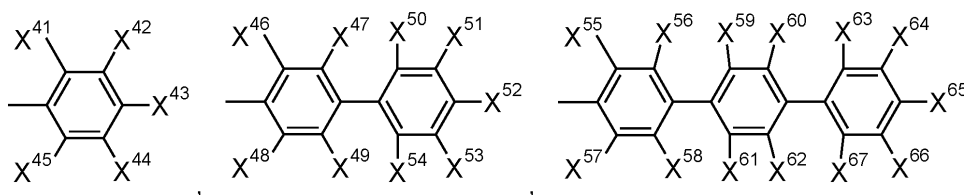
$R^{32}$  は、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_6 \sim C_{18}$  アリール、又は  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルで置換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリールである)の2H-ベンゾトリアゾール化合物に関する。

【0023】

本発明の好ましい実施態様においては、置換基  $A^{21}$ 、 $A^{22}$ 、 $A^{23}$ 、 $A^{24}$ 、 $A^{11}$ 、 $A^{12}$ 、 $A^{13}$ 、 $A^{14}$ 、 $A^{15}$ 、 $A^{16}$ 、 $A^{17}$  及び  $A^{18}$  の内の少なくとも1個、とりわけ  $A^{12}$ 、 $A^{21}$ 、及び / 又は  $A^{23}$  は、式：

【0024】

【化66】



30

【0025】

(式中、

$X^{41}$ 、 $X^{42}$ 、 $X^{43}$ 、 $X^{44}$ 、 $X^{45}$ 、 $X^{46}$ 、 $X^{47}$ 、 $X^{48}$ 、 $X^{49}$ 、 $X^{50}$ 、 $X^{51}$ 、 $X^{52}$ 、 $X^{53}$ 、 $X^{54}$ 、 $X^{55}$ 、 $X^{56}$ 、 $X^{57}$ 、 $X^{58}$ 、 $X^{59}$ 、 $X^{60}$ 、 $X^{61}$ 、 $X^{62}$ 、 $X^{63}$ 、 $X^{64}$ 、 $X^{65}$ 、 $X^{66}$ 、及び  $X^{67}$  は、互いに独立して、 $H$ 、フッ素、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、 $C_7 \sim C_{25}$  アラルキル、 $C_1 \sim C_{24}$  ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$  ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、又は  $C_1 \sim C_{24}$  ハロアルキル、場合によりEで置換され、及び / 又はDで中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、場合によりEで置換されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルケニル、場合によりGで置換されている  $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、場合によりGで置換されている  $C_5 \sim C_{12}$  シクロアル、場合によりGで置換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリール、場合によりEで置換され、及び / 又はDで中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、場合によりGで置換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリールオキシ、場合によりGで置換されている  $C_7 \sim C_{18}$  アリールアルコキシ、場合によりEで置換され、及び / 又はDで中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルチオ、場合によりGで置換されている

40

50

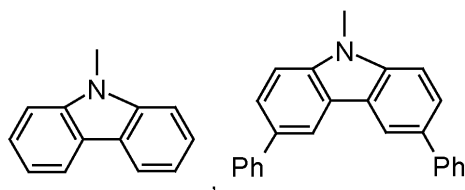


C<sub>2</sub> ~ C<sub>20</sub>ヘテロアリール、又は場合によりGで置換されているC<sub>6</sub> ~ C<sub>18</sub>アラルキルであるか、或いは

X<sup>43</sup>、X<sup>65</sup>又はX<sup>52</sup>は、式：

【0026】

【化67】



10

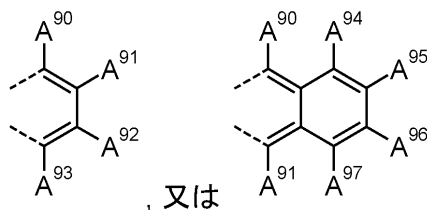
【0027】

の基であり、

互いに隣接する2個の基X<sup>41</sup>、X<sup>42</sup>、X<sup>43</sup>、X<sup>44</sup>、X<sup>45</sup>、X<sup>46</sup>、X<sup>47</sup>、X<sup>48</sup>、X<sup>49</sup>、X<sup>50</sup>、X<sup>51</sup>、X<sup>52</sup>、X<sup>53</sup>、X<sup>54</sup>、X<sup>55</sup>、X<sup>56</sup>、X<sup>57</sup>、X<sup>58</sup>、X<sup>59</sup>、X<sup>60</sup>、X<sup>61</sup>、X<sup>62</sup>、X<sup>63</sup>、X<sup>64</sup>、X<sup>65</sup>、及びX<sup>67</sup>は基：

【0028】

【化68】



20

【0029】

であり、

ここで、

A<sup>90</sup>、A<sup>91</sup>、A<sup>92</sup>、A<sup>93</sup>、A<sup>94</sup>、A<sup>95</sup>、A<sup>96</sup>及びA<sup>97</sup>は互いに独立して、H、ハロゲン、ヒドロキシ、C<sub>1</sub> ~ C<sub>24</sub>アルキル、Eで置換され、及び/又はDで中断されているC<sub>1</sub> ~ C<sub>24</sub>アルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>24</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>6</sub> ~ C<sub>14</sub>ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、C<sub>5</sub> ~ C<sub>12</sub>シクロアルキル、Gで置換され、及び/又はS-、-O-、又は-NR<sup>25</sup>-で中断されているC<sub>5</sub> ~ C<sub>12</sub>シクロアルキル、C<sub>5</sub> ~ C<sub>12</sub>シクロアルコキシ、Gで置換されているC<sub>5</sub> ~ C<sub>12</sub>シクロアルコキシ、C<sub>6</sub> ~ C<sub>24</sub>アリール、Gで置換されているC<sub>6</sub> ~ C<sub>24</sub>アリール、C<sub>2</sub> ~ C<sub>20</sub>ヘテロアリール、Gで置換されているC<sub>2</sub> ~ C<sub>20</sub>ヘテロアリール、C<sub>2</sub> ~ C<sub>24</sub>アルケニル、C<sub>2</sub> ~ C<sub>24</sub>アルキニル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>24</sub>アルコキシ、Eで置換され、及び/又はDで中断されているC<sub>1</sub> ~ C<sub>24</sub>アルコキシ、C<sub>7</sub> ~ C<sub>25</sub>アラルキル、Gで置換されているC<sub>7</sub> ~ C<sub>25</sub>アラルキル、C<sub>7</sub> ~ C<sub>25</sub>アラルコキシ、Eで置換されているC<sub>7</sub> ~ C<sub>25</sub>アラルコキシ、又は-CO-R<sup>28</sup>であり、

30

ここで、

R<sup>25</sup>、R<sup>26</sup>及びR<sup>28</sup>、D、E及びGは上記と同義であり、

好ましくは置換基X<sup>41</sup>、X<sup>42</sup>、X<sup>43</sup>、X<sup>44</sup>、X<sup>45</sup>、X<sup>46</sup>、X<sup>47</sup>、X<sup>48</sup>、X<sup>49</sup>、X<sup>50</sup>、X<sup>51</sup>、X<sup>52</sup>、X<sup>53</sup>、X<sup>54</sup>、X<sup>55</sup>、X<sup>56</sup>、X<sup>57</sup>、X<sup>58</sup>、X<sup>59</sup>、X<sup>60</sup>、X<sup>61</sup>、X<sup>62</sup>、X<sup>63</sup>、X<sup>64</sup>、X<sup>65</sup>、X<sup>66</sup>、及びX<sup>67</sup>の内の少なくとも1個が、フッ素、-NR<sup>25</sup>R<sup>26</sup>、C<sub>1</sub> ~ C<sub>24</sub>アルキル、C<sub>5</sub> ~ C<sub>12</sub>シクロアルキル、C<sub>7</sub> ~ C<sub>25</sub>アラルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>24</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>6</sub> ~ C<sub>14</sub>ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、又はC<sub>1</sub> ~ C<sub>24</sub>ハロアルキルである)の基である。

40

【0030】

本発明の別の好ましい実施態様においては、置換基A<sup>21</sup>、A<sup>22</sup>、A<sup>23</sup>、A<sup>24</sup>、A<sup>11</sup>、A<sup>12</sup>、A<sup>13</sup>、A<sup>14</sup>、A<sup>15</sup>、A<sup>16</sup>、A<sup>17</sup>及びA<sup>18</sup>の内の少なくとも1個、とりわけA<sup>12</sup>、及び

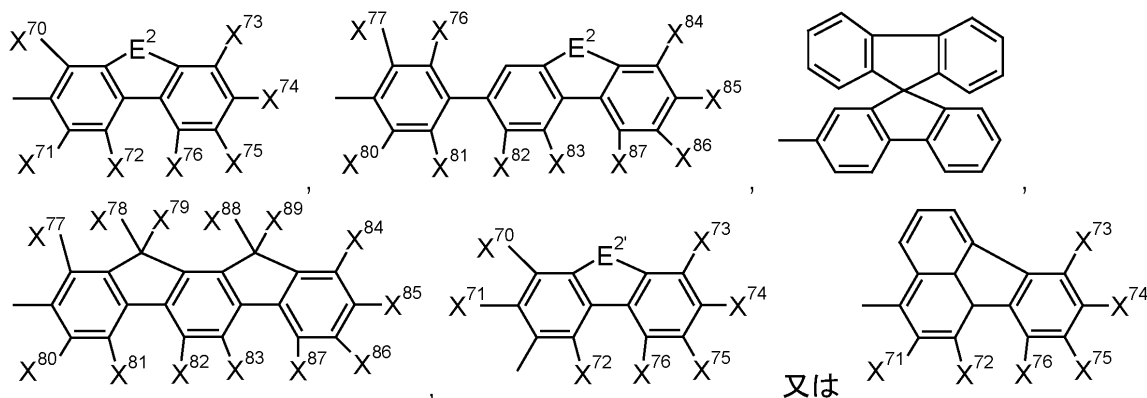
50



/ 又は  $A^{23}$  は、式：

【0031】

【化69】



10

【0032】

(式中、

$X^{68}$ 、 $X^{69}$ 、 $X^{78}$ 、 $X^{79}$ 、 $X^{88}$  及び  $X^{89}$  は、互いに独立して、1個若しくは2個の酸素原子で中断されることができる  $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、とりわけ  $C_1 \sim C_{12}$  アルキルであり、  
 $X^{70}$ 、 $X^{71}$ 、 $X^{72}$ 、 $X^{73}$ 、 $X^{74}$ 、 $X^{75}$ 、 $X^{76}$ 、 $X^{77}$ 、 $X^{80}$ 、 $X^{81}$ 、 $X^{82}$ 、 $X^{83}$ 、 $X^{84}$ 、  
 $X^{85}$ 、 $X^{86}$  及び  $X^{87}$  は、互いに独立して、H、CN、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_6 \sim C_{10}$  アリール、 $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキルチオ、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $-CONR^{25}R^{26}$ 、  
 又は  $-COOR^{27}$  であり、

20

ここで

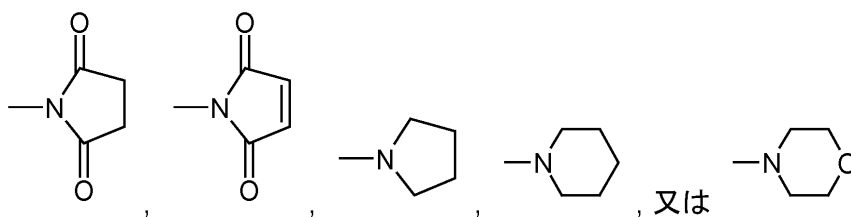
$R^{25}$  及び  $R^{26}$  は、互いに独立して、H、 $C_6 \sim C_{18}$  アリール、 $C_7 \sim C_{18}$  アラルキル、又は  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであり、及び

$R^{27}$  は、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであるか、或いは

$R^{25}$  及び  $R^{26}$  は、一緒になって、5員環又は6員環、特に

【0033】

【化70】



30

【0034】

を形成し、並びに

$E^2$  は、 $-S-$ 、 $-O-$ 、又は  $-NR^{25}-$  であり、

ここで、

$R^{25}$  は、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、又は  $C_6 \sim C_{10}$  アリールである)の基である。

40

【0035】

2H-ベンゾトリアゾール化合物(又は化合物群)は、約520nm未満、とりわけ約380~約520nmの間で発光するべきである。2H-ベンゾトリアゾール化合物(又は化合物群)は、約(0.12、0.05)~約(0.16、0.10)の間のNTSC座標、とりわけ約(0.14、0.08)のNTSC座標を有するべきである。

【0036】

2H-ベンゾトリアゾール化合物(又は化合物群)は、約150、とりわけ約200、より好ましくは約250、最も好ましくは約300を超える融点を有するべきである。

50

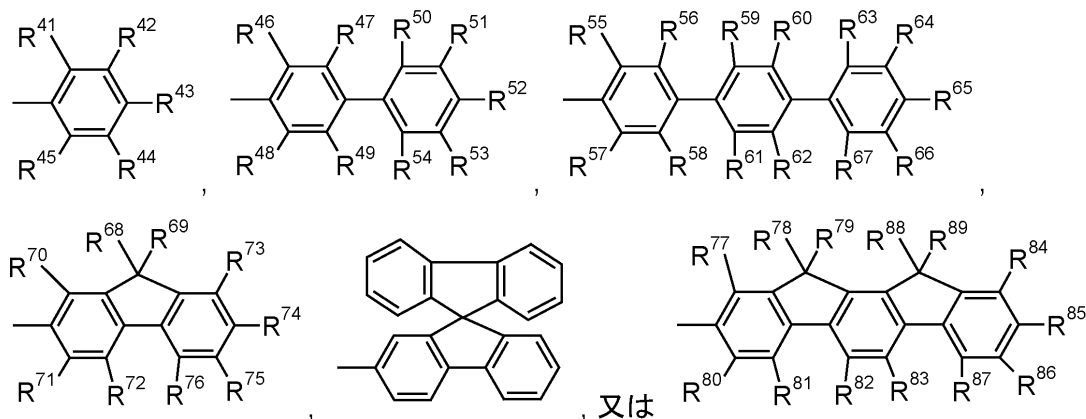


【 0 0 3 7 】

好ましくは、 $Y^3$ は、式：

【 0 0 3 8 】

【 化 7 1 】



10

【 0 0 3 9 】

(式中、

$R^{41}$ 、 $R^{42}$ 、 $R^{43}$ 、 $R^{44}$ 、 $R^{45}$ 、 $R^{46}$ 、 $R^{47}$ 、 $R^{48}$ 、 $R^{49}$ 、 $R^{50}$ 、 $R^{51}$ 、 $R^{52}$ 、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ 、 $R^{55}$ 、 $R^{56}$ 、 $R^{57}$ 、 $R^{58}$ 、 $R^{59}$ 、 $R^{60}$ 、 $R^{61}$ 、 $R^{62}$ 、 $R^{63}$ 、 $R^{64}$ 、 $R^{65}$ 、 $R^{66}$ 、 $R^{67}$ 、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$ 、 $R^{72}$ 、 $R^{73}$ 、 $R^{74}$ 、 $R^{75}$ 、 $R^{76}$ 、 $R^{77}$ 、 $R^{80}$ 、 $R^{81}$ 、 $R^{82}$ 、 $R^{83}$ 、 $R^{84}$ 、 $R^{85}$ 、 $R^{86}$ 、及び $R^{87}$ は、互いに独立して、H、フッ素、 $C_1 \sim C_{24}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$ ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、 $-NR^{25}R^{26}$ 、場合によりEで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、場合によりEで置換されている $C_1 \sim C_{24}$ アルケニル、場合によりGで置換されている $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、場合によりGで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ シクロアルコキシ、場合によりGで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール、場合によりEで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、場合によりGで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリールオキシ、場合によりGで置換されている $C_7 \sim C_{18}$ アリールアルコキシ、場合によりEで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルキルチオ、場合によりGで置換されている $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、又は場合によりGで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アラ

20

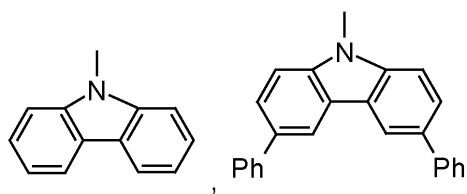
30

ルであるか、或いは

 $R^{43}$ 、 $R^{65}$ 又は $R^{52}$ は、式

【 0 0 4 0 】

【 化 7 2 】



40

【 0 0 4 1 】

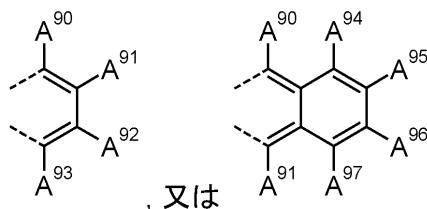
の基であるか、又は

互いに隣接する2個の基 $R^{41}$ 、 $R^{42}$ 、 $R^{43}$ 、 $R^{44}$ 、 $R^{45}$ 、 $R^{46}$ 、 $R^{47}$ 、 $R^{48}$ 、 $R^{49}$ 、 $R^{50}$ 、 $R^{51}$ 、 $R^{52}$ 、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ 、 $R^{55}$ 、 $R^{56}$ 、 $R^{57}$ 、 $R^{58}$ 、 $R^{59}$ 、 $R^{60}$ 、 $R^{61}$ 、 $R^{62}$ 、 $R^{63}$ 、 $R^{64}$ 、 $R^{65}$ 、 $R^{66}$ 、 $R^{67}$ 、 $R^{70}$ 、 $R^{71}$ 、 $R^{72}$ 、 $R^{73}$ 、 $R^{74}$ 、 $R^{75}$ 、 $R^{76}$ 、 $R^{77}$ 、 $R^{80}$ 、 $R^{81}$ 、 $R^{82}$ 、 $R^{83}$ 、 $R^{84}$ 、 $R^{85}$ 、 $R^{86}$ 、及び $R^{87}$ は、基：

【 0 0 4 2 】



## 【化 7 3】



## 【0043】

であり、

ここで、

$A^{90}$ 、 $A^{91}$ 、 $A^{92}$ 、 $A^{93}$ 、 $A^{94}$ 、 $A^{95}$ 、 $A^{96}$ 及び $A^{97}$ は互いに独立して、H、ハロゲン、とりわけフッ素、 $-NR^{25}R^{26}$ 、ヒドロキシ、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、Eで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$ ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、Gで置換され、及び/又はS-、-O-、又は $-NR^{25}-$ で中断されている $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルコキシ、Gで置換されている $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルコキシ、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール、Gで置換されている $C_6 \sim C_{24}$ アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、Gで置換されている $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、 $C_2 \sim C_{24}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{24}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、Eで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、Gで置換されている $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルコキシ、Gで置換されている $C_7 \sim C_{25}$ アラルコキシ、又は $-CO-R^{28}$ であり、

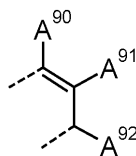
$R^{68}$ 、 $R^{69}$ 、 $R^{78}$ 、 $R^{79}$ 、 $R^{88}$ 及び $R^{89}$ は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール、Gで置換されている $C_6 \sim C_{24}$ アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、Gで置換されている $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、 $C_2 \sim C_{24}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{24}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、Eで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、或いは $C_7 \sim C_{25}$ アラルキルであるか、或いは

$R^{68}$ 及び $R^{69}$ 、 $R^{78}$ 及び $R^{79}$ 、及び/又は $R^{88}$ 及び $R^{89}$ は、環、とりわけ5員環又は6員環を形成し、或いは

$R^{68}$ 及び $R^{70}$ 、 $R^{69}$ 及び $R^{73}$ 、 $R^{77}$ 及び $R^{78}$ 、及び/又は $R^{84}$ 及び $R^{89}$ は、基：

## 【0044】

## 【化 7 4】



## 【0045】

であり、

ここで、

Dは、 $-CO-$ ； $-COO-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-O-$ ； $-NR^{25}-$ ； $-SiR^{30}R^{31}-$ ； $-POR^{32}-$ ； $-CR^{23}=CR^{24}-$ ；又は $-C-C-$ であり；並びに  
Eは、 $-OR^{29}$ ； $-SR^{29}$ ； $-NR^{25}R^{26}$ ； $-COR^{28}$ ； $-COOR^{27}$ ； $-CONR^{25}$ ； $R^{26}$ ； $-CN$ ； $-OCOOR^{27}$ ；又はハロゲン；であり、

Gは、E、又は $C_1 \sim C_{24}$ アルキルであり、

ここで、

$R^{23}$ 、 $R^{24}$ 、 $R^{25}$ 及び $R^{26}$ は、互いに独立して、H； $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、又は $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{24}$ アル

10

20

30

40

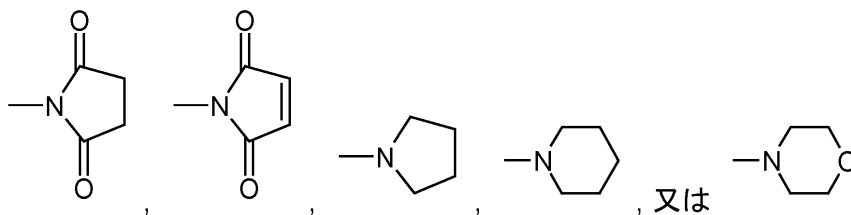
50



キル；又は - O - で中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであり；或いは  
 $R^{25}$  及び  $R^{26}$  は、一緒になって、5員環又は6員環、特に

【0046】

【化75】



10

【0047】

を形成し、

$R^{27}$  及び  $R^{28}$  は、互いに独立して、H； $C_6 \sim C_{18}$  アリール； $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、又は  
 $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシで置換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリール； $C_1 \sim C_{24}$  アルキル；又は -  
 O - で中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであり、

$R^{29}$  は、H； $C_6 \sim C_{18}$  アリール； $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、又は  $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシで置  
 換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリール； $C_1 \sim C_{24}$  アルキル；又は - O - で中断されている  $C_1$   
 $\sim C_{24}$  アルキルであり、

$R^{30}$  及び  $R^{31}$  は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_6 \sim C_{18}$  アリール、又は  $C_1$   
 $\sim C_{24}$  アルキルで置換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリールであり、並びに

20

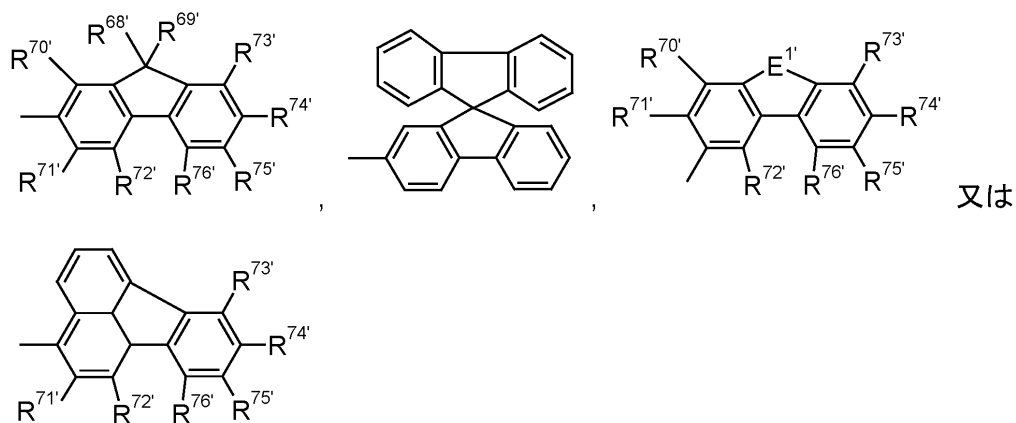
$R^{32}$  は、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_6 \sim C_{18}$  アリール、又は  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルで置換され  
 ている  $C_6 \sim C_{18}$  アリールであり、

或いは、

$R^{43}$ 、又は  $R^{52}$  は、式：

【0048】

【化76】



30

【0049】

40

の基であり、

式中、

$R^{68'}$  及び  $R^{69'}$  は、互いに独立して、1個若しくは2個の酸素原子で中断されることが  
 できる  $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、とりわけ  $C_1 \sim C_{12}$  アルキルであり、

$R^{70'}$ 、 $R^{71'}$ 、 $R^{72'}$ 、 $R^{73'}$ 、 $R^{74'}$ 、 $R^{75'}$  及び  $R^{76'}$  は、互いに独立して、H、CN  
 、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_6 \sim C_{10}$  アリール、 $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキルチ  
 オ、 $-NR^{25'}$ 、 $R^{26'}$ 、 $-CONR^{25'}$ 、 $R^{26'}$ 、又は  $-COOR^{27'}$  であり、

ここで、

$R^{25'}$  及び  $R^{26'}$  は、互いに独立して、H、 $C_6 \sim C_{18}$  アリール、 $C_7 \sim C_{18}$  アラルキル、  
 又は  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであり、並びに

50



$R^{27'}$  は、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであり、並びに

$E^{1'}$  は、 $-S-$ 、 $-O-$ 、又は  $-NR^{25'}$  - であり、

ここで、

$R^{25'}$  は、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、又は  $C_6 \sim C_{10}$  アリールである ) の基である。

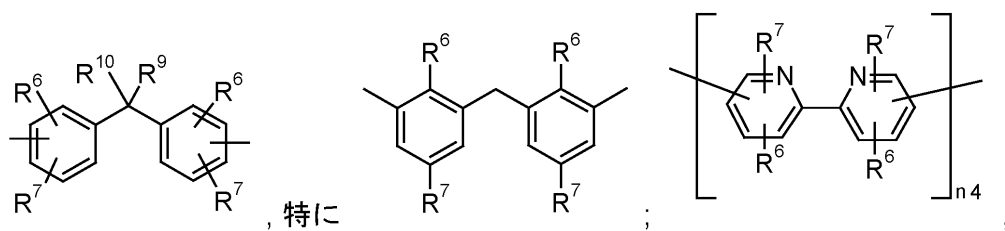
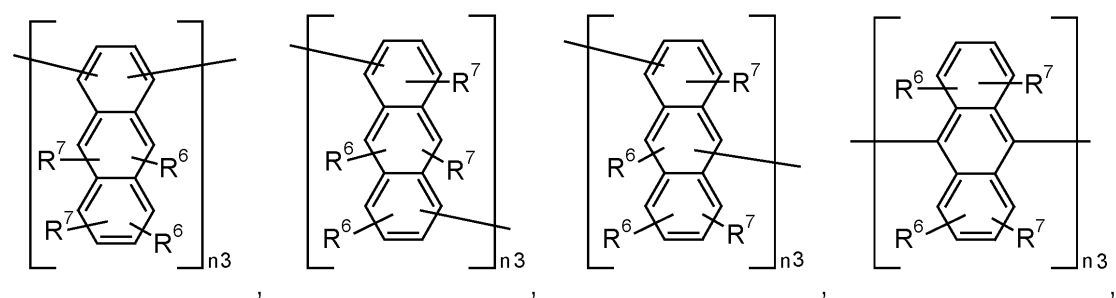
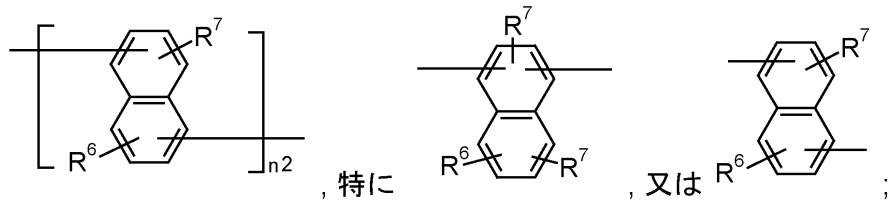
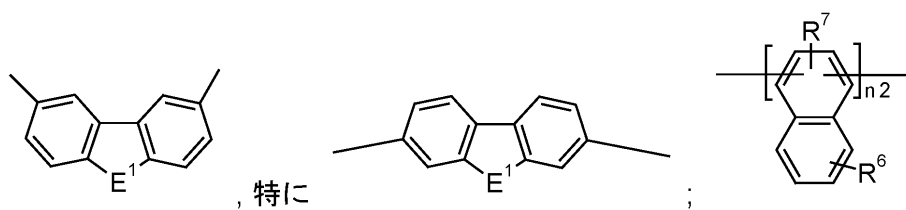
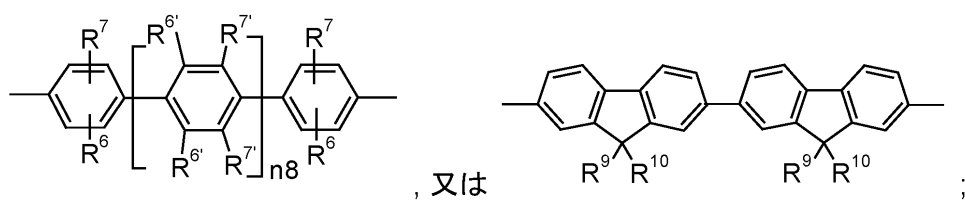
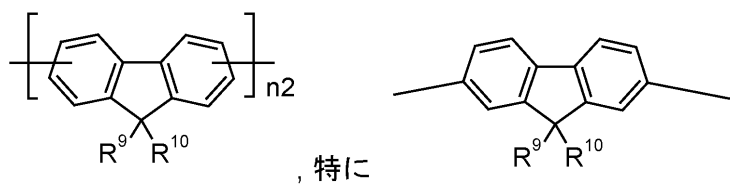
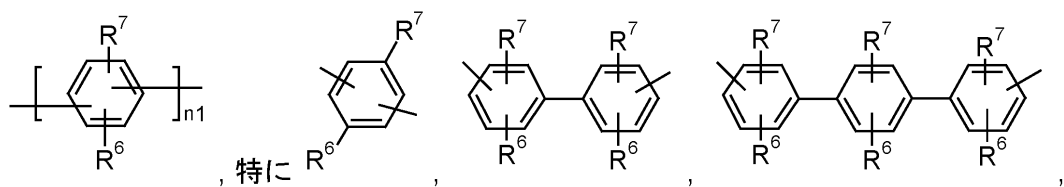
【 0 0 5 0 】

$Y^1$  は、好ましくは、式：

【 0 0 5 1 】



## 【化 7 7】



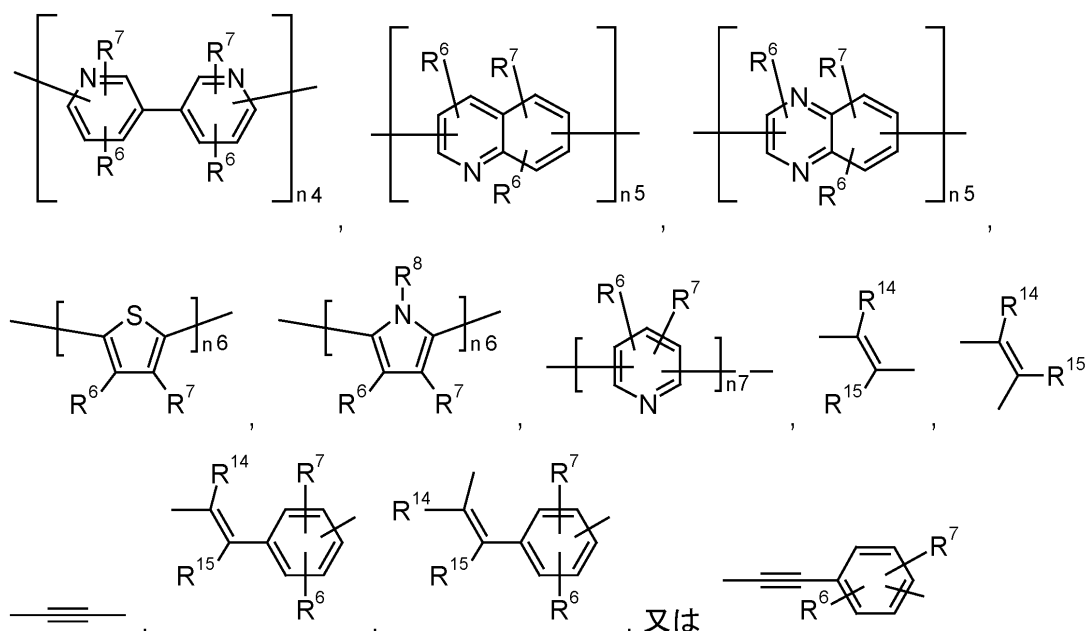
10

20

30

40





10

## 【 0 0 5 2 】

( 式中、

$n_1$ 、 $n_2$ 、 $n_3$ 、 $n_4$ 、 $n_5$ 、 $n_6$ 、 $n_7$  及び  $n_8$  は、1、2、又は3、特に1であり、

$E^1$  は、 $-S-$ 、 $-O-$ 、又は  $-NR^{25'}$  であり、

ここで、

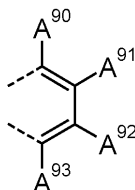
$R^{25'}$  は、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、又は  $C_6 \sim C_{10}$  アリールであり、

$R_6$  及び  $R_7$  は、互いに独立して、H、ハロゲン、とりわけフッ素、 $-NR^{25}R^{26}$ 、ヒドロキシ、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、Eで置換され、及び/又はDで中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_1 \sim C_{24}$  ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$  ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、 $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、Gで置換され、及び/又は  $S-$ 、 $-O-$ 、又は  $-NR^{25}-$  で中断されている  $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、 $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルコキシ、Gで置換されている  $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルコキシ、 $C_6 \sim C_{24}$  アリール、Gで置換されている  $C_6 \sim C_{24}$  アリール、 $C_2 \sim C_{20}$  ヘテロアリール、Gで置換されている  $C_2 \sim C_{20}$  ヘテロアリール、 $C_2 \sim C_{24}$  アルケニル、 $C_2 \sim C_{24}$  アルキニル、 $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、Eで置換され、及び/又はDで中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、 $C_7 \sim C_{25}$  アラルキル、Gで置換されている  $C_7 \sim C_{25}$  アラルキル、 $C_7 \sim C_{25}$  アラルコキシ、Gで置換されている  $C_7 \sim C_{25}$  アラルコキシ、又は  $-CO-R^{28}$  であり、

$R^{6'}$  及び  $R^{7'}$  は、 $R^6$  の意味を有するか、又は一緒になって、基：

## 【 0 0 5 3 】

【 化 7 8 】



40

## 【 0 0 5 4 】

を形成し、

ここで、

$A^{90}$ 、 $A^{91}$ 、 $A^{92}$  及び  $A^{93}$  は、互いに独立して、H、ハロゲン、ヒドロキシ、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、Eで置換され、及び/又はDで中断されている  $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_1 \sim C_{24}$  ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$  ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェ

50



ニル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、Gで置換され、及び/又はS -、- O -、又は-  $NR^2$ <sup>5</sup> - で中断されている $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルコキシ、Gで置換されている $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルコキシ、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール、Gで置換されている $C_6 \sim C_{24}$ アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、Gで置換されている $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、 $C_2 \sim C_{24}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{24}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、Eで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、Gで置換されている $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルコキシ、Eで置換されている $C_7 \sim C_{25}$ アラルコキシ、又は- CO -  $R^{28}$ であり、

$R^8$ は、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、Eで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール、或いは $C_7 \sim C_{25}$ アラルキルであり、

$R^9$ 及び $R^{10}$ は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、Eで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール、Gで置換されている $C_6 \sim C_{24}$ アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、Gで置換されている $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、 $C_2 \sim C_{24}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{24}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、Eで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、或いは $C_7 \sim C_{25}$ アラルキルであるか、或いは

$R^9$ 及び $R^{10}$ は、環、とりわけ5員環又は6員環を形成し、

$R^{14}$ 及び $R^{15}$ は、互いに独立して、H、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、Eで置換され、及び/又はDで中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール、Gで置換されている $C_6 \sim C_{24}$ アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、又はGで置換されている $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリールであり、

ここで、

Dは、- CO -、- COO -、- S -、- SO -、- SO<sub>2</sub> -、- O -、-  $NR^{25}$  -、- Si  $R^{30}R^{31}$  -、- POR<sup>32</sup> -、- CR<sup>23</sup> = CR<sup>24</sup> -、又は- C C - であり、

Gは、E、又は $C_1 \sim C_{24}$ アルキルであり、並びに

Eは、- OR<sup>29</sup>、- SR<sup>29</sup>、-  $NR^{25}R^{26}$ 、- COR<sup>28</sup>、- COOR<sup>27</sup>、- CONR<sup>25</sup> $R^{26}$ 、- CN、- OCOOR<sup>27</sup>、又はハロゲンであり、

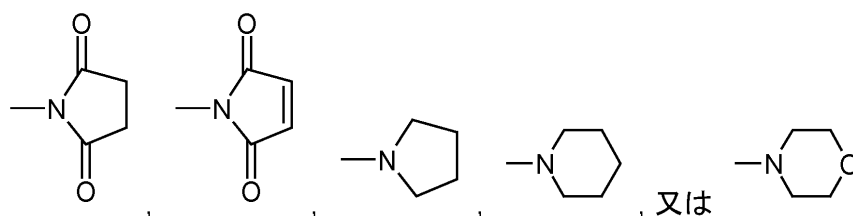
ここで、

$R^{23}$ 、 $R^{24}$ 、 $R^{25}$ 及び $R^{26}$ は、互いに独立して、H、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキルで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール、 $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、又は- O - で中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルキルであるか、或いは

$R^{25}$ 及び $R^{26}$ は、一緒になって、5員環又は6員環、特に

【0055】

【化79】



40

【0056】

を形成し、

$R^{27}$ 及び $R^{28}$ は、互いに独立して、H、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、又は $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、又は- O - で中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルキルであり、

$R^{29}$ は、H、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキルで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール、 $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、又は- O - で中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルキルであり、

$R^{30}$ 及び $R^{31}$ は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール、又は $C_1$

50



～C<sub>24</sub>アルキルで置換されているC<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリールであり、並びに

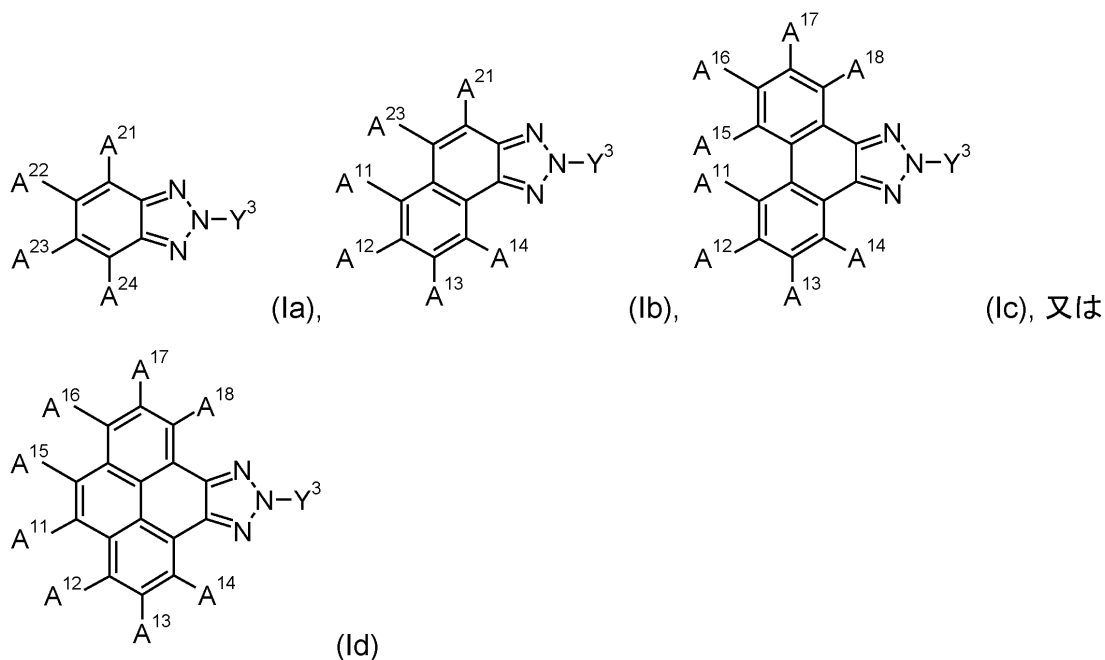
R<sup>32</sup>は、C<sub>1</sub>～C<sub>24</sub>アルキル、C<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリール、又はC<sub>1</sub>～C<sub>24</sub>アルキルで置換されているC<sub>6</sub>～C<sub>18</sub>アリールである)の基である。

【0057】

好ましい実施態様において、本発明は、式：

【0058】

【化80】



10

20

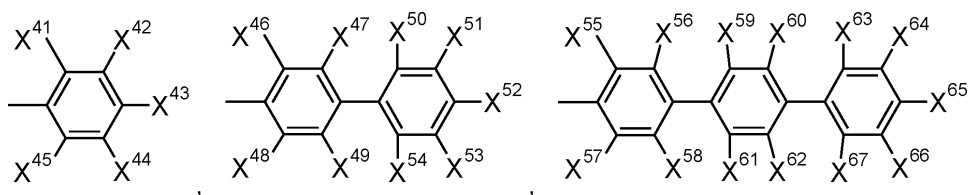
【0059】

(式中、

A<sup>12</sup>又はA<sup>23</sup>は、式：

【0060】

【化81】



30

【0061】

の基であり、

式中、

X<sup>41</sup>、X<sup>42</sup>、X<sup>43</sup>、X<sup>44</sup>、X<sup>45</sup>、X<sup>46</sup>、X<sup>47</sup>、X<sup>48</sup>、X<sup>49</sup>、X<sup>50</sup>、X<sup>51</sup>、X<sup>52</sup>、X<sup>53</sup>、X<sup>54</sup>、X<sup>55</sup>、X<sup>56</sup>、X<sup>57</sup>、X<sup>58</sup>、X<sup>59</sup>、X<sup>60</sup>、X<sup>61</sup>、X<sup>62</sup>、X<sup>63</sup>、X<sup>64</sup>、X<sup>65</sup>、X<sup>66</sup>、及びX<sup>67</sup>は、互いに独立して、H、フッ素、CN、C<sub>1</sub>～C<sub>24</sub>アルキル、C<sub>5</sub>～C<sub>12</sub>シクロアルキル、C<sub>7</sub>～C<sub>25</sub>アラルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>24</sub>ペルフルオロアルキル、C<sub>6</sub>～C<sub>14</sub>ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、C<sub>1</sub>～C<sub>24</sub>ハロアルキル、場合により1個以上のC<sub>1</sub>～C<sub>8</sub>アルキル、又はC<sub>1</sub>～C<sub>8</sub>アルコキシ基で置換されることができC<sub>6</sub>～C<sub>10</sub>アリール；C<sub>1</sub>～C<sub>24</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub>～C<sub>24</sub>アルキルチオ、-NR<sup>25</sup>R<sup>26</sup>、-CONR<sup>25</sup>R<sup>26</sup>、又は-COOR<sup>27</sup>であるか、或いは

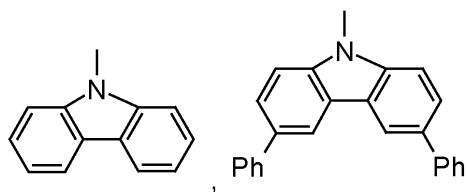
40

X<sup>43</sup>、X<sup>65</sup>又はX<sup>52</sup>は、式：

【0062】



## 【化 8 2】



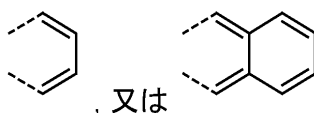
## 【0063】

の基であるか、或いは

互いに隣接する2個の基  $X^{41}$ 、 $X^{42}$ 、 $X^{43}$ 、 $X^{44}$ 、 $X^{45}$ 、 $X^{46}$ 、 $X^{47}$ 、 $X^{48}$ 、 $X^{49}$ 、 $X^{50}$ 、 $X^{51}$ 、 $X^{52}$ 、 $X^{53}$ 、 $X^{54}$ 、 $X^{55}$ 、 $X^{56}$ 、 $X^{57}$ 、 $X^{58}$ 、 $X^{59}$ 、 $X^{60}$ 、 $X^{61}$ 、 $X^{62}$ 、 $X^{63}$ 、 $X^{64}$ 、 $X^{65}$ 、 $X^{66}$ 、及び  $X^{67}$  は、基：

## 【0064】

## 【化 8 3】



## 【0065】

であり、

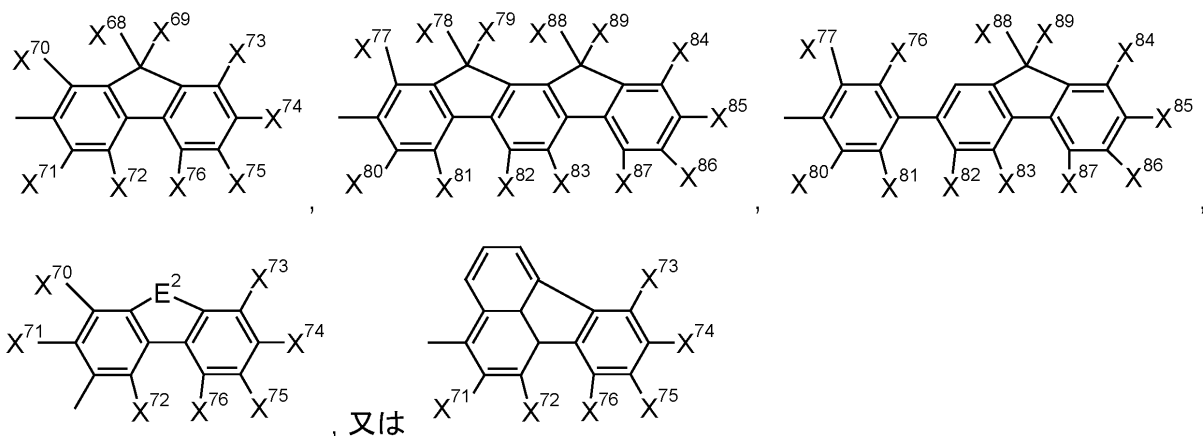
ここで、

好ましくは、置換基  $X^{41}$ 、 $X^{42}$ 、 $X^{43}$ 、 $X^{44}$ 、 $X^{45}$ 、 $X^{46}$ 、 $X^{47}$ 、 $X^{48}$ 、 $X^{49}$ 、 $X^{50}$ 、 $X^{51}$ 、 $X^{52}$ 、 $X^{53}$ 、 $X^{54}$ 、 $X^{55}$ 、 $X^{56}$ 、 $X^{57}$ 、 $X^{58}$ 、 $X^{59}$ 、 $X^{60}$ 、 $X^{61}$ 、 $X^{62}$ 、 $X^{63}$ 、 $X^{64}$ 、 $X^{65}$ 、 $X^{66}$ 、及び  $X^{67}$  の内の少なくとも1個が、フッ素、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、 $C_7 \sim C_{25}$  アラルキル、 $C_1 \sim C_{24}$  ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$  ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、又は  $C_1 \sim C_{24}$  ハロアルキルであり、或いは

$A^{12}$  及び  $A^{23}$  は式：

## 【0066】

## 【化 8 4】



## 【0067】

の基であり、

式中、

$X^{68}$ 、 $X^{69}$ 、 $X^{78}$ 、 $X^{79}$ 、 $X^{88}$ 、及び  $X^{89}$  は、互いに独立して、1個若しくは2個の酸素原子で中断されることができる  $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、とりわけ  $C_1 \sim C_{12}$  アルキルであり、

$X^{70}$ 、 $X^{71}$ 、 $X^{72}$ 、 $X^{73}$ 、 $X^{74}$ 、 $X^{75}$ 、 $X^{76}$ 、 $X^{77}$ 、 $X^{80}$ 、 $X^{81}$ 、 $X^{82}$ 、 $X^{83}$ 、 $X^{84}$ 、 $X^{85}$ 、 $X^{86}$  及び  $X^{87}$  は、互いに独立して、H、CN、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、場合により 1



個以上の  $C_1 \sim C_8$  アルキル、又は  $C_1 \sim C_8$  アルコキシ基で置換されることができる  $C_6 \sim C_{10}$  アリール；  $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルチオ、  $-NR^{25}R^{26}$ 、  $-CONR^{25}R^{26}$ 、又は  $-COOR^{27}$  であり

$E^2$  は、  $-S-$ 、  $-O-$ 、 又は  $-NR^{25'}$  - であり、

ここで、

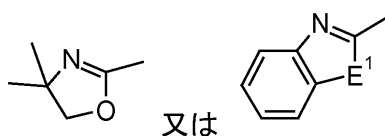
$R^{25'}$  は  $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、又は  $C_6 \sim C_{10}$  アリールであり、

$A^{21}$ 、  $A^{22}$  及び  $A^{24}$  は、互いに独立して、水素、ハロゲン、とりわけフッ素、  $C_1 \sim C_2$  アルキル、  $C_1 \sim C_{24}$  ペルフルオロアルキル、  $C_6 \sim C_{14}$  ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、  $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、  $C_7 \sim C_{25}$  アラルキル、  $C_1 \sim C_2$  ハロアルキル、場合により 1 個以上の  $C_1 \sim C_8$  アルキル、又は  $C_1 \sim C_8$  アルコキシ基で置換されることができる  $C_6 \sim C_{18}$  アリール；  $-NR^{25}R^{26}$ 、  $-CONR^{25}R^{26}$ 、又は  $-COOR^{27}$ 、或いは  $C_2 \sim C_{10}$  ヘテロアリール、とりわけ式：

10

【0068】

【化85】



【0069】

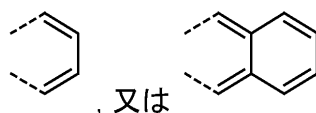
20

の基であるか、或いは

$A^{22}$  及び  $A^{23}$  又は  $A^{11}$  及び  $A^{23}$  は、式：

【0070】

【化86】



【0071】

の基であり、

30

$A^{11}$ 、  $A^{13}$ 、  $A^{14}$ 、  $A^{15}$ 、  $A^{16}$ 、  $A^{17}$ 、 及び  $A^{18}$  は、互いに独立して、H、CN、  $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、  $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、  $C_7 \sim C_{25}$  アラルキル、  $C_1 \sim C_{24}$  ペルフルオロアルキル、  $C_6 \sim C_{14}$  ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、  $C_1 \sim C_{24}$  ハロアルキル、  $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルチオ、  $C_6 \sim C_{18}$  アリール、  $-NR^{25}R^{26}$ 、  $-CONR^{25}R^{26}$ 、又は  $-COOR^{27}$ 、或いは  $C_2 \sim C_{10}$  ヘテロアリールであり、

ここで、

$R^{25}$  及び  $R^{26}$  は、互いに独立して、H、  $C_6 \sim C_{18}$  アリール、  $C_7 \sim C_{18}$  アラルキル、又は  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであり、

$R^{27}$  は、  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであり、並びに

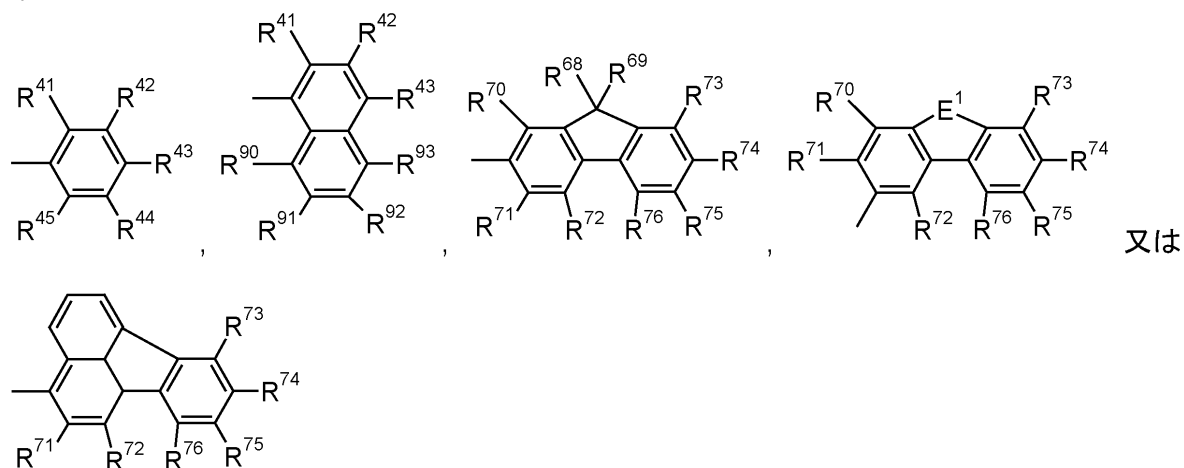
40

$Y^3$  は、式：

【0072】



## 【化 8 7】



10

## 【0073】

の基であり、

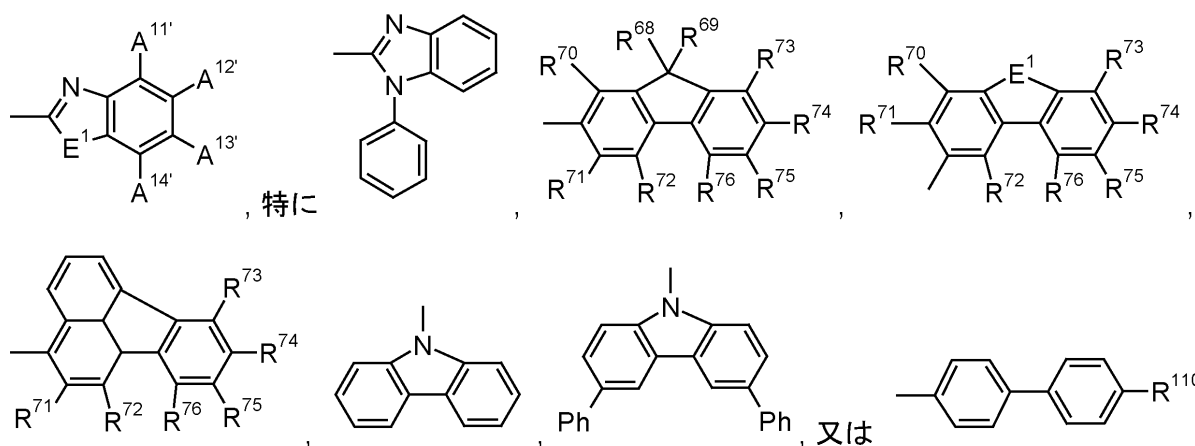
式中、

R<sup>41</sup>は、水素、C<sub>1</sub>～C<sub>24</sub>アルコキシ、又は -OC<sub>7</sub>～C<sub>18</sub>アラルキルであり、R<sup>42</sup>は、水素、又はC<sub>1</sub>～C<sub>24</sub>アルキルであり、R<sup>43</sup>は、水素、ハロゲン、-CONR<sup>25</sup>R<sup>26</sup>、-COOR<sup>27</sup>、

20

## 【0074】

## 【化 8 8】



30

## 【0075】

であり、

ここで、

A<sup>11'</sup>、A<sup>12'</sup>、A<sup>13'</sup>、及びA<sup>14'</sup>は、互いに独立して、H、CN、C<sub>1</sub>～C<sub>24</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>24</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub>～C<sub>24</sub>アルキルチオ、-NR<sup>25</sup>R<sup>26</sup>、-CONR<sup>25</sup>R<sup>26</sup>、又は -COOR<sup>27</sup>であり、

40

E<sup>1</sup>は、-S-、-O-、又は -NR<sup>25'</sup>-であり、

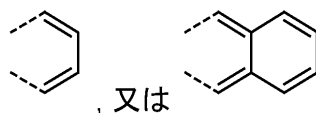
ここで、

R<sup>25'</sup>は、C<sub>1</sub>～C<sub>24</sub>アルキル、又はC<sub>6</sub>～C<sub>10</sub>アリールであり、R<sup>110</sup>は、H、CN、C<sub>1</sub>～C<sub>24</sub>アルキル、C<sub>1</sub>～C<sub>24</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub>～C<sub>24</sub>アルキルチオ、-NR<sup>25</sup>R<sup>26</sup>、-CONR<sup>25</sup>R<sup>26</sup>、又は -COOR<sup>27</sup>であり、或いは、R<sup>42</sup>及びR<sup>43</sup>は、式：

## 【0076】



【化 8 9】



【0077】

の基であり、

 $R^{44}$  は、水素、又は  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであり、 $R^{45}$  は、水素、又は  $C_1 \sim C_{24}$  アルキルであり、

$R^{68}$  及び  $R^{69}$  は、互いに独立して、1 個若しくは 2 個の酸素原子で中断されることがで  
 10 ける  $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、とりわけ  $C_1 \sim C_{12}$  アルキルであり、

$R^{70}$ 、 $R^{71}$ 、 $R^{72}$ 、 $R^{73}$ 、 $R^{74}$ 、 $R^{75}$ 、 $R^{76}$ 、 $R^{90}$ 、 $R^{91}$ 、 $R^{92}$ 、及び  $R^{93}$  は、互いに  
 独立して、H、CN、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、 $C_6 \sim C_{10}$  アリール、 $C_1 \sim C_{24}$  アルコキシ、  
 $C_1 \sim C_{24}$  アルキルチオ、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $-CONR^{25}R^{26}$ 、又は  $-COOR^{27}$  であり、

$R^{25}$  及び  $R^{26}$  は、互いに独立して、H、 $C_6 \sim C_{18}$  アリール、 $C_7 \sim C_{18}$  アラルキル、又  
 は  $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、並びに

 $R^{27}$  は、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキルである) の 2H-ベンゾトリアゾール化合物を指向する。

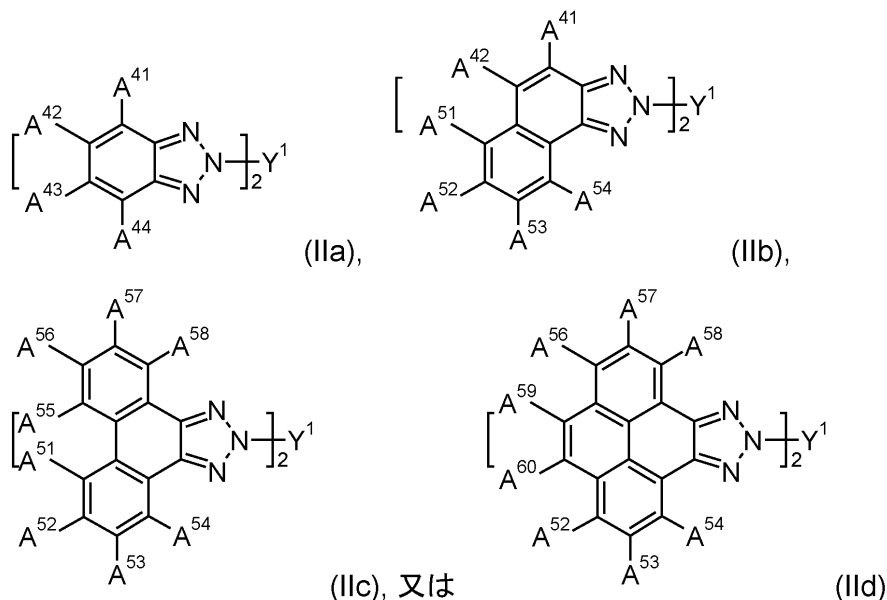
【0078】

好ましい実施態様において、本発明は、式：

【0079】

20

【化 9 0】



30

【0080】

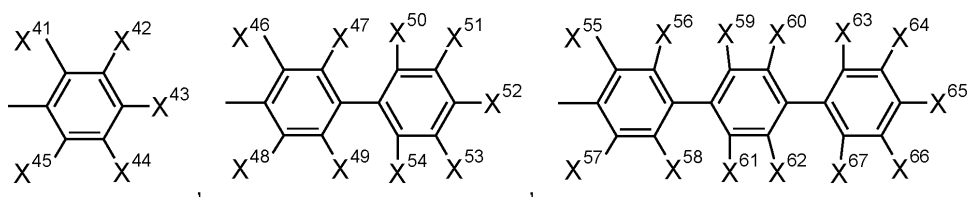
(式中、

 $A^{52}$  又は  $A^{43}$  は、式：

40

【0081】

【化 9 1】



【0082】

の基であり、

50



式中、

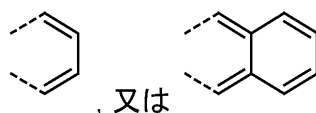
$X^{41}$ 、 $X^{42}$ 、 $X^{43}$ 、 $X^{44}$ 、 $X^{45}$ 、 $X^{46}$ 、 $X^{47}$ 、 $X^{48}$ 、 $X^{49}$ 、 $X^{50}$ 、 $X^{51}$ 、 $X^{52}$ 、 $X^{53}$ 、 $X^{54}$ 、 $X^{55}$ 、 $X^{56}$ 、 $X^{57}$ 、 $X^{58}$ 、 $X^{59}$ 、 $X^{60}$ 、 $X^{61}$ 、 $X^{62}$ 、 $X^{63}$ 、 $X^{64}$ 、 $X^{65}$ 、 $X^{66}$ 、及び $X^{67}$ は、互いに独立して、H、フッ素、CN、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$ ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、又は $C_1 \sim C_{24}$ ハロアルキル、場合により1個以上の $C_1 \sim C_8$ アルキル、又は $C_1 \sim C_8$ アルコキシ基で置換されることが出来る $C_6 \sim C_{10}$ アリール； $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキルチオ、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $-CONR^{25}R^{26}$ 、又は $-COOR^{27}$ であるか、或いは

互いに隣接する2個の基 $X^{41}$ 、 $X^{42}$ 、 $X^{43}$ 、 $X^{44}$ 、 $X^{45}$ 、 $X^{46}$ 、 $X^{47}$ 、 $X^{48}$ 、 $X^{49}$ 、 $X^{50}$ 、 $X^{51}$ 、 $X^{52}$ 、 $X^{53}$ 、 $X^{54}$ 、 $X^{55}$ 、 $X^{56}$ 、 $X^{57}$ 、 $X^{58}$ 、 $X^{59}$ 、 $X^{60}$ 、 $X^{61}$ 、 $X^{62}$ 、 $X^{63}$ 、 $X^{64}$ 、 $X^{65}$ 、 $X^{66}$ 、及び $X^{67}$ は、基：

10

【0083】

【化92】



【0084】

であり、

20

ここで、

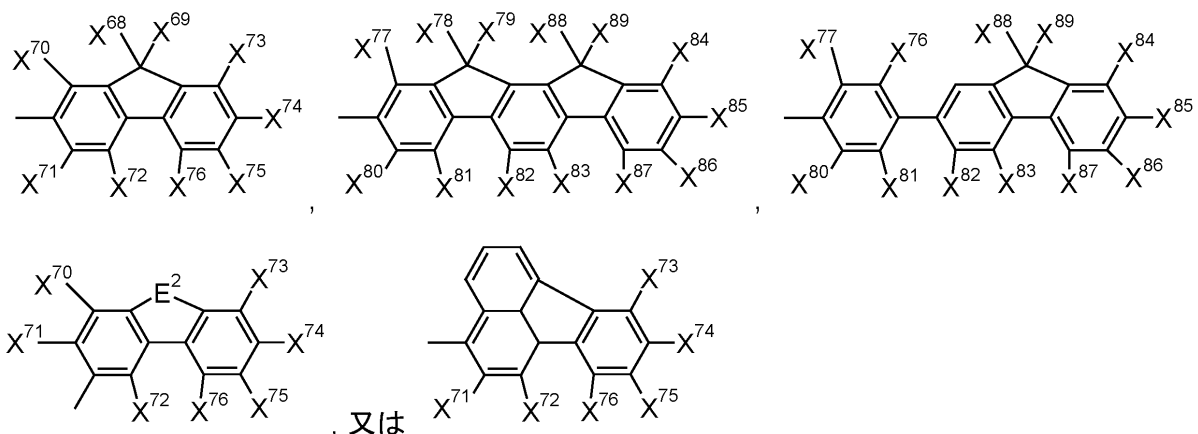
好ましくは置換基 $X^{41}$ 、 $X^{42}$ 、 $X^{43}$ 、 $X^{44}$ 、 $X^{45}$ 、 $X^{46}$ 、 $X^{47}$ 、 $X^{48}$ 、 $X^{49}$ 、 $X^{50}$ 、 $X^{51}$ 、 $X^{52}$ 、 $X^{53}$ 、 $X^{54}$ 、 $X^{55}$ 、 $X^{56}$ 、 $X^{57}$ 、 $X^{58}$ 、 $X^{59}$ 、 $X^{60}$ 、 $X^{61}$ 、 $X^{62}$ 、 $X^{63}$ 、 $X^{64}$ 、 $X^{65}$ 、 $X^{66}$ 、及び $X^{67}$ の内の少なくとも1個が、フッ素、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$ ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、又は $C_1 \sim C_{24}$ ハロアルキルであり、或いは

$A^{43}$ 又は $A^{52}$ は式：

【0085】

【化93】

30



40

【0086】

の基であり、

式中、

$X^{68}$ 、 $X^{69}$ 、 $X^{78}$ 、 $X^{79}$ 、 $X^{88}$ 、及び $X^{89}$ は、互いに独立して、1個若しくは2個の酸素原子で中断されることが出来る $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、とりわけ $C_1 \sim C_{12}$ アルキルであり、

$X^{70}$ 、 $X^{71}$ 、 $X^{72}$ 、 $X^{73}$ 、 $X^{74}$ 、 $X^{75}$ 、 $X^{76}$ 、 $X^{77}$ 、 $X^{80}$ 、 $X^{81}$ 、 $X^{82}$ 、 $X^{83}$ 、 $X^{84}$ 、 $X^{85}$ 、 $X^{86}$ 及び $X^{87}$ は、互いに独立して、H、CN、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{10}$ アリ

50



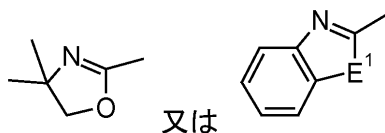
ール、 $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキルチオ、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $-CONR^{25}R^{26}$ 、又は $-COOR^{27}$ であり

$E^2$ は、 $-S-$ 、 $-O-$ 、又は $-NR^{25'}$ であり、

$A^{41}$ 、 $A^{42}$ 及び $A^{44}$ は、互いに独立して、水素、ハロゲン、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$ ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ ハロアルキル、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $-CONR^{25}R^{26}$ 、又は $-COOR^{27}$ 、或いは $C_2 \sim C_{10}$ ヘテロアリール、とりわけ式：

【0087】

【化94】



10

【0088】

の基であるか、或いは

$A^{51}$ 、 $A^{53}$ 、 $A^{54}$ 、 $A^{55}$ 、 $A^{56}$ 、 $A^{57}$ 、 $A^{58}$ 、 $A^{59}$ 及び $A^{60}$ は、互いに独立して、H、フッ素、CN、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキルチオ、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$ ペルフルオロアリール、とりわけペンタフルオロフェニル、 $C_1 \sim C_{24}$ ハロアルキル、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $-CONR^{25}R^{26}$ 、又は $-COOR^{27}$ 、或いは $C_2 \sim C_{10}$ ヘテロアリールであり、

20

ここで、

$E^1$ は、O、S、又は $-NR^{25'}$ であり、

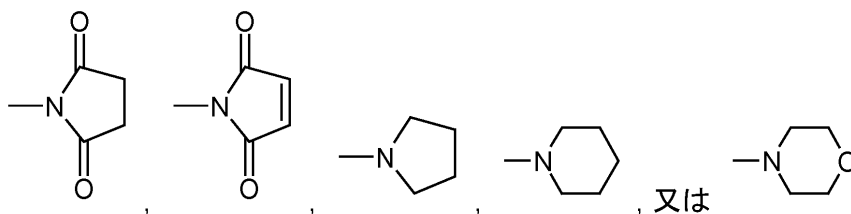
ここで、

$R^{25}$ 及び $R^{26}$ は、互いに独立して、H、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール、 $C_7 \sim C_{18}$ アラルキル、又は $C_1 \sim C_{24}$ アルキルであるか、或いは

$R^{25}$ 及び $R^{26}$ は、一緒になって、5員環又は6員環、特に

【0089】

【化95】



30

【0090】

を形成し、

$R^{27}$ は、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキルであり、並びに

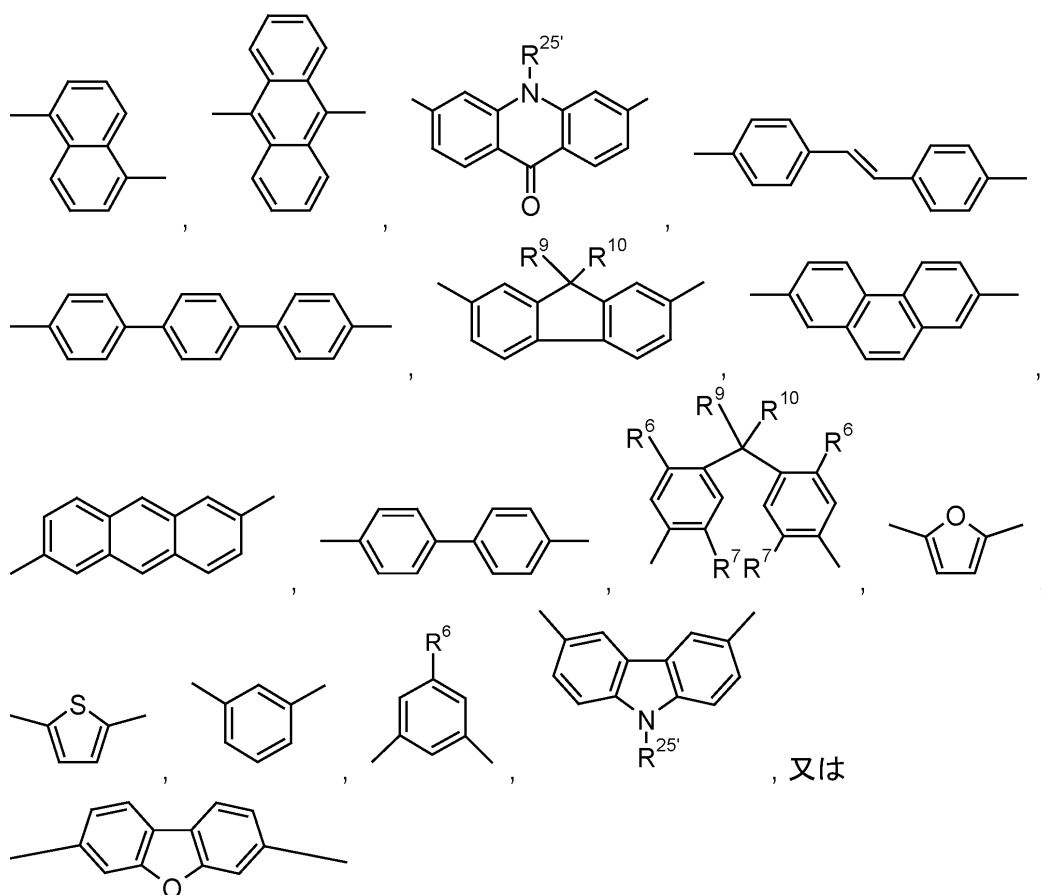
$Y^1$ は、式：

【0091】

40



## 【化 9 6】



10

20

## 【0092】

の基であり、

式中、

$R^6$ は、 $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、又は $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、 $R^7$ は、H、又は $C_1 \sim C_{24}$ アルキルであり、

$R^9$ 及び $R^{10}$ は、互いに独立して、1個若しくは2個の酸素原子で中断されることができ、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、とりわけ $C_4 \sim C_{12}$ アルキルである)の2H-ベンゾトリアゾール化合物を指向する。

30

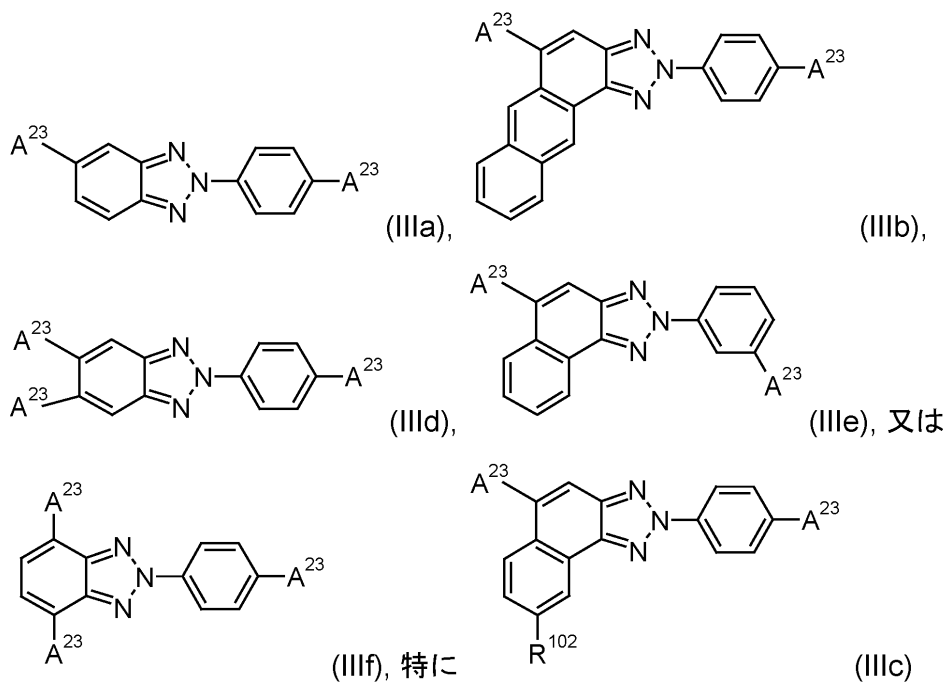
## 【0093】

特に好ましい実施態様において、2H-ベンゾトリアゾール化合物は、式：

## 【0094】



【化 9 7】



10

20

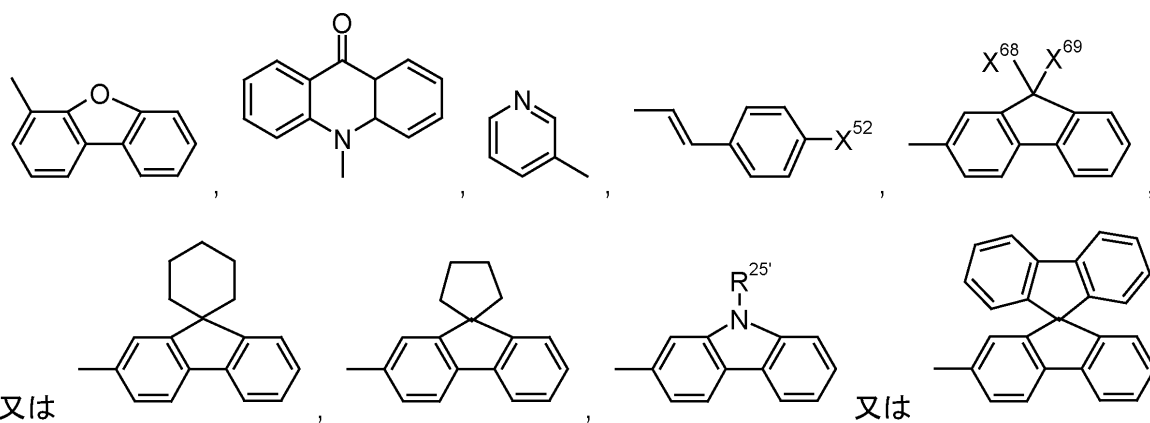
【0095】

(式中、

 $R^{102}$  は、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、とりわけ  $C_1 \sim C_{12}$ アルキルであり、特に H であり、 $A^{23}$  は、式：

【0096】

【化 9 8】



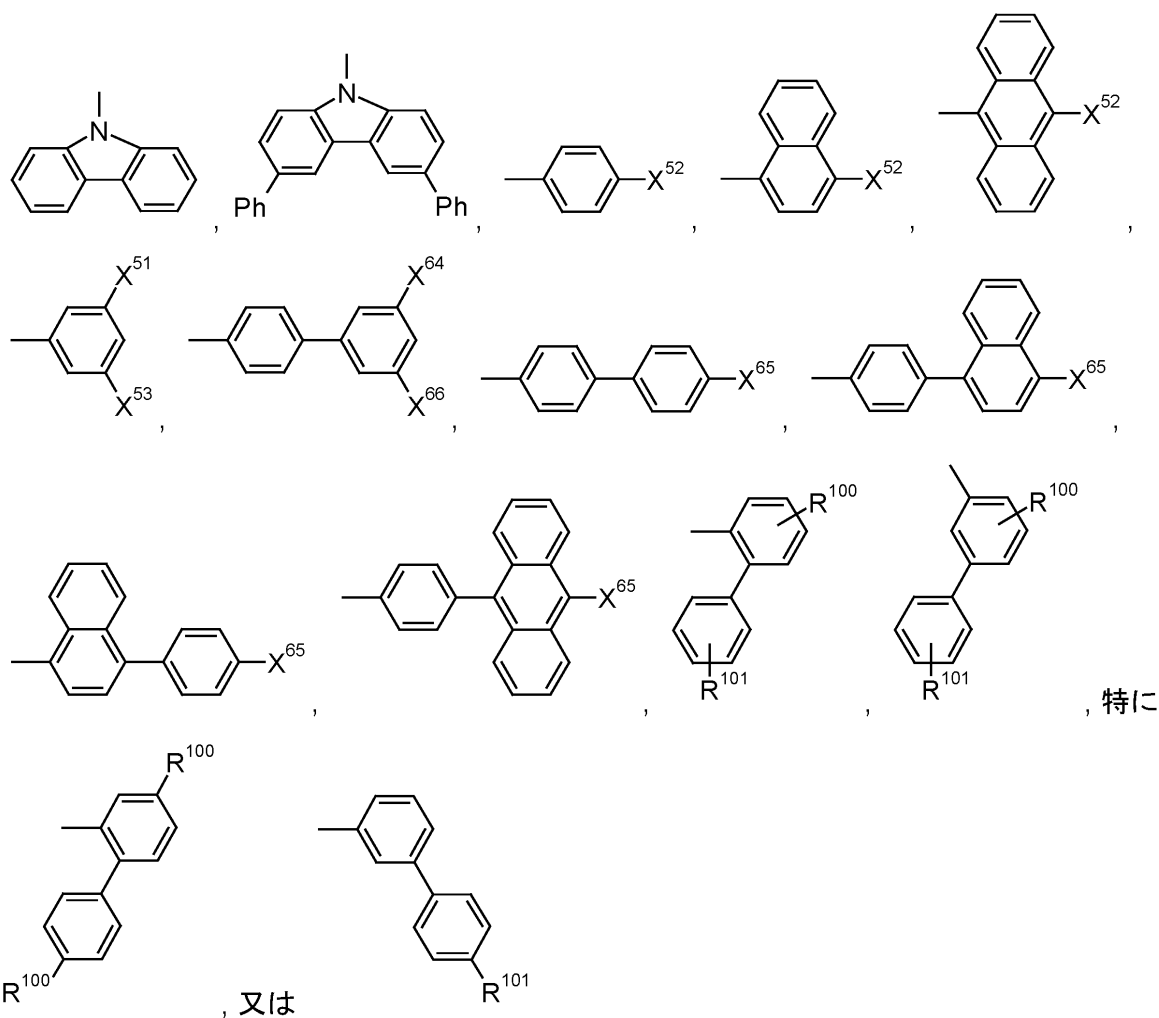
30

の基であるか、或いは式：

40



## 【化 9 9】



10

20

## 【0097】

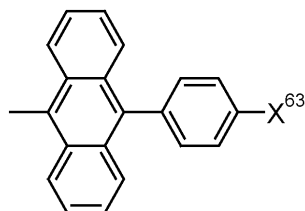
の基であり、

式中、

$R^{100}$  及び  $R^{101}$  は、互いに独立して、H、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、とりわけ  $C_1 \sim C_{12}$  アルキル、極めて殊に tert - ブチル、

## 【0098】

## 【化 100】



40

## 【0099】

であり、

ここで、

$X^{51}$ 、 $X^{52}$ 、 $X^{53}$ 、 $X^{63}$ 、 $X^{64}$ 、 $X^{65}$ 、及び  $X^{66}$  は、互いに独立して、フッ素、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、とりわけ  $C_1 \sim C_{12}$  アルキル、極めて殊に tert - ブチル、場合により 1 個若しくは 2 個の  $C_1 \sim C_8$  アルキル基、又は 1 - アダマンチルにより置換されることが出来る  $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、とりわけシクロヘキシル、 $C_1 \sim C_{24}$  ペルフルオロアルキル、とりわけ  $CF_3$  のような  $C_1 \sim C_{12}$  ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$  ペルフルオロアリ

50



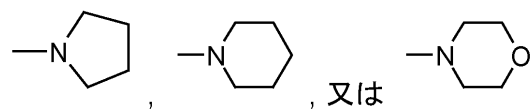
ール、とりわけペンタフルオロフェニル、 $\text{NR}^{25}\text{R}^{26}$ であり、  
ここで、

$\text{R}^{25}$ 及び $\text{R}^{26}$ は、1個若しくは2個の $\text{C}_1 \sim \text{C}_{24}$ アルキル基により置換されることがで  
きる $\text{C}_6 \sim \text{C}_{14}$ アリール、とりわけフェニルであるか、或いは

$\text{R}^{25}$ 及び $\text{R}^{26}$ は、一緒になって、5員環又は6員環、特に

【0100】

【化101】



10

【0101】

を形成する)の化合物である。

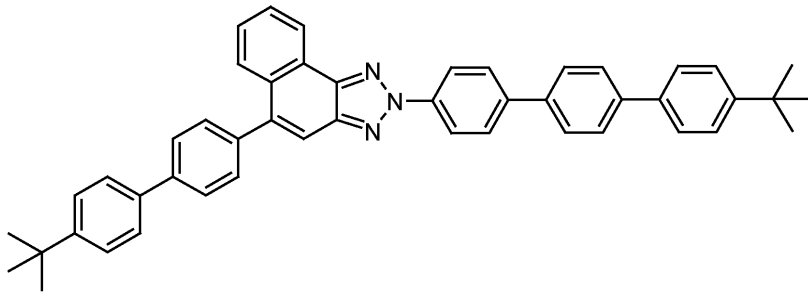
【0102】

とりわけ好ましい2H-ベンゾトリアゾール化合物の例を下記に示す：

【0103】

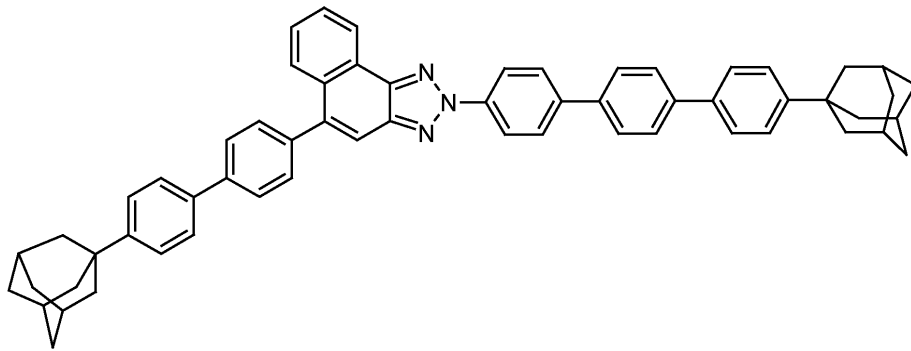


【化 1 0 2】



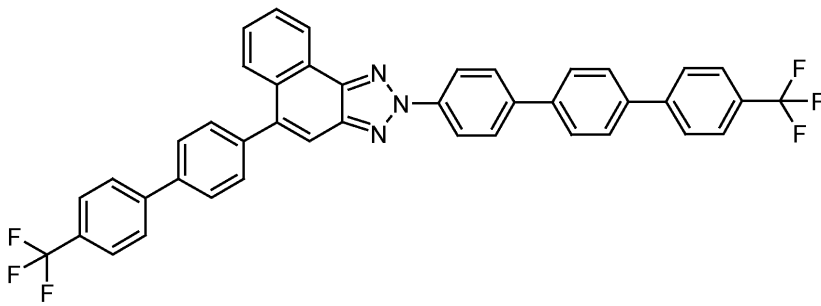
(A-1),

10



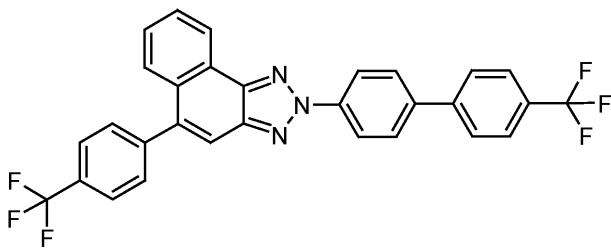
(A-2),

20



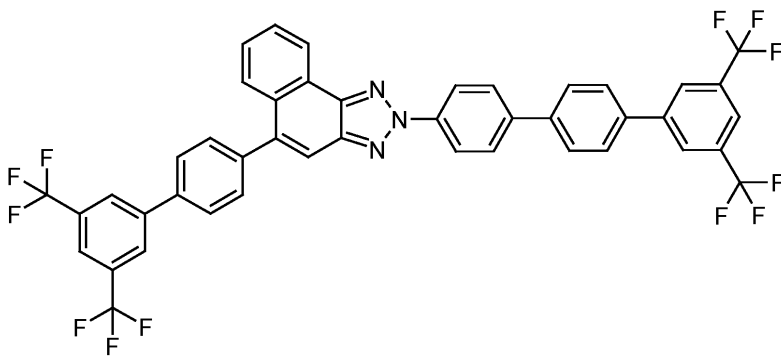
(A-3),

30



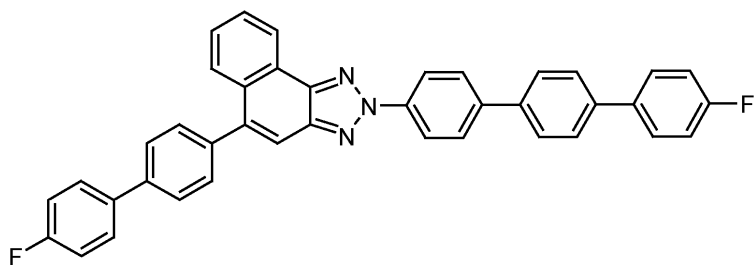
(A-4),

40

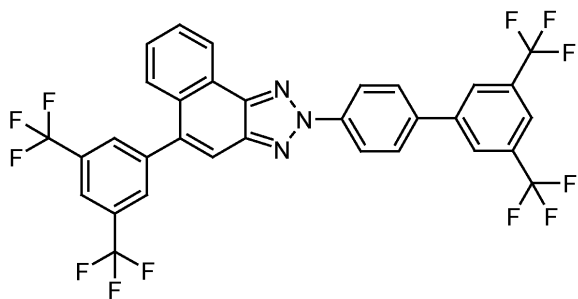


(A-5),

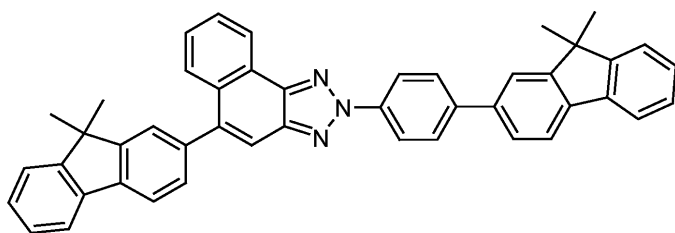




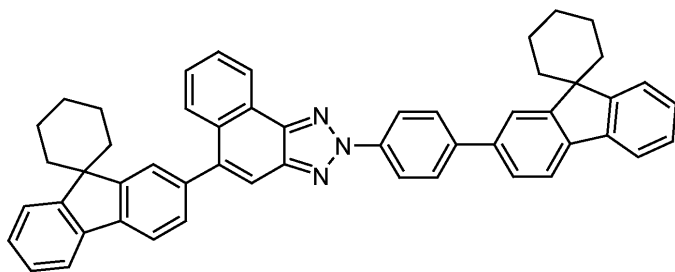
(A-6),



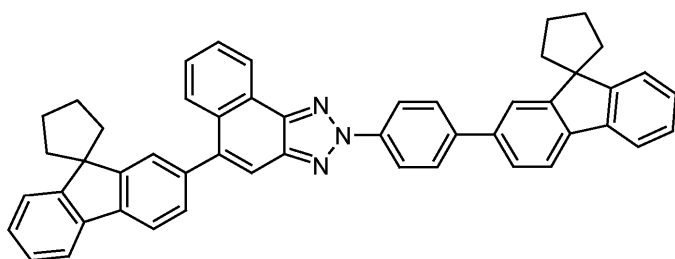
(A-7),



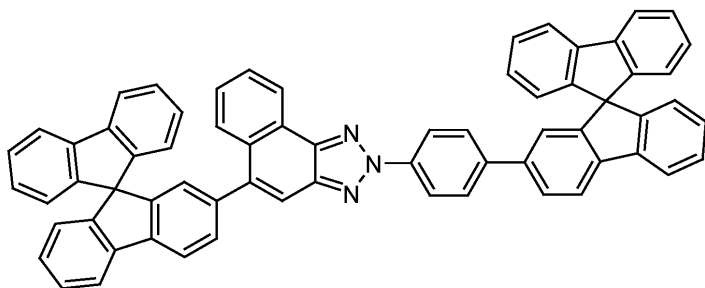
(A-8),



(A-9),



(A-10),



(A-11),

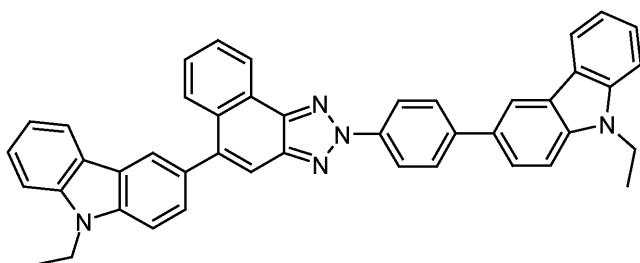
10

20

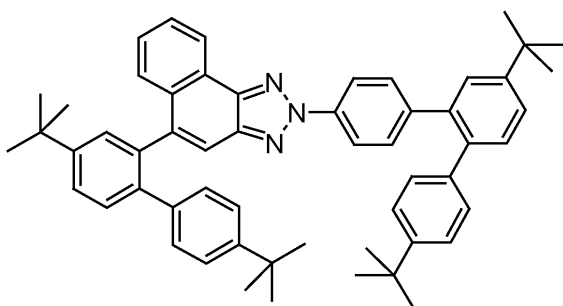
30

40

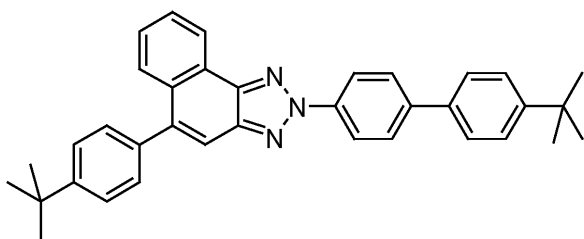




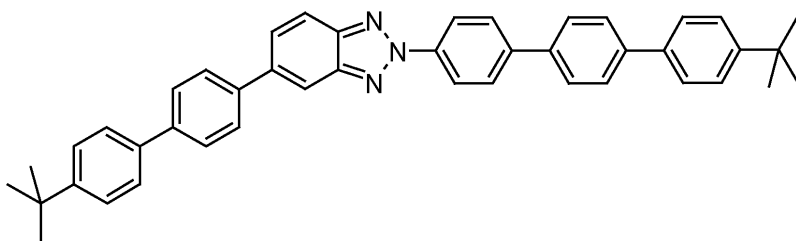
(A-12),



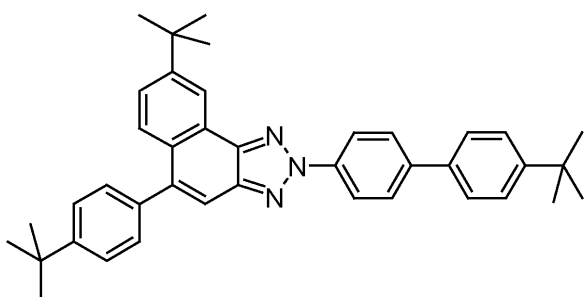
(A-13),



(A-14),



(A-15),



(A-16),

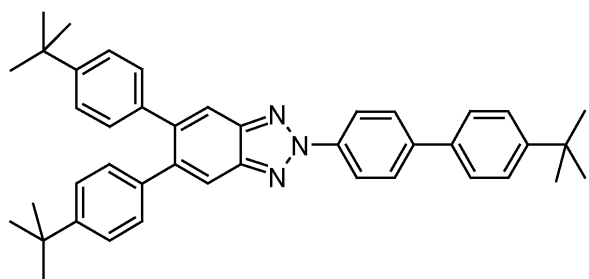
10

20

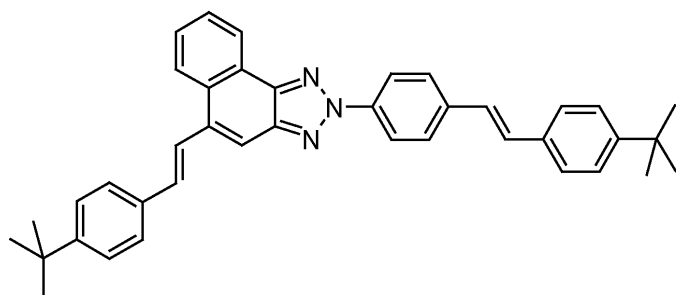
30

40

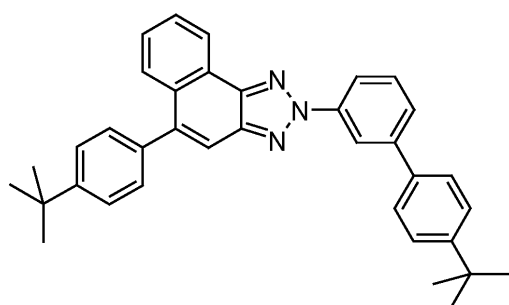




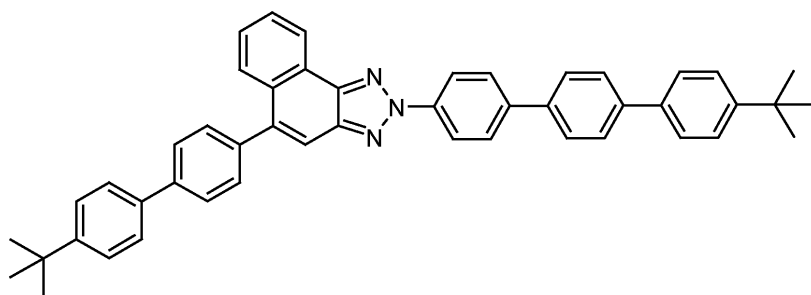
(A-17),



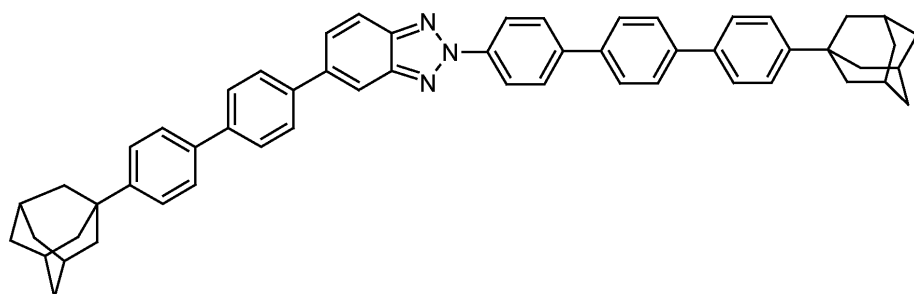
(A-18),



(A-19),



(A-20),



(A-21),

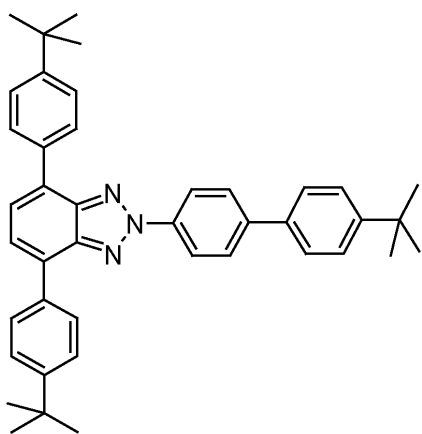
10

20

30

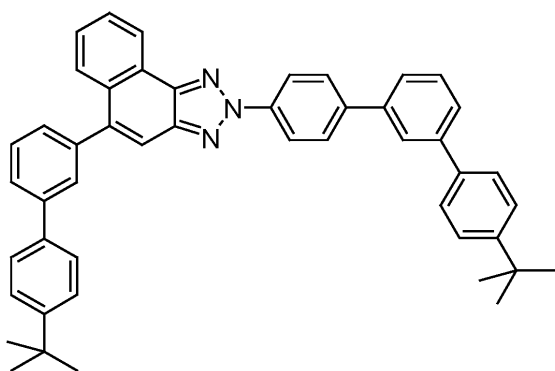
40





(A-22),

10



(A-23)

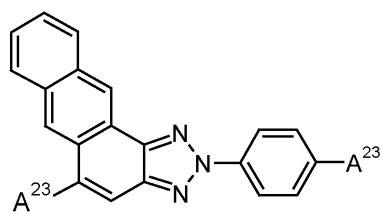
20

【 0 1 0 4 】

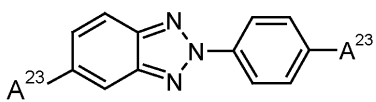
更に好ましい実施態様においては、本発明は式：

【 0 1 0 5 】

【 化 1 0 3 】

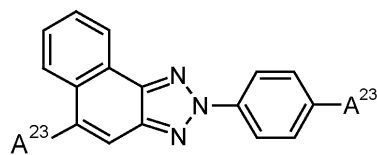


(IIIb),



(IIIa), 特に

30



(IIIc)

【 0 1 0 6 】

(式中、

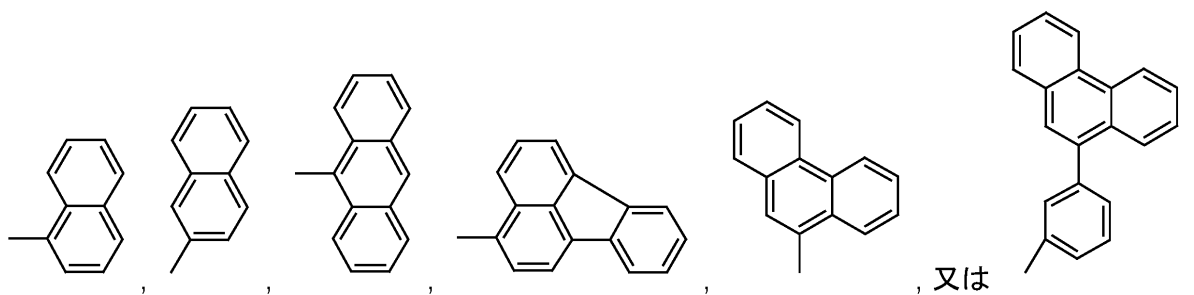
1分子当たりの1個の基  $A^{23}$  は、上記と同義であり、  
 その他の基  $A^{23}$  は、式：

【 0 1 0 7 】

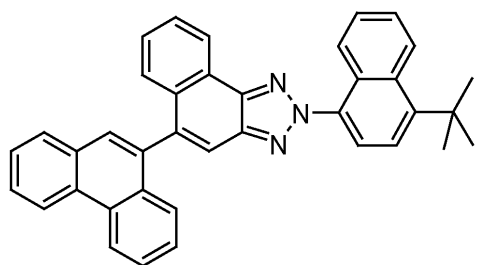
40



【化 1 0 4】



10



特に

(A-23)

【 0 1 0 8】

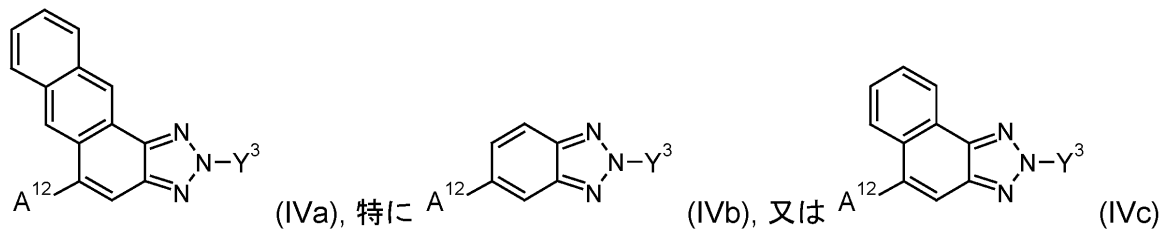
の基である)の化合物に関する。

【 0 1 0 9】

更に好ましい実施態様においては、本発明は式：

【 0 1 1 0】

【化 1 0 5】



30

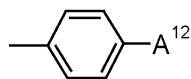
【 0 1 1 1】

(式中、

 $Y^3$ は、上記と同義であるか、あるいは

【 0 1 1 2】

【化 1 0 6】



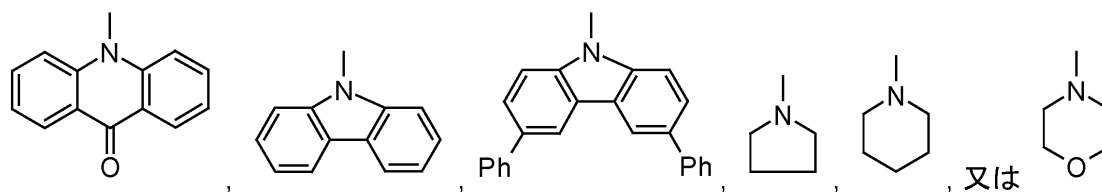
【 0 1 1 3】

であり、

 $A^{12}$ は、 $NR^{25}R^{26}$ 、

【 0 1 1 4】

【化 1 0 7】



40

【 0 1 1 5】

50



であり、  
ここで、

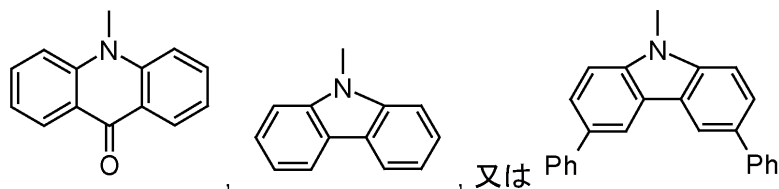
$R^{25}$  及び  $R^{26}$  は、場合により 1 個若しくは 2 個の  $C_1 \sim C_8$  アルキル基、又は  $C_1 \sim C_8$  アルコキシ基により置換されることが出来る  $C_6 \sim C_{14}$  アリール、とりわけ、フェニル、1 - ナフチル、2 - ナフチルである) の化合物に関する。

【0116】

$A^{12}$  が、式：

【0117】

【化108】



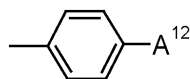
10

【0118】

の基である場合、 $Y^3$  は、好ましくは式：

【0119】

【化109】



20

【0120】

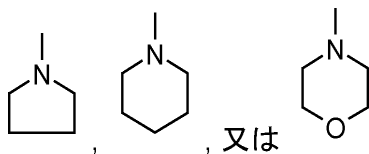
の基である。

【0121】

$A^{12}$  が、式、 $NR^{25}R^{26}$ 、

【0122】

【化110】



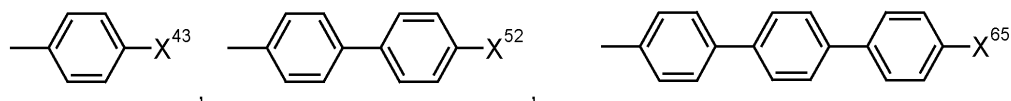
30

【0123】

である場合、

【0124】

【化111】



40

【0125】

(ここで、

$X^{43}$ 、 $X^{52}$  及び  $X^{65}$  は、互いに独立して、フッ素、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、とりわけ  $C_1 \sim C_{12}$  アルキル、極めて殊に tert - ブチル、場合により 1 個若しくは 2 個の  $C_1 \sim C_8$  アルキル基、又は 1 - アダマンチルにより置換されることが出来る  $C_5 \sim C_{12}$  シクロアルキル、とりわけシクロヘキシル、 $C_1 \sim C_{24}$  ペルフルオロアルキル、とりわけ  $CF_3$  のような  $C_1 \sim C_{12}$  ペルフルオロアルキルである) である。

50



【 0 1 2 6 】

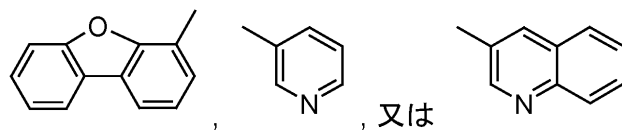
更に好ましい実施態様においては、本発明は式 I V a、I V b、又は I V c：

( 式中、

A<sup>12</sup> は、

【 0 1 2 7 】

【 化 1 1 2 】



10

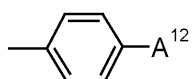
【 0 1 2 8 】

であり、

Y<sup>3</sup> は、

【 0 1 2 9 】

【 化 1 1 3 】



【 0 1 3 0 】

である) の化合物に関する。

20

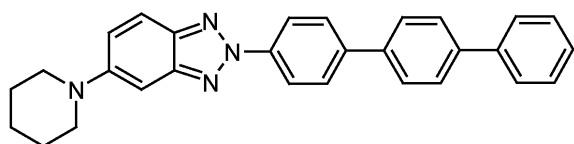
【 0 1 3 1 】

とりわけ好ましい 2 H - ベンゾトリアゾール化合物の例を下記に示す：

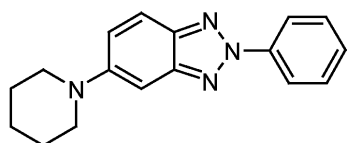
【 0 1 3 2 】



## 【化 1 1 4】

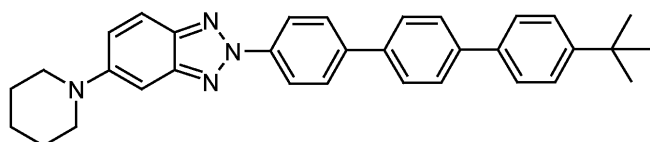


(B-1),

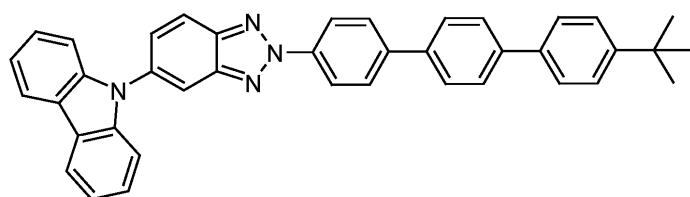


(B-2),

10

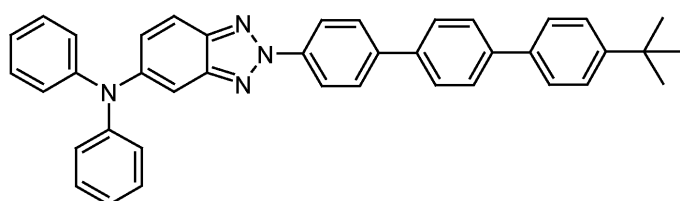


(B-3),

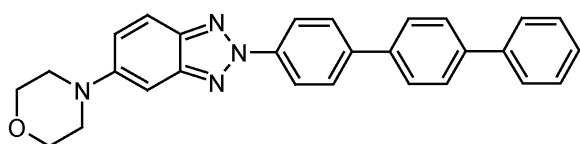


(B-4),

20

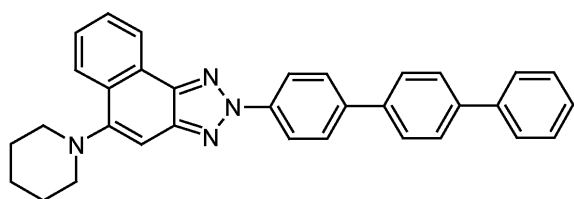


(B-5),



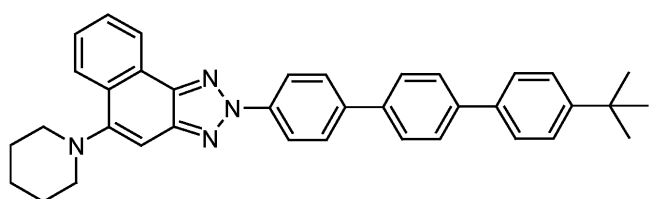
(B-6),

30



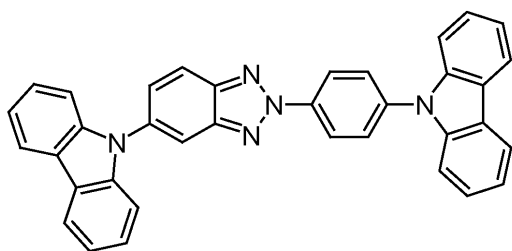
(B-7),

40

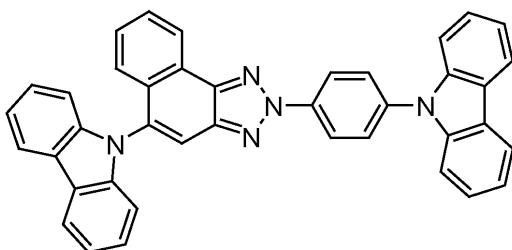


(B-8),

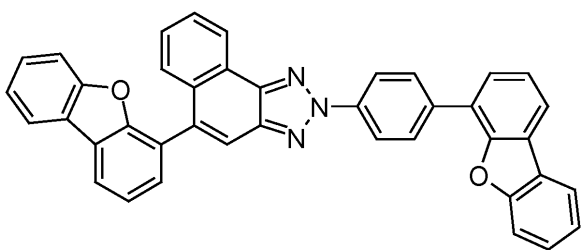




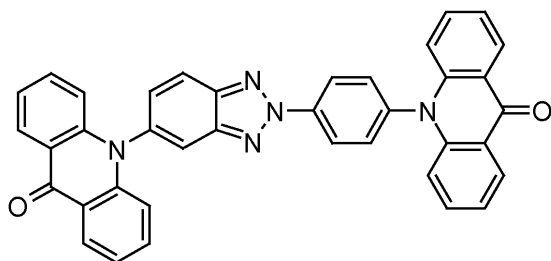
(B-9),



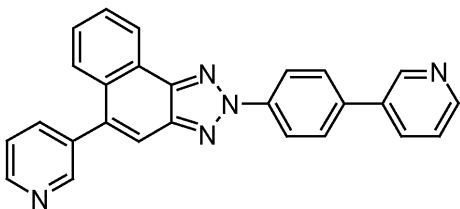
(B-10),



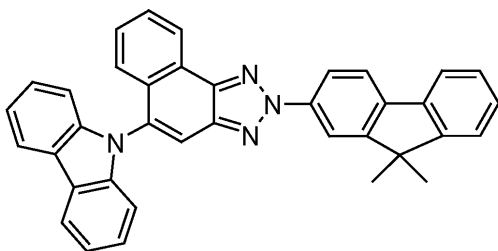
(B-11),



(B-12),



(B-13),



(B-14),

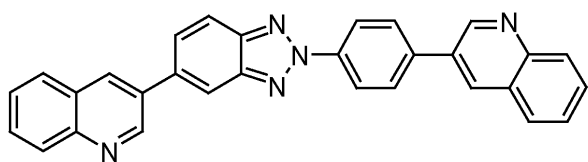
10

20

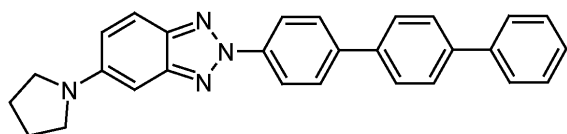
30

40





(B-15), 又は



(B-16)

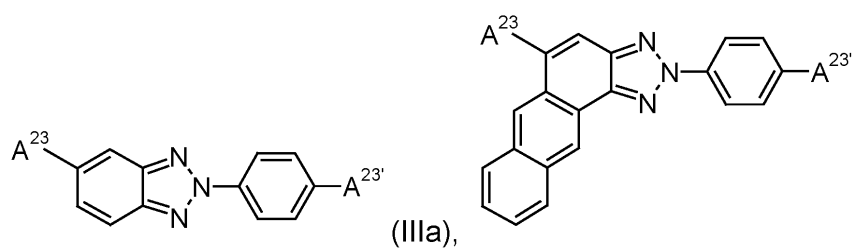
10

【 0 1 3 3 】

更に好ましい実施態様においては、本発明は式：

【 0 1 3 4 】

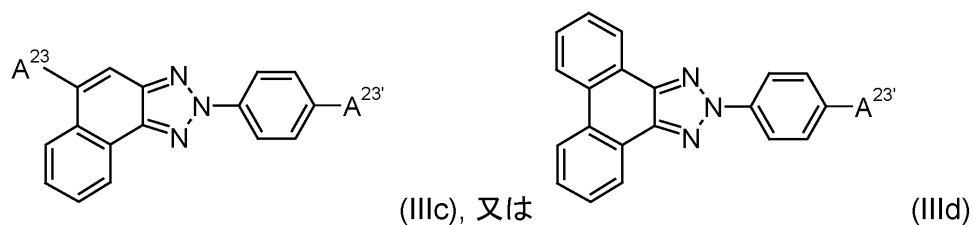
【 化 1 1 5 】



(IIIa),

(IIIb),

20



(IIIc), 又は

(IIId)

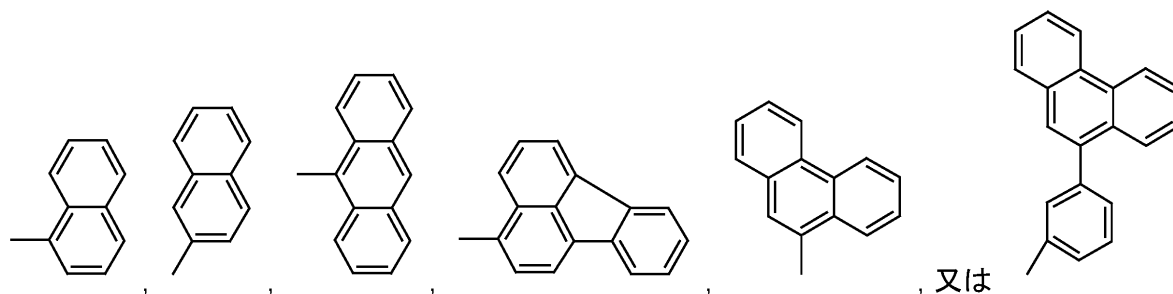
【 0 1 3 5 】

( 式中、

 $A^{23}$  及び  $A^{23'}$  は、互いに独立して、式：

【 0 1 3 6 】

【 化 1 1 6 】



, 又は

40

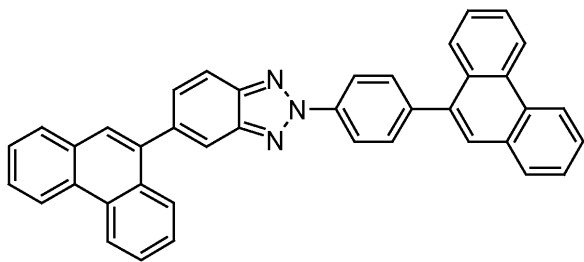
【 0 1 3 7 】

の基である)の化合物に関する。 $A^{23}$  及び  $A^{23'}$  は、好ましくは、同一の意味を有する。  
とりわけ好ましい2H-ベンゾトリアゾール化合物の例を下記に示す：

【 0 1 3 8 】

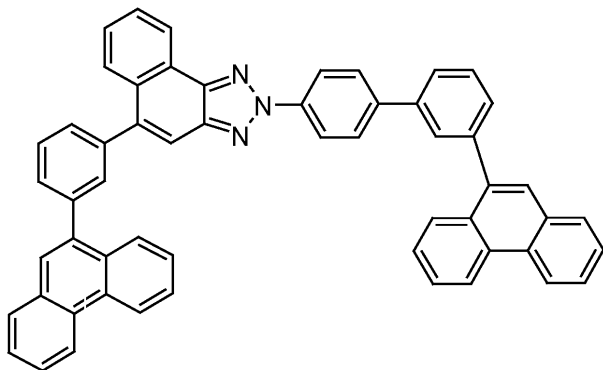


【化 1 1 7】



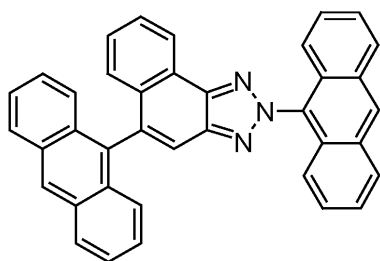
(C-1),

10



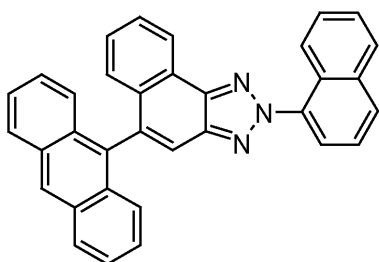
(C-2),

20



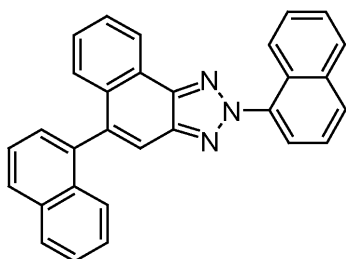
(C-3),

30



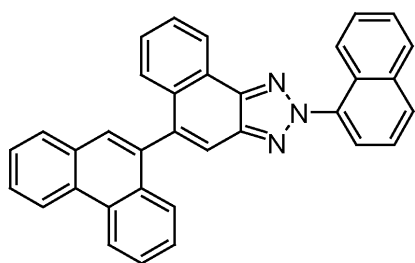
(C-4),

40

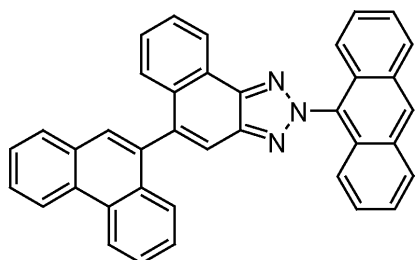


(C-5),

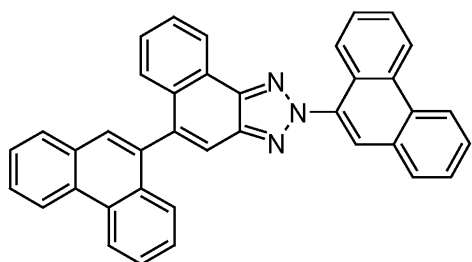




(C-6),



(C-7), 又は



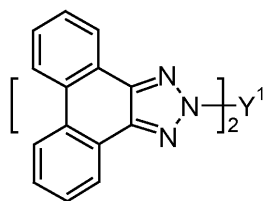
(C-8)

【 0 1 3 9 】

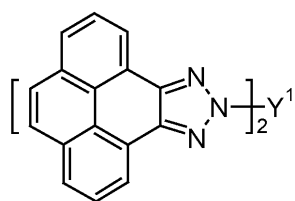
更に好ましい実施態様においては、本発明は式：

【 0 1 4 0 】

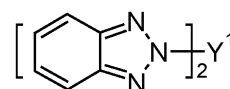
【 化 1 1 8 】



(IIc),

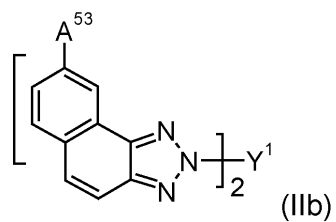


(IIId), とりわけ



(IIa),

極めて殊に



(IIb)

【 0 1 4 1 】

(式中、

 $A^{53}$ は、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、とりわけ  $C_4 \sim C_{12}$ アルキル、特にHであり、 $Y^1$ は、式：

【 0 1 4 2 】

10

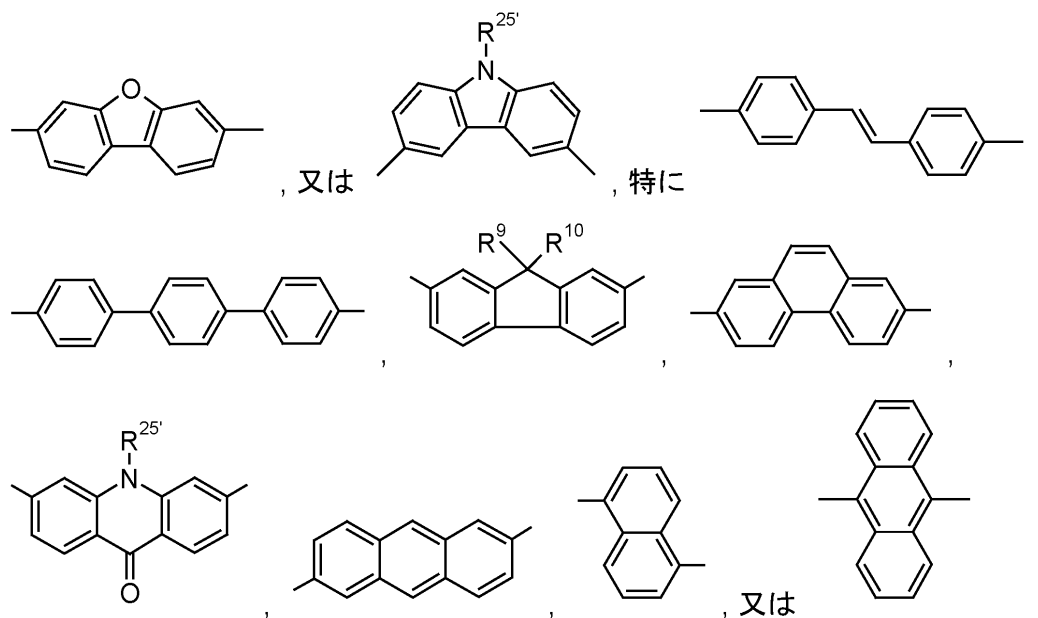
20

30

40



## 【化 1 1 9】



10

## 【 0 1 4 3 】

の基であり、

式中、

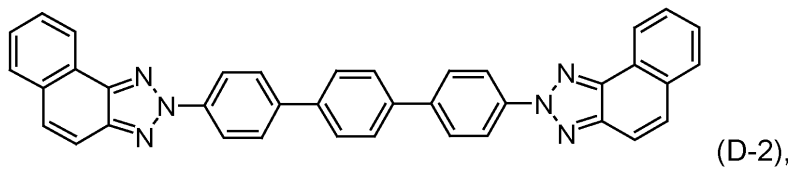
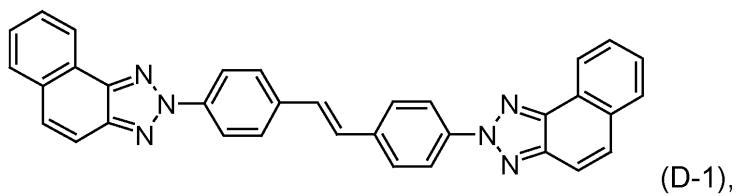
$R^9$  及び  $R^{10}$  は、互いに独立して、1 個若しくは 2 個の酸素原子により中断されることができる  $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、とりわけ  $C_4 \sim C_{12}$  アルキルであり、 $R^{25'}$  は、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、とりわけ  $C_4 \sim C_{12}$  アルキルである) の化合物に関する。とりわけ好ましい 2 H - ベンゾトリアゾール化合物の例を下記に示す：

## 【 0 1 4 4 】

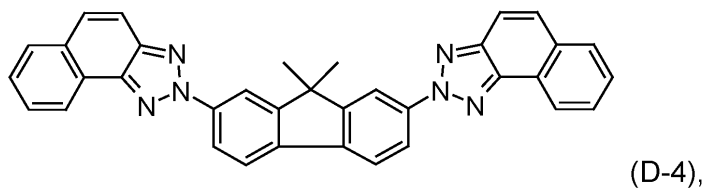
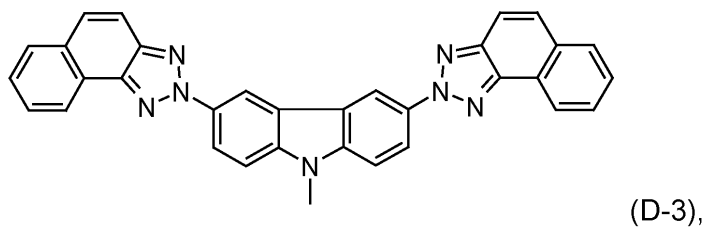
20



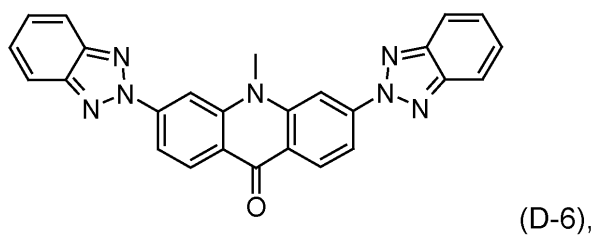
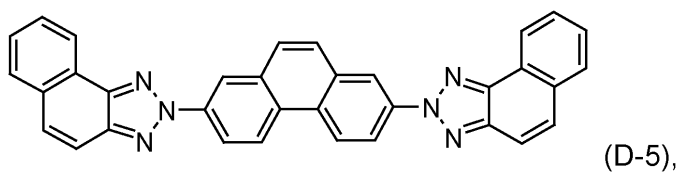
【化 1 2 0】



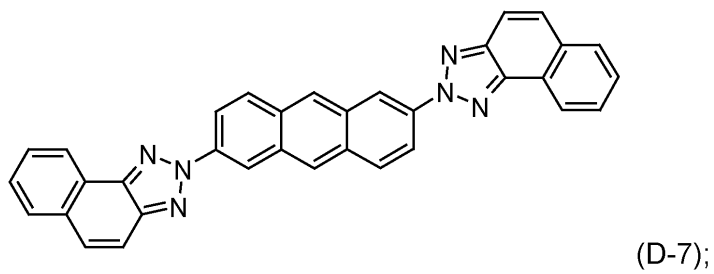
10



20

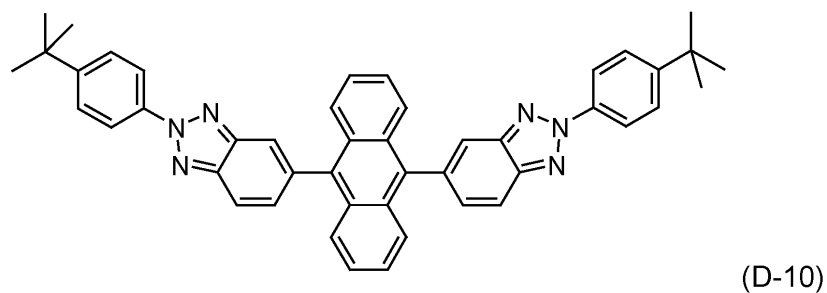
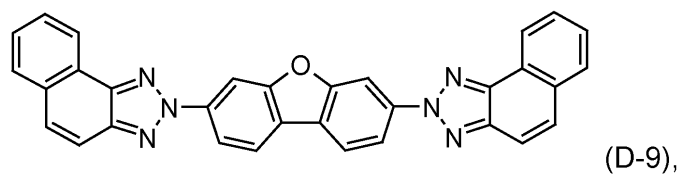
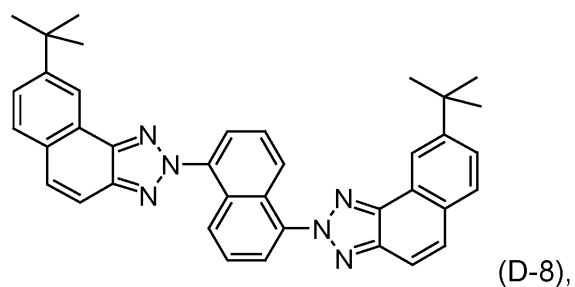


30



40





10

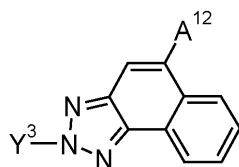
20

【 0 1 4 5 】

更に好ましい実施態様においては、本発明は式 I a、I b、I c 又は I d の化合物、とりわけ

【 0 1 4 6 】

【 化 1 2 1 】



30

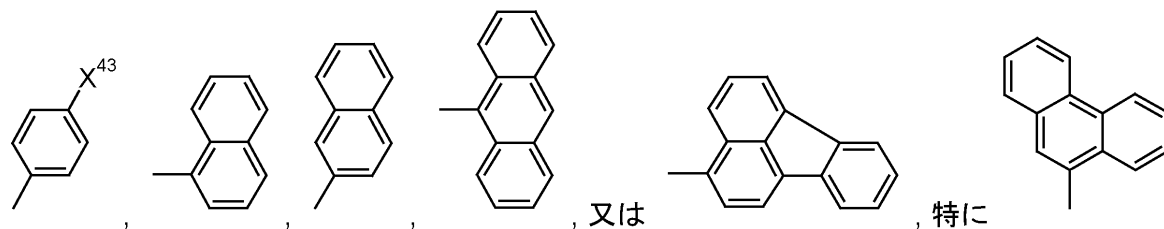
【 0 1 4 7 】

(ここで、

A<sup>12</sup>は、H、式：

【 0 1 4 8 】

【 化 1 2 2 】



40

【 0 1 4 9 】

の基であり、

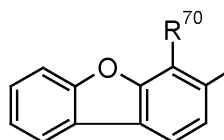
式中、

X<sup>43</sup>は、C<sub>1</sub> ~ C<sub>24</sub>アルキル、とりわけ C<sub>1</sub> ~ C<sub>12</sub>アルキルであり、Y<sup>3</sup>は、式：

【 0 1 5 0 】



【化 1 2 3】



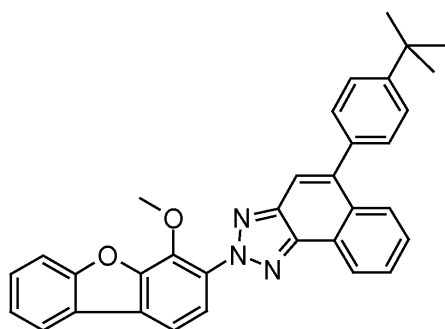
【 0 1 5 1】

の基であり、  
式中、

$R^{70}$  は、 $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、とりわけ  $C_1 \sim C_{12}$  アルコキシである ) に関する。とりわけ 10  
け好ましい 2 H - ベンゾトリアゾール化合物の例を下記に示す：

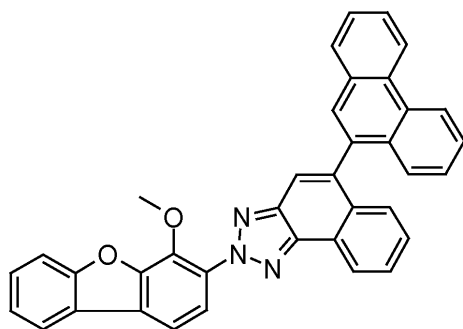
【 0 1 5 2】

【化 1 2 4】



(E-1),

20



(E-2)

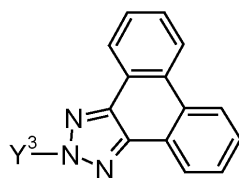
30

【 0 1 5 3】

更に好ましい実施態様においては、本発明は式 I c の化合物、とりわけ

【 0 1 5 4】

【化 1 2 5】



40

【 0 1 5 5】

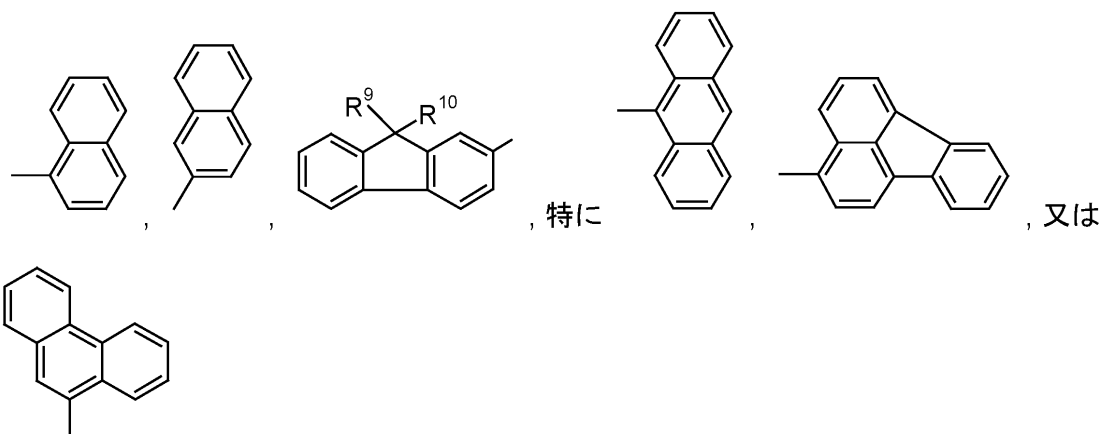
(ここで、

$Y^3$  は、式：

【 0 1 5 6】



## 【化 1 2 6】



10

## 【 0 1 5 7】

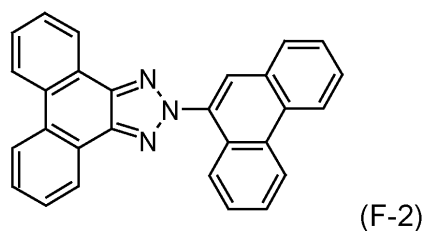
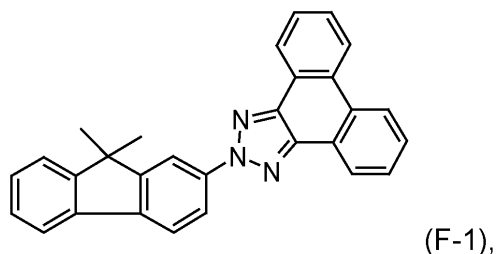
の基であり、  
式中、

$R^9$  及び  $R^{10}$  は、互いに独立して、1 個若しくは 2 個の酸素原子により中断されることが  
できる  $C_1 \sim C_{24}$  アルキル、とりわけ  $C_4 \sim C_{12}$  アルキルである ) に関する。とりわけ好  
ましい 2 H - ベンゾトリアゾール化合物の例を下記に示す :

## 【 0 1 5 8】

20

## 【化 1 2 7】



30

## 【 0 1 5 9】

式 I I I a、I I I b 及び I I I c の 2 H - ベンゾトリアゾール化合物、とりわけ A -  
1 ~ A - 1 2 の化合物は、好ましくはホスト化合物として使用するのに対し、式 I V a、  
I V b 及び I V c の 2 H - ベンゾトリアゾール化合物、とりわけ B - 1 ~ B - 1 0 の化合  
物、並びに式 I I a、I I b、I I c 及び I I d の 2 H - ベンゾトリアゾール化合物、と  
りわけ D - 1 ~ D - 9 の化合物は、好ましくは、E L デバイスの発光層内のゲスト化合物  
として使用する。

40

## 【 0 1 6 0】

式 I I I a、I I I b 及び I I I c ( = I I I ) の 2 H - ベンゾトリアゾール化合物を  
ホストとして使用し、式 I V a、I V b 及び I V c ( = I V )、又は式 I I a、I I b、  
I I c 及び I I d ( = I I ) の 2 H - ベンゾトリアゾール化合物をゲストとして使用する  
場合、式 I I I の 2 H - ベンゾトリアゾール化合物対式 I V 又は I I の 2 H - ベンゾト  
リアゾール化合物の重量比は、一般に、5 0 : 5 0 ~ 9 9 . 9 9 : 0 . 0 1、好ましくは 9  
0 : 1 0 ~ 9 9 . 9 9 : 0 . 0 1、より好ましくは 9 5 : 5 ~ 9 9 . 9 : 0 . 1 である。

## 【 0 1 6 1】

50



本発明の 2 H - ベンゾトリアゾール化合物を、当業界において周知の方法に従って、或いは同様に、合成することができる（例えば、W O 0 3 / 1 0 5 5 3 8 を参照）。

【 0 1 6 2 】

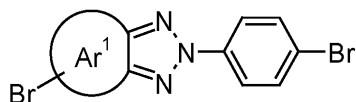
2 H - ベンゾトリアゾールを、任意の適切な方法、例えば慣用的に「スズキ反応」と称される、芳香族ボロナートと臭化物との縮合反応により調製してもよく、この縮合反応は、種々の有機官能基の存在を許容し、N. Miyaura and A. Suzuki in Chemical Reviews, Vol. 95, pp. 457-2483 (1995) で報告されている。

【 0 1 6 3 】

式 ( I ) に相当する 2 H - ベンゾトリアゾールを調製するには、式：

【 0 1 6 4 】

【 化 1 2 8 】

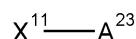


【 0 1 6 5 】

の臭化物 2 当量を、式：

【 0 1 6 6 】

【 化 1 2 9 】



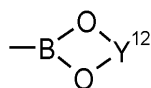
【 0 1 6 7 】

( 式中、

$X^{11}$  は、それぞれの場合に独立して、 $-B(OH)_2$ 、 $-B(OY^{11})_2$ 、又は

【 0 1 6 8 】

【 化 1 3 0 】



【 0 1 6 9 】

であり、

式中、

$Y^{11}$  は、それぞれの場合に独立して、 $C_1 \sim C_{10}$  アルキル基であり、

$Y^{12}$  は、それぞれの場合に独立して、 $-CY^{13}Y^{14}-CY^5Y^6-$ 、又は  $-CY^7Y^8-CY^9Y^{10}-CY^{15}Y^{16}-$  のような  $C_2 \sim C_{10}$  アルキレン基であり、

ここで、

$Y^5$ 、 $Y^6$ 、 $Y^7$ 、 $Y^8$ 、 $Y^9$ 、 $Y^{10}$ 、 $Y^{13}$ 、 $Y^{14}$ 、 $Y^{15}$  及び  $Y^{16}$  は、互いに独立して、水素、又は  $C_1 \sim C_{10}$  アルキル基、とりわけ  $-(CH_3)_2C(CH_3)_2-$ 、又は  $-C(CH_3)_2CH_2(CH_3)_2-$  である) に相当する 2 当量のボロナート、又はその混合物と、Pd 及びトリフェニルホスフィンの触媒作用下で反応させる。反応は、典型的には、トルエンのような芳香族炭化水素溶媒中、約 70 ~ 120 で実施する。ジメチルホルムアミド及びテトラヒドロフランのような他の溶媒も、単独で又は芳香族炭化水素との混合物で 사용할ことができる。水性塩基、好ましくは炭酸ナトリウム又は重炭酸ナトリウムを HBr スカベンジャーとして使用する。反応体の反応性に応じて、反応は 2 ~ 100 時間かかり得る。例えば、テトラアルキルアンモニウムヒドロキシドのような有機塩基、及び例えば TBA B のような相間移動触媒は、ボロンの活性を促進することができる（例えば、Leadbeater & Marco; Angew. Chem. Int. Ed., 2003, 42, 1407 及びそこで引用されている参考文献を参照）。

【 0 1 7 0 】

ハロゲン は、フッ素、塩素、臭素及びヨウ素である。



## 【0171】

$C_1 \sim C_{24}$ アルキルは、例えば、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、*n*-ブチル、*sec*-ブチル、イソブチル、*tert*-ブチル、2-エチルブチル、*n*-ペンチル、イソペンチル、1-メチルペンチル、1, 3-ジメチルブチル、*n*-ヘキシル、1-メチルヘキシル、*n*-ヘプチル、イソヘプチル、1, 1, 3, 3-テトラメチルブチル、1-メチルヘプチル、3-メチルヘプチル、*n*-オクチル、2-エチルヘキシル、1, 1, 3-トリメチルヘキシル、1, 1, 3, 3-テトラメチルペンチル、ノニル、デシル、ウンデシル、1-メチルウンデシル、ドデシル、1, 1, 3, 3, 5, 5-ヘキサメチルヘキシル、トリデシル、テトラデシル、ペンタデシル、ヘキサデシル、ヘプタデシル、オクタデシル、イコシル又はドコシルのような、分岐鎖状又は非分岐鎖状基である。

10

## 【0172】

$C_1 \sim C_{24}$ ペルフルオロアルキルは、例えば、 $-CF_3$ 、 $-CF_2CF_3$ 、 $-CF_2CF_2CF_3$ 、 $-CF(CF_3)_2$ 、 $-(CF_2)_3CF_3$ 、及び $-C(CF_3)_3$ のような、分岐鎖状又は非分岐鎖状基である。

## 【0173】

$C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ基は、直鎖状又は分岐鎖状アルコキシ基であり、例えば、メトキシ、エトキシ、*n*-プロポキシ、イソプロポキシ、*n*-ブトキシ、*sec*-ブトキシ、*tert*-ブトキシ、アミルオキシ、イソアミルオキシ又は*tert*-アミルオキシ、ヘプチルオキシ、オクチルオキシ、イソオクチルオキシ、ノニルオキシ、デシルオキシ、ウンデシルオキシ、ドデシルオキシ、テトラデシルオキシ、ペンタデシルオキシ、ヘキサデシルオキシ、ヘプタデシルオキシ及びオクタデシルオキシである。

20

## 【0174】

$C_2 \sim C_{24}$ アルケニル基は、例えば、ビニル、アリル、メタリル、イソプロペニル、2-ブテニル、3-ブテニル、イソブテニル、*n*-ペンタ-2, 4-ジエニル、3-メチル-ブタ-2-エニル、*n*-オクタ-2-エニル、*n*-ドデカ-2-エニル、イソドデセニル、*n*-ドデカ-2-エニル又は*n*-オクタデカ-4-エニルのような、直鎖状又は分岐鎖状アルケニル基である。

## 【0175】

$C_2 \sim C_{24}$ アルケニルは、例えば、エチニル、1-プロピン-3-イル、1-ブチン-4-イル、1-ペンチン-5-イル、2-メチル-3-ブチン-2-イル、1, 4-ペンタジイン-3-イル、1, 3-ペンタジン-5-イル、1-ヘキシン-6-イル、シス-3-メチル-2-ペンテン-4-イン-1-イル、トランス-3-メチル-2-ペンテン-4-イン-1-イル、1, 3-ヘキサジイン-5-イル、1-オクチン-8-イル、1-ノニン-9-イル、1-デシン-10-イル又は1-テトラコシン-24-イルのような、直鎖状又は分岐鎖状で、好ましくは、非置換であってもよく、又は置換されていてもよい、 $C_{2-8}$ アルキニルである。

30

## 【0176】

$C_4 \sim C_{18}$ シクロアルキル、とりわけ $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキルは、例えば、シクロペンチル、メチルシクロペンチル、ジメチルシクロペンチル、シクロヘキシル、メチルシクロヘキシル、ジメチルシクロヘキシル、トリメチルシクロヘキシル、*tert*-ブチルシクロヘキシル、シクロヘプチル、シクロオクチル、シクロノニル、シクロデシル、シクロドデシル、1-アダマンチル、又は2-アダマンチルのような、1個から3個の $C_1 \sim C_4$ アルキル基により置換されている、好ましくは $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル又は前記シクロアルキルである。シクロヘキシル、1-アダマンチル及びシクロペンチルが最も好ましい。

40

## 【0177】

S、O、又は $NR^{25}$ で中断されている $C_4 \sim C_{18}$ シクロアルキルの例は、ピペリジル、ピペラジニル及びモルホリニルである。

## 【0178】

アリールは、通常、例えば、フェニル、4-メチルフェニル、4-メトキシフェニル、ナフチル、ピフェニリル、2-フルオレニル、フェナントリル、アントリル、テトラシル

50



、ペンタシル、ヘキサシル、テルフェニル又はクアドフェニルのような、場合により置換されていることができる、 $C_6 \sim C_{30}$ アリール、好ましくは $C_6 \sim C_{24}$ アリールであるか；或いは、1個から3個の $C_1 \sim C_4$ アルキル基により置換されているフェニル、例えば、*o*-、*m*-、若しくは*p*-メチルフェニル、2,3-ジメチルフェニル、2,4-ジメチルフェニル、2,5-ジメチルフェニル、2,6-ジメチルフェニル、3,4-ジメチルフェニル、3,5-ジメチルフェニル、2-メチル-6-エチルフェニル、4-*tert*-ブチルフェニル、2-エチルフェニル又は2,6-ジエチルフェニルである。

#### 【0179】

$C_7 \sim C_{24}$ アラルキル基は、例えば、ベンジル、2-ベンジル-2-プロピル、-フェネチル、-メチルベンジル、-ジメチルベンジル、-フェニル-ブチル、-フェニル-オクチル、-フェニル-ドデシルのような、好ましくは、置換されていてもよい $C_7 \sim C_{15}$ アラルキル基であるか；或いは、例えば、2-メチルベンジル、3-メチルベンジル、4-メチルベンジル、2,4-ジメチルベンジル、2,6-ジメチルベンジル又は4-*tert*-ブチルベンジル、或いは3-メチル-5-(1',1',3',3'-テトラメチル-ブチル)-ベンジルのような、1個～3個の $C_1 \sim C_4$ アルキル基によりフェニル環で置換されているフェニル- $C_1 \sim C_4$ アルキルである。

10

#### 【0180】

ヘテロアリールは、典型的には、 $C_2 \sim C_{26}$ ヘテロアリール、すなわち窒素、酸素又は硫黄が考えられるヘテロ原子である、5～7個の環原子を持つ環であるか、又は縮合環系であり、典型的には、少なくとも6個の共役電子を有する原子を5～30個持つ不飽和複素環基であり、例えば、チエニル、ベンゾ〔b〕チエニル、ジベンゾ〔b,d〕チエニル、チアントレニル、フリル、フルフリル、2H-ピラニル、ベンゾフラニル、イソベンゾフラニル、ジベンゾフラニル、フェノキシチエニル、ピロリル、イミダゾリル、ピラゾリル、ピリジル、ピピリジル、トリアジニル、ピリミジニル、ピラジニル、ピリダジニル、インドリジニル、イソインドリル、インドリル、インダゾリル、プリニル、キノリジニル、キノリル、イソキノリル、フタラジニル、ナフチリジニル、キノキサリニル、キナゾリニル、シンノリニル、プテリジニル、カルバゾリル、カルボリニル、ベンゾトリアゾリル、ベンゾオキサゾリル、フェナントリジニル、アクリジニル、ペリミジニル、フェナントロリニル、フェナジニル、イソチアゾリル、フェノチアジニル、イソキサゾリル、フラザニル又はフェノキサジニルであり、これらは非置換であるか、又は置換されていること

20

30

#### 【0181】

$C_6 \sim C_{18}$ シクロアルキルは、例えば、シクロペンチルオキシ、シクロヘキシルオキシ、シクロヘプチルオキシ、又はシクロオクチルオキシ、或いは、1個から3個の $C_1 \sim C_4$ アルキルにより置換されている前記シクロアルコキシ、例えば、メチルシクロペンチルオキシ、ジメチルシクロペンチルオキシ、メチルシクロヘキシルオキシ、ジメチルシクロヘキシルオキシ、トリメチルシクロヘキシルオキシ、又は*tert*-ブチルシクロヘキシルオキシである。

#### 【0182】

$C_6 \sim C_{24}$ アリールオキシは、典型的には、フェノキシ、又は1個から3個の $C_1 \sim C_4$ アルキル基により置換されているフェノキシ、例えば、*o*-、*m*-、又は*p*-メチルフェノキシ、2,3-ジメチルフェノキシ、2,4-ジメチルフェノキシ、2,5-ジメチルフェノキシ、2,6-ジメチルフェノキシ、3,4-ジメチルフェノキシ、3,5-ジメチルフェノキシ、2-メチル-6-エチルフェノキシ、4-*tert*-ブチルフェノキシ、2-エチルフェノキシ、又は2,6-ジエチルフェノキシである。

40

#### 【0183】

$C_6 \sim C_{24}$ アラルコキシは、典型的には、フェニル- $C_1 \sim C_9$ -アルコキシ、例えば、ベンジルオキシ、-メチルベンジルオキシ、-ジメチルベンジルオキシ又は2-フェニルエトキシである。

#### 【0184】

50



C<sub>1</sub> ~ C<sub>24</sub>アルキルチオ基は、直鎖状又は分岐鎖状アルキルチオ基、例えば、メチルチオ、エチルチオ、プロピルチオ、イソプロピルチオ、n - ブチルチオ、イソブチルチオ、ペンチルチオ、イソペンチルチオ、ヘキシルチオ、ヘプチルチオ、オクチルチオ、デシルチオ、テトラデシルチオ、ヘキサデシルチオ又はオクタデシルチオである。

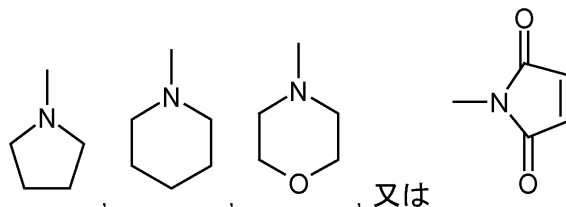
【0185】

R<sup>9</sup>及びR<sup>10</sup>、及びR<sup>25</sup>及びR<sup>26</sup>それぞれにより形成される5員又は6員環の例は、窒素、酸素及び硫黄から選択される1個の追加のヘテロ原子を有することができる、炭素原子3 ~ 5個を有するヘテロシクロアルカン又はヘテロシクロアルケンであり、例えば下記：

【0186】

10

【化131】



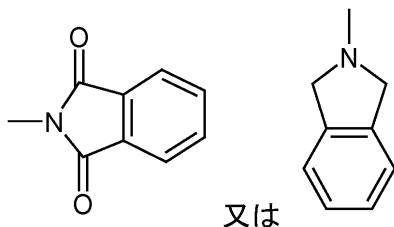
【0187】

であり、これは、二環式系の一部であることができ、例えば、下記：

【0188】

20

【化132】



【0189】

である。

30

【0190】

上述した基の可能な置換基は、C<sub>1</sub> ~ C<sub>8</sub>アルキル、ヒドロキシル基、メルカプト基、C<sub>1</sub> ~ C<sub>8</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub> ~ C<sub>8</sub>アルキルチオ、ハロゲン、ハロ - C<sub>1</sub> ~ C<sub>8</sub>アルキル、シアノ基、アルデヒド基、ケトン基、カルボキシル基、エステル基、カルバモイル基、アミノ基、ニトロ基又シリル基である。

【0191】

用語「ハロアルキル」は、上述したアルキル基がハロゲンにより部分的に又は完全に置換されていることにより与えられる基、例えば、トリフルオロメチル等を意味する。「アルデヒド基、ケトン基、エステル基、カルバモイル基及びアミノ基」には、C<sub>1</sub> ~ C<sub>24</sub>アルキル基、C<sub>4</sub> ~ C<sub>18</sub>シクロアルキル基、C<sub>6</sub> ~ C<sub>30</sub>アリール基、C<sub>7</sub> ~ C<sub>24</sub>アラルキル基、又は複素環基により置換されているものが含まれ、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、アラルキル基及び複素環基は、非置換でも又は置換されていてよい。用語「シリル基」は、式：- Si R<sup>105</sup> R<sup>106</sup> R<sup>107</sup>（式中、R<sup>105</sup>、R<sup>106</sup>及びR<sup>107</sup>は、互いに独立して、C<sub>1</sub> ~ C<sub>8</sub>アルキル基、特にC<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub>アルキル基、C<sub>6</sub> ~ C<sub>24</sub>アリール基、又はC<sub>7</sub> ~ C<sub>12</sub>アラルキル基である）で示される基、例えばトリメチルシリル基を意味する。

40

【0192】

例えば、R<sup>6</sup>及びR<sup>7</sup>のような置換基が基中に1回よりも多く現れる場合、置換基はそれぞれの場合で異なることができる。

【0193】

上記記載のように、前述の基は、Eで置換され、及び/又は、所望であれば、Dで中断

50



されていてよい。中断は、当然のことながら、基が、単一結合により互いに結合している少なくとも2個の炭素原子を含有する基の場合にのみ可能であり； $C_6 \sim C_{18}$ アリールは中断されておらず；中断されているアリールアルキル又はアルキルアリールは、アルキル部分にD単位を含有している。1個以上のEで置換され、及び/又は1個以上のD単位で中断されている $C_1 \sim C_{24}$ アルキルは、例えば、 $(CH_2CH_2O)_{1-9} - R^x$ （ここで、 $R^x$ は、H、又は $C_1 \sim C_{10}$ アルキル若しくは $C_2 \sim C_{10}$ アルカノイル（例えば、 $CO - CH(C_2H_5)C_4H_9$ ）、 $CH_2 - CH(OR^y) - CH_2 - O - R^y$ であり、ここで、 $R^y$ は、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、フェニル、 $C_7 \sim C_{15}$ フェニルアルキルであり、そして $R^y$ は $R^y$ と同じ定義を包含するか又はHである）； $C_1 \sim C_8$ アルキレン -  $COO - R^z$ 、例えば、 $CH_2COOR^z$ 、 $CH(CH_3)COOR^z$ 、 $C(CH_3)_2COOR^z$ （ここで、 $R^z$ は、H、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $(CH_2CH_2O)_{1-9} - R^x$ であり、そして $R^x$ は、上記の定義を包含する）； $CH_2CH_2 - O - CO - CH = CH_2$ ； $CH_2CH(OH)CH_2 - O - CO - C(CH_3) = CH_2$ である。

10

#### 【0194】

本発明の青色発光2H - ベンゾトリアゾールは、約520nm未満、例えば約380～約520nmの間で発光する。例えば、本発明の青色発光2H - ベンゾトリアゾールは、約(0.14、0.08)のNTSC座標を有し、第1座標は約0.12～約0.16の間にあり、第2座標は約0.05～約0.10の間にある。

#### 【0195】

式I、II、III又はIVの本発明の化合物は、青色発光有機化合物以外に機能してよく、例えば、本発明の化合物は、正孔注入、正孔輸送、及び電子注入又は電子輸送材料として機能してもよい。本発明の有機ELデバイスは、壁掛けテレビセット(an on-wall television set)のフラットパネル・ディスプレイ、平面発光装置、コピー機又はプリンターの光源、液晶ディスプレイ又はカウンターの光源、掲示板ディスプレイ及び信号灯に適用されることができるので、重要な産業的価値を有する。

20

#### 【0196】

本発明の材料は、有機ELデバイス、電子写真光受信機、光電変換器、太陽電池、イメージセンサの分野で使用することができる。

#### 【0197】

適切なTg、又はガラス転移温度で、本発明の有機層を得るためには、本発明の2H - ベンゾトリアゾールが、約150、例えば約200、例えば約250、例えば約300を超える融点を有することが有利である。

30

#### 【0198】

本発明のエレクトロルミネセントデバイスは、当業界において既知であるように、別様にも設計され、

例えばUS - B - 5,518,824、6,280,859、5,629,389、5,486,406、5,104,740及び5,116,708に記載されている(関連する開示を本明細書中に援用する)。

#### 【0199】

本発明は、陽極と陰極の間に式Iの2H - ベンゾトリアゾールを有し、電気エネルギーの作用により発光するエレクトロルミネセントデバイスに関する。

40

#### 【0200】

最新の有機エレクトロルミネセンスデバイスの典型的な構造は下記の通りである：

(i)陽極/正孔輸送層/電子輸送層/陰極(ここで、式(I)の2H - ベンゾトリアゾールは、発光及び正孔輸送層の形成に使用される、正孔輸送化合物として使用されるか、又は発光及び電子輸送層の形成に使用される、電子輸送化合物として使用されるかのいずれかである)、(ii)陽極/正孔輸送層/発光層/電子輸送層/陰極(ここで、式(I)の2H - ベンゾトリアゾールは、この構成で正孔輸送特性又は電子輸送特性を示すかどうかに関らず、発光層を形成する)、(iii)陽極/正孔注入層/正孔輸送層/発光層/電子輸送層/陰極、(iv)陽極/正孔輸送層/発光層/正孔抑制層/電子輸送層/陰

50



極、(v)陽極/正孔注入層/正孔輸送層/発光層/正孔阻害層/電子輸送層/陰極、(vi)陽極/発光層/電子輸送層/陰極、(vii)陽極/発光層/正孔抑制層/電子輸送層/陰極、(viii)発光材料しか含有しない単一層、又は発光材料と正孔輸送層、正孔ブロッキング層及び/又は電子輸送層のいずれかの材料との組合せ、及び(ix)(ii)~(vii)で記載された多層構造(ここで、発光層は(viii)で定義された単層である)。

#### 【0201】

式Iの2H-ベンゾトリアゾールは、原則的に任意の有機層、例えば、正孔輸送層、発光層、又は電子輸送層で使うことができるが、好ましくは発光層で発光材料として、場合によりホスト又はゲスト成分として使用される。

10

#### 【0202】

本発明の発光化合物は、固体状態で、強い蛍光を示し、優れた電界印加発光特性を示す。更に、本発明の発光化合物は、金属電極からの正孔の注入及び正孔の輸送に優れ；並びに金属電極からの電子の注入及び電子の輸送に優れている。それらは、発光材料として効果的に使用され、他の正孔輸送材料、他の電子輸送材料又は他のドーパントと組み合わせ使用してよい。

#### 【0203】

本発明の2H-ベンゾトリアゾールは、均一な薄膜を形成する。従って、発光層は、本発明の2H-ベンゾトリアゾールのみから形成されてもよい。

代わりに、発光層は、必要に応じて、既知の発光材料、既知のドーパント、既知の正孔注入材料又は既知の電子注入材料を含有してよい。有機ELデバイスにおいて、消光により引き起こされる輝度及び寿命の減少は、デバイスを複層構造として形成することにより防止することができる。発光材料、ドーパント、正孔注入材料及び電子注入材料は、必要に応じて組み合わせ使用してもよい。更に、ドーパントは、発光輝度及び発光効率を向上させることができ、赤、緑又は青の発光を達成することができる。更に、正孔注入ゾーン、発光層及び電子注入ゾーンの各々が、少なくとも2層の層構造を有してもよい。この場合の正孔注入ゾーンにおいては、正孔が電極から注入される層は、「正孔注入層」と呼ばれ、正孔注入層から正孔を受け取り、正孔を発光層に輸送する層は、「正孔輸送層」と呼ばれる。電子注入ゾーンにおいては、電子が電極から注入される層は、「電子注入層」と呼ばれ、電子注入層から電子を受け取り、電子を発光層に輸送する層は、「電子輸送層」と呼ばれる。これらの層は、材料のエネルギーレベルと耐熱性及び有機層若しくは金属電極への接着性のような要素に応じて選択され、使用される。

20

30

#### 【0204】

本発明の2H-ベンゾトリアゾールと一緒に、発光層内で使用してもよい発光材料又はドーパントには、例えば、アントラセン、ナフタレン、フェナントレン、ピレン、テトラセン、コロネン、クリセン、フルオレセイン、ベリレン、フタロベリレン、ナフタロベリレン、ペリノン、フタオベリノン、ナフタロベリノン、ジフェニルブタジエン、テトラフェニルブタジエン、クマリン、オキサジアゾール、アルダジン、ビスベンゾオキサゾリン、ビススチリル、ピラジン、シクロペンタジエン、キノリン金属錯体、アミノキノリン金属錯体、ベンゾキノリン金属錯体、イミン、ジフェニルエチレン、ピニルアントラセン、ジアミノカルバゾール、ピラン、チオピラン、ポリメチン、メロシアニン、イミダゾールキレートオキシノイド化合物、キナクリドン、ルブレン、及び染料レーザー又は増光用の蛍光染料が含まれる。

40

#### 【0205】

発光層内で使用することができる本発明の2H-ベンゾトリアゾール、及び上記の化合物(又は化合物群)は、任意の混合比率で使用して、発光層を形成してもよい。すなわち、本発明の2H-ベンゾトリアゾールは、上記化合物と本発明の2H-ベンゾトリアゾールとの組み合わせに応じて、発光層を形成するための主要成分を与えてよく、或いは別の主要材料内のドーピング材料としてもよい。例えば、DPVB(4,4'-ビス-(2,2'-ジフェニル-1-ビニル)ピフェニル)をホストとして使用し、化合物A-1~A

50



- 12 をゲストとして使用する場合に、良好な結果が得られる。

#### 【0206】

フィルムタイプのエレクトロルミネセンスデバイスは、通常、本質的に1対の電極と、その間の少なくとも1個の電荷輸送層からなる。通常2個の電荷輸送層、1個の正孔輸送層（陽極の次）及び1個の電子輸送層（陰極の次）が存在する。それらのうちのいずれか1つは、正孔輸送材料又は電子輸送材料としての特性に応じて、発光材料として無機又は有機蛍光物質を含有する。また、発光材料が、追加の層として正孔輸送層と電子輸送層との間に使用されることも通例である。上述したデバイスの構造において、正孔注入層を陽極と正孔輸送層の間に構築し、及び/又は正孔抑制層を発光層と電子輸送層との間に構築して、発光層における正孔及び電子母集団を最大化することができ、電荷再結合及び強力な発光における大きな効率性が達成されることができる。

10

#### 【0207】

デバイスは幾つかの方法で調製することができる。通常、真空蒸着が調製に使用される。好ましくは、有機層は、室温に保持されている市販のインジウム - スズ - 酸化物（「ITO」）ガラス基板上に上記順序で積層され、これは、上記構築で陽極として作用する。膜厚は、好ましくは1 ~ 10,000 nm、より好ましくは1 ~ 5,000 nm、より好ましくは1 ~ 1,000 nm、より好ましくは1 ~ 500 nmの範囲である。厚さが50 ~ 200 nmの範囲のMg / Ag合金、2成分系のLi - Al又はLiF - Al系のような陰極金属が有機層の上面に積層される。蒸着する間の真空は、好ましくは0.1333 Pa ( $1 \times 10^{-3}$  Torr) 未満、より好ましくは1.333  $\times 10^{-3}$  Pa ( $1 \times 10^{-5}$  Torr) 未満、より好ましくは1.333  $\times 10^{-4}$  Pa ( $1 \times 10^{-6}$  Torr) 未満である。

20

#### 【0208】

陽極として、金、銀、銅、アルミニウム、インジウム、鉄、亜鉛、スズ、クロム、チタン、バナジウム、コバルト、ニッケル、鉛、マンガン、タングステン等のような金属のような高い仕事関数を有する通常の陽極材料、マグネシウム / 銅、マグネシウム / 銀、マグネシウム / アルミニウム、アルミニウム / インジウム等のような金属合金、Si、Ge、GaAs等のような半導体、インジウム - スズ - 酸化物（「ITO」）、ZnO等のような金属酸化物、CuI等のような金属化合物、更に、ポリアセチレン、ポリアニリン、ポリチオフェン、ポリピロール、ポリパラフェニレン等のような導電性ポリマー、好ましくはITO、最も好ましくは基板としてのガラス上のITOを使用することができる。

30

#### 【0209】

これらの電極材料のうち、金属、金属合金、金属酸化物及び金属化合物は、例えば、スパッタリング法により電極に変換することができる。電極用材料として金属又は金属合金を使用する場合に、電極は、また真空蒸着法によって形成することができる。電極を形成する材料として金属又は金属合金を使用する場合に、電極は、更に、化学めっき法により形成することができる（例えば、Handbook of Electrochemistry, pp 383-387, Mazuren, 1985を参照）。導電性ポリマーを使用する場合に、電極は、導電コーティングにより予め準備されている基板上に、陽極酸化重合法でフィルムを形成することにより製造することができる。基板上に形成されるべき電極の厚さは、特定の値に限定されないが、基板が発光面として使用される場合に、電極の厚さは、透明性を確保するように、好ましくは1 nm ~ 300 nmの範囲内、より好ましくは5 ~ 200 nmの範囲内である。

40

#### 【0210】

好ましい実施態様において、ITOは、10 nm (100 ) ~ 1  $\mu$  (10000 )、好ましくは20 nm (200 ) ~ 500 nm (5000 ) の範囲のITO膜厚を有して、基板上に使用される。一般に、ITO膜のシート抵抗は、100 /cm<sup>2</sup>以下、より好ましくは50 /cm<sup>2</sup>以下の範囲で選択される。

#### 【0211】

そのような陽極は、Geomatech Co. Ltd.、Sanyo Vacuum Co. Ltd、Nippon Sheet Glass Co. Ltd.のような日本の製造業者から市販されている。

#### 【0212】

50



基板として、導電性材料か又は電氣的に絶縁性の材料のいずれかを使用することができる。導電性基板を使用する場合には、発光層又は正孔輸送層がその上に直接形成されるのに対し、電氣的に絶縁性の材料を使用する場合には、まず初めに電極がその上に形成され、次に発光層又は正孔輸送層が重ね合わされる。

【0213】

基板は、透明、半透明又は不透明のいずれかであってよい。しかし、指示平面として基板を使用する場合には、基板は透明又は半透明でなければならない。

【0214】

透明な電氣的に絶縁性の基板は、例えば、ガラス、石英等のような無機化合物、ポリエチレン、ポリプロピレン、ポリメチルメタクリレート、ポリアクリロニトリル、ポリエス  
10 テル、ポリカーボネート、ポリ塩化ビニル、ポリビニルアルコール、ポリ酢酸ビニル等のような有機ポリマー化合物である。これらの基板を、それぞれ上記の方法のうちの1つに従って基板に電極を備えることにより、透明な導電性基板に変換することができる。

【0215】

半透明な電氣的に絶縁性の基板の例は、アルミナ、Y S Z ( イットリウム安定化ジルコニア ) 等のような無機化合物、ポリエチレン、ポリプロピレン、ポリスチレン、エポキシ樹脂等のような有機ポリマー化合物である。これらの基板を、それぞれ上述した方法のうちの1つに従って基板に電極を備えることにより、半透明な導電性基板に変換することができる。

【0216】

不透明な導電性基板の例は、アルミニウム、インジウム、鉄、ニッケル、亜鉛、スズ、クロム、チタン、銅、銀、金、白金等のような金属、種々の電気めっきされた金属、青銅、ステンレススチールのような金属合金、S i、G e、G a A s 等のような半導体、ポリ  
20 アニリン、ポリチオフェン、ポリピロール、ポリアセチレン、ポリパラフェニレン等のような導電性ポリマーである。

【0217】

基板は、上記の基板材料のうちの1つを所望の寸法に形成して得ることができる。基板が平滑面を有することが好ましい。基板が粗面を有する場合でも、20  $\mu$ m以上の曲率を有する円形むらを有するのであれば、実際の使用のために何ら問題を起こさない。基板の厚さに関しては、十分な機械的強度が確保されていれば、限定されない。

【0218】

陰極として、アルカリ金属、アルカリ土類金属、第13族元素、銀及び銅のような低い仕事関数を有する通常の陰極材料、並びにナトリウム、リチウム、カリウム、カルシウム、フッ化リチウム ( L i F )、ナトリウム - カリウム合金、マグネシウム、マグネシウム - 銀合金、マグネシウム - 銅合金、マグネシウム - アルミニウム合金、マグネシウム - インジウム合金、アルミニウム、アルミニウム - アルミニウム酸化物合金、アルミニウム - リチウム合金、インジウム、カルシウムのような合金又は合金の混合物、導電性ポリマー、例えば、ポリピロール、ポリチオフェン、ポリアニリン、ポリアセチレン等のような E P - A 4 9 9 , 0 1 1 で例示されている材料、好ましくは M g / A g 合金、L i F - A l  
40 又は L i - A l 組成物が使用できる。

【0219】

好ましい実施態様において、マグネシウム - 銀合金、若しくはマグネシウムと銀との混合物、又はリチウム - アルミニウム合金、フッ化リチウム - アルミニウム合金、若しくはリチウムとアルミニウムとの混合物は、10 nm ( 1 0 0 ) ~ 1  $\mu$ m ( 1 0 0 0 0 )、好ましくは20 nm ( 2 0 0 ) ~ 5 0 0 nm ( 5 0 0 0 ) の範囲の膜厚で使用する  
50 ことができる。

【0220】

そのような陰極を、上記記載の既知の真空蒸着技術により前記の電子輸送層に蒸着することができる。

【0221】

10

20

30

40

50



本発明の好ましい実施態様において、発光層は、正孔輸送層と電子輸送層との間で使用することができる。通常、発光層は、正孔輸送層上に薄膜を形成することにより調製される。

#### 【0222】

上記の薄膜を形成する方法としては、例えば、真空蒸着法、スピンコート法、流延法、ラングミュア-プロジェット(「LB」)法等がある。これらの方法のなかで、真空蒸着法、スピンコート法及び流延法が、操作の容易さ及び費用の観点から特に好ましい。

#### 【0223】

真空蒸着法により組成物を使用して薄膜を形成する場合に、真空蒸着法を実施する条件は、通常、化合物の特性、形状及び結晶状態に強く依存する。しかし、最適な条件は、通常次の通りである：加熱ポートの温度：100～400；基板温度：-100～350；圧力： $1.33 \times 10^{-4}$  Pa ( $1 \times 10^{-2}$  Torr)～ $1.33 \times 10^{-4}$  Pa ( $1 \times 10^{-6}$  Torr)及び付着速度：1 pm～6 nm/秒。

#### 【0224】

有機ELデバイスにおいて、発光層の厚さは、発光性を決定する要因の一つである。例えば、発光層が十分に厚くない場合には、前記発光層を間に挟んでいる2個の電極の間で極めて容易に短絡が起こり得、したがってEL発光が得られない。一方、発光層が過剰に厚い場合には、高い電気抵抗のため大きな電位降下が発光層の中で起こり、それでEL発光のしきい電圧が増大する。したがって、有機発光層の厚さは、5 nm～5 μmの範囲、好ましくは10 nm～500 nmの範囲に限定される。

#### 【0225】

スピンコート法及び流延法、インクジェットプリント法を使用して発光層を形成場合には、コーティングは、ベンゼン、トルエン、キシレン、テトラヒドロフラン、メチルテトラヒドロフラン、N,N-ジメチルホルムアミド、ジクロロメタン、ジメチルスルホキシド等のような適切な有機溶媒中、組成物を0.0001～90重量%の濃度で溶解して調製する溶液を使用して、実施することができる。濃度が90重量%を超える場合には、溶液は、通常粘性になるので、平滑で均一な膜をもはや形成することができなくなる。他方、濃度が0.0001重量%未満の場合には、膜を形成する効率が低くなりすぎて経済的ではない。したがって、組成物の好ましい濃度は、0.01～80重量%の範囲内である。

#### 【0226】

上記のスピンコート法又は流延法を使用する場合に、発光層を形成する溶液にポリマー結合剤を加えて、得られる層の均一性及び機械的強度を更に向上させることが可能である。原則的に、組成物が溶解する溶媒に可溶であれば、任意のポリマー結合剤を使用してよい。

#### 【0227】

そのようなポリマー結合剤の例は、ポリカーボネート、ポリビニルアルコール、ポリメタクリレート、ポリメチルメタクリレート、ポリエステル、ポリ酢酸ビニル、エポキシ樹脂等である。しかし、ポリマー結合剤及び組成物で構成される固形分が99重量%を超える場合には、溶液の流動性は、通常非常に低くなるので、等質性に優れた発光層を形成することが不可能になる。他方、組成物の含有量がポリマー結合剤よりも実質的に少ない場合には、前記層の電気抵抗が極めて大きく、それで高電圧が付加されない限り発光しない。したがって、ポリマー結合剤対組成物の好ましい比率は、10：1～1：50重量の範囲内で選択され、溶液中の両方の成分で構成される固形分は、好ましくは0.01～80重量%の範囲内、より好ましくは0.1～60重量%の範囲内である。

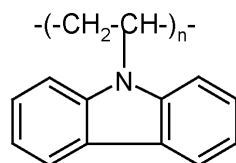
#### 【0228】

正孔輸送層として、ポリビニルカルバゾールのような既知の有機正孔輸送化合物：

#### 【0229】



【化 1 3 3】



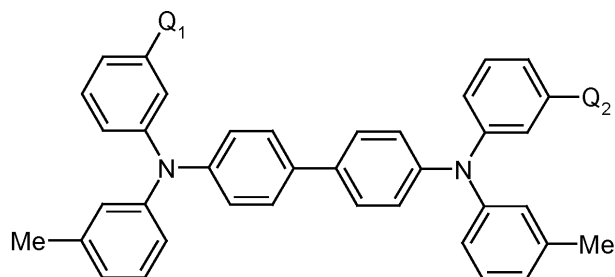
【 0 2 3 0】

J. Amer. Chem. Soc. 90 (1968) 3925に開示されている T P D 化合物：

【 0 2 3 1】

【化 1 3 4】

10



【 0 2 3 2】

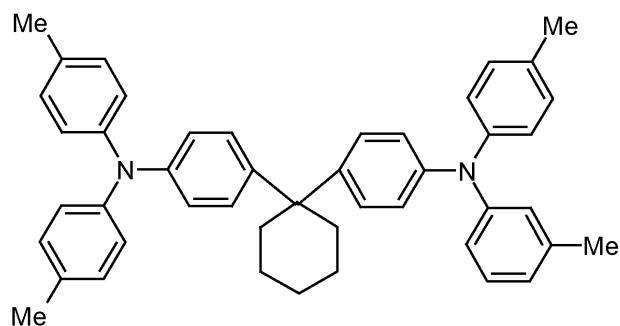
(式中、 $Q_1$ 及び $Q_2$ は、それぞれ水素原子又はメチル基を表す)；

20

J. Appl. Phys. 65(9) (1989) 3610に開示されている化合物：

【 0 2 3 3】

【化 1 3 5】



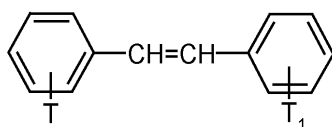
30

【 0 2 3 4】

スチルベンに基づく化合物：

【 0 2 3 5】

【化 1 3 6】



40

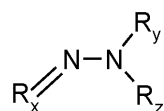
【 0 2 3 6】

(式中、 $T$ 及び $T_1$ は、有機基を表す)；

ヒドラゾンに基づく化合物：

【 0 2 3 7】

【化 1 3 7】



【 0 2 3 8】

50



(式中、 $R_x$ 、 $R_y$ 及び $R_z$ は有機基を表す)等を使用することができる。

#### 【0239】

正孔輸送材料として使用すべき化合物は、上記で示された化合物に限定されない。正孔を輸送する性質を有する任意の化合物が、正孔輸送材料として使用することができ、例えば、トリアゾール誘導体、オキサジアゾール誘導体、イミダゾール誘導体、ポリアリールアルカン誘導体、ピラゾリン誘導体、ピラズロン誘導体、フェニレンジアミン誘導体、アリールアミン誘導体、アミノ置換カルコン誘導体、オキサゾール誘導体、スチルベニルアントラセン誘導体、フルオレノン誘導体、ヒドラゾン誘導体、スチルベン誘導体、アニリン誘導体のコポリマー、PEDOT(ポリ(3,4-エチレンジオキシ-チオフェン))及びその誘導体、導電性オリゴマー、特にチオフェンオリゴマー、ポルフィリン化合物、芳香族第三級アミン化合物、スチルベニルアミン化合物等である。

10

#### 【0240】

特に、芳香族第三級アミン化合物、例えば、N,N,N,N-テトラフェニル-4,4-ジアミノビフェニル、N,N-ジフェニル-N,N-ビス(3-メチルフェニル)-4,4-ジアミノビフェニル(TPD)、2,2-ビス(ジ-p-トリルアミノフェニル)プロパン、1,1-ビス(4-ジ-トリルアミノフェニル)-4-フェニルシクロヘキサン、ビス(4-ジメチルアミノ-2-メチルフェニル)フェニルメタン、ビス(4-ジ-p-トリルアミノフェニル)フェニルメタン、N,N-ジフェニル-N,N-ジ(4-メトキシフェニル)-4,4-ジアミノビフェニル、N,N,N,N-テトラフェニル-4,4-ジアミノジフェニルエーテル、4,4-ビス(ジフェニルアミノ)クアテルフェニル、N,N,N-トリ(p-トリル)アミン、4-(ジ-p-トリルアミノ)-4-[4-(ジ-p-トリルアミノ)スチリル]スチルベン、4-N,N-ジフェニルアミノ-(2-ジフェニルビニル)ベンゼン、3-メトキシ-4-N,N-ジフェニルアミノスチルベン、N-フェニルカルバゾール等が使用される。

20

#### 【0241】

更に、US-A-5,061,569に開示されている4,4-ビス[N-(1-ナフチル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル及びEP-A-508,562に開示され、4,4,4"-トリス[N-(3-メチルフェニル)-N-フェニルアミノ]トリフェニルアミンのような3個のトリフェニルアミン単位が窒素原子と結合している化合物を使用することができる。

30

#### 【0242】

正孔輸送層は、陽極に少なくとも1種の正孔輸送材料を含有する有機膜を調製することにより形成できる。正孔輸送層は、真空蒸着法、スピンコート法、流延法、インクジェットプリント法、LB法等により形成することができる。これらの方法のなかで、真空蒸着法、スピンコート法及び流延法が、容易さ及び費用の観点から特に好ましい。

#### 【0243】

真空蒸着法を使用する場合には、付着条件は、発光層の形成について記載された方法(上記参照)と同様の方法で選択してよい。1個よりも多い正孔輸送材料を含む正孔輸送層を形成することが望ましい場合には、所望の化合物を使用する同時蒸発法が使用できる。

#### 【0244】

正孔輸送層をスピンコート法又は流延法で形成する場合に、層は、発光層の形成について記載された条件(上記参照)で形成することができる。

40

#### 【0245】

発光層を形成する場合のように、より平滑でかつより均一の正孔輸送層は、結合剤及び少なくとも1種の正孔輸送材料を含有する溶液を使用して形成することができる。そのような溶液を使用するコーティングは、発光層について記載された方法と同様の方法により実施することができる。少なくとも1種の正孔輸送材料が溶解している溶媒に可溶であれば、任意のポリマー結合剤を使用してよい。適切なポリマー結合剤の例、及び適切であり好ましい濃度の例は、発光層の形成について記載した際に、上に挙げている。

#### 【0246】

50



正孔輸送層の厚さは、好ましくは、 $0.5 \sim 1000 \text{ nm}$ 、好ましくは  $1 \sim 100 \text{ nm}$ 、より好ましくは  $2 \sim 50 \text{ nm}$  の範囲から選択される。

#### 【0247】

正孔注入材料としては、例えば JP 64-7635 に記載されている通りの金属の存在しないフタロシアニン ( $\text{H}_2\text{Pc}$ )、銅-フタロシアニン ( $\text{Cu-Pc}$ ) 及びそれらの誘導体のような既知の有機正孔輸送化合物を使用することができる。更に、正孔輸送層よりも弱いイオン化電位を有する、上記で正孔輸送材料として定義された芳香族アミンの幾つかを使用することができる。

#### 【0248】

正孔注入層は、少なくとも 1 種の正孔注入材料を陽極層と正孔輸送層との間に含有する有機膜を調製することにより形成できる。正孔注入層は、真空蒸着法、スピンコート法、流延法、LB 法等により形成することができる。層の厚さは、好ましくは  $5 \text{ nm} \sim 5 \mu\text{m}$ 、より好ましくは  $10 \text{ nm} \sim 100 \text{ nm}$  である。

#### 【0249】

例えば、金属錯体化合物又は窒素含有 5 員誘導体である電子輸送材料は、高い電子注入効率（陰極から）及び高い電子移動性を有するべきである。下記の材料は、電子輸送材料用に例示することができる：8-ヒドロキシキノリン酸リチウム、ビス(8-ヒドロキシキノリン酸)亜鉛、ビス(8-ヒドロキシキノリン酸)銅、ビス(8-ヒドロキシキノリン酸)マンガン、トリス(8-ヒドロキシキノリン酸)ガリウム、トリス(8-ヒドロキシキノリナト)-アルミニウム(III) 及びその誘導体、例えばトリス(2-メチル-8-ヒドロキシキノリン酸)アルミニウム、ビス(10-ヒドロキシベンゾ[h]キノリノラト)ベリリウム(II) 及びその誘導体、ビス(10-ヒドロキシベンゾ[h]キノリン酸)亜鉛、ビス(2-メチル-8-キノリン酸)クロロガリウム、ビス(2-メチル-8-キノリン酸)(o-クレゾラト)ガリウム、ビス(2-メチル-8-キノリン酸)(1-ナフトラト)アルミニウム、ビス(2-メチル-8-キノリン酸)(2-ナフトラト)ガリウム、ビス(2-メチル-8-キノリン酸)フェノラトガリウム、ビス(o-(2-ベンゾオキサゾリル)フェノラト)亜鉛、ビス(o-(2-ベンゾチアゾリル)フェノラト)亜鉛及びビス(o-(2-ベンゾトリゾリル)フェノラト)亜鉛；2-(4-ピフェニル)-5-(4-tert-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール及び2,5-ビス(1-ナフチル)-1,3,4-オキサジアゾールのようなオキサジアゾール誘導体、並びにその二量体系、例えば1,4-ビス[2-(5-フェニルオキサジアゾリル)]ベンゼン、1,4-ビス[2-(5-フェニルオキサジアゾリル)-4-tert-ブチルベンゼン]、2,5-ビス(1-フェニル)-1,3,4-オキサジアゾール、2-(4'-tert-ブチルフェニル)-5-(4"-ピフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール、1,3-ビス(4-tert-ブチルフェニル-1,3,4)オキサジアゾリル)ピフェニレン及び1,3-ビス(4-tert-ブチルフェニル-1,3,4)オキサジアゾリル)フェニレン、オキサゾール誘導体、ジオキサゾール誘導体、チアゾール誘導体、チアジアゾール誘導体、トリアゾール誘導体、例えば、2,5-ビス(1-フェニル)-1,3,4-オキサゾール、1,4-ビス(2-(4-メチル-5-フェニルオキサゾリル)ベンゼン)、2,5-ビス(1-フェニル)-1,3,4-チアゾール、2-(4'-tert-ブチルフェニル)-5-(4"-ピフェニル)-1,3,4-チアゾール、2,5-ビス(1-ナフチル)-1,3,4-チアゾール、1,4-ビス[2-(5-フェニルチアゾリル)]ベンゼン、2-(4'-tert-ブチルフェニル)-5-(4"-ピフェニル)-1,3,4-トリアゾール、又は2,5-ビス(1-ナフチル)-1,3,4-トリアゾール及び1,4-ビス[2-(5-フェニルトリアゾリル)]ベンゼン、クマリン誘導体、イミダゾピリジン誘導体、フェナントロリン誘導体、或いはAppl. Phys. Lett. 48 (2) (1986) 183で開示されているベリレンテトラカルボン酸誘導体。

#### 【0250】

電子輸送層は、正孔輸送層又は発光層上に少なくとも 1 種の電子輸送材料を含有する有機膜を調製することにより形成できる。電子輸送層は、真空蒸着法、スピンコート法、流

10

20

30

40

50



延法、LB法等により形成することができる。

【0251】

正孔抑制層用の正孔抑制材料は、電子輸送層から発光層への高い電子注入／輸送効率を有し、また、ルミネセンス効率の低下を回避するため、発光層から正孔の流出を阻止するように発光層よりも高いイオン化電位を有することが好ましい。

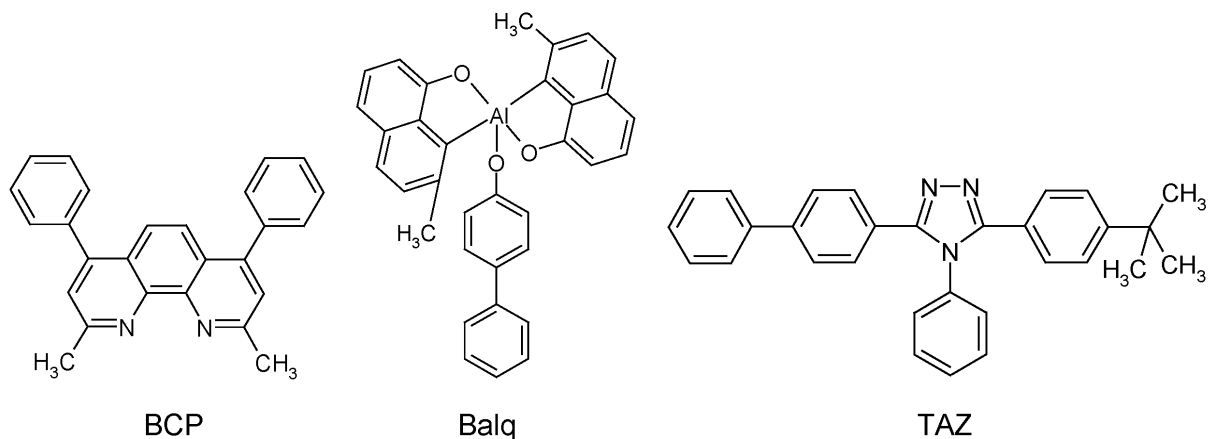
【0252】

正孔抑制材料として、Balq、TAZ及びフェナントロリン誘導体のような既知の材料、例えば、バトクプロイン（BCP）を使用することができる。

【0253】

【化138】

10



20

【0254】

正孔抑制層は、電子輸送層と発光層との間に少なくとも1種の正孔抑制材料を含有する有機膜を調製することにより形成できる。正孔抑制層は、真空蒸着法、スピンコート法、流延法、インクジェットプリント法、LB法等により形成することができる。層の厚さは、好ましくは5nm～2μmの範囲内、より好ましくは10nm～100nmの範囲内から選択される。

【0255】

発光層又は正孔輸送層を形成する場合のように、より平滑で一層均一の電子輸送層は、結合剤及び少なくとも1種の電子輸送材料を含有する溶液を使用して形成することができる。電子輸送層の厚さは、好ましくは、0.5～1000nm、好ましくは1～100nm、より好ましくは2～50nmの範囲から選択される。

30

【0256】

正孔注入材料を、電子受容材料を組み込むことにより感受性を増大させてもよく、また電子注入材料を、電子供与材料を組み込むことにより感受性を増大させてもよい。

【0257】

本発明の有機ELデバイスにおいて、発光層は、本発明の発光2H-ベンゾトリアゾール材料に加えて、他の発光材料、他のドーパント、他の正孔注入材料及び他の電子注入材料のうちの少なくとも1種を含有してもよい。本発明の有機ELデバイスを、温度、湿度及び周囲雰囲気に対する安定性において向上させるために、保護層をデバイスの表面に形成してもよく、或いはデバイス全体をシリコン油等でシールしてもよい。

40

【0258】

陰極用に使用する導電性材料には、4eVよりも小さい仕事関数を有するものから適切に選択する。導電性材料には、マグネシウム、カルシウム、スズ、鉛、チタン、イットリウム、リチウム、ルテニウム、マンガン、アルミニウム及びこれらの合金が含まれるが、導電性材料はこれらに限定されるわけではない。合金の例には、マグネシウム／銀、マグネシウム／インジウム及びリチウム／アルミニウムが含まれるが、合金はこれらに限定されるわけではない。陽極及び陰極はそれぞれ、必要に応じて、2個又はそれ以上の層で形成される層構造を有してもよい。

50



## 【 0 2 5 9 】

有機ＥＬデバイスの効果的な発光のため、デバイスの発光波長領域において、電極の少なくとも１個が、十分に透明であるのが望ましい。更に、基材も同様に透明であるのが望ましい。透明な電極は、所定の光透過率を確保するように、蒸着法又はスパッタリング法により、上記の導電材料から製造される。発光表面側の電極は、例えば、少なくとも１０％の光透過率を有する。基材は、適切な機械的強度及び熱強度並びに透明度を有する限り、特に限定されない。例えば、基材は、ガラス基材、並びにポリエチレン基材、ポリエチレンテレフタレート基材、ポリエーテルスルホン基材及びポリプロピレン基材のような透明な樹脂の基材から選択される。

## 【 0 2 6 0 】

本発明の有機ＥＬデバイスにおいては、各層は、真空蒸着法、スパッタリング法、プラズマ法及びイオンめっき法のような乾式製膜法、並びにスピンコート法、浸漬法及び流し塗り法のような湿式製膜法のいずれか一つにより形成することができる。各層の厚さは特に限定されないが、各層は適切な厚さを有することが必要である。層の厚さが大きすぎて非効率な場合は、所定の発光を達成するために高電圧が必要となる。層の厚さが小さすぎる場合は、層にはピンホール等ができやすく、そのため電界が印加された場合に、十分な発光輝度を得るのが難しい。各層の厚さは、例えば、約５ｎｍ～１０μｍの範囲内、例えば約１０ｎｍ～０．２μｍの範囲内である。

## 【 0 2 6 1 】

湿式製膜法においては、意図した層を形成するための材料は、エタノール、クロロホルム、テトラヒドロフラン及びジオキサンのような適切な溶媒に溶解又は分散し、薄膜が溶液又は分散体から形成される。溶媒は上記の溶媒に限定されない。製膜性を向上させ、層におけるピンホールの発生を防ぐために、層を形成する上記溶液又は分散体は、適切な樹脂及び適切な添加剤を含有してもよい。使用できる樹脂には、ポリスチレン、ポリカーボネート、ポリアリール酸、ポリエステル、ポリアミド、ポリウレタン、ポリスルホン、ポリメタクリル酸メチル、ポリアクリル酸メチル及びセルロース、これらのコポリマー、ポリ-N-ビニルカルボゾール及びポリシランのような導光性樹脂、並びにポリチオフェン及びポリピロールのような導電性ポリマーが含まれる。上記添加剤には、酸化防止剤、紫外線吸収剤及び可塑剤が含まれる。

## 【 0 2 6 2 】

本発明の発光ベンゾトリアゾール材料を有機ＥＬデバイスの発光層に使用する場合に、有機ＥＬデバイスを、発光効率及び最大発光輝度のような有機ＥＬデバイス特性において向上させることができる。更に、本発明の有機ＥＬデバイスは、熱及び電流に対し著しく安定し、使用可能な発光輝度を低作動電圧で与える。従来型デバイスの課題であった劣化を著しく低減させることができる。

## 【 0 2 6 3 】

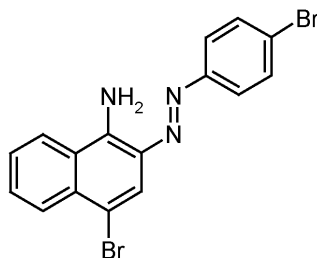
以下の実施例は本発明を例示する。実施例において、並びに本出願全体にわたって、用語「発光材料」は、本２Ｈ-ベンゾトリアゾール化合物を意味する。

## 【 0 2 6 4 】

## 実施例 1

## 【 0 2 6 5 】

## 【 化 1 3 9 】



10

20

30

40

50



## 【 0 2 6 6 】

a) 4 - ブロモアニリン ( 5 8 . 1 4 mmol ) を、H C l 1 7 4 mmol を使用して水 2 0 0 ml に溶解した。混合物を 0 に冷却し、水 3 0 ml 中の亜硝酸ナトリウム ( 5 8 . 1 mmol ) を 3 0 分間かけて滴下により加えた。4 5 分後、ジアゾニウム塩を、エタノール 3 0 0 ml 中の 1 - アミノ - 4 - ブロモナフタレン ( 5 8 . 1 4 mmol ) の混合物に、カニューレを通して、0 で加えた。2 時間後、水 1 0 0 ml 中のカルボン酸ナトリウム ( 8 0 . 2 mmol ) を滴下により加えて、p H 7 にした。更に 3 0 分が経過した後に、赤色の沈殿物を濾過し、水 ( 2 × 3 0 0 ml ) で洗浄した。褐色 - 赤色の固体を、メタノール 1 0 0 ml で一晩粉碎し、濾過し、乾燥させた。生成物を真空中で乾燥させて、鮮やかな赤色の固体 ( 収率 : 9 1 % ) を得た。

10

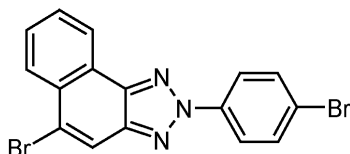
## 【 0 2 6 7 】

## 【 表 1 】

$^1\text{H NMR}$  (ppm,  $(\text{CD}_3)_2\text{SO}$ ): 8.59 (d, 1H), 8.12 (s, 1H), 8.07 (d, 1H), 8.04 (d, 2H), 7.82 (d, 1H), 7.76 (d, 2H), 7.70 (t, 1H).

## 【 0 2 6 8 】

## 【 化 1 4 0 】



20

## 【 0 2 6 9 】

b) 工程 a) の生成物 ( 4 9 . 3 7 mmol ) 及び酢酸銅 ( II ) ( 0 . 4 9 mmol ) を 2 5 0 ml フラスコに攪拌棒を用いて入れた。Tert - アミルアルコール 2 5 0 ml を加え、混合物を 8 0 に加熱した。Tert - ブチルヒドロペルオキシド ( 9 8 . 7 mmol ) をゆっくりと加え、反応を T L C によりモニターした。フラスコを室温に冷却し、生成物を濾過した。Tert - アミルアルコールで洗浄し、揮発分を真空中で除去して、明褐色の固体を得た。生成物を、メタノール 3 0 ml 中で一晩粉碎し、濾過し、乾燥させて、オフホワイトの固体を得た ( 収率 : 7 7 % ) 。

30

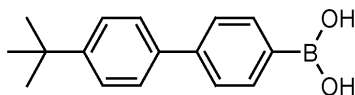
## 【 0 2 7 0 】

## 【 表 2 】

$^1\text{H NMR}$  (ppm,  $\text{CDCl}_3$ ): 8.47 (m, 1H), 8.20 (d, 1H), 8.08 (d, 2H), 8.01 (s, 1H), 7.58 (m, 2H), 7.49 (d, 2H).

## 【 0 2 7 1 】

## 【 化 1 4 1 】



40

## 【 0 2 7 2 】

c) 削り屑状マグネシウム ( 6 8 . 7 mmol ) を、アルゴン下で 1 時間乾燥攪拌した。エーテル 3 2 ml、続いてジブromoエタン 2 滴を加えた。エーテル 2 0 ml 及び T H F 2 5 ml 中の 4 - ブロモ - 4 ' - tert - ブチルビフェニル ( Murphy, S., et. al. J. Org. Chem. 1995, 60, 2411 ) ( 3 4 . 6 mmol ) を 1 時間かけて滴下により加えた。混合物を 3 7 で 2 時間還流した。別のフラスコで、トリイソプロピルボレート ( 4 1 mmol ) 及び T H F 3 0 ml をアルゴン下で - 7 8 に冷却した。上記グリニャール試薬をカニューレを通して加え、反応を - 7 8 で 1 時間攪拌させた。フラスコを室温に温め、更に 1 時間攪拌した。混合物を、H C l / 水を収容するフラスコに注ぎ、2 時間攪拌した。ベージュ色の生成物を濾

50



過し、水で洗浄した。揮発分を真空で除去して、オフホワイトの固体を得た（収率：64%）。 $T_m = 192$ 。

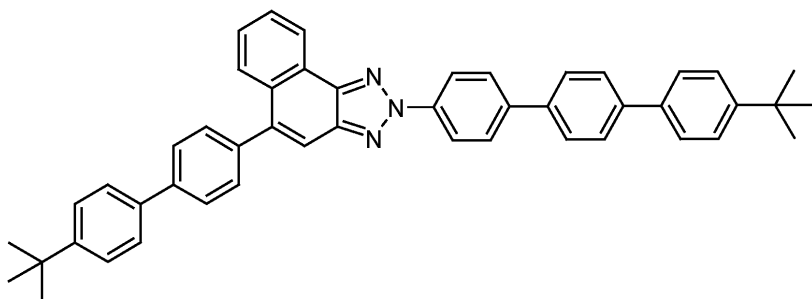
【0273】

【表3】

$^1\text{H}$  NMR (ppm,  $(\text{CD}_3)_2\text{SO}$ ): 7.80 (d, 2H), 7.55 (two overlapping doublets, 4H), 7.41 (d, 2H), 1.25 (s, 9H).

【0274】

【化142】



(A-1)

10

【0275】

d) 工程 b) からの生成物 (0.94 mmol)、工程 c) からの生成物 (2.83 mmol)、パラジウムテトラキス(トリフェニルホスフィン) (8.6  $\mu\text{mol}$ ) 及び N, N - ジメチルアセトアミド 10 ml を、100 ml フラスコに入れ、アルゴンで 2 時間パージした。テトラエチルアンモニウムヒドロキシド (水中 20%) を 50 ml フラスコに入れ、アルゴンで 2 時間パージした。次に、塩基溶液 (2.8 mmol) 2.0 ml を、アルゴン下で第 1 のフラスコに加えた。混合物を 100 に一晩加熱し、冷却した。TLC は、1 個のスポットを示した (ヘキサン：酢酸エチル 1 : 1)。水 20 ml を加え、生成物を濾過により除去した。水 20 ml、続いてメタノール 20 ml で洗浄し、真空で乾燥させて、黄褐色の固体を得た (収率：87%)。その後、ゾーンサブレーション (zone sublimation) を用いて、生成物を精製した。MS (EI) : 662 ( $M + 1$ )。

20

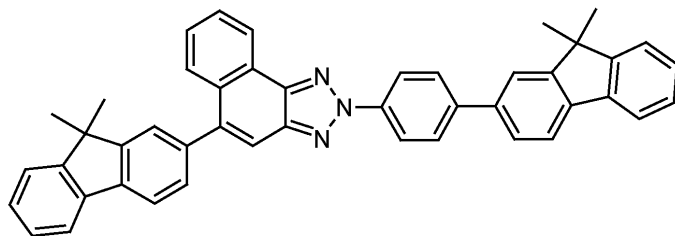
【0276】

実施例 2

30

【0277】

【化143】



(A-8)

40

【0278】

工程 1 b) からの生成物 (2.48 mmol)、9, 9 - ジメチルフルオレン - 2 - ボロン酸 (EP - A - 1238981、7.44 mmol)、パラジウムテトラキス(トリフェニルホスフィン) (22  $\mu\text{mol}$ ) 及び N, N - ジメチルアセトアミド 25 ml を、100 ml フラスコに入れ、アルゴンで 2 時間パージした。テトラエチルアンモニウムヒドロキシド (水中 20%) を 50 ml フラスコに入れ、アルゴンで 2 時間パージした。次に、塩基溶液 (7.5 mmol) 5.3 ml を、アルゴン下で第 1 のフラスコに加えた。混合物を 100 に一晩加熱し、冷却した。水 50 ml を加え、生成物を濾過により除去した。水 100 ml、続いてメタノール 30 ml で洗浄し、真空で乾燥させて、黄褐色の固体を得た (収率：90%)。

50



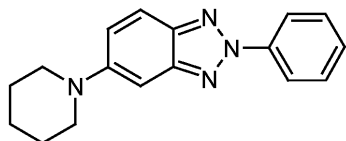
その後、ゾーンサブレーション (zone sublimation) を用いて、生成物を精製した。MS (EI) : 630 (M + 1)。

【0279】

### 実施例 3

【0280】

【化144】



(B-2)

10

【0281】

5 - アミノ - 2 - フェニル - 2 H - ベンゾトリアゾール (Kehrmann, et. al., Chem. Ber. 1892, 25, 899.) (23.8 mmol)、及び炭酸カリウム (52.3 mmol) を、DMF 50 ml 及び攪拌棒を有する 250 ml フラスコに入れた。攪拌しながら、1,5 - ジブロモペンタン (26.2 mmol) をシリンジにより加えた。混合物を 100 で 25 時間加熱した。フラスコを冷却し、生成物を、水 : ジクロロメタンを用いて抽出した。水で洗浄し、抽出し、続いて真空中で揮発分を除去して、暗黄緑色の固体を得た。物質を、ヘキサン : 酢酸エチル 19 : 1 を用いてクロマトグラフィーに付した (収率 : 55%)。T<sub>m</sub> = 143

20

【0282】

【表4】

<sup>1</sup>H NMR (ppm, CDCl<sub>3</sub>): 8.30 (d, 2H), 7.78 (d, 1H), 7.54 (m, 2H), 7.45 (t, 1H), 7.30 (d, 2H), 7.13 (s, 1H), 3.26 (m, 4H), 1.80 (m, 4H), 1.67 (m, 2H).

【0283】

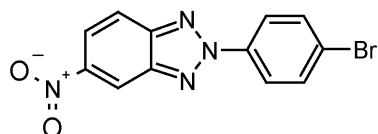
物質は、トルエン中、max 発光が 458 nm で、これは CIE の色点に相当する (0.139, 0.116)。

【0284】

### 実施例 4

【0285】

【化145】



【0286】

a) ブロモフェニルヒドラジン塩酸塩 (0.231 mol)、1 - クロロ - 2,4 - ジニトロベンゼン (0.115 mol) 及び酢酸ナトリウム三水和物 (0.346 mol) を、1 リットル反応器に入れた。エタノール 200 ml を加え、混合物を 6 時間加熱還流した。混合物を室温に冷却し、生成物を濾過により除去した。物質をメタノール、水、次に再びメタノールで洗浄した。揮発分を真空中で除去して、明褐色の固体を得た (収率 : 54%)。T<sub>m</sub> = 201。

40

【0287】

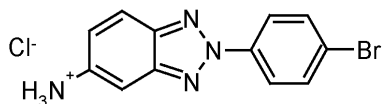
【表5】

<sup>1</sup>H NMR (ppm, CDCl<sub>3</sub>): 8.94 (d, 1H), 8.30 (overlapping d and dd, 3H), 8.07 (d, 1H), 7.74 (d, 2H).

【0288】



## 【化 1 4 6】



## 【0 2 8 9】

b) 実施例 4 a の生成物 (46.69 mmol) 及びエタノール 200 ml を 350 ml 反応器に入れた。ラネーニッケル、70% スラリー 8 mL を加えた。ヒドラジン水和物 (0.226 mol) を、激しく攪拌しながら、少量ずつ 12 時間かけて加えた。室温で更に 5 時間が経過した後、生成物を濾過し、メタノールで洗浄した。物質を水 200 ml 中でスラリーにし、濃塩酸 120 ml (1.44 mol) をゆっくりと加えた。20 時間攪拌した後に、生成物を濾過し、水で洗浄した。メタノールで洗浄し、揮発分を真空で除去して、黄褐色の固体を得た (収率: 67%)。

10

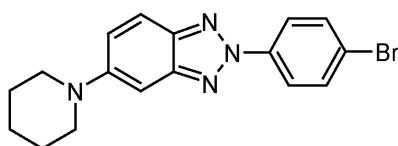
## 【0 2 9 0】

## 【表 6】

$^1\text{H}$  NMR (ppm,  $\text{OS}(\text{CD}_3)_2$ ): 8.19 (d, 2H), 7.97 (d, 1H), 7.83 (d, 2H), 7.45 (d, 1H), 7.28 (dd, 1H).

## 【0 2 9 1】

## 【化 1 4 7】



20

## 【0 2 9 2】

c) 実施例 4 b の生成物 (15.4 mmol) 及び炭酸カリウム (46.5 mmol) を DMF 60 ml を有する 250 ml フラスコに入れた。攪拌しながら、1,5-ジブロモペンタン (19.8 mmol) をシリンジにより加えた。混合物を 100 ° に 2 時間加熱した。1,5-ジブロモペンタン (7.4 mmol) を、シリンジにより更に加えた。加熱を 20 時間続けた。生成物を、ジクロロメタン - 水を用いて抽出し、水で洗浄した。生成物をシリカで乾燥させ、ヘキサン: 酢酸エチル 19:1 を用いてクロマトグラフィーに付した。物質を、黄色の固体として単離した (収率: 46%)。

30

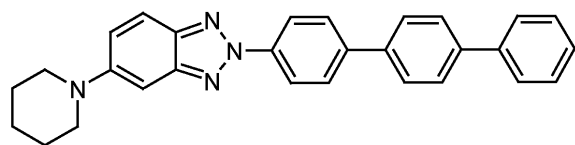
## 【0 2 9 3】

## 【表 7】

$^1\text{H}$  NMR (ppm,  $\text{CDCl}_3$ ): 8.18 (d, 2H), 7.75 (d, 1H), 7.65 (d, 2H), 7.30 (d, 1H), 7.08 (s, 1H), 3.25 (m, 4H), 1.79 (m, 4H), 1.65 (m, 2H).

## 【0 2 9 4】

## 【化 1 4 8】



(B-1)

40

## 【0 2 9 5】

d) 工程 4 c) の生成物 (4.20 mmol)、4-ビフェニルボロン酸 (2.83 mmol)、パラジウムテトラキス(トリフェニルホスフィン) (35 mmol) 及び N,N-ジメチルアセトアミド 25 ml を、100 ml フラスコに入れ、アルゴンで 2 時間パージした。テトラエチルアンモニウムヒドロキシド (水中 20%) を 50 mL フラスコに入れ、アルゴンで 2 時間パージした。次に、塩基溶液 (6.5 mmol) 4.6 mL を、アルゴン下で第 1 のフラ

50



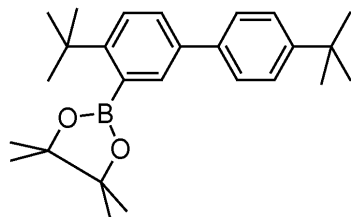
スコに加えた。混合物を 100 に一晩加熱し、冷却した。TLC は、2 個のスポットを示した（ヘキサン：酢酸エチル 1：1）。水 20 ml を加え、生成物を濾過により除去した。水（20 ml）、続いてメタノール（20 ml）で洗浄し、真空で乾燥させて、黄色の固体を得た（収率：85%）。 $T_m = 213$ 。その後、ゾーンサブレーション（zone sublimation）を用いて、生成物を精製した。MS（EI）：431（ $M+1$ ）。

【0296】

実施例 5

【0297】

【化149】



10

【0298】

a) 2-プロモ-4,4'-ジ-tert-ブチル-ビフェニル（34.8 mmol）を THF に溶解し、溶液を -75 に冷却した。n-ブチルリチウム（1.6 mol/l 溶液、41.7 mmol）を 10 分かけて溶液に加えた。混合物を -75 で 1 時間撹拌した。反応混合物に、THF 中の 2-イソプロポキシ-4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボラン（69.5 mmol）を、-75 で 15 分かけて滴下により加えた。フラスコを室温に温め、2 時間撹拌した。混合物を  $H_2O$  に注ぎ、酢酸エチルで抽出した。有機層を  $MgSO_4$  で乾燥させ、蒸発により濃縮した。粗生成物を、ヘキサン及びヘキサン/酢酸エチル（10/1）を溶離剤として用いるカラムクロマトグラフィーに付して、白色の固体を得た（収率：74.1%）。

20

【0299】

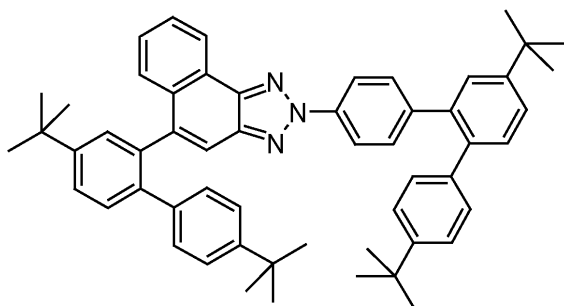
【表 8】

$^1H$  NMR (ppm,  $CDCl_3$ ): 7.50 (d, 1H), 7.47 (dd, 1H), 7.34 (d, 2H), 7.27 (d, 1H), 7.17 (d, 2H), 3.28 (s, 12H), 1.23, (s, 9H), 1.06 (s, 9H).

30

【0300】

【化150】



(A-13)

40

【0301】

b) 実施例 5 b からの生成物（5.1 mmol）、2-(4,4'-ジ-tert-ブチルビフェニル-2-イル)-4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボラン（12.7 mmol）、パラジウムテトラキス（トリフェニルホスフィン）（0.25 mmol）、テトラエチルアンモニウムヒドロキシド（水中 20%、15.3 mmol）及び N,N'-ジメチルアセトアミド 60 ml を 200 ml フラスコに入れた。混合物を 110 で一晩撹拌し、冷却した。次に、混合物を  $H_2O$  に注ぎ、酢酸エチルで抽出した。有機層を  $MgSO_4$  で乾燥

50



させ、蒸発により濃縮した。粗生成物を、ヘキサンを溶離剤として用いるカラムクロマトグラフィーに付して、緑色を帯びた黒色の固体を得た（収率：63.5%）。その後、ゾーンサブリメーションを用いて、生成物を精製した。

【0302】

【表9】

$^1\text{H}$  NMR (ppm,  $\text{CDCl}_3$ ): 8.60 (d, 1H), 8.20 (d, 2H), 7.31-7.62 (m, 12H), 7.25 (d, 2H), 7.09 (d, 2H), 7.03 (d, 2H), 6.99 (d, 2H), 1.40 (d, 18H), 1.26 (s, 9H), 1.11 (s, 9H).

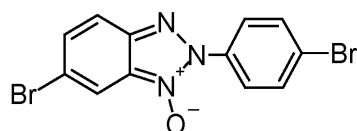
【0303】

実施例6

10

【0304】

【化151】



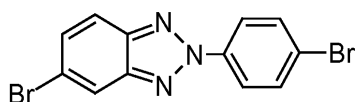
【0305】

a) 4-ブロモフェニルヒドラジンHCl (0.39 mol)、及びNaOAc・3H<sub>2</sub>O (0.59 mol)を、EtOH 550 mlを有する1.5 l フラスコに入れた。攪拌しながら、1-フルオロ-4-ブロモ-2-ニトロベンゼン (0.20 mol) を（注いで）加えた。スラリーは僅かに橙色になった。混合物を一晩（20時間）加熱還流した。室温に冷却した後に、混合物を濾過し、EtOHで洗浄した。フリット上で真空にせずに、攪拌しながら水を加え、NaCl及びNaFを溶解した。真空をかけ、工程を繰り返した。同様にMeOHで2回攪拌し、真空をかけ、明黄色の結晶質固体を得た。揮発分を真空で除去した（収率：93.4%）。

20

【0306】

【化152】



30

【0307】

b) 実施例6 aからの生成物 (0.11 mol)、及び亜硫酸水素ナトリウム (0.11 mol) を、DMF 200 mlを有する250 ml三首丸型バルーンに入れた。攪拌しながら、反応混合物を110℃に一晩過熱した。室温に冷却した後に、混合物を氷水300 mlに注ぎ、次に沈殿物を濾別し、水1000 ml及びEtOH 500 mlで洗浄した。揮発分を真空で除去し、僅かにベージュ色の粉末を得た（収率：93.4%）。

【0308】

【表10】

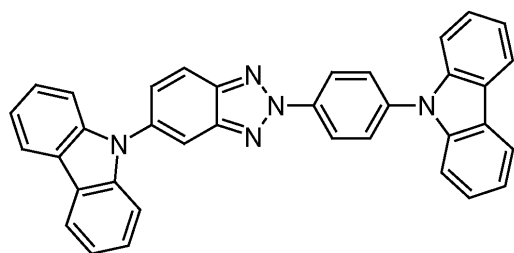
$^1\text{H}$  NMR (ppm,  $\text{CDCl}_3$ ): 8.21 (dd, 2H), 8.09 (d, 1H), 7.79 (dd, 1H), 7.67 (dd, 2H), 7.49 (dd, 1H).

40

【0309】



## 【化 1 5 3】



(B-9)

## 【 0 3 1 0 】

10

c) 実施例 6 b からの生成物 (4.24 mmol)、カルバゾール (8.92 mmol)、CuI (9.34 mmol)、炭酸カリウム (9.34 mmol) 及び N, N - ジメチルアセトアミド 30 ml を、100 ml フラスコに入れた。混合物を 170 で一晩攪拌し、冷却した。CuI を濾過により除去し、次に混合物を H<sub>2</sub>O に注ぎ、生成された固体を濾過により得た。固体を H<sub>2</sub>O、EtOH で洗浄し、減圧下で乾燥させた。粗生成物を、ヘキサンを溶離剤として用いるカラムクロマトグラフィーに付して、黄色の固体を得た (収率: 24.7%)。

## 【 0 3 1 1 】

## 【表 1 1】

20

<sup>1</sup>H NMR (ppm, CDCl<sub>3</sub>): 8.66 (dd, 2H), 8.19 (m, 6H), 7.83 (dd, 2H), 7.67 (dd, 1H), 7.52 (dd, 4H), 7.46 (td, 4H), 7.34 (td, 4H).

## 【 0 3 1 2 】

## 適用例 1 (デバイス)

下記のデバイス構造を調製した: ITO/CuPC/NPD/化合物 A - 1/TPBI/LiF/AI (ここで、ITO はインジウムスズ酸化物であり、CuPC はフタロシアニン銅であり、NPD は 4, 4' - ビス - (1 - ナフチル - フェニルアミノ) ビフェニルであり、TPBI は 1, 3, 5 - トリス - (N - フェニル - ベンズイミダゾール - 2 - イル) ベンゼンである)。このデバイス構造を用いることによって、最大効率 0.67 cd/A、発光 max 450 nm で、最大輝度 2200 cd/m<sup>2</sup> が観測された。

30

## 【 0 3 1 3 】

## 適用例 2 (デバイス)

下記のデバイス構造を調製した: ITO/CuPC/NPD/化合物 A - 8/TPBI/LiF/AI。このデバイス構造を用いて、最大効率 0.83 cd/A、発光 max 467 nm で、最大輝度 3400 cd/m<sup>2</sup> が観測された。

## 【 0 3 1 4 】

## 適用例 3 (デバイス)

下記のデバイス構造を調製した: ITO/CuPC/NPD/化合物 A - 1 + 化合物 B - 2 (2.3 重量%) / TPBI / LiF / AI。このデバイス構造を用いて、最大効率 0.16 cd/A、CIE (0.148, 0.122) での発光で、最大輝度 6800 cd/m<sup>2</sup> が観測された。

40

## 【 0 3 1 5 】

## 適用例 4 (デバイス)

下記のデバイス構造を調製した: ITO/CuPC/NPD/化合物 A - 1 + 化合物 B - 1 (1.6 重量%) / TPBI / LiF / AI。このデバイス構造を用いて、最大効率 1.6 cd/A、CIE (0.161, 0.131) での発光で、最大輝度 7600 cd/m<sup>2</sup> が観測された。

## 【 0 3 1 6 】

## 適用例 5 (デバイス)

下記のデバイス構造を調製した: ITO/CuPC/TCTA/化合物 A - 13/TP

50



B I / L i F / A I (ここで、I T O はインジウムスズ酸化物であり、C u P C はフタロシアニン銅であり、T C T A は 4 , 4 ' , 4 " - トリ - ( N - カルバゾイル ) トリフェニルアミンであり、T P B I は 1 , 3 , 5 - トリス - ( N - フェニル - ベンズイミダゾール - 2 - イル ) ベンゼンである)。このデバイス構造を用いて、12 V にて効率 0 . 37 cd / A、発光 max 440 nm で、輝度 146 cd/m<sup>2</sup> が観測された。

【0317】

適用例 6 (デバイス)

下記のデバイス構造を調製した：I T O / C u P C / T C T A / 化合物 A - 13 + 化合物 B - 9 (1.6 重量%) / T P B I / L i F / A I。このデバイス構造を用いて、12 V にて効率 0 . 53 cd / A、発光 max 440 nm で、輝度 114 cd/m<sup>2</sup> が観測された。

10

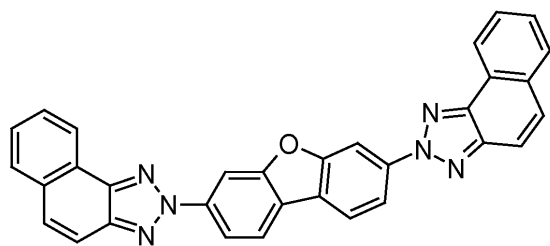
【0318】

適用例 7 (デバイス)

下記のデバイス構造を調製した：I T O / C u P C / T C T A / 化合物 A - 13 + 化合物 D - 8 (1.7 重量%) / T P B I / L i F / A I。このデバイス構造を用いて、12 V にて効率 0 . 57 cd / A、発光 max 437 nm で、輝度 161 cd/m<sup>2</sup> が観測された。

【0319】

【化154】



(D-8)

20



## 【国際調査報告】

## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International Application No.  
PCT/EP2004/053111

## A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

IPC 7 C07D249/22 C07D249/20 C07F5/04 C07D405/14 C09K11/06  
H05B33/14 H01L51/20

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

## B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

IPC 7 C07D C07F C09K H05B H01L

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the International search (name of data base and, where practical, search terms used)

EPO-Internal, BEILSTEIN Data, WPI Data

## C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

| Category * | Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages                                          | Relevant to claim No. |
|------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|
| P,X        | WO 03/105538 A (CIBA SPECIALTY CHEMICALS HOLDING INC.)<br>18 December 2003 (2003-12-18)<br>claims 1-10                      | 1-4,6-13              |
| X          | US 4 533 612 A (H. EILINGSFELD ET AL.)<br>6 August 1985 (1985-08-06)<br>cited in the application<br>claims 1-14             | 1-4,6-13              |
| Y          | EP 0 866 110 A (TOYO INK MANUFACTURING CO., LTD.) 23 September 1998 (1998-09-23)<br>cited in the application<br>claims 1-10 | 1-4,6-13              |
| -/-        |                                                                                                                             |                       |

☒ Further documents are listed in the continuation of box C.☒ Patent family members are listed in annex.

## \* Special categories of cited documents:

\*A\* document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

\*E\* earlier document but published on or after the International filing date

\*L\* document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

\*O\* document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

\*P\* document published prior to the International filing date but later than the priority date claimed

\*T\* later document published after the International filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

\*X\* document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

\*Y\* document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art.

\*Z\* document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

9 May 2005

Date of mailing of the international search report

02.09.2005

Name and mailing address of the ISA

European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2  
NL - 2280 HV Rijswijk  
Tel. (+31-70) 340-2040, Tx. 31 651 epo nl,  
Fax: (+31-70) 340-3016

Authorized officer

Herz, C



## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International Application No.  
PCT/EP2004/053111

| C.(Continuation) DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                       |
|------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|
| Category *                                           | Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages                                                                                                                                                                                                                               | Relevant to claim No. |
| X                                                    | US 5 518 824 A (D. FUNHOFF ET AL.)<br>21 May 1996 (1996-05-21)<br>cited in the application<br>columns 5-9; claims 1-20; example 2                                                                                                                                                                                | 1-4, 6-13             |
| X                                                    | US 5 104 740 A (M. SHINKAI ET AL.)<br>14 April 1992 (1992-04-14)<br>cited in the application<br>claim 4                                                                                                                                                                                                          | 1-4, 6-13             |
| X                                                    | EP 0 418 385 A (SHIONOGI & CO., LTD.)<br>27 March 1991 (1991-03-27)<br>claims 1,2                                                                                                                                                                                                                                | 1-4, 6-13             |
| Y                                                    | US 5 116 708 A (Y. SHIKATANI ET AL.)<br>26 May 1992 (1992-05-26)<br>cited in the application<br>column 4, line 30                                                                                                                                                                                                | 1-4, 6-13             |
| X                                                    | DATABASE BEILSTEIN 'Online!<br>BEILSTEIN INSTITUT ZUR FÖRDERUNG DER<br>CHEMISCHEN WISSENSCHAFTEN, FRANKFURT AM<br>MAIN, DE;<br>XP002327512<br>Database accession no. 286124,23014<br>abstract<br>& CHMATAL ET AL.: COLLECT. CZECH. CHEM.<br>COMMUN.,<br>vol. 24, 1959, page 494,                                 | 1-4, 6-9              |
| X                                                    | DATABASE BEILSTEIN 'Online!<br>BEILSTEIN INSTITUT ZUR FÖRDERUNG DER<br>CHEMISCHEN WISSENSCHAFTEN, FRANKFURT AM<br>MAIN, DE;<br>XP002327513<br>Database accession no. 310010<br>abstract<br>& CRIPPA ET AL.: GAZZ. CHIM. ITAL.,<br>vol. 57, 1927, page 753,                                                       | 1-4, 6-9              |
| X                                                    | DATABASE BEILSTEIN 'Online!<br>BEILSTEIN INSTITUT ZUR FÖRDERUNG DER<br>CHEMISCHEN WISSENSCHAFTEN, FRANKFURT AM<br>MAIN, DE;<br>XP002327514<br>Database accession no.<br>557484,617782,4916078,155862,184724<br>abstract<br>& J. GARMATTER, A. E. SIEGRIST: HELV.<br>CHIM. ACTA,<br>vol. 57, 1974, pages 945-979, | 1-4, 6-9              |
|                                                      | ---                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |                       |

-/--



## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

 International Application No  
 CT/EP2004/053111

| C.(Continuation) DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT |                                                                                                                                                                                                                                                                              |                       |
|------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|
| Category *                                           | Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages                                                                                                                                                                                           | Relevant to claim No. |
| X                                                    | DATABASE BEILSTEIN 'Online!<br>BEILSTEIN INSTITUT ZUR FÖRDERUNG DER<br>CHEMISCHEN WISSENSCHAFTEN, FRANKFURT AM<br>MAIN, DE;<br>XP002327515<br>Database accession no. 167844<br>abstract<br>& ELBS: J. PRAKT. CHEM., <2>,<br>vol. 108, 1924, page 223,                        | 1-4,6-9               |
| X                                                    | DATABASE BEILSTEIN 'Online!<br>BEILSTEIN INSTITUT ZUR FÖRDERUNG DER<br>CHEMISCHEN WISSENSCHAFTEN, FRANKFURT AM<br>MAIN, DE;<br>XP002327516<br>Database accession no. 146520<br>abstract<br>& FRIES ET AL.: JUSTUS LIEBIGS ANN. CHEM.,<br>vol. 511, 1934, page 213,           | 1-4,6-9               |
| X                                                    | DATABASE BEILSTEIN 'Online!<br>BEILSTEIN INSTITUT ZUR FÖRDERUNG DER<br>CHEMISCHEN WISSENSCHAFTEN, FRANKFURT AM<br>MAIN, DE;<br>XP002327517<br>Database accession no. 28432<br>abstract<br>& WILLGERODT, HERZOG: J. RAKT. CHEM. <2>,<br>vol. 71, 1905, page 396,              | 1-4,6-9               |
| X                                                    | DATABASE BEILSTEIN 'Online!<br>BEILSTEIN INSTITUT ZUR FÖRDERUNG DER<br>CHEMISCHEN WISSENSCHAFTEN, FRANKFURT AM<br>MAIN, DE;<br>XP002327518<br>Database accession no. 205560<br>abstract<br>& KROLLPFEIFER ET AL.: JUSTUS LIEBIGS ANN.<br>CHEM.,<br>vol. 515, 1935, page 119, | 1-4,6-9               |
| X                                                    | DATABASE BEILSTEIN 'Online!<br>BEILSTEIN INSTITUT ZUR FÖRDERUNG DER<br>CHEMISCHEN WISSENSCHAFTEN, FRANKFURT AM<br>MAIN, DE;<br>XP002327519<br>Database accession no. 167842<br>abstract<br>& P. ZANIRATO: J. CHEM. SOC. CHEM.<br>COMMUN.,<br>vol. 19, 1983, pages 1065-1067, | 1-4,6-9               |
|                                                      | -/--                                                                                                                                                                                                                                                                         |                       |



## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International Application No.

PCT/EP2004/053111

| C.(Continuation) DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |                       |
|------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|
| Category *                                           | Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages                                                                                                                                                                                                                                                                   | Relevant to claim No. |
| X                                                    | <p>DATABASE BEILSTEIN 'Online!<br/> BEILSTEIN INSTITUT ZUR FÖRDERUNG DER<br/> CHEMISCHEN WISSENSCHAFTEN, FRANKFURT AM<br/> MAIN, DE;<br/> XP002327520<br/> Database accession no. 25415<br/> abstract<br/> &amp; JOSHI, GUPTA: J. INDIAN CHEM. SOC.,<br/> vol. 35, 1958, page 681,</p>                                                               | 1-4,6-9               |
| X                                                    | <p>DATABASE BEILSTEIN 'Online!<br/> BEILSTEIN INSTITUT ZUR FÖRDERUNG DER<br/> CHEMISCHEN WISSENSCHAFTEN, FRANKFURT AM<br/> MAIN, DE;<br/> XP002327521<br/> Database accession no. 20521<br/> abstract</p>                                                                                                                                            | 1-4,6-9               |
| X                                                    | <p>&amp; CHARRIER: GAZZ. CHIM. ITAL.,<br/> vol. 40, 1910, page 138,</p>                                                                                                                                                                                                                                                                              | 1-4,6-9               |
| X                                                    | <p>DATABASE BEILSTEIN 'Online!<br/> BEILSTEIN INSTITUT ZUR FÖRDERUNG DER<br/> CHEMISCHEN WISSENSCHAFTEN, FRANKFURT AM<br/> MAIN, DE;<br/> XP002327522<br/> Database accession no. 13989<br/> abstract<br/> &amp; POSKOCIL, ALLAN: COLLECT. CZECH. CHEM.<br/> COMMUN.,<br/> vol. 22, 1957, page 548,</p>                                              | 1-4,6-9               |
| X                                                    | <p>DATABASE BEILSTEIN 'Online!<br/> BEILSTEIN INSTITUT ZUR FÖRDERUNG DER<br/> CHEMISCHEN WISSENSCHAFTEN, FRANKFURT AM<br/> MAIN, DE;<br/> XP002327523<br/> Database accession no.<br/> 7652458,554679,550543,545489,7488704<br/> abstract<br/> &amp; R. N. BUTLER ET AL.: J. CHEM. SOC.<br/> PERKIN TRANS. 1, no. 7, 1997, pages<br/> 1047-1050,</p> | 1-4,6,7               |
| X                                                    | <p>DATABASE BEILSTEIN 'Online!<br/> BEILSTEIN INSTITUT ZUR FÖRDERUNG DER<br/> CHEMISCHEN WISSENSCHAFTEN, FRANKFURT AM<br/> MAIN, DE;<br/> XP002327524<br/> Database accession no. 8506620<br/> abstract<br/> &amp; A. R. KATRITZKY ET AL.: HETEROCYCLES,<br/> vol. 52, no. 1, 2000, pages 203-214,</p>                                               | 1-4,6-9               |

-/-



## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International Application No  
PCT/EP2004/053111

| C.(Continuation) DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                       |
|------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|
| Category *                                           | Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages                                                                                                                                                                                                  | Relevant to claim No. |
| X                                                    | <p>DATABASE BEILSTEIN 'Online!<br/>BEILSTEIN INSTITUT ZUR FÖRDERUNG DER<br/>CHEMISCHEN WISSENSCHAFTEN, FRANKFURT AM<br/>MAIN, DE;<br/>XP002327525<br/>Database accession no. 554478<br/>abstract<br/>&amp; O. IWAMOTO: YUKI GOSEI KAGAKU KYOKAISHI,<br/>vol. 23, 1965, page 51,</p> | 1-4,6-9               |
| X                                                    | <p>P. LOPEZ-ALVARODO ET AL.: "New Synthetic<br/>Applications of Arylaed Triacetates.<br/>N-Arylation of Azoles"<br/>J. ORG. CHEM.,<br/>vol. 60, no. 17, 1995, pages 5678-5682,<br/>XP002327511<br/>*Scheme 1 - compound of formula 11 *</p>                                         | 1-4,6-9               |
| X                                                    | <p>G. YASUDA, H. KIMOTO: "Substitution<br/>Reactions of Phenanthro'9,10-d!triazole<br/>with Benzyl Chlorides"<br/>J. HETEROCYCL. CHEM.,<br/>vol. 35, 1998, pages 365-369, XP002327533<br/>* Compounds of formula 2 *</p>                                                            | 1-4,6-9               |



## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.  
PCT/EP2004/053111**Box II Observations where certain claims were found unsearchable (Continuation of item 2 of first sheet)**

This International Search Report has not been established in respect of certain claims under Article 17(2)(a) for the following reasons:

1. ☐ Claims Nos.:  
because they relate to subject matter not required to be searched by this Authority, namely:
2. ☐ Claims Nos.:  
because they relate to parts of the International Application that do not comply with the prescribed requirements to such an extent that no meaningful International Search can be carried out, specifically:
3. ☐ Claims Nos.:  
because they are dependent claims and are not drafted in accordance with the second and third sentences of Rule 6.4(a).

**Box III Observations where unity of invention is lacking (Continuation of item 3 of first sheet)**

This International Searching Authority found multiple inventions in this International application, as follows:

see additional sheet

1. ☐ As all required additional search fees were timely paid by the applicant, this International Search Report covers all searchable claims.
2. ☐ As all searchable claims could be searched without effort justifying an additional fee, this Authority did not invite payment of any additional fee.
3. ☐ As only some of the required additional search fees were timely paid by the applicant, this International Search Report covers only those claims for which fees were paid, specifically claims Nos.:
4. ☒ No required additional search fees were timely paid by the applicant. Consequently, this International Search Report is restricted to the invention first mentioned in the claims; it is covered by claims Nos.:  
1-3 (all part), 4, 6 (part), 7 (part), 8, 9, 10 (part), 11 (part)  
12 (part), 13 (part)

**Remark on Protest**

- ☐ The additional search fees were accompanied by the applicant's protest.
- ☐ No protest accompanied the payment of additional search fees.



International Application No. PCT/EP2004 /053111

**FURTHER INFORMATION CONTINUED FROM PCT/ISA/ 210**

This International Searching Authority found multiple (groups of) inventions in this international application, as follows:

1. claims: 1-3 (all part), 4, 6 (part), 7 (part), 8, 9, 10 (part), 11 (part), 12 (part), 13 (part)

2H-Benzotriazole compounds of formula I

---

2. claims: 1-3 (all part), 5, 6 (part), 7 (part), 10 (part), 11 (part), 12 (part), 13 (part)

2H-Benzotriazole compounds of formula II

---



## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International Application No

PCT/EP2004/053111

| Patent document<br>cited in search report |   | Publication<br>date | Patent family<br>member(s)                                                                                                                | Publication<br>date                                                                                          |
|-------------------------------------------|---|---------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| WO 03105538                               | A | 18-12-2003          | AU 2003238442 A1<br>BR 0311615 A<br>CA 2487430 A1<br>WO 03105538 A1<br>EP 1520450 A1                                                      | 22-12-2003<br>08-03-2005<br>18-12-2003<br>18-12-2003<br>06-04-2005                                           |
| US 4533612                                | A | 06-08-1985          | NONE                                                                                                                                      |                                                                                                              |
| EP 0866110                                | A | 23-09-1998          | JP 3503403 B2<br>JP 10251633 A<br>DE 69825134 D1<br>DE 69827061 D1<br>EP 0866110 A1<br>EP 0934992 A1<br>US 6280859 B1<br>US 2001033944 A1 | 08-03-2004<br>22-09-1998<br>26-08-2004<br>25-11-2004<br>23-09-1998<br>11-08-1999<br>28-08-2001<br>25-10-2001 |
| US 5518824                                | A | 21-05-1996          | DE 4325885 A1<br>CN 1103230 A<br>DE 59407212 D1<br>EP 0637899 A1<br>ES 2122108 T3<br>JP 7114987 A                                         | 09-02-1995<br>31-05-1995<br>10-12-1998<br>08-02-1995<br>16-12-1998<br>02-05-1995                             |
| US 5104740                                | A | 14-04-1992          | JP 3000792 A<br>JP 5029675 B                                                                                                              | 07-01-1991<br>06-05-1993                                                                                     |
| EP 0418385                                | A | 27-03-1991          | JP 1308268 A<br>JP 2681369 B2<br>DE 68917728 D1<br>DE 68917728 T2<br>EP 0418385 A1<br>AT 110372 T<br>WO 8912045 A1<br>US 5097040 A        | 12-12-1989<br>26-11-1997<br>29-09-1994<br>23-03-1995<br>27-03-1991<br>15-09-1994<br>14-12-1989<br>17-03-1992 |
| US 5116708                                | A | 26-05-1992          | JP 2282263 A<br>CA 2004880 A1<br>EP 0372979 A2<br>JP 2282264 A                                                                            | 19-11-1990<br>09-06-1990<br>13-06-1990<br>19-11-1990                                                         |



## フロントページの続き

|              |               |             |
|--------------|---------------|-------------|
| (51) Int.Cl. | F I           | テーマコード (参考) |
|              | C 0 9 K 11/06 | 6 9 0       |
|              | H 0 5 B 33/14 | B           |
|              | G 0 3 G 5/06  | 3 1 5 B     |
|              | G 0 3 G 5/06  | 3 1 8 B     |
|              | G 0 3 G 5/06  | 3 1 5 Z     |

(81) 指定国 AP(BW, GH, GM, KE, LS, MW, MZ, NA, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), EA(AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), EP(AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HU, IE, IS, IT, LU, MC, NL, PL, PT, RO, SE, SI, SK, TR), OA(BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG), AE, AG, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KP, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, MZ, NA, NI, NO, NZ, OM, PG, PH, PL, PT, RO, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SY, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, YU, ZA, ZM, ZW

(72) 発明者 ロジャース, ジョナサン  
 アメリカ合衆国、ニューヨーク 1 0 6 0 6、ホワイト・プレインズ、バンク・ストリート 1 5  
 、アパートメント 1 2 1 アイ

(72) 発明者 マケ, フランソワ  
 フランス国、エフ - 6 8 5 1 0 ガイシュピッツェン、リュ・ドゥ・ラ・リベラシオン 3 0 ア  
 ー

(72) 発明者 團 紀寿  
 京都府八幡市橋本栗ヶ谷 7 9 - 1 4

F ターム(参考) 2H068 AA20 AA21 BA16  
 3K107 AA01 CC07 CC21 DD59  
 4C063 AA03 BB06 CC42 DD08 EE10