

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第5553993号
(P5553993)

(45) 発行日 平成26年7月23日 (2014. 7. 23)

(24) 登録日 平成26年6月6日 (2014. 6. 6)

(51) Int. Cl.

F I

C O 8 G 61/00 (2006. 01)

C O 8 G 61/00

C O 8 F 112/32 (2006. 01)

C O 8 F 112/32

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

C O 9 K 11/06 6 9 0

C O 8 F 20/34 (2006. 01)

C O 8 F 20/34

C O 8 F 20/56 (2006. 01)

C O 8 F 20/56

請求項の数 8 (全 105 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2008-553724 (P2008-553724)
 (86) (22) 出願日 平成19年1月31日 (2007. 1. 31)
 (65) 公表番号 特表2009-526111 (P2009-526111A)
 (43) 公表日 平成21年7月16日 (2009. 7. 16)
 (86) 国際出願番号 PCT/EP2007/050934
 (87) 国際公開番号 W02007/090773
 (87) 国際公開日 平成19年8月16日 (2007. 8. 16)
 審査請求日 平成22年1月29日 (2010. 1. 29)
 (31) 優先権主張番号 06101542.6
 (32) 優先日 平成18年2月10日 (2006. 2. 10)
 (33) 優先権主張国 欧州特許庁 (EP)
 (31) 優先権主張番号 06120616.5
 (32) 優先日 平成18年9月14日 (2006. 9. 14)
 (33) 優先権主張国 欧州特許庁 (EP)

(73) 特許権者 508120547
 チバ ホールディング インコーポレーテ
 ッド
 C I B A H O L D I N G I N C .
 スイス国, 4 0 5 7 バーゼル, クリベツ
 クシュトラーセ 1 4 1
 (74) 代理人 100078662
 弁理士 津国 肇
 (74) 代理人 100113653
 弁理士 東田 幸四郎
 (74) 代理人 100116919
 弁理士 齋藤 房幸

最終頁に続く

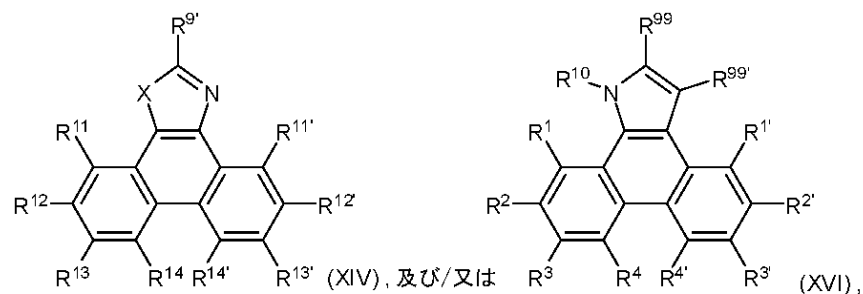
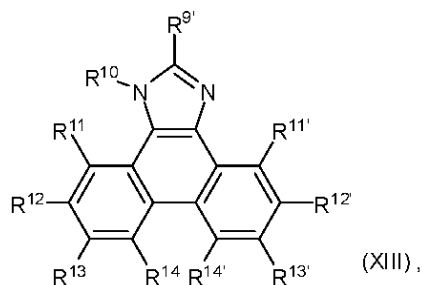
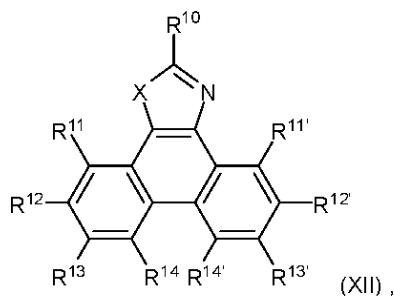
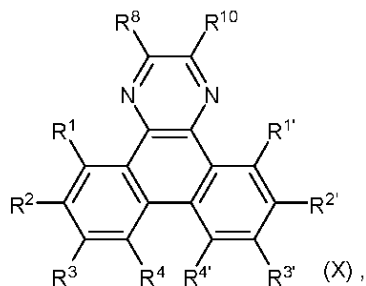
(54) 【発明の名称】 新規ポリマー

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

下記式：

【化 1】



〔式中、

R^1 及び $R^{1'}$ は、互いに独立して、水素、ハロゲン、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、CN又は $-CO-R^{28}$ であり、

R^2 、 R^3 、 R^4 、 $R^{2'}$ 、 $R^{3'}$ 及び $R^{4'}$ は、互いに独立して、E、H、ハロゲン、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{24}$ 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、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、CN又は $-CO-R^{28}$ であり、

R^8 は、H、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{24}$ 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、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、CN又は $-CO-R^{28}$ であり、

$R^{9'}$ 、 R^{99} 及び $R^{99'}$ は、H、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{24}$ 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

10

20

30

40

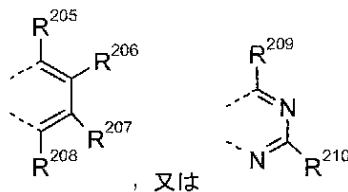
50

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、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル又は $-CO-R^{28}$ であり、

R^{10} は、基 $-(Sp)_x- [PG]<$ であり、ここで、Spはスペーサー単位であり、PGは重合性基から誘導される基であり、xは0又は1であるか、或いは

R^8 及び R^{10} は、一緒になって、下記：

【化2】



10

の基を形成し、

ここで、置換基 R^{205} 、 R^{206} 、 R^{207} 及び R^{208} の1つと、置換基 R^{209} 及び R^{210} の1つは、基 R^{10} であり、他の置換基は、互いに独立して、H、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、又はEで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシであり、

20

R^{11} 及び R^{12} は、互いに独立して、水素、ハロゲン、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、CN又は $-CO-R^{28}$ であり、

R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 及び R^{17} は、互いに独立して、E、H、ハロゲン、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{24}$ 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、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、CN又は $-CO-R^{28}$ であり、

30

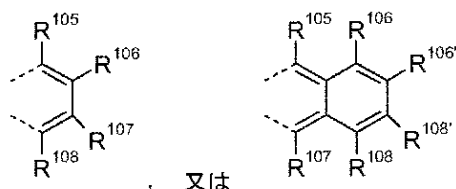
Xは、O又は NR^{17} であり、ここで R^{17} は、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール、Gで置換されている $C_6 \sim C_{24}$ アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、Gで置換されている $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル又は $-CO-R^{28}$ であるか；或いは

互いに隣接している、置換基 R^1 、 R^2 、 R^3 及び R^4 ； R^1 、 R^2 、 R^3 及び R^4 ； R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 及び R^{14} ； R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 及び R^{14}

40

の2つは、一緒になって、下記：

【化3】

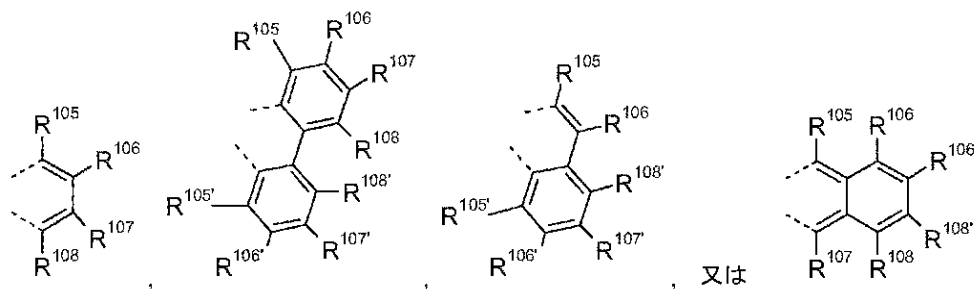


50

の基を形成するか、或いは

互いに隣接している2つの置換基 R^{105} 及び R^{106} は、一緒になって、下記：

【化4】

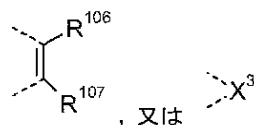


10

基を形成するか、或いは

互いに隣接している2つの置換基 R^4 及び R^4 、並びに / 又は R^{14} 及び R^{14} は、一緒になって、下記：

【化5】



20

の基を形成し、

ここで、 X^3 は、O、S、 $C(R^{119})(R^{120})$ 又は NR^{17} であり、 R^{17} は、上記で定義されたとおりであり、 R^{105} 、 R^{106} 、 R^{107} 、 R^{108} 、 $R^{105'}$ 、 $R^{106'}$ 、 $R^{107'}$ 及び $R^{108'}$ は、互いに独立して、H、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換されている及び / 若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、又はEで置換されている及び / 若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシであり、

R^{119} 及び R^{120} は、互いに独立して、H、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換されている及び / 若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ 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、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、Eで置換されている及び / 若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ 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^{119} 及び R^{120} は、一緒になって、式： $=CR^{121}R^{122}$ の基を形成し、ここで、

R^{121} 及び R^{122} は、互いに独立して、H、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換されている及び / 若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ 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、又は $C_2 \sim C_{20}$ 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るか、或いは

R^{119} 及び R^{120} は、一緒になって、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換されている及び / 若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ 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、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、Eで置換されている及び / 若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル又は $-C(=O)-R^{127}$ で置換されていることができる5員又は6員環を形成し、

R^{127} は、H； $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル若しくは $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル；又は $-O-$ で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキルであり、

50

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、そして

Eは、 $-OR^{29}$ ； $-SR^{29}$ ； $-NR^{25}R^{26}$ ； $-COR^{28}$ ； $-COOR^{27}$ ； $-CONR^{25}R^{26}$ ； $-CN$ ；又はハロゲンであり、Gは、E、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Dで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、又はEで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシであり、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； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル若しくは $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル；又は $-O-$ で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ 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員又は6員環を形成し、

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

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

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

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

R^9 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{12} 、 R^{13} 及び R^{14} は、基 $-(Sp)$ $\times 1$ -HEIであり、ここで、

Spは、スペーサー単位であり、HEIは、ポリマーの正孔注入若しくは正孔輸送特性を増加する基 (HEI^I) であるか、又は、ポリマーの電子注入若しくは電子輸送特性を増加する基 (HEI^{II}) であり、

$\times 1$ は、0又は1であり、

Spが、 $-Ar-$ 、 $-ArY-$ 、 $-YAr-$ 、 $-YAr(CR^{47}R^{48})_n-$ 、 $-ArY(CR^{47}R^{48})_nAr-$ 、 $-ArY(CR^{47}R^{48})_n-$ 、 $-(CR^{47}R^{48})_n-$ 、 $-(YCR^{47}R^{48})_n-$ 又は $-(CR^{47}R^{48}Y)_n-$ から選択され、ここで、

Yが、 NR^5 、O、S、 $C=O$ 、 $C(=O)O$ であり、ここで R^5 が、H； $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル若しくは $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル；又は $-O-$ で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキルであり、

R^{47} 及び R^{48} が、互いに独立して、水素、フッ素又は $C_1 \sim C_{20}$ アルキルであり、

nが、1～20の整数であり、

Arが、置換されていることができる、アルキレン、シクロアルキレン、アリーレン、アラルキレン又はヘテロアリーレンであり、

PGが、 $-C(R^{44})=CH_2$ 、 $-NHC(O)-C(R^{45})=CH_2$ 、 $-OCH_2CH_2OC(O)-C(R^{45})=CH_2$ 、 $-OC(O)-C(R^{45})=CH_2$ 、 $-C(O)-C(R^{46})=CH_2$ 、 $-C-C-$ 、 $-N-C-$ 、 $-O-CH(CH_2CH_2CH=CH_2)_2$ ； $C_5 \sim C_8$ シクロアルケニル、ビシクロアルケニル(5～30個の炭素原子を有する置換又は非置換ビシクロアルケニル基)、下記：

10

20

30

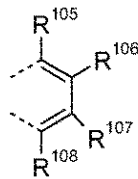
40

R^{214} 及び R^{214} が、互いに独立して、H、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ又は $C_7 \sim C_{25}$ アラルキルであるが、但し、式 X I V の化合物の場合では、置換基 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{12} 及び R^{13} の少なくとも 1 つが基 R^{10} である〕
で示される反復単位を含むポリマー。

【請求項 2】

R^1 及び R^1 が、水素であり、
 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^2 、 R^3 及び R^4 が、互いに独立して、E、H、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ又は $C_7 \sim C_{25}$ アラルキルであり、
 R^8 が、H、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、又は D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシであり、
互いに隣接している置換基 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^1 、 R^2 、 R^3 及び R^4 の 2 つが、一緒になって、下記：

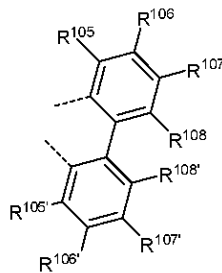
【化 8】



の基を形成するか、或いは、

互いに隣接している 2 つの置換基 R^{99} 及び R^{99} は、一緒になって下記：

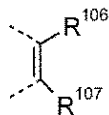
【化 9】



の基を形成するか、或いは、

互いに隣接している 2 つの置換基 R^4 及び R^4 が、一緒になって、下記：

【化 10】



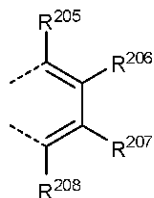
の基を形成し、

ここで、 R^{105} 、 R^{106} 、 R^{107} 、 R^{108} 、 R^{105} 、 R^{106} 、 R^{107} 及び R^{108} は、互いに独立して、H又は $C_1 \sim C_8$ アルキルであり、

R^{10} が、基 - (Sp)_{x1} - [PG] < であり、ここで、Sp がスペーサー単位であり、PG が重合性基から誘導される基であり、x1 が 0 又は 1 であるか、或いは

R^8 及び R^{10} は、一緒になって、下記：

【化 1 1】



の基を形成し、

ここで、置換基 R^{205} 、 R^{206} 、 R^{207} 及び R^{208} の 1 つは、基 R^{10} であり、他の置換基は、互いに独立して、 H 、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、又は若しくは D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシであり、

D が、 $-CO-$ ； $-COO-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-O-$ ； $-NR^{25}-$ ； $-CR^{23}=CR^{24}-$ ；又は $-C-C-$ であり、

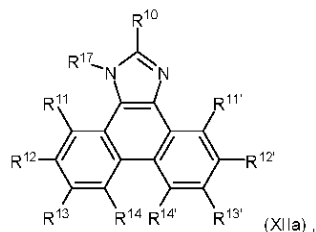
R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 及び R^{26} が、互いに独立して、 H ； $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_8$ アルキル若しくは $C_1 \sim C_8$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_8$ アルキル；又は $-O-$ で中断されている $C_1 \sim C_8$ アルキルであるか、或いは R^{25} 及び R^{26} が、一緒になって、5 員又は 6 員環を形成する、

式 X 又は XVI の反復単位を含む、請求項 1 記載のポリマー、

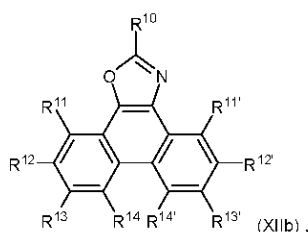
或いは

下記式：

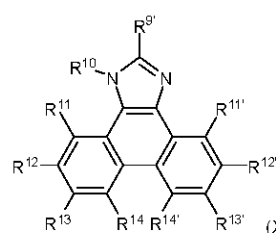
【化 1 2】



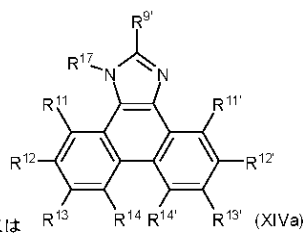
(XIa),



(XIb),



(XIII), 及び/又は



(XIVa)

〔式中、

R^9 は、 H 、 G で置換されていることができる $C_6 \sim C_{18}$ アリール、 G で置換されていることができる $C_2 \sim C_{18}$ ヘテロアリール、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、又は E で置換されている及び/若しくは D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシであり、

R^{11} 及び $R^{11'}$ は、水素であり、

R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 $R^{12'}$ 、 $R^{13'}$ 及び $R^{14'}$ は、水素又は G であり、

R^{17} は、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル若しくは $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル；又は $-O-$ で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキルであるか、或いは

互いに隣接している置換基 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 $R^{11'}$ 、 $R^{12'}$ 、 $R^{13'}$ 及び $R^{14'}$ の 2 つは、一緒になって、下記：

10

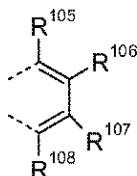
20

30

40

50

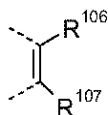
【化 1 3】



の基を形成するか、或いは

互いに隣接している 2 つの置換基 R^{105} 及び R^{106} は、一緒になって、下記：

【化 1 4】



の基を形成し、

ここで、 R^{105} 、 R^{106} 、 R^{107} 、 R^{108} 、D、E 及び R^{10} は、上記で定義されたとおりであり、

式 X I V a の化合物の場合では、置換基 R^{105} 及び R^{106} の少なくとも 1 つが基 R^{10} である]

で示される反復単位を含む、請求項 1 記載のポリマー。

【請求項 3】

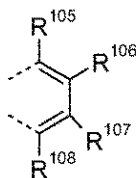
R^1 及び R^2 が、水素であり、

R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 及び R^8 が、互いに独立して、H、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ又は $C_7 \sim C_{25}$ アラルキルであり、

R^9 が、H、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、又は D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシであり、

互いに隣接している置換基 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 及び R^8 の 2 つが、一緒になって、下記：

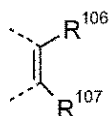
【化 1 5】



の基を形成するか、又は

互いに隣接している 2 つの置換基 R^{105} 及び R^{106} が、一緒になって、下記：

【化 1 6】



の基を形成し、

ここで、 R^{105} 、 R^{106} 、 R^{107} 及び R^{108} は、互いに独立して、H 又は $C_1 \sim C_8$ アルキルであり、

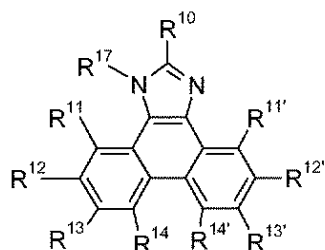
R^{10} が、基 - (Sp)_{x1} - [PG] < であり、ここで、Sp がスペーサー単位であり、PG が重合性基から誘導される基であり、x1 が 0 又は 1 であり、

D が、-CO- ; -COO- ; -S- ; -SO- ; -SO₂- ; -O- ; -NR²⁵- ; -CR²³=CR²⁴- ; 又は -C-C- であり、

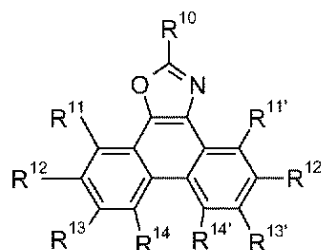
R^{23} 、 R^{24} 及び R^{25} が、互いに独立して、H ; C₆ ~ C₁₈ アリール ; C₁ ~ C₈ アルキル若しくは C₁ ~ C₈ アルコキシで置換されている C₆ ~ C₁₈ アリール ; C₁ ~ C₈ アルキル ; 又は -O- で中断されている C₁ ~ C₈ アルキルである、
式 X の反復単位を含む、請求項 1 記載のポリマー、
或いは

下記式 :

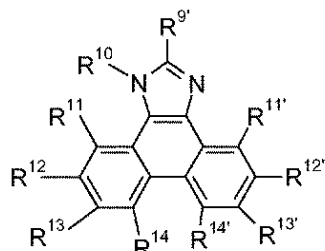
【化 17】



(XIIa),



(XIIb), 及び/又は



(XIII),

〔式中、

R^9 は、H、Gで置換されていることができる C₆ ~ C₁₈ アリール、Gで置換されていることができる C₂ ~ C₁₈ ヘテロアリール、C₁ ~ C₁₈ アルキル、Dで中断されている C₁ ~ C₁₈ アルキル、C₁ ~ C₁₈ ペルフルオロアルキル、C₁ ~ C₁₈ アルコキシ、又は Eで置換されている及び/若しくは Dで中断されている C₁ ~ C₁₈ アルコキシであり、

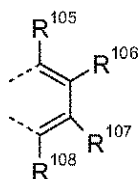
R^{11} 及び $R^{11'}$ は、水素であり、

R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 $R^{12'}$ 、 $R^{13'}$ 及び $R^{14'}$ は、水素であり、

R^{17} は、C₆ ~ C₁₈ アリール ; C₁ ~ C₁₈ アルキル若しくは C₁ ~ C₁₈ アルコキシで置換されている C₆ ~ C₁₈ アリール ; C₁ ~ C₁₈ アルキル ; 又は -O- で中断されている C₁ ~ C₁₈ アルキルであるか、或いは

互いに隣接している置換基 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 $R^{11'}$ 、 $R^{12'}$ 、 $R^{13'}$ 及び $R^{14'}$ の 2 つは、一緒になって、下記 :

【化 18】



の基を形成するか、或いは

互いに隣接している 2 つの置換基 R^{14} 及び $R^{14'}$ は、一緒になって、下記 :

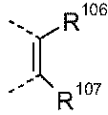
10

20

30

40

【化 1 9】



の基を形成し、

ここで、R¹⁰⁵、R¹⁰⁶、R¹⁰⁷、R¹⁰⁸、D、E、G 及び R¹⁰ は、上記で定義されたとおりである]

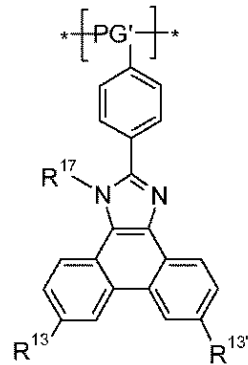
で示される反復単位を含む、請求項 1 記載のポリマー。

10

【請求項 4】

ポリマーが、下記式：

【化 2 0】



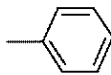
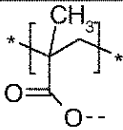
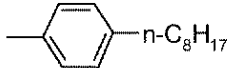
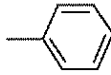
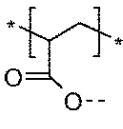
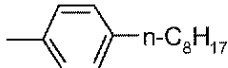
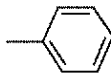
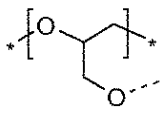
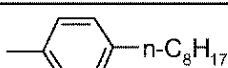
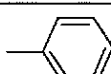
20

すなわち、

【表 1】

化合物	PG'	R ¹³	R ^{13'}	R ¹⁷
A-1		H	H	H
A-2	同上	H	H	n-C ₈ H ₁₇
A-3	同上	H	H	
A-4	同上	N(Ph) ₂	N(Ph) ₂	n-C ₈ H ₁₇
A-5				

30

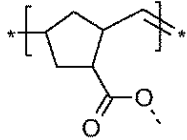
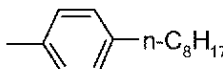
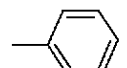
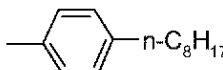
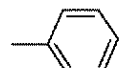
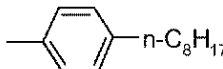
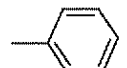
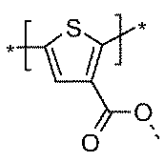
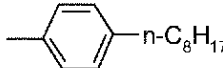
A-6	同上	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$	
A-7	同上	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$
A-8		H	H	H
A-9	同上	H	H	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$
A-10	同上	H	H	 - $n\text{-C}_8\text{H}_{17}$
A-11	同上	$\text{N}(\text{Ph})_2$	$\text{N}(\text{Ph})_2$	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$
A-12	同上	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$	
A-13	同上	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$
A-14		H	H	H
A-15	同上	H	H	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$
A-16	同上	H	H	 - $n\text{-C}_8\text{H}_{17}$
A-17	同上	$\text{N}(\text{Ph})_2$	$\text{N}(\text{Ph})_2$	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$
A-18	同上	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$	
A-19	同上	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$
A-20		H	H	H
A-21	同上	H	H	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$
A-22	同上	H	H	 - $n\text{-C}_8\text{H}_{17}$
A-23	同上	$\text{N}(\text{Ph})_2$	$\text{N}(\text{Ph})_2$	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$
A-24	同上	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$	
A-25	同上	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$

10

20

30

40

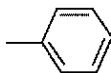
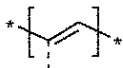
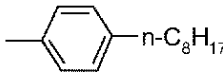
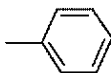
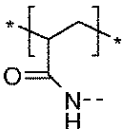
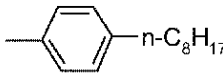
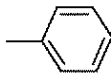
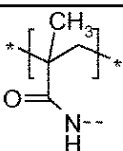
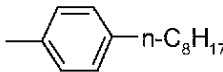
A-26		H	H	H
A-27	同上	H	H	n-C ₈ H ₁₇
A-28	同上	H	H	
A-29	同上	N(Ph) ₂	N(Ph) ₂	n-C ₈ H ₁₇
A-30	同上	n-C ₈ H ₁₇	n-C ₈ H ₁₇	
A-31	同上	n-C ₈ H ₁₇	n-C ₈ H ₁₇	n-C ₈ H ₁₇
A-32	¹⁾	H	H	H
A-33	同上	H	H	n-C ₈ H ₁₇
A-34	同上	H	H	
A-35	同上	N(Ph) ₂	N(Ph) ₂	n-C ₈ H ₁₇
A-36	同上	n-C ₈ H ₁₇	n-C ₈ H ₁₇	
A-37	同上	n-C ₈ H ₁₇	n-C ₈ H ₁₇	n-C ₈ H ₁₇
A-38	²⁾	H	H	H
A-39	同上	H	H	n-C ₈ H ₁₇
A-40	同上	H	H	
A-41	同上	N(Ph) ₂	N(Ph) ₂	n-C ₈ H ₁₇
A-42	同上	n-C ₈ H ₁₇	n-C ₈ H ₁₇	
A-43	同上	n-C ₈ H ₁₇	n-C ₈ H ₁₇	n-C ₈ H ₁₇
A-44		H	H	H
A-45	同上	H	H	n-C ₈ H ₁₇
A-46	同上	H	H	

10

20

30

40

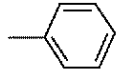
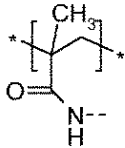
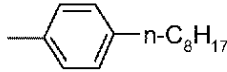
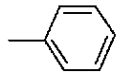
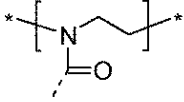
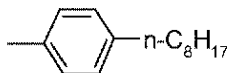
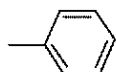
A-47	同上	$N(Ph)_2$	$N(Ph)_2$	$n-C_8H_{17}$
A-48	同上	$n-C_8H_{17}$	$n-C_8H_{17}$	
A-49	同上	$n-C_8H_{17}$	$n-C_8H_{17}$	$n-C_8H_{17}$
A-50		H	H	H
A-51	同上	H	H	$n-C_8H_{17}$
A-52	同上	H	H	
A-53	同上	$N(Ph)_2$	$N(Ph)_2$	$n-C_8H_{17}$
A-54	同上	$n-C_8H_{17}$	$n-C_8H_{17}$	
A-55	同上	$n-C_8H_{17}$	$n-C_8H_{17}$	$n-C_8H_{17}$
A-56		H	H	H
A-57	同上	H	H	$n-C_8H_{17}$
A-58	同上	H	H	
A-59	同上	$N(Ph)_2$	$N(Ph)_2$	$n-C_8H_{17}$
A-60	同上	$n-C_8H_{17}$	$n-C_8H_{17}$	
A-61	同上	$n-C_8H_{17}$	$n-C_8H_{17}$	$n-C_8H_{17}$
A-62		H	H	H
A-63	同上	H	H	$n-C_8H_{17}$
A-64	同上	H	H	
A-65	同上	$N(Ph)_2$	$N(Ph)_2$	$n-C_8H_{17}$

10

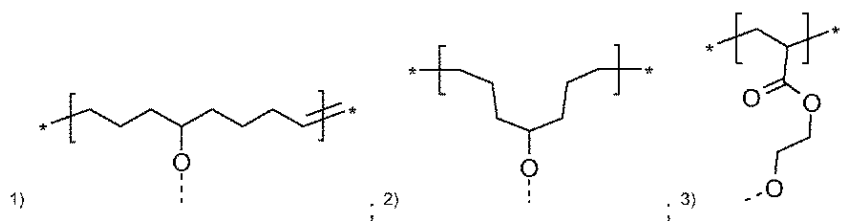
20

30

40

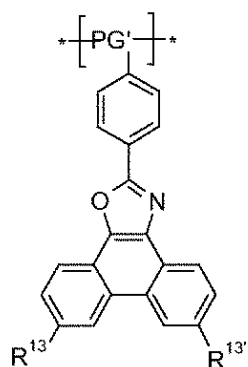
A-66	同上	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$	
A-67	同上	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$
A-68		H	H	H
A-69	同上	H	H	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$
A-70	同上	H	H	
A-71	同上	N(Ph)_2	N(Ph)_2	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$
A-72	同上	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$	
A-73	同上	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$
A-74		H	H	H
A-75	同上	H	H	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$
A-76	同上	H	H	
A-77	同上	N(Ph)_2	N(Ph)_2	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$
A-78	同上	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$	
A-79	同上	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$	$n\text{-C}_8\text{H}_{17}$

【化 2 1】



で示されるホモポリマー、
下記式：

【化 2 2】



10

すなわち

【表 2】

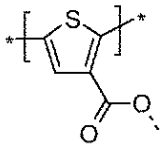
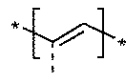
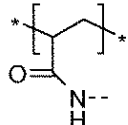
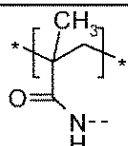
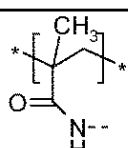
化合物	PG'	R ¹³	R ^{13'}
B-1		H	H
B-2	同上	N(Ph) ₂	N(Ph) ₂
B-3	同上	n-C ₈ H ₁₇	n-C ₈ H ₁₇
B-4		H	H
B-5	同上	N(Ph) ₂	N(Ph) ₂
B-6	同上	n-C ₈ H ₁₇	n-C ₈ H ₁₇
B-7		H	H
B-8	同上	N(Ph) ₂	N(Ph) ₂
B-9	同上	n-C ₈ H ₁₇	n-C ₈ H ₁₇
B-10		H	H
B-11	同上	N(Ph) ₂	N(Ph) ₂
B-12	同上	n-C ₈ H ₁₇	n-C ₈ H ₁₇
B-13		H	H
B-14	同上	N(Ph) ₂	N(Ph) ₂
B-15	同上	n-C ₈ H ₁₇	n-C ₈ H ₁₇

20

30

40

50

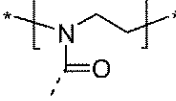
B-16	1)	H	H
B-17	同上	N(Ph) ₂	N(Ph) ₂
B-18	同上	n-C ₈ H ₁₇	n-C ₈ H ₁₇
B-19	2)	H	H
B-20	同上	N(Ph) ₂	N(Ph) ₂
B-21	同上	n-C ₈ H ₁₇	n-C ₈ H ₁₇
B-22		H	H
B-23	同上	N(Ph) ₂	N(Ph) ₂
B-24	同上	n-C ₈ H ₁₇	n-C ₈ H ₁₇
B-25		H	H
B-26	同上	N(Ph) ₂	N(Ph) ₂
B-27	同上	n-C ₈ H ₁₇	n-C ₈ H ₁₇
B-28		H	H
B-29	同上	N(Ph) ₂	N(Ph) ₂
B-30	同上	n-C ₈ H ₁₇	n-C ₈ H ₁₇
B-31		H	H
B-32	同上	N(Ph) ₂	N(Ph) ₂
B-33	同上	n-C ₈ H ₁₇	n-C ₈ H ₁₇
B-34		H	H
B-35	同上	N(Ph) ₂	N(Ph) ₂
B-36	同上	n-C ₈ H ₁₇	n-C ₈ H ₁₇

10

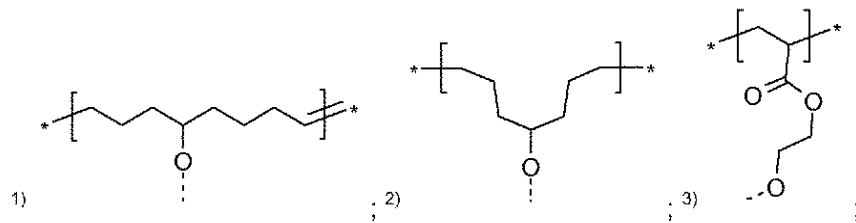
20

30

40

B-37		H	H
B-38	同上	N(Ph) ₂	N(Ph) ₂
B-39	同上	n-C ₈ H ₁₇	n-C ₈ H ₁₇

【化 2 3】

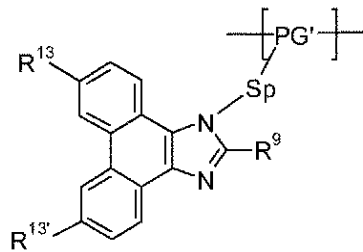


10

で示されるホモポリマー、

下記式：

【化 2 4】



20

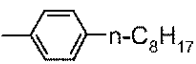
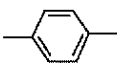
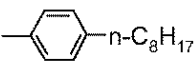
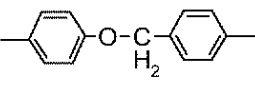
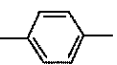
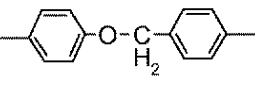
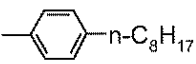
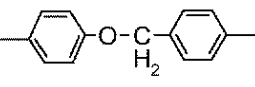
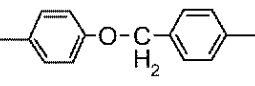
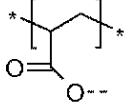
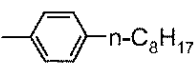
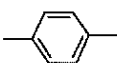
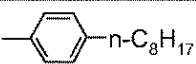
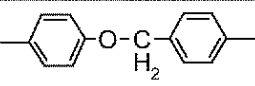
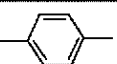
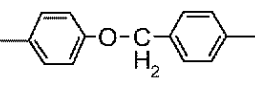
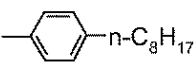
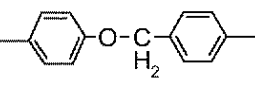
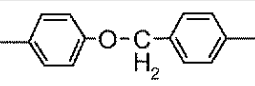
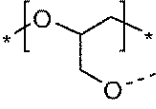
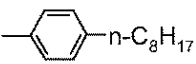
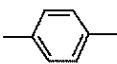
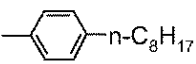
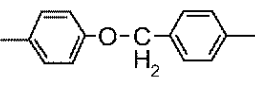
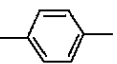
すなわち

【表 3】

化合物	R^{13}	$R^{13'}$	R^9	Sp	PG'
C-1	H	H	Ph		
C-2	H	H			同上
C-3	H	H			同上
C-4	n-C ₈ H ₁₅	n-C ₈ H ₁₅	Ph		同上
C-5	n-C ₈ H ₁₅	n-C ₈ H ₁₅	Ph		同上
C-6	Br	Br			同上
C-7	H	H	Ph		

10

20

C-8	H	H			同上
C-9	H	H			同上
C-10	n-C ₈ H ₁₅	n-C ₈ H ₁₅	Ph		同上
C-11	n-C ₈ H ₁₅	n-C ₈ H ₁₅	Ph		同上
C-12	Br	Br			同上
C-13	H	H	Ph		
C-14	H	H			同上
C-15	H	H			同上
C-16	n-C ₈ H ₁₅	n-C ₈ H ₁₅	Ph		同上
C-17	n-C ₈ H ₁₅	n-C ₈ H ₁₅	Ph		同上
C-18	Br	Br			同上
C-19	H	H	Ph		
C-20	H	H			同上
C-21	H	H			同上
C-22	n-C ₈ H ₁₅	n-C ₈ H ₁₅	Ph		同上

10

20

30

40

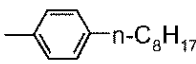
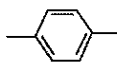
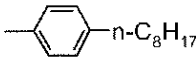
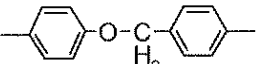
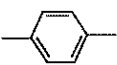
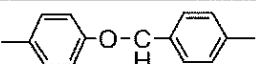
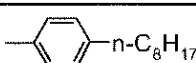
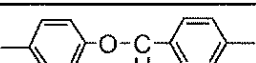
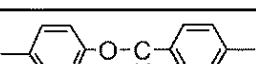
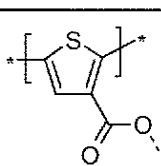
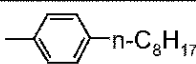
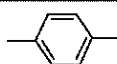
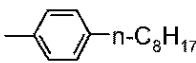
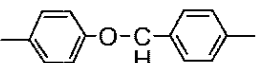
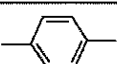
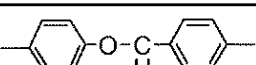
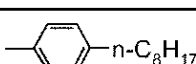
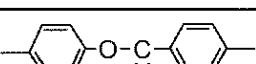
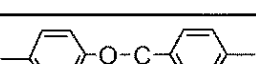
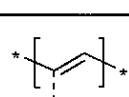
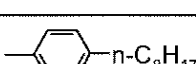
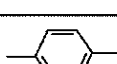
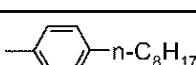
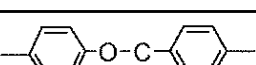
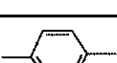
C-23	n-C ₈ H ₁₅	n-C ₈ H ₁₅	Ph		同上
C-24	Br	Br			同上
C-25	H	H	Ph		
C-26	H	H			同上
C-27	H	H			同上
C-28	n-C ₈ H ₁₅	n-C ₈ H ₁₅	Ph		同上
C-29	n-C ₈ H ₁₅	n-C ₈ H ₁₅	Ph		同上
C-30	Br	Br			同上
C-31	H	H	Ph		1)
C-32	H	H			同上
C-33	H	H			同上
C-34	n-C ₈ H ₁₅	n-C ₈ H ₁₅	Ph		同上
C-35	n-C ₈ H ₁₅	n-C ₈ H ₁₅	Ph		同上
C-36	Br	Br			同上
C-37	H	H	Ph		2)

10

20

30

40

C-38	H	H			同上
C-39	H	H			同上
C-40	n-C ₈ H ₁₅	n-C ₈ H ₁₅	Ph		同上
C-41	n-C ₈ H ₁₅	n-C ₈ H ₁₅	Ph		同上
C-42	Br	Br			同上
C-43	H	H	Ph		
C-44	H	H			同上
C-45	H	H			同上
C-46	n-C ₈ H ₁₅	n-C ₈ H ₁₅	Ph		同上
C-47	n-C ₈ H ₁₅	n-C ₈ H ₁₅	Ph		同上
C-48	Br	Br			同上
C-49	H	H	Ph		
C-50	H	H			同上
C-51	H	H			同上
C-52	n-C ₈ H ₁₅	n-C ₈ H ₁₅	Ph		同上

10

20

30

40

C-53	n-C ₈ H ₁₅	n-C ₈ H ₁₅	Ph		同上
C-54	Br	Br			同上
C-55	H	H	Ph		
C-56	H	H			同上
C-57	H	H			同上
C-58	n-C ₈ H ₁₅	n-C ₈ H ₁₅	Ph		同上
C-59	n-C ₈ H ₁₅	n-C ₈ H ₁₅	Ph		同上
C-60	Br	Br			同上
C-61	H	H	Ph		
C-62	H	H			同上
C-63	H	H			同上
C-64	n-C ₈ H ₁₅	n-C ₈ H ₁₅	Ph		同上
C-65	n-C ₈ H ₁₅	n-C ₈ H ₁₅	Ph		同上
C-66	Br	Br			同上

10

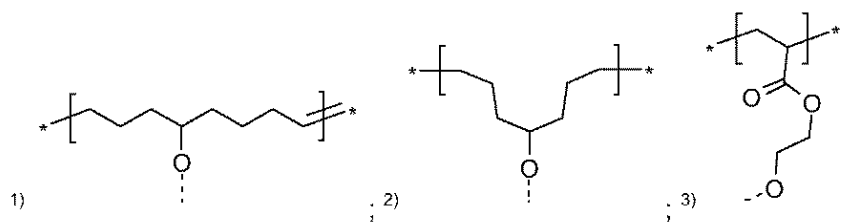
20

30

40

C-67	H	H	Ph		
C-68	H	H			同上
C-69	H	H			同上
C-70	n-C ₈ H ₁₅	n-C ₈ H ₁₅	Ph		同上
C-71	n-C ₈ H ₁₅	n-C ₈ H ₁₅	Ph		同上
C-72	Br	Br			同上
C-73	H	H	Ph		
C-74	H	H			同上
C-75	H	H			同上
C-76	n-C ₈ H ₁₅	n-C ₈ H ₁₅	Ph		同上
C-77	n-C ₈ H ₁₅	n-C ₈ H ₁₅	Ph		同上
C-78	Br	Br			同上

【化 2 5】



で示されるホモポリマー、又は
下記式：

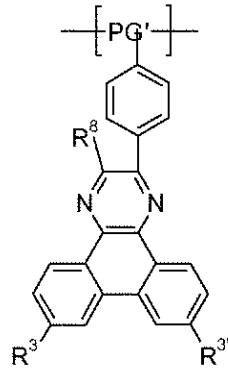
10

20

30

40

【化 2 6】



10

すなわち

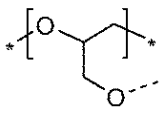
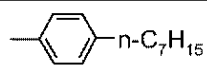
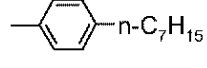
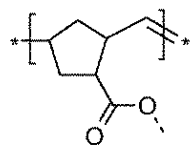
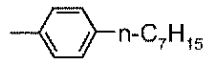
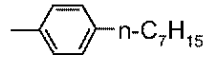
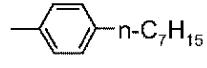
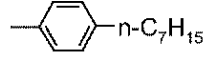
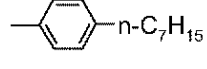
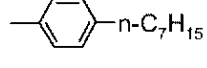
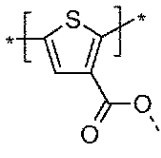
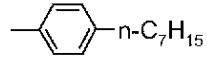
【表 4】

化合物	PG'	R ³	R ^{3'}	R ⁸
D-1		H	H	Ph
D-2	同上	H	H	
D-3	同上	Br	Br	n-C ₈ H ₁₇
D-4	同上	Br	Br	
D-5		H	H	Ph
D-6	同上	H	H	
D-7	同上	Br	Br	n-C ₈ H ₁₇
D-8	同上	Br	Br	
D-9		H	H	Ph
D-10	同上	H	H	
D-11	同上	Br	Br	n-C ₈ H ₁₇
D-12	同上	Br	Br	

20

30

40

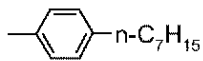
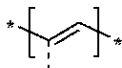
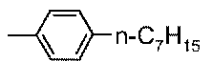
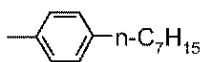
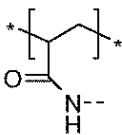
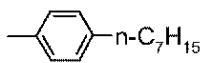
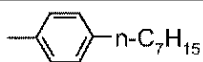
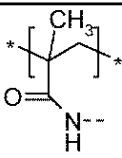
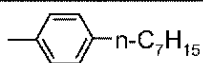
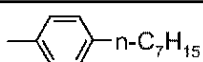
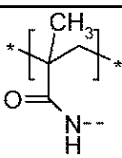
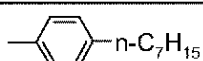
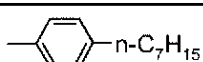
D-13		H	H	Ph
D-14	同上	H	H	
D-15	同上	Br	Br	n-C ₈ H ₁₇
D-16	同上	Br	Br	
D-17		H	H	Ph
D-18	同上	H	H	
D-19	同上	Br	Br	n-C ₈ H ₁₇
D-20	同上	Br	Br	
D-21	¹⁾	H	H	Ph
D-22	同上	H	H	
D-23	同上	Br	Br	n-C ₈ H ₁₇
D-24	同上	Br	Br	
D-25	²⁾	H	H	Ph
D-26	同上	H	H	
D-27	同上	Br	Br	n-C ₈ H ₁₇
D-28	同上	Br	Br	
D-29		H	H	Ph
D-30	同上	H	H	
D-31	同上	Br	Br	n-C ₈ H ₁₇

10

20

30

40

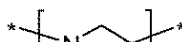


D-32	同上	Br	Br	
D-33		H	H	Ph
D-34	同上	H	H	
D-35	同上	Br	Br	n-C ₈ H ₁₇
D-36	同上	Br	Br	
D-37		H	H	Ph
D-38	同上	H	H	
D-39	同上	Br	Br	n-C ₈ H ₁₇
D-40	同上	Br	Br	
D-41		H	H	Ph
D-42	同上	H	H	
D-43	同上	Br	Br	n-C ₈ H ₁₇
D-44	同上	Br	Br	
D-45		H	H	Ph
D-46	同上	H	H	
D-47	同上	Br	Br	n-C ₈ H ₁₇
D-48	同上	Br	Br	

10

20

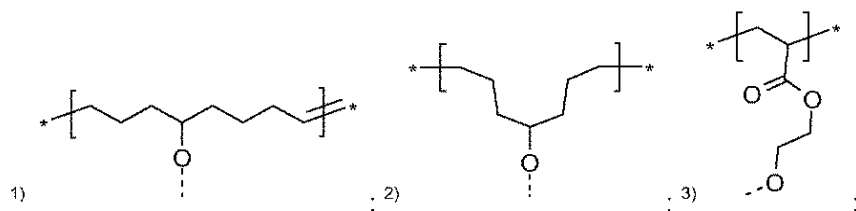
30

40

D-49		H	H	Ph
D-50	同上	H	H	
D-51	同上	Br	Br	n-C ₈ H ₁₇
D-52	同上	Br	Br	

10

【化 2 7】



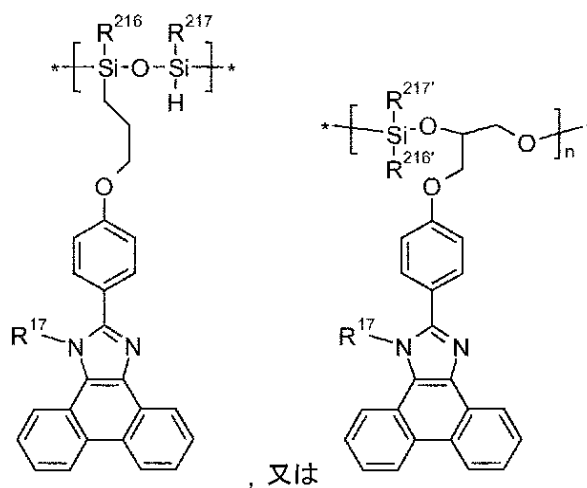
20

で示されるホモポリマーである、
請求項 1 記載のポリマー。

【請求項 5】

ポリマーが、下記式：

【化 2 8】

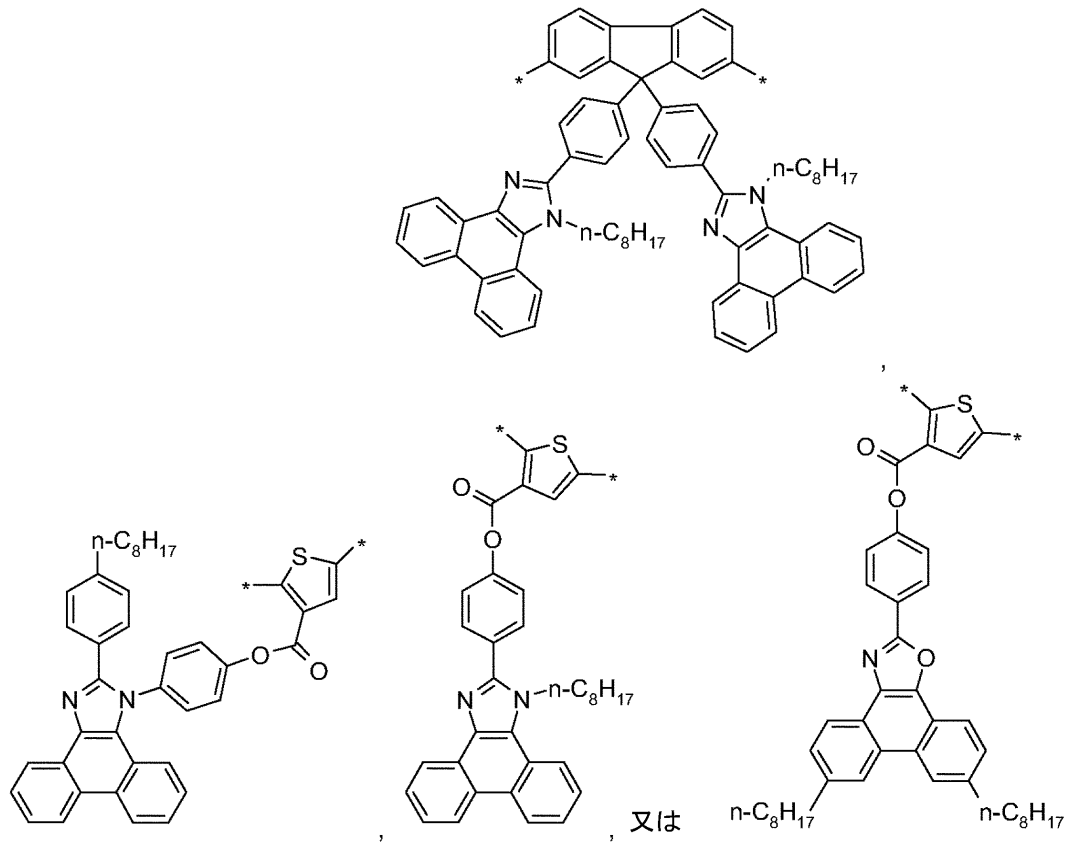


30

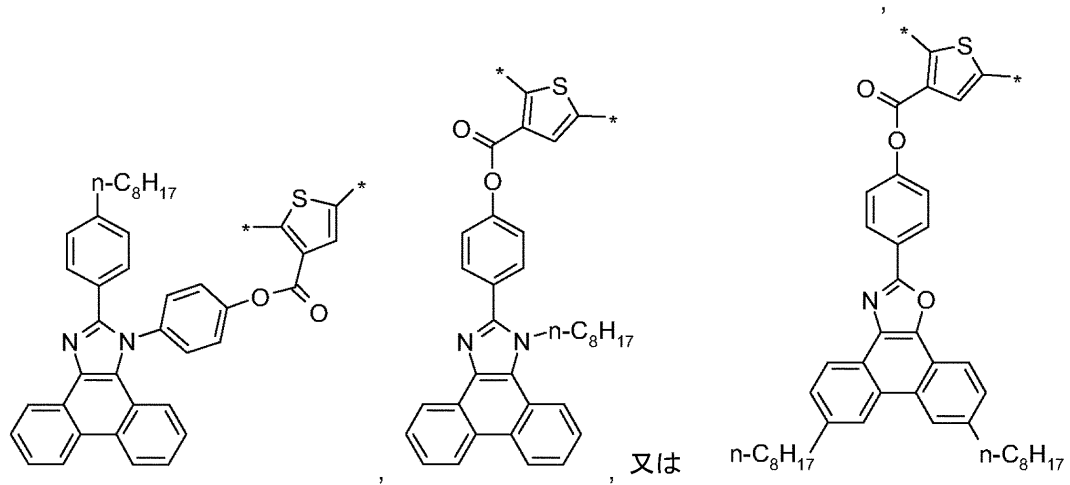
〔式中、

R^{216} 及び R^{217} は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、又は 1 つ以上の $C_1 \sim C_{18}$ アルキル基で置換されていることができる $C_6 \sim C_8$ アリールであり、そして R^{17} は、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル若しくは $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル；又は - O - で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキルである〕で示される反復単位を更に含むか、或いはポリマーが、下記式：

【化 29】



10



20

で示される反復単位を更に含む、請求項 1 記載のポリマー。

【請求項 6】

請求項 1 ～ 5 のいずれか 1 項記載のポリマーを含む、電子装置。

【請求項 7】

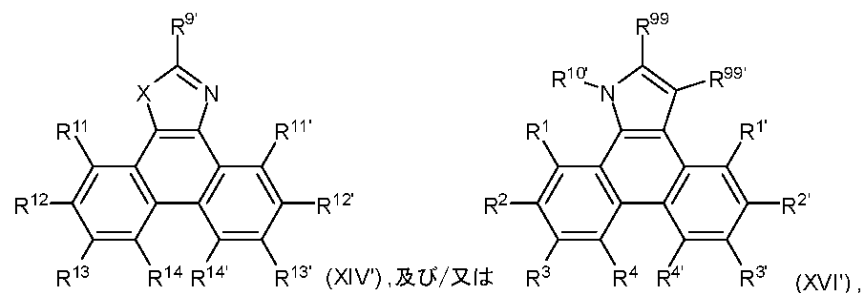
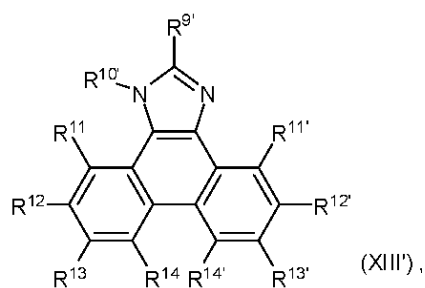
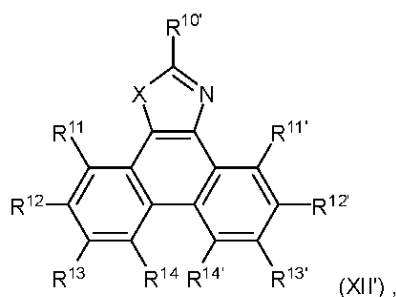
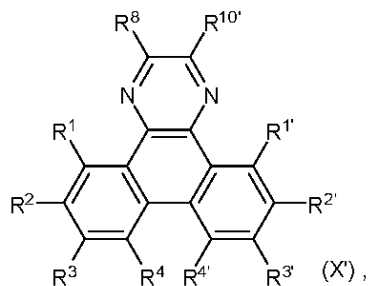
請求項 1 ～ 5 のいずれか 1 項記載のポリマーを含む、電子装置の部品。

【請求項 8】

下記式：

30

【化 30】



〔式中、

R^1 及び R^1 は、互いに独立して、水素、ハロゲン、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、CN又は $-CO-R^{28}$ であり、

R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^2 、 R^3 及び R^4 は、互いに独立して、E、H、ハロゲン、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{24}$ 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、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、CN又は $-CO-R^{28}$ であり、

R^8 は、H、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{24}$ 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、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、CN又は $-CO-R^{28}$ であり、

$R^{9'}$ 、 R^{99} 及び R^{99} は、H、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{24}$ 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、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニ

10

20

30

40

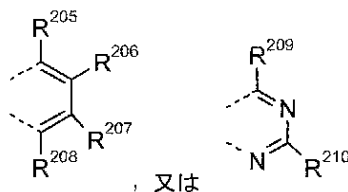
50

ル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル又は $-CO-R^{28}$ であり、

R^{10} は、基 $-(Sp)_{x1}-[PG]$ であり、ここで、Spはスペーサー単位であり、PGは重合性基であり、 $x1$ は0又は1であるか、或いは

R^8 及び R^{10} は、一緒になって、下記：

【化31】



10

の基を形成し、

ここで、置換基 R^{205} 、 R^{206} 、 R^{207} 及び R^{208} の1つと、置換基 R^{209} 及び R^{210} の1つは、基 R^{10} であり、他の置換基は、互いに独立して、H、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、又はEで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシであり、

20

R^{11} 及び R^{11} は、互いに独立して、水素、ハロゲン、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、CN又は $-CO-R^{28}$ であり、

R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{12} 、 R^{13} 及び R^{14} は、互いに独立して、E、H、ハロゲン、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{24}$ 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、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、CN又は $-CO-R^{28}$ であり、

30

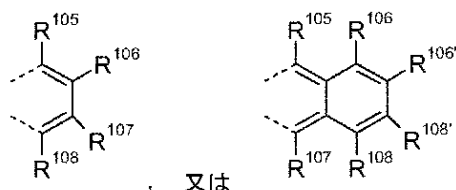
Xは、O又は NR^{17} であり、ここで R^{17} は、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール、Gで置換されている $C_6 \sim C_{24}$ アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、Gで置換されている $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル又は $-CO-R^{28}$ であるか；或いは

互いに隣接している、置換基 R^1 、 R^2 、 R^3 及び R^4 ； R^1 、 R^2 、 R^3 及び R^4 ； R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 及び R^{14} ； R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 及び R^{14}

40

の2つは、一緒になって、下記：

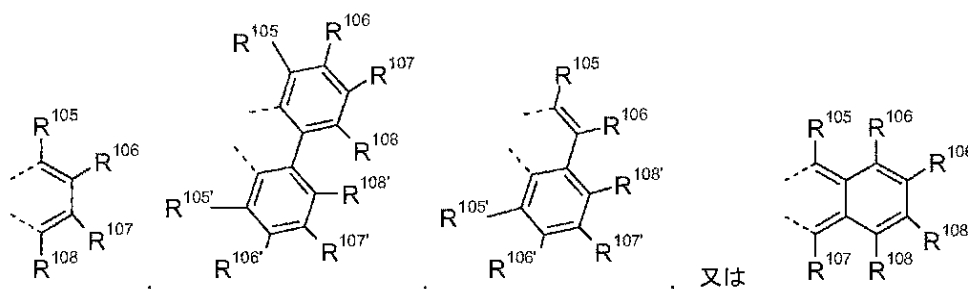
【化32】



の基を形成するか、或いは

50

互いに隣接している 2 つの置換基 R^{105} 及び R^{106} は、一緒になって、下記：
【化 3 3】

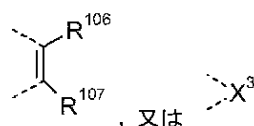


10

基を形成するか、或いは

互いに隣接している 2 つの置換基 R^{105} 及び R^{106} 、並びに / 又は R^{107} 及び R^{108} は、一緒になって、下記：

【化 3 4】



20

の基を形成し、

ここで、 X^3 は、O、S、C(R^{105})(R^{106}) 又は NR^{107} であり、 R^{107} は、上記で定義されたとおりであり、 R^{105} 、 R^{106} 、 R^{107} 、 R^{108} 、 $R^{105'}$ 、 $R^{106'}$ 、 $R^{107'}$ 及び $R^{108'}$ は、互いに独立して、H、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、E で置換されている及び / 若しくは D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、又は E で置換されている及び / 若しくは D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシであり、

R^{105} 及び R^{106} は、互いに独立して、H、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、E で置換されている及び / 若しくは D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ 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、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、E で置換されている及び / 若しくは D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、又は $C_7 \sim C_{25}$ アラルキルであるか、或いは

30

R^{105} 及び R^{106} は、一緒になって、式： $=CR^{107}R^{108}$ の基を形成し、ここで、

R^{107} 及び R^{108} は、互いに独立して、H、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、E で置換されている及び / 若しくは D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ 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、又は $C_2 \sim C_{20}$ 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るか、或いは

R^{107} 及び R^{108} は、一緒になって、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、E で置換されている及び / 若しくは D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ 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、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、E で置換されている及び / 若しくは D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル又は $-C(=O)-R^{109}$ で置換されていることができる 5 員又は 6 員環を形成し、

40

R^{109} は、H； $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル若しくは $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル；又は -O- で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキルであり、

D は、 $-CO-$ ； $-COO-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-O-$ ； $-NR^{110}-$

50

; - S i R^{3 0} R^{3 1} - ; - P O R^{3 2} - ; - C R^{2 3} = C R^{2 4} - ; 又は - C C - であり、そして

E は、 - O R^{2 9} ; - S R^{2 9} ; - N R^{2 5} R^{2 6} ; - C O R^{2 8} ; - C O O R^{2 7} ; - C O N R^{2 5} R^{2 6} ; - C N ; 又はハロゲンであり、G は、E、C₁ ~ C_{1 8} アルキル、D で中断されている C₁ ~ C_{1 8} アルキル、C₁ ~ C_{1 8} ペルフルオロアルキル、又は E で置換されている及び/若しくは D で中断されている C₁ ~ C_{1 8} アルコキシであり、ここで、

R^{2 3}、R^{2 4}、R^{2 5} 及び R^{2 6} は、互いに独立して、H ; C₆ ~ C_{1 8} アリール ; C₁ ~ C_{1 8} アルキル若しくは C₁ ~ C_{1 8} アルコキシで置換されている C₆ ~ C_{1 8} アリール ; C₁ ~ C_{1 8} アルキル ; 又は - O - で中断されている C₁ ~ C_{1 8} アルキルであるか ; 或いは

R^{2 5} 及び R^{2 6} は、一緒になって、5 員又は 6 員環を形成し、

R^{2 7} 及び R^{2 8} は、互いに独立して、H ; C₆ ~ C_{1 8} アリール ; C₁ ~ C_{1 8} アルキル若しくは C₁ ~ C_{1 8} アルコキシで置換されている C₆ ~ C_{1 8} アリール ; C₁ ~ C_{1 8} アルキル ; 又は - O - で中断されている C₁ ~ C_{1 8} アルキルであり、

R^{2 9} は、H ; C₆ ~ C_{1 8} アリール ; C₁ ~ C_{1 8} アルキル若しくは C₁ ~ C_{1 8} アルコキシで置換されている C₆ ~ C_{1 8} アリール ; C₁ ~ C_{1 8} アルキル ; 又は - O - で中断されている C₁ ~ C_{1 8} アルキルであり、

R^{3 0} 及び R^{3 1} は、互いに独立して、C₁ ~ C_{1 8} アルキル、C₆ ~ C_{1 8} アリール、又は C₁ ~ C_{1 8} アルキルで置換されている C₆ ~ C_{1 8} アリールであり、そして

R^{3 2} は、C₁ ~ C_{1 8} アルキル、C₆ ~ C_{1 8} アリール、又は C₁ ~ C_{1 8} アルキルで置換されている C₆ ~ C_{1 8} アリールであるか、或いは

R⁹、R^{1 2}、R^{1 3}、R^{1 4}、R^{1 2}、R^{1 3} 及び R^{1 4} は、基 - (S p)_{x 1} - H E I であり、ここで、

S p は、スペーサー単位であり、H E I は、ポリマーの正孔注入若しくは正孔輸送特性を増加する基 (H E I^I) であるか、又は、ポリマーの電子注入若しくは電子輸送特性を増加する基 (H E I^{I I}) であり、

x 1 は、0 又は 1 であり、

S p が、- A r -、- A r Y -、- Y A r -、- Y A r (C R^{4 7} R^{4 8})_n -、- (C R^{4 7} R^{4 8})_n -、- (Y C R^{4 7} R^{4 8})_n - 又は - (C R^{4 7} R^{4 8} Y)_n - から選択され、ここで、

Y が、N R⁵、O、S、C = O、C (= O) O であり、ここで R⁵ が、H ; C₆ ~ C_{1 8} アリール ; C₁ ~ C_{1 8} アルキル若しくは C₁ ~ C_{1 8} アルコキシで置換されている C₆ ~ C_{1 8} アリール ; C₁ ~ C_{1 8} アルキル ; 又は - O - で中断されている C₁ ~ C_{1 8} アルキルであり ;

R^{4 7} 及び R^{4 8} が、互いに独立して、水素、フッ素又は C₁ ~ C_{2 0} アルキルであり、

n が、1 ~ 2 0 の整数であり、

A r が、置換されていることができる、アルキレン、シクロアルキレン、アリーレン、アラルキレン又はヘテロアリーレンであり、

P G が、- C (R^{4 4}) = C H₂、- N H C (O) - C (R^{4 5}) = C H₂、- O C H₂ C H₂ O C (O) - C (R^{4 5}) = C H₂、- O C (O) - C (R^{4 5}) = C H₂、- C (O) - C (R^{4 6}) = C H₂、- C C -、- N C、- O - C H (C H₂ C H₂ C H = C H₂)₂ ; C₅ ~ C₈ シクロアルケニル、ビスシクロアルケニル (5 ~ 3 0 個の炭素原子を有する置換又は非置換ビスシクロアルケニル基)、下記 :

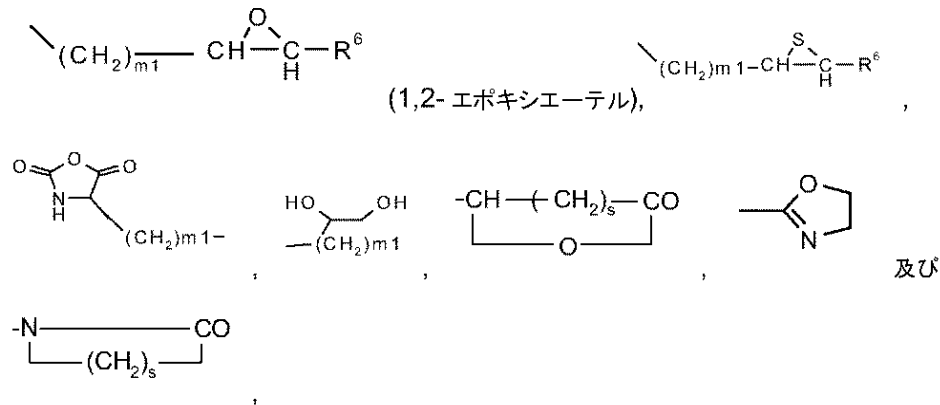
10

20

30

40

【化 3 5】



10

から選択される重合性基であり、

ここで、

s が、1 ~ 6 の整数であり、 m_1 が、1 ~ 6 の整数であり、

R^6 が、水素又は $C_1 \sim C_{20}$ アルキルであり、

R^{44} が、水素又は $C_1 \sim C_4$ アルキル又はハロゲンであり、

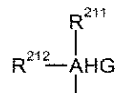
R^{45} が、水素、 $C_1 \sim C_4$ アルキル又はハロゲンであり、そして

R^{46} が、水素、 $C_1 \sim C_4$ アルキル又は $C_6 \sim C_{12}$ アリールであるか、或いは

20

$P G$ が、下記：

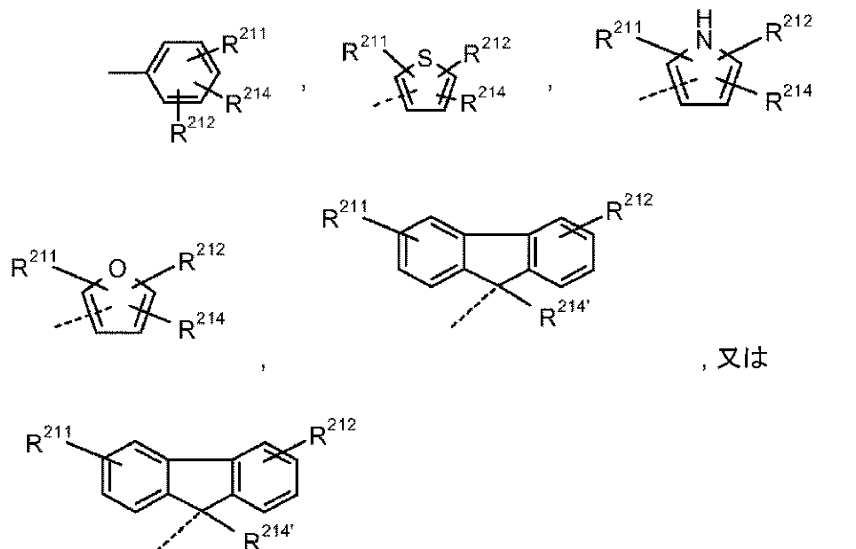
【化 3 6】



の重合性基であり、

ここで $A H G$ が、置換されていることができる 下記芳香族環又は芳香族複素環残基：

【化 1 7 6】



30

40

であり、

R^{211} 及び R^{212} が、互いに独立して、ハロゲン、 $-C \equiv CH$ 、ボロン酸若しくはボロン酸エステル、 $-Mg-Hal$ 、 $-Zn-Hal$ 、 $-Sn(R^{213})_3$ であり、ここで Hal がハロゲンであり、 R^{213} が $C_1 \sim C_{18}$ アルキルであり、

R^{214} 及び $R^{214'}$ が、互いに独立して、 H 、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 D で中断さ

50

れている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、Dで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ又は $C_7 \sim C_{25}$ アラルキルであるが、但し、式XIVの化合物の場合では、置換基 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{12} 及び R^{13} の少なくとも1つが基 R^{10} である]

で示される化合物。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、式(I)の反復単位を含む新規ポリマー及び電子装置におけるそれらの使用に関する。本発明のポリマーは、有機溶媒における優れた溶解性及び優れた皮膜形成特性を有することができる。加えて、本発明のポリマーが有機発光ダイオード(OLED)に使用される場合、高い電荷担体移動性及び発光色の高い安定性を観察することができる。

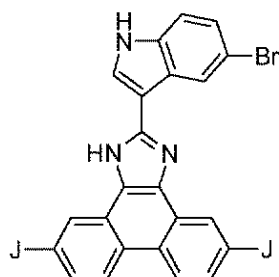
10

【0002】

JPO5273618は、抗炎症剤として使用される場合のフェナントロイミダゾール化合物を開示する。WO04016086は、2,4,5-三置換イミダゾールの製造、並びに抗菌剤及び/若しくは抗真菌剤としてのそれらの使用に関する。とりわけ、以下の化合物がWO04016086に明示されている。

【0003】

【化42】



20

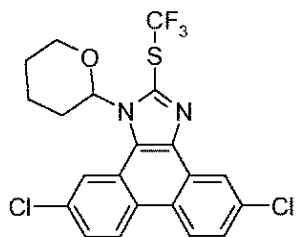
【0004】

US-B-4,215,135は、消炎剤として有用である、2-置換-1H-フェナントロ[9,10-d]-イミダゾールに関する。とりわけ、以下の化合物がUS-B-4,215,135に明示されている。

30

【0005】

【化43】



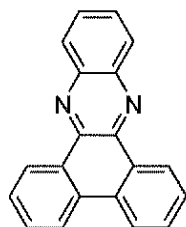
40

【0006】

US 3,635,544は、以下の化合物：

【0007】

【化 4 4】



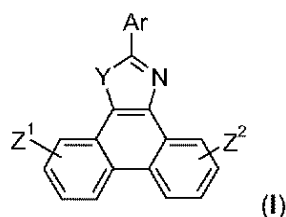
【 0 0 0 8】

を光吸収化合物として含む、フォトクロミックポリマーマトリックスに関する。JP09188874、JP09013025、JP07026255、JP06207169、US2004076853、WO2004043937、US6713781、WO2004006352、WO2003058667及びWO2004006355は、フェナントレン縮合又はフェナントロリン縮合フェナジン、及びEL装置におけるそれらの使用を開示する。

US2004209117は、下記式：

【 0 0 0 9】

【化 4 5】



【 0 0 1 0】

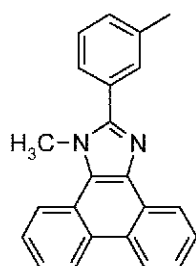
〔式中、Yは、O、S及び-N(R)-からなる群より選択される原子又は基であり、ここでRは、炭素原子1～約30個のヒドロカルビル基であり；Z¹及びZ²は、それぞれ、水素、炭素原子1～約25個のアルキル基、炭素原子約6～約30個のアリール基、炭素原子1～約25個のアルコキシ基、ハロゲン及びシアノ基からなる群より選択される置換基であり、そしてArは、芳香族成分である〕で示されるアゾール化合物を含むEL装置に関する。JP2004161892、JP2002050473及びJP2001023777は、フェナントロイミダゾール化合物及びEL装置におけるそれらの使用を開示する。

【 0 0 1 1】

WO04/030029は、下記：

【 0 0 1 2】

【化 4 6】



【 0 0 1 3】

の基を含有するポリマーを含む、光起電性ELセルに関する。WO03/020790は、スピロピフルオレン単位を含む共役ポリマーに関する。ポリマーは、以下の化合物：

【 0 0 1 4】

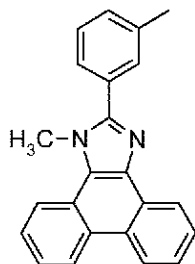
10

20

30

40

【化 4 7】



【 0 0 1 5】

10

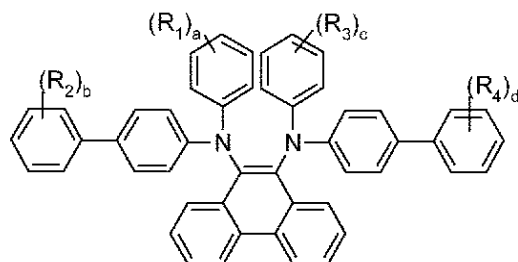
から誘導される反復単位を含むことができる。

【 0 0 1 6】

E P 0 7 5 7 0 3 5 A 1 は、電荷移動能力、結合樹脂との適合性及び安定性において優れており、それによって感受性が高く耐久性に優れている感光性材料を提供する、下記の一般式：

【 0 0 1 7】

【化 4 8】



20

【 0 0 1 8】

により表されるフェナントリレンジアミン誘導体に関する。

【 0 0 1 9】

U S 2 0 0 1 0 0 8 7 1 1 は、発光層を含むか、又は少なくとも 1 つの層が、以下の式： $NR_{11}R_{12}R_{13}$ 〔式中、 R_{11} 、 R_{12} 及び R_{13} は、それぞれ、3 つ以上の環が縮合環化されている縮合環化多環式炭化水素構造を有する基を表す〕により表される少なくとも 1 種の化合物を含んでいる、1 対の電極の間に形成された発光層を含む複数の有機化合物薄層を含む有機発光装置；及び新規縮合環化多環式炭化水素化合物に関する。

30

【 0 0 2 0】

U S 2 0 0 4 / 0 0 2 8 9 4 4 は、一般式： $N(Ar_1)(Ar_2)(Ar_3)$ 〔式中、 $Ar_1 \sim Ar_3$ は、置換又は非置換のアリール基であり、 $Ar_1 \sim Ar_3$ の少なくとも 1 つは、9 - フェナントリル基である〕により表されるトリアリールアミン誘導体を含む有機エレクトロルミネセンス装置に関する。

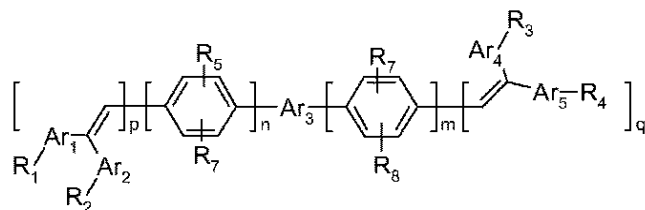
【 0 0 2 1】

E P 1 4 4 0 9 5 9 A 1 は、下記式：

40

【 0 0 2 2】

【化 4 9】



【 0 0 2 3】

〔式中、 Ar_3 は、置換若しくは非置換のアントラセンジイル基、又は置換若しくは非置

50

換のフルオレンジイル基を表す〕で示される新規可溶性化合物、及びエレクトロルミネセンス装置におけるその使用に関する。

【 0 0 2 4 】

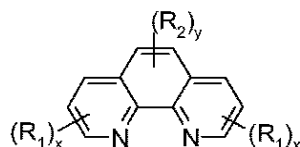
W O 0 3 / 0 6 4 3 7 3 は、トリアリールアミン誘導体、並びに有機エレクトロルミネセンス及び電子写真装置における正孔輸送材料としてのそれらの使用に関する。

【 0 0 2 5 】

W O 0 4 / 0 0 5 2 8 8 は、下記式：

【 0 0 2 6 】

【 化 5 0 】



10

【 0 0 2 7 】

〔式中、 R_1 及び R_2 は、それぞれの場合に同一又は異なっており、 H 、 F 、 Cl 、 Br 、アルキル、ヘテロアルキル、アルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、 $C_n H_a F_b$ 、 $O C_n H_a F_b$ 、 $C_6 H_c F_d$ 及び $O C_6 H_c F_d$ から選択され； a 、 b 、 c 及び d は、0 又は $a + b = 2n + 1$ 及び $c + d = 5$ のような整数であり、 n は、整数であり； x は、0 又は 1 ~ 3 の整数であり； y は、0、1 又は 2 であるが、但し、芳香族基に F 、 $C_n H_a F_b$ 、 $O C_n H_a F_b$ 、 $C_g H_c F_d$ 及び $O C_6 H_c F_d$ から選択される少なくとも 1 つの置換基が存在する〕を有するフェナントロリン誘導体を含む電荷輸送組成物に関する。

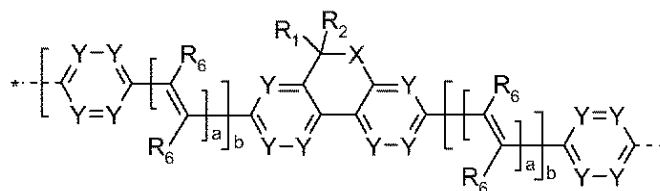
20

【 0 0 2 8 】

W O 0 5 / 0 1 4 6 8 9 は、下記式：

【 0 0 2 9 】

【 化 5 1 】



30

【 0 0 3 0 】

で示されるジヒドロフェナントレン単位を含有する共役ポリマー、及び有機発光ダイオードにおけるそれらの使用に関する。

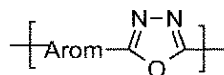
【 0 0 3 1 】

U S 2 0 0 5 / 0 1 5 6 5 1 6 は、独立して同一又は異なっているがよい少なくとも約 20 の反復単位を含む可溶性ポリ(アリール-オキサジアゾール)共役ポリマーに関し、反復単位は、下記式：

40

【 0 0 3 2 】

【 化 5 2 】

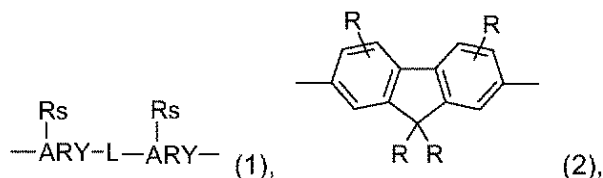


【 0 0 3 3 】

により表され、ここで $Arom$ は、式 (1) 及び (2)：

【 0 0 3 4 】

【化53】



【0035】

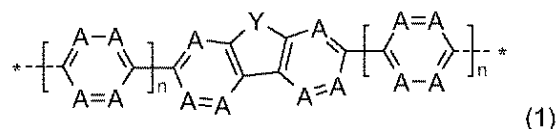
から選択される部分であり、ここで、ARYは、それぞれ、独立して同一又は異なってもよく、芳香族炭化水素環及び C_{2+} 芳香族の複素環から選択され、芳香族炭化水素環は、フルオレニル、テルフェニル、テトラフェニル、ピレニル及びフェナントリルから選択され、 C_{2+} 複素環は、ピロリル、フラニル、イミダゾリル、トリアゾリル、イソキサゾリル、オキサジアゾリル、フラザニル、ピリダジニル、ピリミジニル、ピラジニル、トリアジニル、テトラジニル、ベンゾフラニル、ベンゾチオフェニル、インドリル、イソインドゾリル、ベンゾイミダゾリル、ベンゾトリアゾリル、ベンゾオキサゾリル、キノリル、イソキノリル、シンノリル、キナゾリル、ナフチリジイル、フタラジニル、フェントリアジニル、ベンゾテトラジニル、カルバゾリル、ジベンゾフラニル、ジベンゾチオフェニル、アクリジニル及びフェナジニルから選択され；Lは、エチニル基及び置換又は非置換エチニル基から選択され；Rは、それぞれ、独立して同一又は異なってもよく、非置換又はシアノ、ニトロ及びハロゲンから選択される置換基で置換されていてもよく、水素、アリール、アルキルアリール、アリールアルキル及びアルキルから選択され、ここでアルキルの1つ以上の $-CH_2-$ 単位は、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 C_{2-14} アリール及び $-NR-$ から選択される部分に代えられているか又は何も代えられてなく、Rは、それぞれ、独立して同一又は異なってもよく、 C_{1-10} 飽和非環式ヒドロカルビル基を含み；そしてxは、それぞれ、Rで置換されうるAryの水素原子の数である。

【0036】

WO2005030828は、下記式：

【0037】

【化54】

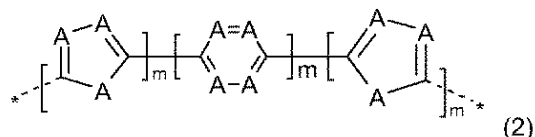


【0038】

及び下記式：

【0039】

【化55】



【0040】

による構造単位を含有する共役ポリマー、並びにポリマー有機発光ダイオード(PLED)におけるそれらの使用に関する。

【0041】

US20050106418は、シクロペンタフェナントレン系化合物及びオルガノエレクトロルミネセンス装置におけるそれらの使用に関する。

【0042】

WO05/104264は、下記式：

【0043】

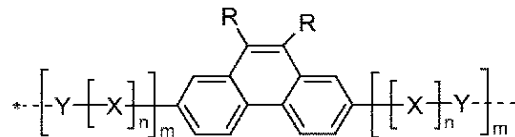
10

20

30

40

【化 5 6】



【 0 0 4 4 】

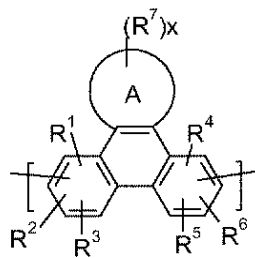
〔式中、両方の基 R は、とりわけ、一緒になって、単環式又は多環式脂肪族環系を形成することができる〕で示される構造単位を含むポリマーに関する。

【 0 0 4 5 】

本発明より早い優先日を享受するが、本発明の優先日の後で公開された W O 2 0 0 6 / 0 9 7 4 1 9 は、下記式：

【 0 0 4 6 】

【化 5 7】



【 0 0 4 7 】

で示される反復単位を含むポリマー及び E L 装置におけるそれらの使用に関する。

【 0 0 4 8 】

有機 E L ディスプレイの導入は、その性能が既存の技術と比較されるとき、数多くの課題に直面する。特定の基準（すなわち N T S C）により要求される正確な色座標を得ることは、難問であった。E L 装置の操作寿命は、陰極線管（C R T）及び液晶ディスプレイ（L C D）の既存の無機技術と比べると依然として低い。加えて、純粋な青、緑、赤色を有し、長寿命の装置を製造することは、この産業界にとって最大の問題の一つである。

【 0 0 4 9 】

したがって、本発明の目的は、電気光学装置に組み込まれたとき、色純度、装置の効率及び／又は操作寿命において著しい利益をもたらす、新規材料を提供することである。

【 0 0 5 0 】

前記の目的は、式 I の反復単位を含む本発明のポリマーにより解決される。本発明のポリマーに基づいた有機発光装置（O L E D）は、色純度、装置の効率性及び／又は操作寿命において著しい利点を示すことができる。加えて、ポリマーは、良好な溶解特性及び相対的に高いガラス転移温度を有することができ、そのことは、ポリマーの、熱及び機械的に安定し、比較的欠陥のない被覆及び薄膜への製造を容易にする。

【 0 0 5 1 】

したがって、本発明は、下記式：

【 0 0 5 2 】

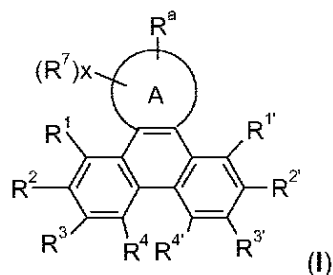
10

20

30

40

【化 5 8】



【0053】

10

〔式中、Aは、窒素、酸素及び硫黄から選択される少なくとも1個のヘテロ原子、特に1個の窒素原子と、窒素、置換窒素、酸素及び硫黄から選択される少なくとも1個の更なるヘテロ原子とを含有する、5員、6員又は7員芳香族複素環であり、

R^a 、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 $R^{1'}$ 、 $R^{2'}$ 、 $R^{3'}$ 及び $R^{4'}$ は、互いに独立して、水素、ハロゲン、特にフッ素、又は有機置換基であるか、或いは

R^a 、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 $R^{1'}$ 、 $R^{2'}$ 、 $R^{3'}$ 及び $R^{4'}$ は、可能であれば、一緒になって、場合により置換されていることができる芳香族若しくは芳香族複素環又は環系を形成し、

R^7 は、ハロゲン、特にフッ素又は有機置換基であり、ここで同じ分子における2つ以上の置換基 R^7 は、異なる意味を有してもよいが、又は一緒になって、芳香族若しくは芳香族複素環、若しくは環系を形成することができ、ここで、

20

R^a 、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 $R^{1'}$ 、 $R^{2'}$ 、 $R^{3'}$ 及び $R^{4'}$ の少なくとも1つは、基 R^{10} であり、

R^{10} は、基 $-(Sp)_{x1}-[PG]<$ であり、

Sp は、スペーサー単位であり、

PG は、重合性基から誘導される基であり、

$x1$ は、0又は1であり、そして

x は、0又は1～4の整数である〕

で示される反復単位を含むポリマーに関する。

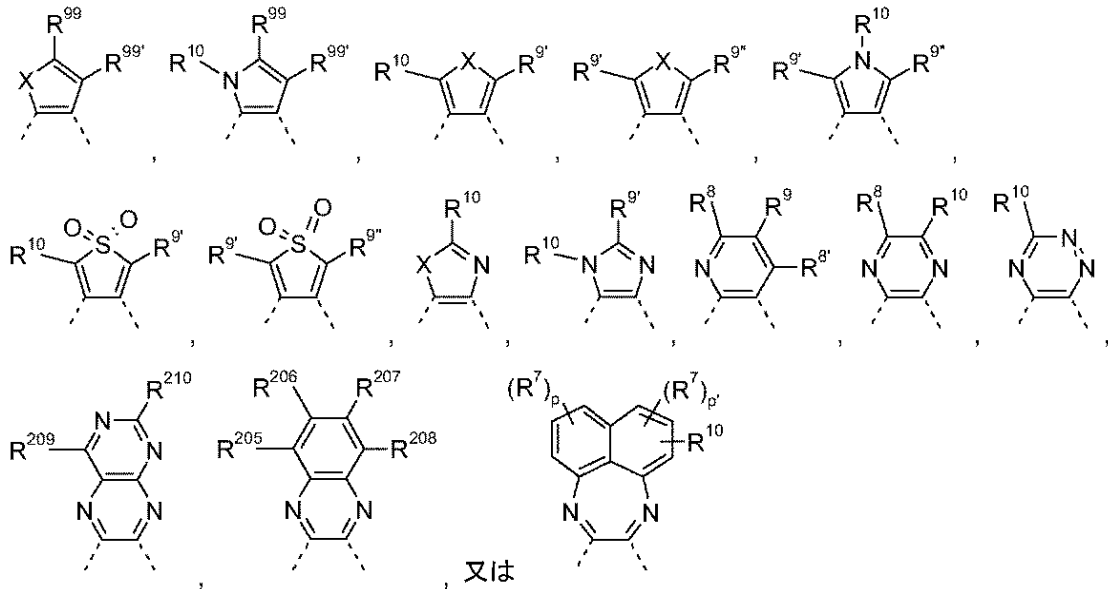
【0054】

30

Aは、窒素、酸素及び硫黄から選択される少なくとも1個のヘテロ原子を含有する5員、6員又は7員芳香族複素環であり、これは置換されていることができる及び/又は縮合芳香族若しくは芳香族複素環系の一部であることができる。Aの非限定例は、以下：

【0055】

【化 5 9】



【0056】

であり、ここで、 R^7 は、 R^8 の意味を有し、 R^8 は、 R^8 の意味を有し、 X は、 O 、 S 、 $N - R^{17}$ であり、 R^{205} 、 R^{206} 、 R^{207} 、 R^{208} 、 R^{209} 、 R^{210} 、 R^8 、 R^9 、 R^9 、 R^9 、 R^{99} 、 R^{99} 、 R^{10} 及び R^{17} は、下記に定義されているとおりであり、 p は、 0 、 1 又は 2 であり、そして点線 - - - は、ベンゼン環への結合を示す。

20

【0057】

好ましくは、 A は、 1 個の窒素原子及び窒素、酸素及び硫黄から選択される少なくとも 1 個の更なるヘテロ原子を含有する、上記の 5 員、 6 員又は 7 員芳香族複素環の 1 つである。ヘテロ原子が窒素である場合、基 = $N -$ 又は $-NR -$ 、特に $-N - R^{17}$ 又は $-NR^{10} -$ であることができ、ここで、 R は、有機置換基であり、 R^{17} 及び R^{10} は、下記に定義されているとおりである。

【0058】

本発明のポリマーは、 100 を超えるガラス転移温度を有するべきである。

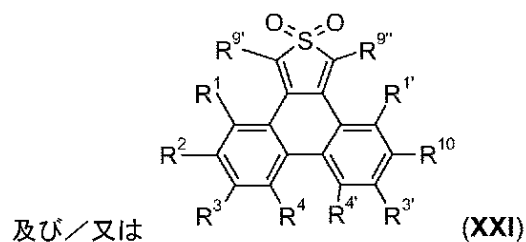
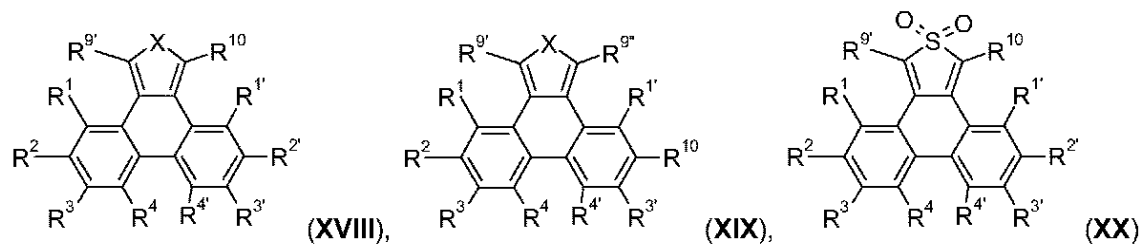
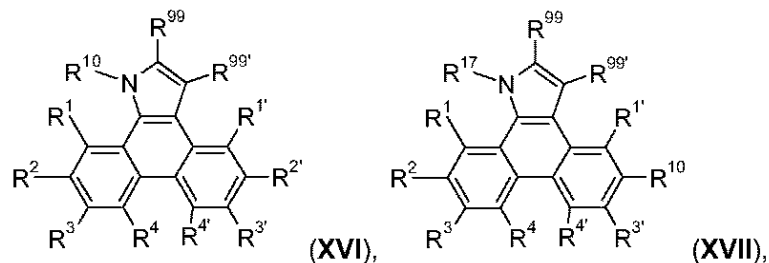
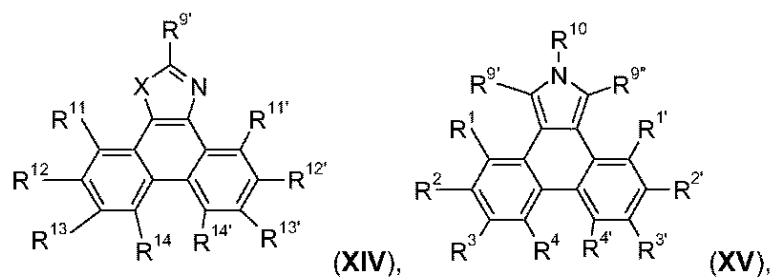
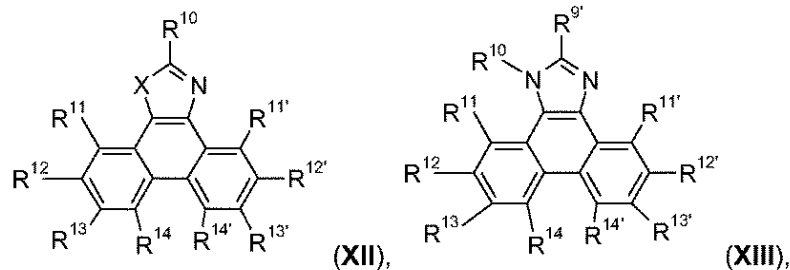
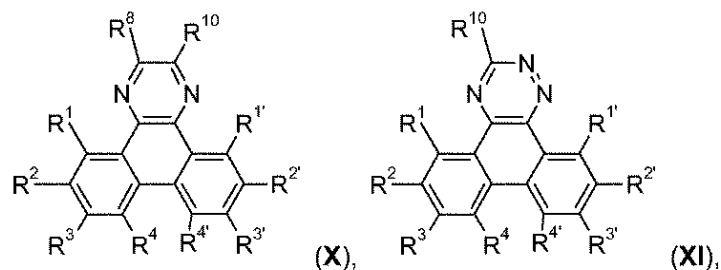
30

【0059】

好ましくは、本発明のポリマーは、下記式：

【0060】

【化 6 0】



【 0 0 6 1】

〔式中、

R^1 及び R^1 は、互いに独立して、水素、ハロゲン、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換されている及び／若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、Eで置換されている及び／若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコ

10

20

30

40

50

キシ、CN又は $-\text{CO}-\text{R}^{28}$ であり、

R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 、 R^{26} 及び R^{27} は、互いに独立して、H、ハロゲン、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{18}$ アルキル、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $\text{C}_1 \sim \text{C}_{18}$ アルキル、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $\text{C}_6 \sim \text{C}_{24}$ アリール、Gで置換されている $\text{C}_6 \sim \text{C}_{24}$ アリール、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_{20}$ ヘテロアリール、Gで置換されている $\text{C}_2 \sim \text{C}_{20}$ ヘテロアリール、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_{18}$ アルケニル、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_{18}$ アルキニル、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{18}$ アルコキシ、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $\text{C}_1 \sim \text{C}_{18}$ アルコキシ、 $\text{C}_7 \sim \text{C}_{25}$ アラルキル、CN又は $-\text{CO}-\text{R}^{28}$ であり、

R^{28} は、H、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{18}$ アルキル、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $\text{C}_1 \sim \text{C}_{18}$ アルキル、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $\text{C}_6 \sim \text{C}_{24}$ アリール、Gで置換されている $\text{C}_6 \sim \text{C}_{24}$ アリール、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_{20}$ ヘテロアリール、Gで置換されている $\text{C}_2 \sim \text{C}_{20}$ ヘテロアリール、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_{18}$ アルケニル、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_{18}$ アルキニル、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{18}$ アルコキシ、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $\text{C}_1 \sim \text{C}_{18}$ アルコキシ、 $\text{C}_7 \sim \text{C}_{25}$ アラルキル、CN又は $-\text{CO}-\text{R}^{28}$ であり、

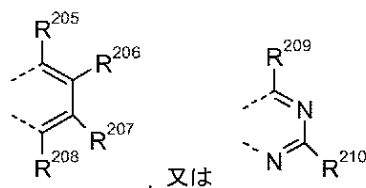
R^{29} 、 R^{30} 、 R^{31} 及び R^{32} は、H、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{18}$ アルキル、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $\text{C}_1 \sim \text{C}_{18}$ アルキル、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $\text{C}_6 \sim \text{C}_{24}$ アリール、Gで置換されている $\text{C}_6 \sim \text{C}_{24}$ アリール、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_{20}$ ヘテロアリール、Gで置換されている $\text{C}_2 \sim \text{C}_{20}$ ヘテロアリール、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_{18}$ アルケニル、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_{18}$ アルキニル、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{18}$ アルコキシ、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $\text{C}_1 \sim \text{C}_{18}$ アルコキシ、 $\text{C}_7 \sim \text{C}_{25}$ アラルキル又は $-\text{CO}-\text{R}^{28}$ であり、

R^{33} は、基 $-(\text{Sp})_{x1}-[\text{PG}]<$ であり、ここで、Spはスペーサー単位であり、PGは重合性基から誘導される基であり、 $x1$ は0又は1であるか、或いは

R^{28} 及び R^{33} は、一緒になって、下記：

【0062】

【化61】



【0063】

の基を形成し、

ここで、置換基 R^{205} 、 R^{206} 、 R^{207} 及び R^{208} の1つと、置換基 R^{209} 及び R^{210} の1つは、基 R^{33} であり、他の置換基は、互いに独立して、H、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{18}$ アルキル、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $\text{C}_1 \sim \text{C}_{18}$ アルキル、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{18}$ アルコキシ、又はEで置換されている及び/若しくはDで中断されている $\text{C}_1 \sim \text{C}_{18}$ アルコキシであり、

R^{34} 及び R^{35} は、互いに独立して、水素、ハロゲン、特にフッ素、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{18}$ アルキル、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $\text{C}_1 \sim \text{C}_{18}$ アルキル、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_{18}$ アルケニル、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_{18}$ アルキニル、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{18}$ アルコキシ、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $\text{C}_1 \sim \text{C}_{18}$ アルコキシ、CN又は $-\text{CO}-\text{R}^{28}$ であり、

R^{36} 、 R^{37} 、 R^{38} 、 R^{39} 、 R^{40} 及び R^{41} は、互いに独立して、H、ハロゲン、特にフッ素、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{18}$ アルキル、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $\text{C}_1 \sim \text{C}_{18}$ アルキル、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $\text{C}_6 \sim \text{C}_{24}$ アリール、Gで置換されている $\text{C}_6 \sim \text{C}_{24}$ アリール、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_{20}$ ヘテロアリール、Gで置換されている $\text{C}_2 \sim \text{C}_{20}$ ヘテロアリール、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_{18}$ アルケニル、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_{18}$ アルキニル、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{18}$ アルコキシ、Eで置換されている及び/若しくはDで中断さ

れている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、 CN 又は $-CO-R^{28}$ であり、

X は、 O 、 S 又は NR^{17} であり、ここで R^{17} は、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 E で置換されている及び／若しくは D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $C_6 \sim C_{24}$ 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、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル又は $-CO-R^{28}$ であるか、或いは

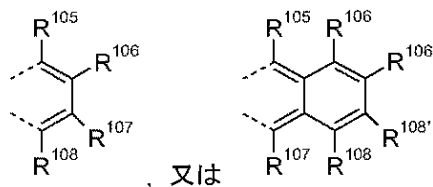
互いに隣接している、置換基 R^1 、 R^2 、 R^3 及び R^4 ； R^1 、 R^2 、 R^3 及び R^4 ； R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 及び R^{14} ； R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 及び R^{14}

10

の2つは、一緒になって、下記：

【0064】

【化62】



【0065】

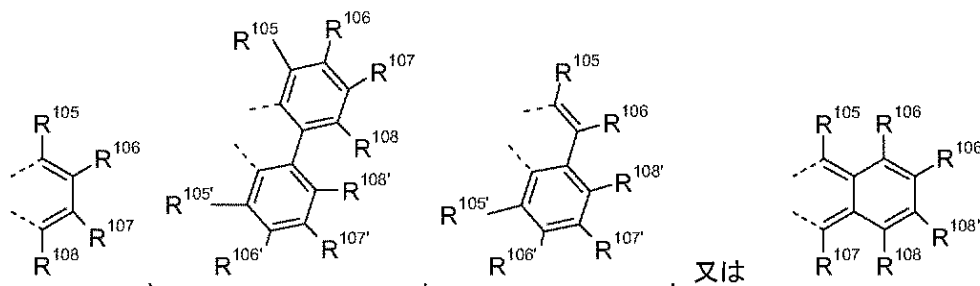
20

の基を形成するか、或いは

互いに隣接している2つの置換基 R^{99} 及び R^{99} は、一緒になって、下記：

【0066】

【化63】



30

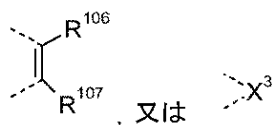
【0067】

の基を形成するか、或いは

互いに隣接している2つの置換基 R^4 及び R^4 、並びに／又は R^{14} 及び R^{14} は、一緒になって、下記：

【0068】

【化64】



40

【0069】

の基を形成し、

ここで、 X^3 は、 O 、 S 、 $C(R^{119})(R^{120})$ 又は NR^{17} であり、 R^{17} は、上記で定義されたとおりであり、 R^{105} 、 R^{106} 、 R^{107} 、 R^{108} 、 R^{105} 、 R^{106} 、 R^{107} 及び R^{108} は、互いに独立して、 H 、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 E で置換されている及び／若しくは D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、又は E で置換されている及び／若しくは D で中断されている C_1

50

～C₁₈ アルコキシであり、

R¹¹⁹ 及び R¹²⁰ は、互いに独立して、H、C₁～C₁₈ アルキル、E で置換されている及び/若しくは D で中断されている C₁～C₁₈ アルキル、C₆～C₂₄ アリール、G で置換されている C₆～C₂₄ アリール、C₂～C₂₀ ヘテロアリール、G で置換されている C₂～C₂₀ ヘテロアリール、C₂～C₁₈ アルケニル、C₂～C₁₈ アルキニル、C₁～C₁₈ アルコキシ、E で置換されている及び/若しくは D で中断されている C₁～C₁₈ アルコキシ、又は C₇～C₂₅ アラルキルであるか、或いは

R¹¹⁹ 及び R¹²⁰ は、一緒になって、場合により C₁～C₁₈ アルキル、E で置換されている及び/若しくは D で中断されている C₁～C₁₈ アルキル、C₆～C₂₄ アリール、G で置換されている C₆～C₂₄ アリール、C₂～C₂₀ ヘテロアリール、G で置換されている C₂～C₂₀ ヘテロアリール、C₂～C₁₈ アルケニル、C₂～C₁₈ アルキニル、C₁～C₁₈ アルコキシ、E で置換されている及び/若しくは D で中断されている C₁～C₁₈ アルコキシ、C₇～C₂₅ アラルキル又は -C(=O)-R¹²⁷ で置換されていることができる 5 員又は 6 員環を形成するか、或いは

R¹¹⁹ 及び R¹²⁰ は、一緒になって、式：=C R¹²¹ R¹²² の基を形成し、ここで、

R¹²¹ 及び R¹²² は、互いに独立して、H、C₁～C₁₈ アルキル、E で置換されている及び/若しくは D で中断されている C₁～C₁₈ アルキル、C₆～C₂₄ アリール、G で置換されている C₆～C₂₄ アリール、又は C₂～C₂₀ ヘテロアリール、又は G で置換されている C₂～C₂₀ ヘテロアリールであり、

R¹²⁷ は、H；C₆～C₁₈ アリール；C₁～C₁₈ アルキル若しくは C₁～C₁₈ アルコキシで置換されている C₆～C₁₈ アリール；C₁～C₁₈ アルキル；又は -O- で中断されている C₁～C₁₈ アルキルであり、

D は、-CO-；-COO-；-S-；-SO-；-SO₂-；-O-；-NR²⁵-；-SiR³⁰R³¹-；-POR³²-；-CR²³=CR²⁴-；又は -C-C- であり、そして

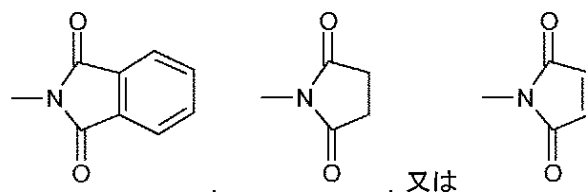
E は、-OR²⁹；-SR²⁹；-NR²⁵R²⁶；-COR²⁸；-COOR²⁷；-CONR²⁵R²⁶；-CN；又はハロゲンであり、G は、E、C₁～C₁₈ アルキル、D で中断されている C₁～C₁₈ アルキル、C₁～C₁₈ ペルフルオロアルキル、又は E で置換されている及び/若しくは D で中断されている C₁～C₁₈ アルコキシであり、

R²³、R²⁴、R²⁵ 及び R²⁶ は、互いに独立して、H；C₆～C₁₈ アリール；C₁～C₁₈ アルキル若しくは C₁～C₁₈ アルコキシで置換されている C₆～C₁₈ アリール；C₁～C₁₈ アルキル；又は -O- で中断されている C₁～C₁₈ アルキルであるか；或いは

R²⁵ 及び R²⁶ は、一緒になって、5 員又は 6 員環、特に下記：

【0070】

【化65】



【0071】

を形成し、

R²⁷ 及び R²⁸ は、互いに独立して、H；C₆～C₁₈ アリール；C₁～C₁₈ アルキル若しくは C₁～C₁₈ アルコキシで置換されている C₆～C₁₈ アリール；C₁～C₁₈ アルキル；又は -O- で中断されている C₁～C₁₈ アルキルであり、

R²⁹ は、H；C₆～C₁₈ アリール；C₁～C₁₈ アルキル若しくは C₁～C₁₈ ア

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

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

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

R^9 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{12} 、 R^{13} 及び R^{14} は、基 - (Sp) \times_1 - HEI であり、ここで、

Sp は、スペーサー単位であり、

HEI は、ポリマーの正孔注入若しくは正孔輸送特性を増加する基 (HEI^I) であるか、又は、ポリマーの電子注入若しくは電子輸送特性を増加する基 (HEI^{II}) であり、

10

\times_1 は、0 又は 1 であるが、但し、式 XIV の化合物の場合では、置換基 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{12} 及び R^{13} の少なくとも 1 つが基 R^{10} である]

で示される反復単位を含む。

【0072】

R^9 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{12} 、 R^{13} 及び R^{14} は、基 - (Sp) \times_1 - HEI であることができ、ここで、Sp、HEI 及び \times_1 は、上記で定義されたとおりである。

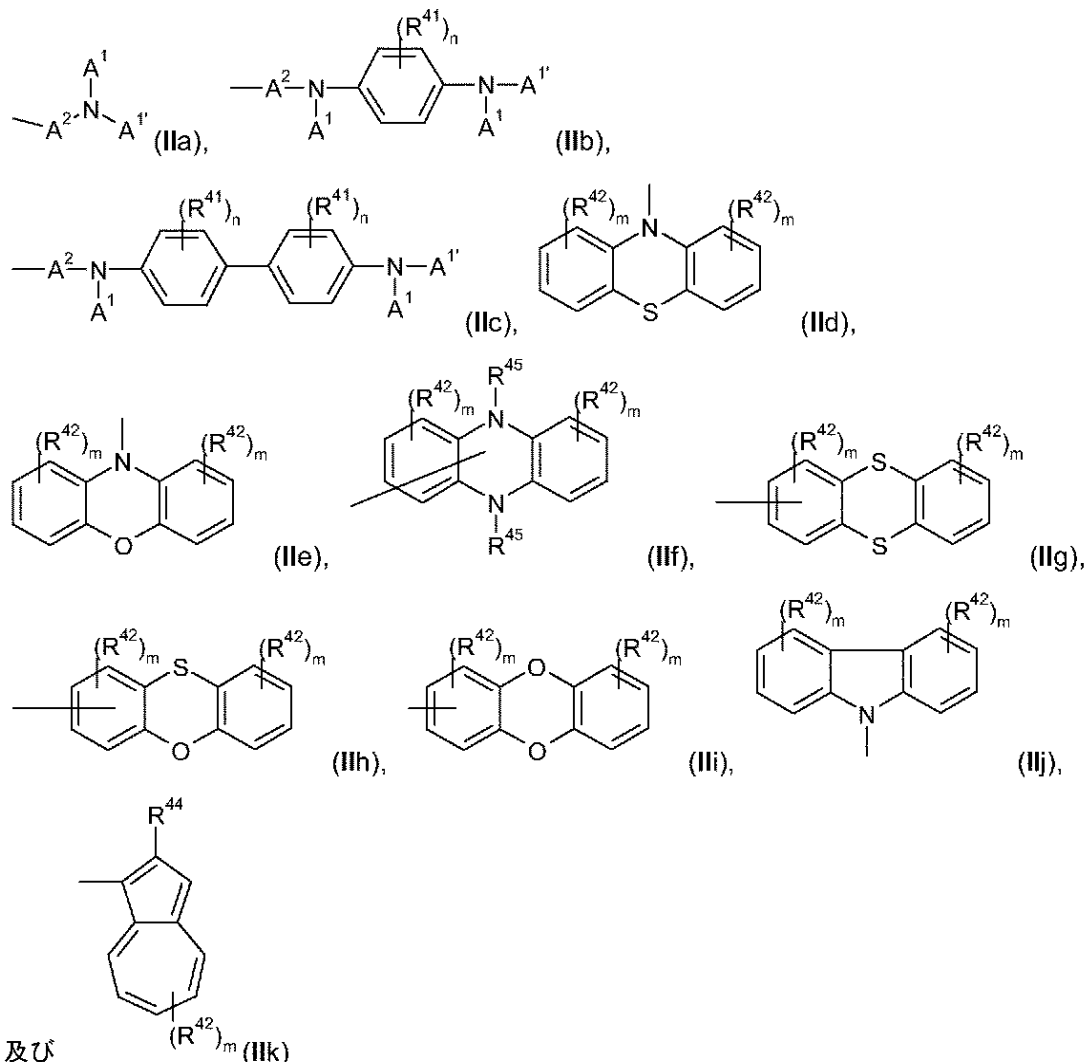
【0073】

ポリマーの正孔注入又は正孔輸送特性を増加する好ましい HEI^I は、下記：

20

【0074】

【化 6 6】



【0075】

であり、ここで

R^{41} は、それぞれの場合に同一又は異なっていることができ、 C_1 、F、CN、 $N(R^{45})_2$ 、 $C_1 \sim C_{25}$ アルキル基、 $C_4 \sim C_{18}$ シクロアルキル基、 $C_1 \sim C_{25}$ アルコキシ基（互いに近接していない1個以上の炭素原子を $-NR^{45}-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(=O)-O-$ 若しくは $-O-C(=O)-O-$ に代えることができる、及び/又は1個以上の水素原子をFに代えることができる）、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール基、又は $C_6 \sim C_{24}$ アリールオキシ基（1個以上の炭素原子をO、S若しくはNに代えることができる及び/又は1つ以上の非芳香族基 R^{41} で置換することができる）であるか、或いは2つ以上の R^{41} は、環系を形成し；

R^{42} は、それぞれの場合に同一又は異なっていることができ、CN、 $C_1 \sim C_{25}$ アルキル基、 $C_4 \sim C_{18}$ シクロアルキル基、 $C_1 \sim C_{25}$ アルコキシ基（互いに近接していない1個以上の炭素原子を $-NR^{45}-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(=O)-O-$ 若しくは $-O-C(=O)-O-$ に代えることができる、及び/又は1個以上の水素原子をFに代えることができる）、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール基、又は $C_6 \sim C_{24}$ アリールオキシ基（1個以上の炭素原子をO、S若しくはNに代えることができる及び/又は1つ以上の非芳香族基 R^{41} で置換することができる）であるか、或いは

2つ以上の R^{41} は、環系を形成し；

R^{44} は、それぞれの場合に同一又は異なっていることができ、水素原子、 $C_1 \sim C_{25}$ アルキル基、 $C_4 \sim C_{18}$ シクロアルキル基、 $C_1 \sim C_{25}$ アルコキシ基（互いに近接

10

20

30

40

50

していない1個以上の炭素原子を $-NR^{45}-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(=O)-O-$ 若しくは $-O-C(=O)-O-$ に代えることができる、及び/又は1個以上の水素原子をFに代えることができる)、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール基、又は $C_6 \sim C_{24}$ アリールオキシ基(1個以上の炭素原子をO、S若しくはNに代えることができる及び/又は1つ以上の非芳香族基 R^{41} で置換することができる)、又はCNであるか、或いは

互いに近接している2つ以上の R^{44} は、環を形成し;

R^{45} は、H、 $C_1 \sim C_{25}$ アルキル基、 $C_4 \sim C_{18}$ シクロアルキル基、 $C_1 \sim C_{25}$ アルコキシ基(互いに近接していない1個以上の炭素原子を $-NR^{45}-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(=O)-O-$ 若しくは $-O-C(=O)-O-$ に代えることができる、及び/又は1個以上の水素原子をFに代えることができる)、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール基、又は $C_6 \sim C_{24}$ アリールオキシ基(1個以上の炭素原子をO、S若しくはNに代えることができる及び/又は1つ以上の非芳香族基 R^{41} で置換することができる)であり;

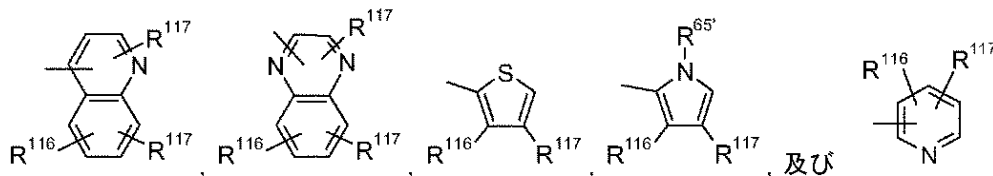
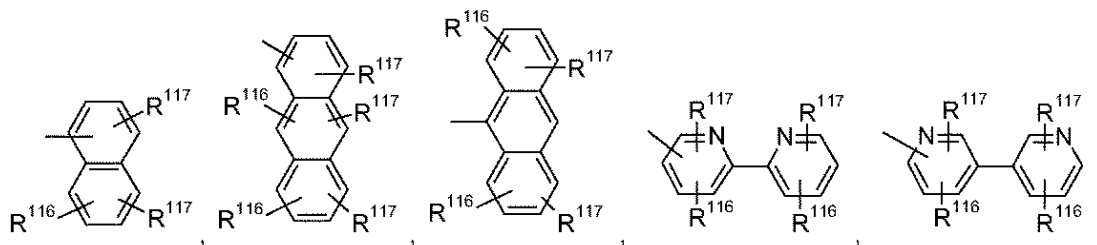
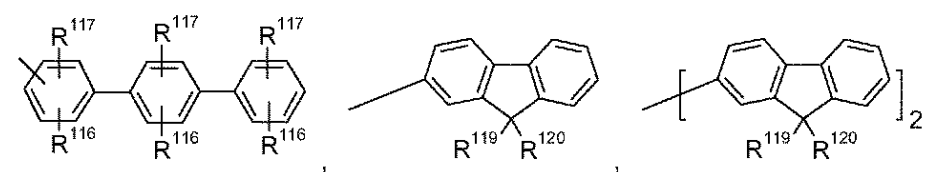
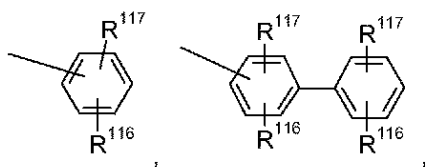
mは、それぞれの場合に同一又は異なっていることができ、0、1、2又は3、特に0、1又は2、とりわけ0又は1であり;

nは、それぞれの場合に同一又は異なっていることができ、0、1、2又は3、特に0、1又は2、とりわけ0又は1であり;

A^1 及び A^1 は、互いに独立して、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール基、1つ以上の非芳香族基 R^{41} 又は NO_2 で置換されていることができる $C_2 \sim C_{30}$ ヘテロアリール基、特に、1つ以上の非芳香族基 R^{41} で置換されていることができるフェニル、ナフチル、アントリル、ピフェニル、2-フルオレニル、フェナントリル又はペリレニルであり、例えば

【0076】

【化67】



【0077】

であり、

A^2 は、場合により置換されていることができる、 $C_6 \sim C_{30}$ アリーレン基又は $C_2 \sim C_{24}$ ヘテロアリーレン基、特に下記:

10

20

30

40

50

【化 6 8】



30

40

50

R^{119} 及び R^{120} は、一緒になって、場合により $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、E で置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ 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、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル又は $-C(=O)-R^{127}$ で置換されていることができる5員又は6員環を形成し、

R^{126} 及び R^{127} は、互いに独立して、H； $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル若しくは $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル；又は $-O-$ で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキルであり、

Dは、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、 $-S-$ 、 $-SO-$ 、 $-SO_2-$ 、 $-O-$ 、 $-NR^{65}-$ 、 $-SiR^{70}R^{71}-$ 、 $-POR^{72}-$ 、 $-CR^{63}=CR^{64}-$ 、又は $-C-C-$ であり、

Eは、 $-OR^{69}$ 、 $-SR^{69}$ 、 $-NR^{65}R^{66}$ 、 $-COR^{68}$ 、 $-COOR^{67}$ 、 $-CONR^{65}R^{66}$ 、 $-CN$ 、又はハロゲンであり、

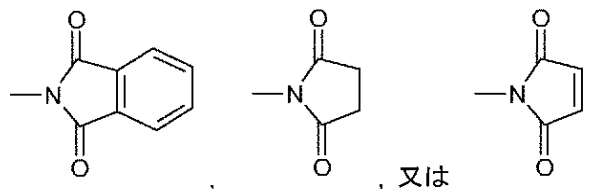
Gは、E又は $C_1 \sim C_{18}$ アルキルであり、

R^{63} 、 R^{64} 、 R^{65} 及び R^{66} は、互いに独立して、H； $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキルか、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル；又は $-O-$ で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキルであるか；或いは

R^{65} 及び R^{66} は、一緒になって、5員又は6員環、特に下記：

【0080】

【化69】



【0081】

を形成し、

R^{67} 及び R^{68} は、互いに独立して、H； $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル若しくは $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル；又は $-O-$ で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキルであり、

R^{69} は、H； $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキルか、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル；又は $-O-$ で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキルであり、

R^{70} 及び R^{71} は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール、又は $C_1 \sim C_{18}$ アルキルで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリールであり、そして

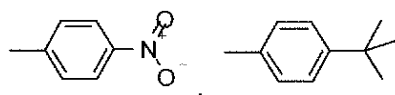
R^{72} は、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール、又は $C_1 \sim C_{18}$ アルキルで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリールである。

【0082】

A^1 は、好ましくは、 $C_1 \sim C_4$ アルキル若しくは NO_2 で置換されている、フェニル基、特に下記：

【0083】

【化70】



【0084】

であるか、又はアントリル基、特にアントラ - 2 - イル基である。

【0085】

好ましくは、 R^{116} 及び R^{117} は、互いに独立して、H、 $C_1 \sim C_{12}$ アルキル、例えばメチル、エチル、n - プロピル、イソ - プロピル、n - ブチル、イソブチル、sec - ブチル、t - ブチル、2 - メチルブチル、n - ペンチル、イソペンチル、n - ヘキシル、2 - エチルヘキシル又は n - ヘプチル、E で置換されている及び / 若しくは D で中断されている $C_1 \sim C_{12}$ アルキル、例えば - CH_2OCH_3 、- $CH_2OCH_2CH_3$ 、- $CH_2OCH_2CH_2OCH_3$ 又は - $CH_2OCH_2CH_2OCH_2CH_3$ 、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール、例えばフェニル、ナフチル又はビフェニル、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、例えばシクロヘキシル、G で置換されている $C_6 \sim C_{14}$ アリール、例えば - $C_6H_4OCH_3$ 、- $C_6H_4OCH_2CH_3$ 、- $C_6H_3(OCH_3)_2$ 若しくは - $C_6H_3(OCH_2CH_3)_2$ 、- $C_6H_4CH_3$ 、- $C_6H_3(CH_3)_2$ 、- $C_6H_2(CH_3)_3$ 又は - C_6H_4tBu である。

【0086】

R^{65} は、好ましくは、H、 $C_1 \sim C_{12}$ アルキル、例えばメチル、エチル、n - プロピル、イソ - プロピル、n - ブチル、イソブチル、sec - ブチル、t - ブチル、2 - メチルブチル、n - ペンチル、イソペンチル、n - ヘキシル、2 - エチルヘキシル、n - ヘプチル、又は $C_6 \sim C_{14}$ アリール、例えばフェニル、ナフチル若しくはビフェニルであり、これは場合により置換されていることができる。

【0087】

好ましくは、 R^{119} 及び R^{120} は、互いに独立して、H、 $C_1 \sim C_{12}$ アルキル、例えばメチル、エチル、n - プロピル、イソ - プロピル、n - ブチル、sec - ブチル、ヘキシル、オクチル又は 2 - エチル - ヘキシル、E で置換されている及び / 若しくは D で中断されている $C_1 \sim C_{12}$ アルキル、例えば - $CH_2(OCH_2CH_2)_wOCH_3$ (ここで、 $w = 1, 2, 3$ 又は 4 である)、 $C_6 \sim C_{14}$ アリール、例えばフェニル、ナフチル又はビフェニル、G で置換されている $C_6 \sim C_{14}$ アリール、例えば - $C_6H_4OCH_3$ 、- $C_6H_4OCH_2CH_3$ 、- $C_6H_3(OCH_3)_2$ 、- $C_6H_3(OCH_2CH_3)_2$ 、- $C_6H_4CH_3$ 、- $C_6H_3(CH_3)_2$ 、- $C_6H_2(CH_3)_3$ 又は - C_6H_4tBu であるか、或いは R^9 及び R^{10} は、一緒になって、4 員 ~ 8 員環、特に 5 員又は 6 員環、例えばシクロヘキシル又はシクロペンチルを形成し、これは場合により $C_1 \sim C_8$ アルキルで置換されていることができる。

【0088】

D は、好ましくは、- CO -、- COO -、- S -、- SO -、- SO₂ -、- O -、- NR⁶⁵ - であり、ここで R^{65} は、 $C_1 \sim C_{12}$ アルキル、例えばメチル、エチル、n - プロピル、イソ - プロピル、n - ブチル、イソブチル若しくは sec - ブチル、又は $C_6 \sim C_{14}$ アリール、例えばフェニル、ナフチル若しくはビフェニルである。

【0089】

E は、好ましくは、- OR⁶⁹；- SR⁶⁹；- NR⁶⁵R⁶⁵；- COR⁶⁸；- COOR⁶⁷；- CONR⁶⁵R⁶⁵；又は - CN であり；ここで R^{65} 、 R^{67} 、 R^{68} 及び R^{69} は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{12}$ アルキル、例えばメチル、エチル、n - プロピル、イソ - プロピル、n - ブチル、イソブチル、sec - ブチル、ヘキシル、オクチル若しくは 2 - エチル - ヘキシル、又は $C_6 \sim C_{14}$ アリール、例えばフェニル、ナフチル若しくはビフェニルである。

【0090】

G は、E と同じ選択肢を有するか、又は $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、特に $C_1 \sim C_{12}$ アルキル、例えばメチル、エチル、n - プロピル、イソ - プロピル、n - ブチル、イソブチル、sec - ブチル、ヘキシル、オクチル若しくは 2 - エチルヘキシルである。

【0091】

ポリマーの電子注入若しくは電子輸送特性を増加する基 HEI^{I I} の好ましい単位は、下記：

10

20

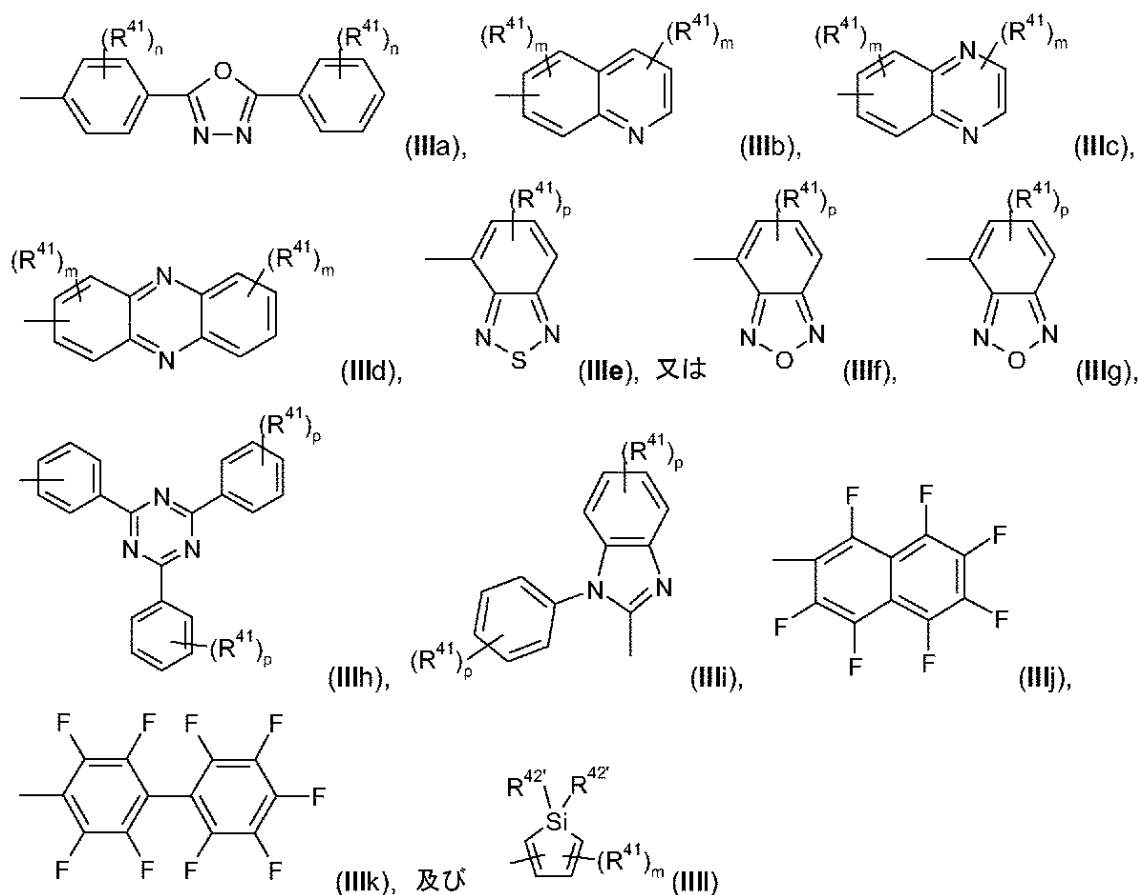
30

40

50

【 0 0 9 2 】

【 化 7 1 】



10

20

【 0 0 9 3 】

であり、ここで、 R^{41} 及び m 及び n は、上記で定義されたとおりであり、 p は、0、1 又は 2、特に 0 又は 1 であり、 R^{42} は、H、又は R^{42} である。基 III の上記の単位のうち、式 III a、III i、III j 及び III k の単位が最も好ましい。

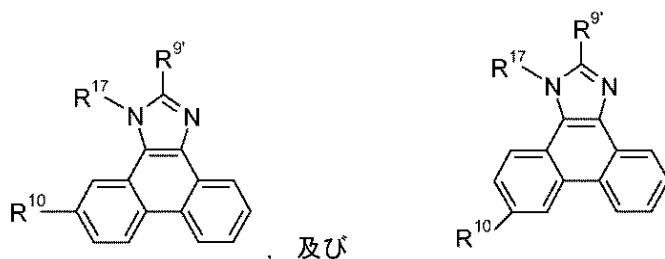
30

【 0 0 9 4 】

式 XIV の化合物の例は下記：

【 0 0 9 5 】

【 化 7 2 】



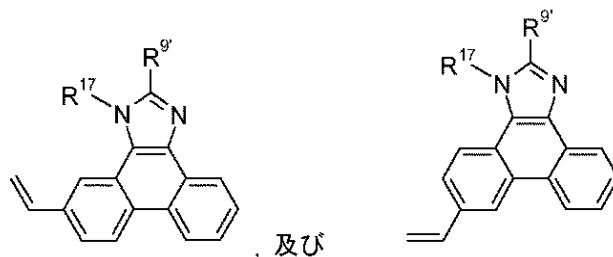
40

【 0 0 9 6 】

であり、ここで R^{10} 、 R^{17} 及び R^9 は、上記で定義されたとおりであり、例えば下記：

【 0 0 9 7 】

【化 7 3】



【 0 0 9 8 】

であり、ここで R^{17} 及び R^9 は、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキルである。

10

【 0 0 9 9 】

本発明の一つの実施態様において、 R^1 及び R^1 が、水素であり、

R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^2 、 R^3 及び R^4 が、互いに独立して、H、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Dで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、Dで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ又は $C_7 \sim C_{25}$ アラルキルであり、

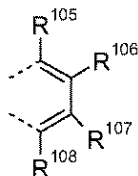
R^8 が、H、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Dで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、又はDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシであるか、或いは

互いに隣接している置換基 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^1 、 R^2 、 R^3 及び R^4 の2つが、一緒になって、下記：

20

【 0 1 0 0 】

【化 7 4】



【 0 1 0 1 】

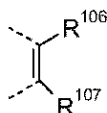
の基を形成するか、或いは

30

互いに隣接している2つの置換基 R^4 及び R^4 が、一緒になって、下記：

【 0 1 0 2 】

【化 7 5】



【 0 1 0 3 】

の基を形成し、

40

ここで、 R^{105} 、 R^{106} 、 R^{107} 及び $-R^{108}$ が、互いに独立して、H又は $C_1 \sim C_8$ アルキルであり、

R^{10} が、基 $-(Sp)_x- [PG]$ であり、ここで、Spがスペーサー単位であり、PGが重合性基から誘導される基であり、xが0又は1であり、

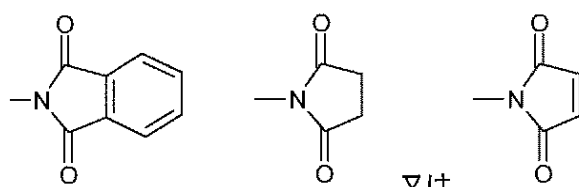
Dが、 $-CO-$ ； $-COO-$ ； $-S-$ ； $-SO-$ ； $-SO_2-$ ； $-O-$ ； $-NR^{25}-$ ； $-CR^{23}=CR^{24}-$ ；又は $-C-C-$ であり、

R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 及び R^{26} が、互いに独立して、H： $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_8$ アルキル若しくは $C_1 \sim C_8$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_8$ アルキル；又は $-O-$ で中断されている $C_1 \sim C_8$ アルキルであるか、或いは R^{25} 及び R^{26} が、一緒になって、5員又は6員環、特に下記：

50

【 0 1 0 4 】

【 化 7 6 】



【 0 1 0 5 】

10

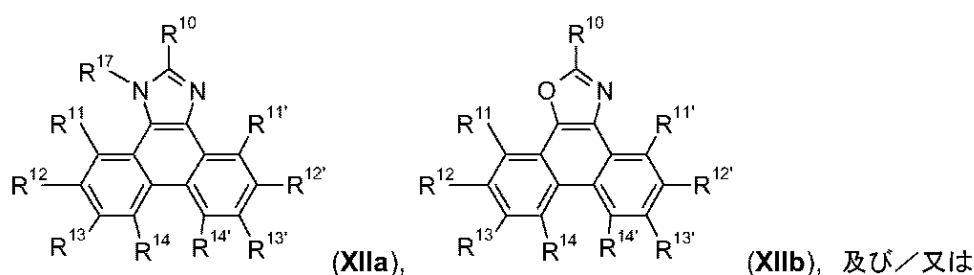
を形成する

式 X 又は X I の反復単位を含むポリマーが好ましいか、或いは

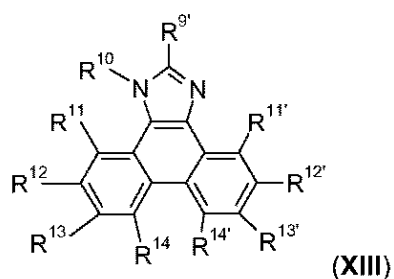
下記式：

【 0 1 0 6 】

【 化 7 7 】



20



30

【 0 1 0 7 】

〔 式中、

R^9 は、H、Gで置換されていることができる $C_6 \sim C_{18}$ アリール、Gで置換されていることができる $C_2 \sim C_{18}$ ヘテロアリール、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Dで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、又はEで置換されている及び／若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシであり、

R^{11} 及び $R^{11'}$ は、水素であり、

R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 $R^{12'}$ 、 $R^{13'}$ 及び $R^{14'}$ は、水素であり、

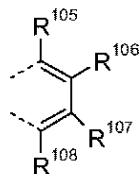
R^{17} は、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル若しくは $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール、； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル；又は-O-で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキルであるか、或いは

40

互いに隣接している置換基 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 $R^{11'}$ 、 $R^{12'}$ 、 $R^{13'}$ 及び $R^{14'}$ の2つは、一緒になって、下記：

【 0 1 0 8 】

【化 7 8】



【0109】

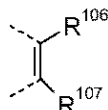
の基を形成するか、或いは

互いに隣接している 2 つの置換基 R^{104} 及び R^{104} は、一緒になって、下記：

【0110】

10

【化 7 9】



【0111】

の基を形成し、

ここで、 R^{105} 、 R^{106} 、 R^{107} 、 R^{108} 、D、E 及び R^{10} は、上記で定義されたとおりである]

で示される反復単位を含むポリマーが好ましい。

20

【0112】

加えて、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{12} 、 R^{13} 及び R^{14} は、基 HEI^I 及び HEI^{II} から選択することができる。

【0113】

Sp は、 $-Ar-$ 、 $-ArY-$ 、 $-YAr-$ 、 $-YAr(CR^{47}R^{48})_n-$ 、 $-(CR^{47}R^{48})_n-$ 、 $-(YCR^{47}R^{48})_n-$ 又は $-(CR^{47}R^{48}Y)_n-$ から選択され、ここで、

Y は、 NR^5 、 O 、 S 、 $C=O$ 、 $C(=O)O$ であり、ここで R^5 は、 H ； $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル若しくは $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール、； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル；又は $-O-$ で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキルであり；

30

R^{47} 及び R^{48} は、互いに独立して、水素、フッ素又は $C_1 \sim C_{20}$ アルキルであり、

n は、1～20 の整数であり、

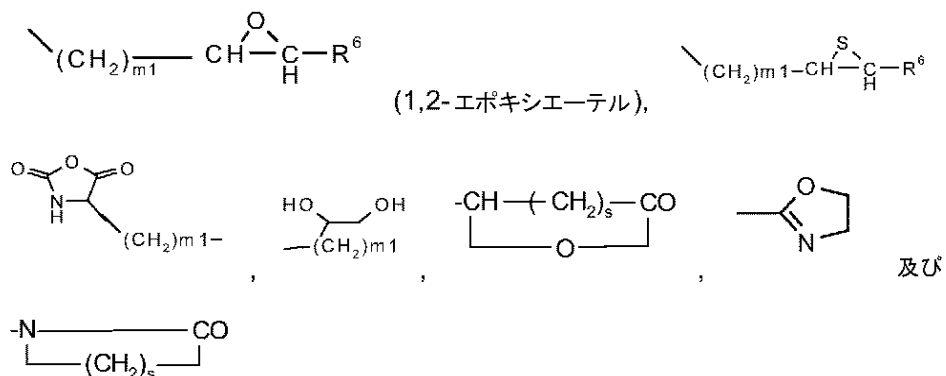
Ar は、場合により置換されていることができる、アルキレン、シクロアルキレン、アリーレン、アラルキレン又はヘテロアリーレンである。

PG は、重合性基から誘導される基であり、好ましくは、 $-C(R^{44})=CH_2$ 、 $-NHC(O)-C(R^{45})=CH_2$ 、 $-OCH_2CH_2OC(O)-C(R^{45})=CH_2$ 、 $-OC(O)-C(R^{45})=CH_2$ 、 $-C(O)-C(R^{46})=CH_2$ 、 $-C-C-$ 、 $-N-C-$ 、 $-O-CH(CH_2CH_2CH=CH_2)_2$ ； $C_5 \sim C_8$ シクロアルケニル、ビスシクロアルケニル（5～30 個の炭素原子を有する置換又は非置換ビスシクロアルケニル基）、下記：

40

【0114】

【化 8 0】



10

【 0 1 1 5】

から選択され、

ここで、

s は、1 ~ 6 の整数であり、m 1 は、1 ~ 6 の整数であり、

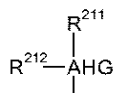
R⁶ は、水素又は C₁ ~ C₂₀ アルキルであり、R⁴⁴ は、水素又は C₁ ~ C₄ アルキル又はハロゲンであり、R⁴⁵ は、水素、C₁ ~ C₄ アルキル又はハロゲンであり、そしてR⁴⁶ は、水素、C₁ ~ C₄ アルキル又は C₆ ~ C₁₂ アリールであるか、或いは

PG は、下記：

20

【 0 1 1 6】

【化 8 1】



【 0 1 1 7】

の重合性基から誘導される基であり、

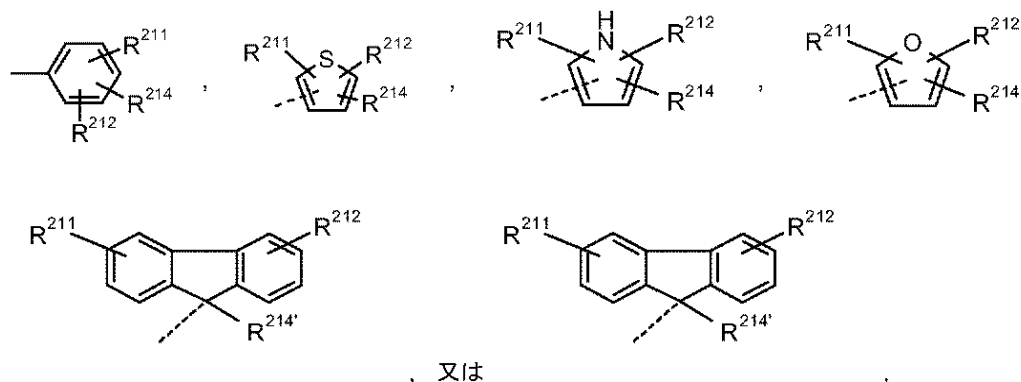
ここで、

AHGは、場合により置換されていることができる芳香族又は芳香族複素環式残基であり、例えば下記：

30

【 0 1 1 8】

【化 8 2】



40

【 0 1 1 9】

であり、

R²¹¹ 及び R²¹² は、互いに独立して、ハロゲン、-C≡CH、ボロン酸若しくはボロン酸エステル、-Mg-Hal、-Zn-Hal、-Sn(R²¹³)₃ であり、ここで Hal はハロゲンであり、R²¹³ は C₁ ~ C₁₈ アルキルであり、R²¹⁴ 及び R^{214'} は、互いに独立して、H、C₁ ~ C₁₈ アルキル、D で中断さ

50

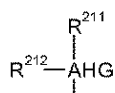
れている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、Dで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ又は $C_7 \sim C_{25}$ アラルキルである。

【0120】

PG が、下記：

【0121】

【化83】



10

【0122】

の重合性基から誘導される基である場合、以下のプロセスをポリマーの製造のために使用することができる。

【0123】

ジハロ - 官能反応体のみを含む重合プロセスは、ニッケルカップリング反応を使用して実施することができる。一つのそのようなカップリング反応は、ColonらによりJ. Pol. Sci., Part A, Polymer Chemistry Edition 28 (1990) 367において、ColonらによりJ. Org. Chem. 51 (1986) 2627において記載された。反応は、典型的には、極性で非プロトン性の溶媒（例えば、ジメチルアセトアミド）中、触媒量のニッケル塩、相当量のトリフェニルホスフィン及び多量の過剰亜鉛末を用いて実施される。このプロセスの変形が、Lloyd 20
aらによりBull. Chem. Soc. Jpn, 63 (1990) 80において記載され、そこでは、有機可溶性ヨウ化物が促進剤として使用された。

【0124】

別のニッケルカップリング反応が、YamamotoによりProgress in Polymer Science 17 (1992)1153において記載され、そこでは、ジハロ芳香族化合物の混合物が、過剰量のニッケル（1, 5 - シクロオクタンジエン）錯体により不活性溶媒中で処理された。全てのニッケルカップリング反応を、2つ以上の芳香族ジハロゲン化合物の反応体混合物に適用すると、実質的にランダムコポリマーを生じる。そのような重合反応は、少量の水を重合反応混合物に加えることにより停止してもよく、それにより末端ハロゲン基を水素基に代える。あるいは、単官能ハロゲン化アリールをそのような反応に連鎖停止剤として使用してもよく、それにより末端アリール基の形成がもたらされる。 30

【0125】

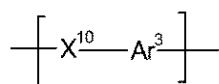
ニッケルカップリング重合は、実質的に、式Iの単位及び他のモノマーから誘導される単位を含むホモポリマー又はランダムコポリマーを生じる。

【0126】

下記式：

【0127】

【化84】



(VII)

40

【0128】

のホモポリマーを、例えばスズキ反応により得ることができ、ここで、 X^{10} は、式I、特にX、XI、XIII及びXIVの反復単位であり；

Ar^3 、は下記の基：

基II：ポリマーの正孔注入又は正孔輸送特性を増加する単位；

基III：ポリマーの電子注入又は電子輸送特性を増加する単位；

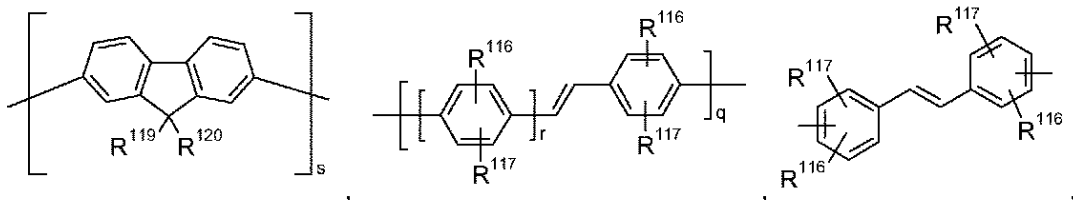
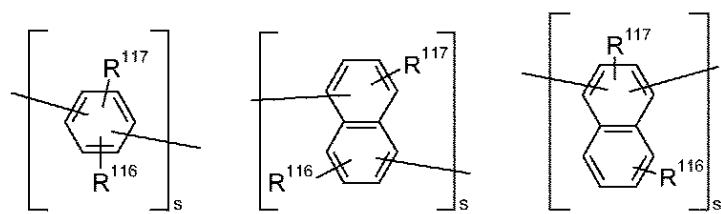
基IV：基IIとIIIの単位の組み合わせである単位；

基V：

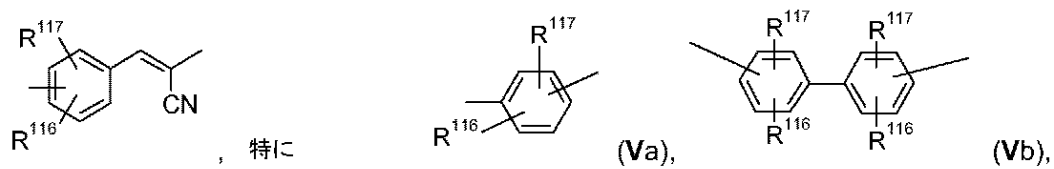
50

【 0 1 2 9 】

【 化 8 5 】



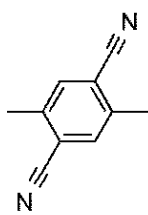
10



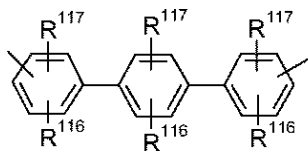
, 特に

(Va),

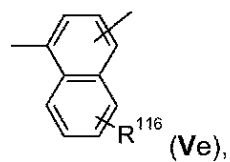
(Vb),



(Vc), 又は

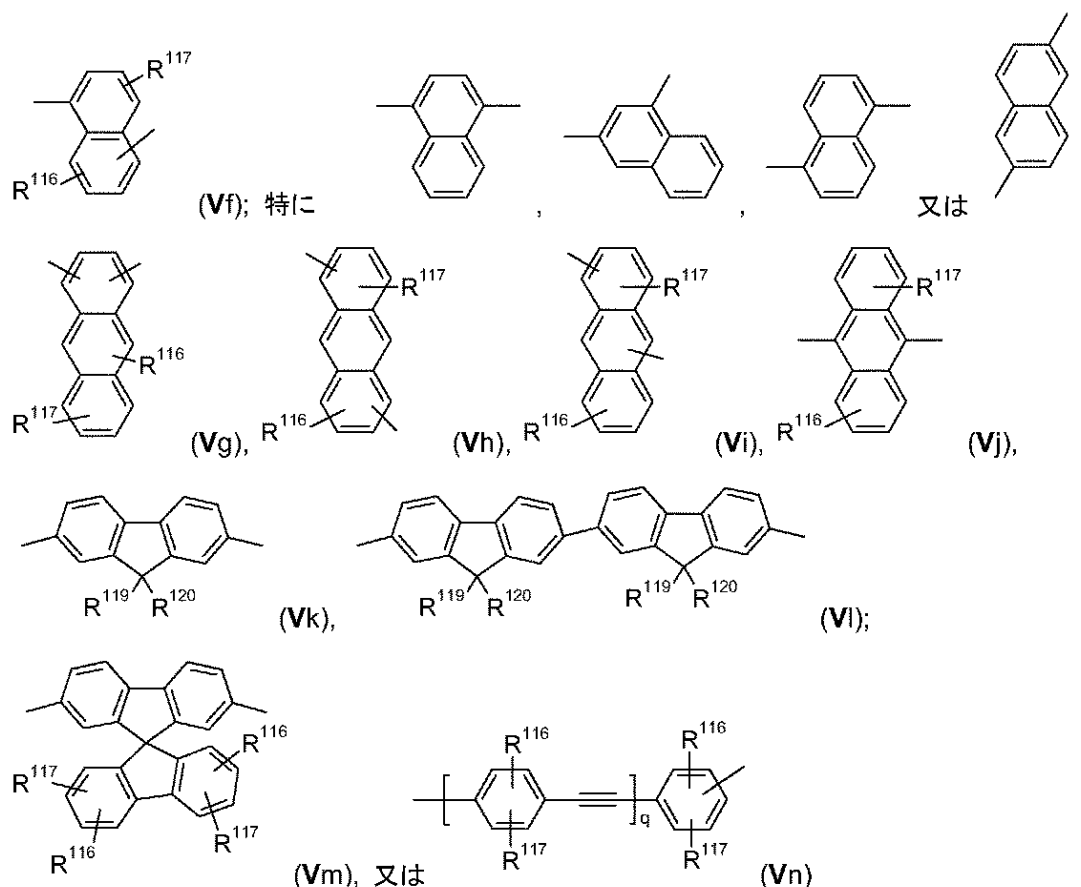


(Vd),



(Ve),

20



【 0 1 3 0 】

から選択され、

ここで、

r は、1 ~ 10、特に1、2又は3の整数であり、

q は、1 ~ 10、特に1、2又は3の整数であり、

s は、1 ~ 10、特に1、2又は3の整数であり、

R^{116} 及び R^{117} は、互いに独立して、H、ハロゲン、 $-CN$ 、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ 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、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル、 $-C(=O)-R^{127}$ 、 $-C(=O)OR^{127}$ 、又は $-C(=O)NR^{127}R^{126}$ であり、

R^{119} 及び R^{120} は、互いに独立して、H、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ 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、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ 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^{119} 及び R^{120} は、一緒になって、式： $=CR^{121}R^{122}$ の基を形成し、ここで、

R^{121} 及び R^{122} は、互いに独立して、H、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ 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、又は $C_2 \sim C_{20}$ 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るか、或いは

R^{119} 及び R^{120} は、一緒になって、場合により $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換

10

20

30

40

50

されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ 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、 $C_2 \sim C_{18}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{18}$ アルキニル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、Eで置換されている及び/若しくはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、 $C_7 \sim C_{25}$ アラルキル又は $-C(=O)-R^{127}$ で置換されていることができる5員又は6員環を形成し、

R^{126} 及び R^{127} は、互いに独立して、H； $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル若しくは $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル；又は $-O-$ で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキルであり、

Dは、 $-CO-$ 、 $-COO-$ 、 $-S-$ 、 $-SO-$ 、 $-SO_2-$ 、 $-O-$ 、 $-NR^{65}-$ 、 $-SiR^{70}R^{71}-$ 、 $-POR^{72}-$ 、 $-CR^{63}=CR^{64}-$ 、又は $-C-C-$ であり、

Eは、 $-OR^{69}$ 、 $-SR^{69}$ 、 $-NR^{65}R^{66}$ 、 $-COR^{68}$ 、 $-COOR^{67}$ 、 $-CONR^{65}R^{66}$ 、 $-CN$ 、又はハロゲンであり、

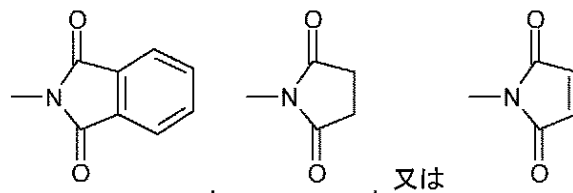
Gは、E又は $C_1 \sim C_{18}$ アルキルであり、

R^{63} 、 R^{64} 、 R^{65} 及び R^{66} は、互いに独立して、H； $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキルか、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル；又は $-O-$ で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキルであるか；或いは

R^{65} 及び R^{66} は、一緒になって、5員又は6員環、特に下記：

【0131】

【化86】



【0132】

を形成し、

R^{67} 及び R^{68} は、互いに独立して、H； $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル若しくは $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル；又は $-O-$ で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキルであり、

R^{69} は、H； $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキルか、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル；又は $-O-$ で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキルであり、

R^{70} 及び R^{71} は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール、又は $C_1 \sim C_{18}$ アルキルで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリールであり、そして

R^{72} は、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール、又は $C_1 \sim C_{18}$ アルキルで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリールである。

【0133】

基II、III及びIVの単位の例は、WO2005/049695、11頁、13行目から22頁9行目に含まれている。

【0134】

本発明の好ましい実施態様において、ポリマーは、下記式：

【0135】

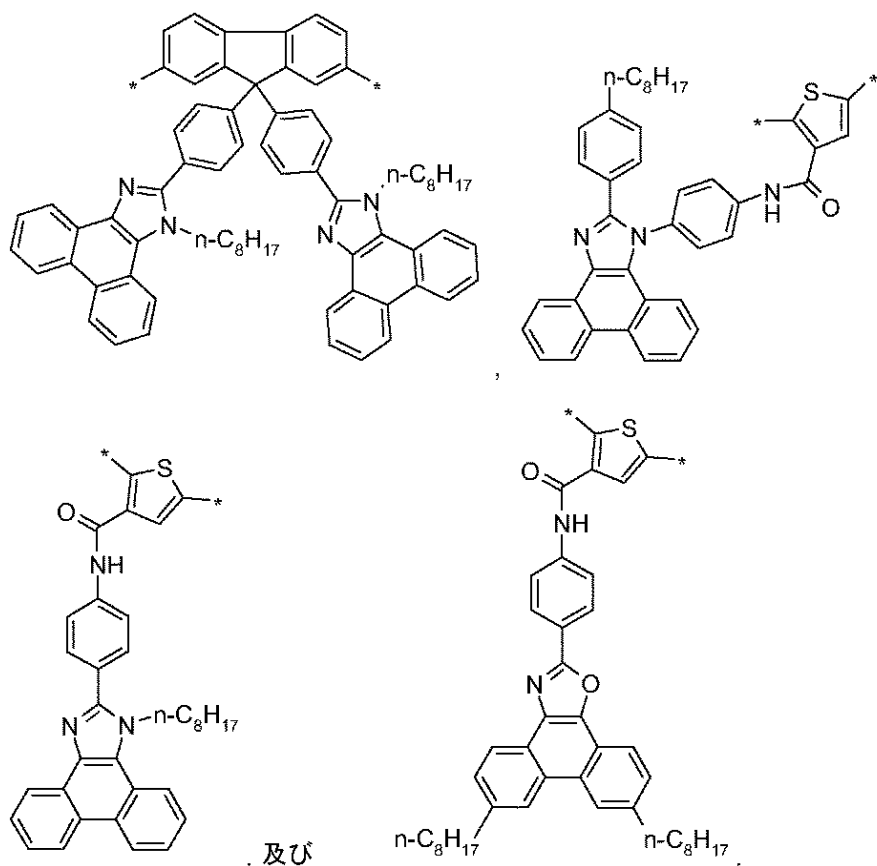
10

20

30

40

【化 8 7】



【 0 1 3 6 】

で示される反復単位を含む。

【 0 1 3 7 】

一般的に「スズキ反応」と呼ばれる、芳香族ボロネートとハロゲン化物、特に臭化物との縮合反応は、N. Miyaura及びA. SuzukiがChemical Reviews, Vol. 95, pp. 457-2483 (1995)で報告しているように、種々の有機官能基の存在を許容する。この反応を、高分子量のポリマー及びコポリマーの調製に適用することができる。

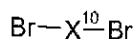
30

【 0 1 3 8 】

式VIIに対応するポリマーを調製するために、ジプロミド又はジハライド、特に、下記式：

【 0 1 3 9 】

【化 8 8】

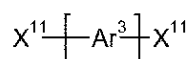


【 0 1 4 0 】

に対応するジプロミドのようなジハライドを、下記式：

【 0 1 4 1 】

【化 8 9】



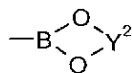
【 0 1 4 2 】

〔式中、 X^{11} は、それぞれの場合に独立して、 $-\text{B}(\text{OH})_2$ 、 $-\text{B}(\text{OY}^1)_2$ 、又は下記：

【 0 1 4 3 】

40

【化 9 0】



【0144】

であり、ここで、 Y^1 は、それぞれの場合に独立して、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{10}$ アルキル基であり、そして Y^2 は、それぞれの場合に独立して、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_{10}$ アルキレン基、例えば $-\text{CY}^3\text{Y}^4 - \text{CY}^5\text{Y}^6 -$ 又は $-\text{CY}^7\text{Y}^8 - \text{CY}^9\text{Y}^{10} - \text{CY}^{11}\text{Y}^{12} -$ であり、ここで、 Y^3 、 Y^4 、 Y^5 、 Y^6 、 Y^7 、 Y^8 、 Y^9 、 Y^{10} 、 Y^{11} 及び Y^{12} は、互いに独立して、水素又は $\text{C}_1 \sim \text{C}_{10}$ アルキル基であり、特に $-\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{C}(\text{CH}_3)_2$ - 又は $-\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_2 -$ である〕で示される等モル量のジボロン酸又はジボロネートと、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 ～ 180 で実施される。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、単独又は芳香族炭化水素との混合物で使うことができる。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が HBr スカベンジャーとして使用される。反応体の反応性に応じて、重合反応は 2 ～ 100 時間かかる場合がある。例えば水酸化テトラアルキルアンモニウムのような有機塩基、及び例えば TBAB のような相間移動触媒は、ホウ素の活性を促進することができる（例えば、Leadbeater & Marco; Angew. Chem. Int. Ed. 42 (2003) 1407 及びそこで引用されている参考文献を参照すること）。反応条件の他の変形は、T. I. Wallow 及び B. M. Novak により J. Org. Chem. 59 (1994) 5034-5037 において、M. Remmers、M. Schulze 及び G. Wegner により Macromol. Rapid Commun. 17 (1996) 239-252 において提示されている。

10

20

【0145】

望ましい場合は、単官能アリールハライド又はアリールボロネートをそのような反応に連鎖停止剤として使用してもよく、それにより末端アリール基の形成がもたらされる。

【0146】

スズキ反応におけるモノマー供給の順序及び組成を制御することにより、得られるコポリマーのモノマー単位の配列を制御することが可能である。

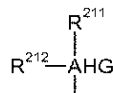
【0147】

PG が、下記：

30

【0148】

【化 9 1】



【0149】

の重合性基と異なる場合、ポリマーは、式 $\text{X} \sim \text{X} \text{X I}$ の反復単位に加えて、1 つ以上の反復単位 RG^{I} 及び / 又は RG^{II} ：

RG^{I} ：ポリマーの正孔注入又は正孔輸送特性を増加する単位；

40

RG^{II} ：ポリマーの電子注入又は電子輸送特性を増加する単位

を含有することができる。

ポリマーの正孔注入又は正孔輸送特性を増加する RG^{I} の好ましい単位は、下記：

【0150】

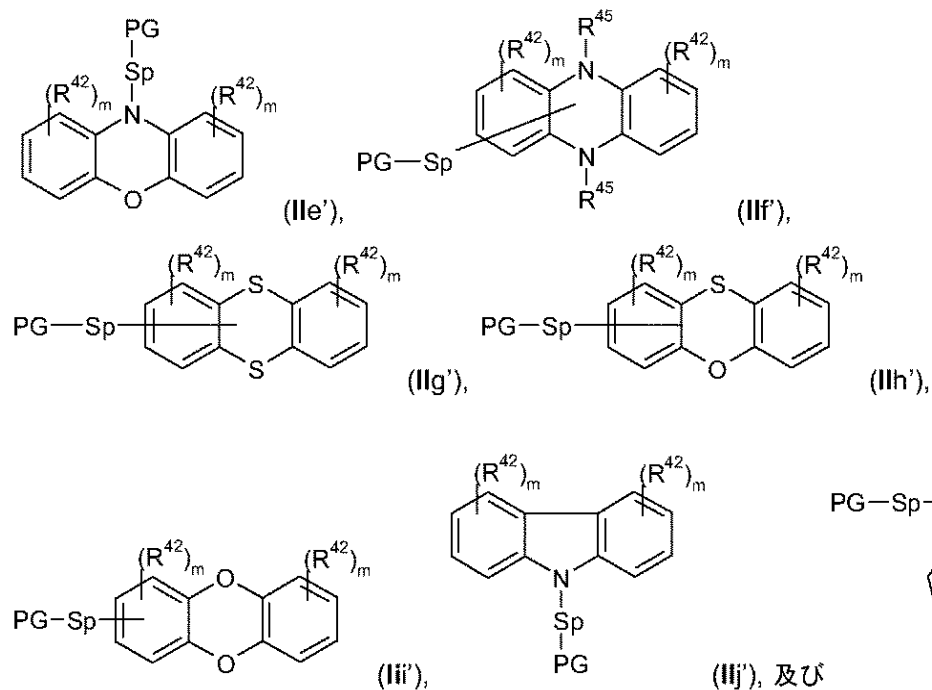
$$\text{PG}-\text{Sp}-\text{A}^2-\text{N}(\text{A}^1)_2 \quad (\text{IIa}'),$$

$$\text{PG}-\text{Sp}-\text{A}^2-\text{N}(\text{A}^1)_2-\text{C}_6\text{H}_4(\text{R}^{41})_n-\text{N}(\text{A}^1)_2 \quad (\text{IIb}'),$$

$$\text{PG}-\text{Sp}-\text{A}^2-\text{N}(\text{A}^1)_2-\text{C}_6\text{H}_4(\text{R}^{41})_n-\text{C}_6\text{H}_4(\text{R}^{41})_n-\text{N}(\text{A}^1)_2 \quad (\text{IIc}'),$$

$$\text{PG}-\text{Sp}-\text{N}(\text{R}^{42})_m-\text{C}_{10}\text{H}_6\text{S}-\text{N}(\text{R}^{42})_m \quad (\text{IId}'),$$

10



20

30

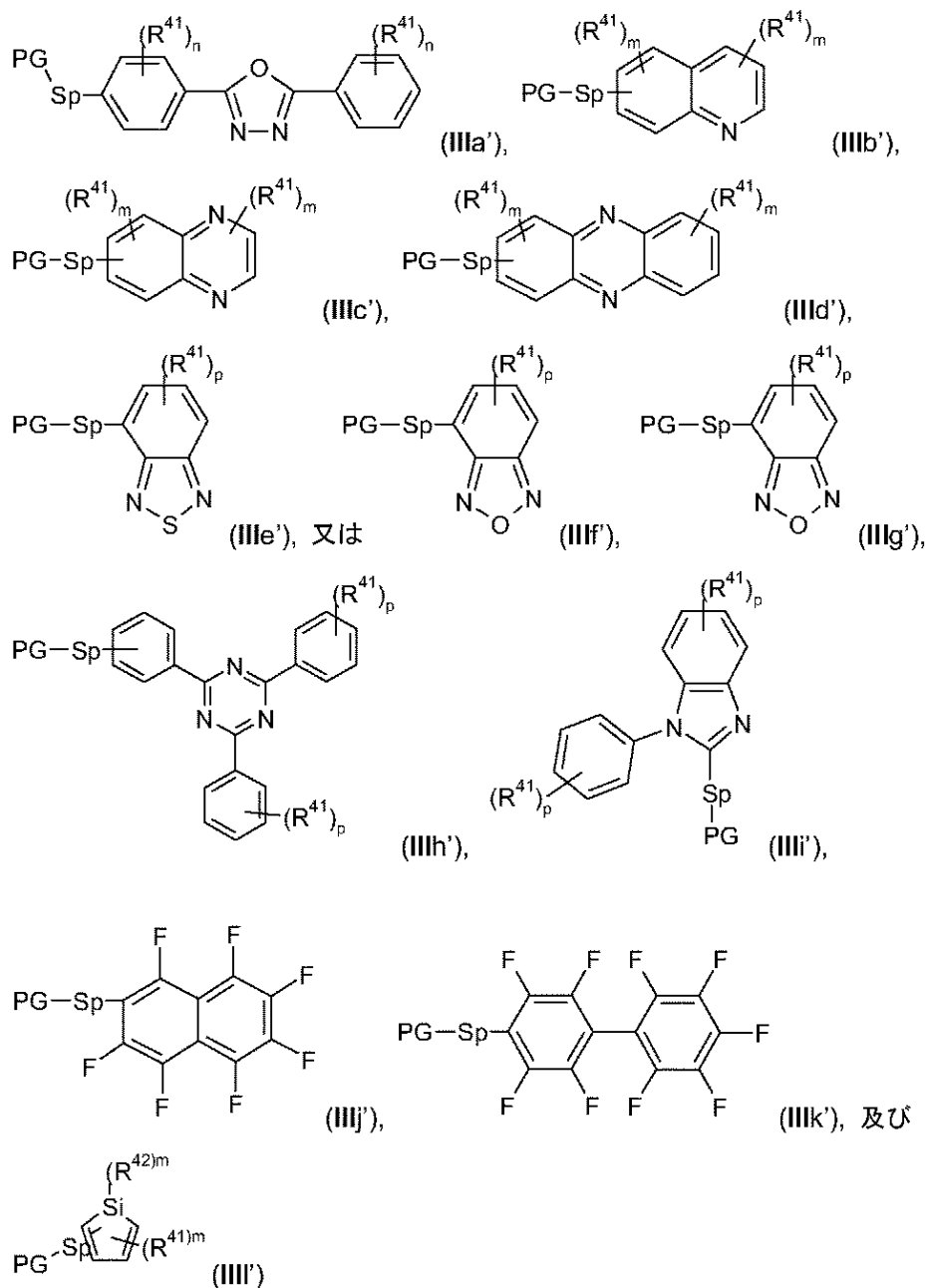
である。

ポリマーの電子注入若しくは電子輸送特性を増加する R G ^I ^I の好ましい単位は、下記

:

【 0 1 5 2 】

【化 9 3】



【0153】

であり、ここで、 R^{41} 、 R^{42} 、Sp、PG及びm及びnは、上記で定義されたとおりであり、そしてpは、0、1又は2、特に0又は1である。

【0154】

本発明によると、ホモポリマーA-1、A-2、A-3、A-4、A-5、A-6、A-7、A-8、A-9、A-10、A-11、A-12、A-13、A-14、A-15、A-16、A-17、A-18、A-19、A-20、A-21、A-22、A-23、A-24、A-25、A-26、A-27、A-28、A-29、A-30、A-31、A-32、A-33、A-34、A-35、A-36、A-37、A-38、A-39、A-40、A-41、A-42、A-43、A-44、A-45、A-46、A-47、A-48、A-49、A-50、A-51、A-52、A-53、A-54、A-55、A-56、A-57、A-58、A-59、A-60、A-61、A-62、A-63、A-64、A-65、A-66、A-67、A-68、A-69、A-70、A-71、A-72、A-73、A-74、A-75、A-76、A-77、A-78、A-79、B-1、B-2、B-3、B-4、B-5、B-6、B-7、B-8、B-9、B-1

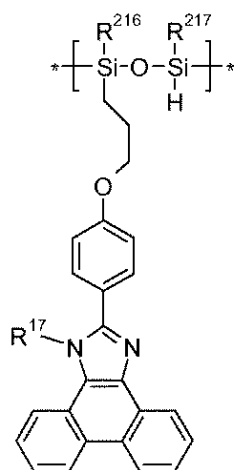
0、B - 11、B - 12、B - 13、B - 14、B - 15、B - 16、B - 17、B - 18、B - 19、B - 20、B - 21、B - 22、B - 23、B - 24、B - 25、B - 26、B - 27、B - 28、B - 29、B - 30、B - 31、B - 32、B - 33、B - 34、B - 35、B - 36、B - 37、B - 38、B - 39、C - 1、C - 2、C - 3、C - 4、C - 5、C - 6、C - 7、C - 8、C - 9、C - 10、C - 11、C - 12、C - 13、C - 14、C - 15、C - 16、C - 17、C - 18、C - 19、C - 20、C - 21、C - 22、C - 23、C - 24、C - 25、C - 26、C - 27、C - 28、C - 29、C - 30、C - 31、C - 32、C - 33、C - 34、C - 35、C - 36、C - 37、C - 38、C - 39、C - 40、C - 41、C - 42、C - 43、C - 44、C - 45、C - 46、C - 47、C - 48、C - 49、C - 50、C - 51、C - 52、C - 53、C - 54、C - 55、C - 56、C - 57、C - 58、C - 59、C - 60、C - 61、C - 62、C - 63、C - 64、C - 65、C - 66、C - 67、C - 68、C - 69、C - 70、C - 71、C - 72、C - 73、C - 74、C - 75、C - 76、C - 77、C - 78、D - 1、D - 2、D - 3、D - 4、D - 5、D - 6、D - 7、D - 8、D - 9、D - 10、D - 11、D - 12、D - 13、D - 14、D - 15、D - 16、D - 17、D - 18、D - 19、D - 20、D - 21、D - 22、D - 23、D - 24、D - 25、D - 26、D - 27、D - 28、D - 29、D - 30、D - 31、D - 32、D - 33、D - 34、D - 35、D - 36、D - 37、D - 38、D - 39、D - 40、D - 41、D - 42、D - 43、D - 44、D - 45、D - 46、D - 47、D - 48、D - 49、D - 50、D - 51、D - 52、E - 1、E - 2、E - 3、E - 4、E - 5、E - 6、E - 7、E - 8、E - 9、E - 10、E - 11、E - 12、E - 13、E - 14、E - 15、E - 16、E - 17、E - 18、E - 19、E - 20、E - 21、E - 22、E - 23、E - 24、E - 25、E - 26、E - 27、E - 28、E - 29、E - 30、E - 31、E - 32、E - 33、E - 34、E - 35、E - 36、E - 37、E - 38、E - 39、E - 40、E - 41、E - 42、E - 43、E - 44、E - 45、E - 46、E - 47、E - 48、E - 49、E - 50、E - 51 及び E - 52、F - 1 ~ F - 36、G - 1 ~ G - 37、H - 1 ~ H - 42、I - 1 ~ I - 8、J - 1 ~ J - 31 及び K - 1 ~ K - 34 が特に好ましい。参照は、請求項 5 でなされている。

【0155】

一つの実施態様において、ポリマーは、下記式：

【0156】

【化94】



【0157】

〔式中、

R²¹⁶ 及び R²¹⁷ は、互いに独立して、C₁ ~ C₁₈ アルキルか、又は場合により 1 つ以上の C₁ ~ C₁₈ アルキル基で置換されていることができる C₆ ~ C₈ アリールであり、そして R¹⁷ は、C₆ ~ C₁₈ アリール；C₁ ~ C₁₈ アルキル若しくは C₁ ~ C

C_{1-8} アルコキシで置換されている C_{6-18} アリール； C_{1-18} アルキル；又は -O- で中断されている C_{1-18} アルキルである〕
で示される反復単位を含む。

【0158】

一つの実施態様において、本発明のポリマーは、式 I の 1 種類以上の反復単位だけで構成される。好ましい実施態様において、本発明のポリマーは、式 I のまさに 1 種類の反復単位から構成される（ホモポリマー）。

【0159】

本発明によると、用語「ポリマー」は、ポリマーもオリゴマーも含み、ここで、ポリマーは比較的高分子量の分子であり、その構造は、実質的に、比較的低分子量の分子から実際に又は概念的に誘導されている単位の反復を含み、オリゴマーは中程度の分子量の分子であり、その構造は、実質的に、比較的低分子量の分子から実際に又は概念的に誘導されている複数の単位を小数含む。分子は、1 個又は数個の単位を取り除いてもあまり実質的に変わらない特性を有する場合に、比較的高分子量を有するとみなされる。分子は、1 個又は数個の単位を取り除くと有意に変わる特性を有する場合に、中程度の分子量を有するとみなされる。

【0160】

本発明によると、ホモポリマーは、1 種の（実際の、潜在的な又は仮定の）モノマーから誘導されるポリマーである。多くのポリマーが、相補的なモノマーの相互反応により作製される。これらのモノマーは、反応させて「潜在的なモノマー」を与えるようにして、容易に可視化することができ、その単独重合は実際の生成物を与え、それをホモポリマーとみなすことができる。幾つかのポリマーは、得られるポリマーを構成する高分子の構造が仮定のモノマーの単重合により形成されたと考えることができるような、他のポリマーの化学的改質により得られる。

【0161】

したがって、コポリマーは、2 種以上のモノマーから誘導されるポリマー、例えば、ビポリマー、ターポリマー、クォーターポリマーなどである。

【0162】

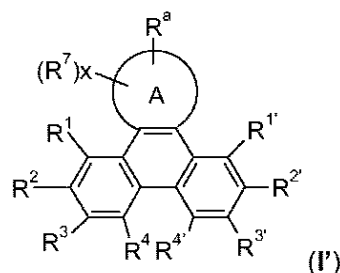
本発明のオリゴマーは、 $< 2,000$ ダルトンの重量平均分子量を有する。本発明のポリマーは、好ましくは、 $2,000$ ダルトン以上、特に $2,000 \sim 250,000$ ダルトン、より好ましくは $10,000 \sim 250,000$ 、最も好ましくは $20,000 \sim 200,000$ ダルトンの重量平均分子量を有する。分子量は、ポリスチレン標準及び/又は光散乱検出器を使用してゲル浸透クロマトグラフィーにより測定する。

【0163】

本発明の更なる実施態様は、下記式：

【0164】

【化 95】



【0165】

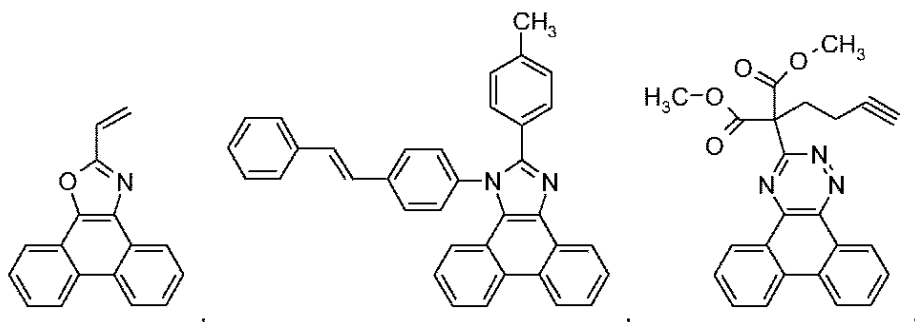
〔式中、 x 、 A 、 R^a 、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 $R^{1'}$ 、 $R^{2'}$ 、 $R^{3'}$ 、 $R^{4'}$ 及び R^7 は、上記で定義されたとおりであり、

R^a 、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 $R^{1'}$ 、 $R^{2'}$ 、 $R^{3'}$ 及び $R^{4'}$ の少なくとも 1 つは、基 R^{10} であり、

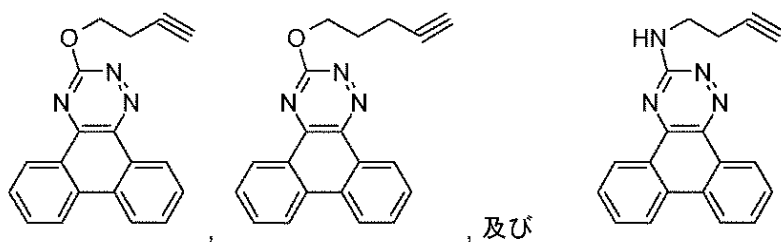
R^{10} は、基 - (Sp)_{x1} - [PG] < であり、ここで、
 Sp は、スペーサー単位であり、
 PG は、重合性基であり、
 x1 は、0 又は 1 であり、そして
 x は、0 又は 1 ~ 5 の整数であるが、但し、以下の化合物が除外される

【0166】

【化96】



10



20

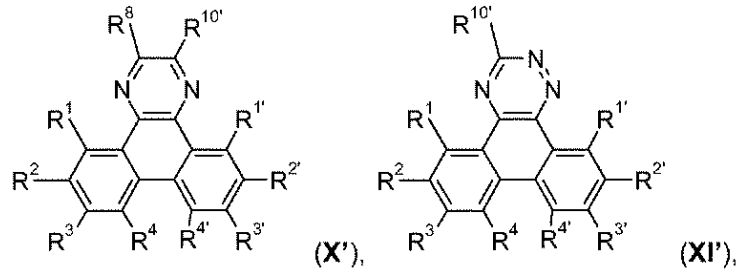
【0167】

）で示される化合物（モノマー）により表される。

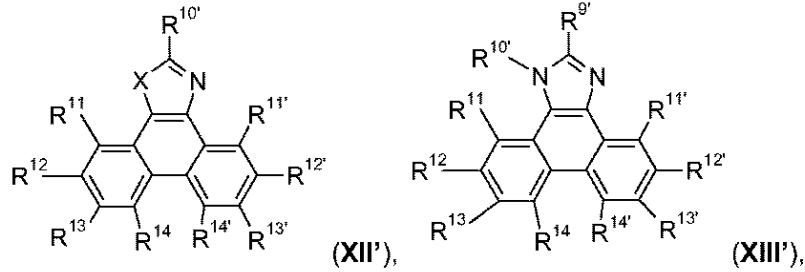
下記式：

【0168】

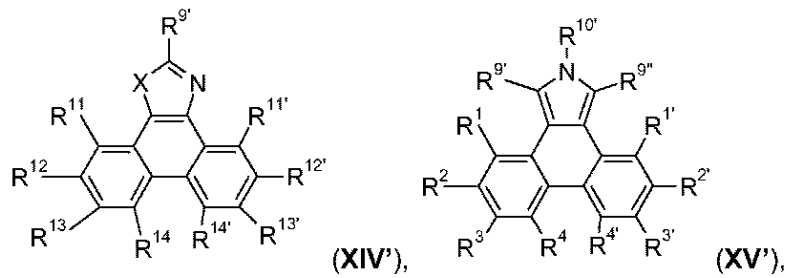
【化 9 7】



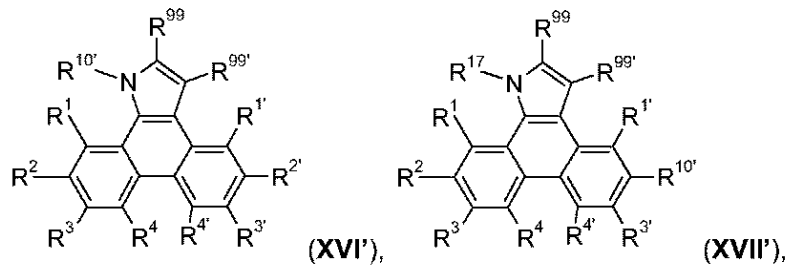
10



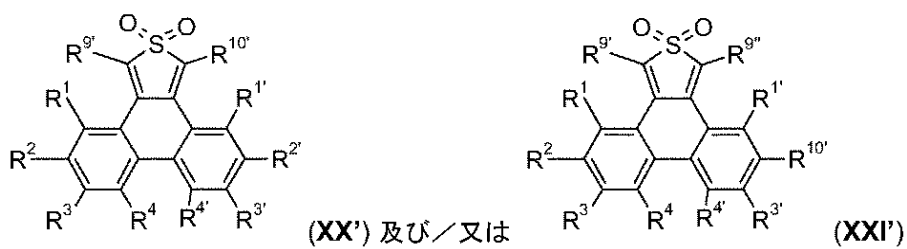
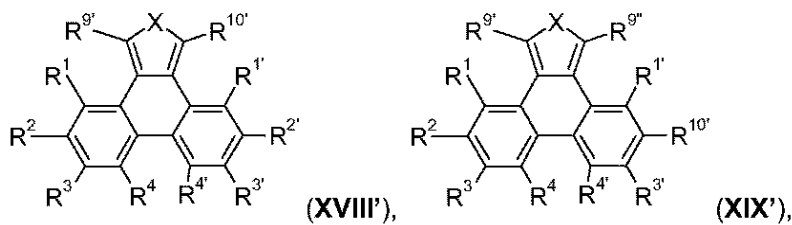
20



30



40



【 0 1 6 9 】

〔 式中、

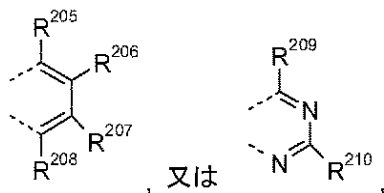
X、R¹、R¹、R²、R³、R⁴、R²、R³、R⁴、R⁸、R⁹、R⁹
 、R⁹⁹、R⁹⁹、R¹⁷、R¹¹、R¹¹、R¹²、R¹³、R¹⁴、R¹²

50

、 R^{13} 及び R^{14} は、上記で定義されたとおりであり、 R^{10} は、基 - (Sp)
 $\times 1$ - [PG] であり、ここで、Sp はスペーサー単位であり、PG は重合性基であり、
 $\times 1$ は 0 又は 1 であるか、或いは R^8 及び R^{10} は、一緒になって、下記：

【0170】

【化98】



10

【0171】

の基を形成し、

ここで、置換基 R^{205} 、 R^{206} 、 R^{207} 及び R^{208} の 1 つと、置換基 R^{208}
 及び R^{210} の 1 つは、基 R^{10} であり、他の置換基は、互いに独立して、H、 $C_1 \sim$
 C_{18} アルキル、E で置換されている及び / 若しくは D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$
 アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、又は E で置換されている及び / 若しくは D で中断され
 ている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシであるが、但し、式 XIV の化合物の場合では、置換基 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{12}
 及び R^{13} の少なくとも 1 つが基 R^{10} である]

で示される化合物。

20

【0172】

Sp は、好ましくは、-Ar-、-ArY-、-YAr-、-YAr(CR⁴⁷R⁴⁸)
 $\times n$ -、-ArY(CR⁴⁷R⁴⁸) $\times n$ Ar-、-ArY(CR⁴⁷R⁴⁸) $\times n$ -、-(
 CR⁴⁷R⁴⁸) $\times n$ -、-(YCR⁴⁷R⁴⁸) $\times n$ - 又は -(CR⁴⁷R⁴⁸Y) $\times n$ - か
 ら選択され、ここで、

Y は、NR⁵、O、S、C=O、C(=O)O であり、ここで R⁵ は、H； $C_6 \sim C_{18}$
 アリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル若しくは $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{18}$
 アリール、； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル；又は -O- で中断されている $C_1 \sim C_{18}$
 アルキルであり；

R^{47} 及び R^{48} は、互いに独立して、水素、フッ素又は $C_1 \sim C_{20}$ アルキルであり

30

n は、1 ~ 20 の整数であり、

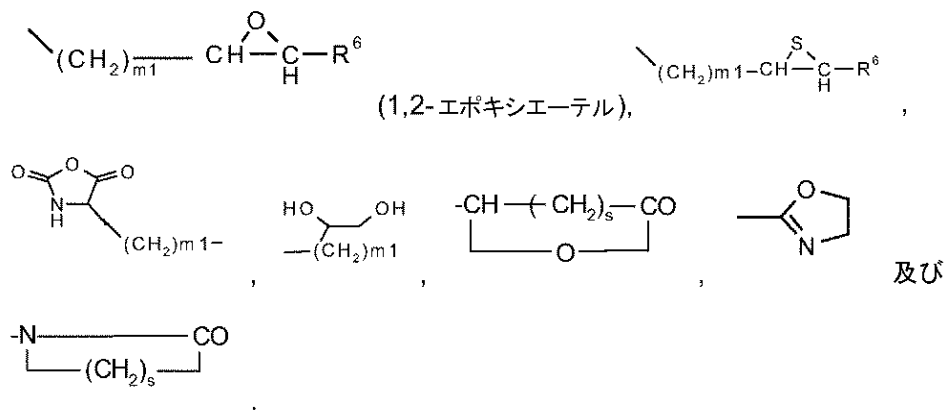
Ar は、場合により置換されていることができる、アルキレン、シクロアルキレン、ア
 リーレン、アラルキレン又はヘテロアリーレンである。

PG は、重合性基であり、好ましくは、-C(R⁴⁴)=CH₂、-NHC(O)-C
 (R⁴⁵)=CH₂、-OCH₂CH₂OC(O)-C(R⁴⁵)=CH₂、-OC(O)
)-C(R⁴⁵)=CH₂、-C(O)-C(R⁴⁶)=CH₂、-C-C-、N-C-
 、-O-CH(CH₂CH₂CH=CH₂)₂； $C_5 \sim C_8$ シクロアルケニル、ビスクロ
 アルケニル (5 ~ 30 個の炭素原子を有する置換又は非置換ビスクロアルケニル基)、下
 記：

40

【0173】

【化 9 9】



10

【 0 1 7 4】

から選択され、

ここで、

s は、1 ~ 6 の整数であり、m 1 は、1 ~ 6 の整数であり、

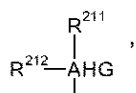
R⁶ は、水素又は C₁ ~ C₂₀ アルキルであり、R⁴⁴ は、水素又は C₁ ~ C₄ アルキル又はハロゲンであり、R⁴⁵ は、水素、C₁ ~ C₄ アルキル又はハロゲンであり、そしてR⁴⁶ は、水素、C₁ ~ C₄ アルキル又は C₆ ~ C₁₂ アリールであるか、或いは

20

PG は、下記：

【 0 1 7 5】

【化 1 0 0】



【 0 1 7 6】

の重合性基であり、

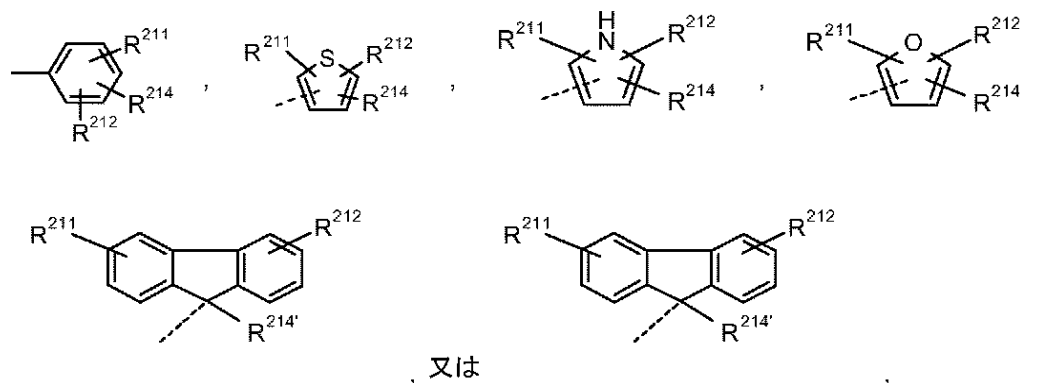
ここで、

AHG は、場合により置換されていることができる芳香族又は芳香族複素環式残基であり、例えば下記：

30

【 0 1 7 7】

【化 1 0 1】



40

【 0 1 7 8】

であり、

R²¹¹ 及び R²¹² は、互いに独立して、ハロゲン、-C≡CH、ボロン酸若しくはボロン酸エステル、-Mg-Hal、-Zn-Hal、-Sn(R²¹³)₃ であり、ここで Hal はハロゲンであり、R²¹³ は C₁ ~ C₁₈ アルキルであり、

50

R^{214} 及び R^{214} は、互いに独立して、H、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ又は $C_7 \sim C_{25}$ アラルキルである。

【0179】

置換基 R^3 、 R^3 、 R^{13} 、 R^{13} 、 R^8 、並びに / 又は R^9 及び R^{10} の少なくとも1つが、水素原子と異なり、特に、G で置換されていることができる $C_6 \sim C_{18}$ アリール、G で置換されていることができる $C_2 \sim C_{18}$ ヘテロアリール、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、又はE で置換されている及び / 若しくはD で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシから特に選択される可溶化置換基であるモノマーが好ましい。

10

【0180】

R^{17} は、好ましくは水素原子と異なり、とりわけ、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル又はD で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキルである。

【0181】

特に、 R^8 、 R^9 及び / 又は R^{17} は、可溶化置換基であり、特に、G で置換されていることができる $C_6 \sim C_{18}$ アリール、G で置換されていることができる $C_2 \sim C_{18}$ ヘテロアリール、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、D で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、 $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ、又はE で置換されている及び / 若しくはD で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシから選択される。

20

【0182】

ハロゲンは、フッ素、塩素、臭素及びヨウ素である。

【0183】

共役ポリマーは、下記：

【0184】

【化102】



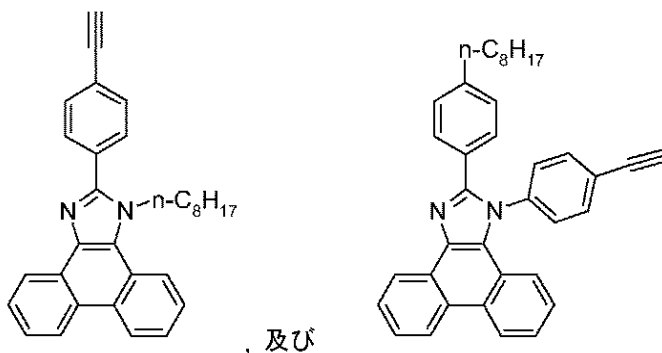
【0185】

の基を有するモノマー、例えば下記：

30

【0186】

【化103】



, 及び

40

【0187】

を使用して得ることができる。

【0188】

ポリマーの実際の調製は、最新技術によって既知である（とりわけ、Houben-Weyl "Methoden der Organischen Chemie", "Makromolekulare Stoffe", Vol. E20, parts 1-3 (1986, 1987)に記載されている）。

【0189】

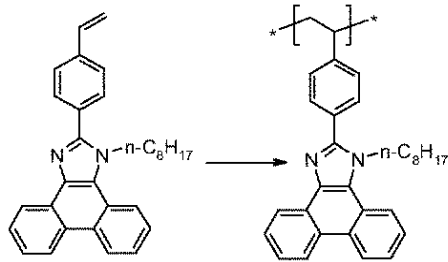
可能な重合法及びそのために適切な化合物を下記に提示する：

50

a) ラジカル重合：

【 0 1 9 0 】

【 化 1 0 4 】



10

【 0 1 9 1 】

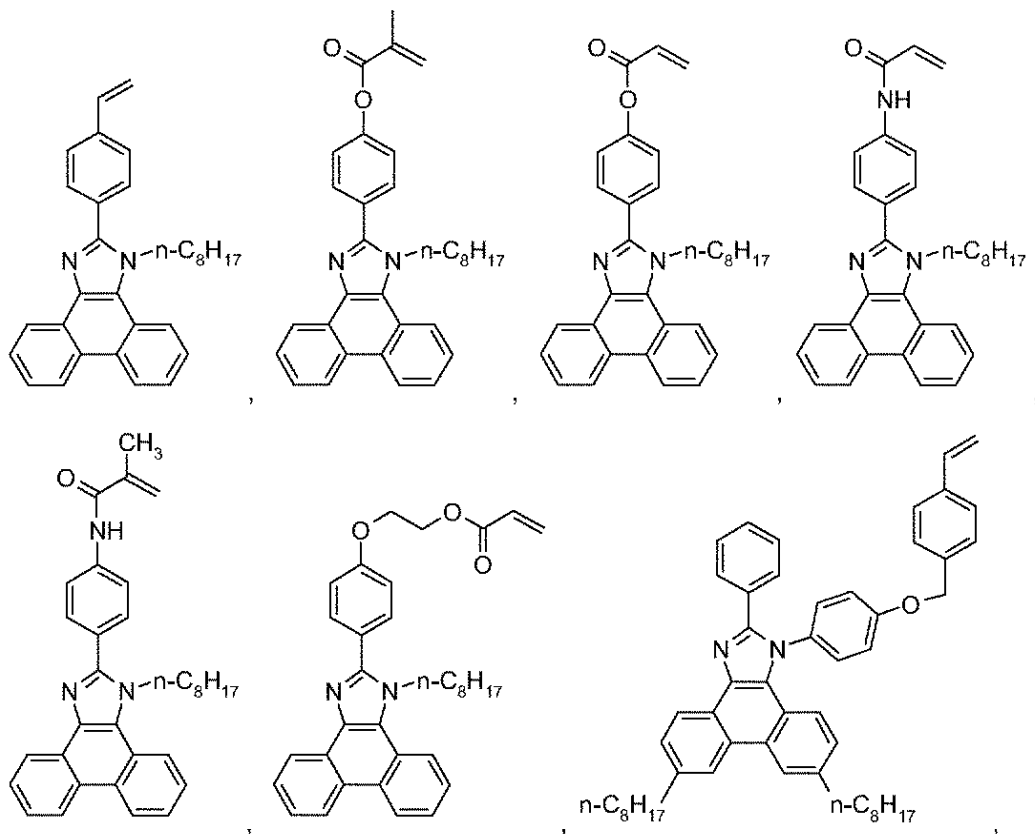
式 I のモノマーが、 $-CH=CH_2$ 、アクリレート又はメタクリレート基を含有する場合、重合は、例えば光化学的に実施することができ、通常、慣用の光開始剤（例えば、"Chemistry & Technology of UV & EB Formulations for Coatings, Inks and Paints, Vol. 3: Photoinitiators for Free Radical and Cationic Polymerization" 1991, p. 11 15-325を参照すること）の 1 つが、使用される全てのモノマーの合計に基づいて、典型的には 0.5 ~ 5 重量%の範囲の量で反応混合物に添加される。

【 0 1 9 2 】

特に適切な追加のモノマーの例を下記に示す：

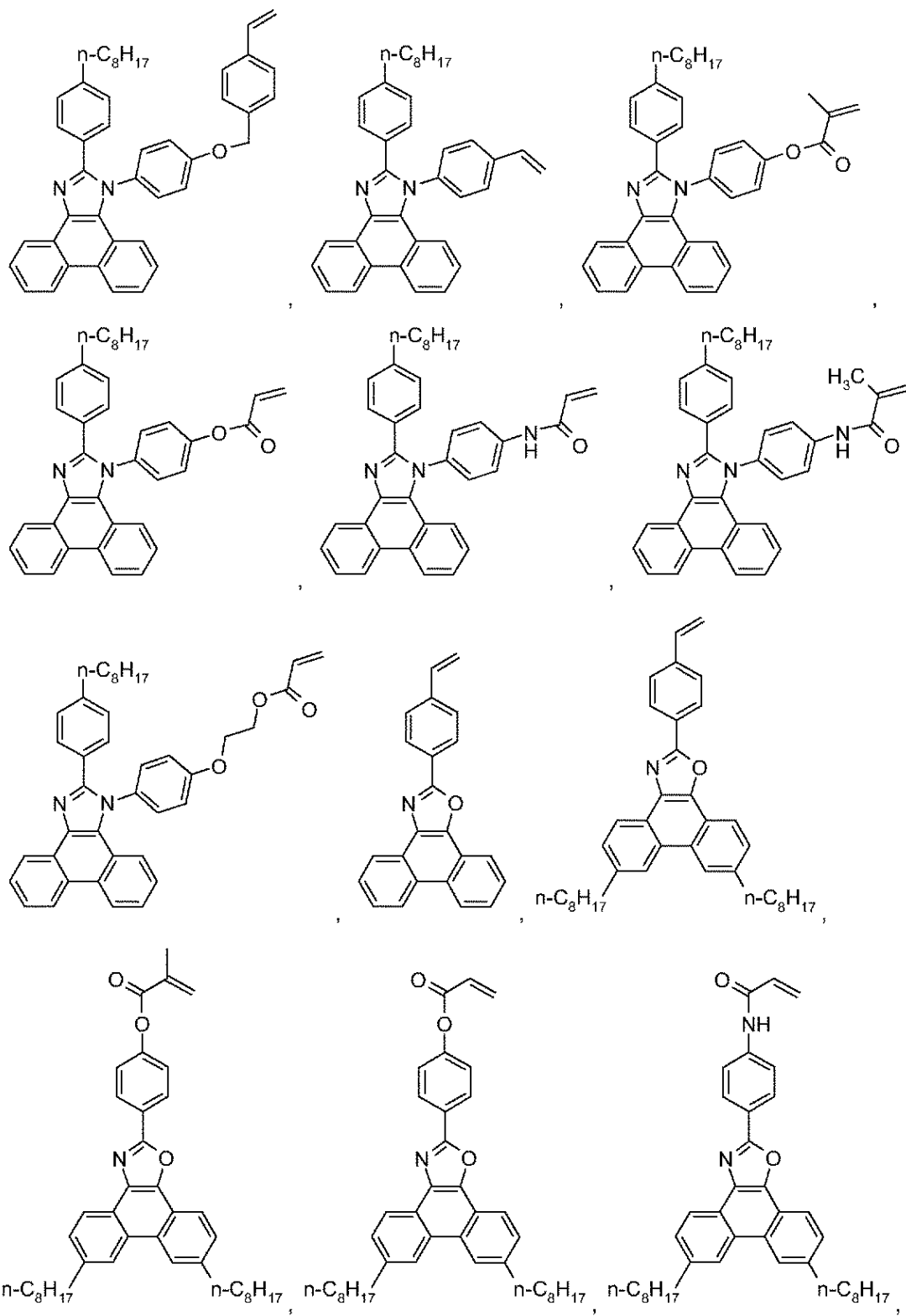
【 0 1 9 3 】

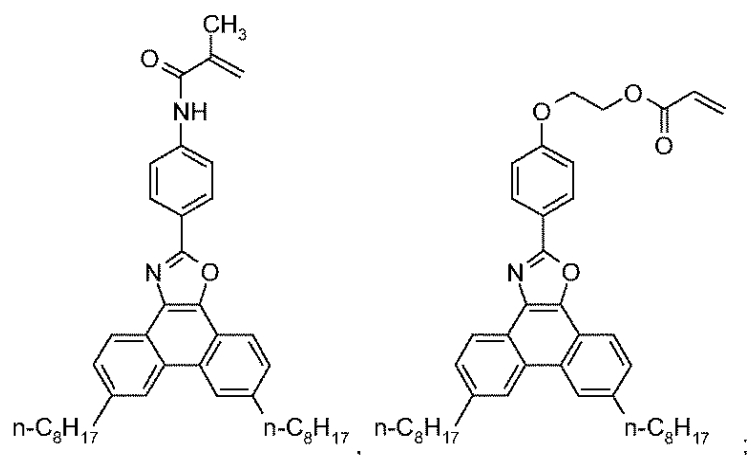
【 化 1 0 5 】



30

40





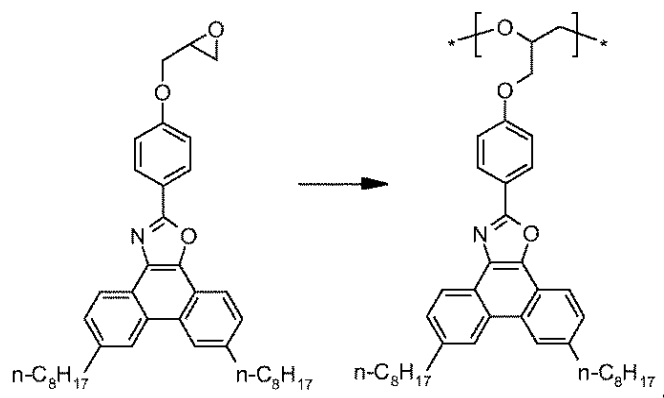
10

【 0 1 9 4 】

b) エポキシ重合：

【 0 1 9 5 】

【 化 1 0 6 】



20

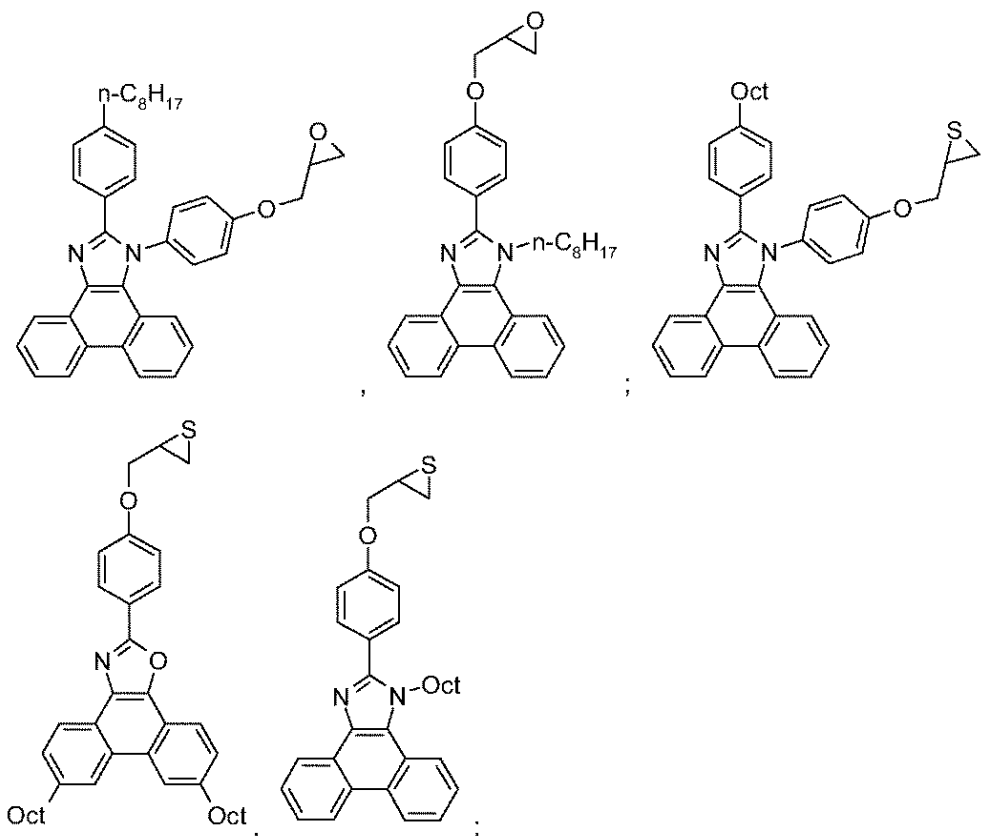
【 0 1 9 6 】

特に適切な追加のモノマーの例を下記に示す：

【 0 1 9 7 】

30

【化 1 0 7】



10

20

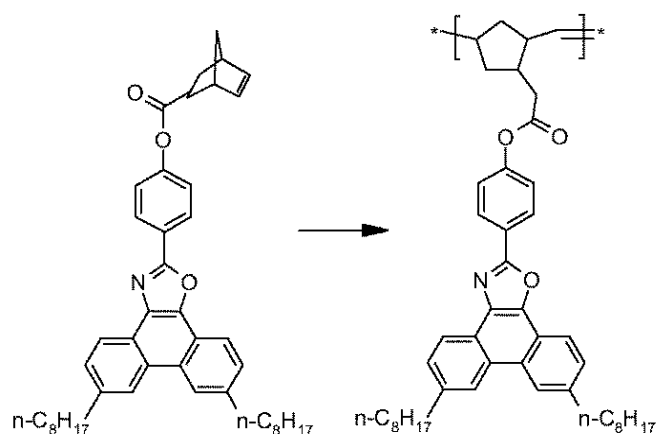
【 0 1 9 8】

c) 多様なメタセシス反応が、Ivin, K. J. and Mol, J. C., Olefin Metathesis and Metathesis Polymerization (Academic Press 1997)に記載されている。

- ROMP (開環メタセシス重合) :

【 0 1 9 9】

【化 1 0 8】



30

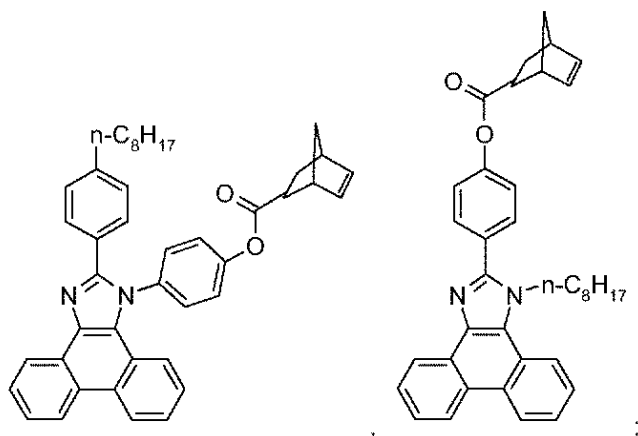
40

【 0 2 0 0】

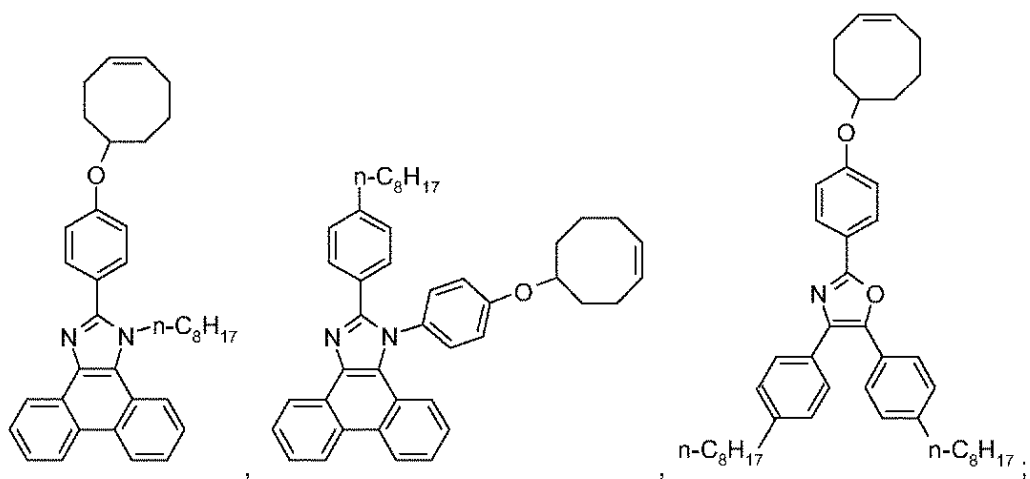
特に適切な追加のモノマーの例を下記に示す：

【 0 2 0 1】

【化 1 0 9】



10



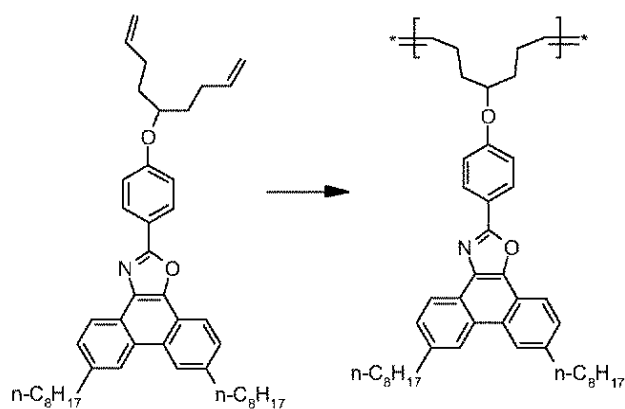
20

【 0 2 0 2】

- A D M E T (非 環 式 ジ エ ン オ レ フ ィ ン メ タ セ シ ス) :

【 0 2 0 3】

【 化 1 1 0】



30

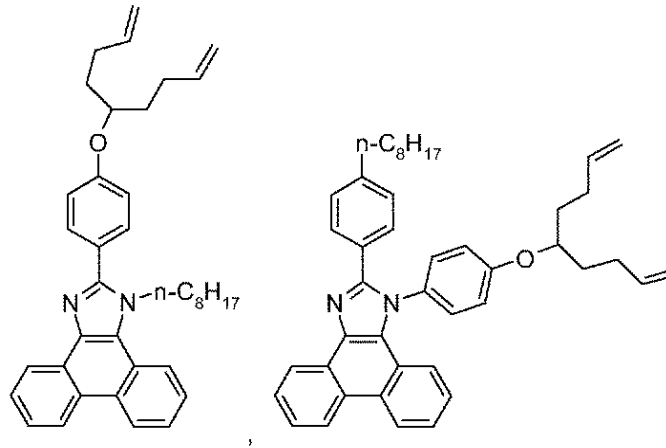
40

【 0 2 0 4】

特に適切な追加のモノマーの例を下記に示す：

【 0 2 0 5】

【化 1 1 1】



10

【 0 2 0 6 】

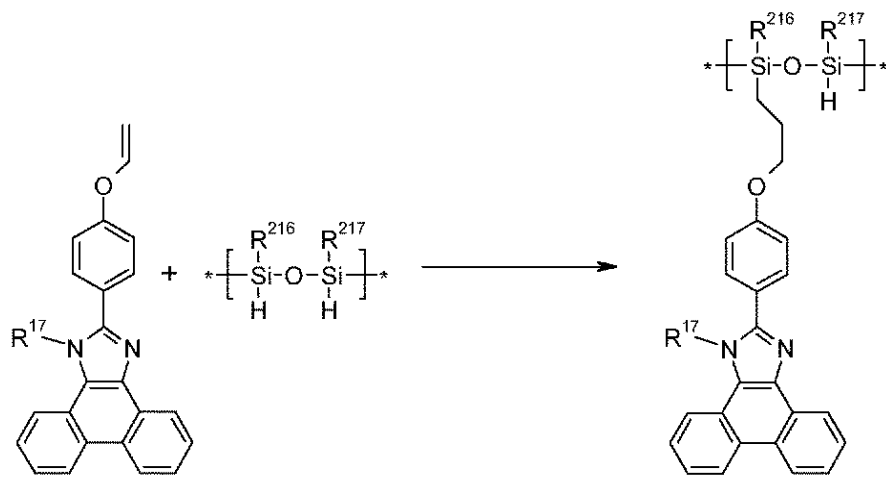
d) ヒドロシリル化

ヒドロシリル化は、UV照射により開始することができ、ラジカル形成剤、遷移金属錯体又はルイス塩基により触媒することができる。ヒドロシリル化触媒の例は、 H_2PtCl_6 、 $\text{RhCl}(\text{PPh}_3)_3$ 又はトランス- $\text{IrCl}(\text{CO})(\text{PPh}_3)_2$ である。

【 0 2 0 7 】

【化 1 1 2】

20



30

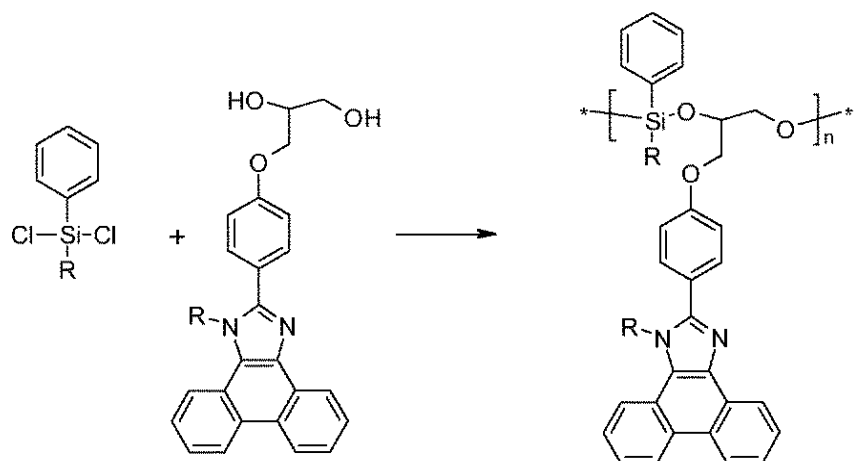
【 0 2 0 8 】

ここで、 R^{216} 及び R^{217} は、互いに独立して、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_8$ アルキル基、 $\text{C}_6 \sim \text{C}_{24}$ アリール基又は $\text{C}_7 \sim \text{C}_{12}$ アラルキル基である。

- Progress in Polymer Science 28 (2003) 1297-1353:

【 0 2 0 9 】

【化 1 1 3】



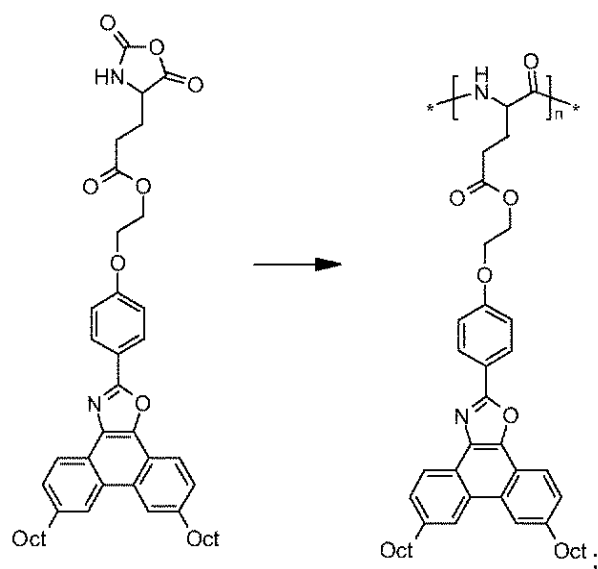
10

【 0 2 1 0】

- Journal of Polymer Science: Part A, vol. 41 (2003) 1167-1187:

【 0 2 1 1】

【化 1 1 4】



20

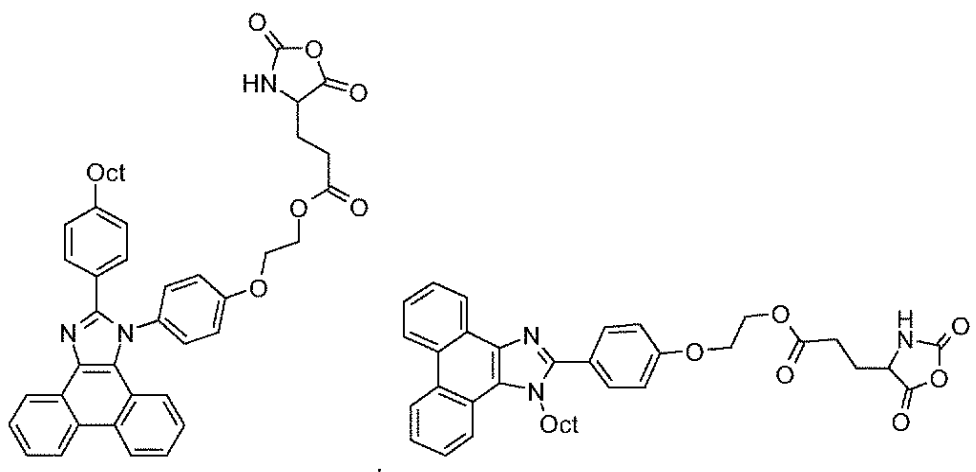
30

【 0 2 1 2】

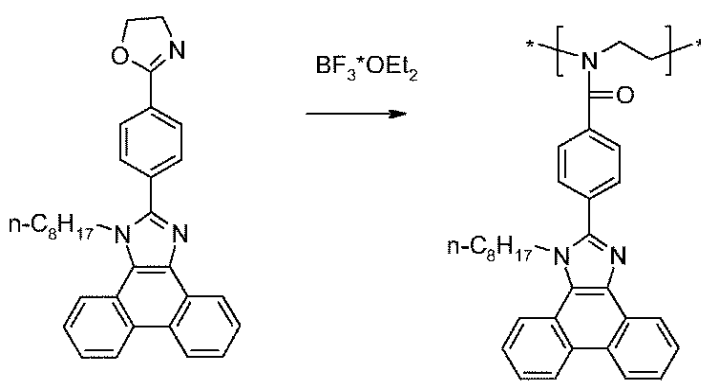
特に適切な追加のモノマーの例を下記に示す：

【 0 2 1 3】

【化 1 1 5】



10



20

【 0 2 1 4】

$C_1 \sim C_{25}$ アルキルは、可能であれば、典型的には直鎖又は分岐鎖である。例は、メチル、エチル、*n*-プロピル、イソプロピル、*n*-ブチル、*sec.*-ブチル、イソブチル、*tert.*-ブチル、*n*-ペンチル、2-ペンチル、3-ペンチル、2,2-ジメチルプロピル、1,1,3,3-テトラメチルペンチル、*n*-ヘキシル、1-メチルヘキシル、1,1,3,3,5,5-ヘキサメチルヘキシル、*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、1,1,3,3-テトラメチルブチル及び2-エチルヘキシル、*n*-ノニル、デシル、ウンデシル、ドデシル、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、エイコシル、ヘネイコシル、ドコシル、テトラコシル又はペンタコシルである。 $C_1 \sim C_8$ アルキルは、典型的には、メチル、エチル、*n*-プロピル、イソプロピル、*n*-ブチル、*sec.*-ブチル、イソブチル、*tert.*-ブチル、*n*-ペンチル、2-ペンチル、3-ペンチル、2,2-ジメチル-プロピル、*n*-ヘキシル、*n*-ヘプチル、*n*-オクチル、1,1,3,3-テトラメチルブチル及び2-エチルヘキシルである。 $C_1 \sim C_4$ アルキルは、典型的には、メチル、エチル、*n*-プロピル、イソプロピル、*n*-ブチル、*sec.*-ブチル、イソブチル、*tert.*-ブチルである。

30

40

【 0 2 1 5】

$C_1 \sim C_{25}$ アルコキシ基は、直鎖又は分岐鎖の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。 $C_1 \sim C_8$ アルコキシの例は、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、イソブトキシ、*tert.*-ブトキシ、*n*-ペンチルオキシ、2-ペンチルオキシ、3-ペンチ

50

ルオキシ、2, 2 - ジメチルプロポキシ、n - ヘキシルオキシ、n - ヘプチルオキシ、n - オクチルオキシ、1, 1, 3, 3 - テトラメチルブトキシ及び2 - エチルヘキシルオキシであり、好ましくは、 $C_1 \sim C_4$ アルコキシ、例えば、典型的にはメトキシ、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、イソブトキシ、tert. - ブトキシである。用語「アルキルチオ基」は、エーテル結合において酸素原子が硫黄原子に代えられていることを除いて、アルコキシ基と同じ基を意味する。

【0216】

$C_2 \sim C_{25}$ アルケニル基は、直鎖又は分岐鎖のアルケニル基であり、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 - エニルである。

10

【0217】

$C_2 \sim C_{24}$ アルキニルは直鎖状又は分岐鎖であり、好ましくは $C_2 \sim C_8$ アルキニルであり、これは非置換であるか又は置換されていてもよく、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 - ペンタジイン - 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 - イルである。

20

【0218】

$C_1 \sim C_{18}$ ペルフルオロアルキル、特に $C_1 \sim C_4$ ペルフルオロアルキルは、分岐鎖又は非分岐鎖のラジカルであり、例えば、 $-CF_3$ 、 $-CF_2CF_3$ 、 $-CF_2CF_2CF_3$ 、 $-CF(CF_3)_2$ 、 $-(CF_2)_3CF_3$ 及び $-C(CF_3)_3$ である。

【0219】

用語「ハロアルキル、ハロアルケニル及びハロアルキニル」は、上記のアルキル基、アルケニル基及びアルキニル基がハロゲンにより部分的又は完全に置換されている基、例えばトリフルオロメチルなどを意味する。用語「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、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、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、ここでアルキル基、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、非置換であるか又は置換されていてもよい。用語「シリル基」は、式： $-SiR^{62}R^{63}R^{64}$ [式中、 R^{62} 、 R^{63} 及び R^{64} は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_8$ アルキル基、特に $C_1 \sim C_4$ アルキル基、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール基又は $C_7 \sim C_{12}$ 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。用語「シロキサニル」基は、式： $-O-SiR^{62}R^{63}R^{64}$ [式中、 R^{62} 、 R^{63} 及び R^{64} は、上記で定義されたとおりである] で示される基、例えばトリメチルシロキサニル基を意味する。

30

【0220】

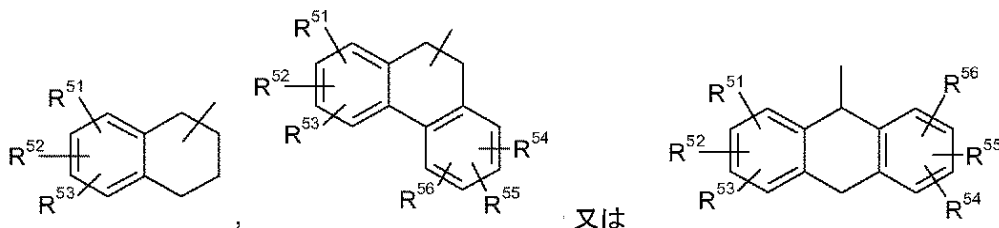
用語「シクロアルキル基」は、典型的には、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル、例えばシクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチル、シクロオクチル、シクロノニル、シクロデシル、シクロウンデシル、シクロドデシル、好ましくはシクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチル又はシクロオクチルであり、非置換であるか又は置換されていてもよい。用語「シクロアルケニル基」は、シクロペンテニル、シクロペンタジエニル、シクロヘキセニルなどのような、1つ以上の二重結合を含有する不飽和脂環式炭化水素基を意味し、非置換であるか又は置換されていてもよい。シクロアルキル基、特にシクロヘキシル基は、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、ハロゲン及びシアノで1～3回置換されていることができるフェニルにより1又は2回縮合されることができる。そのような縮合シクロヘキシル基の例は、下記：

40

【0221】

50

【化 1 1 6】

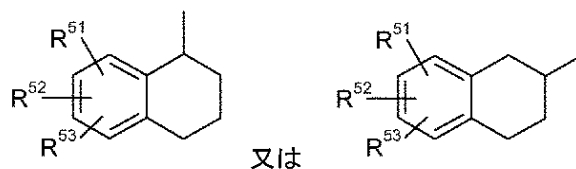


【 0 2 2 2】

であり、特に下記：

【 0 2 2 3】

【化 1 1 7】



【 0 2 2 4】

であり、ここで、 R^{51} 、 R^{52} 、 R^{53} 、 R^{54} 、 R^{55} 及び R^{56} は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_8$ アルキル、 $C_1 \sim C_8$ アルコキシ、ハロゲン及びシアノであり、特に水素である。

【 0 2 2 5】

アリールは、通常、 $C_6 \sim C_{30}$ アリール、好ましくは $C_6 \sim C_{24}$ アリールであり、場合により置換されていることができ、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、特に1-ナフチル若しくは2-ナフチル、ピフェニリル、テルフェニリル、ピレニル、2-若しくは9-フルオレニル、フェナントリル、アントリル、テトラシル、ペンタシル、ヘキサシル、又はクアデルフェニリルであり、非置換であるか又は置換されていてもよい。

【 0 2 2 6】

用語「アラルキル基」は、典型的には、 $C_7 \sim C_{24}$ アラルキル、例えばベンジル、2-ベンジル-2-プロピル、 α -フェニル-エチル、 α -ジメチルベンジル、 α -フェニル-ブチル、 α -ジメチル- α -フェニル-ブチル、 α -フェニル-ドデシル、 α -フェニル-オクタデシル、 α -フェニル-エイコシル又は α -フェニル-ドデシルであり、好ましくは、 $C_7 \sim C_{18}$ アラルキル、例えばベンジル、2-ベンジル-2-プロピル、 α -フェニル-エチル、 α -ジメチルベンジル、 α -フェニル-ブチル、 α -ジメチル- α -フェニル-ブチル、 α -フェニル-ドデシル又は α -フェニル-オクタデシルであり、特に好ましくは、 $C_7 \sim C_{12}$ アラルキル、例えばベンジル、2-ベンジル-2-プロピル、 α -フェニル-エチル、 α -ジメチルベンジル、 α -フェニル-ブチル又は α -ジメチル- α -フェニル-ブチルであり、ここで脂肪族炭化水素基と芳香族炭化水素基の両方は、非置換であるか又は置換されていてもよい。

【 0 2 2 7】

用語「アリールエーテル基」は、典型的には、 $C_6 \sim C_{24}$ アリールオキシ基であり、すなわち、例えばフェノキシ又は4-メトキシフェニルのような $O-C_6 \sim C_{24}$ アリールである。用語「アリールチオエーテル基」は、典型的には、 $C_6 \sim C_{24}$ アリールチオ基であり、すなわち、例えばフェニルチオ又は4-メトキシフェニルチオのような $S-C_6 \sim C_{24}$ アリールである。用語「カルバモイル基」は、典型的には、 $C_1 \sim C_{18}$ カルバモイルラジカル、好ましくは $C_1 \sim C_8$ カルバモイルラジカルであり、これは非置換であるか又は置換されていてもよく、例えば、カルバモイル、メチルカルバモイル、エチルカルバモイル、 n -ブチルカルバモイル、tert-ブチルカルバモイル、ジメチルカルバモイルオキシ、

モルホリノカルバモイル又はピロリジノカルバモイルである。

【0228】

アルキルアミノ基、ジアルキルアミノ基、アルキルアリールアミノ基、アリールアミノ基及びジアリール基における用語「アリール」及び「アルキル」は、典型的には、それぞれ $C_1 \sim C_{25}$ アルキル及び $C_6 \sim C_{24}$ アリールである。

【0229】

アルキルアリールは、アルキル置換アリールラジカル、特に $C_7 \sim C_{12}$ アルキルアリールを意味する。例は、トリル、例えば 3 - メチル - 若しくは 4 - メチルフェニル、又はキシリル、例えば 3, 4 - ジメチルフェニル若しくは 3, 5 - ジメチルフェニルである。

【0230】

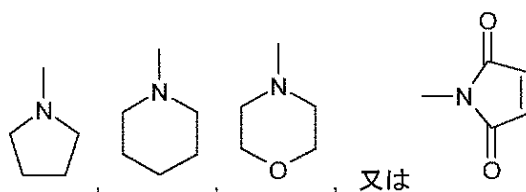
ヘテロアリールは、典型的には $C_2 \sim C_{26}$ ヘテロアリールであり、すなわち、窒素、酸素又は硫黄が考えられるヘテロ原子である、5 ~ 7 個の環原子を有する環であるか、又は縮合環系であり、典型的には、少なくとも 6 個の共役電子を有する 5 ~ 30 個の原子を持つ不飽和複素環式基であり、例えば、チエニル、ベンゾ〔b〕チエニル、ジベンゾ〔b, d〕チエニル、チアントレニル、フリル、フルフリル、2H - ピラニル、ベンゾフラニル、イソベンゾフラニル、ジベンゾフラニル、フェノキシチエニル、ピロリル、イミダゾリル、ピラゾリル、ピリジル、ピピリジル、トリアジニル、ピリミジニル、ピラジニル、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、ピリミジニル、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、イソオキサゾリル、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ができる。

【0231】

R^{16} 及び R^{17} 、又は R^{65} 及び R^{66} 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、3 ~ 5 個の炭素原子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：

【0232】

【化118】

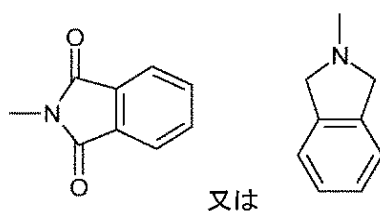


【0233】

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：

【0234】

【化119】



【0235】

である。

【0236】

10

20

30

40

50

上記の基の可能である置換基は、 $C_1 \sim C_8$ アルキル、ヒドロキシル基、メルカプト基、 $C_1 \sim C_8$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_8$ アルキルチオ、ハロゲン、ハロ- $C_1 \sim C_8$ 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。

【0237】

例えば R^7 のような置換基が基において2回以上現れる場合、それぞれの場合において異なることができる。

【0238】

表現「Gで置換されている」は、1つ又はそれ以上、特に1~3つの置換基Gが存在してもよいことを意味する。

【0239】

上記に記載されているように、前述の基は、Eで置換されていてもよい、及び/又は、望ましい場合は、Dで中断されていてもよい。中断は、当然のことながら、基が、単結合により互いに結合している少なくとも2つの炭素原子を含有する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つ以上のEで置換されている及び/又は1つ以上の単位Dで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ 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（例は、 $CO - CH(C_2H_5)C_4H_9$ ））、 $CH_2 - CH(OR^y) - CH_2 - O - R^y$ （ここで、 R^y は、 $C_1 \sim C_{18}$ 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- $COOR^z$ 、例は、 CH_2COOR^z 、 $CH(CH_3)COOR^z$ 、 $C(CH_3)_2COOR^z$ （ここで、 R^z は、H、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $(CH_2CH_2O)_{1-9} - R^x$ であり、そして R^x は、上記で示された定義を包含する）；

$CH_2CH_2 - O - CO - CH = CH_2$ ； $CH_2CH(OH)CH_2 - O - CO - C(CH_3) = CH_2$ である。

【0240】

好ましいアリーレンラジカルは、1,4-フェニレン、2,5-トリレン、1,4-ナフチレン、1,9-アントラシレン、2,7-フェナントリレン及び2,7-ジヒドロフェナントリレンである。

【0241】

好ましいヘテロアリーレンラジカルは、2,5-ピラジニレン、3,6-ピリダジニレン、2,5-ピリジニレン、2,5-ピリミジニレン、1,3,4-チアジアゾール-2,5-イレン、1,3-チアジアゾール-2,4-イレン、1,3-チアジアゾール-2,5-イレン、2,4-チオフェニレン、2,5-チオフェニレン、1,3-オキサゾール-2,4-イレン、1,3-オキサゾール-2,5-イレン及び1,3,4-オキサジアゾール-2,5-イレン、2,5-インデニレン及び2,6-インデニレンである。

【0242】

用語「アルキレン（スペーサー）」は、典型的には、 $C_1 \sim C_{30}$ アルキレン、好ましくは $C_1 \sim C_{18}$ アルキレンであり、直鎖、並びに分岐鎖の代表例を包含し、例えば、 $-CH_2-$ 及び $C_2 \sim C_{30}$ アルキレン、例えば $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH(Me)-$ 、 $-(CH_2)_3-$ 、 $-CH_2-CH(Me)-$ 、 $-C(Me)_2-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-(CH_2)_5-$ 、 $-(CH_2)_6-$ 、 $-(CH_2)_7-$ 、 $-(CH_2)_8-$ 、 $-(CH_2)_9-$ 、 $-(CH_2)_{10}-$ 、 $-(CH_2)_{11}-$ 、 $-(CH_2)_{12}-$ 、 $-(CH_2)_{13}-$ 、 $-(CH_2)_{14}-$ 、 $-(CH_2)_{15}-$ 、 $-(CH_2)_{16}-$ 、 $-(CH_2)_{17}-$ 、 $-(CH_2)_{18}-$ 、 $-(CH_2)_{19}-$ 、 $-(CH_2)_{20}-$ 、 $-(CH_2)_{21}-$ 、 $-(CH_2)_{22}-$ 、 $-(CH_2)_{23}-$ 、 $-(CH_2)_{24}-$ 、 $-(CH_2)_{25}-$ 、 $-(CH_2)_{26}-$ 、 $-(CH_2)_{27}-$ 、 $-(CH_2)_{28}-$ 、 $-(CH_2)_{29}-$ 、 $-(CH_2)_{30}-$ 、好ましくは $-CH_2-$ 、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-(CH_2)_3-$

10

20

30

40

50

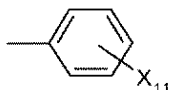
-、- (CH₂)₄ -、- (CH₂)₅ -、- (CH₂)₆ -、- (CH₂)₇ -、- (CH₂)₈ -、- (CH₂)₉ -、- (CH₂)₁₀ -、- (CH₂)₁₁ -、- (CH₂)₁₂ -、- (CH₂)₁₃ -、- (CH₂)₁₄ -、- (CH₂)₁₅ -、- (CH₂)₁₆ -、- (CH₂)₁₇ -、- (CH₂)₁₈ -であり、また -CH(C₂~C₃₀アルキレン)-であることができる。「アルキレンスペーサー」は、場合により、-O-、-S-、-NR^{4 3}-、-CO-、-CONH-、-CON^{4 3}-又は-COO-から選択される1つ以上、特に1又は2つの基を結合基として含むことができる。C₁~C₃₀アルキレンは、例えば、-O-、-S-、-NH-又は-C(O)NH-で数回中断されていることができ、例えば - (CH₂)₂ - O - (CH₂)₂ - O - (CH₂)₂ -、- (CH₂)₂ - S - (CH₂)₂ -、- CH₂ - CH - CH₂ - O - (CH₂)_{p1} - CH₃ (ここでp1は1~10の整数である)、又は - CHX₁₃CH₂ - (X₁₄)_{n3} - OH (ここで、X₁₃は、C₁~C₈アルキルであり、X₁₄は、アルキレンオキシドモノマー、好ましくはエチレンオキシド若しくはプロピレンオキシド、又はアルキレンアミノモノマー、好ましくはアミノエチレン又はアミノプロピレンであり、そしてn3は、1~10、好ましくは1~5の整数である)；又は - (CH₂)₂ - NH - (CH₂)₂ - 又は - (CH₂)₂ - C(O)NH - (CH₂)₂ - である。

【0243】

「アリーレン(スペーサー)」は、好ましくは6~14個の炭素原子を含有する、非置換又は置換の炭素環式又は複素環式アリーレン基であり、典型的にはフェニレン、ナフチレン、アントラセニレン、アントラキノニレン、ピリジニレン、キノリニレン、好ましくは下記：

【0244】

【化120】



【0245】

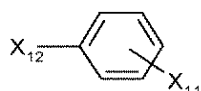
の基であり、ここで、X₁₁は、オルト-、メタ-若しくはパラ位置にある単結合であるか、又はオルト-、メタ-若しくはパラ位置にある-O-、-S-、-NR^{4 3}-、-CO-、-CONH-、-CONR^{4 3}-若しくは-COO-であり；パラ-フェニレン及びパラ-フェニレンオキシが好ましく、R^{4 3}は、R^{6 5}の意味を有する。

【0246】

「アラルキレン(スペーサー)」は、好ましくは6~14個の炭素原子を含有する、非置換又は置換の炭素環式若しくは複素環式アラルキレン基であり、好ましくは下記：

【0247】

【化121】

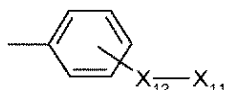


【0248】

の基であり、ここで、X₁₁は、オルト-、メタ-若しくはパラ位置にある単結合であるか、又はオルト-、メタ-若しくはパラ位置にある-O-、-S-、-NR^{4 3}-、-CO-、-CONH-、-CONR^{4 3}-若しくは-COO-であり、そしてX₁₂は、アルキレン又は下記：

【0249】

【化122】



【0250】

10

20

30

40

50

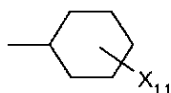
の基であり、ここで、 X_{12} は、オルト -、メタ - 若しくはパラ位置にあるアルキレンであり、そして X_{11} は、単結合、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-NR^{43}-$ 、 $-CO-$ 、 $-CONH-$ 、 $-CONR^{43}-$ 又は $-COO-$ であり、 R^{43} は、 R^{65} の意味を有する。

【0251】

「シクロアルキレン（スペーサー）」は、好ましくは 6 ~ 14 個の炭素原子を含有する、非置換又は置換の炭素環式若しくは複素環式シクロアルキレン基であり、典型的にはシクロヘキシレン、好ましくは下記：

【0252】

【化123】



10

【0253】

の基であり、ここで、 X_{11} は、2 -、3 - 若しくは 4 位にある単結合であるか、又は 2 -、3 - 若しくは 4 位にある $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-NR^{43}-$ 、 $-CO-$ 、 $-CONH-$ 、 $-CONR^{43}-$ 若しくは $-COO-$ であり、4 - シクロヘキシレン及び 4 - シクロヘキシレンオキシが好ましく、 R^{43} は、 R^{65} の意味を有する。

【0254】

本発明の更なる実施態様は、基材及び本発明のポリマーを含む電子装置又はその部品を対象とする。

20

【0255】

そのような装置において、本発明のポリマーをエレクトロルミネセンス材料として使用する。本発明の目的において、用語「エレクトロルミネセンス材料」とは、エレクトロルミネセンス装置に活性層として、又は活性層の中で使用することができる材料を意味する。用語「活性層」は、層が電界の適用によって発光する（発光層）ことができる及び／又は、陽電荷及び／若しくは陰電荷の注入及び／若しくは輸送を改善する（電荷注入若しくは電荷輸送層）を意味する。したがって、本発明は、エレクトロルミネセンス材料としての本発明のポリマーの使用にも関する。本発明は、更に、発明のポリマーを含むエレクトロルミネセンス材料に関する。エレクトロルミネセンス装置は、例えば、制御ランプ、英数字ディスプレイ、信号及び光電子カプラーのような自己発光ディスプレイ素子として使用される。

30

【0256】

本発明の装置は、WO 99 / 48160 の開示に従って調製してもよく、その内容は、参照として組み込まれる。

【0257】

EL 装置は、400 nm ~ 780 nm の可視電磁スペクトルで発光し、好ましくは青色では 430 nm ~ 470 nm であり、好ましくは緑色では 520 nm ~ 560 nm であり、好ましくは赤色では 600 nm ~ 650 nm である。

【0258】

発光層は、1 つ以上の本発明のポリマーと、場合により更なる化合物を含む材料のブレンド又は混合物から形成してもよいことが理解される。本発明の非共役ポリマーは、有機発光ダイオード (OLED) に、リン光性化合物のホスト材料 (三重項エミッター) として特に使用される。

40

【0259】

有機 EL 装置は、典型的には、正バイアスが装置に印加される場合、正孔が陽極から有機フィルムに注入され、電子が陰極から有機フィルムに注入されるように、陽極と陰極との間に挟まれている有機フィルムから構成される。正孔及び電子の組み合わせは励起子を発生させ、光子を遊離することにより放射崩壊して基底状態になりうる。実際には、陽極は、その伝導性及び透明度のために、一般的にスズとインジウムの混合酸化物である。混合酸化物 (ITO) は、ガラス又はプラスチックのような透明な基材上に堆積され、それ

50

により、有機フィルムより放射された光を観察することができる。有機フィルムは、それぞれ特定の機能のために設計された数個の別個の層の複合体であることができる。正孔が陽極から注入されるので、陽極に隣接する層は、正孔を輸送する機能を有することが必要である。同様に、陰極に隣接する層は、電子を輸送する機能を有する必要がある。多くの場合、正孔 - (電子) 輸送層は、放射層としても作用する。幾つかの場合では、1つの層が正孔と電子輸送及び発光を合わせた機能を果たすことができる。有機フィルムの個別の層は、本質的に全てポリマーであるか、又はポリマーのフィルムと、熱蒸発により蒸着されたフィルムの小さい分子との組合せであることができる。有機フィルム全体の厚さは、1000ナノメートル(nm)未満であることが好ましい。全体の厚さが500nm未満であることがより好ましい。全体の厚さが300nm未満であることが最も好ましい。活性(発光)層の厚さは、400ナノメートル(nm)未満であることが好ましい。厚さが40~160nmの範囲であることがより好ましい。

10

【0260】

基材及び陽極としての役割を果たすITOガラスを、洗剤、有機溶媒及びUVオゾン処理による通常の洗浄の後で、被覆に使用することができる。最初に伝導性物質の薄層を被覆して、正孔注入を容易にすることもできる。そのような物質には、銅フタロシアニン、ポリアニリン(PANI)及びポリ(3,4-エチレンジオキシ-チオフェン)(PEDOT)が含まれ、後者の2つは、例えば FeCl_3 又は $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_8$ でドーブされている(ドーブ)伝導性形態である。これらは、水溶性を確実にするために、ポリ(スチレンスルホン酸)(PSS)を対イオンとして含有する。この層の厚さは、200nm以下であることが好ましく、厚さは、100nm以下であることが最も好ましい。

20

【0261】

正孔輸送層が使用される場合、米国特許第5,728,801号に記載の高分子量のアリールアミンを使用することができる。ポリビニルカルバゾールのような他の既知の正孔-伝導性ポリマーを使用することもできる。次いで塗布されるコポリマーフィルムの溶液による浸食に対するこの層の耐性が、多層装置の製造を成功させるために重要であることは明白である。この層の厚さは、500nm以下、好ましくは300nm以下、最も好ましくは150nm以下であることができる。

【0262】

電子輸送層が使用される場合は、それを、低分子量の材料の熱蒸発によるか、又は下にあるフィルムに著しい損傷を起こさない溶媒によるポリマーの溶液被覆により、適用することができる。

30

【0263】

低分子量の材料の例には、8-ヒドロキシキノリンの金属錯体(BurrowsらによりAppl. Phys. Lett. 64 (1994) 2718-2720において記載されている)、10-ヒドロキシベンゾキノリンの金属錯体(HamadaらによりChem. Lett. (1993) 906-906において記載されている)、1,3,4-オキサジアゾール(HamadaらによりOptoelectronics-Devices and Technologies, 7 (1992) 83-93において記載されている)、1,3,4-トリアゾール(KidoらによりChem. Lett. (1996) 47-48において記載されている)及びペリレンのジカルボキシイミド(YoshidaらによりAppl. Phys. Lett. 69 (1996) 734-736において記載されている)が含まれる。

40

【0264】

ポリマー電子輸送材料は、1,3,4-オキサジアゾール含有ポリマー(LiらによりJ. Chem. Soc. (1995) 2211-2212において、Yang及びPeiによりJ. Appl. Phys. 77 (1995) 4807-4809において記載されている)、1,3,4-トリアゾール含有ポリマー(StrukeljらによりScience 267 (1995) 1969-1972において記載されている)、キノキサリン含有ポリマー(YamamotoらによりJpn. J. Appl. Phys. 33 (1994) L250-L253において、O'BrienらによりSynth. Met. 76 (1996) 105-108において記載されている)及びシアノPPV(WeaverらによりThin Solid Films 273 (1996) 39-47において記載されている)により例示される。この層の厚さは、500nm以下、好ましくは300nm以下、最も好ましくは

50

150 nm以下であることができる。

【0265】

陰極材料は、熱蒸発によるか、又はスパッタリングにより付着することができる。陰極の厚さは、1 nm ~ 10,000 nm、好ましくは5 nm ~ 500 nmであることができる。

【0266】

本発明により作製されるOLEDは、装置の発光層に分散され、かつ内部量子効率を100%に近づけることができる、リン光性ドーパントを含有してもよい。本明細書において、用語「リン光性」は、有機又は金属有機分子の三重項励起状態での発光を意味する。リン光性ドーパントを使用する有機発光装置の高い効率は、幾つかの異なる伝導性ホスト材料を使用して実証されている(M. A. Baldo et al., Nature, Vol 395, 151 (1998), C. Adachi et al., Appl. Phys. Lett., Vol. 77, 904 (2000))。本発明の非共役ポリマーは、そのようなリン光性ドーパント(三重項エミッター)のホスト材料として特に適している。

【0267】

本明細書において、用語「正孔輸送ポリマーフィルム」は、電界が印加され、そして正孔が陽極から注入される2つの電極の間に配置されたとき、放射ポリマーに正孔を適切に輸送させるポリマーのフィルム層を意味する。正孔輸送ポリマーは、典型的にはトリアリールアミン部分から構成される。本明細書において、用語「陽極材料」は、4.5 eV電子ポルト(eV) ~ 5.5 eVの仕事関数を持つ半透明又は透明な伝導性のフィルムを意味する。例は、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、タングステンなど、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/インジウムなどのような金属合金、Si、Ge、GaAsなどのような半導体、インジウム-スズ-酸化物(「ITO」)、ZnOなどのような金属酸化物、CuIなど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などのような導電性ポリマーである。酸化物及びインジウムとスズの混合酸化物、並びに金が好ましい。最も好ましいものはITO、特にガラス上のITOであるか、又はポリエステルのようなプラスチック材料、例えば基材としてポリエチレンテレフタレート(PET)上のITOである。

【0268】

本明細書において、用語「陰極材料」は、2.0 eV ~ 4.5 eVの仕事関数を持つ伝導性フィルムを意味する。例は、アルカリ金属、アルカリ土類金属、13族の元素、銀及び銅、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(LiF)、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-酸化アルミニウム合金、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その混合物、及び導電性ポリマー、例えば、ポリピロール、ポリチオフェン、ポリアニリン、ポリアセチレンなどのようなEP-A 499,011で例示された材料である。好ましくは、リチウム、カルシウム、バリウム、マグネシウム、インジウム、銀、アルミニウム又は上記のブレンド及び合金が使用される。電極の材料として金属又は金属合金を使用する場合、電極は真空蒸着法によっても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、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を参照すること)。導電性ポリマーを使用する場合、電極は、予め導電被覆を備えた基材上に、陽極酸化重合法により電極をフィルムに形成することによって製造することができる。

【0269】

上記の薄いフィルム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、インクジェットプリント法などがある。これらの方法のなかで、真空蒸着法、スピンコート法、インクジェットプリント法

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。

【0270】

スピコート法、流延法及びインクジェットプリント法を使用して層を形成する場合、塗布は、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、アセトン、アセトニトリル、アニソール、ジクロロメタン、ジメチルスルホキシド及びこれらの混合物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。

【0271】

本発明の有機EL装置は、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、壁紙のような平面発光装置、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のための、そしてさらにはおそらく白熱灯及び蛍光灯に代わる将来的な代替技術として見なされる。本発明のポリマー及び組成物は、有機EL装置、光起電装置、電子写真受光器、光電変換器、太陽電池、イメージセンサなどの分野で使用する事ができる。

【0272】

したがって、本発明は、本発明のポリマーを1つ以上含む、OLED、有機集積回路(O-IC)、有機電界効果トランジスタ(OFEET)、有機薄膜トランジスタ(OTFT)、有機太陽電池(O-SC)、熱電装置又は有機レーザーダイオードにも関する。

【0273】

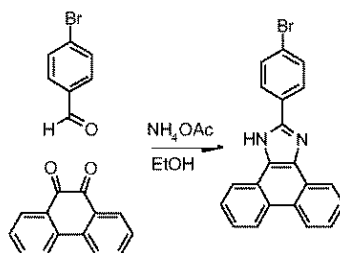
下記の実施例は、例示の目的のみのために含まれるものであり、請求項の範囲を制限しない。特に記述のない限り、部及び%は重量に基づく。(PD)=3.095 分子量及び多分散性は、ポリスチレン標準及び/又は光散乱検出器を使用してゲル浸透クロマトグラフィーにより測定する。

【0274】

実施例

実施例 1

【化124】

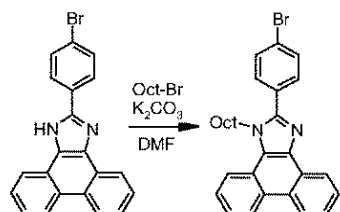


【0275】

a) エタノール(無水)125ml中のフェナントレン-9,10-ジオン5.00g(24.0mmol)に、4-ブロモベンズアルデヒド6.66g(36.0mmol)及び酢酸アンモニウム12.96g(0.168mol)を加えた。反応混合物を窒素下で一晩加熱還流し、25℃に冷却し、生成物を濾取し、エタノールで洗浄した(収量:7.70g(85.8%))。

【0276】

【化125】

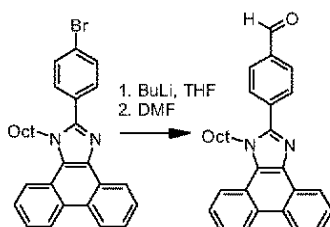


【 0 2 7 7 】

b) 実施例 1 a の生成物 8 g (2 1 . 4 mmol) に、n - 臭化オクチル (O c t) 8 . 2 8 g (4 2 . 8 mmol)、炭酸カリウム 8 . 8 9 g (6 4 . 3 0 mmol) 及びジメチルホルムアミド (D M F) 1 0 0 ml を加えた。反応混合物を窒素下、1 2 0 ° で一晩攪拌し、濾過し、D M F を蒸発させ、生成物を、溶離剤としてジクロロメタンを用いるシリカゲルのカラムクロマトグラフィーにより精製した (収量 : 7 . 3 g (7 0 %))。

【 0 2 7 8 】

【 化 1 2 6 】



10

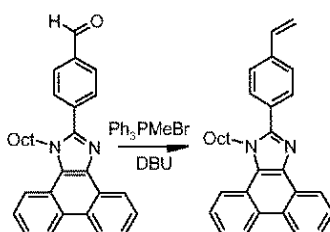
【 0 2 7 9 】

c) ヘキサン中の 2 . 5 M B u L i 3 . 0 7 ml を、乾燥 T H F 5 0 ml に溶解した実施例 1 b の生成物 4 g (8 . 2 4 mmol) に - 7 8 ° で加えた。反応混合物を 1 時間攪拌し、乾燥 D M F 3 g (4 1 . 2 mmol) を加え、室温に温めた。反応を 0 . 5 M H C l で停止させ、生成物を、溶離剤としてクロロホルム / M e O H (9 . 9 : 0 . 1) を用いるシリカゲルのカラムクロマトグラフィーにより精製した (収量 : 2 . 2 g (6 1 . 5 %))。

20

【 0 2 8 0 】

【 化 1 2 7 】



30

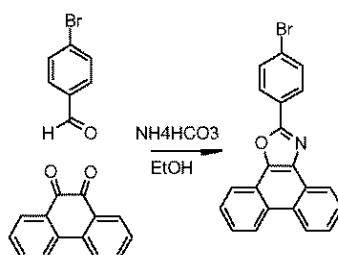
【 0 2 8 1 】

d) 臭化メチルトリフェニルホスフィン 6 . 5 8 g (1 8 . 4 1 mmol)、1 , 8 - ジアザビシクロ [5 . 4 . 0] ウンデカ - 7 - エン (D B U) 2 . 8 g (1 8 . 4 1 mmol) をジクロロメタン 6 0 ml 中で 4 5 分間還流し、ジクロロメタン 2 0 ml 中の実施例 1 c の生成物 2 g (4 . 6 mmol) を加え、還流を一晩続けた。ジクロロメタン溶液を水で洗浄し、溶離剤としてジクロロメタンを用いるカラムクロマトグラフィーにより精製した (収量 : 1 . 6 g (8 0 %))。

【 0 2 8 2 】

実施例 2

【 化 1 2 8 】



40

【 0 2 8 3 】

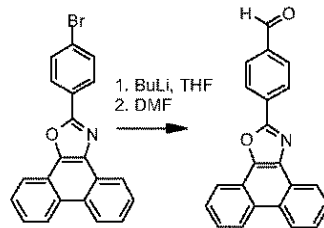
a) エタノール (無水) 2 5 0 ml 中のフェナントレン - 9 , 1 0 - ジオン 1 0 . 0 0 g

50

(48.0 mmol) に、4 - ブロモベンズアルデヒド 13.33 g (72.0 mmol) 及び炭酸水素アンモニウム 18.98 g (0.24 mol) を加えた。反応混合物を窒素下で一晩加熱還流し、25 に冷却し、生成物を濾取し、エタノールで洗浄した (収量: 12.70 g (70.7%))。

【0284】

【化129】



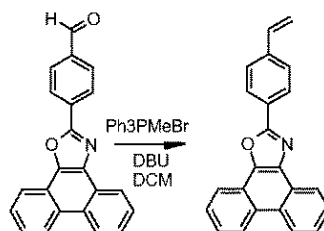
10

【0285】

b) 生成物は、実施例 1 c と同様にして調製した (収率: 77.0%)。

【0286】

【化130】



20

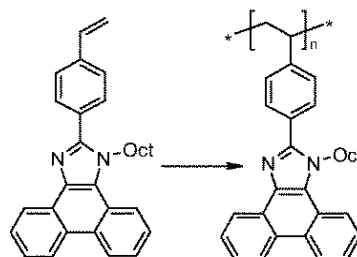
【0287】

c) 生成物は、実施例 1 d と同様にして調製した (収率: 80.0%)。

【0288】

実施例 3

【化131】



30

【0289】

a) 実施例 1 d の生成物 1 g 及び 2,2 - アゾビスイソブチロニトリル (AIBN) 0.05 g を THF 7 ml に溶解し、脱ガスし、60 で 2 日間撹拌した。ポリマーを、メタノールに沈殿させることによって精製した (収量: 0.9 g (90%); $M_w = 4000$ 、 $PDI = 2.35$)。

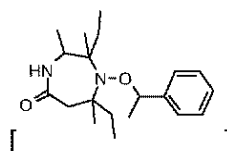
40

【0290】

b) 実施例 1 d の 0.6 g 及びアルコキシアミン開始剤

【0291】

【化132】



50

【0292】

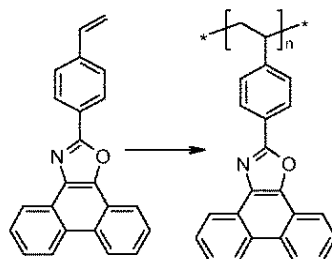
3.8 mgを、クロロベンゼン0.5 mlに溶解し、脱ガスし、120 で20時間撹拌した。得られたポリマーを、MeOHに沈殿させることによって精製した(収量: 0.4 g (66.6%))。

$M_w = 120000$ 、 $PDI = 1.43$ 。

【0293】

実施例4

【化133】



10

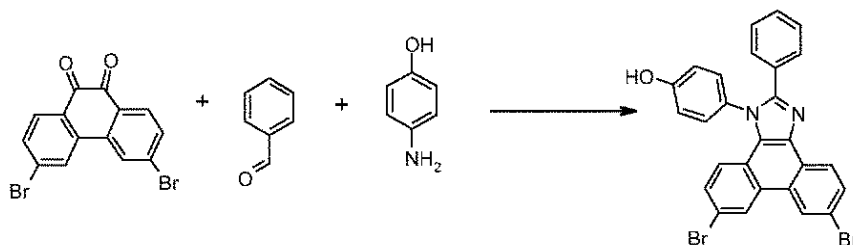
【0294】

生成物を、実施例1dの生成物の代わりに実施例2cの生成物を使用した以外は、実施例3に従って調製した(収率: 75.0%; $M_w = 8000$ 、 $PDI = 1.33$)。

【0295】

実施例5

【化134】



20

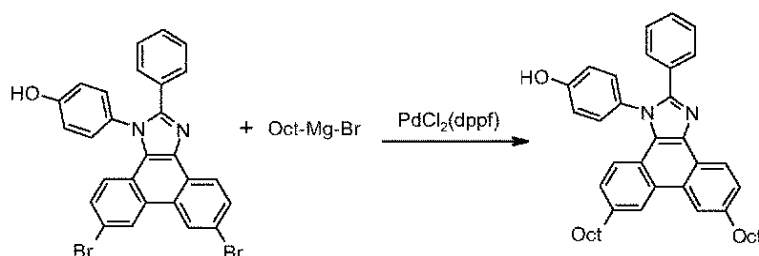
【0296】

a) 酢酸(>98%) 30 ml中の3,6-ジブロモ-フェナントレン-9,10-ジオン1.1 g (3.0 mmol)に、ベンズアルデヒド0.35 g (3.3 mmol)、4-ヒドロキシアニリン0.36 g (3.3 mmol)及び酢酸アンモニウム0.92 g (12.0 mmol)を加えた。反応混合物を窒素下で一晩加熱還流し、25 に冷却した。生成物を濾取し、酢酸、水、炭酸水素ナトリウム溶液及び水で洗浄した(収量: 1.06 g (64.9%))。

30

【0297】

【化135】



40

【0298】

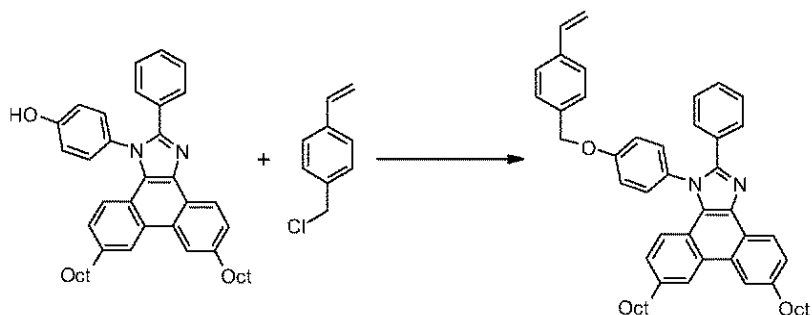
b) THF中の1M臭化オクチルマグネシウム20 mlを、THF 10 ml中の実施例5aの生成物2 g (3.67 mmol)及びPd(dppf)Cl₂ 100 mgに加えた。反応混合物を48時間環流し、4M HClで停止させた。生成物をクロロホルムで抽出し、

50

溶離剤としてクロロホルムを用いるカラムクロマトグラフィーにより精製した（収量：1.23 g（54.8%））。

【0299】

【化136】



10

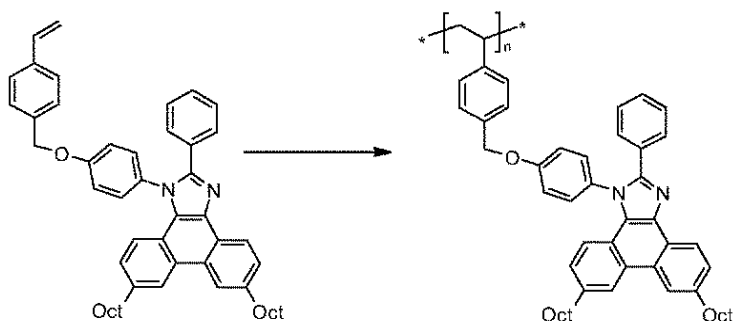
【0300】

c) 実施例 5 b の生成物 1.23 g（2 mmol）、4 - ビニルベンジルクロリド 0.61 g（4 mmol）及び KOH 0.23 g（4 mmol）を DMF 20 ml 中で一晩攪拌し、水で停止させた。生成物を濾過し、溶離剤としてジクロロメタンを用いるカラムクロマトグラフィーにより精製した（収量：1.26 g（86.3%））。

【0301】

実施例 6

【化137】



20

30

【0302】

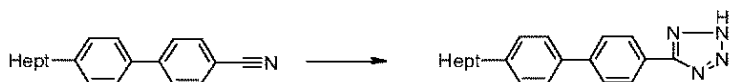
実施例 5 c の生成物 0.5 g 及び AIBN 15 mg を THF 1 ml に溶解し、脱ガスし、60 で 24 時間攪拌した。得られたポリマーを、MeOH に沈殿させることによって精製した（収量：0.4 g（80%））。

Mw = 47000、PEI = 1.91；Oct = n - オクチル。

【0303】

実施例 7

【化138】



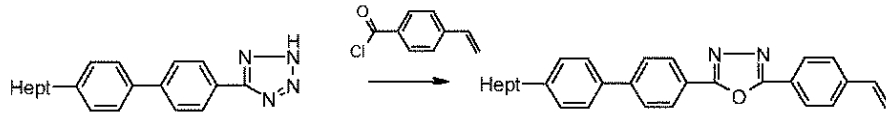
40

【0304】

a) 4 - シアノ - 4' - ヘプチルビフェニル 5 g（18 mmol）、NaN₃ 1.76 g（27 mmol）、NH₄Cl 1.54 g（27 mmol）を乾燥 DMF 35 ml に溶解し、100 で一晩攪拌した。反応混合物を H₂O 300 ml に注ぎ、4M HCl で酸性化し、濾過し、真空下、60 で乾燥した（収量：5.7（100%））。

【0305】

【化 1 3 9】



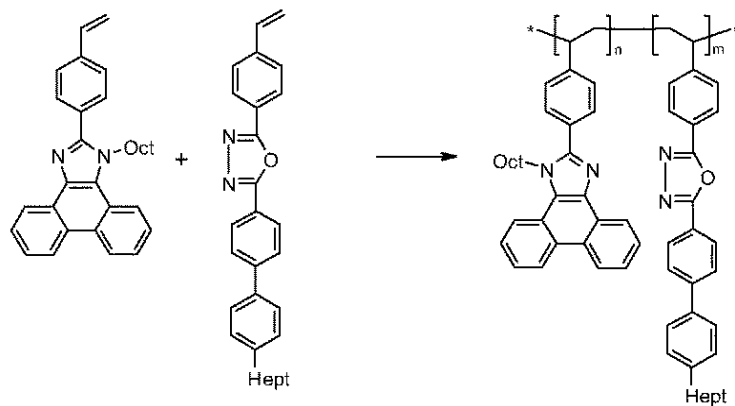
【 0 3 0 6】

b) 実施例 7 a の生成物 4 . 7 6 g (2 7 mmol)、p - ビニルベンゾイルクロリド 5 . 6 2 g (3 3 . 7 5 mmol) 及び少量のヒドロキノンを経ピリジン 4 0 ml に溶解し、2 時間環流した。得られた生成物を水 3 0 0 ml に注ぎ、濾過し、溶離剤としてクロロホルムを用いるシリカゲルのカラムクロマトグラフィーにより精製した (収量 : 1 . 2 g (2 0 %))

10

【 0 3 0 7】

【化 1 4 0】



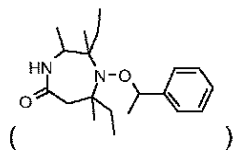
20

【 0 3 0 8】

c) 実施例 1 d の生成物 0 . 7 g、実施例 7 b のオキサジアゾール 0 . 3 g 及びアルコキシアミン開始剤

【 0 3 0 9】

【化 1 4 1】



30

【 0 3 1 0】

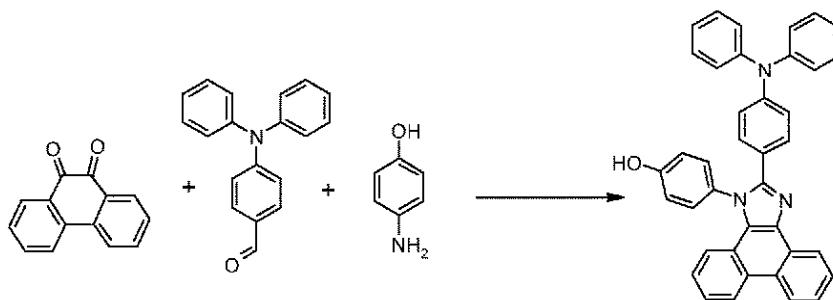
6 . 3 mg を、アセト無水物 0 . 1 ml を有するクロロベンゼン 1 ml に溶解し、脱ガスし、1 2 0 で 4 8 時間撹拌した。得られたポリマーを、MeOH に沈殿させることによって精製した (収量 : 0 . 9 3 g (9 3 %))。Mw = 5 0 0 0 0、PDI = 1 . 7 5、n = 0 . 6 6、m = 0 . 3 4。Oct = n - オクチル ; Hept = n - ヘプチル。

【 0 3 1 1】

実施例 8

40

【化 1 4 2】



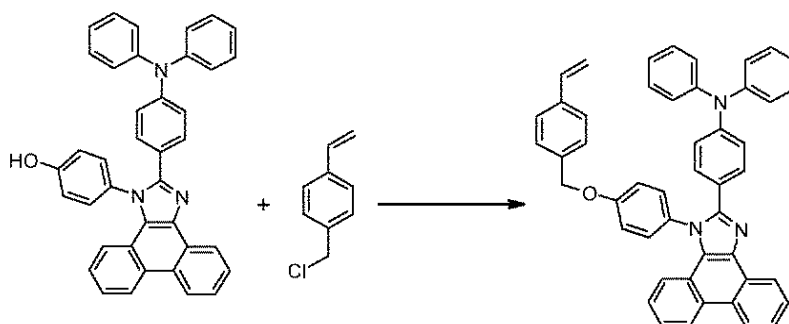
10

【0 3 1 2】

a) 酢酸 (> 98%) 50 ml 中のフェナントレン - 9, 10 - ジオン 1.0 g (4.8 mmol) に、4 - (N, N - ジフェニルアミノ) ベンズアルデヒド 1.44 g (5.3 mmol)、4 - ヒドロキシアニリン 0.6 g (5.5 mmol) 及び酢酸アンモニウム 1.48 g (19.2 mmol) を加えた。反応混合物を窒素下で一晩加熱還流し、25 に冷却した。生成物を濾取し、酢酸、水、炭酸水素ナトリウム溶液及び水で洗浄し、更に、溶離剤として CHCl_3 を用いるシリカゲルのカラムクロマトグラフィーにより精製した (収量: 0.74 g (30.0%))。

【0 3 1 3】

【化 1 4 3】



20

【0 3 1 4】

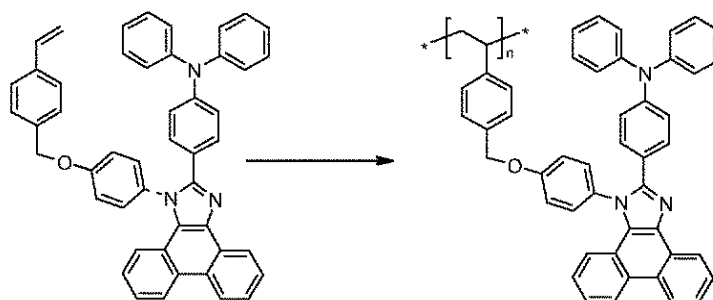
b) 実施例 8 a の生成物 1.0 g (1.8 mmol)、4 - ビニルベンジルクロリド 0.55 g (3.6 mmol) 及び KOH 0.2 g (3.6 mmol) を DMF 20 ml 中で一晩攪拌し、水で停止させた。生成物を濾過し、ヘキサンで洗浄し、溶離剤としてジクロロメタンを用いるカラムクロマトグラフィーにより精製した (収量: 0.6 g (50%))。

30

【0 3 1 5】

実施例 9

【化 1 4 4】



40

【0 3 1 6】

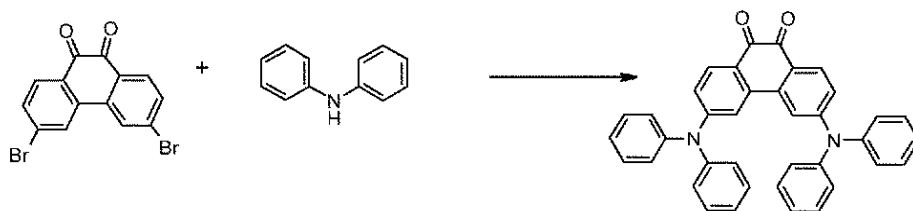
実施例 8 b の生成物 0.5 g 及び AIBN 15 mg を THF 1 ml に溶解し、脱ガスし、60 で 24 時間攪拌した。得られたポリマーを、MeOH に沈殿させることによって精製した (収量: 0.4 g (80%))。Mw = 58000、PDI = 2.0。

50

【 0 3 1 7 】

実施例 1 0

【 化 1 4 5 】



【 0 3 1 8 】

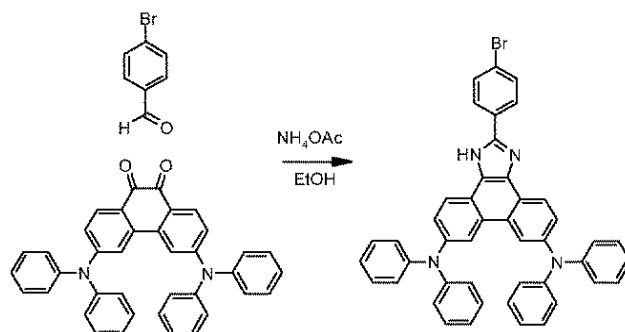
10

a) o-キシレン 200 ml 中の 3, 6 - ジブromo - フェナントレン - 9, 10 - ジオン 5.0 g (13.6 mmol) に、ジフェニルアミン 10.8 g (54.6 mmol) 及びナトリウム tert - ブトキシド 5.25 g (54.6 mmol) を加えた。窒素を反応混合物の中で 10 分間バブリングして、Pd (dba)₃ 80 mg 及びトリ - tert - ブチルホスフィンを加えた。反応混合物を窒素下、130 °で一晩加熱し、25 °に冷却した。溶媒を蒸発させ、生成物を、溶離剤として CHCl₃ を用いるシリカゲルのカラムクロマトグラフィーにより、続いてヘキサンに沈殿させることによって精製した (収量: 4.85 g (65.4%))。

【 0 3 1 9 】

【 化 1 4 6 】

20



【 0 3 2 0 】

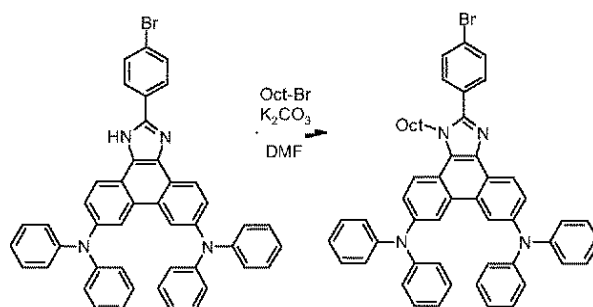
30

b) エタノール (無水) 120 ml 中の実施例 10 a の生成物 4.85 g (8.9 mmol) に、4 - ブロモベンズアルデヒド 2.5 g (13.4 mmol) 及び酢酸アンモニウム 3.4 g (44.7 mmol) を加えた。反応混合物を窒素下で一晩加熱還流し、25 °に冷却した。溶媒を蒸発させ、生成物を、溶離剤として CHCl₃ : MeOH (9.7 : 0.3) を用いるシリカゲルのカラムクロマトグラフィーにより、続いてヘキサンに沈殿させることによって精製した (収量: 4.0 g (63.5%))。

【 0 3 2 1 】

【 化 1 4 7 】

40



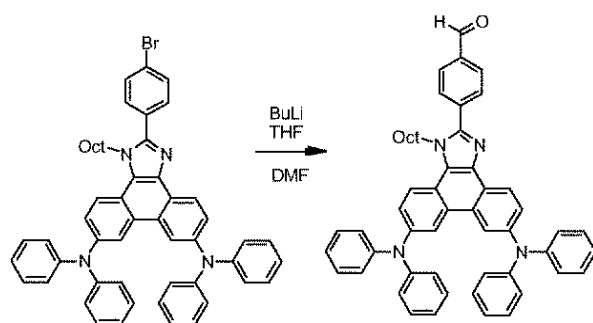
【 0 3 2 2 】

c) 生成物は、実施例 1 b と同様にして調製した (収率: 75.0%)。Oct = n - オクチル

50

【 0 3 2 3 】

【 化 1 4 8 】



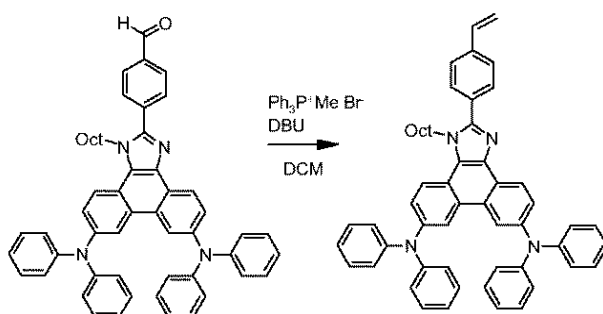
10

【 0 3 2 4 】

d) 生成物は、実施例 1 c と同様にして調製した (収率 : 55.0%)。Oct = n - オクチル

【 0 3 2 5 】

【 化 1 4 9 】



20

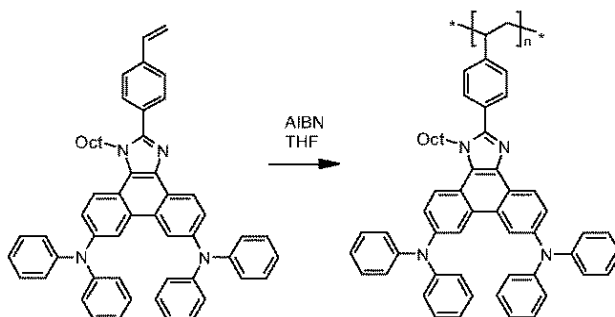
【 0 3 2 6 】

e) 生成物は、実施例 1 d と同様にして調製した (収率 : 60.0%)。Oct = n - オクチル

【 0 3 2 7 】

実施例 1 1

【 化 1 5 0 】



40

【 0 3 2 8 】

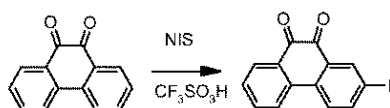
生成物は、実施例 9 に従って調製した。収量 : 0.3 g (60%)。

Mw = 134000、PDI = 2.38。Oct = n - オクチル。

【 0 3 2 9 】

実施例 1 2

【 化 1 5 1 】



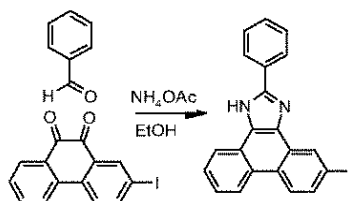
50

【 0 3 3 0 】

a) トリフルオロメタンスルホン酸 40 ml 中のフェナントレン - 9, 10 - ジオン 10.0 g (48.0 mmol) に、N - ヨードスクシンイミド 10.8 g (48.0 mmol) を 0 で加えた。反応混合物を室温で一晩攪拌し、氷に注ぎ、濾過し、酢酸から再結晶させた。収量 4.65 g (30%)。

【 0 3 3 1 】

【 化 1 5 2 】



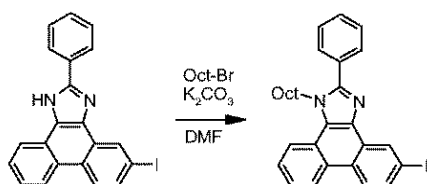
10

【 0 3 3 2 】

b) エタノール (無水) 120 ml 中の 2 - ヨード - フェナントレン - 9, 10 - ジオン 4.6 g (13.7 mmol) に、ベンズアルデヒド 2.19 g (20.6 mmol) 及び酢酸アンモニウム 5.3 g (68.6 mmol) を加えた。反応混合物を窒素下で一晩加熱還流し、25 に冷却した。生成物を濾取し、エタノールで洗浄した (収量: 3.9 g (67.9%))。

【 0 3 3 3 】

【 化 1 5 3 】



20

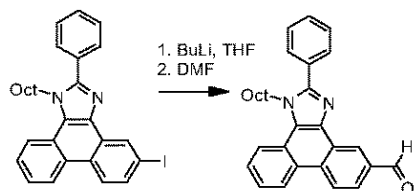
【 0 3 3 4 】

c) 生成物は、実施例 1 b と同様にして調製した (収量: 4.25 g (83.0%)) (Oct = n - オクチル)

30

【 0 3 3 5 】

【 化 1 5 4 】



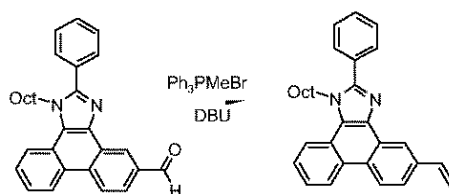
【 0 3 3 6 】

d) 生成物は、実施例 1 c と同様にして調製した (収量: 0.9 g (41.6%))。Oct = n - オクチル。

40

【 0 3 3 7 】

【 化 1 5 5 】



【 0 3 3 8 】

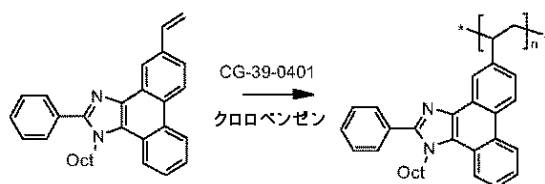
50

e) 生成物は、実施例 1 d と同様にして調製した (収量 : 0 . 8 5 g (9 5 . 5 %)) 。 Oct = n - オクチル

【 0 3 3 9 】

実施例 1 3

【 化 1 5 6 】



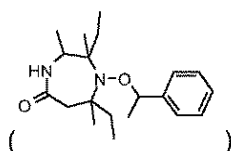
10

【 0 3 4 0 】

実施例 1 2 e の生成物 0 . 5 g 及びアルコキシアミン開始剤 CG - 3 9 - 0 4 0 1

【 0 3 4 1 】

【 化 1 5 7 】



20

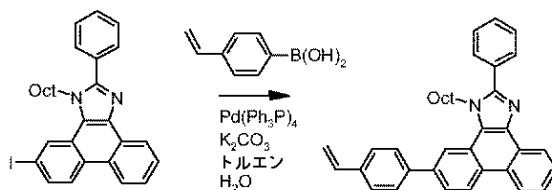
【 0 3 4 2 】

3 . 1 mg を、アセト無水物 0 . 1 ml を有するクロロベンゼン 1 ml に溶解し、脱ガスし、120 で 4 8 時間撹拌した。得られたポリマーを、MeOH に沈殿させることによって精製した (収量 : 0 . 3 g (6 0 %)) 。 Mw = 2 1 5 0 0 0 、 PDI = 3 . 2 6 。 Oct = n - オクチル。

【 0 3 4 3 】

実施例 1 4

【 化 1 5 8 】



30

【 0 3 4 4 】

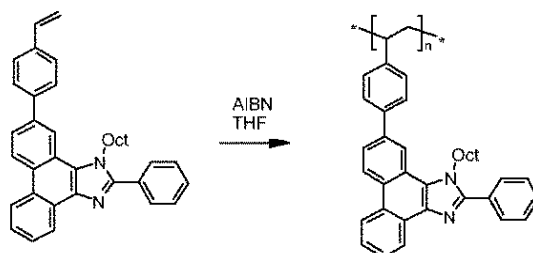
トルエン 100 ml 中の実施例 1 2 c の生成物 1 . 2 g (2 . 2 5 mmol) に、1M K₂CO₃ 水溶液 50 ml を加えた。窒素を反応混合物の中で 10 分間バブリングして、4 - ビニルフェニルボロン酸 0 . 6 7 g (4 . 5 mmol) 及び Pd [Ph₃P]₄ 0 . 5 2 g (0 . 4 5 mmol) を加えた。反応混合物を 80 で 2 時間、室温で一晩撹拌した。反応混合物を Na₂S₂O₃ 水溶液で洗浄し、クロロホルムで抽出し、メタノールに沈殿させた。収量 0 . 7 8 g (6 8 . 4 %) 。 Oct = n - オクチル。

40

【 0 3 4 5 】

実施例 1 5

【化 1 5 9】



【 0 3 4 6】

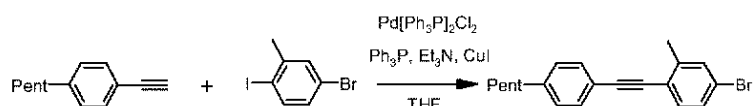
実施例 14 の生成物 0.6 g 及び AIBN 15 mg を THF 2 ml に溶解し、脱ガスし、60 で 24 時間撹拌した。得られたポリマーを、MeOH に沈殿させることによって精製した（収量：0.5 g（83.3%））。 $M_w = 286000$ 、 $PDI = 1.8$ 。Oct = n - オクチル。

10

【 0 3 4 7】

実施例 16

【化 1 6 0】



20

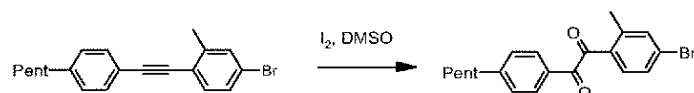
【 0 3 4 8】

a) 4 - n - ペンチルフェニルアセチレン 5 g（2.9 mmol）、5 - ブロモ - 2 - ヨードトルエン 11.2 g（37.7 mmol）、CuI 0.55 g（2.9 mmol）及びトリフェニルホスフィン 0.76 g（2.9 mmol）を、乾燥 THF 100 ml に不活性雰囲気下で溶解した。トリエチルアミン 29.3 g（0.29 mol）及び $Pd(PPh_3)_4Cl_2$ 1.02 g（1.5 mmol）を加え、反応混合物を室温で一晩撹拌した。2M HCl を加えて反応を停止させた。生成物をジクロロメタンで抽出し、溶離剤として石油ベンゼンを用いるカラムクロマトグラフィーにより精製した。収量 6.7 g（68%）。Pent = n - ペンチル。

【 0 3 4 9】

30

【化 1 6 1】



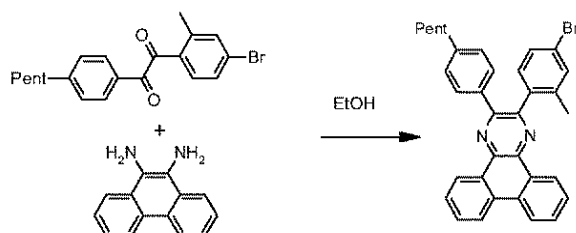
【 0 3 5 0】

b) 実施例 16 a の生成物 6.7 g（1.96 mmol）及びヨウ素 2.5 g（9.8 mmol）を DMSO 80 ml に溶解し、155 で一晩加熱した。水を加えて反応を停止させ、生成物を、石油ベンゼンで抽出し、溶離剤として石油ベンゼン：酢酸エチル（10：0.5）を用いるシリカゲルのカラムクロマトグラフィーにより精製した。収量 5.12 g（76.4%）。Pent = n - ペンチル。

40

【 0 3 5 1】

【化 1 6 2】



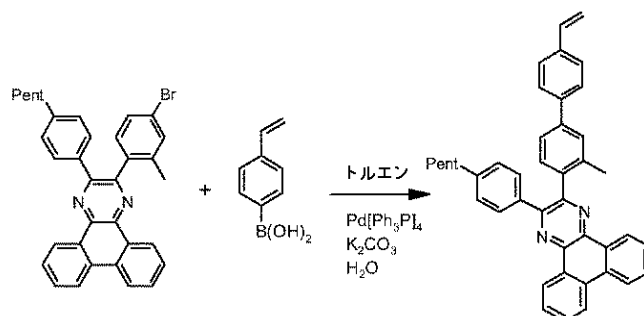
【 0 3 5 2】

50

c) 9, 10 - ジアミノフェナントレン 1 g (4 . 8 mmol) 及び実施例 1 6 b の生成物 1 . 7 g (4 . 5 6 mmol) をエタノールに溶解し、48時間環流した。反応混合物を冷却し、濾過し、酢酸エチルからメタノールに再沈殿させた。収量 2 g (80 . 6 %)。P e n t = n - ペンチル。

【 0 3 5 3 】

【 化 1 6 3 】



10

【 0 3 5 4 】

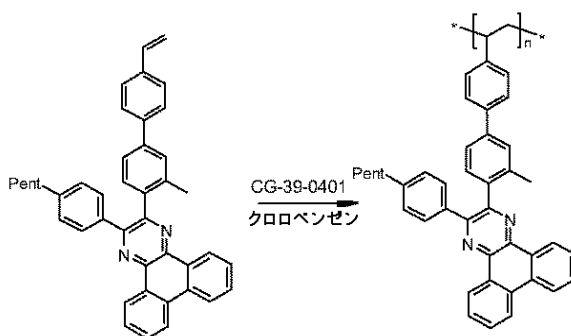
d) トルエン 50 ml 中の実施例 1 6 c の生成物 1 . 0 g (1 . 8 3 mmol) に、1 M K_2CO_3 水溶液 25 ml を加えた。窒素を反応混合物の中で 10 分間バブリングして、4 - ビニルフェニルボロン酸 0 . 5 4 g (3 . 6 7 mmol) 及び $Pd[PPh_3]_4$ 0 . 4 2 g (0 . 3 7 mmol) を加えた。反応混合物を 80 で 2 時間、そして室温で一晩攪拌した。反応混合物を $Na_2S_2O_3$ 水溶液で洗浄し、クロロホルムで抽出し、溶離剤としてヘキサン：酢酸エチル (9 : 1) を用いるシリカゲルのカラムクロマトグラフィーにより精製し、更にメタノールに沈殿させた。収量 0 . 8 4 g (80 . 7 %)。P e n t = n - ペンチル。

20

【 0 3 5 5 】

実施例 1 7

【 化 1 6 4 】



30

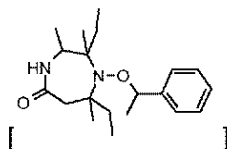
【 0 3 5 6 】

実施例 1 6 d の 0 . 5 g 及びアルコキシアミン開始剤 C G - 3 9 - 0 4 0 1

【 0 3 5 7 】

【 化 1 6 5 】

40



【 0 3 5 8 】

2 . 9 mg を、クロロベンゼン 0 . 5 ml に溶解し、脱ガスし、120 で 20 時間攪拌した。得られたポリマーを、MeOH に沈殿させることによって精製した (収量 : 0 . 3 5 g (70 %))。

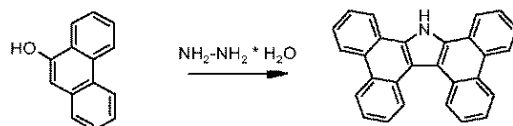
Mw = 29000、PDI = 1 . 46。

50

【 0 3 5 9 】

実施例 1 8

【 化 1 6 6 】

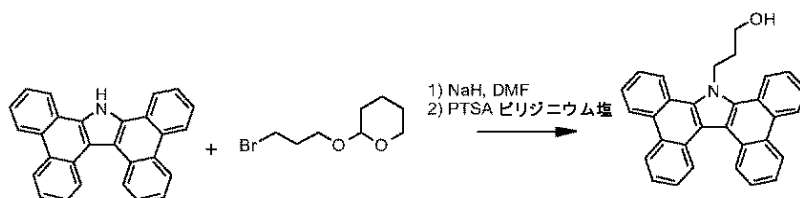


【 0 3 6 0 】

a) 9-フェナントロール 3 g (15.44 mmol) 及びヒドラジン-水和物 0.48 ml を、オートクレーブの中に密閉し、180 で一晩加熱した。生成物をヘキサンで洗浄した。収量 2.5 g (80%)。

【 0 3 6 1 】

【 化 1 6 7 】

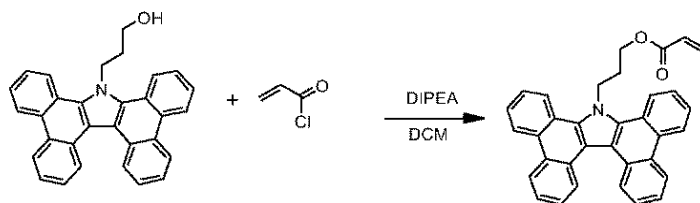


【 0 3 6 2 】

b) 実施例 18 a の生成物 1.8 g (4.9 mmol) を乾燥 DMF 27 ml に溶解し、DMF 11 ml 中の NaH 0.18 g (7.5 mmol) の懸濁液を加え、反応混合物を室温で 20 分間撹拌した。2-(3-プロモプロポキシ)テトラヒドロ-2H-ピラン 1.64 g (7.3 mmol) を加え、反応混合物を 120 で一晩撹拌した。DMF を蒸発させ、残渣をエタノールに再溶解した。p-トルエンスルホン酸ピリジン塩 3 g (11.9 mmol) を加え、70 で 3 時間撹拌した。水を加えて反応を停止させ、生成物を、クロロホルムで抽出し、更に、溶離剤としてヘプタン：酢酸エチル (8 : 2) を用いるシリカゲルのカラムクロマトグラフィーにより精製した。収量 1.3 g (46.3%)

【 0 3 6 3 】

【 化 1 6 8 】



【 0 3 6 4 】

c) 実施例 18 b の生成物 1.2 g (2.8 mmol) を、ジイソプロピルエチルアミン 1 ml を有するジクロロメタン 15 ml に溶解し、0 に冷却した。アクリル酸クロリド 0.4 g (4.32 mmol) を加え、反応混合物を 0 で 30 分間撹拌した。生成物を、溶離剤としてヘプタン：酢酸エチル (1 : 1) を用いるシリカゲルのカラムクロマトグラフィーにより精製した。収量 1.05 g (77.7%)。

【 0 3 6 5 】

実施例 1 9

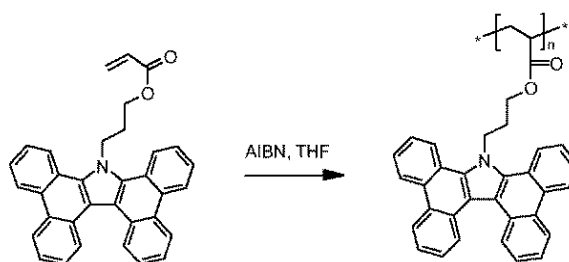
10

20

30

40

【化 1 6 9】



【 0 3 6 6 】

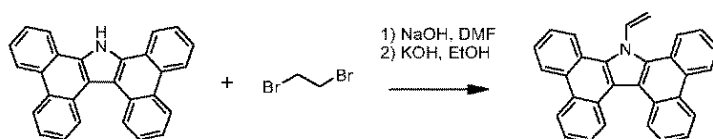
実施例 18 c の生成物 0.5 g 及び AIBN 15 mg を THF 3 ml に溶解し、脱ガスし、60 で 24 時間攪拌した。得られたポリマーを、MeOH に沈殿させることによって精製した（収量：0.41 g（82.0%））。

Mw = 12000、PDI = 1.82。

【 0 3 6 7 】

実施例 20

【化 1 7 0】



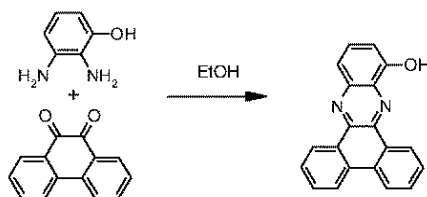
【 0 3 6 8 】

DMF 5 ml 中の実施例 18 a の生成物 1.3 g（3.54 mmol）及び NaOH 4 g に、ジプロモエタン 6.65 g（35.5 mmol）を加え、120 で一晩攪拌した。溶媒をエタノールに投入し、過剰量の KOH を加え、反応混合物を 3 時間環流した。生成物を、溶離剤としてヘプタン：トルエン（8：2）を用いるシリカゲルのカラムクロマトグラフィーにより精製した。収量 1.0 g（71.9%）。

【 0 3 6 9 】

実施例 21

【化 1 7 1】

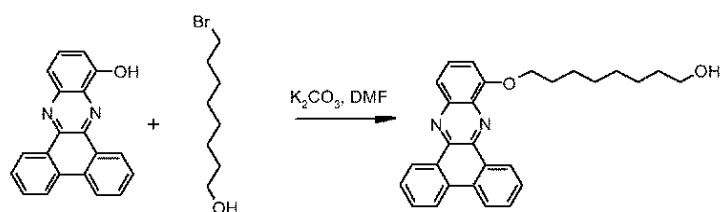


【 0 3 7 0 】

a) フェナントレン - 9, 10 - ジオン 3 g（14.4 mmol）及び 2, 3 - ジアミノフェノール 2.15 g（17.36 mmol）をエタノール 120 ml に溶解し、24 時間環流した。反応混合物を冷却し、濾過し、エタノールで洗浄した。収量 3.94 g（92.3%）。

【 0 3 7 1 】

【化 1 7 2】



【 0 3 7 2 】

10

20

30

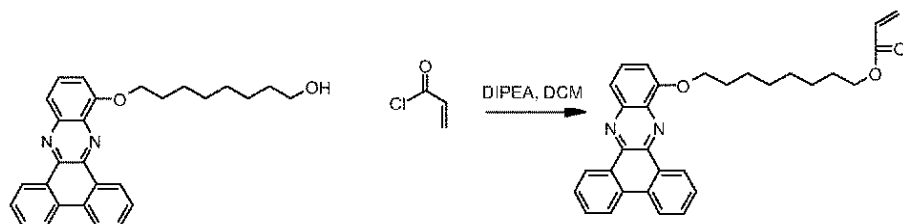
40

50

b) 乾燥ジメチルホルムアミド (DMF) 20 ml 中の実施例 21 a の生成物 2 g (6.75 mmol) 及び K_2CO_3 2.33 g (16.87 mmol) に、8-ブロモ-1-オクタノール 2.82 g (13.5 mmol) を加え、120 で一晩撹拌した。DMF を蒸発させた。残渣を酢酸エチルに再溶解し、ヘプタンに再沈殿させた。収量 0.89 g (31%) 。

【0373】

【化173】



10

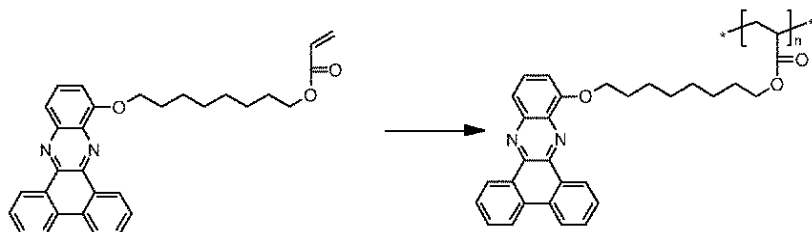
【0374】

c) 生成物は、実施例 18 c と同様にして調製した (収量: 0.5 g (29.7%)) 。

【0375】

実施例 22

【化174】



20

【0376】

実施例 21 c の生成物 0.5 g 及び AIBN 15 mg をクロロベンゼン 5 ml に溶解し、脱ガスし、60 で 24 時間撹拌した。得られたポリマーを、MeOH に沈殿させることによって精製した (収量: 0.41 g (82.0%)) 。

30

フロントページの続き

(51)Int.Cl.		F I	
C 0 8 G 65/22	(2006.01)	C 0 8 G 65/22	
C 0 8 G 75/08	(2006.01)	C 0 8 G 75/08	
C 0 7 D 235/02	(2006.01)	C 0 7 D 235/02	B
C 0 7 D 263/52	(2006.01)	C 0 7 D 263/52	
C 0 7 D 241/38	(2006.01)	C 0 7 D 241/38	
C 0 7 D 209/80	(2006.01)	C 0 7 D 209/80	
H 0 1 L 51/50	(2006.01)	H 0 5 B 33/14	B

- (72)発明者 チェボタリョーワ, ナターリヤ
フランス国、エフ - 6 8 2 2 0 アジャンタル・ル・バ、リュ・デュ・ジュラン 3 3
- (72)発明者 プレトー, ロゲール
スイス国、ツェーハー - 4 0 5 4 バーゼル、ゲネラル・ギザン - シュトラーセ 7 2
- (72)発明者 ファン・デル・スハーフ, パウル・アドリアーン
フランス国、エフ - 6 8 2 2 0 アジャンタル - ル - オー、リュ・デュ・ミュゲ 1
- (72)発明者 シェーフアー, トーマス
スイス国、ツェーハー - 4 4 1 0 リースタル、ヴァイトヴェーク 1 5 デー
- (72)発明者 シュミッドハルター, ベアト
スイス国、ツェーハー - 4 4 1 6 ブーベンドルフ、ダーリエンシュトラーセ 2 5
- (72)発明者 ムーレル, ペーター
スイス国、ツェーハー - 4 1 0 4 オーバーヴィル、ホーヘシュトラーセ 1 6 6

審査官 高原 慎太郎

- (56)参考文献 国際公開第 2 0 0 5 / 1 0 4 2 6 4 (WO, A 1)
米国特許出願公開第 2 0 0 5 / 0 1 5 6 5 1 6 (US, A 1)
米国特許出願公開第 2 0 0 5 / 0 1 0 6 4 1 8 (US, A 1)
国際公開第 2 0 0 5 / 0 3 0 8 2 8 (WO, A 1)
国際公開第 2 0 0 5 / 0 1 4 6 8 9 (WO, A 1)
国際公開第 1 9 9 4 / 0 2 3 3 3 3 (WO, A 1)
特開昭 6 3 - 3 1 6 1 3 3 (JP, A)
特開 2 0 0 0 - 0 8 7 0 2 7 (JP, A)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

C 0 8 F 2 0 / , 1 2 0 / , 2 2 0 /
C 0 8 F 1 2 / , 1 1 2 / , 2 1 2 /
C 0 8 G 6 1 / , 6 5 / , 7 5 /
C A p l u s / R E G I S T R Y (S T N)