

【公報種別】特許法第17条の2の規定による補正の掲載

【部門区分】第3部門第3区分

【発行日】平成17年12月22日(2005.12.22)

【公表番号】特表2005-513170(P2005-513170A)

【公表日】平成17年5月12日(2005.5.12)

【年通号数】公開・登録公報2005-018

【出願番号】特願2002-587490(P2002-587490)

【国際特許分類第7版】

C 0 8 G 61/00

H 0 5 B 33/14

【F I】

C 0 8 G 61/00

H 0 5 B 33/14

B

【手続補正書】

【提出日】平成17年4月27日(2005.4.27)

【手続補正1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

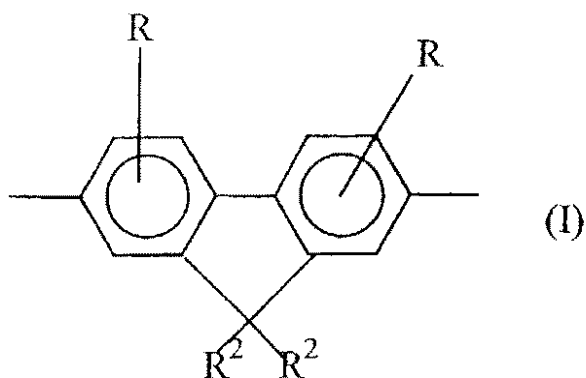
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

式I

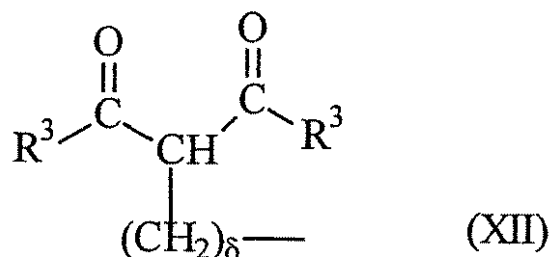
【化1】



を有する1種または複数種の第1モノマー単位を含むポリマーであって、
式中、

Rは、各出現時に同じまたは異なるものであり得る、芳香環中の炭素原子上の置換基であり、かつ、水素、アルキル、アリール、ヘテロアルキル、ヘテロアリール、F、-CN、-OR¹、-CO₂R¹、-C(H)F、-OC(H)F、-SR¹、-N(R¹)₂、-P(R¹)₂、-SOR¹、-SO₂R¹、-NO₂、および式XII

【化 2】



を有するベータ - ジカルボニルから選択され、または隣接する R 基は一緒になって 5 員環シクロアルキル、6 員環シクロアルキル、5 員環アリアル、6 員環アリアル、5 員環ヘテロアリアルおよび 6 員環ヘテロアリアルから選択される環を形成することができ、

ここで、 R^1 は、各出現時に同じまたは異なるものであり得るヘテロ原子上の置換基であり、かつ、アルキル、アリアル、ヘテロアルキルおよびヘテロアリアルから選択され、および

δ は 1 と 20 との間の整数であり、かつ、 n および m は、下の等式 A 1 :

$$n + m = 2 + 1 \quad (\text{等式 A 1})$$

を満足する整数であり、

R^2 は、各出現時に同じまたは異なるものであり得る、芳香環中にない炭素原子上の置換基であり、かつ、水素、アルキル、アリアル、ヘテロアルキル、ヘテロアリアルおよび $-\text{C}(\text{H})_2\text{F}$ から選択され、

ただし、式 $-\text{C}(\text{F})_2 + 1$ を有する少なくとも 1 つの R 置換基を含むことを特徴とするポリマー。

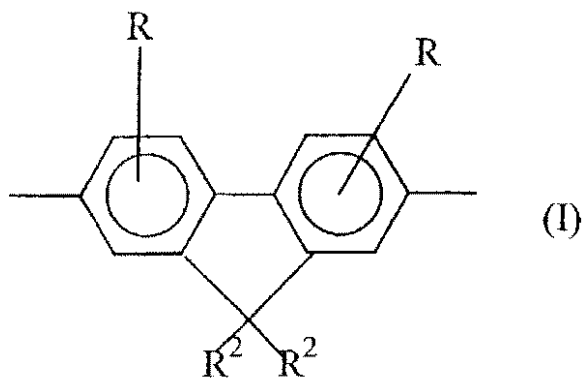
【請求項 2】

請求項 1 に記載のポリマーを含む少なくとも 1 つの電気活性層 (120、130、140) を含むことを特徴とする電子デバイス (100)。

【請求項 3】

請求項 1 に記載のポリマーを調製する方法であって、式 I

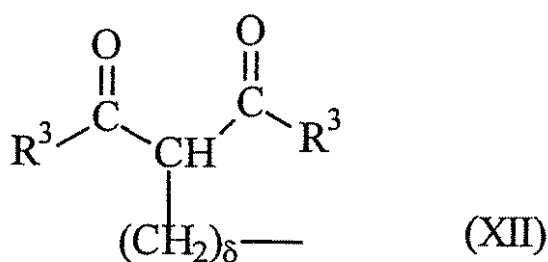
【化 3】



を有する少なくとも1種の第1モノマー単位を有するポリマーを形成する工程であって、式中、

Rは、各出現時に同じまたは異なるものであり得る、芳香環中の炭素原子上の置換基であり、かつ、水素、アルキル、アリール、ヘテロアルキル、ヘテロアリール、F、-CN、-OR¹、-CO₂R¹、-C(H)F、-OC(H)F、-SR¹、-N(R¹)₂、-P(R¹)₂、-SOR¹、-SO₂R¹、-NO₂、および式XII

【化 4】



を有するベータ - ジカルボニルから選択され、または

隣接するR基は一緒になって5員環シクロアルキル、6員環シクロアルキル、5員環アリール、6員環アリール、5員環ヘテロアリールおよび6員環ヘテロアリールから選択される環を形成することができ、

ここで、

R¹は、各出現時に同じまたは異なるものであり得るヘテロ原子上の置換基であり、かつ、アルキル、アリール、ヘテロアルキルおよびヘテロアリールから選択され、およびは1と20との間の整数であり、かつ、およびは、下の等式A1:

$$+ = 2 + 1 \quad (\text{等式 A 1})$$

を満足する整数であり、

R²は、各出現時に同じまたは異なるものであり得る、芳香環中にない炭素原子上の置換基であり、かつ、水素、アルキル、アリール、ヘテロアルキル、ヘテロアリールおよび-C(H)Fから選択され、

ただし、ポリマーは、式 - C F₂ + 1 を有する少なくとも 1 つの R 置換基を含む工程と、

ルテニウム (I I) 触媒の存在下において、ポリマーを、(i) ヨウ化パーフルオロアルキルおよび (i i) 塩化パーフルオロアルキルスルホニルから選択されるパーフルオロアルキル化剤で処理する工程とを含むことを特徴とする方法。

【手続補正 2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0068

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0068】

好ましい実施形態であると今のところ考えられるものに関して本発明を記載してきたが、本発明が開示された実施形態に限定されないことは理解されるべきである。それとは反対に、本発明は、添付の特許請求の精神および範囲内に含まれる様々な修正および同等な手はずを包含することを意図される。次の特許請求の範囲は、すべてのかかる修正ならびに同等な処方および機能を包含するように最も広範な解釈を授けられるべきである。

以下に、本発明の好ましい態様を示す。

1. 図 1 に示される式 I を有する 1 種または複数種の第 1 モノマー単位を含むポリマーであって、
式中、

R は、各出現時に同じまたは異なるものであり得る、芳香環中の炭素原子上の置換基であり、かつ、水素、アルキル、アリール、ヘテロアルキル、ヘテロアリール、F、-CN、-OR¹、-CO₂R¹、-C(H)F、-OC(H)F、-SR¹、-N(R¹)₂、-P(R¹)₂、-SOR¹、-SO₂R¹、-NO₂、および図 12 に示される式 X I I を有するベータ - ジカルボニルから選択され、または隣接する R 基は一緒になって 5 員環シクロアルキル、6 員環シクロアルキル、5 員環アリール、6 員環アリール、5 員環ヘテロアリールおよび 6 員環ヘテロアリールから選択される環を形成することができ、

ここで、R¹ は、各出現時に同じまたは異なるものであり得るヘテロ原子上の置換基であり、かつ、アルキル、アリール、ヘテロアルキルおよびヘテロアリールから選択され、および

は 1 と 20 との間の整数であり、かつ、 および は、下の等式 A 1 :

$$+ = 2 + 1 \quad (\text{等式 A 1})$$

を満足する整数であり、

R² は、各出現時に同じまたは異なるものであり得る、芳香環中にない炭素原子上の置換基であり、かつ、水素、アルキル、アリール、ヘテロアルキル、ヘテロアリールおよび -C(H)F から選択され、

ただし、式 - C F₂ + 1 を有する少なくとも 1 つの R 置換基を含むことを特徴とするポリマー。

2. 少なくとも 1 種の第 2 モノマー単位をさらに含むポリマーであって、該第 2 モノマー単位は、(i) 図 1 に示される式 I を有する芳香族基、(i i) 図 2 に示される式 I I を有する芳香族基、(i i i) 図 6 に示される式 I I I を有する 6 員環複素芳香族基、(i v) 図 7 に示される式 I V を有する 5 員環複素芳香族基、(v) 図 8 に示される式 V を有する芳香族基、(v i) 図 9 に示される式 V I から式 V I I I、および図 10 に示される式 I X から式 X I を有する二価の縮合環芳香族基、ならびに (v i i) それらの組合せから選択され、

ここで、

式 I I、I I I、I V、V、V I、V I I、V I I I および I X のそれぞれにおいて：

R、R¹、R²、 および は上に定義された通りであり、

E は、各出現時に同じまたは異なるものであることができ、かつ、単結合またはアリーレンおよびヘテロアリーレンから選択される結合基であり、

式 I V において：

A は各出現時に独立して C または N であり、かつ、 n は 0 または 1 もしくは 2 から選択される整数であり、ここで、両 A が N である場合、 n は 0 であり、または A の 1 つが N でありかつ A の 1 つが C である場合、 n は 1 であり、または両 A が C である場合、 n は 2 であり、

Q は O、S、 SO_2 または NR^1 であり（ここで、

R^1 は、各出現時に同じまたは異なるものであり得るヘテロ原子上の置換基であり、かつ、アルキル、アリール、ヘテロアルキルおよびヘテロアリールから選択される）、

式 V において：

Q^1 はカルボニル基、O、S、 SO_2 、または NR^1 であり（ここで、

R^1 は、各出現時に同じまたは異なるものであり得るヘテロ原子上の置換基であり、かつ、アルキル、アリール、ヘテロアルキルおよびヘテロアリールから選択される）、

W は H、アルキルもしくはヘテロアルキルであり、または W の両方が一緒になって 1 つの単結合を表すことができ、

式 V I において：

2 つの E は 1, 4 -、1, 5 -、1, 8 -、2, 3 -、または 2, 6 - 位にあり、

式 V I I において：

2 つの E は 1, 4 -、1, 5 -、1, 8 -、2, 3 -、2, 6 -、または 9, 10 - 位にあり、

式 V I I I において：

第 1 の E は 1, 2、または 3 位にあり、第 2 の E は 6, 7、または 8 位にあり、

式 I X において：

第 1 の E は 2, 3、または 4 位にあり、第 2 の E は 7, 8、または 9 位にあり、ならびに、

式 X I I において：

R^3 は、水素、アルキル、アリール、ヘテロアルキルおよびヘテロアリールから選択され、

n は 0 または 1 から 12 の整数である

ことを特徴とする 1 . に記載のポリマー。

3 . 少なくとも 1 種の第 1 モノマー単位の 1 種または複数種における R 基の少なくとも 1 個が、直鎖および分枝の n - ブチル基、直鎖および分枝のイソブチル基、直鎖および分枝のペンチル基、オレフィン性不飽和ありまたはなしのヘキシル基およびオクチル基、フェニル基、チオフエン基、カルバゾール基、アルコキシ基、フェノキシ基ならびにシアノ基から独立して選択されることを特徴とする 2 . に記載のポリマー。

4 . 少なくとも 1 種の第 1 モノマー単位の 1 種または複数種における R 基の少なくとも 1 個が、H、 $C_6 \sim C_{12}$ アルコキシ、フェノキシ、 $C_6 \sim C_{12}$ アルキル、フェニルおよびシアノから独立して選択されることを特徴とする 2 . に記載のポリマー。

5 . 少なくとも 1 種の第 2 モノマー単位の 1 種または複数種が式 I I (a) から I I (z)、I I I (a) から I I I (g)、I V (a) から I V (h)、V (a) から V (e)、V I (a) から V I (d)、および V I I (a) から選択され、

ここで、

式 I I (v) から I I (y)、I V (a)、V (a)、および V (b) において：

R は、式 I、I I、I I I、I V、V、V I、V I I、V I I I から X I のそれぞれについて上に記載されたようなものであり、

式 I V (h) において：

R^1 は、各出現時に同じまたは異なるものであり得るヘテロ原子上の置換基であり、かつ、アルキル、アリール、ヘテロアルキルおよびヘテロアリールから選択され、および

式 V (e) において：

R^1 は、各出現時に同じまたは異なるものであり得るヘテロ原子上の置換基であり、かつ、アルキル、アリール、ヘテロアルキルおよびヘテロアリールから選択されることを特徴とする 2. に記載のポリマー。

6. 少なくとも 1 種の第 2 モノマー単位が式 I I を有し、
式中、R は

水素、
アルキル、
アリール、
ヘテロアルキル、
ヘテロアリール、
F、
-CN、
-NO₂、

図 1 2 に示される式 X I I を有するベータ - ジカルボニル、

-C H F、
-OC H F、および
-P(R¹)₂、-SOR¹、-OR¹、-CO₂R¹、-SR¹、-N(R¹)₂、

および -SO₂R¹ から選択され、

ここで、R¹ は 1 ~ 20 個の炭素の直鎖もしくは分枝アルキルまたは直鎖もしくは分枝ヘテロアルキルである

ことを特徴とする 1. に記載のポリマー。

7. 少なくとも 1 種の第 2 モノマー単位の 1 種または複数種が、式 I I を有し、
式中、R が、

1 ~ 12 個の炭素原子を有するアルキル基、

1 ~ 12 個の炭素原子を有する部分的にまたは完全にフッ素化されたアルキル基、特に CF₃、

6 ~ 20 個の炭素原子を有するアリール基、

4 ~ 20 個の炭素原子を有し、かつ、O、S、または N で置換されたヘテロアリール基

、
1 ~ 12 個の炭素原子を有するアルコキシ基、および

3 ~ 15 個の炭素原子を有するエステル

から選択される

ことを特徴とする 1. に記載のポリマー。

8. 芳香族基を含むエンドキャッピング基をさらに含むことを特徴とする 1. ~ 7. のいずれか一項に記載のポリマー。

9. 1. ~ 7. のいずれか一項に記載のポリマーを含む少なくとも 1 つの電気活性層 (120、130、140) を含むことを特徴とする電子デバイス (100)。

10. 少なくとも 1 つの電気活性層の 1 つまたは複数が光活性層 (130)、または正孔注入 / 輸送層 (120)、または電子注入 / 輸送層 (140) であることを特徴とする 9. に記載のデバイス。

11. デバイスが、発光デバイス、光検出器、および光起電性デバイスから選択されることを特徴とする 9. に記載のデバイス。

12. 1. ~ 7. のいずれか一項に記載のポリマーを調製する方法であって、

図 1 に示される式 I を有する少なくとも 1 種の第 1 モノマー単位を有するポリマーを形成する工程であって、

式中、

R は、各出現時に同じまたは異なるものであり得る、芳香環中の炭素原子上の置換基であり、かつ、水素、アルキル、アリール、ヘテロアルキル、ヘテロアリール、F、-CN、-OR¹、-CO₂R¹、-C H F、-OC H F、-SR¹、-N(R¹)₂、-P(R¹)₂、-SOR¹、-SO₂R¹、-NO₂、および図 1 2 に示される

式 X I I を有するベータ - ジカルボニルから選択され、または隣接する R 基は一緒になって 5 員環シクロアルキル、6 員環シクロアルキル、5 員環アリール、6 員環アリール、5 員環ヘテロアリールおよび 6 員環ヘテロアリールから選択される環を形成することができ、

ここで、

R^1 は、各出現時に同じまたは異なるものであり得るヘテロ原子上の置換基であり、かつ、アルキル、アリール、ヘテロアルキルおよびヘテロアリールから選択され、および n は 1 と 20 との間の整数であり、かつ、 m および k は、下の等式 A 1 :

$$m + k = 2n + 1 \quad (\text{等式 A 1})$$

を満足する整数であり、

R^2 は、各出現時に同じまたは異なるものであり得る、芳香環中にない炭素原子上の置換基であり、かつ、水素、アルキル、アリール、ヘテロアルキル、ヘテロアリールおよび - C H F から選択され、

ただし、ポリマーは、式 - C F₂ +₁ を有する少なくとも 1 つの R 置換基を含む工程と、

ルテニウム (I I) 触媒の存在下において、ポリマーを、(i) ヨウ化パーフルオロアルキルおよび (i i) 塩化パーフルオロアルキルスルホニルから選択されるパーフルオロアルキル化剤で処理する工程とを含むことを特徴とする方法。