

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第5702147号
(P5702147)

(45) 発行日 平成27年4月15日 (2015. 4. 15)

(24) 登録日 平成27年2月27日 (2015. 2. 27)

(51) Int.Cl.

F I

C O 8 G 61/12 (2006. 01)

C O 8 G 61/12

H O 1 L 51/50 (2006. 01)

H O 5 B 33/14

B

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

H O 5 B 33/22

D

C O 9 K 11/06

6 9 0

請求項の数 3 (全 83 頁)

(21) 出願番号 特願2010-535021 (P2010-535021)
 (86) (22) 出願日 平成20年11月18日 (2008. 11. 18)
 (65) 公表番号 特表2011-506626 (P2011-506626A)
 (43) 公表日 平成23年3月3日 (2011. 3. 3)
 (86) 国際出願番号 PCT/US2008/083844
 (87) 国際公開番号 W02009/067419
 (87) 国際公開日 平成21年5月28日 (2009. 5. 28)
 審査請求日 平成23年11月7日 (2011. 11. 7)
 (31) 優先権主張番号 60/988, 951
 (32) 優先日 平成19年11月19日 (2007. 11. 19)
 (33) 優先権主張国 米国 (US)

(73) 特許権者 390023674
 イー・アイ・デュポン・ドウ・ヌムール・
 アンド・カンパニー
 E. I. DU PONT DE NEMO
 URS AND COMPANY
 アメリカ合衆国、デラウェア州、ウイلم
 ントン、マーケット・ストリート 100
 7
 (74) 代理人 100077481
 弁理士 谷 義一
 (74) 代理人 100088915
 弁理士 阿部 和夫

最終頁に続く

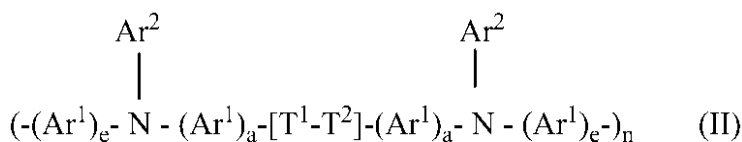
(54) 【発明の名称】 電気活性材料

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

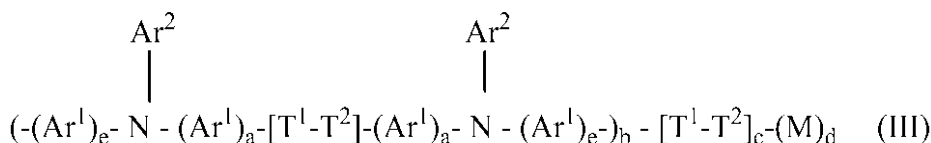
式 I I 又は式 I I I :

【化 1】



10

【化 2】



(式中: A r ¹ は、出現するごとに同種または異種であり、フェニレン、置換フェニレン、ナフチレン、および置換ナフチレンからなる群から選択され;

A r ² は、出現するごとに同種または異種であり、アリール基であり;

20

Mは、出現するごとに同種または異種であり、共役部分であり；

T^1 および T^2 は、出現するごとに独立して同種または異種であり、非平面配置で結合されている共役部分であり；

aは、出現するごとに同種または異種であり、1～6の整数であり；

b、c、およびdは、モル分率であって $b + c + d = 1.0$ であり、但し、cは0ではなく、bは0ではなく；

eは、出現するごとに同種または異種であり、1～6の整数であり；

nは、1を超える整数である）

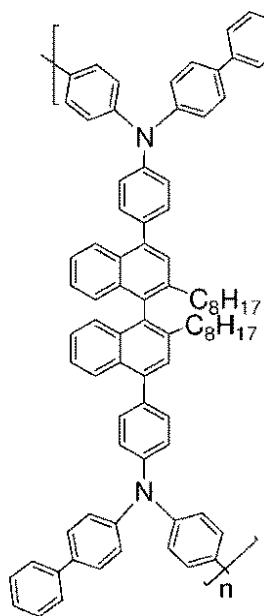
で表される化合物。

【請求項2】

10

化合物C

【化3】

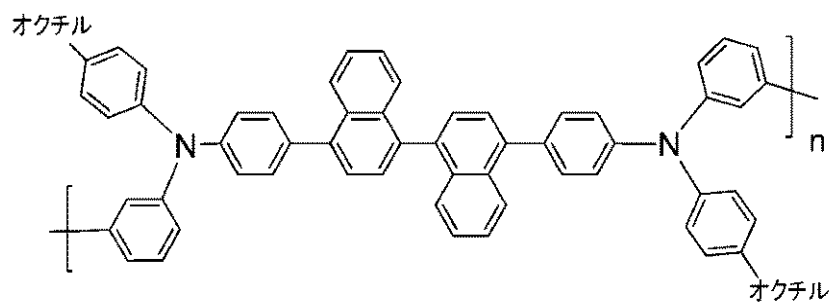


20

30

化合物D：

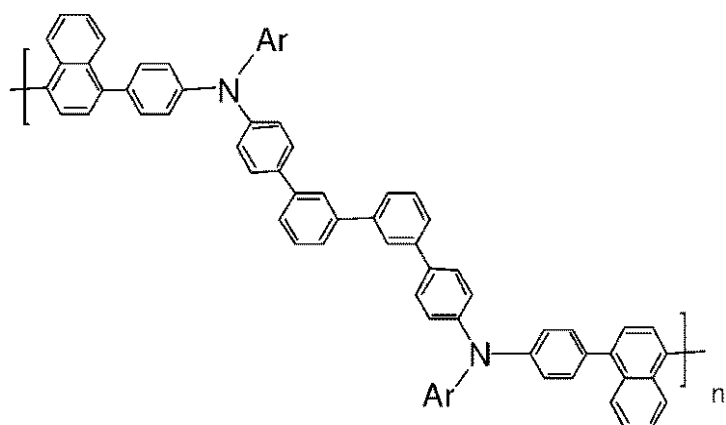
【化4】



40

化合物E：

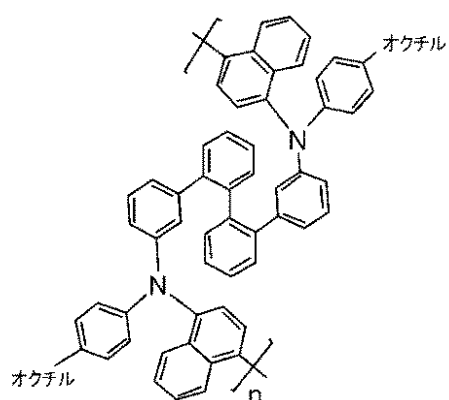
【化 5】



10

化合物 F :

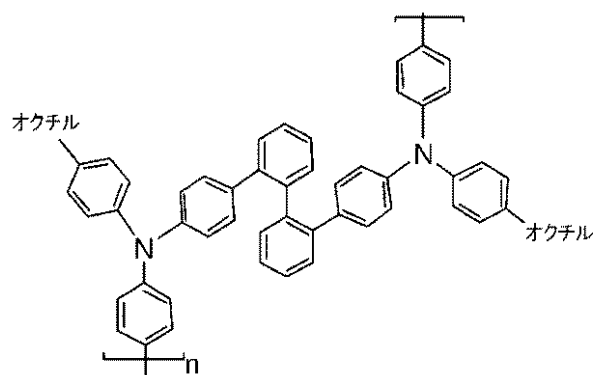
【化 6】



20

化合物 G :

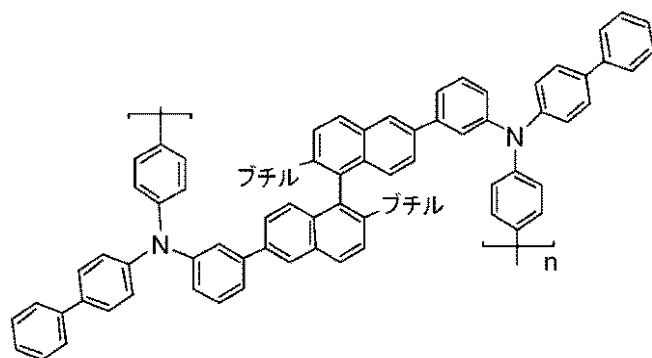
【化 7】



40

化合物 H :

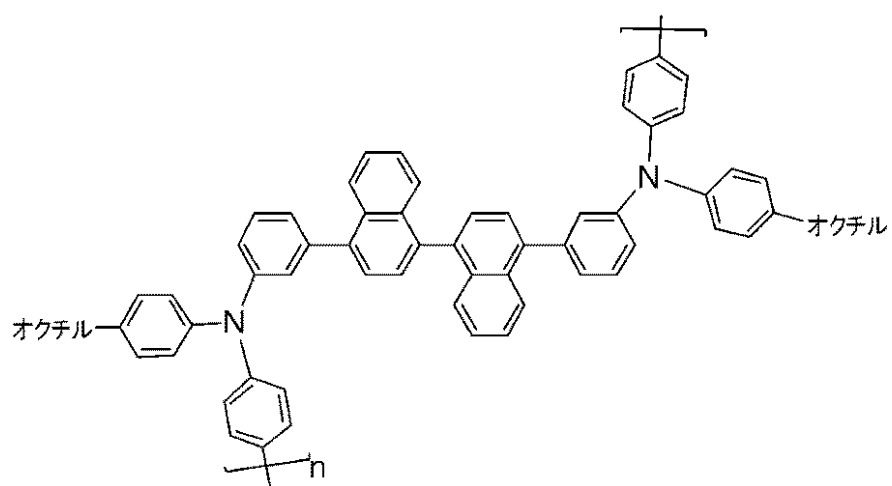
【化 8】



10

化合物 I :

【化 9】

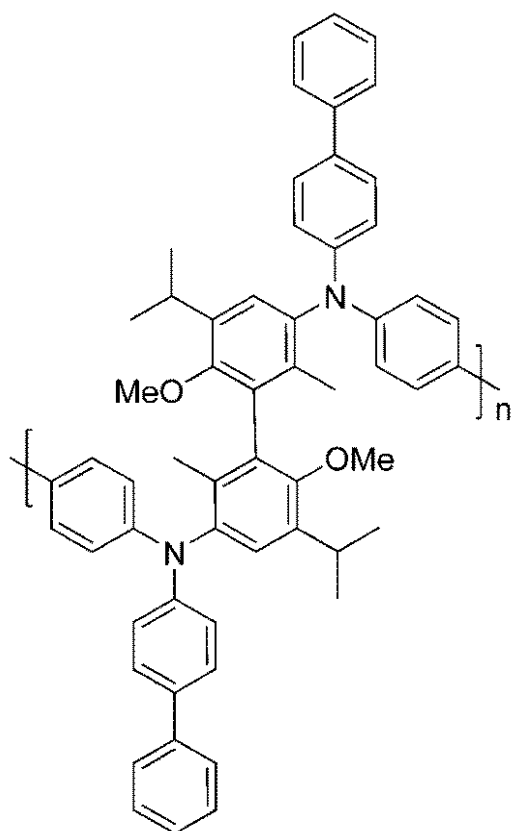


20

化合物 J :

30

【化 1 0】

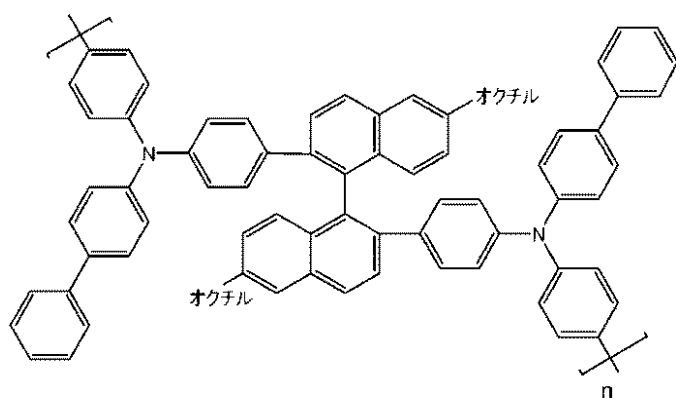


10

20

化合物 L :

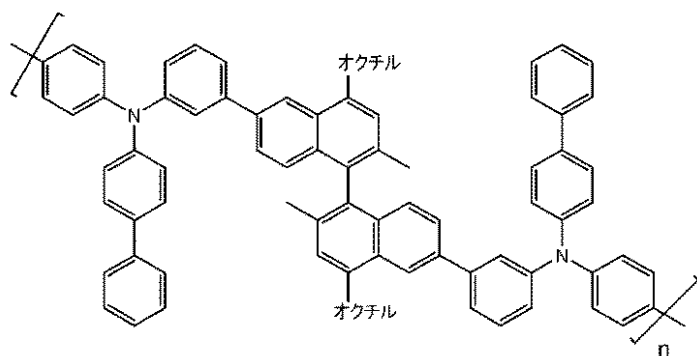
【化 1 1】



30

化合物 M :

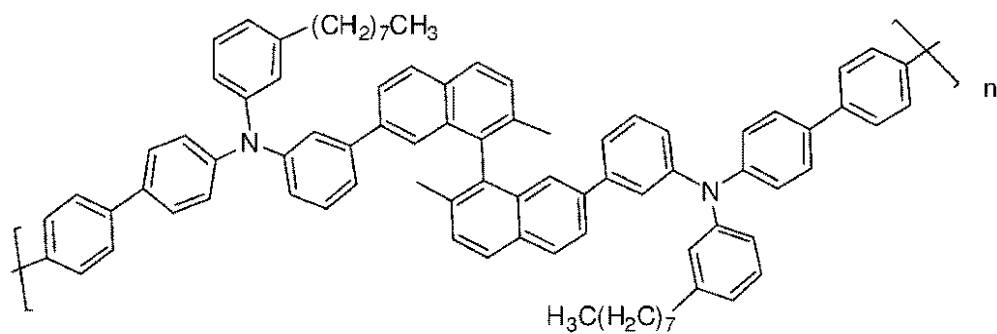
【化 1 2】



10

化合物 M 1 :

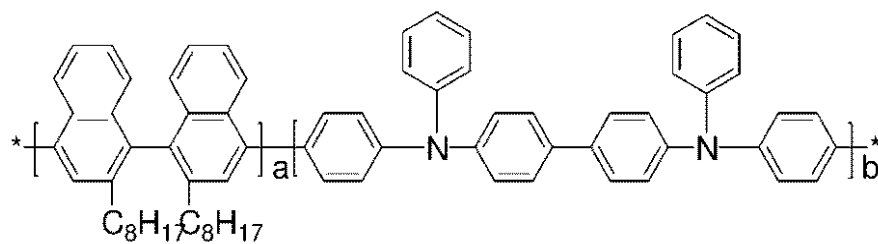
【化 1 3】



20

化合物 N :

【化 1 4】



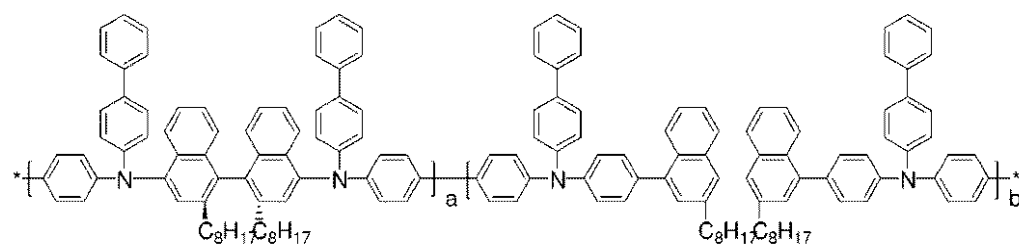
30

$$a = 0.4 \sim 0.8$$

$$b = 0.2 \sim 0.6$$

化合物 O :

【化 1 5】



$$a = 0.3 \sim 0.7$$

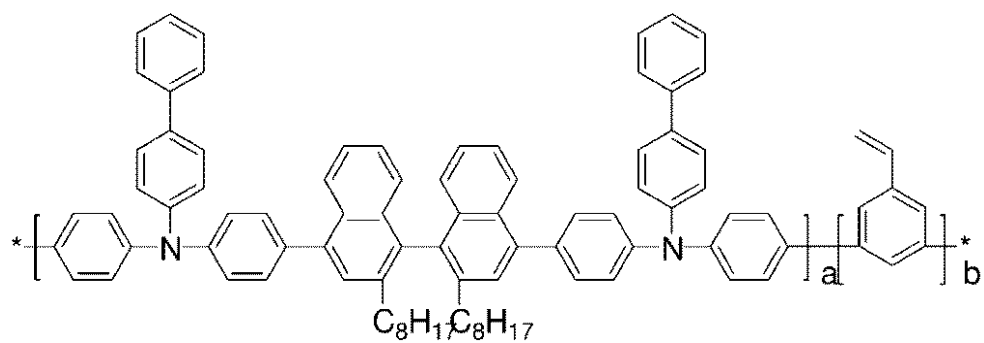
$$b = 0.3 \sim 0.7$$

40

50

化合物 P :

【化 1 6】



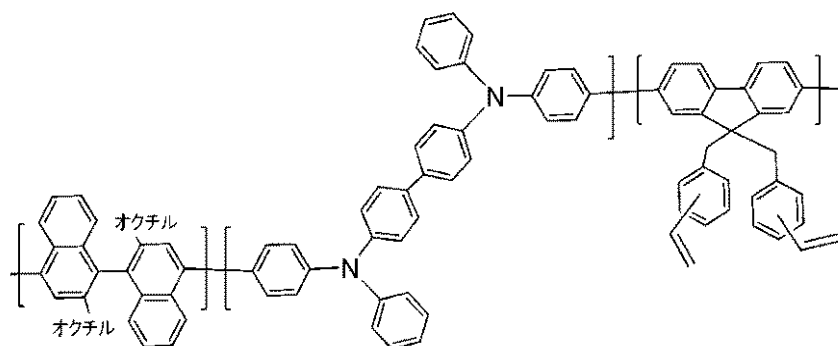
10

$$a = 0.8 \sim 0.95$$

$$b = 0.05 \sim 0.2$$

化合物 Q :

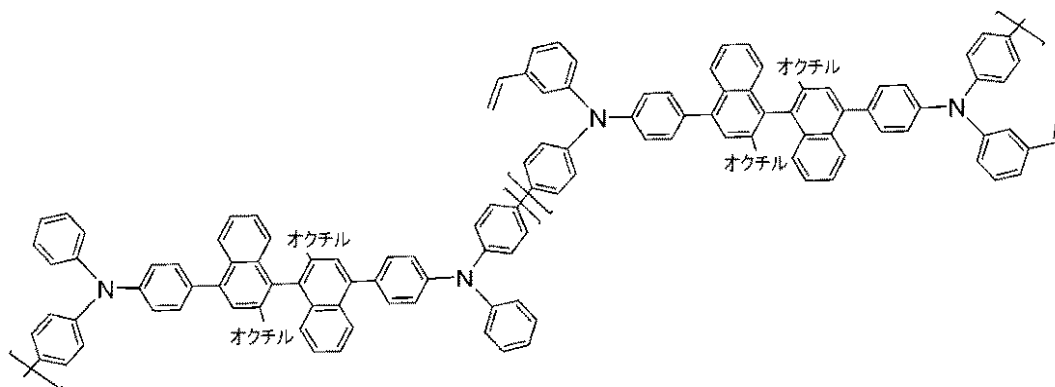
【化 1 7】



20

化合物 R :

【化 1 8】

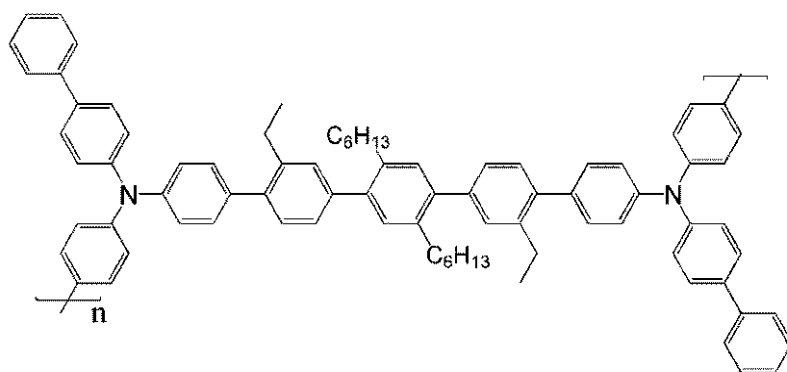


30

化合物 S :

40

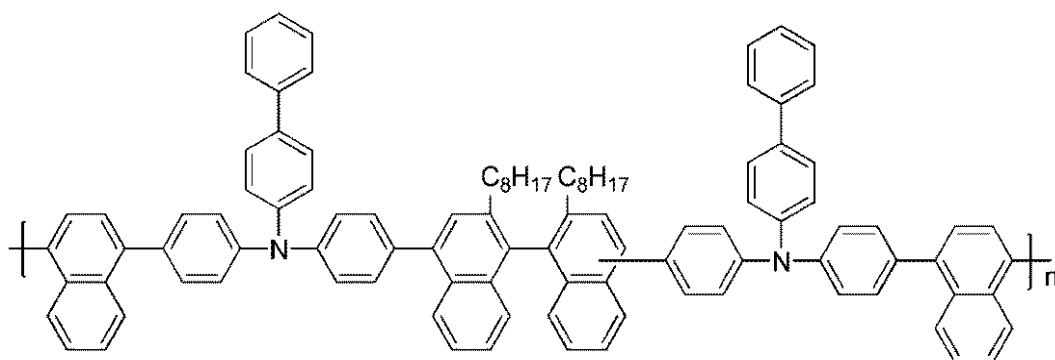
【化 19】



10

化合物 T :

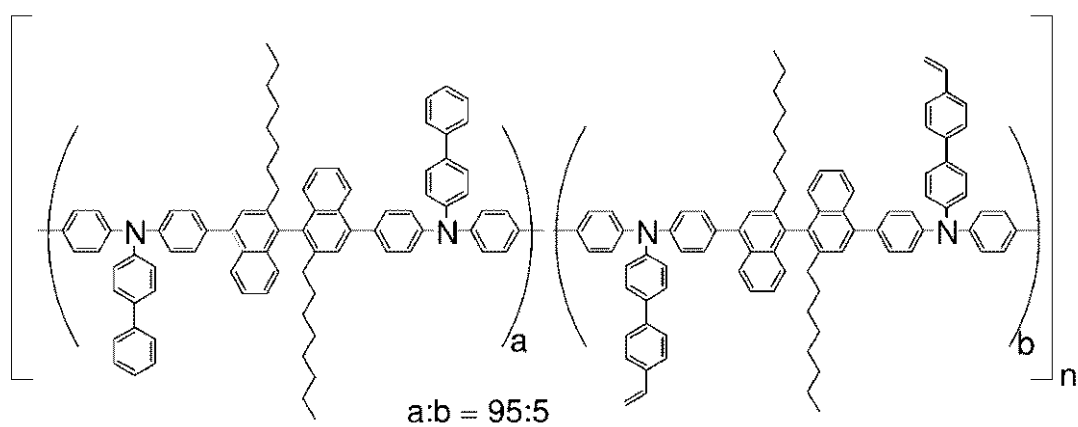
【化 20】



20

化合物 U :

【化 21】

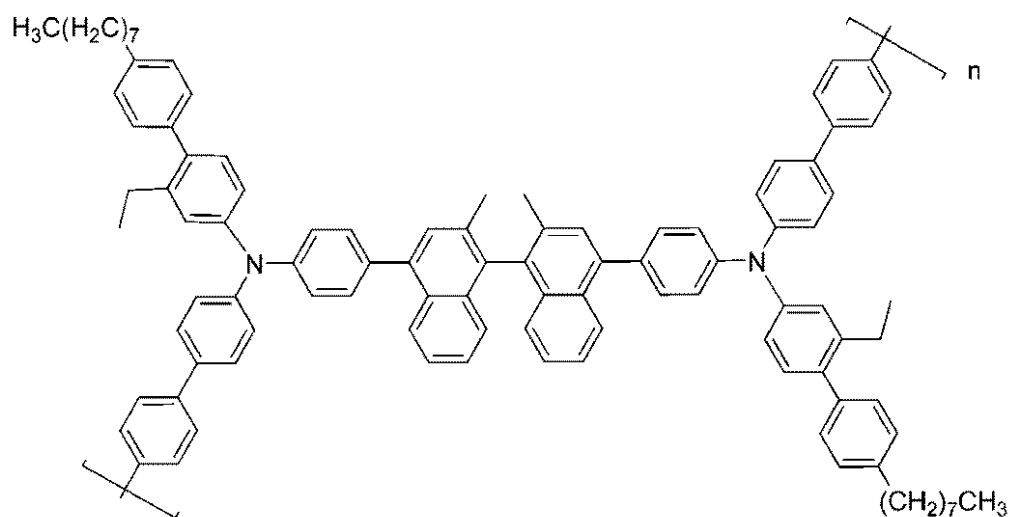


30

40

化合物 V :

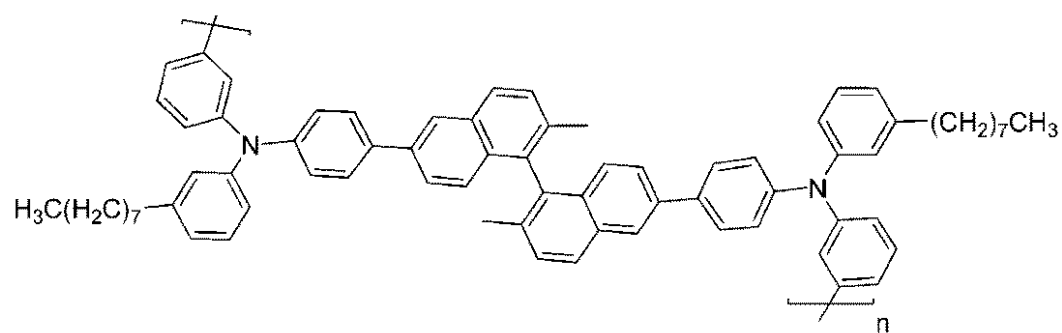
【化 2 2】



10

化合物 W :

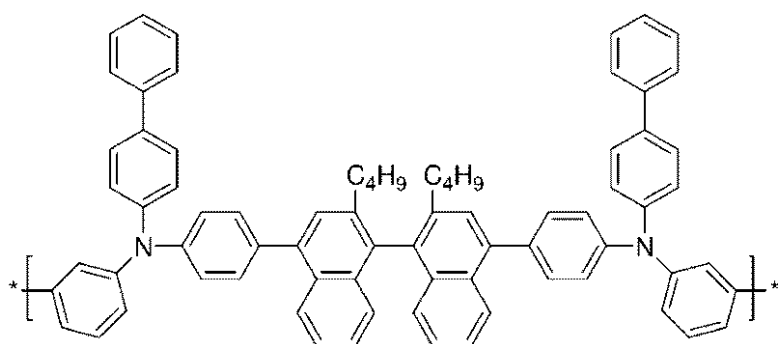
【化 2 3】



20

化合物 X :

【化 2 4】

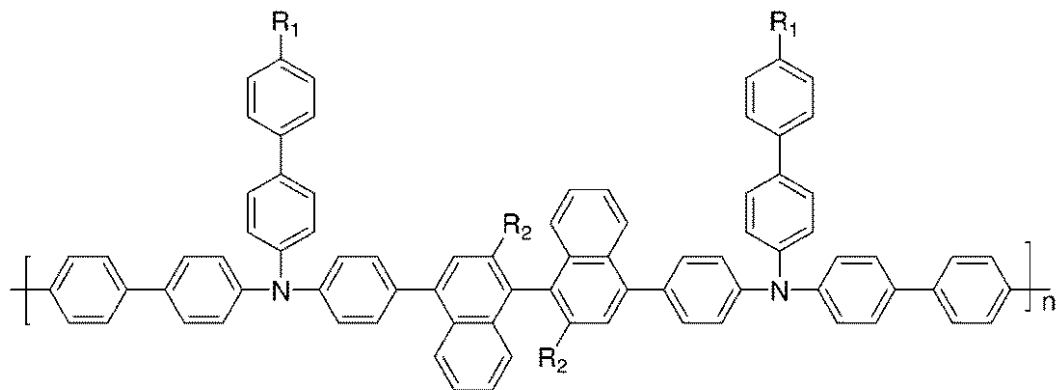


30

40

および化合物 Y 1 ~ Y 4

【化 2 5】



10

化合物 Y1: R₁ = ベンチル; R₂ = ブチル
 化合物 Y2: R₁ = ヘプチル; R₂ = オクチル
 化合物 Y3: R₁ = プロピル; R₂ = オクチル
 化合物 Y4: R₁ = オクチル; R₂ = メチル

からなる群から選択される、化合物。

【請求項 3】

第 1 の電気接触層、第 2 の電気接触層、およびそれらの間の活性層を含み、前記活性層が、請求項 1 または 2 に記載の化合物を含む、有機電子デバイス。

20

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

関連出願データ

本出願は、米国特許法第 119 (e) 条に基づき 2007 年 11 月 19 日に出願された米国仮特許出願第 60 / 988, 951 号明細書の優先権を主張し、この文献全体が参照として本明細書に援用される。

【0002】

本開示は、新規な電気活性化合物に関する。本開示はさらに、このような電気活性化合物を含む少なくとも 1 つの活性層を有する電子デバイスに関する。

30

【背景技術】

【0003】

OLED ディスプレイを構成する有機発光ダイオード (「OLED」) などの有機光活性電子デバイスにおいて、OLED ディスプレイ中では 2 つの電気接触層の間に有機活性層が挟まれている。OLED において、これらの電気接触層にわたって電圧を印加すると、有機光活性層は、光透過性電気接触層を透過する光を発する。

【0004】

発光ダイオード中の活性成分として有機エレクトロルミネッセンス化合物が使用されることが知られている。単純な有機分子、共役ポリマー、および有機金属錯体を使用されて

40

【0005】

光活性材料を使用するデバイスは、多くの場合、光活性 (たとえば、発光) 層と接触層 (正孔注入接触層) との間に配置される 1 つ以上の電荷輸送層を含む。1 つのデバイスは 2 つ以上の接触層を含むことができる。光活性層と正孔注入接触層との間には正孔輸送層を配置することができる。正孔注入接触層はアノードと呼ばれる場合もある。光活性層と電子注入接触層との間には電子輸送層を配置することができる。電子注入接触層はカソードと呼ばれる場合もある。

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

50

【 0 0 0 6 】

電子デバイス中に使用される電荷輸送材料が引き続き必要とされている。

【課題を解決するための手段】

【 0 0 0 7 】

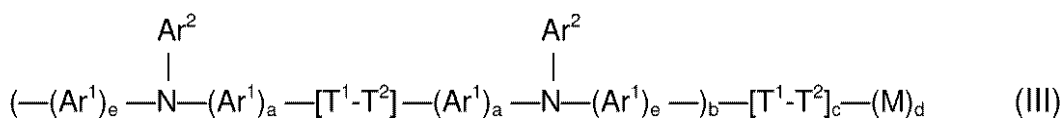
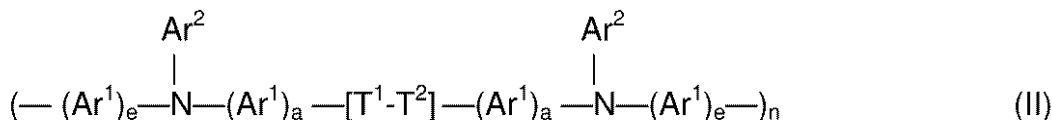
式 I、式 I I、または式 I I I：

【 0 0 0 8 】

【化 1】



10



20

(式中：

Ar^1 は、出現するごとに同種または異種であり、フェニレン、置換フェニレン、ナフチレン、および置換ナフチレンからなる群から選択され；

Ar^2 は、出現するごとに同種または異種であり、アリール基であり；

Mは、出現するごとに同種または異種であり、共役部分であり；

T^1 および T^2 は、出現するごとに独立して同種または異種であり、非平面配置で結合されている共役部分であり；

aは、出現するごとに同種または異種であり、1～6の整数であり；

b、c、およびdは、モル分率であって $b + c + d = 1.0$ であり、但し、cは0ではなく、bおよびdの少なくとも1つは0ではなく、bが0の場合には、Mは、少なくとも2つのトリアリールアミン単位を含み；

30

eは、出現するごとに同種または異種であり、1～6の整数であり；

nは、1を超える整数である)

で表される化合物を提供する。

【 0 0 0 9 】

上記化合物を含む少なくとも1つの層を有する電子デバイスも提供される。

【 0 0 1 0 】

以上の概要および以下の詳細な説明は、単に例示的および説明的なものであり、添付の特許請求の範囲によって規定される本発明を限定するものではない。

【 0 0 1 1 】

40

本明細書において提示される概念の理解をすすめるために、添付の図面において実施形態を説明する。

【図面の簡単な説明】

【 0 0 1 2 】

【図 1】有機電子デバイスの一例の図である。

【 0 0 1 3 】

当業者であれば理解しているように、図面中の物体は、平易かつ明快にするために示されており、必ずしも縮尺通りに描かれているわけではない。たとえば、実施形態を理解しやすいようにするために、図面中の一部の物体の寸法が他の物体よりも誇張されている場合がある。

50

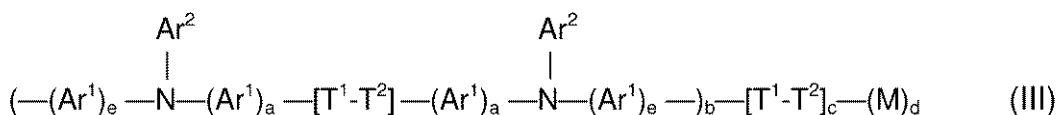
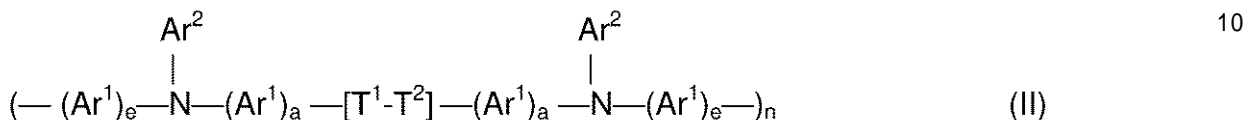
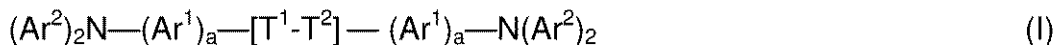
【発明を実施するための形態】

【0014】

式 I、式 I I、または式 I I I：

【0015】

【化 2】



(式中：

Ar^1 は、出現するごとに同種または異種であり、フェニレン、置換フェニレン、ナフチレン、および置換ナフチレンからなる群から選択され； 20

Ar^2 は、出現するごとに同種または異種であり、アリール基であり；

Mは、出現するごとに同種または異種であり、共役部分であり；

T^1 および T^2 は、出現するごとに独立して同種または異種であり、非平面配置で結合されている共役部分であり；

aは、出現するごとに同種または異種であり、1～6の整数であり；

b、c、およびdは、モル分率であって $b + c + d = 1.0$ であり、但し、cは0ではなく、bおよびdの少なくとも1つは0ではなく、bが0の場合には、Mは、少なくとも2つのトリアリールアミン単位を含み；

eは、出現するごとに同種または異種であり、1～6の整数であり； 30

nは、1を超える整数である)

で表される化合物を提供する。

【0016】

上記化合物を含む少なくとも1つの層を有する電子デバイスも提供される。

【0017】

多数の態様および実施形態を以上に説明してきたが、これらは単に例示的で非限定的なものである。本明細書を読めば、本発明の範囲から逸脱しない他の態様および実施形態が実現可能であることが、当業者には分かるであろう。

【0018】

いずれか1つ以上の本発明の実施形態のその他の特徴および利点は、以下の詳細な説明および特許請求の範囲から明らかとなるであろう。この詳細な説明では、最初に、用語の定義および説明を扱い、続いて、電気活性化合物、電子デバイス、ならびに最後に実施例を扱う。 40

【0019】

1. 用語の定義および説明

以下に説明する実施形態の詳細を扱う前に、一部の用語について定義または説明を行う。

【0020】

本発明において使用される場合、用語「アルキル」は、分岐鎖および直鎖の飽和脂肪族炭化水素を含む。特に明記しない限り、この用語は、環状基を含むことも意図している。 50

アルキル基の例としては、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、イソブチル、sec-ブチル、tert-ブチル、ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、シクロペンチル、ヘキシル、シクロヘキシル、イソヘキシルなどが挙げられる。用語「アルキル」は、置換および非置換の炭化水素基の両方をさらに含んでいる。ある実施形態においては、アルキル基は一置換、二置換、および三置換であってよい。置換アルキル基の一例はトリフルオロメチルである。他の置換アルキル基は、本明細書に記載の1つ以上の置換基から形成される。ある実施形態においては、アルキル基は1~20個の炭素原子を有する。別の実施形態においては、この基は1~6個の炭素原子を有する。この用語は、ヘテロアルキル基を含むことを意図している。ヘテロアルキル基は1~20個の炭素原子を有することができる。

10

【0021】

用語「アリール」は、芳香族炭素環部分を意味し、これらは1つの環（単環式）であってもよいし、互いに縮合または共有結合した複数の環（二環またはそれ以上の環）であってもよい。アリール部分のあらゆる好適な環位置は、画定された化学構造に共有結合することができる。アリール部分の例としては、フェニル、1-ナフチル、2-ナフチル、ジヒドロナフチル、テトラヒドロナフチル、ピフェニル、アントリル、フェナントリル、フルオレニル、インダニル、ピフェニレニル、アセナフテニル、アセナフチレニルなどが挙げられるが、これらに限定されるものではない。ある実施形態では、アリール基は6~60個の炭素原子を有し；ある実施形態では、6~30個の炭素原子を有する。この用語は、ヘテロアリール基を含むことを意図している。ヘテロアリール基は、4~50個の炭素原子を有することができ；ある実施形態では、4~30個の炭素原子を有することができる。

20

【0022】

用語「アルコキシ」は、基-O R（式中、Rはアルキルである）を意味することを意図している。

【0023】

用語「アリールオキシ」は、基-O R（式中、Rはアリールである）を意味することを意図している。

【0024】

特に明記しない限り、すべての基は、置換されていてもよいし、非置換であってもよい。限定するものではないがアルキルまたはアリールなどの場合により置換された基は、同種の場合も異種の場合もある1つ以上の置換基で置換されていてもよい。好適な置換基としては、D、アルキル、アリール、ニトロ、シアノ、-N(R⁷)(R⁸)、ハロ、ヒドロキシ、カルボキシ、アルケニル、アルキニル、シクロアルキル、ヘテロアリール、アルコキシ、アリールオキシ、ヘテロアリールオキシ、アルコキシカルボニル、パーフルオロアルキル、パーフルオロアルコキシ、アリールアルキル、シリル、シロキサン、チオアルコキシ、-S(O)₂-N(R')(R'')、-C(=O)-N(R')(R'')、(R')(R'')N-アルキル、(R')(R'')N-アルコキシアルキル、(R')(R'')N-アルキルアリールオキシアルキル、-S(O)_s-アリール（式中、s=0~2）、または-S(O)_s-ヘテロアリール（式中、s=0~2）が挙げられる。それぞれのR'およびR''は独立して、場合により置換されたアルキル基、シクロアルキル基、またはアリール基である。特定の実施形態においては、R'およびR''は、それらの結合する窒素原子と一緒に環系を形成することができる。また、置換基は、架橋基であってもよい。

30

40

【0025】

層、材料、部材、または構造に関して言及される場合、用語「電荷輸送」は、そのような層、材料、部材、または構造が、比較的効率的かつ少ない電荷損失で、そのような層、材料、部材、または構造の厚さを通してそのような電荷の移動を促進することを意味することを意図している。正孔輸送材料はで正電荷を促進し；電子輸送材料は負電荷を促進する。発光材料も、ある程度の電荷輸送特性を有する場合があるが、用語「電荷輸送層、

50

材料、部材、または構造」は、主要な機能が発光である層、材料、部材、または構造を含むことを意図していない。

【 0 0 2 6 】

用語「化合物」は、分子から構成される非帯電物質であって、これらの分子は原子をさらに含み、これらの原子は、化学結合を破壊することなしには物理的手段によって、それらの対応する分子から分離することができない物質を意味することを意図している。この用語は、オリゴマーおよびポリマーを含むことを意図している。

【 0 0 2 7 】

用語「架橋性基」または「架橋基」は、熱処理または放射線への曝露によって架橋を引き起こすことが可能な基を意味することを意図している。ある実施形態では、放射線はUVまたは可視光である。

10

【 0 0 2 8 】

層または材料に関して言及される場合の用語「電気活性」は、デバイスの動作を電子的に促進する層または材料を示すことを意図している。活性材料の例としては、電荷を伝導、注入、輸送、または遮断する材料であって、電荷が電子または正孔のいずれであってもよい材料、あるいは放射線を受けたときに放射線を放出する、または電子 - 正孔対の濃度変化を示す材料が挙げられるが、これらに限定されるものではない。不活性材料の例としては、平坦化材料、絶縁材料、および環境障壁材料が挙げられるが、これらに限定されるものではない。

20

【 0 0 2 9 】

接頭語「フルオロ」は、基の中の1つ以上の水素がフッ素で置換されていることを示すことを意図している。

【 0 0 3 0 】

接頭語「ヘテロ」は、1つ以上の炭素原子が異なる原子で置換されていることを示している。ある実施形態においては、ヘテロ原子はO、N、S、またはそれらの組み合わせである。

【 0 0 3 1 】

本明細書の式I ~ III中の $[T^1 - T^2]$ に言及する場合の用語「非平面配置」は、 T^1 および T^2 中の直接隣接する基が同一平面内で配向していないことを意味することを意図している。

30

【 0 0 3 2 】

用語「オキシアルキル」は、酸素で置換された1つ以上の炭素を有するヘテロアルキル基を意味することを意図している。この用語は、酸素を介して結合している基を含んでいる。

【 0 0 3 3 】

用語「光活性」は、エレクトロルミネッセンスまたは感光性を示すあらゆる材料を意味することを意図している。

【 0 0 3 4 】

用語「シリル」は、基 R_3Si- （式中、Rは、H、D、C1 ~ 20アルキル、フルオロアルキル、またはアリールである）を意味する。ある実施形態では、Rアルキル基中の1つ以上の炭素がSiで置換されている。ある実施形態では、シリル基は、（ヘキシル） $_2Si(Me)CH_2CH_2Si(Me)_2-$ 、および $[CF_3(CF_2)_6CH_2CH_2]_2SiMe-$ である。

40

【 0 0 3 5 】

用語「シロキサン」は、基 $(RO)_3Si-$ （式中、Rは、H、D、C1 ~ 20アルキル、またはフルオロアルキルである）を意味する。

【 0 0 3 6 】

デバイス中の層に言及するために使用される場合、語句「隣接する」は、ある層が別の層のすぐ隣にあることを必ずしも意味するものではない。他方で、語句「隣接するR基」は、化学式中で互いに隣同士であるR基（すなわち、1つの結合によって連結した複数の

50

原子上に存在する複数の R 基)を意味するために使用される。

【0037】

本明細書において使用される場合、用語「含んでなる」、「含んでなること」、「含む」、「含むこと」、「有する」、「有すること」、またはそれらの他のあらゆる変形は、非排他的な包含を扱うことを意図している。たとえば、ある一連の要素を含むプロセス、方法、物品、または装置は、それらの要素にのみに必ずしも限定されるわけではなく、そのようなプロセス、方法、物品、または装置に関して明示されず固有のものでもない他の要素を含むことができる。さらに、反対の意味で明記されない限り、「または」は、包含的な「または」を意味するのであって、排他的な「または」を意味するのではない。たとえば、条件 A または B が満たされるのは、A が真であり（または存在し）B が偽である（または存在しない）、A が偽であり（または存在せず）B が真である（または存在する）、ならびに A および B の両方が真である（または存在する）のいずれか 1 つによってである。

10

【0038】

また、本発明の要素および成分を説明するために「a」または「an」も使用されている。これは単に便宜的なものであり、本発明の一般的な意味を提供するために行われている。この記述は、1 つまたは少なくとも 1 つを含むものと読むべきであり、明らかに他の意味となる場合を除けば、単数形は複数形も含んでいる。

【0039】

元素周期表中の縦列に対応する族の番号は、（非特許文献 2）に見ることができる「新表記法」（New Notation）の規則を使用している。

20

【0040】

特に定義しない限り、本明細書において使用されるすべての技術用語および科学用語は、本発明が属する技術分野の当業者によって一般に理解されている意味と同じ意味を有する。本明細書に記載されているものと類似または同等の方法および材料を使用して、本発明の実施形態の実施または試験を行うことができるが、好適な方法および材料については以下に説明する。本明細書において言及されるあらゆる刊行物、特許出願、特許、およびその他の参考文献は、特に明記しない限り、それらの記載内容全体が援用される。矛盾が生じる場合には、定義を含めて本明細書に従うものとする。さらに、材料、方法、および実施例は、単に説明的なものであって、限定を意図したものではない。

30

【0041】

本明細書に記載されていない程度の、具体的な材料、処理行為、および回路に関する多くの詳細は従来通りであり、それらについては、有機発光ダイオードディスプレイ、光源、光検出器、光電池、および半導体要素の技術分野の教科書およびその他の情報源中に見ることができる。

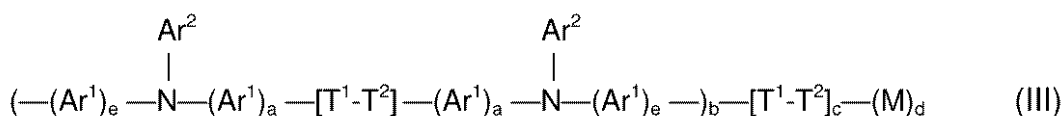
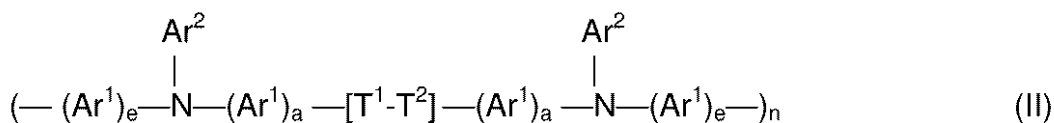
【0042】

2. 電気活性化化合物

本明細書に記載の化合物は、式 I、式 II、または式 III：

【0043】

【化 3】



(式中 :

Ar^1 は、出現するごとに同種または異種であり、フェニレン、置換フェニレン、ナフチレン、および置換ナフチレンからなる群から選択され；

Ar^2 は、出現するごとに同種または異種であり、アリール基であり；

Mは、出現するごとに同種または異種であり、共役部分であり；

T^1 および T^2 は、出現するごとに独立して同種または異種であり、非平面配置で結合されている共役部分であり；

aは、出現するごとに同種または異種であり、1～6の整数であり；

b、c、およびdは、モル分率であって $b + c + d = 1.0$ であり、但し、cは0ではなく、bおよびdの少なくとも1つは0ではなく、bが0の場合には、Mは、少なくとも2つのトリアリールアミン単位を含み；

eは、出現するごとに同種または異種であり、1～6の整数であり；

nは、1を超える整数である)

で表される。

【0044】

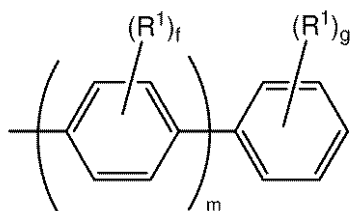
ある実施形態では、少なくとも1つの Ar^1 は、アルキル、アルコキシ、シリル、および架橋基を有する置換基からなる群から選択される置換基を有する置換フェニルである。ある実施形態では、aは1～3である。ある実施形態ではaは1～2である。ある実施形態では、aは1である。ある実施形態では、eは1～4である。ある実施形態では、eは1～3である。ある実施形態では、e = 1である。ある実施形態では、少なくとも1つの Ar^1 が、架橋基を有する置換基を有する。

【0045】

ある実施形態では、 Ar^2 は式a

【0046】

【化 4】



式 a

(式中 :

R^1 は、出現するごとに同種または異種であり、アルキル、アルコキシ、シロキサン、およびシリルからなる群から選択され；

10

20

30

40

50

f は、出現するごとに同種または異種であり、0 ~ 4 の整数であり；

g は 0 ~ 5 の整数であり；

m は 1 ~ 5 の整数である）

で表される。

【0047】

ある実施形態では、f および g の少なくとも 1 つが 0 ではない。ある実施形態では、m = 1 ~ 3 である。

【0048】

ある実施形態では、 Ar^2 は、式 a で表される基、ナフチル、フェニルナフチル、およびナフチルフェニルからなる群から選択される。ある実施形態では、 Ar^2 は、フェニル、p - ビフェニル、p - ターフェニル、ナフチル、フェニルナフチル、およびナフチルフェニルからなる群から選択される。ある実施形態では、 Ar^2 は、フェニル、ビフェニル、およびターフェニルからなる群から選択される。

10

【0049】

式 I ~ III 中のいずれの芳香環も、あらゆる位置で置換されていてもよい。置換基は、溶解性などの化合物の 1 つ以上の物理的性質を改善するために存在することができる。ある実施形態では、置換基は、 C_{1-12} アルキル基、 C_{1-12} アルコキシ基、およびシリル基からなる群から選択される。ある実施形態では、上記アルキル基はヘテロアルキル基である。ある実施形態では、上記アルキル基はフルオロアルキル基である。ある実施形態では、少なくとも 1 つの Ar^2 が、アルキル、アルコキシ、またはシリルの置換基を有する。置換基は、架橋性を付与するために存在することができる。ある実施形態では、架橋置換基が少なくとも 1 つの Ar^2 の上に存在する。ある実施形態では、架橋置換基が、少なくとも 1 つの M 部分の上に存在する。ある実施形態では、架橋性基を含む少なくとも 1 つの置換基が存在する。架橋性基の例としては、ビニル、アクリレート、パーフルオロビニルエーテル、1 - ベンゾ - 3, 4 - シクロブタン、シロキサン、シアネート基、環状エーテル類（エポキシド類）、シクロアルケン類、およびアセチレン系基が挙げられるが、これらに限定されるものではない。

20

【0050】

一実施形態では、架橋性基はビニルである。

【0051】

T^1 - T^2 基によって、化合物の主鎖中に非平面性が導入される。 T^2 中の部分に直接結合している T^1 中の部分は、 T^1 部分が、それが結合している T^2 中の部分とは異なる面内に配向するように結合している。 T^1 単位の別の部分、たとえば置換基は、1 つ以上の異なる面内にあってもよいが、非平面性が得られるのは、化合物主鎖中の T^1 中の結合部分と T^2 中の結合部分との面である。非平面 T^1 - T^2 結合のために、本発明の化合物はキラルとなる。一般に、本発明の化合物はラセミ混合物として形成される。本発明の化合物は鏡像異性的に純粋な形態であってもよい。非平面性は、 T^1 - T^2 結合のまわりの自由回転を制限するものとしてみることができる。この結合のまわりの回転によって、ラセミ化が起こる。 T^1 - T^2 のラセミ化の半減期は、非置換ビフェニルの半減期よりも大きい。ある実施形態では、ラセミ化の半減期は、20 において 12 時間以上である。

30

40

【0052】

T^1 および T^2 は、共役部分である。ある実施形態では、 T^1 および T^2 は、芳香族部分である。ある実施形態では、 T^1 および T^2 は、フェニレン基、ナフチレン基、およびアントラセニル基からなる群から選択される。

【0053】

ある実施形態では、 $[T^1 - T^2]$ は置換ビフェニレン基である。用語「ビフェニレン」は、化合物の主鎖に結合する点を 2 つ有するビフェニル基を意味することを意図している。用語「ビフェニル」は、単結合によって連結した 2 つのフェニル単位を有する基を意味することを意図している。ビフェニレン基は、2 位、3 位、4 位、または 5 位の中の 1 つと、2' 位、3' 位、4' 位、または 5' 位の中の 1 つとにおいて結合することができる

50

。置換ビフェニレン基は、2位において少なくとも1つの置換基を有する。ある実施形態では、ビフェニレン基は、少なくとも2位および2'位において置換基を有する。

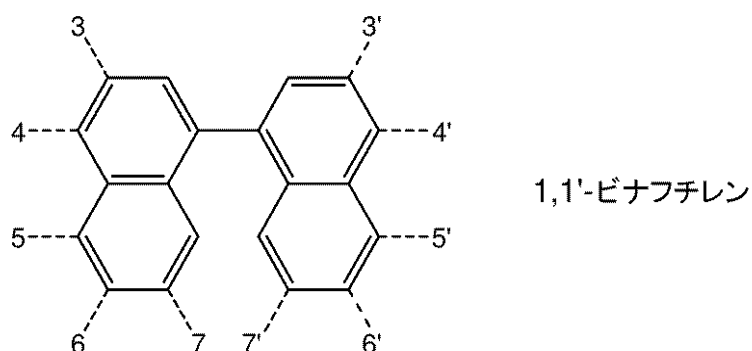
【0054】

ある実施形態では、 $[T^1 - T^2]$ はビナフチレン基である。用語「ビナフチレン」は、化合物の主鎖に結合する点を2つ有するビナフチル基を意味することを意図している。用語「ビナフチル」は、単結合によって連結した2つのナフタレン単位を有する基を意味することを意図している。ある実施形態では、ビナフチレン基は1,1'-ビナフチレンであり、これは、3位、4位、5位、6位、または7位の中の1つと、3'位、4'位、5'位、6'位、または7'位の中の1つにおいて化合物の主鎖に結合する。これは以下に示されており、破線は、可能性のある結合点を表している。

10

【0055】

【化5】



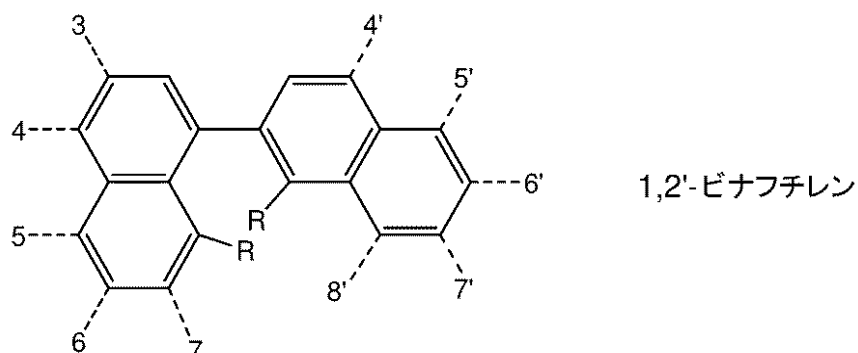
20

【0056】

ある実施形態では、ビナフチレン基は、8位または9'位において少なくとも1つの置換基を有し、3位、4位、5位、6位、または7位の中の1つと、4'位、5'位、6'位、7'位、または8'位の中の1つにおいて化合物の主鎖に結合している1,2'-ビナフチレンである。これは以下に示されており、破線は、可能性のある結合点を表しており、少なくとも1つのRは置換基を表している。

【0057】

【化6】



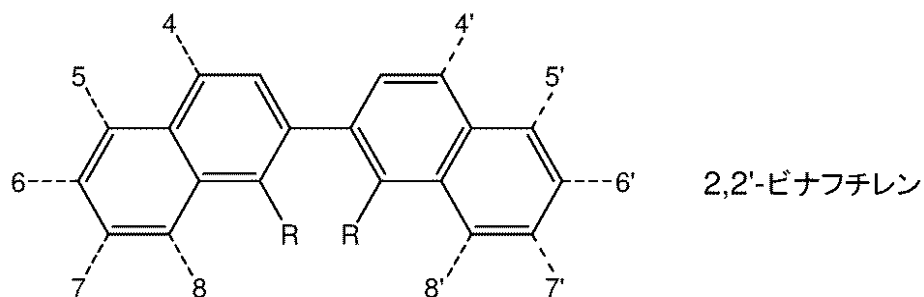
40

【0058】

ある実施形態では、ビナフチレン基は、8位または9'位において少なくとも1つの置換基を有し、4位、5位、6位、7位、または8位の中の1つと、4'位、5'位、6'位、7'位、または8'位の中の1つにおいて化合物の主鎖に結合している2,2'-ビナフチレンである。これは以下に示されており、破線は、可能性のある結合点を表しており、少なくとも1つのRは置換基を表している。

【0059】

【化 7】



10

【 0 0 6 0 】

ある実施形態では、 $[T^1 - T^2]$ は、フェニレン - ナフチレン基である。ある実施形態では、 $[T^1 - T^2]$ は、フェニレン中の 3 位、4 位、または 5 位の中の 1 つと、ナフチレンの 3 位、4 位、または 5 位の中の 1 つとにおいて化合物の主鎖に結合しているフェニレン - 1 - ナフチレン基である。ある実施形態では、 $[T^1 - T^2]$ は、フェニレン中の 3 位、4 位、または 5 位の中の 1 つと、ナフチレンの 4 位、5 位、6 位、7 位、または 8 位の中の 1 つとにおいて化合物の主鎖に結合しているフェニレン - 2 - ナフチレン基である。

【 0 0 6 1 】

ある実施形態では、ビフェニレン基、ビナフチレン基、およびフェニレン - ナフチレン基は、1 つ以上の位置で置換されている。

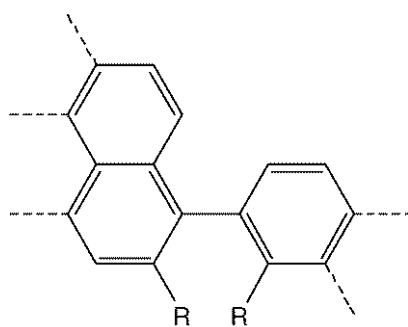
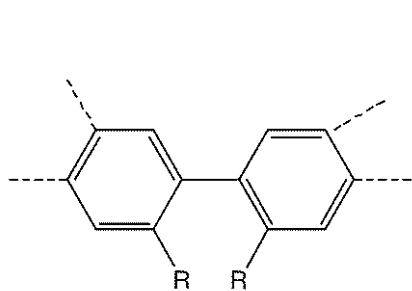
20

【 0 0 6 2 】

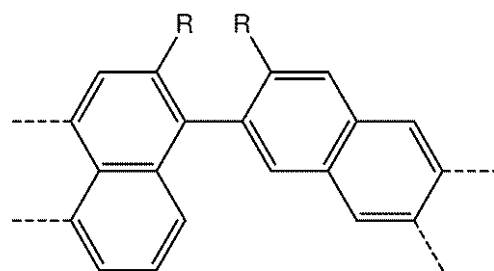
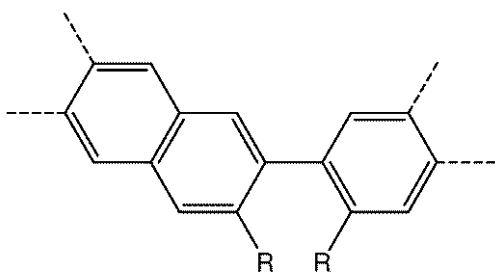
ある実施形態では、 $[T^1 - T^2]$ は、以下の：

【 0 0 6 3 】

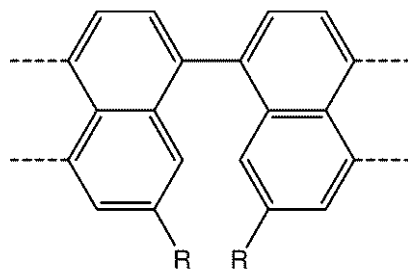
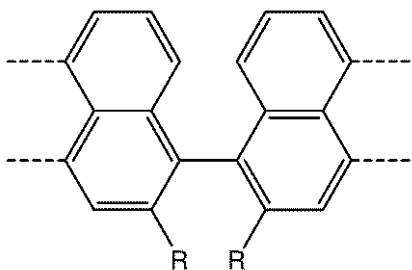
【化 8】



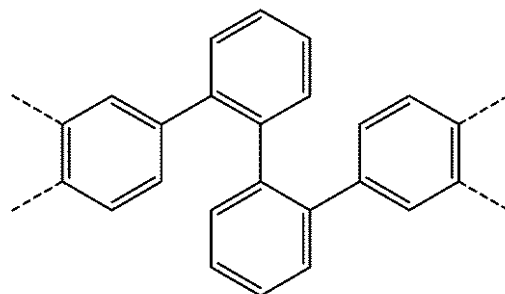
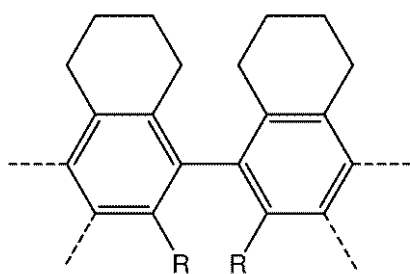
10



20



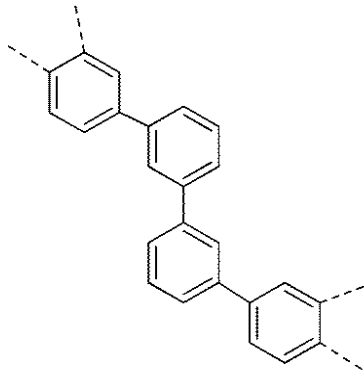
30



40

【 0 0 6 4 】

【化 9】



10

(式中、Rは、同種または異種であり、アルキル、アリール、アルコキシ、アリールオキシ、フルオロアルキル、フルオロアリール、フルオロアリールオキシ、フルオロアルキルオキシ、オキシアルキル、アルケニル基、シリル、シロキサン、および架橋基からなる群から選択される)

の中の1つから選択される。破線は、化合物の主鎖への可能性のある結合点を表している。ある実施形態では、Rは、 C_{1-10} アルキルまたはアルコキシであり；ある実施形態では、 C_{3-8} 分岐アルキルまたはアルコキシである。ある実施形態では、2つのR基が互いに

20

【0065】

ある実施形態では、 $[T^1 - T^2]$ は、4位および4'位において化合物の主鎖に結合している1,1-ピナフチレン基であり、4,4'-(1,1-ピナフチレン)と呼ばれる。ある実施形態では、4,4'-(1,1-ピナフチレン)が、存在する唯一の異性体となる。ある実施形態では、2つ以上の異性体が存在する。ある実施形態では、4,4'-(1,1-ピナフチレン)は、最大50重量%の第2の異性体とともに存在する。ある実施形態では、第2の異性体は、4,5'-(1,1-ピナフチレン)、4,6'-(1,1-ピナフチレン)、および4,7'-(1,1-ピナフチレン)からなる群から選択される。

30

【0066】

式IIIは、少なくとも1つのT部分と、少なくとも1つの別の共役部分とが存在するコポリマーを表している。ある実施形態では、cは少なくとも0.4である。ある実施形態では、cは0.4~0.6の範囲内である。このコポリマーは、ランダムコポリマー、交互コポリマー、またはブロックコポリマーであってよい。ある実施形態では、Mは、トリアリールアミン単位を含む。ある実施形態では、Mは、芳香族基である。ある実施形態では、Mは、架橋性置換基を有する芳香族単位である。架橋性置換基を有するMの量は、一般に4~20モルパーセントの間である。

【0067】

式Iで表される化合物の非限定的な一部の例としては、以下の化合物AおよびBが挙げられる。

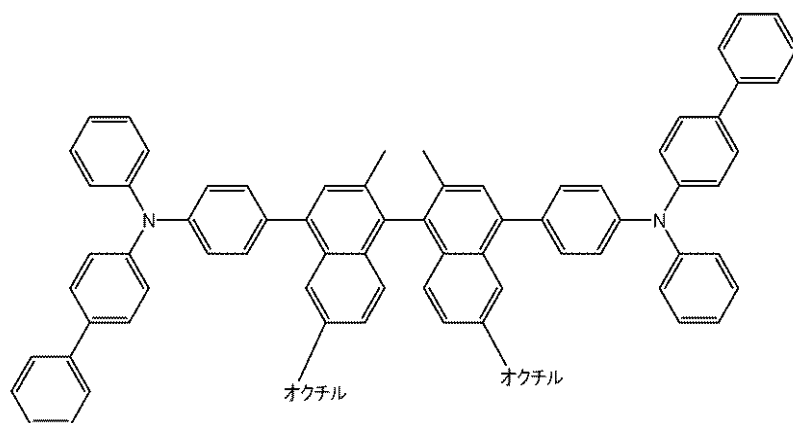
40

【0068】

化合物A：

【0069】

【化 1 0】

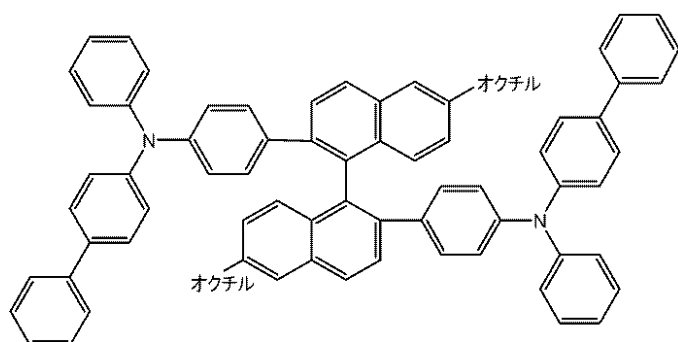


10

化合物 B :

【 0 0 7 0】

【化 1 1】



20

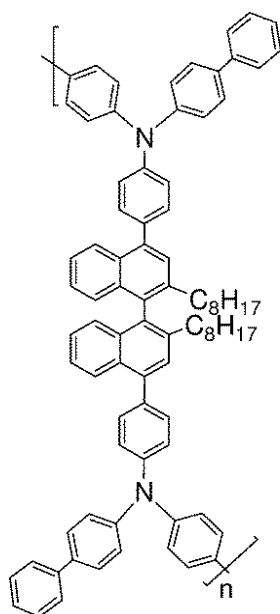
【 0 0 7 1】

式 I I で表される化合物の非限定的な一部の例としては以下の化合物 C から M および M 30
1 が挙げられる。

化合物 C

【 0 0 7 2】

【化 1 2】



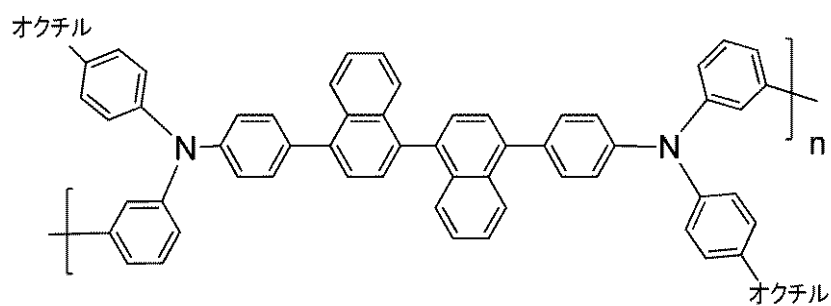
10

化合物 D :

20

【 0 0 7 3】

【化 1 3】

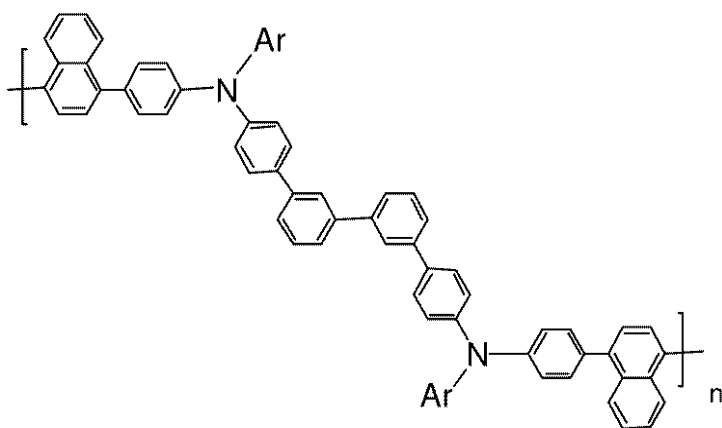


30

化合物 E :

【 0 0 7 4】

【化 1 4】



40

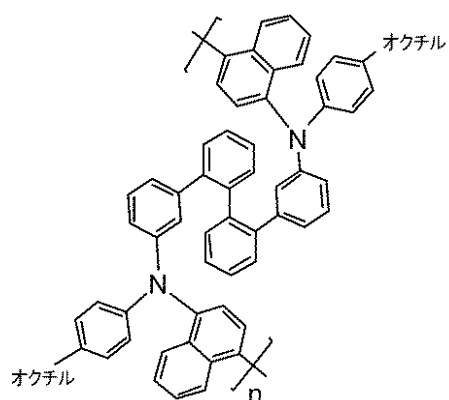
Ar = フェニル、ビフェニル

化合物 F :

50

【 0 0 7 5 】

【 化 1 5 】

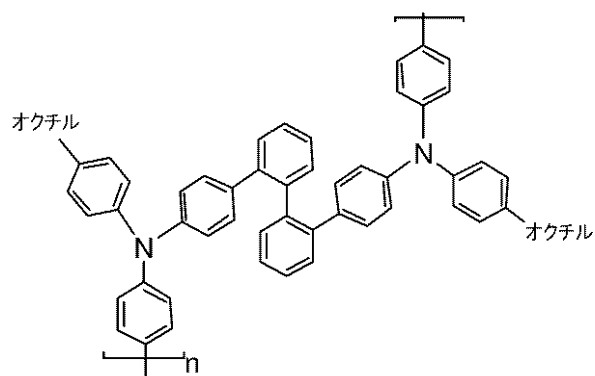


10

化合物 G :

【 0 0 7 6 】

【 化 1 6 】

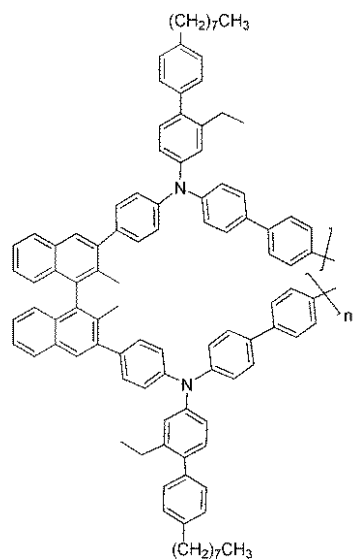


20

化合物 H :

【 0 0 7 7 】

【 化 1 7 】



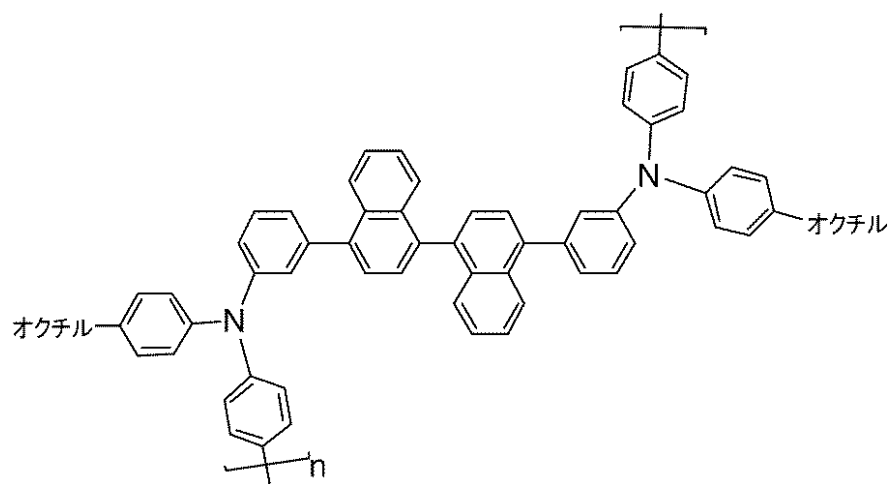
40

化合物 I :

【 0 0 7 8 】

50

【化 1 8】

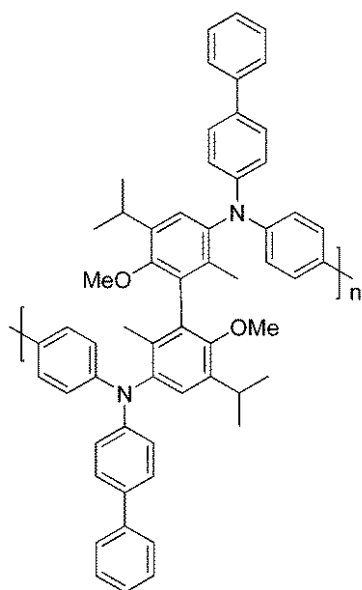


10

化合物 J :

【 0 0 7 9】

【化 1 9】



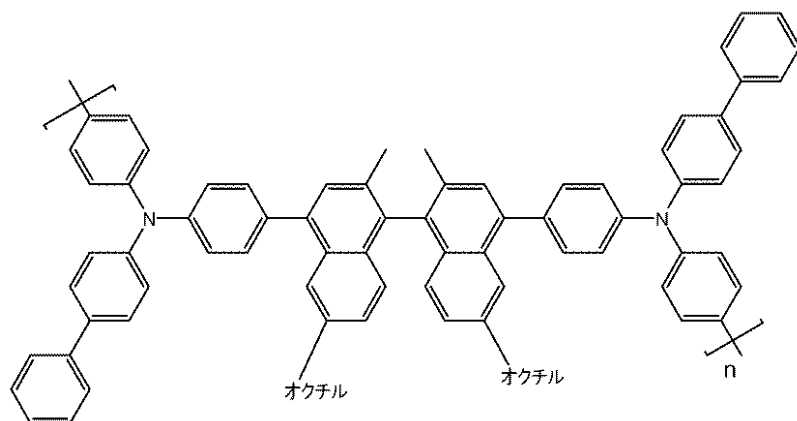
20

化合物 K :

【 0 0 8 0】

30

【化 2 0】

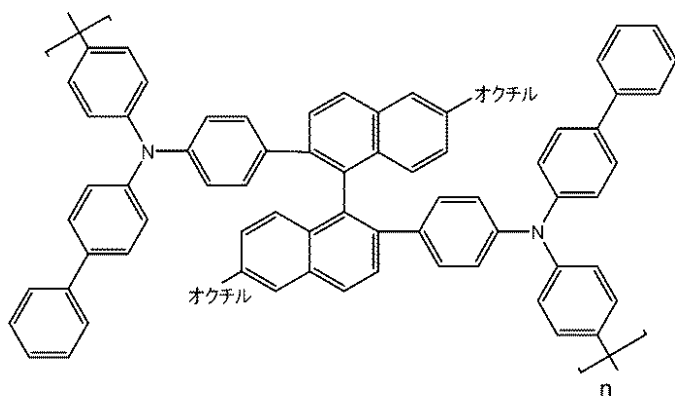


10

化合物 L :

【 0 0 8 1】

【化 2 1】



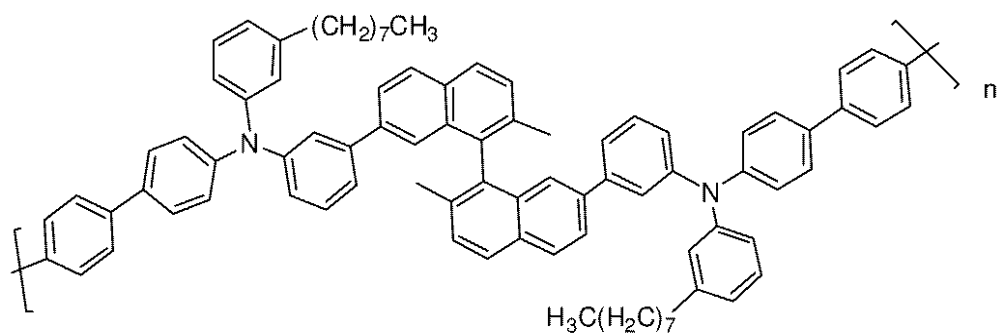
20

化合物 M :

化合物 M 1 :

【 0 0 8 2】

【化 2 2】



40

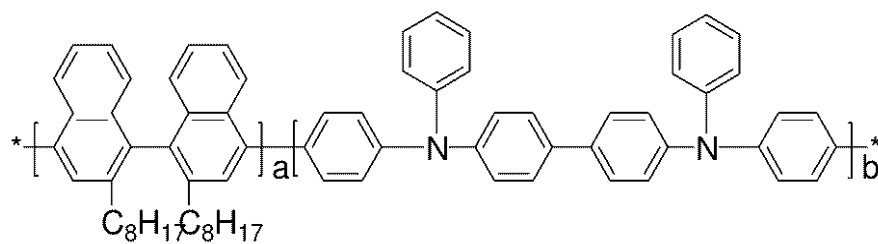
【 0 0 8 3】

式 I I I で表される化合物の非限定的な一部の例としては以下の化合物 N から Y 4 が挙げられる。

化合物 N :

【 0 0 8 4】

【化 2 3】



$$a = 0.4 \sim 0.8$$

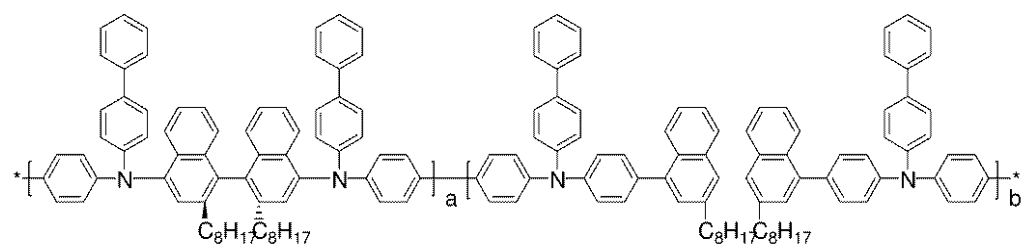
$$b = 0.2 \sim 0.6$$

10

化合物 O :

【 0 0 8 5】

【化 2 4】



$$a = 0.3 \sim 0.7$$

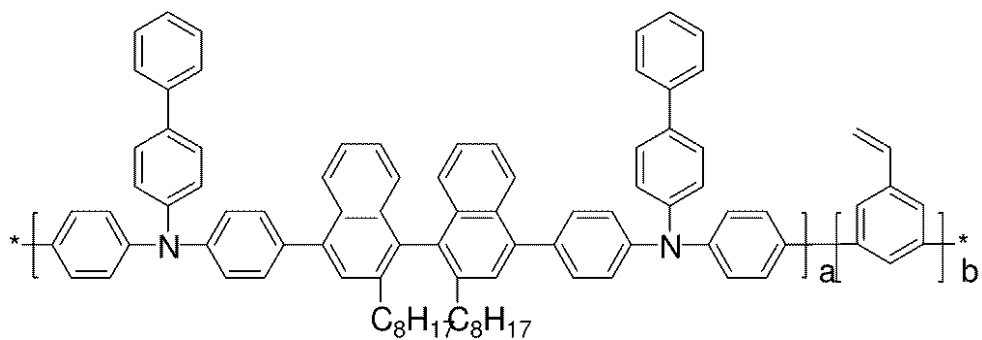
$$b = 0.3 \sim 0.7$$

20

化合物 P :

【 0 0 8 6】

【化 2 5】



$$a = 0.8 \sim 0.95$$

$$b = 0.05 \sim 0.2$$

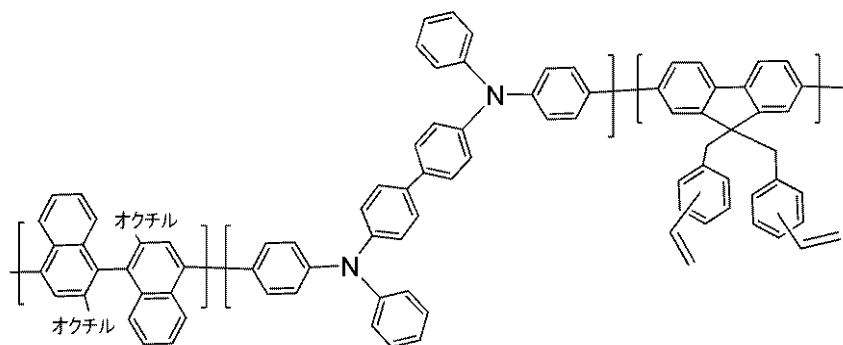
30

40

化合物 Q :

【 0 0 8 7】

【化 2 6】

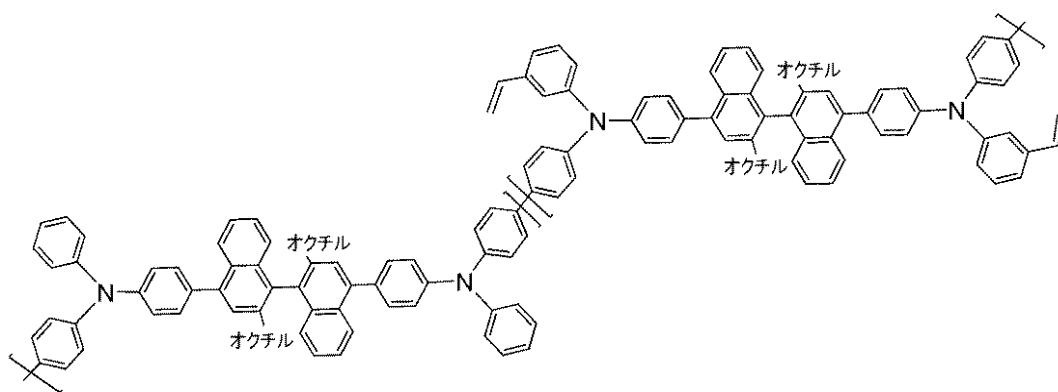


10

化合物 R :

【 0 0 8 8 】

【化 2 7】

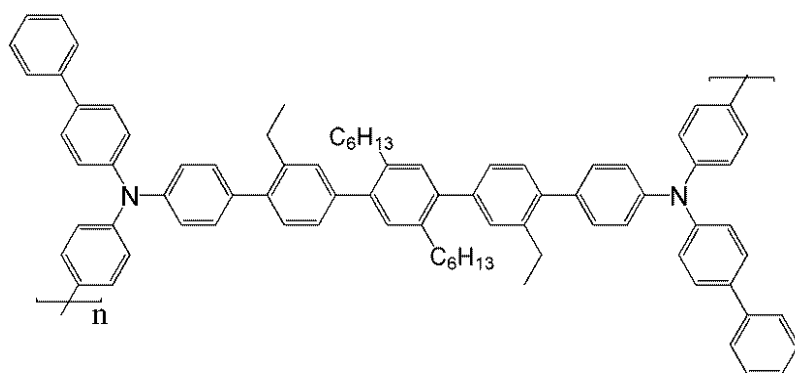


20

化合物 S :

【 0 0 8 9 】

【化 2 8】

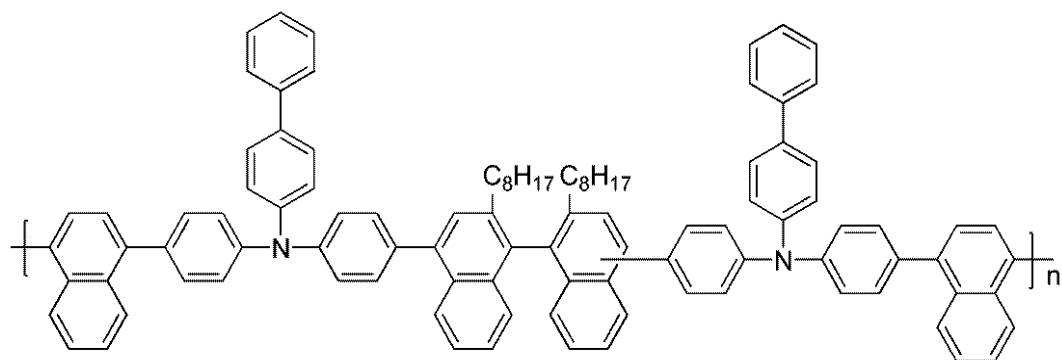


40

化合物 T :

【 0 0 9 0 】

【化 2 9】

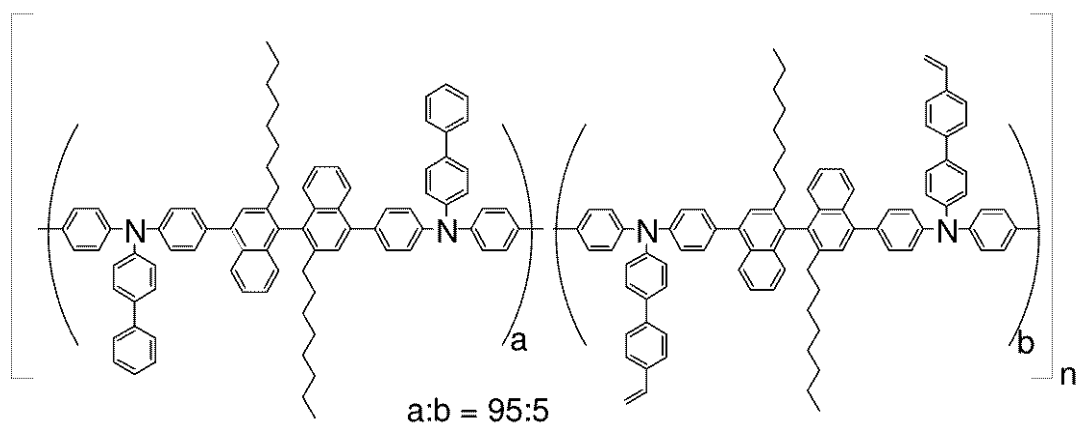


10

化合物 U :

【 0 0 9 1】

【化 3 0】



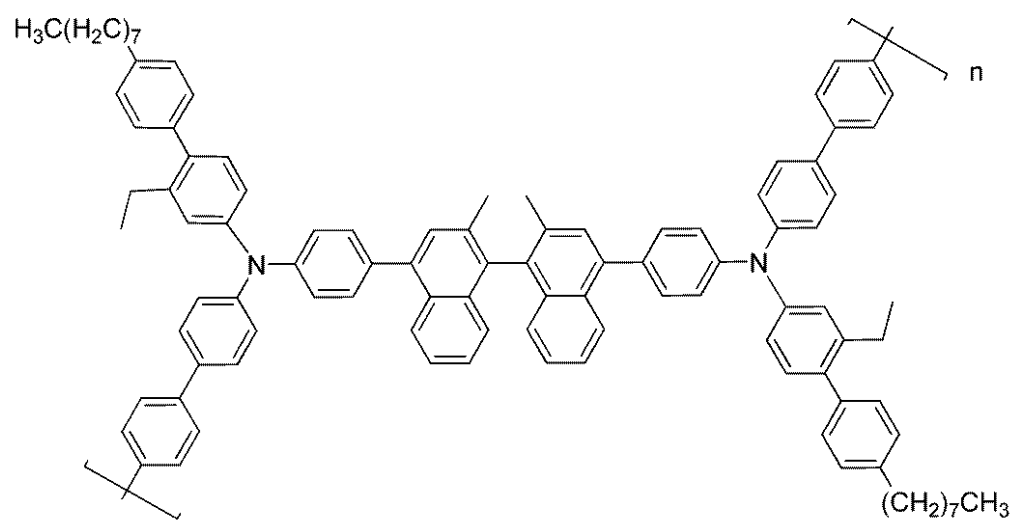
20

化合物 V :

【 0 0 9 2】

【化 3 1】

30

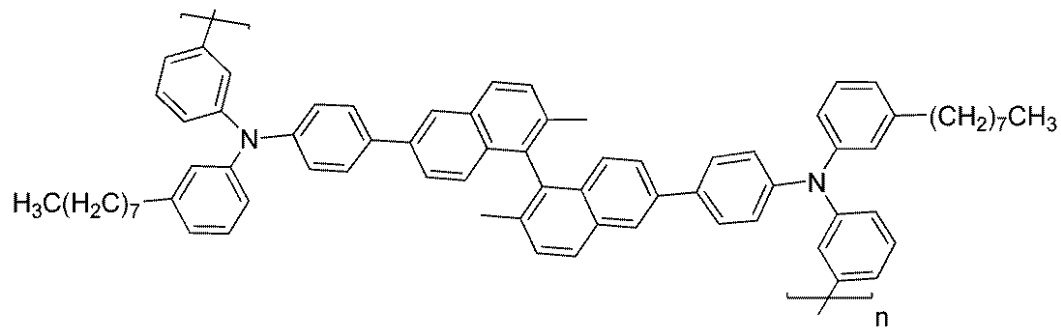


40

化合物 W :

【 0 0 9 3】

【化 3 2】

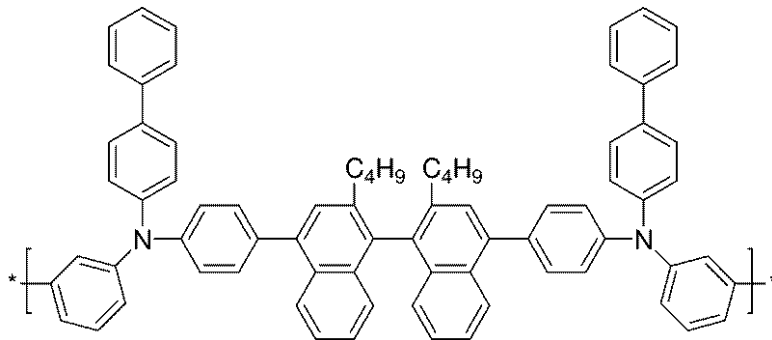


10

化合物 X :

【 0 0 9 4】

【化 3 3】



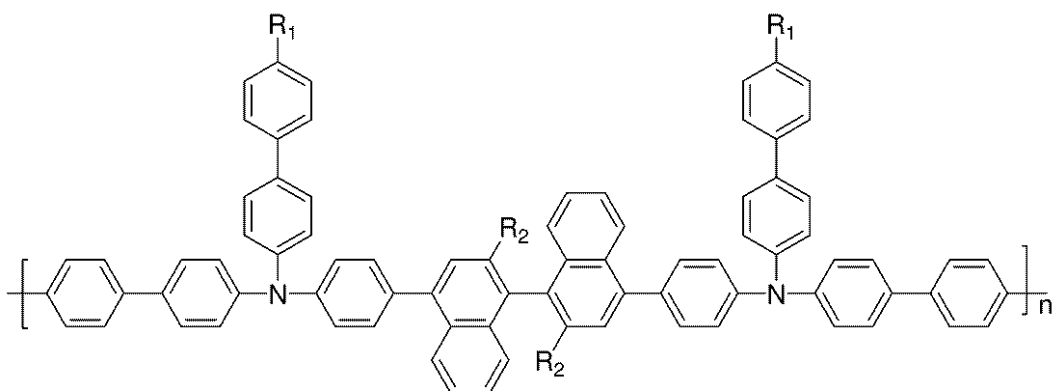
20

化合物 Y

化合物 Y 1 ~ Y 4

【 0 0 9 5】

【化 3 4】



40

化合物 Y1 : R₁ = ベンチル ; R₂ = ブチル
 化合物 Y2 : R₁ = ヘプチル ; R₂ = オクチル
 化合物 Y3 : R₁ = プロピル ; R₂ = オクチル
 化合物 Y4 : R₁ = オクチル ; R₂ = メチル

【 0 0 9 6】

本発明の新規化合物は、C - C 結合または C - N 結合が形成されるあらゆる技術を使用して製造することができる。Suzuki、Yamamoto、Stille、ならびに Pd または Ni 触媒による C - N カップリングなどの多種多様なこのような技術が周知で

50

ある。溶液処理技術を使用して本発明の化合物から層を形成することができる。用語「層」は、用語「膜」と同義的に使用され、所望の領域を覆うコーティングを意味する。この用語は大きさによって限定されることはない。この領域は、デバイス全体の大きさであってもよいし、実際の視覚的表示などの特殊機能領域の小ささ、または1つのサブピクセルの小ささであってもよい。層および膜は、気相堆積、液相堆積（連続的技術および不連続な技術）、および熱転写などの従来のあらゆる堆積技術によって形成することができる。連続堆積技術としては、スピンコーティング、グラビアコーティング、カーテンコーティング、浸漬コーティング、スロットダイコーティング、スプレーコーティング、および連続ノズルコーティングが挙げられるが、これらに限定されるものではない。不連続堆積技術としては、インクジェット印刷、グラビア印刷、およびスクリーン印刷が挙げられるが、これらに限定されるものではない。

10

【0097】

本発明に記載の新規化合物は、正孔輸送材料として、光活性材料として、および光活性材料のホストとして使用することができる。新規化合物は、N, N'-ジフェニル-N, N'-ビス(3-メチルフェニル)-[1, 1'-ビフェニル]-4, 4'-ジアミン(TPD)、およびN, N'-ビス(ナフタレン-1-イル)-N, N'-ビス-(フェニル)ベンジジン(NPB)などの有効な小分子正孔輸送化合物と同様の正孔移動性およびHOMO/LUMOエネルギーを有する。TPDおよびNPBなどの化合物は一般に、気相堆積技術を使用して塗布する必要がある。

【0098】

20

3. 電子デバイス

本明細書に記載の少なくとも1種類の化合物を含む1つ以上の層を有することが有益となりうる有機電子デバイスとしては、(1)電気エネルギーを放射線に変換するデバイス（たとえば、発光ダイオード、発光ダイオードディスプレイ、またはダイオードレーザー）、(2)電子的過程を介して信号を検出するデバイス（たとえば、光検出器、光導電セル、フォトレジスタ、光スイッチ、光トランジスタ、光電管、IR検出器）、(3)放射線を電気エネルギーに変換するデバイス（たとえば、光起電力デバイスまたは太陽電池）、ならびに(4)1つ以上の有機半導体層を含む1つ以上の電子部品（たとえば、トランジスタまたはダイオード）を含むデバイスが挙げられるが、これらに限定されるものではない。本発明による組成物の他の使用としては、コーティング材料が挙げられ、このコーティング材料は、記憶デバイス、帯電防止フィルム、バイオセンサー、エレクトロクロミックデバイス、固体電解コンデンサ、充電式電池などのエネルギー蓄積デバイス、および電磁遮蔽用途に使用される。

30

【0099】

有機電子デバイス構造の一例を図1に示す。デバイス100は、アノード層110およびカソード層150、ならびにそれらの間の光活性層130を含む。アノードに隣接して、電荷輸送材料、たとえば正孔輸送材料を含む層120が存在する。カソードに隣接して、電子輸送材料を含む電荷輸送層140が存在することができる。選択肢の1つとして、デバイスは、アノード110の隣に1つ以上の追加の正孔注入層または正孔輸送層（図示せず）、および/またはカソード150の隣に1つ以上の追加の電子注入層または電子輸送層（図示せず）を使用することができる。

40

【0100】

本発明において使用される場合、用語「光活性」は、印加された電圧によって活性化されると発光する材料（発光ダイオード中または発光電気化学セル中など）、あるいは、放射エネルギーに応答し、バイアス電圧の印加を使用して、または使用せずに信号を発生する材料（光検出器中など）を意味する。一実施形態においては、光活性層は発光体層である。

【0101】

デバイス100の用途に依存するが、光活性層130は、印加電圧によって励起する発光層（発光ダイオード中または発光電気化学セル中など）、放射エネルギーに応答し、バ

50

イアス電圧の印加を使用してまたは使用せずに信号を発生する材料層（光検出器中など）であってよい。光検出器の例としては、光導電セル、フォトレジスタ、光スイッチ、光トランジスタ、および光起電力セルが挙げられ、これらの用語は、Kirk-Othmer Concise Encyclopedia of Chemical Technology, 4th edition, p. 1537, (1999)に記載されている。

【0102】

ある実施形態においては、正孔輸送層120は、本明細書に記載される少なくとも1種類の新規電気活性化合物を含む。

【0103】

ある実施形態では、光活性層130は、本明細書に記載の少なくとも1つの新規電気活性化合物を含み、この電気活性化合物は光活性である。

【0104】

ある実施形態では、光活性層130は、本明細書に記載の少なくとも1つの新規電気活性化合物を含み、この電気活性化合物は、光活性材料が分散されたホストとして役割を果たす。

【0105】

デバイス中の他の層は、そのような層に有用であることが知られているあらゆる材料でできていてよい。アノード110は、正電荷キャリアの注入に特に有効な電極である。アノードは、たとえば金属、混合金属、合金、金属酸化物、または混合金属酸化物を含有する材料でできていてもよいし、伝導性ポリマー、およびそれらの混合物であってもよい。好適な金属としては、11族金属、4族、5族、および6族の金属、ならびに8~10族の遷移金属が挙げられる。アノードが光透過性となるべき場合には、インジウムスズ酸化物などの12族、13族、および14族の金属の混合金属酸化物が一般に使用される。アノード110は、「Flexible light-emitting diodes made from soluble conducting polymer」, Nature vol. 357, pp 477-479 (11 June 1992)に記載されるようなポリアニリンなどの有機材料を含むこともできる。アノードおよびカソードの少なくとも1つは、発生した光を観察できるように、少なくとも部分的に透明となるべきである。

【0106】

ある実施形態においては、本発明のデバイスは、アノードと本発明の新規ポリマーを含む層との間に緩衝層をさらに含む。用語「緩衝層」は、導電性材料または半導体材料を含む層を意味することを意図しており、この層は、限定するものではないが、下にある層の平坦化、電荷輸送および/または電荷注入特性、酸素または金属イオンなどの不純物の捕捉、ならびに有機電子デバイスの性能を促進または改善する他の特徴などの、1つ以上の機能を有機電子デバイス中で有することができる。緩衝材料は、ポリマー、オリゴマー、または小分子であってよく、溶液、分散体、懸濁液、エマルジョン、コロイド混合物、またはその他の組成物の形態であってよい。緩衝層は、プロトン酸がドーブされることが多いポリアニリン(PANI)またはポリエチレンジオキシチオフェン(PEDOT)などのポリマー材料で形成され得る。プロトン酸は、たとえば、ポリ(スチレンスルホン酸)、ポリ(2-アクリルアミド-2-メチル-1-プロパンスルホン酸)などであってよい。緩衝層は、銅フタロシアニンやテトラシアフルバレン-テトラシアノキノジメタン系(TTF-TCNQ)などの電荷輸送化合物などを含むことができる。一実施形態においては、緩衝層は、導電性ポリマーとコロイド形成性ポリマー酸との分散体から作製される。このような材料は、たとえば、米国特許出願公開第2004-0102577号明細書、米国特許出願公開第2004-0127637号明細書、および米国特許出願公開第2005/205860号明細書に記載されている。

【0107】

ある実施形態では、正孔輸送層120は、本明細書に記載の新規電気活性化合物を含む。ある実施形態では、正孔輸送層120は、本明細書に記載の新規電気活性化合物から実

10

20

30

40

50

質的になる。ある実施形態では、層120は、他の正孔輸送材料を含む。層120の別の正孔輸送材料の例は、たとえば、Y. WangによってKirk Othmer Encyclopedia of Chemical Technology、第4版、第18巻、p. 837 860、1996にまとめられている。正孔輸送分子および正孔輸送ポリマーの両方を使用することができる。一般に使用される正孔輸送分子としては：N, N'-ジフェニル-N, N'-ビス(3-メチルフェニル)-[1, 1'-ビフェニル]-4, 4'-ジアミン(TPD)、1, 1'-ビス[(ジ-4-トリルアミノ)フェニル]シクロヘキサン(TAPC)、N, N'-ビス(4-メチルフェニル)-N, N'-ビス(4-エチルフェニル)-[1, 1'-(3, 3'-ジメチル)ビフェニル]-4, 4'-ジアミン(ETPD)、テトラキス(3-メチルフェニル)-N, N, N', N'-2, 5-フェニレンジアミン(PDA)、a-フェニル4-N, N-ジフェニルアミノスチレン(TPS)、p-(ジエチルアミノ)ベンズアルデヒドジフェニルヒドラゾン(DEH)、トリフェニルアミン(TPA)、ビス[4(N, N-ジエチルアミノ)-2-メチルフェニル](4-メチルフェニル)メタン(MPMP)、1-フェニル-3-[p-(ジエチルアミノ)スチリル]-5-[p-(ジエチルアミノ)フェニル]ピラゾリン(PPRまたはDEASP)、1, 2-trans-ビス(9H-カルバゾール-9-イル)シクロブタン(DCZB)、N, N, N', N'テトラキス(4-メチルフェニル)-(1, 1'-ビフェニル)-4, 4'-ジアミン(TTB)、N, N'-ビス(ナフタレン-1-イル)-N, N'-ビス-(フェニル)ベンジジン(-NPB)、および銅フタロシアニンなどのポルフィリン系化合物が挙げられるが、これらに限定されるものではない。一般に使用される正孔輸送ポリマーとしては、ポリビニルカルバゾール、(フェニルメチル)ポリシラン、およびポリアニリンが挙げられるが、これらに限定されるものではない。ポリスチレンおよびポリカーボネートなどのポリマー中に、上述のものなどの正孔輸送分子をドーピングすることによって、正孔輸送ポリマーを得ることもできる。緩衝層および/または正孔輸送層は、米国特許出願公開第2004/102577号明細書、米国特許出願公開第2004/127637号明細書、および米国特許出願公開第2005/205860号明細書に記載されるようなチオフエン、アニリン、またはピロールとポリマーフッ素化スルホン酸とのポリマーを含むこともできる。

【0108】

あらゆる有機エレクトロルミネッセンス(「EL」)材料を層130中の光活性材料として使用することができる。このような材料としては、本発明の化合物の1つ以上、小有機蛍光性化合物、蛍光性およびリン光性の金属錯体、共役ポリマー、およびそれらの混合物が挙げられるが、これらに限定されるものではない。蛍光化合物の例としては、ピレン、ペリレン、ルブレン、クマリン、それらの誘導体、およびそれらの混合物が挙げられるが、これらに限定されるものではない。金属錯体の例としては、トリス(8-ヒドロキシキノラト)アルミニウム(Alq3)などの金属キレート化オキシノイド化合物；シクロメタレート化イリジウムおよび白金エレクトロルミネッセンス化合物、およびそれらの混合物が挙げられるが、これらに限定されるものではない。共役ポリマーとしては、ポリ(フェニレンビニレン)類、ポリフルオレン類、ポリ(スピロビフルオレン)類、ポリチオフエン類、ポリ(p-フェニレン)類、それらのコポリマー、およびそれらの混合物が挙げられるが、これらに限定されるものではない。これらの材料は、ホスト材料と混合されて存在することもできる。ある実施形態においては、ホスト材料は、正孔輸送材料または電子輸送材料である。ある実施形態においては、ホストは、本明細書に記載の新規電気活性化合物である。ある実施形態では、ホスト材料対光活性材料の比は5:1~20:1の範囲内であり；ある実施形態では、10:1~15:1の範囲内である。ある実施形態では、光活性層は、光活性材料と本明細書に記載の新規電気活性化合物とから実質的になる。

【0109】

電子輸送層140中、および/または層140とカソードとの間の任意選択の層中に使用可能な電子輸送材料の例としては、トリス(8-ヒドロキシキノラト)アルミニウム(

A1Q)、ビス(2-メチル-8-キノリノラト)(p-フェニルフェノラト)アルミニウム(BA1q)、テトラキス-(8-ヒドロキシキノラト)ハフニウム(HfQ)、およびテトラキス-(8-ヒドロキシキノラト)ジルコニウム(ZrQ)などの金属キレート化オキシノイド化合物;ならびに2-(4-ピフェニリル)-5-(4-t-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール(PBD)、3-(4-ピフェニリル)-4-フェニル-5-(4-t-ブチルフェニル)-1,2,4-トリアゾール(TAZ)、および1,3,5-トリ(フェニル-2-ベンズイミダゾール)ベンゼン(TPBI)などのアゾール化合物;2,3-ビス(4-フルオロフェニル)キノキサリンなどのキノキサリン誘導体;4,7-ジフェニル-1,10-フェナントロリン(DPA)および2,9-ジメチル-4,7-ジフェニル-1,10-フェナントロリン(DDPA)などのフェナントロリン類;ならびにそれらの混合物が挙げられる。

10

【0110】

カソード150は、電子または負電荷キャリアの注入に特に有効な電極である。カソードは、アノードよりも低い仕事関数を有するあらゆる金属または非金属であってよい。カソードの材料は、1族のアルカリ金属(たとえば、Li、Cs)、2族(アルカリ土類)金属、12族金属、たとえば希土類元素およびランタニド、ならびにアクチニドから選択することができる。アルミニウム、インジウム、カルシウム、バリウム、サマリウム、およびマグネシウム、ならびに組み合わせた材料を使用することができる。動作電圧を低下させるために、Li含有有機金属化合物、LiF、およびLi₂Oを有機層とカソード層との間に堆積することもできる。

20

【0111】

各構成層の材料の選択は、好ましくは、デバイスの可動寿命で高いデバイス効率を有するデバイスを得ることの目標の釣り合いを取ることによって決定される。デバイス中に他の層が存在することもできる。緩衝層と有機活性層との間に1つ以上の正孔注入層および/または正孔輸送層が存在することができる。有機活性層とカソードとの間に1つ以上の電子輸送層および/または電子注入層が存在することができる。

【0112】

本発明のデバイスは、好適な基体上に個別の層を順次堆積するなどの種々の技術によって作製することができる。ガラスおよびポリマーフィルムなどの気体を使用することができる。熱蒸着、化学蒸着などの従来の気相堆積技術を使用することができる。あるいは、有機層は、好適な溶媒を使用した液相堆積によって堆積することができる。この液相は、溶液、分散液、またはエマルジョンの形態であってよい。典型的な液相堆積技術としては、スピンコーティング、グラビアコーティング、カーテンコーティング、浸漬コーティング、スロットダイコーティング、スプレーコーティング、および連続ノズルコーティングなどの連続堆積技術;ならびにインクジェット印刷、グラビア印刷、フレキソ印刷、およびスクリーン印刷、限定するものではないがスピンコーティング、浸漬コーティング、ロール・トゥ・ロール技術、インクジェット印刷、スクリーン印刷、グラビア印刷などのあらゆる従来のコーティング技術または印刷技術が挙げられるが、これらに限定されるものではない。

30

【0113】

本明細書に記載される新規電気活性化合物は、液体組成物からの液相堆積によって適用することができる。用語「液体組成物」は、材料が溶解して溶液を形成する液体媒体、材料が分散して分散液を形成する液体媒体、あるいは材料が懸濁して懸濁液またはエマルジョンを形成する液体媒体を意味することを意図している。

40

【0114】

一実施形態においては、種々の層は以下の範囲の厚さを有する:アノード110、500~5000、一実施形態においては1000~2000;正孔輸送層120、50~2000、一実施形態においては200~1000;光活性層130、10~2000、一実施形態においては100~1000;層140、50~2000、一実施形態においては100~1000;カソード150、200~10000、一実施

50

形態においては300～5000。デバイス中の電子・正孔再結合領域の位置、したがってデバイスの発光スペクトルは、各層の相対厚さによって影響されうる。たとえば、電子・正孔再結合領域が発光層中に存在するように、電子輸送層の厚さを選択すべきである。層の厚さの望ましい比は、使用される材料の厳密な性質に依存する。

【0115】

一実施形態においては、本発明のデバイスは：アノード、緩衝層、正孔輸送層、光活性層、電子輸送層、電子注入層、カソードの構造をこの順序で有する。一実施形態においては、アノードは、インジウムスズ酸化物またはインジウム亜鉛酸化物でできている。一実施形態においては、緩衝層は、ポリチオフェン類、ポリアニリン類、ポリピロール類、それらのコポリマー、およびそれらの混合物からなる群から選択される伝導性ポリマーを含む。一実施形態においては、緩衝層は、伝導性ポリマーとコロイド形成性ポリマー酸との複合体を含む。

10

【0116】

一実施形態においては、正孔輸送層は、本発明に記載の新規化合物を含む。一実施形態においては、正孔輸送層は、トリアリールアミン基またはトリアリールメタン基を有する化合物を含む。一実施形態においては、正孔輸送層は、前述の定義のTPD、MPMP、NPB、CBP、およびそれらの混合物からなる群から選択される材料を含む。

【0117】

一実施形態においては、光活性層は、エレクトロルミネッセンス金属錯体とホスト材料とを含む。このホストは電荷輸送材料であってよい。一実施形態においては、ホストは本発明に記載の新規電気活性化化合物である。一実施形態においては、エレクトロルミネッセンス錯体少なくとも1重量%の量で存在する。一実施形態においては、エレクトロルミネッセンス錯体は2～20重量%である。一実施形態においては、エレクトロルミネッセンス錯体は20～50重量%である。一実施形態においては、エレクトロルミネッセンス錯体は50～80重量%である。一実施形態においては、エレクトロルミネッセンス錯体は80～99重量%である。一実施形態においては、金属錯体は、イリジウム、白金、レニウム、またはオスミウムのシクロメタレート化錯体である。一実施形態においては、光活性層は第2のホスト材料をさらに含むことができる。

20

【0118】

一実施形態においては、電子輸送層は、ヒドロキシアリール-N-複素環の金属錯体を含む。一実施形態においては、このヒドロキシアリール-N-複素環は、非置換または置換8-ヒドロキシキノリンである。一実施形態においては、金属はアルミニウムである。一実施形態においては、電子輸送層は、トリス(8-ヒドロキシキノリナト)アルミニウム、ビス(8-ヒドロキシキノリナト)(4-フェニルフェノラト)アルミニウム、テトラキス(8-ヒドロキシキノリナト)ジルコニウム、テトラキス(8-ヒドロキシキノリナト)ハフニウム、およびそれらの混合物からなる群から選択される材料を含む。一実施形態においては、電子注入層はLiFまたはLi₂Oである。一実施形態においては、カソードはAlまたはBa/Alである。一実施形態においては、トリス(8-ヒドロキシキノリナト)アルミニウム、ビス(8-ヒドロキシキノリナト)(4-フェニルフェノラト)アルミニウム、テトラキス(8-ヒドロキシキノリナト)ジルコニウム、テトラキス(8-ヒドロキシキノリナト)ハフニウム、およびそれらの混合物からなる群から選択される材料を含む電子輸送層と、LiFまたはLi₂Oを含む電子注入層とが存在する。

30

40

【0119】

一実施形態においては、本発明のデバイスは、緩衝層、正孔輸送層、および光活性層の液相堆積と、電子輸送層、電子注入層、およびカソードの気相堆積とによって製造される。

【0120】

緩衝層は、それを溶解または分散してそれから膜を形成するあらゆる液体媒体から堆積することができる。一実施形態においては、液体媒体は、1種類以上の有機溶媒から実質的になる。一実施形態においては、液体媒体は、水、あるいは水および有機溶媒から実質

50

的になる。一実施形態においては、有機溶媒は、アルコール類、ケトン類、環状エーテル類、およびポリオール類からなる群から選択される。一実施形態においては、有機液体は、ジメチルアセトアミド（「DMAc」）、N-メチルピロリドン（「NMP」）、ジメチルホルムアミド（「DMF」）、エチレングリコール（「EG」）、脂肪族アルコール、およびそれらの混合物から選択される。緩衝材料は、0.5～10重量パーセントの量で液体媒体中に存在することができる。液体媒体に依存して、他の重量パーセント値の緩衝材料を使用することもできる。緩衝層は、あらゆる連続または不連続な液相堆積技術によって適用することができる。一実施形態においては、緩衝層はスピンコーティングによって適用される。一実施形態においては、緩衝層はインクジェット印刷によって適用される。液相堆積後、液体媒体は、空气中、不活性雰囲気中、または減圧によって、室温において、または加熱することで除去することができる。一実施形態においては、この層は275未満の温度に加熱される。一実施形態においては、加熱温度は100～275の間である。一実施形態においては、加熱温度は100～120の間である。一実施形態においては、加熱温度は120～140の間である。一実施形態においては、加熱温度は140～160の間である。一実施形態においては、加熱温度は160～180の間である。一実施形態においては、加熱温度は180～200の間である。一実施形態においては、加熱温度は200～220の間である。一実施形態においては、加熱温度は190～220の間である。一実施形態においては、加熱温度は220～240の間である。一実施形態においては、加熱温度は240～260の間である。一実施形態においては、加熱温度は260～275の間である。加熱時間は温度に依存し、一般に5～60分の間である。一実施形態においては、最終層厚さは5～200nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは5～40nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは40～80nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは80～120nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは120～160nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは160～200nmの間である。

【0121】

正孔輸送層は、それを溶解または分散してそれから膜を形成するあらゆる液体媒体から堆積することができる。一実施形態においては、液体媒体は、1種類以上の有機溶媒から実質的になる。一実施形態においては、液体媒体は、水、あるいは水および有機溶媒から実質的になる。一実施形態においては、有機溶媒は芳香族溶媒である。一実施形態においては、有機液体は、クロロホルム、ジクロロメタン、トルエン、アニソール、およびそれらの混合物から選択される。正孔輸送材料は、0.2～2重量パーセントの濃度で液体媒体中に存在することができる。液体媒体に依存して、他の重量パーセント値の正孔輸送材料を使用することもできる。正孔輸送層は、あらゆる連続または不連続な液相堆積技術によって適用することができる。一実施形態においては、正孔輸送層はスピンコーティングによって適用される。一実施形態においては、正孔輸送層はインクジェット印刷によって適用される。液相堆積後、液体媒体は、空气中、不活性雰囲気中、または減圧によって、室温において、または加熱することで除去することができる。一実施形態においては、この層は300以下の温度に加熱される。一実施形態においては、加熱温度は170～275の間である。一実施形態においては、加熱温度は170～200の間である。一実施形態においては、加熱温度は190～220の間である。一実施形態においては、加熱温度は210～240の間である。一実施形態においては、加熱温度は230～270の間である。加熱時間は温度に依存し、一般に5～60分の間である。一実施形態においては、最終層厚さは5～50nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは5～15nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは15～25nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは25～35nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは35～50nmの間である。

【0122】

光活性層は、それを溶解または分散してそれから膜を形成するあらゆる液体媒体から堆

10

20

30

40

50

積することができる。一実施形態においては、液体媒体は、1種類以上の有機溶媒から実質的になる。一実施形態においては、液体媒体は、水、あるいは水および有機溶媒から実質的になる。一実施形態においては、有機溶媒は芳香族溶媒である。一実施形態においては、有機液体は、クロロホルム、ジクロロメタン、トルエン、アニソール、およびそれらの混合物から選択される。光活性材料は、0.2～2重量パーセントの濃度で液体媒体中に存在することができる。液体媒体に依存して、他の重量パーセント値の光活性材料を使用することもできる。光活性層は、あらゆる連続または不連続な液相堆積技術によって適用することができる。一実施形態においては、光活性層はスピンコーティングによって適用される。一実施形態においては、光活性層はインクジェット印刷によって適用される。液相堆積後、液体媒体は、空气中、不活性雰囲気中、または減圧によって、室温において、または加熱することで除去することができる。一実施形態においては、堆積された層は、最低Tgを有する材料のTg未満の温度に加熱される。一実施形態においては、加熱温度は最低Tgよりも少なくとも10℃低い。一実施形態においては、加熱温度は最低Tgよりも少なくとも20℃低い。一実施形態においては、加熱温度は最低Tgよりも少なくとも30℃低い。一実施形態においては、加熱温度は50℃～150℃の間である。一実施形態においては、加熱温度は50℃～75℃の間である。一実施形態においては、加熱温度は75℃～100℃の間である。一実施形態においては、加熱温度は100℃～125℃の間である。一実施形態においては、加熱温度は125℃～150℃の間である。加熱時間は温度に依存し、一般に5～60分の間である。一実施形態においては、最終層厚さは25～100nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは25～40nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは40～65nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは65～80nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは80～100nmの間である。

【0123】

電子輸送層は、あらゆる気相堆積方法によって堆積することができる。一実施形態においては、これは減圧下での熱蒸着によって堆積される。一実施形態においては、最終層厚さは1～100nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは1～15nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは15～30nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは30～45nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは45～60nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは60～75nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは75～90nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは90～100nmの間である。

【0124】

電子注入層は、あらゆる気相堆積方法によって堆積することができる。一実施形態においては、これは減圧下での熱蒸着によって堆積される。一実施形態においては、減圧は 10^{-6} torr未満である。一実施形態においては、減圧は 10^{-7} torr未満である。一実施形態においては、減圧は 10^{-8} torr未満である。一実施形態においては、材料は100～400の範囲内；好ましくは150～350の範囲内の温度に加熱される。本明細書では、すべての気相堆積速度はオンゲストローム/秒の単位で示される。一実施形態においては、材料は0.5～10/秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は0.5～1/秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は1～2/秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は2～3/秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は3～4/秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は4～5/秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は5～6/秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は6～7/秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は7～8/秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は8～9/秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は9～10/秒の速度で堆積される。一実施形態においては、最終層厚さは0.1～3nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは0.1～1nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは1～2nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは

2 ~ 3 nmの間である。

【0125】

カソードは、あらゆる気相堆積方法によって堆積することができる。一実施形態においては、これは減圧下での熱蒸着によって堆積される。一実施形態においては、減圧は 10^{-6} torr 未満である。一実施形態においては、減圧は 10^{-7} torr 未満である。一実施形態においては、減圧は 10^{-8} torr 未満である。一実施形態においては、材料は 100 ~ 400 の範囲内；好ましくは 150 ~ 350 の範囲内の温度に加熱される。一実施形態においては、材料は 0.5 ~ 10 / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は 0.5 ~ 1 / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は 1 ~ 2 / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は 2 ~ 3 / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は 3 ~ 4 / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は 4 ~ 5 / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は 5 ~ 6 / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は 6 ~ 7 / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は 7 ~ 8 / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は 8 ~ 9 / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は 9 ~ 10 / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、最終層厚さは 10 ~ 1000 nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは 10 ~ 1000 nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは 10 ~ 50 nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは 50 ~ 100 nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは 100 ~ 200 nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは 200 ~ 300 nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは 300 ~ 400 nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは 400 ~ 500 nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは 500 ~ 600 nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは 600 ~ 700 nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは 700 ~ 800 nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは 800 ~ 900 nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは 900 ~ 1000 nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは 1000 ~ 2000 nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは 2000 ~ 3000 nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは 3000 ~ 4000 nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは 4000 ~ 5000 nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは 5000 ~ 6000 nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは 6000 ~ 7000 nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは 7000 ~ 8000 nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは 8000 ~ 9000 nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは 9000 ~ 10000 nmの間である。

【0126】

一実施形態においては、本発明のデバイスは、緩衝層、正孔輸送層、および光活性層、電子輸送層、電子注入層、およびカソードの気相堆積によって製造される。

【0127】

一実施形態においては、緩衝層は気相堆積によって適用される。一実施形態においては、これは減圧下での熱蒸着によって堆積される。一実施形態においては、減圧は 10^{-6} torr 未満である。一実施形態においては、減圧は 10^{-7} torr 未満である。一実施形態においては、減圧は 10^{-8} torr 未満である。一実施形態においては、材料は 100 ~ 400 の範囲内；好ましくは 150 ~ 350 の範囲内の温度に加熱される。一実施形態においては、材料は 0.5 ~ 10 / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は 0.5 ~ 1 / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は 1 ~ 2 / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は 2 ~ 3 / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は 3 ~ 4 / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は 4 ~ 5 / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は 5 ~ 6 / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は 6 ~ 7 / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は 7 ~ 8 / 秒の速度で堆積される。一実施形態に

おいては、材料は $8 \sim 9$ / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は $9 \sim 10$ / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、最終層厚さは $5 \sim 200$ nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは $5 \sim 30$ nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは $30 \sim 60$ nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは $60 \sim 90$ nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは $90 \sim 120$ nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは $120 \sim 150$ nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは $150 \sim 280$ nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは $180 \sim 200$ nmの間である。

【0128】

一実施形態においては、正孔輸送層は気相堆積によって適用される。一実施形態においては、これは減圧下での熱蒸着によって堆積される。一実施形態においては、減圧は 10^{-6} torr 未満である。一実施形態においては、減圧は 10^{-7} torr 未満である。一実施形態においては、減圧は 10^{-8} torr 未満である。一実施形態においては、材料は $100 \sim 400$ の範囲内；好ましくは $150 \sim 350$ の範囲内の温度に加熱される。一実施形態においては、材料は $0.5 \sim 10$ / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は $0.5 \sim 1$ / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は $1 \sim 2$ / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は $2 \sim 3$ / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は $3 \sim 4$ / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は $4 \sim 5$ / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は $5 \sim 6$ / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は $6 \sim 7$ / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は $7 \sim 8$ / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は $8 \sim 9$ / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は $9 \sim 10$ / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、最終層厚さは $5 \sim 200$ nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは $5 \sim 30$ nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは $30 \sim 60$ nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは $60 \sim 90$ nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは $90 \sim 120$ nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは $120 \sim 150$ nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは $150 \sim 280$ nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは $180 \sim 200$ nmの間である。

【0129】

一実施形態においては、光活性層は気相堆積によって適用される。一実施形態においては、これは減圧下での熱蒸着によって堆積される。一実施形態においては、光活性層は1種類のエレクトロルミネセンス化合物から実質的になり、この化合物が減圧下での熱蒸着によって堆積される。一実施形態においては、減圧は 10^{-6} torr 未満である。一実施形態においては、減圧は 10^{-7} torr 未満である。一実施形態においては、減圧は 10^{-8} torr 未満である。一実施形態においては、材料は $100 \sim 400$ の範囲内；好ましくは $150 \sim 350$ の範囲内の温度に加熱される。一実施形態においては、材料は $0.5 \sim 10$ / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は $0.5 \sim 1$ / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は $1 \sim 2$ / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は $2 \sim 3$ / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は $3 \sim 4$ / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は $4 \sim 5$ / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は $5 \sim 6$ / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は $6 \sim 7$ / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は $7 \sim 8$ / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は $8 \sim 9$ / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は $9 \sim 10$ / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、最終層厚さは $5 \sim 200$ nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは $5 \sim 30$ nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは $30 \sim 60$ nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは $60 \sim 90$ nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは $90 \sim 120$ nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは $120 \sim 150$ nmの間である。一実施形態においては、最終層

厚さは150～280 nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは180～200 nmの間である。

【0130】

一実施形態においては、光活性層は2種類のエレクトロルミネッセンス材料を含み、そのそれぞれが減圧下での熱蒸着によって適用される。上述のいずれかの減圧条件および温度を使用することができる。上述のいずれかの堆積速度を使用することができる。相対堆積速度は50:1～1:50とすることができる。一実施形態においては、相対堆積速度は1:1～1:3である。一実施形態においては、相対堆積速度は1:3～1:5である。一実施形態においては、相対堆積速度は1:5～1:8である。一実施形態においては、相対堆積速度は1:8～1:10である。一実施形態においては、相対堆積速度は1:10～1:20である。一実施形態においては、相対堆積速度は1:20～1:30である。一実施形態においては、相対堆積速度は1:30～1:50である。層全体の厚さは、1成分の光活性層に関して前述したものと同一であってよい。

10

【0131】

一実施形態においては、光活性層は、1種類のエレクトロルミネッセンス材料と少なくとも1種類のホスト材料とを含み、そのそれぞれが減圧下での熱蒸着によって適用される。上述のいずれかの減圧条件および温度を使用することができる。上述のいずれかの堆積速度を使用することができる。エレクトロルミネッセンス材料対ホストの相対堆積速度は1:1～1:99とすることができる。一実施形態においては、相対堆積速度は1:1～1:3である。一実施形態においては、相対堆積速度は1:3～1:5である。一実施形態においては、相対堆積速度は1:5～1:8である。一実施形態においては、相対堆積速度は1:8～1:10である。一実施形態においては、相対堆積速度は1:10～1:20である。一実施形態においては、相対堆積速度は1:20～1:30である。一実施形態においては、相対堆積速度は1:30～1:40である。一実施形態においては、相対堆積速度は1:40～1:50である。一実施形態においては、相対堆積速度は1:50～1:60である。一実施形態においては、相対堆積速度は1:60～1:70である。一実施形態においては、相対堆積速度は1:70～1:80である。一実施形態においては、相対堆積速度は1:80～1:90である。一実施形態においては、相対堆積速度は1:90～1:99である。層全体の厚さは、1成分の光活性層に関して前述したものと同一であってよい。

20

30

【0132】

一実施形態においては、電子輸送層は気相堆積によって適用される。一実施形態においては、これは減圧下での熱蒸着によって堆積される。一実施形態においては、減圧は 10^{-6} torr未満である。一実施形態においては、減圧は 10^{-7} torr未満である。一実施形態においては、減圧は 10^{-8} torr未満である。一実施形態においては、材料は100～400の範囲内；好ましくは150～350の範囲内の温度に加熱される。一実施形態においては、材料は0.5～10 / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は0.5～1 / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は1～2 / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は2～3 / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は3～4 / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は4～5 / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は5～6 / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は6～7 / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は7～8 / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は8～9 / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、材料は9～10 / 秒の速度で堆積される。一実施形態においては、最終層厚さは5～200 nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは5～30 nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは30～60 nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは60～90 nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは90～120 nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは120～150 nmの間である。一実施形態においては、最終層厚さは150～280 nmの間である。一実施形態において

40

50

は、最終層厚さは180～200nmの間である。

【0133】

一実施形態においては、電子注入層は、前述のように気相堆積によって適用される。

【0134】

一実施形態においては、カソードは、前述のように気相堆積によって適用される。

【0135】

一実施形態においては、本発明のデバイスは、一部の有機層の気相堆積と、一部の有機層の液相堆積とによって製造される。一実施形態においては、本発明のデバイスは、緩衝層の液相堆積と、他のすべての層の気相堆積とによって製造される。

【0136】

本明細書に記載されているものと類似または同等の方法および材料を使用して、本発明の実施または試験を行うことができるが、好適な方法および材料について以下に説明する。さらに、材料、方法、および実施例は、単に説明的なものであって、限定を意図したものではない。本明細書において言及されるあらゆる刊行物、特許出願、特許、およびその他の参考文献は、それらの記載内容全体が援用される。

【実施例】

【0137】

本明細書に記載される概念を以下の実施例でさらに説明するが、特許請求の範囲に記載される本発明の範囲がこれらの実施例によって限定されるものではない。

【0138】

実施例1

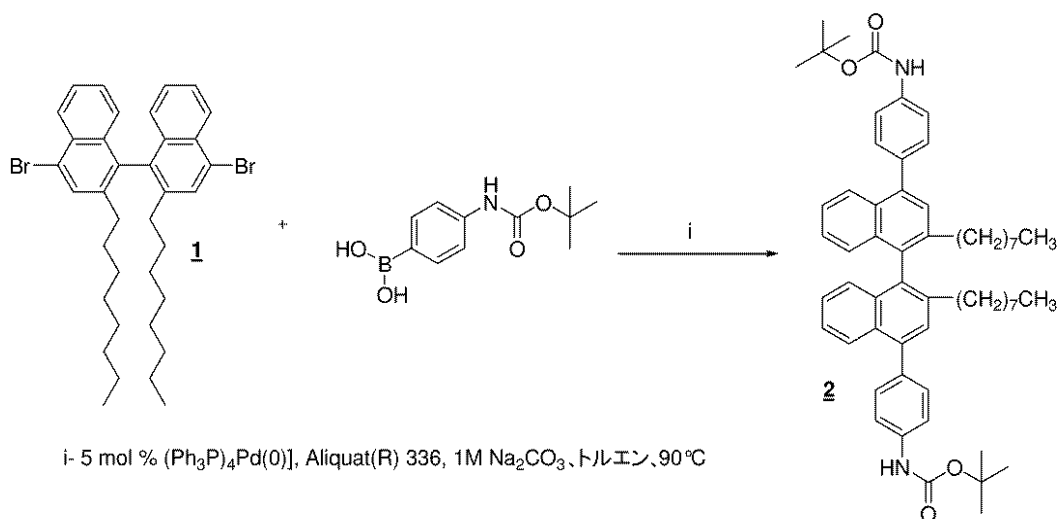
この実施例では、電気活性化合物である化合物Cの調製を示す。

【0139】

パート1 - 中間化合物2：

【0140】

【化35】



化合物1(4.0g、6.3mmol)を60mLのトルエン中に、隔壁で封止した200mLの2口丸底中で溶解させた。4-[(tert-ブトキシカルボニル)アミノ]ベンゼンボロン酸(3.72g、15.7mmol)、Aliquat(登録商標)336(0.5g)、および炭酸ナトリウム(3.33g、31.4mmol)を加えた。混合物に窒素をスパージし、反応フラスコに、還流冷却器および窒素入口・出口を取り付けた。窒素パージしたグローブボックス中で、テトラキストリフェニルホスフィン(363mg、5.00mol%)および無水トルエン(10mL)を丸底フラスコ中で混合した。このフラスコを隔壁で封止し、グローブボックスから取り出した。カニューレによってこの触媒懸濁液を反応混合物に加えた。シリンジによって水(30mL)を反応容器に加

えた。窒素スパージを取り外し、窒素ブランケットと交換した。反応混合物を 90 で 3 時間加熱した。反応物を室温まで冷却し、分液漏斗に移し、酢酸エチルで希釈した。水層を除去し、有機層を水で洗浄し、次にブラインで洗浄し、 $MgSO_4$ 上で乾燥させた。得られた粗生成物をシリカゲルパッドで濾過し、酢酸エチルで洗浄した。溶媒を除去し、生成物を高真空下で乾燥させた。フラッシュカラムクロマトグラフィー（ヘキサン：塩化メチレンが 3：2）で精製した後、2.2 g の薄オレンジ色泡状固体が得られた。純度（HPLC）：98.5%、純粋な 4,4' 異性体。NMR 分析により、中間化合物 2 の構造を確認した。

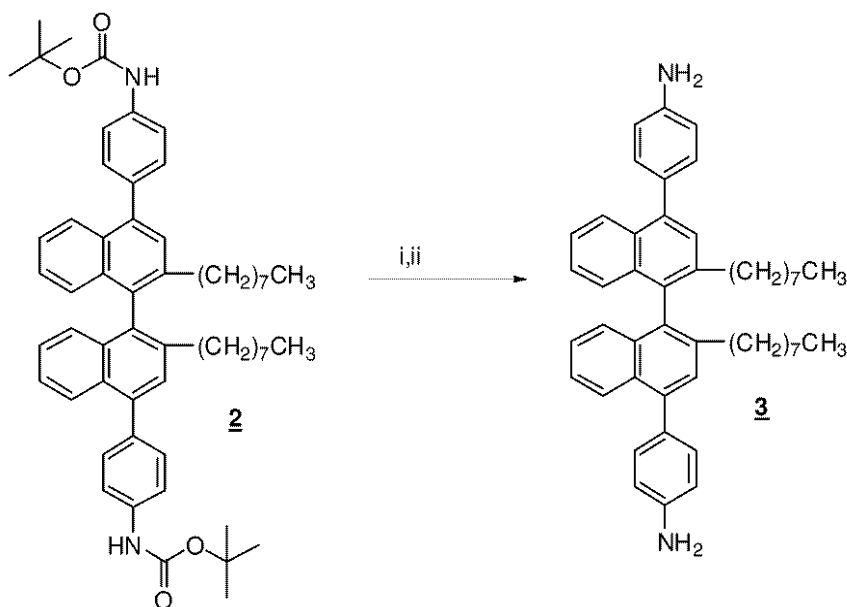
【0141】

パート 2 - 中間化合物 3：

10

【0142】

【化36】



20

条件: i- TFA, CH_2Cl_2 ; ii- 10% $NaHCO_3$

30

中間化合物 2 (2.2 g、2.5 mmol) を 40 mL の塩化メチレン中に、マグネチックスターラーおよび窒素入口・出口を取り付けた 250 mL 丸底フラスコ中で溶解させた。トリフルオロ酢酸 (2.9 g、25 mmol) を加え、反応物を 16 時間攪拌した。溶媒およびトリフルオロ酢酸を回転蒸発によって除去し、生成物をジエチルエーテル中に溶解させた。このジエチルエーテル溶液を飽和重炭酸ナトリウム (2 回)、水、およびブラインで洗浄した。そのエーテル層を $MgSO_4$ 上で乾燥させ、濾過し、ロータリーエバポレーター上で濃縮した。生成物を高真空下で乾燥させて、1.7 g (100%) の薄オレンジ色泡状固体を得た。純度 (HPLC)：94.7%。NMR 分析により、中間化合物 3 の構造を確認した。

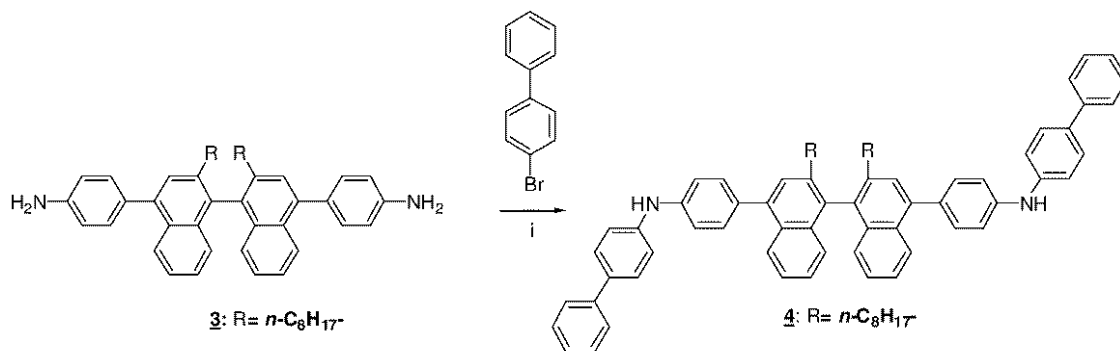
40

【0143】

パート 3 - 中間化合物 4：

【0144】

【化 3 7】



条件: $\text{i-Pd}_2\text{dba}_3$, $t\text{-Bu}_3\text{P}$, NaOBu^t , トルエン、室温

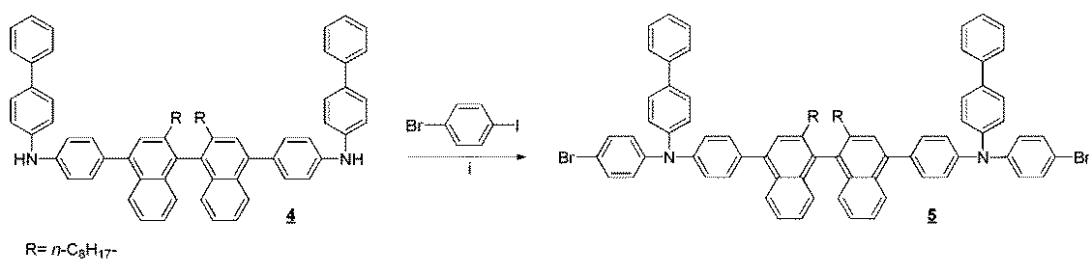
窒素パージしたグローブボックス中で、3 (1.60 g、2.42 mmol)、4-ブロモビフェニル (1.13 g、4.84 mmol)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0) (55 mg、2.5 mol%)、トリ- t -ブチルホスフィン (25 mg、5 mol%)、およびトルエン (30 mL) を、マグネチックスターラーを取り付けた 500 mL の丸底フラスコ中で混合した。ナトリウム t -ブトキシド (0.58 g、6.05 mmol) を加え、反応フラスコに蓋をした。72 時間後、反応混合物をグローブボックスから取りだし、シリカゲルのパッドで濾過し、トルエンで洗浄した。その溶液をロータリーエバポレーター上で濃縮し、高真空下で乾燥させた。生成物を、シリカゲル上のフラッシュクロマトグラフィー (7 : 3 から 3 : 2 のヘキサン : 塩化メチレングラジエント) で精製して、1.56 g の白色固体を得た。NMR 分析により、中間化合物 4 の構造を確認した。

【0145】

パート 5 - 中間化合物 5。

【0146】

【化 3 8】



条件: $\text{i-Pd}_2\text{dba}_3$, $(\text{dppf})_2$, NaOBu^t , トルエン、80°C

窒素パージしたグローブボックス中で、4 (1.50 g、1.55 mmol)、 p -ブロモヨードベンゼン (1.32 g、4.66 mmol)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0) (36 mg、2.5 mol%)、ビス(ジフェニルホスフィノ)フェロセン (43 mg、5 mol%)、およびトルエン (60 mL) を、マグネチックスターラーを取り付けた 300 mL の丸底フラスコ中で混合した。ナトリウム t -ブトキシド (0.373 g、3.88 mmol) を加え、反応容器に蓋をして、グローブボックスから取り出した。冷却器および窒素入口・出口を上記丸底フラスコに取り付け、油浴を使用して反応物を 85 に加熱した。20 時間後、 p -ブロモヨードベンゼン (0.66 g、2.3 mmol)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0) (18 mg、1.25 mol%)、ビス(ジフェニルホスフィノ)フェロセン (21 mg、2.5 mol%)、およびナトリウム t -ブトキシド (186 mg、1.25 mol%) のトルエン (10 mL) 中の懸濁液をグローブボックス中で調製し、カニューレによって反応混合物に移した。さらに 90 で 20 時間後、反応混合物を室温まで冷却した。反応混合物を

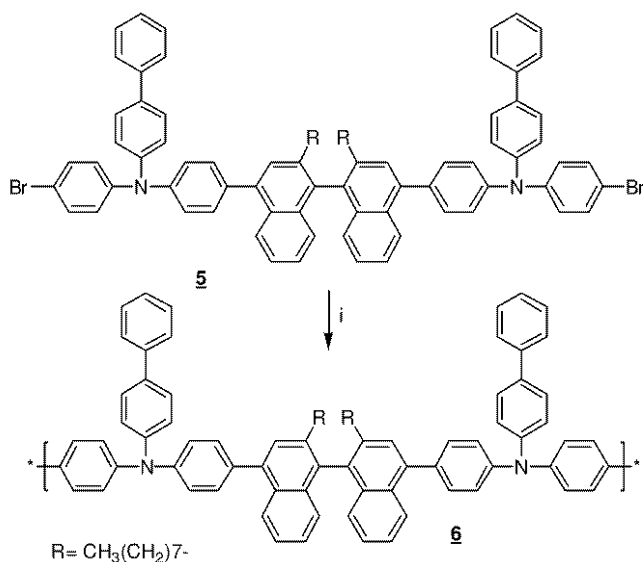
シリカゲルパッドで濾過し、トルエンで洗浄し、続いてロータリーエバポレーター上で濃縮した。得られた粗生成物を高真空下で乾燥させた。生成物を、シリカゲル上のフラッシュクロマトグラフィー（6：1～5：1のヘキサン：塩化メチレングラジエント）によって精製して、1.4 gの白色固体を得た。純度（UPLC）：>99.9%。NMR分析により、中間化合物5の構造を確認した。

【0147】

パート6 - 化合物C：

【0148】

【化39】



条件：i- Ni(COD)₂, COD、ジピリジル、13:2トルエン：DMF, 70°C

特に明記しない限り、すべての作業は窒素パージしたグローブボックス中で行った。モノマー5（1.35 g、1.06 mmol）をシンチレーションバイアルに加え、13 mLのトルエン中に溶解させた。乾燥させた清浄な50 mLのSchlenk管に、ビス（1,5-シクロオクタジエン）ニッケル（0）（0.597 g、2.17 mmol）を投入した。2,2'-ジピリジル（0.339 g、2.17 mmol）および1,5-シクロオクタジエン（0.235 g、2.02 mmol）を秤量してシンチレーションバイアル中に入れ、2 mLのN,N'-ジメチルホルムアミド中に溶解させた。この溶液をSchlenk管に加えた。このSchlenk管をアルミニウムブロック中に挿入し、そのブロックをホットプレート/スターラー上で60の内部温度が得られる設定点で加熱撹拌した。この触媒系を60で30分間維持し、次に70まで上昇させた。トルエン中のモノマー溶液をSchlenk管に加え、管を封止した。この重合混合物を70で18時間撹拌した。18時間後、Schlenk管をブロックから取り出し、室温まで冷却した。この管をグローブボックスから取り出し、内容物を濃HCl/MeOH溶液（1.5% v/v濃HCl）中に注いだ。2時間撹拌した後、得られたポリマーを減圧濾過によって回収し、高真空下で乾燥させた。このポリマーを、トルエンからHCl/MeOH（1% v/v濃HCl）中、MeOH中、トルエン（CMOSグレード）中、および3-ペンタノン中で連続して沈殿させることによって精製した。白色繊維状ポリマー（1.1 g）が得られた。このポリマーの分子量をGPC（THF移動相、ポリスチレン標準物質）によって求めた：M_w = 427,866；M_n = 103,577；M_w/M_n = 4.13。NMR分析により、化合物Cの構造を確認した。

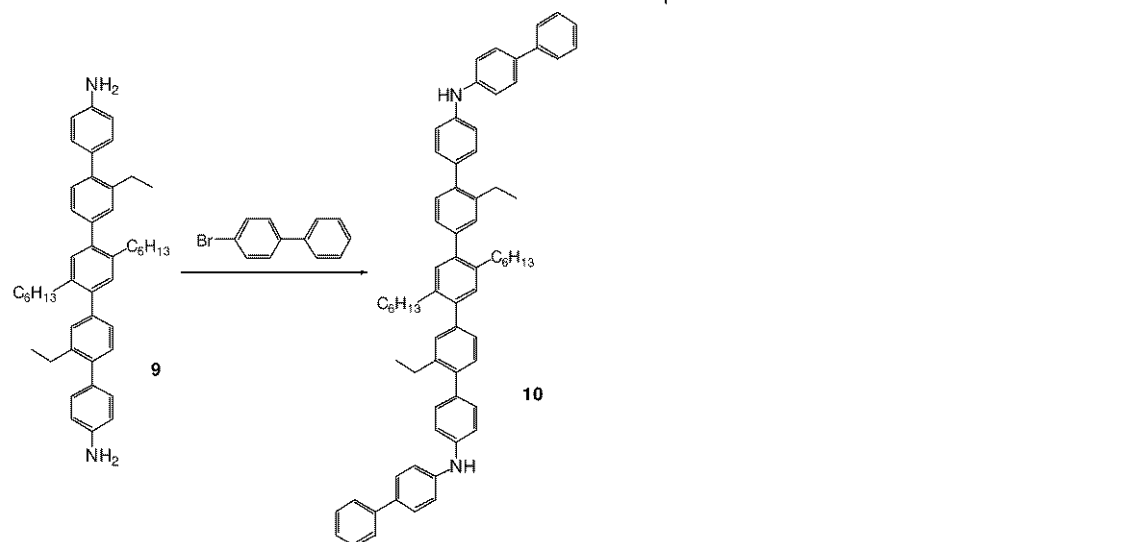
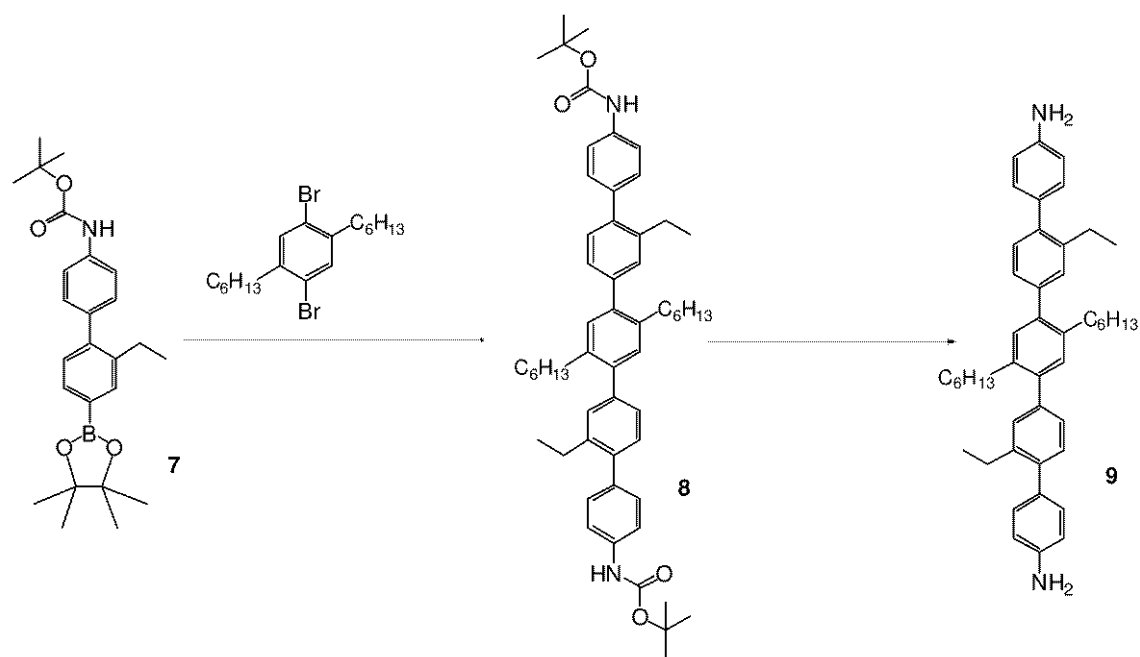
【0149】

実施例2：化合物Sの合成

パート1 - 中間化合物7の合成：

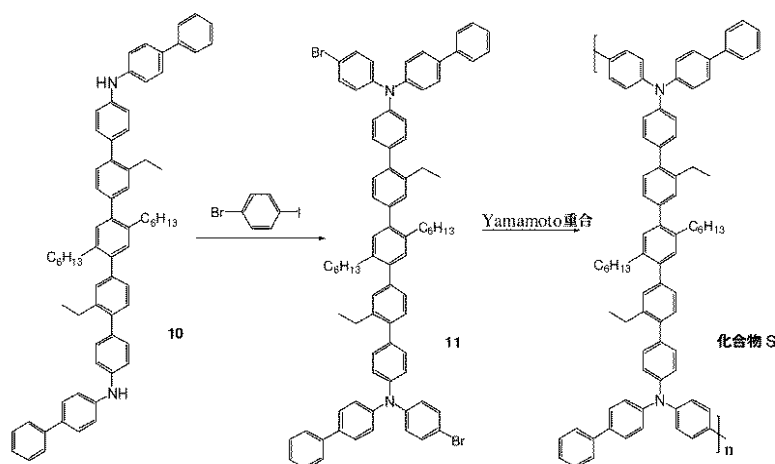
【 0 1 5 0 】

【 化 4 0 】



【 0 1 5 1 】

【化 4 1】



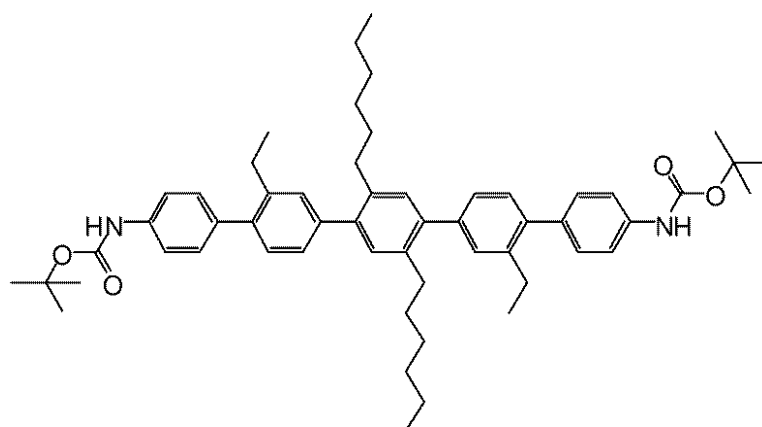
10

【 0 1 5 2】

パート 2：中間化合物 8 の合成

【 0 1 5 3】

【化 4 2】



20

1,4-ジブromo-2,5-ジヘキシルベンゼン (8.05 mmol、3.255 g)、ボロン酸エステル 7 (17.7 mmol、7.545 g)、 Na_2CO_3 (40.3 mmol、4.268 g)、および Aliquat 336 (0.500 g) を、トルエン (100 mL) 中に、攪拌棒および冷却器を取り付けた 250 mL の 2 口丸底フラスコ中で懸濁させた。反応混合物を 30 分間脱気した。 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (0.403 mmol、0.465 g) を粉末として反応混合物に加えた。反応混合物をさらに 15 分間脱気しながら、同時に水 (50 mL) を脱気した。シリンジで水を反応容器に加えた。反応物を 90 まで 2 日間加熱した。得られた反応混合物を酢酸エチル (150 mL) で希釈し、酢酸エチル (3 × 100 mL) で洗浄した。有機層をブライン (2 × 100 mL) で洗浄し、硫酸マグネシウム上で乾燥させ、濾過し、濃縮した。1:3 のジクロロメタン:ヘキサンを使用したシリカゲル上のカラムクロマトグラフィーによって精製して、白色粉末 (56%、3.8 g) を得た。 ^1H NMR (500 MHz, CD_2Cl_2) = 7.45 (d, $J = 8.5$ Hz, 4H)、7.33 ~ 7.31 (m, 5H)、7.26 ~ 7.19 (m, 5H)、6.65 (s, 2H)、2.71 ~ 2.63 (m, 9H)、1.54 (s, 18H)、1.31 ~ 1.20 (m, 14H)、1.15 (t, $J = 7.49$, 7H)、0.83 (t, $J = 6.85$ Hz, 6H)。

40

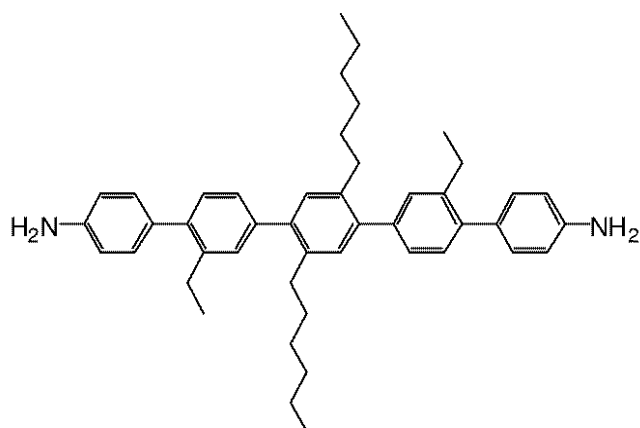
【 0 1 5 4】

パート 3：中間化合物 9 の合成

50

【 0 1 5 5 】

【 化 4 3 】



10

化合物 8 (4 . 5 4 m m o l 、 3 . 8 0 0 g) を 2 0 0 m L の 丸 底 フ ラ ス コ に 加 え 、 ジ ク ロ ロ メ タ ン (9 0 m L) 中 に 溶 解 さ せ た 。 こ の 溶 液 に ト リ フ ル オ ロ 酢 酸 (4 5 . 4 m m o l 、 5 . 1 7 5 g) を 滴 下 し た 。 1 日 後 、 ジ ク ロ ロ メ タ ン を 回 転 蒸 発 に よ っ て 除 去 し 、 得 ら れ た 灰 色 粉 末 を エ チ ル エ ー テ ル (1 0 0 m L) 中 に 溶 解 さ せ 、 こ れ に 重 炭 酸 ナ ト リ ウ ム を 加 え た (1 0 0 m L) 。 得 ら れ た 有 機 層 を 水 (2 × 1 0 0 m L) で 洗 浄 し 、 次 に プ ラ イ ン (2 × 1 0 0 m L) で 洗 浄 し た 。 そ の 後 、 硫 酸 マ グ ネ シ ウ ム 上 で 乾 燥 さ せ 、 濃 縮 し て 、 オ フ ホ ワ イ ト 粉 末 (1 0 0 % 、 2 . 8 9 1 g) を 得 た 。 ^1H NMR (5 0 0 M H z , CD_2Cl_2) = 7 . 2 8 (m , 2 H) 、 7 . 2 3 ~ 7 . 1 8 (m , 6 H) 、 7 . 1 6 (d , $J = 8 . 4 7 \text{ Hz}$, 4 H) 、 6 . 7 6 (d , $J = 8 . 3 7 \text{ Hz}$, 4 H) 、 3 . 7 7 (s , 4 H) 、 2 . 7 1 ~ 2 . 6 3 (m , 6 H) 、 1 . 3 ~ 1 . 1 9 (m , 1 6 H) 、 1 . 1 5 (t , $J = 7 . 5 \text{ Hz}$, 8 H) 、 0 . 8 3 (t , $J = 6 . 8 6 \text{ Hz}$, 6 H) 。

20

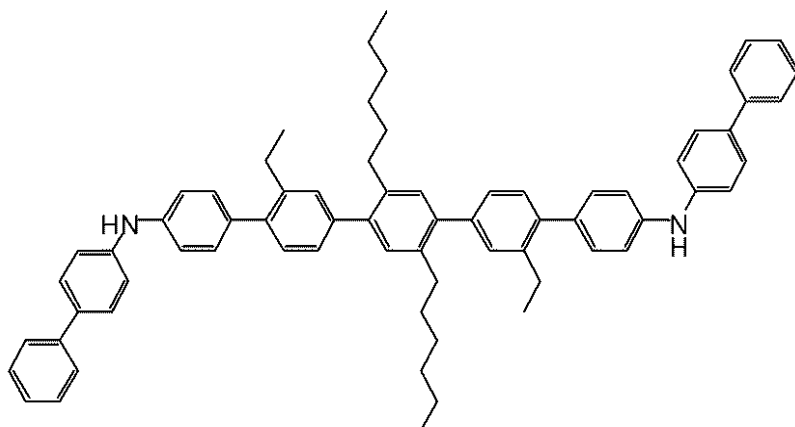
【 0 1 5 6 】

パート 4 : 中間化合物 1 0 の 合 成

【 0 1 5 7 】

【 化 4 4 】

30



40

攪拌棒を取り付けた 2 5 0 m L の フ ラ ス コ 中 で 、 化 合 物 9 (4 . 5 3 9 m m o l 、 2 . 8 9 1 g) 、 プ ロ モ ビ フ ェ ニ ル (9 . 1 2 3 m m o l 、 2 . 1 2 7 g) 、 お よ び ト ル エ ン (6 5 m L) を 加 え 、 続 い て $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0 . 2 2 7 m m o l 、 0 . 2 0 8 g) 、 P^tBu_3 (0 . 4 5 4 m m o l 、 0 . 0 9 2 g) 、 お よ び NaO^tBu (9 . 0 7 8 m m o l 、 0 . 8 4 5 g) を 加 え た 。 3 日 後 、 得 ら れ た 反 応 混 合 物 を ト ル エ ン (1 0 0 m L) で 希 釈 し 、 シ リ カ お よ び セ ラ イ ト の パ ッ ド で 濾 過 し 、 ト ル エ ン (3 × 1 0 0 m L) で 洗 浄 し 、 続 い て 酢 酸 エ チ ル (2 × 1 0 0 m L) で 洗 浄 し 、 濃 縮 し て 、 褐 色 固 体 を 得 た 。 1 : 6

50

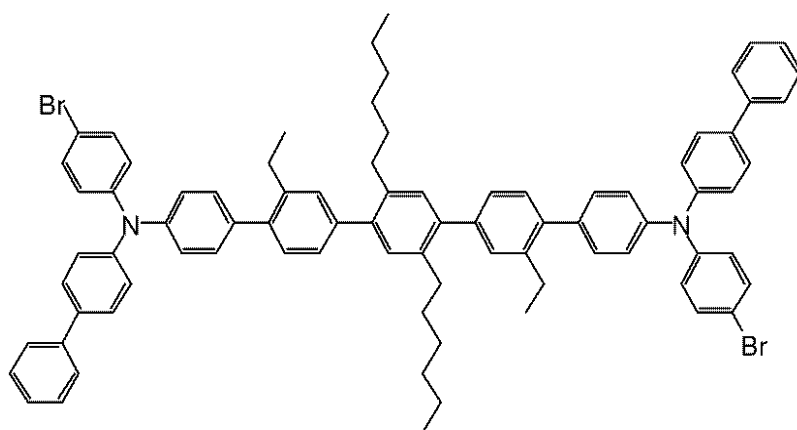
の酢酸エチル：ヘキサンを溶離液として使用するシリカゲル上のカラムクロマトグラフィーによって精製して、白色粉末（55%、2.367g）を得た。 ^1H NMR（500 MHz, CD_2Cl_2 ） = 7.61 (d, $J = 7.24$ Hz, 4H)、7.57 (d, $J = 8.51$ Hz, 4H)、7.43 (t, $J = 7.6$ Hz, 4H)、7.34 ~ 7.28 (m, 12H)、5.99 (s, 2H)、2.73 (q, $J = \text{Hz}$, 4H)、2.66 (t, $J = 7.7$ Hz, 6H)、1.33 ~ 1.17 (m, 20H)、0.84 (t, $J = 7.2$ Hz, 6H)。

【0158】

パート5：中間化合物11の合成

【0159】

【化45】



化合物10（2.515 mmol、2.367g）、1-ブロモ-4-ヨードベンゼン（3.772 mmol、1.067g）、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ （0.126 mmol、0.115g）、1,1-ビス（ジフェニルホスフィノ）フェロセン（0.251 mmol、0.139g）、およびナトリウムt-ブトキシド（2.766 mmol、0.266g）を、トルエン（100 mL）中に、冷却器および撹拌棒を取り付けた200 mLの2口丸底フラスコ中で懸濁させた。反応混合物を2日間90 °Cに加熱した。得られた反応混合物をシリカおよびセライトのパッドで濾過し、トルエン（2 × 200 mL）で洗浄し、濃縮して、褐色固体を得た。1：2のジクロロメタン：ヘキサンを使用するシリカゲル上のカラムクロマトグラフィーによって精製した。生成物をMeOHで洗浄して、白色粉末（23%、0.715g）を得た。 ^1H NMR（500 MHz, CD_2Cl_2 ） = 7.61 (d, $J = 6.95$ Hz, 4H)、7.56 (d, $J = 8.73$ Hz, 4H)、7.46 ~ 7.4 (m, 8H)、7.34 ~ 7.29 (m, 10H)、7.24 ~ 7.18 (m, 12H)、7.08 (d, $J = 8.89$ Hz, 4H)、2.74 (q, $J = 7.5$ Hz, 4H)、2.65 (t, $J = 8.12$ Hz, 6H)、1.32 ~ 1.18 (m, 22H)、0.83 (t, $J = 6.88$ Hz, 6H)。

【0160】

パート6 - 化合物11の重合。

【0161】

化合物Cに関して記載されるようにして、化合物11の重合を行った。ポリマーは白色固体として得られた。ポリマーの分子量をGPC（THFが移動相、ポリスチレン標準物質）によって測定した： $M_w = 140,399$ ； $M_n = 47,692$ ； $M_w/M_n = 2.04$ 。NMR分析により、化合物Sの構造を確認した。

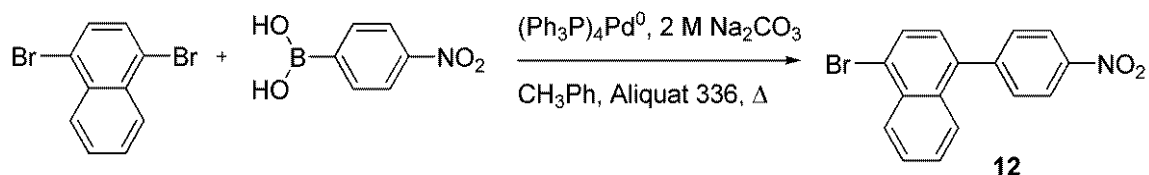
【0162】

実施例3：化合物Tの合成

パート1．中間体1-ブロモ-4'-(ニトロフェニル)ナフタレン(12)の合成

【0163】

【化 4 6】



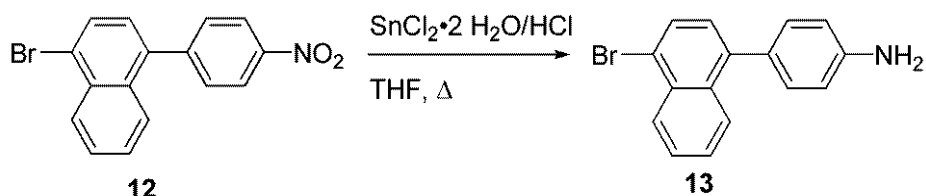
還流冷却器および窒素バブラーを取り付けた 300 ml の 2 口丸底フラスコに、1,4-ジブロモナフタレン (15.5 g、54.2 mmol) および 4-ニトロフェニルボロン酸 (9.05 g、54.2 mmol) を加えた。トルエン (175 ml) を加え、次に 2.0 M の Na_2CO_3 水溶液 (56.9 ml、113.8 mmol) を加え、次に Aliquat 336 (登録商標) (2.19 g、5.42 mmol) を加えた。得られた混合物に窒素を 1 時間スパージした。反応物を窒素下で 20 時間加熱し、次に室温まで冷却した。混合物をトルエンで希釈し、水で 3 回、およびブラインで 1 回洗浄した。その有機層を MgSO_4 上で乾燥させ、濾過し、ロータリーエバポレーター上で濃縮し、高真空下で乾燥させて、22 g の褐色固体を得た。この粗生成物をカラムクロマトグラフィー (シリカゲル、4 : 1 の Hex : CH_2Cl_2) で精製して、7.9 g の白色固体を単離した。収率 : 40%。 ^1H NMR 分析 (500 MHz、 CD_2Cl_2) は構造 12 と一致した。

【0164】

パート 2 . 中間体 1 - (アミノフェニル) - 4' - ブロモナフタレン (13) の合成

【0165】

【化 4 7】



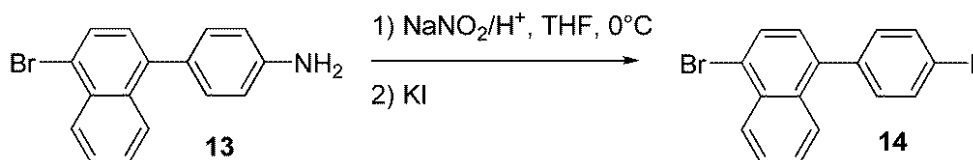
攪拌棒、還流冷却器、および窒素バブラーを取り付けた 500 ml の丸底フラスコに、化合物 1 (7 g、20 mmol)、THF (170 ml)、塩化スズ二水和物 (19.25 g、85.32 mmol)、および 1 M の HCl 水溶液 (64 ml、64 mmol) を加えた。反応物を窒素下で 1 時間加熱還流し、次に室温まで冷却した。得られた混合物をロータリーエバポレーター上で濃縮して THF を除去し、 NaHCO_3 の飽和水溶液で中和した。その水層をジエチルエーテル (3 回) で抽出した。その有機層をブラインで洗浄し、 MgSO_4 上で乾燥させ、濾過し、ロータリーエバポレーター上で濃縮し、高真空下で乾燥させて、4.5 g の粗生成物を得た。この粗生成物をカラムクロマトグラフィー (シリカゲル、 CH_2Cl_2) によって精製して、4.36 g の薄オレンジ色固体を得た。収率 : 69%。純度 (GC-MS) : 99+%。 ^1H NMR (500 MHz、 CD_2Cl_2) は、生成物の構造と一致している。

【0166】

パート 3 . 中間体 1 - ブロモ - 4' - (ヨードフェニル) ナフタレン (14) の合成

【0167】

【化 4 8】



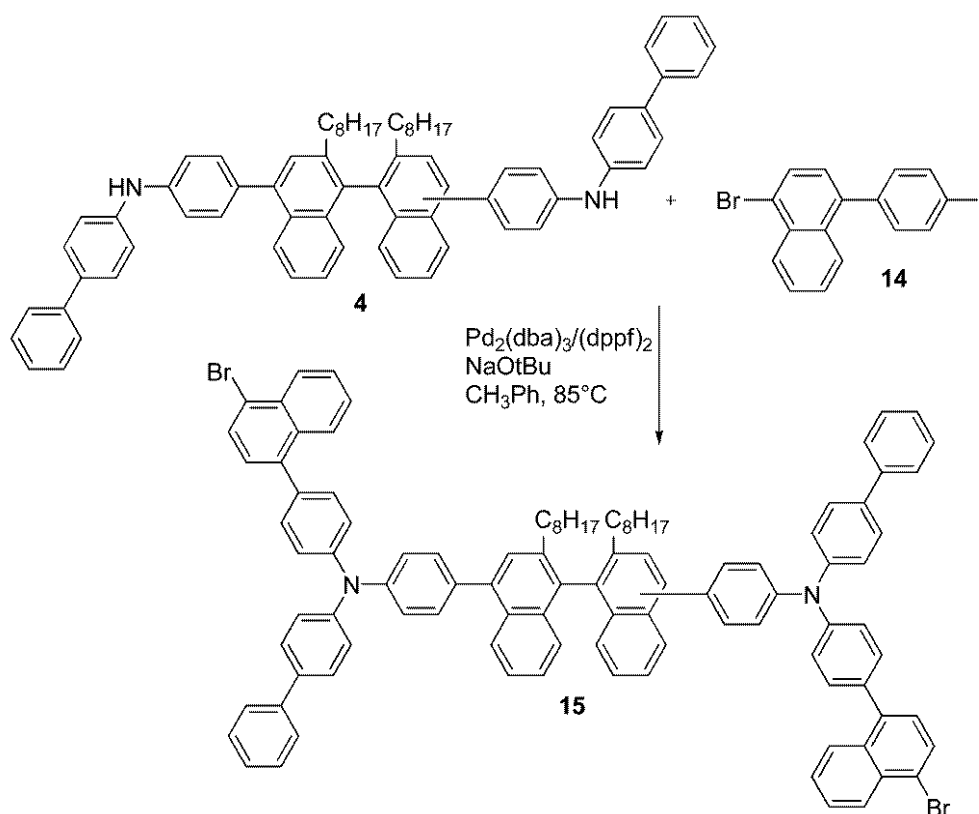
攪拌棒および窒素バブラーを取り付けた 200 ml の丸底フラスコに、化合物 2 (3 . 85 g、12 . 9 mmol)、THF (65 ml)、および濃 HCl 水溶液 (13 ml) を加えた。この反応混合物を氷 / 水浴で 0 °C まで冷却した。13 ml の H₂O 中の NaNO₂ (1 . 07 g、15 . 5 mmol) を滴下し、その混合物を 25 分間冷却しながら攪拌した。13 ml の H₂O 中の KI (4 . 29 g、25 . 8 mmol) を滴下した。この反応混合物を室温までゆっくりと温め、16 時間攪拌した。反応物を水で希釈し、ジエチルエーテルで抽出した。その有機層を水、飽和 NaHCO₃ 水溶液、飽和 NaHSO₃ 水溶液、およびブラインで洗浄した。その有機層を MgSO₄ 上で乾燥させ、濾過し、ロータリーエバポレーター上で濃縮し、高真空下で乾燥させて、4 . 68 g の粗生成物を得た。この粗生成物を 1 : 1 MeOH : 酢酸エチルから再結晶させて、2 . 53 g の薄オレンジ色固体を得た。収率 : 48 %。純度 (GC - MS) : 99 + %。¹H NMR (500 MHz、CD₂Cl₂) は生成物の構造と一致している。

【 0 1 6 8 】

パート 4 . 中間化合物 15 の合成

【 0 1 6 9 】

【化 4 9】



窒素パージしたグローブボックス中で、ジアミン 4 (4 , 4 ' - および 4 , 5 ' - 異性体の混合物) (1 . 75 g、1 . 81 mmol)、14 (1 . 85 g、4 . 52 mmol)、ビス (ジフェニルホスフィノフェロセン) (50 mg、0 . 91 mmol)、トリス (ジベンジリデンアセトン) ジパラジウム (0) (40 mg、0 . 05 mmol)、トル

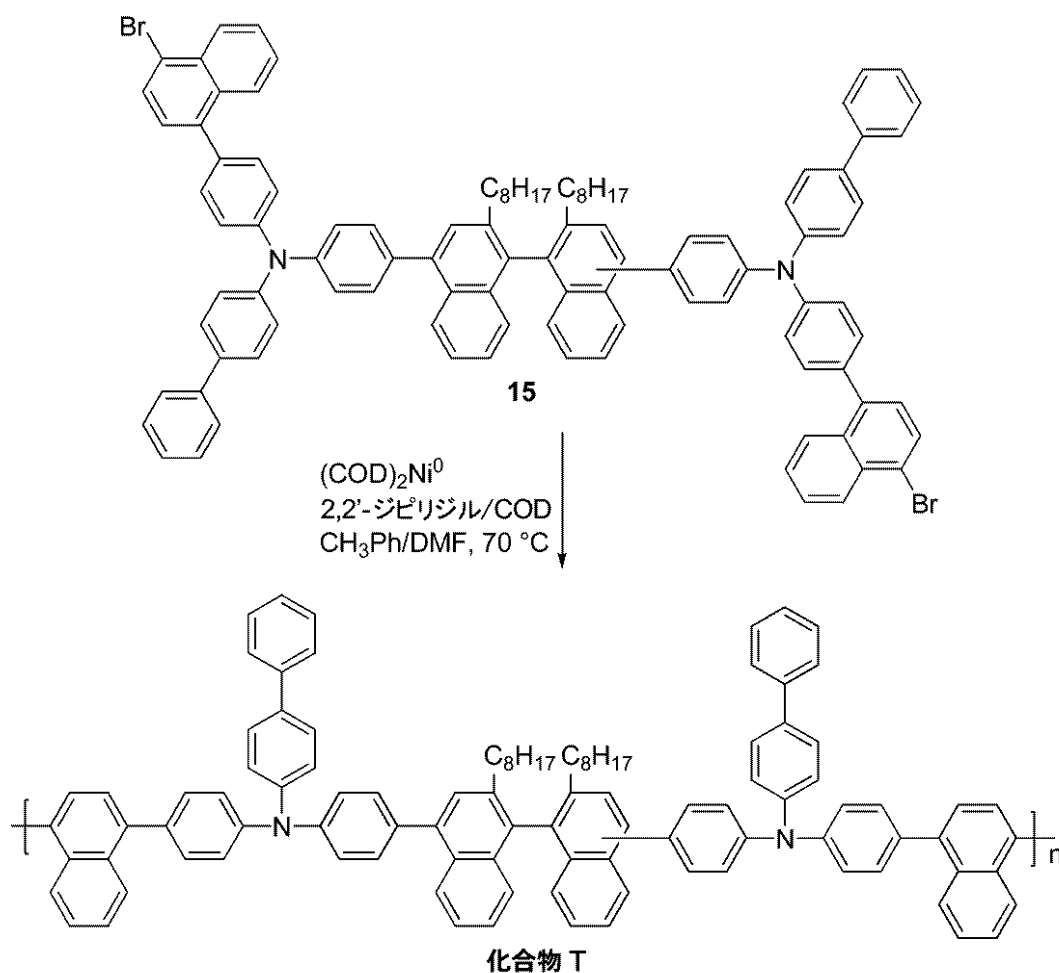
エン (50 m l)、および次にナトリウム *t* - ブトキシド (0 . 44 g、4 . 5 m m o l) を 250 m l の丸底フラスコ中に計り取った。反応容器に蓋をして、グローブボックスから取り出し、還流冷却器および窒素バブラーを取り付けた。反応物を 90 で 18 時間加熱した。反応混合物をシリカゲルプラグで濾過し、ジクロロメタンで洗浄した。その濾液をロータリーエバポレーター上で濃縮し、高真空中で乾燥させて、3 . 5 g の褐色がかったオレンジ色の油を得た。この粗生成物をカラムクロマトグラフィー (3 : 1 のヘキサン : CH_2Cl_2 から 3 : 2 のヘキサン : CH_2Cl_2 へのグラジエント) によって精製して、2 . 15 g の生成物を単離し、これは 4 , 4' - および 4 , 5' - 異性体の混合物であった。収率 : 78 . 2 %。 ^1H NMR (500 M H z、 CD_2Cl_2) は 15 の構造と一致している。

【 0170 】

パート 5 . 化合物 T の合成

【 0171 】

【 化 50 】



5 の重合を窒素パージしたグローブボックス中で行った。ビス (1 , 5 - シクロオクタジエン) ニッケル (0) (0 . 277 g、1 . 01 m m o l) を 25 m l の S c h l e n k 管に加えた。2 , 2' - ジピリジル (0 . 157 g、1 . 01 m m o l) および 1 , 5 - シクロオクタジエン (0 . 109 g、1 . 01 m m o l) を 2 m l の D M F 中に溶解させた。この溶液を上記ニッケル触媒に加えた。この触媒溶液を 60 のアルミニウムブロック中で 30 分間加熱撹拌した。加熱ブロックの温度を 70 まで上昇させた。化合物 15 (0 . 750 g、0 . 491 m m o l) をトルエン (13 m l) 中に溶解させ、次に上記触媒溶液に加えた。S c h l e n k 管を封止し、22 時間加熱した後、室温まで冷却し

た。この反応管をドライボックスから取り出し、内容物を 1.5 v/v % HCl / MeOH 中に注いだ。得られたポリマーを、1.5 v/v % HCl / MeOH 中に 2 回沈殿させ、トルエンから MeOH 中に 1 回沈殿させることによって精製した。得られたポリマーを濾過によって単離した後、トルエン中に溶解させた。このトルエン溶液をシリカゲルプラグに通した。その濾液を濃縮し、3-ペンタノン中に注いだ。得られたポリマーを減圧濾過によって回収し、トルエン中に再溶解させ、Florisil (登録商標) のプラグに通した。その濾液を濃縮し、3-ペンタノンから沈殿させた。得られたポリマーを濾過によって単離し、高真空下で乾燥させて、0.52 g の白色繊維状ポリマーを得た。収率：77%。分子量測定 (GPC、THF、ポリスチレン標準物質)： $M_w = 296,000$ ； $M_n = 103,000$ ； $PDI = 2.88$ 。

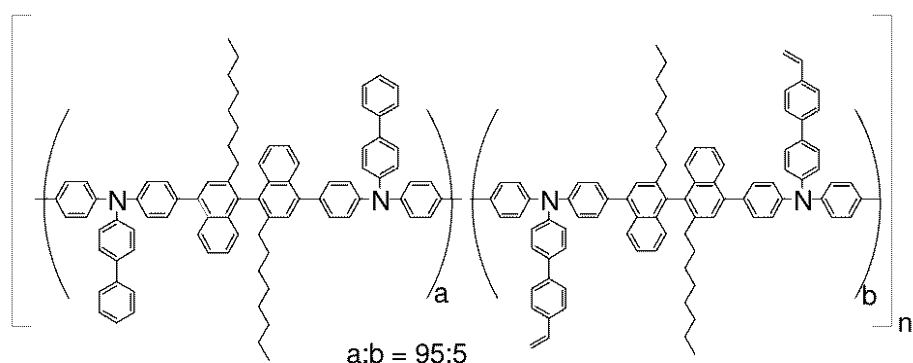
10

【0172】

実施例 4：化合物 U の合成

【0173】

【化51】

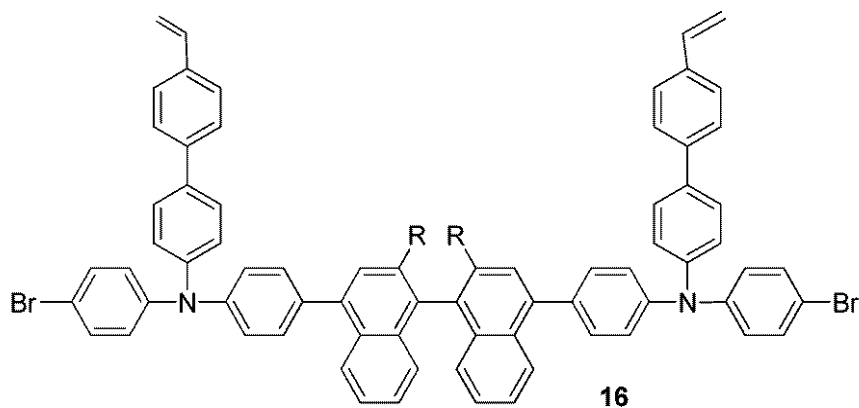


20

ブロモビフェニルの代わりに 4-ビニル-4'-ブロモビフェニルを使用したことを除けば、化合物 5 に関して概説した手順に従ってモノマー 16 を合成した。

【0174】

【化52】



30

40

【0175】

化合物 C の合成手順に従って、化合物 5 (0.95 mmol) および 16 (0.05 mmol) を共重合させて、白色繊維状ポリマーを 86% の収率 (0.96 g) で得た。分子量測定 (GPC、THF、ポリスチレン標準物質)： $M_w = 658,109$ ； $M_n = 105,822$ ； $PDI = 6.22$ 。

【0176】

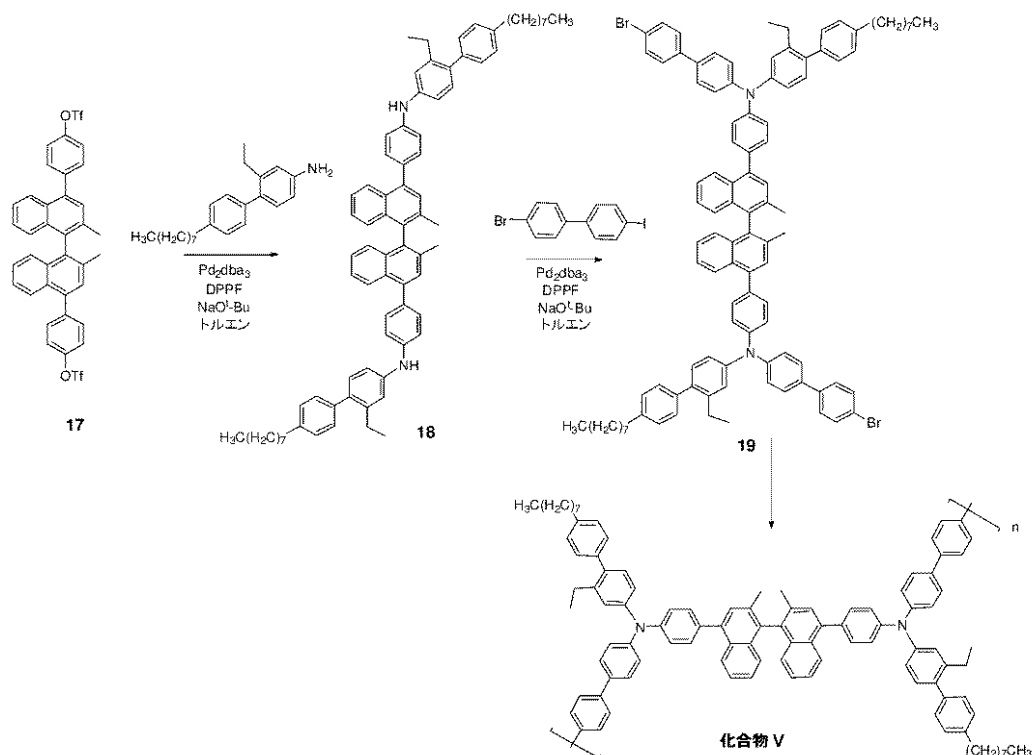
実施例 5：化合物 V の合成

以下に示す経路を使用して化合物 V を合成した：

50

【 0 1 7 7 】

【 化 5 3 】



10

20

【 0 1 7 8 】

パート 1 . 中間体 1 8 の合成 :

窒素パージしたグローブボックス中で、ジトリフレート 1 7 (3 . 2 g 、 4 . 3 8 m m o l) および 2 - エチル - 4 ' - オクチル - ビフェン - 4 - イル - アミン (2 . 8 4 g 、 9 . 1 9 m m o l) をトルエン (6 0 m L) 中に、200 mL の丸底フラスコ中で溶解させた後、トリス (ジベンジリデンアセトン) ジパラジウム (0) (1 0 8 m g 、 0 . 0 2 7 当量) と 1 , 1 ' - ビス (ジフェニルホスフィノ) フェロセン (1 2 8 m g 、 0 . 0 5 3 当量) とのトルエン (1 0 m L) 溶液を混合物に加えた。混合物を 5 分間撹拌した後、得られた溶液にナトリウム t - ブトキシド (1 . 0 5 g 、 1 0 . 9 4 m m o l 、 2 . 5 当量) を加えた。この反応混合物を、グローブボックス外部の窒素下で 8 5 °C において 2 2 時間撹拌した。混合物をシリカゲルパッドに通し、トルエンで洗浄した。1 つにまとめた溶液をロータリーエバポレーター上で濃縮した後、フラッシュカラムクロマトグラフィー (ヘキサン中 5 % から 1 0 % のエチルアセテートのグラジエント) を行って、2 . 8 g の白色固体を得た。N M R 分析により、中間化合物 1 8 の構造を確認した。

30

【 0 1 7 9 】

パート 2 . 中間体 1 9 の合成

窒素パージしたグローブボックス中で、ジアミン 1 8 (1 g 、 0 . 9 3 5 m m o l) および 4 - ブロモ - 4 ' - ヨードビフェニル (1 . 0 2 6 g 、 2 . 8 6 m m o l) をトルエン (3 0 m L) 中に、100 mL の丸底フラスコ中で溶解させた後、トリス (ジベンジリデンアセトン) ジパラジウム (0) (2 4 m g 、 0 . 0 2 7 当量) と 1 , 1 ' - ビス (ジフェニルホスフィノ) フェロセン (2 8 m g 、 0 . 0 5 3 当量) とのトルエン (7 m L) 溶液を混合物に加えた。混合物を 5 分間撹拌した後、得られた溶液にナトリウム t - ブトキシド (2 2 9 m g 、 2 . 3 8 m m o l 、 2 . 5 当量) を加えた。この反応混合物を、グローブボックス外部の窒素下で 9 5 °C において 2 2 時間撹拌した。混合物をシリカゲルパッドに通し、トルエンで洗浄した。1 つにまとめた溶液をロータリーエバポレーター上で濃縮した後、フラッシュカラムクロマトグラフィー (ヘキサン中 5 % から 2 0 % のエチル

40

50

アセテートのグラジエント)を行って、1.3 gの白色固体を得た。NMR分析により、化合物19の構造を確認した。

【0180】

パート3：化合物Vの合成

実施例1中の化合物Cの合成の概略の通りに化合物19の合成を行って白色ポリマーを得た。分子量測定(GPC、THF、ポリスチレン標準物質)： $M_w = 212,506$ ； $M_n = 73,056$ ； $PDI = 2.91$ 。

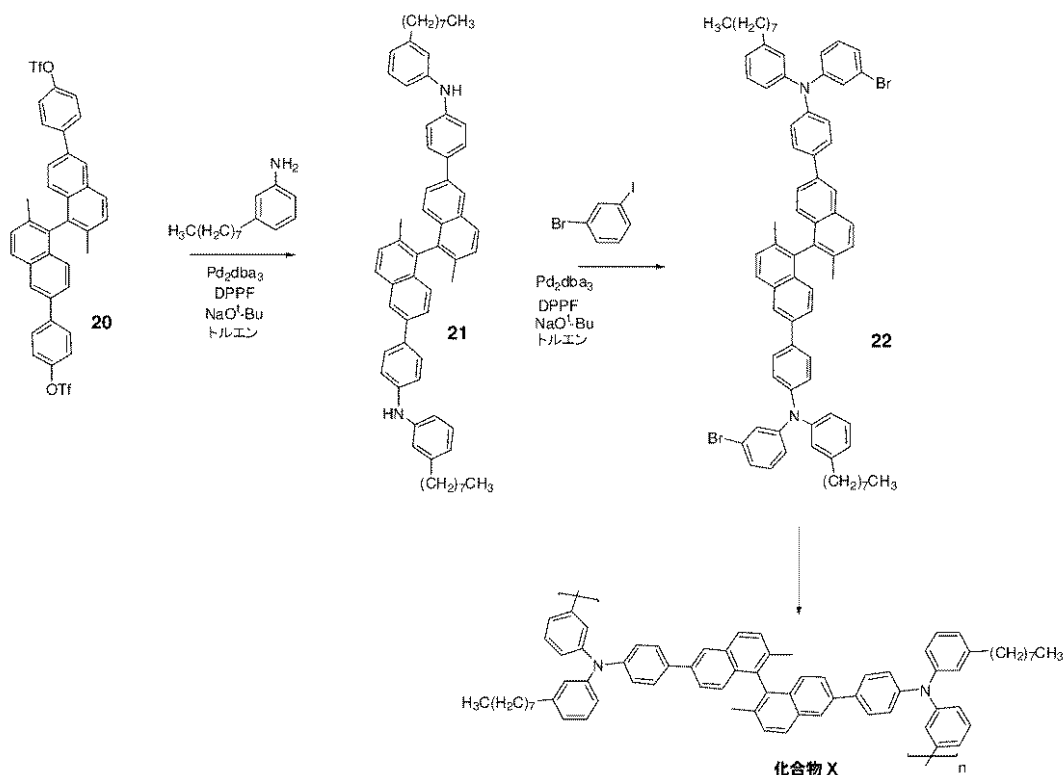
【0181】

実施例6：化合物Wの合成

以下に示す経路を使用して化合物Wを合成した：

【0182】

【化54】



【0183】

パート1：中間体21の合成：

窒素パージしたグローブボックス中で、ジトリフレート20(1.7 g、2.33 mmol)および3-オクチルアニリン(1 g、4.89 mmol)をトルエン(20 mL)中に、100 mLの丸底フラスコ中で溶解させた後、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0)(58 mg、0.027当量)と1,1'-ビス(ジフェニルホスフィノ)フェロセン(68 mg、0.053当量)とのトルエン(10 mL)溶液を混合物に加えた。混合物を5分間攪拌した後、得られた溶液にナトリウムt-ブトキシド(0.56 g、5.82 mmol、2.5当量)を加えた。この反応混合物を、グローブボックス外部の窒素下で85℃において16時間攪拌した。混合物をシリカゲルパッドに通し、トルエンで洗浄した。1つにまとめた溶液を、ロータリーエバポレーター上で濃縮した後、フラッシュカラムクロマトグラフィー(ヘキサン中10%から40%の塩化メチレンのグラジエント)を行って、1.6 gの生成物を得た。NMR分析により、中間化合物21の構造を確認した。

【0184】

パート2：中間体22の合成：窒素パージしたグローブボックス中で、ジアミン21(

1.5 g、1.78 mmol) および 4 - ブロモ - 3 - ヨードベンゼン (1.51 g、5.35 mmol) をトルエン (40 mL) 中に、100 mL の丸底フラスコ中で溶解させた後、トリス (ジベンジリデンアセトン) ジパラジウム (0) (47 mg、0.027 当量) と 1, 1' - ビス (ジフェニルホスフィノ) フェロセン (53 mg、0.053 当量) とのトルエン (7 mL) 溶液を混合物に加えた。混合物を 5 分間攪拌した後、得られた溶液にナトリウム t - ブトキシド (0.428 g、4.45 mmol、2.5 当量) を加えた。この反応混合物を、グローブボックス外部の窒素下で 90 °C において 4 日間攪拌した。混合物をシリカゲルパッドに通し、トルエンで洗浄した。1 つにまとめた溶液をロータリーエバポレーター上で濃縮した後、フラッシュカラムクロマトグラフィー (ヘキサン中 5 % トルエン) を行って、1.6 g の白色固体を得た。NMR 分析により、化合物 22 の構造を確認した。

【0185】

パート 3 : 化合物 W の合成

実施例 1 中の化合物 C の合成の概略の通りに化合物 22 の重合を行って、白色ポリマーを 33 % の収率で得た。分子量測定 (GPC、THF、ポリスチレン標準物質) : $M_w = 210,638$; $M_n = 33,194$; $PDI = 6.34$ 。

【0186】

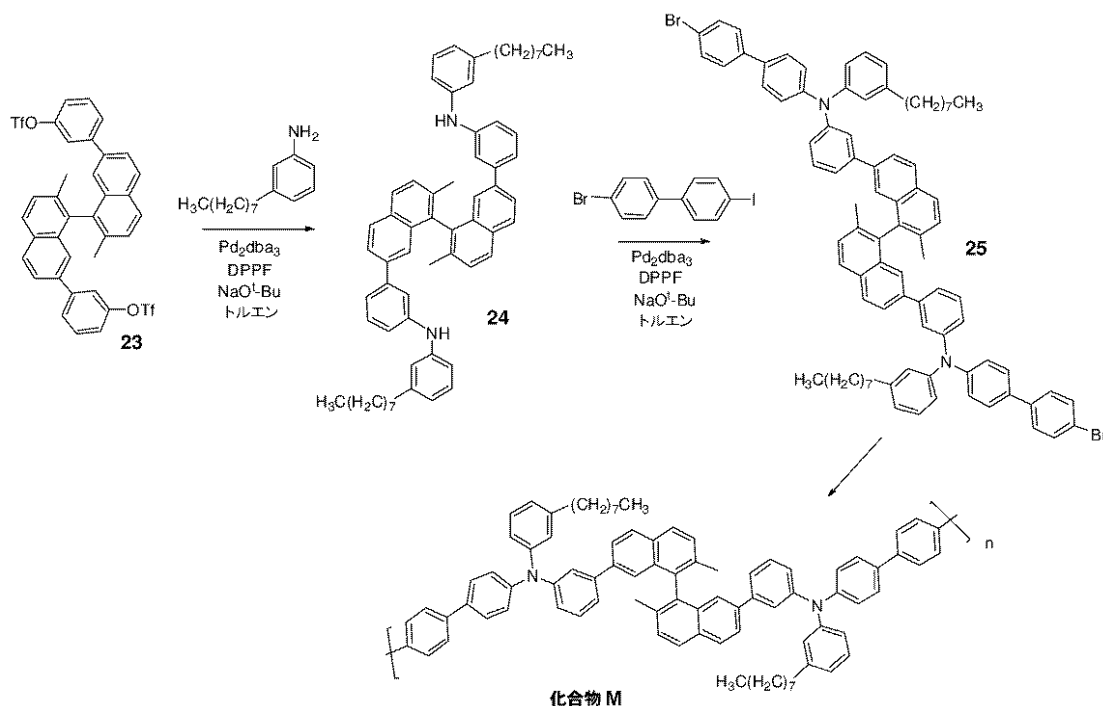
実施例 7 : 化合物 M の合成。

【0187】

以下に示す経路を使用して化合物 M を合成した :

【0188】

【化 55】



【0189】

パート 1 : 中間体 24 の合成 :

窒素パージしたグローブボックス中で、ジトリフレート 23 (3 g、4.11 mmol) および 3 - オクチルアニリン (1.77 g、8.62 mmol) をトルエン (40 mL) 中に、100 mL の丸底フラスコ中で溶解させた後、トリス (ジベンジリデンアセトン) ジパラジウム (0) (102 mg、0.027 当量) と 1, 1' - ビス (ジフェニルホスフィノ) フェロセン (121 mg、0.053 当量) とのトルエン (10 mL) 溶液を混合物に加えた。混合物を 5 分間攪拌した後、得られた溶液にナトリウム t - ブトキシド

(0.986 g、10.26 mmol、2.5 当量)を加えた。この反応混合物をグローブボックス外部の窒素下85 において3日間撹拌した。混合物をシリカゲルパッドに通し、トルエンで洗浄した。1つにまとめた溶液をロータリーエバポレーター上で濃縮した後、フラッシュカラムクロマトグラフィー(ヘキサン中5%から10%のエチルアセテートのグラジエント)を行って、3 gの白色固体を生成物として得た。NMR分析により、中間化合物24の構造を確認した。

【0190】

パート2：中間体25の合成：

窒素パージしたグローブボックス中で、ジアミン24(1.2 g、1.42 mmol)および4-ブromo-4'-ヨードビフェニル(2.3 g、6.42 mmol)をトルエン(30 mL)中に、100 mLの丸底フラスコ中で溶解させた後、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0)(35 mg、0.027 当量)と1,1'-ビス(ジフェニルホスフィノ)フェロセン(42 mg、0.053 当量)とのトルエン(8 mL)溶液を混合物に加えた。混合物を5分間撹拌した後、得られた溶液にナトリウムt-ブトキシド(341 mg、3.55 mmol、2.5 当量)を加えた。この反応混合物をグローブボックス外部の窒素下95 において20時間撹拌した。混合物をシリカゲルパッドに通し、トルエンで洗浄した。1つにまとめた溶液をロータリーエバポレーター上で濃縮した後、フラッシュカラムクロマトグラフィー(ヘキサン中7%トルエン)を行って、1.2 gの白色固体を得た。NMR分析により、化合物25の構造を確認した。

【0191】

パート3：化合物Mの合成

実施例1中の化合物Cの合成の概略の通りに化合物25の重合を行って、白色ポリマーを得た。分子量測定(GPC、THF、ポリスチレン標準物質)： $M_w = 82,023$ ； $M_n = 27,177$ ； $PDI = 3.02$ 。

【0192】

実施例8：化合物Pの合成

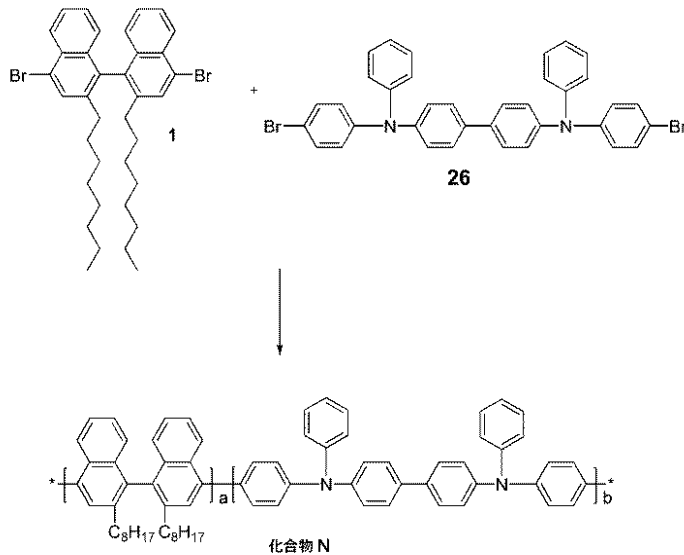
窒素雰囲気下で、ビス(1,5-シクロオクタジエン)ニッケル(0)(0.564 g、2.05 mmol)、2,2'-ジピリジル(0.32 g、2.05 mmol)、および1,5-シクロオクタジエン(0.222 g、2.05 mmol)を2 mLのDMF中に溶解させた。この触媒溶液をアルミニウムブロック中60 において30分間加熱撹拌した。加熱ブロックの温度を60 まで上昇させた。化合物5(1.08 g、0.85 mmol)および3,5-ジブromosチレン(0.0395 g、0.15 mmol)をトルエン(13 mL)中に溶解させた後、上記触媒溶液に加えた。得られた溶液を6時間後に室温まで冷却した。化合物CおよびTに関して前述したようにして、ポリマーを単離して、化合物Pを白色ポリマーとして85%の収率(0.825 g)で得た。分子量測定(GPC、THF、ポリスチレン標準物質)： $M_w = 913,631$ ； $M_n = 50,871$ ； $PDI = 17.96$ 。

【0193】

実施例9：化合物Nの合成

【0194】

【化 5 6】



10

窒素雰囲気下で、ビス(1,5-シクロオクタジエン)ニッケル(0)(1.13g、4.1mmol)、2,2'-ジピリジル(0.64g、4.1mmol)および1,5-シクロオクタジエン(0.444g、4.1mmol)を3mLのDMF中に溶解させた。この触媒溶液をアルミニウムブロック中60℃において30分間加熱撹拌した。加熱ブロックの温度を70℃まで上昇させた。化合物1(0.637g、1mmol)およびジアミン26(0.646g、1mmol)をトルエン(17mL)中に溶解させた後、上記触媒溶液に加えた。得られた溶液を6時間後、室温まで冷却した。化合物CおよびTに関して前述したようにして、ポリマーを単離して、化合物Nを白色ポリマーとして79%の収率(0.760g)で得た。分子量測定(GPC、THF、ポリスチレン標準物質)： $M_w = 284,019$ ； $M_n = 45,611$ ； $PDI = 6.23$ 。

20

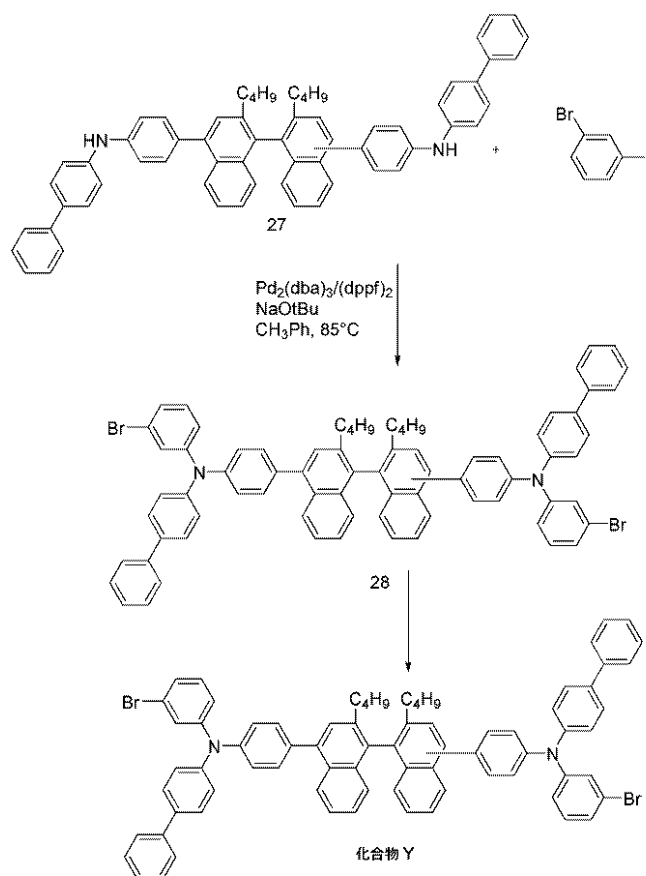
【0195】

実施例10：化合物Xの合成

【0196】

30

【化 5 7】



10

20

【0197】

パート1．化合物28の合成。

窒素パージしたグローブボックス中で、攪拌棒を取り付けた300mlの丸底フラスコに、化合物27(1.61g、1.89mmol)、1-ブromo-3-ヨードベンゼン(1.6g、5.66mmol)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0)(43mg、47μmol)、1,1'-ビス(ジフェニル-ホスフィノ)フェロセン(52mg、94μmol)、トルエン(50ml)、およびナトリウム-tert-ブトキシド(0.45g、4.7mmol)を加えた。反応容器に蓋をして、グローブボックスから取りだし、還流冷却器およびN₂バブラーを取り付け、85℃において3日間加熱した。その反応混合物を室温まで冷却し、ジクロロメタンで希釈し、シリカゲルおよび珪藻土のプラグで濾過した。その濾液をロータリーエバポレーター上で濃縮して粗生成物を得た。粗生成物をカラムクロマトグラフィー(シリカゲル、ヘキサン：CH₂Cl₂のグラジエント)によって精製した後、沸騰MeOHで洗浄して、化合物28を白色粉末(1.42g、65%)として得た。¹H NMR分析(500MHz、CD₂Cl₂)は構造28と一致している。

30

40

【0198】

パート2．化合物Xの合成。

化合物Cに関して前述したようにして化合物Xを合成して、白色ビーズを65%で得た。分子量測定(GPC、THF、ポリスチレン標準物質)：M_w = 320,000；M_n = 97,000；PDI = 3.29。

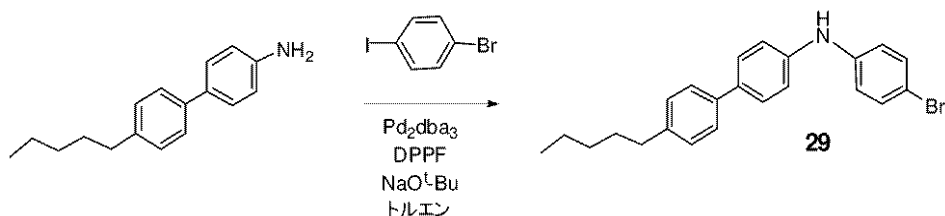
【0199】

実施例11：化合物Y1の合成

パート1．中間体29の合成：

【0200】

【化 5 8】



窒素パージしたグローブボックス中で、4 - ブロモ - 1 - ヨードベンゼン (3 . 5 4 g 、 1 2 . 5 3 m m o l) および 4 - (p - ベンチルフェニル) - アニリン (3 g 、 1 2 . 5 3 m m o l) をトルエン (5 0 m L) 中に、1 0 0 m L の丸底フラスコ中で溶解させた後、トリス (ジベンジリデンアセトン) ジパラジウム (0) (2 8 6 m g 、 0 . 0 2 5 当量) と 1 , 1 ' - ビス (ジフェニルホスフィノ) フェロセン (3 4 7 m g 、 0 . 0 5 当量) とのトルエン (1 0 m L) 溶液を混合物に加えた。混合物を 5 分間撹拌した後、得られた溶液にナトリウム t - ブトキシド (1 . 4 4 g 、 1 5 . 0 3 m m o l 、 1 . 2 当量) を加えた。反応混合物を、グローブボックス外部の窒素下で 8 0 °C において 6 時間撹拌した。混合物をシリカゲルパッドに通し、トルエンで洗浄した。1 つにまとめた溶液をロータリーエバポレーター上で濃縮した後、再結晶 (ヘキサンおよびエチルアセテートの溶媒中) およびフラッシュカラムクロマトグラフィー (ヘキサン中 5 % 酢酸エチルのグラジエント) を行って、2 . 3 g の白色固体を得た。NMR 分析により、中間化合物 2 9 の構造を

10

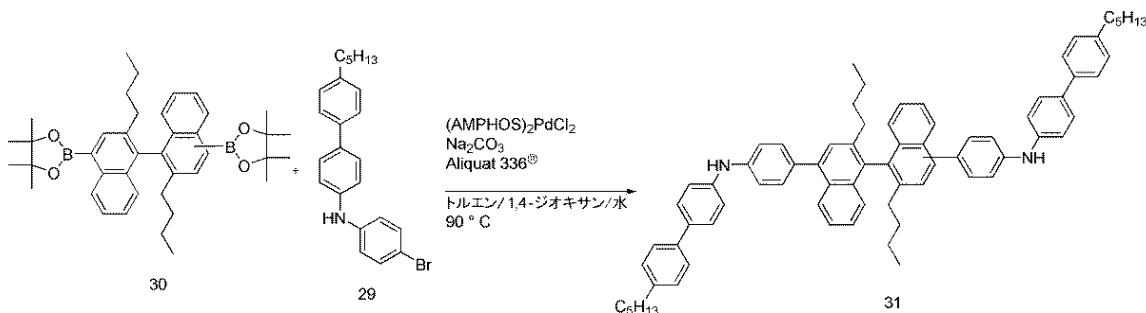
20

【 0 2 0 1 】

パート 2 . 中間体 3 1 の合成 :

【 0 2 0 2 】

【化 5 9】



30

撹拌棒、還流冷却器、および N_2 バブラーを取り付けた 1 0 0 m L の 2 口丸底フラスコに、 Na_2CO_3 (1 . 4 g 、 1 3 . 3 m m o l) および水 (8 m L) を加えた。得られた Na_2CO_3 溶液に、化合物 3 0 (1 . 6 5 g 、 2 . 6 6 m m o l) 、化合物 2 9 (2 . 1 g 、 5 . 3 m m o l) 、Aliquat 336 (登録商標) (0 . 1 1 g 、 0 . 2 7 m m o l) 、トルエン (1 2 m L) 、および 1 , 4 - ジオキサン (1 2 m L) を加えた。この混合物に N_2 を 1 時間スパージした後、ビス (ジ - t e r t - ブチル (4 - ジメチルアミノフェニル) - ホスフィンジクロロパラジウム (I I)) (4 . 1 m g 、 5 . 3 μ m o l) を加えた。この混合物に N_2 を 1 0 分間スパージした後、9 0 °C において 1 . 5 時間加熱した。反応混合物を室温まで冷却し、トルエンで希釈した。有機層を分離し、水 (3 回) およびブラインで洗浄し、 MgSO_4 上で乾燥させ、濾過し、ロータリーエバポレーター上で濃縮し、高真空下で乾燥させて、淡褐色泡状固体を単離した。この粗生成物をカラムクロマトグラフィー (シリカゲル、2 : 1 の $\text{Hex} : \text{CH}_2\text{Cl}_2$) によって精製して、2 . 4 g の白色泡状固体を 9 1 % で単離した。 ^1H NMR (5 0 0 M H z 、 CD_2Cl_2) は構造 3 1 と一致している。

40

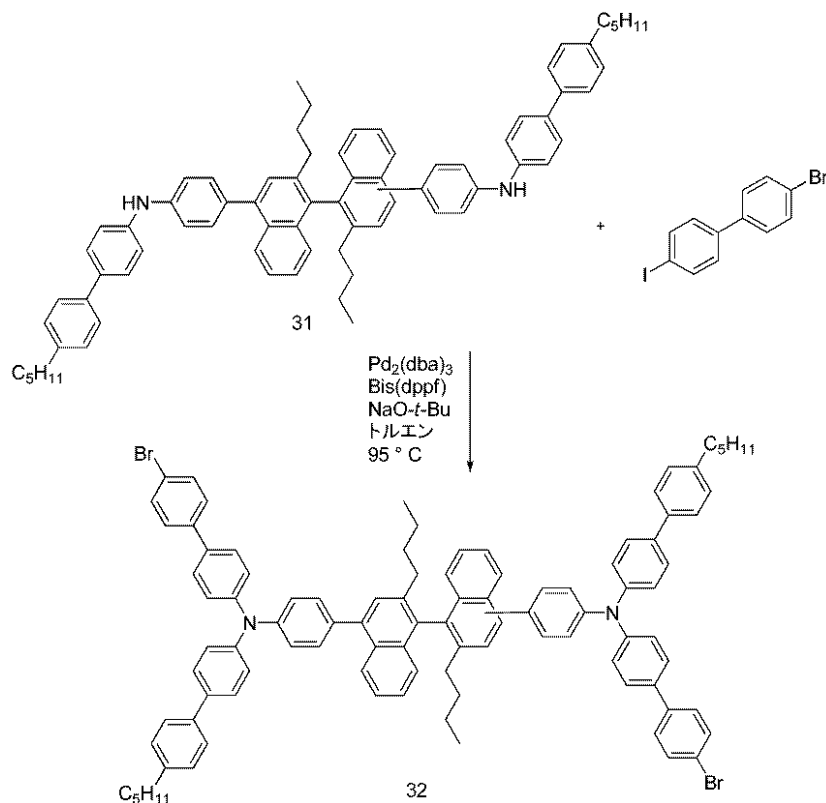
【 0 2 0 3 】

50

パート 3 . 中間体 3 2 の合成 :

【 0 2 0 4 】

【 化 6 0 】



窒素パージしたグローブボックス中で、攪拌棒を取り付けた 300 mL の丸底フラスコに、化合物 31 (2 . 3 g 、 2 . 3 2 mmol) 、ヨード - ブロモビフェニル (2 . 5 g 、 6 . 9 mmol) 、トリス (ジベンジリデンアセトン) ジパラジウム (0) (53 mg 、 50 μmol) 、 1 , 1 ' - ビス (ジフェニル - ホスフィノ) フェロセン (64 mg 、 120 μmol) 、トルエン (100 mL) 、およびナトリウム - *tert* - ブトキシド (0 . 56 g 、 5 . 8 mmol) を加えた。反応容器に蓋をして、グローブボックスから取りだし、還流冷却器および N_2 バブラーを取り付け、 95°C において 18 時間加熱した。反応混合物を室温まで冷却し、ジクロロメタンで希釈し、シリカゲルおよび珪藻土のプラグで濾過した。その濾液をロータリーエバポレーター上で濃縮して、粗生成物を得た。この粗生成物を、カラムクロマトグラフィー (シリカゲル、ヘキサン : CH_2Cl_2 のグラジエント) によって精製した後、沸騰 MeOH で洗浄して、2 . 8 g の白色粉末 (収率 83 %) を得た。 ^1H NMR 分析 (500 MHz 、 CD_2Cl_2) は構造 32 と一致している。

【 0 2 0 5 】

パート 3 . 化合物 Y 1 の合成 :

【 0 2 0 6 】

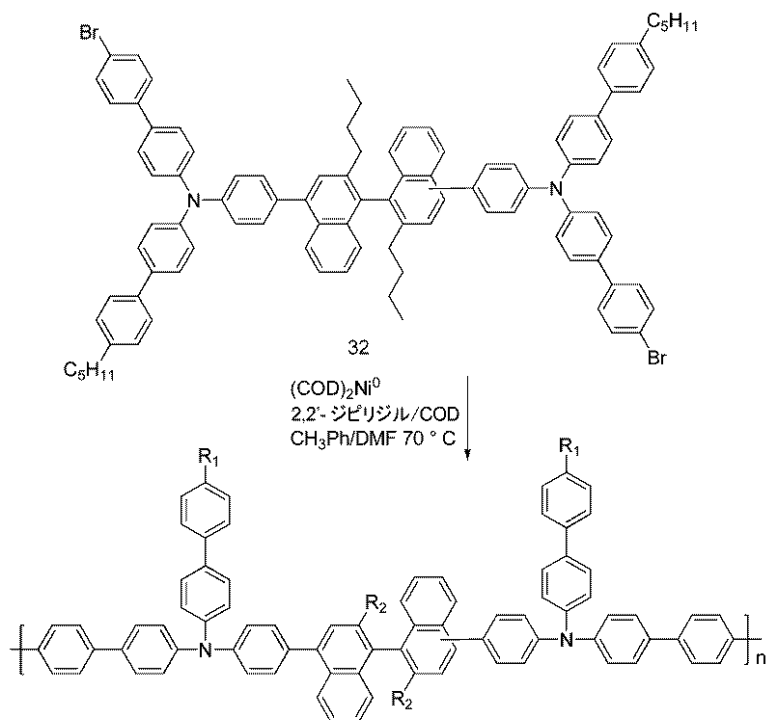
10

20

30

40

【化 6 1】



実施例 1 中の化合物 C の合成の概略の通りに化合物 3 2 の重合を行って、白色ポリマーを 95 % の収率で得た。分子量測定 (GPC、THF、ポリスチレン標準物質) : $M_w = 169,000$; $M_n = 91,700$; $PDI = 1.84$ 。

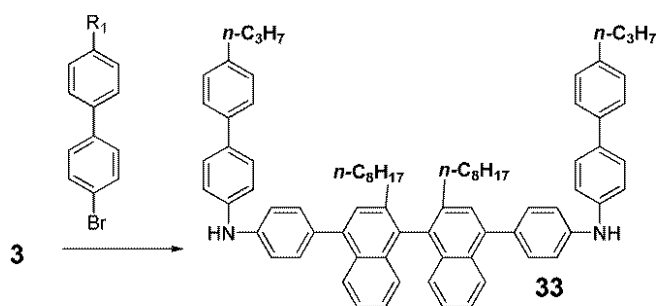
【 0 2 0 7】

実施例 12 : 化合物 Y 3 の合成

パート 1 - 中間化合物 3 3 の合成 :

【 0 2 0 8】

【化 6 2】



窒素雰囲気下で、化合物 3 (2.0 g、3.03 mmol)、4-ブromo-4'-プロピルビフェニル (1.67 g、6.05 mmol)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0) (139 mg、5 mol %)、トリ-t-ブチルホスフィン (61 mg、10 mol %)、およびトルエン (27 mL) を混合した。ナトリウム t-ブトキシド (0.872 g、9.08 mmol) を加え、反応物を室温において 40 時間攪拌した。次に、4-ブromo-4'-プロピルビフェニル (250 mg、0.091 mmol)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0) (55 mg、2 mol %)、トリ-t-ブチルホスフィン (25 mg、4 mol %)、およびナトリウム t-ブトキシド (291 mg、3.03 mmol) を加えた。さらに 23 時間後、反応混合物を Celit

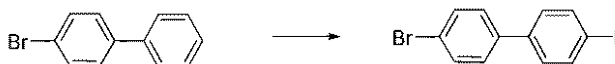
e のパッドで濾過し、トルエンで洗浄した。得られた溶液をロータリーエバポレーター上で濃縮し、減圧乾燥した。生成物を、シリカゲル上の中圧液体クロマトグラフィー（ヘキサン中 0 ～ 40 % の塩化メチレンのグラジエント）によって精製して、1.70 g（収率 53 %）の白色固体を得た。NMR 分析により、4, 4' および 4, 5' の位置異性体の混合物として中間化合物 33 の構造を確認した。純度（UPLC）：97.8 %。

【0209】

パート 2 - 中間体 4 - ブロモ - 4' - ヨードビフェニルの合成：

【0210】

【化 63】



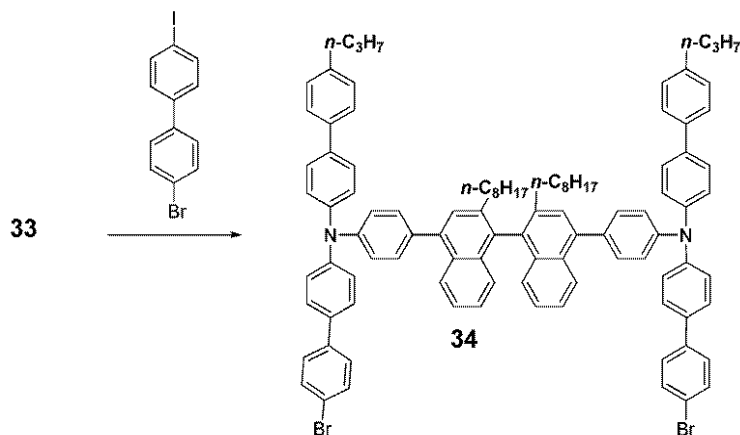
機械的攪拌装置、温度計、および上部に窒素バブラー入口を有する還流冷却器を取り付けた 1 リットルの 4 口丸底フラスコに、酢酸（400 mL）中の 4 - ブロモビフェニル（23.31 g、100 mmol）、硫酸（10 mL）、および水（20 mL）を投入した。攪拌しながらこの混合物にヨウ素酸（4.84 g、27.5 mmol）を加え、その直後にヨウ素片（11.17 g、44.0 mmol）を加えた。反応フラスコを、あらかじめ加熱したトリ（エチレングリコール）加熱浴中に浸漬し、65 の内部温度に加熱した。30 分後、内部温度が 20 分後に 85 まで上昇するように浴の温度を上昇させた。この温度における加熱を 4.5 時間続け、その時点で UPLC 分析を行うと反応の終了が示された。室温において終夜攪拌した後、反応混合物を粗いフリット漏斗で減圧濾過し、得られた固形分を水で洗浄した。得られた白色固体（32.1 g、収率 89 %）は、mp が 177 ～ 179 であり、さらに精製することなく次のステップで使用した。NMR 分析により、中間化合物 3 の 4 - ブロモ - 4' - ヨードビフェニルの構造を確認した。純度（UPLC）：> 99 %。

【0211】

パート 3 - 中間化合物 34 の合成：

【0212】

【化 64】



窒素パージしたグローブボックス中で、マグネチックスターラー、温度計、および上部に閉鎖位置のガス入口アダプターを有する還流冷却器を取り付けた 3 口丸底フラスコの開いている口から、33（1.70 g、1.62 mmol）、4 - ブロモ - 4' - ヨードビフェニル（2.62 g、7.29 mmol）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（0）（178 mg、12 mol %）、ビス（ジフェニルホスフィノフェロセン）（215 mg、24 mol %）、およびトルエン（30 mL）を投入した。ナトリウム t - ブトキシド（0.342 g、3.56 mmol）を加え、開いている口に蓋をして、反

応容器をグローブボックスから取り出した。窒素バブラーのホースをガス入口アダプターに取り付け、窒素のわずかな陽圧下でコックを開放位置に動かした。トリ（エチレングリコール）浴を使用して反応物を加熱還流した。16時間後、反応物を室温まで冷却し、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（0）（178 mg、12 mol %）、ビス（ジフェニルホスフィノ）フェロセン（215 mg、24 mol %）、およびナトリウム t - ブトキシド（342 mg、3.56 mmol）を反応混合物に加えた。さらに2時間還流した後、反応混合物を室温まで冷却した。室温で72時間後、反応混合物を Celite のパッドで濾過し、トルエンで洗浄した。その濾液を回転蒸発によって濃縮した。得られた粗生成物を高真空下で乾燥させ、シリカゲル上の（ヘキサン 0 ~ 35 % 塩化メチレンのグラジエント）によって中圧液体クロマトグラフィーによって精製して、1.42 g（収率 58 %）の白色固体を得た。NMR 分析によって、4, 4' - および 4, 5' 位置異性体の混合物として中間化合物 34 の構造を確認した。純度（UPLC）：98.7 %。

10

【0213】

パート 4 - 化合物 Y3 の合成。

実施例 1 中の化合物 C の合成の概略の通りに化合物 34 の重合を行って、白色ポリマーを得た。分子量測定（GPC、THF、ポリスチレン標準物質）： $M_w = 512,983$ ； $M_n = 136,936$ ； $PDI = 3.75$ 。

【0214】

デバイス例

20

以下の材料を使用した：

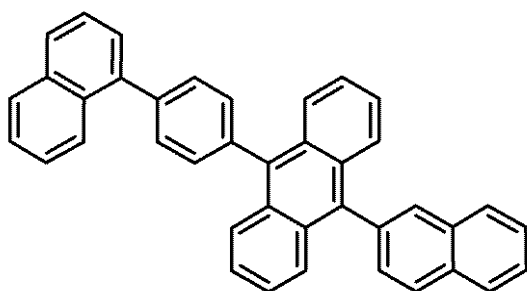
緩衝液 1 は、ポリピロールおよびポリマーフッ素化スルホン酸の水性分散体である。この材料は、米国特許出願公開第 2005 / 0205860 号明細書の実施例 1 に記載の手順と類似の手順を使用して調製した。

【0215】

H1：

【0216】

【化 65】

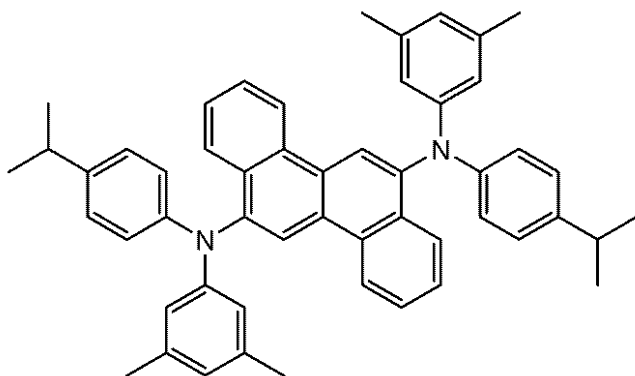


30

E1：

【0217】

【化 6 6】



10

Alq3 = トリス(8-ヒドロキシキノリン)アルミニウム

ZrQ = テトラキス-(8-ヒドロキシキノリン)ジルコニウム

【0218】

デバイス例 1

この例では、深青色発光を示すデバイスの製造および性能を示す。

【0219】

このデバイスは以下の層を有した：

アノード = インジウムスズ酸化物(ITO) : 50 nm

緩衝層 = 緩衝液 1 (25 nm)

正孔輸送層 = 実施例 1 の化合物 C (20 nm)

光活性層 = 13 : 1 のホスト H1 : ドーパント E1 (47 nm)

電子輸送層 = ZrQ (20 nm)

カソード = CsF / Al (0.7 / 100 nm)

【0220】

OLED デバイスは、溶液処理と熱蒸着技術との組み合わせによって製造した。Thin Film Devices, Inc のパターン化されたインジウムスズ酸化物(ITO)がコーティングされたガラス基体を使用した。これらのITO基体は、50 / のシート抵抗および80%の光透過率を有するITOがコーティングされたCorning 1737 ガラスを主とするものである。これらのパターン化されたITO基体を、水性洗剤溶液中で超音波洗浄し、蒸留水ですすいだ。次に、このパターン化されたITOを、アセトン中で超音波洗浄し、イソプロパノールですすぎ、窒素気流中で乾燥させた。

30

【0221】

デバイス製造の直前に、このパターン化されたITO基体を洗浄したものをUVオゾンで10分間処理した。冷却した直後に、緩衝液1の水性分散体をITO表面上にスピコーティングし、加熱して溶媒を除去した。冷却後、次に基体に正孔輸送材料の溶液をスピコーティングし、次に加熱して溶媒を除去した。冷却後、基体に発光層溶液をスピコーティングし、加熱して溶媒を除去した。基体をマスクし、真空チャンバーに入れた。熱蒸着によってZrQ層を堆積し、続いてCsF層を堆積した。次に減圧下でマスクを交換し、熱蒸着によってAl層を堆積した。チャンバーに通気し、ガラス蓋、乾燥剤、およびUV硬化性エポキシを使用してデバイスを封入した。

40

【0222】

OLED 試料の特性決定は、(1)電流 - 電圧(I - V)曲線、(2)エレクトロルミネッセンス放射輝度対電圧、および(3)エレクトロルミネッセンススペクトル対電圧を測定することによって行った。3つすべての測定を同時に行い、コンピュータで制御を行った。LEDのエレクトロルミネッセンス放射輝度を、デバイスを動作させるために必要な電流密度で割ることによって、ある電圧におけるデバイスの電流効率が求められる。この単位はcd / Aである。出力効率は、電流効率を動作電圧で割った値である。この単位

50

は 1 m / W である。結果を以下の表 1 に示す。

【 0 2 2 3 】

デバイス例 2

この例では、深青色発光を示すデバイスの製造および性能を示す。以下の材料を使用した：

インジウムスズ酸化物 (I T O) : 5 0 n m

緩衝層 = 緩衝液 1 (2 5 n m)

正孔輸送層 = 化合物 C (2 0 n m)

光活性層 = 4 : 1 のホスト H 1 : ドーパント E 1 (3 9 n m)

電子輸送層 = Z r Q (2 0 n m)

カソード = C s F / A l (0 . 8 / 1 0 0 n m)

10

【 0 2 2 4 】

O L E D デバイスは、溶液処理と熱蒸着技術との組み合わせによって製造した。T h i n F i l m D e v i c e s , I n c のパターン化されたインジウムスズ酸化物 (I T O) がコーティングされたガラス基体を使用した。これらの I T O 基体は、5 0 / のシート抵抗および 8 0 % の光透過率を有する I T O がコーティングされた C o r n i n g 1 7 3 7 ガラスを主とするものである。これらのパターン化された I T O 基体を、水性洗剤溶液中で超音波洗浄し、蒸留水ですすいだ。次に、このパターン化された I T O を、アセトン中で超音波洗浄し、イソプロパノールですすぎ、窒素気流中で乾燥させた。

20

【 0 2 2 5 】

デバイス製造の直前に、このパターン化された I T O 基体を洗浄したものを U V オゾンで 1 0 分間処理した。冷却した直後に、緩衝液 1 の水性分散体を I T O 表面上にスピンコーティングし、加熱して溶媒を除去した。冷却後、次に基体に正孔輸送材料の溶液をスピンコーティングし、次に加熱して溶媒を除去した。冷却後、基体をマスクし、真空チャンバーに入れた。4 : 1 の比率の蛍光性ホスト : ドーパントを 3 9 n m の厚さまで同時蒸着した。基体をマスクし、真空チャンバーに入れた。熱蒸着によって Z r Q 層を堆積し、続いて C s F 層を堆積した。次に減圧下でマスクを交換し、熱蒸着によって A l 層を堆積した。チャンバーに通気し、ガラス蓋、乾燥剤、および U V 硬化性エポキシを使用してデバイスを封入した。

30

【 0 2 2 6 】

前述のようにして O L E D 試料の特性決定を行った。結果を以下の表 1 に示す。

【 0 2 2 7 】

デバイス例 3

この例では、深青色発光を示すデバイスの製造および性能を示す。以下の材料を使用した：

インジウムスズ酸化物 (I T O) : 5 0 n m

緩衝層 = 緩衝液 1 (5 0 n m)

正孔輸送層 = 化合物 T (2 0 n m)

光活性層 = 6 : 1 のホスト H 1 : ドーパント E 1 (3 2 n m)

電子輸送層 = Z r Q (1 0 n m)

カソード = C s F / A l (0 . 7 / 1 0 0 n m)

40

【 0 2 2 8 】

O L E D デバイスは、溶液処理と熱蒸着技術との組み合わせによって製造した。T h i n F i l m D e v i c e s , I n c のパターン化されたインジウムスズ酸化物 (I T O) がコーティングされたガラス基体を使用した。これらの I T O 基体は、5 0 / のシート抵抗および 8 0 % の光透過率を有する I T O がコーティングされた C o r n i n g 1 7 3 7 ガラスを主とするものである。これらのパターン化された I T O 基体を、水性洗剤溶液中で超音波洗浄し、蒸留水ですすいだ。次に、このパターン化された I T O を、アセトン中で超音波洗浄し、イソプロパノールですすぎ、窒素気流中で乾燥させた。

【 0 2 2 9 】

50

デバイス製造の直前に、このパターン化されたITO基体を洗浄したものをUVオゾンで10分間処理した。冷却した直後に、緩衝液1の水性分散体をITO表面上にスピンコーティングし、加熱して溶媒を除去した。冷却後、次に基体に正孔輸送材料の溶液をスピンコーティングし、次に加熱して溶媒を除去した。冷却後、基体をマスクし、真空チャンバーに入れた。6:1の比率の蛍光性ホスト:ドーパントを32nmの厚さまで同時蒸着した。基体をマスクし、真空チャンバーに入れた。熱蒸着によってZrQ層を堆積し、続いてCsF層を堆積した。次に減圧下でマスクを交換し、熱蒸着によってAl層を堆積した。チャンバーに通気し、ガラス蓋、乾燥剤、およびUV硬化性エポキシを使用してデバイスを封入した。

【0230】

10

前述のようにしてOLED試料の特性決定を行った。結果を以下の表1に示す。

【0231】

デバイス例4

この例では、深青色発光を示すデバイスの製造および性能を示す。

【0232】

デバイスは以下の層を有した：

アノード = インジウムスズ酸化物 (ITO) : 50 nm

緩衝層 = 緩衝液1 (25 nm)

正孔輸送層 = 化合物V

光活性層 = 13:1のホストH1:ドーパントE1 (47 nm)

電子輸送層 = ZrQ (20 nm)

カソード = CsF / Al (0.7 / 100 nm)

20

【0233】

OLEDデバイスは、溶液処理と熱蒸着技術との組み合わせによって製造した。Thin Film Devices, Inc.のパターン化されたインジウムスズ酸化物 (ITO) がコーティングされたガラス基体を使用した。これらのITO基体は、50 / のシート抵抗および80%の光透過率を有するITOがコーティングされたCorning 1737ガラスを主とするものである。これらのパターン化されたITO基体を、水性洗剤溶液中で超音波洗浄し、蒸留水ですすいだ。次に、このパターン化されたITOを、アセトン中で超音波洗浄し、イソプロパノールですすぎ、窒素気流中で乾燥させた。

30

【0234】

デバイス製造の直前に、このパターン化されたITO基体を洗浄したものをUVオゾンで10分間処理した。冷却した直後に、緩衝液1の水性分散体をITO表面上にスピンコーティングし、加熱して溶媒を除去した。冷却後、次に基体に正孔輸送材料の溶液をスピンコーティングし、次に加熱して溶媒を除去した。冷却後、基体に発光層溶液をスピンコーティングし、加熱して溶媒を除去した。基体をマスクし、真空チャンバーに入れた。熱蒸着によってZrQ層を堆積し、続いてCsF層を堆積した。次に減圧下でマスクを交換し、熱蒸着によってAl層を堆積した。チャンバーに通気し、ガラス蓋、乾燥剤、およびUV硬化性エポキシを使用してデバイスを封入した。

【0235】

40

OLED試料の特性決定は、(1)電流 - 電圧 (I - V) 曲線、(2)エレクトロルミネッセンス放射輝度対電圧、および(3)エレクトロルミネッセンススペクトル対電圧を測定することによって行った。3つすべての測定を同時に行い、コンピュータで制御を行った。LEDのエレクトロルミネッセンス放射輝度を、デバイスを動作させるために必要な電流密度で割ることによって、ある電圧におけるデバイスの電流効率が求められる。この単位はcd / Aである。出力効率は、電流効率を動作電圧で割った値である。この単位はlm / Wである。結果を以下の表1に示す。

【0236】

デバイス例5

この例では、深青色発光を示すデバイスの製造および性能を示す。以下の材料を使用し

50

た：

インジウムスズ酸化物 (ITO) : 50 nm

緩衝層 = 緩衝液 1 (25 nm)

正孔輸送層 = 化合物 V (20 nm)

光活性層 = 4 : 1 のホスト H1 : ドーパント E1 (39 nm)

電子輸送層 = ZrQ (20 nm)

カソード = CsF / Al (0.8 / 100 nm)

【0237】

OLED デバイスは、溶液処理と熱蒸着技術との組み合わせによって製造した。Thin Film Devices, Inc のパターン化されたインジウムスズ酸化物 (ITO) がコーティングされたガラス基体を使用した。これらの ITO 基体は、50 / のシート抵抗および 80 % の光透過率を有する ITO がコーティングされた Corning 1737 ガラスを主とするものである。これらのパターン化された ITO 基体を、水性洗剤溶液中で超音波洗浄し、蒸留水ですすいだ。次に、このパターン化された ITO を、アセトン中で超音波洗浄し、イソプロパノールですすぎ、窒素気流中で乾燥させた。

【0238】

デバイス製造の直前に、このパターン化された ITO 基体を洗浄したものを UV オゾンで 10 分間処理した。冷却した直後に、緩衝液 1 の水性分散体を ITO 表面上にスピンコーティングし、加熱して溶媒を除去した。冷却後、次に基体に正孔輸送材料の溶液をスピンコーティングし、次に加熱して溶媒を除去した。冷却後、基体をマスクし、真空チャンパーに入れた。4 : 1 の比率の蛍光性ホスト : ドーパントを 39 nm の厚さまで同時蒸着した。基体をマスクし、真空チャンパーに入れた。熱蒸着によって ZrQ 層を堆積し、続いて CsF 層を堆積した。次に減圧下でマスクを交換し、熱蒸着によって Al 層を堆積した。チャンパーに通気し、ガラス蓋、乾燥剤、および UV 硬化性エポキシを使用してデバイスを封入した。

【0239】

前述のようにして OLED 試料の特性決定を行った。結果を以下の表 1 に示す。

【0244】

デバイス例 7

この例では、深青色発光を示すデバイスの製造および性能を示す。

【0245】

デバイスは以下の層を有した：

アノード = インジウムスズ酸化物 (ITO) : 50 nm

緩衝層 = 緩衝液 1 (25 nm)

正孔輸送層 = 化合物 Y3

光活性層 = 13 : 1 のホスト H1 : ドーパント E1 (47 nm)

電子輸送層 = ZrQ (20 nm)

カソード = CsF / Al (0.7 / 100 nm)

【0246】

OLED デバイスは、溶液処理と熱蒸着技術との組み合わせによって製造した。Thin Film Devices, Inc のパターン化されたインジウムスズ酸化物 (ITO) がコーティングされたガラス基体を使用した。これらの ITO 基体は、50 / のシート抵抗および 80 % の光透過率を有する ITO がコーティングされた Corning 1737 ガラスを主とするものである。これらのパターン化された ITO 基体を、水性洗剤溶液中で超音波洗浄し、蒸留水ですすいだ。次に、このパターン化された ITO を、アセトン中で超音波洗浄し、イソプロパノールですすぎ、窒素気流中で乾燥させた。

【0247】

デバイス製造の直前に、このパターン化された ITO 基体を洗浄したものを UV オゾンで 10 分間処理した。冷却した直後に、緩衝液 1 の水性分散体を ITO 表面上にスピンコーティングし、加熱して溶媒を除去した。冷却後、次に基体に正孔輸送材料の溶液をスピ

ンコーティングし、次に加熱して溶媒を除去した。冷却後、基体に発光層溶液をスピンコーティングし、加熱して溶媒を除去した。基体をマスクし、真空チャンバーに入れた。熱蒸着によってZrQ層を堆積し、続いてCsF層を堆積した。次に減圧下でマスクを交換し、熱蒸着によってAl層を堆積した。チャンバーに通気し、ガラス蓋、乾燥剤、およびUV硬化性エポキシを使用してデバイスを封入した。

【0248】

OLED試料の特性決定は、(1)電流-電圧(I-V)曲線、(2)エレクトロルミネッセンス放射輝度対電圧、および(3)エレクトロルミネッセンススペクトル対電圧を測定することによって行った。3つすべての測定を同時に行い、コンピュータで制御を行った。LEDのエレクトロルミネッセンス放射輝度を、デバイスを動作させるために必要な電流密度で割ることによって、ある電圧におけるデバイスの電流効率が求められる。この単位はcd/Aである。出力効率は、電流効率を動作電圧で割った値である。この単位はlm/Wである。結果を以下の表1に示す。

10

【0249】

デバイス例8

この例では、深青色発光を示すデバイスの製造および性能を示す。以下の材料を使用した：

インジウムスズ酸化物(ITO)：50nm

緩衝層 = 緩衝液1 (25nm)

正孔輸送層 = 化合物Y3 (20nm)

光活性層 = 4：1のホストH1：ドープアントE1 (39nm)

電子輸送層 = ZrQ (20nm)

カソード = CsF/Al (0.8/100nm)

20

【0250】

OLEDデバイスは、溶液処理と熱蒸着技術との組み合わせによって製造した。Thin Film Devices, Incのパターン化されたインジウムスズ酸化物(ITO)がコーティングされたガラス基体を使用した。これらのITO基体は、50 / のシート抵抗および80%の光透過率を有するITOがコーティングされたCorning 1737ガラスを主とするものである。これらのパターン化されたITO基体を、水性洗剤溶液中で超音波洗浄し、蒸留水ですすいだ。次に、このパターン化されたITOを、アセトン中で超音波洗浄し、イソプロパノールですすぎ、窒素気流中で乾燥させた。

30

【0251】

デバイス製造の直前に、このパターン化されたITO基体を洗浄したものをUVオゾンで10分間処理した。冷却した直後に、緩衝液1の水性分散体をITO表面上にスピンコーティングし、加熱して溶媒を除去した。冷却後、次に基体に正孔輸送材料の溶液をスピンコーティングし、次に加熱して溶媒を除去した。冷却後、基体をマスクし、真空チャンバーに入れた。4：1の比率の蛍光性ホスト：ドープアントを39nmの厚さまで同時蒸着した。基体をマスクし、真空チャンバーに入れた。熱蒸着によってZrQ層を堆積し、続いてCsF層を堆積した。次に減圧下でマスクを交換し、熱蒸着によってAl層を堆積した。チャンバーに通気し、ガラス蓋、乾燥剤、およびUV硬化性エポキシを使用してデバイスを封入した。

40

【0252】

前述のようにしてOLED試料の特性決定を行った。結果を以下の表1に示す。

【0253】

【表 1】

表 1

実施例	CE [cd/A]	電圧 [V]	ELピーク [nm]	CIE [x]	CIE [y]
デバイス 1	6.28	5.0	462	0.138	0.135
デバイス 2	8.53	4.4	462	0.136	0.136
デバイス 3	8.1	4.0	458	0.138	0.107
デバイス 4	6.26	5.3	462	0.140	0.121
デバイス 5	8.85	4.1	458	0.137	0.126
デバイス 7	6.49	5.0	460	0.138	0.127
デバイス 8	7.96	4.5	462	0.137	0.131

10

すべてのデータは1000ニトにおける値であり、CE=電流効率であり、CIE[x]およびCIE[y]は、C.I.E.色度図（Commission International de L' Eclairage,1931）に準拠したxおよびyの色座標を意味する。

【 0 2 5 4 】

概要または実施例において前述したすべての行為が必要なわけではなく、特定の行為の一部は不要である場合があり、1つ以上のさらに別の行為が、前述の行為に加えて実施される場合があることに留意されたい。さらに、行為が列挙されている順序は、必ずしもそれらが実施される順序ではない。

20

【 0 2 5 5 】

以上の明細書において、具体的な実施形態を参照しながら本発明の概念を説明してきた。しかし、当業者であれば、特許請求の範囲に記載される本発明の範囲から逸脱せずに種々の修正および変更を行えることが理解できよう。したがって、本明細書および図面は、限定的な意味ではなく説明的なものであると見なすべきであり、すべてのこのような修正は本発明の範囲内に含まれることを意図している。

【 0 2 5 6 】

特定の実施形態に関して、利益、その他の利点、および問題に対する解決法を以上に記載してきた。しかし、これらの利益、利点、問題の解決法、ならびに、なんらかの利益、利点、または解決法を発生させたり、より顕著にしたりすることがある、あらゆる特徴が、特許請求の範囲のいずれかまたはすべての重要、必要、または本質的な特徴であるとして解釈すべきではない。

30

【 0 2 5 7 】

別々の実施形態の状況において、明確にするために本明細書に記載されている特定の複数の特徴は、1つの実施形態の中で組み合わせても提供できることを理解されたい。逆に、簡潔にするため1つの実施形態の状況において説明した種々の特徴も、別々に提供したり、あらゆる副次的な組み合わせで提供したりすることができる。本明細書において明記される種々の範囲内の数値が使用される場合、記載の範囲内の最小値および最大値の両方の前に単語「約」が付けられているかのように近似値として記載されている。この方法では、記載の範囲よりもわずかに上およびわずかに下のばらつきを使用して、その範囲内の値の場合と実質的に同じ結果を得ることができる。また、これらの範囲の開示は、ある値の一部の成分を異なる値の一部の成分と混合した場合に生じうる分数値を含めて、最小平均値と最大平均値との間のすべての値を含む連続した範囲であることを意図している。さらに、より広い範囲およびより狭い範囲が開示される場合、ある範囲の最小値を別の範囲の最大値と一致させること、およびその逆のことが本発明の意図の範囲内となる。

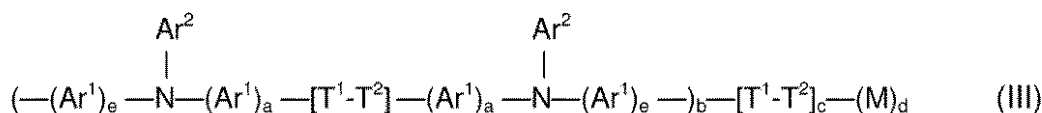
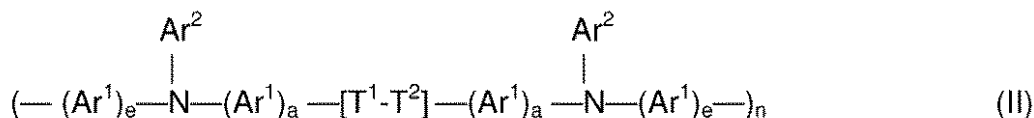
40

以下、本明細書に記載の発明につき列記する。

1 .

式 I、式 I I、または式 I I I :

【化 2】



10

(式中： Ar^1 は、出現するごとに同種または異種であり、フェニレン、置換フェニレン、ナフチレン、および置換ナフチレンからなる群から選択され；

Ar^2 は、出現するごとに同種または異種であり、アリール基であり；

Mは、出現するごとに同種または異種であり、共役部分であり；

T^1 および T^2 は、出現するごとに独立して同種または異種であり、非平面配置で結合されている共役部分であり；

20

aは、出現するごとに同種または異種であり、1～6の整数であり；

b、c、およびdは、モル分率であって $b + c + d = 1$ 、0であり、但し、cは0ではなく、bおよびdの少なくとも1つは0ではなく、bが0の場合には、Mは、少なくとも2つのトリアリールアミン単位を含み；

eは、出現するごとに同種または異種であり、1～6の整数であり；

nは、1を超える整数である）

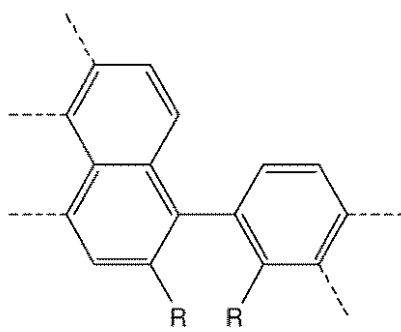
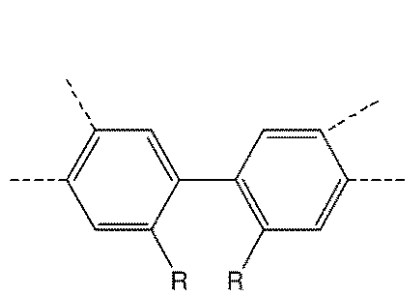
で表される化合物。

2.

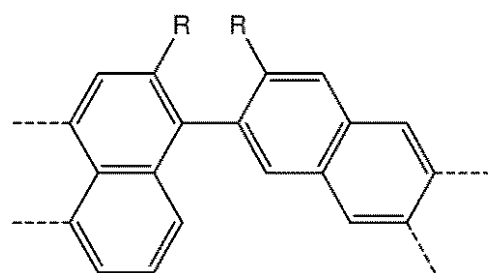
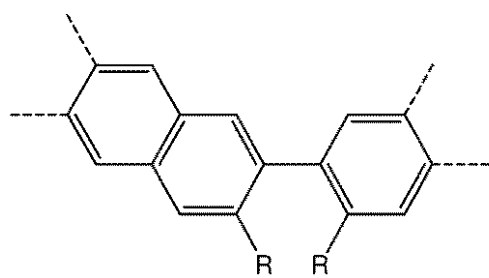
$[\text{T}^1 - \text{T}^2]$ の構成要素が独立して：

30

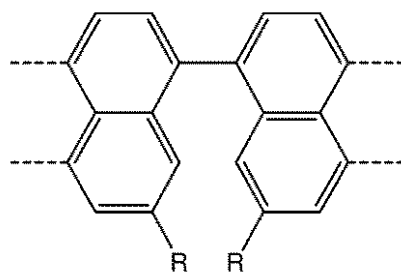
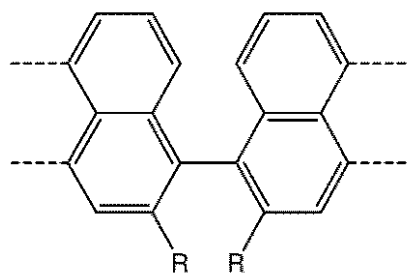
【化 3】



10

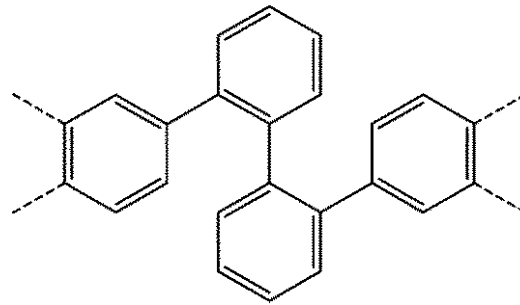
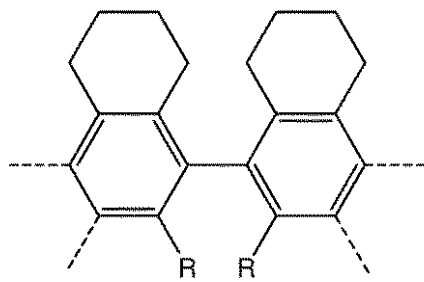


20

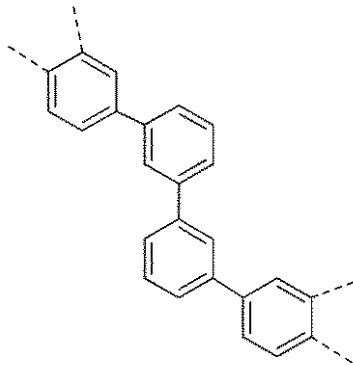


30

【化 4】



10



20

(式中：Rは、同種または異種であり、アルキル、アリール、アルコキシ、アリールオキシ、フルオロアルキル、フルオロアリール、フルオロアリールオキシ、フルオロアルキルオキシ、オキシアルキル、およびアルケニル基からなる群から選択される)
からなる群から選択される、前記 1 . に記載の化合物。

3 .

R が、C 1 ~ 1 0 アルキルおよび C 1 ~ 1 0 アルコキシからなる群から選択される、前記 2 . に記載の化合物。

30

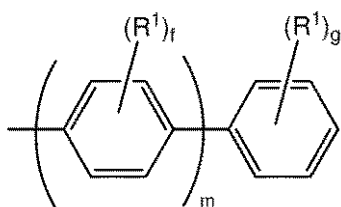
4 .

両方の R 基が互いに連結して非芳香環を形成している、前記 2 . に記載の化合物。

5 .

A r ² が式 a

【化 5】



式 a

40

(式中：R ¹ は、出現するごとに同種または異種であり、アルキル、アルコキシ、およびシリルからなる群から選択され；

f は、出現するごとに同種または異種であり、0 ~ 4 の整数であり；

g は 0 ~ 5 の整数であり；

m は 1 ~ 5 の整数である)

で表される、前記 1 . に記載の化合物。

6 .

50

Ar^2 が、フェニル、p - ビフェニル、p - ターフェニル、ナフチル、フェニルナフチル、およびナフチルフェニルからなる群から選択される、前記 1 . に記載の化合物。

7 .

Ar^2 が、架橋基を含む置換基を有する、前記 1 . に記載の化合物。

8 .

少なくとも 1 つの Ar^2 が、アルキル、アルコキシ、およびシリルからなる群から選択される少なくとも 1 つの置換基を有する、前記 1 . に記載の化合物。

9 .

式 I I I で表され、c が少なくとも 0 . 4 である、前記 1 . に記載の化合物。

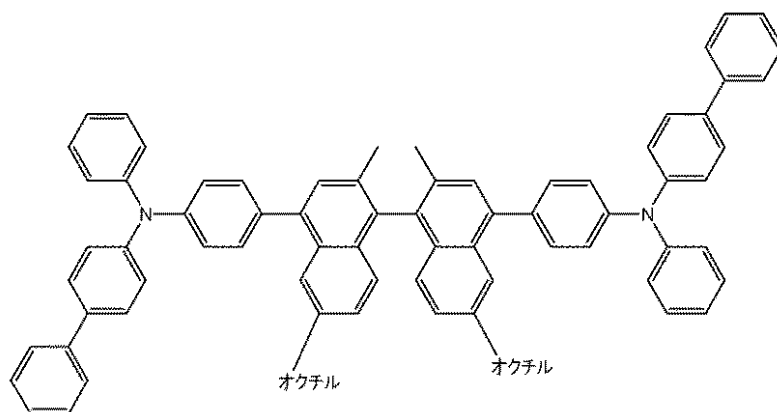
1 0 .

M が、架橋性置換基を有する、トリアリールアミン単位および芳香族単位からなる群から選択される、前記 9 . に記載の化合物。

1 1 .

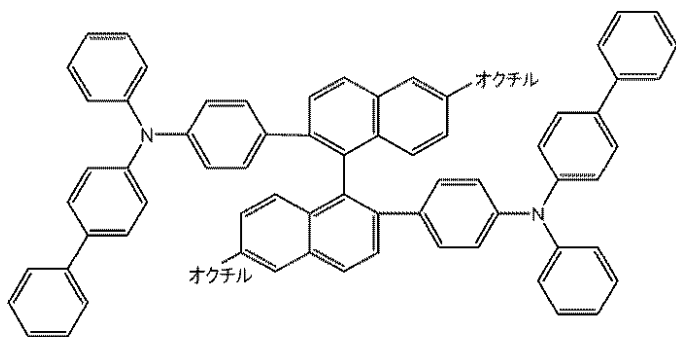
化合物 A :

【化 6】



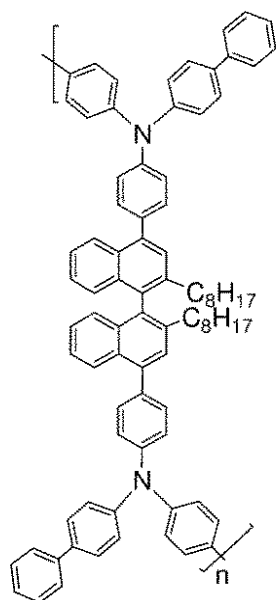
化合物 B :

【化 7】



化合物 C

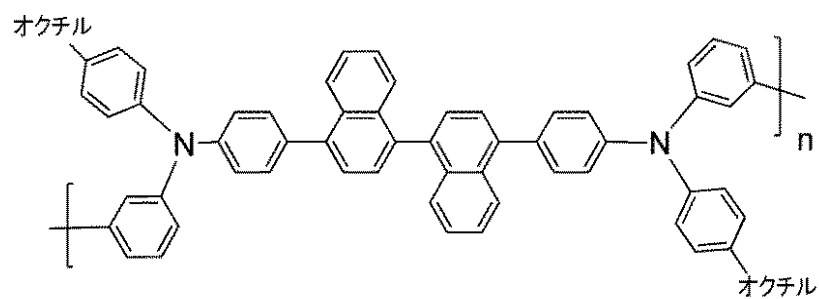
【化 8】



10

化合物 D :

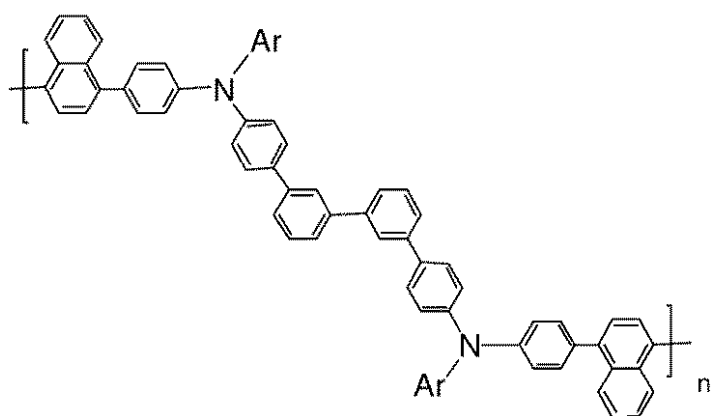
【化 9】



20

化合物 E :

【化 10】

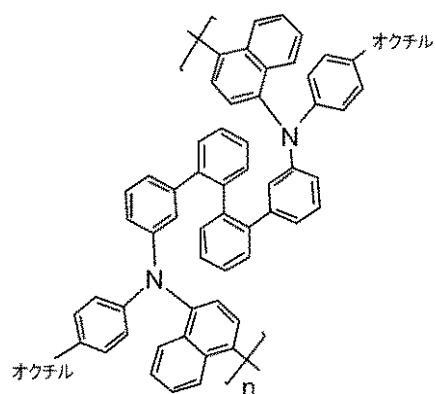


30

40

化合物 F :

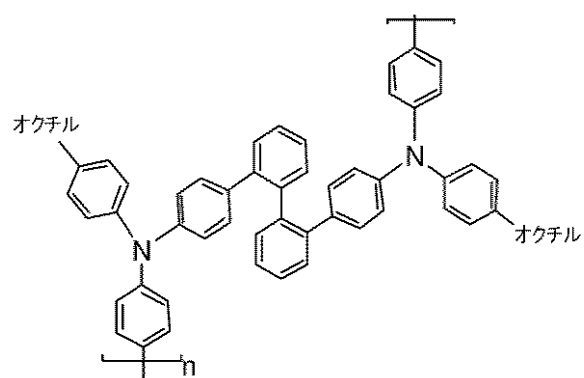
【化 1 1】



10

化合物 G :

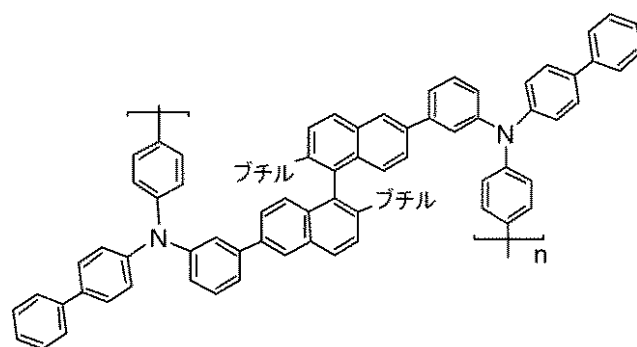
【化 1 2】



20

化合物 H :

【化 1 3】

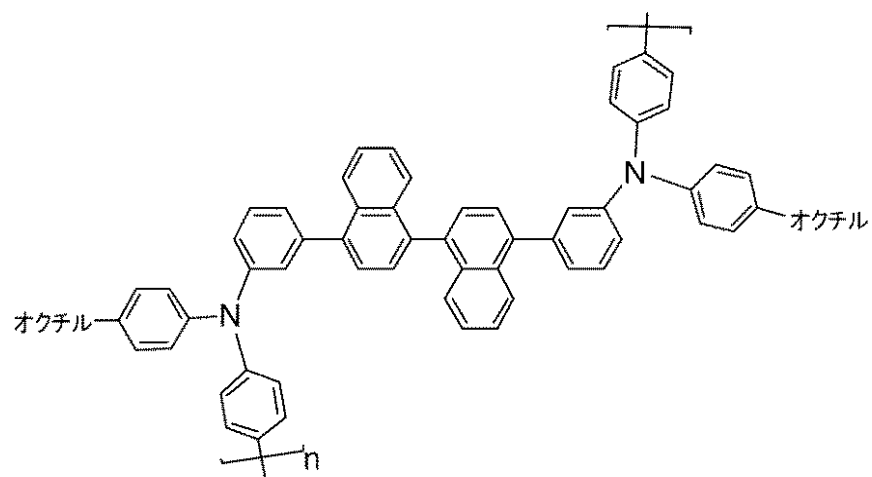


30

化合物 I :

40

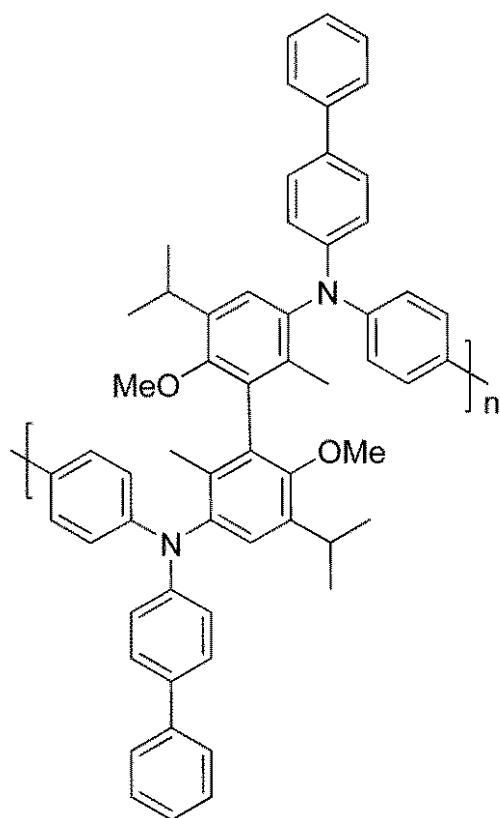
【化 1 4】



10

化合物 J :

【化 1 5】



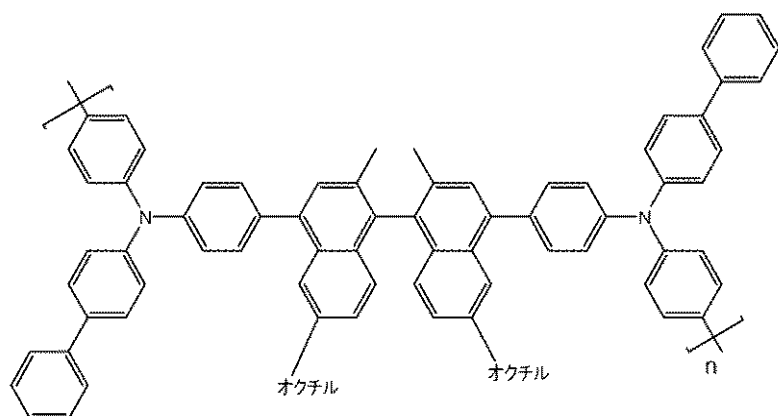
20

30

化合物 K :

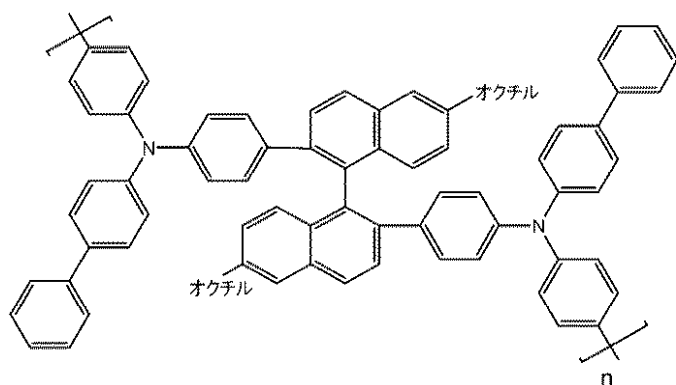
40

【化 1 6】



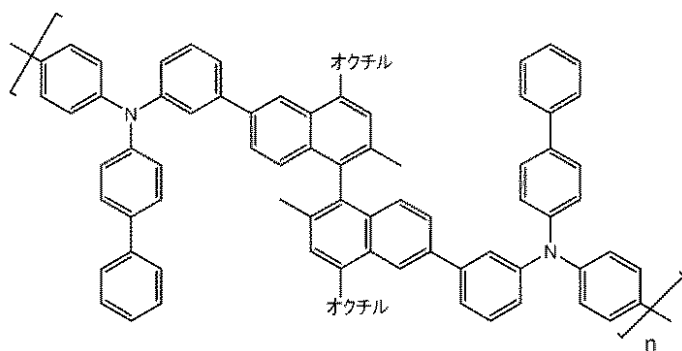
10

化合物 L :
【化 1 7】



20

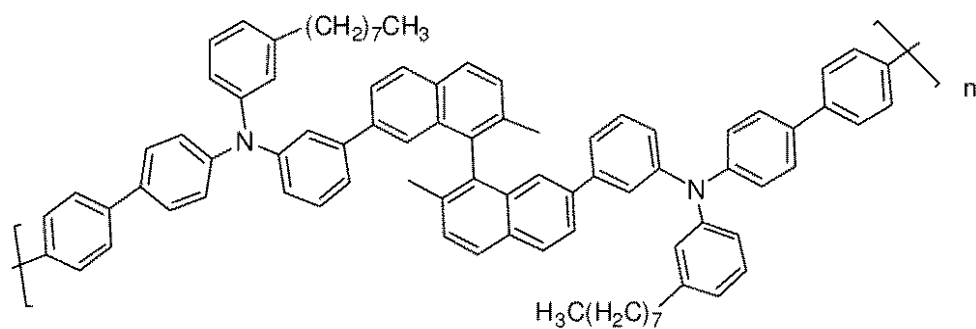
化合物 M :
【化 1 8】



40

化合物 M 1 :

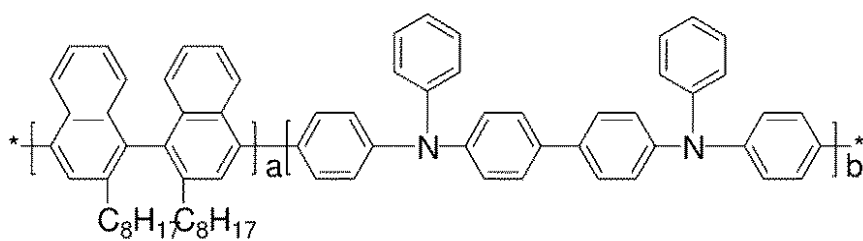
【化 1 9】



10

化合物 N :

【化 2 0】



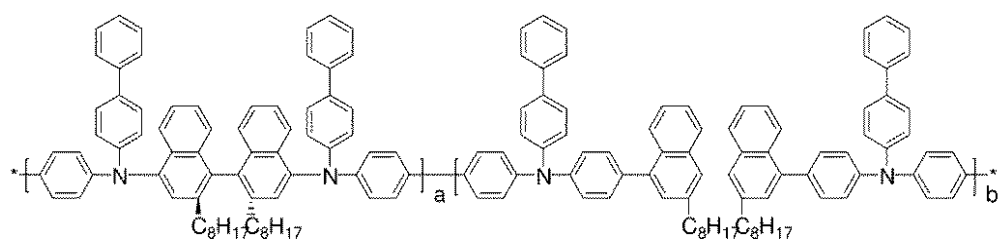
20

$$a = 0.4 \sim 0.8$$

$$b = 0.2 \sim 0.6$$

化合物 O :

【化 2 1】



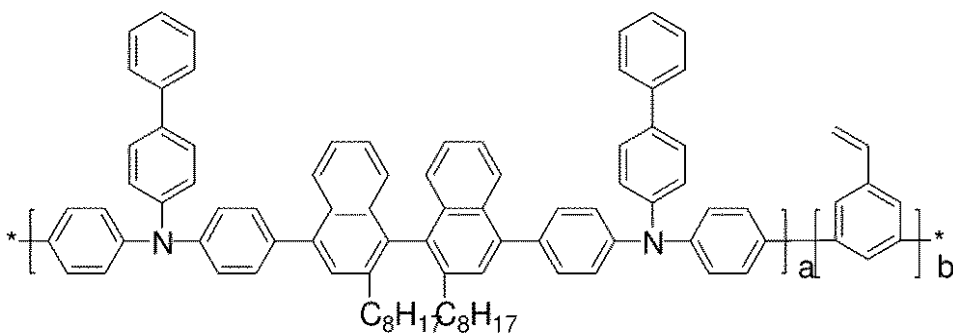
30

$$a = 0.3 \sim 0.7$$

$$b = 0.3 \sim 0.7$$

化合物 P :

【化 2 2】



40

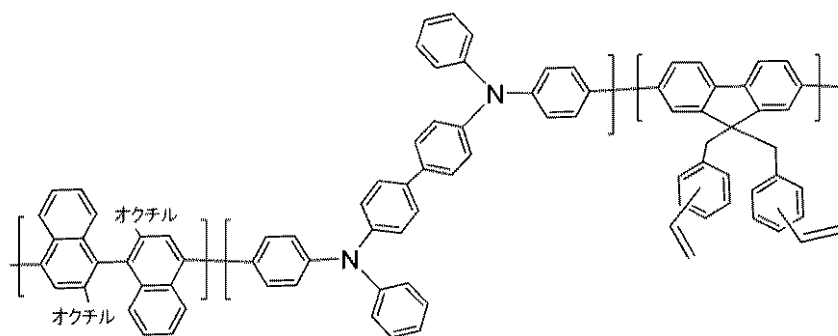
$$a = 0.8 \sim 0.95$$

50

$$b = 0.05 \sim 0.2$$

化合物 Q :

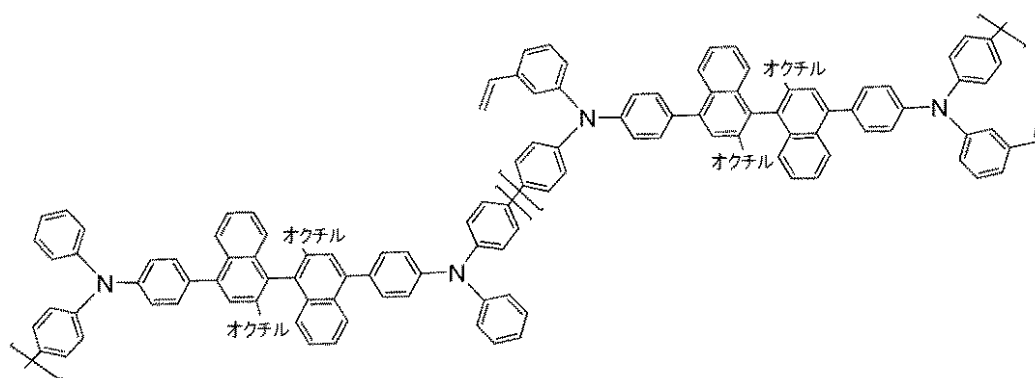
【化 2 3】



10

化合物 R :

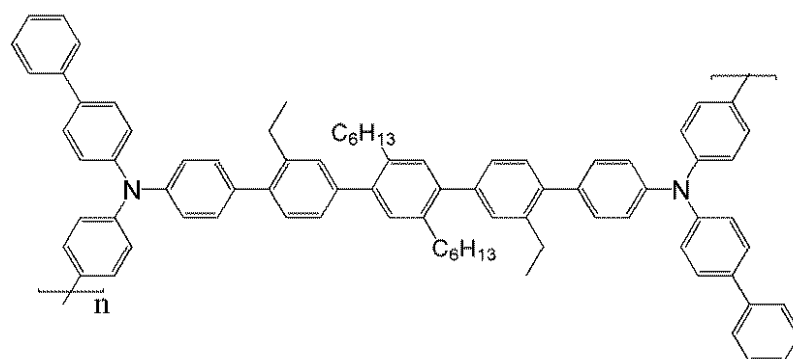
【化 2 4】



20

化合物 S :

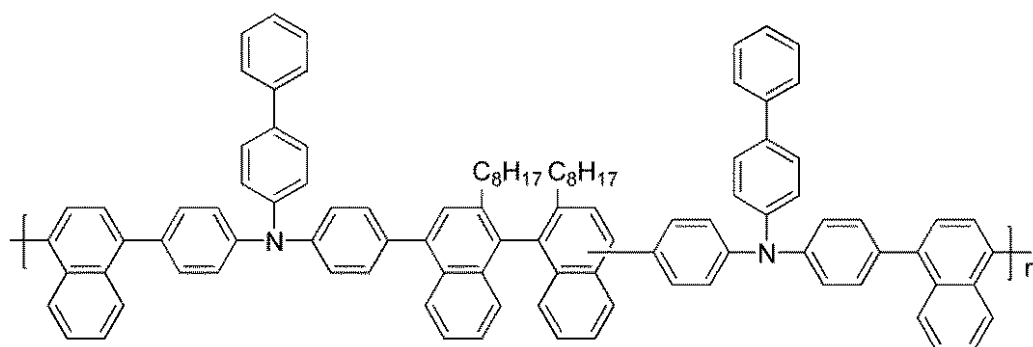
【化 2 5】



40

化合物 T :

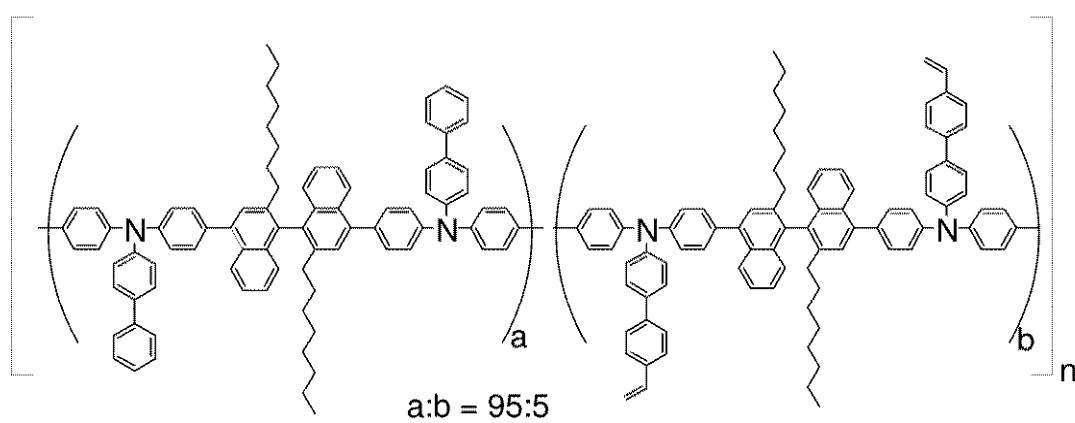
【化 2 6】



10

化合物 U :

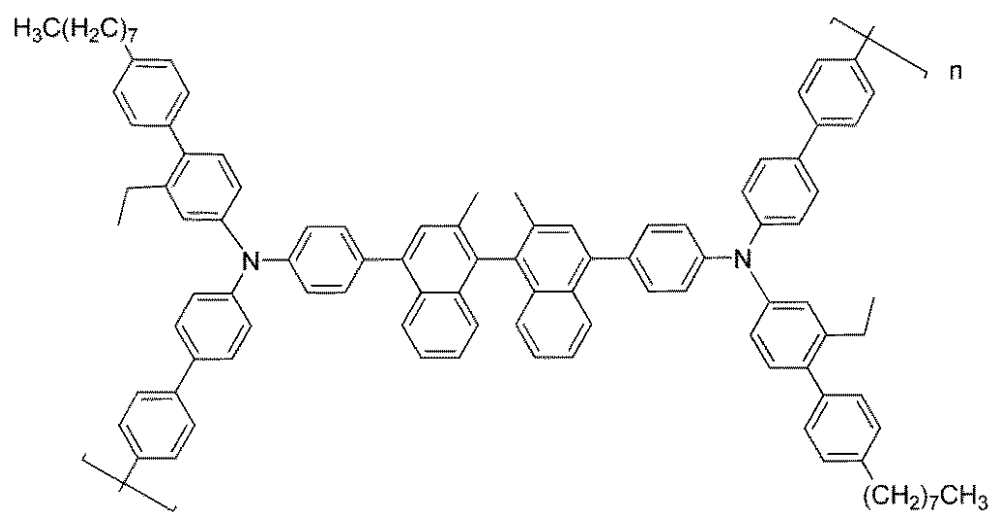
【化 2 7】



20

化合物 V :

【化 2 8】

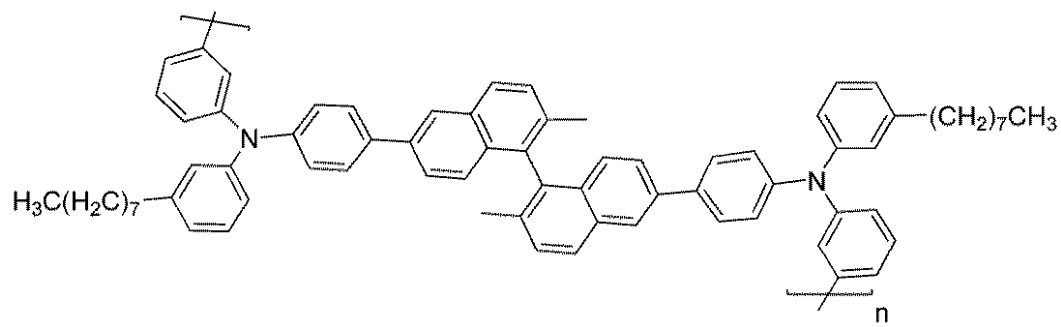


30

40

化合物 W :

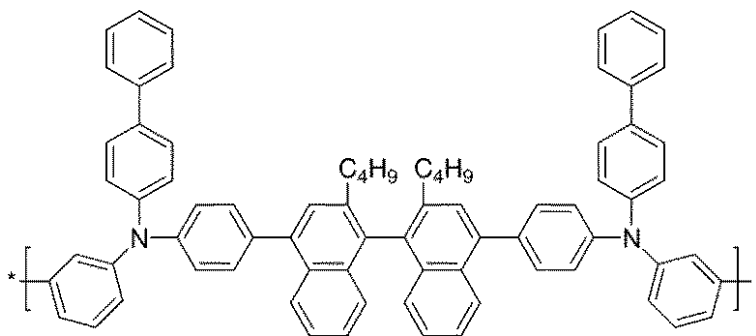
【化 2 9】



10

化合物 X :

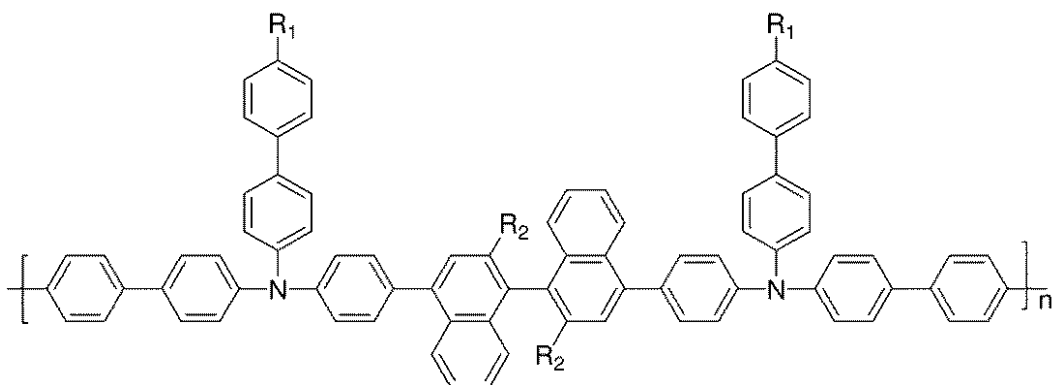
【化 3 0】



20

および化合物 Y 1 ~ Y 4

【化 3 1】



30

化合物 Y1: R₁ = ペンチル; R₂ = ブチル
 化合物 Y2: R₁ = ヘプチル; R₂ = オクチル
 化合物 Y3: R₁ = プロピル; R₂ = オクチル
 化合物 Y4: R₁ = オクチル; R₂ = メチル

40

からなる群から選択される、化合物。

1 2 .

第 1 の電気接触層、第 2 の電気接触層、およびそれらの間の活性層を含み、前記活性層が、前記 1 . ~ 1 1 . のいずれか一項に記載の化合物を含む、有機電子デバイス。

1 3 .

前記活性層が、正孔輸送層、および光活性層からなる群から選択される層である、前記 1 2 . に記載のデバイス。

1 4 .

50

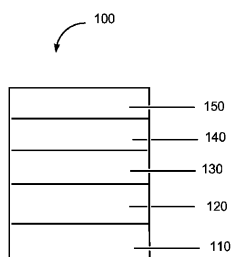
前記活性層が、光活性材料と、式 I、式 I I、または式 I I I で表される化合物とから実質的になる、前記 1 2 . または 1 3 . に記載のデバイス。

1 5 .

少なくとも 1 つの Ar^1 が、アルキル、アルコキシ、シリル、および架橋基を有する置換基からなる群から選択される置換基を有する置換フェニルである、前記 1 .、1 2 .、1 3 .、および 1 4 . のいずれか一項に記載の化合物。

【図 1】

FIGURE 1



フロントページの続き

- (72)発明者 ゲイリー エー．ヨハンソン
アメリカ合衆国 19707 デラウェア州 ホッケシン ケンウィック ロード 6
- (72)発明者 エリック モーリス スミス
アメリカ合衆国 19707 デラウェア州 ホッケシン スプリングハウス レーン 359
- (72)発明者 レイド ジョン チェスターフィールド
アメリカ合衆国 19803 デラウェア州 ウィルミントン ロビン ロード 2206
- (72)発明者 マイケル ヘンリー ハワード ジュニア
アメリカ合衆国 19710 デラウェア州 モンシャナン モンシャナン ロード 908
- (72)発明者 キョン・ホ パク
アメリカ合衆国 19810 デラウェア州 ウィルミントン ウェイラーズ ベンド 52
- (72)発明者 ノラ サビーナ ラデュー
アメリカ合衆国 19350 ペンシルベニア州 ランデンベルグ ストーンー リッジ ロード 109
- (72)発明者 ジーン エム．ロッシ
アメリカ合衆国 19803 デラウェア州 ウィルミントン リンドハースト アベニュー 116
- (72)発明者 フレデリック ピー．ジェントリー
アメリカ合衆国 19701 デラウェア州 ベアー クリッシー コート 4
- (72)発明者 トロイ シー．ゲーハート
アメリカ合衆国 19803 デラウェア州 ウィルミントン リンドハースト アベニュー 116
- (72)発明者 ダニエル デイビッド レクルー
アメリカ合衆国 19803 デラウェア州 ウィルミントン ウェストクリフ ロード 730
- (72)発明者 アダム フェニモア
アメリカ合衆国 19808 デラウェア州 ウィルミントン アビー ロード 704

審査官 井津 健太郎

- (56)参考文献 国際公開第2006/063852(WO, A1)
特開2004-014187(JP, A)
特開2004-311404(JP, A)
特開平11-338172(JP, A)
特表2010-529037(JP, A)
A Hole-Transporting Material with Controllable MorphologyContaining Binaphthyl and Triphenylamine Chromophores, By Qingguo He, Advanced Functional Material, 2006年, Volume 16, Issue 10, pages 1343-1348
- (58)調査した分野(Int.Cl., DB名)
C08G 61/00 - 61/12
CAplus/REGISTRY(STN)