

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11) 特許出願公開番号

特開2004-2493

(P2004-2493A)

(43) 公開日 平成16年1月8日(2004.1.8)

(51) Int.Cl.⁷

C08G 61/12

C09K 11/06

H05B 33/14

F I

C08G 61/12

C09K 11/06 635

H05B 33/14 B

テーマコード (参考)

3K007

4J032

審査請求 未請求 請求項の数 4 O L (全 24 頁)

(21) 出願番号 特願2002-109927 (P2002-109927)
 (22) 出願日 平成14年4月12日 (2002.4.12)
 (31) 優先権主張番号 特願2002-80818 (P2002-80818)
 (32) 優先日 平成14年3月22日 (2002.3.22)
 (33) 優先権主張国 日本国 (JP)

(71) 出願人 000183646
 出光興産株式会社
 東京都千代田区丸の内3丁目1番1号
 (74) 代理人 100078732
 弁理士 大谷 保
 (72) 発明者 安蘇 芳雄
 広島県東広島市鏡山1丁目4番1号 広島
 大学大学院工学研究科内
 (72) 発明者 川端 和重
 北海道札幌市北区北10条西8丁目 北海
 道大学大学院理学研究科内
 Fターム(参考) 3K007 AB03 AB18 DB03
 4J032 BA04 BB06 BC01 CG01

(54) 【発明の名称】新規化合物及び有機エレクトロルミネッセンス素子用材料

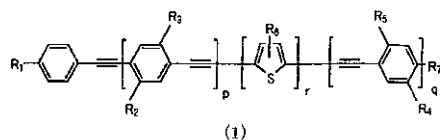
(57) 【要約】

【課題】発光効率が高く、安価な有機EL素子を提供可能な新規化合物及び有機エレクトロルミネッセンス素子用材料を提供する。

【解決手段】下記一般式(1)で表される新規化合物及びその化合物からなる有機エレクトロルミネッセンス素子用材料である。

一般式(1)

【化1】



(式中、R₁は、官能基であり、R₂～R₅は、それぞれ独立に、アルキル基、アルキルオキシ基又はアルキルチオ基、R₆は、水素原子、アルキル基、アルキルオキシ基、アルキルチオ基、アリール基又は芳香族複素環基、R₇は、水素原子、アルキル基、アルキルオキシ基、アルキルチオ基又は官能基である。p及びqは、それぞれ独立に、4～16の整数であり、rは2～16の整数である。なお、R₆は、それぞれのチオフエンごとに同一でも異なってもよい。)

【選択図】 なし

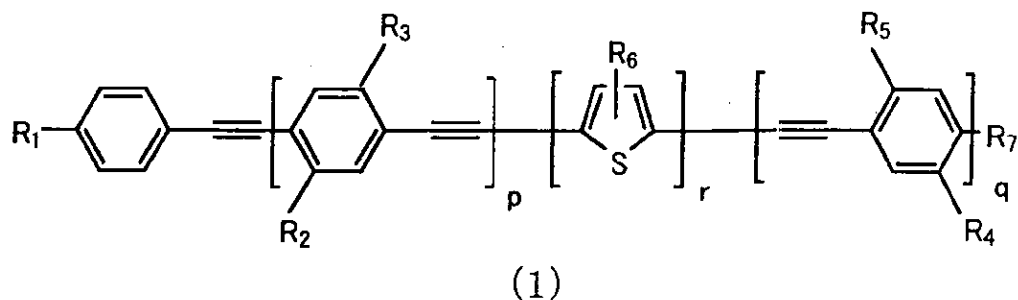
【特許請求の範囲】

【請求項 1】

下記一般式（１）で表される新規化合物。

一般式（１）

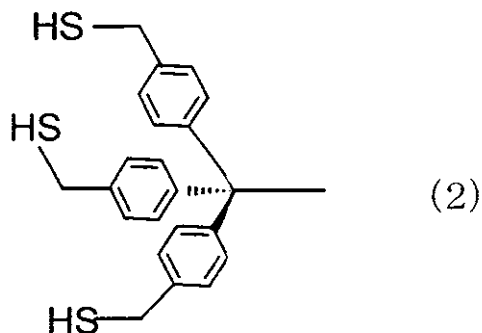
【化 1】



10

（式中、 R_1 は、カルボキシ基、メルカプト基、シアノ基、メルカプトフェニル基、イソニトリル基、アミノ基、シラノール基又は下記式（２）

【化 2】



20

で表される基からなる官能基であり、 $R_2 \sim R_5$ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数 1～18 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1～18 のアルキルオキシ基又は置換もしくは無置換の炭素数 1～18 のアルキルチオ基、 R_6 は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～18 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1～18 のアルキルオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～18 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の炭素数 6～12 のアリアル基又は置換もしくは無置換の炭素数 2～8 の芳香族複素環基、 R_7 は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～18 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1～18 のアルキルオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～18 のアルキルチオ基、あるいはカルボキシ基、メルカプト基、シアノ基、メルカプトフェニル基、イソニトリル基、アミノ基、シラノール基又は上記式（２）で表される基からなる官能基である。 p 及び q は、それぞれ独立に、4～16 の整数であり、 r は 2～16 の整数である。なお、 R_6 は、それぞれのチオフエンごとに同一でも異なってもよい。）

30

40

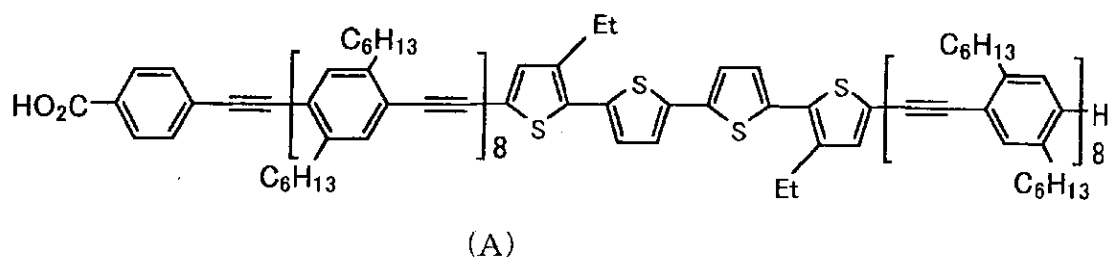
【請求項 2】

一般式（１）において、 r が 4～8 の整数である請求項 1 に記載の新規化合物。

【請求項 3】

一般式（１）で表される化合物が、下記化合物（Ａ）である請求項 1 に記載の新規化合物。

【化 3】



【請求項 4】

10

請求項 1～3 のいずれかに記載の化合物からなる有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】

本発明は、新規化合物及び有機エレクトロルミネッセンス（EL）素子用材料に関し、特に、発光効率が高く、安価な有機 EL 素子を提供可能な新規化合物及び有機 EL 素子用材料に関するものである。

【0002】

【従来の技術】

20

有機物質を使用した有機 EL 素子は、固体発光型の安価な大面積フルカラー表示素子としての用途が有望視され、多くの開発が行われている。一般に、有機 EL 素子は、発光層及び該層を挟んだ一对の対向電極から構成されている。

有機 EL 素子の発光は、両電極間に電界が印加されると、陰極側から電子が注入され、陽極側から正孔が注入され、電子が発光層において正孔と再結合し、励起状態を生成し、励起状態が基底状態に戻る際にエネルギーを光として放出する現象である。

特に最近では、有機 EL 素子の発光効率を上げるため、陽極と発光層との間に、正孔注入・輸送層を設け、発光層と陰極との間に、電子注入・輸送層を設けることにより、電子及び正孔輸送効率を上げた有機 EL 素子が用いられている。

しかしながら、正孔注入・輸送層や電子注入・輸送層を設けた有機 EL 素子よりも、さらに発光効率を上げた、有機 EL 素子が求められていた。

30

【0003】

【発明が解決しようとする課題】

本発明は、前記の課題を解決するためになされたもので、発光効率が高い有機 EL 素子を提供可能な新規化合物及び有機 EL 素子用材料を提供することを目的とする。

【0004】

【課題を解決するための手段】

本発明者らは、前記課題を解決するために鋭意検討した結果、一分子内に正孔輸送部、発光部、電子輸送部として機能する部分を有する化合物を有機 EL 素子用材料として用いることにより、前記の課題を解決することを見出し、そのような化合物を合成することに成功し、本発明を解決するに至った。

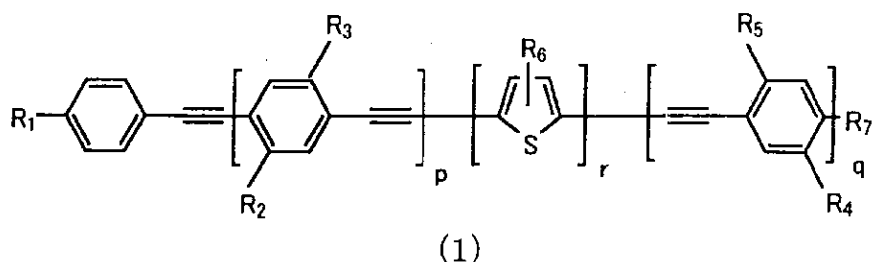
40

【0005】

すなわち、本発明は、下記一般式（1）で表される新規化合物及びその化合物からなる有機 EL 素子用材料を提供するものである。

一般式（1）

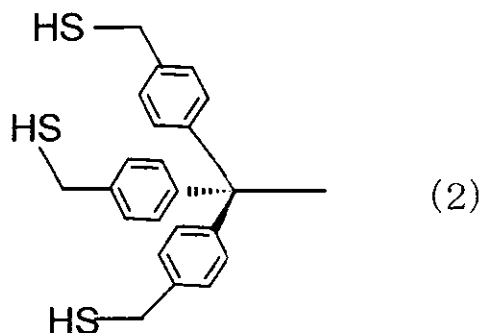
【化 4】



(式中、 R_1 は、カルボキシ基、メルカプト基、シアノ基、メルカプトフェニル基、イソニトリル基、アミノ基、シラノール基又は下記式 (2)

10

【化 5】



20

で表される基からなる官能基であり、 $R_2 \sim R_5$ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数 1～18 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1～18 のアルキルオキシ基又は置換もしくは無置換の炭素数 1～18 のアルキルチオ基、 R_6 は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～18 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1～18 のアルキルオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～18 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の炭素数 6～12 のアリール基又は置換もしくは無置換の炭素数 2～8 の芳香族複素環基、 R_7 は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～18 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1～18 のアルキルオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～18 のアルキルチオ基、あるいはカルボキシ基、メルカプト基、シアノ基、メルカプトフェニル基、イソニトリル基、アミノ基、シラノール基又は上記式 (2) で表される基からなる官能基である。 p 及び q は、それぞれ独立に、4～16 の整数であり、 r は 2～16 の整数である。なお、 R_6 は、それぞれのチオフエンごとに同一でも異なってもよい。)

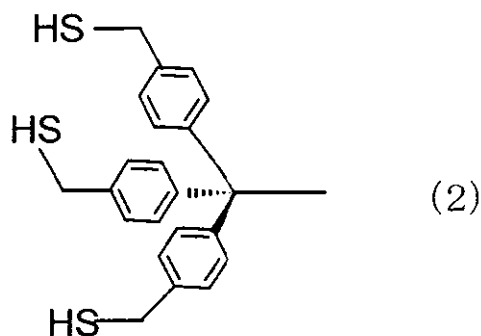
30

【0006】

【発明の実施の形態】

上記一般式 (1) において、 R_1 は、カルボキシ基、メルカプト基、シアノ基、メルカプトフェニル基、イソニトリル基、アミノ基、シラノール基又は下記式 (2)

【化 6】



40

で表されるからなる官能基であり、カルボキシ基、メルカプト基、式 (2) で表される

50

基が好ましく、特にカルボキシル基が好ましい。

一般式(1)において、 $R_2 \sim R_5$ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数1～18のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～18のアルキルオキシ基又は置換もしくは無置換の炭素数1～18のアルキルチオ基である。

【0007】

置換もしくは無置換の炭素数1～18のアルキル基としては、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、 n -ブチル基、 s -ブチル基、イソブチル基、 t -ブチル基、 n -ペンチル基、 n -ヘキシル基、 n -ヘプチル基、 n -オクチル基、ヒドロキシメチル基、1-ヒドロキシエチル基、2-ヒドロキシエチル基、2-ヒドロキシイソブチル基、1, 2-ジヒドロキシエチル基、1, 3-ジヒドロキシイソプロピル基、2, 3-ジヒドロキシ- t -ブチル基、1, 2, 3-トリヒドロキシプロピル基、クロロメチル基、1-クロロエチル基、2-クロロエチル基、2-クロロイソブチル基、1, 2-ジクロロエチル基、1, 3-ジクロロイソプロピル基、2, 3-ジクロロ- t -ブチル基、1, 2, 3-トリクロロプロピル基、ブロモメチル基、1-ブロモエチル基、2-ブロモエチル基、2-ブロモイソブチル基、1, 2-ジブロモエチル基、1, 3-ジブロモイソプロピル基、2, 3-ジブromo- t -ブチル基、1, 2, 3-トリブロモプロピル基、ヨードメチル基、1-ヨードエチル基、2-ヨードエチル基、2-ヨードイソブチル基、1, 2-ジヨードエチル基、1, 3-ジヨードイソプロピル基、2, 3-ジヨード- t -ブチル基、1, 2, 3-トリヨードプロピル基、アミノメチル基、1-アミノエチル基、2-アミノエチル基、2-アミノイソブチル基、1, 2-ジアミノエチル基、1, 3-ジアミノイソプロピル基、2, 3-ジアミノ- t -ブチル基、1, 2, 3-トリアミノプロピル基、シアノメチル基、1-シアノエチル基、2-シアノエチル基、2-シアノイソブチル基、1, 2-ジシアノエチル基、1, 3-ジシアノイソプロピル基、2, 3-ジシアノ- t -ブチル基、1, 2, 3-トリシアノプロピル基、ニトロメチル基、1-ニトロエチル基、2-ニトロエチル基、2-ニトロイソブチル基、1, 2-ジニトロエチル基、1, 3-ジニトロイソプロピル基、2, 3-ジニトロ- t -ブチル基、1, 2, 3-トリニトロプロピル基等が挙げられる。

これらの中でも、 n -ブチル基、 i -ブチル基、 t -ブチル基、 n -ペンチル基、 n -ヘキシル基、 n -ヘプチル基、 n -オクチル基が好ましい。

【0008】

置換もしくは無置換の炭素数1～18のアルキルオキシ基は、 $-OX$ で表され、 X としては、前記アルキル基と同様のものが挙げられる。それらの中でも、 n -ブトキシ基、 i -ブトキシ基、 t -ブトキシ基、 n -ペンチルオキシ基、 n -ヘキシルオキシ基、 n -ヘプチルオキシ基、 n -オクチルオキシ基であると好ましい。

置換もしくは無置換の炭素数1～18のアルキルチオ基は、 $-SY$ で表され、 Y としては、前記アルキル基と同様のものが挙げられる。それらの中でも、 n -ブチルチオ基、 i -ブチルチオ基、 t -ブチルチオ基、 n -ペンチルチオ基、 n -ヘキシルチオ基、 n -ヘプチルチオ基、 n -オクチルチオ基であると好ましい。

【0009】

一般式(1)において、 R_6 は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～18のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～18のアルキルオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～18のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の炭素数6～12のアリール基又は置換もしくは無置換の炭素数2～8の芳香族複素環基である。なお、 R_6 は、それぞれのチオフエンごとに同一でも異なってもよい。

R_6 の置換もしくは無置換の炭素数1～18のアルキル基としては、 $R_2 \sim R_5$ と同様のものが挙げられるが、それらの中でも、メチル基、エチル基、プロピル基、 n -ブチル基、 i -ブチル基、 t -ブチル基が好ましい。

R_6 の置換もしくは無置換の炭素数1～18のアルキルオキシ基としては、 $R_2 \sim R_5$ と同様のものが挙げられるが、それらの中でも、メトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基、 n -ブトキシ基、 i -ブトキシ基、 t -ブトキシ基が好ましい。

R₆ の置換もしくは無置換の炭素数 1～18 のアルキルチオ基としては、R₂～R₅ と同様のものが挙げられるが、それらの中でも、メチルチオ基、エチルチオ基、プロピルチオ基、n-ブチルチオ基、i-ブチルチオ基、t-ブチルチオ基が好ましい。

R₆ の置換もしくは無置換の炭素数 6～12 のアリール基としては、フェニル基、ナフチル基、ビフェニル基等が挙げられ、これらの中でも、フェニル基が好ましい。

R₆ の置換もしくは無置換の炭素数 2～8 の芳香族複素環基としては、ピロリル基、ピラジニル基、ピリジニル基、インドリル基、フリル基、ベンゾフラニル基、キノリル基、オキサゾリル基、フラザニル基、チエニル基等が挙げられる。

【0010】

一般式 (1) において、R₇ は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1～18 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1～18 のアルキルオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1～18 のアルキルチオ基、あるいはカルボキシ基、メルカプト基、シアノ基、メルカプトフェニル基、イソニトリル基、アミノ基、シラノール基又は上記式 (2) で表される基からなる官能基であり、水素元素であると好ましい。

R₇ の置換もしくは無置換の炭素数 1～18 のアルキル基としては、R₂～R₅ と同様のものが挙げられるが、それらの中でも、n-ブチル基、i-ブチル基、t-ブチル基、n-ペンチル基、n-ヘキシル基、n-ヘプチル基、n-オクチル基が好ましい。

R₇ の置換もしくは無置換の炭素数 1～18 のアルキルオキシ基としては、R₂～R₅ と同様のものが挙げられるが、それらの中でも、n-ブトキシ基、i-ブトキシ基、t-ブトキシ基、n-ペンチルオキシ基、n-ヘキシルオキシ基、n-ヘプチルオキシ基、n-オクチルオキシ基であると好ましい。

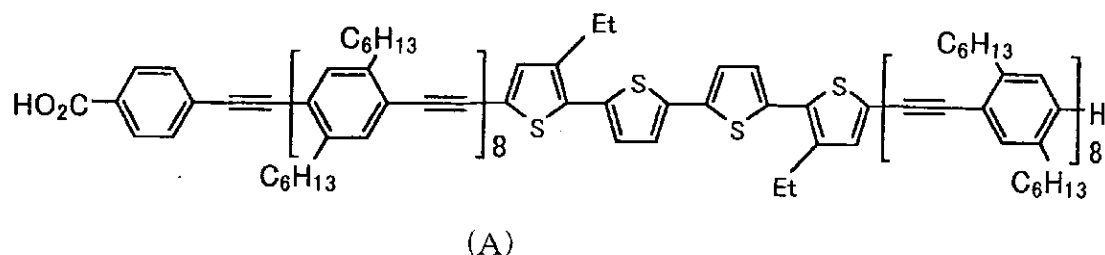
R₇ の置換もしくは無置換の炭素数 1～18 のアルキルチオ基としては、R₂～R₅ と同様のものが挙げられるが、それらの中でも、n-ブチルチオ基、i-ブチルチオ基、t-ブチルチオ基、n-ペンチルチオ基、n-ヘキシルチオ基、n-ヘプチルチオ基、n-オクチルチオ基であると好ましい。

【0011】

前記一般式 (1) における、各置換基としては、ハロゲン原子、ヒドロキシ基、置換もしくは無置換アミノ基、ニトロ基、シアノ基、置換もしくは無置換のアルキル基、置換もしくは無置換のアルケニル基、置換もしくは無置換のシクロアルキル基、置換もしくは無置換のアルコキシ基、置換もしくは無置換の芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の芳香族複素環基、置換もしくは無置換のアラルキル基、置換もしくは無置換のアリールオキシ基、置換もしくは無置換のアルコキシカルボニル基、カルボキシ基等が挙げられる。一般式 (1) において、p 及び q は、それぞれ独立に、4～16 の整数であり 6～12 であると好ましい。また、r は、2～16 の整数であり 2～12 であると好ましく、4～8 であるとさらに好ましい。

本発明の一般式 (1) で表される新規化合物は、上記したような、各基の例示及び p、q、r の中でも、特に、以下の組み合わせを有する構造の化合物 (A) が好ましい。なお、式中、Et は、エチル基である。

【化 7】



【0012】

本発明の新規化合物は、一分子内に正孔輸送ワイヤー、発光部、電子輸送ワイヤーを有する単分子型の有機 EL 素子用材料であり、それを利用した概念図は図 1 のように表される

10

20

30

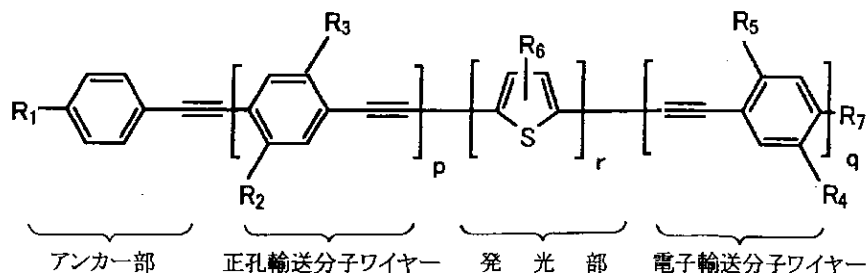
40

50

。

図1に示したように、Anode（陽極）とCathode（陰極）との間に、本発明の単分子型の有機EL素子用材料からなる層を設けて用いる。また、図1に示す単分子型の有機EL素子用材料に対応する本発明の一般式（1）の化合物の各部を対応させて示すと以下のようになる。

【化8】



10

【0013】

以上に示す本発明の化合物を利用した有機EL素子において、その発光は、両電極間に電界が印加されると、陰極側から電子輸送ワイヤーを介して電子が注入され、陽極側から正孔輸送ワイヤーを介して正孔が注入され、電子が発光部において正孔と再結合し、励起状態を生成し、励起状態が基底状態に戻る際にエネルギーを光として放出する。また、アンカー部（図1中では接合部）は、官能基であるR₁が、電極と結合することにより、本発明の化合物を電極に固定するために機能する。

20

したがって、本発明の有機EL素子用材料を利用した有機EL素子は、正孔注入・輸送層や電子注入・輸送層を設けることなく、電子及び正孔が輸送されるため、従来のような多層構造の有機EL素子の電子及び正孔輸送時のエネルギーロスが極めて少なく、従来型の多層構造の有機EL素子に比べ、極めて高い発光効率を得られる。また、多層構造とする必要がないため、製造工程を簡略化でき、低価格で有機EL素子を製造することが可能である。また、発光部におけるrの数を調整することで種々の発光色を得ることができる。また、本発明の有機EL素子用材料は、1つの分子のみで素子を構成することができるため、将来的には分子コンピューター内部のナノデバイスに組み込む光電変換や光スイッチとして応用することも可能である。

30

【0014】

本発明の有機EL素子用材料を用いた有機EL素子の構造は、図1に示したように、陽極と陰極との間に、本発明の単分子型の有機EL素子用材料からなる層を設ければよい。

本発明の有機EL素子用材料を用いて層を形成する場合には、真空蒸着、スパッタリング、プラズマ、イオンプレーティング等の乾式成膜法やスピンコーティング、ディッピング、フローコーティング等の湿式成膜法のいずれの方法を適用することができる。各層の膜厚は特に限定されるものではないが、適切な膜厚に設定する必要がある。膜厚が厚すぎると、一定の光出力を得るために大きな印加電圧が必要になり発光効率が悪くなることがある。膜厚が薄すぎるとピンホール等が発生して、電界を印加しても十分な発光輝度が得られないことがある。通常の膜厚は、図1に記載したように、10～20nmである。

40

【0015】

有機EL素子の陽極に使用される導電性材料としては、4eVより大きな仕事関数を持つものが適しており、炭素、アルミニウム、バナジウム、鉄、コバルト、ニッケル、タンゲステン、銀、金、白金、パラジウム等及びそれらの合金、ITO基板、NESEA基板に使用される酸化スズ、酸化インジウム等の酸化金属、さらにはポリチオフェンやポリピロール等の有機導電性樹脂が用いられる。陰極に使用される導電性物質としては、4eVより小さな仕事関数を持つものが適しており、マグネシウム、カルシウム、錫、鉛、チタニウム、イットリウム、リチウム、ルテニウム、マンガン、アルミニウム等及びそれらの合金が用いられるが、これらに限定されるものではない。合金としては、マグネシウム／銀、マグネシウム／インジウム、リチウム／アルミニウム等が代表例として挙げられるが、こ

50

れらに限定されるものではない。合金の比率は、蒸着源の温度、雰囲気、真空度等により制御され、適切な比率に選択される。陽極及び陰極は、必要があれば二層以上の層構成により形成されていてもよい。

【0016】

有機EL素子は、効率良く発光させるために、少なくとも一方の面は素子の発光波長領域において充分透明にすることが望ましい。また、基板も透明であることが望ましい。

透明電極は、上記の導電性材料を使用して、蒸着やスパッタリング等の方法で所定の透光性が確保するように設定する。発光面の電極は、光透過率を10%以上にすることが望ましい。基板は、機械的、熱的強度を有し、透明性を有するものであれば限定されるものではないが、ガラス基板及び透明性樹脂フィルムが挙げられる。透明性樹脂フィルムとしては、ポリエチレン、エチレン-酢酸ビニル共重合体、エチレン-ビニルアルコール共重合体、ポリプロピレン、ポリスチレン、ポリメチルメタアクリレート、ポリ塩化ビニル、ポリビニルアルコール、ポリビニルブチラール、ナイロン、ポリエーテルエーテルケトン、ポリサルホン、ポリエーテルサルフォン、テトラフルオロエチレン-パーフルオロアルキルビニルエーテル共重合体、ポリビニルフルオライド、テトラフルオロエチレン-エチレン共重合体、テトラフルオロエチレン-ヘキサフルオロプロピレン共重合体、ポリクロロトリフルオロエチレン、ポリビニリデンフルオライド、ポリエステル、ポリカーボネート、ポリウレタン、ポリイミド、ポリエーテルイミド、ポリイミド、ポリプロピレン等が挙げられる。

10

【0017】

20

【実施例】

次に、実施例を用いて本発明をさらに詳しく説明するが、本発明は実施例に限定されるものではない。

実施例1

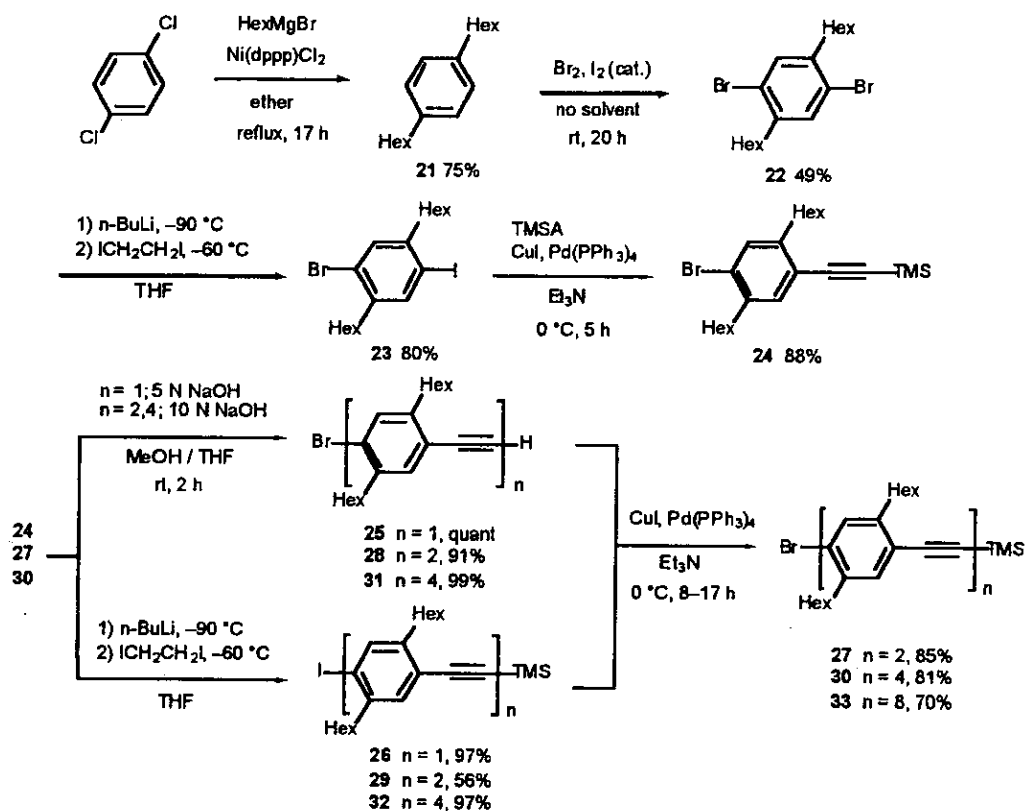
上記例示化合物(A) (α -(4-カルボキシフェニル)エチニル- ω -(4',','-オクタキス[1,4-(2,5-ジ-*n*-ヘキシル)フェニレン]エチニレン-3,2',','-ジエチル-4,2':5',2':5'',2',','-クォーターチオフェニル)-オクタキス[1,4-(2,5-ジ-*n*-ヘキシル)フェニレン]エチニレン)を下記スキーム(I)~(IV)の合成経路にて製造した。なお、以下に記載の化合物の番号は、スキーム中の番号に対応している。

30

【0018】

スキーム(I)：フェニレンエチレンオリゴマーの合成(1)

【化9】



10

20

【0019】

(I-1) p-ジ-*n*-ヘキシルベンゼン (p-Di-n-hexylbenzene) : 化合物 21 の合成

反応容器にマグネシウム (3.2 g, 0.132 mol) を入れ、反応容器を乾燥し、窒素雰囲気下とし、エーテル (10 ml) を加えた。臭化ヘキシル (19.8 g, 23.2 ml, 0.12 mol) をエーテル (30 ml) に溶解したものを還流が続くように滴下した。滴下終了後、室温で3時間還流させグリニャー試薬を生成した。乾燥窒素気流下の反応容器に1,4-ジクロロベンゼン (7.0 g, 0.048 mol)、エーテル (36 ml)、Ni(dppp)Cl₂ (30 mg, 0.054 mmol) を入れ (dppp はジフェニルホスフィノプロパン配位子)、氷浴で0℃にしてから、グリニャー試薬を滴下した。滴下終了後、氷浴をはずし室温で30分攪拌してから22時間還流させた。還流後、温度を0℃にして水 (30 ml) を徐々に入れた。セライトろ過し、分液漏斗で有機層を取り、水層をエーテル (50 ml × 2) で抽出して有機層に加えた。水 (30 ml × 2) で洗浄した後、硫酸マグネシウムで乾燥させ、溶媒を留去し、カラムクロマトグラフィー (シリカゲル、ヘキサン、R_f = 0.85) で精製した。無色のオイル 8.85 g (収率 75%) を得た。得られた物質は、以下のNMR測定データにより、p-ジ-ヘキシルベンゼン：化合物 21 と同定された。

30

40

¹H NMR (395.75 MHz, CDCl₃) δ 7.08 (s, 4H), 2.56 (t, 4H), 1.59 (m, 4H), 1.30 (m, 12H), 0.88 (t, 6H).

【0020】

(I-2) 1,4-ジブromo-2,5-ジ-*n*-ヘキシルベンゼン (1,4-Dibromo-2,5-di-n-hexylbenzene) : 化合物 22 の合成

反応容器に化合物 21 (8.85 g, 0.036 mol) を入れ遮光し、氷浴につけた後、ヨウ素 (0.133 g, 1.07 mmol) を加えた。攪拌しながら、3時間で臭素 (14.3 g, 4.50 ml, 0.090 mol) を滴下した。滴下終了後、室温で21時間攪拌した。20%の水酸化カリウム水溶液 (27 ml)

50

1)を加え、温めながら色が消えるまで攪拌した。室温に戻し、分液漏斗で有機層を取り、水層を塩化メチレン (30 ml×2)で抽出し、有機層に加えた。溶媒を留去し、カラムクロマトグラフィー (シリカゲル、ヘキサン、 $R_f = 0.93$)を行ってから再結晶 (エタノール)を行い、無色の板状晶 7.1 g (収率 49%)を得た。得られた物質は、以下のNMR測定データにより、1, 4-ジブromo-2, 5-ジ-n-ヘキシルベンゼン：化合物 22と同定され、その融点は、38℃であった。

^1H NMR (395.75 MHz, CDCl_3) δ 7.39 (s, 2H), 2.63 (t, 4H), 1.57 (m, 4H), 1.33 (m, 12H), 0.89 (t, 6H).

【0021】

(I-3) 1-ブromo-2, 5-ジ-n-ヘキシル-4-ヨードベンゼン (1-Bromo-2, 5-di-n-hexyl-4-iodobenzene)：化合物 23の合成

窒素雰囲気下で、反応容器に化合物 22 (10.0 g, 24.7 mmol)とテトラヒドロフラン (THF) (99 ml)を入れ、-90℃まで冷却した。n-ブチルリチウム (16.3 ml, 24.7 mmol, 1.52 Mヘキサン溶液)を-80℃を超えないように滴下し、滴下後-60℃まで放置して、-60℃に冷却した1, 2-ジヨードエタン (7.4 g, 26.2 mmol)のTHF (49.5 ml)溶液をキャヌラを用いて加えた。その後、冷浴を取り外し、30分間攪拌した。このとき溶液の色は濃い茶色になった。薄い黄色になるまで飽和亜硫酸水素ナトリウム水溶液を加えた。その後、分液漏斗で有機層を取り、水層をエーテル (60 ml×2)で抽出し、有機層に加えた。硫酸マグネシウムで乾燥し、溶媒を留去してからエタノールで再結晶を行い、無色の針状晶 8.9 g (収率 80%)を得た。得られた物質は、以下のマスペクトル (MS) 及びNMR測定データにより、1-ブromo-2, 5-ジ-n-ヘキシル-4-ヨードベンゼン：化合物 23と同定され、その融点は、37~38℃であった。

MS m/z 450 (M^+)

^1H NMR (395.75 MHz, CDCl_3) δ 7.62 (s, 1H), 7.33 (s, 1H), 2.61 (t, 4H, $J = 7.7$ Hz), 1.56 (m, 4H), 1.33 (m, 12H), 0.90 (m, 6H)

【0022】

(I-4) 1-ブromo-2, 5-ジ-n-ヘキシル-4-(トリメチルシリル)エチニルベンゼン (1-Bromo-2, 5-di-n-hexyl-4-(trimethylsilyl)ethynylbenzene)：化合物 24の合成

乾燥した反応容器に化合物 23 (10.5 g, 23.27 mmol)とトリエチルアミン (29 ml)を入れ、脱気した後、氷浴で0℃まで温度を下げた。TMSアセチレン (2.40 g, 3.47 ml, 24.4 mmol)を加え、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム (0.16 g, 0.23 mmol)とヨウ化銅 (0.12 g, 0.46 mmol)を加え、室温で5時間攪拌した。水を加え、分液漏斗で有機層を取り、水層をエーテル (50 ml×2)で抽出し、有機層に加えた。飽和塩化アンモニウム水溶液 (50 ml×2)で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥した後、溶媒を留去し、カラムクロマトグラフィー (シリカゲル、ヘキサン、 $R_f = 0.7$)で精製して薄い黄色のオイル 8.61 g (収率 88%)を得た。得られた物質は、以下のNMR測定データにより、1-ブromo-2, 5-ジ-n-ヘキシル-4-(トリメチルシリル)エチニルベンゼン：化合物 24と同定された。

^1H NMR (395.75 MHz, CDCl_3) δ 7.33 (s, 1H), 7.26 (s, 1H), 2.68 (t, 2H, $J = 7.7$ Hz), 2.63 (t, 2H, $J = 8.0$ Hz), 1.56 (m, 4H), 1.32 (s, 12H), 0.89 (t, 6H, $J = 7$ Hz), 0

. 25 (s, 9H).

【0023】

(I-5) 1-ブロモ-4-エチニル-2, 5-ジ-*n*-ヘキシルベンゼン (1-Br-om o-4-eth y n y l-2, 5-d i-n-h e x y l b e n z e n e) : 化合物 25 の合成

反応容器に化合物 24 (7.4 g, 17.5 mmol) とメタノール (97.8 ml)、THF (73 ml) を入れ、5Nの水酸化ナトリウム水溶液 (3.9 ml) を加えた後、室温で2時間攪拌した。水 (100 ml) を加え、分液漏斗を用いて有機層を取り、水層をエーテル (100 ml) で抽出し、有機層に加えた。硫酸マグネシウムで乾燥させた後、溶媒を留去し、橙色のオイル 6.09 g (収率は定量的 (quant) であった) を得た。この物質は組成生物のまま次の反応へ用いた。また、得られた物質は、以下のNMR測定データにより、1-ブロモ-4-エチニル-2, 5-ジ-*n*-ヘキシルベンゼン : 化合物 25 と同定された。

¹H NMR (395.75 MHz, CDCl₃) δ 7.36 (s, 1H), 7.29 (s, 1H), 3.24 (s, 1H), 2.70 (t, 2H, J = 7.7 Hz), 2.64 (t, 2H, J = 7.8 Hz), 1.58 (m, 4H), 1.32 (m, 12H), 0.89 (m, 6H).

【0024】

(I-6) 2, 5-ジ-*n*-ヘキシル-1-ヨード-4-(トリメチルシリル)エチニルベンゼン (2, 5-D i-n-h e x y l-1-i o d o-4-(t r i m e t h y l s i l y l) e t h y n y l b e n z e n e) : 化合物 26 の合成

乾燥窒素雰囲気下で反応容器に化合物 24 (7.3 g, 17.3 mmol) と THF (96 ml) を加え、反応容器を-90℃まで冷却した。*n*-ブチルリチウム (12.3 ml, 18.7 mmol, 1.50Mヘキサン溶液) を-80℃を超えないように滴下し、滴下後-60℃まで放置し、-60℃に冷却した1, 2-ジヨードエタン (5.27 g, 18.7 mmol) のTHF (46.8 ml) 溶液をキャヌラを用いて加えた。その後、冷浴を取り外し、30分間攪拌した。このとき溶液の色は濃い茶色になった。薄い黄色になるまで飽和亜硫酸水素ナトリウム水溶液を加えた。その後、分液漏斗で有機層を取り、水層をエーテル (100 ml×2) で抽出し、有機層に加えた。硫酸マグネシウムで乾燥し、溶媒を留去してからカラムクロマトグラフィー (シリカゲル、ヘキサン、Rf = 0.65) で精製し、黄色のオイル 7.87 g (収率97%) を得た。得られた物質は、以下のNMR測定データにより、2, 5-ジ-*n*-ヘキシル-1-ヨード-4-(トリメチルシリル)エチニルベンゼン : 化合物 26 と同定された。

¹H NMR (395.75 MHz, CDCl₃) δ 7.62 (s, 1H), 7.22 (s, 1H), 2.65 (t, 2H, J = 7.7 Hz), 2.61 (t, 2H, J = 8.0 Hz), 1.55 (m, 4H), 1.32 (m, 12H), 0.89 (t, 6H), 0.25 (s, 9H).

【0025】

(I-7) α-ブロモ-ω-トリメチルシリル-ビス [1, 4-(2, 5-ジ-*n*-ヘキシル)フェニレン] エチニレン (α-Br o m o-ω-t r i m e t h y l s i l y l-b i s [1, 4-(2, 5-d i-n-h e x y l) p h e n y l e n e] e t h y n y l e n e) : 化合物 27 の合成

乾燥した反応容器に化合物 26 (7.87 g, 16.8 mmol) と化合物 25 (6.09 g, 17.4 mmol) とトリエチルアミン (22 ml) を入れ、脱気した後、氷浴で0℃まで温度を下げた。テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム (0.12 g, 0.174 mmol) とヨウ化銅 (0.09 g, 0.384 mmol) を加え、室温で7時間攪拌した。水 (30 ml) を加え、分液

10

20

30

40

50

漏斗で有機層を取り、水層をエーテル (30 ml×2) で抽出し、有機層に加えた。飽和塩化アンモニウム水溶液 (30 ml×2) で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥した後、溶媒を留去し、カラムクロマトグラフィー (シリカゲル、ヘキサン、R_f = 0.5) で精製して黄色のオイル 9.85 g (収率 85%) を得た。得られた物質は、以下の NMR 測定データにより、 α -ブromo- ω -トリメチルシリル-ビス [1, 4-(2, 5-ジ-*n*-ヘキシル) フェニレン] エチニレン：化合物 27 と同定された。

¹H NMR (395.75 MHz, CDCl₃) δ 7.39 (s, 1H), 7.31 (s, 1H), 7.29 (s, 2H), 2.65–2.79 (m, 8H), 1.64 (m, 8H), 1.31 (m, 24H), 0.87 (m, 12H), 0.26 (s, 9H).

10

【0026】

(I-8) α -ブromo-ビス [1, 4-(2, 5-ジ-*n*-ヘキシルフェニレン)] エチニレン (α -Bromo-bis [1, 4-(2, 5-di-*n*-hexylphenylene)] ethynylene)：化合物 28 の合成反応容器に化合物 27 (2.07 g, 4.32 mmol) とメタノール (21.3 ml)、THF (32 ml) を入れ、10N の水酸化ナトリウム水溶液 (0.79 ml) を加えた後、室温で 2 時間攪拌した。水 (50 ml) を加え、分液漏斗を用いて有機層を取り、水層をエーテル (40 ml×2) で抽出し、有機層に加えた。硫酸マグネシウムで乾燥させた後、溶媒を留去し黄色の固体 2.44 g (収率 91%) を得た。この物質は組成生物のまま次の反応へ用いた。また、得られた物質は、以下の NMR 測定データにより、 α -ブromo-ビス [1, 4-(2, 5-ジ-*n*-ヘキシルフェニレン)] エチニレン：化合物 28 と同定された。

20

¹H NMR (395.75 MHz, CDCl₃) δ 7.39 (s, 1H), 7.32 (s, 1H), 7.32 (s, 1H), 7.32 (s, 1H), 3.30 (s, 1H), 2.76 (m, 6H), 2.67 (t, 2H, J = 8.0 Hz), 1.64 (m, 8H), 1.33 (m, 24H), 0.88 (m, 12H).

【0027】

(I-9) α -ヨード- ω -トリメチルシリル-ビス [1, 4-(2, 5-ジ-*n*-ヘキシル) フェニレン] エチニレン (α -Iodo- ω -trimethylsilyl-bis [1, 4-(2, 5-di-*n*-hexyl) phenylene] ethynylene)：化合物 29 の合成

30

乾燥窒素気流下で反応容器に化合物 27 (5.03 g, 7.29 mmol) と THF (77 ml) を加え、反応容器を -90℃ まで冷却した。*n*-ブチルリチウム (5.08 ml, 7.72 mmol, 1.52N ヘキサン溶液) を -80℃ を超えないように滴下し、滴下後 -60℃ まで放置し、-60℃ に冷却した 1, 2-ジヨードエタン (2.18 g, 7.72 mmol) の THF (39 ml) 溶液をキャスラを用いて加えた。その後、冷浴を取り外し、30 分間攪拌した。このとき溶液の色は濃い茶色になった。薄い黄色になるまで飽和亜硫酸水素ナトリウム水溶液を加えた。その後、分液漏斗で有機層を取り、水層をエーテル (60 ml×2) で抽出し、有機層に加えた。硫酸マグネシウムで乾燥し、溶媒を留去してからカラムクロマトグラフィー (シリカゲル、ヘキサン、R_f = 0.45) で精製を行い、黄色のオイル 3.02 g (収率 56%) を得た。得られた物質は、以下の NMR 測定データにより、 α -ヨード- ω -トリメチルシリル-ビス [1, 4-(2, 5-ジ-*n*-ヘキシル) フェニレン] エチニレン：化合物 29 と同定された。

40

¹H NMR (395.75 MHz, CDCl₃) δ 7.67 (s, 1H), 7.29 (s, 2H), 7.28 (s, 1H), 2.72 (m, 6H), 2.65 (t, 2H, J = 7.7 Hz), 1.63 (m, 8H), 1.32 (m, 24H), 0.88 (m, 12H), 0.26 (s, 9H).

50

【0028】

(I-10) α -ブロモ- ω -トリメチルシリル-テトラキス[1, 4-(2, 5-ジ-*n*-ヘキシル)フェニレン]エチニレン (α -Bromo- ω -trimethylsilyl-tetrakis[1, 4-(2, 5-din-hexyl)phenylene]ethynylene) : 化合物30の合成

乾燥した反応容器に化合物29 (3.02 g, 4.09 mmol) と化合物28 (2.44 g, 3.95 mmol) とトリエチルアミン (17.5 ml) を入れ、脱気した後、氷浴で0℃まで温度を下げた。テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム (0.03 g, 0.041 mmol) とヨウ化銅 (0.02 g, 0.079 mmol) を加え、室温で13時間攪拌した。水 (20 ml) を加え、分液漏斗で有機層を取り、水層をエーテル (20 ml $\times$ 2) で抽出し、有機層に加えた。飽和塩化アンモニウム水溶液 (20 ml $\times$ 2) で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥した後、溶媒を留去し、カラムクロマトグラフィー (シリカゲル、ヘキサン、Rf = 0.35) で精製して薄い黄緑の固体3.93 g (収率81%) を得た。得られた物質は、以下のNMR測定データにより、 α -ブロモ- ω -トリメチルシリル-テトラキス[1, 4-(2, 5-ジ-*n*-ヘキシル)フェニレン]エチニレン : 化合物30と同定され、その融点は、77.0~77.5℃であった。

^1H NMR (395.75 MHz, CDCl_3) δ 7.40 (s, 1H), 7.36 (s, 2H), 7.36 (s, 2H), 7.34 (s, 1H), 7.31 (s, 1H), 7.30 (s, 1H), 2.82 (m, 14H), 2.70 (m, 2H), 1.72 (m, 16H), 1.33 (m, 48H), 0.89 (m, 24H), 0.27 (s, 9H).

【0029】

(I-11) α -ブロモ-テトラキス[1, 4-(2, 5-ジ-*n*-ヘキシル)フェニレン]エチニレン (α -Bromo-tetrakis[1, 4-(2, 5-din-hexyl)phenylene]ethynylene) 31の合成

反応容器に化合物30 (1.62 g, 1.32 mmol) とメタノール (12.2 ml)、THF (20.4 ml) を入れ、10Nの水酸化ナトリウム水溶液 (0.24 ml) を加えた後、室温で2時間攪拌した。水 (20 ml) を加え、分液漏斗を用いて有機層を取り、水層をエーテル (30 ml $\times$ 2) で抽出し、有機層に加えた。硫酸マグネシウムで乾燥させた後、溶媒を留去し薄い黄緑色の固体1.51 g (収率99%) を得た。この物質は組成生物のまま次の反応へ用いた。また、得られた物質は、以下のNMR測定データにより、 α -ブロモ-テトラキス[1, 4-(2, 5-ジ-*n*-ヘキシル)フェニレン]エチニレン : 化合物31と同定された。

^1H NMR (395.75 MHz, CDCl_3) δ 7.40 (s, 1H), 7.37 (s, 3H), 7.36 (s, 1H), 7.34 (s, 3H), 3.30 (s, 1H), 2.82 (m, 14H), 2.68 (t, 2H, J = 8.0 Hz), 1.67 (m, 16H), 1.32-1.41 (m, 48H), 0.87 (m, 24H).

【0030】

(I-12) α -ヨード- ω -トリメチルシリル-テトラキス[1, 4-(2, 5-ジ-*n*-ヘキシル)フェニレン]エチニレン (α -Iodo- ω -trimethylsilyl-tetrakis[1, 4-(2, 5-din-hexyl)phenylene]ethynylene) : 化合物32の合成

窒素雰囲気下で反応容器に化合物30 (2.28 g, 1.86 mmol) とTHF (91.2 ml) を加え、反応容器を-90℃まで冷却した。*n*-ブチルリチウム (1.46 ml, 2.28 mmol, 1.56Mヘキサン溶液) を-80℃を超えないように滴下し、滴下後-60℃まで放置し、-60℃に冷却した1, 2-ジヨードエタン (0.643 g, 2.28 mmol) のTHF (22.8 ml) 溶液をキャヌラを用いて加えた。その後、冷浴を取り外し、30分間攪拌した。このとき溶

液の色は濃い茶色になった。薄い黄色になるまで飽和亜硫酸水素ナトリウム水溶液を加えた。その後、分液漏斗で有機層を取り、水層をエーテル（50 ml×3）で抽出し、有機層に加えた。硫酸マグネシウムで乾燥し、溶媒を留去してからカラムクロマトグラフィー（シリカゲル、ヘキサン、 $R_f = 0.28$ ）で精製を行い、薄い黄緑色の固体2.31 g（収率97%）を得た。得られた物質は、以下のNMR測定データにより、 α -ヨード- ω -トリメチルシリル-テトラキス[1,4-(2,5-ジ-*n*-ヘキシル)フェニレン]エチニレン：化合物32と同定され、その融点は、82～85℃であった。

^1H NMR（395.75 MHz, CDCl_3 ） δ 7.68（s, 1H）, 7.36（s, 2H）, 7.35（s, 2H）, 7.31（s, 1H）, 7.31（s, 1H）, 7.30（s, 1H）, 2.68–2.84（m, 14H）, 2.64（t, 2H, $J = 8.2$ Hz）, 1.70（m, 16H）, 1.33（m, 48H）, 0.88（m, 24H）, 0.27（s, 9H）.

【0031】

（I-13） α -ブromo- ω -トリメチルシリル-オクタキス[1,4-(2,5-ジ-*n*-ヘキシル)フェニレン]エチニレン（ α -Bromo- ω -trimethylsilyl-octakis[1,4-(2,5-din-hexyl)phenylene]ethynylene）：化合物33の合成

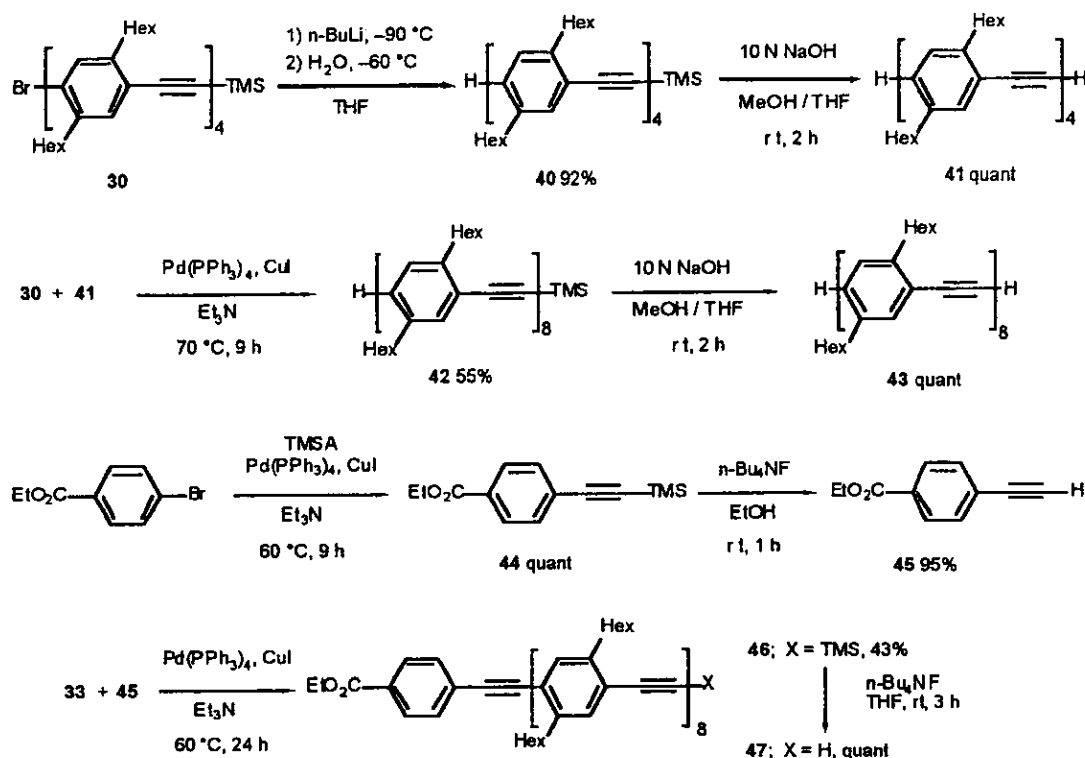
反応容器に化合物32（2.20 g, 1.72 mmol）と化合物31（1.51 g, 1.31 mmol）とトリエチルアミン（47 ml）とTHF（23.5 ml）を入れ、脱気した後、氷浴で0℃まで温度を下げた。テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（0.021 g, 0.017 mmol）とヨウ化銅（0.005 g, 0.026 mmol）を加え、室温で17時間攪拌した。水（100 ml）を加え、分液漏斗で有機層を取り、水層をクロロホルム（80 ml×3）で抽出し、有機層に加えた。飽和塩化アンモニウム水溶液（80 ml×2）で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥した後、溶媒を留去し、カラムクロマトグラフィー（シリカゲル、ヘキサン、 $R_f = 0.10$ ）で分取した後、液体クロマトグラフィー（JAIGEL 1H, 2H）で溶媒をクロロホルム、保持容量（リテンションボリューム：Rv）= 150 mlで精製して薄い黄緑色の固体2.12 g（収率70%）を得た。得られた物質は、以下のNMR測定データにより、 α -ブromo- ω -トリメチルシリル-オクタキス[1,4-(2,5-ジ-*n*-ヘキシル)フェニレン]エチニレン：化合物33と同定され、その融点は、144～150℃であった。

^1H NMR（395.75 MHz, CDCl_3 ） δ 7.40（s, 1H）, 7.38（s, 8H）, 7.37（s, 2H）, 7.36（s, 2H）, 7.34（s, 1H）, 7.32（s, 1H）, 7.31（s, 1H）, 2.83（m, 30H）, 2.68（m, 2H）, 1.72（m, 32H）, 1.33–1.42（m, 96H）, 0.88（m, 48H）, 0.27（s, 9H）.

【0032】

スキーム（II）：フェニレンエチレンオリゴマーの合成（2）

【化10】



10

20

【0033】

(II-1) ω -トリメチルシリル-テトラキス[1,4-(2,5-ジ- n -ヘキシル)フェニレン]エチニレン (ω -trimethylsilyl-tetrakis[1,4-(2,5-di- n -hexyl)phenylene]ethynylene) : 化合物40の合成

乾燥窒素雰囲気下で反応容器に化合物30 (700 mg, 0.57 mmol) と THF (28 ml) を加え、反応容器を -90°C まで冷却した。 n -ブチルリチウム (0.44 ml, 0.7 mmol, 1.59 M ヘキサン溶液) を -80°C を超えないように滴下し、滴下後 -60°C まで放置し、 -60°C に冷却した蒸留水 (100 mg, 0.1 ml, 5.6 mmol) の THF (10 ml) 溶液をキャスラを用いて加えた。その後、冷浴を取り外し、30分間攪拌した。水を加えた後、分液漏斗で有機層を取り、水層をクロロホルム (30 ml $\times$ 3) で抽出し、有機層に加えた。硫酸マグネシウムで乾燥し、溶媒を留去してからカラムクロマトグラフィー (シリカゲル、ヘキサン、 $R_f = 0.28$) で精製して、薄い黄緑色の固体 604 mg (収率 92%) を得た。得られた物質は、以下の NMR 測定データにより、 ω -トリメチルシリル-テトラキス[1,4-(2,5-ジ- n -ヘキシル)フェニレン]エチニレン : 化合物40 と同定された。

30

^1H NMR (395.75 MHz, CDCl_3) δ 7.36 (s, 3H), 7.34 (d, 1H), 7.34 (s, 1H), 7.14 (d, 1H), 7.08 (dd, 1H), 2.82 (m, 12H), 2.72 (t, 2H), 2.57 (t, 2H), 1.69 (m, 16H), 1.38 (m, 16H), 1.31 (m, 32H), 0.87 (m, 24H), 0.27 (s, 9H).

40

【0034】

(II-2) テトラキス[1,4-(2,5-ジ- n -ヘキシル)フェニレン]エチニレン (tetrakis[1,4-(2,5-di- n -hexyl)phenylene]ethynylene) : 化合物41の合成

反応容器に化合物40 (600 mg, 0.52 mmol) とメタノール (4.

50

8 ml)、THF (8.1 ml)を入れ、10Nの水酸化ナトリウム水溶液 (0.01 ml)を加えた後、室温で2時間攪拌した。水 (10 ml)を加え、分液漏斗を用いて有機層を取り、水層をクロロホルム (10 ml×2)で抽出し、有機層に加えた。硫酸マグネシウムで乾燥させた後、溶媒を留去し薄い黄緑色の固体オイル560 mg (収率は定量的 (quant)であった)を得た。この物質は組成生物のまま次の反応へ用いた。また、得られた物質は、以下のNMR測定データにより、テトラキス [1, 4-(2, 5-ジ-*n*-ヘキシル)フェニレン]エチニレン：化合物41と同定された。

¹H NMR (395.75 MHz, CDCl₃) δ 7.37 (s, 3H), 7.34 (s, 3H), 7.35 (d, 1H), 7.14 (d, 1H), 7.08 (dd, 1H), 3.30 (s, 1H), 2.83 (m, 12H), 2.75 (t, 2H), 2.57 (t, 2H), 1.69 (m, 16H), 1.38 (m, 16H), 1.31 (m, 32H), 0.87 (m, 24H).

【0035】

(II-3) ω-トリメチルシリル-オクタキス [1, 4-(2, 5-ジ-*n*-ヘキシル)フェニレン]エチニレン (ω-trimethylsilyl-octakis [1, 4-(2, 5-di-*n*-hexyl)phenylene]ethynylene)：化合物42の合成

乾燥した反応容器に化合物30 (710 mg, 0.58 mmol)と化合物41 (623 mg, 0.58 mmol)とトリエチルアミン (30 ml)を入れ、脱気した後、60℃に加熱した。テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム (6.7 mg, 0.0058 mmol)とヨウ化銅 (0.6 mg, 0.012 mmol)を加え、室温で15時間攪拌した。水 (20 ml)を加え、分液漏斗で有機層を取り、水層をクロロホルム (30 ml×3)で抽出し、有機層に加えた。飽和塩化アンモニウム水溶液 (20 ml×2)で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥した後、溶媒を留去し、カラムクロマトグラフィー(シリカゲル、ヘキサン：塩化メチレン = 9：1、Rf = 0.4)で精製して黄緑色の固体704 mg (収率55%)を得た。得られた物質は、以下のNMR測定データにより、ω-トリメチルシリル-オクタキス [1, 4-(2, 5-ジ-*n*-ヘキシル)フェニレン]エチニレン：化合物42と同定された。

¹H NMR (395.75 MHz, CDCl₃) δ 7.37 (m, 15H), 7.14 (d, 1H), 7.07 (dd, 1H), 2.83 (m, 28H), 2.57 (t, 4H), 1.69 (m, 32H), 1.38 (m, 32H), 1.31 (m, 64H), 0.87 (m, 48H), 0.27 (s, 9H).

【0036】

(II-4) オクタキス [1, 4-(2, 5-ジ-*n*-ヘキシル)フェニレン]エチニレン (octakis [1, 4-(2, 5-di-*n*-hexyl)phenylene]ethynylene)：化合物43の合成

反応容器に化合物42 (200 mg, 0.090 mmol)とメタノール (3.2 ml)、THF (20 ml)を入れ、10Nの水酸化ナトリウム水溶液 (0.032 ml)を加えた後、室温で2時間攪拌した。水 (20 ml)を加え、分液漏斗を用いて有機層を取り、水層をクロロホルム (20 ml×2)で抽出し、有機層に加えた。硫酸マグネシウムで乾燥させた後、溶媒を留去し黄緑色の固体194 mg (収率は定量的 (quant)であった)を得た。この物質は組成生物のまま次の反応へ用いた。また、得られた物質は、以下のNMR測定データにより、オクタキス [1, 4-(2, 5-ジ-*n*-ヘキシル)フェニレン]エチニレン：化合物43と同定された。

¹H NMR (395.75 MHz, CDCl₃) δ 7.37 (m, 15H), 7.14 (d, 1H), 7.07 (dd, 1H), 3.30 (s, 1

10

20

30

40

50

H), 2.83 (m, 28H), 2.57 (t, 4H), 1.69 (m, 32H), 1.38 (m, 32H), 1.31 (m, 64H), 0.87 (m, 48H).

【0037】

(II-5) 4-(トリメチルシリル)エチニル安息香酸エチルエステル (4-(trimethylsilyl)ethynylbenzoic acid ethyl ester): 化合物44の合成

乾燥した反応容器にp-ブromo安息香酸エチルエステル (4.58 g, 20 mmol) とトリエチルアミン (25 ml) を入れ、脱気した後、60℃まで加熱した。トリメチルシリルアセチレン (TMSA) (2.07 g, 3.00 ml, 21.1 mmol) を加え、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム (243 mg, 0.211 mmol) とヨウ化銅 (80 mg, 0.422 mmol) を加え、7時間攪拌した。水を加え、分液漏斗で有機層を取り、水層をクロロホルム (20 ml × 2) で抽出し、有機層に加えた。飽和塩化アンモニウム水溶液 (20 ml × 2) で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥した後、溶媒を留去し、カラムクロマトグラフィー (シリカゲル、ヘキサン: 塩化メチレン = 2:1, Rf = 0.3) で精製して薄い橙色のオイル 5.34 g (収率は定量的 (quant) であった) を得た。得られた物質は、以下のNMR測定データにより、4-(トリメチルシリル)エチニル安息香酸エチルエステル: 化合物44と同定された。

¹H NMR (60 MHz, CDCl₃) δ 7.97 (d, 2H, J = 8.19 Hz), 7.51 (d, 2H, J = 8.19 Hz), 4.37 (q, 2H, J = 7.28 Hz), 1.39 (t, 3H, J = 7.28 Hz), 0.26 (s, 9H).

【0038】

(II-6) 4-エチニル安息香酸エチルエステル (4-ethynylbenzoic acid ethyl ester): 化合物45の合成

乾燥した反応容器に化合物44 (246 mg, 1.0 mmol) とエタノール (10 ml) を入れ、テトラn-ブチルアンモニウムフルオリド (1.2 ml, 1.2 mmol, 1M in THF) を加えた後、室温で2時間攪拌した。水 (10 ml) を加え、分液漏斗を用いて有機層を取り、水層をクロロホルム (10 ml × 2) で抽出し、有機層に加えた。硫酸マグネシウムで乾燥させた後、溶媒を留去し、カラムクロマトグラフィー (シリカゲル、ヘキサン: 塩化メチレン = 2:1, Rf = 0.3) で精製し、薄い橙色のオイル 165 mg (収率95%) を得た。得られた物質は、以下のNMR測定データにより、4-エチニル安息香酸エチルエステル: 化合物45と同定された。

¹H NMR (60 MHz, CDCl₃) δ 7.94 (d, 2H, J = 8.16 Hz), 7.48 (d, 2H, J = 8.19 Hz), 4.34 (q, 2H, J = 7.28 Hz), 3.19 (s, 1H), 1.38 (t, 3H, J = 7.28 Hz).

【0039】

(II-7) α-(4-エトキシカルボニルフェニル)エチニル-ω-トリメチルシリル-オクタキス[1, 4-(2, 5-ジ-n-ヘキシル)-フェニレン]エチニレン (α-(4-ethoxycarbonylphenyl)ethynyl-ω-trimethylsilyl-octakis[1, 4-(2, 5-di-n-hexyl)-phenylene]ethynylene): 化合物46の合成

反応容器に化合物33 (1.33 g, 0.58 mmol) と化合物45 (130 mg, 0.75 mmol) とトリエチルアミン (10 ml) を入れ、脱気した後、60℃まで加熱した。テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム (6.7 mg, 0.0075 mmol) とヨウ化銅 (2.2 mg, 0.015 mmol) を加え、室温で10時間攪拌した。水 (10 ml) を加え、分液漏斗で有機

10

20

30

40

50

層を取り、水層をクロロホルム（10 ml×3）で抽出し、有機層に加えた。飽和塩化アンモニウム水溶液（10 ml×2）で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥した後、溶媒を留去し、カラムクロマトグラフィー（シリカゲル、ヘキサン：塩化メチレン = 2：1、R_f = 0.35）で精製して黄緑色の固体600mg（収率43%）を得た。得られた物質は、以下のNMR測定データにより、 α -(4-エトキシカルボニルフェニル)エチニル- ω -トリメチルシリル-オクタキス[1, 4-(2, 5-ジ-*n*-ヘキシル)-フェニレン]エチニレン：化合物46と同定された。

¹H NMR (395.75 MHz, CDCl₃) δ 8.02 (d, 2H), 7.60 (d, 2H), 7.40 (s, 1H), 7.39 (s, 1H), 7.38 (s, 9H), 7.36 (s, 2H), 7.34 (s, 1H), 7.32 (s, 1H), 7.31 (s, 1H), 4.37 (q, 2H), 2.83 (m, 32H), 7.04 (d, 1H), 6.98 (d, 1H), 4.39 (q, 2H), 2.83 (m, 32H), 1.72 (m, 32H), 1.42 (m, 32H), 1.34 (m, 64H), 0.89 (m, 48H), 0.27 (s, 9H).

【0040】

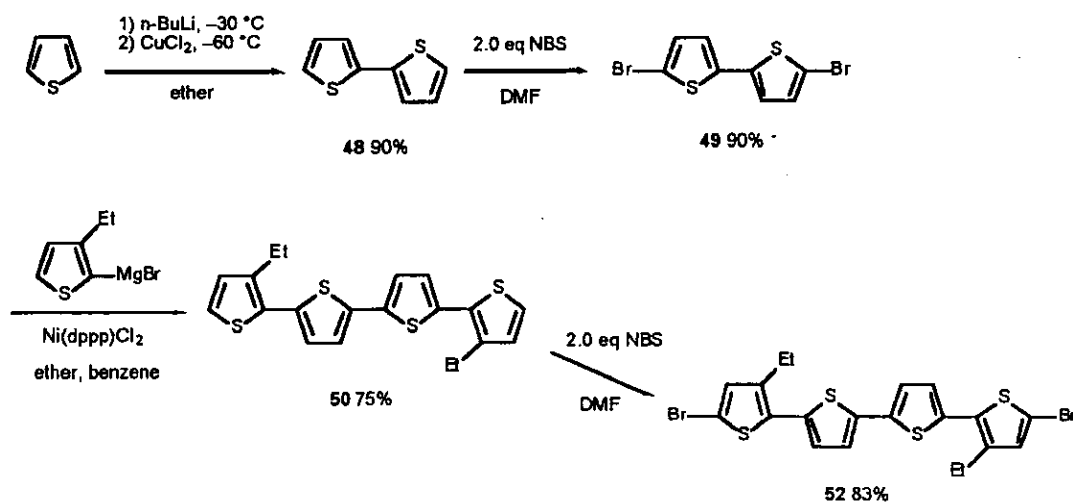
(II-8) α -(4-エトキシカルボニルフェニル)エチニル-オクタキス[1, 4-(2, 5-ジ-*n*-ヘキシルフェニレン)]エチニレン (α -(4-ethoxycarbonylphenyl)ethynyl-octakis[1, 4-(2, 5-din-hexylphenylene)]ethynylene)：化合物47の合成
反応容器に化合物46（100 mg, 0.043 mmol）とTHF（10 ml）を入れ、テトラ-*n*-ブチルアンモニウムフルオリド（0.065 ml, 0.065 mmol, 1M in THF）を加えた後、室温で2時間攪拌した。水（10 ml）を加え、分液漏斗を用いて有機層を取り、水層をクロロホルム（10 ml×2）で抽出し、有機層に加えた。硫酸マグネシウムで乾燥させた後、溶媒を留去し、カラムクロマトグラフィー（シリカゲル、ヘキサン：塩化メチレン = 2：1、R_f = 0.3）で精製し、黄緑色の固体99 mg（収率は定量的（quant）であった）を得た。得られた物質は、以下のNMR測定データにより、 α -(4-エトキシカルボニルフェニル)エチニル-オクタキス[1, 4-(2, 5-ジ-*n*-ヘキシルフェニレン)]エチニレン：化合物47と同定された。

¹H NMR (395.75 MHz, CDCl₃) δ 8.02 (d, 2H), 7.60 (d, 2H), 7.40 (s, 1H), 7.39 (s, 1H), 7.38 (s, 9H), 7.36 (s, 2H), 7.34 (s, 1H), 7.32 (s, 1H), 7.31 (s, 1H), 4.37 (q, 2H), 2.83 (m, 32H), 7.04 (d, 1H), 6.98 (d, 1H), 4.39 (q, 2H), 3.30 (s, 9H), 2.83 (m, 32H), 1.72 (m, 32H), 1.42 (m, 32H), 1.34 (m, 64H), 0.89 (m, 48H).

【0041】

スキーム(III)：オリゴチオフェン部の合成

【化11】



10

【0042】

(III-1) 2, 2'-ビチオフエン (2, 2'-bithiophene) : 化合物 48 の合成

乾燥窒素雰囲気下でチオフエン (16 g, 15.2 ml, 0.19 mol) と無水エーテル (104 ml) を $-60\text{ }^{\circ}\text{C}$ に冷却し、 n -ブチルリチウム (102 ml, 0.16 mol, 1.56 M in Hex) をゆっくりと滴下し、30 分間攪拌した。再び、 $-60\text{ }^{\circ}\text{C}$ に冷却し、 CuCl_2 (25 g, 0.19 mmol) を加え12時間攪拌した。水を加え、析出した固体をセライトでろ過した。分液漏斗で有機層を分離し、水層をヘキサンで抽出した。有機層を合わせ、1 N塩酸で洗浄後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。溶媒を留去後、カラムクロマトグラフィー (シリカゲル、ヘキサン、 $R_f = 0.6$) で精製し、黄色の固体11.92 mg (収率90%)を得た。得られた物質は、以下のNMR測定データにより、2, 2'-ビチオフエン : 化合物 48 と同定された。

20

^1H NMR (60 MHz, CDCl_3) δ 7.11–6.94 (m, 6H)

30

【0043】

(III-2) 5, 5'-ジブromo-2, 2'-ビチオフエン (5, 5'-dibromo-2, 2'-bithiophene) : 化合物 49 の合成

反応容器にビチオフエン (12.0 g, 0.072 mol) と (N, N-ジメチルホルムアミド) DMF (100 ml) を入れ、氷浴で冷却した。(N-ブロモスクシンイミド) NBS (25.7 g, 0.15 mol) をゆっくりと加え、3時間攪拌した。これをろ過し、メタノールで洗浄した。生成物をクロロホルムに溶解し、副生成物をろ過した。溶媒を留去し、再結晶 (ヘキサン) を行って無色の板状晶20.91 mg (収率90%)を得た。得られた物質は、以下のNMR測定データにより、5, 5'-ジブromo-2, 2'-ビチオフエン : 化合物 49 と同定された。

40

^1H NMR (395.75 MHz, CDCl_3) δ 6.96 (d, 2H, $J = 3.9\text{ Hz}$), 6.85 (d, 2H, $J = 3.9\text{ Hz}$).

【0044】

(III-3) 3, 3', 3', 3'-ジエチル-2, 2':5', 2':5'', 2'', 2''-クォーターチオフエン (3, 3', 3', 3'-diethyl-2, 2':5', 2':5'', 2'', 2''-quaterthiophene) : 化合物 50 の合成

反応容器にマグネシウム (1.65 g, 67.9 mmol) を入れ、乾燥して窒素雰囲気下で無水エーテル (5 ml) を入れ、そこに2-ブromo-3-エチルチオフエン (20 g, 61.7 mmol) と無水エーテル (65 ml) をゆっくりと滴下し、適下後3時間還流させグリニャー試薬を調整した。乾燥窒素雰囲気下で化合物

50

49 (10 g, 30.9 mol) と Ni(dppp)Cl_2 (250 mg) と無水エーテル (90 ml) とベンゼン (70 ml) を入れ、そこに調製したグリニャー試薬をゆっくりと滴下し、15時間還流させた。反応後、氷浴で冷却し、水を少しずつ加えて析出した固体をセライトでろ過した。分液漏斗で有機層を分取し、水層をクロロホルム (60 ml $\times$ 2) で抽出して有機層に加えた。炭酸水素ナトリウム水溶液 (60 ml $\times$ 2)、飽和食塩水 (60 ml $\times$ 2) で洗浄後、無水硫酸マグネシウムで乾燥し、溶媒を留去した。カラムクロマトグラフィー (シリカゲル、ヘキサン、 $R_f = 0.2$) で精製し、黄色の固体 15.7 g (収率 91%) を得た。得られた物質は、以下の NMR 測定データにより、3, 3'-'-ジエチル-2, 2':5', 2':5', 2'-'-クオーターチオフエン：化合物 50 と同定された。

10

^1H NMR (395.75 MHz, CDCl_3) δ 7.18 (d, 2H, $J = 5.4$ Hz), 7.12 (d, 2H, $J = 3.9$ Hz), 7.02 (d, 2H, $J = 3.9$ Hz), 6.94 (d, 2H, 5.1 Hz)。

【0045】

(III-4) 5, 5'-'-ジブromo-3, 3'-'-ジエチル-2, 2':5', 2':5', 2'-'-クオーターチオフエン (5, 5'-'-di-bromo-3, 3'-'-diethyl-2, 2':5', 2':5', 2'-'-quarterthiophene)：化合物 52 の合成

反応容器に化合物 50 (1.0 g, 2.59 mmol) と DMF (30 ml) を入れ、氷浴で冷却した。ゆっくりと NBS (934 mg, 5.31 mmol) を加え、10時間攪拌した。さらに飽和炭酸水素ナトリウム水溶液 (30 ml) を加え、これをろ過した。分液漏斗で有機層を分取し、水層をクロロホルム (30 ml $\times$ 2) で抽出し、有機層に加えた。飽和食塩水 (30 ml $\times$ 2) で洗浄後、無水硫酸マグネシウムで乾燥し、溶媒を留去した。カラムクロマトグラフィー (シリカゲル、ヘキサン、 $R_f = 0.35$) で精製し、黄色の固体 1.08 g (収率 77%) を得た。得られた物質は、以下の NMR 測定データにより、5, 5'-'-ジブromo-3, 3'-'-ジエチル-2, 2':5', 2':5', 2'-'-クオーターチオフエン：化合物 52 と同定された。

20

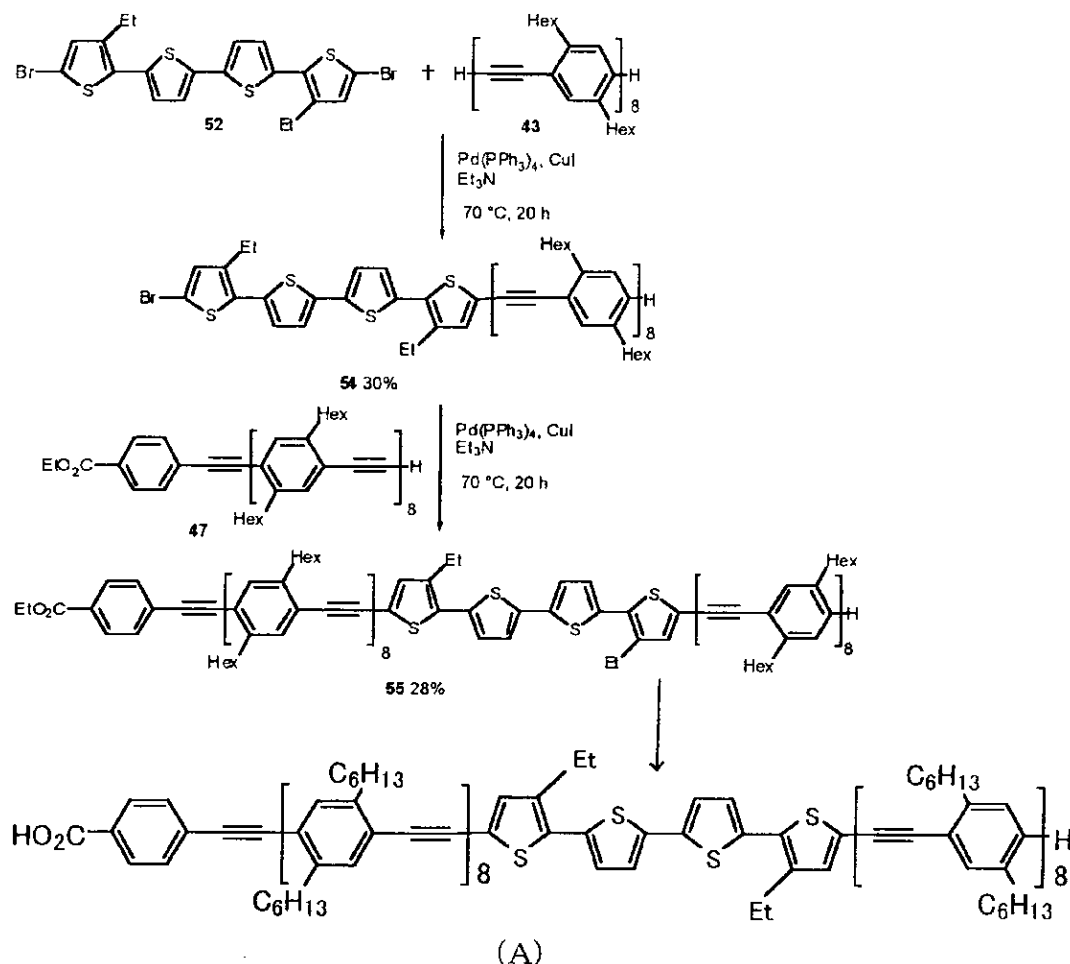
^1H NMR (395.75 MHz, CDCl_3) δ 7.11 (d, 2H, $J = 3.4$ Hz), 6.96 (d, 2H, $J = 3.5$ Hz), 6.93 (s, 2H), 2.75 (q, 2H, $J = 7.5$ Hz), 1.25 (t, 3H, $J = 7.5$ Hz)。

30

【0046】

スキーム (IV)：目的化合物 (A) の合成

【化12】



10

20

30

40

50

【0047】

(IV-1) ω -(4'''-bromo-3,2'''-diethyl-4,2':5',2':5'',2'''-quarterthiophenyl)-octakis[1,4-(2,5-di-n-hexyl)phenylene]ethynylene) : 化合物54の合成

乾燥した反応容器に化合物43 (194 mg, 0.090 mmol)と化合物52 (450 mg, 0.83 mmol)とトリエチルアミン (2 ml)を入れ、脱気した後、70℃に加熱した。テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム (1.04 mg, 0.0009 mmol)とヨウ化銅 (0.3 mg, 0.0018 mmol)を加え、室温で20時間攪拌した。水 (4 ml)を加え、分液漏斗で有機層を取り、水層をクロロホルム (5 ml×3)で抽出し、有機層に加えた。飽和塩化アンモニウム水溶液 (5 ml×2)で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥した後、溶媒を留去し、カラムクロマトグラフィー(シリカゲル、ヘキサン：塩化メチレン = 9：1、R_f = 0.3)で精製して黄色の固体60 mg(収率26%)を得た。得られた物質は、以下のNMR測定データにより、 ω -(4'''-bromo-3,2'''-diethyl-4,2':5',2':5'',2'''-quarterthiophenyl)-octakis[1,4-(2,5-di-n-hexyl)phenylene]ethynylene : 化合物54と同定された。

¹H NMR (395.75 MHz, CDCl₃) δ 7.38 (s, 9H), 7.37 (s, 2H), 7.36 (d, 1H), 7.35 (s, 1H), 7.34 (s, 1H), 7.34 (s, 1H), 7.14 (d, 1H), 7.14 (d, 1H), 7.13 (d, 1H), 7.13 (d

, 1H), 7.08 (dd, 1H), 7.07 (d, 1H), 6.98 (d, 1H), 6.93 (s, 1H), 2.83 (m, 36H), 1.72 (m, 32H), 1.40 (m, 32H), 1.27 (m, 70H), 0.89 (m, 48H).

【0048】

(IV-2) α -(4-エトキシカルボニルフェニル)エチニル- ω -(4'''-オクタキス[1,4-(2,5-ジ-*n*-ヘキシル)フェニレン]エチニレン-3,2'''-ジエチル-4,2':5',2':5'',2'''-クオーターチオフェニル)-オクタキス[1,4-(2,5-ジ-*n*-ヘキシル)フェニレン]エチニレン(α -(4-ethoxycarbonylphenyl)ethynyl- ω -(4'''-octakis[1,4-(2,5-di-*n*-hexyl)phenylene]ethynylene-3,2'''-diethyl-4,2':5',2':5'',2'''-quarterthiophenyl)-octakis[1,4-(2,5-di-*n*-hexyl)phenylene]-ethynylene): 化合物55の合成
乾燥した反応容器に化合物54 (40 mg, 0.0153 mmol)と化合物47 (35 mg, 0.015 mmol)とトリエチルアミン (1 ml)を入れ、脱気した後、70℃に加熱した。テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム (0.17 mg, 0.00015 mmol)とヨウ化銅 (0.058 mg, 0.00030 mmol)を加え、室温で20時間攪拌した。水 (4 ml)を加え、分液漏斗で有機層を取り、水層をクロロホルム (5 ml×3)で抽出し、有機層に加えた。飽和塩化アンモニウム水溶液 (5 ml×2)で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥した後、溶媒を留去し、カラムクロマトグラフィー(シリカゲル、ヘキサン:塩化メチレン = 2:1、Rf = 0.3)で分取を行った。さらに液体クロマトグラフィーで精製して橙色の固体18 mg(収率25%)を得た。得られた物質は、以下の(マトリックシアスティドレーザーデソープションイオン化飛行時間-マスマスペクトル)MALDI-TOFMS及びNMR測定データにより、 α -(4-エトキシカルボニルフェニル)エチニル- ω -(4'''-オクタキス[1,4-(2,5-ジ-*n*-ヘキシル)フェニレン]エチニレン-3,2'''-ジエチル-4,2':5',2':5'',2'''-クオーターチオフェニル)-オクタキス[1,4-(2,5-ジ-*n*-ヘキシル)フェニレン]エチニレン:化合物55と同定された。

MALDI-TOFMS: m/z = 4855.82 (計算値 4853.45)

^1H NMR (395.75 MHz, CDCl_3) δ 8.04 (d, 2H), 7.58 (d, 2H), 7.39 (s, 2H), 7.38 (s, 24H), 7.37 (s, 2H), 7.36 (s, 2H), 7.33 (s, 1H), 7.17 (d, 2H), 7.15 (d, 1H), 7.14 (s, 2H), 7.09 (d, 2H), 7.08 (d, 1H), 4.40 (q, 2H), 2.82 (m, 68H), 2.57 (t, 3H), 1.72 (m, 64H), 1.41 (m, 64H), 1.25 (m, 134H), 0.89 (m, 96H).

【0049】

(IV-3) α -(4-カルボキシフェニル)エチニル- ω -(4'''-オクタキス[1,4-(2,5-ジ-*n*-ヘキシル)フェニレン]エチニレン-3,2'''-ジエチル-4,2':5',2':5'',2'''-クオーターチオフェニル)-オクタキス[1,4-(2,5-ジ-*n*-ヘキシル)フェニレン]-エチニレン(α -(4-carboxyphenyl)ethynyl- ω -(4'''-octakis[1,4-(2,5-di-*n*-hexyl)phenylene]ethynylene-3,2'''-diethyl-4,2':5',2':5'',2'''-quarterthiophenyl)-octakis[1,4-(2,5-di-*n*-hexyl)phenylene]ethynylene): 化合物(A)の合成

反応容器に化合物55 (10 mg, 0.0021 mmol)、エタノール (0

． 20 ml)、THF (1.80 ml)を入れた後、10Nの水酸化ナトリウム水溶液 (0.08 ml)を加え、50℃に加熱した。水 (3 ml)を加え、分液漏斗で有機層を取り、水層をクロロホルム (2 ml×2)で抽出し、有機層に加えた。飽和塩化アンモニウム水溶液 (5 ml×2)で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥した後、溶媒を留去し、カラムクロマトグラフィー (シリカゲル、クロロホルム、 $R_f = 0.4$)で精製して橙色の固体7.3mg (収率73%)を得た。得られた物質は、以下のMALDI-TOFMS及びNMR測定データにより、 α -(4-カルボキシフェニル)エチニル- ω -(4'''-オクタキス[1,4-(2,5-ジ-*n*-ヘキシル)フェニレン]エチニレン-3,2'''-ジエチル-4,2':5',2':5'',2'''-クォーターチオフェニル)-オクタキス[1,4-(2,5-ジ-*n*-ヘキシル)フェニレン]エチニレン：化合物(A)と同定された。

MALDI-TOFMS： $m/z = 4824.87$ (計算値 4825.40)；
 ^1H NMR (395.75 MHz, CDCl_3) δ 8.04 (d, 2H), 7.58 (d, 2H), 7.39 (s, 2H), 7.38 (s, 2H), 7.37 (s, 2H), 7.36 (s, 2H), 7.33 (s, 1H), 7.17 (d, 2H), 7.15 (d, 1H), 7.14 (s, 2H), 7.09 (d, 2H), 7.08 (d, 1H), 2.82 (m, 68H), 1.72 (m, 64H), 1.41 (m, 64H), 1.25 (m, 134H), 0.89 (m, 96H)。

【0050】

実施例 2

実施例1で製造した化合物(A)の発光部及びワイヤー部の各ユニットのエネルギー順位を求めるため、化合物(A)の発光部に対応する8PPE(化合物50)及びワイヤー部に対応する4T(化合物33)のHOMO(最高被占分子軌道(Highest occupied molecular orbital))及びLUMO(最低空分子軌道(Lowest unoccupied molecular orbital))のエネルギーを算出した。その結果を図2に示す。同図に示しように、8PPEに対して4Tのエネルギーギャップが小さく、8PPEが電子輸送ワイヤー及び正孔輸送ワイヤーとして機能し、4Tが発光部として機能し、化合物(A)が有機EL素子用材料として有用であることが分かった。

【0051】

【発明の効果】

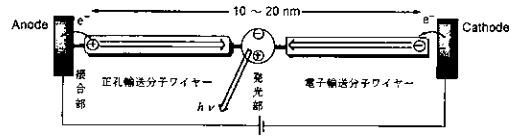
以上詳細に説明したように、本発明の新規化合物を有機EL素子用材料として使用すると、電極間が単層構造の単分子型の有機EL素子を提供することができるため、従来型より極めて発光効率が高く、安価な有機EL素子を提供可能なことができる。

【図面の簡単な説明】

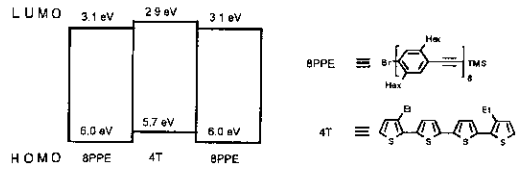
【図1】本発明の単分子型の有機EL素子用材料を示す概略図である。

【図2】実施例1で合成した本発明の化合物の各ユニットのエネルギー順位を示す図である。

【 図 1 】



【図 2】



专利名称(译)	用于有机电致发光元件的新型化合物和材料		
公开(公告)号	JP2004002493A	公开(公告)日	2004-01-08
申请号	JP2002109927	申请日	2002-04-12
[标]申请(专利权)人(译)	出光兴产株式会社		
申请(专利权)人(译)	出光兴产株式会社		
[标]发明人	安蘇芳雄 川端和重		
发明人	安蘇 芳雄 川端 和重		
IPC分类号	H01L51/50 C08G61/12 C09K11/06 H05B33/14		
FI分类号	C08G61/12 C09K11/06.635 H05B33/14.B		
F-TERM分类号	3K007/AB03 3K007/AB18 3K007/DB03 4J032/BA04 4J032/BB06 4J032/BC01 4J032/CG01 3K107/AA01 3K107/BB01 3K107/CC04 3K107/CC42 3K107/CC45 3K107/DD59		
优先权	2002080818 2002-03-22 JP		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

要解决的问题：提供一种新的化合物，其提供具有高发射效率的廉价有机电致发光（EL）元件和用于有机EL元件的材料。ŽSOLUTION：新化合物由式（1）表示（其中，R_{SB1}和R_{SB2}是官能团；R_{SB3}和R_{SB4}各自独立地为烷基，烷氧基或烷硫基；R_{SB5}和R_{SB6}为氢原子，烷基，烷氧基，烷硫基，芳基或芳香杂环基；R_{SB7}和R_{SB8}为氢原子，烷基，烷氧基，烷硫基或官能团；p和q各自独立地为4-16的整数；r为2-16的整数；对于每种噻吩，R_{SB6}可以各自相同或不同。有机EL元件的材料包括化合物。Ž

