

19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 530 353**

51 Int. Cl.:

C07F 5/02 (2006.01)

C07F 5/05 (2006.01)

H01L 51/00 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **16.03.2012 E 12709628 (7)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **03.12.2014 EP 2686326**

54 Título: **Derivados de borazeno**

30 Prioridad:

18.03.2011 EP 11158909

45 Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:

02.03.2015

73 Titular/es:

**UNIVERSITÉ DE NAMUR (100.0%)
Rue de Bruxelles 61
5000 Namur, BE**

72 Inventor/es:

**BONIFAZI, DAVIDE y
KERVYN DE MEERENDRE, SIMON**

74 Agente/Representante:

LEHMANN NOVO, María Isabel

ES 2 530 353 T3

Aviso: En el plazo de nueve meses a contar desde la fecha de publicación en el Boletín europeo de patentes, de la mención de concesión de la patente europea, cualquier persona podrá oponerse ante la Oficina Europea de Patentes a la patente concedida. La oposición deberá formularse por escrito y estar motivada; sólo se considerará como formulada una vez que se haya realizado el pago de la tasa de oposición (art. 99.1 del Convenio sobre concesión de Patentes Europeas).

DESCRIPCIÓN

Derivados de borazeno.

Campo técnico de la invención.

5 La presente invención se refiere a nuevos derivados de borazeno y su uso en la fabricación de dispositivos electrónicos, en particular dispositivos electroluminiscentes y semiconductores. Más específicamente, la presente invención se refiere a nuevos derivados de borazeno estables que comprenden átomos de boro sustituidos por grupos arilo y a su uso en una o más capas de un dispositivo electroluminiscente o uno semiconductor, en particular en la capa emisora de dispositivos orgánicos emisores de luz (OLED, por sus siglas en inglés).

Antecedentes de la invención

10 Con el objetivo general de reducir consumo de energía por el planeta, se ha dirigido un importante objeto de investigación a materiales electroluminiscentes orgánicos y poliméricos que han surgido como alternativas valiosas a la producción de luz incandescente. El interés cada vez mayor en la investigación y desarrollo de OLED ha estado motivado principalmente por su uso extendido en tecnología de pantalla plana.

15 Aunque muchos grupos de investigación han orientado sus estudios hacia la producción de luz blanca, encontrar fuentes de luz UV fiables y eficaces ha parecido que es de gran interés en diversos campos, tales como almacenamiento óptico, fotocatalisis, esterilización y desinfección y diversos métodos quirúrgicos o tratamientos médicos tales como cirugía oftálmica o tratamiento de epilepsia.

20 La producción de luz UV por materiales orgánicos es un reto mucho mayor que la producción de luz blanca (Visible) debido a que se conocen muy pocas moléculas orgánicas que emitan en el UV con un rendimiento cuántico aceptable para la producción de dispositivos emisores de luz.

Mientras se conoce LED a base de material inorgánico que emite en el UV, esto último presenta varias desventajas comparado con sus contrapartidas orgánicas. Estas desventajas incluyen, pero no se limitan a, no sintonizabilidad de la densidad electrónica del correspondiente material y amplia emisión UV debido a la red cristalina en que se forma el emisor inorgánico.

25 En ese contexto, los materiales de borazina han surgido recientemente como una nueva clase de materiales prometedores con supuesta alta movilidad de electrones y de huecos para aplicaciones en dispositivos electroluminiscentes. En particular, la patente internacional WO 2005/068583 describe material que contiene borazina con supuestamente alta movilidad de huecos y electrones y estabilidad térmica, que se puede usar supuestamente en una o más capas de un dispositivo electroluminiscente, incluyendo dispositivos OLED o PLED.
30 Supuestamente se reivindica que estos dispositivos son capaces de emitir luz en las regiones UV o visible.

La patente japonesa JP 2005-170857 describe una serie de derivados de B, B, B"-triantril-N,N,N"-triarilborazina y que pueden emitir en la región UV - Visible con rendimientos cuánticos bastante altos. Aunque se ha sugerido su potencial utilidad como una estructura de núcleo para aplicaciones de dispositivos electrónicos orgánicos, queda que las propiedades de fluorescencia de los correspondientes derivados se deben principalmente a los restos antraceno que pueden reducir considerablemente las potenciales propiedades de ajuste electrónico de los derivados de borazina descritos e interfieren con la fluorescencia que se origina del anillo de borazina.

35 Meller et al. en "Fluoralkyl- und Fluorarylborazinderivate, 1. Mitt.", publicado en Monatshefte fuer Chemie (1.966), 97 (2), 619-32, páginas 388-395, describe simplemente la síntesis y los espectros IR de diversas N-Fluoroalquil- y B-Fluoroarilborazinas, incluyendo derivados de B,B,B"-pentafluorofenil-N,N,N"-trifenilborazina.

40 La patente japonesa JP 2010 280.637 proporciona un método industrialmente ventajoso para producir una B-arilborazina útil para los usos tales como una membrana de aislamiento para un semiconductor, una capa de metal de barrera, etc.

45 Paetzold et al. en "Boron imides from the thermal decomposition of diarylazidoboranes", publicado en Chem. Ber. 1.983, vol. 116, nº 4, páginas 1.531-1.539 describen que los diarilazidoboranos se someten a termólisis en diazadiboretidinas o en borazinas. Se discute la formación de boroimididas como compuestos intermedios de reacción.

J. Bielawski et al. en "Reactions of borazines with pyrazole and related studies: (μ -amido)(μ -pyrazolato)diboron species, novel relatives of the pyrazaboles", publicado en Inorg. Chem. 1.986, vol. 25, nº 26, páginas 4.623-4.628 describen la reacción de borazinas, (-BRNR-)₃, con pirazol, Hpz, y algunos estudios relacionados.

50 Pinckney M. Johnson et al. en "Atropisomerism in aryl-substituted borazines", publicado en Inorg. Chem. 1.974, vol. 13, nº 11, páginas 2.769-2.772 presenta una borazina aril-sustituida en que se demuestra la ausencia de coplanaridad de los anillos aromáticos y de borazina. También se indica atropisomería en borazinas.

Korshak, V. V. et al. describen una reacción de 1,2-difenildiborano con aminas y organo-borodiaminas, publicado en

Izvestiya Akademii Nauk SSSR, Seriya Khimicheskaya (1.963), (9), 1.645-8.

Gerrard, W. en "The experimental approach to the preparation of applicable borazole polymers", publicado en SCI Monograph (1.961), 13, 328-42 desarrolla procedimientos para unir anillos de borazol entre sí para proporcionar poliborazoles.

- 5 La patente de EE.UU. 2005/0153164 se refiere a materiales que contienen uno o más anillos de borazina se emplean como materiales para dispositivos electroluminiscentes.

Sin rebatir las ventajas asociadas al uso de materiales derivados de borazina descritos en la técnica, aún hay la necesidad de nuevos derivados de borazeno estables con propiedades mejoradas.

Objetivos de la invención

- 10 Es un objetivo de la presente invención proporcionar nuevos derivados de borazeno estables al aire que sean capaces de emitir en la región UV.

Ventajosamente, los derivados de borazeno según la invención son capaces de emitir en la región UV con alto rendimiento cuántico.

- 15 Aún ventajosamente, los derivados de borazeno según la invención presentan sustituyentes que permiten ajustar las propiedades electrónicas de los derivados de borazeno. Aún ventajosamente, se pueden ajustar las propiedades electrónicas de los derivados de borazina no de acuerdo con la invención sin interferir o perturbar en absoluto la fluorescencia/emisión que se origina del anillo de borazina.

- 20 Otra ventaja más que poseen los derivados de borazeno de la invención es alta movilidad del portador de carga y son fáciles de sintetizar, al tiempo que se proporciona excelente procesabilidad (tal como, por ej., tratamiento en disolución, impresión continua) y excelente estabilidad en condiciones atmosféricas/ambientales.

Más ventajosamente, los derivados de borazeno de la invención presentan excelente estabilidad frente a la hidrólisis.

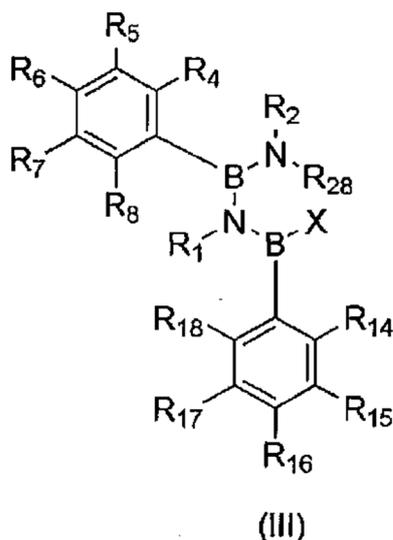
Ventajosamente, los derivados de borazeno según la invención son adecuados para uso en la capa emisora de un dispositivo electroluminiscente, en particular dispositivos orgánicos emisores de luz (OLED).

- 25 Además, los derivados de borazeno de la invención pueden encontrar uso ventajoso en particular en la fabricación de otros dispositivos electrónicos, en particular dispositivos semiconductores, y preferiblemente en la fabricación de transistores debido a sus excelentes propiedades de transporte de portador de carga.

Otros objetivos de la invención serán evidentes inmediatamente para los expertos en la materia a partir de la siguiente descripción.

Sumario de la invención

- 30 Según un aspecto de la presente invención, se proporciona un derivado de borazeno que tiene la fórmula (III):



en la que los sustituyentes R^1 , R^2 , R^4 a R^8 y R^{14} a R^{18} son iguales o diferentes entre sí;

- 5 en la que cada uno de R^1 , R^2 , R^4 a R^8 y R^{14} a R^{18} se selecciona independientemente del grupo que consiste en: hidrógeno; grupo alquilo saturado lineal o ramificado; grupo alquilo insaturado lineal o ramificado; grupo cicloalquilo; grupo arilo; grupo aralquilo; grupo heteroarilo; grupo acilo; hidroxilo; grupo alcoxi; grupo ariloxi; grupo aciloxi; grupo amino; grupo alquilamino; grupo arilamino; grupo acilamino; grupo ciano; grupo carboxilo; grupo tio; grupo aminocarbonilo; grupo carbamoilo, grupo ariloxicarbonilo, grupo fenoxicarbonilo, grupo alcoxicarbonilo y halógeno;
- en la que no se puede seleccionar simultáneamente que R^4 , R^8 , R^{14} y R^{18} sean hidrógeno;
- no se puede seleccionar simultáneamente que R^4 a R^8 y R^{14} a R^{18} sean flúor;
- en la que no se puede seleccionar simultáneamente que R^1 y R^2 sean metilo;
- 10 en la que R^{28} se selecciona del grupo que consiste en: hidrógeno; grupo alquilo saturado lineal o ramificado; grupo alquilo insaturado lineal o ramificado; grupo cicloalquilo; grupo arilo; grupo aralquilo; grupo heteroarilo; grupo acilo; hidroxilo; grupo alcoxi; grupo ariloxi; grupo aciloxi; grupo amino; grupo alquilamino; grupo arilamino; grupo acilamino; grupo ciano; grupo carboxilo; grupo tio; grupo aminocarbonilo; grupo carbamoilo, grupo ariloxicarbonilo, grupo fenoxicarbonilo, grupo alcoxicarbonilo y halógeno; y
- 15 en la que X se selecciona del grupo que consiste en: hidroxilo; grupo alcoxi; grupo cicloalquiloxi; grupo ariloxi; grupo aralquiloxi; grupo aciloxi; grupo amino; grupo alquilamino; grupo cicloalquilamino; grupo dialquilamino; grupo arilamino; grupo aralquilamino; grupo diarilamino; grupo acilamino;
- en la que al menos un sustituyente seleccionado del grupo de R^6 y R^{16} se selecciona independientemente del grupo que consiste en grupos alquilo saturados lineales o ramificados, preferiblemente con 1 a 6 átomos de carbono, más preferiblemente con 1 a 4 átomos de carbono, incluso más preferiblemente con 1 a 3 átomos de carbono.
- 20 Preferiblemente, en el derivado según la invención, al menos dos sustituyentes, preferiblemente todos los sustituyentes seleccionados del grupo de R^4 , R^8 , R^{14} y R^{18} se seleccionan independientemente del grupo que consiste en grupos alquilo saturados lineales o ramificados, preferiblemente con 1 a 6 átomos de carbono, más preferiblemente con 1 a 4 átomos de carbono, incluso más preferiblemente con 1 a 3 átomos de carbono.
- 25 Preferiblemente, en el derivado según la invención, cada uno de R^1 , R^2 y R^{28} se selecciona independientemente del grupo que consiste en: hidrógeno, grupo alquilo saturado lineal o ramificado, grupo cicloalquilo, grupo arilo y grupo aralquilo.
- 30 Preferiblemente, en el derivado de borazeno según la invención, X se selecciona del grupo que consiste en: hidroxilo, grupo alcoxi, grupo cicloalquiloxi, grupo ariloxi, grupo aralquiloxi, grupo amino, grupo alquilamino, grupo cicloalquilamino, grupo arilamino y grupo aralquilamino; preferiblemente del grupo que consiste en: hidroxilo, grupo alquilamino, grupo cicloalquilamino y grupo arilamino.
- La presente invención también se refiere a un método para la fabricación de un dispositivo electrónico que comprende la etapa de incluir un derivado de borazeno como se describió anteriormente, en el que el dispositivo electrónico se selecciona preferiblemente del grupo que consiste en dispositivos electroluminiscentes y semiconductores.
- 35 Preferiblemente, en el método según la invención, el dispositivo electrónico es un dispositivo semiconductor, preferiblemente un transistor.
- Otro objeto de la presente invención es el uso de un derivado de borazeno como se describió anteriormente para la fabricación de un dispositivo electrónico, preferiblemente para la fabricación de un dispositivo seleccionado del grupo que consiste en dispositivos electroluminiscentes y semiconductores.
- 40 Preferiblemente, en este uso, el dispositivo electrónico es un OLED, y el derivado se usa preferiblemente para la fabricación de una capa emisora de dicho OLED.
- Preferiblemente en este uso, el dispositivo electrónico es un dispositivo semiconductor, preferiblemente un transistor.
- 45 Según otro aspecto, la presente invención se refiere a un dispositivo electrónico que comprende al menos una capa que comprende un derivado de borazeno como se describió anteriormente, en el que el dispositivo electrónico se selecciona preferiblemente del grupo que consiste en dispositivos electroluminiscentes y semiconductores.
- En un aspecto preferido, el dispositivo electrónico de la invención es un OLED, en el que dicha capa es preferiblemente la capa emisora.
- En otro aspecto preferido, el dispositivo electrónico de la invención es un dispositivo semiconductor. Más preferiblemente, el dispositivo electrónico de la invención es un transistor.
- 50 Preferiblemente, el derivado según la invención puede emitir en la región UV con un rendimiento cuántico por encima de 0,05, preferiblemente por encima de 0,3, más preferiblemente por encima de 0,4, incluso más

preferiblemente por encima de 0,5, lo más preferiblemente por encima de 0,6.

5 En la presente descripción, el término "OLED" se refiere a dispositivos orgánicos que emiten luz que comprenden un medio electroluminiscente orgánico, con espesor del orden de aproximadamente 100 nm, intercalado entre dos electrodos. Las configuraciones de dispositivo más comúnmente usadas de OLED son de tres tipos diferentes: tipo capa única, tipo doble capa y tipo multicapa. El OLED de tipo capa única presenta solamente una capa electroluminiscente única entre el ánodo y el cátodo. El OLED de tipo doble capa comprende dos capas que son responsables del transporte de huecos y electrones, respectivamente. Una de, la capa que transporta huecos o la capa que transporta electrones es también la capa emisora. En un dispositivo multicapa, se inserta una capa emisora entre la capa que transporta huecos y la capa que transporta electrones; dicho dispositivo puede comprender además otras capas, con otras funcionalidades, tales como capas que bloquean huecos, capas que bloquean electrones y/o capas que actúan como "etapas" para su capa adyacente.

10 En la presente invención, proporcionar dispositivos electroluminiscentes con realizaciones mejoradas incluye, pero no se limita a, proporcionar dispositivos electroluminiscentes con color de alta pureza, eficacia y bajo voltaje de conducción.

15 Los dispositivos electroluminiscentes según la invención, y en particular OLED, se pueden obtener mediante diferentes técnicas conocidas para el experto en la materia, en particular con deposición con vapor, recubrimiento por rotación, procedimientos de impresión con chorro de tinta y similares.

Breve descripción de los dibujos

20 La Figura 1 representa la estructura del cristal de derivado (1) de borazina no de acuerdo con la invención que muestra la corta distancia carbono-boro, en la que se cree que los grupos metilo protegen al boro de un ataque nucleófilo.

La Figura 2 representa espectros de absorción UV de derivado (1) de borazina no de acuerdo con la invención que muestran los máximos de absorción a 222 nm.

25 La Figura 3 representa los espectros de emisión de derivado (1) de borazina no de acuerdo con la invención en disolución a 300 nm.

La Figura 4 representa espectros de absorción UV de derivado (3) de borazeno y derivado (4) de borazeno que muestran los máximos de absorción a 200 nm.

La Figura 5 representa los espectros de fluorescencia de derivados (3) de borazeno y derivado (4) de borazeno que muestran los máximos de emisión a 318 nm.

30 La Figura 6 representa espectros de absorción UV de derivado (5) de borazeno y derivado (6) de borazeno que muestran los máximos de absorción a 200 nm.

La Figura 7 representa los espectros de fluorescencia de derivado (5) de borazeno y derivado (6) de borazeno que muestran los máximos de emisión a 318 nm.

35 La Figura 8 representa espectros de absorción UV de derivado (7) de borazeno y derivado (8) de borazeno que muestran los máximos de absorción a 200 nm.

La Figura 9 representa los espectros de excitación de derivado (7) de borazeno y derivado (8) de borazeno que muestran los máximos de emisión a 279 nm.

La Figura 10 representa los espectros de emisión de derivado (7) de borazeno y derivado (8) de borazeno que muestran los máximos de emisión a 303 nm.

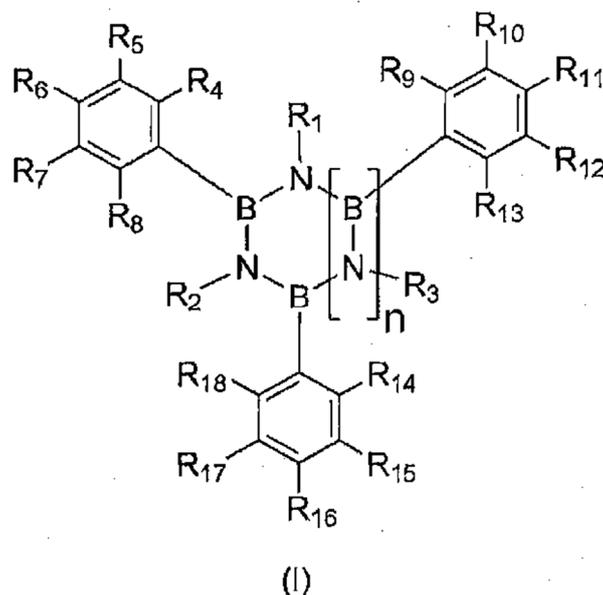
40 La Figura 11 representa la estrategia sintética general para la formación de derivados según la fórmula (I).

La Figura 12 representa la estrategia sintética general para la formación de derivados de borazina no de acuerdo con la invención según la fórmula (II).

La Figura 13 representa los espectros RMN de derivado (1) de borazina no según la invención a t=0 (parte superior) y a t=10 meses (fondo) que muestran la excelente estabilidad del compuesto al aire y a temperatura ambiente.

45 Descripción detallada de la invención

Según un aspecto de la presente invención, se proporciona un derivado de la fórmula (I):



en la que los sustituyentes R^1 a R^{18} son iguales o diferentes entre sí;

5 en la que cada uno de R^1 a R^{18} se selecciona independientemente del grupo que consiste en: hidrógeno; grupo alquilo saturado lineal o ramificado; grupo alquilo insaturado lineal o ramificado; grupo cicloalquilo; grupo arilo, grupo aralquilo; grupo heteroarilo; grupo acilo; hidroxilo; grupo alcoxi; grupo ariloxi; grupo aciloxi; grupo amino; grupo alquilamino; grupo arilamino; grupo acilamino; grupo ciano; grupo carboxilo; grupo tio; grupo aminocarbonilo; grupo carbamoilo, grupo ariloxicarbonilo, grupo fenoxicarbonilo, grupo alcoxycarbonilo y halógeno;

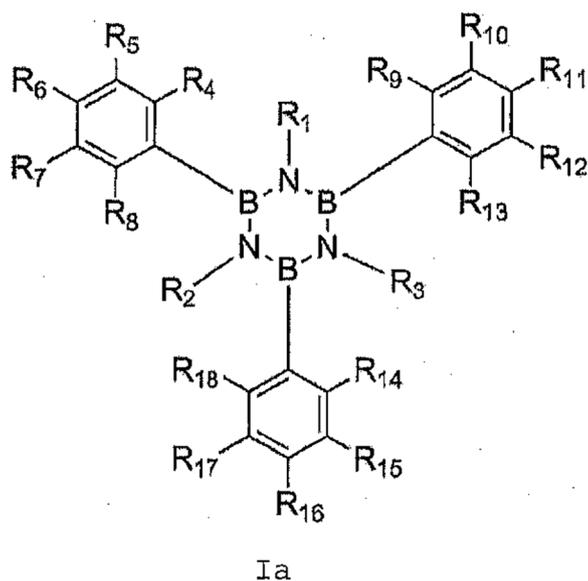
en la que $n=0$;

en la que R^4 , R^8 , R^9 , R^{13} , R^{14} y R^{18} no pueden ser seleccionados simultáneamente que sean hidrógeno;

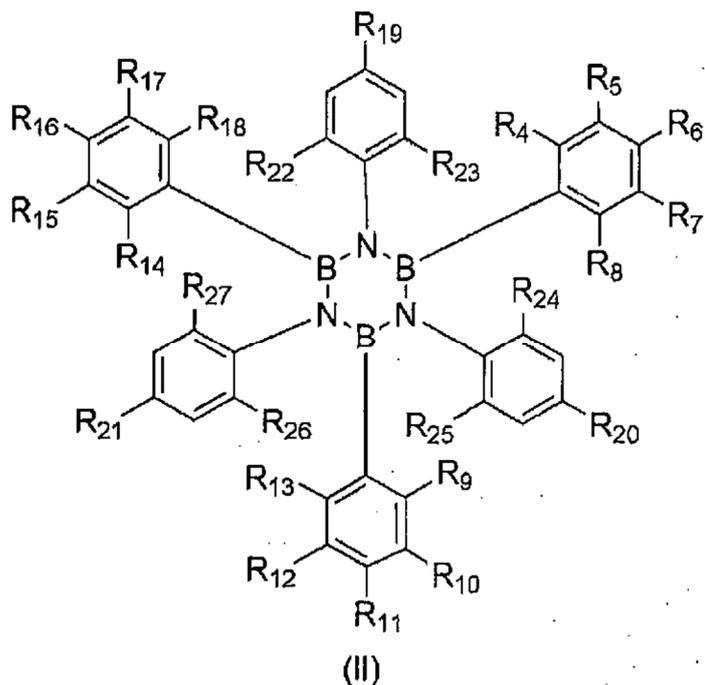
10 en la que R^4 a R^8 y R^{14} a R^{18} no pueden ser seleccionados simultáneamente que sean flúor y

en la que R^1 , R^2 y R^3 no pueden ser seleccionados simultáneamente que sean metilo.

Según un aspecto no de acuerdo con la presente invención, cuando $n=1$, se proporciona un derivado (borazina) con la fórmula (Ia):



Preferiblemente, en el derivado no de acuerdo con la invención, cuando n=1, el derivado (borazina) tiene la fórmula (II):



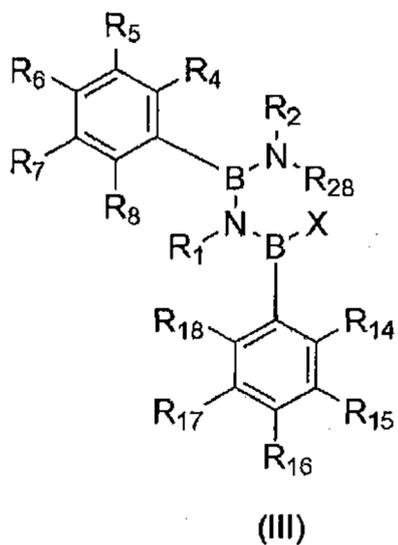
5 en la que los sustituyentes R⁴ a R¹⁸ son como se definió anteriormente; en la que los sustituyentes R¹⁹ a R²⁷ son iguales o diferentes entre sí y

10 en la que cada uno de R¹⁹ a R²⁷ se selecciona independientemente del grupo que consiste en: hidrógeno; grupo alquilo saturado lineal o ramificado; grupo alquilo insaturado lineal o ramificado; grupo cicloalquilo; grupo arilo; grupo aralquilo; grupo heteroarilo; grupo acilo; hidroxilo; grupo alcoxi; grupo ariloxi; grupo aciloxi; grupo amino; grupo alquilamino; grupo arilamino; grupo acilamino; grupo ciano; grupo carboxilo; grupo tio; grupo aminocarbonilo; grupo carbamoilo; grupo ariloxicarbonilo, grupo fenoxicarbonilo, grupo alcoxycarbonilo y halógeno.

Preferiblemente, en el derivado (borazina) no según la invención como se describió anteriormente, al menos un sustituyente, preferiblemente todos los sustituyentes, seleccionados del grupo de R²², R²³, R²⁴, R²⁵, R²⁶ y R²⁷ se seleccionan independientemente que sean hidrógeno.

En el derivado de la invención, cuando n=0, el derivado (borazeno) presenta la fórmula (III):

15



en la que los sustituyentes R^1 , R^2 , R^4 a R^8 y R^{14} a R^{18} son como se definió anteriormente;

en la que R^{28} se selecciona del grupo que consiste en: hidrógeno; grupo alquilo saturado lineal o ramificado; grupo alquilo insaturado lineal o ramificado; grupo cicloalquilo; grupo arilo; grupo aralquilo; grupo heteroarilo; grupo acilo; hidroxilo; grupo alcoxi; grupo ariloxi; grupo aciloxi; grupo amino; grupo alquilamino; grupo arilamino; grupo acilamino; grupo ciano; grupo carboxilo; grupo tio; grupo aminocarbonilo; grupo carbamoilo, grupo ariloxicarbonilo, grupo fenoxicarbonilo, grupo alcocicarbonilo y halógeno y

en la que X se selecciona del grupo que consiste en: hidroxilo; grupo alcoxi; grupo cicloalquiloxi; grupo ariloxi; grupo aralquiloxi; grupo aciloxi; grupo amino; grupo alquilamino; grupo cicloalquilamino; grupo dialquilamino; grupo arilamino; grupo aralquilamino; grupo diarilamino; grupo acilamino.

- 10 Preferiblemente, en los derivados (borazeno o borazina), al menos dos sustituyentes, preferiblemente todos los sustituyentes, seleccionados del grupo de R^4 , R^8 , R^9 , R^{13} , R^{14} y R^{18} se seleccionan independientemente del grupo que consiste en: grupos alquilo saturados lineales o ramificados, preferiblemente con 1 a 6 átomos de carbono, más preferiblemente con 1 a 4 átomos de carbono, incluso más preferiblemente con 1 a 3 átomos de carbono. Incluso más preferiblemente, en los derivados (borazeno o borazina) de la invención, al menos dos sustituyentes,
- 15 preferiblemente todos los sustituyentes seleccionados del grupo de R^4 , R^8 , R^9 , R^{13} , R^{14} y R^{18} se seleccionan independientemente del grupo que consiste en grupos metilo, etilo e isopropilo.

- Preferiblemente, en los derivados (borazeno o borazina), al menos un sustituyente, preferiblemente todos los sustituyentes, seleccionados del grupo de R^6 , R^{11} y R^{16} se seleccionan independientemente del grupo que consiste en: grupos alquilo saturados lineales o ramificados y halógenos; preferiblemente del grupo que consiste en: grupos alquilo saturados lineales o ramificados con 1 a 6 átomos de carbono, más preferiblemente con 1 a 4 átomos de carbono, incluso más preferiblemente con 1 a 3 átomos de carbono. Incluso más preferiblemente, en los derivados (borazeno o borazina), al menos un sustituyente, preferiblemente todos los sustituyentes, seleccionados del grupo de R^6 , R^{11} y R^{16} se seleccionan independientemente del grupo que consiste en grupos metilo, etilo e isopropilo.

- Preferiblemente, en los derivados (borazina) no según la invención, al menos un sustituyente, preferiblemente todos los sustituyentes, seleccionados del grupo de R^{19} , R^{20} y R^{21} se seleccionan independientemente del grupo que consiste en hidrógeno y grupos alquilo saturados lineales o ramificados, preferiblemente con 1 a 12 átomos de carbono, más preferiblemente con 1 a 6 átomos de carbono, incluso más preferiblemente con 1 a 3 átomos de carbono. Más preferiblemente, en el derivado (borazina) no según la invención, al menos un sustituyente, preferiblemente todos los sustituyentes, seleccionados del grupo de R^{19} , R^{20} y R^{21} se seleccionan independientemente del grupo que consiste en hidrógeno y grupos dodecilo.

Preferiblemente, en los derivados (borazeno o borazina), cada uno de R^1 a R^3 se selecciona independientemente del grupo que consiste en: hidrógeno, grupo alquilo saturado lineal o ramificado, grupo cicloalquilo, grupo arilo y grupo aralquilo. Más preferiblemente, en los derivados (borazeno o borazina) de la invención, cada uno de R^1 a R^3 se selecciona independientemente del grupo que consiste en: hidrógeno, grupos isopropilo, ciclohexilo y fenilo.

- 35 Preferiblemente, en los derivados (borazeno) de la invención, R^{28} se selecciona del grupo que consiste en: hidrógeno, grupo alquilo saturado lineal o ramificado, grupo cicloalquilo, grupo arilo y grupo aralquilo. Más preferiblemente, en el derivado (borazeno) de la invención, R^{28} se selecciona del grupo que consiste en: hidrógeno, grupos isopropilo, ciclohexilo y fenilo.

- Preferiblemente, en los derivados (borazeno) de la invención, X se selecciona del grupo que consiste en: hidroxilo, grupo alcoxi, grupo cicloalquiloxi, grupo ariloxi, grupo aralquiloxi, grupo amino, grupo alquilamino, grupo cicloalquilamino, grupo arilamino y grupo aralquilamino; preferiblemente del grupo que consiste en: hidroxilo, grupo alquilamino, grupo cicloalquilamino y grupo arilamino. Más preferiblemente, en el derivado (borazeno) de la invención, X se selecciona del grupo que consiste en: hidroxilo, grupo ciclohexilamino, grupo bencilamino y grupo isopropilamino.

- 45 Preferiblemente, el derivado (borazina) no según la invención es según la fórmula (II), en la que R^4 , R^6 , R^8 , R^9 , R^{11} , R^{13} , R^{14} , R^{16} y R^{18} son grupos metilo y en la que R^5 , R^7 , R^{10} , R^{12} , R^{15} , R^{17} y R^{19} a R^{27} se seleccionan que sean hidrógeno.

- Preferiblemente, el derivado (borazina) no según la invención es según la fórmula (II), en la que R^4 , R^6 , R^8 , R^9 , R^{11} , R^{13} , R^{14} , R^{16} y R^{18} son grupos metilo; en la que R^5 , R^7 , R^{10} , R^{12} , R^{15} y R^{17} y R^{22} a R^{27} se seleccionan que sean hidrógeno y en la que R^{19} , R^{20} , R^{21} son grupos dodecilo.

Preferiblemente, el derivado (borazeno) de la invención es según la fórmula (III), en la que R^1 y R^2 son grupos ciclohexilo; en la que R^4 , R^6 , R^8 , R^{14} , R^{16} y R^{18} son grupos metilo; en la que R^5 , R^7 , R^{15} , R^{17} y R^{28} se seleccionan que sean hidrógeno y en la que X se selecciona que sea grupo hidroxilo.

- 55 Preferiblemente, el derivado (borazeno) de la invención es según la fórmula (III), en la que R^1 y R^2 son grupos ciclohexilo; en la que R^4 , R^6 , R^8 , R^{14} , R^{16} y R^{18} son grupos metilo; en la que R^5 , R^7 , R^{15} , R^{17} y R^{28} se seleccionan que sean hidrógeno y en la que X se selecciona que sea grupo ciclohexilamino.

Preferiblemente, el derivado (borazeno) de la invención es según la fórmula (III), en la que R¹ y R² son grupos bencilo; en la que R⁴, R⁶, R⁸, R¹⁴, R¹⁶ y R¹⁸ son grupos isopropilo; en la que R⁵, R⁷, R¹⁵, R¹⁷ y R²⁸ se seleccionan que sean hidrógeno y en la que X se selecciona que sea grupo hidroxilo.

5 Preferiblemente, el derivado (borazeno) de la invención es según la fórmula (III), en la que R¹ y R² son grupos bencilo; en la que R⁴, R⁶, R⁸, R¹⁴, R¹⁶ y R¹⁸ son grupos isopropilo; en la que R⁵, R⁷, R¹⁵, R¹⁷ y R²⁸ se seleccionan que sean hidrógeno y en la que X se selecciona que sea grupo bencilamino.

Preferiblemente, el derivado (borazeno) de la invención es según la fórmula (III), en la que R¹ y R² son grupos isopropilo; en la que R⁴, R⁶, R⁸, R¹⁴, R¹⁶ y R¹⁸ son grupos metilo; en la que R⁵, R⁷, R¹⁵, R¹⁷ y R²⁸ se seleccionan que sean hidrógeno y en la que X se selecciona que sea grupo hidroxilo.

10 Preferiblemente, el derivado (borazeno) de la invención es según la fórmula (III), en la que R¹ y R² son grupos isopropilo; en la que R⁴, R⁶, R⁸, R¹⁴, R¹⁶ y R¹⁸ son grupos metilo; en la que R⁵, R⁷, R¹⁵, R¹⁷ y R²⁸ se seleccionan que sean hidrógeno y en la que X se selecciona que sea grupo isopropilamino.

15 Según otro aspecto, la presente invención se refiere a un dispositivo electrónico que comprende al menos una capa que comprende un derivado (borazeno) como se describió anteriormente, en el que el dispositivo electrónico se selecciona preferiblemente del grupo que consiste en dispositivos electroluminiscentes y semiconductores.

En un aspecto preferido, el dispositivo electrónico de la invención es un OLED, en el que dicha capa es preferiblemente la capa emisora.

En otro aspecto preferido, el dispositivo electrónico de la invención es un dispositivo semiconductor. Más preferiblemente, el dispositivo electrónico de la invención es un transistor.

20 Según otro aspecto más de la presente invención, se proporciona un método para la fabricación de un dispositivo electrónico que comprende la etapa de incluir un derivado (borazeno) como se describió anteriormente, en el que el dispositivo electrónico se selecciona preferiblemente del grupo que consiste en dispositivos electroluminiscentes y semiconductores.

25 Preferiblemente, en el método de la presente invención, el dispositivo electrónico es un OLED. Más preferiblemente, en el método de la presente invención el derivado (borazeno) se incluye en la capa emisora del OLED.

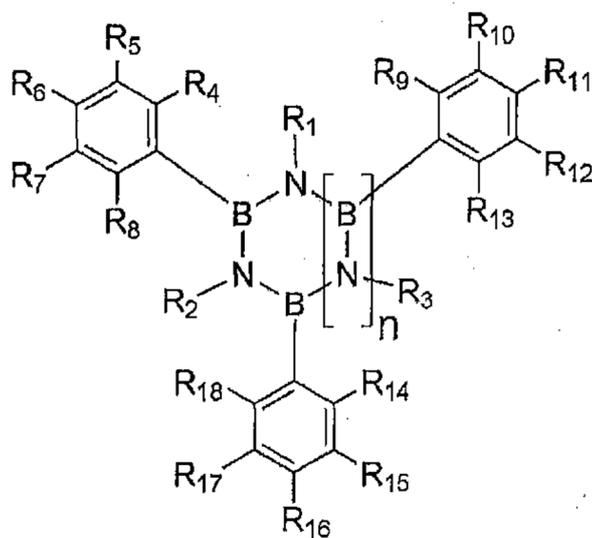
Más preferiblemente, en el método de la presente invención, el dispositivo electrónico es un dispositivo semiconductor, más preferiblemente un transistor.

30 Según otro aspecto más, la presente invención se refiere al uso de un derivado (borazeno) como se describió anteriormente para la fabricación de un dispositivo electrónico. Preferiblemente, el derivado (borazeno) de la invención se usa para la fabricación de un dispositivo seleccionado del grupo que consiste en dispositivos electroluminiscentes y semiconductores.

En un aspecto preferido, el derivado (borazeno) de la invención se usa para la fabricación de un OLED, en el que el derivado (borazeno) se usa preferiblemente para la fabricación de la capa emisora del OLED.

35 En otro aspecto preferido, el derivado (borazeno) de la invención se usa para la fabricación de un dispositivo semiconductor, preferiblemente un transistor.

Según un aspecto de la presente invención, se proporciona un derivado de borazeno de la fórmula (I):



(I)

en la que los sustituyentes R^1 a R^{18} son iguales o diferentes entre sí;

5 en la que cada uno de R^1 a R^{18} se selecciona independientemente del grupo que consiste en: hidrógeno; grupo alquilo saturado lineal o ramificado; grupo alquilo insaturado lineal o ramificado; grupo cicloalquilo; grupo arilo; grupo aralquilo; grupo heteroarilo; grupo acilo; hidroxilo; grupo alcoxi; grupo ariloxi; grupo aciloxi; grupo amino; grupo alquilamino; grupo arilamino; grupo acilamino; grupo ciano; grupo carboxilo; grupo tio; grupo aminocarbonilo; grupo carbamoilo, grupo ariloxicarbonilo, grupo fenoxicarbonilo, grupo alcoxicarbonilo y halógeno;

en la que $n=0$;

en la que R^4 , R^8 , R^9 , R^{13} , R^{14} y R^{18} no pueden ser seleccionados simultáneamente que sean hidrógeno;

10 en la que R^4 a R^8 y R^{14} a R^{18} no pueden ser seleccionados simultáneamente que sean flúor y

en la que R^1 , R^2 y R^3 no pueden ser seleccionados simultáneamente que sean metilo.

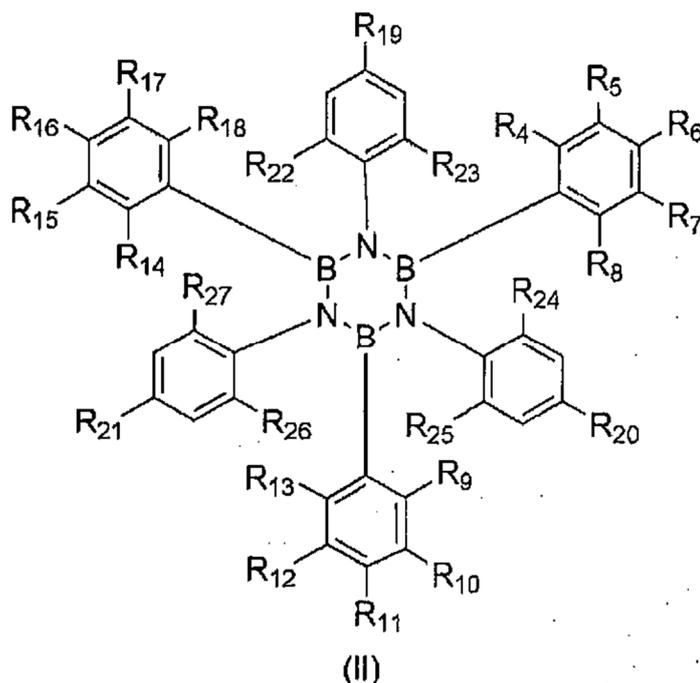
En el contexto de la presente invención, se ha encontrado sorprendentemente que los derivados de borazeno según la invención presentan excelente estabilidad al aire, que incluye resistencia a oxidación, hidrólisis, degradación o descomposición en condiciones atmosféricas/ambientales.

15 Sin estar limitados por la teoría, se cree que esta excelente estabilidad se debe al impedimento estérico alrededor de los átomos de boro creado por los sustituyentes particulares representados en la fórmula (I) anterior. Se cree en particular que la presencia de sustituyentes de los grupos a base de restos fenilo (sustituidos), como se definió anteriormente, crea protección estérica eficaz en particular alrededor de los átomos de boro de los derivados de borazeno de la invención en que están sustituidos.

20 También, se cree que la presencia de al menos un sustituyente en (preferiblemente todas) las posiciones orto de los grupos fenilo unidos a los átomos de boro de los derivados de borazeno de la invención desempeña un papel sustancial en la protección de los átomos de boro contra ataques nucleófilos en particular.

25 En algunos aspectos preferidos de los derivados de borazeno de la invención, los sustituyentes particulares presentes en los átomos de nitrógeno pueden participar en la creación de protección estérica mejorada adicional alrededor de los átomos de boro de los derivados de borazeno de la invención.

Preferiblemente, en el derivado no de acuerdo con la invención, cuando $n = 1$, el derivado de borazina presenta la fórmula (II):



en la que los sustituyentes R^4 a R^{18} son como se definió anteriormente; en la que los sustituyentes R^{19} a R^{27} son iguales o diferentes entre sí y

5 en la que cada uno de R^{19} a R^{27} se selecciona independientemente del grupo que consiste en: hidrógeno; grupo alquilo saturado lineal o ramificado; grupo alquilo insaturado lineal o ramificado; grupo cicloalquilo; grupo arilo; grupo aralquilo; grupo heteroarilo; grupo acilo; hidroxilo; grupo alcoxi; grupo ariloxi; grupo aciloxi; grupo amino; grupo alquilamino; grupo arilamino; grupo acilamino; grupo ciano; grupo carboxilo; grupo tio; grupo aminocarbonilo; grupo carbamoilo, grupo ariloxicarbonilo, grupo fenoxicarbonilo, grupo alcoxycarbonilo y halógeno.

10 Se ha encontrado sorprendentemente que los derivados de borazeno o borazina emiten en la región UV (típicamente en una región que corresponde a una longitud de onda comprendida entre 100 nm y 400 nm) como se representa en la FIG.2 a FIG.10.

15 Según un aspecto preferido, los derivados de borazeno según la invención presentan la capacidad de emitir (sustancialmente) exclusivamente en la región UV y son sustancialmente no emisores en la región visible. Esta propiedad específica proporcionará mejor control de emisión y pureza del color cuando se incluyen dichos derivados de borazeno en, por ej., dispositivos emisores de luz.

Sin embargo, algunos derivados de borazeno según la invención pueden emitir adicionalmente (al menos parcialmente) en la región UV - Visible.

20 Como se mencionó previamente, las fuentes de luz UV pueden encontrar uso particular en diversos campos, tales como almacenamiento óptico, fotocatalisis, esterilización y desinfección de líquidos tales como agua o herramientas quirúrgicas, detección de productos falsificados y en diversos métodos quirúrgicos o tratamientos médicos tales como cirugía oftálmica o tratamiento de la epilepsia.

25 Ventajosamente, los derivados de borazeno según la invención pueden emitir (esencialmente en la región UV) con un pico de emisión sorprendentemente agudo. Esta propiedad permite obtener fuentes de luz UV con características de emisión muy precisas, que pueden ser útiles en particular en, por ej., el campo de tratamiento/desinfección de agua.

30 Ventajosamente, los derivados de borazeno según la invención pueden emitir en la región UV con rendimiento cuántico sorprendentemente alto. Típicamente, rendimientos cuánticos por encima de 0,05, preferiblemente por encima de 0,3, más preferiblemente por encima de 0,4, incluso más preferiblemente por encima de 0,5, lo más preferiblemente por encima de 0,6. Los rendimientos cuánticos se miden típicamente en disolución o en estado sólido.

Más ventajosamente, los derivados de borazeno según la invención presentan sustituyentes que permiten ajustar las propiedades electrónicas de los derivados de borazeno. En ese contexto, se ha encontrado sorprendentemente que los derivados de borazeno de la invención, por selección apropiada de los sustituyentes unidos al borano y átomos

de nitrógeno de los derivados de borazeno, permiten la modulación fina de las propiedades de fluorescencia/emisión al tiempo que se conserva la emisión en la región UV y la estabilidad al aire y al tiempo que se conserva alto rendimiento cuántico de la emisión.

5 En el caso de derivados de borazina no de acuerdo con la invención, se puede realizar este ajuste sin afectar perjudicialmente (interferir o perturbar) las propiedades de emisión del anillo de borazina de por sí. Como tales, los sustituyentes de los grupos presentes en los derivados de borazina no de acuerdo con la presente invención se pueden considerar con anterioridad como "sustituyentes transparentes" puesto que proporcionan una contribución mínima a la emisión UV total del derivado de borazina, mientras la principal contribución a la emisión total de UV de los derivados de borazina se puede atribuir al anillo de borazina. Esta es una propiedad importante de los derivados de borazina no de acuerdo con la invención que proporciona mejor control de las propiedades de emisión de UV total y por último realización/eficacia mejorada de los dispositivos luminiscentes fabricados con los derivados de borazina.

10 Ventajosamente, los derivados de borazeno de la invención proporcionan sorprendentemente excelentes propiedades de procesabilidad y permiten en particular tratamiento de la disolución e impresión continua (tal como, por ej., impresión por chorro de tinta).

15 Otra ventaja sorprendente más de los derivados de borazeno, en particular los derivados de borazeno, de la invención reside en el hecho de que poseen alta movilidad de portador de carga, incluyendo excelentes propiedades de movilidad de electrones y de huecos.

20 De acuerdo con esto, los derivados de borazeno según la invención se pueden usar ventajosamente en la fabricación de dispositivos electrónicos, preferiblemente dispositivos electroluminiscentes y dispositivos semiconductores.

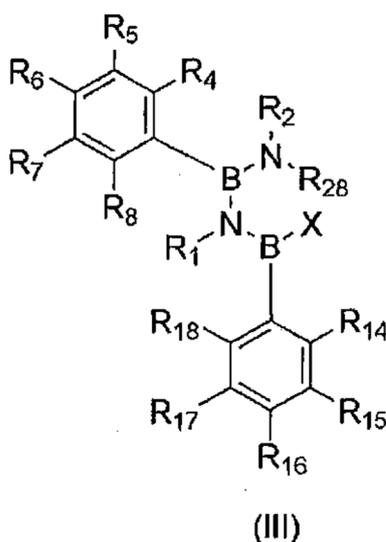
25 Los derivados de borazina no de acuerdo con la invención pueden encontrar uso particular en la fabricación de la capa emisora del dispositivo electroluminiscente, en particular un dispositivo orgánico emisor de luz (OLED). Los derivados de borazina no de acuerdo con la invención se pueden usar/incorporar en otras capas típicas de capas electroluminiscentes tales como por ej., capa de inyección de huecos, capa de transporte de huecos, capa de inyección de electrones y capa de transporte de electrones.

Los derivados de borazeno de la invención pueden encontrar uso particular en la fabricación de dispositivos semiconductores, preferiblemente transistores.

30 Otras aplicaciones de los derivados de borazeno de acuerdo con la invención incluyen, pero no se limitan a, uso como retardantes de llama, uso como aislante para condensadores, uso como material de hidrógeno, uso para la producción de cerámica, uso en terapia de neutrones como agente de captura de neutrones y uso en óptica no lineal.

Preferiblemente, en el derivado de borazina no de acuerdo con la invención como se describió anteriormente, al menos un sustituyente, preferiblemente todos los sustituyentes, seleccionados del grupo de R²², R²³, R²⁴, R²⁵, R²⁶ y R²⁷ se seleccionan independientemente que sean hidrógeno.

35 En el derivado de la invención, cuando n=0, el derivado de borazeno presenta la fórmula (III):



en la que los sustituyentes R^1 , R^2 , R^4 a R^8 y R^{14} a R^{18} son como se definió anteriormente;

en la que R^{28} se selecciona del grupo que consiste en: hidrógeno; grupo alquilo saturado lineal o ramificado; grupo alquilo insaturado lineal o ramificado; grupo cicloalquilo; grupo arilo; grupo aralquilo; grupo heteroarilo; grupo acilo; hidroxilo; grupo alcoxi; grupo ariloxi; grupo aciloxi; grupo amino; grupo alquilamino; grupo arilamino; grupo acilamino; grupo ciano; grupo carboxilo; grupo tio; grupo aminocarbonilo; grupo carbamoilo, grupo ariloxicarbonilo, grupo fenoxicarbonilo, grupo alcocixarbonilo y halógeno y

en la que X se selecciona del grupo que consiste en: hidroxilo; grupo alcoxi; grupo cicloalquiloxi; grupo ariloxi; grupo aralquiloxi; grupo aciloxi; grupo amino; grupo alquilamino; grupo cicloalquilamino; grupo dialquilamino; grupo arilamino; grupo aralquilamino; grupo diarilamino; grupo acilamino.

- 10 Preferiblemente, en los derivados de borazeno o borazina, al menos dos sustituyentes, preferiblemente todos los sustituyentes, seleccionados del grupo de R^4 , R^8 , R^9 , R^{13} , R^{14} y R^{18} se seleccionan independientemente del grupo que consiste en: grupos alquilo saturados lineales o ramificados, preferiblemente con 1 a 6 átomos de carbono, más preferiblemente con 1 a 4 átomos de carbono, incluso más preferiblemente con 1 a 3 átomos de carbono. Grupos alquilo saturados lineales o ramificados ejemplares para uso en la presente memoria incluyen, pero no se limitan a,
- 15 grupos metilo, etilo, n-propilo, isopropilo, n-butilo, isobutilo, terc-tiobutilo, pentilo y hexilo. Incluso más preferiblemente, en los derivados de borazeno o borazina, al menos dos sustituyentes, preferiblemente todos los sustituyentes, seleccionados del grupo de: R^4 , R^8 , R^9 , R^{13} , R^{14} y R^{18} se seleccionan independientemente del grupo que consiste en grupos metilo, etilo e isopropilo.

- 20 Preferiblemente, en los derivados de borazeno o borazina, al menos un sustituyente, preferiblemente todos los sustituyentes, seleccionados del grupo de: R^6 , R^{11} y R^{16} se seleccionan independientemente del grupo que consiste en grupos alquilo saturados lineales o ramificados y halógenos; preferiblemente del grupo que consiste en: grupos alquilo saturados lineales o ramificados con 1 a 6 átomos de carbono, más preferiblemente con 1 a 4 átomos de carbono, incluso más preferiblemente con 1 a 3 átomos de carbono. Grupos alquilo saturados lineales o ramificados ejemplares para uso en la presente memoria incluyen, pero no se limitan a, grupos metilo, etilo, n-propilo, isopropilo,
- 25 n-butilo, isobutilo, terc-tiobutilo, pentilo y hexilo. Incluso más preferiblemente, en los derivados de borazeno o borazina, al menos un sustituyente, preferiblemente todos los sustituyentes, seleccionados del grupo de: R^6 , R^{11} y R^{16} se seleccionan independientemente del grupo que consiste en grupos metilo, etilo e isopropilo.

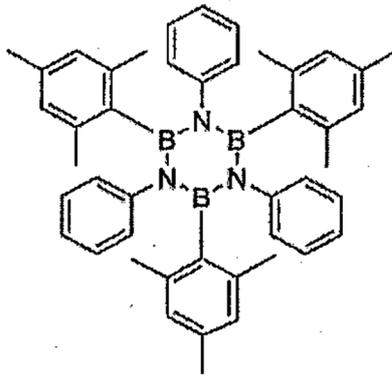
- 30 Preferiblemente, en el derivado de borazina no de acuerdo con la invención, al menos un sustituyente, preferiblemente todos los sustituyentes, seleccionados del grupo de R^{19} , R^{20} y R^{21} se seleccionan independientemente del grupo que consiste en hidrógeno y grupos alquilo saturados lineales o ramificados, preferiblemente con 1 a 12 átomos de carbono, más preferiblemente con 1 a 6 átomos de carbono, incluso más preferiblemente con 1 a 3 átomos de carbono. Grupos alquilo saturados lineales o ramificados ejemplares para uso en la presente memoria incluyen, pero no se limitan a, grupos metilo, etilo, n-propilo, iso-propilo, n-butilo, iso-butilo, tertio-butilo, pentilo, hexilo y dodecilo. Más preferiblemente, en el derivado (borazina) no según la invención, al
- 35 menos un sustituyente, preferiblemente todos los sustituyentes, seleccionados del grupo de R^{19} , R^{20} y R^{21} se seleccionan independientemente del grupo que consiste en hidrógeno y grupos dodecilo.

- 40 Preferiblemente, en los derivados de borazeno o borazina, cada uno de R^1 a R^3 se selecciona independientemente del grupo que consiste en: hidrógeno, grupo alquilo saturado lineal o ramificado, grupo cicloalquilo, grupo arilo y grupo aralquilo. Más preferiblemente, en los derivados de borazeno o borazina, cada uno de R^1 a R^3 se selecciona independientemente del grupo que consiste en hidrógeno, grupos isopropilo, ciclohexilo y fenilo.

Preferiblemente, en los derivados de borazeno de la invención, R^{28} se selecciona del grupo que consiste en: hidrógeno, grupo alquilo saturado lineal o ramificado, grupo cicloalquilo, grupo arilo y grupo aralquilo. Más preferiblemente, en el derivado de borazeno de la invención, R^{28} se selecciona del grupo que consiste en hidrógeno, grupos isopropilo, ciclohexilo y fenilo.

- 45 Preferiblemente, en los derivados de borazeno de la invención, X se selecciona del grupo que consiste en: hidroxilo, grupo alcoxi, grupo cicloalquiloxi, grupo ariloxi, grupo aralquiloxi, grupo amino, grupo alquilamino, grupo cicloalquilamino, grupo arilamino y grupo aralquilamino; preferiblemente del grupo que consiste en: hidroxilo, grupo alquilamino, grupo cicloalquilamino y grupo arilamino. Más preferiblemente, en el derivado de borazeno de la invención, X se selecciona del grupo que consiste en: hidroxilo, grupo ciclohexilamino, grupo bencilamino y grupo isopropilamino.
- 50

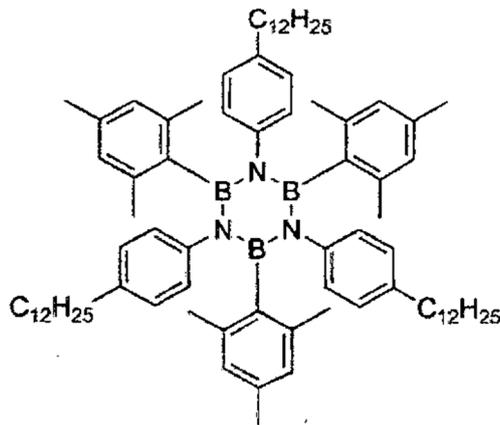
Según un aspecto preferido no según la invención, el derivado de borazina es según la fórmula (II), en la que R^4 , R^6 , R^8 , R^9 , R^{11} , R^{13} , R^{14} , R^{16} y R^{18} son grupos metilo y en la que R^5 , R^7 , R^{10} , R^{12} , R^{15} , R^{17} y R^{19} a R^{27} se seleccionan que sean hidrógeno. De acuerdo con esto, en un aspecto preferido no según la invención, el derivado de borazina está representado por la siguiente fórmula (1):



(1)

Según otro aspecto preferido no según la invención, el derivado de borazina es según la fórmula (II), en la que R^4 , R^6 , R^8 , R^9 , R^{11} , R^{13} , R^{14} , R^{16} y R^{18} son grupos metilo; en la que R^5 , R^7 , R^{10} , R^{12} , R^{15} y R^{17} y R^{22} a R^{27} se seleccionan que sean hidrógeno y en la que R^{19} , R^{20} , R^{21} son grupos dodecilo. De acuerdo con esto, en un aspecto preferido no según la invención, el derivado de borazina está representado por la siguiente fórmula (2):

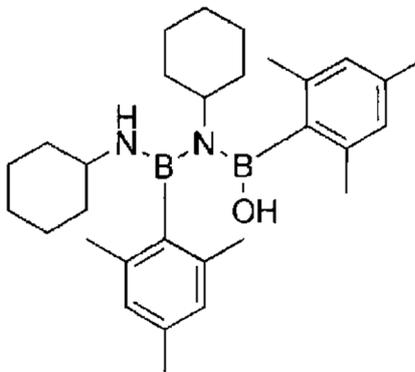
5



(2)

Según otro aspecto preferido más, el derivado de borazeno de la invención es según la fórmula (III), en la que R^1 y R^2 son grupos ciclohexilo; en la que R^4 , R^6 , R^8 , R^{14} , R^{16} y R^{18} son grupos metilo; en la que R^5 , R^7 , R^{15} , R^{17} y R^{28} se seleccionan que sean hidrógeno y en la que X se selecciona que sea grupo hidroxilo. De acuerdo con esto, en un aspecto preferido, el derivado de borazeno de la invención está representado por la siguiente fórmula (3):

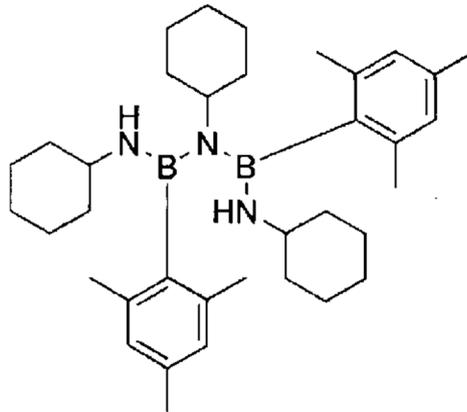
10



(3)

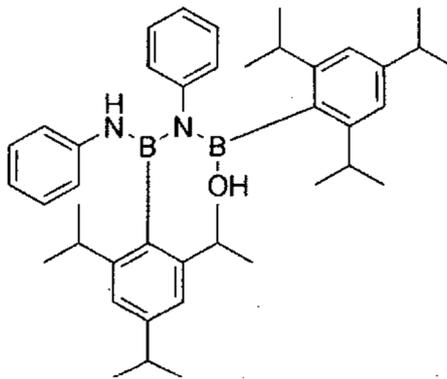
Según otro aspecto preferido más, el derivado de borazeno de la invención es según la fórmula (III), en la que R^1 y R^2 son grupos ciclohexilo; en la que R^4 , R^6 , R^8 , R^{14} , R^{16} y R^{18} son grupos metilo; en la que R^5 , R^7 , R^{15} , R^{17} y R^{28} se

seleccionan que sean hidrógeno y en la que X se selecciona que sea grupo ciclohexilamino. De acuerdo con esto, en un aspecto preferido, el derivado de borazeno de la invención está representado por la siguiente fórmula (4):



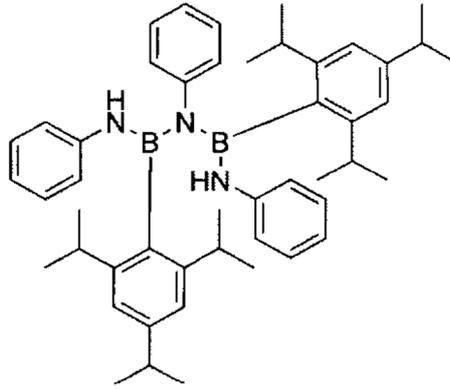
(4)

- 5 Según otro aspecto preferido más, el derivado de borazeno de la invención es según la fórmula (III), en la que R¹ y R² son grupos bencilo; en la que R⁴, R⁶, R⁸, R¹⁴, R¹⁶ y R¹⁸ son grupos isopropilo; en la que R⁵, R⁷, R¹⁵, R¹⁷ y R²⁸ se seleccionan que sean hidrógeno y en la que X se selecciona que sea grupo hidroxilo. De acuerdo con esto, en un aspecto preferido, el derivado de borazeno de la invención está representado por la siguiente fórmula (5):



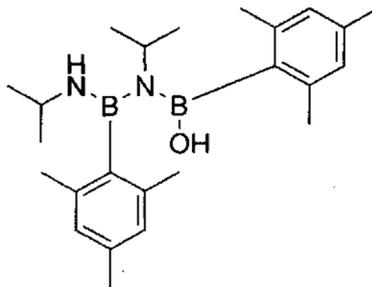
(5)

- 10 Según otro aspecto preferido más, el derivado de borazeno de la invención es según la fórmula (III), en la que R¹ y R² son grupos bencilo; en la que R⁴, R⁶, R⁸, R¹⁴, R¹⁶ y R¹⁸ son grupos isopropilo; en la que R⁵, R⁷, R¹⁵, R¹⁷ y R²⁸ se seleccionan que sean hidrógeno y en la que X se selecciona que sea grupo bencilamino. De acuerdo con esto, en un aspecto preferido, el derivado de borazeno de la invención está representado por la siguiente fórmula (6):



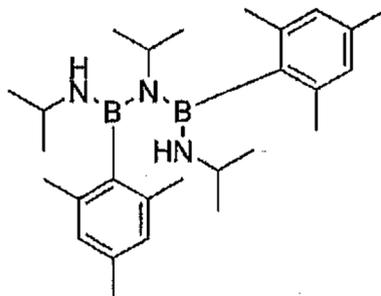
(6)

5 Según otro aspecto preferido más, el derivado de borazeno de la invención es según la fórmula (III), en la que R^1 y R^2 son grupos isopropilo; en la que R^4 , R^6 , R^8 , R^{14} , R^{16} y R^{18} son grupos metilo; en la que R^5 , R^7 , R^{15} , R^{17} y R^{28} se seleccionan que sean hidrógeno y en la que X se selecciona que sea grupo hidroxilo. De acuerdo con esto, en un aspecto preferido, el derivado de borazeno de la invención está representado por la siguiente fórmula (7):



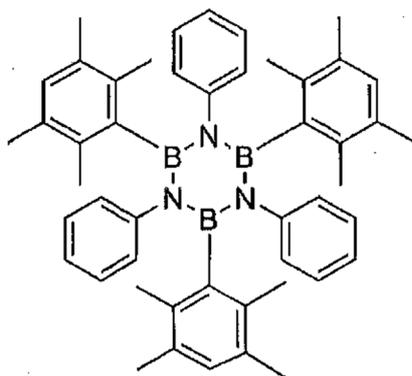
(7)

10 Según otro aspecto preferido más, el derivado de borazeno de la invención es según la fórmula (III), en la que R^1 y R^2 son grupos isopropilo; en la que R^4 , R^6 , R^8 , R^{14} , R^{16} y R^{18} son grupos metilo; en la que R^5 , R^7 , R^{15} , R^{17} y R^{28} se seleccionan que sean hidrógeno y en la que X se selecciona que sea grupo isopropilamino. De acuerdo con esto, en un aspecto preferido, el derivado de borazeno de la invención está representado por la siguiente fórmula (8):



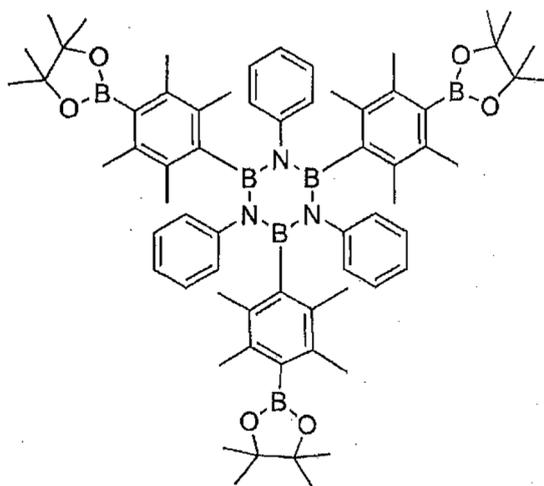
(8)

15 Según otro aspecto preferido más no según la invención, el derivado de borazina es según la fórmula (II), en la que R^4 , R^5 , R^7 , R^8 , R^9 , R^{10} , R^{12} , R^{13} , R^{14} , R^{15} , R^{17} y R^{18} son grupos metilo y en la que R^6 , R^{11} , R^{16} y R^{19} a R^{27} se seleccionan que sean hidrógeno. De acuerdo con esto, en un aspecto preferido no según la invención, el derivado de borazina está representado por la siguiente fórmula (9):



(9)

Según otro aspecto preferido más no según la invención, el derivado de borazina está representado por la siguiente fórmula (10):



(10)

- 5 Ventajosamente, los derivados de borazina no de acuerdo con la presente invención se pueden sintetizar fácilmente de acuerdo con protocolos sintéticos clásicos y establecidos. Las rutas sintéticas adecuadas se identificarán fácilmente por los expertos en la materia de la química orgánica sintética.

Una ruta sintética ejemplar y adecuada para los derivados de borazina no de acuerdo con la invención se describe, por ej., por Wakamiya et al. en *J. Am. Chem. Soc.* 2.005, **127**, 14.859.

- 10 Una ruta ejemplar general para la síntesis de derivados de acuerdo con la fórmula (I) implica la reacción de condensación de derivado de amina primaria con tricloruro de boro, formando un compuesto intermedio de borazol N,N,N"-trisustituido-B, B, B"-tricluro (9) seguido por sustitución en los átomos de boro del borazol clorado por derivado (10) litiado como se describe en la FIG.11. La figura 11 describe la estrategia sintética general para la formación de derivados de acuerdo con la fórmula (I), en la que: a) BCl₃, tolueno anhidro, reflujo, 16 h; b) BuLi, THF anhidro, -78°C, 1 h 30; c) t. a., 3 h.
- 15

- Una ruta ejemplar general para la síntesis de derivados de borazina de acuerdo con la fórmula (II) implica la reacción de condensación de derivado de anilina con tricloruro de boro, formando un compuesto intermedio de borazol N,N,N"-trifenil sustituido -B,B, B"-tricluro (11) seguido por sustitución en los átomos de boro del borazol clorado por derivado (10) litiado como se describe en la FIG.12. La figura 12 describe la estrategia sintética general para la formación de derivados de borazina de acuerdo con la fórmula (II), en la que: a) BCl₃, tolueno anhidro, reflujo, 16 h; b) BuLi, THF anhidro, -78°C, 1 h 30; c) t. a., 3 h.
- 20

- Según otro aspecto, la presente invención se refiere a un dispositivo electrónico que comprende al menos una capa que comprende un derivado de borazeno como se describió anteriormente. El dispositivo electrónico según la presente invención se selecciona preferiblemente del grupo que consiste en dispositivos electroluminiscentes y semiconductores.
- 25

- 5 En un aspecto preferido, el dispositivo electrónico de la invención es un dispositivo electroluminiscente, preferiblemente un OLED, en el que la capa es preferiblemente la capa emisora. Alternativamente, la capa que comprende un derivado de borazeno de la invención puede ser cualquiera de otras capas típicas de capas electroluminiscentes tales como por ej., capa de inyección de huecos, capas de transporte de huecos, capa de inyección de electrones y capa de transporte de electrones.
- Según el aspecto preferido en el que el dispositivo electrónico de la invención es un dispositivo electroluminiscente, dicho dispositivo comprende preferiblemente al menos una capa que comprende un derivado de borazina no de acuerdo con la invención como se describió anteriormente.
- 10 En otro aspecto preferido, el dispositivo electrónico de la invención es un dispositivo semiconductor. Más preferiblemente, el dispositivo electrónico de la invención es un transistor.
- Según el aspecto preferido en el que el dispositivo electrónico de la invención es un dispositivo semiconductor, preferiblemente un transistor, dicho dispositivo comprende preferiblemente un derivado de borazeno como se describió anteriormente.
- 15 Según otro aspecto más de la presente invención, se proporciona un método para la fabricación de un dispositivo electrónico que comprende la etapa de incluir un derivado de borazeno como se describió anteriormente, en el que el dispositivo electrónico se selecciona preferiblemente del grupo que consiste en dispositivos electroluminiscentes y semiconductores.
- 20 Preferiblemente, en el método de la presente invención, el dispositivo electrónico es un dispositivo electroluminiscente, más preferiblemente y OLED. Más preferiblemente, en el método de la presente invención el derivado de borazeno se incluye en la capa emisora del OLED. Alternativamente, el derivado de borazeno de la invención se puede incluir en cualquiera de otras capas típicas de capas electroluminiscentes tales como, por ej., capa de inyección de huecos, capa de transporte de huecos, capa de inyección de electrones y capa de transporte de electrones.
- 25 Según el aspecto preferido en el que el método de la invención se dirige a la fabricación de un dispositivo electroluminiscente, dicho método comprende preferiblemente la etapa de incluir un derivado de borazeno no de acuerdo con la invención como se describió anteriormente.
- En otro aspecto preferido del método de la presente invención, el dispositivo electrónico es un dispositivo semiconductor, más preferiblemente un transistor. De acuerdo con este aspecto preferido, el método comprende preferiblemente la etapa de incluir un derivado de borazeno como se describió anteriormente.
- 30 Según otro aspecto más, la presente invención se refiere al uso de derivados de borazeno como se describió anteriormente para la fabricación de un dispositivo electrónico. Preferiblemente, el derivado de borazeno de la invención se usa para la fabricación de un dispositivo seleccionado del grupo que consiste en dispositivos electroluminiscentes y semiconductores.
- 35 En un aspecto preferido, el derivado de borazeno de la invención se usa para la fabricación de un OLED, en el que el derivado de borazeno se usa preferiblemente para la fabricación de la capa emisora del OLED. Alternativamente, los derivados de borazeno de la invención se pueden usar para la fabricación de otras capas típicas de capas electroluminiscentes tales como por ej., capa de inyección de huecos, capa de transporte de huecos, capa de inyección de electrones y capa de transporte de electrones.
- 40 Según el aspecto preferido de la invención en el que se prevé la fabricación de un dispositivo electroluminiscente, se hace uso preferiblemente de derivados de borazina no de acuerdo con la invención como se describió anteriormente.
- En otro aspecto preferido, los derivados de borazeno de la invención se usan para la fabricación de un dispositivo semiconductor, preferiblemente un transistor.
- 45 Según el aspecto preferido alternativamente de la invención en el que se prevé la fabricación de un dispositivo semiconductor, preferiblemente un transistor, se hace uso preferiblemente de derivados de borazeno como se describió anteriormente.
- En otro aspecto más, la presente invención se refiere a una composición orgánica que comprende derivados de borazeno como se describió anteriormente. Preferiblemente, la composición orgánica es una composición de tinta adecuada para uso en un procedimiento de impresión continua, más preferiblemente en un procedimiento de impresión por chorro de tinta.
- 50 En el contexto de la presente invención, se ha encontrado sorprendentemente que los derivados de borazeno según la invención presentan excelente solubilidad en disolventes orgánicos comunes, que los hace adecuados para la preparación de, por ej., tintas orgánicas que a su vez se pueden usar en la fabricación de, por ej., los OLED por, por ej., disolución de deposición. Sin estar limitados por la teoría, se cree que la fuerte solubilidad (mejorada) de algunos de los derivados de borazina no de acuerdo con la invención es debida a la presencia de sustituyentes, tales como

por ej., cadenas alquílicas en los correspondientes anillos fenílicos.

EJEMPLOS

Ejemplo 1 (útil para comprender la invención)

Síntesis detallada de compuestos intermedios de borazina N,N',N"-trifenil-B,B,B"-tri(2,4,6-trimetil)fenilborazina (1).

5 Referencia: Yamagushi, JACS, 2.005, página 14.859.

10 En un matraz Schlenk de 25 ml, seco, se diluye anilina anhidra (370 mg, 4 mmoles) con 8 ml de tolueno anhidro. Se deja enfriar la disolución a -5°C (baño de sal de hielo). Después se añade gota a gota tricloruro de boro (5,2 ml, 5,2 mmoles, disolución 1 M en tolueno) que proporciona un precipitado blanco. Se cambia el septo por un condensador seco que lleva en la parte de arriba un tubo de cloruro de calcio. Se calienta la mezcla de reacción durante 16 horas. Después de este período, se deja enfriar el matraz y se somete a tres ciclos de congelación a descongelación para retirar el cloruro de hidrógeno.

15 Preparación del litiado: en un matraz Schlenk de 50 ml, seco, se diluye bromomesitileno (876 mg, 4,4 mmoles) con 10 ml de THF anhidro. Se deja enfriar la disolución a -78°C y se añade gota a gota butil litio (3,8 ml, 5,2 mmoles) recién valorado. Se deja calentar el matraz hasta 0°C durante 1 h. El color cambia de transparente a amarillo claro. La borazina es canulada gota a gota al litiado a 0°C y se deja reaccionar a temperatura ambiente. Se toman alícuotas después de 3 h y 24 h, el análisis RMN no muestra cambios entre las dos muestras. Después de 24 h, se enfría rápidamente la reacción mediante 20 ml de agua. Se extrae tres veces la capa acuosa con 20 ml de acetato de etilo. Se seca la capa orgánica sobre sulfato de magnesio, se filtra y se retiran los disolventes a vacío. Se purifica el bruto mediante cromatografía de gel de sílice, acetato de etilo-ciclohexano (1:5) (Rf=0,5).

20 El compuesto cristaliza en:

a) Diclorometano (t. a., evaporación lenta, agujas grandes)

b) Ciclohexano (t. a., evaporación lenta, hexágono que se rompe cuando se secan)

c) Pentano, hexano o acetato de metilo (5°C, hexágono obtenido con ciclohexano convertido lentamente en estas formas más estables, diversos aspectos, pirámide, paralelogramo, etc.).

25 ^1H (400 MHz, CDCl_3 , 25°C): δ (ppm) 6,82-6,80 (d de d, 8 Hz, 6 H, H_2); 6,77-6,71 (m, 9 H, H_3 y H_4); 6,32 (s, 6 H, H_7); 2,22 (s, 18 H, H_9) 1,97 (s, 9 H, H_{10}) ^{13}C (100 MHz, CDCl_3 , 25°C) δ (ppm) 146,4 (C_1); 137,3; 136,1; 127,0; 126,7; 126,2; 23,1 (C_9); 21,1 (C_{10}).

^{11}B (100 MHz, CDCl_3 , 25°C) δ (ppm) 38-35 (d).

30 ^1H (400 MHz, C_6D_6 , 25°C): δ (ppm) 7,16 (d, 6,8 Hz, 6 H, H_2); 6,78 (t, 8 Hz, 6 H, H_3), 6,58 (t, 7,6 Hz, 3 H, H_4); 6,47 Hz (s, 6 H, H_7); 2,51 (s, 18 H, H_9); 1,86 (s, 9 H, H_{10}).

IR: Sólido, KBr, (cm^{-1}) 3.027 (CH aromático); 2.914; 2.854 (CH alquilo); 1.611; 1.597; 1.491; 1.359 (B-N) 1.308;

Espectrometría de masas: $\text{C}_{45}\text{H}_{48}\text{N}_3\text{B}_3$, Teoría: M= 663,3157; Masa Exacta = 663,4127.

UV: Disolvente: acetonitrilo. Máximos de absorción: 259 nm ($\epsilon= 6,4 \cdot 10^3$); 265 nm ($\epsilon= 11 \cdot 10^3$); 271 nm ($\epsilon= 9,7 \cdot 10^3$), 217 nm.

35 Fluorescencia: Disolvente: acetonitrilo. Excitación: 264 nm. Emisión: 305 nm.

Solubilidad:

Disolvente	Miligramo/mililitro
Tolueno	45
Acetato de etilo	62
Diclorometano	102
Cloroformo	54

Ejemplo 2 (útil para entendimiento de la invención)

Síntesis detallada de compuesto intermedio de borazina N,N',N"-tri(4-dodecil)fenil-B,B,B"-tri(2,4,6-trimetil)fenilborazina (2).

Referencia: Yamagushi, JACS, 2.005, pág. 14.859

- 5 En un matraz Schlenk de 25 ml, seco, se diluye 4-dodecilanilina anhidra (261,46 mg, 1 mmol) con 8 ml de tolueno anhidro. Se deja enfriar la disolución a -5°C (baño de sal de hielo). Después se añade gota a gota tricloruro de boro (1,3 ml, 1,3 mmoles, disolución 1 M en tolueno) que proporciona un precipitado blanco. Se cambia el septo por un condensador seco que lleva en la parte de arriba un tubo de cloruro de calcio. Se calienta la mezcla de reacción durante 18 h. Después de este período, se deja enfriar el matraz y se somete a tres ciclos de congelación a descongela-
10 ción para retirar el cloruro de hidrógeno.

- Preparación del litiado: en un matraz Schlenk de 50 ml, seco, se diluye bromomesitileno (219 mg, 1,1 mmoles) con 10 ml de THF anhidro. Se deja enfriar la disolución a -78°C y se añade gota a gota butil-litio (3,8 ml, 5,2 mmoles) recién valorado. Se deja calentar el matraz hasta 0°C durante 1 h. El color cambia de transparente a amarillo claro. Se canula gota a gota la borazina al litiado a 0°C y se deja reaccionar a temperatura ambiente. Después de 15 h se
15 enfría rápidamente la reacción mediante 20 ml de agua. Se extrae tres veces la capa acuosa con 20 ml de acetato de etilo. Se seca la capa orgánica sobre sulfato de magnesio, se filtra y se retiran los disolventes a vacío. Se purifica el bruto mediante cromatografía de gel de sílice, ciclohexano:diclorometano (1:4) (Rf=0,2).

- ¹H (400 MHz, CDCl₃, 25°C) δ (ppm) 6,66 (d, 8 Hz, 6 H, H₃); 6,50 (d, 8 Hz, 6 H, H₂); 6,31 (s, 6 H, H₇); 2,26 (t, 6,2 Hz, 6 H, Ph-CH₂-CH₂), 2,18 (s, 18 H, H₉), 1,97 (s 9 H, H₁₀); 1,32-1,25 (d, 19 H, alquilo), 0,88 (t, 6,6 Hz, CH₂-CH₃).

- 20 ¹³C (100 MHz, CDCl₃, 25°C) δ (ppm) 143,9 (C₁); 138,0; 137,3; 136,9; 135,7; 126,7 (C₃); 126,6 (C₂); 126,0 (C₇); 34,9 (Ph-CH₂-CH₂), 32,0; 31,0; 29,8; 29,7; 23,1 (C₉); 23,0; 21,1 (C₁₀); 14,2 (CH₂-CH₃).

¹¹B (100 MHz, CDCl₃, 25°C) δ (ppm) 38-35 (d).

IR: Sólido. KBr. (cm⁻¹) 2.925 (CH aromático); 2.853 (CH alquilo); 1.611; 1.509; 1.438; 1.361 (B-N) 1.301; 847.

Espectrometría de masas: C₈₁H₁₂₀N₃B₃, Teoría: M= 1.168,2939; Masa Exacta= 1.167,9761.

- 25 Solubilidad: El compuesto es un aceite, que es miscible con tolueno, acetato de etilo, diclorometano, benceno y cloroformo.

Ejemplo 3

- Síntesis detallada de compuesto intermedio (3) de borazeno. En un matraz Schlenk de 25 ml, seco, se diluye ciclohexilamina anhidra (991,76 mg, 10 mmoles) con 3 ml de tolueno anhidro. Se deja enfriar la disolución a -5°C (baño de sal de hielo). Después se añade gota a gota tricloruro de boro (12 ml, 12 mmoles, disolución 1 M en tolueno). Se cambia el septo por un condensador seco que lleva en la parte de arriba un tubo de cloruro de calcio. Se calienta la mezcla de reacción durante 15 h. Después de este período, se deja enfriar el matraz y se somete a tres ciclos de congelación a descongela-
30 ción para retirar el cloruro de hidrógeno.

- Preparación del litiado: en un matraz Schlenk de 100 ml, seco, se diluye bromomesitileno (2,189 mg, 11 mmoles) con 60 ml de THF anhidro. Se deja enfriar la disolución a -78°C y se añade gota a gota butil litio (13 ml, 13 mmoles) recién valorado. Se deja calentar el matraz hasta 0°C durante 1 h. El color cambia de transparente a amarillo claro. Se canula gota a gota el borazeno al litiado a 0°C y se deja reaccionar a temperatura ambiente. Después de 25 h, se
35 enfría rápidamente la reacción mediante 20 ml de agua. Se extrae tres veces la capa acuosa con 40 ml de acetato de etilo. Se seca la capa orgánica sobre sulfato de magnesio, se filtra y se retiran los disolventes a vacío. Se purifica el bruto por precipitación de ciclohexilamonio en acetonitrilo.

- ¹H (400 MHz, CDCl₃, 25°C) δ (ppm) (rotámero) 6,80-6,55 (s), 2,85 (m), 2,15 (s, metilos), 1,86 (m), 1,65 (m), 1,50 (m), 1,22 (m), 1,04 (m).

¹¹B (400 MHz, CDCl₃, 25°C) δ (ppm) 36,2 (s), 30,7 (s).

- 45 ¹³C (400 MHz, CDCl₃, 25°C) δ (ppm) 138,5; 138,4; 137,8; 127,1; 127,1; 127,0; 126,8; 56,7; 34,6; 26,6; 25,8; 22,4; 22,2; 22,0; 21,2.

IR: Sólido. KBr. (cm⁻¹) 3.393 (NH), 2.927 (CH aromático), 2.853 (CH alquilo), 1.609, 1.486, 1.356 (BN), 1.283.

Espectrometría de masas: C₃₀H₄₆N₂OB₂, Teoría: Calculado (MH⁺) = 473,3875; Masa Exacta= 473,3853.

C₃₆H₅₇N₃B₂, Teoría: Calculado= 553,4739 Masa Exacta= 554,1.

UV: Disolvente: acetonitrilo. Máximos de absorción: 209 nm

Fluorescencia: Disolvente: acetonitrilo. Excitación: 278 nm. Emisión: 318 nm.

Solubilidad: El compuesto es un aceite, que es miscible con tolueno, acetato de etilo, diclorometano, benceno, cloroformo y acetonitrilo.

Ejemplo 4

5 Síntesis detallada de compuesto intermedio (5) de borazeno. En un matraz Schlenk de 25 ml, seco, se diluye anilina anhídra (335,26 mg, 3,6 mmoles) con 4 ml de tolueno anhídro. Se deja enfriar la disolución a -5°C (baño de sal de hielo). Después se añade gota a gota tricloruro de boro (4,7 ml, 4,7 mmoles, disolución 1 M en tolueno). El septo se cambia por un condensador seco que lleva en la parte de arriba un tubo de cloruro de calcio. Se calienta la mezcla de reacción durante 17 h. Después de este período, se deja enfriar el matraz y se somete a tres ciclos de congelación a descongelación para retirar el cloruro de hidrógeno.

10 Preparación del litiado: en un matraz Schlenk de 50 ml, seco, se diluye 1-bromo-2,4,6-triisopropilbenceno (1.230 mg, 4 mmoles) con 20 ml de THF anhídro. Se deja enfriar la disolución a -78°C y se añade gota a gota butil litio (3,5 ml, 4,3 mmoles) recién valorado. Se deja calentar el matraz hasta 0°C durante 1 h. El color cambia de transparente a amarillo claro. Se canula gota a gota el borazeno al litiado a 0°C y se deja reaccionar a temperatura ambiente.

15 Después de 20 h, se enfría rápidamente la reacción mediante 20 ml de agua. Se extrae tres veces la capa acuosa con 40 ml de acetato de etilo. Se seca la capa orgánica sobre sulfato de magnesio, se filtra y se retiran los disolventes a vacío. Se purifica el bruto mediante columna de cromatografía para obtener un sólido blanco. Eluyente: ciclohexano:diclorometano (1:1). Cristal obtenido en pentano. Grupo espacial: P21/n.

20 ^1H (400 MHz, CDCl_3 , 25°C) δ (ppm) (rotámero) 7,20 (m), 7,12 (s), 7,07 (m), 6,90 (s), 6,84 (t), 6,71 (m), 6,64 (s), 6,58 (m), 6,13-6,07 (s), 5,32 (d), 5,2 (s), 3,18-2,88 (m), 1,31-1,09 (m).

^{11}B (400 MHz, CDCl_3 , 25°C) δ (ppm) 30,69.

^{13}C (400 MHz, CDCl_3 , 25°C) δ (ppm) (rotámeros) 151,1; 148,8; 148,0; 145,3; 143,4; 129,3; 129,1; 128,8; 128,5; 128,0; 125,7; 122,0; 121,6; 121,6; 119,4; 119,1; 118,8; 35,6; 35,3; 35,2; 35,0; 34,5; 34,1; 26,8; 25,3; 25,2; 24,7; 24,25; 24,2; 24,0; 23,8; 22,7.

25 IR: Sólido. KBr. (cm^{-1}) 3.373 (OH) 2.959 (CH aromático), 2.869 (CH alquilo), 1.517, 1.462, 1.361 (BN), 1.312, 1.196.

Espectrometría de masas: $\text{C}_{42}\text{H}_{58}\text{N}_2\text{OB}_2$, Teoría: Calculado= 628,4735; Masa Exacta= 668,4735.

$\text{C}_{48}\text{H}_{63}\text{N}_3\text{OB}_2$, Teoría: Calculado= 703,5208; Masa Exacta= 703,5180.

UV: Disolvente: acetonitrilo. Máximos de absorción: 209 nm.

Fluorescencia: Disolvente: acetonitrilo. Excitación: 278 nm. Emisión: 318 nm.

30 Ejemplo 5

Síntesis detallada de compuesto intermedio (7) de borazeno. En un matraz Schlenk de 25 ml, seco, se diluye isopropilamina anhídra (298 mg, 5 mmoles) con 2 ml de tolueno anhídro. Se deja enfriar la disolución a -5°C (baño de sal de hielo). Después se añade gota a gota tricloruro de boro (6 ml, 6 mmoles, disolución 1 M en tolueno). Se cambia el septo por un condensador seco que lleva en la parte de arriba un tubo de cloruro de calcio. Se calienta la mezcla de reacción durante 16 h. Después de este período, se deja enfriar el matraz y se somete a tres ciclos de congelación a descongelación para retirar el cloruro de hidrógeno.

40 Preparación del litiado: en un matraz Schlenk de 50 ml, seco, se diluye bromomesitileno (1.094 mg, 5,5 mmoles) con 20 ml de THF anhídro. Se deja enfriar la disolución hasta -78°C y se añade gota a gota butil litio (3 ml, 6 mmoles) recién valorado. Se deja calentar el matraz a 0°C durante 1 h. El color cambia de transparente a amarillo claro. Se canula gota a gota el borazeno al litiado a 0°C y se deja reaccionar a temperatura ambiente. Después de 15 h, se enfría rápidamente la reacción mediante 10 ml de agua. Se extrae tres veces la capa acuosa con 20 ml de acetato de etilo. Se seca la capa orgánica sobre sulfato de magnesio, se filtra y se retiran los disolventes a vacío. Se purifica el bruto mediante columna de cromatografía para obtener un sólido blanco. Eluyente: ciclohexano:diclorometano (1:1). Cristal obtenido en pentano. Grupo espacial: P21/n.

45 ^1H (400 MHz, CDCl_3 , 25°C) δ (ppm) (rotámero) 6,76 (s), 6,75 (s), 3,70 (m), 2,60 (m), 1,25-1,23 (m), 0,43 (m).

^{11}B (400 MHz, CDCl_3 , 25°C) δ (ppm) 34,38.

^{13}C (400 MHz, CDCl_3 , 25°C) δ (ppm) (rotámeros) 138,8; 138,6; 138,0; 127,5; 126,9; 50,1; 47,5; 43,7; 25,9; 23,9; 21,5; 21,2.

50 IR: Sólido. KBr. (cm^{-1}) 3.536 (OH), 3.390 (NH) 2.993 (CH aromático), 2.863 (CH alquilo), 1.609, 1.450, 1.348 (BN), 1.327, 1.277.

ES 2 530 353 T3

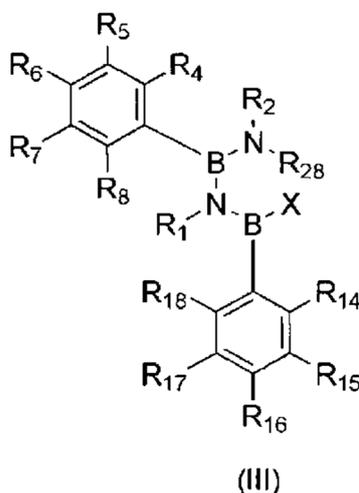
Espectrometría de masas: $C_{24}H_{38}N_2OB_2$, Teoría: $M= 392,3170$; Masa Exacta= $392,3179$.

UV: Disolvente: acetonitrilo. Máximos de absorción: 208 nm.

Fluorescencia: Disolvente: acetonitrilo. Excitación: 278 nm. Emisión: 302 nm.

REIVINDICACIONES

1. Un derivado que tiene la fórmula (III):



en la que los sustituyentes R^1 , R^2 , R^4 a R^8 y R^{14} a R^{18} son iguales o diferentes entre sí;

5 en la que cada uno de R^1 , R^2 , R^4 a R^8 y R^{14} a R^{18} se selecciona independientemente del grupo que consiste en: hidrógeno; grupo alquilo saturado lineal o ramificado; grupo alquilo insaturado lineal o ramificado; grupo cicloalquilo; grupo arilo; grupo aralquilo; grupo heteroarilo; grupo acilo; hidroxilo; grupo alcoxi; grupo ariloxi; grupo aciloxi; grupo amino; grupo alquilamino; grupo arilamino; grupo acilamino; grupo ciano; grupo carboxilo; grupo tio; grupo aminocarbonilo; grupo carbamoilo, grupo ariloxicarbonilo, grupo fenoxicarbonilo, grupo alcoxycarbonilo y halógeno;

10 en la que R^4 , R^8 , R^{14} y R^{18} no pueden ser seleccionados simultáneamente que sean hidrógeno;

R^4 a R^8 y R^{14} a R^{18} no pueden ser seleccionados simultáneamente que sean flúor;

en la que R^1 y R^2 no pueden ser seleccionados simultáneamente que sean metilo;

15 en la que R^{28} se selecciona del grupo que consiste en: hidrógeno; grupo alquilo saturado lineal o ramificado; grupo alquilo insaturado lineal o ramificado; grupo cicloalquilo; grupo arilo; grupo aralquilo; grupo heteroarilo; grupo acilo; hidroxilo; grupo alcoxi; grupo ariloxi; grupo aciloxi; grupo amino; grupo alquilamino; grupo arilamino; grupo acilamino; grupo ciano; grupo carboxilo; grupo tio; grupo aminocarbonilo; grupo carbamoilo, grupo ariloxicarbonilo, grupo fenoxicarbonilo, grupo alcoxycarbonilo y halógeno; en la que X se selecciona del grupo que consiste en: hidroxilo; grupo alcoxi; grupo cicloalquiloxi; grupo ariloxi; grupo aralquiloxi; grupo aciloxi; grupo amino; grupo alquilamino; grupo cicloalquilamino; grupo dialquilamino; grupo arilamino; grupo aralquilamino; grupo diarilamino; grupo acilamino

20 y

en la que al menos un sustituyente seleccionado del grupo de R^6 y R^{16} se selecciona independientemente del grupo que consiste en grupos alquilo saturados lineales o ramificados, preferiblemente con 1 a 6 átomos de carbono, más preferiblemente con 1 a 4 átomos de carbono, incluso más preferiblemente con 1 a 3 átomos de carbono.

25 2. Un derivado según cualquiera de las reivindicaciones precedentes, en el que al menos dos sustituyentes, preferiblemente todos los sustituyentes seleccionados del grupo de R^4 , R^8 , R^{14} y R^{18} se seleccionan independientemente del grupo que consiste en grupos alquilo saturados lineales o ramificados, preferiblemente con 1 a 6 átomos de carbono, más preferiblemente con 1 a 4 átomos de carbono, incluso más preferiblemente con 1 a 3 átomos de carbono.

30 3. Un derivado según la reivindicación 1 ó 2, en el que cada uno de R^1 , R^2 y R^{28} se selecciona independientemente del grupo que consiste en: hidrógeno, grupo alquilo saturado lineal o ramificado, grupo cicloalquilo, grupo arilo y grupo aralquilo.

35 4. Un derivado según cualquiera de las reivindicaciones 1 a 3, en el que X se selecciona del grupo que consiste en: hidroxilo, grupo alcoxi, grupo cicloalquiloxi, grupo ariloxi, grupo aralquiloxi, grupo amino, grupo alquilamino, grupo cicloalquilamino, grupo arilamino y grupo aralquilamino; preferiblemente del grupo que consiste en: hidroxilo, grupo alquilamino, grupo cicloalquilamino y grupo arilamino.

5. Un derivado según cualquiera de las reivindicaciones 1 a 4, capaz de emitir en la región UV con un rendimiento cuántico por encima de 0,05, preferiblemente por encima de 0,3, más preferiblemente por encima de 0,4, incluso

más preferiblemente por encima de 0,5, lo más preferiblemente por encima de 0,6.

6. Un método para la fabricación de un dispositivo electrónico que comprende la etapa de incluir un derivado según cualquiera de las reivindicaciones 1 a 5, en el que el dispositivo electrónico se selecciona preferiblemente del grupo que consiste en dispositivos electroluminiscentes y semiconductores.

5 7. Un método según la reivindicación 6, en el que el dispositivo electrónico es un OLED y en el que el derivado se incluye preferiblemente en la capa emisora de dicho OLED.

8. Un método según la reivindicación 6, en el que el dispositivo electrónico es un dispositivo semiconductor, preferiblemente un transistor.

10 9. Uso de un derivado según cualquiera de las reivindicaciones 1 a 5, para la fabricación de un dispositivo electrónico, preferiblemente para la fabricación de un dispositivo seleccionado del grupo que consiste en dispositivos electroluminiscentes y semiconductores.

10. Uso según la reivindicación 9, en el que el dispositivo electrónico es un OLED y en el que el derivado se usa preferiblemente para la fabricación de la capa emisora de dicho OLED.

15 11. Uso según la reivindicación 9, en el que el dispositivo electrónico es un dispositivo semiconductor, preferiblemente un transistor.

12. Dispositivo electrónico que comprende al menos una capa que comprende un derivado de borazeno según cualquiera de las reivindicaciones 1 a 5, en el que el dispositivo electrónico se selecciona preferiblemente del grupo que consiste en dispositivos electroluminiscentes y semiconductores.

20 13. Dispositivo electrónico según la reivindicación 12, siendo dicho dispositivo electrónico un OLED en el que dicha capa es preferiblemente la capa emisora.

14. Dispositivo electrónico según la reivindicación 12, siendo dicho dispositivo electrónico un dispositivo semiconductor, preferiblemente un transistor.

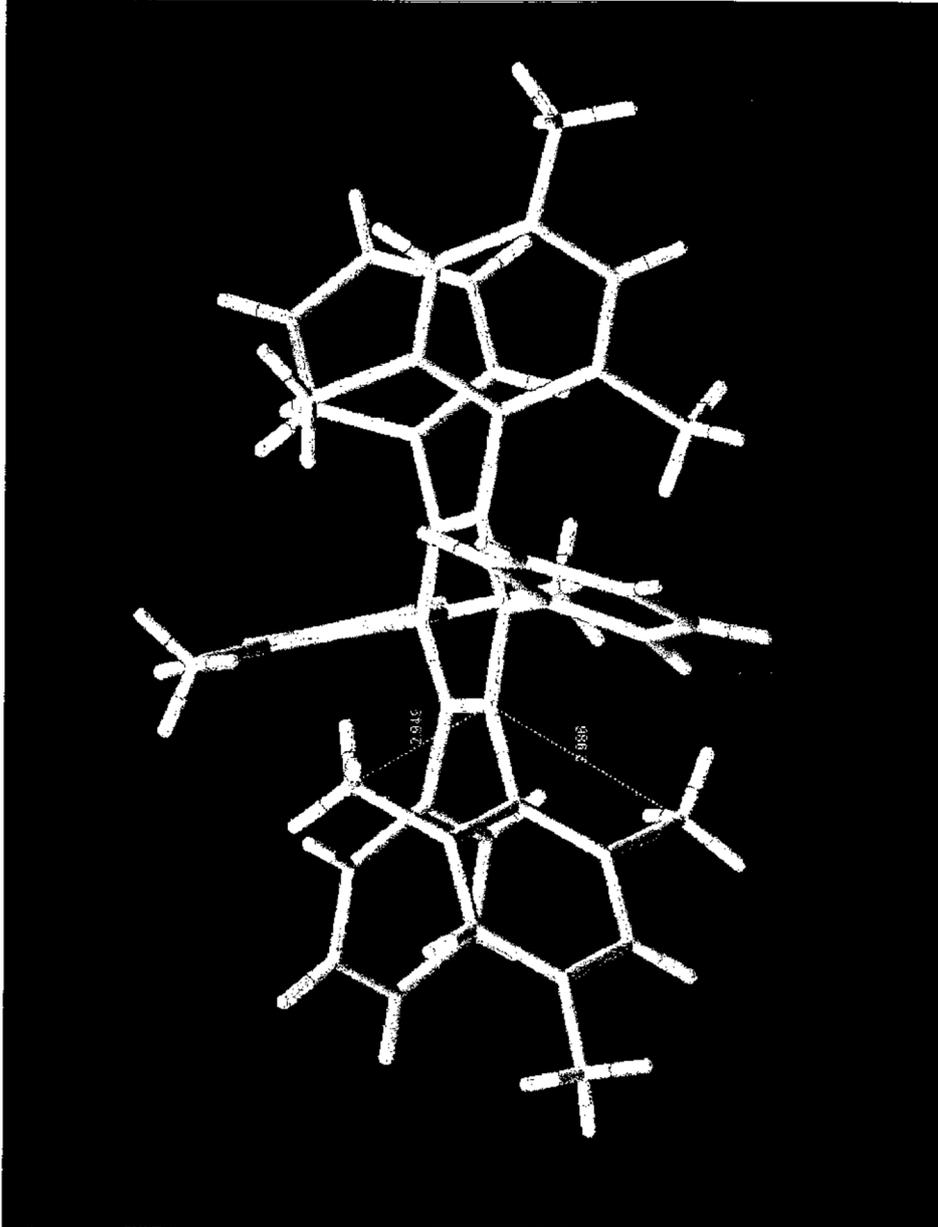


FIG.1

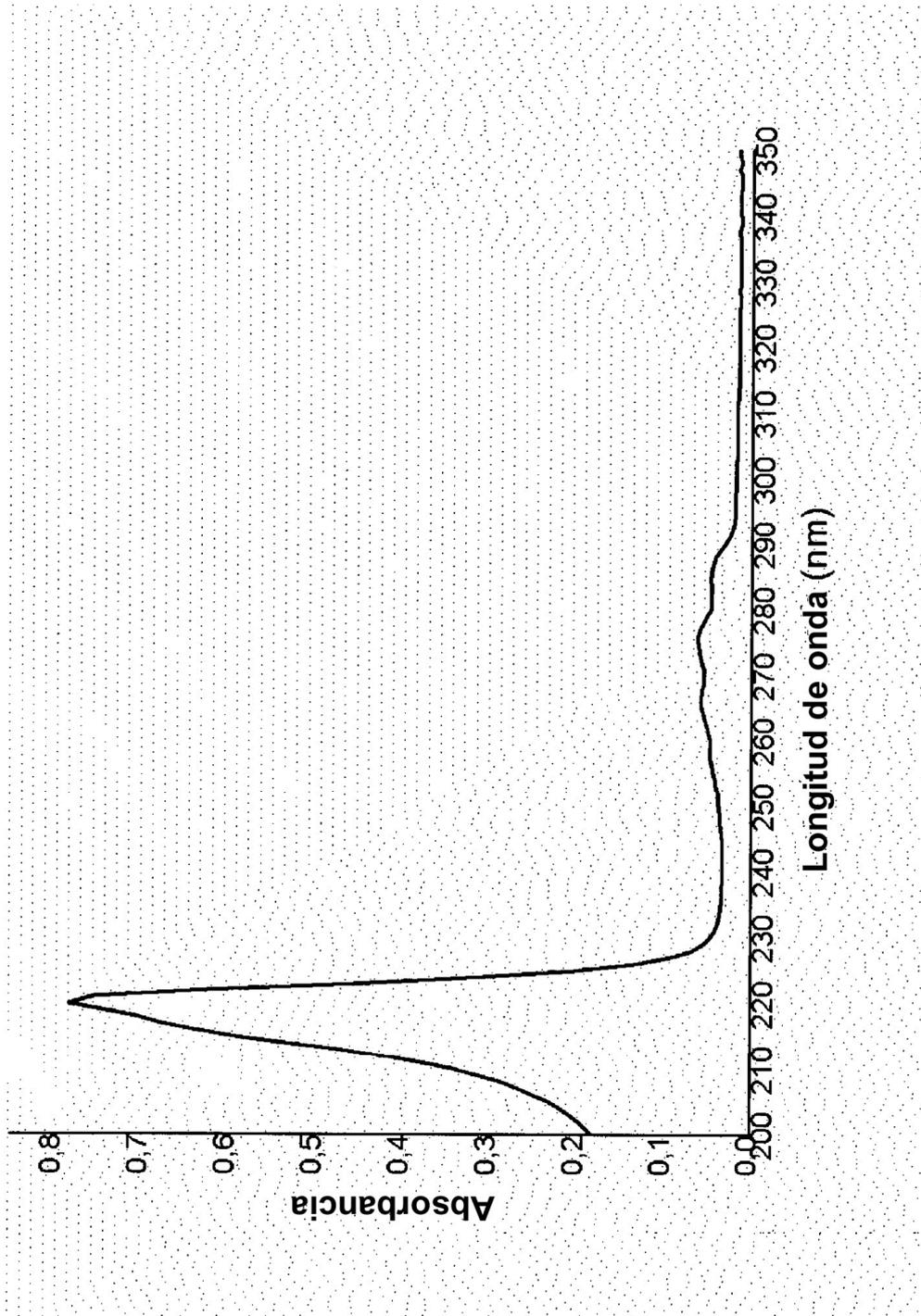


FIG. 2

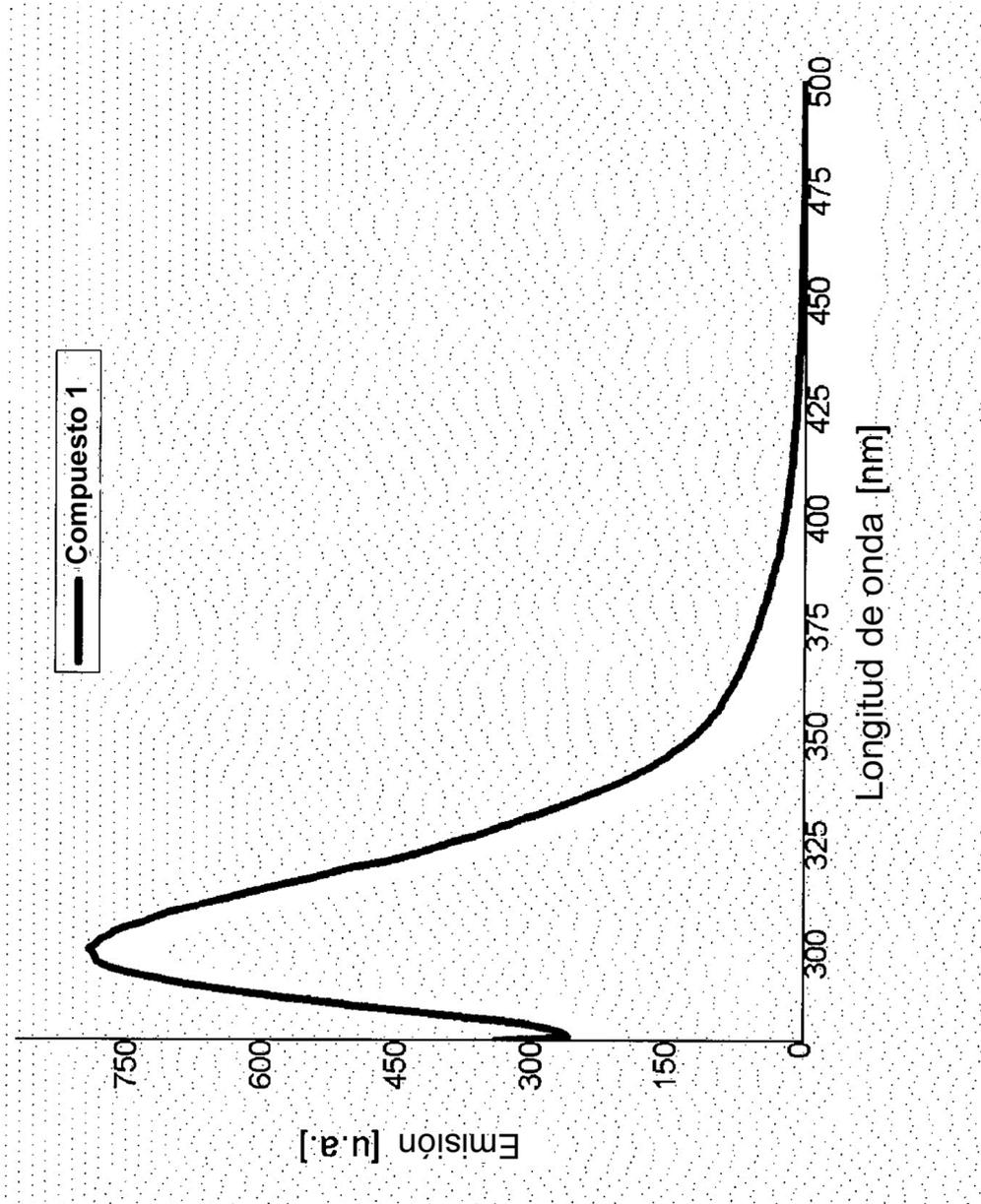


FIG. 3

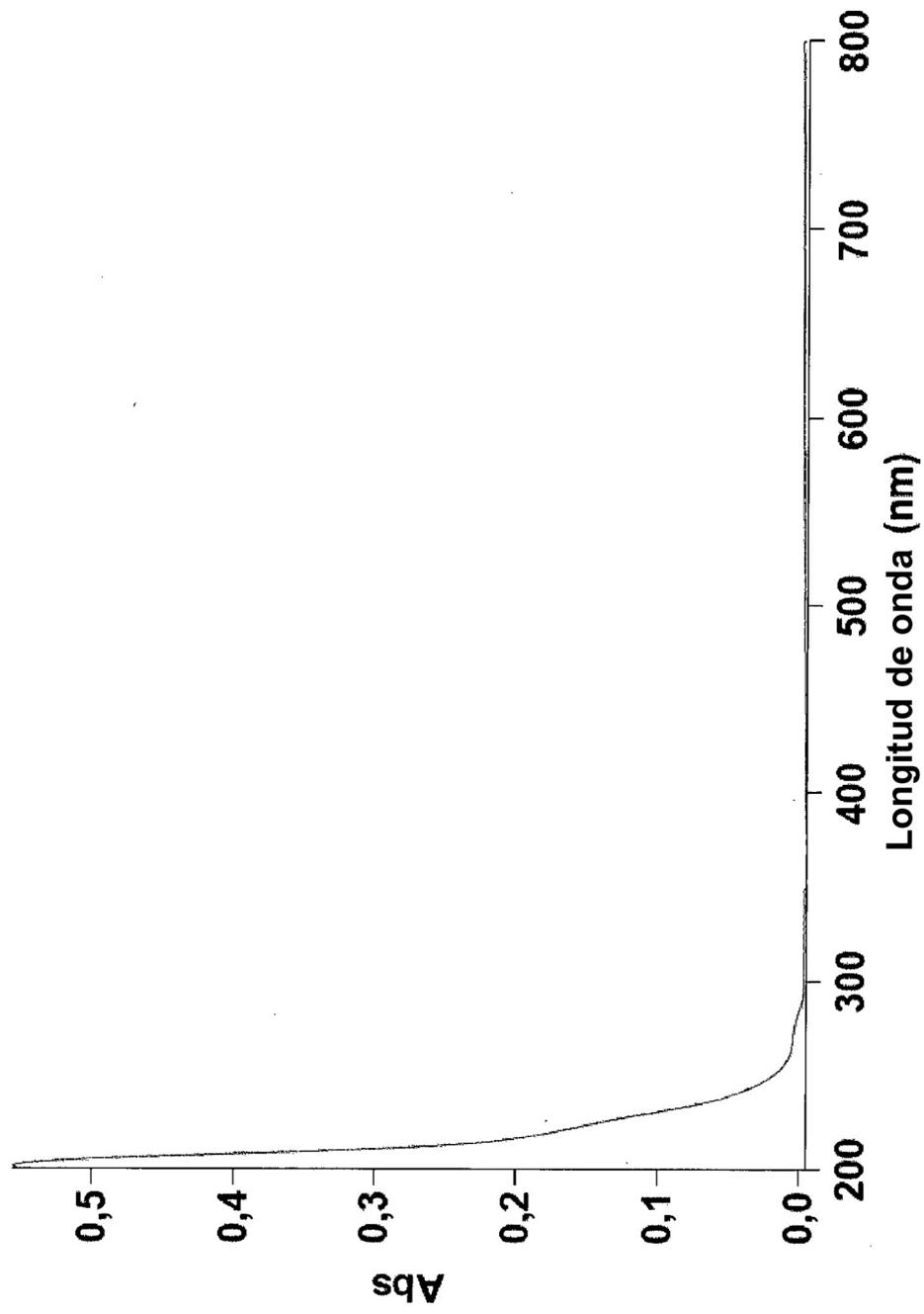


FIG.4

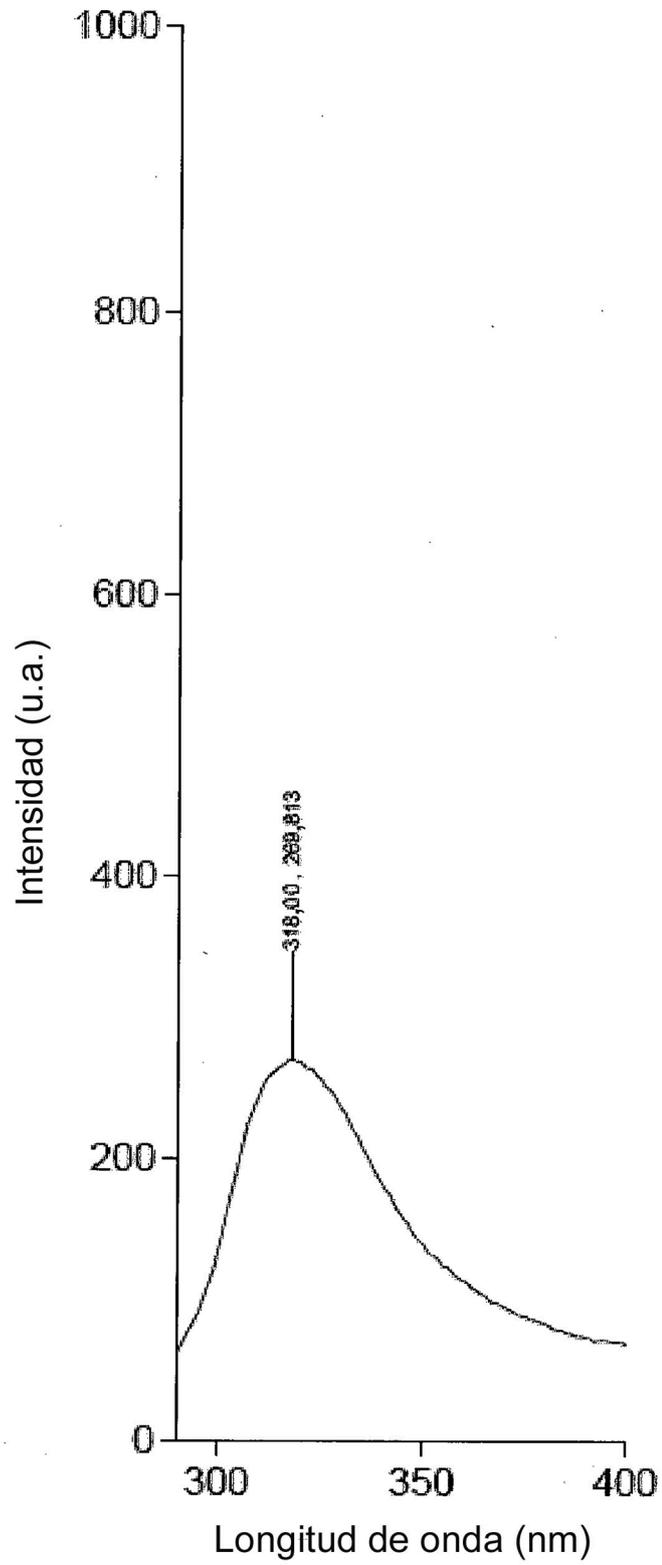


FIG. 5

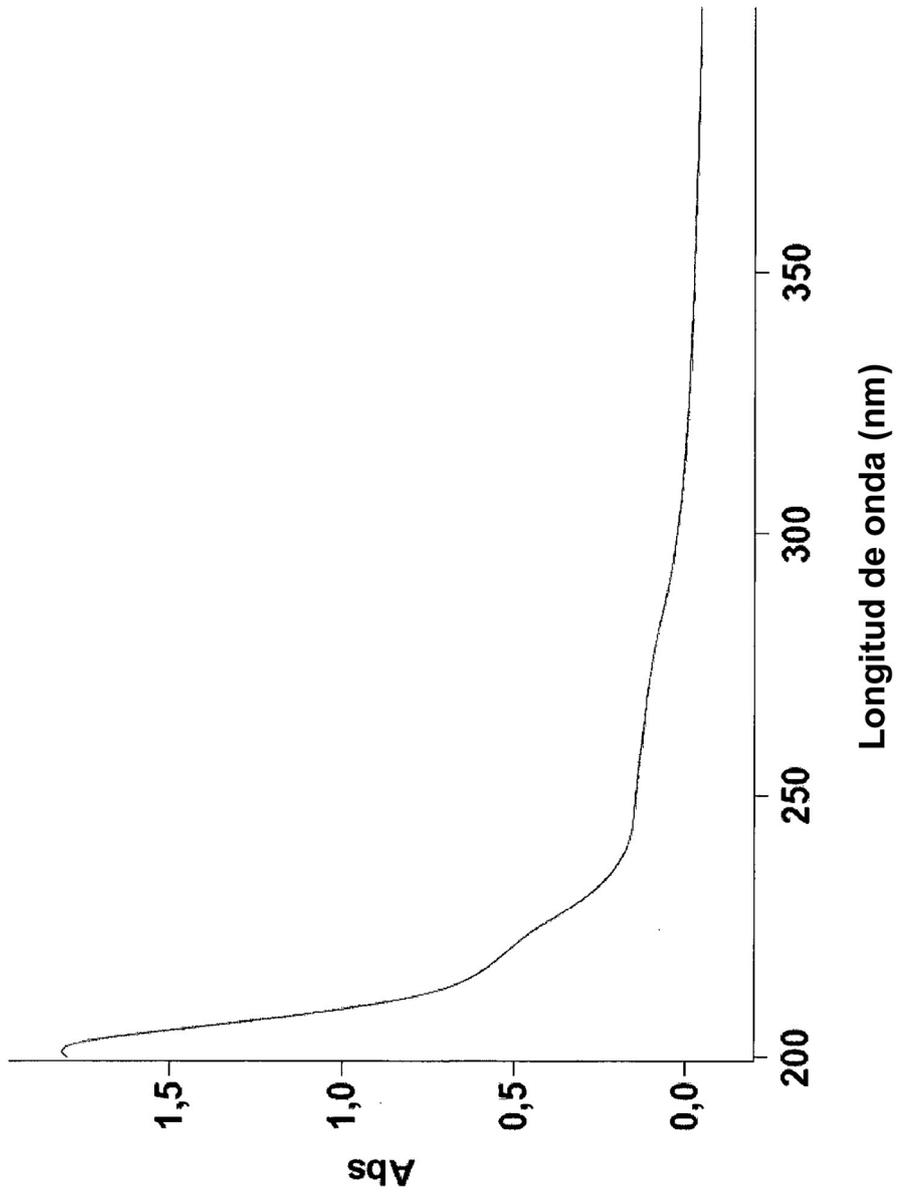


FIG.6

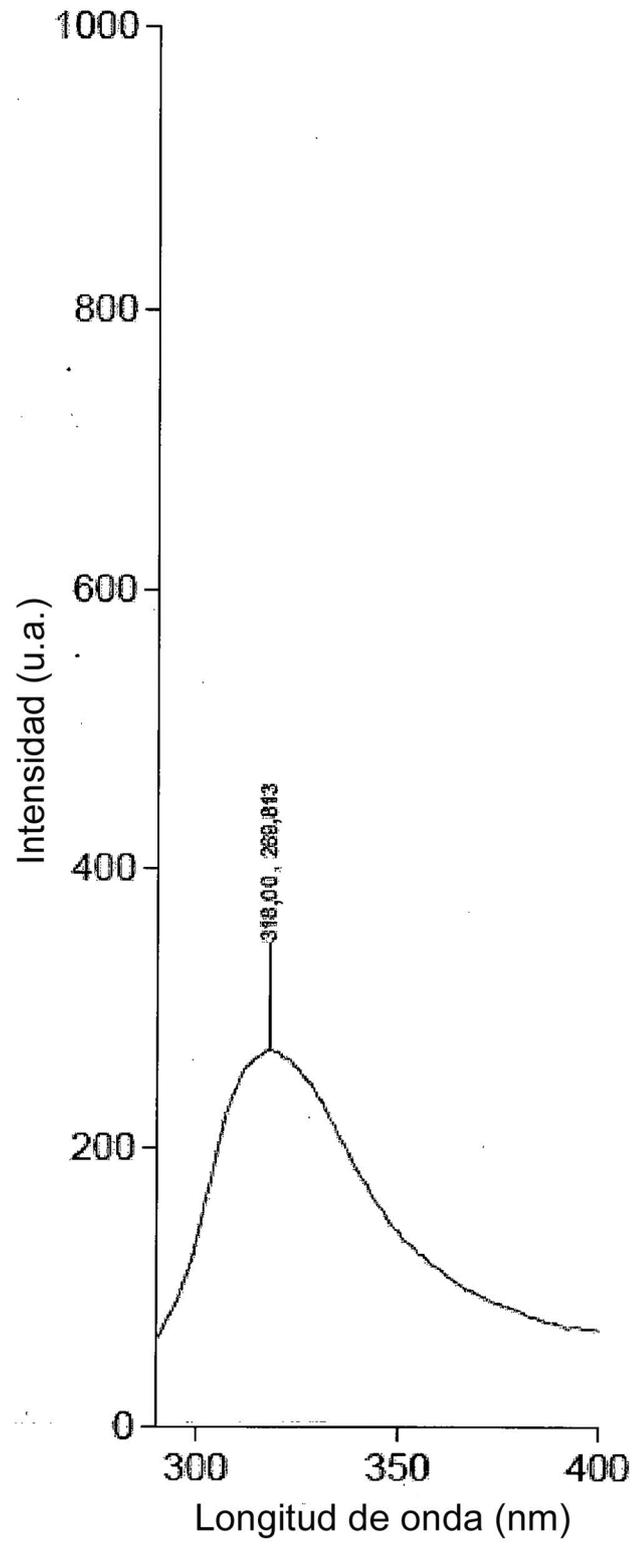


FIG. 7

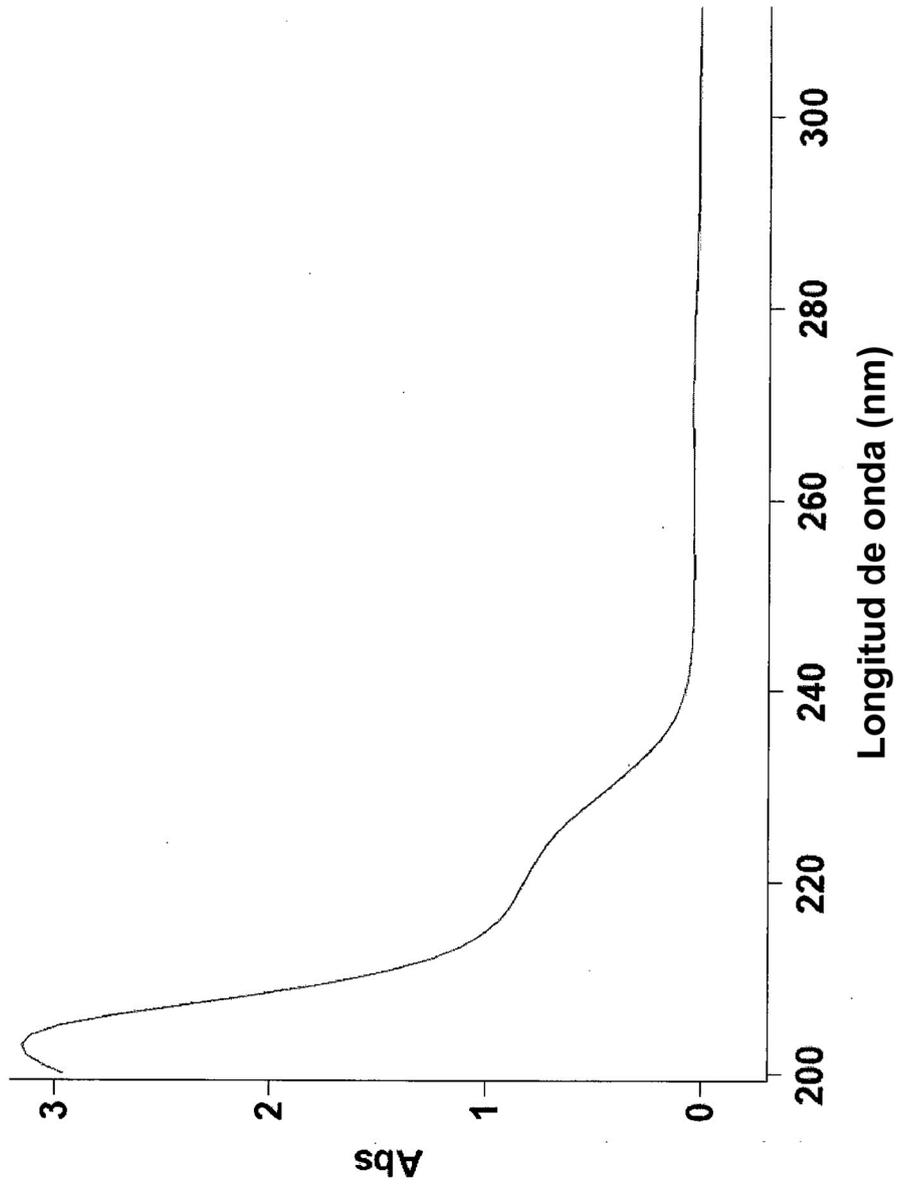


FIG. 8

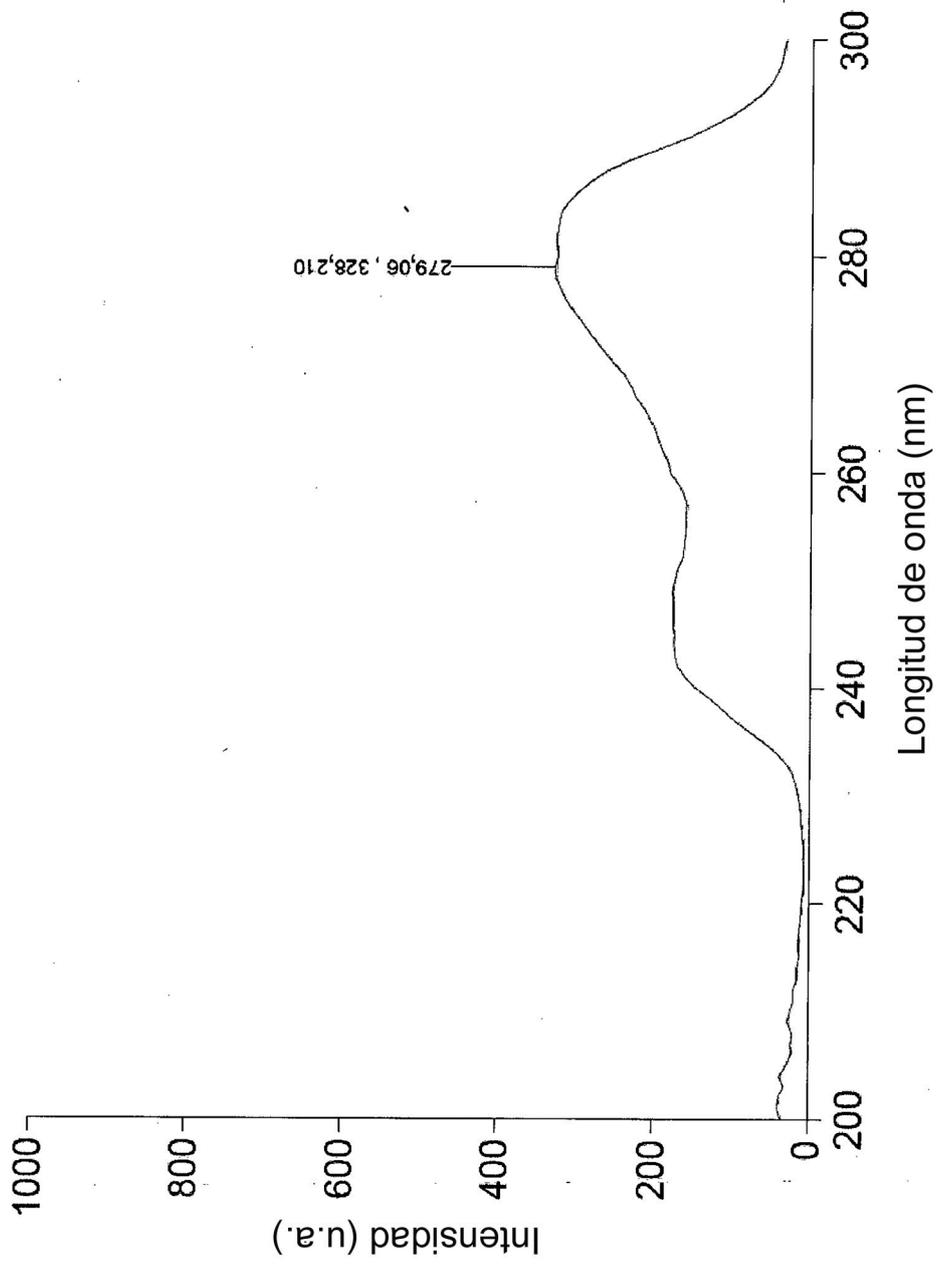


FIG.9

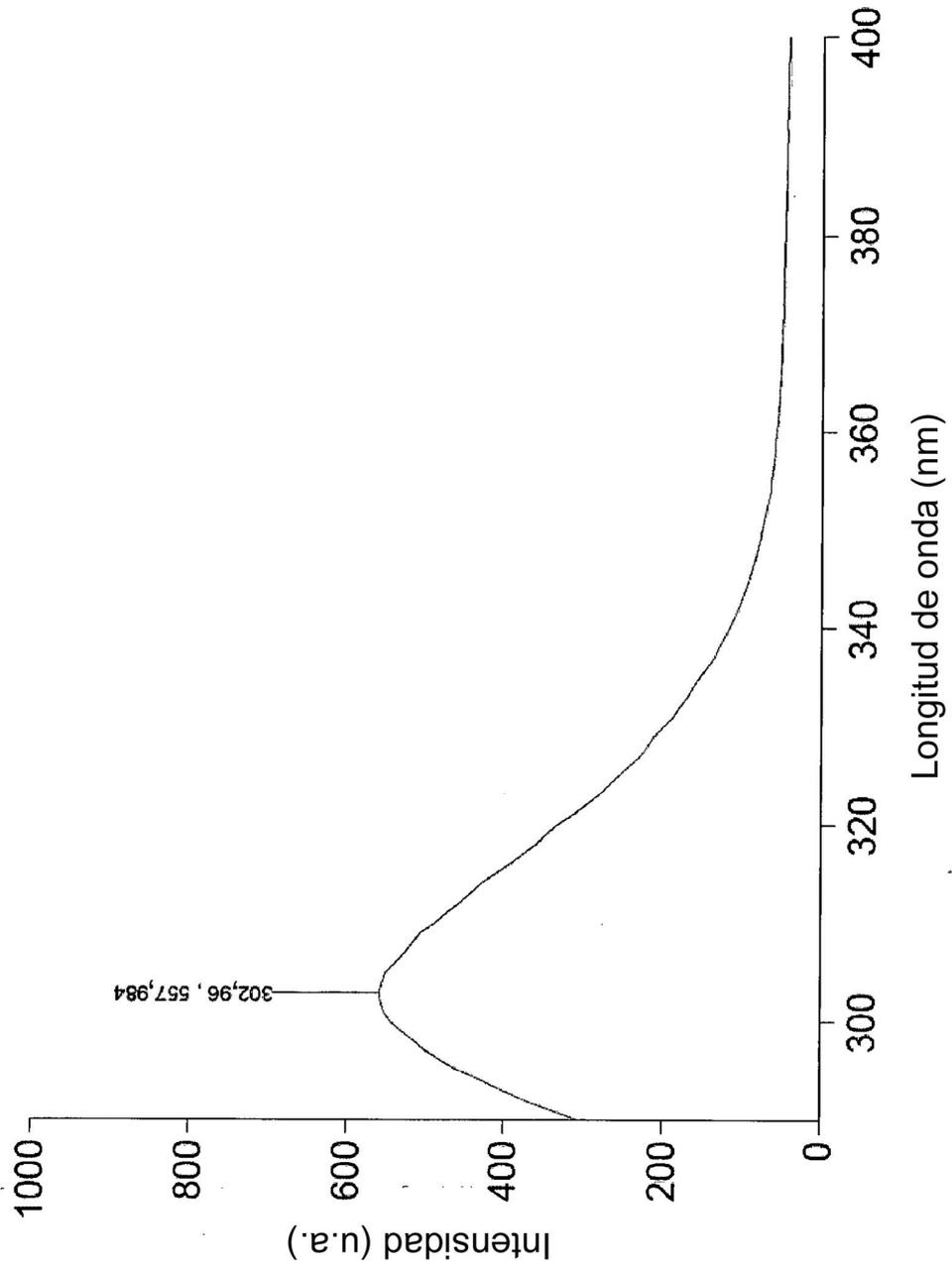


FIG. 10

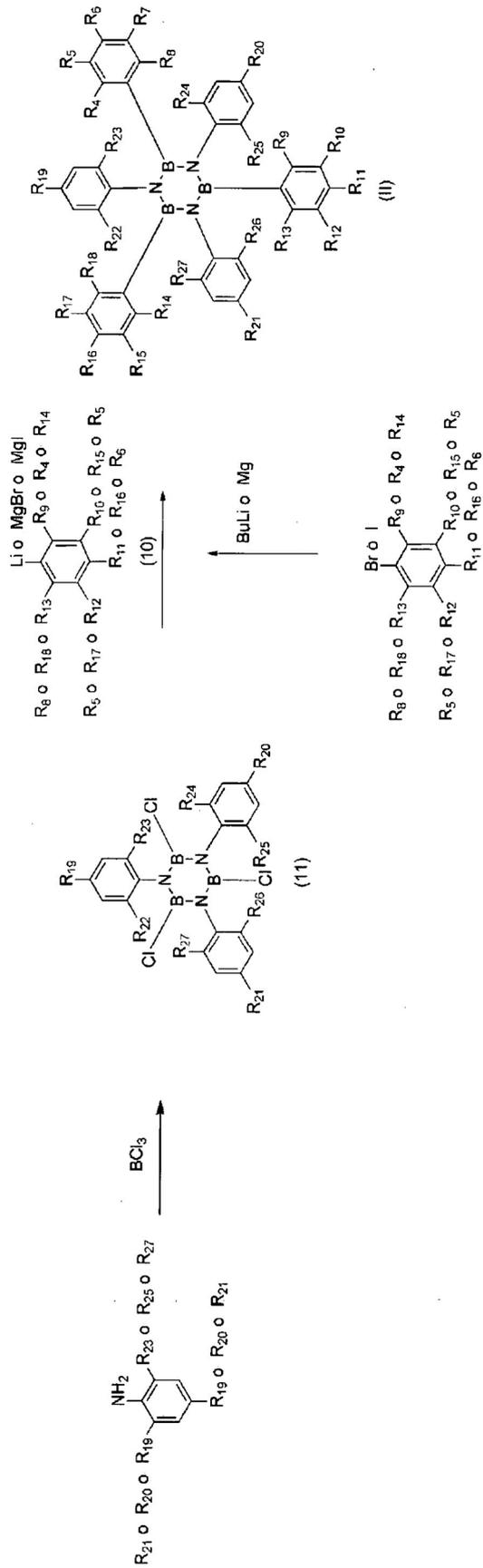


FIG. 12

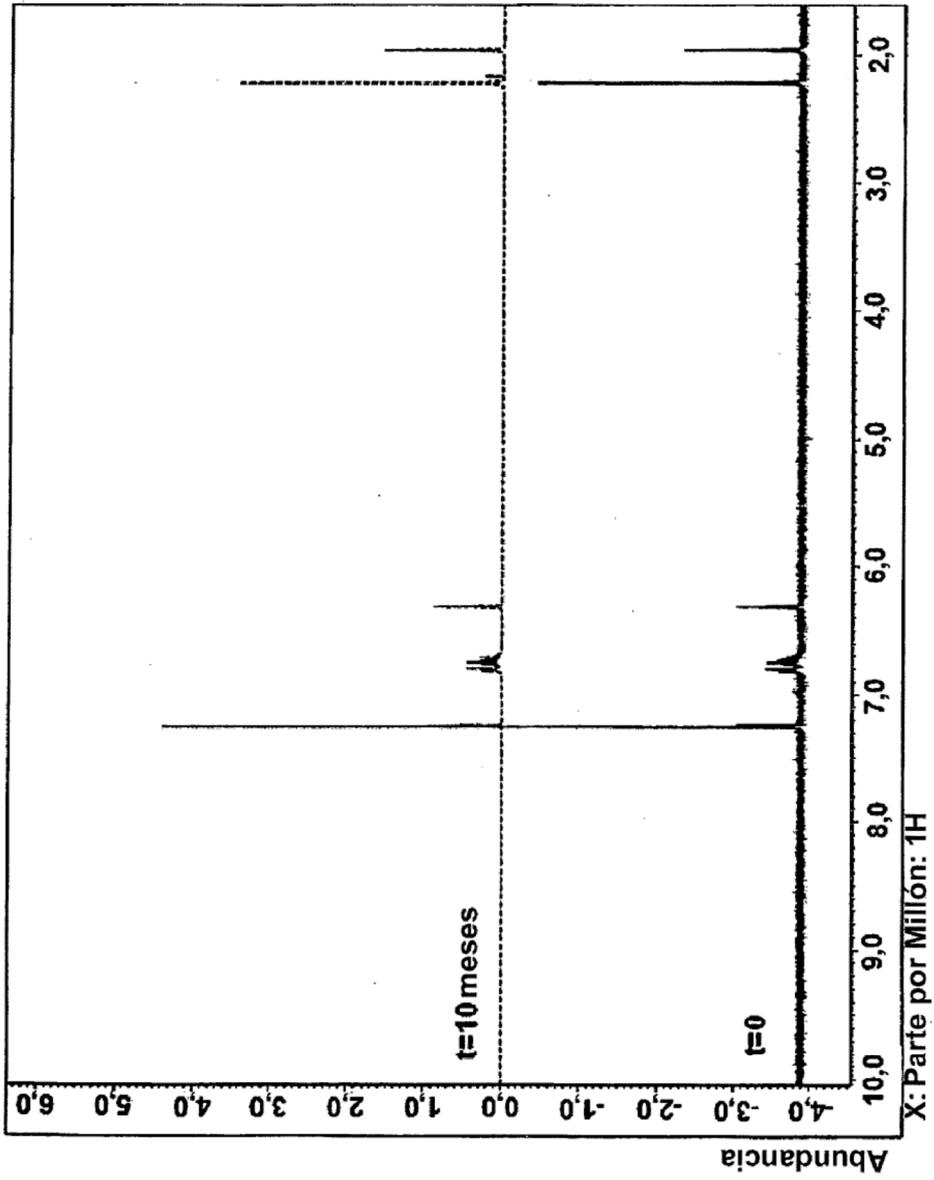


FIG. 13