

【公報種別】特許法第17条の2の規定による補正の掲載

【部門区分】第3部門第2区分

【発行日】令和7年1月9日(2025.1.9)

【国際公開番号】WO2022/254965

【出願番号】特願2023-525646(P2023-525646)

【国際特許分類】

C 0 7 D 5 1 9 / 0 0 (2 0 0 6 . 0 1)

H 1 0 K 5 0 / 1 2 (2 0 2 3 . 0 1)

H 1 0 K 8 5 / 6 0 (2 0 2 3 . 0 1)

C 0 9 K 1 1 / 0 6 (2 0 0 6 . 0 1)

10

【 F I 】

C 0 7 D 5 1 9 / 0 0 C S P

C 0 7 D 5 1 9 / 0 0 3 1 1

H 1 0 K 5 0 / 1 2

H 1 0 K 8 5 / 6 0

C 0 9 K 1 1 / 0 6 6 5 5

C 0 9 K 1 1 / 0 6 6 5 0

【手続補正書】

20

【提出日】令和6年12月25日(2024.12.25)

【手続補正1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

【補正の内容】

【特許請求の範囲】

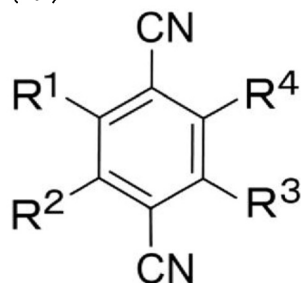
【請求項1】

下記一般式(1)で表される化合物。

【化1】

30

一般式(1)



[一般式(1)において、

40

R¹ ~ R⁴ のうちの2 ~ 3個は、各々独立にドナー性基を表すが、そのうちの少なくとも1つは環が縮合しているインドール-1-イル基である。前記環が縮合しているインドール-1-イル基は、インドールへの環縮合により環数が4以上の縮合環を形成しており、前記縮合環は置換されていてもよい。

R¹ ~ R⁴ のうちの1 ~ 2個は、各々独立に置換もしくは無置換のアリール基、または炭素原子で結合する置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。

残りのR¹ ~ R⁴ は水素原子または重水素原子を表す。

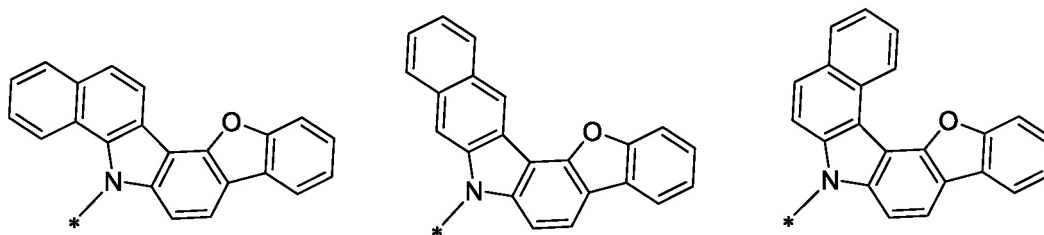
ただし、一般式(1)は下記(a) ~ (d)のいずれかを満たす。

(a) 前記環が縮合しているインドール-1-イル基の少なくとも1つが、インドールへの環縮合により下記のいずれかの縮合環を形成しており、その縮合環は置換されていても

50

よい。

【化 2】



(b) $R^1 \sim R^4$ のうちの2個が、各々独立に、置換もしくは無置換のインドロ[2, 3 - a]カルバゾール-9-イル基、置換もしくは無置換のインドロ[3, 2 - a]カルバゾール-9-イル基、置換もしくは無置換のインドロ[2, 3 - b]カルバゾール-9-イル基、置換もしくは無置換のインドロ[3, 2 - b]カルバゾール-9-イル基、置換もしくは無置換のインドロ[2, 3 - c]カルバゾール-9-イル基、または、置換もしくは無置換のインドロ[3, 2 - c]カルバゾール-9-イル基であり、

10

$R^1 \sim R^4$ のうちの1個が、置換もしくは無置換のアリール基、または炭素原子で結合する置換もしくは無置換のヘテロアリール基であり、なおかつ、

$R^1 \sim R^4$ のうちの残りの1個が、水素原子または重水素原子である。

(c) $R^1 \sim R^4$ のうちの2個が、各々独立に、置換もしくは無置換のインドロ[2, 3 - a]カルバゾール-9-イル基、置換もしくは無置換のインドロ[3, 2 - a]カルバゾール-9-イル基、置換もしくは無置換のインドロ[2, 3 - b]カルバゾール-9-イル基、置換もしくは無置換のインドロ[3, 2 - b]カルバゾール-9-イル基、置換もしくは無置換のインドロ[2, 3 - c]カルバゾール-9-イル基、または、置換もしくは無置換のインドロ[3, 2 - c]カルバゾール-9-イル基であり、なおかつ、

20

$R^1 \sim R^4$ の残りの2個が各々独立に置換もしくは無置換の重水素化アリール基である。

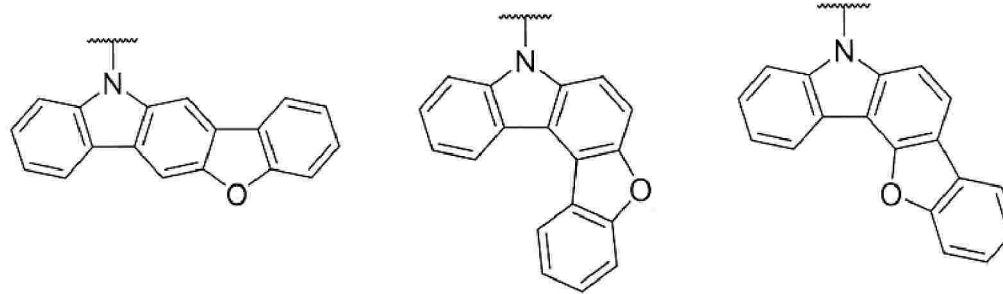
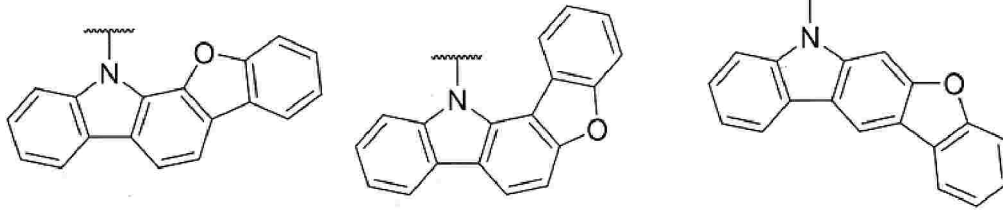
(d) $R^1 \sim R^4$ のうちの2個だけがドナー性基であり、前記2個のドナー性基は、各々独立に、下記のいずれかの構造を有する基である。

30

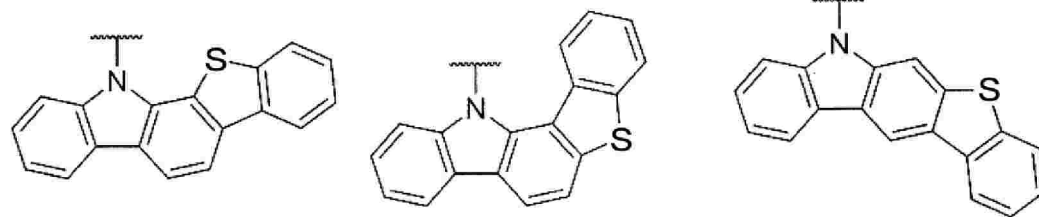
40

50

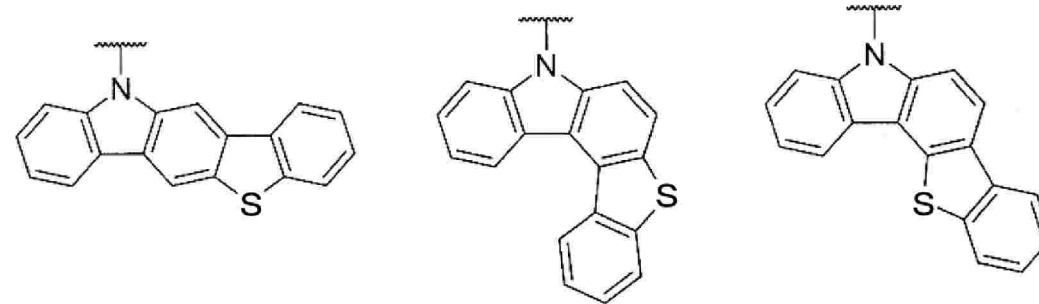
【化 3】



10



20



30

[上記各構造中の水素原子の少なくとも1個はアリール基で置換されており、また、上記各構造中の水素原子はアリール基以外で置換されていてもよい。]

【請求項 2】

$R^1 \sim R^4$ のうちの2個が各々独立にドナー性基であり、そのうちの少なくとも1つが前記環が縮合しているインドール-1-イル基であり、

$R^1 \sim R^4$ のうちの1個が置換もしくは無置換のアリール基、または炭素原子で結合する置換もしくは無置換のヘテロアリール基であり、

40

残りの $R^1 \sim R^4$ が水素原子または重水素原子である、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 3】

$R^1 \sim R^4$ のうちの2個が各々独立にドナー性基であり、そのうちの少なくとも1つが前記環が縮合しているインドール-1-イル基であり、

$R^1 \sim R^4$ のうちの2個が置換もしくは無置換のアリール基、または炭素原子で結合する置換もしくは無置換のヘテロアリール基である、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 4】

$R^1 \sim R^4$ のうちの3個が各々独立にドナー性基であり、そのうちの少なくとも1つが前記環が縮合しているインドール-1-イル基であり、

50

R¹ ~ R⁴ のうちの 1 個が置換もしくは無置換のアリール基、または炭素原子で結合する置換もしくは無置換のヘテロアリール基である、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 5】

R¹ および R⁴ が各々独立にドナー性基であり、

R³ が置換もしくは無置換のアリール基、または炭素原子で結合する置換もしくは無置換のヘテロアリール基である、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 6】

R² および R⁴ が各々独立にドナー性基であり、

R³ が置換もしくは無置換のアリール基、または炭素原子で結合する置換もしくは無置換のヘテロアリール基である、請求項 1 に記載の化合物。

10

【請求項 7】

前記縮合環の環数が 5 以上である、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 8】

前記環数が 4 以上の縮合環の骨格を構成する炭素原子に置換もしくは無置換のアリール基が置換している、請求項 7 に記載の化合物。

【請求項 9】

前記環数が 4 以上の縮合環の骨格に窒素原子が含まれており、その窒素原子に置換もしくは無置換のアリール基が置換している、請求項 7 に記載の化合物。

【請求項 10】

前記インドール - 1 - イル基を構成するベンゼン環に縮合している環が、置換もしくは無置換のフラン環、置換もしくは無置換のチオフェン環、または置換もしくは無置換のピロール環であって、前記フラン環、前記チオフェン環および前記ピロール環にはさらに他の環が縮合していてもよい、請求項 1 に記載の化合物。

20

【請求項 11】

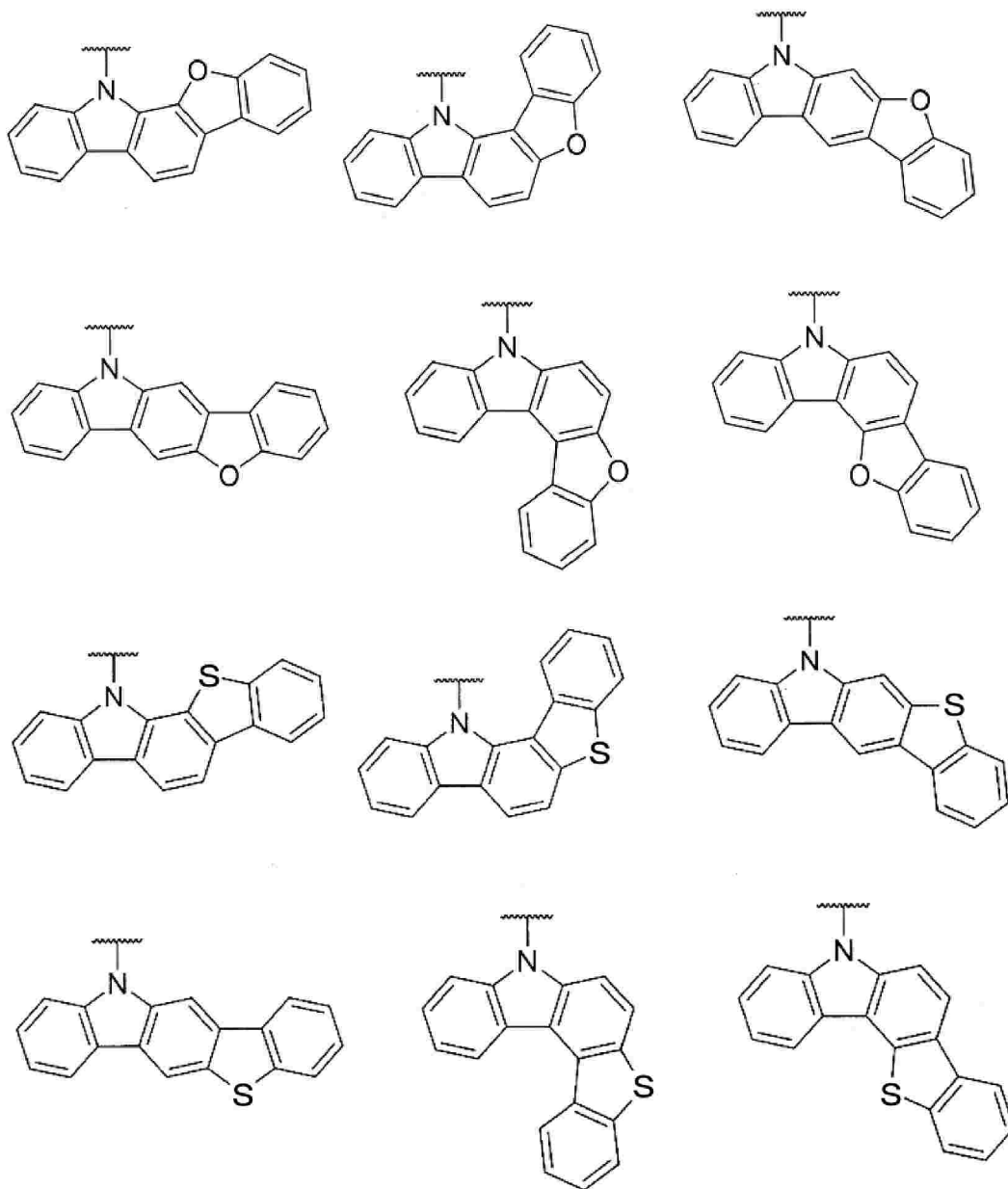
前記前記環が縮合しているインドール - 1 - イル基が下記のいずれかの縮合環を有する、請求項 1 に記載の化合物。

30

40

50

【化 4】



10

20

30

[上記の各構造において、水素原子は置換されていてもよく、またさらに環が縮合していてもよい。]

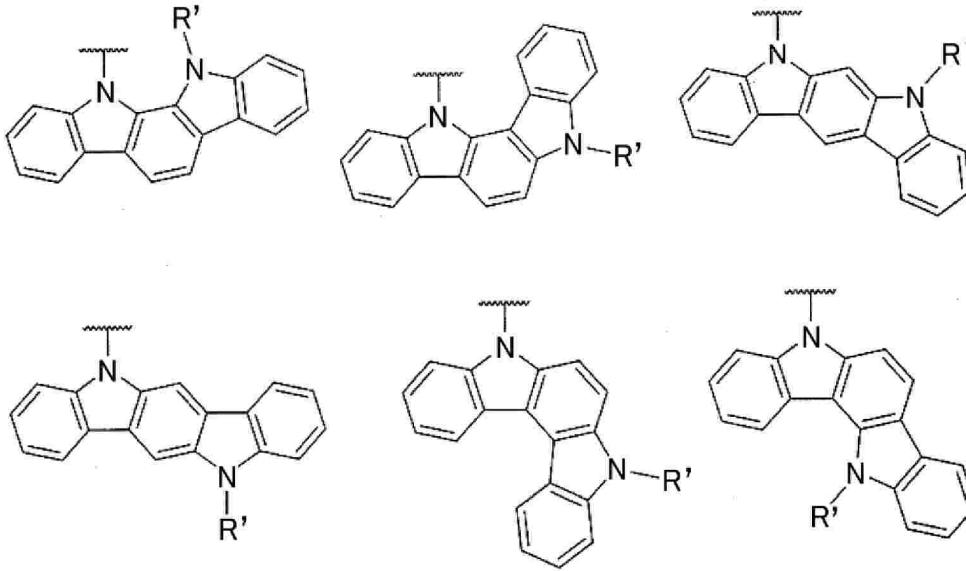
【請求項 1 2】

前記環が縮合しているインドール - 1 - イル基が下記のいずれかの縮合環骨格を有する、請求項 1 に記載の化合物。

40

50

【化 5】



10

[上記の各構造において、R' はフェニル基を表す。上記の各構造において、水素原子は置換されていてもよく、またさらに環が縮合していてもよい。]

【請求項 13】

20

前記環が縮合しているインドール-1-イル基が、インドール環の4,5位にヘテロ環が縮合した構造を有する、請求項1に記載の化合物。

【請求項 14】

A_r が置換もしくは無置換のフェニル基、または置換もしくは無置換のピリジル基である、請求項1に記載の化合物。

【請求項 15】

炭素原子、水素原子、重水素原子、窒素原子、酸素原子および硫黄原子からなる群より選択される原子からなる、請求項1に記載の化合物。

【請求項 16】

請求項1～15のいずれか1項に記載の化合物からなる発光材料。

30

【請求項 17】

請求項1～15のいずれか1項に記載の化合物を含むことを特徴とする発光素子。

【請求項 18】

前記発光素子が発光層を有しており、前記発光層が前記化合物とホスト材料を含む、請求項17に記載の発光素子。

【請求項 19】

前記発光素子が発光層を有しており、前記発光層が前記化合物と発光材料を含み、前記発光材料から主として発光する、請求項18に記載の発光素子。

40

50