

【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5年2月13日(2023.2.13)

【公開番号】特開2022-184899(P2022-184899A)

【公開日】令和4年12月13日(2022.12.13)

【年通号数】公開公報(特許)2022-229

【出願番号】特願2022-142836(P2022-142836)

【国際特許分類】

C 07 D 307/91(2006.01)

10

C 07 D 333/76(2006.01)

C 07 D 409/12(2006.01)

C 07 D 405/04(2006.01)

C 07 D 405/14(2006.01)

C 07 D 495/04(2006.01)

C 07 D 409/14(2006.01)

H 10 K 50/00(2023.01)

C 09 K 11/06(2006.01)

【F I】

C 07 D 307/91 C S P

20

C 07 D 333/76

C 07 D 409/12

C 07 D 405/04

C 07 D 405/14

C 07 D 495/04 103

C 07 D 409/14

H 05 B 33/14 B

C 09 K 11/06 690

【手続補正書】

30

【提出日】令和5年2月3日(2023.2.3)

【手続補正1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

【補正の内容】

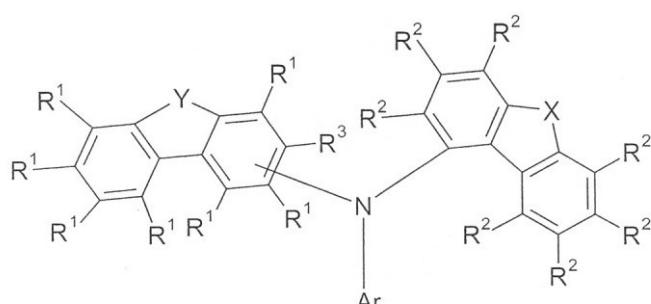
【特許請求の範囲】

【請求項1】

式(1)

【化1】

40



式(1)

50

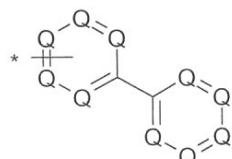
[ここで、使用されている記号は、次の通りである：

X は O または S であり；

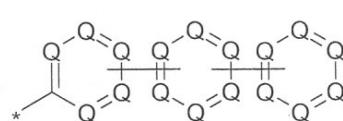
Y は O、S または CR₂ であり；

Ar は、式 (Ar-2) ~ (Ar-5)、(Ar-8) (Ar-9)、(Ar-11) および (Ar-14) ~ (Ar-16) の構造から選ばれ、ここで、Ar は、最大 15 個の芳香族環原子を有するアリール基またはヘテロアリール基のみを含み、ヘテロアリール基としてカルバゾリル基を含まず、9, 9'-スピロビフルオレン基を含まず；

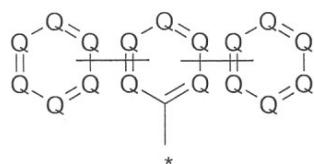
【化 2】



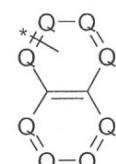
式 (Ar-2)



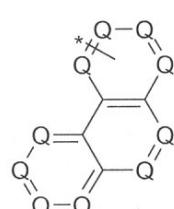
式 (Ar-3)



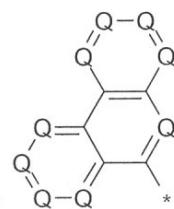
式 (Ar-4)



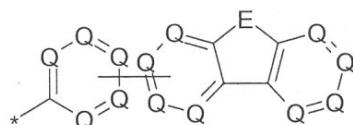
式 (Ar-5)



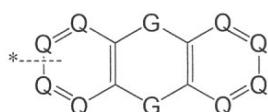
式 (Ar-8)



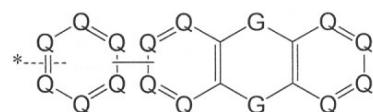
式 (Ar-9)



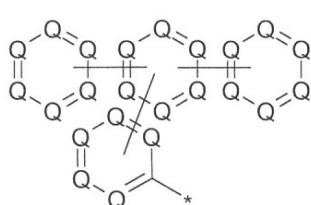
式 (Ar-11)



式 (Ar-14)



式 (Ar-15)



式 (Ar-16)

ここで、

Q は、それぞれの場合に、同じであるかまたは異なり、CR⁴ であり；

10

20

30

40

50

Eは、それぞれの場合に、同じであるかまたは異なり、C(R⁴)₂、OまたはSであり；ここで、2つのR⁴は、芳香族またはヘテロ芳香族環系を形成せず；

Gは、それぞれの場合に、同じであるかまたは異なり、NR⁴、C(R⁴)₂、OまたはSであり；および

*は、窒素原子への結合を示し；

Rは、それぞれの場合に、同じであるかまたは異なり、H、D、1、2、3もしくは4個の炭素原子を有する直鎖状のアルキル基、または、3、4，5もしくは6個の炭素原子を有する分岐状もしくは環状のアルキル基（1個以上の水素原子は、DもしくはFによって置きかえられていてもよい）、6～13個の芳香族環原子を有し、それぞれの場合に、1以上のR⁴ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族環系からなる群から選択され；

R¹は、それぞれの場合に、同じであるかまたは異なり、H、D、F、CN、N(Ar₁)₂、1、2、3もしくは4個の炭素原子を有する直鎖状のアルキル基、または、3、4，5もしくは6個の炭素原子を有する分岐状もしくは環状のアルキル基（1個以上の水素原子は、DもしくはFによって置きかえられていてもよい）、6～13個の芳香族環原子を有し、それぞれの場合に、1以上のR⁴ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族環系からなる群から選択され；

R²は、それぞれの場合に、同じであるかまたは異なり、H、D、F、CN、N(Ar₁)₂、1、2、3もしくは4個の炭素原子を有する直鎖状のアルキル基、または、3、4，5もしくは6個の炭素原子を有する分岐状もしくは環状の、アルキル基（1個以上の水素原子は、DもしくはFによって置きかえられていてもよい）、6～13個の芳香族環原子を有し、それぞれの場合に、1以上のR⁴ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族もしくはヘテロ芳香族環系からなる群から選択され；

R³は、それぞれの場合に、同じであるかまたは異なり、H、D、F、CN、1、2、3もしくは4個の炭素原子を有する直鎖状のアルキル基、または、3、4，5もしくは6個の炭素原子を有する分岐状もしくは環状のアルキル基（1個以上の水素原子は、DもしくはFによって置きかえられていてもよい）、6～13個の芳香族環原子を有し、それぞれの場合に、1以上のR⁴ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族環系から選択され；

Ar¹は、それぞれの場合に、同じであるかまたは異なり、6～30個の芳香族環原子を有し、1以上の非芳香族R⁴ラジカルによって置換されていてもよい芳香族環系であり；

R⁴は、それぞれの場合に、同じであるかまたは異なり、H、D、1個の炭素原子を有する直鎖状のアルキル基（1個以上の水素原子は、Dによって置きかえられていてもよい）6個の芳香族環原子を有し、それぞれの場合に、1以上のR⁵ラジカルによって置換されていてもよい、芳香族環系からなる群から選択され；同時に、同じ炭素原子に結合した2つのR⁴置換基が、単環もしくは多環の芳香族環系を形成していることが任意に可能であり；

R⁵は、それぞれの場合に、同じであるかまたは異なり、HまたはDから選択され；

ここで、窒素原子は、R¹またはR³の代わりに対応する炭素原子に結合しており、ここで、R³の場合におけるYは、CR₂となり得ない】

の化合物；

ただし、以下の化合物を除く。

10

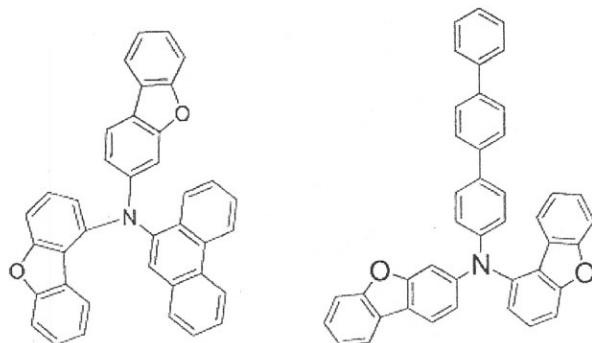
20

30

40

50

【化3】



10

【請求項2】

XがOであることを特徴とする、請求項1に記載の化合物。

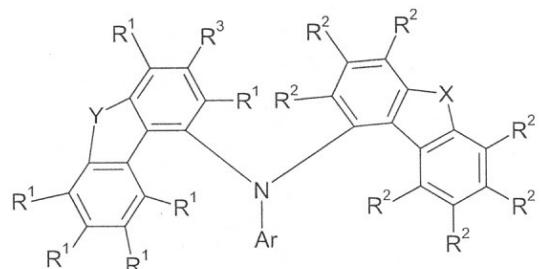
【請求項3】

YがCR₂であることを特徴とする、請求項1または2に記載の化合物。

【請求項4】

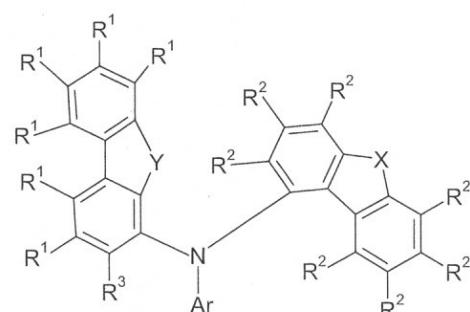
前記化合物が、式(1-1)または式(1-2)

【化4】



20

式(1-1)



30

式(1-2)

40

(ここで、記号は、請求項1で与えられた定義を有する)

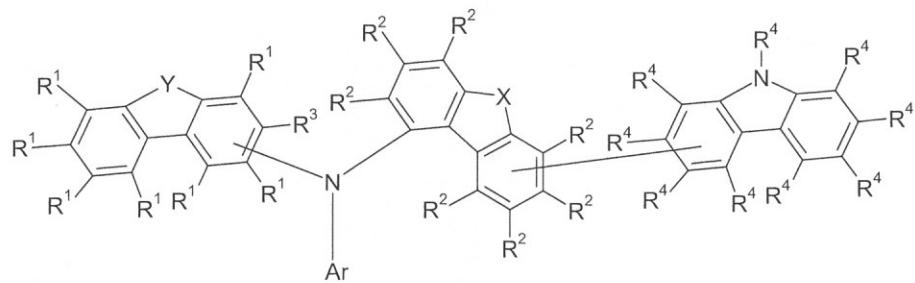
の化合物であることを特徴とする、請求項1～3の何れか1項に記載の化合物。

【請求項5】

前記化合物が、式(2)

50

【化5】



式(2)

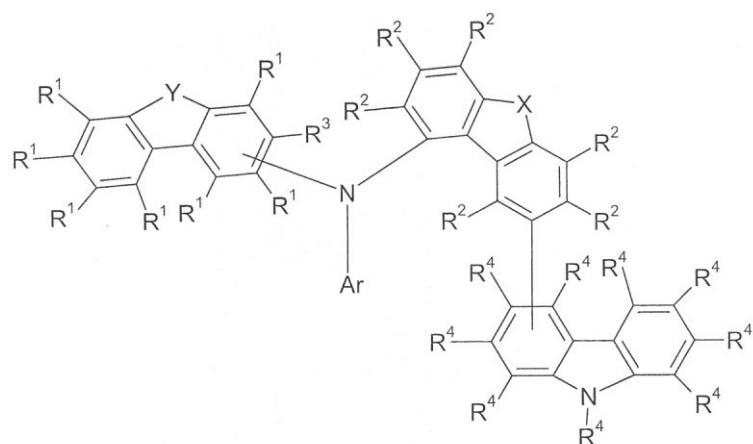
10

(ここで、記号は、請求項1で与えられた定義を有し、ここで、炭素原子に結合した1つのR²および1つのR⁴は、単結合によって置きかえられている)
の化合物であることを特徴とする、請求項1～4の何れか1項に記載の化合物。

【請求項6】

前記化合物が、式(2-1)および(2-2)

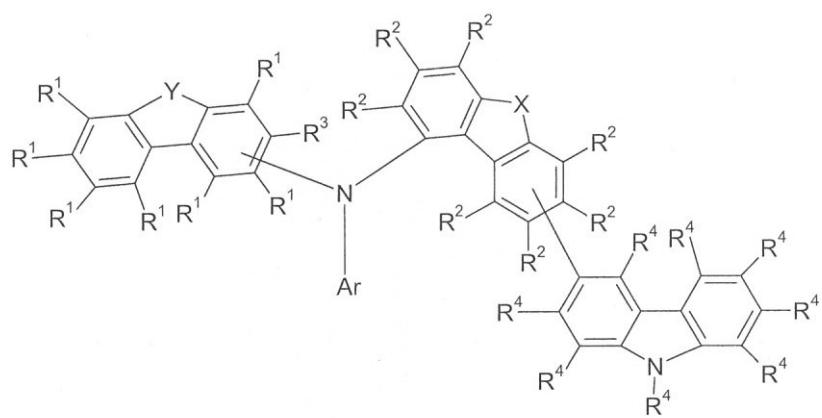
【化6】



式(2-1)

20

30



式(2-2)

40

(ここで、記号は、請求項1で与えられた定義を有し、ここで、式(2-2)の1つのR²および式(2-1)の炭素原子に結合した1つのR⁴は、単結合によって置きかえられている)
の1つの化合物であることを特徴とする、請求項1～5の何れか1項に記載の化合物。

50

【請求項 7】

式(2-2)において、単結合によって置きかえられているR²が、窒素原子に結合している6員環上に配置されていないことを特徴とする、請求項6に記載の化合物。

【請求項 8】

請求項1~7の何れか1項に記載の少なくとも1種の化合物と、少なくとも1種のさらなる化合物および/または少なくとも1種の溶媒とを含む混合物。

【請求項 9】

電子デバイスにおける、請求項1~7の何れか1項に記載の化合物または請求項8に記載の混合物の使用。

【請求項 10】

請求項1~7の何れか1項に記載の少なくとも1種の化合物または請求項8に記載の混合物を含む電子デバイス。

【請求項 11】

有機エレクトロルミネッセンスデバイスであることを特徴とする、請求項10に記載の電子デバイス。

【請求項 12】

請求項1~7の何れか1項に記載の化合物または請求項8に記載の混合物が、発光層に使用されるか、または、ホール輸送層に、または、電子阻止体層に使用されることを特徴とする、請求項11に記載の電子デバイス。

【請求項 13】

請求項1~7の何れか1項に記載の化合物または請求項8に記載の混合物が、燐光性ドーパント、および任意に1以上のさらなるマトリックス材料と組み合わせて、発光層に使用されるか、または、ホール輸送層に、または、電子阻止体層に使用されることを特徴とする、請求項11に記載の電子デバイス。

10

20

30

40

50