

【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7月13日(2023.7.13)

【国際公開番号】WO2022/210818

【出願番号】特願2023-511450(P2023-511450)

【国際特許分類】

C 0 7 C 2 1 1 / 6 1 (2 0 0 6 . 0 1)

C 0 7 D 3 0 7 / 9 1 (2 0 0 6 . 0 1)

C 0 7 D 3 3 3 / 7 6 (2 0 0 6 . 0 1)

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

H 1 0 K 5 0 / 1 7 (2 0 2 3 . 0 1)

10

【 F I 】

C 0 7 C 2 1 1 / 6 1 C S P

C 0 7 D 3 0 7 / 9 1

C 0 7 D 3 3 3 / 7 6

H 1 0 K 5 0 / 1 5

H 1 0 K 5 0 / 1 2

H 1 0 K 8 5 / 6 0

H 1 0 K 5 0 / 1 7

20

【手続補正書】

【提出日】令和5年4月21日(2023.4.21)

【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】

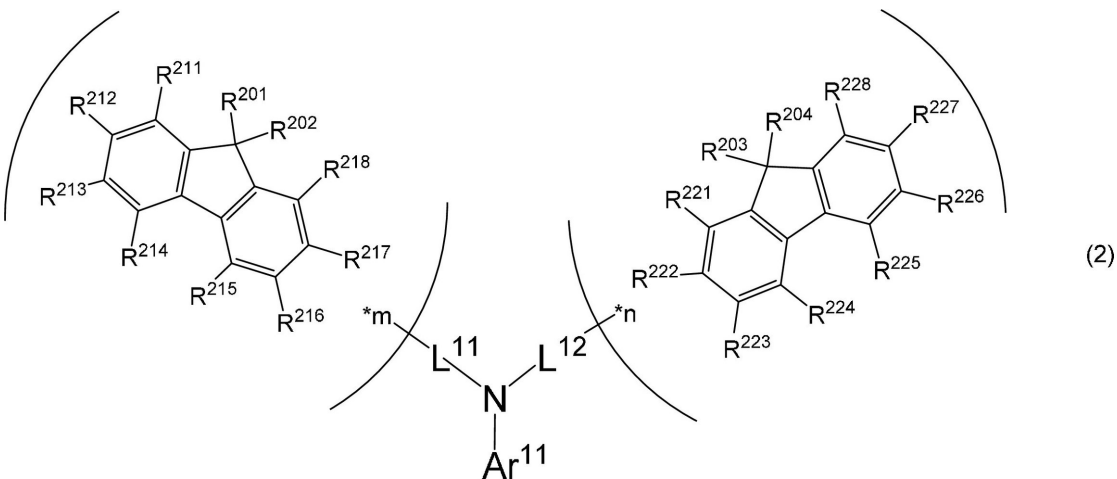
30

【特許請求の範囲】

【請求項1】

下記式(2)で表される化合物。

【化1】



40

(式(2)中、

R²⁰¹ ~ R²⁰⁴ から選ばれる1つはメチル基であり、R²⁰¹ ~ R²⁰⁴ から選ばれる他の3つは無置換のフェニル基であり、

50

R²⁰¹とR²⁰²は、互いに結合せず、したがって環構造を形成せず、
 R²⁰³とR²⁰⁴は、互いに結合せず、したがって環構造を形成しない。
 R²¹¹～R²¹⁸、及びR²²¹～R²²⁸は、水素原子である。

ただし、

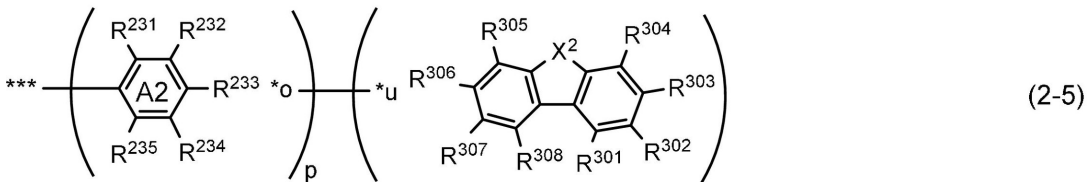
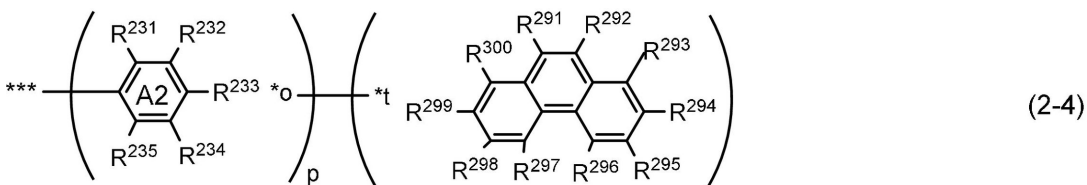
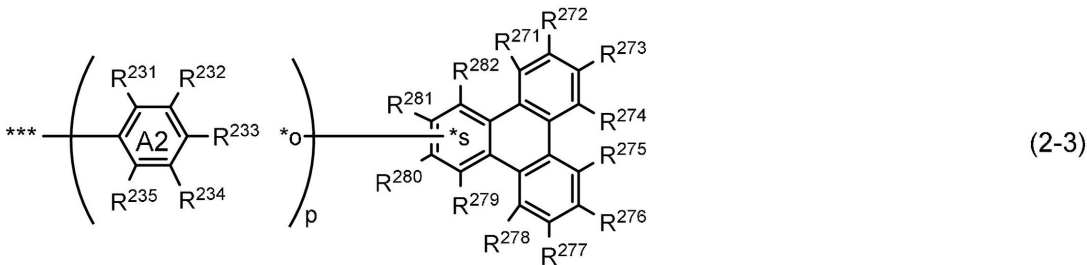
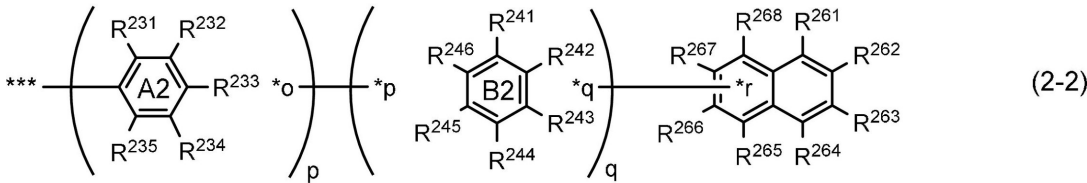
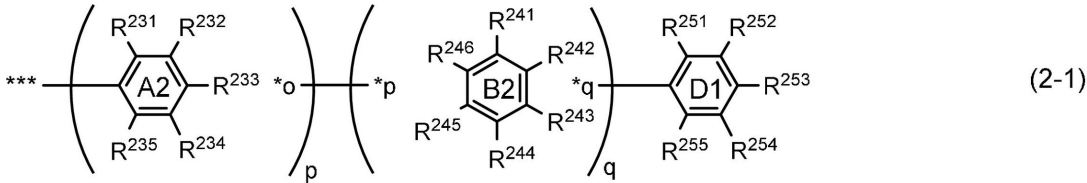
R²¹²及びR²¹⁷から選ばれる1つは*mに結合する単結合であり、

R²²²及びR²²⁷から選ばれる1つは*nに結合する単結合である。

L¹¹及びL¹²は、それぞれ独立して、単結合、又は置換もしくは無置換のフェニレン基である。

Ar¹¹は、式(2-1)～(2-5)のいずれかで表される基である。

【化4】



(式(2-1)～(2-5)中、

R²³¹～R²³⁵、R²⁴¹～R²⁴⁶、R²⁵¹～R²⁵⁵、R²⁶¹～R²⁶⁸、R²⁷¹～R²⁸²、R²⁹¹～R³⁰⁰、R³⁰¹～R³⁰⁸、R³¹¹～R³¹⁶、R³²¹～R³²⁵、及びR³³¹～R³³⁵は、それぞれ独立して、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基である。

X²は、酸素原子、硫黄原子、又はC^cR^dであり、

R^c及びR^dは、それぞれ独立して、水素原子、又はメチル基であり、R^cとR^dは、

10

20

30

40

50

互いに結合せず、したがって環構造を形成しない。

ただし、

$R^{231} \sim R^{235}$ から選ばれる 1 つは * o に結合する単結合であり、
 $R^{241} \sim R^{246}$ から選ばれる 1 つは * p に結合する単結合であり、 $R^{241} \sim R^{246}$
 から選ばれる他の 1 つは * q に結合する単結合であり、
 $R^{265} \sim R^{268}$ から選ばれる 1 つは * r に結合する単結合であり、
 $R^{279} \sim R^{282}$ から選ばれる 1 つは * s に結合する単結合であり、
 R^{291} 、及び $R^{297} \sim R^{300}$ から選ばれる 1 つは * t に結合する単結合あり、
 $R^{305} \sim R^{308}$ から選ばれる 1 つは * u に結合する単結合であり、
 $R^{311} \sim R^{316}$ から選ばれる 1 つは * v に結合する単結合であり、 $R^{311} \sim R^{316}$ 10
 から選ばれる他の 1 つは * w に結合する単結合であり、 $R^{311} \sim R^{316}$ から選ばれ
 るさらに他の 1 つは * x に結合する単結合であり、

前記単結合ではない $R^{231} \sim R^{235}$ から選ばれる隣接する 2 つ、前記いずれの単結
 合でもない $R^{241} \sim R^{246}$ から選ばれる隣接する 2 つ、 $R^{251} \sim R^{255}$ から選ばれ
 る隣接する 2 つ、前記単結合ではない $R^{261} \sim R^{268}$ から選ばれる隣接する 2 つ、前
 記単結合ではない $R^{271} \sim R^{282}$ から選ばれる隣接する 2 つ、前記単結合ではない R
 $^{291} \sim R^{300}$ から選ばれる隣接する 2 つ、前記単結合ではない $R^{301} \sim R^{308}$ から
 選ばれる隣接する 2 つ、前記いずれの単結合でもない $R^{311} \sim R^{316}$ から選ばれる隣
 接する 2 つ、 $R^{321} \sim R^{325}$ から選ばれる隣接する 2 つ、 $R^{331} \sim R^{335}$ から選ば
 れる隣接する 2 つは、互いに結合せず、したがって環構造を形成せず、 20

ベンゼン環 A 2 とベンゼン環 B 2、ベンゼン環 A 2 とベンゼン環 C 2、ベンゼン環 A 2
 とベンゼン環 D 2、ベンゼン環 A 2 とベンゼン環 E 2、ベンゼン環 A 2 とベンゼン環 F 2
 、ベンゼン環 B 2 とベンゼン環 C 2、ベンゼン環 D 2 とベンゼン環 E 2、及びベンゼン環
 D 2 とベンゼン環 F 2 は架橋せず、

* * * は中心窒素原子 N への結合位置を表し、

式 (2 - 1) 及び (2 - 2) において、p は 0 又は 1、q は 0 又は 1 であり、

式 (2 - 3) 及び (2 - 4) において、p は 0 又は 1 であり、

式 (2 - 5) において、p は 0 であり、

式 (2 - 1) 及び (2 - 2) において、p が 0 で q が 0 のとき、* q が中心窒素原子 N
 に結合し、p が 0 で q が 1 のとき、* o が中心窒素原子 N に結合し、p が 1 で q が 0 のと
 き、* q が $R^{231} \sim R^{235}$ から選ばれる 1 つに結合し、 30

式 (2 - 3) ~ (2 - 56) において、p が 0 のとき、* o が中心窒素原子 N に結合し

、
 式 (2 - 5) において、 X^2 が $C^r C^c R^d$ であるとき、 L^{11} 及び L^{12} から選ばれる
 少なくとも 1 つは、置換もしくは無置換のフェニレン基であり、

式 (2 - 1) は、p - ビフェニル基を除く。))

【請求項 2】

L^{11} 及び L^{12} は、単結合である、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 3】

$A r^{11}$ は、式 (2 - 1)、(2 - 2)、及び (2 - 5) のいずれかで表される基であ
 る、請求項 1 又は 2 に記載の化合物。 40

【請求項 4】

$R^{231} \sim R^{235}$ 、 $R^{241} \sim R^{246}$ 、 $R^{251} \sim R^{255}$ 、 $R^{261} \sim R^{268}$ 、 $R^{271} \sim R^{282}$ 、 $R^{291} \sim R^{300}$ 、及び $R^{301} \sim R^{308}$ は、それぞれ独立して、水素
 原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成
 炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環
 基である、請求項 1 ~ 3 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 5】

* o に結合する単結合ではない $R^{231} \sim R^{235}$ が、すべて水素原子である、請求項
 1 ~ 4 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 6】

* p に結合する単結合ではなく、かつ * q に結合する単結合ではない $R^{241} \sim R^{246}$ が、すべて水素原子である、請求項 1 ~ 5 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 7】

$R^{251} \sim R^{255}$ が、すべて水素原子である、請求項 1 ~ 6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 8】

$R^{261} \sim R^{264}$ 、及び * r に結合する単結合ではない $R^{265} \sim R^{268}$ が、すべて水素原子である、請求項 1 ~ 7 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 9】

$R^{271} \sim R^{278}$ 、及び * s に結合する単結合ではない $R^{279} \sim R^{282}$ が、すべて水素原子である、請求項 1 ~ 8 のいずれか 1 項に記載の化合物。

10

【請求項 10】

$R^{292} \sim R^{296}$ 、並びに * t に結合する単結合ではない R^{291} 及び $R^{297} \sim R^{300}$ が、すべて水素原子である、請求項 1 ~ 9 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 11】

$R^{301} \sim R^{304}$ 、及び * u に結合する単結合ではない $R^{305} \sim R^{308}$ が、すべて水素原子である、請求項 1 ~ 10 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 12】

式 (2-1) において、p 又は q が 0 である、請求項 1 ~ 11 のいずれか 1 項に記載の化合物。

20

【請求項 13】

前記式 (2) で表される化合物が少なくとも 1 個の重水素原子を含む、請求項 1 ~ 12 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 14】

請求項 1 ~ 13 のいずれか 1 項に記載の化合物を有する有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【請求項 15】

陰極、陽極、及び該陰極と該陽極の間に有機層を有する有機エレクトロルミネッセンス素子であって、該有機層が発光層を含み、該有機層の少なくとも 1 層が請求項 1 ~ 13 のいずれか 1 項に記載の化合物を含む有機エレクトロルミネッセンス素子。

30

【請求項 16】

前記有機層が前記陽極と前記発光層の間に正孔輸送帯域を含み、該正孔輸送帯域が前記化合物を含む、請求項 15 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 17】

前記正孔輸送帯域が陽極側の第 1 正孔輸送層と陰極側の第 2 正孔輸送層を含み、該第 1 正孔輸送層、該第 2 正孔輸送層、又は双方が前記化合物を含む、請求項 16 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 18】

前記第 1 正孔輸送層が前記化合物を含む、請求項 17 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

40

【請求項 19】

前記第 2 正孔輸送層が前記発光層に隣接する、請求項 17 又は 18 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 20】

前記正孔輸送帯域が陽極側から順に第 1 正孔輸送層、第 2 正孔輸送層及び第 3 正孔輸送層を含み、第 1 ~ 第 3 正孔輸送層から選ばれる 1 層のみ、第 1 ~ 第 3 正孔輸送層から選ばれる 2 層のみ、又は、第 1 ~ 第 3 正孔輸送層の全ての層が前記化合物を含む請求項 16 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 21】

50

前記発光層と前記第3正孔輸送層とが直接接している請求項20に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項22】

前記発光層が蛍光ドーパント材料を含む、請求項15～21のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項23】

前記発光層が燐光ドーパント材料を含む、請求項15～21のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項24】

請求項15～23のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を含む、電子機器。

10

20

30

40

50