

【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5月30日(2023.5.30)

【公開番号】特開2021-14446(P2021-14446A)

【公開日】令和3年2月12日(2021.2.12)

【年通号数】公開・登録公報2021-006

【出願番号】特願2020-98433(P2020-98433)

【国際特許分類】

C 07 F 5/02(2006.01)

10

H 10 K 50/00(2023.01)

H 10 K 50/16(2023.01)

H 10 K 50/15(2023.01)

C 09 K 11/06(2006.01)

【F I】

C 07 F 5/02 A C S P

H 05 B 33/14 B

H 05 B 33/22 B

H 05 B 33/22 D

C 09 K 11/06 6 6 0

20

【手続補正書】

【提出日】令和5年5月22日(2023.5.22)

【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

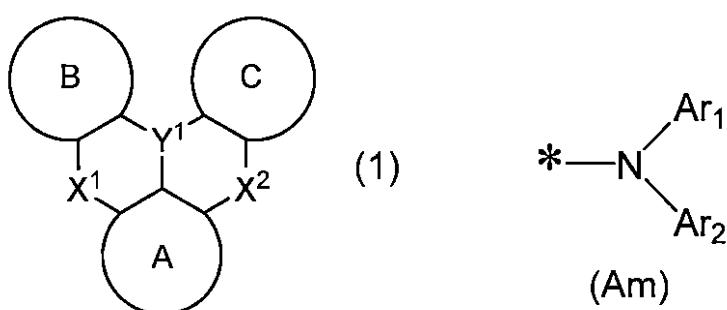
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

下記一般式(1)で表される多環芳香族化合物、または下記一般式(1)で表される構造を複数有する多環芳香族化合物の多量体。

【化1】



30

40

(上記式(1)中、

A環、B環およびC環は、それぞれ独立して、アリール環またはヘテロアリール環であり、これらの環における少なくとも1つの水素は置換されていてもよく、

B環およびC環の少なくとも1つの環における少なくとも1つの水素が上記式(Am)で表される基で置換されており、上記式(Am)において、Ar<sub>1</sub>およびAr<sub>2</sub>は、それぞれ独立して、アリールまたはヘテロアリールであり、当該アリールまたはヘテロアリールにおける少なくとも1つの水素は置換されていてもよく、Ar<sub>1</sub>およびAr<sub>2</sub>は単結合

50

または連結基を介して結合していてもよく、上記式(1A)で表される基は\*においてB環またはC環における水素と置換し、

B環およびC環は連結基を介して結合していてもよく、

Y<sup>1</sup>は、B、P、P=O、P=S、Al、Ga、As、Si-RまたはGe-Rであり、前記Si-RおよびGe-RのRは、アリール、アルキルまたはシクロアルキルであり、

X<sup>1</sup>およびX<sup>2</sup>は、それぞれ独立して、>O、>N-R、>Si(-R)<sub>2</sub>、>C(-R)<sub>2</sub>、>Sまたは>Seであり、前記>N-RのRは、置換されていてもよいアリール(ただし置換基としてアミノ基を除く)、置換されていてもよいヘテロアリール、置換されていてもよいアルキルまたは置換されていてもよいシクロアルキルであり、前記>Si(-R)<sub>2</sub>のRは、置換されていてもよいアリール、置換されていてもよいヘテロアリール、置換されていてもよいアルキルまたは置換されていてもよいシクロアルキルであり、前記>C(-R)<sub>2</sub>のRは、水素、置換されていてもよいアリール、置換されていてもよいヘテロアリール、置換されていてもよいアルキルまたは置換されていてもよいシクロアルキルであり、また、前記>N-R、>Si(-R)<sub>2</sub>および>C(-R)<sub>2</sub>の少なくとも1つにおけるRは連結基または単結合により前記A環、B環およびC環の少なくとも1つの環と結合していてもよく、

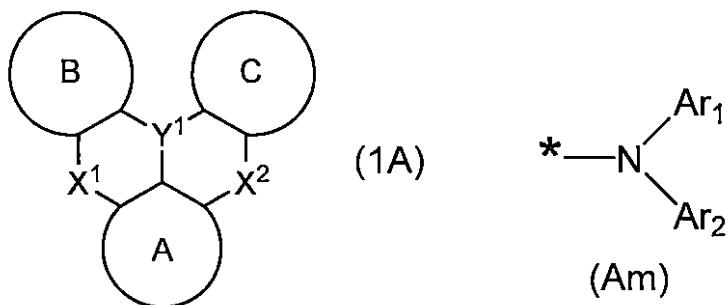
式(1)で表される化合物または構造における、A環、B環、C環、アリールおよびヘテロアリールの少なくとも1つは、少なくとも1つのシクロアルカンで縮合されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも1つの水素は置換されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも1つの-CH<sub>2</sub>-は-O-で置換されていてもよく、そして、

式(1)で表される化合物または構造における少なくとも1つの水素は、重水素、シアノまたはハロゲンで置換されていてもよい。)

### 【請求項2】

下記一般式(1A)で表される請求項1に記載の多環芳香族化合物、または下記一般式(1A)で表される構造を複数有する請求項1に記載の多環芳香族化合物の多量体。

### 【化2】



(上記式(1A)中、

A環、B環およびC環は、それぞれ独立して、アリール環またはヘテロアリール環であり、これらの環における少なくとも1つの水素は置換されていてもよく、

B環およびC環の少なくとも1つの環における少なくとも1つの水素が上記式(1A)で表される基で置換されており、上記式(1A)において、Ar<sub>1</sub>はビフェニリルであり、Ar<sub>2</sub>はアリール(ただしビフェニリルは除く)またはヘテロアリールであり、当該ビフェニリル、アリールまたはヘテロアリールにおける少なくとも1つの水素はアルキルまたはシクロアルキルで置換されていてもよく、上記式(1A)で表される基は\*においてB環またはC環における水素と置換し、

B環およびC環は連結基を介して結合していてもよく、

Y<sup>1</sup>は、B、P、P=O、P=S、Al、Ga、As、Si-RまたはGe-Rであり、前記Si-RおよびGe-RのRは、アリール、アルキルまたはシクロアルキルであり、

10

20

30

40

50

X<sup>1</sup> および X<sup>2</sup> は、それぞれ独立して、>O、>N - R、>Si(-R)<sub>2</sub>、>C(-R)<sub>2</sub>、>S または >Se であり、前記 >N - R の R は、置換されていてもよいアリール（ただし置換基としてアミノ基を除く）、置換されていてもよいヘテロアリール、置換されていてもよいアルキルまたは置換されていてもよいシクロアルキルであり、前記 >Si(-R)<sub>2</sub> の R は、置換されていてもよいアリール、置換されていてもよいヘテロアリール、置換されていてもよいアルキルまたは置換されていてもよいシクロアルキルであり、前記 >C(-R)<sub>2</sub> の R は、水素、置換されていてもよいアリール、置換されていてもよいヘテロアリール、置換されていてもよいアルキルまたは置換されていてもよいシクロアルキルであり、また、前記 >N - R、>Si(-R)<sub>2</sub> および >C(-R)<sub>2</sub> の少なくとも 1 つにおける R は連結基または単結合により前記 A 環、B 環および C 環の少なくとも 1 つの環と結合していてもよく、

式 (1A) で表される化合物または構造における、A 環、B 環、C 環、アリールおよびヘテロアリールの少なくとも 1 つは、少なくとも 1 つのシクロアルカンで縮合されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも 1 つの水素は置換されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも 1 つの -CH<sub>2</sub>- は -O- で置換されていてもよく、そして、

式 (1A) で表される化合物または構造における少なくとも 1 つの水素は、重水素、シアノまたはハロゲンで置換されていてもよい。)

### 【請求項 3】

上記式 (1A) 中、

A 環、B 環および C 環は、それぞれ独立して、アリール環またはヘテロアリール環であり、これらの環における少なくとも 1 つの水素は、置換もしくは無置換のアリール、置換もしくは無置換のヘテロアリール、置換もしくは無置換のジアリールアミノ、置換もしくは無置換のジヘテロアリールアミノ、置換もしくは無置換のアリールヘテロアリールアミノ、置換もしくは無置換のジアリールボリル（2 つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、置換もしくは無置換のアルキル、置換もしくは無置換のシクロアルキル、置換もしくは無置換のアルコキシ、置換もしくは無置換のアリールオキシ、または、置換シリルで置換されていてもよく、また、これらの環は Y<sup>1</sup>、X<sup>1</sup> および X<sup>2</sup> から構成される上記式 (1A) 中央の縮合 2 環構造と結合を共有する 5 員環または 6 員環を有し、

B 環および C 環の少なくとも 1 つの環における少なくとも 1 つの水素が上記式 (Am) で表される基で置換されており、

B 環および C 環は、>O、>N - R、>Si(-R)<sub>2</sub>、>C(-R)<sub>2</sub>、>S または >Se を介して結合していてもよく、前記 >N - R および >Si(-R)<sub>2</sub> の R は、それ独立して、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいアリール、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルであり、前記 >C(-R)<sub>2</sub> の R は、水素、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいアリール、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルであり、また、前記 >N - R、>Si(-R)<sub>2</sub> および >C(-R)<sub>2</sub> の少なくとも 1 つにおける R は、-O-、-S-、-C(-R)<sub>2</sub>- または単結合により、前記 B 環および C 環の少なくとも 1 つの環と結合していてもよく、前記 -C(-R)<sub>2</sub>- の R は、水素、アルキルまたはシクロアルキルであり、

Y<sup>1</sup> は、B、P、P = O、P = S、Al、Ga、As、Si - R または Ge - R であり、前記 Si - R および Ge - R の R は、アリール、アルキルまたはシクロアルキルであり、

X<sup>1</sup> および X<sup>2</sup> は、それぞれ独立して、>O、>N - R、>Si(-R)<sub>2</sub>、>C(-R)<sub>2</sub>、>S または >Se であり、前記 >N - R および >Si(-R)<sub>2</sub> の R は、それ独立して、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいアリール、アルキ

10

20

30

40

50

ルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルであり、前記  $> C(-R)_2$  の R は、水素、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいアリール、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルであり、また、前記  $> N - R$ 、 $> S i(-R)_2$  および  $> C(-R)_2$  の少なくとも 1 つにおける R は、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(-R)_2$  - または単結合により、前記 A 環、B 環および C 環の少なくとも 1 つの環と結合していてもよく、前記  $-C(-R)_2$  - の R は、水素、アルキルまたはシクロアルキルであり、

式 (1A) で表される化合物または構造における、A 環、B 環、C 環、アリールおよびヘテロアリールの少なくとも 1 つは、少なくとも 1 つのシクロアルカンで縮合されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも 1 つの水素は置換されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも 1 つの  $-CH_2-$  は  $-O-$  で置換されていてもよく、

多量体の場合には、一般式 (1A) で表される構造を 2 個または 3 個有する 2 量体または 3 量体であり、そして、

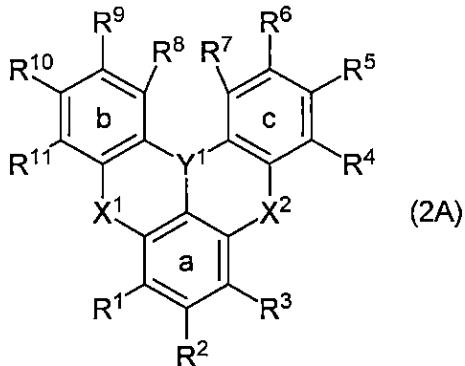
式 (1A) で表される化合物または構造における少なくとも 1 つの水素は、重水素、シアノまたはハロゲンで置換されていてもよい、

請求項 2 に記載する多環芳香族化合物またはその多量体。

【請求項 4】

下記一般式 (2A) で表される、請求項 2 に記載する多環芳香族化合物。

【化 3】



(上記式 (2A) 中、

a 環、b 環、および c 環における、任意の「 $-C(-R)=$ 」(ここで R は式 (2A) 中の  $R^1 \sim R^{11}$  である) は「 $-N=$ 」に置き換わっていてもよく、任意の「 $-C(-R)=C(-R)-$ 」(ここで R は式 (2A) 中の  $R^1 \sim R^{11}$  である) は、「 $-N(-R)-$ 」、「 $-O-$ 」、または「 $-S-$ 」に置き換わっていてもよく、前記「 $-N(-R)-$ 」の R は、アリール、アルキル、またはシクロアルキルであり、

$R^1 \sim R^{11}$  は、それぞれ独立して、水素、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、ジアリールボリル (2 つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい)、アルキル、シクロアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、トリアリールシリル、トリアルキルシリル、トリシクロアルキルシリル、ジアルキルシクロアルキルシリルまたはアルキルジシクロアルキルシリルであり、これらにおける少なくとも 1 つの水素は、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルで置換されていてもよく、また、 $R^1 \sim R^{11}$  のうちの隣接する基同士が結合して a 環、b 環または c 環と共にアリール環またはヘテロアリール環を形成していてもよく、形成された環における少なくとも 1 つの水素は、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、ジアリールボリル (2 つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよ

10

20

30

40

50

い)、アルキル、シクロアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、トリアリールシリル、トリアルキルシリル、トリシクロアルキルシリル、ジアルキルシクロアルキルシリルまたはアルキルジシクロアルキルシリルで置換されていてもよく、これらにおける少なくとも1つの水素は、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルで置換されていてもよく、

$R^4 \sim R^{11}$  の少なくとも1つが上記式( A m )で表される基であるか、および/または、前記 b 環もしくは c 環と共に形成されたアリール環もしくはヘテロアリール環における少なくとも1つの水素が上記式( A m )で表される基で置換されており、

$R^7$  および  $R^8$  は結合して、 $>O$ 、 $>N - R$ 、 $>Si(-R)_2$ 、 $>C(-R)_2$ 、 $>S$  または  $>Se$  となっていてもよく、前記  $>N - R$  および  $>Si(-R)_2$  の R は、それぞれ独立して、炭素数 6 ~ 12 のアリール、炭素数 2 ~ 15 のヘテロアリール、炭素数 1 ~ 6 のアルキルまたは炭素数 3 ~ 14 のシクロアルキルであり、前記  $>C(-R)_2$  の R は、水素、炭素数 6 ~ 12 のアリール、炭素数 2 ~ 15 のヘテロアリール、炭素数 1 ~ 6 のアルキルまたは炭素数 3 ~ 14 のシクロアルキルであり、また、前記  $>N - R$ 、 $>Si(-R)_2$  および  $>C(-R)_2$  の少なくとも1つにおける R は、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(-R)_2$  - または単結合により、前記 b 環および c 環の少なくとも1つの環と結合していてもよく、前記  $-C(-R)_2$  - の R は炭素数 1 ~ 6 のアルキルまたは炭素数 3 ~ 14 のシクロアルキルであり、

$Y^1$  は、B、P、 $P = O$ 、 $P = S$ 、Al、Ga、As、 $Si - R$  または  $Ge - R$  であり、前記  $Si - R$  および  $Ge - R$  の R は、炭素数 6 ~ 12 のアリール、炭素数 1 ~ 6 のアルキルまたは炭素数 3 ~ 14 のシクロアルキルであり、

$X^1$  および  $X^2$  は、それぞれ独立して、 $>O$ 、 $>N - R$ 、 $>Si(-R)_2$ 、 $>C(-R)_2$ 、 $>S$  または  $>Se$  であり、前記  $>N - R$  および  $>Si(-R)_2$  の R は、それぞれ独立して、炭素数 6 ~ 12 のアリール、炭素数 2 ~ 15 のヘテロアリール、炭素数 1 ~ 6 のアルキルまたは炭素数 3 ~ 14 のシクロアルキルであり、前記  $>C(-R)_2$  の R は、水素、炭素数 6 ~ 12 のアリール、炭素数 2 ~ 15 のヘテロアリール、炭素数 1 ~ 6 のアルキルまたは炭素数 3 ~ 14 のシクロアルキルであり、また、前記  $>N - R$ 、 $>Si(-R)_2$  および  $>C(-R)_2$  の少なくとも1つにおける R は、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(-R)_2$  - または単結合により、前記 a 環、b 環および c 環の少なくとも1つの環と結合していてもよく、前記  $-C(-R)_2$  - の R は炭素数 1 ~ 6 のアルキルまたは炭素数 3 ~ 14 のシクロアルキルであり、

式( 2 A )で表される化合物における、前記 a 環、前記 b 環、前記 c 環、前記形成された環、前記アリールおよび前記ヘテロアリールの少なくとも1つは、炭素数 3 ~ 24 の、少なくとも1つのシクロアルカンで縮合されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも1つの水素は、炭素数 6 ~ 30 のアリール、炭素数 2 ~ 30 のヘテロアリール、炭素数 1 ~ 24 のアルキルまたは炭素数 3 ~ 24 のシクロアルキルで置換されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも1つの  $-CH_2-$  は  $-O-$  で置換されていてもよく、そして、

式( 2 A )で表される化合物における少なくとも1つの水素は、重水素、シアノまたはハロゲンで置換されていてもよい。)

### 【請求項 5】

上記式( 2 A )中、

a 環、b 環、および c 環における、任意の「 $-C(-R) =$ 」(ここで R は式( 2 A )中の  $R^1 \sim R^{11}$  である)は「 $-N =$ 」に置き換わっていてもよく、任意の「 $-C(-R) = C(-R) -$ 」(ここで R は式( 2 A )中の  $R^1 \sim R^{11}$  である)は、「 $-N(-R) -$ 」、「 $-O -$ 」、または「 $-S -$ 」に置き換わっていてもよく、前記「 $-N(-R) -$ 」の R は、炭素数 6 ~ 12 のアリール、炭素数 1 ~ 6 のアルキル、または炭素数 3 ~ 14 のシクロアルキルであり、

$R^1 \sim R^{11}$  は、それぞれ独立して、水素、炭素数 6 ~ 30 のアリール、炭素数 2 ~ 30 のヘテロアリール、ジアリールアミノ(ただしアリールは炭素数 6 ~ 12 のアリール)

10

20

30

40

50

、ジアリールボリル（ただしアリールは炭素数6～12のアリールであり、2つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、炭素数1～24のアルキル、炭素数3～24のシクロアルキル、トリアリールシリル（ただしアリールは炭素数6～12のアリール）、またはトリアルキルシリル（ただしアルキルは炭素数1～6のアルキル）であり、また、R<sup>1</sup>～R<sup>11</sup>のうちの隣接する基同士が結合してa環、b環またはc環と共に炭素数9～16のアリール環または炭素数6～15のヘテロアリール環を形成してもよく、形成された環における少なくとも1つの水素は、炭素数6～10のアリール、炭素数1～12のアルキル、炭素数3～16のシクロアルキル、トリアリールシリル（ただしアリールは炭素数6～12のアリール）、またはトリアルキルシリル（ただしアルキルは炭素数1～5のアルキル）で置換されていてもよく、

10

R<sup>4</sup>～R<sup>11</sup>の少なくとも1つが上記式（Am）で表される基であるか、および／または、前記b環もしくはc環と共に形成されたアリール環もしくはヘテロアリール環における少なくとも1つの水素が上記式（Am）で表される基で置換されており、上記式（Am）において、Ar<sub>1</sub>はビフェニリルであり、Ar<sub>2</sub>は炭素数6～30のアリール（ただしビフェニリルは除く）または炭素数2～30のヘテロアリールであり、当該ビフェニリル、アリールまたはヘテロアリールにおける少なくとも1つの水素は炭素数1～24のアルキルまたは炭素数3～24のシクロアルキルで置換されていてもよく、

R<sup>7</sup>およびR<sup>8</sup>は結合して、>O、>N-R、>C(-R)<sub>2</sub>または>Sとなっていてもよく、前記>N-RのRは、炭素数6～10のアリール、炭素数1～5のアルキルまたは炭素数5～10のシクロアルキルであり、前記>C(-R)<sub>2</sub>のRは、水素、炭素数6～10のアリール、炭素数1～5のアルキルまたは炭素数5～10のシクロアルキルであり、

20

Y<sup>1</sup>は、B、P、P=O、P=SまたはSi-Rであり、前記Si-RのRは、炭素数6～10のアリール、炭素数1～5のアルキルまたは炭素数5～10のシクロアルキルであり、

X<sup>1</sup>およびX<sup>2</sup>は、それぞれ独立して、>O、>N-R、>C(-R)<sub>2</sub>または>Sであり、前記>N-RのRは、炭素数6～10のアリール、炭素数1～5のアルキルまたは炭素数5～10のシクロアルキルであり、前記>C(-R)<sub>2</sub>のRは、水素、炭素数6～10のアリール、炭素数1～5のアルキルまたは炭素数5～10のシクロアルキルであり、

30

式（2A）で表される化合物における、前記a環、前記b環、前記c環、前記形成された環、前記アリールおよび前記ヘテロアリールの少なくとも1つは、炭素数3～20の、少なくとも1つのシクロアルカンで縮合されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも1つの水素は、炭素数6～16のアリール、炭素数2～22のヘテロアリール、炭素数1～12のアルキルまたは炭素数3～16のシクロアルキルで置換されていてもよく、そして、

式（2A）で表される化合物における少なくとも1つの水素は、重水素、シアノまたはハロゲンで置換されていてもよい、

請求項4に記載する多環芳香族化合物。

40

#### 【請求項6】

上記式（2A）中、

a環、b環、およびc環における、任意の「-C(-R)=」（ここでRは式（2A）中のR<sup>1</sup>～R<sup>11</sup>である）は「-N=」に置き換わっていてもよく、任意の「-C(-R)=C(-R)-」（ここでRは式（2A）中のR<sup>1</sup>～R<sup>11</sup>である）は、「-N(-R)-」、「-O-」、または「-S-」に置き換わっていてもよく、前記「-N(-R)-」のRは、炭素数6～10のアリール、炭素数1～5のアルキル、または炭素数5～10のシクロアルキルであり、

R<sup>1</sup>～R<sup>11</sup>は、それぞれ独立して、水素、炭素数6～16のアリール、炭素数2～20のヘテロアリール、ジアリールアミノ（ただしアリールは炭素数6～10のアリール）、炭素数1～12のアルキルまたは炭素数3～16のシクロアルキルであり、

50

$R^5$  および  $R^{10}$  の少なくとも 1 つが上記式 (A m) で表される基であり、上記式 (A m) において、 $Ar_1$  はビフェニリルであり、 $Ar_2$  は炭素数 6 ~ 16 のアリール (ただしビフェニリルは除く) または炭素数 2 ~ 20 のヘテロアリールであり、当該ビフェニリル、アリールまたはヘテロアリールにおける少なくとも 1 つの水素は炭素数 1 ~ 12 のアルキルまたは炭素数 3 ~ 16 のシクロアルキルで置換されていてもよく、

$R^7$  および  $R^8$  は結合して、 $>O$ 、 $>N - R$  または  $>C(-R)_2$  となっていてもよく、前記  $>N - R$  の  $R$  は、炭素数 6 ~ 10 のアリール、炭素数 1 ~ 5 のアルキルまたは炭素数 5 ~ 10 のシクロアルキルであり、前記  $>C(-R)_2$  の  $R$  は、水素、炭素数 6 ~ 10 のアリール、炭素数 1 ~ 5 のアルキルまたは炭素数 5 ~ 10 のシクロアルキルであり、

$Y^1$  は、 $B$ 、 $P$ 、 $P = O$  または  $P = S$  であり、

10

$X^1$  および  $X^2$  は、それぞれ独立して、 $>O$ 、 $>N - R$  または  $>C(-R)_2$  であり、前記  $>N - R$  の  $R$  は、炭素数 6 ~ 10 のアリール、炭素数 1 ~ 5 のアルキルまたは炭素数 5 ~ 10 のシクロアルキルであり、前記  $>C(-R)_2$  の  $R$  は、水素、炭素数 6 ~ 10 のアリール、炭素数 1 ~ 5 のアルキルまたは炭素数 5 ~ 10 のシクロアルキルであり、

式 (2 A) で表される化合物における、前記 a 環、前記 b 環、前記 c 環、および、前記  $>N - R$  の  $R$  としての炭素数 6 ~ 10 のアリールの少なくとも 1 つは、炭素数 3 ~ 16 の、少なくとも 1 つのシクロアルカンで縮合されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも 1 つの水素は炭素数 1 ~ 6 のアルキルまたは炭素数 3 ~ 14 のシクロアルキルで置換されていてもよく、そして、

式 (2 A) で表される化合物における少なくとも 1 つの水素は、重水素、シアノまたはハロゲンで置換されていてもよい、

20

請求項 4 に記載する多環芳香族化合物。

#### 【請求項 7】

上記式 (2 A) 中、

$R^1$  ~  $R^{11}$  は、それぞれ独立して、水素、炭素数 6 ~ 16 のアリール、ジアリールアミノ (ただしアリールは炭素数 6 ~ 10 のアリール)、炭素数 1 ~ 12 のアルキルまたは炭素数 3 ~ 16 のシクロアルキルであり、

$R^5$  および  $R^{10}$  の少なくとも 1 つが上記式 (A m) で表される基であり、上記式 (A m) において、 $Ar_1$  はビフェニリルであり、 $Ar_2$  は炭素数 6 ~ 16 のアリール (ただしビフェニリルは除く) または炭素数 2 ~ 20 のヘテロアリールであり、当該ビフェニリル、アリールまたはヘテロアリールにおける少なくとも 1 つの水素は炭素数 1 ~ 12 のアルキルまたは炭素数 3 ~ 16 のシクロアルキルで置換されていてもよく、

30

$Y^1$  は  $B$  であり、

$X^1$  および  $X^2$  は共に  $>N - R$  であるか、または、 $X^1$  は  $>N - R$  であって  $X^2$  は  $>O$  であり、前記  $>N - R$  の  $R$  は炭素数 6 ~ 10 のアリール、炭素数 1 ~ 5 のアルキルまたは炭素数 5 ~ 10 のシクロアルキルであり、

式 (2 A) で表される化合物における、前記 a 環、前記 b 環、前記 c 環、および、前記  $>N - R$  の  $R$  としての炭素数 6 ~ 10 のアリールの少なくとも 1 つは、炭素数 3 ~ 14 のシクロアルカンで縮合されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも 1 つの水素は炭素数 1 ~ 5 のアルキルで置換されていてもよく、そして、

式 (2 A) で表される化合物における少なくとも 1 つの水素は重水素またはハロゲンで置換されていてもよい、

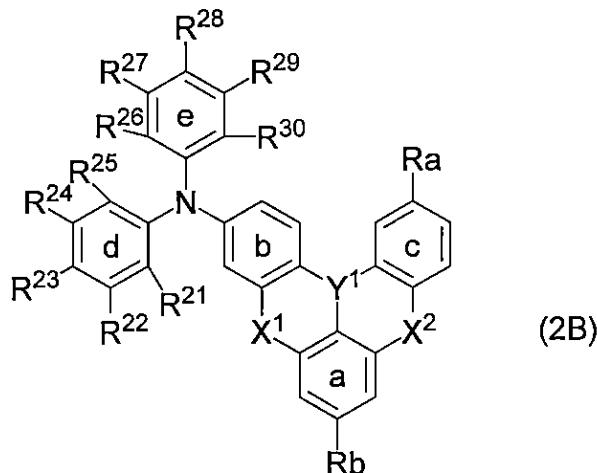
40

請求項 4 に記載する多環芳香族化合物。

#### 【請求項 8】

下記一般式 (2 B) で表される請求項 1 に記載の多環芳香族化合物、または下記一般式 (2 B) で表される構造を複数有する請求項 1 に記載の多環芳香族化合物の多量体。

【化4】



10

(上記式(2B)中、

a環、b環、およびc環における、任意の「-C(-H)=」は「-N=」に置き換わっていてもよく、

R<sup>21</sup>～R<sup>30</sup>は、それぞれ独立して、水素、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、ジアリールボリル(2つのアリールは単結合または連結基を介して結合してもよい)、アルキル、シクロアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、トリアリールシリル、トリアルキルシリル、トリシクロアルキルシリル、ジアルキルシクロアルキルシリルまたはアルキルジシクロアルキルシリルであり、これらにおける少なくとも1つの水素は、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルで置換されていてもよく、

R<sup>21</sup>～R<sup>30</sup>のうちの隣接する基同士が結合してd環またはe環と共にアリール環またはヘテロアリール環を形成していてもよく、形成された環における少なくとも1つの水素は、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、ジアリールボリル(2つのアリールは単結合または連結基を介して結合してもよい)、アルキル、シクロアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、トリアリールシリル、トリアルキルシリル、トリシクロアルキルシリル、ジアルキルシクロアルキルシリルまたはアルキルジシクロアルキルシリルで置換されていてもよく、これらにおける少なくとも1つの水素は、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルで置換されていてもよく、

R<sup>25</sup>およびR<sup>26</sup>は結合して、>O、>N-R、>Si(-R)<sub>2</sub>、>C(-R)<sub>2</sub>、>Sまたは>Seとなっていてもよく、前記>N-Rおよび>Si(-R)<sub>2</sub>のRは、それぞれ独立して、炭素数6～12のアリール、炭素数2～15のヘテロアリール、炭素数1～6のアルキルまたは炭素数3～14のシクロアルキルであり、これらにおける少なくとも1つの水素は、炭素数6～12のアリール、炭素数2～15のヘテロアリール、炭素数1～6のアルキルまたは炭素数3～14のシクロアルキルで置換されていてもよく、前記>C(-R)<sub>2</sub>のRは、水素、炭素数6～12のアリール、炭素数2～15のヘテロアリール、炭素数1～6のアルキルまたは炭素数3～14のシクロアルキルであり、これらにおける少なくとも1つの水素は、炭素数6～12のアリール、炭素数2～15のヘテロアリール、炭素数1～6のアルキルまたは炭素数3～14のシクロアルキルで置換されていてもよく、

Raは、アリール、ヘテロアリール、アルキル、シクロアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、トリアリールシリル、トリアルキルシリル、トリシクロアルキルシリル、ジアルキルシクロアルキルシリルまたはアルキルジシクロアルキルシリルであり、これらにおける少なくとも1つの水素は、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルで置換されていてもよく、

20

30

40

50

R<sub>b</sub>は、水素、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、ジアリールボリル（2つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、アルキル、シクロアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、トリアリールシリル、トリアルキルシリル、トリシクロアルキルシリル、ジアルキルシクロアルキルシリルまたはアルキルジシクロアルキルシリルであり、これらにおける少なくとも1つの水素は、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルで置換されていてもよく、

Y<sup>1</sup>は、B、P、P=O、P=S、A1、Ga、As、Si-RまたはGe-Rであり、前記Si-RおよびGe-RのRは、炭素数6~12のアリール、炭素数1~6のアルキルまたは炭素数3~14のシクロアルキルであり、

$X^1$  および  $X^2$  は、それぞれ独立して、 $>O$ 、 $>N - R$ 、 $>Si(-R)_2$ 、 $>C(-R)_2$ 、 $>Se$  であり、前記  $>N - R$  および  $>Si(-R)_2$  の  $R$  は、それ各自立して、炭素数 6 ~ 12 のアリール、炭素数 2 ~ 15 のヘテロアリール、炭素数 1 ~ 6 のアルキルまたは炭素数 3 ~ 14 のシクロアルキルであり、これらにおける少なくとも 1 つの水素は、炭素数 6 ~ 12 のアリール、炭素数 2 ~ 15 のヘテロアリール、炭素数 1 ~ 6 のアルキルまたは炭素数 3 ~ 14 のシクロアルキルで置換されていてもよく、前記  $>C(-R)_2$  の  $R$  は、水素、炭素数 6 ~ 12 のアリール、炭素数 2 ~ 15 のヘテロアリール、炭素数 1 ~ 6 のアルキルまたは炭素数 3 ~ 14 のシクロアルキルであり、これらにおける少なくとも 1 つの水素は、炭素数 6 ~ 12 のアリール、炭素数 2 ~ 15 のヘテロアリール、炭素数 1 ~ 6 のアルキルまたは炭素数 3 ~ 14 のシクロアルキルで置換されていてもよく、また、前記  $>N - R$ 、 $>Si(-R)_2$  および  $>C(-R)_2$  の少なくとも 1 つにおける  $R$  は、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(-R)_2$  - または単結合により、前記 a 環、b 環および c 環の少なくとも 1 つの環と結合していてもよく、前記  $-C(-R)_2$  - の  $R$  は炭素数 1 ~ 6 のアルキルまたは炭素数 3 ~ 14 のシクロアルキルであり、

式(2B)で表される化合物または構造における、前記a環、前記b環、前記c環、前記d環、前記e環、前記形成された環、前記アリールおよび前記ヘテロアリールの少なくとも1つは、炭素数3～24の、少なくとも1つのシクロアルカンで縮合されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも1つの水素は、炭素数6～30のアリール、炭素数2～30のヘテロアリール、炭素数1～24のアルキルまたは炭素数3～24のシクロアルキルで置換されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも1つの-CH<sub>2</sub>-は-O-で置換されていてもよく、そして、

式(2B)で表される化合物または構造における少なくとも1つの水素は、重水素、シアノまたはハロゲンで置換されていてよい。)

### 【 請求項 9 】

上記式(2B)中、

a 環、b 環、および c 環における、任意の「 - C ( - H ) = 」は「 - N = 」に置き換わっていてもよく、

$R^{2\sim 1}$  ~  $R^{3\sim 0}$  は、それぞれ独立して、水素、炭素数 6 ~ 30 のアリール、炭素数 2 ~ 30 のヘテロアリール、ジアリールアミノ（ただしアリールは炭素数 6 ~ 12 のアリール）、ジアリールボリル（ただしアリールは炭素数 6 ~ 12 のアリールであり、2 つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、炭素数 1 ~ 24 のアルキル、炭素数 3 ~ 24 のシクロアルキル、トリアリールシリル（ただしアリールは炭素数 6 ~ 12 のアリール）、またはトリアルキルシリル（ただしアルキルは炭素数 1 ~ 6 のアルキル）である。

R<sub>2</sub>1 ~ R<sub>3</sub>0 のうちの隣接する基同士が結合して d 環または e 環と共に炭素数 9 ~ 16 のアリール環または炭素数 6 ~ 15 のヘテロアリール環を形成していてもよく、形成された環における少なくとも 1 つの水素は、炭素数 6 ~ 30 のアリール、炭素数 2 ~ 30 のヘテロアリール、ジアリールアミノ（ただしアリールは炭素数 6 ~ 12 のアリール）、ジアリールボリル（ただしアリールは炭素数 6 ~ 12 のアリールであり、2 つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、炭素数 1 ~ 24 のアルキル、炭素数

3 ~ 2 4 のシクロアルキル、トリアリールシリル（ただしアリールは炭素数 6 ~ 1 2 のアリール）、またはトリアルキルシリル（ただしアルキルは炭素数 1 ~ 6 のアルキル）で置換されていてもよく、

R<sup>25</sup> および R<sup>26</sup> は結合して、>O、>N - R、または >C(-R)<sub>2</sub>、となっていてもよく、前記 >N - R の R は、それぞれ独立して、炭素数 6 ~ 1 2 のアリール、炭素数 2 ~ 1 5 のヘテロアリール、炭素数 1 ~ 6 のアルキルまたは炭素数 3 ~ 1 4 のシクロアルキルであり、これらにおける少なくとも 1 つの水素は、炭素数 6 ~ 1 2 のアリール、炭素数 2 ~ 1 5 のヘテロアリール、炭素数 1 ~ 6 のアルキルまたは炭素数 3 ~ 1 4 のシクロアルキルで置換されていてもよく、前記 >C(-R)<sub>2</sub> の R は、水素、炭素数 6 ~ 1 2 のアリール、炭素数 2 ~ 1 5 のヘテロアリール、炭素数 1 ~ 6 のアルキルまたは炭素数 3 ~ 1 4 のシクロアルキルであり、これらにおける少なくとも 1 つの水素は、炭素数 6 ~ 1 2 のアリール、炭素数 2 ~ 1 5 のヘテロアリール、炭素数 1 ~ 6 のアルキルまたは炭素数 3 ~ 1 4 のシクロアルキルで置換されていてもよく、

R<sub>a</sub> は、炭素数 6 ~ 3 0 のアリール、炭素数 1 ~ 2 4 のアルキル、炭素数 3 ~ 2 4 のシクロアルキル、トリアリールシリル（ただしアリールは炭素数 6 ~ 1 2 のアリール）、またはトリアルキルシリル（ただしアルキルは炭素数 1 ~ 6 のアルキル）であり、前記アリールにおける少なくとも 1 つの水素は炭素数 1 ~ 2 4 のアルキルまたは炭素数 3 ~ 2 4 のシクロアルキルで置換されていてもよく、

R<sub>b</sub> は、水素、炭素数 6 ~ 3 0 のアリール、ジアリールアミノ（ただしアリールは炭素数 6 ~ 1 2 のアリール）、ジアリールボリル（ただしアリールは炭素数 6 ~ 1 2 のアリールであり、2 つのアリールは単結合または連結基を介して結合してもよい）、炭素数 1 ~ 2 4 のアルキル、炭素数 3 ~ 2 4 のシクロアルキル、トリアリールシリル（ただしアリールは炭素数 6 ~ 1 2 のアリール）、またはトリアルキルシリル（ただしアルキルは炭素数 1 ~ 6 のアルキル）であり、前記アリールにおける少なくとも 1 つの水素は炭素数 1 ~ 2 4 のアルキルまたは炭素数 3 ~ 2 4 のシクロアルキルで置換されていてもよく、

Y<sup>1</sup> は、B、P、P = O、P = S または S<sub>i</sub> - R であり、前記 S<sub>i</sub> - R の R は、炭素数 6 ~ 1 0 のアリール、炭素数 1 ~ 5 のアルキルまたは炭素数 5 ~ 1 0 のシクロアルキルであり、

X<sup>1</sup> および X<sup>2</sup> は、それぞれ独立して、>O、>N - R、>C(-R)<sub>2</sub>、または >S であり、前記 >N - R の R は、炭素数 6 ~ 1 0 のアリール、炭素数 1 ~ 5 のアルキルまたは炭素数 5 ~ 1 0 のシクロアルキルであり、これらにおける少なくとも 1 つの水素は、炭素数 6 ~ 1 0 のアリール、炭素数 1 ~ 5 のアルキルまたは炭素数 5 ~ 1 0 のシクロアルキルで置換されていてもよく、前記 >C(-R)<sub>2</sub> の R は、水素、炭素数 6 ~ 1 0 のアリール、炭素数 1 ~ 5 のアルキルまたは炭素数 5 ~ 1 0 のシクロアルキルであり、これらにおける少なくとも 1 つの水素は、炭素数 6 ~ 1 0 のアリール、炭素数 1 ~ 5 のアルキルまたは炭素数 5 ~ 1 0 のシクロアルキルで置換されていてもよく、

式 (2B) で表される化合物または構造における、前記 a 環、前記 b 環、前記 c 環、前記 d 環、前記 e 環、前記形成された環、前記アリールおよび前記ヘテロアリールの少なくとも 1 つは、炭素数 3 ~ 2 0 の、少なくとも 1 つのシクロアルカンで縮合されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも 1 つの水素は、炭素数 6 ~ 1 6 のアリール、炭素数 2 ~ 2 2 のヘテロアリール、炭素数 1 ~ 1 2 のアルキルまたは炭素数 3 ~ 1 6 のシクロアルキルで置換されていてもよく、そして、

式 (2B) で表される化合物または構造における少なくとも 1 つの水素は、重水素、シアノまたはハロゲンで置換されていてもよい、

請求項 8 に記載する多環芳香族化合物またはその多量体。

#### 【請求項 10】

上記式 (2B) 中、

a 環、b 環、および c 環における、任意の「-C(-H)=」は「-N=」に置き換わっていてもよく、

R<sup>21</sup> ~ R<sup>30</sup> は、それぞれ独立して、水素、炭素数 6 ~ 1 6 のアリール、ジアリール

10

20

30

40

50

アミノ（ただしアリールは炭素数6～10のアリール）、ジアリールボリル（ただしアリールは炭素数6～10のアリールであり、2つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、炭素数1～12のアルキルまたは炭素数3～16のシクロアルキルであり、

R<sub>a</sub>は、炭素数6～30のアリール、炭素数1～24のアルキル、炭素数3～24のシクロアルキルであり、前記アリールにおける少なくとも1つの水素は炭素数1～24のアルキルまたは炭素数3～24のシクロアルキルで置換されていてもよく、

R<sub>b</sub>は、水素、炭素数6～30のアリール、ジアリールアミノ（ただしアリールは炭素数6～12のアリール）、ジアリールボリル（ただしアリールは炭素数6～12のアリールであり、2つのアリールは単結合または連結基を介して結合していてもよい）、炭素数1～24のアルキルまたは炭素数3～24のシクロアルキルであり、前記アリールにおける少なくとも1つの水素は炭素数1～24のアルキルまたは炭素数3～24のシクロアルキルで置換されていてもよく、

Y<sup>1</sup>は、B、P、P=OまたはP=Sであり、

X<sup>1</sup>およびX<sup>2</sup>は、それぞれ独立して、>Oまたは>N-Rであり、前記>N-RのRは、炭素数6～10のアリール、炭素数1～5のアルキルまたは炭素数5～10のシクロアルキルであり、これらにおける少なくとも1つの水素は、炭素数6～10のアリール、炭素数1～5のアルキルまたは炭素数5～10のシクロアルキルで置換されていてもよく、

式(2B)で表される化合物または構造における、前記a環、前記b環、前記c環、前記d環、前記e環、および、前記>N-RのRとしての炭素数6～10のアリールの少なくとも1つは、炭素数3～16の、少なくとも1つのシクロアルカンで縮合されていてもよく、当該シクロアルカンにおける少なくとも1つの水素は炭素数1～6のアルキルまたは炭素数3～14のシクロアルキルで置換されていてもよく、そして、

式(2B)で表される化合物または構造における少なくとも1つの水素は、重水素、シアノまたはハロゲンで置換されていてもよい、

請求項8に記載する多環芳香族化合物またはその多量体。

#### 【請求項11】

シクロアルカンで縮合されたジアリールアミノ基、シクロアルカンで縮合されたカルバゾリル基またはシクロアルカンで縮合されたベンゾカルバゾリル基で置換されている、請求項1～10のいずれかに記載する多環芳香族化合物またはその多量体。

#### 【請求項12】

上記式(2A)におけるR<sup>2</sup>または上記式(2B)におけるR<sub>b</sub>は、シクロアルカンで縮合されたジアリールアミノ基またはシクロアルカンで縮合されたカルバゾリル基である、請求項4～10のいずれかに記載する多環芳香族化合物。

#### 【請求項13】

前記シクロアルカンは炭素数3～20のシクロアルカンである、請求項11または12に記載する多環芳香族化合物。

#### 【請求項14】

前記ハロゲンはフッ素である、請求項1～13のいずれかに記載する多環芳香族化合物またはその多量体。

#### 【請求項15】

下記構造式で表される、請求項1に記載する多環芳香族化合物。

10

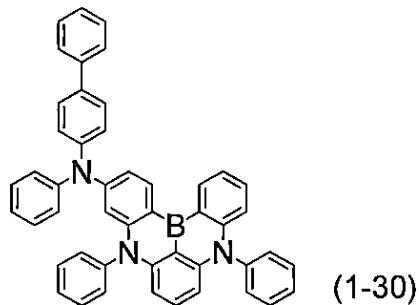
20

30

40

50

## 【化 5】

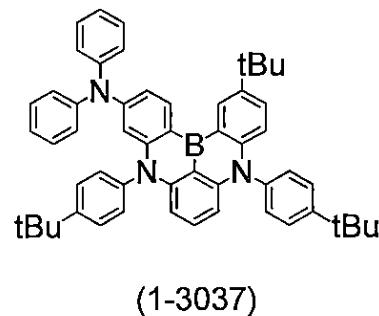
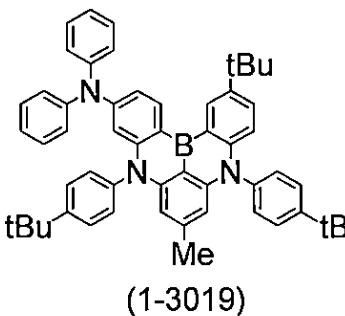
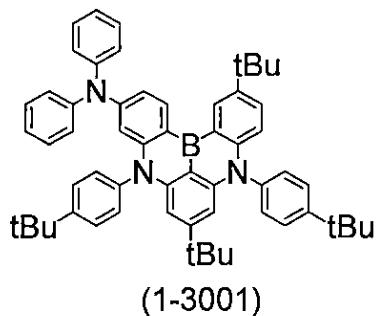


10

## 【請求項 1 6】

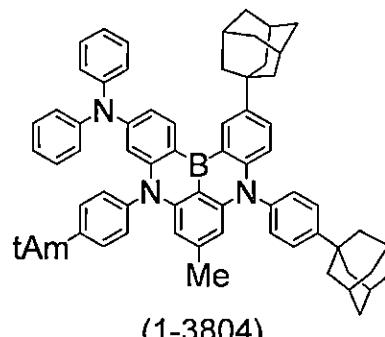
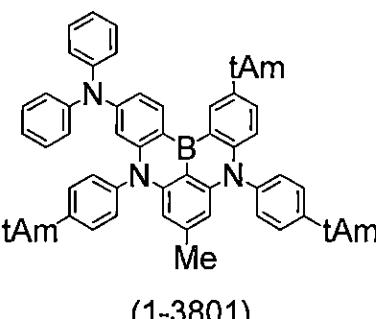
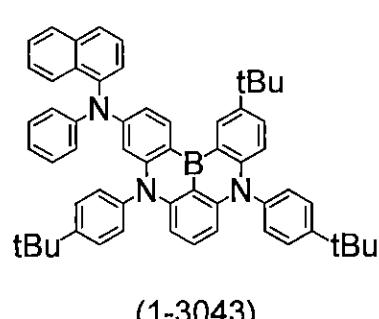
下記構造式のいずれかで表される、請求項 1 に記載する多環芳香族化合物。

## 【化 6】

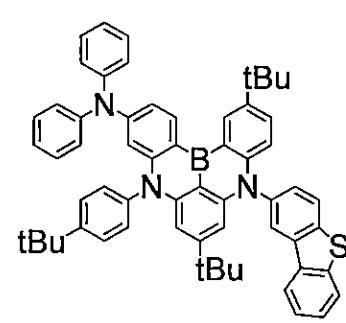
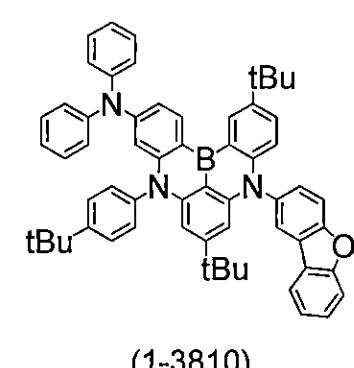
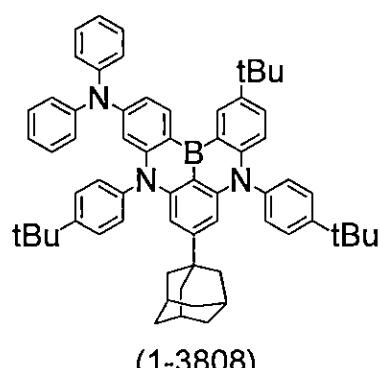


20

## 【化 7】



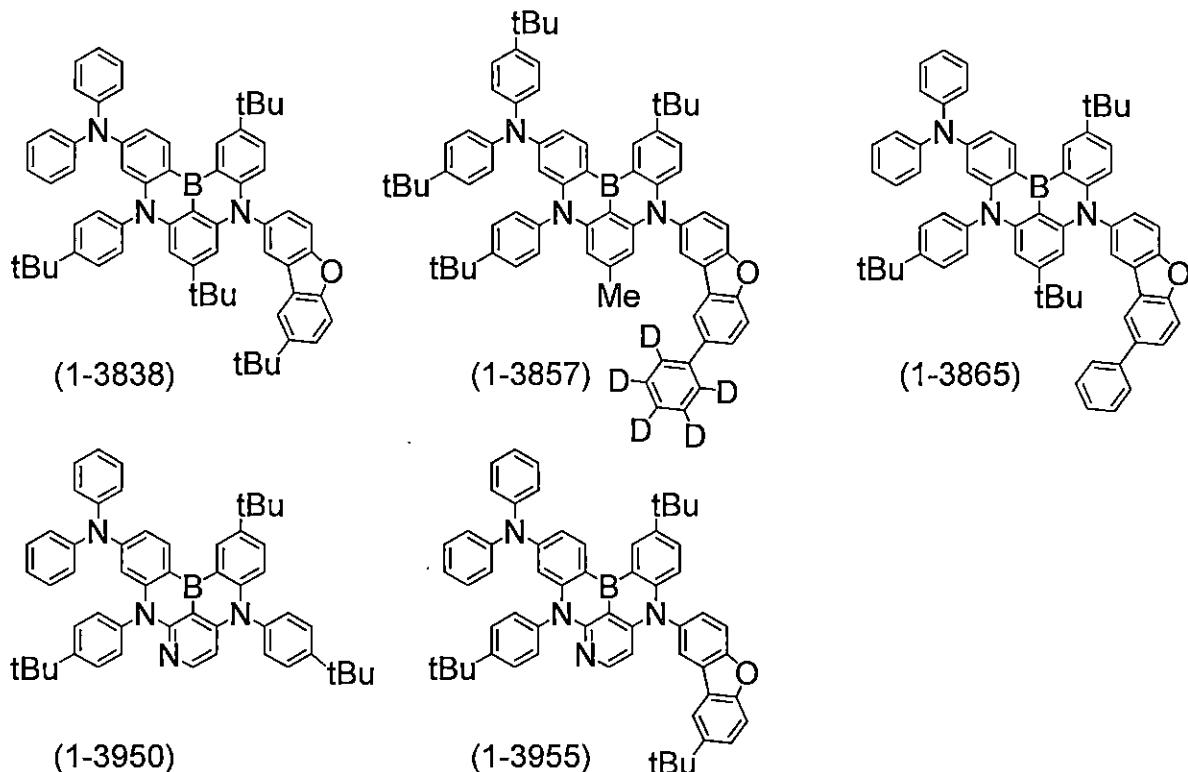
30



40

50

## 【化 8】



上記構造式中の「Me」はメチル基、「tBu」はt-ブチル基、「tAm」はt-アミル基、「D」は重水素である。

## 【請求項 17】

請求項1～16のいずれかに記載する多環芳香族化合物またはその多量体を含有する、有機デバイス用材料。

## 【請求項 18】

前記有機デバイス用材料が、有機電界発光素子用材料、有機電界効果トランジスタ用材料または有機薄膜太陽電池用材料である、請求項17に記載する有機デバイス用材料。

## 【請求項 19】

前記有機電界発光素子用材料が発光層用材料である、請求項18に記載する有機デバイス用材料。

## 【請求項 20】

陽極および陰極からなる一対の電極と、該一対の電極間に配置され、請求項1～16のいずれかに記載する多環芳香族化合物もしくはその多量体を含有する有機層とを有する、有機電界発光素子。

## 【請求項 21】

前記有機層が発光層である、請求項20に記載する有機電界発光素子。

## 【請求項 22】

前記発光層が、ホストと、ドーパントとしての前記多環芳香族化合物またはその多量体とを含む、請求項21に記載する有機電界発光素子。

## 【請求項 23】

前記ホストが、アントラセン系化合物、フルオレン系化合物またはジベンゾクリセン系化合物である、請求項22に記載する有機電界発光素子。

## 【請求項 24】

前記陰極と前記発光層との間に配置される電子輸送層および電子注入層の少なくとも1つの層を有し、該電子輸送層および電子注入層の少なくとも1つは、ボラン誘導体、ピリジン誘導体、フルオランテン誘導体、B-O系誘導体、アントラセン誘導体、ベンゾフルオ

レン誘導体、ホスフィンオキサイド誘導体、ピリミジン誘導体、カルバゾール誘導体、トリアジン誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、フェナントロリン誘導体、キノリノール系金属錯体、チアゾール誘導体、ベンゾチアゾール誘導体、シロール誘導体およびアゾリン誘導体からなる群から選択される少なくとも1つを含有する、請求項21～23のいずれかに記載する有機電界発光素子。

【請求項25】

前記電子輸送層および電子注入層の少なくとも1つの層が、さらに、アルカリ金属、アルカリ土類金属、希土類金属、アルカリ金属の酸化物、アルカリ金属のハロゲン化物、アルカリ土類金属の酸化物、アルカリ土類金属のハロゲン化物、希土類金属の酸化物、希土類金属のハロゲン化物、アルカリ金属の有機錯体、アルカリ土類金属の有機錯体および希土類金属の有機錯体からなる群から選択される少なくとも1つを含有する、請求項24に記載の有機電界発光素子。

10

【請求項26】

請求項20～25のいずれかに記載する有機電界発光素子を備えた表示装置または照明装置。

20

30

40

50