

【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 4 年 5 月 20 日 (2022.5.20)

【公開番号】特開 2020-196715 (P2020-196715A)

【公開日】令和 2 年 12 月 10 日 (2020.12.10)

【年通号数】公開・登録公報 2020-050

【出願番号】特願 2020-118555 (P2020-118555)

【国際特許分類】

C 07 F 5/02 (2006.01)

H 01 L 51/50 (2006.01)

C 09 K 11/06 (2006.01)

C 08 G 61/12 (2006.01)

10

【F I】

C 07 F 5/02 A C S P

H 05 B 33/14 B

H 05 B 33/22 A

H 05 B 33/22 D

C 09 K 11/06 6 6 0

C 08 G 61/12

20

【手続補正書】

【提出日】令和 4 年 5 月 10 日 (2022.5.10)

【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】

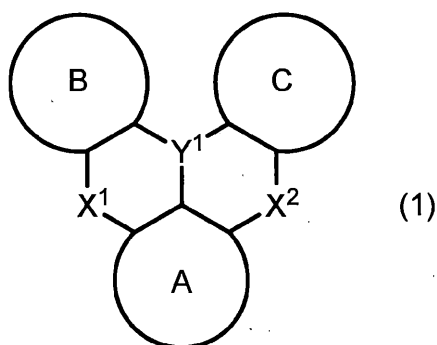
【特許請求の範囲】

【請求項 1】

30

下記一般式 (1) で表される多環芳香族化合物に反応性置換基が置換した、反応性化合物。

【化 1】



40

(上記式 (1) 中、

A 環、B 環および C 環は、それぞれ独立して、アリール環であり、これらの環における少なくとも 1 つの水素は、アリール、ジアリールアミノ、アルキル、アルコキシまたはアリールオキシで置換されているとよく、これらにおける少なくとも 1 つの水素は、アリールまたはアルキルで置換されているとよく、

Y¹ は、B であり、

50

X¹ および X² は、それぞれ独立して、>N-R であり、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、これらにおける少なくとも 1 つの水素はアルキルで置換されていてもよく、

式 (1) 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く、そして、

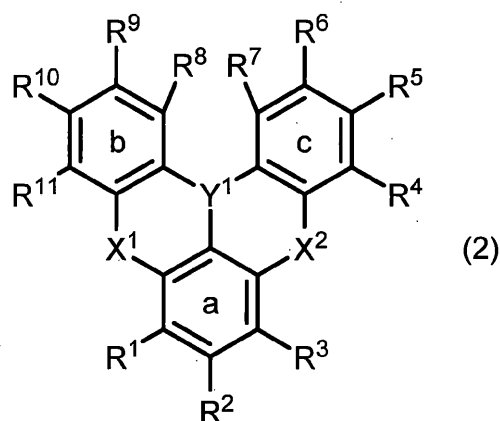
式 (1) で表される化合物における少なくとも 1 つの水素はシクロアルキルで置換されている。))

【請求項 2】

上記一般式 (1) で表される多環芳香族化合物が下記一般式 (2) で表される多環芳香族化合物である、請求項 1 に記載する反応性化合物。

10

【化 2】



20

(上記式 (2) 中、

R¹ ~ R¹¹ は、それぞれ独立して、水素、アリール、ジアリールアミノ、アルキル、アルコキシまたはアリールオキシであり、これらにおける少なくとも 1 つの水素は、アリールまたはアルキルで置換されていてもよく、また、R¹ ~ R¹¹ 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、ジアリールアミノ、アルキル、アルコキシまたはアリールオキシ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、アリールまたはアルキルで置換されていてもよく、

30

Y¹ は、B であり、

X¹ および X² は、それぞれ独立して、>N-R であり、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、

式 (2) 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く、そして、

式 (2) で表される化合物における少なくとも 1 つの水素はシクロアルキルで置換されている。))

40

【請求項 3】

上記式 (2) 中、

R¹ ~ R¹¹ は、それぞれ独立して、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) または炭素数 1 ~ 24 のアルキルであり、また、R¹ ~ R¹¹ 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 ~ 10 のアリールまたは炭素数 1 ~ 12 のアルキルで置換されていてもよく、

Y¹ は、B であり、

X¹ および X² は、それぞれ独立して、>N-R であり、前記 >N-R の R は、炭素数 6

50

～ 10 のアリール、炭素数 1 ～ 4 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) 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く、そして、

式 (2) で表される化合物における少なくとも 1 つの水素はシクロアルキルで置換されている、

請求項 2 に記載する 反応性化合物。

【請求項 4】

上記式 (2) 中、

R¹ ～ R¹¹ 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) または炭素数 1 ～ 12 のアルキルであり、

10

Y¹ は、B であり、

X¹ および X² は、それぞれ独立して、>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 ～ 4 のアルキルまたは炭素数 5 ～ 10 のシクロアルキルであり、そして、

式 (2) で表される化合物における少なくとも 1 つの水素はシクロアルキルで置換されている、

請求項 2 に記載する 反応性化合物。

【請求項 5】

20

上記式 (2) 中、

R¹ ～ R¹¹ 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) または炭素数 1 ～ 12 のアルキルであり、

Y¹ は B であり、

X¹ および X² は、それぞれ独立して、>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 ～ 4 のアルキルまたは炭素数 5 ～ 10 のシクロアルキルであり、そして、

式 (2) で表される化合物における少なくとも 1 つの水素はシクロアルキルで置換されている、

30

請求項 2 に記載する 反応性化合物。

【請求項 6】

前記多環芳香族化合物が、シクロアルキルで置換されたジアリールアミノ基で置換されている、請求項 1 ～ 5 のいずれかに記載する反応性化合物。

【請求項 7】

上記式 (2) 中、R² は、シクロアルキルで置換されたジアリールアミノ基である、請求項 2 ～ 5 のいずれかに記載する反応性化合物。

【請求項 8】

前記シクロアルキルは炭素数 3 ～ 20 のシクロアルキルである、請求項 1 ～ 7 のいずれかに記載する 反応性化合物。

40

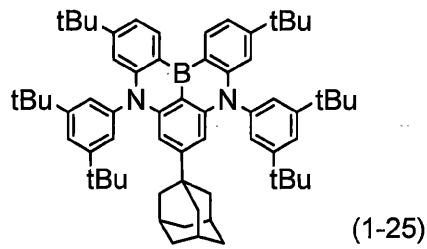
【請求項 9】

前記ハロゲンはフッ素である、請求項 1 ～ 8 のいずれかに記載する 反応性化合物。

【請求項 10】

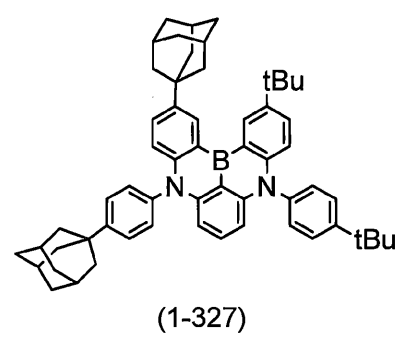
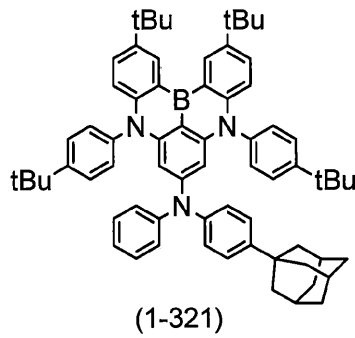
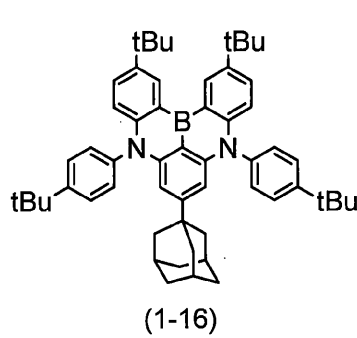
前記多環芳香族化合物が下記構造式のいずれかで表される、請求項 1 に記載する反応性化合物。

【化 3】

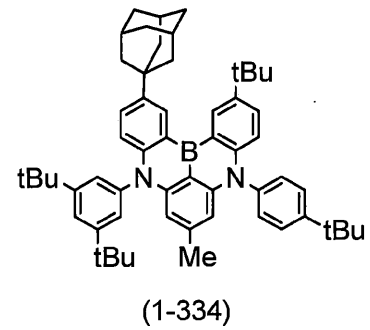
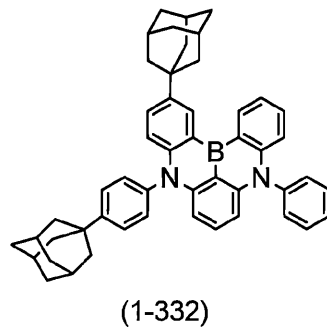
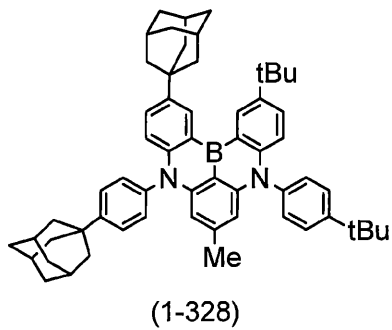


10

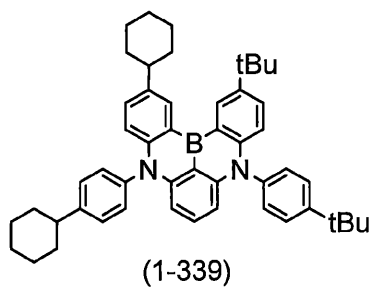
【化 4】



20



30



40

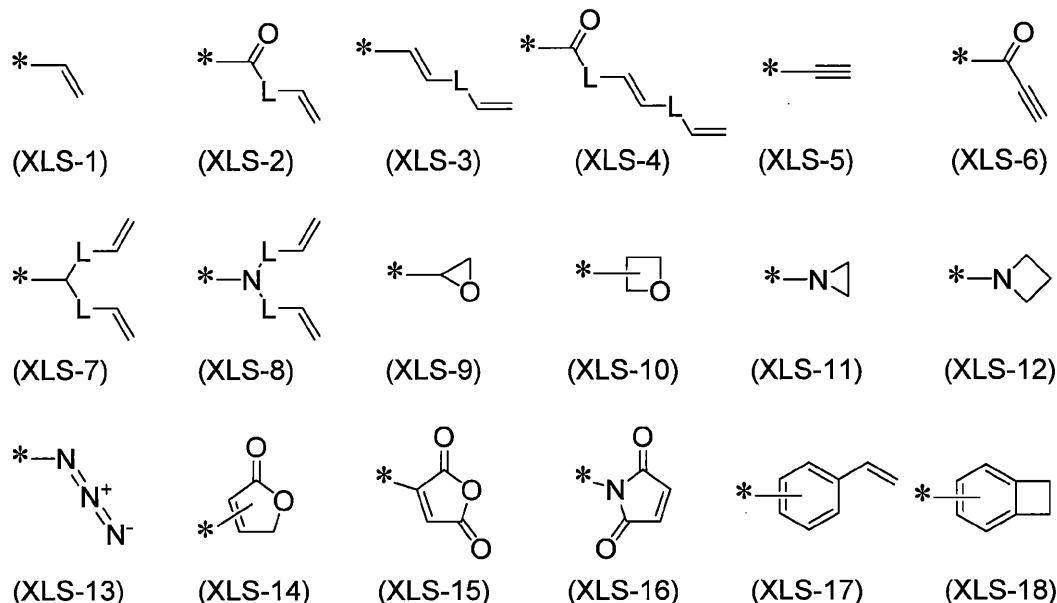
(上記各構造式中の「Me」はメチル基、「tBu」はt-ブチル基を示す。)

【請求項 11】

前記反応性置換基は下記構造式のいずれかで表される基である、請求項 1 ~ 10 のいずれかに記載する反応性化合物。

50

【化 5】



10

上記構造式中、L は、それぞれ独立して、単結合、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $>C=O$ 、 $-O-C(=O)-$ 、炭素数 1 ~ 12 のアルキレン、炭素数 1 ~ 12 のオキシアルキレンまたは炭素数 1 ~ 12 のポリオキシアルキレンであり、* は結合位置を示す。

20

【請求項 12】

請求項 1 ~ 11 のいずれかに記載する反応性化合物をモノマーとして高分子化させた高分子化合物、または、当該高分子化合物をさらに架橋させた高分子架橋体。

【請求項 13】

主鎖型高分子に請求項 1 ~ 11 のいずれかに記載する反応性化合物を置換させたペンダント型高分子化合物、または、当該ペンダント型高分子化合物をさらに架橋させたペンダント型高分子架橋体。

【請求項 14】

請求項 1 ~ 11 のいずれかに記載する反応性化合物を含有する、有機デバイス用材料。

30

【請求項 15】

請求項 12 に記載する高分子化合物または高分子架橋体を含有する、有機デバイス用材料。

【請求項 16】

請求項 13 に記載するペンダント型高分子化合物またはペンダント型高分子架橋体を含有する、有機デバイス用材料。

【請求項 17】

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 14 ~ 16 のいずれかに記載する有機デバイス用材料。

40

【請求項 18】

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 17 に記載する有機デバイス用材料。

【請求項 19】

請求項 1 ~ 11 のいずれかに記載する反応性化合物と、有機溶媒とを含む、インク組成物。

【請求項 20】

主鎖型高分子と、請求項 1 ~ 11 のいずれかに記載する反応性化合物と、有機溶媒とを含む、インク組成物。

50

【請求項 2 1】

請求項 1 2 に記載する高分子化合物または高分子架橋体と、有機溶媒とを含む、インク組成物。

【請求項 2 2】

請求項 1 3 に記載するペンダント型高分子化合物またはペンダント型高分子架橋体と、有機溶媒とを含む、インク組成物。

【請求項 2 3】

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 ~ 1 1 のいずれかに記載する反応性化合物、請求項 1 2 に記載する高分子化合物もしくは高分子架橋体、または、請求項 1 3 に記載するペンダント型高分子化合物もしくはペンダント型高分子架橋体を含む有機層とを有する、有機電界発光素子。

10

【請求項 2 4】

前記有機層が発光層である、請求項 2 3 に記載する有機電界発光素子。

【請求項 2 5】

前記発光層が、ホストと、ドーパントとしての前記反応性化合物、高分子化合物、高分子架橋体、ペンダント型高分子化合物またはペンダント型高分子架橋体とを含む、請求項 2 4 に記載する有機電界発光素子。

【請求項 2 6】

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 2 5 に記載する有機電界発光素子。

20

【請求項 2 7】

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/または電子注入層を有し、該電子輸送層および電子注入層の少なくとも 1 つは、ポラン誘導体、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およびキノリノール系金属錯体からなる群から選択される少なくとも 1 つを含む、請求項 2 3 ~ 2 6 のいずれかに記載する有機電界発光素子。

【請求項 2 8】

前記電子輸送層および/または電子注入層が、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 つを含む、請求項 2 7 に記載の有機電界発光素子。

30

【請求項 2 9】

正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子輸送層および電子注入層のうちの少なくとも 1 つの層が、各層を形成し得る低分子化合物をモノマーとして高分子化させた高分子化合物、もしくは、当該高分子化合物をさらに架橋させた高分子架橋体、または、各層を形成し得る低分子化合物を主鎖型高分子と反応させたペンダント型高分子化合物、もしくは、当該ペンダント型高分子化合物をさらに架橋させたペンダント型高分子架橋体を含む、請求項 2 3 ~ 2 8 のいずれかに記載する有機電界発光素子。

40

【請求項 3 0】

請求項 2 3 ~ 2 9 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。