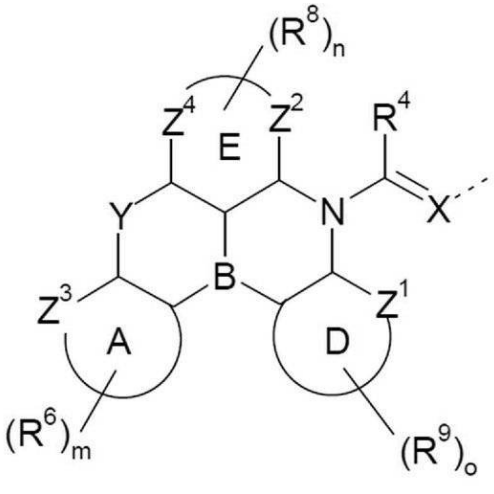
【公報種別】特許法第１７条の２の規定による補正の掲載
【部門区分】第３部門第２区分
【発行日】令和5年5月9日(2023.5.9)

【国際公開番号】WO2020/217229
【公表番号】特表2022-530148(P2022-530148A)
【公表日】令和4年6月27日(2022.6.27)
【年通号数】公開公報(特許)2022-115
【出願番号】特願2021-563593(P2021-563593)
【国際特許分類】
C07F 5/02(2006.01)
C09K 11/06(2006.01)
H10K 50/00(2023.01)
H10K 50/16(2023.01)
【FI】
C07F 5/02 ACSP
C09K 11/06 660
H05B 33/14 B
H05B 33/22 B

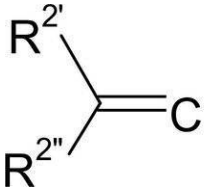
【手続補正書】
【提出日】令和5年4月26日(2023.4.26)
【手続補正１】
【補正対象書類名】特許請求の範囲
【補正対象項目名】全文
【補正方法】変更
【補正の内容】
【特許請求の範囲】
【請求項１】
式（Ｉ）：
【化１】



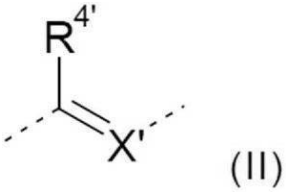
(I)

（式中、
環Ａ、環Ｅ、および環Ｄは、それぞれ独立して、６個～３０個の環炭素原子を有する芳香族基、または３個～３０個の環原子を有する複素芳香族基を表し、
Ｘは、ＣＲ^{5}またはＮを表し、
点線－－－は、Ｚ^{1}と接続されたまたはＺ^{2}と接続された単結合を表し、

Z^1は、Ｘでの点線と接続されている場合はＣを表し、かつZ^1は、Ｘでの点線と接続されていない場合はCR^{X9}またはＮを表し、
Z^2は、Ｘでの点線と接続されている場合はＣを表し、かつZ^2は、Ｘでの点線と接続されていない場合はCR^{X8}またはＮを表し、
Ｙは、NR^1、Ｏ、Ｓ、
【化２】



または$CR^2{}_2$を表し、
R^4およびR^5は、それぞれ独立して、Ｈ、ハロゲン、１個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルキル基、２個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルケニル基、２個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルキニル基、３個～２５個の環炭素原子を有する置換もしくは無置換のシクロアルキル基、１個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルコキシ基、６個～３０個の環炭素原子を有する置換もしくは無置換のアリール基、３個～１８個の環原子を有する置換もしくは無置換のヘテロアリール基、３個～１８個の環原子を有する置換もしくは無置換の複素環式基、６個～２４個の環炭素原子を有する置換もしくは無置換のアリールオキシ基、１個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルキルチオ基、６個～２４個の環炭素原子を有する置換もしくは無置換のアリールチオ基、アルキル置換および／またはアリール置換されたシリル基、アルキル置換もしくはアリール置換されたカルボニル基、アルキル置換、アリール置換、もしくはヘテロアリール置換されたアミノ基、アルキル置換もしくはアリール置換されたアミド基、アルキル置換もしくはアリール置換されたカルボキシル基、置換されたホスホリル基、ＣＮ、または１個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のフルオロアルキル基を表し、または、
R^4およびR^5は一緒に、無置換または置換された脂肪族環を形成する場合があり、
R^1は、１個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルキル基、２個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルケニル基、２個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルキニル基、３個～２５個の環炭素原子を有する置換もしくは無置換のシクロアルキル基、６個～３０個の環炭素原子を有する置換もしくは無置換のアリール基、３個～１８個の環原子を有する置換もしくは無置換のヘテロアリール基、３個～１８個の環原子を有する置換もしくは無置換の複素環式基、または１個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のフルオロアルキル基、または式
【化３】

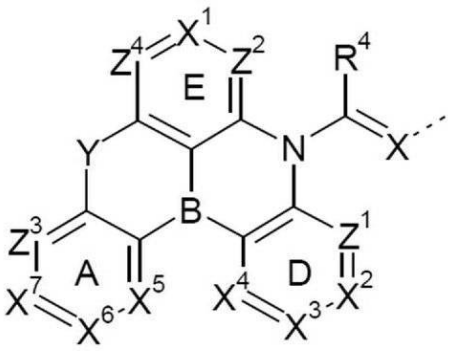


(II)

の基を表し、
ここで、Ｘ’は、$CR^{5'}$またはＮを表し、$R^{4'}$、$R^{5'}$、およびＸ’は、R^4、R^5、およびＸと同様に定義されるが、$R^{4'}$および$R^{5'}$が一緒に、無置換または置換された環を形成する場合があるという点で異なり、
Ｘ’での点線－－－は、Z^3と接続されたまたはZ^4と接続された単結合を表し、
Z^3は、Ｘ’での点線と接続されている場合はＣを表し、かつZ^3は、Ｘ’での点線と接続されていない場合はCR^{X6A}またはＮを表し、

Z^4は、Ｘ’での点線と接続されている場合はＣを表し、かつZ^4は、Ｘ’での点線と接続されていない場合はCR^{X8A}またはＮを表し、
式（ＩＩ）の基中の他の点線－－－は、基NR^1のＮ原子への結合部位を表し、
ここで、R^1は、環Ａまたは環Ｅに接続されている場合があり、
R^2、$R^{2'}$、および$R^{2'}$は、それぞれ独立して、Ｈ、ハロゲン、１個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルキル基、２個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルケニル基、２個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルキニル基、３個～２５個の環炭素原子を有する置換もしくは無置換のシクロアルキル基、１個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルコキシ基、６個～３０個の環炭素原子を有する置換もしくは無置換のアリール基、３個～１８個の環原子を有する置換もしくは無置換のヘテロアリール基、３個～１８個の環原子を有する置換もしくは無置換の複素環式基、６個～２４個の環炭素原子を有する置換もしくは無置換のアリールオキシ基、１個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルキルチオ基、６個～２４個の環炭素原子を有する置換もしくは無置換のアリールチオ基、アルキル置換および／またはアリール置換されたシリル基、アルキル置換もしくはアリール置換されたカルボニル基、アルキル置換、アリール置換、もしくはヘテロアリール置換されたアミノ基、アルキル置換もしくはアリール置換されたアミド基、アルキル置換もしくはアリール置換されたカルボキシル基、置換されたホスホリル基、ＣＮ、または１個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のフルオロアルキル基を表し、または、
２つの残基R^2は一緒に、無置換または置換された環を形成する場合があり、または、
残基$R^{2'}$または残基$R^{2'}$の１つは、環Ａまたは環Ｅと接続されている場合があり、
R^6、R^8、R^9、R^{X6A}、R^{X8A}、R^{X8}、およびR^{X9}は、それぞれ独立して、Ｈ、ハロゲン、１個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルキル基、２個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルケニル基、２個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルキニル基、３個～２５個の環炭素原子を有する置換もしくは無置換のシクロアルキル基、１個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルコキシ基、６個～３０個の環炭素原子を有する置換もしくは無置換のアリール基、３個～１８個の環原子を有する置換もしくは無置換のヘテロアリール基、３個～１８個の環原子を有する置換もしくは無置換の複素環式基、６個～２４個の環炭素原子を有する置換もしくは無置換のアリールオキシ基、１個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルキルチオ基、６個～２４個の環炭素原子を有する置換もしくは無置換のアリールチオ基、アルキル置換および／またはアリール置換されたシリル基、アルキル置換もしくはアリール置換されたカルボニル基、アルキル置換もしくはアリール置換されたカルボキシル基、アルキル置換もしくはアリール置換されたアミド基、アルキル置換、アリール置換、もしくはヘテロアリール置換されたアミノ基、置換されたホスホリル基、ＣＮ、または１個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のフルオロアルキル基を表し、
ここで、２つの隣接する基R^6、２つの隣接する基R^8、および／または２つの隣接する基R^9、および／またはR^{X6A}およびR^{X6A}に隣接する基R^6、および／またはR^{X9}およびR^{X9}に隣接する基R^9、および／またはR^{X8}およびR^{X8}に隣接する基R^8、および／またはR^{X8A}およびR^{X8A}に隣接する基R^8は一緒に、無置換または置換された環を形成する場合があり、
ｎは、０または１であり、かつ、
ｍおよびｏは、それぞれ独立して、０、１、２、または３である）によって表される多環式化合物。
【請求項２】
式（ＩＩＩ）

【化４】

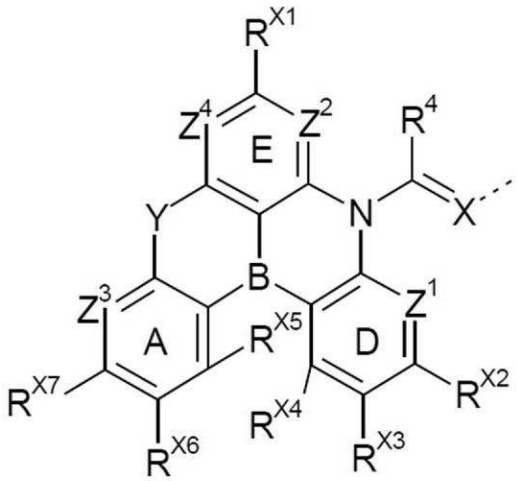


(III)

（式中、
X^1は、CR^{X1}またはＮであり、
X^2は、CR^{X2}またはＮであり、
X^3は、CR^{X3}またはＮであり、
X^4は、CR^{X4}またはＮであり、
X^5は、CR^{X5}またはＮであり、
X^6は、CR^{X6}またはＮであり、
X^7は、CR^{X7}またはＮであり、
R^{X1}、R^{X2}、R^{X3}、R^{X4}、R^{X5}、R^{X6}、およびR^{X7}は、それぞれ独立して、Ｈ、ハロゲン、１個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルキル基、２個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルケニル基、２個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルキニル基、３個～２５個の環炭素原子を有する置換もしくは無置換のシクロアルキル基、１個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルコキシ基、６個～３０個の環炭素原子を有する置換もしくは無置換のアリール基、３個～１８個の環原子を有する置換もしくは無置換のヘテロアリール基、３個～１８個の環原子を有する置換もしくは無置換の複素環式基、６個～２４個の環炭素原子を有する置換もしくは無置換のアリールオキシ基、１個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルキルチオ基、６個～２４個の環炭素原子を有する置換もしくは無置換のアリールチオ基、アルキル置換および／またはアリール置換されたシリル基、アルキル置換もしくはアリール置換されたカルボニル基、アルキル置換もしくはアリール置換されたカルボキシル基、アルキル置換もしくはアリール置換されたアミド基、アルキル置換、アリール置換、もしくはヘテロアリール置換されたアミノ基、置換されたホスホリル基、ＣＮ、または１個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のフルオロアルキル基を表し、
ここで、２つの隣接する基R^{X5}およびR^{X6}、R^{X6}およびR^{X7}、および／またはR^{X7}およびR^{X6A}、２つの隣接する基R^{X8}およびR^{X1}、および／またはR^{X1}およびR^{X8A}、および／または２つの隣接する基R^{X4}およびR^{X3}、R^{X3}およびR^{X2}、および／またはR^{X2}およびR^{X9}は一緒に、無置換または置換された環を形成する場合がある）によって表される、請求項１に記載の化合物。

【請求項３】
式（ＩＶ）

【化５】



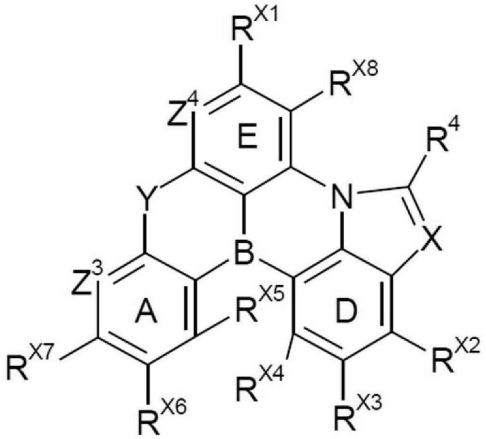
(IV)

によって表される、請求項２に記載の化合物。

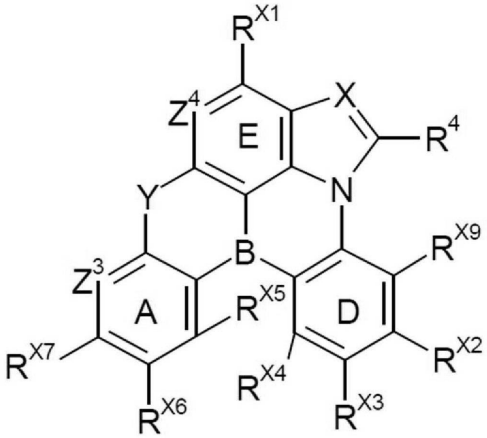
【請求項４】

式（Ｖ）および式（ＶＩ）

【化６】



(V),



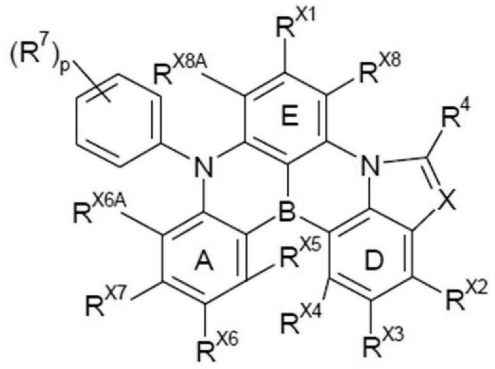
(VI)

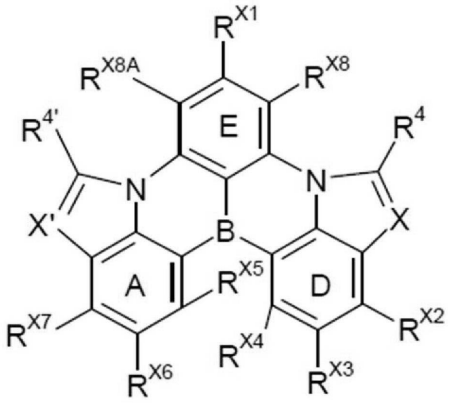
によって表される、請求項３に記載の化合物。

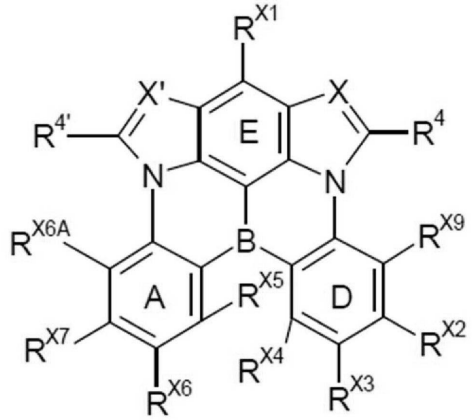
【請求項５】

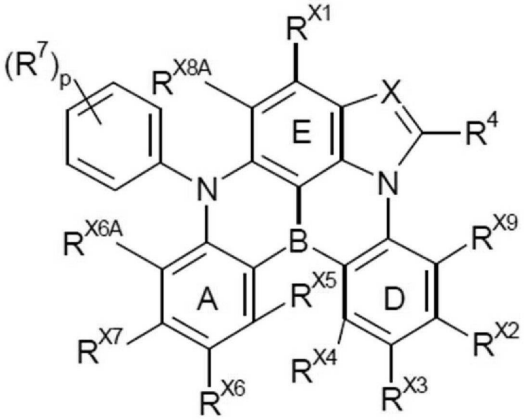
式（ＶＩＩ）、式（ＶＩＩＩ）、式（ＩＸ）、式（Ｘ）、および式（ＸＩ）

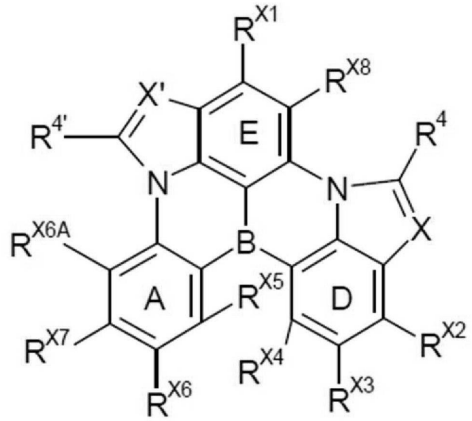
【化７】


(VII),


(VIII),


(IX),


(X),

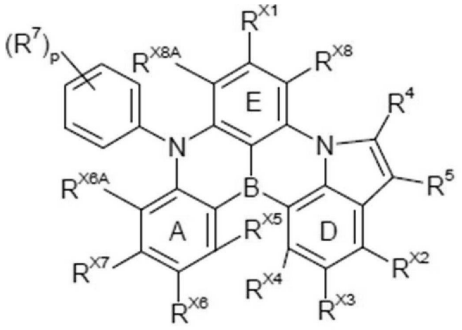

(XI)

（式中、

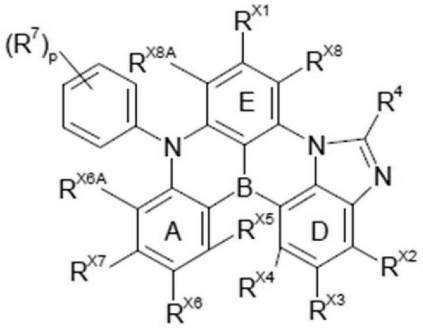
R^7は、Ｈ、ハロゲン、１個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルキル基、２個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルケニル基、２個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルキニル基、３個～２５個の環炭素原子を有する置換もしくは無置換のシクロアルキル基、１個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルコキシ基、６個～３０個の環炭素原子を有する置換もしくは無置換のアリール基、３個～１８個の環原子を有する置換もしくは無置換のヘテロアリール基、３個～１８個の環原子を有する置換もしくは無置換の複素環式基、６個～２４個の環炭素原子を有する置換もしくは無置換のアリールオキシ基、１個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルキルチオ基、６個～２４個の環炭素原子を有する置換もしくは無置換のアリールチオ基、アルキル置換および／またはアリール置換されたシリル基、アルキル置換もしくはアリール置換されたカルボニル基、アルキル置換もしくはアリール置換されたカルボキシル基、アルキル置換もしくはアリール置換されたアミド基、アルキル置換

、アリール置換、もしくはヘテロアリール置換されたアミノ基、置換されたホスホリル基、ＣＮ、または１個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のフルオロアルキル基を表し、
ここで、２つの隣接する基R^7は一緒に、無置換または置換された環を形成する場合があり、または、
R^7およびR^{X6A}、および／またはR^7およびR^{X8A}は一緒に、無置換または置換された環を形成する場合があり、かつ、
ｐは、０、１、２、３、４、または５を表し、かつ、
式（ＶＩＩ）、式（ＶＩＩＩ）、式（ＩＸ）、式（Ｘ）、および式（ＸＩ）中のその他の各基および各残基は上記で定義されている）によって表される、
請求項４に記載の化合物。
【請求項６】
式（ＸＩＩ）、式（ＸＩＩＩ）、式（ＸＩＶ）、式（ＸＶ）、式（ＸＶＩ）、式（ＸＶＩＩ）、式（ＸＶＩＩＩ）、式（ＸＩＸ）、式（ＸＸ）、式（ＸＸＩ）、式（ＸＸＩＩ）、式（ＸＸＩＩＩ）、式（ＸＸＩＶ）、および式（ＸＸＶ）

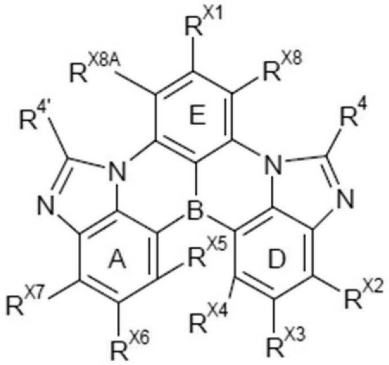
【化８】



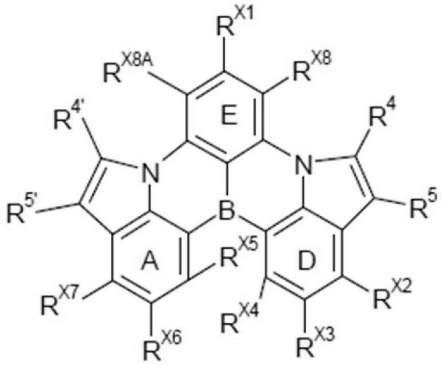
(XII),



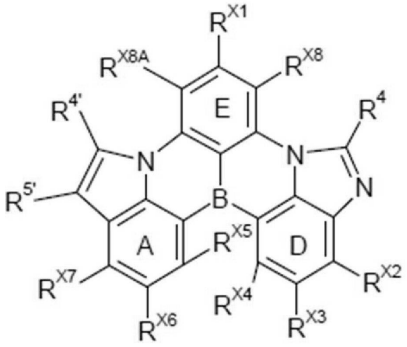
(XIII),



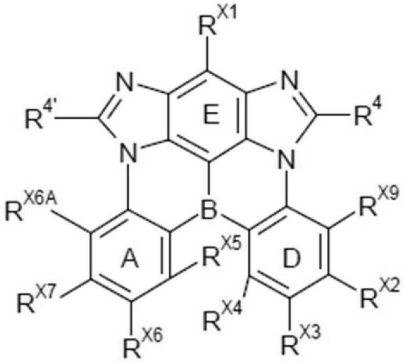
(XIV),



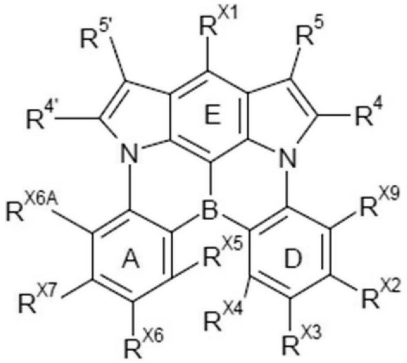
(XV),



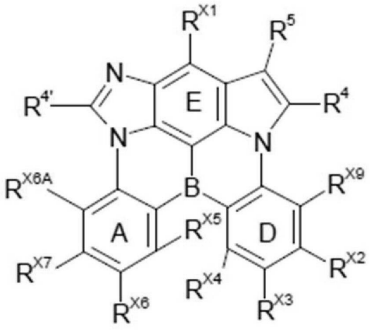
(XVI),



(XVII),

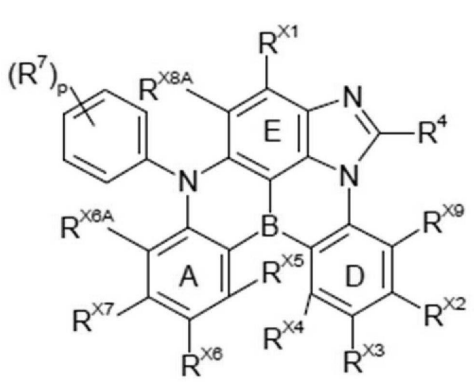


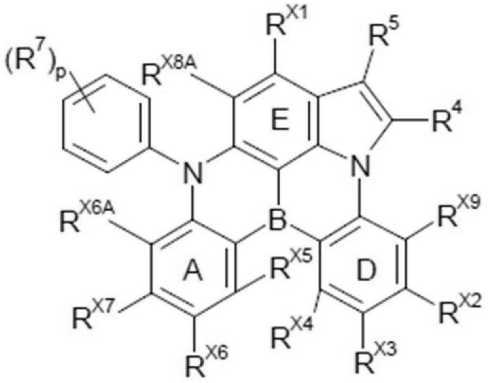
(XVIII),

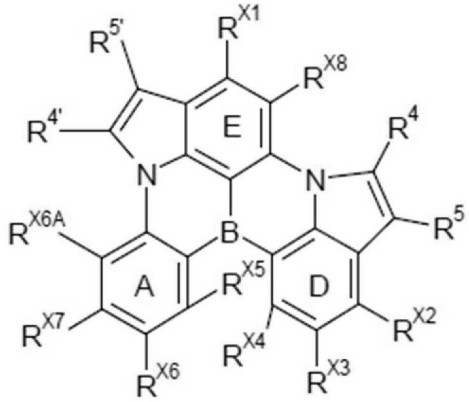


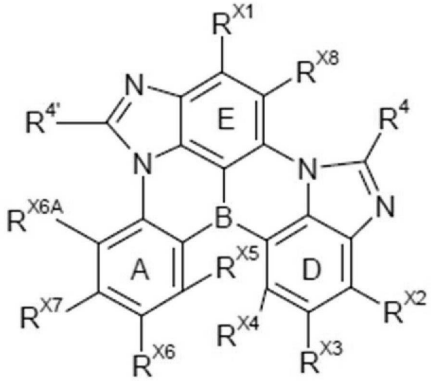
(XIX),

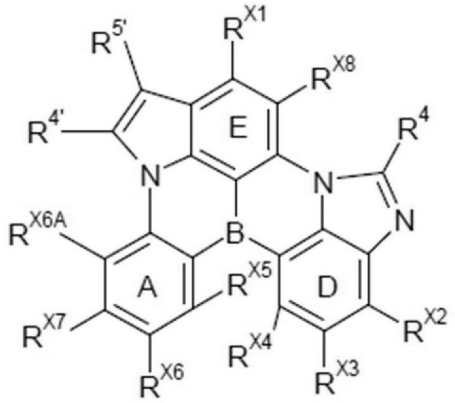
【化９】

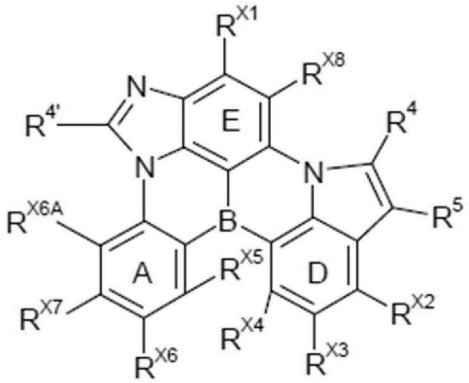

(XX),


(XXI),


(XXII),


(XXIII),


(XXIV),


(XXV)

によって表される、請求項５に記載の化合物。

【請求項７】

R^4、R^5、$R^{4'}$、および$R^{5'}$は、それぞれ独立して、Ｈ、１個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルキル基、６個～３０個の環炭素原子を有する置換もしくは無置換のアリール基、１個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のフルオロアルキル基、５個～１８個の環原子を有する置換もしくは無置換のヘテロアリール基、アルキル置換および／またはアリール置換されたシリル基、またはアルキル置換、アリール置換、もしくはヘテロアリール置換されたアミノ基を表し、または、

R^4およびR^5は一緒に、置換または無置換のシクロヘキシル環を形成し、および／または、

$R^{4'}$および$R^{5'}$は一緒に、置換もしくは無置換のフェニル環、または置換もしくは無置換のシクロヘキシル環を形成する、請求項１～６のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項８】

R^{X1}、およびR^{X8}、R^6、R^7、R^8、R^9、R^{X2}、R^{X3}、R^{X4}、R^{X5}、R^{X6}、R^{X7}、R^{X6A}、R^{X8A}、およびR^{X9}は、それぞれ独立して、Ｈ、１個～２５個

の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルキル基、６個～３０個の環炭素原子を有する置換もしくは無置換のアリール基、１個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のフルオロアルキル基、５個～１８個の環原子を有する置換もしくは無置換のヘテロアリール基、アルキル置換および／またはアリール置換されたシリル基、アルキル置換、アリール置換、もしくはヘテロアリール置換されたアミノ基、１個～２５個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルコキシ基、または１個～２５個の環炭素原子を有する置換もしくは無置換のアリールオキシ基を表し、
ここで、２つの隣接する基R^{X5}およびR^{X6}、R^{X6}およびR^{X7}、および／またはR^{X7}およびR^{X6A}、２つの隣接する基R^{X8}およびR^{X1}、および／またはR^{X1}およびR^{X8A}、および／または２つの隣接する基R^{X4}およびR^{X3}、R^{X3}およびR^{X2}、および／またはR^{X2}およびR^{X9}は一緒に、無置換または置換された環を形成する場合があり、および／または、
R^{7}およびR^{X6A}、および／またはR^{7}およびR^{X8A}は一緒に、以下の橋架け基：単結合、－$CR^{10}{}_2$－、－NR^{11}－、または－C（R^{12}）＝C（R^{13}）－の１つによって環を形成する場合があり、および／または、
２つの隣接する基R^{7}は一緒に、無置換または置換された環を形成する場合があり、
ここで、
R^{10}は、H、または１個～８個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルキル基を表し、
R^{11}は、６個～３０個の環炭素原子を有する置換もしくは無置換のアリール基、または５個～１８個の環原子を有する置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表し、かつ、
R^{12}およびR^{13}は、それぞれ独立して、H、１個～８個の炭素原子を有する置換もしくは無置換のアルキル基、６個～１８個の環炭素原子を有する置換もしくは無置換のアリール基、または５個～１４個の環原子を有する置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表し、または、
R^{12}およびR^{13}は一緒に、５個または６個の環原子を含む置換または無置換の炭素環式環または複素環式環を形成する、請求項１～７のいずれか一項に記載の化合物。
【請求項９】
請求項１～８のいずれか一項に記載の少なくとも１種の化合物を含む、有機エレクトロルミネッセンスデバイス用の材料。
【請求項１０】
陰極、陽極、および前記陰極と前記陽極との間に配置された発光層を含む１つ以上の有機薄膜層を含む有機エレクトロルミネッセンスデバイスであって、前記有機薄膜層の少なくとも１つの層は、請求項１～８のいずれか一項に記載の少なくとも１種の化合物を含む、有機エレクトロルミネッセンスデバイス。
【請求項１１】
前記発光層は、請求項１～８のいずれか一項に記載の少なくとも１種の化合物を含む、請求項１０に記載の有機エレクトロルミネッセンスデバイス。
【請求項１２】
前記発光層は、少なくとも１種のホストおよび少なくとも１種のドーパントを含み、ここで、前記ドーパントは、請求項１～８のいずれか一項に記載の少なくとも１種の化合物を含む、請求項１１に記載の有機エレクトロルミネッセンスデバイス。
【請求項１３】
前記ホストは、少なくとも１種の置換または無置換のアントラセン化合物を含む、請求項１２に記載の有機エレクトロルミネッセンスデバイス。
【請求項１４】
前記陰極と前記発光層との間に電子輸送層が設けられており、かつ前記電子輸送層は、請求項１～８のいずれか一項に記載の少なくとも１種の化合物を含む、請求項１０～１３のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンスデバイス。
【請求項１５】

前記電子輸送層と前記発光層との間に正孔阻止層が設けられており、かつ前記正孔阻止層は、請求項１～８のいずれか一項に記載の少なくとも１種の化合物を含む、請求項１０～１３のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンスデバイス。

【請求項１６】

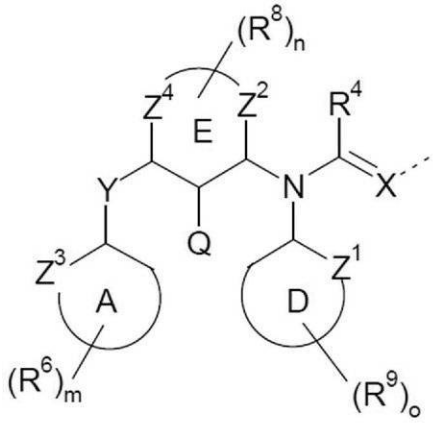
請求項１０～１５のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンスデバイスを備える電子機器。

【請求項１７】

請求項１～８のいずれか一項に記載の式（Ｉ）の化合物を製造する方法であって、

式（ＸＸＶＩ）：

【化１０】



(XXVI)

（式中、

Ｑは、ハロゲンまたはＳｉＲ$^{14}{}_3$であり、かつ、

Ｒ^{14}は、１個～２５個の炭素原子を有する置換または無置換のアルキル基、３個～２５個の環炭素原子を有する置換または無置換のシクロアルキル基、１個～２５個の炭素原子を有する置換または無置換のアルコキシ基、６個～３０個の環炭素原子を有する置換または無置換のアリール基、６個～３０個の環炭素原子を有する置換または無置換のアリールオキシ基を表し、かつ、

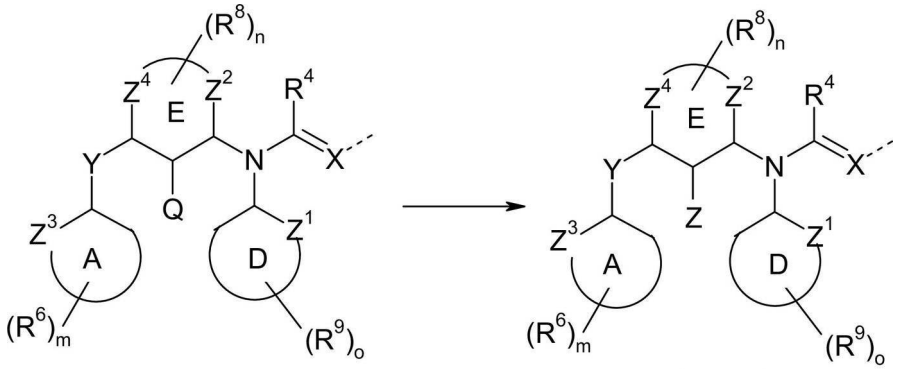
式（ＸＸＶＩ）中に挙げられる全ての他の残基、記号、および係数は上記で定義されている）の化合物のホウ素化工程、

を含む、製造方法。

【請求項１８】

ｉａ）式（ＸＸＶＩ）の化合物の式（ＸＸＶＩＩ）の化合物への変換工程、

【化１１】



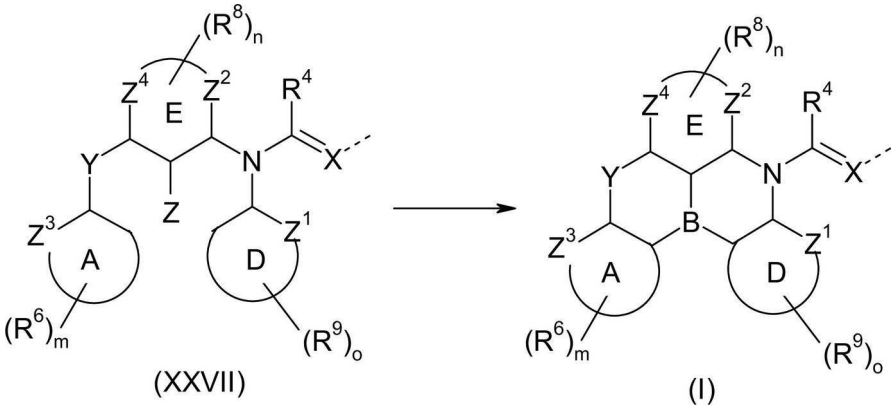
(XXVI) (XXVII)

（式中、

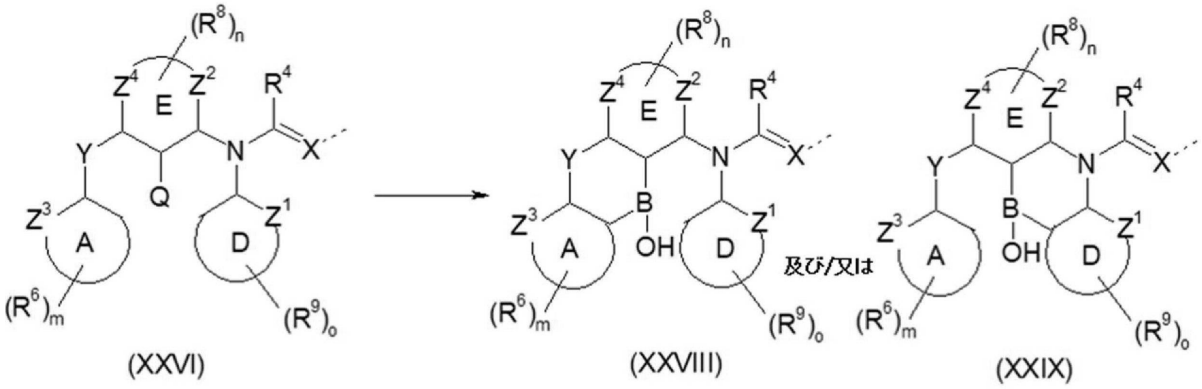
Ｚは、Ｂ（Ｒ^{15}）$_2$およびＢ（ｈａｌ）$_3{}^-$Ｍ$^+$からなる群から選択される含ホウ素化合物を表し、ここで、

ｈａｌは、ハロゲン原子を表し、

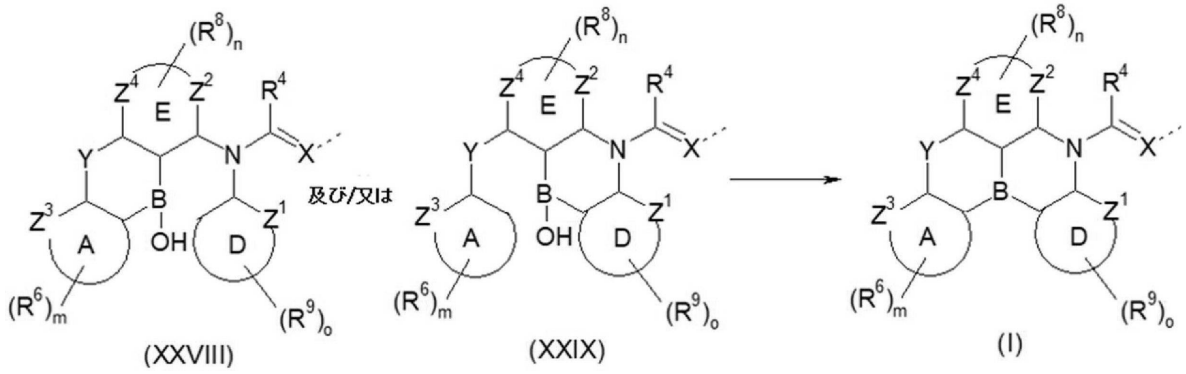
Ｍは、アルカリ金属を表し、かつ、
Ｒ^{15}は、ハロゲン、またはＯＲ^{16}を表し、
Ｒ^{16}は、Ｈ、若しくは、無置換もしくは置換されたＣ$_{1}$～Ｃ$_{18}$アルキル基を表し、または、
２つの基Ｒ^{16}は一緒に、環を形成する場合がある）、
および、
ｉｉａ）式（ＸＸＶＩＩ）の化合物の式（Ｉ）の化合物への変換工程、
【化１３】



または、
ｉｂ）式（ＸＸＶＩ）の化合物の式（ＸＸＶＩＩＩ）および／または式（ＸＸＩＸ）の化合物への変換工程、
【化１４】



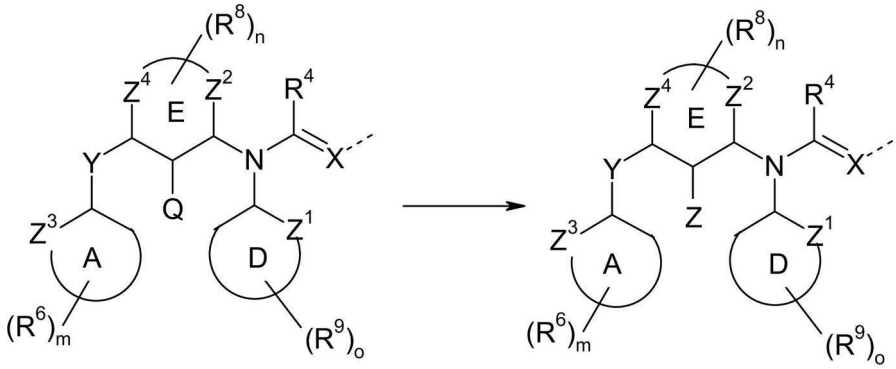
および、
ｉｉｂ）式（ＸＸＶＩＩＩ）および／または式（ＸＸＩＸ）の化合物の式（Ｉ）の化合物への変換工程、
【化１５】



または、

ｉｃ）式（ＸＸＶＩ）の化合物の式（ＸＸＶＩＩ）の化合物への変換工程、

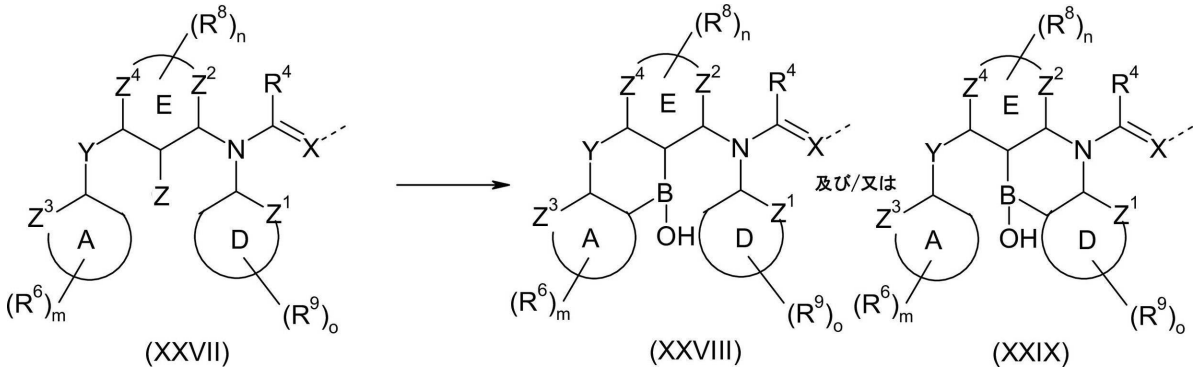
【化１６】



(XXVI) (XXVII)

ｉｉｃ）式（ＸＸＶＩＩ）の化合物の式（ＸＸＶＩＩＩ）および／または式（ＸＸＩＸ）の化合物への変換工程、

【化１７】

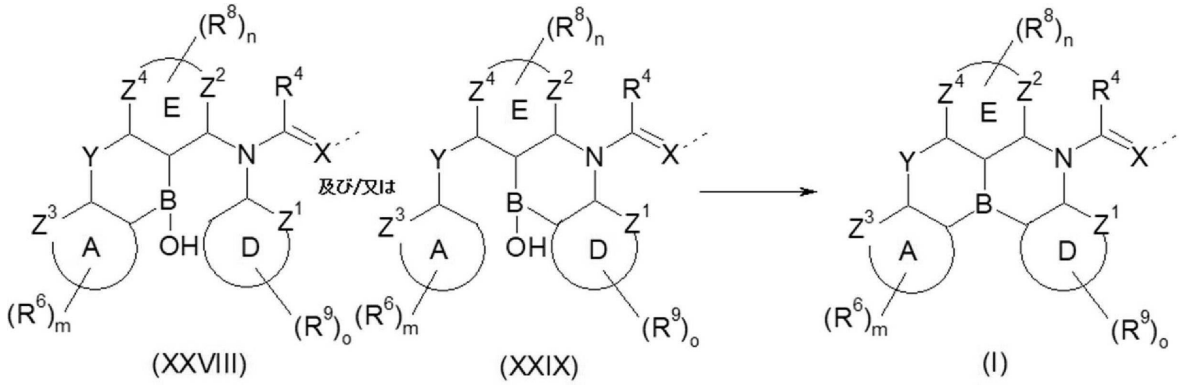


(XXVII) (XXVIII) (XXIX)

および、

ｉｉｉｃ）式（ＸＸＶＩＩＩ）および／または式（ＸＸＩＸ）の化合物の式（Ｉ）の化合物への変換工程、

【化１８】



(XXVIII) (XXIX) (I)

を含み、式中、前記各残基の各記号および各係数は上述されている、請求項１７に記載の製造方法。