

【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】平成29年11月2日(2017.11.2)

【公表番号】特表2016-537331(P2016-537331A)

【公表日】平成28年12月1日(2016.12.1)

【年通号数】公開・登録公報2016-066

【出願番号】特願2016-525874(P2016-525874)

【国際特許分類】

C 07 C 211/61 (2006.01)

C 09 K 11/06 (2006.01)

H 01 L 51/50 (2006.01)

C 07 D 209/86 (2006.01)

【F I】

C 07 C 211/61 C S P

C 09 K 11/06 6 4 5

H 05 B 33/14 B

C 07 D 209/86

【手続補正書】

【提出日】平成29年9月19日(2017.9.19)

【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

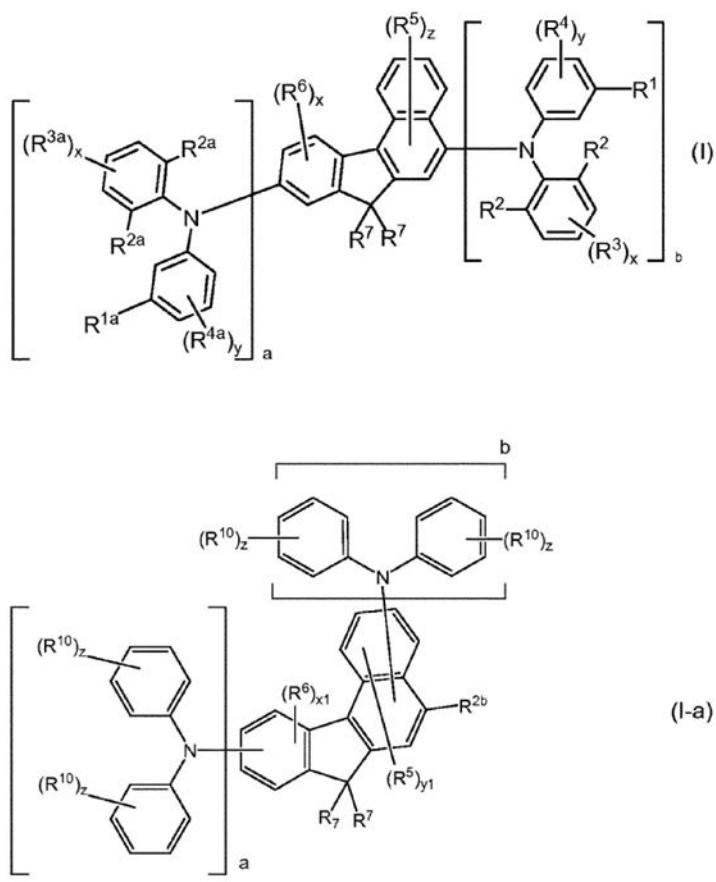
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

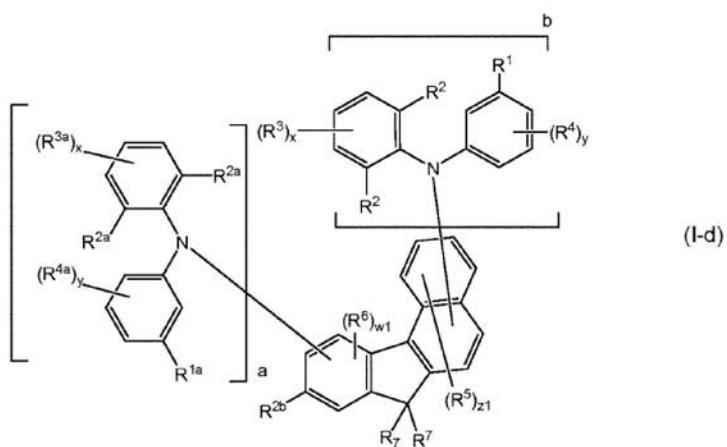
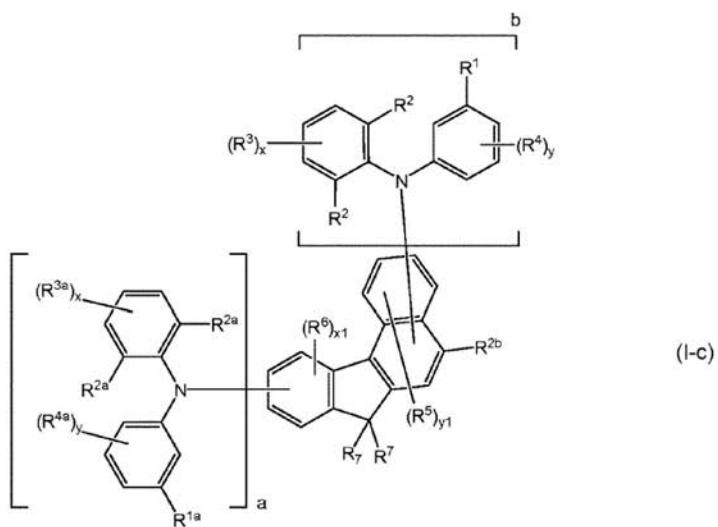
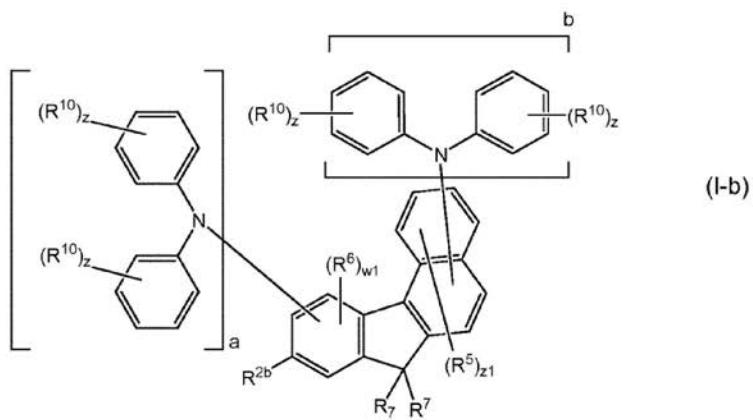
【請求項1】

式I、式I-a、式I-b、式I-c、式I-d、式I I - a、式I I - c、式I I I、式I I I - a、式I I I - b、式I I I - c、式I I I - dまたは式I I I - eを有する化合物。

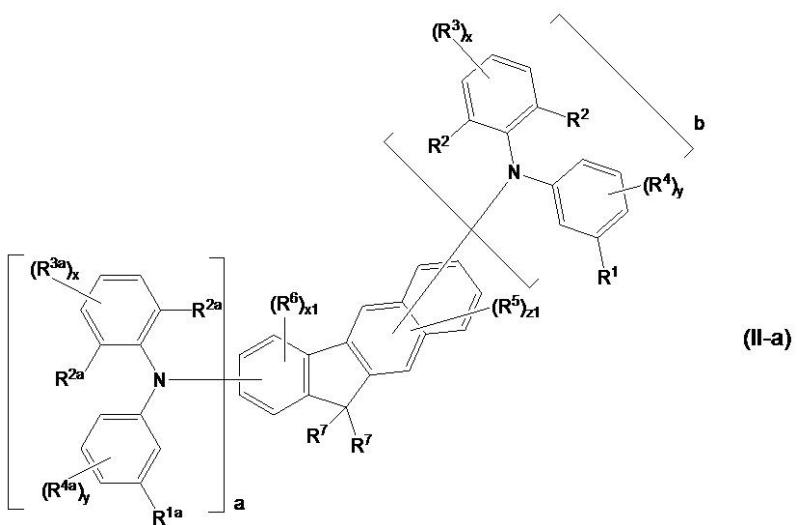
【化 1】



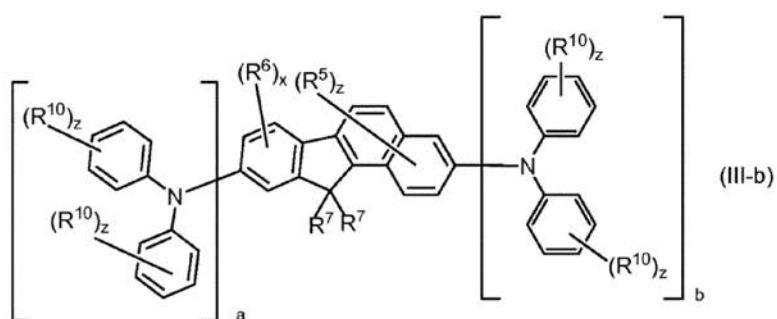
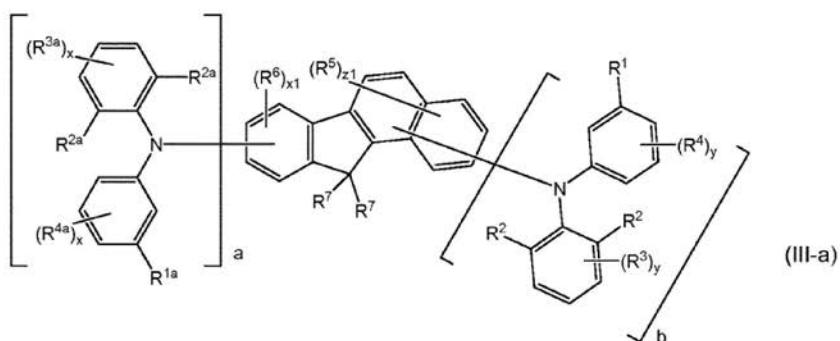
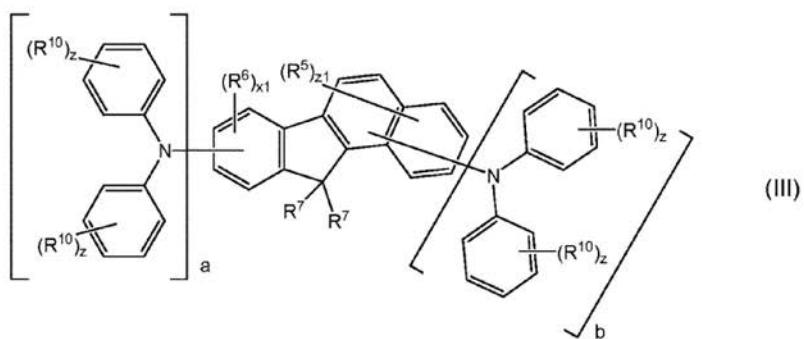
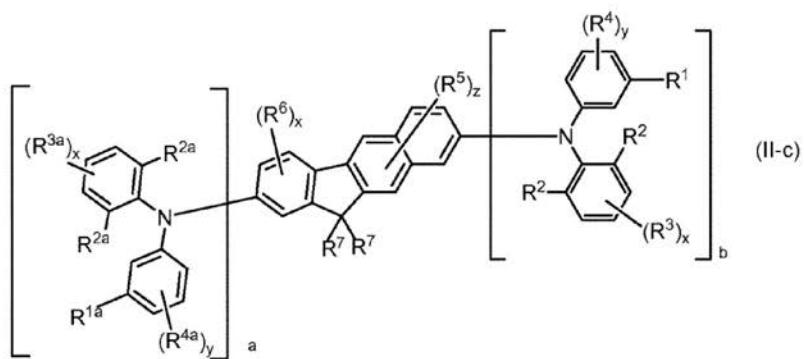
【化 2】



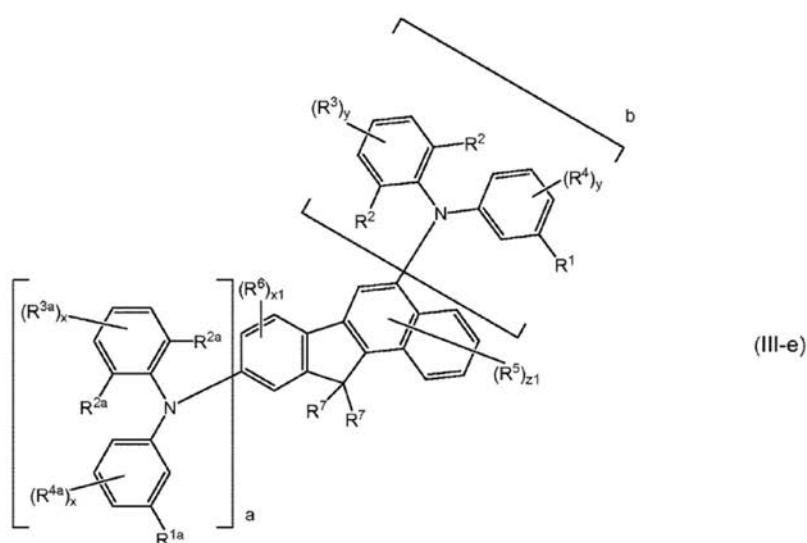
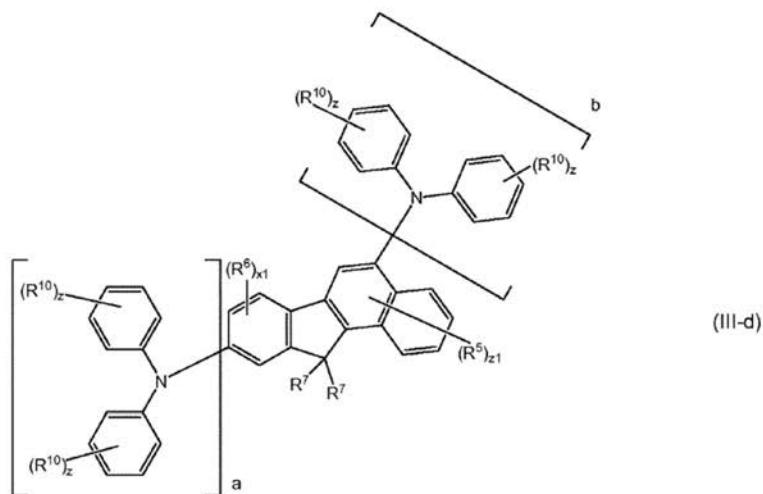
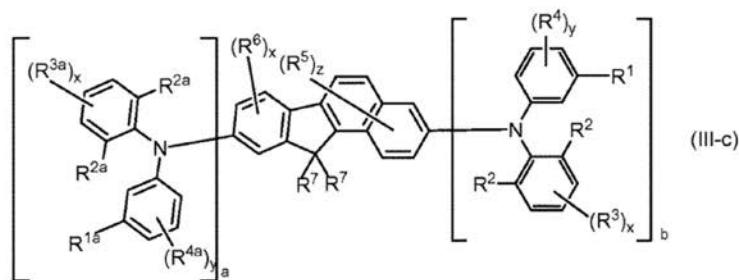
【化3】



【化 4】



【化5】



(式中：

R^1 、 R^{1a} 、 R^2 、 R^{2a} および R^{2b} はそれぞれの場合に、同一もしくは異なると共に、H、D、F、C N、アルキル、フルオロアルキル、アリール、ヘテロアリール、シリル、重水素化アルキル、重水素化部分フッ素化アルキル、重水素化アリール、重水素化ヘテロアリール、重水素化シリル、アルコキシ、アリールオキシ、フルオロアルコキシ、シロキサン、シロキシ、重水素化アルコキシ、重水素化アリールオキシ、重水素化フルオロアルコキシ、重水素化シロキサンおよび重水素化シロキシからなる群から選択されるが、ただし、 R^1 および R^{1a} の少なくとも一方はヘテロアリールまたは重水素化ヘテロアリールであり；

R^3 、 R^{3a} 、 R^4 、 R^{4a} 、 R^5 および R^6 はそれぞれの場合に、同一もしくは異なると共に

、D、F、CN、アルキル、フルオロアルキル、アリール、ヘテロアリール、シリル、重水素化アルキル、重水素化部分フッ素化アルキル、重水素化アリール、重水素化ヘテロアリール、重水素化シリル、アルコキシ、アリールオキシ、フルオロアルコキシ、シロキサン、シロキシ、重水素化アルコキシ、重水素化アリールオキシ、重水素化フルオロアルコキシ、重水素化シロキサンおよび重水素化シロキシからなる群から選択され、R³、R^{3a}、R⁴およびR^{4a}から選択される隣接する基は一緒に結合して縮合環を形成可能であり；R⁷はそれぞれの場合に、同一もしくは異なると共に、アルキル、アリールおよびこれらの重水素化類似体からなる群から選択され、2個のアルキルR⁷基は一緒に結合してシクロアルキルスピロ環を形成可能であり、また、2個のR⁷フェニル基は結合してスピロフルオレン基を形成可能であり；

R¹⁰はそれぞれの場合に、同一もしくは異なると共に、D、F、CN、アルキル、フルオロアルキル、アリール、ヘテロアリール、シリル、重水素化アルキル、重水素化部分フッ素化アルキル、重水素化アリール、重水素化ヘテロアリール、重水素化シリル、アルコキシ、アリールオキシ、フルオロアルコキシ、シロキサン、シロキシ、重水素化アルコキシ、重水素化アリールオキシ、重水素化フルオロアルコキシ、重水素化シロキサンおよび重水素化シロキシからなる群から選択され、隣接するR¹⁰基は一緒に結合して縮合環を形成可能であり；

aおよびbは同一もしくは異なり、0または1であるが、ただし、a+b=1であり；

w₁は0～3の整数であるが、ただし、a=1である場合、w₁は0～2であり；

xは0～3の整数であり；

x₁は0～4の整数であるが、ただし、a=1である場合、x₁は0～3であり；

yは0～4の整数であり；

y₁は0～5の整数であるが、ただし、b=1である場合、y₁は0～4であり；

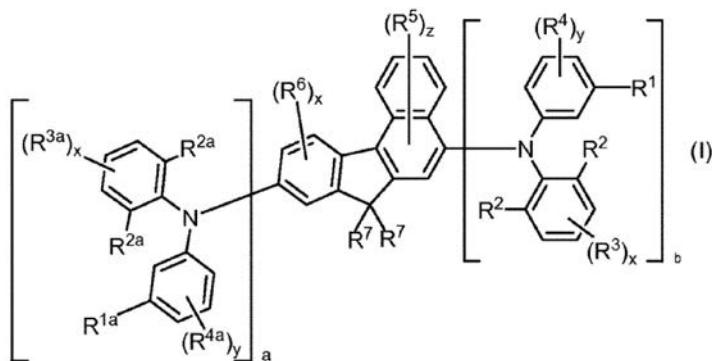
zは0～5の整数であり；ならびに

z₁は0～6の整数であるが、ただし、b=1である場合、z₁は0～5である。)

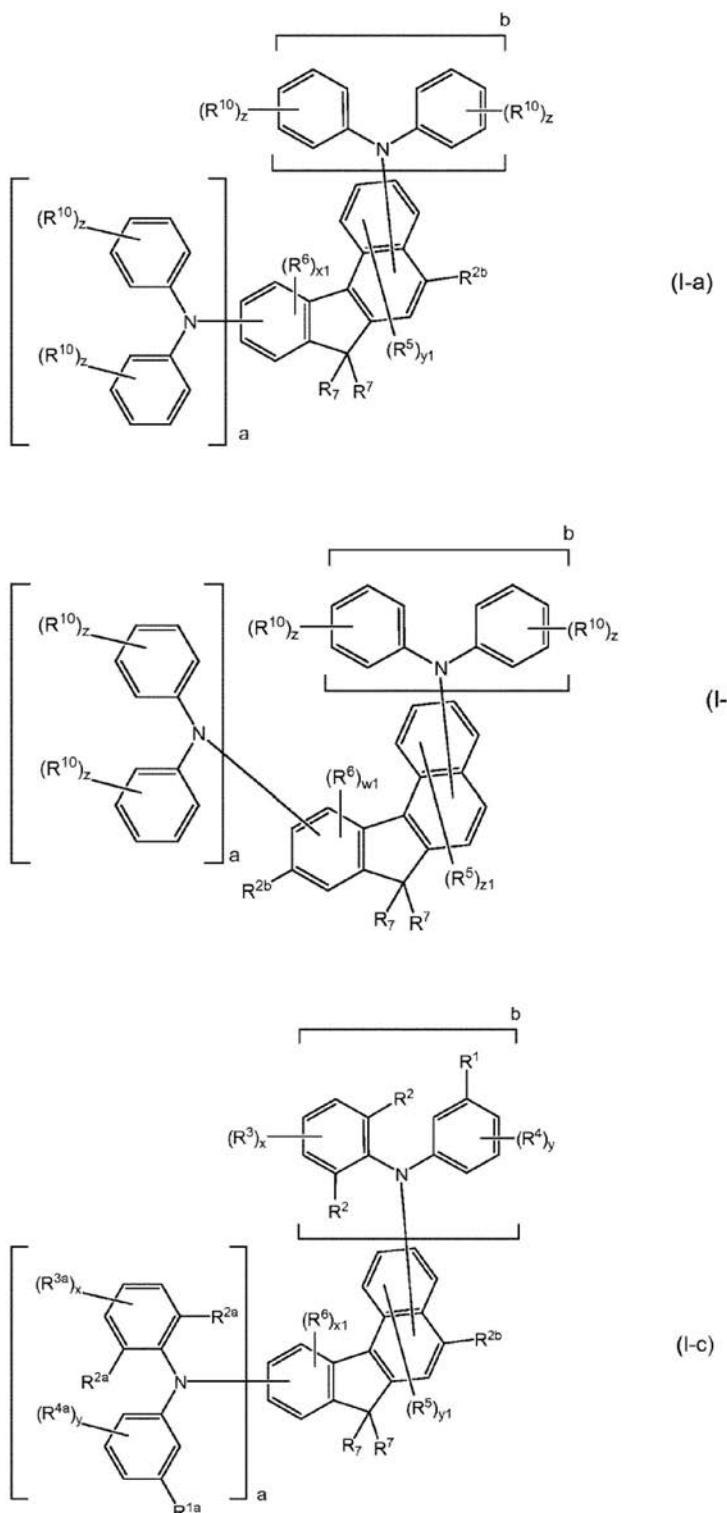
【請求項2】

少なくとも1つの光活性層を備える電子素子であって、前記光活性層が、式I、式I-a、式I-b、式I-c、式I-d、式II-a、式II-c、式II-I、式II-I-a、式II-I-b、式II-I-c、式II-I-dまたは式II-I-eを有する化合物

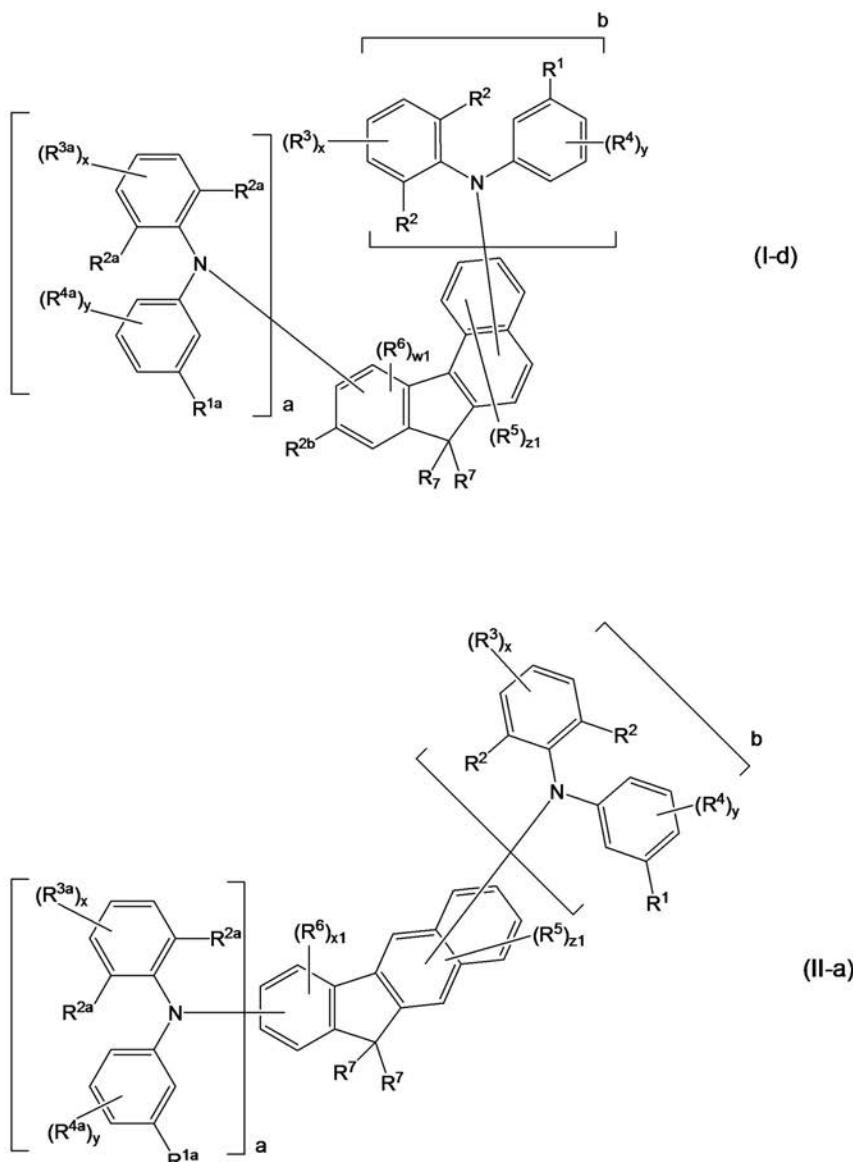
【化6】



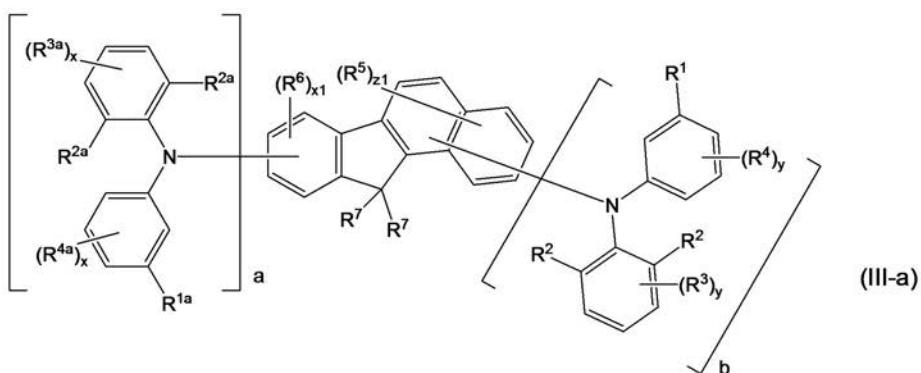
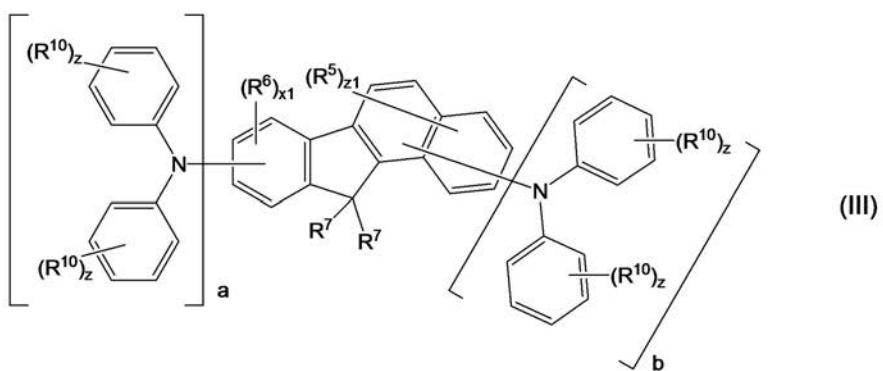
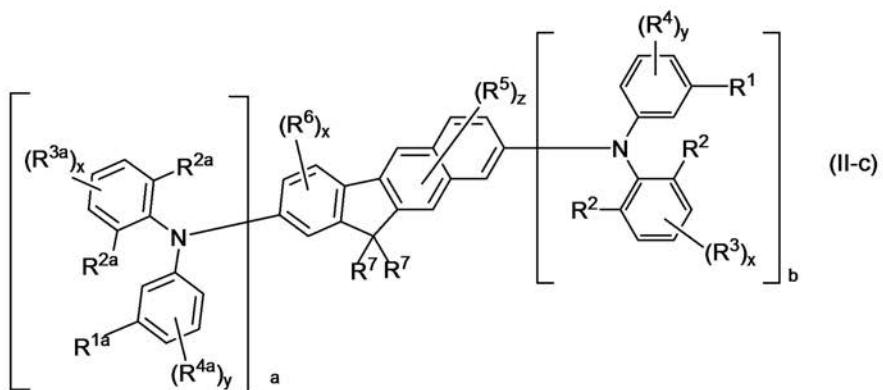
【化 7】



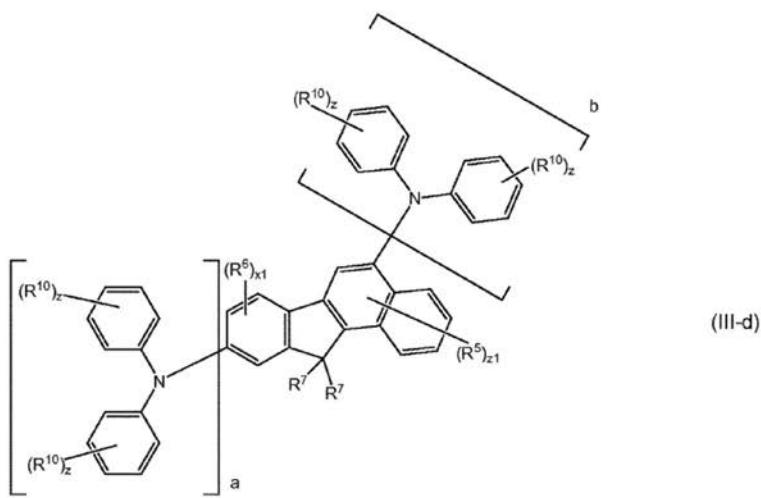
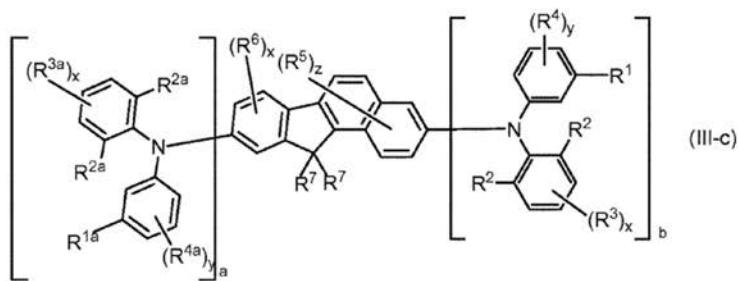
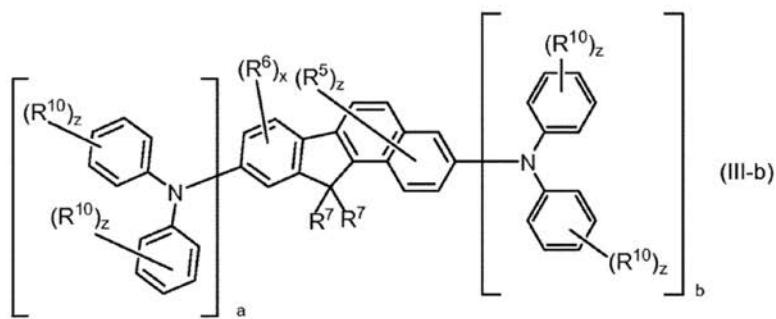
【化 8】



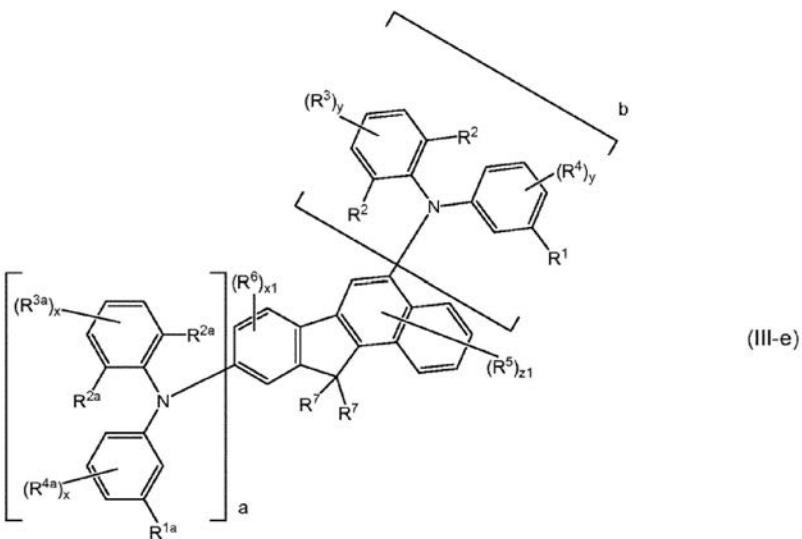
【化9】



【化 1 0】



【化 1 1】



(式中：

R^1 、 R^{1a} 、 R^2 、 R^{2a} および R^{2b} はそれぞれの場合に、同一もしくは異なると共に、H、D、F、CN、アルキル、フルオロアルキル、アリール、ヘテロアリール、シリル、重水素化アルキル、重水素化部分フッ素化アルキル、重水素化アリール、重水素化ヘテロアリール、重水素化シリル、アルコキシ、アリールオキシ、フルオロアルコキシ、シロキサン、シロキシ、重水素化アルコキシ、重水素化アリールオキシ、重水素化フルオロアルコキシ、重水素化シロキサンおよび重水素化シロキシからなる群から選択されるが、ただし、 R^1 および R^{1a} の少なくとも一方はヘテロアリールまたは重水素化ヘテロアリールであり；

R^3 、 R^{3a} 、 R^4 、 R^{4a} 、 R^5 および R^6 はそれぞれの場合に、同一もしくは異なると共に、D、F、CN、アルキル、フルオロアルキル、アリール、ヘテロアリール、シリル、重水素化アルキル、重水素化部分フッ素化アルキル、重水素化アリール、重水素化ヘテロアリール、重水素化シリル、アルコキシ、アリールオキシ、フルオロアルコキシ、シロキサン、シロキシ、重水素化アルコキシ、重水素化アリールオキシ、重水素化フルオロアルコキシ、重水素化シロキサンおよび重水素化シロキシからなる群から選択され、 R^3 、 R^{3a} 、 R^4 および R^{4a} から選択される隣接する基は一緒に結合して縮合環を形成可能であり；

R^7 はそれぞれの場合に、同一もしくは異なると共に、アルキル、アリールおよびこれらの重水素化類似体からなる群から選択され、2個のアルキル R^7 基は一緒に結合してシクロアルキルスピロ環を形成可能であり、また、2個の R^7 フェニル基は結合してスピロフルオレン基を形成可能であり；

R^{10} はそれぞれの場合に、同一もしくは異なると共に、D、F、CN、アルキル、フルオロアルキル、アリール、ヘテロアリール、シリル、重水素化アルキル、重水素化部分フッ素化アルキル、重水素化アリール、重水素化ヘテロアリール、重水素化シリル、アルコキシ、アリールオキシ、フルオロアルコキシ、シロキサン、シロキシ、重水素化アルコキシ、重水素化アリールオキシ、重水素化フルオロアルコキシ、重水素化シロキシからなる群から選択され、隣接する R^{10} 基は一緒に結合して縮合環を形成可能であり；

aおよびbは同一もしくは異なり、0または1であるが、ただし、 $a + b = 1$ であり；

w1は0～3の整数であるが、ただし、 $a = 1$ である場合、w1は0～2であり；

xは0～3の整数であり；

x1は0～4の整数であるが、ただし、 $a = 1$ である場合、x1は0～3であり；

yは0～4の整数であり；

y1は0～5の整数であるが、ただし、 $b = 1$ である場合、y1は0～4であり；

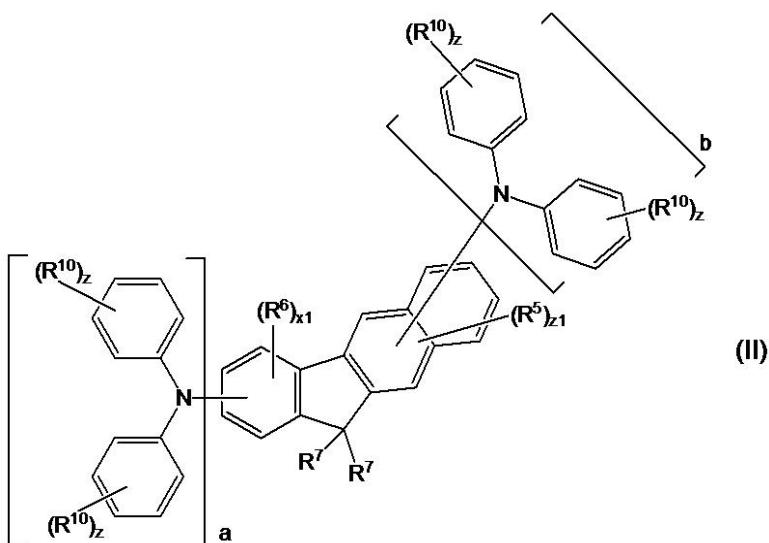
zは0～5の整数であり；ならびに

z1は0～6の整数であるが、ただし、 $b = 1$ である場合、z1は0～5である)を含む電子素子。

【請求項3】

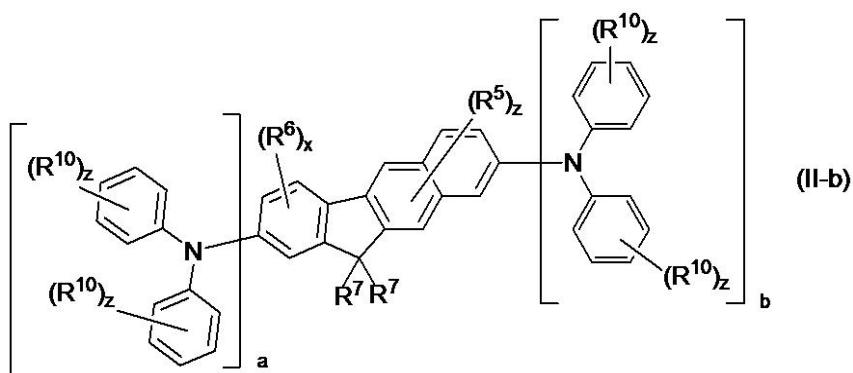
式IIまたは式II-bを有する化合物。

【化12】



(II)

【化13】



(II-b)

(式中：

R^5 および R^6 はそれぞれの場合に、同一もしくは異なると共に、D、F、CN、アルキル、フルオロアルキル、アリール、ヘテロアリール、シリル、重水素化アルキル、重水素化部分フッ素化アルキル、重水素化アリール、重水素化ヘテロアリール、重水素化シリル、アルコキシ、アリールオキシ、フルオロアルコキシ、シロキサン、シロキシ、重水素化アルコキシ、重水素化アリールオキシ、重水素化フルオロアルコキシ、重水素化シロキサンおよび重水素化シロキシからなる群から選択され、；

R^7 はそれぞれの場合に、同一もしくは異なると共に、アルキル、アリールおよびこれらの重水素化類似体からなる群から選択され、2個のアルキル R^7 基は一緒に結合してシクロアルキルスピロ環を形成可能であり、また、2個の R^7 フェニル基は結合してスピロフルオレン基を形成可能であり；

R^{10} はそれぞれの場合に、同一もしくは異なると共に、D、F、CN、アルキル、フルオロアルキル、アリール、ヘテロアリール、シリル、重水素化アルキル、重水素化部分フッ素化アルキル、重水素化アリール、重水素化ヘテロアリール、重水素化シリル、アルコキシ、アリールオキシ、フルオロアルコキシ、シロキサン、シロキシ、重水素化アルコキシ、重水素化アリールオキシ、重水素化フルオロアルコキシ、重水素化シロキサンおよび重水素化シロキシからなる群から選択され、；

a および b は同一もしくは異なり、0 または 1 であるが、ただし、 $a + b = 1$ であり；

x は 0 ~ 3 の整数であり；

x1 は 0 ~ 4 の整数であり；

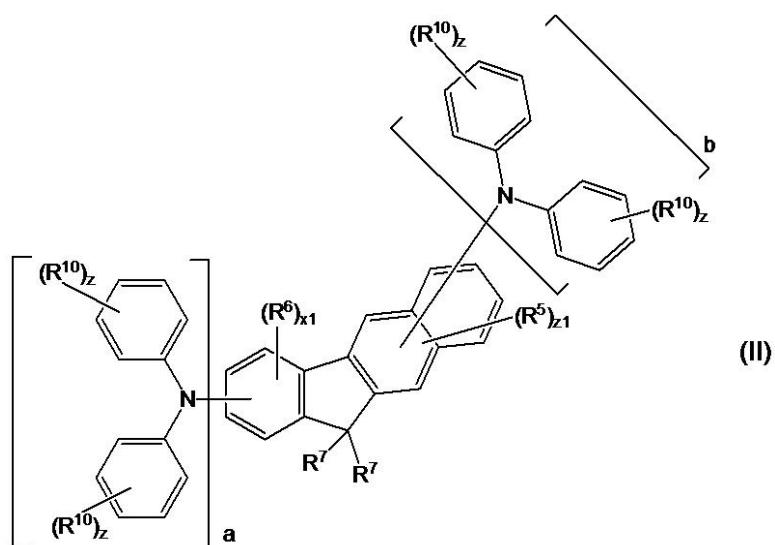
z は 0 ~ 5 の整数であり；ならびに

z1 は 0 ~ 6 の整数である。)

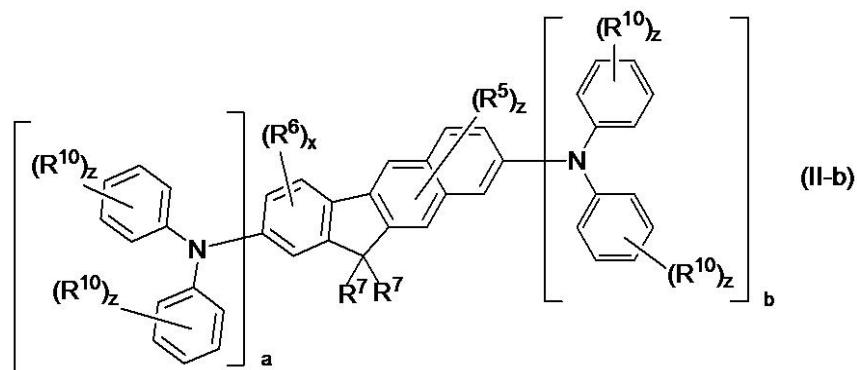
【請求項4】

少なくとも 1 つの光活性層を備える電子素子であって、前記光活性層が、式 II または式 II - b を有する化合物

【化 1 4】



【化 1 5】



(式中：

R⁵およびR⁶はそれぞれの場合に、同一もしくは異なると共に、D、F、CN、アルキル、フルオロアルキル、アリール、ヘテロアリール、シリル、重水素化アルキル、重水素化部分フッ素化アルキル、重水素化アリール、重水素化ヘテロアリール、重水素化シリル、アルコキシ、アリールオキシ、フルオロアルコキシ、シロキサン、シロキシ、重水素化アルコキシ、重水素化アリールオキシ、重水素化フルオロアルコキシ、重水素化シロキサンおよび重水素化シロキシからなる群から選択され；

R^7 はそれぞれの場合に、同一もしくは異なると共に、アルキル、アリールおよびこれらの重水素化類似体からなる群から選択され、2個のアルキル R^7 基は一緒に結合してシクロアルキルスピロ環を形成可能であり、また、2個の R^7 フェニル基は結合してスピロフルオレン基を形成可能であり；

R^{10} はそれぞれの場合に、同一もしくは異なると共に、D、F、CN、アルキル、フルオロアルキル、アリール、ヘテロアリール、シリル、重水素化アルキル、重水素化部分フッ素化アルキル、重水素化アリール、重水素化ヘテロアリール、重水素化シリル、アルコキシ、アリールオキシ、フルオロアルコキシ、シロキサン、シロキシ、重水素化アルコキシ、重水素化アリールオキシ、重水素化フルオロアルコキシ、重水素化シロキサンおよび重水素化シロキシからなる群から選択され；

a および b は同一もしくは異なり、0 または 1 であるが、ただし、 $a + b = 1$ である。

× は 0 ~ 3 の 整 数 で あ り :

× 1 は 0 ~ 4 の整数であり：

これは $0 \sim 5$ の整数であり：ならびに

z 1 は 0 ~ 6 の整数である)

を含む電子素子。

【手続補正 2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 8 3 1

【補正方法】変更

【補正の内容】

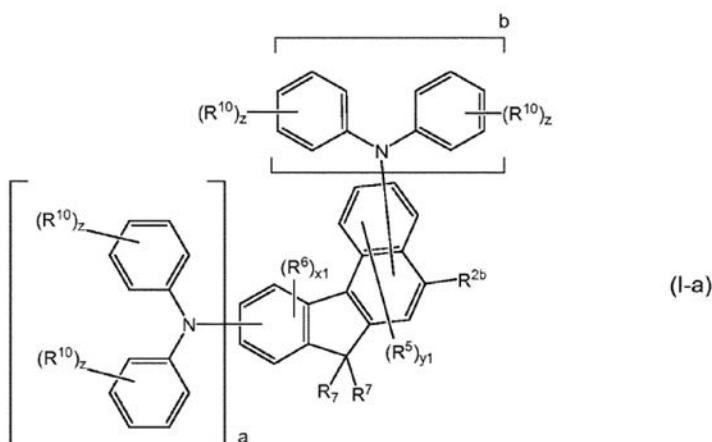
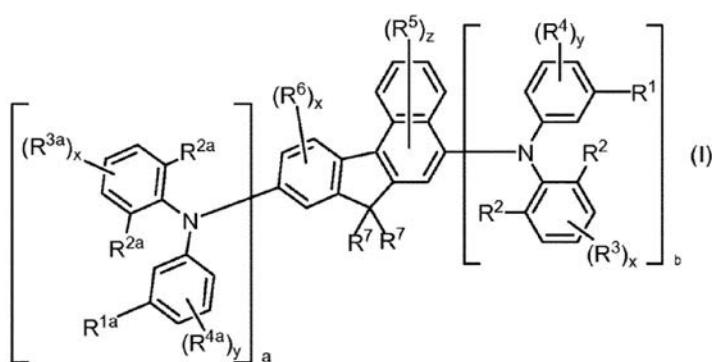
【0 8 3 1】

明確性のために、本明細書において個別の実施形態の文脈に記載の一定の特性はまた、単一の実施形態において組み合わせて提供されてもよいことが理解されるべきである。反対に、簡潔さのために、単一の実施形態の文脈で記載された種々の特性はまた、個別に、または、いずれかのサブコンビネーションで提供されてもよい。さらに、範囲で規定された値への参照は、その範囲内における各々、および、すべての値を含む。

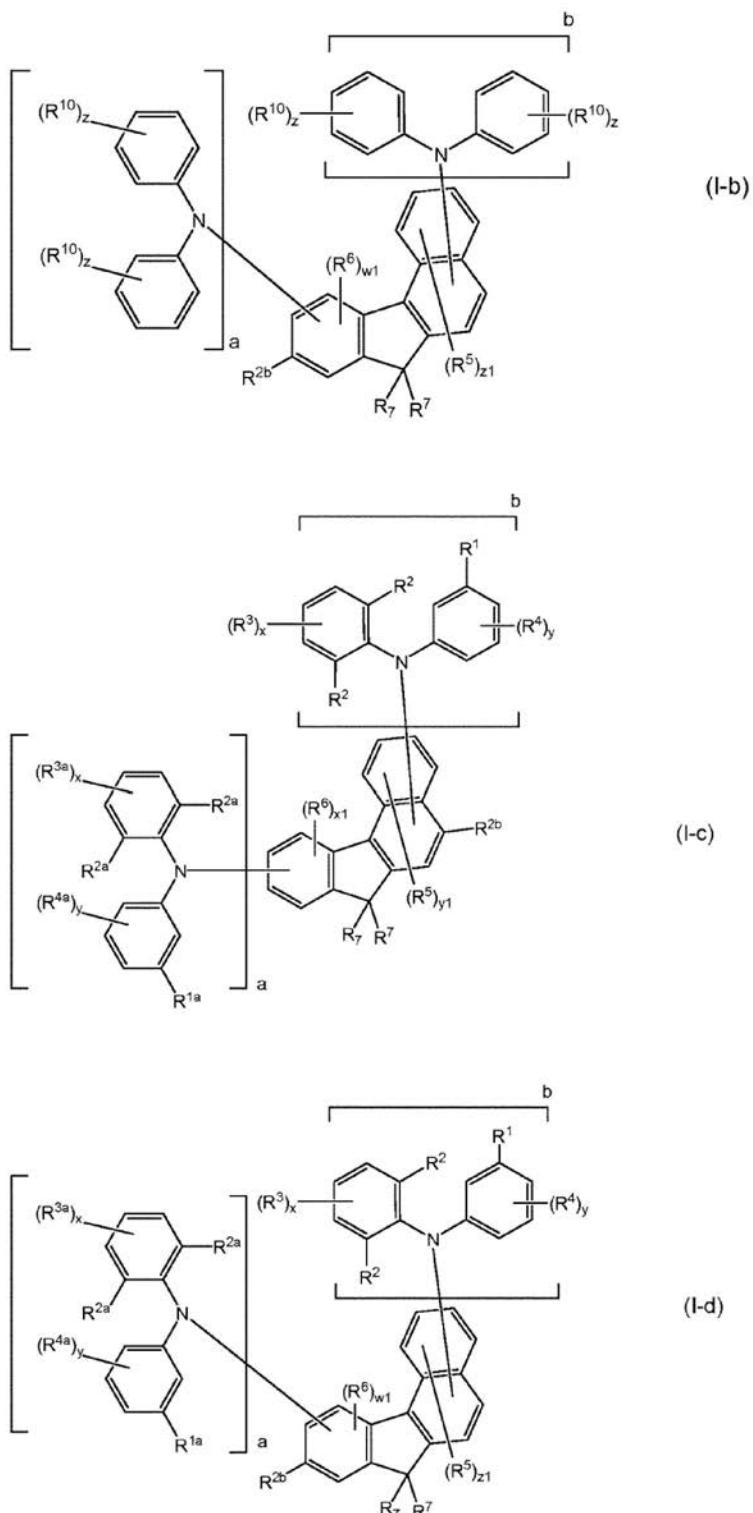
本発明は以下の実施の態様を含む。

1. 式 I、式 I - a、式 I - b、式 I - c、式 I - d、式 I I、式 I I - a、式 I I - b、式 I I - c、式 I I I、式 I I I - a、式 I I I - b、式 I I I - c、式 I I I - d または式 I I I - e を有する化合物。

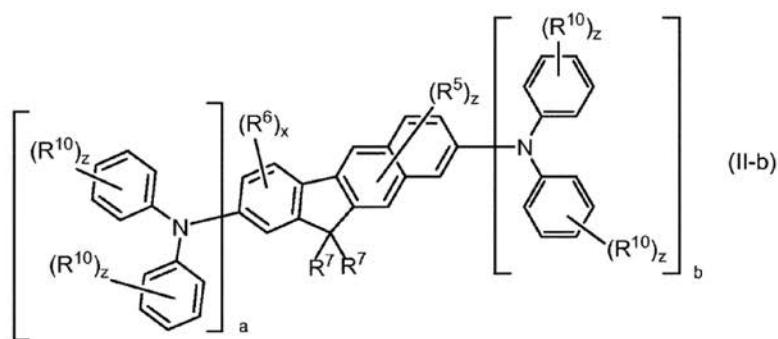
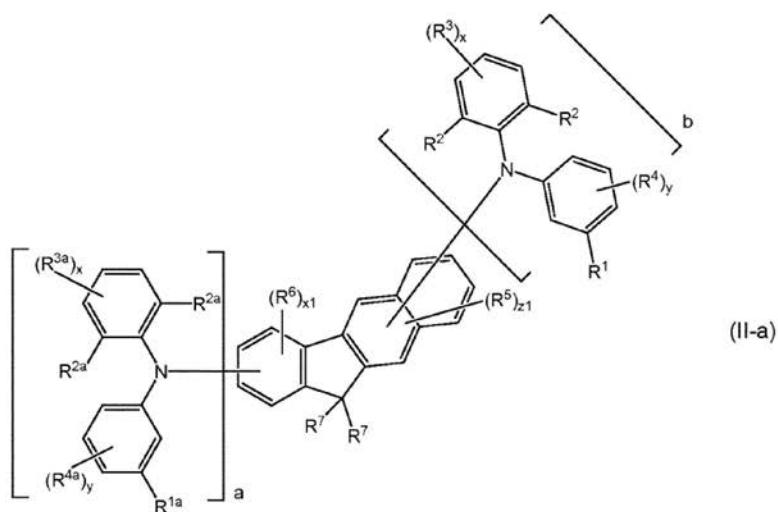
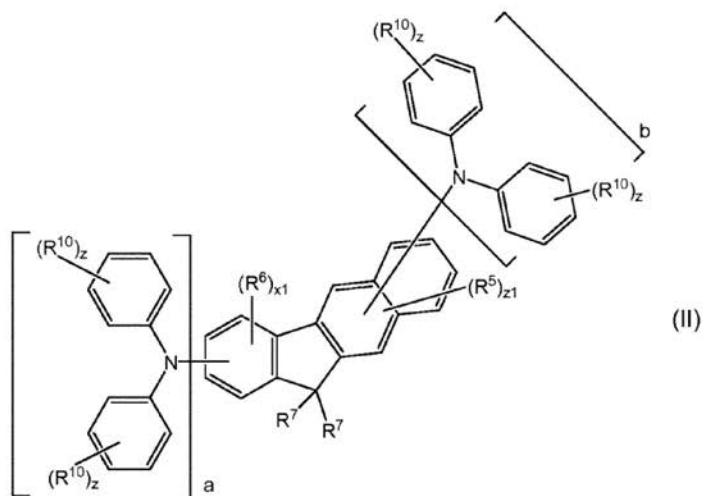
【化 1】



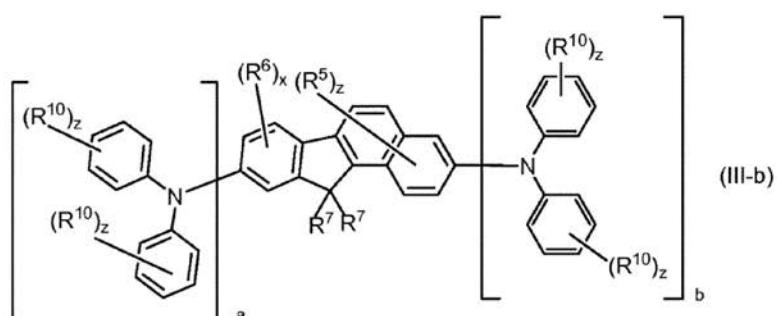
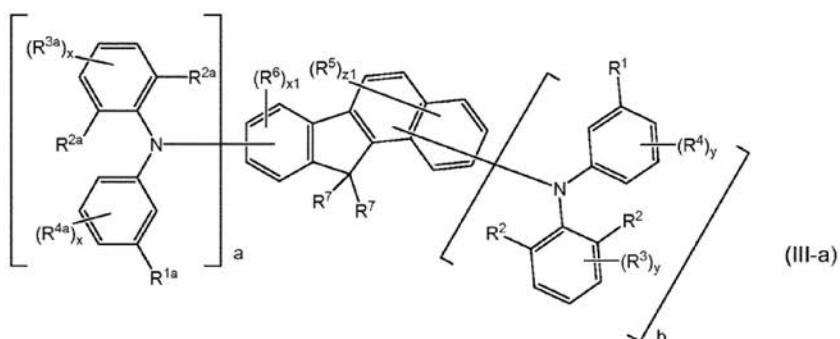
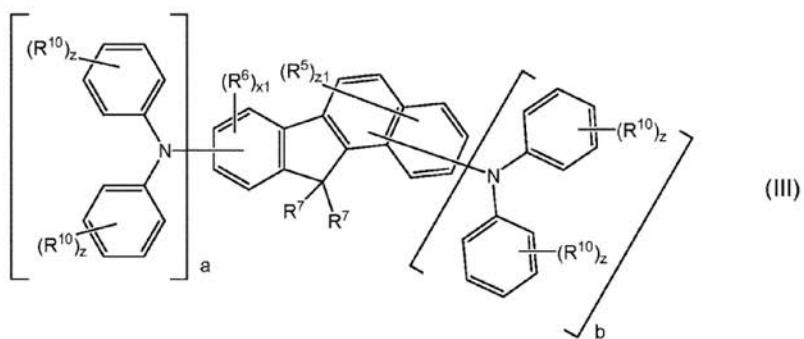
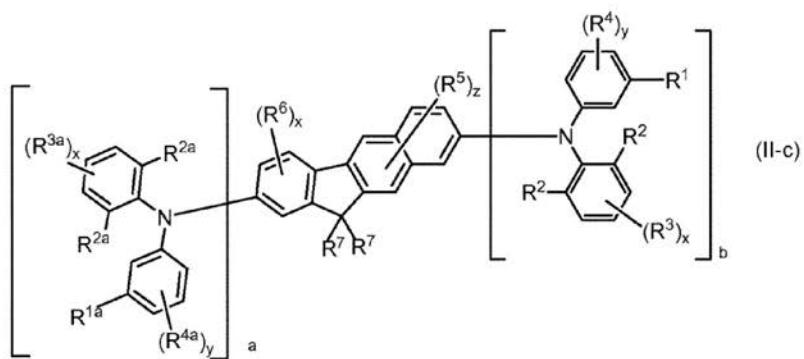
【化 2】



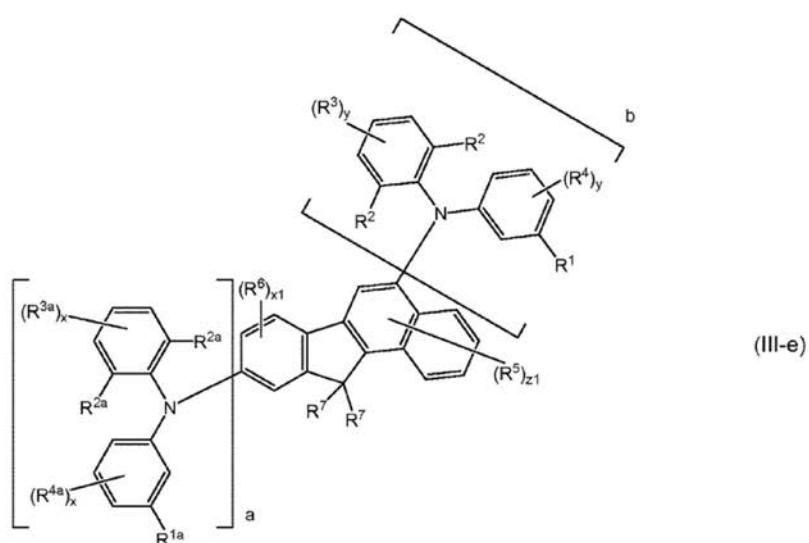
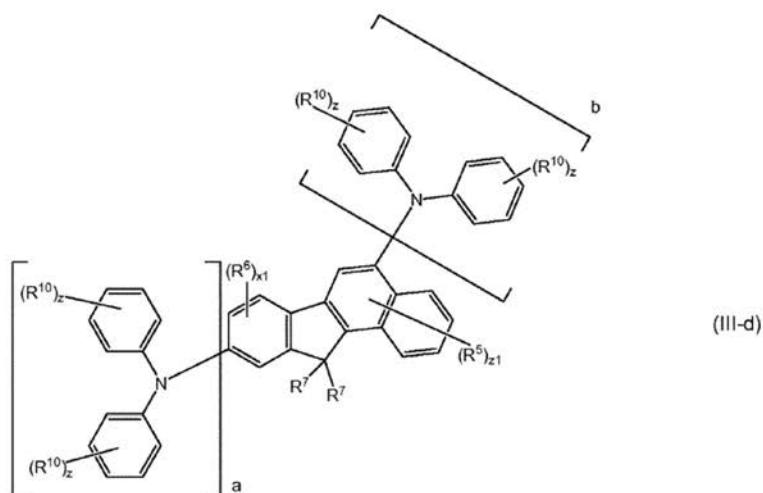
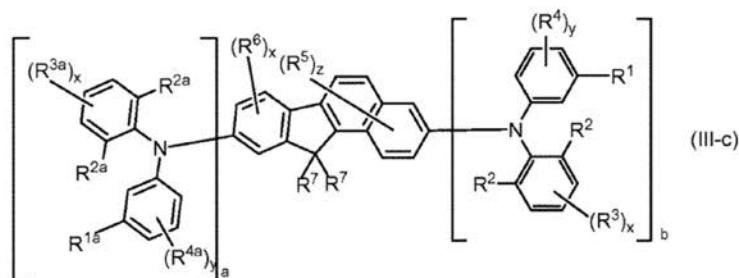
【化3】



【化4】



【化5】



(式中：

R^1 、 R^{1a} 、 R^2 、 R^{2a} および R^{2b} はそれぞれの場合に、同一もしくは異なると共に、H、D、F、CN、アルキル、フルオロアルキル、アリール、ヘテロアリール、シリル、重水素化アルキル、重水素化部分フッ素化アルキル、重水素化アリール、重水素化ヘテロアリール、重水素化シリル、アルコキシ、アリールオキシ、フルオロアルコキシ、シロキサン、シロキシ、重水素化アルコキシ、重水素化アリールオキシ、重水素化フルオロアルコキシ、重水素化シロキサンおよび重水素化シロキシからなる群から選択されるが、ただし、 R^1 および R^{1a} の少なくとも一方はヘテロアリールまたは重水素化ヘテロアリールであり；

R^3 、 R^{3a} 、 R^4 、 R^{4a} 、 R^5 および R^6 はそれぞれの場合に、同一もしくは異なると共に

、D、F、CN、アルキル、フルオロアルキル、アリール、ヘテロアリール、シリル、重水素化アルキル、重水素化部分フッ素化アルキル、重水素化アリール、重水素化ヘテロアリール、重水素化シリル、アルコキシ、アリールオキシ、フルオロアルコキシ、シロキサン、シロキシ、重水素化アルコキシ、重水素化アリールオキシ、重水素化フルオロアルコキシ、重水素化シロキサンおよび重水素化シロキシからなる群から選択され、R³、R^{3a}、R⁴およびR^{4a}から選択される隣接する基は一緒に結合して縮合環を形成可能であり；

R⁷はそれぞれの場合に、同一もしくは異なると共に、アルキル、アリールおよびこれらの重水素化類似体からなる群から選択され、2個のアルキルR⁷基は一緒に結合してシクロアルキルスピロ環を形成可能であり、また、2個のR⁷フェニル基は結合してスピロフルオレン基を形成可能であり；

R¹⁰はそれぞれの場合に、同一もしくは異なると共に、D、F、CN、アルキル、フルオロアルキル、アリール、ヘテロアリール、シリル、重水素化アルキル、重水素化部分フッ素化アルキル、重水素化アリール、重水素化ヘテロアリール、重水素化シリル、アルコキシ、アリールオキシ、フルオロアルコキシ、シロキサン、シロキシ、重水素化アルコキシ、重水素化アリールオキシ、重水素化フルオロアルコキシ、重水素化シロキサンおよび重水素化シロキシからなる群から選択され、隣接するR¹⁰基は一緒に結合して縮合環を形成可能であり；

aおよびbは同一もしくは異なり、0または1であるが、ただし、a+b=1であり；

w1は0～3の整数であるが、ただし、a=1である場合、w1は0～2であり；

xは0～3の整数であり；

x1は0～4の整数であるが、ただし、a=1である場合、x1は0～3であり；

yは0～4の整数であり；

y1は0～5の整数であるが、ただし、b=1である場合、y1は0～4であり；

zは0～5の整数であり；ならびに

z1は0～6の整数であるが、ただし、b=1である場合、z1は0～5である。)

2. 式Iを有する、前記1に記載の化合物。

3. 式I-aを有する、前記1に記載の化合物。

4. 式I-bを有する、前記1に記載の化合物。

5. 式I-cを有する、前記1に記載の化合物。

6. 式I-dを有する、前記1に記載の化合物。

7. 式I Iを有する、前記1に記載の化合物。

8. 式I I-aを有する、前記1に記載の化合物。

9. 式I I-bを有する、前記1に記載の化合物。

10. 式I I-cを有する、前記1に記載の化合物。

11. 式I I Iを有する、前記1に記載の化合物。

12. 式I I I-aを有する、前記1に記載の化合物。

13. 式I I I-bを有する、前記1に記載の化合物。

14. 式I I I-cを有する、前記1に記載の化合物。

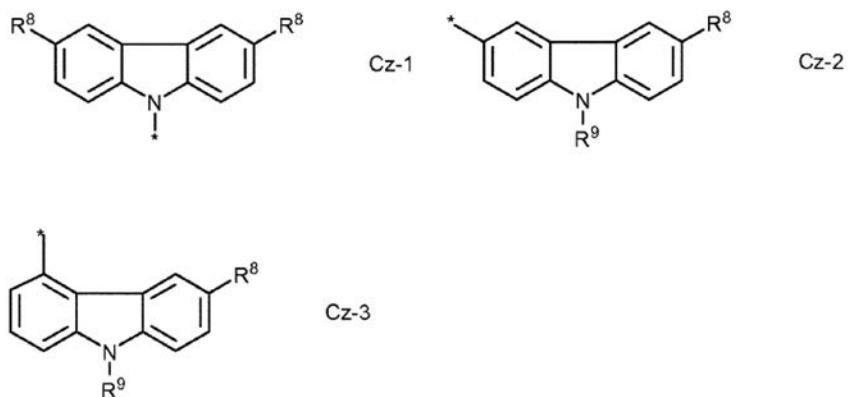
15. 式I I I-dを有する、前記1に記載の化合物。

16. 式I I I-eを有する、前記1に記載の化合物。

17. R¹およびR^{1a}の少なくとも一方が、ピロール、ピリジン、ピリミジン、カルバゾール、イミダゾール、ベンズイミダゾール、イミダゾロベンズイミダゾール、トリアゾール、ベンゾトリアゾール、トリアゾロピリジン、チオフェン、ベンゾチオフェン、ジベンゾチオフェン、フラン、ベンゾフラン、ジベンゾフラン、オキサゾール、ベンゾキサゾール、チアゾール、ベンゾチアゾール、これらの置換誘導体およびこれらの重水素化類似体からなる群から選択される、前記1に記載の化合物。

18. 前記カルバゾールが、Cz-1、Cz-2、Cz-3およびこれらの重水素化類似体

【化 6】



(式中：

R^8 はそれぞれの場合に、同一もしくは異なると共に、アルキル、シリル、アリールおよびこれらの重水素化類似体からなる群から選択され；

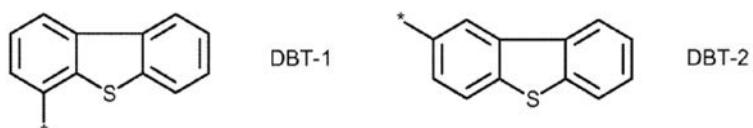
R⁹は、アリールおよび重水素化アリールからなる群から選択され；ならびに

* は結合点を表す)

からなる群から選択される、前記 17 に記載の化合物。

19. 前記ジベンゾチオフェンが、DBT-1、DBT-2およびこれらの重水素化類似体

【化7】



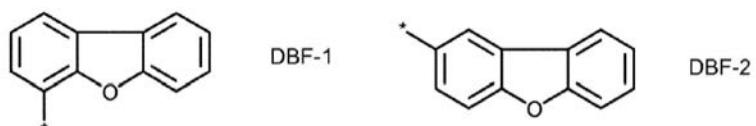
(式中：

* は結合点を表す)

からなる群から選択される、前記 17 に記載の化合物。

20. 前記ジベンゾフランが、DBF-1、DBF-2 およびこれらの重水素化類似体

【化 8】



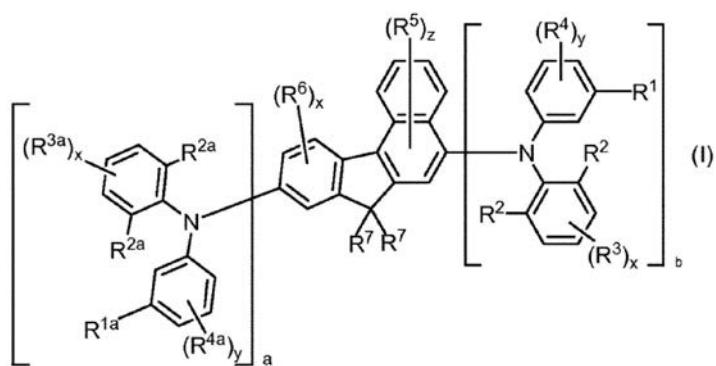
(式中：

* は結合点を表す)

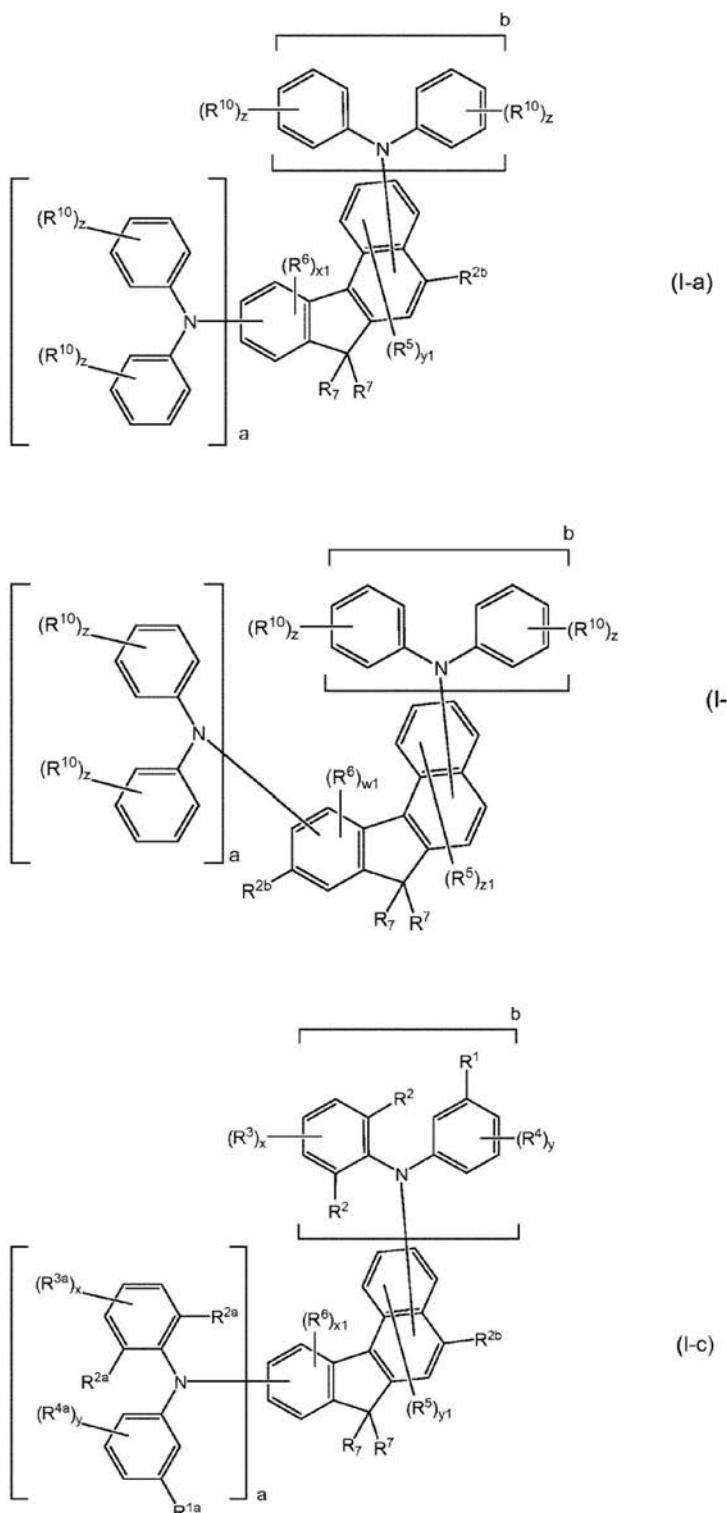
からなる群から選択される、前記 17 に記載の化合物。

21. 少なくとも 1 つの光活性層を備える電子素子であって、前記光活性層が、式 I、式 I-a、式 I-b、式 I-c、式 I-d、式 II、式 II-a、式 II-b、式 II-c、式 III、式 III-a、式 III-b、式 III-c、式 III-d または式 III-e を有する化合物

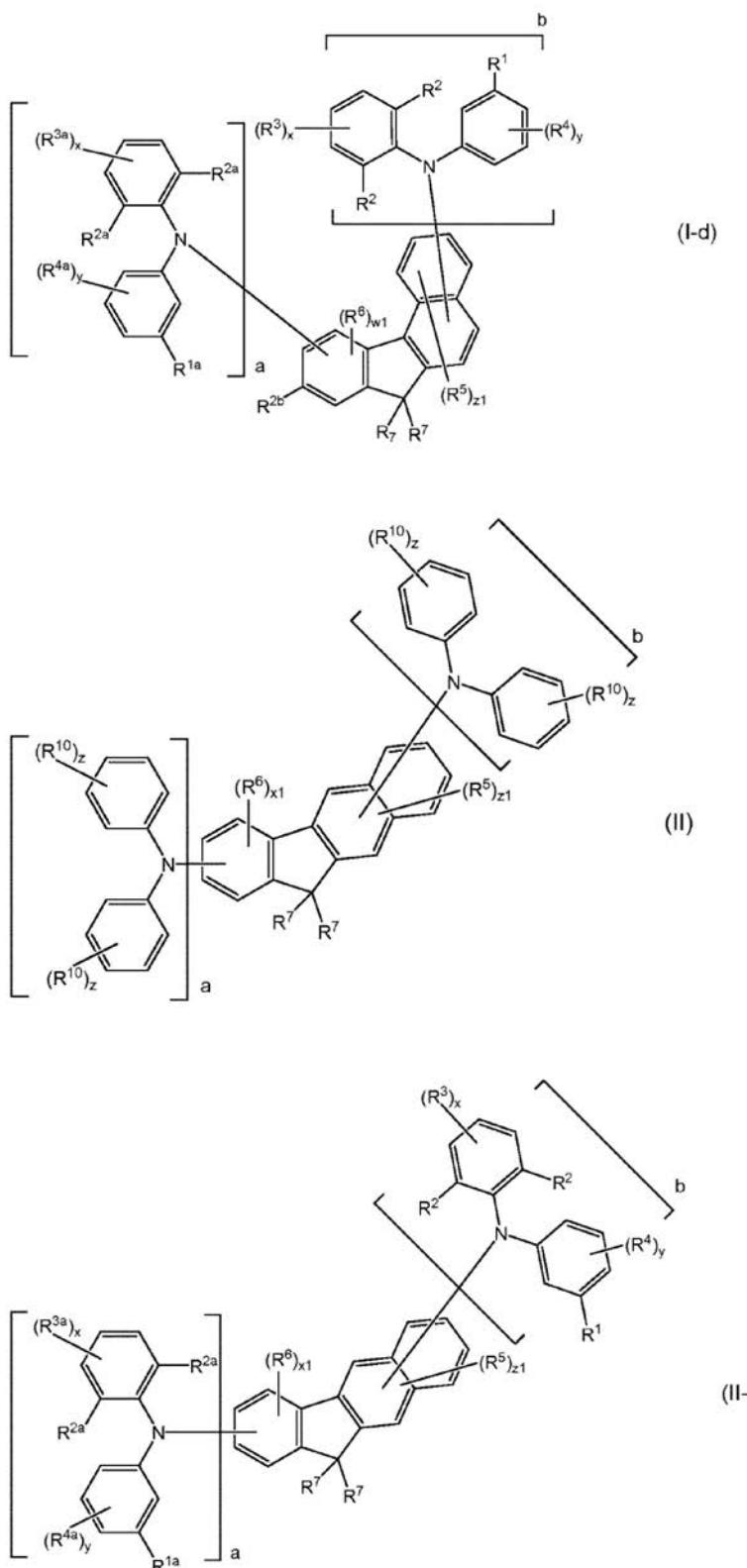
【化9】



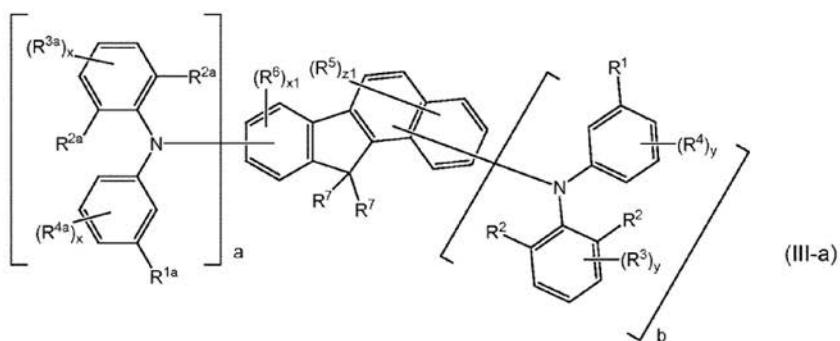
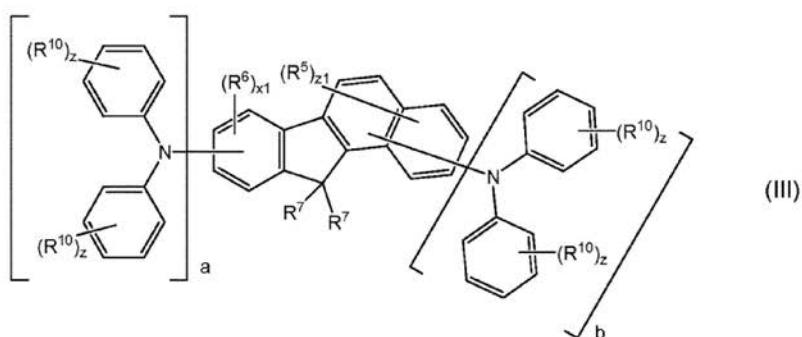
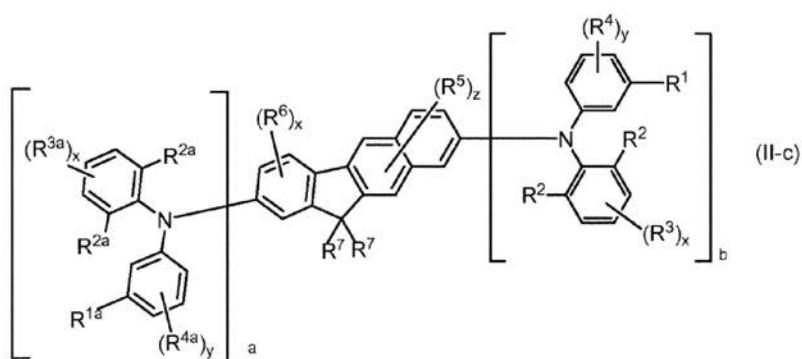
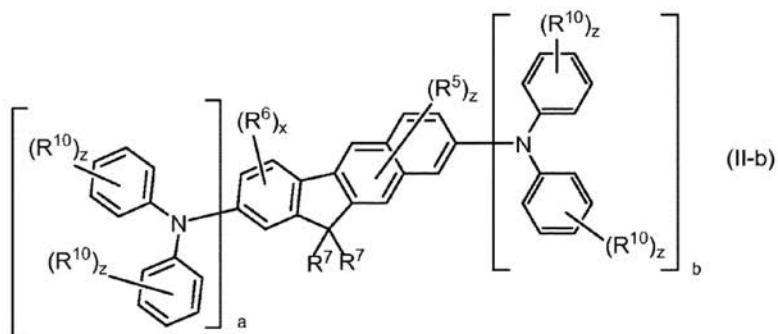
【化 10】



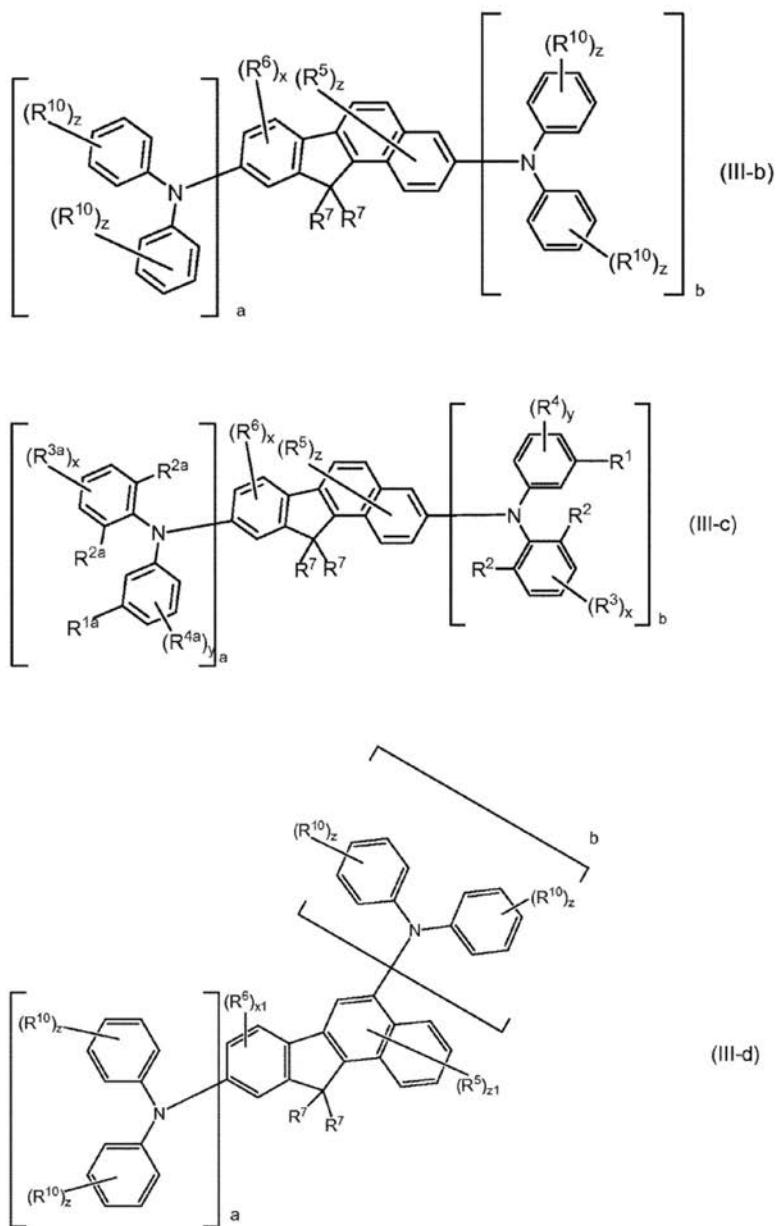
【化 11】



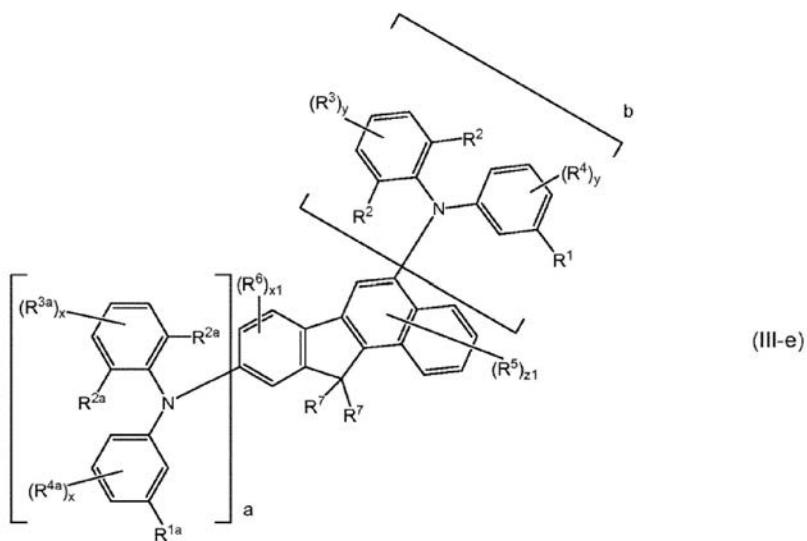
【化 1 2】



【化13】



【化14】



(式中：

R^1 、 R^{1a} 、 R^2 、 R^{2a} および R^{2b} はそれぞれの場合に、同一もしくは異なると共に、H、D、F、CN、アルキル、フルオロアルキル、アリール、ヘテロアリール、シリル、重水素化アルキル、重水素化部分フッ素化アルキル、重水素化アリール、重水素化ヘテロアリール、重水素化シリル、アルコキシ、アリールオキシ、フルオロアルコキシ、シロキサン、シロキシ、重水素化アルコキシ、重水素化アリールオキシ、重水素化フルオロアルコキシ、重水素化シロキサンおよび重水素化シロキシからなる群から選択されるが、ただし、 R^1 および R^{1a} の少なくとも一方はヘテロアリールまたは重水素化ヘテロアリールであり；

R^3 、 R^{3a} 、 R^4 、 R^{4a} 、 R^5 および R^6 はそれぞれの場合に、同一もしくは異なると共に、D、F、CN、アルキル、フルオロアルキル、アリール、ヘテロアリール、シリル、重水素化アルキル、重水素化部分フッ素化アルキル、重水素化アリール、重水素化ヘテロアリール、重水素化シリル、アルコキシ、アリールオキシ、フルオロアルコキシ、シロキサン、シロキシ、重水素化アルコキシ、重水素化アリールオキシ、重水素化フルオロアルコキシ、重水素化シロキサンおよび重水素化シロキシからなる群から選択され、 R^3 、 R^{3a} 、 R^4 および R^{4a} から選択される隣接する基は一緒に結合して縮合環を形成可能であり；

R^7 はそれぞれの場合に、同一もしくは異なると共に、アルキル、アリールおよびこれらの重水素化類似体からなる群から選択され、2個のアルキル R^7 基は一緒に結合してシクロアルキルスピロ環を形成可能であり、また、2個の R^7 フェニル基は結合してスピロフルオレン基を形成可能であり；

R^{10} はそれぞれの場合に、同一もしくは異なると共に、D、F、CN、アルキル、フルオロアルキル、アリール、ヘテロアリール、シリル、重水素化アルキル、重水素化部分フッ素化アルキル、重水素化アリール、重水素化ヘテロアリール、重水素化シリル、アルコキシ、アリールオキシ、フルオロアルコキシ、シロキサン、シロキシ、重水素化アルコキシ、重水素化アリールオキシ、重水素化フルオロアルコキシ、重水素化シロキシからなる群から選択され、隣接する R^{10} 基は一緒に結合して縮合環を形成可能であり；

aおよびbは同一もしくは異なり、0または1であるが、ただし、 $a + b = 1$ であり；

w1は0～3の整数であるが、ただし、 $a = 1$ である場合、w1は0～2であり；

xは0～3の整数であり；

x1は0～4の整数であるが、ただし、 $a = 1$ である場合、x1は0～3であり；

yは0～4の整数であり；

y1は0～5の整数であるが、ただし、 $b = 1$ である場合、y1は0～4であり；

zは0～5の整数であり；ならびに

z1は0～6の整数であるが、ただし、 $b = 1$ である場合、z1は0～5である)を含む電子素子。