

【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7年3月13日(2025.3.13)

【国際公開番号】WO2022/210445

【出願番号】特願2023-511214(P2023-511214)

【国際特許分類】

C 0 7 D 2 0 9 / 8 6 (2 0 0 6 . 0 1)

C 0 7 D 2 0 9 / 8 8 (2 0 0 6 . 0 1)

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

H 1 0 K 3 0 / 8 5 (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 5 (2 0 2 3 . 0 1)

H 1 0 K 3 0 / 4 0 (2 0 2 3 . 0 1)

10

【 F I 】

C 0 7 D 2 0 9 / 8 6 C S P

C 0 7 D 2 0 9 / 8 8

H 1 0 K 3 0 / 5 0

H 1 0 K 3 0 / 8 5

H 1 0 K 8 5 / 6 0

H 1 0 K 5 0 / 1 5

H 1 0 K 3 0 / 4 0

20

【手続補正書】

【提出日】令和7年3月5日(2025.3.5)

【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】

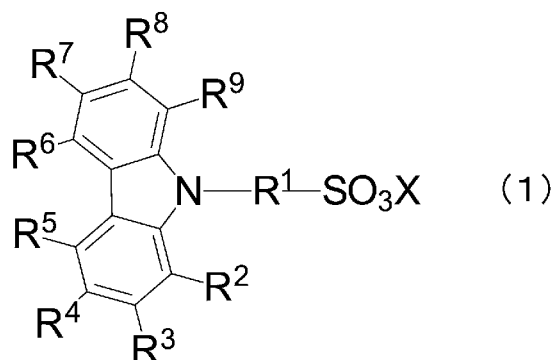
30

【特許請求の範囲】

【請求項1】

下記一般式(1)で表される化合物。

【化1】



40

[式中、R¹は、

置換基を有していてもよい炭素原子数1~18の直鎖状もしくは分岐状のアルキレン基、

置換基を有していてもよい炭素原子数2~20の直鎖状もしくは分岐状のアルケニレン基、

50

置換基を有していてもよい炭素原子数 2 ~ 20 の直鎖状もしくは分岐状のアルキレン基、

置換基を有していてもよい炭素原子数 3 ~ 12 のシクロアルキレン基、

置換基を有していてもよい炭素原子数 6 ~ 36 の 2 価の芳香族炭化水素基、

または、置換基を有していてもよい環形成原子数 5 ~ 36 の 2 価の複素環基であり、

X は水素イオンを除く 1 価のカチオンを表す。

R² ~ R⁹ は、それぞれ独立して、

水素原子、

置換基を有していてもよい炭素原子数 1 ~ 18 の直鎖状もしくは分岐状のアルキル基

10

、置換基を有していてもよい炭素原子数 2 ~ 20 の直鎖状もしくは分岐状のアルケニル基、

置換基を有していてもよい炭素原子数 2 ~ 20 の直鎖状もしくは分岐状のアルキニル基、

置換基を有していてもよい炭素原子数 3 ~ 12 のシクロアルキル基、

置換基を有していてもよい炭素原子数 1 ~ 20 の直鎖状もしくは分岐状のアルコキシ

基、

置換基を有していてもよい炭素原子数 3 ~ 10 のシクロアルコキシ基、

置換基を有していてもよい炭素原子数 1 ~ 18 の直鎖状もしくは分岐状のアルコキシ

カルボニル基、

20

置換基を有していてもよい炭素原子数 1 ~ 18 のチオ基、

置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアミノ基、

置換基を有していてもよい炭素原子数 6 ~ 36 の芳香族炭化水素基、

または置換基を有していてもよい環形成原子数 5 ~ 36 の複素環基を表す。

また、R² ~ R⁹ のうち、少なくとも 1 つは、置換基を有していてもよいジフェニルアミノ基、または置換基を有していてもよいジフェニルアミノ基もしくはカルバゾール基によって置換された炭素原子数 6 ~ 36 の芳香族炭化水素基である。]

【請求項 2】

前記一般式 (1) において、R¹ が、置換基を有していてもよい炭素原子数 1 ~ 18 の直鎖状もしくは分岐状のアルキレン基である、請求項 1 に記載の化合物。

30

【請求項 3】

前記一般式 (1) において、X がアルカリ金属イオンまたは置換基を有していてもよいアンモニウムイオンである、請求項 1 または請求項 2 に記載の化合物。

【請求項 4】

前記一般式 (1) において、アルカリ金属イオンが、ナトリウムイオン、カリウムイオン、ルビジウムイオンおよびセシウムイオンからなる群から選択される少なくとも 1 種である、請求項 3 に記載の化合物。

【請求項 5】

請求項 1 ~ 請求項 4 のいずれか一項に記載の化合物を含む正孔輸送材料。

【請求項 6】

請求項 5 に記載の正孔輸送材料を含む光電変換素子用正孔輸送材料組成物。

40

【請求項 7】

請求項 6 に記載の光電変換用正孔輸送材料組成物を用いた光電変換素子。

【手続補正 2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0012

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0012】

[式中、R¹ は、

50

置換基を有していてもよい炭素原子数 1 ~ 18 の直鎖状もしくは分岐状のアルキレン基、
 置換基を有していてもよい炭素原子数 2 ~ 20 の直鎖状もしくは分岐状のアルケニレン基、
 置換基を有していてもよい炭素原子数 2 ~ 20 の直鎖状もしくは分岐状のアルキニレン基、
 置換基を有していてもよい炭素原子数 3 ~ 12 のシクロアルキレン基、
 置換基を有していてもよい炭素原子数 6 ~ 36 の2価の芳香族炭化水素基、
 または、置換基を有していてもよい環形成原子数 5 ~ 36 の2価の複素環基であり、
 X は水素イオンを除く 1 価のカチオンを表す。
 R² ~ R⁹ は、それぞれ独立して、
 水素原子、
 置換基を有していてもよい炭素原子数 1 ~ 18 の直鎖状もしくは分岐状のアルキル基、
 置換基を有していてもよい炭素原子数 2 ~ 20 の直鎖状もしくは分岐状のアルケニル基、
 置換基を有していてもよい炭素原子数 2 ~ 20 の直鎖状もしくは分岐状のアルキニル基、
 置換基を有していてもよい炭素原子数 3 ~ 12 のシクロアルキル基、
 置換基を有していてもよい炭素原子数 1 ~ 20 の直鎖状もしくは分岐状のアルコキシカルボニル基、
 置換基を有していてもよい炭素原子数 3 ~ 10 のシクロアルコキシ基、
 置換基を有していてもよい炭素原子数 1 ~ 18 の直鎖状もしくは分岐状のアルコキシカルボニル基、
 置換基を有していてもよい炭素原子数 1 ~ 18 のチオ基、
 置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアミノ基、
 置換基を有していてもよい炭素原子数 6 ~ 36 の芳香族炭化水素基、
 または置換基を有していてもよい環形成原子数 5 ~ 36 の複素環基を表す。]

10

20

【**手続補正 3**】【**補正対象書類名**】明細書

30

【**補正対象項目名**】0013【**補正方法**】変更【**補正の内容**】

【0013】

2. 前記一般式(1)において、R¹が、置換基を有していてもよい炭素原子数 1 ~ 18 の直鎖状もしくは分岐状のアルキレン基である、上記 1 に記載の化合物。

【**手続補正 4**】【**補正対象書類名**】明細書【**補正対象項目名**】0024【**補正方法**】変更【**補正の内容**】

【0024】

一般式(1)において、R¹は、

置換基を有していてもよい炭素原子数 1 ~ 18 の直鎖状もしくは分岐状のアルキレン基、

置換基を有していてもよい炭素原子数 2 ~ 20 の直鎖状もしくは分岐状のアルケニレン基、

置換基を有していてもよい炭素原子数 2 ~ 20 の直鎖状もしくは分岐状のアルキニレン基、

置換基を有していてもよい炭素原子数 3 ~ 12 のシクロアルキレン基、

50

置換基を有していてもよい炭素原子数 6 ~ 36 の 2 価の芳香族炭化水素基、
または、置換基を有していてもよい環形成原子数 5 ~ 36 の 2 価の複素環基
を表す。

【手続補正 5】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0025

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0025】

一般式(1)において、 R^1 で表される「置換基を有していてもよい炭素原子数 1 ~ 18 の直鎖状もしくは分岐状のアルキレン基」における「炭素原子数 1 ~ 18 の直鎖状もしくは分岐状のアルキレン基」としては具体的に、メチレン基、エチレン基、n-プロピレン基、イソプロピレン基、n-ブチレン基、イソブチレン基、s-ブチレン基、t-ブチレン基、n-ペンチレン基、イソペンチレン基、n-ヘキシレン基、2-エチルヘキシレン基、ヘプチレン基、オクチレン基、イソオクチレン基、ノニレン基、デシレン基などをあげることができ、 R^1 には、前記あげた置換基の水素の1つがスルホン酸塩基(SO_3X)に置換されている。

10

【手続補正 6】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0026

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0026】

一般式(1)において、 R^1 で表される「置換基を有していてもよい炭素原子数 2 ~ 20 の直鎖状もしくは分岐状のアルケニレン基」における「炭素原子数 2 ~ 20 の直鎖状もしくは分岐状のアルケニレン基」としては具体的に、ビニレン基、1-プロペニレン基、アリレン基、1-ブテニレン基、2-ブテニレン基、1-ペンテニレン基、1-ヘキセニレン基、イソプロペニレン基、イソブテニレン基、またはこれらのアルケニレン基が複数結合した炭素原子数 2 ~ 20 の直鎖状もしくは分岐状のアルケニレン基などをあげることができ、 R^1 には、前記あげた置換基の水素の1つがスルホン酸塩基(SO_3X)に置換されている。

20

30

【手続補正 7】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0027

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0027】

一般式(1)において、 R^1 で表される「置換基を有していてもよい炭素原子数 2 ~ 20 の直鎖状もしくは分岐状のアルキニレン基」における「炭素原子数 2 ~ 20 の直鎖状もしくは分岐状のアルキニレン基」としては具体的に、エチニレン基、1-プロピニレン基、2-プロピニレン基、1-ブチニレン基、2-ブチニレン基、1-メチル-2-プロピニレン基、1-ペンチニレン基、2-ペンチニレン基、1-メチル-n-ブチニレン基、2-メチル-n-ブチニレン基、3-メチル-n-ブチニレン基、1-ヘキシニレン基などをあげることができ、 R^1 には、前記あげた置換基の水素の1つがスルホン酸塩基(SO_3X)に置換されている。

40

【手続補正 8】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0028

【補正方法】変更

【補正の内容】

50

【 0 0 2 8 】

一般式 (1) において、 R^1 で表される「置換基を有していてもよい炭素原子数 3 ~ 12 のシクロアルキレン基」における「炭素原子数 3 ~ 12 のシクロアルキレン基」としては、具体的に、シクロプロピレン基、シクロブチレン基、シクロペンチレン基、シクロヘキシレン基、シクロヘプチレン基、シクロオクチレン基、シクロデシレン基、シクロドデシレン基などをあげることができ、 R^1 には、前記あげた置換基の水素の 1 つがスルホン酸塩基 (SO_3X) に置換されている。

【 手 続 補 正 9 】

【 補 正 対 象 書 類 名 】 明 細 書

【 補 正 対 象 項 目 名 】 0 0 2 9

【 補 正 方 法 】 変 更

【 補 正 の 内 容 】

【 0 0 2 9 】

一般式 (1) において、 R^1 で表される「置換基を有していてもよい炭素原子数 6 ~ 36 の 2 価の芳香族炭化水素基」における「炭素原子数 6 ~ 36 の 2 価の芳香族炭化水素基」としては具体的に、フェニレン基、ピフェニレン基、テルフェニレン基、ナフチレン基、アントラセニレン基 (アントリレン基)、フェナントリレン基、フルオレニレン基、インデニレン基、ピレニレン基、ペリレニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレニレン基などをあげることができ、 R^1 には、前記あげた置換基の水素の 1 つがスルホン酸塩基 (SO_3X) に置換されている。なお、本発明において芳香族炭化水素基には、「縮合多環芳香族基」が含まれるものとする。

【 手 続 補 正 1 0 】

【 補 正 対 象 書 類 名 】 明 細 書

【 補 正 対 象 項 目 名 】 0 0 3 0

【 補 正 方 法 】 変 更

【 補 正 の 内 容 】

【 0 0 3 0 】

一般式 (1) において、 R^1 で表される「置換基を有していてもよい環形成原子数 5 ~ 36 の 2 価の複素環基」における「環形成原子数 5 ~ 36 の 2 価の複素環基」としては具体的に、ピリジレン基、ピリミジニレン基、トリアジニレン基、チエニレン基、フリレン基 (フラニレン基)、ピロリレン基、イミダゾリレン基、ピラゾリレン基、トリアゾリレン基、キノリレン基、イソキノリレン基、ナフチルジニレン基、アクリジニレン基、フェナントロリニレン基、ベンゾフラニレン基、ベンゾチエニレン基、オキサゾリレン基、インドリレン基、カルバゾリレン基、ベンゾオキサゾリレン基、チアゾリレン基、ベンゾチアゾリレン基、キノキサリニレン基、ベンゾイミダゾリレン基、ピラゾリレン基、ジベンゾフラニレン基、ジベンゾチエニレン基、カルボニレン基などをあげることができ、 R^1 には、前記あげた置換基の水素の 1 つがスルホン酸塩基 (SO_3X) に置換されている。

【 手 続 補 正 1 1 】

【 補 正 対 象 書 類 名 】 明 細 書

【 補 正 対 象 項 目 名 】 0 0 3 1

【 補 正 方 法 】 変 更

【 補 正 の 内 容 】

【 0 0 3 1 】

一般式 (1) において、 R^1 で表される「置換基を有していてもよい炭素原子数 1 ~ 18 の直鎖状もしくは分岐状のアルキレン基」、「置換基を有していてもよい炭素原子数 2 ~ 20 の直鎖状もしくは分岐状のアルケニレン基」、「置換基を有していてもよい炭素原子数 2 ~ 20 の直鎖状もしくは分岐状のアルキニレン基」、「置換基を有していてもよい炭素原子数 3 ~ 12 のシクロアルキレン基」、「置換基を有していてもよい炭素原子数 6 ~ 36 の 2 価の芳香族炭化水素基」または「置換基を有していてもよい環形成原子数 5 ~

10

20

30

40

50

36の「2価の複素環基」における「置換基」としては、具体的に、

フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子などのハロゲン原子；シアノ基；水酸基；ニトロ基；ニトロソ基；カルボキシル基；リン酸基；

メチルエステル基、エチルエステル基などのカルボン酸エステル基；

メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、*s*-ブチル基、*t*-ブチル基、*n*-ペンチル基、イソペンチル基、*n*-ヘキシル基、2-エチルヘキシル基、ヘプチル基、オクチル基、イソオクチル基、ノニル基、デシル基などの炭素原子数1~18の直鎖状もしくは分岐状のアルキル基；

ビニル基、1-プロペニル基、アリル基、1-ブテニル基、2-ブテニル基、1-ペンテニル基、1-ヘキセニル基、イソプロペニル基、イソブテニル基など炭素原子数2~20の直鎖状もしくは分岐状のアルケニル基；

メトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基、*t*-ブトキシ基、ペンチルオキシ基、ヘキシルオキシ基などの炭素原子数1~18の直鎖状もしくは分岐状のアルコキシ基；

フェニル基、ナフチル基、アントリル基、フェナントリル基、ピレニル基などの炭素原子数6~30の芳香族炭化水素基；

ピリジル基、ピリミジリニル基、トリアジニル基、チエニル基、フリル基（フラニル基）、ピロリル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、トリアゾリル基、キノリル基、イソキノリル基、ナフチルジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチエニル基、オキサゾリル基、インドリル基、カルバゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、チアゾリル基、ベンゾチアゾリル基、キノキサリニル基、ベンゾイミダゾリル基、ピラゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチエニル基、カルボニリル基などの環形成原子数5~30の複素環基；

無置換アミノ基（ NH_2 ）、エチルアミノ基、アセチルアミノ基、フェニルアミノ基などの一置換アミノ基、またはジエチルアミノ基、ジフェニルアミノ基、アセチルフェニルアミノ基などの二置換アミノ基である、炭素原子数0~18のアミノ基；

無置換チオ基（チオール基： SH ）、メチルチオ基、エチルチオ基、プロピルチオ基、ヘキサ-5-エン-3-チオ基、フェニルチオ基、ビフェニルチオ基などの炭素原子数0~18のチオ基；

などをあげることができる。これらの「置換基」は、1つのみ含まれてもよく、複数含まれてもよく、複数含まれる場合は互いに同一でも異なってもよい。また、これら「置換基」はさらに前記例示した置換基を有していてもよい。

【手続補正12】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0035

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0035】

一般式(1)において、 R^1 は、置換基を有していてもよい炭素原子数1~18の直鎖状もしくは分岐状のアルキレン基であることが好ましい。 R^1 は、置換基を含めた全体での炭素原子数が18以下であるアルキレン基であることがより好ましく、置換基を含めた全体での炭素原子数が10以下であるアルキレン基であることが更に好ましく、置換基を含めた全体での炭素原子数が6以下であるアルキレン基であることが特に好ましい。

【手続補正13】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0037

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0037】

一般式(1)において、 $R^2 \sim R^9$ で表される「置換基を有していてもよい炭素原子数1~18の直鎖状もしくは分岐状のアルキル基」における「炭素原子数1~18の直鎖状

10

20

30

40

50

もしくは分岐状のアルキル基」としては具体的に、メチル基、エチル基、n-プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、イソブチル基、s-ブチル基、t-ブチル基、n-ペンチル基、イソペンチル基、n-ヘキシル基、2-エチルヘキシル基、ヘプチル基、オクチル基、イソオクチル基、ノニル基、デシル基などをあげることができる。

【手続補正14】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0038

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0038】

一般式(1)において、 $R^2 \sim R^9$ で表される「置換基を有していてもよい炭素原子数2~20の直鎖状もしくは分岐状のアルケニル基」における「炭素原子数2~20の直鎖状もしくは分岐状のアルケニル基」としては具体的に、ビニル基、1-プロペニル基、アリル基、1-ブテニル基、2-ブテニル基、1-ペンテニル基、1-ヘキセニル基、イソプロペニル基、イソブテニル基、またはこれらのアルケニル基が複数結合した炭素原子数2~20の直鎖状もしくは分岐状のアルケニル基などをあげることができる。

10

【手続補正15】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0039

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0039】

一般式(1)において、 $R^2 \sim R^9$ で表される「置換基を有していてもよい炭素原子数2~20の直鎖状もしくは分岐状のアルキニル基」における「炭素原子数2~20の直鎖状もしくは分岐状のアルキニル基」としてはエチニル基、1-プロピニル基、2-プロピニル基、1-ブチニル基、2-ブチニル基、1-メチル-2-プロピニル基、1-ペンチニル基、2-ペンチニル基、1-メチル-n-ブチニル基、2-メチル-n-ブチニル基、3-メチル-n-ブチニル基、1-ヘキシニル基などをあげることができる。

20

【手続補正16】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0040

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0040】

一般式(1)において、 $R^2 \sim R^9$ で表される「置換基を有していてもよい炭素原子数3~12のシクロアルキル基」における「炭素原子数3~12のシクロアルキル基」としては具体的に、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、シクロデシル基、シクロドデシル基などをあげることができる。

30

【手続補正17】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0046

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0046】

一般式(1)において、 $R^2 \sim R^9$ で表される「置換基を有していてもよい炭素原子数6~36の芳香族炭化水素基」における「炭素原子数6~36の芳香族炭化水素基」としては具体的に、フェニル基、ビフェニル基、テルフェニル基、ナフチル基、ピフェニル基、アントラセニル基(アントリル基)、フェナントリル基、フルオレニル基、インデニル基、ピレニル基、ペリレニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基などをあげ

40

50

ことができる。なお、本発明において芳香族炭化水素基には、「縮合多環芳香族基」が含まれるものとする。

【手続補正 18】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0047

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0047】

一般式(1)において、 $R^2 \sim R^9$ で表される「置換基を有していてもよい環形成原子数5～36の複素環基」における「環形成原子数5～36の複素環基」としては具体的に、ピリジル基、ピリミジリニル基、トリアジニル基、チエニル基、フリル基(フラニル基)、ピロリル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、トリアゾリル基、キノリル基、イソキノリル基、ナフチルジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチエニル基、オキサゾリル基、インドリル基、カルバゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、チアゾリル基、ベンゾチアゾリル基、キノキサリニル基、ベンゾイミダゾリル基、ピラゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチエニル基、カルボニリル基などをあげることができる。

10

20

30

40

50