

【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30年8月23日(2018.8.23)

【公表番号】特表2017-523969(P2017-523969A)

【公表日】平成29年8月24日(2017.8.24)

【年通号数】公開・登録公報2017-032

【出願番号】特願2017-503549(P2017-503549)

【国際特許分類】

C 0 7 D 413/04 (2006.01)

C 0 7 D 413/14 (2006.01)

C 0 7 D 417/04 (2006.01)

C 0 9 K 11/06 (2006.01)

【F I】

C 0 7 D 413/04 C S P

C 0 7 D 413/14

C 0 7 D 417/04

C 0 9 K 11/06

【手続補正書】

【提出日】平成30年7月11日(2018.7.11)

【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

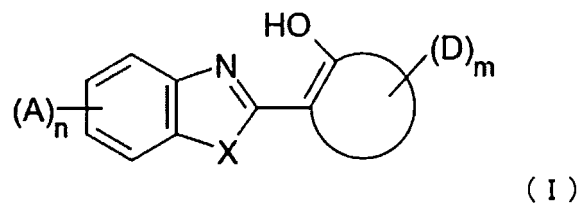
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

式(I)の化合物であって、

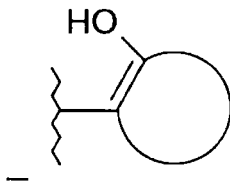
【化1】



式中、

- A が、電子求引基を表し、
- D が、電子供与基を表し、
- X が、O、S、及びNRからなる群から選択され、式中、R が、H、アルキル基、アリール基、及びヘテロアリール基からなる群から選択され、
- n が、1～4の整数であり、
- m が、1～6の整数であり、

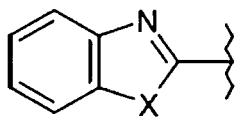
## 【化 2】



が、6 ~ 22 個の炭素原子と、N、S、及び O からなる群から選択される 1 ~ 3 個のヘテロ原子（複数可）とを含む、縮合二環式芳香族ラジカルを表し、

前記 OH 基が以下のラジカル

## 【化 3】

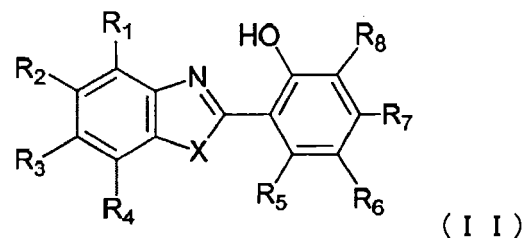


に対して前記縮合二環式芳香族ラジカルのオルト位にある、化合物。

## 【請求項 2】

以下の式 (I I) を有し、

## 【化 4】



式中、

- R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、R<sub>3</sub>、及び R<sub>4</sub> が、互いに独立して、H または電子求引基 A を表し、
- R<sub>5</sub>、R<sub>6</sub>、R<sub>7</sub>、及び R<sub>8</sub> が、互いに独立して、H または電子供与基 D を表すか、

あるいは R<sub>5</sub> 及び R<sub>6</sub> が、これらを担持する炭素原子と共に、4 ~ 6 個の原子を含む少なくとも部分的に不飽和の環を形成し、前記環が、N、O、及び S からなる群から選択される少なくとも 1 個のヘテロ原子を含み、前記環が、任意に、少なくとも 1 つの電子供与基 D によって置換されるか、

あるいは R<sub>6</sub> 及び R<sub>7</sub> が、これらを担持する炭素原子と共に、4 ~ 6 個の原子を含む少なくとも部分的に不飽和の環を形成し、前記環が、N、O 及び S からなる群から選択される少なくとも 1 個のヘテロ原子を含み、前記環が、任意に、少なくとも 1 つの電子供与基 D によって置換されるか、

あるいは R<sub>7</sub> 及び R<sub>8</sub> が、これらを担持する炭素原子と共に、4 ~ 6 個の原子を含む少なくとも部分的に不飽和の環を形成し、前記環が、N、O、及び S からなる群から選択される少なくとも 1 個のヘテロ原子を含み、前記環が、任意に、少なくとも 1 つの電子供与基 D によって置換され、

- X、A、及び D が、請求項 1 で定義された通りであり、

R<sub>5</sub> 及び R<sub>6</sub>、または R<sub>6</sub> 及び R<sub>7</sub>、または R<sub>7</sub> 及び R<sub>8</sub> のうちの少なくとも 1 つが、前記少なくとも部分的に不飽和の環を形成し、

R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、R<sub>3</sub>、及び R<sub>4</sub> のうちの少なくとも 1 つが、電子求引基 A であり、

式 ( I I ) の前記化合物が、少なくとも 1 つの電子供与基 D を含む、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 3】

前記電子供与基 D が、

- $O^-$ 、
- $OR_a$  であって、式中、 $R_a$  が、H であるか、またはアルキル基である、 $OR_a$ 、
- $NR_bR_c$  であって、式中、 $R_b$  及び  $R_c$  が、互いに独立して、
  - ・ H、
  - ・ アルキル基、及び
  - ・ アリール基からなる群から選択される、 $NR_bR_c$ 、
- $NHC(O)R_d$  であって、式中、 $R_d$  が、
  - ・ アルキル基、及び
  - ・ アリール基からなる群から選択される、 $NHC(O)R_d$ 、
- アリール基、ならびに
  - アルキル基からなる群から選択され、

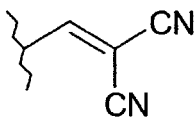
前記アルキル基及びアリール基が、任意に、少なくとも 1 つの電子供与基で置換される請求項 1 または 2 に記載の化合物。

【請求項 4】

前記基 A が、

- ハロゲン、
- $C(O)R_e$  であって、 $R_e$  が、
  - ・ Cl、
  - ・ H、
  - ・  $OR_f$  であって、 $R_f$  が、H であるか、またはアルキル基である、 $OR_f$ 、及び
  - ・ アルキル基からなる群から選択される、 $C(O)R_e$ 、
- $NO_2$ 、
- $SO_2NR_gR_h$  であって、 $R_g$  及び  $R_h$  が、互いに独立して、アルキル基、またはアリール基を表す、 $SO_2NR_gR_h$ 、
- CN、
- $CF_3$ 、
- ハロゲン、 $NO_2$ 、CN、 $C(O)R_e$ 、 $SO_2NR_gR_h$ 、及び  $CF_3$  から選択される少なくとも 1 つの基で置換されたアルキル基であって、式中、 $R_e$ 、 $R_g$ 、及び  $R_h$  が、上記で定義された通りであり、前記アルキルが、ヘテロアリールで任意に置換され、前記ヘテロアリールが、置換ヘテロアリールで任意に置換される、アルキル基、
- ハロゲン、 $NO_2$ 、CN、 $C(O)R_e$ 、 $SO_2NR_gR_h$ 、及び  $CF_3$  から選択される少なくとも 1 つの基で置換されたアリール基であって、式中、 $R_e$ 、 $R_g$ 、及び  $R_h$  が、上記で定義された通りである、アリール基、
- $-S(O)_2-W$  であって、W が、置換ヘテロアリールで任意に置換されたヘテロアリールである、 $-S(O)_2-W$ 、
- $SO_3H$ 、
- 以下の式

【化 5】



を有するラジカル、ならびに

- $N^+R_iR_jR_kR_l$  であって、式中、 $R_i$ 、 $R_j$ 、 $R_k$ 、及び  $R_l$  が、互いに独立して、H で

あるか、またはアルキル基であり、前記アルキル基が、ハロゲン、 $\text{NO}_2$ 、 $\text{CN}$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{R}_e$ 、 $\text{SO}_2\text{NR}_g\text{R}_h$ 、及び $\text{CF}_3$ から選択される少なくとも1つの基で任意に置換され、 $\text{R}_e$ 、 $\text{R}_g$ 、及び $\text{R}_h$ が、上記で定義された通りである、 $\text{N}^+\text{R}_i\text{R}_j\text{R}_k\text{R}_l$ 、からなる群から選択される、請求項1～3のいずれか一項に記載の化合物。

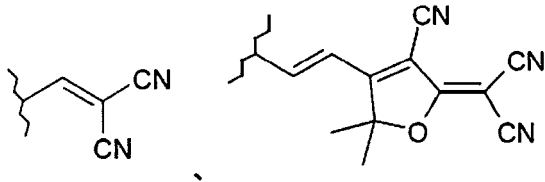
【請求項5】

前記基Aが、電子共役鎖を含む、請求項4に記載の化合物。

【請求項6】

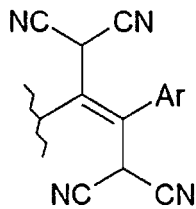
前記基Aが、

【化6】



または

【化7】



である、請求項4に記載の化合物。

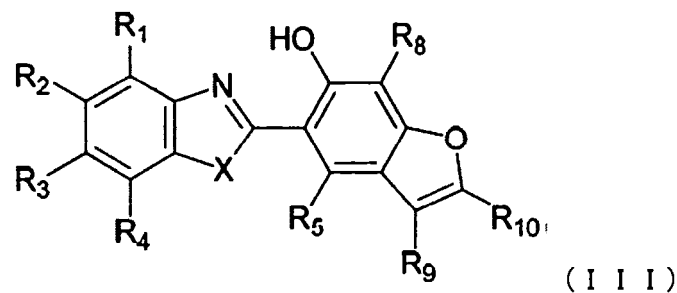
【請求項7】

$\text{R}_5$ 及び $\text{R}_6$ が、これらを担持する炭素原子と共に、5個の原子を含む少なくとも部分的に不飽和の環を形成し、前記環が、 $\text{N}$ 、 $\text{O}$ 、及び $\text{S}$ からなる群から選択される少なくとも1個のヘテロ原子を含み、前記環が、少なくとも1個の電子供与基Dによって任意に置換された、請求項2～6のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項8】

以下の式(III)を有し、

【化8】



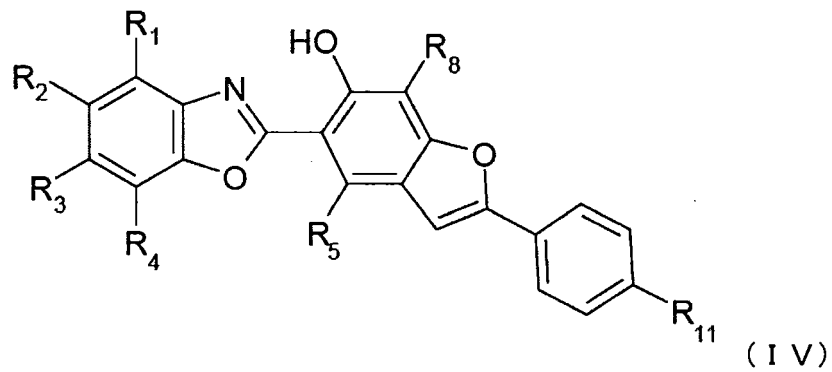
式中、

-  $\text{R}_9$ 及び $\text{R}_{10}$ が、互いに独立して、 $\text{H}$ または電子供与基Dを表し、

-  $\text{R}_1$ 、 $\text{R}_2$ 、 $\text{R}_3$ 、 $\text{R}_4$ 、 $\text{R}_5$ 、 $\text{R}_8$ 、 $\text{X}$ 、及びDが、請求項1～4のいずれか一項で定義された通りである、請求項1～7のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項9】

以下の式 (I V) を有し、  
【化 9】

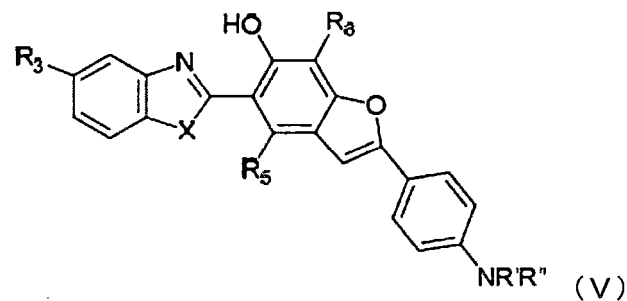


式中、

- $R_{11}$  が、H または電子供与基 D を表し、
- $R_1$ 、 $R_2$ 、 $R_3$ 、 $R_4$ 、 $R_5$ 、 $R_8$ 、X、A、及び D が、請求項 8 で定義された通りである、請求項 8 に記載の化合物。

【請求項 10】

以下の式 (V) を有し、  
【化 10】



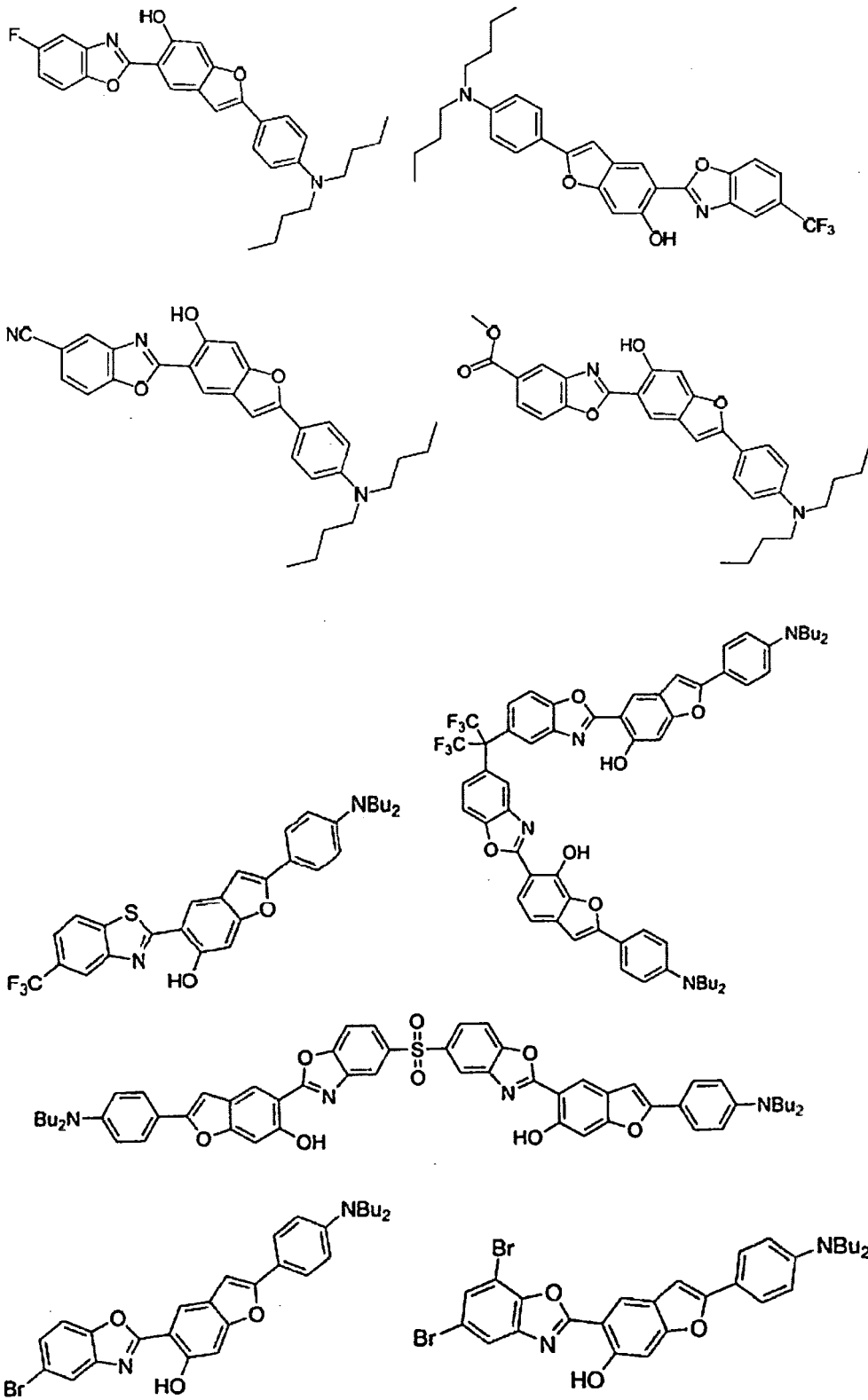
式中、

- $R'$  及び  $R''$  が、互いに独立して、H であるか、またはアルキル基を表し、
- $R_3$ 、 $R_5$ 、 $R_8$ 、及び X が、請求項 2 ~ 9 のいずれか一項で定義された通りである、請求項 9 に記載の化合物。

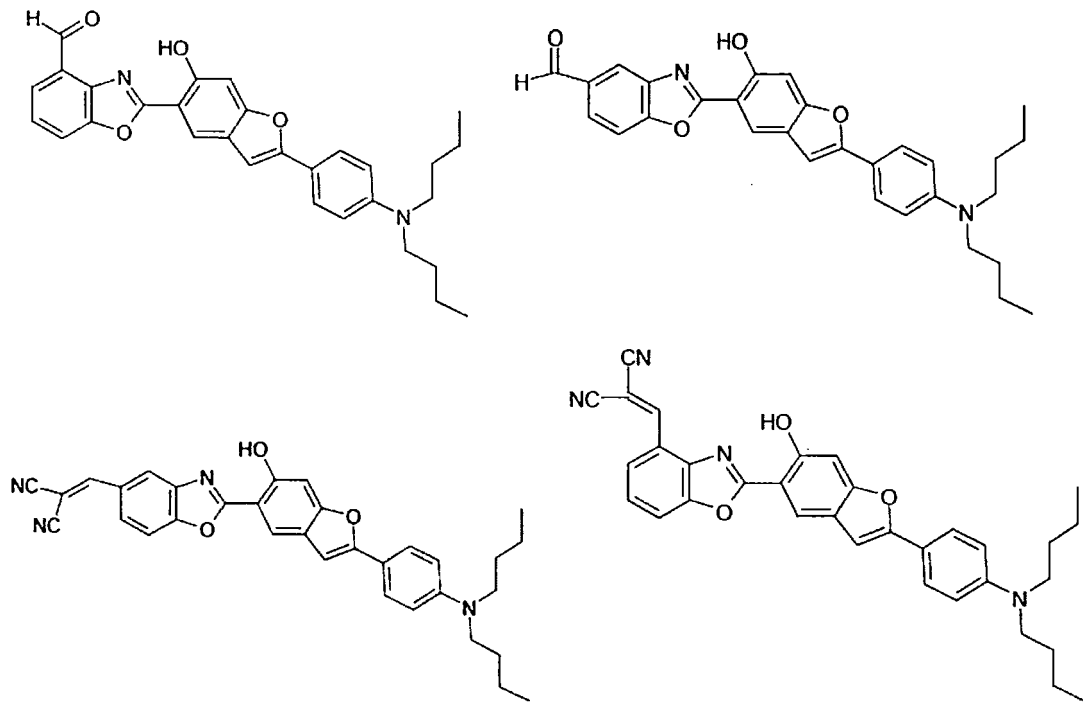
【請求項 11】

下記からなる群から選択される、請求項 1 ~ 10 のいずれか一項に記載の化合物。

【化 1 1】



## 【化 1 2】



## 【請求項 1 2】

請求項 1 ~ 1 1 のいずれか一項に記載の少なくとも 1 つの化合物を含むまたはこれらからなる固体材料 (S)。

## 【請求項 1 3】

請求項 1 ~ 1 1 のいずれか一項に記載の 1 つ以上の化合物と、少なくとも 1 つのポリマー及び/もしくはポリマー材料ならびに/または有機マトリックスとを含み、前記有機マトリックスが、任意に無機材料を含む材料 (M)。

## 【請求項 1 4】

請求項 1 ~ 1 1 のいずれか一項に記載の少なくとも 1 つの化合物、または請求項 1 2 に記載の固体材料 (S) もしくは請求項 1 3 に記載の材料 (M) を含む、発光デバイス。

## 【請求項 1 5】

請求項 1 ~ 1 1 のいずれか一項に記載の少なくとも 1 つの化合物、または請求項 1 2 に記載の固体材料 (S) もしくは請求項 1 3 に記載の材料 (M) を含む、レシオメトリック分析のためのデバイス。

## 【請求項 1 6】

白色光を発光するための、請求項 1 ~ 1 1 のいずれか一項に記載の化合物、または請求項 1 2 に記載の固体材料 (S) もしくは請求項 1 3 に記載の材料 (M)。

## 【請求項 1 7】

蛍光プローブとしての、請求項 1 ~ 1 1 のいずれか一項に記載の化合物、または請求項 1 2 に記載の固体材料 (S) もしくは請求項 1 3 に記載の材料 (M)。