

【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7部門第2区分

【発行日】令和5年7月3日(2023.7.3)

【国際公開番号】WO2021/132667

【出願番号】特願2021-567727(P2021-567727)

【国際特許分類】

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

C 0 9 K 1 1 / 0 6 (2 0 0 6 . 0 1)

C 0 7 D 3 0 7 / 7 7 (2 0 0 6 . 0 1)

10

【 F I 】

H 0 5 B 3 3 / 1 4 B

C 0 9 K 1 1 / 0 6 6 5 0

C 0 9 K 1 1 / 0 6 6 3 0

C 0 7 D 3 0 7 / 7 7 C S P

【手続補正書】

【提出日】令和5年6月23日(2023.6.23)

【手続補正1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

20

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

【補正の内容】

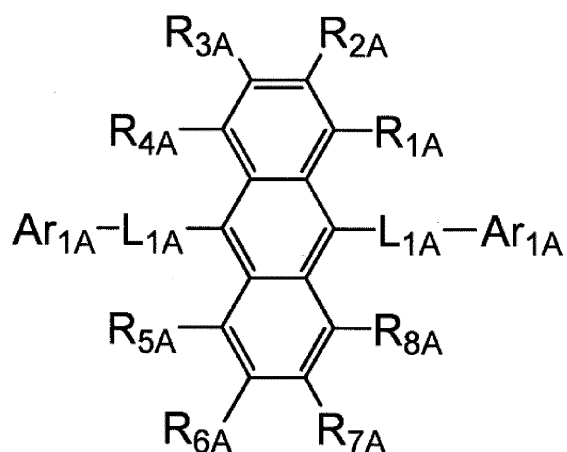
【特許請求の範囲】

【請求項1】

下記式(1)で表される化合物と、下記式(2)で表される化合物と、を含み、下記式(1)で表される化合物と、下記式(2)で表される化合物が異なる化合物である、組成物。

【化1】

30



40

(1)

[式(1)中、

R_{1A} ~ R_{8A}は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換基R、又は
下記式(1A)で表される基である。

50

前記置換基 R は、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、

- Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃)、

- O - (R₉₀₄)、

- S - (R₉₀₅)、

- N (R₉₀₆) (R₉₀₇)、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の 1 価の複素環基である。

10

前記置換基 R が 2 個以上存在する場合、2 個以上の前記置換基 R は同一でもよく、異なってもよい。

L_{1A} は、それぞれ独立に、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーレン基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の 2 価の複素環基である。

Ar_{1A} は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の 1 価の複素環基である。

20

R₉₀₁ ~ R₉₀₇ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の 1 価の複素環基である。

R₉₀₁ ~ R₉₀₇ が 2 個以上存在する場合、2 個以上の R₉₀₁ ~ R₉₀₇ のそれぞれは同一でもよく、異なってもよい。

- L_{1A} - Ar_{1A} (1A)

30

(式 (1A) 中、

L_{1A} 及び Ar_{1A} は、前記式 (1) で定義した通りである。)

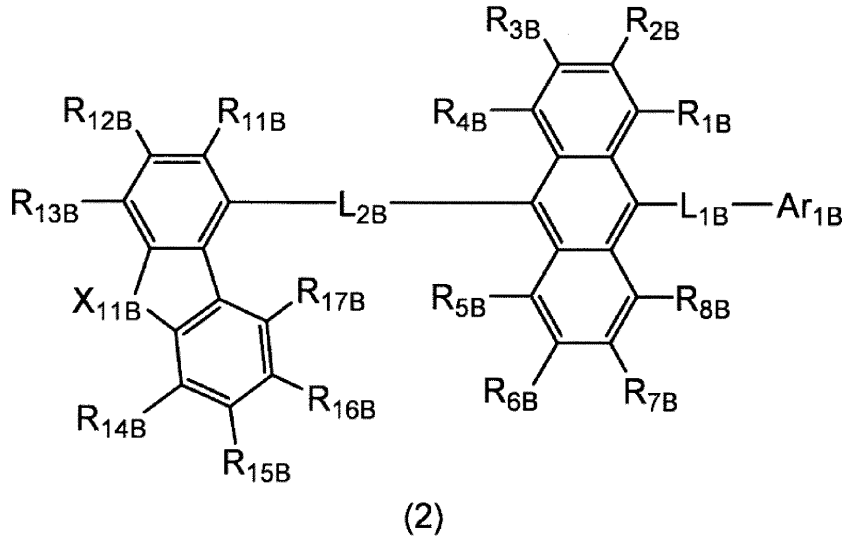
前記式 (1A) で表される基が 2 以上存在する場合、2 以上の前記式 (1A) で表される基のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。

前記式 (1) で表される化合物が有する水素原子のうち 1 以上は重水素原子である。]

40

50

【化 2】



10

(式(2)中、

X_{11B} は、酸素原子又は硫黄原子である。

$R_{14B} \sim R_{17B}$ のうちの隣接する 2 つ以上の 1 組以上は、互いに結合して、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成する。

20

$R_{11B} \sim R_{13B}$ のうち隣接する 2 つ以上の 1 組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない $R_{11B} \sim R_{17B}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、

30

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、

- Si (R_{901}) (R_{902}) (R_{903})、

- O - (R_{904})、

- S - (R_{905})、

- N (R_{906}) (R_{907})、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の 1 価の複素環基である。

$R_{1B} \sim R_{8B}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

40

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、

- Si (R_{901}) (R_{902}) (R_{903})、

- O - (R_{904})、

- S - (R_{905})、

- N (R_{906}) (R_{907})、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は

50

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の 1 価の複素環基である。

L_{1B} 及び L_{2B} は、それぞれ独立に、
単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーレン基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の 2 価の複素環基である。

A_{r1B} は、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の 1 価の複素環基である。

$R_{901} \sim R_{907}$ は、前記式 (1) で定義した通りである。)

【請求項 2】

前記式 (1) において、2 以上の L_{1A} が、それぞれ独立に、単結合又は無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーレン基であり、

2 以上の A_{r1A} が、それぞれ独立に、無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基である、請求項 1 に記載の組成物。

【請求項 3】

前記式 (1) において、 $R_{1A} \sim R_{8A}$ のうちの 1 以上が、それぞれ独立に、重水素原子である、請求項 1 又は 2 に記載の組成物。

【請求項 4】

前記式 (1) において、 $R_{1A} \sim R_{8A}$ が、重水素原子である、請求項 1 ~ 3 のいずれかに記載の組成物。

【請求項 5】

前記式 (2) で表される化合物が、下記式 (2-11)、式 (2-12) 又は式 (2-13) で表される化合物である、請求項 1 ~ 4 のいずれかに記載の組成物。

10

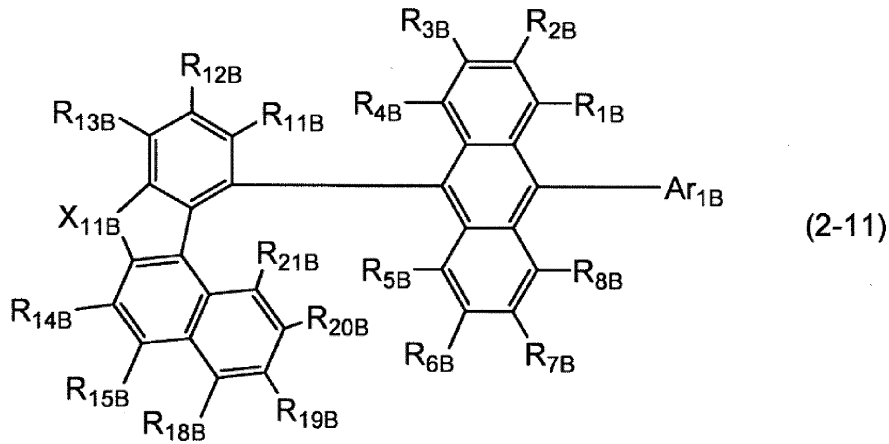
20

30

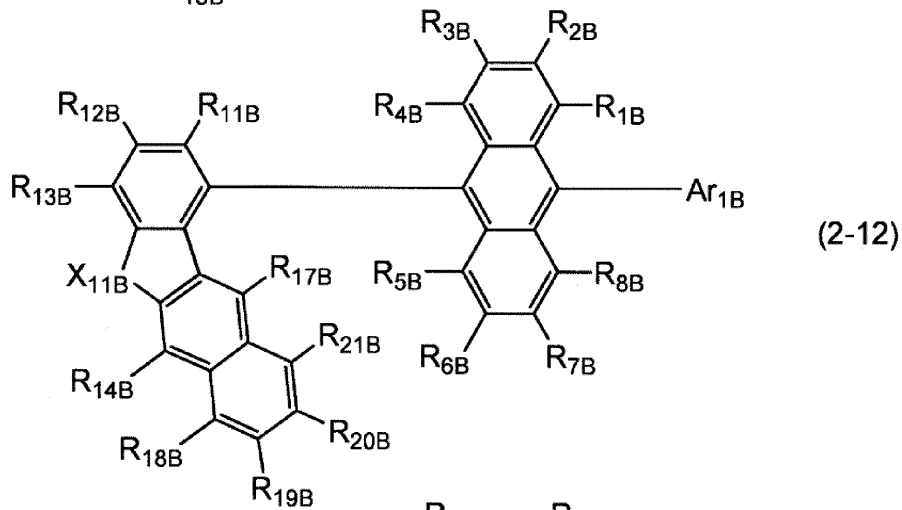
40

50

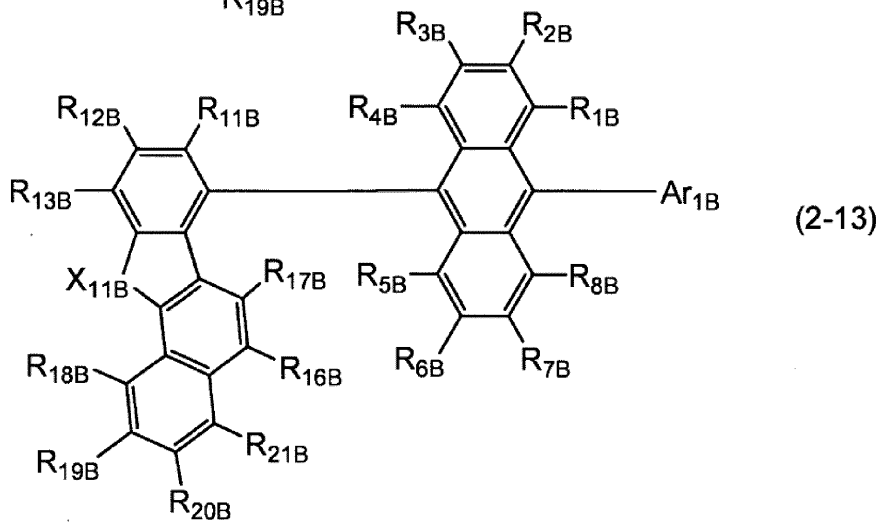
【化 3】



10



20



30

40

(式(2-11)、(2-12)及び(2-13)中、

$R_{1B} \sim R_{8B}$ 、 $R_{11B} \sim R_{13B}$ 、 X_{11B} 及び Ar_{1B} は、前記式(2)で定義した通りである。

$R_{14B} \sim R_{21B}$ は、それぞれ独立に、
水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3~50のシクロアルキル基、

-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})、

50

- O - (R 9 0 4)、
- S - (R 9 0 5)、
- N (R 9 0 6) (R 9 0 7)、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0 の 1 価の複素環基である。

(R 9 0 1 ~ R 9 0 7 は、前記式 (1) で定義した通りである。)

【請求項 6】

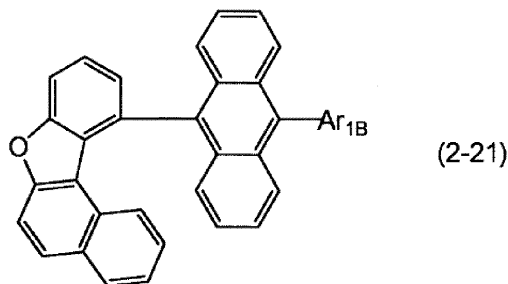
前記式 (2) において、X_{11B} が酸素原子である、請求項 1 ~ 5 のいずれかに記載の組成物。

10

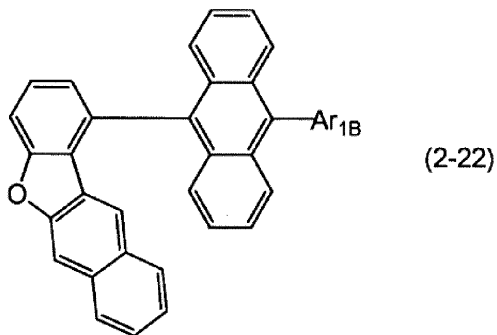
【請求項 7】

前記式 (2) で表される化合物が、下記式 (2 - 2 1)、式 (2 - 2 2) 又は式 (2 - 2 3) で表される化合物である、請求項 1 ~ 6 のいずれかに記載の組成物。

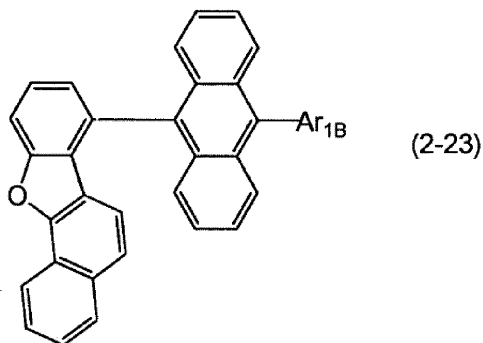
【化 4】



20



30



40

(式 (2 - 2 1)、(2 - 2 2) 及び (2 - 2 3) 中、A r_{1B} は、前記式 (2) で定義した通りである。)

【請求項 8】

前記式 (2) において、A r_{1B} が、無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 のアリール基であって、該アリール基が、1 以上の重水素原子を有する、請求項 1 ~ 7 のいずれかに記載の組成物。

【請求項 9】

前記式 (2) において、A r_{1B} が、- C₆D₅ 基を有する、請求項 1 ~ 7 のいずれか

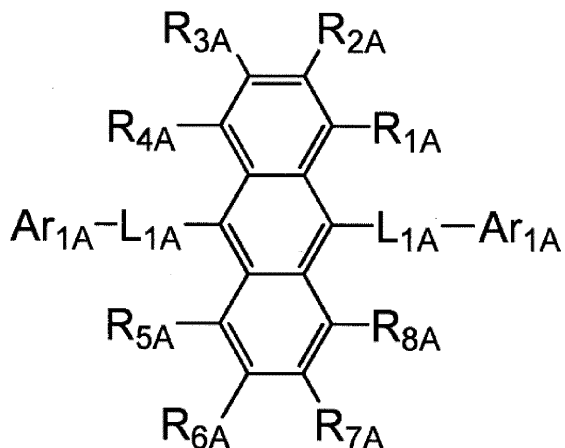
50

に記載の組成物。

【請求項 10】

下記式(1)で表される化合物と、下記式(2)で表される化合物と、を含み、下記式(1)で表される化合物と、下記式(2)で表される化合物が異なる化合物である、組成物。

【化 5】



10

(1)

20

[式(1)中、

$R_{1A} \sim R_{8A}$ は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換基R、又は
下記式(1A)で表される基である。

前記置換基Rは、
置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、
-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})、
-O-(R_{904})、
-S-(R_{905})、
-N(R_{906})(R_{907})、

30

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

前記置換基Rが2個以上存在する場合、2個以上の前記置換基Rは同一でもよく、異な
っていてもよい。

40

L_{1A} は、それぞれ独立に、
単結合、
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリーレン基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の2価の複素環基である。

Ar_{1A} は、それぞれ独立に、
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の1価の複素環基である。

$R_{901} \sim R_{907}$ は、それぞれ独立に、
水素原子、

50

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の 1 価の複素環基である。

R 9 0 1 ~ R 9 0 7 が 2 個以上存在する場合、2 個以上の R 9 0 1 ~ R 9 0 7 のそれぞれは同一でもよく、異なってもよい。

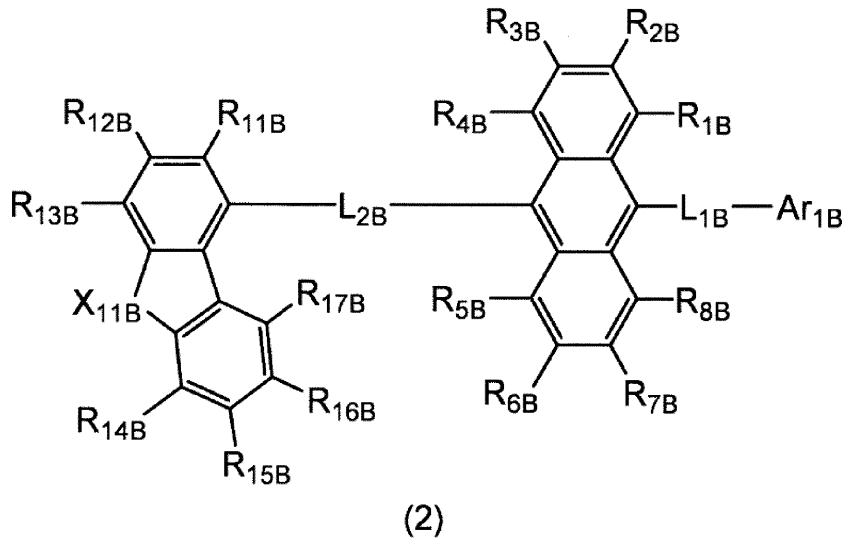
- L 1 A - A r 1 A (1 A)

(式 (1 A) 中、

L 1 A 及び A r 1 A は、前記式 (1) で定義した通りである。)

前記式 (1 A) で表される基が 2 以上存在する場合、2 以上の前記式 (1 A) で表される基のそれぞれは、同じであってもよいし、異なってもよい。] 10

【化 6】



(式 (2) 中、

X 1 1 B は、酸素原子又は硫黄原子である。 30

R 1 4 B ~ R 1 7 B のうちの隣接する 2 つ以上の 1 組以上は、互いに結合して、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成する。

R 1 1 B ~ R 1 3 B のうち隣接する 2 つ以上の 1 組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成するか、あるいは置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない。

前記置換もしくは無置換の飽和又は不飽和の環を形成しない R 1 1 B ~ R 1 7 B は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、 40

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、

- S i (R 9 0 1) (R 9 0 2) (R 9 0 3) 、

- O - (R 9 0 4) 、

- S - (R 9 0 5) 、

- N (R 9 0 6) (R 9 0 7) 、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の 1 価の複素環基である。

R 1 B ~ R 8 B は、それぞれ独立に、 50

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、

- Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃)、

- O - (R₉₀₄)、

- S - (R₉₀₅)、

- N (R₉₀₆) (R₉₀₇)、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の 1 価の複素環基である。

L_{1B} 及び L_{2B} は、それぞれ独立に、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーレン基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の 2 価の複素環基である。

A_{r1B} は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の 1 価の複素環基である。

R₉₀₁ ~ R₉₀₇ は、前記式 (1) で定義した通りである。

前記式 (2) で表される化合物が有する水素原子のうち 1 以上は重水素原子である。))

【請求項 1 1】

前記式 (1) において、2 以上の L_{1A} が、それぞれ独立に、単結合又は無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーレン基であり、

2 以上の A_{r1A} が、それぞれ独立に、無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基である、請求項 1 0 に記載の組成物。

【請求項 1 2】

前記式 (1) において、R_{1A} ~ R_{8A} のうちの 1 以上が、それぞれ独立に、重水素原子である、請求項 1 0 又は 1 1 に記載の組成物。

【請求項 1 3】

前記式 (1) において、R_{1A} ~ R_{8A} が、重水素原子である、請求項 1 0 ~ 1 2 のいずれかに記載の組成物。

【請求項 1 4】

前記式 (2) で表される化合物が、下記式 (2 - 1 1)、式 (2 - 1 2) 又は式 (2 - 1 3) で表される化合物である、請求項 1 0 ~ 1 3 のいずれかに記載の組成物。

10

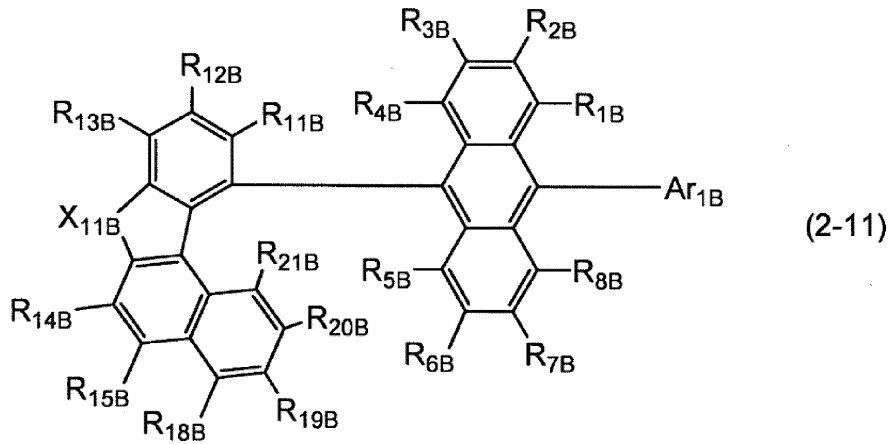
20

30

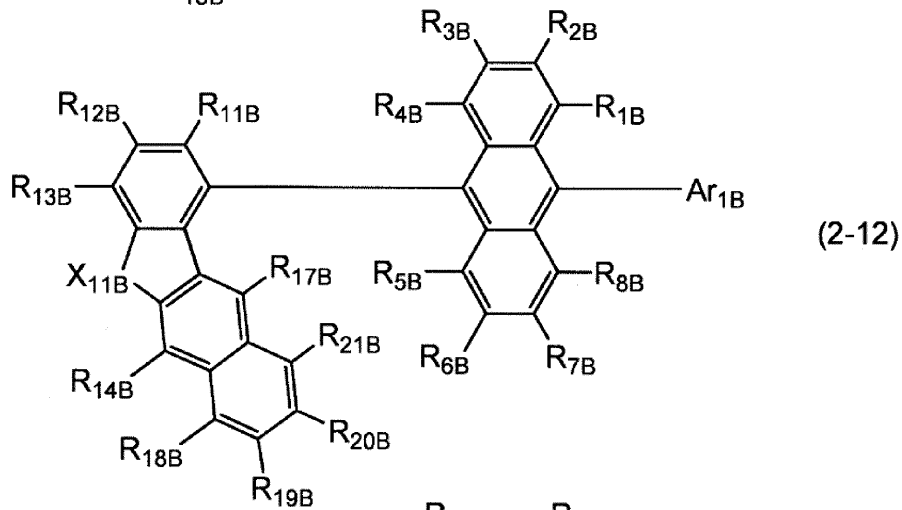
40

50

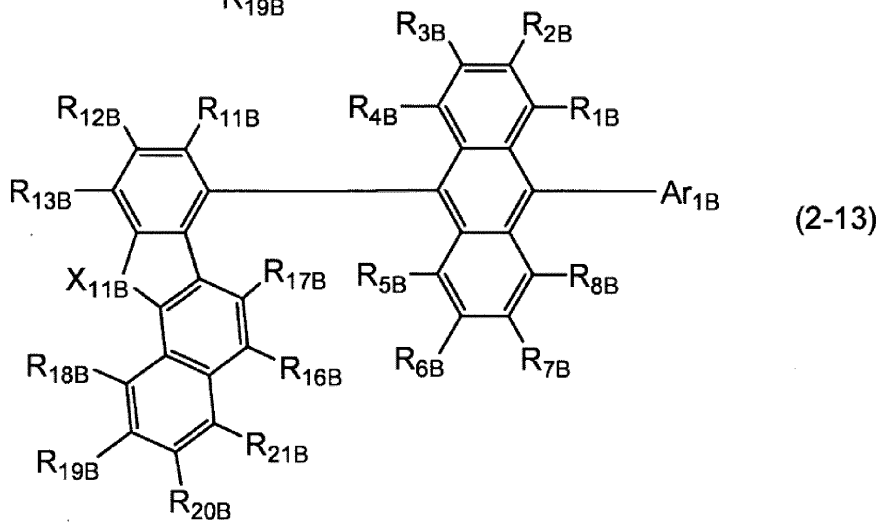
【化 7】



10



20



30

40

(式(2-11)、(2-12)及び(2-13)中、

$R_{1B} \sim R_{8B}$ 、 $R_{11B} \sim R_{13B}$ 、 X_{11B} 及び Ar_{1B} は、前記式(2)で定義した通りである。

$R_{14B} \sim R_{21B}$ は、それぞれ独立に、
水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2~50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3~50のシクロアルキル基、

-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})、

50

- O - (R 9 0 4)、
- S - (R 9 0 5)、
- N (R 9 0 6) (R 9 0 7)、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0 の 1 価の複素環基である。

(R 9 0 1 ~ R 9 0 7 は、前記式 (1) で定義した通りである。)

【請求項 1 5】

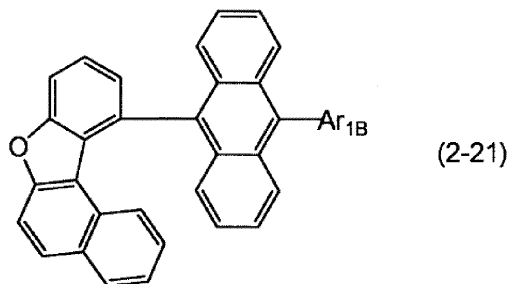
前記式 (2) において、X_{11B} が酸素原子である、請求項 1 0 ~ 1 4 のいずれかに記載の組成物。

10

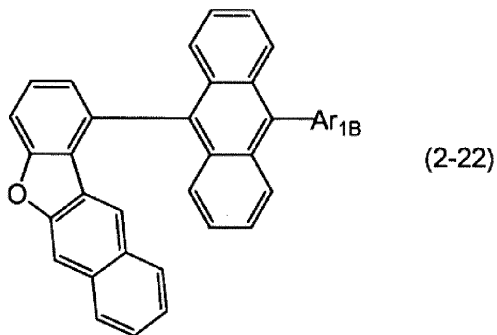
【請求項 1 6】

前記式 (2) で表される化合物が、下記式 (2 - 2 1)、式 (2 - 2 2) 又は式 (2 - 2 3) で表される化合物である、請求項 1 0 ~ 1 5 のいずれかに記載の組成物。

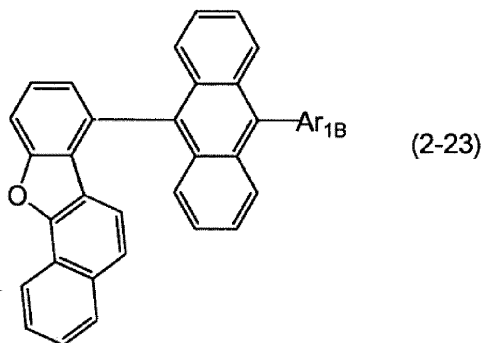
【化 8】



20



30



40

(式 (2 - 2 1)、(2 - 2 2) 及び (2 - 2 3) 中、A r_{1B} は、前記式 (2) で定義した通りである。)

【請求項 1 7】

前記式 (2) において、A r_{1B} が、無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 のアリール基であって、該アリール基が、1 以上の重水素原子を有する、請求項 1 0 ~ 1 6 のいずれかに記載の組成物。

【請求項 1 8】

前記式 (2) において、A r_{1B} が、- C₆D₅ 基を有する、請求項 1 0 ~ 1 6 のい

50

れかに記載の組成物。

【請求項 19】

陰極と、

陽極と、

前記陰極と前記陽極との間に配置された少なくとも1つの発光層と、

を有し、

前記発光層は請求項 1 ~ 18 のいずれかに記載の組成物を含む

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 20】

請求項 19 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を備える電子機器。

10

【請求項 21】

請求項 1 ~ 18 のいずれかに記載の組成物からなる粉体。

20

30

40

50