

【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 7 月 3 日(2025.7.3)

【公開番号】特開 2024-175023(P2024-175023A)

【公開日】令和 6 年 12 月 17 日(2024.12.17)

【年通号数】公開公報(特許)2024-236

【出願番号】特願 2024-158882(P2024-158882)

【国際特許分類】

C 0 7 F 5/02(2006.01)

10

C 0 9 K 11/06(2006.01)

C 0 9 D 11/00(2014.01)

H 1 0 K 59/10(2023.01)

H 1 0 K 85/10(2023.01)

H 1 0 K 85/30(2023.01)

H 1 0 K 71/12(2023.01)

H 1 0 K 50/12(2023.01)

H 1 0 K 85/60(2023.01)

H 1 0 K 50/17(2023.01)

H 1 0 K 50/16(2023.01)

20

H 1 0 K 50/165(2023.01)

H 1 0 K 50/15(2023.01)

【F I】

C 0 7 F 5/02 A

C 0 9 K 11/06 6 6 0

C 0 9 K 11/06 6 9 0

C 0 9 D 11/00

H 1 0 K 59/10

H 1 0 K 85/10

H 1 0 K 85/30

30

H 1 0 K 71/12

H 1 0 K 50/12

H 1 0 K 85/60

H 1 0 K 50/17 1 7 1

H 1 0 K 50/16

H 1 0 K 50/165

H 1 0 K 50/15

H 1 0 K 50/17

【手続補正書】

40

【提出日】令和 7 年 6 月 23 日(2025.6.23)

【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】

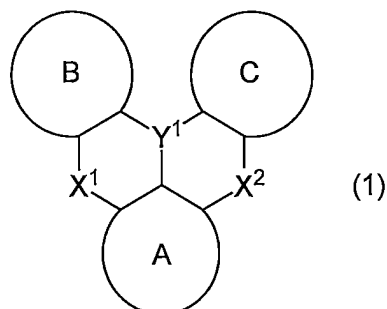
【請求項 1】

下記一般式(1)で表される多環芳香族化合物、または下記一般式(1)で表される単位構造を複数有する多環芳香族化合物の多量体であって、前記多量体は、単位構造が単結

50

合、炭素数 1 ~ 3 のアルキレン基、フェニレン基またはナフチレン基で複数結合した連結型多量体、前記単位構造に含まれる A 環、B 環または C 環を複数の単位構造で共有するようにして結合した環共有型多量体、または、前記単位構造に含まれる A 環、B 環または C 環同士が縮合するようにして結合した環縮合型多量体である、多環芳香族化合物またはその多量体。

【化 1】



10

上記式 (1) 中、

A 環、B 環および C 環は、それぞれ独立して、アリール環またはヘテロアリール環であり、これらの環における少なくとも 1 つの水素は、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、ジアリールボリル、アルキル、シクロアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、トリアリールシリル、トリアルキルシリル、トリシクロアルキルシリル、ジアルキルシクロアルキルシリルまたはアルキルジシクロアルキルシリルで置換されていてもよく、これらの置換基における少なくとも 1 つの水素は、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルで置換されていてもよく、

20

Y^1 は、B、P、 $P=O$ 、または $P=S$ であり、

X^1 および X^2 は、それぞれ独立して、 $>O$ 、 $>N-R$ 、 $>C(-R)_2$ 、 $>S$ または $>Se$ であり、前記 $>N-R$ の R は、アルキル、シクロアルキル、アリールもしくはヘテロアリールの第 2 の基で置換されていてもよい、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルの第 1 の基であり、前記 $>C(-R)_2$ の R は、水素、アルキル、シクロアルキル、アリールもしくはヘテロアリールの第 2 の基で置換されていてもよい、アリール、アルキルまたはシクロアルキルの第 1 の基であり、また、前記 $>N-R$ の R および前記 $>C(-R)_2$ の R の少なくとも 1 つは、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(-R)_2$ - または単結合により、前記 A 環、B 環および C 環の少なくとも 1 つと結合していてもよく、前記 $-C(-R)_2$ - の R は、水素、アルキルまたはシクロアルキルであり、

30

式 (1) で表される化合物または単位構造における少なくとも 1 つの水素は、重水素、シアノまたはハロゲンで置換されていてもよく、そして、

式 (1) で表される化合物または単位構造における、A 環、B 環、C 環、アリールおよびヘテロアリールの少なくとも 1 つは、少なくとも 1 つのシクロアルカンで縮合されており、当該シクロアルカンの 2 つの α 位の炭素における合計 4 つの水素は、それぞれ独立して、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルで置換されており、当該シクロアルカンにおける少なくとも 1 つの $-CH_2-$ は $-O-$ で置換されていてもよく、ただし、下記 (a) または (b) は必須である。

40

(a) 前記 $>N-R$ の R における第 2 の基であるアリールまたはヘテロアリールによる置換。

(b) 前記 $>C(-R)_2$ の R における第 2 の基であるアリールまたはヘテロアリールによる置換。

【請求項 2】

多量体の場合には、一般式 (1) で表される単位構造を 2 個または 3 個有する 2 量体または 3 量体である、

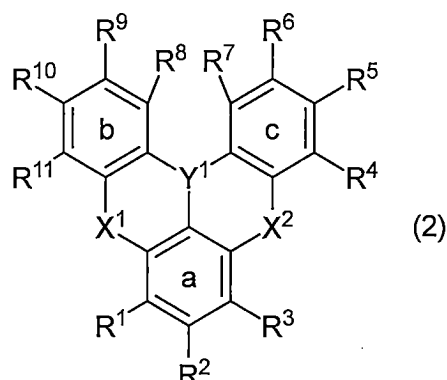
50

請求項 1 に記載する多環芳香族化合物またはその多量体。

【請求項 3】

下記一般式 (2) で表される、請求項 1 に記載する多環芳香族化合物またはその多量体。

【化 2】



10

上記式 (2) 中、

a 環、b 環、および c 環における、任意の「-C(-R)=」(ここで R は式 (2) 中の R¹ ~ R¹¹ である) は「-N=」に置き換わっていてもよく、任意の「-C(-R)=C(-R)-」(ここで R は式 (2) 中の R¹ ~ R¹¹ である) は、「-N(-R)-」、「-O-」、または「-S-」に置き換わっていてもよく、前記「-N(-R)-」の R は、アリール、アルキル、またはシクロアルキルであり、

20

R¹ ~ R¹¹ は、それぞれ独立して、水素、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、ジアリールボリル、アルキル、シクロアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、トリアリールシリル、トリアルキルシリル、トリシクロアルキルシリル、ジアルキルシクロアルキルシリルまたはアルキルジシクロアルキルシリルであり、これらにおける少なくとも 1 つの水素は、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルで置換されていてもよく、また、R¹ ~ R¹¹ のうちの隣接する基同士が結合して a 環、b 環または c 環と共にアリール環またはヘテロアリール環を形成していてもよく、形成された環における少なくとも 1 つの水素は、アリール、ヘテロアリール、ジアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、アリールヘテロアリールアミノ、ジアリールボリル、アルキル、シクロアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、トリアリールシリル、トリアルキルシリル、トリシクロアルキルシリル、ジアルキルシクロアルキルシリルまたはアルキルジシクロアルキルシリルで置換されていてもよく、これらにおける少なくとも 1 つの水素は、アリール、ヘテロアリール、アルキルまたはシクロアルキルで置換されていてもよく、

30

Y¹ は、B、P、P=O、または P=S であり、

X¹ および X² は、それぞれ独立して、>O、>N-R、>C(-R)₂、>S または >Se であり、前記 >N-R の R は、炭素数 6 ~ 12 のアリールもしくは炭素数 2 ~ 15 のヘテロアリールの第 2 の基で置換されていてもよい、炭素数 6 ~ 12 のアリール、炭素数 2 ~ 15 のヘテロアリール、炭素数 1 ~ 6 のアルキルまたは炭素数 3 ~ 14 のシクロアルキルの第 1 の基であり、前記 >C(-R)₂ の R は、水素、炭素数 6 ~ 12 のアリールもしくは炭素数 2 ~ 15 のヘテロアリールの第 2 の基で置換されていてもよい、炭素数 6 ~ 12 のアリール、炭素数 1 ~ 6 のアルキルまたは炭素数 3 ~ 14 のシクロアルキルの第 1 の基であり、また、前記 >N-R の R および前記 >C(-R)₂ の R の少なくとも 1 つは、-O-、-S-、-C(-R)₂- または単結合により、前記 a 環、b 環および c 環の少なくとも 1 つと結合していてもよく、前記 -C(-R)₂- の R は炭素数 1 ~ 6 のアルキルまたは炭素数 3 ~ 14 のシクロアルキルであり、

40

式 (2) で表される化合物における少なくとも 1 つの水素は、重水素、シアノまたはハロゲンで置換されていてもよく、

50

多量体の場合には、一般式(2)で表される単位構造を2個または3個有する2量体または3量体であり、そして、

式(2)で表される化合物における、前記a環、前記b環、前記c環、前記形成された環、前記アリーールおよび前記ヘテロアリーールの少なくとも1つは、炭素数3~24の、少なくとも1つのシクロアルカンで縮合されており、当該シクロアルカンの2つのα位の炭素における合計4つの水素は、それぞれ独立して、炭素数6~30のアリーール、炭素数2~30のヘテロアリーール、炭素数1~24のアルキルまたは炭素数3~24のシクロアルキルで置換されており、当該シクロアルカンにおける少なくとも1つの-CH₂-は-O-で置換されていてもよく、

ただし、下記(a)または(b)は必須である。

(a) 前記>N-RのRにおける第2の基による置換。

(b) 前記>C(-R)₂のRにおける第2の基による置換。

10

【請求項4】

上記式(2)中、

a環、b環、およびc環における、任意の「-C(-R)=」(ここでRは式(2)中のR¹~R¹¹である)は「-N=」に置き換わっていてもよく、任意の「-C(-R)=C(-R)-」(ここでRは式(2)中のR¹~R¹¹である)は、「-N(-R)-」、「-O-」、または「-S-」に置き換わっていてもよく、前記「-N(-R)-」のRは、炭素数6~12のアリーール、炭素数1~6のアルキル、または炭素数3~14のシクロアルキルであり、

20

R¹~R¹¹は、それぞれ独立して、水素、炭素数6~30のアリーール、炭素数2~30のヘテロアリーール、ジアリーールアミノ(ただしアリーールは炭素数6~12のアリーール)、ジアリーールボリル(ただしアリーールは炭素数6~12のアリーール)、炭素数1~24のアルキル、炭素数3~24のシクロアルキル、トリアリーールシリル(ただしアリーールは炭素数6~12のアリーール)、またはトリアルキルシリル(ただしアルキルは炭素数1~6のアルキル)であり、また、R¹~R¹¹のうちの隣接する基同士が結合してa環、b環またはc環と共に炭素数9~16のアリーール環または炭素数6~15のヘテロアリーール環を形成していてもよく、形成された環における少なくとも1つの水素は、炭素数6~10のアリーール、炭素数1~12のアルキル、炭素数3~16のシクロアルキル、トリアリーールシリル(ただしアリーールは炭素数6~12のアリーール)、またはトリアルキルシリル(ただしアルキルは炭素数1~5のアルキル)で置換されていてもよく、

30

Y¹は、B、P、P=O、またはP=Sであり、

X¹およびX²は、それぞれ独立して、>O、>N-R、>C(-R)₂または>Sであり、前記>N-RのRは、炭素数6~10のアリーールの第2の基で置換されていてもよい、炭素数6~10のアリーール、炭素数1~5のアルキルまたは炭素数5~10のシクロアルキルの第1の基であり、前記>C(-R)₂のRは、水素、炭素数6~10のアリーールの第2の基で置換されていてもよい、炭素数6~10のアリーール、炭素数1~5のアルキルまたは炭素数5~10のシクロアルキルの第1の基であり、

式(2)で表される化合物における少なくとも1つの水素は、重水素、シアノまたはハロゲンで置換されていてもよく、

40

多量体の場合には、一般式(2)で表される単位構造を2個または3個有する2量体または3量体であり、そして、

式(2)で表される化合物における、前記a環、前記b環、前記c環、前記形成された環、前記アリーールおよび前記ヘテロアリーールの少なくとも1つは、炭素数3~20の、少なくとも1つのシクロアルカンで縮合されており、当該シクロアルカンの2つのα位の炭素における合計4つの水素は、それぞれ独立して、炭素数6~16のアリーール、炭素数2~22のヘテロアリーール、炭素数1~12のアルキルまたは炭素数3~16のシクロアルキルで置換されており、

ただし、下記(a)または(b)は必須である、

(a) 前記>N-RのRにおける第2の基による置換；

50

(b) 前記 $>C(-R)_2$ の R における第 2 の基による置換；

請求項 3 に記載する多環芳香族化合物またはその多量体。

【請求項 5】

上記式 (2) 中、

a 環、b 環、および c 環における、任意の「 $-C(-R)=C(-R)-$ 」(ここで R は式 (2) 中の $R^1 \sim R^{11}$ である) は「 $-S-$ 」に置き換わっていてもよく、

$R^1 \sim R^{11}$ は、それぞれ独立して、水素、炭素数 6 ~ 16 のアリール、炭素数 2 ~ 20 のヘテロアリール、ジアリールアミノ (ただしアリールは炭素数 6 ~ 10 のアリール)、炭素数 1 ~ 12 のアルキルまたは炭素数 3 ~ 16 のシクロアルキルであり、

Y^1 は、B、P、 $P=O$ または $P=S$ であり、

X^1 および X^2 は、それぞれ独立して、 $>O$ 、 $>N-R$ または $>C(-R)_2$ であり、前記 $>N-R$ の R は、炭素数 6 ~ 10 のアリールの第 2 の基で置換されていてもよい、炭素数 6 ~ 10 のアリール、炭素数 1 ~ 5 のアルキルまたは炭素数 5 ~ 10 のシクロアルキルの第 1 の基であり、前記 $>C(-R)_2$ の R は、水素、炭素数 6 ~ 10 のアリールの第 2 の基で置換されていてもよい、炭素数 6 ~ 10 のアリール、炭素数 1 ~ 5 のアルキルまたは炭素数 5 ~ 10 のシクロアルキルの第 1 の基であり、

式 (2) で表される化合物における少なくとも 1 つの水素は、重水素、シアノまたはハロゲンで置換されていてもよく、

多量体の場合には、一般式 (2) で表される単位構造を 2 個または 3 個有する 2 量体または 3 量体であり、そして、

式 (2) で表される化合物における、前記 a 環、前記 b 環、前記 c 環、および、前記 $>N-R$ の R としての炭素数 6 ~ 10 のアリールの少なくとも 1 つは、炭素数 3 ~ 16 の、少なくとも 1 つのシクロアルカンで縮合されており、当該シクロアルカンの 2 つの α 位の炭素における合計 4 つの水素は、それぞれ独立して、炭素数 1 ~ 6 のアルキルまたは炭素数 3 ~ 14 のシクロアルキルで置換されており、
ただし、下記 (a) または (b) は必須である、

(a) 前記 $>N-R$ の R における第 2 の基による置換；

(b) 前記 $>C(-R)_2$ の R における第 2 の基による置換；

請求項 3 に記載する多環芳香族化合物またはその多量体。

【請求項 6】

$R^1 \sim R^{11}$ は、それぞれ独立して、水素、炭素数 6 ~ 16 のアリール、ジアリールアミノ (ただしアリールは炭素数 6 ~ 10 のアリール)、炭素数 1 ~ 12 のアルキルまたは炭素数 3 ~ 16 のシクロアルキルであり、

Y^1 は B であり、

X^1 および X^2 は共に $>N-R$ であるか、または、 X^1 は $>N-R$ であって X^2 は $>O$ であり、前記 $>N-R$ の R は、炭素数 6 ~ 10 のアリールの第 2 の基で置換されていてもよい、炭素数 6 ~ 10 のアリール、炭素数 1 ~ 5 のアルキルまたは炭素数 5 ~ 10 のシクロアルキルの第 1 の基であり、

式 (2) で表される化合物における少なくとも 1 つの水素は重水素またはハロゲンで置換されていてもよく、

多量体の場合には、一般式 (2) で表される単位構造を 2 個または 3 個有する 2 量体または 3 量体であり、そして、

式 (2) で表される化合物における、前記 a 環、前記 b 環、前記 c 環、および、前記 $>N-R$ の R としての炭素数 6 ~ 10 のアリールの少なくとも 1 つは、炭素数 3 ~ 14 のシクロアルカンで縮合されており、当該シクロアルカンの 2 つの α 位の炭素における合計 4 つの水素は炭素数 1 ~ 5 のアルキルで置換されており、
ただし、下記 (a) は必須である、

(a) 前記 $>N-R$ の R における第 2 の基による置換；

請求項 3 に記載する多環芳香族化合物またはその多量体。

【請求項 7】

10

20

30

40

50

シクロアルカンで縮合されたジアリールアミノ基、シクロアルカンで縮合されたカルバゾリル基またはシクロアルカンで縮合されたベンゾカルバゾリル基で置換されている、請求項 1 ~ 6 のいずれかに記載する多環芳香族化合物またはその多量体。

【請求項 8】

R^2 は、シクロアルカンで縮合されたジアリールアミノ基またはシクロアルカンで縮合されたカルバゾリル基である、請求項 3 ~ 6 のいずれかに記載する多環芳香族化合物またはその多量体。

【請求項 9】

前記シクロアルkanは炭素数 3 ~ 20 のシクロアルカンである、請求項 7 または 8 に記載する多環芳香族化合物またはその多量体。

10

【請求項 10】

前記ハロゲンはフッ素である、請求項 1 ~ 9 のいずれかに記載する多環芳香族化合物またはその多量体。

【請求項 11】

請求項 1 ~ 10 のいずれかに記載する多環芳香族化合物またはその多量体を含有する、有機デバイス用材料。

【請求項 12】

前記有機デバイス用材料が、有機電界発光素子用材料、有機電界効果トランジスタ用材料または有機薄膜太陽電池用材料である、請求項 11 に記載する有機デバイス用材料。

【請求項 13】

前記有機電界発光素子用材料が発光層用材料である、請求項 12 に記載する有機デバイス用材料。

20

【請求項 14】

請求項 1 ~ 10 のいずれかに記載する多環芳香族化合物またはその多量体と、有機溶媒とを含む、インク組成物。

【請求項 15】

陽極および陰極からなる一対の電極と、該一対の電極間に配置され、請求項 1 ~ 10 のいずれかに記載する多環芳香族化合物またはその多量体を含有する有機層とを有する、有機電界発光素子。

【請求項 16】

前記有機層が発光層である、請求項 15 に記載する有機電界発光素子。

30

【請求項 17】

前記発光層が、ホストと、ドーパントとしての前記多環芳香族化合物またはその多量体とを含む、請求項 16 に記載する有機電界発光素子。

【請求項 18】

前記ホストが、アントラセン系化合物、フルオレン系化合物またはジベンゾクリセン系化合物である、請求項 17 に記載する有機電界発光素子。

【請求項 19】

前記陰極と前記発光層との間に配置される電子輸送層および電子注入層の少なくとも 1 つの層を有し、該電子輸送層および電子注入層の少なくとも 1 つは、ボラン誘導体、ピリジン誘導体、フルオランテン誘導体、BO系誘導体、アントラセン誘導体、ベンゾフルオレン誘導体、ホスフィンオキサイド誘導体、ピリミジン誘導体、カルバゾール誘導体、トリアジン誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、フェナントロリン誘導体およびキノリノール系金属錯体からなる群から選択される少なくとも 1 つを含有する、請求項 15 ~ 18 のいずれかに記載する有機電界発光素子。

40

【請求項 20】

前記電子輸送層および電子注入層の少なくとも 1 つの層が、さらに、アルカリ金属、アルカリ土類金属、希土類金属、アルカリ金属の酸化物、アルカリ金属のハロゲン化物、アルカリ土類金属の酸化物、アルカリ土類金属のハロゲン化物、希土類金属の酸化物、希土類金属のハロゲン化物、アルカリ金属の有機錯体、アルカリ土類金属の有機錯体および希

50

土類金属の有機錯体からなる群から選択される少なくとも１つを含有する、請求項 1 9 に記載の有機電界発光素子。

【請求項 2 1】

請求項 1 5 ～ 2 0 のいずれかに記載する有機電界発光素子を備えた表示装置または照明装置。

10

20

30

40

50