

【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 3 年 10 月 21 日 (2021.10.21)

【公開番号】特開 2021-132221 (P2021-132221A)

【公開日】令和 3 年 9 月 9 日 (2021.9.9)

【年通号数】公開・登録公報 2021-042

【出願番号】特願 2021-78789 (P2021-78789)

【国際特許分類】

H 0 1 L 51/50 (2006.01)

H 0 5 B 33/12 (2006.01)

C 0 9 K 11/06 (2006.01)

C 0 7 D 307/91 (2006.01)

C 0 7 D 405/12 (2006.01)

C 0 7 D 405/10 (2006.01)

C 0 7 D 405/14 (2006.01)

C 0 7 D 307/81 (2006.01)

C 0 7 D 307/77 (2006.01)

C 0 7 D 491/048 (2006.01)

C 0 7 D 491/052 (2006.01)

【 F I 】

H 0 5 B 33/14 B

H 0 5 B 33/22 B

H 0 5 B 33/22 D

H 0 5 B 33/12 C

C 0 9 K 11/06 6 9 0

C 0 9 K 11/06 6 3 5

C 0 7 D 307/91

C 0 7 D 405/12

C 0 7 D 405/10

C 0 7 D 405/14

C 0 7 D 307/81

C 0 7 D 307/77

C 0 7 D 491/048

C 0 7 D 491/052

【手続補正書】

【提出日】令和 3 年 5 月 28 日 (2021.5.28)

【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】請求項 1

【補正方法】変更

【補正の内容】

【請求項 1】

第 1 電極と、

前記第 1 電極に対向した第 2 電極と、

前記第 1 電極と前記第 2 電極との間に介在され、第 1 化合物を含む第 1 層と、

前記第 1 層と前記第 2 電極との間に介在され、第 2 化合物を含む第 2 層と、

前記第 2 層と前記第 2 電極との間に介在され、第 3 化合物を含む第 3 層と、を含み、

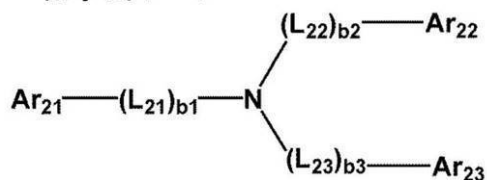
前記第 1 化合物は、* = N - * ' を有する窒素含有ヘテロ環基を環形成部分構造として

含まず、

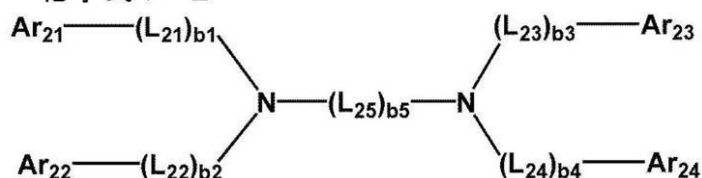
前記第 1 化合物は、化学式 1 - 1 ~ 1 - 3、化学式 2 H - 1、2 D - 1、2 D - 2、式 3 - 1 および 3 - 2 によって表される化合物から選択され、前記第 2 化合物は、化学式 1 - 1 ~ 1 - 3、化学式 2 D - 1 および 2 D - 2 によって表される化合物から選択され、前記第 3 化合物は、化学式 2 H - 1、2 D - 1、2 D - 2、化学式 3 - 1 および 3 - 2 によって表される化合物から選択され、

【化 1】

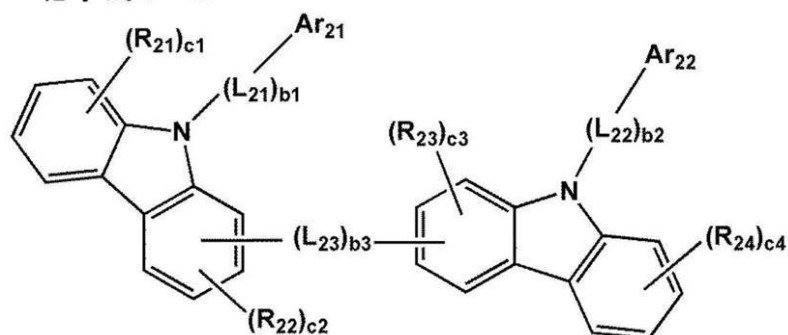
化学式 1 - 1



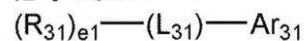
化学式 1 - 2



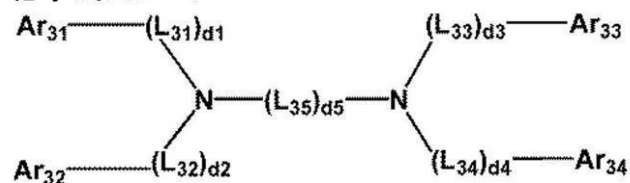
化学式 1 - 3



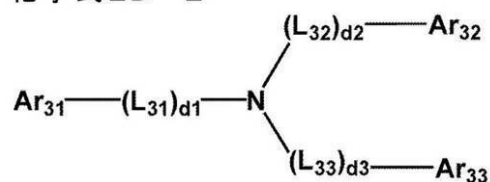
化学式 2 H - 1



化学式 2 D - 1

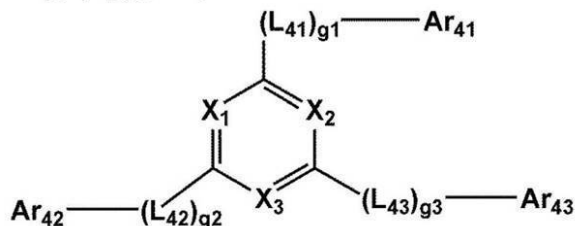


化学式 2 D - 2

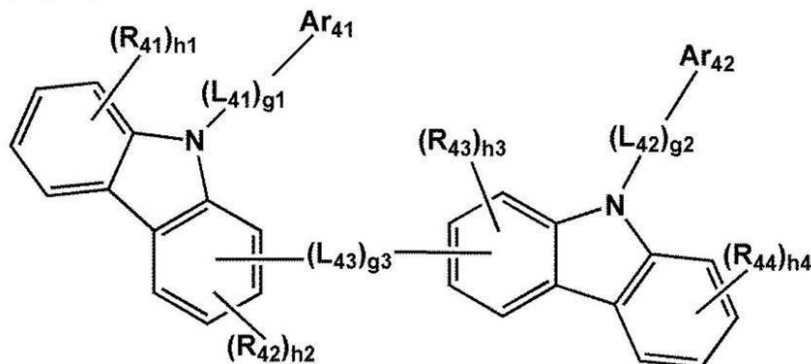


【化 2】

化学式 3-1



化学式 3-2



前記化学式 1 - 1、1 - 2、1 - 3、2 H - 1、2 D - 1、2 D - 2、3 - 1 及び 3 - 2 中、

X_1 は $C(R_{41})$ または N であり、

X_2 は $C(R_{42})$ または N であり、

X_3 は $C(R_{43})$ または N であり、

$L_{21} \sim L_{24}$ 、 $L_{31} \sim L_{34}$ 、および $L_{41} \sim L_{43}$ は、それぞれ独立して、置換もしくは非置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルキレン基、置換もしくは非置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキレン基、置換もしくは非置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニレン基、置換もしくは非置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニレン基、置換もしくは無置換の $C_6 - C_{60}$ アリーレン基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリーレン基、置換もしくは無置換の 2 価の非芳香族縮合多環基、および置換もしくは無置換の 2 価の非芳香族縮合ヘテロ多環基から選択され、

L_{25} は、置換もしくは非置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルキレン基、置換もしくは非置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキレン基、置換もしくは非置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニレン基、置換もしくは非置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニレン基、置換もしくは非置換の $C_6 - C_{60}$ 非縮合アリーレン基、および置換もしくは非置換の $C_1 - C_{60}$ 非縮合ヘテロアリーレン基から選択され、

L_{35} は、置換もしくは非置換の $C_6 - C_{60}$ 縮合多環アリーレン基、置換もしくは非置換の $C_1 - C_{60}$ 縮合多環ヘテロアリーレン基、置換もしくは非置換の 2 価の非芳香族縮合多環基、および置換もしくは非置換の 2 価の非芳香族縮合ヘテロ多環基から選択され、

$b_1 \sim b_5$ 、 $d_1 \sim d_5$ 、および $g_1 \sim g_3$ は、それぞれ独立して、0 ~ 3 の整数であり、

$Ar_{21} \sim Ar_{24}$ 、 $Ar_{31} \sim Ar_{34}$ 、および $Ar_{41} \sim Ar_{43}$ は、それぞれ独立して、下記化学式 A ~ C で表される基、置換もしくは無置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは無置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは非置換の $C_6 - C_{60}$ アリール基、ピフェニリル基、ターフェニリル基、置換もしくは非置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、置換もしくは非置換

の一価の非芳香族縮合多環基、および置換もしくは非置換の一価の非芳香族縮合ヘテロ多環基からなる群から選択され、

$R_{21} \sim R_{24}$ 、 R_{31} 、および $R_{41} \sim R_{44}$ は、それぞれ独立して、水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、置換もしくは非置換の $C_1 - C_{60}$ アルキル基、置換もしくは非置換の $C_2 - C_{60}$ アルケニル基、置換もしくは非置換の $C_2 - C_{60}$ アルキニル基、置換もしくは非置換の $C_1 - C_{60}$ アルコキシ基、置換もしくは非置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、置換もしくは非置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基、置換もしくは非置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは非置換の $C_6 - C_{60}$ アリール基、置換もしくは非置換の $C_6 - C_{60}$ アリールオキシ基、置換もしくは非置換の $C_6 - C_{60}$ アリールチオ基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、置換もしくは無置換の一価の非芳香族縮合多環基、置換もしくは無置換の一価の非芳香族縮合ヘテロ多環基、ピフェニル基、ターフェニル基、および $-Si(Q_{43})(Q_{44})(Q_{45})$ から選択され、

c_1 、 c_4 、 h_1 、 h_4 は、それぞれ独立して、0～4の整数であり、 e_1 は0～4の整数であり、 c_2 、 c_3 、 h_2 、 h_3 は、それぞれ独立して、0～3の整数であり、

前記化学式 1 - 1 において、 $Ar_{21} \sim Ar_{23}$ から選択される少なくとも1つは、前記化学式 A～C で表される基から選択される基であり、

前記化学式 1 - 2 において、 $Ar_{21} \sim Ar_{24}$ から選択される少なくとも1つは、前記化学式 A～C で表される基から選択される基であり、

前記化学式 1 - 3 において、 Ar_{21} および Ar_{22} から選択される少なくとも1つは、前記化学式 A～C で表される基から選択される基であり、

前記化学式 2 H - 1 において、 Ar_{31} は、前記化学式 A～C で表される基から選択される基であり、

前記化学式 2 D - 1 において、 $Ar_{31} \sim Ar_{34}$ から選択される少なくとも1つは、前記化学式 A～C で表される基から選択される基であり、

前記化学式 2 D - 2 において、 $Ar_{31} \sim Ar_{33}$ から選択される少なくとも1つは、前記化学式 A～C で表される基から選択される基であり、前記化学式 A～C で表される基から選択された基は、 $-N(Q_1)(Q_2)$ を含み、

前記化学式 3 - 1 において、 $Ar_{41} \sim Ar_{43}$ から選択される少なくとも1つは、前記化学式 A～C で表される基から選択される基であり、

前記化学式 3 - 2 において、 Ar_{41} および Ar_{42} から選択される1つは、前記化学式 A～C で表される基から選択される基であり、

置換された $C_3 - C_{10}$ シクロアルキレン基、置換された $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキレン基、置換された $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニレン基、置換された $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニレン基、置換された $C_6 - C_{60}$ アリーレン基、置換された $C_6 - C_{60}$ 非縮合アリーレン基、置換された $C_6 - C_{60}$ 縮合多環アリーレン基、置換された $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリーレン基、置換された $C_1 - C_{60}$ 非縮合ヘテロアリーレン基、置換された $C_1 - C_{60}$ 縮合多環ヘテロアリーレン基、置換された2価の非芳香族縮合多環基、置換された2価の非芳香族縮合ヘテロ多環基、置換された $C_1 - C_{60}$ アルキル基、置換された $C_2 - C_{60}$ アルケニル基、置換された $C_2 - C_{60}$ アルキニル基、置換された $C_1 - C_{60}$ アルコキシ基、置換された $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、置換された $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、置換された $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基、置換された $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、置換された $C_6 - C_{60}$ アリール基、置換された $C_6 - C_{60}$ アリールオキシ基、置換された $C_6 - C_{60}$ アリールチオ基、置換された $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、置換された一価の非芳香族縮合多環基、および置換された一価の非芳香族縮合ヘテロ多環基の置換基は、

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ

基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、 $C_1 - C_{60}$ アルキル基、 $C_2 - C_{60}$ アルケニル基、 $C_2 - C_{60}$ アルキニル基、および $C_1 - C_{60}$ アルコキシ基；

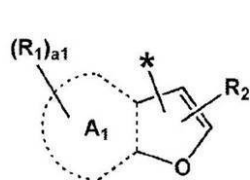
重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、 $C_6 - C_{60}$ アリール基、 $C_6 - C_{60}$ アリールオキシ基、 $C_6 - C_{60}$ アリールチオ基、 $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、一価の非芳香族縮合ヘテロ多環基、および $-Si(Q_{13})(Q_{14})(Q_{15})$ からなる群より選択された少なくとも1つで置換された、 $C_1 - C_{60}$ アルキル基、 $C_2 - C_{60}$ アルケニル基、 $C_2 - C_{60}$ アルキニル基、および $C_1 - C_{60}$ アルコキシ基；

$C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、 $C_6 - C_{60}$ アリール基、 $C_6 - C_{60}$ アリールオキシ基、 $C_6 - C_{60}$ アリールチオ基、 $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、ピフェニリル基およびターフェニリル基；

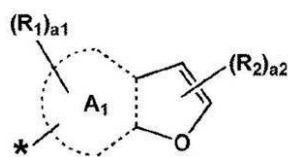
重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、 $C_1 - C_{60}$ アルキル基、 $C_2 - C_{60}$ アルケニル基、 $C_2 - C_{60}$ アルキニル基、 $C_1 - C_{60}$ アルコキシ基、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、 $C_6 - C_{60}$ アリール基、 $C_6 - C_{60}$ アリールオキシ基、 $C_6 - C_{60}$ アリールチオ基、 $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、ピフェニリル基、ターフェニリル基、および $-Si(Q_{23})(Q_{24})(Q_{25})$ からなる群より選択された少なくとも一つで置換された、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、 $C_6 - C_{60}$ アリール基、 $C_6 - C_{60}$ アリールオキシ基、 $C_6 - C_{60}$ アリールチオ基、 $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、および一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基；並びに

$-Si(Q_{33})(Q_{34})(Q_{35})$ ；からなる群より選択され、前記 $Q_{13} \sim Q_{15}$ 、 $Q_{23} \sim Q_{25}$ 、 $Q_{33} \sim Q_{35}$ 、および $Q_{43} \sim Q_{45}$ は、互いに独立して、水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、 $C_1 - C_{60}$ アルキル基、 $C_2 - C_{60}$ アルケニル基、 $C_2 - C_{60}$ アルキニル基、 $C_1 - C_{60}$ アルコキシ基、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基、 $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、 $C_6 - C_{60}$ アリール基、 $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基、ピフェニリル基、およびターフェニリル基からなる群より選択され、前記第1化合物、前記第2化合物および前記第3化合物は、互いに独立して、前記化学式 A ~ C のいずれかで表される基を少なくとも1つ含む、有機発光素子；

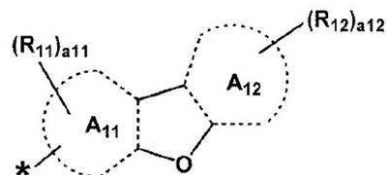
【化 3】



化学式 A



化学式 B



化学式 C

前記化学式 A ~ C 中、

環 A₁、環 A₁₁ および環 A₁₂ は、互いに独立して、C₅ - C₃₀ 炭素環およびまたは C₂ - C₃₀ ヘテロ環であり、

R₁、R₂、R₁₁ および R₁₂ は、互いに独立して、

水素原子、重水素原子、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、置換もしくは非置換の C₁ - C₆₀ アルキル基、置換もしくは非置換の C₂ - C₆₀ アルケニル基、置換もしくは非置換の C₂ - C₆₀ アルキニル基、および置換もしくは非置換の C₁ - C₆₀ アルコキシ基；

重水素原子、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩から選択された少なくとも一つで置換された C₁ - C₆₀ アルキル基、C₂ - C₆₀ アルケニル基、C₂ - C₆₀ アルキニル基、および C₁ - C₆₀ アルコキシ基；

C₃ - C₁₀ シクロアルキル基、C₁ - C₁₀ ヘテロシクロアルキル基、C₃ - C₁₀ シクロアルケニル基、C₁ - C₁₀ ヘテロシクロアルケニル基、C₆ - C₆₀ アリール基、C₆ - C₆₀ アリールオキシ基、C₆ - C₆₀ アリールチオ基、C₁ - C₆₀ ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、および一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基；

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、C₁ - C₆₀ アルキル基、C₂ - C₆₀ アルケニル基、C₂ - C₆₀ アルキニル基、C₁ - C₆₀ アルコキシ基、C₃ - C₁₀ シクロアルキル基、C₁ - C₁₀ ヘテロシクロアルキル基、C₃ - C₁₀ シクロアルケニル基、C₁ - C₁₀ ヘテロシクロアルケニル基、C₆ - C₆₀ アリール基、C₆ - C₆₀ アリールオキシ基、C₆ - C₆₀ アリールチオ基、C₁ - C₆₀ ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基から選択された少なくとも一つで置換された、C₃ - C₁₀ シクロアルキル基、C₁ - C₁₀ ヘテロシクロアルキル基、C₃ - C₁₀ シクロアルケニル基、C₁ - C₁₀ ヘテロシクロアルケニル基、C₆ - C₆₀ アリール基、C₆ - C₆₀ アリールオキシ基、C₆ - C₆₀ アリールチオ基、C₁ - C₆₀ ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、および一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基；並びに

-N(Q₁)(Q₂)、-Si(Q₃)(Q₄)(Q₅) および -B(Q₆)(Q₇)
；からなる群より選択され、

前記 Q₁ ~ Q₇ は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、C₁ - C₆₀ アルキル基、C₂ - C₆₀ アルケニル基、C₂ - C₆₀ アルキニル基、C₁ - C₆₀ アルコキシ基、C₃ - C₁₀ シクロアルキル基、C₁ - C₁₀ ヘテロシクロアルキル基、C₃ - C₁₀ シクロアルケニル基、C₁ - C₁₀ ヘテロシクロアルケニル基、C₆ - C₆₀ アリール基、C₁ - C₆₀ ヘテロアリール基、一価の非芳香族縮合多環基、および一価の非芳香族ヘテロ縮合多環基からなる群より選択され、

a_1 、 a_{11} および a_{12} は、互いに独立して、 $0 \sim 10$ の整数であり、
 a_2 は、 $0 \sim 2$ の整数であり、
 $* \text{ および } *'$ は、隣接する原子との結合サイトである。