

【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 01 L	51/50	(2006.01)
H 05 B	33/12	(2006.01)
C 09 K	11/06	(2006.01)
C 07 D	307/91	(2006.01)
C 07 D	405/12	(2006.01)
C 07 D	405/10	(2006.01)
C 07 D	405/14	(2006.01)
C 07 D	307/81	(2006.01)
C 07 D	307/77	(2006.01)
C 07 D	491/048	(2006.01)
C 07 D	491/052	(2006.01)

【F I】

H 05 B	33/14	B
H 05 B	33/22	B
H 05 B	33/22	D
H 05 B	33/12	C
C 09 K	11/06	6 9 0
C 09 K	11/06	6 3 5
C 07 D	307/91	
C 07 D	405/12	
C 07 D	405/10	
C 07 D	405/14	
C 07 D	307/81	
C 07 D	307/77	
C 07 D	491/048	
C 07 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、

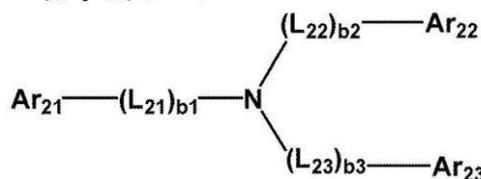
前記第1化合物は、\* = N - \*' を有する窒素含有ヘテロ環基を環形成部分構造として

含ます、

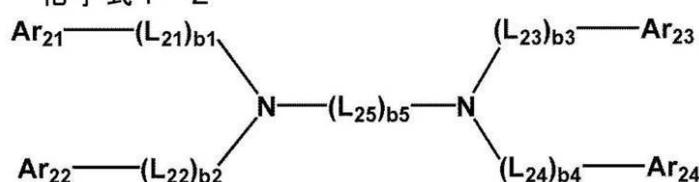
前記第1化合物は、化学式1-1～1-3、化学式2H-1、2D-1、2D-2、式3-1および3-2によって表される化合物から選択され、前記第2化合物は、化学式1-1～1-3、化学式2D-1および2D-2によって表される化合物から選択され、前記第3化合物は、化学式2H-1、2D-1、2D-2、化学式3-1および3-2によって表される化合物から選択され、

【化1】

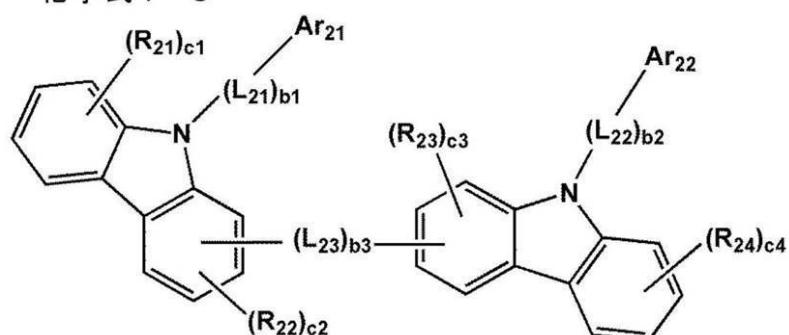
化学式1-1



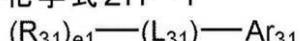
化学式1-2



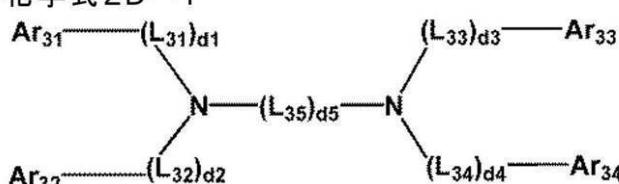
化学式1-3



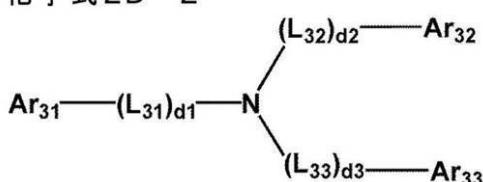
化学式2H-1



化学式2D-1

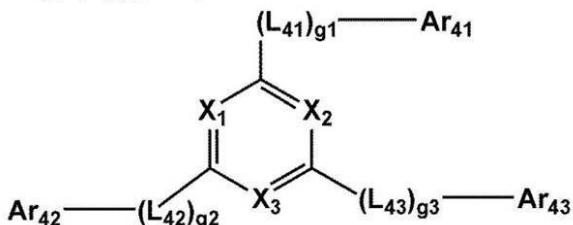


化学式2D-2

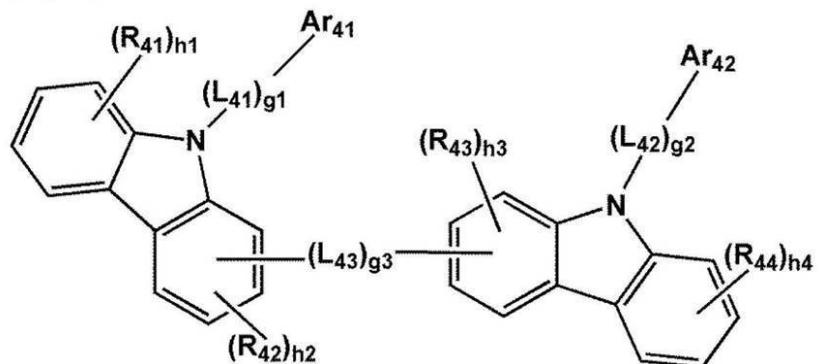


【化2】

化学式3-1



化学式3-2



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

X<sub>1</sub>はC(R<sub>4-1</sub>)またはNであり、

X<sub>2</sub>はC(R<sub>4-2</sub>)またはNであり、

X<sub>3</sub>はC(R<sub>4-3</sub>)またはNであり、

L<sub>2-1</sub>～L<sub>2-4</sub>、L<sub>3-1</sub>～L<sub>3-4</sub>、およびL<sub>4-1</sub>～L<sub>4-3</sub>は、それぞれ独立して、置換もしくは非置換のC<sub>3</sub>-C<sub>1-0</sub>シクロアルキレン基、置換もしくは非置換のC<sub>1</sub>-C<sub>1-0</sub>ヘテロシクロアルキレン基、置換もしくは非置換のC<sub>3</sub>-C<sub>1-0</sub>シクロアルケニレン基、置換もしくは非置換のC<sub>1</sub>-C<sub>1-0</sub>ヘテロシクロアルケニレン基、置換もしくは無置換のC<sub>6</sub>-C<sub>6-0</sub>アリーレン基、置換もしくは無置換のC<sub>1</sub>-C<sub>6-0</sub>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<sub>2-5</sub>は、置換もしくは非置換のC<sub>3</sub>-C<sub>1-0</sub>シクロアルキレン基、置換もしくは非置換のC<sub>1</sub>-C<sub>1-0</sub>ヘテロシクロアルキレン基、置換もしくは非置換のC<sub>3</sub>-C<sub>1-0</sub>シクロアルケニレン基、置換もしくは非置換のC<sub>1</sub>-C<sub>1-0</sub>ヘテロシクロアルケニレン基、置換もしくは非置換のC<sub>6</sub>-C<sub>6-0</sub>非縮合アリーレン基、および置換もしくは非置換のC<sub>1</sub>-C<sub>6-0</sub>非縮合ヘテロアリーレン基から選択され、

L<sub>3-5</sub>は、置換もしくは非置換のC<sub>6</sub>-C<sub>6-0</sub>縮合多環アリーレン基、置換もしくは非置換のC<sub>1</sub>-C<sub>6-0</sub>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<sub>1</sub>～b<sub>5</sub>、d<sub>1</sub>～d<sub>5</sub>、およびg<sub>1</sub>～g<sub>3</sub>は、それぞれ独立して、0～3の整数であり、

Ar<sub>2-1</sub>～Ar<sub>2-4</sub>、Ar<sub>3-1</sub>～Ar<sub>3-4</sub>、およびAr<sub>4-1</sub>～Ar<sub>4-3</sub>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<sub>3</sub>-C<sub>1-0</sub>シクロアルキル基、置換もしくは無置換のC<sub>1</sub>-C<sub>1-0</sub>ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは無置換のC<sub>3</sub>-C<sub>1-0</sub>シクロアルケニル基、置換もしくは無置換のC<sub>1</sub>-C<sub>1-0</sub>ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは非置換のC<sub>6</sub>-C<sub>6-0</sub>アリール基、ビフェニリル基、ターフェニリル基、置換もしくは非置換のC<sub>1</sub>-C<sub>6-0</sub>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、

$R_{2\,1} \sim R_{2\,4}$ 、 $R_{3\,1}$ 、および $R_{4\,1} \sim R_{4\,4}$ は、それぞれ独立して、水素、重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシリル基、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、リン酸基またはその塩、置換もしくは非置換の $C_{1\, - C_{6\,0}}$ アルキル基、置換もしくは非置換の $C_{2\, - C_{6\,0}}$ アルキニル基、置換もしくは非置換の $C_{1\, - C_{6\,0}}$ アルコキシ基、置換もしくは非置換の $C_{3\, - C_{1\,0}}$ シクロアルキル基、置換もしくは非置換の $C_{1\, - C_{1\,0}}$ ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは非置換の $C_{3\, - C_{1\,0}}$ シクロアルケニル基、置換もしくは非置換の $C_{1\, - C_{1\,0}}$ ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは非置換の $C_{6\, - C_{6\,0}}$ アリール基、置換もしくは非置換の $C_{6\, - C_{6\,0}}$ アリールオキシ基、置換もしくは非置換の $C_{6\, - C_{6\,0}}$ アリールチオ基、置換もしくは無置換の $C_{1\, - C_{6\,0}}$ 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、ビフェニリル基、ターフェニリル基、および-Si(Q<sub>4</sub><sub>3</sub>)(Q<sub>4</sub><sub>4</sub>)(Q<sub>4</sub><sub>5</sub>)から選択され、

c<sub>1</sub>、c<sub>4</sub>、h<sub>1</sub>、h<sub>4</sub>は、それぞれ独立して、0～4の整数であり、e<sub>1</sub>は0～4の整数であり、c<sub>2</sub>、c<sub>3</sub>、h<sub>2</sub>、h<sub>3</sub>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<sub>2</sub><sub>1</sub>～Ar<sub>2</sub><sub>3</sub>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<sub>2</sub><sub>1</sub>～Ar<sub>2</sub><sub>4</sub>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<sub>2</sub><sub>1</sub>およびAr<sub>2</sub><sub>2</sub>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2H-1において、Ar<sub>3</sub><sub>1</sub>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2D-1において、Ar<sub>3</sub><sub>1</sub>～Ar<sub>3</sub><sub>4</sub>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2D-2において、Ar<sub>3</sub><sub>1</sub>～Ar<sub>3</sub><sub>3</sub>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<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>)を含み、

前記化学式3-1において、Ar<sub>4</sub><sub>1</sub>～Ar<sub>4</sub><sub>3</sub>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<sub>4</sub><sub>1</sub>およびAr<sub>4</sub><sub>2</sub>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 $C_{3\, - C_{1\,0}}$ シクロアルキレン基、置換された $C_{1\, - C_{1\,0}}$ ヘテロシクロアルキレン基、置換された $C_{3\, - C_{1\,0}}$ シクロアルケニレン基、置換された $C_{1\, - C_{1\,0}}$ ヘテロシクロアルケニレン基、置換された $C_{6\, - C_{6\,0}}$ アリーレン基、置換された $C_{6\, - C_{6\,0}}$ 非縮合アリーレン基、置換された $C_{6\, - C_{6\,0}}$ 縮合多環アリーレン基、置換された $C_{1\, - C_{6\,0}}$ ヘテロアリーレン基、置換された $C_{1\, - C_{6\,0}}$ 非縮合ヘテロアリーレン基、置換された $C_{1\, - C_{6\,0}}$ 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 $C_{1\, - C_{6\,0}}$ アルキル基、置換された $C_{2\, - C_{6\,0}}$ アルケニル基、置換された $C_{2\, - C_{6\,0}}$ アルキニル基、置換された $C_{1\, - C_{6\,0}}$ アルコキシ基、置換された $C_{3\, - C_{1\,0}}$ シクロアルキル基、置換された $C_{1\, - C_{1\,0}}$ ヘテロシクロアルキル基、置換された $C_{3\, - C_{1\,0}}$ シクロアルケニル基、置換された $C_{1\, - C_{1\,0}}$ ヘテロシクロアルケニル基、置換された $C_{6\, - C_{6\,0}}$ アリール基、置換された $C_{6\, - C_{6\,0}}$ アリールオキシ基、置換された $C_{6\, - C_{6\,0}}$ アリールチオ基、置換された $C_{1\, - C_{6\,0}}$ 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、ヒドロキシリル基、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、 $C_1 - C_{6,0}$ アルキル基、 $C_2 - C_{6,0}$ アルケニル基、 $C_2 - C_{6,0}$ アルキニル基、および $C_1 - C_{6,0}$ アルコキシ基；

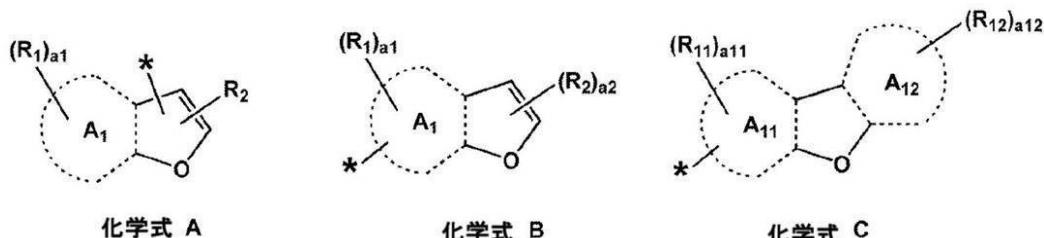
重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基またはその塩、スルホン酸基またはその塩、リン酸基またはその塩、 $C_3 - C_{1,0}$ シクロアルキル基、 $C_1 - C_{1,0}$ ヘテロシクロアルキル基、 $C_3 - C_{1,0}$ シクロアルケニル基、 $C_1 - C_{1,0}$ ヘテロシクロアルケニル基、 $C_6 - C_{6,0}$ アリール基、 $C_6 - C_{6,0}$ アリールオキシ基、 $C_6 - C_{6,0}$ アリールチオ基、 $C_1 - C_{6,0}$ 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<sub>1,3</sub>)(Q<sub>1,4</sub>)(Q<sub>1,5</sub>)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、 $C_1 - C_{6,0}$ アルキル基、 $C_2 - C_{6,0}$ アルケニル基、 $C_2 - C_{6,0}$ アルキニル基、および $C_1 - C_{6,0}$ アルコキシ基；

$C_3 - C_{1,0}$ シクロアルキル基、 $C_1 - C_{1,0}$ ヘテロシクロアルキル基、 $C_3 - C_{1,0}$ シクロアルケニル基、 $C_1 - C_{1,0}$ ヘテロシクロアルケニル基、 $C_6 - C_{6,0}$ アリール基、 $C_6 - C_{6,0}$ アリールオキシ基、 $C_6 - C_{6,0}$ アリールチオ基、 $C_1 - C_{6,0}$ 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、ビフェニリル基およびターフェニリル基；

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、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、 $C_1 - C_{6,0}$ アルキル基、 $C_2 - C_{6,0}$ アルケニル基、 $C_2 - C_{6,0}$ アルキニル基、 $C_1 - C_{6,0}$ アルコキシ基、 $C_3 - C_{1,0}$ シクロアルキル基、 $C_1 - C_{1,0}$ ヘテロシクロアルキル基、 $C_3 - C_{1,0}$ シクロアルケニル基、 $C_1 - C_{1,0}$ ヘテロシクロアルケニル基、 $C_6 - C_{6,0}$ アリール基、 $C_6 - C_{6,0}$ アリールオキシ基、 $C_6 - C_{6,0}$ アリールチオ基、 $C_1 - C_{6,0}$ 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、ビフェニリル基、ターフェニリル基、およびSi(Q<sub>2,3</sub>)(Q<sub>2,4</sub>)(Q<sub>2,5</sub>)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、 $C_3 - C_{1,0}$ シクロアルキル基、 $C_1 - C_{1,0}$ ヘテロシクロアルキル基、 $C_3 - C_{1,0}$ シクロアルケニル基、 $C_1 - C_{1,0}$ ヘテロシクロアルケニル基、 $C_6 - C_{6,0}$ アリール基、 $C_6 - C_{6,0}$ アリールオキシ基、 $C_6 - C_{6,0}$ アリールチオ基、 $C_1 - C_{6,0}$ 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<sub>3,3</sub>)(Q<sub>3,4</sub>)(Q<sub>3,5</sub>)；からなる群より選択され、前記Q<sub>1,3</sub>～Q<sub>1,5</sub>、Q<sub>2,3</sub>～Q<sub>2,5</sub>、Q<sub>3,3</sub>～Q<sub>3,5</sub>、およびQ<sub>4,3</sub>～Q<sub>4,5</sub>は、互いに独立して、水素、重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、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、 $C_1 - C_{6,0}$ アルキル基、 $C_2 - C_{6,0}$ アルケニル基、 $C_2 - C_{6,0}$ アルキニル基、 $C_1 - C_{6,0}$ アルコキシ基、 $C_3 - C_{1,0}$ シクロアルキル基、 $C_1 - C_{1,0}$ ヘテロシクロアルキル基、 $C_3 - C_{1,0}$ シクロアルケニル基、 $C_1 - C_{1,0}$ ヘテロシクロアルケニル基、 $C_6 - C_{6,0}$ アリール基、 $C_1 - C_{6,0}$ 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、ビフェニリル基、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】



前記化学式 A ~ C 中、

環  $A_{11}$ 、環  $A_{12}$  および環  $A_{112}$  は、互いに独立して、 $C_5$  ~  $C_{30}$  炭素環およびまたは  $C_2$  ~  $C_{30}$  ヘテロ環であり、

$R_1$ 、 $R_2$ 、 $R_{11}$  および  $R_{12}$  は、互いに独立して、

水素原子、重水素原子、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、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  $C_1$  ~  $C_{60}$  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、および置換もしくは非置換の  $C_1$  ~  $C_{60}$  アルコキシ基；

重水素原子、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、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  $C_1$  ~  $C_{60}$  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、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、ヒドロキシル基、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から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

-N(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>)、-Si(Q<sub>3</sub>)(Q<sub>4</sub>)(Q<sub>5</sub>) および -B(Q<sub>6</sub>)(Q<sub>7</sub>)；からなる群より選択され、

前記 Q<sub>1</sub> ~ Q<sub>7</sub> は、互いに独立して、水素原子、重水素原子、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、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、 $C_6$  ~  $C_{60}$  アリールチオ基、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<sub>1</sub>、a<sub>11</sub>およびa<sub>12</sub>は、互いに独立して、0～10の整数であり、  
a<sub>2</sub>は、0～2の整数であり、  
\*および\*’は、隣接する原子との結合サイトである。