

【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5月2日(2025.5.2)

【公開番号】特開2025-32148(P2025-32148A)

【公開日】令和7年3月11日(2025.3.11)

【年通号数】公開公報(特許)2025-044

【出願番号】特願2024-204352(P2024-204352)

【国際特許分類】

C 0 7 F 5/02(2006.01)

C 0 9 K 11/06(2006.01)

C 0 8 G 61/12(2006.01)

H 1 0 K 85/30(2023.01)

H 1 0 K 85/10(2023.01)

H 1 0 K 85/60(2023.01)

H 1 0 K 50/12(2023.01)

H 1 0 K 50/17(2023.01)

H 1 0 K 50/18(2023.01)

H 1 0 K 50/165(2023.01)

H 1 0 K 50/15(2023.01)

H 1 0 K 59/10(2023.01)

H 1 0 K 30/50(2023.01)

10

20

【F I】

C 0 7 F 5/02 A C S P

C 0 9 K 11/06 6 6 0

C 0 8 G 61/12

H 1 0 K 85/30

H 1 0 K 85/10

H 1 0 K 85/60

H 1 0 K 50/12

H 1 0 K 50/17 1 7 1

H 1 0 K 50/18

H 1 0 K 50/165

H 1 0 K 50/15

H 1 0 K 59/10

H 1 0 K 30/50

30

【手続補正書】

【提出日】令和7年4月22日(2025.4.22)

【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】

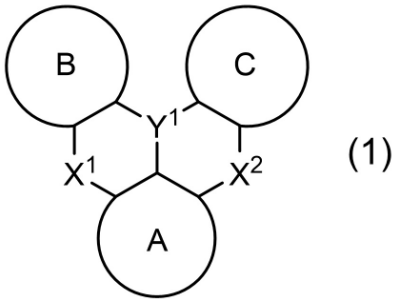
【特許請求の範囲】

【請求項1】

下記式(1)で表されるか、または下記式(1)で表される単位構造を2つ有する2量体である多環芳香族化合物。

40

【化 1】

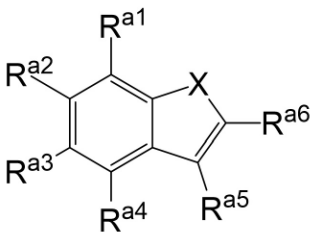


(式(1)中、

A環、B環およびC環は、それぞれ独立して、炭素数6～30のアリール環または炭素数2～30の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、置換もしくは無置換のアリール、置換もしくは無置換のヘテロアリール、置換もしくは無置換のジアリールアミノ、置換もしくは無置換のジヘテロアリールアミノ、置換もしくは無置換のアリールヘテロアリールアミノ、置換もしくは無置換のジアリールボリル、置換もしくは無置換のアルキル、置換もしくは無置換のシクロアルキル、置換もしくは無置換のアルコキシ、置換もしくは無置換のアリールオキシ、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、アルキルジシクロアルキルシリル、トリアリールシリル、ジアルキルアリールシリル、およびアルキルジアリールシリルからなる群より選択される置換基で置換されていてもよく、これらの基が置換基を有する場合の置換基は、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、またはジアリールアミノであり、

ただし、A環、B環およびC環からなる群より選択される少なくとも一つの環は、式(BHet)で表される環であり、

【化 2】



BHet

式(BHet)において、 $R^{a1} \sim R^{a6}$ は水素または置換もしくは無置換のアリール、置換もしくは無置換のヘテロアリール、置換もしくは無置換のジアリールアミノ、置換もしくは無置換のジヘテロアリールアミノ、置換もしくは無置換のアリールヘテロアリールアミノ、置換もしくは無置換のジアリールボリル、置換もしくは無置換のアルキル、置換もしくは無置換のシクロアルキル、置換もしくは無置換のアルコキシ、置換もしくは無置換のアリールオキシ、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、アルキルジシクロアルキルシリル、トリアリールシリル、ジアルキルアリールシリル、およびアルキルジアリールシリルからなる群より選択される置換基であり、これらの基が置換基を有する場合の置換基は、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あり、ただし $R^{a1} \sim R^{a6}$ のうち、隣接するいずれかの2つまたは3つは、式(1)中の Y^1 ならびに X^1 および/または X^2 との結合手となり、 X は $>O$ 、 $>S$ 、 $>N-R$ 、または $>C(-R)_2$ であり、前記 $>N-R$ または $>C(-R)_2$ のRはそれぞれ独立して、水素、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていて

もよいアリール、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキルであり、前記 $>C(-R)_2$ の 2 つの R は互いに結合して環を形成していてもよく、

Y^1 は、 B 、 $P=O$ 、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、水素、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいアリール、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキルであり、前記 $>C(-R)_2$ の R は、水素、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいアリール、アルキルもしくはシクロアルキルで置換されていてもよいヘテロアリール、アルキル、またはシクロアルキルであり、前記 $>C(-R)_2$ の 2 つの R は互いに結合して環を形成してもよく、また、前記 $>N-R$ および $>C(-R)_2$ の少なくとも 1 つにおける R 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 つの環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、前記多環芳香族化合物におけるアリール環およびヘテロアリール環からなる群より選択される少なくとも 1 つは、少なくとも 1 つの炭素数 3 ~ 24 のシクロアルカンで縮合されていてもよく、当該シクロアルカン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、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、

前記多環芳香族化合物は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、アルキルジシクロアルキルシリル、トリアリールシリル、ジアルキルアリールシリル、およびアルキルジアリールシリルからなる群より選択される置換基の少なくとも 1 つを有しており、

前記多環芳香族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、

式 (1) において、アリールはいずれも炭素数 6 ~ 30 のアリールであり、ヘテロアリールはいずれも炭素数 2 ~ 30 のヘテロアリールであり、アルキルはいずれも炭素数 1 ~ 24 のアルキルであり、シクロアルキルはいずれも炭素数 3 ~ 24 のシクロアルキルであり、

前記 2 量体は、A 環、B 環または C 環を 2 つの前記単位構造で共有するようにして結合した形態である。))

【請求項 2】

下記式 (3)、(4)、(5)、(6)、(8)、または (9) で表される、多環芳香族化合物。

10

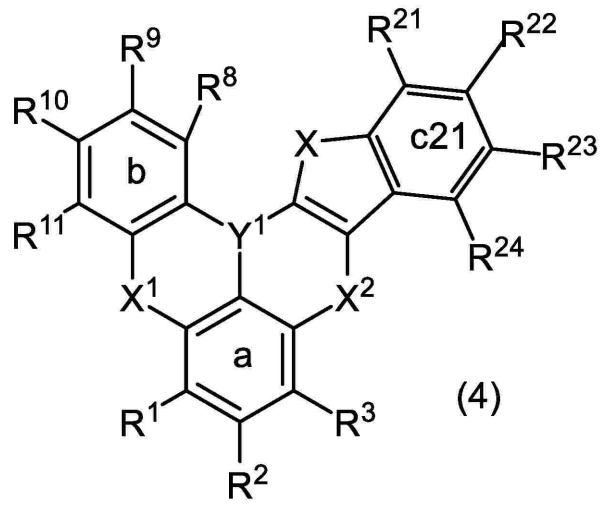
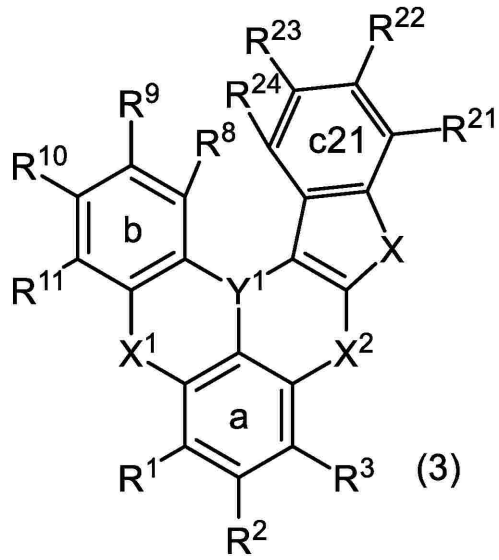
20

30

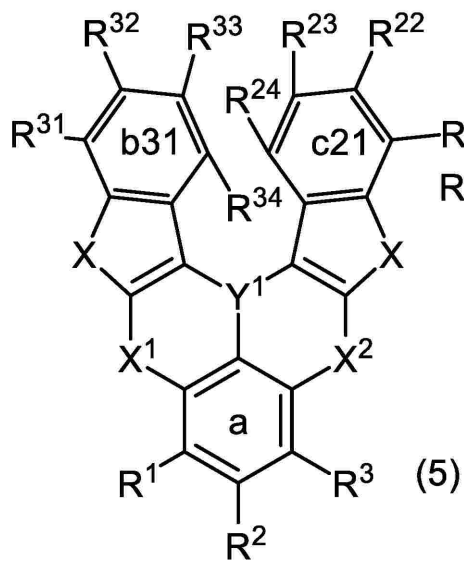
40

50

【化 3】



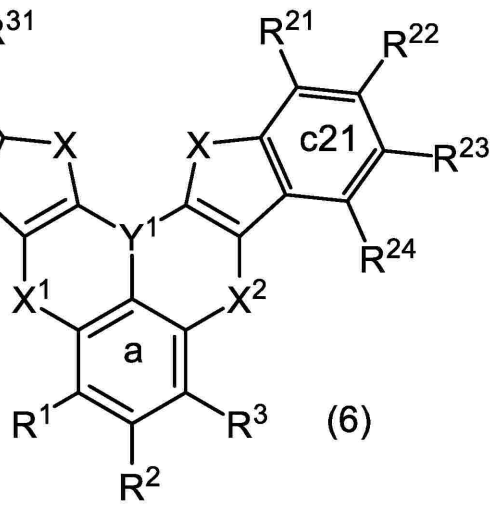
10



(5)

(6)

20

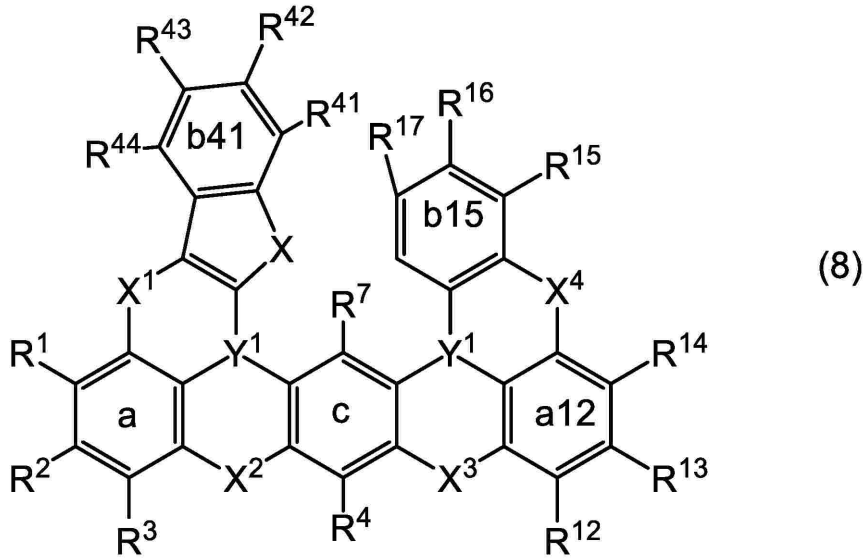


30

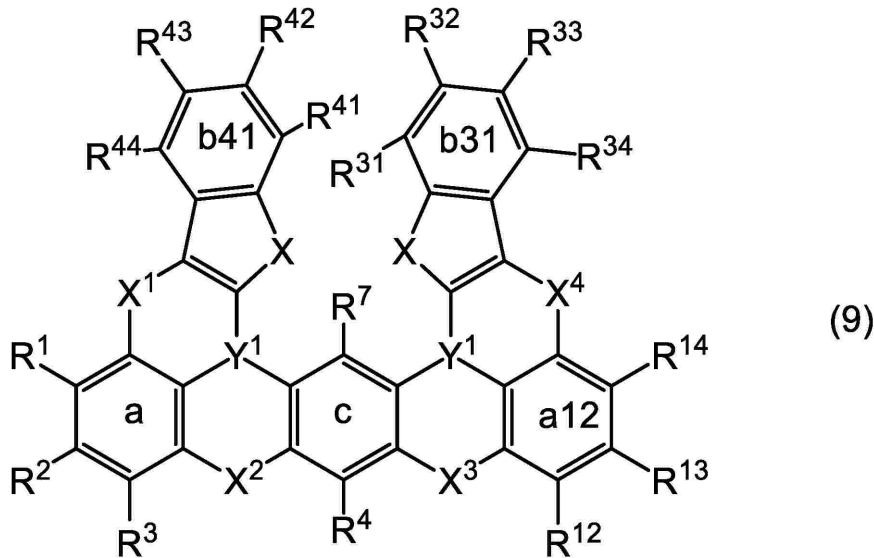
40

50

【化 4】



10



20

30

(式(3)、(4)、(5)、(6)、(8)、および(9)中、

$R^1 \sim R^{17}$ 、 $R^{21} \sim R^{24}$ 、 $R^{31} \sim R^{34}$ 、および $R^{41} \sim R^{44}$ 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、アルキルジシクロアルキルシリル、トリアリールシリル、ジアルキルアリールシリル、またはアルキルジアリールシリルであり、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、 $R^1 \sim R^3$ のうちの隣接する基同士が結合してa環と共に、 $R^8 \sim R^{11}$ のうちの隣接する基同士が結合してb環と共に、 $R^4 \sim R^7$ のうちの隣接する基同士が結合してc環と共に、 $R^{12} \sim R^{14}$ のうちの隣接する基同士が結合してa12環と共に、 $R^{15} \sim R^{17}$ のうちの隣接する基同士が結合してb15環と共に、 $R^{21} \sim R^{24}$ のうちの隣接する基同士が結合してc21環と共に、 $R^{31} \sim R^{34}$ のうちの隣接する基同士が結合してb31環と共に、および $R^{41} \sim R^{44}$ のうちの隣接する基同士が結合してb41環と共に、それぞれ、炭素数6～30のアリール環または炭素数2～30の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

40

50

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、アリーロキシ、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、

Xは、それぞれ独立して、 $>O$ 、 $>S$ 、 $>N-R$ 、または $>C(-R)_2$ であり、前記 $>N-R$ または $>C(-R)_2$ のRはそれぞれ独立して、水素、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あり、前記 $>C(-R)_2$ の2つのRは互いに結合して環を形成してもよく、

Y^1 は、それぞれ独立して、B、 $P=O$ 、または $P=S$ であり、

X^1 、 X^2 、 X^3 、および X^4 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、それぞれ独立して、水素、置換されていてもよい炭素数6~12のアリール、置換されていてもよい炭素数2~15のヘテロアリール、置換されていてもよい炭素数1~6のアルキル、または置換されていてもよい炭素数3~14のシクロアルキルであり、前記 $>C(-R)_2$ のRは、水素、置換されていてもよい炭素数6~12のアリール、置換されていてもよい炭素数2~15のヘテロアリール、置換されていてもよい炭素数1~6のアルキル、または置換されていてもよい炭素数3~14のシクロアルキルであり、前記 $>C(-R)_2$ の2つのRは互いに結合して環を形成してもよく、また、前記 $>N-R$ および $>C(-R)_2$ の少なくとも1つにおけるRは、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(-R)_2-$ 、または単結合により、a環、b環、c環、a12環、b15環、c21環と縮合する5員環、b31環と縮合する5員環、およびb41環の少なくとも1つの環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、

式(3)、(4)、(5)、(6)、(8)、または(9)で表される化合物におけるアリール環およびヘテロアリール環からなる群より選択される少なくとも1つは、少なくとも1つの炭素数3~24のシクロアルカンで縮合されていてもよく、当該シクロアルカン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、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、

前記多環芳香族化合物は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、アルキルジシクロアルキルシリル、トリアリールシリル、ジアルキルアリールシリル、およびアルキルジアリールシリルからなる群より選択される置換基の少なくとも1つを有しており、

式(3)、(4)、(5)、(6)、(8)、または(9)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、

式(3)、(4)、(5)、(6)、(8)、または(9)において、アリールはいずれも炭素数6~30のアリールであり、ヘテロアリールはいずれも炭素数2~30のヘテロアリールであり、アルキルはいずれも炭素数1~24のアルキルであり、シクロアルキルはいずれも炭素数3~24のシクロアルキルである。))

【請求項3】

式(3)、(4)、(5)、または(6)で表される、請求項2に記載の多環芳香族化合物。

【請求項4】

Xが $>O$ または $>S$ である、請求項1~3のいずれか一項に記載の多環芳香族化合物。

【請求項5】

下記式(tR)で表されるターシャリ-アルキルを少なくとも1つ含む、請求項1~4のいずれか一項に記載の多環芳香族化合物。

10

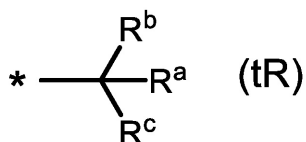
20

30

40

50

【化5】



(式(tR)中、R^a、R^bおよびR^cはそれぞれ独立して炭素数1~24のアルキルであり、前記アルキルにおける任意の-CH₂-は-O-で置換されていてもよく、*は結合位置である。)

10

【請求項6】

X¹、X²、X³およびX⁴がいずれも>N-Rであり、X¹、X²、X³またはX⁴として、Rが置換されていてもよい2-ピフェニルまたは置換されていてもよいテルフェニル-2'-イルである>N-Rを少なくとも1つ含む請求項1~5のいずれか一項に記載の多環芳香族化合物。

【請求項7】

アリール環およびヘテロアリール環からなる群より選択される少なくとも1つが、少なくとも1つの炭素数3~24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における少なくとも1つの水素は置換されていてもよく、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い、請求項1~6のいずれか一項に記載の多環芳香族化合物。

20

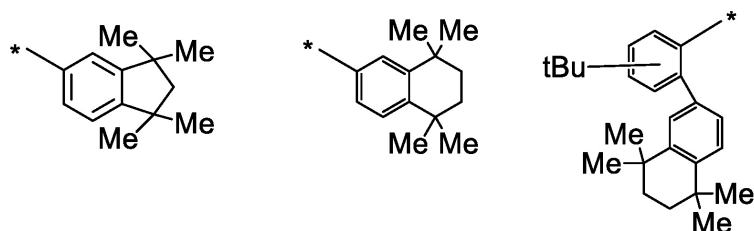
【請求項8】

Y¹がBである請求項1~7のいずれか一項に記載の多環芳香族化合物。

【請求項9】

X¹、X²、X³またはX⁴として、Rが以下のいずれかの基である>N-Rを少なくとも1つ含む、請求項1~8のいずれか一項に記載の多環芳香族化合物。

【化6】



30

(Meはメチル、tBuはt-ブチル、*は結合位置を示す。)

【請求項10】

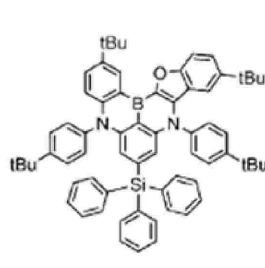
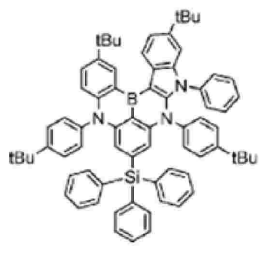
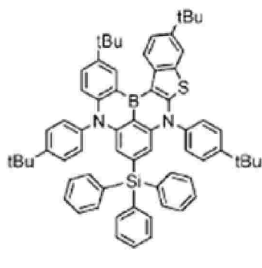
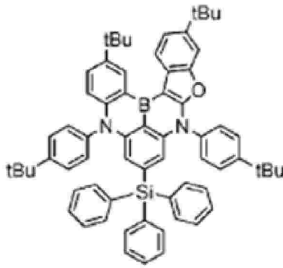
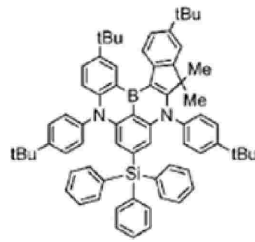
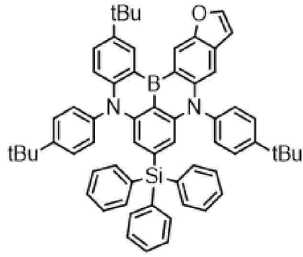
前記ハロゲンはフッ素である、請求項1~9のいずれか一項に記載の多環芳香族化合物。

【請求項11】

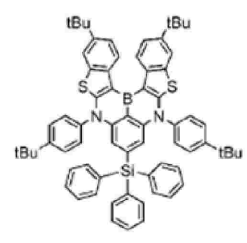
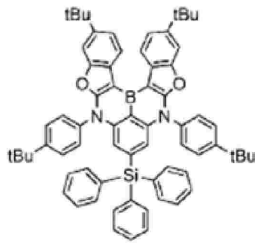
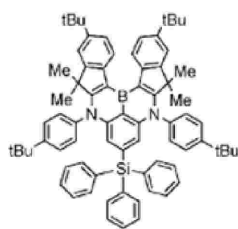
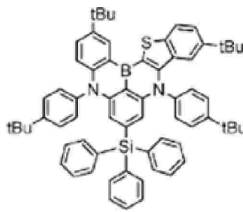
下記構造式のいずれかで表される、請求項1に記載の多環芳香族化合物。

40

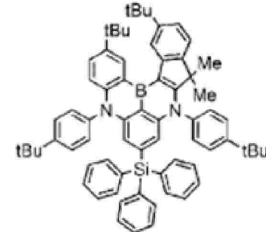
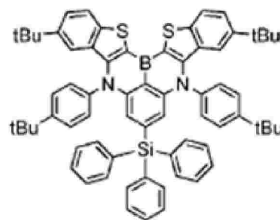
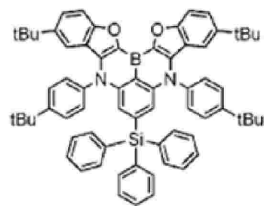
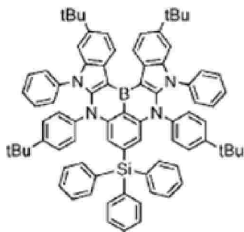
【化 7】



10



20

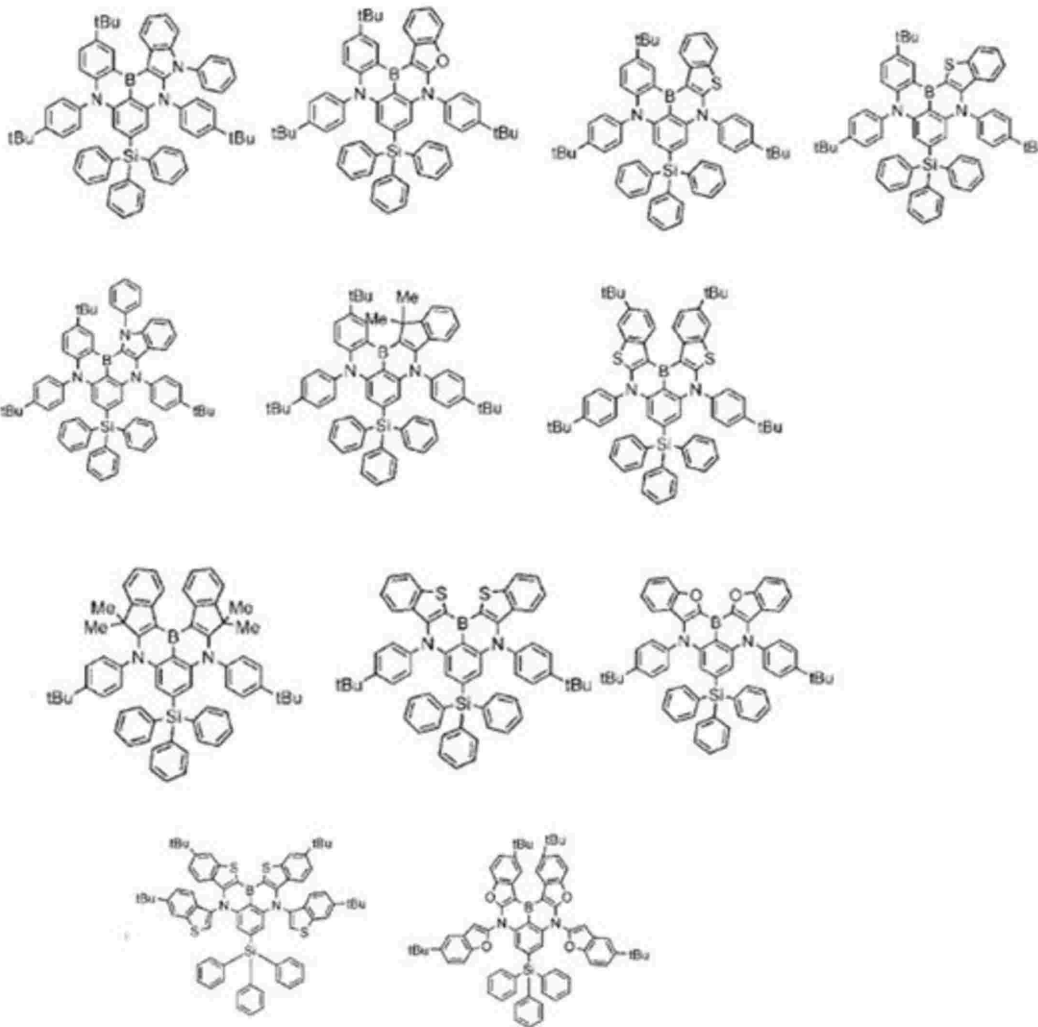


30

40

50

【化 8】



10

20

30

【請求項 1 2】

請求項 1 ~ 1 1 のいずれか一項に記載の 多環芳香族化合物 を含有する、有機デバイス用材料。

【請求項 1 3】

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 1 2 に記載の有機デバイス用材料。

【請求項 1 4】

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 1 3 に記載の有機デバイス用材料。

【請求項 1 5】

請求項 1 ~ 1 1 のいずれか一項に記載の 多環芳香族化合物 と、有機溶媒とを含む、組成物。

40

【請求項 1 6】

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 ~ 1 1 のいずれか一項に記載の 多環芳香族化合物 を含有する有機層とを有する、有機電界発光素子。

【請求項 1 7】

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 ~ 1 1 のいずれか一項に記載の 多環芳香族化合物 を含有する発光層とを有する、有機電界発光素子。

50

【請求項 18】

前記発光層が、ホストと、ドープメントとしての前記多環芳香族化合物とを含む、請求項 17 に記載の有機電界発光素子。

【請求項 19】

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 18 に記載の有機電界発光素子。

【請求項 20】

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/または電子注入層を有し、該電子輸送層および電子注入層の少なくとも 1 つは、ポラン誘導体、ピリジン誘導体、フルオランテン誘導体、B O 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、アリールニトリル誘導体、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、キノリノール系金属錯体、チアゾール誘導体、ベンゾチアゾール誘導体、シロール誘導体およびアゾリン誘導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 17 ~ 19 のいずれか一項に記載の有機電界発光素子。

10

【請求項 21】

前記電子輸送層および/または電子注入層が、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 20 に記載の有機電界発光素子。

20

【請求項 22】

請求項 16 ~ 21 のいずれか一項に記載の有機電界発光素子を備えた表示装置または照明装置。

30

40

50