

【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2年11月19日(2020.11.19)

【公表番号】特表2018-530522(P2018-530522A)

【公表日】平成30年10月18日(2018.10.18)

【年通号数】公開・登録公報2018-040

【出願番号】特願2018-507509(P2018-507509)

【国際特許分類】

C 07 D 209/80	(2006.01)
H 01 L 51/50	(2006.01)
H 05 B 33/10	(2006.01)
C 09 K 11/06	(2006.01)
A 61 K 31/403	(2006.01)
C 07 D 409/14	(2006.01)
C 07 D 403/14	(2006.01)
C 07 D 405/14	(2006.01)
A 61 K 31/53	(2006.01)
C 07 D 471/16	(2006.01)
A 61 K 31/4738	(2006.01)
A 61 K 31/4709	(2006.01)
A 61 K 41/00	(2020.01)
A 61 K 8/49	(2006.01)
A 61 P 43/00	(2006.01)
A 61 P 17/00	(2006.01)
A 61 Q 19/00	(2006.01)
C 07 D 491/048	(2006.01)
C 07 D 498/04	(2006.01)
C 07 D 487/04	(2006.01)
A 61 K 31/407	(2006.01)
A 61 K 31/5383	(2006.01)
C 07 D 209/86	(2006.01)

【F I】

C 07 D 209/80	C S P
H 05 B 33/14	B
H 05 B 33/10	
C 09 K 11/06	6 9 0
A 61 K 31/403	
C 07 D 409/14	
C 07 D 403/14	
C 07 D 405/14	
A 61 K 31/53	
C 07 D 471/16	
A 61 K 31/4738	
A 61 K 31/4709	
A 61 K 41/00	
A 61 K 8/49	
A 61 P 43/00	1 2 1
A 61 P 17/00	
A 61 Q 19/00	

C 0 7 D 491/048
 C 0 7 D 498/04 1 1 2 Q
 C 0 7 D 487/04 1 3 7
 A 6 1 K 31/407
 A 6 1 K 31/5383
 C 0 7 D 209/86

【誤訛訂正書】

【提出日】令和2年10月6日(2020.10.6)

【誤訛訂正1】

【訂正対象書類名】特許請求の範囲

【訂正対象項目名】全文

【訂正方法】変更

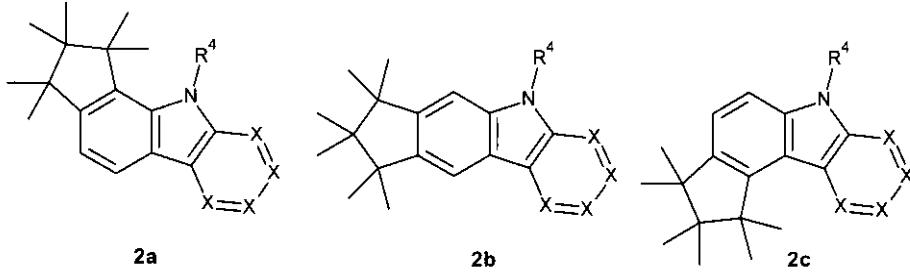
【訂正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

以下の式(2a)、(2b)または(2c)の一つから選ばれる化合物、

【化1】



式中、

Xは、出現毎に同一であるか異なり、CR¹またはNであり；

R¹は、出現毎に同一であるか異なり、R¹は、H、D、F、Cl、Br、I、CHO、N(Ar¹)₂、C(=O)Ar¹、P(=O)(Ar¹)₂、S(=O)Ar¹、S(=O)₂Ar¹、CR²=CR²Ar¹、CN、NO₂、Si(R²)₃、B(OR²)₂、B(R²)₂、B(N(R²)₂)₂、OSO₂R²、1～40個のC原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基、3～40個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基(夫々、1以上のR²により置換されてもよく、1以上の隣接しないメチレン基は、R²C=CR²、C=C、Si(R²)₂、Ge(R²)₂、Sn(R²)₂、C=O、C=S、C=Se、C=N R²、P(=O)(R²)、SO、SO₂、NR²、O、SもしくはC(=O)NR²で置き代えられてよく、ここで、1以上の水素原子は、D、F、Cl、Br、I、CN、NO₂から選ばれる置換基を含むことができる。)または、1以上の基R²により各場合に置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、または、1以上の基R²により随意に置換されてよい5～40個の芳香族環原子を有するアリールオキシもしくはヘテロアリーリオキシ基または、1以上の基R²により随意に置換されてよい5～40個の芳香族環原子を有するアラルキルもしくはヘテロアラルキル基またはこれらの構造の組み合わせを含み；ここで、2個以上の置換基R¹は、それらが結合する原子と一緒に、もしくは2個の置換基R¹は、それらが結合する原子と一緒に、モノあるいはポリ環状の脂肪族もしくは芳香族環構造を互いに形成してもよく；

R²は、出現毎に同一であるか異なり、R²は、H、D、F、Cl、Br、I、N(R³)₂、CN、NO₂、Si(R³)₃、B(OR³)₂、C(=O)R³、P(=O)(R³)₂、S(=O)R³、S(=O)₂R³、OSO₂R³、1～40個のC原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基、2～40個のC原子を有す

る直鎖アルケニルもしくはアルキニル基、3～40個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル、アルケニル、アルキニル、アルコキシ、アルキルアルコキシもしくはチオアルコキシ基(夫々、1以上の基R³により随意に置換されてもよい。)または、1以上の基R³により各場合に置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、または、1以上の基R³により随意に置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有するアリールオキシ、アラルコキシもしくはヘテロアリーオキシ基または、10～40個の芳香族環原子を有するジアリールアミノ基、ジヘテロアリールアミノ基もしくはアリールヘテロアリールアミノ基を含み；

R³は、出現毎に同一であるか異なり、R³は、H、D、F、1以上の水素原子がFで置換することができる1～20個のC原子を有する脂肪族、芳香族および/または複素環式芳香族炭化水素基を含み；ここで、1以上のH原子はFで置き代えられてよく；ここで、2個以上の置換基R³は、モノあるいはポリ環状の脂肪族もしくは芳香族環構造を互いに形成してもよく、ここで、ジェミナルおよびビシナルな置換基R³は、単一のモノあるいはポリ環状の脂肪族もしくは芳香族環構造を形成せず；

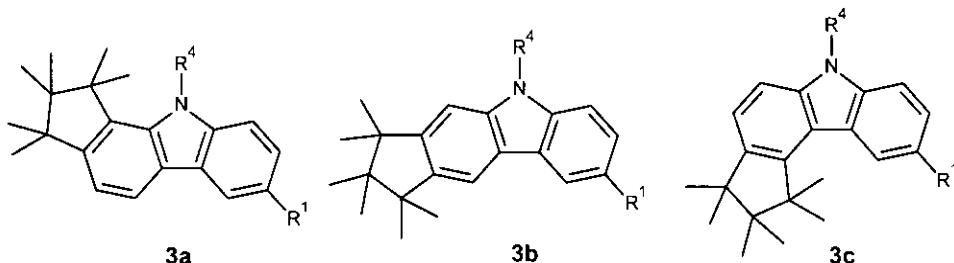
R⁴は、出現毎に同一であるか異なり、出現毎に同一であるか異なることができる1以上のR²で置換されることができるフェニル-、ビフェニル-、テルフェニル-、クアテルフェニル-、ピリジル-、ピリミジニル-、ピラジニル-、ピリダジニル-、トリアジニル-、ジアリールアミノフェニル-もしくはジアリールアミノビフェニル基から選ばれ；

A_r¹は、出現毎に同一であるか異なり、A_r¹は、芳香族環、芳香族環構造、複素環式芳香族環、複素環式芳香族環構造もしくは芳香族複素環式芳香族環構造を含み；ここで、A_r¹は、1以上のR³置換基を含むことができる。

【請求項2】

以下の式から選ばれる、請求項1記載の化合物。

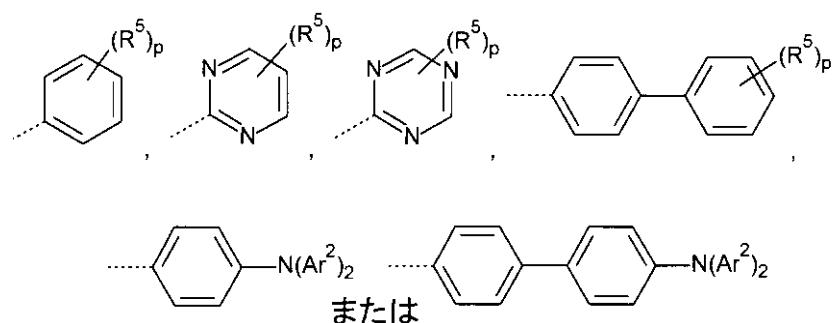
【化2】



【請求項3】

R⁴が、以下の基の一つを含む、請求項1または2記載の化合物：

【化3】



式中、

R⁵は、出現毎に同一であるか異なり、R⁵は、H、D、F、C1、Br、I、CHO、N(A_r²)₂、C(=O)Ar²、P(=O)(Ar²)₂、S(=O)Ar²、S(=O)₂Ar²、CR⁶=CR⁶Ar²、CN、NO₂、Si(R⁶)₃、B(OR⁶)₂、B(R⁶)₂、B(N(R⁶)₂)₂、OSO₂R⁶、1～40個のC原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基、3～40個のC原子を有する分

岐あるいは環状アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基（夫々、1以上のR⁶により置換されてもよく、1以上の隣接しないメチレン基は、R⁶C=CR⁶、C—C、S i (R⁶)₂、Ge(R⁶)₂、Sn(R⁶)₂、C=O、C=S、C=Se、C=N R⁶、P(=O)(R⁶)、SO、SO₂、NR⁶、O、SもしくはC(=O)NR⁶で置き替えられてよく、ここで、1以上の水素原子は、D、F、Cl、Br、I、CN、NO₂から選ばれる置換基を含むことができる。）または、1以上の基R⁶により各場合に置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、または、1以上の基R⁶により隨意に置換されてよい5～40個の芳香族環原子を有するアリールオキシもしくはヘテロアリーオキシ基または、1以上の基R⁶により隨意に置換されてよい5～40個の芳香族環原子を有するアラルキルもしくはヘテロアラルキル基またはこれらの構造の組み合わせを含み；ここで、2個以上の置換基R⁵は、それらが結合する原子と一緒に、モノあるいはポリ環状の脂肪族もしくは芳香族環構造を互いに形成してもよく；

R⁶は、出現毎に同一であるか異なり、R⁶は、H、D、F、1以上のH原子がFで置換することができる1～20個のC原子を有する脂肪族、芳香族および/または複素環式芳香族炭化水素（1以上のH原子は、Fで置換されるができる）を含み；ここで、2個以上の置換基R⁶は、モノあるいはポリ環状の脂肪族もしくは芳香族環構造を互いに形成してもよく、ここで、ジエミナルおよびビシナルな置換基R⁶は、単一のモノあるいはポリ環状の脂肪族もしくは芳香族環構造を形成してもよく；

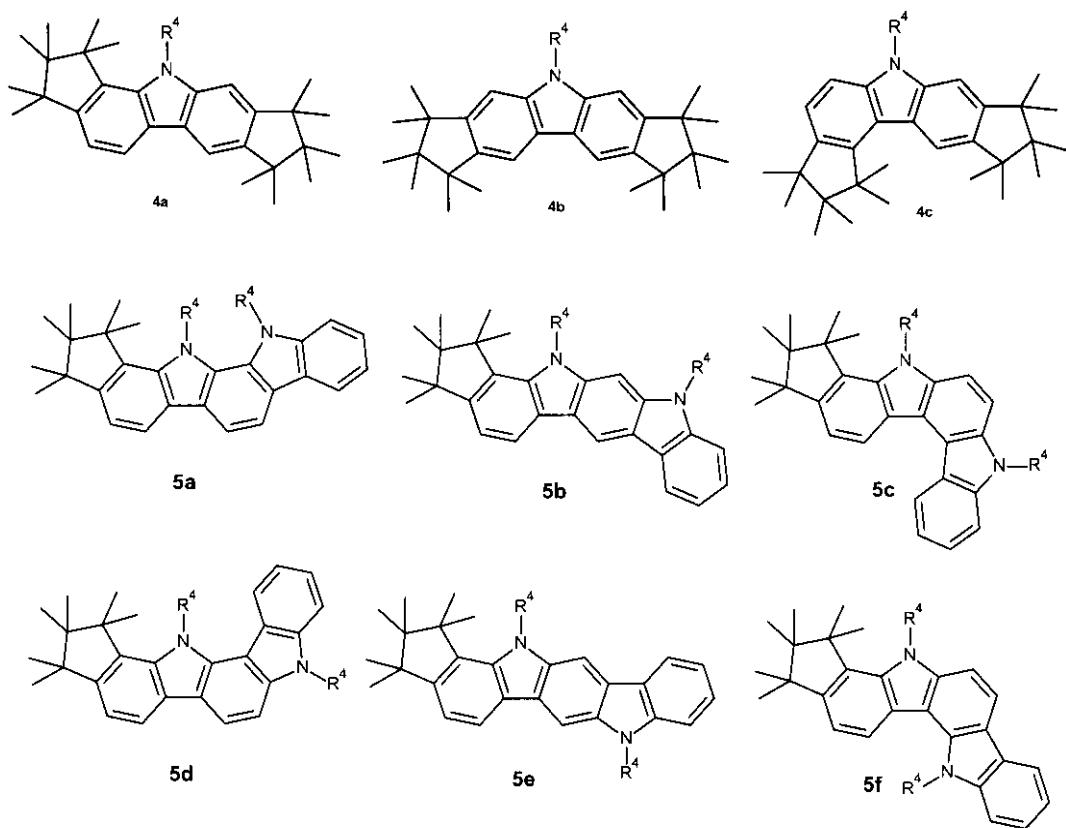
Ar²は、出現毎に同一であるか異なり、Ar²は、芳香族環、芳香族環構造、複素環式芳香族環、複素環式芳香族環構造もしくは芳香族複素環式芳香族環構造を含み；ここで、Ar²は、5～40個の環原子を含むことができ、Ar²は、1以上のR⁶置換基を含み；

pは、0、1、2、3、4または5である。

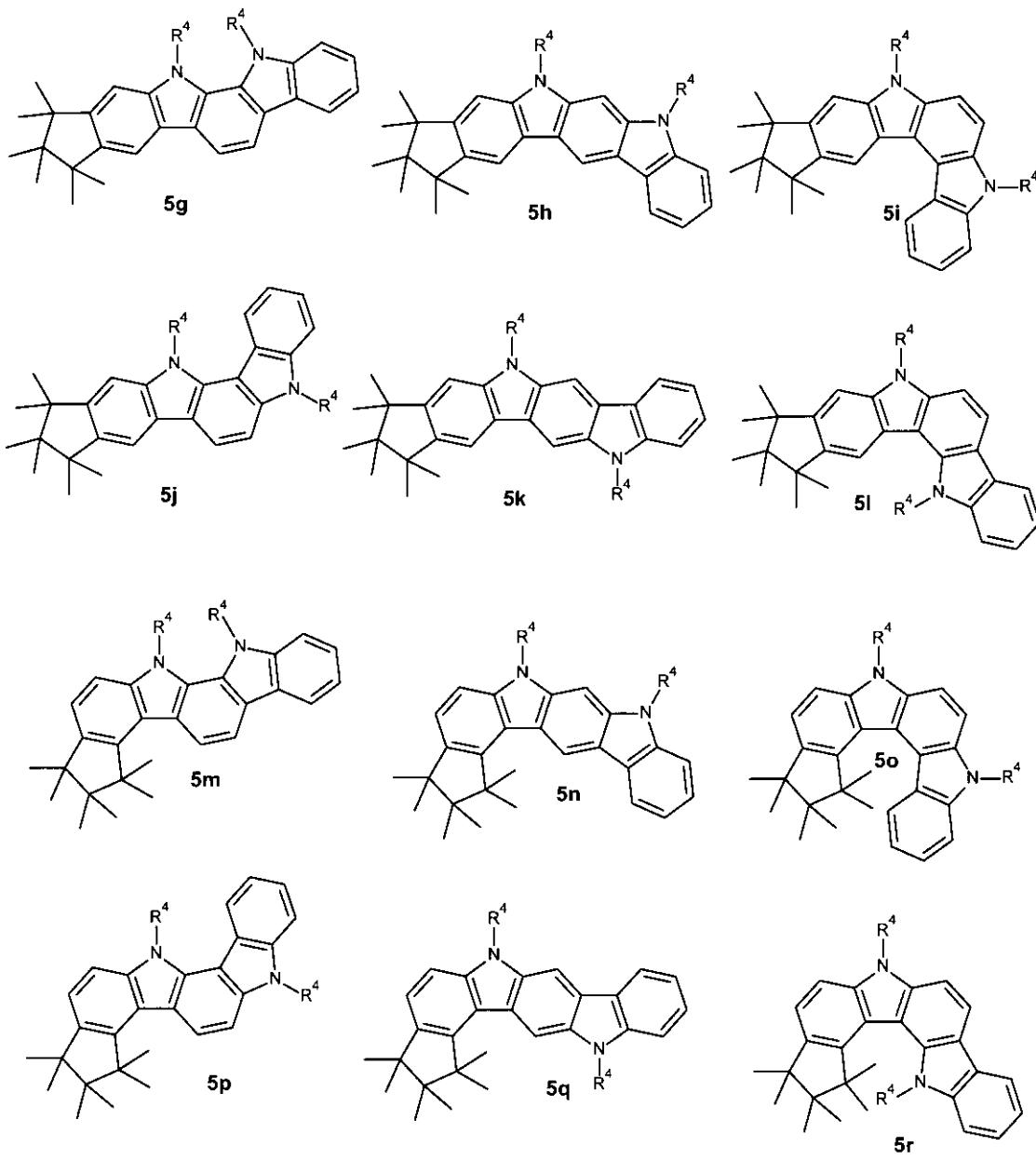
【請求項4】

以下の式(4a)、(4b)および(4c)、(5a)～(5r)、(6a)～(6d)、(7a)～(7r)、(8a)～(8l)、(10a)～(10l)、(11a)～(11r)から選ばれる、請求項1記載の化合物。

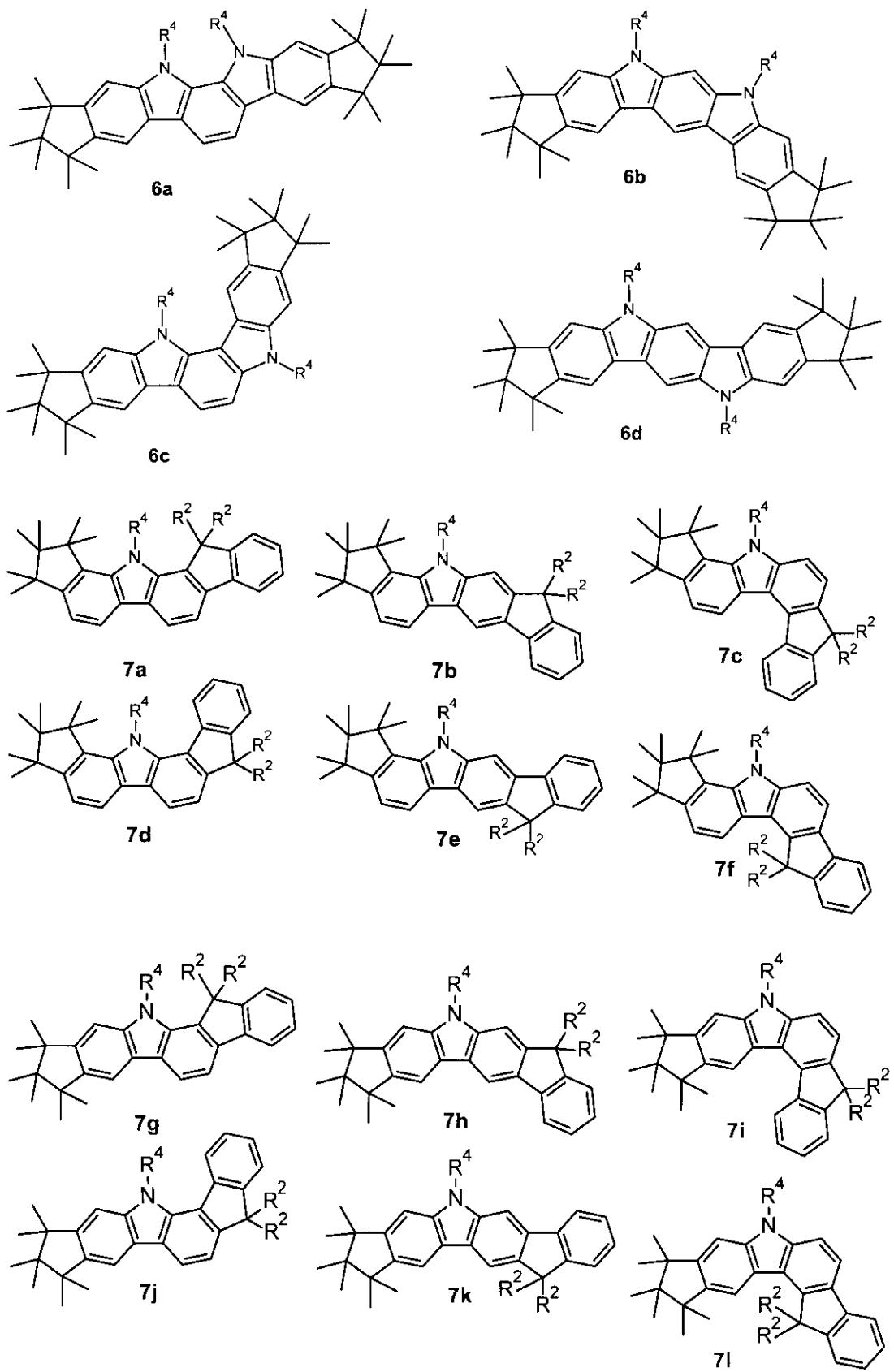
【化 4 - 1】



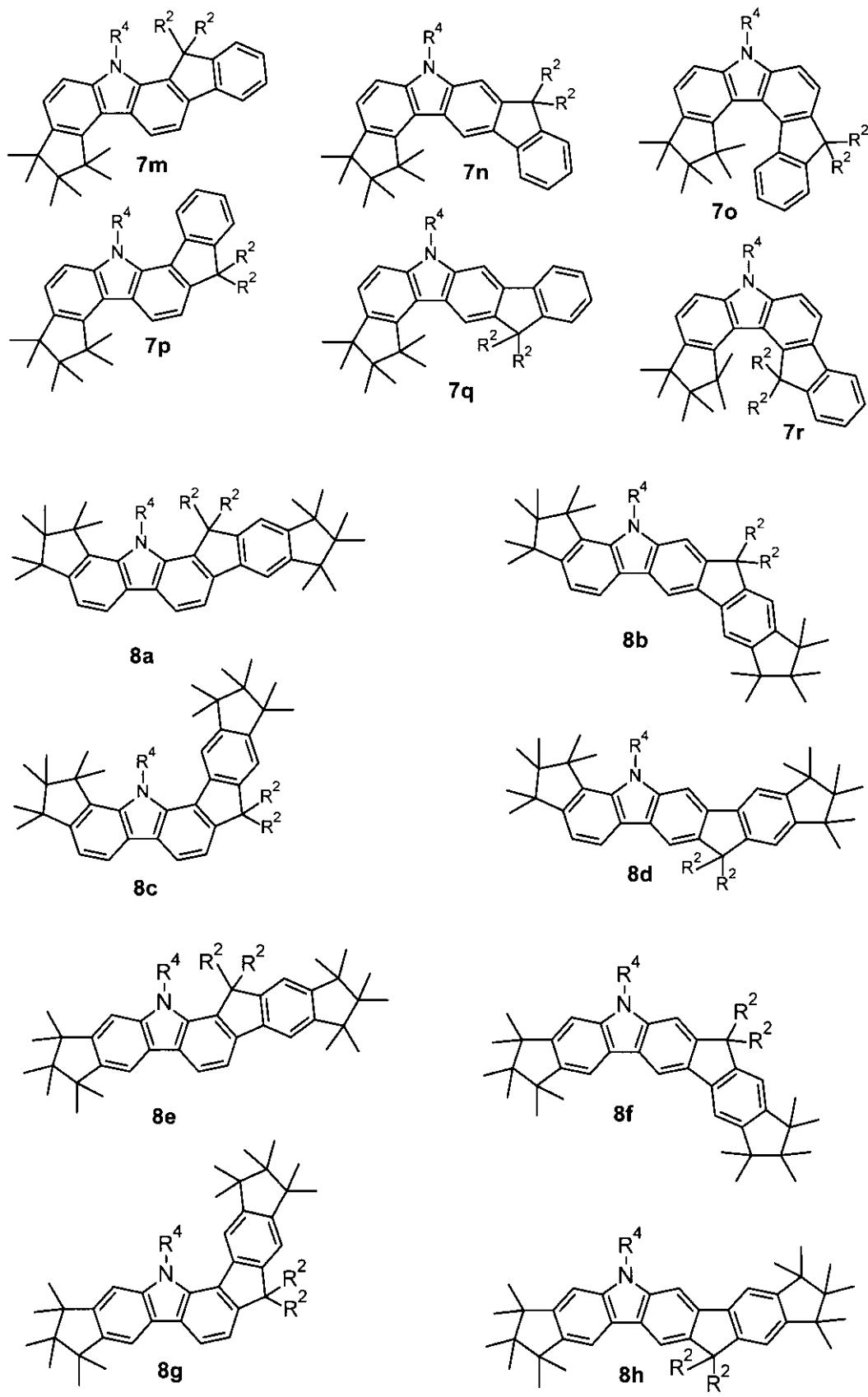
【化 4 - 2】



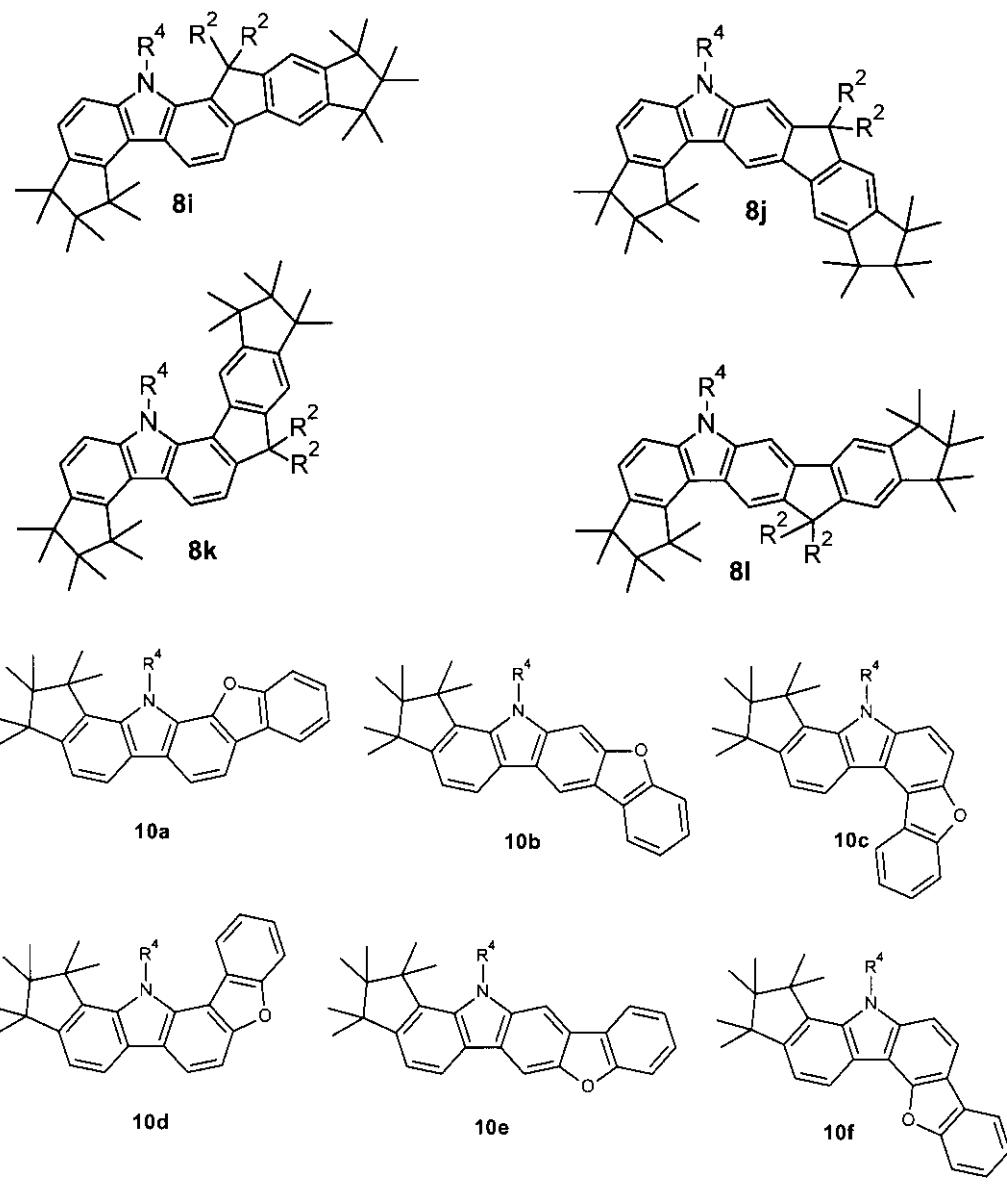
【化 4 - 3】



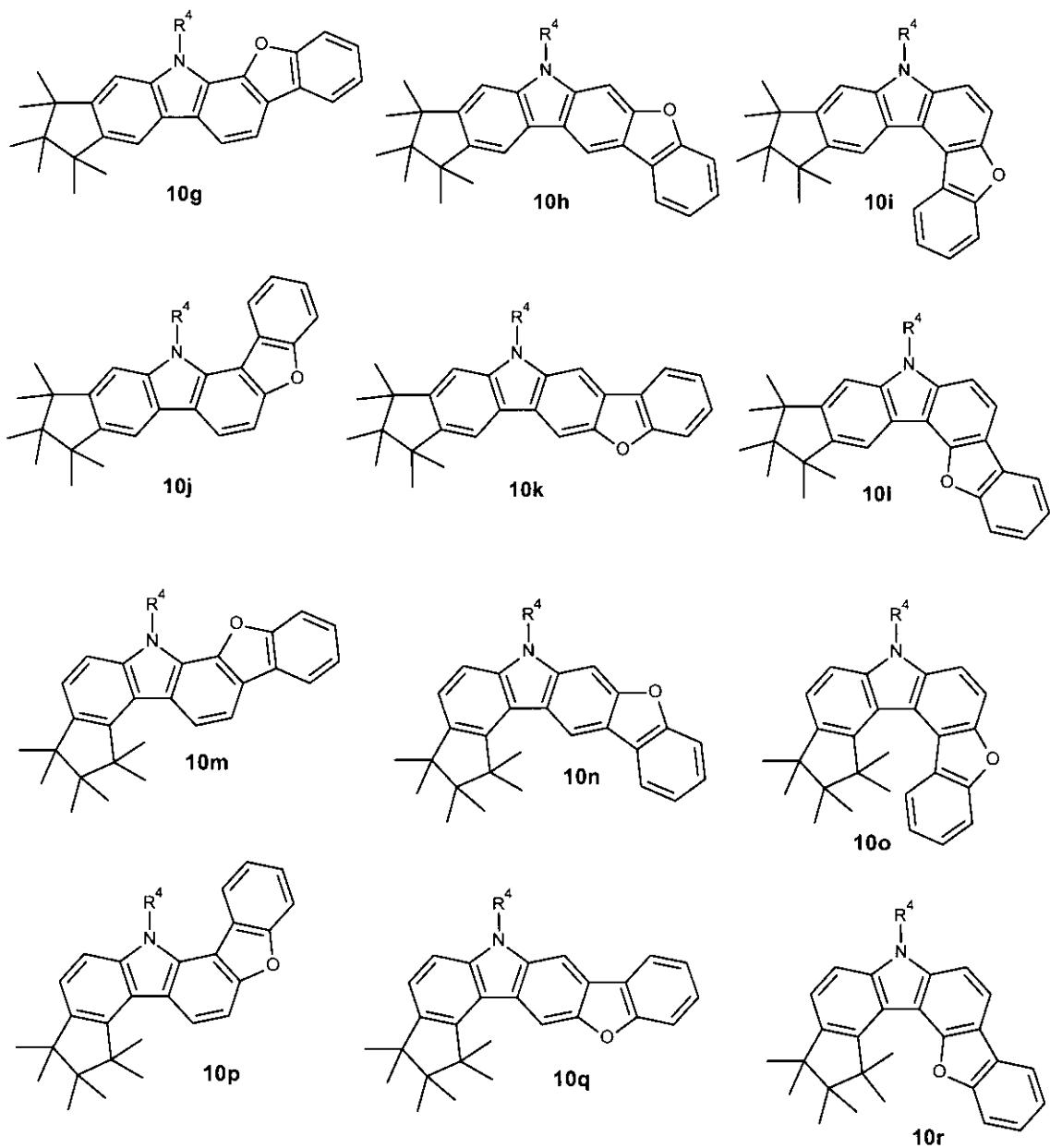
【化4-4】



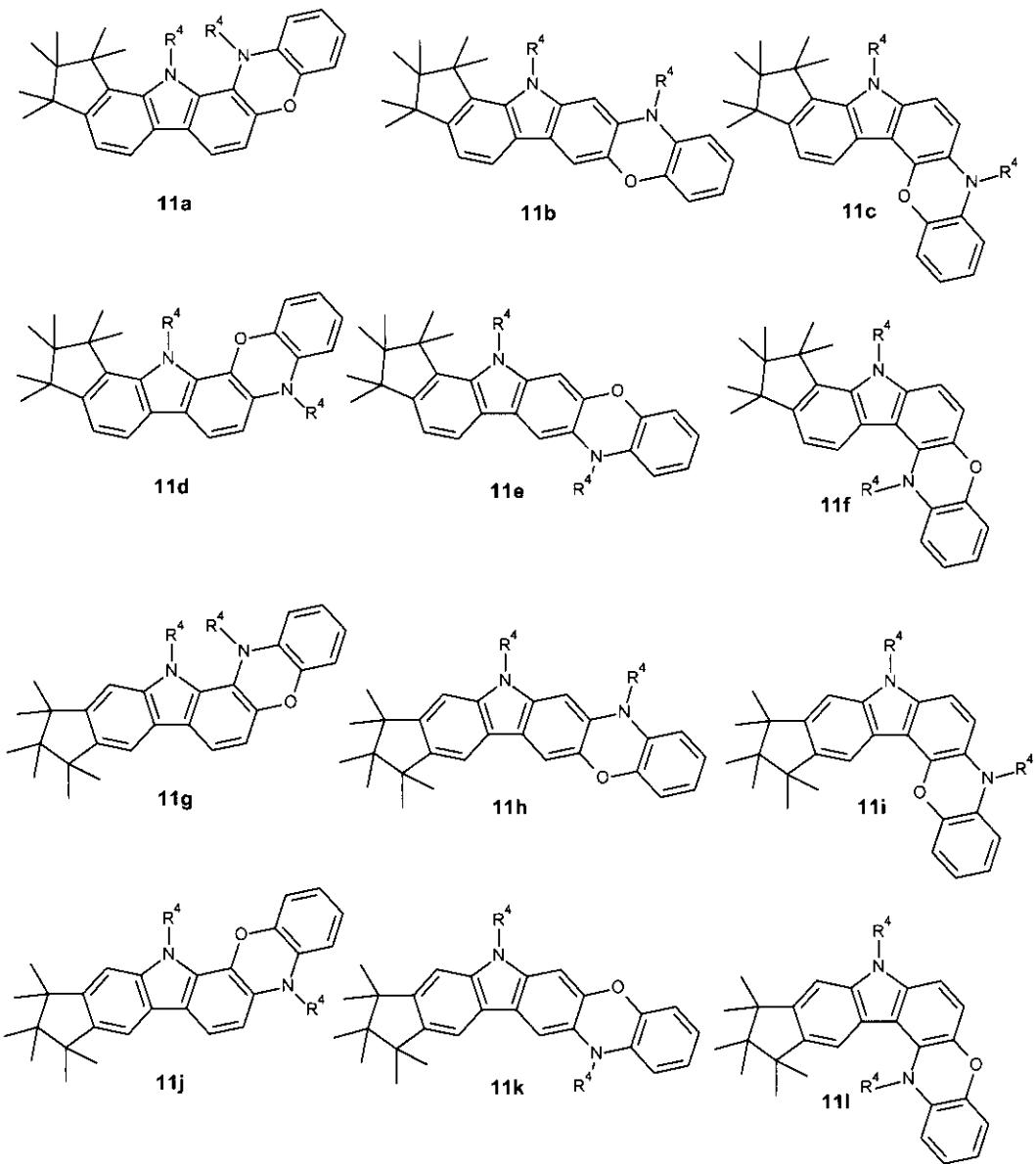
【化 4 - 5】



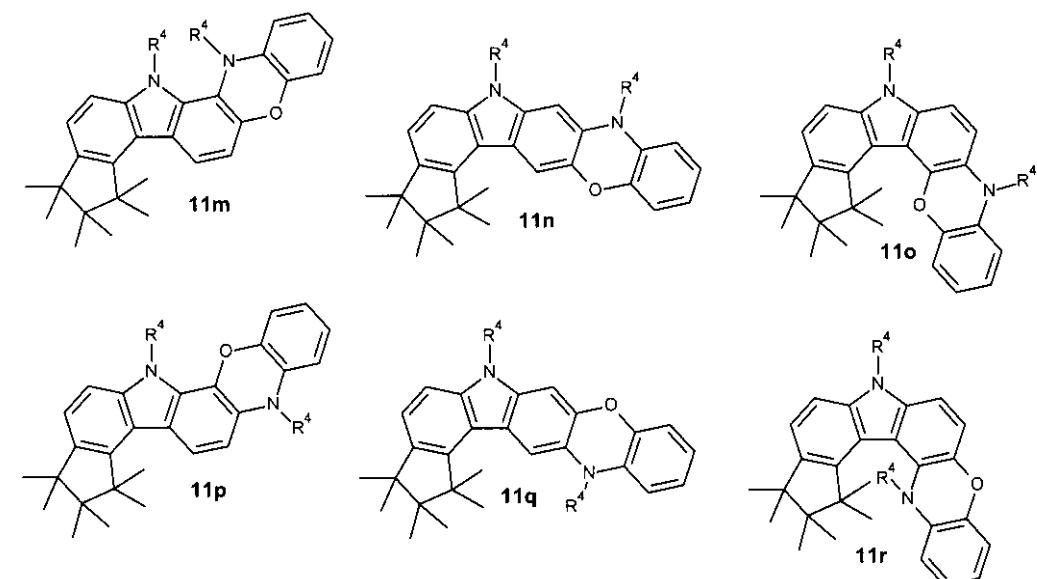
【化 4 - 6】



【化 4 - 7】



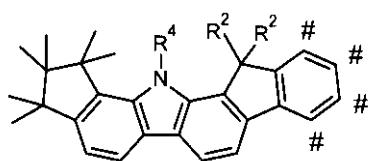
【化 4 - 8】



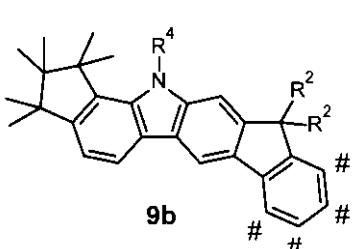
【請求項 5】

以下の式(9a)～(9r)から選ばれる、請求項1記載の化合物：

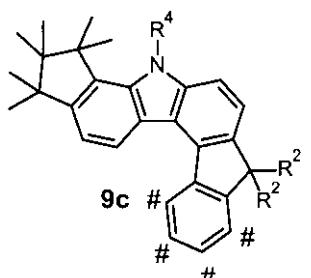
【化5-1】



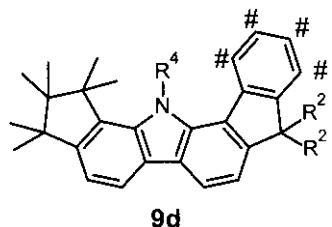
9a



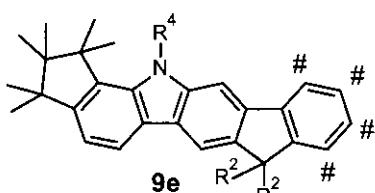
9b



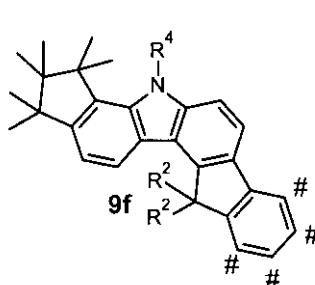
9c



9d

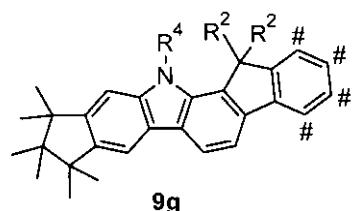


9e

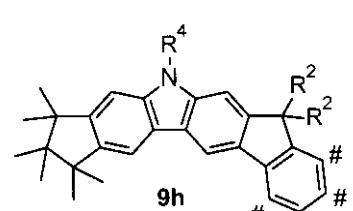


9f

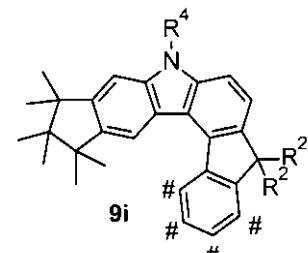
【化5-2】



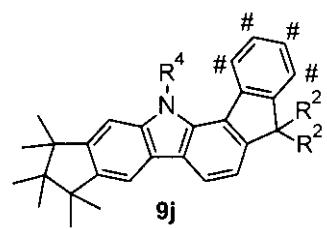
9g



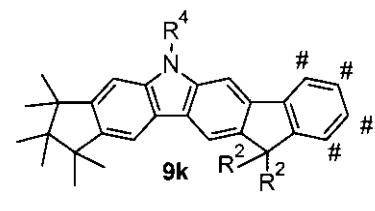
9h



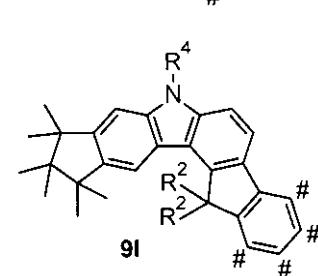
9i



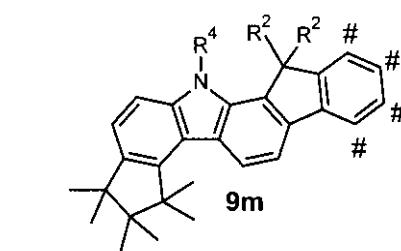
9j



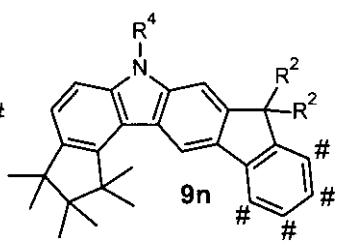
9k



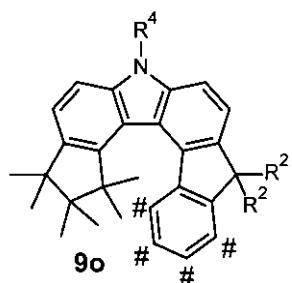
9l



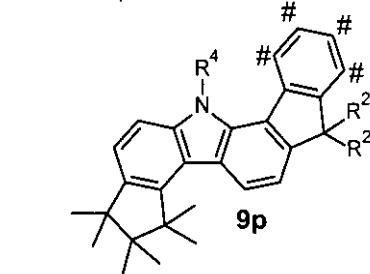
9m



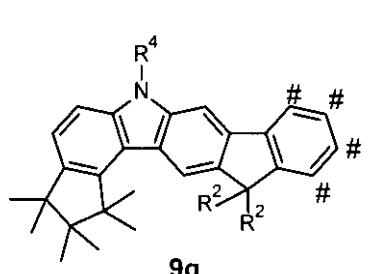
9n



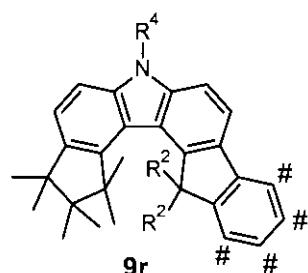
9o



9p

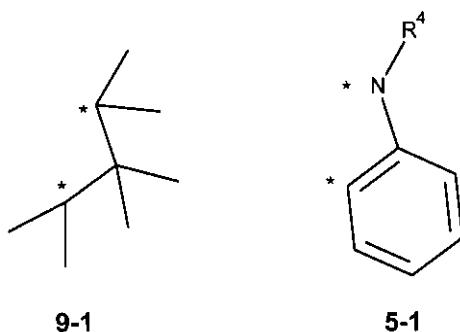


9q



9r

【化6】

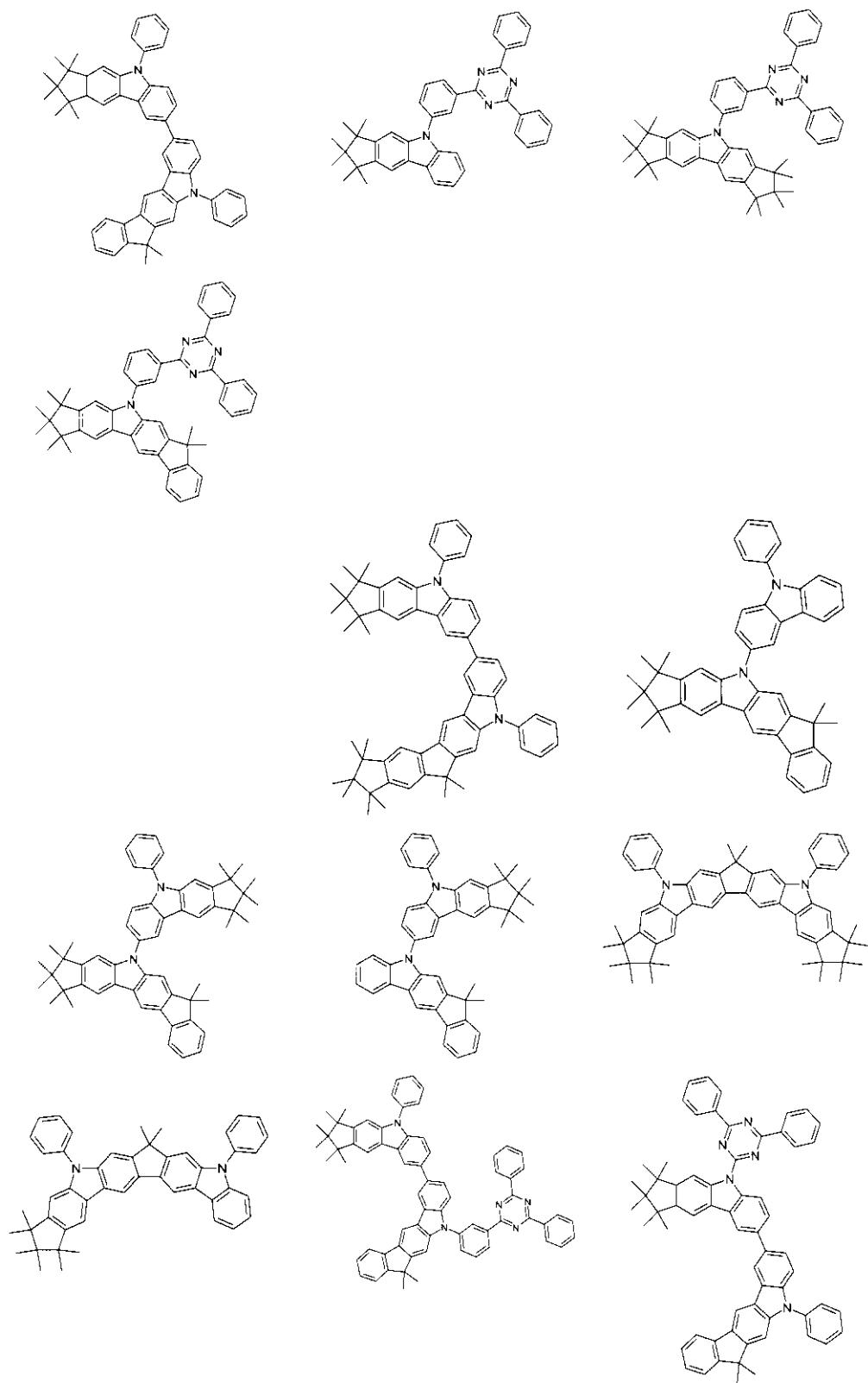


式中、#で印された2個のビシナルな芳香族炭素原子は、*で印された以下の式(9-1)の炭素原子または式(5-1)の炭素原子と窒素原子に結合する。

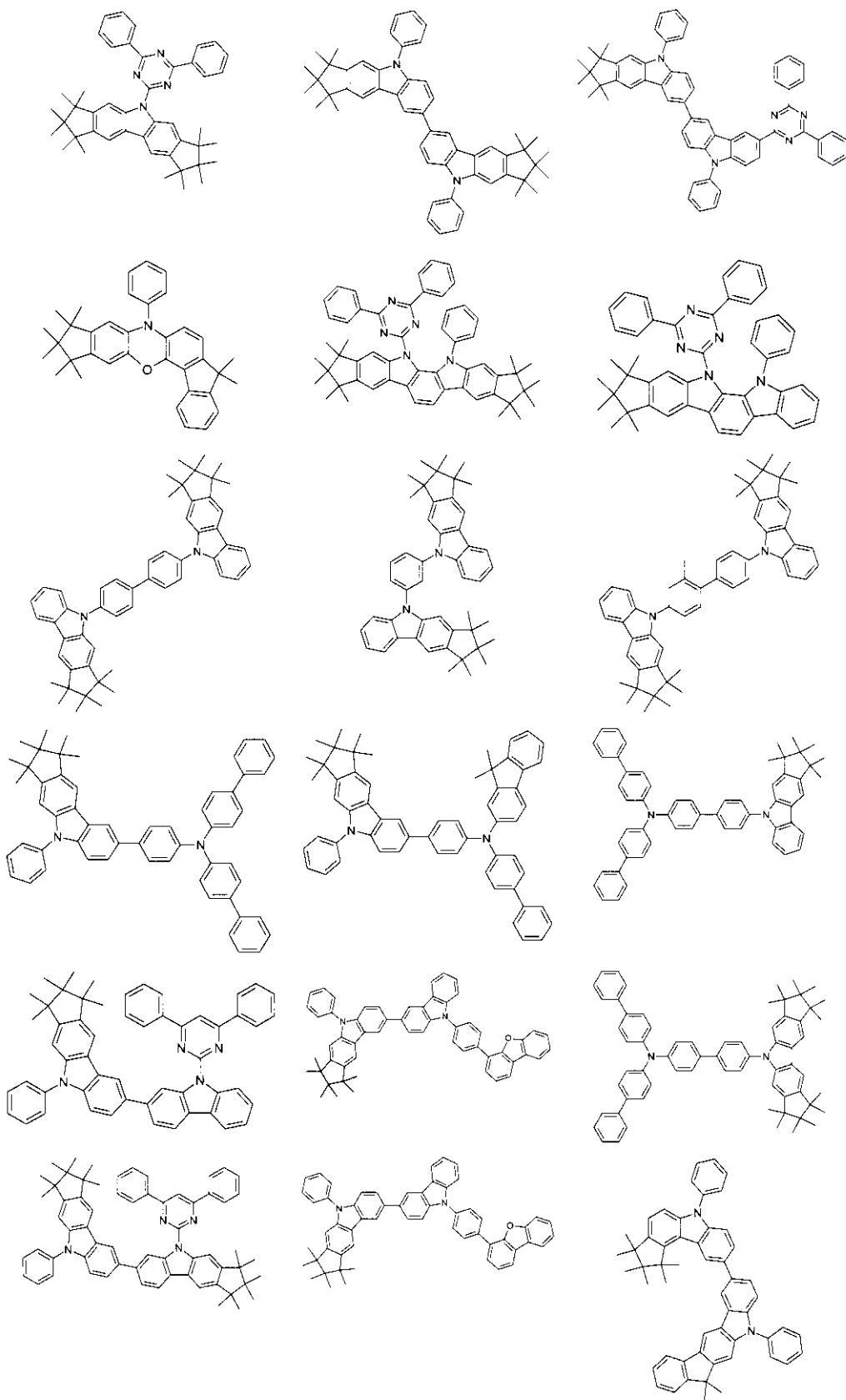
【請求項6】

以下の式から選ばれる、請求項1記載の化合物。

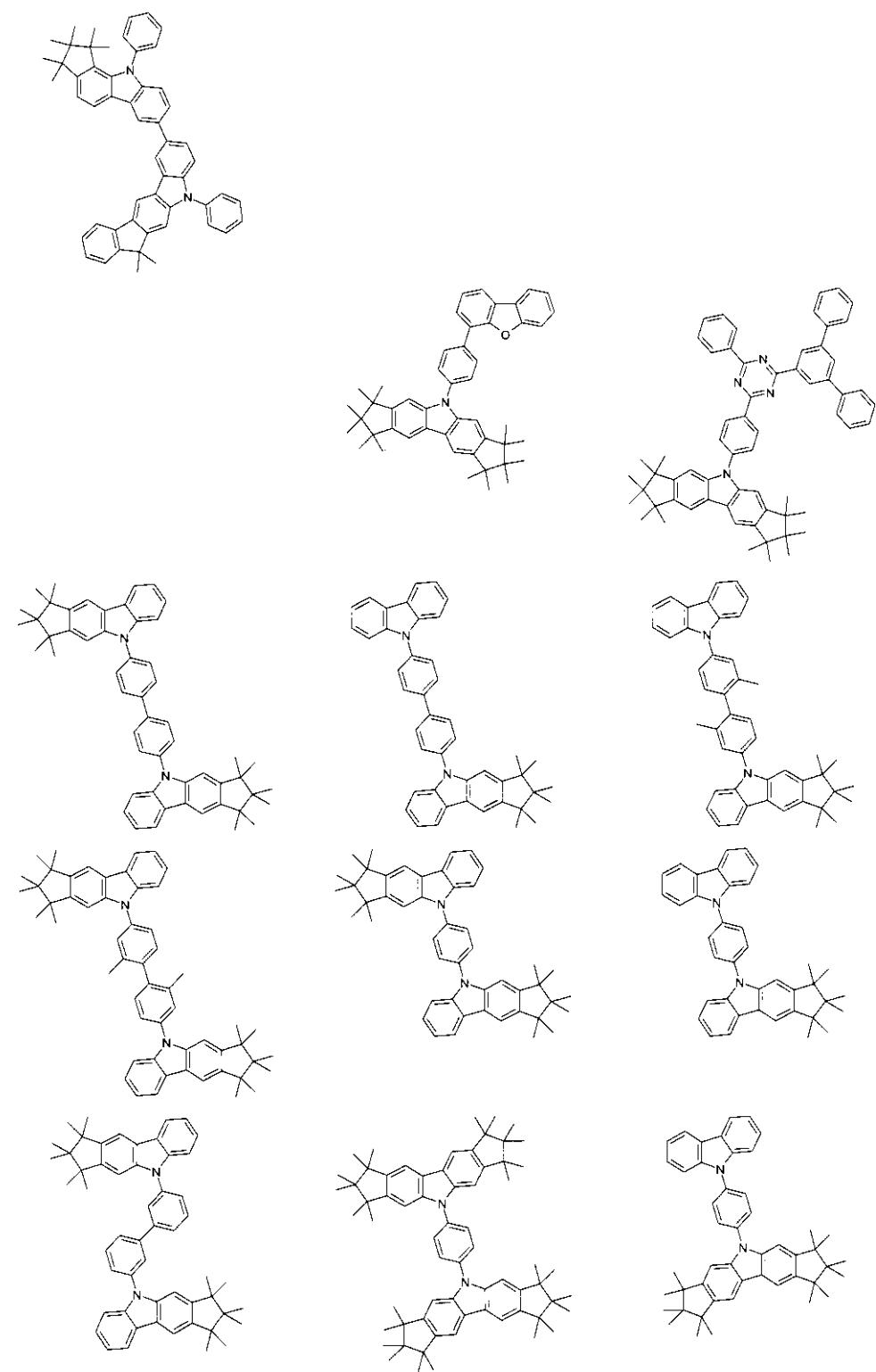
【化 7 - 1】



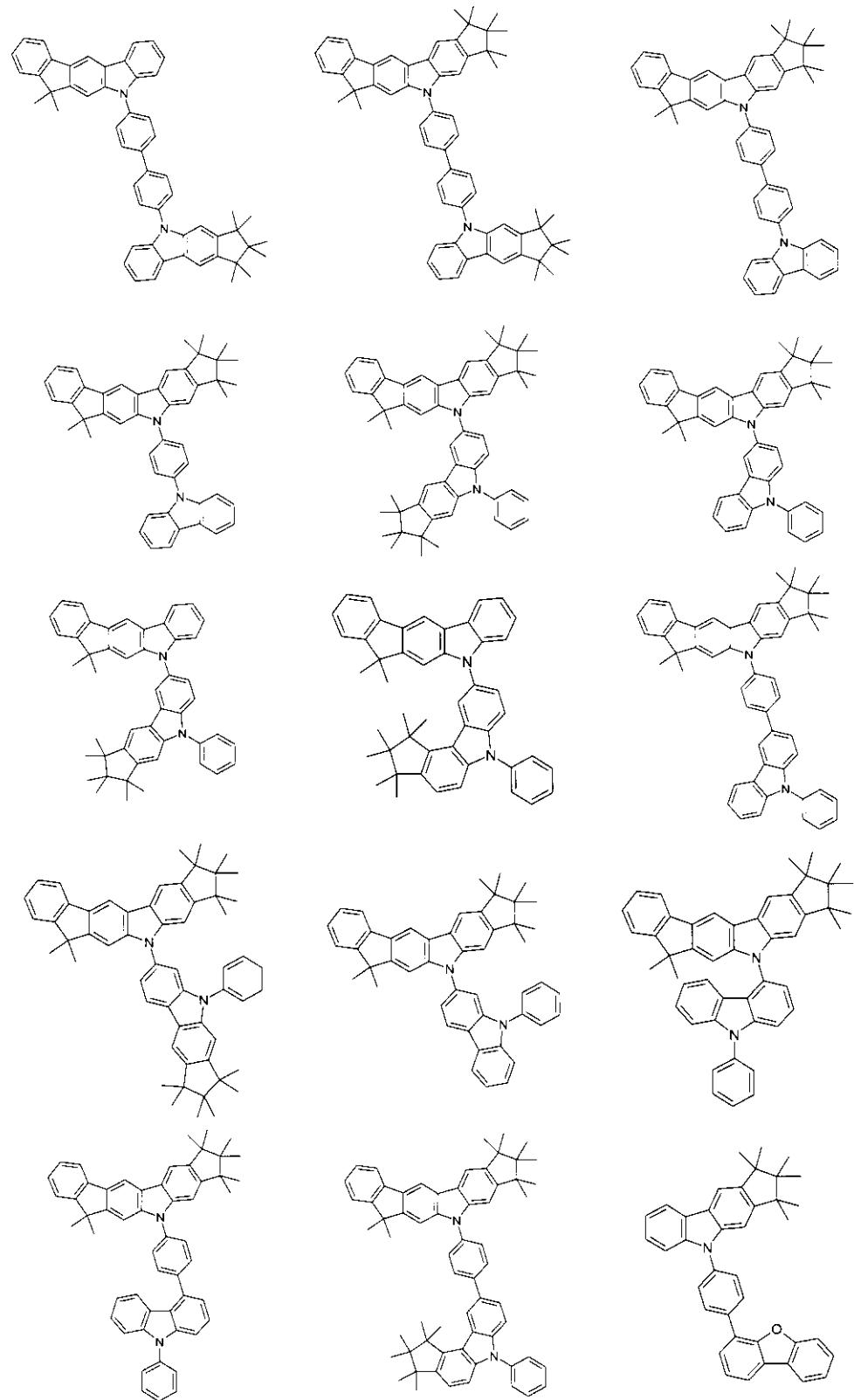
【化 7 - 2】



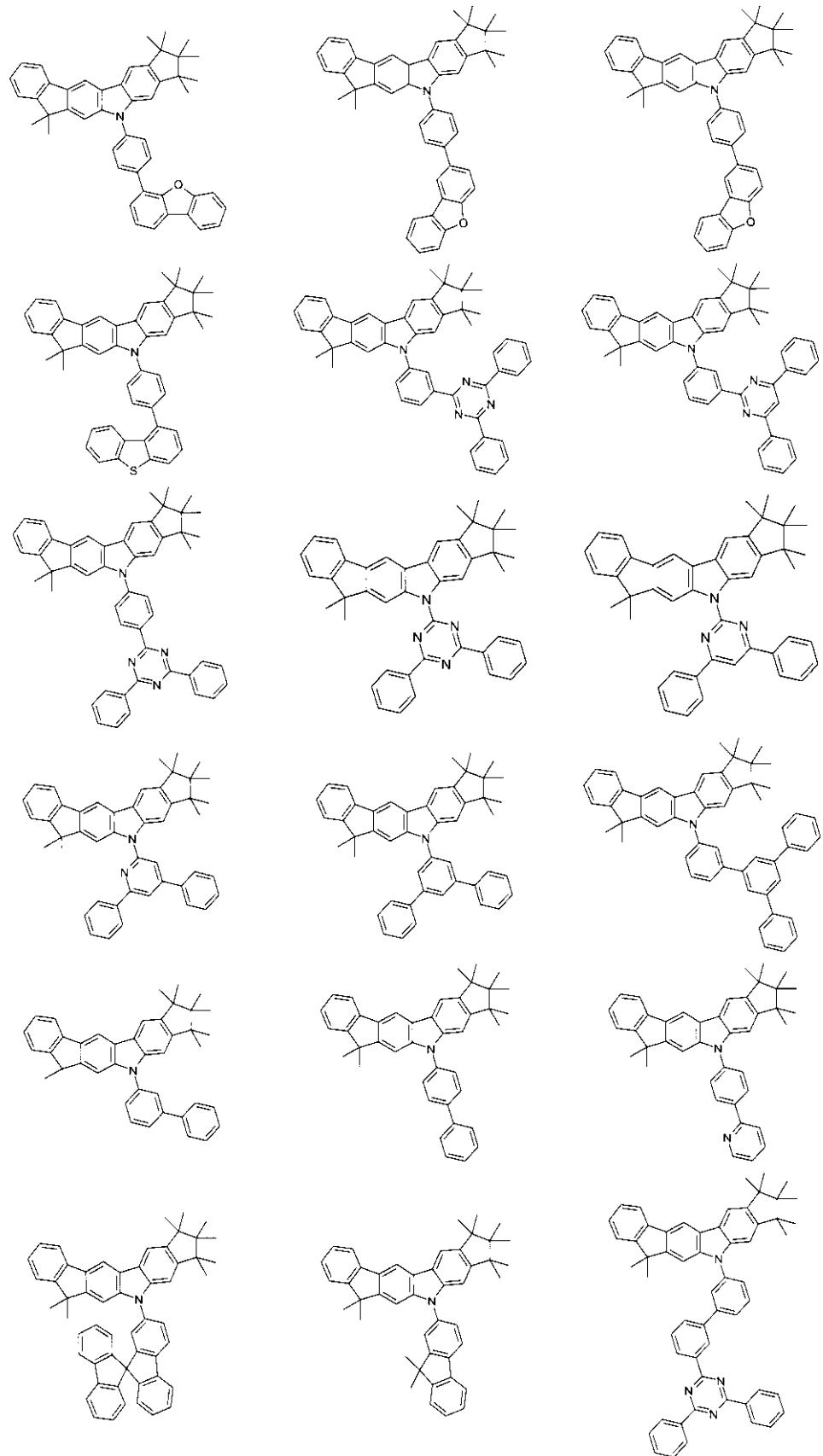
【化 7 - 3】



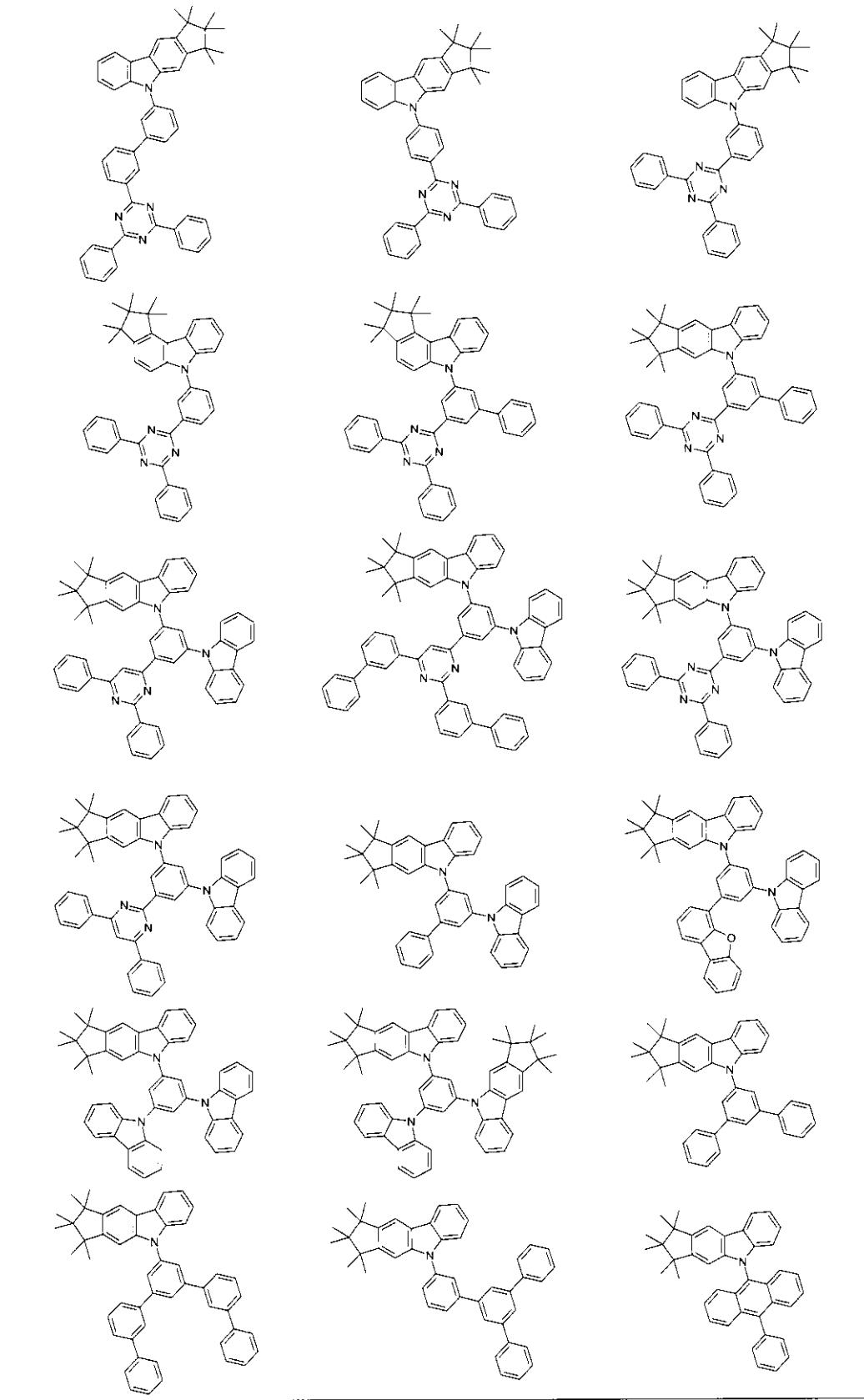
【化 7 - 4】



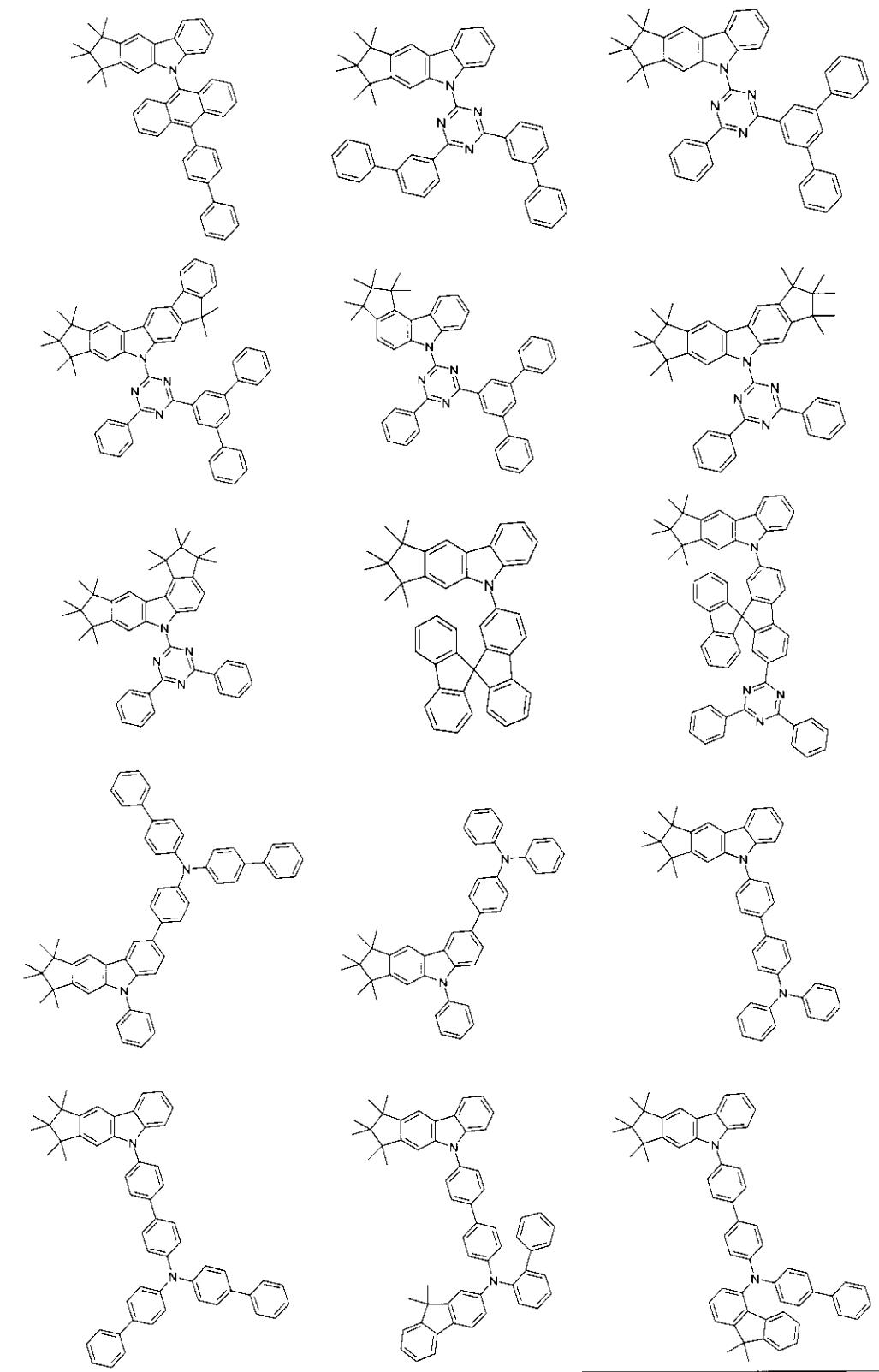
【化 7 - 5】



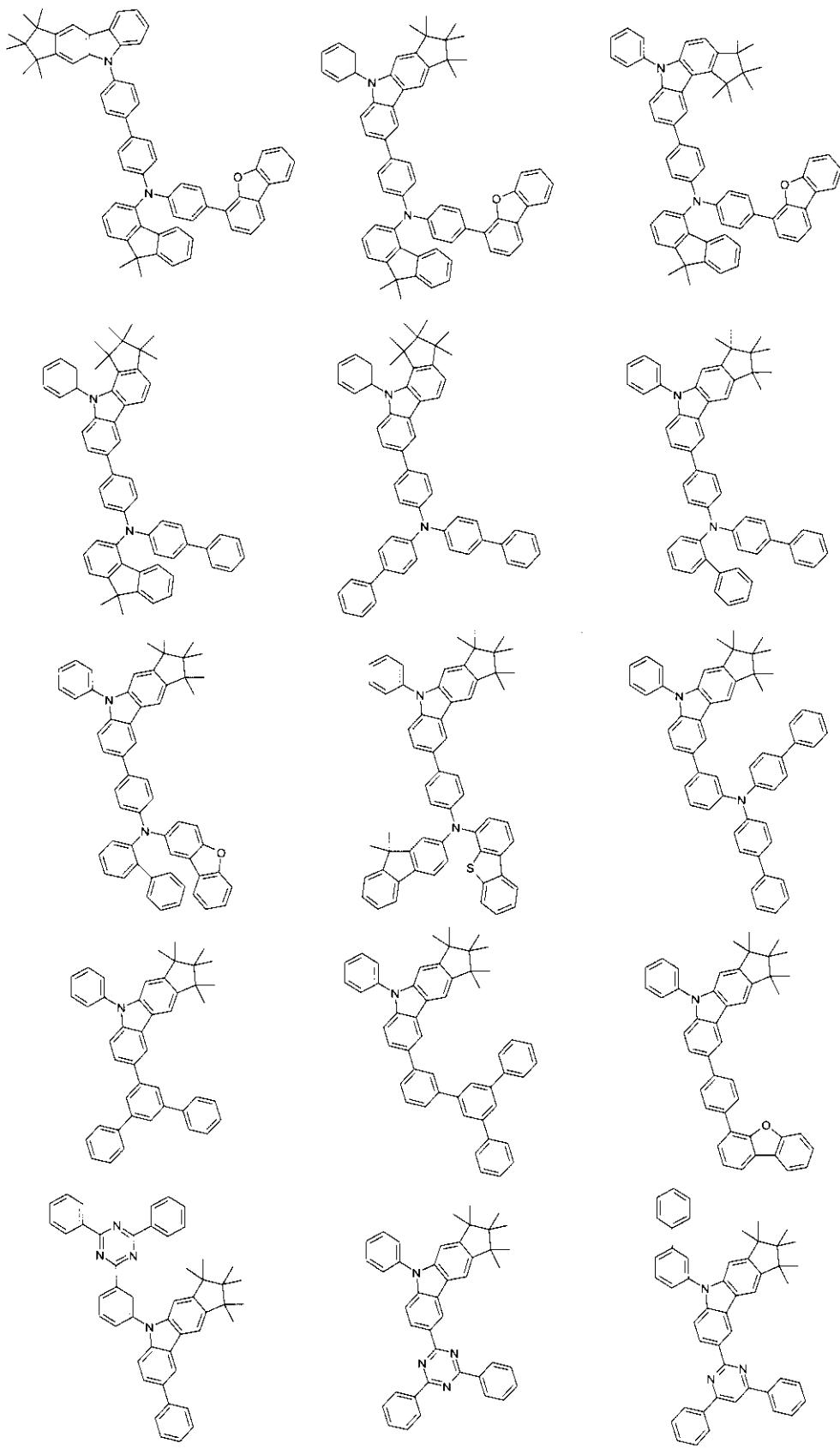
【化 7 - 6】



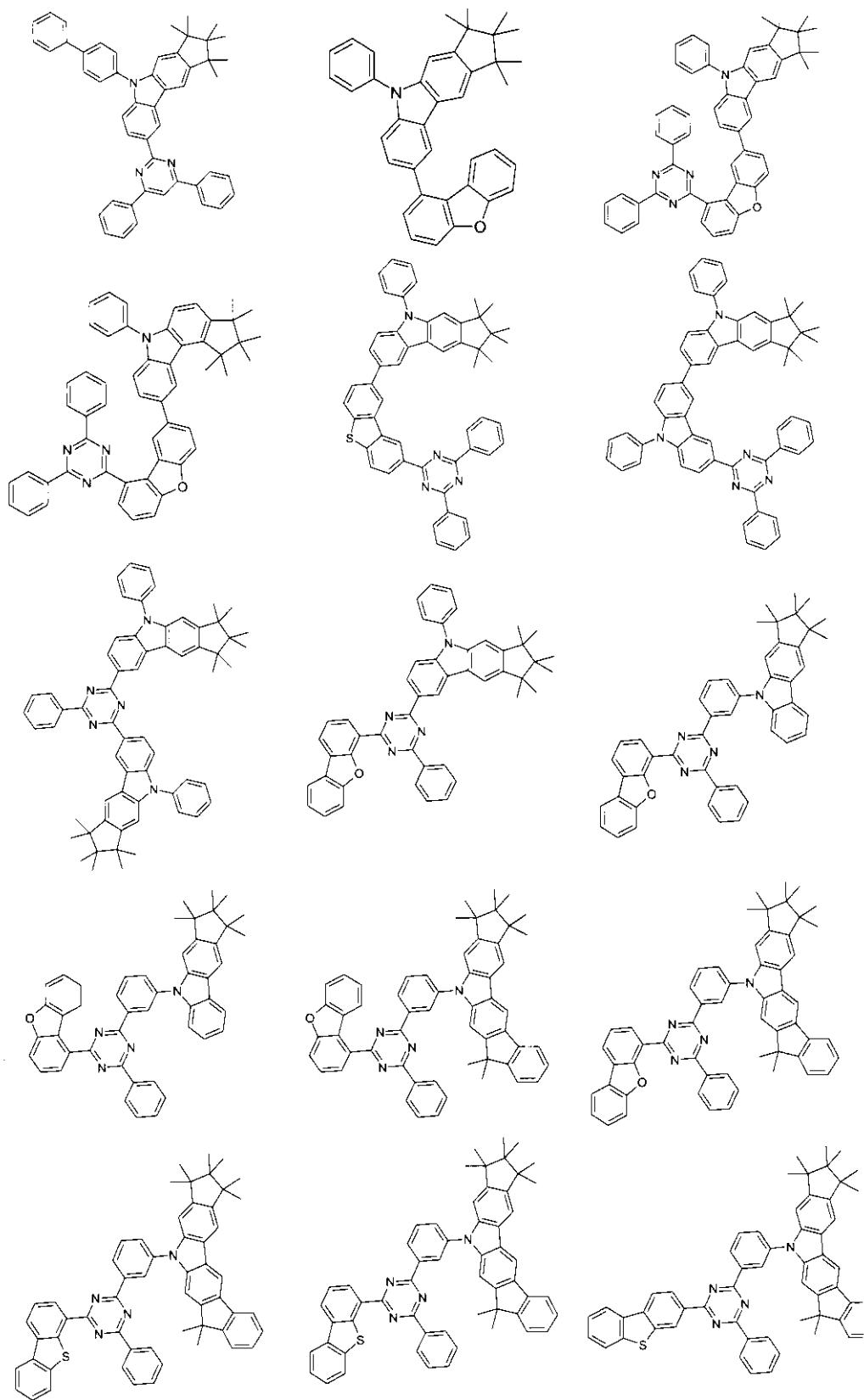
【化 7 - 7】



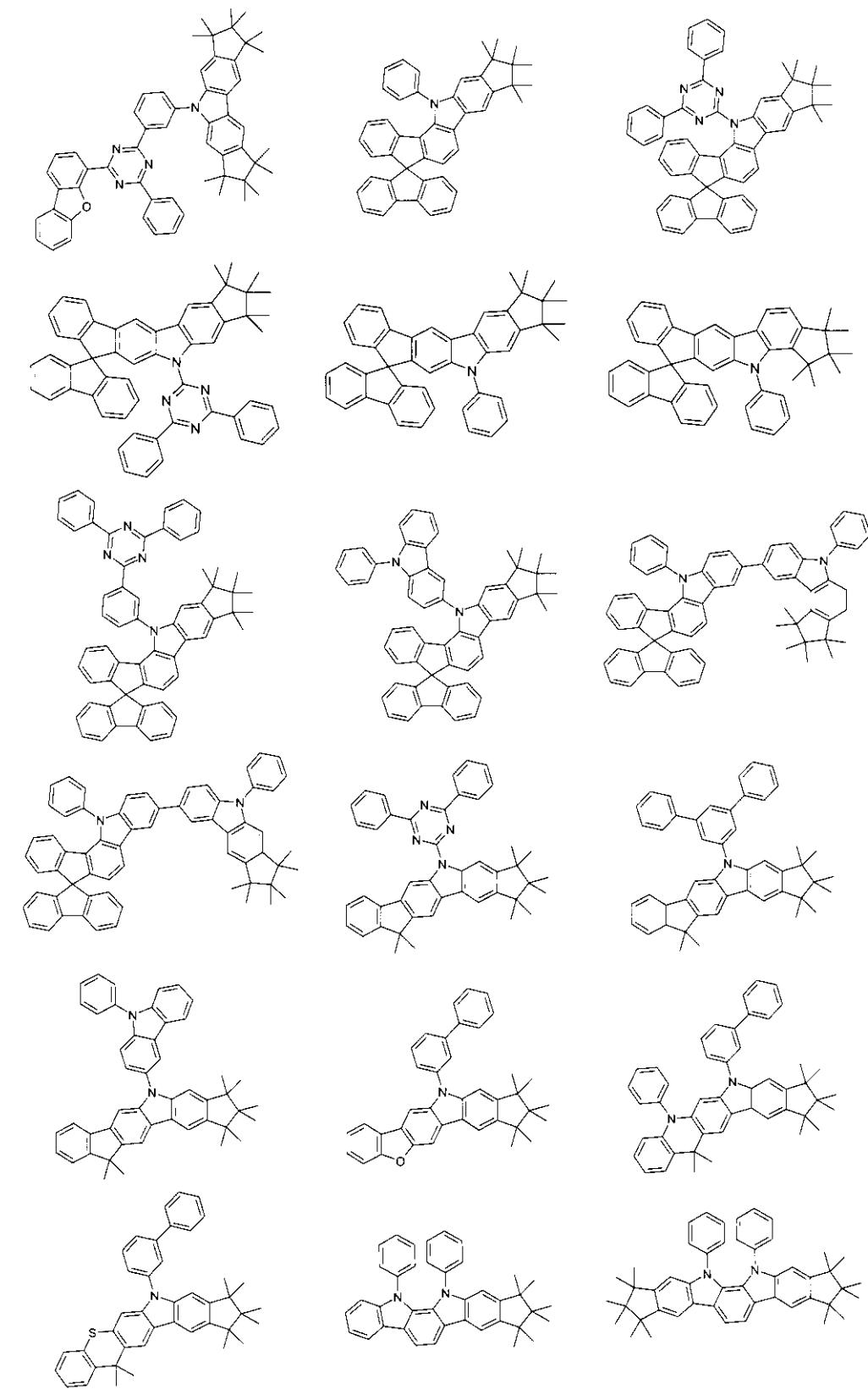
【化 7 - 8】



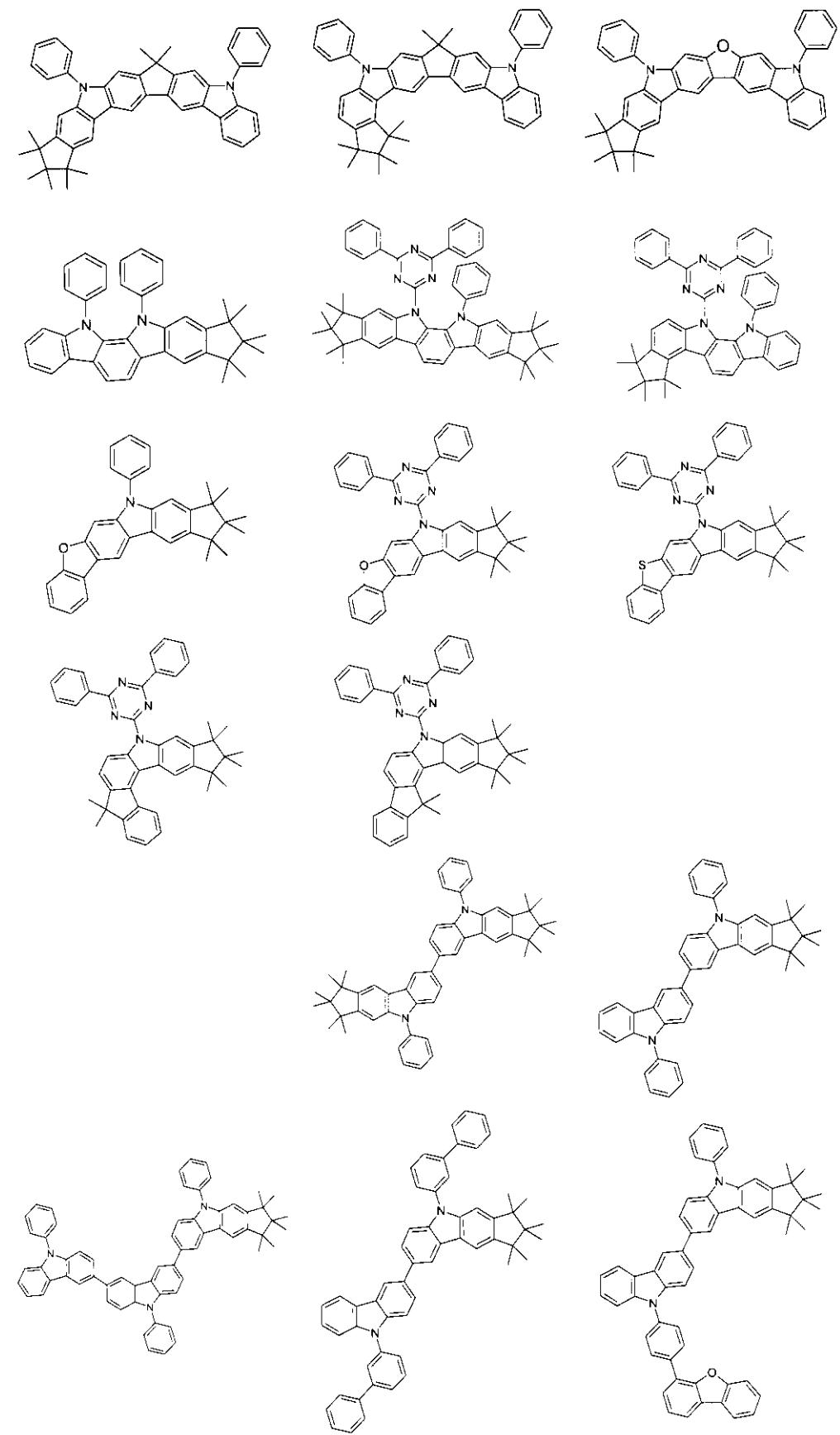
【化 7 - 9】



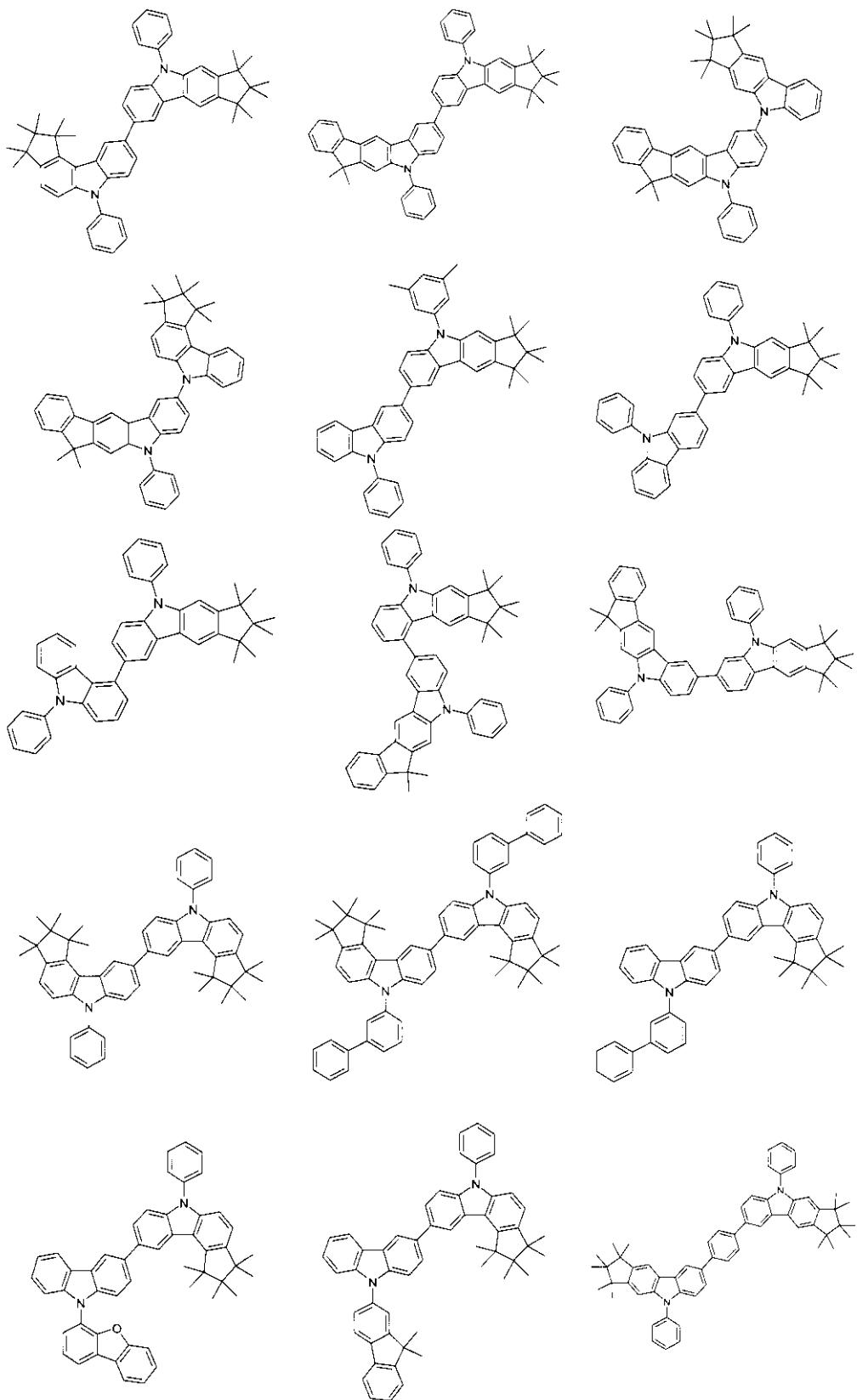
【化 7 - 10】



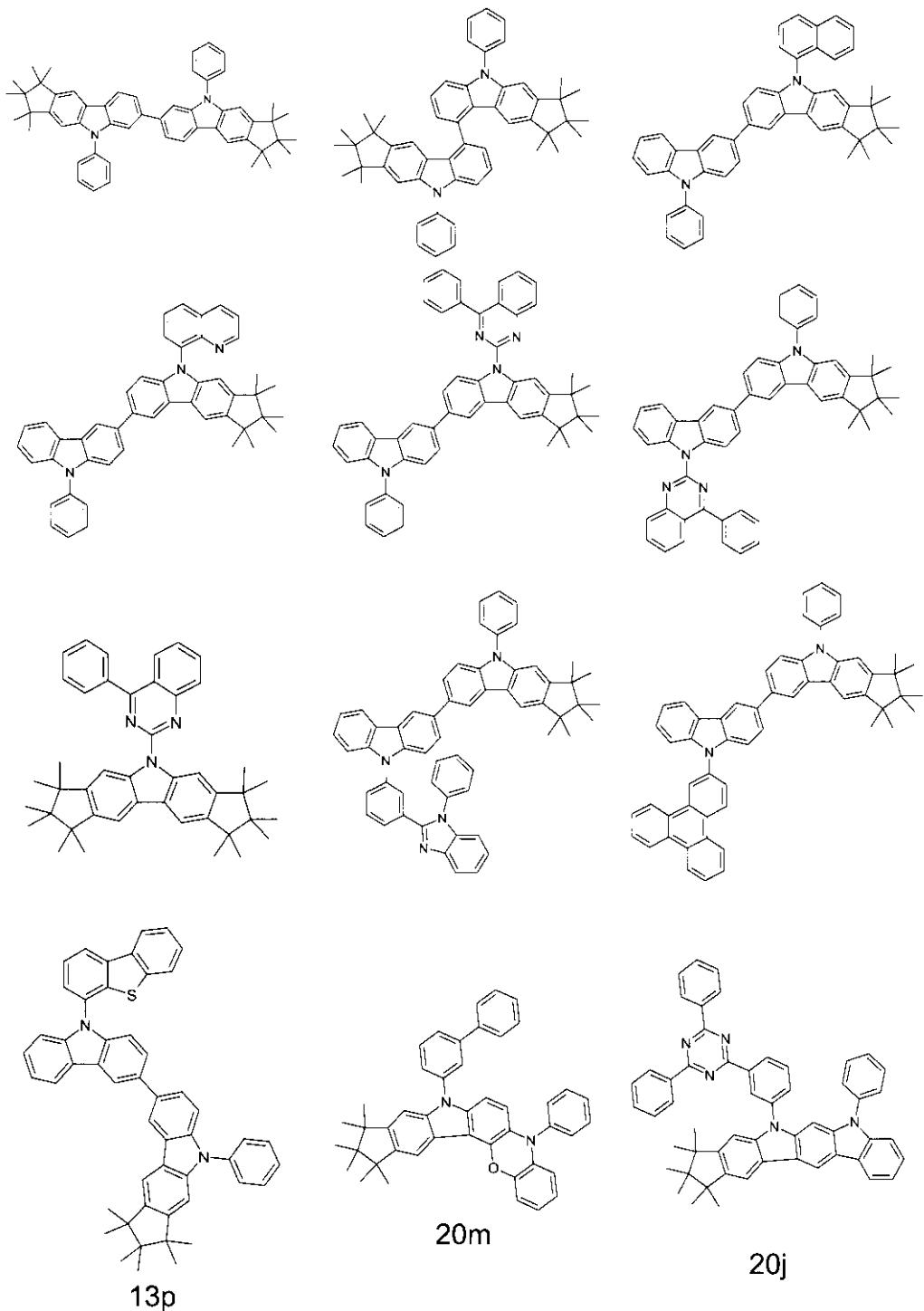
【化 7 - 11】



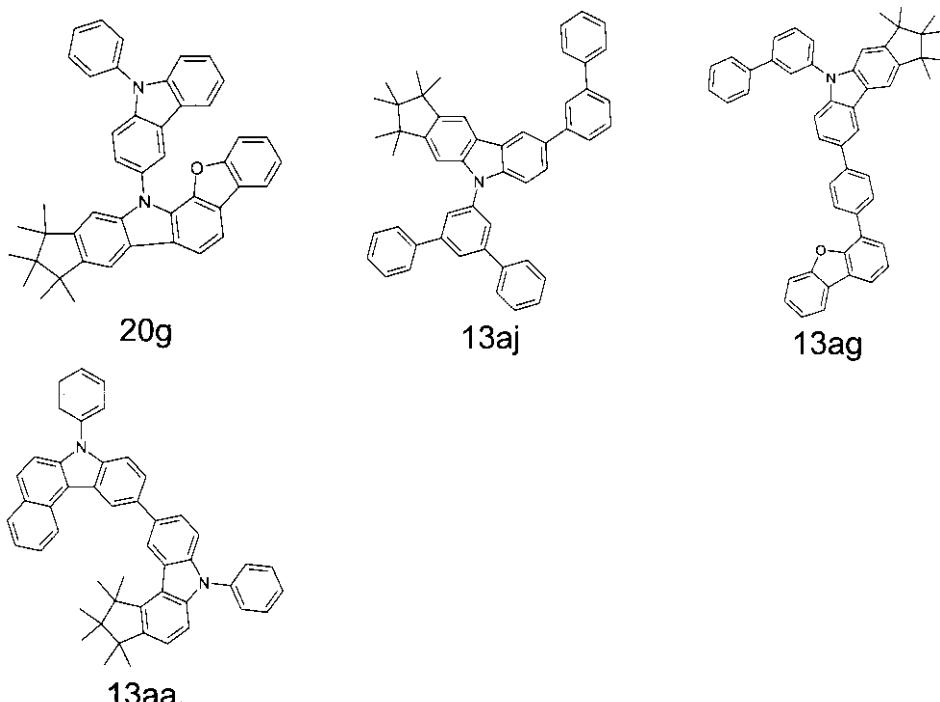
【化 7 - 1 2】



【化 7 - 13】



【化 7 - 1 4】



【請求項 7】

請求項 1 ~ 6 何れか 1 項記載の少なくとも一つの化合物と、正孔注入材料 (HIM)、正孔輸送材料 (HTM)、正孔ブロック材料 (HBM)、電子注入材料 (EIM)、電子輸送材料 (ETM)、電子ブロック材料 (EBM)、ホスト材料、マトリックス材料、ワイドバンドギャップ材料、蛍光エミッター、燐光エミッター、n - ドーパントおよびp - ドーパントから選ばれる少なくとも一つの機能性材料を含む組成物。

【請求項 8】

機能性材料が、マトリックス材料から選ばれる、請求項7 記載の組成物。

【請求項 9】

少なくとも一つの燐光エミッターをさらに含む、請求項7 または8 記載の組成物。

【請求項 10】

さらに少なくとも一つのワイドバンドギャップ材料をさらに含み、ここで、ワイドバンドギャップ材料は、3.5 eV 以上のバンドギャップを有する、請求項7 ~ 9 何れか 1 項記載の組成物。

【請求項 11】

請求項 1 ~ 6 何れか 1 項記載の少なくとも一つの化合物または請求項7 ~ 10 何れか 1 項記載の組成物と、少なくとも一つの溶媒を含む、調合物。

【請求項 12】

請求項 1 ~ 6 何れか 1 項記載の少なくとも一つの化合物または請求項7 ~ 10 何れか 1 項記載の組成物の、電子素子での使用。

【請求項 13】

請求項 1 ~ 6 何れか 1 項記載の少なくとも一つの化合物または請求項7 ~ 10 何れか 1 項記載の組成物を含む電子素子。

【請求項 14】

電子素子が、有機集積回路 (OIC)、有機電界効果トランジスタ (OFET)、有機薄膜トランジスタ (OTFT)、有機エレクトロルミネッセンス素子、有機ソーラーセル (OSC)、有機光学検査器、有機光受容器から選ばれる、請求項13 記載の電子素子。

【請求項 15】

素子が、有機発光トランジスタ (OLET)、有機電場消光素子 (OFQD)、有機発光電子化学セル (OLEC)、有機レーザーダイオード (O-Laser) および有機発

光ダイオード(OLED)より成る群から選ばれる有機エレクトロルミネッセンス素子であることを特徴とする、請求項13または14記載の電子素子。

【請求項16】

有機発光電子化学セルまたは有機レーザーダイオードである、請求項15記載の電子素子。

【請求項17】

方法は、気相堆積によりまたは溶液から、素子の少なくとも一つの有機層を堆積することを含む、請求項13～15何れか1項記載の電子素子の製造方法。

【誤訳訂正2】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0008

【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0008】

式中、使用される記号には、以下が適用される；

Yは、出現毎に同一であるか異なり $C(R^1)_2$ 、 $N(R^1)$ 、 $C(=O)$ 、 $C(=S)$ 、OまたはS、好ましくは、 $C(R^1)_2$ または $N(R^1)$ であり；

Xは、出現毎に同一であるか異なり、Xは、 CR^1 またはNであり；ここで、X基の何れかが CR^1 であることが好ましく；

R^1 は、出現毎に同一であるか異なり、 R^1 は、H、D、F、Cl、Br、I、CHO、 $N(Ar^1)_2$ 、 $C(=O)Ar^1$ 、 $P(=O)(Ar^1)_2$ 、 $S(=O)Ar^1$ 、 $S(=O)_2Ar^1$ 、 $CR^2=CR^2Ar^1$ 、CN、 NO_2 、 $Si(R^2)_3$ 、 $B(OR^2)_2$ 、 $B(R^2)_2$ 、 $B(N(R^2)_2)_2$ 、 OSO_2R^2 、1～40個のC原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基、3～40個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基(夫々、1以上の R^2 により置換されてもよく、1以上の隣接しないメチレン基は、 $R^2C=CR^2$ 、C-C、 $Si(R^2)_2$ 、Ge(R^2)₂、Sn(R^2)₂、C=O、C=S、C=Se、C=N R^2 、P(=O)(R^2)、SO、 SO_2 、NR²、O、Sもしくは $C(=O)NR^2$ で置き代えられてよく、ここで、1以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、CN、 NO_2 を含むことができる。)または、1以上の基 R^2 により各場合に置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、または、1以上の基 R^2 により随意に置換されてよい5～40個の芳香族環原子を有するアリールオキシもしくはヘテロアリーオキシ基または、1以上の基 R^2 により随意に置換されてよい5～40個の芳香族環原子を有するアラルキルもしくはヘテロアラルキル基またはこれらの構造の組み合わせを含み；ここで、2個以上の置換基 R^1 は、それらが結合する原子と一緒に、もしくは2個の置換基 R^1 は、それらが結合する原子と一緒に、モノあるいはポリ環状の脂肪族もしくは芳香族環構造を互いに形成してもよく；

R^2 は、出現毎に同一であるか異なり、 R^2 は、H、D、F、Cl、Br、I、 $N(R^3)_2$ 、CN、 NO_2 、 $Si(R^3)_3$ 、 $B(OR^3)_2$ 、 $C(=O)R^3$ 、 $P(=O)(R^3)_2$ 、 $S(=O)R^3$ 、 $S(=O)_2R^3$ 、 OSO_2R^3 、1～40個のC原子を有する直鎖アルキル、アルコキシもしくはチオアルコキシ基、2～40個のC原子を有する直鎖アルケニルもしくはアルキニル基、3～40個のC原子を有する分岐あるいは環状アルキル、アルケニル、アルキニル、アルコキシ、アルキルアルコキシもしくはチオアルコキシ基(夫々、1以上の基 R^3 により随意に置換されてもよく、1以上の隣接しないCH₂基は、 $R^3C=CR^3$ 、C-C、 $Si(R^3)_2$ 、Ge(R^3)₂、Sn(R^3)₂、C=O、C=S、C=Se、C=N R^3 、P(=O)(R^3)、SO、 SO_2 、NR³、O、SもしくはCON R^3 で随意に置き代えられてよく、ここで、1以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、CNもしくは NO_2 で随意に置き代えられてよい。)または、1以上の基 R^3 により各場合に置換されてよい5～60個の芳香族環原子を有する芳香族もしくは複素環式芳香族環構造、または、1以上の基 R^3 により随意に置換されてよい5～4

0 個の芳香族環原子を有するアリールオキシ、アラルコキシもしくはヘテロアリーオキシ基または、1 以上の基 R³ により随意に置換されてよい 10 ~ 40 個の芳香族環原子を有するジアリールアミノ基、ジヘテロアリールアミノ基もしくはアリールヘテロアリールアミノ基またはこれらの基の 1 以上の組み合わせを含み；ここで、2 個以上の置換基 R² は、モノあるいはポリ環状の脂肪族もしくは芳香族環構造を互いに形成してもよく、ここで、好ましくは、2 個以上のジェミナルおよびビシナルな置換基 R² は、単一のモノあるいはポリ環状の脂肪族もしくは芳香族環構造を形成してもよく；

R³ は、出現毎に同一であるか異なり、R³ は、H、D、F、1 以上の H 原子が F で置換することができる 1 ~ 20 個の C 原子を有する脂肪族、芳香族および/または複素環式芳香族炭化水素基を含み；ここで、1 以上の H 原子は F で置き代えられてよく；ここで、2 個以上の置換基 R³ は、モノあるいはポリ環状の脂肪族もしくは芳香族環構造を互いに形成してもよく、ここで、好ましくは、ジェミナルおよびビシナルな置換基 R³ は、単一のモノあるいはポリ環状の脂肪族もしくは芳香族環構造を形成せず；

R⁴ は、出現毎に同一であるか異なり、R⁴ は、Ar¹、C₁ - C₄₀ アルキル、C₁ - C₄₀ 不飽和基、C₃ - C₄₀ 環状アルキルもしくは、C₃ - C₄₀ 不飽和環状基を含む第 1 の部分、さらに R² を含む部分を含み、ここで、1 以上のメチレン基は、好ましくは、非ビシナルなメチレン基は、R² C = C R²、C=C、Si(R²)₂、Ge(R²)₂、Sn(R²)₂、C=O、C=S、C=Se、C=N R²、P(=O)(R²)、SO、SO₂、NR²、O もしくは CON R² から選ばれる置換基を含むことができ、ここで、1 以上の水素原子は、D、F、Cl、Br、I、CN、NO₂ もしくは Ar¹ から選ばれる置換基を含むことができ、

Ar¹ は、出現毎に同一であるか異なり、Ar¹ は、芳香族環、芳香族環構造、複素環式芳香族環、複素環式芳香族環構造もしくは芳香族複素環式芳香族環構造を含み；ここで、Ar¹ は、1 以上の基 R³ を含むことができ；

m は、0、1 または 2 であり、好ましくは、m は、1 であり、非常に好ましくは、m は、0 であり；

n は、0 または 1、好ましくは、0 であり；ここで、n = 0 は、両方の環が、共有単結合を介して互いに結合することを意味する。