

【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】平成 28 年 5 月 12 日 (2016.5.12)

【公表番号】特表 2014-515014 (P2014-515014A)

【公表日】平成 26 年 6 月 26 日 (2014.6.26)

【年通号数】公開・登録公報 2014-033

【出願番号】特願 2014-501544 (P2014-501544)

【国際特許分類】

C 0 7 D 487/04 (2006.01)

H 0 1 L 51/50 (2006.01)

C 0 7 D 519/00 (2006.01)

C 0 9 K 11/06 (2006.01)

C 0 7 B 61/00 (2006.01)

【F I】

C 0 7 D 487/04 1 3 6

C 0 7 D 487/04 C S P

H 0 5 B 33/14 B

H 0 5 B 33/22 D

C 0 7 D 519/00 3 1 1

C 0 7 D 487/04 1 3 9

C 0 9 K 11/06 6 9 0

C 0 7 B 61/00 3 0 0

【誤訳訂正書】

【提出日】平成 28 年 3 月 11 日 (2016.3.11)

【誤訳訂正 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

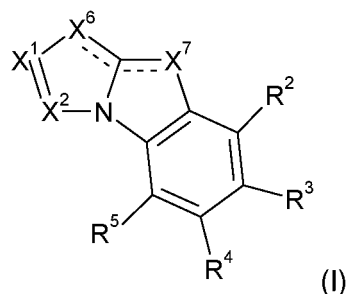
【訂正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

式：

【化 1】



[ 式中、

$X^6$  は - N = でありかつ  $X^7$  は - N R<sup>1</sup> - であるか、または

$X^7$  は = N - でありかつ  $X^6$  は - N R<sup>1</sup> - であり、

R<sup>1</sup> は、式 - A<sup>1</sup> - (A<sup>2</sup>)<sub>p</sub> - (A<sup>3</sup>)<sub>q</sub> - (A<sup>4</sup>)<sub>r</sub> - R<sup>6</sup> の基であり、

p は 0 または 1 であり、q は 0 または 1 であり、r は 0 または 1 であり、

A<sup>1</sup>、A<sup>2</sup>、A<sup>3</sup>、および A<sup>4</sup> は、互いに独立して、場合により G で置換されていてもよい C

$C_6 \sim C_{24}$  アリーレン基、または場合により G で置換されていてもよい  $C_2 \sim C_{30}$  ヘテロアリーレン基であり、この場合、

基  $A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^3$ 、および  $A^4$  は、1 つ以上の基 - ( S i R<sup>7</sup> R<sup>8</sup> ) - で中断されていてもよく、

$R^2$ 、 $R^3$ 、 $R^4$ 、および  $R^5$  は、互いに独立して、H、場合により E で置換されていてもおよび / または D で中断されていてもよい  $C_1 \sim C_{25}$  アルキル基；場合により G で置換されていてもよい  $C_6 \sim C_{24}$  アリール基、または場合により G で置換されていてもよい  $C_2 \sim C_{30}$  ヘテロアリール基であり；

$R^6$  は、H、基 - ( S i R<sup>20</sup> R<sup>21</sup> R<sup>22</sup> )、場合により G で置換されていてもよい  $C_6 \sim C_{24}$  アリール基、または場合により G で置換されていてもよい  $C_2 \sim C_{30}$  ヘテロアリール基であり；

$R^7$  および  $R^8$  は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{25}$  アルキル基または  $C_6 \sim C_{24}$  アリール基であり、これらは G で場合により置換されていてもよく；

$X^1$  は、N または C R<sup>9</sup> であり、

$X^2$  は、N または C R<sup>10</sup> であり、

$R^9$  および  $R^{10}$  は、互いに独立して、H、場合により E で置換されていてもおよび / または D で中断されていてもよい  $C_1 \sim C_{25}$  アルキル基；場合により G で置換されていてもよい  $C_6 \sim C_{24}$  アリール基、または場合により G で置換されていてもよい  $C_2 \sim C_{30}$  ヘテロアリール基であり；あるいは

$R^9$  および  $R^{10}$  は一緒に環を形成し、当該環は、場合により置換されていてもよく、

$R^{20}$ 、 $R^{21}$ 、および  $R^{22}$  は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{25}$  アルキル基または  $C_6 \sim C_{24}$  アリール基であり、これらは G で場合により置換されていてもよく；

D は、- CO -、- COO -、- S -、- SO -、- SO<sub>2</sub> -、- O -、- NR<sup>65</sup> -、- S i R<sup>70</sup> R<sup>71</sup> -、- POR<sup>72</sup> -、- CR<sup>63</sup> = CR<sup>64</sup> -、または - C C - であり、

E は、- OR<sup>69</sup>、- SR<sup>69</sup>、- NR<sup>65</sup> R<sup>66</sup>、- COR<sup>68</sup>、- COOR<sup>67</sup>、- CONR<sup>65</sup> R<sup>66</sup>、- CN、またはハロゲンであり、

G は、E、あるいは  $C_1 \sim C_{18}$  アルキル基、 $C_6 \sim C_{24}$  アリール基、F、 $C_1 \sim C_{18}$  アルキル又は O で中断されている  $C_1 \sim C_{18}$  アルキルで置換されている  $C_6 \sim C_{24}$  アリール基、 $C_2 \sim C_{30}$  ヘテロアリール基、または F、 $C_1 \sim C_{18}$  アルキル又は O で中断されている  $C_1 \sim C_{18}$  アルキルで置換されている  $C_2 \sim C_{30}$  ヘテロアリール基であり；

$R^{63}$  および  $R^{64}$  は、互いに独立して、 $C_6 \sim C_{18}$  アリール； $C_1 \sim C_{18}$  アルキル、 $C_1 \sim C_{18}$  アルコキシ、で置換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリール； $C_1 \sim C_{18}$  アルキル；または - O - で中断されている  $C_1 \sim C_{18}$  アルキルであり；

$R^{65}$  および  $R^{66}$  は、互いに独立して、 $C_6 \sim C_{18}$  アリール基； $C_1 \sim C_{18}$  アルキルまたは  $C_1 \sim C_{18}$  アルコキシで置換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリール； $C_1 \sim C_{18}$  アルキル基；または - O - で中断されている  $C_1 \sim C_{18}$  アルキル基であり；あるいは

$R^{65}$  および  $R^{66}$  は一緒に 5 または 6 員環を形成し、

$R^{67}$  は、 $C_6 \sim C_{18}$  アリール基； $C_1 \sim C_{18}$  アルキルまたは  $C_1 \sim C_{18}$  アルコキシで置換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリール基； $C_1 \sim C_{18}$  アルキル基；または - O - で中断されている  $C_1 \sim C_{18}$  アルキル基であり、

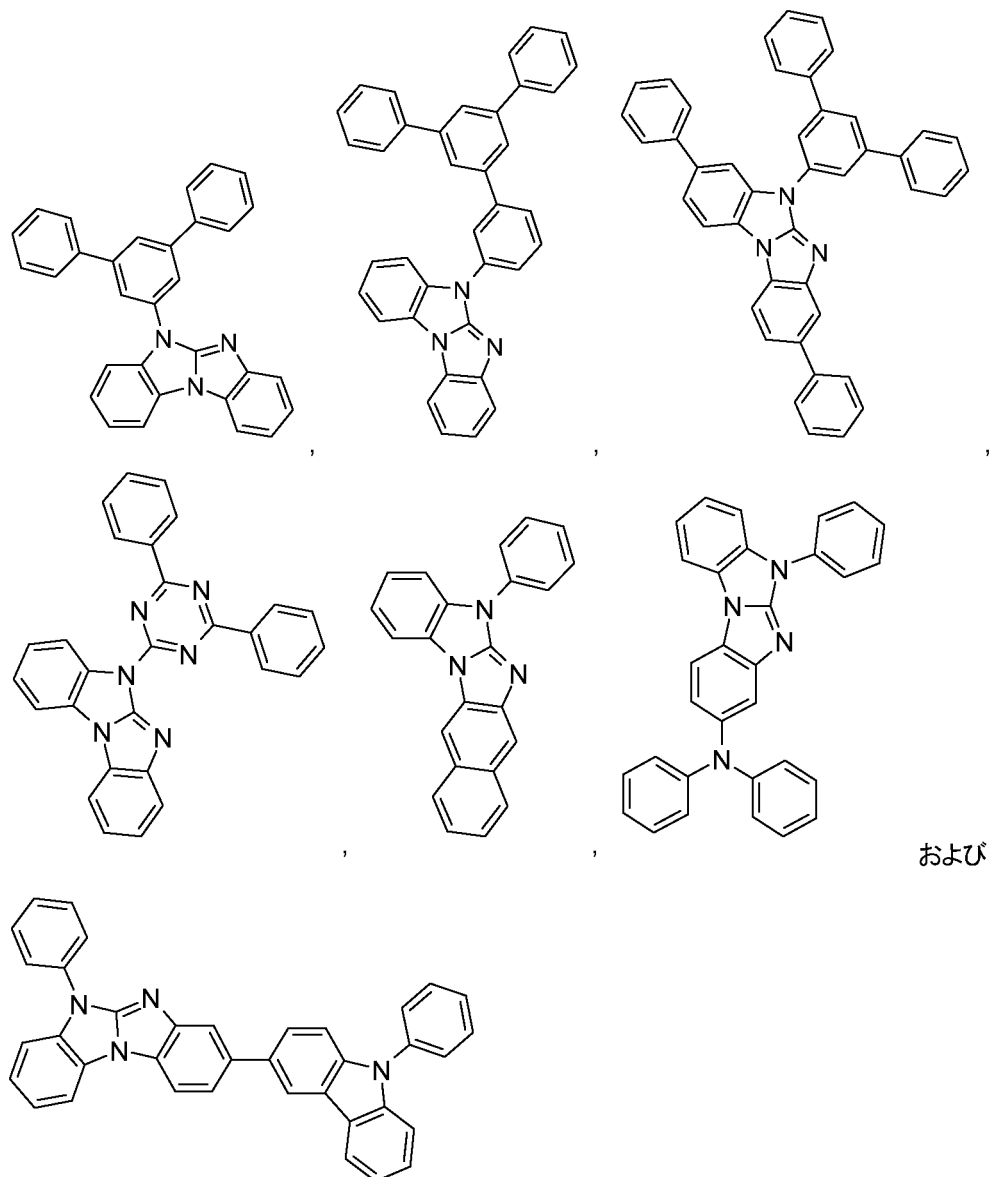
$R^{68}$  は、H； $C_6 \sim C_{18}$  アリール基； $C_1 \sim C_{18}$  アルキルまたは  $C_1 \sim C_{18}$  アルコキシで置換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリール基； $C_1 \sim C_{18}$  アルキル基；または - O - で中断されている  $C_1 \sim C_{18}$  アルキル基であり、

$R^{69}$  は、 $C_6 \sim C_{18}$  アリール； $C_1 \sim C_{18}$  アルキルまたは  $C_1 \sim C_{18}$  アルコキシで置換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリール； $C_1 \sim C_{18}$  アルキル基；または - O - で中断されている  $C_1 \sim C_{18}$  アルキル基であり、

$R^{70}$  および  $R^{71}$  は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{18}$  アルキル基、 $C_6 \sim C_{18}$  アリール基、または  $C_1 \sim C_{18}$  アルキルで置換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリール基であり、ならびに

$R^{72}$  は、 $C_1 \sim C_{18}$  アルキル基、 $C_6 \sim C_{18}$  アリール基、または  $C_1 \sim C_{18}$  アルキルで置換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリール基であり；ただし、以下の化合物：

## 【化 2】

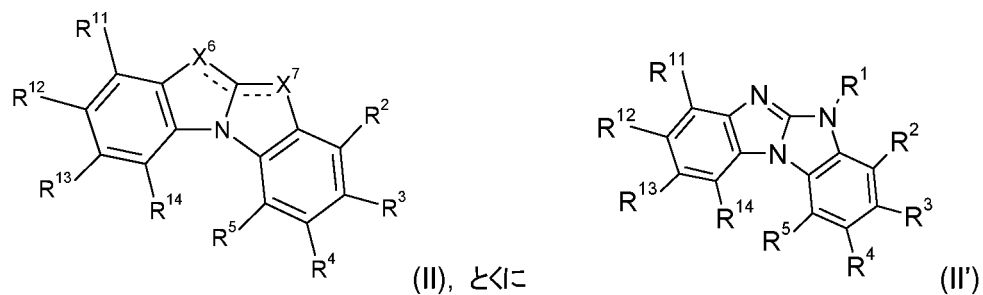


を除く]の化合物。

## 【請求項 2】

式：

## 【化 3】



[式中、

$X^6$  は - N = でありかつ  $X^7$  は - N R<sup>1</sup> - であるか、または

$X^7$  は = N - でありかつ  $X^6$  は - N R<sup>1</sup> - であり、

R<sup>11</sup>、R<sup>12</sup>、R<sup>13</sup>、および R<sup>14</sup> は、互いに独立して、H、場合により E で置換されていて

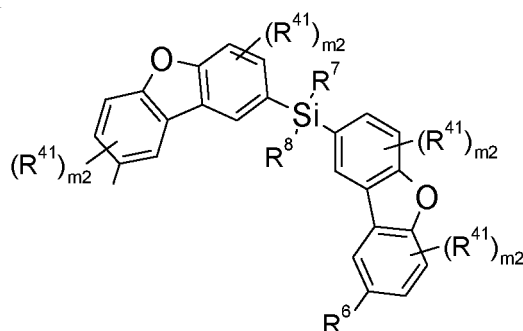
もおよび / または D で中断されていてもよい  $C_1 \sim C_{25}$  アルキル基 ; 場合により G で置換されていてもよい  $C_6 \sim C_{24}$  アリール基、または場合により G で置換されていてもよい  $C_2 \sim C_{30}$  ヘテロアリール基であり、ならびに  
E、D、G、 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、 $R^4$ 、および  $R^5$  は、請求項 1 において定義される通りである ] の化合物である、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 3】

$R^2$ 、 $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、および  $R^{14}$  が、H であり、かつ  $R^1$  が、請求項 1 において定義される通りである、請求項 3 に記載の式 I I の化合物。

【請求項 4】

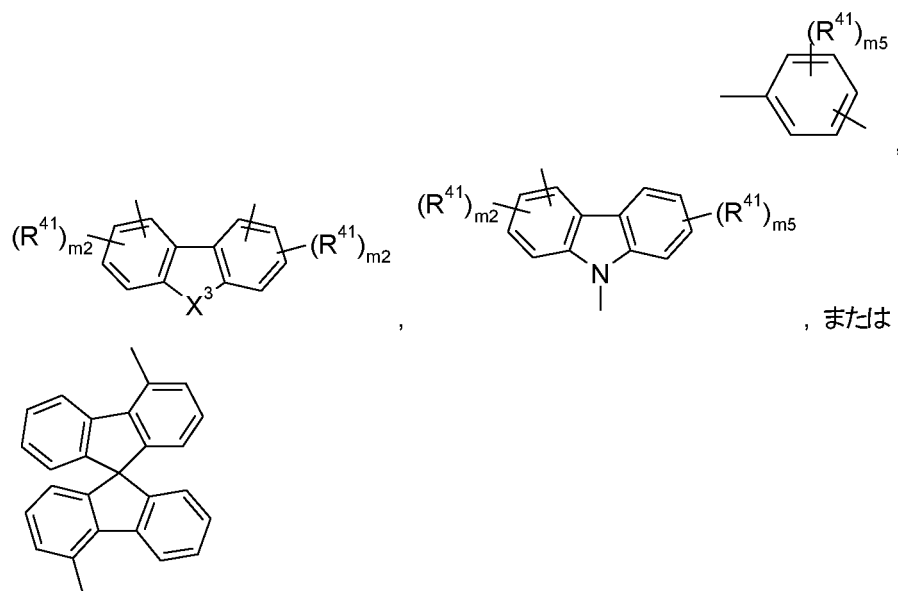
$R^1$  が、式 -  $A^1$  - ( $A^2$ )<sub>p</sub> - ( $A^3$ )<sub>q</sub> - ( $A^4$ )<sub>r</sub> -  $R^6$  の基、または  
【化 4】



であり、

この場合、 $A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^3$ 、および  $A^4$  は、互いに独立して、式：

【化 5】



[ 式中、

$m_5$  は、0 または 1 ~ 4 の整数であり、

$m_2$  は、0 または 1 ~ 3 の整数であり、

$X^3$  は、- O -、- S -、または -  $N R^{15}$  - であり、

$R^7$  および  $R^8$  は、 $C_1 \sim C_{18}$  アルキル基であり、

$R^{15}$  は、 $C_1 \sim C_{18}$  アルキル基 ; - O - で中断されている  $C_1 \sim C_{18}$  アルキル基 ;  $C_6 \sim C_{18}$  アリール基 ; 1 つ以上の  $C_1 \sim C_{18}$  アルキルまたは  $C_1 \sim C_{18}$  アルコキシ基で置換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリール基 ;  $C_2 \sim C_{20}$  ヘテロアリール基、または 1 つ以上の  $C_1 \sim C_{18}$  アルキル基で置換されている  $C_2 \sim C_{20}$  ヘテロアリール基であり、

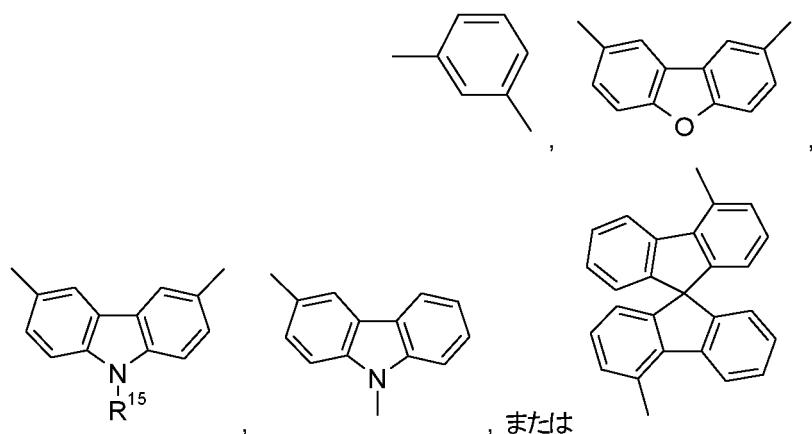
$R^{41}$ は、各場合において同じかまたは異なってもよく、ならびに、F、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール、Gで置換されている $C_6 \sim C_{24}$ アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、またはGで置換されている $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリールであり、ならびに

$R^6$ 、p、q、r、E、D、およびGは、請求項1において定義される通りである]の基である、請求項1～3のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項5】

$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^3$ 、および $A^4$ が、互いに独立して、式：

【化6】

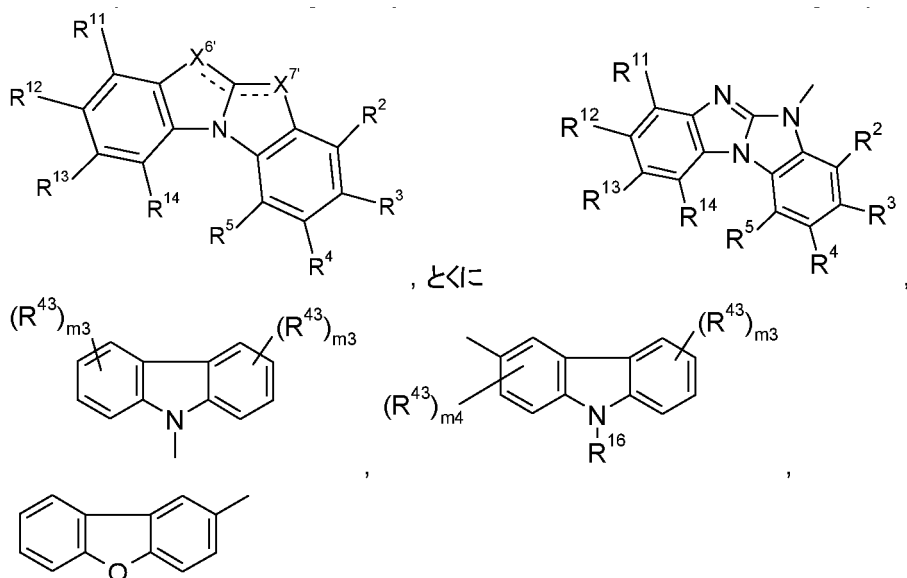


[ $R^{15}$ は、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール基；または1つ以上の $C_1 \sim C_{18}$ アルキル基で置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール基である]の基である、請求項4に記載の化合物。

【請求項6】

$R^6$ が、式：

【化7】



の基、または基 - ( $Si R^{20} R^{21} R^{22}$ ) であり、この場合、 $X^{6'}$ は - N = でありかつ $X^{7'}$ は - N < であるか、あるいは $X^{7'}$ は = N - でありかつ $X^{6'}$ は - N < であり、

$R^2$ 、 $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、および $R^{14}$ は、互いに独立して、H、場合によりEで置換されていてもおよび/またはDで中断されていてもよい $C_1 \sim C_{25}$ アルキル基；場合によりGで置換されていてもよい $C_6 \sim C_{24}$ アリール基、または場合によりGで置換されていてもよい $C_2 \sim C_{30}$ ヘテロアリール基であり、

$R^{16}$ は、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール基；または1つ以上の $C_1 \sim C_{18}$ アルキル基で置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール基であり、

$R^{20}$ 、 $R^{21}$ 、および $R^{22}$ は、互いに独立して、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール基；または1つ以上の $C_1 \sim C_{18}$ アルキル基で置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール基であり、

$R^{43}$ は、各場合において同じかまたは異なってもよく、ならびに、F、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール、Gで置換されている $C_6 \sim C_{24}$ アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、またはGで置換されている $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリールであり、

m3は、0または1～4の整数であり、

m4は、0または1～3の整数であり、ならびに

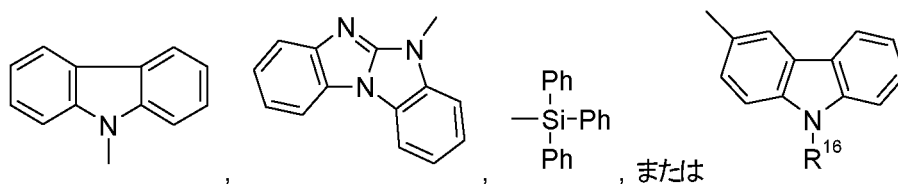
E、D、およびGは、請求項1において定義される通りである、

請求項1～5のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項7】

$R^6$ が、式：

【化8】

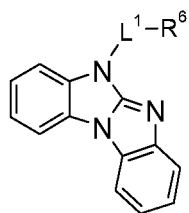


の基であり、 $R^{16}$ は、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール基；または1つ以上の $C_1 \sim C_{18}$ アルキル基で置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール基である、請求項6に記載の化合物。

【請求項8】

式：

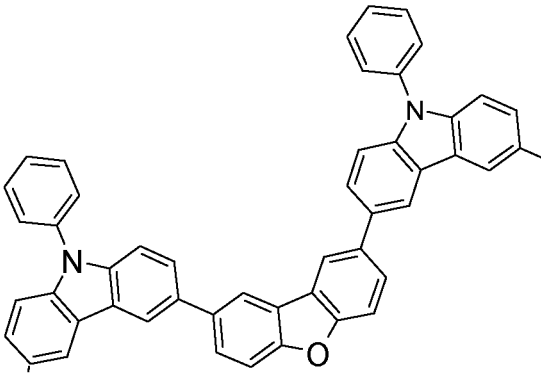
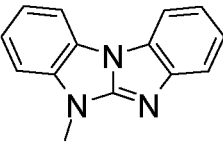
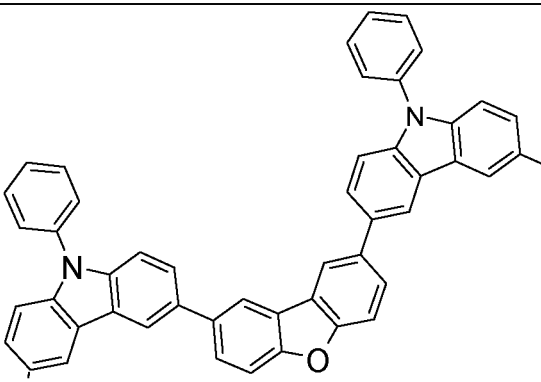
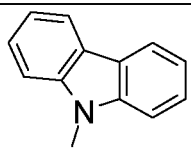
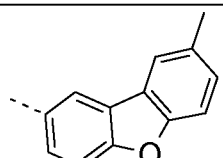
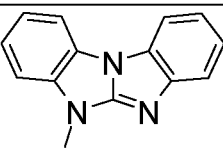
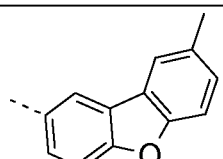
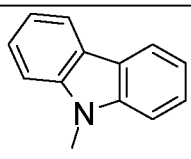
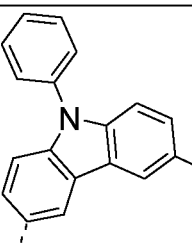
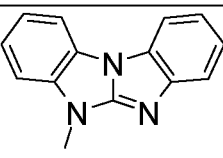
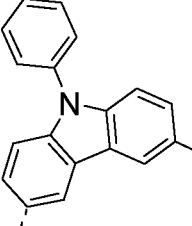
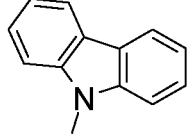
【化9】



【表 1】

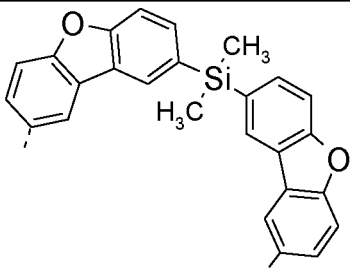
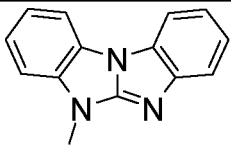
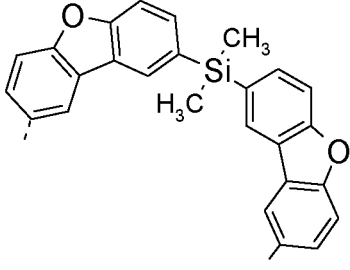
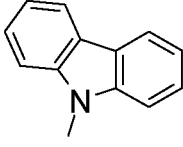
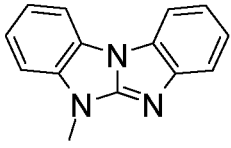
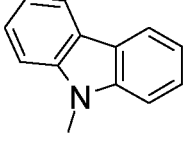
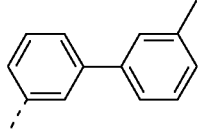
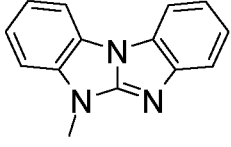
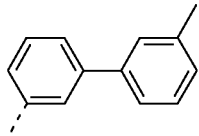
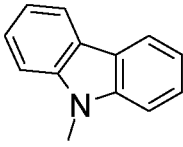
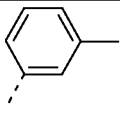
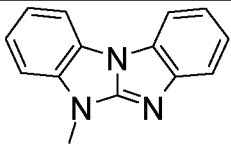
化合物	L <sup>12)</sup>	R <sup>6</sup>
A-1		
A-2		
A-3		
A-4		
A-5		
A-6		
A-7		

【表 2】

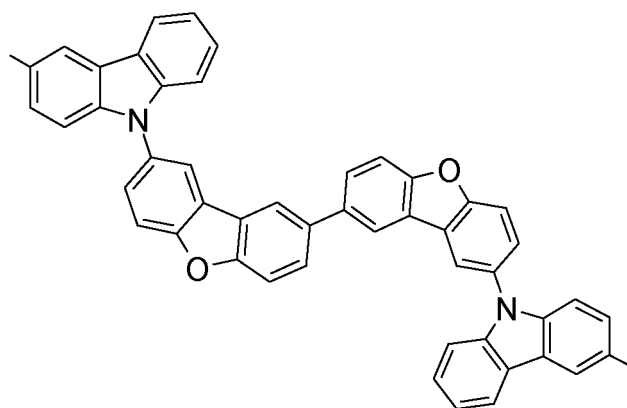
A-8		
A-9		
A-10		
A-11		
A-12		
A-13		



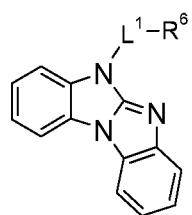
【表 3】

A-14		
A-15		
A-16	1)	
A-17	1)	
A-18		
A-19		
A-20		

【化 1 0】

1) L<sup>1</sup> =

【化 1 1】

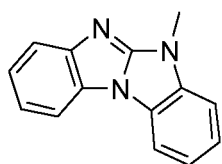


【表 4】

化合物	L <sup>12)</sup>	R <sup>6</sup>
B-1		
B-2		
B-3		
B-4		
B-5		

2) 点線は、式：

【化 1 2】

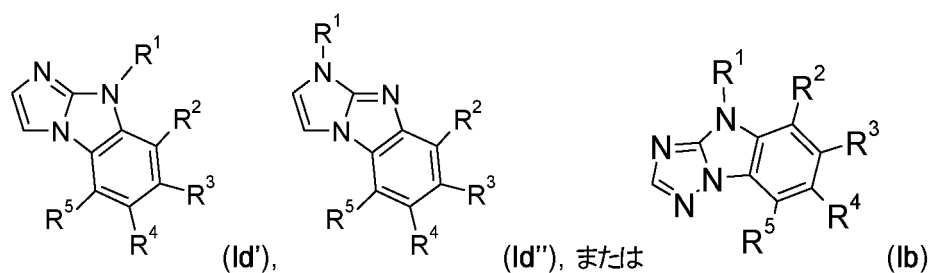


の基への結合を示す、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 9】

式：

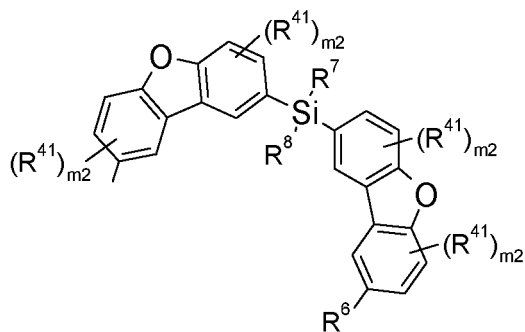
【化 1 3】



[ 式中

$R^1$  は、式  $-A^1-(A^2)_p-(A^3)_q-(A^4)_r-R^6$  の基、または

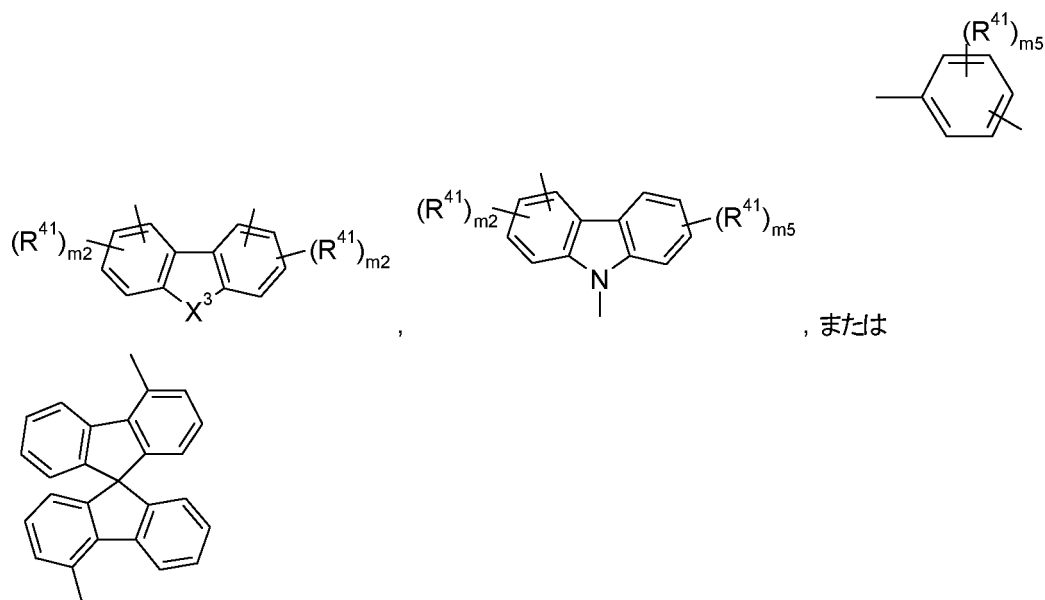
【化 1 4】



であり、

$A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^3$ 、および  $A^4$  は、互いに独立して、式：

## 【化 1 5】



の基であり、この場合、

$m_5$  は、0 または 1 ~ 4 の整数であり、

$m_2$  は、0 または 1 ~ 3 の整数であり、

$X^3$  は、 $-O-$ 、 $-S-$ 、または  $-NR^{15}-$  であり、

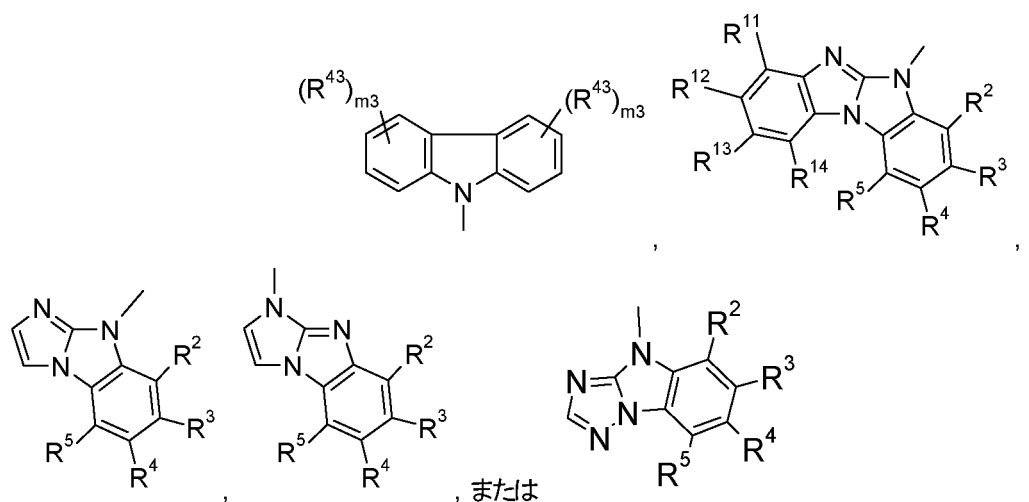
$R^7$  および  $R^8$  は、 $C_1 \sim C_{18}$  アルキル基であり、

$R^{15}$  は、 $C_1 \sim C_{18}$  アルキル基；または  $-O-$  で中断されている  $C_1 \sim C_{18}$  アルキル基； $C_6 \sim C_{18}$  アリール基；1 つ以上の  $C_1 \sim C_{18}$  アルキルまたは  $C_1 \sim C_{18}$  アルコキシ基で置換されている  $C_6 \sim C_{18}$  アリール基； $C_2 \sim C_{20}$  ヘテロアリール基、または 1 つ以上の  $C_1 \sim C_{18}$  アルキル基で置換されている  $C_2 \sim C_{20}$  ヘテロアリール基であり、

$R^{41}$  は、各場合において同じかまたは異なってもよく、ならびに、 $F$ 、 $C_1 \sim C_{18}$  アルキル、 $E$  で置換されおよび / または  $D$  で中断されている  $C_1 \sim C_{18}$  アルキル、 $C_6 \sim C_{24}$  アリール、 $G$  で置換されている  $C_6 \sim C_{24}$  アリール、 $C_2 \sim C_{20}$  ヘテロアリール、または  $G$  で置換されている  $C_2 \sim C_{20}$  ヘテロアリールであり、

$R^6$  は、式：

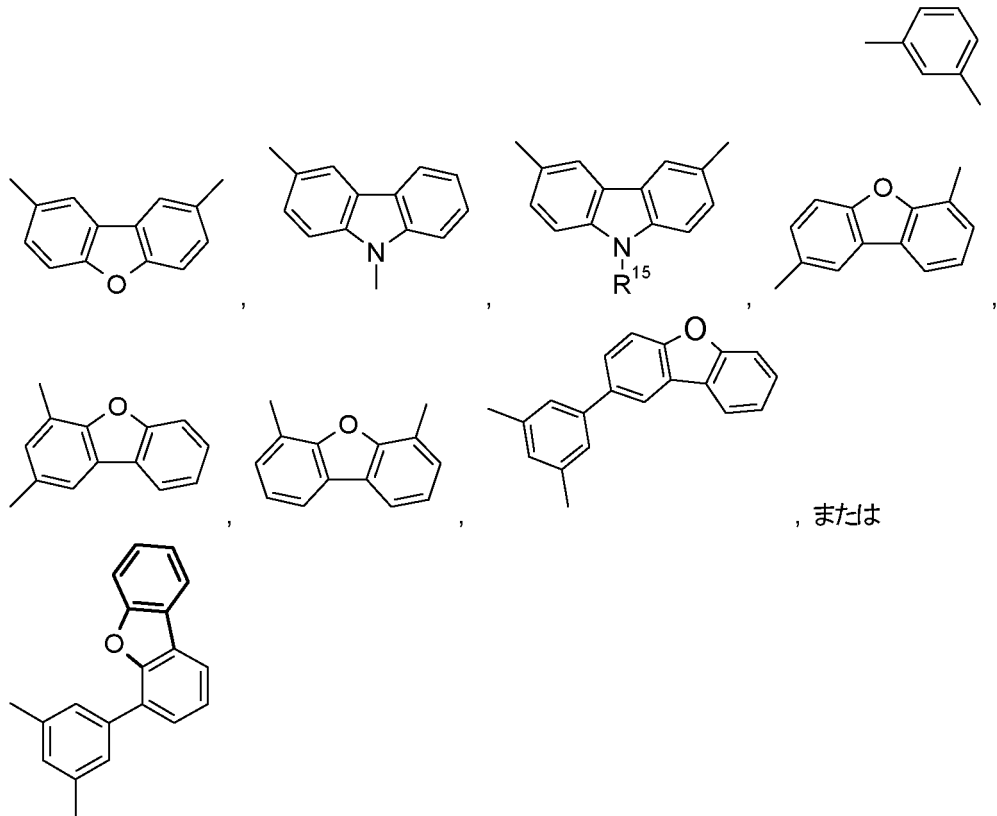
## 【化 1 6】



の基であり、

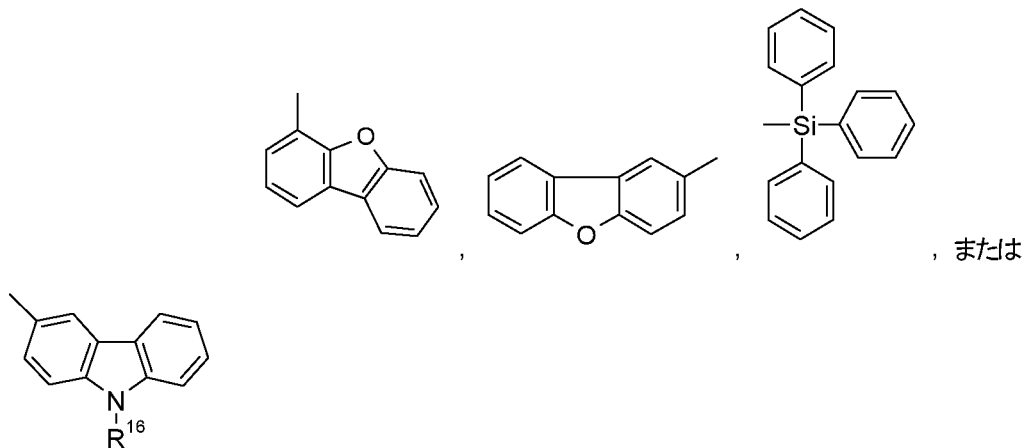
$R^{43}$  は、各場合において同じかまたは異なってもよく、ならびに、 $F$ 、 $C_1 \sim C_{18}$  ア

ルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール、Gで置換されている $C_6 \sim C_{24}$ アリール、 $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリール、またはGで置換されている $C_2 \sim C_{20}$ ヘテロアリールであり、  
 $m_3$ は、0または1～4の整数であり；あるいは  
 $R^1$ は、式  $-A^1-(A^2)_p-(A^3)_q-(A^4)_r-R^6$  の基であり、この場合、  
 $A^1$ 、 $A^2$ 、 $A^3$ 、および $A^4$ は、互いに独立して、式：  
 【化17】



, または

の基であり、  
 $R^6$ は、式：  
 【化18】



, または

の基であり、  
 $R^2$ 、 $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $p$ 、 $q$ 、 $r$ 、 $E$ 、 $D$ 、および $G$ は、請求項1において定義される通りであり、ならびに  
 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、および $R^{14}$ は、請求項2において定義される通りである」の化合物で

ある、

請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 1 0】

請求項 1 ～ 9 のいずれか一項に記載の化合物を含む電子デバイス。

【請求項 1 1】

エレクトロルミネセントデバイスである、請求項 1 0 に記載の電子デバイス。

【請求項 1 2】

請求項 1 ～ 9 のいずれか一項に記載の化合物を含む、正孔輸送層または発光層。

【請求項 1 3】

リン光発光体との組み合わせにおいてホスト材料として請求項 1 ～ 9 のいずれか一項に記載の化合物を含む、請求項 1 2 に記載の発光層。

【請求項 1 4】

定置型視覚的表示装置、例えば、コンピュータの視覚的表示装置、テレビ、プリンタの視覚的表示装置、台所用電化製品、ならびに広告パネル、照明パネル、情報パネル、ならびに可動型視覚的表示装置、例えば、携帯電話、タブレット型 P C、ラップトップ、デジタルカメラ、M P 3 プレーヤー、自動車、ならびにバスおよび電車の行先表示の視覚的表示装置；照明装置；キーボード；衣服のアイテム；家具；壁紙、からなる群より選択される機器であって、

請求項 1 0 もしくは 1 1 に記載の有機電子デバイスまたは請求項 1 2 に記載の正孔輸送層もしくは発光層を含む、機器。

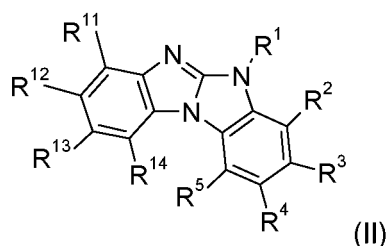
【請求項 1 5】

電子写真感光体、光電変換素子、有機太陽電池（有機光発電）、スイッチング素子、有機発光電界効果トランジスタ（O L E F E T）、画像センサー、色素レーザー、およびエレクトロルミネセントデバイスのための、請求項 1 ～ 9 のいずれか一項に記載の式 I の化合物の使用。

【請求項 1 6】

式：

【化 1 9】

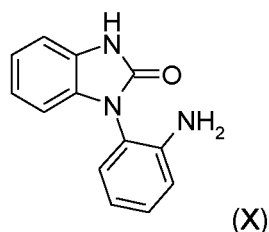


[ 式中、

$R^2$ 、 $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 、 $R^{13}$ 、および  $R^{14}$  が H であり、 $R^1$  は請求項 1 において定義される通りである ] の化合物の製造方法であって、

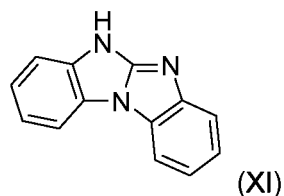
( a ) 式：

【化 2 0】



の化合物を、 $H_3PO_4$ 、ポリリン酸、 $CH_3SO_3H / P_2O_5$ 、 $CH_3SO_3H$ 、または硫酸において加熱して、式：

## 【化 2 1】



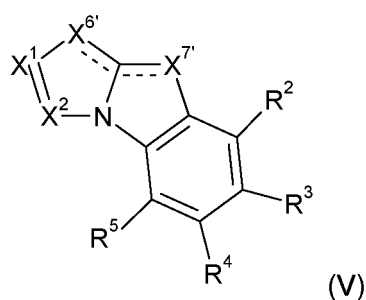
の化合物を得る工程；および

(b) 式 XI の化合物を式 II の化合物へと反応させる工程を含む、製造方法。

## 【請求項 17】

式：

## 【化 2 2】



[ 式中、

$X^{6'}$  は  $-N=$  でありかつ  $X^{7'}$  は  $-NR^{1'}$  - であるか、あるいは  $X^{7'}$  は  $=N-$  でありかつ  $X^{6'}$  は  $-NR^{1'}$  - であり、

$R^{1'}$  は、式  $-A^1-(A^2)_p-(A^3)_q-(A^4)_r-(R^{6'})_t$  の基であり、 $t$  は 1 または 2 であり、

$p, q, r, A^1, A^2, A^3, A^4, X^1, X^2, R^2, R^3, R^4$ 、および  $R^5$  は、請求項 1 において定義される通りであり、 $R^{6'}$  は、ハロゲン、 $ZnX^{12}$ ； $-SnR^{207}R^{208}R^{209}$  であり、この場合、 $R^{207}, R^{208}$ 、および  $R^{209}$  は、同じかまたは異なっており、ならびに  $H$  または  $C_1 \sim C_6$  アルキルであり、この場合、2 つの基は、場合により、共通の環を形成し、これらの基は、場合により分岐または非分岐であり；ならびに、 $X^{12}$  は、ハロゲン原子、 $-OS(O)_2CF_3$ 、 $-OS(O)_2$ -アリール、 $-OS(O)_2CH_3$ 、 $-B(OH)_2$ 、 $-B(OY^1)_2$ 、

## 【化 2 3】



、 $-BF_4Na$ 、または  $-BF_4K$  であり、この場合、 $Y^1$  は、独立して各場合において、 $C_1 \sim C_{10}$  アルキル基であり、ならびに、 $Y^2$  は、独立して各場合において、 $C_2 \sim C_{10}$  アルキレン基であり、ならびに  $Y^{13}$  および  $Y^{14}$  は、互いに独立して、水素または  $C_1 \sim C_{10}$  アルキル基である ] の化合物。