

【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 07 D 487/04	(2006.01)
H 01 L 51/50	(2006.01)
C 07 D 519/00	(2006.01)
C 09 K 11/06	(2006.01)
C 07 B 61/00	(2006.01)

【F I】

C 07 D 487/04	1 3 6
C 07 D 487/04	C S P
H 05 B 33/14	B
H 05 B 33/22	D
C 07 D 519/00	3 1 1
C 07 D 487/04	1 3 9
C 09 K 11/06	6 9 0
C 07 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

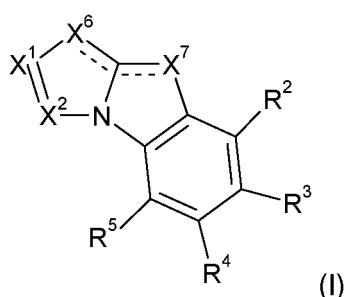
【訂正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

式:

【化1】



[式中、

X⁶は-N=でありかつX⁷は-NR¹-であるか、または

X⁷は=N-でありかつX⁶は-NR¹-であり、

R¹は、式-A¹-(A²)_p-(A³)_q-(A⁴)_r-R⁶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、

A¹、A²、A³、およびA⁴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A¹、A²、A³、およびA⁴は、1つ以上の基-(SiR⁷R⁸)-で中断されていてもよく；

R²、R³、R⁴、およびR⁵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；

R⁶は、H、基-(SiR²⁰R²¹R²²)、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；

R⁷およびR⁸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；

X¹は、NまたはCR⁹であり、

X²は、NまたはCR¹⁰であり、

R⁹およびR¹⁰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

R⁹およびR¹⁰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、

R²⁰、R²¹、およびR²²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-、-SO₂-、-O-、-NR⁶⁵-、-SiR⁷⁰R⁷¹-、-POR⁷²-、-CR⁶³=CR⁶⁴-、または-C=C-であり、

Eは、-OR⁶⁹、-SR⁶⁹、-NR⁶⁵R⁶⁶、-COR⁶⁸、-COOR⁶⁷、-CONR⁶⁵R⁶⁶、-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；

R⁶³およびR⁶⁴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、 $C_1 \sim C_8$ 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；

R⁶⁵およびR⁶⁶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

R⁶⁵およびR⁶⁶は一緒に5または6員環を形成し、

R⁶⁷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、

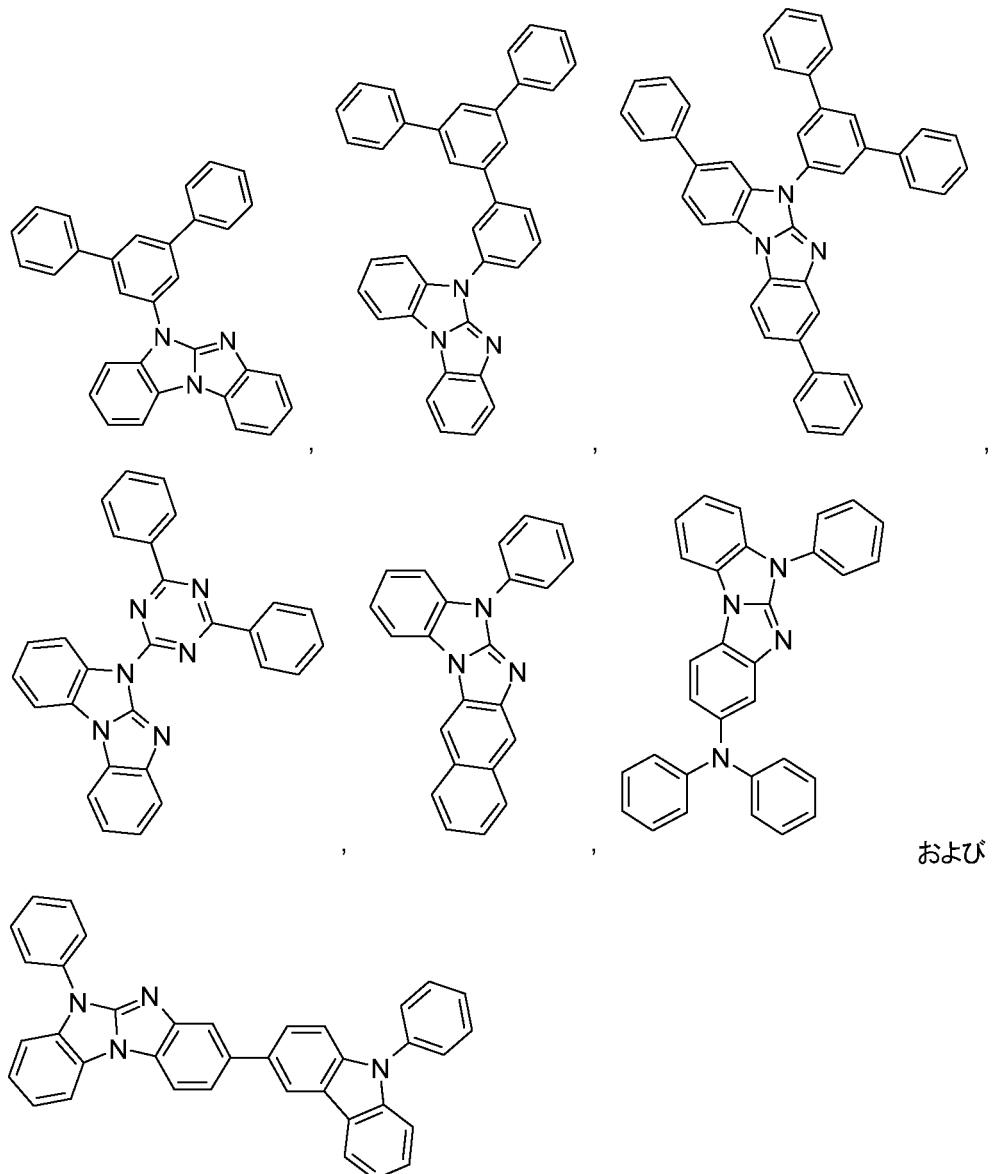
R⁶⁸は、H； $C_6 \sim C_{18}$ アリール基； $C_1 \sim C_{18}$ アルキルまたは $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール基； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル基；または-O-で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキル基であり、

R⁶⁹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、

R⁷⁰およびR⁷¹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

R⁷²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】

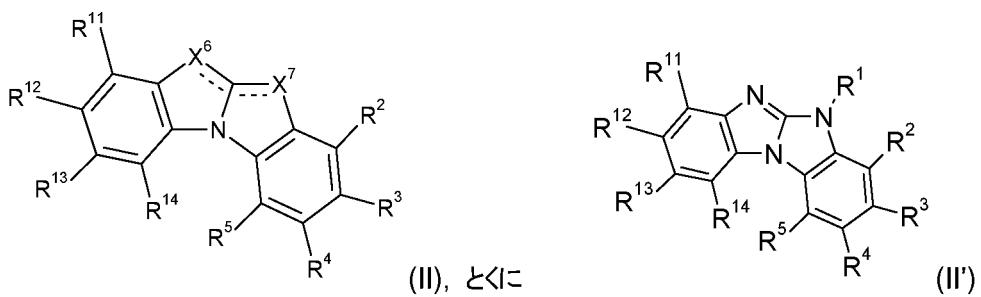


を除く] の化合物。

【請求項 2】

式 :

【化 3】



[式中、

 X^6 は $-N=$ でありかつ X^7 は $-NR^1-$ であるか、または X^7 は $=N-$ でありかつ X^6 は $-NR^1-$ であり、 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 で中断されてもよい C₁ ~ C₂₅ アルキル基 ; 場合により G で置換されていてもよい C₆ ~ C₂₄ 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 C₂ ~ C₃₀ ヘテロアリール基であり、ならびに E、D、G、R¹、R²、R³、R⁴、および R⁵ 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。

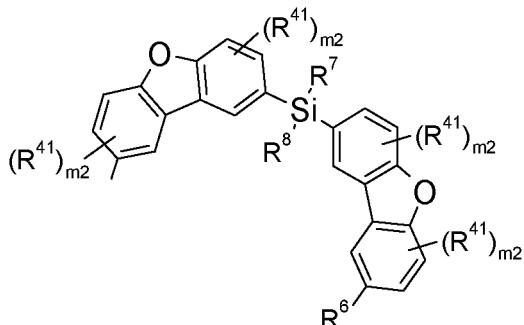
【請求項 3】

R²、R³、R⁴、R⁵、R¹¹、R¹²、R¹³、および R¹⁴ が、H であり、かつ R¹ 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】

R¹ が、式 - A¹ - (A²)_p - (A³)_q - (A⁴)_r - R⁶ の基、または

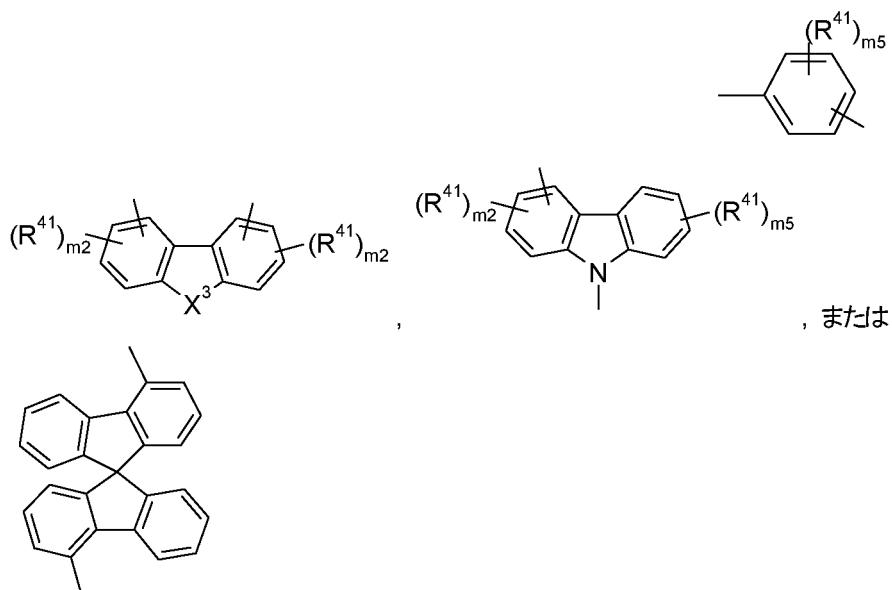
【化 4】



であり、

この場合、A¹、A²、A³、および A⁴ 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、

X³ は、- O - 、- S - 、または - N R¹⁵ - であり、

R⁷ および R⁸ は、C₁ ~ C₁₈ アルキル基であり、

R¹⁵ は、C₁ ~ C₁₈ アルキル基 ; - O - で中断されている C₁ ~ C₁₈ アルキル基 ; C₆ ~ C₁₈ アリール基 ; 1 つ以上の C₁ ~ C₁₈ アルキルまたは C₁ ~ C₁₈ アルコキシ基で置換されている C₆ ~ C₁₈ アリール基 ; C₂ ~ C₂₀ ヘテロアリール基、または 1 つ以上の C₁ ~ C₁₈ アルキル基で置換されている C₂ ~ C₂₀ ヘテロアリール基であり、

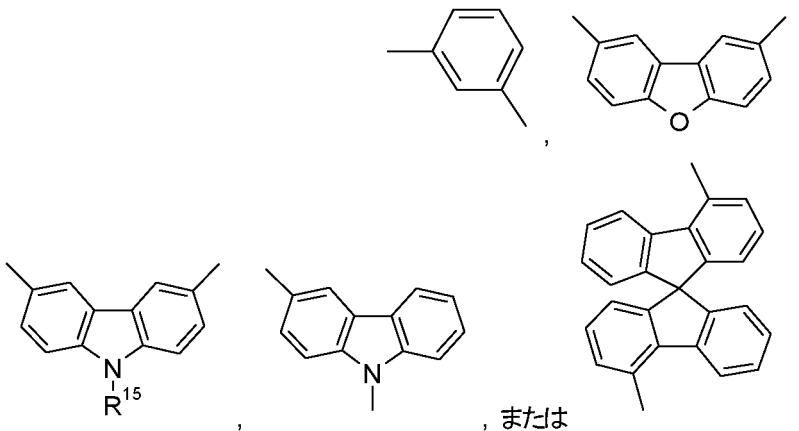
R⁴¹は、各場合において同じかまたは異なっていてもよく、ならびに、F、C₁～C₁₈アルキル、Eで置換されおよび/またはDで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₆～C₂₄アリール、Gで置換されているC₆～C₂₄アリール、C₂～C₂₀ヘテロアリール、またはGで置換されているC₂～C₂₀ヘテロアリールであり、ならびに

R⁶、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】

A¹、A²、A³、およびA⁴が、互いに独立して、式：

【化6】

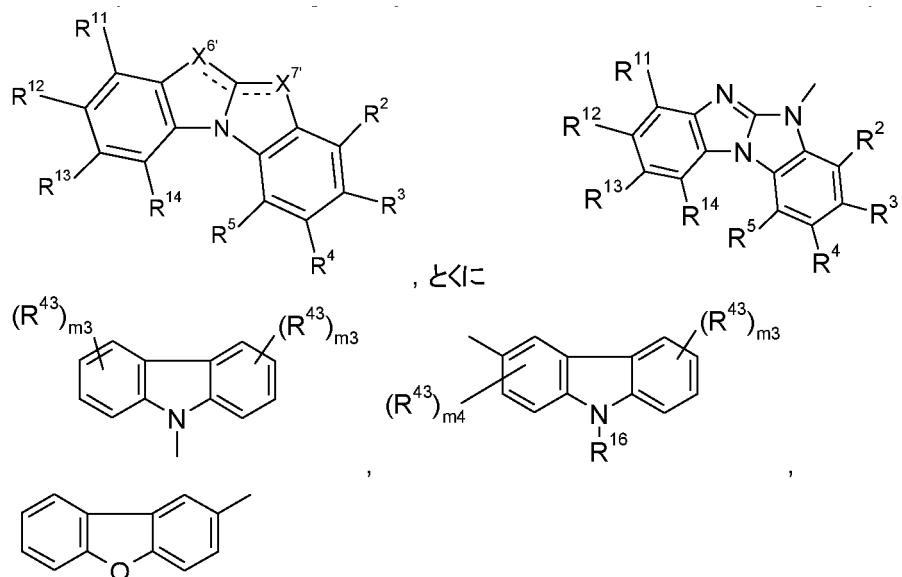


[R¹⁵は、C₆～C₁₈アリール基；または1つ以上のC₁～C₁₈アルキル基で置換されているC₆～C₁₈アリール基である]の基である、請求項4に記載の化合物。

【請求項6】

R⁶が、式：

【化7】



の基、または基-(S i R²⁰R²¹R²²)であり、この場合、

X⁶は-N=でありかつX⁷は-N<であるか、あるいは

X⁷は=N-でありかつX⁶は-N<であり、

R²、R³、R⁴、R⁵、R¹¹、R¹²、R¹³、およびR¹⁴は、互いに独立して、H、場合によりEで置換されてもおよび/またはDで中断されてもよいC₁～C₂₅アルキル基；場合によりGで置換されてもよいC₆～C₂₄アリール基、または場合によりGで置換されてもよいC₂～C₃₀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いてもよく、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、

m_4 は、0または1～3の整数であり、ならびに

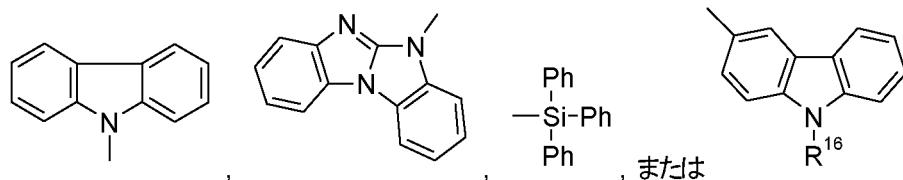
E、D、およびGは、請求項1において定義される通りである、

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】

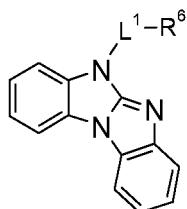


の基であり、 R^{16} は、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール基；または1つ以上の $C_1 \sim C_{18}$ アルキル基で置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール基である、請求項6に記載の化合物。

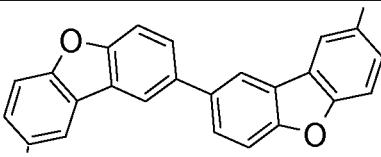
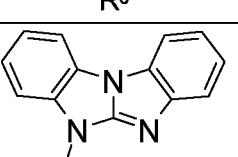
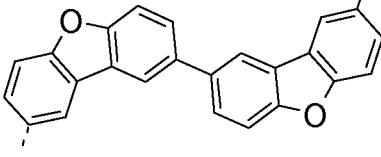
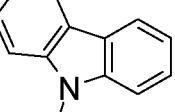
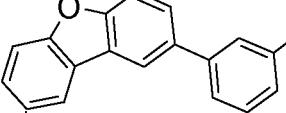
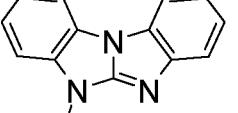
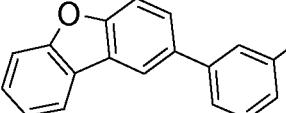
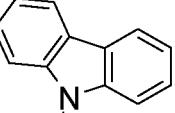
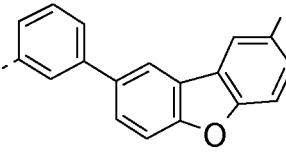
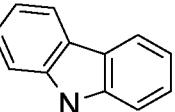
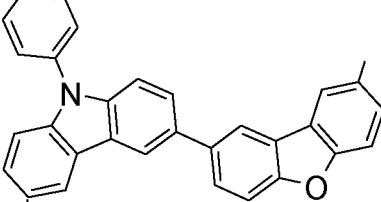
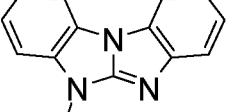
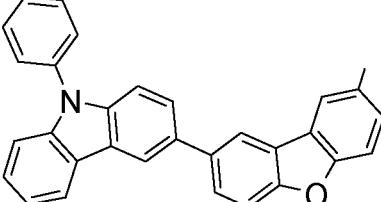
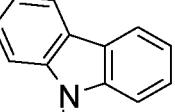
【請求項8】

式：

【化9】



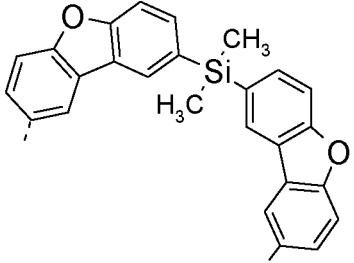
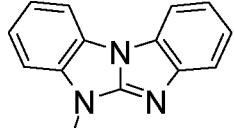
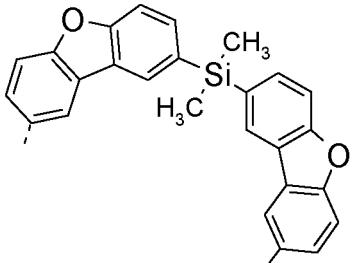
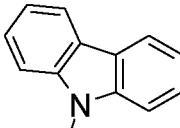
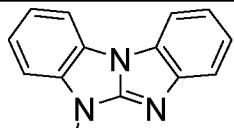
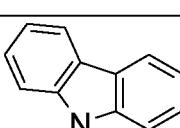
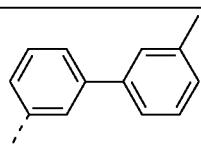
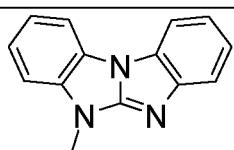
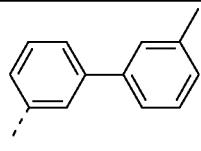
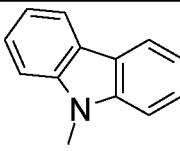
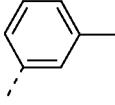
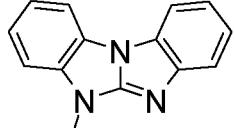
【表1】

化合物	$L^{12)}$	R^6
A-1		
A-2		
A-3		
A-4		
A-5		
A-6		
A-7		

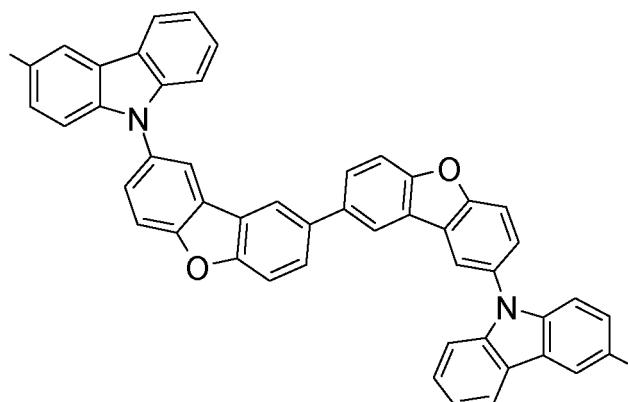
【表 2】

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

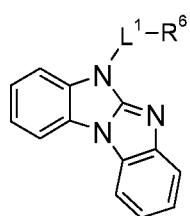
【表 3】

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

【化 1 0】

① L¹ =

【化 1 1】

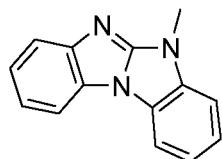


【表 4】

化合物	L ¹ ²⁾	R ⁶
B-1		
B-2		
B-3		
B-4		
B-5		

²⁾ 点線は、式：

【化12】

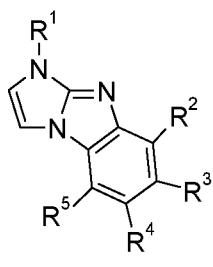
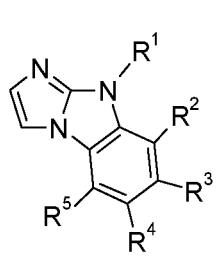


の基への結合を示す、請求項1に記載の化合物。

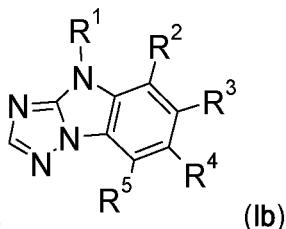
【請求項9】

式：

【化13】



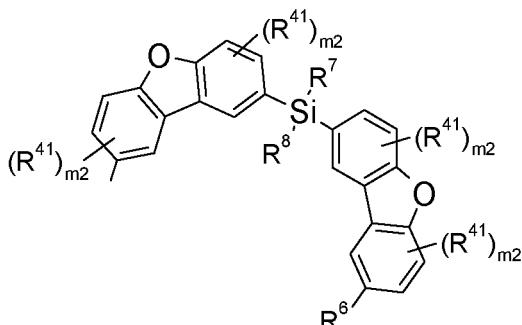
(Id''), または



[式中

R¹は、式 - A¹ - (A²)_p - (A³)_q - (A⁴)_r - R⁶の基、または

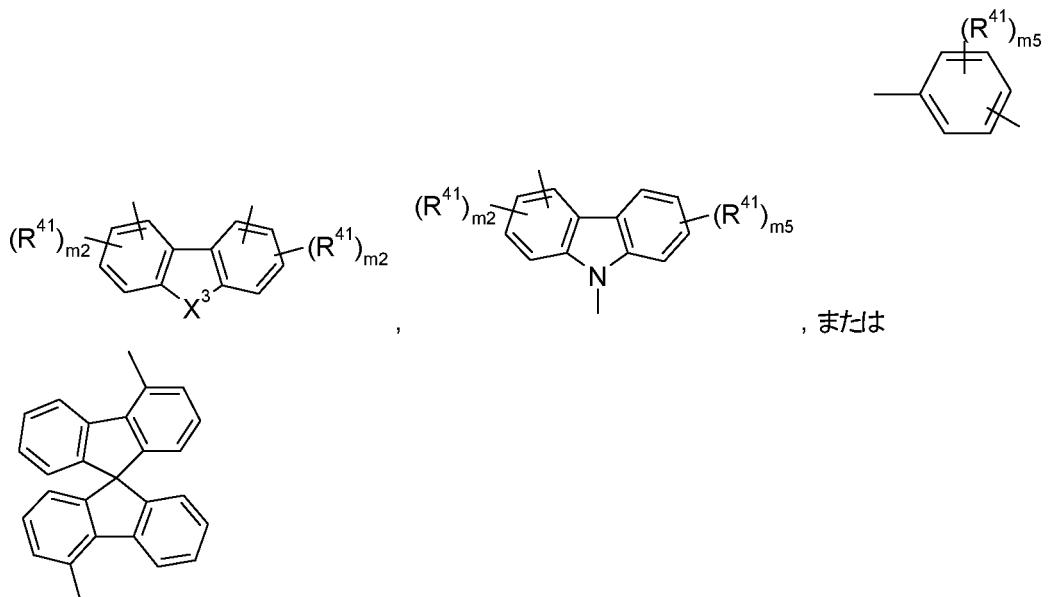
【化14】



であり、

A¹、A²、A³、およびA⁴は、互いに独立して、式：

【化15】



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-NR¹⁵-であり、

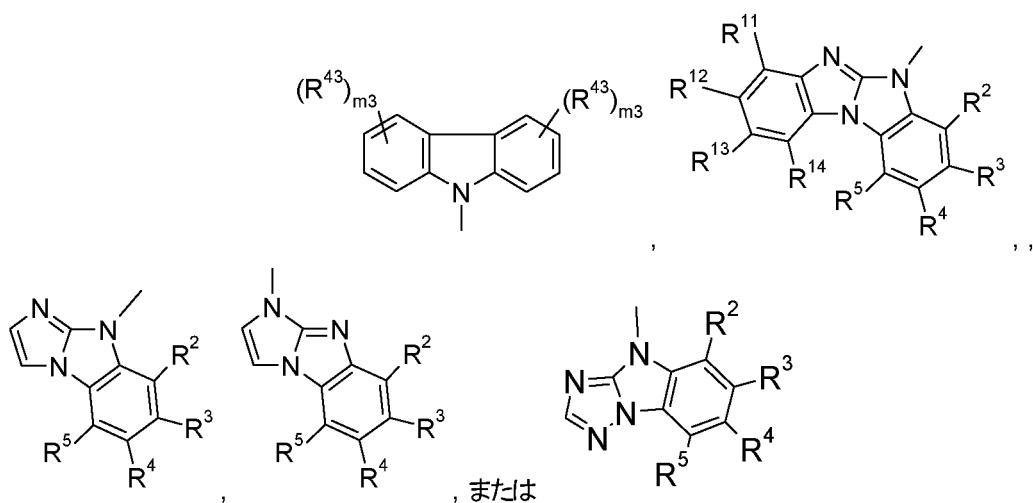
R⁷およびR⁸は、C₁～C₁₈アルキル基であり、

R¹⁵は、C₁～C₁₈アルキル基；または-O-で中断されているC₁～C₁₈アルキル基；C₆～C₁₈アリール基；1つ以上のC₁～C₁₈アルキルまたはC₁～C₁₈アルコキシ基で置換されているC₆～C₁₈アリール基；C₂～C₂₀ヘテロアリール基、または1つ以上のC₁～C₁₈アルキル基で置換されているC₂～C₂₀ヘテロアリール基であり、

R⁴¹は、各場合において同じかまたは異なっていてもよく、ならびに、F、C₁～C₁₈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C₁～C₁₈アルキル、C₆～C₂₄アリール、Gで置換されているC₆～C₂₄アリール、C₂～C₂₀ヘテロアリール、またはGで置換されているC₂～C₂₀ヘテロアリールであり、

R⁶は、式：

【化16】



の基であり、

R⁴³は、各場合において同じかまたは異なっていてもよく、ならびに、F、C₁～C₁₈ア

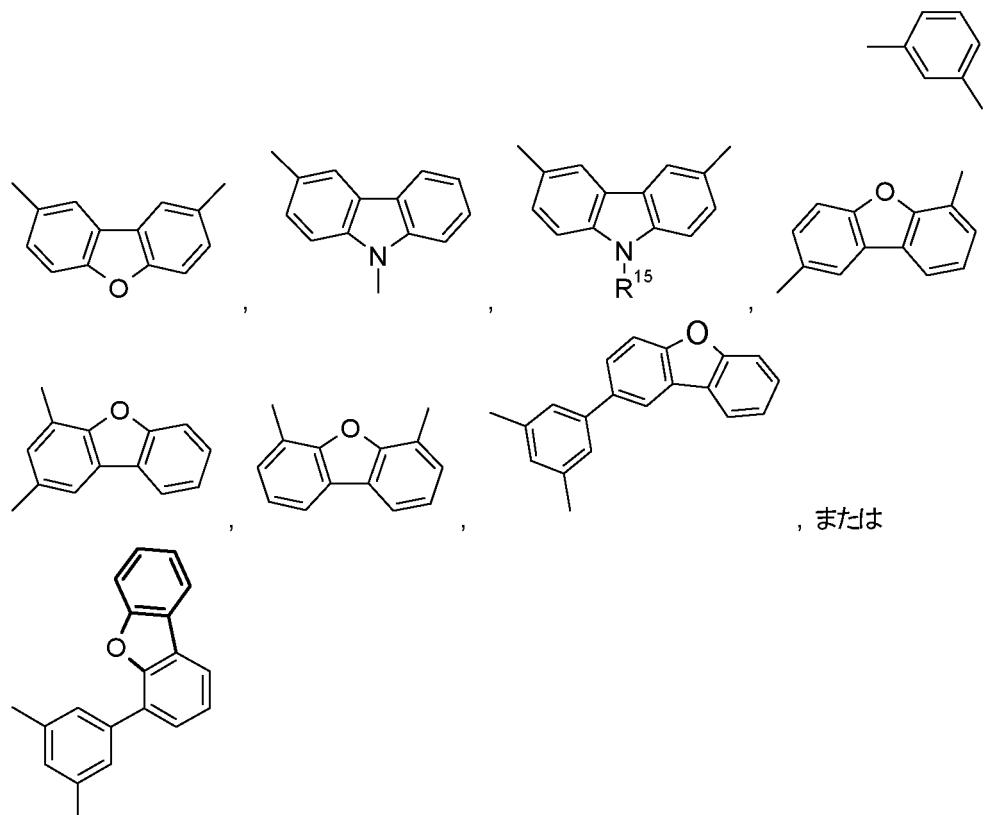
ルキル、Eで置換されおよび／またはDで中断されているC₁～C₁₈アルキル、C₆～C₂₄アリール、Gで置換されているC₆～C₂₄アリール、C₂～C₂₀ヘテロアリール、またはGで置換されているC₂～C₂₀ヘテロアリールであり、

m₃は、0または1～4の整数であり；あるいは

R¹は、式-A¹- (A²)_p- (A³)_q- (A⁴)_r- R⁶の基であり、この場合、

A¹、A²、A³、およびA⁴は、互いに独立して、式：

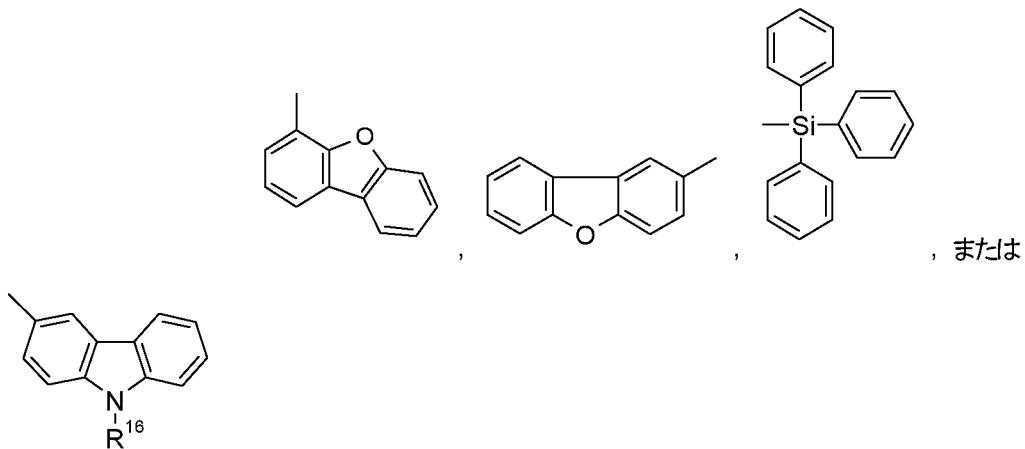
【化17】



の基であり、

R⁶は、式：

【化18】



の基であり、

R²、R³、R⁴、R⁵、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

R¹¹、R¹²、R¹³、およびR¹⁴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 PC、ラップトップ、デジタルカメラ、MP3 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。

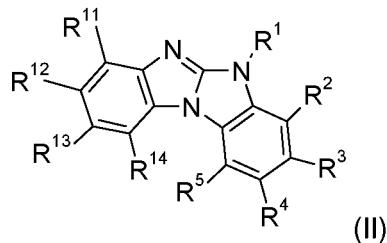
【請求項 1 5】

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（OLEFET）、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】

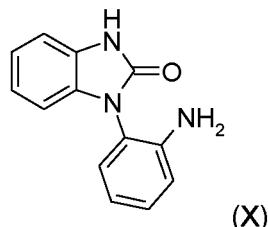


[式中、

R²、R³、R⁴、R⁵、R¹¹、R¹²、R¹³、およびR¹⁴がHであり、R¹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、

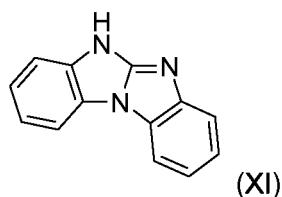
(a) 式：

【化 2 0】



の化合物を、H₃PO₄、ポリリン酸、CH₃SO₃H / P₂O₅、CH₃SO₃H、または硫酸において加熱して、式：

【化21】



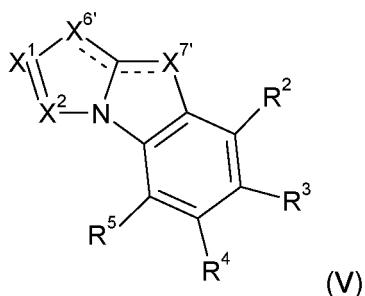
の化合物を得る工程；および

(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22】



[式中、

X⁶は-N=でありかつX⁷は-NR¹-であるか、あるいはX⁷は=N-でありかつX⁶は-NR¹-であり、

R¹は、式-A¹-(A²)_p-(A³)_q-(A⁴)_r-(R⁶)_tの基であり、tは1または2であり、

p、q、r、A¹、A²、A³、A⁴、X¹、X²、R²、R³、R⁴、およびR⁵は、請求項1において定義される通りであり、R⁶は、ハロゲン、ZnX¹²；-SnR²⁰⁷R²⁰⁸R²⁰⁹であり、この場合、R²⁰⁷、R²⁰⁸、およびR²⁰⁹は、同じかまたは異なっており、ならびにHまたはC₁～C₆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、X¹²は、ハロゲン原子、-OS(O)₂CF₃、-OS(O)₂-アリール、-OS(O)₂CH₃、-B(OH)₂、-B(OY¹)₂、

【化23】



、-BF₄Na、または-BF₄Kであり、この場合、Y¹は、独立して各場合において、C₁～C₁₀アルキル基であり、ならびに、Y²は、独立して各場合において、C₂～C₁₀アルキレン基であり、ならびにY¹³およびY¹⁴は、互いに独立して、水素またはC₁～C₁₀アルキル基である]の化合物。