

【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7年5月29日(2025.5.29)

【国際公開番号】WO2024/062871

【出願番号】特願2024-548166(P2024-548166)

【国際特許分類】

H 1 0 K 3 0 / 6 0 (2 0 2 3 . 0 1)

H 1 0 K 3 0 / 3 0 (2 0 2 3 . 0 1)

C 0 7 D 4 9 5 / 1 4 (2 0 0 6 . 0 1)

C 0 7 D 5 1 9 / 0 0 (2 0 0 6 . 0 1)

H 1 0 K 3 9 / 3 2 (2 0 2 3 . 0 1)

H 1 0 F 3 9 / 1 8 (2 0 2 5 . 0 1)

H 1 0 K 8 5 / 6 0 (2 0 2 3 . 0 1)

H 1 0 K 8 5 / 2 0 (2 0 2 3 . 0 1)

10

【 F I 】

H 1 0 K 3 0 / 6 0

H 1 0 K 3 0 / 3 0

C 0 7 D 4 9 5 / 1 4 C S P

C 0 7 D 5 1 9 / 0 0

20

H 1 0 K 3 9 / 3 2

H 1 0 F 3 9 / 1 8 E

H 1 0 K 8 5 / 6 0

H 1 0 K 8 5 / 2 0

【手続補正書】

【提出日】令和7年2月26日(2025.2.26)

【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

30

【補正方法】変更

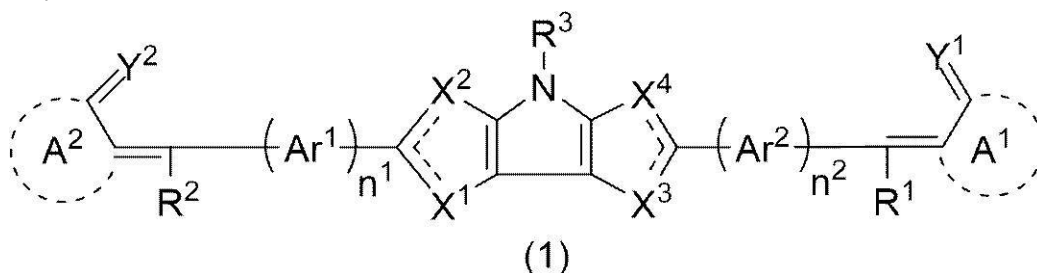
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

導電性膜、光電変換膜及び透明導電性膜をこの順で有する光電変換素子であって、前記光電変換膜が、式(1)で表される化合物を含む、光電変換素子。

【化1】



40

式(1)中、R¹及びR²は、それぞれ独立に、水素原子、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基、シアノ基又はハロゲン原子を表す。

R³は、-O-を有していてもよく、ハロゲン原子を有していてもよい炭素数7以下の脂肪族炭化水素基、又は、置換基を有していてもよい芳香環基を表す。

X¹及びX²の一方は、酸素原子、硫黄原子、セレン原子又は-NR^{X1}-を表し、他

50

方は $-CR^{X2} =$ 又は窒素原子を表す。 X^3 及び X^4 の一方は、酸素原子、硫黄原子、セレン原子又は $-NR^{X3} -$ を表し、他方は $-CR^{X4} =$ 又は窒素原子を表す。 R^{X1} 及び R^{X3} は、それぞれ独立に、水素原子、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基又は置換基を有していてもよい芳香環基を表す。 R^{X2} 及び R^{X4} は、それぞれ独立に、水素原子、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基、置換基を有していてもよい芳香環基又はハロゲン原子を表す。

Ar^1 及び Ar^2 は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい芳香環基を表す。

Y^1 及び Y^2 は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、 $=NR^{Y1}$ 又は $=C(R^{Y2})(R^{Y3})$ を表す。 R^{Y1} は、水素原子、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基又は置換基を有していてもよい芳香環基を表す。 R^{Y2} 及び R^{Y3} は、それぞれ独立に、シアノ基、 $-CO_2R^{Y4}$ 、 $-C(=O)R^{Y5}$ 、 $-S(=O)R^{Y6}$ 又は $-S(=O)_2R^{Y7}$ を表す。 $R^{Y4} \sim R^{Y7}$ は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基又は置換基を有していてもよい芳香環基を表す。

10

A^1 及び A^2 は、それぞれ独立に、2以上の炭素原子を含み、置換基を有していてもよい環を表す。

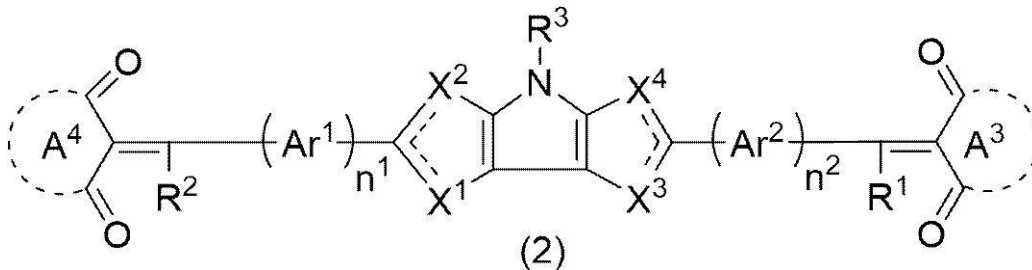
n^1 及び n^2 の一方は1を表し、他方は0又は1を表す。

【請求項2】

前記式(1)で表される化合物が、式(2)で表される化合物を含む、請求項1に記載の光電変換素子。

【化2】

20



式(2)中、 R^1 及び R^2 は、それぞれ独立に、水素原子、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基、シアノ基又はハロゲン原子を表す。

30

R^3 は、 $-O-$ を有していてもよく、ハロゲン原子を有していてもよい炭素数7以下の脂肪族炭化水素基、又は、置換基を有していてもよい芳香環基を表す。

X^1 及び X^2 の一方は、酸素原子、硫黄原子、セレン原子又は $-NR^{X1} -$ を表し、他方は $-CR^{X2} =$ 又は窒素原子を表す。 X^3 及び X^4 の一方は、酸素原子、硫黄原子、セレン原子又は $-NR^{X3} -$ を表し、他方は $-CR^{X4} =$ 又は窒素原子を表す。 R^{X1} 及び R^{X3} は、それぞれ独立に、水素原子、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基又は置換基を有していてもよい芳香環基を表す。 R^{X2} 及び R^{X4} は、それぞれ独立に、水素原子、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基、置換基を有していてもよい芳香環基又はハロゲン原子を表す。

Ar^1 及び Ar^2 は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい芳香環基を表す。

40

A^3 及び A^4 は、それぞれ独立に、3以上の炭素原子を含み、置換基を有していてもよい環を表す。

n^1 及び n^2 の一方は1を表し、他方は0又は1を表す。

【請求項3】

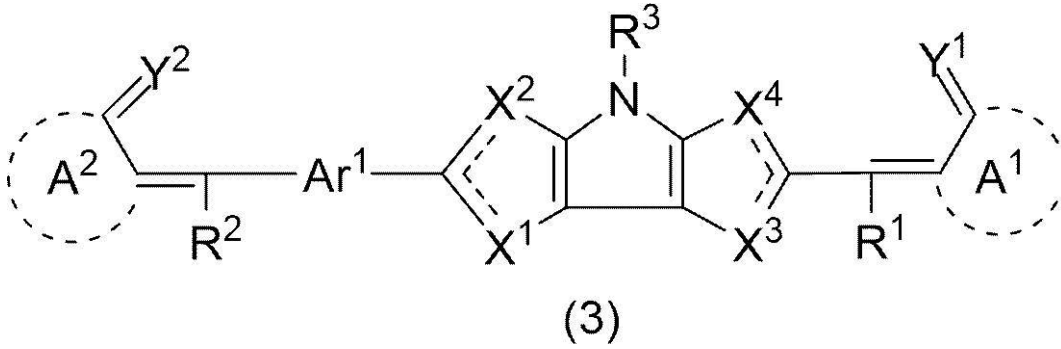
Ar^1 及び Ar^2 は、それぞれ独立に、単環の芳香環基を表す、請求項1に記載の光電変換素子。

【請求項4】

前記式(1)で表される化合物が、式(3)で表される化合物を含む、請求項1に記載の光電変換素子。

50

【化3】



10

式(3)中、 R^1 及び R^2 は、それぞれ独立に、水素原子、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基、シアノ基又はハロゲン原子を表す。

R^3 は、 $-O-$ を有していてもよく、ハロゲン原子を有していてもよい炭素数7以下の脂肪族炭化水素基、又は、置換基を有していてもよい芳香環基を表す。

X^1 及び X^2 の一方は、酸素原子、硫黄原子、セレン原子又は $-NR^{X1}$ を表し、他方は $-CR^{X2}$ 又は窒素原子を表す。 X^3 及び X^4 の一方は、酸素原子、硫黄原子、セレン原子又は $-NR^{X3}$ を表し、他方は $-CR^{X4}$ 又は窒素原子を表す。 R^{X1} 及び R^{X3} は、それぞれ独立に、水素原子、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基又は置換基を有していてもよい芳香環基を表す。 R^{X2} 及び R^{X4} は、それぞれ独立に、水素原子、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基、置換基を有していてもよい芳香環基又はハロゲン原子を表す。

20

Ar^1 は、置換基を有していてもよい芳香環基を表す。

Y^1 及び Y^2 は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、 $=NR^{Y1}$ 又は $=C(R^{Y2})(R^{Y3})$ を表す。 R^{Y1} は、水素原子、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基又は置換基を有していてもよい芳香環基を表す。 R^{Y2} 及び R^{Y3} は、それぞれ独立に、シアノ基、 $-CO_2R^{Y4}$ 、 $-C(=O)R^{Y5}$ 、 $-S(=O)R^{Y6}$ 又は $-S(=O)_2R^{Y7}$ を表す。 $R^{Y4} \sim R^{Y7}$ は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基又は置換基を有していてもよい芳香環基を表す。

A^1 及び A^2 は、それぞれ独立に、2以上の炭素原子を含み、置換基を有していてもよい環を表す。

30

【請求項5】

Ar^1 は、単環の芳香環基を表す、請求項4に記載の光電変換素子。

【請求項6】

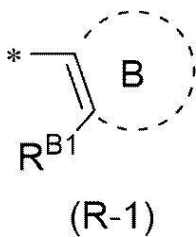
X^1 及び X^2 の一方は硫黄原子を表し、他方は $-CR^{X2}$ 又は窒素原子を表し、かつ、 X^3 及び X^4 の一方は硫黄原子を表し、他方は $-CR^{X4}$ 又は窒素原子を表す、請求項1に記載の光電変換素子。

【請求項7】

R^3 が、式(R-1)で表される基又は式(R-2)で表される基を表す、請求項1~6のいずれか1項に記載の光電変換素子。

40

【化4】

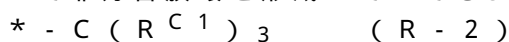


式(R-1)中、*は、結合位置を表す。Bは、2以上の炭素原子を含み、置換基を有していてもよい単環の芳香環を表す。 R^{B1} は、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水

50

素基、置換基を有していてもよいシリル基、置換基を有していてもよいアルコキシ基、置換基を有していてもよい芳香環基、シアノ基又はハロゲン原子を表す。

Bで表される前記芳香環、及び、 R^{B1} で表される前記脂肪族炭化水素基、前記シリル基、前記アルコキシ基又は前記芳香環基が置換基を有する場合、前記置換基同士は、互いに結合して非芳香族環を形成していてもよい。



式(R-2)中、*は、結合位置を表す。 R^{C1} は、それぞれ独立に、水素原子、メチル基、イソプロピル基又はt-ブチル基を表す。

ただし、前記式(R-2)で表される基の炭素数は、3~7であり、3つの R^{C1} のうち、2つ以上が水素原子以外である。

10

【請求項8】

前記光電変換膜が、更にn型有機半導体を含み、

前記光電変換膜が、前記式(1)で表される化合物と前記n型有機半導体とが混合された状態で形成するバルクヘテロ構造を有する、請求項1~6のいずれか1項に記載の光電変換素子。

【請求項9】

前記n型有機半導体が、フラレン及びその誘導体からなる群から選択されるフラレン類を含む、請求項8に記載の光電変換素子。

【請求項10】

前記光電変換膜が、更にp型有機半導体を含む、請求項1~6のいずれか1項に記載の光電変換素子。

20

【請求項11】

前記光電変換膜が、更に色素を含む、請求項1~6のいずれか1項に記載の光電変換素子。

【請求項12】

前記導電性膜と前記透明導電性膜の間に、前記光電変換膜の他に1種以上の中間層を有する、請求項1~6のいずれか1項に記載の光電変換素子。

【請求項13】

請求項1~6のいずれか1項に記載の光電変換素子を有する、撮像素子。

【請求項14】

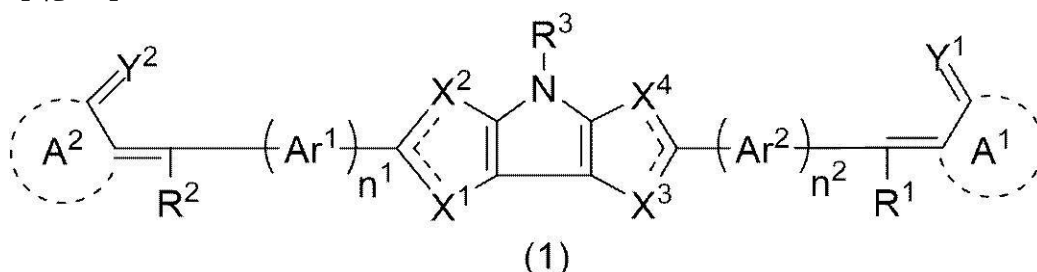
請求項1~6のいずれか1項に記載の光電変換素子を有する、光センサ。

30

【請求項15】

式(1)で表される化合物。

【化5】



40

式(1)中、 R^1 及び R^2 は、それぞれ独立に、水素原子、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基、シアノ基又はハロゲン原子を表す。

R^3 は、-O-を有していてもよく、ハロゲン原子を有していてもよい炭素数7以下の脂肪族炭化水素基、又は、置換基を有していてもよい芳香環基を表す。

X^1 及び X^2 の一方は、酸素原子、硫黄原子、セレン原子又は $-NR^{X1}$ -を表し、他方は $-CR^{X2}$ -又は窒素原子を表す。 X^3 及び X^4 の一方は、酸素原子、硫黄原子、セレン原子又は $-NR^{X3}$ -を表し、他方は $-CR^{X4}$ -又は窒素原子を表す。 R^{X1} 及び R^{X3} は、それぞれ独立に、水素原子、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基又は

50

置換基を有していてもよい芳香環基を表す。 R^{X2} 及び R^{X4} は、それぞれ独立に、水素原子、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基、置換基を有していてもよい芳香環基又はハロゲン原子を表す。

Ar^1 及び Ar^2 は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい芳香環基を表す。

Y^1 及び Y^2 は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、 $=NR^{Y1}$ 又は $=C(R^{Y2})(R^{Y3})$ を表す。 R^{Y1} は、水素原子、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基又は置換基を有していてもよい芳香環基を表す。 R^{Y2} 及び R^{Y3} は、それぞれ独立に、シアノ基、 $-CO_2R^{Y4}$ 、 $-C(=O)R^{Y5}$ 、 $-S(=O)R^{Y6}$ 又は $-S(=O)_2R^{Y7}$ を表す。 $R^{Y4} \sim R^{Y7}$ は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基又は置換基を有していてもよい芳香環基を表す。

10

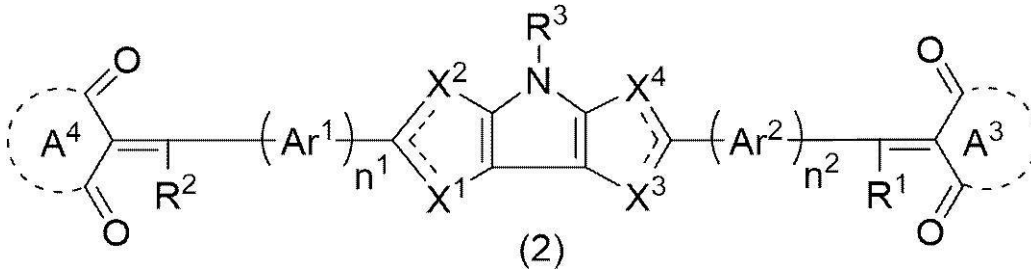
A^1 及び A^2 は、それぞれ独立に、2以上の炭素原子を含み、置換基を有していてもよい環を表す。

n^1 及び n^2 の一方は1を表し、他方は0又は1を表す。

【請求項16】

式(2)で表される化合物である、請求項15に記載の化合物。

【化6】



20

式(2)中、 R^1 及び R^2 は、それぞれ独立に、水素原子、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基、シアノ基又はハロゲン原子を表す。

R^3 は、 $-O-$ を有していてもよく、ハロゲン原子を有していてもよい炭素数7以下の脂肪族炭化水素基、又は、置換基を有していてもよい芳香環基を表す。

X^1 及び X^2 の一方は、酸素原子、硫黄原子、セレン原子又は $-NR^{X1}-$ を表し、他方は $-CR^{X2}=$ 又は窒素原子を表す。 X^3 及び X^4 の一方は、酸素原子、硫黄原子、セレン原子又は $-NR^{X3}-$ を表し、他方は $-CR^{X4}=$ 又は窒素原子を表す。 R^{X1} 及び R^{X3} は、それぞれ独立に、水素原子、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基又は置換基を有していてもよい芳香環基を表す。 R^{X2} 及び R^{X4} は、それぞれ独立に、水素原子、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基、置換基を有していてもよい芳香環基又はハロゲン原子を表す。

30

Ar^1 及び Ar^2 は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい芳香環基を表す。

A^3 及び A^4 は、それぞれ独立に、3以上の炭素原子を含み、置換基を有していてもよい環を表す。

n^1 及び n^2 の一方は1を表し、他方は0又は1を表す。

【請求項17】

Ar^1 及び Ar^2 は、それぞれ独立に、単環の芳香環基を表す、請求項15に記載の化合物。

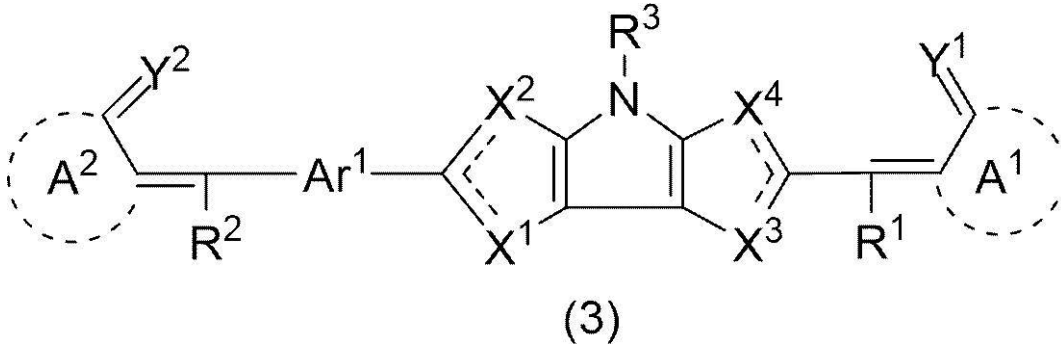
40

【請求項18】

式(3)で表される化合物である、請求項15に記載の化合物。

50

【化 7】



10

式(3)中、 R^1 及び R^2 は、それぞれ独立に、水素原子、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基、シアノ基又はハロゲン原子を表す。

R^3 は、 $-O-$ を有していてもよく、ハロゲン原子を有していてもよい炭素数7以下の脂肪族炭化水素基、又は、置換基を有していてもよい芳香環基を表す。

X^1 及び X^2 の一方は、酸素原子、硫黄原子、セレン原子又は $-NR^{X1}$ を表し、他方は $-CR^{X2}$ 又は窒素原子を表す。 X^3 及び X^4 の一方は、酸素原子、硫黄原子、セレン原子又は $-NR^{X3}$ を表し、他方は $-CR^{X4}$ 又は窒素原子を表す。 R^{X1} 及び R^{X3} は、それぞれ独立に、水素原子、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基又は置換基を有していてもよい芳香環基を表す。 R^{X2} 及び R^{X4} は、それぞれ独立に、水素原子、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基、置換基を有していてもよい芳香環基又はハロゲン原子を表す。

20

Ar^1 は、置換基を有していてもよい芳香環基を表す。

Y^1 及び Y^2 は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、 $=NR^{Y1}$ 又は $=C(R^{Y2})(R^{Y3})$ を表す。 R^{Y1} は、水素原子、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基又は置換基を有していてもよい芳香環基を表す。 R^{Y2} 及び R^{Y3} は、それぞれ独立に、シアノ基、 $-CO_2R^{Y4}$ 、 $-C(=O)R^{Y5}$ 、 $-S(=O)R^{Y6}$ 又は $-S(=O)_2R^{Y7}$ を表す。 $R^{Y4} \sim R^{Y7}$ は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基又は置換基を有していてもよい芳香環基を表す。

A^1 及び A^2 は、それぞれ独立に、2以上の炭素原子を含み、置換基を有していてもよい環を表す。

30

【請求項 19】

Ar^1 は、単環の芳香環基を表す、請求項18に記載の化合物。

【請求項 20】

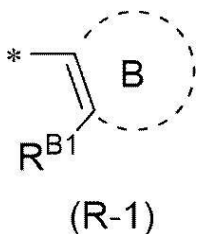
X^1 及び X^2 の一方は硫黄原子を表し、他方は $-CR^{X2}$ 又は窒素原子を表し、かつ、 X^3 及び X^4 の一方は硫黄原子を表し、他方は $-CR^{X4}$ 又は窒素原子を表す、請求項15に記載の化合物。

【請求項 21】

R^3 が、式(R-1)で表される基又は式(R-2)で表される基を表す、請求項15~20のいずれか1項に記載の化合物。

40

【化 8】

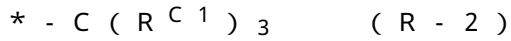


式(R-1)中、*は、結合位置を表す。Bは、2以上の炭素原子を含み、置換基を有していてもよい単環の芳香環を表す。 R^{B1} は、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水

50

素基、置換基を有していてもよいシリル基、置換基を有していてもよいアルコキシ基、置換基を有していてもよい芳香環基、シアノ基又はハロゲン原子を表す。

Bで表される前記芳香環、及び、 R^{B1} で表される前記脂肪族炭化水素基、前記シリル基、前記アルコキシ基又は前記芳香環基が置換基を有する場合、前記置換基同士は、互いに結合して非芳香族環を形成していてもよい。



式(R - 2)中、*は、結合位置を表す。 R^{C1} は、それぞれ独立に、水素原子、メチル基、イソプロピル基又はt - ブチル基を表す。

ただし、前記式(R - 2)で表される基の炭素数は、3 ~ 7であり、3つの R^{C1} のうち、2つ以上が水素原子以外である。

10

20

30

40

50