

【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】平成23年12月1日(2011.12.1)

【公表番号】特表2011-501451(P2011-501451A)

【公表日】平成23年1月6日(2011.1.6)

【年通号数】公開・登録公報2011-001

【出願番号】特願2010-530403(P2010-530403)

【国際特許分類】

H 01 L 51/30 (2006.01)

C 08 G 61/12 (2006.01)

H 01 L 51/05 (2006.01)

H 01 L 29/786 (2006.01)

H 01 L 51/42 (2006.01)

【F I】

H 01 L 29/28 2 5 0 H

C 08 G 61/12

H 01 L 29/28 1 0 0 A

H 01 L 29/28 2 5 0 G

H 01 L 29/78 6 1 8 B

H 01 L 31/04 D

【手続補正書】

【提出日】平成23年10月13日(2011.10.13)

【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

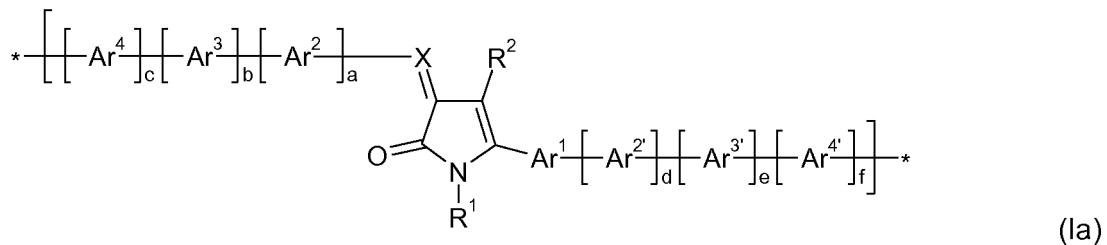
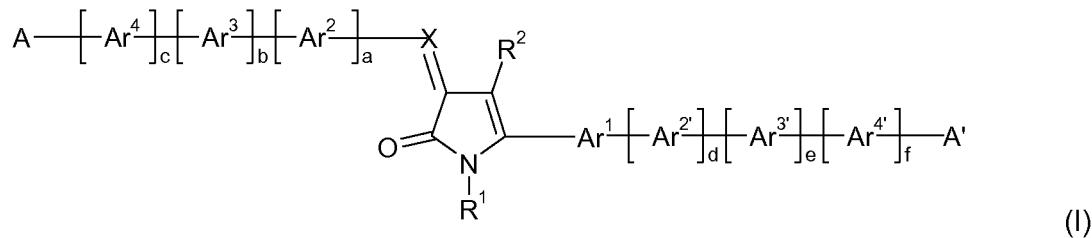
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

式(I)の化合物、又は式(Ia)の繰返単位を含む相応するオリゴマーもしくはポリマー

【化1】



[式中、

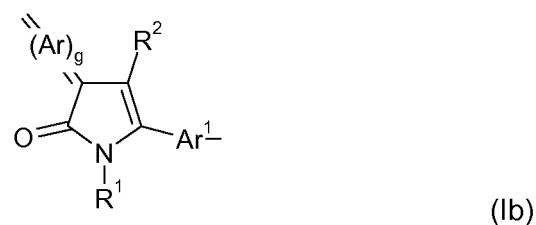
a、b、c、d、e 及び f は、0 ~ 3 の範囲であり；

A、A'、R¹、R²のそれぞれは、無関係に、水素；E；C₁ ~ C₂₅-アルキル、C₂ ~ C₂₅-アルケニル、C₂ ~ C₂₄-アルキニル（そのそれぞれは、場合によりEによって置換されていてよく、かつ/又は存在する場合に任意のC、C単結合においてDによって中断されていてよい）；シクロアルキル基（前記基は、Eによって、特にC₁ ~ C₈-アルキル、C₁ ~ C₈-チオアルコキシもしくはC₁ ~ C₈-アルコキシによって1 ~ 3置換されていてよい）；又はシクロアルキル基（前記基は、非置換フェニルもしくはEによって置換されたフェニル、特にC₁ ~ C₄-アルキル、ハロゲン、ニトロもしくはシアノによって1 ~ 3置換されたフェニルによって1もしくは2縮合されていてよい）；シクロアルケニル基；ケトン基もしくはアルデヒド基；エステル基；カルバモイル基；シリル基；シロキサンル基；Ar¹⁰もしくは-CR⁵R⁶- (C₉H_{2g}) -Ar¹⁰（式中、gは0、1、2、3もしくは4を表す）から選択されるか；又は

R²及びAr¹は、それらが結合されるビニル部と一緒にになって、環、例えばアリール基もしくはヘテロアリール基を形成し、前記環は、場合によりGによって置換されていてよく；

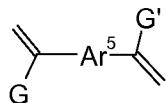
Xは、CR（式中、RはR¹について定義したものである）であるか、又は式(Ib)

【化2】



（式中、係数gは0もしくは1であり、かつArは、存在する場合には、2つの化学的二重結合によって該分子の基に結合された四価の残基であり、かつキノイドC₆ ~ C₁₀-環系、例えば=C₆H₄=及び式

【化3】



の残基から選択される)の別のケトピロール部であり;

Ar^1 (R^2 と結合されていない場合に)、 Ar^2 、 $\text{Ar}^{2'}$ 、 Ar^3 、 $\text{Ar}^{3'}$ 、 Ar^4 、 $\text{Ar}^{4'}$ 及び Ar^5 は、互いに無関係に、5~15個の炭素原子の二価の炭素環式部、2~15個の炭素原子とO、N、S、Siから選択される1~8個のヘテロ原子との二価の複素環式部(前記部のそれぞれは、共役もしくは交差共役の二重及び/又は三重結合を有する)又はエチレン性部もしくはエチン性部(これらの部のそれぞれは、非置換であるかもしくはEによって置換されている)から選択され;

R^5 及び R^6 は、互いに無関係に、水素、フッ素、シアノもしくはC₁~C₄-アルキル(これはフッ素、塩素もしくは臭素によって置換されていてよい)又はフェニル(これはC₁~C₄-アルキルで1~3置換されていてよい)を表し;

Ar^{10} は、アリールもしくはヘテロアリール(それらは場合によりGによって置換されていてよい)、特にフェニル又は1-もしくは2-ナフチル(それらはC₁~C₈-アルキル、C₁~C₈-チオアルコキシ及び/又はC₁~C₈-アルコキシで1~3置換されていてよい)を表し;

Dは、-CO-；-COO-；-S-；-SO-；-SO₂-；-OP(O)(OR²⁹)O-；-O-；-NR²⁵-；-CR²³=CR²⁴-；又は-C-C-であり;かつ

Eは、-OR²⁹；-SR²⁹；-SOR²⁹；-SO₂R²⁹；-NR²⁵R²⁶；-COR²⁸；-COOR²⁷；-CONR²⁵R²⁶；-CN；ニトロ；-OP(O)(OR²⁹)₂；-OP(O)(R²⁹)₂；-Si(R²⁹)₃；又はハロゲンであり;

G及びG'は、無関係に、E; C₁~C₁₈-アルキル(それはDによって中断されていてよい);又はC₁~C₁₈-アルコキシ(それは、Eによって置換されており、かつ/又は、2もしくは特にそれより多くの炭素原子を含む場合には、Dによって中断されている)であり、その際、

R²³、R²⁴、R²⁵及びR²⁶は、互いに無関係に、H; C₆~C₁₈-アリール; C₆~C₁₈-アリール(それは、C₁~C₁₈-アルキルもしくはC₁~C₁₈-アルコキシによって置換されている); C₁~C₁₈-アルキル; 又はC₂~C₁₈-アルキル(それは-O-によって中断されている)であり;

R²⁷及びR²⁸は、互いに無関係に、H; C₆~C₁₈-アリール; C₆~C₁₈-アリール(それは、C₁~C₁₈-アルキルもしくはC₁~C₁₈-アルコキシによって置換されている); C₁~C₁₈-アルキル; 又はC₂~C₁₈-アルキル(それは-O-によって中断されている)であり;

R²⁹は、H; C₆~C₁₈-アリール; C₆~C₁₈-アリール(それは、C₁~C₁₈-アルキルもしくはC₁~C₁₈-アルコキシによって置換されている); C₁~C₁₈-アルキル; 又はC₂~C₁₈-アルキル(それは-O-によって中断されている)であり;

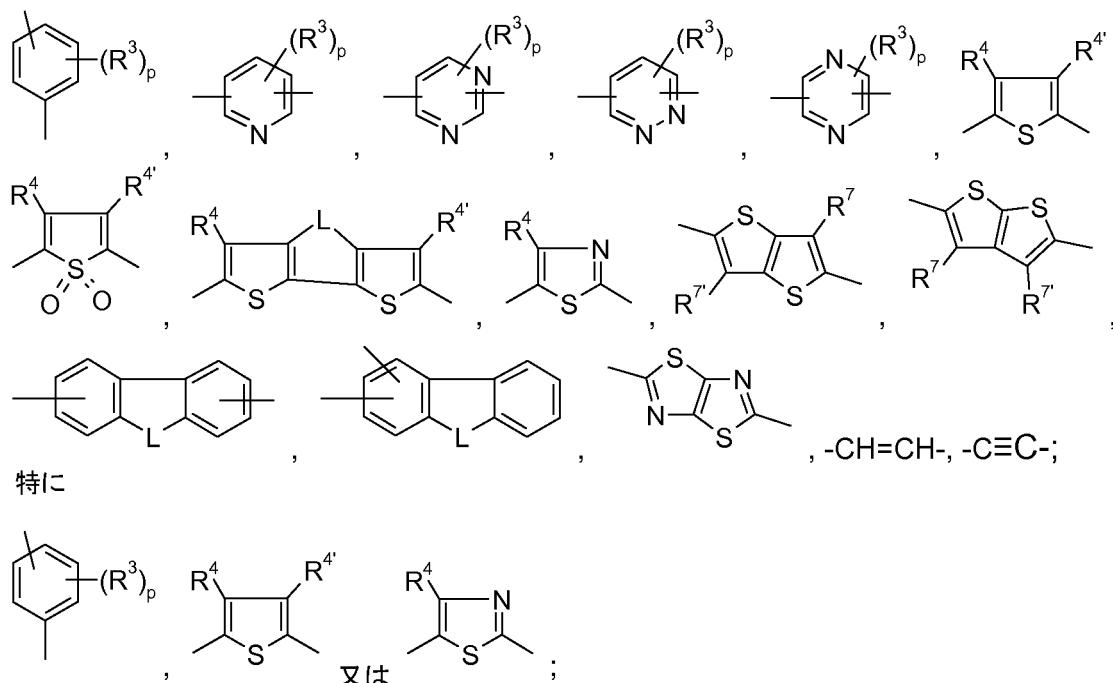
R²⁹は、R²⁹について定義したものであるが、但し、R²⁹はHではない]又はかかる化合物、オリゴマーもしくはポリマーの互変異性体を含む層を含有する、半導体デバイス、特にダイオード、ホトダイオード、有機電界効果トランジスタ、太陽電池又はダイオード及び/又はホトダイオード及び/又は有機電界効果トランジスタ及び/又は太陽電池を含むデバイス。

【請求項2】

式中、

Ar^1 (R^2 に結合されていない場合に)、 Ar^2 、 $\text{Ar}^{2'}$ 、 Ar^3 、 $\text{Ar}^{3'}$ 、 Ar^4 、 $\text{Ar}^{4'}$ 及び Ar^5 は、互いに無関係に、

【化4】



から選択され、式中、

Lは、 $\text{CR}^7\text{R}'^7$ 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{NR}^7$ 、 O 、 S 、 NR^7 、 $\text{SiR}^{17}\text{R}'^{17}$ から選択され；
 R^3 は、1つの基内で同一もしくは異なってよく、かつ水素、残基E、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{25}$ -アルキル（それは、場合によりEによって置換されていてよく、かつ/又は2もしくは特にそれより多くの炭素原子を含む場合には、Dによって中断されていてよい）、 $\text{C}_6 \sim \text{C}_{24}$ -アリール（それは、場合によりGによって置換されていてよい）、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_{20}$ -ヘテロアリール（それは、場合によりGによって置換されていてよい）、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{18}$ -アルコキシ（それは、場合によりEによって置換されていてよく、かつ/又は2もしくは特にそれより多くの炭素原子を含む場合には、Dによって中断されていてよい）、 $\text{C}_7 \sim \text{C}_{25}$ -アラルキル（アラルキルのアラ（=アリール）は、場合によりGによって置換されていてよい）又は $-\text{CO}-\text{R}^{28}$ から選択されるか、又は互いに隣接する2つ以上の基 R^3 は、環を形成し；

R^4 、 $\text{R}^{4'}$ 、 R^7 及び $\text{R}^{7'}$ は、互いに無関係に、水素、残基E、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{25}$ -アルキル（それは、場合によりEによって置換されていてよく、かつ/又は2もしくは特にそれより多くの炭素原子を含む場合には、Dによって中断されていてよい）、 $\text{C}_6 \sim \text{C}_{24}$ -アリール（それは、場合によりGによって置換されていてよい）、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_{20}$ -ヘテロアリール（それは、場合によりGによって置換されていてよい）、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{18}$ -アルコキシ（それは、場合によりEによって置換されていてよく、かつ/又は2もしくは特にそれより多くの炭素原子を含む場合には、Dによって中断されていてよい）、 $\text{C}_7 \sim \text{C}_{25}$ -アラルキル（アラルキルのアラ（=アリール）は、場合によりGによって置換されていてよい）又は $-\text{CO}-\text{R}^{28}$ を表すか、又は R^4 及び $\text{R}^{4'}$ は、環を形成し；かつ

R^{17} 及び R'^{17} は、 R^{29} として定義したものである、請求項1に記載の半導体デバイス。

【請求項3】

各アリールが、フェニル及びチオフェニルから選択される、請求項1又は2に記載の半導体デバイス。

【請求項4】

式中、

A及びA'が、無関係に、水素； $\text{C}_1 \sim \text{C}_{25}$ -アルキルもしくは $\text{C}_2 \sim \text{C}_{25}$ -アルケニル（そのそれぞれは、場合によりEによって置換されていてよく、かつ/又は存在する場合にはC-C单結合において、Dによって中断されていてよい）； Ar^{10} 又は $-\text{CR}^5\text{R}^6-$ （

$C H_2$)_g - Ar¹⁰; から選択され;

Ar¹⁰は、フェニル及びチオフェニルから選択され;

Dは、-S-; -O-; -CR²³=CR²⁴-であり; かつ

Eは、-OR²⁹; -SR²⁹; -NR²⁵R²⁶; -CN; 又はハロゲンであり;

G及びG'は、無関係に、E; C₁~C₁₈-アルキル(それは、Dによって中断されていてよい); 又はC₁~C₁₈-アルコキシ(それは、Eによって置換されており、かつ/又は2もしくは特にそれより多くの炭素原子を含む場合には、Dによって中断されている)であり、その際、

R²³、R²⁴、R²⁵及びR²⁶は、互いに無関係に、H; フェニル; チオフェニル; フェニルもしくはチオフェニル(それらは、C₁~C₁₈-アルキルもしくはC₁~C₁₈-アルコキシによって置換されている); C₁~C₁₈-アルキルであり;

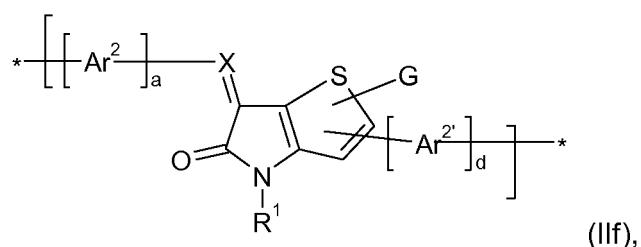
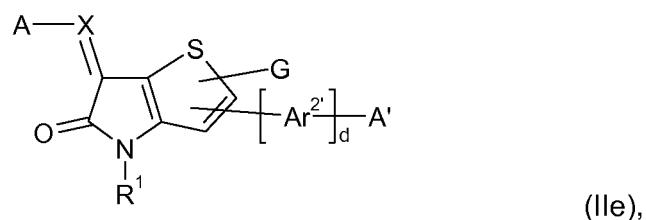
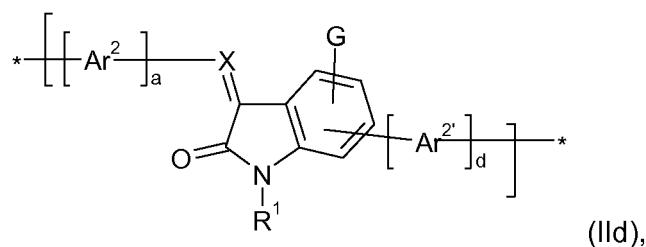
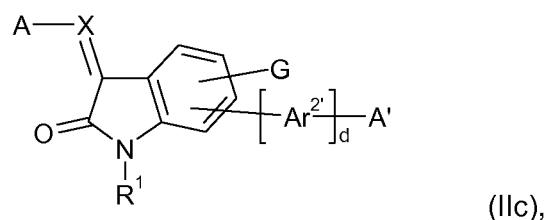
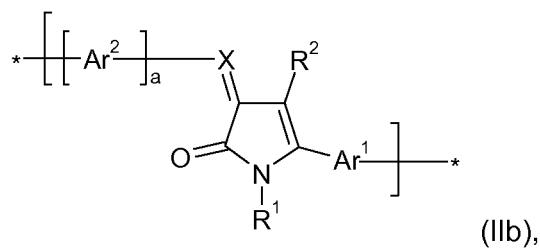
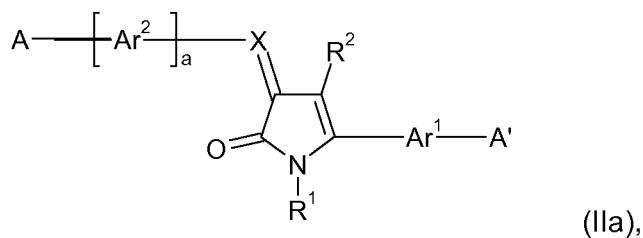
R²⁹は、H; フェニル; チオフェニル; フェニルもしくはチオフェニル(それらは、C₁~C₁₈-アルキルもしくはC₁~C₁₈-アルコキシによって置換されている); C₁~C₁₈-アルキルであり;

R'²⁹は、R²⁹について定義されるものであるが、但し、R'²⁹はHではない、請求項1から3までのいずれか1項に記載の半導体デバイス。

【請求項5】

式(I)又は(Ia)の化合物が、式(IIa)、(IIb)、(IIC)、(IID)、(IIe)もしくは(IIf)

【化 5】



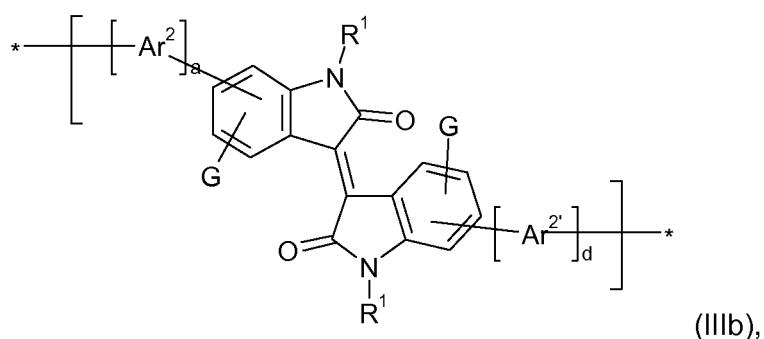
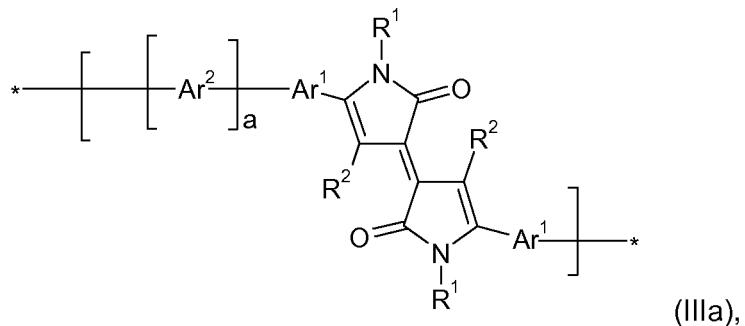
[式中、記号は、請求項1に定義されるものである]に一致する、請求項1又は4に記載

の半導体デバイス。

【請求項 6】

式(I)又は(Ia)の化合物が、式(IIIa)もしくは(IIIb)

【化6】



[式中、記号は、請求項1、2もしくは5に定義されるものである]に一致する、請求項1、2又は5に記載の半導体デバイス。

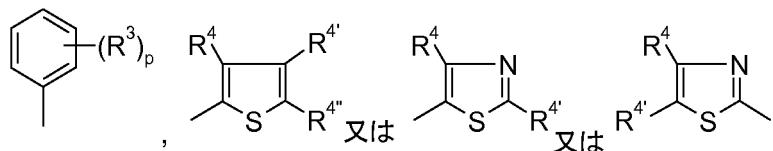
【請求項 7】

式(Ia)、(IIb)、(IId)及び/又は(IIId)のオリゴマーもしくはポリマーの半導体化合物を含有する請求項1から6までのいずれか1項に記載の半導体デバイスであって、部分Aをホモオリゴマー鎖もしくはホモポリマー鎖の末端基として含み、その末端基A、A'は、無関係に、水素；C₁～C₂₅-アルキルもしくはC₂～C₂₅-アルケニル（そのそれぞれは、場合によりEによって置換されていてよく、かつ/又は存在する場合にC、C単結合において、Dによって中断されていてよい）；Ar¹⁰又は-CR⁵R⁶-（CH₂)_g-Ar¹⁰から選択され；その際、

R⁵及びR⁶は、互いに無関係に、水素、フッ素又はC₁～C₄-アルキル（それは、フッ素によって置換されていてよい）を表し；かつ

Ar¹⁰は、式

【化7】



の基を表し、その際、pは、0、1、2もしくは3を表し；

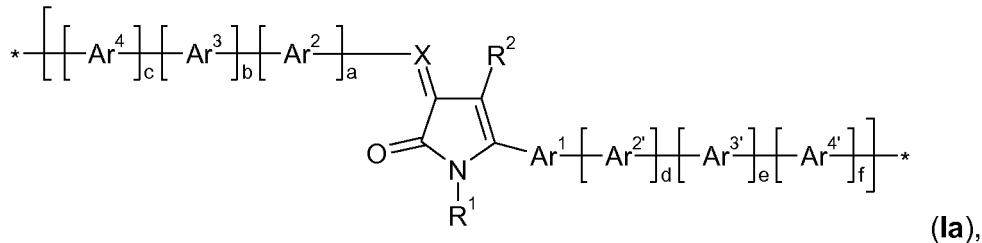
R³は、1つの基内で同一もしくは異なってよく、かつC₁～C₁₈-アルキル、C₁～C₁₈-アルコキシ（それらのそれぞれは、Eによって置換されていてよい）であるか；又は-CO-R²⁸であるか；又は互いに隣接する2つ以上の基R³は、縮合された5もしくは6員の炭素環式の環を形成し；

R^4 、 $R^{4'}$ 及び $R^{4''}$ は、無関係に、水素、 $C_1 \sim C_{25}$ -アルキル（それは、場合によりEによって置換されていてよく、かつ/又は2もしくは特にそれより多くの炭素原子を含む場合には、Dによって中断されていてよい）； $C_1 \sim C_{18}$ -アルコキシ（それは、場合によりEによって置換されていてよく、かつ/又は2もしくは特にそれより多くの炭素原子を含む場合には、Dによって中断されていてよい）； $C_7 \sim C_{15}$ -フェニルアルキル（フェニルは、場合によりGによって置換されていてよい）又は-CO-R²⁸を表す、半導体デバイス。

【請求項8】

式

【化8】



[式中、記号は、請求項1に定義されるものである]の少なくとも4つの繰返単位を含むオリゴマー又はポリマー。

【請求項9】

有機半導体デバイスの製造方法であって、請求項1から8までのいずれか1項による式(I)及び/又は(Ia)の化合物の有機溶剤中の溶液及び/又は分散液を、好適な基板に適用し、そして溶剤を除去することを含む製造方法。

【請求項10】

請求項1から8までのいずれか1項による式(I)及び/又は(Ia)の化合物を、電荷輸送性の、半導性の、導電性の、光伝導性の、発光性の材料、表面改質材料、電池中の電極材料、アライメント層として、又はO F E T、I C、T F T、ディスプレイ、R F I Dタグ、エレクトロルミネッセンスもしくはホトルミネッセンスデバイス、ディスプレイのバックライト、光起電性デバイスもしくはセンサデバイス、電荷注入層、ショットキダイオード、メモリデバイス（例えばF e F E T）、平坦層、静電防止剤、導電性基板もしくはパターン、光伝導体、又は電子写真用途（記録）において用いる使用。