(19)日本国特許庁(JP)　(12)特　許　公　報(B2)　(11)特許番号

特許第5658145号
(P5658145)

(45)発行日　平成27年1月21日(2015.1.21)　(24)登録日　平成26年12月5日(2014.12.5)

(51)Int.Cl.		F I	
C07F 7/08	(2006.01)	C07F 7/08	CSPC
C09D 183/14	(2006.01)	C07F 7/08	S
C09D 149/00	(2006.01)	C09D 183/14	
C09D 183/07	(2006.01)	C09D 149/00	
C08K 5/54	(2006.01)	C09D 183/07	

請求項の数 3　(全 59 頁)　最終頁に続く

(21)出願番号　特願2011-511852 (P2011-511852)
(86)(22)出願日　平成21年5月29日 (2009.5.29)
(65)公表番号　特表2011-521972 (P2011-521972A)
(43)公表日　平成23年7月28日 (2011.7.28)
(86)国際出願番号　PCT/US2009/045667
(87)国際公開番号　WO2009/155106
(87)国際公開日　平成21年12月23日 (2009.12.23)
審査請求日　平成24年4月12日 (2012.4.12)
(31)優先権主張番号　61/057,715
(32)優先日　平成20年5月30日 (2008.5.30)
(33)優先権主張国　米国(US)

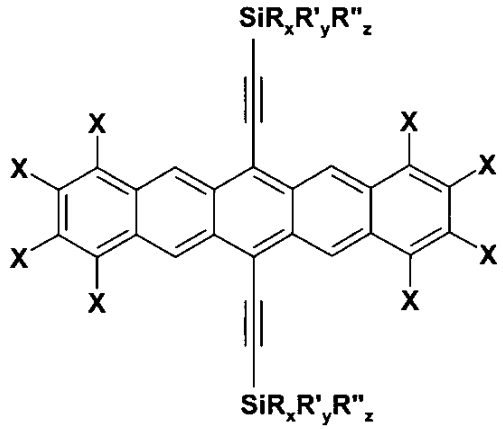
前置審査

(73)特許権者　505005049
スリーエム　イノベイティブ　プロパティズ　カンパニー
アメリカ合衆国，ミネソタ州　５５１３３－３４２７，セント　ポール，ポスト　オフィス　ボックス　３３４２７，スリーエム　センター
(73)特許権者　510314301
アウトライダー　テクノロジーズ
アメリカ合衆国，ケンタッキー　４０２４３，ルイスビル，クライドバンク　コート　４０４
(74)代理人　100099759
弁理士　青木　篤

最終頁に続く

(54)【発明の名称】シリルメチルペンタセン化合物及び組成物、並びにそれらの製造及び使用方法

(57)【特許請求の範囲】
【請求項１】
次の化学構造を有するペンタセン化合物。
【化１】



（式中、
各Ｒは独立して、（ｉ）分枝若しくは非分枝のアルキル基、（ｉｉ）１つ以上の第１の

置換基で置換された分枝若しくは非分枝のアルキル基、（ｉｉｉ）シクロプロピル基、シクロブチル基、若しくはシクロペンチル基、（ｉｖ）１つ以上の第１の置換基で置換されたシクロプロピル基、シクロブチル基、若しくはシクロペンチル基、（ｖ）シクロプロピルアルキレン基、シクロブチルアルキレン基、若しくはシクロペンチルアルキレン基、又は（ｖｉ）１つ以上の第１の置換基で置換されたシクロプロピルアルキレン基、シクロブチルアルキレン基、若しくはシクロペンチルアルキレン基から選択され、

各Ｒ’は独立して、（ｉ）分枝若しくは非分枝のアルケニル基、（ｉｉ）１つ以上の第１の置換基で置換された分枝若しくは非分枝のアルケニル基、（ｉｉｉ）シクロプロピル基、シクロブチル基、若しくはシクロペンチル基、（ｉｖ）１つ以上の第１の置換基で置換されたシクロプロピル基、シクロブチル基、若しくはシクロペンチル基、（ｖ）シクロプロピルアルキレン基、シクロブチルアルキレン基、若しくはシクロペンチルアルキレン基、又は（ｖｉ）１つ以上の第１の置換基で置換されたシクロプロピルアルキレン基、シクロブチルアルキレン基、若しくはシクロペンチルアルキレン基から選択され、

Ｒ”は、（ｉ）水素、（ｉｉ）分枝若しくは非分枝のアルキニル基、（ｉｉｉ）１つ以上の第１の置換基で置換された分枝若しくは非分枝のアルキニル基、（ｉｖ）シクロプロピル基、シクロブチル基、若しくはシクロペンチル基、（ｖ）１つ以上の第１の置換基で置換されたシクロプロピル基、シクロブチル基、若しくはシクロペンチル基、（ｖｉ）シクロプロピルアルキレン基、シクロブチルアルキレン基、若しくはシクロペンチルアルキレン基、（ｖｉｉ）１つ以上の第１の置換基で置換されたシクロプロピルアルキレン基、シクロブチルアルキレン基、若しくはシクロペンチルアルキレン基、（ｖｉｉｉ）アリールアルキレン基、（ｉｘ）１つ以上の第１の置換基で置換されたアリールアルキレン基、（ｘ）アセチル基、（ｘｉ）環構造内に炭素原子とＯ、Ｎ、Ｓ、及びＳｅの少なくとも１つとを有する複素環、又は（ｘｉｉ）環構造内に炭素原子とＯ、Ｎ、Ｓ、及びＳｅの少なくとも１つとを有し前記環構造の１つ以上の環員が１つ以上の第１の置換基で置換された複素環から選択され、

前記１つ以上の第１の置換基のそれぞれが独立して、ハロゲン、水酸基、アルキル基、ハロゲン化アルキル基、シアノ基、アミノ基、カルボニル基、アルコキシ基、ハロゲン化アルコキシ基、チオアルコキシ基、ニトロ基、カルボン酸基、カルボン酸エステル基、アルケニル基、アルキニル基、アリール基、ヘテロアリール基、又はシリル基から選択され、

ｘ＝０、１又は２であり、

ｙ＝０、１又は２であり、

ｚ＝０又は１であり、

但し（ｘ＋ｙ＋ｚ）＝３であることを条件とし、

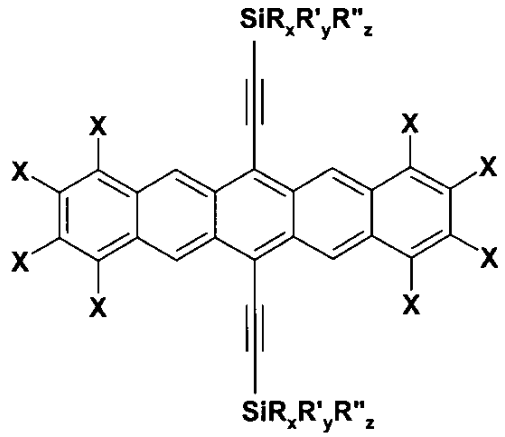
各Ｘは独立して、（ｉ）水素、（ｉｉ）ハロゲン、（ｉｉｉ）分枝又は非分枝のアルキル基、（ｉｖ）１つ以上の第２の置換基で置換された分枝若しくは非分枝のアルキル基、（ｖ）アリール基、（ｖｉ）１つ以上の第２の置換基で置換されたアリール基、（ｖｉｉ）分枝若しくは非分枝のアルケニル基、（ｖｉｉｉ）１つ以上の第２の置換基で置換された分枝若しくは非分枝のアルケニル基、（ｉｘ）分枝若しくは非分枝のアルキニル基、（ｘ）１つ以上の第２の置換基で置換された分枝若しくは非分枝のアルキニル基、（ｘｉ）環構造内に炭素原子とＯ、Ｎ、Ｓ、及びＳｅの少なくとも１つとを有する複素環基、（ｘｉｉ）環構造内に炭素原子とＯ、Ｎ、Ｓ、及びＳｅの少なくとも１つとを有し前記環構造の１つ以上の環員が１つ以上の第２の置換基で置換された複素環基、（ｘｉｉｉ）シアノ基、（ｘｉｖ）エーテル基、（ｘｖ）分枝若しくは非分枝のアルコキシ基、（ｘｖｉ）１つ以上の第２の置換基で置換された分枝若しくは非分枝のアルコキシ基、又は（ｘｖｉｉ）ニトロ基から選択されるか、あるいは（ｘｖｉｉｉ）任意の２個の隣り合うＸ基同士が（ａ）環構造内に炭素原子のみを有する炭素環、（ｂ）環構造内に炭素原子のみを有し前記環構造の１つ以上の環員が１つ以上の第２の置換基で置換された炭素環、（ｃ）環構造内に炭素原子とＯ、Ｎ、Ｓ、及びＳｅの少なくとも１つとを有する複素環、又は（ｄ）環構造内に炭素原子とＯ、Ｎ、Ｓ、及びＳｅの少なくとも１つとを有し前記環構造の１つ以

上の環員が１つ以上の第２の置換基で置換された複素環を形成し、
前記１つ以上の第２の置換基のそれぞれが独立して、ハロゲン、アルキル基、シアノ基、水酸基、又はカルボン酸基から選択される。）

【請求項２】

少なくとも１つのコーティング可能な表面と、前記少なくとも１つのコーティング可能な表面上にコーティングされた層とを有する基板であって、前記コーティング層が、
次の化学構造を有するペンタセン化合物を含む、基板。

【化２】



（式中、
各Ｒは独立して、（ｉ）分枝若しくは非分枝のアルキル基、（ｉｉ）１つ以上の第１の置換基で置換された分枝若しくは非分枝のアルキル基、（ｉｉｉ）シクロプロピル基、シクロブチル基、若しくはシクロペンチル基、（ｉｖ）１つ以上の第１の置換基で置換されたシクロプロピル基、シクロブチル基、若しくはシクロペンチル基、（ｖ）シクロプロピルアルキレン基、シクロブチルアルキレン基、若しくはシクロペンチルアルキレン基、又は（ｖｉ）１つ以上の第１の置換基で置換されたシクロプロピルアルキレン基、シクロブチルアルキレン基、若しくはシクロペンチルアルキレン基から選択され、
各Ｒ’は独立して、（ｉ）分枝若しくは非分枝のアルケニル基、（ｉｉ）１つ以上の第１の置換基で置換された分枝若しくは非分枝のアルケニル基、（ｉｉｉ）シクロプロピル基、シクロブチル基、若しくはシクロペンチル基、（ｉｖ）１つ以上の第１の置換基で置換されたシクロプロピル基、シクロブチル基、若しくはシクロペンチル基、（ｖ）シクロプロピルアルキレン基、シクロブチルアルキレン基、若しくはシクロペンチルアルキレン基、又は（ｖｉ）１つ以上の第１の置換基で置換されたシクロプロピルアルキレン基、シクロブチルアルキレン基、若しくはシクロペンチルアルキレン基をから選択され、
Ｒ”は、（ｉ）水素、（ｉｉ）分枝若しくは非分枝のアルキニル基、（ｉｉｉ）１つ以上の第１の置換基で置換された分枝若しくは非分枝のアルキニル基、（ｉｖ）シクロプロピル基、シクロブチル基、若しくはシクロペンチル基、（ｖ）１つ以上の第１の置換基で置換されたシクロプロピル基、シクロブチル基、若しくはシクロペンチル基、（ｖｉ）シクロプロピルアルキレン基、シクロブチルアルキレン基、若しくはシクロペンチルアルキレン基、（ｖｉｉ）１つ以上の第１の置換基で置換されたシクロプロピルアルキレン基、シクロブチルアルキレン基、若しくはシクロペンチルアルキレン基、（ｖｉｉｉ）アリールアルキレン基、（ｉｘ）１つ以上の第１の置換基で置換されたアリールアルキレン基、（ｘ）アセチル基、（ｘｉ）環構造内に炭素原子とＯ、Ｎ、Ｓ、及びＳｅの少なくとも１つとを有する複素環、又は（ｘｉｉ）環構造内に炭素原子とＯ、Ｎ、Ｓ、及びＳｅの少なくとも１つとを有し前記環構造の１つ以上の環員が１つ以上の第１の置換基で置換された複素環から選択され、

前記１つ以上の第１の置換基のそれぞれが独立して、ハロゲン、水酸基、アルキル基、ハロゲン化アルキル基、シアノ基、アミノ基、カルボニル基、アルコキシ基、ハロゲン化アルコキシ基、チオアルコキシ基、ニトロ基、カルボン酸基、カルボン酸エステル基、アルケニル基、アルキニル基、アリール基、ヘテロアリール基、又はシリル基から選択され、

ｘ＝０、１又は２であり、

ｙ＝０、１又は２であり、

ｚ＝０又は１であり、

但し（ｘ＋ｙ＋ｚ）＝３であることを条件とし、

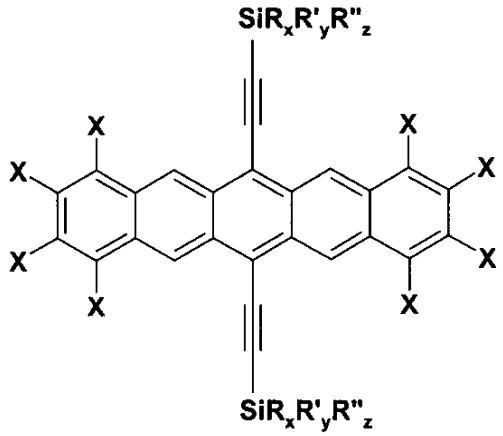
各Ｘは独立して、（ｉ）水素、（ｉｉ）ハロゲン、（ｉｉｉ）分枝又は非分枝のアルキル基、（ｉｖ）１つ以上の第２の置換基で置換された分枝若しくは非分枝のアルキル基、（ｖ）アリール基、（ｖｉ）１つ以上の第２の置換基で置換されたアリール基、（ｖｉｉ）分枝若しくは非分枝のアルケニル基、（ｖｉｉｉ）１つ以上の第２の置換基で置換された分枝若しくは非分枝のアルケニル基、（ｉｘ）分枝若しくは非分枝のアルキニル基、（ｘ）１つ以上の第２の置換基で置換された分枝若しくは非分枝のアルキニル基、（ｘｉ）環構造内に炭素原子とＯ、Ｎ、Ｓ、及びＳｅの少なくとも１つとを有する複素環基、（ｘｉｉ）環構造内に炭素原子とＯ、Ｎ、Ｓ、及びＳｅの少なくとも１つとを有し前記環構造の１つ以上の環員が１つ以上の第２の置換基で置換された複素環基、（ｘｉｉｉ）シアノ基、（ｘｉｖ）エーテル基、（ｘｖ）分枝若しくは非分枝のアルコキシ基、（ｘｖｉ）１つ以上の第２の置換基で置換された分枝若しくは非分枝のアルコキシ基、又は（ｘｖｉｉ）ニトロ基から選択されるか、あるいは（ｘｖｉｉｉ）任意の２個の隣り合うＸ基同士が（ａ）環構造内に炭素原子のみを有する炭素環、（ｂ）環構造内に炭素原子のみを有し前記環構造の１つ以上の環員が１つ以上の第２の置換基で置換された炭素環、（ｃ）環構造内に炭素原子とＯ、Ｎ、Ｓ、及びＳｅの少なくとも１つとを有する複素環、又は（ｄ）環構造内に炭素原子とＯ、Ｎ、Ｓ、及びＳｅの少なくとも１つとを有し前記環構造の１つ以上の環員が１つ以上の第２の置換基で置換された複素環を形成し、

前記１つ以上の第２の置換基のそれぞれが独立して、ハロゲン、アルキル基、シアノ基、水酸基、又はカルボン酸基から選択される。）

【請求項３】

コーティング層を有する電子デバイスであって、前記コーティング層が次の化学構造を有するペンタセン化合物を含む、電子デバイス。

【化３】



（式中、

各Ｒは独立して、（ｉ）分枝若しくは非分枝のアルキル基、（ｉｉ）１つ以上の第１の置換基で置換された分枝若しくは非分枝のアルキル基、（ｉｉｉ）シクロプロピル基、シ

クロブチル基、若しくはシクロペンチル基、（ｉｖ）１つ以上の第１の置換基で置換されたシクロプロピル基、シクロブチル基、若しくはシクロペンチル基、（ｖ）シクロプロピルアルキレン基、シクロブチルアルキレン基、若しくはシクロペンチルアルキレン基、又は（ｖｉ）１つ以上の第１の置換基で置換されたシクロプロピルアルキレン基、シクロブチルアルキレン基、若しくはシクロペンチルアルキレン基から選択され、

各Ｒ’は独立して、（ｉ）分枝若しくは非分枝のアルケニル基、（ｉｉ）１つ以上の第１の置換基で置換された分枝若しくは非分枝のアルケニル基、（ｉｉｉ）シクロプロピル基、シクロブチル基、若しくはシクロペンチル基、（ｉｖ）１つ以上の第１の置換基で置換されたシクロプロピル基、シクロブチル基、若しくはシクロペンチル基、（ｖ）シクロプロピルアルキレン基、シクロブチルアルキレン基、若しくはシクロペンチルアルキレン基、又は（ｖｉ）１つ以上の第１の置換基で置換されたシクロプロピルアルキレン基、シクロブチルアルキレン基、若しくはシクロペンチルアルキレン基から選択され、

Ｒ”は、（ｉ）水素、（ｉｉ）分枝若しくは非分枝のアルキニル基、（ｉｉｉ）１つ以上の第１の置換基で置換された分枝若しくは非分枝のアルキニル基、（ｉｖ）シクロプロピル基、シクロブチル基、若しくはシクロペンチル基、（ｖ）１つ以上の第１の置換基で置換されたシクロプロピル基、シクロブチル基、若しくはシクロペンチル基、（ｖｉ）シクロプロピルアルキレン基、シクロブチルアルキレン基、若しくはシクロペンチルアルキレン基、（ｖｉｉ）１つ以上の第１の置換基で置換されたシクロプロピルアルキレン基、シクロブチルアルキレン基、若しくはシクロペンチルアルキレン基、（ｖｉｉｉ）アリールアルキレン基、（ｉｘ）１つ以上の第１の置換基で置換されたアリールアルキレン基、（ｘ）アセチル基、（ｘｉ）環構造内に炭素原子とＯ、Ｎ、Ｓ、及びＳｅの少なくとも１つとを有する複素環、又は（ｘｉｉ）環構造内に炭素原子とＯ、Ｎ、Ｓ、及びＳｅの少なくとも１つとを有し前記環構造の１つ以上の環員が１つ以上の第１の置換基で置換された複素環から選択され、

前記１つ以上の第１の置換基のそれぞれが独立して、ハロゲン、水酸基、アルキル基、ハロゲン化アルキル基、シアノ基、アミノ基、カルボニル基、アルコキシ基、ハロゲン化アルコキシ基、チオアルコキシ基、ニトロ基、カルボン酸基、カルボン酸エステル基、アルケニル基、アルキニル基、アリール基、ヘテロアリール基、又はシリル基から選択され、

ｘ＝０、１又は２であり、

ｙ＝０、１又は２であり、

ｚ＝０又は１であり、

但し（ｘ＋ｙ＋ｚ）＝３であることを条件とし、

各Ｘは独立して、（ｉ）水素、（ｉｉ）ハロゲン、（ｉｉｉ）分枝又は非分枝のアルキル基、（ｉｖ）１つ以上の第２の置換基で置換された分枝若しくは非分枝のアルキル基、（ｖ）アリール基、（ｖｉ）１つ以上の第２の置換基で置換されたアリール基、（ｖｉｉ）分枝若しくは非分枝のアルケニル基、（ｖｉｉｉ）１つ以上の第２の置換基で置換された分枝若しくは非分枝のアルケニル基、（ｉｘ）分枝若しくは非分枝のアルキニル基、（ｘ）１つ以上の第２の置換基で置換された分枝若しくは非分枝のアルキニル基、（ｘｉ）環構造内に炭素原子とＯ、Ｎ、Ｓ、及びＳｅの少なくとも１つとを有する複素環基、（ｘｉｉ）環構造内に炭素原子とＯ、Ｎ、Ｓ、及びＳｅの少なくとも１つとを有し前記環構造の１つ以上の環員が１つ以上の第２の置換基で置換された複素環基、（ｘｉｉｉ）シアノ基、（ｘｉｖ）エーテル基、（ｘｖ）分枝若しくは非分枝のアルコキシ基、（ｘｖｉ）１つ以上の第２の置換基で置換された分枝若しくは非分枝のアルコキシ基、又は（ｘｖｉｉ）ニトロ基から選択されるか、あるいは（ｘｖｉｉｉ）任意の２個の隣り合うＸ基同士が（ａ）環構造内に炭素原子のみを有する炭素環、（ｂ）環構造内に炭素原子のみを有し前記環構造の１つ以上の環員が１つ以上の第２の置換基で置換された炭素環、（ｃ）環構造内に炭素原子とＯ、Ｎ、Ｓ、及びＳｅの少なくとも１つとを有する複素環、又は（ｄ）環構造内に炭素原子とＯ、Ｎ、Ｓ、及びＳｅの少なくとも１つとを有し前記環構造の１つ以上の環員が１つ以上の第２の置換基で置換された複素環を形成し、

前記１つ以上の第２の置換基のそれぞれが独立して、ハロゲン、アルキル基、シアノ基、水酸基、又はカルボン酸基から選択される。）

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【０００１】

本発明は一般的にはシリルエチルペンタセン及びシリルエチルペンタセンを含有する組成物に関する。本発明は更に、シリルエチルペンタセンを製造及び使用する方法、並びにシリルエチルペンタセンを含有する組成物に一般的に関する。

【背景技術】

【０００２】

有機ベースのトランジスタからなる電子デバイスは、無機トランジスタからなる電子デバイスと比較して性能面では見劣りがするもののより低コストで製造することができ、より大きな面積のフォーマットに適用することができる。一般に有機ベーストランジスタは、小型の分子又はポリマーを半導体材料として利用している。通常、小分子半導体材料は有機溶媒に対する溶解度が低いために薄膜を形成するには真空蒸着する必要がある。有用なデバイスを製造するための多層パターニングにはシャドーマスク又はフォトリソグラフィー法を必要とする。真空蒸着及びリソグラフィーは、真空蒸着及びリソグラフィーを必要としないプロセス（例えば溶液コーティング法）よりも大幅にコストがかかるプロセスを必要とする。

【０００３】

安価な電子デバイスを製造するためのコスト効率の高いアプローチの１つとして、以下の代表的なコーティング法、すなわちスピンコーティング、ナイフコーティング、ロール・ツー・ロール・ウェブコーティング、及びディップコーティング、並びにインクジェット印刷、スクリーン印刷、及びオフセットリソグラフィーなどの印刷法のいずれかによって有機半導体材料を塗布することがある。しかしながら、上記に述べたように有機半導体材料は溶媒に溶けにくいことで有名であり、溶解するものも一般に溶液中で不安定である。不溶性及び不安定性の問題のため、安価な電子デバイスを作製するために上記のような安価なコーティング工程を使用して有機半導体材料を塗布する可能性は限定されている。

【０００４】

６，１３－シリルエチニル置換されたペンタセンに基づいた特定の有機半導体は、（ｉ）有機溶媒に溶解し、（ｉｉ）溶液中で安定であり、（ｉｉｉ）有機電界トランジスタ（ＯＦＥＴ）で高い性能を与えることが示されている。例えば、６，１３－ビス［（トリイソプロピルシリル）エチニル］ペンタセン（本明細書中では「ＴＩＰＳペンタセン」とも呼ぶ）は、（ｉ）有機溶媒中に一定の溶解度を有し、（ｉｉ）溶液中で一定の安定性を有し、（ｉｉｉ）有機電界トランジスタ（ＯＦＥＴ）で高い性能を与えることが示されている。しかしながら、ＴＩＰＳペンタセンであっても特定の有機溶媒に対する溶解度は限定されており、例えば電荷キャリア移動度の値によって測定されるような電子デバイス（例えばトランジスタ）において与えられる性能も限定されている。

【発明の概要】

【課題を解決するための手段】

【０００５】

当該技術分野では、少なくとも以下の性質、すなわち、（ｉ）１以上の有機溶媒への高い溶解度、（ｉｉ）特定の有機溶媒中に取り込まれた際の高い安定性、及び、（ｉｉｉ）例えば電子デバイスの電荷キャリア移動度の値によって測定される、半導体層として電子デバイスに組み込まれた際の高い性能、の少なくとも１つを与える有機化合物が求められている。

【０００６】

本発明は、以下の性質、すなわち、（ｉ）１つ以上の有機溶媒（例えばトルエン）への高い溶解度、（ｉｉ）特定の有機溶媒（例えばトルエン）中に取り込まれた際の高い安定性、及び、（ｉｉｉ）、電子デバイスの電荷キャリア移動度の値によって測定される、半

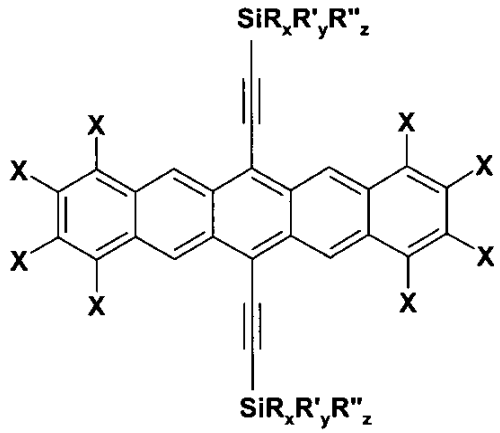
導体層として電子デバイスに組み込まれた際の高い性能、の１つ以上を有する有機化合物、すなわち６，１３－シリルエチニル置換されたペンタセン化合物の発見によって当該技術分野における特定の課題を解決するものである。本発明のペンタセン化合物は、電子デバイスの製造においてコーティング可能な組成物として利用することができる。更に、得られた電子デバイスは、約２．０ｃｍ^2／Ｖ－ｓよりも高い（例えば約２．４ｃｍ^2／Ｖ－ｓよりも高い、約３．０ｃｍ^2／Ｖ－ｓよりも高い、又はそれよりも高い）電荷キャリア移動度の値を示しうる。

【０００７】

本発明は特定の６，１３－シリルエチニル置換を有するペンタセン化合物に関する。例示的な一実施形態では、本発明は下記化学構造を有するペンタセン化合物に関する。

【０００８】

【化１】



【０００９】

（以後、「構造Ａ」とも呼ぶ）

［式中、各Ｒは独立して、（ｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキル基、（ｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキル基、又は（ｉｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキルアルキレン基を含み、

各Ｒ’は独立して、（ｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルケニル基、（ｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキル基、又は（ｉｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキルアルキレン基を含み、

Ｒ”は、（ｉ）水素、（ｉｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキニル基、（ｉｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキル基、（ｉｖ）置換又は非置換のシクロアルキルアルキレン基、（ｖ）置換アリール基、（ｖｉ）置換又は非置換のアリールアルキレン基、（ｖｉｉ）アセチル基、又は（ｖｉｉｉ）環内にＯ、Ｎ、Ｓ、及びＳｅの少なくとも１つを有する置換又は非置換の複素環を含み、

ｘ＝１又は２であり、

ｙ＝１又は２であり、

ｚ＝０又は１であり、

（ｘ＋ｙ＋ｚ）＝３であり、

各Ｘは独立して、（ｉ）水素、（ｉｉ）ハロゲン、（ｉｉｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキル基、（ｉｖ）置換又は非置換のアリール基、（ｖ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルケニル基、（ｖｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキニル基、（ｖｉｉ）置換又は非置換の複素環基、（ｖｉｉｉ）シアノ基、（ｉｖ）エーテル基、（ｘ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルコキシ基、（ｘｉ）ニトロ基を含むか、あるいは（ｘｉｉ）任意の２個の隣り合うＸ基同士が（ａ）置換又は非置換の炭素環、又

は（ｂ）置換又は非置換の複素環を形成し、
ｚ＝０であり、かつＲ及びＲ’がともに（ｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキル基、及び（ｉｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルケニル基の組み合わせを含む場合、ペンタセン化合物は、本発明のトランジスタ製造及び電荷キャリア移動度値試験方法（後述、「ＴＦ及びＣＣＭＶ試験方法」とも呼ぶ）によって測定される電荷キャリア最大移動度の値が２．０ｃｍ^2／Ｖ－ｓ以上であるような半導体層の形成を可能とする。
【００１０】
別の例示的実施形態では、本発明は、Ｒ、Ｒ’及びＸが上記に定義したものであり、Ｒ”が（ｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキニル基、（ｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキル基、（ｉｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキルアルキレン基、（ｉｖ）置換アリール基、（ｖ）置換又は非置換のアリールアルキレン基、（ｖｉ）アセチル基、又は（ｖｉｉ）環内にＯ、Ｎ、Ｓ、及びＳｅの少なくとも１つを有する置換又は非置換の複素環を含み、かつ、ｘ＝ｙ＝ｚ＝１であるような上記構造Ａを有するペンタセン化合物に関する。
【００１１】
更なる別の例示的実施形態では、本発明は、Ｒ、Ｒ’及びＸが上記に定義したものであり、Ｒ”が（ｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキニル基、（ｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキル基、（ｉｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキルアルキレン基、（ｉｖ）置換アリール基、（ｖ）置換又は非置換のアリールアルキレン基、（ｖｉ）アセチル基、又は（ｖｉｉ）環内にＯ、Ｎ、Ｓ、及びＳｅの少なくとも１つを有する置換又は非置換の複素環を含み、（ｘ＋ｙ＋ｚ）＝３であり、かつｘ又はｙ＝２であってｚ＝１であるような上記構造Ａを有するペンタセン化合物に関する。
【００１２】
更なる別の例示的実施形態では、本発明は、Ｒ、Ｒ’、Ｒ”、ｘ、ｙ、ｚ及びＸが上記に定義したものであり、Ｒ又はＲ’の少なくとも一方が（ｉ）置換又は非置換のシクロアルキル基、又は（ｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキルアルキレン基を有するような上記構造Ａを有するペンタセン化合物に関する。特定の実施形態では、ペンタセン化合物は上記構造Ａであり、（ａ）Ｒ、Ｒ’、Ｒ”、ｘ、ｙ、ｚ及びＸが上記に定義したものであり、（ｂ）Ｒ又はＲ’の少なくとも一方が（ｉ）置換又は非置換のシクロアルキル基、又は（ｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキルアルキレン基を含み、（ｃ）残りの基（すなわちＲ、Ｒ’、Ｒ”）が（ｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキル基、及び（ｉｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルケニル基のいずれかを含むような構造Ａを有する。
【００１３】
本発明は更に、（ｉ）Ｒ、Ｒ’、Ｒ”、ｘ、ｙ、ｚ及びＸが上記に述べたものであるような構造Ａを有する少なくとも１つのペンタセン化合物と、（ＩＩ）溶媒とを含む組成物に関する。本発明の組成物は、前記少なくとも１つのペンタセン化合物及び溶媒を、それら単独で又はポリマー添加剤などの１つ以上の更なる組成物成分と組み合わせて含みうる。
【００１４】
本発明は更に、少なくとも１つのコーティング可能な表面と、前記少なくとも１つのコーティング可能な表面上にコーティングされた層とを有する基板であって、前記コーティング層が、Ｒ、Ｒ’、Ｒ”、ｘ、ｙ、ｚ及びＸが上記に述べたものであるような構造Ａを有するペンタセン化合物を含む基板に関する。例示的な一実施形態では、前記基板は電子デバイス又は電子デバイス要素を含む。
【００１５】
本発明は更に、Ｒ、Ｒ’、Ｒ”、ｘ、ｙ、ｚ及びＸが上記に述べたものであるような構造Ａを有するペンタセン化合物を含むコーティング層を有する電子デバイスであって、電荷キャリア移動度の値が２．０ｃｍ^2／Ｖ－ｓよりも大きい電子デバイスにも関する。
【００１６】

本発明は更に、Ｒ、Ｒ’、Ｒ”、ｘ、ｙ、ｚ及びＸが上記に述べたものであるような構造Ａを有するペンタセン化合物の製造方法にも関する。

【００１７】

本発明は更に、組成物（例えばインクジェット印刷用組成物）、コーティング、コーティング層を有する基板、電子デバイス要素、及び電子デバイスを形成するために、Ｒ、Ｒ’、Ｒ”、ｘ、ｙ、ｚ及びＸが上記に述べたものであるような構造Ａを有する少なくとも１つのペンタセン化合物を使用する方法に関する。

【００１８】

本発明のこれら及びその他の特徴及び利点は、以下の開示される実施態様の詳細な説明及び添付の請求項を検討すれば明らかになるであろう。

【図面の簡単な説明】

【００１９】

添付の図面を参照しながら本発明を更に説明する。

【図１】本発明の少なくとも１つのペンタセン化合物を含む組成物の溶液成膜によって形成された半導体層を有する例示的な薄膜トランジスタの断面図。

【図２】本発明の少なくとも１つのペンタセン化合物を含む組成物の溶液成膜によって形成された半導体層を有する別の例示的な薄膜トランジスタの断面図。

【図３】掃引ゲートバイアスの関数としてトランジスタ出力（I_{DS}及び$(I_{DS})^{1/2}$をプロットした代表的なプロット。

【図４】熱転移を示す、ＴＩＰＳペンタセンの示差走査熱量測定グラフの代表的なサーモグラム。

【図５】本発明の少なくとも１つのペンタセン化合物を含む組成物の溶液成膜によって形成された半導体層を有する更なる別の例示的な薄膜トランジスタの断面図。

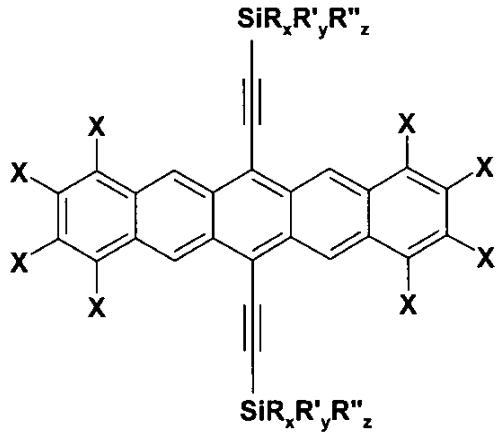
【発明を実施するための形態】

【００２０】

本発明は、下記化学構造（「構造Ａ」とも呼ぶ）を有するペンタセン化合物に関する。

【００２１】

【化２】



【００２２】

［式中、各Ｒは独立して、（ｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキル基、（ｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキル基、又は（ｉｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキルアルキレン基を含み、

各Ｒ’は独立して、（ｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルケニル基、（ｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキル基、又は（ｉｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキルアルキレン基を含み、

Ｒ”は、（ｉ）水素、（ｉｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキニル基、（ｉｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキル基、（ｉｖ）置換又は非置換のシクロアルキルアルキレン基、（ｖ）置換アリール基、（ｖｉ）置換又は非置換のアリールアルキレン基、（ｖｉｉ）アセチル基、又は（ｖｉｉｉ）環内にＯ、Ｎ、Ｓ、及びＳｅの少なくとも１つを有する置換又は非置換の複素環を含み、

ｘ＝１又は２であり、

ｙ＝１又は２であり、

ｚ＝０又は１であり、

（ｘ＋ｙ＋ｚ）＝３であり、

各Ｘは独立して、（ｉ）水素、（ｉｉ）ハロゲン、（ｉｉｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキル基、（ｉｖ）置換又は非置換のアリール基、（ｖ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルケニル基、（ｖｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキニル基、（ｖｉｉ）置換又は非置換の複素環基、（ｖｉｉｉ）シアノ基、（ｉｖ）エーテル基、（ｘ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルコキシ基、（ｘｉ）ニトロ基を含むか、あるいは（ｘｉｉ）任意の２個の隣り合うＸ基同士が（ａ）置換又は非置換の炭素環、又は（ｂ）置換又は非置換の複素環を形成し、

ｚ＝０であり、かつＲ及びＲ’がともに（ｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ１～Ｃ８アルキル基、及び（ｉｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ２～Ｃ８アルケニル基の組み合わせを含む場合、ペンタセン化合物は、本発明のトランジスタ製造及び電荷キャリア移動度値試験方法（後述する）によって測定される最大電荷キャリア移動度の値が２．０ｃｍ^2／Ｖ－ｓ以上であるような半導体層の形成を可能とする。

【００２３】

本発明のペンタセン化合物を説明するためには多くの用語を使用する。本明細書中で使用する様々な用語を下記に定義する。

【００２４】

「置換アルキル基」とは、１つ以上の置換基を有するアルキル基を指し、その１つ以上の置換基がそれぞれ、炭素及び水素以外の１つ以上の原子を有する１価の部分を、単独で（例えばＦなどのハロゲン）あるいは炭素（例えばシアノ基）及び／又は水素原子（例えば水酸基又はカルボン酸基）と組み合わせて有するようなものを指す。

【００２５】

「置換アルケニル基」とは、（ｉ）１つ以上のＣ－Ｃ２重結合、及び（ｉｉ）１つ以上の置換基を有するアルケニル基であって、その１つ以上の置換基がそれぞれ、炭素及び水素以外の１つ以上の原子を有する１価の部分を、単独であるいは炭素及び／又は水素原子と組み合わせて有するようなものを指す。

【００２６】

「置換アルキニル基」とは、（ｉ）１つ以上のＣ－Ｃ３重結合、及び（ｉｉ）１つ以上の置換基を有するアルキニル基であって、その１つ以上の置換基がそれぞれ、炭素及び水素以外の１以上の原子（例えばＳｉ）を有する１価の部分を、単独であるいは炭素及び／又は水素原子と組み合わせて有するようなものを指す。

【００２７】

「シクロアルキル基」とは、環構造内の３個以上の炭素原子（すなわち環構造内の炭素原子のみ）からなる環構造であって、環構造の１個の炭素原子がシリル基のケイ素原子に直接結合しているものを指す。

【００２８】

「置換シクロアルキル基」とは、１つ以上の置換基を有するシクロアルキル基であって、その１つ以上の置換基がそれぞれ、１つ以上の原子を有する１価の部分（例えばＦなどのハロゲン、アルキル基、シアノ基、水酸基、又はカルボン酸基）を有するようなものを指す。

【００２９】

「シクロアルキルアルキレン基」とは、環構造内の３個以上の炭素原子（すなわち環構

造内の炭素原子のみ）からなる環構造であって、環構造が、１つ以上の炭素原子（一般的には１～３個の炭素原子、より一般的には１個の炭素原子）を有する２価のアルキルスペーサー基によってシリル基のケイ素原子から分離されているようなものを指す。

【００３０】

「置換シクロアルキルアルキレン基」とは、１つ以上の置換基を有するシクロアルキルアルキレン基であって、その１つ以上の置換基がそれぞれ、１つ以上の原子を有する１価の部分（例えばフッ素などのハロゲン、アルキル基、シアノ基、水酸基、又はカルボン酸基）を有するようなものを指す。

【００３１】

「置換アリール基」とは、環構造内の５～１０個の炭素原子（すなわち環構造内の炭素原子のみ）からなる芳香環構造であって、環構造の１個の炭素原子がシリル基のケイ素原子に直接結合するとともに環構造が１つ以上の置換基を有し、その１つ以上の置換基のそれぞれが１個以上の原子を有する１価の部分（例えばＦなどのハロゲン、アルキル基、シアノ基、水酸基、又はカルボン酸基）を有するようなものを指す。

【００３２】

「アリールアルキレン基」とは、環構造内の５～１０個の炭素原子（すなわち環構造内の炭素原子のみ）からなる芳香環構造であって、芳香環構造が、１個以上の炭素原子（一般的には１～３個の炭素原子、より一般的には１個の炭素原子）を有する２価のアルキレンスペーサー基によってシリル基のケイ素原子から分離されているようなものを指す。

【００３３】

「置換アリールアルキレン基」とは、１つ以上の置換基を有するアリールアルキレン基であって、その１つ以上の置換基がそれぞれ、１個以上の原子を有する１価の部分（例えばＦなどのハロゲン、アルキル基、シアノ基、水酸基、又はカルボン酸基）を有するようなものを指す。

【００３４】

「置換複素環」又は「置換複素環基」とは、環構造内にＯ、Ｎ、Ｓ及びＳｅの少なくとも１つを有するとともに環構造の少なくとも１つ以上の環員に１つ以上の置換基が結合した複素環（すなわち飽和、部分飽和、又は不飽和複素環）であって、芳香族性又は非芳香族性であってよく、前記１つ以上の置換基のそれぞれが、１個以上の原子を有する１価の部分（例えばＦなどのハロゲン、アルキル基、シアノ基、水酸基、又はカルボン酸基）を有するようなものを指す。

【００３５】

「置換炭素環」とは、環構造内に炭素を有するとともに環構造の少なくとも１つ以上の環員に１つ以上の置換基が結合した環（すなわち飽和、部分飽和、又は不飽和炭素環）であって、前記１つ以上の置換基のそれぞれが、１個以上の原子を有する１価の部分（例えばＦなどのハロゲン、アルキル基、シアノ基、水酸基、又はカルボン酸基）を有するようなものを指す。

【００３６】

「置換アルコキシ基」とは、１つ以上の置換基を有するアルコキシ基を指し、その１つ以上の置換基がそれぞれ、炭素及び水素以外の１個以上の原子を有する１価の部分を、単独で（例えばＦなどのハロゲン）あるいは炭素（例えばシアノ基）及び／又は水素原子（例えば水酸基又はカルボン酸基）と組み合わせて有するようなものを指す。

【００３７】

「エーテル基」とは、R_aが分枝又は非分枝のアルキレン、アリーレン、アルキルアリーレン、又はアリールアルキレン炭化水素であり、R_bが分枝又は非分枝のアルキル、アリール、アルキルアリール、又はアリールアルキル炭化水素であるような－R_a－Ｏ－R_bラジカルを指す。

【００３８】

「電荷キャリア移動度値」とは、電荷キャリアのドリフト速度を測定するための任意の試験方法によって測定される、印加された単位電場（Ｖ／ｃｍ）当たりの電荷キャリアの

ドリフト速度を指し、その測定単位は「ｃｍ^2／Ｖ－ｓ」である。

【００３９】

「移動度値試験方法Ｉにより測定される電荷キャリア移動度値」又は「移動度値試験方法ＩＩにより測定される電荷キャリア移動度値」とは、後述する実施例の試験方法の項において述べるような特定の移動度値試験方法Ｉ又は移動度値試験方法ＩＩによって測定される電子デバイスの電荷キャリア移動度の値を指す。

【００４０】

「トランジスタ製造及び電荷キャリア移動度値試験方法によって測定される電荷キャリア移動度値」又は「ＴＦ及びＣＣＭＶ試験方法によって測定される電荷キャリア移動度値」とは、特定のデバイス構造、特定のデバイス材料、及び特定のデバイス製造方法を用いて製造された電子デバイスの電荷キャリア移動度値であって、後述する実施例の試験方法の項において述べるような特定の移動度値試験方法によって測定される電荷キャリア移動度値を指す。

【００４１】

上記の化学構造を有するペンタセン化合物は、以下の性質、すなわち、（ｉ）異なる溶媒中への高い溶解度、（ｉｉ）異なる有機溶媒中での高い安定性、及び（ｉｉｉ）電子デバイスの半導体層として使用された場合の高い電荷キャリア移動度値、の少なくとも１つを有することが示されている。上記の化学構造中のＲ基（すなわちＲ、Ｒ’及びＲ”）及びＸ基を変えることにより、得られるペンタセン化合物を特定の用途（例えば電子デバイスの半導体層）に対して適合させることができる。

【００４２】

例えば、本発明の特定のペンタセン化合物を用いて電子デバイス（例えばトランジスタ）の半導体層を形成しようとする場合、ペンタセン化合物が２次元積層性を示す（すなわち、個々の分子の２次元的な積層）を示す性質は重要な考慮点であり、得られる半導体層の電荷キャリア移動度値に大きな影響を与えるものである。所定の積層形態の次元性は、与えられた材料の単結晶Ｘ線構造を調べることによって容易に測定することができる。２次元性又はすなわち「レンガ積み」積層性を示す特定の材料は、芳香族炭素原子間の接点が概ね炭素のファンデルワールス半径（理想的には３．３～３．６オングストローム）内に存在する４個の最近接した隣接分子を有することによって特徴付けられる。単純なペンタセン単位を考えると、ペンタセン環の平面よりも上側に２個の芳香族近接隣接分子を、ペンタセン環の平面よりも下側に２個の芳香族近接隣接分子を有するあらゆる材料は、２次元的相互作用すなわち２次元積層形態を有するものとして分類される。一般に、２次元的なπ積層構造を有する分子は、電界効果トランジスタ用途における優れた薄膜形態、及び固体状態における高い電荷移動性を示す。

【００４３】

各分子が芳香環の平面よりも上側に１個の積層隣接分子を、芳香環の平面よりも下側に１個の積層隣接分子を有する１次元積層形態も一般的である。芳香環の面同士の間の間隔は好ましくは炭素のファンデルワールス半径の範囲内である（理想的には３．３～３．６オングストローム）。一般に、１次元積層形態を示す材料は溶液からキャストした場合には高性能のトランジスタとはならないが、こうした材料は光起電力デバイスで高い性能を示す。こうした１次元積層材料は、例えば光起電力デバイスの電子供与要素としての使用に適しており、置換基Ｘが電子吸引基（例えばフルオロ、フルオロアルキル、シアノ、又はニトロ基）である場合には、こうした材料は光起電力デバイスの電子受容要素としての使用に潜在的に適している。

【００４４】

本発明のペンタセン化合物の多くは２次元又は１次元積層形態を示す。Ｒ、Ｒ’及びＲ”が２個の立体的に似た基と１個の立体的に異なる基をともに含むような化学構造（すなわち構造Ａ）を有するペンタセン化合物は、例えば単結晶Ｘ線解析によって示されるように結晶固体状態では２次元積層形態を示す。これらの化合物では、立体的に似た２個の基は、ペンタセン化合物の５個の環構造を通じて延びる平面の両側面に空間的に配向し、立

体的に異なる基は、実質的に結晶固体状態のペンタセン化合物の５個の環構造を含む平面内、又は平面に沿って（すなわち平面とほぼ平行に）空間的に配向するものと考えられる。

【００４５】

そのため、望ましい一実施形態では、本発明のペンタセン化合物は、Ｒ、Ｒ’及びＲ”が２個の立体的に似た基及び１個の立体的に異なる基をともに含み、前記２個の立体的に似た基がペンタセン化合物の５個の環構造を通じて延びる平面の両側面に空間的に配向し、前記立体的に異なる基が実質的に前記平面（すなわちペンタセン化合物の５個の環構造を含む平面）内に位置するような構造Ａを有する。更なる望ましい一実施形態では、本発明のペンタセン化合物は、Ｒ、Ｒ’及びＲ”が２個の同じ基及び異なる１個の基をともに含み、前記２個の同じ基がペンタセン化合物の５個の環構造を通じて延びる平面の両側面に空間的に配向し、前記異なる基が実質的に前記平面（すなわちペンタセン化合物の５個の環構造を含む平面）内に位置するような構造Ａを有する。

【００４６】

例えば、ペンタセン化合物は、（ａ）（ｉ）２個のＲ基が独立して分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキル基を含むか、又は（ａ）（ｉｉ）２個のＲ’基が独立して分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルケニル基を含み、かつ、（ｂ）ケイ素原子に結合した残りの基が、（ｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキル基、及び（ｉｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルケニル基以外の置換基を含む場合のように、ケイ素原子に共有結合した２個の同じ基を有してよい。他の実施形態では、ペンタセン化合物はケイ素原子に結合された２個の同じ基を有してよく、その場合２個の同じ基が（ｉ）置換又は非置換のシクロアルキル基、又は（ｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキルアルキレン基を含み、異なる基が（ｉ）置換又は非置換のシクロアルキル基及び（ｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキルアルキレン基（例えばアリル基又はイソプロピル基）以外の置換基を含む。

【００４７】

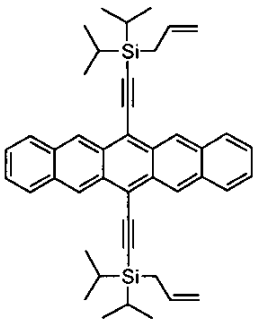
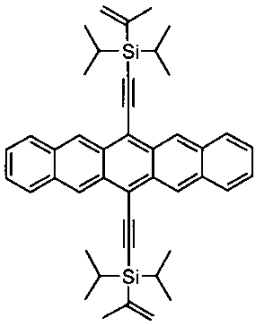
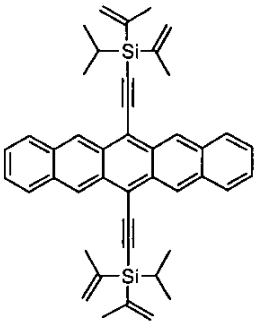
特定の例示的実施形態では、ペンタセン化合物は、（ａ）ｚ＝０であり、（ｂ）各Ｒが独立して（ｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ１～Ｃ８アルキル基、（ｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキル基、又は（ｉｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキルアルキレン基を含み、（ｃ）各Ｒ’が独立して分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ２～Ｃ８のアルケニル基を含むような構造Ａを有する。これらの例示的実施形態では、ペンタセン化合物は、（ａ）ｚ＝０であり、（ｂ）各Ｒが独立してｎ個の炭素原子を有する分枝した非置換のアルキル基を含み、（ｃ）各Ｒ’が独立してｎ個の炭素原子を有する分枝した非置換のアルケニル基を含み、（ｄ）３≦ｎ≦８、より望ましくはｎ＝３又は４であるような構造式Ａを有してよい。

【００４８】

特定の例示的実施形態では、ペンタセン化合物は、（ｉ）ｚ＝０であり、（ｉｉ）各Ｒが独立してｎ個の炭素原子を有する分枝したアルカン置換基を含み、（ｉｉｉ）各Ｒ’が独立してｎ個の炭素原子を有する分枝したアルケン置換基を含み、（ｉｖ）３≦ｎ≦８であるような構造式Ａを有する。例えば、特定の実施形態では、ペンタセン化合物は、Ｒがイソプロピルを含み、Ｒ’がイソプロペニルを含む構造Ａを有する。特定の例示的実施形態では、本発明のペンタセン化合物は、以下の化学構造の１つを有する。

【００４９】

【化３】

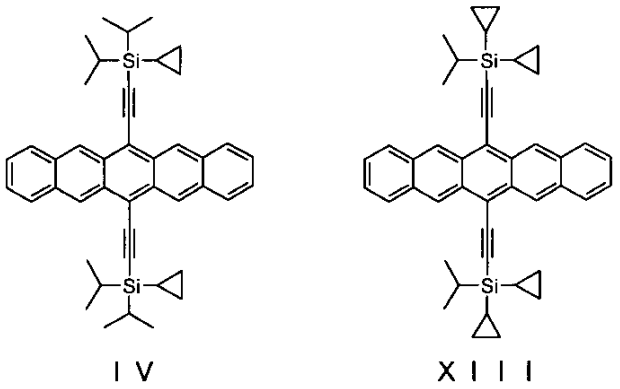
Ｉ　，　ＩＩ　又は　ＩＩＩ

【００５０】
化合物Ｉ及びＩＩは、（ｉ）各種の有機溶媒中で極めて高い溶解度及び安定性、及び／又は（ｉｉ）特定の電子デバイス（例えばＴＦＴ）に組み込まれた際に極めて高い移動度の値を与えることが見出された。化合物Ｉ、すなわち６，１３－ビス（アリルジイソプロピルシリルエチニル）ペンタセン（本明細書では「アリルＤＩＰＳ」とも称する）は、ＴＩＰＳ－ペンタセンのような公知のペンタセン化合物と比較してトルエンなどの特定の有機溶媒に高い溶解度を示すことが見出された。例えば化合物Ｉはトルエンに対して約２１重量％以上の溶解度を示す。電子デバイスの半導体層に使用される場合、化合物Ｉは、ＴＦ及びＣＣＭＶ試験方法（後述する）によって測定した場合に約２．０ｃｍ^2／Ｖ－ｓよりも高い（又は約２．１ｃｍ^2／Ｖ－ｓよりも高い、又は約２．２ｃｍ^2／Ｖ－ｓよりも高い、又は約２．３ｃｍ^2／Ｖ－ｓよりも高い、又は約２．４ｃｍ^2／Ｖ－ｓよりも高い）最大電荷キャリア移動度の値を半導体層に与えることができる。
【００５１】
化合物ＩＩ、すなわち６，１３－ビス（イソプロペニルジソプロピルシリルエチニル）ペンタセン（本明細書では「ＩＰ－ＤＩＰＳ」とも称する）は、ＴＩＰＳ－ペンタセンのような公知のペンタセン化合物と比較して同様の利点を与える。電子デバイスの半導体層に使用される場合、化合物ＩＩは、ＴＦ及びＣＣＭＶ試験方法によって測定した場合に約３．０ｃｍ^2／Ｖ－ｓよりも高い（又は約３．１ｃｍ^2／Ｖ－ｓよりも高い、又は約３．２ｃｍ^2／Ｖ－ｓよりも高い、又は約３．３ｃｍ^2／Ｖ－ｓよりも高い、又は約３．４ｃｍ^2／Ｖ－ｓよりも高い）最大電荷キャリア移動度の値を半導体層に与えることができる。
【００５２】
化合物Ｉ、ＩＩ及びＩＩＩ以外に、（ｉ）ｚ＝０であり、（ｉｉ）（ａ）少なくとも１つのＲ基が分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ１～Ｃ８アルキル基を含むか、又は（ｉｉ）（ｂ）少なくとも１つのＲ’基が分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ２～Ｃ８アルケニル基を含むような上記の化学構造を有する本発明の例示的なペンタセン化合物の多くを下記表１に示す。
【００５３】
下記表１に示すように、本発明の他の例示的なペンタセン化合物には、（ａ）ｚ＝０であり、（ｂ）各Ｒが独立して分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキル基（例えばＣ１～Ｃ８アルキル）を含み、（ｃ）各Ｒ’が独立して置換又は非置換のシクロアルキル基を含むような構造Ａを有するペンタセン化合物が含まれる。例えば、所望のペンタセン化合物は、（１）２個のＲ基が独立してイソプロピル基を含み、Ｒ’が置換又は非置換のシクロプロピル基又はシクロブチル基、より望ましくは下記に示す化合物ＩＶのようにシクロプロピル基を含むか、又は（２）１個のＲ基がイソプロピル基を含み、各Ｒ’基が独立して置換又は非置換のシクロプロピル基又はシクロブチル基、より望ましくは下記に示す化

合物ＶＩＩＩのようにシクロプロピル基を含むような構造Ａを有する。

【００５４】

【化４】



ＩＶ　　ＸＩＩＩ

【００５５】

下記表１に示すように、本発明の他の例示的なペンタセン化合物には、（ａ）ｚ＝０であり、（ｂ）各Ｒが独立して置換又は非置換のシクロアルキル基を含み、（ｃ）各Ｒ’が独立して分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルケニル基（（例えばＣ２～Ｃ８アルケニル））を含むような構造Ａを有するペンタセン化合物が含まれる。例えば、あるペンタセン化合物は、２個のＲ基が独立して置換又は非置換のシクロプロピル基又はシクロブチル基、望ましくはシクロプロピル基を含み、Ｒ’がイソプロペニル基又は１個以上の置換基（例えば１個以上のフッ素原子）を有するイソプロペニル基のような分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ２～Ｃ８アルケニル基を含むような構造Ａを有しうる。別のペンタセン化合物は、１つのＲ基が置換又は非置換のシクロプロピル基又はシクロブチル基、望ましくはシクロプロピル基を含み、２つのＲ’基がイソプロペニル基又は１個以上の置換基（例えば１個以上のフッ素原子）を有するイソプロペニル基のような分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ２～Ｃ８アルケニル基を含むような構造Ａを有しうる。

【００５６】

本発明の他の例示的ペンタセン化合物には、（ａ）ｚ＝０であり、（ｂ）各Ｒが独立して、各シクロアルカン部分（例えばシクロプロパン）と各ケイ素原子との間に１～３個の炭素原子、通常は１個の炭素原子（例、メチレン）を有する２価のアルキレンスペーサーを有する置換又は非置換のシクロアルキルアルキレン基（例えばシクロプロピルメチレン基）を含み、（ｃ）各Ｒ’が独立して分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ２～Ｃ８のアルケニル基（イソプロペニル基）を含むような構造Ａを有するペンタセン化合物が含まれる。例示的なペンタセン化合物は、２個のＲ基が独立して置換又は非置換のシクロプロピルメチレン基又はシクロブチルメチレン基、望ましくはシクロプロピルメチレン基を含み、Ｒ’基がイソプロペニル基又は１つ以上の置換基（例えば１個以上のＦ原子）を有するイソプロペニル基のような分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ２～Ｃ８アルケニル基を含むような上記の化学構造を有しうる。別のペンタセン化合物は、１つのＲ基が置換又は非置換のシクロプロピルメチレン基又はシクロブチルメチレン基、望ましくはシクロプロピルメチレン基を含み、２つのＲ’基がイソプロペニル基又は１つ以上の置換基（例えば１個以上のＦ原子）を有するイソプロペニル基のような分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ２～Ｃ８アルケニル基を含むような構造Ａを有しうる。下記表１の例示的化合物を参照されたい。

【００５７】

【表１】

表１．ｚ＝０である例示的ペンタセン化合物

化合物	x＝	y＝	R	R’
Ｉ	2	1	イソプロピル／イソプロピル	アリル
ＩＩ	2	1	イソプロピル／イソプロピル	イソプロペニル
ＩＩＩ	1	2	イソプロピル	イソプロペニル／イソプロペニル
ＩＶ	2	1	イソプロピル／イソプロピル	シクロプロピル
Ｖ Ｉ	2	1	イソプロピル／イソプロピル	２，３－ジメチルシクロプロピル
ＶＩＩ	2	1	イソプロピル／イソプロピル	２，２，３，３－テトラメチルシクロプロピル
ＶＩＩＩ	2	1	イソプロピル／イソプロピル	シクロプチル
ＩＸ	2	1	イソプロピル／イソプロピル	シクロペンチル
Ｘ	2	1	イソプロピル／イソプロピル	２－ブトー１－エニル
ＸＩ	2	1	イソプロピル／イソプロピル	シス－２－ブトー２－エニル
ＸＩＩ	2	1	イソプロピル／イソプロピル	３－ブトー１－エニル
ＸＩＩＩ	1	2	イソプロピル	シクロプロピル／シクロプロピル
ＸＶ	1	2	イソプロピル	アリル／アリル
ＸＶＩ	1	2	シクロプロピル	イソプロペニル／イソプロペニル
ＸＶＩＩＩ	1	2	２，３－ジメチルシクロプロピル	イソプロペニル／イソプロペニル
ＸＩＸ	1	2	２，２，３，３－テトラメチルシクロプロピル	イソプロペニル／イソプロペニル
ＸＸ	1	2	シクロプチル	イソプロペニル／イソプロペニル
ＸＸＩ	1	2	シクロペンチル	イソプロペニル／イソプロペニル
ＸＸＩＩ	1	2	２－ブトー１－エニル	イソプロペニル／イソプロペニル

【００５８】

本発明の他の例示的ペンタセン化合物には、（ａ）ｘ又はｙ＝２であり、かつ（ｂ）ｚ＝１であるような構造Ａを有するペンタセン化合物が含まれる。この種のシリル置換を有する本発明の例示的ペンタセン化合物の多くを下記表２に示す。

【００５９】

表２に示すように、本発明の例示的ペンタセン化合物には、（ａ）各Ｒが独立して分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ１～Ｃ８アルキル基を含み、（ｂ）各Ｒ’が独立して分

枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ２～Ｃ８アルケニル基を含み、（ｃ）Ｒ”が（ｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ２～Ｃ８アルキニル基、（ｉｉ）置換アリール基、（ｉｉｉ）置換又は非置換のアリールアルキレン基、（ｉｖ）アセチル基、又は（ｖ）環内にＯ、Ｎ、Ｓ、及びＳｅの少なくとも１つを有する置換又は非置換の複素環を含むような構造Ａを有するペンタセン化合物が含まれる。望ましくは、本ペンタセン化合物は、（ａ）各Ｒが独立して分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ１～Ｃ８アルキル基（又はＣ１～Ｃ４アルキル基）を含み、（ｂ）各Ｒ’が独立して分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ２～Ｃ８アルケニル基（又はＣ２～Ｃ４アルケニル基）を含み、（ｃ）Ｒ”が（ｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ２～Ｃ８アルキニル基、（ｉｉ）置換アリール基、（ｉｉｉ）置換又は非置換のアリールアルキレン基、（ｉｖ）アセチル基、又は（ｖ）環内にＯ、Ｎ、Ｓ、及びＳｅの少なくとも１つを有する置換又は非置換の複素環を含むような構造Ａを有する。

【００６０】

例示的な一実施形態では、本発明のペンタセン化合物には、（ａ）各Ｒが独立して分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ１～Ｃ８アルキル基（又はイソプロピル基などのＣ１～Ｃ４アルキル基）を含み、（ｂ）各Ｒ’が独立して分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ２～Ｃ８アルケニル基（又はアリル基などのＣ２～Ｃ４アルケニル基）を含み、（ｃ）Ｒ”が置換又は非置換のアリール基（例えばｐ－トリル基又はｐ－メトキシフェニル）を含むような構造Ａを有するペンタセン化合物が含まれる。例として表２の例示的化合物ＸＸＩＶ及びＸＸＸＩＩを参照されたい。

【００６１】

別の例示的実施形態では、本発明のペンタセン化合物には、（ａ）各Ｒが独立して分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ１～Ｃ８アルキル基（又はイソプロピル基などのＣ１～Ｃ４アルキル基）を含み、（ｂ）各Ｒが独立して分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ２～Ｃ８アルケニル基（又はアリル基などのＣ２～Ｃ４アルケニル基）を含み、（ｃ）Ｒ”が各アリール部分と各ケイ素原子との間に１～３個の炭素原子を有する２価のアルキレンスペーサーを有する置換又は非置換のアリールアルキレン基（例えばベンジル基）を含むような構造Ａを有するペンタセン化合物が含まれる。例として表２の例示的化合物ＸＸＶ及びＸＸＸＩＩＩを参照されたい。

【００６２】

本発明の他のペンタセン化合物には、（ａ）各Ｒが独立して分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ１～Ｃ８アルキル基（又はイソプロピル基などのＣ１～Ｃ４アルキル基）を含み、（ｂ）各Ｒ’が独立して分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ２～Ｃ８アルケニル基（又はアリル基などのＣ２～Ｃ４アルケニル基）を含み、（ｃ）Ｒ”がアセチル基を含むような構造Ａを有するペンタセン化合物が含まれる。例として表２の例示的化合物ＸＸＶＩ及びＸＸＸＩＶを参照されたい。

【００６３】

本発明の他の例示的なペンタセン化合物には、（ａ）各Ｒが独立して分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ１～Ｃ８アルキル基（又はイソプロピル基などのＣ１～Ｃ４アルキル基）を含み、（ｂ）各Ｒ’が独立して分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ２～Ｃ８アルケニル基（又はアリル基などのＣ２～Ｃ４アルケニル基）を含み、（ｃ）Ｒ”が環内にＯ、Ｎ、Ｓ、及びＳｅの少なくとも１つを有する置換又は非置換の複素環を含むような構造Ａを有するペンタセン化合物が含まれる。例として表２の例示的化合物ＸＸＶＩＩ～ＸＸＸ、及びＸＸＸＶ～ＸＸＸＶＩＩＩを参照されたい。

【００６４】

【表２】

表２．ｘ又はｙ＝２であり、かつｚ＝１である例示的ペンタセン化合物

化合物	x＝	y＝	R又はR’	R”
ＸＸＩＩＩ	2	0	イソプロピル／イソプロピル	プロピニル
ＸＸＩＶ	2	0	イソプロピル／イソプロピル	ｐ－トリル
ＸＸＶ	2	0	イソプロピル／イソプロピル	ベンジル
ＸＸＶＩ	2	0	イソプロピル／イソプロピル	アセチル
ＸＸＶＩＩ	2	0	イソプロピル／イソプロピル	２－フラニル
ＸＸＶＩＩＩ	2	0	イソプロピル／イソプロピル	Ｎ－メチルピロール－２－イル
ＸＸＩＸ	2	0	イソプロピル／イソプロピル	２－チエニル
ＸＸＸ	2	0	イソプロピル／イソプロピル	２－セレノフェニル
ＸＸＸＩ	0	2	アリル／アリル	プロピニル
ＸＸＸＩＩ	0	2	アリル／アリル	ｐ－トリル
ＸＸＸＩＩＩ	0	2	アリル／アリル	ベンジル
ＸＸＸＩＶ	0	2	アリル／アリル	アセチル
ＸＸＸＶ	0	2	アリル／アリル	２－フラニル
ＸＸＸＶＩ	0	2	アリル／アリル	Ｎ－メチルピロール－２－イル
ＸＸＸＶＩＩ	0	2	アリル／アリル	２－チエニル
ＸＸＸＶＩＩＩ	0	2	アリル／アリル	２－セレノフェニル

【００６５】

表２には示されていないが、本発明の他のペンタセン化合物は、環内にＯ、Ｎ、Ｓ、及びＳｅの少なくとも１つを有する置換又は非置換の複素環が、置換又は非置換のフラニル基、置換又は非置換のピロリル基、置換又は非置換のチエニル基、又は置換又は非置換のセレノフェニル基を含むような構造Ａを有しうる点には注意を要する。

【００６６】
本発明の他の例示的ペンタセン化合物には、（ａ）ｘ＝１であり、（ｂ）ｙ＝１であり、かつ（ｃ）ｚ＝１であるような構造Ａを有するペンタセン化合物が含まれる。この種のシリル置換を有する本発明の例示的ペンタセン化合物の多くを下記表３に示す。
【００６７】
表３に示されるように、本発明のペンタセン化合物には、任意のシリル基のケイ素原子に３つの異なるＲ基（例えばＲ、Ｒ’及びＲ”）が結合したペンタセン化合物が含まれる。こうしたペンタセン化合物は、異なるＲ基に基づいた特徴の組み合わせを与えるように適合させることができる。例えば、アリル基を用いることによって特定の溶媒（例えばトルエン）に対する得られるペンタセン化合物の溶解度を高めることができるのに対して、シクロプロピル基を用いることによって移動度の値を高めることができる。他の実施形態では、３つの似たＲ基（例えば３つのシクロプロピル基）を用いることができる。
【００６８】

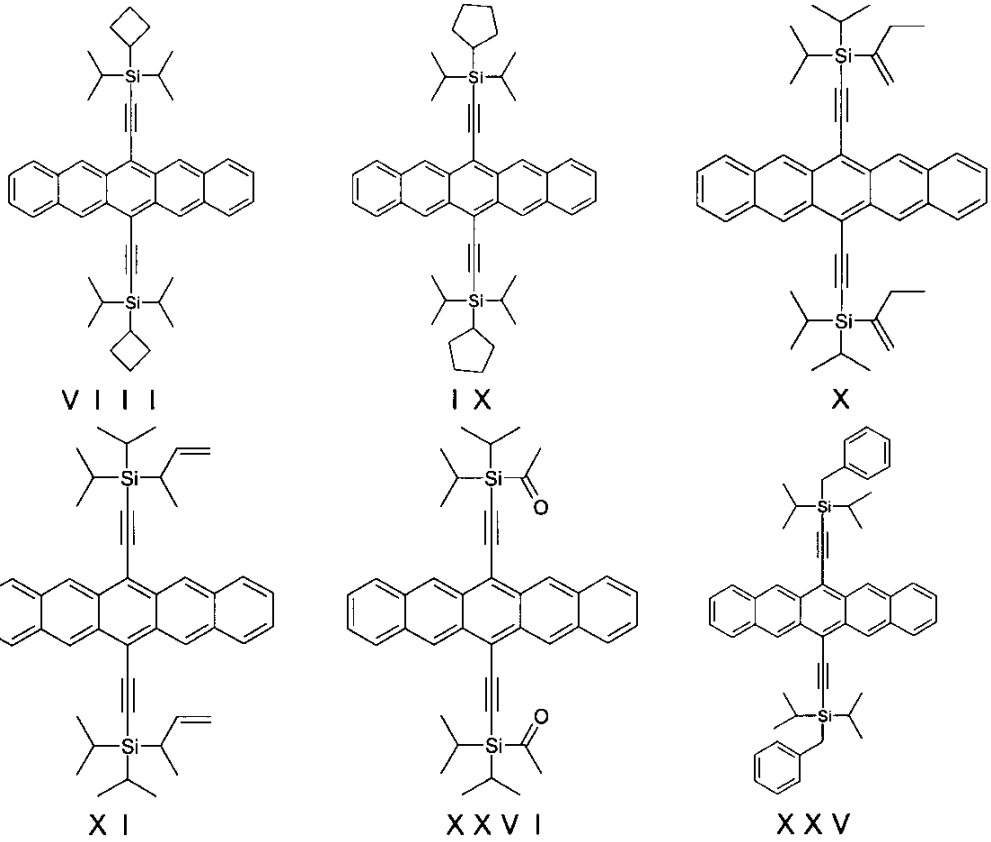
【表３】

表３．ｘ、ｙ及びｚ＝１である例示的ペンタセン化合物

化合物	R	R’	R”
ＸＸＸＩＸ	イソプロピル	アリル	プロピニル
ＸＬ	イソプロピル	アリル	ｐ－トリル
ＸＬＩ	イソプロピル	アリル	ベンジル
ＸＬＩＩ	イソプロピル	アリル	アセチル
ＸＬＩＩＩ	イソプロピル	アリル	２－フラニル
ＸＬＩＩＩＩ	イソプロピル	アリル	Ｎ－メチルピロール－２－イル
ＸＬＩＶ	イソプロピル	アリル	２－チエニル
ＸＬＶ	イソプロピル	アリル	２－セレノフェニル
ＸＬＶＩ	イソプロピル	アリル	シクロプロピル
ＸＬＶＩＩ	イソプロピル	アリル	２，３－ジメチルシクロプロピル
ＸＬＩＸ	イソプロピル	アリル	２，２，３，３－テトラメチルシクロプロピル
Ｌ	イソプロピル	アリル	シクロプチル
Ｌｉ	イソプロピル	シクロプロピル	シクロプロピル
ＬＩＩ	シクロプロピル	ｐ－トリル	ｐ－トリル
ＬＩＩＩ	ｐ－トリル	ベンジル	ベンジル
ＬＩＶ	ベンジル		

【００６９】
本発明の化合物の例示的な構造を幾つか下記に示す。
【００７０】

【化５】

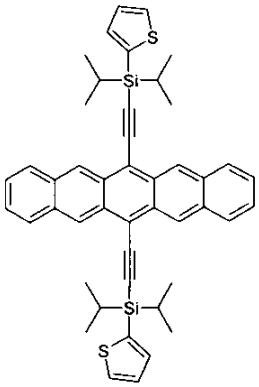


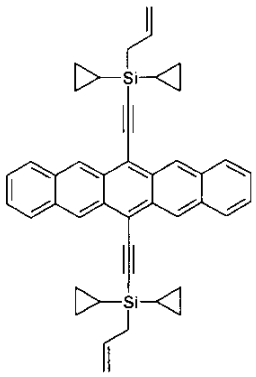
ＶＩＩＩ　ＩＸ　Ｘ

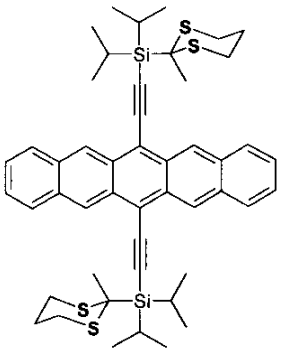
ＸＩ　ＸＸＶＩ　ＸＸＶ

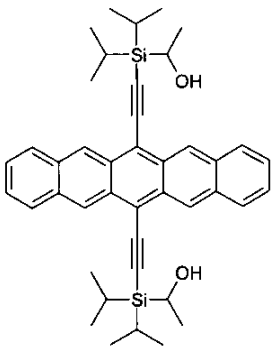
【００７１】

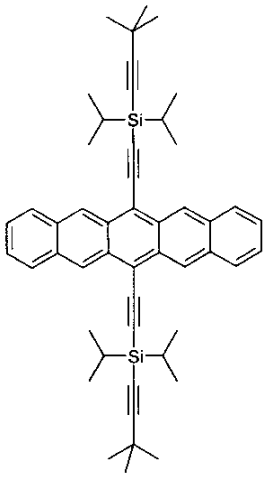
【化６】


XXIX

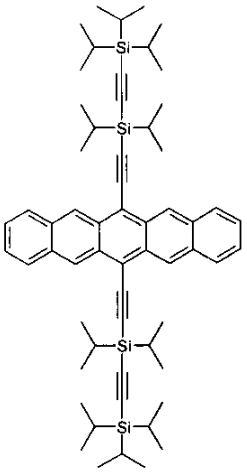

LV


LVI


LVII


LVIII

並びに


LIX

【００７２】

式中、

ＶＩＩＩ＝６，１３－ビス［（シクロブチルジイソプロピルシリル）エチニル］ペンタセン；

ＩＸ＝６，１３－ビス［（シクロペンチルジイソプロピルシリル）エチニル］ペンタセン；

Ｘ＝６，１３－ビス［（２－ブト－１－エニルジイソプロピルシリル）エチニル］ペンタセン；

ＸＩ＝６，１３－ビス［（３－ブト－１－エニルジイソプロピルシリル）エチニル］ペンタセン；

ＸＸＶＩ＝６，１３－ビス［（アセチルジイソプロピルシリル）エチニル］ペンタセン；

ＸＸＶ＝６，１３－ビス［（ベンジルジイソプロピルシリル）エチニル］ペンタセン；

ＸＸＩＸ＝６，１３－ビス［（２－チエニルジイソプロピルシリル）エチニル］ペンタセン；

ＬＶ＝６，１３－ビス［（アリルジシクロプロピルシリル）エチニル］ペンタセン；

ＬＶＩ＝６，１３－ビス［（（２－（１，３－ジチアニル）エチルジイソプロピルシリル）エチニル］ペンタセン；

ＬＶＩＩ＝６，１３－ビス［（１－ヒドロキシエチルジイソプロピルシリル）エチニル］ペンタセン；

ＬＶＩＩＩ＝６，１３－ビス［（３，３－ジメチルブト－１－イニルジイソプロピルシ

リル）エチニル］ペンタセン；
ＬＩＸ＝６，１３－ビス［（トリイソプロピルシリルエチニルジイソプロピルシリル）エチニル］ペンタセン
上記に述べたように、本発明は上記の構造Ａを有する多くのペンタセン化合物に関するものである。特定の実施形態では、本発明のペンタセン化合物は、Ｒ又はＲ’の少なくとも１つが、（ｉ）置換又は非置換のシクロアルキル基、又は（ｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキルアルキレン基を含むような構造Ａを有する。特定の実施形態では、ペンタセン化合物は、Ｒ、Ｒ’及びＲ”が、（ｉ）１つ以上の分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキル基、（ｉｉ）１つ以上の分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルケニル基、（ｉｉｉ）１つ以上の置換又は非置換のシクロアルキル基、及び（ｉｖ）１つ以上の置換又は非置換のシクロアルキルアルキレン基の組み合わせを含むような構造Ａを有する。更に特定の実施形態では、ペンタセン化合物は、Ｒ、Ｒ’及びＲ”が、（ｉ）１つ以上の分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルケニル基、及び（ｉｉｉ）１つ以上の置換又は非置換のシクロアルキル基の組み合わせを含むような構造Ａを有する。例えば化合物ＬＶを参照されたい。

【００７３】
上述の例示的ペンタセン化合物のすべてにおいて、Ｒ、Ｒ’及び／又はＲ”の１つ以上が１つ以上の置換基で置換されていてよい。上述のＲ基に適した置換基としては、これらに限定されるものではないが、ハロゲン、水酸基、アルキル基、シアノ基、アミノ基、カルボニル基、アルコキシ基、チオアルコキシ基、ニトロ基、カルボン酸基、カルボン酸エステル基、アルケニル基、アルキニル基、アリール基、ヘテロアリール基、シリル基（例えば各アルキル基が１～８個の炭素原子を有するトリアルキルシリル基）、又はこれらの組み合わせが挙げられる。これらの例示的な組み合わせとして、ハロゲン化アルキル基又はハロゲン化アルコキシ基が挙げられる。アルキル基及びアルケニル基の一般的な置換基としては、これらに限定されるものではないが、－Ｆ、－ＯＨ、－ＣＮ、及び－ＣＯＯＨが挙げられる。シクロアルキル基、シクロアルキルアルキレン基、アリール基、及びアリールアルキレン基の一般的な置換基としては、これらに限定されるものではないが、アルキル基、－Ｆ、－ＯＨ、－ＣＮ及び－ＣＯＯＨが挙げられる。

【００７４】
更に、上記の例示的なペンタセン化合物のすべてにおいて、ペンタセン環が１つ以上の上記に述べた置換基Ｘを更に有してよい。１つ以上の置換基Ｘを用いることによって、特定のペンタセン化合物を特定の用途に対して更に適合させることができる。例えば、１つ以上の置換基Ｘを用いることによって、（１）特定のペンタセン化合物が２次元積層形態を示す性質を更に高め、（２）特定のペンタセン化合物の、他の似た若しくは異なるペンタセン化合物、又は組成物中に用いられる場合には他の成分（例えば特定の溶媒）との相溶性を高め、（３）例えば優位なキャリアのタイプをホールから電子に変えるなど、特定のペンタセン化合物の電子的特性を調整する、といった１つ以上の更なる効果を得ることができる（ただしこれらに限定されない）。

【００７５】
上記に述べたように、各Ｘは独立して、（ｉ）水素、（ｉｉ）ハロゲン、（ｉｉｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキル基、（ｉｖ）置換又は非置換のアリール基、（ｖ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルケニル基、（ｖｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキニル基、（ｖｉｉ）置換又は非置換の複素環基、（ｖｉｉｉ）シアノ基、（ｉｖ）エーテル基、（ｘ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルコキシ基、又は（ｘｉ）ニトロ基（$-NO_2$）を含むものでよい。特定の実施形態では、各Ｘは独立して（ｉ）水素、又は（ｉｉ）フッ素（－Ｆ）などのハロゲンを含む。特定の実施形態では、各Ｘは独立して（ｉ）水素、又は（ｉｉ）フルオロアルキル基（例えば$-CF_3$）などの分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキル基を含む。特定の実施形態では、各Ｘは独立して（ｉ）水素、（ｉｉ）フェニル基などの置換又は非置換の芳香環構造（$-C_6H_5$）、又は（ｉｉｉ）チエニル基（$-C_4H_3S$）などの置換又は非置換の複素環基を含む。特

定の実施形態では、各Ｘは独立して（ｉ）水素、又は（ｉｉ）ニトロ基（－ＮＯ$_2$）を含む。

【００７６】

更に上記に述べたように、任意の２つの隣り合うＸ基がともに（ａ）置換又は非置換の炭素環、又は（ｂ）置換又は非置換の複素環を形成してもよい。この炭素環又は複素環は化合物のペンタセン部分の芳香環と縮合される。得られた縮合炭素環又は複素環は部分的に飽和又は完全に飽和していてもよい。特定の実施形態では、唯一の不飽和部分は化合物のペンタセン部分の一部をなす芳香環に基づくものである。すなわち、隣り合う２個のＸ基に基づいた縮合炭素環又は複素環の部分は飽和している。特定の実施形態では、隣り合う２個のＸ基はともに、環構造内に酸素を有する置換又は非置換の複素環を形成する（例えばジヒドロフラノ置換基）。

【００７７】

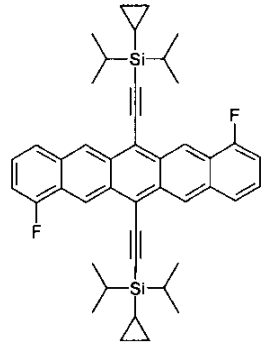
特定の実施形態では、本発明のペンタセン化合物は、少なくとも１つのＸが（ｉ）ハロゲン、（ｉｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキル基、（ｉｉｉ）置換又は非置換のアリール基、（ｉｖ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルケニル基、（ｖ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキニル基、（ｖｉ）置換又は非置換の複素環基、（ｖｉｉ）シアノ基、（ｖｉｉｉ）エーテル基、又は（ｉｘ）ニトロ基を含むような上記の構造Ａを有する。特定の実施形態では、本発明のペンタセン化合物は、少なくとも１つのＸが（ｉ）フッ素原子、（ｉｉ）フルオロアルキル基、（ｉｉｉ）アリール基、（ｉｖ）置換又は非置換の複素環基、（ｖ）シアノ基、又は（ｖｉ）ニトロ基を含むような上記の構造Ａを有する。特定の実施形態では、本発明のペンタセン化合物は、少なくとも１つのＸが（ｉ）フッ素原子、（ｉｉ）トリフルオロメチル基、（ｉｉｉ）フェニル基、又は（ｖ）チエニル基を含むような上記の構造Ａを有する。

【００７８】

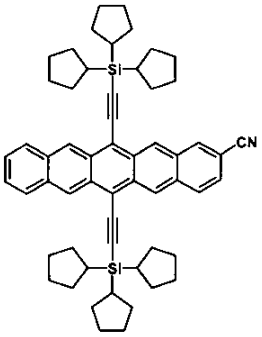
本発明の化合物の例示的な構造を幾つか下記に示す。

【００７９】

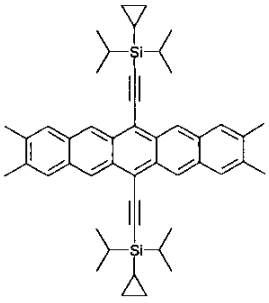
【化７】



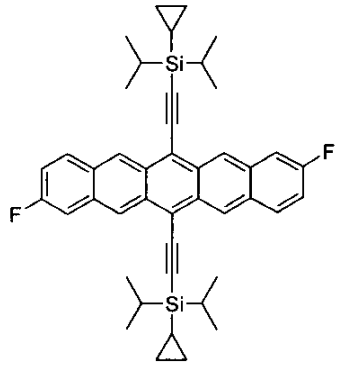
ＬＸＩ



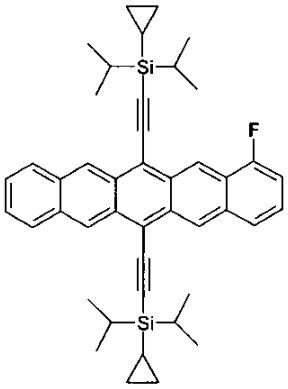
ＬＸＩＩ



ＬＸＩＩＩ

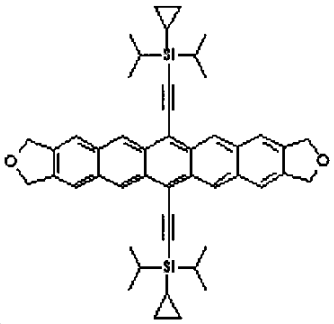


ＬＸＩＶ



ＬＸＶ

並びに



ＬＸＶＩ

【００８０】

式中、

ＬＸＩ＝１，８－ジフルオロ－６，１３－ビス［（シクロプロピル，ジイソプロピルシリル）エチニル］ペンタセン（及び１，１１－ジフルオロ異性体）；

ＬＸＩＩ＝２－シアノ－６，１３－ビス［（トリシクロペンチルシリル）エチニル］ペンタセン；

ＬＸＩＩＩ＝２，３，９，１０－テトラメチル－６，１３－ビス［（シクロプロピル，ジイソプロピルシリル）エチニル］－ペンタセン；

ＬＸＩＶ＝２，９－ジフルオロ－６，１３－ビス－［（シクロプロピルジイソプロピルシリル）エチニル］ペンタセン；

ＬＸＶ＝６，１３－ビス（シクロプロピルジイソプロピルシリルエチニル）－１－フルオロペンタセン；及び

ＬＸＶＩ＝６，１３－ビス（シクロプロピルジイソプロピルシリルエチニル）－２，３：９，１０－ビス（ｃ－ジヒドロフラノ）ペンタセン。

【００８１】

上記に述べたように、本ペンタセン化合物は電気デバイス（例えばトランジスタ）などの用途に使用される場合に、最大電荷キャリア移動度の値が２．０ｃｍ^{2}Ｖ－ｓ以上であるような半導体層の形成を可能とするようなものであることが望ましい。ペンタセン化合物は、いずれも下記実施例の試験方法の項で説明する移動度値試験方法Ｉ、移動度値試験方法ＩＩ、及び／又はＴＦ及びＣＣＭＶ試験方法によって測定した最大電荷キャリア移動度の値が２．０ｃｍ^2／Ｖ－ｓであるような半導体層の形成を可能とするようなものであることがより望ましい。

【００８２】

本発明は更に、（Ｉ）１つ以上の上記に述べたペンタセン化合物と、（ＩＩ）溶媒とを

含む組成物に関する。本発明の化合物を形成するうえで適当な一般的な溶媒としては、これらに限定されるものではないがケトン、芳香族炭化水素などの有機溶媒が挙げられる。好適な溶媒としては、これらに限定されるものではないが、トルエン、エチルベンゼン、ブチルベンゼン、クロロベンゼン、ジクロロベンゼン、テトラヒドロフラン、イソホロン、アニソール、テトラヒドロナフタレン、及びシクロヘキサノンが挙げられる。例示的な一実施形態では、組成物は１つ以上の上記に述べたペンタセン化合物と、トルエン、ブチルベンゼン、アニソール又はシクロヘキサノンなどの溶媒とを含む。

【００８３】

一般的に、１つ以上の上記に述べたペンタセン化合物は、組成物の全重量に対して少なくとも０．１重量％の濃度で組成物中に含まれる。上記に述べたように、特定の実施形態では、組成物を形成するために使用されるペンタセン化合物は、トルエンなどの特定の溶媒に対して最大で約２１重量％の濃度（又は２１重量％よりも高い濃度）で溶解する。特定のペンタセン化合物は特定の有機溶媒に対する溶解度が２１重量％以上にも及ぶ場合もあるが、本発明の典型的な組成物は１以上の上記に述べたペンタセン化合物を約０．１重量％～約５．０重量％、より一般的には約１．５重量％～約３．０重量％の範囲の濃度で含む。

【００８４】

特定の実施形態では、本発明の組成物は上記に述べたペンタセン化合物の少なくとも１つと、溶媒とを含む。他の実施形態では、本発明の組成物は、上記に述べたペンタセン化合物の少なくとも１つと溶媒とを、１つ以上の更なる組成物成分と組み合わせて含む。好適な更なる組成物成分が添加される場合、組成物成分としては、これらに限定されるものではないが、ポリマー添加剤、レオロジー改質剤、又はこれらの組み合わせが挙げられる。特定の例示的実施形態では、本組成物には、ポリスチレン、ポリ（α－メチルスチレン）、ポリ（メチルメタクリレート）、ポリ（４－シアノメチルスチレン）、ポリ（４－ビニルフェノール）、又は、米国特許出願公開第２００４／０２２２４１２　Ａ１号若しくは米国特許出願公開第２００７／０１４６４２６　Ａ１号（これらの発明の主題をその全容にわたって本願に援用する）に開示される他の任意の好適なポリマーからなる群から選択されるポリマー添加剤が含まれる。特定の望ましい実施形態では、ポリマー添加剤には、ポリスチレン、ポリ（α－メチルスチレン）、又はポリビニルフェノールが含まれる。

【００８５】

更なる組成物成分が添加される場合、各組成物成分（すなわちペンタセン化合物以外の成分）は組成物の全重量に対して０～約５０重量％の量で独立して加えられる。一般的に、更なる各組成物成分（すなわちペンタセン化合物以外の成分）は組成物の全重量に対して約１．０～約１０．０重量％の量で独立して加えられる。例えば、ポリマー添加剤（例えばポリスチレン）が組成物に加えられる場合、ポリマー添加剤は、組成物の全重量に対して一般的に０～約５．０重量％、より一般的には約０．５～約３．０重量％の量で加えられる。

【００８６】

特定の実施形態では、得られる組成物が、従来のコーティング法によって基板上に組成物をコーティングすることができるような組成物としての性質（例えば組成物安定性、粘性など）を有することが望ましい。好適な従来のコーティング法としては、これらに限定されるものではないが、スピンコーティング、ナイフコーティング、ロール・ツー・ロール・ウェブコーティング、及びディップコーティング、並びにインクジェット印刷、スクリーン印刷、及びオフセットリソグラフィーなどの印刷法が挙げられる。望ましい一実施形態では、得られる組成物は印刷可能な組成物、更により望ましくはインクジェット印刷可能な組成物である。

【００８７】

上記に述べた組成物は基板上にコーティングすることができる。得られる基板は、少なくとも１つのコーティング可能な表面と、その少なくとも１つのコーティング可能な表面上のコーティング層とを有し、コーティング層はＲ、Ｒ’、Ｒ”、ｘ、ｙ、ｚ及びＸが上

記に述べたものであるような構造Ａを有するペンタセン化合物を含む。上記に述べたように、コーティング層は更に、少なくとも１つの上記に述べたペンタセン化合物以外の１つ以上の更なる組成物成分を含んでもよい。

【００８８】

本発明の組成物は各種の基板上にコーティングすることができる。好適な基板としては、これらに限定されるものではないが、ポリエチレンテレフタレート（ＰＥＴ）、ポリエチレンナフタレート（ＰＥＮ）、及びポリイミドなどのポリマーフィルム、並びにシリカ、アルミナ、シリコンウェーハ、及びガラスなどの無機基板が挙げられる。例示的な一実施形態では、前記基板は電子デバイス又は電子デバイス要素を含む。例えば、本発明の組成物を基板上にコーティングすることによって、薄膜トランジスタ（ＴＦＴ）又は有機発光ダイオード（ＯＬＥＤ）のような電子デバイスの半導体層を形成することができる。本発明の組成物を基板上にコーティングすることによって、光起電力モジュール若しくはその内部の太陽電池、又はセンサーを形成することができる。

【００８９】

上記に述べたペンタセン化合物及び当該化合物から調製される組成物は、電荷キャリア移動度の値が２．０ｃｍ^2／Ｖ－ｓよりも高い電子デバイス（例えばトランジスタ）を形成することを可能とするものである。例示的な一実施形態では、電子デバイスはコーティング層を有し、コーティング層はＲ、Ｒ’、Ｒ”、ｘ、ｙ及びｚが上記に述べたものであるような構造Ａを有するペンタセン化合物を含む。得られる電子デバイスは、本願で開示する移動度値試験方法Ｉ及び／又は本願で開示する移動度値試験方法ＩＩ及び／又は本願で開示するＴＦ及びＣＣＭＶ試験方法、及び／又は電子デバイスの電荷キャリア移動度の値を測定するための同様な方法によって測定される電荷キャリア移動度の値が２．０ｃｍ^2／Ｖ－ｓよりも高い（又は２．１よりも高い、又は２．２よりも高い、又は２．３よりも高い、又は２．４よりも高い、又は２．５よりも高い、又は２．６よりも高い、又は２．７よりも高い、又は２．８よりも高い、又は２．９よりも高い、又は３．０よりも高い、又は３．１よりも高い、又は３．２よりも高い、又は３．３よりも高い、又は３．４よりも高い、又は３．５よりも高い）。

【００９０】

本発明の例示的な電子デバイスは、図１に示されるようなトップコンタクト／ボトムゲート型のＴＦＴ構造を有しうる。図１に示されるように、例示的な電子デバイス１０は、基板１１、ゲート電極１６、誘電体層１２、半導体層１３、ソース電極１４、及びドレイン電極１５を有している。例示的電子デバイス１０の基板１１、ゲート電極１６、誘電体層１２、ソース電極１４、及びドレイン電極１５を形成するための材料は、ＴＦＴ電子デバイスを形成するために通常使用される任意の材料であってよい。

【００９１】

基板１１を形成するうえで適当な材料としては、これらに限定されるものではないが、ガラス、ポリエチレンテレフタレート、ポリエチレンナフタレート、及びポリイミドが挙げられる。誘電体層１２を形成するうえで適当な材料としては、これらに限定されるものではないが、ポリ（４－ビニルフェノール）、ポリ（メチルメタクリレート）、及びポリ（４－シアノメチルスチレン）などの各種のポリマーの任意のものが含まれ、これらは通常は溶液から成膜されるが、官能性モノマー及び／又はオリゴマーと硬化剤とを含む配合物を硬化させることによって定位置に形成することもできる。誘電体層１２は、これらに限定されるものではないが、誘電体層１２の誘電率を高める機能を有するＢａＴｉＯ$_3$、ＳｉＯ$_2$、ＺｒＯ$_2$などの無機充填剤を更に含んでもよい。

【００９２】

半導体層１３を形成するうえで適当な材料には、上記に述べた本発明の組成物が含まれる。ゲート電極１６、ソース電極１４、及びドレイン電極１５のそれぞれを形成するうえで適当な材料としては、これらに限定されるものではないが、カーボンナノチューブ、ポリ（３，４－エチレンジオキシチオフェン）（ＰＥＤＯＴ）、ポリアニリン（ＰＡＮＩ）、金、銀、アルミニウム、銅、チタン、パラジウム、白金、クロム、及びこれらの混合物

（例えば各種の電極材料の混合物、合金、多層複合体）が挙げられる。

【００９３】

特定の場合では、基板１１、ゲート電極１６、及び誘電体層１２は、熱酸化物を有する高濃度ドープしたｎ型シリコンウェーハ（例えばノエル・テクノロジー社（Noel Technologies, Inc.）（カリフォルニア州キャンベル）より市販されるもの）であり、その場合、高濃度ドープしたｎ型シリコンウェーハが基板及びゲート電極の両方として機能し、熱酸化物が誘電体層として機能する。

【００９４】

特定の例示的実施形態では、以下の層、すなわち、ゲート電極１６、誘電体層１２、半導体層１３、ソース電極１４、及びドレイン電極１５の内の１つ以上のものが印刷可能（例えばインクジェット印刷可能）な層である。例えば、誘電体層１２、半導体層１３、ゲート電極１６、ソース電極１４、及びドレイン電極１５を形成するうえで適当な印刷可能な組成物が、現在米国特許第７，４９８，６６２号となっている米国特許出願公開第２００７０１１４５１６　Ａ１号に開示されている（その発明の主題をその全容にわたって本願に援用する）。

【００９５】

本発明の電子デバイスは、上記に述べたペンタセン化合物の少なくとも１つを含み、２．０ｃｍ^2／Ｖ－ｓよりも高い電荷キャリア移動度の値を有することが望ましい。こうした電子デバイスは、図２の例示的デバイス２０に示されるような以下の特定のトップコンタクト／ボトムゲート型のＴＦＴ構造を有しうる。すなわち、ゲート電極層１６（例えば、ノエル・テクノロジー社（Noel Technologies, Inc.）（カリフォルニア州キャンベル）より市販される高濃度ｎ型ドープしたシリコンウェーハ）上に配置された熱酸化物（ＳｉO_2）層の形態の第１の誘電体層１２ａを有する高濃度にｎ型ドープしたシリコンウェーハを含むゲート電極１６、ＳＡＲＴＯＭＥＲ（商標）ＳＲ－３６８（サルトマー社（Sartomer Company Inc.）（ペンシルベニア州エクストン））（約８．５重量％）、γ－メタクリルオキシプロピルトリメトキシシラン（オー・エス・アイ・スペシャルティーズ社（OSi Specialties）（ウェストバージニア州サウスチャールストン）より販売されるＳｉｌｑｕｅｓｔ（登録商標）Ａ－１７４シラン）により表面処理し、米国特許出願第１１／７７１，７８７号及び同第１１／７７１，８５９号（これらの発明の主題をその全容にわたって本願に援用する）（例えば、各出願の「調製例１－誘電体インク」を参照）に開示されるようにして形成したジルコニアナノ粒子（約４０．０重量％）、ＩＲＧＡＣＵＲＥ（商標）１８４光開始剤（チバ社（Ciba Corporation）（デラウェア州ニューポート））（約１．５重量％）、及びイソホロン（シグマ・アルドリッチ社（Sigma-Aldrich）（ウィスコンシン州ミルウォーキー））（約５０．０重量％）を含むポリマー誘電体組成物を含む第２の誘電体層１２ｂ、上記に述べたペンタセン化合物の少なくとも１つ（例えば化合物Ｉ、ＩＩ、又はＩＶ）（約２．０重量％）、ポリスチレン（ポリマー・ソース社（Polymer Source Inc.）（カナダ、モントリオール））（約１．０重量％）、及びブチルベンゼン（シグマ・アルドリッチ社（Sigma-Aldrich）（ウィスコンシン州ミルウォーキー））（約９７．０重量％）を含む半導体層１３、金を含むソース電極１４、並びに金を含むドレイン電極１５。

【００９６】

上記に述べた本発明のペンタセン化合物は、Ｒ、Ｒ’及びＲ”置換基の所望の組み合わせを有する置換シリルアセチレンを形成する工程と、次いでこの置換シリルアセチレンを６，１３－ペンタセンキノンと反応させる工程とを含む方法によって調製することができる。Ｒ、Ｒ’及びＲ”置換基の所望の組み合わせを有する置換シリルアセチレンを形成する工程は、特定のシリルアセチレン（例えばトリメチルシリルアセチレン）のケイ素原子に結合した１つ以上の第１の置換基を１つ以上の第２の置換基（例えばイソプロピル基）に置換する第１の置換反応、及びケイ素原子に結合した１つ以上の第２の置換基を１つ以上の第３の置換基（例えばイソプロペニル基）に置換する第２の置換反応（ただしこれに限定されない）を含む多くの反応工程を含みうる。

【００９７】
本発明のペンタセン化合物を形成する方法は更に以下の方法工程の１つ以上を含みうる。すなわち、少なくとも１工程、場合によっては２又は３工程の再結晶化工程による、アセトンなどの適当な溶媒からの精製である。その場合、ペンタセン化合物を所定量の沸騰したアセトンに溶解して固形分をすべて溶解した後、光分解を防止するために溶液を光から保護しながら約０℃～４℃に冷却する。この後、固形分を濾過により回収し、真空下で乾燥して残留アセトンを除去する。
【００９８】
本発明のペンタセン化合物が一旦形成されたなら、溶媒及び１つ以上の更なる成分と合わせて印刷可能な組成物のような組成物とする。上記に述べたように、本発明のペンタセン化合物（例えば化合物Ｉ～ＬＩＶ）を上記に参照した有機溶媒（例えばトルエン）の少なくとも１つに含有させることによって、最大で２１重量％又は２１重量％よりも多くのペンタセン化合物を含む第１の組成物を形成することができる。上記に述べたような更なる組成物成分（例えばポリスチレン）を第１の組成物に含有させて最終的な組成物としてもよい。この最終組成物はインクジェット印刷装置によって印刷可能なものであることが望ましい。
【００９９】
上記に述べた本発明のペンタセン化合物の少なくとも１つを含有する本発明の組成物（例えば第１の組成物、最終組成物、又はその両方）を使用することによって、様々なコーティング、コーティング層を有する基板、電子デバイス部品、及び電子デバイスを作製することができる。得られるコーティング、コーティング層を有する基板、電子デバイス部品、又は電子デバイスは、Ｒ、Ｒ’、Ｒ”、ｘ、ｙ、ｚ及びＸが上記に述べたものであるような構造Ａを有するペンタセン化合物を含んでいることが望ましい。より望ましくは、コーティング、コーティング層を有する基板、電子デバイス部品、又は電子デバイスは、Ｒ、Ｒ’及びＲ”が２個の立体的に似た基と１個の立体的に異なる基とをともに含み、２個の立体的に似た基はペンタセン化合物の５個の環構造を通じて延びる平面の両側面に配向し、立体的に異なる基はペンタセン化合物の５個の環構造を通じて延びる平面内にほぼ位置するような構造Ａを有するペンタセン化合物を含む。特定の所望の実施形態では、得られるコーティング、コーティング層を有する基板、電子デバイス部品、又は電子デバイスは、ｚ＝０であり、Ｒがイソプロピルを含み、Ｒ’がイソプロペニルを含むような構造Ａを有するペンタセン化合物を含む。他の所望の実施形態では、得られるコーティング、コーティング層を有する基板、電子デバイス部品、又は電子デバイスは、上記に示したペンタセン化合物Ｉ、ＩＩ及びＩＶの内の１つを含む。
【０１００】
本発明を上記に説明し、更に下記に実施例により説明するが、実施例はいかなる意味においても発明の範囲を限定するものとして解釈されるべきではない。逆に本明細書を読むことでそれ自体当業者にとって示唆的となりうる様々な他の実施形態、改変及びその均等物を本発明の趣旨及び／又は添付した特許請求の範囲から逸脱することなく実施する余地がありうる点は明確に理解されるはずである。
【実施例】
【０１０１】
これらの実施例はあくまで説明を目的としたものであって、添付した特許請求の範囲の限定を目的とするものではない。実施例及び明細書の残りの部分における部、比率、比などは、特に断らないかぎりにおいてはすべて重量に基づいたものである。
【０１０２】

【表４－１】

表４．実施例で使用した材料

材料	略称（ある場合）	供給元
２－ブロモプロペン		シグマ・アルドリッチ社（Sigma-Aldrich）（ウィスコンシン州ミルウォーキー）
塩化アンモニウム	NH_4Cl	
２，２’－アゾビス（２－メチルプロピオニトリル）		
ベンゾキノン		
ブロモシクロプロパン		
Ｎ－ブチルベンゼン		
Ｎ－ブチルリチウム	ｎ－ＢｕＬｉ	
クロロベンゼン		
クロロジイソプロピルシラン		
シクロヘキサン－１，４－ジオン		
臭化シクロプロピルマグネシウム		
デカン		
ジクロロジイソプロピルシラン		
ジクロロエタン		
ジクロロメタン	ＤＣＭ	
ジエチルエーテル		
ジメチルホルムアミド	ＤＭＦ	
エタノール	ＥｔＯＨ	
エチルベンゼン		
塩化エチルマグネシウム		
臭化エチニルマグネシウム		
臭化アリルマグネシウム		
ヘキサメチルジシラザン	ＨＭＤＳ	
ヘプタン		
ヘキサン		
塩酸	ＨＣｌ	
イソホロン		
イソプロピルリチウム		
硫酸マグネシウム	$MgSO_4$	
メタノール	ＭｅＯＨ	
２－メチル－１，３－ジチアン		
４－メトキシチオフェノール		
Ｎ－ブロモコハク酸イミド	ＮＢＳ	
ペンタン		

【０１０３】

【表４－２】

（表４の続き）

材料	略称（ある場合）	供給元
ヨウ化カリウム	ＫＩ	
6，13－ペンタンキノン		
ペンタクロロチオフェノール		
ペンタフルオロチオフェノール		
塩化第一スズ二水和物	$SnCl_2 \cdot 2H_2O$	
テトラヒドロフラン（無水）	ＴＨＦ	
チオフェノール		
トルエン		
（3－ヘプタフルオロイソプロポキシ）プロピルートリクロロシラン		ジェレスト社（Gelest）（ペンシルベニア州モーリスビル）
デカンジチオール		アルファ・エイサー社（Alfa Aesar）（マサチューセッツ州ウォードヒル）
1，4－アントラキノン		
3－フルオロ－ｏ－キシレン		
4－フルオロ－ｏ－キシレン		
2－ブロモ－1－ブテン		
トリメチルシリルアセチレン		
ドデカンチオール		
オクタンチオール		
n型ドープシリコンウェーハ（高濃度ドープ）		ノエル・テクノロジー社（Noel Technologies, Inc.）（カリフォルニア州キャンベル）
熱酸化物を有するn型ドープシリコンウェーハ		
ポリスチレン（分子量11万8千）		ポリマー・ソース社（Polymer Source Inc.）（カナダ、モントリオール）
ＳＡＲＴＯＭＥＲ（商標）ＳＲ－３６８		サルトマー社（Sartomer Company Inc.）（ペンシルベニア州エクストン）
インクジェット印刷可能な銀インク Ｃａｂｏｔ ＡＧ－ＩＪ－Ｇ－１００－Ｓ１		カボット社（Cabot Corporation）（ニューメキシコ州アルバカーキ）
ＩＲＧＡＣＵＲＥ（商標）１８４光開始剤		チバ社（Ciba Corporation）（デラウェア州ニューポート）
シランＡ－１７４[1]で表面処理したジルコニアナノ粒子		スリー・エム社（3M Company）（ミネソタ州セントポール）

【０１０４】

[1]本発明で使用するシランＡ－１７４で表面処理されたジルコニアナノ粒子を形成する方法については、いずれもスリー・エム社（The 3M Company）（ミネソタ州セントポール）の出願人名で出願され、同社に譲渡された米国特許出願第１１／７７１，７８７号及び同第１１／７７１，８５９号（例えば各出願の「調製例１－誘電体インク」を参照）（これらの出願の発明の主題をその全容において本願に援用する）に開示されている。

【０１０５】

試験方法

移動度値の試験方法Ｉ

作製したトランジスタの性能特性を空気中、周辺照明下で、２台のソース測定ユニット（キースリー・インスツルメンツ社（Keithley Instruments,Inc.）（オハイオ州クリーブランド）より販売されるモデル２４００）を使用して測定した。各装置をＳｉｇｎａｔｏｎｅ（商標）１１６０シリーズのプローブステーション上に置き、Ｓｉｇｎａｔｏｎｅ（商標）Ｓ－７２５－ＰＲＭマニピュレータ（シグナトーン社（カリフォルニア州ギルロイ））を使用してプローブを接続した。ドレイン－ソース間のバイアス電圧（V_{DS}）を－４０Ｖに保ち、ゲート・ソース間のバイアス電圧（V_{GS}）を＋１０Ｖ～－４０Ｖの範囲で１Ｖ刻みに変化させた。図３は、例示的な測定パラメータをグラフで示したものである。

【０１０６】

図３で、「Ａ」として示されるトレースは、測定されたドレイン電流（I_{DS}）をV_{GS}の関数として示したものである。「Ｂ」として示されるトレースは、測定されたドレイン電流（I_{DS}）の平方根をV_{GS}に対して示したものであり、「Ｃ」として示されるトレースは測定されたゲート電流（I_{GS}）をV_{GS}に対して示したものである。飽和電界効果移動度（μ）は、V_{GS}に対するドレイン電流の平方根（トレース「Ｂ」）の傾き（ｍ）から下式を用いて計算することができる。

【０１０７】

【数１】

$$\mu = 2\left(\frac{m^2 L}{WC_i}\right)$$

【０１０８】

式中、C_iはゲート誘電体の比静電容量、Ｗはチャネル幅、及びＬはチャネル長さである。記録した電荷キャリア移動度値は、測定範囲において観察された最大電荷キャリア移動度の値である。

【０１０９】

V_{GS}に対するI_{DS}の平方根の曲線（トレース「Ｂ」）を用いて直線フィットについてＸ軸外挿を行って閾値電圧（V_t）とした。$I_{DS}-V_{GS}$曲線の最小及び最大ドレイン電流（I_{DS}）値間の差としてオン／オフ比をとった。

【０１１０】

移動度値の試験方法ＩＩ

作製したトランジスタの性能特性を室温で空気中、半導体パラメータ分析装置（キースリー・インスツルメンツ社（Keithley Instruments,Inc.）（オハイオ州クリーブランド）より販売されるモデル４２００）を使用して測定した。ドレイン－ソース電流（I_{DS}）の平方根を、－４０Ｖの一定のドレイン－ソース間バイアス電圧（V_{DS}）について＋１０Ｖ～－４０Ｖまでのゲート－ソース間バイアス電圧（V_{GS}）の関数としてプロットした。下式を用いた。

【０１１１】

$I_{DS}=\mu C\times W/L\times(V_{GS}-V_t)^2/2$

飽和電界効果移動度（μ）を、ゲート誘電体の比静電容量（Ｃ）、チャネル幅（Ｗ）及びチャネル長さ（Ｌ）を用いて曲線の直線部分から計算した。閾値電圧、サブ閾値の傾き、及びオン／オフ比は方法Ｉと同様にして求めた。

【０１１２】

トランジスタ製造及び電荷キャリア移動度値試験方法（すなわちＴＦ及びＣＣＭＶ試験方法）：

下記実施例４に述べるような特定の材料及び反応工程を用いてトランジスタを作製した

。作製したトランジスタの電荷キャリア移動度の値を、上記に述べた移動度値試験方法Ｉを用いて測定した。

【０１１３】

熱分析試験方法

オートサンプラーを備えたティー・エー・インスツルメンツ社（TA Instrument）製モデルＱ２００の示差走査熱量計（ＤＳＣ）を使用して特性評価を行った。２～１０ｍｇの特性評価を行う材料をアルミニウムパン（ティー・エー・インスツルメンツ社（TA Instruments）より販売されるＳｔａｎｄａｒｄ又はＴｚｅｒｏ（商標））に入れ、使用した特定のパンの使用条件にしたがってかしめた。パンをオートサンプラーに入れてＤＳＣの試料セル中に自動的に試料をロードした。同じタイプの空のパンを参照用に使用した。

【０１１４】

試料を０℃にまで冷却した後、制御された速度（５℃／分）で３２０℃にまで温度を上げて最初の走査を行った。この走査により、吸熱及び発熱反応が起こったことが分かった。各反応がおこった温度を用いて第２の走査の温度限界を決定し、第２の走査ではより低温での転移が可逆であるか否かを調べた。

【０１１５】

第２の走査は、新たに調製した試料を用い、固体／固体転移にともなう最も高い温度での吸熱反応よりも約１０℃高い温度にまで温度を一定の速度で変化させ、溶解及びこれに続くディールス・アルダー反応が起こる温度よりも低い温度に保って行った。次いで温度を制御された速度（５℃／分）で最も低い温度の熱反応よりも低い温度にまで下げた後、再び５℃／分で材料が不可逆的に変化する（ディールス・アルダー反応）温度よりも高い温度にまで上げた。

【０１１６】

サーモグラムに見られる反応を、装置とともに提供される汎用解析ソフトウェアの分析メニューの「Ｉｎｔｅｇｒａｔｅ　Ｐｅａｋ　Ｌｉｎｅａｒ」又は「Ｏｎｓｅｔ　Ｐｏｉｎｔ」機能を使用して分析することによって、反応が起こった温度を求めるとともに試料が正確に秤量されている場合には転移にともなうエンタルピーを求めた。

【０１１７】

ＴＩＰＳペンタセンの第２の走査の代表的なサーモグラムを図４に示す。図４は、１２４℃付近で起こる反応が１８０℃付近で起こる反応と同様、可逆的であることを示している。２６６℃付近では、吸熱反応が起こった後に大きな発熱反応が起きていることが分かる。ＴＩＰＳペンタセンをＦｉｓｈｅｒ－Ｊｏｈｎ融点装置上で観察したところ、より低温における２つの熱反応は固体－固体転移であり、実際に材料が２６６℃付近で溶融する（固体－液体転移）ことが確認された。本発明のペンタセン化合物の熱分析の結果を下記表８に示す。

【０１１８】

実施例１－６，１３－ビス（アリルジイソプロピルシリルエチニル）ペンタセン（アリルＤＩＰＳ）の合成

アリルジイソプロピルシリルアセチレンの合成

ジクロロジイソプロピルシラン（４．００ｇ，２１．６ｍｍｏｌ）及び無水ＴＨＦ（２０ｍＬ）を、攪拌子を備えた乾燥した２５０ｍＬの丸底フラスコに加えた。フラスコに乾式冷却器を取り付けた。臭化アリルマグネシウム（２２．０ｍＬ，２２．０ｍｍｏｌ，１．０ＭＴＨＦ溶液）を冷却器から加えて第１の混合物を形成した。この第１の混合物を６３℃に１２時間加熱した後、室温にまで冷却した。

【０１１９】

トリメチルシリルアセチレン（２．３６ｇ，２４．０ｍｍｏｌ）及び無水ＴＨＦ（１２ｍＬ）を、攪拌子を備えた別の乾燥した１００ｍＬの丸底フラスコに加えた。１００ｍＬフラスコの反応混合物を０℃にまで冷却し、ｎ－ブチルリチウム（９．２ｍＬ，２３ｍｍｏｌ，２．５Ｍヘキサン溶液）を滴下した後、９０分間攪拌して第２の混合物を形成した。

【０１２０】
次いで２５０ｍＬフラスコの反応混合物（第１の混合物）を０℃にまで冷却し、第２の混合物を注射器で滴下した。合わせた混合物を一晩攪拌した。次いで合わせた混合物を１００ｍＬの飽和塩化アンモニウム溶液中に注ぎ、ヘキサン：ジエチルエーテルの１：１混合物（１００ｍＬ）で洗った。有機層を分離し、水層を５０ｍＬのヘキサン：ジエチルエーテルの１：１混合物（１００ｍＬ）で再び抽出した。有機層の各部分を合わせ、水（５０ｍＬ）及び食塩水（２５ｍＬ）で洗った後、$MgSO_4$上で乾燥し、濾過してから回転蒸発によって濃縮した。
【０１２１】
生成物をＴＨＦ（５０ｍＬ）に溶解し、K_2CO_3で飽和したＭｅＯＨ（１００ｍＬ）を加えた後、２時間攪拌した。水（５０ｍＬ）及びヘキサン（１００ｍＬ）を加え、有機層を分離した。水層を再び抽出し（２０ｍｌヘキサン）、各有機層を合わせた。合わせた有機層を水（２０ｍＬ）で洗い、$MgSO_4$上で乾燥し、濾過してから溶媒を蒸発させた。生成物をカラムクロマトグラフィー（ヘキサン：ＤＣＭ＝５：１）で精製して１．７ｇの無色油状物を得た（９．４ｍｍｏｌ，４４％）。生成物を分析して以下のデータを得た。^{1}Ｈ－ＮＭＲ（２００ＭＨｚ，$CDCl_3$）δ＝５．８７（ｍ，１Ｈ），４．９４（ｍ，２Ｈ），２．３９（ｓ，１Ｈ），１．７０（ｄｔ，Ｊ＝１．４Ｈｚ，８Ｈｚ，２Ｈ），１．０８（ｓ，１４Ｈ）。
【０１２２】
６，１３－ビス（アリルジイソプロピルシリルエチニル）ペンタセン（アリルＤＩＰＳ）の合成
上記で得たアリルジイソプロピルシリルアセチレン（１．６２ｇ，９．３６ｍｍｏｌ）及び無水ＴＨＦ（２０ｍＬ）を、攪拌子を備えた乾燥した１００ｍＬの丸底フラスコに加え、０℃に冷却した。ｎ－ブチルリチウム（３．１ｍＬ，７．８ｍｍｏｌ，２．５Ｍヘキサン中）を滴下し、溶液を１時間温まらせた。６，１３－ペンタセンキノン（１．２２ｇ，３．８９ｍｍｏｌ）を加え、混合物を４８時間攪拌した。０．５ｍＬの飽和塩化アンモニウム溶液を加えて反応を停止させた後、メタノール（６０ｍＬ）で希釈して反応混合物を形成した。
【０１２３】
大型の三角フラスコ中で、ＭｅＯＨ（６００ｍＬ）、$SnCl_2 \cdot 2H_2O$（２．６０ｇ，１１．５ｍｍｏｌ）、及び２５％塩酸（２．５ｍＬ）を攪拌下で合わせ、０℃に冷却して第２の溶液を形成した。反応混合物を第２の溶液にゆっくりと流し込み、更なるメタノールで洗ったものも加えた。更なる２５％塩酸（３ｍＬ）を加え、混合物を２０分間攪拌してから冷蔵庫に１時間入れた。混合物を濾過して１．３ｇの緑がかった青色の固体を得た。得られた固体を最小量のＤＣＭ（約５ｍＬ）に溶解してからヘキサン（２００ｍＬ）で希釈し、厚いプラグ上に流した。余分なアセチレンをプラグをヘキサンで洗い流すことによって除去した。生成物をヘキサン：ＤＣＭの５：１混合物で溶出した。溶媒を除去して０．５ｇの青色の固体を得た。得られた固体を高温のアセトンに溶解し、熱いうちに濾過して緑色の不純物を取り除き、一晩結晶化させた。アセトンから再び再結晶化させることによって０．３８ｇの青色の針状結晶を得た（０．６２ｍｍｏｌ，１６％）。青色の針状結晶を分析して以下のデータを得た。^{1}Ｈ－ＮＭＲ（２００ＭＨｚ，$CDCl_3$）δ＝９．３（ｓ，４Ｈ），８．０（ｄｄ，Ｊ＝３．４Ｈｚ，４Ｈ），７．４（ｄｄ，Ｊ＝３．４Ｈｚ，４Ｈ），６．３８（ｍ，２Ｈ），５．１（ｍ，４Ｈ），２．０（ｍ，４Ｈ），１．３～１．４（ｍ，２８Ｈ）。
【０１２４】
実施例２－６，１３－ビス（イソプロペニルジイソプロピルシリルエチニル）ペンタセン（ＩＰ－ＤＩＰＳ）の合成
イソプロピルジイソプロピルシリルアセチレンの合成
２－ブロモプロペン（４．３２ｇ，３８．６ｍｍｏｌ）と無水ＴＨＦ（２０ｍＬ）を、攪拌子を備えた乾燥した２５０ｍＬの丸底フラスコ内で合わせて－７８℃に冷却した。ｎ

－ブチルリチウム（１４．８ｍＬ，３７ｍｍｏｌ，２．５Ｍヘキサン溶液）を滴下した。撹拌を継続して温度を１０分間維持した後、ジクロロジイソプロピルシラン（６．８５ｇ，３７．０ｍｍｏｌ）を滴下した。混合物を温まらせ、４８時間撹拌して第１の混合物を形成した。

【０１２５】

撹拌子を備えた別の乾燥した１００ｍＬの丸底フラスコ中でトリメチリシリルアセチレン（３．９３ｇ，４０．０ｍｍｏｌ）と無水ＴＨＦ（１０ｍＬ）を合わせて０℃に冷却した。ｎ－ブチルリチウム（１４．８ｍＬ，３７ｍｍｏｌ，２．５Ｍヘキサン溶液）を滴下し、撹拌を２時間継続して第２の混合物を形成した。第１の反応混合液を０℃にまで冷却した。第２の混合液を第１の混合液に注射器で加え、撹拌を１２時間継続した。反応フラスコの内容物をNH_4Cl溶液（１００ｍＬ）中に加え、ヘキサン：ジエチルエーテルの１：１混合物（１００ｍＬ）を加えた。有機層を分離し、水層をヘキサン：ジエチルエーテルの１：１混合物（２０ｍＬ）で再び抽出した。有機層の各部分を合わせ、水（２０ｍＬ）及び食塩水（２０ｍＬ）で洗った後、硫酸マグネシウム上で乾燥し、濾過してから回転蒸発によって濃縮した。

【０１２６】

混合生成物をＴＨＦ（５０ｍＬ）に溶解した後、炭酸カリウムで飽和したメタノールを加え、撹拌を２時間継続した。水（１００ｍＬ）及びヘキサン（１００ｍＬ）を加え、有機層を分離してから水（２０ｍＬ）で洗い、硫酸マグネシウム上で乾燥、濾過し、回転蒸発によって濃縮することにより４．６ｇの無色油状物を得た（２６ｍｍｏｌ，７０％）。生成物を分析して以下のデータを得た。^{1}Ｈ－ＮＭＲ（２００ＭＨｚ，$CDCl_3$）δ＝５．７６（ｍ，１Ｈ），５．５１（ｍ，１Ｈ），２．４２（ｓ，１Ｈ），１．８８（ｓ，３Ｈ），１．０５（ｍ，１４Ｈ）。

【０１２７】

６，１３－ビス（イソプロペニルジイソプロピルシリルエチニル）ペンタセン（ＩＰ－ＤＩＰＳ）の合成

上記で得たイソプロペニルジイソプロピルシリルアセチレン（３．００ｇ，１６．７ｍｍｏｌ）と無水ＴＨＦ（１６ｍＬ）を撹拌子を備えた乾燥した２５０ｍＬの丸底フラスコ内で合わせた。フラスコを０℃に冷却した後、ｎ－ブチルリチウム（５．６ｍＬ，１４ｍｍｏｌ，２．５Ｍヘキサン溶液）を滴下し、撹拌を２時間継続した。６，１３－ペンタセンキノン（１．４ｇ，４．６ｍｍｏｌ）を加え、混合物を４８時間撹拌した。０．５ｍＬの飽和NH_4Cl溶液を加えて反応を停止させた後、メタノール（５０ｍＬ）で希釈して第１の反応混合物を形成した。

【０１２８】

大型の三角フラスコ中、$SnCl_2 \cdot 2H_2O$（５．８ｇ，２５ｍｍｏｌ）をメタノール（８００ｍＬ）に溶解し、２５％塩酸（５ｍＬ）を加えて第２の混合物を形成した。第２の混合物を０℃に冷却した後、第１の反応混合物をゆっくりと流し込み、２０分間撹拌してから冷蔵庫に１時間入れた。混合物を濾過して青緑色の固体を得、これを最小量のＤＣＭ（約５ｍＬ）に溶解し、ヘキサン（２００ｍＬ）で希釈してから厚いシリカプラグ上に流した。余分なアセチレンをヘキサンで洗い流し、生成物をヘキサン：ＤＣＭの５：１混合物で溶出した。溶媒を除去して１．３５ｇの青色固体を得た。アセトン（約４００ｍＬ）から再結晶化することにより１．１ｇの青色の針状結晶を得た（１．７４ｍｍｏｌ，３８％）。青色の針状結晶を分析して以下のデータを得た。^{1}Ｈ－ＮＭＲ（２００ＭＨｚ，$CDCl_3$）δ＝９．３（ｓ，４Ｈ），８．０（ｄｄ，Ｊ＝３．２Ｈｚ，４Ｈ），７．４（ｄｄ，Ｊ＝３．２Ｈｚ，４Ｈ），５．９（ｂｍ，２Ｈ），５．８（ｂｍ，２Ｈ），２．１（ｓ，６Ｈ），１．３～１．４（ｍ，２８Ｈ）、及びＭＳ（７０ｅＶ，ＥＩ）ｍ／ｚ ６３４（１００％，M^+）。

【０１２９】

実施例３－６，１３－ビス（ジイソプロペニルイソプロピルシリルエチニル）ペンタセン（ＤＩＩＰ－ＩＰＳ）

ジイソプロペニルイソプロピルシリルアセチレンの合成
２－ブロモプロペン（１４．５ｇ，１２０ｍｍｏｌ）と無水ＴＨＦ（１００ｍＬ）を、撹拌子を備えた乾燥した５００ｍＬの丸底フラスコ内で合わせて－７８℃に冷却した。ｎ－ブチルリチウム（４７．５ｍＬ，１１９ｍｍｏｌ，２．５Ｍヘキサン溶液）を滴下した。撹拌を継続して温度を１０分間維持した後、トリクロロジイソプロピルシラン（１０．５ｇ，５９．４ｍｍｏｌ）を滴下した。混合物を温まらせ、４８時間撹拌して第１の反応混合物を形成した。
【０１３０】
撹拌子を備えた別の乾燥した２５０ｍＬの丸底フラスコ中でトリメチリシリルアセチレン（７．３７ｇ，７５．０ｍｍｏｌ）と無水ＴＨＦ（２０ｍＬ）を合わせて０℃に冷却した。ｎ－ブチルリチウム（２８ｍＬ，７０ｍｍｏｌ，２．５Ｍヘキサン溶液）を滴下し、撹拌を２時間継続して第２の反応混合物を形成した。第１の反応混合物を０℃に冷却した後、第２の反応混合物を注射器で加え、撹拌を１２時間継続した。反応フラスコの内容物を飽和NH_4Cl溶液（１００ｍＬ）中に加え、ヘキサン：ジエチルエーテルの１：１混合物（１００ｍＬ）を加えた。有機層を分離し、水層をヘキサン：ジエチルエーテルの１：１混合物（２０ｍＬ）で再び抽出した。有機層の各部分を合わせ、水（２０ｍＬ）及び食塩水（２０ｍＬ）で洗った後、$MgSO_4$上で乾燥し、濾過してから回転蒸発によって濃縮した。
【０１３１】
混合生成物をＴＨＦ（５０ｍＬ）に溶解した後、K_2CO_3で飽和したＭｅＯＨを加え、撹拌を２時間継続した。水（１００ｍＬ）及びヘキサン（１００ｍＬ）を加え、有機層を分離してから水（２０ｍＬ）で洗い、$MgSO_4$上で乾燥、濾過し、回転蒸発によって濃縮することにより２．１ｇの無色油状物を得た（１１．８ｍｍｏｌ，２０％）。生成物を分析して以下のデータを得た。^{1}Ｈ－ＮＭＲ（２００ＭＨｚ，$CDCl_3$）δ＝５．７６（ｍ，２Ｈ），５．５５（ｍ，２Ｈ），２．４８（ｓ，１Ｈ），１．８８（ｍ，６Ｈ），１．０５（ｍ，７Ｈ）。
【０１３２】
６，１３－ビス（ジイソプロペニルイソプロピルシリルエチニル）ペンタセン（ＤＩＰ－ＩＰＳ）の合成
上記で得たジイソプロペニルイソプロピルシリルアセチレン（１．００ｇ，５．５９ｍｍｏｌ）と無水ＴＨＦ（１０ｍＬ）を撹拌子を備えた乾燥した１００ｍＬの丸底フラスコ内で合わせた。フラスコを０℃に冷却した後、ｎ－ブチルリチウム（２．１ｍＬ，５．３ｍｍｏｌ，２．５Ｍヘキサン溶液）を滴下し、撹拌を２時間継続した。６，１３－ペンタセンキノン（０．７９ｇ，２．５ｍｍｏｌ）を加え、混合物を４８時間撹拌した。０．５ｍＬの飽和NH_4Cl溶液を加えて反応を停止させた後、N_2でパージした。$SnCl_2 \cdot 2H_2O$（２．２６ｇ，１０．０ｍｍｏｌ）及びＨＩ（５～６滴）を加え、反応液をN_2下で２０分撹拌した。ヘキサン（５０ｍＬ）及び水（２０ｍＬ）を加え、混合物をマリンクロッド・ベーカー社（Mallinckrodt Baker, Inc.）（ニュージャージー州ピッツバーグ）より販売されるＣｅｌｉｔｅ（登録商標）５４５濾過物質によって濾過した。
【０１３３】
有機層を分離し、水で洗い、$MgSO_4$上で乾燥、濾過し、回転蒸発により濃縮して青緑色の固体を得た。生成物を最小量のＤＣＭ（約５ｍＬ）に溶解し、ヘキサン（２００ｍＬ）で希釈してから厚いシリカプラグ上に流した。余分なアセチレンはヘキサンを用いて洗い流した。次いで生成物をヘキサン：ＤＣＭの９：１混合物で溶出した。溶媒を除去して０．１３ｇの青色固体を得た。アセトン（約１０ｍＬ）から再結晶して３０ｍｇの青色の針状小結晶を得た（０．０４８ｍｍｏｌ，２％）。青色の針状結晶を分析して以下のデータを得た。^{1}Ｈ－ＮＭＲ（２００ＭＨｚ，$CDCl_3$）δ＝９．３（ｓ，４Ｈ），８．０（ｄｄ，Ｊ＝３．２Ｈｚ，４Ｈ），７．４（ｄｄ，Ｊ＝３．２Ｈｚ，４Ｈ），５．９（ｍ，４Ｈ），５．８（ｍ，４Ｈ），２．１（ｔ，Ｊ＝１．４Ｈｚ，１２Ｈ），１．３～１．４（ｍ，１４Ｈ）、及びＭＳ（７０ｅＶ，ＥＩ）ｍ／ｚ６３０（１００％，M^+）。

【０１３４】
実施例４－Ａｕトップコンタクトを有する電子デバイスの作製
熱酸化物を有するｎ型シリコンウェーハ（すなわち、ノエル・テクノロジー社（Noel Technologies, Inc.）（カリフォルニア州キャンベル）より販売される、０．００５Ωｃｍ未満の固有抵抗となるように高濃度にｎ＋型ドープ（ヒ素）し、前面に１０００オングストロームの熱酸化物（SiO_2）を与え、後面が１００オングストロームのＴｉＮ及び５０００オングストロームのアルミニウムでコーティングされたシリコン＜１００＞ウェーハ）を、（ｉ）アセトンで洗浄してからN_2で乾燥し、（ｉｉ）イソプロピルアルコール（ＩＰＡ）で洗浄してからN_2で乾燥し、（ｉｉｉ）脱イオン水（ＤＩ）で洗浄してからN_2で乾燥し、（ｉｖ）更にＵＶ／O_3で１０分間処理した。次いでウェーハ試料を、（ｉ）スピンコーティング（加速率４１５ＲＰＭ／秒、最終速度２０００ＲＰＭで３０秒）により１５．３ｍＰａの粘度を有する酢酸ジルコニウム（ＺｒＯＡｃ）溶液でコーティングし、（ｉｉ）次いでホットプレート上で１００℃に１０分加熱した後、（ｉｉｉ）窒素雰囲気中で紫外線（２５４ｎｍ殺菌ランプ）に１５分曝露し、（ｉｖ）ホットプレート上で１００℃に１０分、加熱後処理した。酢酸ジルコニウム溶液は、８．５重量％のＳＡＲＴＯＭＥＲ（商標）ＳＲ－３６８、４０．０重量％のシランＡ－１７４で表面処理したジルコニアナノ粒子（米国特許出願第１１／７７１，７８７号及び同第１１／７７１，８５９号に記載されるもの）、１．５重量％のＩＲＧＡＣＵＲＥ（商標）１８４光開始剤、及び５０．０重量％のイソホロンを含むものを使用した。

【０１３５】
上記に述べたようにして以下の半導体インク配合物の１つを用いて３つの試料を基板上に調製した。ＴＩＰＳペンタセンについては、インク配合物は２．０重量％のＴＩＰＳペンタセン及び１重量％のポリスチレン（ＰＳ）をｎ－ブチルベンゼンに加えた溶液であった。アリル－ＤＩＰＳについては、インク配合物は２．０重量％のアリル－ＤＩＰＳ及び１重量％のポリスチレン（ＰＳ）をｎ－ブチルベンゼンに加えた溶液であった。イソプロペニル－ＤＩＰＳ（ＩＰ－ＤＩＰＳ）については、インク配合物は１．８重量％のイソプロペニル－ＤＩＰＳ（ＩＰ－ＤＩＰＳ）及び１重量％のポリスチレン（ＰＳ）をｎ－ブチルベンゼンに加えた溶液であった。

【０１３６】
各インク溶液を０．２ミクロンのフィルターを通じて濾過し、Ｄｉｍａｔｉｘ（商標）２８００シリーズのインクジェットプリンター（ＤＭＰ、フジフィルム・ディマティックス社（Fujifilm Dimatix, Inc.）（カリフォルニア州サンタクララ）製）用に設計されたプリントカートリッジに充填した。以下のＤＭＰパラメータを用い、半導体インクを使用して各試料に３０ｍｍ×２０ｍｍの領域を印刷した。すなわち、１０ピコリットル（ｐＬ）の液滴体積を有する液晶ポリマー（ＬＣＰ）カートリッジ、カートリッジヘッド温度＝２８℃、プラテン温度＝３０℃、及び液滴間隔＝２０μｍ。基板上に１５０１×１００１個の液滴のインクジェット液滴マトリクスを形成し、液滴同士がくっついてインク溶液が領域を覆うようにした。

【０１３７】
半導体層を室温で乾燥させた後、約１０００オングストロームの金をシャドーマスクを介して半導体層上に蒸着して、個々の構造が図２に示す例示的デバイス２０に似たデバイスのアレイを形成した。（図２に示す例示的デバイス２０ではゲート電極１６は単一層として示されているが、本実施例では３層構造、すなわち、高濃度ドープしたｎ型シリコンウェーハ層、中間の１００オングストロームのＴｉＮ層、及び下側の５０００オングストロームのアルミニウム層が、この例示的デバイスのゲート電極となっている。）
チャネル長さ（Ｌ）＝１００μｍ及びチャネル幅（Ｗ）＝１０００μｍである、上記に述べたようにして作製した各デバイスは、移動度試験方法Ｉを用いて（すなわち、本発明のＴＦ及びＣＣＭＶ試験方法を用いて）測定した場合に下記表５に示すような以下の電荷キャリア移動度の値を示した。

【０１３８】

【表５】

表５．ＴＩＰＳ－ペンタセン、アリル－ＤＩＰＳ及びＩＰ－ＤＩＰＳを含む電子デバイスの電荷キャリア移動度値の測定値の比較

	電荷キャリア移動度値（cm^2／Ｖ－ｓ）		
	ＴＩＰＳ－ペンタセン	アリル－ＤＩＰＳ	ＩＰ－ＤＩＰＳ
最小移動度値	０．００４９８	０．００６７１	０．０２１５９
最大移動度値	１．９５７	２．４５３	３．４３８
平均移動度値	０．３５９	０．４４３	０．８７２

【０１３９】

実施例５－Ａｇトップコンタクトを有する電子デバイスの作製

実施例４と同様の熱酸化物を有するｎ型シリコンウェーハを、（ｉ）アセトンで洗浄してからN_2で乾燥し、（ｉｉ）イソプロピルアルコール（ＩＰＡ）で洗浄してからN_2で乾燥し、（ｉｉｉ）脱イオン水（ＤＩ）で洗浄してからN_2で乾燥し、（ｉｖ）更に紫外線で発生させたオゾン（ＵＶ／O_3）で１０分間処理した。次いで実施例４で述べたようにこの試料にＺｒＯＡｃの溶液をスピンコーティングして硬化させた。２．０重量％のＴＩＰＳ－ペンタセン及び１重量％のポリスチレン（ＰＳ）をｎ－ブチルベンゼンに加えた溶液からなる半導体インクを調製した。このインク溶液を０．２μｍのフィルターを通じて濾過し、実施例４で使用したＤｉｍａｔｉｘドットマトリクスプリンター（ＤＭＰ）用に設計されたプリントカートリッジに充填した。

【０１４０】

以下のＤＭＰパラメータを用いてこの試料に半導体インクで３０ｍｍ×２０ｍｍの領域を印刷した。すなわち、１０ｐＬの液滴体積を有するＬＣＰカートリッジ、カートリッジヘッド温度＝２８℃、プラテン温度＝３０℃、及び液滴間隔＝２０μｍ。基板上に１５０１×１００１個の液滴のインクジェット液滴マトリクスを形成し、液滴同士がくっついてインク溶液が領域を覆うようにした。半導体層を室温で乾燥させた後、５０ｐＬの液滴体積を有するＳｐｅｃｔｒａ（商標）インクジェットプリントヘッドＳＭ－１２８及びＣａｂｏｔ銀インクを使用して、銀のソース及びドレイン端子を３０４ｄｐｉで印刷した。この試料を１２０℃に１０分加熱した。試料は、移動度試験方法Ｉによって測定した電荷キャリア移動度値が０．０８～０．１２２cm^2／Ｖ－ｓであった。

【０１４１】

実施例６－電子デバイスの作製

図５に示されるような構造を有する電子デバイスを以下のようにして作製した。高濃度にｎ型ドープしたシリコンウェーハをゲート電極層１６として使用し、２５０ｎｍの熱成長させた酸化物を誘電体層１２として使用した。ソース及びドレイン電極１４及び１５はそれぞれ、高真空下でシャドーマスクを介して金又は銀を蒸発させることによって形成した。ソース及びドレイン電極１４及び１５はそれぞれ、チャネル幅（Ｗ）が１，０００μｍ、チャネル長さ（Ｌ）が１００μｍであるチャネルを形成した。金電極を有するデバイスについては、基板を８５℃で１５分間、ＵＶ／O_3に曝露することによって洗浄した。

【０１４２】

電極表面は、その主題の全容を本願に援用するＩＥＥＥ　Ｅｌｅｃｔ．Ｄｅｖ．Ｌｅｔｔ．（２００１），２２，５７１（Ｇｕｎｄｌａｃｈら）に開示されるように所定数のチオールベースの単層によって処理することによって半導体の結晶化性を高め、金属の仕事関数をシフトさせることによって電荷注入性を高めた。チオールベースの単層による処理としては、これらに限定されるものではないが、オクタンチオール、ドデカンチオール、デカンジチオール、ベンゼンチオール、４－メトキシベンゼンチオール、ペンタクロロベンゼンチオール、及びペンタフルオロベンゼンチオールが挙げられる。一般的に、ペンタフルオロベンゼンチオール処理された電極では最適な形態を有する薄膜が得られた。

【０１４３】
次いでデバイス基板をヘキサメチルジシラザン（ＨＭＤＳ）で処理した。純粋なＨＭＤＳをデバイスの表面全体にわたって塗布し、窒素ブランケット下でスピンにより振り落とした（１０００ｒｐｍで３０秒の後、４０００ｒｐｍで１２０秒）。次いでデバイス基板を１２０℃のオーブンに２分間入れて単層をアニールした。
【０１４４】
半導体層１３は、本発明のペンタセン化合物の少なくとも１つの１重量％溶液（トルエン、エチルベンゼン、ブチルベンゼン又はクロロベンゼンに溶解したもの）をソース／ドレイン電極を覆ってドロップキャストすることによって成膜した。溶媒をゆっくりと蒸発させた（基板を時計皿で覆うことにより）。溶媒の大部分が蒸発し、半導体がデバイス表面に明瞭に結晶化した時点で基板を９０℃のオーブンに１２０秒入れることによって残りの溶媒を飛ばした。
【０１４５】
各デバイスを上記に述べた移動度値試験方法ＩＩを用いて評価した。ＴＩＰＳ－ペンタセンに対する一般的なデバイスパラメータは以下のようなものであった。
【０１４６】
－０．００１～０．４５ｃｍ^2／Ｖ－ｓの範囲で変化する線形領域から抽出される電荷キャリア移動度値、
－－２～１１Ｖの範囲で変化する閾値電圧、及び
－１０^3～１０^{6}の範囲で変化するオン／オフ電流比。
【０１４７】
Ａｕ電極上のＤＩＰ－ＩＰＳペンタセンに対する一般的なデバイスパラメータ
－０．０１～０．０９ｃｍ^2／Ｖ－ｓの範囲で変化する線形領域から抽出される電荷キャリア移動度値、
－１２～－２２Ｖの範囲で変化する閾値電圧、及び
－１０^2～１０^{4}の範囲で変化するオン／オフ電流比。
【０１４８】
Ａｇ電極上のＤＩＰ－ＩＰＳペンタセンに対する一般的なデバイスパラメータ
－０．００５～０．０１ｃｍ^2／Ｖ－ｓの範囲で変化する線形領域から抽出される電荷キャリア移動度値、
－１０～－２５Ｖの範囲で変化する閾値電圧、及び
－１０^2～１０^{5}の範囲で変化するオン／オフ電流比。
【０１４９】
実施例７－６，１３－ビス（シクロプロピルジイソプロピルシリルエチニル）ペンタセン（シクロプロピルＤＩＰＳ－ペンタセン）の合成
シクロプロピルジイソプロピルシリルアセチレンの合成
この物質は、臭化アリルマグネシウムを臭化シクロプロピルマグネシウムで単純に置き換え、実施例１でアリルジイソプロピルシリルアセチレンの調製に用いたものと同じ方法を用いて合成した。^{1}Ｈ－ＮＭＲ（２００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ$_3$）δ＝２．３（ｓ，１Ｈ），１．１（ｂｒ－ｍ，１４Ｈ），０．６１（ｍ，２Ｈ），０．４５（ｍ，２Ｈ），－０．４４（ｍ，１Ｈ）。
【０１５０】
６，１３－ビス（シクロプロピルジイソプロピルシリルエチニル）ペンタセン（シクロプロピルＤＩＰＳペンタセン）の合成
この物質は、アリルジイソプロピルシリルアセチレンをシクロプロピルジイソプロピルシリルアセチレンで単純に置き換え、実施例１でアリルＤＩＰＳペンタセンの合成に用いたものと同様の方法を用いて調製した。^{1}Ｈ－ＮＭＲ（２００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ$_3$）δ＝９．２（ｓ，４Ｈ），８．０（ｄｄ，Ｊ＝３．２，５．６Ｈｚ，４Ｈ），７．４（ｄｄ，Ｊ＝３．２，５．６Ｈｚ，４Ｈ），１．４（ｂｒ－ｍ，２８Ｈ），０．８５（ｍ，８Ｈ），－０．２１（ｍ，２Ｈ）。

【０１５１】
実施例８－６，１３－ビス（（１－メチレンプロピル）ジイソプロピルシリルエチニル）ペンタセン（２－ブト－１－エニルＤＩＰＳアセチレン）の合成
（１－メチレンプロピル）ジイソプロピルシリルアセチレンの合成
この物質は、臭化アリルマグネシウムを２－リチオ－１－ブテン（－７８℃のテトラヒドロフラン中で２－ブロモ－１－ブテンをｎ－ＢｕＬｉで処理することによりその場で生成される）で単純に置き換え、アリルジイソプロピルシリルアセチレンの調製（実施例１）に用いたものと同じ方法により合成した。^{1}Ｈ－ＮＭＲ（２００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ$_{3}$）δ＝５．７６（ｑ，Ｊ＝１．２Ｈｚ，１Ｈ），５．５５（ｑｕｉｎｔ，Ｊ＝１．２Ｈｚ，１Ｈ），２．４１（ｓ，１Ｈ），１．０６（ｂｒ．ｓ，１４Ｈ），２．１９（ｑ，ｔ，Ｊ＝９．５，１．２Ｈｚ，２Ｈ），１．１０（ｔ，Ｊ＝９Ｈｚ，３Ｈ）。

【０１５２】
６，１３－ビス（（１－メチレンプロピル）ジイソプロピルシリルエチニル）ペンタセンの合成
（２－ブト－１－エニルＤＩＰＳ－ペンタセン）
この物質は、アリルジイソプロピルシリルアセチレンを（１－メチレンプロピル）ジイソプロピルシリルアセチレンで単純に置き換え、アリルＤＩＰＳ－ペンタセンの合成（実施例１）に用いたものと同様の方法を用いて調製した。^{1}Ｈ－ＮＭＲ（２００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ$_{3}$）δ＝９．３３（ｓ，４Ｈ），７．９８（ｄｄ，Ｊ＝３．４，６．６Ｈｚ，４Ｈ），７．４１（ｄｄ，Ｊ＝３．４，６．６Ｈｚ，４Ｈ），５．９（ｑ，Ｊ＝１Ｈｚ，２Ｈ），５．８３（ｑｕｉｎｔ，Ｊ＝１Ｈｚ，２Ｈ），２．１９（ｑ，ｔ，Ｊ＝８，１．１Ｈｚ，４Ｈ），１．３９（ｂｒ．ｓ，２８Ｈ），１．２４（ｔ，Ｊ＝８Ｈｚ，６Ｈ）。

【０１５３】
実施例９－ディップコーティングを用いた電子デバイスの作製
実施例４と同様の１０００オングストロームの熱酸化物を有する高濃度にドープしたｎ型シリコンウェーハを基板として使用した。５００Ｗの出力設定及び１標準立方ｃｍ（ｓｃｃｍ）／分の酸素流を使用してプラズマクリーニングシステム（イールド・エンジニアリング・システムズ社（Yield Engineering Systems, Inc.）（カリフォルニア州リバーモア）より販売されるモデルＹＥＳ－Ｇ１０００）で基板を３分間処理した。次いで試料を、（ｉ）３ｍｍ／分の引き抜き速度でディップコーティング装置（ニーマ・テクノロジー社（Nima Technology LTD）（英国、コベントリー）より販売されるＮＩＭＡ　Ｄ１Ｌ）を使用して半導体溶液でコーティングし、（ｉｉ）次いで室温で乾燥させた。この試料に約８００～１０００オングストロームの金をシャドーマスクを介して蒸着した。次いで移動度値試験方法Ｉにしたがってトランジスターの特性評価を行った。

【０１５４】
各半導体溶液は、使用に先立って濾過（ポールライフサイエンス社（Pall Life Sciences）Ａｃｒｏｄｉｓｃ（登録商標）ＣＲ２５ｍｍ，０．２μｍＰＴＦＥシリンジ型フィルター）した、ｎ－ブチルベンゼンを溶媒とした１．８～２．０重量％溶液である。半導体溶液を幅約５０ｍｍ、深さ５ｍｍ、高さ３０ｍｍのディップコーティング槽に入れた。約５ｍＬの溶液を使用した。コーティングの後、基板のＳｉＯ$_{2}$表面上に長い結晶が存在し、一般にディップ軸に対して平行に配向する。ソース及びドレイン端子は、結晶が端子間を架橋するように半導体結晶に対して方向付けた。

【０１５５】
本実施例で使用した半導体は、（ｉ）ＴＩＰＳ－ペンタセン、（ｉｉ）６，１３－ビス－［（イソプロペニルジイソプロピルシリル）エチニル］ペンタセン（ＩＰ－ＤＩＰＳ）、（ｉｉｉ）６，１３－ビス［（アリル－ジイソプロピルシリル）エチニル］ペンタセン（アリル－ＤＩＰＳ）、（ｉｖ）６，１３－ビス（（１－メチレンプロピル）ジイソプロピルシリルエチニル）ペンタセン（２－ブト－１－エニルＤＩＰＳ）、及び（ｖ）６，１３－ビス－［（シクロプロピルジイソプロピルシリル）エチニル］ペンタセン（シクロプロピルＤＩＰＳ）である。

【０１５６】
ディップコーティングではしばしば基板は完全に覆われないため、デバイスの有効チャネル幅を測定する必要があった。結晶によって覆われた基板表面の比率を、（ｉ）高倍率（１００×）で基板のデジタル写真を撮影し、次いで（ｉｉ）アドビ社（Adobe）（登録商標）のＰｈｏｔｏｓｈｏｐ（登録商標）写真編集用ソフトウェアのような写真編集用ツールを使用して曝露された基板の領域をＬ、ａ、ｂ色空間内の均一な黒（０，０，０）の色彩として識別及びレンダリングし、次いで（ｉｉｉ）Ｐｈｏｔｏｓｈｏｐ（登録商標）写真編集用ソフトウェアのヒストグラム機能を使用して明度（Ｌ）＜１５の写真の比率を求め、次いで（ｉｖ）３つの写真の結果の平均をとって基板の表面被覆率の値を求めることによって測定した。次いで表面被覆率の値を用いてＴＦＴの有効チャネル幅を計算し、この有効チャネル幅を用いて電荷キャリア移動度の値を計算した。有効チャネル幅の計算には下式を用いた。

【０１５７】
【数２】

$$Weff = \left(\frac{Wdep}{100}\right) * Cov$$

【０１５８】
式中、W_{eff}は有効チャネル幅であり、W_{dep}はソース及びドレイン端子の長さ（成膜時の）であり、C_{ov}は表面被覆率（％）である。例えば、ソース及びドレイン電極の長さが１０００ミクロンであり、表面被覆率が８０％である場合、有効チャネル幅は８００ミクロンとなる。

【０１５９】
本実施例における半導体の電荷キャリア移動度の値を下記表６に示す。これらの値は上記に述べた移動度値試験方法Ｉによって測定したものである。

【０１６０】

【表６】

表６．ＴＩＰＳ－ペンタセン、アリル－ＤＩＰＳ、ＩＰ－ＤＩＰＳ、２－ブトー１－エニルＤＩＰＳ、及びシクロプロピルＤＩＰＳを用いた電子デバイスの電荷キャリア移動度値の測定値の比較

	電荷キャリア移動度値（$cm^2/V-s$）				
	ＴＩＰＳ－ペンタセン	アリル－ＤＩＰＳ	ＩＰ－ＤＩＰＳ	２－ブトー１－エニル ＤＩＰＳ	シクロプロピル ＤＩＰＳ
最小移動度値	０．１２３	０．１４８	０．０９９１	０．１２７	０．１０４
最大移動度値	０．１７６	０．４１７	０．２０１	０．３８７	１．４６
平均移動度値	０．１５５	０．２６５	０．１４７	０．２８６	０．５５９

【０１６１】

実施例１０－６，１３－ビス（シクロプロピルジイソプロピルシリルエチニル）－１－フルオロ－ペンタセンの合成

１－フルオロペンタセンキノンの合成

３－フルオロ－ｏ－キシレン（１．２ｇ，９．７ｍｍｏｌ）を撹拌子を備えた丸底フラスコに加え、３０ｍＬのジクロロメタンに溶解した。Ｎ－ブロモサスクシンイミド（７．

０ｇ，３９ｍｍｏｌ）及び少量のＡＩＢＮ（２，２’－アゾビス（２－メチルプロピオニトリル））を加え、環流冷却器を取付けた。混合物を６時間還流し、ＧＣ－ＭＳ分析を行ったところ、三臭化物が主要成分であることが示された。冷却後、水及びジクロロメタンを加え、有機層を分離して水及び希塩酸で洗い、硫酸マグネシウム上で乾燥し、ジクロロメタンを溶離剤として用いてシリカゲルの薄いパッドに通じて流した。溶媒を除去して３．４ｇの混合生成物を得た。冷却器及び攪拌子を備えた１００ｍＬの丸底フラスコに１２ｍＬのジメチルホルムアミドを加え、次いで０．５４ｇ（２．０７ｍｍｏｌ）の上記で得られた三臭化物及び０．４３ｇ（２．１ｍｍｏｌ）の１，４－アントラキノンを加えた。溶液に窒素を２０分バブリングした後、２．１ｇ（１２ｍｍｏｌ）のヨウ化カリウムを加え、反応液を１１０℃に３日間加熱した。反応液を冷却し、沈殿物を濾過して回収し、水、アセトン、及びジエチルエーテルで順次洗った。得られた固体を風乾して０．２９ｇ（０．８８ｍｍｏｌ，４２％）の１－フルオロペンタセンキノンを淡褐色の固体として得た。

【０１６２】

６，１３－ビス（シクロプロピルジイソプロピルシリルエチニル）－１－フルオロペンタセンの合成

火炎乾燥した１００ｍｌの丸底フラスコ（攪拌子付き）を窒素雰囲気下冷却して氷浴中に入れた。このフラスコに、８ｍＬの無水ＴＨＦ及び１．５ｇ（８．３ｍｍｏｌ）の実施例７で得た（シクロプロピルジイソプロピルシリル）アセチレンを加えた。ｎ－ブチルリチウム（２．６ｍＬ，２．５Ｍヘキサン溶液）を１０分かけて加えた。反応液を１時間攪拌した後、０．９８ｇ（３．０ｍｍｏｌ）の１－フルオロペンタセンキノンを加え、攪拌を一晩継続した。飽和塩化アンモニウムを数滴加え、次いで５ｍＬのメタノールを加え、この溶液を、２．４ｇ（１１ｍｍｏｌ）の塩化第一スズ二水和物及び２ｍＬの１０％塩酸を５０ｍＬのメタノールに加えた溶液に注ぎ、１０分攪拌した。次いで３０ｍＬのメタノール及び３ｍＬの１０％塩酸を加え、攪拌を１５分継続してから２０ｍＬのメタノールを加え、溶液を冷蔵庫に３時間入れた。溶液を濾過して青色の固体を得、これをヘキサンを溶離剤として用いてシリカゲルクロマトグラフィーで精製した。得られた青色固体をアセトンから再結晶化させて０．７７ｇ（１．２ｍｍｏｌ，３９％）の生成物を青色の針状結晶として得た。青色の針状結晶を分析して以下のデータを得た。１Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ３）δ＝９．５（ｓ，１Ｈ），９．２（ｓ，１Ｈ），９．２（ｓ，１Ｈ），９．２（ｓ，１Ｈ），８．０（ｄｄ，Ｊ＝３．２Ｈｚ，６．８Ｈｚ，２Ｈ），７．７（ｄ，Ｊ＝８．８Ｈｚ，１Ｈ），７．４（ｄｄ，Ｊ＝３．２Ｈｚ，６．４Ｈｚ，２Ｈ），７．３（ｍ，１Ｈ），７．０（ｍ，１Ｈ），１．４（ｍ，２８Ｈ），０．８（ｍ，８Ｈ），－０．２（ｍ，２Ｈ）。

【０１６３】

実施例１１－６，１３－ビス（シクロプロピルジイソプロピルシリルエチニル）－２．９（１０）－ジフロオロ－ペンタセンの合成

２，９－ジフルオロペンタセン－６，１３－ジオン及び２，１０－ジフルオロペンタセン－６，１３－ジオンの合成

４－フルオロ－ｏ－キシレン（５．７ｇ，４６ｍｍｏｌ）を攪拌子を備えた丸底フラスコに加え、１５０ｍＬのジクロロメタンに溶解した。Ｎ－ブロモサスクシンイミド（３３．１ｇ，１８６ｍｍｏｌ）及び少量のＡＩＢＮ（２，２’－アゾビス（２－メチルプロピオニトリル））を加え、環流冷却器を取付け、混合物を６時間還流した。ＧＣ－ＭＳ分析を行ったところ、三臭化物：四臭化物の９０：１０混合物であることが示された。冷却後、水及びジクロロメタンを加え、有機層を分離して水及び希塩酸で洗い、硫酸マグネシウム上で乾燥し、ジクロロメタンを用いてシリカゲルの薄いパッドに通じて流した。溶媒を除去して１６．３ｇの混合生成物を得、これをベンゾキノン（１．９ｇ，１８ｍｍｏｌ）とともに１２０ｍＬのジメチルホルムアミドに溶解した。この混合物を窒素ガスでパージし、ヨウ化カリウム（４０ｇ，２４０ｍｍｏｌ）を加えて反応混合物を１１０℃に４日間加熱した。得られた沈殿物を冷却し、アセトンで希釈し、濾過によって単離し、更なるア

セトン及び水で洗い、アセトンを加えて粉砕して１．３ｇ（３．７ｍｍｏｌ，２１％）の生成物を淡褐色固体として得た。

【０１６４】

６，１３－ビス（シクロプロピルジイソプロピルシリルエチニル）－２．９（１０）－ジフルオロペンタセンの合成

（シクロプロピルジイソプロピルシリル）アセチレン（１．６ｇ，８．８ｍｍｏｌ）及び無水ＴＨＦ（７ｍＬ）を、攪拌子を備えた乾燥した１００ｍＬの丸底フラスコに加え、氷浴中で冷却した。ｎ－ブチルリチウム（３．０ｍＬ，２．５Ｍヘキサン溶液）を滴下し、溶液を３０分攪拌した。２種類のキノン（２，９－ジフルオロペンタセン－６，１３－ジオン及び２，１０－ジフルオロペンタセン－６，１３－ジオン）の異性体混合物（１．１ｇ，３．１ｍｍｏｌ）を加え、攪拌を１２時間継続した。飽和塩化アンモニウムを４滴加えることによって反応を停止させた後、メタノール（２０ｍＬ）で希釈した。別の三角フラスコ中で塩化第一スズ二水和物（２．１ｇ，９．３ｍｍｏｌ）をメタノール（２００ｍＬ）及び１０％塩酸（２ｍＬ）に溶解し、冷蔵庫で１時間冷やした。反応停止させた反応混合物を、冷やしたメタノール溶液に攪拌下でゆっくりと流し込み、２０分攪拌した後、冷蔵庫に戻して１時間置いた。得られた固体を濾過によって回収し、風乾し、ヘキサン：ジクロロメタンの９：１混合物に溶かし、薄いシリカパッドを通じて流した。溶媒を除去して光沢のある青色粉末を得、これをアセトンから再結晶化させて青色の針状結晶を得た（０．１ｇ，５％）青色の針状生成物を分析して以下のデータを得た。１Ｈ－ＮＭＲ（２００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ３）δ＝９．２（ｓ，２Ｈ，異性体Ａ，２Ｈ，異性体Ｂ），９．１（ｓ，２Ｈ，異性体Ａ，２Ｈ異性体Ｂ），８．０（ｍ，２Ｈ，異性体Ａ，２Ｈ，異性体Ｂ），７．５（ｍ，２Ｈ，異性体Ａ，２Ｈ，異性体Ｂ），７．２（ｍ，２Ｈ，異性体Ａ，２Ｈ，異性体Ｂ，クロロホルムのシグナルと重なる），１．４（ｍ，２８Ｈ），０．８（ｍ，８Ｈ），－０．２（ｍ，２Ｈ）。

【０１６５】

実施例１２－６，１３－ビス（シクロプロピルジイソプロピルシリルエチニル）－１，８（１１）－ジフロオロ－ペンタセンの合成

１，８－ジフルオロペンタセン－６，１３－ジオン及び１，１１－ジフルオロペンタセン－６，１３－ジオンの合成

３－フルオロ－ｏ－キシレン（５．７ｇ，４６ｍｍｏｌ）を攪拌子を備えた丸底フラスコに加え、１５０ｍＬのジクロロメタンに溶解した。Ｎ－ブロモサスクシンイミド（３３．１ｇ，１８６ｍｍｏｌ）及び少量のＡＩＢＮ（２，２’－アゾビス（３３．１－メチルプロピオニトリル））を加え、環流冷却器を取付けた。混合物を６時間還流してからＧＣ－ＭＳ分析を行ったところ、三臭化付加物が主生成物であることが示された。冷却後、水及びジクロロメタンを加え、有機層を分離して水及び希塩酸で洗い、硫酸マグネシウム上で乾燥し、ジクロロメタンを用いてシリカゲルの薄いパッドに通じて流した。溶媒を除去して１６．１ｇの混合生成物を得た。冷却器及び攪拌子を備えた１００ｍＬの丸底フラスコに１２ｍＬのジメチルホルムアミドを加え、次いで１．１ｇ（約４．１ｍｍｏｌ）の上記で得られた三臭化物及び０．２２ｇ（２．０ｍｍｏｌ）のベンゾキノンを加えた。溶液に窒素を２０分バブリングした後、２．１ｇ（１２ｍｍｏｌ）のヨウ化カリウムを加え、反応液を１１０℃に３日間加熱した。反応液を冷却し、沈殿物を濾過して回収し、水、アセトン、及びジエチルエーテルで順次洗った。得られた固体を風乾して０．１５ｇ（０．４２ｍｍｏｌ，２１％）のジフルオロペンタセンキノンの異性体混合物を淡褐色の固体として得た。

【０１６６】

６，１３－ビス（シクロプロピルジイソプロピルシリルエチニル）－１，８（１１）－ジフルオロペンタセンの合成

この物質は、２，９－ジフルオロペンタセン－６，１３－ジオンと２，１０－ジフルオロペンタセン－６，１３－ジオンとの混合物を、１，８－ジフルオロペンタセン－６，１３－ジオンと１，１１－ジフルオロペンタセン－６，１３－ジオンとの混合物に単純に置

き換え、上記実施例１１で６，１３－ビス（シクロプロピルジイソプロピルシリルエチニル）－２．９（１０）－ジフルオロペンタセンの合成に用いたものと同様の方法を用いて調製した。生成物を分析して以下のデータを得た。１Ｈ－ＮＭＲ（２００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ３）δ＝９．５（ｓ，２Ｈ，異性体Ａ），９．２（ｓ，２Ｈ，異性体Ｂ），７．８（ｓ，１Ｈ，異性体Ａ），７．７（ｓ，１Ｈ，異性体Ｂ），７．３（ｍ，各異性体に対して２Ｈ，異性体Ａ及びＢ），７．０（ｍ，各異性体に対して２Ｈ，異性体Ａ及びＢ），１．３（ｍ，２８Ｈ），０．８（ｍ，８Ｈ），－０．２（ｍ，２Ｈ）。

【０１６７】

実施例１３－６，１３－ビス（シクロプロピルジイソプロピルシリルエチニル）－２，３，９，１０－テトラ－メチルペンタセンの合成

２，３，９，１０－テトラメチルペンタセン－６，１３－ジオンの合成

１．６ｇ（１０ｍｍｏｌ）の４，５－ジメチルフタルアルデヒドを２０ｍＬのエタノールに加えた溶液に、０．５６ｇ（５ｍｍｏｌ）のシクロヘキサン１，４－ジオンを加えた。開始物質が完全に溶解した時点で１５％ＮａＯＨ水溶液を２滴加えたところ、キノンの沈殿が直ちに始まった。この懸濁液を更に２時間攪拌した後、１０倍量のメタノールで希釈し、固体を濾過して回収した。固体のキノンを大量のメタノール次いでエーテルで洗い、一晩風乾した。このキノン（１．５ｇ，８２％）を更に精製することなく用いた。

【０１６８】

６，１３－ビス（シクロプロピルジイソプロピルシリルエチニル）－２，３，９，１０－テトラメチル－ペンタセンの合成

火炎乾燥した１００ｍｌの丸底フラスコ（攪拌子付き）を窒素雰囲気下冷却して氷浴中に入れた。注射器を使用して無水ＴＨＦ（６ｍＬ）を加えた後、１．４ｇ（７．５ｍｍｏｌ）（シクロプロピルジイソプロピルシリル）アセチレンを加えた。ｎ－ブチルリチウム（２，４ｍＬ，２．５Ｍヘキサン溶液）を滴下し、反応液を１時間攪拌してから１．０ｇ（２．７ｍｍｏｌ）の２，３，９，１０－テトラメチルペンタセン－６，１３－ジオンを加えた。１２時間攪拌した後、０．５ｍＬの飽和塩化アンモニウムを加え、次いで１．９ｇ（８．５ｍｍｏｌ）の塩化第一スズ二水和物及び２ｍＬの１０％水性の塩酸を６ｍＬのＭｅＯＨに加えた冷たい溶液を加えた。得られた混合物を４０分攪拌した。次いで混合物を、１００ｍＬのＭｅＯＨに３ｍＬの１０％塩酸を加えた溶液に加え、更に１０分攪拌してから冷蔵庫に入れた。２時間後、緑色の溶液を除去し、０．５ｇの塩化第一スズ二水和物及び１ｍＬの１０％水性の塩酸を加えて室温で１５分攪拌してから冷蔵庫に戻して１．５時間置いた。次いで溶液を濾過し、ＭｅＯＨで洗い、ＤＣＭに溶解し、ＤＣＭを溶離剤として短いシリカプラグに通過させた。得られた緑色の固体をトルエンから再結晶化して０．１２ｇ（０．１７ｍｍｏｌ，６．５％）の生成物を青緑色の針状結晶として得た。青緑色の針状生成物を分析して以下のデータを得た。１Ｈ－ＮＭＲ（２００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ３）δ＝９．０（ｓ，４Ｈ），７．７（ｓ，４Ｈ），２．５（ｓ，１２Ｈ），１．３（ｍ，２８Ｈ），０．８（ｍ，８Ｈ），－０．２（ｍ，２Ｈ）。

【０１６９】

実施例１４－６，１３－ビス（シクロプロピルジイソプロピルシリルエチニル）－２，３：９，１０－ビス（ｃ－ジヒドロフラノ）ペンタセンの合成

２，３：９，１０－ビス（ｃ－ジヒドロフラノ）ペンタセン－６，１３－ジオンの合成

スウェルン条件を用い、４，５－ｃ－ジヒドロフラノ－１，２－ジヒドロキシメチルベンゼンを対応するアルデヒドに９０％の収率で酸化した。得られた４，５－ｃ－ジヒドロフラノ－１，２－ジホルミルベンゼンを、４重アルドール縮合の触媒として１５％水酸化ナトリウム水溶液を用いて、ＴＨＦ中で０．５当量のシクロヘキサン－１，４－ジオンと反応させて所望のキノンを６０～９６％の収率で得た。

【０１７０】

火炎乾燥した１００ｍｌの丸底フラスコ（攪拌子付き）を窒素雰囲気下冷却して氷浴中に入れた。このフラスコに、５ｍＬの無水ＴＨＦ及び０．９０ｇ（５．０ｍｍｏｌ）の（シクロプロピルジイソプロピルシリル）アセチレンを加えた。ｎ－ブチルリチウム（２．

０ｍＬ，２．２Ｍヘキサン溶液）を滴下し、溶液を１時間攪拌した。次いで２，３：９，１０－ビス（ｃ－ジヒドロフラノ）ペンタセン－６，１３－ジオン（０．７８ｇ，２．０ｍｍｏｌ）を加え、反応液を１２時間攪拌した。０．５ｍＬの飽和塩化アンモニウムを加えることによって反応を停止させた後、１．６ｇ（７．０ｍｍｏｌ）の塩化第一スズ二水和物及び２ｍＬの１０％水性の塩酸を５ｍＬのメタノールに加えた冷たい溶液を加えた。得られた混合物を氷浴中で３０分攪拌した。次いで、１ｍＬの１０％ＨＣｌを１５０ｍＬのメタノールに加えた溶液を加えた。溶液を１時間攪拌してから冷蔵庫に入れ、３時間置いた。溶液を濾過することにより生成物を青緑色の固体として得、これをＤＣＭを溶離剤として用いたクロマトグラフィーによって精製し、アセトンから２回再結晶化させて青色の針状結晶を得た（０．１９ｇ，０．２６ｍｍｏｌ，１３％）。青緑色の針状生成物を分析して以下のデータを得た。１Ｈ－ＮＭＲ（２００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ３）δ＝９．１（ｓ，４Ｈ），７．８（ｓ，４Ｈ），５．２（ｓ，８Ｈ），１．４（ｍ，２８Ｈ），０．８（ｍ，８Ｈ），－０．２（ｍ，２Ｈ）。

【０１７１】

実施例１５－６，１３－ビス（アリルジシクロプロピルシリルエチニル）－ペンタセンの合成

（アリルジシクロプロピルシリル）アセチレンの合成

オーブン乾燥した２５０ｍｌの丸底フラスコに（トリメチルシリル）アセチレン（３．２ｇ，３３ｍｍｏｌ）及び無水ＴＨＦ（２４ｍＬ）を加えた。この溶液を０℃に冷却してからｎ－ブチルリチウム（１１．６ｍＬ，２９ｍｍｏｌ，２．５Ｍヘキサン中）を滴下した。溶液を１時間攪拌した後、次の段階を行った。別のオーブン乾燥した２５０ｍＬの丸底フラスコ中、アリルトリクロロシラン（５．１３ｇ，２９．２ｍｍｏｌ）を無水ＴＨＦ（２０ｍＬ）に溶解し、氷浴中で冷却した。この第２の溶液に更なる漏斗を取付け、そこから第１の反応混合物を加えた。第１の反応混合物は３０分かけて第２の液体に滴下した。得られた溶液を一晩攪拌した。

【０１７２】

冷却器を備えた第３のオーブン乾燥した丸底フラスコ（５００ｍＬ）中で、臭化シクロプロピル（９．１ｇ，７５ｍｍｏｌ，４０ｍＬのEt_2O中）の無水ジエチルエーテル溶液を、無水ジエチルエーテル（７ｍＬ）にマグネシウム（１．７ｇ，７０ｍｍｏｌ）を加えた溶液に加え、４時間還流することによって、７０ｍｍｏｌの臭化シクロプロピルマグネシウムを形成した。次いでこの新たに形成されたグリニャール試薬を熱から外し、第１の段階から得られたアリルジクロロ（トリメチルシリルエチニル）シランの粗生成物をこの試薬に加え、一晩環流した。水を加えることによって反応を停止させてから希硫酸を加えて塩を溶解し、ヘキサン中に抽出した（２×５０ｍＬ）。有機層を水（５×２０ｍＬ）及び食塩水で洗い、硫酸マグネシウム上で乾燥、濾過し、真空下で濃縮して淡褐色の液体を得た。ヘキサンを溶離剤としてシリカゲルクロマトグラフィーで更に精製してトリメチルシリルでキャップされた生成物を無色の液体として得た。ＴＨＦ及びＭｅＯＨに１５％の水酸化ナトリウム溶液を加えた溶液中で３０分攪拌することによってトリメチルシリルキャップを除去した。水を加えた後、生成物をヘキサン中に抽出し（２×５０ｍＬ）、水で洗い（３×２０ｍＬ）、硫酸マグネシウム上で乾燥して、濾過し、真空下で濃縮して０．９３ｇ（５．３ｍｍｏｌ，１８％）の無色の液体を得た。無色の液体生成物を分析して以下のデータを得た。１Ｈ－ＮＭＲ（２００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ３）δ＝５．９（ｍ，１Ｈ），４．９（ｍ，２Ｈ），２．３（ｓ，１Ｈ），１．７（ｄｔ，Ｊ＝８．２Ｈｚ，１．１Ｈｚ，２Ｈ），０．６（ｍ，４Ｈ），０．４（ｍ，４Ｈ），－０．４（ｍ，２Ｈ）。

【０１７３】

６，１３－ビス（アリルジシクロプロピルシリルエチニル）－ペンタセンの合成

オーブン乾燥した１００ｍＬの丸底フラスコ中、（アリルジシクロプロピルシリル）アセチレン（１．５ｇ，８．８ｍｍｏｌ）を９ｍＬの無水ＴＨＦに溶解し、塩化エチルマグネシウム（３．５ｍＬ，７ｍｍｏｌ，２Ｍジエチルエーテル溶液）を滴下した。この溶液を６０℃に１時間加熱し、熱から外した。ペンタセンキノン（０．９４ｇ，３．０ｍｍｏ

ｌ）を加えた後、再び６０℃に加熱して１２時間加熱を継続した。この間に反応液は固化した。２ｍＬの飽和塩化アンモニウム溶液を加えることによって反応を停止させると固体は溶解し、これをメタノール（５０ｍＬ）で希釈した。三角フラスコ中、塩化第一スズ二水和物（２．５ｇ，１２ｍｍｏｌ）をメタノール（２００ｍＬ）に溶解し、１０％塩酸溶液（２ｍＬ）を加え、溶液を１時間冷却した。次いで反応停止させたジオールを塩化第一スズ溶液にゆっくりと流し込み、３０分撹拌してから１時間冷却した。固体を濾過し、メタノールで洗い、最小量のジクロロメタンに再溶解してヘキサンで希釈し（ヘキサン：ジクロロメタン＝約９：１）、ヘキサン：ジクロロメタンの９：１混合物を溶離剤として用いてシリカゲルパッドを通じて流した。溶媒を除去して７５０ｍｇの粗生成物を青色の固体として得、これを約１２５ｍＬのアセトンから再結晶化して０．５８ｇ（０．９２ｍｍｏｌ，キノンからの収率３０％）の青色針状結晶を得た。青色の針状生成物を分析して以下のデータを得た。１Ｈ－ＮＭＲ（２００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ３）δ＝９．２（ｓ，４Ｈ），８．０（ｄｄ，Ｊ＝３．３Ｈｚ，４Ｈ），７．４（ｄｄ，Ｊ＝３．３Ｈｚ，６．６Ｈｚ，４Ｈ），６．２（ｍ，２Ｈ），５．２（ｍ，４Ｈ），２．０（ｄｔ，Ｊ＝８．２Ｈｚ，１．１Ｈｚ，４Ｈ），０．８３（ｍ，１６Ｈ），－０．０２５（ｍ，２Ｈ）。

【０１７４】

実施例１６－６，１３－ビス（（２－メチル－１，３－ジチアン）ジイソプロピルシリルエチニル）－ペンタセンの合成

ジイソプロピル（トリメチルシリルエチニル）シランの合成

火炎乾燥した２５０ｍｌの丸底フラスコを窒素雰囲気下冷却して氷浴中に入れた。このフラスコに３０ｍＬのペンタン及び３．６ｇ（３６ｍｍｏｌ）トリメチルシリルアセチレンを加えた。ｎ－ブチルリチウム（１３．２，２．５Ｍトルエン溶液）を１２分かけて加え、反応液を１時間、０℃で撹拌した。次いでジイソプロピルクロロシラン（５．１ｇ，３４ｍｍｏｌ）を加え、反応液を一晩撹拌した。溶液をペンタンで抽出し（２×４０ｍＬ）、有機層を水で洗い、硫酸マグネシウム上で乾燥し、濾過してから回転蒸発により注意深く濃縮した（生成物は揮発性であった）。ペンタンを溶離剤としたシリカクロマトグラフィーにより、６．９ｇ（３３ｍｍｏｌ，９９％）の所望の生成物を透明な油状物として得た。

【０１７５】

ジイソプロピル（トリメチルシリルエチニル）シリルブロミドの合成

撹拌子を備えた丸底フラスコ中でジイソプロピル（トリメチルシリルエチニル）シラン（６．９ｇ，３３ｍｍｏｌ）をジクロロエタン（２０ｍＬ）に溶解し、氷浴中に入れた。Ｎ－ブロモスクシンイミド（３６ｍｍｏｌ，６．５ｇ）を３０分かけてスクープですくって加え、更に１５分又は溶液が明るいオレンジ色に変わり始めるまで撹拌を続けた。回転蒸発により溶媒を除去し、得られた固体にペンタンを加え、残った固体スクシンイミド残渣を濾過によって除去した。このペンタン溶液を再び蒸発させ、このプロセスを繰り返し、ペンタンを除去して８．６ｇ（２９ｍｍｏｌ，８９％）の生成物を淡褐色の油状物として得た。

【０１７６】

（（２－メチル－１，３－ジチアン）ジイソプロピルシリル）アセチレンの合成

撹拌子を備えた２５０ｍｌの丸底フラスコを火炎乾燥し、窒素雰囲気下で冷却して氷浴中に入れた。このフラスコに２０ｍＬのヘプタン、１０ｍＬの無水ジエチルエーテル、及び５．０ｇ（３７ｍｍｏｌ）の２－メチル－１，３－ジチアンを注射器で加えた。ｎ－ブチルリチウム（１４．９ｍＬ，２．５Ｍヘキサン中）を３０分かけて注射器で加えた。この溶液を０℃で１．５時間撹拌した後、室温で水浴中に入れ、更に１．５時間撹拌してから再び氷浴中に戻した。次いで１０ｍＬのヘプタンに溶解したジイソプロピル（トリメチルシリルエチニル）シリルブロミド（１５．１ｇ，５１．０ｍｍｏｌ）を注射器で６分かけて加え、反応液を一晩撹拌した。反応混合物を飽和塩化アンモニウム溶液に注ぎ、ヘキサン中に抽出し（２×５０ｍＬ）、水及び食塩水で洗った。有機層を硫酸マグネシウムで乾燥し、濾過してから回転蒸発下で濃縮した。粗生成物をヘキサン：ジクロロメタンの２

：１溶液を溶離剤として用いてクロマトグラフィーで精製し、３．６ｇ（１１ｍｍｏｌ，２９％）のトリメチルシリルでキャップされたアセチレンを透明な油状物として得た。このアセチレンを２４ｍＬのメタノール：ＴＨＦの１：１溶液に溶かし、次いで１５％水酸化ナトリウム水溶液を３滴加えてから、反応液を室温で３０分攪拌した。ヘキサン及び水を加え、更に３０分攪拌した。得られた溶液をヘキサン中に抽出し（２×３０ｍＬ）、有機層を合わせ、水で洗い、硫酸マグネシウム上で乾燥した。溶媒を蒸発させた後、粗生成物をヘキサン：ジクロロメタンの２：１混合物を溶離剤として用いてクロマトグラフィーで精製し、２．２ｇ（８．０ｍｍｏｌ，開始物質である２－メチル－１，３－ジチアンからの全体の収率２２％）の生成物を透明な油状物として得た。透明油状生成物を分析して以下のデータを得た。１Ｈ－ＮＭＲ（２００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ３）δ＝３．３（ｍ，２Ｈ），２．５（ｍ，２Ｈ），２．５（ｓ，１Ｈ），２．０（ｍ，３Ｈ），１．６（ｍ，２Ｈ），１．４（ｍ，１４Ｈ）。

【０１７７】

６，１３－ビス（（２－メチル－１，３－ジチアン）ジイソプロピルシリルエチニル）ペンタセンの合成

オーブン乾燥した１００ｍＬの丸底フラスコ中、（（２－メチル－１，３－ジチアン）ジイソプロピルシリル）アセチレン（１．５ｇ，５．６ｍｍｏｌ）を無水ＴＨＦ（８ｍＬ）に溶解して氷浴中で冷却した。ｎ－ブチルリチウム（１．３４ｍＬ，２．５Ｍヘキサン溶液）を滴下し、溶液を３０分攪拌した後、ペンタセンキノン（０．４４ｇ，１．４ｍｍｏｌ）を加えて攪拌を１２時間継続した。飽和塩化アンモニウム溶液を３滴加えることによって反応を停止させた後、塩化第一スズ二水和物（１．３ｇ，６．２ｍｍｏｌ）を２ｍＬの塩酸に加えた溶液を加え、反応液を１０分攪拌した。ジクロロメタン（２０ｍＬ）及び水（２５ｍＬ）を加え、溶液の全体を更なるジクロロメタンを用いてＣｅｌｉｔｅ（商標）濾過材を通じて流した。有機層を分離して硫酸マグネシウム上で乾燥し、濾過してから回転蒸発下で濃縮した。得られた油状物をジクロロメタン：ヘキサンの１：１混合物に溶かし、シリカゲルの媒質パッド上に流し、青色の生成物を同じ溶媒混合物を用いて溶出した。溶媒を除去すると粘稠な青色油状物が得られ、これにペンタンを加えると青色の固体が得られた。明るい青色の溶液からこの固体を回収し、トルエンから再結晶化して０．１１ｇ（０．１３ｍｍｏｌ，９％）の生成物を青色の板状物として得た。青色の生成物を分析して以下のデータを得た。１Ｈ－ＮＭＲ（２００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ３）δ＝９．４（ｓ，４Ｈ），７．９（ｄｄ，Ｊ＝３．２Ｈｚ，６．６Ｈｚ，４Ｈ），７．４（ｄｄ，Ｊ＝３．２Ｈｚ，６．６Ｈｚ，４Ｈ），３．２（ｍ，４Ｈ），２．７（ｍ，４Ｈ），２．３（ｓ．６Ｈ），２．１（識別不能なマルチプレット），１．７（ｍ，２Ｈ），１．５（ｍ，２８Ｈ）。

【０１７８】

参考例１７－６，１３－ビス－（（３－ヘプタフルオロイソプロポキシ）プロピルジイソプロピルシリル－エチニル）ペンタセンの合成

（（３－ヘプタフルオロイソプロポキシ）プロピルジイソプロピルシリル）アセチレンの合成

乾燥した２５０ｍＬの丸底フラスコ中で、（３－ヘプタフルオロイソプロポキシ）プロピル－トリクロロシラン（４．８７ｇ，１３．５ｍｍｏｌ）を無水 ＴＨＦ（１５ｍＬ）に溶解した。この溶液を氷浴中で冷却し、イソプロピルリチウム（４１ｍＬ，２８ｍｍｏｌ，０．７Ｍペンタン中）を１時間かけて滴下して から１２時間かけて室温にまで温めた。臭化エチニルマグネシウム（３５ｍＬ，１７ｍｍｏｌ，０．５ＭＴＨＦ溶液）を加え、溶液を６０℃に１２時間加熱し た。水をゆっくり加えることによって反応を停止させた後、希硫酸を加えてマグネシウム塩を溶解した。混合物をヘキサン中に抽出し（２×５０ｍＬ）、水で洗 い（５×１０ｍＬ）、硫酸マグネシウム上で乾燥し、濾過してから濃縮した。生成物をヘキサンを溶離剤として用いたシリカクロマトグラフィー（ヘキサン中の Ｒｆ値＝約０．６）で精製して２．４ｇ（６．５ｍｍｏｌ，４８％）の無色の液体を得た。無色の液体生成物を分析して以下のデータを得た。 １Ｈ－ＮＭＲ（２００ＭＨｚ

，ＣＤＣｌ３）δ＝４．０（ｔ，Ｊ＝６．２Ｈｚ，２Ｈ），２．４（ｓ，１Ｈ），１．８（ｍ，２Ｈ），１．０（ｍ，１４Ｈ），０．６（ｍ，２Ｈ）。

【０１７９】

６，１３－ビス－（（３－ヘプタフルオロイソプロポキシ）プロピルジイソプロピルシリルエチニル）－ペンタセンの合成

オーブン乾燥した１００ｍＬの丸底フラスコ中、（（３－ヘプタフルオロイソプロポキシ）－プロピルジイソプロピルシリル）アセチレン（２．０ｇ，５．４ｍｍｏｌ）を無水ＴＨＦ（５ｍＬ）に溶解し、氷浴中で冷却した。ｎ－ブチルリチウム（１．８ｍＬ，４．５ｍｍｏｌ，２．５Ｍヘキサン溶液）を滴下し、溶液を浴中で３０分攪拌した。ペンタセンキノン（０．５７ｇ，１．８ｍｍｏｌ）を加え、反応液を１２時間攪拌した。別の三角フラスコ中で、塩化第一スズ二水和物（１．４ｇ，６．４ｍｍｏｌ）をメタノール（１００ｍＬ）に溶解し、１ｍＬの１０％塩酸を加えた後、この溶液を１時間冷蔵した。反応混合物に０．５ｍＬの飽和塩化アンモニウム溶液を加えて反応を停止させた後、メタノール（２０ｍＬ）で希釈した。反応を停止させた反応混合物を攪拌下、塩化第一スズ混合物中にゆっくりと流し込み、更なるメタノールで洗ったものも加えた。攪拌を３０分継続した後、混合物全体を３時間冷蔵した。固体を濾去し、周囲雰囲気中で乾燥し、溶離剤としてヘキサン：ジクロロメタンの９：１混合物を用いたシリカゲルクロマトグラフィーによって精製して０．６８ｇの青色固体を得た。アセトン（約３０ｍＬ）から再結晶化することにより、０．６ｇ（０．６ｍｍｏｌ，３４％）の生成物を赤紫色の板状物として得た。赤紫色の生成物を分析して以下のデータを得た。１Ｈ－ＮＭＲ（２００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ３）δ＝９．２（ｓ，４Ｈ），７．９（ｄｄ，Ｊ＝３．４Ｈｚ，７．０Ｈｚ，４Ｈ），７．４（ｄｄ，Ｊ＝３．４Ｈｚ，７．０Ｈｚ，４Ｈ），４．１（ｔ，Ｊ＝６．０Ｈｚ，４Ｈ），２．１（ｍ，４Ｈ），１．３（ｍ，２８Ｈ），１．０（ｍ，４Ｈ）。

【０１８０】

実施例１８－ディップコーティングを用いた電子デバイスの作製

実施例４と同様の１０００オングストロームの熱酸化物を有する高濃度にドープしたｎ型シリコンウェーハを基板として使用した。５００Ｗの出力設定及び１標準立方ｃｍ／分（ｓｃｃｍ）の酸素流を使用してプラズマクリーニングシステム（イールド・エンジニアリング・システムズ社（Yield Engineering Systems, Inc.）（カリフォルニア州リバーモア）より販売されるモデルＹＥＳ－Ｇ１０００）で基板を３分間処理した。次いで試料を、（ｉ）３ｍｍ／分の引き抜き速度でディップコーティング装置（ニーマ・テクノロジー社（Nima Technology LTD）（英国、コベントリー）より販売されるＮＩＭＡ　Ｄ１Ｌ）を使用して半導体溶液でコーティングし、（ｉｉ）次いで室温で乾燥させた。この試料に約８００～１０００オングストロームの金をシャドーマスクを介して蒸着した。次いで移動度値試験方法Ｉにしたがってトランジスターの特性評価を行った。

【０１８１】

各半導体コーティング溶液は、２．０重量％の半導体及び１重量％のポリスチレン（ＰＳ）を、９１重量％のｎ－ブチルベンゼン及び９重量％のデカンを含む溶媒混合物に加えたものである。半導体溶液は使用に先立って予め濾過した（ポールライフサイエンス社（Pall Life Sciences）Ａｃｒｏｄｉｓｃ（登録商標）ＣＲ　２５ｍｍ，０．２μｍＰＴＦＥシリンジ型フィルター）。半導体溶液を幅約５０ｍｍ、深さ５ｍｍ、高さ３０ｍｍのディップコーティング槽に入れた。約５ｍＬの溶液を使用した。コーティングの後、基板のSiO_2表面上に長い結晶が存在し、一般にディップ軸に対して平行に配向する。ソース及びドレイン端子は、結晶が端子間を架橋するように半導体結晶に対して方向付けた。

【０１８２】

本実施例で使用した半導体は、（ｉ）６，１３－ビス［（アリルジシクロプロピルシリル）－エチニル］ペンタセン（Ａ－ＤＣＰＳ）、及び（ｉｉ）６，１３－ビス－［（シクロプロピルジイソプロピルシリル）エチニル］－ペンタセン（シクロプロピルＤＩＰＳ）である。

【０１８３】

移動度を計算する目的で、有効チャネル幅を実施例９と同様にして測定した。本実施例における半導体の電荷キャリア移動度の値を下記表７に示す。これらの値は上記に述べた移動度値試験方法Ｉによって測定したものである。

【０１８４】

【表７】

表７．Ａ－ＤＣＰＳ及びシクロプロピルＤＩＰＳを用いた電子デバイスの電荷キャリア移動度値の測定値の比較

	電荷キャリア移動度値（$cm^2/V-s$）	
	Ａ－ＤＣＰＳ	シクロプロピルＤＩＰＳ
最小移動度値	０．７８	０．１９２
最大移動度値	１．０５	４．４７
平均移動度値	０．９２	１．５４

【０１８５】

実施例１９－材料の熱分析

ＴＩＰＳペンタセンは約１２４℃で結晶転移を示し、約２６６℃で溶融する際に不可逆反応を示すことが知られており、この不可逆反応は１つの分子の側基のアセチレンと、最低でも二量体を形成する別の分子の芳香族構造との間のディールス・アルダー反応であると考えられている。これらの転移及び反応は、示差走査熱量測定法（ＤＳＣ）を用いて容易に観察することができる。ＴＩＰＳペンタセンでは温度を一定の割合で上昇させた場合、約１２４℃で吸熱（固体－固体結晶転移）、及び約２６６℃で吸熱（固体－液体転移）の開始が明らかに認められ、後者は発熱（ディールス・アルダー反応）によって乗り越えられる。１２４℃での吸熱の開始後に温度上昇を停止させて温度を一定の割合で低下させると、固体－固体転移は発熱反応が生じることによって可逆的となることが示される。２６６℃よりも高い温度に加熱することによって二量体が形成される場合、温度を一定の割合で低下させても最早こうした転移が起こる徴候は認められない。

【０１８６】

特定の用途では、こうした転移が生じないか、これらの半導体材料を用いて製造されたデバイスの予測される動作温度範囲よりも遥かに高い温度で生じるような材料を使用することが有利である場合がある。

【０１８７】

６，１３－ビス（イソプロペニルジイソプロピルシリルエチニル）ペンタセン、６，１３－ビス（アリルジシクロプロピルシリルエチニル）－ペンタセン、及び６，１３－ビス（シクロプロピル－ジイソプロピルシリルエチニル）－２，３，９，１０－テトラメチル－ペンタセンのＤＳＣによる特性評価により、これらの化合物は低温では固体－固体転移を起こさないことが示された。ＤＳＣによって調べたこれらの化合物の熱転移を下記表８に示す。

【０１８８】

【表８】

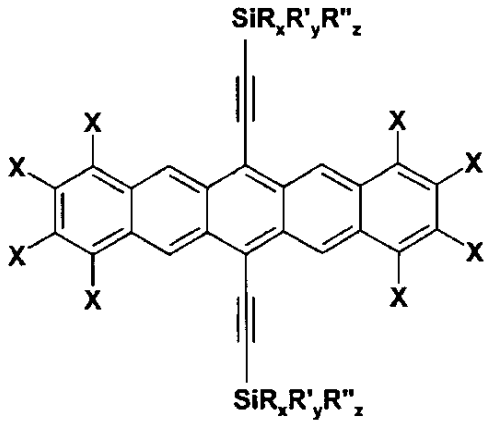
表８．特定の有機半導体の熱転移の比較

化合物	実施例番号	化合物名	固体－固体	固体－液体	不可逆発熱
			℃	℃	℃
		6，13－ビス（トリイソプロピルシリルエチニル）ペンタセン	１２４．０	２６６．０	溶融時
II	2	6，13－ビス（イソプロペニルジイソプロピルシリルエチニル）ペンタセン		２３７．０	溶融時
LV	15	6，13－ビス（アリルジシクロプロピルシリルエチニル）－ペンタセン		１９９．１	溶融時
LXIII	13	6，13－ビス（シクロプロピルジイソプロピルシリルエチニル）－2，3，9，10－テトラメチル－ペンタセン		３７３．０	溶融時

【０１８９】

以上、本明細書をその特定の実施形態について詳述してきたが、前述の事項を理解することにより、当業者がこれらの実施形態に対する変更、その変形、及びそれらの均等物を容易に想像できることは明らかである。したがって、本発明の範囲は、添付された請求項の範囲及びその均等物として評価されるべきである。本発明の実施態様の一部を以下の項目１－２０に列記する。

［１］
次の化学構造を有するペンタセン化合物。
【化１】



（式中、
各Ｒは独立して、（ｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキル基、（ｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキル基、又は（ｉｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキルアルキレン基を含み、
各Ｒ’は独立して、（ｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルケニル基、（ｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキル基、又は（ｉｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキルアルキレン基を含み、
Ｒ”は、（ｉ）水素、（ｉｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキニル基、（ｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキル基、（ｉｖ）置換又は非置換のシクロアルキルアルキレン基、（ｖ）置換アリール基、（ｖｉ）置換又は非置換のアリールアルキレン基、（ｖｉｉ）アセチル基、又は（ｖｉｉｉ）環内にＯ、Ｎ、Ｓ、及びＳｅの少なくとも１つを有する置換又は非置換の複素環を含み、
ｘ＝１又は２であり、
ｙ＝１又は２であり、
ｚ＝０又は１であり、
（ｘ＋ｙ＋ｚ）＝３であり、
各Ｘは独立して、（ｉ）水素、（ｉｉ）ハロゲン、（ｉｉｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキル基、（ｉｖ）置換又は非置換のアリール基、（ｖ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルケニル基、（ｖｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキニル基、（ｖｉｉ）置換又は非置換の複素環基、（ｖｉｉｉ）シアノ基、（ｉｖ）エーテル基、（ｘ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルコキシ基、（ｘｉ）ニトロ基を含むか、あるいは（ｘｉｉ）任意の２個の隣り合うＸ基同士が（ａ）置換又は非置換の炭素環、又は（ｂ）置換又は非置換の複素環を形成し、
ｚ＝０であり、かつＲ及びＲ’がともに（ｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ１～Ｃ８アルキル基、及び（ｉｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ２～Ｃ８アルケニル基の組み合わせを含む場合、前記ペンタセン化合物は、トランジスタ製造及び電荷キャリア移動度値試験方法によって測定される最大電荷キャリア移動度の値が２．０ｃｍ^2／Ｖ－ｓ以上であるような半導体層の形成を可能とする。）
［２］
Ｒ”が、（ｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキニル基、（ｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキル基、（ｉｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキルアルキレン基、（ｉｖ）置換アリール基、（ｖ）置換又は非置換のアリールアルキレン基、（ｖｉ）アセチ

ル基、又は（ｖｉｉ）環内にＯ、Ｎ、Ｓ、及びＳｅの少なくとも１つを有する置換又は非置換の複素環を含み、かつ、ｘ＝ｙ＝ｚ＝１である、項目１に記載のペンタセン化合物。

［３］

Ｒ”が、（ｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキニル基、（ｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキル基、（ｉｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキルアルキレン基、（ｉｖ）置換アリール基、（ｖ）置換又は非置換のアリールアルキレン基、（ｖｉ）アセチル基、又は（ｖｉｉ）環内に酸素、窒素、硫黄、及びセレンの少なくとも１つを有する置換又は非置換の複素環を含み、（ｘ＋ｙ＋ｚ）＝３であり、かつｘ又はｙ＝２であってｚ＝１である、項目１に記載のペンタセン化合物。

［４］

（ａ）各Ｒが独立して分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキル基を含み、（ｂ）各Ｒ’が独立して分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルケニル基を含む、項目１～３のいずれか一項に記載のペンタセン化合物。

［５］

（ａ）各Ｒが独立して分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ１～Ｃ８アルキル基を含み、（ｂ）各Ｒ’が独立して分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ２～Ｃ８アルケニル基を含み、（ｃ）Ｒ”が（ｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ２～Ｃ８アルキニル基、（ｉｉ）置換アリール基、（ｉｉｉ）置換又は非置換のアリールアルキレン基、（ｉｖ）アセチル基、又は（ｖ）環内にＯ、Ｎ、Ｓ、及びＳｅの少なくとも１つを有する置換又は非置換の複素環を含む、項目１～４のいずれか一項に記載のペンタセン化合物。

［６］

（ａ）各Ｒが独立して分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ１～Ｃ８アルキル基を含み、（ｂ）各Ｒ’が独立して分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ２～Ｃ８アルケニル基を含み、（ｂ）Ｒ”が置換又は非置換のアリール基を含む、項目１～５のいずれか一項に記載のペンタセン化合物。

［７］

Ｒ又はＲ’の少なくとも１つが、（ｉ）置換又は非置換のシクロアルキル基、又は（ｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキルアルキレン基を含む、項目１～３のいずれか一項に記載のペンタセン化合物。

［８］

Ｒ、Ｒ’及びＲ”が、（ｉ）１以上の分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキル基、（ｉｉ）１つ以上の分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルケニル基、（ｉｉｉ）１つ以上の置換又は非置換のシクロアルキル基、及び（ｉｖ）１つ以上の置換又は非置換のシクロアルキルアルキレン基の組み合わせを含む、項目１～３又は７のいずれか一項に記載のペンタセン化合物。

［９］

Ｒ、Ｒ’及びＲ”が、（ｉ）１つ以上の分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルケニル基、及び（ｉｉｉ）１つ以上の置換又は非置換のシクロアルキル基の組み合わせを含む、項目１～３又は７～８のいずれか一項に記載のペンタセン化合物。

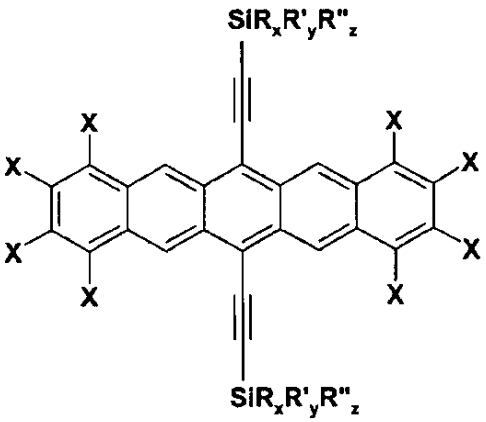
［１０］

（ａ）ｚ＝０であり、（ｂ）各Ｒが独立して（ｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ１～Ｃ８アルキル基、（ｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキル基、又は（ｉｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキルアルキレン基を含み、（ｃ）各Ｒ’が独立して（ｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のＣ２～Ｃ８アルケニル基、（ｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキル基、又は（ｉｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキルアルキレン基を含む、項目１に記載のペンタセン化合物。

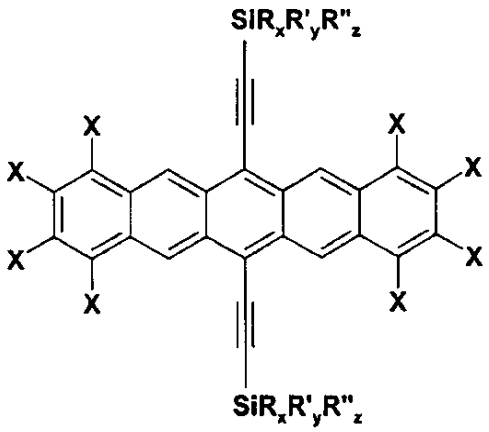
［１１］

（ａ）ｚ＝０であり、（ｂ）各Ｒが独立してｎ個の炭素原子を有する分枝した非置換のアルキル基を含み、（ｃ）各Ｒ’が独立してｎ個の炭素原子を有する分枝した非置換のアルケニル基を含み、（ｄ）ｎ＝３又は４である、項目１０に記載のペンタセン化合物。

［１２］
Ｒ、Ｒ’、Ｒ”の１つ以上が１つ以上の置換基で置換され、前記１つ以上の置換基が、ハロゲン、水酸基、アルキル基、シアノ基、アミノ基、カルボニル基、アルコキシ基、チオアルコキシ基、ニトロ基、カルボン酸基、カルボン酸エステル基、アルケニル基、アルキニル基、アリール基、ヘテロアリール基、シリル基、又はこれらの組み合わせから選択される、項目１～１１のいずれか一項に記載のペンタセン化合物。
［１３］
少なくとも１つのＸが（ｉ）ハロゲン、（ｉｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキル基、（ｉｉｉ）置換又は非置換のアリール基、（ｉｖ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルケニル基、（ｖ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキニル基、（ｖｉ）置換又は非置換の複素環基、（ｖｉｉｉ）シアノ基、（ｉｖ）エーテル基、（ｘ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルコキシ基、又は（ｘｉ）ニトロ基を含む、項目１～１２のいずれか一項に記載のペンタセン化合物。
［１４］
少なくとも１つのＸが（ｉ）フッ素原子、（ｉｉ）フルオロアルキル基、（ｉｉｉ）アリール基、（ｉｖ）置換又は非置換の複素環基、（ｖ）シアノ基、又は（ｖｉ）ニトロ基を含む、項目１～１３のいずれか一項に記載のペンタセン化合物。
［１５］
少なくとも２個の隣り合うＸ基同士が、（ａ）置換又は非置換の炭素環、又は（ｂ）置換又は非置換の複素環を形成する、項目１～１２のいずれか一項に記載のペンタセン化合物。
［１６］
溶媒を更に含む、項目１～１５のいずれか一項に記載のペンタセン化合物を含む組成物。
［１７］
ポリマーを更に含む、項目１６に記載の組成物。
［１８］
前記ポリマーが、ポリスチレン、ポリ（α－メチルスチレン）、ポリ（メチルメタクリレート）、ポリ（４－シアノメチルスチレン）、ポリ（４－ビニルフェノール）、及びこれらの組み合わせからなる群から選択される、項目１７に記載の組成物。
［１９］
少なくとも１つのコーティング可能な表面と、前記少なくとも１つのコーティング可能な表面上にコーティングされた層とを有する基板であって、前記コーティング層が、
次の化学構造を有するペンタセン化合物を含む、基板。
【化２】



（式中、
各Ｒは独立して、（ｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキル基、（ｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキル基、又は（ｉｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキルアルキレン基を含み、
各Ｒ’は独立して、（ｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルケニル基、（ｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキル基、又は（ｉｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキルアルキレン基を含み、
Ｒ”は、（ｉ）水素、（ｉｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキニル基、（ｉｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキル基、（ｉｖ）置換又は非置換のシクロアルキルアルキレン基、（ｖ）置換アリール基、（ｖｉ）置換又は非置換のアリールアルキレン基、（ｖｉｉ）アセチル基、又は（ｖｉｉｉ）環内にＯ、Ｎ、Ｓ、及びＳｅの少なくとも１つを有する置換又は非置換の複素環を含み、
ｘ＝１又は２であり、
ｙ＝１又は２であり、
ｚ＝０又は１であり、
（ｘ＋ｙ＋ｚ）＝３であり、
各Ｘは独立して、（ｉ）水素、（ｉｉ）ハロゲン、（ｉｉｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキル基、（ｉｖ）置換又は非置換のアリール基、（ｖ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルケニル基、（ｖｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキニル基、（ｖｉｉ）置換又は非置換の複素環基、（ｖｉｉｉ）シアノ基、（ｉｖ）エーテル基、（ｘ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルコキシ基、（ｘｉ）ニトロ基を含むか、あるいは（ｘｉｉ）任意の２個の隣り合うＸ基同士が（ａ）置換又は非置換の炭素環、又は（ｂ）置換又は非置換の複素環を形成し、
ｚ＝０であり、かつＲ及びＲ’がともに（ｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキル基、及び（ｉｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルケニル基の組み合わせを含む場合、前記ペンタセン化合物は、トランジスタ製造及び電荷キャリア移動度値試験方法によって測定される最大電荷キャリア移動度の値が２．０ｃｍ^2／Ｖ－ｓ以上であるような半導体層の形成を可能とする。）
［２０］
コーティング層を有する電子デバイスであって、前記コーティング層が次の化学構造を有するペンタセン化合物を含む、電子デバイス。
【化３】



（式中、
各Ｒは独立して、（ｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキル基、（ｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキル基、又は（ｉｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキルアルキ

レン基を含み、
各Ｒ’は独立して、（ｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルケニル基、（ｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキル基、又は（ｉｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキルアルキレン基を含み、
Ｒ”は、（ｉ）水素、（ｉｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキニル基、（ｉｉ）置換又は非置換のシクロアルキル基、（ｉｖ）置換又は非置換のシクロアルキルアルキレン基、（ｖ）置換アリール基、（ｖｉ）置換又は非置換のアリールアルキレン基、（ｖｉｉ）アセチル基、又は（ｖｉｉｉ）環内にＯ、Ｎ、Ｓ、及びＳｅの少なくとも１つを有する置換又は非置換の複素環を含み、
ｘ＝１又は２であり、
ｙ＝１又は２であり、
ｚ＝０又は１であり、
（ｘ＋ｙ＋ｚ）＝３であり、
各Ｘは独立して、（ｉ）水素、（ｉｉ）ハロゲン、（ｉｉｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキル基、（ｉｖ）置換又は非置換のアリール基、（ｖ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルケニル基、（ｖｉ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルキニル基、（ｖｉｉ）置換又は非置換の複素環基、（ｖｉｉｉ）シアノ基、（ｉｖ）エーテル基、（ｘ）分枝又は非分枝、置換又は非置換のアルコキシ基、（ｘｉ）ニトロ基を含むか、あるいは（ｘｉｉ）任意の２個の隣り合うＸ基同士が（ａ）置換又は非置換の炭素環、又は（ｂ）置換又は非置換の複素環を形成し、
前記電子デバイスは２．０ｃｍ^2／Ｖ－ｓ以上の電荷キャリア移動度値を有する。）

【図１】

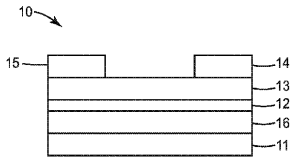


FIG. 1

【図２】

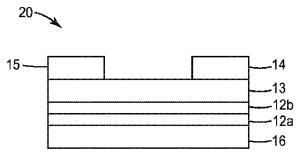


FIG. 2

【図３】

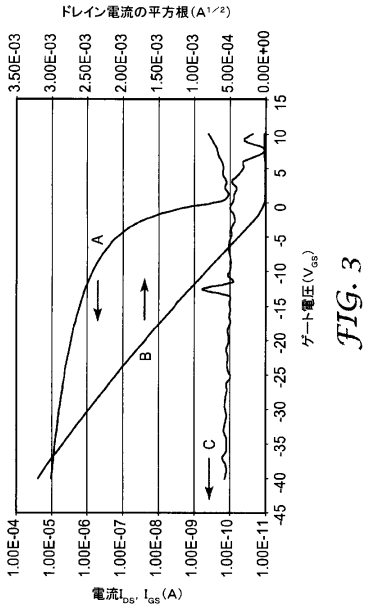


FIG. 3

【図４】

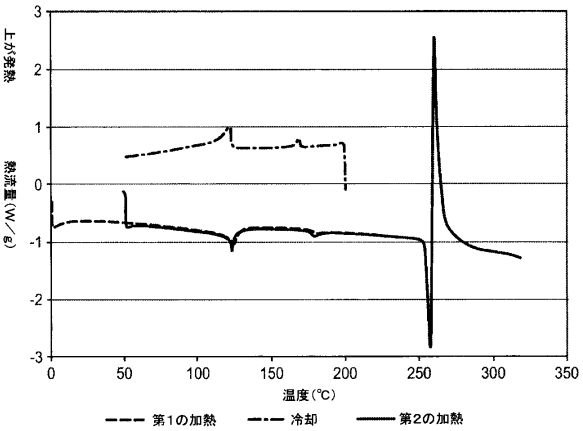


FIG. 4

【図５】

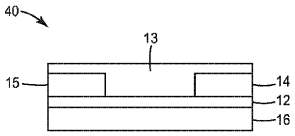


FIG. 5

フロントページの続き

(51)Int.Cl.		FI
C08L 101/00	***(2006.01)***	C08K 5/54
C08L 25/00	***(2006.01)***	C08L 101/00
C08L 33/12	***(2006.01)***	C08L 25/00
C09D 11/00	*(2014.01)*	C08L 33/12
		C09D 11/00

(74)代理人 100077517
弁理士 石田 敬
(74)代理人 100087413
弁理士 古賀 哲次
(74)代理人 100128495
弁理士 出野 知
(74)代理人 100146466
弁理士 高橋 正俊
(74)代理人 100186370
弁理士 小久保 菜里
(72)発明者 アンソニー, ジョン イー.
アメリカ合衆国, ケンタッキー ４０５０９, レキシントン, ビレッジ グリーン アベニュ ９４９
(72)発明者 カルドウェル, グレッグ エー.
アメリカ合衆国, ミネソタ ５５１３３－３４２７, セント ポール, ポスト オフィス ボックス ３３４２７, スリーエム センター
(72)発明者 クロウ, ロバート エス.
アメリカ合衆国, ミネソタ ５５１３３－３４２７, セント ポール, ポスト オフィス ボックス ３３４２７, スリーエム センター
(72)発明者 ノバック, ジェイムズ シー.
アメリカ合衆国, ミネソタ ５５１３３－３４２７, セント ポール, ポスト オフィス ボックス ３３４２７, スリーエム センター
(72)発明者 ペイン, マルシア エム.
アメリカ合衆国, ケンタッキー ４０５０４, レキシントン, セリア レーン ８４８
(72)発明者 レディンガー, デイビッド エイチ.
アメリカ合衆国, ミネソタ ５５１３３－３４２７, セント ポール, ポスト オフィス ボックス ３３４２７, スリーエム センター
(72)発明者 ボーゲル, デニス イー.
アメリカ合衆国, ミネソタ ５５１３３－３４２７, セント ポール, ポスト オフィス ボックス ３３４２７, スリーエム センター

審査官 井上 典之

(56)参考文献 特開２００７－２９９８５２（ＪＰ，Ａ）
特表２００７－５１９２２７（ＪＰ，Ａ）
国際公開第２００６／１１９８５３（WO，Ａ１）
特表２０１０－５２４８６５（ＪＰ，Ａ）
特表２００７－１５８０６２（ＪＰ，Ａ）
特表２０１０－５２０２４１（ＪＰ，Ａ）
米国特許出願公開第２００６／０２６７００４（ＵＳ，Ａ１）
特表２００９－５２２７７４（ＪＰ，Ａ）

DAN LEHNHERR, ET AL., "Pentacene Oligomers and Polymers: Functionalization of Pentacene to Afford Mono-, Di-, Tri-, and Polymeric Materials" , ORGANIC LETTERS, ２００７年, VOL.9, NO.22, PP.4583-4586
JOHN E. ANTHONY, ET AL., "A Road Map to Stable, Soluble, Easily Crystallized Pentacene Derivatives", ORGANIC LETTERS, ２００２年, VOL.4, NO.1, PP.15-18
MARCIA M. PAYNE, ET AL., "Robust, Soluble Pentacene Ethers", ORGANIC LETTERS, ２００４年, VOL.6, NO.10, PP.1609-1612
CHRISTOPHER R. SWARTZ, ET AL., "Synthesis and Characterization of Electron-Deficient Pentacenes", ORGANIC LETTERS, ２００５年, VOL.7, NO.15, PP.3163-3166
MARCIA M. PAYNE, ET AL., "Functionalized Higher Acenes: Hexacene and Heptacene", JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, ２００５年, VOL.127, NO.22, PP.8028-8029
MARCIA M. PAYNE, ET AL., "Stable, Crystalline Acenedithiophenes with uo to Seven Linearly Fused Rings", ORGANIC LETTERS, ２００４年, VOL.6, NO.19, PP.3325-3328
JINYUE JIANG, ET AL., "Design, Synthesis, and Properties of New Derivatives of Pentacene", JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY, ２００６年, VOL.71, NO.5, PP.2155-2158
CHRISTOPHE P. BENARD, ET AL., "Double Diels-Alder Strategies to Soluble 2,9- and 2,9,6,13-Tetraethynylpentacenes, Photolytic [4 + 4] Cycloadditions, and Pentacene Crystal Packing", JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY, ２００７年, VOL.72, NO.19, PP.7229-7236
TOSHIHIRO OKAMOTO, ET AL., "Synthesis of Solution-Soluble Pentacene-Containing Conjugated Copolymers", JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, ２００７年, VOL.129, NO.134, PP.10308-10309
DO-HWAN KIM, ET AL., "High-Mobility Organic Transistors Based on Single-Crystalline Microribbons of Triisopropylsilylethynyl Pentacene via Solution-Phase Self-Assembly", ADVANCED MATERIALS, ２００７年, VOL.19, NO.5, PP.678-682

(58)調査した分野(Int.Cl., ＤＢ名)
Ｃ０７Ｆ　　７／
ＣＡ／ＲＥＧＩＳＴＲＹ（ＳＴＮ）