(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2015 年 7 月 2 日(02.07.2015)

WIPO | PCT

(10) 国際公開番号
WO 2015/098604 A1

(51) 国際特許分類:
H01L 51/30 (2006.01) *C07D 495/04* (2006.01)
C07D 333/18 (2006.01) *H01L 29/786* (2006.01)
C07D 487/04 (2006.01) *H01L 51/05* (2006.01)
C07D 493/04 (2006.01) *H01L 51/40* (2006.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2014/083194

(22) 国際出願日: 2014 年 12 月 16 日(16.12.2014)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

(30) 優先権データ:
特願 2013-265910 2013 年 12 月 24 日(24.12.2013) JP

(71) 出願人: 富士フイルム株式会社(FUJIFILM CORPORATION) [JP/JP]; 〒1068620 東京都港区西麻布２丁目２６番３０号 Tokyo (JP).

(72) 発明者: 養父　克行(YOUFU Katsuyuki); 〒2588577 神奈川県足柄上郡開成町牛島５７７番地　富士フイルム株式会社内 Kanagawa (JP). 平井　友樹(HIRAI Yuki); 〒2588577 神奈川県足柄上郡開成町牛島５７７番地　富士フイルム株式会社内 Kanagawa (JP). 益居　健介(MASUI Kensuke); 〒2588577 神奈川県足柄上郡開成町牛島５７７番地　富士フイルム株式会社内 Kanagawa (JP).

(74) 代理人: 特許業務法人特許事務所サイクス(SIKS & CO.); 〒1040031 東京都中央区京橋一丁目８番７号　京橋日殖ビル８階 Tokyo (JP).

(81) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, KE, KG, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

(84) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

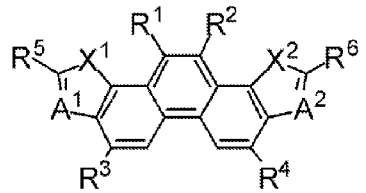
添付公開書類:

— 国際調査報告（条約第 21 条(3)）

WO 2015/098604 A1

(54) **Title**: ORGANIC TRANSISTOR, COMPOUND, ORGANIC SEMICONDUCTOR MATERIAL FOR NON-LIGHT-EMITTING ORGANIC SEMICONDUCTOR DEVICES, MATERIAL FOR ORGANIC TRANSISTORS, COATING SOLUTION FOR NON-LIGHT-EMITTING ORGANIC SEMICONDUCTOR DEVICES, AND ORGANIC SEMICONDUCTOR FILM FOR NON-LIGHT-EMITTING ORGANIC SEMICONDUCTOR DEVICES

(54) 発明の名称 : 有機トランジスタ、化合物、非発光性有機半導体デバイス用有機半導体材料、有機トランジスタ用材料、非発光性有機半導体デバイス用塗布溶液、非発光性有機半導体デバイス用有機半導体膜



(57) **Abstract**: The objective of the present invention is to provide: a compound which has high solubility in an organic solvent and increases the carrier mobility if used in a semiconductor active layer of an organic transistor; and an organic transistor which uses this compound. The present invention provides a compound represented by formula (AA) and an organic transistor which uses this compound in a semiconductor active layer. (In the formula, each of X^1 and X^2 represents NR^{13}, an O atom or an S atom; A^1 represents CR^7 or an N atom; A^2 represents CR^8 or an N atom; R^{13} represents a hydrogen atom, an alkyl group, an alkenyl group, an alkynyl group or an acyl group; each of R^1-R^8 independently represents a hydrogen atom or a substituent, and at least one of the R^1-R^8 moieties represents a substituent represented by -L-R; L represents a divalent linking group having a specific structure; and R represents an alkyl group, a cyano group, a vinyl group, an ethynyl group, an oxyethylene group, an oligooxyethylene group wherein the repetition number (v) of oxyethylene groups is 2 or more, a siloxane group, an oligosiloxane group wherein the number of silicon atoms is 2 or more, or a trialkylsilyl group.)

(57) 要約:

[続葉有]

本発明は、有機トランジスタの半導体活性層に用いたときにキャリア移動度が高くなり、有機溶媒への高い溶解性を有する化合物及びこの化合物を用いた有機トランジスタを提供することを課題とする。本発明は、下記の式で表される化合物及びこの化合物を半導体活性層に含む有機トランジスタである。（式中、X^1およびX^2はＮR^{13}、Ｏ原子またはＳ原子；A^1はＣR^7またはＮ原子；A^2はＣR^8またはＮ原子；R^{13}は水素原子、アルキル基、アルケニル基、アルキニル基またはアシル基；R^1～R^8はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、R^1～R^8のうち少なくとも１つが－Ｌ－Ｒで表される置換基；Ｌは特定構造の２価の連結基；Ｒはアルキル基、シアノ基、ビニル基、エチニル基、オキシエチレン基、オキシエチレン単位の繰り返し数ｖが２以上のオリゴオキシエチレン基、シロキサン基、ケイ素原子数が２以上のオリゴシロキサン基、あるいはトリアルキルシリル基である。）

明　細　書

発明の名称 ：

有機トランジスタ、化合物、非発光性有機半導体デバイス用有機半導体材料、有機トランジスタ用材料、非発光性有機半導体デバイス用塗布溶液、非発光性有機半導体デバイス用有機半導体膜

技術分野

[0001] 本発明は、有機トランジスタ、有機半導体膜および有機半導体材料などに関する。詳しくは、本発明は、２つのヘテロ５員環が縮環したフェナントレン骨格構造を有する化合物、この化合物を含有する有機トランジスタ、この化合物を含有する非発光性有機半導体デバイス用有機半導体材料、この化合物を含有する有機トランジスタ用材料、この化合物を含有することを特徴とする非発光性有機半導体デバイス用塗布溶液、この化合物を含有する非発光性有機半導体デバイス用有機半導体膜、この化合物を合成するための中間体である化合物に関する。

背景技術

[0002] 有機半導体材料を用いたデバイスは、従来のシリコンなどの無機半導体材料を用いたデバイスと比較して、様々な優位性が見込まれているため、高い関心を集めている。有機半導体材料を用いたデバイスの例としては、有機半導体材料を光電変換材料として用いた有機薄膜太陽電池や固体撮像素子などの光電変換素子や、非発光性（本明細書中、「非発光性」とは、室温、大気下０．１ｍＷ／ｃｍ^{2}の電流密度でデバイスに電流を流した場合に、１ｌｍ／Ｗ以下の発光効率のことを言う。非発光性有機半導体デバイスと言えば、有機電界発光素子などの発光性有機半導体デバイスを除く有機半導体デバイスを意味する）の有機トランジスタ（有機薄膜トランジスタと言われることもある）が挙げられる。有機半導体材料を用いたデバイスは、無機半導体材料を用いたデバイスと比べて低温、低コストで大面積の素子を作製できる可能性がある。さらに分子構造を変化させることで容易に材料特性を変化させる

ことが可能であるため材料のバリエーションが豊富であり、無機半導体材料ではなし得なかったような機能や素子を実現することができる。

[0003] 例えば、特許文献１には、ピロールが縮環したフェナントレン系化合物を有機発光（有機ＥＬまたは有機Ｅｌｅｃｔｒｏ－Ｌｕｍｉｎｅｓｃｅｎｃｅ）素子材料として用いると、電気特性、電荷輸送性能および発光能に優れ、長寿命、低駆動電圧の有機ＥＬ素子が得られることが記載されている。特許文献１には有機トランジスタに用いることを示唆する記載はなかった。

[0004] 特許文献２には、ピロールが縮環した芳香族構造をもつ有機半導体化合物は、低温で水性および有機溶媒に対する溶解性が高く、溶液成膜可能であり、有機半導体作製時にドーピング調整が容易であり、低コスト大量生産可能であることが記載されている。しかしながら、特許文献２の実施例は太陽電池への使用例のみが記載されており、有機トランジスタを製造した例はなかった。

先行技術文献

特許文献

[0005] 特許文献1：特開２０１１－４６６８７号公報

特許文献2：特表２０１２－５１３４５９号公報

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0006] 有機ＥＬ素子材料として有用なものが、ただちに有機トランジスタ用半導体材料として有用であると言うことはできない。これは、有機ＥＬ素子と有機トランジスタでは、有機化合物に求められる特性が異なるためである。有機ＥＬ素子では通常膜の膜厚方向（通常数ｎｍ～数１００ｎｍ）に電荷を輸送する必要があるのに対し、有機トランジスタでは膜面方向の電極間（通常数μｍ～数１００μｍ）の長距離を電荷（キャリア）輸送する必要がある。このため、求められるキャリア移動度が格段に高い。そのため、有機トランジスタ用半導体材料としては、分子の配列秩序が高い、結晶性が高い有機化

合物が求められている。また、高いキャリア移動度発現のため、π共役平面は基板に対して直立していることが好ましい。一方、有機ＥＬ素子では、発光効率を高めるため、発光効率が高く、面内での発光が均一な素子が求められている。通常、結晶性の高い有機化合物は、面内の電界強度不均一、発光不均一、発光クエンチ等、発光欠陥を生じさせる原因となるため、有機ＥＬ素子用材料は結晶性を低くし、アモルファス性の高い材料が望まれる。このため、有機ＥＬ素子材料を構成する有機化合物を有機半導体材料にそのまま転用しても、ただちに良好なトランジスタ特性を得ることができる訳ではない。

また、同様に太陽電池材料として有用なものも、ただちには、求められるキャリア移動度が格段に高い有機トランジスタ用半導体材料として有用であると言うことはできない。

[0007] このような状況のもと、本発明者らが特許文献１に記載の化合物を用いた有機トランジスタについて検討したところ、有機トランジスタに使用した例の記載がない特許文献１に記載されている化合物を有機トランジスタの半導体活性層に用いたとしてもキャリア移動度が低く、高いトランジスタ特性が得られないことがわかった。

特許文献２に記載されている化合物は、キャリア移動度が低いか、特許文献２の記載に反して有機溶媒に対する溶解性が低く有機トランジスタの半導体活性層を溶液製膜法によって製膜できないことがわかった。すなわち、特許文献２に記載されている化合物は高いキャリア移動度および一般的な有機溶剤に対する溶解性を両立できないことがわかった。

[0008] そこで本発明者らは、このような従来技術の課題を解決するために検討を進めた。本発明が解決しようとする課題は、有機トランジスタの半導体活性層に用いたときにキャリア移動度が高くなり、有機溶媒への高い溶解性を有する化合物およびこの化合物を用いた有機トランジスタを提供することである。

課題を解決するための手段

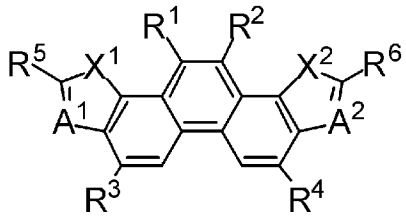
[0009] 上記の課題を解決するために鋭意検討を行った結果、フェナントレン骨格に十分なＨＯＭＯ軌道の重なりが得られるように、チオフェン、フランまたはピロールを特定の位置に２個縮環させ、さらに一般式（Ｗ）で表される基を置換させることで、有機トランジスタの半導体活性層に用いたときにキャリア移動度が高く、かつ、駆動電圧が低くなり、有機溶媒への高い溶解性を有する化合物が得られることを見出し、本発明に至った。

上記課題を解決するための具体的な手段である本発明は、以下の構成を有する。

[0010] ［１］ 下記一般式（１）で表される化合物を半導体活性層に含む有機トランジスタ：

一般式（１）

[化1]



一般式（１）中、Ｘ[1]およびＸ[2]はそれぞれ独立にＮＲ[13]、Ｏ原子またはＳ原子を表し、

Ａ[1]はＣＲ[7]またはＮ原子を表し、Ａ[2]はＣＲ[8]またはＮ原子を表し、

Ｒ[13]は水素原子、アルキル基、アルケニル基、アルキニル基またはアシル基を表し、

Ｒ[1]～Ｒ[8]はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、Ｒ[1]～Ｒ[8]のうち少なくとも１つが下記一般式（Ｗ）で表される置換基である：

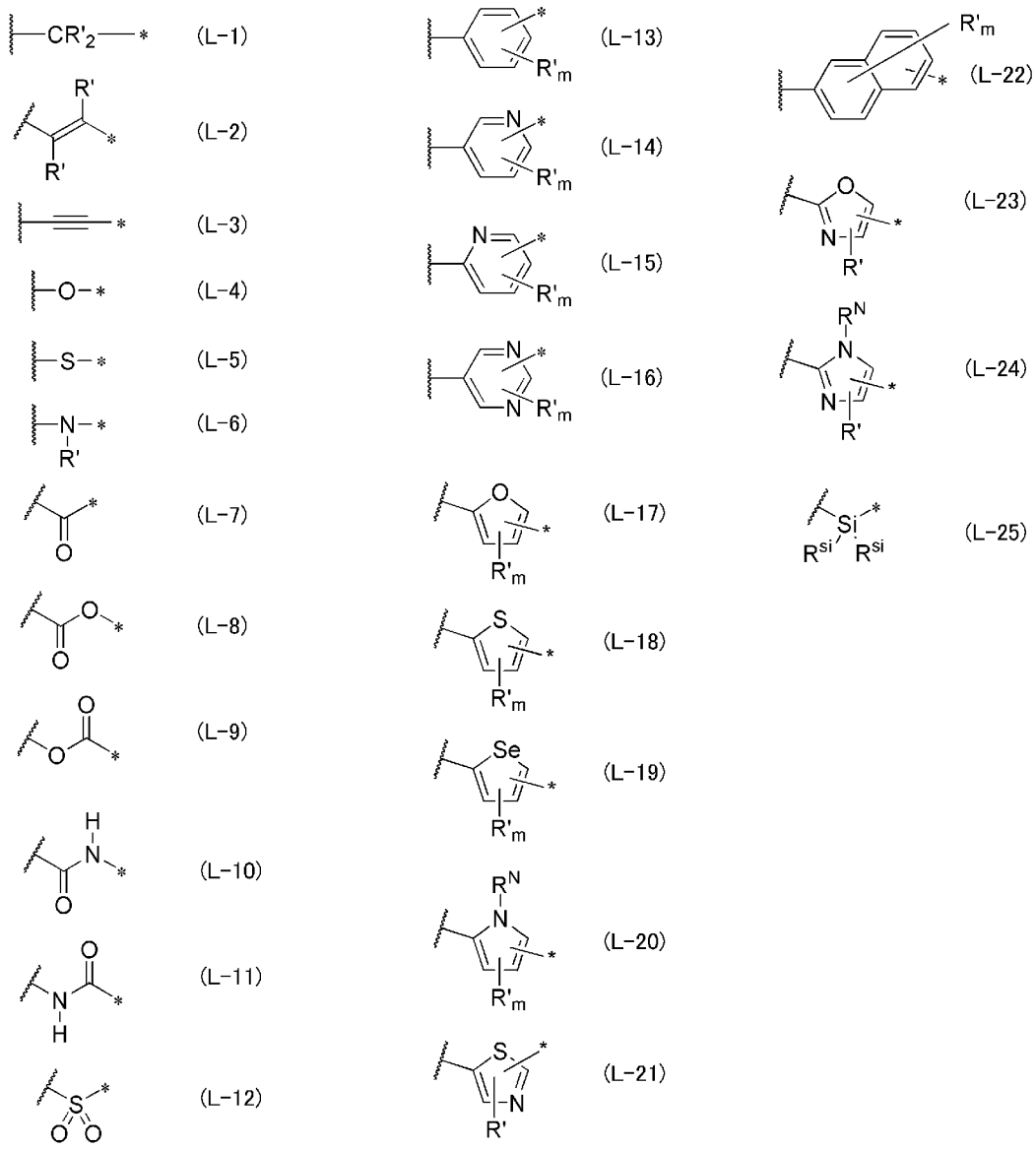
－Ｌ－Ｒ 一般式（Ｗ）

一般式（Ｗ）中、Ｌは下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基または２以上の下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基が結合した２価の連結基を表し、

Ｒは置換または無置換のアルキル基、シアノ基、ビニル基、エチニル基、

オキシエチレン基、オキシエチレン単位の繰り返し数ｖが２以上のオリゴオキシエチレン基、シロキサン基、ケイ素原子数が２以上のオリゴシロキサン基、あるいは、置換または無置換のトリアルキルシリル基を表す：

[化2]



一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）中、波線部分は２つのヘテロ５員環が縮環したフェナントレン骨格との結合位置を表し、

一般式（Ｌ－１３）におけるｍは４を表し、一般式（Ｌ－１４）および（Ｌ－１５）におけるｍは３を表し、一般式（Ｌ－１６）～（Ｌ－２０）におけるｍは２を表し、（Ｌ－２２）におけるｍは６を表し、

一般式（Ｌ－１）、（Ｌ－２）、（Ｌ－６）および（Ｌ－１３）～（Ｌ－２４）におけるＲ’はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、

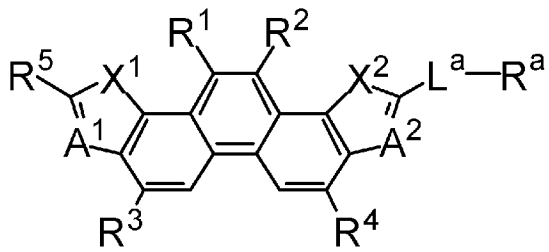
R^Nは水素原子または置換基を表し、

R^{si}はそれぞれ独立に水素原子、アルキル基、アルケニル基またはアルキニル基を表す。

［２］　［１］に記載の有機トランジスタは、一般式（１）で表される化合物が、下記一般式（２－１）または（２－２）で表される化合物であることが好ましい：

一般式（２－１）

[化3]



一般式（２－１）中、X^1およびX^2はそれぞれ独立にＯ原子またはＳ原子を表し、

A^1はＣR^7またはＮ原子を表し、A^2はＣR^8またはＮ原子を表し、

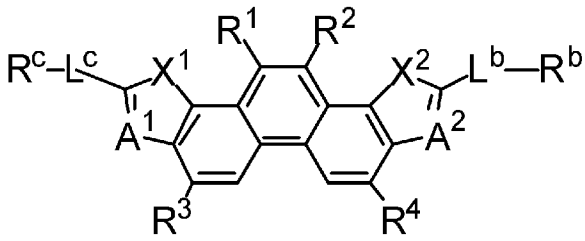
R^1～R^5、R^7およびR^8はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、R^5は－L^a－R^aで表される基ではなく、

L^aは下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基または２以上の下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基が結合した２価の連結基を表し、

R^aは置換または無置換のアルキル基、シアノ基、ビニル基、エチニル基、オキシエチレン基、オキシエチレン単位の繰り返し数ｖが２以上のオリゴオキシエチレン基、シロキサン基、ケイ素原子数が２以上のオリゴシロキサン基、あるいは、置換または無置換のトリアルキルシリル基を表す；

[化4]

一般式（２－２）



一般式（２－２）中、X^1およびX^2はそれぞれ独立にＯ原子またはＳ原子を表し、

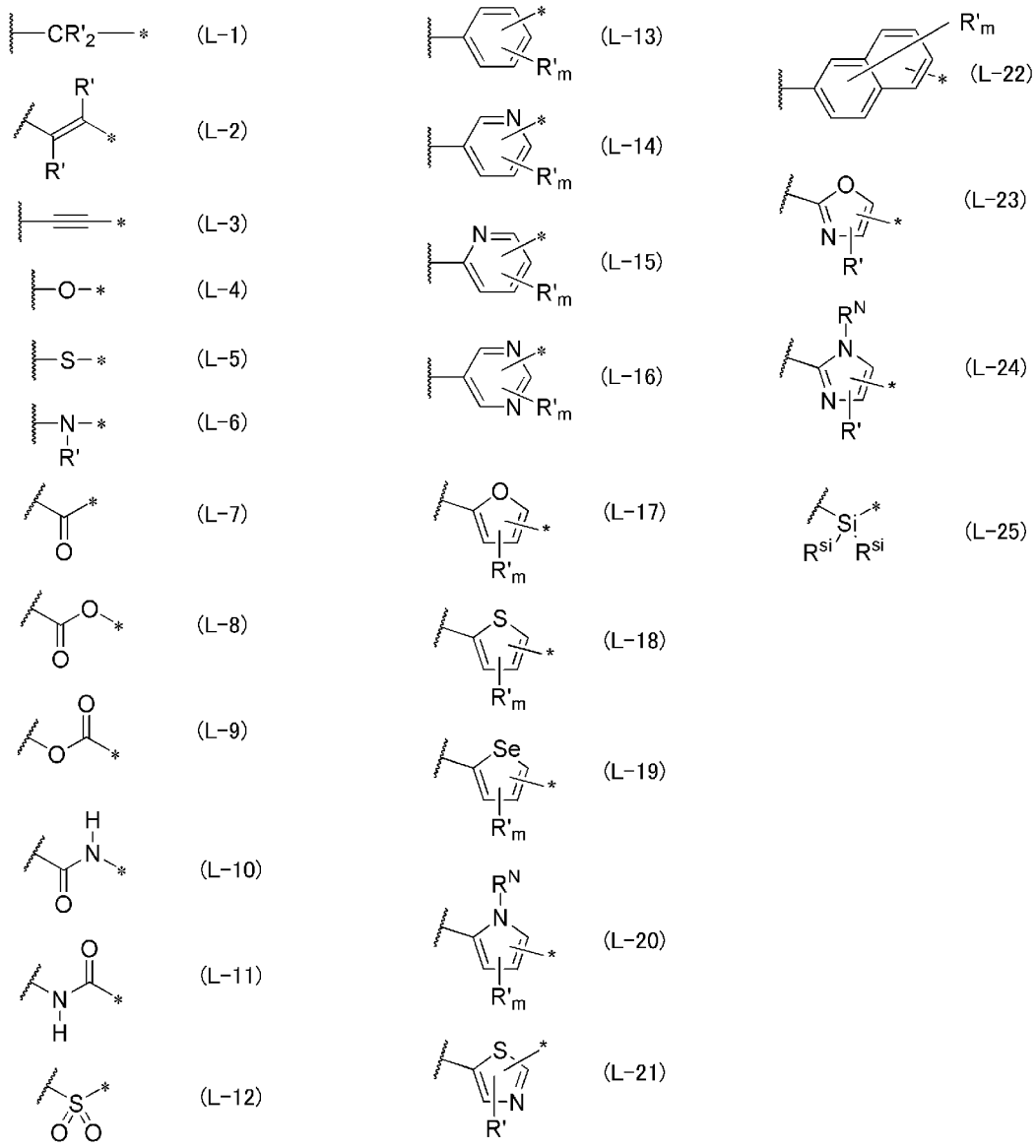
A^1はＣR^7またはＮ原子を表し、A^2はＣR^8またはＮ原子を表し、

R^1～R^4、R^7およびR^8はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、

L^bおよびL^cはそれぞれ独立に下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基または２以上の下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基が結合した２価の連結基を表し、

R^bおよびR^cはそれぞれ独立に置換または無置換のアルキル基、シアノ基、ビニル基、エチニル基、オキシエチレン基、オキシエチレン単位の繰り返し数ｖが２以上のオリゴオキシエチレン基、シロキサン基、ケイ素原子数が２以上のオリゴシロキサン基、あるいは、置換または無置換のトリアルキルシリル基を表す；

[化5]



一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）中、波線部分は２つのヘテロ５員環が縮環したフェナントレン骨格との結合位置を表し、

一般式（Ｌ－１３）におけるｍは４を表し、一般式（Ｌ－１４）および（Ｌ－１５）におけるｍは３を表し、一般式（Ｌ－１６）～（Ｌ－２０）におけるｍは２を表し、（Ｌ－２２）におけるｍは６を表し、

一般式（Ｌ－１）、（Ｌ－２）、（Ｌ－６）および（Ｌ－１３）～（Ｌ－２４）におけるＲ’はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、

R^Nは水素原子または置換基を表し、

R^{si}はそれぞれ独立に水素原子、アルキル基、アルケニル基またはアルキニル基を表す。

［３］　［１］または［２］に記載の有機トランジスタは、一般式（１）、（２－１）または（２－２）中、A^1がCR^7であるか、A^2がCR^8であり、R^7およびR^8はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表すことが好ましい。

［４］　［１］～［３］のいずれか一つに記載の有機トランジスタは、一般式（１）、（２－１）または（２－２）中、X^1およびX^2のうち少なくとも１つがＳ原子であることが好ましい。

［５］　［１］～［４］のいずれか一つに記載の有機トランジスタは、一般式（１）、（２－１）または（２－２）中、Ｌ、L^a、L^bおよびL^cが全て一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－５）、（Ｌ－１３）、（Ｌ－１７）もしくは（Ｌ－１８）のいずれかで表される２価の連結基またはこれらの２価の連結基が２以上結合した２価の連結基であることが好ましい。

［６］　［１］～［５］のいずれか一つに記載の有機トランジスタは、一般式（１）、（２－１）または（２－２）中、Ｌ、L^a、L^bおよびL^cが全て一般式（Ｌ－１）、（Ｌ－３）、（Ｌ－１３）または（Ｌ－１８）のいずれかで表される２価の連結基、あるいは一般式（Ｌ－３）、（Ｌ－１３）または（Ｌ－１８）のいずれか１つで表される２価の連結基と一般式（Ｌ－１）で表される２価の連結基が結合した２価の連結基であることが好ましい。

［７］　［１］～［６］のいずれか一つに記載の有機トランジスタは、一般式（１）、（２－１）または（２－２）中、Ｒ、R^a、R^bおよびR^cが全て置換または無置換のアルキル基であることが好ましい。

［８］　［１］～［７］のいずれか一つに記載の有機トランジスタは、一般式（１）、（２－１）または（２－２）中、Ｌ、L^a、L^bおよびL^cが全て一般式（Ｌ－１）で表される２価の連結基であり、かつ、Ｒ、R^a、R^bおよびR^cが全て直鎖の炭素数７～１７のアルキル基であるか；あるいは、

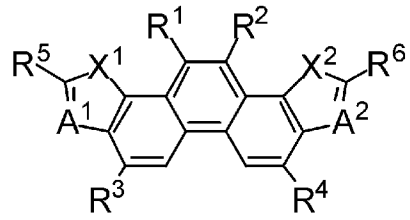
Ｌ、L^a、L^bおよびL^cが全て一般式（Ｌ－３）、（Ｌ－１３）または（Ｌ

－１８）のいずれか１つで表される２価の連結基と一般式（Ｌ－１）で表される２価の連結基が結合した２価の連結基であり、かつ、Ｒ、Ｒ^{a}、Ｒ^{b}およびＲ^{c}が全て直鎖のアルキル基であることが好ましい。

［９］　下記一般式（１）で表される化合物：

一般式（１）

[化6]



一般式（１）中、Ｘ^{1}およびＸ^{2}はそれぞれ独立にＮＲ^{13}、Ｏ原子またはＳ原子を表し、

Ａ^{1}はＣＲ^{7}またはＮ原子を表し、Ａ^{2}はＣＲ^{8}またはＮ原子を表し、

Ｒ^{13}は水素原子、アルキル基、アルケニル基、アルキニル基またはアシル基を表し、

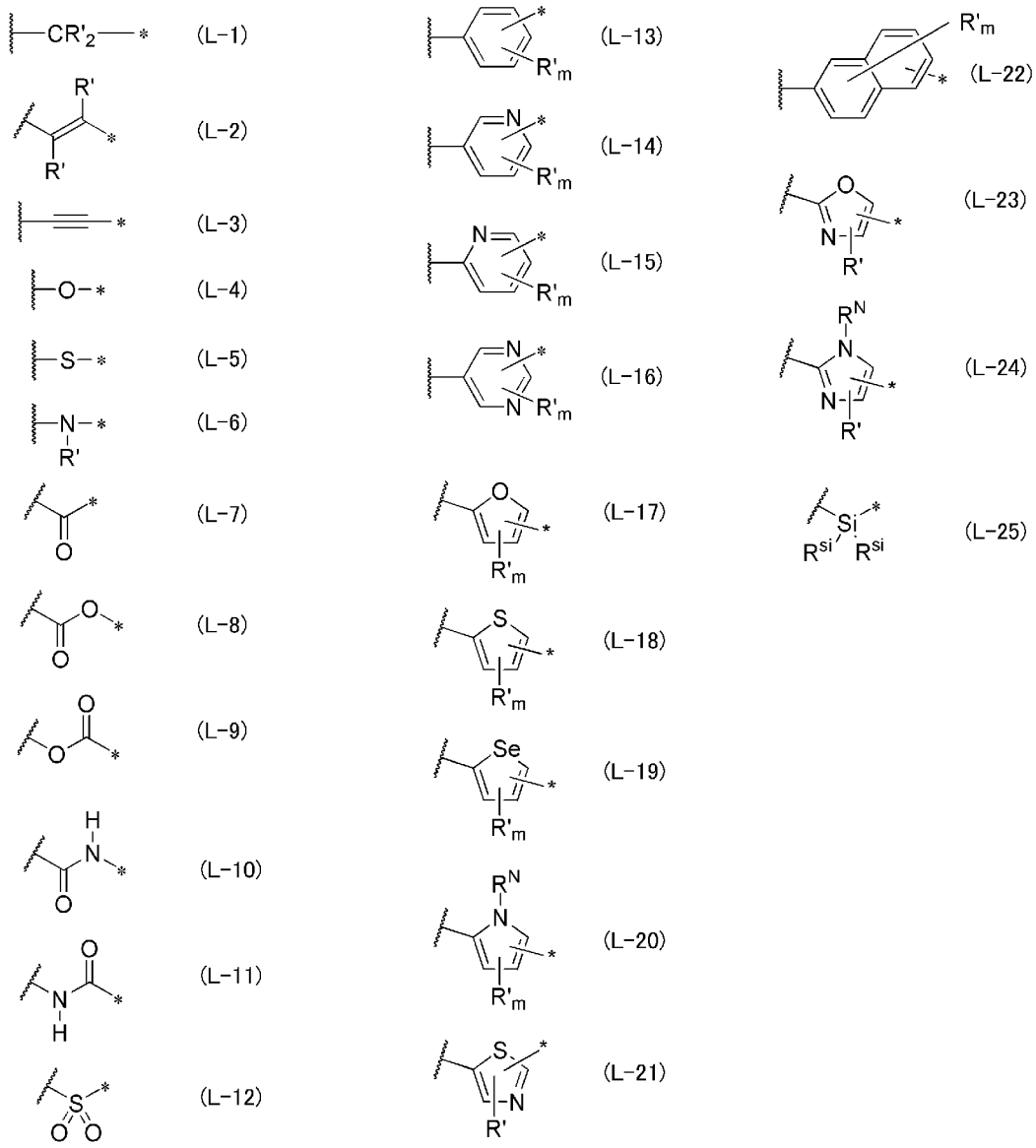
Ｒ^{1}～Ｒ^{8}はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、Ｒ^{1}～Ｒ^{8}のうち少なくとも１つが下記一般式（Ｗ）で表される置換基である：

－Ｌ－Ｒ　　一般式（Ｗ）

一般式（Ｗ）中、Ｌは下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基または２以上の下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基が結合した２価の連結基を表し、

Ｒは置換または無置換のアルキル基、シアノ基、ビニル基、エチニル基、オキシエチレン基、オキシエチレン単位の繰り返し数ｖが２以上のオリゴオキシエチレン基、シロキサン基、ケイ素原子数が２以上のオリゴシロキサン基、あるいは、置換または無置換のトリアルキルシリル基を表す：

[化7]



一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）中、波線部分は２つのヘテロ５員環が縮環したフェナントレン骨格との結合位置を表し、

一般式（Ｌ－１３）におけるｍは４を表し、一般式（Ｌ－１４）および（Ｌ－１５）におけるｍは３を表し、一般式（Ｌ－１６）～（Ｌ－２０）におけるｍは２を表し、（Ｌ－２２）におけるｍは６を表し、

一般式（Ｌ－１）、（Ｌ－２）、（Ｌ－６）および（Ｌ－１３）～（Ｌ－２４）におけるＲ’はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、

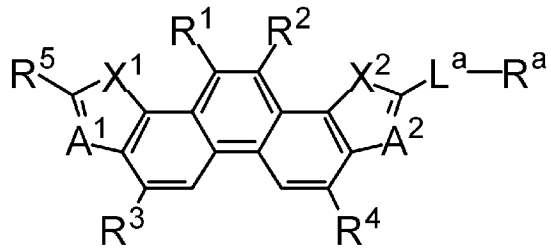
R^Nは水素原子または置換基を表し、

R^{si}はそれぞれ独立に水素原子、アルキル基、アルケニル基またはアルキニル基を表す。

［１０］　［９］に記載の化合物は、一般式（１）で表される化合物が、下記一般式（２－１）または（２－２）で表される化合物であることが好ましい：

一般式（２－１）

[化8]



一般式（２－１）中、X^1およびX^2はそれぞれ独立にＯ原子またはＳ原子を表し、

A^1はＣR^7またはＮ原子を表し、A^2はＣR^8またはＮ原子を表し、

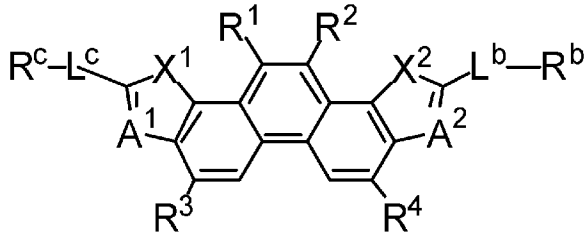
R^1～R^5、R^7およびR^8はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、R^5は－L^a－R^aで表される基ではなく、

L^aは下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基または２以上の下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基が結合した２価の連結基を表し、

R^aは置換または無置換のアルキル基、シアノ基、ビニル基、エチニル基、オキシエチレン基、オキシエチレン単位の繰り返し数ｖが２以上のオリゴオキシエチレン基、シロキサン基、ケイ素原子数が２以上のオリゴシロキサン基、あるいは、置換または無置換のトリアルキルシリル基を表す；

[化9]

一般式（２－２）



一般式（２－２）中、Ｘ[1]およびＸ[2]はそれぞれ独立にＯ原子またはＳ原子を表し、

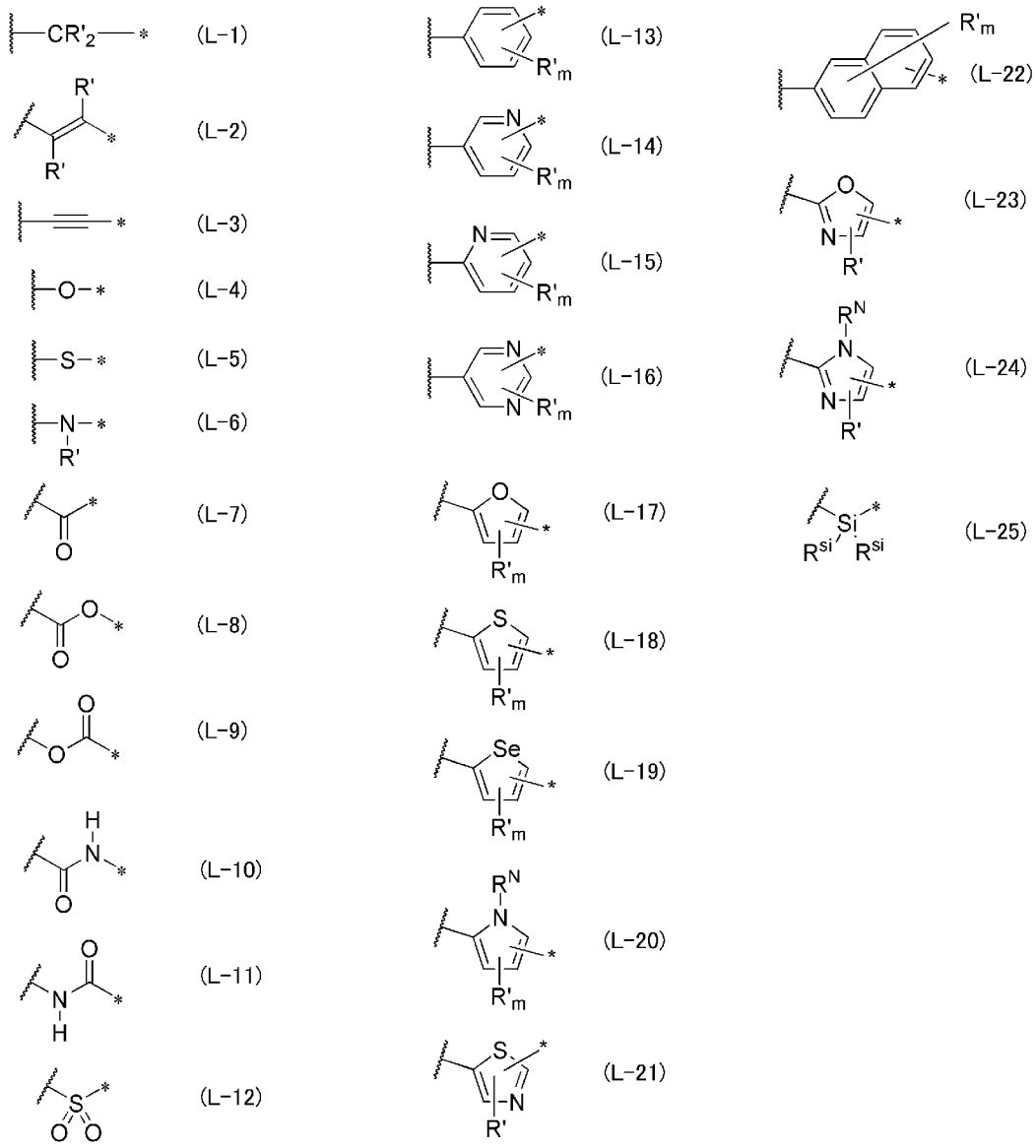
Ａ[1]はＣＲ[7]またはＮ原子を表し、Ａ[2]はＣＲ[8]またはＮ原子を表し、

Ｒ[1]～Ｒ[4]、Ｒ[7]およびＲ[8]はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、

Ｌ[b]およびＬ[c]はそれぞれ独立に下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基または２以上の下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基が結合した２価の連結基を表し、

Ｒ[b]およびＲ[c]はそれぞれ独立に置換または無置換のアルキル基、シアノ基、ビニル基、エチニル基、オキシエチレン基、オキシエチレン単位の繰り返し数ｖが２以上のオリゴオキシエチレン基、シロキサン基、ケイ素原子数が２以上のオリゴシロキサン基、あるいは、置換または無置換のトリアルキルシリル基を表す；

[化10]



一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）中、波線部分は２つのヘテロ５員環が縮環したフェナントレン骨格との結合位置を表し、

一般式（Ｌ－１３）におけるｍは４を表し、一般式（Ｌ－１４）および（Ｌ－１５）におけるｍは３を表し、一般式（Ｌ－１６）～（Ｌ－２０）におけるｍは２を表し、（Ｌ－２２）におけるｍは６を表し、

一般式（Ｌ－１）、（Ｌ－２）、（Ｌ－６）および（Ｌ－１３）～（Ｌ－２４）におけるＲ’はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、

R^Nは水素原子または置換基を表し、

R^{si}はそれぞれ独立に水素原子、アルキル基、アルケニル基またはアルキニル基を表す。

［１１］　［９］または［１０］に記載の化合物は、一般式（１）、（２－１）または（２－２）中、A^1がCR^7であるか、A^2がCR^8であり、R^7およびR^8はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表すことが好ましい。

［１２］　［９］～［１１］のいずれか一つに記載の化合物は、一般式（１）、（２－１）または（２－２）中、X^1およびX^2のうち少なくとも１つがＳ原子であることが好ましい。

［１３］　［９］～［１２］のいずれか一つに記載の化合物は、一般式（１）、（２－１）または（２－２）中、Ｌ、L^a、L^bおよびL^cが全て一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－５）、（Ｌ－１３）、（Ｌ－１７）もしくは（Ｌ－１８）のいずれかで表される２価の連結基またはこれらの２価の連結基が２以上結合した２価の連結基であることが好ましい。

［１４］　［９］～［１３］のいずれか一つに記載の化合物は、一般式（１）、（２－１）または（２－２）中、Ｌ、L^a、L^bおよびL^cが全て一般式（Ｌ－１）、（Ｌ－３）、（Ｌ－１３）または（Ｌ－１８）のいずれかで表される２価の連結基、あるいは一般式（Ｌ－３）、（Ｌ－１３）または（Ｌ－１８）のいずれか１つで表される２価の連結基と一般式（Ｌ－１）で表される２価の連結基が結合した２価の連結基であることが好ましい。

［１５］　［９］～［１４］のいずれか一つに記載の化合物は、一般式（１）、（２－１）または（２－２）中、Ｒ、R^a、R^bおよびR^cが全て置換または無置換のアルキル基であることが好ましい。

［１６］　［９］～［１５］のいずれか一つに記載の化合物は、一般式（１）、（２－１）または（２－２）中、Ｌ、L^a、L^bおよびL^cが全て一般式（Ｌ－１）で表される２価の連結基であり、かつ、Ｒ、R^a、R^bおよびR^cが全て直鎖の炭素数７～１７のアルキル基であるか；あるいは、

Ｌ、L^a、L^bおよびL^cが全て一般式（Ｌ－３）、（Ｌ－１３）または（Ｌ－１８）のいずれか１つで表される２価の連結基と一般式（Ｌ－１）で表さ

れる２価の連結基が結合した２価の連結基であり、かつ、Ｒ、Ｒ^{a}、Ｒ^{b}およびＲ^{c}が全て直鎖のアルキル基であることが好ましい。

［１７］　［９］～［１６］のいずれか一つに記載の化合物を含有する非発光性有機半導体デバイス用有機半導体材料。

［１８］　［９］～［１６］のいずれか一つに記載の化合物を含有する有機トランジスタ用材料。

［１９］　［９］～［１６］いずれか一つに記載の化合物を含有する非発光性有機半導体デバイス用塗布溶液。

［２０］　［９］～［１６］のいずれか一つに記載の化合物とポリマーバインダーを含有する非発光性有機半導体デバイス用塗布溶液。

［２１］　［９］～［１６］のいずれか一つに記載の化合物を含有する非発光性有機半導体デバイス用有機半導体膜。

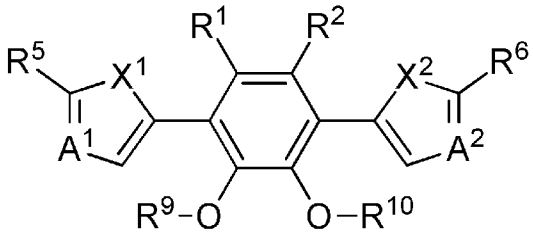
［２２］　［９］～［１６］のいずれか一つに記載の化合物とポリマーバインダーを含有する非発光性有機半導体デバイス用有機半導体膜。

［２３］　［２１］または［２２］に記載の非発光性有機半導体デバイス用有機半導体膜は、溶液塗布法により作製されたことが好ましい。

［２４］　下記一般式（３）で表される化合物：

一般式（３）

[化11]



一般式（３）中、Ｘ^{1}およびＸ^{2}はそれぞれ独立にＯ原子またはＳ原子を表し、

Ａ^{1}はＣＲ^{7}またはＮ原子を表し、Ａ^{2}はＣＲ^{8}またはＮ原子を表し、

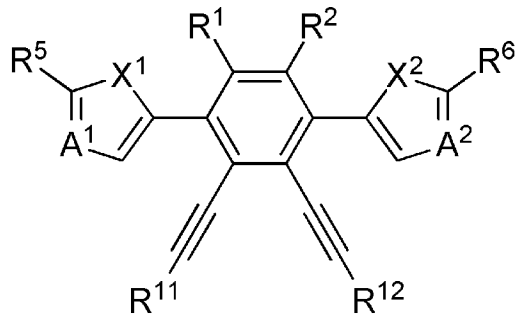
Ｒ^{1}、Ｒ^{2}、Ｒ^{5}～Ｒ^{8}はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、

R^9およびR^{10}はそれぞれ独立に水素原子、アルキル基、アルキルカルボニル基、アリールカルボニル基またはトリフルオロメチルスルホニル基を表す。

［２５］　下記一般式（４）で表される化合物：

一般式（４）

[化12]



一般式（４）において、X^1およびX^2はそれぞれ独立にＯ原子またはＳ原子を表し、

A^1はＣR^7またはＮ原子を表し、A^2はＣR^8またはＮ原子を表し、

R^1、R^2、R^5～R^8はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、

R^{11}およびR^{12}はそれぞれ独立に水素原子、アルキル基、トリアルキルシリル基、アルキル置換または無置換のアリール基、あるいは、アルキル置換または無置換のヘテロアリール基を表す。

［２６］　［２４］または［２５］に記載の化合物は、［９］～［１６］のいずれか一つに記載の化合物の中間体化合物であることが好ましい。

発明の効果

[0011] 本発明によれば、有機トランジスタの半導体活性層に用いたときにキャリア移動度が高くなり、有機溶媒への高い溶解性を有する化合物およびこの化合物を用いた有機トランジスタを提供することができる。

図面の簡単な説明

[0012] [図1]図１は、本発明の有機トランジスタの一例の構造の断面を示す概略図である。

[図2]図２は、本発明の実施例でＦＥＴ特性測定用基板として製造した有機トランジスタの構造の断面を示す概略図である。

発明を実施するための形態

[0013] 以下において、本発明について詳細に説明する。以下に記載する構成要件の説明は、代表的な実施形態や具体例に基づいてなされることがあるが、本発明はそのような実施形態に限定されるものではない。なお、本明細書において「～」を用いて表される数値範囲は「～」前後に記載される数値を下限値および上限値として含む範囲を意味する。

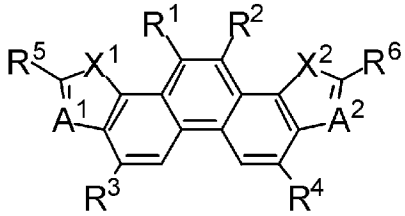
本発明において、各一般式の説明において特に区別されずに用いられている場合における水素原子は同位体（重水素原子等）も含んでいることを表す。さらに、置換基を構成する原子は、その同位体も含んでいることを表す。

[0014] ［有機トランジスタ］

本発明の有機トランジスタは、下記一般式（１）で表される化合物を半導体活性層に含むことを特徴とする。

一般式（１）

[化13]



一般式（１）中、X^1およびX^2はそれぞれ独立にＮR^{13}、Ｏ原子またはＳ原子を表し、

A^1はＣR^7またはＮ原子を表し、A^2はＣR^8またはＮ原子を表し、

R^{13}は水素原子、アルキル基、アルケニル基、アルキニル基またはアシル基を表し、

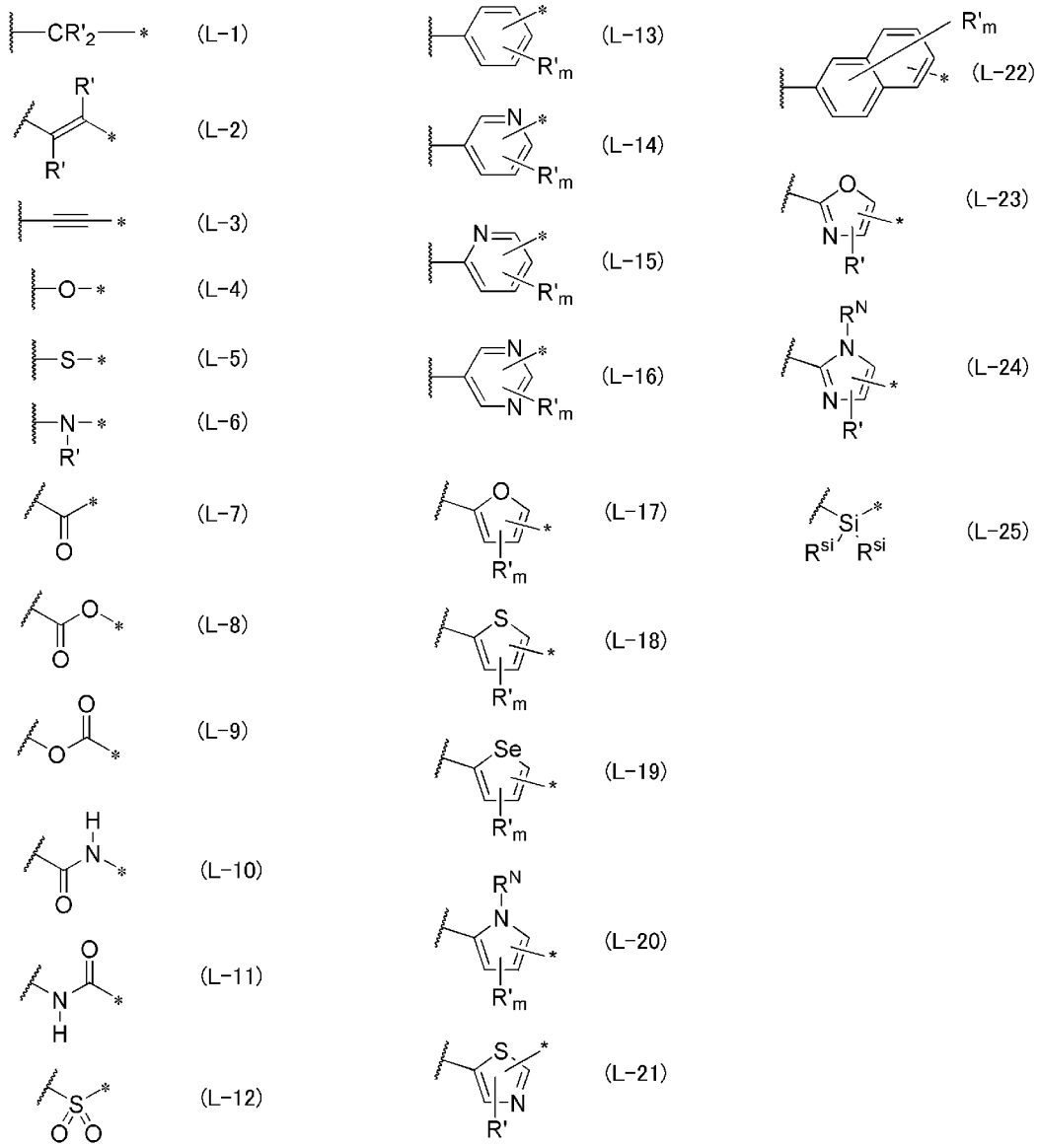
R^1～R^8はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、R^1～R^8のうち少なくとも１つが下記一般式（Ｗ）で表される置換基である：

－Ｌ－Ｒ　　一般式（Ｗ）

一般式（W）中、Ｌは下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基または２以上の下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基が結合した２価の連結基を表し、

Ｒは置換または無置換のアルキル基、シアノ基、ビニル基、エチニル基、オキシエチレン基、オキシエチレン単位の繰り返し数ｖが２以上のオリゴオキシエチレン基、シロキサン基、ケイ素原子数が２以上のオリゴシロキサン基、あるいは、置換または無置換のトリアルキルシリル基を表す：

[化14]



一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）中、波線部分は２つのヘテロ５員環が縮

環したフェナントレン骨格との結合位置を表し、

一般式（Ｌ－１３）におけるｍは４を表し、一般式（Ｌ－１４）および（Ｌ－１５）におけるｍは３を表し、一般式（Ｌ－１６）～（Ｌ－２０）におけるｍは２を表し、（Ｌ－２２）におけるｍは６を表し、

一般式（Ｌ－１）、（Ｌ－２）、（Ｌ－６）および（Ｌ－１３）～（Ｌ－２４）におけるＲ’はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、

R^Nは水素原子または置換基を表し、

R^{si}はそれぞれ独立に水素原子、アルキル基、アルケニル基またはアルキニル基を表す。

[0015] このような構造の一般式（１）で表される化合物は有機溶媒への高い溶解性を有し、一般式（１）で表される化合物を半導体活性層に含むことにより、本発明の有機トランジスタは、キャリア移動度が高い。

ここで、特許文献１では、本発明の化合物と一見すると構造が類似するフェナントロジピロール化合物が記載されているが、特許文献１に記載の化合物はＮ上に嵩高い芳香環を有することで、化合物が結晶化した際、分子間で十分なＨＯＭＯ軌道の重なりが得られず、高いキャリア移動度が得られない。特許文献１には有機トランジスタに使用した実施例はなく、もし使用したとしてもキャリア移動度が低くなる。

特許文献２の実施例に記載の化合物は、有機トランジスタに使用された実施例はなく、もし使用したとしてもキャリア移動度が低くなるか、有機溶媒に対する溶解性が低く有機トランジスタの半導体活性層を溶液製膜法によって製膜できない。

これに対し、前記一般式（１）で表される化合物は、２つのヘテロ５員環が縮環したフェナントレン骨格構造に導入する置換基の種類を工夫することで、高いキャリア移動度および一般的な有機溶剤に対する溶解性を両立するものである。一般式（１）で表される化合物については、一般式（Ｗ）で表される基の導入が一般的な有機溶剤に対する溶解性向上に効果的であり、これまで困難であった高移動度と溶解性の両立が可能となる。

[0016] さらに、一般式（１）で表される化合物を用いた本発明の有機トランジスタは、繰り返し駆動後の閾値電圧変化も小さいことが好ましい。繰り返し駆動後の閾値電圧変化を小さくするためには、有機半導体材料のＨＯＭＯが浅すぎずかつ深すぎないこと、有機半導体材料の化学的安定性（特に耐空気酸化性、酸化還元安定性）、膜状態の熱安定性、空気や水分が入りこみにくい高い膜密度、電荷がたまりにくい欠陥の少ない膜質、等が必要である。また、前記一般式（１）で表される化合物は、成膜時の有機溶媒への溶解性が高いほど、有機トランジスタの半導体活性層に用いたときの繰り返し駆動後の閾値電圧変化を小さくできる。前記一般式（１）で表される化合物はこれらを満足するため、繰り返し駆動後の閾値電圧変化が小さいと考えられる。すなわち、繰り返し駆動後の閾値電圧変化が小さい有機トランジスタは、半導体活性層が高い化学的安定性や膜密度等を有し、長期間に渡ってトランジスタとして有効に機能し得る。

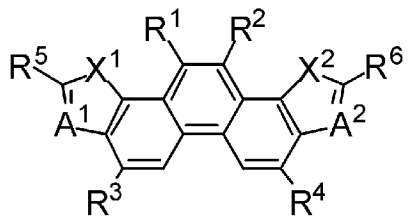
[0017] 以下、本発明の化合物や本発明の有機トランジスタなどの好ましい態様を説明する。

[0018] ＜一般式（１）で表される化合物＞

本発明の化合物は、前記一般式（１）で表されることを特徴とする。本発明の化合物は、本発明の有機トランジスタにおいて、後述の半導体活性層に含まれる。すなわち、本発明の化合物は、有機トランジスタ用材料として用いることができる。

[0019] 一般式（１）

[化15]



[0020] 一般式（１）中、X^1およびX^2はそれぞれ独立にNR^{13}、Ｏ原子またはＳ原子を表す。X^1およびX^2はそれぞれ独立にＯ原子またはＳ原子であること

が合成容易性の観点から好ましい。一方、X^1およびX^2のうち少なくとも１つがＳ原子であることが、キャリア移動度を高める観点から好ましい。X^1およびX^2は、同じ連結基であることが好ましい。X^1およびX^2はいずれもＳ原子であることがより好ましい。

R^{13}は水素原子、アルキル基、アルケニル基、アルキニル基またはアシル基を表し、水素原子またはアルキル基であることが好ましく、炭素数１～１４のアルキル基であることがより好ましく、炭素数１～４のアルキル基であることが特に好ましい。

R^{13}がアルキル基を表す場合、直鎖アルキル基でも、分枝アルキル基でも、環状アルキル基でもよいが、直鎖アルキル基であることが、分子の直線性が高まり、キャリア移動度を高めることができる観点から好ましい。

[0021] 一般式（１）中、A^1はCR^7またはＮ原子を表し、A^2はCR^8またはＮ原子を表し、R^7およびR^8はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表す。A^1がCR^7であるか、A^2がCR^8であることが好ましく、A^1がCR^7かつA^2がCR^8であることがより好ましい。A^1およびA^2は、同じであっても互いに異なっていてもよいが、同じあることが好ましい。

[0022] 一般式（１）において、R^5とR^7は互いに結合して環を形成してもよく、互いに結合して環を形成しなくてもよいが、互いに結合して環を形成しない方が好ましい。

一般式（１）において、R^6とR^8は互いに結合して環を形成してもよく、互いに結合して環を形成しなくてもよいが、互いに結合して環を形成しない方が好ましい。

[0023] 一般式（１）中、R^1～R^8はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、R^1～R^8のうち少なくとも１つが下記一般式（Ｗ）で表される置換基である：

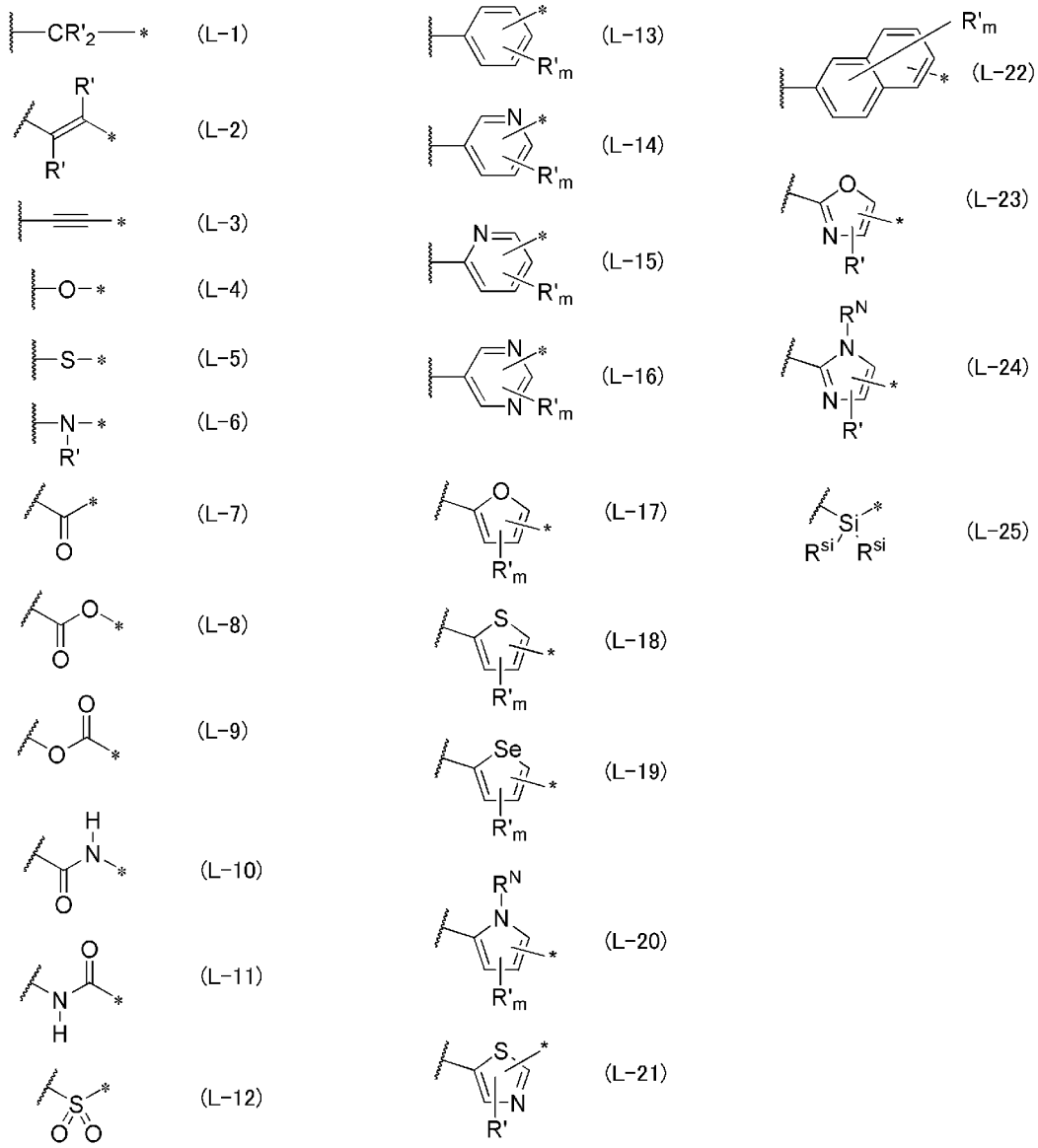
－Ｌ－Ｒ　　一般式（Ｗ）

一般式（Ｗ）中、Ｌは下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基または２以上の下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）

のいずれかで表される２価の連結基が結合した２価の連結基を表し、

Ｒは置換または無置換のアルキル基、シアノ基、ビニル基、エチニル基、オキシエチレン基、オキシエチレン単位の繰り返し数ｖが２以上のオリゴオキシエチレン基、シロキサン基、ケイ素原子数が２以上のオリゴシロキサン基、あるいは、置換または無置換のトリアルキルシリル基を表す：

[化16]



一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）中、波線部分は２つのヘテロ５員環が縮環したフェナントレン骨格との結合位置を表し、

一般式（Ｌ－１３）におけるｍは４を表し、一般式（Ｌ－１４）および（

Ｌ－１５）におけるｍは３を表し、一般式（Ｌ－１６）～（Ｌ－２０）におけるｍは２を表し、（Ｌ－２２）におけるｍは６を表し、

一般式（Ｌ－１）、（Ｌ－２）、（Ｌ－６）および（Ｌ－１３）～（Ｌ－２４）におけるＲ’はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、

R^Nは水素原子または置換基を表し、

R^{si}はそれぞれ独立に水素原子、アルキル基、アルケニル基またはアルキニル基を表す。

[0024] 一般式（１）中、R^1～R^8はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、少なくとも１つは前記一般式（Ｗ）で表される基を表す。

一般式（１）のR^1～R^8がそれぞれ独立にとりうる置換基として、ハロゲン原子、アルキル基（メチル基、エチル基、プロピル基、ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、ヘプチル基、オクチル基、ノニル基、デシル基、ウンデシル基、ドデシル基、トリデシル基、テトラデシル基、ペンタデシル基等の炭素数１～４０のアルキル基、ただし、２，６－ジメチルオクチル基、２－デシルテトラデシル基、２－ヘキシルドデシル基、２－エチルオクチル基、２－デシルテトラデシル基、２－ブチルデシル基、１－オクチルノニル基、２－エチルオクチル基、２－オクチルテトラデシル基、２－エチルヘキシル基、シクロアルキル基、ビシクロアルキル基、トリシクロアルキル基等を含む）、アルケニル基（１－ペンテニル基、シクロアルケニル基、ビシクロアルケニル基等を含む）、アルキニル基（１－ペンチニル基、トリメチルシリルエチニル基、トリエチルシリルエチニル基、トリ－ｉ－プロピルシリルエチニル基、２－ｐ－プロピルフェニルエチニル基等を含む）、アリール基（フェニル基、ナフチル基、ｐ－ペンチルフェニル基、３，４－ジペンチルフェニル基、ｐ－ヘプトキシフェニル基、３，４－ジヘプトキシフェニル基の炭素数６～２０のアリール基等を含む）、複素環基（ヘテロ環基といってもよい。２－ヘキシルフラニル基等を含む）、シアノ基、ヒドロキシル基、ニトロ基、アシル基（ヘキサノイル基、ベンゾイル基等を含む）、アルコキシ基（ブトキシ基等を含む）、アリールオキシ基、シリルオキシ基、ヘテロ環

オキシ基、アシルオキシ基、カルバモイルオキシ基、アミノ基（アニリノ基を含む）、アシルアミノ基、アミノカルボニルアミノ基（ウレイド基含む）、アルコキシおよびアリールオキシカルボニルアミノ基、アルキルおよびアリールスルホニルアミノ基、メルカプト基、アルキルおよびアリールチオ基（メチルチオ基、オクチルチオ基等を含む）、ヘテロ環チオ基、スルファモイル基、スルホ基、アルキルおよびアリールスルフィニル基、アルキルおよびアリールスルホニル基、アルキルおよびアリールオキシカルボニル基、カルバモイル基、アリールおよびヘテロ環アゾ基、イミド基、ホスフィノ基、ホスフィニル基、ホスフィニルオキシ基、ホスフィニルアミノ基、ホスホノ基、シリル基（ジトリメチルシロキシメチルブトキシ基等）、ヒドラジノ基、ウレイド基、ボロン酸基（－Ｂ（ＯＨ）$_2$）、ホスファト基（－ＯＰＯ（ＯＨ）$_2$）、スルファト基(－ＯＳＯ$_3$Ｈ)、その他の公知の置換基が挙げられる。

また、これら置換基は、さらに上記置換基を有していてもよい。また、前記一般式（１）で表される化合物が繰り返し構造を有する高分子化合物である場合は、Ｒ^1～Ｒ^{8}が重合性基由来の基を有していてもよい。

これらの中でも、Ｒ^1～Ｒ^{8}がそれぞれ独立にとりうる置換基として、アルキル基、アリール基、アルケニル基、アルキニル基、複素環基、アルコキシ基、アルキルチオ基、後述の一般式（Ｗ）で表される基が好ましく、炭素数１～１２のアルキル基、炭素数６～２０のアリール基、炭素数２～１２のアルケニル基、炭素数２～１２のアルキニル基、炭素数１～１１のアルコキシ基、炭素数５～１２の複素環基、炭素数１～１２のアルキルチオ基、後述の一般式（Ｗ）で表される基がより好ましく、後述の連結基鎖長が３．７Å以下の基および後述の一般式（Ｗ）で表される基が特に好ましく、後述の一般式（Ｗ）で表される基がより特に好ましい。

[0025] 前記一般式（Ｗ）で表される基について説明する。

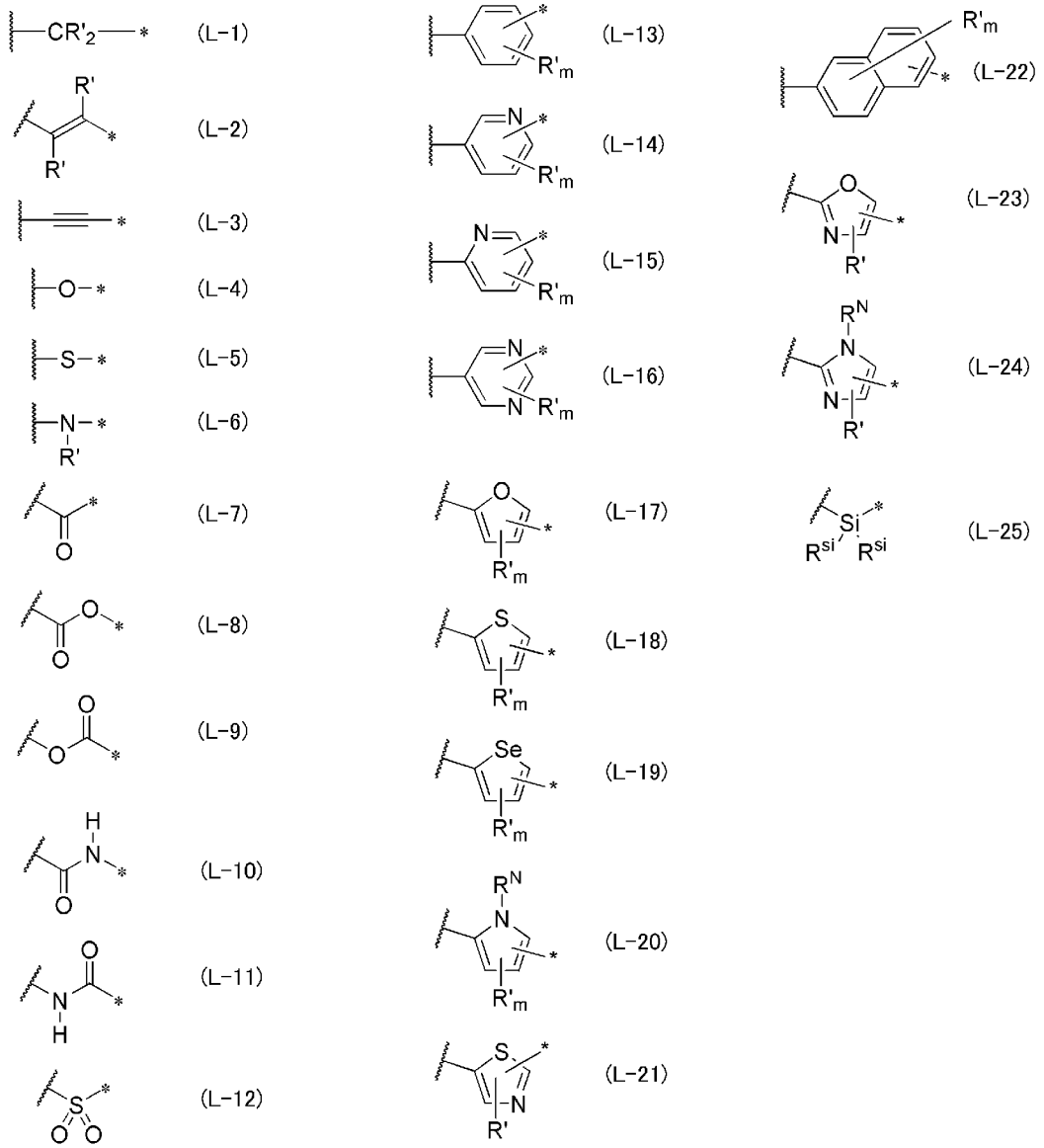
－Ｌ－Ｒ　　一般式（Ｗ）

一般式（Ｗ）中、Ｌは下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで

表される２価の連結基または２以上の下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基が結合した２価の連結基を表し、

Ｒは置換または無置換のアルキル基、シアノ基、ビニル基、エチニル基、オキシエチレン基、オキシエチレン単位の繰り返し数ｖが２以上のオリゴオキシエチレン基、シロキサン基、ケイ素原子数が２以上のオリゴシロキサン基、あるいは、置換または無置換のトリアルキルシリル基を表す：

[化17]



一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）中、波線部分は２つのヘテロ５員環が縮環したフェナントレン骨格との結合位置を表し、

一般式（Ｌ－１３）におけるｍは４を表し、一般式（Ｌ－１４）および（Ｌ－１５）におけるｍは３を表し、一般式（Ｌ－１６）～（Ｌ－２０）におけるｍは２を表し、（Ｌ－２２）におけるｍは６を表し、

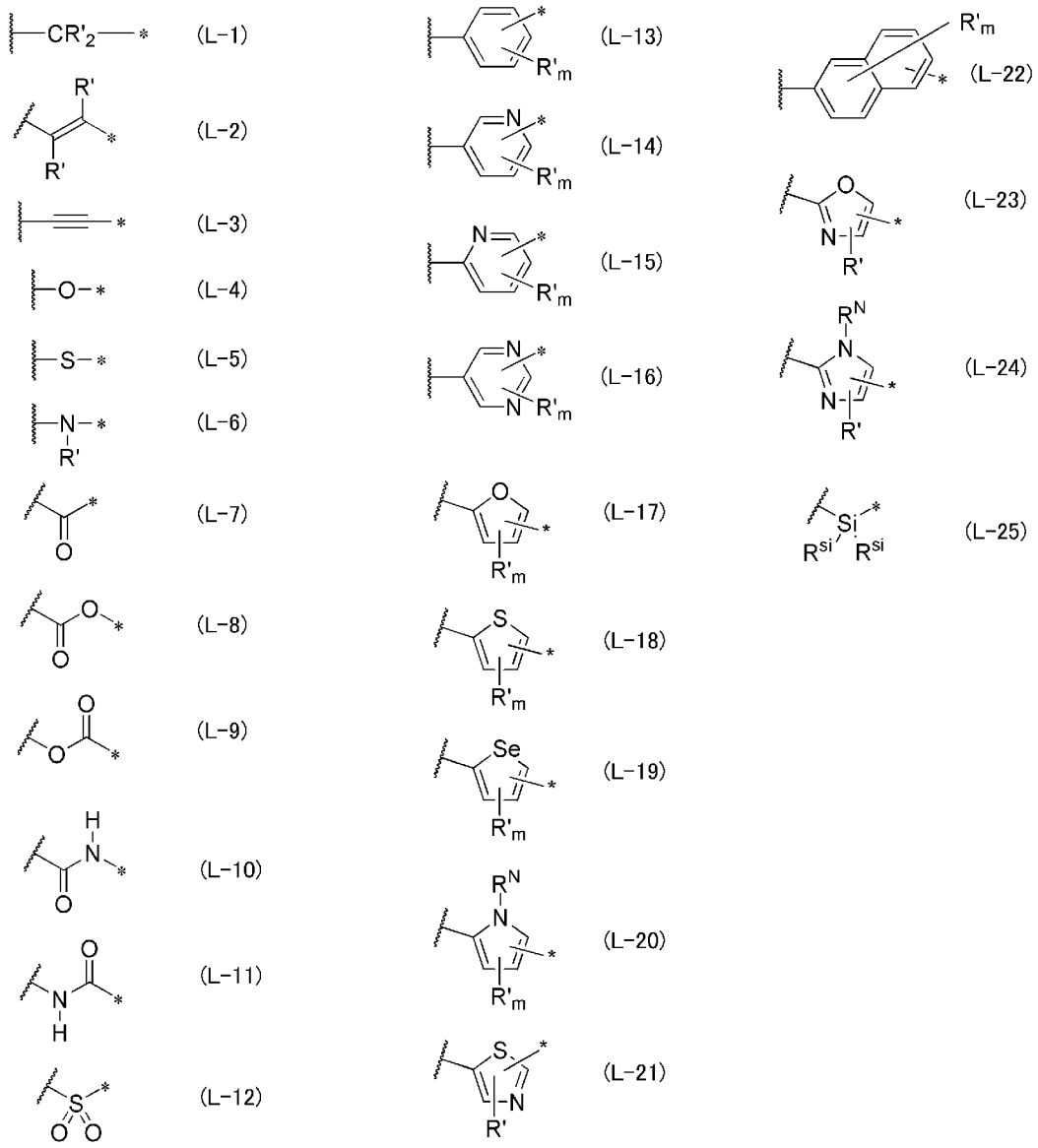
一般式（Ｌ－１）、（Ｌ－２）、（Ｌ－６）および（Ｌ－１３）～（Ｌ－２４）におけるＲ’はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、

R^Nは水素原子または置換基を表し、

R^{si}はそれぞれ独立に水素原子、アルキル基、アルケニル基またはアルキニル基を表す。

[0026] 一般式（Ｗ）において、Ｌは下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基または下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基が２つ以上が結合した２価の連結基を表す。

[化18]



[0027] 一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）において、波線部分は２つのヘテロ５員環が縮環したフェナントレン骨格との結合位置を表す。

＊は一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）で表される２価の連結基およびＲのいずれかとの結合位置を示す。

一般式（Ｌ－１３）におけるｍは４を表し、一般式（Ｌ－１４）および（Ｌ－１５）におけるｍは３を表し、一般式（Ｌ－１６）～（Ｌ－２０）におけるｍは２を表し、（Ｌ－２２）におけるｍは６を表す。

一般式（Ｌ－１）、（Ｌ－２）、（Ｌ－６）および（Ｌ－１３）～（Ｌ－

２４）におけるＲ’はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表す。

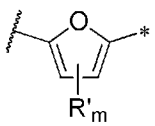
R^Nは水素原子または置換基を表す。

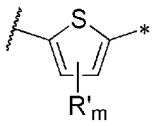
R^{si}はそれぞれ独立に水素原子、アルキル基、アルケニル基またはアルキニル基を表す。

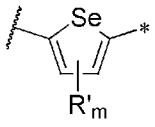
一般式（Ｌ－１）および（Ｌ－２）中のＲ’はそれぞれＬに隣接するＲと結合して縮合環を形成してもよい。

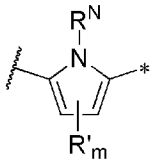
この中でも、一般式（Ｌ－１９）～（Ｌ－２１）、（Ｌ－２３）および（Ｌ－２４）で表される２価の連結基は、下記一般式（Ｌ－１９Ａ）～（Ｌ－２１Ａ）、（Ｌ－２３Ａ）および（Ｌ－２４Ａ）で表される２価の連結基であることがより好ましい。

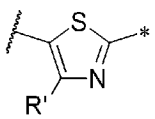
[化19]

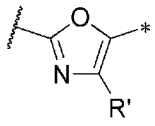

(L-17A)

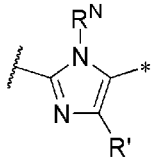

(L-18A)


(L-19A)


(L-20A)


(L-21A)


(L-23A)


(L-24A)

[0028] ここで、置換または無置換のアルキル基、オキシエチレン基、オキシエチレン単位の繰り返し数ｖが２以上のオリゴオキシエチレン基、シロキサン基、ケイ素原子数が２以上のオリゴシロキサン基、あるいは、置換または無置換のトリアルキルシリル基が置換基の末端に存在する場合は、一般式（Ｗ）

における－Ｒ単独と解釈することもでき、一般式（Ｗ）における－Ｌ－Ｒと解釈することもできる。

本発明では、主鎖が炭素数Ｎ個の置換または無置換のアルキル基が置換基の末端に存在する場合は、置換基の末端から可能な限りの連結基を含めた上で一般式（Ｗ）における－Ｌ－Ｒと解釈することとし、具体的には「一般式（Ｗ）におけるＬに相当する（Ｌ－１）１個」と「一般式（Ｗ）におけるＲに相当する主鎖が炭素数Ｎ－１個の置換または無置換のアルキル基」とが結合した置換基として解釈する。例えば、炭素数８のアルキル基であるｎ－オクチル基が置換基の末端に存在する場合、２個のＲ’が水素原子である（Ｌ－１）１個と、炭素数７のｎ－ヘプチル基とが結合した置換基として解釈する。

一方、本発明では、オキシエチレン基、オキシエチレン単位の繰り返し数ｖが２以上のオリゴオキシエチレン基、シロキサン基、ケイ素原子数が２以上のオリゴシロキサン基、あるいは、置換または無置換のトリアルキルシリル基が置換基の末端に存在する場合は、置換基の末端から可能な限りの連結基を含めた上で、一般式（Ｗ）におけるＲ単独と解釈する。例えば、－（ＯＣＨ$_2$ＣＨ$_2$）－（ＯＣＨ$_2$ＣＨ$_2$）－（ＯＣＨ$_2$ＣＨ$_2$）－ＯＣＨ$_3$基が置換基の末端に存在する場合、オキシエチレン単位の繰り返し数ｖが３のオリゴオキシエチレン基単独の置換基として解釈する。

[0029] 前記Ｌが一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基が結合した連結基を形成する場合、一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基の結合数は２～４であることが好ましく、２または３であることがより好ましい。

[0030] 一般式（Ｌ－１）、（Ｌ－２）、（Ｌ－６）および（Ｌ－１３）～（Ｌ－２４）中の置換基Ｒ’としては、上記の一般式（１）のＲ^1～Ｒ^{8}が採りうる置換基として例示したものを挙げることができる。その中でも一般式（Ｌ－６）中の置換基Ｒ’はアルキル基であることが好ましく、（Ｌ－６）中のＲ’がアルキル基である場合は、このアルキル基の炭素数は１～９であること

が好ましく、４～９であることが化学的安定性、キャリア輸送性の観点からより好ましく、５～９であることがさらに好ましい。（Ｌ－６）中のＲ’がアルキル基である場合は、このアルキル基は直鎖アルキル基であることが、キャリア移動度を高めることができる観点から好ましい。

R^Nは水素原子または置換基を表し、R^Nとしては、上記の一般式（１）のR^1～R^8が採りうる置換基として例示したものを挙げることができる。その中でもR^Nとしては水素原子またはメチル基が好ましい。

R^{si}はそれぞれ独立に水素原子、アルキル基、アルケニル基アルキニル基を表し、アルキル基であることが好ましい。R^{si}がとり得るアルキル基としては特に制限はないが、R^{si}がとり得るアルキル基の好ましい範囲はＲがシリル基である場合にこのシリル基がとり得るアルキル基の好ましい範囲と同様である。R^{si}がとり得るアルケニル基としては特に制限はないが、置換または無置換のアルケニル基が好ましく、分枝アルケニル基であることがより好ましく、このアルケニル基の炭素数は２～３であることが好ましい。R^{si}がとり得るアルキニル基としては特に制限はないが、置換または無置換のアルキニル基が好ましく、分枝アルキニル基であることがより好ましく、このアルキニル基の炭素数は２～３であることが好ましい。

[0031] Ｌは前記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－５）、（Ｌ－１３）、（Ｌ－１７）もしくは（Ｌ－１８）のいずれかで表される２価の連結基、または前記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－５）、（Ｌ－１３）、（Ｌ－１７）もしくは（Ｌ－１８）のいずれかで表される２価の連結基が２以上結合した２価の連結基であることが好ましく、一般式（Ｌ－１）、（Ｌ－３）、（Ｌ－１３）もしくは（Ｌ－１８）のいずれかで表される２価の連結基または一般式（Ｌ－１）、（Ｌ－３）、（Ｌ－１３）もしくは（Ｌ－１８）で表される２価の連結基が２以上結合した２価の連結基であることがより好ましく、（Ｌ－１）、（Ｌ－３）、（Ｌ－１３）もしくは（Ｌ－１８）で表される２価の連結基、あるいは前記一般式（Ｌ－３）、（Ｌ－１３）または（Ｌ－１８）のいずれか１つで表される２価の連結基と前記一般式（Ｌ－１）で表される２価の連結基が

結合した２価の連結基であることが特に好ましい。前記一般式（Ｌ－３）、（Ｌ－１３）または（Ｌ－１８）のいずれか１つで表される２価の連結基と前記一般式（Ｌ－１）で表される２価の連結基が結合した２価の連結基は、前記一般式（Ｌ－１）で表される２価の連結基がＲ側に結合することが好ましい。

化学的安定性、キャリア輸送性の観点から一般式（Ｌ－１）で表される２価の連結基を含む２価の連結基であることが特に好ましく、一般式（Ｌ－１）で表される２価の連結基であることがより特に好ましく、Ｌが前記一般式（Ｌ－１）で表される２価の連結基であり、Ｒが置換または無置換のアルキル基であることがさらにより特に好ましい。

[0032] 前記一般式（Ｗ）において、Ｒは置換または無置換のアルキル基、シアノ基、ビニル基、エチニル基、オキシエチレン基、オキシエチレン単位の繰り返し数が２以上のオリゴオキシエチレン基、シロキサン基、ケイ素原子数が２以上のオリゴシロキサン基、あるいは、置換または無置換のシリル基を表す。

前記一般式（Ｗ）において、Ｒに隣接するＬが前記一般式（Ｌ－１）で表される２価の連結基である場合は、Ｒは置換または無置換のアルキル基、オキシエチレン基、オキシエチレン単位の繰り返し数が２以上のオリゴオキシエチレン基、シロキサン基、ケイ素原子数が２以上のオリゴシロキサン基であることが好ましく、置換または無置換のアルキル基であることがより好ましい。

前記一般式（Ｗ）において、Ｒに隣接するＬが前記一般式（Ｌ－２）および（Ｌ－４）～（Ｌ－２５）で表される２価の連結基である場合は、Ｒは置換または無置換のアルキル基であることがより好ましい。

前記一般式（Ｗ）において、Ｒに隣接するＬが前記一般式（Ｌ－３）で表される２価の連結基である場合は、Ｒは置換または無置換のアルキル基、置換または無置換のシリル基であることが好ましい。

[0033] Ｒが置換または無置換のアルキル基の場合、炭素数は４～１７であること

が好ましく、６～１４であることが化学的安定性、キャリア輸送性の観点からより好ましく、６～１２であることがさらに好ましい。Ｒが上記の範囲の長鎖アルキル基であること、特に長鎖の直鎖アルキル基であることが、分子の直線性が高まり、キャリア移動度を高めることができる観点から好ましい。

Ｒがアルキル基を表す場合、直鎖アルキル基でも、分枝アルキル基でも、環状アルキル基でもよいが、直鎖アルキル基であることが、分子の直線性が高まり、キャリア移動度を高めることができる観点から好ましい。

これらの中でも、前記一般式（Ｗ）におけるＲとＬの組み合わせとしては、前記一般式（１）、（２－１）または（２－２）中、Ｌ、Ｌ^{a}、Ｌ^{b}およびＬ^{c}が全て前記一般式（Ｌ－１）で表される２価の連結基であり、かつ、Ｒ、Ｒ^{a}、Ｒ^{b}およびＲ^{c}が全て直鎖の炭素数７～１７のアルキル基であるか；あるいは、Ｌ、Ｌ^{a}、Ｌ^{b}およびＬ^{c}が全て前記一般式（Ｌ－３）、（Ｌ－１３）または（Ｌ－１８）のいずれか１つで表される２価の連結基と前記一般式（Ｌ－１）で表される２価の連結基が結合した２価の連結基であり、かつ、Ｒ、Ｒ^{a}、Ｒ^{b}およびＲ^{c}が全て直鎖のアルキル基であることが、キャリア移動度を高める観点から好ましい。

Ｌ、Ｌ^{a}、Ｌ^{b}およびＬ^{c}が全て前記一般式（Ｌ－１）で表される２価の連結基であり、かつ、Ｒ、Ｒ^{a}、Ｒ^{b}およびＲ^{c}が全て直鎖の炭素数７～１７のアルキル基である場合、Ｒ、Ｒ^{a}、Ｒ^{b}およびＲ^{c}が全て直鎖の炭素数７～１４のアルキル基であることがキャリア移動度を高める観点からより好ましく、直鎖の炭素数７～１２のアルキル基であることが特に好ましい。

Ｌ、Ｌ^{a}、Ｌ^{b}およびＬ^{c}が全て前記一般式（Ｌ－３）、（Ｌ－１３）または（Ｌ－１８）のいずれか１つで表される２価の連結基と前記一般式（Ｌ－１）で表される２価の連結基が結合した２価の連結基であり、かつ、Ｒ、Ｒ^{a}、Ｒ^{b}およびＲ^{c}が全て直鎖のアルキル基である場合、Ｒ、Ｒ^{a}、Ｒ^{b}およびＲ^{c}が全て直鎖の炭素数４～１７のアルキル基であることがより好ましく、直鎖の炭素数６～１４のアルキル基であることが化学的安定性、キャリア輸送性の

観点からより好ましく、直鎖の炭素数６～１２のアルキル基であることがキャリア移動度を高める観点から特に好ましい。

一方、有機溶媒への溶解度を高める観点からは、Ｒが分枝アルキル基であることが好ましい。

Ｒが置換基を有するアルキル基である場合のこの置換基としては、ハロゲン原子などを挙げることができ、フッ素原子が好ましい。なお、Ｒがフッ素原子を有するアルキル基である場合はこのアルキル基の水素原子が全てフッ素原子で置換されてパーフルオロアルキル基を形成してもよい。ただし、Ｒは無置換のアルキル基であることが好ましい。

[0034] 前記Ｒがエチレンオキシ基、または、オキシエチレン基の繰り返し数が２以上のオリゴエチレンオキシ基の場合、Ｒが表す「オリゴオキシエチレン基」とは本明細書中、－（ＯＣＨ$_2$ＣＨ$_2$）$_v$ＯＹで表される基のことを言う（オキシエチレン単位の繰り返し数ｖは２以上の整数を表し、末端のＹは水素原子または置換基を表す）。なお、オリゴオキシエチレン基の末端のＹが水素原子である場合はヒドロキシ基となる。オキシエチレン単位の繰り返し数ｖは２～４であることが好ましく、２～３であることがさらに好ましい。オリゴオキシエチレン基の末端のヒドロキシ基は封止されていること、すなわちＹが置換基を表すことが好ましい。この場合、ヒドロキシ基は、炭素数が１～３のアルキル基で封止されること、すなわちＹが炭素数１～３のアルキル基であることが好ましく、Ｙがメチル基やエチル基であることがより好ましく、メチル基であることが特に好ましい。

[0035] 前記Ｒが、シロキサン基、または、ケイ素原子数が２以上のオリゴシロキサン基の場合、シロキサン単位の繰り返し数は２～４であることが好ましく、２～３であることがさらに好ましい。また、Ｓｉ原子には、水素原子やアルキル基が結合することが好ましい。Ｓｉ原子にアルキル基が結合する場合、アルキル基の炭素数は１～３であることが好ましく、例えば、メチル基やエチル基が結合することが好ましい。Ｓｉ原子には、同一のアルキル基が結合してもよく、異なるアルキル基または水素原子が結合してもよい。また、

オリゴシロキサン基を構成するシロキサン単位はすべて同一であっても異なっていてもよいが、すべて同一であることが好ましい。

[0036] Ｒに隣接するＬが前記一般式（Ｌ－３）で表される２価の連結基である場合、Ｒが置換または無置換のシリル基であることも好ましい。Ｒが置換または無置換のシリル基である場合はその中でも、Ｒが置換シリル基であることが好ましい。シリル基の置換基としては特に制限はないが、置換または無置換のアルキル基が好ましく、分枝アルキル基であることがより好ましい。Ｒがトリアルキルシリル基の場合、Ｓｉ原子に結合するアルキル基の炭素数は１～３であることが好ましく、例えば、メチル基やエチル基やイソプロピル基が結合することが好ましい。Ｓｉ原子には、同一のアルキル基が結合してもよく、異なるアルキル基が結合してもよい。Ｒがアルキル基上にさらに置換基を有するトリアルキルシリル基である場合のこの置換基としては、特に制限はない。

[0037] 一般式（Ｗ）において、ＬおよびＲに含まれる炭素数の合計は５～１８であることが好ましい。ＬおよびＲに含まれる炭素数の合計が上記範囲の下限値以上であると、キャリア移動度が高くなり、駆動電圧を低くなる。ＬおよびＲに含まれる炭素数の合計が上記範囲の上限値以下であると、有機溶媒に対する溶解性が高くなる。

ＬおよびＲに含まれる炭素数の合計は５～１４であることが好ましく、６～１４であることがより好ましく、６～１２であることが特に好ましく、８～１２であることがより特に好ましい。

[0038] 前記一般式（１）で表される化合物中、R^1～R^8のうち、前記一般式（Ｗ）で表される基は１～４個であることが、キャリア移動度を高め、有機溶媒への溶解性を高める観点から好ましく、１または２個であることがより好ましく、２個であることが特に好ましい。

R^1～R^8のうち、前記一般式（Ｗ）で表される基の位置に特に制限はないが、R^5またはR^6であることが、キャリア移動度を高め、有機溶媒への溶解性を高める観点から好ましい。

[0039] Ｒ[1]～Ｒ[8]のうち、前記一般式（Ｗ）で表される基以外の置換基は、０～４個であることが好ましく、０～２個であることがより好ましく、０または１個であることが特に好ましく、０個であることがより特に好ましい。

[0040] Ｒ[1]～Ｒ[8]が一般式（Ｗ）で表される置換基以外の置換基である場合の置換基は、連結基鎖長が３．７Å以下の基であることが好ましく、連結基鎖長が１．０～３．７Åの基であることが好ましく、連結基鎖長が１．０～２．１Åの基であることがより好ましい。

ここで、連結基鎖長とはフェナントレン構造のＣ－Ｒ[8]結合におけるＣ原子から置換基Ｒ[8]の末端までの長さのことを指す。構造最適化計算は、密度汎関数法（Ｇａｕｓｓｉａｎ０３（米ガウシアン社）／基底関数：６－３１Ｇ＊、交換相関汎関数：Ｂ３ＬＹＰ／ＬＡＮＬ２ＤＺ）を用いて行うことができる。なお、代表的な置換基の分子長としては、プロピル基は４．６Å、ピロール基は４．６Å、プロピニル基は４．５Å、プロペニル基は４．６Å、エトキシ基は４．５Å、メチルチオ基は３．７Å、エテニル基は３．４Å、エチル基は３．５Å、エチニル基は３．６Å、メトキシ基は３．３Å、メチル基は２．１Å、水素原子は１．０Åである。

Ｒ[1]～Ｒ[8]が一般式（Ｗ）で表される置換基以外の置換基である場合の置換基はそれぞれ独立に炭素数２以下の置換または無置換のアルキル基、炭素数２以下の置換または無置換のアルキニル基、炭素数２以下の置換または無置換のアルケニル基、炭素数２以下の置換または無置換のアシル基であることが好ましく、炭素数２以下の置換または無置換のアルキル基であることがより好ましい。

Ｒ[1]～Ｒ[8]が一般式（Ｗ）で表される置換基以外の置換基である場合の置換基がそれぞれ独立に炭素数２以下の置換アルキル基を表す場合、このアルキル基がとり得る置換基としては、シアノ基、フッ素原子、重水素原子などを挙げることができ、シアノ基が好ましい。一般式（Ｗ）で表される置換基以外の置換基である場合の置換基が表す炭素数２以下の置換または無置換のアルキル基としては、メチル基、エチル基、シアノ基置換のメチル基が好まし

く、メチル基またはシアノ基置換のメチル基がより好ましく、シアノ基置換のメチル基が特に好ましい。

R^1～R^8が一般式（W）で表される置換基以外の置換基である場合の置換基がそれぞれ独立に炭素数２以下の置換アルキニル基を表す場合、このアルキニル基がとり得る置換基としては、重水素原子などを挙げることができる。一般式（W）で表される置換基以外の置換基である場合の置換基が表す炭素数２以下の置換または無置換のアルキニル基としては、エチニル基、重水素原子置換のアセチレン基を挙げることができ、エチニル基が好ましい。

R^1～R^8が一般式（W）で表される置換基以外の置換基である場合の置換基がそれぞれ独立に炭素数２以下の置換アルケニル基を表す場合、このアルケニル基がとり得る置換基としては、重水素原子などを挙げることができる。一般式（W）で表される置換基以外の置換基である場合の置換基が表す炭素数２以下の置換または無置換のアルケニル基としては、エテニル基、重水素原子置換のエテニル基を挙げることができ、エテニルが好ましい。

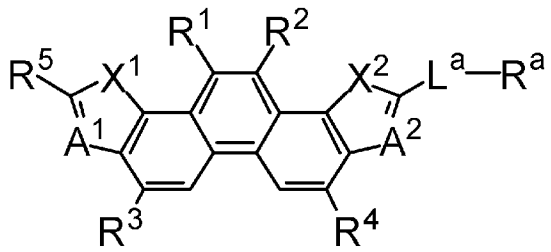
R^1～R^8が一般式（W）で表される置換基以外の置換基である場合の置換基がそれぞれ独立に炭素数２以下の置換アシル基を表す場合、このアシル基がとり得る置換基としては、フッ素原子などを挙げることができる。一般式（W）で表される置換基以外の置換基である場合の置換基が表す炭素数２以下の置換または無置換のアシル基としては、ホルミル基、アセチル基、フッ素置換のアセチル基を挙げることができ、ホルミル基が好ましい。

[0041] 前記一般式（１）で表される化合物は、下記一般式（２－１）または（２－２）で表される化合物であることが好ましく、高移動度の観点からは前記一般式（２－１）で表される化合物であることが特に好ましい。

前記一般式（１）で表される化合物が下記一般式（２－１）で表される化合物である場合について、まず説明する。

一般式（２－１）

[化20]



一般式（２－１）中、Ｘ[1]およびＸ[2]はそれぞれ独立にＯ原子またはＳ原子を表し、

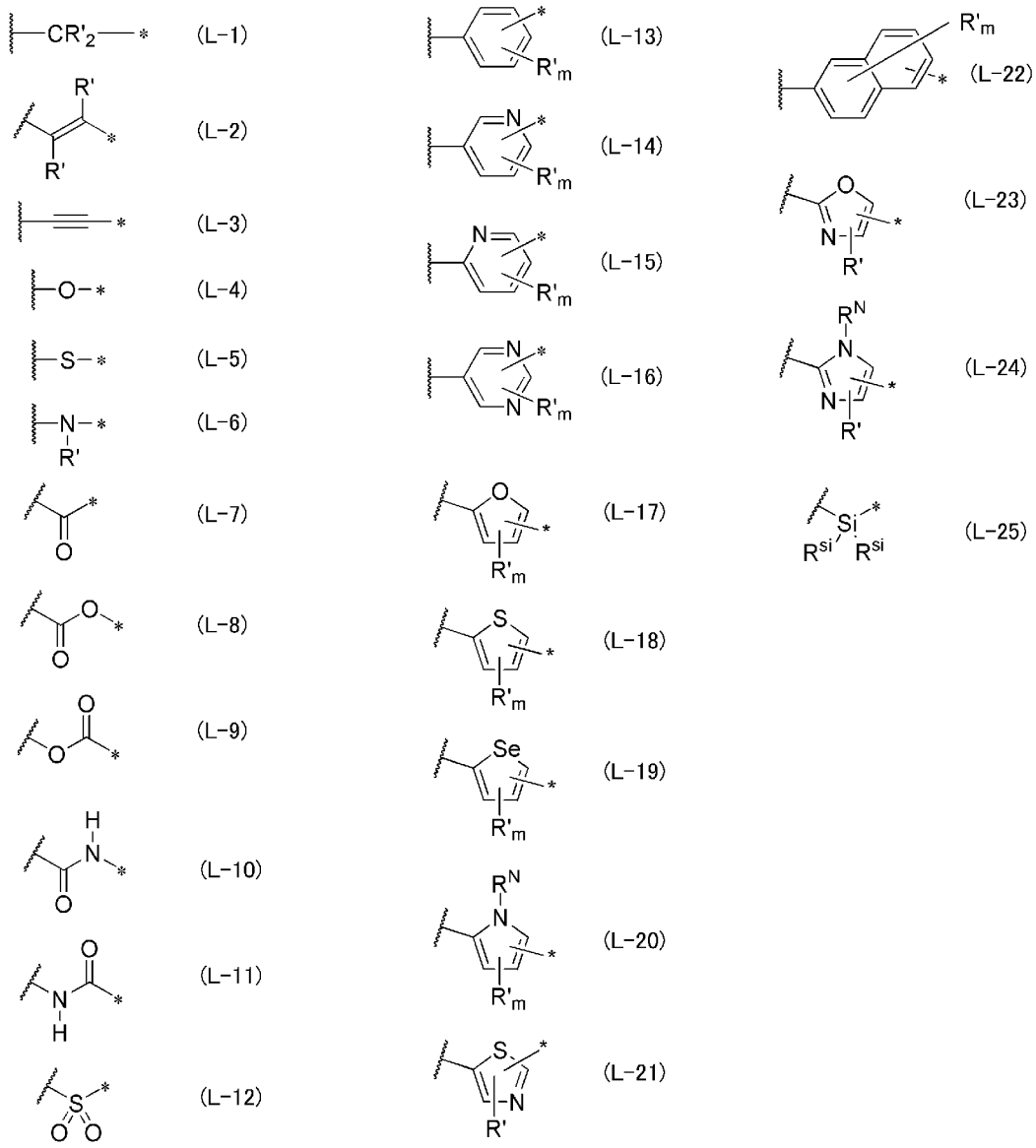
Ａ[1]はＣＲ[7]またはＮ原子を表し、Ａ[2]はＣＲ[8]またはＮ原子を表し、

Ｒ[1]～Ｒ[5]、Ｒ[7]およびＲ[8]はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、Ｒ[5]は－Ｌ[a]－Ｒ[a]で表される基ではなく、

Ｌ[a]は下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基または２以上の下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基が結合した２価の連結基を表し、

Ｒ[a]は置換または無置換のアルキル基、シアノ基、ビニル基、エチニル基、オキシエチレン基、オキシエチレン単位の繰り返し数ｖが２以上のオリゴオキシエチレン基、シロキサン基、ケイ素原子数が２以上のオリゴシロキサン基、あるいは、置換または無置換のトリアルキルシリル基を表す；

[化21]



一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）中、波線部分は２つのヘテロ５員環が縮環したフェナントレン骨格との結合位置を表し、

一般式（Ｌ－１３）におけるｍは４を表し、一般式（Ｌ－１４）および（Ｌ－１５）におけるｍは３を表し、一般式（Ｌ－１６）～（Ｌ－２０）におけるｍは２を表し、（Ｌ－２２）におけるｍは６を表し、

一般式（Ｌ－１）、（Ｌ－２）、（Ｌ－６）および（Ｌ－１３）～（Ｌ－２４）におけるＲ’はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、

R^Nは水素原子または置換基を表し、

R^{si}はそれぞれ独立に水素原子、アルキル基、アルケニル基またはアルキニル基を表す。

[0042] 一般式（２－１）中、X^1およびX^2はそれぞれ独立にＯ原子またはＳ原子を表す。一般式（２－１）におけるX^1およびX^2の好ましい範囲は一般式（１）におけるX^1およびX^2の好ましい範囲と同様である。

一般式（２－１）中、A^1はＣR^7またはＮ原子を表し、A^2はＣR^8またはＮ原子を表す。一般式（２－１）中のA^1、A^2、R^7およびR^8は、一般式（１）中のA^1、A^2、R^7およびR^8とそれぞれ同義である。一般式（２－１）中のA^1およびA^2の好ましい範囲は、一般式（１）中のA^1およびA^2の好ましい範囲と同様である。

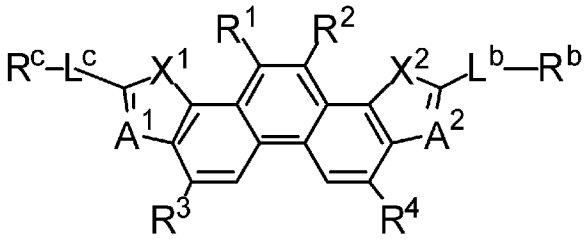
一般式（２－１）中、R^1～R^5、R^7およびR^8はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、R^5は－L^a－R^aで表される基ではない。一般式（２－１）中のR^1～R^5、R^7およびR^8が置換基を表す場合、この置換基の好ましい範囲は、一般式（１）中のR^1～R^8が一般式（Ｗ）で表される置換基以外の置換基である場合の好ましい範囲と同様である。

一般式（２－１）中、L^aは前記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基または２以上の下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基が結合した２価の連結基を表し、R^aは置換または無置換のアルキル基、シアノ基、ビニル基、エチニル基、オキシエチレン基、オキシエチレン単位の繰り返し数ｖが２以上のオリゴオキシエチレン基、シロキサン基、ケイ素原子数が２以上のオリゴシロキサン基、あるいは、置換または無置換のトリアルキルシリル基を表す。一般式（２－１）中のL^aおよびR^aの好ましい範囲は、一般式（１）中のＬおよびＲの好ましい範囲と同様である。

[0043] 次に、前記一般式（１）で表される化合物が、下記一般式（２－２）で表される化合物である場合について説明する。

[化22]

一般式（２－２）



一般式（２－２）中、Ｘ[1]およびＸ[2]はそれぞれ独立にＯ原子またはＳ原子を表し、

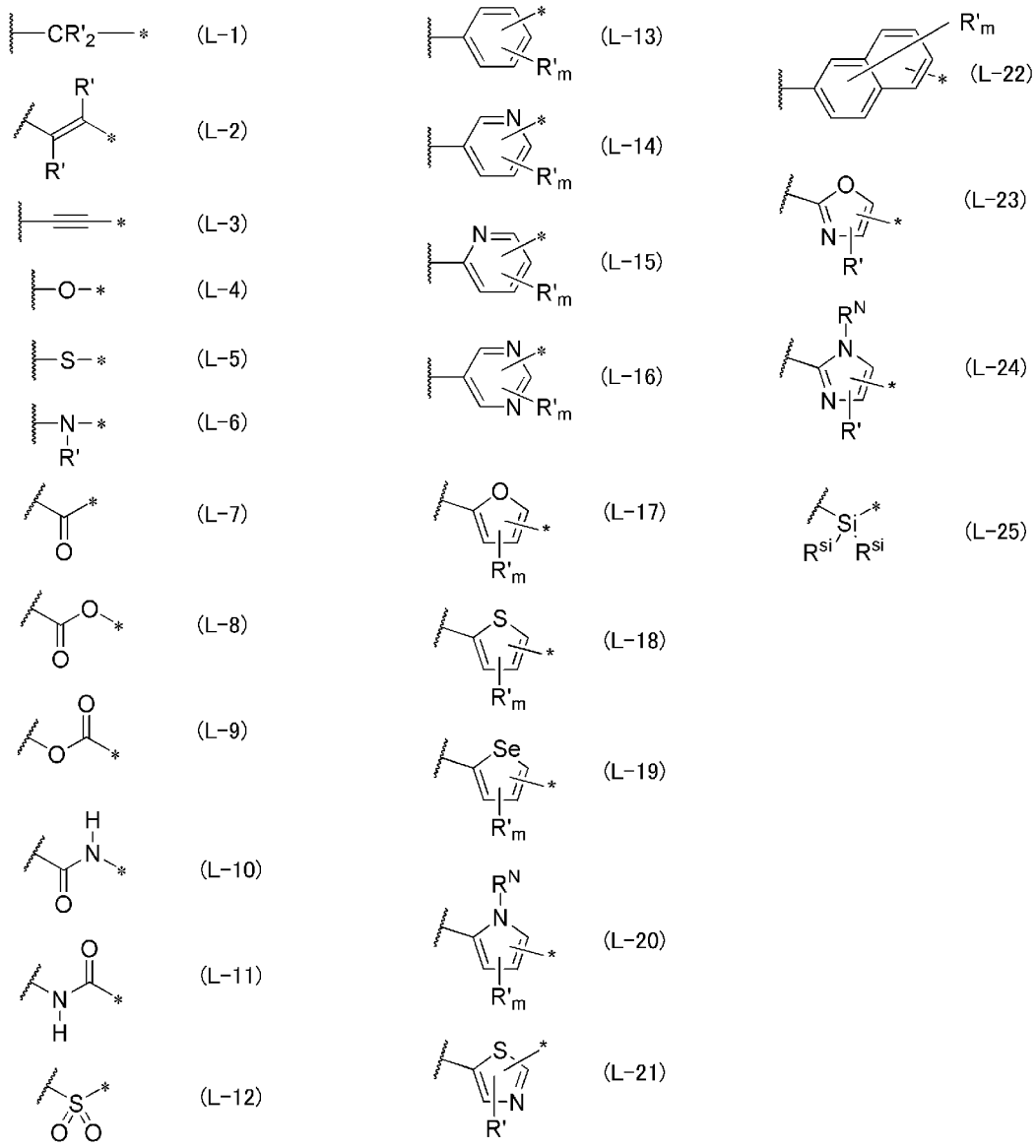
Ａ[1]はＣＲ[7]またはＮ原子を表し、Ａ[2]はＣＲ[8]またはＮ原子を表し、

Ｒ[1]～Ｒ[4]、Ｒ[7]およびＲ[8]はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、

Ｌ[b]およびＬ[c]はそれぞれ独立に下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基または２以上の下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基が結合した２価の連結基を表し、

Ｒ[b]およびＲ[c]はそれぞれ独立に置換または無置換のアルキル基、シアノ基、ビニル基、エチニル基、オキシエチレン基、オキシエチレン単位の繰り返し数ｖが２以上のオリゴオキシエチレン基、シロキサン基、ケイ素原子数が２以上のオリゴシロキサン基、あるいは、置換または無置換のトリアルキルシリル基を表す；

[化23]



一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）中、波線部分は２つのヘテロ５員環が縮環したフェナントレン骨格との結合位置を表し、

一般式（Ｌ－１３）におけるｍは４を表し、一般式（Ｌ－１４）および（Ｌ－１５）におけるｍは３を表し、一般式（Ｌ－１６）～（Ｌ－２０）におけるｍは２を表し、（Ｌ－２２）におけるｍは６を表し、

一般式（Ｌ－１）、（Ｌ－２）、（Ｌ－６）および（Ｌ－１３）～（Ｌ－２４）におけるＲ’はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、

R^Nは水素原子または置換基を表し、

R^{si}はそれぞれ独立に水素原子、アルキル基、アルケニル基またはアルキニル基を表す。

[0044] 一般式（２－２）中、X^1およびX^2はそれぞれ独立にＯ原子またはＳ原子を表す。一般式（２－２）におけるX^1およびX^2の好ましい範囲は一般式（１）におけるX^1およびX^2の好ましい範囲と同様である。

一般式（２－２）中、A^1はＣR^7またはＮ原子を表し、A^2はＣR^8またはＮ原子を表す。一般式（２－２）中のA^1、A^2、R^7およびR^8は、一般式（１）中のA^1、A^2、R^7およびR^8とそれぞれ同義である。一般式（２－２）中のA^1およびA^2の好ましい範囲は、一般式（１）中のA^1およびA^2の好ましい範囲と同様である。

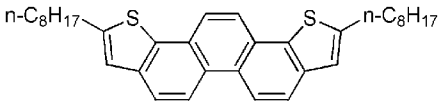
一般式（２－２）中、R^1～R^4、R^7およびR^8はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表す。一般式（２－２）中のR^1～R^4、R^7およびR^8が置換基を表す場合、この置換基の好ましい範囲は、一般式（１）中のR^1～R^8が一般式（Ｗ）で表される置換基以外の置換基である場合の好ましい範囲と同様である。

一般式（２－２）中、L^bおよびL^cはそれぞれ独立に一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基または２以上の一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基が結合した２価の連結基を表し、R^bおよびR^cはそれぞれ独立に置換または無置換のアルキル基、シアノ基、ビニル基、エチニル基、オキシエチレン基、オキシエチレン単位の繰り返し数ｖが２以上のオリゴオキシエチレン基、シロキサン基、ケイ素原子数が２以上のオリゴシロキサン基、あるいは、置換または無置換のトリアルキルシリル基を表す。一般式（２－２）中のL^bおよびL^cの好ましい範囲は一般式（１）中のＬの好ましい範囲と同様であり、一般式（２－２）中のR^bおよびR^cの好ましい範囲は一般式（１）中のＲの好ましい範囲と同様である。

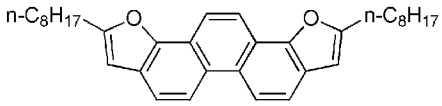
[0045] 上記一般式（１）で表される化合物の具体例を以下に示すが、本発明で用いることができる一般式（１）で表される化合物は、これらの具体例により

限定的に解釈されるべきものではない。

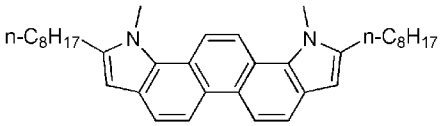
[0046] [化24]



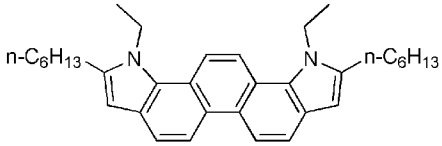
化合物1



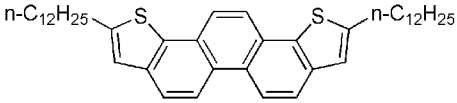
化合物2



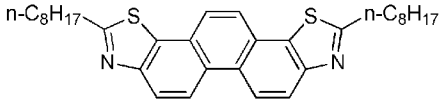
化合物3



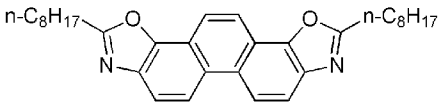
化合物4



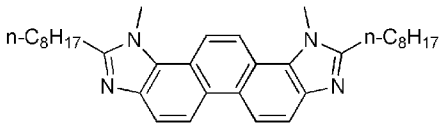
化合物5



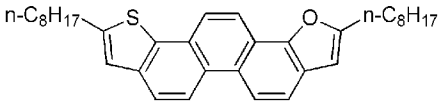
化合物6



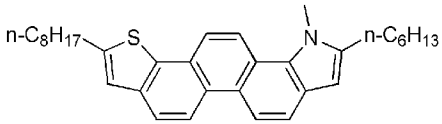
化合物7



化合物8



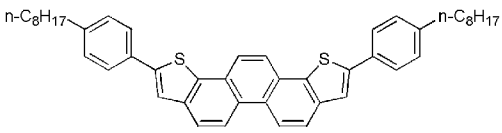
化合物9



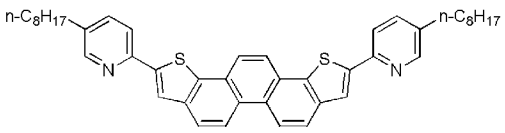
化合物10

[0047]

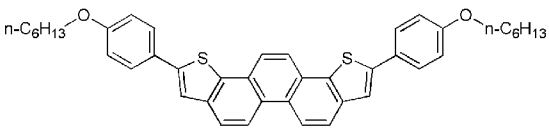
[化25]



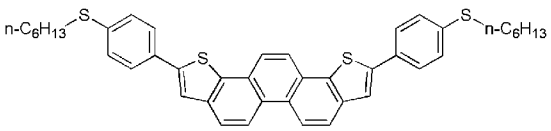
化合物11



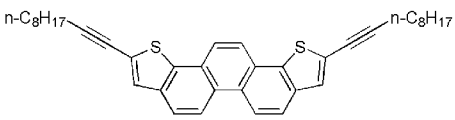
化合物12



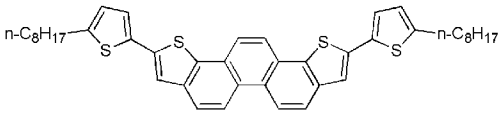
化合物13



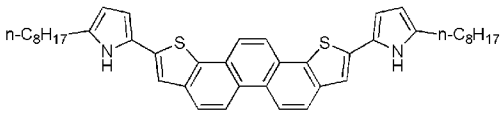
化合物14



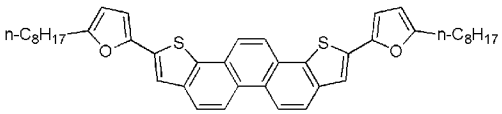
化合物15



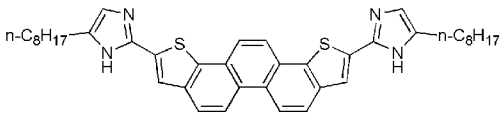
化合物16



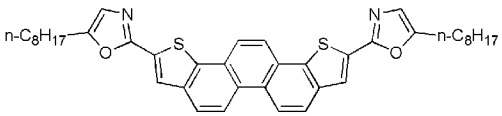
化合物17



化合物18



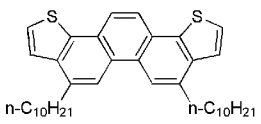
化合物19



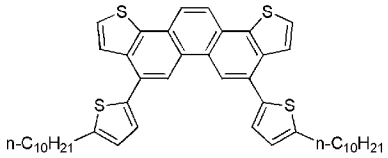
化合物20

[0048]

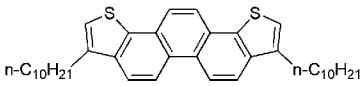
[化26]



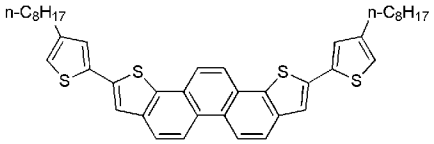
化合物21



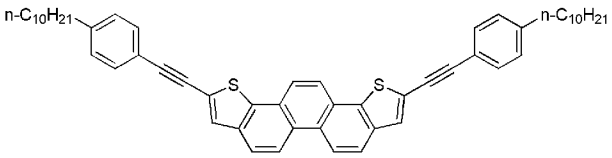
化合物22



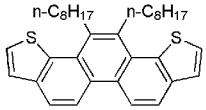
化合物23



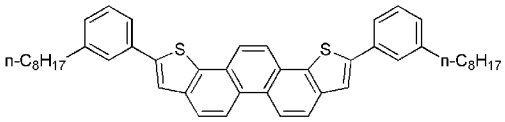
化合物24



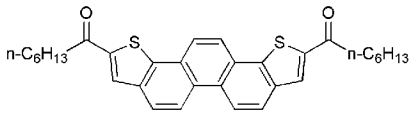
化合物25



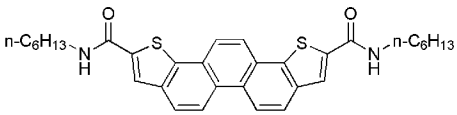
化合物26



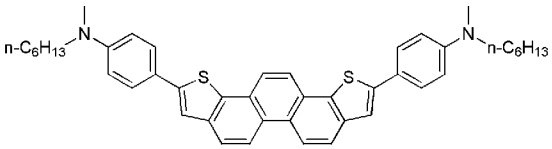
化合物27



化合物28



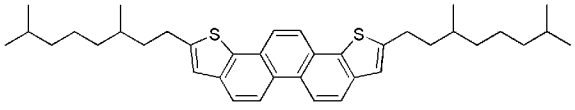
化合物29

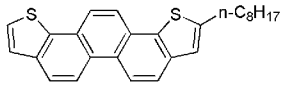


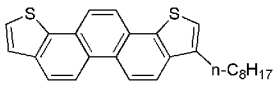
化合物30

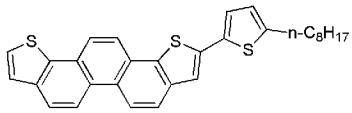
[0049]

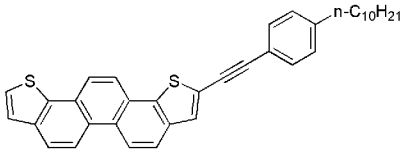
[化27]

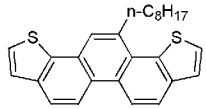

化合物31

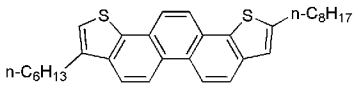

化合物32

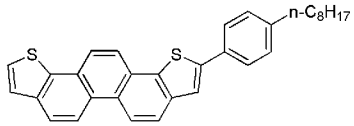

化合物33

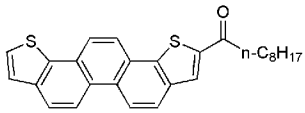

化合物34

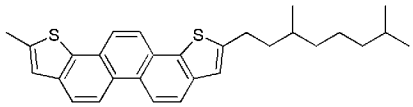

化合物35


化合物36


化合物37


化合物38


化合物39


化合物40

[0050] 上記一般式（１）で表される化合物は、繰り返し構造をとってもよく、低分子でも高分子でも良い。前記一般式（１）で表される化合物が低分子化合物の場合は、分子量が３０００以下であることが好ましく、２０００以下であることがより好ましく、１０００以下であることがさらに好ましく、８５０以下であることが特に好ましい。分子量を上記上限値以下とすることにより、溶媒への溶解性を高めることができるため好ましい。

一方で、膜の膜質安定性の観点からは、分子量は４００以上であることが好ましく、４５０以上であることがより好ましく、５００以上であることがさらに好ましい。

また、前記一般式（１）で表される化合物が繰り返し構造を有する高分子化合物の場合は、重量平均分子量が３万以上であることが好ましく、５万以

上であることがより好ましく、１０万以上であることがさらに好ましい。前記一般式（１）で表される化合物が繰り返し構造を有する高分子化合物である場合に、重量平均分子量を上記下限値以上とすることにより、分子間相互作用を高めることができ、高い移動度が得られるため好ましい。

繰り返し構造を有する高分子化合物としては、一般式（１）で表される化合物が少なくとも1つ以上のアリーレン基、ヘテロアリーレン基（チオフェン、ビチオフェン）を表して繰り返し構造を示すπ共役ポリマーや、一般式（１）で表される化合物が高分子主鎖に側鎖を介して結合したペンダント型ポリマーがあげられ、高分子主鎖としては、ポリアクリレート、ポリビニル、ポリシロキサンなどが好ましく、側鎖としては、アルキレン基、ポリエチレンオキシド基などが好ましい。

[0051] 前記一般式（１）で表される化合物は、後述のスキーム１に記載の化合物Ａを出発原料として公知文献（Ｏｒｇ．Ｌｅｔｔ．，２００１，３，３４７１、Ｍａｃｒｏｍｏｌｅｃｕｌｅｓ，２０１０，４３，６２６４、Ｔｅｔｒａｈｅｄｒｏｎ，２００２，５８，１０１９７）を参考に合成することができる。

本発明の化合物の合成において、いかなる反応条件を用いてもよい。反応溶媒としては、いかなる溶媒を用いてもよい。また、環形成反応促進のために、酸または塩基を用いることが好ましく、特に塩基を用いることが好ましい。最適な反応条件は、目的とする化合物の構造により異なるが、上記の文献に記載された具体的な反応条件を参考に設定することができる。

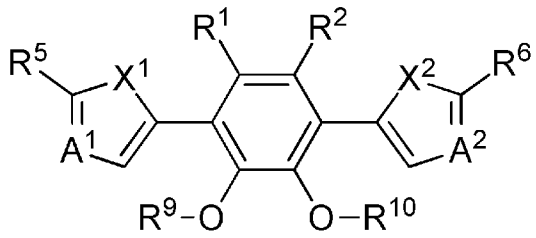
[0052] ＜中間体化合物＞

各種置換基を有する合成中間体は公知の反応を組み合わせて合成することができる。また、各置換基はいずれの中間体の段階で導入してもよい。中間体の合成後は、カラムクロマトグラフィー、再結晶等による精製を行った後、昇華精製により精製する事が好ましい。昇華精製により、有機不純物を分離できるだけでなく、無機塩や残留溶媒等を効果的に取り除くことができる。

本発明は、下記一般式（３）で表される化合物および下記一般式（４）で表される化合物にも関する。

一般式（３）

[化28]



一般式（３）中、Ｘ[1]およびＸ[2]はそれぞれ独立にＯ原子またはＳ原子を表し、

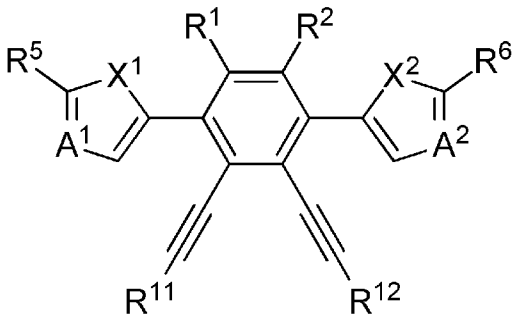
Ａ[1]はＣＲ[7]またはＮ原子を表し、Ａ[2]はＣＲ[8]またはＮ原子を表し、

Ｒ[1]、Ｒ[2]、Ｒ[5]～Ｒ[8]はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、

Ｒ[9]およびＲ[10]はそれぞれ独立に水素原子、アルキル基、アルキルカルボニル基、アリールカルボニル基またはトリフルオロメチルスルホニル基を表す。

一般式（４）

[化29]



一般式（４）において、Ｘ[1]およびＸ[2]はそれぞれ独立にＯ原子またはＳ原子を表し、

Ａ[1]はＣＲ[7]またはＮ原子を表し、Ａ[2]はＣＲ[8]またはＮ原子を表し、

Ｒ[1]、Ｒ[2]、Ｒ[5]～Ｒ[8]はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、

Ｒ[11]およびＲ[12]はそれぞれ独立に水素原子、アルキル基、トリアルキルシ

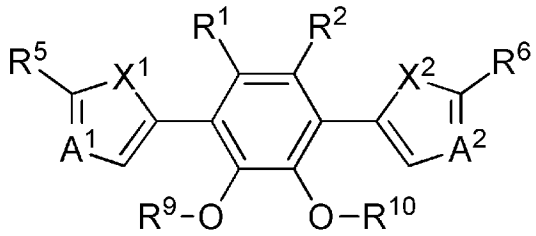
リル基、アルキル置換または無置換のアリール基、あるいは、アルキル置換または無置換のヘテロアリール基を表す。

[0053] 上述の一般式（３）で表される化合物および上述の一般式（４）で表される化合物は、上述の一般式（１）で表される化合物の中間体化合物であることが好ましい。上述の一般式（１）で表される化合物は、上述の一般式（３）で表される化合物および上述の一般式（４）で表される化合物を合成中間体化合物として経て、後述のスキーム１にしたがって、合成することができる。

[0054] まず、一般式（３）で表される化合物について説明する。

一般式（３）

[化30]



[0055] 一般式（３）中、X^1およびX^2はそれぞれ独立にＯ原子またはＳ原子を表す。一般式（３）におけるX^1およびX^2の好ましい範囲は一般式（１）におけるX^1およびX^2の好ましい範囲と同様である。

一般式（３）中、A^1はＣR^7またはＮ原子を表し、A^2はＣR^8またはＮ原子を表す。一般式（３）中のA^1、A^2、R^7およびR^8は、一般式（１）中のA^1、A^2、R^7およびR^8とそれぞれ同義である。一般式（３）中のA^1およびA^2の好ましい範囲は、一般式（１）中のA^1およびA^2の好ましい範囲と同様である。

一般式（３）中、R^1、R^2、R^5～R^8はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表す。一般式（３）中のR^1、R^2、R^5～R^8が置換基を表す場合、この置換基の好ましい範囲は、一般式（１）中のR^1～R^8が一般式（Ｗ）で表される置換基以外の置換基である場合の好ましい範囲と同様である。

一般式（３）中、R^9およびR^{10}はそれぞれ独立に水素原子、アルキル基、

アルキルカルボニル基、アリールカルボニル基またはトリフルオロメチルスルホニル基を表す。一般式（３）中のＲ[9]およびＲ[10]はそれぞれ独立に水素原子、アルキル基またはトリフルオロメチルスルホニル基であることが好ましい。

一般式（３）中のＲ[9]およびＲ[10]がアルキル基を表す場合のアルキル基としては、炭素数１～１０のアルキル基が好ましく、炭素数１～６のアルキル基がより好ましく、メチル基が特に好ましい。

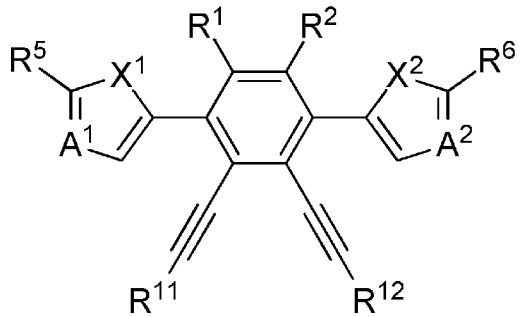
一般式（３）中のＲ[9]およびＲ[10]がアルキルカルボニル基を表す場合のアルキルカルボニル基としては、炭素数２～１１のアルキルカルボニル基が好ましく、炭素数２～７のアルキルカルボニル基がより好ましく、アセチル基が特に好ましい。

一般式（３）中のＲ[9]およびＲ[10]がアリールカルボニル基を表す場合のアリールカルボニル基としては、炭素数７～２０のアリールカルボニル基が好ましく、炭素数７～１３のアリールカルボニル基がより好ましく、フェニルカルボニル基が特に好ましい。

[0056] 次に、一般式（４）で表される化合物について説明する。

一般式（４）

[化31]



一般式（４）中、Ｘ[1]およびＸ[2]はそれぞれ独立にＯ原子またはＳ原子を表す。一般式（４）におけるＸ[1]およびＸ[2]の好ましい範囲は一般式（１）におけるＸ[1]およびＸ[2]の好ましい範囲と同様である。

一般式（４）中、Ａ[1]はＣＲ[7]またはＮ原子を表し、Ａ[2]はＣＲ[8]またはＮ原

子を表す。一般式（４）中のＡ^{1}、Ａ^{2}、Ｒ^{7}およびＲ^{8}は、一般式（１）中のＡ^{1}、Ａ^{2}、Ｒ^{7}およびＲ^{8}とそれぞれ同義である。一般式（４）中のＡ^{1}およびＡ^{2}の好ましい範囲は、一般式（１）中のＡ^{1}およびＡ^{2}の好ましい範囲と同様である。

一般式（４）中、Ｒ^{1}、Ｒ^{2}、Ｒ^{5}～Ｒ^{8}はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表す。一般式（４）中のＲ^{1}、Ｒ^{2}、Ｒ^{5}～Ｒ^{8}が置換基を表す場合、この置換基の好ましい範囲は、一般式（１）中のＲ^{1}～Ｒ^{8}が一般式（Ｗ）で表される置換基以外の置換基である場合の好ましい範囲と同様である。

一般式（４）中、Ｒ^{11}およびＲ^{12}はそれぞれ独立に水素原子、アルキル基、トリアルキルシリル基、アルキル置換または無置換のアリール基、またはアルキル置換または無置換のヘテロアリール基を表す。一般式（４）中のＲ^{11}およびＲ^{12}はそれぞれ独立にアルキル基、トリアルキルシリル基または水素原子であることが好ましく、トリアルキルシリル基または水素原子であることがより好ましい。

一般式（４）中のＲ^{11}およびＲ^{12}がアルキル基を表す場合のアルキル基としては、炭素数１～２４のアルキル基が好ましく、炭素数４～２０のアルキル基がより好ましく、炭素数６～１６のアルキル基が特に好ましい。

一般式（４）中のＲ^{11}およびＲ^{12}がトリアルキルシリル基を表す場合のトリアルキルシリル基としては、シリル基に置換する３個のアルキル基がそれぞれ独立に炭素数１～１０のトリアルキルシリル基が好ましく、炭素数１～４のトリアルキルシリル基がより好ましく、トリメチルシリル基（ＴＭＳ基）が特に好ましい。

一般式（４）中のＲ^{11}およびＲ^{12}がアルキル置換アリール基や無置換アリール基を表す場合のアリール基としては、炭素数６～１８のアリール基が好ましく、炭素数６～１０のアリール基がより好ましく、フェニル基が特に好ましい。アルキル置換アリール基を表す場合のアルキル基としては、炭素数１～２４のアルキル基が好ましく、炭素数４～２０のアルキル基がより好ましく、炭素数６～１６のアルキル基が特に好ましい。

一般式（４）中のＲ^{11}およびＲ^{12}がアルキル置換ヘテロアリール基や無置換アリール基を表す場合のヘテロアリール基としては、環員数５～７のヘテロアリール基が好ましく、環員数５～６のヘテロアリール基がより好ましく、チエニル基が特に好ましい。アルキル置換ヘテロアリール基を表す場合のアルキル基としては、炭素数１～２４のアルキル基が好ましく、炭素数４～２０のアルキル基がより好ましく、炭素数６～１６のアルキル基が特に好ましい。

[0057] ＜有機トランジスタの構造＞

本発明の有機トランジスタは、前記一般式（１）で表される化合物を含む半導体活性層を有する。

本発明の有機トランジスタは、さらに前記半導体活性層以外にその他の層を含んでいてもよい。

本発明の有機トランジスタは、有機電界効果トランジスタ（Ｆｉｅｌｄ Ｅｆｆｅｃｔ Ｔｒａｎｓｉｓｔｏｒ、ＦＥＴ）として用いられることが好ましく、ゲート－チャンネル間が絶縁されている絶縁ゲート型ＦＥＴとして用いられることがより好ましい。

以下、本発明の有機トランジスタの好ましい構造の態様について、図面を用いて詳しく説明するが、本発明はこれらの態様に限定されるものではない。

[0058] （積層構造）

有機電界効果トランジスタの積層構造としては特に制限はなく、公知の様々な構造のものとすることができる。

本発明の有機トランジスタの構造の一例としては、最下層の基板の上面に、電極、絶縁体層、半導体活性層（有機半導体層）、２つの電極を順に配置した構造（ボトムゲート・トップコンタクト型）を挙げることができる。この構造では、最下層の基板の上面の電極は基板の一部に設けられ、絶縁体層は、電極以外の部分で基板と接するように配置される。また、半導体活性層の上面に設けられる２つの電極は、互いに隔離して配置される。

ボトムゲート・トップコンタクト型素子の構成を図１に示す。図１は、本発明の有機トランジスタの一例の構造の断面を示す概略図である。図１の有機トランジスタは、最下層に基板１１を配置し、その上面の一部に電極１２を設け、さらにこの電極１２を覆い、かつ電極１２以外の部分で基板１１と接するように絶縁体層１３を設けている。さらに絶縁体層１３の上面に半導体活性層１４を設け、その上面の一部に２つの電極１５ａと１５ｂとを隔離して配置している。

図１に示した有機トランジスタは、電極１２がゲートであり、電極１５ａと電極１５ｂはそれぞれドレインまたはソースである。また、図１に示した有機トランジスタは、ドレイン－ソース間の電流通路であるチャンネルと、ゲートとの間が絶縁されている絶縁ゲート型ＦＥＴである。

[0059] 本発明の有機トランジスタの構造の一例としては、ボトムゲート・ボトムコンタクト型素子を挙げることができる。

ボトムゲート・ボトムコンタクト型素子の構成を図２に示す。図２は本発明の実施例でＦＥＴ特性測定用基板として製造した有機トランジスタの構造の断面を示す概略図である。図２の有機トランジスタは、最下層に基板３１を配置し、その上面の一部に電極３２を設け、さらにこの電極３２を覆い、かつ電極３２以外の部分で基板３１と接するように絶縁体層３３を設けている。さらに絶縁体層３３の上面に半導体活性層３５を設け、電極３４ａと３４ｂが半導体活性層３５の下部にある。

図２に示した有機トランジスタは、電極３２がゲートであり、電極３４ａと電極３４ｂはそれぞれドレインまたはソースである。また、図２に示した有機トランジスタは、ドレイン－ソース間の電流通路であるチャンネルと、ゲートとの間が絶縁されている絶縁ゲート型ＦＥＴである。

[0060] 本発明の有機トランジスタの構造としては、その他、絶縁体、ゲート電極が半導体活性層の上部にあるトップゲート・トップコンタクト型素子や、トップゲート・ボトムコンタクト型素子も好ましく用いることができる。

[0061] （厚さ）

本発明の有機トランジスタは、より薄いトランジスタとする必要がある場合には、例えばトランジスタ全体の厚さを０．１～０．５μｍとすることが好ましい。

[0062]（封止）

有機トランジスタ素子を大気や水分から遮断し、有機トランジスタ素子の保存性を高めるために、有機トランジスタ素子全体を金属の封止缶やガラス、窒化ケイ素などの無機材料、パリレンなどの高分子材料や、低分子材料などで封止してもよい。

以下、本発明の有機トランジスタの各層の好ましい態様について説明するが、本発明はこれらの態様に限定されるものではない。

[0063]＜基板＞

（材料）

本発明の有機トランジスタは、基板を含むことが好ましい。

前記基板の材料としては特に制限はなく、公知の材料を用いることができ、例えば、ポリエチレンナフタレート（ＰＥＮ）、ポリエチレンテレフタレート（ＰＥＴ）などのポリエステルフィルム、シクロオレフィンポリマーフィルム、ポリカーボネートフィルム、トリアセチルセルロース（ＴＡＣ）フィルム、ポリイミドフィルム、およびこれらポリマーフィルムを極薄ガラスに貼り合わせたもの、セラミック、シリコン、石英、ガラス、などを挙げることができ、シリコンが好ましい。

[0064]＜電極＞

（材料）

本発明の有機トランジスタは、電極を含むことが好ましい。

前記電極の構成材料としては、例えば、Ｃｒ、Ａｌ、Ｔａ、Ｍｏ、Ｎｂ、Ｃｕ、Ａｇ、Ａｕ、Ｐｔ、Ｐｄ、Ｉｎ、ＮｉあるいはＮｄなどの金属材料やこれらの合金材料、あるいはカーボン材料、導電性高分子などの既知の導電性材料であれば特に制限することなく使用できる。

[0065]（厚さ）

電極の厚さは特に制限はないが、１０～５０ｎｍとすることが好ましい。

ゲート幅（またはチャンネル幅）Ｗとゲート長（またはチャンネル長）Ｌに特に制限はないが、これらの比Ｗ／Ｌが１０以上であることが好ましく、２０以上であることがより好ましい。

[0066] ＜絶縁層＞

（材料）

絶縁層を構成する材料は必要な絶縁効果が得られれば特に制限はないが、例えば、二酸化ケイ素、窒化ケイ素、ＰＴＦＥ、ＣＹＴＯＰ等のフッ素ポリマー系絶縁材料、ポリエステル絶縁材料、ポリカーボネート絶縁材料、アクリルポリマー系絶縁材料、エポキシ樹脂系絶縁材料、ポリイミド絶縁材料、ポリビニルフェノール樹脂系絶縁材料、ポリパラキシリレン樹脂系絶縁材料などが挙げられる。

絶縁層の上面は表面処理がなされていてもよく、例えば、二酸化ケイ素表面をヘキサメチルジシラザン（ＨＭＤＳ）やオクタデシルトリクロロシラン（ＯＴＳ）の塗布により表面処理した絶縁層を好ましく用いることができる。

[0067] （厚さ）

絶縁層の厚さに特に制限はないが、薄膜化が求められる場合は厚さを１０～４００ｎｍとすることが好ましく、２０～２００ｎｍとすることがより好ましく、５０～２００ｎｍとすることが特に好ましい。

[0068] ＜半導体活性層＞

（材料）

本発明の有機トランジスタは、前記半導体活性層が前記一般式（１）で表される化合物、すなわち本発明の化合物を含むことを特徴とする。

前記半導体活性層は、本発明の化合物からなる層であってもよく、本発明の化合物に加えて後述のポリマーバインダーがさらに含まれた層であってもよい。また、成膜時の残留溶媒が含まれていてもよい。

前記半導体活性層中における前記ポリマーバインダーの含有量は、特に制

限はないが、好ましくは０～９５質量％の範囲内で用いられ、より好ましくは１０～９０質量％の範囲内で用いられ、さらに好ましくは２０～８０質量％の範囲内で用いられ、特に好ましくは３０～７０質量％の範囲内で用いられる。

[0069] （厚さ）

半導体活性層の厚さに特に制限はないが、薄膜化が求められる場合は厚さを１０～４００ｎｍとすることが好ましく、１０～２００ｎｍとすることがより好ましく、１０～１００ｎｍとすることが特に好ましい。

[0070] ［非発光性有機半導体デバイス用有機半導体材料］

本発明は、前記一般式（１）で表される化合物、すなわち本発明の化合物を含有する非発光性有機半導体デバイス用有機半導体材料にも関する。

[0071] （非発光性有機半導体デバイス）

なお、本明細書において、「非発光性有機半導体デバイス」とは、発光することを目的としないデバイスを意味する。非発光性有機半導体デバイスは、膜の層構造を有するエレクトロニクス要素を用いた非発光性有機半導体デバイスとすることが好ましい。非発光性有機半導体デバイスには、有機トランジスタ、有機光電変換素子（光センサ用途の固体撮像素子、エネルギー変換用途の太陽電池等）、ガスセンサ、有機整流素子、有機インバータ、情報記録素子などが包含される。有機光電変換素子は光センサ用途（固体撮像素子）、エネルギー変換用途（太陽電池）のいずれにも用いることができる。好ましくは、有機光電変換素子、有機トランジスタであり、さらに好ましくは有機トランジスタである。すなわち、本発明の非発光性有機半導体デバイス用有機半導体材料は、上述のとおり有機トランジスタ用材料であることが好ましい。

[0072] （有機半導体材料）

本明細書において、「有機半導体材料」とは、半導体の特性を示す有機材料のことである。無機材料からなる半導体と同様に、正孔をキャリアとして伝導するｐ型（ホール輸送性）有機半導体材料と、電子をキャリアとして伝

導するｎ型（電子輸送性）有機半導体材料がある。

本発明の化合物はｐ型有機半導体材料、ｎ型の有機半導体材料のどちらとして用いてもよいが、ｐ型として用いることがより好ましい。有機半導体中のキャリアの流れやすさはキャリア移動度μで表される。キャリア移動度μは高い方がよく、１×１０$^{-3}$ｃｍ^{2}／Ｖｓ以上であることが好ましく、５×１０$^{-3}$ｃｍ^{2}／Ｖｓ以上であることがより好ましく、１×１０$^{-2}$ｃｍ^{2}／Ｖｓ以上であることが特に好ましく、５×１０$^{-2}$ｃｍ^{2}／Ｖｓ以上であることがより特に好ましく、１×１０$^{-1}$ｃｍ^{2}／Ｖｓ以上であることがよりさらに特に好ましい。キャリア移動度μは電界効果トランジスタ（ＦＥＴ）素子を作製したときの特性や飛行時間計測（ＴＯＦ）法により求めることができる。

[0073] ［非発光性有機半導体デバイス用有機半導体膜］

（材料）

本発明は、上記一般式（１）で表される化合物、すなわち本発明の化合物を含有する非発光性有機半導体デバイス用有機半導体膜にも関する。

本発明の非発光性有機半導体デバイス用有機半導体膜は、前記一般式（１）で表される化合物、すなわち本発明の化合物を含有し、ポリマーバインダーを含有しない態様も好ましい。

また、本発明の非発光性有機半導体デバイス用有機半導体膜は、前記一般式（１）で表される化合物、すなわち本発明の化合物とポリマーバインダーを含有してもよい。

[0074] 前記ポリマーバインダーとしては、ポリスチレン、ポリカーボネート、ポリアリレート、ポリエステル、ポリアミド、ポリイミド、ポリウレタン、ポリシロキサン、ポリスルフォン、ポリメチルメタクリレート、ポリメチルアクリレート、セルロース、ポリエチレン、ポリプロピレンなどの絶縁性ポリマー、およびこれらの共重合体、ポリビニルカルバゾール、ポリシランなどの光伝導性ポリマー、ポリチオフェン、ポリピロール、ポリアニリン、ポリパラフェニレンビニレンなどの導電性ポリマー、半導体ポリマーを挙げることができる。

前記ポリマーバインダーは、単独で使用してもよく、あるいは複数併用してもよい。

また、有機半導体材料と前記ポリマーバインダーとは均一に混合していてもよく、一部または全部が相分離していてもよいが、電荷移動度の観点では、膜中で膜厚方向に有機半導体とバインダーが相分離した構造が、バインダーが有機半導体の電荷移動を妨げず最も好ましい。

膜の機械的強度を考慮するとガラス転移温度の高いポリマーバインダーが好ましく、電荷移動度を考慮すると極性基を含まない構造のポリマーバインダーや光伝導性ポリマー、導電性ポリマーが好ましい。

ポリマーバインダーの使用量は、特に制限はないが、本発明の非発光性有機半導体デバイス用有機半導体膜中、好ましくは０～９５質量％の範囲内で用いられ、より好ましくは１０～９０質量％の範囲内で用いられ、さらに好ましくは２０～８０質量％の範囲内で用いられ、特に好ましくは３０～７０質量％の範囲内で用いられる。

[0075] さらに、本発明では、化合物が上述した構造をとることにより、膜質の良い有機膜を得ることができる。具体的には、本発明で得られる化合物は、結晶性が良いため、十分な膜厚を得ることができ、得られた本発明の非発光性有機半導体デバイス用有機半導体膜は良質なものとなる。

[0076] （成膜方法）

本発明の化合物を基板上に成膜する方法はいかなる方法でもよい。

成膜の際、基板を加熱または冷却してもよく、基板の温度を変化させることで膜質や膜中での分子のパッキングを制御することが可能である。基板の温度としては特に制限はないが、０℃から２００℃の間であることが好ましく、１５℃～１００℃の間であることがより好ましく、２０℃～９５℃の間であることが特に好ましい。

本発明の化合物を基板上に成膜するとき、真空プロセスあるいは溶液プロセスにより成膜することが可能であり、いずれも好ましい。

[0077] 真空プロセスによる成膜の具体的な例としては、真空蒸着法、スパッタリ

ング法、イオンプレーティング法、分子ビームエピタキシー（ＭＢＥ）法などの物理気相成長法あるいはプラズマ重合などの化学気相蒸着（ＣＶＤ）法が挙げられ、真空蒸着法を用いることが特に好ましい。

[0078] 溶液プロセスによる成膜とは、ここでは有機化合物を溶解させることができる溶媒中に溶解させ、その溶液を用いて成膜する方法をさす。具体的には、キャスト法、ディップコート法、ダイコーター法、ロールコーター法、バーコーター法、スピンコート法などの塗布法、インクジェット法、スクリーン印刷法、グラビア印刷法、フレキソグラフィー印刷法、オフセット印刷法、マイクロコンタクト印刷法などの各種印刷法、Ｌａｎｇｍｕｉｒ－Ｂｌｏｄｇｅｔｔ（ＬＢ）法などの通常の方法を用いることができ、キャスト法、スピンコート法、インクジェット法、グラビア印刷法、フレキソグラフィー印刷法、オフセット印刷法、マイクロコンタクト印刷法を用いることが特に好ましい。

本発明の非発光性有機半導体デバイス用有機半導体膜は、溶液塗布法により作製されたことが好ましい。また、本発明の非発光性有機半導体デバイス用有機半導体膜がポリマーバインダーを含有する場合、層を形成する材料とポリマーバインダーとを適当な溶媒に溶解させ、または分散させて塗布液とし、各種の塗布法により形成されることが好ましい。

以下、溶液プロセスによる成膜に用いることができる、本発明の非発光性有機半導体デバイス用塗布溶液について説明する。

[0079] ［非発光性有機半導体デバイス用塗布溶液］

本発明は、前記一般式（１）で表される化合物、すなわち本発明の化合物を含有する非発光性有機半導体デバイス用塗布溶液にも関する。

溶液プロセスを用いて基板上に成膜する場合、層を形成する材料を適当な有機溶媒（例えば、ヘキサン、オクタン、デカン、トルエン、キシレン、メシチレン、エチルベンゼン、デカリン、１－メチルナフタレンなどの炭化水素系溶媒、例えば、アセトン、メチルエチルケトン、メチルイソブチルケトン、シクロヘキサノンなどのケトン系溶媒、例えば、ジクロロメタン、クロ

ロホルム、テトラクロロメタン、ジクロロエタン、トリクロロエタン、テトラクロロエタン、クロロベンゼン、ジクロロベンゼン、クロロトルエンなどのハロゲン化炭化水素系溶媒、例えば、酢酸エチル、酢酸ブチル、酢酸アミルなどのエステル系溶媒、例えば、メタノール、プロパノール、ブタノール、ペンタノール、ヘキサノール、シクロヘキサノール、メチルセロソルブ、エチルセロソルブ、エチレングリコールなどのアルコール系溶媒、例えば、ジブチルエーテル、テトラヒドロフラン、ジオキサン、アニソールなどのエーテル系溶媒、例えば、Ｎ，Ｎ－ジメチルホルムアミド、Ｎ，Ｎ－ジメチルアセトアミド、１－メチル－２－ピロリドン、１－メチル－２－イミダゾリジノン等のアミド・イミド系溶媒、ジメチルスルフォキサイドなどのスルホキシド系溶媒、アセトニトリルなどのニトリル系溶媒）および／または水に溶解、または分散させて塗布液とし、各種の塗布法により膜を形成することができる。溶媒は単独で用いてもよく、複数組み合わせて用いてもよい。これらの中でも、炭化水素系溶媒、ハロゲン化炭化水素系溶媒またはエーテル系溶媒が好ましく、トルエン、キシレン、メシチレン、テトラリン、ジクロロベンゼンまたはアニソールがより好ましく、トルエン、キシレン、テトラリン、アニソールが特に好ましい。その塗布液中の一般式（１）で表される化合物の濃度は、好ましくは、０．１～８０質量％、より好ましくは０．１～１０質量％、特に好ましくは０．５～１０質量％とすることにより、任意の厚さの膜を形成できる。

[0080] 溶液プロセスで成膜するためには、上記で挙げた溶媒などに材料が溶解することが必要であるが、単に溶解するだけでは不十分である。通常、真空プロセスで成膜する材料でも、溶媒にある程度溶解させることができる。しかし、溶液プロセスでは、材料を溶媒に溶解させて塗布した後で、溶媒が蒸発して膜が形成する過程があり、溶液プロセス成膜に適さない材料は結晶性が高いものが多いため、この過程で不適切に結晶化（凝集）してしまい良好な膜を形成させることが困難である。一般式（１）で表される化合物は、このような結晶化（凝集）が起こりにくい点でも優れている。

[0081] 本発明の非発光性有機半導体デバイス用塗布溶液は、前記一般式（１）で表される化合物、すなわち本発明の化合物を含み、ポリマーバインダーを含有しない態様も好ましい。

また、本発明の非発光性有機半導体デバイス用塗布溶液は、前記一般式（１）で表される化合物、すなわち本発明の化合物とポリマーバインダーを含有してもよい。この場合、層を形成する材料とポリマーバインダーとを前述の適当な溶媒に溶解させ、または分散させて塗布液とし、各種の塗布法により膜を形成することができる。ポリマーバインダーとしては、上述したものから選択することができる。

実施例

[0082] 以下に実施例と比較例を挙げて本発明の特徴をさらに具体的に説明する。以下の実施例に示す材料、使用量、割合、処理内容、処理手順等は、本発明の趣旨を逸脱しない限り適宜変更することができる。したがって、本発明の範囲は以下に示す具体例により限定的に解釈されるべきものではない。

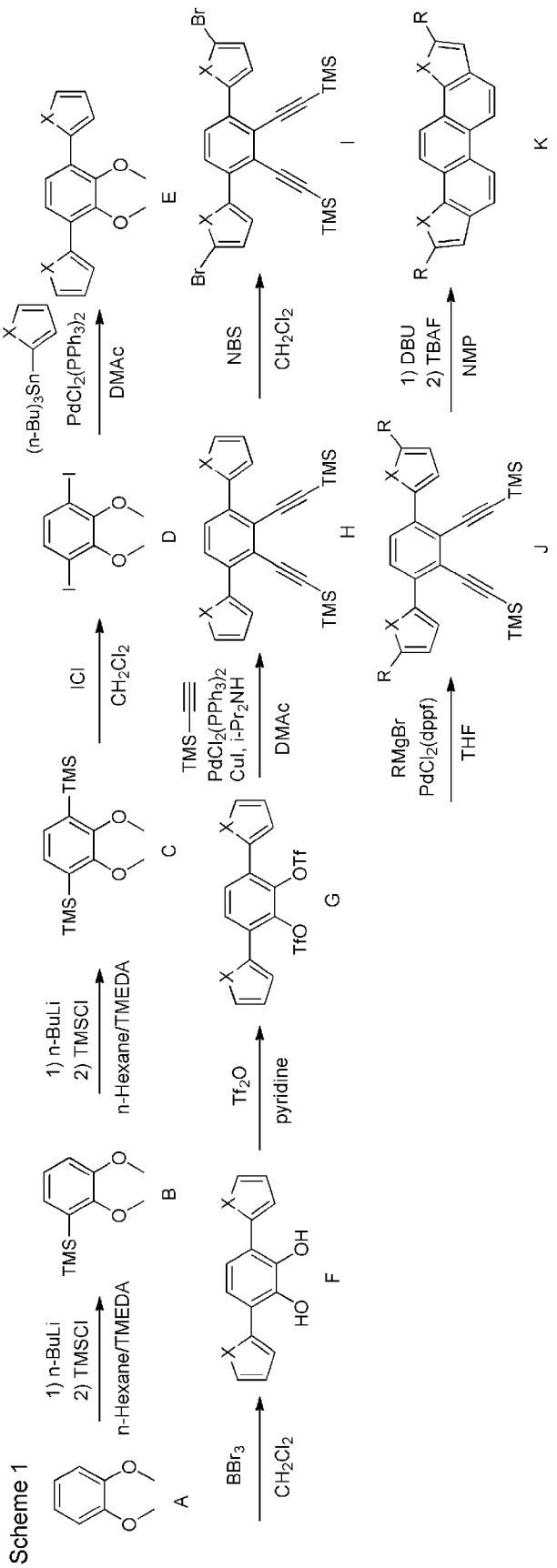
[0083] ［実施例１］

＜合成例１＞ 化合物１～３、５、１１、１３、１５、１６、２４、３１および３２、ならびに、中間体化合物ｅ、ｆおよびｇの合成

以下のスキーム１に示した具体的合成手順にしたがって、一般式（１）で表される化合物である、化合物１～３、５、１１、１３、１５、１６、２４、３１および３２、ならびに、中間体化合物ｅ、ｆおよびｇを合成した。

[0084]

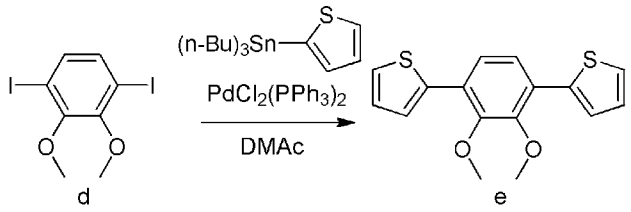
[化32]


Scheme 1
1) n-BuLi
2) TMSCl
n-Hexane/TMEDA
BBr3
CH2Cl2
1) n-BuLi
2) TMSCl
n-Hexane/TMEDA
Tf2O
pyridine
ICl
CH2Cl2
PdCl2(PPh3)2
Cul, i-Pr2NH
DMAc
(n-Bu)3Sn
PdCl2(PPh3)2
DMAc
NBS
CH2Cl2
RMgBr
PdCl2(dppf)
THF
1) DBU
2) TBAF
NMP
A
B
C
D
E
F
G
H
I
J
K

[0085] 下記の化合物ｄから、一般式（３）で表される中間体化合物ｅ、一般式（３）で表される中間体化合物ｆおよび一般式（３）で表される中間体化合物ｇまでの合成の詳細を示す。

[0086] （化合物ｅの合成）

[化33]



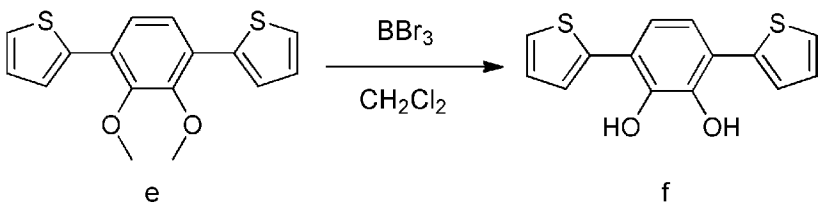
[0087] 化合物ｄ　５．０ｇ（１２．８２ｍｍｏｌ）をＮ，Ｎ‘－ジメチルアセトアミド４０ｍｌに溶解させ、窒素雰囲気化、ＰｄＣｌ$_2$（ＰＰｈ$_3$）$_2$　３６０．０ｍｇ（０．５１ｍｍｏｌ）添加し、内温８０℃まで加熱した。４時間後、室温まで放冷し、１Ｎ　ＨＣｌ、酢酸エチルを添加した。油層を再度１Ｎ　ＨＣｌで洗浄した後、油層を硫酸マグネシウムで乾燥させ、ろ過し、ろ液を減圧濃縮した。反応混合物をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製した（展開溶媒：酢酸エチル／ｎ－ヘキサン＝１／９）。減圧濃縮により化合物ｅを３．６ｇ得た。化合物ｅの構造は、^{1}Ｈ－ＮＭＲにより同定した。

[0088] ^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_3$）

δ：３．９４（６Ｈ，ｓ），７．１１（２Ｈ，ｍ），７．３７（２Ｈ，ｄ），７．４５（２Ｈ，ｓ），７．５２（２Ｈ，ｄ）

[0089] （化合物ｆの合成）

[化34]



[0090] 化合物ｅ　１．０ｇ（３．３１ｍｍｏｌ）をｄｒｙ　ＣＨ$_2$Ｃｌ$_2$　１０ｍ

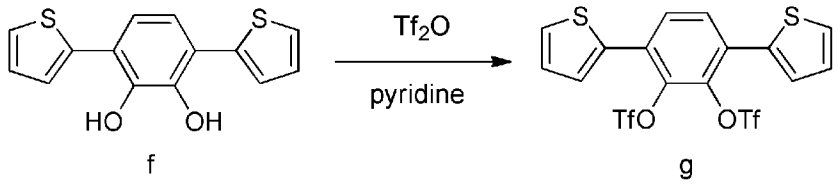
Ｉに溶解させ、窒素雰囲気化、ドライアイスバスにより－７８℃まで冷却し、１Ｍ　ＢＢｒ$_3$ＣＨ$_2$ＣＩ$_2$溶液をゆっくり滴下した。滴下終了後、ドライアイスバスを除き、室温まで徐々に昇温させた。室温で３０分攪拌した後、反応溶液を氷にゆっくり注いだ。これに酢酸エチルを加え、抽出操作を行った。油層を硫酸マグネシウムで乾燥し、ろ過後、ろ液を減圧濃縮した。これをシリカゲルクロマトグラフィーによって精製した（展開溶媒：酢酸エチル／ｎ－ヘキサン＝２／３）。フラクションを集め、減圧濃縮することにより白色結晶の化合物ｆを０．４ｇ得た。化合物ｆの構造は、^{1}Ｈ－ＮＭＲにより同定した。

[0091] ^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣＩ$_3$）

δ：５．８９（２Ｈ，ｓ），７．１２（２Ｈ，ｓ），７．１６（２Ｈ，ｍ），７．４０（２Ｈ，ｄ），７．４５（２Ｈ，ｄ）

[0092] （化合物ｇの合成）

[化35]



[0093] 化合物ｆ　４．２ｇ（１５．３１ｍｍｏｌ）をピリジン４２ｍｌに溶解させ、窒素雰囲気化、氷水浴により０℃まで冷却し、無水トリフルオロメタンスルホン酸７．７ｍｌ（４５．９３ｍｍｏｌ）をゆっくり滴下した。滴下終了後、氷水浴を除き、室温まで徐々に昇温させた。室温で３０分攪拌した後、反応溶液を水にゆっくり注いだ。これに酢酸エチルを加え、油層を水で１回、１Ｎ　ＨＣｌで３回洗浄した。油層を硫酸マグネシウムで乾燥し、ろ過後、ろ液を減圧濃縮した。これをシリカゲルクロマトグラフィーによって精製した（展開溶媒：酢酸エチル／ｎ－ヘキサン＝１／４）。フラクションを集め、減圧濃縮することにより白色結晶の化合物ｇを４．０ｇ得た。化合物ｇの構造は、^{1}Ｈ－ＮＭＲにより同定した。

[0094] ^{1}Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_3$）

δ：７．１９（２Ｈ，ｍ），７．４１（２Ｈ，ｍ），７．５２（２Ｈ，ｄ），７．６１（２Ｈ，ｓ）

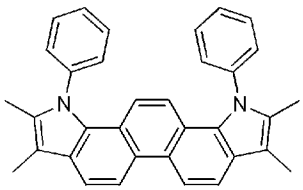
[0095] 化合物ｇより、一般式（４）で表される中間体化合物ｈ、一般式（４）で表される中間体化合物ｉおよび一般式（４）で表される中間体化合物ｊを経て、一般式（１）で表される化合物１、５、１１、１３、１５、１６、２４、３１および３２を合成した。

また、上記の各化合物の合成方法と類似の合成方法にて、上述のスキーム１にしたがって一般式（１）で表される化合物２および３を合成した。

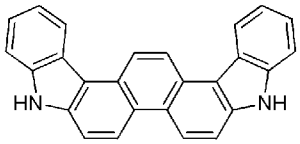
なお、得られた一般式（１）で表される各化合物の同定は元素分析、ＮＭＲ及びＭＡＳＳスペクトルにより行った。

[0096] 比較素子の半導体活性層（有機半導体層）に用いた比較化合物１および２を特開２０１１－４６６８７号公報および特表２０１２－５１３４５９号公報に記載の方法にしたがって合成した。比較化合物１は特開２０１１－４６６８７号公報の化合物１であり、比較化合物２は特表２０１２－５１３４５９号公報の化合物Ｎｏ．３である。比較化合物１および２の構造を以下に示す。

[化36]



比較化合物1



比較化合物2

[0097] ［実施例２］

＜素子作製・評価＞

素子作製に用いた材料は全て昇華精製を行い、高速液体クロマトグラフィー（東ソーＴＳＫｇｅｌ　ＯＤＳ－１００Ｚ）により純度（２５４ｎｍの吸収強度面積比）が９９．５％以上であることを確認した。

[0098] ＜化合物単独で半導体活性層（有機半導体層）を形成＞

本発明の化合物または比較化合物（各１ｍｇ）とトルエン（１ｍＬ）を混合し、１００℃に加熱したものを、非発光性有機半導体デバイス用塗布溶液とした。この塗布溶液を窒素雰囲気下、９０℃に加熱したＦＥＴ特性測定用基板上にキャストすることで、非発光性有機半導体デバイス用有機半導体膜を形成し、ＦＥＴ特性測定用の実施例２の有機トランジスタ素子を得た。ＦＥＴ特性測定用基板としては、ソースおよびドレイン電極としてくし型に配置されたクロム／金（ゲート幅Ｗ＝１００ｍｍ、ゲート長Ｌ＝１００μｍ）、絶縁膜としてSiO_2（膜厚２００ｎｍ）を備えたボトムゲート・ボトムコンタクト構造のシリコン基板（図２に構造の概略図を示した）を用いた。

[0099] ［評価］

実施例２の有機トランジスタ素子のＦＥＴ特性は、セミオートプローバー（ベクターセミコン製、ＡＸ－２０００）を接続した半導体パラメーターアナライザー（Ａｇｉｌｅｎｔ製、４１５６Ｃ）を用いて常圧・窒素雰囲気下で、キャリア移動度、繰り返し駆動後の閾値電圧変化の観点で評価した。

得られた結果を下記表１に示す。

（ａ）キャリア移動度

各有機トランジスタ素子（ＦＥＴ素子）のソース電極－ドレイン電極間に－８０Ｖの電圧を印加し、ゲート電圧を２０Ｖ～－１００Ｖの範囲で変化させ、ドレイン電流I_dを表わす下記式を用いてキャリア移動度μを算出した。

$I_d = (w/2L)\ \mu C_i\ (V_g - V_{th})^2$

式中、Ｌはゲート長、Ｗはゲート幅、C_iは絶縁層の単位面積当たりの容量、V_gはゲート電圧、V_{th}は閾値電圧を表す。

なお、キャリア移動度が1×10^{-5}ｃｍ^2／Ｖｓを下回るものに関しては特性が低過ぎるため、後の（ｂ）繰り返し駆動後の閾値電圧変化の評価は行っていない。

[0100] （ｂ）繰り返し駆動後の閾値電圧変化

各有機トランジスタ素子（ＦＥＴ素子）のソース電極－ドレイン電極間に－８０Ｖの電圧を印加し、ゲート電圧を＋２０Ｖ～－１００Ｖの範囲で１０

０回繰り返して（ａ）と同様の測定を行い、繰り返し駆動前の閾値電圧$V_{前}$と繰り返し駆動後の閾値電圧$V_{後}$の差（$|V_{後}-V_{前}|$）を以下の３段階で評価した。この値は小さいほど素子の繰り返し駆動安定性が高く、好ましい。

Ａ：$|V_{後}-V_{前}| \leqq 5V$

Ｂ：$5V < |V_{後}-V_{前}| \leqq 10V$

Ｃ：$|V_{後}-V_{前}| > 10V$

[0101] （ｃ）溶解性

本発明の化合物または比較化合物（各２０ｍｇ）とトルエン（１ｍＬ）を混合し、溶解性を以下の２段階で評価した。

Ａ：完溶した

Ｂ：完溶しなかった

[0102] [表1]

素子番号	有機半導体材料	キャリア移動度（cm^2/Vs）	繰り返し駆動後の閾値電圧変化	溶解性	備考
素子１	化合物１	7.8×10^{-2}	Ａ	Ａ	本発明
素子２	化合物２	9.3×10^{-3}	Ａ	Ａ	本発明
素子３	化合物３	8.4×10^{-3}	Ａ	Ａ	本発明
素子４	化合物５	2.6×10^{-1}	Ａ	Ａ	本発明
素子５	化合物１１	1.3×10^{-1}	Ａ	Ａ	本発明
素子６	化合物１３	6.8×10^{-2}	Ａ	Ａ	本発明
素子７	化合物１５	1.1×10^{-1}	Ａ	Ａ	本発明
素子８	化合物１６	1.5×10^{-1}	Ａ	Ａ	本発明
素子９	化合物２４	7.8×10^{-2}	Ａ	Ａ	本発明
素子１０	化合物３１	9.5×10^{-2}	Ａ	Ａ	本発明
素子１１	化合物３２	4.7×10^{-2}	Ａ	Ａ	本発明
比較素子１	比較化合物１	4.3×10^{-5}	Ｃ	Ｂ	比較例
比較素子２	比較化合物２	低溶解性のため素子作製できず	低溶解性のため素子作製できず	Ｂ	比較例

[0103] 上記表１より、本発明の化合物は有機溶媒への溶解性が良好であり、本発明の化合物を用いた有機トランジスタ素子は、キャリア移動度が高いことがわかった。そのため、本発明の化合物は非発光性有機半導体デバイス用有機半導体材料として好ましく用いられることがわかった。

一方、比較化合物１を用いた有機トランジスタ素子は、キャリア移動度が低いものであった。比較化合物２は溶解性が低く素子を作製することができなかった。

なお、本発明の化合物を用いた有機トランジスタ素子は、繰り返し駆動後の閾値電圧変化も小さいものであった。

[0104] ［実施例３］

＜化合物をバインダーとともに用いて半導体活性層（有機半導体層）を形成＞

本発明の化合物または比較化合物（各１ｍｇ）、ＰαＭＳ（ポリ（α－メチルスチレン、Ｍｗ＝３００,０００）、Ａｌｄｒｉｃｈ製）１ｍｇ、トルエン（１ｍＬ）を混合し、１００℃に加熱したものを塗布溶液として用いる以外は実施例２と同様にしてＦＥＴ特性測定用の有機トランジスタ素子を作製し、実施例２と同様の評価を行った。

得られた結果を下記表２に示す。

[0105] [表2]

素子番号	有機半導体材料	キャリア移動度（cm^2/Vs）	繰り返し駆動後の閾値電圧変化	備考
素子１２	化合物１	8.5×10^{-2}	Ａ	本発明
素子１３	化合物５	1.5×10^{-1}	Ａ	本発明
素子１４	化合物１１	7.1×10^{-2}	Ａ	本発明
素子１５	化合物１６	8.4×10^{-2}	Ａ	本発明
比較素子３	比較化合物１	3.0×10^{-5}	Ｃ	比較例
比較素子４	比較化合物２	低溶解性のため素子作製できず	低溶解性のため素子作製できず	比較例

[0106] 上記表２より、本発明の化合物をバインダーとともに用いて半導体活性層を形成した有機トランジスタ素子は、キャリア移動度が高いことがわかった。そのため、本発明の化合物は非発光性有機半導体デバイス用有機半導体材料として好ましく用いられることがわかった。

一方、比較化合物１をバインダーとともに用いて半導体活性層を形成した有機トランジスタ素子は、キャリア移動度が低いものであった。比較化合物

２は溶解性が低く素子を作製することができなかった。

なお、本発明の化合物を用いた有機トランジスタ素子は、繰り返し駆動後の閾値電圧変化も小さいものであった。

[0107] さらに、実施例３で得られた各有機トランジスタ素子について、肉眼による観察および光学顕微鏡観察を行ったところ、バインダーとしてＰαＭＳを用いた膜はいずれも膜の平滑性・均一性が非常に高いことが分かった。

[0108] 以上より、比較素子ではバインダーと比較化合物の複合系で半導体活性層を形成した場合にキャリア移動度が非常に低くなるのに対し、本発明の有機トランジスタ素子では本発明の化合物をバインダーとともに用いて半導体活性層を形成した場合も良好なキャリア移動度を示す上、好ましくは繰り返し駆動後の閾値電圧変化が小さく、膜の平滑性・均一性が非常に高い素子を得ることができることが分かった。

[0109] ［実施例４］

＜半導体活性層（有機半導体層）形成＞

ゲート絶縁膜としてSiO_2（膜厚３７０ｎｍ）を備えたシリコンウエハーを用い、オクチルトリクロロシランで表面処理を行った。

本発明の化合物または比較化合物（各１ｍｇ）とトルエン（１ｍＬ）を混合し、１００℃に加熱したものを、非発光性有機半導体デバイス用塗布溶液とした。この塗布溶液を窒素雰囲気下、９０℃に加熱したオクチルシラン表面処理シリコンウエハー上にキャストすることで、非発光性有機半導体デバイス用有機半導体膜を形成した。

更にこの膜表面にマスクを用いて金を蒸着することで、ソースおよびドレイン電極を作製し、ゲート幅Ｗ＝５ｍｍ、ゲート長Ｌ＝８０μｍのボトムゲート・トップコンタクト構造の有機トランジスタ素子を得た（図１に構造の概略図を示した）。

実施例４の有機トランジスタ素子のＦＥＴ特性は、セミオートプローバー（ベクターセミコン製、ＡＸ－２０００）を接続した半導体パラメーターアナライザー（Ａｇｉｌｅｎｔ製、４１５６Ｃ）を用いて常圧・窒素雰囲気下

で、実施例２と同様の評価を行った。

得られた結果を下記表３に示す。

[0110] [表3]

素子番号	有機半導体材料	キャリア移動度（cm^2/Vs）	繰り返し駆動後の閾値電圧変化	備考
素子１６	化合物１	1.0×10^{-1}	A	本発明
素子１７	化合物５	1.3×10^{-1}	A	本発明
素子１８	化合物１１	8.9×10^{-2}	A	本発明
素子１９	化合物１５	1.0×10^{-1}	A	本発明
比較素子５	比較化合物１	2.8×10^{-5}	C	比較例
比較素子６	比較化合物２	低溶解性のため素子作製できず	低溶解性のため素子作製できず	比較例

[0111] 上記表３より、本発明の化合物を用いた有機トランジスタ素子は、キャリア移動度が高いことがわかった。そのため、本発明の化合物は非発光性有機半導体デバイス用有機半導体材料として好ましく用いられることがわかった。比較化合物２は溶解性が低く素子を作製することができなかった。

なお、本発明の化合物を用いた有機トランジスタ素子は、繰り返し駆動後の閾値電圧変化も小さいものであった。

符号の説明

[0112] １１　基板

１２　電極

１３　絶縁体層

１４　半導体活性層（有機物層、有機半導体層）

１５ａ、１５ｂ　電極

３１　基板

３２　電極

３３　絶縁体層

３４ａ、３４ｂ　電極

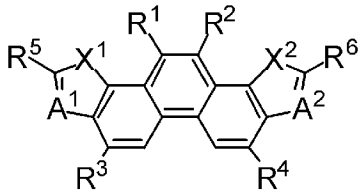
３５　半導体活性層（有機物層、有機半導体層）

請求の範囲

[請求項1] 下記一般式（１）で表される化合物を半導体活性層に含む有機トランジスタ：

一般式（１）

[化1]



一般式（１）中、X^1およびX^2はそれぞれ独立にNR^{13}、Ｏ原子またはＳ原子を表し、

A^1はCR^7またはN原子を表し、A^2はCR^8またはN原子を表し、

R^{13}は水素原子、アルキル基、アルケニル基、アルキニル基またはアシル基を表し、

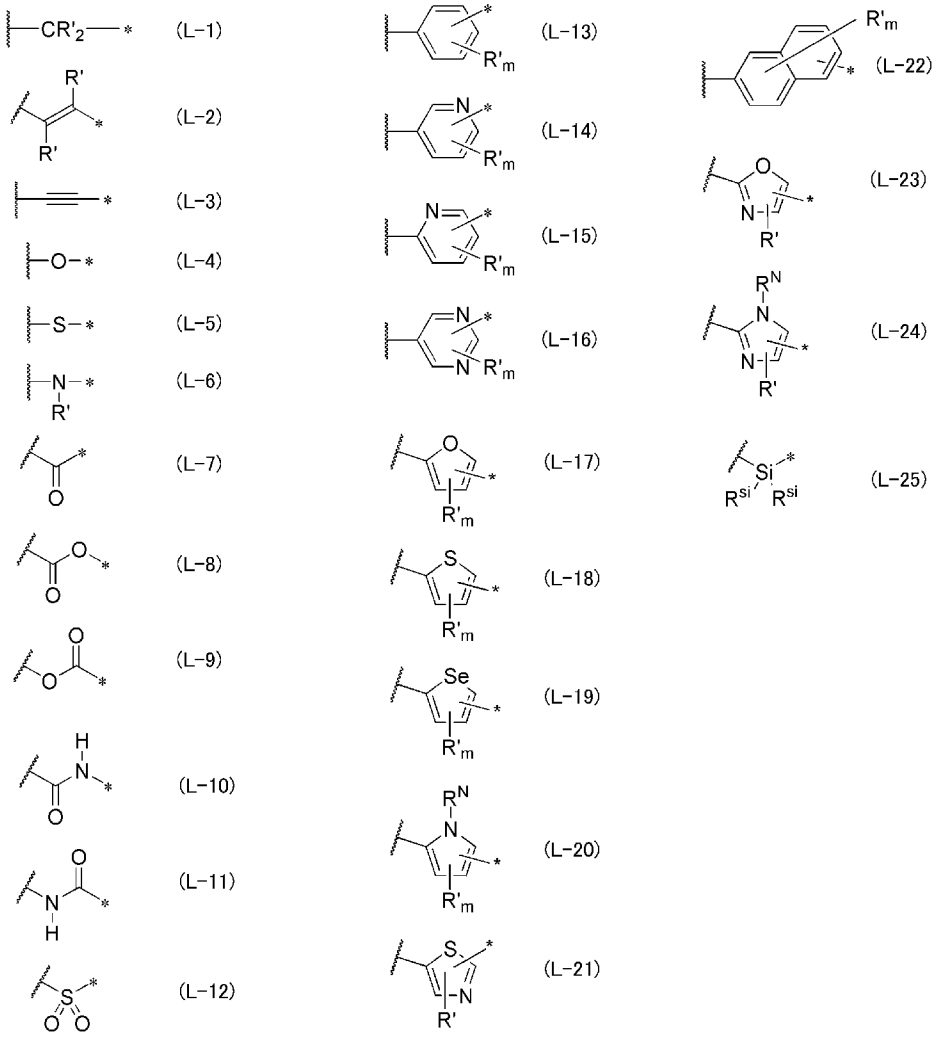
R^1～R^8はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、R^1～R^8のうち少なくとも１つが下記一般式（Ｗ）で表される置換基である：

－Ｌ－Ｒ 一般式（Ｗ）

一般式（Ｗ）中、Ｌは下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基または２以上の下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基が結合した２価の連結基を表し、

Ｒは置換または無置換のアルキル基、シアノ基、ビニル基、エチニル基、オキシエチレン基、オキシエチレン単位の繰り返し数ｖが２以上のオリゴオキシエチレン基、シロキサン基、ケイ素原子数が２以上のオリゴシロキサン基、あるいは、置換または無置換のトリアルキルシリル基を表す：

[化2]



一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）中、波線部分は２つのヘテロ５員環が縮環したフェナントレン骨格との結合位置を表し、

一般式（Ｌ－１３）におけるｍは４を表し、一般式（Ｌ－１４）および（Ｌ－１５）におけるｍは３を表し、一般式（Ｌ－１６）～（Ｌ－２０）におけるｍは２を表し、（Ｌ－２２）におけるｍは６を表し、

一般式（Ｌ－１）、（Ｌ－２）、（Ｌ－６）および（Ｌ－１３）～（Ｌ－２４）におけるＲ’はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、

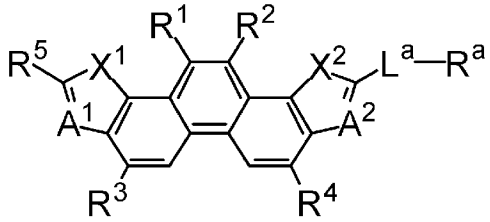
R^Nは水素原子または置換基を表し、

R^{si}はそれぞれ独立に水素原子、アルキル基、アルケニル基またはアルキニル基を表す。

[請求項2] 前記一般式（１）で表される化合物が、下記一般式（２－１）または（２－２）で表される化合物である請求項１に記載の有機トランジスタ：

一般式（２－１）

[化3]



一般式（２－１）中、X^1およびX^2はそれぞれ独立にＯ原子またはＳ原子を表し、

A^1はＣR^7またはＮ原子を表し、A^2はＣR^8またはＮ原子を表し、

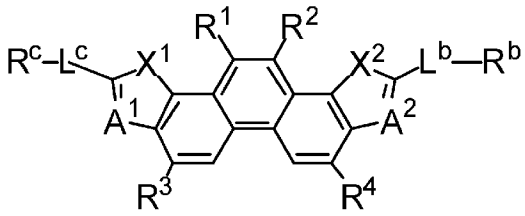
R^1～R^5、R^7およびR^8はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、R^5は－L^a－R^aで表される基ではなく、

L^aは下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基または２以上の下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基が結合した２価の連結基を表し、

R^aは置換または無置換のアルキル基、シアノ基、ビニル基、エチニル基、オキシエチレン基、オキシエチレン単位の繰り返し数ｖが２以上のオリゴオキシエチレン基、シロキサン基、ケイ素原子数が２以上のオリゴシロキサン基、あるいは、置換または無置換のトリアルキルシリル基を表す；

[化4]

一般式（２－２）



一般式（２－２）中、Ｘ[1]およびＸ[2]はそれぞれ独立にＯ原子またはＳ原子を表し、

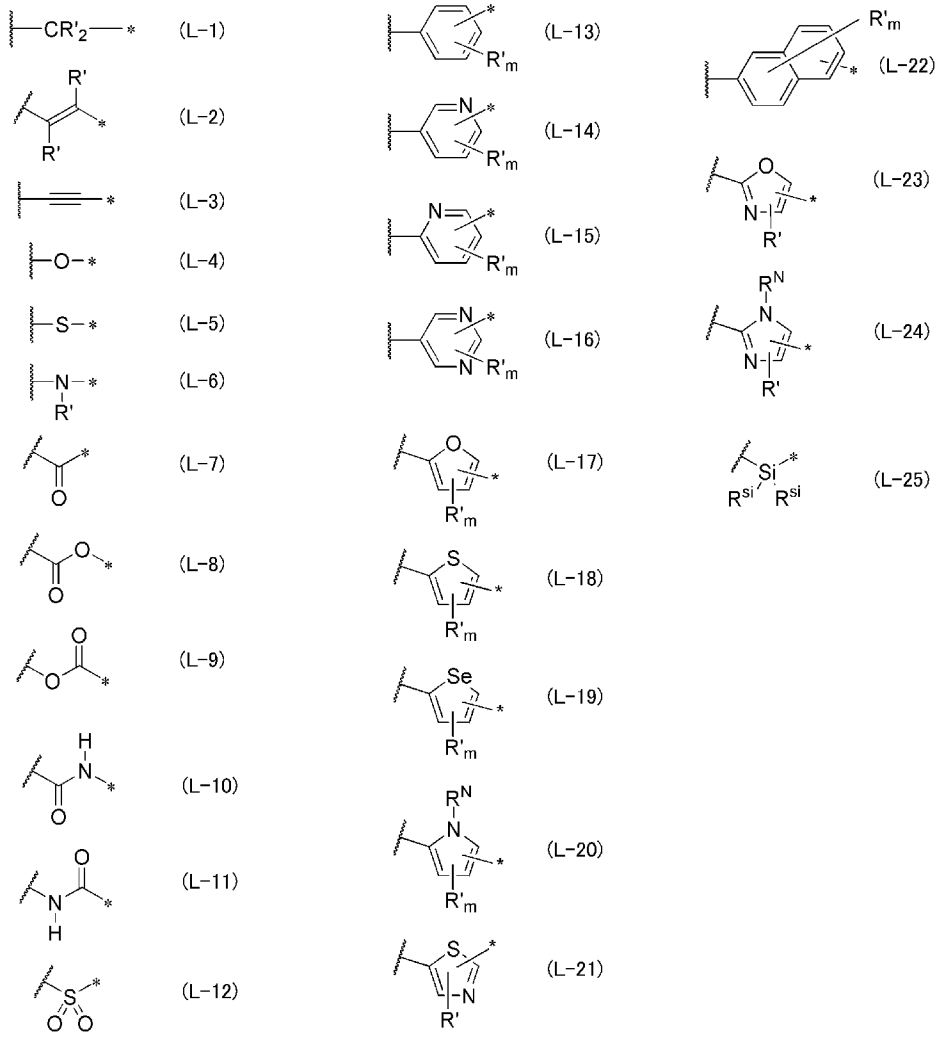
Ａ[1]はＣＲ[7]またはＮ原子を表し、Ａ[2]はＣＲ[8]またはＮ原子を表し、

Ｒ[1]～Ｒ[4]、Ｒ[7]およびＲ[8]はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、

Ｌ[b]およびＬ[c]はそれぞれ独立に下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基または２以上の下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基が結合した２価の連結基を表し、

Ｒ[b]およびＲ[c]はそれぞれ独立に置換または無置換のアルキル基、シアノ基、ビニル基、エチニル基、オキシエチレン基、オキシエチレン単位の繰り返し数ｖが２以上のオリゴオキシエチレン基、シロキサン基、ケイ素原子数が２以上のオリゴシロキサン基、あるいは、置換または無置換のトリアルキルシリル基を表す；

[化5]



一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）中、波線部分は２つのヘテロ５員環が縮環したフェナントレン骨格との結合位置を表し、

一般式（Ｌ－１３）におけるｍは４を表し、一般式（Ｌ－１４）および（Ｌ－１５）におけるｍは３を表し、一般式（Ｌ－１６）～（Ｌ－２０）におけるｍは２を表し、（Ｌ－２２）におけるｍは６を表し、

一般式（Ｌ－１）、（Ｌ－２）、（Ｌ－６）および（Ｌ－１３）～（Ｌ－２４）におけるＲ’はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、

R^Nは水素原子または置換基を表し、

R^{si}はそれぞれ独立に水素原子、アルキル基、アルケニル基またはアルキニル基を表す。

[請求項3] 前記一般式（１）、（２－１）または（２－２）中、A^1がCR^7であるか、A^2がCR^8であり、R^7およびR^8はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表す請求項１または２に記載の有機トランジスタ。

[請求項4] 前記一般式（１）、（２－１）または（２－２）中、X^1およびX^2のうち少なくとも１つがＳ原子である請求項１～３のいずれか一項に記載の有機トランジスタ。

[請求項5] 前記一般式（１）、（２－１）または（２－２）中、Ｌ、L^a、L^bおよびL^cが全て前記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－５）、（Ｌ－１３）、（Ｌ－１７）もしくは（Ｌ－１８）のいずれかで表される２価の連結基またはこれらの２価の連結基が２以上結合した２価の連結基である請求項１～４のいずれか一項に記載の有機トランジスタ。

[請求項6] 前記一般式（１）、（２－１）または（２－２）中、Ｌ、L^a、L^bおよびL^cが全て前記一般式（Ｌ－１）、（Ｌ－３）、（Ｌ－１３）または（Ｌ－１８）のいずれかで表される２価の連結基、あるいは前記一般式（Ｌ－３）、（Ｌ－１３）または（Ｌ－１８）のいずれか１つで表される２価の連結基と前記一般式（Ｌ－１）で表される２価の連結基が結合した２価の連結基である請求項１～５のいずれか一項に記載の有機トランジスタ。

[請求項7] 前記一般式（１）、（２－１）または（２－２）中、Ｒ、R^a、R^bおよびR^cが全て置換または無置換のアルキル基である請求項１～６のいずれか一項に記載の有機トランジスタ。

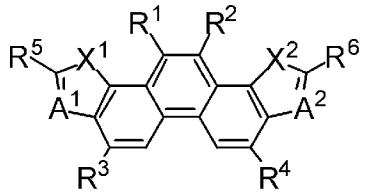
[請求項8] 前記一般式（１）、（２－１）または（２－２）中、Ｌ、L^a、L^bおよびL^cが全て前記一般式（Ｌ－１）で表される２価の連結基であり、かつ、Ｒ、R^a、R^bおよびR^cが全て直鎖の炭素数７～１７のアルキル基であるか；あるいは、

Ｌ、Ｌ^{a}、Ｌ^{b}およびＬ^{c}が全て前記一般式（Ｌ－３）、（Ｌ－１３）または（Ｌ－１８）のいずれか１つで表される２価の連結基と前記一般式（Ｌ－１）で表される２価の連結基が結合した２価の連結基であり、かつ、Ｒ、Ｒ^{a}、Ｒ^{b}およびＲ^{c}が全て直鎖のアルキル基である請求項１～７のいずれか一項に記載の有機トランジスタ。

[請求項9] 下記一般式（１）で表される化合物：

一般式（１）

[化6]



一般式（１）中、Ｘ^{1}およびＸ^{2}はそれぞれ独立にＮＲ^{13}、Ｏ原子またはＳ原子を表し、

Ａ^{1}はＣＲ^{7}またはＮ原子を表し、Ａ^{2}はＣＲ^{8}またはＮ原子を表し、

Ｒ^{13}は水素原子、アルキル基、アルケニル基、アルキニル基またはアシル基を表し、

Ｒ^{1}～Ｒ^{8}はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、Ｒ^{1}～Ｒ^{8}のうち少なくとも１つが下記一般式（Ｗ）で表される置換基である：

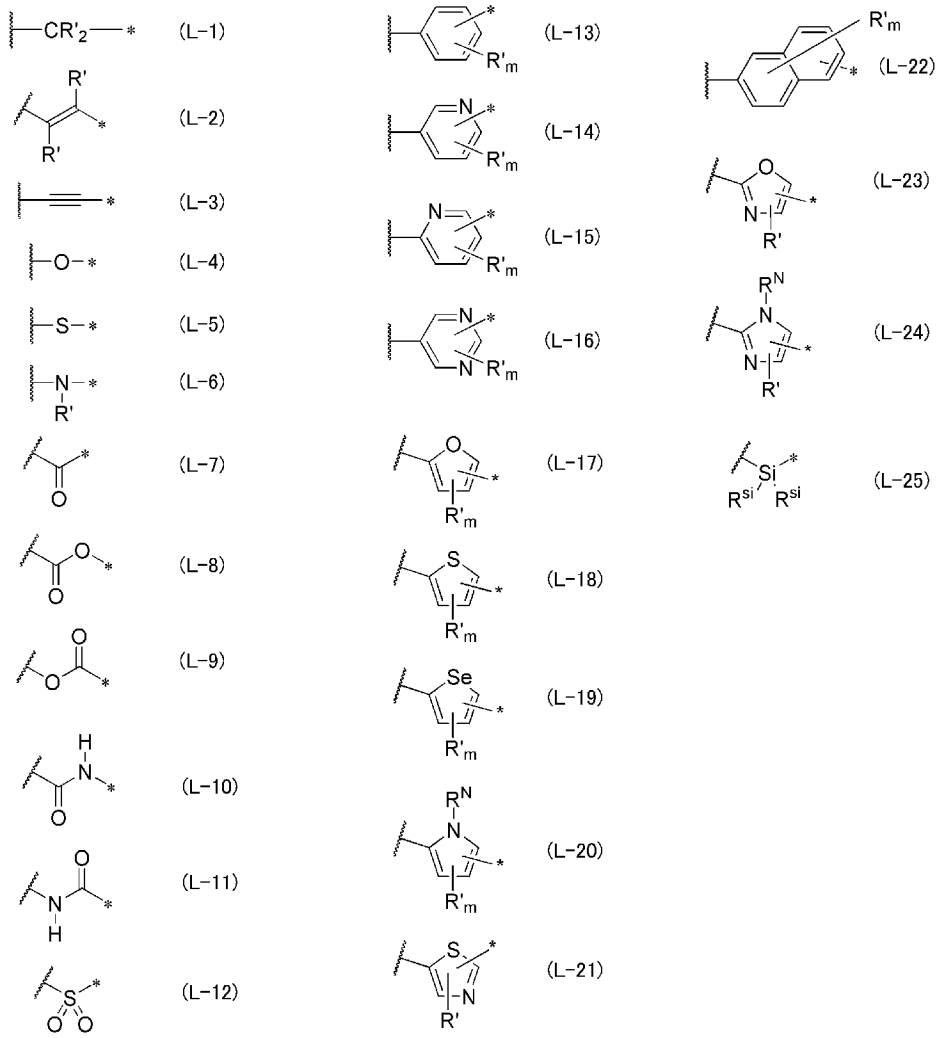
－Ｌ－Ｒ 一般式（Ｗ）

一般式（Ｗ）中、Ｌは下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基または２以上の下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基が結合した２価の連結基を表し、

Ｒは置換または無置換のアルキル基、シアノ基、ビニル基、エチニル基、オキシエチレン基、オキシエチレン単位の繰り返し数ｖが２以

上のオリゴオキシエチレン基、シロキサン基、ケイ素原子数が２以上のオリゴシロキサン基、あるいは、置換または無置換のトリアルキルシリル基を表す：

[化7]



一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）中、波線部分は２つのヘテロ５員環が縮環したフェナントレン骨格との結合位置を表し、

一般式（Ｌ－１３）におけるｍは４を表し、一般式（Ｌ－１４）および（Ｌ－１５）におけるｍは３を表し、一般式（Ｌ－１６）～（Ｌ－２０）におけるｍは２を表し、（Ｌ－２２）におけるｍは６を表し、

一般式（Ｌ－１）、（Ｌ－２）、（Ｌ－６）および（Ｌ－１３）～

（Ｌ－２４）におけるＲ’はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、

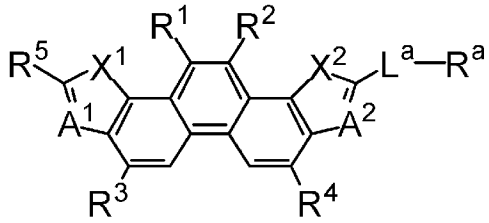
R^Nは水素原子または置換基を表し、

R^{si}はそれぞれ独立に水素原子、アルキル基、アルケニル基またはアルキニル基を表す。

[請求項10] 前記一般式（１）で表される化合物が、下記一般式（２－１）または（２－２）で表される化合物である請求項９に記載の化合物：

一般式（２－１）

[化8]



一般式（２－１）中、X^1およびX^2はそれぞれ独立にＯ原子またはＳ原子を表し、

A^1はＣR^7またはＮ原子を表し、A^2はＣR^8またはＮ原子を表し、

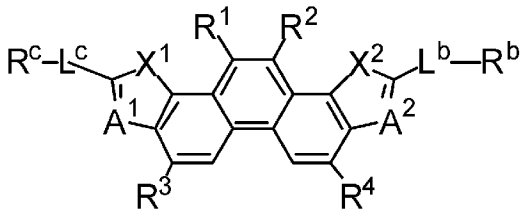
R^1～R^5、R^7およびR^8はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、R^5は－L^a－R^aで表される基ではなく、

L^aは下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基または２以上の下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基が結合した２価の連結基を表し、

R^aは置換または無置換のアルキル基、シアノ基、ビニル基、エチニル基、オキシエチレン基、オキシエチレン単位の繰り返し数ｖが２以上のオリゴオキシエチレン基、シロキサン基、ケイ素原子数が２以上のオリゴシロキサン基、あるいは、置換または無置換のトリアルキルシリル基を表す；

[化9]

一般式（２－２）



一般式（２－２）中、Ｘ[1]およびＸ[2]はそれぞれ独立にＯ原子またはＳ原子を表し、

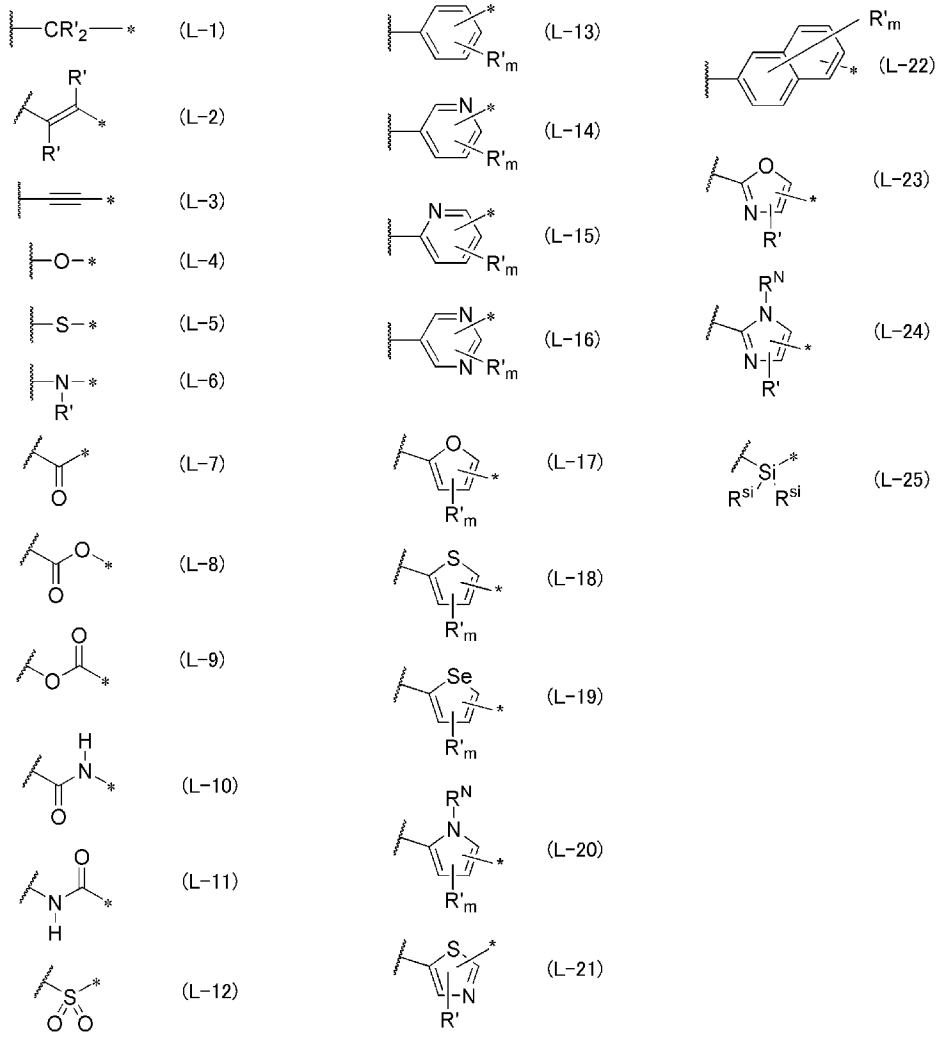
Ａ[1]はＣＲ[7]またはＮ原子を表し、Ａ[2]はＣＲ[8]またはＮ原子を表し、

Ｒ[1]～Ｒ[4]、Ｒ[7]およびＲ[8]はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、

Ｌ[b]およびＬ[c]はそれぞれ独立に下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基または２以上の下記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）のいずれかで表される２価の連結基が結合した２価の連結基を表し、

Ｒ[b]およびＲ[c]はそれぞれ独立に置換または無置換のアルキル基、シアノ基、ビニル基、エチニル基、オキシエチレン基、オキシエチレン単位の繰り返し数ｖが２以上のオリゴオキシエチレン基、シロキサン基、ケイ素原子数が２以上のオリゴシロキサン基、あるいは、置換または無置換のトリアルキルシリル基を表す；

[化10]



一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－２５）中、波線部分は２つのヘテロ５員環が縮環したフェナントレン骨格との結合位置を表し、

一般式（Ｌ－１３）におけるｍは４を表し、一般式（Ｌ－１４）および（Ｌ－１５）におけるｍは３を表し、一般式（Ｌ－１６）～（Ｌ－２０）におけるｍは２を表し、（Ｌ－２２）におけるｍは６を表し、

一般式（Ｌ－１）、（Ｌ－２）、（Ｌ－６）および（Ｌ－１３）～（Ｌ－２４）におけるＲ’はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、

R^Nは水素原子または置換基を表し、

R^{si}はそれぞれ独立に水素原子、アルキル基、アルケニル基またはアルキニル基を表す。

[請求項11] 前記一般式（１）、（２－１）または（２－２）中、A^1がCR^7であるか、A^2がCR^8であり、R^7およびR^8はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表す請求項９または１０に記載の化合物。

[請求項12] 前記一般式（１）、（２－１）または（２－２）中、X^1およびX^2のうち少なくとも１つがＳ原子である請求項９～１１のいずれか一項に記載の化合物。

[請求項13] 前記一般式（１）、（２－１）または（２－２）中、Ｌ、L^a、L^bおよびL^cが全て前記一般式（Ｌ－１）～（Ｌ－５）、（Ｌ－１３）、（Ｌ－１７）もしくは（Ｌ－１８）のいずれかで表される２価の連結基またはこれらの２価の連結基が２以上結合した２価の連結基である請求項９～１２のいずれか一項に記載の化合物。

[請求項14] 前記一般式（１）、（２－１）または（２－２）中、Ｌ、L^a、L^bおよびL^cが全て前記一般式（Ｌ－１）、（Ｌ－３）、（Ｌ－１３）または（Ｌ－１８）のいずれかで表される２価の連結基、あるいは前記一般式（Ｌ－３）、（Ｌ－１３）または（Ｌ－１８）のいずれか１つで表される２価の連結基と前記一般式（Ｌ－１）で表される２価の連結基が結合した２価の連結基である請求項９～１３のいずれか一項に記載の化合物。

[請求項15] 前記一般式（１）、（２－１）または（２－２）中、Ｒ、R^a、R^bおよびR^cが全て置換または無置換のアルキル基である請求項９～１４のいずれか一項に記載の化合物。

[請求項16] 前記一般式（１）、（２－１）または（２－２）中、Ｌ、L^a、L^bおよびL^cが全て前記一般式（Ｌ－１）で表される２価の連結基であり、かつ、Ｒ、R^a、R^bおよびR^cが全て直鎖の炭素数７～１７のアルキル基であるか；あるいは、

Ｌ、L^a、L^bおよびL^cが全て前記一般式（Ｌ－３）、（Ｌ－１３

）または（Ｌ－１８）のいずれか１つで表される２価の連結基と前記一般式（Ｌ－１）で表される２価の連結基が結合した２価の連結基であり、かつ、Ｒ、Ｒ^{a}、Ｒ^{b}およびＲ^{c}が全て直鎖のアルキル基である請求項９～１５のいずれか一項に記載の化合物。

[請求項17] 請求項９～１６のいずれか一項に記載の化合物を含有する非発光性有機半導体デバイス用有機半導体材料。

[請求項18] 請求項９～１６のいずれか一項に記載の化合物を含有する有機トランジスタ用材料。

[請求項19] 請求項９～１６のいずれか一項に記載の化合物を含有する非発光性有機半導体デバイス用塗布溶液。

[請求項20] 請求項９～１６のいずれか一項に記載の化合物とポリマーバインダーを含有する非発光性有機半導体デバイス用塗布溶液。

[請求項21] 請求項９～１６のいずれか一項に記載の化合物を含有する非発光性有機半導体デバイス用有機半導体膜。

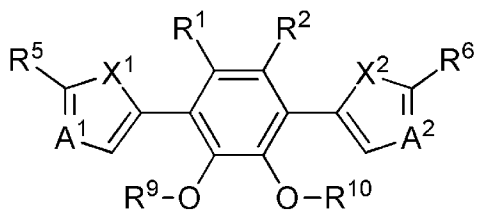
[請求項22] 請求項９～１６のいずれか一項に記載の化合物とポリマーバインダーを含有する非発光性有機半導体デバイス用有機半導体膜。

[請求項23] 溶液塗布法により作製された請求項２１または２２に記載の非発光性有機半導体デバイス用有機半導体膜。

[請求項24] 下記一般式（３）で表される化合物：

一般式（３）

[化11]



一般式（３）中、Ｘ^{1}およびＸ^{2}はそれぞれ独立にＯ原子またはＳ原子を表し、

Ａ^{1}はＣＲ^{7}またはＮ原子を表し、Ａ^{2}はＣＲ^{8}またはＮ原子を表し

、

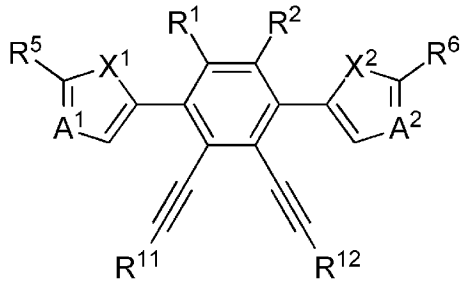
R^1、R^2、R^5～R^8はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、

R^9およびR^{10}はそれぞれ独立に水素原子、アルキル基、アルキルカルボニル基、アリールカルボニル基またはトリフルオロメチルスルホニル基を表す。

[請求項25] 下記一般式（４）で表される化合物：

一般式（４）

[化12]



一般式（４）において、X^1およびX^2はそれぞれ独立にＯ原子またはＳ原子を表し、

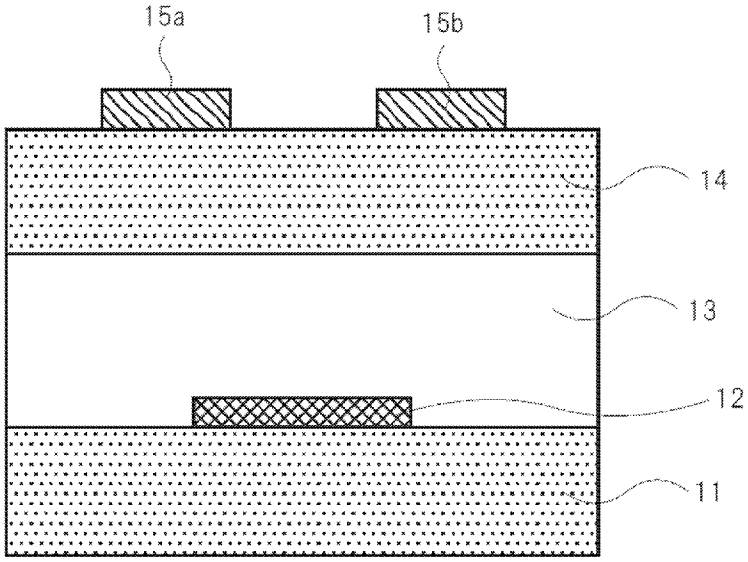
A^1はＣR^7またはＮ原子を表し、A^2はＣR^8またはＮ原子を表し、

R^1、R^2、R^5～R^8はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、

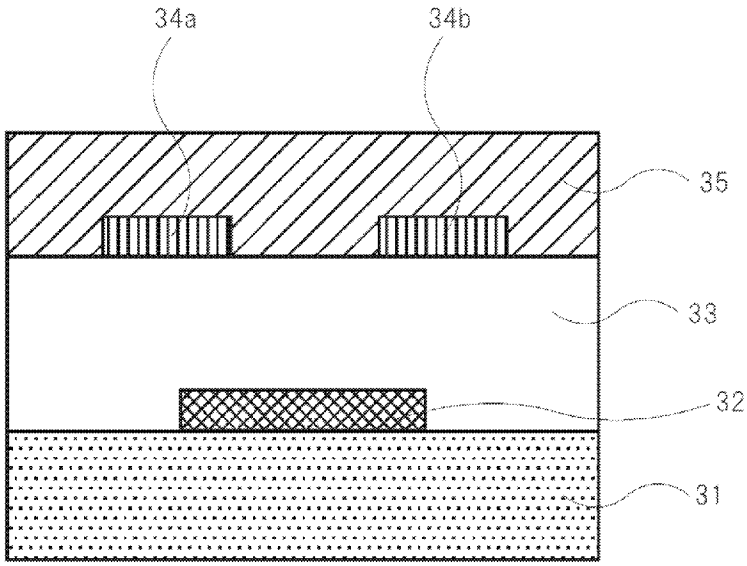
R^{11}およびR^{12}はそれぞれ独立に水素原子、アルキル基、トリアルキルシリル基、アルキル置換または無置換のアリール基、あるいは、アルキル置換または無置換のヘテロアリール基を表す。

[請求項26] 請求項９～１６のいずれか一項に記載の化合物の中間体化合物である請求項２４または２５に記載の化合物。

[図1]



[図2]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2014/083194

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
H01L51/30(2006.01)i, *C07D333/18*(2006.01)i, *C07D487/04*(2006.01)i, *C07D493/04*
(2006.01)i, *C07D495/04*(2006.01)i, *H01L29/786*(2006.01)i, *H01L51/05*
(2006.01)i, *H01L51/40*(2006.01)i

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)
H01L51/30, C07D333/18, C07D487/04, C07D493/04, C07D495/04, H01L29/786, H01L51/05, H01L51/40

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Jitsuyo Shinan Koho	1922-1996	Jitsuyo Shinan Toroku Koho	1996-2015
Kokai Jitsuyo Shinan Koho	1971-2015	Toroku Jitsuyo Shinan Koho	1994-2015

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)
CAplus/REGISTRY(STN)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 2013/168048 A1 (BASF SE), 14 November 2013 (14.11.2013), page 3, line 11 to page 7, line 12; page 10, line 30 to page 11, line 9; page 11, line 25 to page 12, line 5; page 16, line 22 to page 17, line 28 & TW 201406764 A	1-26
A	JP 2011-46687 A (Samsung Mobile Display Co., Ltd.), 10 March 2011 (10.03.2011), entire text; all drawings & US 2011/0049485 A1 & EP 2298739 A1 & KR 10-2011-0023091 A & CN 102002046 A	1-26

☒ Further documents are listed in the continuation of Box C. ☐ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:
"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date
"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed
"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report
19 January 2015 (19.01.15)	03 February 2015 (03.02.15)

Name and mailing address of the ISA/	Authorized officer
Japan Patent Office 3-4-3,Kasumigaseki,Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915,Japan	Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2014/083194

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	WO 2010/016511 A1 (Idemitsu Kosan Co., Ltd.), 11 February 2010 (11.02.2010), entire text; all drawings & US 2011/0220883 A1 & CN 102177598 A & KR 10-2011-0057133 A & TW 201014006 A	1-26

国際調査報告

国際出願番号　ＰＣＴ／ＪＰ２０１４／０８３１９４

Ａ．　発明の属する分野の分類（国際特許分類（ＩＰＣ））

Int.Cl.　H01L51/30(2006.01)i, C07D333/18(2006.01)i, C07D487/04(2006.01)i, C07D493/04(2006.01)i, C07D495/04(2006.01)i, H01L29/786(2006.01)i, H01L51/05(2006.01)i, H01L51/40(2006.01)i

Ｂ．　調査を行った分野

調査を行った最小限資料（国際特許分類（ＩＰＣ））

Int.Cl.　H01L51/30, C07D333/18, C07D487/04, C07D493/04, C07D495/04, H01L29/786, H01L51/05, H01L51/40

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報	１９２２－１９９６年
日本国公開実用新案公報	１９７１－２０１５年
日本国実用新案登録公報	１９９６－２０１５年
日本国登録実用新案公報	１９９４－２０１５年

国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）

CAplus/REGISTRY(STN)

Ｃ．　関連すると認められる文献

引用文献のカテゴリー＊	引用文献名　及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する請求項の番号
X	WO 2013/168048 A1（ＢＡＳＦ　ＳＥ）2013.11.14, 第３ページ第１１行－第７ページ第１２行、第１０ページ第３０行－第１１ページ第９行、第１１ページ第２５行－第１２ページ第５行、第１６ページ第２２行－第１７ページ第２８行 & TW 201406764 A	1-26
A	JP 2011-46687 A (三星モバイルディスプレイ株式會社) 2011.03.10, 全文、全図 & US 2011/0049485 A1 & EP 2298739 A1 & KR 10-2011-0023091 A & CN 102002046 A	1-26

☑　Ｃ欄の続きにも文献が列挙されている。

☐　パテントファミリーに関する別紙を参照。

＊　引用文献のカテゴリー
「Ａ」特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの
「Ｅ」国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの
「Ｌ」優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す）
「Ｏ」口頭による開示、使用、展示等に言及する文献
「Ｐ」国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献
「Ｔ」国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの
「Ｘ」特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの
「Ｙ」特に関連のある文献であって、当該文献と他の１以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの
「＆」同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日 １９．０１．２０１５	国際調査報告の発送日 ０３．０２．２０１５
国際調査機関の名称及びあて先 日本国特許庁（ＩＳＡ／ＪＰ） 郵便番号１００－８９１５ 東京都千代田区霞が関三丁目４番３号	特許庁審査官（権限のある職員）　５Ｆ　３８６４ 鈴木　聡一郎 電話番号　０３－３５８１－１１０１　内線　３５１６

Ｃ（続き）．　関連すると認められる文献

引用文献のカテゴリー＊	引用文献名　及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する請求項の番号
A	WO 2010/016511 A1 (出光興産株式会社) 2010.02.11, 全文、全図 & US 2011/0220883 A1 & CN 102177598 A & KR 10-2011-0057133 A & TW 201014006 A	1-26