

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号
特許第7655805号
(P7655805)

(45)発行日 令和7年4月2日(2025.4.2)

(24)登録日 令和7年3月25日(2025.3.25)

(51)国際特許分類	F I
H 1 0 K 30/60 (2023.01)	H 1 0 K 30/60
C 0 7 D 409/14 (2006.01)	C 0 7 D 409/14
C 0 7 D 495/14 (2006.01)	C 0 7 D 495/14
C 0 7 D 517/04 (2006.01)	C 0 7 D 517/04
C 0 7 D 519/00 (2006.01)	C 0 7 D 519/00

請求項の数 31 (全74頁) 最終頁に続く

(21)出願番号 特願2021-109461(P2021-109461)
 (22)出願日 令和3年6月30日(2021.6.30)
 (65)公開番号 特開2022-13894(P2022-13894A)
 (43)公開日 令和4年1月18日(2022.1.18)
 審査請求日 令和6年2月9日(2024.2.9)
 (31)優先権主張番号 10-2020-0080484
 (32)優先日 令和2年6月30日(2020.6.30)
 (33)優先権主張国・地域又は機関 韓国(KR)

(73)特許権者 390019839
 三星電子株式会社
 Samsung Electronics
 Co., Ltd.
 大韓民国京畿道水原市靈通区三星路129
 129, Samsung-ro, Yeongtong-gu, Suwon-si,
 Gyeonggi-do, Republic of Korea
 (74)代理人 110000051
 弁理士法人共生国際特許事務所
 (72)発明者 權 五 達
 大韓民国 ソウル特別市 松坡区 オリム
 ビック路 435

最終頁に続く

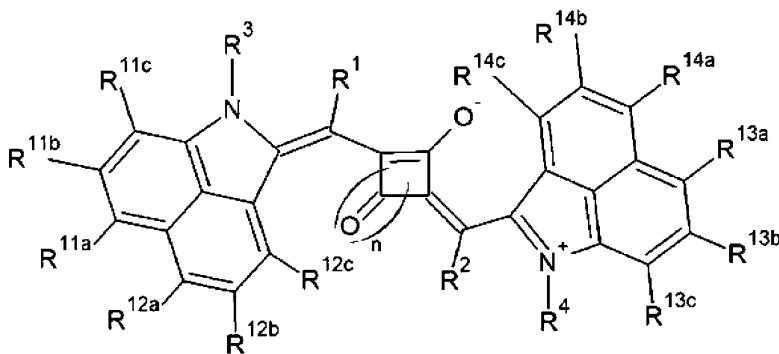
(54)【発明の名称】 化合物及びそれを含む光電素子、赤外線吸収材、赤外線吸収/遮断フィルム、並びにセンサー及び電子装置

(57)【特許請求の範囲】

【請求項1】

下記に示す化学式1で表されることを特徴とする化合物。

【化1】



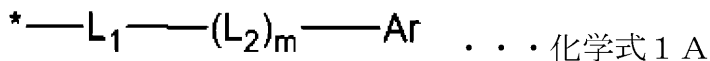
(前記化学式1中、

R¹ ~ R⁴は、それぞれ独立して、水素、重水素、炭素数1 ~ 10のアルキル基、炭素数1 ~ 10のアルコキシ基、炭素数1 ~ 10のハロアルキル基、炭素数6 ~ 14のアリール基、又は炭素数3 ~ 12のヘテロアリール基であり、

R^{11a} ~ R^{14c}は、それぞれ独立して、水素、重水素、ハロゲン、シアノ基、炭素数

1 ~ 10のアルキル基、炭素数1 ~ 10のアルコキシ基、炭素数1 ~ 10の八口アルキル基、炭素数6 ~ 14のアリール基、炭素数6 ~ 14のアリールオキシ基、炭素数3 ~ 12のヘテロアリール基、又は下記に示す化学式1 Aで表される官能基であり、 $R^{11a} \sim R^{14c}$ の内の少なくとも1つは、下記に示す化学式1 Aで表される官能基であり、 $R^{11a} \sim R^{14c}$ は、互いに独立して存在するか、又は隣接する2個の官能基が互いに連結されてベンゾインドールと縮合環を形成し、
(nは、1又は2の整数である。)

【化1 A】



10

(前記化学式1 A中、

L_1 は、置換又は非置換の炭素数2 ~ 15のヘテロ芳香族環基であり、

L_2 は、置換又は非置換の炭素数2 ~ 15のヘテロ芳香族環基、置換又は非置換の炭素数6 ~ 30の芳香族環基、置換又は非置換の炭素数1 ~ 10のアルキレン基、又は置換又は非置換の炭素数3 ~ 20のシクロアルキレン基であり、

Ar は、置換又は非置換の炭素数6 ~ 30の芳香族環基、置換又は非置換の炭素数2 ~ 30のヘテロ芳香族環基、これらの縮合環、置換又は非置換の炭素数6 ~ 30のアリールアミン基、又は置換又は非置換の炭素数2 ~ 30のヘテロアリールアミン基であり、

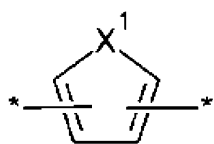
20

mは、0、1、又は2である。)

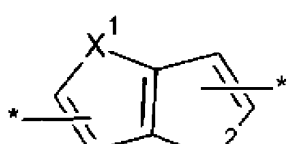
【請求項2】

前記化学式1 A中、 L_1 及び L_2 は、それぞれ独立して、下記に示す化学式1 A - 11 ~ 化学式1 A - 15から選択されるヘテロ芳香族環基又はこれらの組み合わせであることを特徴とする請求項1に記載の化合物。

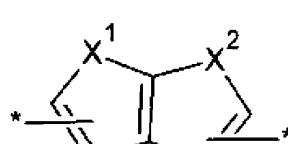
【化1 A - 11 - 1 A - 15】



(1A-11)

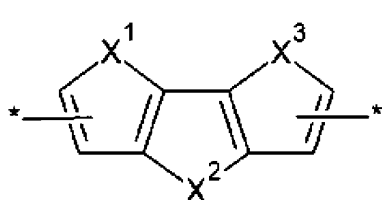


(1A-12)

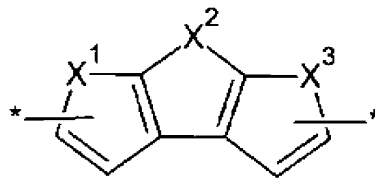


(1A-13)

30



(1A-14)



(1A-15)

40

(前記化学式1 A - 11 ~ 化学式1 A - 15中、

X^1 、 X^2 、及び X^3 は、それぞれ独立して、O、S、Se、Te、S(=O)、S(=O)₂、NR^a、SiR^bR^c、又はGeR^dR^eであり(ここでR^a、R^b、R^c、R^d、及びR^eはそれぞれ独立して、水素、重水素、炭素数1 ~ 10のアルキル基、炭素数1 ~ 10の八口アルキル基、炭素数6 ~ 14のアリール基、炭素数3 ~ 12のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、

ヘテロ芳香族環のそれぞれの水素は、非置換若しくは、重水素、ハロゲン、シアノ基、炭素数1 ~ 10のアルキル基、炭素数1 ~ 10のアルコキシ基、炭素数1 ~ 10の八口アルキル基、炭素数6 ~ 10のアリール基、炭素数6 ~ 10のアリールオキシ基、-SiH₃基、及び炭素数1 ~ 10のアルキルシリル基からなる一群から選択される置換基で置換さ

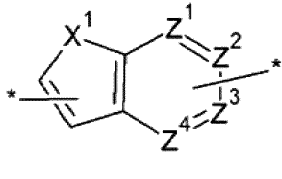
50

れる。)

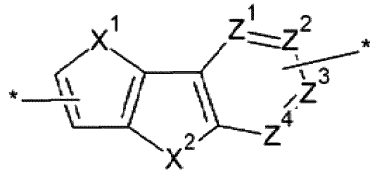
【請求項 3】

前記化学式 1 A 中、 L_1 及び L_2 は、それぞれ独立して、下記に示す化学式 1 A - 1 6 ~ 化学式 1 A - 2 0 から選択されるヘテロ芳香族環基又はこれらの組み合わせであることを特徴とする請求項 1 に記載の化合物。

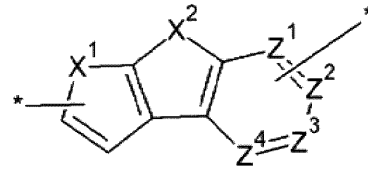
【化 1 A - 1 6 - 1 A - 2 0】



(1A-16)

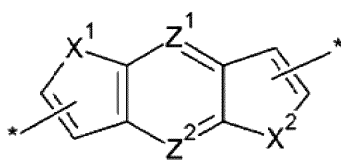


(1A-17)

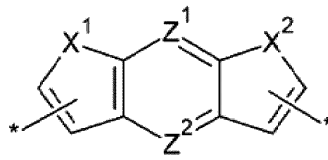


(1A-18)

10



(1A-19)



(1A-20)

20

(前記化学式 1 A - 1 6 ~ 化学式 1 A - 2 0 中、

X^1 及び X^2 は、それぞれ独立して、O、S、Se、Te、 $S(=O)$ 、 $S(=O)_2$ 、 NR^a 、 SiR^bR^c 、又は GeR^dR^e であり (ここで R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、及び R^e は、それぞれ独立して、水素、重水素、炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基、 $-SiH_3$ 、炭素数 1 ~ 10 のアルキルシリル基、 $-NH_2$ 、炭素数 1 ~ 10 のアルキルアミン基、炭素数 6 ~ 10 のアリールアミン基、炭素数 6 ~ 14 のアリール基、炭素数 3 ~ 12 のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、

30

$Z^1 \sim Z^4$ は、それぞれ独立して、 CR^x 又は N であり (ここで R^x は水素、重水素、炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基、 $-SiH_3$ 、炭素数 1 ~ 10 のアルキルシリル基、 $-NH_2$ 、炭素数 1 ~ 10 のアルキルアミン基、炭素数 6 ~ 10 のアリールアミン基、炭素数 6 ~ 14 のアリール基、炭素数 3 ~ 12 のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、但し、化学式 1 A - 1 6 ~ 化学式 1 A - 1 8 中、 $Z^1 \sim Z^4$ の内の 1 つは、 CR^x であり、 R^x は単結合であり、芳香族環又はヘテロ芳香族環のそれぞれの水素は、非置換若しくは、重水素、ハロゲン、シアノ基、炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基、 $-SiH_3$ 基、及び炭素数 1 ~ 10 のアルキルシリル基からなる一群から選択される置換基で置換される。)

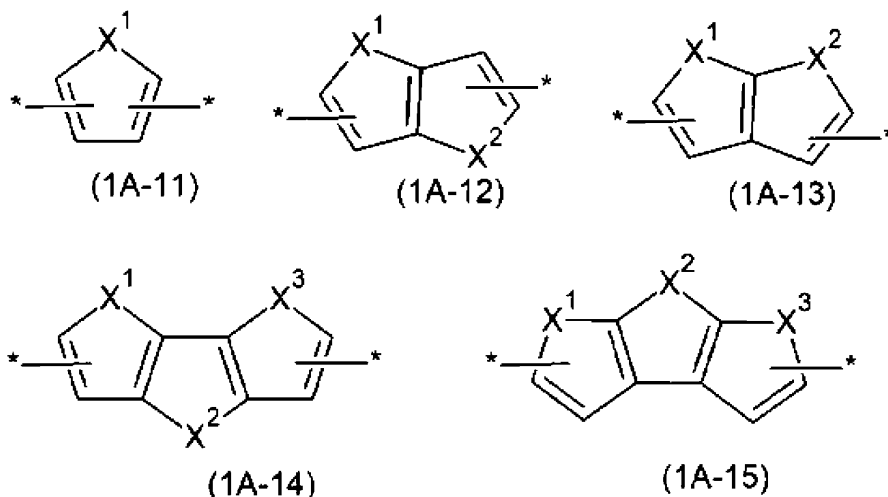
40

【請求項 4】

前記 L_1 及び L_2 は、それぞれ独立して、下記に示す化学式 1 A - 1 1 ~ 化学式 1 A - 1 5 から選択されるヘテロ芳香族環基と下記に示す化学式 1 A - 1 6 ~ 化学式 1 A - 2 0 から選択されるヘテロ芳香族環基の組み合わせであることを特徴とする請求項 1 に記載の化合物。

50

【化1A-11-1A-15】

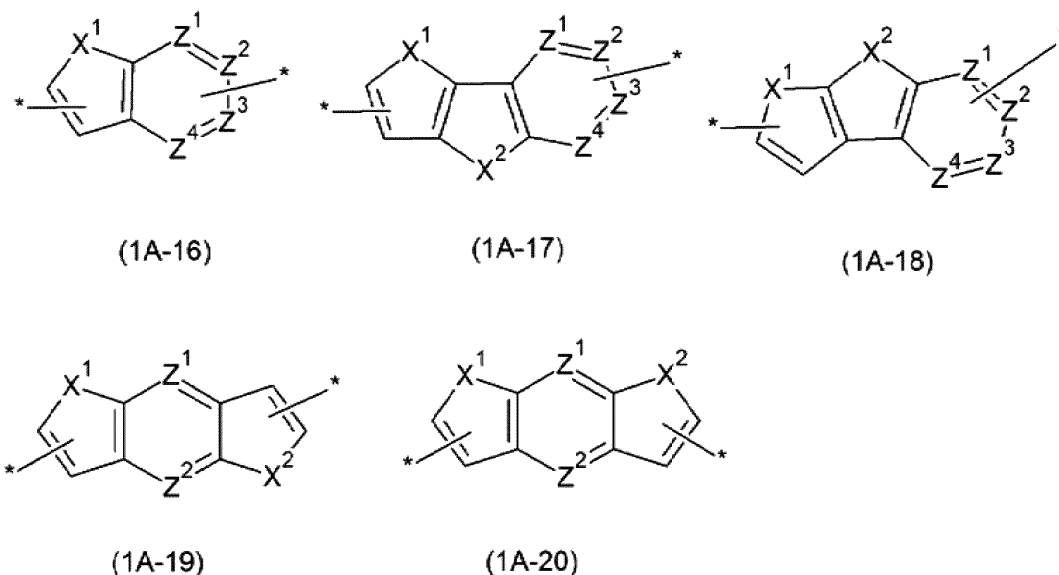


10

(前記化学式1A-11~化学式1A-15中、
 X^1 、 X^2 、及び X^3 は、それぞれ独立して、O、S、Se、Te、 $S(=O)$ 、 $S(=O)_2$ 、 NR^a 、 SiR^bR^c 、又は GeR^dR^e であり(ここで R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、及び R^e はそれぞれ独立して、水素、重水素、炭素数1~10のアルキル基、炭素数1~10のハロアルキル基、炭素数6~14のアリール基、炭素数3~12のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、
 ヘテロ芳香族環のそれぞれの水素は、非置換若しくは、重水素、ハロゲン、シアノ基、炭素数1~10のアルキル基、炭素数1~10のアルコキシ基、炭素数1~10のハロアルキル基、炭素数6~10のアリール基、炭素数6~10のアリールオキシ基、 $-SiH_3$ 基、及び炭素数1~10のアルキルシリル基からなる一群から選択される置換基で置換される。)

20

【化1A-16-1A-20】



30

(前記化学式1A-16~化学式1A-20中、
 X^1 及び X^2 は、それぞれ独立して、O、S、Se、Te、 $S(=O)$ 、 $S(=O)_2$ 、 NR^a 、 SiR^bR^c 、又は GeR^dR^e であり(ここで R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、及び R^e はそれぞれ独立して、水素、重水素、炭素数1~10のアルキル基、炭素数1~10のハロアルキル基、 $-SiH_3$ 、炭素数1~10のアルキルシリル基、 $-NH_2$ 、炭素数1~10のアルキルアミン基、炭素数6~10のアリールアミン基、炭素数6~14のアリール基、炭素数3~12のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わ

40

50

せである)、

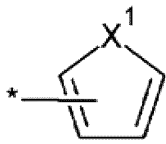
Z¹ ~ Z⁴は、それぞれ独立して、CR^x又はNであり(ここでR^xは水素、重水素、炭素数1~10のアルキル基、炭素数1~10のハロアルキル基、-SiH₃、炭素数1~10のアルキルシリル基、-NH₂、炭素数1~10のアルキルアミン基、炭素数6~10のアリールアミン基、炭素数6~14のアリール基、炭素数3~12のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、但し、化学式1A-16~化学式1A-18中、Z¹~Z⁴の内のは、CR^xであり、R^xは単結合であり、芳香族環又はヘテロ芳香族環のそれぞれの水素は、非置換若しくは、重水素、ハロゲン、シアノ基、炭素数1~10のアルキル基、炭素数1~10のアルコキシ基、炭素数1~10のハロアルキル基、-SiH₃基、及び炭素数1~10のアルキルシリル基からなる一群から選択される置換基で置換される。)

10

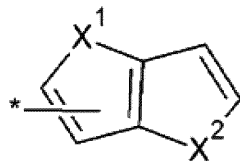
【請求項5】

前記化学式1中、Arは、下記に示す化学式1B-11~化学式1B-15から選択されるヘテロ芳香族環基であることを特徴とする請求項1に記載の化合物。

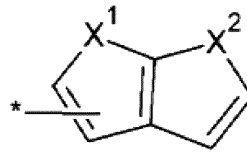
【化1B-11-1B-15】



(1B-11)

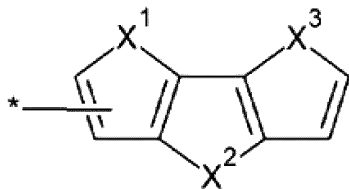


(1B-12)

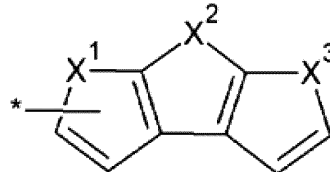


(1B-13)

20



(1B-14)



(1B-15)

30

(前記化学式1B-11~化学式1B-15中、X¹、X²、及びX³は、それぞれ独立して、O、S、Se、Te、S(=O)、S(=O)₂、NR^a、SiR^bR^c、又はGeR^dR^eであり(ここでR^a、R^b、R^c、R^d、及びR^eは、それぞれ独立して、水素、重水素、炭素数1~10のアルキル基、炭素数1~10のハロアルキル基、炭素数6~14のアリール基、炭素数3~12のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、ヘテロ芳香族環のそれぞれの水素は、非置換若しくは、重水素、ハロゲン、シアノ基、炭素数1~10のアルキル基、炭素数1~10のアルコキシ基、炭素数1~10のハロアルキル基、炭素数6~10のアリール基、炭素数6~10のアリールオキシ基、-SiH₃基、及び炭素数1~10のアルキルシリル基からなる一群から選択される置換基で置換される。)

40

【請求項6】

前記化学式1中、Arは、置換又は非置換の炭素数6~30のアリール基、置換又は非置換の炭素数2~15のヘテロアリール基又はこれらの縮合環であることを特徴とする請求項1に記載の化合物。

【請求項7】

前記化学式1中、Arは、置換又は非置換のフェニル、置換又は非置換のナフチル、アセナフテニル(acenaphthényl)、置換又は非置換のアントラセニル、置換又は非置換のフェナントレニル、置換又は非置換のテトラセニル、置換又は非置換のピレニル、置換又は非置換のキノリル、置換又は非置換のイソキノリル、置換又は非置換のキ

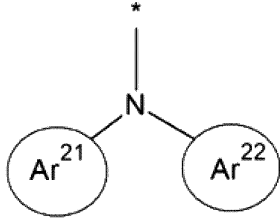
50

ノキサリル、置換又は非置換のキナゾリル又は置換又は非置換のフェナントロリルであることを特徴とする請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 8】

前記化学式 1 中、前記アリールアミン基又はヘテロアリールアミン基は、下記に示す化学式 1 C - 1 で表されることを特徴とする請求項 1 に記載の化合物。

【化 1 C - 1】



・・・化学式 1 C - 1

10

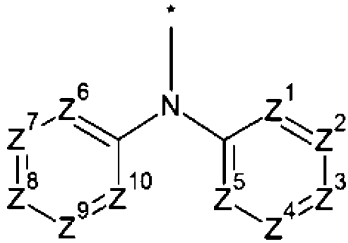
(前記化学式 1 C - 1 中、

Ar²¹ 及び Ar²² はそれぞれ独立して、置換又は非置換の炭素数 6 ~ 30 のアリール基、及び置換又は非置換の炭素数 3 ~ 30 のヘテロアリール基から選択される。)

【請求項 9】

前記化学式 1 C - 1 は、下記に示す化学式 1 C - 1 a 又は化学式 1 C - 1 b で表されることを特徴とする請求項 8 に記載の化合物。

【化 1 C - 1 a】



・・・化学式 1 C - 1 a

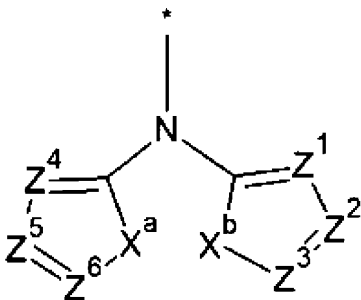
20

(前記化学式 1 C - 1 a 中、

Z¹ ~ Z¹⁰ は、それぞれ独立して、N 又は CR^x であり (ここで R^x は水素、重水素、炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基、- SiH₃、炭素数 1 ~ 10 のアルキルシリル基、- NH₂、炭素数 1 ~ 10 のアルキルアミン基、炭素数 6 ~ 12 のアリール基、炭素数 3 ~ 12 のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、

Z¹ ~ Z¹⁰ が CR^x の場合、R^x は独立して存在するか、又は Z¹ ~ Z¹⁰ の内の隣接する 2 個が互いに連結されて 5 員芳香族環又は 6 員芳香族環を形成する。)

【化 1 C - 1 b】



・・・化学式 1 C - 1 b

30

(前記化学式 1 C - 1 b 中、

X^a 及び X^b は、それぞれ独立して、- O -、- S -、- Se -、- Te -、- NR^a -、- SiR^bR^c -、及び - GeR^dR^e - から選択され (ここで R^a、R^b、R^c、R^d

50

及び R^e は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、置換又は非置換の炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、及び置換又は非置換の炭素数 6 ~ 10 のアリール基から選択される)、

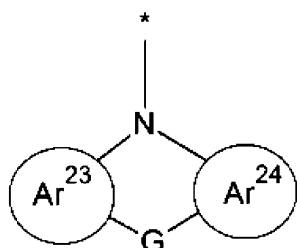
$Z^1 \sim Z^6$ は、それぞれ独立して、N 又は CR^x であり (ここで R^x は、水素、重水素、炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基、 $-SiH_3$ 、炭素数 1 ~ 10 のアルキルシリル基、 $-NH_2$ 、炭素数 1 ~ 10 のアルキルアミン基、炭素数 6 ~ 12 のアリール基、炭素数 3 ~ 12 のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、

$Z^1 \sim Z^6$ が CR^x の場合、 R^x は独立して存在するか、又は $Z^1 \sim Z^6$ の内の隣接する 2 個が互いに連結されて 5 員芳香族環又は 6 員芳香族環を形成する。)

【請求項 10】

前記化学式 1 中、前記ヘテロ芳香族環基は、下記に示す化学式 1 C - 2 で表される N - 含有ヘテロ芳香族環基であることを特徴とする請求項 1 に記載の化合物。

【化 1 C - 2】



・・・化学式 1 C - 2

(前記化学式 1 C - 2 中、

Ar^{23} 及び Ar^{24} は、それぞれ独立して、置換又は非置換の炭素数 6 ~ 30 のアレーン基、及び置換又は非置換の炭素数 3 ~ 15 のヘテロアレーン基から選択され、

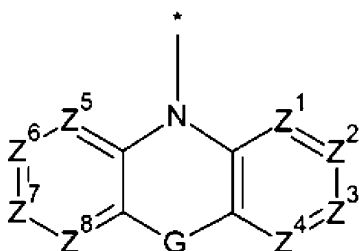
G は単結合、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-Se-$ 、 $-Te-$ 、 $-N=$ 、 $-NR^a-$ 、 $-SiR^bR^c-$ 、 $-GeR^dR^e-$ 、 $-(CR^fR^g)_n-$ 、及び $-(C(R^h)=C(R^i))-$ から選択される (ここで R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g 、 R^h 、及び R^i は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、置換又は非置換の炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、及び置換又は非置換の炭素数 6 ~ 10 のアリール基から選択され、 R^b と R^c 、 R^d と R^e 、 R^f と R^g 、又は R^h と R^i は、それぞれ独立して存在するか、又は互いに連結されて環を形成し、

$-(CR^fR^g)_n-$ の n は、1 又は 2 の整数である))。

【請求項 11】

前記化学式 1 C - 2 は、下記に示す化学式 1 C - 2 a、化学式 1 C - 2 b、又は化学式 1 C - 2 c で表されることを特徴とする請求項 10 に記載の化合物。

【化 1 C - 2 a】



・・・化学式 1 C - 2 a

(前記化学式 1 C - 2 a 中、

G は、単結合、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-Se-$ 、 $-Te-$ 、 $-N=$ 、 $-NR^a-$ 、 $-SiR^bR^c-$ 、 $-GeR^dR^e-$ 、 $-(CR^fR^g)_n-$ 、及び $-(C(R^h)=C(R^i))-$ から選択され (ここで R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g 、 R^h 及び R^i はそれぞれ独立して、水素、ハロゲン、置換又は非置換の炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、及び置換又は非置換の炭素数 6 ~ 10 のアリール基から選択され、 R^b と R^c 、 R^d と R^e 、 R^f と

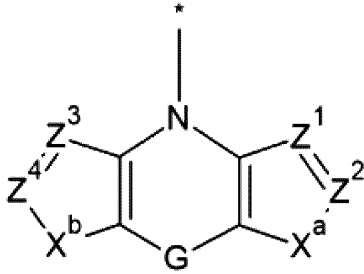
R^g 、又は R^h と R^i はそれぞれ独立して存在するか、又は互いに連結されて環を形成し、
 $-(CR^fR^g)_n-$ の n は、1又は2の整数である)、

$Z^1 \sim Z^8$ は、それぞれ独立して、 N 又は CR^x であり(ここで R^x は水素、重水素、炭素数1~10のアルキル基、炭素数1~10のハロアルキル基、炭素数1~10のアルコキシ基、 $-SiH_3$ 、炭素数1~10のアルキルシリル基、 $-NH_2$ 、炭素数1~10のアルキルアミン基、炭素数6~12のアリール基、炭素数3~12のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、

$Z^1 \sim Z^8$ が CR^x の場合、 R^x は独立して存在するか、又は $Z^1 \sim Z^8$ の内の隣接する2個が互いに連結されて5員芳香族環又は6員芳香族環を形成する。)

【化1C-2b】

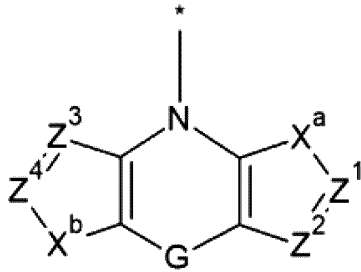
10



・・・化学式1C-2b

【化1C-2c】

20



・・・化学式1C-2c

(前記化学式1C-2b及び化学式1C-2c中、

30

G は、単結合、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-Se-$ 、 $-Te-$ 、 $-N=$ 、 $-NR^a-$ 、 $-SiR^bR^c-$ 、 $-GeR^dR^e-$ 、 $-(CR^fR^g)_n-$ 、及び $-(C(R^h)=C(R^i))-$ から選択され(ここで R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g 、 R^h 、及び R^i は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、置換又は非置換の炭素数1~10のアルキル基、及び置換又は非置換の炭素数6~10のアリール基から選択され、 R^b と R^c 、 R^d と R^e 、 R^f と R^g 、又は R^h と R^i はそれぞれ独立して存在するか、又は互いに連結されて環を形成し、 $-(CR^fR^g)_n-$ の n は1又は2の整数である)、

X^a 及び X^b は、それぞれ独立して、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-Se-$ 、 $-Te-$ 、 $-NR^p-$ 、 $-SiR^qR^r-$ 、及び $-GeR^sR^t-$ から選択され(ここで R^p 、 R^q 、 R^r 、 R^s 、及び R^t は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、置換又は非置換の炭素数1~10のアルキル基、及び置換又は非置換の炭素数6~10のアリール基から選択される)、

40

$Z^1 \sim Z^4$ は、それぞれ独立して、 N 又は CR^x であり(ここで R^x は水素、重水素、炭素数1~10のアルキル基、炭素数1~10のハロアルキル基、炭素数1~10のアルコキシ基、 $-SiH_3$ 、炭素数1~10のアルキルシリル基、 $-NH_2$ 、炭素数1~10のアルキルアミン基、炭素数6~12のアリール基、炭素数3~12のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、

$Z^1 \sim Z^4$ が CR^x の場合、 R^x は独立して存在するか、又は $Z^1 \sim Z^4$ の内の隣接する2個が互いに連結されて5員芳香族環又は6員芳香族環を形成する。)

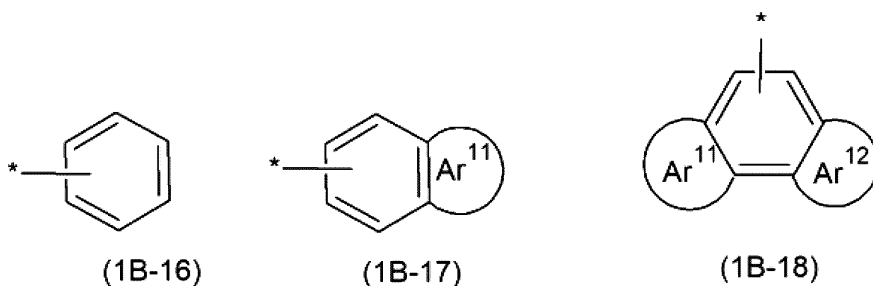
【請求項12】

前記化学式1中、 A_r は、下記に示す化学式1B-16~化学式1B-25から選択さ

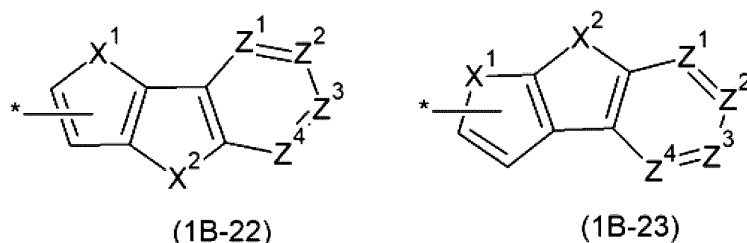
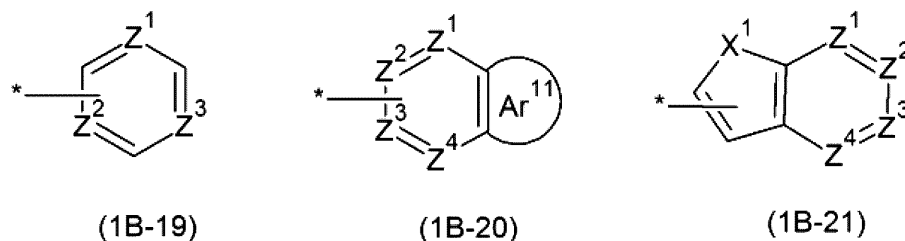
50

れる芳香族環基又はヘテロ芳香族環基であることを特徴とする請求項1に記載の化合物。

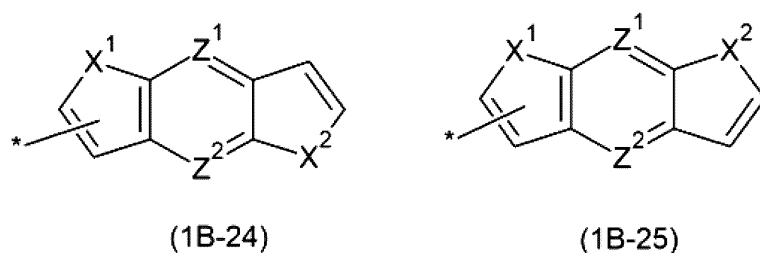
【化1B-16-1B-25】



10



20



30

(前記化学式1B-16~化学式1B-25中、

X^1 及び X^2 は、それぞれ独立して、O、S、Se、Te、 $S(=O)$ 、 $S(=O)_2$ 、 NR^a 、 SiR^bR^c 、又は GeR^dR^e であり(ここで R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、及び R^e は、それぞれ独立して、水素、重水素、炭素数1~10のアルキル基、炭素数1~10のハロアルキル基、 $-SiH_3$ 、炭素数1~10のアルキルシリル基、 $-NH_2$ 、炭素数1~10のアルキルアミン基、炭素数6~10のアリールアミン基、炭素数6~14のアリール基、炭素数3~12のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、

40

Z^1 ~ Z^4 は、それぞれ独立して、 CR^x 又はNであり(ここで R^x は、水素、重水素、炭素数1~10のアルキル基、炭素数1~10のハロアルキル基、 $-SiH_3$ 、炭素数1~10のアルキルシリル基、 $-NH_2$ 、炭素数1~10のアルキルアミン基、炭素数6~10のアリールアミン基、炭素数6~14のアリール基、炭素数3~12のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、但し、化学式1B-20中、 Z^1 ~ Z^4 の内の1つは CR^x であり、 R^x は単結合であり、

Ar^{11} 及び Ar^{12} は、それぞれ独立して、置換又は非置換の炭素数6~30のアレー

50

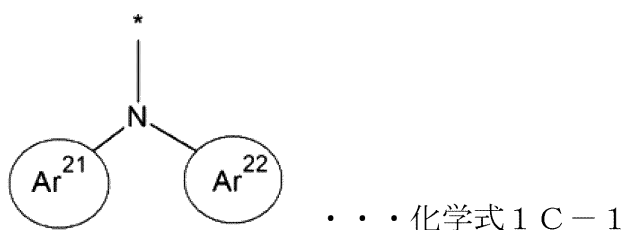
ン基、及び置換又は非置換の炭素数 3 ~ 30 のヘテロアレン基から選択され、芳香族環又はヘテロ芳香族環のそれぞれの水素は、非置換若しくは、重水素、ハロゲン、シアノ基、炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基、炭素数 6 ~ 10 のアリール基、炭素数 6 ~ 10 のアリールオキシ基、- SiH₃基、及び炭素数 1 ~ 10 のアルキルシリル基からなる一群から選択される置換基で置換される。)

【請求項 13】

前記化学式 1 B - 16 ~ 化学式 1 B - 25 で表される芳香族環基は、アリールアミン基又はアリールアミン基で置換され、

前記アリールアミン基又はアリールアミン基は、下記に示す化学式 1 C - 1 で表されることを特徴とする請求項 12 に記載の化合物。 10

【化 1 C - 1】



20

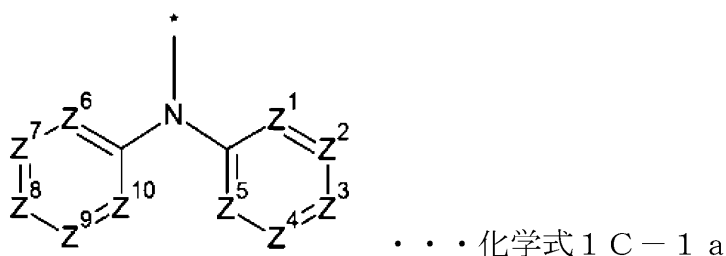
(前記化学式 1 C - 1 中、

Ar²¹ 及び Ar²² はそれぞれ独立して、置換又は非置換の炭素数 6 ~ 30 のアリール基、及び置換又は非置換の炭素数 3 ~ 30 のヘテロアリール基から選択される。

【請求項 14】

前記化学式 1 C - 1 は、下記に示す化学式 1 C - 1 a 又は化学式 1 C - 1 b で表されることを特徴とする請求項 13 に記載の化合物。

【化 1 C - 1 a】



30

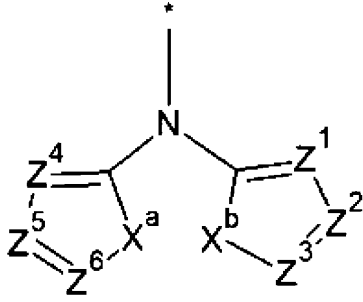
(前記化学式 1 C - 1 a 中、

Z¹ ~ Z¹⁰ は、それぞれ独立して、N 又は CR^x であり (ここで R^x は、水素、重水素、炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基、- SiH₃、炭素数 1 ~ 10 のアルキルシリル基、- NH₂、炭素数 1 ~ 10 のアルキルアミン基、炭素数 6 ~ 12 のアリール基、炭素数 3 ~ 12 のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、 40

Z¹ ~ Z¹⁰ が CR^x の場合、R^x は独立して存在するか、又は Z¹ ~ Z¹⁰ の内の隣接する 2 個が互いに連結されて 5 員芳香族環又は 6 員芳香族環を形成する。)

50

【化1C-1b】



・・・化学式1C-1b

10

(前記化学式1C-1b中、
 X^a 及び X^b は、それぞれ独立して、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-Se-$ 、 $-Te-$ 、 $-NR^a-$ 、
 $-SiR^bR^c-$ 、及び $-GeR^dR^e-$ から選択され(ここで R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、
 及び R^e は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、置換又は非置換の炭素数1~10のアルキル基、及び置換又は非置換の炭素数6~10のアリール基から選択される)、

$Z^1 \sim Z^6$ は、それぞれ独立して、N又は CR^x であり(ここで R^x は水素、重水素、炭素数1~10のアルキル基、炭素数1~10のハロアルキル基、炭素数1~10のアルコキシ基、 $-SiH_3$ 、炭素数1~10のアルキルシリル基、 $-NH_2$ 、炭素数1~10のアルキルアミン基、炭素数6~12のアリール基、炭素数3~12のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、

20

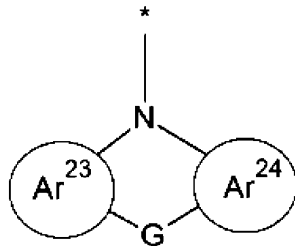
$Z^1 \sim Z^6$ が CR^x の場合、 R^x は独立して存在するか、又は $Z^1 \sim Z^6$ の内の隣接する2個が互いに連結されて5員芳香族環又は6員芳香族環を形成する。)

【請求項15】

前記化学式1B-16~化学式1B-25で表される芳香族環基は、N-含有ヘテロ環基で置換され、

前記N-含有ヘテロ環基は、下記に示す化学式1C-2で表されることを特徴とする請求項12に記載の化合物。

【化1C-2】



・・・化学式1C-2

30

(前記化学式1C-2中、
 Ar^{23} 及び Ar^{24} は、それぞれ独立して、置換又は非置換の炭素数6~30のアレーン基、及び置換又は非置換の炭素数3~15のヘテロアレーン基から選択され、

Gは、単結合、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-Se-$ 、 $-Te-$ 、 $-N=$ 、 $-NR^a-$ 、 $-SiR^bR^c-$ 、 $-GeR^dR^e-$ 、 $-(CR^fR^g)_n-$ 、及び $-(C(R^h)=C(R^i))-$ から選択される(ここで R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g 、 R^h 、及び R^i は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、置換又は非置換の炭素数1~10のアルキル基、及び置換又は非置換の炭素数6~10のアリール基から選択され、 R^b と R^c 、 R^d と R^e 、 R^f と R^g 、又は R^h と R^i はそれぞれ独立して存在するか、又は互いに連結されて環を形成し、 $-(CR^fR^g)_n-$ のnは、1又は2の整数である。)

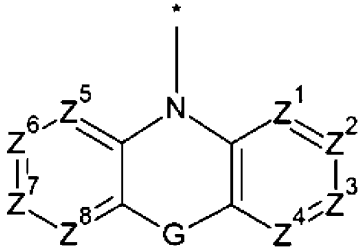
40

【請求項16】

前記化学式1C-2は、下記に示す化学式1C-2a、化学式1C-2b、又は化学式1C-2cで表されることを特徴とする請求項15に記載の化合物。

50

【化1C-2a】



・・・化学式1C-2a

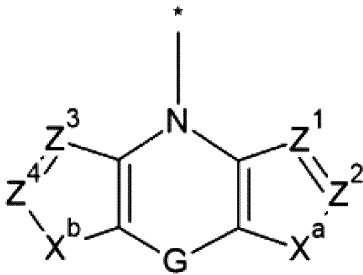
(前記化学式1C-2a中、

Gは、単結合、-O-、-S-、-Se-、-Te-、-N=、-NR^a-、-SiR^bR^c-、-GeR^dR^e-、-(CR^fR^g)_n-、及び-(C(R^h)=C(Rⁱ))-から選択され(ここでR^a、R^b、R^c、R^d、R^e、R^f、R^g、R^h、及びRⁱは、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、置換又は非置換の炭素数1~10のアルキル基、及び置換又は非置換の炭素数6~10のアリール基から選択され、R^bとR^c、R^dとR^e、R^fとR^g、又はR^hとRⁱは、それぞれ独立して存在するか、又は互いに連結されて環を形成し、-(CR^fR^g)_n-のnは1又は2の整数である)、

Z¹~Z⁸は、それぞれ独立して、N又はCR^xである(ここで、R^xは、水素、重水素、炭素数1~10のアルキル基、炭素数1~10のハロアルキル基、炭素数1~10のアルコキシ基、-SiH₃、炭素数1~10のアルキルシリル基、-NH₂、炭素数1~10のアルキルアミン基、炭素数6~12のアリール基、炭素数3~12のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、

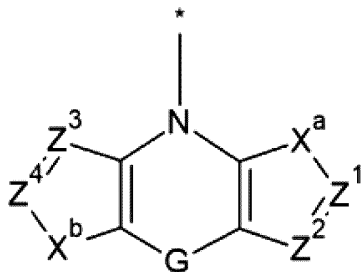
Z¹~Z⁸がCR^xの場合、R^xは独立して存在するか、又はZ¹~Z⁸の内の隣接する2個が互いに連結されて5員芳香族環又は6員芳香族環を形成する。)

【化1C-2b】



・・・化学式1C-2b

【化1C-2c】



・・・化学式1C-2c

(前記化学式1C-2b及び化学式1C-2c中、

Gは、単結合、-O-、-S-、-Se-、-Te-、-N=、-NR^a-、-SiR^bR^c-、-GeR^dR^e-、-(CR^fR^g)_n-、及び-(C(R^h)=C(Rⁱ))-から選択され(ここでR^a、R^b、R^c、R^d、R^e、R^f、R^g、R^h、及びRⁱは、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、置換又は非置換の炭素数1~10のアルキル基、及び置換又は非置換の炭素数6~10のアリール基から選択され、R^bとR^c、R^dとR^e、R

f と R^g 、又は R^h と R^i は、それぞれ独立して存在するか、又は互いに連結されて環を形成し、 $-(CR^fR^g)_n-$ の n は 1 又は 2 の整数である)、

X^a 及び X^b は、それぞれ独立して、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-Se-$ 、 $-Te-$ 、 $-NRP-$ 、 $-SiR^qR^r-$ 、及び $-GeR^sR^t-$ から選択され(ここで、 R^p 、 R^q 、 R^r 、 R^s 、及び R^t は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、置換又は非置換の炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、及び置換又は非置換の炭素数 6 ~ 10 のアリール基から選択される)、

$Z^1 \sim Z^4$ は、それぞれ独立して、 N 又は CR^x であり(ここで R^x は水素、重水素、炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基、 $-SiH_3$ 、炭素数 1 ~ 10 のアルキルシリル基、 $-NH_2$ 、炭素数 1 ~ 10 のアルキルアミン基、炭素数 6 ~ 12 のアリール基、炭素数 3 ~ 12 のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、

$Z^1 \sim Z^4$ が CR^x の場合、 R^x は独立して存在するか、又は $Z^1 \sim Z^4$ の内の隣接する 2 個が互いに連結されて 5 員芳香族環又は 6 員芳香族環を形成する。)

【請求項 17】

前記化学式 1 中、 R^{11a} 、 R^{11b} 、 R^{11c} 、 R^{12a} 、 R^{12b} 、及び R^{12c} の内の少なくとも 1 つは、前記化学式 1 A で表される官能基であり、

R^{13a} 、 R^{13b} 、 R^{13c} 、 R^{14a} 、 R^{14b} 、及び R^{14c} の内の少なくとも 1 つは前記化学式 1 A で表される官能基であることを特徴とする請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 18】

前記化学式 1 中、 $R^{11a} \sim R^{11c}$ の内の少なくとも 1 つは、前記化学式 1 A で表される官能基であり、

$R^{13a} \sim R^{13c}$ の内の少なくとも 1 つは、前記化学式 1 A で表される官能基であることを特徴とする請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 19】

前記化学式 1 中、 $R^{12a} \sim R^{12c}$ の内の少なくとも 1 つは、前記化学式 1 A で表される官能基であり、

$R^{14a} \sim R^{14c}$ の内の少なくとも 1 つは、前記化学式 1 A で表される官能基であることを特徴とする請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 20】

前記化学式 1 中、 R^{11a} 及び R^{13a} は、前記化学式 1 A で表される官能基であることを特徴とする請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 21】

前記化学式 1 中、 R^{12a} 及び R^{14a} は、前記化学式 1 A で表される官能基であることを特徴とする請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 22】

請求項 1 乃至 21 のいずれか一項に記載の化合物を有することを特徴とする赤外線吸収材。

【請求項 23】

請求項 1 乃至 21 のいずれか一項に記載の化合物を有することを特徴とする赤外線吸収/遮断フィルム。

【請求項 24】

互いに対向する第 1 電極と第 2 電極と、

前記第 1 電極と前記第 2 電極との間に位置する光活性層と、を有し、

前記光活性層は、請求項 1 乃至 21 のいずれか一項に記載の化合物を含むことを特徴とする光電素子。

【請求項 25】

前記光活性層は、フラーレン又はフラーレン誘導体をさらに含むことを特徴とする請求項 24 に記載の光電素子。

【請求項 26】

前記光活性層のピーク吸収波長は、750 nm ~ 3000 nm の波長領域に属すること

10

20

30

40

50

を特徴とする請求項 2 4 に記載の光電素子。

【請求項 2 7】

互いに対向する第 1 電極と第 2 電極と、前記第 1 電極と前記第 2 電極との間に位置する光活性層と、前記第 1 電極と光活性層との間又は第 2 電極と光活性層との間に電荷補助層とを含み、

前記第 1 電極、第 2 電極、光活性層又は電荷補助層の内の少なくとも一つは請求項 1 乃至 2 1 の内のいずれか一項に記載の化合物を含むことを特徴とする光電素子。

【請求項 2 8】

半導体基板と、半導体基板上に位置して第 1 赤外線波長領域の光を選択的に吸収するように構成された第 1 光電素子と、前記第 1 赤外線波長領域と異なる別途の波長領域の光を選択的に吸収するように構成された追加センサーとを含み、

10

前記第 1 光電素子は、請求項 1 乃至 2 1 のいずれか一項に記載の化合物を含むことを特徴とするイメージセンサー。

【請求項 2 9】

請求項 2 4 乃至 2 7 のいずれか一項に記載の光電素子を含むことを特徴とする有機センサー。

【請求項 3 0】

請求項 2 9 に記載の有機センサーを含むことを特徴とする電子装置。

【請求項 3 1】

請求項 2 4 乃至 2 7 のいずれか一項に記載の光電素子を含むことを特徴とする電子装置。

20

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0 0 0 1】

本発明は、化合物及びそれを含む光電素子、赤外線吸収材、赤外線吸収/遮断フィルム、並びに有機センサー及び電子装置に関し、特に赤外線吸光特性に優れた化合物及びそれを含む光電素子、赤外線吸収材、赤外線吸収/遮断フィルム、並びにセンサー及び電子装置に関する。

【背景技術】

【0 0 0 2】

デジタルカメラやカムコーダーなどには映像を撮影して電氣的信号として貯蔵する撮像素子が用いられ、撮像素子は、入射する光を波長により分解してそれぞれの成分を電氣的信号に変換するセンサーを含む。

30

近年、低照度環境でのセンサ感度を改善、又は生体認証装置として使用するための赤外線領域の光電素子の研究・開発が課題となっている。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0 0 0 3】

【文献】特開 2 0 1 5 - 2 0 0 8 7 8 号公報

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

40

【0 0 0 4】

本発明は、上記従来 of 光電素子における課題点に鑑みてなされたものであって、本発明の目的は、赤外線吸光特性に優れた化合物を提供することにある。

また、本発明の他の目的は、前記化合物を含む光電素子、赤外線吸収材、赤外線吸収/遮断フィルム、並びに前記化合物又は前記光電素子を含むセンサー（例えば、イメージセンサー）、前記光電素子又は前記センサーを含む電子装置を提供することにある。

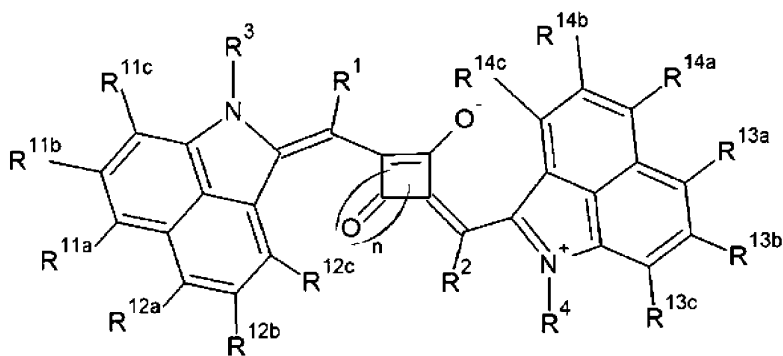
【課題を解決するための手段】

【0 0 0 5】

上記目的を達成するためになされた本発明による化合物は、下記に示す化学式 1 で表されることを特徴とする。

50

【化 1】



・・・化学式 1

10

(前記化学式 1 中、

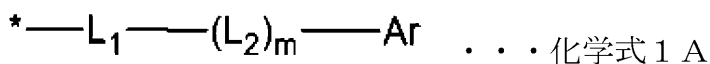
$R^1 \sim R^4$ はそれぞれ独立して、水素、重水素、炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基、炭素数 6 ~ 14 のアリール基又は炭素数 3 ~ 12 のヘテロアリール基であり、

$R^{11a} \sim R^{14c}$ はそれぞれ独立して、水素、重水素、ハロゲン、シアノ基、炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基、炭素数 6 ~ 14 のアリール基、炭素数 6 ~ 14 のアリールオキシ基、炭素数 3 ~ 12 のヘテロアリール基、又は下記に示す化学式 1 A で表される官能基であり、 $R^{11a} \sim R^{14c}$ の内の少なくとも 1 つは下記に示す化学式 1 A で表される官能基であり、 $R^{11a} \sim R^{14c}$ は互いに独立して存在するか、又は隣接する 2 個の官能基が互いに連結されてベンゾインドールと縮合環を形成し、

20

n は、1 又は 2 の整数である。)

【化 1 A】



(前記化学式 1 A 中、

L_1 は、置換又は非置換の炭素数 2 ~ 15 のヘテロ芳香族環基であり、

L_2 は、置換又は非置換の炭素数 2 ~ 15 のヘテロ芳香族環基、置換又は非置換の炭素数 6 ~ 30 の芳香族環基、置換又は非置換の炭素数 1 ~ 10 のアルキレン基、又は置換又は非置換の炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキレン基であり、

Ar は、置換又は非置換の炭素数 6 ~ 30 の芳香族環基、置換又は非置換の炭素数 2 ~ 30 のヘテロ芳香族環基、これらの縮合環、置換又は非置換の炭素数 6 ~ 30 のアリールアミン基、又は置換又は非置換の炭素数 2 ~ 30 のヘテロアリールアミン基であり、 m は 0、1 又は 2 である。)

30

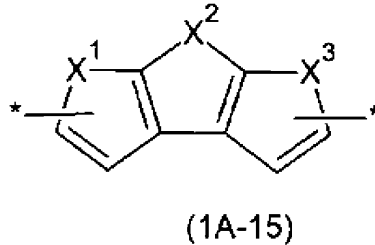
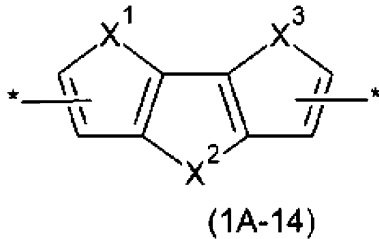
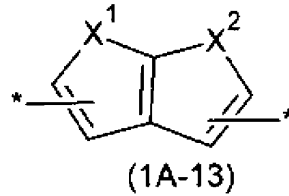
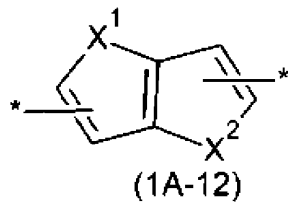
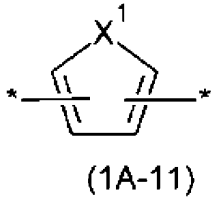
【0006】

前記化学式 1 A 中、 L_1 及び L_2 はそれぞれ独立して、下記に示す化学式 1 A - 11 ~ 化学式 1 A - 15 から選択されるヘテロ芳香族環基、又はこれらの組み合わせであることが好ましい。

40

50

【化1A-11-1A-15】



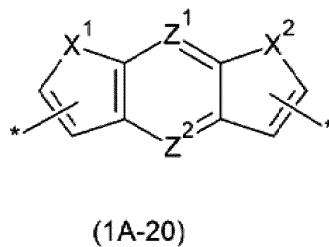
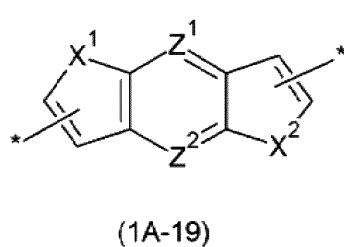
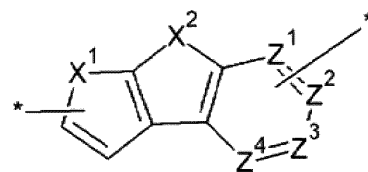
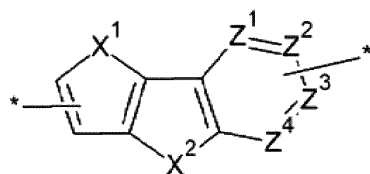
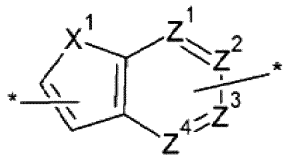
(前記化学式1A-11~化学式1A-15中、
 X^1 、 X^2 及び X^3 は、それぞれ独立して、O、S、Se、Te、 $S(=O)$ 、 $S(=O)_2$ 、 NR^a 、 SiR^bR^c 、又は GeR^dR^e であり(ここで R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、及び R^e は、それぞれ独立して、水素、重水素、炭素数1~10のアルキル基、炭素数1~10のハロアルキル基、炭素数6~14のアリール基、炭素数3~12のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、

それぞれのヘテロ芳香族環の水素は、重水素、ハロゲン、シアノ基、炭素数1~10のアルキル基、炭素数1~10のアルコキシ基、炭素数1~10のハロアルキル基、炭素数6~10のアリール基、炭素数6~10のアリールオキシ基、 $-SiH_3$ 基、又は炭素数1~10のアルキルシリル基で置換(replace)される。)

【0007】

前記化学式1A中、 L_1 及び L_2 はそれぞれ独立して、下記に示す化学式1A-16~化学式1A-20から選択されるヘテロ芳香族環基、又はこれらの組み合わせであることが好ましい。

【化1A-16-1A-20】



(前記化学式1A-16~化学式1A-20中、
 X^1 及び X^2 は、それぞれ独立して、O、S、Se、Te、 $S(=O)$ 、 $S(=O)_2$ 、 NR^a 、 SiR^bR^c 、又は GeR^dR^e であり(ここで R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、及び R^e は、それぞれ独立して、水素、重水素、炭素数1~10のアルキル基、炭素数1~10の

ハロアルキル基、 $-SiH_3$ 、炭素数1~10のアルキルシリル基、 $-NH_2$ 、炭素数1~10のアルキルアミン基、炭素数6~10のアリールアミン基、炭素数6~14のアリール基、炭素数3~12のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、

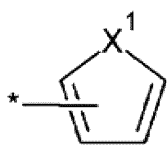
$Z^1 \sim Z^4$ は、それぞれ独立して、 CR^x 又はNであり(ここで R^x は、水素、重水素、炭素数1~10のアルキル基、炭素数1~10のハロアルキル基、 $-SiH_3$ 、炭素数1~10のアルキルシリル基、 $-NH_2$ 、炭素数1~10のアルキルアミン基、炭素数6~10のアリールアミン基、炭素数6~14のアリール基、炭素数3~12のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、但し、化学式1A-16~化学式1A-18中、 $Z^1 \sim Z^4$ の内の1つは CR^x であり、 R^x は単結合であり、

それぞれの芳香族環の水素は、重水素、ハロゲン、シアノ基、炭素数1~10のアルキル基、炭素数1~10のアルコキシ基、炭素数1~10のハロアルキル基、 $-SiH_3$ 基、又は炭素数1~10のアルキルシリル基で置換(replace)され得る。

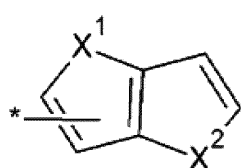
前記 L_1 及び L_2 は、それぞれ独立して、前記化学式1A-11~化学式1A-15から選択されるヘテロ芳香族環基と前記化学式1A-16~化学式1A-20から選択されるヘテロ芳香族環基の組み合わせであることが好ましい。

前記化学式1A中、Arは、下記に示す化学式1B-11~化学式1B-15から選択される芳香族環基であることが好ましい。

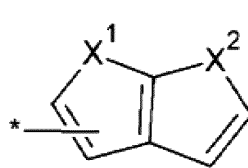
【化1B-11-1B-15】



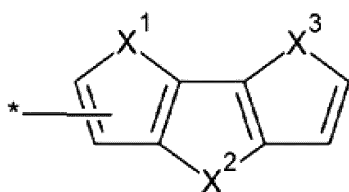
(1B-11)



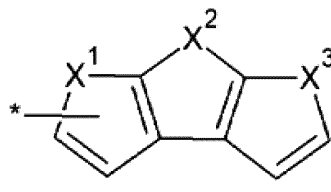
(1B-12)



(1B-13)



(1B-14)



(1B-15)

(前記化学式1B-11~化学式1B-15中、

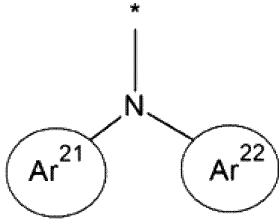
X^1 、 X^2 、及び X^3 は、それぞれ独立して、O、S、Se、Te、 $S(=O)$ 、 $S(=O)_2$ 、 NR^a 、 SiR^bR^c 、又は GeR^dR^e であり(ここで R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、及び R^e は、それぞれ独立して、水素、重水素、炭素数1~10のアルキル基、炭素数1~10のハロアルキル基、炭素数6~14のアリール基、炭素数3~12のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、

それぞれのヘテロ芳香族環の水素は、重水素、ハロゲン、シアノ基、炭素数1~10のアルキル基、炭素数1~10のアルコキシ基、炭素数1~10のハロアルキル基、炭素数6~10のアリール基、炭素数6~10のアリールオキシ基、 $-SiH_3$ 基、又は炭素数1~10のアルキルシリル基で置換(replace)される。)

前記化学式1A中、Arは、置換又は非置換のフェニル基、置換又は非置換のナフチル基、置換又は非置換のアセナフテニル(acenaphthenyl)基、置換又は非置換のアントラセニル基、置換又は非置換のフェナントレニル基、置換又は非置換のテトラセニル基、置換又は非置換のピレニル基、置換又は非置換のキノリル基、置換又は非置換のイソキノリル基、置換又は非置換のキノキサリル基、置換又は非置換のキナゾリル基又は置換又は非置換のフェナントロリル基であることが好ましい。

【0008】

前記化学式1A中、Arは置換又は非置換の炭素数6～30のアリールアミン基、又は置換又は非置換の炭素数2～30のヘテロアリールアミン基であり得、前記アリールアミン基又はヘテロアリールアミン基は下記に示す化学式1C-1で表されることが好ましい。
【化1C-1】



・・・化学式1C-1

10

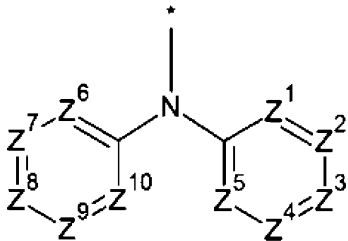
(前記化学式1C-1中、

Ar²¹及びAr²²は、それぞれ独立して、置換又は非置換の炭素数6～30のアリール基、及び置換又は非置換の炭素数3～30のヘテロアリール基から選択される。)

【0009】

前記化学式1C-1は、下記に示す化学式1C-1a又は化学式1C-1bで表されることが好ましい。

【化1C-1a】



・・・化学式1C-1a

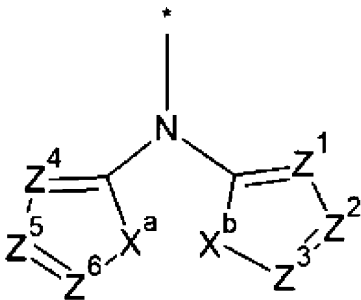
20

(前記化学式1C-1a中、

Z¹～Z¹⁰は、それぞれ独立して、N又はCR^xであり(ここでR^xは水素、重水素、炭素数1～10のアルキル基、炭素数1～10のハロアルキル基、炭素数1～10のアルコキシ基、-SiH₃、炭素数1～10のアルキルシリル基、-NH₂、炭素数1～10のアルキルアミン基、炭素数6～12のアリール基、炭素数3～12のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、

Z¹～Z¹⁰がCR^xの場合、R^xは独立して存在するか、又はZ¹～Z¹⁰の内の隣接する2個が互いに連結されて5員芳香族環又は6員芳香族環を形成する。)

【化1C-1b】



・・・化学式1C-1b

40

(前記化学式1C-1b中、

X^a及びX^bは、それぞれ独立して、-O-、-S-、-Se-、-Te-、-NR^a-、-SiR^bR^c-、及び-GeR^dR^e-から選択され(ここでR^a、R^b、R^c、R^d及びR^eはそれぞれ独立して、水素、ハロゲン、置換又は非置換の炭素数1～10のアル

50

キル基、及び置換又は非置換の炭素数 6 ~ 10 のアリール基から選択される)、

Z¹ ~ Z⁶ は、それぞれ独立して、N 又は C R^x であり (ここで R^x は水素、重水素、炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基、- Si H₃、炭素数 1 ~ 10 のアルキルシリル基、- NH₂、炭素数 1 ~ 10 のアルキルアミン基、炭素数 6 ~ 12 のアリール基、炭素数 3 ~ 12 のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、

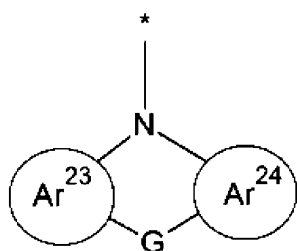
Z¹ ~ Z⁶ が C R^x の場合、R^x は独立して存在するか、又は Z¹ ~ Z⁶ の内の隣接する 2 個が互いに連結されて 5 員芳香族環又は 6 員芳香族環を形成する。)

【0010】

前記化学式 1 A 中、Ar はヘテロ芳香族環基であり得、前記ヘテロ芳香族環基は下記に示す化学式 1 C - 2 で表される N - 含有ヘテロ環基であることが好ましい。

10

【化 1 C - 2】



・・・化学式 1 C - 2

20

(前記化学式 1 C - 2 中、

Ar²³ 及び Ar²⁴ は、それぞれ独立して、置換又は非置換の炭素数 6 ~ 30 のアレーン基、及び置換又は非置換の炭素数 3 ~ 15 のヘテロアレーン基から選択され、

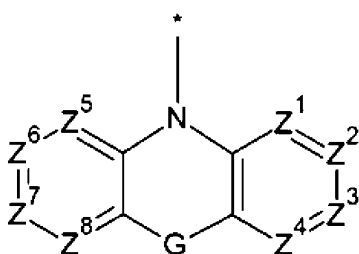
G は単結合、- O -、- S -、- Se -、- Te -、- N =、- N R^a -、- Si R^b R^c -、- Ge R^d R^e -、- (C R^f R^g)_n -、及び - (C (R^h) = C (Rⁱ)) - から選択される (ここで R^a、R^b、R^c、R^d、R^e、R^f、R^g、R^h、及び Rⁱ は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、置換又は非置換の炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、及び置換又は非置換の炭素数 6 ~ 10 のアリール基から選択され、R^b と R^c、R^d と R^e、R^f と R^g、又は R^h と Rⁱ はそれぞれ独立して存在するか、又は互いに連結されて環を形成することができ、- (C R^f R^g)_n - の n は 1 又は 2 の整数である。)

30

【0011】

前記化学式 1 C - 2 は、下記に示す化学式 1 C - 2 a、化学式 1 C - 2 b 又は化学式 1 C - 2 c で表されることが好ましい。

【化 1 C - 2 a】



・・・化学式 1 C - 2 a

40

(前記化学式 1 C - 2 a 中、

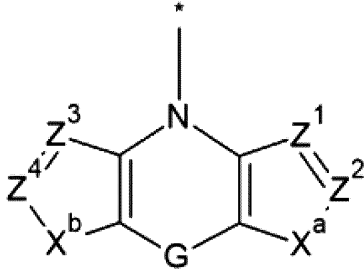
G は、単結合、- O -、- S -、- Se -、- Te -、- N =、- N R^a -、- Si R^b R^c -、- Ge R^d R^e -、- (C R^f R^g)_n -、及び - (C (R^h) = C (Rⁱ)) - から選択され (ここで R^a、R^b、R^c、R^d、R^e、R^f、R^g、R^h、及び Rⁱ は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、置換又は非置換の炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、及び置換又は非置換の炭素数 6 ~ 10 のアリール基から選択され、R^b と R^c、R^d と R^e、R^f と R^g、又は R^h と Rⁱ はそれぞれ独立して存在するか、又は互いに連結されて環を形成することができ、- (C R^f R^g)_n - の n は 1 又は 2 の整数である)、

50

$Z^1 \sim Z^8$ は、それぞれ独立して、N又は CR^x であり(ここで R^x は水素、重水素、炭素数1~10のアルキル基、炭素数1~10のハロアルキル基、炭素数1~10のアルコキシ基、 $-SiH_3$ 、炭素数1~10のアルキルシリル基、 $-NH_2$ 、炭素数1~10のアルキルアミン基、炭素数6~12のアリール基、炭素数3~12のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、

$Z^1 \sim Z^8$ が CR^x の場合、 R^x は独立して存在するか、又は $Z^1 \sim Z^8$ の内の隣接する2個が互いに連結されて5員芳香族環又は6員芳香族環を形成する。)

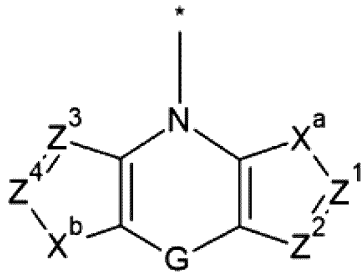
【化1C-2b】



・・・化学式1C-2b

10

【化1C-2c】



・・・化学式1C-2c

20

(前記化学式1C-2b及び化学式1C-2c中、

Gは、単結合、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-Se-$ 、 $-Te-$ 、 $-N=$ 、 $-NR^a-$ 、 $-SiR^bR^c-$ 、 $-GeR^dR^e-$ 、 $-(CR^fR^g)_n-$ 、及び $-(C(R^h)=C(R^i))-$ から選択され(ここで R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g 、 R^h 、及び R^i は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、置換又は非置換の炭素数1~10のアルキル基、及び置換又は非置換の炭素数6~10のアリール基から選択され、 R^b と R^c 、 R^d と R^e 、 R^f と R^g 、又は R^h と R^i はそれぞれ独立して存在するか、又は互いに連結されて環を形成することができ、 $-(CR^fR^g)_n-$ のnは1又は2の整数である)、

30

X^a 及び X^b は、それぞれ独立して、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-Se-$ 、 $-Te-$ 、 $-NRP-$ 、 $-SiR^qR^r-$ 、及び $-GeR^sR^t-$ から選択され(ここで R^p 、 R^q 、 R^r 、 R^s 及び R^t はそれぞれ独立して、水素、ハロゲン、置換又は非置換の炭素数1~10のアルキル基、及び置換又は非置換の炭素数6~10のアリール基から選択される)、

$Z^1 \sim Z^4$ は、それぞれ独立して、N又は CR^x であり(ここで R^x は水素、重水素、炭素数1~10のアルキル基、炭素数1~10のハロアルキル基、炭素数1~10のアルコキシ基、 $-SiH_3$ 、炭素数1~10のアルキルシリル基、 $-NH_2$ 、炭素数1~10のアルキルアミン基、炭素数6~12のアリール基、炭素数3~12のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、

40

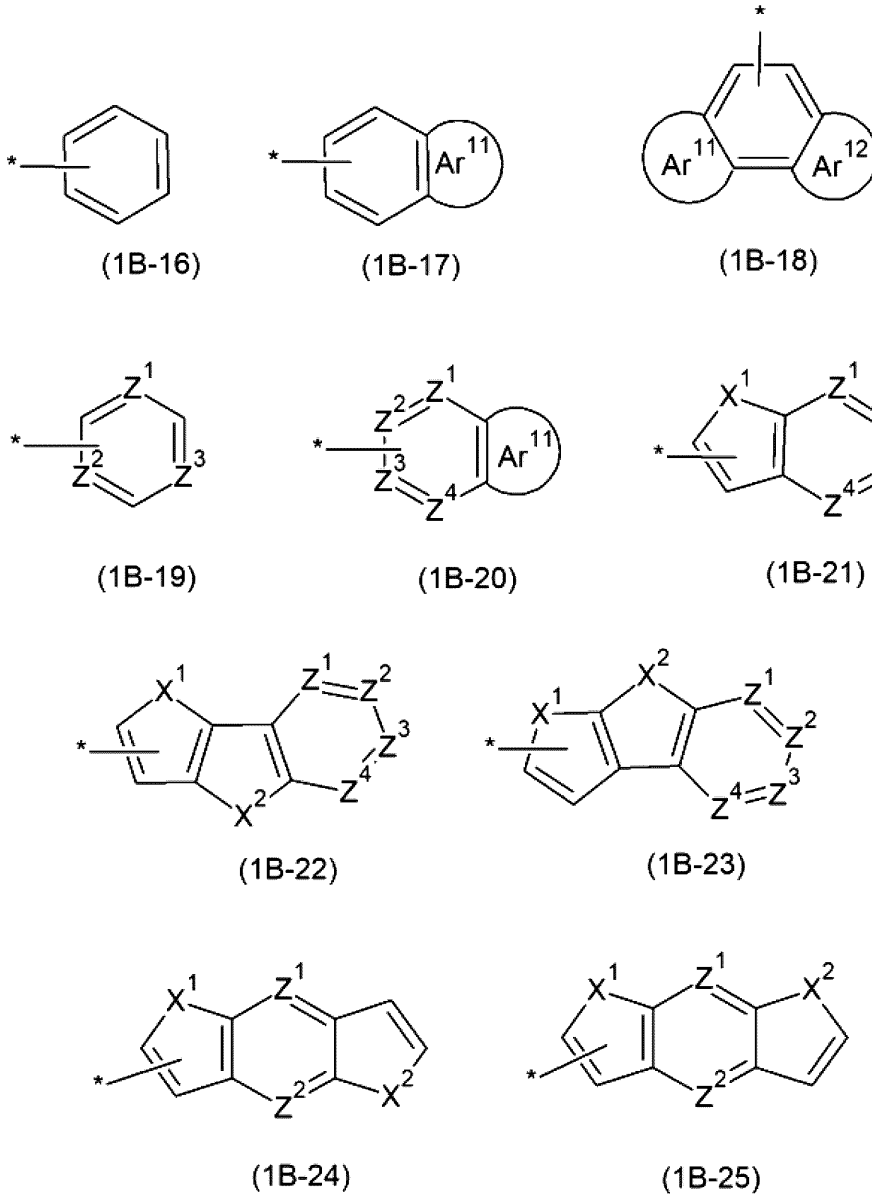
$Z^1 \sim Z^4$ が CR^x の場合、 R^x は独立して存在するか、又は $Z^1 \sim Z^4$ の内の隣接する2個が互いに連結されて5員芳香族環又は6員芳香族環を形成する。)

【0012】

前記化学式1A中、Arは、下記に示す化学式1B-16~化学式1B-25から選択される芳香族環基であることが好ましい。

50

【化1B-16-1B-25】



10

20

30

(前記化学式1B-16~化学式1B-25中、

X^1 及び X^2 は、それぞれ独立して、O、S、Se、Te、 $S(=O)$ 、 $S(=O)_2$ 、 NR^a 、 SiR^bR^c 、又は GeR^dR^e であり(ここで R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、及び R^e は、それぞれ独立して、水素、重水素、炭素数1~10のアルキル基、炭素数1~10のハロアルキル基、 $-SiH_3$ 、炭素数1~10のアルキルシリル基、 $-NH_2$ 、炭素数1~10のアルキルアミン基、炭素数6~10のアリーールアミン基、炭素数6~14のアリーール基、炭素数3~12のヘテロアリーール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、

40

$Z^1 \sim Z^4$ は、それぞれ独立して、 CR^x 又は N であり(ここで R^x は水素、重水素、炭素数1~10のアルキル基、炭素数1~10のハロアルキル基、 $-SiH_3$ 、炭素数1~10のアルキルシリル基、 $-NH_2$ 、炭素数1~10のアルキルアミン基、炭素数6~10のアリーールアミン基、炭素数6~14のアリーール基、炭素数3~12のヘテロアリーール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、但し、化学式1B-20中、 $Z^1 \sim Z^4$ の内の1つは CR^x であり、 R^x は単結合であり、

Ar^{11} 及び Ar^{12} は、それぞれ独立して、置換又は非置換の炭素数6~30のアレーン基、及び置換又は非置換の炭素数3~30のヘテロアレーン基から選択され、

50

それぞれの芳香族環又はヘテロ芳香族環の水素は、重水素、ハロゲン、シアノ基、炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基、炭素数 6 ~ 10 のアリール基、炭素数 6 ~ 10 のアリールオキシ基、 $-SiH_3$ 基、又は炭素数 1 ~ 10 のアルキルシリル基で置換 (replace) され得る。

前記化学式 1 B - 16 ~ 化学式 1 B - 25 で表される芳香族環基はアリールアミン基で置換され、前記アリールアミン基は、前記化学式 1 C - 1 で表されることが好ましい。

前記化学式 1 C - 1 は、前記化学式 1 C - 1 a 又は化学式 1 C - 1 b で表されることが好ましい。

前記化学式 1 B - 16 ~ 化学式 1 B - 25 で表される芳香族環基は、N - 含有ヘテロ環基で置換され、前記 N - 含有ヘテロ環基は、前記化学式 1 C - 2 で表されることが好ましい。

10

前記化学式 1 C - 2 は、前記化学式 1 C - 2 a、化学式 1 C - 2 b、又は化学式 1 C - 2 c で表されることが好ましい。

【0013】

前記化学式 1 中、 R^{11a} 、 R^{11b} 、 R^{11c} 、 R^{12a} 、 R^{12b} 及び R^{12c} の内の少なくとも 1 つは前記化学式 1 A で表される官能基であり、 R^{13a} 、 R^{13b} 、 R^{13c} 、 R^{14a} 、 R^{14b} 及び R^{14c} の内の少なくとも 1 つは前記化学式 1 A で表される官能基であることが好ましい。

前記化学式 1 中、 $R^{11a} \sim R^{11c}$ の内の少なくとも 1 つは前記化学式 1 A で表される官能基であり、 $R^{13a} \sim R^{13c}$ の内の少なくとも 1 つは前記化学式 1 A で表される官能基であることが好ましい。

20

前記化学式 1 中、 $R^{12a} \sim R^{12c}$ の内の少なくとも 1 つは前記化学式 1 A で表される官能基であり、 $R^{14a} \sim R^{14c}$ の内の少なくとも 1 つは前記化学式 1 A で表される官能基であることが好ましい。

前記化学式 1 中、 R^{11a} 及び R^{13a} は前記化学式 1 A で表される官能基であることが好ましい。

前記化学式 1 中、 R^{12a} 及び R^{14a} は前記化学式 1 A で表される官能基であることが好ましい。

【0014】

上記目的を達成するためになされた本発明による赤外線吸収材は、本発明の化合物を含むことを特徴とする。

30

前記赤外線吸収材は、約 750 nm ~ 約 3000 nm の波長領域でピーク吸収波長を示すことができる。

【0015】

上記目的を達成するためになされた本発明による赤外線吸収 / 遮断フィルムは、本発明の化合物を含むことを特徴とする。

【0016】

上記目的を達成するためになされた本発明による光電素子は、互いに対向する第 1 電極と第 2 電極と、前記第 1 電極と前記第 2 電極との間に位置する光活性層と、を有し、前記光活性層は、前記化学式 1 で表される化合物を含むことを特徴とする。

40

上記目的を達成するためになされた本発明による他の光電素子は、互いに対向する第 1 電極と第 2 電極と、前記第 1 電極と前記第 2 電極との間に位置する光活性層と、前記第 1 電極と光活性層との間又は第 2 電極と光活性層との間に電荷補助層とを含み、前記第 1 電極、第 2 電極、光活性層又は電荷補助層の内の少なくとも一つは前記化学式 1 で表される化合物を含むことを特徴とする。

上記目的を達成するためになされた本発明によるイメージセンサーは、半導体基板、半導体基板上に位置し、第 1 赤外線波長領域の光を選択的に吸収するように構成された第 1 光電素子、及び前記第 1 赤外線波長領域と異なる別途の波長領域の光を選択的に吸収するように構成された追加センサーを含むことを特徴とする。

前記第 1 光電素子は、上述した化学式 1 で表される化合物を含み得る。

50

前記追加センサーは、半導体基板内に少なくとも部分的に内蔵された赤外線センサーであり得、前記別途の波長領域は第1赤外線波長領域と異なる別途の赤外線波長領域であり得る。前記第1光電素子と赤外線センサーは半導体基板の上面に垂直の方向に重なり得る。

前記追加センサーは半導体基板内に少なくとも部分的に内蔵された複数のフォトダイオードを含み得、複数のフォトダイオードは別途の可視波長領域で光を選択的に吸収するように構成され、第1光電素子と複数のフォトダイオードは半導体基板の上面に垂直の方向に重なり得る。

前記追加センサーは第1光電素子と半導体基板との間に垂直に積層された少なくとも一つの追加光電素子を含み得る。少なくとも一つの追加光電素子はそれぞれ光電変換層を含み得、第1赤外線波長領域と異なる別途の波長領域の光を選択的に吸収するように構成され得る。

10

前記第1光電素子は互いに対向する第1電極と第2電極と、前記第1電極と第2電極との間に光活性層とを含み、前記光活性層は上述した化合物を含む。

第1光電素子は、互いに対向する第1電極と第2電極と、第1電極と第2電極との間の光活性層と、光活性層と第1電極との間又は光活性層と第2電極との間の電荷補助層とを含み、前記第1電極、第2電極、光活性層又は電荷補助層の内の少なくとも一つは上述した化合物を含み得る。

【0017】

上記目的を達成するためになされた本発明による有機センサーは、本発明の光電素子を含むことを特徴とする。

20

【0018】

上記目的を達成するためになされた本発明による電子装置は、本発明の光電素子又は有機センサーを含むことを特徴とする。

【発明の効果】

【0019】

本発明に係る化合物によれば、赤外線領域で良好な吸光特性を示す化合物を提供して、光電素子、赤外線吸収材、赤外線吸収/遮断フィルム、有機センサー、及び電子装置に効果的に用いることができる。

【図面の簡単な説明】

【0020】

30

【図1】本発明の一実施形態による光電素子の概略構成を示す断面図である。

【図2】本発明の他の実施形態による光電素子の概略構成を示す断面図である。

【図3】本発明の一実施形態によるイメージセンサーの概略構成を示す断面図である。

【図4】本発明の他の実施形態によるイメージセンサーの概略構成を示す断面図である。

【図5】本発明のさらに他の実施形態によるイメージセンサーの概略構成を示す断面図である。

【図6】本発明のさらに他の実施形態によるイメージセンサーの概略構成を示す断面図である。

【図7】本発明のさらに他の実施形態によるイメージセンサーの概略構成を示す断面図である。

40

【図8】本発明の一実施形態による複数のセンサーを含むイメージセンサーの概略構成を示す断面図である。

【図9】本発明のさらに他の実施形態によるイメージセンサーの概略構成を示す断面図である。

【図10】本発明のさらに他の実施形態によるイメージセンサーの概略構成を示す断面図である。

【図11】本発明の一実施形態によるイメージセンサーを含むデジタルカメラの概略構成を示すブロック図である。

【図12】本発明の一実施形態による電子装置の概略構成を示すブロック図である。

【図13】実施例1、実施例6、及び比較例1の光電素子の光電変換効率を測定した結果

50

を示すグラフである。

【発明を実施するための形態】

【0021】

次に、本発明に係る化合物及びそれを含む光電素子、赤外線吸収材、赤外線吸収/遮断フィルム、並びに有機センサー及び電子装置を実施するための形態の具体例を図面を参照しながら説明する。

【0022】

以下、本発明の実施形態について当該技術分野における通常の知識を有する者が容易に実施できるように詳しく説明する。

しかし、実際に適用される構造は様々な異なる形態で具現され、ここで説明する実施形態に限定されない。

図面では様々な層及び領域を明確に表現するために厚さを拡大して示している。層、膜、領域、板などの部分が他の部分の「上に」あるというとき、これは他の部分の「直上に」ある場合だけでなく、その中間にまた他の部分がある場合も含む。逆に、ある部分が他の部分の「直上」にあるというときは、その中間に他の部分がないことを意味する。図面では本実施形態を明確に説明するために説明上不要な部分は省略し、明細書全体にわたって同一又は類似の構成要素については同じ参照符号を付与した。

本明細書において「組み合わせ」とは、2以上の混合物、相互置換及び2以上の積層構造を含む。

【0023】

本明細書において別途の定義がない限り、「置換」とは、化合物中の水素原子がハロゲン、ヒドロキシ基、ニトロ基、シアノ基、アミノ基、アジド基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、カルボニル基、カルバミル基、チオール基、エステル基、カルボキシ基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、シリル基、炭素数1~20のアルキル基、炭素数2~20のアルケニル基、炭素数2~20のアルキニル基、炭素数6~30のアリール基、炭素数7~30のアリールアルキル基、炭素数1~30のアルコキシ基、炭素数1~20のヘテロアルキル基、炭素数3~20のヘテロアリール基、炭素数3~20のヘテロアリールアルキル基、炭素数3~30のシクロアルキル基、炭素数3~15のシクロアルケニル基、炭素数6~15のシクロアルキニル基、炭素数3~30のヘテロシクロアルキル基、及びこれらの組み合わせから選択される置換基で置換されることを意味する。

【0024】

本明細書において別途の定義がない限り、「ヘテロ」とは、N、O、S、Se、Te、Si、及びPから選択されるヘテロ原子を1~4個含有したものを意味する。

本明細書において別途の定義がない限り、「芳香族環」とは、環状の官能基の全ての元素がp-オービタルを有しており、これらのp-オービタルが共役(conjugation)を形成している官能基を意味し、「ヘテロ芳香族環」とは、ヘテロ原子を含む芳香族環を意味する。

「芳香族環」は、炭素数6~30のアレーン基、例えば、炭素数6~20のアレーン基又は炭素数6~30のアリール基、例えば炭素数6~20のアリール基を意味し、「ヘテロ芳香族環」は、炭素数3~30のヘテロアレーン基、例えば炭素数3~20のヘテロアレーン基又は炭素数6~30のヘテロアリール基、例えば、炭素数6~20のヘテロアリール基であり得る。

【0025】

本明細書において別途の定義がない限り、「アレーン基」は、芳香族環を有する炭化水素基であって、単環及び複数環炭化水素基を含み、複数環炭化水素基の付加的な環は芳香族環又は非芳香族環であり得る。「ヘテロアレーン基」は、環内にN、O、S、Se、Te、P及びSiから選択されるヘテロ原子を1~3個含有するアレーン基を意味する。

【0026】

本明細書において別途の定義がない限り、「アリール基」は、炭化水素芳香族モイエテ

10

20

30

40

50

イを1以上有する基を総括する概念であって、炭化水素芳香族モイエティの全ての元素がp-オービタルを有し、これらのp-オービタルが共役(conjugation)を形成している形態、例えば、フェニル基、ナフチル基などを含み、2以上の炭化水素芳香族モイエティがシグマ結合を通じて連結された形態、例えば、ビフェニル基、ターフェニル基、クォーターフェニル基などを含み、2以上の炭化水素芳香族モイエティが直接又は間接的に縮合された非芳香族縮合環、例えばフルオレニル基などを含み。アリール基は、モノサイクリック、ポリサイクリック又は縮合ポリサイクリック(すなわち、炭素原子の隣接した対を共有する環)官能基を含む。

【0027】

本明細書において別途の定義がない限り、「ヘテロアリール基」は、環内に炭素(C)の代わりにN、O、S、Se、Te、P、及びSiからなる群より選択されるヘテロ原子を少なくとも1個を含有したものを意味する。

10

ヘテロアリール基が縮合環の場合、ヘテロアリール基を形成する環の内の少なくとも1つがヘテロ原子を有し、それぞれの環ごとにヘテロ原子を有する。

本明細書において別途の定義がない限り、「環」は、芳香族環、非芳香族環、ヘテロ芳香族環、ヘテロ非芳香族環、これらの縮合環及び/又はこれらの組み合わせを意味する。

芳香族環は、上述した通りであり、非芳香族環は、炭素数3~30のシクロアルキル基、炭素数3~30のシクロアルケニル基、炭素数3~30のシクロアルキニル基であり得る。

【0028】

20

本明細書において別途の定義がない限り、「ハロゲン」は、F、Cl、Br、及びIの内のいずれか1つであり、ハロアルキル基は、アルキル基の少なくとも1つの水素がハロゲンで置換されたものであり、例えば、-CF₃などのペルフルオロアルキル基であり得る。

本明細書において別途の定義がない限り、置換又は非置換のアルキレン基において、「置換されたアルキレン基」は、少なくとも1つの水素が前記置換基で置換されるか、又は少なくとも1つのメチレン基が-O-、-C(=O)-、-OC(=O)-又は-C(=O)O-で置換されたものであり得る。

【0029】

また、本明細書において別途の定義がない限り、「シアノ含有基」は、C₁~C₃₀のアルキル基、C₂~C₃₀のアルケニル基又はC₂~C₃₀のアルキニル基の少なくとも1つの水素がシアノ基で置換された1個の官能基を意味し得る。

30

また、シアノ含有基は、 $=CR^X - (CR^Y)_p - CR^Y - (CN)_2$ で表される官能基のような2個の官能基を含むことができ、ここで、R^X、R^Y、R^{X'}及びR[']は、それぞれ独立して水素又はC₁~C₁₀のアルキル基であり、pは、0~10(又は1~10)の整数である。

例えば、ジシアノメチル基(dicyanomethyl group)、ジシアノメテニル基(dicyanomethenyl group)又はシアノメチニル基(cyanomethynyl group)がある。

【0030】

40

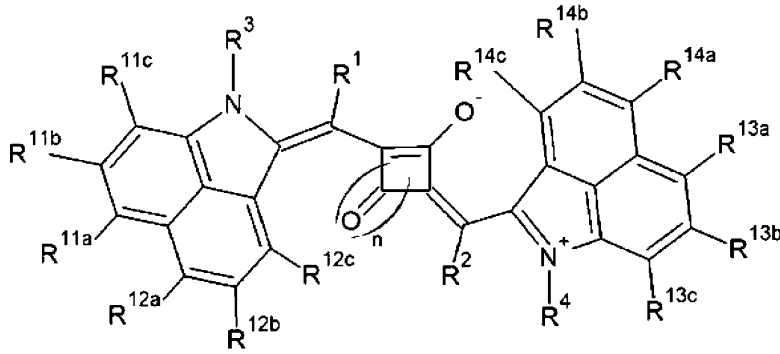
本明細書において別途の定義がない限り、「赤外線波長領域」は、約750nm~約3000nmの波長領域で近赤外線/赤外線波長領域を含む。

【0031】

以下、本発明の一実施形態による化合物を説明する。

本発明の一実施形態による化合物は、下記に示す化学式1で表される。

【化 1】



・・・化学式 1

10

【0032】

化学式 1 中、

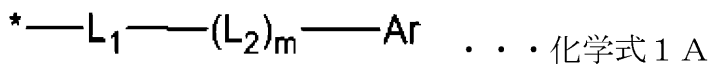
$R^1 \sim R^4$ は、それぞれ独立して、水素、重水素、炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基、炭素数 6 ~ 14 のアリール基、又は炭素数 3 ~ 12 のヘテロアリール基であり、

$R^{11a} \sim R^{14c}$ は、それぞれ独立して、水素、重水素、ハロゲン、シアノ基、炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基、炭素数 6 ~ 14 のアリール基、炭素数 6 ~ 14 のアリールオキシ基、炭素数 3 ~ 12 のヘテロアリール基、又は下記に示す化学式 1 A で表される官能基であり、 $R^{11a} \sim R^{14c}$ の内の少なくとも 1 つは下記に示す化学式 1 A で表される官能基であり、 $R^{11a} \sim R^{14c}$ は互いに独立して存在するか、又は隣接する 2 個の官能基が互いに連結されてベンゾインドールと縮合環を形成することができ、

20

n は、1 又は 2 の整数である。

【化 1 A】



30

化学式 1 A 中、

L_1 は、置換又は非置換の炭素数 2 ~ 15 のヘテロ芳香族環基であり、

L_2 は、置換又は非置換の炭素数 2 ~ 15 のヘテロ芳香族環基、置換又は非置換の炭素数 6 ~ 30 の芳香族環基、置換又は非置換の炭素数 1 ~ 10 のアルキレン基、又は置換又は非置換の炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキレン基であり、

Ar は、置換又は非置換の炭素数 6 ~ 30 の芳香族環基、置換又は非置換の炭素数 2 ~ 30 のヘテロ芳香族環基、これらの縮合環（置換又は非置換の炭素数 6 ~ 30 の芳香族環基及び / 又は置換又は非置換の炭素数 2 ~ 30 のヘテロ芳香族環基の縮合環）、置換又は非置換の炭素数 6 ~ 30 のアリールアミン基、又は置換又は非置換の炭素数 2 ~ 30 のヘテロアリールアミン基であり、

40

m は 0、1 又は 2 である。

【0033】

赤外線などの長波長の光を吸収する素材は、小さな HOMO - LUMO 間のバンドギャップ (band gap) エネルギーを持った方が良い。

小さなバンドギャップエネルギーを持つためには共役長を長くするが、共役長が長くなると膜形成工程が容易ではない。

化学式 1 で表される化合物は、電子受容特性を有する共役構造のコア（化学式 1 においてスクアレイン (squaraine、SQ) 又はクロコナイン (croconaine、CR) に電子供与性のベンゾインドール (benzo[cd]indole) モイエティを含み、モイエティは、化学式 1 A で表される官能基を含む。

50

【0034】

化合物は、ドナー - アクセプター - ドナー (D - A - D) 構造を持つことによって光電変換効率と電荷伝達 (charge transfer) 特性に優れ、バンドギャップエネルギーが小さく、近赤外線 / 赤外線波長領域 (例えば、約 750 nm ~ 約 3000 nm、特に 1000 nm 以上の長波長領域) の光を効果的に吸収することができる。

化学式 1 A で表される官能基は、化学式 1 で表される化合物を、吸収波長を長波長にシフト (shift) させることができ、吸光係数を高める。

化学式 1 A で表される官能基は、 L_1 、 L_2 、及び A_r の多様な組み合わせで、化学式 1 で表される化合物のバンドギャップを容易に調整 (tune) することができる。

以下、化合物、フィルム、層などのエネルギーバンドギャップ (又はバンドギャップエネルギーともいう) は HOMO エネルギー準位と LUMO エネルギー準位との差の絶対値を意味する。

後述する表 2 に示されているように、一部の実施形態において、化学式 1 で表される化合物又は化合物を含む層、フィルムなどのエネルギーバンドギャップは約 0.99 eV ~ 約 1.40 eV、例えば、約 0.99 eV ~ 約 1.18 eV であり得る。

【0035】

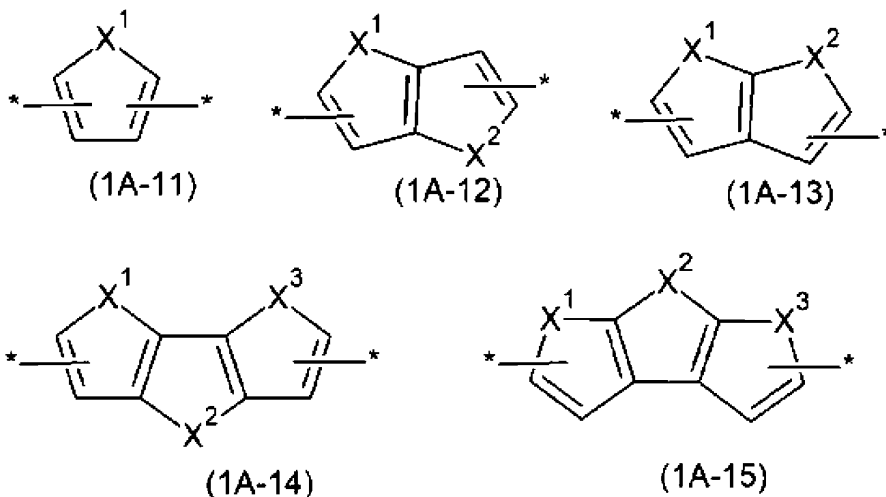
化学式 1 A で表される官能基は、ヘテロ芳香族環基 (L_1 及び選択的に L_2) と (ヘテロ) 芳香族環基 (A_r) を含み化学式 1 で表される化合物を、吸収波長を長波長にシフトさせ、吸光係数を高める。

化学式 1 A 中、 L_1 及び L_2 は互いに同一又は異なり、それぞれ独立してヘテロ芳香族環基であり、 A_r は置換又は非置換の炭素数 6 ~ 30 の芳香族環基、置換又は非置換の炭素数 2 ~ 30 のヘテロ芳香族環基、これらの縮合環、置換又は非置換の炭素数 6 ~ 30 のアリールアミン基、又は置換又は非置換の炭素数 2 ~ 30 のヘテロアリールアミン基であり得る。

【0036】

化学式 1 A 中、 L_1 及び L_2 は、それぞれ独立して、下記に示す化学式 1 A - 11 ~ 化学式 1 A - 15 から選択されるヘテロ芳香族環基、又はこれらの組み合わせであり得る。ここでこれらの組み合わせとは、化学式 1 A - 11 ~ 化学式 1 A - 15 から選択されるヘテロ芳香族環基 2 個以上が単結合、又は置換又は非置換の炭素数 1 ~ 6 のアルキレン基 (例えば、メチレン基) によって連結されることを意味する。

【化 1 A - 11 - 1 A - 15】



【0037】

化学式 1 A - 11 ~ 化学式 1 A - 15 中、

X^1 、 X^2 、及び X^3 は、それぞれ独立して、O、S、Se、Te、S(=O)、S(=O)₂、NR^a、SiR^bR^c、又は GeR^dR^e であり (ここで R^a、R^b、R^c、R^d、及び R^e はそれぞれ独立して、水素、重水素、炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、炭素数 1

10

20

30

40

50

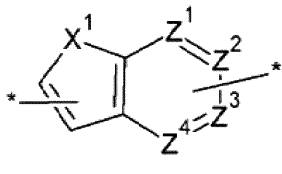
～10のハロアルキル基、炭素数6～14のアリール基、炭素数3～12のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、

それぞれのヘテロ芳香族環の水素は、重水素、ハロゲン、シアノ基、炭素数1～10のアルキル基、炭素数1～10のアルコキシ基、炭素数1～10のハロアルキル基、炭素数6～10のアリール基、炭素数6～10のアリールオキシ基、 $-SiH_3$ 基、又は炭素数1～10のアルキルシリル基で置換される。

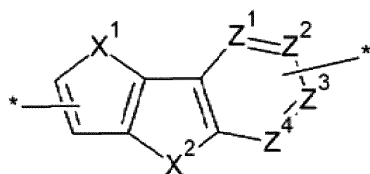
【0038】

化学式1A中、 L_1 及び L_2 はそれぞれ独立して、下記に示す化学式1A-16～化学式1A-20から選択されるヘテロ芳香族環基、又はこれらの組み合わせであり得る。ここでこれらの組み合わせとは、化学式1A-16～化学式1A-20から選択されるヘテロ芳香族環基が、2個以上が単結合又は置換又は非置換の炭素数1～6のアルキレン基(例えば、メチレン基)によって連結されることを意味する。

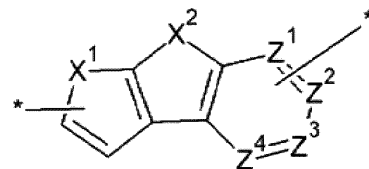
【化1A-16-1A-20】



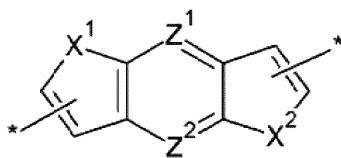
(1A-16)



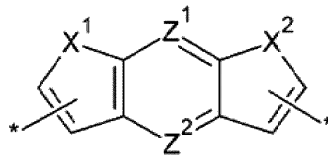
(1A-17)



(1A-18)



(1A-19)



(1A-20)

【0039】

化学式1A-16～化学式1A-20中、

X^1 及び X^2 は、それぞれ独立して、O、S、Se、Te、 $S(=O)$ 、 $S(=O)_2$ 、 NR^a 、 SiR^bR^c 、又は GeR^dR^e であり(ここで R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、及び R^e はそれぞれ独立して、水素、重水素、炭素数1～10のアルキル基、炭素数1～10のハロアルキル基、 $-SiH_3$ 、炭素数1～10のアルキルシリル基、 $-NH_2$ 、炭素数1～10のアルキルアミン基、炭素数6～10のアリールアミン基、炭素数6～14のアリール基、炭素数3～12のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、

Z^1 ～ Z^4 は、それぞれ独立して、 CR^x 又はNであり(ここで R^x は水素、重水素、炭素数1～10のアルキル基、炭素数1～10のハロアルキル基、 $-SiH_3$ 、炭素数1～10のアルキルシリル基、 $-NH_2$ 、炭素数1～10のアルキルアミン基、炭素数6～10のアリールアミン基、炭素数6～14のアリール基、炭素数3～12のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、但し、化学式1A-16～化学式1A-18中、 Z^1 ～ Z^4 の内1つは CR^x であり、 R^x は単結合であり、

それぞれの芳香族環又はヘテロ芳香族環の水素は、重水素、ハロゲン、シアノ基、炭素数1～10のアルキル基、炭素数1～10のアルコキシ基、炭素数1～10のハロアルキル基、 $-SiH_3$ 基、又は炭素数1～10のアルキルシリル基で置換される。

【0040】

L_1 及び L_2 は、それぞれ独立して、化学式1A-11～化学式1A-15から選択されるヘテロ芳香族環基と化学式1A-16～化学式1A-20から選択されるヘテロ芳香

10

20

30

40

50

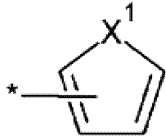
族環基の組み合わせであり得る。

ここで、これらの組み合わせとは、化学式 1 A - 1 1 ~ 化学式 1 A - 1 5 から選択されるヘテロ芳香族環基と化学式 1 A - 1 6 ~ 化学式 1 A - 2 0 から選択されるヘテロ芳香族環基が単結合又は置換又は非置換の炭素数 1 ~ 6 のアルキレン基（例えば、メチレン基）によって連結されることを意味する。

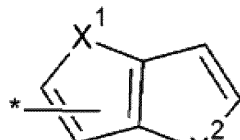
【 0 0 4 1 】

化学式 1 A 中、A r は、下記に示す化学式 1 B - 1 1 ~ 化学式 1 B - 1 5 から選択されるヘテロ芳香族環であり得る。

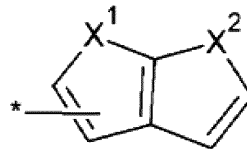
【 化 1 B - 1 1 - 1 B - 1 5 】



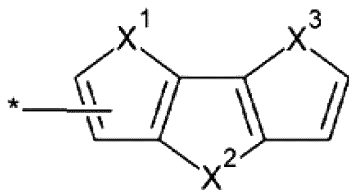
(1B-11)



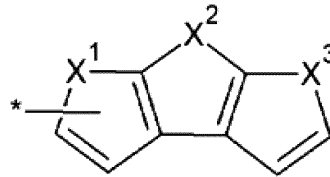
(1B-12)



(1B-13)



(1B-14)



(1B-15)

化学式 1 B - 1 1 ~ 化学式 1 B - 1 5 中、

X¹、X²、及び X³ は、それぞれ独立して、O、S、Se、Te、S(=O)、S(=O)₂、NR^a、SiR^bR^c、又は GeR^dR^e であり（ここで R^a、R^b、R^c、R^d、及び R^e は、それぞれ独立して、水素、重水素、炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基、炭素数 6 ~ 14 のアリール基、炭素数 3 ~ 12 のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである）、

それぞれのヘテロ芳香族環の水素は、重水素、ハロゲン、シアノ基、炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基、炭素数 6 ~ 10 のアリール基、炭素数 6 ~ 10 のアリールオキシ基、-SiH₃ 基、又は炭素数 1 ~ 10 のアルキルシリル基で置換される。

【 0 0 4 2 】

化学式 1 A 中、A r は、置換又は非置換のフェニル基、置換又は非置換のナフチル基、置換又は非置換のアセナフテニル (acenaphthényl) 基、置換又は非置換のアントラセニル基、置換又は非置換のフェナントレニル基、置換又は非置換のテトラセニル基、置換又は非置換のピレニル基、置換又は非置換のキノリル基、置換又は非置換のイソキノリル基、置換又は非置換のキノキサリル基、置換又は非置換のキナゾリル基又は置換又は非置換のフェナントロリル基である。

本発明の一実施形態において、A r の置換基は、ハロゲン又は炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基である。

【 0 0 4 3 】

化学式 1 A 中、A r は、アリールアミン基又はヘテロアリールアミン基であり、アリールアミン基又はヘテロアリールアミン基は、下記に示す化学式 1 C - 1 で表される。

10

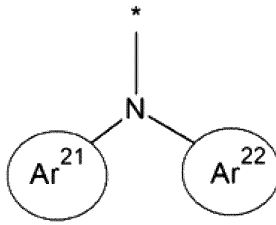
20

30

40

50

【化 1 C - 1】



・・・化学式 1 C - 1

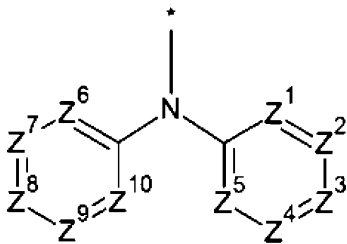
化学式 1 C - 1 中、

$Ar^{21}Ar^{22}$ はそれぞれ独立して、置換又は非置換の炭素数 6 ~ 30 のアリール基、及び置換又は非置換の炭素数 3 ~ 30 のヘテロアリール基から選択される。

【0044】

化学式 1 C - 1 は、下記に示す化学式 1 C - 1 a で表される。

【化 1 C - 1 a】



・・・化学式 1 C - 1 a

化学式 1 C - 1 a 中、

$Z^1 \sim Z^{10}$ は、それぞれ独立して、N 又は CR^x であり (ここで、 R^x は、水素、重水素、炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基、 $-SiH_3$ 、炭素数 1 ~ 10 のアルキルシリル基、 $-NH_2$ 、炭素数 1 ~ 10 のアルキルアミン基、炭素数 6 ~ 12 のアリール基、炭素数 3 ~ 12 のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、

$Z^1 \sim Z^{10}$ が CR^x の場合、 R^x は独立して存在するか、又は $Z^1 \sim Z^{10}$ の内の隣接する 2 個が互いに連結されて 5 員芳香族環又は 6 員芳香族環を形成する。

【0045】

本発明の一実施形態において、化学式 1 C - 1 a の $Z^2 \sim Z^4$ の内の少なくとも 1 つ及び $Z^7 \sim Z^9$ の内の少なくとも 1 つは、 CR^x であり、 R^x は、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基又は炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基であり得る。

本発明の一実施形態において、化学式 1 C - 1 a の Z^3 及び Z^8 は、 CR^x であり、 R^x は、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基又は炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基であり得る。

【0046】

化学式 1 C - 1 a は、下記に示す化学式 1 C - 1 a - 1 ~ 化学式 1 C - 1 a - 1 2 で表される。

10

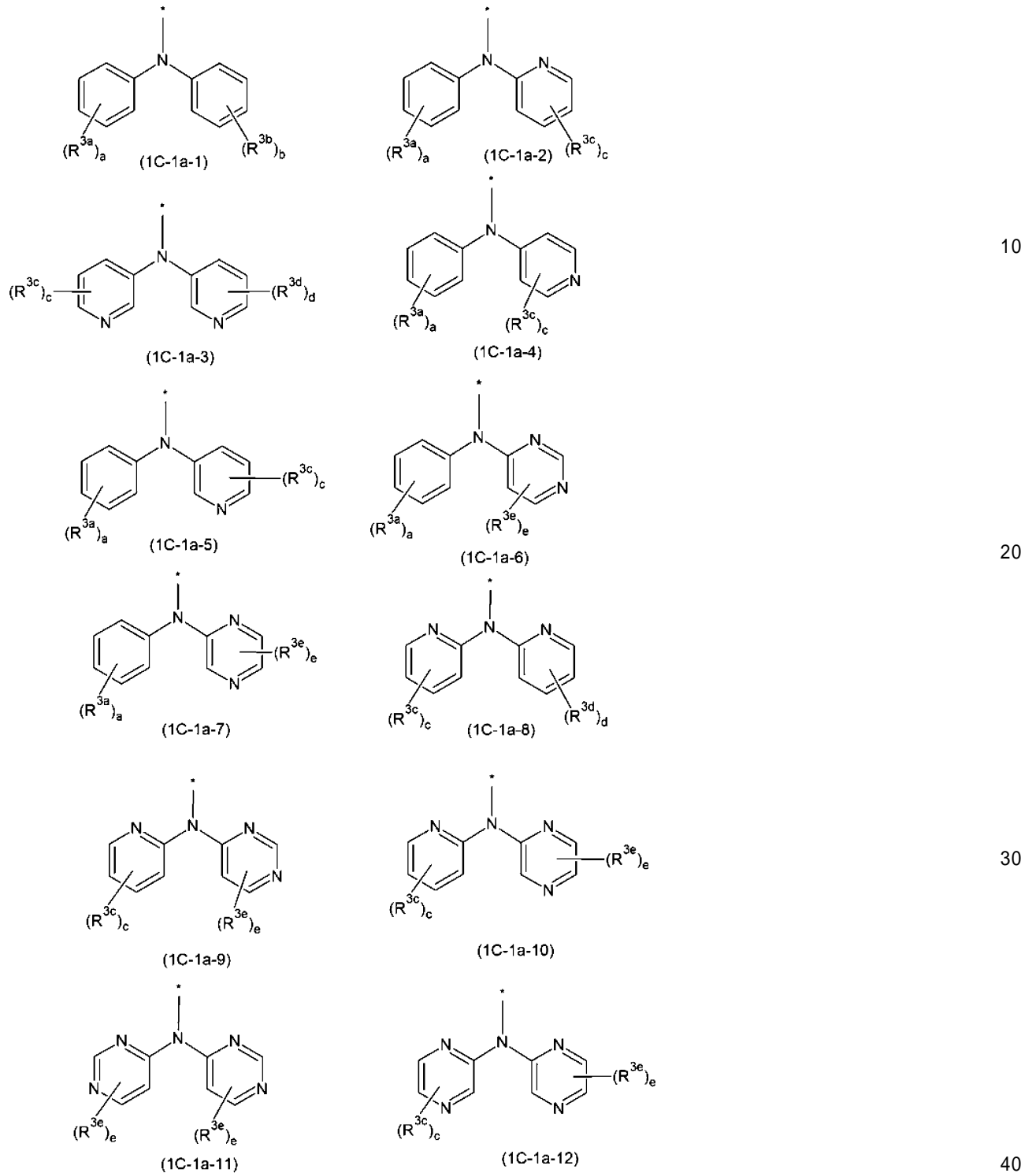
20

30

40

50

【化 1 C - 1 a - 1 - 1 C - 1 a - 1 2】



【 0 0 4 7】

化学式 1 C - 1 a - 1 ~ 化学式 1 C - 1 a - 1 2 中、
 a 及び b は、それぞれ独立して、1 ~ 5 の整数であり、
 c 及び d は、それぞれ独立して、1 ~ 4 の整数であり
 e は、1 ~ 3 の整数であり、

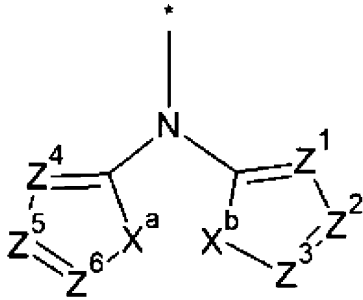
R^{3a} ~ R^{3e} は、それぞれ独立して、水素、置換又は非置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、置換又は非置換の炭素数 6 ~ 30 のアリール基、置換又は非置換の炭素数 3 ~ 30 のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基 (-CN)、シアノ含有基、及びこれらの組み合わせから選択されるか、又は選択的に (optionally)、a、b、c、d、及

び e が 2 以上の場合、複数の R^{3a} の内の互いに隣接する 2 個、複数の R^{3b} の内の互いに隣接する 2 個、複数の R^{3c} の内の互いに隣接する 2 個、複数の R^{3d} の内の互いに隣接する 2 個、又は複数の R^{3e} の内の互いに隣接する 2 個が互いに連結されて 5 員芳香族環又は 6 員芳香族環を形成する。

【0048】

また、化学式 1 C - 1 は、下記に示す化学式 1 C - 1 b で表される。

【化 1 C - 1 b】



・・・化学式 1 C - 1 b

化学式 1 C - 1 b 中、

X^a 及び X^b は、それぞれ独立して、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-Se-$ 、 $-Te-$ 、 $-NR^a-$ 、 $-SiR^bR^c-$ 、及び $-GeR^dR^e-$ から選択され（ここで、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、及び R^e は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、置換又は非置換の炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、及び置換又は非置換の炭素数 6 ~ 10 のアリール基から選択される）、

$Z^1 \sim Z^6$ は、それぞれ独立して、N 又は CR^x であり（ここで、 R^x は、水素、重水素、炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基、 $-SiH_3$ 、炭素数 1 ~ 10 のアルキルシリル基、 $-NH_2$ 、炭素数 1 ~ 10 のアルキルアミン基、炭素数 6 ~ 12 のアリール基、炭素数 3 ~ 12 のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである）、

$Z^1 \sim Z^6$ が CR^x の場合、 R^x は独立して存在するか、又は $Z^1 \sim Z^6$ の内の隣接する 2 個が互いに連結されて 5 員芳香族環又は 6 員芳香族環を形成する。

【0049】

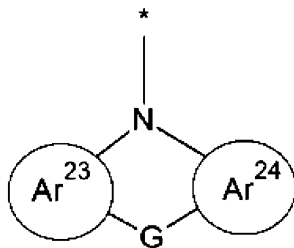
本発明の一実施形態において、化学式 1 C - 1 b の $Z^1 \sim Z^3$ の内の少なくとも 1 つ及び $Z^4 \sim Z^6$ の内の少なくとも 1 つは、 CR^x であり、 R^x は、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基又は炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基であり得る。

本発明の一実施形態において、化学式 1 C - 1 a 中の Z^2 及び Z^5 は、 CR^x であり、 R^x は、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基又は炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基であり得る。

【0050】

化学式 1 A 中、Ar は、ヘテロ芳香族環基であり得、前記ヘテロ芳香族環基は下記に示す化学式 1 C - 2 で表される N - 含有ヘテロ環基であり得る。

【化 1 C - 2】



・・・化学式 1 C - 2

【0051】

化学式 1 C - 2 中、

Ar^{23} 及び Ar^{24} は、それぞれ独立して、置換又は非置換の炭素数 6 ~ 30 のアレーン基、及び置換又は非置換の炭素数 3 ~ 15 のヘテロアレーン基から選択され、

Gは、単結合、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-Se-$ 、 $-Te-$ 、 $-N=$ 、 $-NR^a-$ 、 $-SiR^bR^c-$ 、 $-GeR^dR^e-$ 、 $-(CR^fR^g)_n-$ 、及び $-(C(R^h)=C(R^i))-$ から選択される(ここで、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g 、 R^h 、及び R^i は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、置換又は非置換の炭素数1~10のアルキル基、及び置換又は非置換の炭素数6~10のアリール基から選択され、 R^b と R^c 、 R^d と R^e 、 R^f と R^g 、又は R^h と R^i は、それぞれ独立して存在するか、又は互いに連結されて環を形成し、

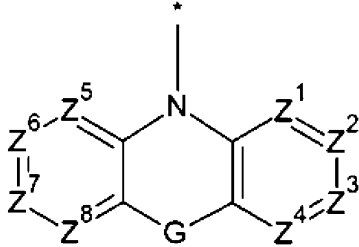
$-(CR^fR^g)_n-$ のnは、1又は2の整数である)。

【0052】

化学式1C-2は、下記に示す化学式1C-2aで表される。

10

【化1C-2a】



・・・化学式1C-2a

【0053】

20

化学式1C-2a中、

Gは、単結合、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-Se-$ 、 $-Te-$ 、 $-N=$ 、 $-NR^a-$ 、 $-SiR^bR^c-$ 、 $-GeR^dR^e-$ 、 $-(CR^fR^g)_n-$ 、及び $-(C(R^h)=C(R^i))-$ から選択され(ここで、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g 、 R^h 、及び R^i は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、置換又は非置換の炭素数1~10のアルキル基、及び置換又は非置換の炭素数6~10のアリール基から選択され、 R^b と R^c 、 R^d と R^e 、 R^f と R^g 、又は R^h と R^i は、それぞれ独立して存在するか、又は互いに連結されて環を形成し、 $-(CR^fR^g)_n-$ のnは、1又は2の整数である)。

$Z^1 \sim Z^8$ は、それぞれ独立して、N又は CR^x であり(ここで R^x は水素、重水素、炭素数1~10のアルキル基、炭素数1~10のハロアルキル基、炭素数1~10のアルコキシ基、 $-SiH_3$ 、炭素数1~10のアルキルシリル基、 $-NH_2$ 、炭素数1~10のアルキルアミン基、炭素数6~12のアリール基、炭素数3~12のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)。

30

$Z^1 \sim Z^8$ が CR^x の場合、 R^x は、独立して存在するか、又は $Z^1 \sim Z^8$ の内の隣接する2個が互いに連結されて5員芳香族環又は6員芳香族環を形成する。

【0054】

本発明の一実施形態において、化学式1C-2a中の $Z^2 \sim Z^4$ の内の少なくとも1つ及び $Z^6 \sim Z^8$ の内の少なくとも1つは、 CR^x であり、 R^x は、炭素数1~10のハロアルキル基又は炭素数1~10のアルコキシ基であり得る。

本発明の一実施形態において、化学式1C-2a中の Z^3 及び Z^7 は、 CR^x であり、 R^x は、炭素数1~10のハロアルキル基又は炭素数1~10のアルコキシ基であり得る。

40

本発明の一実施形態によれば、化学式1C-2a中、 $Z^1 \sim Z^4$ の内の少なくとも1つ及び/又は $Z^5 \sim Z^8$ の内の少なくとも1つは、Nであり得る。

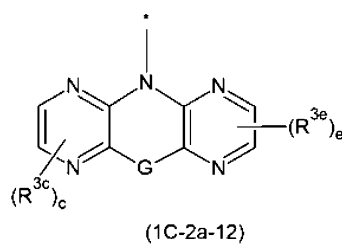
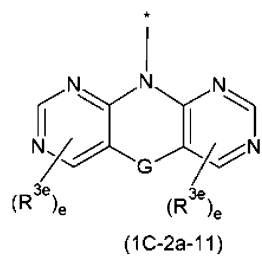
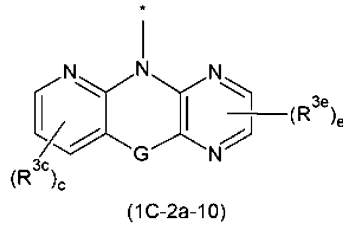
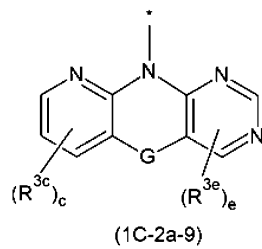
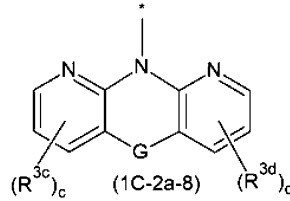
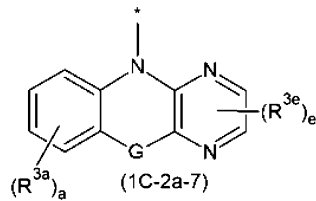
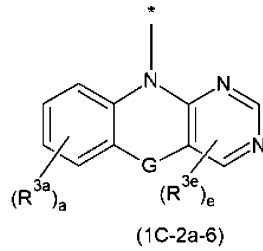
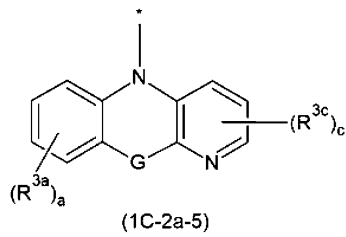
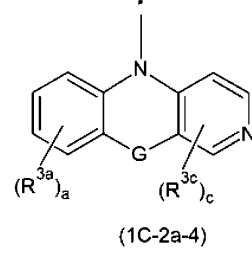
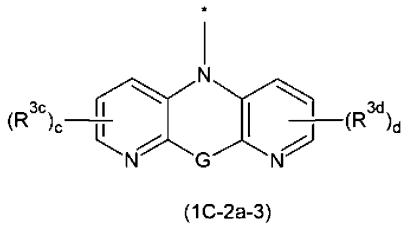
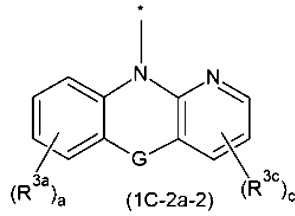
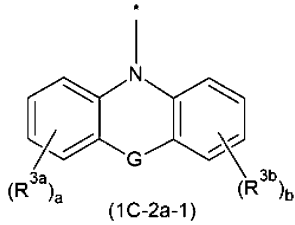
本発明の一実施形態によれば、化学式1C-2a中、 $Z^1 \sim Z^4$ の内の少なくとも2つ及び/又は $Z^5 \sim Z^8$ の内の少なくとも2つは、Nであり得る。

【0055】

化学式1C-2aは、下記に示す化学式1C-2a-1~化学式1C-2a-12の内のいずれか1つで表される。

50

【化 1 C - 2 a - 1 - 1 C - 2 a - 1 2】



【 0 0 5 6】

化学式 1 C - 2 a - 1 ~ 化学式 1 C - 2 a - 1 2 中、
 a 及び b は、それぞれ独立して、1 ~ 4 の整数であり、
 c 及び d は、それぞれ独立して、1 ~ 3 の整数であり、
 e は、1 又は 2 の整数であり、

G は、単結合、- O -、- S -、- S e -、- T e -、- N =、- N R^a -、- S i R^b
 R^c -、- G e R^d R^e -、- (C R^f R^g)_n -、及び - (C (R^h) = C (Rⁱ)) -
 から選択され(ここで、R^a、R^b、R^c、R^d、R^e、R^f、R^g、R^h、及び Rⁱ は、
 それぞれ独立して、水素、ハロゲン、置換又は非置換の炭素数 1 ~ 1 0 のアルキル基、及

10

20

30

40

50

び置換又は非置換の炭素数 6 ~ 10 のアリール基から選択され、 R^b と R^c 、 R^d と R^e 、 R^f と R^g 、又は R^h と R^i は、それぞれ独立して存在するか、又は互いに連結されて環を形成し、 $-(CR^fR^g)_n-$ の n は、1 又は 2 の整数である)、

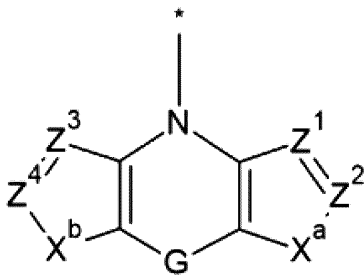
$R^{3a} \sim R^{3e}$ は、それぞれ独立して、水素、置換又は非置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、置換又は非置換の炭素数 6 ~ 30 のアリール基、置換又は非置換の炭素数 3 ~ 30 のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基 ($-CN$)、シアノ含有基、及びこれらの組み合わせから選択されるか、又は選択的に (optionally)、 a 、 b 、 c 、 d 、及び e が 2 以上の場合、複数の R^{3a} の内の互いに隣接する 2 個、複数の R^{3b} の内の互いに隣接する 2 個、複数の R^{3c} の内の互いに隣接する 2 個、複数の R^{3d} の内の互いに隣接する 2 個、又は複数の R^{3e} の内の互いに隣接する 2 個が互いに連結されて 5 員芳香族環又は 6 員芳香族環を形成する。

10

【0057】

化学式 1C-2 は、下記に示す化学式 1C-2b で表される。

【化 1C-2b】



・・・化学式 1C-2b

20

化学式 1C-2b 中、

G は、単結合、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-Se-$ 、 $-Te-$ 、 $-N=$ 、 $-NR^a-$ 、 $-SiR^bR^c-$ 、 $-GeR^dR^e-$ 、 $-(CR^fR^g)_n-$ 、及び $-(C(R^h)=C(R^i))-$ から選択され (ここで、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g 、 R^h 、及び R^i は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、置換又は非置換の炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、及び置換又は非置換の炭素数 6 ~ 10 のアリール基から選択され、 R^b と R^c 、 R^d と R^e 、 R^f と R^g 、又は R^h と R^i は、それぞれ独立して存在するか、又は互いに連結されて環を形成し、 $-(CR^fR^g)_n-$ の n は、1 又は 2 の整数である)、

30

X^a 及び X^b は、それぞれ独立して、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-Se-$ 、 $-Te-$ 、 $-NR^p-$ 、 $-SiR^qR^r-$ 、及び $-GeR^sR^t-$ から選択され (ここで、 R^p 、 R^q 、 R^r 、 R^s 、及び R^t は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、置換又は非置換の炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、及び置換又は非置換の炭素数 6 ~ 10 のアリール基から選択される)、

$Z^1 \sim Z^4$ は、それぞれ独立して、 N 又は CR^x であり (ここで、 R^x は、水素、重水素、炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基、 $-SiH_3$ 、炭素数 1 ~ 10 のアルキルシリル基、 $-NH_2$ 、炭素数 1 ~ 10 のアルキルアミン基、炭素数 6 ~ 12 のアリール基、炭素数 3 ~ 12 のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、

40

$Z^1 \sim Z^4$ が CR^x の場合、 R^x は独立して存在するか、又は $Z^1 \sim Z^4$ の内の隣接する 2 個が互いに連結されて 5 員芳香族環又は 6 員芳香族環を形成する。

【0058】

本発明の一実施形態において、化学式 1C-2b 中の Z^1 及び Z^2 の内の少なくとも 1 つ及び Z^3 及び Z^4 の内の少なくとも 1 つは、 CR^x であり、 R^x は、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基又は炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基であり得る。

本発明の一実施形態において、化学式 1C-2b 中の Z^2 及び Z^4 は、 CR^x であり、 R^x は、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基又は炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基であり得る。

本発明の一実施形態によれば、化学式 1C-2b 中の Z^1 と Z^2 の内の少なくとも 1 つ及び / 又は Z^3 と Z^4 の内の少なくとも 1 つは、 N であり得る。

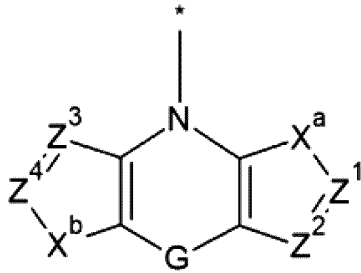
50

本発明の一実施形態によれば、化学式 1 C - 2 b 中、 Z^1 と Z^2 及び / 又は Z^3 と Z^4 は、N であり得る。

【0059】

化学式 1 C - 2 は、下記に示す化学式 1 C - 2 c で表される。

【化 1 C - 2 c】



・・・化学式 1 C - 2 c

10

【0060】

化学式 1 C - 2 c 中、

G は、単結合、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-Se-$ 、 $-Te-$ 、 $-N=$ 、 $-NR^a-$ 、 $-SiR^bR^c-$ 、 $-GeR^dR^e-$ 、 $-(CR^fR^g)_n-$ 、及び $-(C(R^h)=C(R^i))-$ から選択され（ここで、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^g 、 R^h 、及び R^i は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、置換又は非置換の炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、及び置換又は非置換の炭素数 6 ~ 10 のアリール基から選択され、 R^b と R^c 、 R^d と R^e 、 R^f と R^g 、又は R^h と R^i は、それぞれ独立して存在するか、又は互いに連結されて環を形成し、 $-(CR^fR^g)_n-$ の n は、1 又は 2 の整数である）、

20

X^a 及び X^b は、それぞれ独立して、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-Se-$ 、 $-Te-$ 、 $-NRP-$ 、 $-SiR^qR^r-$ 、及び $-GeR^sR^t-$ から選択され（ここで、 R^p 、 R^q 、 R^r 、 R^s 、及び R^t は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、置換又は非置換の炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、及び置換又は非置換の炭素数 6 ~ 10 のアリール基から選択される）、

Z^1 ~ Z^4 は、それぞれ独立して、N 又は CR^x であり（ここで、 R^x は、水素、重水素、炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基、 $-SiH_3$ 、炭素数 1 ~ 10 のアルキルシリル基、 $-NH_2$ 、炭素数 1 ~ 10 のアルキルアミン基、炭素数 6 ~ 12 のアリール基、炭素数 3 ~ 12 のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである）、

30

Z^1 ~ Z^4 が CR^x の場合、 R^x は、独立して存在するか、又は Z^1 ~ Z^4 の内の隣接する 2 個が互いに連結されて 5 員芳香族環又は 6 員芳香族環を形成する。

【0061】

本発明の一実施形態において、化学式 1 C - 2 c 中の Z^1 及び Z^2 の内の少なくとも 1 つ及び Z^3 及び Z^4 の内の少なくとも 1 つは CR^x であり、 R^x は炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基又は炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基であり得る。

本発明の一実施形態において、化学式 1 C - 2 c 中の Z^2 及び Z^4 は CR^x であり、 R^x は炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基又は炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基であり得る。

40

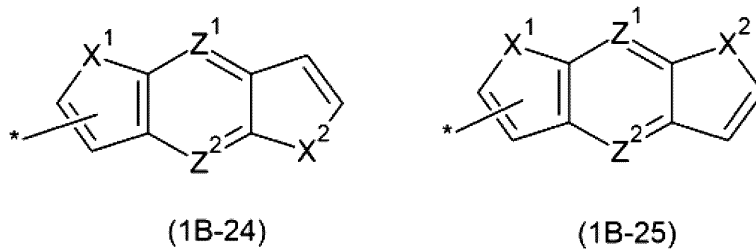
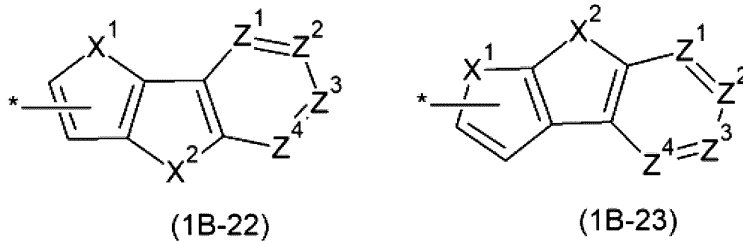
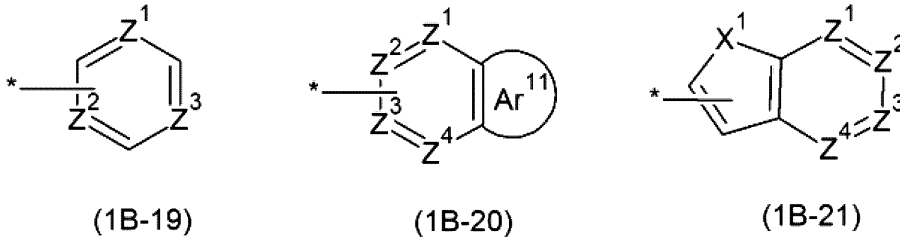
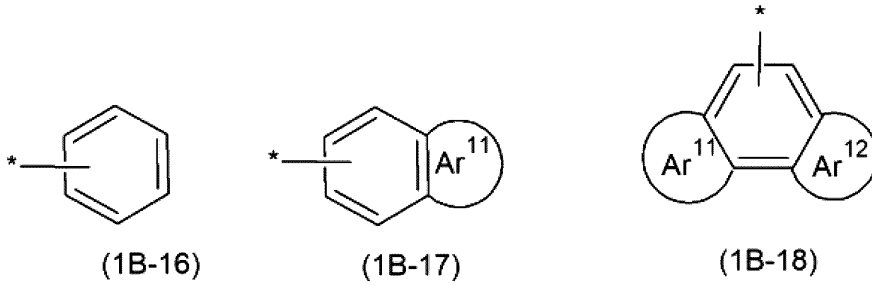
本発明の一実施形態によれば、前記化学式 1 C - 2 c 中、 Z^1 と Z^2 の内の少なくとも 1 つ及び / 又は Z^3 と Z^4 の内の少なくとも 1 つは N であり得る。本発明の一実施形態によれば、前記化学式 1 C - 2 c 中、 Z^1 と Z^2 及び / 又は Z^3 と Z^4 は N であり得る。

【0062】

化学式 1 A 中、Ar は、下記に示す化学式 1 B - 16 ~ 化学式 1 B - 25 から選択される芳香族環基であり得る。

50

【化1B-16-1B-25】



【0063】

化学式1B-16～化学式1B-25中、

X^1 及び X^2 は、それぞれ独立して、O、S、Se、Te、 $S(=O)$ 、 $S(=O)_2$ 、 NR^a 、 SiR^bR^c 、又は GeR^dR^e であり（ここで、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、及び R^e は、それぞれ独立して、水素、重水素、炭素数1～10のアルキル基、炭素数1～10のハロアルキル基、 $-SiH_3$ 、炭素数1～10のアルキルシリル基、 $-NH_2$ 、炭素数1～10のアルキルアミン基、炭素数6～10のアリールアミン基、炭素数6～14のアリール基、炭素数3～12のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである）、

$Z^1 \sim Z^4$ は、それぞれ独立して、 CR^x 又は N であり（ここで、 R^x は、水素、重水素、炭素数1～10のアルキル基、炭素数1～10のハロアルキル基、 $-SiH_3$ 、炭素数1～10のアルキルシリル基、 $-NH_2$ 、炭素数1～10のアルキルアミン基、炭素数6～10のアリールアミン基、炭素数6～14のアリール基、炭素数3～12のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである）、但し、化学式1B-20中の $Z^1 \sim Z^4$ の内の1つは、 CR^x であり、 R^x は、単結合であり、

Ar^{11} 及び Ar^{12} は、それぞれ独立して、置換又は非置換の炭素数6～30のアレー

10

20

30

40

50

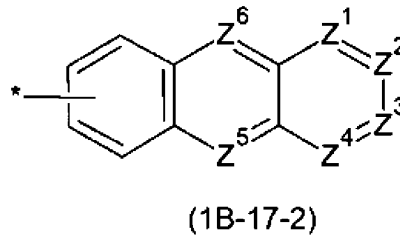
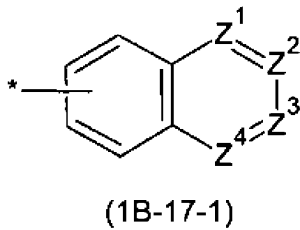
ン基、及び置換又は非置換の炭素数 3 ~ 30 のヘテロアレン基から選択され、

それぞれの芳香族環又はヘテロ芳香族環の水素は、重水素、ハロゲン、シアノ基、炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基、炭素数 6 ~ 10 のアリール基、炭素数 6 ~ 10 のアリールオキシ基、 $-SiH_3$ 基、又は炭素数 1 ~ 10 のアルキルシリル基で置換される。

【0064】

化学式 1B-17 は、下記に示す化学式 1B-17-1 又は化学式 1B-17-2 であり得る。

【化 1B-17-1-1B-17-2】



10

化学式 1B-17-1 及び化学式 1B-17-2 中、

$Z_1 \sim Z_6$ は、それぞれ独立して、N 又は CR^x であり（ここで、 R^x は、水素、重水素、炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基、 $-SiH_3$ 、炭素数 1 ~ 10 のアルキルシリル基、 $-NH_2$ 、炭素数 1 ~ 10 のアルキルアミン基、炭素数 6 ~ 12 のアリール基、炭素数 3 ~ 12 のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである）、

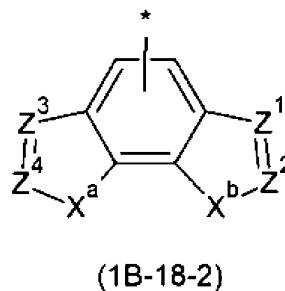
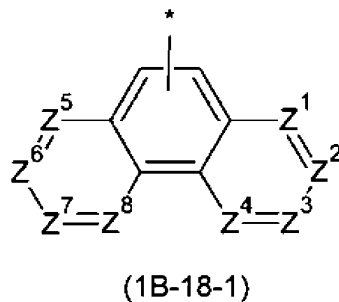
20

$Z_1 \sim Z_4$ が CR^x の場合、 R^x は、独立して存在するか、又は $Z_1 \sim Z_4$ の内の隣接する 2 個が互いに連結されて 5 員芳香族環又は 6 員芳香族環を形成する。

【0065】

化学式 1B-18 は、下記に示す化学式 1B-18-1 又は化学式 1B-18-2 であり得る。

【化 1B-18-1-1B-18-2】



30

【0066】

化学式 1B-18-1 及び化学式 1B-18-2 中、

$Z_1 \sim Z_8$ は、それぞれ独立して、N 又は CR^x であり（ここで、 R^x は、水素、重水素、炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基、 $-SiH_3$ 、炭素数 1 ~ 10 のアルキルシリル基、 $-NH_2$ 、炭素数 1 ~ 10 のアルキルアミン基、炭素数 6 ~ 12 のアリール基、炭素数 3 ~ 12 のヘテロアリール基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである）、

40

X^a 及び X^b は、それぞれ独立して、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-Se-$ 、 $-Te-$ 、 $-NR^p-$ 、 $-SiR^qR^r-$ 、及び $-GeR^sR^t-$ から選択され（ここで、 R^p 、 R^q 、 R^r 、 R^s 、及び R^t は、それぞれ独立して、水素、ハロゲン、置換又は非置換の炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、及び置換又は非置換の炭素数 6 ~ 10 のアリール基から選択される）、

50

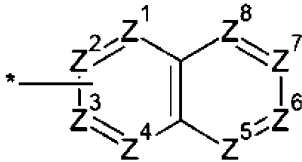
化学式 1 B - 1 8 - 1 中、 $Z^1 \sim Z^8$ が CR^x の場合、 R^x は、独立して存在するか、又は $Z^1 \sim Z^4$ の内の隣接する 2 個及び / 又は $Z^5 \sim Z^8$ の内の隣接する 2 個が互いに連結されて 5 員芳香族環又は 6 員芳香族環を形成し、

化学式 1 B - 1 8 - 2 中、 Z^1 及び Z^2 及び / 又は Z^3 及び Z^4 が CR^x の場合、 R^x は、独立して存在するか、又は Z^1 及び Z^2 及び / 又は Z^3 及び Z^4 は、互いに連結されて 5 員芳香族環又は 6 員芳香族環を形成する。

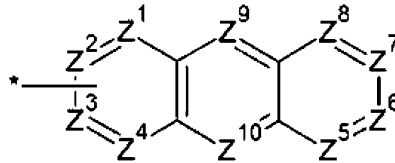
【 0 0 6 7 】

化学式 1 B - 2 0 は、下記に示す化学式 1 B - 2 0 - 1 又は化学式 1 B - 2 0 - 2 であり得る。

【 化 1 B - 2 0 - 1 - 1 B - 2 0 - 2 】



(1B-20-1)



(1B-20-2)

【 0 0 6 8 】

化学式 1 B - 2 0 - 1 及び化学式 1 B - 2 0 - 2 中、

$Z^1 \sim Z^{10}$ は、それぞれ独立して、N 又は CR^x であり (ここで、 R^x は、水素、重水素、炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基、炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基、 $-SiH_3$ 、炭素数 1 ~ 10 のアルキルシリル基、 $-NH_2$ 、炭素数 1 ~ 10 のアルキルアミン基、炭素数 6 ~ 12 のアリアル基、炭素数 3 ~ 12 のヘテロアリアル基、ハロゲン、シアノ基、又はこれらの組み合わせである)、

$Z^5 \sim Z^8$ が CR^x の場合、 R^x は、独立して存在するか、又は $Z^5 \sim Z^8$ の内の隣接する 2 個が互いに連結されて 5 員芳香族環又は 6 員芳香族環を形成する。

上記化学式 1 B - 1 6 ~ 化学式 1 B - 2 5 (例えば、化学式 1 B - 1 7 - 1、化学式 1 B - 1 7 - 2、化学式 1 B - 1 8 - 1、化学式 1 B - 1 8 - 2、化学式 1 B - 2 0 - 1 及び化学式 1 B - 2 0 - 2) で表される芳香族環基はアリアルアミン基又はヘテロアリアルアミン基で置換され、上記アリアルアミン基又はヘテロアリアルアミン基は上記化学式 1 C - 1 で表される。上記化学式 1 C - 1 は上記化学式 1 C - 1 a 又は化学式 1 C - 1 b で表される。

【 0 0 6 9 】

化学式 1 B - 1 6 ~ 化学式 1 B - 2 5 (例えば、化学式 1 B - 1 7 - 1、化学式 1 B - 1 7 - 2、化学式 1 B - 1 8 - 1、化学式 1 B - 1 8 - 2、化学式 1 B - 2 0 - 1、及び化学式 1 B - 2 0 - 2) で表される芳香族環基は、N-含有ヘテロ環基で置換され、N-含有ヘテロ環基は、化学式 1 C - 2 で表される。

化学式 1 C - 2 は、化学式 1 C - 2 a、化学式 1 C - 2 b、又は化学式 1 C - 2 c で表される。

【 0 0 7 0 】

化学式 1 中、化学式 1 A で表される官能基を含むことによって電荷伝達特性を強化させ、バンドギャップエネルギーを小さくすることができる。

化学式 1 A で表される官能基が 2 個以上存在する場合、共役構造のコア (化学式 1 中、スクアレイン (squareine、SQ) 又はクロコナイン (croconaine、CR)) に対して対称位置又は非対称位置に連結され得る。

化学式 1 中、 R^{11a} 、 R^{11b} 、 R^{11c} 、 R^{12a} 、 R^{12b} 、及び R^{12c} の内の少なくとも 1 つは、化学式 1 A で表される官能基であり、 R^{13a} 、 R^{13b} 、 R^{13c} 、 R^{14a} 、 R^{14b} 、及び R^{14c} の内の少なくとも 1 つは、化学式 1 A で表される官能基であり得る。

10

20

30

40

50

【0071】

また、 $R^{11a} \sim R^{11c}$ の内の少なくとも1つは、化学式1Aで表される官能基であり、 $R^{13a} \sim R^{13c}$ の内の少なくとも1つは、化学式1Aで表される官能基であり得る。

また、 $R^{12a} \sim R^{12c}$ の内の少なくとも1つは、化学式1Aで表される官能基であり、 $R^{14a} \sim R^{14c}$ の内の少なくとも1つは、化学式1Aで表される官能基であり得る。

また、 R^{11a} 及び R^{13a} は、化学式1Aで表される官能基であり得る。

また、 R^{12a} 及び R^{14a} は、化学式1Aで表される官能基であり得る。

【0072】

本発明の一実施形態において、 $R^{11a} \sim R^{14c}$ は、互いに独立して存在するか、又は隣接する2個の官能基が互いに連結されてベンゾインドールと縮合環を形成する。

10

本発明の一実施形態において、 R^{11a} 、 R^{11b} 、 R^{11c} 、 R^{12a} 、 R^{12b} 、 R^{12c} 、 R^{13a} 、 R^{13b} 、 R^{13c} 、 R^{14a} 、 R^{14b} 、及び R^{14c} の内の互いに隣接する2個の官能基が連結されて炭素数6～10のアレーン基（ベンゼン、ナフタレンなど）又は炭素数3～10のヘテロアレーン基（例えば、チオフェン、ピロール、ピリジン、ピリミジンなど）を形成し、このようなアレーン基又はヘテロアレーン基がベンゾインドールと縮合環を形成する。

【0073】

本発明の一実施形態による化合物は、下記に示すグループ1の化合物を含み得る。

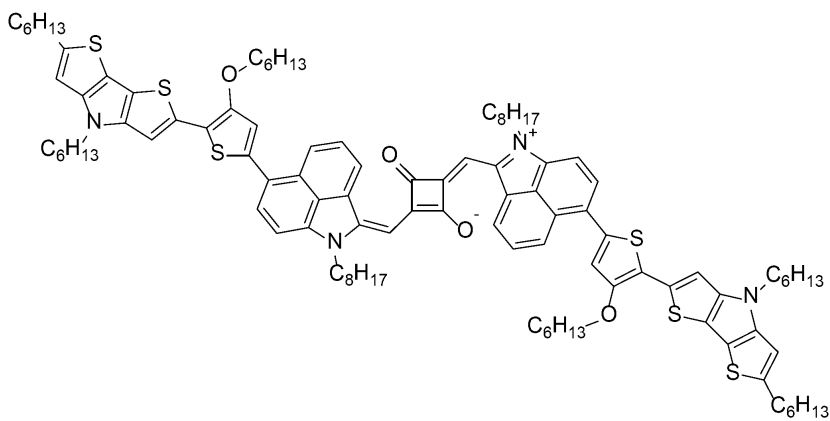
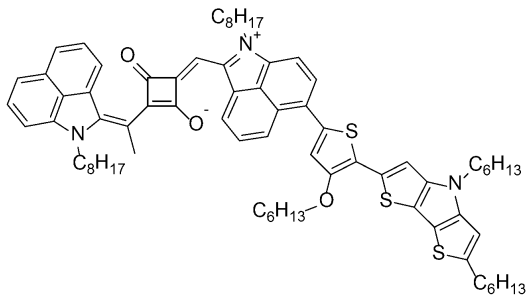
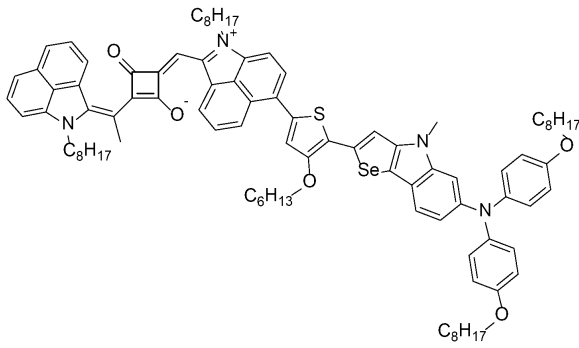
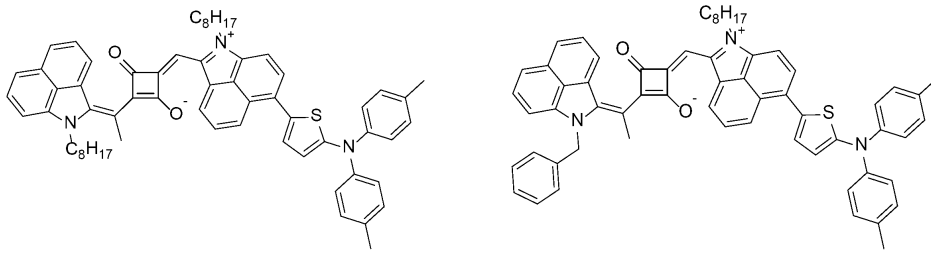
20

30

40

50

【化 g r o u p 1 (1)】



10

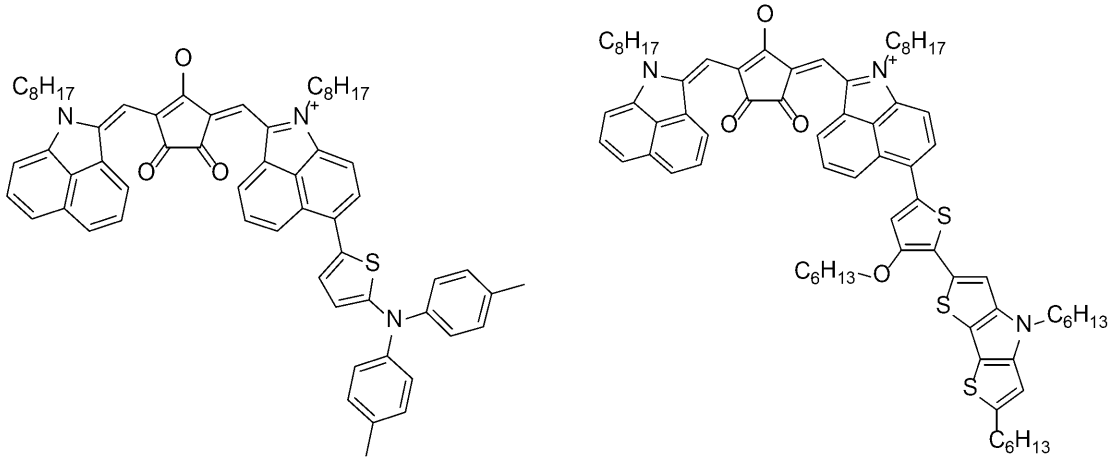
20

30

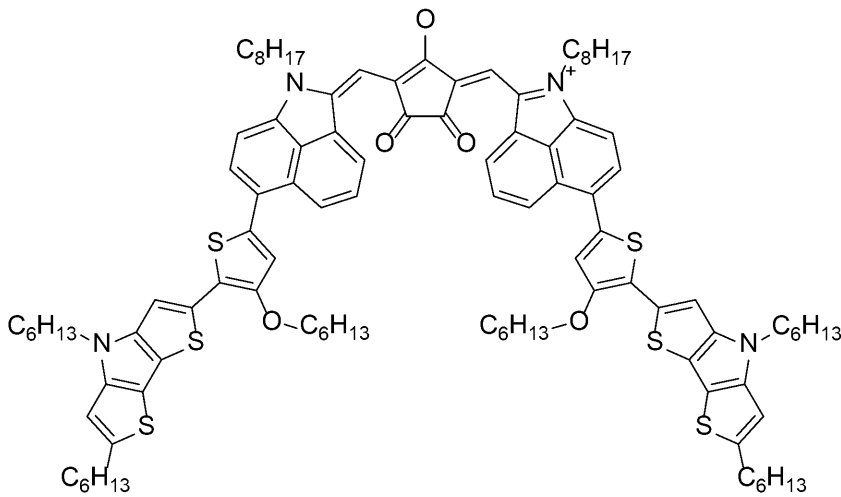
40

50

【化 group 1 (2)】



10



20

【 0 0 7 4 】

30

本発明の化合物は、外線波長領域の光を吸収することができ、化合物のピーク吸収波長 (peak absorption wavelength : max) は、例えば、約 750 nm 以上であり、例えば、約 780 nm 以上、例えば、約 790 nm 以上、例えば、約 800 nm 以上、例えば、約 810 nm 以上、例えば、約 820 nm 以上、又は約 830 nm 以上であり得る。

化合物のピーク吸収波長は、例えば、約 750 nm ~ 3000 nm の波長領域に属し、上記の範囲内で、例えば、約 750 nm ~ 2500 nm、例えば、約 780 nm ~ 2200 nm、例えば、約 790 nm ~ 2100 nm、例えば、約 800 nm ~ 2000 nm、例えば、約 810 nm ~ 2000 nm、例えば、約 820 nm ~ 2000 nm、又は例えば、約 830 nm ~ 2000 nm の波長領域に属する。

40

一実施形態において、本発明の化合物又は化合物を含む層、フィルムなどは例えば、約 1000 nm ~ 約 3000 nm、例えば、約 1060 nm ~ 約 1350 nm のピーク吸収波長 (max) を有する。

【 0 0 7 5 】

本発明の化合物は、良好な電荷移動特性を示すことができ、これにより、光を吸収して電氣的信号に変換する光電変換特性が良好で光電素子の光電変換物質として効果的に用いられる。

本発明の他の実施形態は、本発明の化合物を含む赤外線吸収材及び赤外線吸収 / 遮断フィルムを提供する。

本発明の化合物、赤外線吸収材、及び赤外線吸収 / 遮断 (吸収及び / 又は遮断) フィル

50

ムは、赤外線波長領域の吸光特性が要求される多様な分野に適用され得る。

化合物及び赤外線吸収材は、近赤外線／赤外線波長領域の吸光特性及び光電特性を同時に有するので、光電変換物質に効果的に用いることができる。

【0076】

図1は、本発明の一実施形態による光電素子の概略構成を示す断面図である。

図1を参照すると、本発明の一実施形態による光電素子100は、互いに対向する第1電極10と第2電極20、及び第1電極10と第2電極20との間に配置される光活性層30を含む。

【0077】

基板(図示せず)は、第1電極10側に配置されるか、又は第2電極20側に配置される。

10

基板は、例えば、ガラスなどの無機物質、ポリカーボネート、ポリメチルメタクリレート、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、ポリアミド、ポリエーテルスルホン、又はこれらの組み合わせなどの有機物質又はシリコンウェハーなどで作られる。

基板は、省略され得る。

【0078】

第1電極10と第2電極20の内のいずれか1つは、アノード(anode)であり、他の1つはカソード(cathode)である。

例えば、第1電極10はアノードであり、第2電極20はカソードである。

20

第1電極10と第2電極20の内の少なくとも1つは透光電極であり得、透光電極は、例えば、インジウム錫オキシド(indium tin oxide: ITO)、インジウム亜鉛オキシド(indium zinc oxide: IZO)、亜鉛酸化物(ZnO)、スズ酸化物(SnO₂)、アルミニウムスズ酸化物(AlTO)、及びフッ素ドーピングされたスズ酸化物(FTO)などの導電性酸化物、又は薄い厚さの単一層又は複数層の金属薄膜で作られる。

第1電極10と第2電極20の内の1つが不透光電極の場合、例えば、アルミニウム(Al)、銀(Ag)、又は金(Au)などの不透明導電体で作られる。

一例として、第1電極10と第2電極20は、いずれも透光電極であり得る。

一例として、第2電極20は、光を受ける側に位置する受光電極(light receiving electrode)であり得る。

30

【0079】

光活性層30は、p型半導体とn型半導体がpn接合(pn junction)を形成する層であって、外部から光を受けてエキシトン(exciton)を生成した後、生成されたエキシトンを正孔と電子に分離する。

p型半導体とn型半導体は、それぞれ少なくとも一部の波長領域の光を吸収する吸光物質であり、上述した化学式1で表される化合物又は赤外線吸収材は、p型半導体又はn型半導体として用いることができる。

一例として、上述した化学式1で表される化合物又は赤外線吸収材は、p型半導体に用いることができ、n型半導体としてフラーレン又はフラーレン誘導体を含み得る。

40

従って、光活性層30は、例えば、約750nm以上、約780nm以上、約790nm以上、約800nm以上、約810nm以上、約820nm以上又は約830nm以上、例えば、約750nm~3000nm、約750nm~2500nm、約780nm~2200nm、約790nm~2100nm、約800nm~2000nm、約810nm~2000nm、約820nm~2000nm又は約830nm~2000nmの波長領域でピーク吸収波長(peak absorption wavelength、max)を示し得る。

光活性層30は、p型半導体とn型半導体を含む真性層を含み、この時、p型半導体とn型半導体は、約1:9~9:1の体積比で含まれ、上記の範囲内で、例えば、約2:8~8:2の体積比で含まれ、上記の範囲内で、例えば、約3:7~7:3の体積比で含ま

50

れ、上記の範囲内で、例えば、約 4 : 6 ~ 6 : 4 の体積比で含まれ、上記の範囲内で、例えば、約 5 : 5 の体積比で含まれる。

【 0 0 8 0 】

光活性層 3 0 は、真性層以外に、p 型層及び / 又は n 型層をさらに含む。

p 型層は、上述した p 型半導体を含み、n 型層は、上述した n 型半導体を含む。

例えば、p 型層 / I 層、I 層 / n 型層、p 型層 / I 層 / n 型層などの多様な組み合わせで含まれる。

光電素子 1 0 0 は、第 1 電極 1 0 と光活性層 3 0 との間及び / 又は第 2 電極 2 0 と光活性層 3 0 との間に配置される補助層をさらに含む。

補助層は、電荷補助層又は光学補助層である。

10

【 0 0 8 1 】

このような構造の光電素子 1 0 0 ' を図 2 に示す。

図 2 は、本発明の他の実施形態による光電素子の概略構成を示す断面図である。

図 2 を参照すると、本実施形態による光電素子 1 0 0 ' は、上述した実施形態と同様に互いに対向する第 1 電極 1 0 と第 2 電極 2 0、及び第 1 電極 1 0 と第 2 電極 2 0 の間に位置する光活性層 3 0 を含む。

しかし、本実施形態による光電素子 1 0 0 ' は、上述した実施形態とは異なり、第 1 電極 1 0 と光活性層 3 0 との間、及び第 2 電極 2 0 と光活性層 3 0 との間にそれぞれ電荷補助層 (4 0、4 5) をさらに含む。

【 0 0 8 2 】

20

電荷補助層 (4 0、4 5) は、光活性層 3 0 で分離された正孔と電子の移動を容易にして効率を高める。

電荷補助層 (4 0、4 5) は、正孔の注入を容易にする正孔注入層 (hole injecting layer : HIL)、正孔の輸送を容易にする正孔輸送層 (hole transporting layer : HTL)、電子の移動を阻止する電子遮断層 (electron blocking layer : EBL)、電子の注入を容易にする電子注入層 (electron injecting layer : EIL)、電子の輸送を容易にする電子輸送層 (electron transporting layer : ETL)、及び正孔の移動を阻止する正孔遮断層 (hole blocking layer : HBL) から選択される少なくとも 1 つを含む。

30

電荷補助層 (4 0、4 5) は、例えば、有機物、無機物、又は有機 - 無機物を含む。

有機物は、正孔又は電子特性を有する有機化合物であり、無機物は、例えば、モリブデン酸化物、タングステン酸化物、ニッケル酸化物などの金属酸化物である。

電荷補助層 (4 0、4 5) は、例えば、上述した赤外線吸収材を含む。

一実施形態で、光電素子 1 0 0 ' は、少なくとも一つの電荷補助層 (第 1 電荷補助層 4 0 及び第 2 電荷補助層 4 5 の内の少なくとも一つ) を含み、第 1 電極 1 0、第 2 電極 2 0、光活性層 3 0 又は電荷補助層の内の少なくとも一つは上述した化学式 1 で表される化合物を含み得る。

電荷補助層 4 0 及び / 又は 4 5 は、本発明の化合物を含み、第 1 電極 1 0、第 2 電極 2 0、及び光活性層 3 0 は、本発明の化合物を含んでいないこともある。

40

電荷補助層 4 0 及び / 又は 4 5 と光活性層 3 0 は本発明の化合物を含み、第 1 電極 1 0 と第 2 電極 2 0 は、本発明の化合物を含んでいないこともある。

光活性層 3 0 は、本発明の化合物を含み、第 1 電極 1 0、第 2 電極 2 0、及び電荷補助層 4 0 及び / 又は 4 5 は、本発明の化合物を含んでいないこともある。

【 0 0 8 3 】

光学補助層は、光電素子の光入射方向に位置し、例えば、第 2 電極 2 0 が受光電極の場合、光活性層 3 0 の上部に配置される。

例えば、光学補助層は、第 2 電極 2 0 と光活性層 3 0 との間に配置される。

【 0 0 8 4 】

光電素子 (1 0 0、1 0 0 ') は、第 1 電極 1 0 又は第 2 電極 2 0 の一面に反射防止層 4

50

7をさらに含む。

反射防止層は、光が入射される側に配置して入射光の反射度を低くすることによって光吸収度をさらに改善することができる。

例えば、第1電極10側に光が入射される場合、反射防止層47は、第1電極10の一面に配置され、第2電極20側に光が入射される場合、反射防止層は、第2電極20の一面に配置される。

反射防止層47は、例えば約1.6～2.5の屈折率を有する物質を含み、例えば、上記範囲の屈折率を有する金属酸化物、カルコゲン酸化物、準金属酸化物(semi-metal oxide)、金属硫化物、及び有機物の内の少なくとも1つを含み得る。

【0085】

反射防止層は、例えば、アルミニウム含有酸化物、モリブデン含有酸化物、タングステン含有酸化物、バナジウム含有酸化物、レニウム含有酸化物、ニオブ含有酸化物、タンタル含有酸化物、チタン含有酸化物、ニッケル含有酸化物、銅含有酸化物、コバルト含有酸化物、マンガン含有酸化物、クロム含有酸化物、テルル含有酸化物、又はこれらの組み合わせなどの金属酸化物又は準金属酸化物、亜鉛スルフィドなどの金属硫化物、又はアミン誘導体などの有機物を含むことができるが、これらに限定されるものではない。

【0086】

光電素子(100、100')は、第1電極10又は第2電極20側から光が入射されて光活性層30が所定の波長領域の光を吸収すると、内部でエキシトンが生成される。

エキシトンは、光活性層30において正孔と電子に分離され、分離された正孔は、第1電極10及び第2電極20の内の方のアノード側に移動し、分離された電子は、第1電極10及び第2電極20の内の方のカソード側に移動して電流が流れる。

光電素子(100、100')は、イメージセンサー(CMOSイメージセンサー)、光検出器、光センサー(赤外光センサー)などのセンサー、太陽電池などに適用されるが、これらに限定されるものではない。

光電素子は、例えば、センサーに適用される。

センサーは、有機CMOSセンサーであり、例えば、有機CMOS赤外光センサー又は有機CMOSイメージセンサーである。

【0087】

以下、図面を参照して本発明の光電素子を含むイメージセンサーについて説明する。

図3は、本発明の一実施形態によるイメージセンサーの概略構成を示す断面図である。

図3を参照すると、本発明の一実施形態によるイメージセンサー200は、半導体基板110、絶縁層80及び光電素子100を含む。

図3には、図1の光電素子100を含むイメージセンサー200を示したが、イメージセンサー200は、図2の光電素子100'を含むこともできる。

【0088】

半導体基板110は、シリコン基板であり、伝送トランジスター(図示せず)及び電荷貯蔵所55が集積されている。

電荷貯蔵所55は、画素ごとに集積されている。

電荷貯蔵所55は、光電素子100に電氣的に接続されており、電荷貯蔵所55の情報は、伝送トランジスターによって伝えられる。

半導体基板110の上にはまた、金属配線(図示せず)及びパッド(図示せず)が形成される。

金属配線及びパッドは、信号遅延を減らすために低い比抵抗を有する金属、例えば、アルミニウム(Al)、銅(Cu)、銀(Ag)及びこれらの合金で作られるが、これらに限定されるものではない。

しかし、上記構造に限定されず、金属配線及びパッドを半導体基板110の下部に配置することもできる。

【0089】

金属配線及びパッドの上には絶縁層80が形成される。

10

20

30

40

50

絶縁層 80 は、酸化ケイ素及び/又は窒化ケイ素などの無機絶縁物質、又は SiC、SiCOH、SiCO、及び SiOF などの低誘電率 (low K) 物質で作られる。

絶縁層 80 は、電荷貯蔵所 55 を露出させるトレンチ 85 を有する。

トレンチ 85 は、充填材で満たされる。

【0090】

絶縁層 80 の上には上述した光電素子 100 が形成される。

光電素子 100 は、上述のように第 1 電極 10、光活性層 30、及び第 2 電極 20 を含む。

図には、第 1 電極 10、光活性層 30、及び第 2 電極 20 が順次積層された構造を提示的に示すが、これに限定されず、第 2 電極 20、光活性層 30、及び第 1 電極 10 の順に配置してもよい。

10

第 1 電極 10 及び第 2 電極 20 は、両方とも透明電極であり、光活性層 30 は、上述した通りである。

光活性層 30 は、赤外線波長領域の光を選択的に吸収する。

第 2 電極 20 側から入射した光は、光活性層 30 で赤外線波長領域の光が主として吸収されて光電変換される。

【0091】

光電素子 100 の上には集光レンズ (図示せず) がさらに形成される。

集光レンズは、入射光の方向を制御して光を 1 つの地点に集める。

集光レンズは、例えば、シリンダー状又は半球状であるが、これらに限定されるものではない。

20

【0092】

図 4 は、本発明の他の実施形態によるイメージセンサーの概略構成を示す断面図である。

図 4 を参照すると、本発明の他の実施形態によるイメージセンサー 300 は、光感知素子 (50a、50b、50c)、伝送トランジスター (図示せず) 及び電荷貯蔵所 55 が集積されている半導体基板 110、下部絶縁層 60、色フィルター層 (70a、70b、70c)、上部絶縁層 80、及び光電素子 100 を含む。

【0093】

半導体基板 110 は、光感知素子 (50a、50b、50c)、伝送トランジスター (図示せず)、及び電荷貯蔵所 55 が集積されている。

30

光感知素子 (50a、50b、50c) は、光ダイオード (例えば、シリコン基盤のダイオード) である。

光感知素子 (50a、50b、50c)、伝送トランジスター及び/又は電荷貯蔵所 55 は、画素ごとに集積されており、一例として、光感知素子 50a は、赤色画素に含まれ、光感知素子 50b は、緑色画素に含まれ、光感知素子 50c は、青色画素に含まれる。

光感知素子 (50a、50b、50c) は、光をセンシングし、センシングされた情報は、伝送トランジスターによって伝えられ、電荷貯蔵所 55 は、光電素子 100 に電氣的に接続されており、電荷貯蔵所 55 の情報は、伝送トランジスターによって伝えられる。

【0094】

半導体基板 110 の上にはまた、金属配線 (図示せず) 及びパッド (図示せず) が形成される。

40

金属配線及びパッドは、信号遅延を減らすために低い比抵抗を有する金属、例えば、アルミニウム (Al)、銅 (Cu)、銀 (Ag)、及びこれらの合金で作られるが、これらに限定されるものではない。

しかし、上記構造に限定されず、金属配線及びパッドを光感知素子 (50a、50b) の下部に配置することもできる。

金属配線及びパッドの上には下部絶縁層 60 が形成される。下部絶縁層は、絶縁層 80 で説明された物質で形成され得る。

【0095】

下部絶縁膜 60 の上には色フィルター (70a、70b、70c) が形成される。

50

色フィルター（70a、70b、70c）は、赤色画素に形成されている赤色フィルター70a、緑色画素に形成されている緑色フィルター70b、及び青色画素に形成されている青色フィルター70cを含む。

色フィルター（70a、70b、70c）の上には、上部絶縁層80が形成される。

上部絶縁層80は、色フィルター（70a、70b、70c）による段差を除去して平坦化する。

【0096】

上部絶縁層80の上には、上述した光電素子100が形成される。

光電素子100は、上述のように第1電極10、光活性層30、及び第2電極20を含む。

図には、第1電極10、光活性層30、及び第2電極20が順次積層された構造を例示的に示したが、これに限定されず、第2電極20、光活性層30、及び第1電極10の順に配置してもよい。

第1電極10及び第2電極20は、両方とも透明電極であり、光活性層30は上述した通りである。

光活性層30は、赤外線波長領域の光を選択的に吸収する。

【0097】

第2電極20側から入射した光は、光活性層30で赤外線波長領域の光が主として吸収されて光電変換される。

残りの波長領域の光は、第1電極10及び色フィルター（70a、70b、70c）を通過し、色フィルター70aを通過した赤色波長領域の光は、光感知素子50aによってセンシングし、色フィルター70bを通過した緑色波長領域の光は、光感知素子50bによってセンシングし、色フィルター70cを通過した青色波長領域の光は、光感知素子50cによってセンシングする。

【0098】

図5は、本発明のさらに他の実施形態によるイメージセンサーの概略構成を示す断面図である。

図5を参照すると、本実施形態によるイメージセンサー400は、赤外光電荷貯蔵所55IR、青色光電荷貯蔵所55B、緑色光電荷貯蔵所55G、赤色光電荷貯蔵所55R、及び伝送トランジスター（図示せず）が集積されている半導体基板110、下部絶縁層65、青色光感知素子100B、緑色光感知素子100G、赤色光感知素子100R、及び赤外光感知素子100IRを含む。

【0099】

半導体基板110は、シリコン基板であり、赤外光電荷貯蔵所55IR、青色光電荷貯蔵所55B、緑色光電荷貯蔵所55G、赤色光電荷貯蔵所55R、及び伝送トランジスター（図示せず）が集積されている。

青色光電荷貯蔵所55B、緑色光電荷貯蔵所55G、及び赤色光電荷貯蔵所55Rは、各青色画素、緑色画素及び赤色画素ごとに集積されている。

赤外光電荷貯蔵所55IR、青色光電荷貯蔵所55B、緑色光電荷貯蔵所55G、及び赤色光電荷貯蔵所55Rは、赤外光感知素子100IR、青色光感知素子100B、緑色光感知素子100G、及び赤色光感知素子100Rで吸収した電荷が移動して集積される部分で、それぞれ赤外光感知素子100IR、青色光感知素子100B、緑色光感知素子100G、及び赤色光感知素子100Rに電気的に接続されている。

【0100】

半導体基板110の上にはまた、金属配線（図示せず）及びパッド（図示せず）が形成される。

金属配線及びパッドは、信号遅延を減らすために低い比抵抗を有する金属、例えば、アルミニウム（Al）、銅（Cu）、銀（Ag）、及びこれらの合金で作られるが、これらに限定されるものではない。

金属配線及びパッドの上には、下部絶縁層65が形成される。

10

20

30

40

50

下部絶縁層 65 は、酸化ケイ素及び/又は窒化ケイ素などの無機絶縁物質、又は SiC、SiCOH、SiCO、及び SiOF などの低誘電率 (Low K) 物質で作られる。

【0101】

下部絶縁層 65 の上には、青色光感知素子 100B、緑色光感知素子 100G、赤色光感知素子 100R、及び赤外光感知素子 100IR が形成される。

青色光感知素子 100B は、第 1 電極 10B、第 2 電極 20B、及び青色波長領域の光を選択的に吸収する光活性層 30B を含み、緑色光感知素子 100G は、第 1 電極 10G、第 2 電極 20G、及び緑色波長領域の光を選択的に吸収する光活性層 30G を含み、赤色光感知素子 100R は、第 1 電極 10R、第 2 電極 20R、及び赤色波長領域の光を選択的に吸収する光活性層 30R を含み、赤外光感知素子 100IR は、第 1 電極 10IR、第 2 電極 20IR、及び赤外光波長領域の光を選択的に吸収する光活性層 30IR を含む。

10

【0102】

第 1 電極 (10B、10G、10R、10IR) 及び第 2 電極 (20B、20G、20R、20IR) は透光電極であり、例えば、インジウムスズ酸化物 (ITO)、インジウム亜鉛酸化物 (IZO)、亜鉛酸化物 (ZnO)、スズ酸化物 (SnO)、アルミニウムスズ酸化物 (AlTO)、及びフッ素ドーピングされたスズ酸化物 (FTO) などの透明導電体で作られるか、又は数ナノメートル~数十ナノメートル厚さの薄い厚さからなる金属薄膜又は金属酸化物がドーピングされた数ナノメートル~数十ナノメートル厚さの薄い厚さからなる金属薄膜である。

20

【0103】

光活性層 (30B、30G、30R、30IR) は、p 型半導体化合物と n 型半導体化合物を含む。

青色光感知素子 100B の光活性層 30B は、青色波長領域の光を選択的に吸収する p 型半導体化合物と青色波長領域の光を選択的に吸収する n 型半導体化合物を含み、緑色光感知素子 100G の光活性層 30G は、緑色波長領域の光を選択的に吸収する p 型半導体化合物と緑色波長領域の光を選択的に吸収する n 型半導体化合物を含み、赤色光感知素子 100R の光活性層 30R は、赤色波長領域の光を選択的に吸収する p 型半導体化合物と赤色波長領域の光を選択的に吸収する n 型半導体化合物を含み、赤外光感知素子 100IR の光活性層 30IR は、上述した本発明の化合物を含む。

30

赤外光感知素子 100IR は、可視光領域の吸収なしに、約 750nm 以上約 3000nm 以下の赤外線領域の光を選択的に吸収する。

【0104】

図 6 は、本発明のさらに他の実施形態によるイメージセンサの概略構成を示す断面図である。

図 6 を参照すると、イメージセンサー 500 は、赤外光電荷貯蔵所 55IR、青色光電荷貯蔵所 55B、緑色光電荷貯蔵所 55G、赤色光電荷貯蔵所 55R、及び伝送トランジスタ (図示せず) が集積されている半導体基板 110、下部絶縁層 65、上部絶縁層 90、青色光感知素子 100B、緑色光感知素子 100G、赤色光感知素子 100R、及び赤外光感知素子 100IR を含む。

40

赤外光感知素子 100IR は、青色光感知素子 100B、緑色光感知素子 100G、赤色光感知素子 100R の前面に形成される。

残りの構成は、図 5 に示すイメージセンサーと同様である。

【0105】

図 6 の構成において、下部絶縁層 65 の上に赤外光感知素子 100IR が存在し、その上に青色光感知素子 100B、緑色光感知素子 100G、赤色光感知素子 100R を配置することもできる。

このような構成を有するイメージセンサー 600 を、図 7 に示す。

赤外光感知素子 100IR は、約 750nm 以上約 3000nm 以下の赤外線領域の光を選択的に吸収し、広い吸収面積を有することによって効率を向上させる。

50

【0106】

本発明の一実施形態によるセンサーは、機能が異なる複数のセンサーを含む。

一例として、機能が異なる複数のセンサーの内の少なくとも1つは、生体認証センサーであり、生体認証センサーは、例えば、虹彩センサー、距離センサー、指紋センサー、血管分布センサーなどであるが、これらに限定されるものではない。

一例として、機能が異なる複数のイメージセンサーの内の1つは、虹彩センサー (iris sensor) であり、もう1つは、距離センサー (depth sensor) である。

【0107】

虹彩センサー (iris sensor) は、人ごとにそれぞれ異なる虹彩の特性を利用して個人の身元を把握するセンサーであって、使用者との適切な距離内でセンサーにより使用者の目を撮影し、撮影されたイメージを処理して予め保存されたイメージと比較することによって虹彩認証動作を行う。

距離センサー (depth sensor) は、3次元客体の情報から客体の形状や位置を把握するセンサーであって、使用者との適切な距離内でセンサーにより客体を撮影し、撮影されたイメージを処理して客体の形状や位置を確認する。

このような距離センサーは、例えば、顔認識センサーに用いられる。

【0108】

本発明の一実施形態において、複数のセンサーは、例えば、赤外線波長領域内で第1波長 λ_1 を有する赤外線領域の光を感知する第1赤外光センサーと、赤外線波長領域内で第2波長 λ_2 を有する赤外光を感知する第2赤外光センサーとを含む。

第1波長 λ_1 と第2波長 λ_2 は、例えば、約800nm～3000nmの波長領域内で互いに異なり、例えば、第1波長 λ_1 と第2波長 λ_2 の差は、約30nm以上であり、上記の範囲内で約50nm以上であり、約70nm以上であり、約80nm以上であり、約90nm以上である。

【0109】

一例として、第1波長 λ_1 と第2波長 λ_2 の内の1つは、約780nm～900nmの波長領域に属し、第1波長 λ_1 と第2波長 λ_2 の内のもう1つは、約900nm超過1000nm以下の波長領域に属する。

一例として、第1波長 λ_1 と第2波長 λ_2 の内の1つは、約780nm～840nmの波長領域に属し、第1波長 λ_1 と第2波長 λ_2 の内のもう1つは、約910nm～970nmの波長領域に属する。

一例として、第1波長 λ_1 と第2波長 λ_2 の内の1つは、約800nm～830nmの波長領域に属し、第1波長 λ_1 と第2波長 λ_2 の内のもう1つは、約930nm～950nmの波長領域に属する。

一例として、第1波長 λ_1 と第2波長 λ_2 の内の1つは、約805nm～815nmの波長領域に属し、第1波長 λ_1 と第2波長 λ_2 の内のもう1つは、約935nm～945nmの波長領域に属する。

一例として、第1波長 λ_1 と第2波長 λ_2 の内の1つは、約810nmであり、第1波長 λ_1 と第2波長 λ_2 の内のもう1つは、約940nmである。

【0110】

図8は、本発明の一実施形態による複数のセンサーを含むイメージセンサーの概略構成を示す断面図である。

本実施形態によるイメージセンサー700は、デュアルバンドパスフィルター95、第1赤外光センサー100A、絶縁層80、及び第2赤外光センサー120が集積された(少なくとも部分的に埋め立てられた)半導体基板110を含む。

第1赤外光センサー100Aと第2赤外光センサー120は、例えば、半導体基板110の上面110Sに対して垂直の方向に積層されている。

【0111】

デュアルバンドパスフィルター95は、第1赤外光センサー100Aの前面(fron

10

20

30

40

50

t side) に配置され、第 1 波長 λ_1 を含む赤外光及び第 2 波長 λ_2 を含む赤外光を選択的に透過し、その他の光は、遮断及び / 又は吸収させる。

ここで、その他の光は、紫外線及び可視光線領域の光も含まれる。

第 1 赤外光センサー 100A は、第 1 電極 10、光活性層 30、及び第 2 電極 20 を含む。

第 1 赤外光センサー 100A は、上述した実施形態の光電素子 (100、100') と同様である。

第 2 赤外光センサー 120 は、半導体基板 110 内に集積されており、光感知素子である。

半導体基板 110 は、例えば、シリコン基板であり、第 2 赤外光センサー 120、電荷貯蔵所 55、及び伝送トランジスター (図示せず) が集積されている。

10

【0112】

第 2 赤外光センサー 120 は、光ダイオードであり、入射した光をセンシングし、センシングされた情報は、伝送トランジスターによって伝えられる。

ここで、第 2 赤外光センサー 120 に入射した光は、デュアルバンドパスフィルター 95 と第 1 赤外光センサー 100A を通過した光で、第 2 波長 λ_2 を含む所定領域の赤外光である。

第 1 波長 λ_1 を含む所定領域の赤外光は、第 1 赤外光センサーの光活性層 30 で全て吸収されて、第 2 赤外光センサー 120 に到達しない。

この場合、第 2 赤外光センサー 120 に入射する光の波長選択性のための別のフィルターを必要としない。

20

しかし、第 1 波長 λ_1 を含む所定領域の赤外光が光活性層 30 で全て吸収されない場合に備えて、第 1 赤外光センサー 100A と第 2 赤外光センサー 120 との間にフィルターをさらに備えてもよい。

【0113】

本実施形態によるセンサーは、別個の機能を行う 2 つの赤外光センサーを含むことによって複合センサーの機能を行うだけでなく、各画素に別個の機能を行う 2 つのセンサーを積層することによって大きさはそのまま維持しながら、各センサーの機能を行う画素の個数を 2 倍に増やして、感度を大きく改善することができる。

図 9 は、本発明のさらに他の実施形態によるイメージセンサーの概略構成を示す断面図である。

30

図 9 を参照すると、前述の実施形態のように、イメージセンサー 800 は、可視光センサー 50 及び光電素子 100 を含む。

可視光センサー 50 は、半導体基板 110 に集積された赤色光感知素子 50a、緑色光感知素子 50b、及び青色光感知素子 50c を含み、赤色光感知素子 50a、緑色光感知素子 50b、及び青色光感知素子 50c は、光ダイオード (例えば、シリコン基盤の光ダイオード) であり得、可視光領域の光を選択的に吸収するように構成される。

赤色光感知素子 50a、緑色光感知素子 50b、及び青色光感知素子 50c は、基板に垂直である方向に積層される。

赤色光感知素子 50a、緑色光感知素子 50b、及び青色光感知素子 50c は、積層の深さにより各波長領域で光を選択的に吸収及び / 又は変換 (電気的信号に光電変換) して感知するように構成される。

40

図 10 は、本発明のさらに他の実施形態によるイメージセンサーの概略構成を示す断面図である。

図 10 を参照すると、イメージセンサー 900 は、入射光中、赤外線波長スペクトル (例えば、第 1 赤外線波長領域) における光を選択的に吸収及び / 又は変換 (電気的信号に光電変換) するように構成された第 1 光電素子 (例えば、赤外線光電素子 1200d) 及び第 1 光電素子と半導体基板 (例えば、110) の間に垂直に積層された少なくとも一つの追加の光電素子 (例えば、1200a ~ 1200c) を含み、追加の光電素子は、それぞれの光電変換層を含み、入射光中、第 1 赤外線波長領域と異なる個別 (例えば、それぞ

50

れの) 波長領域を選択的に吸収及び/又は変換(例えば、光電変換)するように構成される。

個別(例えば、それぞれの)波長領域は、可視光又は非可視光波長領域である。

例えば、図10に示しているように、イメージセンサー900は、入射光の赤色波長スペクトルにおける光を選択的に吸収及び/又は変換(電気的信号に光電変換)するように構成された赤色光電素子1200a、入射光の緑色波長スペクトルにおける光を選択的に吸収及び/又は変換(電気的信号に光電変換)するように構成された緑色光電素子1200b及び入射光の青色波長スペクトルにおける光を選択的に吸収及び/又は変換(電気的信号に光電変換)するように構成された青色光電素子1200cを含む追加の光電素子を含む。

10

赤色光電素子1200a、緑色光電素子1200b、及び青色光電素子1200cは、半導体基板110の上面110Sに垂直である方向(例えば、y方向)に積層される。

イメージセンサー900は、第1近赤外線波長領域で光を選択的に吸収及び/又は変換するように構成された第1光電素子(例えば、第4光電素子1200d)以外に多数の追加の光電素子(1200a~1200c)を含むものとして示しているが、有機センサー970は、光電素子1200dと半導体基板110との間の一つの追加の光電素子(例えば、1200a~1200cの内の任意の一つ)を含み得る。

本実施形態によるイメージセンサー900は、半導体基板110、下部絶縁層80a、第1中間絶縁層80b、第2中間絶縁層80c、上部絶縁層80d、第1光電素子1200a、第2光電素子1200b、第3光電素子1200c、及び第4光電素子1200dを含む。

20

本実施形態において、第4光電素子1200dは、第1近赤外線波長領域で光を選択的に吸収及び/又は変換(電気的信号に光電変換)するように構成された第1光電素子であり、第1~第3光電素子(1200a~1200c)は、集合的に(collectively)第1近赤外線波長領域と異なる一つ以上の別途の波長領域で光を選択的に吸収及び/又は変換(電気的信号に光電変換)するように構成された少なくとも一つの追加の光電素子である。

図に示しているように、第1~第4光電素子(1200a~1200d)は、半導体基板110上に垂直に積層され、第1~第4光電素子(1200a~1200d)は、半導体基板110の上面110Sに垂直に伸びる方向に互いに重なる。

30

半導体基板110は、シリコン基板であり得、伝送トランジスター(図示せず)及び電荷貯蔵所が集積される。

下部絶縁層80aの上には第1光電素子1200aが形成される。

第1光電素子1200aは、光電変換層1230aを含む。

第1光電素子1200aは、上述した一実施形態のいずれか一つによる光電素子である。光電変換層1230aは、入射光中、赤外線、赤色、青色、及び緑色波長スペクトルの内の一つで光を選択的に吸収及び/又は変換(電気的信号に光電変換)する。

例えば、第1光電素子1200aは、青色光電素子である。

第1光電素子1200aの上には第1中間絶縁層80bが形成される。

第2光電素子1200bは、第1中間絶縁層80bの上に形成される。

40

第2光電素子1200bは、光電変換層1230bを含む。

第2光電素子1200bは、上述した一実施形態のいずれか一つによる光電素子である。光電変換層1230bは、入射光中、赤外線、赤色、青色及び緑色波長スペクトルの内の一つで光を選択的に吸収及び/又は変換(電気的信号に光電変換)する。

例えば、第2光電素子1200bは、緑色光電素子である。

第2光電素子1200bの上には第2中間絶縁層80cが形成される。

第3光電素子1200cは、第2中間絶縁層80cの上に形成される。

第3光電素子1200cは、光電変換層1230cを含む。

第3光電素子1200cは、上述した一実施形態のいずれか一つによる光電素子である。光電変換層1230cは、入射光中、赤外線、赤色、青色、及び緑色波長スペクトルの

50

内の一つで光を選択的に吸収及び／又は変換（電氣的信号に光電変換）する。

例えば、第3光電素子1200cは、赤色光電素子である。

第3光電素子1200cの上には上部絶縁層80dが形成される。

下部絶縁層80a、第1及び第2中間絶縁層（80b、80c）及び上部絶縁層80dは、電荷貯蔵所（55a、55b、55c、55d）を露出させる複数の貫通孔又はトレランチ（85a、85b、85c、85d）を有する。

上部絶縁層80dの上には、第4光電素子1200dが形成される。

第4光電素子1200dは、光電変換層1230dを含む。

第4光電素子1200dは、上述した一実施形態のいずれか一つによる光電素子である。

光電変換層1230dは、入射光中、赤外線、赤色、青色、及び緑色波長スペクトルの内の一つで光を選択的に吸収及び／又は変換（電氣的信号に光電変換）する。

例えば、第4光電素子1200dは、赤外線吸収材を含む赤外光／近赤外光の光電素子である。

図10で、第1光電素子1200a、第2光電素子1200b、第3光電素子1200c、及び第4光電素子1200dは、順次に積層されるが、本発明はこれに限定されず、多様な順に積層することができる。

上述したように、第1光電素子1200a、第2光電素子1200b、第3光電素子1200c、及び第4光電素子1200dは、積層構造を有するので、有機センサーの大きさを減らし、小型化を実現することができる。

上述したイメージセンサーは、多様な電子装置に適用され、例えば、カメラ、カムコーダー、これらを内蔵したスマートフォン、ディスプレイ装置、セキュリティー装置、又は医療装置などに適用されるが、これらに限定されるものではない。

【0114】

図11は、本発明の一実施形態によるイメージセンサーを含むデジタルカメラの概略構成を示すブロック図である。

図11を参照すると、デジタルカメラ1000は、レンズ1010、イメージセンサー1020、モータ1030、及びエンジン1040を含む。

イメージセンサー1020は、図3～図10に示した実施形態によるイメージセンサーの内のいずれか一つである。

【0115】

レンズ1010は、入射光をイメージセンサー1020に集光する。

イメージセンサー1020は、レンズ1010を通して受光した光に対してRGBデータを生成する。

本発明の一実施形態において、イメージセンサー1020は、エンジン1040とインタフェースする。

モータ1030は、レンズ1010の焦点を調節するか、又はエンジン1040から受けたコントロール信号に対応してシャッターを調節する。

エンジン1040は、イメージセンサー1020とモータ1030を調節する。

エンジン1040は、ホスト/アプリケーション1050に接続される。

【0116】

図12は、本発明の一実施形態による電子装置の概略構成を示すブロック図である。

図12を参照すると、電子装置1100は、バス1110を通じて互いに電氣的に接続されたプロセッサ1120、メモリ1130、及びイメージセンサー1140を含む。

イメージセンサー1140は、上述の実施形態による任意のイメージセンサーを含む。

メモリ1130は、非一時的コンピュータ読み取り可能な媒体であり、命令プログラムを保存することができる。

【0117】

メモリ1130は、フラッシュメモリ、PRAM (phase-change random access memory)、MRAM (magneto-resistive RAM)、ReRAM (resistive RAM) 又はFRAM (登録商標) (fe

10

20

30

40

50

rr o - e l e c t r i c R A M) のような非揮発性メモリであるか、又は S R A M (s t a t i c R A M)、D R A M (d y n a m i c R A M)、又は S D R A M (s y n c h r o n o u s D R A M) のような揮発性メモリである。

プロセッサ 1 1 2 0 は、一つ以上の機能を実行するために保存されたコマンドプログラムを実行する。

例えば、プロセッサ 1 1 2 0 は、イメージセンサー 1 1 4 0 で生成された電気的信号を処理するように構成される。

プロセッサ 1 1 2 0 は、上記処理に基づいて出力（例えば、ディスプレイインタフェースに表示されるイメージ）を生成するように構成される。

【 0 1 1 8 】

10

上記に開示の構成要素の内の 1 つ以上は、論理回路（ソフトウェアを実行するプロセッサのようなハードウェア/ソフトウェアの組み合わせ、又はこれらの組み合わせ）を含むハードウェアのような処理回路を含むか、又はこれによって実現できる。

例えば、処理回路は、より具体的には、中央処理装置（CPU）、算術論理装置（ALU）、デジタル信号プロセッサ、マイクロコンピュータ、FPGA（Field Programmable Gate Array）、SoC（System-on-Chip）、プログラミング可能の論理装置、マイクロプロセッサ、ASIC（application-specific integrated circuit）などを含むことができ、これに限定されるのではない。

【 0 1 1 9 】

20

以下、実施例を通じて上述した本発明の実施形態をより詳細に説明する。

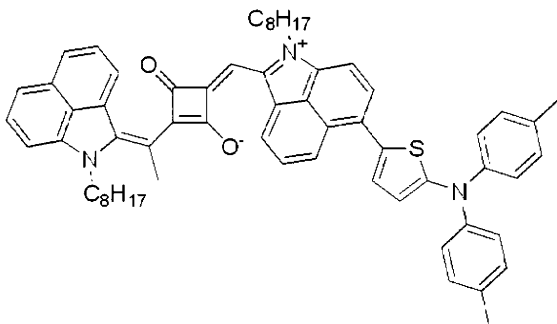
ただし、下記の実施例は、単に説明のためのものであり、本発明の権利範囲を限定するものではない。

【 0 1 2 0 】

<< 合成例 >>

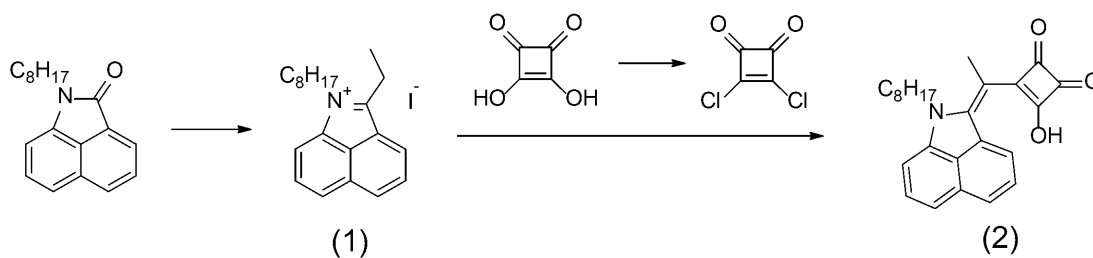
合成例 1 化学式 1 - 1 で表される化合物（化合物（6））の合成

【 化 1 - 1 】



30

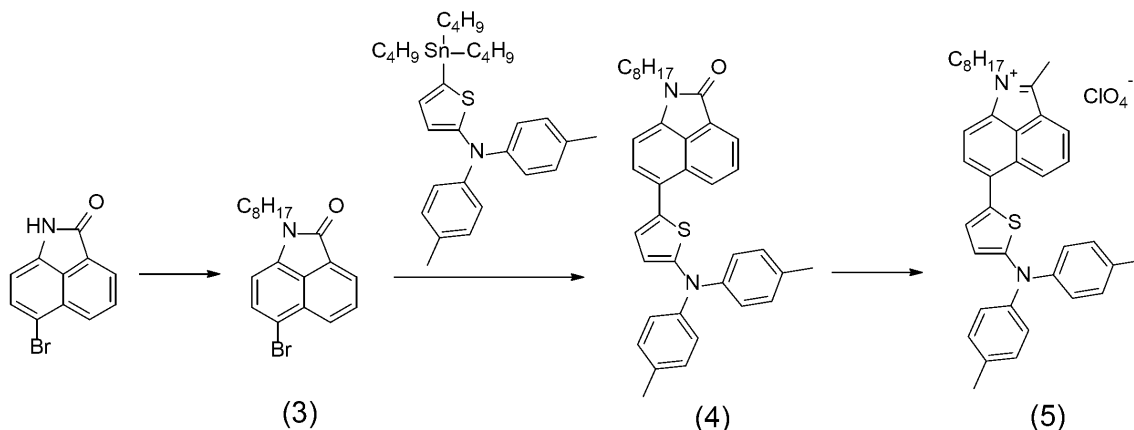
【 化 r e a c t 1 - 1 a 】



40

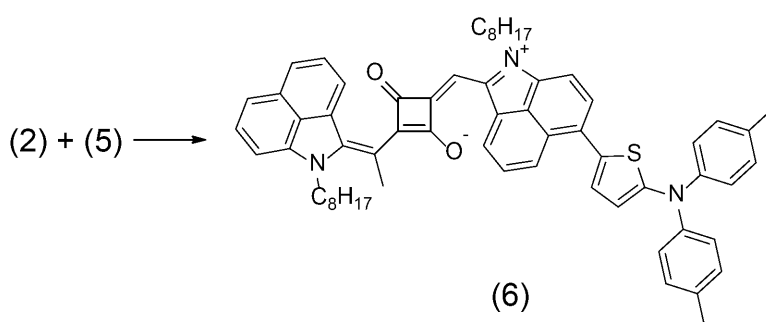
50

【化 r e a c t 1 - 1 b】



10

【化 r e a c t 1 - 1 c】



20

【 0 1 2 1】

i) 第1段階：化合物(1)の合成

1-オクチルベンゾ[cd]インドール-2(1H)-オン(1-octylbenzo[cd]indol-2(1H)-one、2.0g、7.1mmol)を乾燥テトラヒドロフラン(dry THF)10mLに溶かした溶液にエチルマグネシウムブロミド溶液(ethylmagnesium bromide solution、3M in diethyl ether、7.1mL、21.3mmol)を徐々に入れた後、60

30

で6時間攪拌した。

その後、0 で1N HCl(20mL)を徐々に入れた後、THFを蒸発させて残った溶液をKI(2.36g、14.2mmol、in 20mL H₂O)溶液に注いだ。

その後、析出物をろ過して化合物(1)(1.8g、収率：約60%)を得た。

LC-MS：294.21m/zの分子量確認

【 0 1 2 2】

ii) 第2段階：化合物(2)の合成

「Squaric acid」(0.26g、2.3mmol)、塩化チオニル(thionyl chloride、1M in MC、4.5mL、4.5mmol)、及びジメチルホルムアミド(DMF、0.04g、0.6mmol)をトルエン(8mL)に入れて、95 で3時間攪拌した。

40

その後、塩化チオニルを蒸発させた後、常温で化合物(1)(0.32g、0.8mmol)を入れて、1時間攪拌した。

次に、トリエチルアミン(triethylamine、0.76g、7.5mmol)、H₂O(0.55g、7.5mmol)、及びアセトン(6mL)を入れて、常温で継続攪拌した。

12時間後、H₂O(30mL)を入れて物質を溶かし、溶けない部分はフィルターで除去した。

50

最後に、2 N HCl (10 mL) で pH 2 まで作った後、メチレンクロライド (MC) で抽出した。

得られた生成物は、シリカゲルカラムクロマトグラフィーによって分離精製 (酢酸エチル (EA) : n - ヘキサン (n - Hex) = 1 : 1 v / v) して、化合物 (2) (0.2 g、収率：約 68%) を得た。

LC - MS : 390.28 m / z の分子量確認

【0123】

iii) 第3段階：化合物 (3) の合成

6 - プロモベンゾ [cd] インドール - 2 (1H) - オン (6 - bromobenzo [cd] indol - 2 (1H) - one、3 g、12.1 mmol) を DMF (60 mL) に溶かし、0 で NaH (60% in mineral oil、0.73 g、18.0 mmol) を徐々に入れて攪拌した。

1 時間後、常温で「1 - bromooctane」(4.7 g、24.2 mmol) を入れた後、12 時間攪拌した。

反応終了後、EA で抽出した後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーによって分離精製 (EA : n - Hex = 1 : 10 v / v) して、化合物 (3) (3.8 g、収率：約 88%) を得た。

LC - MS : 360.10 m / z の分子量確認

【0124】

iv) 第4段階：化合物 (4) の合成

「N, N - di - p - tolyl - 5 - (tributylstannyl) thiophen - 2 - amine」(3.0 g、5.3 mmol)、化合物 (3) (1.9 g、5.3 mmol)、及び「tetrakis (triphenylphosphine) palladium (0)」(5 mol%) を 125 mL トルエンに溶かし、110 で 18 時間攪拌した。

反応終了後、トルエンを濃縮させた後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーによって分離精製 (EA : n - Hex = 1 : 10 v / v) して、化合物 (4) (2.5 g、収率：約 85%) を得た。

LC - MS : 559.24 m / z の分子量確認

【0125】

v) 第5段階：化合物 (5) の合成

化合物 (4) (1.0 g、1.8 mmol) を乾燥テトラヒドロフラン (dry THF、6 mL) に溶かした溶液にメチルマグネシウムクロリド溶液 (methylmagnesium chloride solution、3 M in THF、0.78 mL、2.3 mmol) を徐々に入れた後、60 で 6 時間攪拌した。

その後、0 で H₂O (5 mL) と過塩素酸 (perchloric acid) 1.5 mL を順次に徐々に入れた。

最後に、生成物を EA で抽出した後、ヘキサン (hexane) に沈殿及びろ過して、化合物 (5) (0.9 g、収率：約 76%) を得た。

LC - MS : 557.25 m / z の分子量確認

【0126】

vi) 第6段階：化学式 1 - 1 で表される化合物 (化合物 (6)) の合成

化合物 (2) (0.040 g、0.1 mmol) と化合物 (5) (0.067 g、0.1 mmol) を 1 - ブタノール (3 mL) 及びトルエン (3 mL) の混合溶媒に溶かし、80 で 1 時間攪拌した。

反応終了後、溶媒を除去した後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーによって分離精製 (EA : n - Hex = 1 : 2 v / v) して、化合物 (6) (0.03 g、収率：約 31%) を得た。

LC - MS : 928.54 m / z の分子量確認

【0127】

10

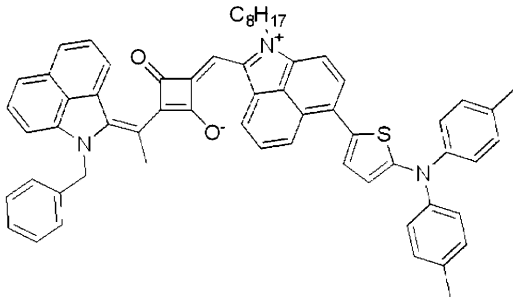
20

30

40

50

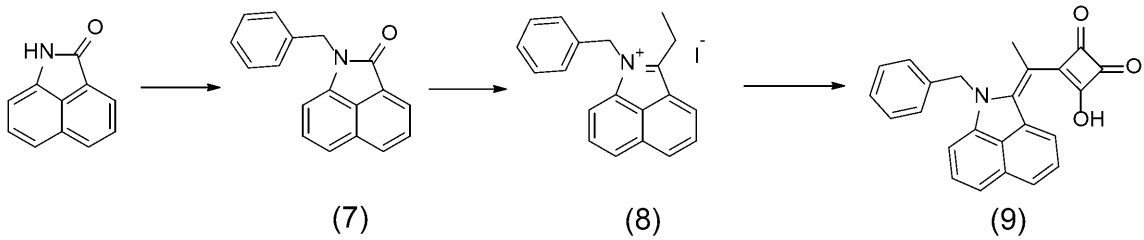
合成例 2 化学式 1 - 2 で表される化合物 (化合物 (10)) の合成
【化 1 - 2】



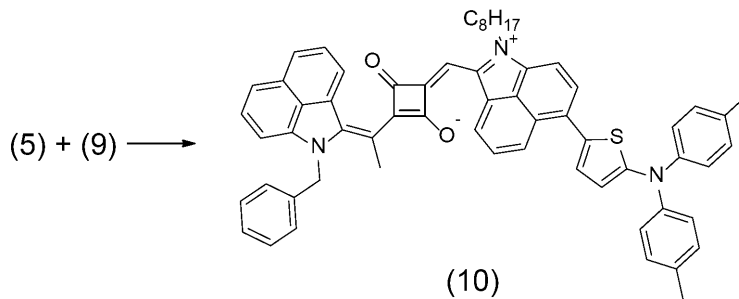
・・・化学式 1 - 2

10

【化 react 1 - 2】



20



30

【0128】

i) 第 1 段階：化合物 (7) の合成

ベンゾ[cd]インドール-2(1H)-オン (benzo[cd]indol-2(1H)-one、1g、5.9mmol) を DMF (24mL) に溶かし、0 で NaH (60% in mineral oil、0.36g、8.9mmol) を徐々に入れて攪拌した。

1 時間後、常温でベンジルブロミド (benzyl bromide、2.0g、11.8mmol) を入れた後、12 時間攪拌した。

反応終了後、EA で抽出した後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーによって分離精製 (EA : n-Hex = 1 : 10 v/v) して、化合物 (7) (1.5g、収率：約 98%) を得た。

40

LC-MS : 260.13 m/z の分子量確認

【0129】

ii) 第 2 段階：化合物 (8) の合成

化合物 (7) (1.5g、5.8mmol) を「dry THF」(10mL) に溶かした溶液にエチルマグネシウムブロミド溶液 (3M in diethyl ether、5.8mL、17.4mmol) を徐々に入れた後、60 で 6 時間攪拌した。

その後、0 で 1N HCl (20mL) を徐々に入れた後、THF を蒸発 (evaporation) させて残った溶液を KI (1.92g、11.6mmol、in 20mL H₂O) 溶液に注いだ。

50

その後、析出物をろ過して化合物(8)(0.9g、収率：約40%)を得た。

LC-MS：272.11m/zの分子量確認

【0130】

iii) 第3段階：化合物(9)の合成

スクアリン酸(0.26g、2.3mmol)、塩化チオニル(1M in MC、4.5mL、4.5mmol)、及びDMF(0.04g、0.6mmol)をトルエン(8mL)に入れて、95で3時間攪拌した。

その後、塩化チオニルを蒸発させた後、常温で化合物(8)(0.3g、0.8mmol)を入れて、1時間攪拌した。

次に、「triethylamine」(0.76g、7.5mmol)、H₂O(0.55g、7.5mmol)、及びacetone(6mL)を入れて、常温で継続攪拌した。

12時間後、H₂O(30mL)を入れて物質を溶かし、溶けない部分はフィルターで除去した。

最後に、2N HCl(10mL)でpH2まで作った後、MCで抽出した。

得られた生成物は、シリカゲルカラムクロマトグラフィーによって分離精製(EA:n-Hex=1:1v/v)して、化合物(9)(0.2g、収率：約72%)を得た。

LC-MS：368.15m/zの分子量確認

【0131】

iv) 第4段階：化学式1-2で表される化合物(化合物(10))の合成

化合物(5)(0.067g、0.1mmol)と化合物(9)(0.038g、0.1mmol)を1-ブタノール(3mL)及びトルエン(3mL)の混合溶媒に溶かし、80で1時間攪拌した。

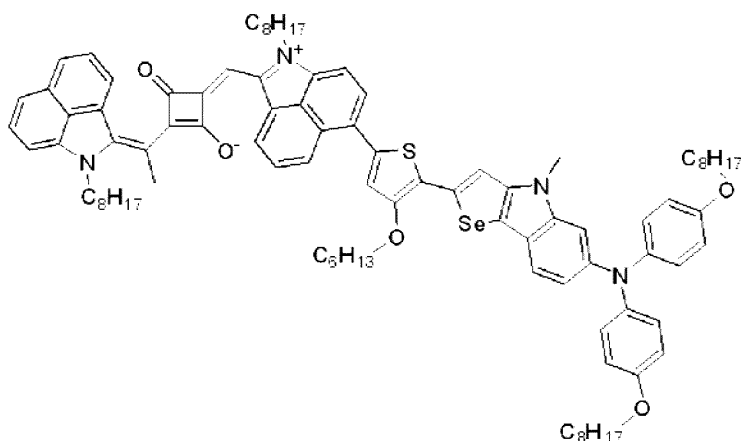
反応終了後、溶媒を除去した後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーによって分離精製(EA:n-Hex=1:2v/v)して、化合物(10)(0.02g、収率：約21%)を得た。

LC-MS：906.58m/zの分子量確認

【0132】

合成例3 化学式1-3で表される化合物(化合物19)の合成

【化1-3】



・・・化学式1-3

10

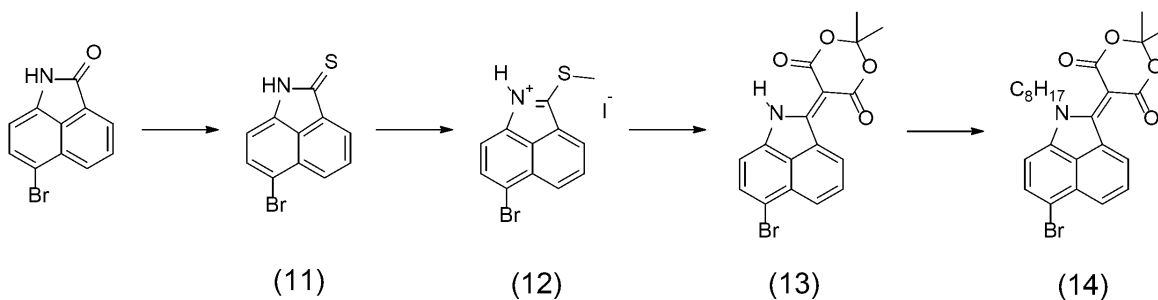
20

30

40

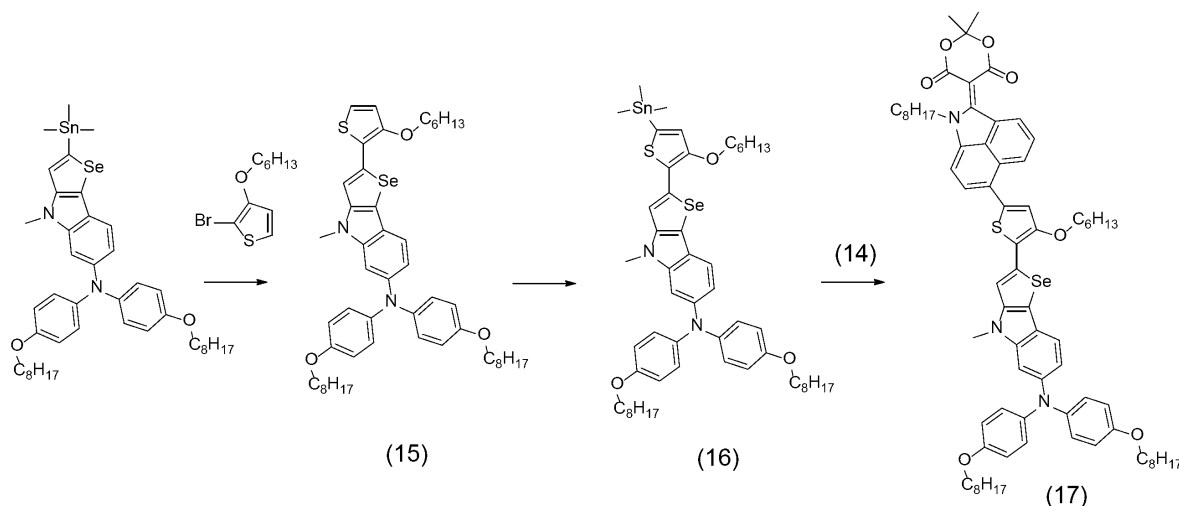
50

【化 r e a c t 1 - 3 a】



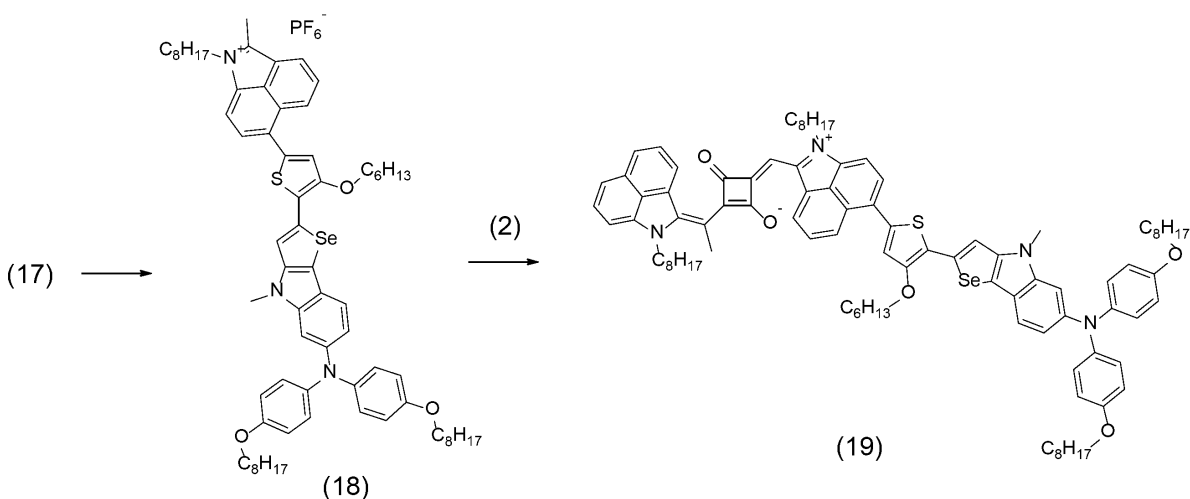
10

【化 r e a c t 1 - 3 b】



20

【化 r e a c t 1 - 3 c】



30

40

【 0 1 3 3】

i) 第1段階：化合物(11)の合成

6-ブロモベンゾ[cd]インドール-2(1H)-オン(6-bromobenzo[cd]indol-2(1H)-one、6.1g、24.7mmol)と「Lawesson reagent」(5.0g、12.4mmol)をトルエン250mLに溶かし、110 で12時間攪拌した。

その後、温度を常温に下げ、トルエンを蒸発(evaporation)させた後、生成物をH₂Oに沈殿させて、化合物(11)(5.3g、収率：約82%)を得た。

50

LC-MS : 263.85 m/z の分子量確認

【0134】

ii) 第2段階：化合物(12)の合成

化合物(11)(2g、7.6mmol)とヨードメタン(iodomethane、1.3g、9.1mmol)を1N NaOH(10mL)、THF(50mL)に溶かし、常温で攪拌した。

1時間後、EAで抽出した後、蒸発させて、化合物(12)(3g、収率：約98%)を得た。

【0135】

iii) 第3段階：化合物(13)の合成

化合物(12)(3g、7.4mmol)、「 Meldrum's acid 」(2g、13.9mmol)、及び酢酸ナトリウム(1.14g、13.9mmol)をエタノール60mLに溶かし、80 で2時間攪拌した。

生成物は常温に下げ、ろ過して直ちに化合物(13)(2.1g、収率：約75%)を得た。

【0136】

iv) 第4段階：化合物(14)の合成

化合物(13)(1.0g、2.7mmol)、「1-bromooctane」(1.0g、5.3mmol)、及び「potassium carbonate」(0.74g、5.3mmol)をDMF(20mL)に溶かし、120 で8時間攪拌した。

生成物はEAで抽出した後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーによって分離精製(EA:chloroform=1:40v/v)して、化合物(14)(0.53g、収率：約41%)を得た。

LC-MS : 488.19 m/z の分子量確認

【0137】

v) 第5段階：化合物(15)の合成

4-メチル-N,N-ビス(4-(オクチルオキシ)フェニル)-2-(トリメチルスタンニル)-4H-セレノフェノ[3,2-b]インドール-6-アミン(4-methyl-N,N-bis(4-(octyloxy)phenyl)-2-(trimethylstannyl)-4H-selenopheno[3,2-b]indol-6-amine、3g、3.7mmol)、2-bromo-3-(hexyloxy)thiophene(1.0g、3.7mmol)、及び「tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0)」(5mol%)を100mLトルエンに溶かし、110 で18時間攪拌した。

反応終了後、トルエンを濃縮させた後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーによって分離精製(EA:n-Hex=1:20v/v)して、化合物(15)(0.9g、収率：約29%)を得た。

LC-MS : 841.41 m/z の分子量確認

【0138】

vi) 第6段階：化合物(16)の合成

化合物(15)(0.9g、1.1mmol)を無水THFに溶かし、-78 で攪拌した。

2.5M「n-BuLi」(in n-Hex、0.5mL、1.3mmol)を徐々に入れて、3時間攪拌後、1M「trimethyltin chloride」(in THF、1.3mL、1.3mmol)を入れて、常温に上げた。

得られた生成物(化合物(16))、1.0g、収率：約93%)をクロロホルムで抽出した後、追加の精製なしで次の反応に使用した。

LC-MS : 1005.31 m/z の分子量確認

【0139】

vii) 第7段階：化合物(17)の合成

10

20

30

40

50

化合物(14)(0.26g、0.54mmol)、化合物(16)(0.54g、0.54mmol)及び「tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0)」(5mol%)を20mLトルエンに溶かし、110 で18時間攪拌した。

反応終了後、トルエンを濃縮させた後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーによって分離精製(EA:chloroform=1:40v/v)して、化合物(17)(0.28g、収率:約42%)を得た。

LC-MS:1248.58m/zの分子量確認

【0140】

viii)第8段階:化合物(18)の合成

化合物(17)(0.1g、0.08mmol)を酢酸(5mL)に溶かし、HCl(0.2mL)を徐々に入れた。

70 で1時間攪拌後、NaPF₆(0.13g、0.8mmol)in H₂O(1mL)を入れると生成物が析出され、これをろ過して化合物(18)(0.09g、収率:約89%)を得た。

LC-MS:1118.54m/zの分子量確認

【0141】

ix)第9段階:化学式1-3で表される化合物(化合物(19))の合成

化合物(2)(0.020g、0.05mmol)と化合物(18)(0.065g、0.05mmol)を1-ブタノール(3mL)及びトルエン(3mL)の混合溶媒に溶かし、80 で1時間攪拌した。

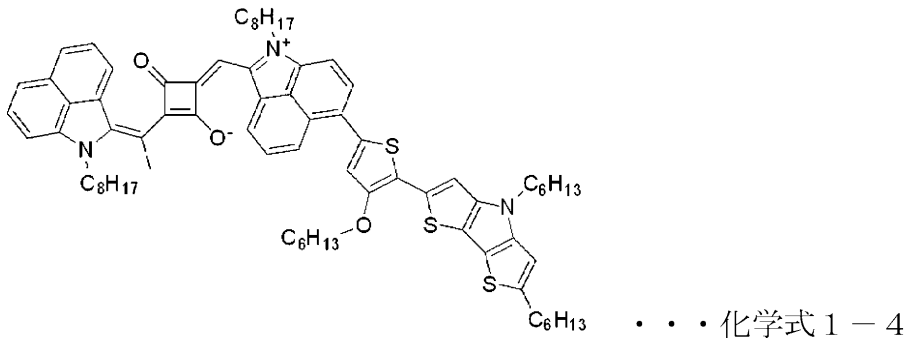
反応終了後、溶媒を除去した後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーによって分離精製(EA:n-Hex=1:2v/v)して、化合物(19)(0.015g、収率:約20%)を得た。

LC-MS:1490.97m/zの分子量確認

【0142】

合成例4 化学式1-4で表される化合物(化合物(22))の合成

【化1-4】



10

20

30

40

50

【 0 1 4 5 】

i i i) 第 3 段階：化学式 1 - 4 で表される化合物（化合物（ 2 2 ））の合成

化合物（ 2 ）（ 0 . 0 3 0 g、 0 . 0 8 m m o l ）と化合物（ 2 1 ）（ 0 . 0 7 2 g、 0 . 0 8 m m o l ）を 1 - ブタノール（ 3 m L ）及びトルエン（ 3 m L ）の混合溶媒に溶かし、 8 0 で 1 時間攪拌した。

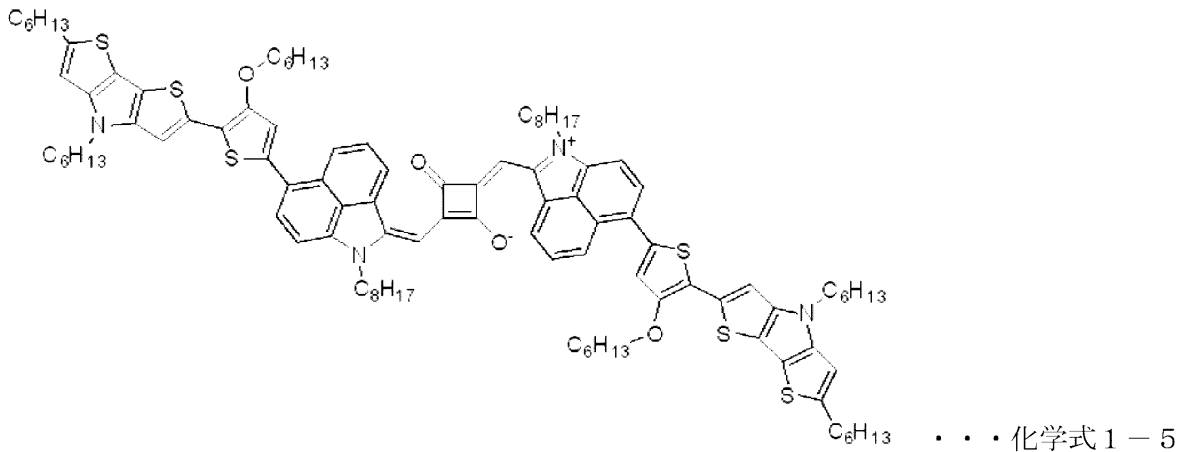
反応終了後、溶媒を除去した後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーによって分離精製（ E A : n - H e x = 1 : 2 v / v ）して、化合物（ 2 2 ）（ 0 . 0 3 g、収率：約 3 3 % ）を得た。

L C - M S : 1 1 7 8 . 4 8 m / z の分子量確認

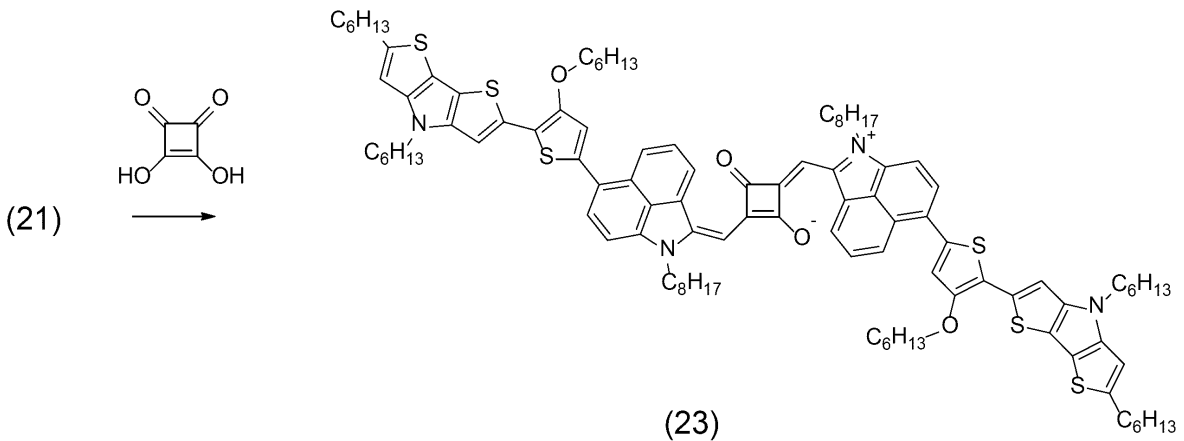
【 0 1 4 6 】

合成例 5 化学式 1 - 5 で表される化合物（化合物（ 2 3 ））の合成

【化 1 - 5】



【化 r e a c t 1 - 5】



【 0 1 4 7 】

i) 第 1 段階：化学式 1 - 5 で表される化合物（化合物（ 2 3 ））の合成

化合物（ 2 1 ）（ 0 . 0 8 0 g、 0 . 0 9 m m o l ）とスクアリン酸（ 0 . 0 0 5 g、 0 . 0 4 m m o l ）を 1 - ブタノール（ 3 m L ）及びトルエン（ 3 m L ）の混合溶媒に溶かし、 1 1 0 で 1 時間攪拌した。

反応終了後、溶媒を除去した後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーによって分離精製（ E A : n - H e x = 1 : 2 v / v ）して、化合物（ 2 3 ）（ 0 . 0 2 g、収率：約 2 8 % ）を得た。

L C - M S : 1 6 9 2 . 9 0 m / z の分子量確認

【 0 1 4 8 】

合成例 6 化学式 1 - 6 で表される化合物（化合物（ 2 5 ））の合成

10

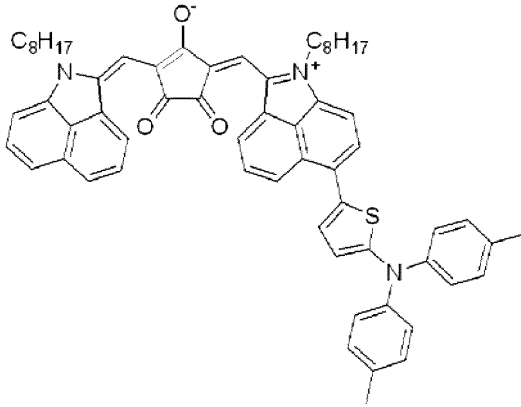
20

30

40

50

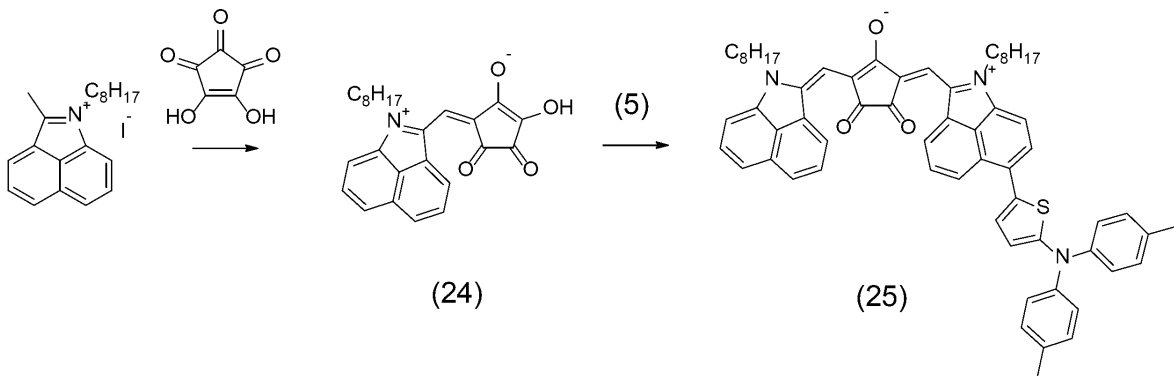
【化 1 - 6】



・・・化学式 1 - 6

10

【化 react 1 - 6】



20

【0149】

i) 第1段階：化合物(24)の合成

2-メチル-1-オクチルベンゾ[cd]インドール-1-リウムヨード(2-methyl-1-octylbenzo[cd]indol-1-ium iodide、0.4g、1.0mmol)とクロコン酸(croconic acid、0.2g、1.4mmol)をアセトン(6mL)とH₂O(6mL)の混合溶媒に溶かし、常温で72時間攪拌した。

30

その後、H₂O(40mL)を入れて、溶ける不純物はフィルターで全て除去した。

残った析出物をシリカゲルカラムクロマトグラフィーによって分離精製(acetone:chloroform=1:1v/v)して、化合物(24)(0.2g、収率：約50%)を得た。

LC-MS：404.20m/zの分子量確認

【0150】

ii) 第2段階：化学式1-6で表される化合物(化合物(25))の合成

40

化合物(5)(0.067g、0.1mmol)と化合物(24)(0.041g、0.1mmol)を1-ブタノール(3mL)及びトルエン(3mL)の混合溶媒に溶かし、110℃で1時間攪拌した。

反応終了後、溶媒を除去した後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーによって分離精製(EA:n-Hex=1:2v/v)して、化合物(25)(0.02g、収率：約21%)を得た。

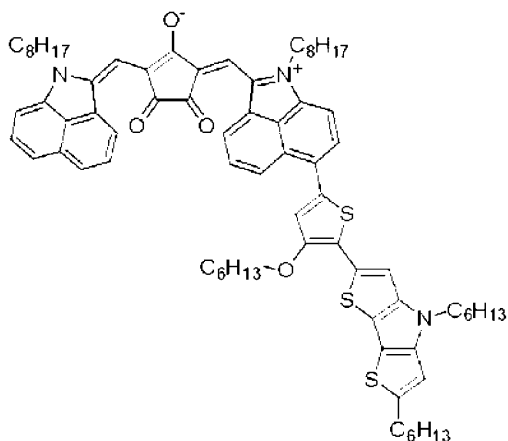
LC-MS：942.68m/zの分子量確認

【0151】

合成例7 化学式1-7で表される化合物(化合物(26))の合成

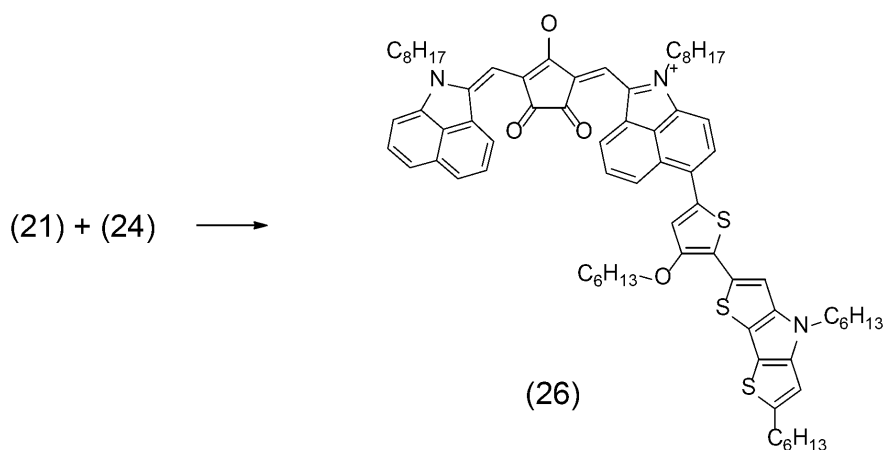
50

【化 1 - 7】



10

【化 react 1 - 7】



20

【 0 1 5 2】

i) 第 1 段階：化学式 1 - 7 で表される化合物（化合物（26））の合成

30

化合物（21）（0.070 g、0.07 mmol）と化合物（24）（0.030 g、0.07 mmol）を 1 - ブタノール（3 mL）及びトルエン（3 mL）の混合溶媒に溶かし、110 で 1 時間攪拌した。

反応終了後、溶媒を除去した後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーによって分離精製（EA : n - Hex = 1 : 2 v / v）して、化合物（26）（0.015 g、収率：約 17%）を得た。

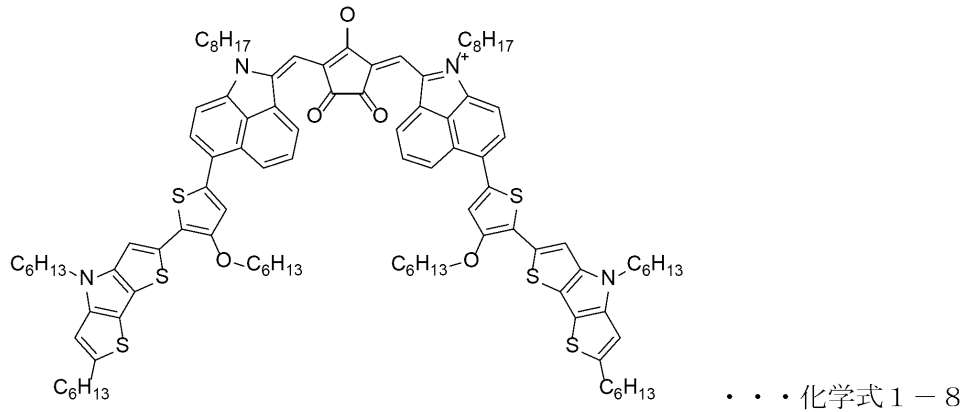
LC - MS : 1192 . 44 m / z の分子量確認

【 0 1 5 3】

合成例 8 化学式 1 - 8 で表される化合物（化合物（27））の合成

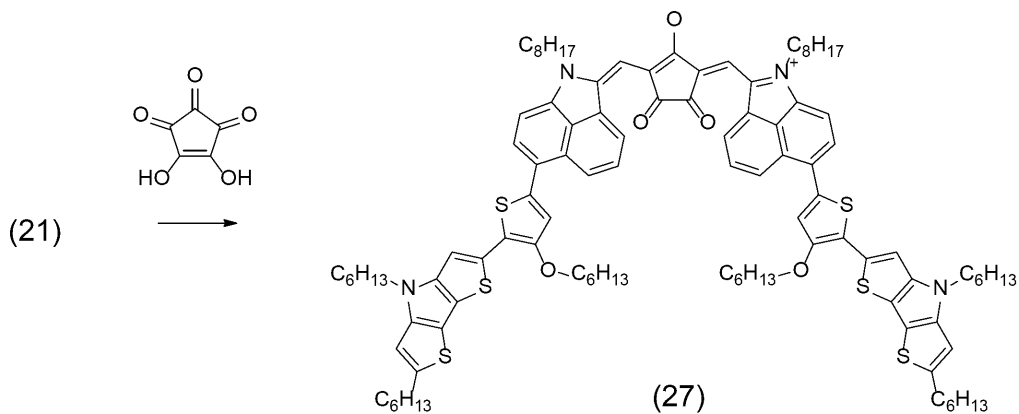
40

【化 1 - 8】



10

【化 react 1 - 8】



20

【 0 1 5 4】

i) 第 1 段階：化学式 1 - 8 で表される化合物（化合物（27））の合成

化合物（21）（0.080 g、0.09 mmol）とクロコン酸（0.006 g、0.04 mmol）を 1 - ブタノール（3 mL）及びトルエン（3 mL）の混合溶媒に溶かし、110 で 1 時間攪拌した。

30

反応終了後、溶媒を除去した後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーによって分離精製（EA : n - Hex = 1 : 2 v / v）して、化合物（27）（0.02 g、収率：約 27%）を得た。

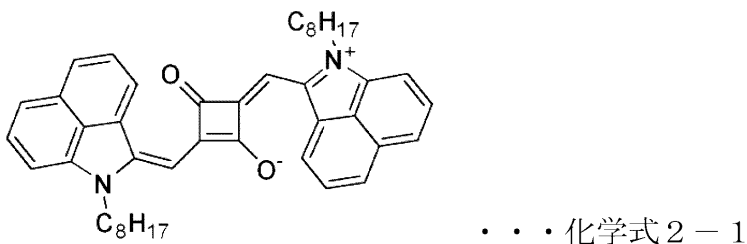
LC - MS : 1721.76 m / z の分子量確認

【 0 1 5 5】

比較合成例 1 化学式 2 - 1 で表される化合物の合成

文献「ACS Appl. Mater. Interfaces」10, 11063 (2018) の方法で合成した。

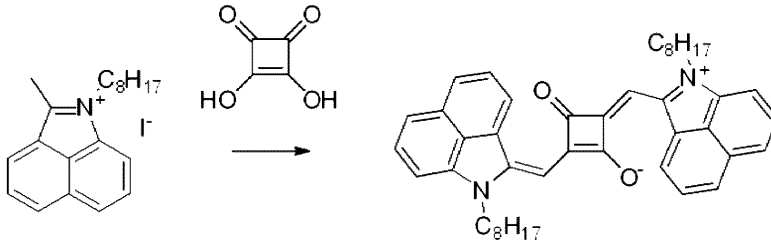
【化 2 - 1】



40

50

【化 react 2 - 1】

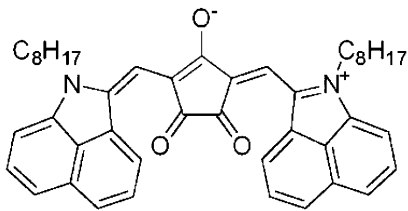


【0156】

10

比較合成例 2 化学式 2 - 2 で表される化合物の合成

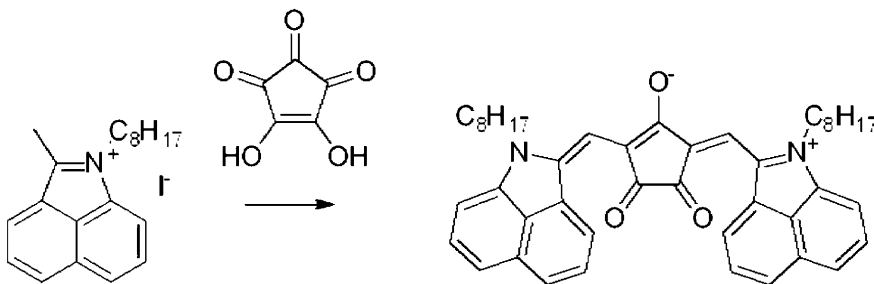
【化 2 - 2】



・・・化学式 2 - 2

20

【化 react 2 - 2】



30

【0157】

2 - メチル - 1 - オクチルベンゾ [c d] インドール - 1 - リウムヨージド (0 . 4 g 、 1 . 0 m m o l) とクロコン酸 (0 . 0 5 6 g 、 0 . 4 m m o l) をアセトン (6 m L) と H₂O (6 m L) に溶かし、常温で 7 2 時間攪拌した。

その後、H₂O (4 0 m L) を入れて、溶ける不純物はフィルターで全て除去した。

残った析出物をシリカゲルカラムクロマトグラフィーによって分離精製 (a c e t o n e : c h l o r o f o r m = 1 : 4 v / v) して、化学式 2 - 2 で表される化合物 (0 . 1 3 g 、 収率 : 約 5 0 %) を得た。

L C - M S : 6 6 5 . 2 6 m / z の分子量確認

【0158】

40

<<評価 I>> 吸光特性

合成例 1 ~ 合成例 8 及び比較合成例 1 で得られた化合物をジクロロメタンに 1×10^{-5} M の濃度に溶かして溶液を準備し、上記化合物の溶液状態での吸光特性を評価した。

その結果を下記の表 1 に示す。

吸光特性は、Shimadzu 社製の「UV - 3 6 0 0 Plus UV - Vis - N I R」分光装置 (UV - Vis - N I R s p e c t r o m e t e r) を用いて最大吸収波長 λ_{max} を測定した。

【0159】

また、ガラス基板上に上記合成例 1 ~ 合成例 8 及び比較合成例 1 で得られた化合物を、それぞれスピンコート方式でコーティングして薄膜状態での吸光特性を評価した。

50

吸光特性は、Shimadzu社製の「UV-3600 Plus UV-Vis-NIR」分光装置（UV-Vis-NIR spectrometer）を用いて最大吸収波長 λ_{\max} を測定した。

その結果を下記の表 1 に示す。

【0160】

【表 1】

	λ_{\max} (nm) (溶液)	λ_{\max} (nm) (薄膜)
合成例 1	972	1060
合成例 2	972	1060
合成例 3	974	1060
合成例 4	986	1065
合成例 5	1013	1100
合成例 6	1081	1200
合成例 7	1112	1210
合成例 8	1182	1350
比較合成例 1	884	960

10

20

30

【0161】

表 1 を参照すると、合成例 1 ~ 合成例 8 による化合物は、比較合成例 1 による化合物に比べて赤外線波長領域で良好な波長吸水性を示すことが分かった。

【0162】

<<評価 I I>> エネルギー準位及びバンドギャップ

「M. J. Frisch, et al., Gaussian 09, Revision D. 01; Gaussian, Inc.: Wallingford, CT (2009)」に記載された「B3LYP/6-31 G(d) level」理論で上記薄膜の HOMO エネルギー準位、LUMO エネルギー準位、及びバンドギャップを計算した。

その結果を下記の表 2 に示す。

【0163】

40

50

【表 2】

	HOMO (eV)	LUMO (eV)	バンドギャップ エネルギー (eV)
合成例 1	-4.60	-3.20	1.40
合成例 2	-4.60	-3.20	1.40
合成例 3	-4.41	-3.26	1.15
合成例 4	-4.52	-3.24	1.29
合成例 5	-4.52	-3.29	1.23
合成例 6	-4.66	-3.48	1.18
合成例 7	-4.61	-3.54	1.08
合成例 8	-4.52	-3.53	0.99
比較合成例 1	-4.80	-3.26	1.54

10

20

30

【0164】

表 2 を参照すると、合成例 1 ~ 合成例 8 の化合物は、比較合成例 1 の化合物に比べてバンドギャップエネルギーが小さいことが分かり、よって、赤外線波長領域の光を効果的に吸収することができることが分かる。

【0165】

実施例及び比較例 光電素子の製作

ガラス基板上にITOをスパッタリングで積層してアノードを形成した。

次いで、アノード上にPEDOT (poly(3,4-ethylenedioxythiophene)) をスピコート方式でコーティングして45nm厚さの正孔輸送層を形成した。

40

合成例 1 ~ 合成例 8 及び比較合成例 1 及び比較合成例 2 で得られたそれぞれの化合物をPC70BMと2.5:7.5の質量比でクロロホルムに溶かした溶液を正孔輸送層上にスピコートして光活性層(光電変換層)を形成した。

次いで、光活性層上にC₆₀を蒸着して30nm厚さの補助層を形成した。

次いで、補助層上にITOをスパッタリングしてカソードを形成した。

次いで、ガラス板で封止した後、120、140 で順次アニーリングを30分間施して、実施例 1 ~ 実施例 8 及び比較合成例 1 及び比較合成例 2 による光電素子を製作した。

【0166】

<<評価III>> 光電変換効率

実施例 1 ~ 実施例 8 及び比較例 1 及び比較例 2 による光電素子の光電変換効率 (EQE

50

)を評価した。

光電変換効率は、「IPCE measurement system」(TNE tech社製、韓国)装置を用いて測定した。

まず、Siフォトダイオード(Hamamatsu社製)を用いて装置を補正(calibration)した後、光電素子を装置に装着し、波長範囲約400nm~約1600nmの領域で測定した。

その中で、実施例1、実施例6、及び比較例1の光電素子の光電変換効率(EQE)を図13に示す。

図13は、実施例1、実施例6及び比較例1の光電素子の光電変換効率を測定した結果を示すグラフである。

【0167】

図13を参照すると、実施例1及び実施例6による光電素子が、比較例1による光電素子に比べて約1000nmの長波長領域で優れた光電変換効率を示すことを確認することができた。

【0168】

尚、本発明は、上述の実施形態に限られるものではない。本発明の技術的範囲から逸脱しない範囲内で多様に変更実施することが可能である。

【符号の説明】

【0169】

10、10B、10G、10R、10IR	第1電極	20
20、20B、20G、20R、20IR	第2電極	
30、30B、30G、30R、30IR	光活性層	
40、45	電荷補助層	
50a、50b、50c	光感知素子	
55	電荷貯蔵所	
55B	青色光電荷貯蔵所	
55G	緑色光電荷貯蔵所	
55R	赤色光電荷貯蔵所	
55IR	赤外光電荷貯蔵所	
65	下部絶縁層	30
70、70a、70b、70c	色フィルター(層)	
80	上部絶縁層	
85	トレンチ	
90	上部絶縁層	
95	デュアルバンドパスフィルター	
100、100'	光電素子	
100A	第1赤外光センサー	
110	半導体基板	
100B	青色光感知素子	
100G	緑色光感知素子	40
100R	赤色光感知素子	
100IR	赤外光感知素子	
120	第2赤外光センサー	
300、400、500、600、700	イメージセンサー	
1000	デジタルカメラ	
1010	レンズ	
1020	イメージセンサー	
1030	モータ	
1040	エンジン	
1050	ホスト/アプリケーション	50

10

20

30

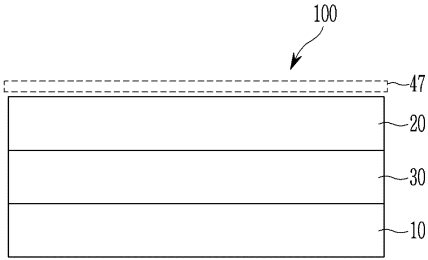
40

50

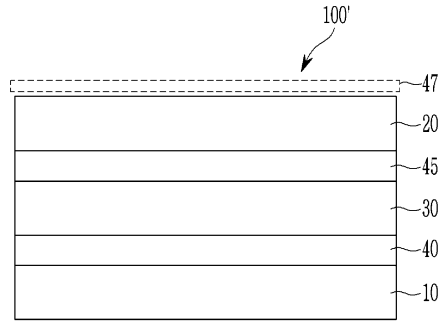
- 1 1 0 0 電子装置
- 1 1 1 0 バス
- 1 1 2 0 プロセッサ
- 1 1 3 0 メモリ
- 1 1 4 0 イメージセンサー

【図面】

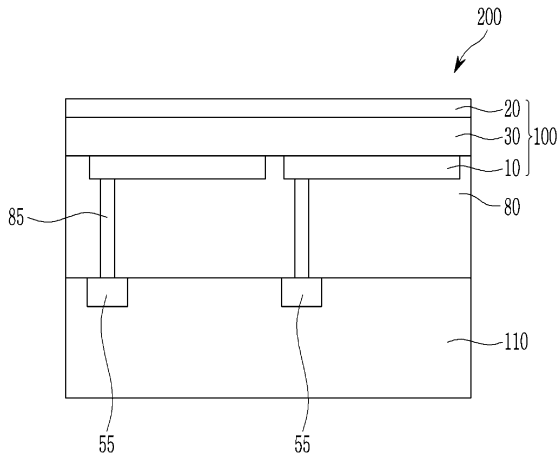
【図 1】



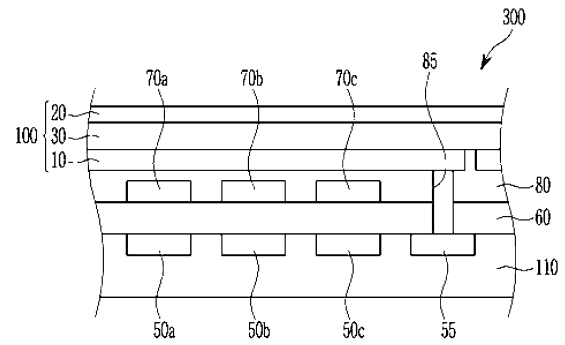
【図 2】



【図 3】



【図 4】



10

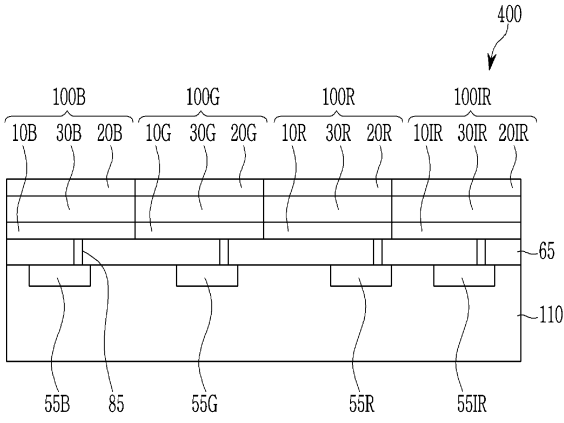
20

30

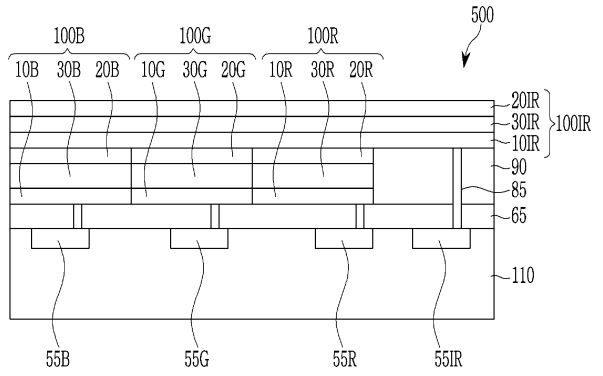
40

50

【 図 5 】

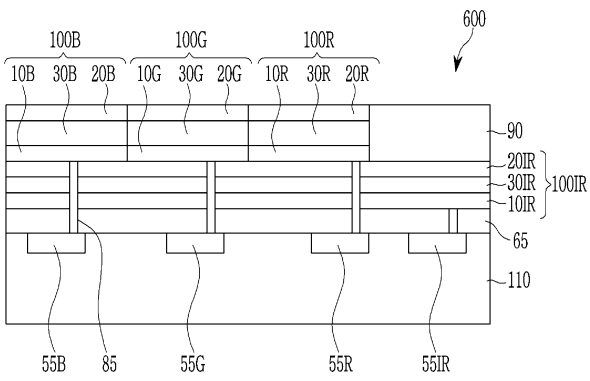


【 図 6 】

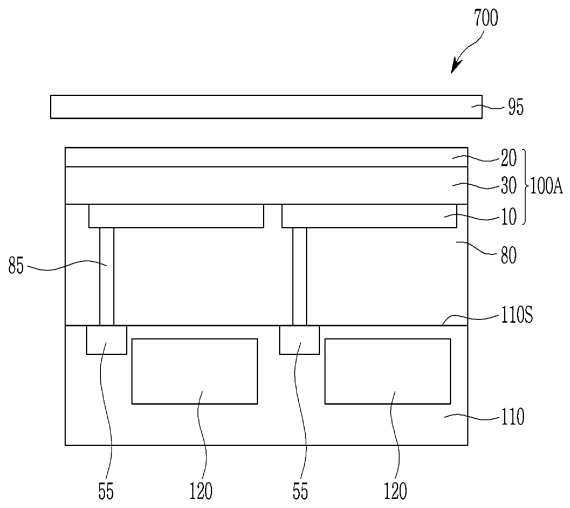


10

【 図 7 】



【 図 8 】



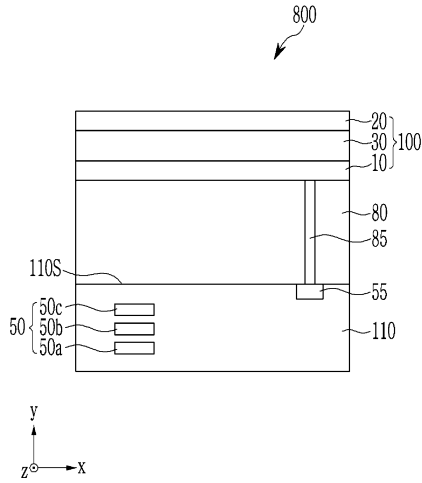
20

30

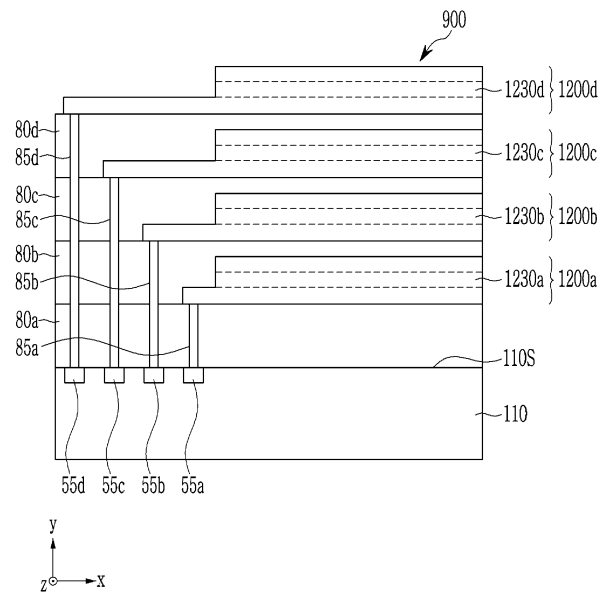
40

50

【 図 9 】

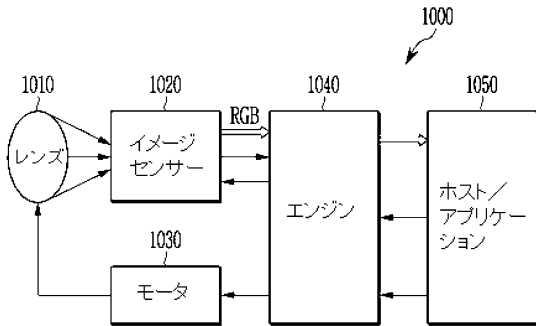


【 図 10 】

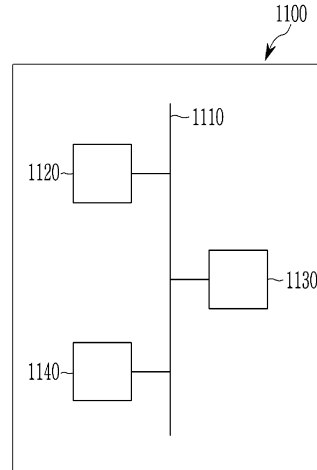


10

【 図 11 】



【 図 12 】



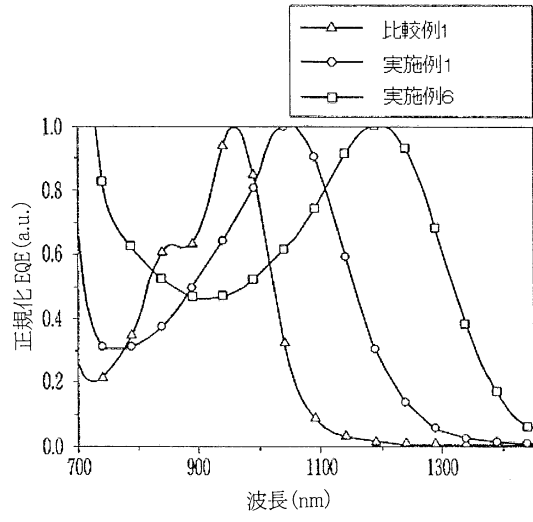
20

30

40

50

【 図 1 3 】



10

20

30

40

50

フロントページの続き

(51)国際特許分類

F I

<i>H 1 0 F</i>	<i>39/10 (2025.01)</i>	<i>H 1 0 F</i>	<i>39/10</i>	<i>K</i>
<i>H 1 0 F</i>	<i>39/18 (2025.01)</i>	<i>H 1 0 F</i>	<i>39/18</i>	<i>E</i>
<i>H 1 0 K</i>	<i>30/30 (2023.01)</i>	<i>H 1 0 K</i>	<i>30/30</i>	
<i>H 1 0 K</i>	<i>39/32 (2023.01)</i>	<i>H 1 0 K</i>	<i>39/32</i>	
<i>H 1 0 K</i>	<i>85/60 (2023.01)</i>	<i>H 1 0 K</i>	<i>85/60</i>	

(72)発明者 金 暢 基

大韓民国 京畿道 水原市 靈通区 新院路 6 6 , 5 0 1 号

(72)発明者 崔 惠 成

大韓民国 ソウル特別市 道峰区 道峰路 1 3 6 ギル 2 8 , 5 0 8 棟 1 6 0 4 号

(72)発明者 金 煌 スク

大韓民国 京畿道 水原市 長安区 長安路 3 9 5 , 1 0 5 棟 1 5 0 1 号

(72)発明者 朴 仁 仙

大韓民国 京畿道 水原市 勸善区 東水原路 1 4 5 番ギル 2 3 , 4 1 3 棟 1 3 0 4 号

(72)発明者 林 東 ソク

大韓民国 京畿道 城南市 盆唐区 西板橋路 2 9

審査官 佐竹 政彦

(56)参考文献

特開 2 0 2 1 - 1 9 5 5 1 5 (J P , A)

特開 2 0 2 0 - 0 8 3 8 6 6 (J P , A)

国際公開第 2 0 2 0 / 0 5 4 7 1 9 (W O , A 1)

国際公開第 2 0 1 6 / 0 2 5 6 2 0 (W O , A 1)

特開昭 6 2 - 2 3 0 8 5 7 (J P , A)

(58)調査した分野 (Int.Cl. , D B 名)

H 1 0 K 1 0 / 0 0 - 9 9 / 0 0

C A p l u s / R E G I S T R Y (S T N)