202502772

(19)中華民國智慧財產局

(12)發明說明書公開本 (11)公開編號：TW 202502772 A

(43)公開日： 中華民國 114 (2025) 年 01 月 16 日

(21)申請案號：113125889 (22)申請日： 中華民國 113 (2024) 年 07 月 10 日

(51)Int. Cl.： *C07D487/04 (2006.01)* *C07D491/04 (2006.01)*
C07D495/04 (2006.01) *H01L27/146 (2006.01)*
H10K85/10 (2023.01) *H10K39/32 (2023.01)*

(30)優先權：2023/07/14 日本 2023-116154

(71)申請人：日商日鐵化學材料股份有限公司 (日本) NIPPON STEEL CHEMICAL & MATERIAL CO., LTD. (JP)
日本

(72)發明人：林健太郎 HAYASHI, KENTARO (JP) ；井上棟智 INOUE, MUNETOMO (JP) ；吉田和成 YOSHIDA, KAZUNARI (JP) ；成田昌弘 NARITA, MASAHIRO (JP)

(74)代理人：卓俊傑；鮑亞嵐；卓孟儀

申請實體審查：無 申請專利範圍項數：17 項 圖式數：1 共 116 頁

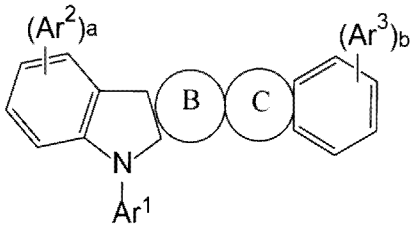
(54)名稱

包含光電轉換元件用材料的光電轉換元件及攝像用的光電轉換元件

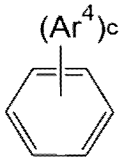
(57)摘要

本發明提供一種達成攝像用的光電轉換元件的高感度、高解析度化的材料、以及使用其的攝像用的光電轉換元件。一種包含光電轉換元件用材料的光電轉換元件，具體而言，其特徵在於，包含下述通式（1）所表示的化合物。

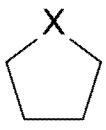
[化 1]



（1）



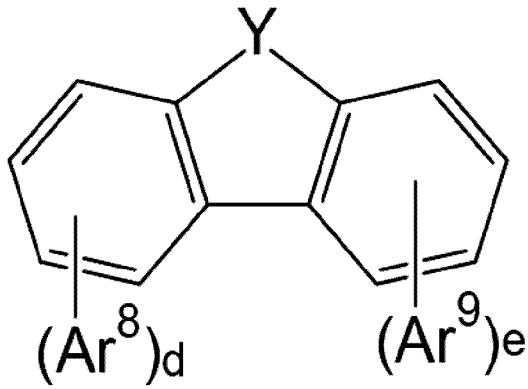
（1B）



（1C）

環 B 由式（1B）表示，環 C 由式（1C）表示，X 由 N-Ar^5 等表示，Ar^1 ～ Ar^7 由碳數 6 ～ 18 的芳香族烴基等表示。其中，Ar^1 ～ Ar^5 中的至少一個包含一個以上的下述通式（2）所表示的結構，並且包含一個以上的下述通式（3）所表示的結構。a、b、c 表示取代數。

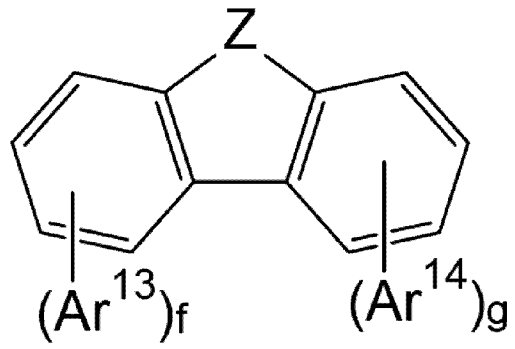
[化 2]



（2）

Y 由 O 等表示，Ar [8] ～ Ar [12] 由碳數 6 ～ 18 的芳香族烴基等表示，d、e 表示取代數。

[化 3]



（3）

Z 由 O 等表示，Ar [13] ～ Ar [16] 由碳數 6 ～ 18 的芳香族烴基等表示。f、g 表示取代數。

指定代表圖：

TW 202502772 A

符號簡單說明：

1:電極

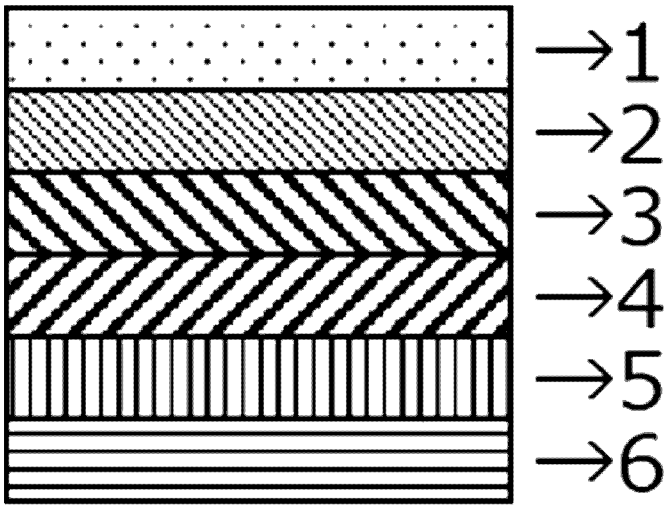
2:電洞阻擋層

3:光電轉換層

4:電子阻擋層

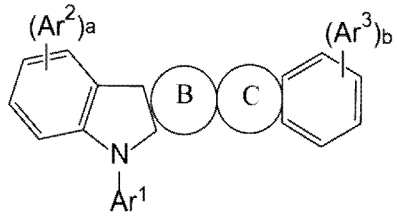
5:電極

6:基板

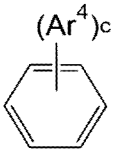


【圖1】

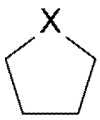
特徵化學式：



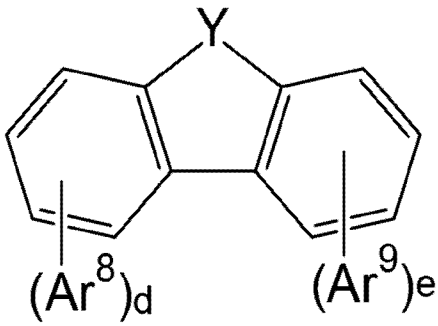
（1）



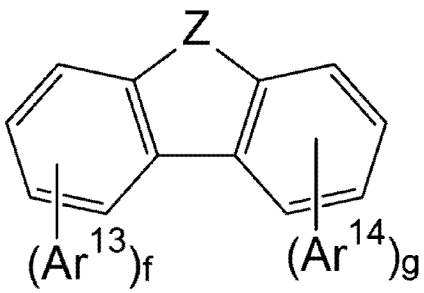
（1B）



（1C）



（2）



（3）

2025.05.27 專利申請案：113125889
2025.05.27

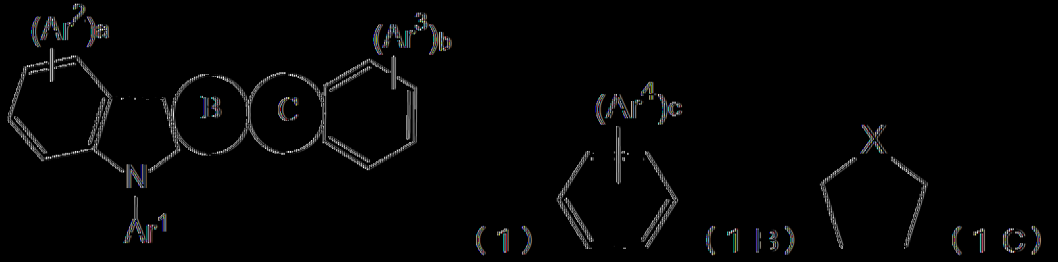
[(發明摘要)]

[(中文發明名稱)] 光電轉換元件用材料及使用其的光電轉換元件

[(中文)]

本發明提供一種達成攝像用的光電轉換元件的高感度、高解析度化的材料、以及使用其的攝像用的光電轉換元件。一種包含光電轉換元件用材料的光電轉換元件，具體而言，其特徵在於，包含下述通式（1）所表示的化合物。

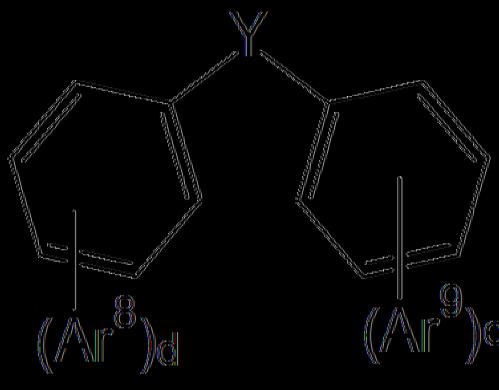
[化 1]



（1）　（1B）　（1C）

環 B 由式（1B）表示，環 C 由式（1C）表示，X 由 $N\text{-}Ar^5$ 等表示，Ar^1～Ar^7 由碳數 6～18 的芳香族烴基等表示。其中，Ar^1～Ar^5 中的至少一個包含一個以上的下述通式(2)所表示的結構，並且包含一個以上的下述通式（3）所表示的結構。a、b、c 表示取代數。

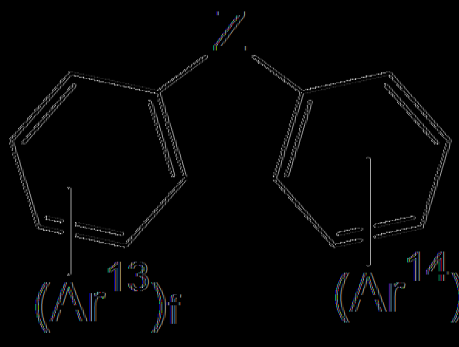
[化 2]



（2）

Y 係由 O 等表示，Ar^8～Ar^{12} 係碳數 6～18 的芳香族烴基等表示，d、e 表示取代數。

[化 3]



（3）

Z 係由 O 等表示，Ar^{13}～Ar^{16} 係碳數 6～18 的芳香族烴基等表示。f、g 表示取代數。

【指定代表圖】圖 1。

【代表圖之符號簡單說明】

1:電極

2:電洞阻擋層

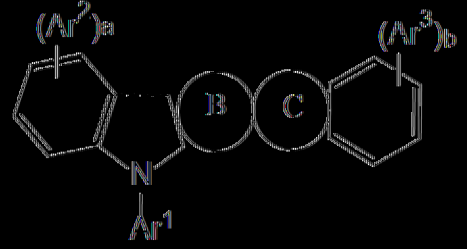
3:光電轉換層

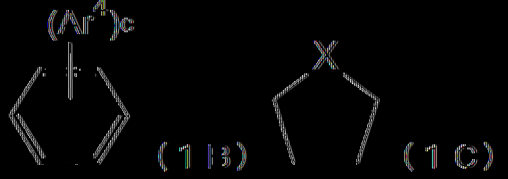
4:電子阻擋層

5:電極

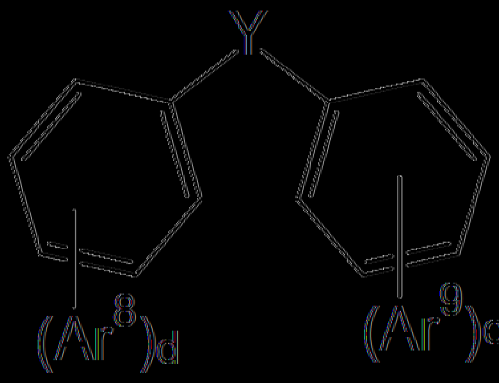
6:基板

|(特徵化學式)|

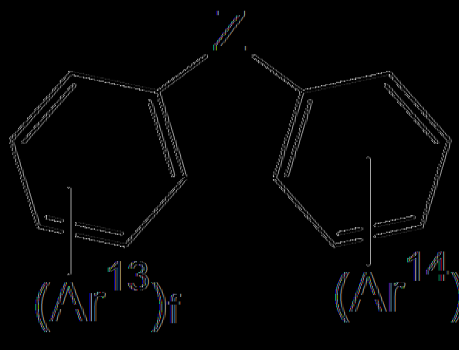




(1) (1B) (1C)



(2)



(3)

【發明說明書】

【中文發明名稱】光電轉換元件用材料及使用其的光電轉換元件

【技術領域】

【0001】 本發明是有關於一種光電轉換元件用材料及使用其的光電轉換元件，特別是有關於一種有效用於攝像設備中的光電轉換元件。

【先前技術】

【0002】 近年來，正推進使用由有機半導體形成的薄膜的有機電子設備的開發。例如，可例示電場發光元件、太陽電池、電晶體元件、光電轉換元件等。特別是，該些中，作為基於有機物的電場發光元件的有機電致發光（electroluminescence，EL）元件的開發最先進，於推進在智慧型手機或電視機（television，TV）等中的應用的同時，繼續進行以更高功能化為目標的開發。

【0003】 其中，於攝像用的光電轉換元件中，先前，使用矽等無機半導體的 P-N 結的元件的開發/實用化得以推進，正進行數位相機、智慧型手機用相機的高功能化研究、於監視用相機、汽車用感測器等中的應用的研究，作為用以應對該些各種用途的課題，列舉有高感度化、畫素微細化（高解析度化）。於使用無機半導體的光電轉換元件中，為了獲得彩色圖像，主要採用在光電轉換元件的受光部上配置與作為光的三原色的紅綠藍（red green blue，RGB）對應的彩色濾光片的方式。於所述方式中，由於將 RGB 的

彩色濾光片配置於平面上，因此於入射光的利用效率或解析度方面存在課題（非專利文獻 1、非專利文獻 2）。

【0004】 作為此種攝像用的光電轉換元件的課題的解決方案之一，正進行代替無機半導體而使用有機半導體的光電轉換元件的開發（非專利文獻 1、非專利文獻 2）。其是利用了有機半導體所具有的可選擇性地以高感度僅吸收特定波長區域的光的性質，提出了藉由將利用與光的三原色對應的有機半導體而得的光電轉換元件進行積層來解決高感度化、高解析度化的課題。另外，亦提出了將包含有機半導體的光電轉換元件與包含無機半導體的光電轉換元件積層而得的元件（非專利文獻 3）。

【0005】 此處，藉由有機半導體的光電轉換元件是藉由如下方式而構成的元件、即、於兩片電極之間具有包含有機半導體的薄膜的光電轉換層，視需要於光電轉換層與兩片電極之間配置電洞阻擋層及/或電子阻擋層。於光電轉換元件中，藉由利用光電轉換層吸收具有所期望的波長的光來生成激子，接下來藉由激子的電荷分離而產生電洞以及電子。其後，藉由電洞以及電子遷移至各電極，將光轉換為電訊號。以促進所述過程為目的，一般使用在兩電極之間施加偏置電壓的方法，但減少因施加偏置電壓而產生的來自兩電極的漏電流成為課題之一。就此種情況而言，可以說控制光電轉換元件內的電洞或電子的遷移是光電轉換元件的特性顯現的關鍵。

【0006】 光電轉換元件的各層中使用的有機半導體可大致分為 P

型有機半導體以及 N 型有機半導體，P 型有機半導體用作電洞傳輸性材料，N 型有機半導體用作電子傳輸性材料。為了控制光電轉換元件內的電洞以及電子的遷移，進行了各種具有適當物性、例如電洞遷移率、電子遷移率、最高佔據分子軌域（highest occupied molecular orbital，HOMO）的能量值、最低未佔用分子軌域（lowest unoccupied molecular orbital，LUMO）的能量值的有機半導體的開發，但為尚不能說具有充分特性的狀況。

【0007】 另外，揭示了各種作為有機電致發光元件、有機太陽能電池的電洞傳輸材料或電子阻止材料而優異的化合物，但該些作為攝像用的電洞傳輸材料或電子阻止材料未必優異。具體而言，作為攝像用的光電轉換元件的電洞傳輸材料所要求的重要特性之一，例如為了使照相機於暗處進行鮮明的攝像，重要的是增大關閉快門的狀態下的電流值與打開快門的狀態下的電流值之差（明暗比），因此暗處的電流值越低越較佳，明處的電流值越高越較佳。即，「明暗比高」的情況變得重要。另一方面，於有機電致發光元件中，使一定電流流動而所需的電壓、發光效率、元件壽命等是成為改善對象的特性，所謀求的特性與攝像用的光電轉換元件大不相同。另外，關於有機太陽能電池，重要的是於暗處/明處此兩者中產生電流量多，所要求的特性與較佳為暗處的電流值低的攝像用的光電轉換元件不同。如以上所述，於有機電致發光元件或有機太陽能電池的電洞傳輸材料或電子阻止材料、及攝像用的光電轉換元件的電洞傳輸材料或電子阻止材料中，所需的特性不同，

因此作為有機電致發光元件或有機太陽能電池的電洞傳輸材料或電子阻止材料而優異的材料作為攝像用光電轉換元件的電洞傳輸材料或電子阻止材料是否優異的情況於藉由實驗進行確認之前尚不明確。

【0008】 於專利文獻 1 中，提出了一種於光電轉換層中使用喹吖啶酮作為 P 型有機半導體，使用亞酞菁氯化物（subphthalocyanine chloride）作為 N 型有機半導體，於配置於光電轉換層與電極之間的第一緩衝層中使用吲哚並咔唑衍生物的元件。

【0009】 於專利文獻 2 中，提出了一種於配置於光電轉換層與電極之間的電子阻擋層中使用咔唑衍生物的元件。

【0010】 於專利文獻 3、專利文獻 4 中，提出了一種於電子阻擋層中使用吲哚並咔唑衍生物的光電轉換元件。

【0011】 於專利文獻 5、專利文獻 6 中，提出了一種使用吲哚並咔唑衍生物作為發光層材料的有機 EL 元件。

[現有技術文獻]

[專利文獻]

【0012】 [專利文獻 1]日本專利特開 2018-85427 號公報

[專利文獻 2]日本專利特開 2011-228614 號公報

[專利文獻 3]WO2022114065

[專利文獻 4]WO2022114067

[專利文獻 5]WO2013088973

[專利文獻 6]US20170358756

[非專利文獻]

【0013】 [非專利文獻 1]NHK 技研 R&D No.132,pp.4-11（2012.3）

[非專利文獻 2]NHK 技研 R&D No.174,pp.4-17（2019.3）

[非專利文獻 3]2019 電氣及電子工程師學會（Institute of Electrical and Electronics Engineers，IEEE）國際電子設備會議（International Electron Devices Meeting，IEDM），pp.16.6.1-16.6.4（2019）

【發明內容】

【0014】 [發明所欲解決之課題]

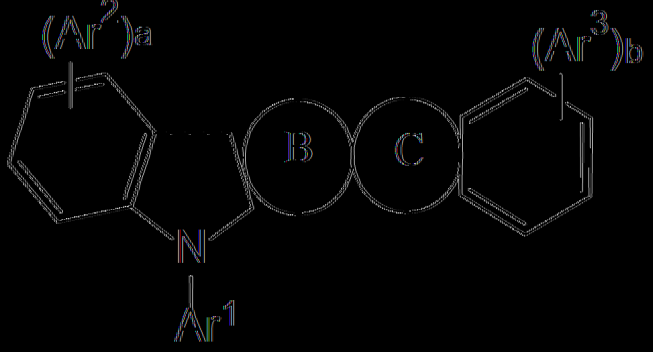
對於攝像用的光電轉換元件，為了推進數位相機、智慧型手機用相機的高功能化、或於監視用相機、汽車用感測器等中的應用，而用於達成更高感度化、高解析度化的有機化成為關鍵。為了提高圖像的對比度而需要兼具暗電流值低與明電流值高的、顯示出高明暗比的材料。本發明鑒於此種現狀，其目的在於提供一種達成攝像用的光電轉換元件的高感度化、高解析度化的材料及使用其的攝像用的光電轉換元件。

[解決課題之手段]

【0015】 本發明者等人進行了努力研究，結果發現：藉由使用本發明的化合物，可控制光電轉換元件內的電洞、電子的行為，實現顯示出高明暗比的光電轉換元件，從而完成了本發明。

【0016】 本發明為一種包含光電轉換元件用材料的光電轉換元件，其特徵在於，包含下述通式（1）所表示的化合物。

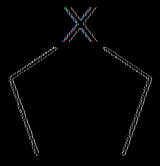
[化 1]



（1）



（1B）

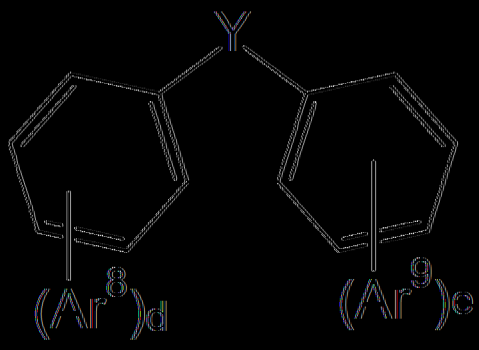


（1C）

於通式（1）中，環 B 與鄰接環於任意位置進行縮合，且表示式（1B）所表示的六元環。環 C 與鄰接環於任意位置進行縮合，且表示式（1C）所表示的五元環。X 由 N-Ar^5、O、S、C-Ar^{6}Ar^7 中的任一者表示。Ar^1～Ar^7 分別獨立地表示氫、鹵素、碳數 1～20 的烷基、經取代或未經取代的碳數 12～36 的芳香族胺基、經取代或未經取代的碳數 6～18 的芳香族烴基、經取代或未經取代的碳數 3～18 的芳香族雜環基、或者將該些芳香族基的兩個～十個連結而成的經取代或未經取代的連結芳香族基。其中，Ar^1～Ar^5 中

的至少一個包含一個以上的下述通式（2）所表示的結構，並且包含一個以上的下述通式（3）所表示的結構。a、b、c表示取代數，a、b分別獨立地表示0～4的整數，c表示0～2的整數。

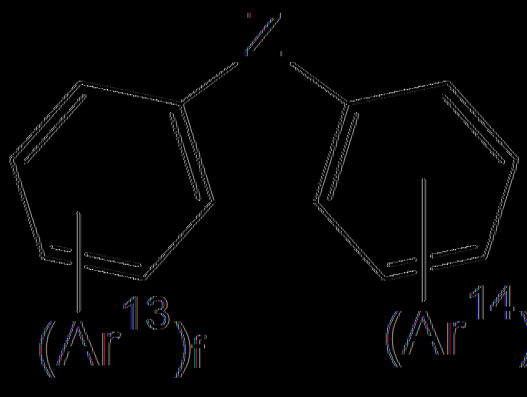
[化2]



（2）

於通式（2）中，Y獨立地由N-Ar^{10}、O、S、C-Ar^{11}Ar^{12}中的任一者表示。Ar^{8}～Ar^{12}分別獨立地表示氘、鹵素、碳數1～20的烷基、經取代或未經取代的碳數12～36的芳香族胺基、經取代或未經取代的碳數6～18的芳香族烴基、經取代或未經取代的碳數3～18的芳香族雜環基、或者將該些芳香族基的兩個～四個連結而成的經取代或未經取代的連結芳香族基。d、e表示取代數，且分別獨立地表示0～4的整數。

[化3]



（3）

於通式（3）中，Z獨立地由 O、S、C-Ar[15]Ar[16] 中的任一者表示。Ar[13]～Ar[16] 分別獨立地表示氫、鹵素、碳數 1～20 的烷基、經取代或未經取代的碳數 12～36 的芳香族胺基、經取代或未經取代的碳數 6～18 的芳香族烴基、經取代或未經取代的碳數 3～18 的芳香族雜環基、或者將該些芳香族基的兩個～四個連結而成的經取代或未經取代的連結芳香族基。f、g 表示取代數，且分別獨立地表示 0～4 的整數。

[0017] 所述通式（1）所表示的光電轉換元件用材料較佳為攝像用的光電轉換元件用材料，所述光電轉換元件較佳為攝像用的光電轉換元件。

[0018] 所述通式(1)所表示的攝像用的光電轉換元件用材料中，藉由基於密度泛函計算 B3LYP/6-31G（d）的結構最佳化計算而獲得的最高佔據分子軌域（HOMO）的能階較佳為 -4.3 eV 以下。另外，最低未佔用分子軌域（LUMO）的能階較佳為 -2.5 eV 以上。

[0019] 所述通式（1）所表示的攝像用的光電轉換元件用材料較佳為具有 1×10^{-6} cm^2/Vs 以上的電洞遷移率。另外，所述光電轉換

元件用材料較佳為非晶質。

【0020】 所述通式（1）所表示的攝像用的光電轉換元件用材料可用作電洞傳輸性材料。

【0021】 另外，本發明為一種攝像用的光電轉換元件，於兩片電極之間具有光電轉換層與電子阻擋層，所述攝像用的光電轉換元件的特徵在於，於光電轉換層與電子阻擋層的至少一層中包含所述通式（1）所表示的攝像用的光電轉換元件用材料。

【0022】 本發明的所述攝像用的光電轉換元件中，可於電子阻擋層中包含所述通式（1）所表示的攝像用的光電轉換元件用材料，可於光電轉換層中包含富勒烯衍生物等電子傳輸性材料。

[發明的效果]

【0023】 認為本發明的光電轉換元件藉由使用通式（1）所表示的攝像用的光電轉換元件用材料，可達成於攝像用的光電轉換元件內的電洞或電子的適當移動，因此能夠減少將光轉換為電能時因施加偏置電壓而產生的漏電流，其結果，可獲得達成暗電流值低以及明暗比高的光電轉換元件。因此，本發明的材料有效用作光電轉換膜積層型攝像設備的光電轉換元件用材料。

【圖式簡單說明】

【0024】

圖 1 是表示本發明中所使用的光電轉換元件的結構例的剖面示意圖。

【實施方式】

【0025】 本發明的攝像用光電轉換元件是於兩片電極之間具有至少一層有機層、且將光轉換為電能的光電轉換元件。於所述有機層中含有包含所述通式（1）所表示的化合物的攝像用的光電轉換元件用材料。詳細而言，於兩片電極之間具有光電轉換層以及電子阻擋層的攝像用光電轉換元件中，於光電轉換層、電子阻擋層的至少一層中含有所述通式（1）所表示的光電轉換元件用材料。以下，將包含通式（1）所表示的化合物的攝像用的光電轉換元件用材料簡稱為光電轉換元件用材料。另外，有時亦稱為本發明的材料或通式（1）所表示的化合物。

【0026】 以下對所述通式（1）所表示的化合物進行說明。

【0027】 於所述通式(1)中，環 B 與鄰接環於任意位置進行縮合，且表示式（1B）所表示的六元環。環 C 與鄰接環於任意位置進行縮合，且表示式(1C)所表示的五元環。X 由 N-Ar^5、O、S、C-Ar^6Ar^7 中的任一者表示，較佳為由 N-Ar^5、O、S 表示，更佳為由 N-Ar^5 或 S 表示，進而佳為由 N-Ar^5 表示。另外，a、b、c 表示取代數，a、b 分別獨立地表示 0～4 的整數，c 表示 0～2 的整數，但均較佳為 0。

【0028】 於所述通式（1）中，Ar^1～Ar^5 中的至少一個包含一個以上的所述通式（2）所表示的結構，並且包含一個以上的所述通式（3）所表示的結構，其中，較佳為 Ar^1 包含分別各為至少一個的所述通式（2）及所述通式（3）所表示的結構。進而，Ar^1～Ar^7 較佳為不包含含氮六元環結構，更佳為不包含含氮六元環結構、

以及喹啉、異喹啉、喹唑啉、喹噁啉、苯並咪唑、氮雜-三伸苯基、啡啉、氮雜-芘、氮雜-蒽、氮雜-芴、氮雜-二苯並呋喃、氮雜-二苯並噻吩、氮雜-二苯並硒吩、氮雜-咔唑。

【0029】 於所述通式(2)中，Y 獨立地由 N-Ar^{10}、O、S、C-$Ar^{11}Ar^{12}$ 中的任一者表示，較佳為 N-Ar^{10}、O、S，進而佳為 N-Ar^{10}。

【0030】 於所述通式（3）中，Z 獨立地由 O、S、C-$Ar^{15}Ar^{16}$ 中的任一者表示，較佳為 O 或 S 中的任一者。

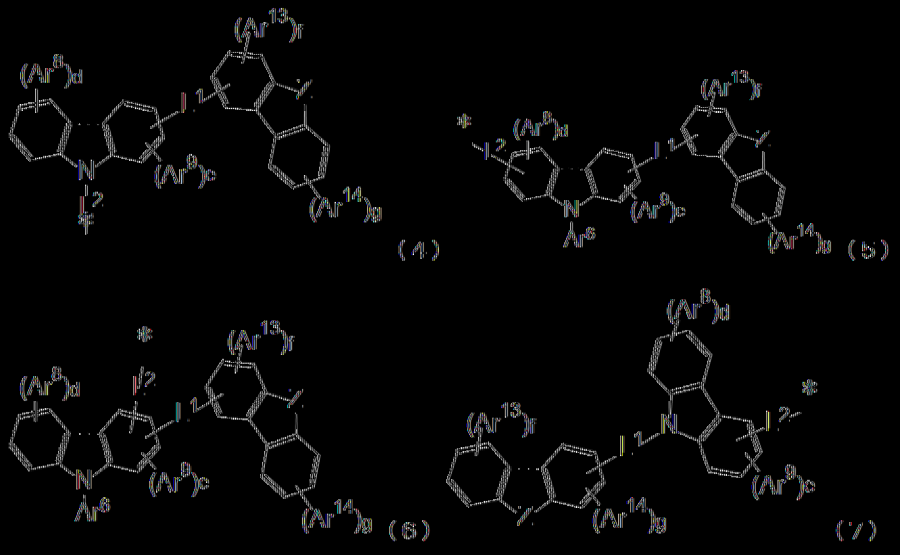
【0031】 於通式（2）、通式（3）中，d～g 表示取代數，且分別獨立地表示 0～4 的整數，較佳為 0～2，更佳為 0～1。

【0032】 Ar^1～Ar^7 分別獨立地表示氘、鹵素、碳數 1～20 的烷基、經取代或未經取代的碳數 12～36 的芳香族胺基、經取代或未經取代的碳數 6～18 的芳香族烴基、經取代或未經取代的碳數 3～18 的芳香族雜環基、或者將該些芳香族基的兩個～十個連結而成的經取代或未經取代的連結芳香族基，較佳為經取代或未經取代的碳數 6～18 的芳香族烴基、經取代或未經取代的碳數 3～18 的芳香族雜環基，更佳為經取代或未經取代的碳數 6～13 的芳香族烴基、經取代或未經取代的碳數 3～17 的芳香族雜環基，進而佳為經取代或未經取代的碳數 6～13 的芳香族烴基、經取代或未經取代的碳數 6～12 的芳香族雜環基。另外，於 Ar^1～Ar^7 表示連結芳香族基的情況下，連結數較佳為 2～6，進而佳為 2～4。Ar^8～Ar^{16} 分別獨立地表示氘、鹵素、碳數 1～20 的烷基、經取代或未經取代的碳數 12～36 的芳香族胺基、經取代或未經取代的碳數 6～18

的芳香族烴基、經取代或未經取代的碳數 3～18 的芳香族雜環基、或者將該些芳香族基的兩個～四個連結而成的經取代或未經取代的連結芳香族基，較佳為經取代或未經取代的碳數 6～18 的芳香族烴基、經取代或未經取代的碳數 3～18 的芳香族雜環基，更佳為經取代或未經取代的碳數 6～13 的芳香族烴基、經取代或未經取代的碳數 3～17 的芳香族雜環基，進而佳為經取代或未經取代的碳數 6～13 的芳香族烴基、經取代或未經取代的碳數 6～12 的芳香族雜環基。另外，於 Ar^8～Ar^{16} 表示連結芳香族基的情況下，連結數較佳為 2～3。其中，於 Ar^1～Ar^7 為所述芳香族雜環基及包含芳香族雜環基的所述連結芳香族基的情況下，較佳為不包含含氮六元環結構、以及喹啉、異喹啉、喹唑啉、喹噁啉、苯並咪唑、氮雜-三伸苯基、啡啉、氮雜-芘、氮雜-蒽、氮雜-芴、氮雜-二苯並呋喃、氮雜-二苯並噻吩、氮雜-二苯並硒吩、氮雜-咔唑。作為所述含氮六元環的具體例，可列舉吡啶、嘧啶、吡嗪、噠嗪、及三嗪、以及四嗪等。再者，所謂 Ar^1～Ar^7 不包含含氮六元環結構、以及喹啉等所述結構，即，是指於 Ar^8～Ar^{16} 中，亦不包含含氮六元環結構、以及喹啉等所述結構。另外，於 Ar^1～Ar^{16} 為具有氫原子的基的情況下，所述氫原子亦可經氘或鹵素取代。

【0033】 於 Ar^1 包含分別各為至少一個的所述通式（2）所表示的結構及所述通式(3)所表示的結構的情況下，較佳為由下述式(4)～式（7）中的任一者表示，更佳為由式（4）、式（5）、式（7）中的任一者表示，進而佳為由式（4）、式（7）中的任一者表示。

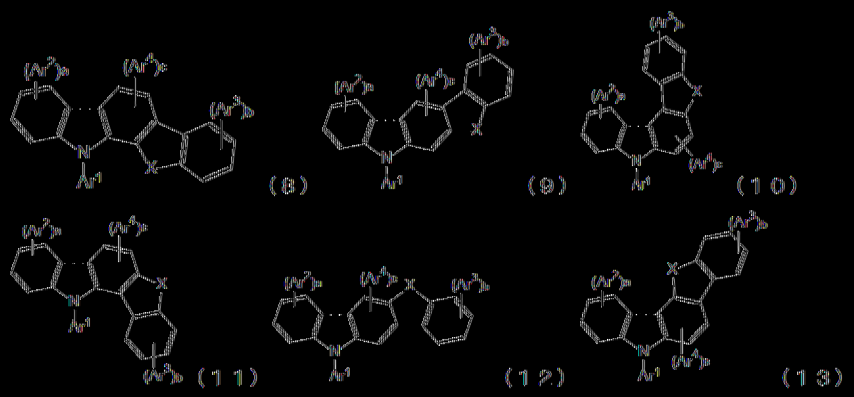
[化 4]



[0034] 於所述式（4）～式（7）中，L^1 及 L^2 分別獨立地表示直接鍵、經取代或未經取代的碳數 6～18 的芳香族烴基、或者將該些芳香族基的兩個～六個連結而成的經取代或未經取代的連結芳香族基，較佳為直接鍵、或者經取代或未經取代的碳數 6～18 的芳香族烴基，進而佳為直接鍵、或者經取代或未經取代的碳數 6～12 的芳香族烴基。關於 L^1 及 L^2 為未經取代的碳數 6～18 的芳香族烴基時的具體例，除了是自公知的芳香族烴中除去兩個氫而得的基以外，與 Ar^1～Ar^{16} 為未經取代的碳數 6～18 的芳香族烴基時的具體例相同。

[0035] 作為所述通式（1）的形態，由下述式（8）～式（13）中的任一者表示，較佳為由式（8）、式（9）、式（10）、式（12）表示，進而佳為由式（8）、式（9）、式（12）表示。

[化 5]



[0036] 作為 Ar^1～Ar^{16} 為鹵素時的具體例，可列舉氟基、氯基、溴基、碘基。較佳為氟基。

[0037] 於 Ar^1～Ar^{16} 為碳數 1～20 的烷基的情況下，可為直鏈、支鏈、環狀中的任一種烷基，較佳為碳數 1～10 的直鏈、支鏈或者環狀的烷基。作為其具體例，可列舉：甲基、乙基、正丙基、正丁基、正戊基、正己基、正辛基、正十二烷基、正十四烷基、正十八烷基之類的直鏈飽和烴基，異丙基、異丁基、新戊基、2-乙基己基、2-己基辛基等支鏈飽和烴基，環戊基、環己基、環辛基、4-丁基環己基等飽和脂環烴基等。

[0038] 作為 Ar^1～Ar^{16} 為未經取代的芳香族烴基的芳基的具體例，可列舉苯基、聯苯基、三聯苯基、四聯苯基、萘基、菲基、蒽基、三伸苯基、苊基、芴基、螺聯芴基等中除去一個氫原子而得的基，較佳為苯基、聯苯基、三聯苯基、萘基、菲基、芴基、三伸苯基。另外，作為 Ar^1～Ar^{16} 為未經取代的芳香族烴基的雜芳基

的具體例，可列舉自吡咯、吡咯並吡咯、吲哚、吡咯並吲哚、苯並吲哚、萘並吡咯、異吲哚、吡咯並異吲哚、苯並異吲哚、萘並異吡咯、咔唑、苯並咔唑、吲哚並吲哚、咔唑並咔唑、苯並呋喃並咔唑、苯並噻吩並咔唑、咔啉、噻吩、苯並噻吩、萘並噻吩、二苯並噻吩、苯並噻吩並萘、苯並噻吩並苯並噻吩、苯並噻吩並二苯並噻吩、二萘並噻吩、二萘並噻吩並噻吩、萘並苯並噻吩、呋喃、苯並呋喃、萘並呋喃、二苯並呋喃、苯並呋喃並萘、苯並呋喃並苯並呋喃、苯並呋喃並二苯並呋喃、二萘並呋喃、二萘並呋喃並呋喃、萘並苯並呋喃、吡啶、嘧啶、三嗪、喹啉、異喹啉、喹唑啉、喹噁啉等中除去一個氫原子而得的基，較佳為二苯並呋喃、二苯並噻吩、咔唑、苯並呋喃並咔唑、或苯並噻吩並咔唑。

【0039】 於 Ar^1～Ar^{16} 為未經取代的碳數 6～18 的芳香族烴基的情況下，可列舉自公知的芳香族烴中除去一個氫而得的基。作為所述芳香族烴，例如可列舉苯之類的單環式芳香族烴，萘之類的二環式芳香族烴，苯並二茚、伸聯苯、苊、蒽、菲、或芴之類的三環式芳香族烴，螢蒽、醋菲烯（acephenanthrylene）、醋蒽烯（aceanthrylene）、三伸苯、苉、熒、四芬、稠四苯、或七曜烯（pleiadene）之類的四環式芳香族烴等。較佳為苯、萘、蒽、三伸苯或苉。

【0040】 於 Ar^1～Ar^{16} 為所述碳數 3～18 的芳香族雜環基的情況下，作為其具體例，可列舉自芳香族雜環去除一個氫而得的基。作為所述芳香族雜環基，例如可以吡咯、吡咯並吡咯、吲哚、吡咯並

吲哚、苯並吲哚、萘並吡咯、異吲哚、吡咯並異吲哚、苯並異吲哚、萘並異吡咯、咔唑、苯並咔唑、吲哚並吲哚、咔唑並咔唑、吲哚並咔唑、咔啉之類的具有吡咯環的含氮芳香族化合物，噻吩、苯並噻吩、萘並噻吩、二苯並噻吩、苯並噻吩並萘、苯並噻吩並苯並噻吩、苯並噻吩並二苯並噻吩、二萘並噻吩、二萘並噻吩並噻吩、萘並苯並噻吩、苯並噻吩並咔唑之類的具有噻吩環的含硫芳香族化合物，呋喃、苯並呋喃、萘並呋喃、二苯並呋喃、苯並呋喃並萘、苯並呋喃並苯並呋喃、苯並呋喃並二苯並呋喃、二萘並呋喃、二萘並呋喃並呋喃、萘並苯並呋喃、苯並呋喃並咔唑之類的具有呋喃環的含氧芳香族化合物，吡啶、嘧啶、三嗪、喹啉、異喹啉、喹唑啉、喹噁啉等為例來示出。較佳為二苯並呋喃、二苯並噻吩、咔唑、苯並噻吩並二苯並噻吩、苯並呋喃並二苯並呋喃、吲哚並咔唑、苯並呋喃並咔唑、或苯並噻吩並咔唑，更佳為二苯並呋喃、二苯並噻吩、咔唑。

【0041】 於本說明書中，連結芳香族基是指兩個以上的芳香族基的芳香族環藉由單鍵進行鍵結而連結的芳香族基。該些連結芳香族基可為直鏈狀，亦可分支。苯環彼此連結時的連結位置可為鄰、間、對中的任一種，較佳為對位連結或間位連結。芳香族基可為芳香族烴基，亦可為芳香族雜環基，多個芳香族基可相同亦可不同。再者，構成連結芳香族基的芳香族基中不包含芳香族胺基。

【0042】 於 Ar^1～Ar^{16} 及 L^1～L^2 為芳香族烴基、芳香族雜環基或連結芳香族基的情況下，可具有取代基，作為所述取代基，可列舉：

氘、鹵素、碳數 1～20 的烷基、碳數 7～38 的芳烷基、碳數 2～20 的烯基、碳數 2～20 的炔基、碳數 2～20 的醯基、碳數 2～20 的醯氧基、碳數 1～20 的烷氧基、碳數 2～20 的烷氧基羰基、碳數 2～20 的烷氧基羰基氧基、碳數 1～20 的烷基磺醯基、碳數 3～12 的烷基矽烷基等。另外，於 Ar^1～Ar^{16} 為芳香族胺基的情況下，芳香族基亦可具有取代基，此時的取代基與所述芳香族烴基、芳香族雜環基或連結芳香族基具有取代基的情況相同。

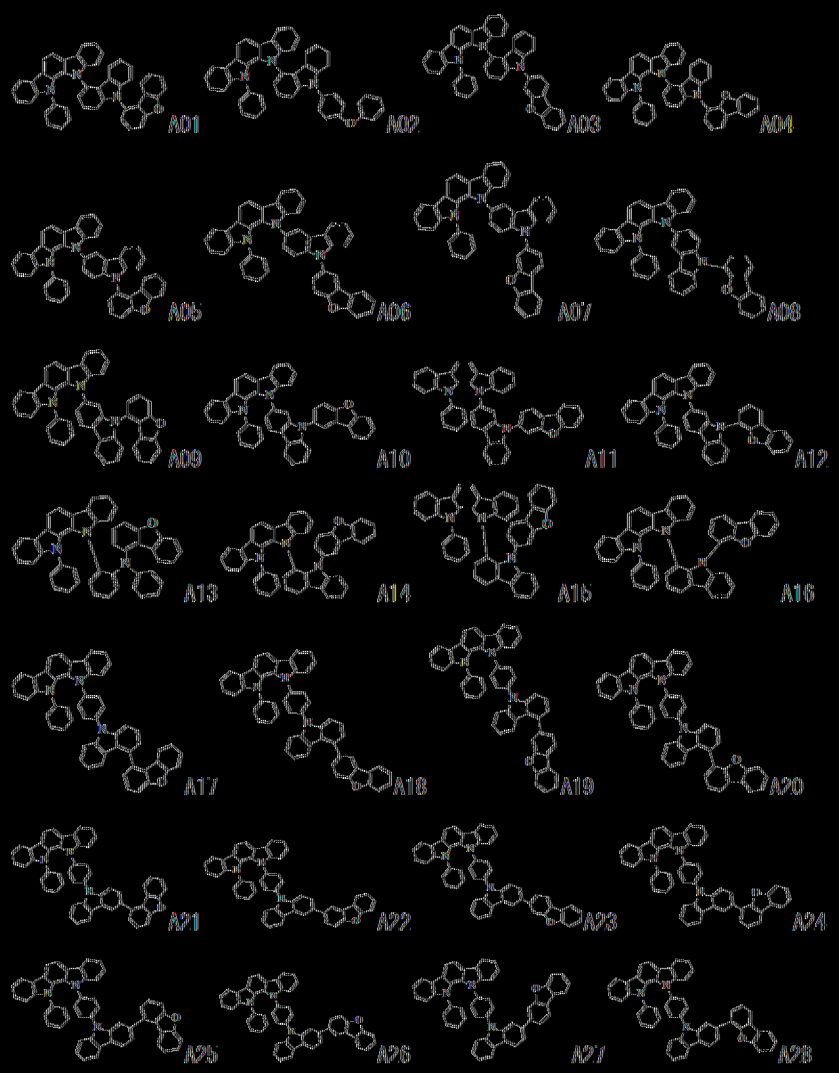
【0043】 所述作為取代基的碳數 1～20 的烷基可為直鏈、支鏈、環狀中的任一種烷基，較佳為碳數 1～10 的直鏈、支鏈或者環狀的烷基。作為其具體例，可例示：甲基、乙基、正丙基、正丁基、正戊基、正己基、正辛基、正十二烷基、正十四烷基、正十八烷基之類的直鏈飽和烴基，異丙基、異丁基、新戊基、2-乙基己基、2-己基辛基等支鏈飽和烴基，環戊基、環己基、環辛基、4-丁基環己基、4-十二烷基環己基等飽和脂環烴基。

【0044】 所述作為取代基的鹵素的具體例可列舉氟基、氯基、溴基、碘基。作為所述作為取代基的碳數 7～38 的芳烷基的具體例，可列舉苄基、苯乙基、苯基丙基、苯基丁基、萘基甲基、三伸苯基甲基等。作為所述作為取代基的碳數 2～20 的烯基的具體例，可列舉乙烯基、丙烯基、丁烯基、戊烯基、環戊烯基、己烯基、環己烯基、辛烯基等。作為碳數 2～20 的炔基的具體例，可列舉乙炔基、丙炔基、丁炔基、戊炔基等。作為所述作為取代基的碳數 2～20 的醯基的具體例，可列舉甲醯基、乙醯基、丙醯基、苯

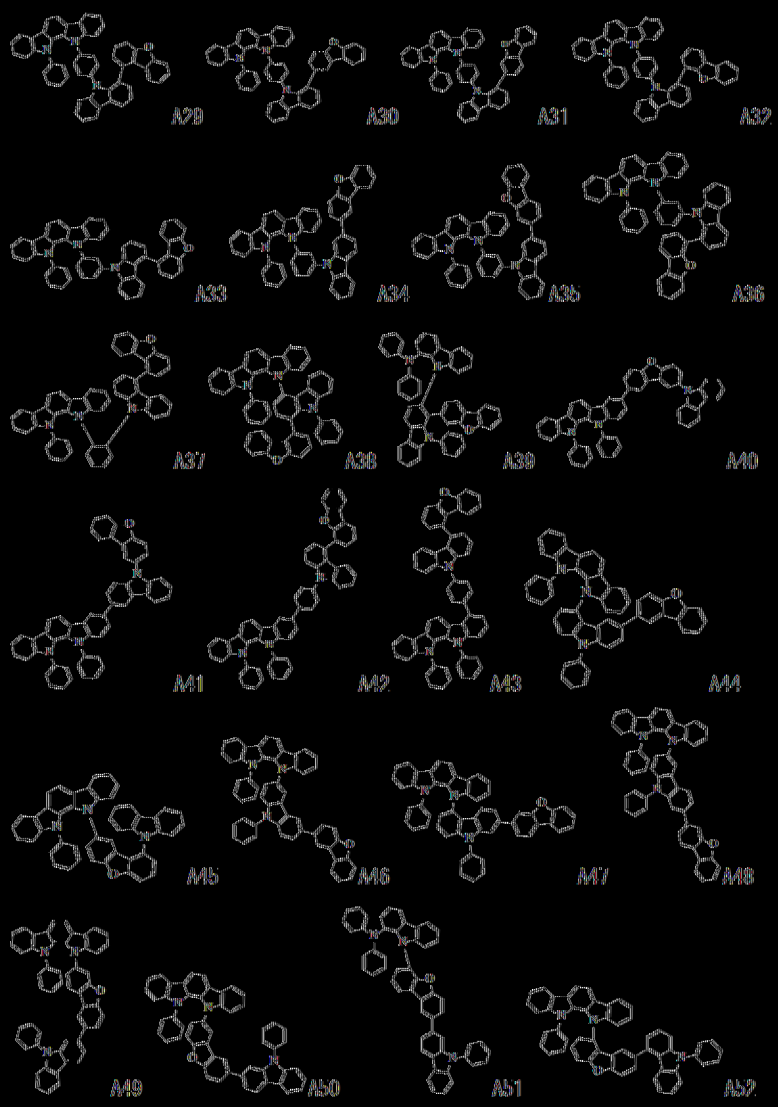
甲醯基等。作為所述作為取代基的碳數 1～20 的烷氧基的具體例，可列舉甲氧基、乙氧基、丙氧基、丁氧基等。作為所述作為取代基的碳數 2～20 的烷氧基羰基的具體例，可列舉甲氧基羰基、乙氧基羰基等。作為所述作為取代基的碳數 3～12 的烷基矽烷基的具體例，可列舉三甲基矽烷基、三乙基矽烷基、三丙基矽烷基等。作為烷氧基羰氧基的具體例，可列舉甲氧基羰氧基、乙氧基羰氧基、丁氧基羰氧基等，作為烷基磺醯基的具體例，可列舉甲基磺醯基、乙基磺醯基、丙基磺醯基等。

【0045】 將作為本發明的光電轉換元件用材料的通式（1）所表示的化合物的較佳的具體例示於以下，但並不限定於該些。再者，以下式中的 D 表示氘，數字表示氘的取代數。

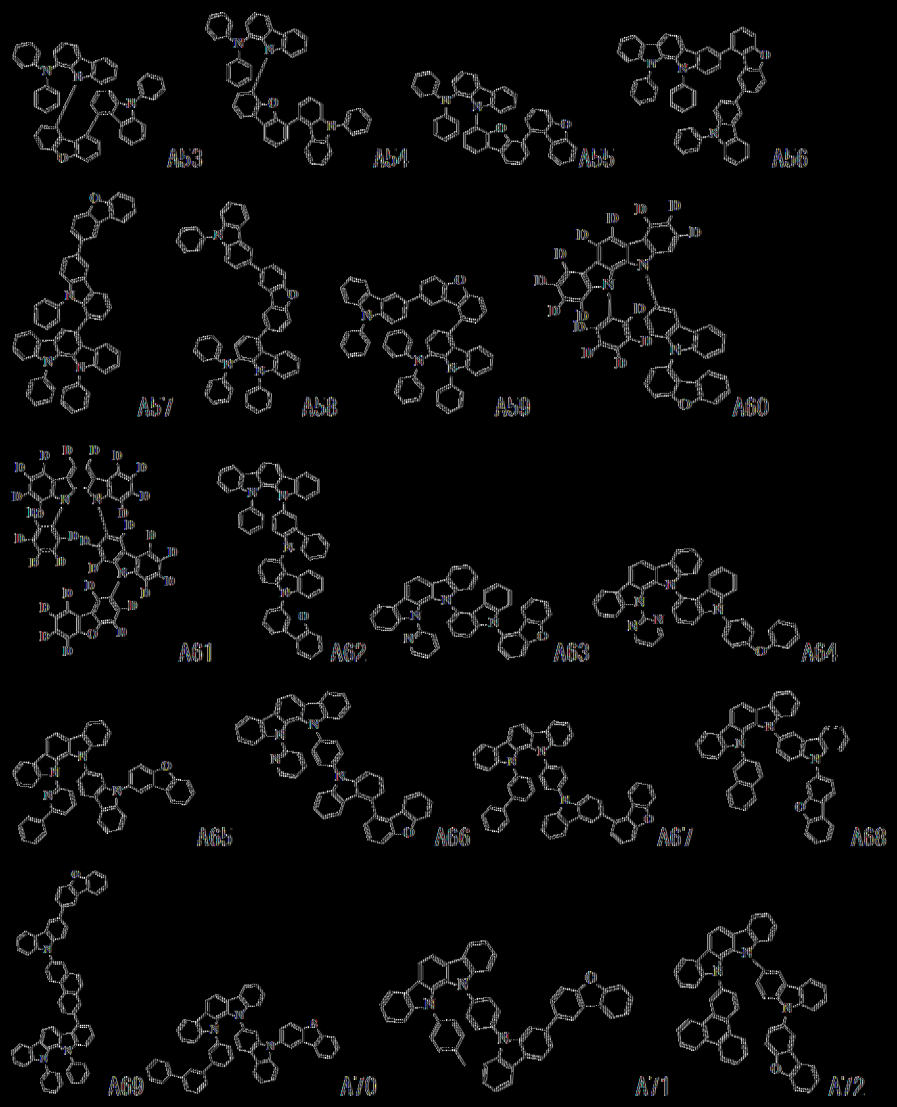
【0046】 [化 6]


A01
A02
A03
A04
A05
A06
A07
A08
A09
A10
A11
A12
A13
A14
A15
A16
A17
A18
A19
A20
A21
A22
A23
A24
A25
A26
A27
A28

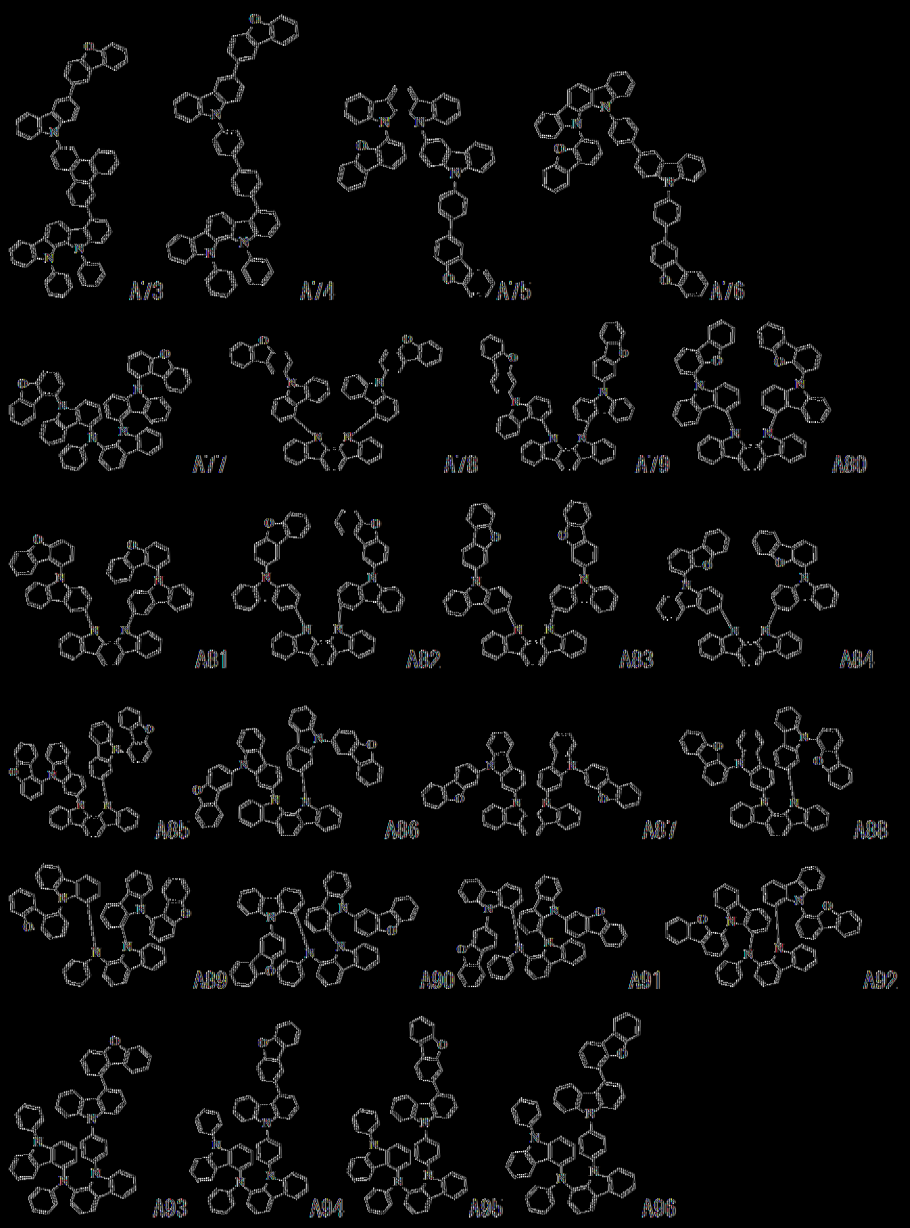
[化 7]


A29
A30
A31
A32
A33
A34
A35
A36
A37
A38
A39
A40
A41
A42
A43
A44
A45
A46
A47
A48
A49
A50
A51
A52

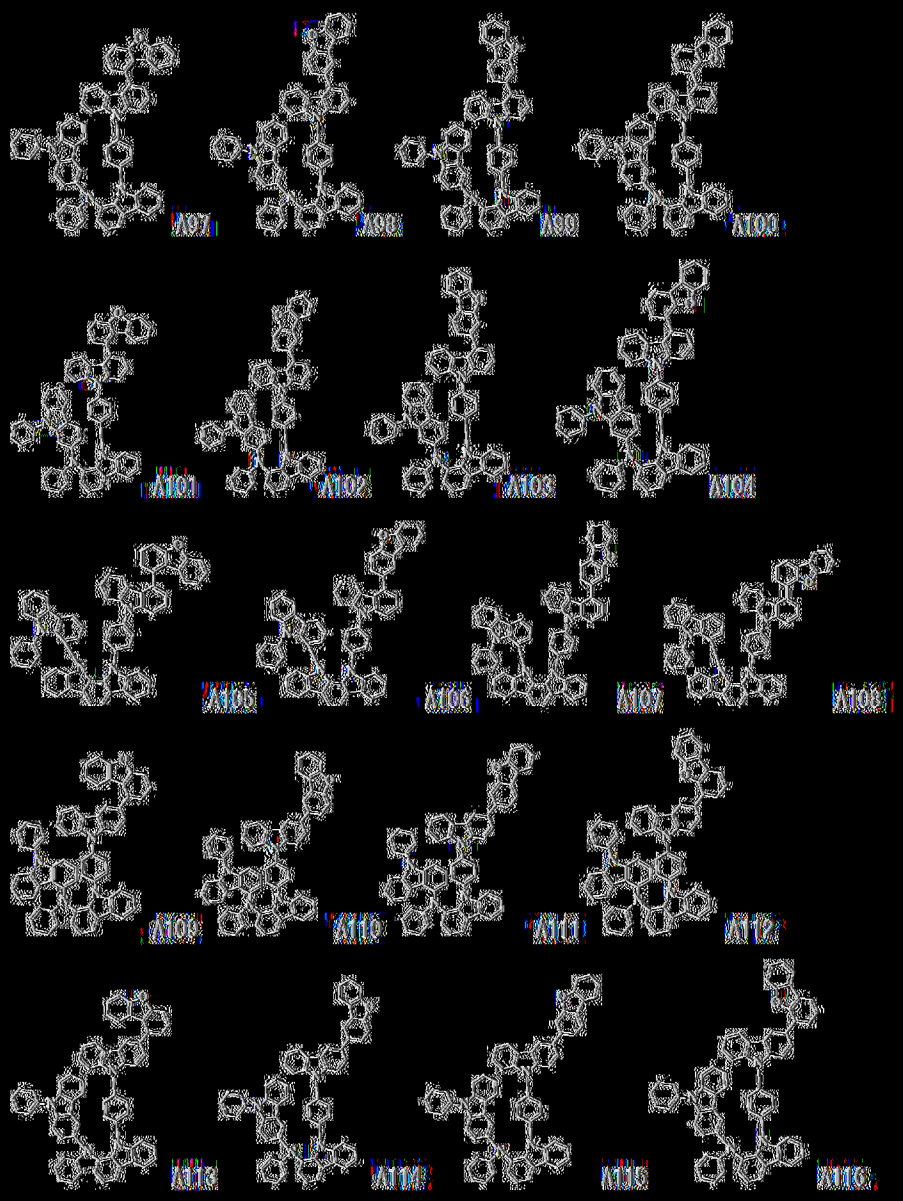
[化 8]


A53
A54
A55
A56
A57
A58
A59
A60
A61
A62
A63
A64
A65
A66
A67
A68
A69
A70
A71
A72

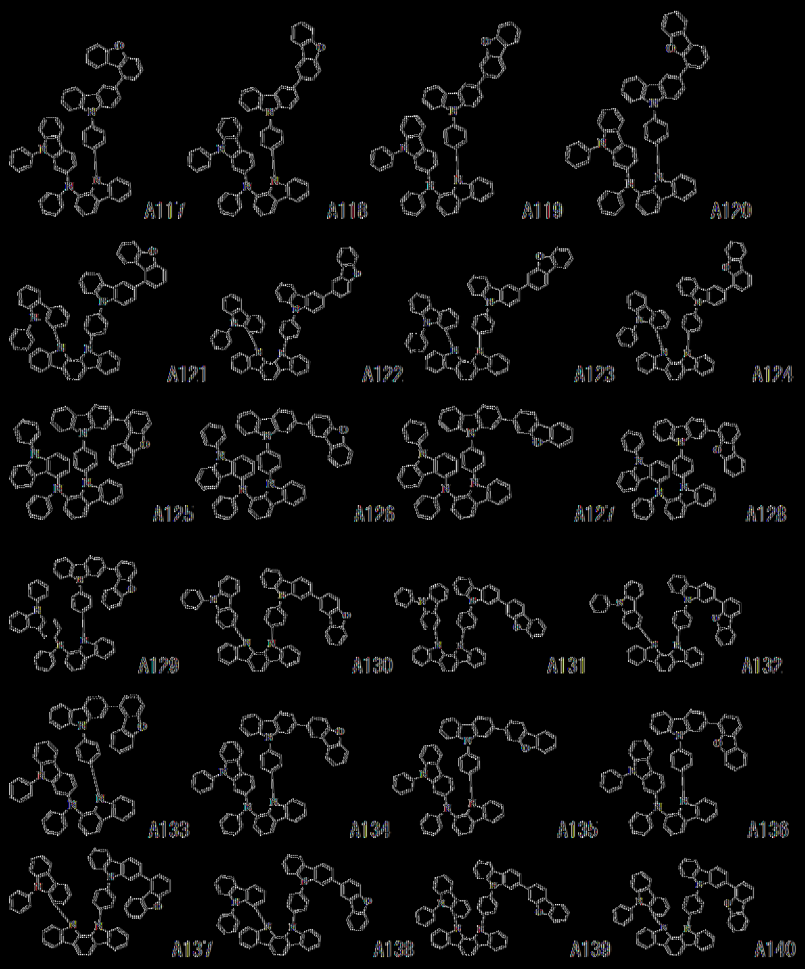
[化 9-1]


A73
A74
A75
A76
A77
A78
A79
A80
A81
A82
A83
A84
A85
A86
A87
A88
A89
A90
A91
A92
A93
A94
A95
A96

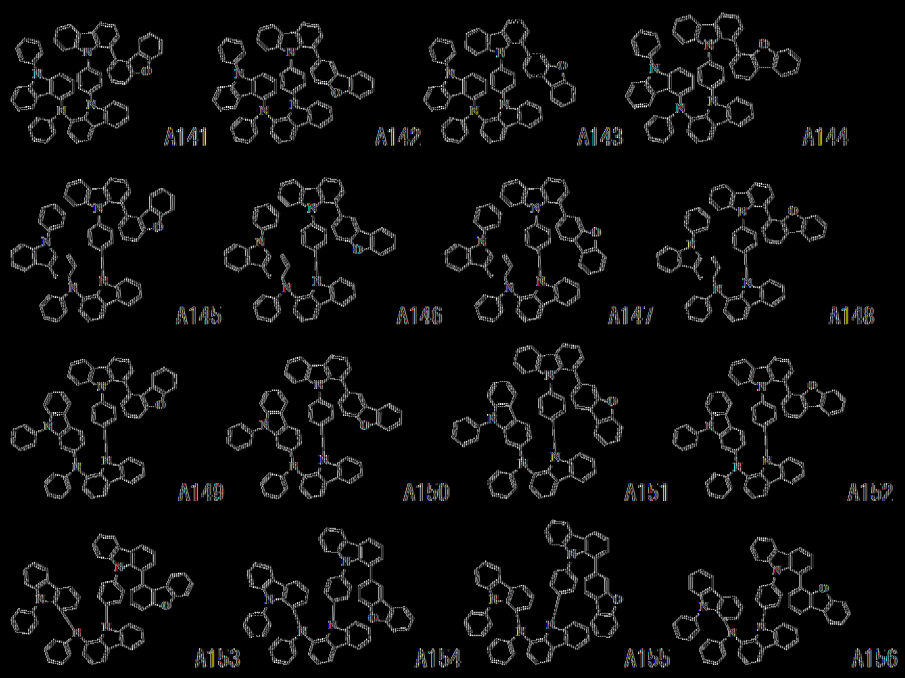
[化 9-2]


A97
A98
A99
A100
A101
A102
A103
A104
A105
A106
A107
A108
A109
A110
A111
A112
A113
A114
A115
A116

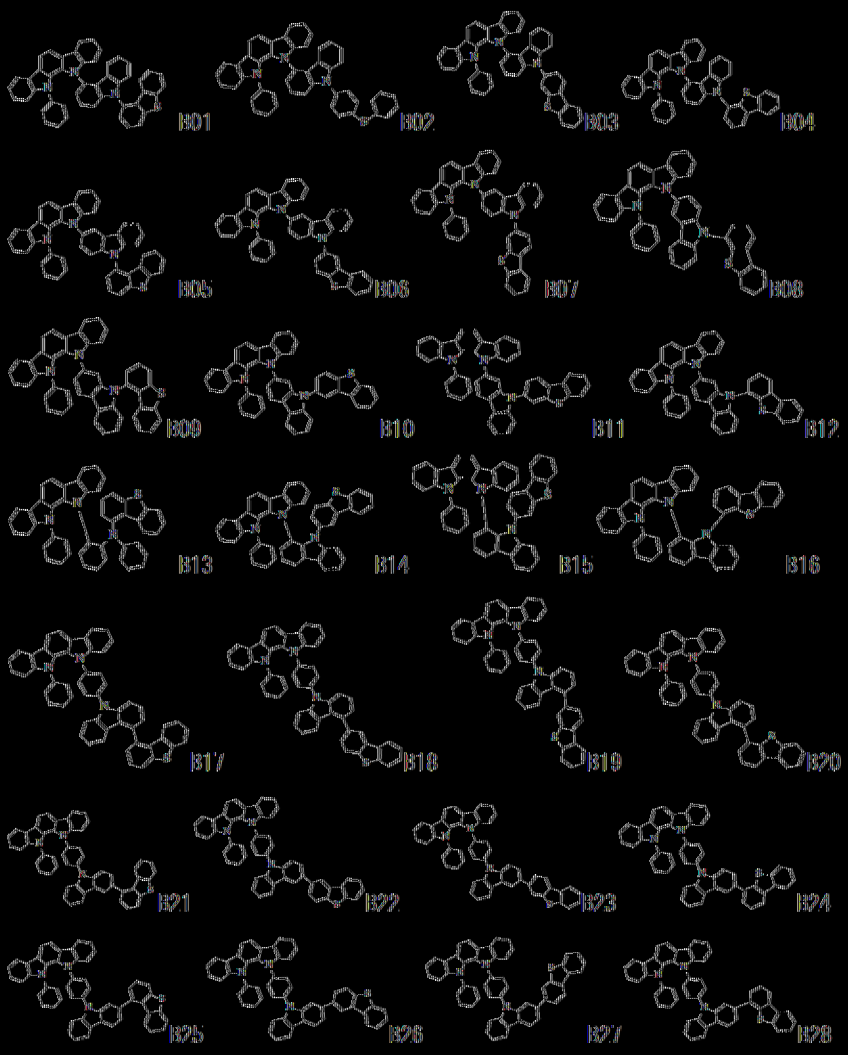
[化 9-3]


A117
A118
A119
A120
A121
A122
A123
A124
A125
A126
A127
A128
A129
A130
A131
A132
A133
A134
A135
A136
A137
A138
A139
A140

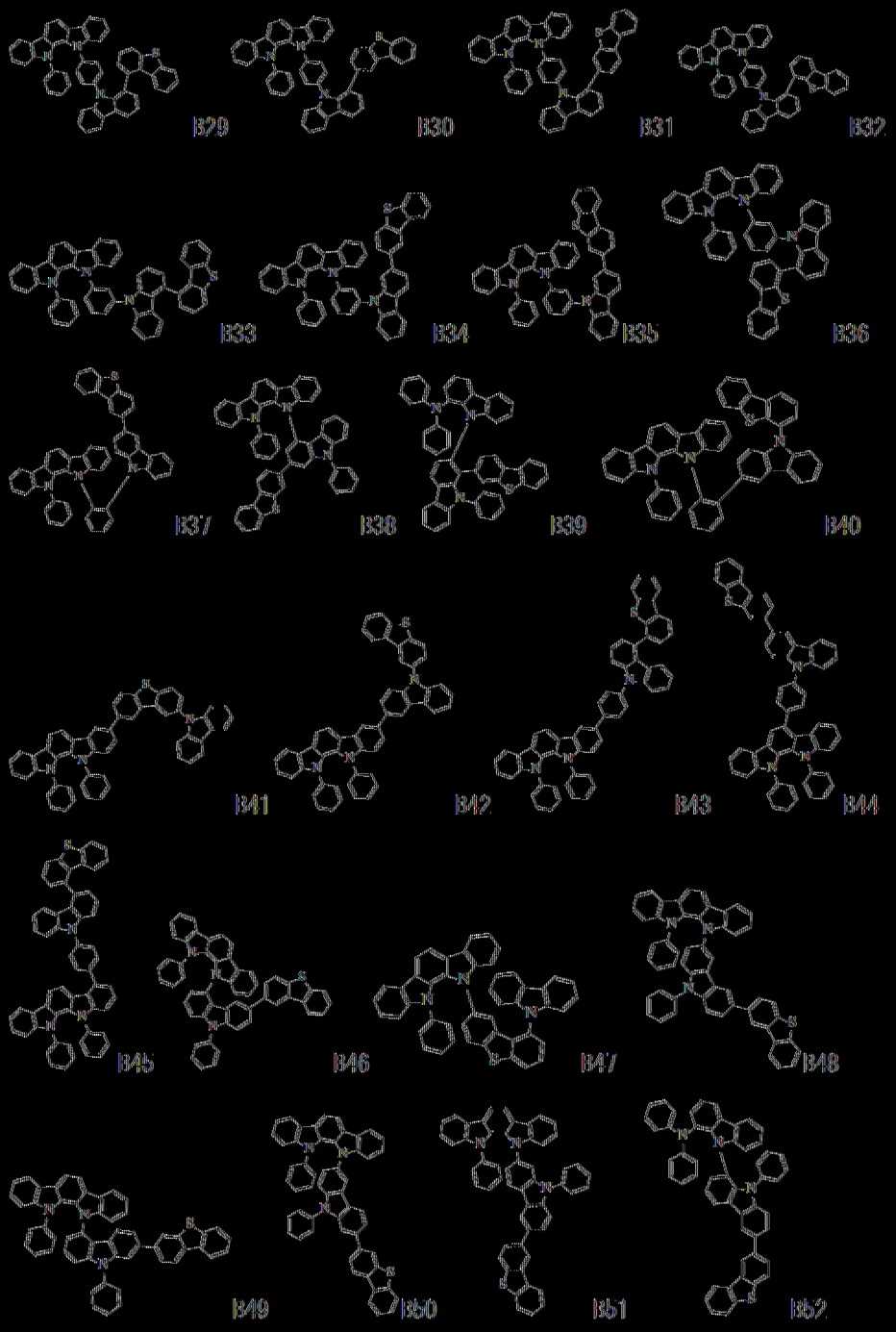
[化 9-4]


A141
A142
A143
A144
A145
A146
A147
A148
A149
A150
A151
A152
A153
A154
A155
A156

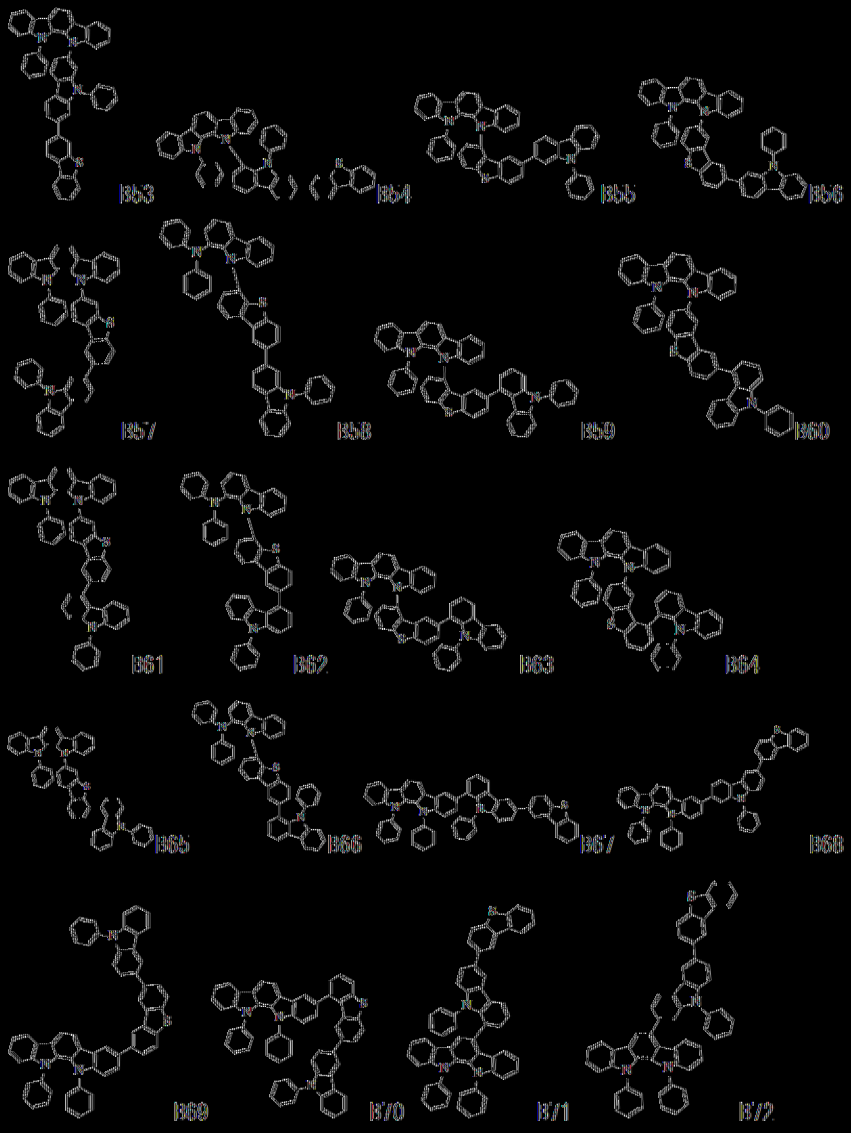
[化 10]


B01
B02
B03
B04
B05
B06
B07
B08
B09
B10
B11
B12
B13
B14
B15
B16
B17
B18
B19
B20
B21
B22
B23
B24
B25
B26
B27
B28

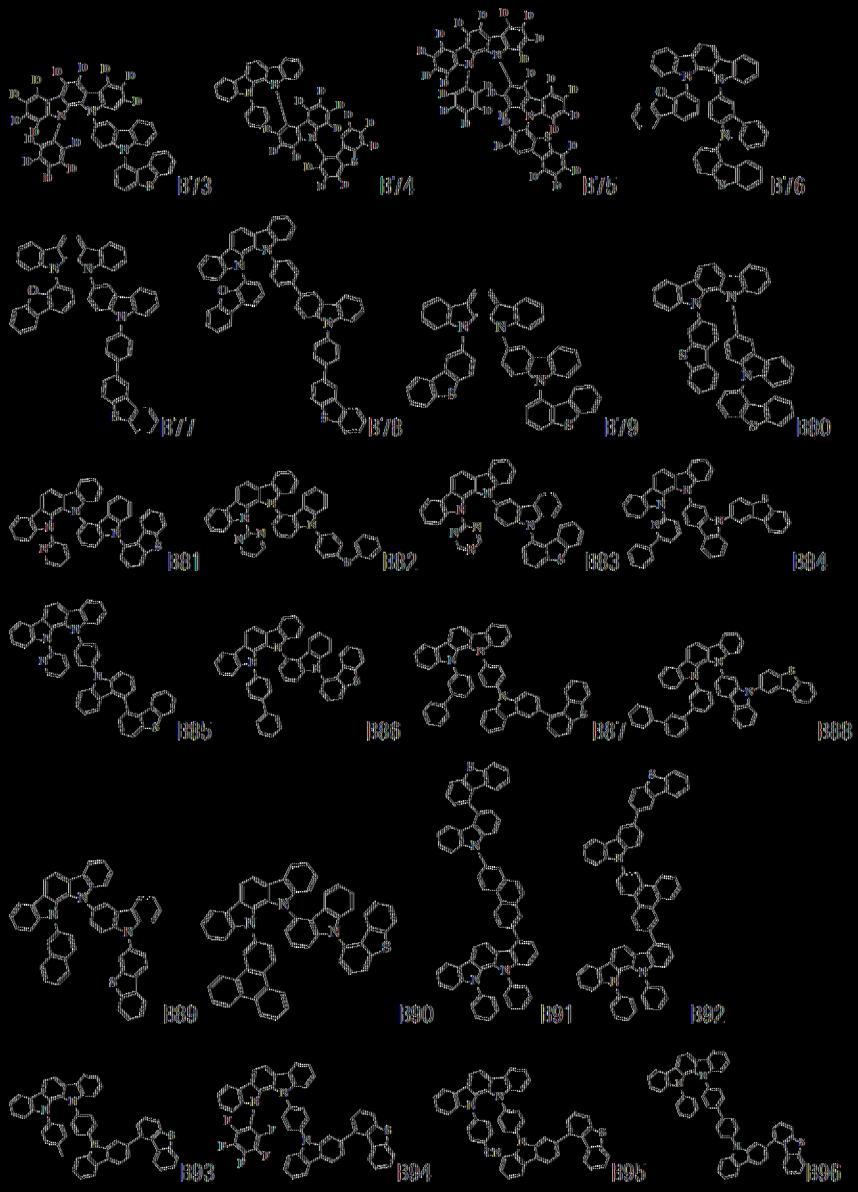
[化 11]


B29
B30
B31
B32
B33
B34
B35
B36
B37
B38
B39
B40
B41
B42
B43
B44
B45
B46
B47
B48
B49
B50
B51
B52

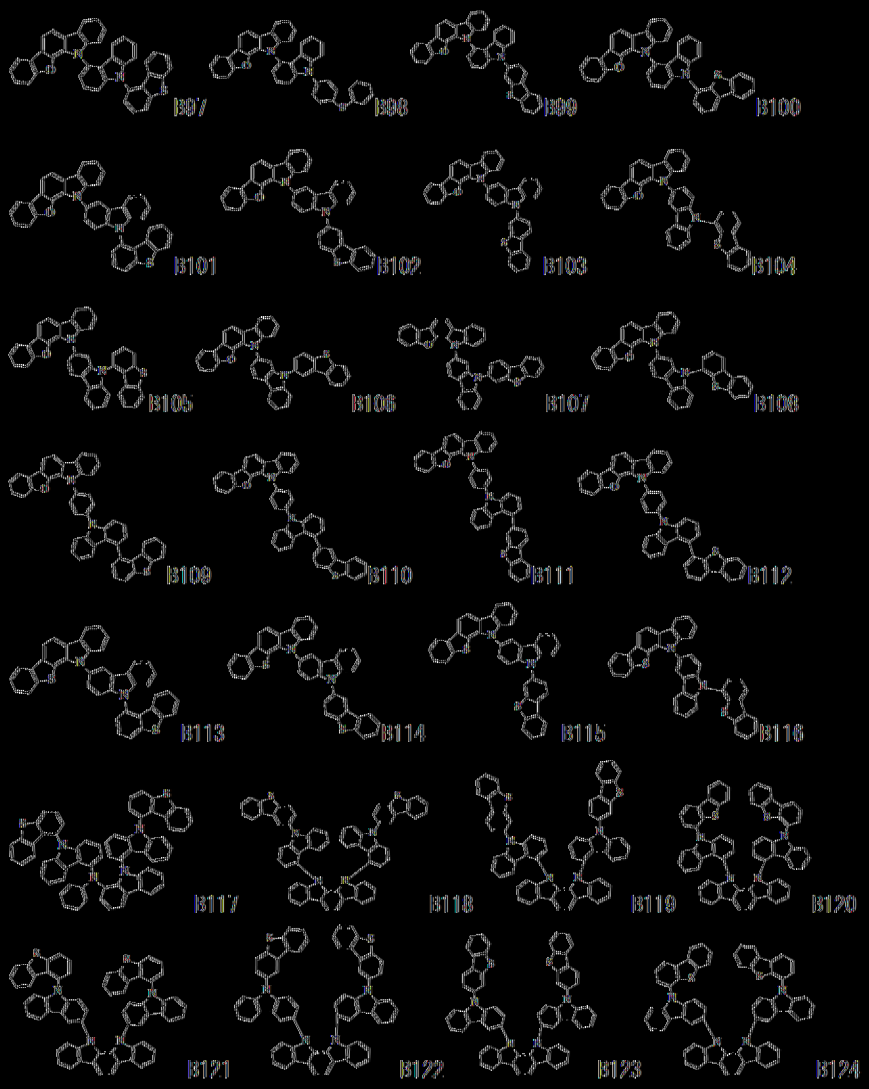
[化 12]


B53
B54
B55
B56
B57
B58
B59
B60
B61
B62
B63
B64
B65
B66
B67
B68
B69
B70
B71
B72

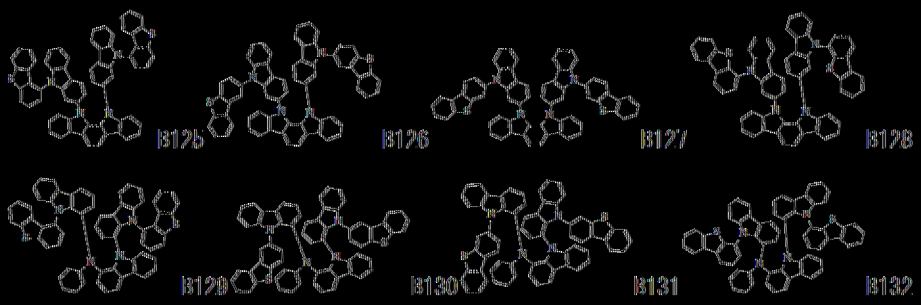
[化 13]


B73
B74
B75
B76
B77
B78
B79
B80
B81
B82
B83
B84
B85
B86
B87
B88
B89
B90
B91
B92
B93
B94
B95
B96

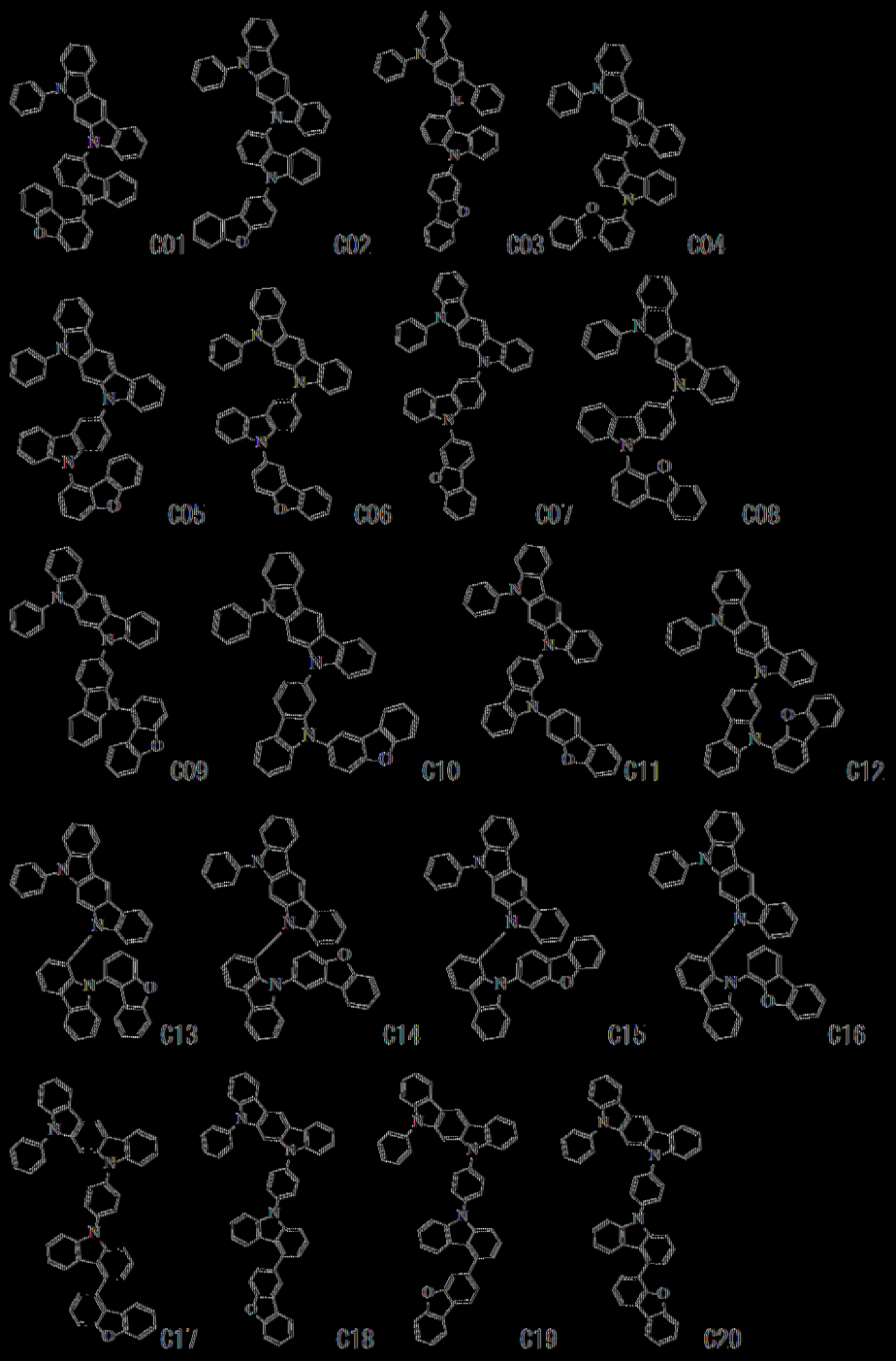
[化 14-1]



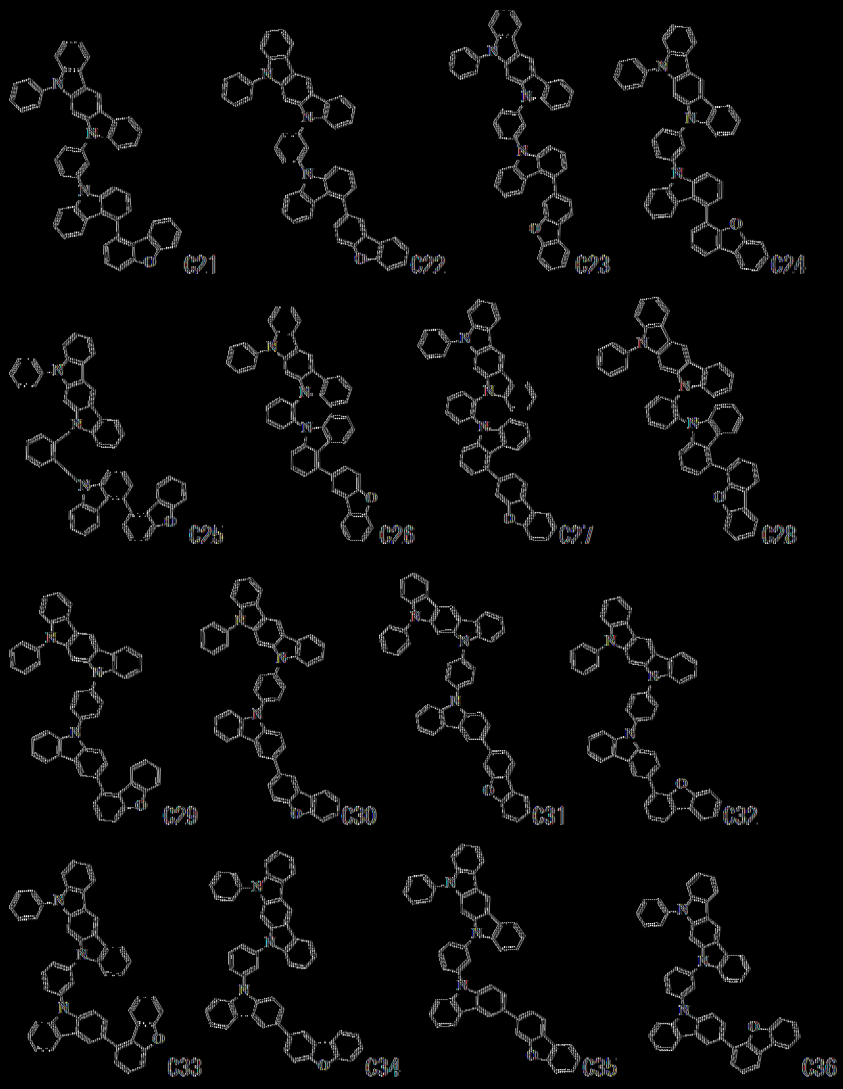
[化學式 14-2]



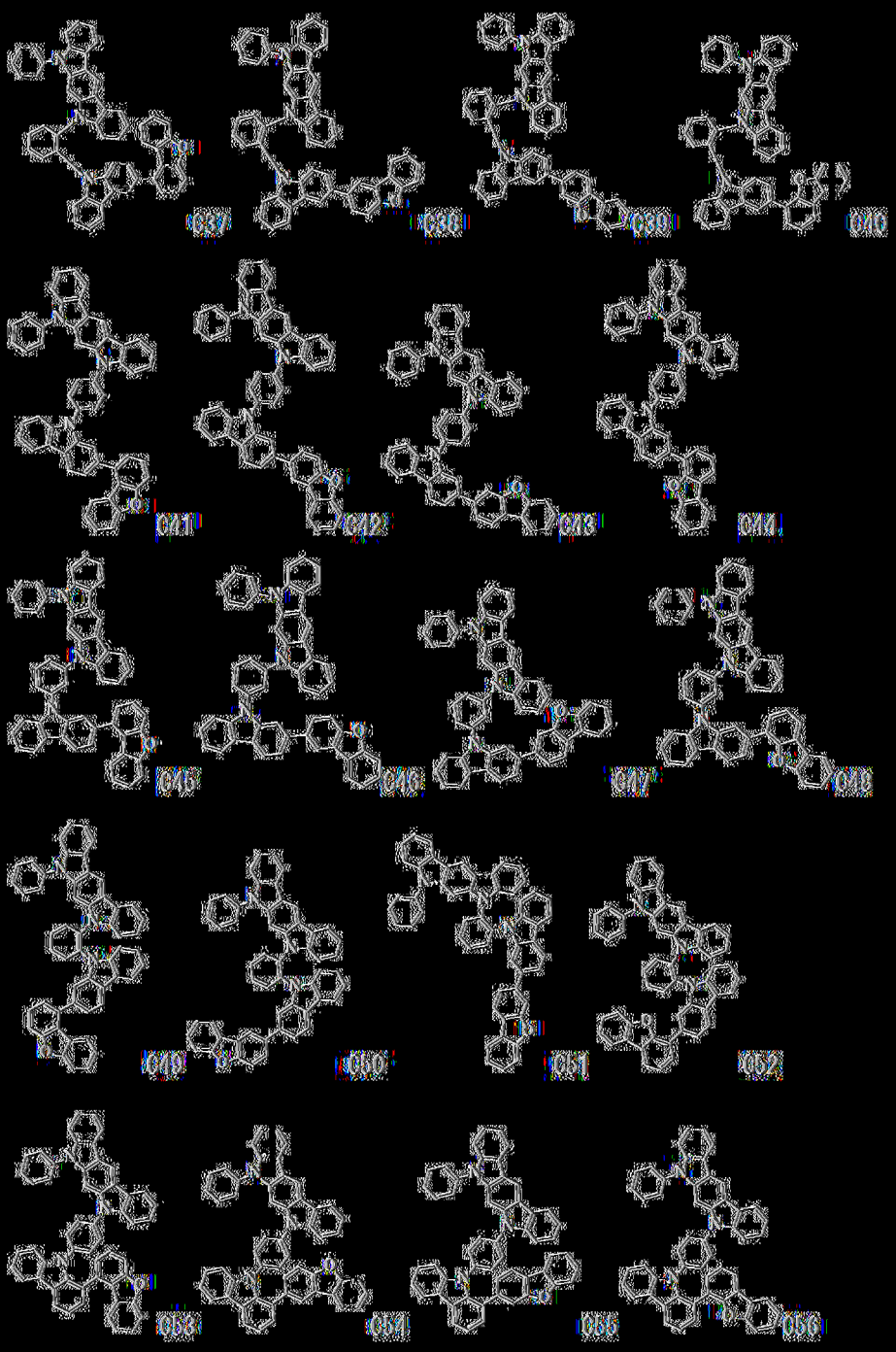
[化學式 15]


C01
C02
C03
C04
C05
C06
C07
C08
C09
C10
C11
C12
C13
C14
C15
C16
C17
C18
C19
C20

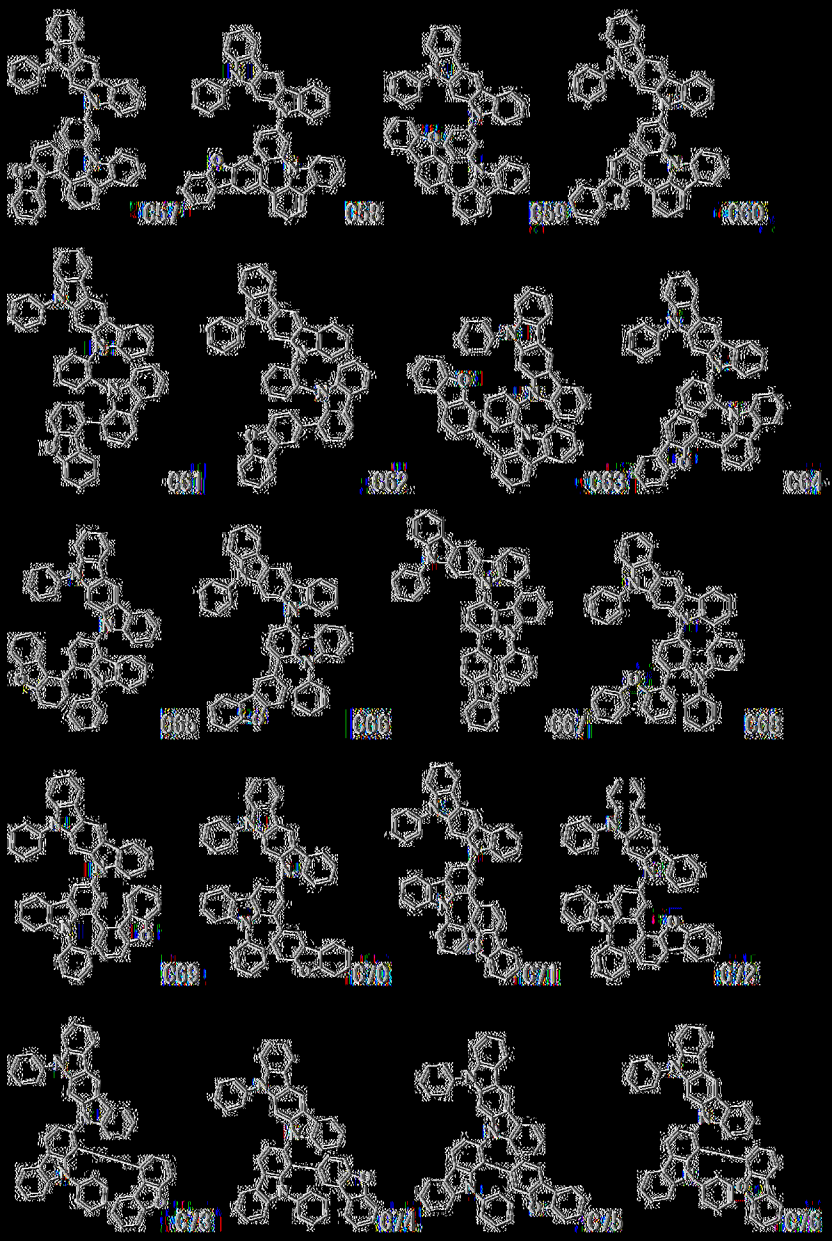
[化 16]



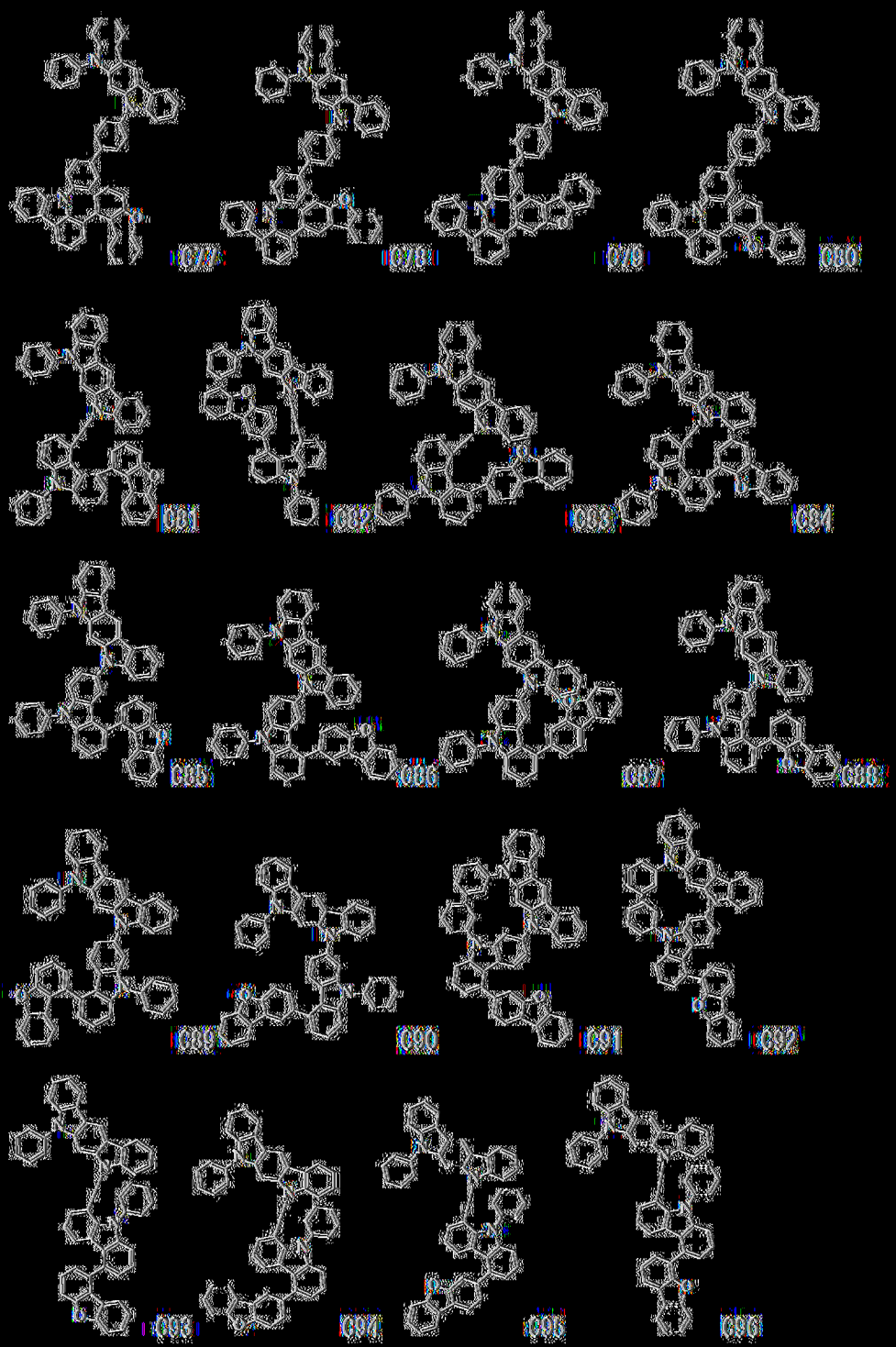
[化 17]



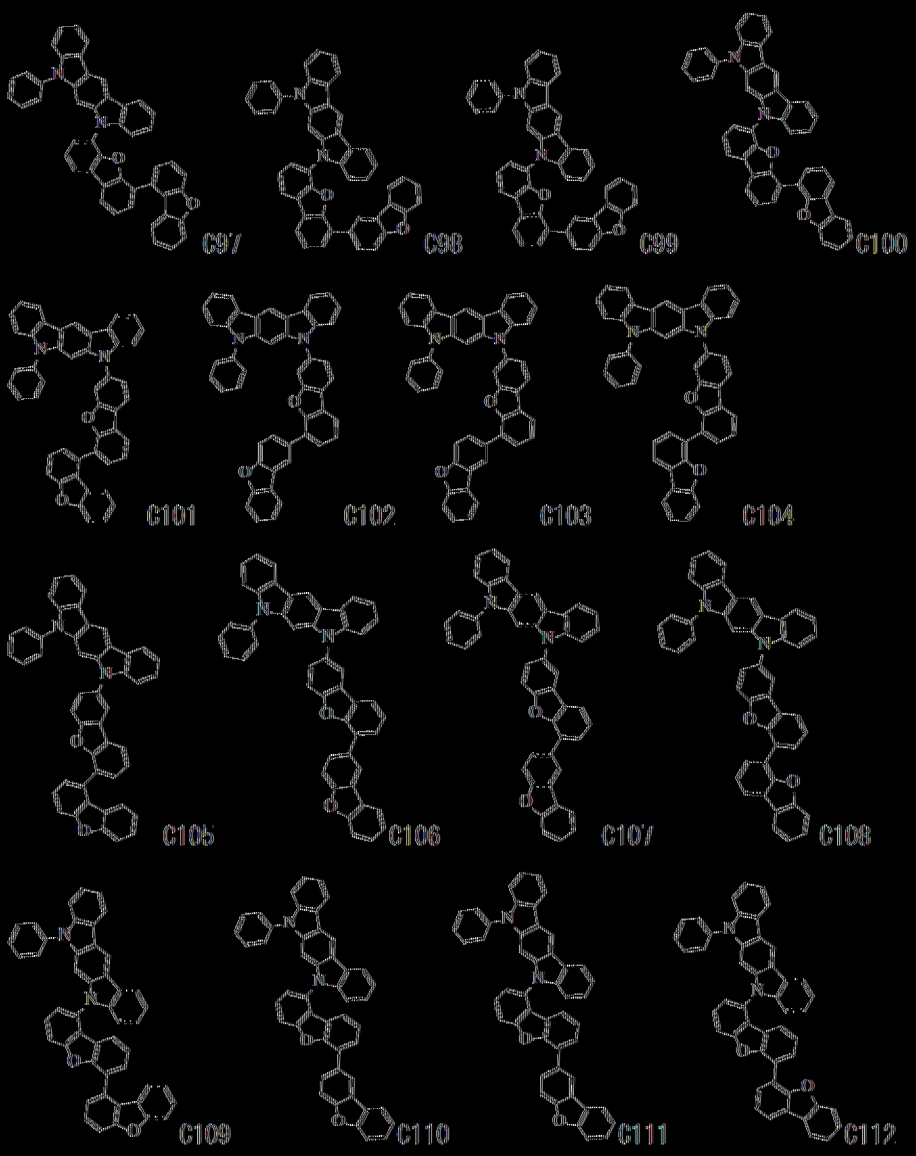
[化 18]



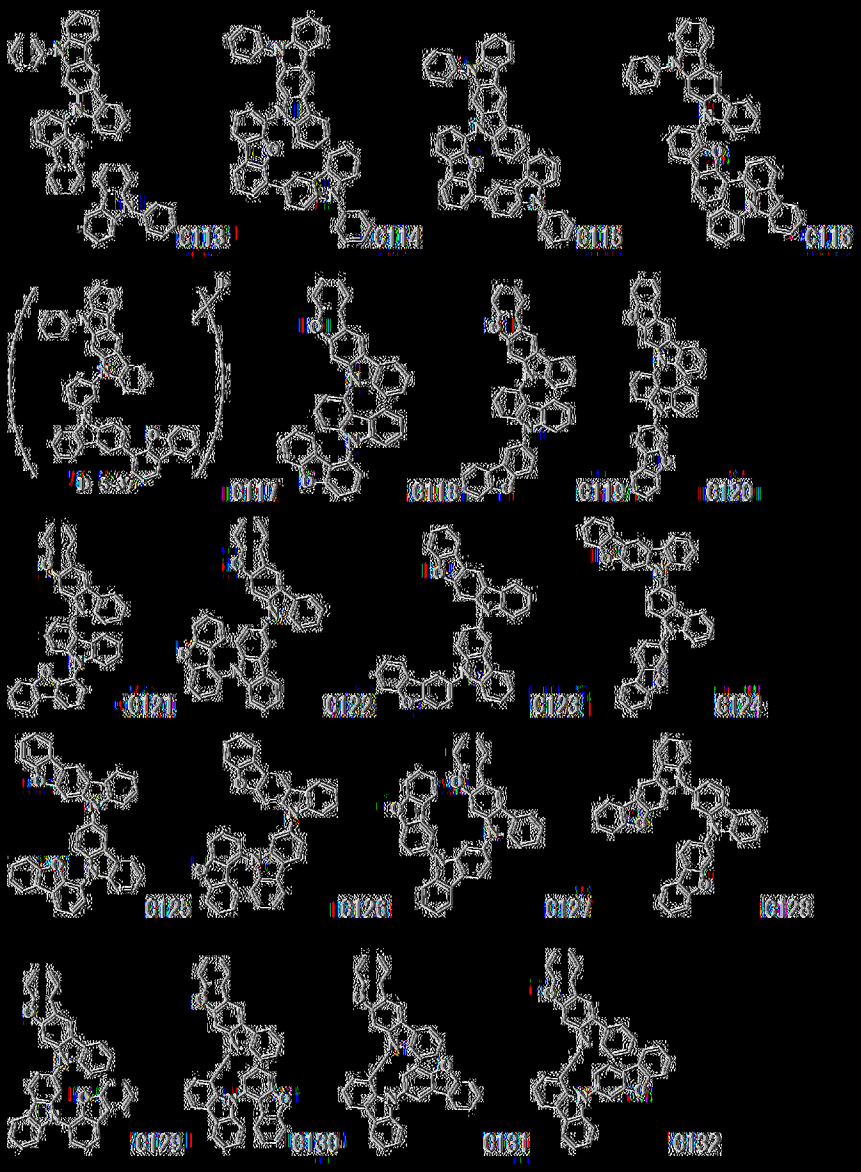
[化 19]


C77
C78
C79
C80
C81
C82
C83
C84
C85
C86
C87
C88
C89
C90
C91
C92
C93
C94
C95
C96

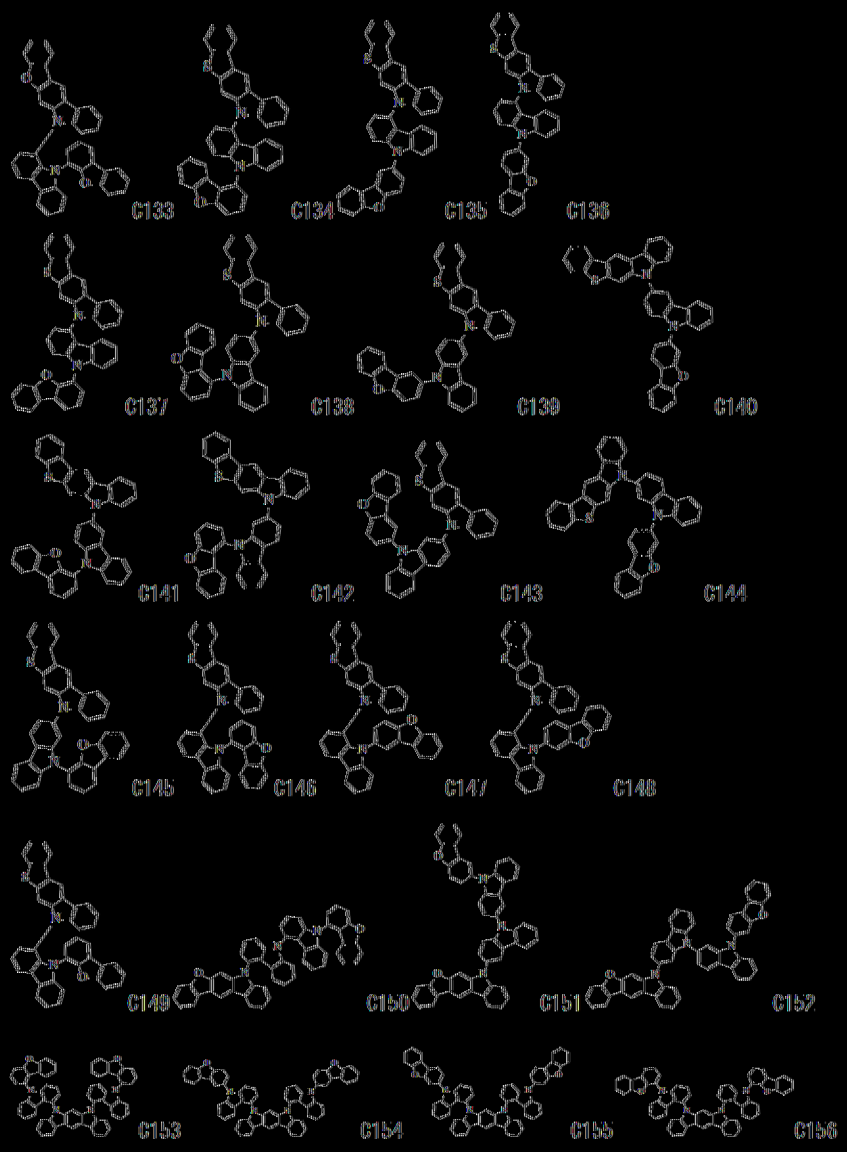
[化 20]


C97
C98
C99
C100
C101
C102
C103
C104
C105
C106
C107
C108
C109
C110
C111
C112

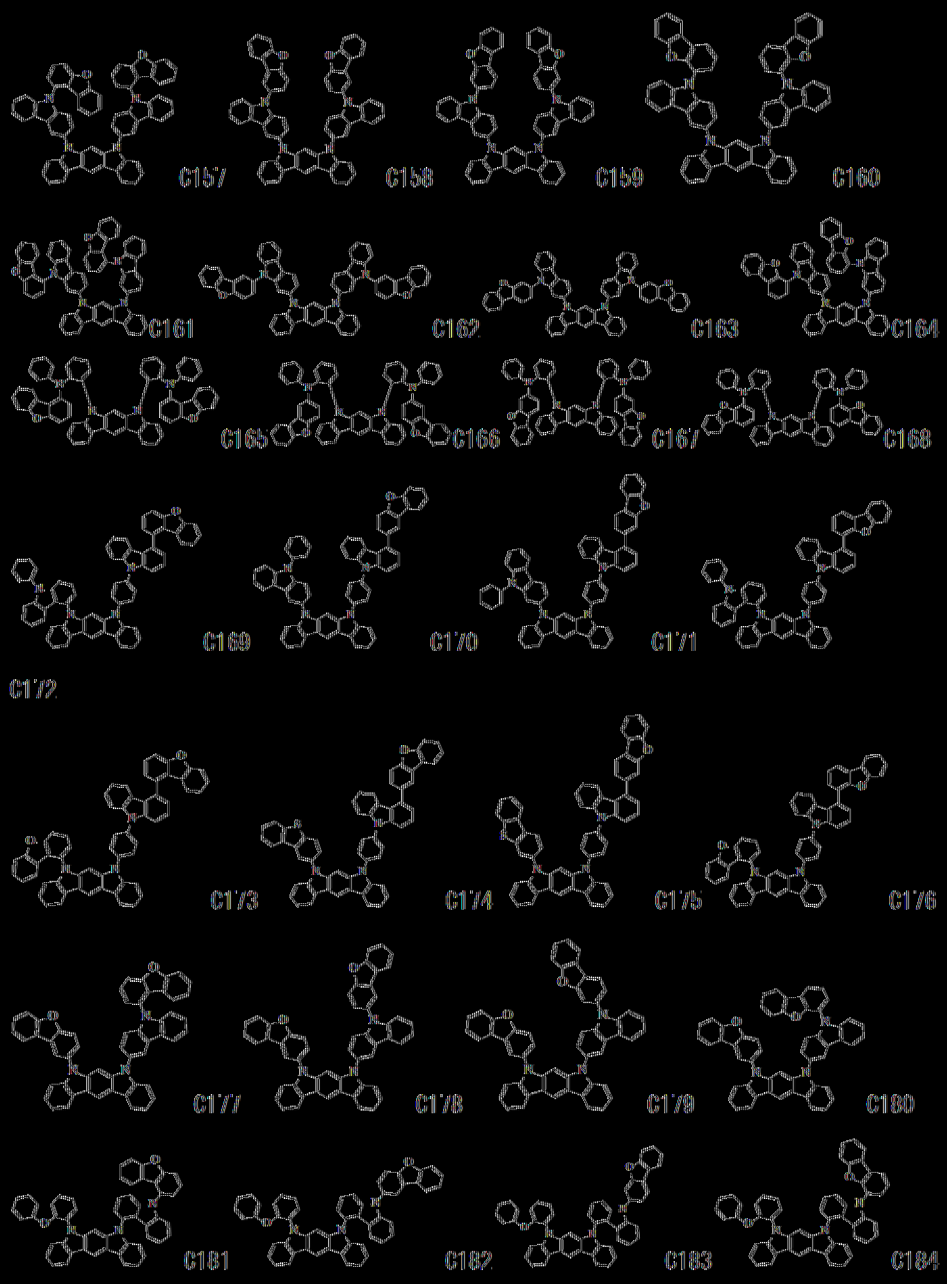
[化 21-1]



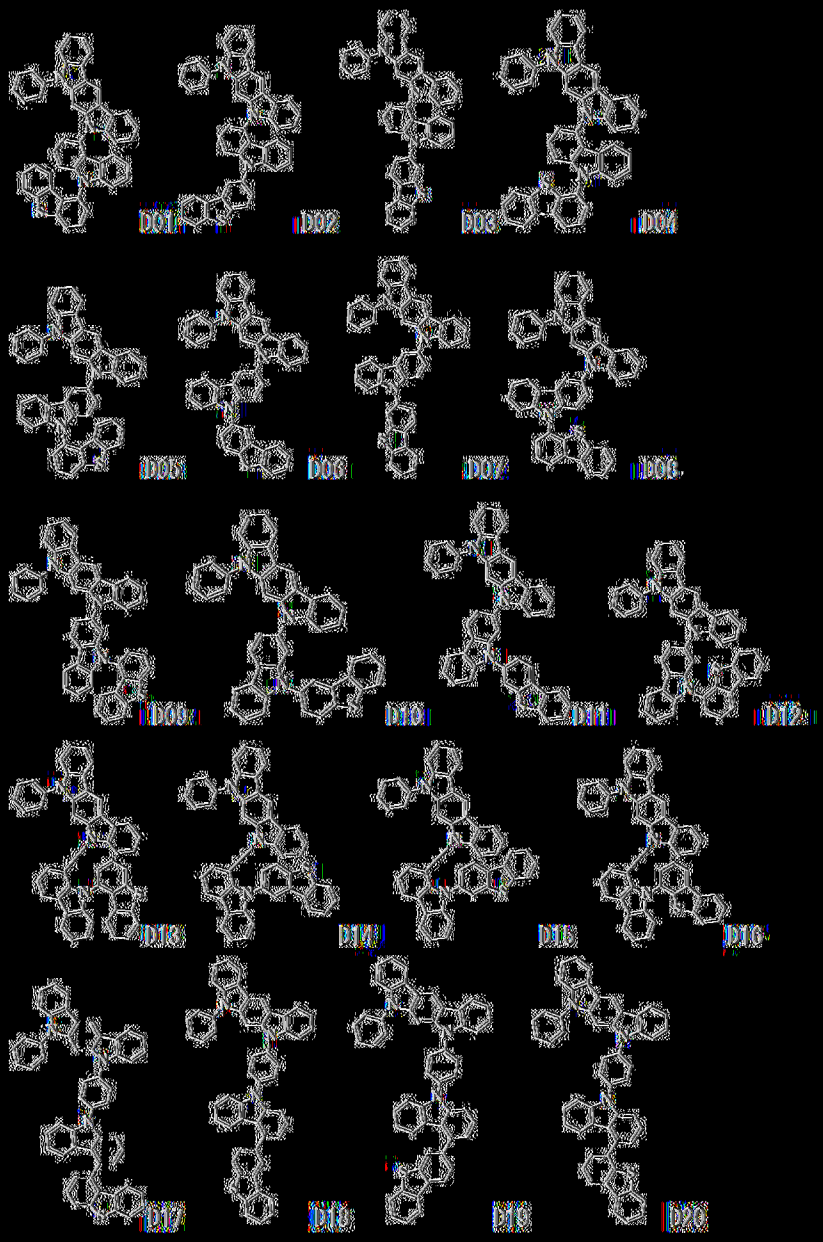
[化 22-2]


C133
C134
C135
C136
C137
C138
C139
C140
C141
C142
C143
C144
C145
C146
C147
C148
C149
C150
C151
C152
C153
C154
C155
C156

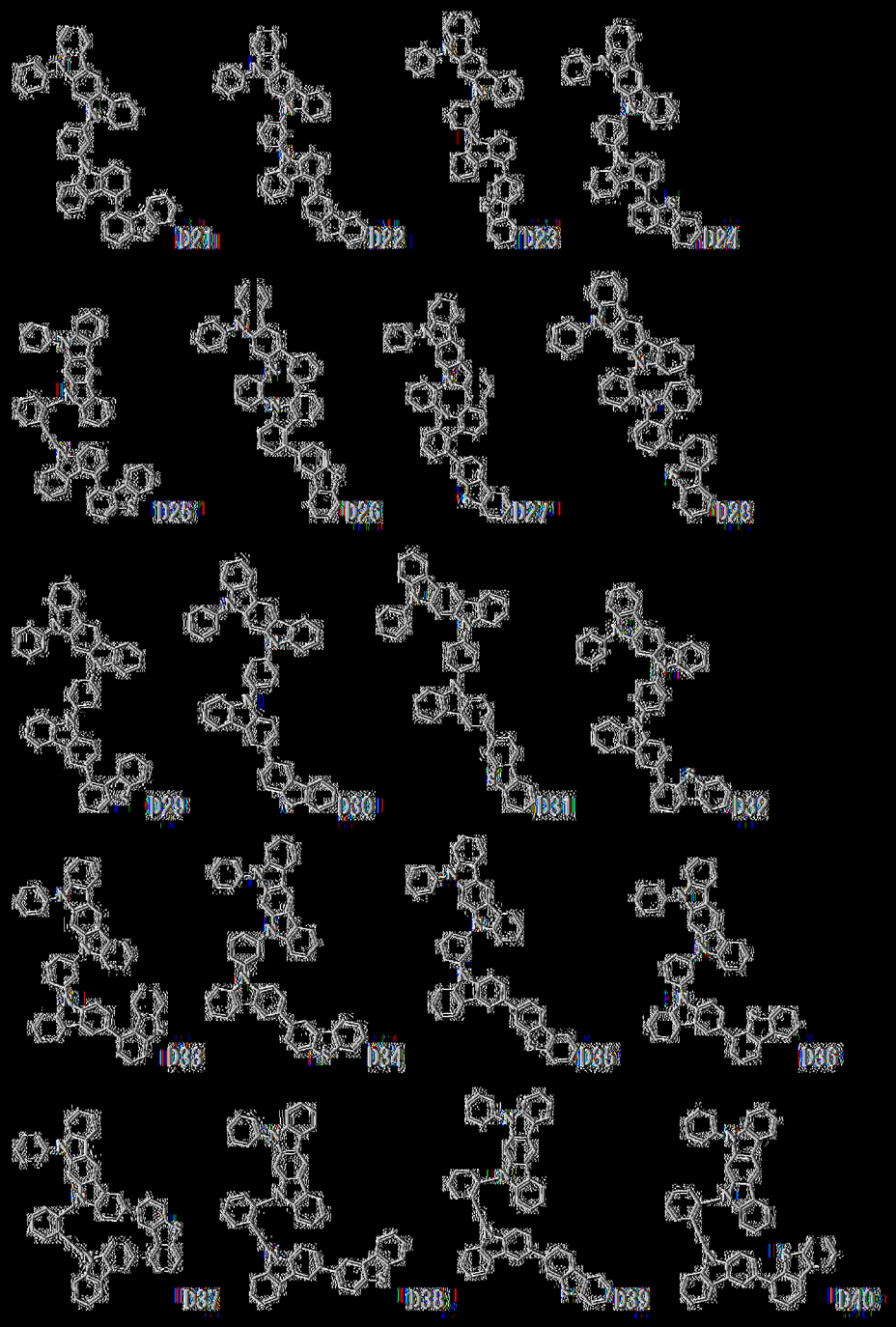
[化 22-3]


C157
C158
C159
C160
C161
C162
C163
C164
C165
C166
C167
C168
C169
C170
C171
C172
C173
C174
C175
C176
C177
C178
C179
C180
C181
C182
C183
C184

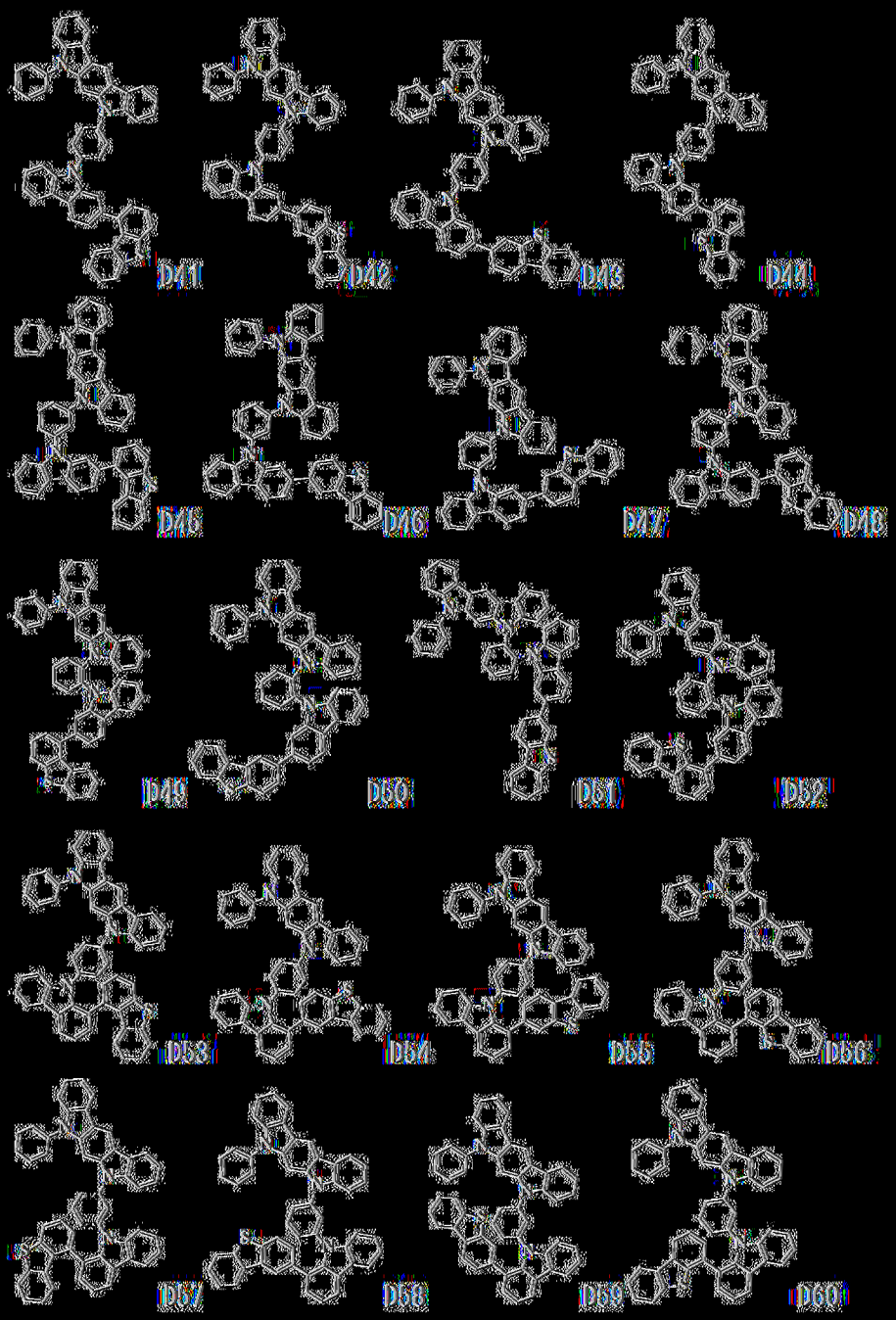
[化 23]


D01
D02
D03
D04
D05
D06
D07
D08
D09
D10
D11
D12
D13
D14
D15
D16
D17
D18
D19
D20

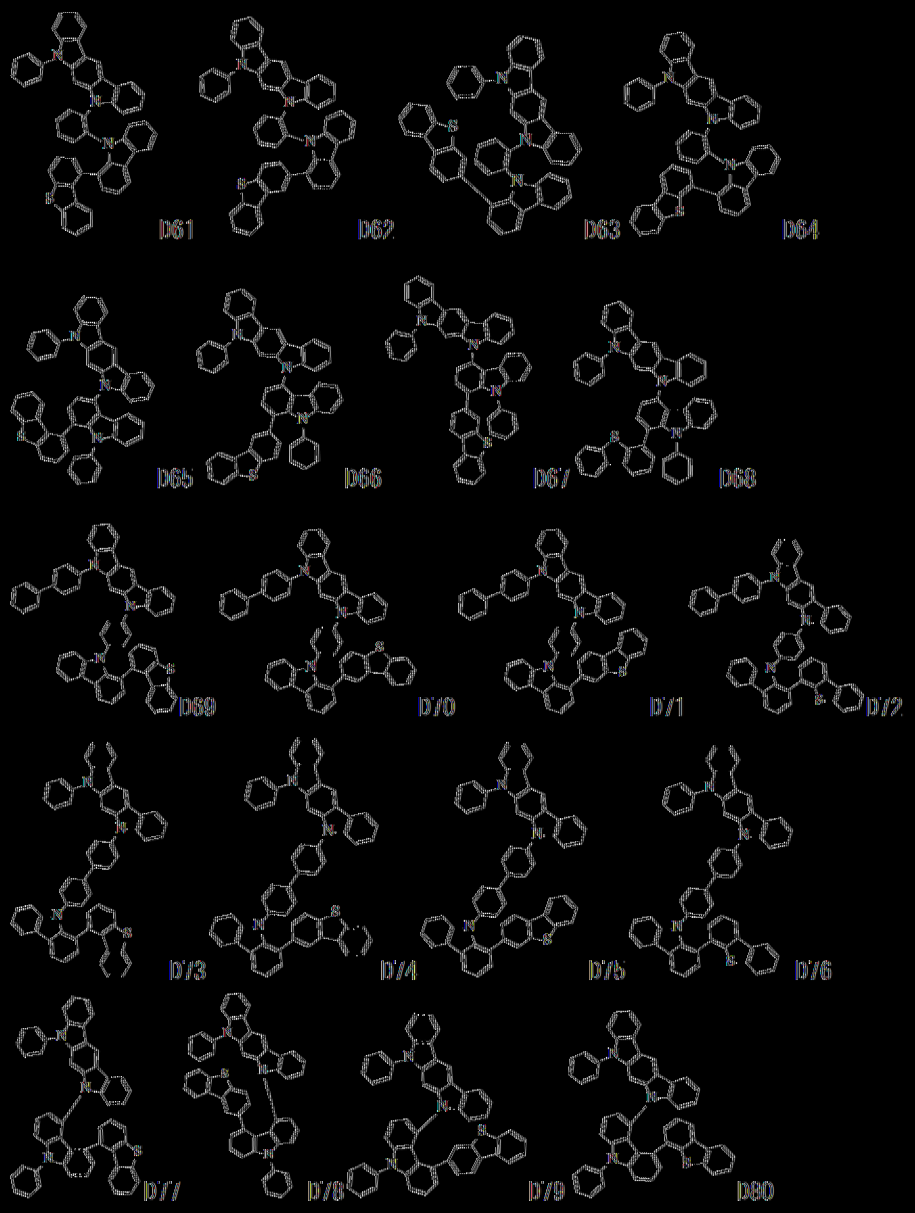
[化 24]


D21
D22
D23
D24
D25
D26
D27
D28
D29
D30
D31
D32
D33
D34
D35
D36
D37
D38
D39
D40

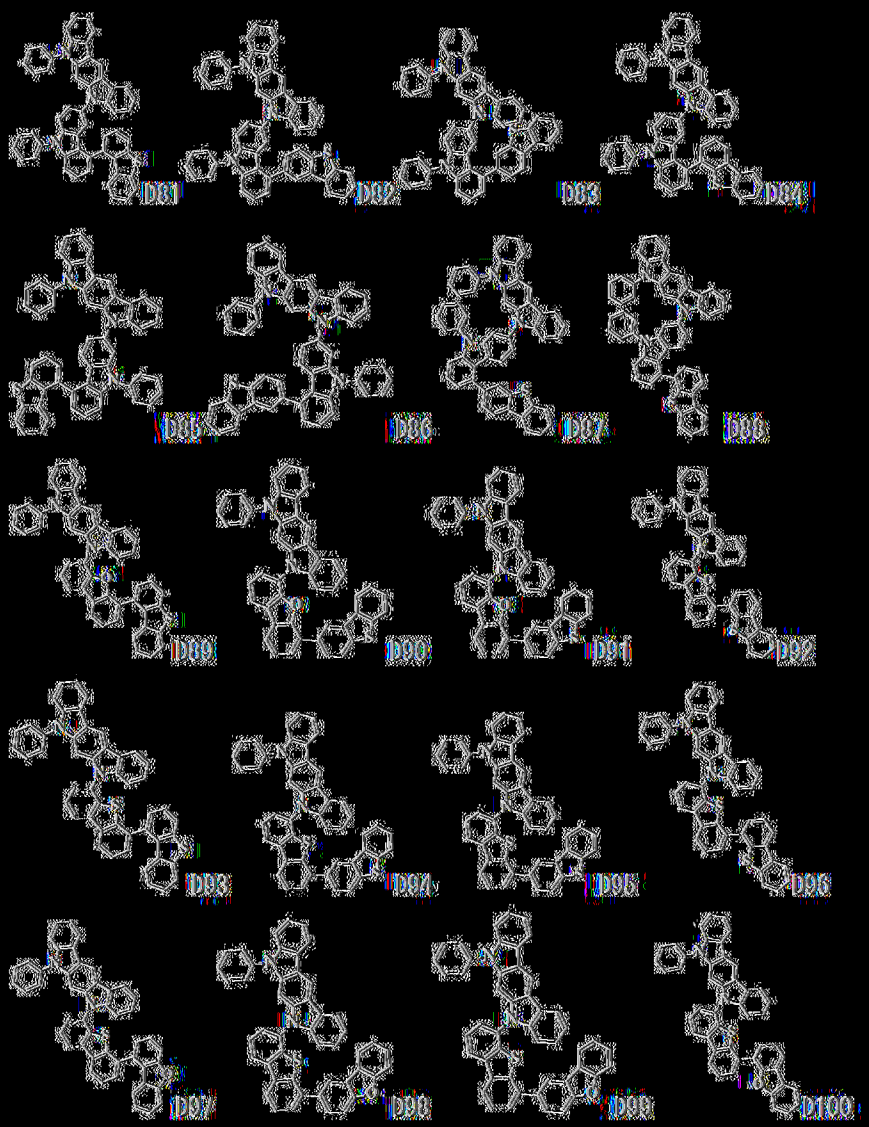
[化 25]


D41
D42
D43
D44
D45
D46
D47
D48
D49
D50
D51
D52
D53
D54
D55
D56
D57
D58
D59
D60

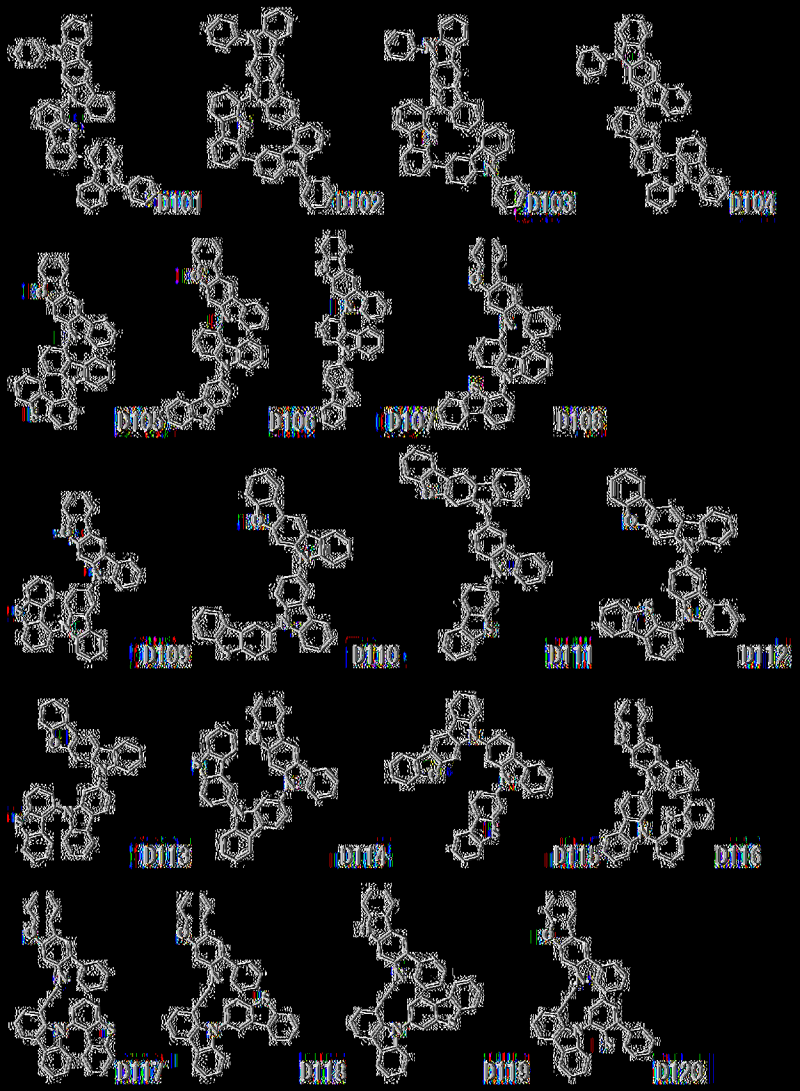
[化 26]


D61
D62
D63
D64
D65
D66
D67
D68
D69
D70
D71
D72
D73
D74
D75
D76
D77
D78
D79
D80

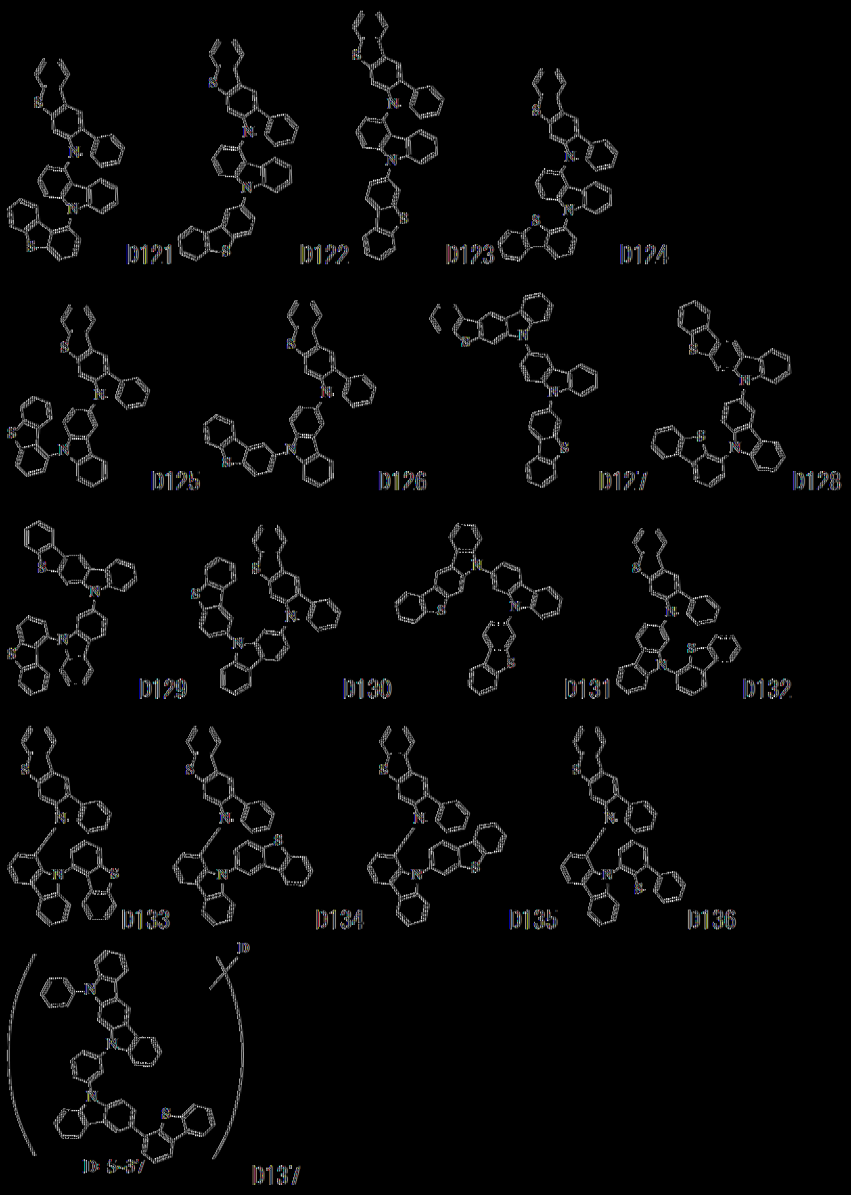
[化 27]


D81
D82
D83
D84
D85
D86
D87
D88
D89
D90
D91
D92
D93
D94
D95
D96
D97
D98
D99
D100

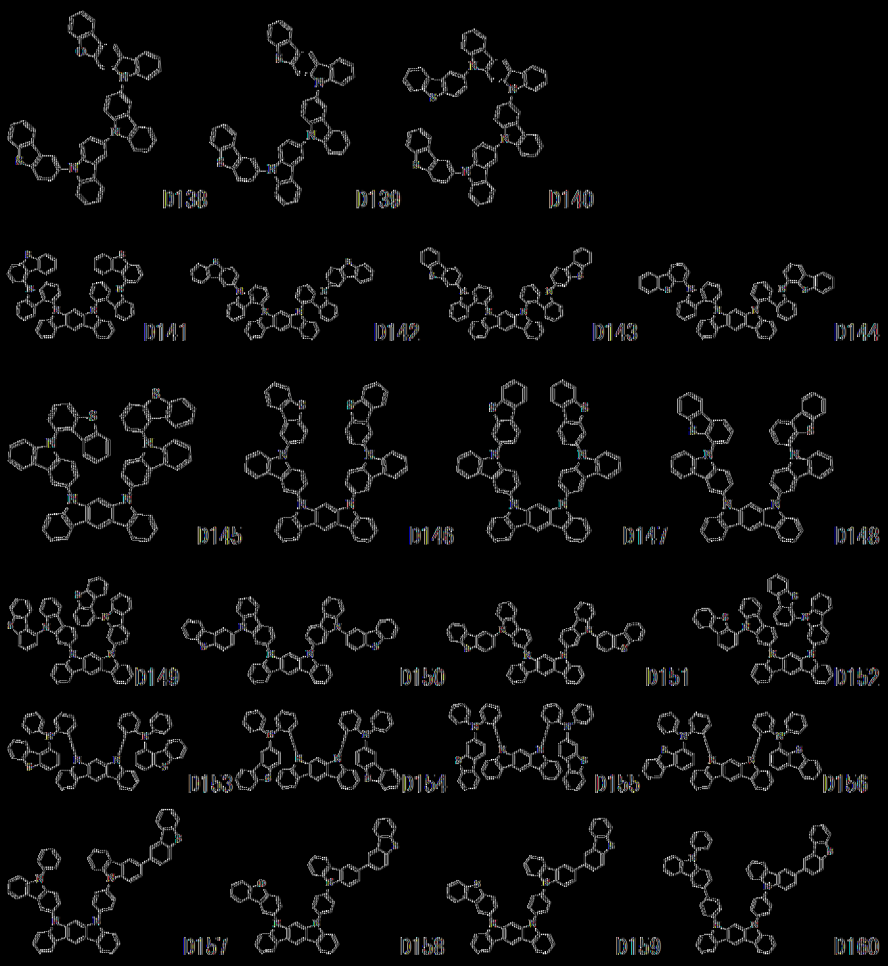
[化 28]


D101
D102
D103
D104
D105
D106
D107
D108
D109
D110
D111
D112
D113
D114
D115
D116
D117
D118
D119
D120

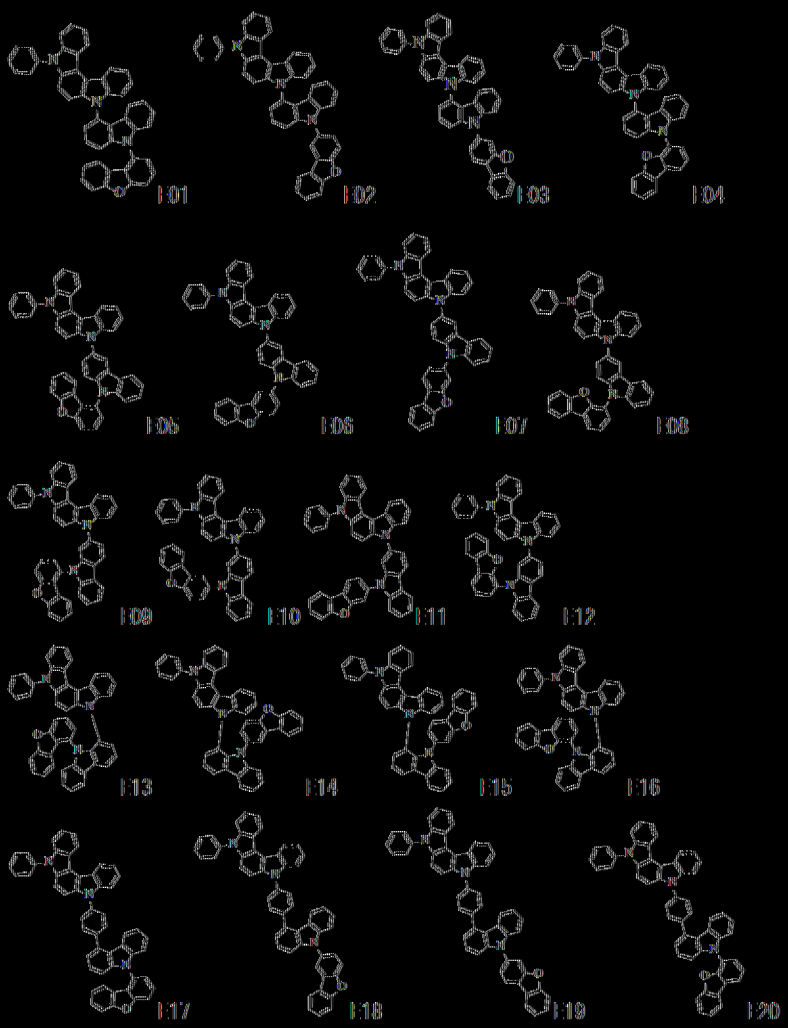
[化 29-1]


D121
D122
D123
D124
D125
D126
D127
D128
D129
D130
D131
D132
D133
D134
D135
D136
D137

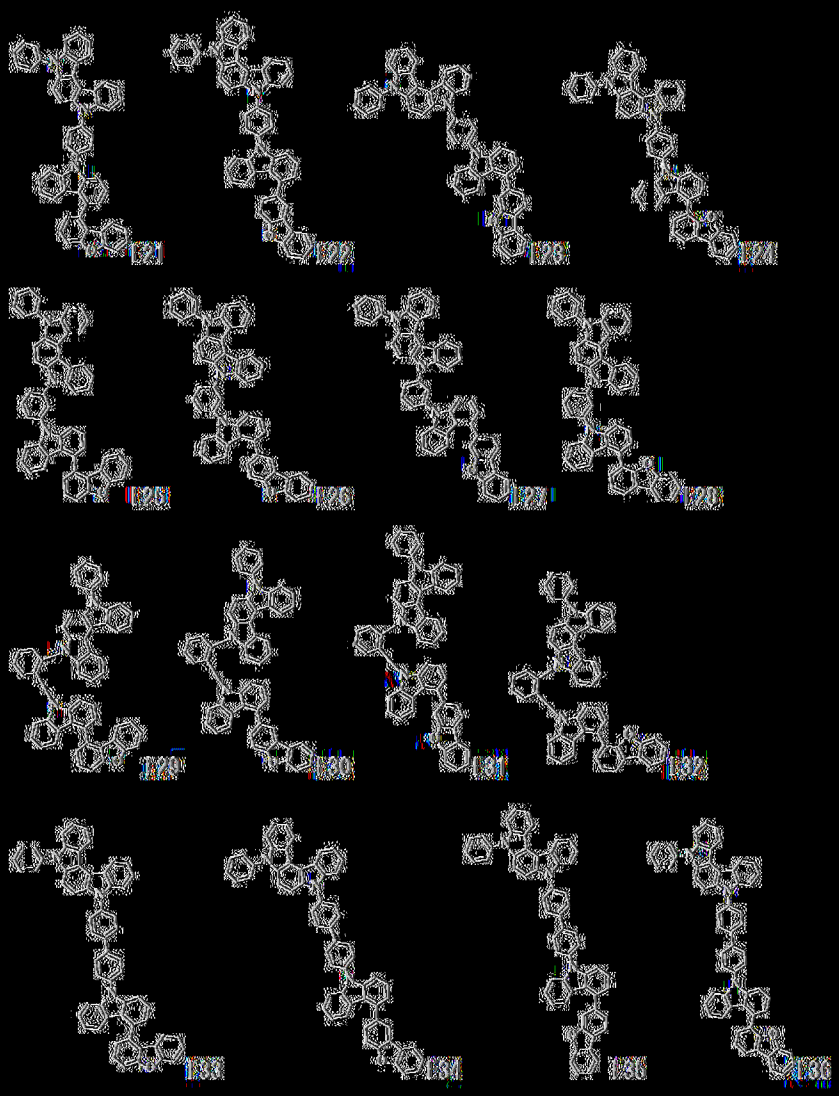
[化 29-2]


D138
D139
D140
D141
D142
D143
D144
D145
D146
D147
D148
D149
D150
D151
D152
D153
D154
D155
D156
D157
D158
D159
D160

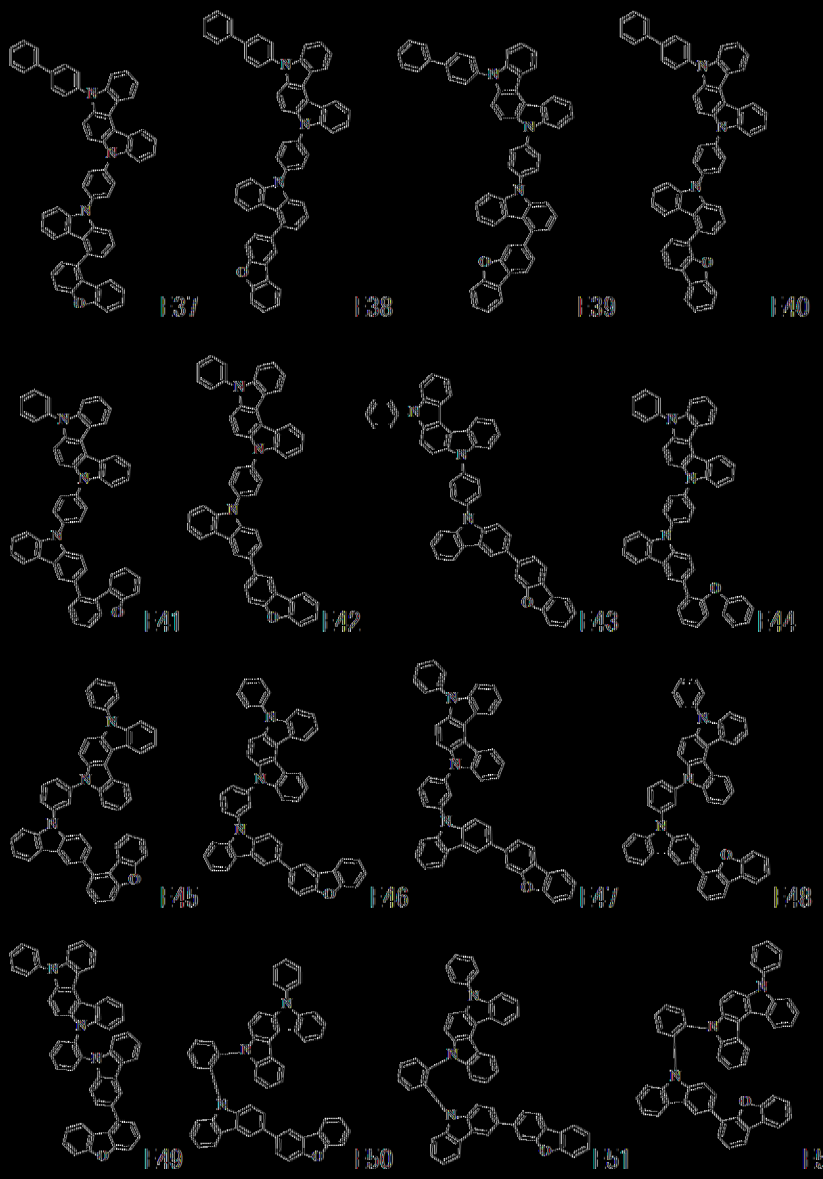
[化 30]


H01
H02
H03
H04
H05
H06
H07
H08
H09
H10
H11
H12
H13
H14
H15
H16
H17
H18
H19
H20

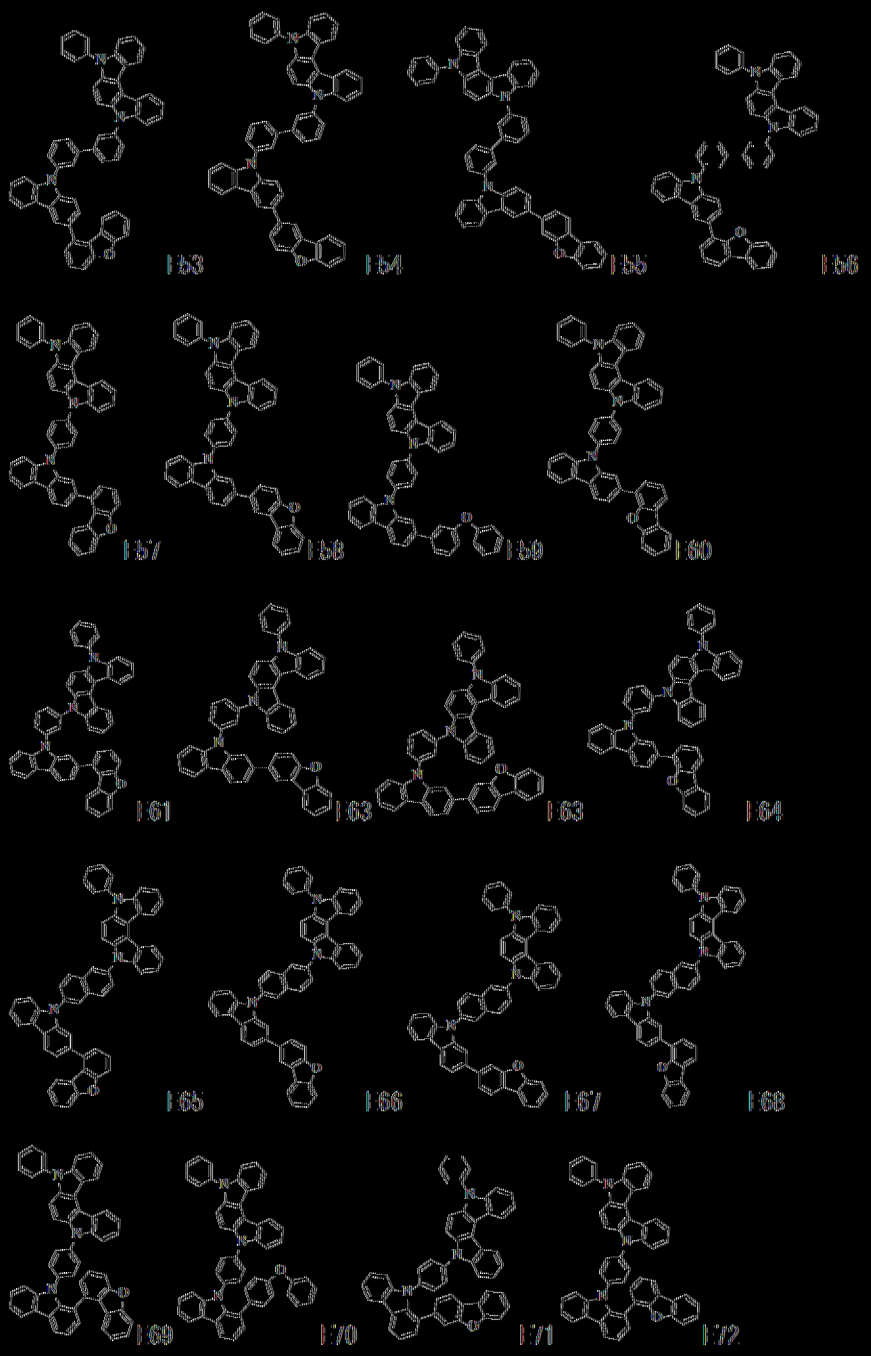
[化 31]



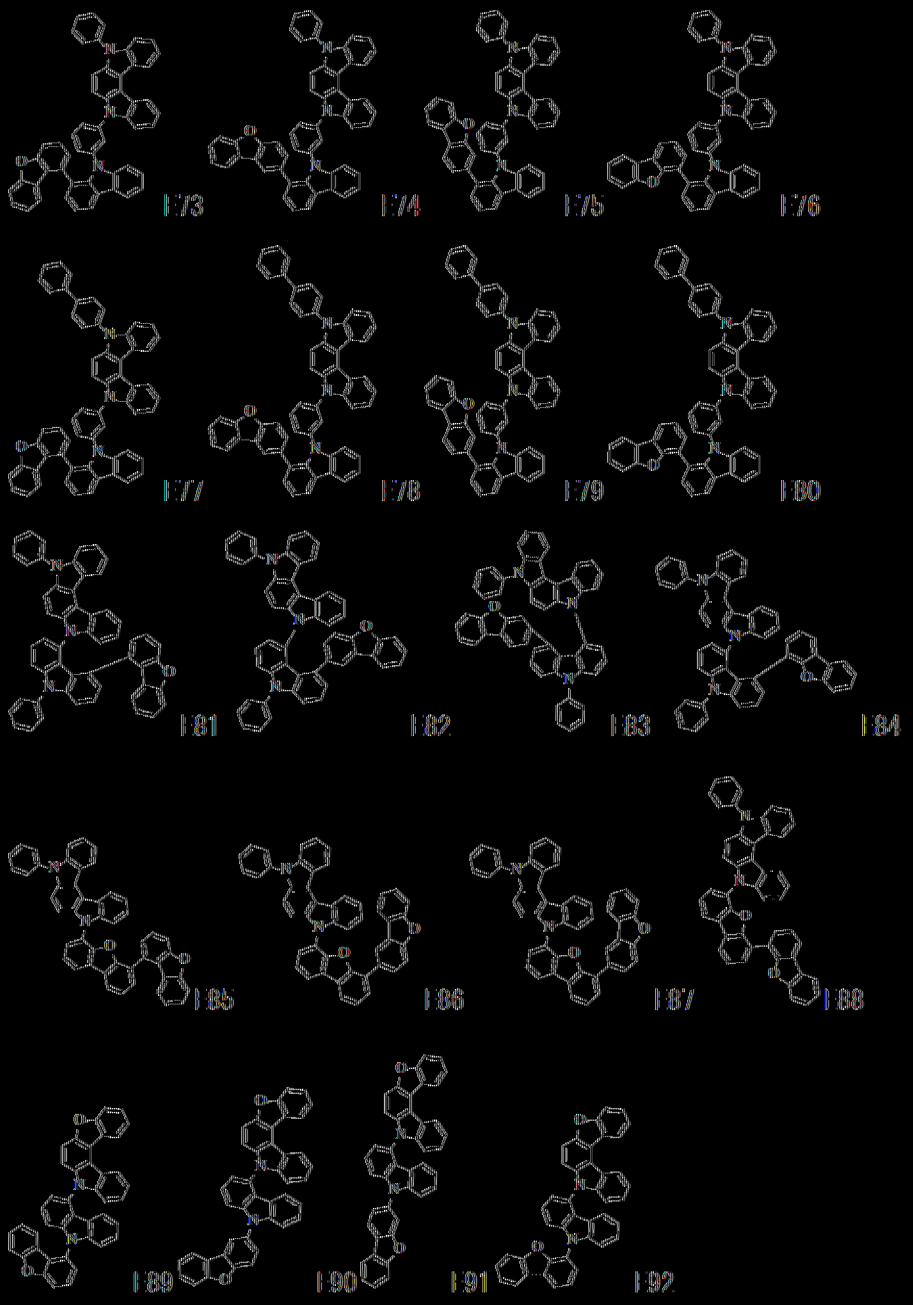
[化 32]



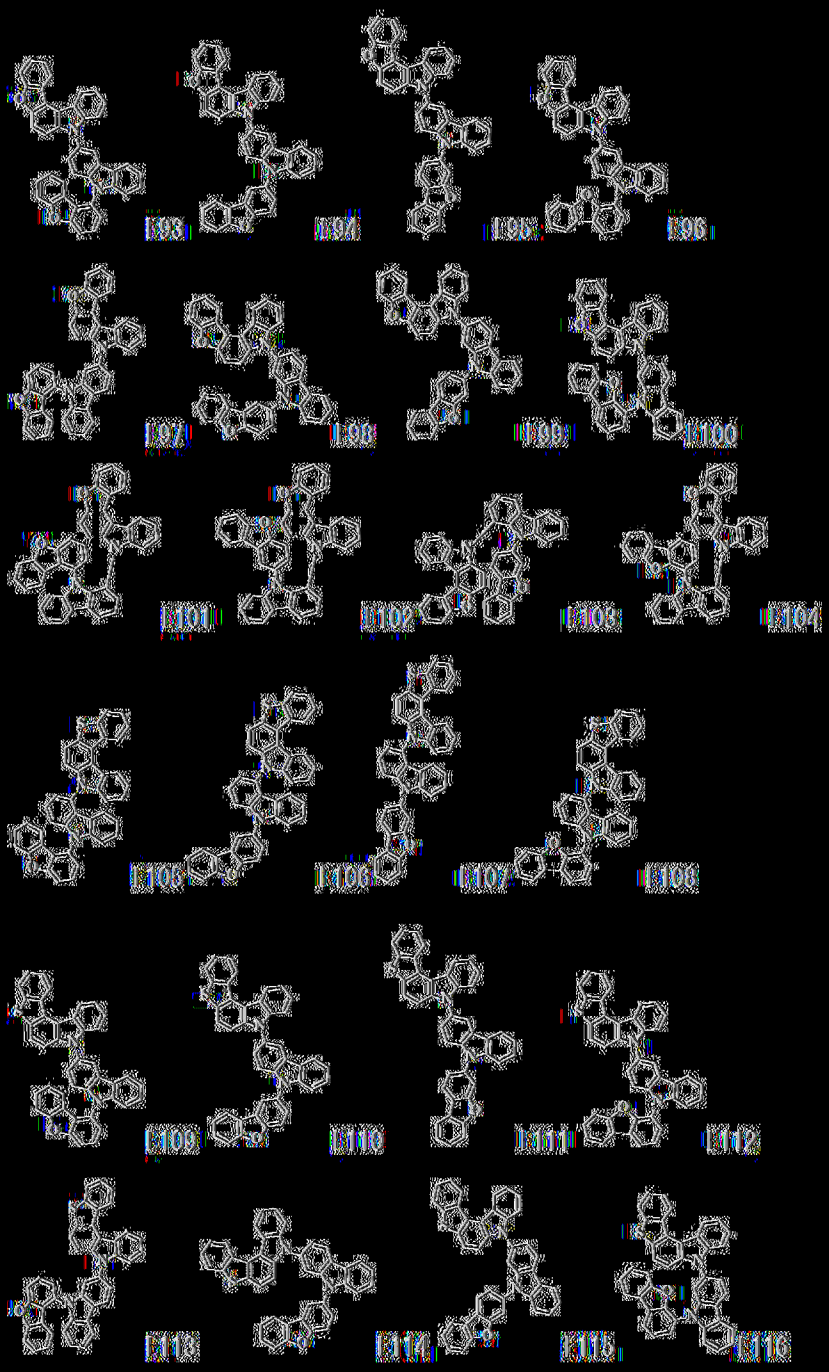
[化 33]



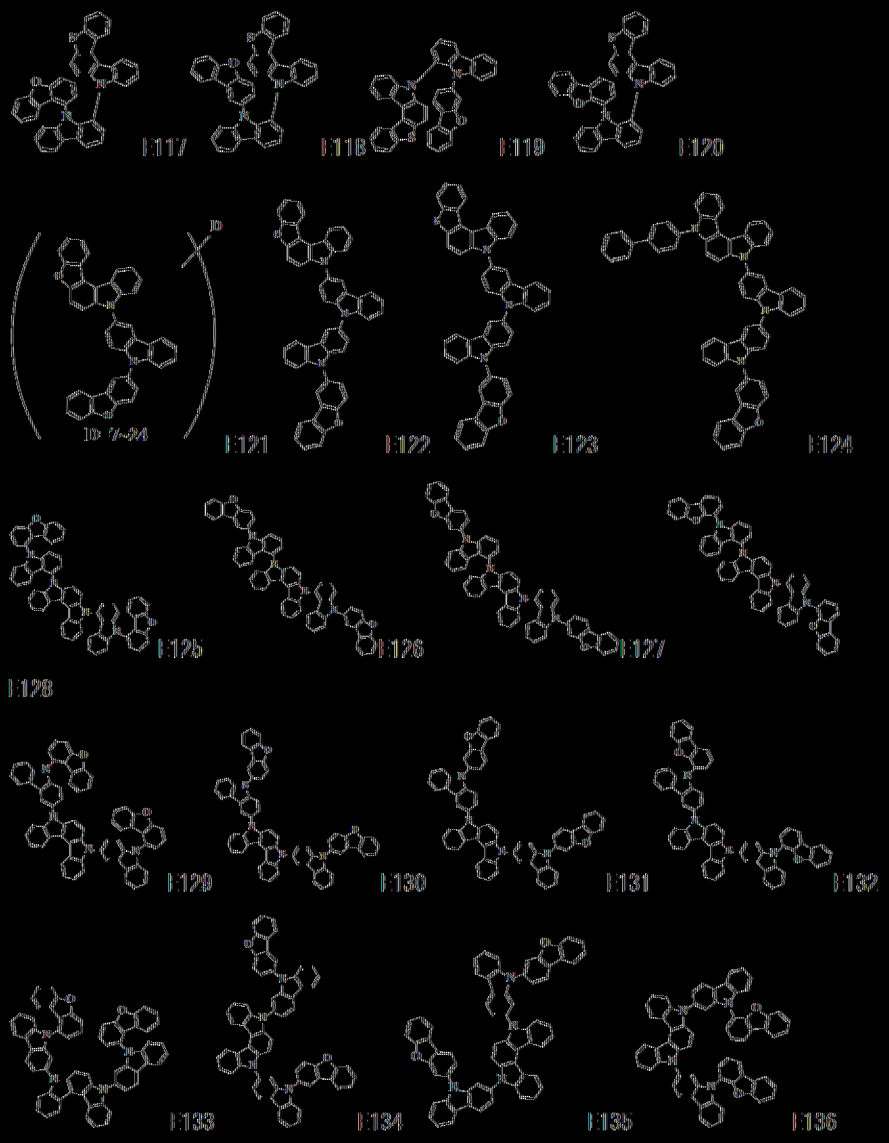
[化 34]



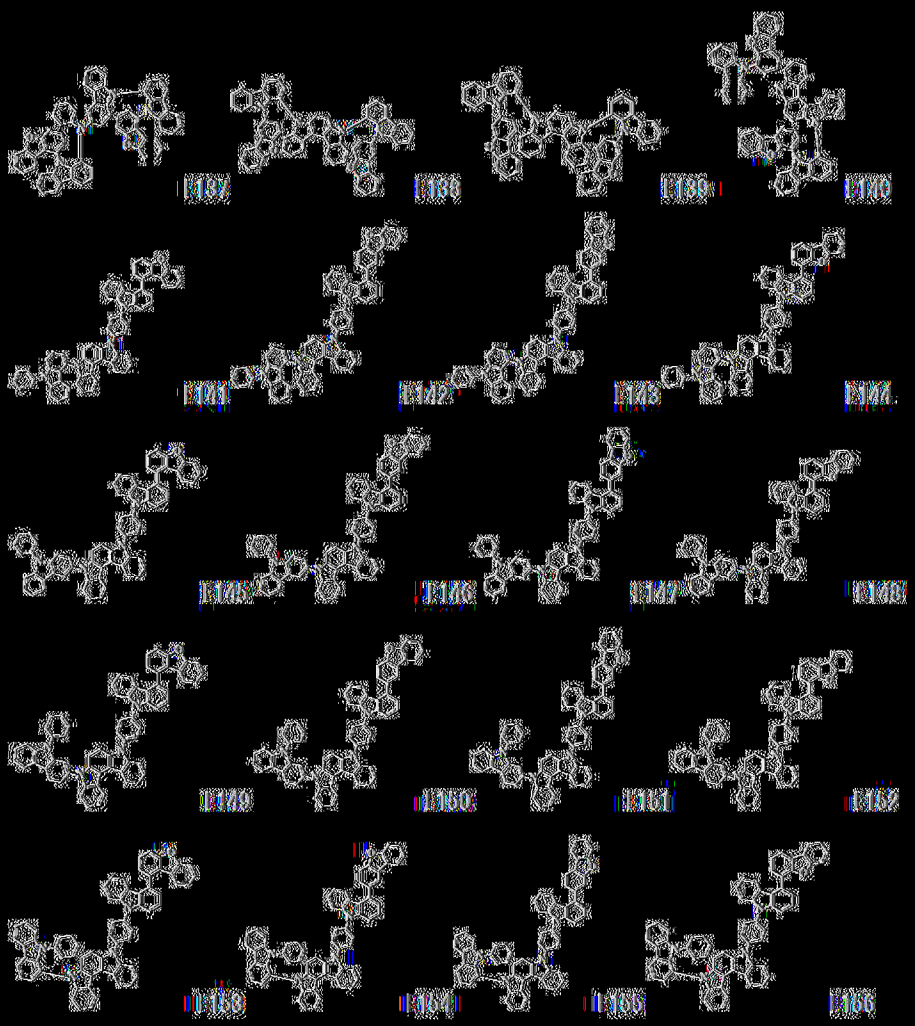
[化 35]


I-93
I-94
I-95
I-96
I-97
I-98
I-99
I-100
I-101
I-102
I-103
I-104
I-105
I-106
I-107
I-108
I-109
I-110
I-111
I-112
I-113
I-114
I-115
I-116

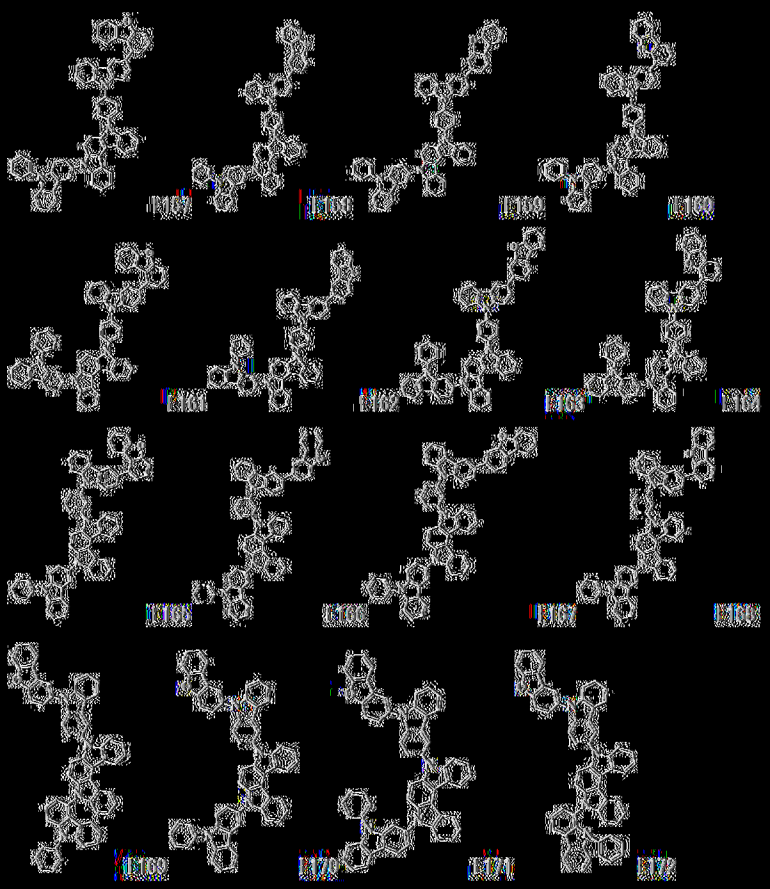
[化 36-1]


I-117
I-118
I-119
I-120
ID: 7~24
I-121
I-122
I-123
I-124
I-125
I-126
I-127
I-128
I-129
I-130
I-131
I-132
I-133
I-134
I-135
I-136

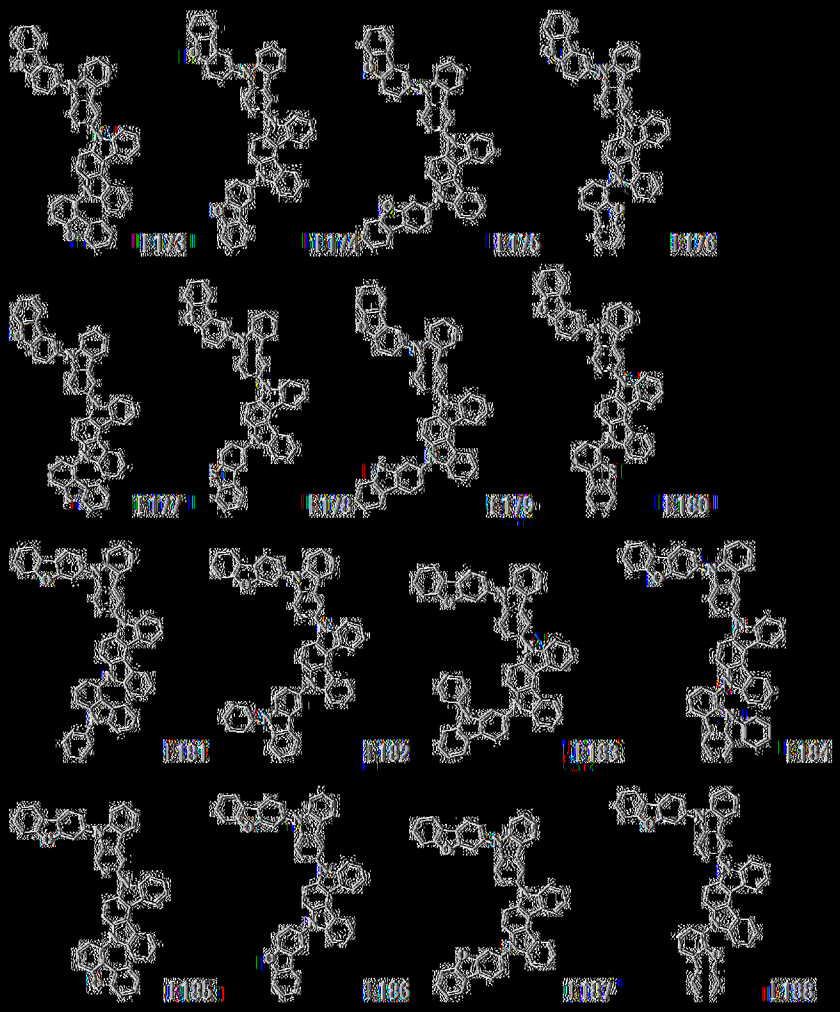
[化學式 36-2]


136
137
138
139
140
141
142
143
144
145
146
147
148
149
150
151
152
153
154
155
156

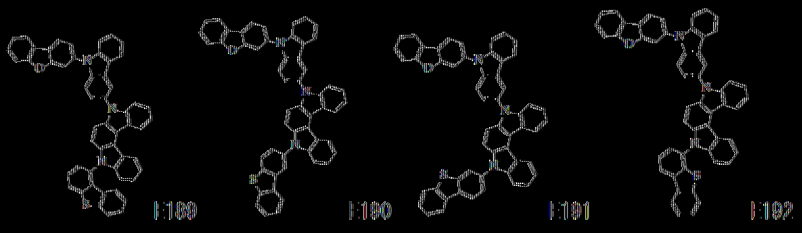
[圖 36-3]



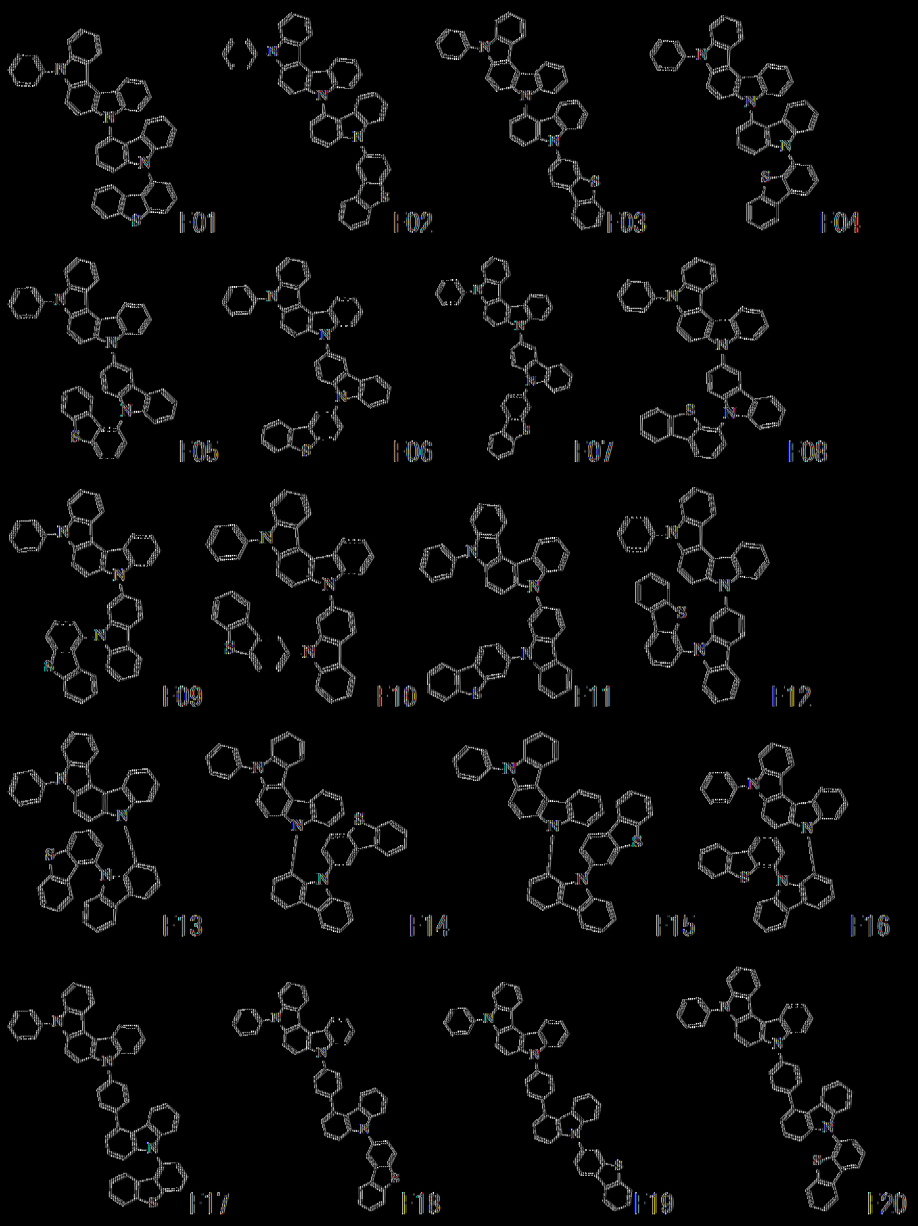
[化 36-4]



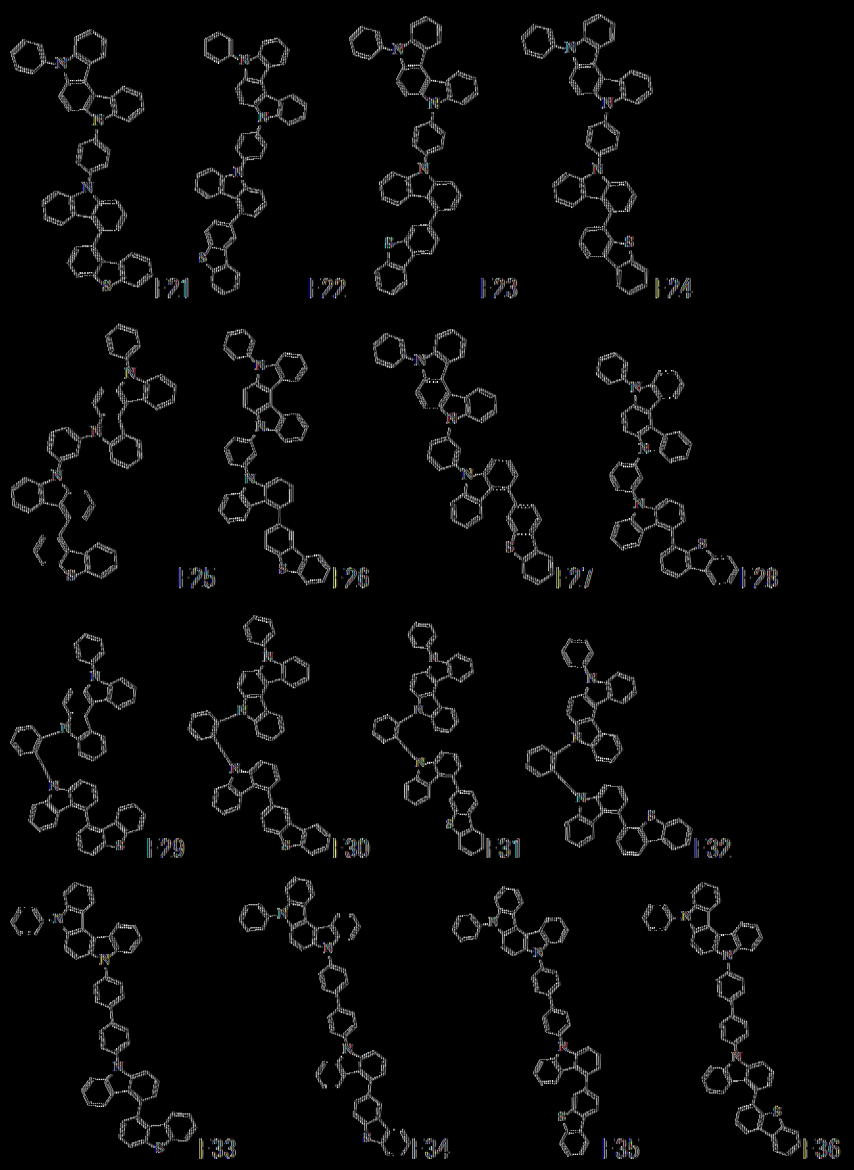
[化 36-5]



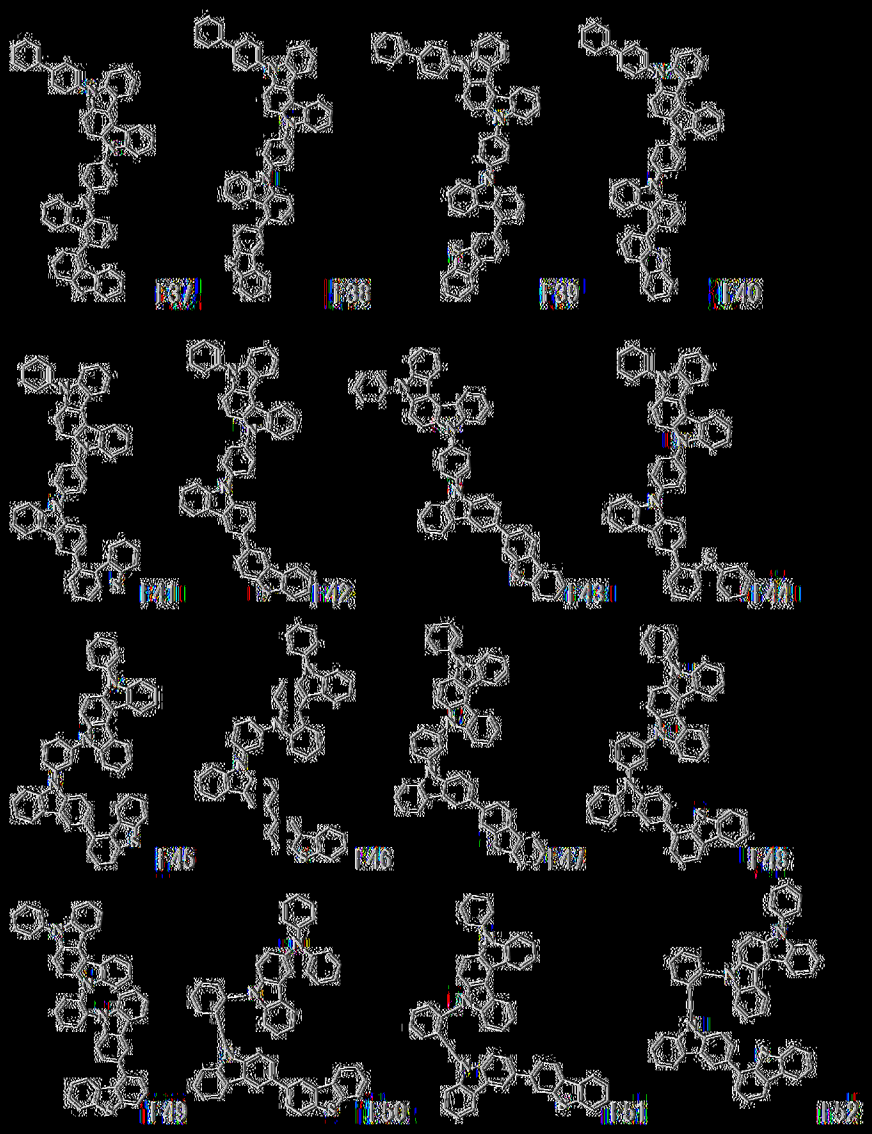
[化 37]


I-01
I-02
I-03
I-04
I-05
I-06
I-07
I-08
I-09
I-10
I-11
I-12
I-13
I-14
I-15
I-16
I-17
I-18
I-19
I-20

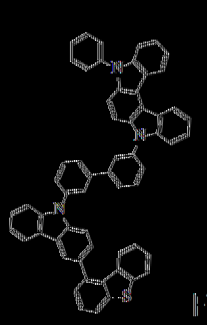
[化 38]

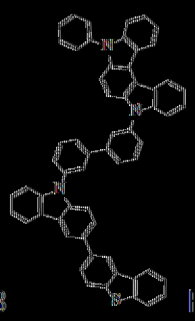


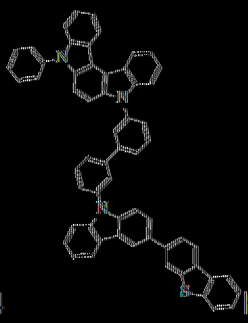
[化: 39]

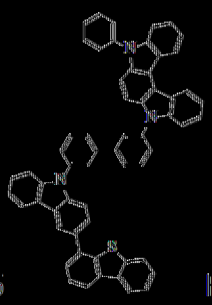


[化 40]

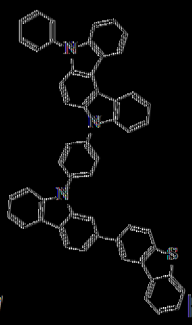

化 53

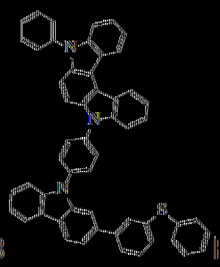

化 54

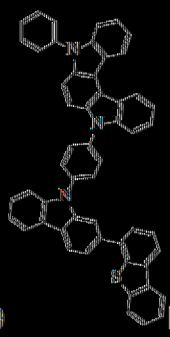

化 55

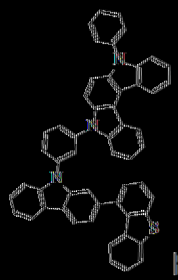

化 56

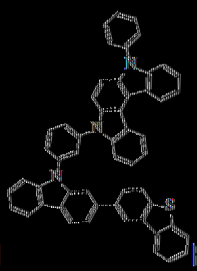

化 57

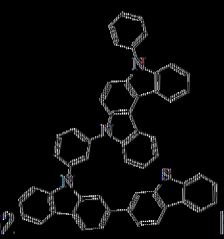

化 58

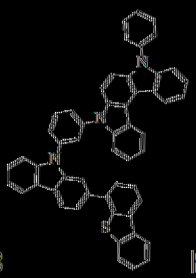

化 59

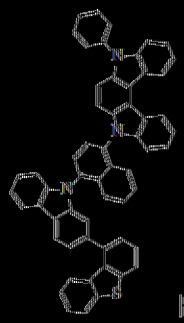

化 60

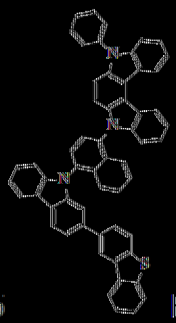

化 61

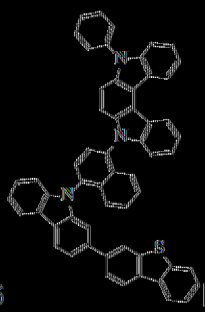

化 62

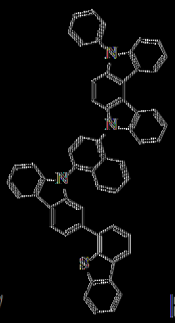

化 63


化 64

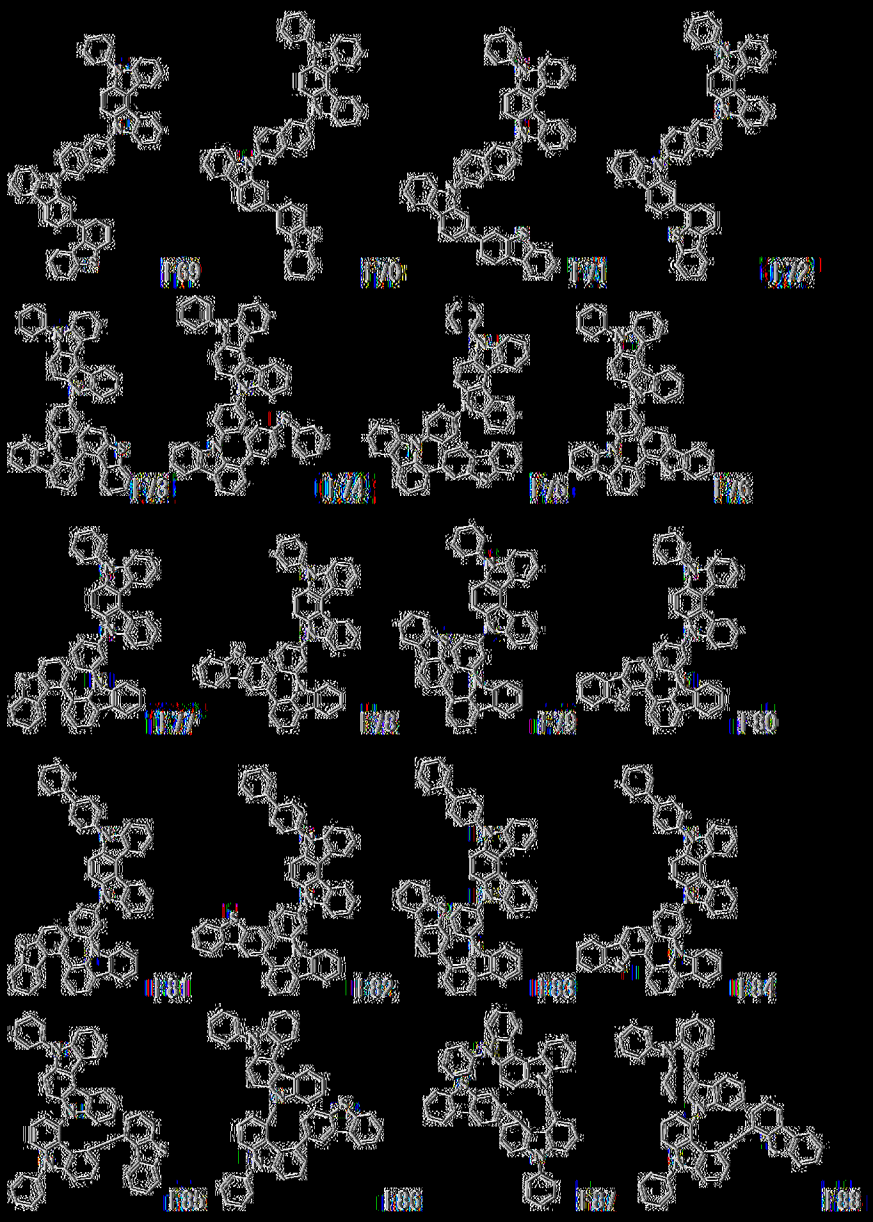

化 65


化 66

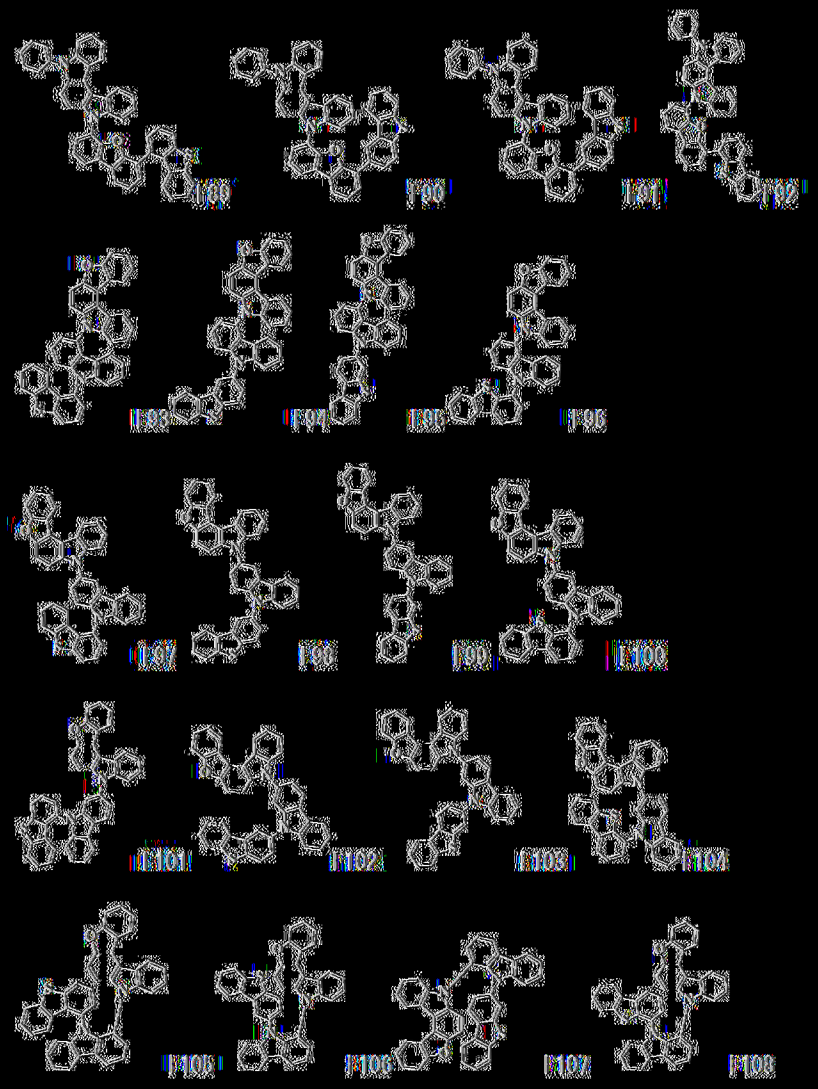

化 67


化 68

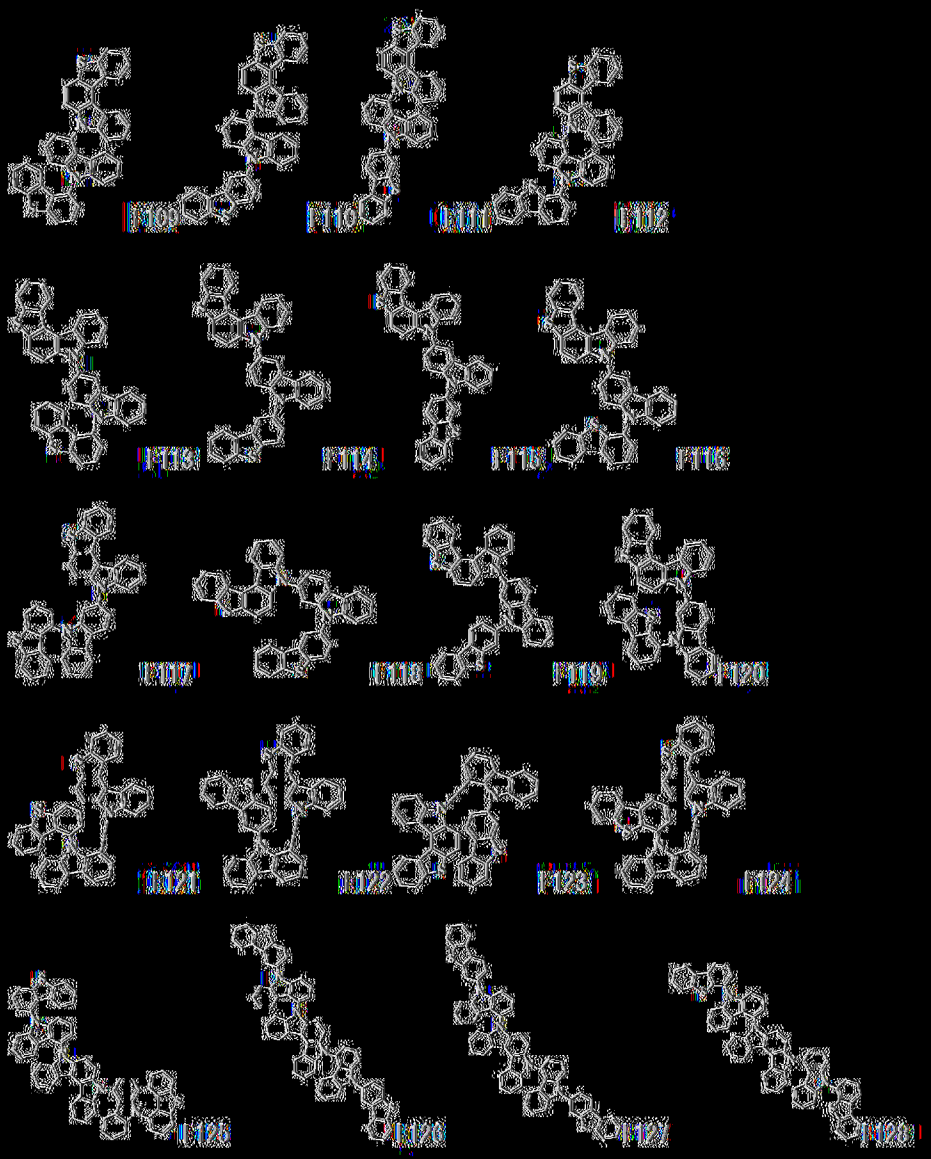
[化 41]



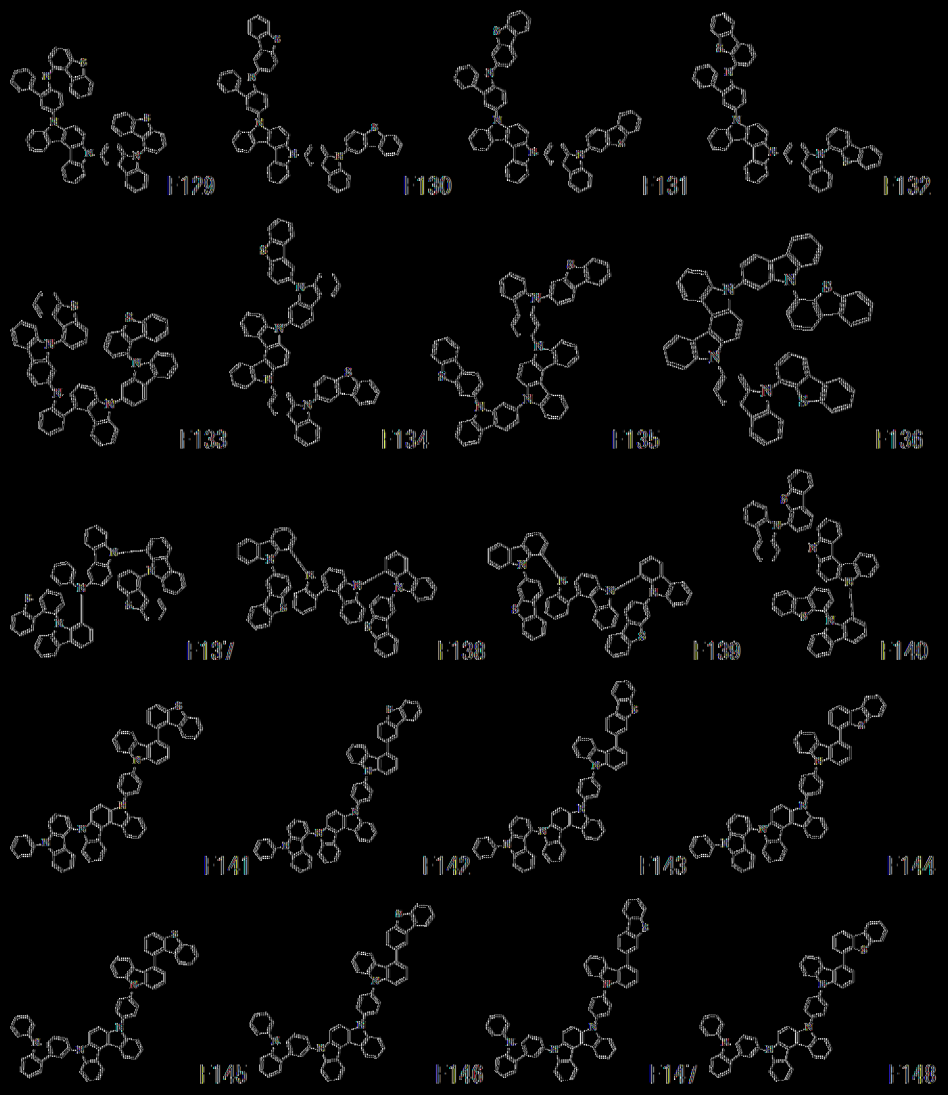
[化 42]



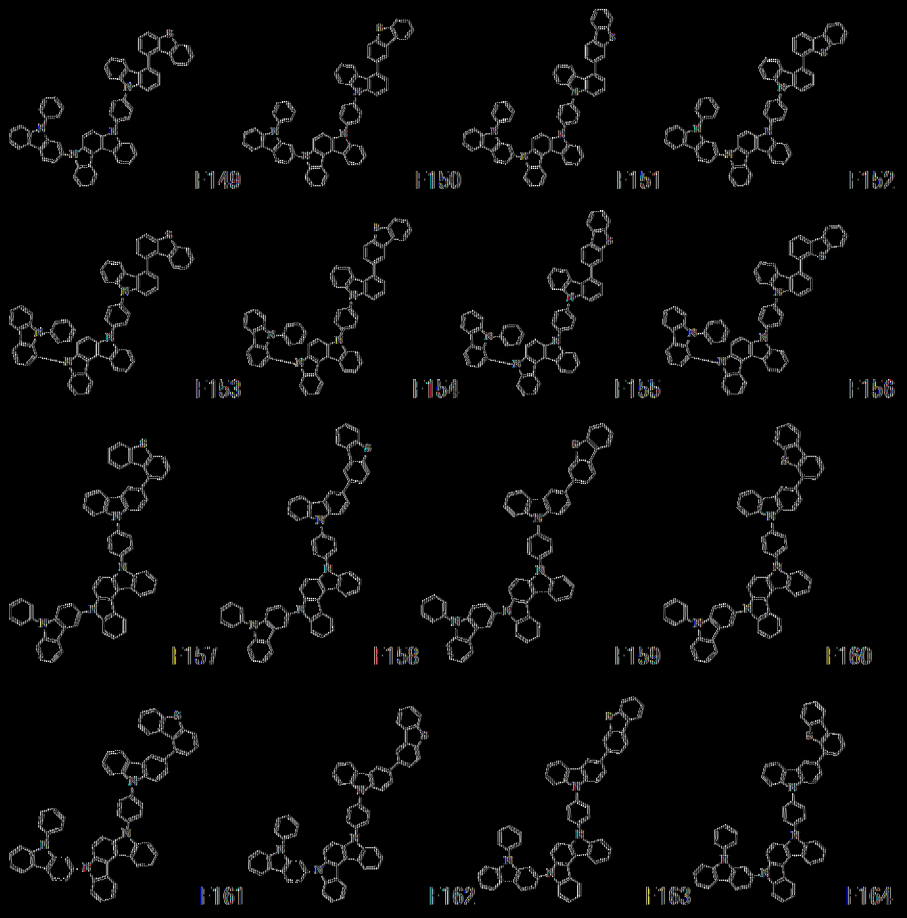
[化 43-1]



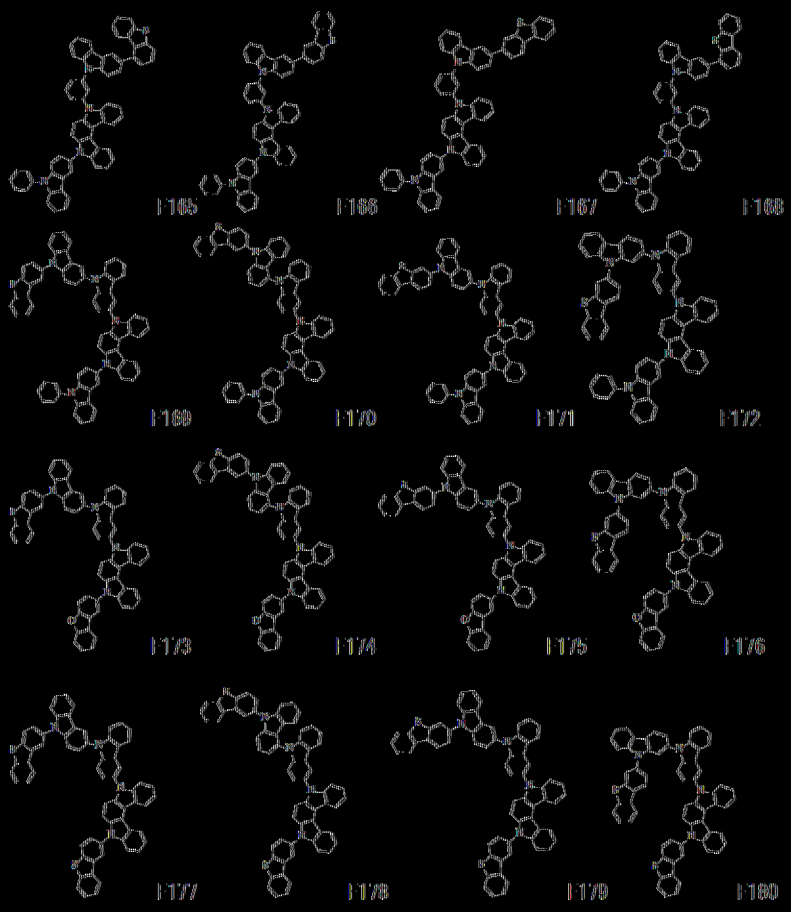
[化學式 43-2]


I-129
I-130
I-131
I-132
I-133
I-134
I-135
I-136
I-137
I-138
I-139
I-140
I-141
I-142
I-143
I-144
I-145
I-146
I-147
I-148

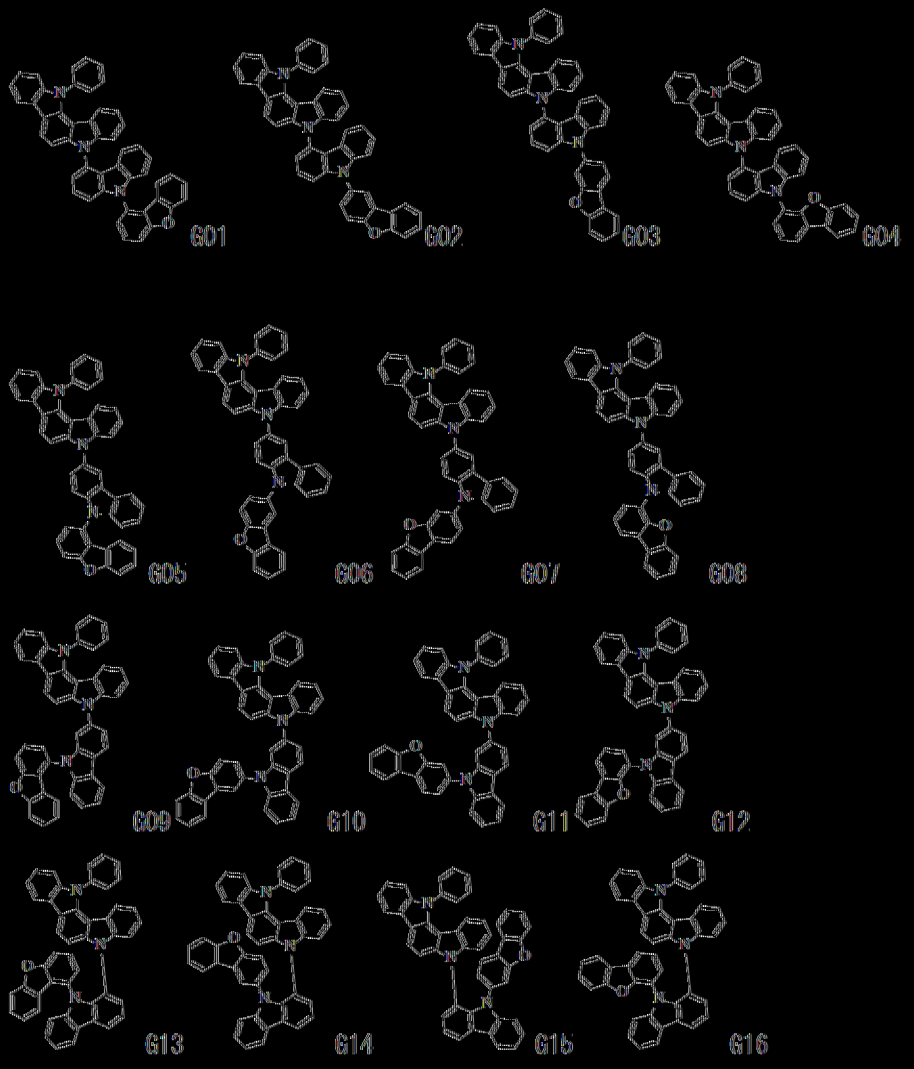
[化 43-3]


I-149
I-150
I-151
I-152
I-153
I-154
I-155
I-156
I-157
I-158
I-159
I-160
I-161
I-162
I-163
I-164

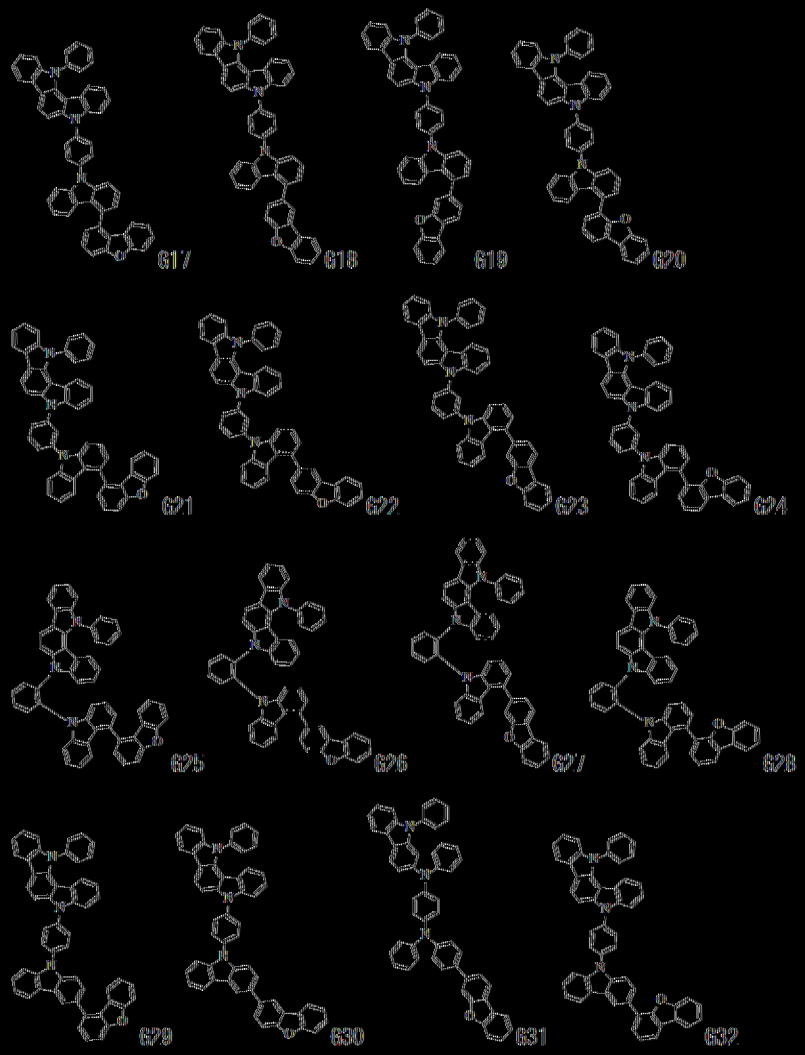
[化 43-4]


I-165
I-166
I-167
I-168
I-169
I-170
I-171
I-172
I-173
I-174
I-175
I-176
I-177
I-178
I-179
I-180

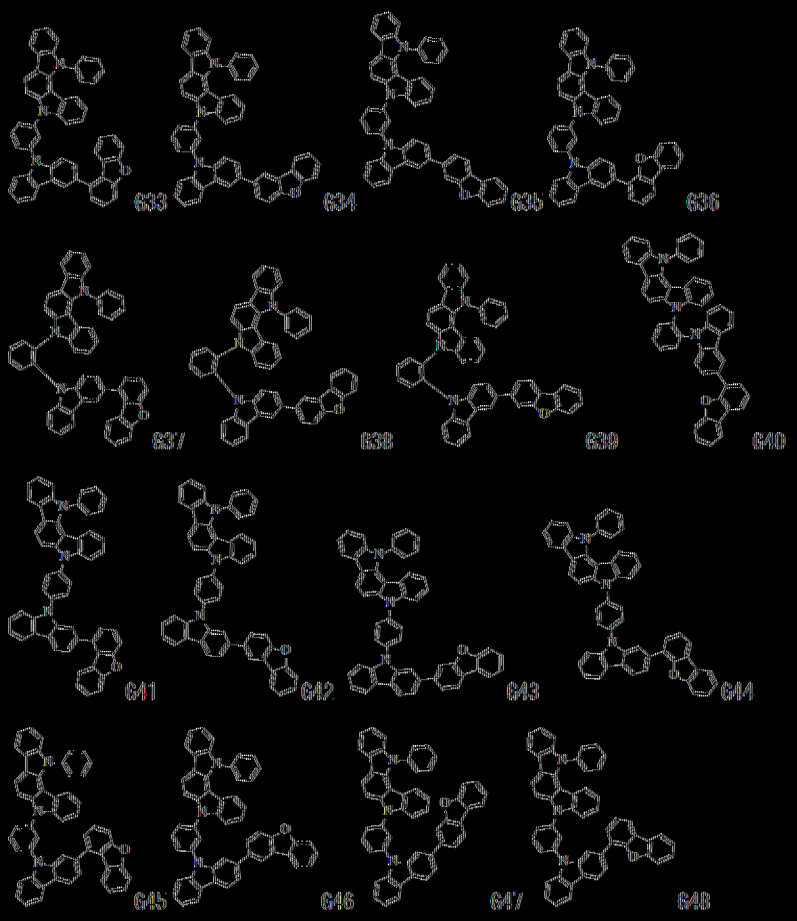
[化 44]



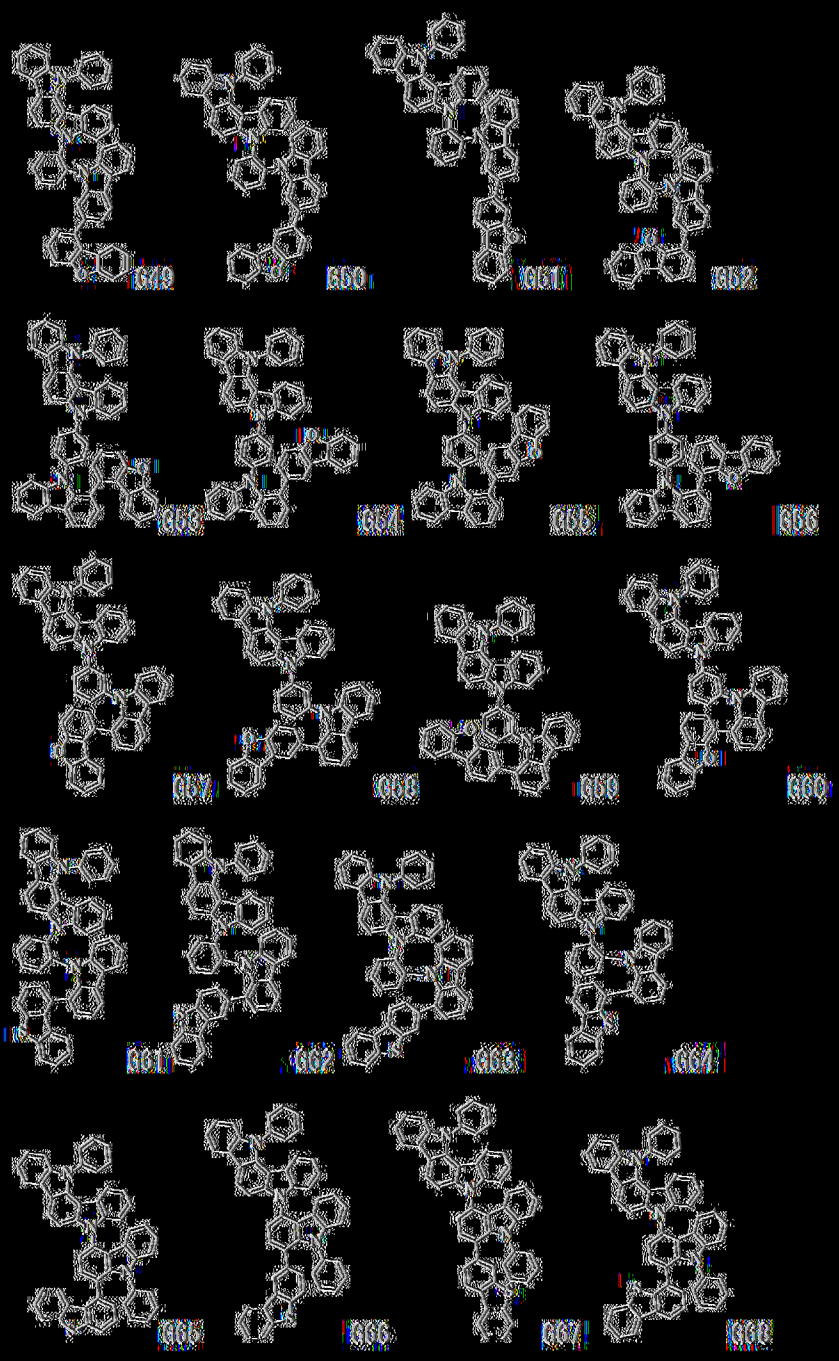
[化 45]



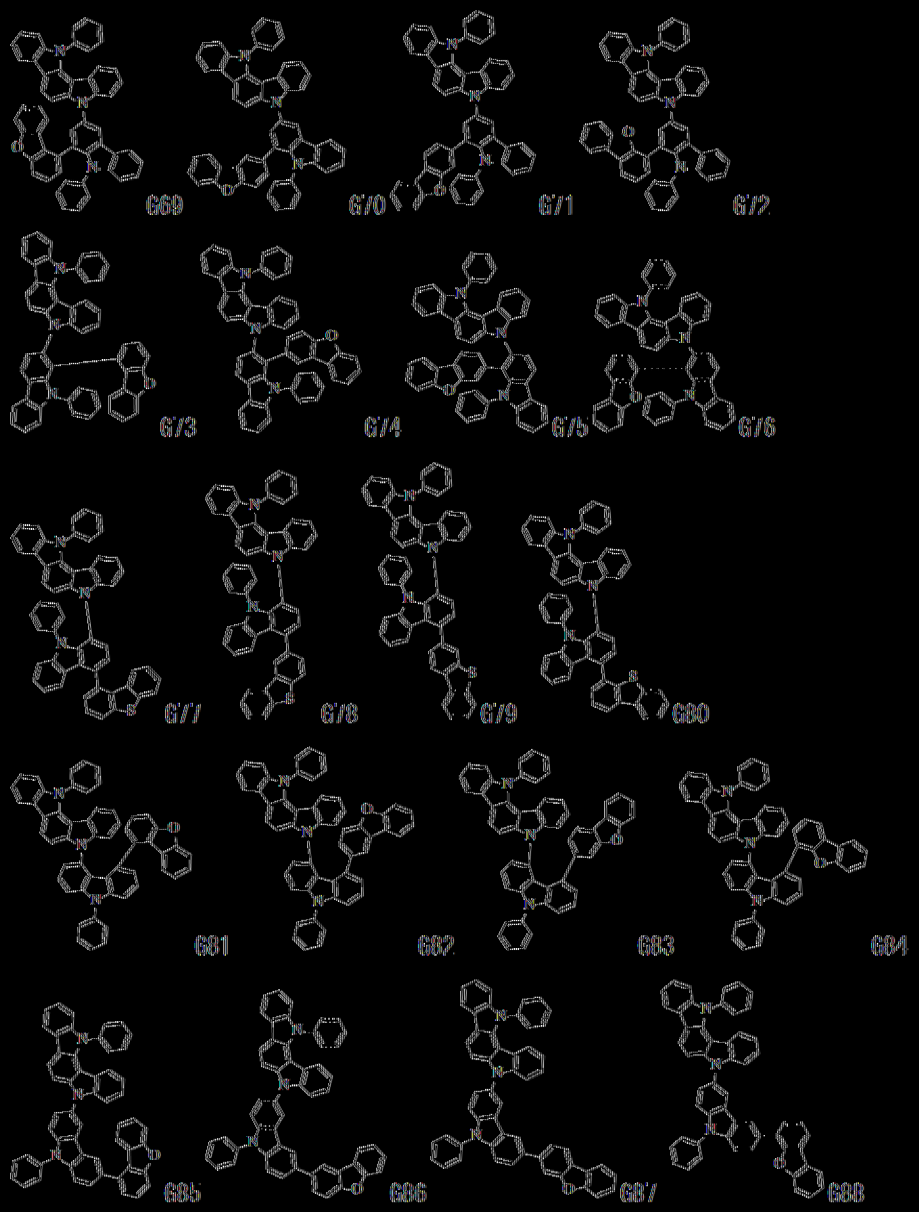
[化 46]



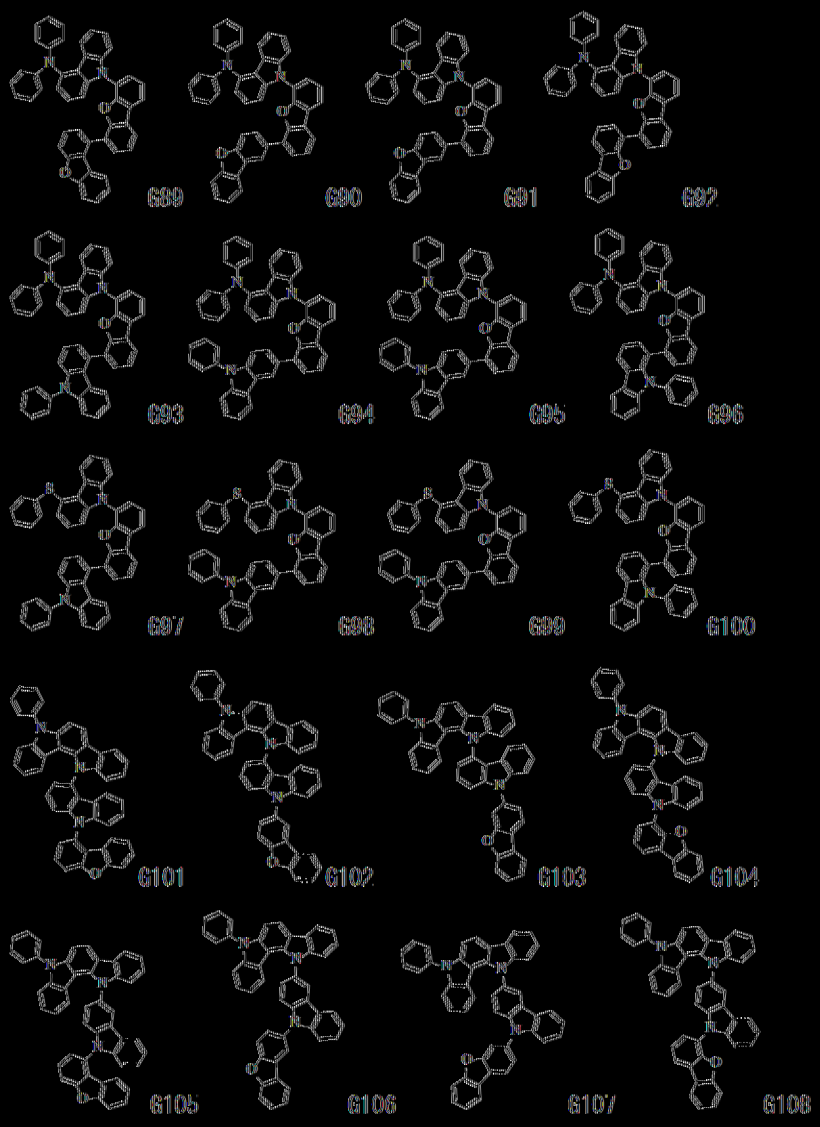
[化 47]


649
650
651
652
653
654
655
656
657
658
659
660
661
662
663
664
665
666
667
668

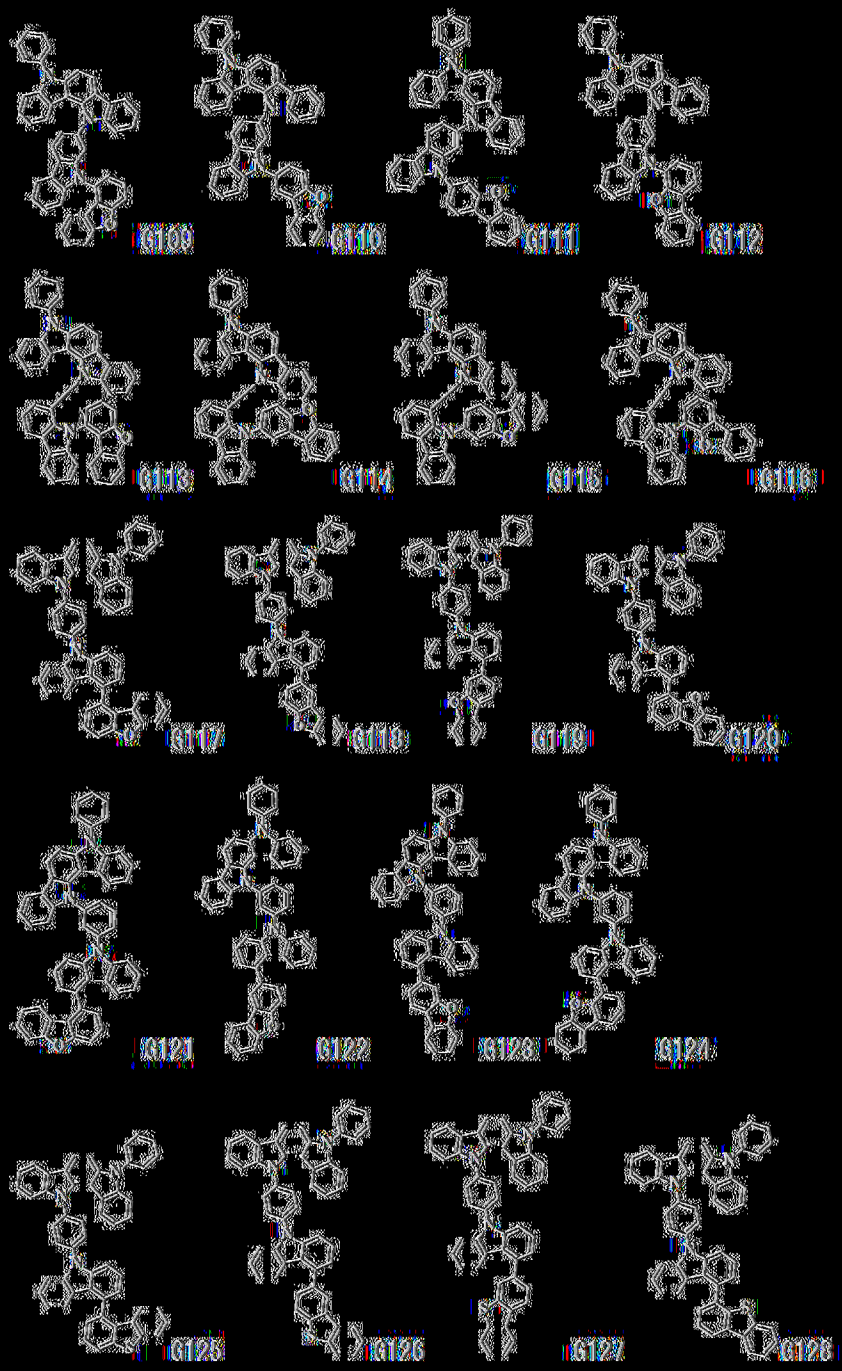
[化 48]


G69
G70
G71
G72
G73
G74
G75
G76
G77
G78
G79
G80
G81
G82
G83
G84
G85
G86
G87
G88

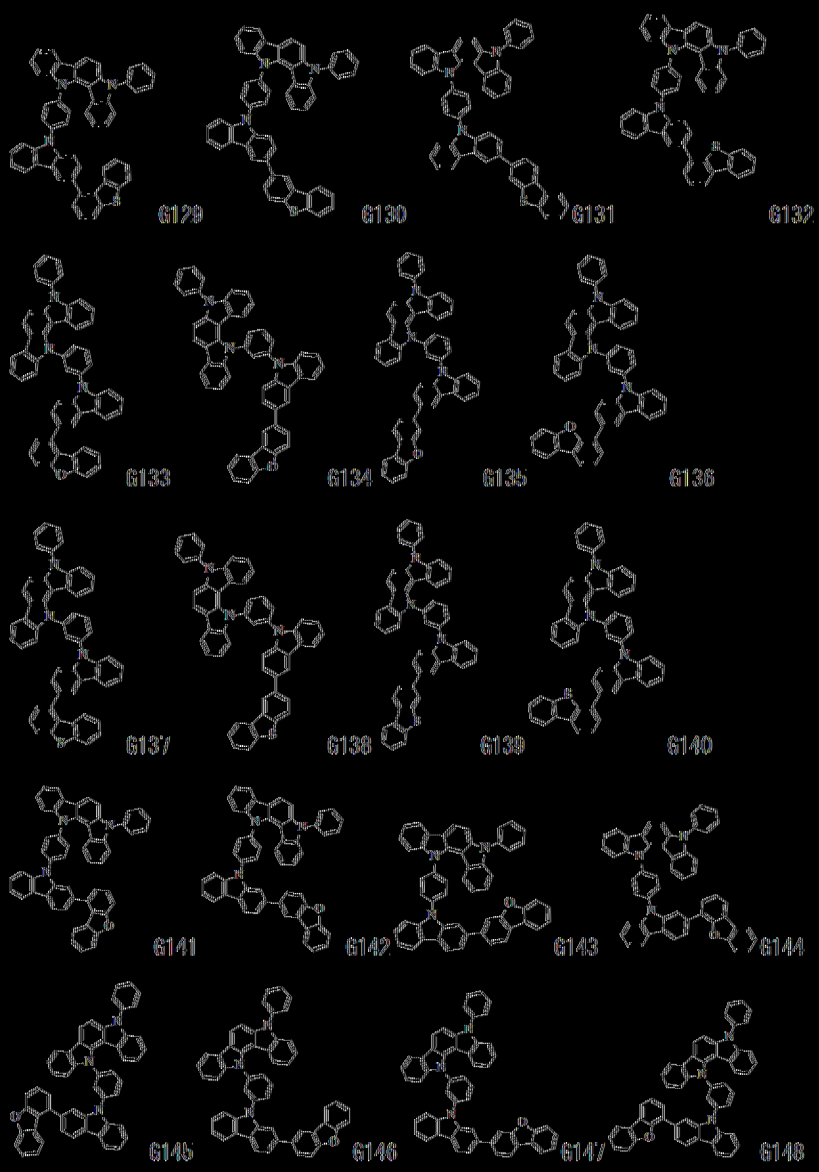
[化 49]


G89
G90
G91
G92
G93
G94
G95
G96
G97
G98
G99
G100
G101
G102
G103
G104
G105
G106
G107
G108

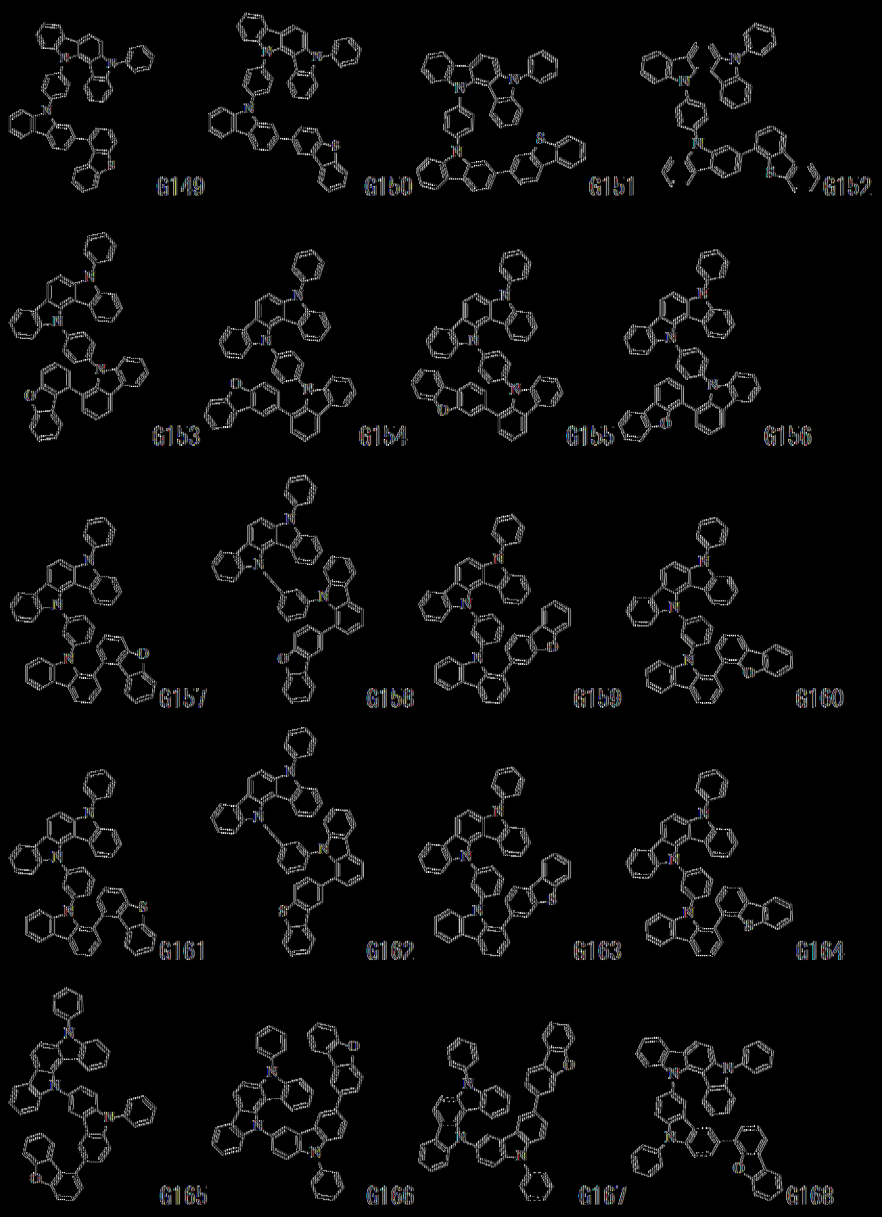
[化 50]


G109
G110
G111
G112
G113
G114
G115
G116
G117
G118
G119
G120
G121
G122
G123
G124
G125
G126
G127
G128

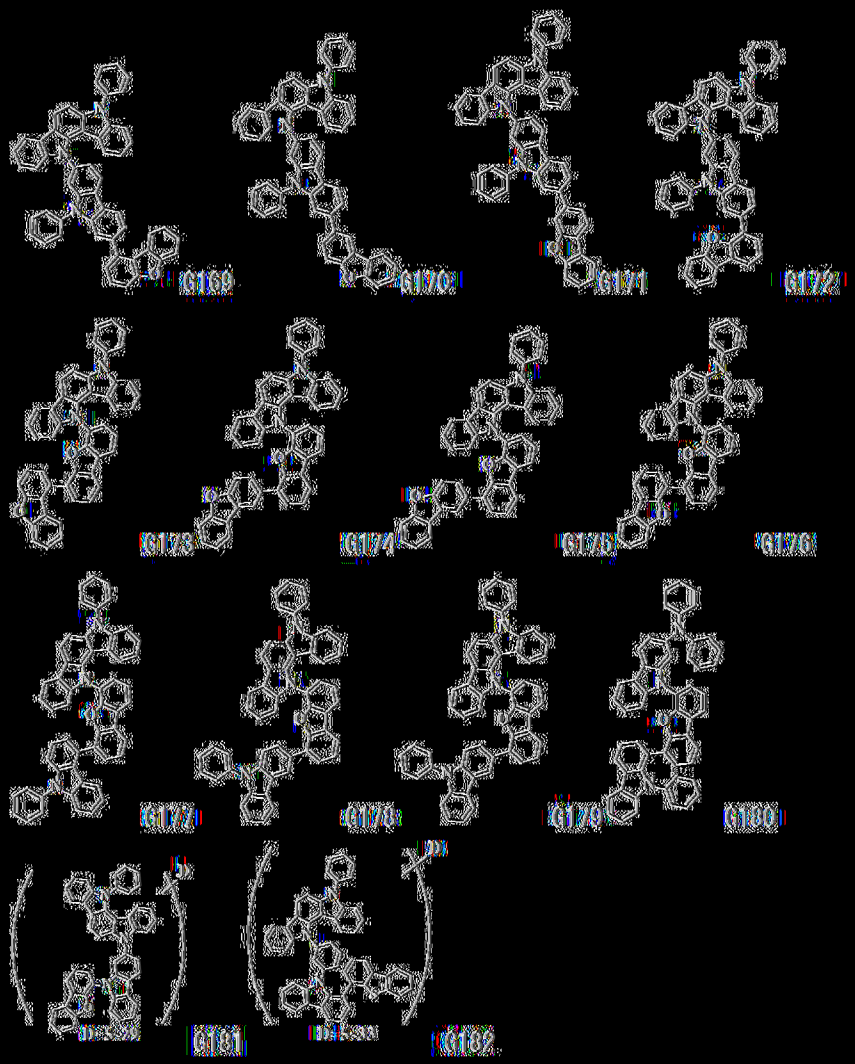
[化 51]


G129
G130
G131
G132
G133
G134
G135
G136
G137
G138
G139
G140
G141
G142
G143
G144
G145
G146
G147
G148

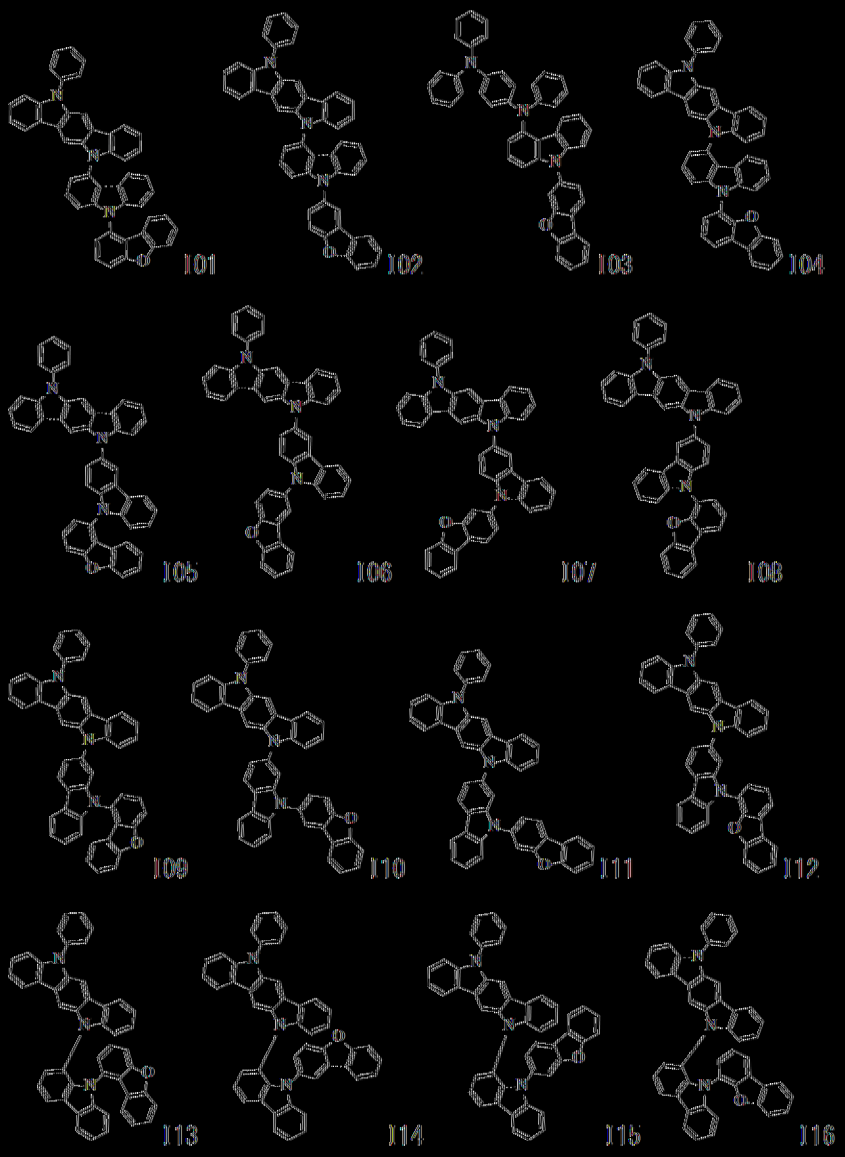
[化 52]


G149
G150
G151
G152
G153
G154
G155
G156
G157
G158
G159
G160
G161
G162
G163
G164
G165
G166
G167
G168

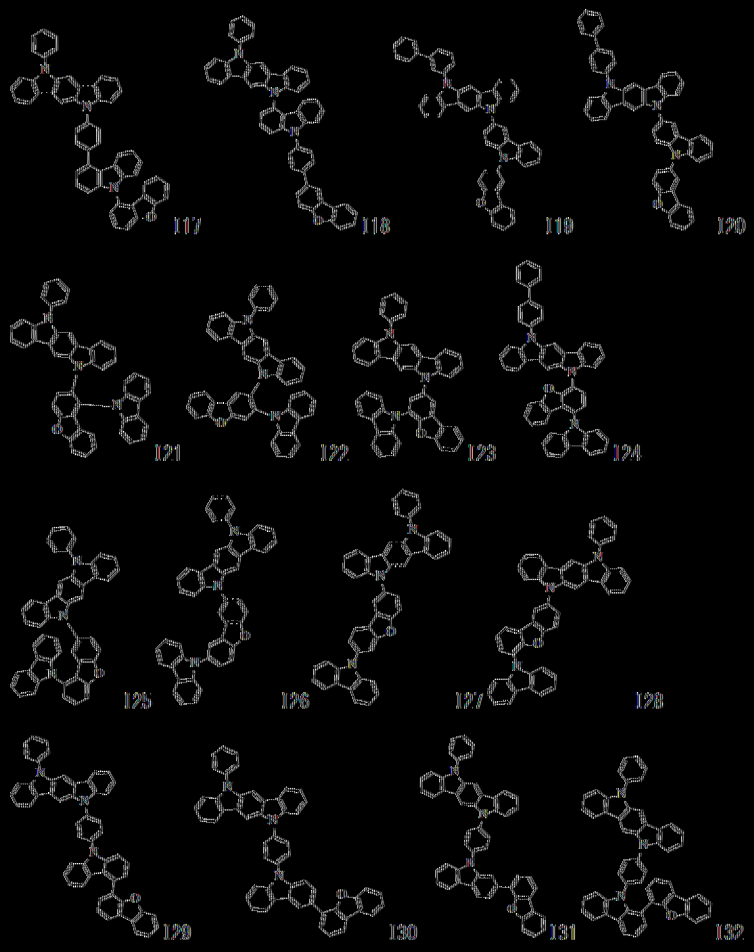
[化 53]



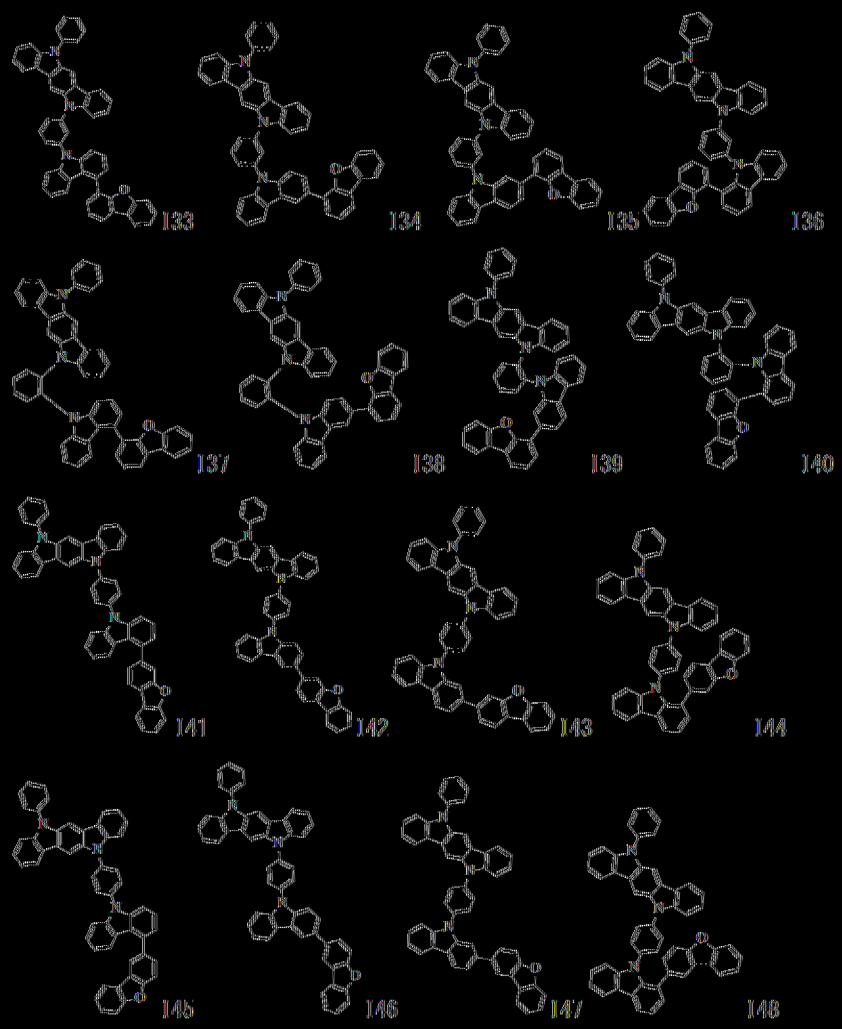
[化 54]



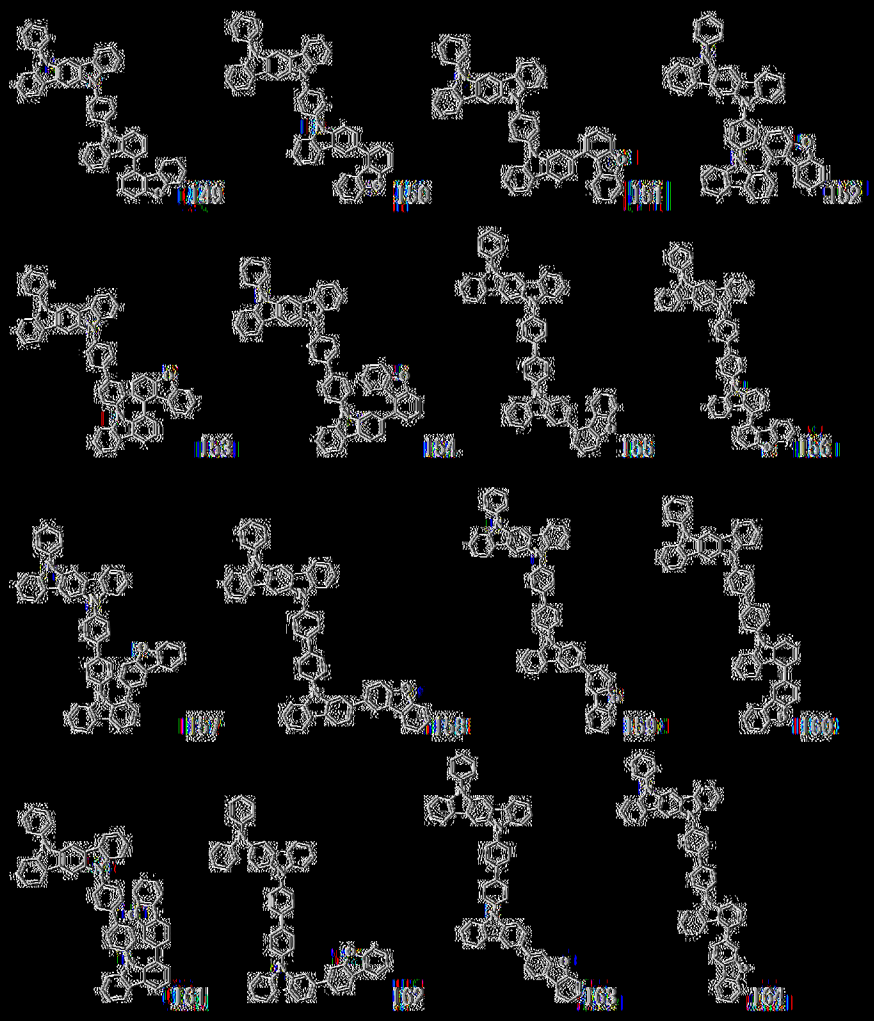
[化 55]



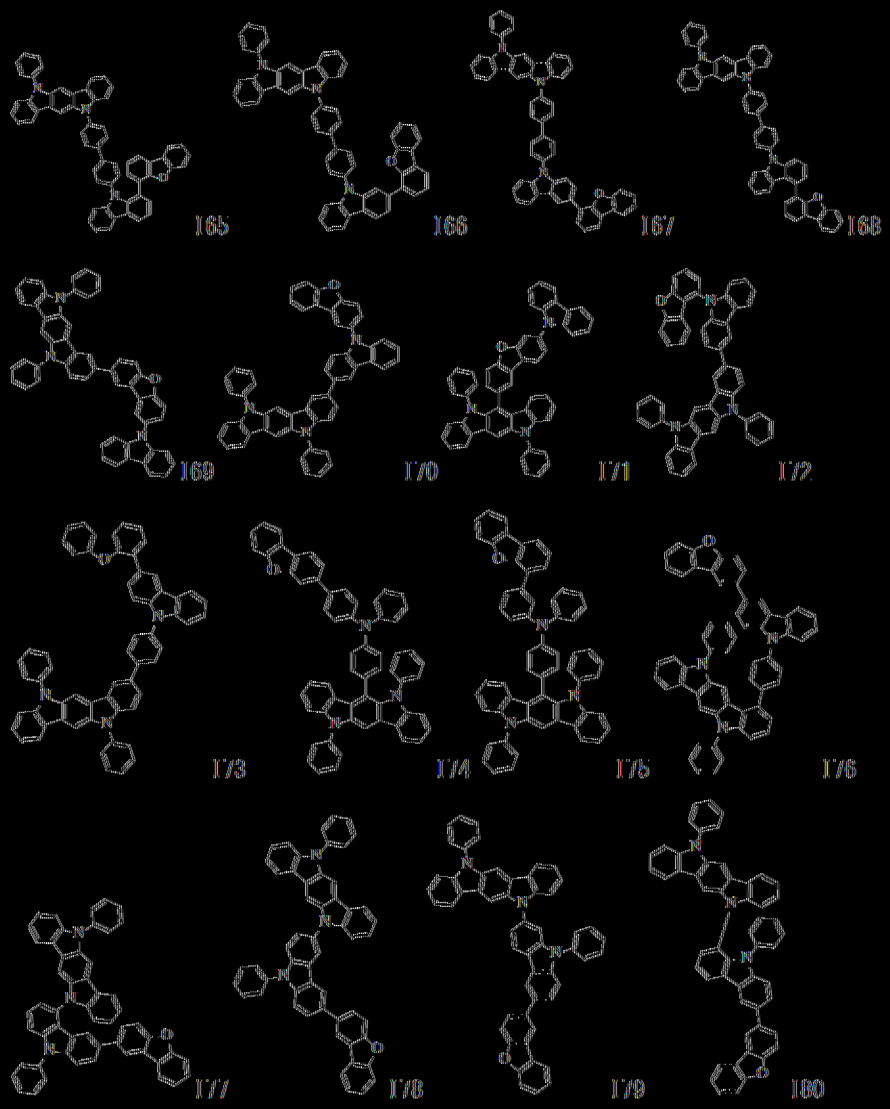
[化 56]



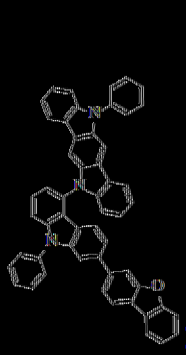
[化 57]

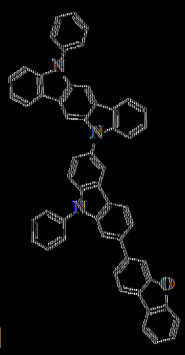


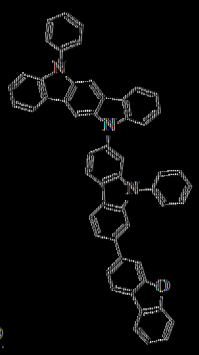
[化 58]

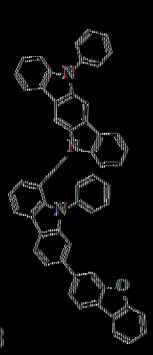


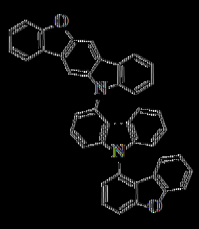
[化 59]

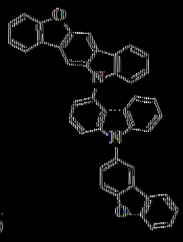

181

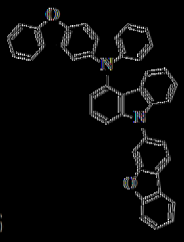

182

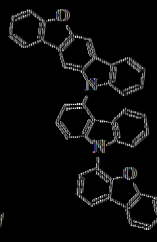

183

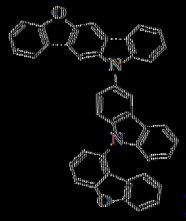

184

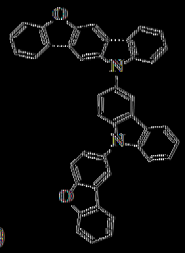

185

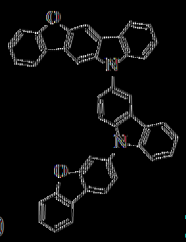

186

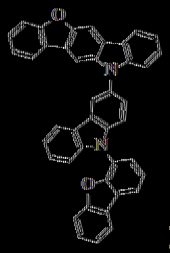

187

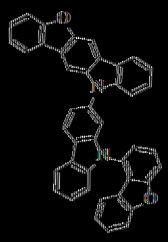

188

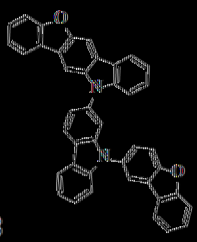

189

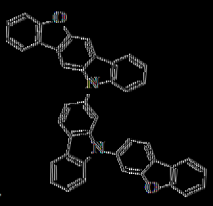

190

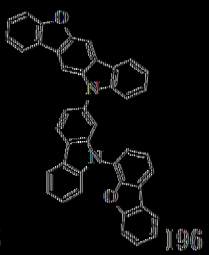

191

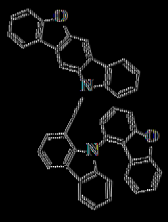

192

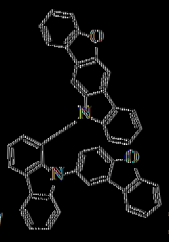

193

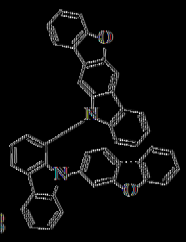

194

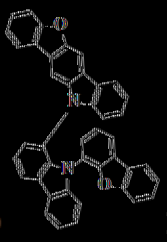

195


196

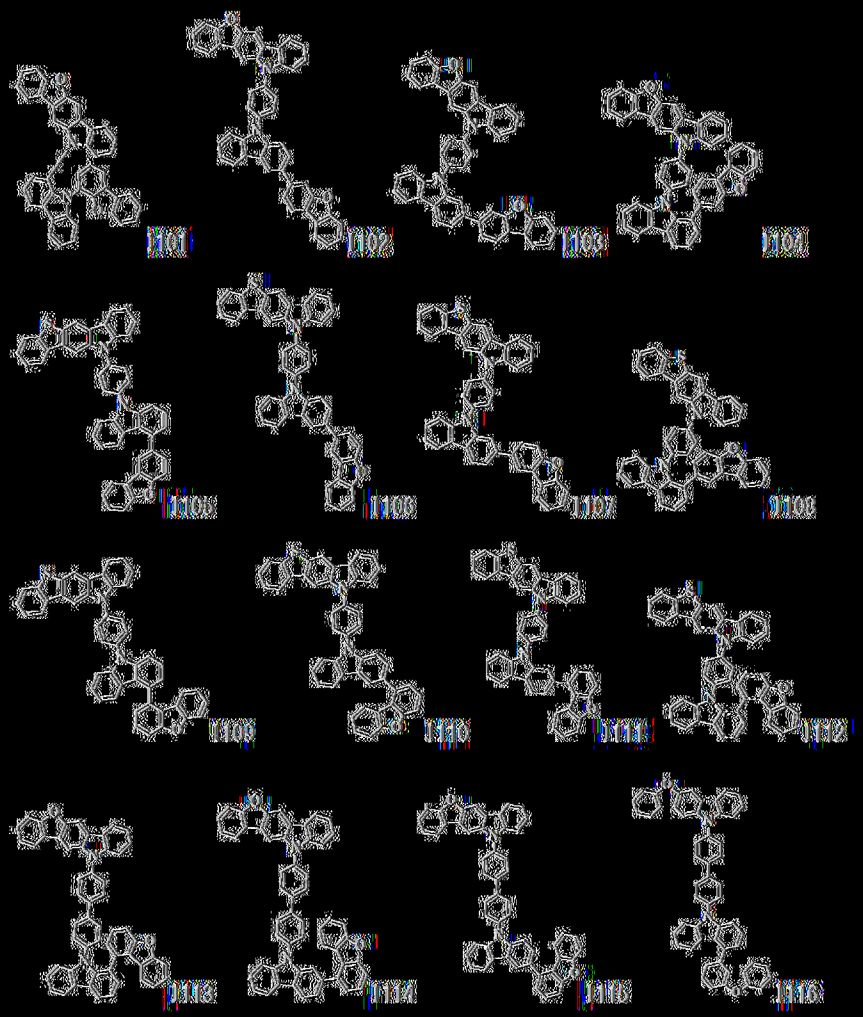

197


198

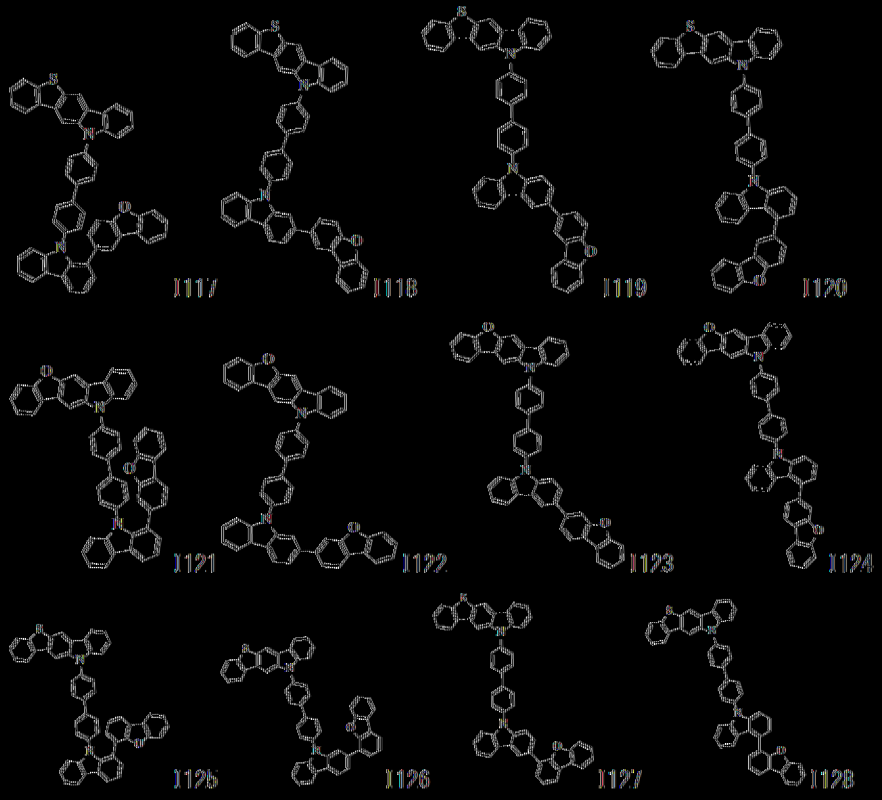

199


100

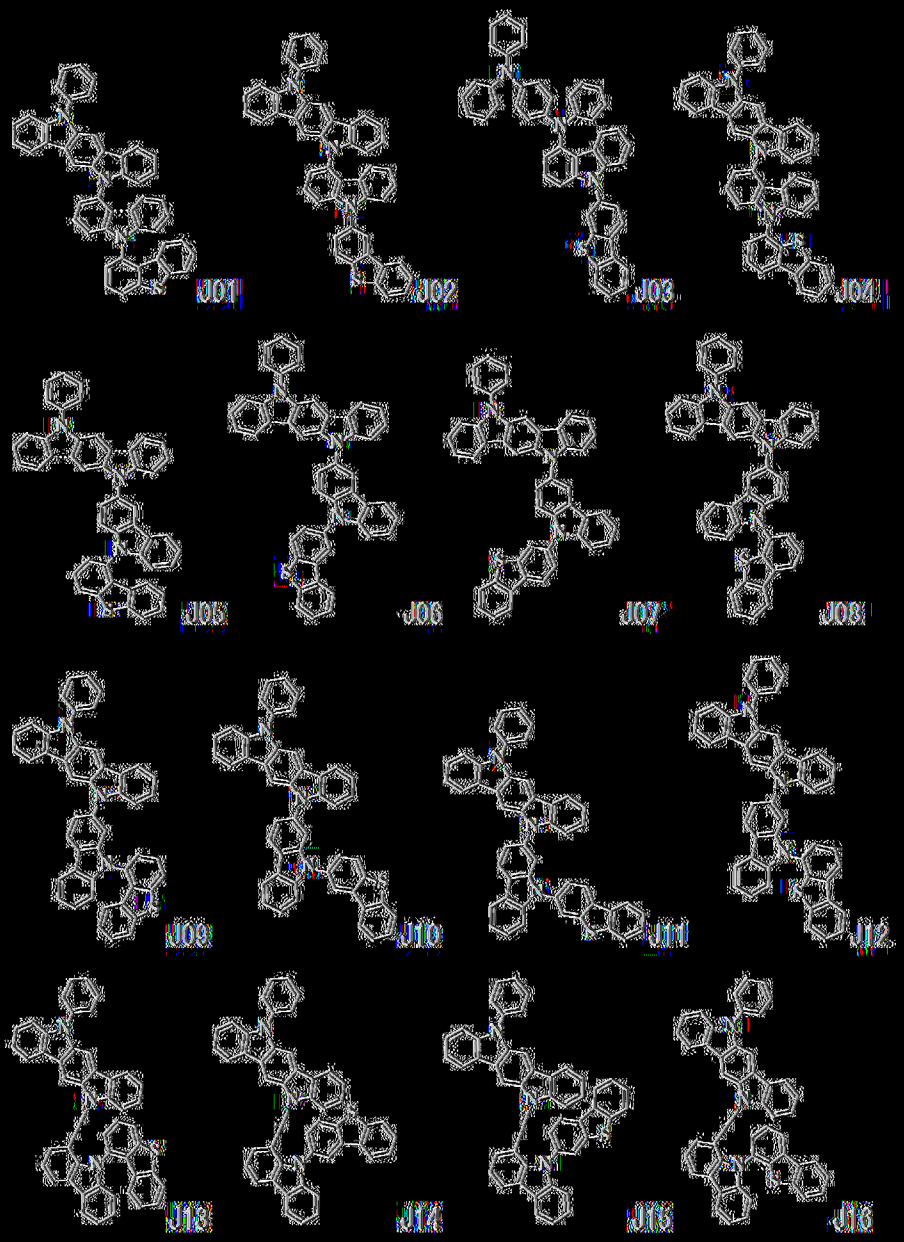
[化 60]



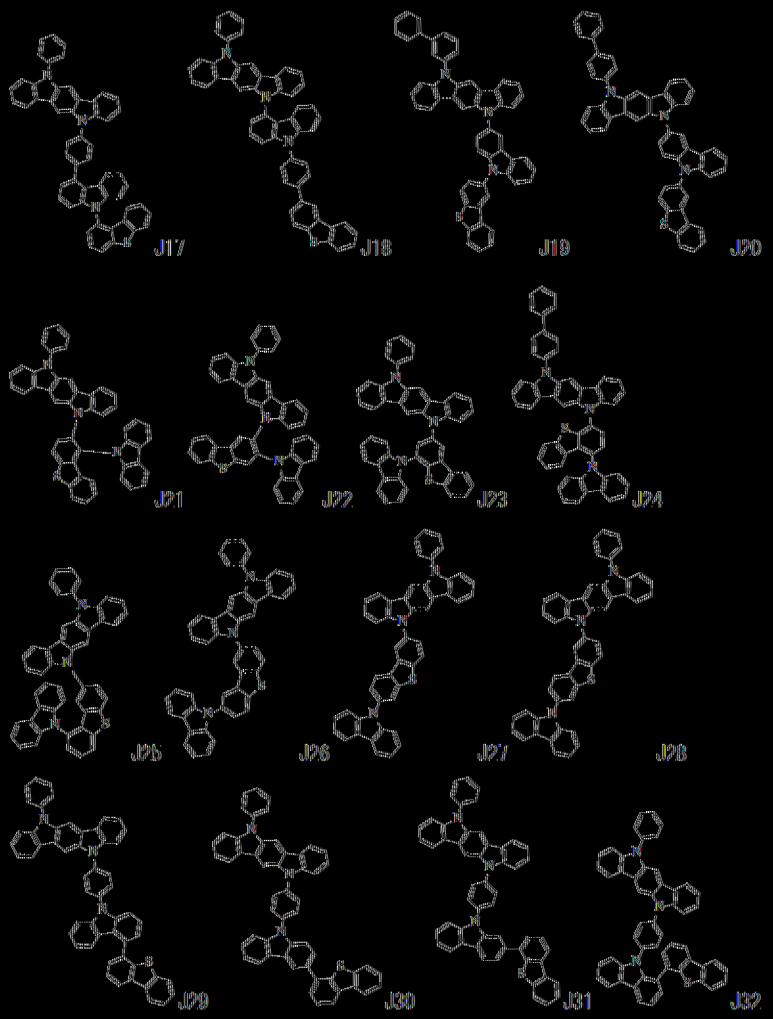
[化 61]



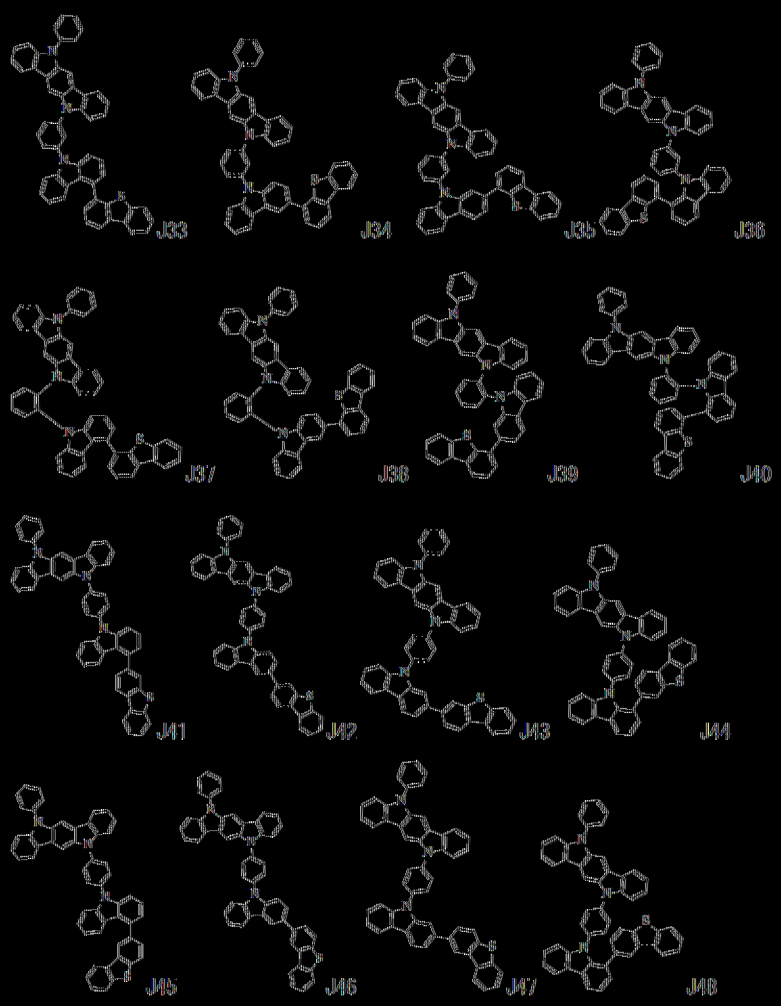
[化 62]



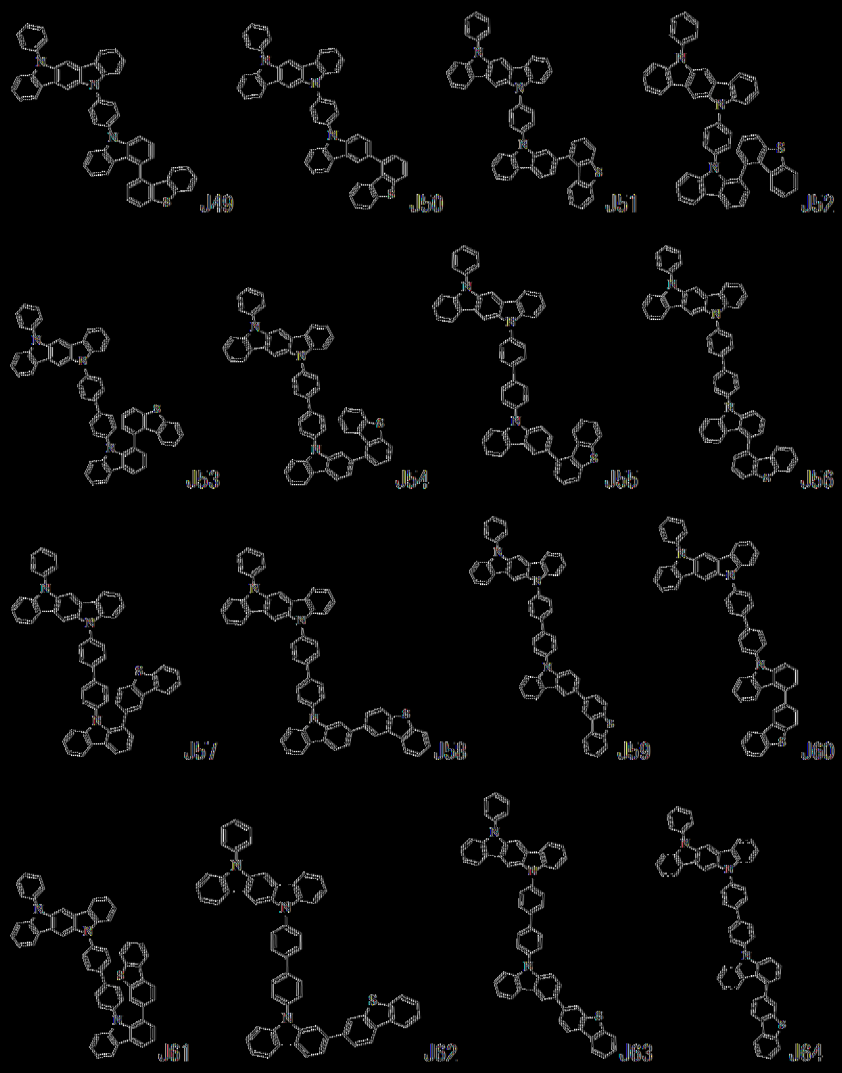
[化 63]



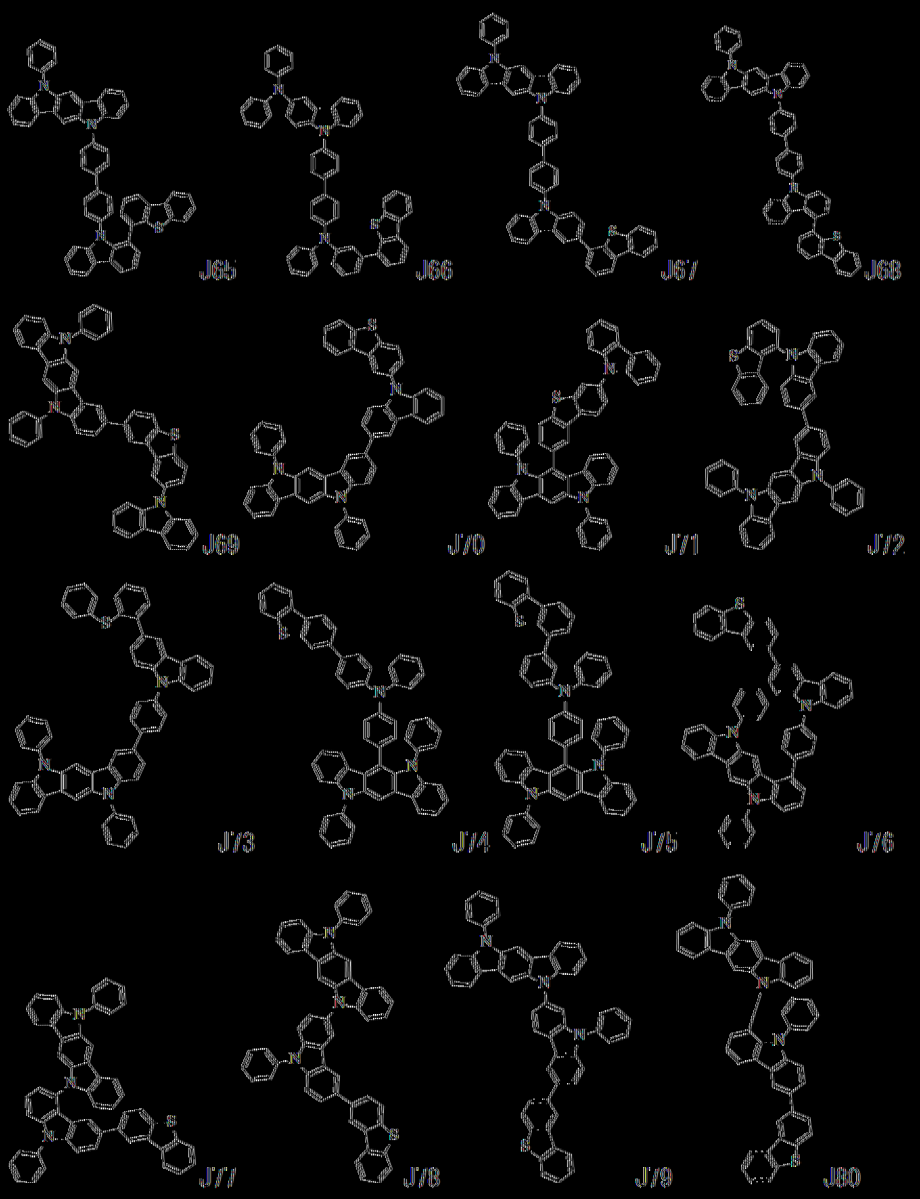
[化 64]



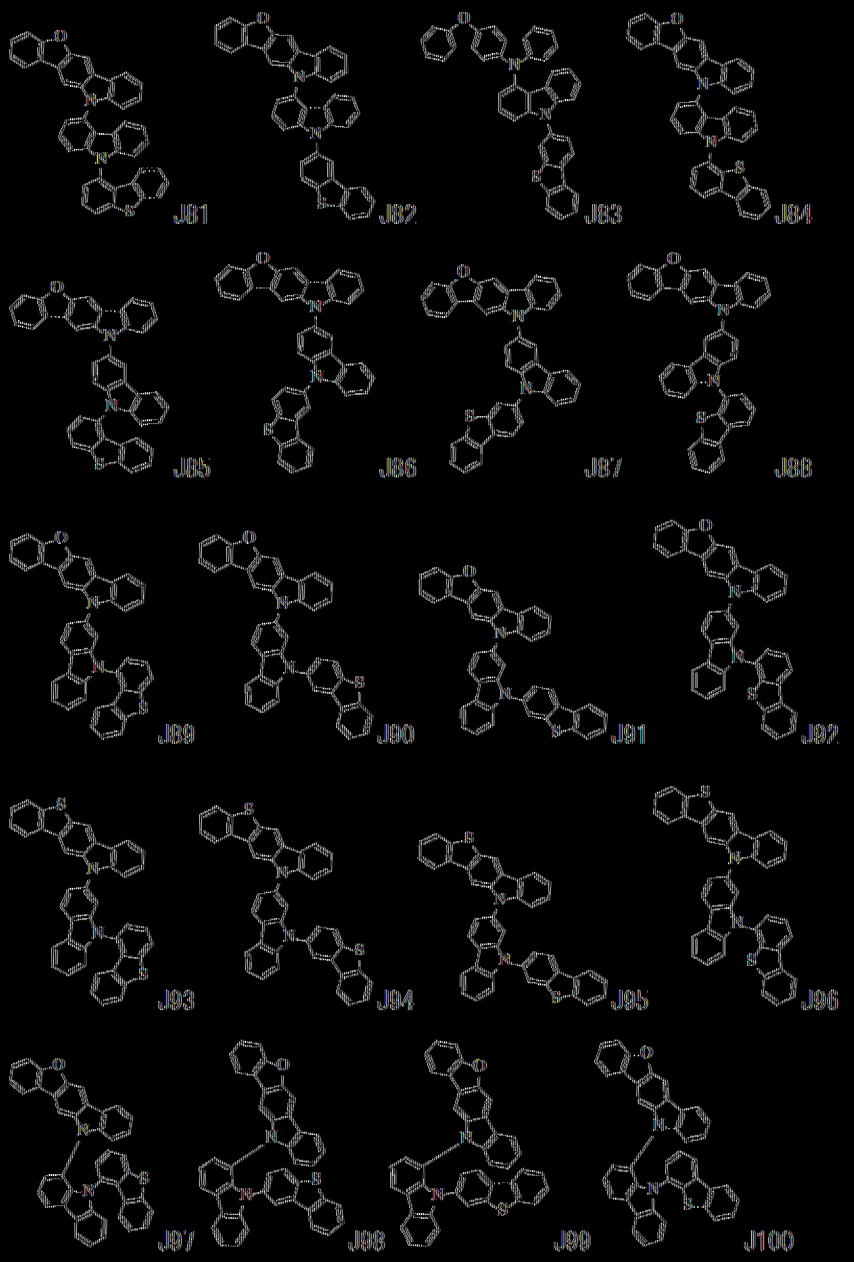
[化 65]



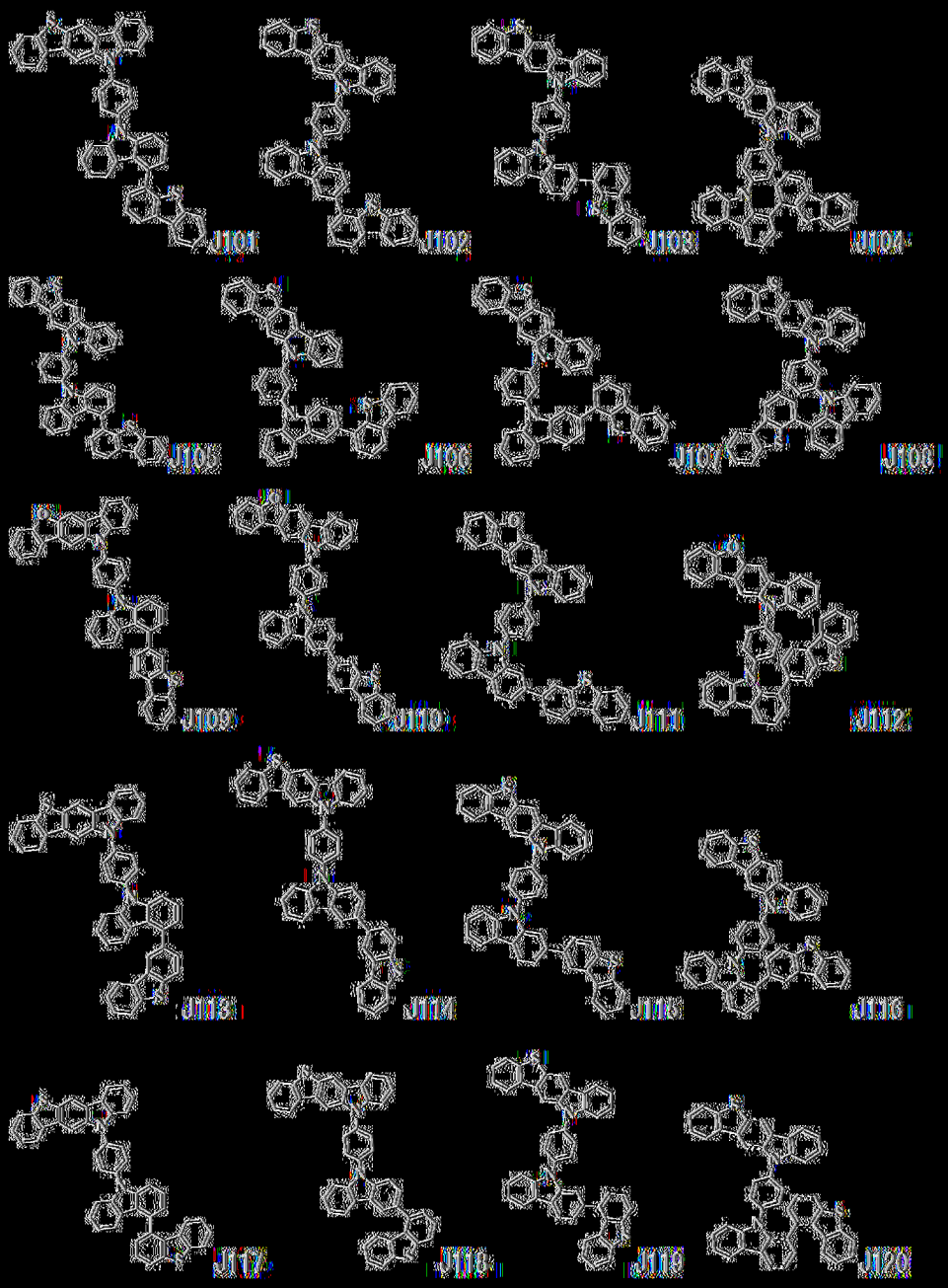
[化 66]



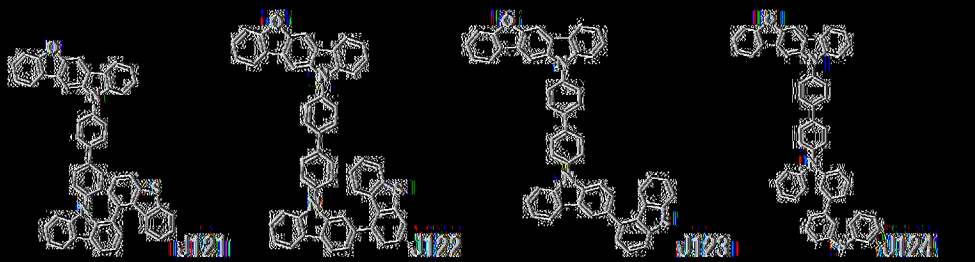
[化 67]


J81
J82
J83
J84
J85
J86
J87
J88
J89
J90
J91
J92
J93
J94
J95
J96
J97
J98
J99
J100

[化 68]


J101
J102
J103
J104
J105
J106
J107
J108
J109
J110
J111
J112
J113
J114
J115
J116
J117
J118
J119
J120

[化 69]


J121
J122
J123
J124

【0047】 本發明的通式（1）所表示的化合物可藉由如下方式而獲得，即於藉由基於包含以市售的試劑類為原料的鈴木偶合（Suzuki coupling）、施蒂勒偶合（Stille coupling）、格林納偶合（Grignard coupling）、烏爾曼偶合、布赫瓦爾德-哈特維希（Buchwald-Hartwig）反應、赫克反應（Heck reaction）等偶合反應在內的於有機合成化學領域確立的各種有機合成反應的方法合成後，使用再結晶、管柱層析法、昇華精製等公知的方法進行精製，但並不限定於所述方法。

【0048】 關於本發明的光電轉換元件用材料，藉由基於密度泛函計算 B3LYP/6-31G（d）的結構最佳化計算而獲得的最高佔據分子軌域（HOMO）的能階較佳為-4.3 eV 以下，更佳為-5.5 eV～-4.5 eV 的範圍，進而佳為-5.2 eV～-4.8 eV 的範圍。

【0049】 關於本發明的光電轉換元件用材料，藉由基於密度泛函計算 B3LYP/6-31G（d）的結構最佳化計算而獲得的最低未佔用分子軌域（LUMO）的能階較佳為-2.5 eV 以上，更佳為-2.0 eV～-0.5 eV 的範圍，進而佳為-1.5 eV～-0.5 eV 的範圍。

【0050】 關於本發明的光電轉換元件用材料，HOMO 能階與 LUMO 能階的差（絕對值）較佳為 2.0 eV～5.0 eV 的範圍內，更佳為 2.5 eV～4.7 eV 的範圍內，進而佳為 3.5 eV～4.5 eV 的範圍。

【0051】 本發明的光電轉換元件用材料的電洞遷移率較佳為 1×10^{-6} cm^2/Vs 以上，更佳為 1×10^{-5} cm^2/Vs～1×10^{-1} cm^2/Vs，進而

佳為 8×10^{-5} cm^2/Vs～1×10^{-2} cm^2/Vs。電洞遷移率可藉由基於場效電晶體（Field Effect Transistor，FET）型電晶體元件的方法、基於飛行時間法的方法、空間電荷限制電流（Space Charge Limited Current，SCLC）法等公知的方法進行評價。

【0052】 本發明的光電轉換元件用材料較佳為非晶質。關於為非晶質的情況，可藉由各種方法進行確認，例如可藉由利用 X 射線繞射（X-Ray diffraction，XRD）法未檢測出波峰的情況、或利用示差掃描量熱（differential scanning calorimetry，DSC）法未檢測出吸熱波峰的情況來確認。

【0053】 接下來，對使用本發明的光電轉換元件用材料的攝像用光電轉換元件進行說明，但本發明的攝像用光電轉換元件的結構並不限定於此。參照圖式進行說明。

圖 1 是示意性地表示本發明的攝像用光電轉換元件的結構例的剖面圖，1 表示電極，2 表示電洞阻擋層，3 表示光電轉換層，4 表示電子阻擋層，5 表示電極，6 表示基板。再者，亦可為除了基板以外的結構與圖 1 相反的結構、即 1 為基板，2 為電極，3 為電子阻擋層，4 為光電轉換層，5 為電洞阻擋層，6 為電極。並不限定於圖 1 的結構，能夠視需要追加或省略層。

【0054】 -電極-

使用本發明的攝像用光電轉換元件用材料的攝像用光電轉換元件中使用的電極具有捕集於光電轉換層中生成的電洞及電子的功能。另外，亦需要使光入射至光電轉換層的功能。因此，理想

的是兩片電極內的至少一片為透明或者半透明。另外，作為電極而使用的材料只要是具有導電性的材料，則並無特別限定，例如可例示：氧化銦錫（indium tin oxide，ITO）、氧化銦鋅（indium zinc oxide，IZO）、SnO_2、銻摻雜氧化錫（antimony doped tin oxide，ATO）、ZnO、Al 摻雜氧化鋅（aluminum doped zinc oxide，AZO）、鎵摻雜氧化鋅（gallium doped zinc oxide，GZO）、TiO_2 及摻氟氧化錫（fluorine doped tin oxide，FTO）等導電性透明材料、金、銀、鉑、鉻、鋁、鐵、鈷、鎳及鎢等金屬、碘化銅及硫化銅等無機導電性物質、聚噻吩、聚吡咯及聚苯胺等導電性聚合物等。關於該些材料，根據需要亦可混合使用多種。另外，亦可積層兩層以上。

【0055】 -光電轉換層-

光電轉換層是藉由利用入射光而生成的激子的電荷分離生成電洞以及電子的層。可由單獨的光電轉換材料形成，亦可與作為電洞傳輸性材料的 P 型有機半導體材料、或作為電子傳輸性材料的 N 型有機半導體材料組合而形成。另外，可使用兩種以上的 P 型有機半導體，亦可使用兩種以上的 N 型有機半導體。理想的是該些 P 型有機半導體及/或 N 型有機半導體中的一種以上使用具有吸收可見區域中所期望波長的光的功能的色素材料。關於作為電洞傳輸性材料的 P 型有機半導體材料，可使用本發明的通式（1）所表示的化合物。

【0056】 作為所述 P 型有機半導體材料，只要是具有電洞傳輸性的材料即可，較佳為使用通式（1）所表示的材料，但亦可使用其

他 P 型有機半導體材料。另外，亦可混合使用兩種以上的通式（1）所表示的材料。進而亦可混合使用通式（1）所表示的化合物與其他 P 型有機半導體材料。

【0057】 作為所述其他 P 型有機半導體材料，只要是具有電洞傳輸性的材料即可，例如可使用：萘、蒽、菲、芘、䓛、稠四苯、三伸苯、苉、螢蒽、芴、茚等具有縮合多環芳香族基的化合物，環戊二烯衍生物、呋喃衍生物、噻吩衍生物、吡咯衍生物、苯並呋喃衍生物、苯並噻吩衍生物、二萘並噻吩並噻吩衍生物、吲哚衍生物、吡唑啉衍生物、二苯並呋喃衍生物、二苯並噻吩衍生物、咔唑衍生物、吲哚並咔唑衍生物等具有 π 過剩系芳香族基的化合物，芳香族胺衍生物、苯乙烯基胺衍生物、聯苯胺衍生物、卟啉衍生物、酞菁衍生物、喹吖啶酮衍生物。

【0058】 另外，作為所述其他 P 型有機半導體材料，可使用高分子型 P 型有機半導體材料。具體而言，可列舉：聚苯乙炔衍生物、聚對伸苯基衍生物、聚芴衍生物、聚乙烯基咔唑衍生物、聚噻吩衍生物等。進而，亦可混合使用兩種以上通式（1）所表示的化合物、以及選自所述 P 型有機半導體材料或所述高分子型 P 型有機半導體材料中的化合物。

【0059】 作為所述 N 型有機半導體材料，只要是具有電子傳輸性的材料即可，例如可列舉：萘四羧酸二醯亞胺或苝四羧酸二醯亞胺、富勒烯類、咪唑、噻唑、噻二唑、噁唑、噁二唑、三唑等唑衍生物等。另外，亦可混合使用選自該些 N 型有機半導體材料中

的兩種以上的化合物。

【0060】 -電子阻擋層-

電子阻擋層是為了抑制於兩片電極之間施加偏置電壓時因自其中一個電極向光電轉換層注入電子而產生的暗電流而設置。另外，亦具有作為將光電轉換層中的因電荷分離而產生的電洞傳輸至電極的電洞傳輸的功能，且視需要可配置單層或多層。電子阻擋層中可使用作為電洞傳輸性材料的 P 型有機半導體材料。作為 P 型有機半導體材料，只要是具有電洞傳輸性的材料即可，較佳為使用通式（1）所表示的化合物，亦可使用其他 P 型有機半導體材料。另外，亦可混合使用通式（1）所表示的化合物與其他 P 型有機半導體材料。作為其他 P 型有機半導體材料，只要是具有電洞傳輸性的材料即可，具體而言，可列舉於光電轉換層的場所作為其他 P 型有機半導體材料而例示的化合物。

【0061】 作為所述其他 P 型有機半導體材料，亦可使用高分子型 P 型有機半導體材料。作為其具體例，可列舉於光電轉換層的場所作為高分子型 P 型有機半導體材料而例示的化合物。另外，亦可混合使用兩種以上本發明的通式（1）所表示的化合物、選自所述 P 型有機半導體材料或所述高分子型 P 型有機半導體材料中的化合物。

【0062】 -電洞阻擋層-

電洞阻擋層是為了抑制於兩片電極之間施加偏置電壓時因自其中一個電極向光電轉換層注入電洞而產生的暗電流而設置。另

外，亦具有作為將光電轉換層中的因電荷分離而產生的電子傳輸至電極的電子傳輸的功能，且視需要可配置單層或多層。電洞阻擋層中可使用具有電子傳輸性的 N 型有機半導體。作為所述 N 型有機半導體材料，只要是具有電子傳輸性的材料即可，例如可列舉：萘四羧酸二醯亞胺或苝四羧酸二醯亞胺之類的多環芳香族多元羧酸酐或其醯亞胺化物，C60 或 C70 之類的富勒烯類，咪唑、噻唑、噻二唑、噁唑、噁二唑、三唑等唑衍生物，三(8-羥基喹啉)鋁(III)衍生物、氧化膦衍生物、硝基取代芴衍生物、二苯基醌衍生物、噻喃二氧化物（thiopyran dioxide）衍生物、碳二醯亞胺衍生物、亞芴基甲烷衍生物、蒽醌二甲烷衍生物及蒽酮衍生物、聯吡啶衍生物、喹啉衍生物、吲哚並咔唑衍生物等。另外，亦可混合使用該些 N 型有機半導體材料的兩種以上。

【0063】 本發明的光電轉換元件用材料中的氫可為氘。即，除了通式（1）中的芳香族環上的氫以外，取代基的氫的一部分或全部可為氘。進而，用作所述 N 型有機半導體材料及所述 P 型有機半導體材料的化合物所具有的氫的一部分或全部可為氘。

【0064】 製作本發明的攝像用光電轉換元件時的各層的製膜方法並無特別限定，可藉由乾式製程、濕式製程中的任意一種進行製作。包含本發明的光電轉換元件用材料的有機層視需要亦可設為多層。

【0065】 本申請案的攝像用的光電轉換元件於本申請案的實施例 1 中所記載的測定條件下，暗處的電流值較佳為 5.3×10^{-10} A/cm^2

以下，更佳為 1.0×10^{-12} A/cm^2～5.3×10^{-10} A/cm^2，進而佳為 1.0×10^{-12} A/cm^2～4.5×10^{-10} A/cm^2 的範圍。另外，本申請案的攝像用的光電轉換元件於本申請案的實施例 1 中所記載的測定條件下的明暗比較佳為 6.0×10^2 以上，更佳為 7.0×10^2 以上，進而佳為 7.5×10^2 以上。

[實施例]

【0066】 以下，藉由實施例更詳細地說明本發明，但本發明並不限定於該些實施例。

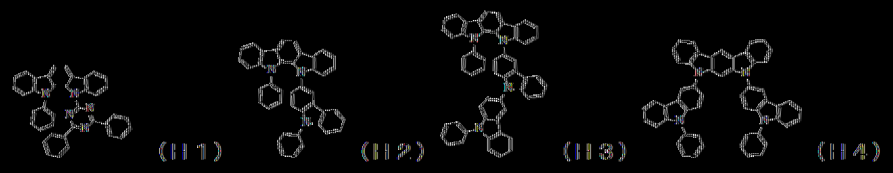
【0067】 計算例

HOMO 及 LUMO 的計算

計算出所述化合物 A05、化合物 A22、化合物 A100、化合物 B06、化合物 B20、化合物 C17、化合物 C20、化合物 C169、化合物 D01、化合物 G07、化合物 I01 及化合物 I128 的 HOMO 與 LUMO 的能階、以及 HOMO 與 LUMO 的能差。再者，關於計算，使用基於密度泛函法（密度泛函理論（DFT：Density Functional Theory））的計算，使用高斯（Gaussian）作為計算程式，並藉由基於密度泛函計算 B3LYP/6-31G（d）的結構最佳化計算而進行計算。將結果示於表 1 中。可以說本發明的攝像用的光電轉換元件用材料的任一種均具有較佳的 HOMO 及 LUMO 值。

【0068】 利用與所述化合物相同的方法計算出作為比較化合物的 H1～H4 的 HOMO 及 LUMO 的能階以及 HOMO 與 LUMO 的能差。將結果示於表 1。

[化 70]



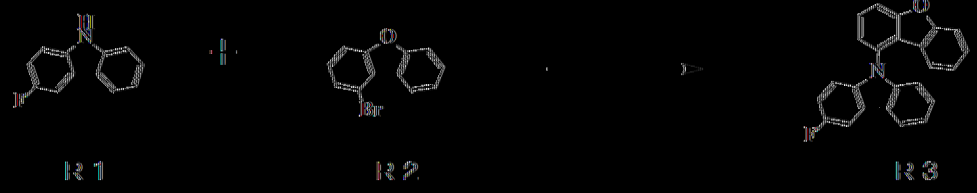
[0069] [表 1]

化合物	HOMO[eV]	LUMO[eV]	能隙[eV]
A05	-5.0	-1.3	3.6
A22	-5.2	-1.0	4.2
A100	-5.1	-1.1	4.0
B06	-5.0	-1.3	3.7
B20	-5.2	-1.0	4.2
C17	-5.1	-1.0	4.1
C20	-5.0	-1.1	4.0
C169	-5.0	-1.0	4.0
D01	-4.9	-1.3	3.6
G07	-4.9	-1.3	3.5
I01	-4.8	-1.3	3.5
I128	-5.2	-1.3	3.9
H1	-5.3	-1.9	3.4
H2	-5.0	-0.9	4.1
H3	-4.9	-1.1	3.8
H4	-4.7	-0.9	3.8

[0070] 以下，作為代表例，示出化合物 A05 的合成例。對於其他化合物，亦藉由類似的方法來合成。

[0071] 合成例 1（中間體 R3 的合成）

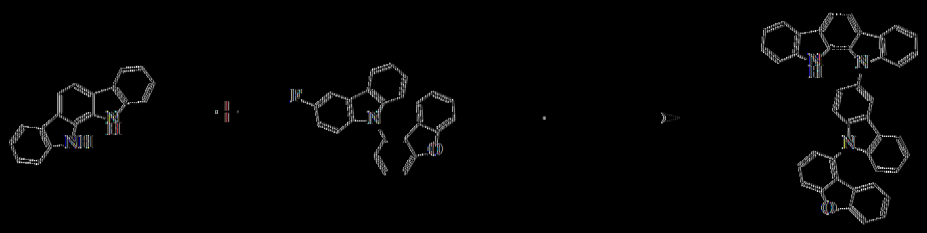
[化 71]



於進行了脫氣氮置換的 500 ml 三口燒瓶中投入 R1（54.0 mmol）、R2（56.7 mmol）、碘化銅（1.1 mmol）、磷酸三鉀（162.0 mmol），向其中加入脫水二噁烷 150 ml 後，於 120℃下攪拌 5 小時。冷卻至室溫後，藉由過濾除去無機物，於濾液中加入水 300 ml、二氯甲烷 300 ml，移至分液漏斗中，分成有機層以及水層。利用 200 ml 的水將有機層清洗三次，將所獲得的有機層利用硫酸鎂脫水後進行減壓濃縮。將所獲得的殘渣藉由管柱層析法進行精製，獲得 R3（淡黃色固體）。產量 15.2 g，產率 80.1%。

[0072] 合成例 2（中間體 R5 的合成）

[化 72]

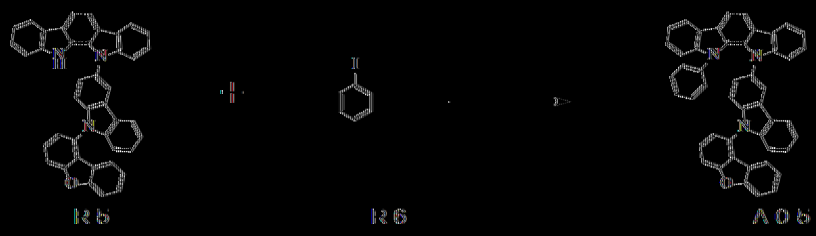


向進行了脫氣氮置換的 500 ml 三口燒瓶中投入 R4（19.5 mmol）、合成例 1 中合成的 R3（21.5 mmol）、磷酸三鉀（39.0 mmol），向其中加入二甲基咪唑啶酮 50 ml 後，於 180℃下攪拌 8 小時。冷卻至室溫後，藉由過濾除去無機物，於濾液中加入水 200 ml、二氯甲烷 200 ml，移至分液漏斗中，分為有機層以及水層。利用 200 ml 的水將有機層清洗三次，將所獲得的有機層利用硫酸鎂脫水後

進行減壓濃縮。將所獲得的殘渣利用管柱層析法進行精製，獲得R5（淡黃色固體）。產量為 7.1 g，產率為 62%。

[0073] 合成例 3（A05 的合成）

[化 73]



向進行了脫氣氮置換的 500 ml 三口燒瓶中投入合成例 2 中合成的 R5（8.5 mmol）、R6（127.6 mmol）、銅粉末（25.5 mmol）、碳酸鉀（42.5 mmol），於 180℃下攪拌 8 小時。冷卻至室溫後，藉由過濾除去無機物，於濾液中加入水 200 ml、二氯甲烷 200 ml，移至分液漏斗中，分為有機層以及水層。利用 200 ml 的水將有機層清洗 3 次，將所獲得的有機層利用硫酸鎂脫水後進行減壓濃縮。將所獲得的殘渣利用管柱層析法進行精製，獲得 A05（無色固體）。產量為 5.2 g，產率為 92%。藉由 XRD 法對所獲得的固體進行了評價，但未檢測出波峰，因此可知本化合物為非晶質。（APCI-TOFMS，m/z 664[M+H]$^+$）

[0074] 物性評價例

於形成有包含膜厚 110 nm 的 ITO 的透明電極的玻璃基板上，利用真空蒸鍍法於膜厚約為 3 μm 的條件下對化合物 A05 進行製膜

而作為有機層。繼而，使用將鋁（Al）以 70 nm 的厚度形成的元件作為電極，利用飛行時間法進行電洞遷移率測定。其結果，電洞遷移率為 5.5×10^{-4} cm^2/Vs。

【0075】 除了將化合物 A05 替換為 A22、A100、B06、B20、C17、C20、C169、D01、G07、I01、I128、H1、H2、H3 以及 H4 以外，同樣地進行操作，進行電洞遷移率的評價。將結果示於表 2。

【0076】 [表 2]

化合物	電洞遷移率[cm^2/Vs]	化合物	電洞遷移率[cm^2/Vs]
A05	5.5×10^{-4}	D01	4.4×10^{-4}
A22	4.5×10^{-4}	G07	6.5×10^{-4}
A100	2.3×10^{-4}	I01	3.9×10^{-4}
B06	4.1×10^{-4}	I128	3.1×10^{-4}
B20	8.3×10^{-4}	H1	4.0×10^{-5}
C17	7.8×10^{-4}	H2	3.0×10^{-5}
C20	3.3×10^{-4}	H3	1.0×10^{-4}
C169	5.2×10^{-4}	H4	6.0×10^{-5}

【0077】 實施例 1

於玻璃基板上形成的包含膜厚 70 nm 的 ITO 的電極上，以真空度 4.0×10^{-5} Pa 將化合物 A05 以 10 nm 的厚度成膜來作為電子阻擋層。繼而，作為光電轉換層，以蒸鍍速度比 4:4:2 將 2Ph-BTBT、F6-SubPc-OC6F5、富勒烯（C60）共蒸鍍 200 nm 來成膜。接著，將 dpy-NDI 蒸鍍 10 nm，形成電洞阻擋層。最後，將鋁以 70 nm 的厚度成膜來作為電極，製作光電轉換元件。以 ITO 以及鋁為電極來施加 2.6 V 的電壓時，暗處的電流值（暗電流值）為 2.8×10^{-10} A/cm^2。另外，施加 2.6 V 的電壓，藉由調整為照射光波長 500 nm、1.6 μW 的 LED 對 ITO 電極側自 10 cm 的高度進行光照射時的電流

值（明電流值）為 3.0×10^{-7} A/cm^2。施加 2.6 V 電壓時的明暗比為 1.1×10^3。將該些結果示於表 3 中。

〔0078〕 實施例 2～實施例 9

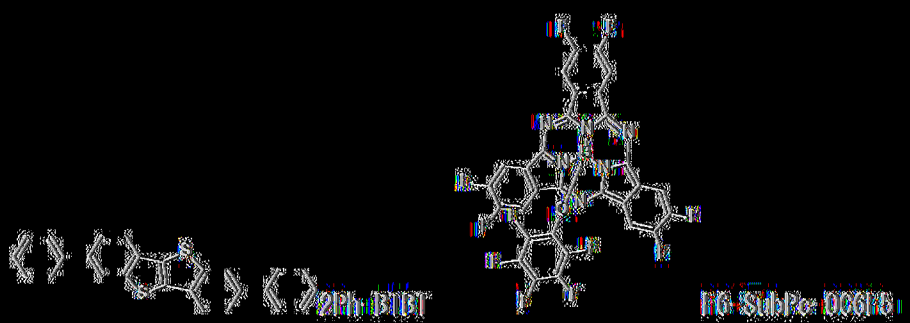
除了使用表 3 所示的化合物來作為電子阻擋材以外，與實施例 1 同樣地製作光電轉換元件。

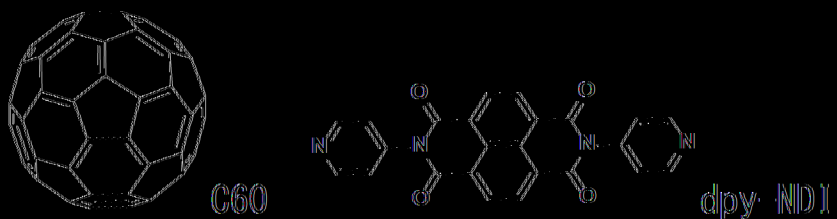
〔0079〕 比較例 1～比較例 4

除了使用表 3 所示的化合物來作為電子阻擋材以外，與實施例 1 同樣地製作光電轉換元件。將實施例 1～實施例 9、及比較例 1～比較例 4 的結果示於表 3 中。

〔0080〕 實施例及比較例中所使用的化合物如下所示。

[化 74]





〔0081〕 [表 3]

	化合物	暗處的電流值 [A/cm^2]	光照射時的電流值 [A/cm^2]	明暗比
實施例 1	A05	2.8×10^{-10}	3.0×10^{-7}	1.1×10^{3}
實施例 2	A22	4.1×10^{-10}	3.1×10^{-7}	7.6×10^{2}
實施例 3	A100	2.0×10^{-10}	3.0×10^{-7}	1.5×10^{3}
實施例 4	B20	1.7×10^{-10}	2.8×10^{-7}	1.6×10^{3}
實施例 5	C17	3.4×10^{-10}	2.9×10^{-7}	8.5×10^{2}
實施例 6	C169	2.3×10^{-10}	2.9×10^{-7}	1.3×10^{3}
實施例 7	D01	3.2×10^{-10}	3.3×10^{-7}	1.0×10^{3}
實施例 8	I01	3.8×10^{-10}	3.2×10^{-7}	8.4×10^{2}
實施例 9	I128	2.9×10^{-10}	3.0×10^{-7}	1.0×10^{3}
比較例 1	H1	7.5×10^{-10}	2.5×10^{-7}	3.3×10^{2}
比較例 2	H2	6.3×10^{-10}	3.0×10^{-7}	4.8×10^{2}
比較例 3	H3	6.4×10^{-10}	3.3×10^{-7}	5.2×10^{2}
比較例 4	H4	7.2×10^{-10}	2.5×10^{-7}	3.5×10^{2}

[產業上之可利用性]

【0082】 認為藉由使用本發明的攝像用的光電轉換元件用材料可達成於攝像用的光電轉換元件內的電洞或電子的適當遷移，因此能夠減少將光轉換為電能時因施加偏置電壓而產生的漏電流，其結果，可獲得達成暗電流值低以及明暗比高的光電轉換元件。因此，本發明的材料有效用作光電轉換膜積層型攝像設備的光電轉換元件用材料。

【符號說明】

【0083】

1:電極

2:電洞阻擋層

3:光電轉換層

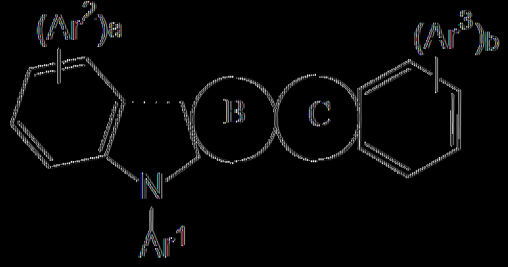
4:電子阻擋層

5:電極

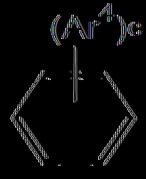
6:基板

【發明申請專利範圍】

【請求項1】 一種包含光電轉換元件用材料的光電轉換元件，其特徵在於，包含下述通式（1）所表示的化合物；



（1）



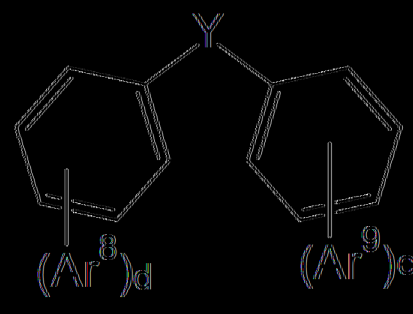
（1B）



（1C）

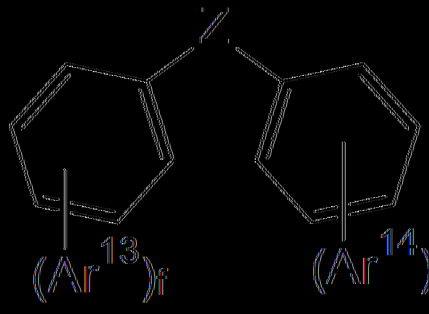
於通式（1）中，環 B 與鄰接環於任意位置進行縮合，且表示式（1B）所表示的六元環；環 C 與鄰接環於任意位置進行縮合，且表示式（1C）所表示的五元環；X 由 N-Ar^5、O、S 及 C-Ar^{6}Ar^7 中的任一者表示；Ar^1～Ar^7 分別獨立地表示氘、鹵素、碳數 1～20 的烷基、經取代或未經取代的碳數 12～36 的芳香族胺基、經取代或未經取代的碳數 6～18 的芳香族烴基、經取代或未經取代的碳數 3～18 的芳香族雜環基、或者將該些芳香族基的兩個～十個連結而成的經取代或未經取代的連結芳香族基；其中，Ar^1～Ar^5 中的至少一個包含一個以上的下述通式（2）所表示的結構，並且包

含一個以上的下述通式（3）所表示的結構；a、b 及 c 表示取代數，a 及 b 分別獨立地表示 0～4 的整數，c 表示 0～2 的整數；



（2）

於通式（2）中，Y 獨立地由 N-Ar[10]、O、S 及 C-Ar[11]Ar[12] 中的任一者表示；Ar[8]～Ar[12] 分別獨立地表示氫、鹵素、碳數 1～20 的烷基、經取代或未經取代的碳數 12～36 的芳香族胺基、經取代或未經取代的碳數 6～18 的芳香族烴基、經取代或未經取代的碳數 3～18 的芳香族雜環基、或者將該些芳香族基的兩個～四個連結而成的經取代或未經取代的連結芳香族基；d 及 e 表示取代數，且分別獨立地表示 0～4 的整數；



（3）

於通式（3）中，Z 獨立地由 O、S 及 C-Ar[15]Ar[16] 中的任一者

表示；Ar^{13}～Ar^{16}分別獨立地表示氘、鹵素、碳數 1～20 的烷基、經取代或未經取代的碳數 12～36 的芳香族胺基、經取代或未經取代的碳數 6～18 的芳香族烴基、經取代或未經取代的碳數 3～18 的芳香族雜環基、或者將該些芳香族基的兩個～四個連結而成的經取代或未經取代的連結芳香族基；f 及 g 表示取代數，且分別獨立地表示 0～4 的整數。

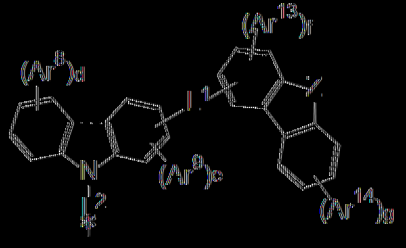
【請求項2】 如請求項 1 所述的光電轉換元件，其中，於所述通式（1）中，Ar^1包含分別各為至少一個的所述通式（2）及通式（3）所表示的結構，並且 Ar^1～Ar^7不包含含氮六元環結構。

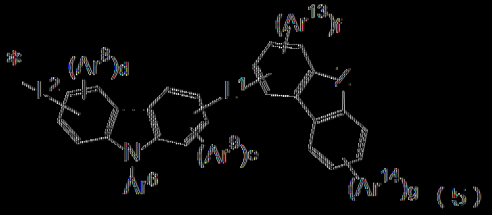
【請求項3】 如請求項 1 所述的光電轉換元件，其中，於所述通式（1）中，X 由 N-Ar^5、O 及 S 中的任一者表示。

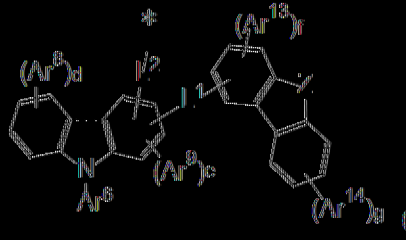
【請求項4】 如請求項 1 所述的光電轉換元件，其中，於所述通式（1）中，Y 由 N-Ar^{10}表示。

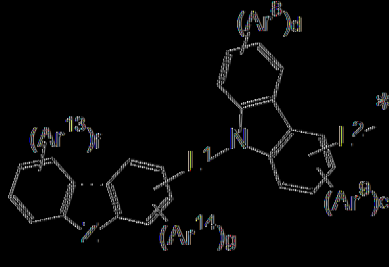
【請求項5】 如請求項 1 所述的光電轉換元件，其中，於所述通式（1）中，Z 由 O 或 S 中的任一者表示。

【請求項6】 如請求項 1 所述的光電轉換元件，其中，於所述通式（1）中，Ar^1由下述式（4）～式（7）中的任一者表示；*表示與通式（1）的連結位置；


（4）


（5）


（6）

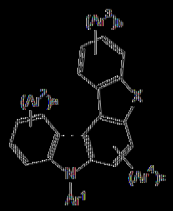

（7）

L^1 以及 L^2 分別獨立地表示直接鍵、經取代或未經取代的碳數 6～18 的芳香族烴基、或者將該些芳香族基的兩個～六個連結而成的經取代或未經取代的連結芳香族基。

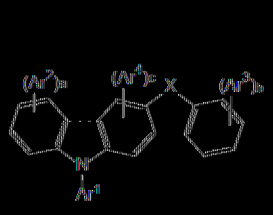
【請求項7】 如請求項 1 所述的光電轉換元件，其中，所述通式（1）由以下式（8）～式（13）中的任一者表示：

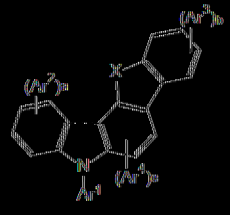

（8）


（9）


（10）


（11）


（12）


（13）

。

【請求項8】 一種攝像用的光電轉換元件，其特徵在於，包含攝

像用的光電轉換元件用材料，所述攝像用的光電轉換元件用材料為如請求項 1 所述的所述通式（1）所表示的化合物。

【請求項9】 如請求項 8 所述的攝像用的光電轉換元件，其中，所述通式（1）所表示的攝像用的光電轉換元件用材料中，藉由基於密度泛函計算 B3LYP/6-31G（d）的結構最佳化計算而獲得的最高佔據分子軌域（HOMO）的能階為-4.3 eV 以下。

【請求項10】 如請求項 8 所述的攝像用的光電轉換元件，其中，所述通式（1）所表示的攝像用的光電轉換元件用材料中，藉由基於密度泛函計算 B3LYP/6-31G（d）的結構最佳化計算而獲得的最低未佔用分子軌域（LUMO）的能階為-2.5 eV 以上。

【請求項11】 如請求項 8 所述的攝像用的光電轉換元件，其中，所述通式（1）所表示的攝像用的光電轉換元件用材料具有 1×10^{-6} cm^2/Vs 以上的電洞遷移率。

【請求項12】 如請求項 8 所述的攝像用的光電轉換元件，其中，所述通式（1）所表示的攝像用的光電轉換元件用材料是非晶質。

【請求項13】 如請求項 8 所述的攝像用的光電轉換元件，其中，所述通式（1）所表示的攝像用的光電轉換元件用材料被用作攝像用的光電轉換元件的電洞傳輸性材料。

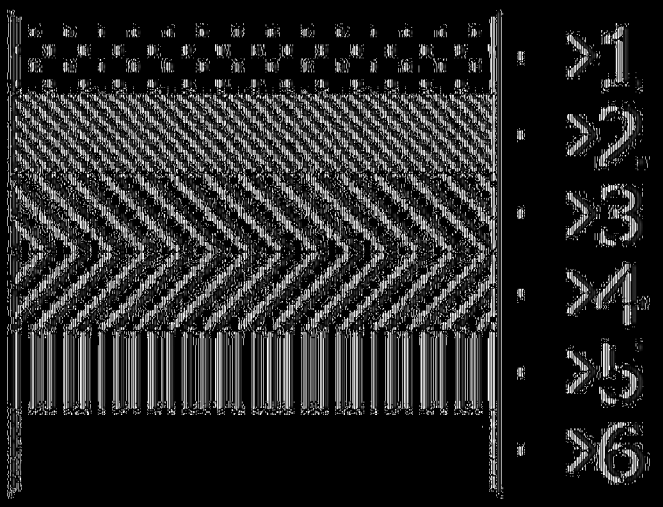
【請求項14】 如請求項 8 所述的攝像用的光電轉換元件，其中，於兩片電極之間具有光電轉換層與電子阻擋層，所述攝像用的光電轉換元件中，於光電轉換層與電子阻擋層的至少一層中包含所述通式（1）所表示的攝像用的光電轉換元件用材料。

【請求項15】　如請求項 14 所述的攝像用的光電轉換元件，其中，於所述電子阻擋層中包含所述通式（1）所表示的攝像用的光電轉換元件用材料。

【請求項16】　如請求項 15 所述的攝像用的光電轉換元件，其中，於所述光電轉換層中包含電子傳輸性材料。

【請求項17】　如請求項 16 所述的攝像用的光電轉換元件，包含富勒烯衍生物作為所述電子傳輸材料。

【發明圖式】



【圖1】

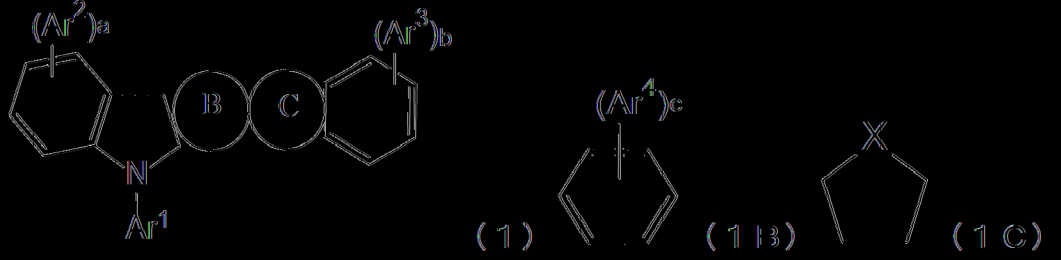
【發明摘要】

【中文發明名稱】包含光電轉換元件用材料的光電轉換元件及攝像用的光電轉換元件

【中文】

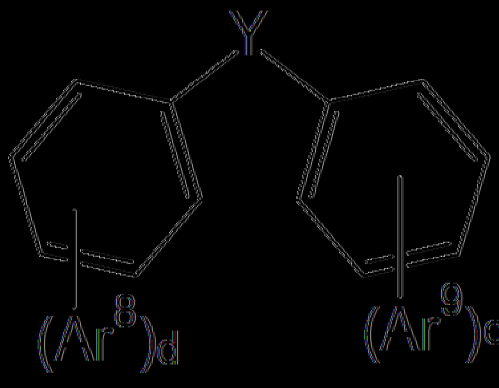
本發明提供一種達成攝像用的光電轉換元件的高感度、高解析度化的材料、以及使用其的攝像用的光電轉換元件。一種包含光電轉換元件用材料的光電轉換元件，其特徵在於，包含下述通式（1）所表示的化合物。

[化 1]



環 B 由式（1B）表示，環 C 由式（1C）表示，X 由 N-Ar5 等表示，Ar1～Ar7 由碳數 6～18 的芳香族烴基等表示。其中，Ar1～Ar5 中的至少一個包含一個以上的下述通式(2)所表示的結構，並且包含一個以上的下述通式（3）所表示的結構。a、b、c 表示取代數。

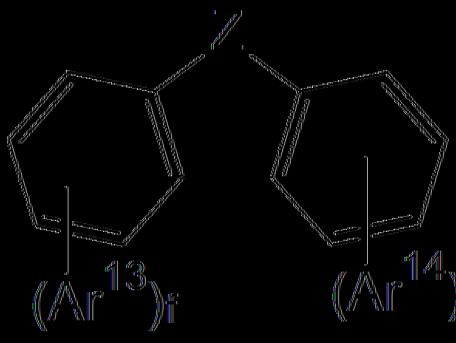
[化 2]



（2）

Y 係由 O 等表示，Ar^8～Ar^{12} 係由碳數 6～18 的芳香族烴基等表示，d、e 表示取代數。

[化 3]



（3）

Z 係由 O 等表示，Ar^{13}～Ar^{16} 係由碳數 6～18 的芳香族烴基等表示。f、g 表示取代數。

【指定代表圖】圖 1。

【代表圖之符號簡單說明】

1:電極

2:電洞阻擋層

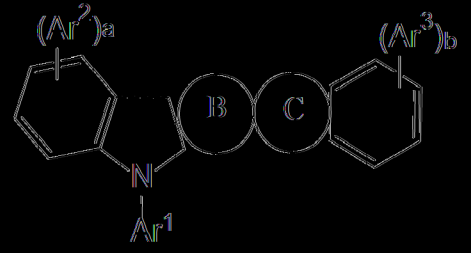
3:光電轉換層

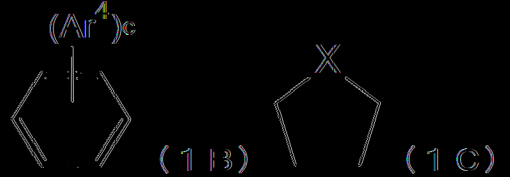
4:電子阻擋層

5:電極

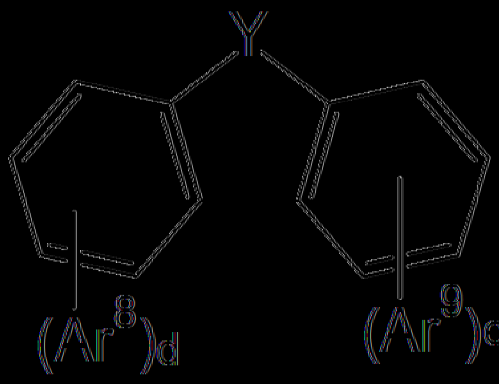
6:基板

【特徵化學式】

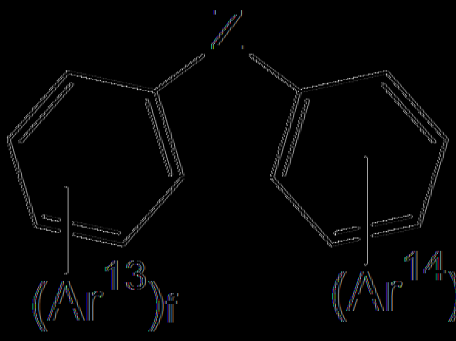




（1）　（1B）　（1C）



（2）



（3）

【發明說明書】

【中文發明名稱】包含光電轉換元件用材料的光電轉換元件及攝像用的光電轉換元件

【技術領域】

【0001】 本發明是有關於一種光電轉換元件用材料及使用其的光電轉換元件，特別是有關於一種有效用於攝像設備中的光電轉換元件。

【先前技術】

【0002】 近年來，正推進使用由有機半導體形成的薄膜的有機電子設備的開發。例如，可例示電場發光元件、太陽電池、電晶體元件、光電轉換元件等。特別是，該些中，作為基於有機物的電場發光元件的有機電致發光（electroluminescence，EL）元件的開發最先進，於推進在智慧型手機或電視機（television，TV）等中的應用的同時，繼續進行以更高功能化為目標的開發。

【0003】 其中，於攝像用的光電轉換元件中，先前，使用矽等無機半導體的 P-N 結的元件的開發/實用化得以推進，正進行數位相機、智慧型手機用相機的高功能化研究、於監視用相機、汽車用感測器等中的應用的研究，作為用以應對該些各種用途的課題，列舉有高感度化、畫素微細化（高解析度化）。於使用無機半導體的光電轉換元件中，為了獲得彩色圖像，主要採用在光電轉換元件的受光部上配置與作為光的三原色的紅綠藍（red green blue，

RGB）對應的彩色濾光片的方式。於所述方式中，由於將 RGB 的彩色濾光片配置於平面上，因此於入射光的利用效率或解析度方面存在課題（非專利文獻 1、非專利文獻 2）。

【0004】 作為此種攝像用的光電轉換元件的課題的解決方案之一，正進行代替無機半導體而使用有機半導體的光電轉換元件的開發（非專利文獻 1、非專利文獻 2）。其是利用了有機半導體所具有的可選擇性地以高感度僅吸收特定波長區域的光的性質，提出了藉由將利用與光的三原色對應的有機半導體而得的光電轉換元件進行積層來解決高感度化、高解析度化的課題。另外，亦提出了將包含有機半導體的光電轉換元件與包含無機半導體的光電轉換元件積層而得的元件（非專利文獻 3）。

【0005】 此處，藉由有機半導體的光電轉換元件是藉由如下方式而構成的元件、即、於兩片電極之間具有包含有機半導體的薄膜的光電轉換層，視需要於光電轉換層與兩片電極之間配置電洞阻擋層及/或電子阻擋層。於光電轉換元件中，藉由利用光電轉換層吸收具有所期望的波長的光來生成激子，接下來藉由激子的電荷分離而產生電洞以及電子。其後，藉由電洞以及電子遷移至各電極，將光轉換為電訊號。以促進所述過程為目的，一般使用在兩電極之間施加偏置電壓的方法，但減少因施加偏置電壓而產生的來自兩電極的漏電流成為課題之一。就此種情況而言，可以說控制光電轉換元件內的電洞或電子的遷移是光電轉換元件的特性顯現的關鍵。

【0006】 光電轉換元件的各層中使用的有機半導體可大致分為 P 型有機半導體以及 N 型有機半導體，P 型有機半導體用作電洞傳輸性材料，N 型有機半導體用作電子傳輸性材料。為了控制光電轉換元件內的電洞以及電子的遷移，進行了各種具有適當物性、例如電洞遷移率、電子遷移率、最高佔據分子軌域（highest occupied molecular orbital，HOMO）的能量值、最低未佔用分子軌域（lowest unoccupied molecular orbital，LUMO）的能量值的有機半導體的開發，但為尚不能說具有充分特性的狀況。

【0007】 另外，揭示了各種作為有機電致發光元件、有機太陽能電池的電洞傳輸材料或電子阻止材料而優異的化合物，但該些作為攝像用的電洞傳輸材料或電子阻止材料未必優異。具體而言，作為攝像用的光電轉換元件的電洞傳輸材料所要求的重要特性之一，例如為了使照相機於暗處進行鮮明的攝像，重要的是增大關閉快門的狀態下的電流值與打開快門的狀態下的電流值之差（明暗比），因此暗處的電流值越低越較佳，明處的電流值越高越較佳。即，「明暗比高」的情況變得重要。另一方面，於有機電致發光元件中，使一定電流流動而所需的電壓、發光效率、元件壽命等是成為改善對象的特性，所謀求的特性與攝像用的光電轉換元件大不相同。另外，關於有機太陽能電池，重要的是於暗處/明處此兩者中產生電流量多，所要求的特性與較佳為暗處的電流值低的攝像用的光電轉換元件不同。如以上所述，於有機電致發光元件或有機太陽能電池的電洞傳輸材料或電子阻止材料、及攝像用的光

電轉換元件的電洞傳輸材料或電子阻止材料中，所需的特性不同，因此作為有機電致發光元件或有機太陽能電池的電洞傳輸材料或電子阻止材料而優異的材料作為攝像用光電轉換元件的電洞傳輸材料或電子阻止材料是否優異的情況於藉由實驗進行確認之前尚不明確。

【0008】 於專利文獻 1 中，提出了一種於光電轉換層中使用喹吖啶酮作為 P 型有機半導體，使用亞酞菁氯化物（subphthalocyanine chloride）作為 N 型有機半導體，於配置於光電轉換層與電極之間的第一緩衝層中使用吲哚並咔唑衍生物的元件。

【0009】 於專利文獻 2 中，提出了一種於配置於光電轉換層與電極之間的電子阻擋層中使用咔唑衍生物的元件。

【0010】 於專利文獻 3、專利文獻 4 中，提出了一種於電子阻擋層中使用吲哚並咔唑衍生物的光電轉換元件。

【0011】 於專利文獻 5、專利文獻 6 中，提出了一種使用吲哚並咔唑衍生物作為發光層材料的有機 EL 元件。

[現有技術文獻]

[專利文獻]

【0012】 [專利文獻 1]日本專利特開 2018-85427 號公報

[專利文獻 2]日本專利特開 2011-228614 號公報

[專利文獻 3]WO2022114065

[專利文獻 4]WO2022114067

[專利文獻 5]WO2013088973

[專利文獻 6]US20170358756

[非專利文獻]

【0013】 [非專利文獻 1]NHK 技研 R&D No.132,pp.4-11（2012.3）

[非專利文獻 2]NHK 技研 R&D No.174,pp.4-17（2019.3）

[非專利文獻 3]2019 電氣及電子工程師學會（Institute of Electrical and Electronics Engineers，IEEE）國際電子設備會議（International Electron Devices Meeting，IEDM），pp.16.6.1-16.6.4（2019）

【發明內容】

【0014】 [發明所欲解決之課題]

對於攝像用的光電轉換元件，為了推進數位相機、智慧型手機用相機的高功能化、或於監視用相機、汽車用感測器等中的應用，而用於達成更高感度化、高解析度化的有機化成為關鍵。為了提高圖像的對比度而需要兼具暗電流值低與明電流值高的、顯示出高明暗比的材料。本發明鑒於此種現狀，其目的在於提供一種達成攝像用的光電轉換元件的高感度化、高解析度化的材料及使用其的攝像用的光電轉換元件。

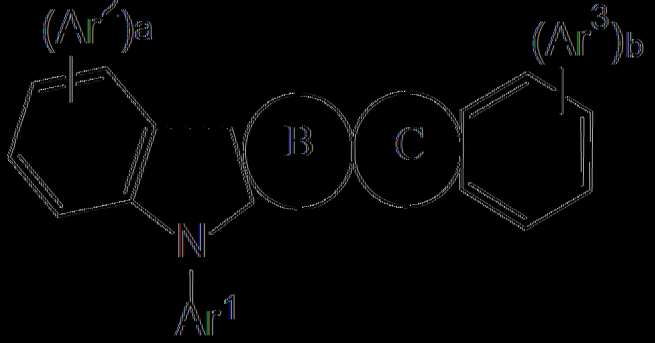
[解決課題之手段]

【0015】 本發明者等人進行了努力研究，結果發現：藉由使用本發明的化合物，可控制光電轉換元件內的電洞、電子的行為，實現顯示出高明暗比的光電轉換元件，從而完成了本發明。

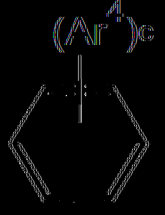
【0016】 本發明為一種包含光電轉換元件用材料的光電轉換元件，

其特徵在於，包含下述通式（1）所表示的化合物。

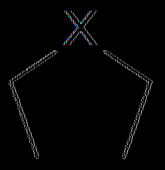
[化 1]



（1）



（1B）

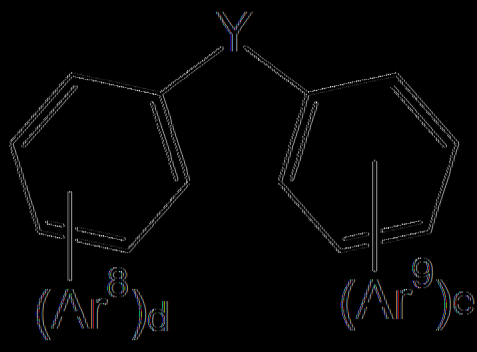


（1C）

於通式（1）中，環 B 與鄰接環於任意位置進行縮合，且表示式（1B）所表示的六元環。環 C 與鄰接環於任意位置進行縮合，且表示式（1C）所表示的五元環。X 由 $N\text{-}Ar^5$、O、S、$C\text{-}Ar^6Ar^7$ 中的任一者表示。Ar^1～Ar^7 分別獨立地表示氫、鹵素、碳數 1～20 的烷基、經取代或未經取代的碳數 12～36 的芳香族胺基、經取代或未經取代的碳數 6～18 的芳香族烴基、經取代或未經取代的碳數 3～18 的芳香族雜環基、或者將該些芳香族基的兩個～十個連

結而成的經取代或未經取代的連結芳香族基。其中，Ar^1～Ar^5 中的至少一個包含一個以上的下述通式（2）所表示的結構，並且包含一個以上的下述通式（3）所表示的結構。a、b、c 表示取代數，a、b 分別獨立地表示 0～4 的整數，c 表示 0～2 的整數。

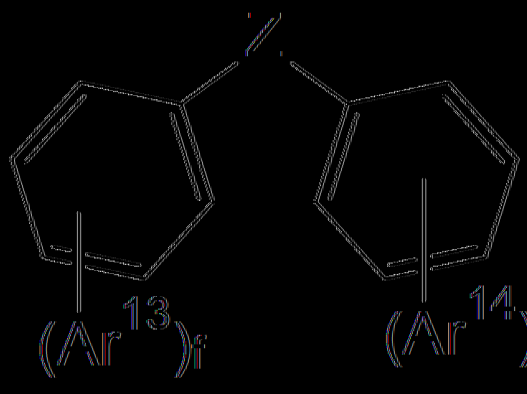
[化 2]



（2）

於通式（2）中，Y 獨立地由 N-Ar^{10}、O、S、C-$Ar^{11}Ar^{12}$ 中的任一者表示。Ar^8～Ar^{12} 分別獨立地表示氫、鹵素、碳數 1～20 的烷基、經取代或未經取代的碳數 12～36 的芳香族胺基、經取代或未經取代的碳數 6～18 的芳香族烴基、經取代或未經取代的碳數 3～18 的芳香族雜環基、或者將該些芳香族基的兩個～四個連結而成的經取代或未經取代的連結芳香族基。d、e 表示取代數，且分別獨立地表示 0～4 的整數。

[化 3]



（3）

於通式（3）中，Z獨立地由 O、S、C-Ar[15]Ar[16]中的任一者表示。Ar[13]～Ar[16]分別獨立地表示氘、鹵素、碳數 1～20 的烷基、經取代或未經取代的碳數 12～36 的芳香族胺基、經取代或未經取代的碳數 6～18 的芳香族烴基、經取代或未經取代的碳數 3～18 的芳香族雜環基、或者將該些芳香族基的兩個～四個連結而成的經取代或未經取代的連結芳香族基。f、g 表示取代數，且分別獨立地表示 0～4 的整數。

[0017] 所述通式（1）所表示的光電轉換元件用材料較佳為攝像用的光電轉換元件用材料，所述光電轉換元件較佳為攝像用的光電轉換元件。

[0018] 所述通式(1)所表示的攝像用的光電轉換元件用材料中，藉由基於密度泛函計算 B3LYP/6-31G（d）的結構最佳化計算而獲得的最高佔據分子軌域（HOMO）的能階較佳為-4.3 eV 以下。另外，最低未佔用分子軌域（LUMO）的能階較佳為-2.5 eV 以上。

[0019] 所述通式（1）所表示的攝像用的光電轉換元件用材料較佳為具有 1×10^{-6} cm^2/Vs 以上的電洞遷移率。另外，所述光電轉換

元件用材料較佳為非晶質。

【0020】 所述通式（1）所表示的攝像用的光電轉換元件用材料可用作電洞傳輸性材料。

【0021】 另外，本發明為一種攝像用的光電轉換元件，於兩片電極之間具有光電轉換層與電子阻擋層，所述攝像用的光電轉換元件的特徵在於，於光電轉換層與電子阻擋層的至少一層中包含所述通式（1）所表示的攝像用的光電轉換元件用材料。

【0022】 本發明的所述攝像用的光電轉換元件中，可於電子阻擋層中包含所述通式（1）所表示的攝像用的光電轉換元件用材料，可於光電轉換層中包含富勒烯衍生物等電子傳輸性材料。

[發明的效果]

【0023】 認為本發明的光電轉換元件藉由使用通式（1）所表示的攝像用的光電轉換元件用材料，可達成於攝像用的光電轉換元件內的電洞或電子的適當移動，因此能夠減少將光轉換為電能時因施加偏置電壓而產生的漏電流，其結果，可獲得達成暗電流值低以及明暗比高的光電轉換元件。因此，本發明的材料有效用作光電轉換膜積層型攝像設備的光電轉換元件用材料。

【圖式簡單說明】

【0024】

圖 1 是表示本發明中所使用的光電轉換元件的結構例的剖面示意圖。

【實施方式】

【0025】 本發明的攝像用光電轉換元件是於兩片電極之間具有至少一層有機層、且將光轉換為電能的光電轉換元件。於所述有機層中含有包含所述通式（1）所表示的化合物的攝像用的光電轉換元件用材料。詳細而言，於兩片電極之間具有光電轉換層以及電子阻擋層的攝像用光電轉換元件中，於光電轉換層、電子阻擋層的至少一層中含有所述通式（1）所表示的光電轉換元件用材料。以下，將包含通式（1）所表示的化合物的攝像用的光電轉換元件用材料簡稱為光電轉換元件用材料。另外，有時亦稱為本發明的材料或通式（1）所表示的化合物。

【0026】 以下對所述通式（1）所表示的化合物進行說明。

【0027】 於所述通式(1)中，環 B 與鄰接環於任意位置進行縮合，且表示式（1B）所表示的六元環。環 C 與鄰接環於任意位置進行縮合，且表示式(1C)所表示的五元環。X 由 N-Ar^5、O、S、C-Ar^6Ar^7 中的任一者表示，較佳為由 N-Ar^5、O、S 表示，更佳為由 N-Ar^5 或 S 表示，進而佳為由 N-Ar^5 表示。另外，a、b、c 表示取代數，a、b 分別獨立地表示 0～4 的整數，c 表示 0～2 的整數，但均較佳為 0。

【0028】 於所述通式（1）中，Ar^1～Ar^5 中的至少一個包含一個以上的所述通式（2）所表示的結構，並且包含一個以上的所述通式（3）所表示的結構，其中，較佳為 Ar^1 包含分別各為至少一個的所述通式（2）及所述通式（3）所表示的結構。進而，Ar^1～Ar^7 較佳為不包含含氮六元環結構，更佳為不包含含氮六元環結構、

以及喹啉、異喹啉、喹唑啉、喹噁啉、苯並咪唑、氮雜-三伸苯基、啡啉、氮雜-芘、氮雜-蒽、氮雜-芴、氮雜-二苯並呋喃、氮雜-二苯並噻吩、氮雜-二苯並硒吩、氮雜-咔唑。

【0029】 於所述通式(2)中，Y 獨立地由 N-Ar^{10}、O、S、C-$Ar^{11}Ar^{12}$ 中的任一者表示，較佳為 N-Ar^{10}、O、S，進而佳為 N-Ar^{10}。

【0030】 於所述通式（3）中，Z 獨立地由 O、S、C-$Ar^{15}Ar^{16}$ 中的任一者表示，較佳為 O 或 S 中的任一者。

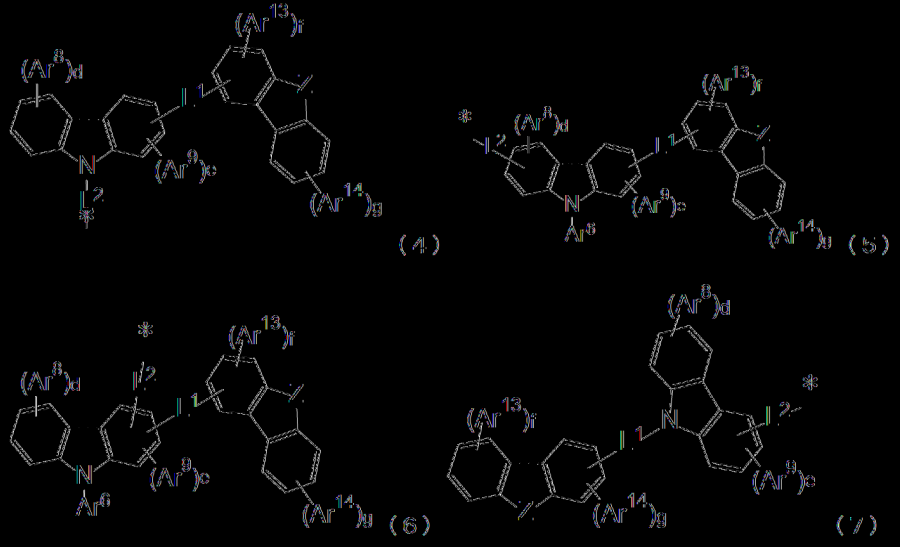
【0031】 於通式（2）、通式（3）中，d～g 表示取代數，且分別獨立地表示 0～4 的整數，較佳為 0～2，更佳為 0～1。

【0032】 Ar^1～Ar^7 分別獨立地表示氘、鹵素、碳數 1～20 的烷基、經取代或未經取代的碳數 12～36 的芳香族胺基、經取代或未經取代的碳數 6～18 的芳香族烴基、經取代或未經取代的碳數 3～18 的芳香族雜環基、或者將該些芳香族基的兩個～十個連結而成的經取代或未經取代的連結芳香族基，較佳為經取代或未經取代的碳數 6～18 的芳香族烴基、經取代或未經取代的碳數 3～18 的芳香族雜環基，更佳為經取代或未經取代的碳數 6～13 的芳香族烴基、經取代或未經取代的碳數 3～17 的芳香族雜環基，進而佳為經取代或未經取代的碳數 6～13 的芳香族烴基、經取代或未經取代的碳數 6～12 的芳香族雜環基。另外，於 Ar^1～Ar^7 表示連結芳香族基的情況下，連結數較佳為 2～6，進而佳為 2～4。Ar^8～Ar^{16} 分別獨立地表示氘、鹵素、碳數 1～20 的烷基、經取代或未經取代的碳數 12～36 的芳香族胺基、經取代或未經取代的碳數 6～18

的芳香族烴基、經取代或未經取代的碳數3～18的芳香族雜環基、或者將該些芳香族基的兩個～四個連結而成的經取代或未經取代的連結芳香族基，較佳為經取代或未經取代的碳數 6～18 的芳香族烴基、經取代或未經取代的碳數 3～18 的芳香族雜環基，更佳為經取代或未經取代的碳數 6～13 的芳香族烴基、經取代或未經取代的碳數 3～17 的芳香族雜環基，進而佳為經取代或未經取代的碳數 6～13 的芳香族烴基、經取代或未經取代的碳數 6～12 的芳香族雜環基。另外，於 Ar^8～Ar^{16} 表示連結芳香族基的情況下，連結數較佳為 2～3。其中，於 Ar^1～Ar^7 為所述芳香族雜環基及包含芳香族雜環基的所述連結芳香族基的情況下，較佳為不包含含氮六元環結構、以及喹啉、異喹啉、喹唑啉、喹噁啉、苯並咪唑、氮雜-三伸苯基、啡啉、氮雜-芘、氮雜-蒽、氮雜-芴、氮雜-二苯並呋喃、氮雜-二苯並噻吩、氮雜-二苯並硒吩、氮雜-咔唑。作為所述含氮六元環的具體例，可列舉吡啶、嘧啶、吡嗪、噠嗪、及三嗪、以及四嗪等。再者，所謂 Ar^1～Ar^7 不包含含氮六元環結構、以及喹啉等所述結構，即，是指於 Ar^8～Ar^{16} 中，亦不包含含氮六元環結構、以及喹啉等所述結構。另外，於 Ar^1～Ar^{16} 為具有氫原子的基的情況下，所述氫原子亦可經氘或鹵素取代。

【0033】 於 Ar^1 包含分別各為至少一個的所述通式（2）所表示的結構及所述通式(3)所表示的結構的情況下，較佳為由下述式(4)～式（7）中的任一者表示，更佳為由式（4）、式（5）、式（7）中的任一者表示，進而佳為由式（4）、式（7）中的任一者表示。

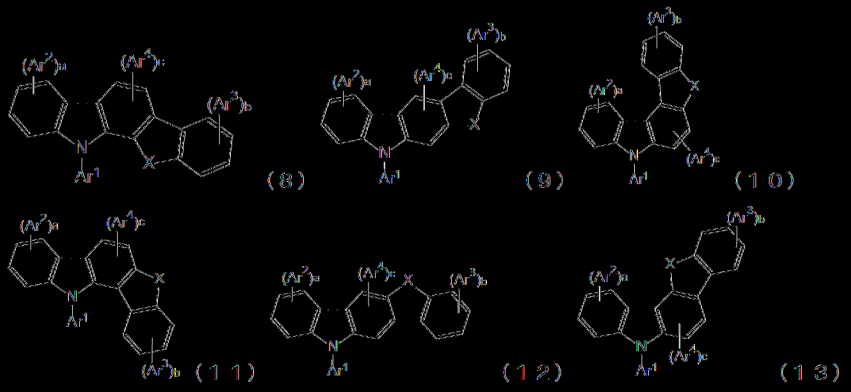
[化 4]



[0034] 於所述式（4）～式（7）中，L^1 及 L^2 分別獨立地表示直接鍵、經取代或未經取代的碳數 6～18 的芳香族烴基、或者將該些芳香族基的兩個～六個連結而成的經取代或未經取代的連結芳香族基，較佳為直接鍵、或者經取代或未經取代的碳數 6～18 的芳香族烴基，進而佳為直接鍵、或者經取代或未經取代的碳數 6～12 的芳香族烴基。關於 L^1 及 L^2 為未經取代的碳數 6～18 的芳香族烴基時的具體例，除了是自公知的芳香族烴中除去兩個氫而得的基以外，與 Ar^1～Ar^{16} 為未經取代的碳數 6～18 的芳香族烴基時的具體例相同。

[0035] 作為所述通式（1）的形態，由下述式（8）～式（13）中的任一者表示，較佳為由式（8）、式（9）、式（10）、式（12）表示，進而佳為由式（8）、式（9）、式（12）表示。

[化 5]



[0036] 作為 Ar^1～Ar^{16} 為鹵素時的具體例，可列舉氟基、氯基、溴基、碘基。較佳為氟基。

[0037] 於 Ar^1～Ar^{16} 為碳數 1～20 的烷基的情況下，可為直鏈、支鏈、環狀中的任一種烷基，較佳為碳數 1～10 的直鏈、支鏈或者環狀的烷基。作為其具體例，可列舉：甲基、乙基、正丙基、正丁基、正戊基、正己基、正辛基、正十二烷基、正十四烷基、正十八烷基之類的直鏈飽和烴基，異丙基、異丁基、新戊基、2-乙基己基、2-己基辛基等支鏈飽和烴基，環戊基、環己基、環辛基、4-丁基環己基等飽和脂環烴基等。

[0038] 作為 Ar^1～Ar^{16} 為未經取代的芳香族胺基的芳基的具體例，可列舉苯基、聯苯基、三聯苯基、四聯苯基、萘基、菲基、蒽基、三伸苯基、苊基、芴基、螺聯芴基等中除去一個氫原子而得的基，較佳為苯基、聯苯基、三聯苯基、萘基、菲基、芴基、三伸苯基中除去一個氫原子而得的基。另外，作為 Ar^1～Ar^{16} 為未

經取代的芳香族胺基的雜芳基的具體例，可列舉自吡咯、吡咯並吡咯、吲哚、吡咯並吲哚、苯並吲哚、萘並吡咯、異吲哚、吡咯並異吲哚、苯並異吲哚、萘並異吡咯、咔唑、苯並咔唑、吲哚並吲哚、咔唑並咔唑、苯並呋喃並咔唑、苯並噻吩並咔唑、咔啉、噻吩、苯並噻吩、萘並噻吩、二苯並噻吩、苯並噻吩並萘、苯並噻吩並苯並噻吩、苯並噻吩並二苯並噻吩、苯並噻吩並萘、苯並呋喃並萘、苯並呋喃並苯並呋喃、苯並呋喃並二苯並呋喃、二萘並呋喃、二萘並呋喃並呋喃、萘並苯並呋喃、吡啶、嘧啶、三嗪、喹啉、異喹啉、喹唑啉、喹噁啉等中除去一個氫原子而得的基，較佳為自二苯並呋喃、二苯並噻吩、咔唑、苯並呋喃並咔唑、或苯並噻吩並咔唑中除去一個氫原子而得的基。

【0039】 於 Ar^1～Ar^{16} 為未經取代的碳數 6～18 的芳香族烴基的情況下，可列舉自公知的芳香族烴中除去一個氫而得的基。作為所述芳香族烴，例如可列舉苯之類的單環式芳香族烴，萘之類的二環式芳香族烴，苯並二茚、伸聯苯、苊、蒽、菲、或芴之類的三環式芳香族烴，螢蒽、醋菲烯（acephenanthrylene）、醋蒽烯（aceanthrylene）、三伸苯、苉、熒、四芬、稠四苯、或七曜烯（pleiadene）之類的四環式芳香族烴等。較佳為苯、萘、蒽、三伸苯或苉。

【0040】 於 Ar^1～Ar^{16} 為所述碳數 3～18 的芳香族雜環基的情況下，作為其具體例，可列舉自芳香族雜環去除一個氫而得的基。作為

所述芳香族雜環基，例如可以吡咯、吡咯並吡咯、吲哚、吡咯並吲哚、苯並吲哚、萘並吡咯、異吲哚、吡咯並異吲哚、苯並異吲哚、萘並異吡咯、咔唑、苯並咔唑、吲哚並吲哚、咔唑並咔唑、吲哚並咔唑、咔啉之類的具有吡咯環的含氮芳香族化合物，噻吩、苯並噻吩、萘並噻吩、二苯並噻吩、苯並噻吩並萘、苯並噻吩並苯並噻吩、苯並噻吩並二苯並噻吩、二萘並噻吩、二萘並噻吩並噻吩、萘並苯並噻吩、苯並噻吩並咔唑之類的具有噻吩環的含硫芳香族化合物，呋喃、苯並呋喃、萘並呋喃、二苯並呋喃、苯並呋喃並萘、苯並呋喃並苯並呋喃、苯並呋喃並二苯並呋喃、二萘並呋喃、二萘並呋喃並呋喃、萘並苯並呋喃、苯並呋喃並咔唑之類的具有呋喃環的含氧芳香族化合物，吡啶、嘧啶、三嗪、喹啉、異喹啉、喹唑啉、喹噁啉等為例來示出。較佳為二苯並呋喃、二苯並噻吩、咔唑、苯並噻吩並二苯並噻吩、苯並呋喃並二苯並呋喃、吲哚並咔唑、苯並呋喃並咔唑、或苯並噻吩並咔唑，更佳為二苯並呋喃、二苯並噻吩、咔唑。

【0041】 於本說明書中，連結芳香族基是指兩個以上的芳香族基的芳香族環藉由單鍵進行鍵結而連結的芳香族基。該些連結芳香族基可為直鏈狀，亦可分支。苯環彼此連結時的連結位置可為鄰、間、對中的任一種，較佳為對位連結或間位連結。芳香族基可為芳香族烴基，亦可為芳香族雜環基，多個芳香族基可相同亦可不同。再者，構成連結芳香族基的芳香族基中不包含芳香族胺基。

【0042】 於 Ar^1～Ar^{16} 及 L^1～L^2 為芳香族烴基、芳香族雜環基或連

結芳香族基的情況下，可具有取代基，作為所述取代基，可列舉：氘、鹵素、碳數 1～20 的烷基、碳數 7～38 的芳烷基、碳數 2～20 的烯基、碳數 2～20 的炔基、碳數 2～20 的醯基、碳數 2～20 的醯氧基、碳數 1～20 的烷氧基、碳數 2～20 的烷氧基羰基、碳數 2～20 的烷氧基羰基氧基、碳數 1～20 的烷基磺醯基、碳數 3～12 的烷基矽烷基等。另外，於 Ar^1～Ar^{16} 為芳香族胺基的情況下，芳香族基亦可具有取代基，此時的取代基與所述芳香族烴基、芳香族雜環基或連結芳香族基具有取代基的情況相同。

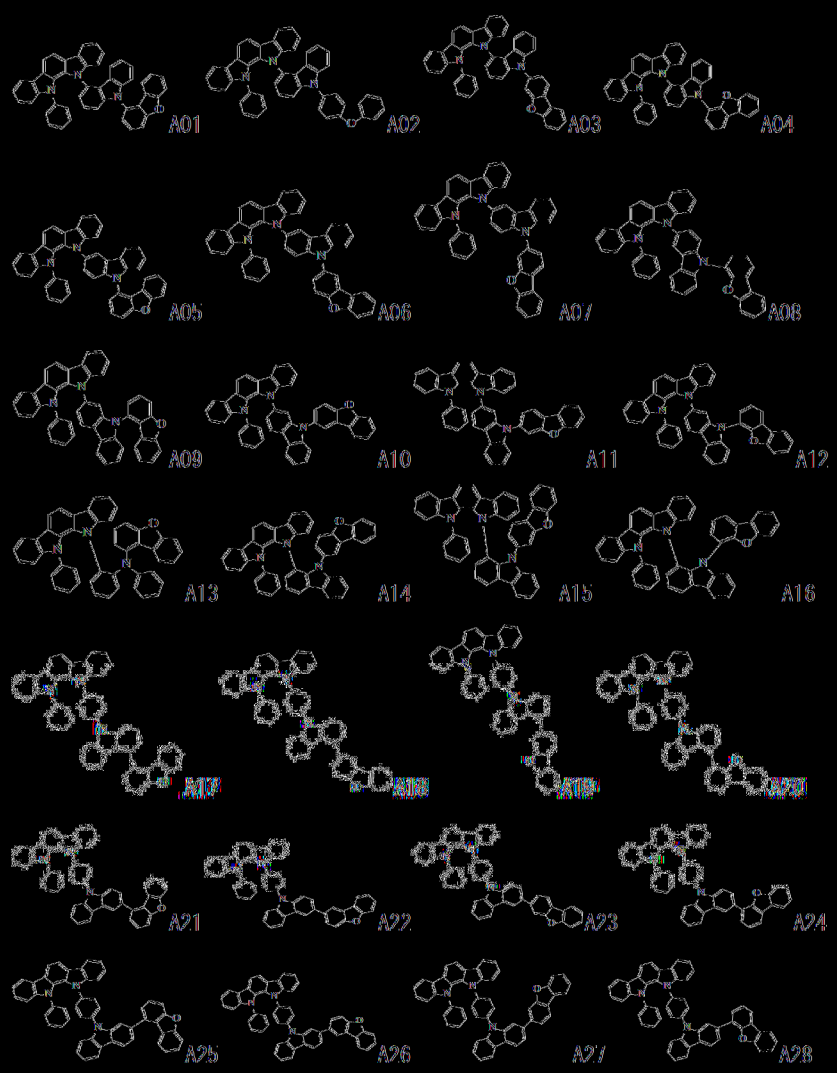
【0043】 所述作為取代基的碳數 1～20 的烷基可為直鏈、支鏈、環狀中的任一種烷基，較佳為碳數 1～10 的直鏈、支鏈或者環狀的烷基。作為其具體例，可例示：甲基、乙基、正丙基、正丁基、正戊基、正己基、正辛基、正十二烷基、正十四烷基、正十八烷基之類的直鏈飽和烴基，異丙基、異丁基、新戊基、2-乙基己基、2-己基辛基等支鏈飽和烴基，環戊基、環己基、環辛基、4-丁基環己基、4-十二烷基環己基等飽和脂環烴基。

【0044】 所述作為取代基的鹵素的具體例可列舉氟基、氯基、溴基、碘基。作為所述作為取代基的碳數 7～38 的芳烷基的具體例，可列舉苄基、苯乙基、苯基丙基、苯基丁基、萘基甲基、三伸苯基甲基等。作為所述作為取代基的碳數 2～20 的烯基的具體例，可列舉乙烯基、丙烯基、丁烯基、戊烯基、環戊烯基、己烯基、環己烯基、辛烯基等。作為碳數 2～20 的炔基的具體例，可列舉乙炔基、丙炔基、丁炔基、戊炔基等。作為所述作為取代基的碳

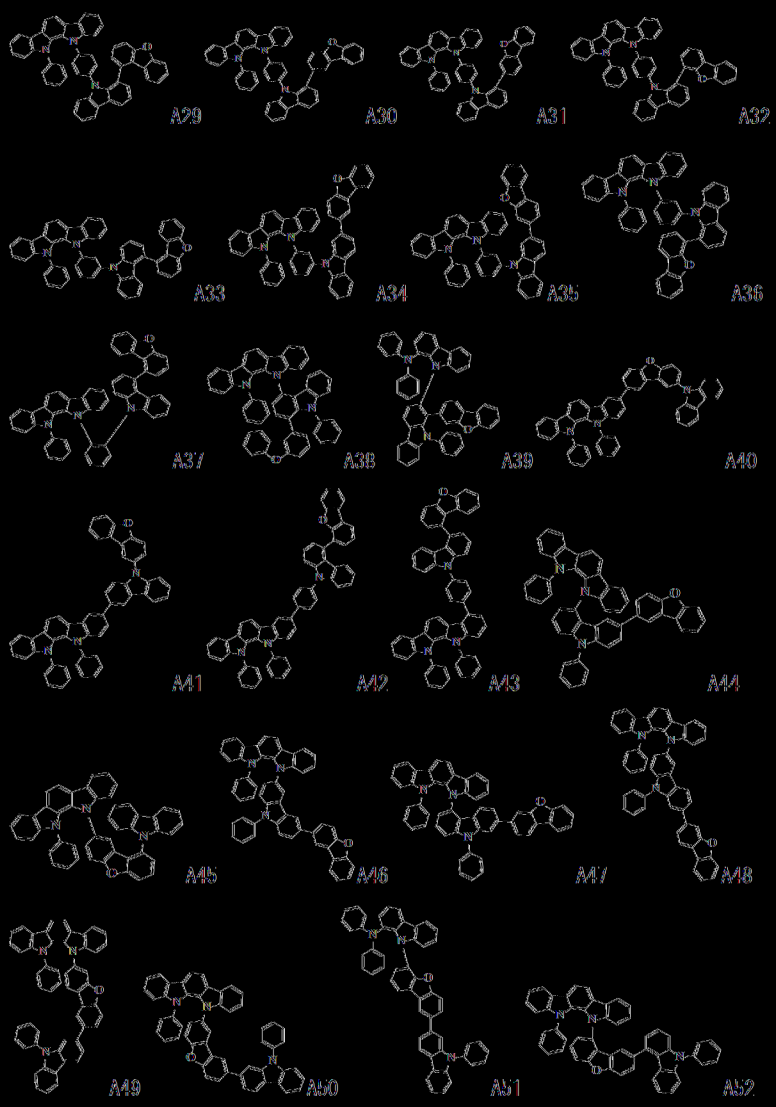
數 2～20 的醯基的具體例，可列舉甲醯基、乙醯基、丙醯基、苯甲醯基等。作為所述作為取代基的碳數 1～20 的烷氧基的具體例，可列舉甲氧基、乙氧基、丙氧基、丁氧基等。作為所述作為取代基的碳數 2～20 的烷氧基羰基的具體例，可列舉甲氧基羰基、乙氧基羰基等。作為所述作為取代基的碳數 3～12 的烷基矽烷基的具體例，可列舉三甲基矽烷基、三乙基矽烷基、三丙基矽烷基等。作為烷氧基羰氧基的具體例，可列舉甲氧基羰氧基、乙氧基羰氧基、丁氧基羰氧基等，作為烷基磺醯基的具體例，可列舉甲基磺醯基、乙基磺醯基、丙基磺醯基等。

【0045】 將作為本發明的光電轉換元件用材料的通式（1）所表示的化合物的較佳的具體例示於以下，但並不限定於該些。再者，以下式中的 D 表示氘，數字表示氘的取代數。

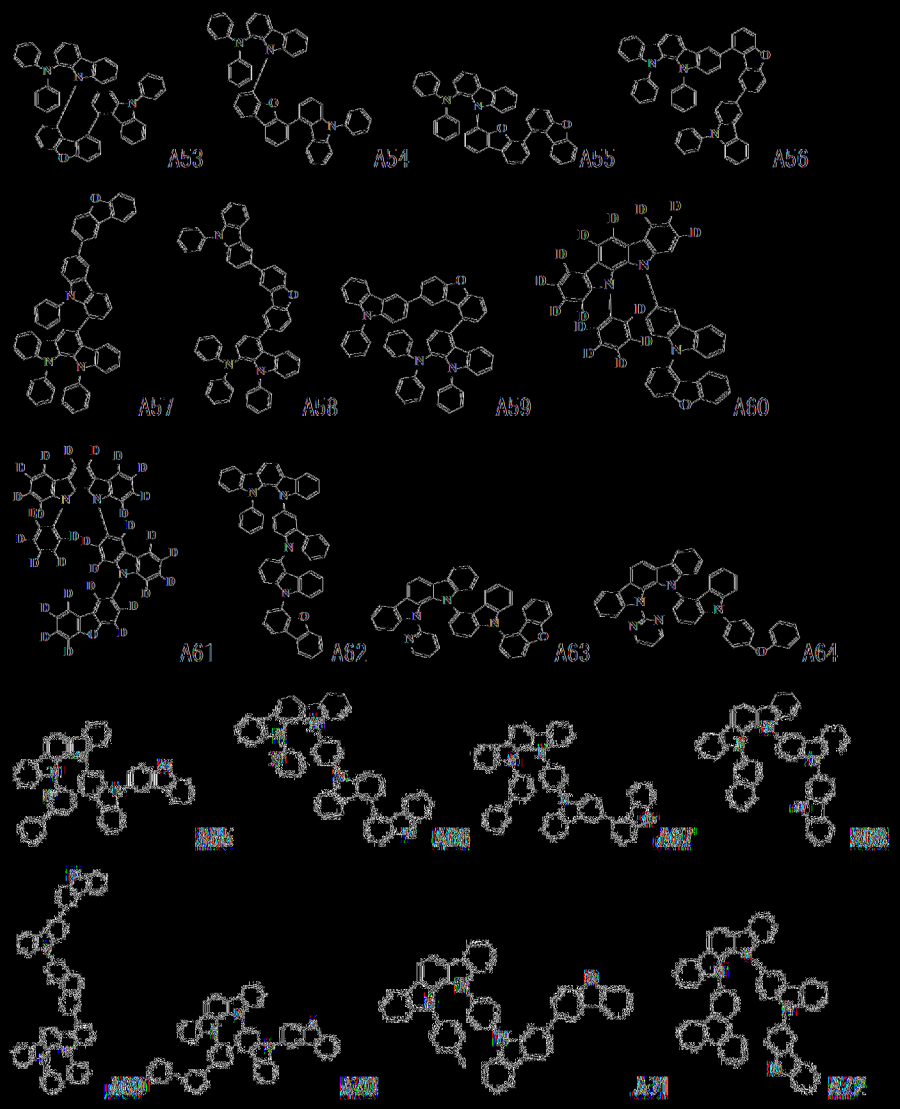
【0046】 [化 6]


A01
A02
A03
A04
A05
A06
A07
A08
A09
A10
A11
A12
A13
A14
A15
A16
A17
A18
A19
A20
A21
A22
A23
A24
A25
A26
A27
A28

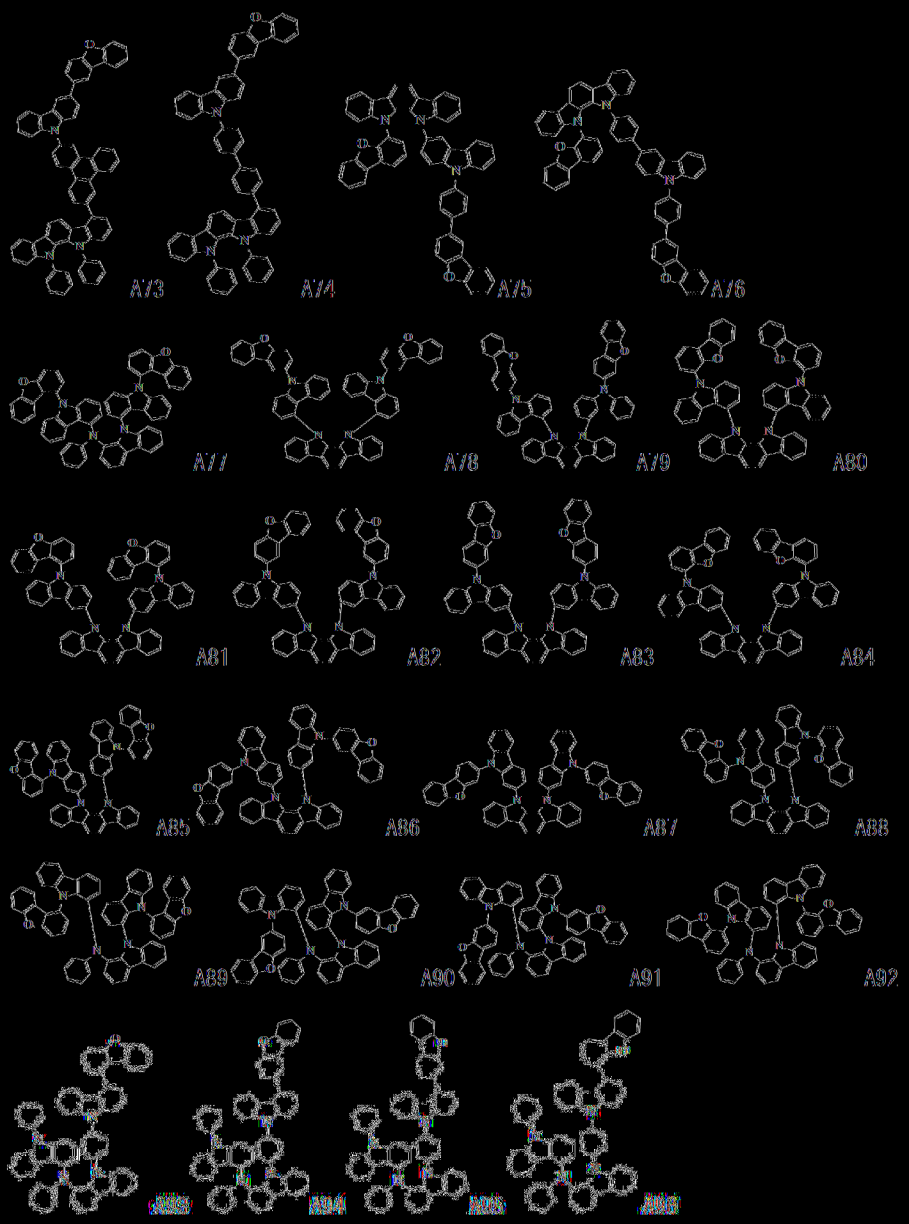
[化 7]


A29
A30
A31
A32
A33
A34
A35
A36
A37
A38
A39
A40
A41
A42
A43
A44
A45
A46
A47
A48
A49
A50
A51
A52

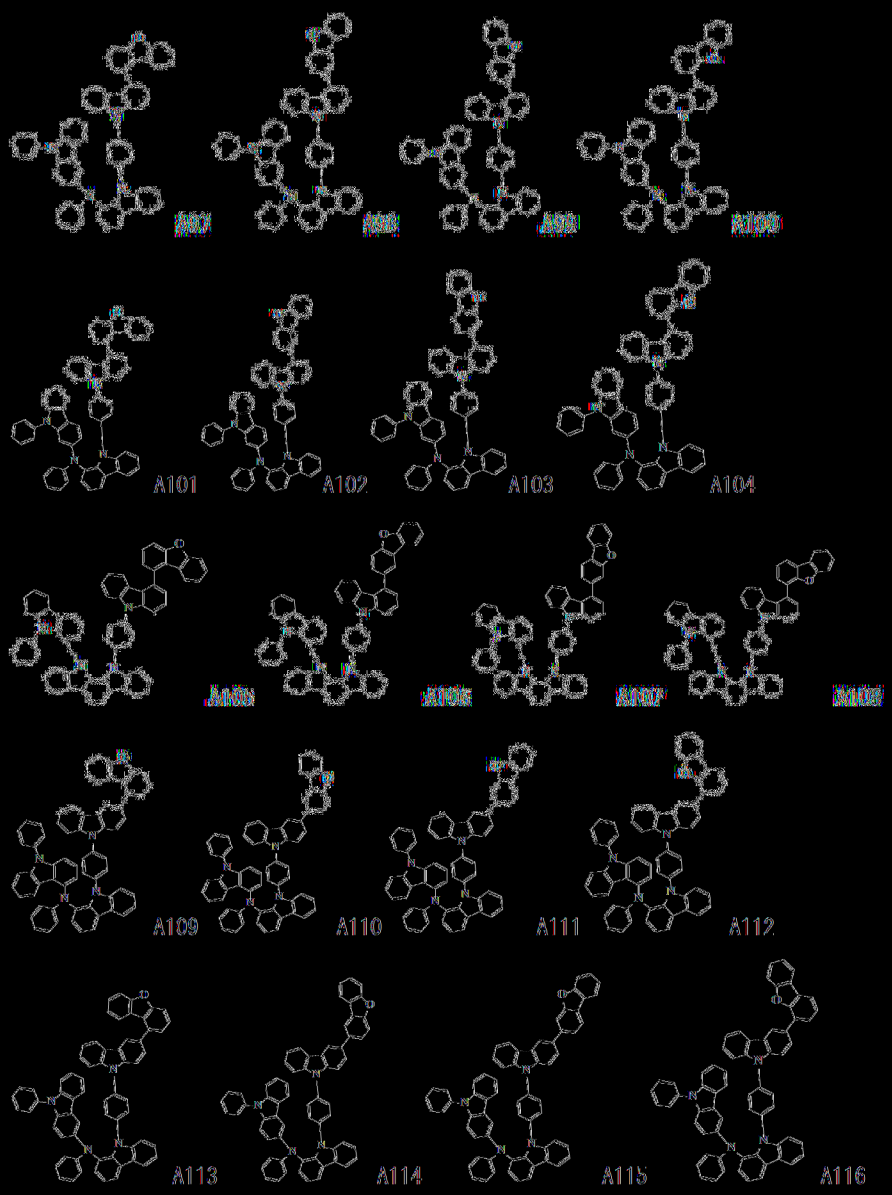
[化 8]


A53
A54
A55
A56
A57
A58
A59
A60
A61
A62
A63
A64
A65
A66
A67
A68
A69
A70
A71
A72

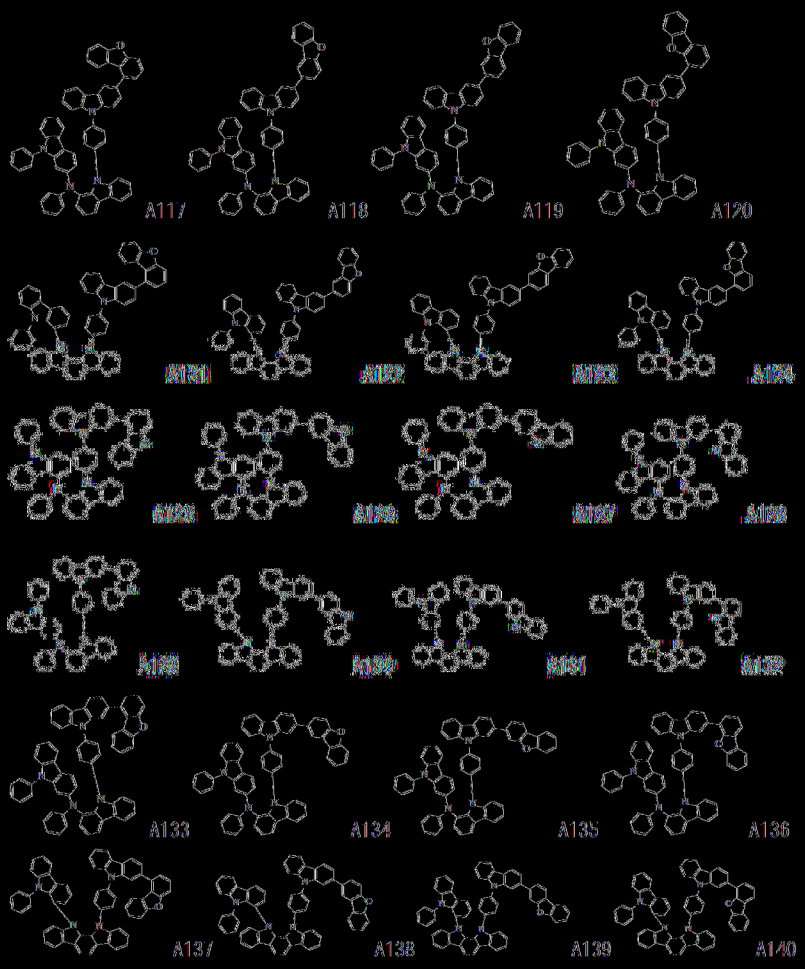
[化 9-1]


A73
A74
A75
A76
A77
A78
A79
A80
AB1
AB2
AB3
AB4
AB5
AB6
AB7
AB8
AB9
A90
A91
A92

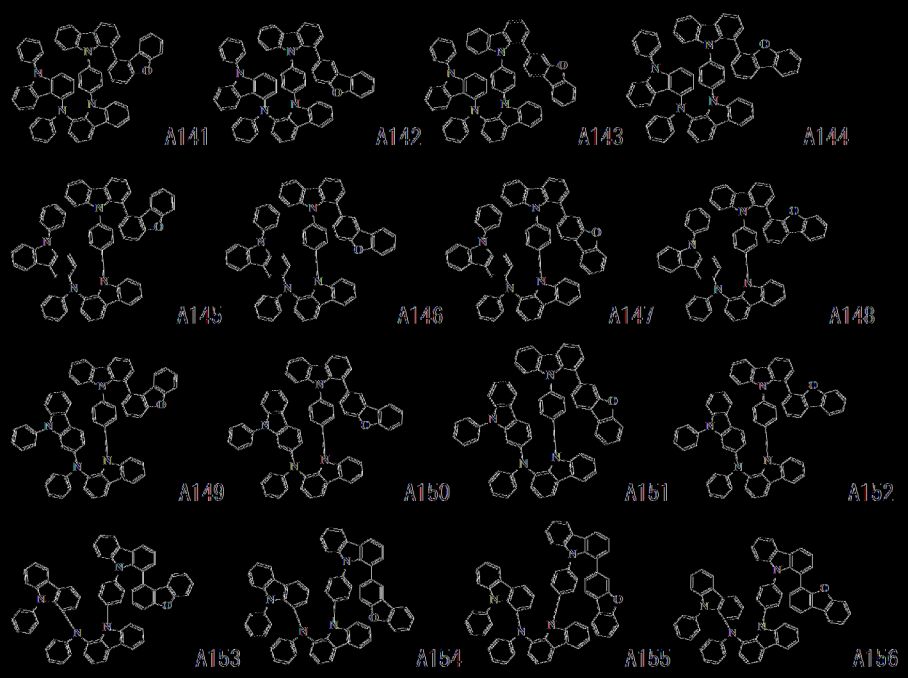
[化 9-2]



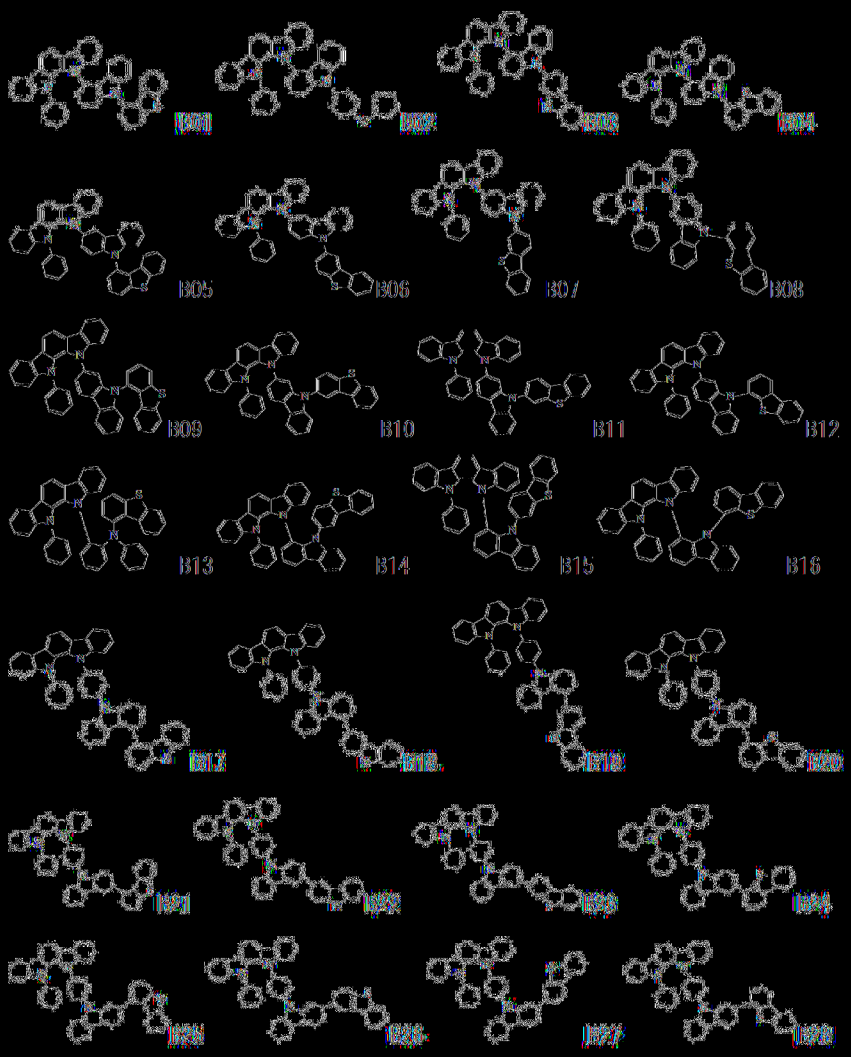
[化 9-3]


A117
A118
A119
A120
A121
A122
A123
A124
A125
A126
A127
A128
A129
A130
A131
A132
A133
A134
A135
A136
A137
A138
A139
A140

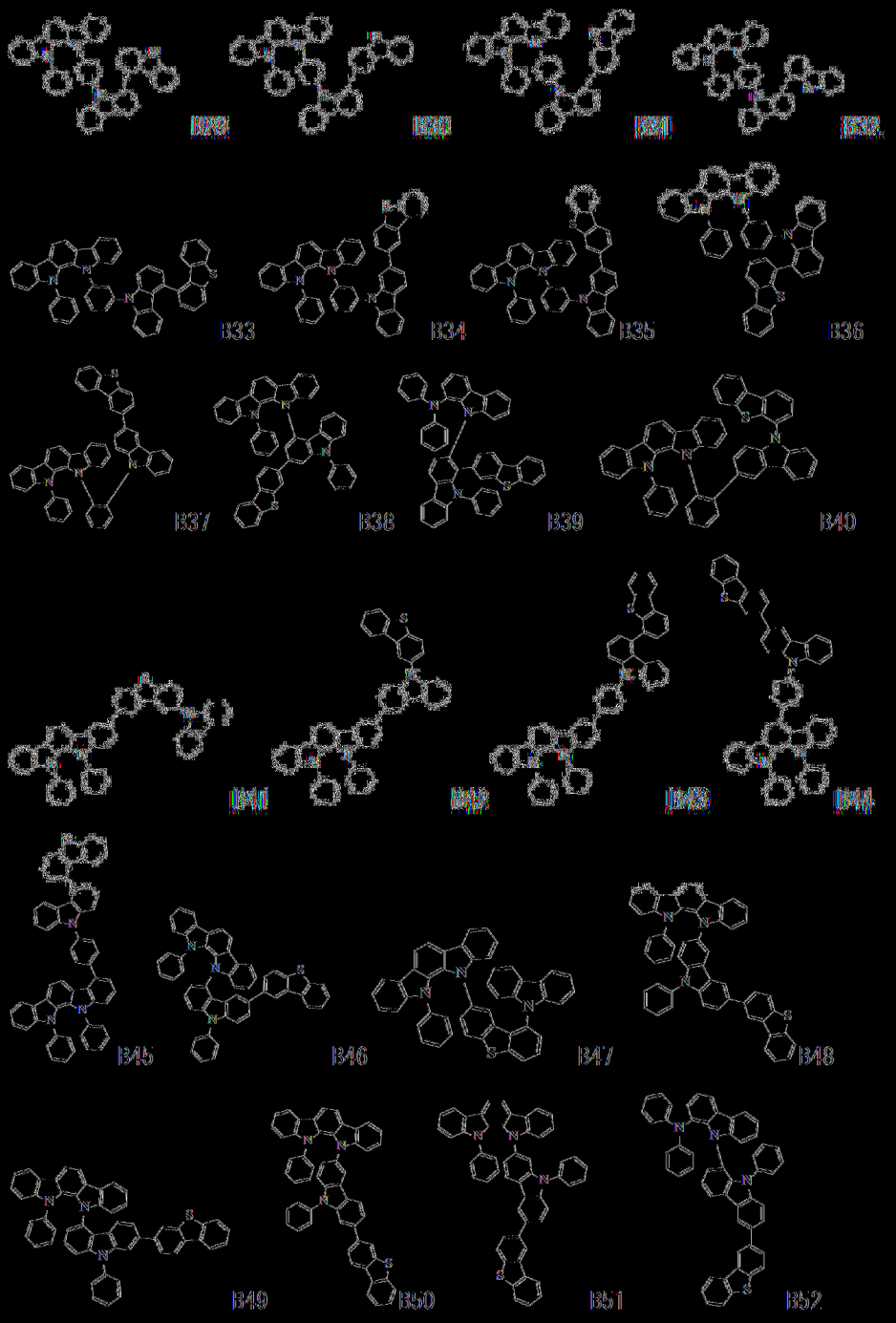
[化 9-4]


A141
A142
A143
A144
A145
A146
A147
A148
A149
A150
A151
A152
A153
A154
A155
A156

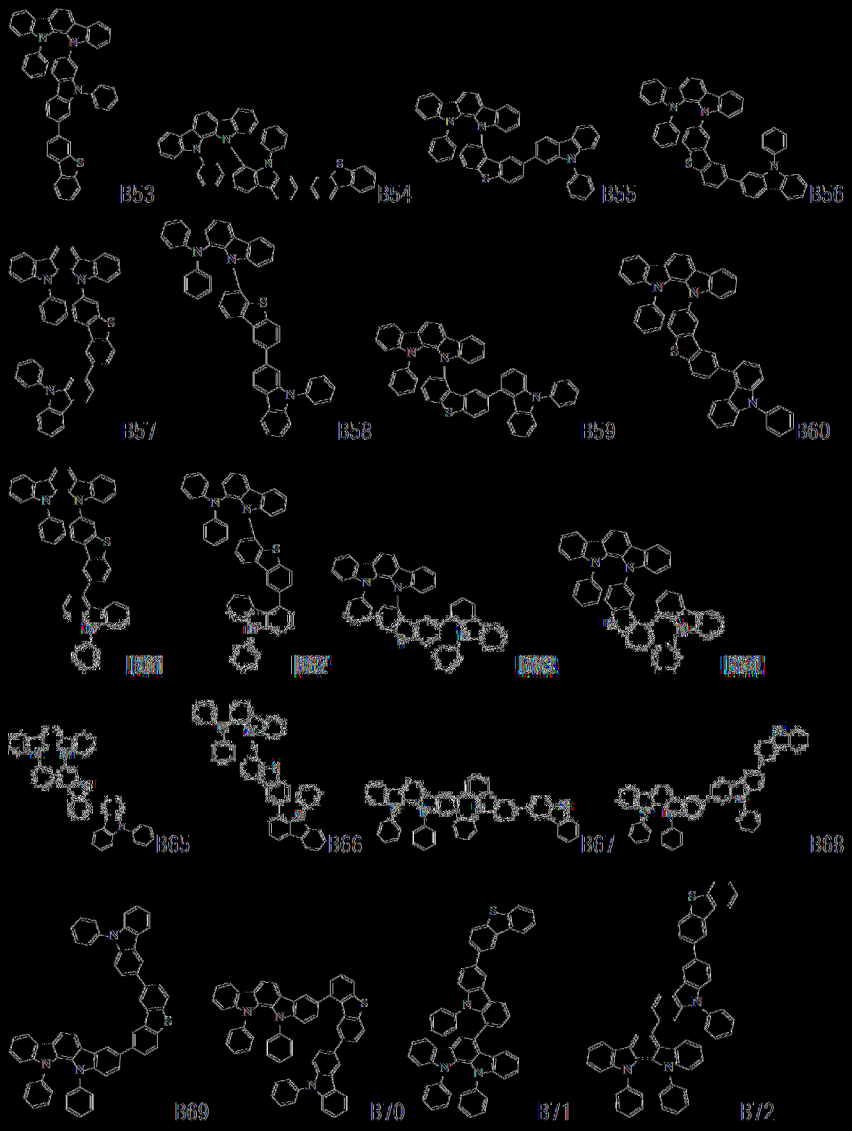
[化 10]


B01
B02
B03
B04
B05
B06
B07
B08
B09
B10
B11
B12
B13
B14
B15
B16
B17
B18
B19
B20
B21
B22
B23
B24
B25
B26
B27
B28

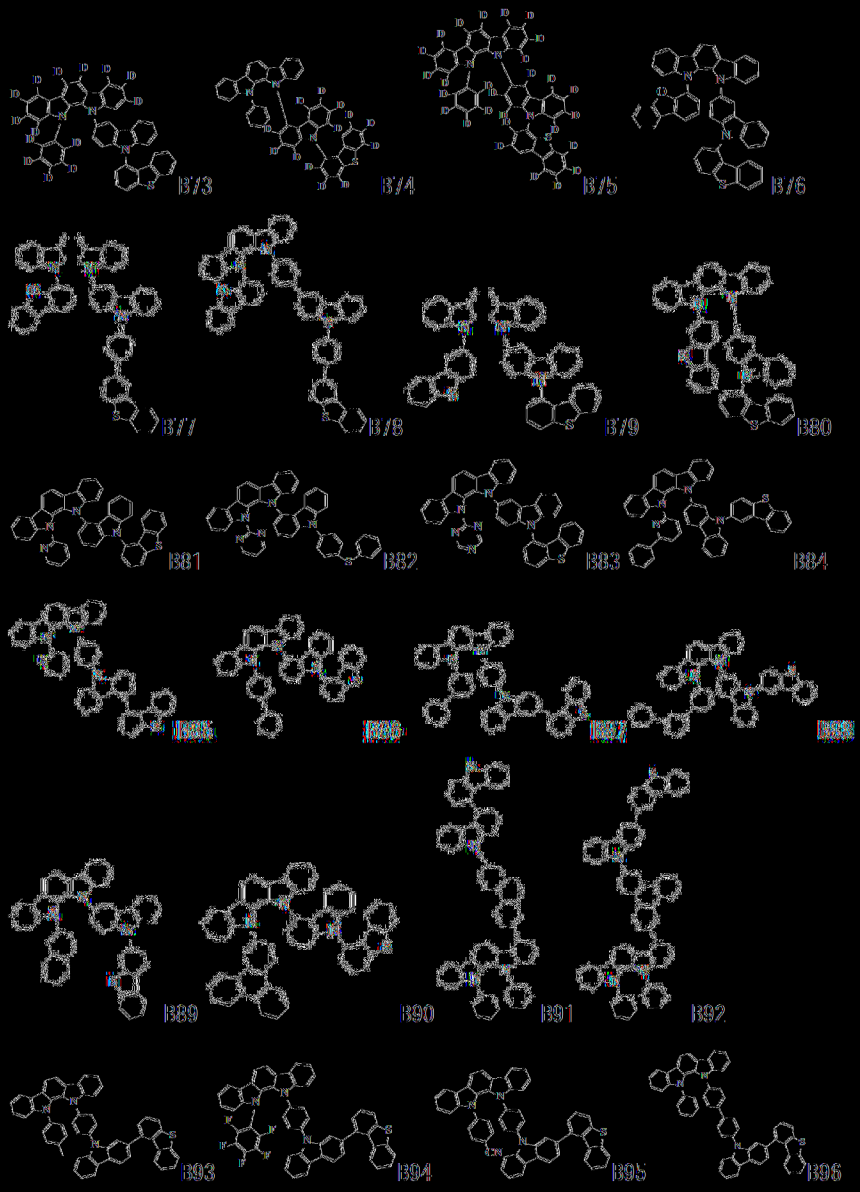
[化 11]


B29
B30
B31
B32
B33
B34
B35
B36
B37
B38
B39
B40
B41
B42
B43
B44
B45
B46
B47
B48
B49
B50
B51
B52

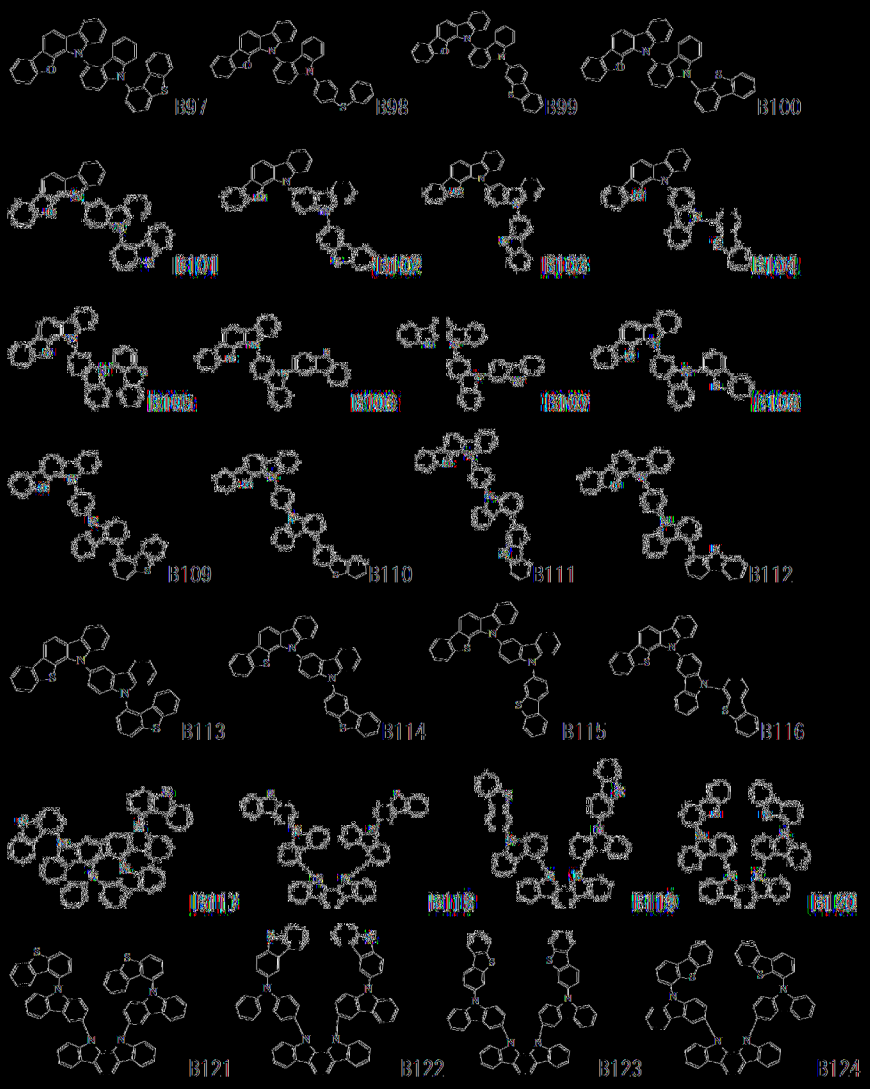
[化 12]


B53
B54
B55
B56
B57
B58
B59
B60
B61
B62
B63
B64
B65
B66
B67
B68
B69
B70
B71
B72

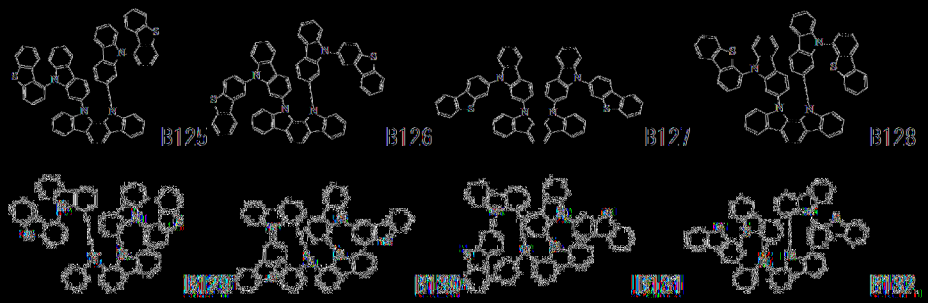
[化 13]


B73
B74
B75
B76
B77
B78
B79
B80
B81
B82
B83
B84
B85
B86
B87
B88
B89
B90
B91
B92
B93
B94
B95
B96

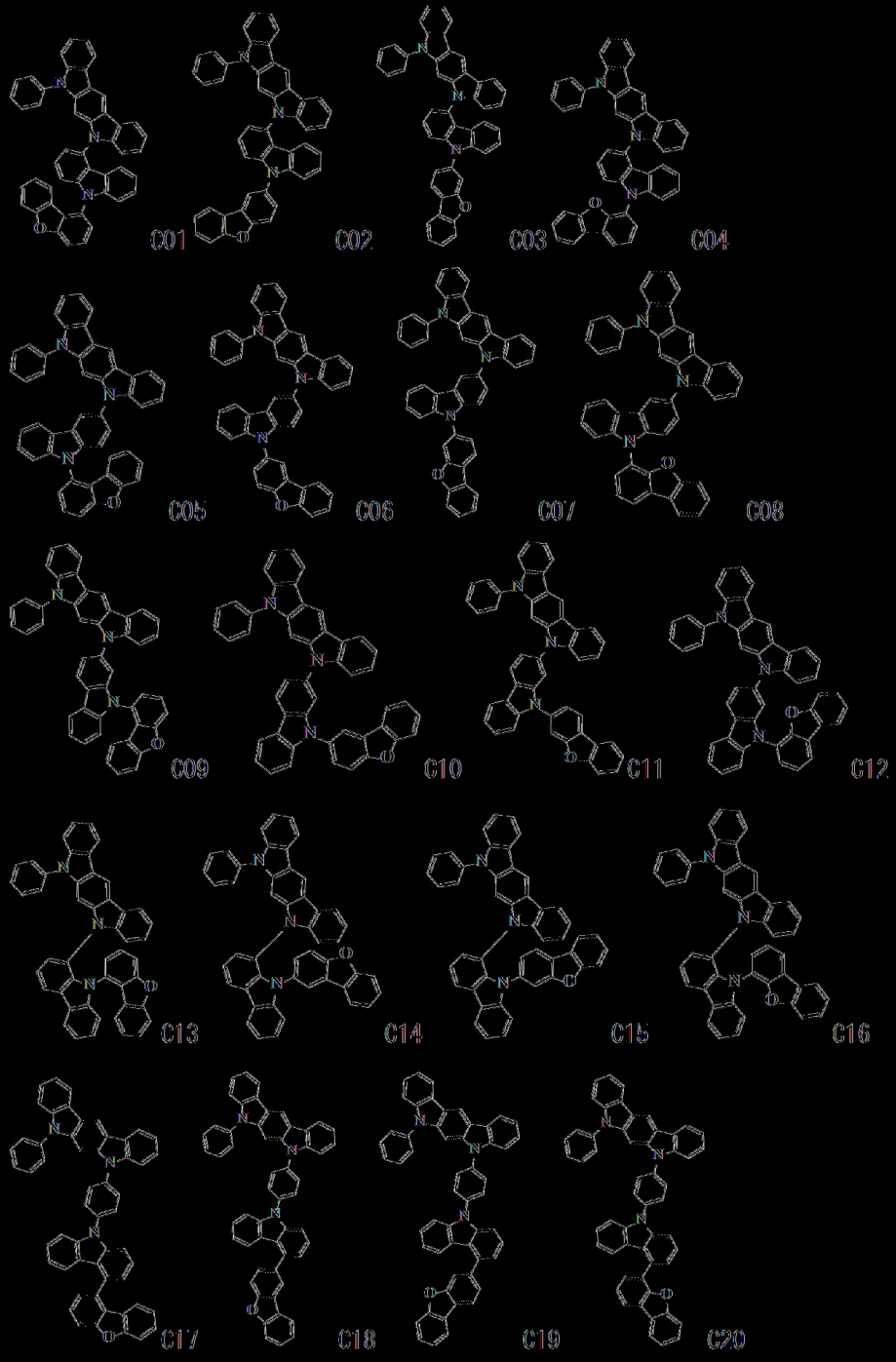
[化 14-1]


B97
B98
B99
B100
B101
B102
B103
B104
B105
B106
B107
B108
B109
B110
B111
B112
B113
B114
B115
B116
B117
B118
B119
B120
B121
B122
B123
B124

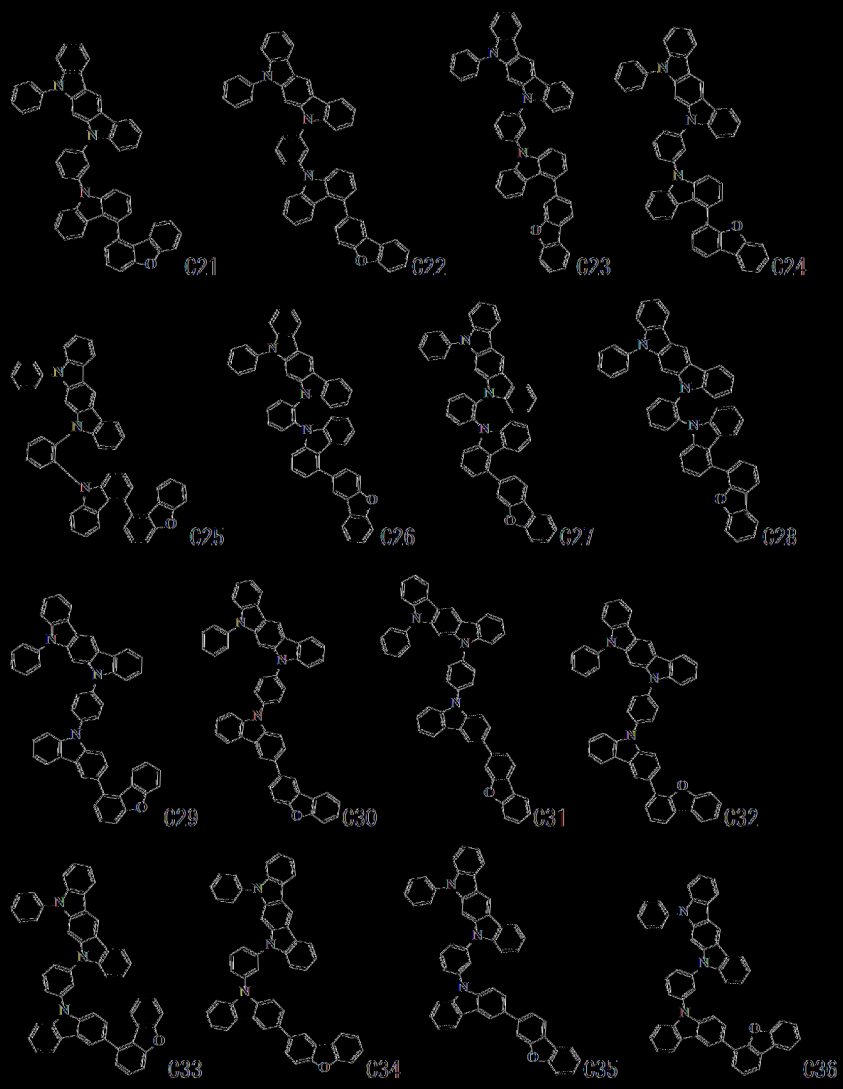
[化 14-2]


B125
B126
B127
B128
B129
B130
B131
B132

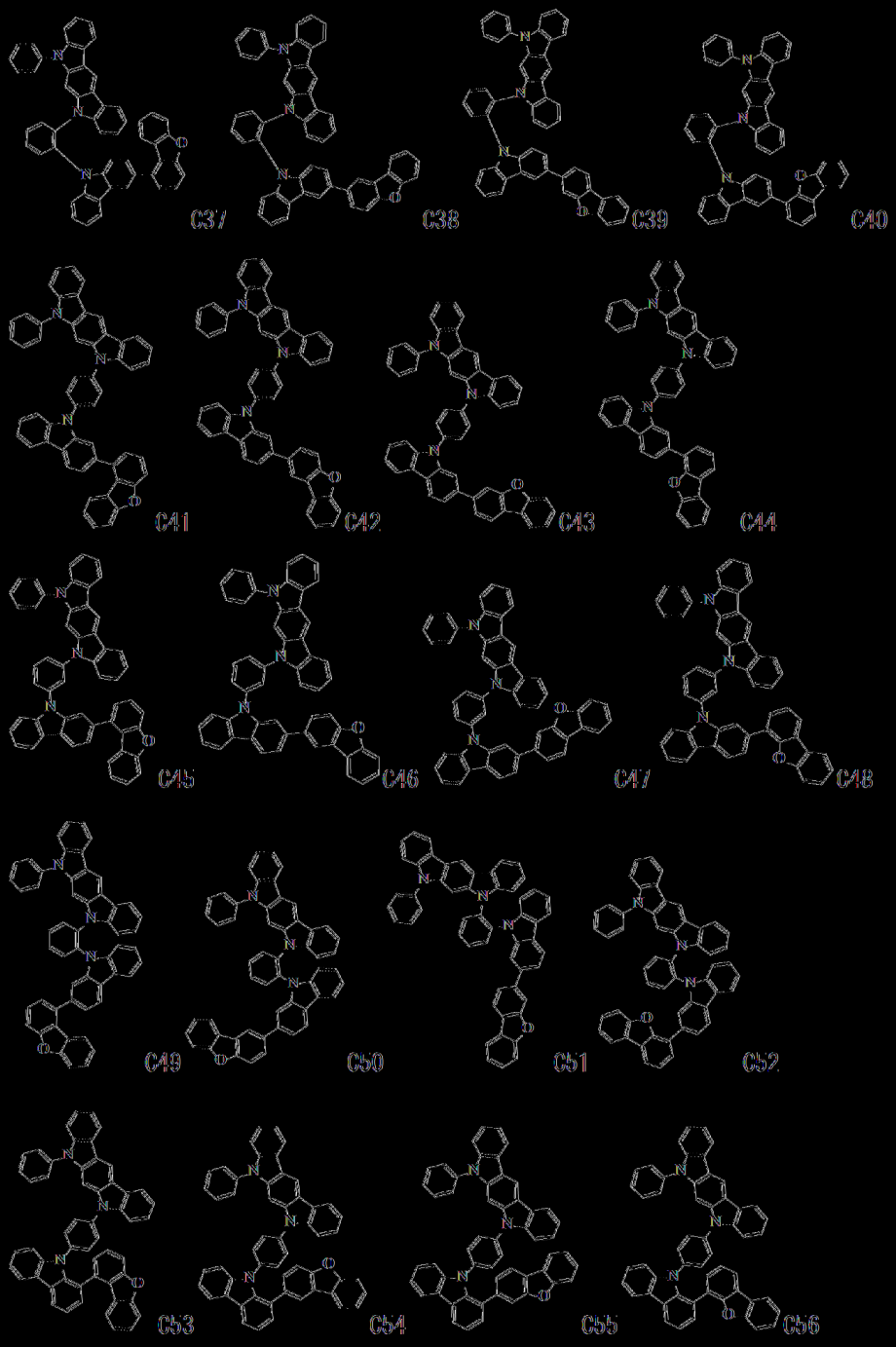
[化 15]


C01
C02
C03
C04
C05
C06
C07
C08
C09
C10
C11
C12
C13
C14
C15
C16
C17
C18
C19
C20

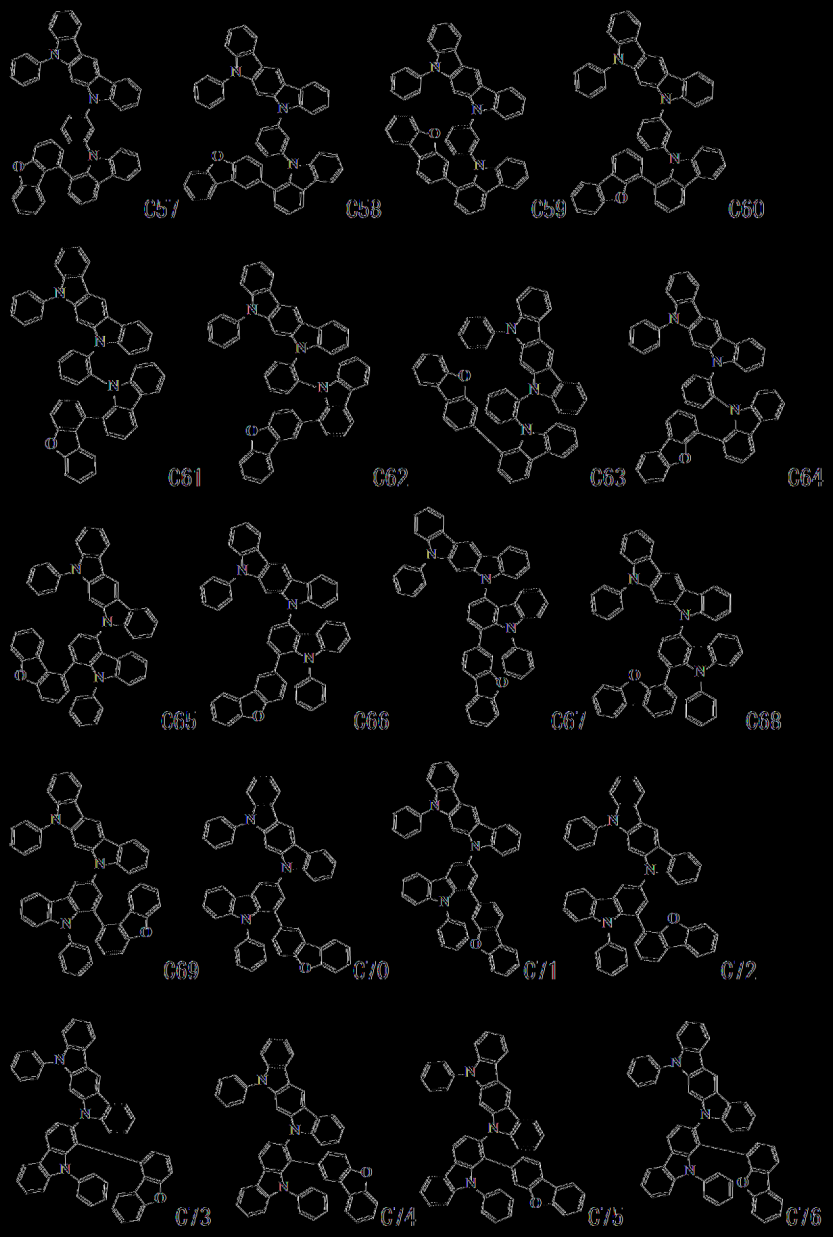
[化 16]



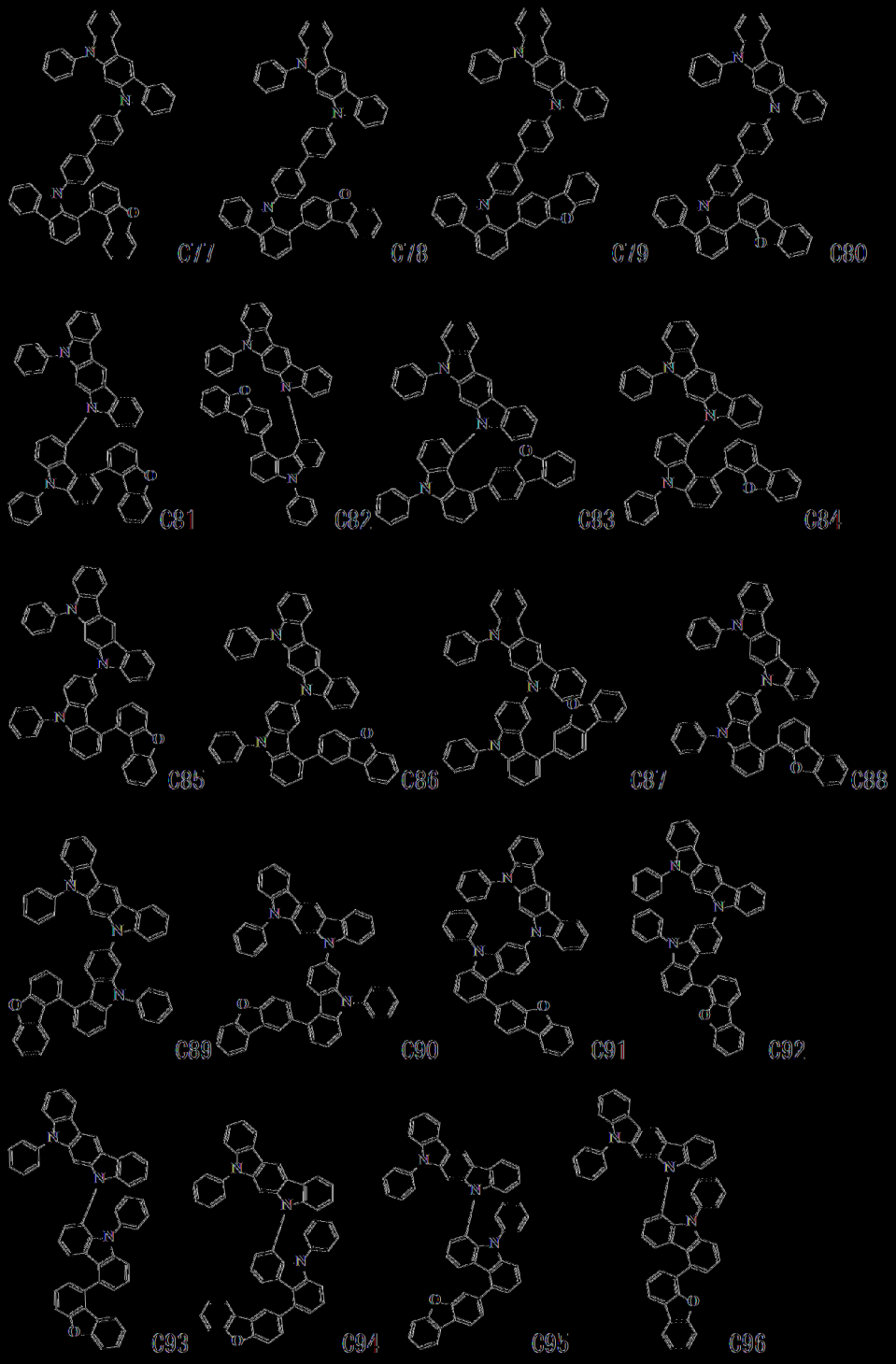
[化 17]


C37
C38
C39
C40
C41
C42
C43
C44
C45
C46
C47
C48
C49
C50
C51
C52
C53
C54
C55
C56

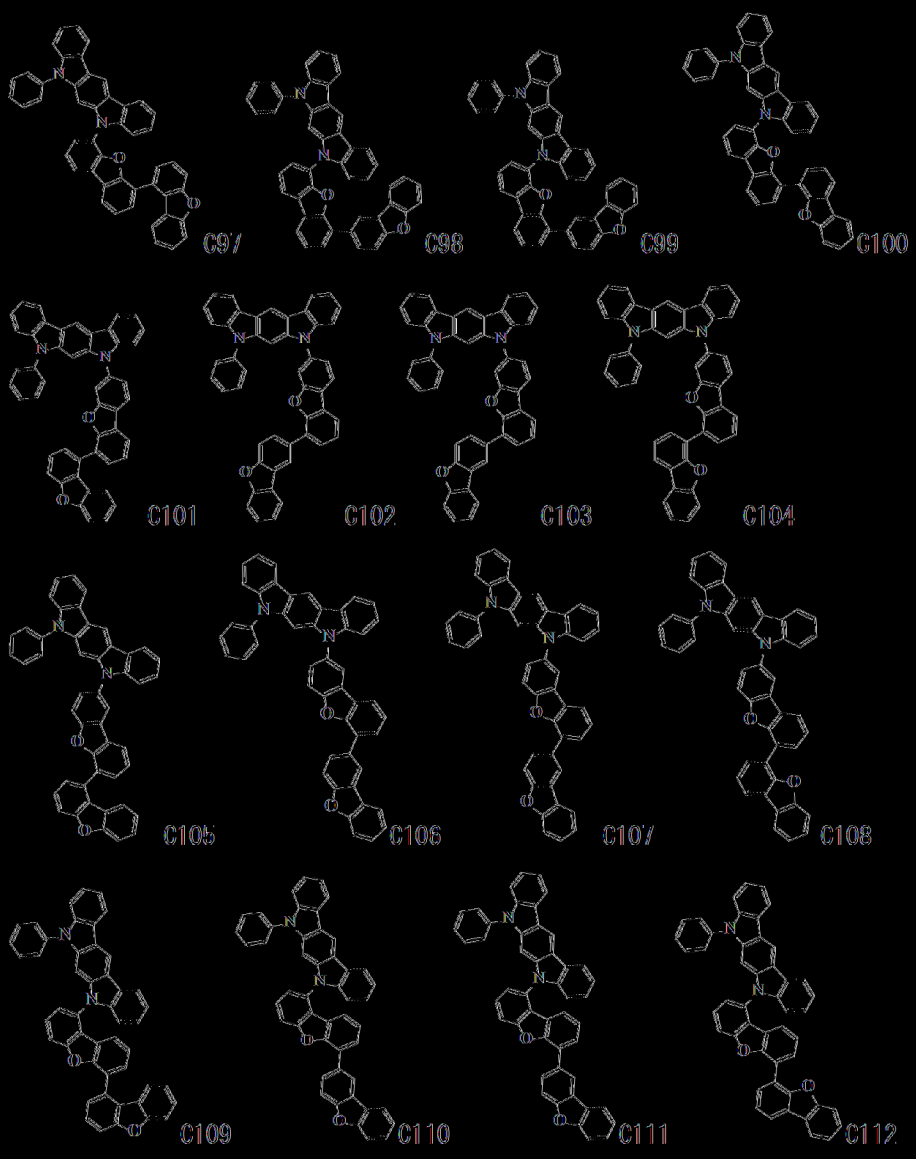
[化 18]


C57
C58
C59
C60
C61
C62
C63
C64
C65
C66
C67
C68
C69
C70
C71
C72
C73
C74
C75
C76

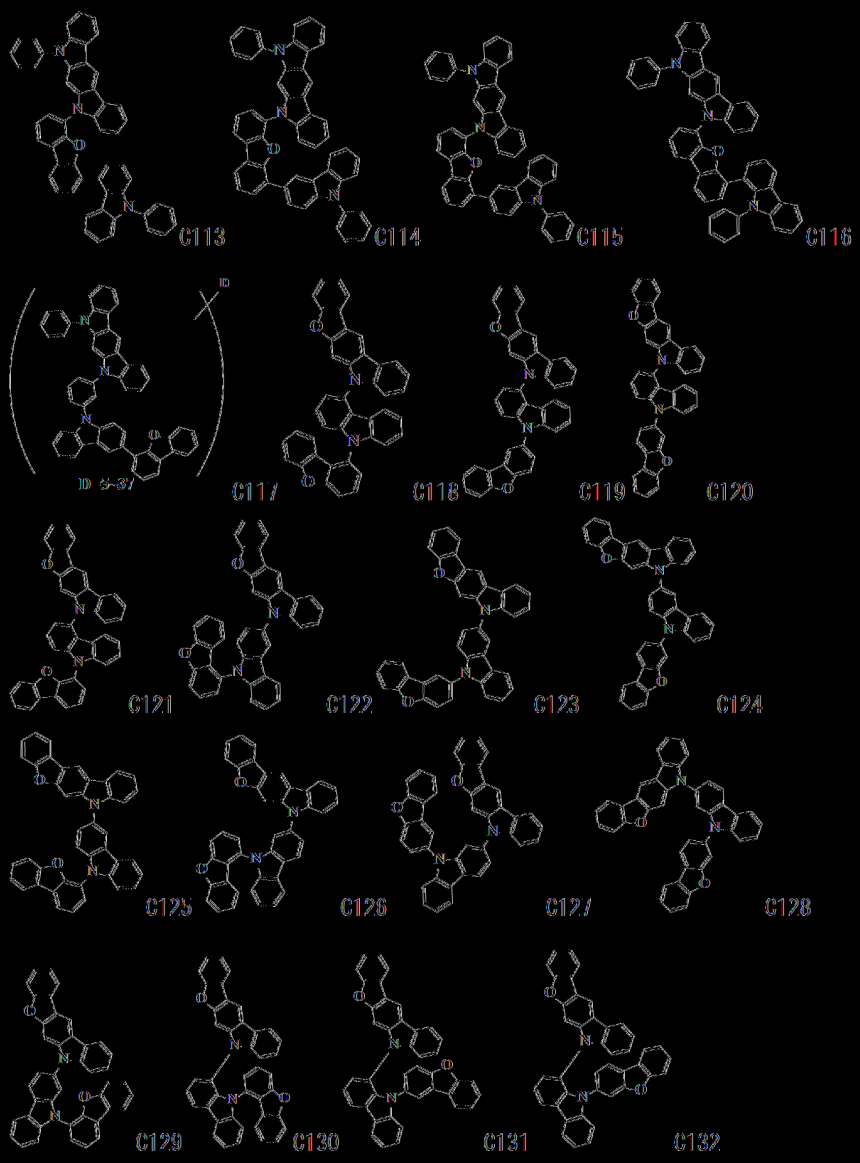
[化 19]


C77
C78
C79
C80
C81
C82
C83
C84
C85
C86
C87
C88
C89
C90
C91
C92
C93
C94
C95
C96

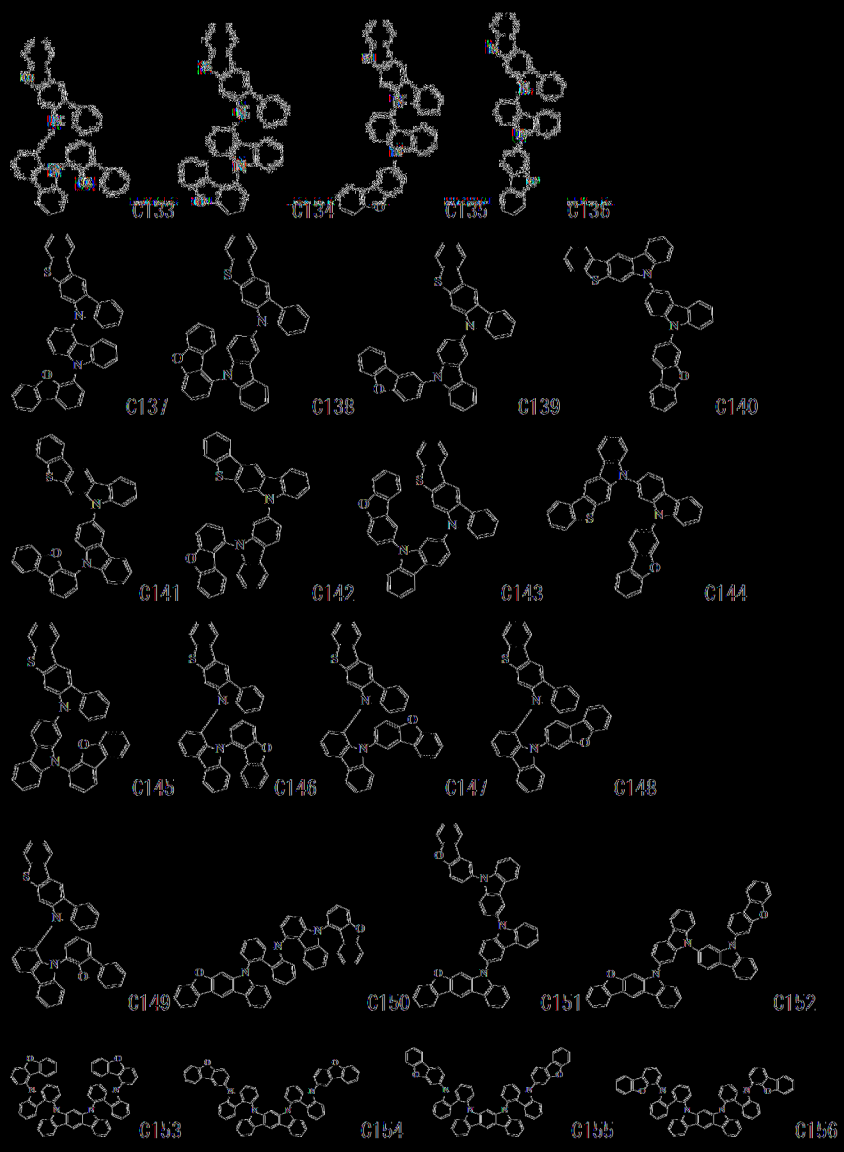
[化 20]


C97
C98
C99
C100
C101
C102
C103
C104
C105
C106
C107
C108
C109
C110
C111
C112

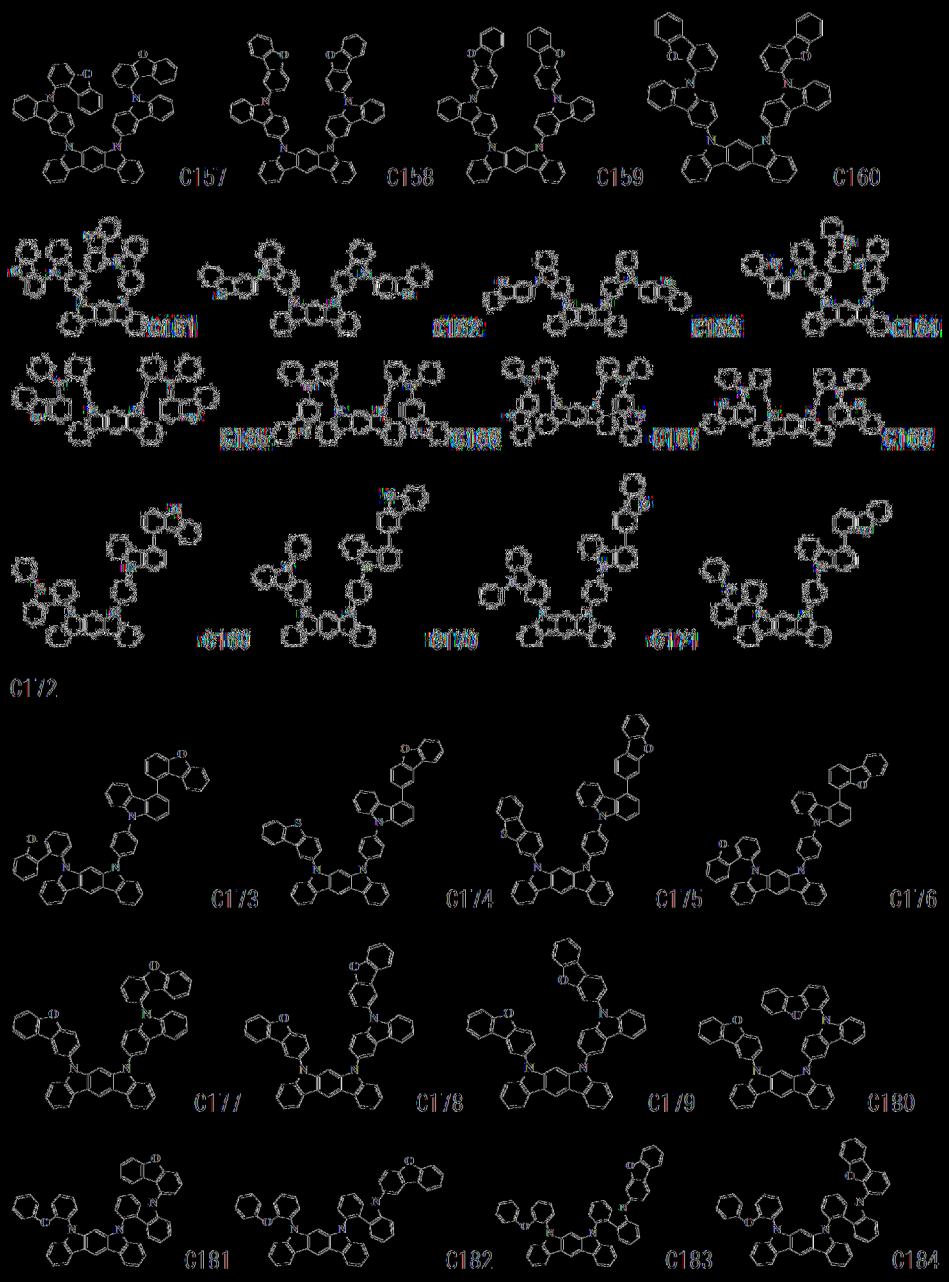
[化 21-1]


C113
C114
C115
C116
ID
ID 5-37
C117
C118
C119
C120
C121
C122
C123
C124
C125
C126
C127
C128
C129
C130
C131
C132

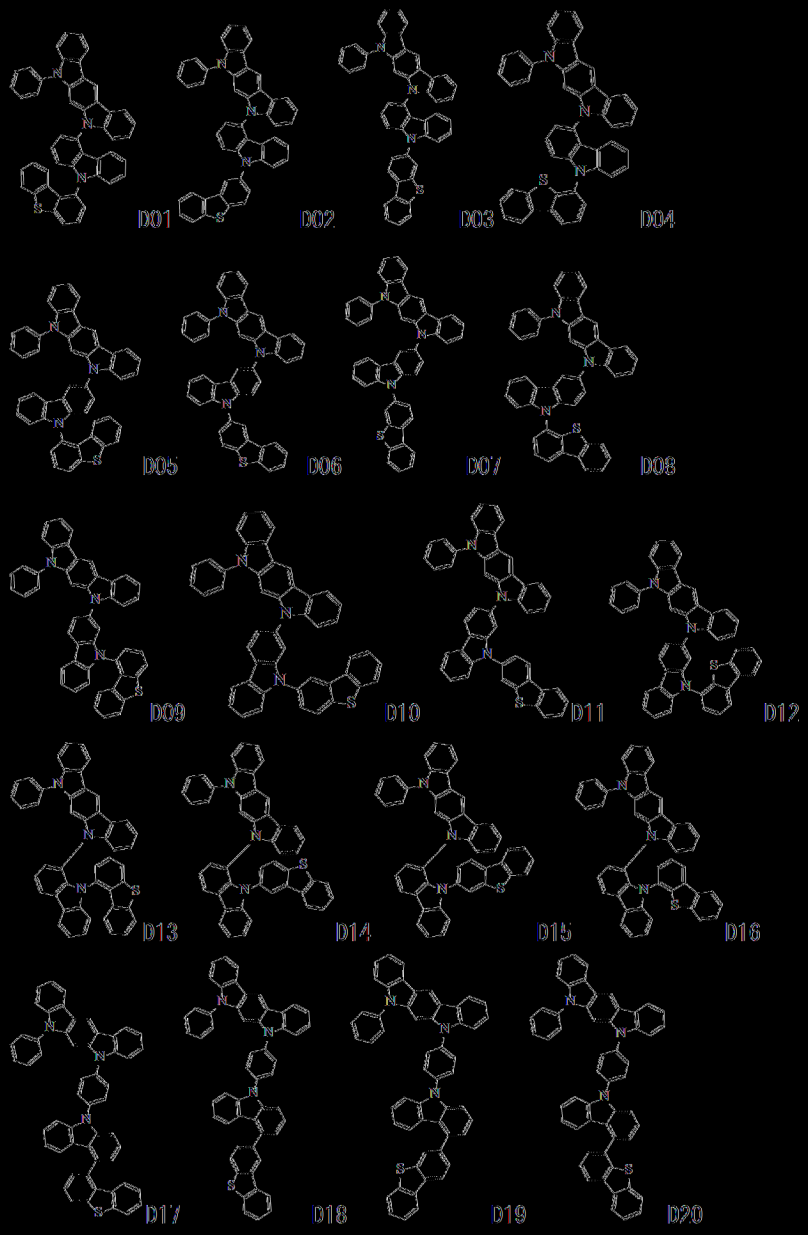
[化 22-2]


C133
C134
C135
C136
C137
C138
C139
C140
C141
C142
C143
C144
C145
C146
C147
C148
C149
C150
C151
C152
C153
C154
C155
C156

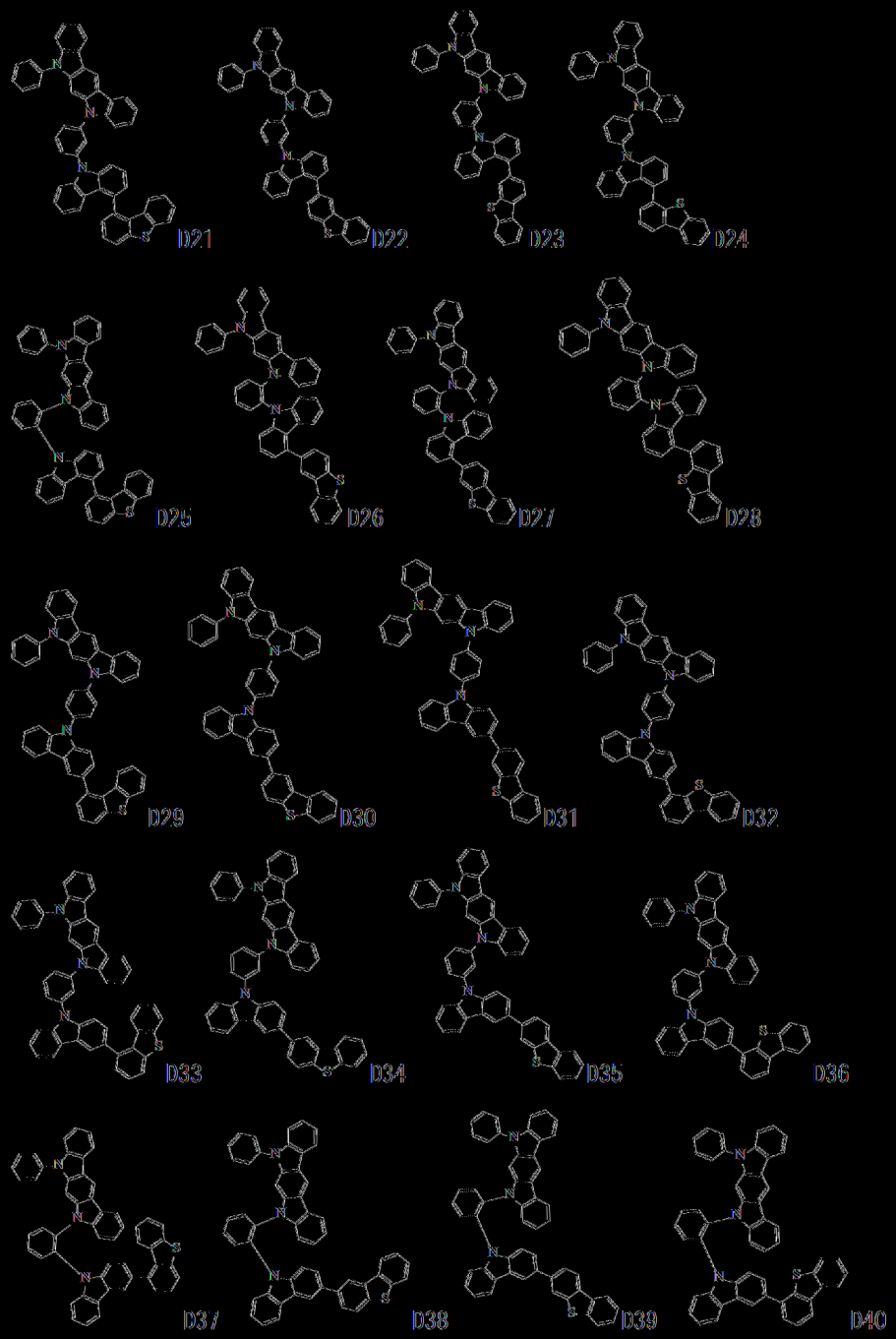
[化 22-3]


C157
C158
C159
C160
C161
C162
C163
C164
C165
C166
C167
C168
C169
C170
C171
C172
C173
C174
C175
C176
C177
C178
C179
C180
C181
C182
C183
C184

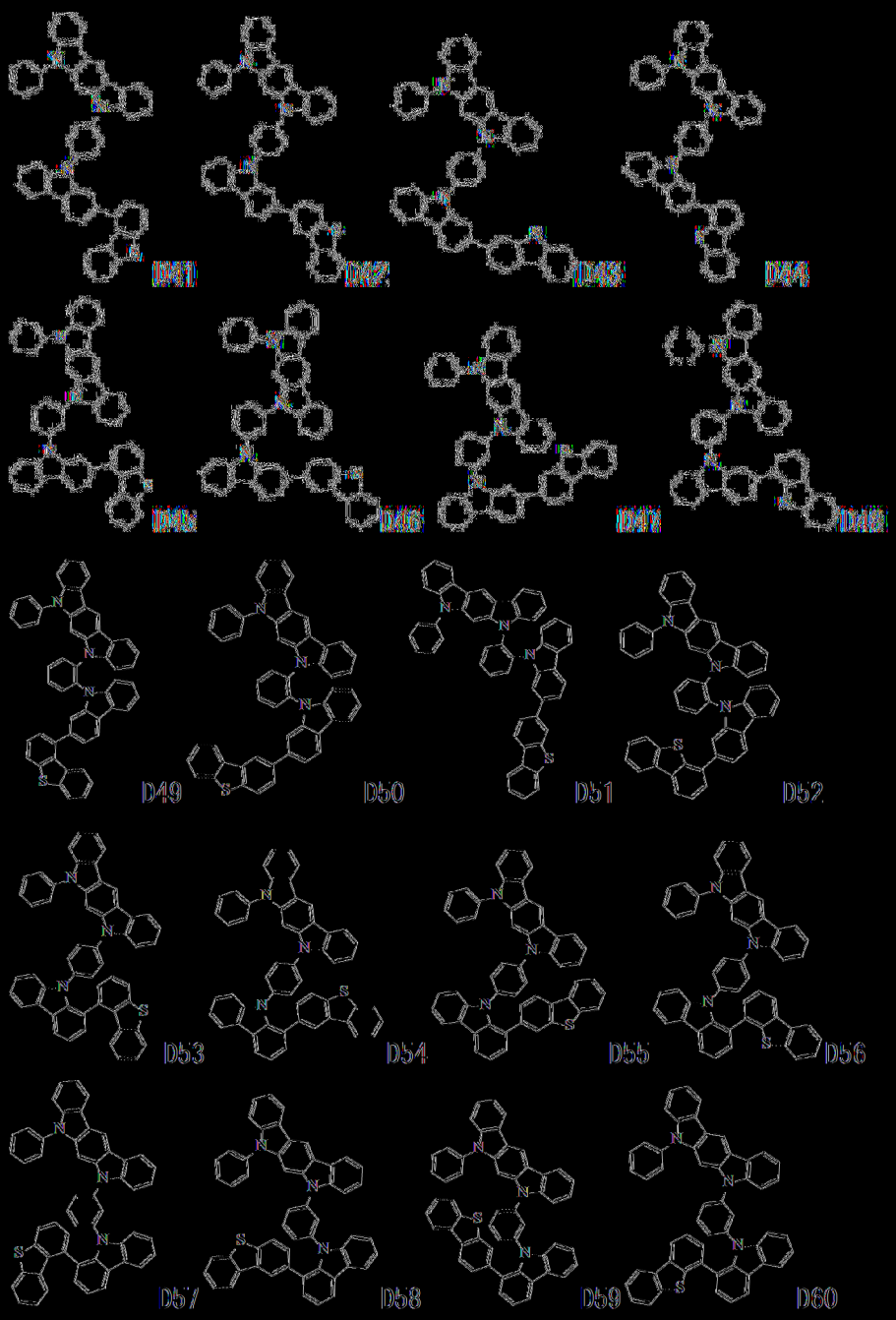
[化 23]


D01
D02
D03
D04
D05
D06
D07
D08
D09
D10
D11
D12
D13
D14
D15
D16
D17
D18
D19
D20

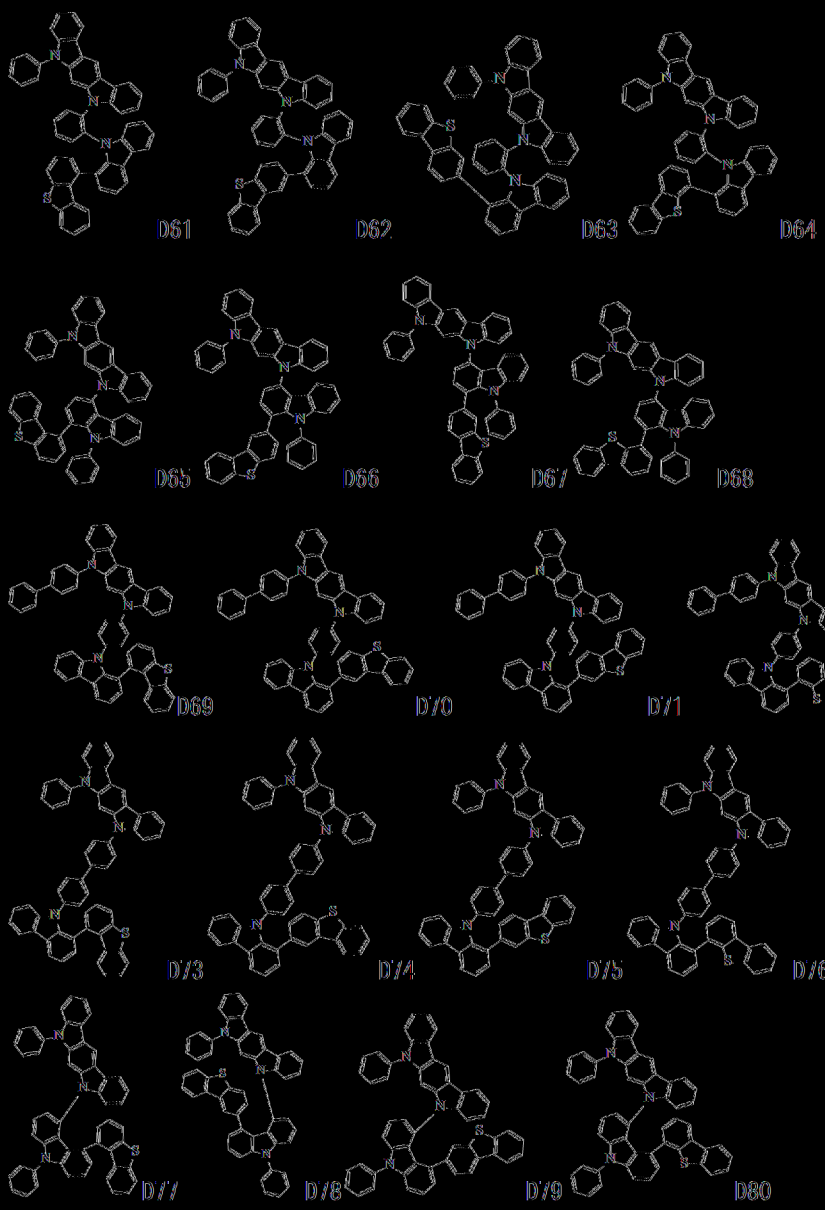
[化 24]


D21
D22
D23
D24
D25
D26
D27
D28
D29
D30
D31
D32
D33
D34
D35
D36
D37
D38
D39
D40

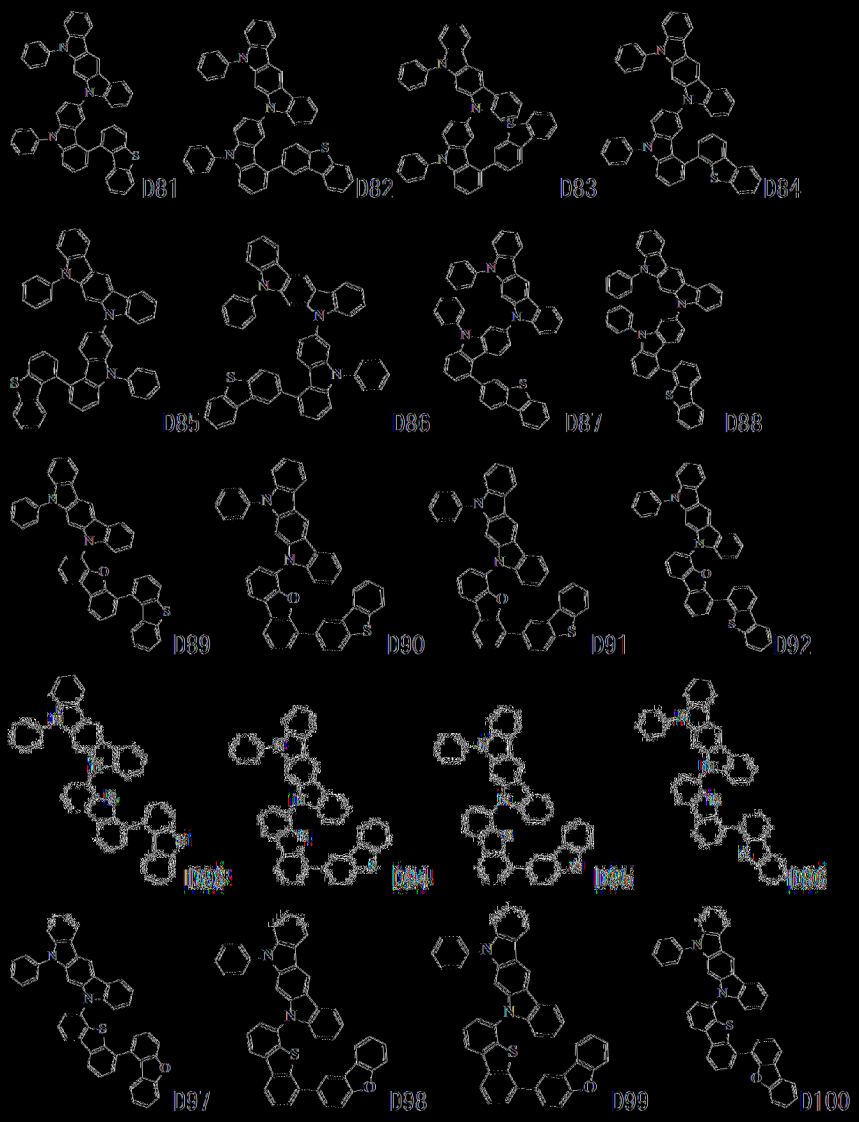
[化 25]


D41
D42
D43
D44
D45
D46
D47
D48
D49
D50
D51
D52
D53
D54
D55
D56
D57
D58
D59
D60

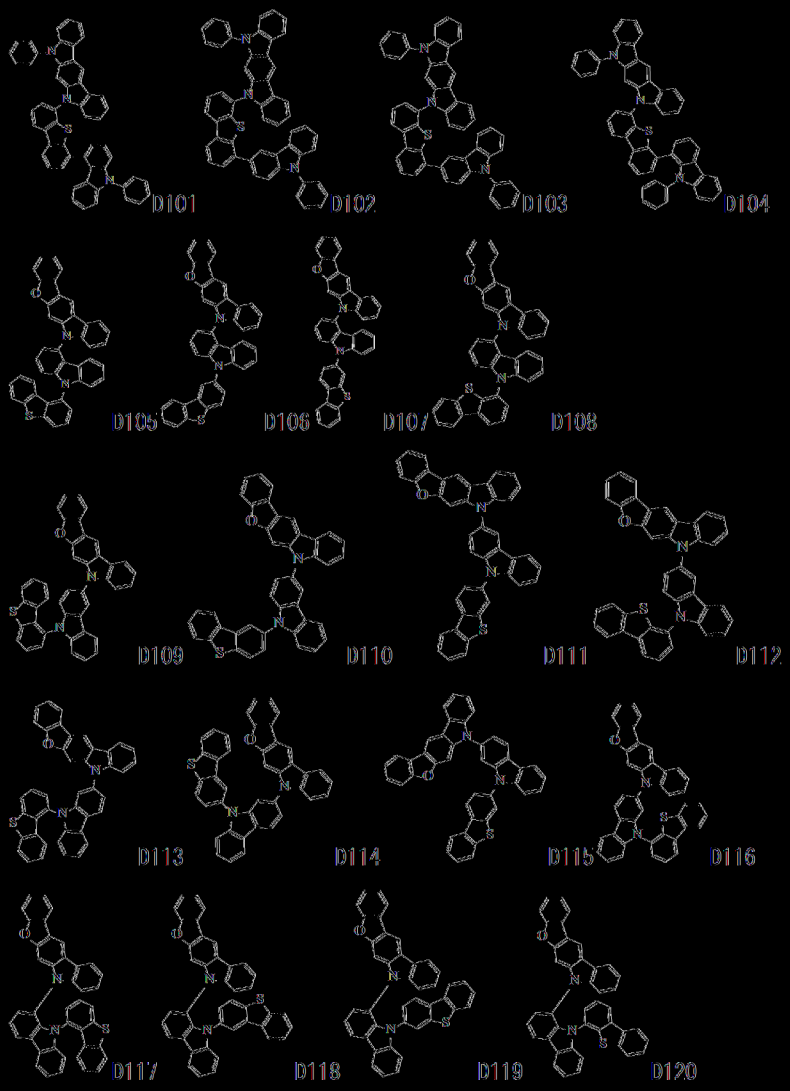
[化 26]


D61
D62
D63
D64
D65
D66
D67
D68
D69
D70
D71
D72
D73
D74
D75
D76
D77
D78
D79
D80

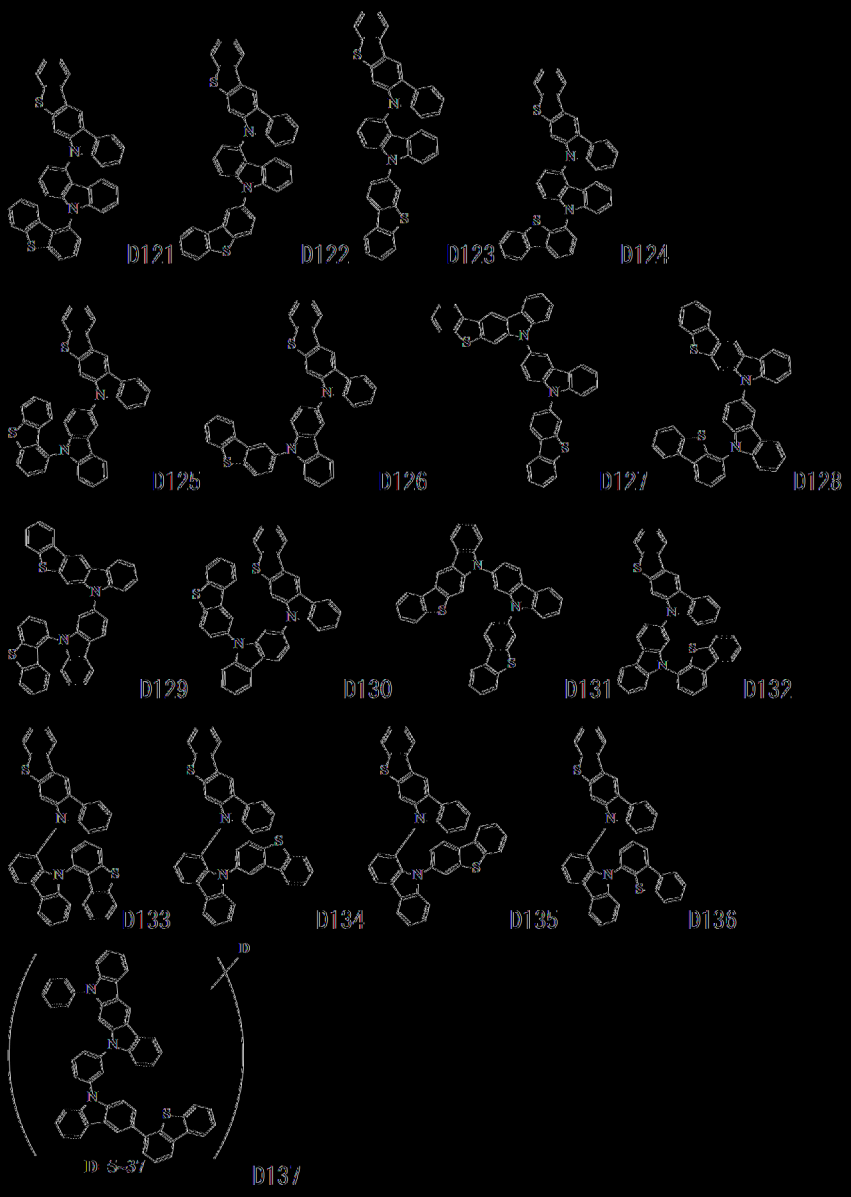
[化 27]


D81
D82
D83
D84
D85
D86
D87
D88
D89
D90
D91
D92
D93
D94
D95
D96
D97
D98
D99
D100

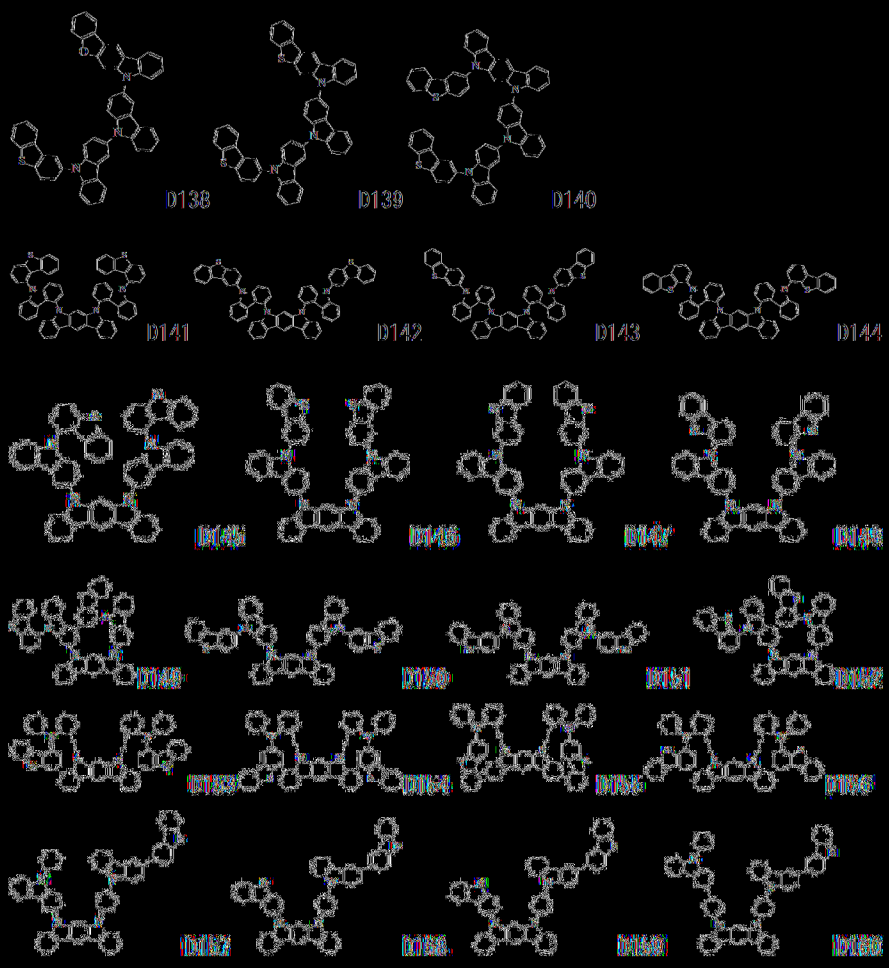
[化 28]


D101
D102
D103
D104
D105
D106
D107
D108
D109
D110
D111
D112
D113
D114
D115
D116
D117
D118
D119
D120

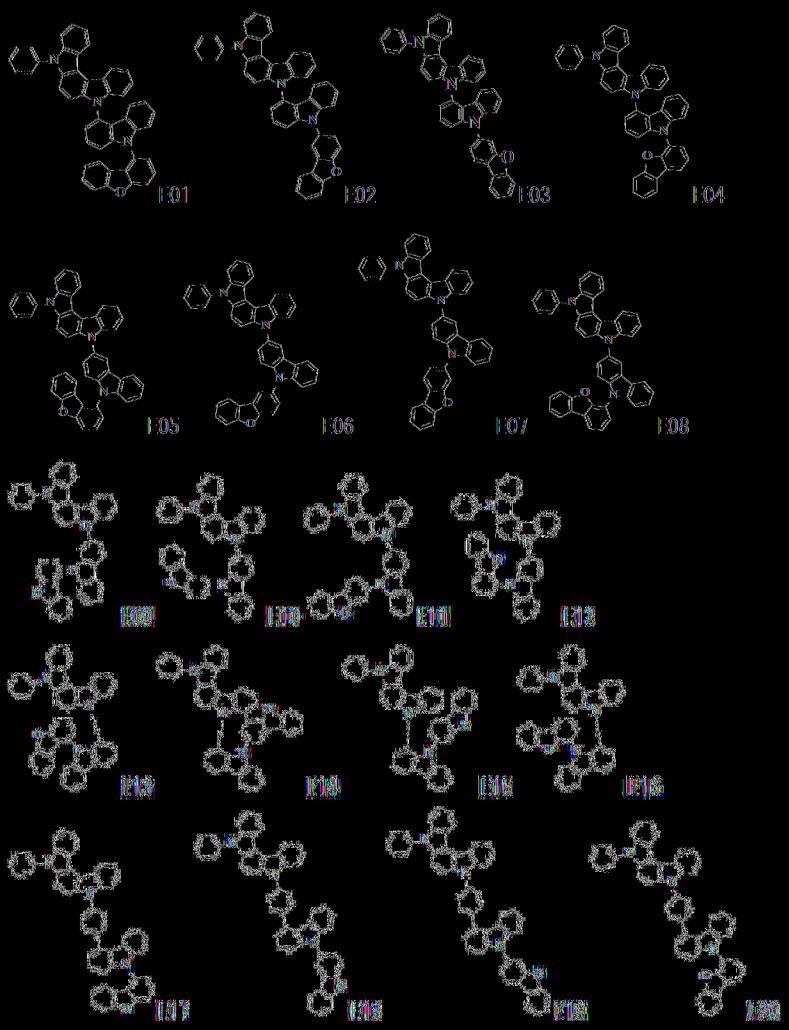
[化 29-1]


D121
D122
D123
D124
D125
D126
D127
D128
D129
D130
D131
D132
D133
D134
D135
D136
ID
ID 5-37
D137

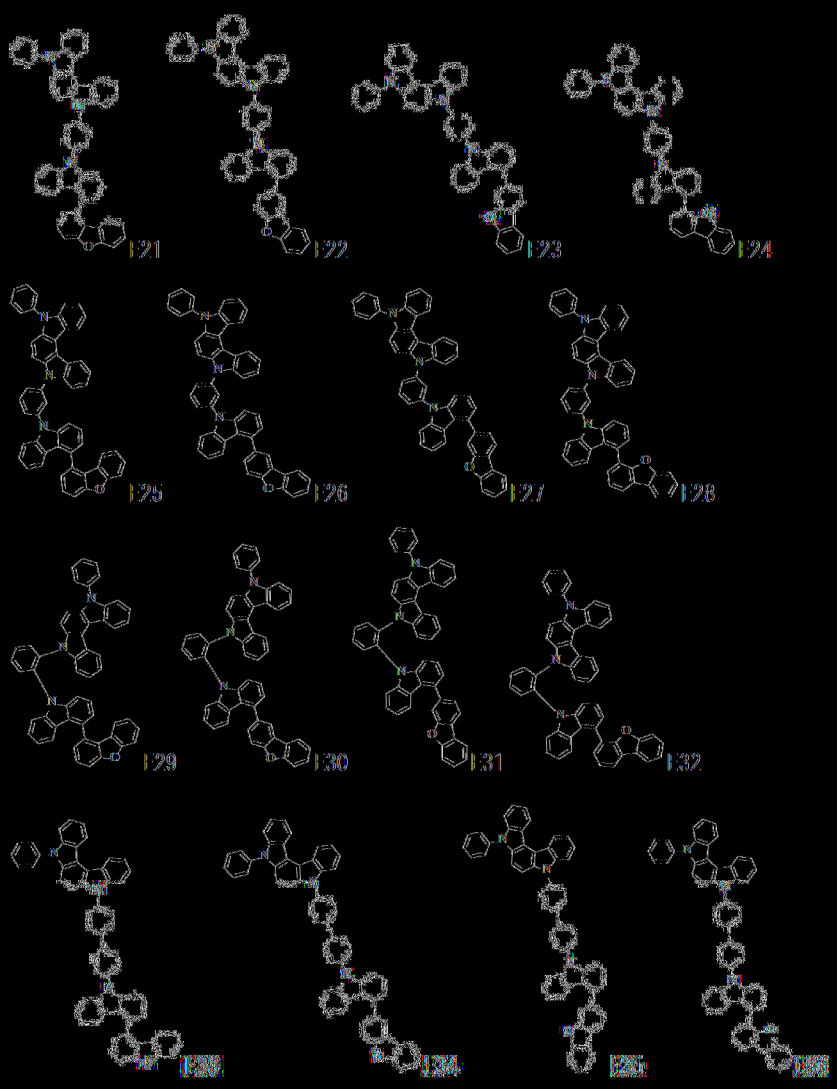
[化 29-2]


D138
D139
D140
D141
D142
D143
D144
D145
D146
D147
D148
D149
D150
D151
D152
D153
D154
D155
D156
D157
D158
D159
D160

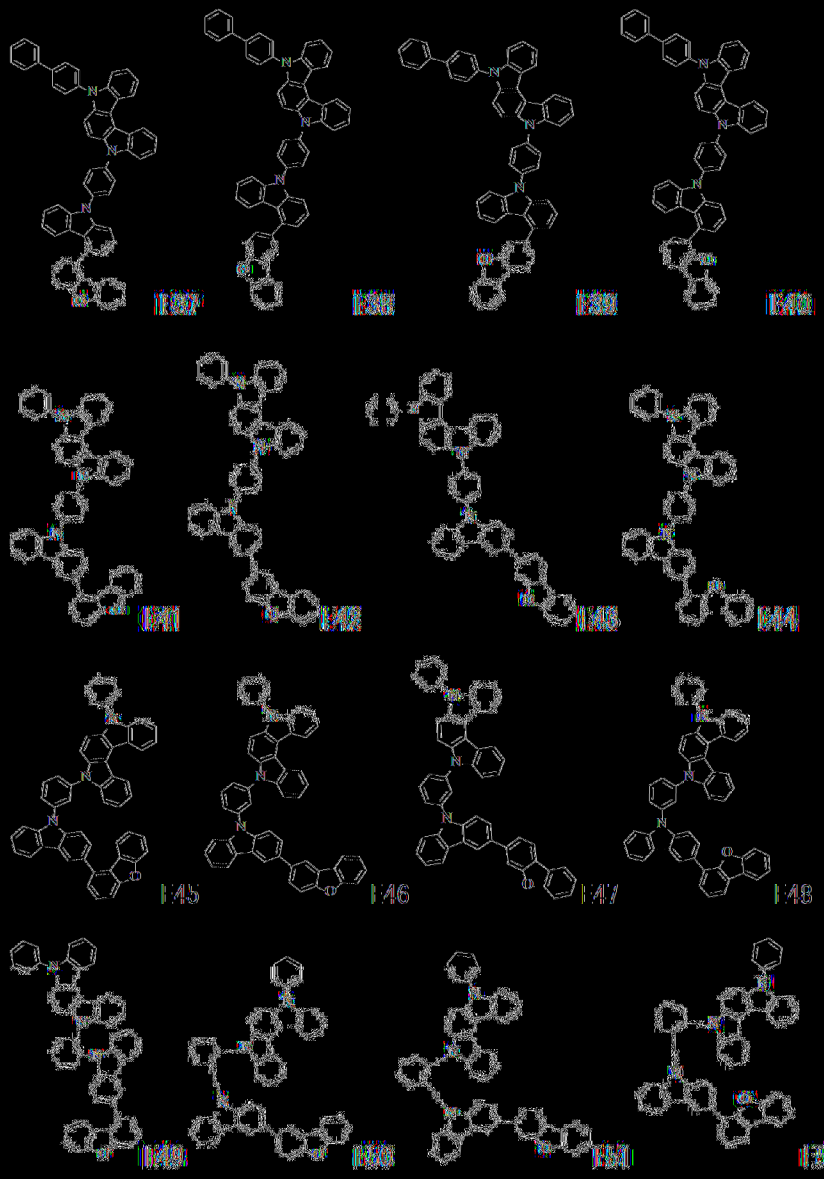
[化 30]


H01
H02
H03
H04
H05
H06
H07
H08
H09
H10
H11
H12
H13
H14
H15
H16
H17
H18
H19
H20

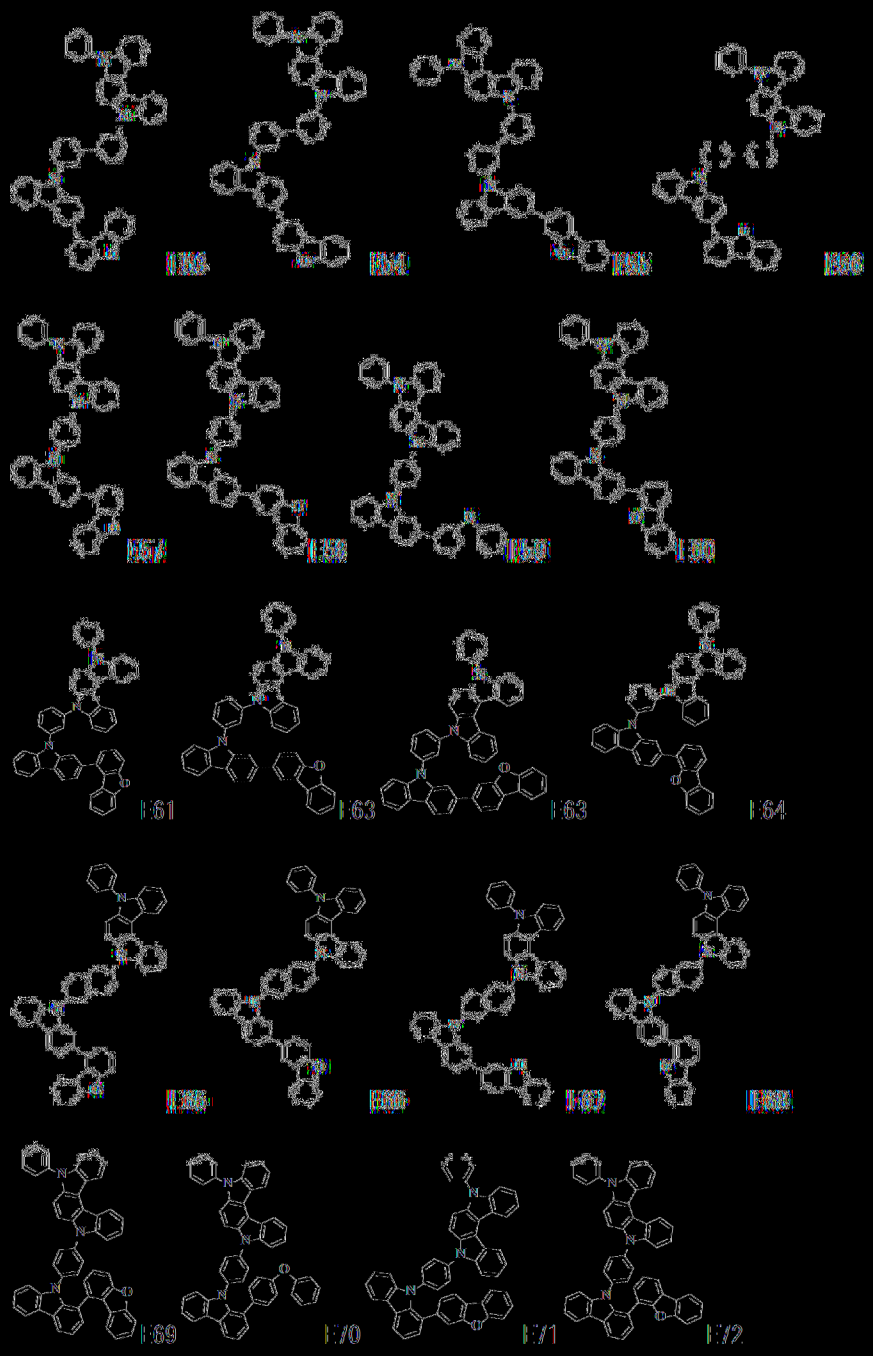
[化 31]



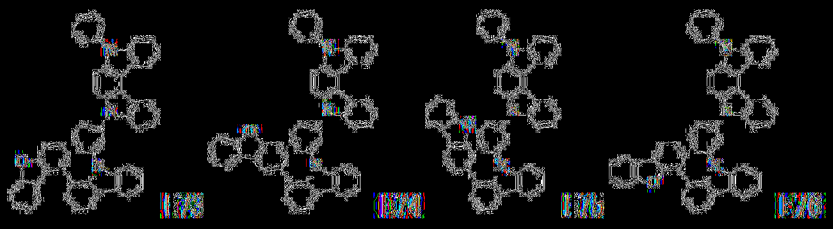
[化 32]

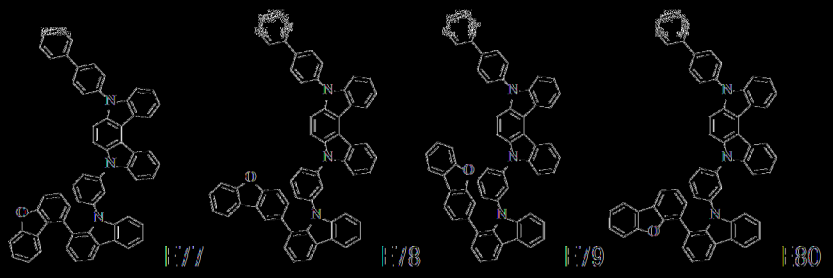


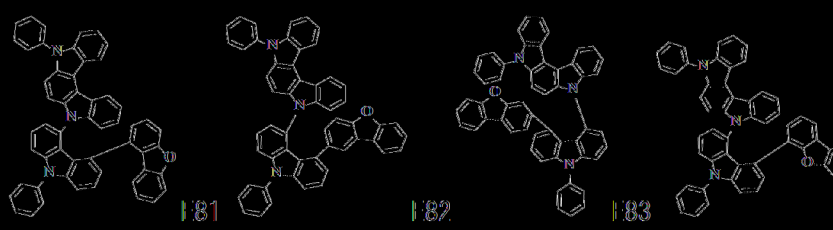
[化 33]



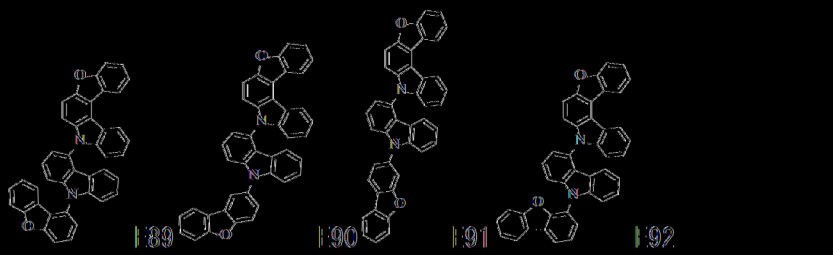
[化學式 34]



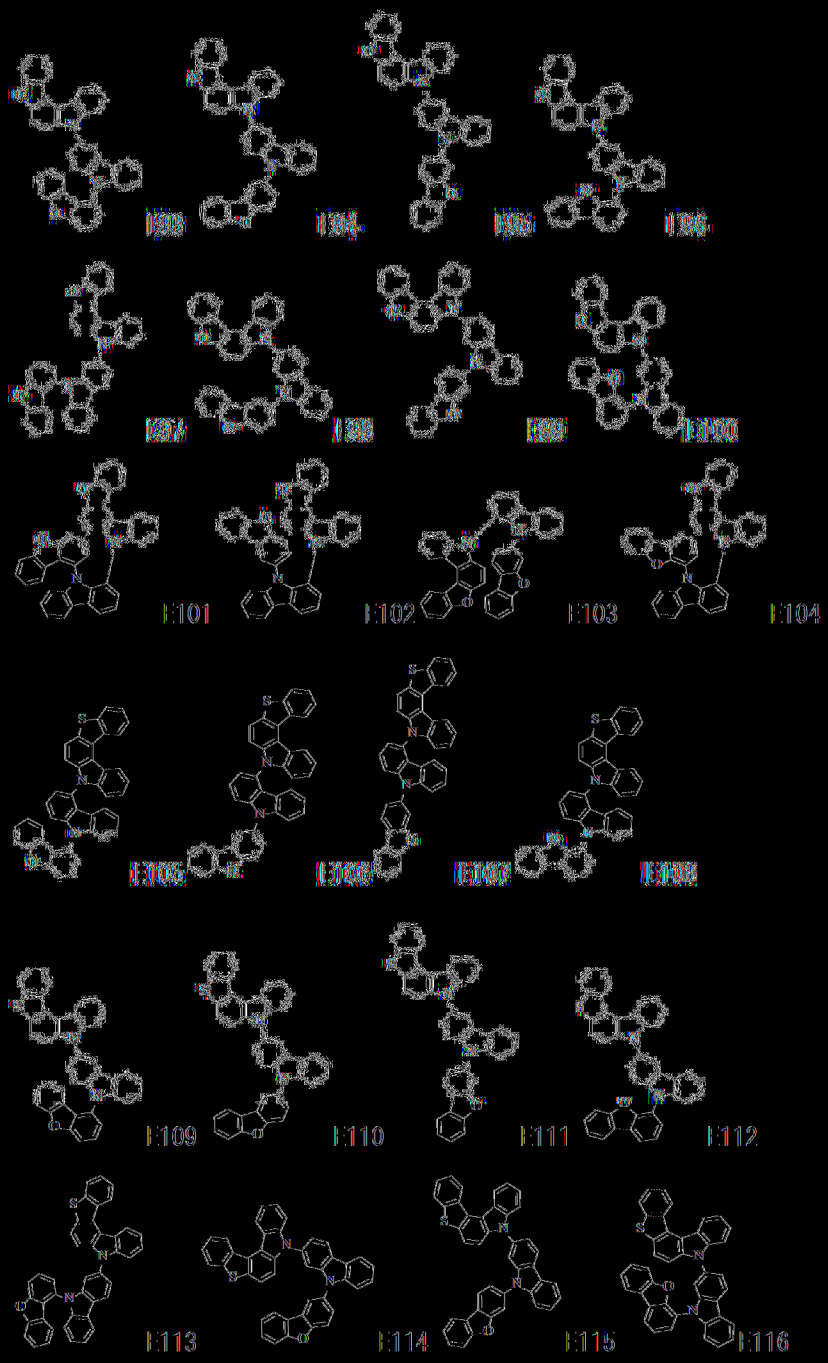




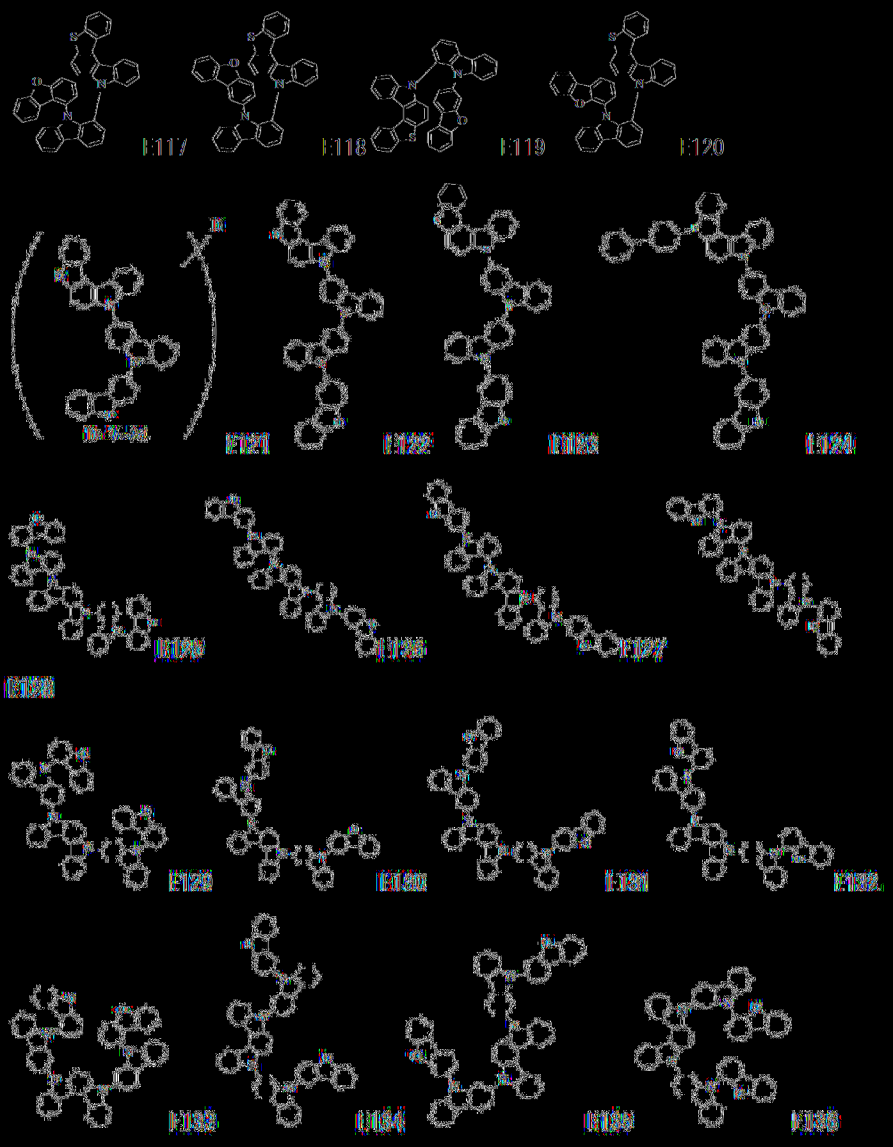




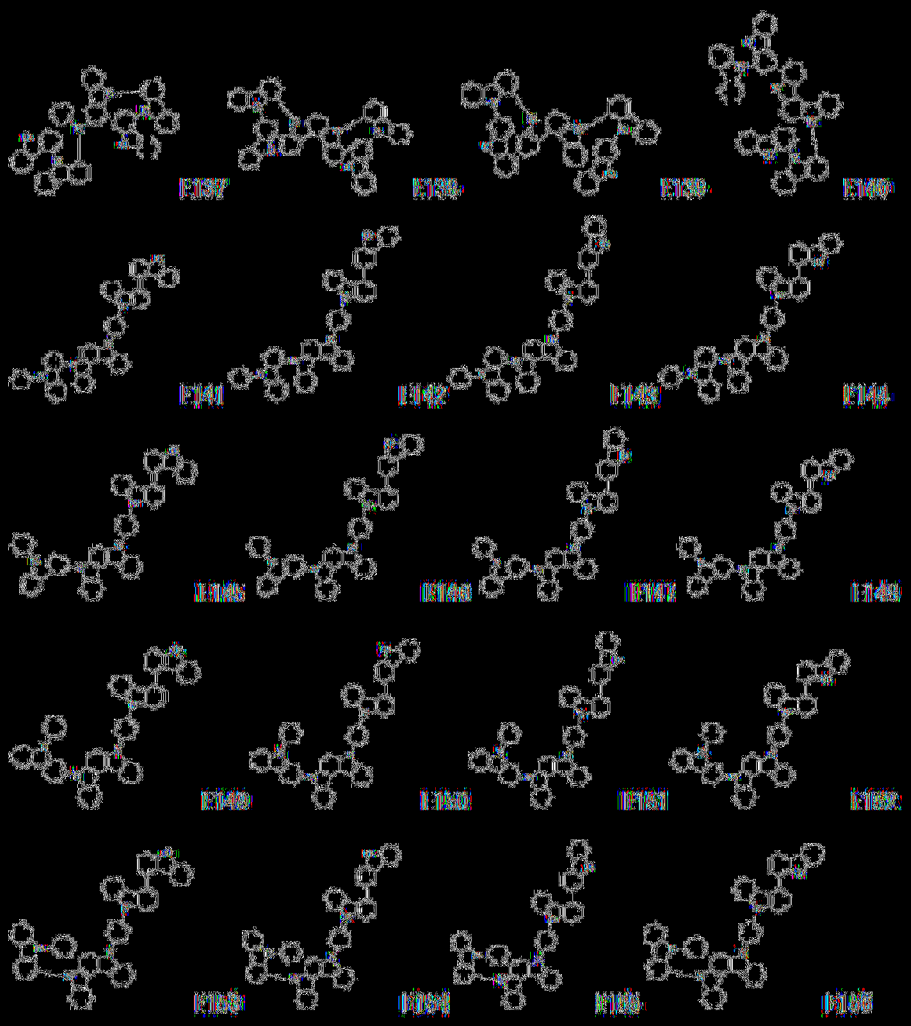
[化 35]



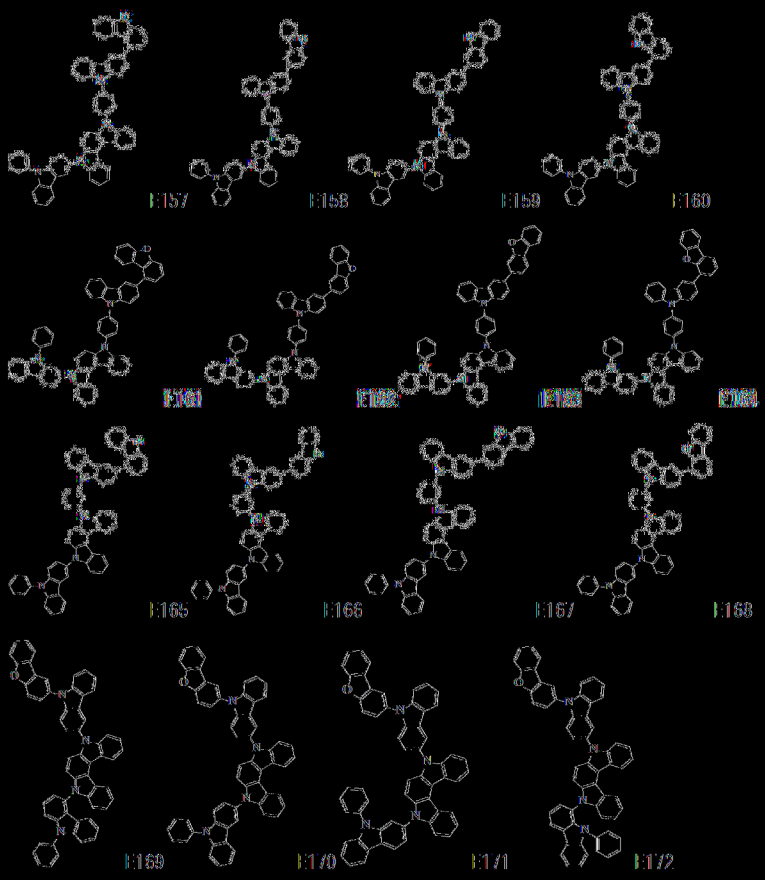
[化 36-1]


I117
I118
I119
I120
I121
I122
I123
I124
I125
I126
I127
I128
I129
I130
I131
I132
I133
I134
I135
I136

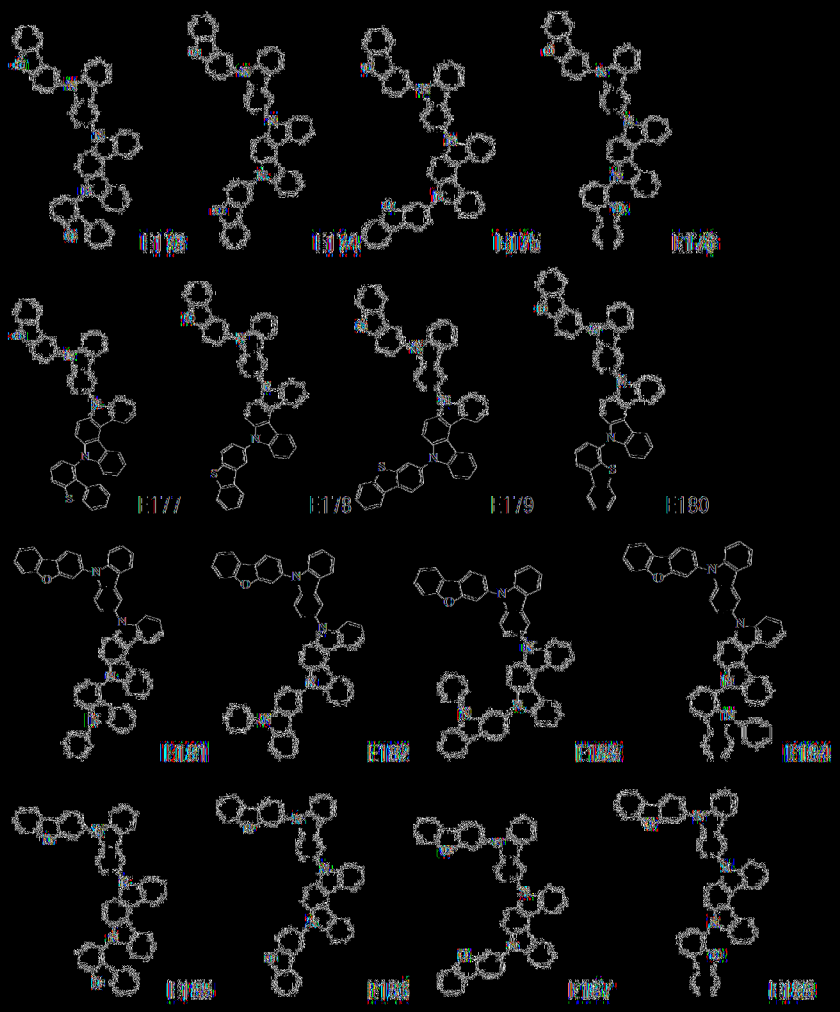
[化 36-2]



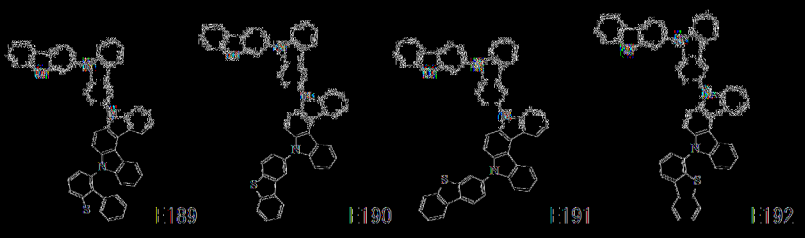
[化 36-3]


E157
E158
E159
E160
E161
E162
E163
E164
E165
E166
E167
E168
E169
E170
E171
E172

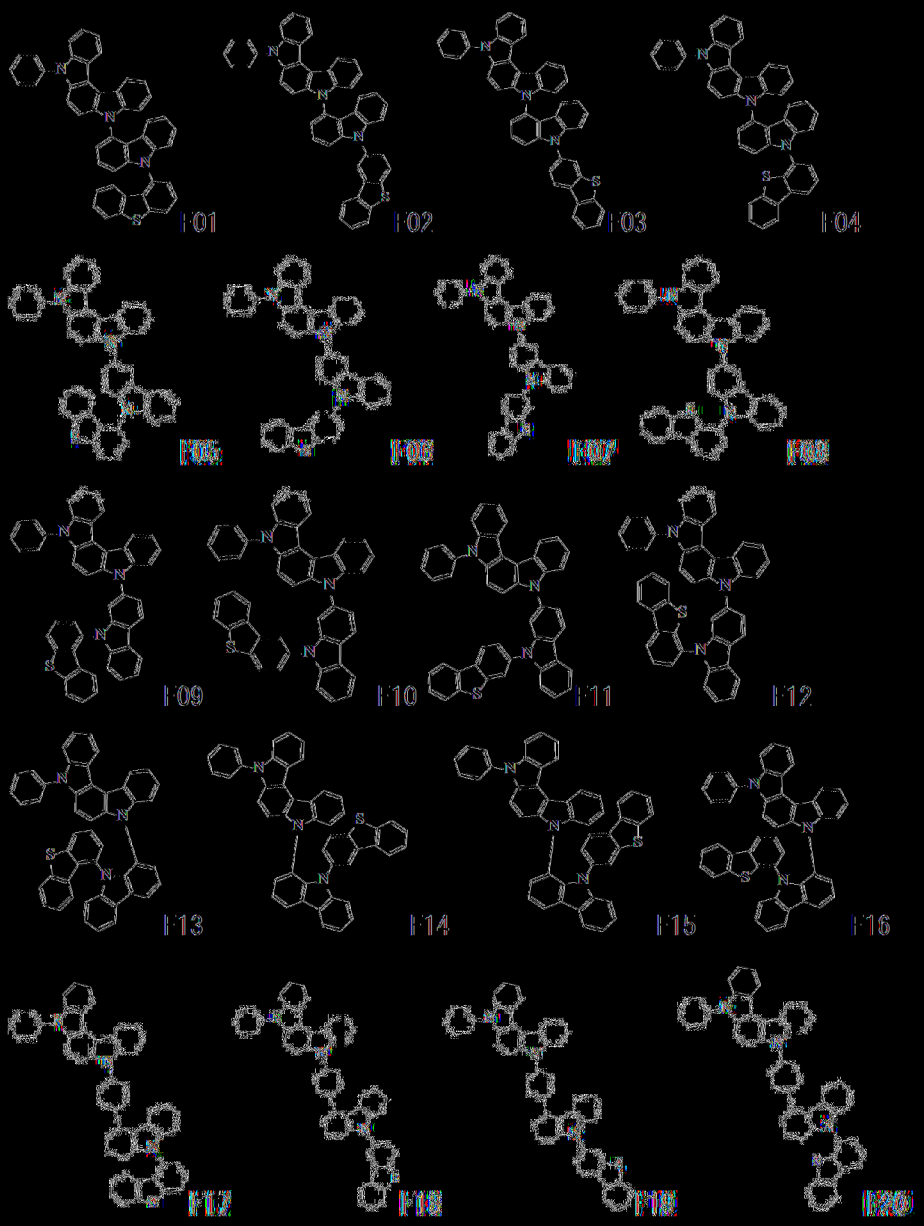
[化 36-4]


I-173
I-174
I-175
I-176
I-177
I-178
I-179
I-180
I-181
I-182
I-183
I-184
I-185
I-186
I-187
I-188

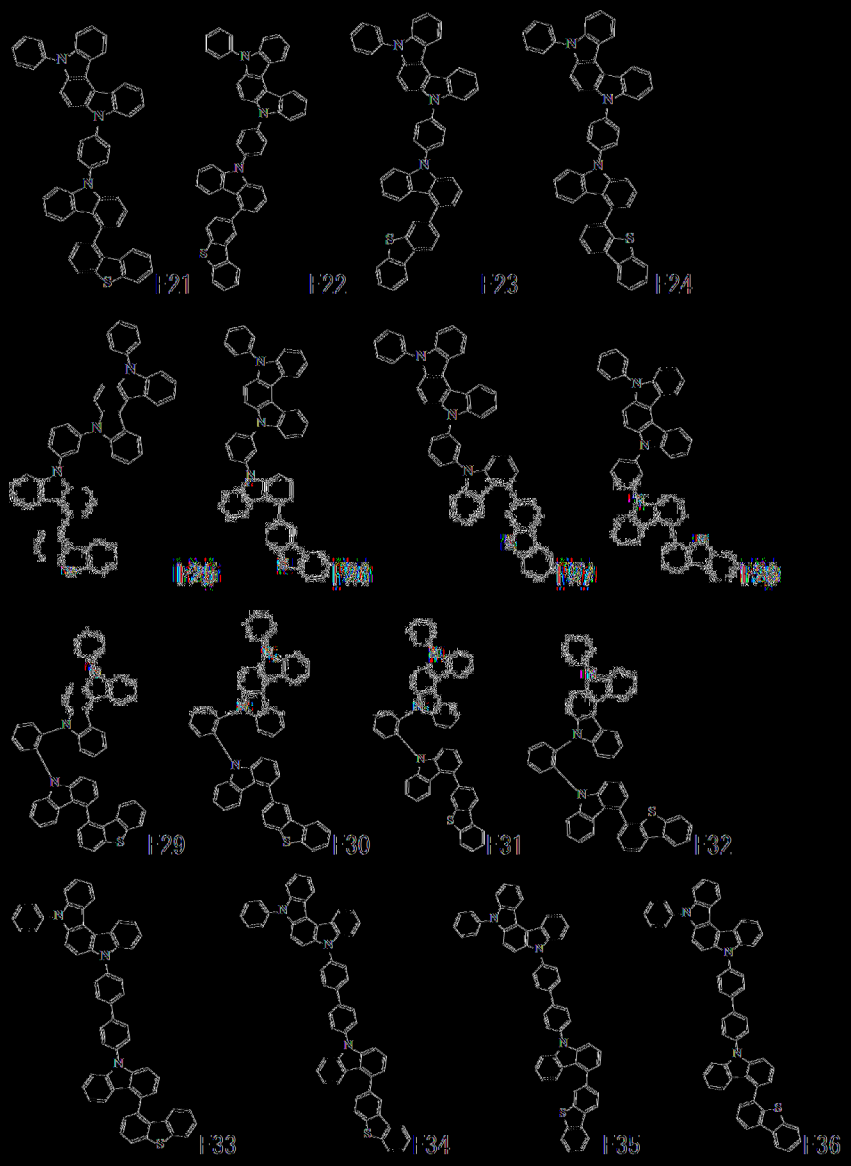
[化 36-5]


I-189
I-190
I-191
I-192

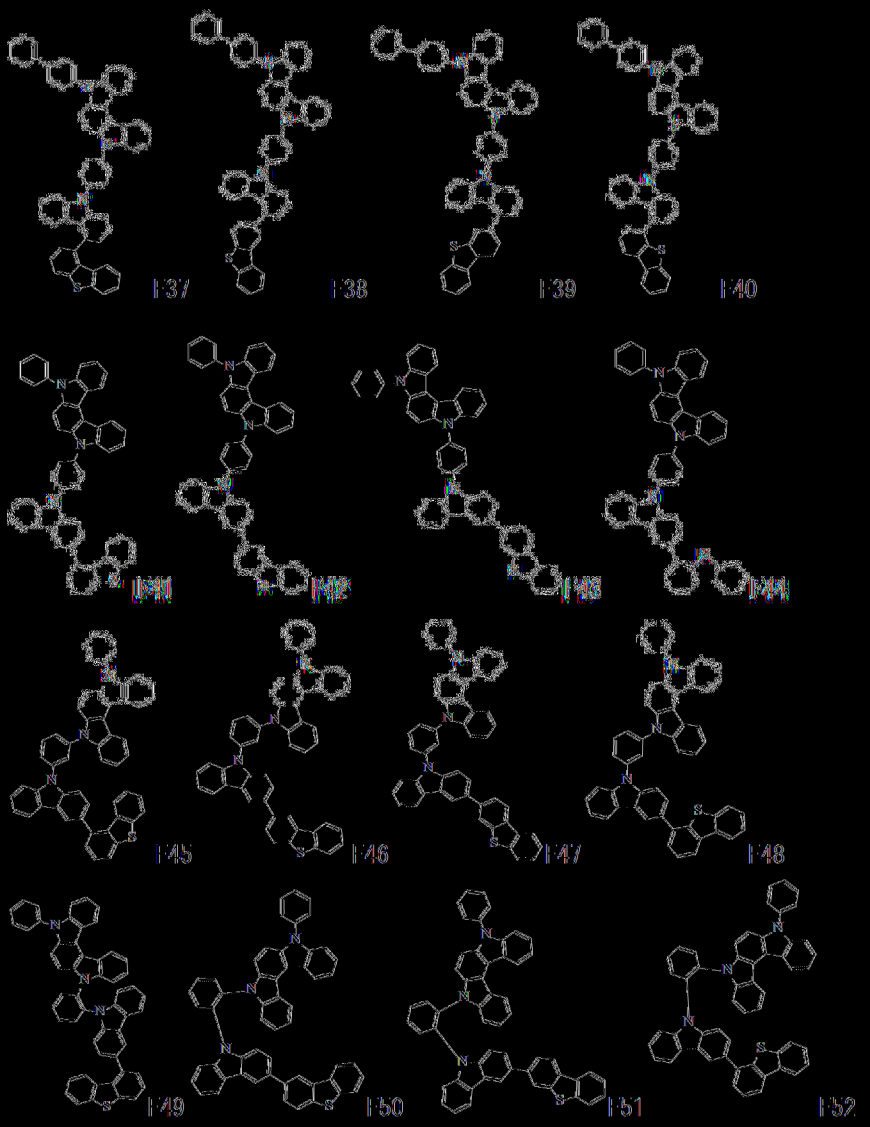
[化 37]


F01
F02
F03
F04
F05
F06
F07
F08
F09
F10
F11
F12
F13
F14
F15
F16
F17
F18
F19
F20

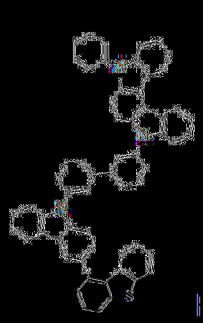
[化 38]



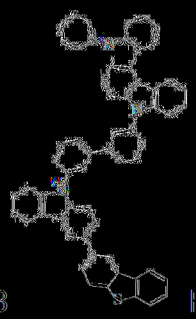
[化 39]



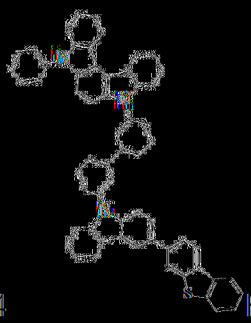
[化 40]



I-53



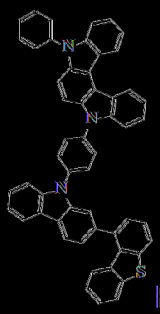
I-54



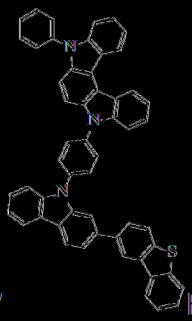
I-55



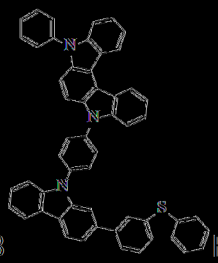
I-56



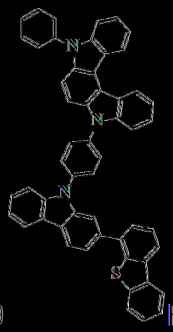
I-57



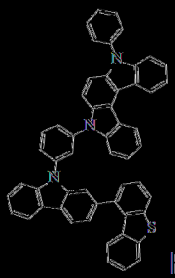
I-58



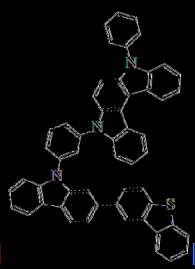
I-59



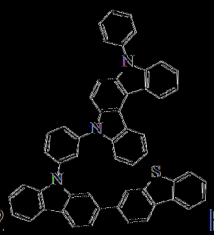
I-60



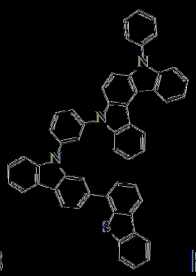
I-61



I-62



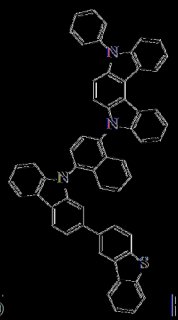
I-63



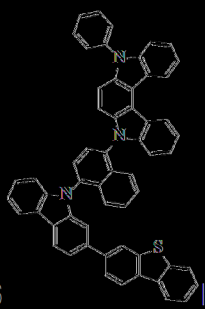
I-64



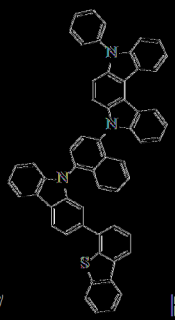
I-65



I-66

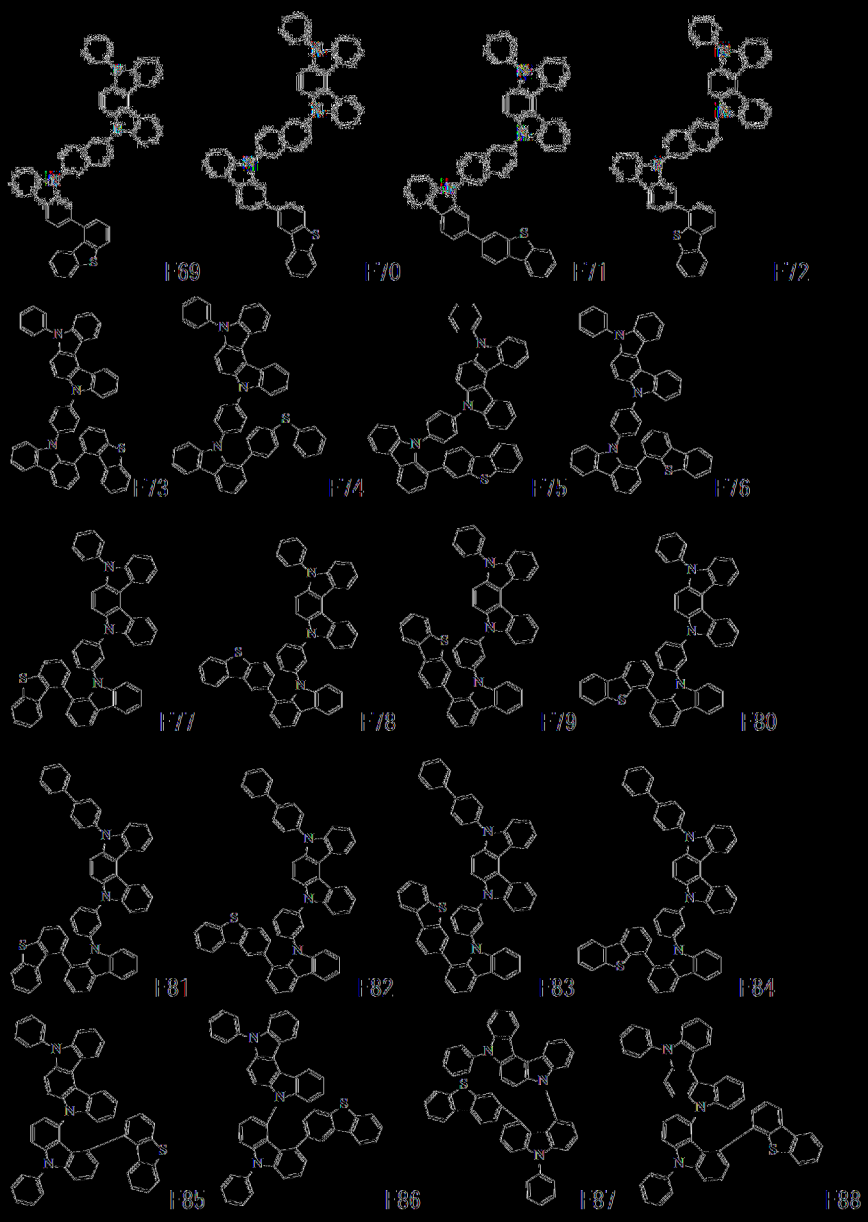


I-67

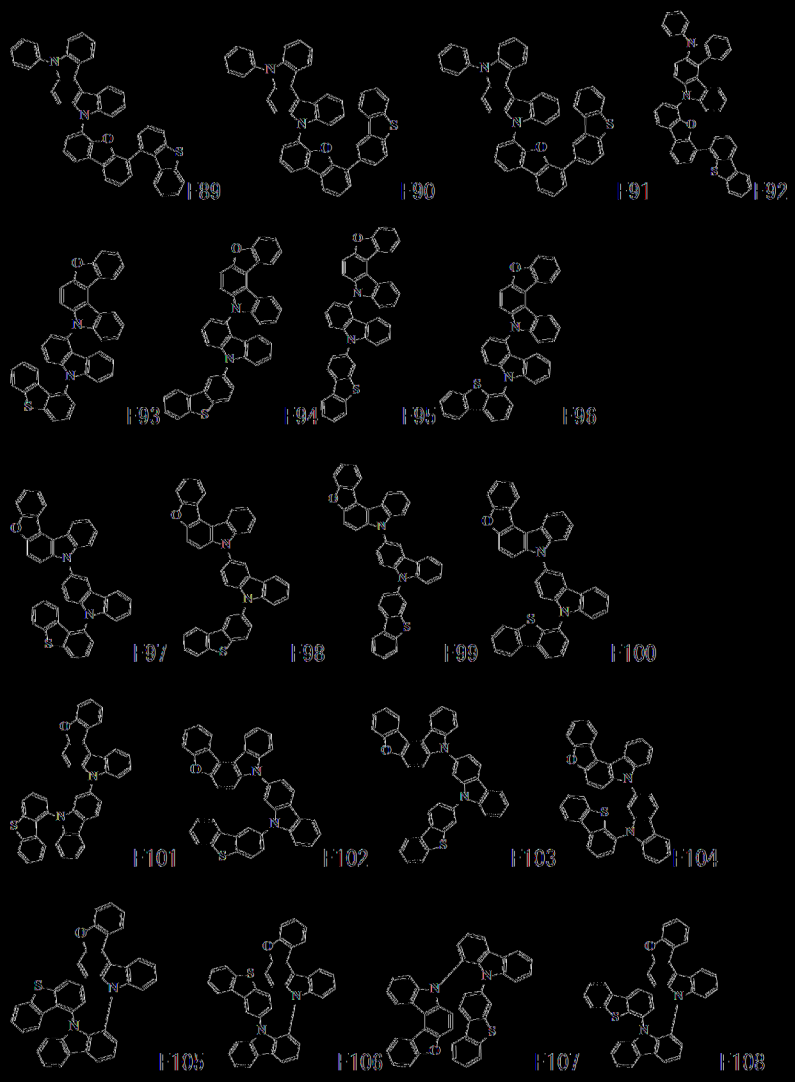


I-68

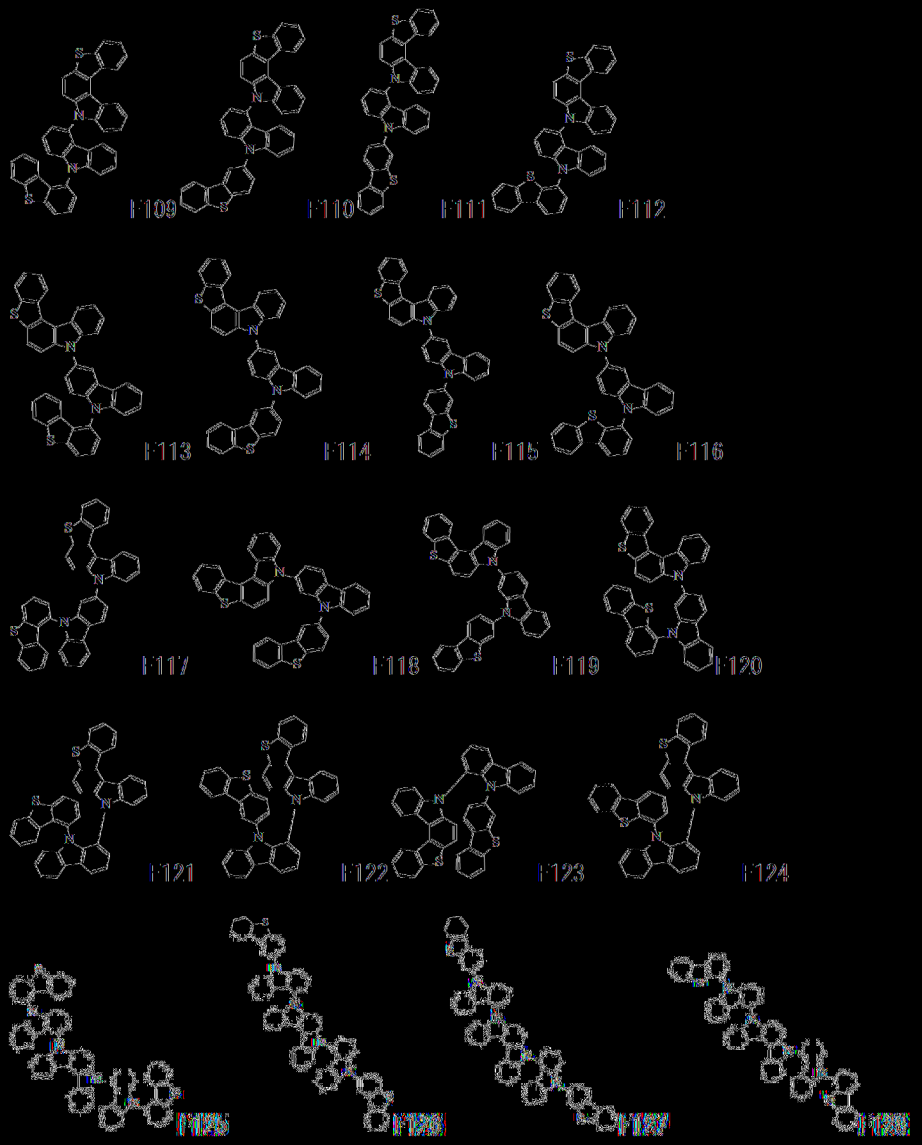
[化 41]


F69
F70
F71
F72
F73
F74
F75
F76
F77
F78
F79
F80
F81
F82
F83
F84
F85
F86
F87
F88

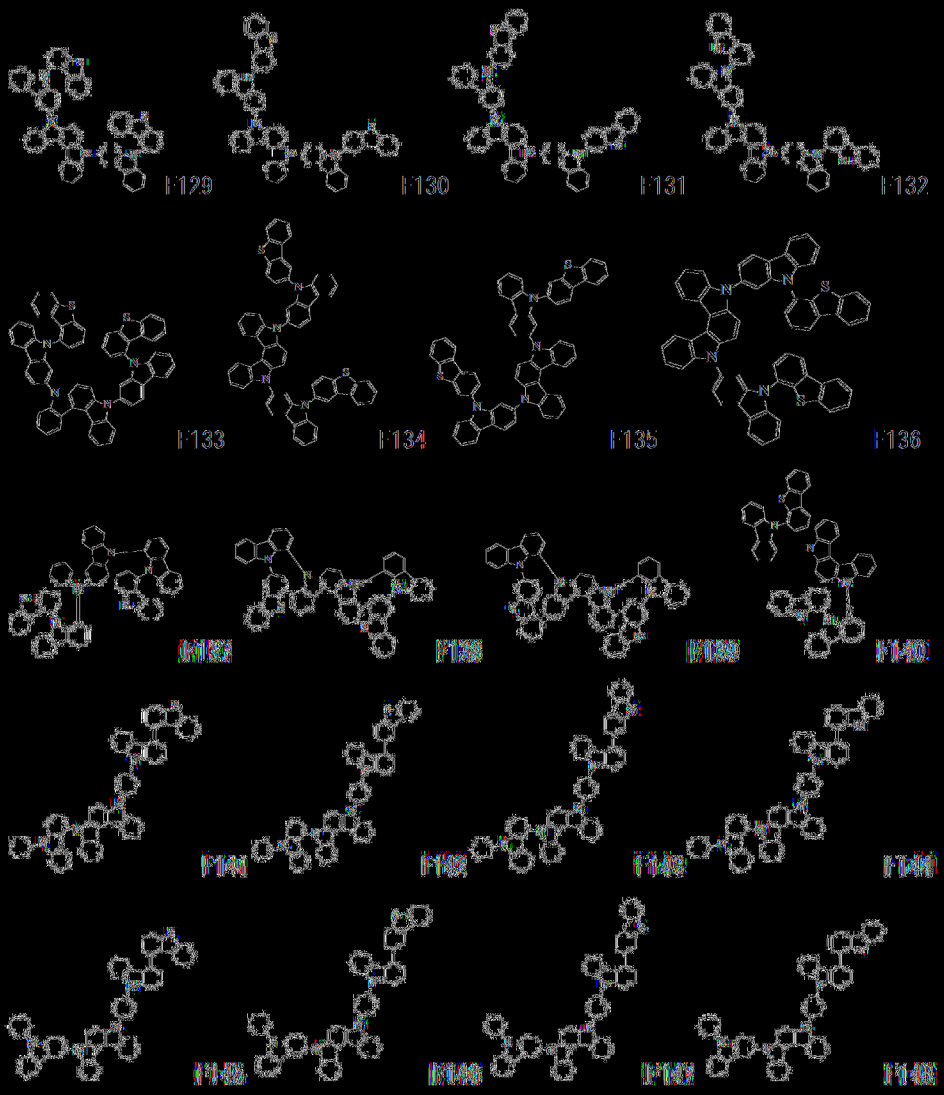
[化 42]


F89
F90
F91
F92
F93
F94
F95
F96
F97
F98
F99
F100
F101
F102
F103
F104
F105
F106
F107
F108

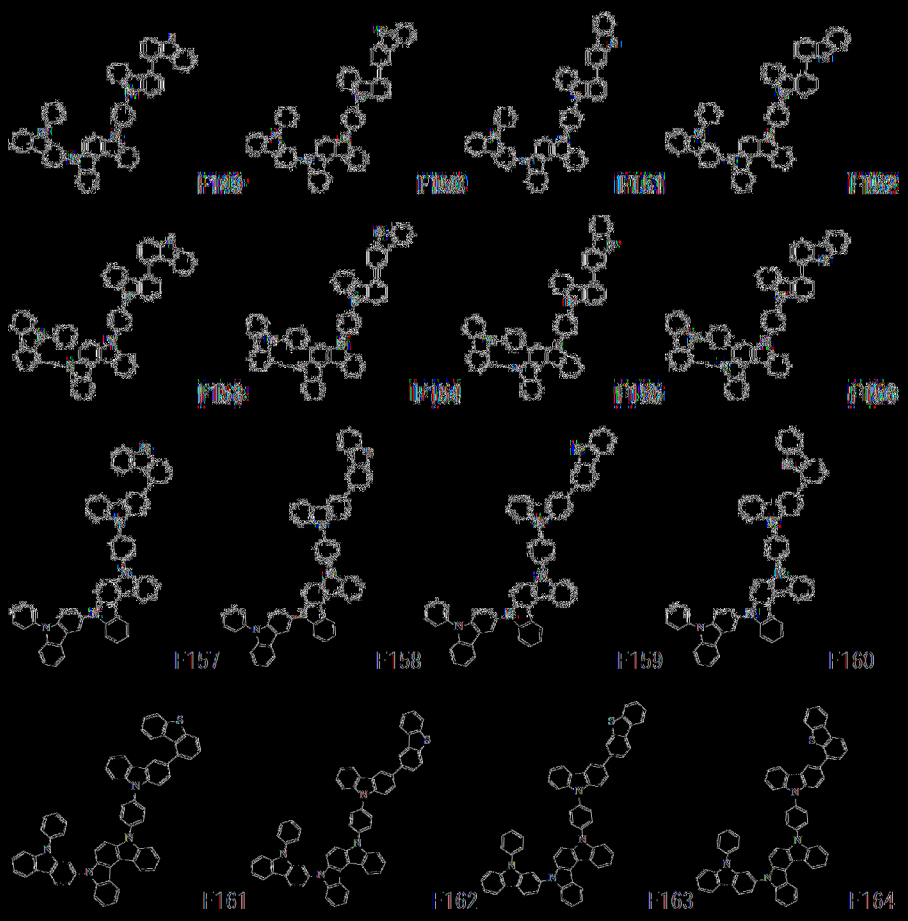
[化 43-1]


F109
F110
F111
F112
F113
F114
F115
F116
F117
F118
F119
F120
F121
F122
F123
F124
F125
F126
F127
F128

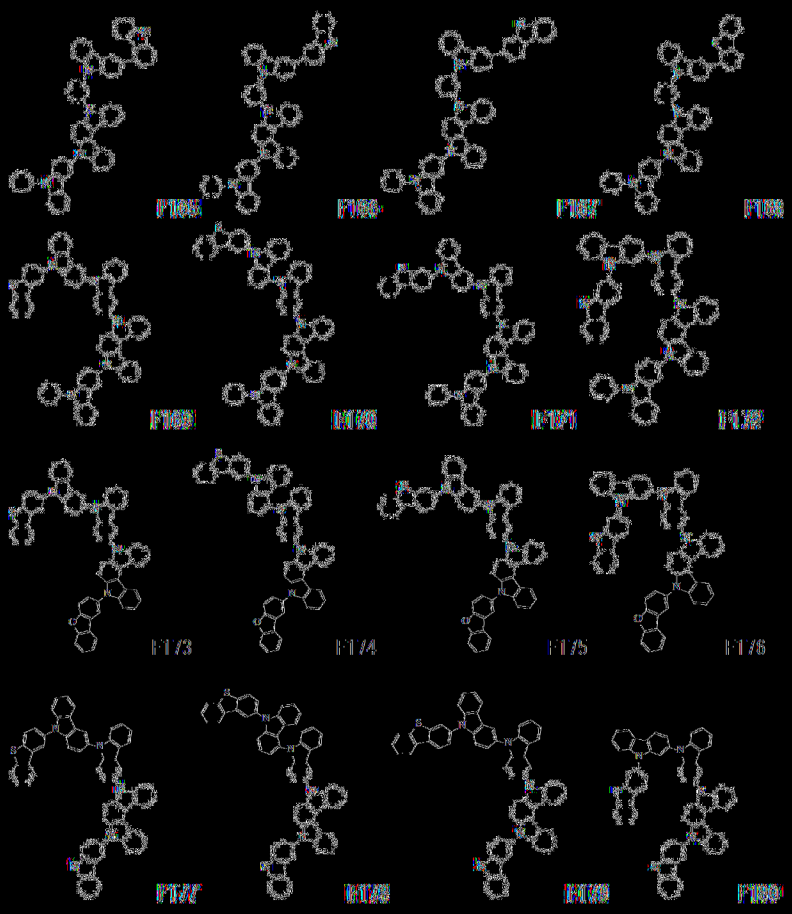
[化 43-2]


F129
F130
F131
F132
F133
F134
F135
F136
F137
F138
F139
F140
F141
F142
F143
F144
F145
F146
F147
F148

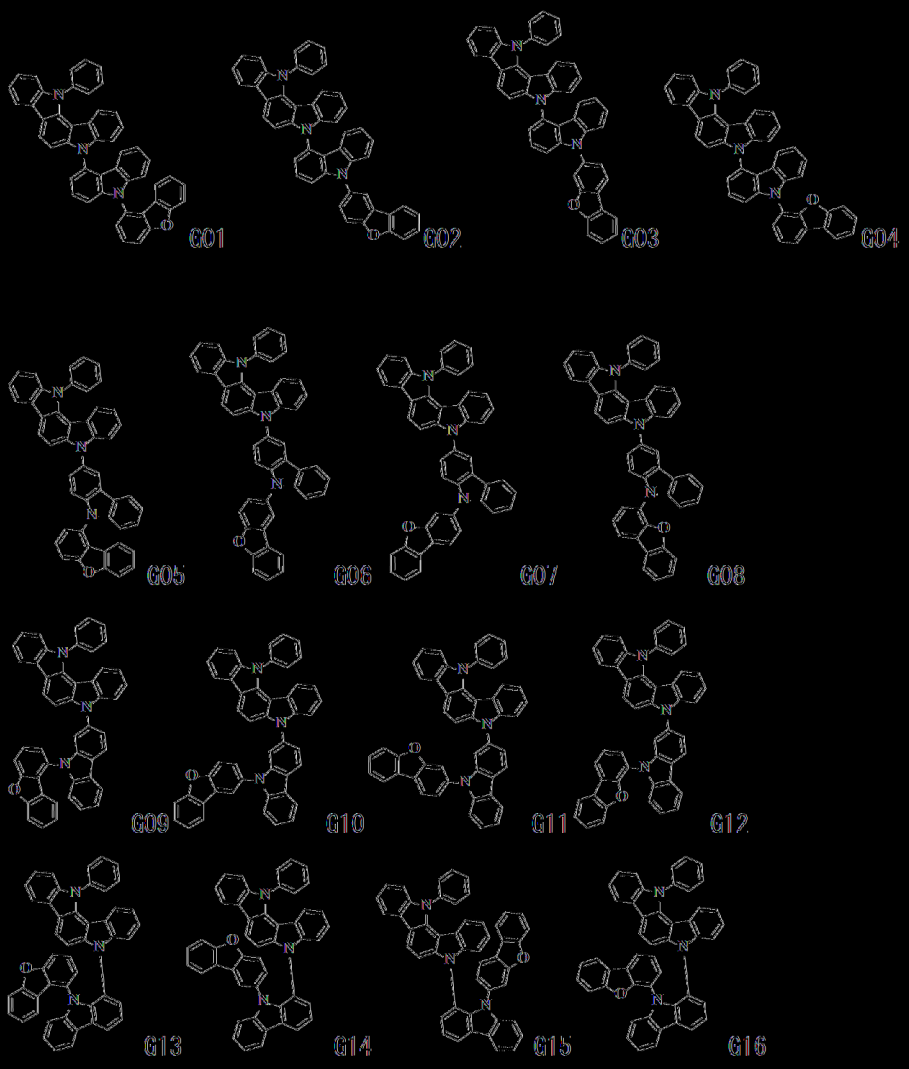
[化 43-3]



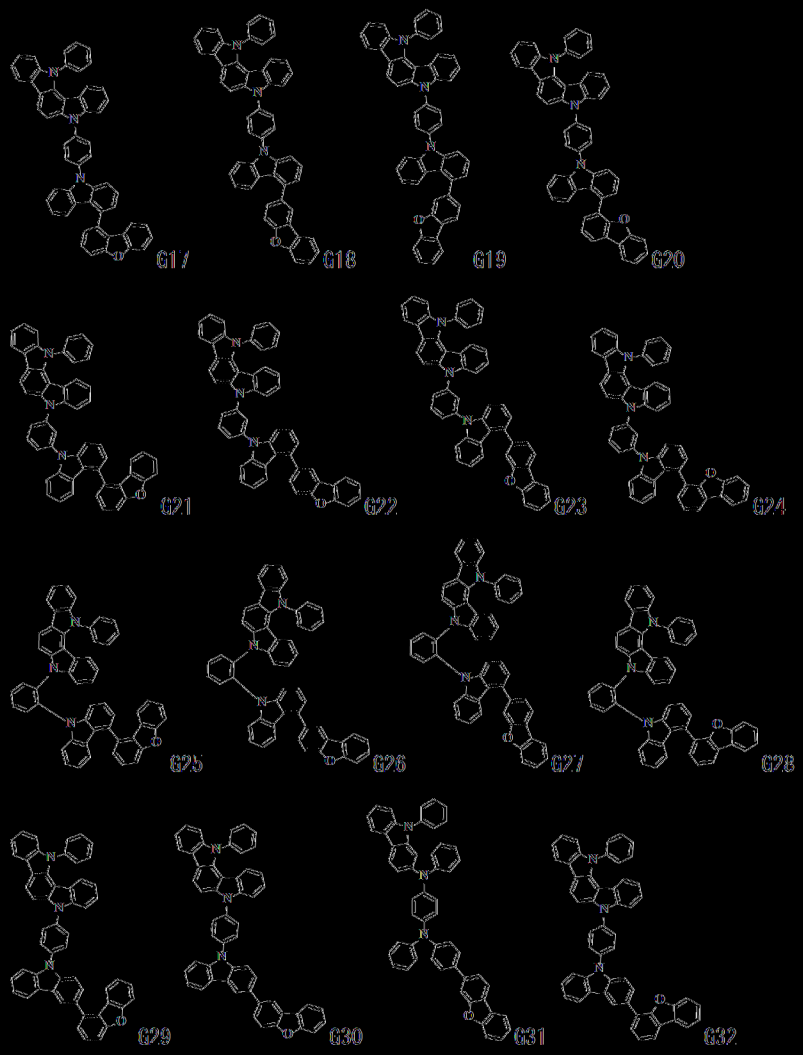
[化 43-4]



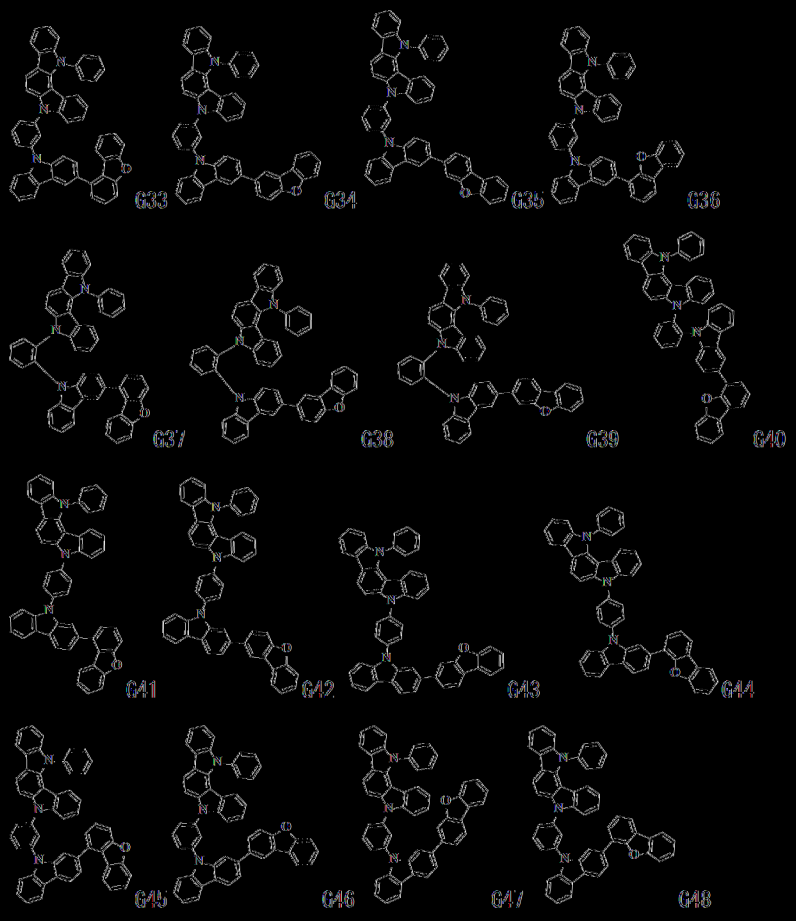
[化 44]



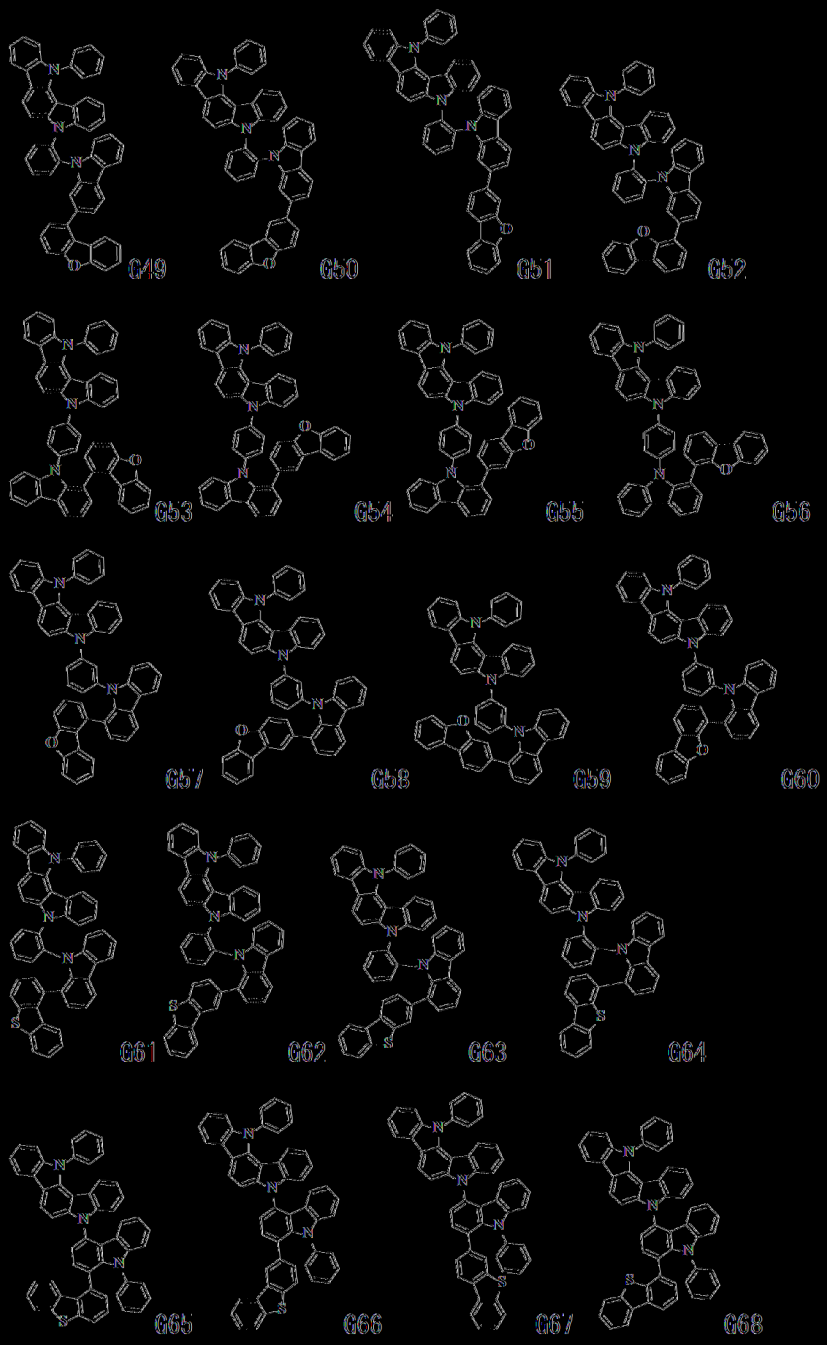
[化 45]



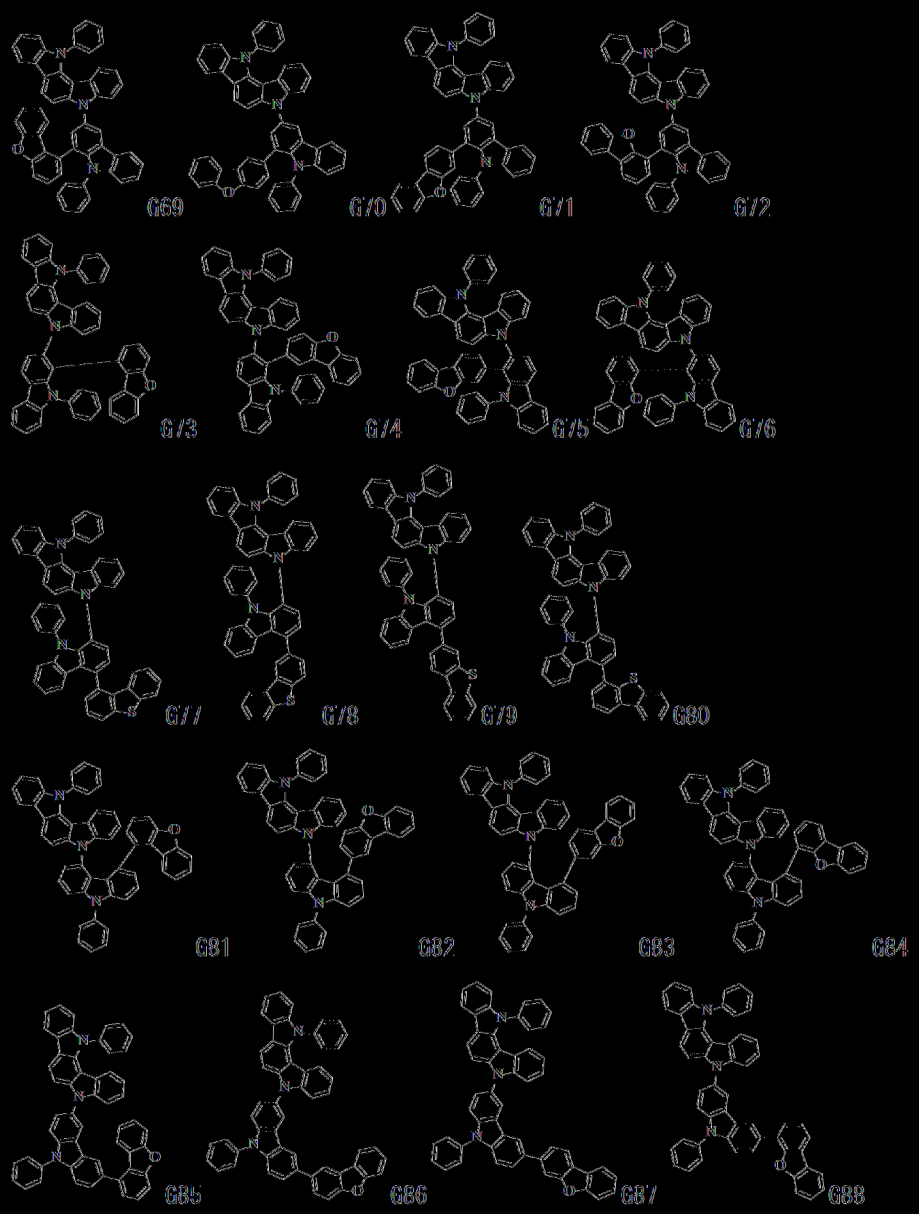
[化 46]



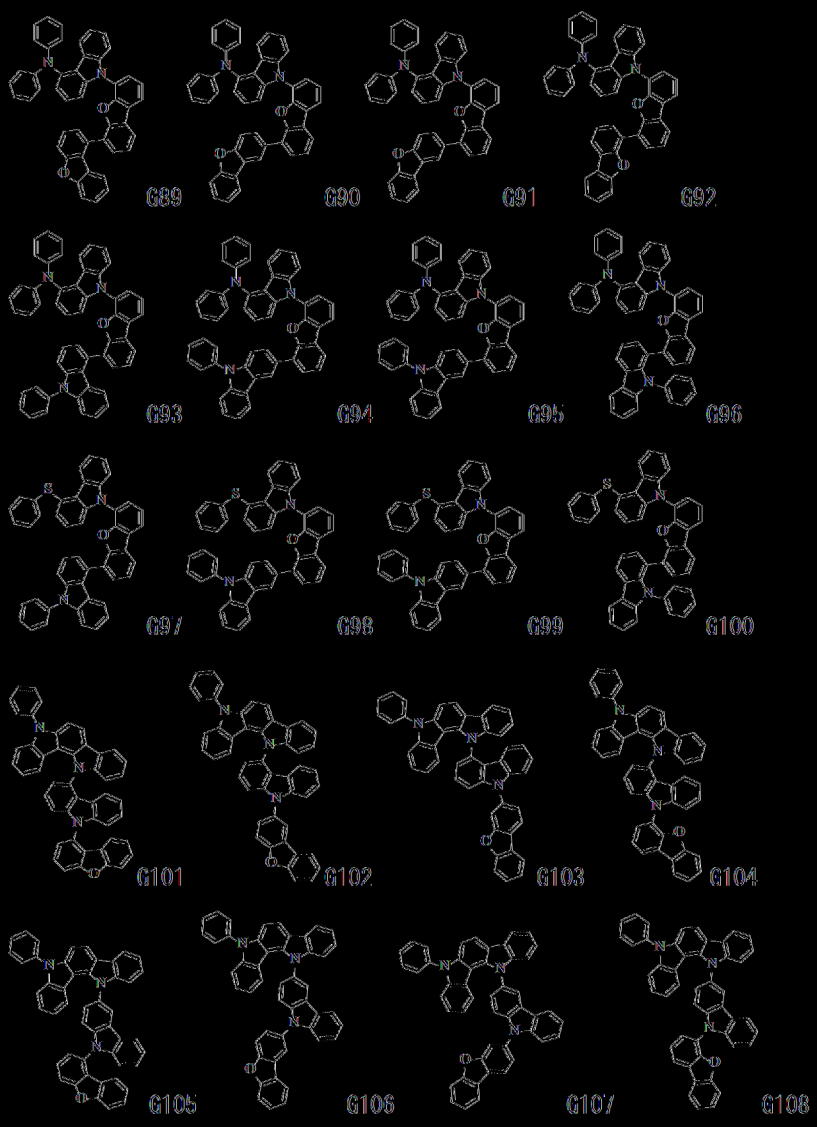
[化 47]


G49
G50
G51
G52
G53
G54
G55
G56
G57
G58
G59
G60
G61
G62
G63
G64
G65
G66
G67
G68

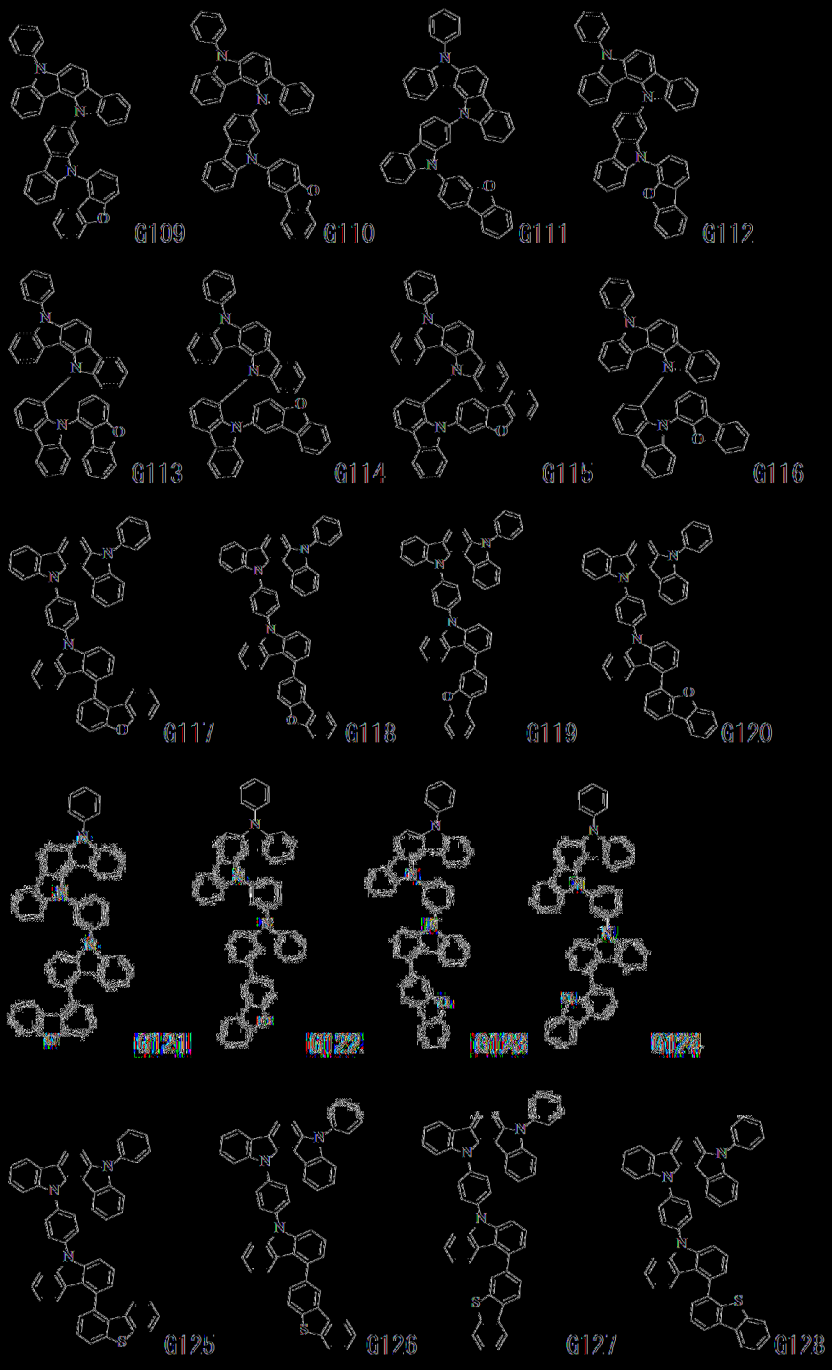
[化 48]


G69
G70
G71
G72
G73
G74
G75
G76
G77
G78
G79
G80
G81
G82
G83
G84
G85
G86
G87
G88

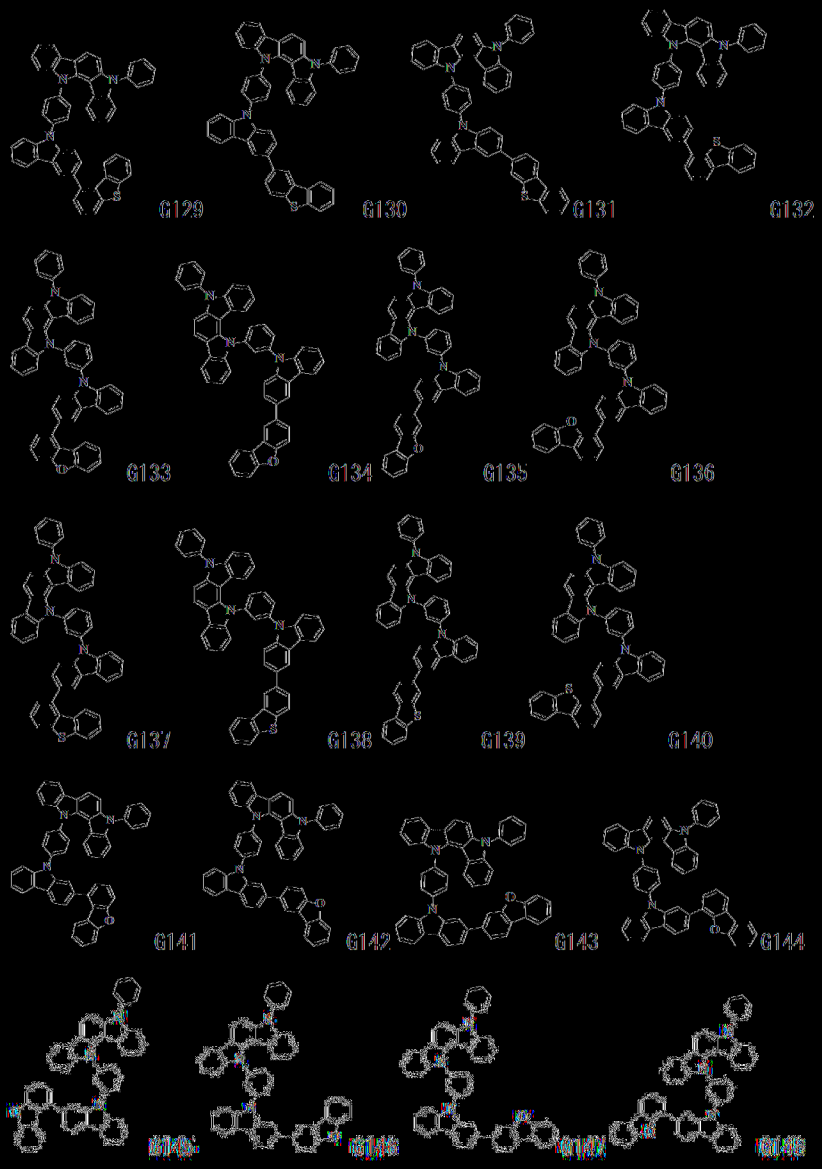
[化 49]


G89
G90
G91
G92
G93
G94
G95
G96
G97
G98
G99
G100
G101
G102
G103
G104
G105
G106
G107
G108

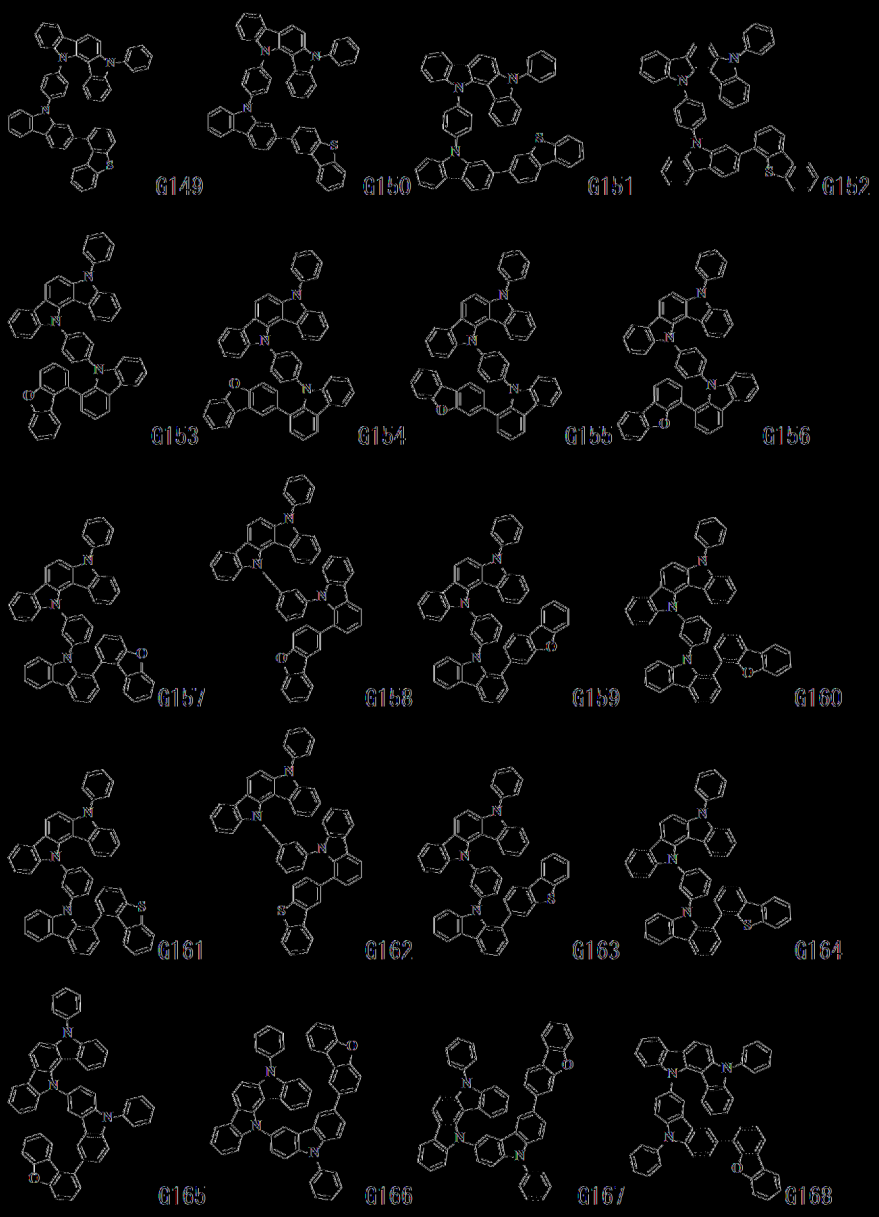
[化 50]


G109
G110
G111
G112
G113
G114
G115
G116
G117
G118
G119
G120
G121
G122
G123
G124
G125
G126
G127
G128

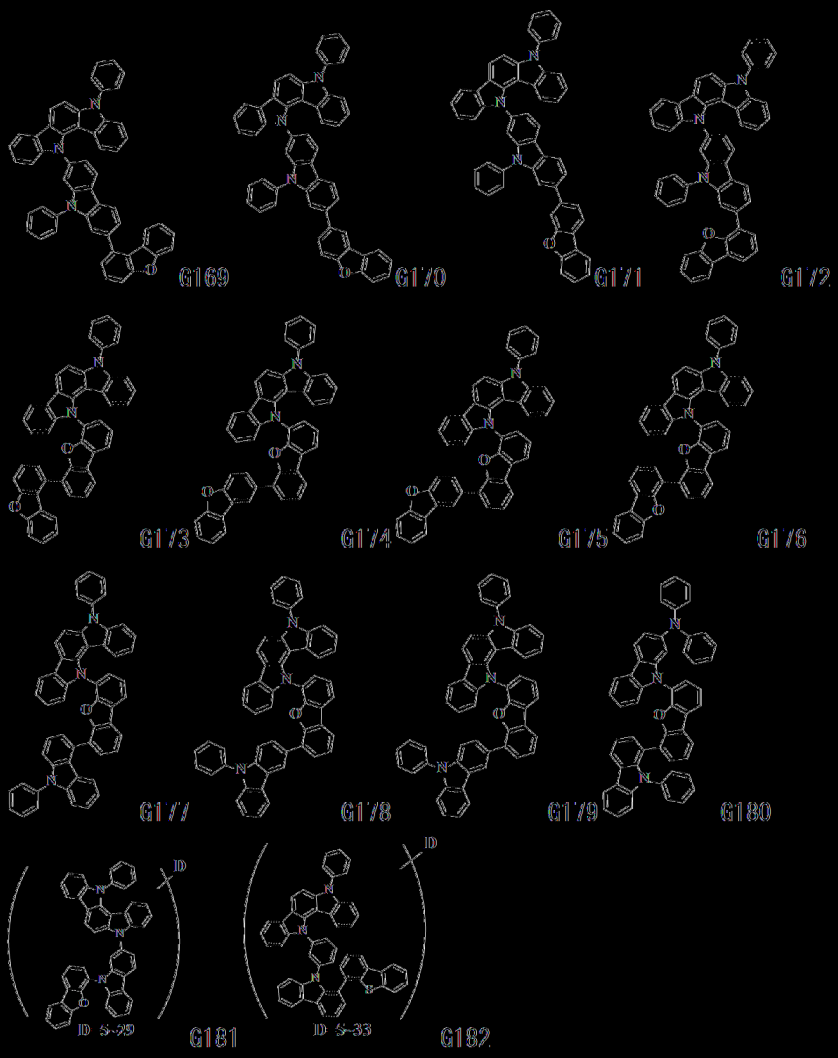
[化 51]


G129
G130
G131
G132
G133
G134
G135
G136
G137
G138
G139
G140
G141
G142
G143
G144
G145
G146
G147
G148

[化 52]

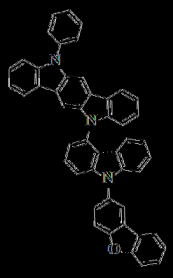

G149
G150
G151
G152
G153
G154
G155
G156
G157
G158
G159
G160
G161
G162
G163
G164
G165
G166
G167
G168

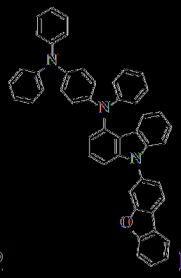
[化 53]


G169
G170
G171
G172
G173
G174
G175
G176
G177
G178
G179
G180
ID
ID 5-29
G181
ID
ID 5-33
G182

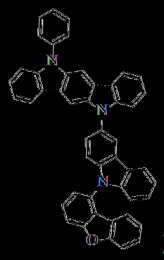
[化 54]

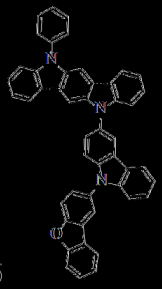

101

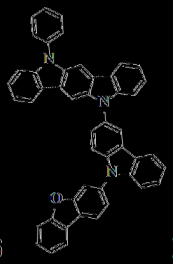

102

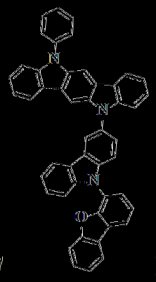

103

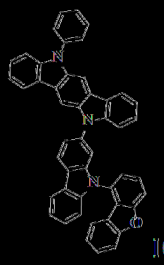

104

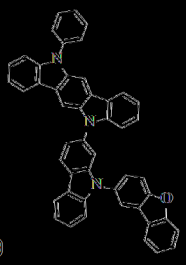

105


106

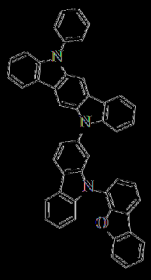

107

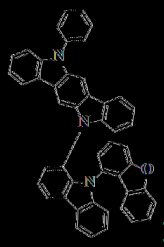

108

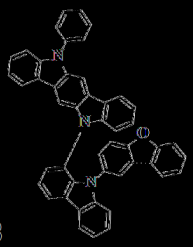

109

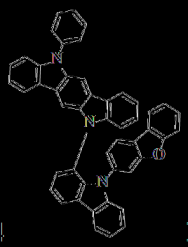

110

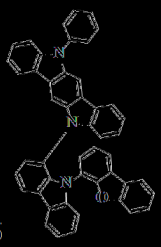

111


112

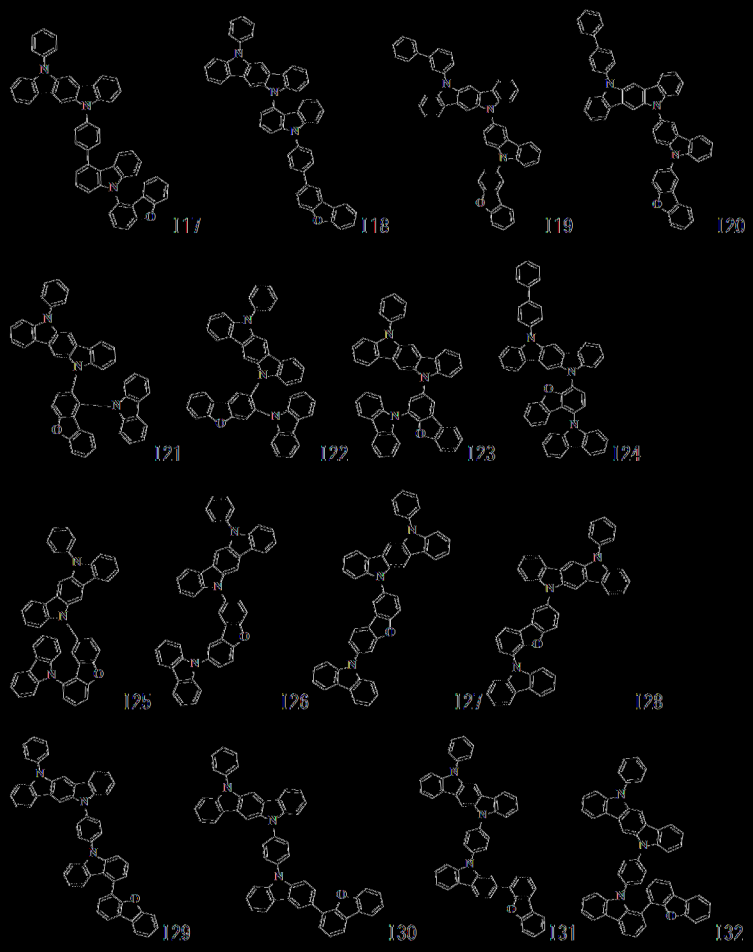

113


114

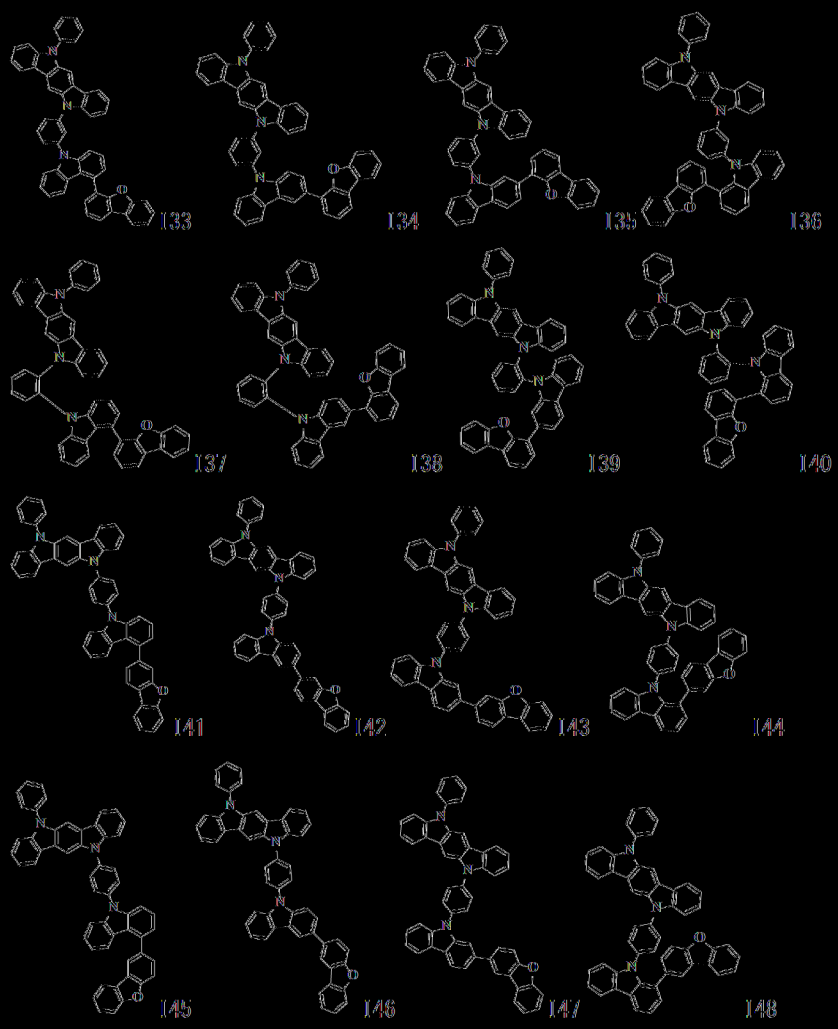

115


116

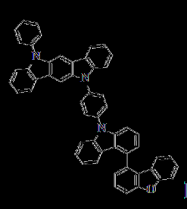
[化 55]

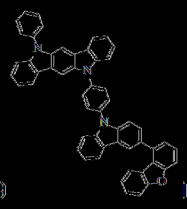


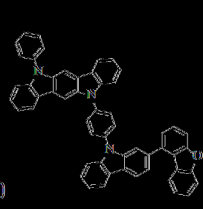
[化 56]

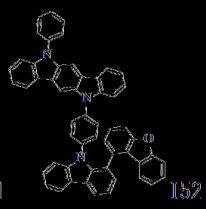


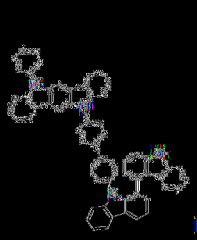
[化 57]


149

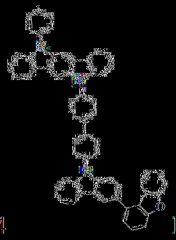

150

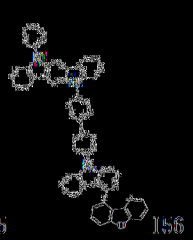

151

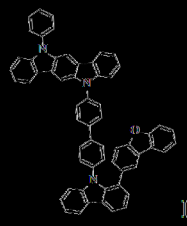

152

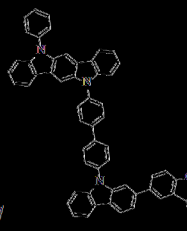

153

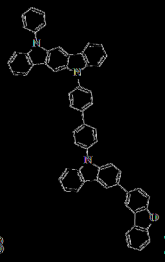

154

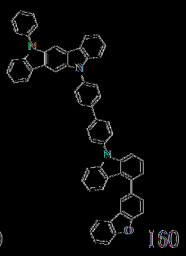

155

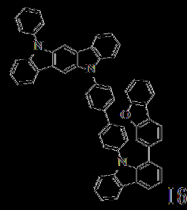

156

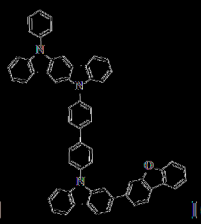

157

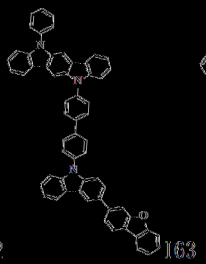

158

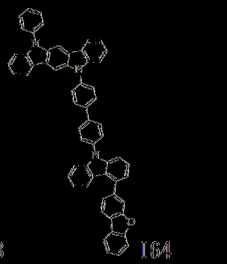

159


160

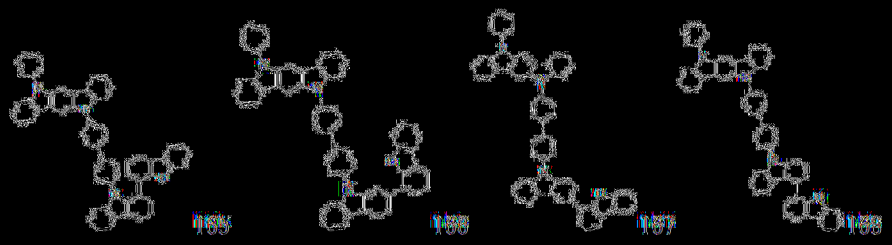

161

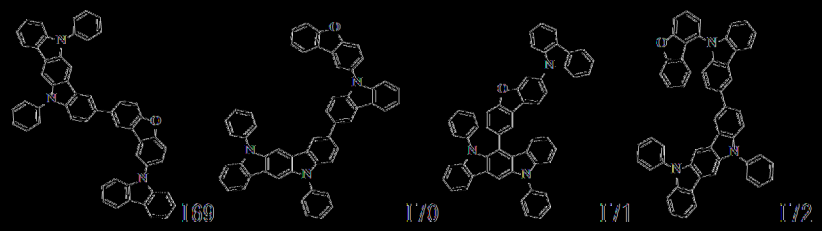

162

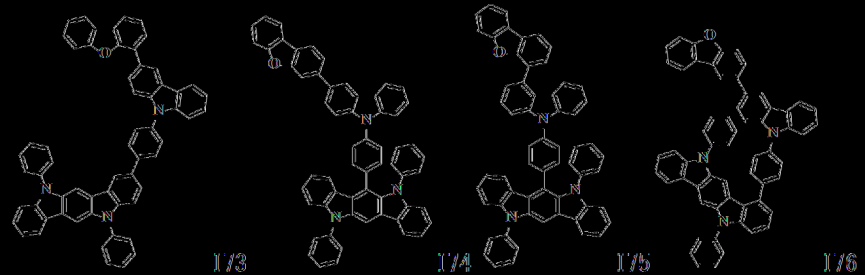

163

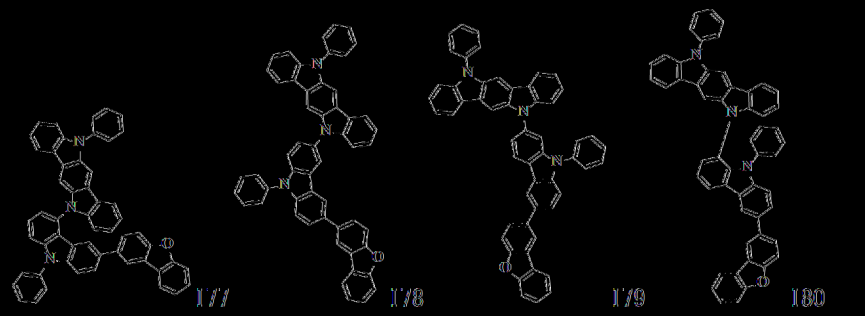

164

[化 58]



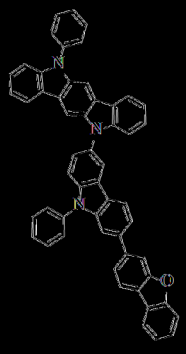




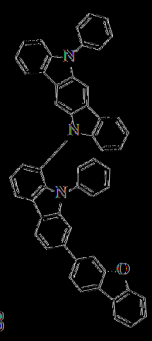


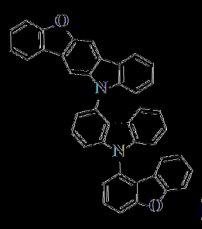
[化 59]

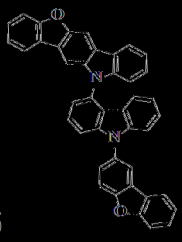

181

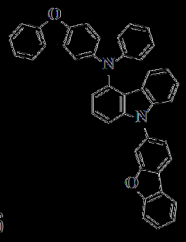

182


183

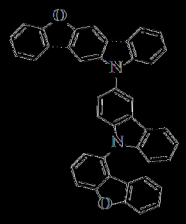

184

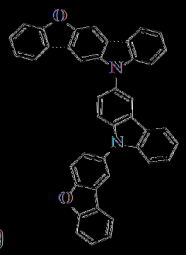

185

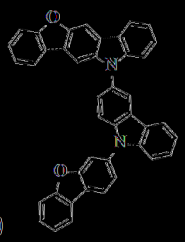

186

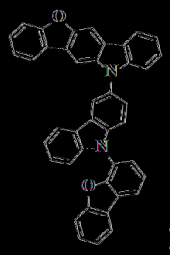

187

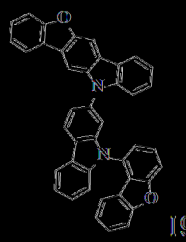

188

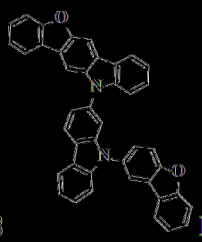

189

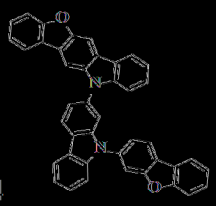

190


191


192

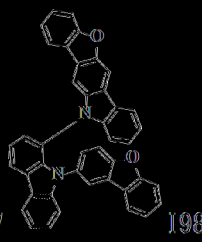

193


194

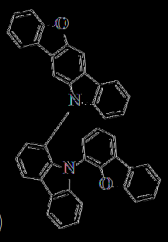

195


196

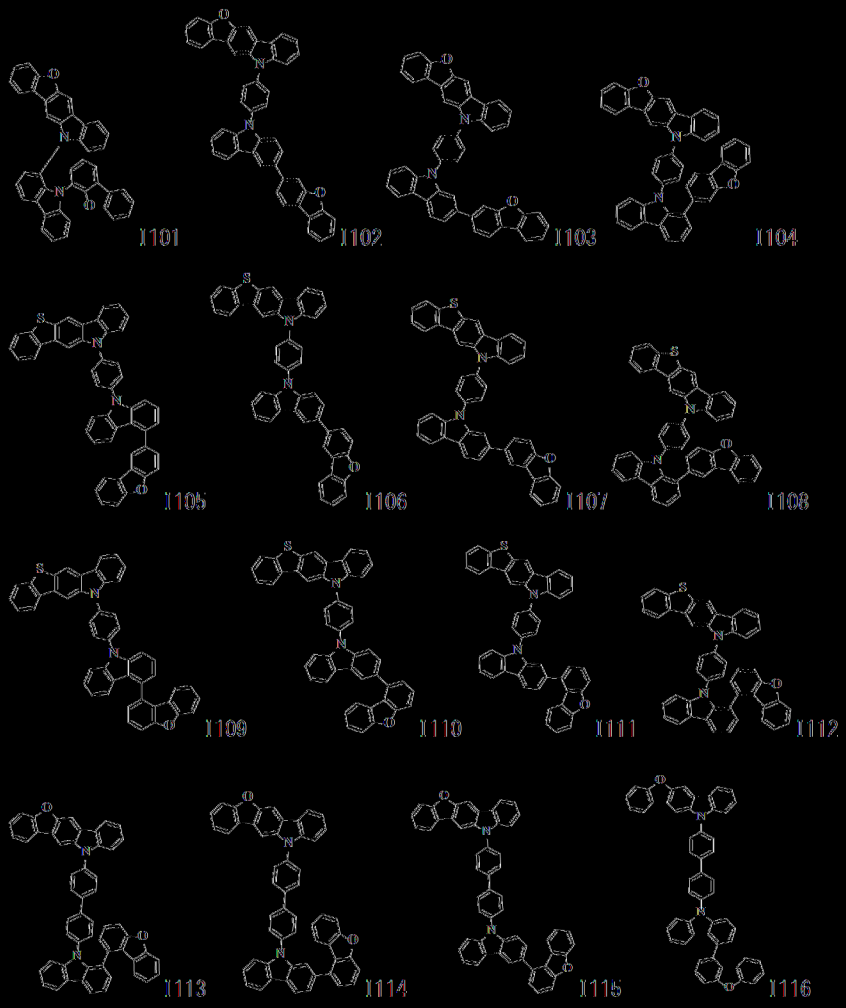

197


198

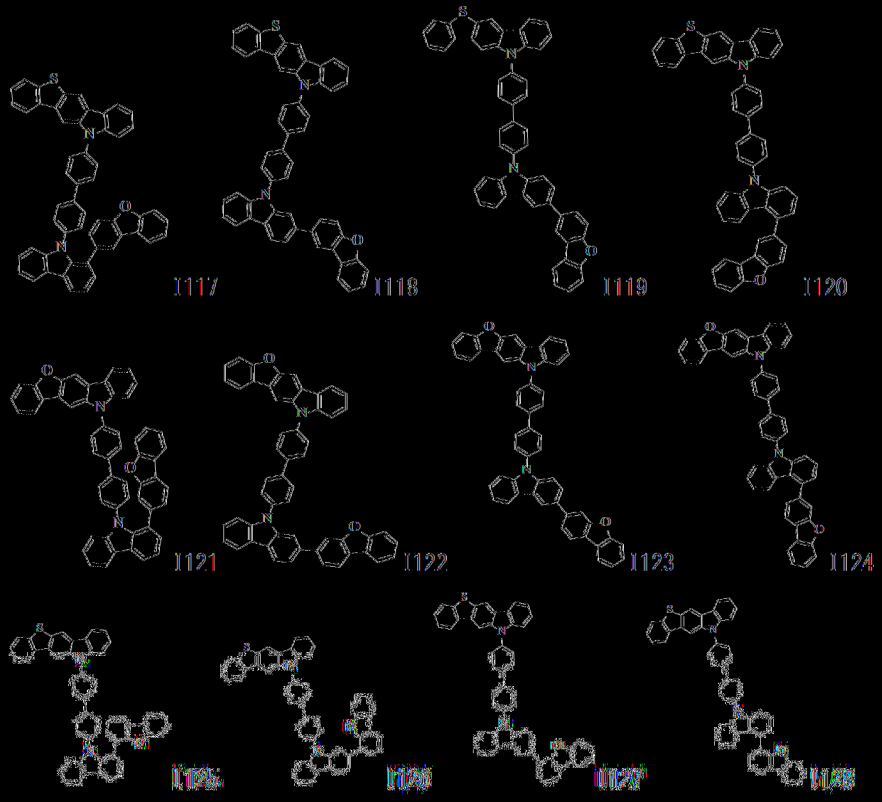

199


1100

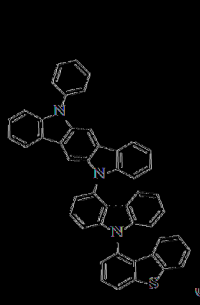
[化 60]


I101
I102
I103
I104
I105
I106
I107
I108
I109
I110
I111
I112
I113
I114
I115
I116

[化 61]

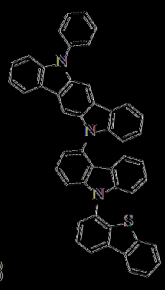


[化 62]


J01


J02

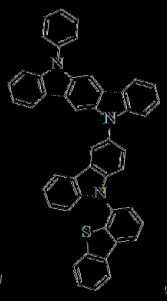

J03

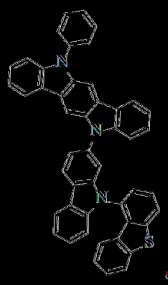

J04

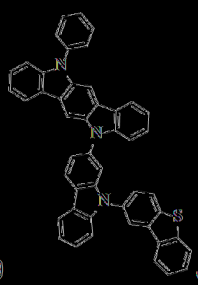

J05

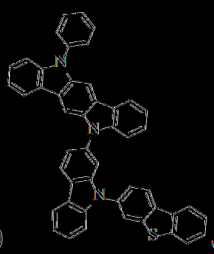

J06

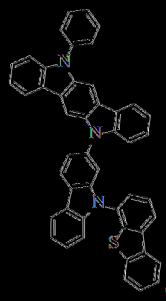

J07

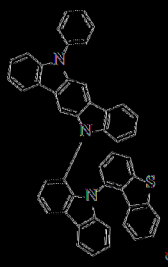

J08

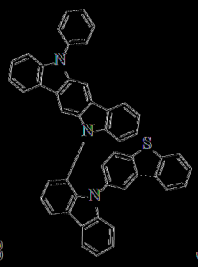

J09


J10


J11


J12

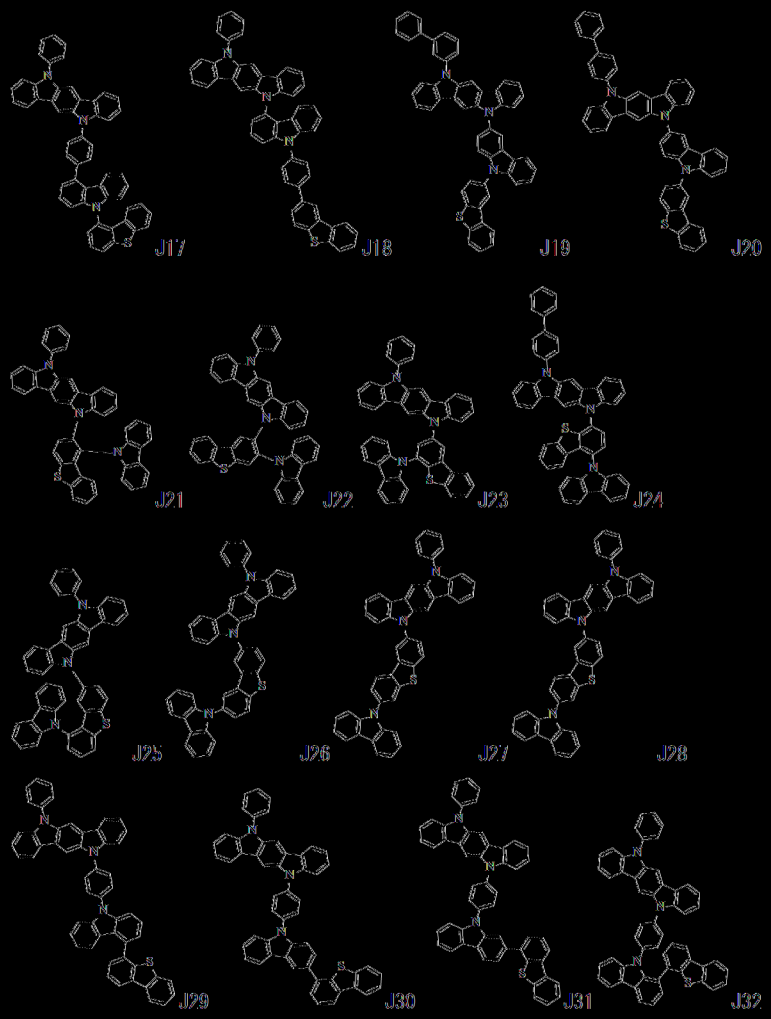

J13


J14

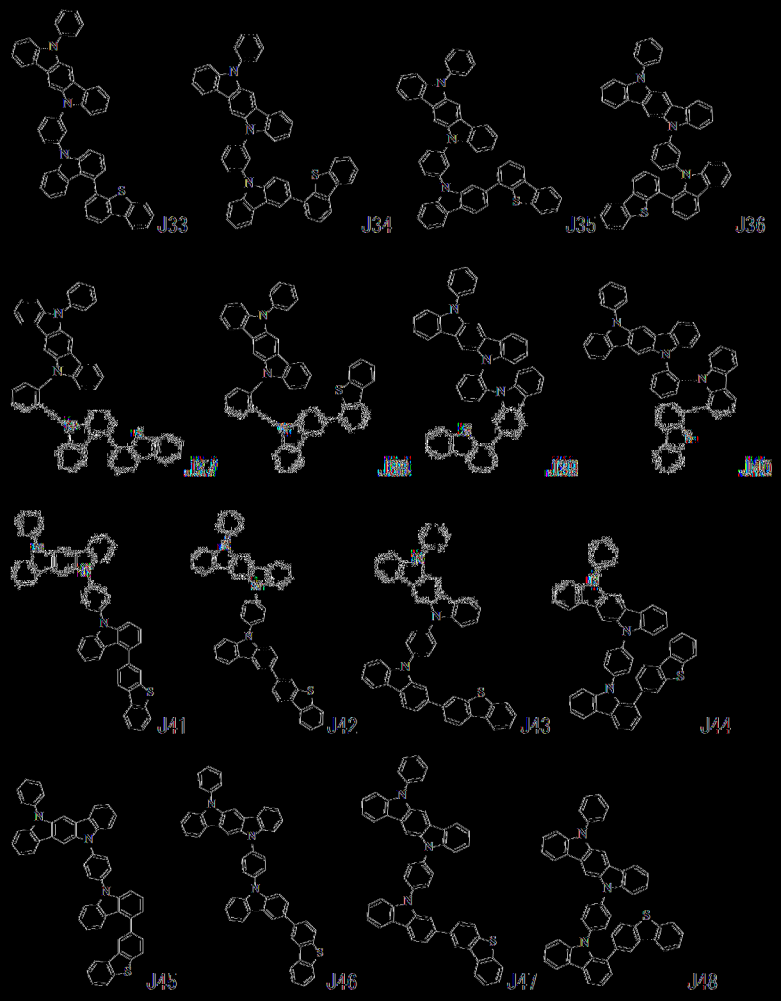

J15


J16

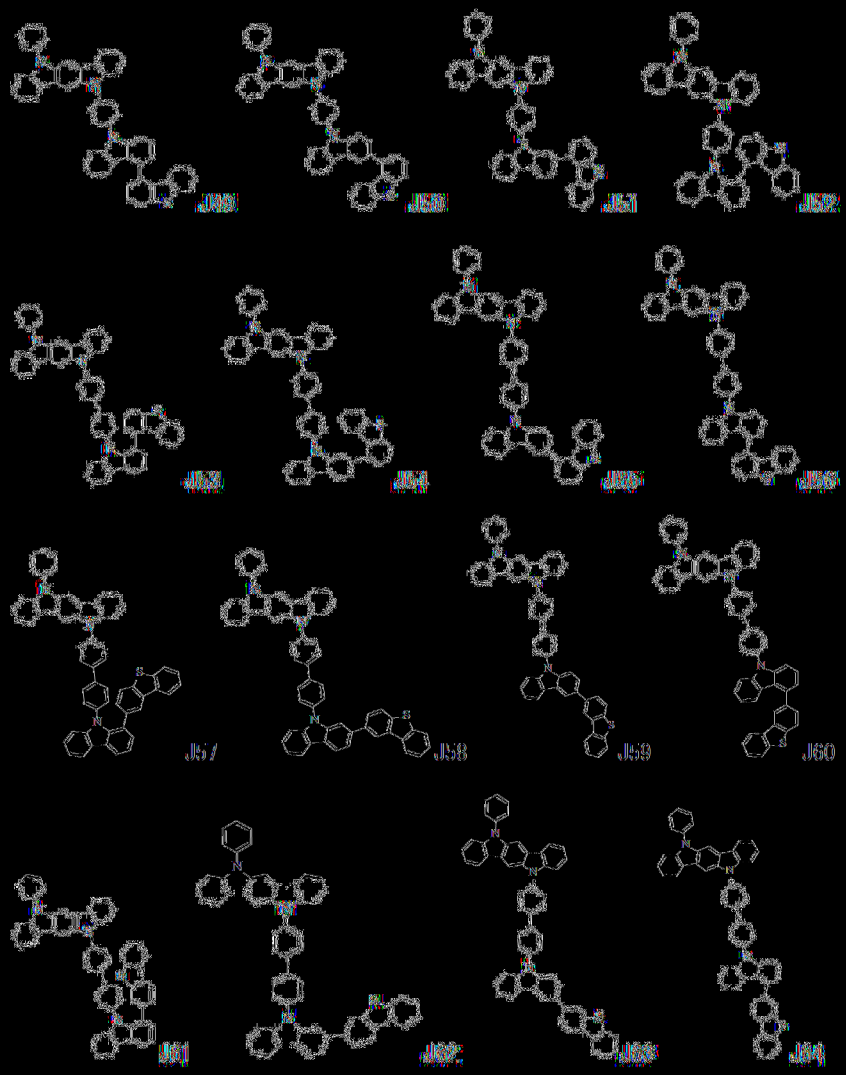
[化 63]



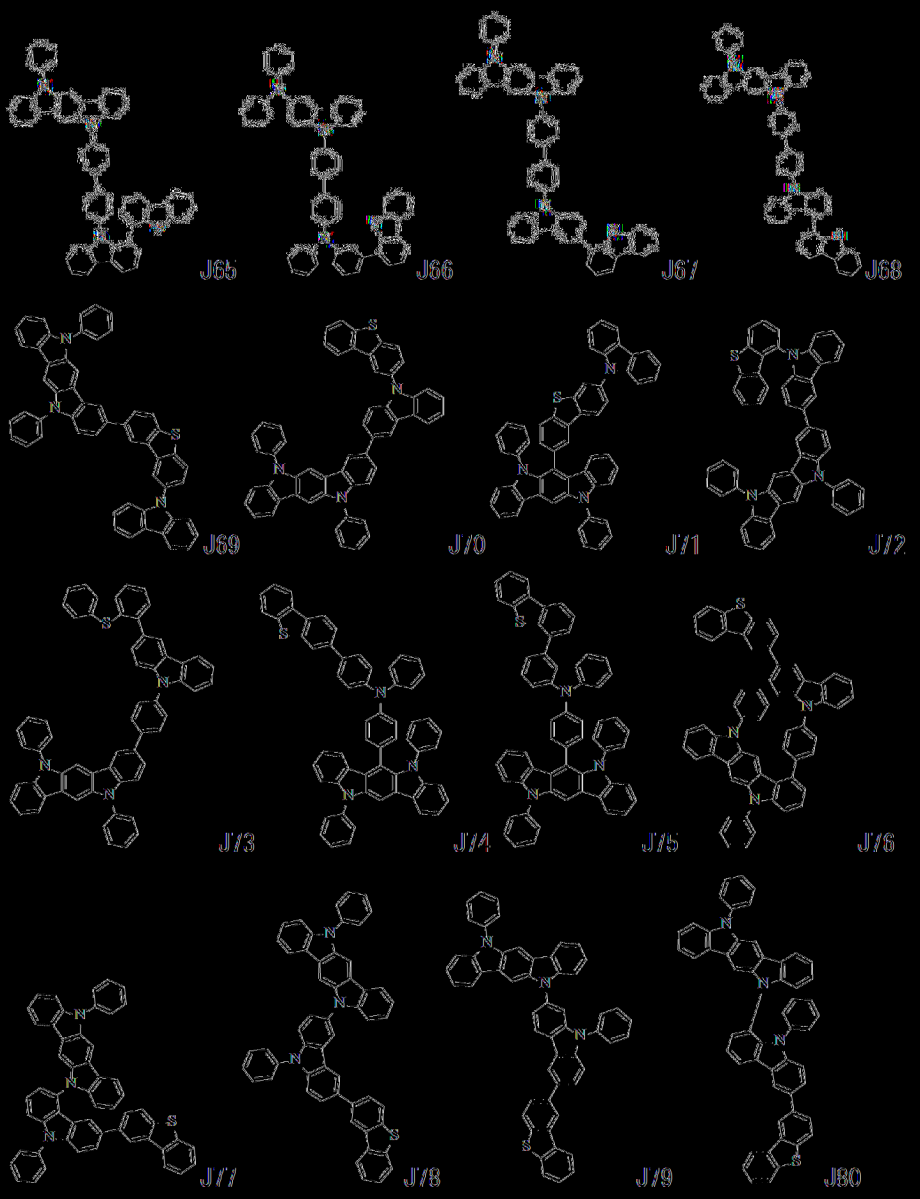
[化 64]



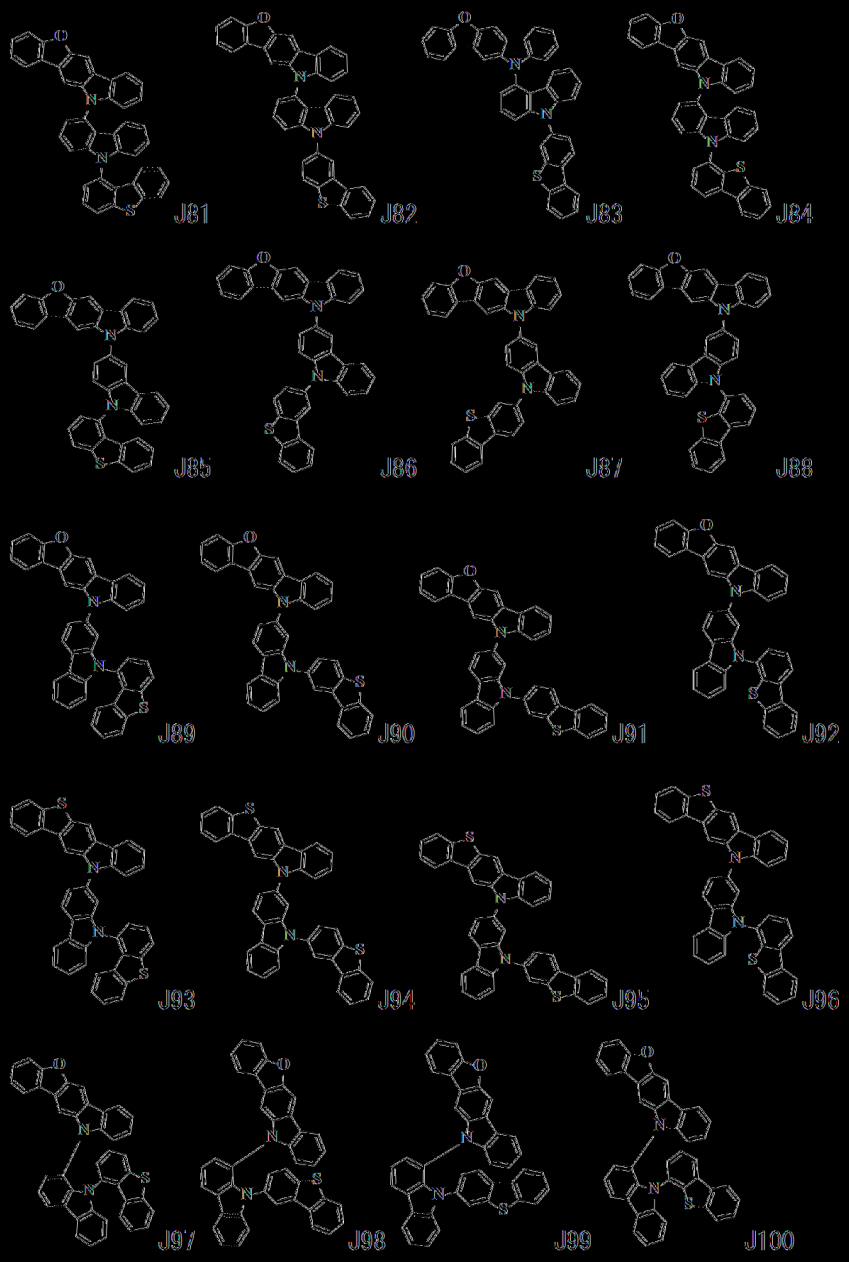
[化 65]



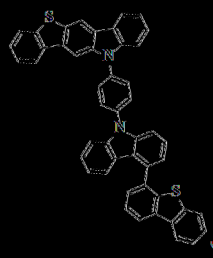
[化 66]

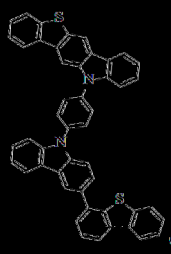


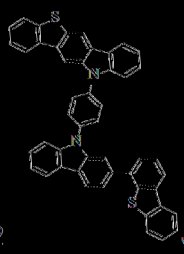
[化 67]

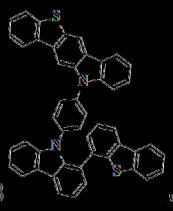

J81
J82
J83
J84
J85
J86
J87
J88
J89
J90
J91
J92
J93
J94
J95
J96
J97
J98
J99
J100

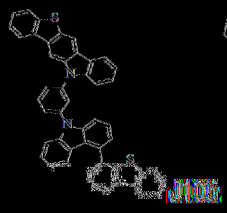
[化 68]


J101


J102


J103

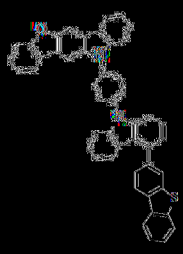

J104

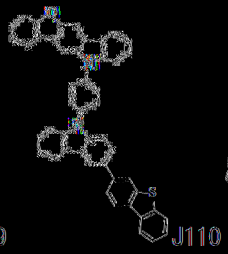

J105

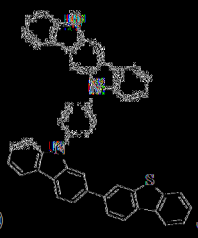

J106

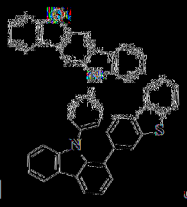

J107

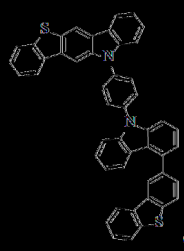

J108


J109

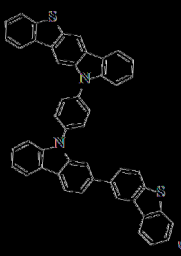

J110

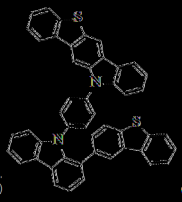

J111

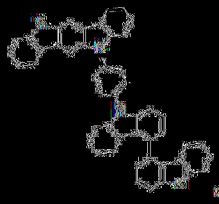

J112

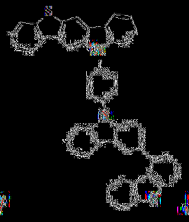

J113

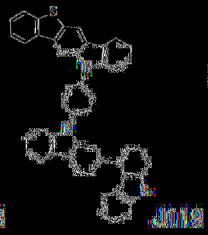

J114

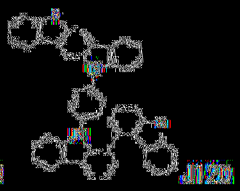

J115


J116

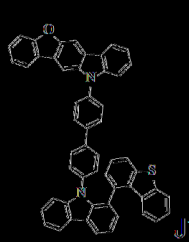

J117

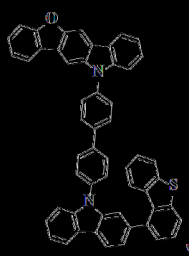

J118

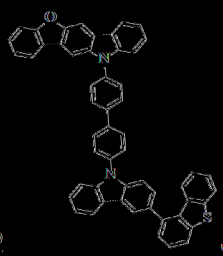

J119

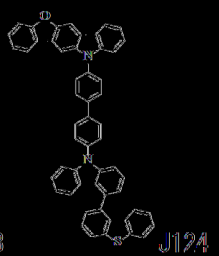

J120

[化 69]


J121


J122


J123


J124

【0047】 本發明的通式（1）所表示的化合物可藉由如下方式而獲得，即於藉由基於包含以市售的試劑類為原料的鈴木偶合（Suzuki coupling）、施蒂勒偶合（Stille coupling）、格林納偶合（Grignard coupling）、烏爾曼偶合、布赫瓦爾德-哈特維希（Buchwald-Hartwig）反應、赫克反應（Heck reaction）等偶合反應在內的於有機合成化學領域確立的各種有機合成反應的方法合成後，使用再結晶、管柱層析法、昇華精製等公知的方法進行精製，但並不限定於所述方法。

【0048】 關於本發明的光電轉換元件用材料，藉由基於密度泛函計算 B3LYP/6-31G（d）的結構最佳化計算而獲得的最高佔據分子軌域（HOMO）的能階較佳為-4.3 eV 以下，更佳為-5.5 eV～-4.5 eV 的範圍，進而佳為-5.2 eV～-4.8 eV 的範圍。

【0049】 關於本發明的光電轉換元件用材料，藉由基於密度泛函計算 B3LYP/6-31G（d）的結構最佳化計算而獲得的最低未佔用分子軌域（LUMO）的能階較佳為-2.5 eV 以上，更佳為-2.0 eV～-0.5 eV 的範圍，進而佳為-1.5 eV～-0.5 eV 的範圍。

【0050】 關於本發明的光電轉換元件用材料，HOMO 能階與 LUMO 能階的差（絕對值）較佳為 2.0 eV～5.0 eV 的範圍內，更佳為 2.5 eV～4.7 eV 的範圍內，進而佳為 3.5 eV～4.5 eV 的範圍。

【0051】 本發明的光電轉換元件用材料的電洞遷移率較佳為 1×10^{-6} cm^2/Vs 以上，更佳為 1×10^{-5} cm^2/Vs～1×10^{-1} cm^2/Vs，進而

佳為 8×10^{-5} cm^2/Vs～1×10^{-2} cm^2/Vs。電洞遷移率可藉由基於場效電晶體（Field Effect Transistor，FET）型電晶體元件的方法、基於飛行時間法的方法、空間電荷限制電流（Space Charge Limited Current，SCLC）法等公知的方法進行評價。

【0052】 本發明的光電轉換元件用材料較佳為非晶質。關於為非晶質的情況，可藉由各種方法進行確認，例如可藉由利用 X 射線繞射（X-Ray diffraction，XRD）法未檢測出波峰的情況、或利用示差掃描量熱（differential scanning calorimetry，DSC）法未檢測出吸熱波峰的情況來確認。

【0053】 接下來，對使用本發明的光電轉換元件用材料的攝像用光電轉換元件進行說明，但本發明的攝像用光電轉換元件的結構並不限定於此。參照圖式進行說明。

圖 1 是示意性地表示本發明的攝像用光電轉換元件的結構例的剖面圖，1 表示電極，2 表示電洞阻擋層，3 表示光電轉換層，4 表示電子阻擋層，5 表示電極，6 表示基板。再者，亦可為除了基板以外的結構與圖 1 相反的結構、即 1 為基板，2 為電極，3 為電子阻擋層，4 為光電轉換層，5 為電洞阻擋層，6 為電極。並不限定於圖 1 的結構，能夠視需要追加或省略層。

【0054】 -電極-

使用本發明的攝像用光電轉換元件用材料的攝像用光電轉換元件中使用的電極具有捕集於光電轉換層中生成的電洞及電子的功能。另外，亦需要使光入射至光電轉換層的功能。因此，理想

的是兩片電極內的至少一片為透明或者半透明。另外，作為電極而使用的材料只要是具有導電性的材料，則並無特別限定，例如可例示：氧化銦錫（indium tin oxide，ITO）、氧化銦鋅（indium zinc oxide，IZO）、SnO_2、銻摻雜氧化錫（antimony doped tin oxide，ATO）、ZnO、Al 摻雜氧化鋅（aluminum doped zinc oxide，AZO）、鎵摻雜氧化鋅（gallium doped zinc oxide，GZO）、TiO_2及摻氟氧化錫（fluorine doped tin oxide，FTO）等導電性透明材料、金、銀、鉑、鉻、鋁、鐵、鈷、鎳及鎢等金屬、碘化銅及硫化銅等無機導電性物質、聚噻吩、聚吡咯及聚苯胺等導電性聚合物等。關於該些材料，根據需要亦可混合使用多種。另外，亦可積層兩層以上。

【0055】 -光電轉換層-

光電轉換層是藉由利用入射光而生成的激子的電荷分離生成電洞以及電子的層。可由單獨的光電轉換材料形成，亦可與作為電洞傳輸性材料的 P 型有機半導體材料、或作為電子傳輸性材料的 N 型有機半導體材料組合而形成。另外，可使用兩種以上的 P 型有機半導體，亦可使用兩種以上的 N 型有機半導體。理想的是該些 P 型有機半導體及/或 N 型有機半導體中的一種以上使用具有吸收可見區域中所期望波長的光的功能的色素材料。關於作為電洞傳輸性材料的 P 型有機半導體材料，可使用本發明的通式（1）所表示的化合物。

【0056】 作為所述 P 型有機半導體材料，只要是具有電洞傳輸性的材料即可，較佳為使用通式（1）所表示的材料，但亦可使用其

他 P 型有機半導體材料。另外，亦可混合使用兩種以上的通式（1）所表示的材料。進而亦可混合使用通式（1）所表示的化合物與其他 P 型有機半導體材料。

【0057】 作為所述其他 P 型有機半導體材料，只要是具有電洞傳輸性的材料即可，例如可使用：萘、蒽、菲、芘、䓛、稠四苯、三伸苯、苉、螢蒽、芴、茚等具有縮合多環芳香族基的化合物，環戊二烯衍生物、呋喃衍生物、噻吩衍生物、吡咯衍生物、苯並呋喃衍生物、苯並噻吩衍生物、二萘並噻吩並噻吩衍生物、吲哚衍生物、吡唑啉衍生物、二苯並呋喃衍生物、二苯並噻吩衍生物、咔唑衍生物、吲哚並咔唑衍生物等具有 π 過剩系芳香族基的化合物，芳香族胺衍生物、苯乙烯基胺衍生物、聯苯胺衍生物、卟啉衍生物、酞菁衍生物、喹吖啶酮衍生物。

【0058】 另外，作為所述其他 P 型有機半導體材料，可使用高分子型 P 型有機半導體材料。具體而言，可列舉：聚苯乙炔衍生物、聚對伸苯基衍生物、聚芴衍生物、聚乙烯基咔唑衍生物、聚噻吩衍生物等。進而，亦可混合使用兩種以上通式（1）所表示的化合物、以及選自所述 P 型有機半導體材料或所述高分子型 P 型有機半導體材料中的化合物。

【0059】 作為所述 N 型有機半導體材料，只要是具有電子傳輸性的材料即可，例如可列舉：萘四羧酸二醯亞胺或苝四羧酸二醯亞胺、富勒烯類、咪唑、噻唑、噻二唑、噁唑、噁二唑、三唑等唑衍生物等。另外，亦可混合使用選自該些 N 型有機半導體材料中

的兩種以上的化合物。

【0060】 -電子阻擋層-

電子阻擋層是為了抑制於兩片電極之間施加偏置電壓時因自其中一個電極向光電轉換層注入電子而產生的暗電流而設置。另外，亦具有作為將光電轉換層中的因電荷分離而產生的電洞傳輸至電極的電洞傳輸的功能，且視需要可配置單層或多層。電子阻擋層中可使用作為電洞傳輸性材料的 P 型有機半導體材料。作為 P 型有機半導體材料，只要是具有電洞傳輸性的材料即可，較佳為使用通式（1）所表示的化合物，亦可使用其他 P 型有機半導體材料。另外，亦可混合使用通式（1）所表示的化合物與其他 P 型有機半導體材料。作為其他 P 型有機半導體材料，只要是具有電洞傳輸性的材料即可，具體而言，可列舉於光電轉換層的場所作為其他 P 型有機半導體材料而例示的化合物。

【0061】 作為所述其他 P 型有機半導體材料，亦可使用高分子型 P 型有機半導體材料。作為其具體例，可列舉於光電轉換層的場所作為高分子型 P 型有機半導體材料而例示的化合物。另外，亦可混合使用兩種以上本發明的通式（1）所表示的化合物、選自所述 P 型有機半導體材料或所述高分子型 P 型有機半導體材料中的化合物。

【0062】 -電洞阻擋層-

電洞阻擋層是為了抑制於兩片電極之間施加偏置電壓時因自其中一個電極向光電轉換層注入電洞而產生的暗電流而設置。另

外，亦具有作為將光電轉換層中的因電荷分離而產生的電子傳輸至電極的電子傳輸的功能，且視需要可配置單層或多層。電洞阻擋層中可使用具有電子傳輸性的 N 型有機半導體。作為所述 N 型有機半導體材料，只要是具有電子傳輸性的材料即可，例如可列舉：萘四羧酸二醯亞胺或苝四羧酸二醯亞胺之類的多環芳香族多元羧酸酐或其醯亞胺化物，C60 或 C70 之類的富勒烯類，咪唑、噻唑、噻二唑、噁唑、噁二唑、三唑等唑衍生物，三(8-羥基喹啉)鋁(III)衍生物、氧化膦衍生物、硝基取代芴衍生物、二苯基醌衍生物、噻喃二氧化物（thiopyran dioxide）衍生物、碳二醯亞胺衍生物、亞芴基甲烷衍生物、蒽醌二甲烷衍生物及蒽酮衍生物、聯吡啶衍生物、喹啉衍生物、吲哚並咔唑衍生物等。另外，亦可混合使用該些 N 型有機半導體材料的兩種以上。

【0063】 本發明的光電轉換元件用材料中的氫可為氘。即，除了通式（1）中的芳香族環上的氫以外，取代基的氫的一部分或全部可為氘。進而，用作所述 N 型有機半導體材料及所述 P 型有機半導體材料的化合物所具有的氫的一部分或全部可為氘。

【0064】 製作本發明的攝像用光電轉換元件時的各層的製膜方法並無特別限定，可藉由乾式製程、濕式製程中的任意一種進行製作。包含本發明的光電轉換元件用材料的有機層視需要亦可設為多層。

【0065】 本申請案的攝像用的光電轉換元件於本申請案的實施例 1 中所記載的測定條件下，暗處的電流值較佳為 5.3×10^{-10} A/cm^2

以下，更佳為 1.0×10^{-12} A/cm^2～5.3×10^{-10} A/cm^2，進而佳為 1.0×10^{-12} A/cm^2～4.5×10^{-10} A/cm^2 的範圍。另外，本申請案的攝像用的光電轉換元件於本申請案的實施例 1 中所記載的測定條件下的明暗比較佳為 6.0×10^2 以上，更佳為 7.0×10^2 以上，進而佳為 7.5×10^2 以上。

[實施例]

【0066】 以下，藉由實施例更詳細地說明本發明，但本發明並不限定於該些實施例。

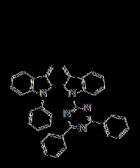
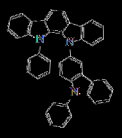
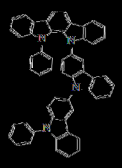
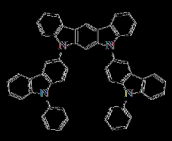
【0067】 計算例

HOMO 及 LUMO 的計算

計算出所述化合物 A05、化合物 A22、化合物 A100、化合物 B06、化合物 B20、化合物 C17、化合物 C20、化合物 C169、化合物 D01、化合物 G07、化合物 I01 及化合物 I128 的 HOMO 與 LUMO 的能階、以及 HOMO 與 LUMO 的能差。再者，關於計算，使用基於密度泛函法（密度泛函理論（DFT：Density Functional Theory））的計算，使用高斯（Gaussian）作為計算程式，並藉由基於密度泛函計算 B3LYP/6-31G（d）的結構最佳化計算而進行計算。將結果示於表 1 中。可以說本發明的攝像用的光電轉換元件用材料的任一種均具有較佳的 HOMO 及 LUMO 值。

【0068】 利用與所述化合物相同的方法計算出作為比較化合物的 H1～H4 的 HOMO 及 LUMO 的能階以及 HOMO 與 LUMO 的能差。將結果示於表 1。

[化 70]


(H1)

(H2)

(H3)

(H4)

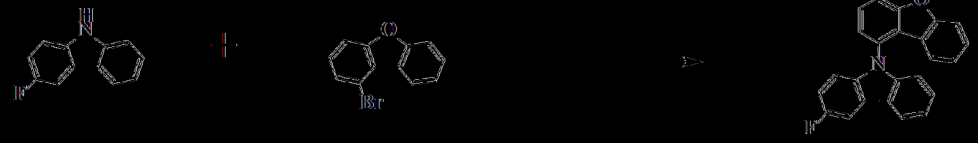
[0069] [表 1]

化合物	HOMO[eV]	LUMO[eV]	能差[eV]
A05	-5.0	-1.3	3.6
A22	-5.2	-1.0	4.2
A100	-5.1	-1.1	4.0
B06	-5.0	-1.3	3.7
B20	-5.2	-1.0	4.2
C17	-5.1	-1.0	4.1
C20	-5.0	-1.1	4.0
C169	-5.0	-1.0	4.0
D01	-4.9	-1.3	3.6
G07	-4.9	-1.3	3.5
I01	-4.8	-1.3	3.5
I128	-5.2	-1.3	3.9
H1	-5.3	-1.9	3.4
H2	-5.0	-0.9	4.1
H3	-4.9	-1.1	3.8
H4	-4.7	-0.9	3.8

[0070] 以下，作為代表例，示出化合物 A05 的合成例。對於其他化合物，亦藉由類似的方法來合成。

[0071] 合成例 1（中間體 R3 的合成）

[化 71]

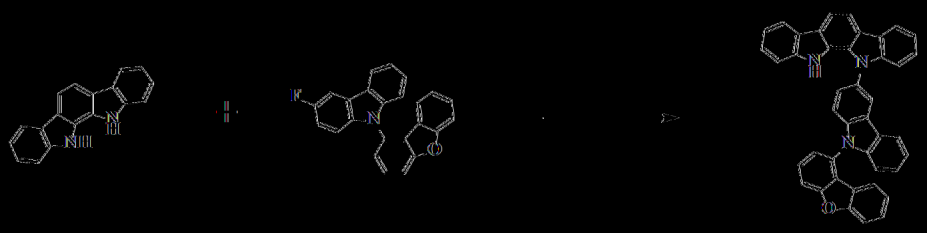


R1　　R2　　R3

於進行了脫氣氮置換的 500 ml 三口燒瓶中投入 R1（54.0 mmol）、R2（56.7 mmol）、碘化銅（1.1 mmol）、磷酸三鉀（162.0 mmol），向其中加入脫水二噁烷 150 ml 後，於 120℃下攪拌 5 小時。冷卻至室溫後，藉由過濾除去無機物，於濾液中加入水 300 ml、二氯甲烷 300 ml，移至分液漏斗中，分成有機層以及水層。利用 200 ml 的水將有機層清洗三次，將所獲得的有機層利用硫酸鎂脫水後進行減壓濃縮。將所獲得的殘渣藉由管柱層析法進行精製，獲得 R3（淡黃色固體）。產量 15.2 g，產率 80.1%。

[0072] 合成例 2（中間體 R5 的合成）

[化 72]

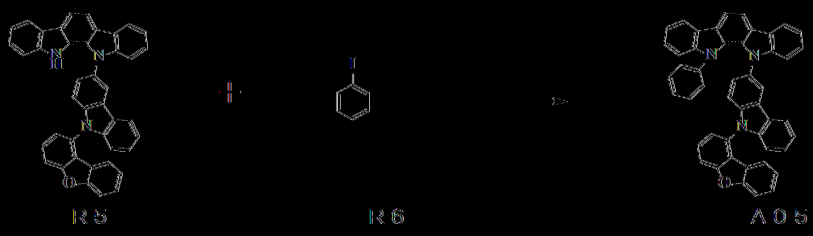


向進行了脫氣氮置換的 500 ml 三口燒瓶中投入 R4（19.5 mmol）、合成例 1 中合成的 R3（21.5 mmol）、磷酸三鉀（39.0 mmol），向其中加入二甲基咪唑啉酮 50 ml 後，於 180℃下攪拌 8 小時。冷卻至室溫後，藉由過濾除去無機物，於濾液中加入水 200 ml、二氯甲烷 200 ml，移至分液漏斗中，分為有機層以及水層。利用 200 ml 的水將有機層清洗三次，將所獲得的有機層利用硫酸鎂脫水後

進行減壓濃縮。將所獲得的殘渣利用管柱層析法進行精製，獲得R5（淡黃色固體）。產量為 7.1 g，產率為 62%。

[0073] 合成例 3（A05 的合成）

[化 73]



向進行了脫氣氮置換的 500 ml 三口燒瓶中投入合成例 2 中合成的 R5（8.5 mmol）、R6（127.6 mmol）、銅粉末（25.5 mmol）、碳酸鉀（42.5 mmol），於 180℃下攪拌 8 小時。冷卻至室溫後，藉由過濾除去無機物，於濾液中加入水 200 ml、二氯甲烷 200 ml，移至分液漏斗中，分為有機層以及水層。利用 200 ml 的水將有機層清洗三次，將所獲得的有機層利用硫酸鎂脫水後進行減壓濃縮。將所獲得的殘渣利用管柱層析法進行精製，獲得 A05（無色固體）。產量為 5.2 g，產率為 92%。藉由 XRD 法對所獲得的固體進行了評價，但未檢測出波峰，因此可知本化合物為非晶質。（APCI-TOFMS，m/z 664[M+H]+）

[0074] 物性評價例

於形成有包含膜厚 110 nm 的 ITO 的透明電極的玻璃基板上，利用真空蒸鍍法於膜厚約為 3 μm 的條件下對化合物 A05 進行製膜

而作為有機層。繼而，使用將鋁（Al）以 70 nm 的厚度形成的元件作為電極，利用飛行時間法進行電洞遷移率測定。其結果，電洞遷移率為 5.5×10^{-4} cm^2/Vs。

【0075】 除了將化合物 A05 替換為 A22、A100、B06、B20、C17、C20、C169、D01、G07、I01、I128、H1、H2、H3 以及 H4 以外，同樣地進行操作，進行電洞遷移率的評價。將結果示於表 2。

【0076】 [表 2]

化合物	電洞遷移率[cm^2/Vs]	化合物	電洞遷移率[cm^2/Vs]
A05	5.5×10^{-4}	D01	4.4×10^{-4}
A22	4.5×10^{-4}	G07	6.5×10^{-4}
A100	2.3×10^{-4}	I01	3.9×10^{-4}
B06	4.1×10^{-4}	I128	3.1×10^{-4}
B20	8.3×10^{-4}	H1	4.0×10^{-5}
C17	7.8×10^{-4}	H2	3.0×10^{-5}
C20	3.3×10^{-4}	H3	1.0×10^{-4}
C169	5.2×10^{-4}	H4	6.0×10^{-5}

【0077】 實施例 1

於玻璃基板上形成的包含膜厚 70 nm 的 ITO 的電極上，以真空度 4.0×10^{-5} Pa 將化合物 A05 以 10 nm 的厚度成膜來作為電子阻擋層。繼而，作為光電轉換層，以蒸鍍速度比 4:4:2 將 2Ph-BTBT、F6-SubPc-OC6F5、富勒烯（C60）共蒸鍍 200 nm 來成膜。接著，將 dpy-NDI 蒸鍍 10 nm，形成電洞阻擋層。最後，將鋁以 70 nm 的厚度成膜來作為電極，製作光電轉換元件。以 ITO 以及鋁為電極來施加 2.6 V 的電壓時，暗處的電流值（暗電流值）為 2.8×10^{-10} A/cm^2。另外，施加 2.6 V 的電壓，藉由調整為照射光波長 500 nm、1.6 μW 的 LED 對 ITO 電極側自 10 cm 的高度進行光照射時的電流

值（明電流值）為 3.0×10^{-7} A/cm^2。施加 2.6 V 電壓時的明暗比為 1.1×10^3。將該些結果示於表 3 中。

〔0078〕 實施例 2～實施例 9

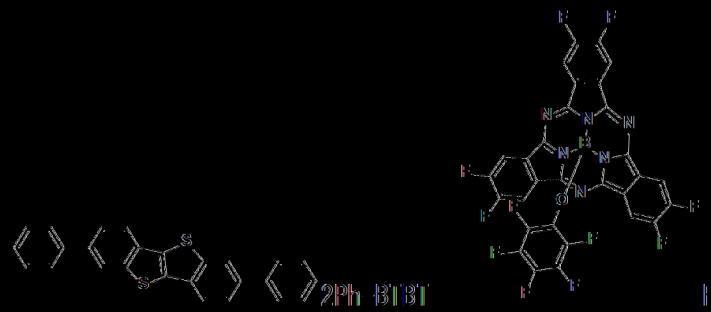
除了使用表 3 所示的化合物來作為電子阻擋層以外，與實施例 1 同樣地製作光電轉換元件。

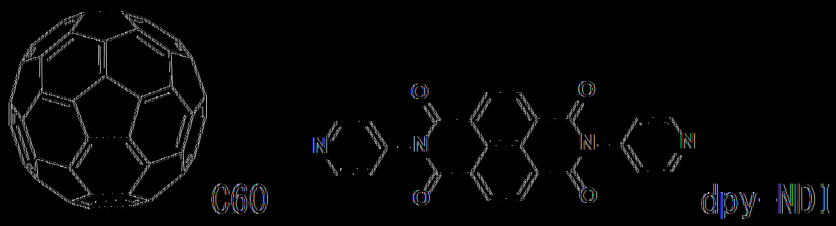
〔0079〕 比較例 1～比較例 4

除了使用表 3 所示的化合物來作為電子阻擋層以外，與實施例 1 同樣地製作光電轉換元件。將實施例 1～實施例 9、及比較例 1～比較例 4 的結果示於表 3 中。

〔0080〕 實施例及比較例中所使用的化合物如下所示。

[化 74]





〔0081〕 [表 3]

	化合物	暗處的電流值 [A/cm^2]	光照射時的電流值 [A/cm^2]	明暗比
實施例 1	A05	2.8×10^{-10}	3.0×10^{-7}	1.1×10^{3}
實施例 2	A22	4.1×10^{-10}	3.1×10^{-7}	7.6×10^{2}
實施例 3	A100	2.0×10^{-10}	3.0×10^{-7}	1.5×10^{3}
實施例 4	B20	1.7×10^{-10}	2.8×10^{-7}	1.6×10^{3}
實施例 5	C17	3.4×10^{-10}	2.9×10^{-7}	8.5×10^{2}
實施例 6	C169	2.3×10^{-10}	2.9×10^{-7}	1.3×10^{3}
實施例 7	D01	3.2×10^{-10}	3.3×10^{-7}	1.0×10^{3}
實施例 8	I01	3.8×10^{-10}	3.2×10^{-7}	8.4×10^{2}
實施例 9	I128	2.9×10^{-10}	3.0×10^{-7}	1.0×10^{3}
比較例 1	H1	7.5×10^{-10}	2.5×10^{-7}	3.3×10^{2}
比較例 2	H2	6.3×10^{-10}	3.0×10^{-7}	4.8×10^{2}
比較例 3	H3	6.4×10^{-10}	3.3×10^{-7}	5.2×10^{2}
比較例 4	H4	7.2×10^{-10}	2.5×10^{-7}	3.5×10^{2}

[產業上之可利用性]

【0082】 認為藉由使用本發明的攝像用的光電轉換元件用材料可達成於攝像用的光電轉換元件內的電洞或電子的適當遷移，因此能夠減少將光轉換為電能時因施加偏置電壓而產生的漏電流，其結果，可獲得達成暗電流值低以及明暗比高的光電轉換元件。因此，本發明的材料有效用作光電轉換膜積層型攝像設備的光電轉換元件用材料。

【符號說明】

【0083】

1:電極

2:電洞阻擋層

3:光電轉換層

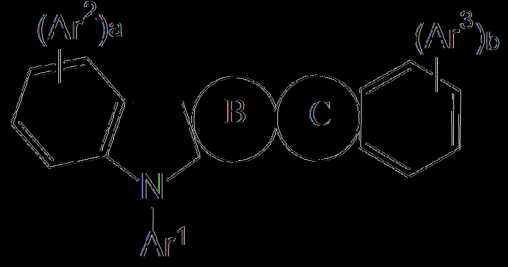
4:電子阻擋層

5:電極

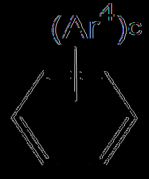
6:基板

【發明申請專利範圍】

【請求項1】一種包含光電轉換元件用材料的光電轉換元件，其特徵在於，包含下述通式（1）所表示的化合物；



（1）



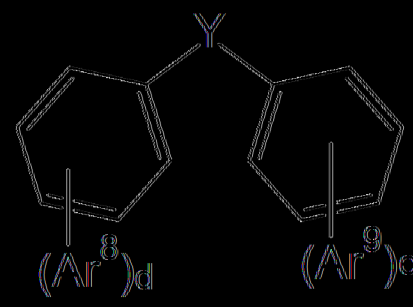
（1B）



（1C）

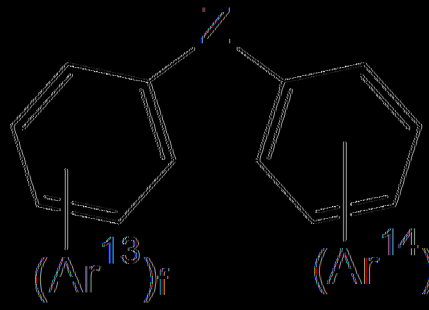
於通式（1）中，環 B 與鄰接環於任意位置進行縮合，且表示式（1B）所表示的六元環；環 C 與鄰接環於任意位置進行縮合，且表示式（1C）所表示的五元環；X 由 N-Ar^5、O、S 及 C-Ar^{6}Ar^7 中的任一者表示；Ar^1～Ar^7 分別獨立地表示氘、鹵素、碳數 1～20 的烷基、經取代或未經取代的碳數 12～36 的芳香族胺基、經取代或未經取代的碳數 6～18 的芳香族烴基、經取代或未經取代的碳數 3～18 的芳香族雜環基、或者將該些芳香族基的兩個～十個連結而成的經取代或未經取代的連結芳香族基；其中，Ar^1～Ar^5 中的至少一個包含一個以上的下述通式（2）所表示的結構，並且包

含一個以上的下述通式（3）所表示的結構；a、b 及 c 表示取代數，a 及 b 分別獨立地表示 0～4 的整數，c 表示 0～2 的整數；



（2）

於通式（2）中，Y 獨立地由 N-Ar[10]、O、S 及 C-Ar[11]Ar[12] 中的任一者表示；Ar[8]～Ar[12] 分別獨立地表示氫、鹵素、碳數 1～20 的烷基、經取代或未經取代的碳數 12～36 的芳香族胺基、經取代或未經取代的碳數 6～18 的芳香族烴基、經取代或未經取代的碳數 3～18 的芳香族雜環基、或者將該些芳香族基的兩個～四個連結而成的經取代或未經取代的連結芳香族基；d 及 e 表示取代數，且分別獨立地表示 0～4 的整數；



（3）

於通式（3）中，Z 獨立地由 O、S 及 C-Ar[15]Ar[16] 中的任一者

表示；Ar^{13}～Ar^{16}分別獨立地表示氘、鹵素、碳數 1～20 的烷基、經取代或未經取代的碳數 12～36 的芳香族胺基、經取代或未經取代的碳數 6～18 的芳香族烴基、經取代或未經取代的碳數 3～18 的芳香族雜環基、或者將該些芳香族基的兩個～四個連結而成的經取代或未經取代的連結芳香族基；f 及 g 表示取代數，且分別獨立地表示 0～4 的整數。

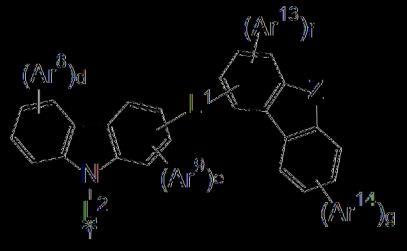
【請求項2】 如請求項 1 所述的光電轉換元件，其中，於所述通式（1）中，Ar^1包含分別各為至少一個的所述通式（2）及通式（3）所表示的結構，並且 Ar^1～Ar^7不包含含氮六元環結構。

【請求項3】 如請求項 1 所述的光電轉換元件，其中，於所述通式（1）中，X 由 N-Ar^5、O 及 S 中的任一者表示。

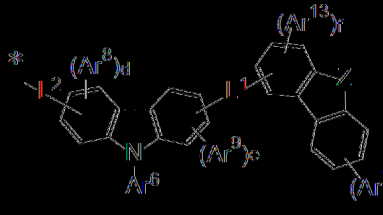
【請求項4】 如請求項 1 所述的光電轉換元件，其中，於所述通式（1）中，Y 由 N-Ar^{10}表示。

【請求項5】 如請求項 1 所述的光電轉換元件，其中，於所述通式（1）中，Z 由 O 或 S 中的任一者表示。

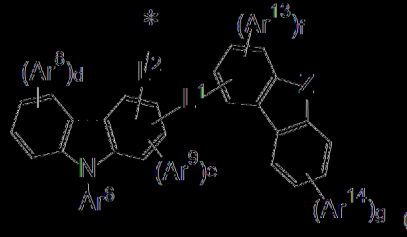
【請求項6】 如請求項 1 所述的光電轉換元件，其中，於所述通式（1）中，Ar^1由下述式（4）～式（7）中的任一者表示；*表示與通式（1）的連結位置；



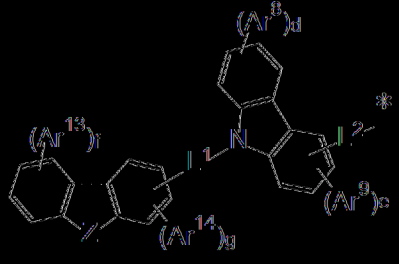
（4）



（5）



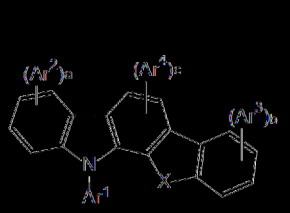
（6）



（7）

L^1 以及 L^2 分別獨立地表示直接鍵、經取代或未經取代的碳數 6～18 的芳香族烴基、或者將該些芳香族基的兩個～六個連結而成的經取代或未經取代的連結芳香族基。

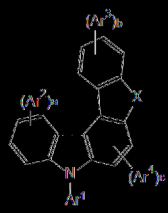
【請求項7】 如請求項 1 所述的光電轉換元件，其中，所述通式（1）由以下式（8）～式（13）中的任一者表示：



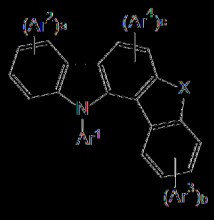
（8）



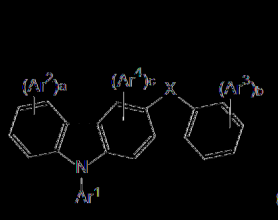
（9）



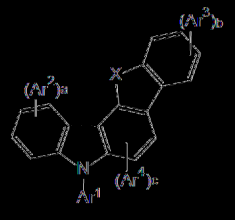
（10）



（11）



（12）



（13）

。

【請求項8】 一種攝像用的光電轉換元件，其特徵在於，包含攝

像用的光電轉換元件用材料，所述攝像用的光電轉換元件用材料為如請求項 1 所述的所述通式（1）所表示的化合物。

【請求項9】 如請求項 8 所述的攝像用的光電轉換元件，其中，所述通式（1）所表示的攝像用的光電轉換元件用材料中，藉由基於密度泛函計算 B3LYP/6-31G（d）的結構最佳化計算而獲得的最高佔據分子軌域（HOMO）的能階為-4.3 eV 以下。

【請求項10】 如請求項 8 所述的攝像用的光電轉換元件，其中，所述通式（1）所表示的攝像用的光電轉換元件用材料中，藉由基於密度泛函計算 B3LYP/6-31G（d）的結構最佳化計算而獲得的最低未佔用分子軌域（LUMO）的能階為-2.5 eV 以上。

【請求項11】 如請求項 8 所述的攝像用的光電轉換元件，其中，所述通式（1）所表示的攝像用的光電轉換元件用材料具有 1×10^{-6} cm^2/Vs 以上的電洞遷移率。

【請求項12】 如請求項 8 所述的攝像用的光電轉換元件，其中，所述通式（1）所表示的攝像用的光電轉換元件用材料是非晶質。

【請求項13】 如請求項 8 所述的攝像用的光電轉換元件，其中，所述通式（1）所表示的攝像用的光電轉換元件用材料被用作攝像用的光電轉換元件的電洞傳輸性材料。

【請求項14】 如請求項 8 所述的攝像用的光電轉換元件，其中，於兩片電極之間具有光電轉換層與電子阻擋層，所述攝像用的光電轉換元件中，於光電轉換層與電子阻擋層的至少一層中包含所述通式（1）所表示的攝像用的光電轉換元件用材料。

【請求項15】　如請求項 14 所述的攝像用的光電轉換元件，其中，於所述電子阻擋層中包含所述通式（1）所表示的攝像用的光電轉換元件用材料。

【請求項16】　如請求項 15 所述的攝像用的光電轉換元件，其中，於所述光電轉換層中包含電子傳輸性材料。

【請求項17】　如請求項 16 所述的攝像用的光電轉換元件，包含富勒烯衍生物作為所述電子傳輸性材料。