



(21) 申請案號：113110979

(22) 申請日：中華民國 113 (2024) 年 03 月 25 日

(51) Int. Cl. : C07D495/04 (2006.01)

H01L27/14 (2006.01)

H10K30/00 (2023.01)

H10K85/60 (2023.01)

(30) 優先權：2023/03/31 日本

2023-057955

(71) 申請人：日商富士軟片股份有限公司 (日本) FUJIFILM CORPORATION (JP)

日本

(72) 發明人：森田昌樹 MORITA, MASAKI (JP)；杉浦寬記 SUGIURA, HIROKI (JP)；米久田康智 YONEKUTA, YASUNORI (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：14 項 圖式數：2 共 97 頁

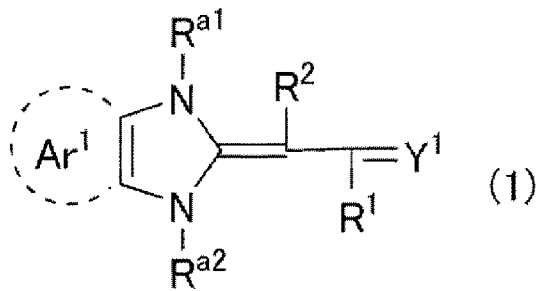
(54) 名稱

光電轉換元件、攝像元件、光學感測器

(57) 摘要

本發明提供一種對綠光的響應性優異的光電轉換元件，以及具有上述光電轉換元件之攝像元件及光學感測器。本發明的光電轉換元件依序具有導電性膜、光電轉換膜及透明導電性膜，其中，光電轉換膜包含由式 (1) 表示之第 1 化合物和與第 1 化合物不同的化合物亦即第 2 化合物，第 1 化合物的極大吸收波長  $\lambda_1$  及第 2 化合物的極大吸收波長  $\lambda_2$  滿足式 (X) 的關係。

$$-20\text{nm} \leq \lambda_1 - \lambda_2 \leq 20\text{nm} \cdots \cdots \text{式 (X)}$$



指定代表圖：

符號簡單說明：

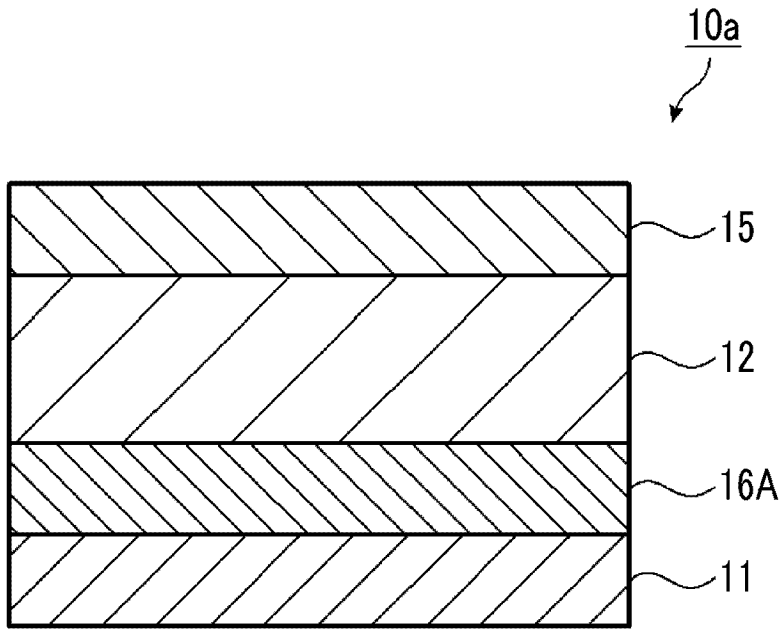
10a:光電轉換元件

11:導電性膜(下部電極)

12:光電轉換膜

15:透明導電性膜(上部電極)

16A:電子阻擋膜



【圖1】

## 【發明摘要】

【中文發明名稱】光電轉換元件、攝像元件、光學感測器

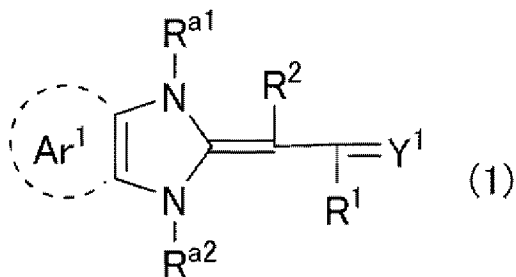
【英文發明名稱】PHOTOELECTRIC CONVERSION ELEMENT, IMAGE

SENSOR, OPTICAL SENSOR

【中文】

本發明提供一種對綠光的響應性優異的光電轉換元件，以及具有上述光電轉換元件之攝像元件及光學感測器。本發明的光電轉換元件依序具有導電性膜、光電轉換膜及透明導電性膜，其中，光電轉換膜包含由式(1)表示之第1化合物和與第1化合物不同的化合物亦即第2化合物，第1化合物的極大吸收波長 $\lambda_1$ 及第2化合物的極大吸收波長 $\lambda_2$ 滿足式(X)的關係。

$$-20\text{nm} \leq \lambda_1 - \lambda_2 \leq 20\text{nm} \cdots \cdots \text{式 (X)}$$



【指定代表圖】圖1

【代表圖之符號簡單說明】

10a:光電轉換元件

11:導電性膜(下部電極)

12:光電轉換膜

15:透明導電性膜（上部電極）

16A:電子阻擋膜

## 【發明說明書】

【中文發明名稱】光電轉換元件、攝像元件、光學感測器

【英文發明名稱】PHOTOELECTRIC CONVERSION ELEMENT, IMAGE SENSOR, OPTICAL SENSOR

### 【技術領域】

【0001】 本發明係有關一種光電轉換元件、攝像元件及光學感測器。

### 【先前技術】

【0002】 近年來，正在開發一種具有光電轉換膜之元件（例如，攝像元件）。

例如，在專利文獻 1 中，作為對全色區域的光適用時，連續驅動時的外部量子效率的變化抑制性優異且連續驅動時的暗電流的變化抑制性優異的光電轉換元件，揭示有“一種光電轉換元件，其依序具有導電性膜、光電轉換膜及透明導電性膜，前述光電轉換膜包含：第 1 化合物，在波長 500~620nm 處具有極大吸收波長、不具有離子性基且為由式(1)表示之化合物；及第 2 化合物，不同於前述第 1 化合物且在波長 450~550nm 處具有極大吸收波長”。

【0003】 [專利文獻 1]國際公開第 2021/141078 號

【0004】 本發明人使用上述專利文獻 1 中揭示之結構的光電轉換元件，評價對綠光（波長 490~600nm）的響應性（響應速度）之結果，發現無法滿足近年來更高的要求水準，需要進一步改良。

## 【發明內容】

【0005】 因此，本發明的課題在於提供一種對綠光的響應性優異的光電轉換元件。

又，本發明的課題還在於提供一種具有上述光電轉換元件之攝像元件及光學感測器。

【0006】 本發明人為了解決上述課題而進行深入研究之結果，發現了藉由以下構成能夠解決課題。

【0007】〔1〕一種光電轉換元件，其依序具有導電性膜、光電轉換膜及透明導電性膜，其中

上述光電轉換膜包含由後述式（1）表示之第 1 化合物和與上述第 1 化合物不同的化合物亦即第 2 化合物，

上述第 1 化合物的極大吸收波長  $\lambda_1$  及上述第 2 化合物的極大吸收波長  $\lambda_2$  滿足式（X）的關係。

$$-20\text{nm} \leq \lambda_1 - \lambda_2 \leq 20\text{nm} \cdots \cdots \text{式 (X)}$$

〔2〕如〔1〕所述之光電轉換元件，其中上述第 1 化合物為由後述式（2）表示之化合物。

〔3〕如〔2〕所述之光電轉換元件，其中在上述式（2）中， $X^1$  及  $X^4$  表示氮原子。

〔4〕如〔1〕至〔3〕之任一項所述之光電轉換元件，其中上述第 1 化合物為由後述式（3）表示之化合物。

〔5〕如〔1〕至〔4〕之任一項所述之光電轉換元件，其中

上述第 2 化合物為選自包括具有咪唑啉骨架之化合物、吡咯亞甲基硼錯合物、亞酞青化合物、方酸菁化合物及具有三芳基胺骨架之化合物之群組中的化合物。

〔6〕如〔1〕至〔5〕之任一項所述之光電轉換元件，其中上述第 2 化合物為由後述式（11）表示之化合物。

〔7〕如〔1〕至〔6〕之任一項所述之光電轉換元件，其中上述光電轉換膜進一步包含 n 型半導體材料，

上述光電轉換膜具有在混合了上述第 1 化合物、上述第 2 化合物及上述 n 型半導體材料之狀態下形成的本體異質結構。

〔8〕如〔7〕所述之光電轉換元件，其中

上述 n 型半導體材料包含選自包括富勒烯及其衍生物之群組中的富勒烯類。

〔9〕如〔1〕至〔8〕之任一項所述之光電轉換元件，其中

上述光電轉換膜進一步包含 n 型半導體材料及 p 型半導體材料，

上述光電轉換膜具有在混合了上述第 1 化合物、上述第 2 化合物、上述 n 型半導體材料及上述 p 型半導體材料之狀態下形成的本體異質結構。

〔10〕如〔9〕所述之光電轉換元件，其中

上述 n 型半導體材料包含選自包括富勒烯及其衍生物之群組中的富勒烯類。

〔11〕如〔9〕或〔10〕所述之光電轉換元件，其中

上述 p 型半導體材料在可見光區域內不具有吸收。

〔12〕如〔1〕至〔11〕之任一項所述之光電轉換元件，其中

在上述導電性膜與上述透明導電性膜之間，除了上述光電轉換膜以外還具有 1 種以上的中間層。

〔13〕一種攝像元件，其具有〔1〕至〔12〕之任一項所述之光電轉換元件。

〔14〕一種光學感測器，其具有〔1〕至〔12〕之任一項所述之光電轉換元件。

#### [發明效果]

【0008】 根據本發明，能夠提供一種對綠光的響應性優異的光電轉換元件。

又，亦能夠提供一種具有上述光電轉換元件之攝像元件及光學感測器。

#### 【圖式簡單說明】

【0009】 圖 1 係表示光電轉換元件的一結構例之剖面示意圖。

圖 2 係表示光電轉換膜的一結構例之剖面示意圖。

#### 【實施方式】

【0010】 以下，對本發明進行詳細說明。

有時根據本發明的代表性實施態樣，對以下記載之構成元素進行說明，但本發明並不限於此類實施態樣。

【0011】 以下，示出本說明書中各記載的含義。

【0012】 在本說明書中，只要沒有特別說明，則“取代基”可舉出下述取代基 W 中例示之基。

(取代基 W)

取代基 W 例如可舉出鹵素原子( 氟原子、氯原子、溴原子及碘原子等)、烷基( 包括環烷基、雙環烷基及三環烷基)、烯基( 包括環烯基及雙環烯基)、炔基、芳基、雜芳基( 亦可稱為雜環基。)、氰基、硝基、烷氧基、芳氧基、矽氧基、雜環氧基、醯氧基、胺甲醯氧基、烷氧基羰基氧基、芳氧基羰基氧基、二級或三級胺基( 包括苯胺基。)、烷硫基、芳硫基、雜環硫基、烷基或芳基亞磺醯基、烷基或芳基磺醯基、醯基、芳氧基羰基、烷氧基羰基、芳基或雜環偶氮基、醯亞胺基、膦基、氧膦基、氧膦基氧基、氧膦基胺基、膦醯基及矽基。又，上述各基在可能的情況下，可以進一步具有取代基( 例如，上述各基中的 1 個以上的基)。例如，亦包含可具有取代基的烷基作為取代基 W 的一形態。

又，取代基 W 具有碳原子時，取代基 W 所具有的碳數例如為 1~20。

取代基 W 所具有的除了氫原子以外的原子數例如為 1~30。

再者，從適當調節蒸鍍適性方面考慮，後述第 1 化合物、第 2 化合物、n 型半導體材料及/或 p 型半導體材料不具有作為取代基的羧基、羧基的鹽、磷酸基、磷酸基的鹽、磺酸基、磺酸基的鹽、羥基、SH 基、醯胺基、胺甲醯基、脲基、硼酸基(  $-B(OH)_2$  ) 及/或  $-NH_2$  亦較佳。

**【0013】** 在本說明書中，作為鹵素原子，例如，可舉出氟原子、氯原子、溴原子及碘原子。

**【0014】** 又，在本說明書中，只要沒有特別說明，則烷基的碳數為 1~20 為較佳，1~10 為更佳，1~6 為進一步較佳。

烷基可以為直鏈狀、支鏈狀及環狀中的任一種。

烷基例如可舉出甲基、乙基、正丙基、異丙基、正丁基、三級丁基、正己基及環戊基等。

又，烷基例如可以為環烷基、雙環烷基及三環烷基，作為部分結構可以具有該等環狀結構。

在可具有取代基的烷基中，烷基可具有的取代基並沒有特別限制，例如，可舉出取代基 W，芳基（較佳為碳數 6~18，更佳為碳數 6）、雜芳基（較佳為碳數 5~18，更佳為碳數 5~6）或鹵素原子（較佳為氟原子或氯原子）為較佳。

又，在本說明書中，伸烷基可舉出從上述烷基中去除一個氫原子而成為二價基之伸烷基。

**【0015】** 在本說明書中，只要沒有特別說明，則烷氧基中之烷基部分為上述烷基為較佳。烷硫基中的烷基部分為上述烷基為較佳。

在可具有取代基的烷氧基中，烷氧基可具有的取代基可舉出與可具有取代基的烷基中的取代基相同的例子。在可具有取代基的烷硫基中，烷硫基可具有的取代基可舉出與可具有取代基的烷基中的取代基相同的例子。

**【0016】** 在本說明書中，只要沒有特別說明，則烯基可以為直鏈狀、支鏈狀及環狀中的任一種。上述烯基的碳數為 2~20 為較佳。在可具有取代基的烯基中，烯基可具有的取代基可舉出與可具有取代基的烷基中的取代基相同的例子。

又，在本說明書中，伸烯基可舉出從上述烯基中去除一個氫原子而成為二價基之伸烯基。

在本說明書中，只要沒有特別說明，則炔基可以為直鏈狀、支鏈狀及環

狀中的任一種。上述炔基的碳數為 2~20 為較佳。在可具有取代基的炔基中，炔基可具有的取代基可舉出與可具有取代基的烷基中的取代基相同的例子。

又，在本說明書中，伸炔基可舉出從上述炔基中去除一個氫原子而成為二價基之伸炔基。

**【0017】** 在本說明書中，只要沒有特別說明，則芳基為環員數為 6~18 的芳基為較佳。

芳基可以為單環，亦可以為多環（例如 2~6 環）。

芳基例如為苯基、萘基、蒽基或菲基為較佳。

在可具有取代基的芳基中，芳基可具有的取代基並沒有特別限制，例如可舉出取代基 W，可具有取代基的烷基（較佳為碳數 1~10）為較佳，甲基為更佳。

再者，在可具有取代基的芳基具有複數個取代基時，複數個取代基彼此可以相互鍵結而形成環。如此，在複數個取代基彼此相互鍵結而形成環時，例如，可具有取代基的芳基可以整體形成可進一步具有取代基的萸基（9,9-二甲基萸基等）。

又，在本說明書中，伸芳基可舉出從上述芳基的環員原子中去除一個氫原子而成為二價基之伸芳基。

**【0018】** 在本說明書中，只要沒有特別說明，則雜芳基為具有包含氮原子、硫原子、氧原子、硒原子、碲原子、磷原子、矽原子和/或硼原子等雜原子之單環或多環環結構之雜芳基為較佳。

上述雜芳基的環員原子中的碳數並沒有特別限制，3~18 為較佳，3~



上述芳香環基為  $m$  價 ( $m$  為 2 以上的整數, 2~5 為較佳) 時, 作為芳香環基, 例如, 可舉出從上述芳基或雜芳基的環員原子中去除 ( $m-1$ ) 個氫原子而成之基。

**【0020】** 在本說明書中, 只要沒有特別說明, 則可具有取代基的矽基例如可舉出由  $-\text{Si}(\text{R}^{\text{S}1})(\text{R}^{\text{S}2})(\text{R}^{\text{S}3})$  表示之基。 $\text{R}^{\text{S}1}$ 、 $\text{R}^{\text{S}2}$  及  $\text{R}^{\text{S}3}$  分別獨立地表示氫原子或取代基, 表示可具有取代基的烷基、可具有取代基的烷氧基、可具有取代基的烷硫基、可具有取代基的芳基或可具有取代基的雜芳基為較佳。

**【0021】** 本說明書中表述之二價基 (例如,  $-\text{CO}-\text{O}-$ ) 的鍵結方向只要沒有特別說明, 則並沒有限制。例如, 由構成為“ $\text{X}-\text{Y}-\text{Z}$ ”之通式表示之化合物中的  $\text{Y}$  為  $-\text{CO}-\text{O}-$  時, 上述化合物可以為“ $\text{X}-\text{O}-\text{CO}-\text{Z}$ ”, 亦可以為“ $\text{X}-\text{CO}-\text{O}-\text{Z}$ ”。

**【0022】** 只要沒有特別說明, 則本說明書中記載之化合物亦可以包含結構異構物、光學異構物及同位素。又, 結構異構物、光學異構物及同位素可以單獨包含 1 種或 2 種以上。

在本說明書中, 關於可具有幾何異構物 (順式-反式異構物) 之化合物, 為了便於說明, 有時表示上述化合物之通式或結構式僅以順式體及反式體中的任一種形態記載。即使在該種情況下, 只要沒有特別說明, 則上述化合物的形態並不限定於順式體及反式體中的任一種, 上述化合物亦可以為順式體及反式體中的任一種形態。

**【0023】** 又, 在本說明書中, 使用“ $\sim$ ”表示之數值範圍係指將記載於“ $\sim$ ”前後之數值作為下限值及上限值而包括之範圍。

【0024】 在本說明書中，氫原子可以為氘原子（通常的氫原子）及氚原子（雙氫原子等）。

【0025】 在本說明書中，各化合物（第 1 化合物及第 2 化合物等）的極大吸收波長能夠根據使用將化合物溶解於氯仿中而得之溶液來測定之吸收光譜來計算。上述溶液中的化合物的濃度被調整至極大吸收波長的吸光度成為 0.5~1 的程度的濃度。又，上述極大吸收波長位於可見光區域（波長 400~700nm），觀察到複數個極大吸收波長時，將吸光度最高的波長作為極大吸收波長。其中，化合物不溶於氯仿時，將化合物蒸鍍並使用成為膜狀態之化合物測定而得之值作為化合物的極大吸收波長。

【0026】 〔光電轉換元件〕

以下，對本發明的光電轉換元件進行詳細說明。

本發明的光電轉換元件依序具有導電性膜、光電轉換膜及透明導電性膜，其中，

光電轉換膜包含由式（1）表示之第 1 化合物和與第 1 化合物不同的第 2 化合物，

第 1 化合物的極大吸收波長  $\lambda_1$  及第 2 化合物的極大吸收波長  $\lambda_2$  滿足後述式（X）的關係。

本發明的光電轉換元件藉由採用上述結構，能夠解決本發明的課題之機制雖尚不明確，但本發明人推測為如下。

再者，藉由下述推測，可獲得效果之機制並沒有限制。換言之，即使藉由下述以外的機制獲得效果的情況亦包括在本發明的範圍內。

在專利文獻 1 中記載之光電轉換元件藉由包含在波長 500~620nm 處

具有極大吸收波長之第 1 化合物和在波長 450~550nm 處具有極大吸收波長之第 2 化合物，改善了針對廣範圍的可見光區域（全色區域）的光之元件性能（例如，外部量子效率等）。因此，作為全色用途的性能雖優異，但作為本發明的課題之針對綠光的元件性能（尤其，響應性）無法獲得近年來所要求之更高水準的性能。

**【0027】** 在本發明的光電轉換元件中，藉由混合極大吸收波長相近之 2 種色素，改善對綠光的元件性能。通常，混合 2 種以上的色素時的吸收光譜的形狀成為將各色素的光譜進行平均化而得之類的寬光譜，往往難以獲得銳利的光譜。又，僅混合 2 種色素時，往往難以獲得對綠光的選擇性元件性能。

另一方面，令人驚訝的是，在本發明的實施形態中，確認到藉由混合作為特定色素的第 1 化合物和極大吸收波長與第 1 化合物相近的第 2 化合物，在光電轉換元件中對藍光的吸收減少。詳細機理雖尚不明確，但認為由於第 1 化合物具有非對稱結構而能夠抑制色素彼此的凝聚，並能夠實現藍光的吸收抑制和對綠光的選擇性元件性能的提高（例如，對綠光的響應性等）。

以下，將對綠光的響應性（尤其，對波長 560nm 的光的響應性）更優異的情況亦簡稱為“本發明的效果更優異”。

又，以下，將第 1 化合物和第 2 化合物亦統稱為特定化合物。

**【0028】** 在圖 1 中示出本發明的光電轉換元件的一實施形態的剖面示意圖。

圖 1 所示之光電轉換元件 10a 具有依序積層了作為下部電極發揮作用之導電性膜（以下，亦記載為下部電極）11、電子阻擋膜 16A、光電轉換膜

12、作為上部電極發揮作用之透明導電性膜（以下，亦記載為上部電極）15之結構。

【0029】 上述光電轉換膜 12 包含上述第 1 化合物及第 2 化合物。

上述光電轉換膜 12 可以為由一個層構成之單層型，亦可以為由複數個層構成之積層型。

上述光電轉換膜 12 為單層型時，例如，上述光電轉換膜 12 可以為在混合了第 1 化合物和第 2 化合物之狀態下形成的混合層。

【0030】 在圖 2 中示出另一光電轉換元件的結構例。圖 2 所示之光電轉換元件 10b 具有在下部電極 11 上依序積層了電子阻擋膜 16A、光電轉換膜 12、電洞阻擋膜 16B 及上部電極 15 之結構。再者，圖 1 及圖 2 中的電子阻擋膜 16A、光電轉換膜 12 及電洞阻擋膜 16B 的積層順序亦可以根據用途及特性而適當變更。

圖 2 中的光電轉換膜 12 可以為由一個層構成之單層型光電轉換膜 12，亦可以為由複數個層構成之積層型光電轉換膜 12。

【0031】 在光電轉換元件 10a（或 10b）中，光經由上部電極 15 入射到光電轉換膜 12 為較佳。

又，使用光電轉換元件 10a（或 10b）時，能夠施加電壓。此時，下部電極 11 與上部電極 15 構成一對電極，並且在該一對電極之間施加  $1 \times 10^{-5} \sim 1 \times 10^7 \text{V/cm}$  的電壓為較佳。從性能及耗電量方面考慮，施加電壓為  $1 \times 10^{-4} \sim 1 \times 10^7 \text{V/cm}$  為更佳， $1 \times 10^{-3} \sim 5 \times 10^6 \text{V/cm}$  為進一步較佳。

再者，關於電壓施加方法，以在圖 1 及圖 2 中電子阻擋膜 16A 側成為陰極且光電轉換膜 12 側成為陽極的方式施加為較佳。在將光電轉換元件 10a

(或 10b) 用作光學感測器的情況或組裝到攝像元件的情況下，亦能夠藉由相同的方法施加電壓。

如在後段進行詳細說明，光電轉換元件 10a (或 10b) 能夠較佳地適用於攝像元件用途中。

以下，對構成本發明的光電轉換元件之各層的形態進行詳細說明。

【0032】 以下，對構成本發明的光電轉換元件之各層的形態進行詳細說明。

【0033】 <光電轉換膜>

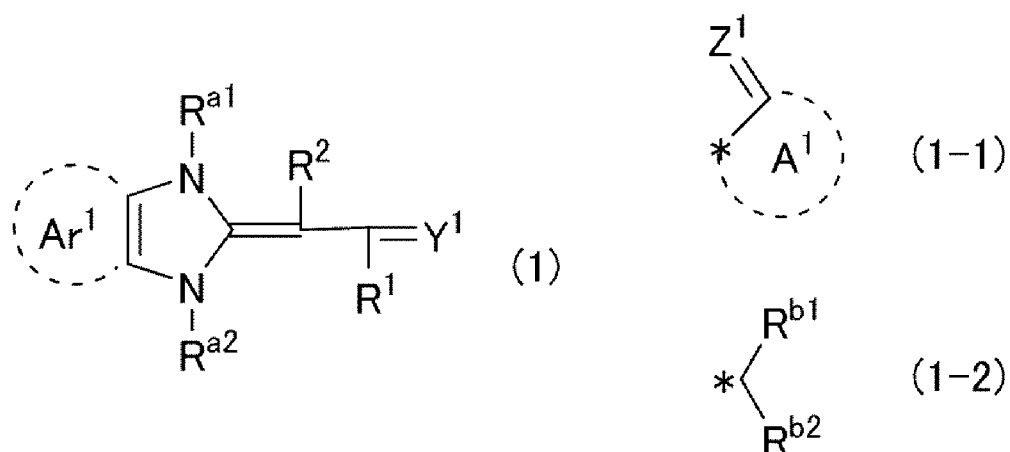
如上所述，光電轉換膜為包含第 1 化合物及第 2 化合物之膜。

【0034】 (第 1 化合物)

對第 1 化合物進行說明。

第 1 化合物為由式 (1) 表示之化合物，第 1 化合物的極大吸收波長  $\lambda_1$  及後述第 2 化合物的極大吸收波長  $\lambda_2$  滿足後述式 (X) 的關係。

【0035】 [化學式 1]



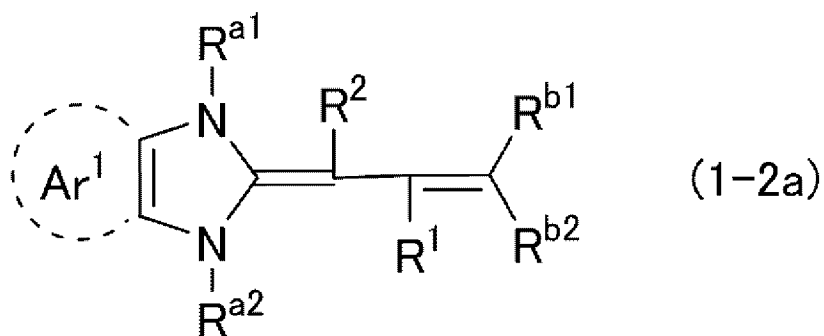
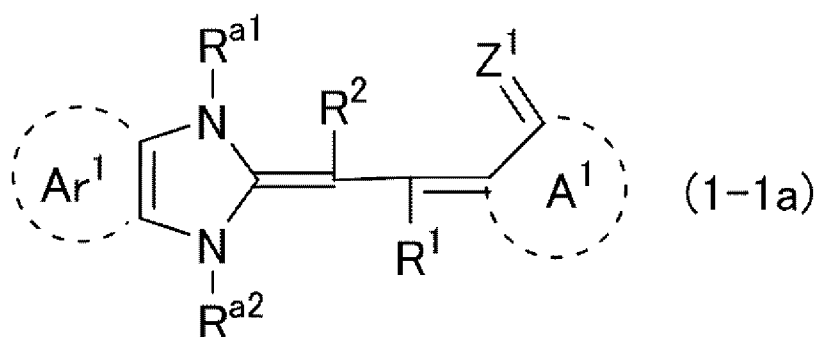
【0036】 式 (1) 中， $Y^1$  表示由式 (1-1) 表示之基或由式 (1-2) 表示之基。其中，從本發明的效果更優異的方面考慮，由式 (1-1) 表示之基為

較佳。式(1-1)及式(1-2)中的\*表示鍵結位置，標註有\*之碳原子與鍵結於 $R^1$ 之碳原子形成雙鍵。

亦即，由式(1)表示之化合物為由式(1-1a)表示之化合物或由式(1-2a)表示之化合物。

再者，式(1-1a)及式(1-2a)中使用的符號與式(1)中使用的對應符號的含義相同。

【0037】 [化學式 2]



【0038】 式(1-1)中， $Z^1$ 表示氧原子、硫原子、 $=NR^{Z1}$ 或 $=CR^{Z2}R^{Z3}$ 。

$R^{Z1}$ 表示氫原子或取代基。 $R^{Z2}$ 及 $R^{Z3}$ 分別獨立地表示氰基或 $-COOR^{Z4}$ 。 $R^{Z4}$ 表示可具有取代基的烷基、可具有取代基的芳基或可具有取代基的雜芳基。

$Z^1$ 為氧原子為較佳。

【0039】 式(1-1)中， $A^1$ 表示包含至少2個碳原子且可具有取代基

的環。再者，2 個碳原子表示式 (1-1) 中明示的與  $Z^1$  鍵結之碳原子、與鍵結於上述  $Z^1$  之碳原子相鄰之式 (1-1) 中明示的碳原子 (與鍵結於  $R^1$  之碳原子以雙鍵鍵結之碳原子)，任何碳原子均為構成  $A^1$  之原子。

又，上述環中，構成環之碳原子可以被其他羰基碳 ( $>C=O$ ) 和/或其他硫代羰基碳 ( $>C=S$ ) 取代。再者，此處提及之其他羰基碳 ( $>C=O$ ) 及其他硫代羰基碳 ( $>C=S$ ) 表示構成環之碳原子中以與  $Z^1$  鍵結之碳原子以外的碳原子作為構成要件之羰基碳及硫代羰基碳。

**【0040】**  $A^1$  的碳數為 3~30 為較佳，3~20 為更佳，3~15 為進一步較佳。再者，上述碳數為包含式中明示的 2 個碳原子之數量。

$A^1$  可以具有雜原子，例如，可舉出氮原子、硫原子、氧原子、硒原子、碲原子、磷原子、矽原子及硼原子。

$A^1$  中的雜原子數為 0~10 為較佳，0~5 為更佳，0~2 為進一步較佳。再者，上述雜原子數為構成由  $A^1$  表示之環的碳原子被羰基碳 ( $>C=O$ ) 或硫代羰基碳 ( $>C=S$ ) 取代而導入到環中之雜原子 (再者，此處提及之羰基碳 ( $>C=O$ ) 表示包括式 (1-1) 中明示的羰基碳) 的數量，及不包括  $A^1$  的取代基所具有的雜原子數之數量。

$A^1$  可以具有取代基，作為取代基，鹵素原子 (較佳為氯原子)、烷基 (可以為直鏈狀、支鏈狀及環狀中的任一種。碳數為 1~10 為較佳，1~6 為更佳。)、芳基 (碳數為 6~18 為較佳，6~12 為更佳。)、雜芳基 (碳數為 5~18 為較佳，5~6 為更佳。)、或矽基 (例如，可舉出烷基矽基。烷基矽基中的烷基可以為直鏈狀、支鏈狀及環狀中的任一種。又，其碳數為 1~4 為較佳，1 為更佳。) 為較佳。

A<sup>1</sup> 可以顯示出芳香族性，亦可以不顯示芳香族性。

A<sup>1</sup> 可以為單環結構，亦可以為縮環結構，5 員環、6 員環或包含 5 員環及 6 員環中的至少任一個之縮環為較佳。形成上述縮合環之環的數量為 1~4 個為較佳，1~3 個為更佳。

**【0041】** 作為由 A<sup>1</sup> 表示之環，通常，用作酸性核（具體而言，部花青色素中的酸性核）之環為較佳，作為其具體例，可舉出以下。

(a) 1,3-二羰基核：例如，1,3-茛烷二酮核、1,3-環己烷二酮、5,5-二甲基-1,3-環己烷二酮及 1,3-二噁烷-4,6-二酮等。

(b) 吡唑啉酮核：例如，1-苯基-2-吡唑啉-5-酮、3-甲基-1-苯基-2-吡唑啉-5-酮、3-氰基-1-苯基-2-吡唑啉-5-酮及 1-(2-苯并噻唑)-3-甲基-2-吡唑啉-5-酮等。

(c) 異噁唑啉酮核：例如，3-苯基-2-異噁唑啉-5-酮及 3-甲基-2-異噁唑啉-5-酮等。

(d) 氧基吡啶核：例如，1-烷基-2,3-二氫-2-氧基吡啶等。

(e) 2,4,6-三氧代六氫嘧啶核：例如，巴比妥酸或 2-硫巴比妥酸及其衍生物等。作為衍生物，例如，可舉出 1-甲基、1-乙基等 1-烷基體、1,3-二甲基、1,3-二乙基及 1,3-二丁基等 1,3-二烷基體、1,3-二苯基、1,3-二（對氯苯基）及 1,3-二（對乙氧基羰基苯基）等 1,3-二芳基體、1-乙基-3-苯基等 1-烷基-1-芳基體以及 1,3-二（2-吡啶基）等 1,3-二雜芳基體等。

(f) 2-硫代-2,4-噻唑啉二酮核：例如，繞丹寧及其衍生物等。作為衍生物，例如，可舉出 3-甲基繞丹寧、3-乙基繞丹寧及 3-烯丙基繞丹寧等 3-烷基繞丹寧、3-苯基繞丹寧等 3-芳基繞丹寧以及 3-(2-吡啶基)繞丹寧等 3-雜

芳基繞丹寧等。

(g) 2-硫代-2,4-噁唑啉二酮核 (2-硫代-2,4-(3H,5H)-噁唑啉二酮核)：

例如，3-乙基-2-硫代-2,4-噁唑啉二酮等。

(h) 硫茛酮核：例如，3(2H)-硫茛酮-1,1-二氧化物等。

(i) 2-硫代-2,5-噻唑啉二酮核：例如，3-乙基-2-硫代-2,5-噻唑啉二酮等。

(j) 2,4-噻唑啉二酮核：例如，2,4-噻唑啉二酮、3-乙基-2,4-噻唑啉二酮及 3-苯基-2,4-噻唑啉二酮等。

(k) 噻唑啉-4-酮核：例如，4-噻唑啉酮及 2-乙基-4-噻唑啉酮等。

(l) 2,4-咪唑啉二酮 (乙內醯脲) 核：例如，2,4-咪唑啉二酮及 3-乙基-2,4-咪唑啉二酮等。

(m) 2-硫代-2,4-咪唑啉二酮 (2-硫乙內醯脲) 核：例如，2-硫代-2,4-咪唑啉二酮及 3-乙基-2-硫代-2,4-咪唑啉二酮等。

(n) 咪唑啉-5-酮核：例如，2-丙基巯基-2-咪唑啉-5-酮等。

(o) 3,5-吡唑啉二酮核：例如，1,2-二苯基-3,5-吡唑啉二酮及 1,2-二甲基-3,5-吡唑啉二酮等。

(p) 苯并噻吩-3(2H)-酮核：例如，苯并噻吩-3(2H)-酮、氧代苯并噻吩-3(2H)-酮及二氧代苯并噻吩-3(2H)-酮等。

(q) 二氫茛酮核：例如，1-二氫茛酮、3-苯基-1-二氫茛酮、3-甲基-1-二氫茛酮、3,3-二苯基-1-二氫茛酮、3-(二氰基亞甲基)環戊烷-1-酮及 3,3-二甲基-1-二氫茛酮等。

(r) 苯并呋喃-3-(2H)-酮核：例如，苯并呋喃-3-(2H)-酮等。

(s) 2,2-二氫茛-1,3-二酮核等。

(t) 吡啶酮核：例如，3-氰基-1-乙基-6-羥基-4-甲基-2-吡啶酮、3-氰基-1-甲基-6-羥基-4-甲基-2-吡啶酮、3-氰基-1-乙基-6-羥基-4-三氟甲基-2-吡啶酮及 3-氰基-1-苯基-6-羥基-4-三氟甲基-2-吡啶酮等。

【0042】  $A^1$  為具有由式 (AW) 表示之基之環為較佳，具有由後述式 (AW1) ~ 式 (AW6) 中的任一個表示之基之環為更佳。

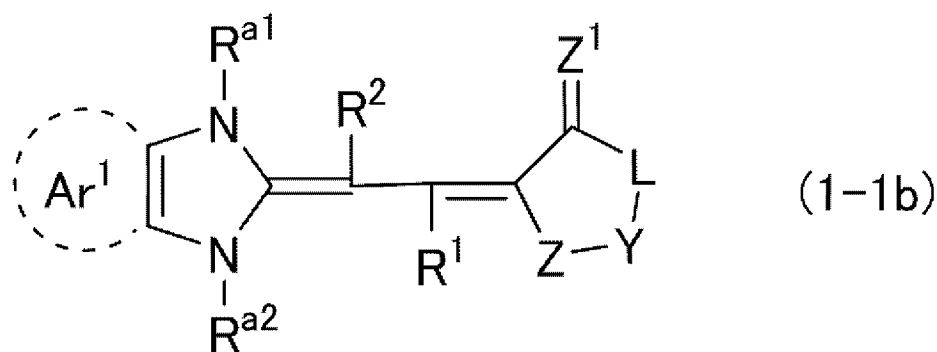
【0043】 \*1-L-Y-Z-\*2 (AW)

【0044】 式 (AW) 中，\*1 表示與式 (1-1) (或式 (1-1a)) 中明示的  $-C(=Z^1)-$  中碳原子的鍵結位置。\*2 表示與式 (1-1) 中的標註有\*之碳原子的鍵結位置 (換言之，\*2 表示與式 (1) 中  $R^1$  直接鍵結之碳原子一同形成雙鍵之碳原子的鍵結位置)。

亦即， $A^1$  為具有由式 (AW) 表示之基之環時， $Y^1$  為由式 (1-1) 表示之基亦即由式 (1) 表示之化合物 (或由式 (1-1a) 表示之化合物) 為由式 (1-1b) 表示之化合物。

再者，式 (1-1b) 中使用的符號與式 (1) 中使用的對應符號的含義相同。

【0045】 [化學式 3]



【0046】 式 (AW) 中，L 表示單鍵或  $-NR^L-$ 。

$R^L$  表示氫原子或取代基。其中， $R^L$  為烷基、芳基或雜芳基為較佳，烷

基或芳基為較佳。

上述烷基及上述芳基可以具有取代基。作為上述芳基可具有的取代基，烷基（例如，碳數 1~3）為較佳。

**【0047】** Y 表示 $-\text{CR}^{\text{Y1}}=\text{CR}^{\text{Y2}}-$ 、 $-\text{CS}-\text{NR}^{\text{Y3}}-$ 、 $-\text{CO}-$ 、 $-\text{CS}-$ 、 $-\text{NR}^{\text{Y4}}-$ 、 $-\text{N}=\text{CR}^{\text{Y5}}-$ 、 $-\text{CO}-\text{NR}^{\text{Y6}}$ -或可具有取代基的 1,8-萘二基，其中 $-\text{CR}^{\text{Y1}}=\text{CR}^{\text{Y2}}-$ 、 $-\text{CO}-$ 或 $-\text{N}=\text{CR}^{\text{Y5}}-$ 為較佳。

$\text{R}^{\text{Y1}}\sim\text{R}^{\text{Y6}}$  分別獨立地表示氫原子或取代基。其中， $\text{R}^{\text{Y1}}\sim\text{R}^{\text{Y6}}$  分別獨立地為烷基、氰基、芳基或雜芳基為較佳。

又，Y 表示 $-\text{CR}^{\text{Y1}}=\text{CR}^{\text{Y2}}$ -時， $\text{R}^{\text{Y1}}$  與  $\text{R}^{\text{Y2}}$  可以相互鍵結而形成環。作為上述環，例如，可舉出芳香環，具體而言，可舉出苯環、萘環、蔥環及吡啶環。上述環可以進一步具有取代基，而且此類取代基彼此可以相互鍵結而形成環。

**【0048】** Z 表示單鍵、 $-\text{CO}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{SO}_2-$ 、 $-\text{CR}^{\text{ZA}}=\text{CR}^{\text{ZB}}$ -或 $-\text{C}(=\text{CR}^{\text{ZC}}\text{R}^{\text{ZD}})-$ ，其中 $-\text{CO}-$ 、 $-\text{CR}^{\text{ZA}}=\text{CR}^{\text{ZB}}$ -或 $-\text{C}(=\text{CR}^{\text{ZC}}\text{R}^{\text{ZD}})-$ 為較佳。

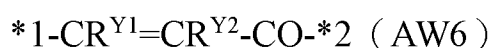
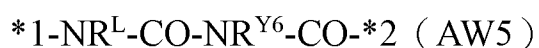
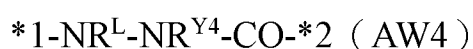
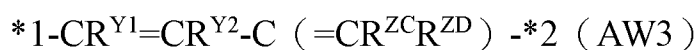
$\text{R}^{\text{ZA}}\sim\text{R}^{\text{ZD}}$  分別獨立地表示氫原子或取代基。

$\text{R}^{\text{ZA}}\sim\text{R}^{\text{ZD}}$  分別獨立地為烷基、氰基、芳基或雜芳基為較佳。上述烷基可以具有取代基，例如，成為三氟甲基之類的具有鹵素原子作為取代基之烷基（例如，碳數 1~3）亦較佳。

**【0049】** 作為由式 (AW) 表示之基的更佳形態，例如，可舉出由下述式 (AW1)~式 (AW6) 中的任一個表示之基。式 (AW1)~式 (AW6) 中的各基的結構如以上關於由式 (AW) 表示之基所示。

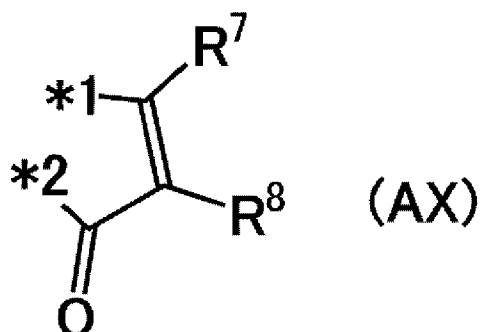
由式 (AW1)~式 (AW6) 中的任一個表示之基為由式 (AW1)~式

(AW3) 中的任一個表示之基為較佳。

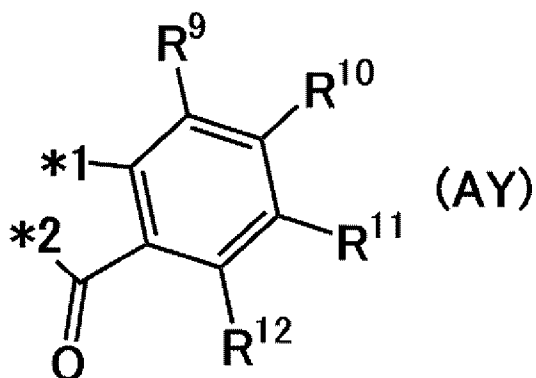


【0051】  $A^1$  具有由式 (AX) 表示之基亦較佳。由式 (AX) 表示之基為由式 (AY) 表示之基為更佳。在式 (AX) 及式 (AY) 中，\*1 及 \*2 分別與式 (AW) 中的 \*1 及 \*2 的含義相同。

【0052】 [化學式 4]



【0053】 [化學式 5]



【0054】 式 (AX) 中， $R^7$  及  $R^8$  分別獨立地表示氫原子或取代基。

$R^7$  與  $R^8$  相互鍵結而形成環為較佳，作為  $R^7$  與  $R^8$  相互鍵結而形成之環，例如，可舉出芳香環，具體而言，可舉出苯環、嗒咩環、吡咩環及吡啶環。

$R^7$  與  $R^8$  相互鍵結而形成之環進一步具有取代基亦較佳。作為取代基，鹵素原子為較佳，氯原子為更佳。

又， $R^7$  與  $R^8$  相互鍵結而形成之環所具有之取代基可以進一步相互鍵結而形成環（苯環等）。

**【0055】** 式 (AY) 中，\*1 及 \*2 分別與式 (AX) 中的 \*1 及 \*2 的含義相同。

式 (AY) 中， $R^9 \sim R^{12}$  分別獨立地表示氫原子或取代基。其中， $R^9 \sim R^{12}$  分別獨立地為氫原子或鹵素原子為較佳，氫原子或氯原子為更佳。

$R^9$  與  $R^{10}$ 、 $R^{10}$  與  $R^{11}$  及  $R^{11}$  與  $R^{12}$  可以相互鍵結而形成環。作為上述環，可舉出芳香環，具體而言，苯環為較佳。

其中， $R^{10}$  與  $R^{11}$  相互鍵結而形成環為較佳。

再者，上述環可以進一步由取代基取代。此類環所具有之取代基彼此可以相互鍵結而進一步形成環。又，在可能的情況下，上述環所具有之取代基與  $R^9 \sim R^{12}$  中的 1 個以上可以相互鍵結而進一步形成 1 個以上的環。

再者，環所具有之取代基彼此相互鍵結而形成之基可以為單鍵。

**【0056】** 式 (1-2) 中， $R^{b1}$  及  $R^{b2}$  分別獨立地表示羧基或  $-COOR^{b3}$ 。

$R^{b3}$  表示可具有取代基的烷基、可具有取代基的芳基（苯基等）或可具有取代基的雜芳基。

**【0057】** 式 (1) 中， $R^1$  及  $R^2$  分別獨立地表示氫原子或取代基。 $R^1$  及  $R^2$  為氫原子為較佳。

$R^{a1}$  及  $R^{a2}$  分別獨立地表示可具有取代基的芳基、 $-C(R^{L1})(R^{L2})(R^{L3})$  或可具有取代基的雜芳基。其中， $R^{a1}$  及  $R^{a2}$  表示互不相同的基。

上述芳基為苯基、萘基或蒽基為較佳，苯基或萘基為更佳。

上述芳基為苯基時，苯基具有取代基為較佳，作為取代基，分別獨立地為烷基（較佳為碳數 1~3）為較佳。

上述芳基為苯基時，苯基所具有之取代基數為 1~5 為較佳，2 或 3 為更佳。

**【0058】**  $-C(R^{L1})(R^{L2})(R^{L3})$  中的  $R^{L1} \sim R^{L3}$  分別獨立地表示可具有取代基的烷基、可具有取代基的芳基、可具有取代基的雜芳基或氫原子， $R^{L1} \sim R^{L3}$  中的 2 個以上分別獨立地表示可具有取代基的烷基、可具有取代基的芳基或可具有取代基的雜芳基。

由  $R^{L1} \sim R^{L3}$  表示之可具有取代基的烷基、可具有取代基的芳基及可具有取代基的雜芳基可以相互鍵結而形成環。

**【0059】** 作為上述環，例如，可舉出可具有取代基的烷基彼此相互鍵結而形成之環。可具有取代基的芳基（或可具有取代基的雜芳基）中的取代基與可具有取代基的烷基可以相互鍵結而形成環。

可具有取代基的芳基（或可具有取代基的雜芳基）中的取代基與可具有取代基的另一芳基（或可具有取代基的雜芳基）中的取代基可以相互鍵結而形成環。

如此形成的環所具有之取代基可以與可具有取代基的另一烷基、可具有取代基的另一芳基中的取代基或可具有取代基的另一雜芳基中的取代基鍵結而進一步形成環。

再者，如上所述，取代基與取代基（例如，可具有取代基的芳基中的取代基與可具有取代基的雜芳基中的取代基）相互鍵結而形成之基可以為單鍵。

再者，由  $R^{L1} \sim R^{L3}$  表示之可具有取代基的烷基、可具有取代基的芳基及可具有取代基的雜芳基相互鍵結而形成環時， $-C(R^{L1})(R^{L2})(R^{L3})$  為芳基及雜芳基以外者為較佳。

**【0060】** 由  $R^{L1} \sim R^{L3}$  表示之烷基可以為直鏈狀、支鏈狀及環狀中的任一種。由  $R^{L1} \sim R^{L3}$  表示之烷基中，2 個烷基彼此可以相互鍵結而形成環。

例如，由  $R^{L1}$  表示之烷基與由  $R^{L2}$  表示之烷基可以相互鍵結而形成環。而且，由  $R^{L1}$  表示之烷基與由  $R^{L2}$  表示之烷基相互鍵結而形成之環（單環的環烷環等）所具有之取代基與由  $R^{L3}$  表示之烷基可以相互鍵結而形成多環（多環的環烷環等）。

亦即， $-C(R^{L1})(R^{L2})(R^{L3})$  可以為可具有取代基的環烷基（較佳為環己基）。上述環烷基的環員數為 3~12 為較佳，5~8 為更佳，6 為進一步較佳。

上述環烷基可以為單環（環己基等），亦可以為多環（1-金剛烷基等）。

上述環烷基具有取代基為較佳。上述環烷基具有取代基時，與通式(1)中明示的直接鍵結於氮原子之碳原子（亦即，“ $-C(R^{L1})(R^{L2})(R^{L3})$ ”中明示的“C”原子）相鄰之碳原子具有取代基為較佳。

作為上述環烷基可具有的取代基，例如，可舉出烷基（較佳為碳數 1~3）。

上述環烷基所具有之取代基彼此可以相互鍵結而形成環，取代基彼此

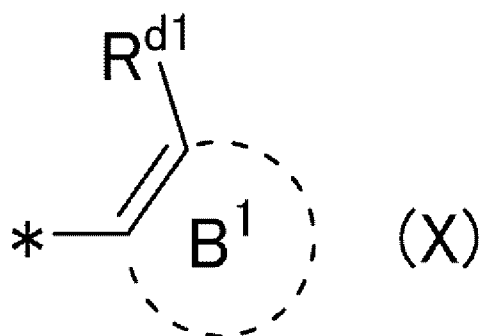
相互鍵結而形成之環可以為環烷環以外者。

【0061】  $R^{a1}$  及  $R^{a2}$  分別獨立地為由式(X)表示之基、 $-C(R^{L1})(R^{L2})(R^{L3})$ 、可具有取代基的多環芳基或可具有取代基的多環雜芳基為較佳，由式(X)表示之基、 $-C(R^{L1})(R^{L2})(R^{L3})$  或可具有取代基的多環芳基為更佳。

由式(X)表示之基為由後述式(Z)表示之基為較佳，由後述式(ZB)表示之基為更佳。

以下示出由式(X)表示之基。\*表示鍵結位置。 $B^1$ 的芳香環與式(1)中明示的氮原子直接鍵結。

【0062】 [化學式 6]



【0063】 式(X)中， $B^1$ 表示 $R^{d1}$ 以外的可具有取代基的單環的芳香環。

$R^{d1}$ 表示烷基、矽基、烷氧基、烷硫基、氰基、鹵素原子、芳基、雜芳基、烯基或炔基。

由 $R^{d1}$ 表示之各基在可能的情況下可以進一步具有取代基。取代基的定義與上述取代基W的含義相同。作為取代基，例如，可舉出烷基、芳基、雜芳基、矽基、鹵素原子及氰基等。 $R^{d1}$ 所具有之取代基與 $B^1$ 所具有之取代基可以相互鍵結而形成非芳香環。

作為上述單環的芳香環，可舉出單環的芳香族烴環及單環的芳香族雜環。作為芳香族烴環，例如，可舉出苯環。作為芳香族雜環，例如，可舉出吡咯環、呋喃環、噻吩環、咪唑環及嘔唑環。

其中，從光電轉換元件的耐熱性更加優異方面考慮，芳香族烴環為較佳，苯環為更佳。

**【0064】** 作為由  $R^{d1}$  表示之烷基的碳數，1~12 為較佳，1~6 為更佳，1~3 為進一步較佳。

又，上述烷基可以為  $-CH(R^{d3})(R^{d4})$  或  $-C(R^{d3})(R^{d4})(R^{d5})$ 。 $R^{d3} \sim R^{d5}$  分別獨立地表示芳基、烷基（例如，碳數 1~3）或雜芳基。

**【0065】** 作為由  $R^{d1}$  表示之矽基，例如，可舉出由  $-Si(R^p)(R^q)(R^r)$  表示之基。 $R^p \sim R^r$  分別獨立地表示氫原子或取代基。作為由  $R^p \sim R^r$  表示之取代基，例如，可舉出烷基（可以為直鏈狀、支鏈狀及環狀中的任一種。碳數為 1~4 為較佳。）、芳基及雜芳基。該等基可以進一步具有取代基。

作為由  $R^{d1}$  表示之矽基的碳數，1~12 為較佳，1~6 為更佳，3 為進一步較佳。

**【0066】** 作為由  $R^{d1}$  表示之烷氧基的碳數，1~12 為較佳，1~6 為更佳，1~3 為進一步較佳。

作為由  $R^{d1}$  表示之烷硫基的碳數，1~12 為較佳，1~6 為更佳，1~3 為進一步較佳。

作為由  $R^{d1}$  表示之鹵素原子，可舉出氟原子、碘原子、溴原子及氯原子等。

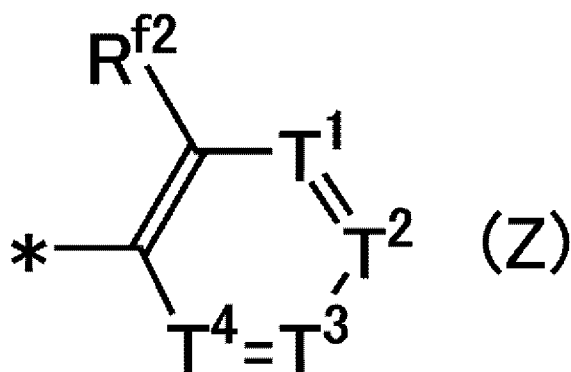
作為由  $R^{d1}$  表示之烯基的碳數，2~12 為較佳，2~6 為更佳，2~3 為

進一步較佳。

作為由  $R^{d1}$  表示之炔基的碳數，2~12 為較佳，2~6 為更佳，2~3 為進一步較佳。

【0067】 由上述式 (X) 表示之基為由式 (Z) 表示之基為較佳。

【0068】 [化學式 7]



【0069】 式 (Z) 中， $R^{f2}$  表示烷基、矽基、烷氧基、烷硫基、氰基、鹵素原子、芳基、雜芳基、烯基或炔基。 $R^{f2}$  與式 (X) 中的  $R^{d1}$  的含義相同，較佳條件亦相同。

【0070】 式 (Z) 中， $T^1 \sim T^4$  分別獨立地表示  $-CR^{e12}=$  或氮原子 ( $=N-$ )。 $R^{e12}$  表示氫原子或取代基。在式 (Z) 中存在複數個  $R^{e12}$  時， $R^{e12}$  可以彼此相同或互不相同。又， $R^{e12}$  及  $R^{f2}$  可以相互鍵結而形成非芳香環。

【0071】 “ $T^1 \sim T^4$  中的至少 1 個表示  $-CR^{e12}=$  且  $R^{e12}$  的至少 1 個表示取代基”為較佳，“至少  $T^4$  表示  $-CR^{e12}=$  且  $R^{e12}$  表示烷基、芳基或雜芳基”為更佳。又，亦可以為“至少  $T^4$  表示  $-CR^{e12}=$  且  $R^{e12}$  為  $-CH(R^{d3})(R^{d4})$  或  $-C(R^{d3})(R^{d4})(R^{d5})$ ”之形態。

上述  $-CH(R^{d3})(R^{d4})$  及上述  $-C(R^{d3})(R^{d4})(R^{d5})$  在後面進行說明。

取代基的定義與上述取代基 W 的含義相同。作為取代基，例如，可舉

出烷基、芳基、雜芳基、矽基、鹵素原子及氰基等。再者，該等基可以進一步具有取代基（例如，可舉出氟原子等鹵素原子。）。

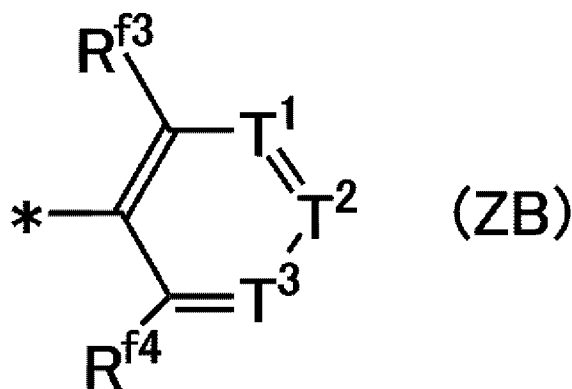
由  $R^{e12}$  表示之烷基的碳數為 1~12 為較佳，1~6 為更佳，1~3 為進一步較佳。又，上述烷基可以為  $-CH(R^{d3})(R^{d4})$  或  $-C(R^{d3})(R^{d4})(R^{d5})$ 。  $R^{d3} \sim R^{d5}$  分別獨立地表示芳基、烷基（例如，碳數 1~3）或雜芳基。

作為由  $R^{e12}$  表示之矽基，例如，可舉出作為由  $R^{d1}$  表示之矽基而說明的矽基。

作為由  $R^{e12}$  表示之鹵素原子，可舉出氟原子、碘原子、溴原子及氯原子。

【0072】 作為由式 (X) 表示之基，由式 (ZB) 表示之基為更佳。

【0073】 [化學式 8]



【0074】 式 (ZB) 中， $T^1 \sim T^3$  分別獨立地表示  $-CR^{e12}=$  或氮原子。 $R^{e12}$  表示氫原子或取代基。

式 (ZB) 中的  $R^{e12}$  與式 (Z) 中的  $R^{e12}$  的含義相同。

$R^{f3}$  及  $R^{f4}$  分別獨立地表示烷基、芳基或雜芳基。烷基為由  $-CH(R^{d3})(R^{d4})$  表示之基或由  $-C(R^{d3})(R^{d4})(R^{d5})$  表示之基為較佳。 $R^{d3} \sim R^{d5}$  分別獨立地表示烷基（例如，碳數 1~3）、芳基或雜芳基。

該等基在可能的情況下可以進一步具有取代基。取代基的定義與上述取代基 **W** 的含義相同。作為取代基，例如，可舉出烷基、芳基、雜芳基、矽基、鹵素原子及氰基等。

\*表示鍵結位置。

**【0075】** 構成可具有取代基的多環芳基及可具有取代基的多環雜芳基之環數為 2 以上，2~4 為較佳，2~3 為更佳，2 為進一步較佳。

可具有取代基的多環芳基及可具有取代基的多環雜芳基可具有的取代基可以包含非芳香環。

作為可具有取代基的多環芳基，例如，可具有取代基的萘基為較佳。

**【0076】**  $R^{a1}$  及  $R^{a2}$  的組合只要表示互不相同的基，則並沒有特別限制，但  $R^{a1}$  及  $R^{a2}$  表示互不相同的芳基為較佳。再者，“互不相同的基”係指結構互不相同的基。

其中， $R^{a1}$  及  $R^{a2}$  為由式 (X) 表示之基為較佳，由式 (Z) 表示之基為更佳，由式 (ZB) 表示之基為進一步較佳。

**【0077】** 式 (1) 中， $Ar^1$  表示可具有取代基的芳香環。

芳香環可以為單環，亦可以為多環。

作為芳香環，可舉出芳香族烴環及芳香族雜環。作為芳香族烴環，例如，可舉出苯環、萘環、蔥環及菲環。作為芳香族雜環，例如，可舉出喹啉環、吡啶環、吡咯環、呋喃環、噻吩環、咪唑環及嘧啶環。該等環可以進一步與其他環（可以為非芳香環）縮合。

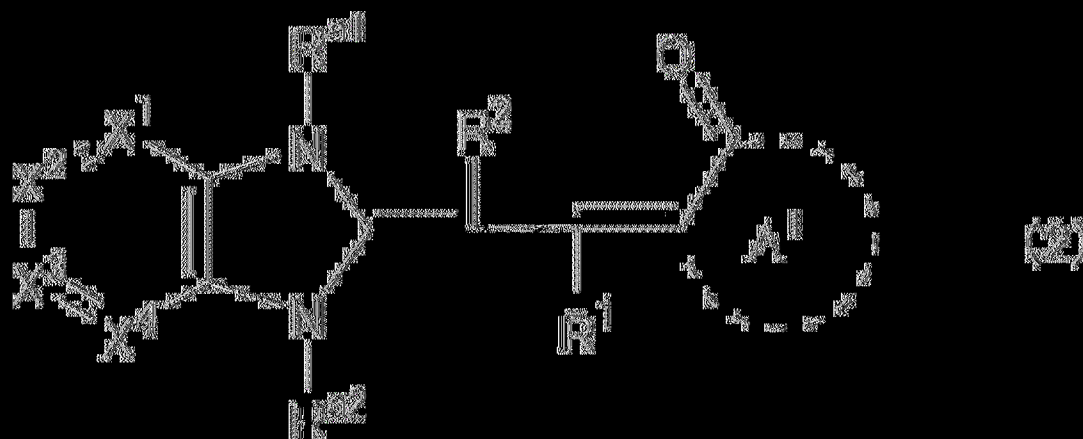
其中， $Ar^1$  為芳香族雜環為較佳，喹啉環或吡啶環為更佳。

作為由  $Ar^1$  表示之芳香環所具有之取代基，烷基或烷氧基為較佳。

[(0078)] 由式 (2) 表示之化合物

由式 (1) 表示之化合物為由式 (2) 表示之化合物為較佳，由式 (3) 表示之化合物為更佳。

[(0079)] [化學式 9]



[(0080)] 式 (2) 中的 A<sup>1</sup> 與式 (1-1) (或式 (1-1a)) 中的 A<sup>1</sup> 的含義相同，較佳條件亦相同。

式 (2) 中的 R<sup>1</sup> 及 R<sup>2</sup> 與式 (1) 中的 R<sup>1</sup> 及 R<sup>2</sup> 的含義相同，較佳條件亦相同。

式 (2) 中的 R<sup>a1</sup> 及 R<sup>a2</sup> 與式 (1) 中的 R<sup>a1</sup> 及 R<sup>a2</sup> 的含義相同，較佳條件亦相同。

[(0081)] 式 (2) 中，X<sup>1</sup>~X<sup>4</sup> 分別獨立地表示氮原子 (N) 或 CR<sup>o1</sup>。

R<sup>o1</sup> 表示氫原子或取代基。

X<sup>1</sup>~X<sup>4</sup> 中，至少 2 個為氮原子為較佳，至少 X<sup>1</sup> 及 X<sup>4</sup> 為氮原子為更佳，僅 X<sup>1</sup> 及 X<sup>4</sup> 為氮原子為進一步較佳。

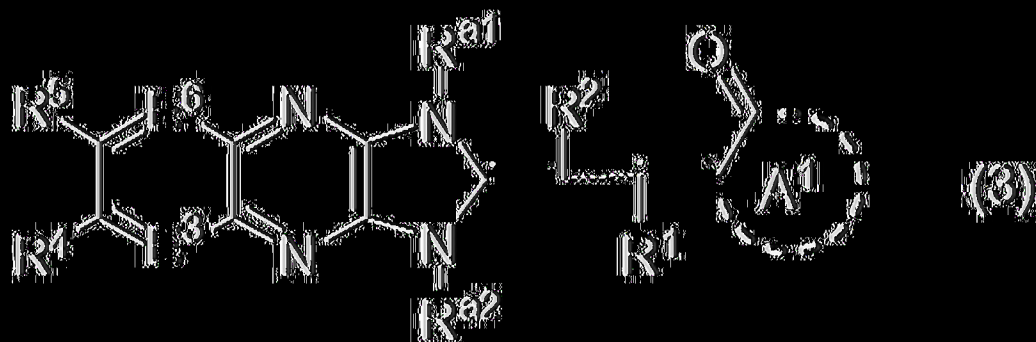
R<sup>o1</sup> 存在複數個時，存在複數個之 R<sup>o1</sup> 可以相互鍵結而形成環。作為存在複數個之 R<sup>o1</sup> 相互鍵結而形成之環，芳香環為較佳，苯環或吡啶環為更佳。

存在複數個之 R<sup>o1</sup> 相互鍵結而形成之環可以進一步具有取代基。

〔0082〕 由式 (3) 表示之化合物

由式 (1) 表示之化合物為由式 (3) 表示之化合物為更佳。

〔0083〕 [化學式 10]



〔0084〕 式 (3) 中的 A<sup>1</sup> 與式 (1-1) (或式 (1-1a)) 中的 A<sup>1</sup> 的含義相同，較佳條件亦相同。

式 (3) 中的 R<sup>1</sup> 及 R<sup>2</sup> 與式 (1) 中的 R<sup>1</sup> 及 R<sup>2</sup> 的含義相同，較佳條件亦相同。

R<sup>3</sup> 表示氮原子 (N) 或 CR<sup>3</sup>。

R<sup>6</sup> 表示氮原子 (N) 或 CR<sup>6</sup>。

R<sup>3</sup> 及 R<sup>6</sup> 為“R<sup>3</sup> 為 CR<sup>3</sup> 且 R<sup>6</sup> 為 CR<sup>6</sup> 之形態”，“R<sup>3</sup> 為 N 且 R<sup>6</sup> 為 CR<sup>6</sup> 之形態”或“R<sup>3</sup> 為 CR<sup>3</sup> 且 R<sup>6</sup> 為 N 之形態”為較佳，“R<sup>3</sup> 為 CR<sup>3</sup> 且 R<sup>6</sup> 為 CR<sup>6</sup> 之形態”為更佳。

R<sup>3</sup>~R<sup>6</sup> 分別獨立地表示氮原子或取代基。

R<sup>3</sup>~R<sup>6</sup> 分別獨立地為氮原子、烷氧基、矽基、氮原子、氮原子、氫基或烷基為較佳，氮原子、烷基部分的碳數為 1~3 的烷氧基、氮原子、氮原子、氫基或碳數為 1~4 的烷基為更佳。

R<sup>3</sup>~R<sup>6</sup> 中，表示取代基之 R<sup>3</sup>~R<sup>6</sup> 的數量為 0~2 為較佳。R<sup>3</sup>~R<sup>6</sup> 中的

1 個以上表示取代基時， $R^4$  及/或  $R^5$  表示取代基為較佳。

$E^3$  為  $-CR^3=$  時的  $R^3$  與  $R^4$ 、 $R^4$  與  $R^5$  及  $E^6$  為  $-CR^6=$  時的  $R^5$  與  $R^6$  可以分別獨立地相互鍵結而形成環。 $R^3$  與  $R^4$ 、 $R^4$  與  $R^5$  及  $R^5$  與  $R^6$  相互鍵結而形成之環可以為單環或多環，可以為芳香族或非芳香族，亦可以具有取代基。

上述環的環員原子數為 5~12 為較佳，5~7 為更佳。

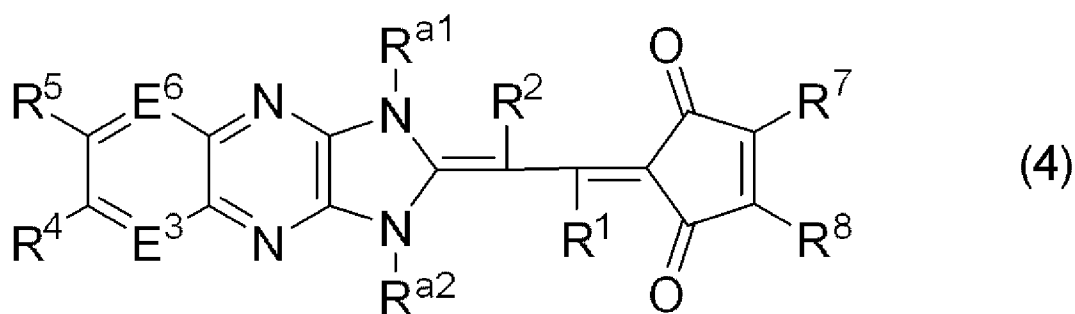
例如， $R^3$  與  $R^4$ 、 $R^4$  與  $R^5$  或  $R^5$  與  $R^6$ （較佳為  $R^4$  與  $R^5$ ）相互鍵結而進一步形成可具有取代基的苯環亦較佳。此時，苯環（亦可以進一步具有取代基之苯環）與包含  $E^3$  及  $E^6$  之環縮合。

式 (3) 中的  $R^{a1}$  及  $R^{a2}$  與式 (1) 中的  $R^{a1}$  及  $R^{a2}$  的含義相同，較佳條件亦相同。

【0085】 · 由式 (4) 表示之化合物

由式 (1) 表示之化合物可以為由式 (4) 表示之化合物。

【0086】 [化學式 11]



【0087】 式 (4) 中的  $R^1$  及  $R^2$  與式 (1) 中的  $R^1$  及  $R^2$  的含義相同，較佳條件亦相同。

式 (4) 中的  $E^3$  及  $E^6$  與式 (3) 中的  $E^3$  及  $E^6$  的含義相同，較佳條件亦相同。

式 (4) 中的  $R^3 \sim R^6$  與式 (3) 中的  $R^3 \sim R^6$  的含義相同，較佳條件亦相

同。

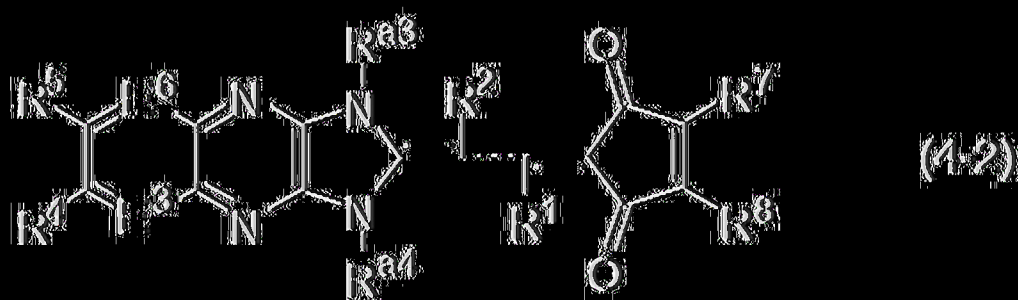
式(4)中的 $R^7$ 及 $R^8$ 與式(AX)中的 $R^7$ 及 $R^8$ 的含義相同，較佳條件亦相同。

式(4)中的 $R^{a1}$ 及 $R^{a2}$ 與式(1)中的 $R^{a1}$ 及 $R^{a2}$ 的含義相同，較佳條件亦相同。

[(0088)] 由式(4.2)表示之化合物

作為由式(4)表示之化合物的較佳形態之一，可舉出由式(4.2)表示之化合物。

[(0089)] [化學式 12]



[(0090)] 式(4.2)中的 $R^1$ 及 $R^2$ 與式(1)中的 $R^1$ 及 $R^2$ 的含義相同，較佳條件亦相同。

式(4.2)中的 $R^3$ 及 $R^6$ 與式(3)中的 $R^3$ 及 $R^6$ 的含義相同，較佳條件亦相同。

式(4.2)中的 $R^3 \sim R^6$ 與式(3)中的 $R^3 \sim R^6$ 的含義相同，較佳條件亦相同。

式(4.2)中的 $R^7$ 及 $R^8$ 與式(AX)中的 $R^7$ 及 $R^8$ 的含義相同，較佳條件亦相同。

式(4.2)中的 $R^{a3}$ 及 $R^{a4}$ 分別獨立地表示由式(X)表示之基、 $-C(R^{L1})$

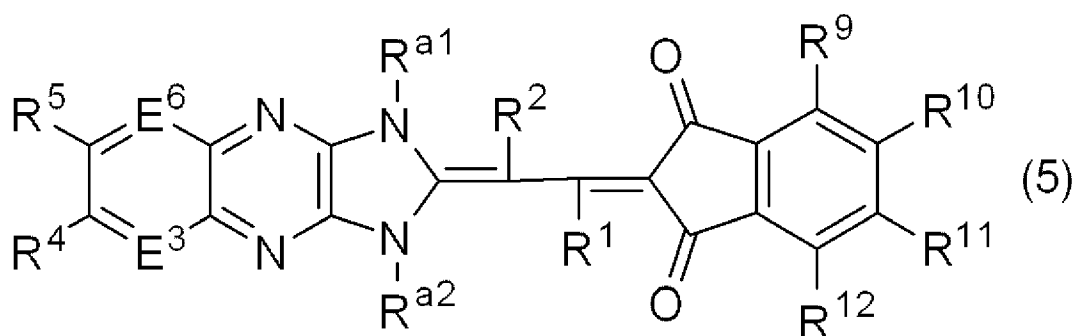
( $R^{L2}$ )( $R^{L3}$ )、可具有取代基的多環芳基或可具有取代基的多環雜芳基。其中， $R^{a3}$  及  $R^{a4}$  表示互不相同的基。

式(4-2)中的  $R^{a3}$  及  $R^{a4}$  中由式(X)表示之基、 $-C(R^{L1})(R^{L2})(R^{L3})$ 、可具有取代基的多環芳基及可具有取代基的多環雜芳基分別與關於式(1)中的  $R^{a1}$  及  $R^{a2}$  說明的由式(X)表示之基、 $-C(R^{L1})(R^{L2})(R^{L3})$ 、可具有取代基的多環芳基及可具有取代基的多環雜芳基的含義相同，較佳條件亦相同。

**【0091】** · 由式(5)表示之化合物

由式(1)表示之化合物可以為由式(5)表示之化合物。

**【0092】** [化學式 13]



**【0093】** 式(5)中的  $R^1$  及  $R^2$  與式(1)中的  $R^1$  及  $R^2$  的含義相同，較佳條件亦相同。

式(5)中的  $E^3$  及  $E^6$  與式(3)中的  $E^3$  及  $E^6$  的含義相同，較佳條件亦相同。

式(5)中的  $R^3 \sim R^6$  與式(3)中的  $R^3 \sim R^6$  的含義相同，較佳條件亦相同。

式(5)中的  $R^9 \sim R^{12}$  與式(AY)中的  $R^9 \sim R^{12}$  的含義相同，較佳條件亦相同。

式(5)中的  $R^{a1}$  及  $R^{a2}$  與式(1)中的  $R^{a1}$  及  $R^{a2}$  的含義相同，較佳條件亦相同。

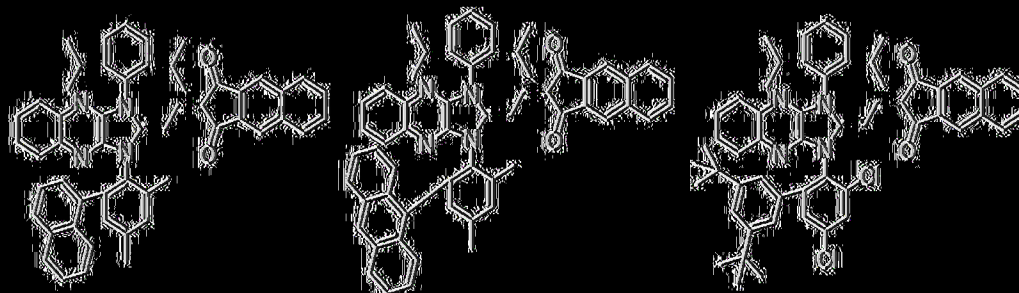
**【0094】** 以下，例示由式(1)表示之化合物。

再者，在將以下例示之化合物代入式(1)時，以下例示之由式(1)表示之化合物包含可根據由  $R^1$  所鍵結之碳原子和與其相鄰之碳原子構成之  $C=C$  雙鍵區分之幾何異構物的任一種。亦即，根據上述  $C=C$  雙鍵區分之順式體和反式體均分別包含在以下例示之由式(1)表示之化合物中。

在以下例示中，**Me** 表示甲基，**Ph** 表示苯基。

又，作為由式(1)表示之化合物，除了下述例示化合物以外，亦可舉出國際公開第 2020/013246 號的[0091]~[0095]段中記載之化合物，本內容編入該說明書中。

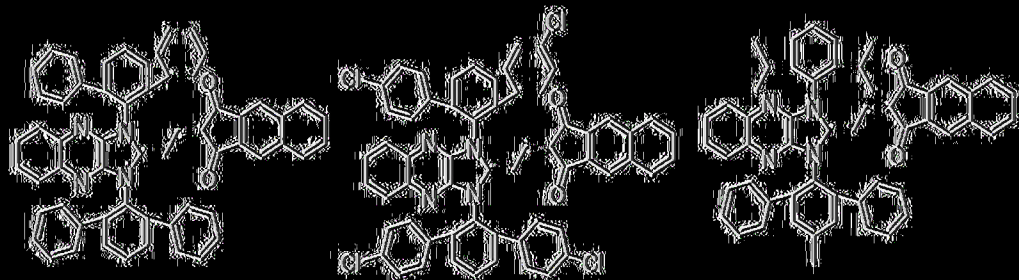
**【0095】** [化學式 14]



D-40

D-41

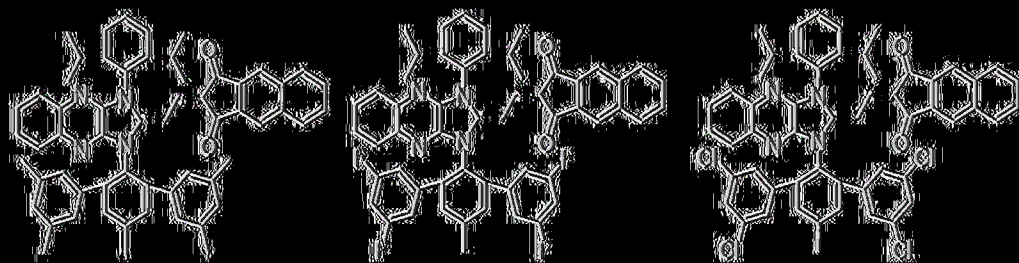
D-42



D-43

D-44

D-45



D-46

D-47

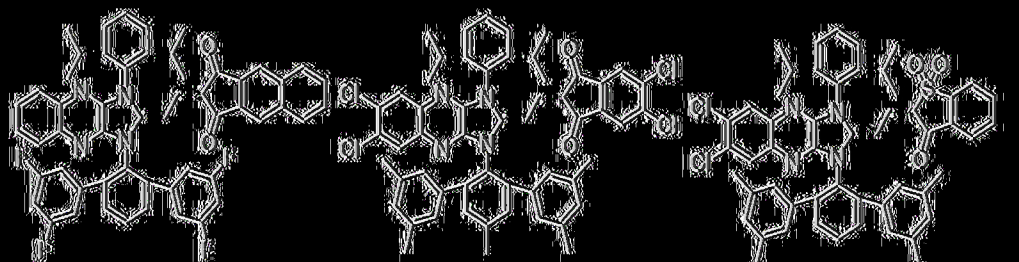
D-48



D-49

D-50

D-51

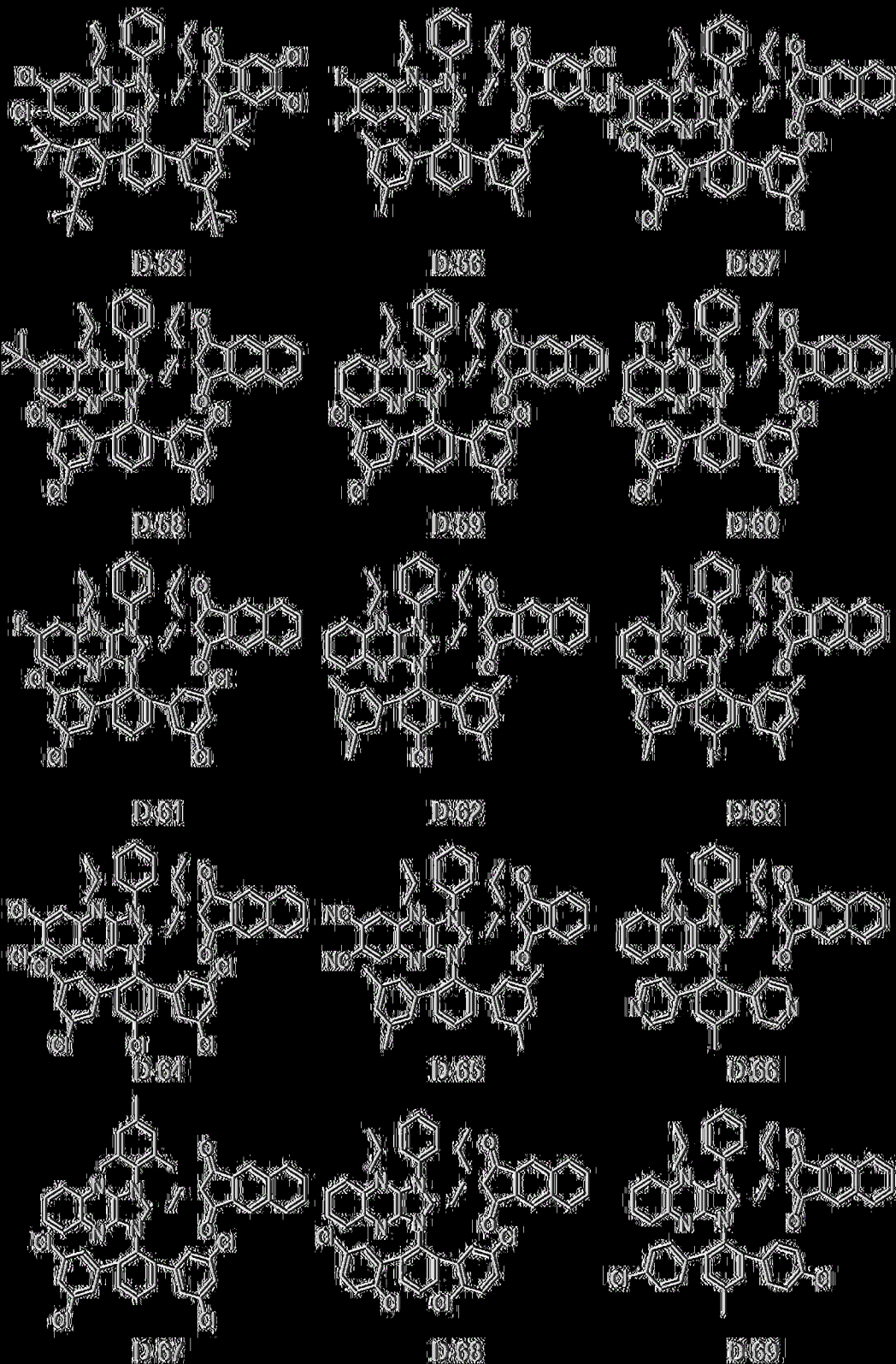


D-52

D-53

D-54

[(0096)] [化學式 15]



(0097) 第 1 化合物的分子量並沒有特別限制，300~1200 為較佳。分子量為 1200 以下時，蒸鍍溫度不會提高，化合物不易分解。分子量為 300 以上時，蒸鍍膜的玻璃轉移溫度不會降低，光電轉換元件的耐熱性會得到提

高。

【0098】 第 1 化合物的極大吸收波長為 490~600nm 為較佳，510~590nm 為更佳，530~590nm 為進一步較佳。

【0099】 從與後述 n 型半導體材料的能階匹配方面考慮，第 1 化合物為單獨膜中的游離電位為 5.0~6.2eV 的化合物為較佳，單獨膜中的游離電位為 5.2~6.1eV 的化合物為更佳，單獨膜中的游離電位為 5.4~6.0eV 的化合物為進一步較佳。

再者，在本說明書中，游離電位為利用 RIKEN KEIKI CO.,LTD.製光電子分光裝置 AC-2 對化合物的單獨膜進行測定而得之值。

【0100】 相對於光電轉換膜整體之第 1 化合物的含量（=（第 1 化合物以單層換算計之膜厚/光電轉換膜整體的膜厚）×100）為 5~70 體積%為較佳，10~50 體積%為更佳，15~40 體積%為進一步較佳。

【0101】 （第 2 化合物）

接著，對第 2 化合物進行說明。

第 2 化合物為與第 1 化合物不同且具有滿足下述式 (X) 的關係之極大吸收波長之化合物，下述式 (X) 示出第 1 化合物的極大吸收波長  $\lambda_1$  與第 2 化合物的極大吸收波長  $\lambda_2$  的關係。

$$-20\text{nm} \leq \lambda_1 - \lambda_2 \leq 20\text{nm} \cdots \cdots \text{式 (X)}$$

【0102】 其中，第 1 化合物的極大吸收波長  $\lambda_1$  與第 2 化合物的極大吸收波長  $\lambda_2$  滿足式 (X-1) 的關係為較佳，滿足式 (X-2) 的關係為更佳。

$$-10\text{nm} \leq \lambda_1 - \lambda_2 \leq 10\text{nm} \cdots \cdots \text{式 (X-1)}$$

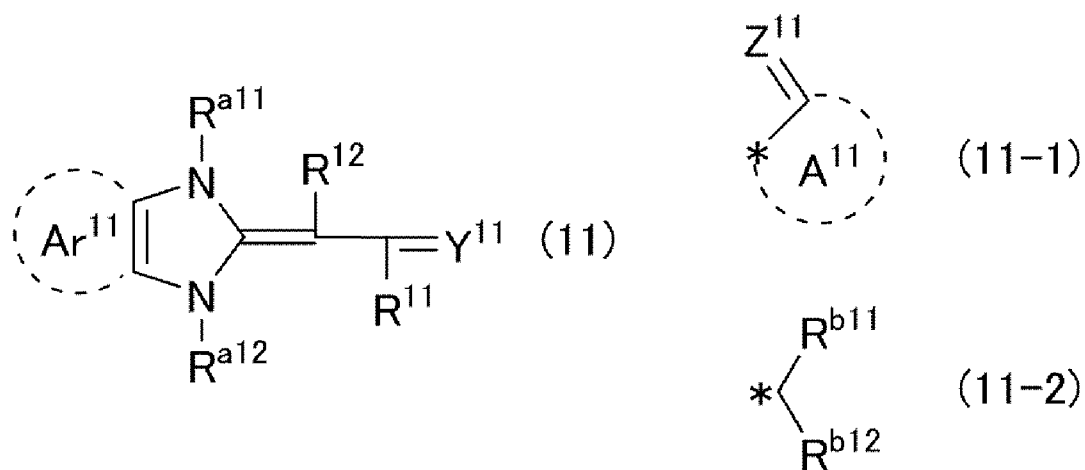
$$-5\text{nm} \leq \lambda_1 - \lambda_2 \leq 5\text{nm} \cdots \cdots \text{式 (X-2)}$$

【0103】 作為第 2 化合物，更具體而言，選自包括具有咪唑啉骨架之化合物、吡咯亞甲基硼錯合物、亞酞青化合物、方酸菁化合物及具有三芳基胺骨架之化合物之群組中的化合物為較佳，具有咪唑啉骨架之化合物為更佳，由後述式 (11) 表示之化合物為進一步較佳。

【0104】 具有咪唑啉骨架之化合物

作為具有咪唑啉骨架之化合物，例如，可舉出由式 (11) 表示之化合物。

【0105】 [化學式 16]



【0106】 式 (1) 中， $Y^1$  表示由式 (11-1) 表示之基或由式 (11-2) 表示之基。其中，從本發明的效果更優異的方面考慮，由式 (11-1) 表示之基為較佳。式 (11-1) 及式 (11-2) 中的 \* 表示鍵結位置，標註有 \* 之碳原子與鍵結於  $R^{11}$  之碳原子形成雙鍵。

【0107】 式 (1-1) 中， $Z^{11}$  表示氧原子、硫原子、 $=NR^{Z11}$  或  $=CR^{Z12}R^{Z13}$ 。

$R^{Z11}$  表示氫原子或取代基。 $R^{Z12}$  及  $R^{Z13}$  分別獨立地表示羰基或  $-COOR^{Z14}$ 。 $R^{Z14}$  表示可具有取代基的烷基、可具有取代基的芳基或可具有取代基的雜芳基。

$Z^{11}$  為氧原子為較佳。

**【0108】** 式(11-1)中， $A^{11}$ 表示包含至少2個碳原子且可具有取代基的環。再者，2個碳原子表示式(11-1)中明示的與 $Z^{11}$ 鍵結之碳原子、與鍵結於上述 $Z^{11}$ 之碳原子相鄰之式(11-1)中明示的碳原子(與鍵結於 $R^{11}$ 之碳原子以雙鍵鍵結之碳原子)，任何碳原子均為構成 $A^{11}$ 之原子。

由 $A^{11}$ 表示之可具有取代基的環的具體態樣及較佳態樣與由 $A^1$ 表示之可具有取代基的環的具體態樣及較佳態樣相同。

**【0109】** 式(11-2)中， $R^{b11}$ 及 $R^{b12}$ 分別獨立地表示氰基或 $-COOR^{b13}$ 。

$R^{b13}$ 表示可具有取代基的烷基、可具有取代基的芳基(苯基等)或可具有取代基的雜芳基。

**【0110】** 式(11)中， $R^{11}$ 及 $R^{12}$ 分別獨立地表示氫原子或取代基。 $R^{11}$ 及 $R^{12}$ 為氫原子為較佳。

$R^{a11}$ 及 $R^{a12}$ 分別獨立地表示可具有取代基的芳基、 $-C(R^{L11})(R^{L12})(R^{L13})$ 或可具有取代基的雜芳基。其中， $R^{a11}$ 及 $R^{a12}$ 表示互不相同的基。

$-C(R^{L11})(R^{L12})(R^{L13})$ 中的 $R^{L11} \sim R^{L13}$ 分別獨立地表示可具有取代基的烷基、可具有取代基的芳基、可具有取代基的雜芳基或氫原子， $R^{L11} \sim R^{L13}$ 中的2個以上分別獨立地表示可具有取代基的烷基、可具有取代基的芳基或可具有取代基的雜芳基。

由 $R^{L11} \sim R^{L13}$ 表示之可具有取代基的烷基、可具有取代基的芳基及可具有取代基的雜芳基可以相互鍵結而形成環。

**【0111】** 式(11)中的 $R^{a11}$ 、 $R^{a12}$ 及 $R^{L11} \sim R^{L13}$ 的具體態樣及較佳態樣與式(1)中的 $R^{a1}$ 、 $R^{a2}$ 及 $R^{L1} \sim R^{L3}$ 的具體態樣及較佳態樣相同。

**【0112】** 式(11)中， $Ar^{11}$ 表示可具有取代基的芳香環。 $Ar^{11}$ 的具體

態樣及較佳態樣與式(1)中的  $Ar^1$  的具體態樣及較佳態樣相同。

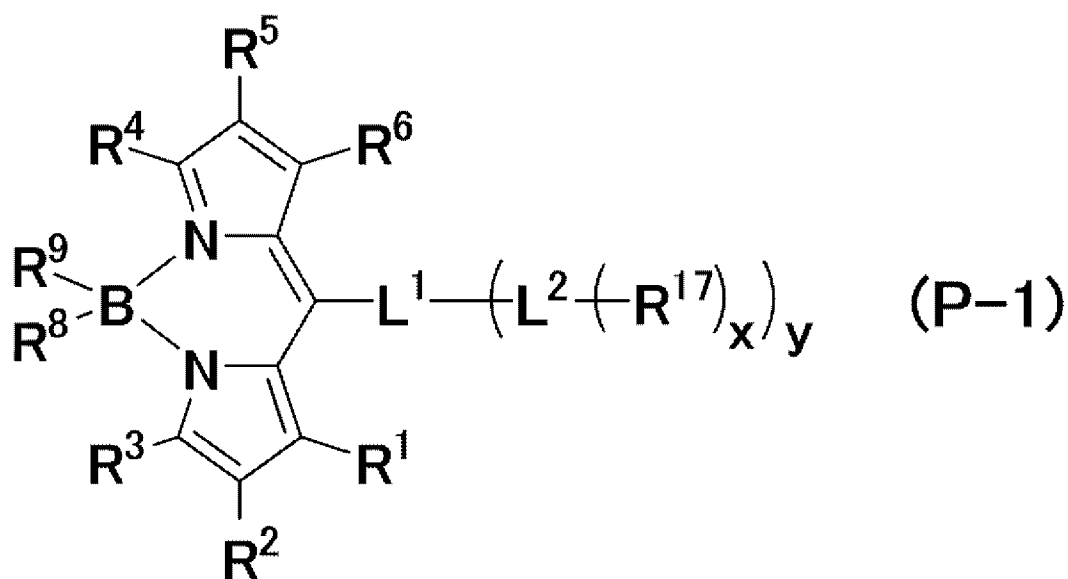
【0113】 由式(11)表示之化合物為由上述式(2)表示之化合物為較佳，由上述式(3)表示之化合物為更佳。又，由式(11)表示之化合物可以為由式(4)表示之化合物或由式(5)表示之化合物。

【0114】 作為由式(11)表示之化合物的具體例，可舉出作為由上述式(1)表示之化合物例示之各化合物。

【0115】 · 吡咯亞甲基硼錯合物

作為吡咯亞甲基硼錯合物，例如，可舉出由下述式(P-1)表示之化合物。

【0116】 [化學式 17]



【0117】  $R^1 \sim R^6$  分別獨立地表示氫原子或取代基。

作為取代基，例如，可舉出可具有取代基的烷基、可具有取代基的脂肪族雜環基、可具有取代基的烯基、可具有取代基的炔基、羥基、硫醇基、可具有取代基的烷氧基、可具有取代基的烷硫基、可具有取代基的芳基醚基、可具有取代基的芳基硫醚基、可具有取代基的芳基、可具有取代基的雜芳基、

鹵素原子、氰基、醛基、可具有取代基的羰基、羧基、可具有取代基的氧基羰基、可具有取代基的胺甲醯基、可具有取代基的烷氧基羰基、可具有取代基的胺基、硝基、可具有取代基的矽基、可具有取代基的矽氧烷基、可具有取代基的硼基及可具有取代基的氧化磷基。

**【0118】**  $R^8$  及  $R^9$  分別獨立地表示可具有取代基的烷基、可具有取代基的脂肪族雜環基、可具有取代基的烯基、可具有取代基的炔基、羥基、硫醇基、可具有取代基的烷氧基、可具有取代基的烷硫基、可具有取代基的芳基醚基、可具有取代基的芳基硫醚基、可具有取代基的芳基、可具有取代基的雜芳基或鹵素原子。

$L^1$  表示單鍵或  $(y+1)$  價連結基，單鍵、可具有取代基的伸芳基或可具有取代基的雜伸芳基為較佳。

$L^2$  表示單鍵、 $(x+1)$  價芳香族烴環基或  $(x+1)$  價芳香族雜環基。

$x$  及  $y$  分別獨立地表示 1~5 的整數。

$R^{17}$  表示拉電子基。

**【0119】** 又，在上述所有基中，作為被取代時的取代基，烷基、脂肪族雜環基、烯基、炔基、羥基、硫醇基、烷氧基、烷硫基、芳基醚基、芳基硫醚基、芳基、雜芳基、鹵素原子、氰基、醛基、羰基、羧基、氧基羰基、胺甲醯基、胺基、硝基、矽基、矽氧烷基、硼基或氧化磷基為較佳，在各取代基的說明中較佳之具體取代基為進一步較佳。又，該等取代基可以進一步被上述取代基取代。

**【0120】** 烷基可以為直鏈狀、支鏈狀及環狀中的任一種。

烷基的碳數並沒有特別限定，從易獲得性、成本方面考慮，1~20 為較

佳，1~8 為更佳。

【0121】 作為芳基，例如，可舉出苯基、聯苯基、三苯基、萘基、蒾基、菲基、蔥基、芘基、1,2-苯并芴基及聯三伸苯基。

芳基的碳數並沒有特別限定，6~40 為較佳，6~30 為更佳。

【0122】  $R^1 \sim R^6$ 、 $R^8$  及  $R^9$  為可具有取代基的芳基時，作為芳基，苯基、聯苯基、三苯基、萘基、蒾基、菲基或蔥基為較佳，苯基、聯苯基、三苯基或萘基為更佳，苯基、聯苯基或三苯基為進一步較佳，苯基為特佳。

【0123】 鹵素原子表示選自氟原子、氯原子、溴原子及碘原子中的原子。

【0124】 作為較佳之拉電子基，可舉出氟原子、含氟芳基、含氟雜芳基、含氟烷基、可具有取代基的醯基、可具有取代基的烷氧基羰基及氰基。

【0125】 作為  $L^1$ ，從光穩定性方面考慮，單鍵或可具有取代基的伸芳基為較佳。

【0126】 作為  $L^2$ ， $x+1$  價芳香族烴環為較佳。

作為構成由  $L^2$  表示之  $x+1$  價芳香族烴環之環，可舉出苯環、萘環及蔥環。

作為構成由  $L^2$  表示之  $x+1$  價芳香族雜環之環，可舉出公知的環。

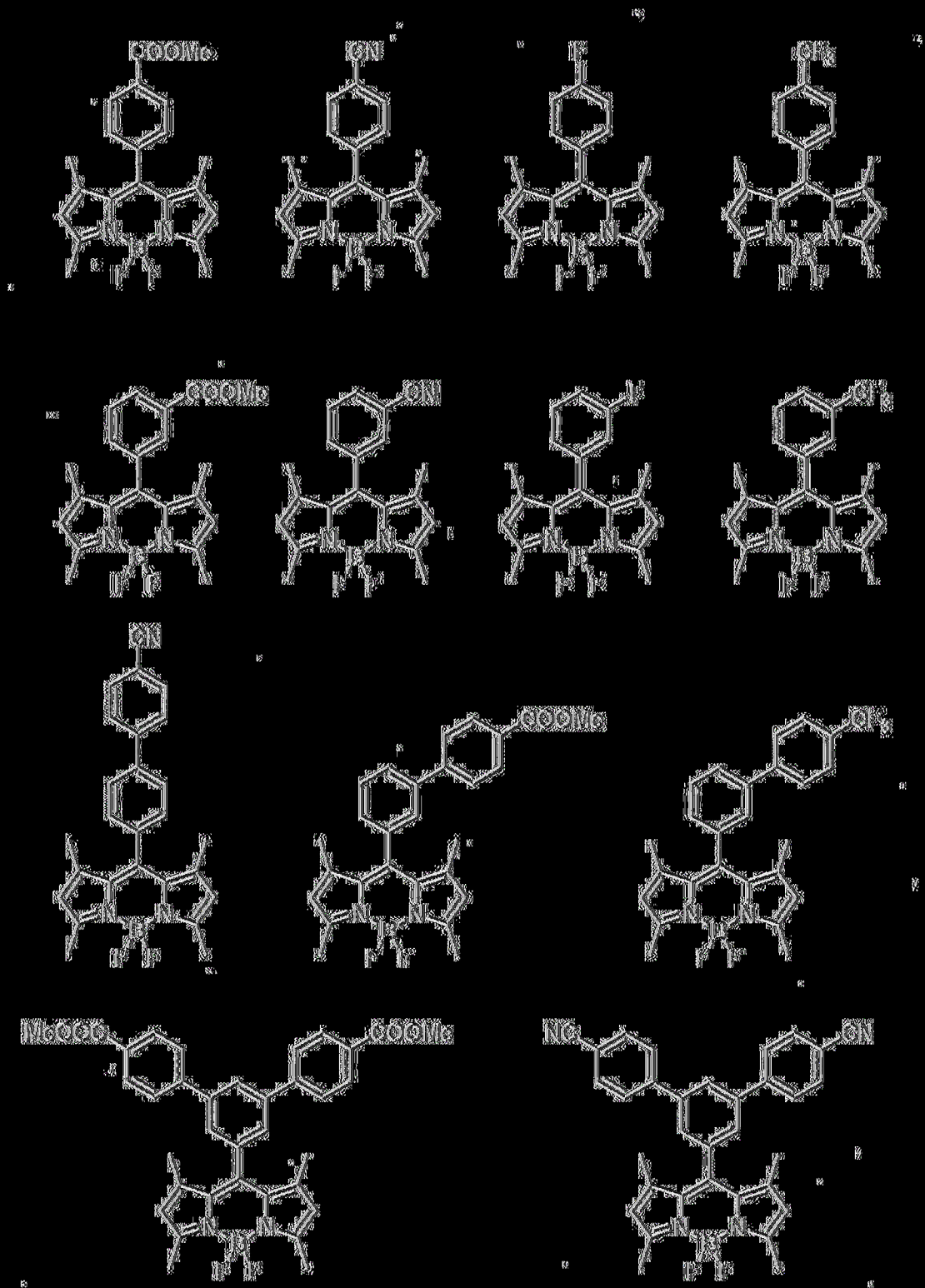
【0127】  $R^{17}$  為氟時， $x$  及  $y$  為 1~5 為較佳。當  $R^{17}$  為氟時，氟的原子數為 1 個，因此根本不會發生由分子振動引起之螢光量子產率的下降，提高耐久性的效果更大，因此  $R^{17}$  為氟時， $x$  及  $y$  為 1~5 為較佳。

【0128】 又，作為由式 (P-1) 表示之化合物的特佳例之一，可舉出如下情況： $R^1$ 、 $R^3$ 、 $R^4$  及  $R^6$  全部可以彼此相同或互不相同且為可具有取代

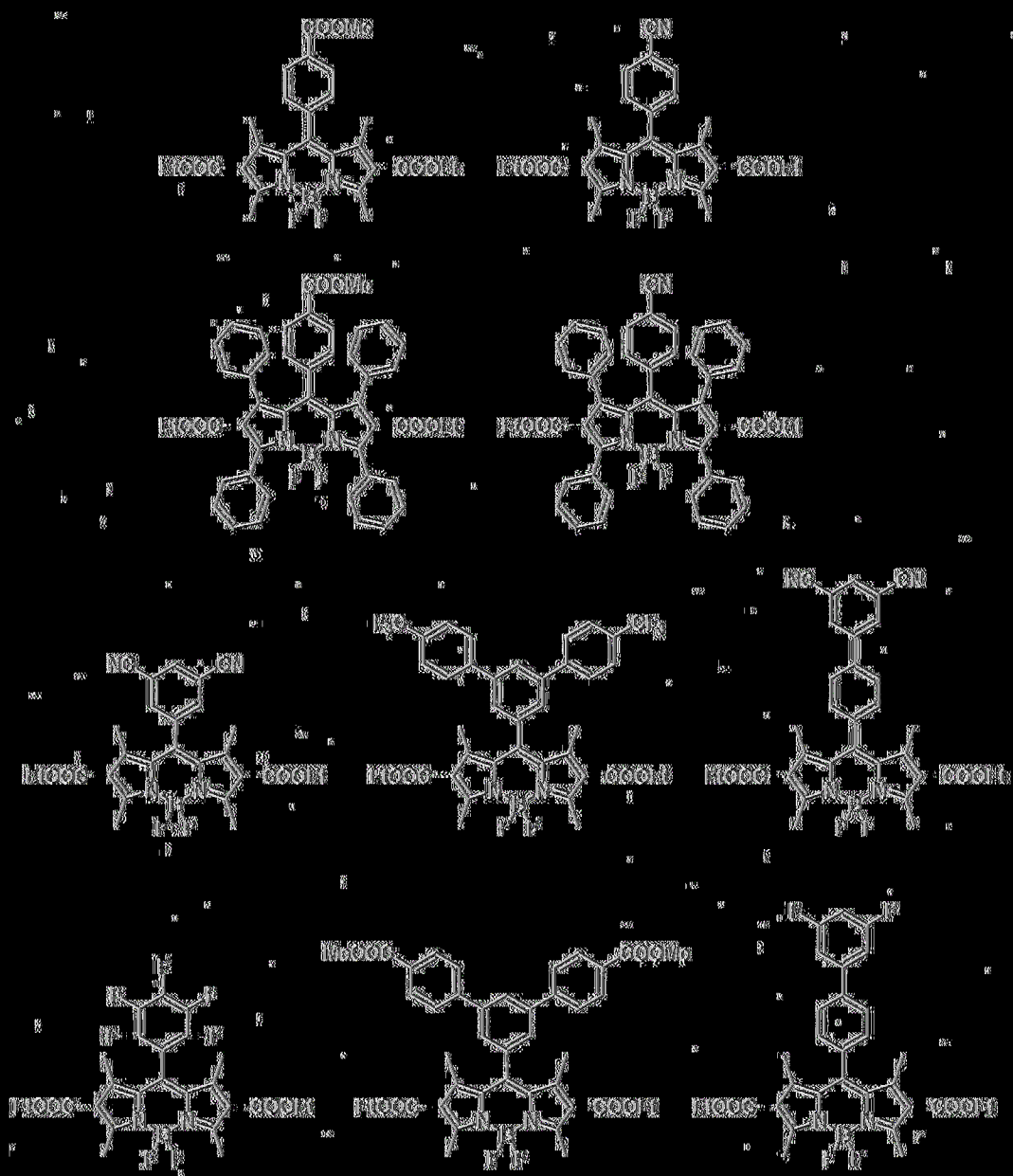
基的烷基，而且  $L^1$  為單鍵， $L^2$  為可具有取代基的芳香族烴環， $x$  為 5， $y$  為 1。

**【0129】** 以下示出由式 (P-1) 表示之吡咯亞甲基硼錯合物的一例，但並不限定於該等。又，作為由式 (P-1) 表示之化合物，亦可舉出國際公開第 2016/190283 號的[0136]~[0149]段中記載之化合物，該等內容編入本說明書中。

**【0130】** [化學式 18]



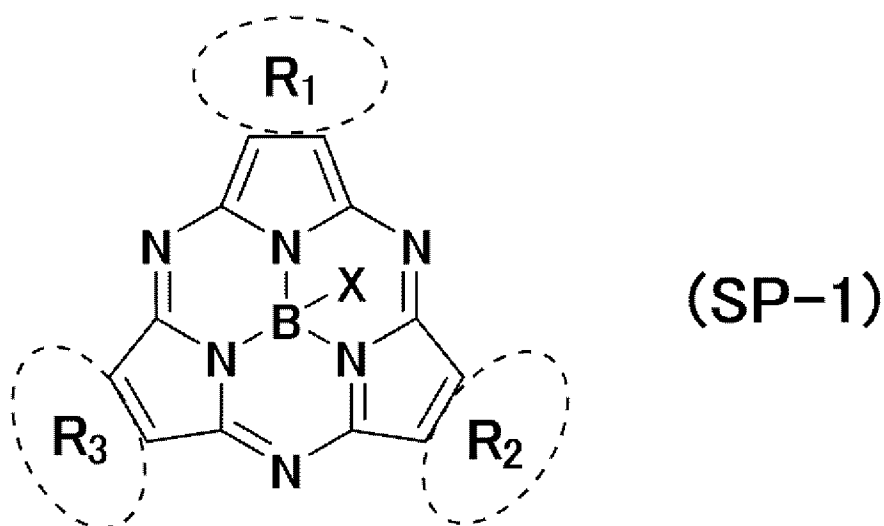
[0131] [化學式 19]



〔0132〕 亞酞菁化合物

作為亞酞菁化合物，例如，可舉出由下述式（SP-1）表示之化合物。

〔0133〕 [化學式 20]



【0134】 在上述式 (SP-1) 中，X 表示鹵素原子（較佳為氟原子或氯原子）、羥基、硫醇基、胺基、可具有取代基的烷氧基、可具有取代基的芳氧基、可具有取代基的烷基、可具有取代基的烷基胺基、可具有取代基的芳基胺基、可具有取代基的烷硫基或可具有取代基的芳硫基。

$R_1 \sim R_3$  分別獨立地表示可具有取代基的環結構。 $R_1 \sim R_3$  中的至少 1 個在環結構中包含至少 1 個雜原子為較佳。

再者，在上述式 (SP-1) 中，中心的硼與氮的鍵之一為配位鍵。

【0135】 式 (SP-1) 中，在  $R_1 \sim R_3$  的環結構中包含至少 1 個以上的雜原子時，能夠具有適合作為吸收綠光的光電轉換膜之光吸收特性。具體而言，在  $R_1 \sim R_3$  的環結構中包含至少 1 個以上的雜原子時，具有長波長區域的光吸收減少且能夠選擇性吸收綠光區域的光之光吸收特性。

【0136】 又，在上述式 (SP-1) 中， $R_1 \sim R_3$  中的至少 1 個為具有取代基之環結構為較佳。尤其， $R_1 \sim R_3$  中的至少 1 個為被拉電子基取代之環結構時，由式 (SP-1) 表示之化合物能夠以更高的產率合成，因此較佳。例如，在上述式 (SP-1) 中， $R_1 \sim R_3$  中的至少 1 個可以為具有鹵素原子作為取代基之環結構。

【0137】 在此，在上述式 (SP-1) 中， $R_1 \sim R_3$  可以為部分氫原子被取代基取代之環結構，亦可以為所有氫原子被取代基取代之環結構。又，取代基可以以使由式 (SP-1) 表示之化合物具有對稱性的方式對  $R_1 \sim R_3$  的環結構進行取代，亦可以以使由式 (SP-1) 表示之化合物不具有對稱性的方式對  $R_1 \sim R_3$  的環結構進行取代。

【0138】 又，在上述式 (SP-1) 中， $R_1 \sim R_3$  為具有  $\pi$  共軛系結構之環結構為較佳。 $R_1 \sim R_3$  為具有  $\pi$  共軛系結構之環結構時，由式 (SP-1) 表示之化合物能夠具有適合於吸收 490~600nm 的波長的綠光之吸收光譜。

從在光電轉換膜中減少吸收比綠光更短的短波長區域的藍光方面考慮，由  $R_1 \sim R_3$  表示之環結構為芳香環結構為較佳。作為構成芳香環結構之芳香環，可舉出芳香族烴環及芳香族雜環。

【0139】 又，在上述式 (SP-1) 中， $R_1 \sim R_3$  可以為任意環構成原子數的環結構。此外， $R_1 \sim R_3$  可以為單環結構，亦可以為縮環結構。其中， $R_1 \sim R_3$  為環構成原子數為 3~8 的環結構為較佳，環構成原子數為 6 的環結構為進一步較佳。

【0140】 而且， $R_1 \sim R_3$  的環結構中包含的雜原子為氮原子為較佳。在  $R_1 \sim R_3$  的環結構中包含氮原子時，由式 (SP-1) 表示之化合物的吸收區域向短波長側移動且長波長區域的光吸收減少，因此能夠較佳地用於吸收綠光之光電轉換膜。

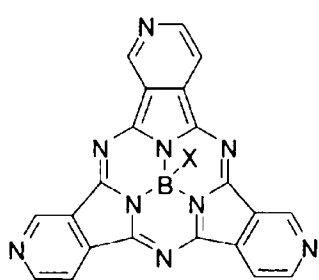
作為含有氮原子之環結構，例如，可舉出吡啶環、嗒吡環、嘧啶環、吡嗪環、四吡環、吡咯環及咪唑環。

再者， $R_1 \sim R_3$  在環結構中包含的雜原子可以以使由式 (SP-1) 表示之化

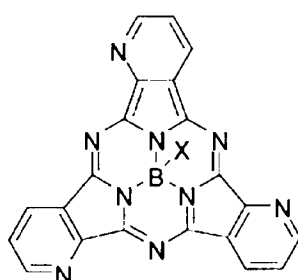
合物具有對稱性的方式包含在  $R_1 \sim R_3$  的環結構中，亦可以以由式(SP-1)表示之化合物不具有對稱性的方式包含在  $R_1 \sim R_3$  的環結構中。

**【0141】** 在此，將亞酞青化合物的環結構的具體例示於以下結構例(1)～(17)中。然而，本揭示的一實施形態之亞酞青化合物的環結構並不限定於下述結構例(1)～(17)。

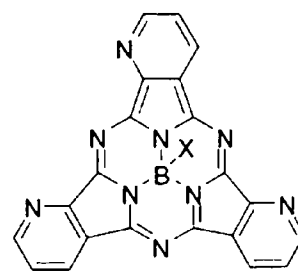
**【0142】** [化學式 21]



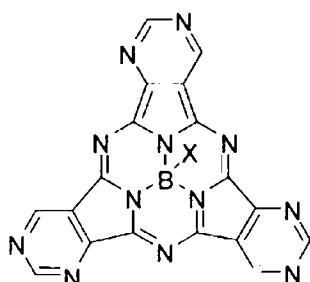
結構例 1



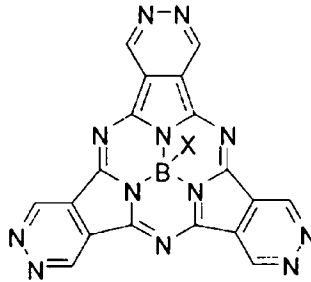
結構例 2



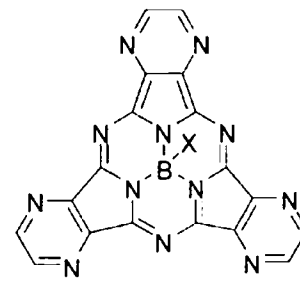
結構例 3



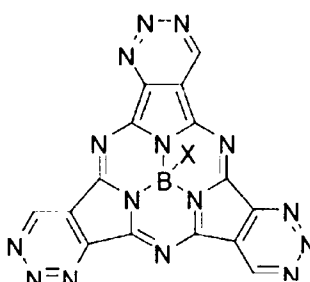
結構例 4



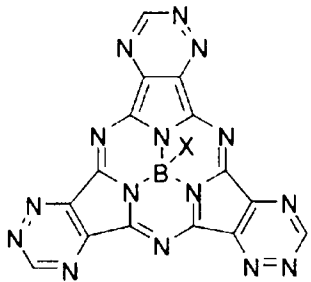
結構例 5



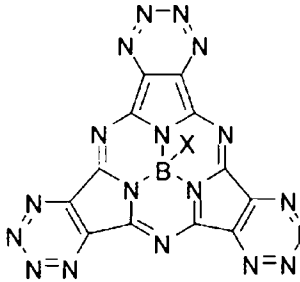
結構例 6



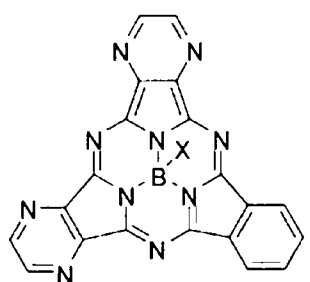
結構例 7



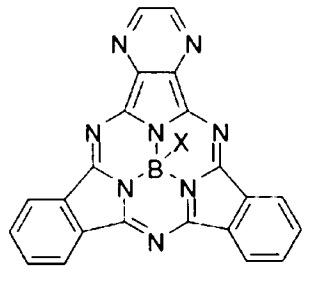
結構例 8



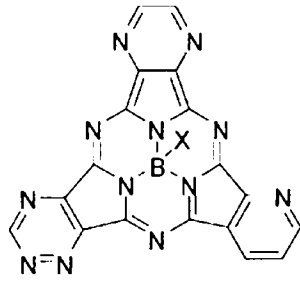
結構例 9



結構例 10

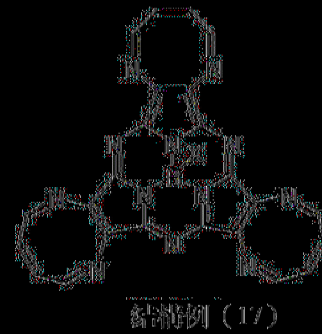
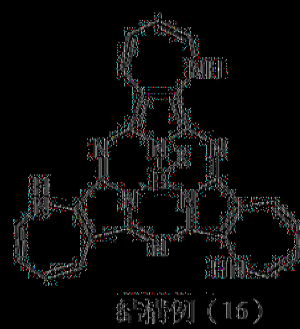
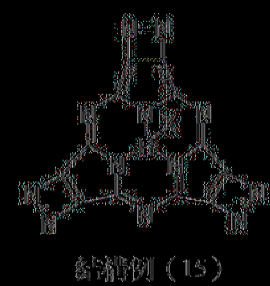
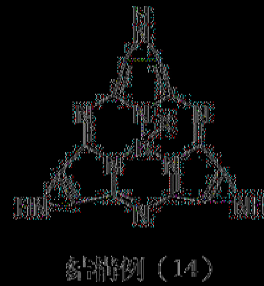
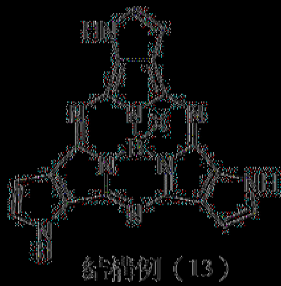


結構例 11



結構例 12

〔0143〕 [化學式 22]

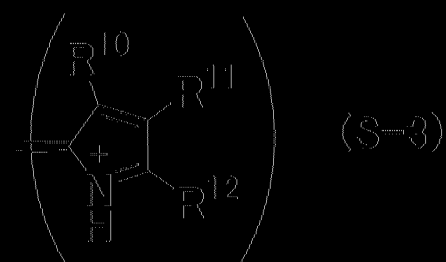
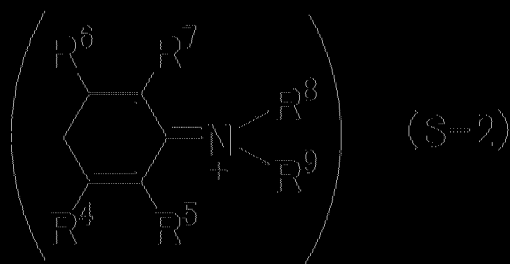
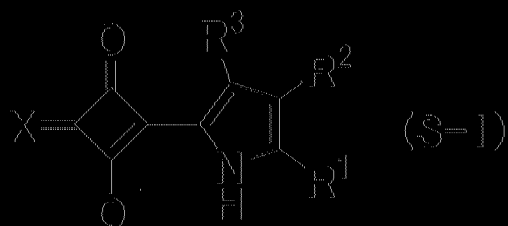


〔0144〕 再者，在上述結構例 (1) ~ (17) 中，X 如上所述。

〔0145〕 。方酸菁化合物

作為方酸菁化合物，例如，可舉出由下述式 (S-1) 表示之化合物。

〔0146〕 [化學式 23]



〔0147〕 上述式 (S-1) 中， $R^1 \sim R^3$  分別獨立地表示氫原子、碳數 1 ~ 6 的烷基或乙酰基。

由  $R^1 \sim R^3$  表示之碳數 1~6 的烷基只要為碳數 1~6 的烷基，則並不限定於直鏈狀、支鏈狀或環狀中的任一種，作為其具體例，可舉出甲基、乙基、正丙基、異丙基、正丁基、異丁基、二級丁基、三級丁基、正戊基、1-甲基丁基、2-甲基丁基、3-甲基丁基、1-乙基丙基、1,1-二甲基丙基、1,2-二甲基丙基、2,2-二甲基丙基、正己基、1-甲基戊基、2-甲基戊基、3-甲基戊基、4-甲基戊基、1,1-二甲基丁基、1,2-二甲基丁基、1,3-二甲基丁基、2,2-二甲基丁基、2,3-二甲基丁基、3,3-二甲基丁基、1-乙基-1-甲基丙基及環己基。

**【0148】** 作為式 (S-1) 的  $R^1 \sim R^3$ ， $R^1$  及  $R^3$  為碳數 1~6 的烷基且  $R^2$  為氫原子、碳數 1~6 的烷基或乙醯基為較佳， $R^1$  及  $R^3$  為碳數 1~6 的直鏈烷基且  $R^2$  為氫原子、碳數 1~6 的直鏈烷基或乙醯基為更佳， $R^1$  及  $R^3$  為相同的碳數 1~6 的直鏈烷基且  $R^2$  為氫原子、碳數 1~6 的直鏈烷基或乙醯基為進一步較佳， $R^1$  及  $R^3$  為甲基且  $R^2$  為氫原子、碳數 1 或 2 的直鏈烷基或乙醯基為特佳。

**【0149】** 上述式 (S-1) 中，X 表示由上述式 (S-2) 或式 (S-3) 表示之基，由式 (S-3) 表示之基為較佳。

上述式 (S-2) 中， $R^4 \sim R^7$  分別獨立地表示氫原子、氟原子、氯原子、甲基、甲氧基或羥基， $R^4 \sim R^7$  中的 1 個為氟原子、甲基、甲氧基或羥基且其餘 3 個為氫原子為較佳， $R^4$  或  $R^6$  中的任一者為氟原子、甲基、甲氧基或羥基且其餘 3 個為氫原子為更佳， $R^4$  或  $R^6$  中的任一者為羥基且其餘 3 個為氫原子為進一步較佳。

**【0150】** 上述式 (S-2) 中， $R^8$  及  $R^9$  分別獨立地表示碳數 1~6 的烷基。

作為式 (S-2) 的  $R^8$  及  $R^9$  所表示之碳數 1~6 的烷基的具體例，可舉出與式 (S-1) 的  $R^1 \sim R^3$  所表示之碳數 1~6 的烷基的具體例相同者。

作為式 (S-2) 的  $R^8$  及  $R^9$ ，碳數 1~6 的直鏈烷基為較佳，碳數 1~4 的直鏈烷基為更佳。

**【0151】** 上述式 (S-3) 中， $R^{10} \sim R^{12}$  分別獨立地表示氫原子、碳數 1~6 的烷基或乙醯基。

作為式 (S-3) 的  $R^{10} \sim R^{12}$  所表示之碳數 1~6 的烷基的具體例，可舉出與式 (S-1) 的  $R^1 \sim R^3$  所表示之碳數 1~6 的烷基的具體例相同者。

**【0152】** 作為式 (S-3) 的  $R^{10} \sim R^{12}$ ， $R^{10}$  及  $R^{12}$  為碳數 1~6 的烷基且  $R^{11}$  為氫原子、碳數 1~6 的烷基或乙醯基為較佳， $R^{10}$  及  $R^{12}$  為碳數 1~6 的直鏈烷基且  $R^{11}$  為氫原子、碳數 1~6 的直鏈烷基或乙醯基為更佳， $R^{10}$  及  $R^{12}$  為相同的碳數 1~6 的直鏈烷基且  $R^{11}$  為氫原子、碳數 1~6 的直鏈烷基或乙醯基為進一步較佳， $R^{10}$  及  $R^{12}$  為甲基且  $R^{11}$  為氫原子、碳數 1~2 的直鏈烷基或乙醯基為特佳。

**【0153】** 作為由式 (S-1) 表示之化合物，上述  $R^1 \sim R^{12}$  及 X 各自的較佳者的組合為更佳，更佳者的組合為進一步較佳。

**【0154】** 以下示出由上述式 (S-1) 表示之化合物的具體例，但本發明並不限定於該等具體例。

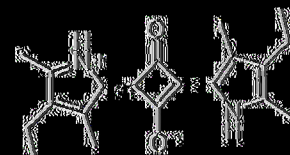
**【0155】** [化學式 24]



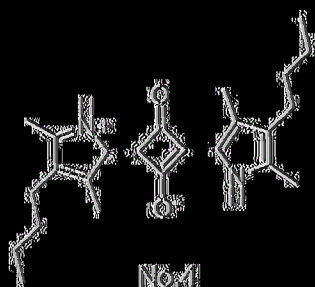
No.1



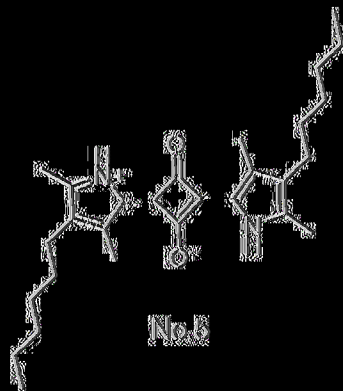
No.2



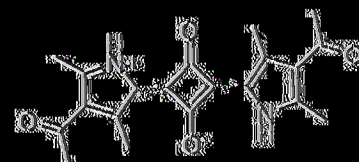
No.3



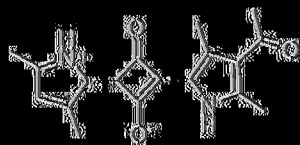
No.4



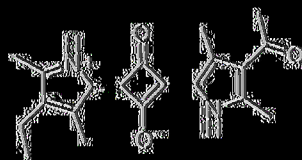
No.5



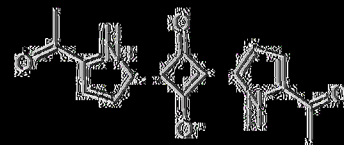
No.6



No.7



No.8



No.9



No.10



No.11



No.12

(0156) [化學式 25]



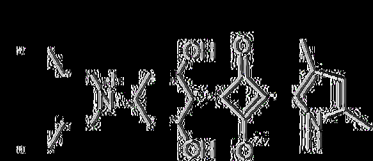
No.13



No.14



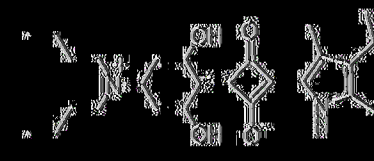
No.15



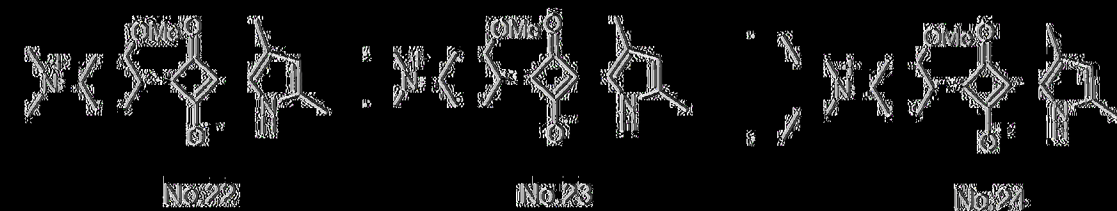
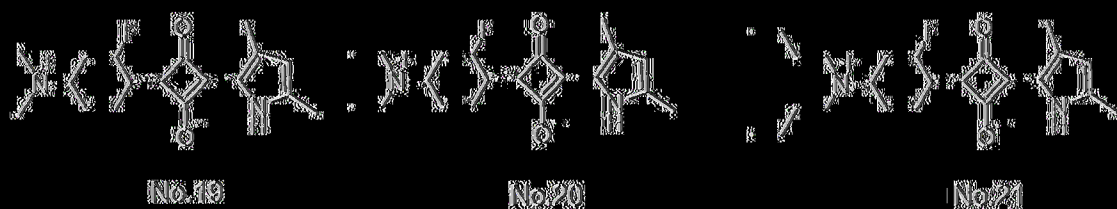
No.16



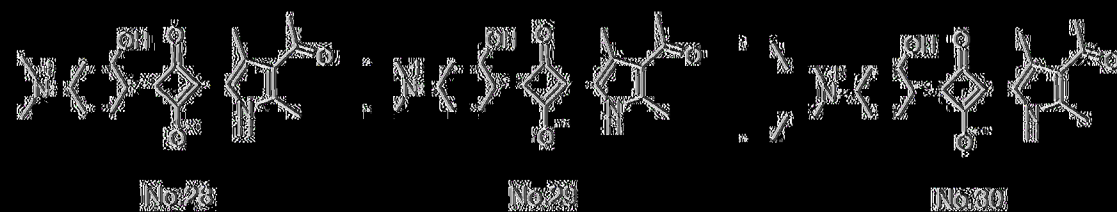
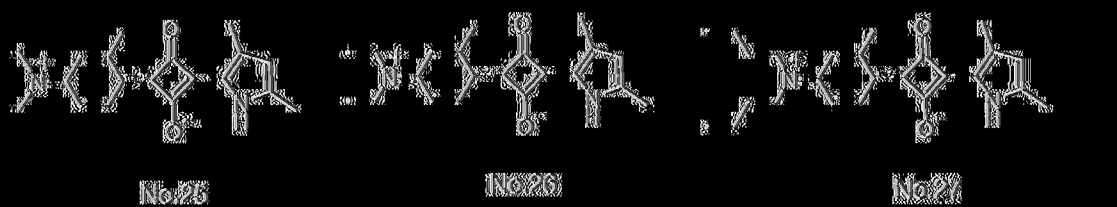
No.17



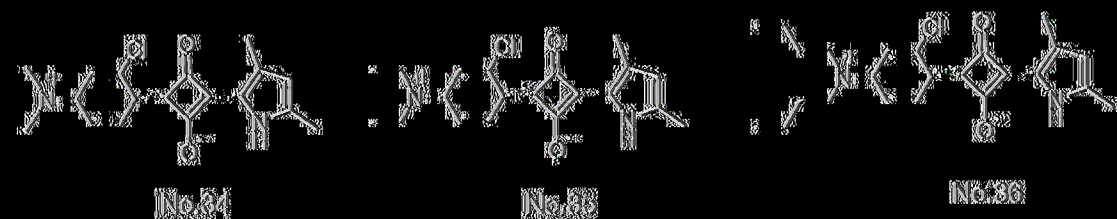
No.18

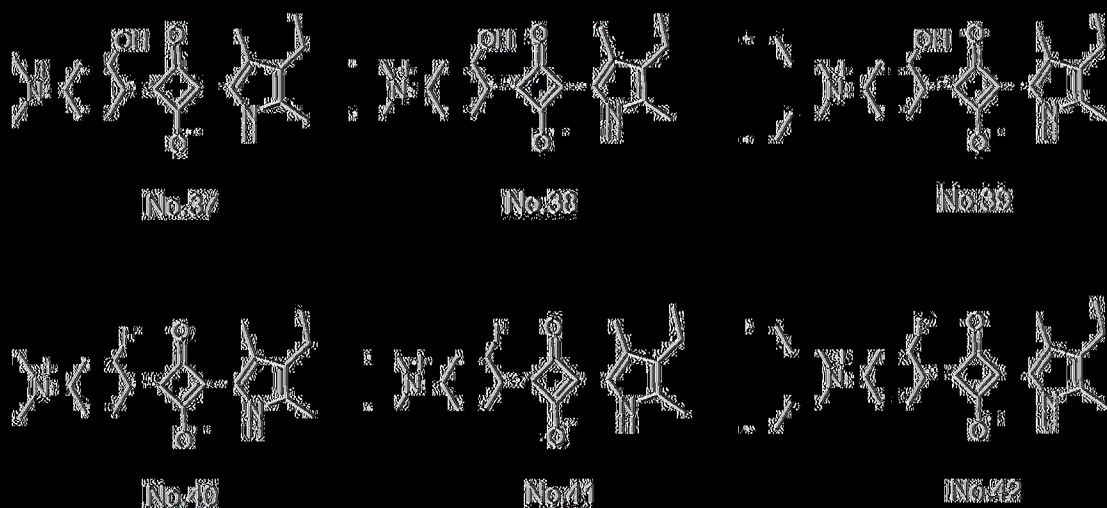


〔0157〕 〔化學式 26〕



〔0158〕 〔化學式 27〕





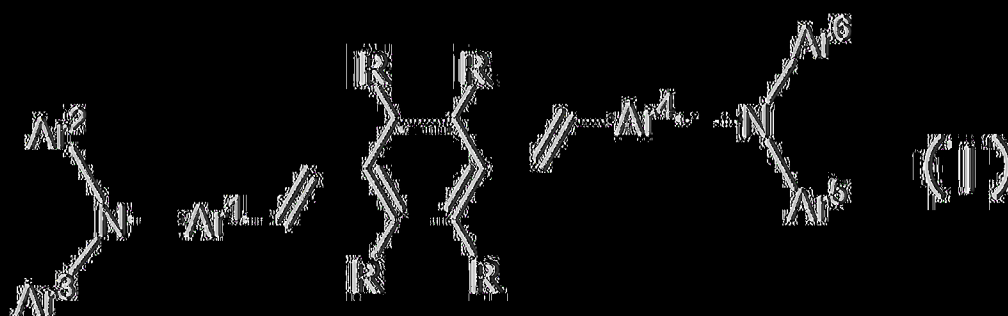
〔0159〕。具有三芳基胺骨架之化合物

作為具有三芳基胺骨架之化合物，例如，可舉出由式 (T) 表示之化合物及由式 (U) 表示之化合物。作為具有三芳基胺骨架之化合物，由式 (U) 表示之化合物為較佳。

〔0160〕。由式 (T) 表示之化合物

以下示出式 (T)。

〔0161〕 [化學式 28]



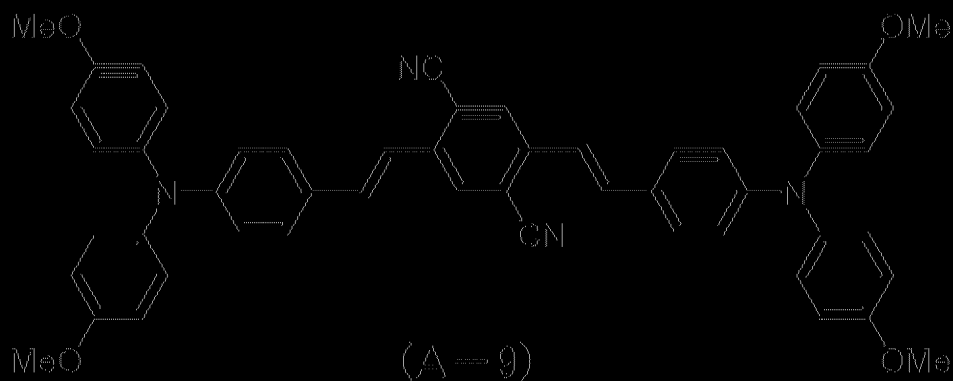
〔0162〕 式 (T) 中， $Ar^1$  及  $Ar^4$  分別獨立地表示可具有取代基的仲芳基或可具有取代基的雜仲芳基。

$Ar^2$ 、 $Ar^3$ 、 $Ar^5$  及  $Ar^6$  分別獨立地表示可具有取代基的芳基或可具有取代基的雜芳基。

存在 4 個之  $R$  分別獨立地表示氮原子或取代基 (較佳為氫基)。

以下示出由上述式 (T) 表示之化合物的具體例，但本發明並不限定於該等具體例。

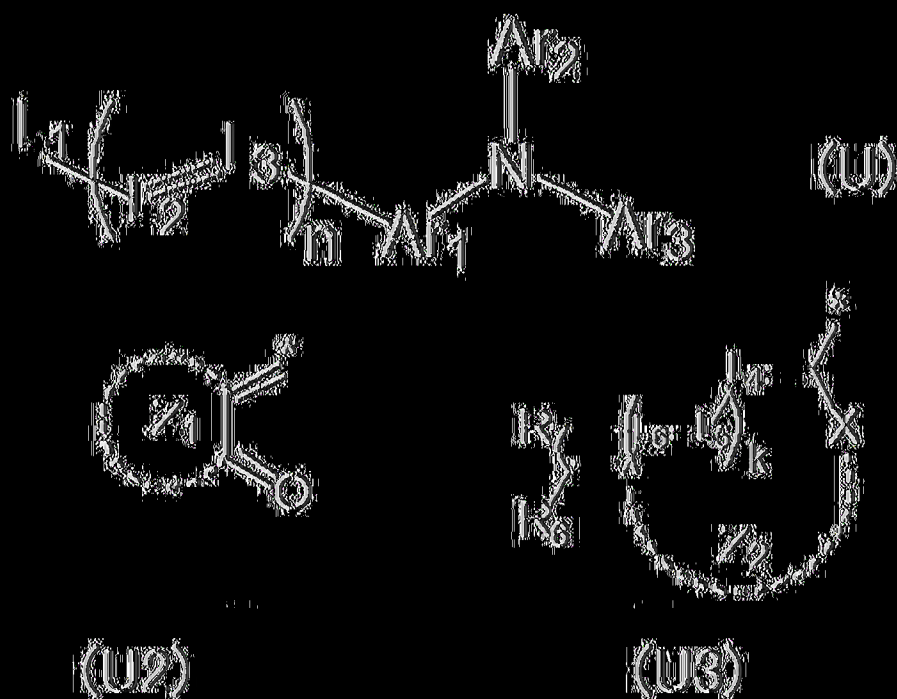
〔0163〕 [化學式 29]



〔0164〕 〃〃由式 (U) 表示之化合物

以下示出式 (U)。

〔0165〕 [化學式 30]



〔0166〕 式 (U) 中， $L_2$  及  $L_3$  分別獨立地表示可具有取代基的次甲基。

$m$  表示 0~2 的整數。

$Ar_1$  表示可具有取代基的伸芳基或可具有取代基的雜伸芳基。

$Ar_2$  及  $Ar_3$  分別獨立地表示可具有取代基的芳基、可具有取代基的烷基或可具有取代基的雜芳基。

$Ar_1$  與  $Ar_2$ 、 $Ar_2$  與  $Ar_3$ 、 $Ar_3$  與  $Ar_1$  (較佳為  $Ar_1$  中伸芳基或雜伸芳基中的取代基與  $Ar_2$  中芳基或雜芳基中的取代基、 $Ar_2$  中芳基或雜芳基中的取代基與  $Ar_3$  中芳基或雜芳基中的取代基、及  $Ar_1$  中伸芳基或雜伸芳基中的取代基與  $Ar_2$  中芳基或雜芳基中的取代基) 分別可以相互鍵結而形成環。

$L_1$  表示與由式(U2)表示之基鍵結之可具有取代基的次甲基或由式(U3)表示之基。

**【0167】** 式(U2)中， $Z_1$  為包含與鍵結於  $L_1$  之碳原子和上述碳原子相鄰的羰基之環，表示可具有取代基的 5 員環、可具有取代基的 6 員環或包含 5 員環及 6 員環中的至少任一個且可具有取代基的縮合環。作為此類環，通常在部花青色素中用作酸性核者為較佳。

\*表示與由  $L_1$  表示之可具有取代基的次甲基的鍵結位置。

**【0168】** 式(U3)中， $X$  表示雜原子。

$Z_2$  為包含  $X$  之環，表示可具有取代基的 5 員環、可具有取代基的 6 員環、可具有取代基的 7 員環或包含 5 員環、6 員環及 7 員環中的至少任一個且可具有取代基的縮合環。

$L_4 \sim L_6$  分別獨立地表示可具有取代基的次甲基。

$L_5$  及/或  $L_6$  存在複數個時，存在複數個之  $L_5$  及/或  $L_6$  可以彼此相同或互不相同。

$R_6$  及  $R_7$  分別獨立地表示氫原子或取代基。 $R_6$  與  $R_7$  可以相互鍵結而形

成環。

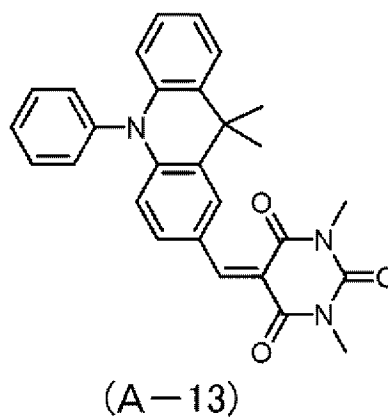
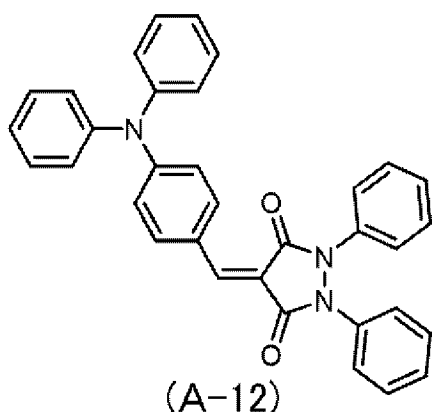
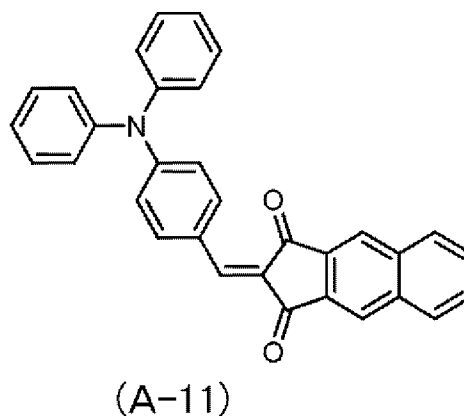
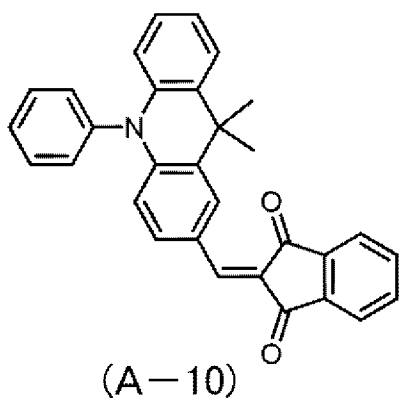
k 表示 0~2 的整數。

\*表示與  $L_2$  或  $Ar_1$  鍵結之鍵結位置。

【0169】 作為由式 (U) 表示之化合物，亦能夠使用日本特開 2015-118977 號公報中的由通式 (1) 表示之化合物，該等內容編入本說明書中。

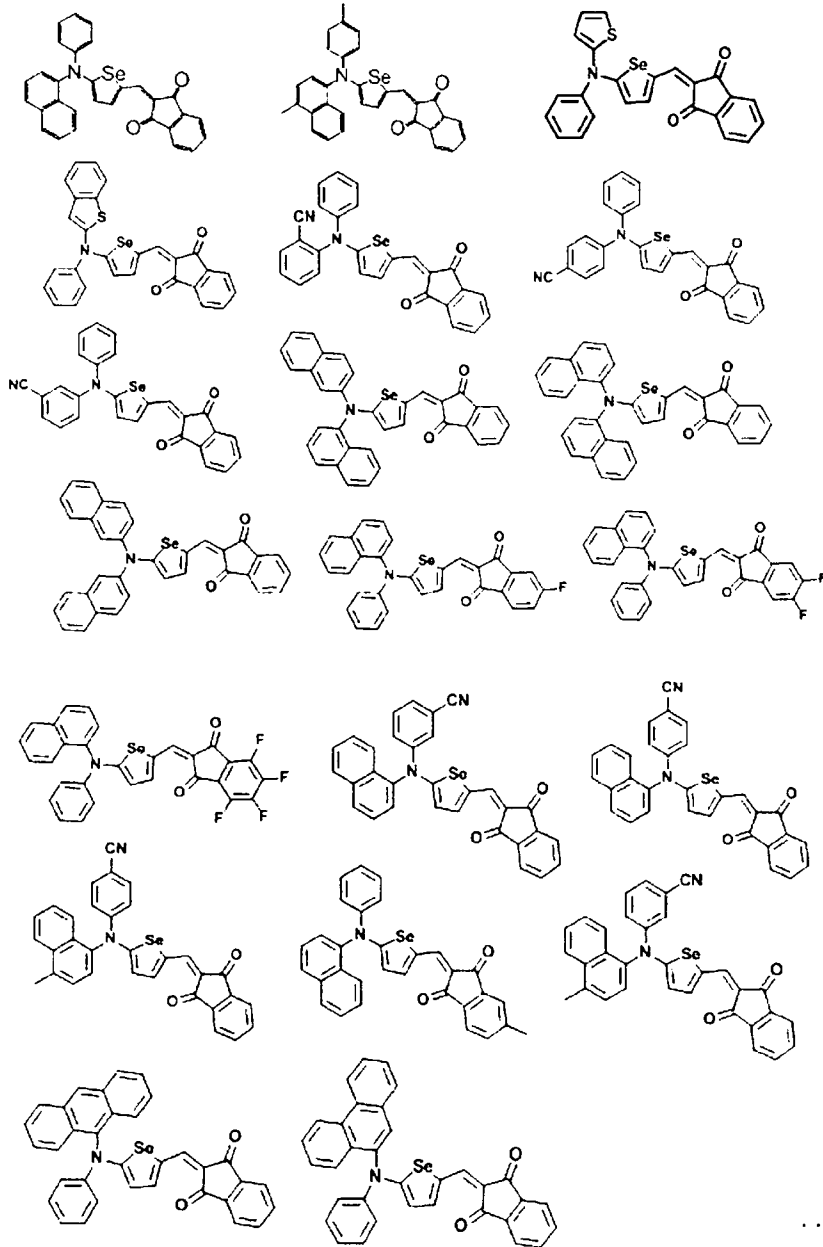
【0170】 以下示出由上述式 (U) 表示之化合物的具體例，但本發明並不限定於該等具體例。

【0171】 [化學式 31]



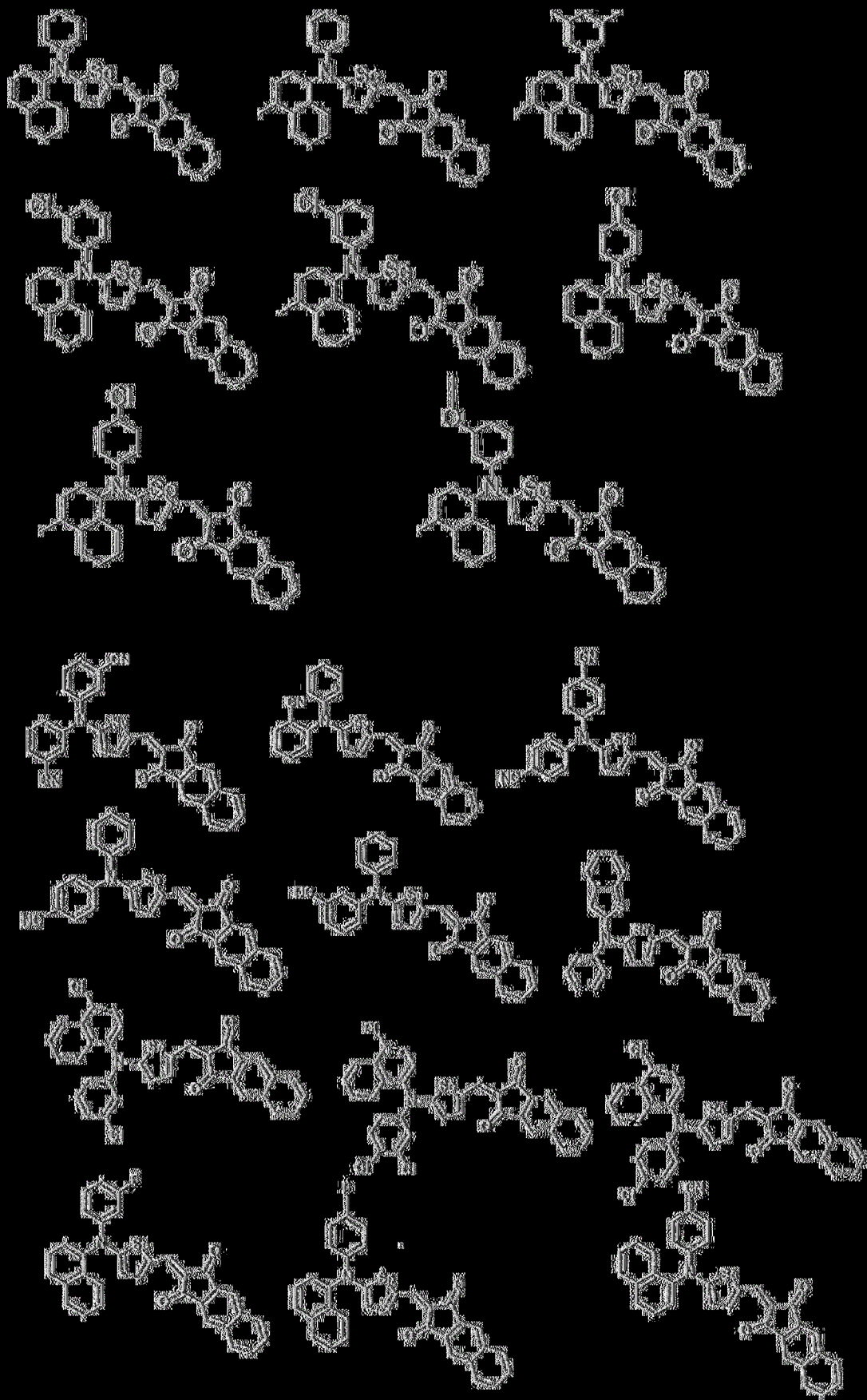
【0172】 又，除了上述以外，由以下所示之通式 (5-1)、通式 (5-2)、通式 (5-3)、通式 (5-4) 及通式 (5-5) 表示之化合物亦能夠作為由式 (U) 表示之具有三芳基胺骨架之化合物的具體例舉出。

【0173】 [化學式 32]

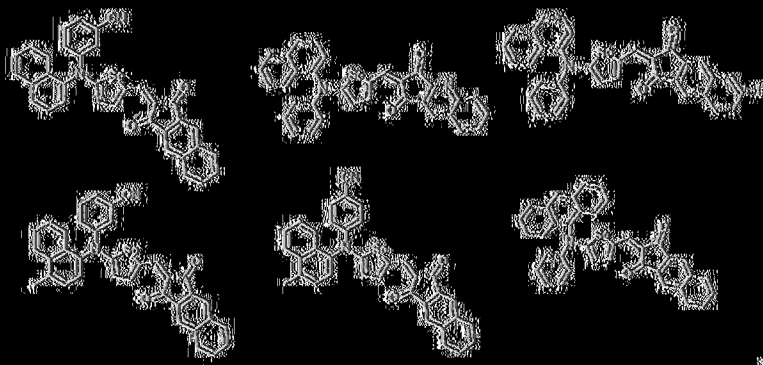


.....通式 (5-1)

【0174】 [化學式 33]

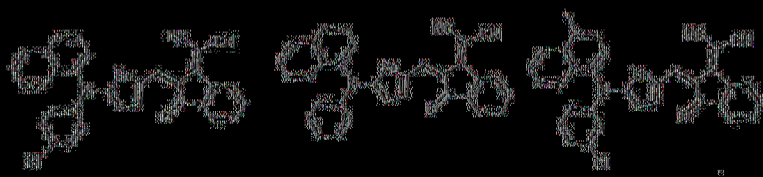


〔0175〕 〔化學式 34〕



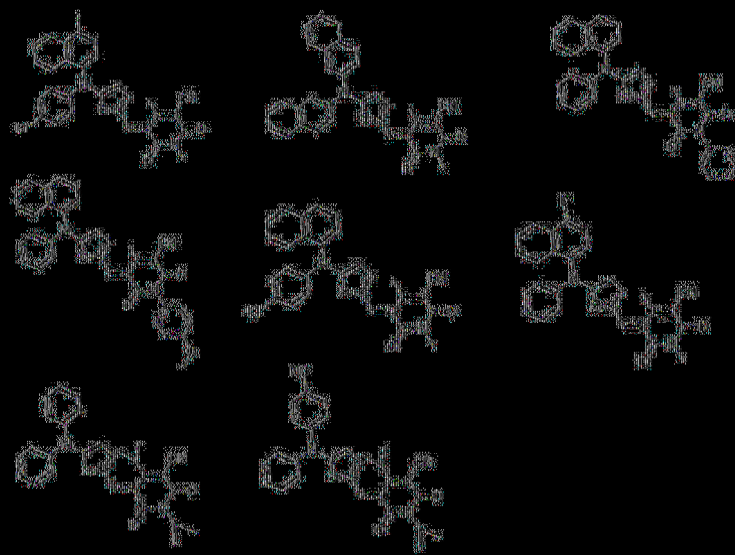
.....通式 (5.2)

[(01/6) | [化學式 35]



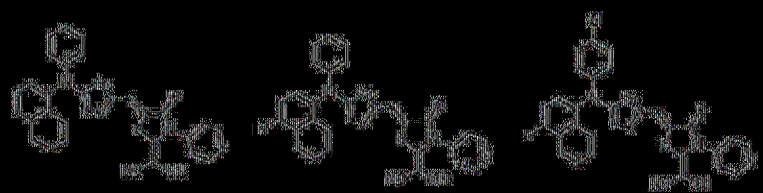
.....通式 (5.3)

[(01/7) | [化學式 36]



.....通式 (5.4)

[(01/8) | [化學式 37]



.....通式 (5.5)

【0179】 第 2 化合物的分子量並沒有特別限制，300~1200 為較佳。分子量為 1200 以下時，蒸鍍溫度不會提高，化合物不易分解。分子量為 300 以上時，蒸鍍膜的玻璃轉移溫度不會降低，光電轉換元件的耐熱性會得到提高。

【0180】 第 2 化合物的極大吸收波長為 490~600nm 為較佳，510~590nm 為更佳，530~590nm 為進一步較佳。

【0181】 從與後述 n 型半導體材料的能階匹配方面考慮，第 2 化合物為單獨膜中的游離電位為 5.0~6.2eV 的化合物為較佳，單獨膜中的游離電位為 5.2~6.1eV 的化合物為更佳，單獨膜中的游離電位為 5.4~6.0eV 的化合物為進一步較佳。

再者，在本說明書中，游離電位為利用 RIKEN KEIKI CO.,LTD.製光電子分光裝置 AC-2 對化合物的單獨膜進行測定而得之值。

【0182】 相對於光電轉換膜整體之第 2 化合物的含量（=（第 2 化合物以單層換算計之膜厚/光電轉換膜整體的膜厚）×100）為 5~70 體積%為較佳，10~50 體積%為更佳，15~40 體積%為進一步較佳。

【0183】 光電轉換膜整體中第 1 化合物的含量與第 2 化合物的含量之比（第 2 化合物以單層換算計之膜厚/第 1 化合物以單層換算計之膜厚）為 10/90~90/10 為較佳，30/70~70/30 為更佳，40/60~60/40 為進一步較佳。

【0184】 <n 型半導體材料>

光電轉換膜包含 n 型半導體材料作為第 1 化合物及第 2 化合物以外的其他成分為較佳。n 型半導體材料為受體性有機半導體材料（化合物），係指具有容易接受電子的性質之有機化合物。



喹二唑衍生物；蔥醌基二甲烷衍生物；二苯醌（diphenyl quinone）衍生物；浴銅靈（bathocuproine）、紅啡啉（bathophenanthroline）及該等的衍生物；三唑化合物；二苯乙烯基伸芳基（distyryl arylene）衍生物；具有含氮雜環化合物作為配位體之金屬錯合物；以及矽雜環戊二烯化合物；日本特開 2006-100767 號公報的[0056]~[0057]段中記載之化合物。

**【0186】** 其中，n 型半導體材料包含選自包括富勒烯及其衍生物之群組中的富勒烯類為較佳。

在此，光電轉換元件包含上述富勒烯類時，能夠期待元件性能更優異，但由於富勒烯類的吸收波長存在於藍色區域，因此認為對綠光的選擇性變差，有可能對本發明的效果不會產生較佳之影響。

然而，已確認到光電轉換元件即使進一步包含富勒烯類，亦可獲得本發明的效果，詳細機理雖尚不明確，但本發明人推測由於第 1 化合物具有非對稱結構，因此亦會影響富勒烯的凝聚抑制，並且亦能夠抑制吸收源自富勒烯類的藍光。

**【0187】** 作為富勒烯，例如，可舉出富勒烯 C<sub>60</sub>、富勒烯 C<sub>70</sub>、富勒烯 C<sub>76</sub>、富勒烯 C<sub>78</sub>、富勒烯 C<sub>80</sub>、富勒烯 C<sub>82</sub>、富勒烯 C<sub>84</sub>、富勒烯 C<sub>90</sub>、富勒烯 C<sub>96</sub>、富勒烯 C<sub>240</sub>、富勒烯 C<sub>540</sub> 及混合富勒烯。

富勒烯衍生物例如可舉出對上述富勒烯加成取代基而成之化合物。取代基為烷基、芳基或雜環基為較佳。富勒烯衍生物為日本特開 2007-123707 號公報中記載之化合物為較佳。

n 型半導體材料包含富勒烯類時，相對於光電轉換膜中 n 型半導體材料的合計含量之富勒烯類的含量（=（富勒烯類以單層換算計之膜厚/總 n 型半

導體材料以單層換算計之膜厚) ×100) 為 15~100 體積%為較佳, 35~100 體積%為更佳。

**【0188】** 有機色素可以代替上段為止記載之 n 型半導體材料或與上段為止記載之 n 型半導體材料一同用作 n 型半導體材料。

藉由使用有機色素作為 n 型半導體材料, 容易將光電轉換元件的吸收波長(極大吸收波長)控制在任意波長範圍內。

上述有機色素例如可舉出花青色素、苯乙烯色素、半花青色素、部花青色素(包括零次甲基部花青(簡單部花青))、羅丹花青色素、阿羅波拉色素、氧雜菁色素、半氧雜菁色素、方酸菁色素、克酮酸色素、氮次甲基色素、香豆素色素、亞芳基色素、蔥醌色素、三苯基甲烷色素、偶氮色素、次甲基偶氮色素、茂金屬色素、萘酮色素、俘精酸酐色素、芘色素、啡啉色素、啡噻啉色素、醌色素、二苯基甲烷色素、多烯色素、吡啶色素、吡啶酮色素、二苯基胺色素、喹啉黃色素、啡啉色素、酞芘色素、二噁烷色素、卟啉色素、葉綠素色素、酞青色素、亞酞青色素、金屬錯合物色素、日本特開 2014-82483 號公報的[0083]~[0089]段中記載之化合物、日本特開 2009-167348 號公報的[0029]~[0033]段中記載之化合物、日本特開 2012-77064 號公報的[0197]~[0227]段中記載之化合物、WO2018-105269 號公報的[0035]~[0038]段中記載之化合物、WO2018-186389 號公報的[0041]~[0043]段中記載之化合物、WO2018-186397 號公報的[0059]~[0062]段中記載之化合物、WO2019-009249 號公報的[0078]~[0083]段中記載之化合物、WO2019-049946 號公報的[0054]~[0056]段中記載之化合物、WO2019-054327 號公報的[0059]~[0063]段中記載之化合物及 WO2019-098161 號公報的[0086]~[0087]段中記

載之化合物。

n 型半導體材料包含有機色素時，在光電轉換膜中相對於 n 型半導體材料的合計含量之上述有機色素的含量(=(有機色素以單層換算計之膜厚/所有 n 型半導體材料以單層換算計之膜厚)×100)為 15~100 體積%為較佳，35~100 體積%為更佳。

**【0189】** n 型半導體材料的分子量為 200~1200 為較佳，200~1000 為更佳。

**【0190】** 光電轉換膜具有在混合了第 1 化合物及/或第 2 化合物和 n 型半導體材料之狀態下形成的本體異質結構為較佳。

又，光電轉換膜具備具有在混合了第 1 化合物、第 2 化合物及 n 型半導體材料之狀態下形成的本體異質結構之混合層亦較佳。

在此提及之本體異質結構為在光電轉換膜內構成光電轉換膜之材料彼此(例如，第 1 化合物與 n 型半導體材料彼此、第 2 化合物與 n 型半導體材料彼此或第 1 化合物、第 2 化合物及 n 型半導體材料彼此)混合、分散而成之層。

**【0191】** 相對於光電轉換膜整體之 n 型半導體材料的含量(=(n 型半導體材料以單層換算計之膜厚/光電轉換膜整體的膜厚)×100)為 5~70 體積%為較佳，10~50 體積%為更佳，15~40 體積%為進一步較佳，20~30 體積%為最佳。

**【0192】** 從光電轉換元件的響應性方面考慮，光電轉換膜整體中相對於特定化合物(第 1 化合物和第 2 化合物的統稱)和 n 型半導體材料的合計含量之特定化合物的含量(=特定化合物以單層換算計之膜厚的合計/(特

定化合物以單層換算計之膜厚的合計+n 型半導體材料以單層換算計之膜厚)  
×100) 為 40~90 體積%為較佳, 60~90 體積%為更佳。

又, 光電轉換膜包含後述 p 型半導體材料時, 光電轉換膜整體中特定化合物的含量 (=特定化合物以單層換算計之膜厚的合計/(特定化合物以單層換算計之膜厚的合計+n 型半導體材料以單層換算計之膜厚+p 型半導體材料以單層換算計之膜厚) ×100) 為 15~75 體積%為較佳, 25~75 體積%為更佳。

**【0193】** 再者, 光電轉換膜實質上僅由特定化合物、根據需要包含的 n 型半導體材料及根據需要包含的 p 型半導體材料構成為較佳。實質上係指, 相對於光電轉換膜總質量, 特定化合物、n 型半導體材料及 p 型半導體材料的合計含量為 95 質量%以上。

**【0194】** 再者, 光電轉換膜中包含的 n 型半導體材料可以單獨使用 1 種, 亦可以同時使用 2 種以上。

**【0195】** <p 型半導體材料>

光電轉換膜包含 p 型半導體材料作為第 1 化合物及第 2 化合物以外的其他成分為較佳。

p 型半導體材料為供體性有機半導體材料 (化合物), 並且係指具有容易提供電子的性質之有機化合物。

更具體而言, p 型半導體材料係指電洞傳輸性比上述第 1 化合物及第 2 化合物更優異的有機化合物。

在本說明書中, 化合物的電洞傳輸性 (電洞載子遷移率) 例如能夠藉由 Time-of-Flight 法 (飛行時間法、TOF 法) 或使用場效電晶體元件進行評價。

p 型半導體材料的電洞載子遷移率為  $10^4\text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$  以上為較佳， $10^3\text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$  以上為更佳， $10^2\text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$  以上為進一步較佳。上述電洞載子遷移率的上限並沒有特別限制，從在未經光照射的狀態下抑制微量電流流動方面考慮，例如  $10\text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$  以下為較佳。

又，p 型半導體材料對上述第 1 化合物及第 2 化合物兩者的游離電位均小亦較佳。

又，p 型半導體材料在可見光區域內不具有吸收為較佳。

**【0196】** 光電轉換膜具有在混合了第 1 化合物及/或第 2 化合物、p 型半導體材料（較佳為進一步混合上述 n 型半導體材料）之狀態下形成的本體異質結構為較佳。

又，光電轉換膜具有在混合了第 1 化合物、第 2 化合物、p 型半導體材料（較佳為進一步混合上述 n 型半導體材料）之狀態下形成的本體異質結構亦較佳。

此處提及之本體異質結構為在光電轉換膜內構成光電轉換膜之材料彼此（例如，第 1 化合物與 p 型半導體材料彼此、第 2 化合物與 p 型半導體材料彼此、第 1 化合物、第 2 化合物及 p 型半導體材料彼此、第 1 化合物、n 型半導體材料及 p 型半導體材料彼此、第 2 化合物、n 型半導體材料及 p 型半導體材料彼此或第 1 化合物、第 2 化合物、n 型半導體材料及 p 型半導體材料彼此）混合、分散而成之層。

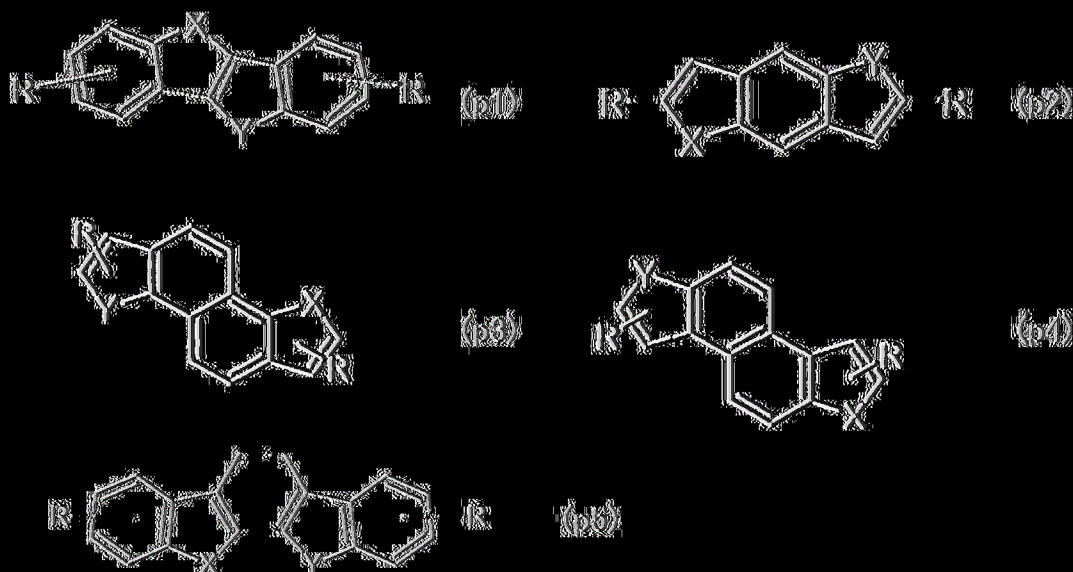
**【0197】** 作為 p 型半導體材料，例如可舉出三芳基胺化合物（例如，N,N'-雙（3-甲基苯基）-（1,1'-聯苯基）-4,4'-二胺（TPD）、4,4'-雙[N-（萘基）-N-苯基-胺基]聯苯（ $\alpha$ -NPD）、日本特開 2011-228614 號公報的[0128]～

[0148]段中記載之化合物、日本特開 2011-176259 號公報的[0052]～[0063]段中記載之化合物、日本特開 2011-225544 號公報的[0119]～[0158]段中記載之化合物、日本特開 2015-153910 號公報的[0044]～[0051]段中記載之化合物及日本特開 2012-94660 號公報的[0086]～[0090]段中記載之化合物等)、吡啶啞化合物、苯乙烯胺化合物、脞化合物、聚矽烷化合物、噻吩化合物(例如,噻吩并噻吩衍生物、二苯并噻吩衍生物、苯并二噻吩衍生物、二噻吩并噻吩衍生物、[1]苯并噻吩并[3,2-b]噻吩(BTBT)衍生物、噻吩并[3,2-f:4,5-f']雙[1]苯并噻吩(TBBT)衍生物、日本特開 2018-14474 號的[0031]～[0036]段中記載之化合物、WO2016-194630 號的[0043]～[0045]段中記載之化合物、WO2017-159684 號的[0025]～[0037]、[0099]～[0109]段中記載之化合物、日本特開 2017-076766 號公報的[0029]～[0034]段中記載之化合物、WO2018-207722 的[0015]～[0025]段中記載之化合物、日本特開 2019-54228 的[0045]～[0053]段中記載之化合物、WO2019-058995 的[0045]～[0055]段中記載之化合物、WO2019-081416 的[0063]～[0089]段中記載之化合物、日本特開 2019-80052 的[0033]～[0036]段中記載之化合物、WO2019-054125 的[0044]～[0054]段中記載之化合物、WO2019-093188 的[0041]～[0046]段中記載之化合物等)、花青化合物、氧雜薈化合物、多胺化合物、吲哚化合物、吡咯化合物、吡啶化合物、聚伸芳基化合物、縮合芳香族碳環化合物(例如,萘衍生物、蔥衍生物、菲衍生物、稠四苯衍生物、稠五苯衍生物、芘衍生物、芘衍生物及 1,2-苯并芘(fluoranthene)衍生物)、卟啉化合物、酞青化合物、三唑化合物、嘔二唑化合物、咪唑化合物、聚芳基烷烴化合物、吡啶啞酮化合物、胺基取代查耳酮化合物、嘔唑酮化合物、萸酮化合物、矽氮烷化合物

以及具有含氮(雜)環化合物作為配位體之金屬錯合物。

〔0198〕 又，p型半導體材料為由式(p1)表示之化合物、由式(p2)表示之化合物、由式(p3)表示之化合物、由式(p4)表示之化合物或由式(p5)表示之化合物亦較佳。

〔0199〕 [化學式 38]



〔0200〕 在式(p1)~(p5)中，存在2個之R分別獨立地表示氮原子或取代基(烷基、烷氧基、鹵素原子、烷硫基、(雜)芳硫基、烷基胺基、(雜)芳基胺基或(雜)芳基等。該等基在可能的情況下可以進一步具有取代基。例如，(雜)芳基可以為可進一步具有取代基的芳基芳基(亦即聯芳基。構成該基之芳基中的至少一者可以為雜芳基))。

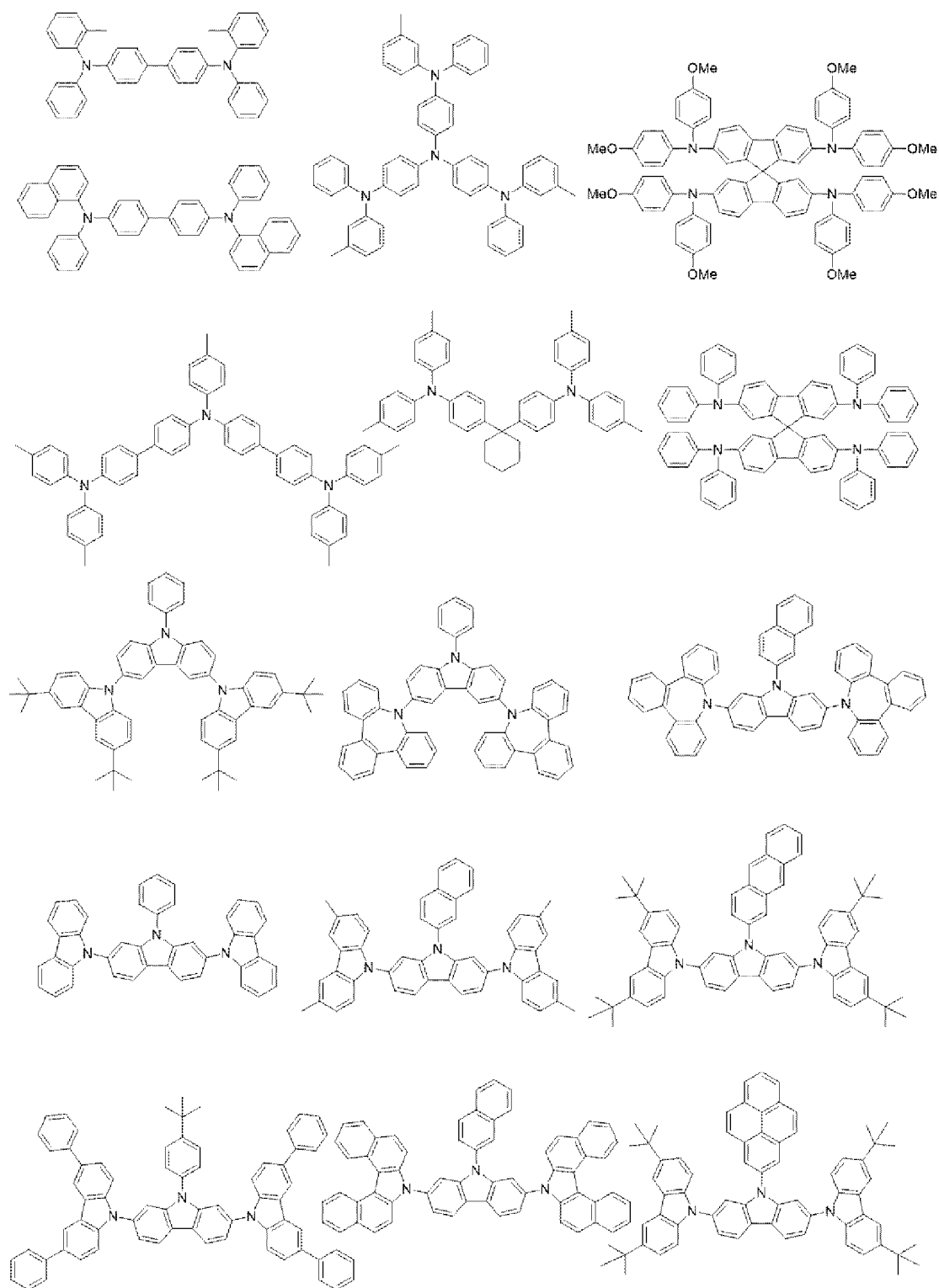
又，作為R，WO2019/081416的式(IX)中的由R表示之基亦較佳。

X及Y分別獨立地表示CR<sup>2</sup><sub>2</sub>、硫原子、氧原子、NR<sup>2</sup>或SiR<sup>2</sup><sub>2</sub>。

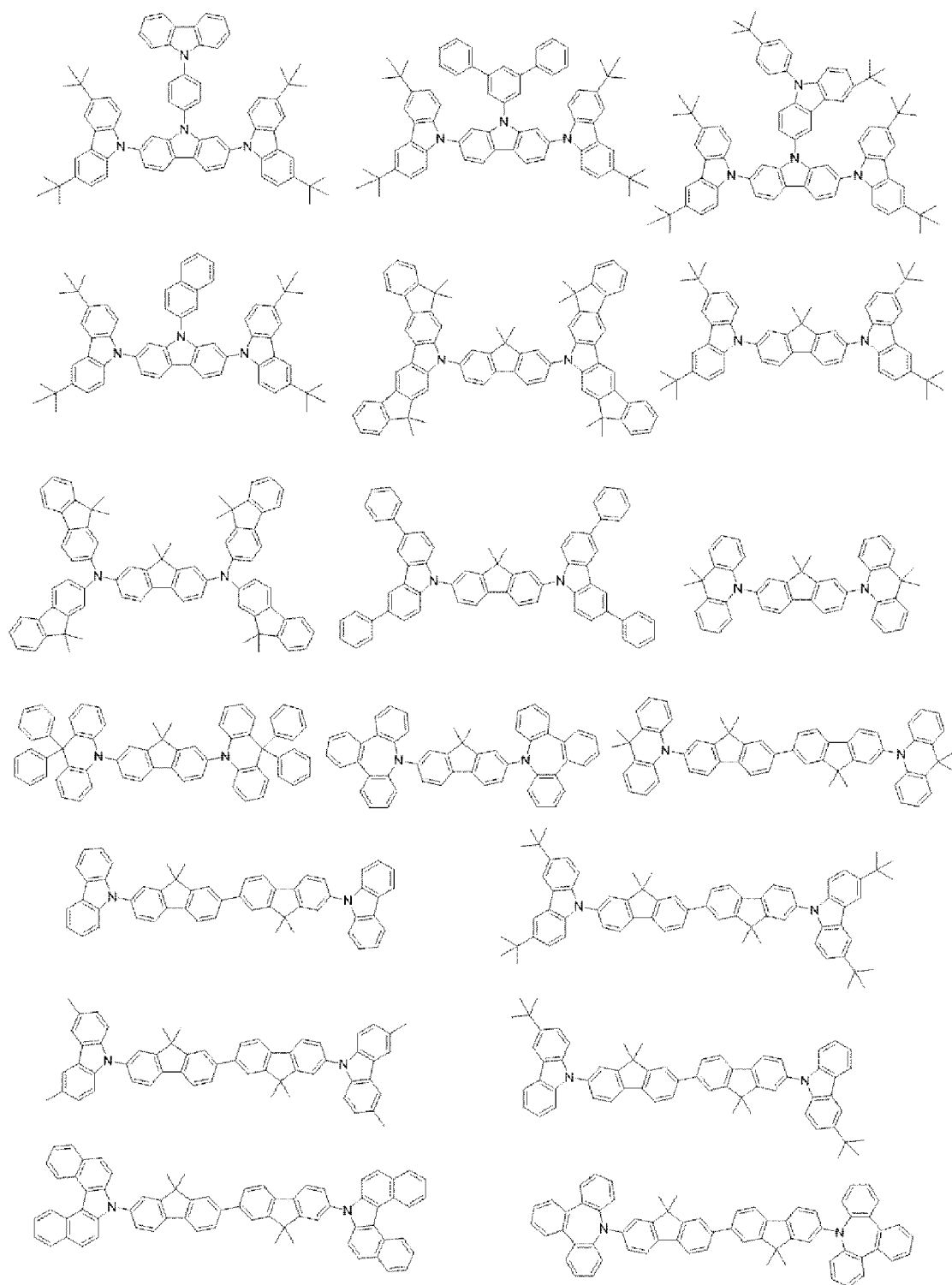
R<sup>2</sup>表示氮原子、可具有取代基的烷基(較佳為甲基或三氟甲基)、可具有取代基的芳基或可具有取代基的雜芳基中，存在2個以上之R<sup>2</sup>可以彼此相同或互不相同。

【0201】 以下，例示能夠用作 p 型半導體材料之化合物。

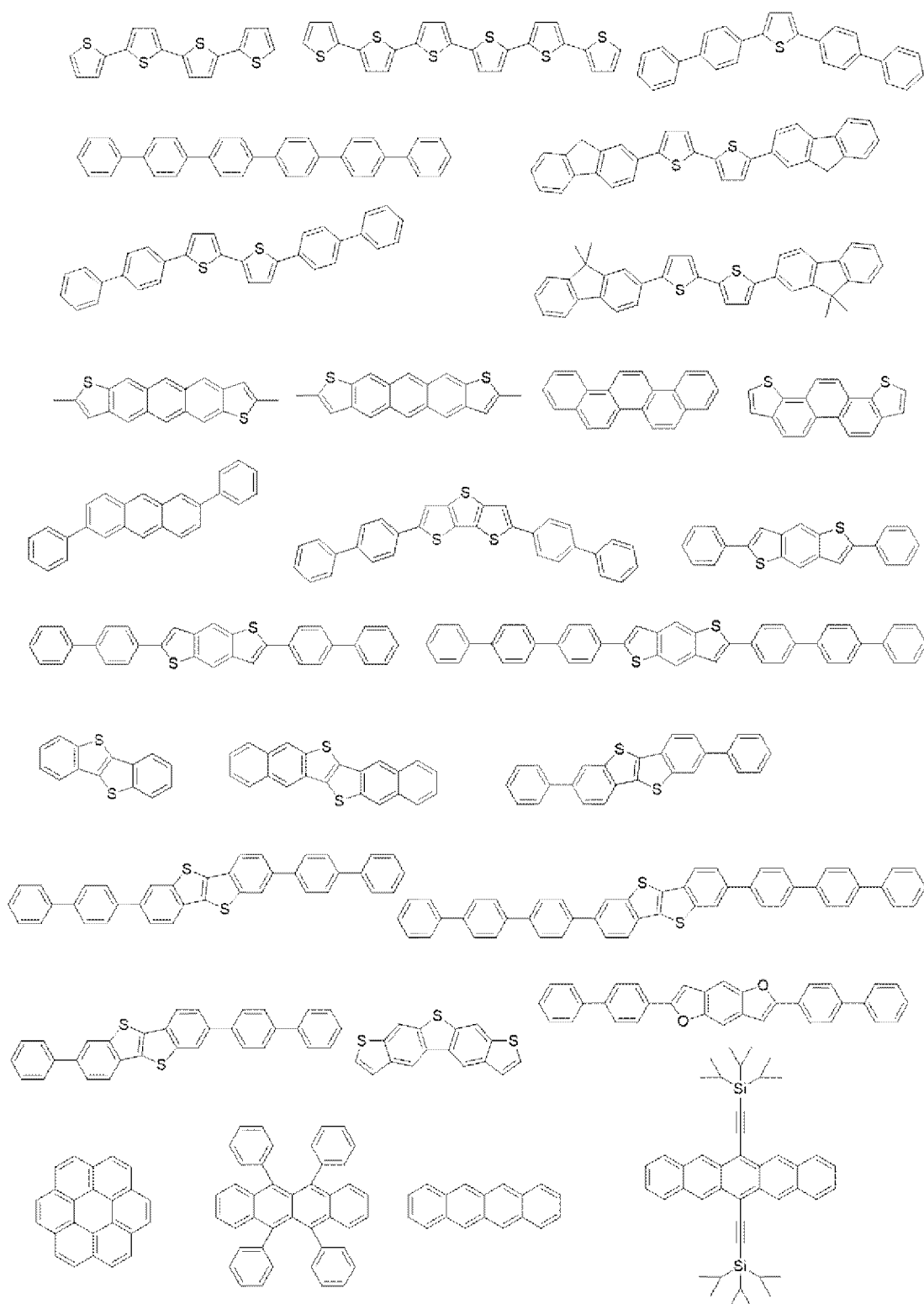
【0202】 [化學式 39]



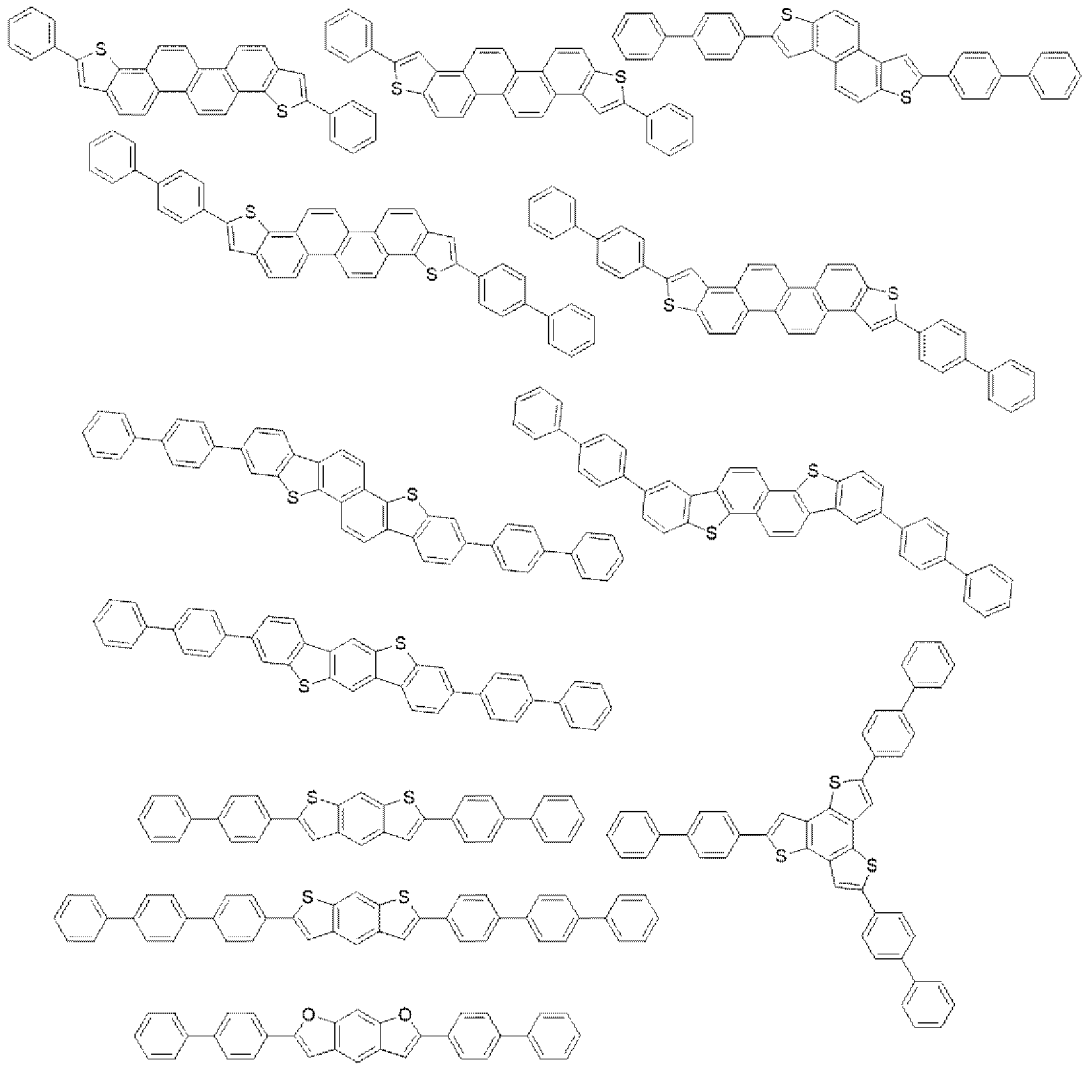
【0203】 [化學式 40]



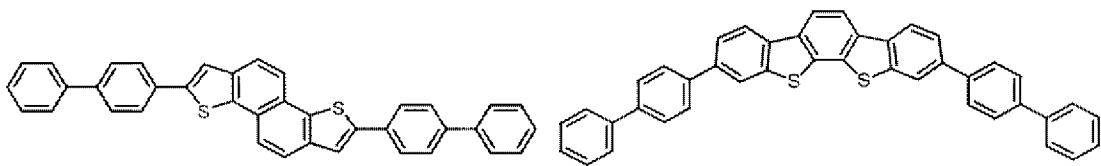
【0204】 [化學式 41]



【0205】 [化學式 42]



【0206】 [化學式 43]



【0207】 相對於光電轉換膜整體之 p 型半導體材料的含量 (= (p 型半導體材料以單層換算計之膜厚/光電轉換膜整體的膜厚) × 100) 為 5~70 體積%為較佳，10~50 體積%為更佳，15~40 體積%為進一步較佳。

【0208】 再者，光電轉換膜中包含的 p 型半導體材料可以單獨使用 1 種，亦可以同時使用 2 種以上。

【0209】 本發明中的光電轉換膜為非發光性膜，並且具有不同於有機

電致發光元件（OLED：Organic Light Emitting Diode）的特徵。非發光性膜係指發光量子效率為 1% 以下的膜，發光量子效率為 0.5% 以下為較佳，0.1% 以下為更佳。

**【0210】** <成膜方法>

光電轉換膜主要能夠藉由乾式成膜法成膜。乾式成膜法例如可舉出蒸鍍法（尤其是真空蒸鍍法）、濺射法、離子鍍法及 MBE（Molecular Beam Epitaxy：分子束磊晶）法等物理氣相沉積法以及電漿聚合等 CVD（Chemical Vapor Deposition：化學氣相沉積）法。其中，真空蒸鍍法為較佳。在藉由真空蒸鍍法形成光電轉換膜的情況下，真空度及蒸鍍溫度等製造條件能夠按照常規方法來設定。

**【0211】** 光電轉換膜的厚度（光電轉換膜為積層型時為光電轉換膜整體的厚度）為 10~1000nm 為較佳，50~800nm 為更佳，50~500nm 為進一步較佳。

又，光電轉換膜為積層型時的各層的厚度分別獨立地為 5~500nm 為較佳，25~400nm 為更佳，25~250nm 為進一步較佳。

**【0212】** <電極>

電極（上部電極（透明導電性膜）15 和下部電極（導電性膜）11）由導電性材料構成。導電性材料可舉出金屬、合金、金屬氧化物、導電性化合物及該等的混合物等。

由於光從上部電極 15 入射，因此上部電極 15 相對於欲檢測的光透明為較佳。構成上部電極 15 之材料例如可舉出摻雜有銻或氟等之氧化錫（ATO：Antimony Tin Oxide（氧化錫銻）、FTO：Fluorine doped Tin Oxide（摻氟氧化

錫))、氧化錫、氧化鋅、氧化銦、氧化銦錫 (ITO: Indium Tin Oxide) 及氧化鋅銦 (IZO: Indium zinc oxide) 等導電性金屬氧化物；金、銀、鉻及鎳等金屬薄膜；該等金屬與導電性金屬氧化物的混合物或積層物；以及聚苯胺、聚噻吩及聚吡咯等有機導電性材料等。其中，從高導電性及透明性等方面考慮，導電性金屬氧化物為較佳。

**【0213】** 通常，使導電性膜比某一膜厚範圍薄時，會帶來電阻值的急劇增加，但在組裝有本實施形態之光電轉換元件之固體攝像元件中，薄片電阻為  $100\sim 10000\Omega/\square$  為較佳，能夠薄膜化之膜厚範圍的自由度大。又，上部電極 (透明導電性膜) 15 的厚度越薄，所吸收之光的量越少，一般而言，透光率增加。透光率的增加會增大光電轉換膜中的光吸收，並增大光電轉換能，因此較佳。若考慮伴隨薄膜化的漏電流的抑制、薄膜的電阻值的增大及透射率的增加，則上部電極 15 的膜厚為  $5\sim 100\text{nm}$  為較佳， $5\sim 20\text{nm}$  為更佳。

**【0214】** 下部電極 11 根據用途存在具有透明性的情況和相反地不具有透明性而使光反射的情況。構成下部電極 11 之材料例如可舉出摻雜有銻或氟等之氧化錫 (ATO、FTO)、氧化錫、氧化鋅、氧化銦、氧化銦錫 (ITO) 及氧化銦鋅 (IZO) 等導電性金屬氧化物；金、銀、鉻、鎳、鈦、鎢及鋁等金屬、該等金屬的氧化物或氮化物等導電性化合物 (作為一例，舉出氮化鈦 (TiN))；該等金屬與導電性金屬氧化物的混合物或積層物；以及聚苯胺、聚噻吩及聚吡咯等有機導電性材料等。

**【0215】** 形成電極之方法並沒有特別限制，能夠根據電極材料適當選擇。具體而言，可舉出印刷方式及塗層方式等濕式方式；真空蒸鍍法、濺射

法及離子鍍法等物理方式；以及 CVD 及電漿 CVD 法等化學方式等。

電極材料為 ITO 時，可舉出電子束法、濺射法、電阻加熱蒸鍍法、化學反應法（溶膠-凝膠法等）及氧化銻錫的分散物的塗布等方法。

**【0216】** <電荷阻擋膜：電子阻擋膜、電洞阻擋膜>

本發明的光電轉換元件在導電性膜與透明導電性膜之間，除了光電轉換膜以外還具有 1 種以上的中間層亦為較佳。上述中間層可舉出電荷阻擋膜。藉由光電轉換元件具有該膜，所獲得之光電轉換元件的特性（光電轉換效率及響應性等）更優異。電荷阻擋膜可舉出電子阻擋膜和電洞阻擋膜。光電轉換元件至少具有電子阻擋膜作為中間層為較佳。

以下，對各膜進行詳細說明。

**【0217】** （電子阻擋膜）

電子阻擋膜為供體性有機半導體材料（化合物）。

電子阻擋膜的游離電位為 4.8~5.8eV 為較佳。

又，電子阻擋膜的游離電位  $I_p(B)$ 、第 1 化合物的游離電位  $I_p(1)$  及第 2 化合物的游離電位  $I_p(2)$  滿足  $I_p(B) \leq I_p(1)$  且  $I_p(B) \leq I_p(2)$  的關係為較佳。

作為電子阻擋膜，例如能夠使用 p 型有機半導體。p 型有機半導體可以單獨使用 1 種，亦可以使用 2 種以上。

**【0218】** p 型有機半導體例如可舉出三芳基胺化合物（例如，N,N'-雙（3-甲基苯基）-（1,1'-聯苯基）-4,4'-二胺（TPD）、4,4'-雙[N-（萘基）-N-苯基-胺基]聯苯（ $\alpha$ -NPD））、日本特開 2011-228614 號公報的[0128]~[0148]段中記載之化合物、日本特開 2011-176259 號公報的[0052]~[0063]段中記

載之化合物、日本特開 2011-225544 號公報的[0119]~[0158]段中記載之化合物、日本特開 2015-153910 號公報的[0044]~[0051]段中記載之化合物及日本特開 2012-94660 號公報的[0086]~[0090]段中記載之化合物等)、吡唑啉化合物、苯乙烯胺化合物、脲化合物、聚矽烷化合物、噻吩化合物(例如,噻吩并噻吩衍生物、二苯并噻吩衍生物、苯并二噻吩衍生物、二噻吩并噻吩衍生物、[1]苯并噻吩并[3,2-b]噻吩(BTBT)衍生物、噻吩并[3,2-f:4,5-f']雙[1]苯并噻吩(TBBT)衍生物、日本特開 2018-14474 號的[0031]~[0036]段中記載之化合物、WO2016-194630 號的[0043]~[0045]段中記載之化合物、WO2017-159684 號的[0025]~[0037]、[0099]~[0109]段中記載之化合物、日本特開 2017-076766 號公報的[0029]~[0034]段中記載之化合物、WO2018-207722 的[0015]~[0025]段中記載之化合物、日本特開 2019-54228 的[0045]~[0053]段中記載之化合物、WO2019-058995 的[0045]~[0055]段中記載之化合物、WO2019-081416 的[0063]~[0089]段中記載之化合物、日本特開 2019-80052 的[0033]~[0036]段中記載之化合物、WO2019-054125 的[0044]~[0054]段中記載之化合物、WO2019-093188 的[0041]~[0046]段中記載之化合物等)、花青化合物、氧雜薈化合物、多胺化合物、吲哚化合物、吡咯化合物、吡唑化合物、聚伸芳基化合物、縮合芳香族碳環化合物(例如,萘衍生物、蔥衍生物、菲衍生物、稠四苯衍生物、稠五苯衍生物、芘衍生物、芘衍生物及 1,2-苯并芘(fluoranthene)衍生物)、卟啉化合物、酞青化合物、三唑化合物、噁二唑化合物、咪唑化合物、聚芳基烷烴化合物、吡唑啉酮化合物、胺基取代查耳酮化合物、噁唑酮化合物、萘酮化合物、矽氮烷化合物以及具有含氮雜環化合物作為配位體之金屬錯合物。

p 型有機半導體可舉出游離電位小於 n 型半導體材料之化合物，只要滿足該條件，則亦能夠使用以 n 型半導體材料例示之有機色素。

**【0219】** 又，作為電子阻擋膜，亦能夠使用高分子材料。

高分子材料例如可舉出伸苯伸乙烯、萸、吡啶、吡咯、吡啶、噻吩、乙炔及聯乙炔等聚合物及其衍生物。

**【0220】** 再者，電子阻擋膜可以由複數個膜構成。

電子阻擋膜可以由無機材料構成。通常，由於無機材料的介電常數大於有機材料，因此在將無機材料用於電子阻擋膜時，光電轉換膜會被施加較多的電壓，光電轉換效率變高。可成為電子阻擋膜之無機材料例如可舉出氧化鈣、氧化鉻、氧化鉻銅、氧化錳、氧化鈷、氧化鎳、氧化銅、氧化鎳銅、氧化鋁銅、氧化鋁、氧化鋁銅、氧化鋁銀及氧化鋁。

**【0221】** （電洞阻擋膜）

電洞阻擋膜為受體性有機半導體材料（化合物），能夠利用上述 n 型半導體材料。

**【0222】** 電荷阻擋膜的製造方法並沒有特別限制，例如可舉出乾式成膜法及濕式成膜法。乾式成膜法例如可舉出蒸鍍法及濺射法。蒸鍍法可以為物理蒸鍍（PVD：Physical Vapor Deposition）法及化學蒸鍍（CVD）法中的任一種，真空蒸鍍法等物理蒸鍍法為較佳。濕式成膜法例如可舉出噴墨法、噴霧法、噴嘴印刷法、旋塗法、浸塗法、澆鑄法、模塗法、輥塗法、棒塗法及凹版塗布法，從高精度圖案化的方面考慮，噴墨法為較佳。

**【0223】** 電荷阻擋膜（電子阻擋膜及電洞阻擋膜）的厚度分別為 3～200nm 為較佳，5～100nm 為更佳，5～30nm 為進一步較佳。

**【0224】** <基板>

光電轉換元件可以進一步具有基板。所使用的基板的種類並沒有特別限制，例如可舉出半導體基板、玻璃基板及塑膠基板。

再者，基板的位置並沒有特別限制，通常在基板上依序積層導電性膜、光電轉換膜及透明導電性膜。

**【0225】** <密封層>

光電轉換元件可以進一步具有密封層。有時光電轉換材料因水分子等劣化因子的存在而導致其性能明顯劣化。因此，能夠用水分子不滲透的緻密的金屬氧化物、金屬氮化物或金屬氧氮化物等陶瓷或類鑽碳（DLC：Diamond-like Carbon）等密封層將光電轉換膜整體包覆密封來防止上述劣化。

再者，密封層可以按照日本特開 2011-082508 號公報的[0210]~[0215]段的記載進行材料的選擇及製造。

**【0226】**〔攝像元件〕

作為光電轉換元件的用途，例如可舉出具有光電轉換元件之攝像元件。攝像元件為將圖像的光資訊轉換為電訊號之元件，通常係指如下元件：複數個光電轉換元件在同一平面上配置成矩陣狀，在各光電轉換元件（像素）中能夠將光訊號轉換成電訊號，並將該電訊號按每個像素逐次輸出至攝像元件外。因此，每個像素由 1 個以上的光電轉換元件及 1 個以上的電晶體構成。

攝像元件搭載於數位相機及數位攝影機等攝像元件、電子內窺鏡以及行動電話等攝像模組等。

**【0227】** 本發明的光電轉換元件用於具有本發明的光電轉換元件之

光學感測器亦較佳。光學感測器可以單獨使用上述光電轉換元件，亦可以作為將上述光電轉換元件配置成直線狀之線感測器或配置成平面狀之二維感測器來使用。

[實施例]

**【0228】** 以下，根據實施例對本發明進行更詳細的說明。

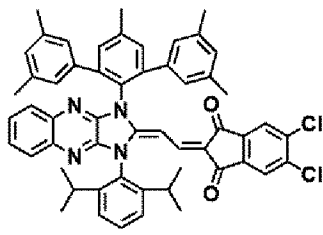
以下實施例所示之材料、使用量、比例、處理內容及處理步驟等，只要不脫離本發明的主旨則能夠適當地變更。藉此，本發明的範圍並不應藉由以下所示之實施例做限定性地解釋。

**【0229】** [用於光電轉換膜的材料]

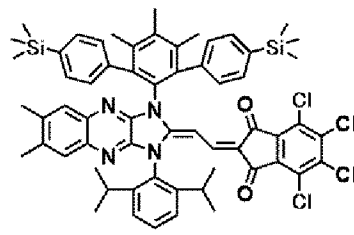
以下示出光電轉換膜所包含的各種成分。

**【0230】** [第 1 化合物或第 2 化合物]

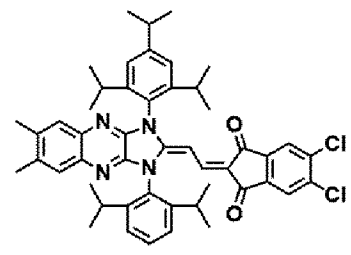
**【0231】** [化學式 44]



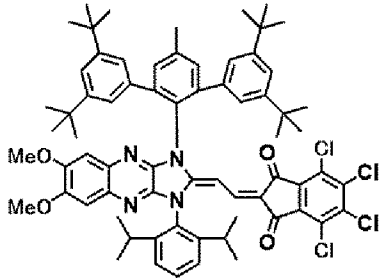
D-1



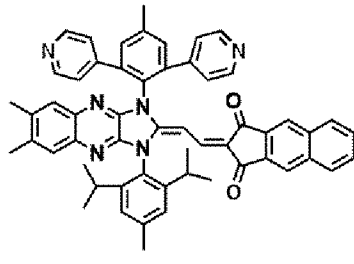
D-2



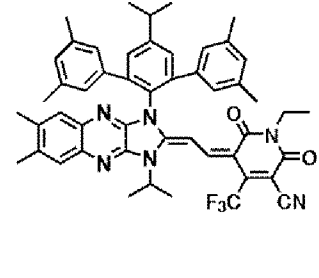
D-3



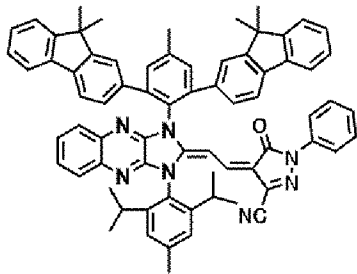
D-4



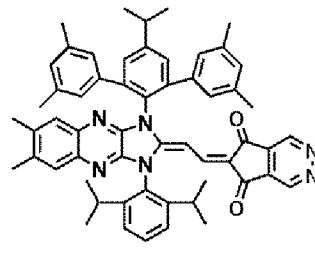
D-5



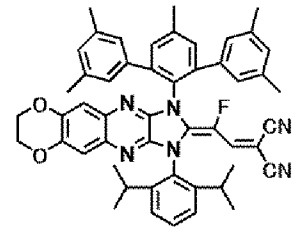
D-6



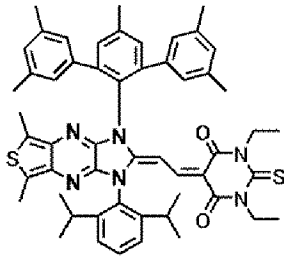
D-7



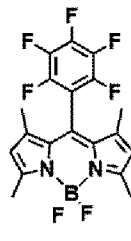
D-8



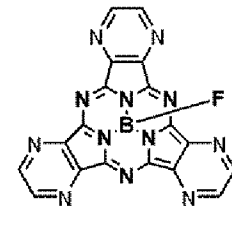
D-9



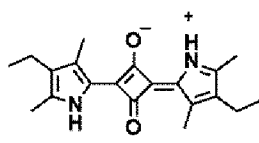
D-10



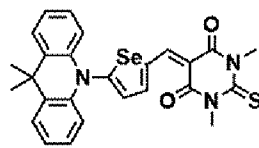
D-11



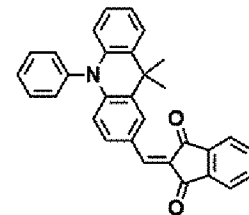
D-12



D-13



D-14



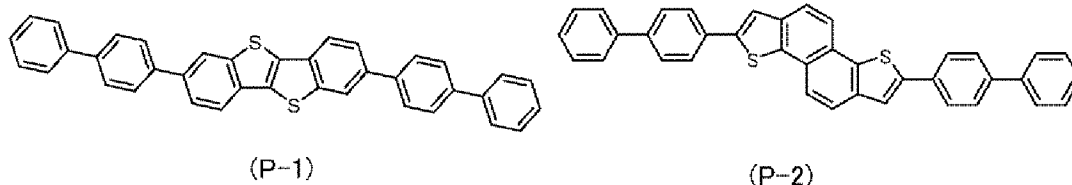
D-15

【0232】〔n型有機半導體〕

• C60：富勒烯（C<sub>60</sub>）

【0233】〔p型有機半導體〕

【0234】〔化學式 45〕



**【0235】** [評價]

使用上述材料製作光電轉換元件，並實施了各評價。

**【0236】** <光電轉換元件的製作>

使用上述所示之各種成分製作了圖 2 的形態的光電轉換元件。其中，光電轉換元件由下部電極 11、電子阻擋膜 16A、光電轉換膜 12、電洞阻擋膜 16B 及上部電極 15 構成。

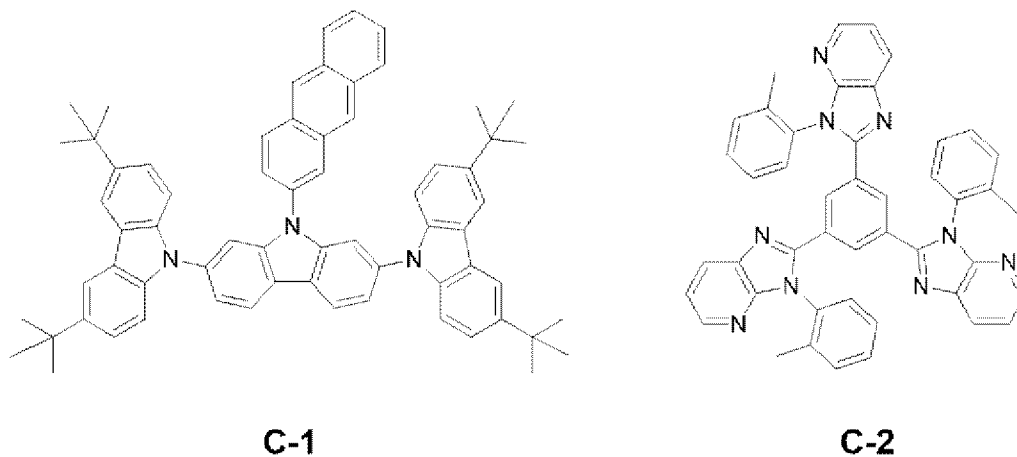
具體而言，在玻璃基板上藉由濺射法使非晶質性 ITO 成膜而形成下部電極 11（厚度：30nm），進一步在下部電極 11 上藉由真空加熱蒸鍍法使化合物（C-1）成膜，由此形成了電子阻擋膜 16A（厚度：30nm）。

接著，在將玻璃基板的溫度控制在 25°C 的狀態下，在電子阻擋膜 16A 上，藉由真空蒸鍍法按表 1 所示之成分比率對表 1 所示之第 1 化合物及第 2 化合物與 n 型有機半導體（富勒烯（C<sub>60</sub>））及 p 型有機半導體進行共蒸鍍來形成了膜。藉此，形成了具有 240nm 的本體異質結構之光電轉換膜 12。此時，將光電轉換膜 12 的成膜速度設定為 1.0Å/秒。

而且，在光電轉換膜 12 上蒸鍍化合物（C-2）而形成了電洞阻擋膜 16B（厚度：10nm）。在電洞阻擋膜 16B 上藉由濺射法使非晶質性 ITO 成膜而形成了上部電極 15（透明導電性膜）（厚度：10nm）。在上部電極 15 上藉由真空蒸鍍法形成 SiO 膜作為密封層之後，在其上藉由 ALCVD（Atomic Layer Chemical Vapor Deposition：原子層化學氣相沉積）法形成了氧化鋁（Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>）

層。將所獲得之積層體在手套箱內以 150°C 加熱 30 分鐘，由此獲得了光電轉換元件。

【0237】 [化學式 46]



【0238】 <暗電流>

藉由以下方法測定了所獲得之各光電轉換元件的暗電流。對各光電轉換元件的下部電極及上部電極施加電壓直至電場強度達到  $2.5 \times 10^5 \text{V/cm}$ ，測定了暗室中的電流值（暗電流）。其結果，確認到在任意光電轉換元件中，暗電流均為  $50 \text{nA/cm}^2$  以下，並且顯示出充分低的暗電流。

【0239】 <光電轉換效率（外部量子效率）的評價>

確認了所獲得之各光電轉換元件的驅動。對各光電轉換元件施加電壓直至電場強度達到  $2.0 \times 10^5 \text{V/cm}$ 。之後，從上部電極（透明導電性膜）側照射光，進行 IPCE（Incident photon-to-current conversion efficiency：入射光子-電子轉換效率）測定，並提取了波長 460nm 及波長 560nm 的光電轉換效率（外部量子效率）。使用 OPTEL Co.,LTD. 製定能量子效率測定裝置測定了光電轉換效率。所照射的光量為  $50 \mu\text{W/cm}^2$ 。

求出將實施例 1-1 的各波長的光電轉換元件的光電轉換效率歸一化為 1

時的各光電轉換元件的光電轉換效率，根據所求出的光電轉換效率，按照下述區分進行了評價。再者，確認到各光電轉換元件均在測定波長 560nm 處顯示出 40% 以上的光電轉換效率，並且作為光電轉換元件具有一定以上的外部量子效率。

**【0240】** （評價基準：測定波長 460nm）

A：未達 1.1

B：1.1% 以上且未達 1.2

C：1.2 以上

再者，在實際應用上，B 以上為較佳，A 為最佳。

**【0241】** （評價基準：測定波長 560nm）

A：0.9 以上

B：0.7 以上且未達 0.9

C：未達 0.7

再者，在實際應用上，B 以上為較佳，A 為最佳。

**【0242】** <響應速度（響應性）的評價>

評價了所獲得之各光電轉換元件的響應性。對各光電轉換元件施加電壓直至電場強度達到  $2.0 \times 10^5 \text{V/cm}$  之後，瞬間點亮 LED (light emitting diode: 發光二極體) 並從上部電極 (透明導電性膜) 側照射光，用示波器測定 560nm 波長處的光電流，並計測了從 0 (未照射時間點) 上升至 97% 訊號強度的上升時間。

接著，求出在 560nm 的波長處將實施例 1-1 的光電轉換元件的上述上升時間歸一化為 1 時的各光電轉換元件的上述上升時間，根據所求出的上

述上升時間，按照下述區分評價了各光電轉換元件的響應性。

**【0243】** （評價基準）

AA：未達 0.9

A：0.9 以上且未達 1.1

B：1.1 以上且未達 2.0

C：2.0 以上

再者，在實際應用上，B 以上為較佳，AA 為最佳。

**【0244】** 在表 1 中示出在各光電轉換元件的製作中使用的各成分及其成分比率以及各光電轉換元件的評價結果。

表 1 中，“成分比率”一欄的數值依序表示第 1 化合物:第 2 化合物:n 型有機半導體:p 型有機半導體的各成分比（體積比）。

表 1 中，“化合物 1 與 2 的極大吸收波長差”一欄表示如下定義之第 1 化合物與第 2 化合物的極大吸收波長差的絕對值。

A：10nm 以下

B：超過 10nm 且 20nm 以下

C：超過 20nm

【0245】 [表 1]

	元件製作中使用的材料					成分比率	光電轉換效率		響應性
	第 1 化合物	第 2 化合物	n 型有機半導體	p 型有機半導體	化合物 1 與 2 的極大吸收波長差		460nm	560nm	
實施例 1-1	(D-1)	(D-2)	C <sub>60</sub>	-	A	1:1:1:0	A	A	A
實施例 1-2	(D-1)	(D-2)	C <sub>60</sub>	(P-1)	A	0.5:0.5:1:1	A	A	AA
實施例 1-3	(D-1)	(D-2)	C <sub>60</sub>	(P-2)	A	0.5:0.5:1:1	A	A	AA
實施例 1-4	(D-1)	(D-3)	C <sub>60</sub>	(P-1)	A	0.5:0.5:1:1	A	A	AA
實施例 1-5	(D-1)	(D-4)	C <sub>60</sub>	(P-1)	A	0.5:0.5:1:1	A	A	AA
實施例 1-6	(D-2)	(D-4)	C <sub>60</sub>	(P-1)	A	0.5:0.5:1:1	A	A	AA
實施例 1-7	(D-1)	(D-5)	C <sub>60</sub>	(P-1)	A	0.5:0.5:1:1	A	A	AA
實施例 1-8	(D-1)	(D-6)	C <sub>60</sub>	(P-1)	A	0.5:0.5:1:1	A	A	AA
實施例 1-9	(D-1)	(D-7)	C <sub>60</sub>	(P-1)	A	0.5:0.5:1:1	A	A	AA
實施例 1-10	(D-1)	(D-8)	C <sub>60</sub>	(P-1)	A	0.5:0.5:1:1	A	A	AA
實施例 1-11	(D-1)	(D-9)	C <sub>60</sub>	(P-1)	A	0.5:0.5:1:1	A	A	AA
實施例 1-12	(D-1)	(D-10)	C <sub>60</sub>	(P-1)	B	0.5:0.5:1:1	A	A	A
實施例 1-13	(D-1)	(D-11)	C <sub>60</sub>	(P-1)	B	0.9:0.1:1:1	A	A	B
實施例 1-14	(D-1)	(D-12)	C <sub>60</sub>	(P-1)	A	0.9:0.1:1:1	A	A	B
實施例 1-15	(D-8)	(D-13)	C <sub>60</sub>	(P-1)	A	0.9:0.1:1:1	A	A	B
實施例 1-16	(D-1)	(D-14)	C <sub>60</sub>	(P-1)	A	0.9:0.1:1:1	A	A	B
比較例 1-1	(D-8)	-	C <sub>60</sub>	-	-	1:0:1:0	C	C	C
比較例 1-2	(D-8)	-	C <sub>60</sub>	(P-1)	-	1:0:1:1	C	B	C
比較例 1-3	(D-1)	-	C <sub>60</sub>	(P-1)	-	1:0:1:1	B	A	C
比較例 1-4	(D-1)	(D-15)	C <sub>60</sub>	(P-1)	C	0.9:0.1:1:1	C	A	C

【0246】 如表所示，確認到本發明的光電轉換元件對綠光的響應性優異。

根據實施例 1-2～實施例 1-12 的對比等確認到，第 1 化合物及第 2 化合物的極大吸收波長之差的絕對值為 10nm 以下時，本發明的效果更優異。

根據實施例 1-12～實施例 1-16 的對比等確認到，第 2 化合物為由式 (11) 表示之化合物時，本發明的效果更優異。

根據實施例 1-1 與實施例 1-2 的對比等確認到，光電轉換元件中的光電轉換膜包含 p 型半導體材料時，本發明的效果更優異。

#### 【符號說明】

##### 【0247】

10a,10b:光電轉換元件

11:導電性膜（下部電極）

12:光電轉換膜

15:透明導電性膜（上部電極）

16A:電子阻擋膜

16B:電洞阻擋膜

## 【發明申請專利範圍】

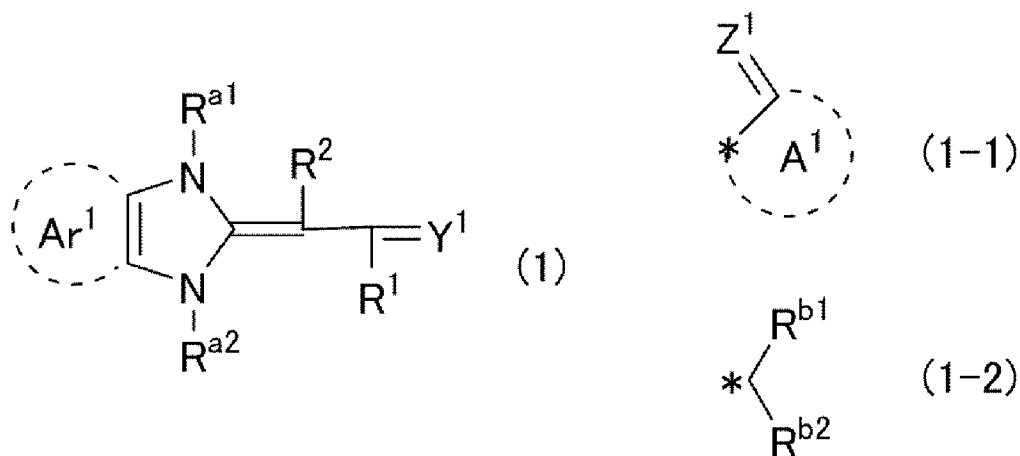
### 【請求項 1】

一種光電轉換元件，其依序具有導電性膜、光電轉換膜及透明導電性膜，  
其中

前述光電轉換膜包含由式 (1) 表示之第 1 化合物和與前述第 1 化合物不同的化合物亦即第 2 化合物，

前述第 1 化合物的極大吸收波長  $\lambda_1$  及前述第 2 化合物的極大吸收波長  $\lambda_2$  滿足式 (X) 的關係，

$$-20\text{nm} \leq \lambda_1 - \lambda_2 \leq 20\text{nm} \cdots \cdots \text{式 (X)}$$



式 (1) 中，

$\text{Ar}^1$  表示可具有取代基的芳香環，

$\text{R}^{\text{a}1}$  及  $\text{R}^{\text{a}2}$  分別獨立地表示可具有取代基的芳基、 $-\text{C}(\text{R}^{\text{L}1})(\text{R}^{\text{L}2})(\text{R}^{\text{L}3})$  或可具有取代基的雜芳基，其中， $\text{R}^{\text{a}1}$  及  $\text{R}^{\text{a}2}$  表示互不相同的基，

$\text{R}^{\text{L}1} \sim \text{R}^{\text{L}3}$  分別獨立地表示可具有取代基的烷基、可具有取代基的芳基、可具有取代基的雜芳基或氫原子， $\text{R}^{\text{L}1} \sim \text{R}^{\text{L}3}$  中的 2 個以上分別獨立地表示可具有取代基的烷基、可具有取代基的芳基或可具有取代基的雜芳基，由

$R^{11} \sim R^{13}$  表示之可具有取代基的烷基、可具有取代基的芳基及可具有取代基的雜芳基可以相互鍵結而形成環，

$R^1$  及  $R^2$  分別獨立地表示氫原子或取代基，

$Y^1$  表示由式 (1.1) 表示之基或由式 (1.2) 表示之基，

式 (1.1) 中，

$X^1$  表示氧原子、硫原子、 $NR^{21}$  或  $CR^{22}R^{23}$ ， $R^{21}$  表示氫原子或取代基，

$R^{22}$  及  $R^{23}$  分別獨立地表示烷基或  $COOR^{24}$ ， $R^{24}$  表示可具有取代基的烷基、可具有取代基的芳基或可具有取代基的雜芳基，

$A^1$  表示至少包含 2 個碳原子且可具有取代基的環，

式 (1.2) 中，

$R^{b1}$  及  $R^{b2}$  分別獨立地表示烷基或  $COOR^{b3}$ ，

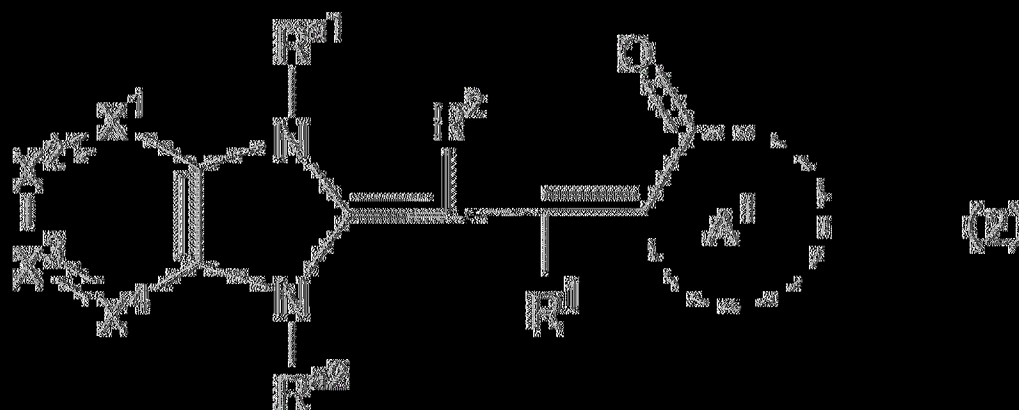
$R^{b3}$  表示可具有取代基的烷基、可具有取代基的芳基或可具有取代基的雜芳基，

\*表示鍵結位置。

〔請求項 2〕

如請求項 1 所述之光電轉換元件，其中

前述第 1 化合物為由式 (2) 表示之化合物，



式 (2) 中，

$X^1 \sim X^4$  分別獨立地表示氮原子或  $-CR^{c1} =$ ，

$R^{c1}$  表示氫原子或取代基，

$R^{c1}$  存在複數個時，存在複數個之  $R^{c1}$  可以相互鍵結而形成環，

$R^{a1}$  及  $R^{a2}$  分別獨立地表示可具有取代基的芳基、 $-C(R^{L1})(R^{L2})(R^{L3})$  或可具有取代基的雜芳基，其中， $R^{a1}$  及  $R^{a2}$  表示互不相同的基，

$R^{L1} \sim R^{L3}$  分別獨立地表示可具有取代基的烷基、可具有取代基的芳基、可具有取代基的雜芳基或氮原子， $R^{L1} \sim R^{L3}$  中的 2 個以上分別獨立地表示可具有取代基的烷基、可具有取代基的芳基或可具有取代基的雜芳基，由  $R^{L1} \sim R^{L3}$  表示之可具有取代基的烷基、可具有取代基的芳基及可具有取代基的雜芳基可以相互鍵結而形成環，

$R^1$  及  $R^2$  分別獨立地表示氫原子或取代基，

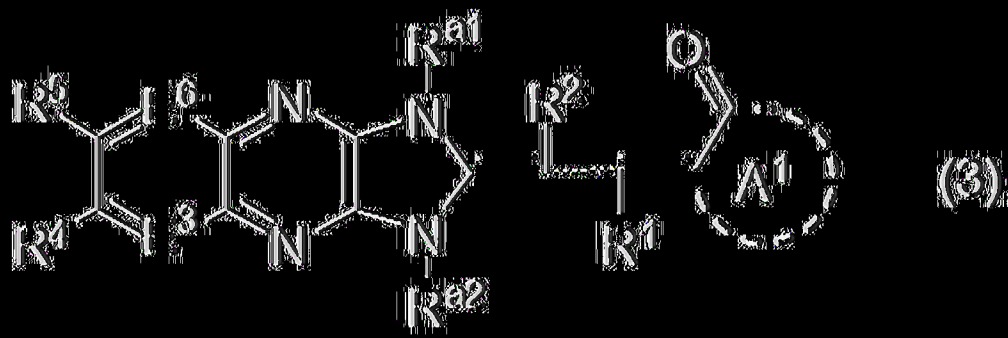
$A^1$  表示至少包含 2 個碳原子且可具有取代基的環。

### 【請求項 3】

如請求項 2 所述之光電轉換元件，其中  
在前述式 (2) 中， $X^1$  及  $X^4$  表示氮原子。

### 【請求項 4】

如請求項 1 所述之光電轉換元件，其中  
前述第 1 化合物為由式 (3) 表示之化合物，



式 (3) 中，

R<sup>3</sup> 表示氮原子或 -CR<sup>3</sup> ；

R<sup>6</sup> 表示氮原子或 -CR<sup>6</sup> ；

R<sup>1</sup>~R<sup>6</sup> 分別獨立地表示氮原子或取代基，

R<sup>3</sup> 與 R<sup>4</sup>、R<sup>4</sup> 與 R<sup>5</sup> 及 R<sup>5</sup> 與 R<sup>6</sup> 可以分別獨立地相互鍵結而形成環，

R<sup>a1</sup> 及 R<sup>a2</sup> 分別獨立地表示可具有取代基的芳基、C(R<sup>1.1</sup>)(R<sup>1.2</sup>)(R<sup>1.3</sup>) 或可具有取代基的雜芳基，其中，R<sup>a1</sup> 及 R<sup>a2</sup> 表示互不相同的基，

R<sup>1.1</sup>~R<sup>1.3</sup> 分別獨立地表示可具有取代基的烷基、可具有取代基的芳基、可具有取代基的雜芳基或氮原子，R<sup>1.1</sup>~R<sup>1.3</sup> 中的 2 個以上分別獨立地表示可具有取代基的烷基、可具有取代基的芳基或可具有取代基的雜芳基，由 R<sup>1.1</sup>~R<sup>1.3</sup> 表示之可具有取代基的烷基、可具有取代基的芳基及可具有取代基的雜芳基可以相互鍵結而形成環，

A<sup>1</sup> 表示至少包含 2 個碳原子且可具有取代基的環。

(請求項 5)

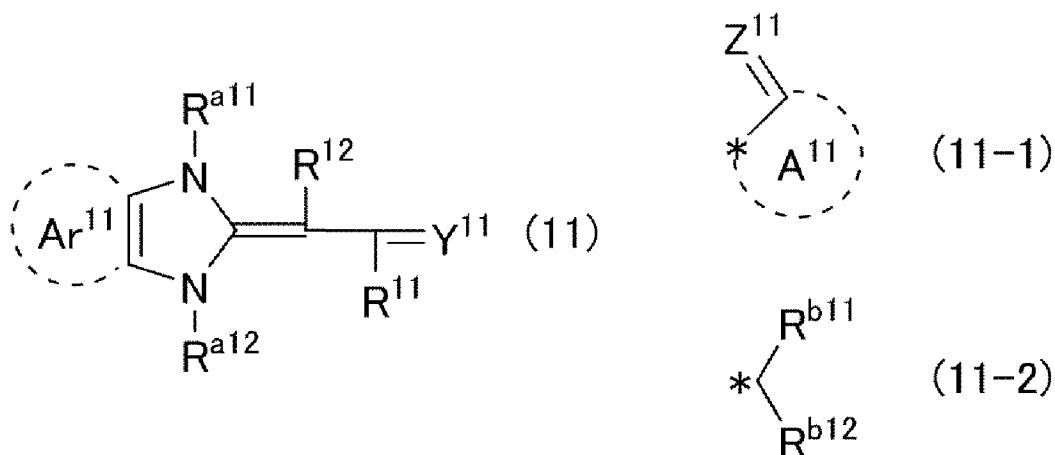
如請求項 1 所述之光電轉換元件，其中

前述第 2 化合物為選自包括具有咪唑啉骨架之化合物、吡咯啉酮基硼錯合物、亞醌菁化合物、方酸菁化合物及具有三芳基胺骨架之化合物之群組

中的化合物。

**【請求項 6】**

如請求項 1 至請求項 5 之任一項所述之光電轉換元件，其中  
前述第 2 化合物為由式 (11) 表示之化合物，



式 (11) 中，

$\text{Ar}^{11}$  表示可具有取代基的芳香環，

$\text{R}^{\text{a}11}$  及  $\text{R}^{\text{a}12}$  分別獨立地表示可具有取代基的芳基、 $-\text{C}(\text{R}^{\text{L}11})(\text{R}^{\text{L}12})(\text{R}^{\text{L}13})$   
或可具有取代基的雜芳基，其中， $\text{R}^{\text{a}11}$  及  $\text{R}^{\text{a}12}$  表示互不相同的基，

$\text{R}^{\text{L}11} \sim \text{R}^{\text{L}13}$  分別獨立地表示可具有取代基的烷基、可具有取代基的芳基、  
可具有取代基的雜芳基或氫原子， $\text{R}^{\text{L}11} \sim \text{R}^{\text{L}13}$  中的 2 個以上分別獨立地表示  
可具有取代基的烷基、可具有取代基的芳基或可具有取代基的雜芳基，由  
 $\text{R}^{\text{L}11} \sim \text{R}^{\text{L}13}$  表示之可具有取代基的烷基、可具有取代基的芳基及可具有取代  
基的雜芳基可以相互鍵結而形成環，

$\text{R}^{11}$  及  $\text{R}^{12}$  分別獨立地表示氫原子或取代基，

$\text{Y}^{11}$  表示由式 (11-1) 表示之基或由式 (11-2) 表示之基，

式 (11-1) 中，

$Z^{11}$  表示氧原子、硫原子、 $=NR^{Z11}$  或  $=CR^{Z12}R^{Z13}$ ， $R^{Z11}$  表示氫原子或取代基， $R^{Z12}$  及  $R^{Z13}$  分別獨立地表示氰基或  $-COOR^{Z14}$ ， $R^{Z14}$  表示可具有取代基的烷基、可具有取代基的芳基或可具有取代基的雜芳基，

$A^{11}$  表示至少包含 2 個碳原子且可具有取代基的環，  
式 (11-2) 中，

$R^{b11}$  及  $R^{b12}$  分別獨立地表示氰基或  $-COOR^{b13}$ ，

$R^{b13}$  表示可具有取代基的烷基、可具有取代基的芳基或可具有取代基的雜芳基，

\*表示鍵結位置。

#### 【請求項 7】

如請求項 1 至請求項 5 之任一項所述之光電轉換元件，其中  
前述光電轉換膜進一步包含 n 型半導體材料，  
前述光電轉換膜具有在混合了前述第 1 化合物、前述第 2 化合物及前述 n 型半導體材料之狀態下形成的本體異質結構。

#### 【請求項 8】

如請求項 7 所述之光電轉換元件，其中  
前述 n 型半導體材料包含選自包括富勒烯及其衍生物之群組中的富勒烯類。

#### 【請求項 9】

如請求項 1 至請求項 5 之任一項所述之光電轉換元件，其中  
前述光電轉換膜進一步包含 n 型半導體材料及 p 型半導體材料，  
前述光電轉換膜具有在混合了前述第 1 化合物、前述第 2 化合物、前

述 n 型半導體材料及前述 p 型半導體材料之狀態下形成的本體異質結構。

**【請求項 10】**

如請求項 9 所述之光電轉換元件，其中

前述 n 型半導體材料包含選自包括富勒烯及其衍生物之群組中的富勒烯類。

**【請求項 11】**

如請求項 9 所述之光電轉換元件，其中

前述 p 型半導體材料在可見光區域內不具有吸收。

**【請求項 12】**

如請求項 1 至請求項 5 之任一項所述之光電轉換元件，其中

在前述導電性膜與前述透明導電性膜之間，除了前述光電轉換膜以外還具有 1 種以上的中間層。

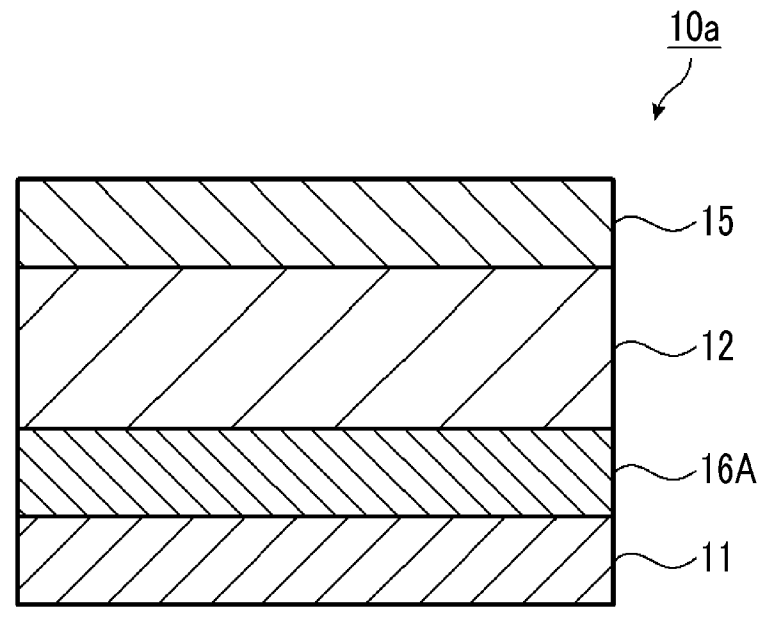
**【請求項 13】**

一種攝像元件，其具有請求項 1 至請求項 5 之任一項所述之光電轉換元件。

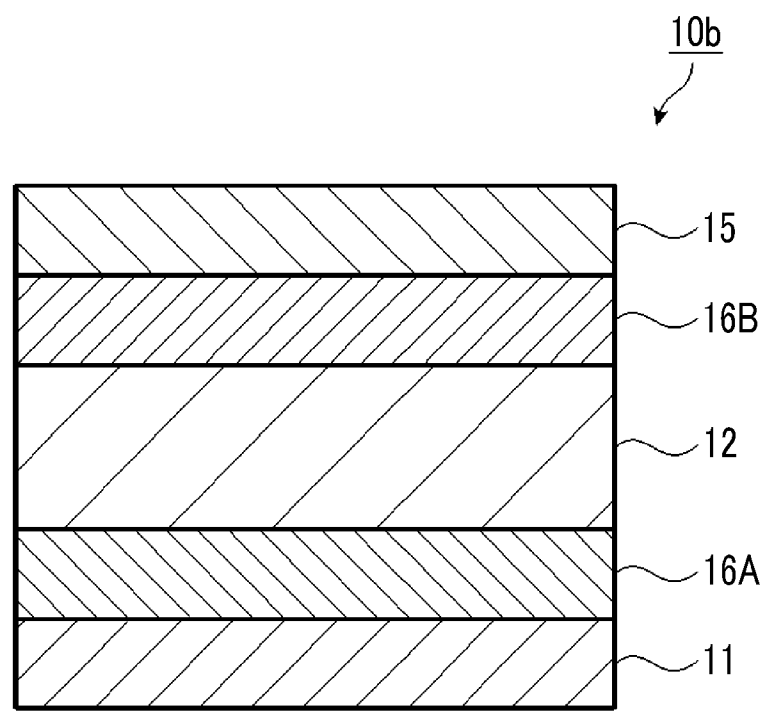
**【請求項 14】**

一種光學感測器，其具有請求項 1 至請求項 5 之任一項所述之光電轉換元件。

【發明圖式】



【圖1】



【圖2】