(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2024年6月13日(13.06.2024)

WIPO | PCT

(10) 国際公開番号
WO 2024/122652 A1

(51) 国際特許分類:
H10K 30/60 (2023.01) *H10K 30/85* (2023.01)
C07C 255/51 (2006.01) *H10K 39/32* (2023.01)
C07C 255/52 (2006.01) *H10K 85/60* (2023.01)
C07D 213/84 (2006.01)

(21) 国際出願番号： PCT/JP2023/044249

(22) 国際出願日： 2023年12月11日(11.12.2023)

(25) 国際出願の言語： 日本語

(26) 国際公開の言語： 日本語

(30) 優先権データ：
特願 2022-197533 2022年12月9日(09.12.2022) JP

(71) 出願人: 東ソー株式会社 (**TOSOH CORPORATION**) [JP/JP]; 〒7468501 山口県周南市開成町４５６０番地 Yamaguchi (JP).

(72) 発明者: 尾池 華奈(**OIKE, Kana**); 〒2521123 神奈川県綾瀬市早川２７４３番地１ 東ソー株式会社 東京研究センター内 Kanagawa (JP).

森中 裕太(**MORINAKA, Yuta**); 〒2521123 神奈川県綾瀬市早川２７４３番地１ 東ソー株式会社 東京研究センター内 Kanagawa (JP). 小野 洋平(**ONO, Yohei**); 〒2521123 神奈川県綾瀬市早川２７４３番地１ 東ソー株式会社 東京研究センター内 Kanagawa (JP).

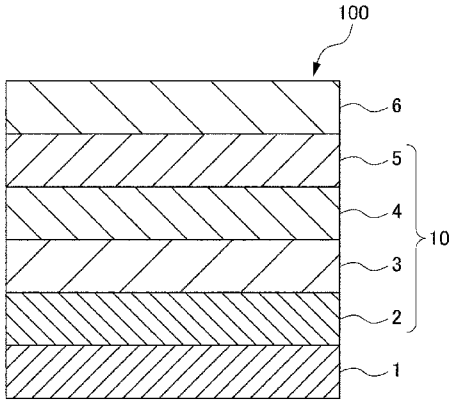
(74) 代理人: 弁理士法人 HARAKENZO WORLD PATENT & TRADEMARK (**HARAKENZO WORLD PATENT & TRADEMARK**); 〒5300041 大阪府大阪市北区天神橋２丁目北２番６号 大和南森町ビル Osaka (JP).

(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CV, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU,

(54) **Title:** PHOTOELECTRIC CONVERSION ELEMENT, IMAGING ELEMENT, PHOTOELECTRIC CONVERSION ELEMENT MATERIAL, AND COMPOUND

(54) 発明の名称： 光電変換素子、撮像素子、光電変換素子用材料、および化合物

図１



$$Ar\left(\left\{(L)_k\right\}EWG_p\right)_n \quad (1)$$

(57) **Abstract:** Provided are a photoelectric conversion element having excellent response speed and high external quantum efficiency, an imaging element, and a photoelectric conversion element material that contributes to producing said elements. A photoelectric conversion element (100) for imaging comprises a layer that includes a photoelectric conversion element material represented by formula (1), where EWG is an electron-attracting group, L is a C6-30 aromatic hydrocarbon group, n is 1 to 8, k is 0 to 2, and p is 1 to 8, and p is 1 when k is 0.

(57) 要約：応答速度に優れ、外部量子収率が高い光電変換素子、および撮像素子、並びに、これら素子の作製に資する光電変換素子用材料を提供する。撮像用光電変換素子（１００）は、下記式（１）で表される光電変換素子用材料を含む、層を備え、ＥＷＧは電子吸引基、Ｌは炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、ｎは１～８、ｋは０～２、ｐは１～８を表し、ｋが０である場合、ｐは１である。

WO 2024/122652 A1

［続葉有］

LY, MA, MD, MG, MK, MN, MU, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

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

添付公開書類:

一　国際調査報告(条約第21条(3))

明　細　書

発明の名称 ：

光電変換素子、撮像素子、光電変換素子用材料、および化合物

技術分野

[0001]　本発明は、光電変換素子、撮像素子、光電変換素子用材料、および化合物に関する。

背景技術

[0002]　光電変換素子は、太陽電池、光センサ、やイメージセンサ等に広く利用され、その用途および市場は拡大しており、開発が精力的に行われている。

[0003]　例えば、特許文献１には、ピリミジン誘導体を正孔ブロック層に含む、光電変換素子が開示されている。

[0004]　例えば、特許文献２には、トリアジン誘導体を正孔ブロック層に含む光電変換素子が開示されている。

先行技術文献

特許文献

[0005] 特許文献1：日本国特開２０２２－１７３０２号公報

特許文献2：韓国公開特許公報第１０－２０２１－０５３１４１号公報

発明の概要

発明が解決しようとする課題

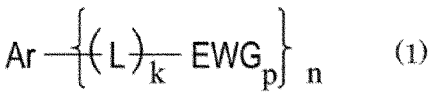
[0006]　例えば、光電変換素子である撮像素子においては、応答速度、および外部量子効率のいずれにおいても優れた素子が求められている。

[0007]　本発明の一態様にかかる発明の目的は、応答速度に優れ、外部量子収率が高い、光電変換素子および撮像素子、ならびに、光電変換素子および撮像素子に用いられる光電変換素子用材料および正孔ブロック材料を提供することである。

課題を解決するための手段

[0008] 本発明の一態様によれば、下記式（１）で表される光電変換素子用材料を含む層を備える光電変換素子が提供される。

[0009] [化1]



(1)

[0010] 前記式（１）中、

Ａｒは、炭素数１６～４０の縮環芳香族炭化水素基を表し；

ＥＷＧは、電子吸引基を表し；

Ｌは、炭素数６～３０の芳香族炭化水素基を表し；

ｎは、１～８の整数を表し；

ｋは、０～２の整数を表し；

ｐは、１～８の整数を表し；

ｋが、０である場合、ｐは、１であり、

前記ＥＷＧを２つ以上有している場合、前記ＥＷＧは、同一または互いに異なる電子吸引基であり、

前記Ａｒ、Ｌ、およびＥＷＧのそれぞれは、少なくとも１つの置換基を有しているか、または前記置換基を有していない。

[0011] 本発明の他の態様によれば、上記態様に係る光電変換素子は、撮像素子である。

[0012] 本発明の他の態様によれば、前記光電変換素子用材料を含む前記層が、正孔ブロック層である、光電変換素子が提供される。

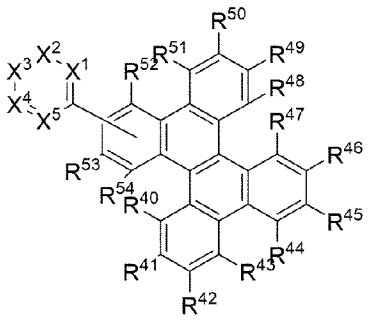
[0013] 本発明の他の態様によれば、上記態様に係る光電変換素子が備える前記層を形成するための、光電変換素子用材料が提供される。

[0014] 本発明の他の態様によれば、上記態様に係る光電変換素子用材料は、撮像素子用光電変換素子用材料である、光電変換素子用材料が提供される。

[0015] 本発明の他の態様によれば、正孔ブロック材料である、上記態様に係る光電変換素子用材料が提供される。

[0016] また、本発明の他の態様によれば、下記式（３）で表される化合物：

[化2]



（３）

Ｘ[1]～Ｘ[5]は、窒素原子またはＣＲ[55]を表し；

Ｘ[1]～Ｘ[5]の内、前記窒素原子の数は、０～３の整数であり；

Ｒ[40]～Ｒ[55]は、それぞれ独立して、水素原子、シアノ基、ニトロ基、ハロゲン原子、ハロゲン化アルキル基、アシル基、スルホニル基、ホスホリル基、炭素数１～２０のアルキル基、炭素原子数１～２０のアルケニル基、炭素原子数１～２０のシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のビシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のトリシクロアルキル基、炭素原子数１～１０のアルコキシ基、炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、および炭素数３～３０のヘテロアリール基から選択されるか、または、

前記Ｒ[40]～Ｒ[55]のうちの一部は、互いに隣接する２つの基が結合することで環が形成され、；

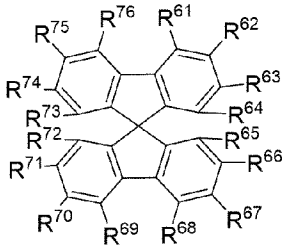
Ｒ[55]の少なくともひとつが、シアノ基、ハロゲン原子、またはハロゲン化アルキル基から選択され；

Ｘ[1]～Ｘ[5]は、すべてＣＲ[55]である場合、前記Ｒ[55]の２つ以上がシアノ基、ハロゲン原子、およびハロゲン化アルキル基から選択され；、

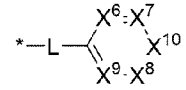
前記Ｒ[40]～Ｒ[55]は、それぞれ独立して、さらに少なくとも１つの置換基を有しているか、または前記置換基を有していない、化合物が提供される。

[0017] また、本発明の他の態様によれば、下記式（４－１）で表される、化合物：

[化3]



（4-1）



（4-2）

前記式（４－１）中、

Ｒ^{61}～Ｒ^{76}は、それぞれ独立して、水素原子、シアノ基、ニトロ基、ハロゲン原子、ハロゲン化アルキル基、アシル基、スルホニル基、ホスホリル基、炭素数１～２０のアルキル基、炭素原子数１～２０のアルケニル基、炭素原子数１～２０のシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のビシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のトリシクロアルキル基、炭素原子数１～１０のアルコキシ基、炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、炭素数３～３０のヘテロアリール基、および式（４－２）で表される基から選択されるか、または、互いに隣接する２つの基が結合することで環が形成され；

Ｒ^{61}～Ｒ^{64}の内、いずれかひとつは式（４－２）で表される基であり；

Ｌは直接結合または炭素数６～１６の芳香族炭化水素基を表し；

Ｘ^{6}～Ｘ^{10}は、窒素原子、Ｃ（ＣＮ）、またはＣＲ^{77}を表し；

Ｘ^{9}～Ｘ^{10}の内、Ｘ^{9}がＣ（ＣＮ）であるか、Ｘ^{10}が窒素原子またはＣ（ＣＮ）であり；

Ｘ^{6}～Ｘ^{10}の内、前記窒素原子の数は０または１つであり、前記窒素原子の数が０である場合、前記Ｃ（ＣＮ）の数は２～３つの何れかであり、前記窒素原子の数が１つである場合、前記Ｃ（ＣＮ）の数は２つであり；

Ｒ^{77}は、それぞれ独立して、水素原子、ニトロ基、ハロゲン原子、ハロゲン化アルキル基、アシル基、スルホニル基、ホスホリル基、炭素数１～２０のアルキル基、炭素原子数１～２０のアルケニル基、炭素原子数１～２０のシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のビシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のトリシクロアルキル基、炭素原子数１～１０のアルコキシ基から選択され；

前記R^{61}～R^{77}、及び前記Ｌは、少なくとも１つの置換基を有しているか、または前記置換基を有してない、化合物が提供される。

発明の効果

[0018] 本発明の一態様によれば、応答速度に優れ、外部量子収率が高い光電変換素子および撮像素子、ならびに、光電変換素子および撮像素子に用いられる光電変換素子用材料および正孔ブロック材料を提供することができる。

図面の簡単な説明

[0019] [図1]本発明の一態様にかかる光電変換素子用材料を含む撮像素子用光電変換素子の積層構成の概略を示す断面図である。

発明を実施するための形態

[0020] 以下、本発明の一態様にかかる光電変換素子が備える層に含まれる光電変換素子用材料について詳細に説明する。

＜光電変換素子用材料（１）＞

本発明の一態様に係る光電変換素子は、下記式（１）で表される光電変換素子用材料の層を含んでいる。

[0021] [化4]



(1)

[0022] 前記式（１）中、

Ａｒは、炭素数１６～４０の縮環芳香族炭化水素基を表し；

ＥＷＧは、電子吸引基を表し；

Ｌは、炭素数６～３０の芳香族炭化水素基を表し；

ｎは１～８の整数を表し；

ｋは０～２の整数を表し；

ｐは、１～８の整数を表し；

ｋが、０である場合、ｐは、１であり、

前記ＥＷＧを２つ以上有している場合、前記ＥＷＧは、同一または互い

に異なる電子吸引基であり、

前記Ａｒ、Ｌ、およびＥＷＧのそれぞれは、少なくとも１つの置換基を有しているか、または前記置換基を有していない。

[0023] すなわち、本明細書中、式（１）に示す、光電変換素子用材料が備える、下記式（１’）に示す基以外の基が、「置換基」として説明される。

[0024] [化5]



(1')

[0025] 式（１’）に示す、Ｌ、およびＥＷＧ、並びに、ｋおよびｐの定義は、式（１）に示す、Ｌ、およびＥＷＧ、並びに、ｋおよびｐと同じである。

[0026] 前記式（１）で表される化合物は、電荷、すなわち、電子の輸送性に優れる、電子輸送材料であり、逆電荷、すなわち正孔のブロック性に優れる、正孔ブロック材料であり、光電変換素子用材料として好適に用いることができる。

[0027] 上記式（１）、および式（１’）における各基の定義、およびその好ましい具体例は、それぞれ以下のとおりである。

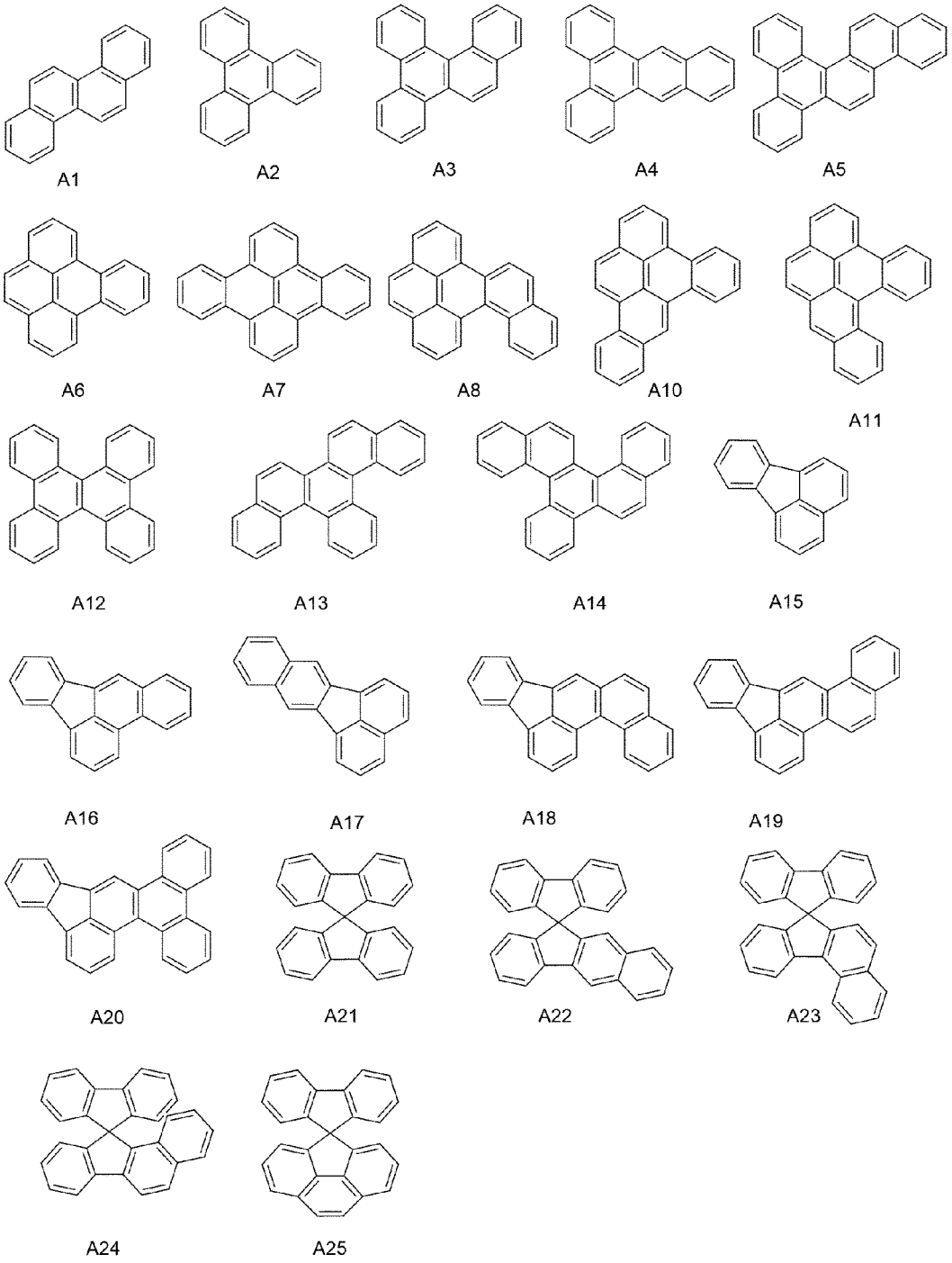
[0028] ＜Ａｒについて＞

Ａｒは、芳香族環が縮合してなる縮環芳香族炭化水素基であり、当該縮環芳香族炭化水素基は、置換基を有していてもよい。Ａｒである縮環芳香族炭化水素基は、その炭素数が１６～４０の範囲内であり、２０～４０の範囲内であることが好ましい。ここで、Ａｒは、炭素数が１６～４０の範囲内おいて、より大きいことにより、光電変換素子用材料に高い熱安定性を付与することができ、より小さいことにより、光電変換素子用材料におけるＬＵＭＯ準位が過度に浅くなることを抑制することができる。

[0029] Ａｒは、例えば、６員環を４つ以上内包する縮環芳香族炭化水素基であることが好ましい。Ａｒが、４つ以上の６員環が縮合した縮環芳香族炭化水素基であることにより、光電変換素子用材料のＴｇを高めることができ、これにより、光電変換素子用材料の熱安定性を高めることができる。

[0030] 以下に、Ａｒについて、好ましい具体例を示すが、これらに限定されるものではない。

[0031] [化6]

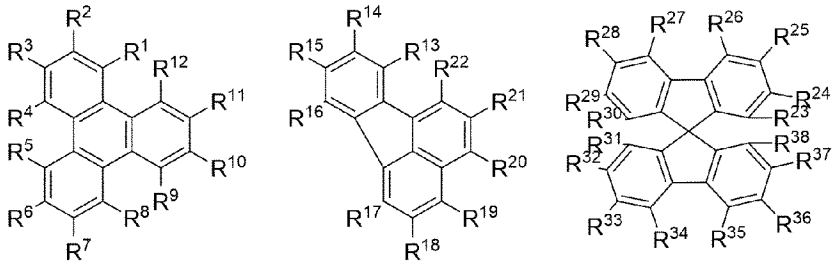


[0032] 上記Ａｒのうち、例えば、トリフェニレン基（Ａ２）、フルオランテン基（Ａ１５）、スピロフルオレン基（Ａ２１）から選択される縮環芳香族炭化水素基と、トリフェニレン基を内包する縮環芳香族炭化水素基（Ａ３）～（

Ａ１４）と、フルオランテン基を内包する縮環芳香族炭化水素基（Ａ１６）～（Ａ２０）と、スピロフルオレン基を内包する縮環芳香族炭化水素基（Ａ２２）～（Ａ２５）とから選択される縮環芳香族炭化水素基であることがより好ましい。

[0033] Ａｒは、置換基を有していてもよく、例えば、下記式（２－１）、（２－２）、および（２－３）で表される構造であるとよい。

[0034] [化7]



(2-1) (2-2) (2-3)

[0035] 式（２－１）、式（２－２）、および式（２－３）中、

Ｒ[1]～Ｒ[38]は、それぞれ独立して、水素原子、炭素数１～２０のアルキル基、炭素原子数１～２０のアルケニル基、炭素原子数１～２０のシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のビシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のトリシクロアルキル基、炭素原子数１～１０のアルコキシ基、炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、および炭素数３～３０のヘテロアリール基から選択される少なくとも１つの置換基であることが好ましい。

[0036] 炭素数６～３０の芳香族炭化水素基は後述するＬが表すこれらの基として後述するものと同様である。また、炭素数３～３０のヘテロアリール基は、後述するＥＷＧが表す、窒素原子を含む炭素数３～３０のヘテロアリール基から選択されることが好ましい。

[0037] また、Ｒ[1]～Ｒ[38]の一部は、置換基として、互いに隣接する２つの基が結合することで、環が形成されていてもよく、当該環は炭化水素環であるとよい。より具体的には、式（２－１）に示す、Ｒ[1]～Ｒ[12]のうちの互いに隣接する２つの基が結合することで環が形成されていてもよい。これにより、式（２－１）で表される構造を含み、例えば、上述の縮環芳香族炭化水素基（Ａ４

）～（Ａ１４）から選択される何れかの縮環芳香族炭化水素基を有することができる。また、式（２－２）に示す、R^{12}～R^{22}のうちの互いに隣接する２つの基が結合することで環が形成されていてもよい。これにより、式（２－２）で表される構造を含み、例えば、上述の縮環芳香族炭化水素基（Ａ１６）～（Ａ２０）から選択される何れかの縮環芳香族炭化水素基を有することができる。また、式（２－３）に示す、R^{23}～R^{38}のうちの互いに隣接する２つの基のそれぞれが結合することで環が形成されていてもよい。これにより、式（２－３）で表される構造を含み、例えば、上述の縮環芳香族炭化水素基（Ａ２２）～（Ａ２５）から選択される何れかの縮環芳香族炭化水素基を有することができる。

[0038] 上記式（２－１）、（２－２）、または（２－３）に示す、Ａｒは、R^{1}～R^{38}のうちの一部が、式（１’）に示す基に置換されているか、または、R^{1}～R^{38}が有する水素原子が式（１’）に示す基に置換されていればよい。

[0039] また、前記R^{1}～R^{35}は、それぞれ独立して、さらに少なくとも１つの置換基を有していてもよく、前記置換基を有していなくてもよい。

[0040] ＜ＥＷＧについて＞

ＥＷＧは、電子吸引基を表し、式（１）の光電変換素子用材料が複数のＥＷＧを備えている場合、これらＥＷＧは同一の電子吸引基であってもよく、互いに異なる電子吸引基であってもよい。

[0041] 電子吸引基としては、シアノ基、ニトロ基、ハロゲン原子、ハロゲン化アルキル基、アシル基、スルホニル基、ホスホリル基、および、窒素原子を含む炭素数３～３０のヘテロアリール基から選択される少なくとも１つの基であることが好ましく、窒素原子を含む炭素数３～３０のヘテロアリール基は、少なくとも１つの置換基を有していてもよく、または前記置換基を有していなくてもよい。

[0042] ＥＷＧが表すハロゲン原子としては、フッ素原子が好ましい。

[0043] ＥＷＧが表すハロゲン化アルキル基としては、炭素原子数１～５のハロゲン化アルキル基が好ましく、炭素原子数１～３のハロゲン化アルキル基がよ

り好ましい。また、ハロゲン化アルキル基としては、フッ化アルキル基が好ましく、パーフルオロアルキル基が好ましい。フッ化アルキル基としては、パーフルオロブチル基、パーフルオロプロピル基、パーフルオロエチル基、トリフルオロメチル基が好ましく、トリフルオロメチル基がより好ましい。

[0044] ＥＷＧが表すアシル基としては、アルキルアシル基、アリールアシル基等が挙げられるが、炭素原子数２～５のアルキルアシル基、炭素原子数７～１５のアリールアシル基が好ましい。アルキルアシル基としては、例えば、アセチル基、プロピオニル基、およびトリフルオロアセチル基等が挙げられる。アリールアシル基としては、例えば、ベンゾイル基、シアノベンゾイル基、フルオロベンゾイル基、およびトリフルオロメチルベンゾイル基等が挙げられる。

[0045] ＥＷＧが表すスルホニル基としては、アルキルスルホニル基、およびアリールスルホニル基等が挙げられるが、炭素原子数１～５のアルキルスルホニル基、および炭素原子数６～１５のアリールスルホニル基が好ましい。アルキルスルホニル基としては、例えば、メチルスルホニル基、エチルスルホニル基、ｎ－プロピルスルホニル基、およびイソプロピルスルホニル基等が挙げられる。アリールスルホニル基としては、例えば、フェニルスルホニル基、シアノフェニルスルホニル基、およびフルオロフェニルスルホニル基等が挙げられる。

[0046] ＥＷＧが表すホスホリル基としては、ジアルキルホスホリル基、およびジアリールホスホリル基等が挙げられるが、炭素原子数２～１０のジアルキルホスホリル基、および炭素原子数１２～３０のジアリールホスホニル基が好ましい。ジアルキルホスホリル基としては、例えば、ジメチルホスホリル基、ジエチルホスホリル基、およびジプロピルホスホリル基等が挙げられる。ジアリールホスホリル基としては、例えば、ジフェニルホスホリル基、およびジ（フルオロフェニル）ホスホリル基等が挙げられる。

[0047] 窒素原子を含む炭素数３～３０のヘテロアリール基としては、例えば、ピリジル基、ピリミジル基、ピラジル基、トリアジル基、イミダゾリル基、キ

ノリル基、イソキノリル基、アザアントリル基、ジアザアントリル基、トリアザアントリル基、テトラアザアントリル基、アザフェナントリル基、ジアザフェナントリル基、トリアザフェナントリル基、テトラアザフェナントリル基、アザピレニル基、ジアザピレニル基、トリアザピレニル基、テトラアザピレニル基、アザフルオランテニル基、ジアザフルオランテニル基、トリアザフルオランテニル基、テトラアザフルオランテニル基、アザトリフェニレニル基、ジアザトリフェニレニル基、トリアザトリフェニレニル基、テトラアザトリフェニレニル基、ペンタアザトリフェニレニル基、ヘキサアザトリフェニレニル基、オキサゾリル基、ピロリル基、イミダゾリル基、トリアゾリル基、チアジアゾリル基、オキサジアゾリル基、ベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、ベンゾチアジアゾリル基、およびベンゾオキサジアゾリル基が挙げられる。

[0048] 窒素原子を含む炭素数３～３０のヘテロアリール基の置換基、すなわち、ＥＷＧの置換基としては、例えば、重水素原子、シアノ基、ハロゲン原子、ハロゲン化アルキル基、アシル基、ニトロ基、スルホニル基、ホスホリル基、炭素原子数１～２０のアルキル基、アルケニル基およびシクロアルキル基、炭素原子数１～１０のアルコキシ基、－Ｐ（＝Ｏ）（Ａｒ’）$_2$で表される基、－ＯＳＯ$_2$Ａｒ’で表される基、－Ｓ（＝Ｏ）Ａｒ’で表される基、－Ｂ（Ａｒ’）$_2$で表される基、－Ｂ（ＯＡｒ’）$_2$で表される基、－Ｓｉ（Ａｒ’）$_3$で表される基、炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、および炭素数３～３０のヘテロアリール基が挙げられる（Ａｒ’はアリール基を表す）。これらＥＷＧの置換基の中では、シアノ基、ハロゲン原子、ハロゲン化アルキル基、アシル基、スルホニル基、ホスホリル基、炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、および炭素数３～３０のヘテロアリール基が好ましく、シアノ基、ハロゲン原子、ハロゲン化アルキル基、炭素数３～３０のヘテロアリール基がより好ましく、シアノ基、フッ素原子、およびフッ化アルキル基がさらに好ましく、シアノ基、フッ素原子、およびトリフルオロメチル基が特に好ましい。ＥＷＧの置換基におけるハロゲン化アルキル基、アシル基、スルホニ

ル基、ホスホリル基、および炭素数３～３０のヘテロアリール基は、ＥＷＧが表すこれらの基で説明したものと同様である。炭素数６～３０の芳香族炭化水素基は、Ｌが表すこれらの基として後述するものと同様である。

[0049] ＥＷＧとしては、シアノ基、フッ素原子、フルオロアルキル基、および窒素原子を含む炭素数３～３０のヘテロアリール基が好ましく、シアノ基、フッ素原子、フルオロアルキル基、ならびにシアノ基、フッ素原子、およびフルオロアルキル基から選択される少なくとも１つの基をＥＷＧの置換基として有する窒素原子を含む炭素数３～３０のヘテロアリール基がより好ましい。

[0050] ＜Ｌについて＞

Ｌは、炭素数６～３０の芳香族炭化水素基を表し、当該炭素数６～３０の芳香族炭化水素基は置換基を有していてもよい。

[0051] 炭素数６～３０の芳香族炭化水素基としては、例えば、フェニル基、ナフチル基、フェナントリル基、アントリル基、フルオレニル基、ジメチルフルオレニル基、スピロフルオレニル基、ピレニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、テトラセニル基、およびクリセニル基等が挙げられる。これらの中では、フェニル基、およびナフチル基が好ましい。炭素数６～３０の芳香族炭化水素基が有する置換基としては、窒素原子を含む炭素数３～３０のヘテロアリール基等のＥＷＧの置換基として説明したものと同様であるため、説明を省略する。

[0052] ＜ｎ、ｋおよびｐについて＞

ｎは、好ましくは、１～８の整数を表す。式（１）に示す光電変換素子用材料は、ｎが、１～８の範囲内において最適化することで、当該光電変換素子用材料のＴｇが低くなることを抑制でき、当該光電変換素子用材料のＬＵＭＯ準位を深くすることができ、光電変換素子における応答速度を高めることができる。

[0053] ｋは、０～２の整数で表され、０または１の整数であることが好ましく、ｋが１である場合、ＥＷＧがシアノ基、フッ素原子、フルオロアルキル基で

あることがより好ましく、これにより光電変換素子用材料のＴｇが低くなることを抑制しつつ、当該光電変換素子用材料のＬＵＭＯ準位を深くすることができ、光電変換素子における応答速度を高めることができる。

[0054] ｐは、１～８の整数を表し、ｋが０である場合、ｐは１であるとよい。

[0055] 上記式（１）で表される光電変換素子用材料は、上述のＡｒ構造によってガラス転移温度Ｔｇを後述するように高め、これにより、加熱による光電変換素子用材料から形成される層を備える光電変換素子における外部量子効率、および暗電流の低下が防がれている。また、上記式（１）で表される光電変換素子用材料は、上述のＥＷＧを備えることにより、光に対する応答速度が高められている。よって。応答速度と、外部量子効率とを両立が求められる光電変換素子に好適に用いることができる。

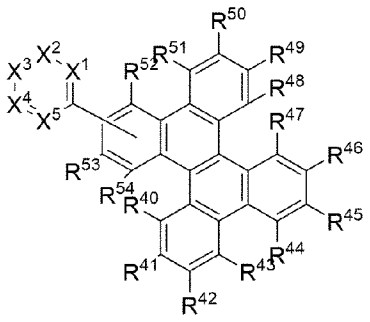
[0056] 本発明の一態様にかかる光電変換素子が備える光電変換素子用材料は上記態様に限定されない。式（１）で表されるＡｒは、（Ａ１２）、（Ａ２０）、（Ａ２１）、（Ａ－２２）～（Ａ－２５）で表される縮環芳香族炭化水素基であることが、当該縮環芳香族炭化水素基を備える化合物のＴｇをより高めることができるという観点から好ましい。より好ましくは、本発明の一態様に係る化合物は、縮環芳香族炭化水素基を備えた化合物であって、下記式（３）で表される化合物、並びに下記式（４－１）および式（４－２）で表される化合物から選択される化合物であり得る。

[0057] ＜化合物（光電変換素子用材料（２））＞

本発明の一態様にかかる光電変換素子が備える光電変換素子用材料は上記態様に限定されない。例えば、以下に記載する、下記式（３）で表される化合物も、一態様に係る本発明の範疇である。

[0058]

[化8]



（３）

[0059] 式（３）中、

Ｘ[1]～Ｘ[5]は、窒素原子またはＣＲ[55]を表し；

Ｘ[1]～Ｘ[5]の内、前記窒素原子の数は、０～３の整数であり；

Ｒ[40]～Ｒ[55]は、それぞれ独立して、水素原子、シアノ基、ニトロ基、ハロゲン原子、ハロゲン化アルキル基、アシル基、スルホニル基、ホスホリル基、炭素数１～２０のアルキル基、炭素原子数１～２０のアルケニル基、炭素原子数１～２０のシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のビシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のトリシクロアルキル基、炭素原子数１～１０のアルコキシ基、炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、および炭素数３～３０のヘテロアリール基から選択されるか、または、

前記Ｒ[40]～Ｒ[55]のうちの一部は、互いに隣接する２つの基が結合することで環が形成され；

Ｒ[55]の少なくともひとつが、シアノ基、ハロゲン原子、またはハロゲン化アルキル基から選択され；

Ｘ[1]～Ｘ[5]は、すべてＣＲ[55]である場合、前記Ｒ[55]の２つ以上がシアノ基、ハロゲン原子、およびハロゲン化アルキル基から選択され；

前記Ｒ[40]～Ｒ[55]は、それぞれ独立して、さらに少なくとも１つの置換基を有しているか、または前記置換基を有していない。

[0060] 式（３）で表される化合物は、縮環芳香族炭化水素基を備え、当該縮環芳香族炭化水素基は、式（１）で表されるＡｒとして例示される（Ａ１２）であり得る。

[0061] ＜X^1～X^5について＞

X^1～X^5は窒素原子またはCR^{55}を表し、X^1～X^5の内、窒素原子数は０～３の整数である。

[0062] X^1～X^5がすべてCR^{55}であるか、X^2～X^4のいずれかひとつが窒素原子であることが好ましい。

[0063] ＜R^{40}～R^{55}について＞

R^{40}～R^{55}が表す置換基、および好ましい具体例は、式（１）で表される置換基の例と同じである。また、R^{40}～R^{55}が有するさらなる置換基の好ましい具体例は、式（１）で表されるＥＷＧの置換基と同じである。

[0064] ＜R^{55}について＞

R^{55}は、水素原子、シアノ基、ニトロ基、ハロゲン原子、ハロゲン化アルキル基、アシル基、スルホニル基、ホスホリル基、炭素数１～２０のアルキル基、炭素原子数１～２０のアルケニル基、炭素原子数１～２０のシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のビシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のトリシクロアルキル基、炭素原子数１～１０のアルコキシ基、炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、炭素数３～３０のヘテロアリール基、から選択するとよい。

R^{55}のいずれかひとつは、シアノ基、ハロゲン原子、またはハロゲン化アルキル基であり、隣接するR^{55}は、互いに結合して環を形成しても良い。

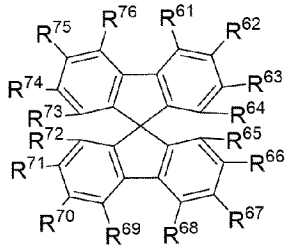
[0065] また、式（３）に表される化合物において、前記ハロゲン原子は、フッ素原子であり、前記炭素数６～３０の芳香族炭化水素基は、シアノ基、フッ素基、およびフルオロアルキル基から選択される基によって置換されていてもよく、置換されていなくてもよい。

[0066] ＜化合物（光電変換素子用材料（３））＞

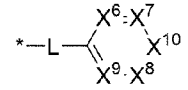
本発明の一態様にかかる光電変換素子が備える光電変換素子用材料は上記態様に限定されない。例えば、以下に記載する、下記式（４－１）で表される化合物も、一態様に係る本発明の範疇である。

[0067]

[化9]



(4-1)



(4-2)

[0068] 前記式（４－１）中、

Ｒ^{61}～Ｒ^{76}は、それぞれ独立して、水素原子、シアノ基、ニトロ基、ハロゲン原子、ハロゲン化アルキル基、アシル基、スルホニル基、ホスホリル基、炭素数１～２０のアルキル基、炭素原子数１～２０のアルケニル基、炭素原子数１～２０のシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のビシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のトリシクロアルキル基、炭素原子数１～１０のアルコキシ基、炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、炭素数３～３０のヘテロアリール基、および式（４－２）で表される基から選択されるか、または、互いに隣接する２つの基が結合することで環が形成され；

Ｒ^{61}～Ｒ^{64}の内、いずれかひとつは式（４－２）で表される基であり；

Ｌは直接結合または炭素数６～１６の芳香族炭化水素基を表し；

Ｘ^{6}～Ｘ^{10}は、窒素原子、Ｃ（ＣＮ）、またはＣＲ^{77}を表し；

Ｘ^{9}およびＸ^{10}の内、Ｘ^{9}がＣ（ＣＮ）であるか、Ｘ^{10}が窒素原子またはＣ（ＣＮ）であり；

Ｘ^{6}～Ｘ^{10}の内、前記窒素原子の数は０または１つであり、前記窒素原子の数が０である場合、前記Ｃ（ＣＮ）の数は２～３つの何れかであり、前記窒素原子の数が１つである場合、前記Ｃ（ＣＮ）の数は２つであり；

Ｒ^{77}は、それぞれ独立して、水素原子、ニトロ基、ハロゲン原子、ハロゲン化アルキル基、アシル基、スルホニル基、ホスホリル基、炭素数１～２０のアルキル基、炭素原子数１～２０のアルケニル基、炭素原子数１～２０のシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のビシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のトリシクロアルキル基、炭素原子数１～１０のアルコキシ基から選択される。

[0069] ＜R^{61}～R^{76}について＞

式（４－１）中、R^{61}～R^{76}は、式（４－２）で表される基から選択される場合を除き、上記式（３）の化合物におけるR^{40}～R^{55}と同様の基から選択され得る。ここで、式（４－１）中、R^{61}～R^{76}は、（ａ）シアノ基、ニトロ基、ハロゲン原子、ハロゲン化アルキル基、アシル基、スルホニル基、ホスホリル基、炭素数３～３０のヘテロアリール基、および式（４－２）で表される基から選択されるか、又は、（ｂ）水素原子、炭素数１～２０のアルキル基、炭素原子数１～２０のアルケニル基、炭素原子数１～２０のシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のビシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のトリシクロアルキル基、炭素原子数１～１０のアルコキシ基、炭素数６～３０の芳香族炭化水素基から選択され得、互いに隣接する２つの基が結合することで環を形成し得る。

[0070] 式（４－１）中、R^{61}～R^{76}は、化合物のＬＵＭＯ準位を深くするという観点から、上述の（ａ）から選択されることが好ましく、上述の式（１）に示すＥＷＧが表す基から選択され得、シアノ基、炭素数３～１６のヘテロアリール基、および式（４－２）で表される基から選択されることがより好ましい。ただし、R^{61}～R^{76}が、炭素数３～１６のヘテロアリール基から選択される場合、当該ヘテロアリール基は、カルバゾリル基を含んでいてもよいし、含まなくてもよい。

[0071] また、R^{61}～R^{76}は、ガラス転移温度Ｔｇを高めるという観点から、上述の（ｂ）から選択されることが好ましく、水素原子、炭素数１～２０のアルキル基、炭素原子数１～２０のシクロアルキル基、炭素数６～１６の芳香族炭化水素基から選択されることがより好ましい。

[0072] 式（４－１）中、R^{61}～R^{76}において、互いに隣接する２つの基が結合することで環が形成される場合、当該環は、式（１）にＡｒとして例示される縮環芳香族炭化水素基の一部を構成し得る。すなわち、式（４－１）で表される化合物は、縮環芳香族炭化水素基を備え、当該縮環芳香族炭化水素基は、式（１）で表されるＡｒとして例示される（Ａ２１）であり得、R^{61}～R^{7}

^{6}が環を形成する場合、（Ａ－２２）～（Ａ－２５）に例示される縮環芳香族炭化水素基であり得る。式（４－１）中、Ｒ^{61}～Ｒ^{76}が、環を形成することは、化合物のＴｇをより高めることができるという観点から好ましい。

[0073] 式（４－２）で表される基において、Ｌは、式（１）に表されたＬの具体例うち、炭素数６～１６の芳香族炭化水素基から選択され、フェニル基、ナフチル基、フェナントリル基、アントリル基、フルオレニル基、ジメチルフルオレニル基などであり得、当該炭素数６～１６の芳香族炭化水素基は置換基を有していてもよい。ここで、炭素数６～１６の芳香族炭化水素基が有する置換基としては、窒素原子を含む炭素数３～３０のヘテロアリール基等のＥＷＧの置換基として説明したものから選択すればよい。式（４－２）に示すＬが直接結合である場合は、式（１）のｋが０である場合に該当することは言うまでもない。

[0074] 式（４－２）で表される基において、Ｘ^{6}～Ｘ^{10}を備える環構造は、２～３つのニトリル基により置換されたフェニル基、及び２つのニトリル基に置換されたピリジル基から選択され、ニトリル基以外の基としてＲ^{77}を備え、式（１）で表されるＥＷＧと同じく、電子吸引基である。Ｘ^{6}～Ｘ^{10}を備える環構造は、Ｘ^{10}が、窒素原子またはＣ（ＣＮ）であり、Ｘ^{7}およびＸ^{8}がＣ（ＣＮ）またはＣＲ^{77}であり、Ｘ^{6}およびＸ^{9}がＣＲ^{77}であることがより好ましい。

[0075] Ｒ^{77}は、それぞれ独立して、水素原子、ニトロ基、ハロゲン原子、ハロゲン化アルキル基、アシル基、スルホニル基、ホスホリル基、炭素数１～２０のアルキル基、炭素原子数１～２０のアルケニル基、炭素原子数１～２０のシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のビシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のトリシクロアルキル基、炭素原子数１～１０のアルコキシ基から選択され、それぞれ独立して、水素原子、炭素数１～２０のアルキル基、および炭素原子数１～２０のシクロアルキル基から選択されることがより好ましい。

[0076] また、Ｒ^{61}～Ｒ^{77}が表す置換基は、少なくとも１つの置換基を有している

か、または前記置換基を有してなく、置換基を有している場合、当該置換基は、窒素原子を含む炭素数３～３０のヘテロアリール基等のＥＷＧが表す置換基として説明したものから選択すればよい。

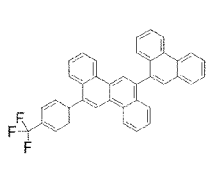
[0077] ＜光電変換素子用材料の好ましい具体例＞

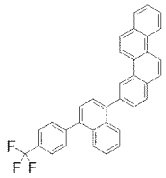
以下に、式（１）のいずれかで表される光電変換素子用材料について、好ましい具体例を示すが、これらに限定されるものではない。

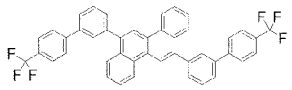
[0078]

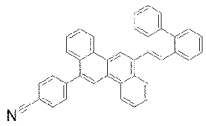
[化10-1]

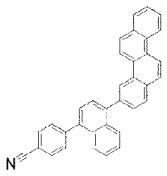
〔Ｂ００１－Ｂ０２４〕

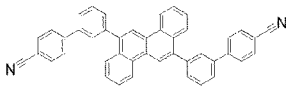

B001

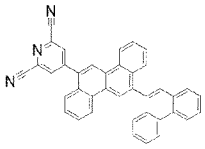

B002

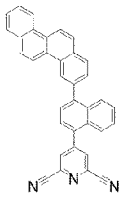

B003

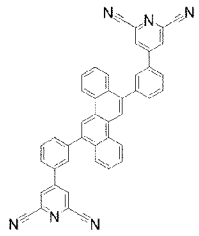

B004

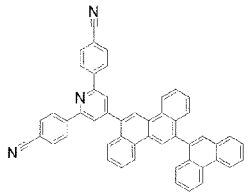

B005

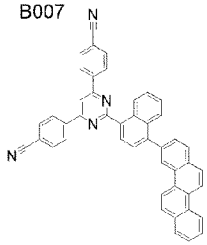

B006

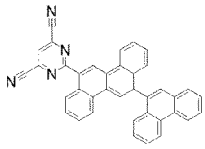

B007

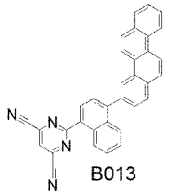

B008

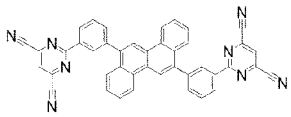

B009

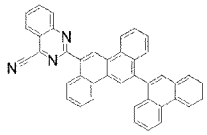

B010

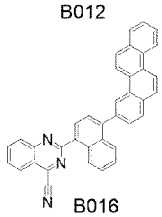

B011

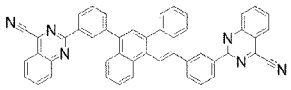

B012

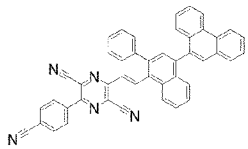

B013

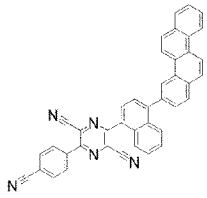

B014

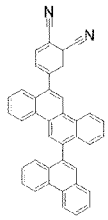

B015

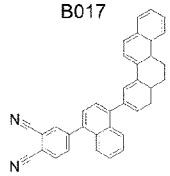

B016

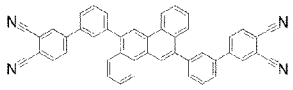

B017

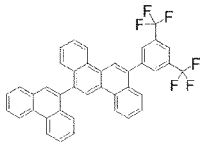

B018

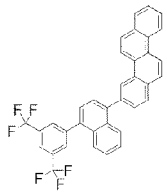

B019


B020


B021


B022

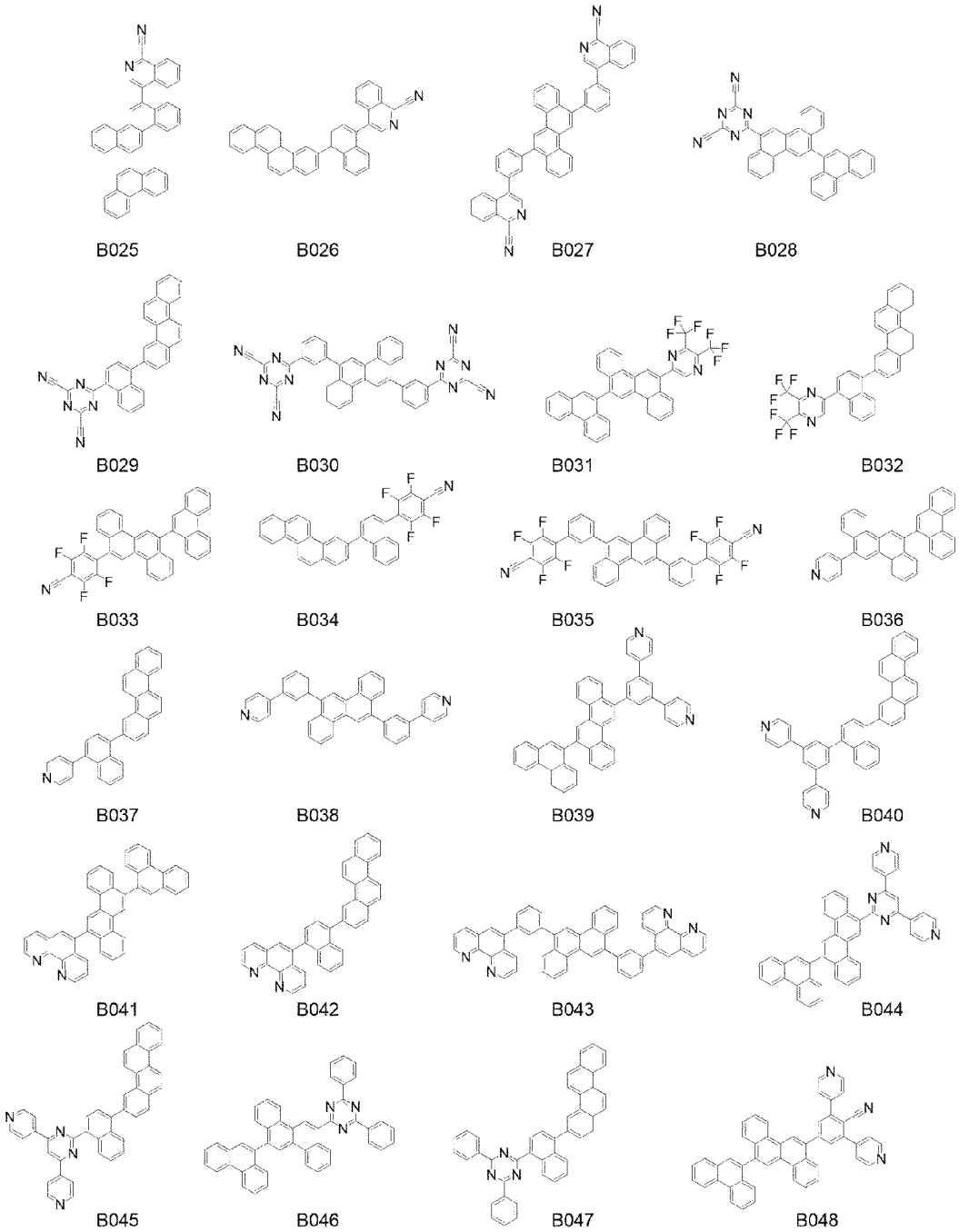

B023


B024

[0079]

[化10-2]

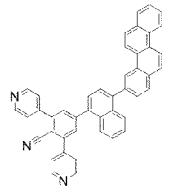
[B025－B048]

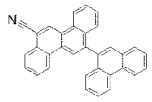


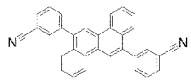
[0080]

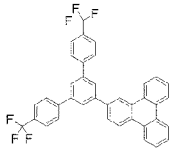
[化10-3]

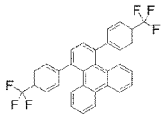
〔B049－B072〕

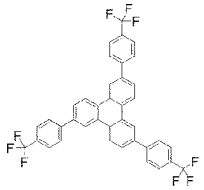

B049

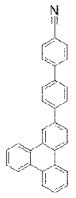

B050

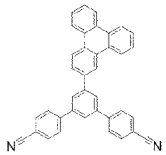

B051

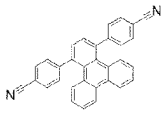

B052

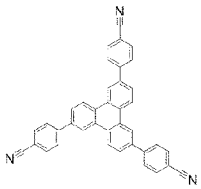

B053

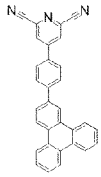

B054

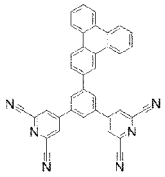

B055

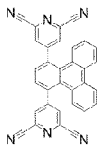

B056

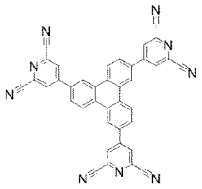

B057

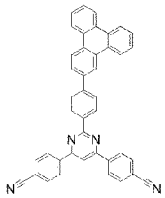

B058

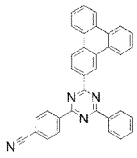

B059

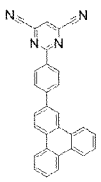

B060

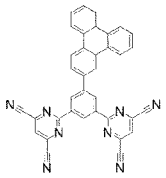

B061

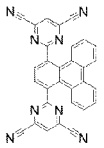

B062

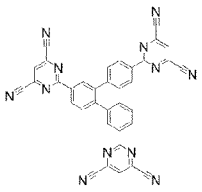

B063

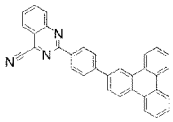

B064

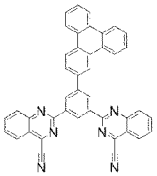

B065

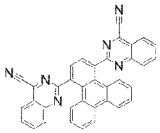

B066

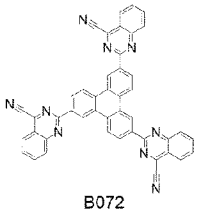

B067


B068


B069


B070

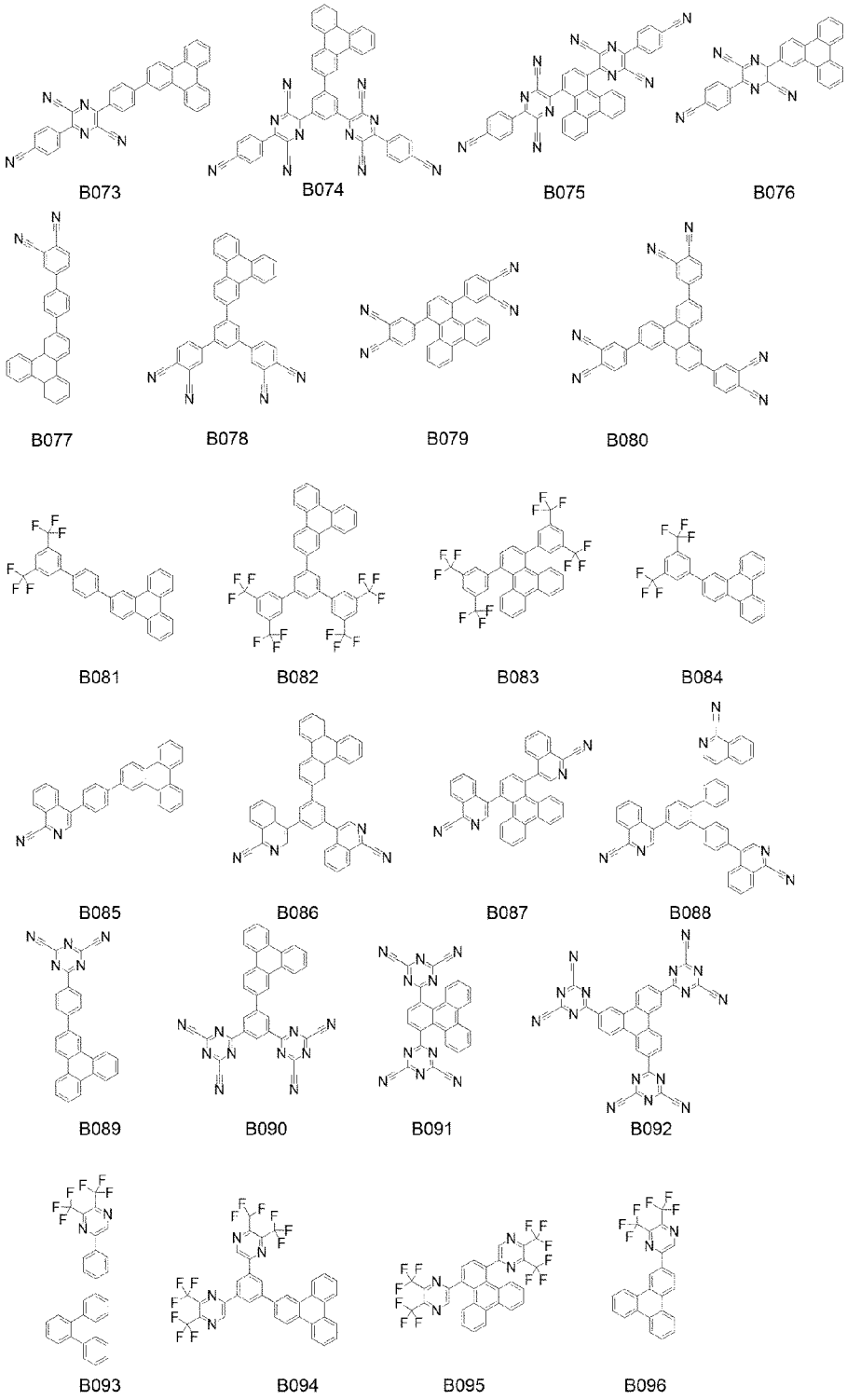

B071


B072

[0081]

[化10-4]

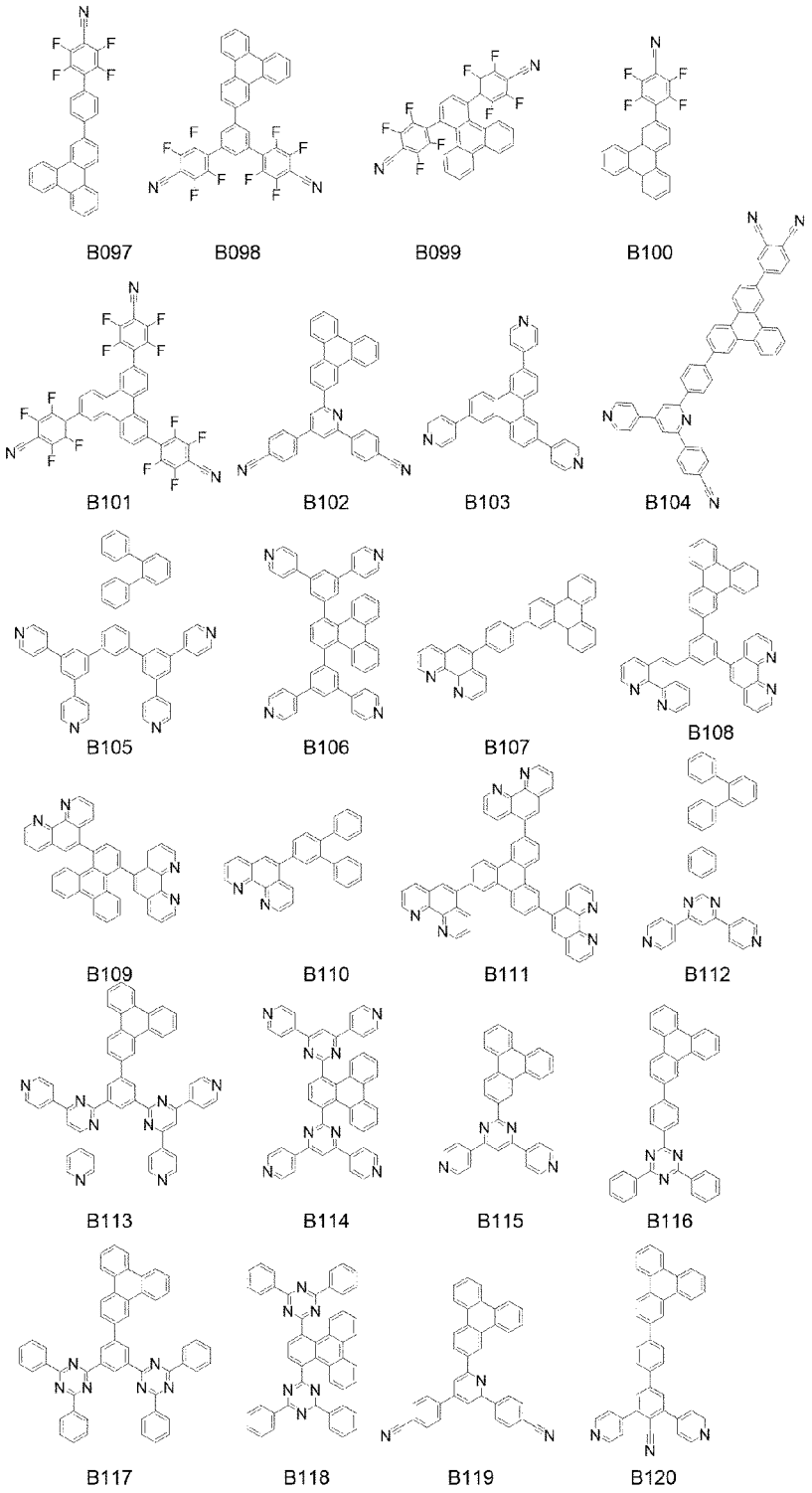
〔B073－B096〕



[0082]

[化10-5]

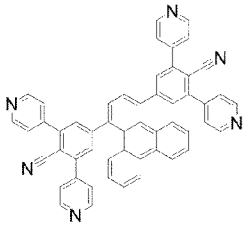
[B097－B120]



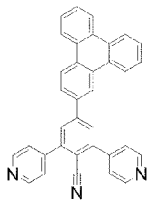
[0083]

[化10-6]

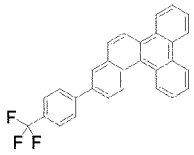
〔B121－B144〕



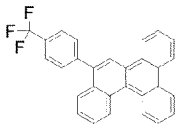
B121



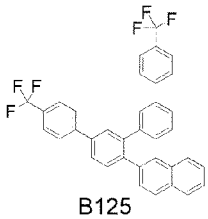
B122



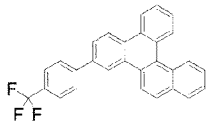
B123



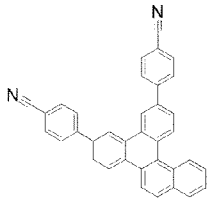
B124



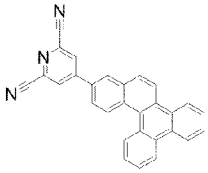
B125



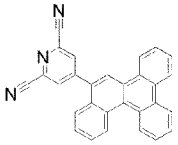
B126



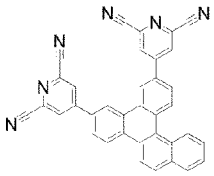
B127



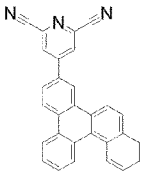
B128



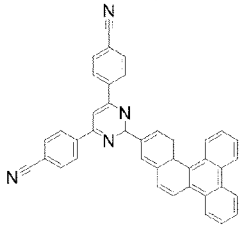
B129



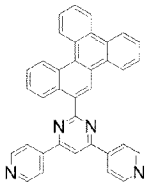
B130



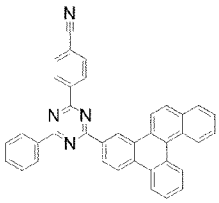
B131



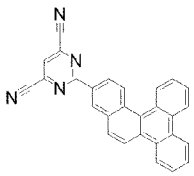
B132



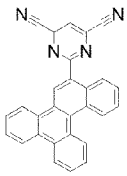
B133



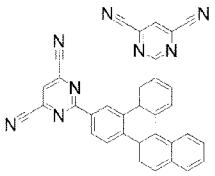
B134



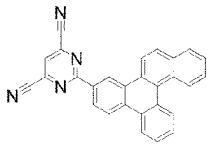
B135



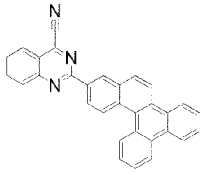
B136



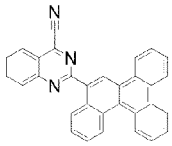
B137



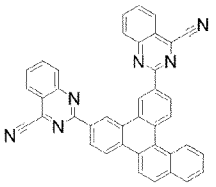
B138



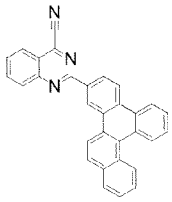
B139



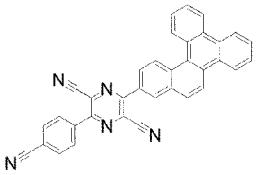
B140



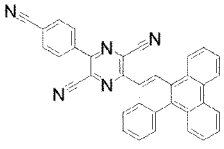
B141



B142



B143

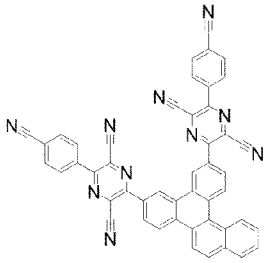


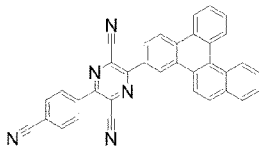
B144

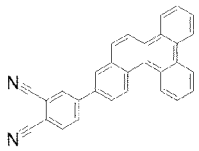
[0084]

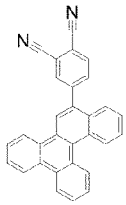
[化10-7]

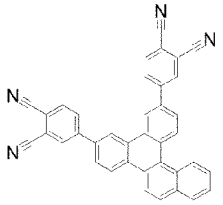
[B145－B168]

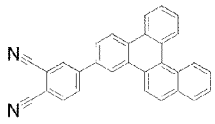

B145

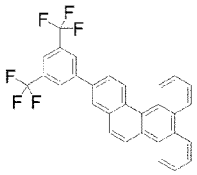

B146

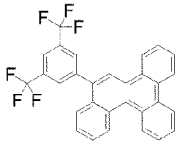

B147

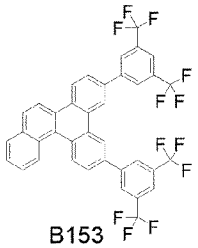

B148

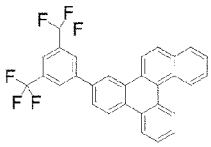

B149

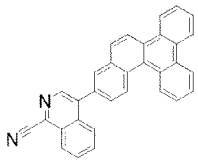

B150

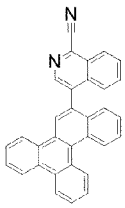

B151

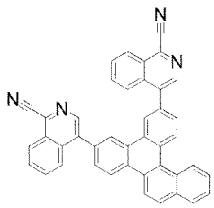

B152

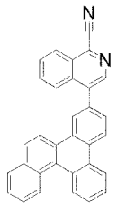

B153

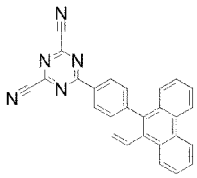

B154

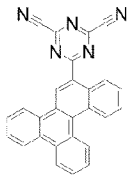

B155

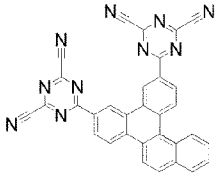

B156

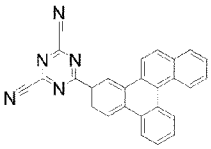

B157

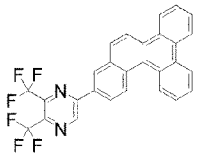

B158

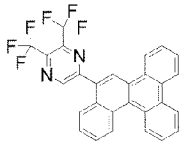

B159

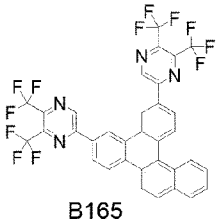

B160

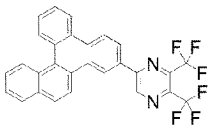

B161

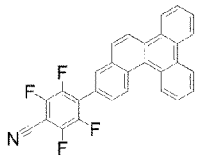

B162

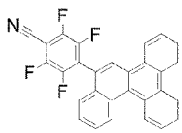

B163


B164


B165


B166

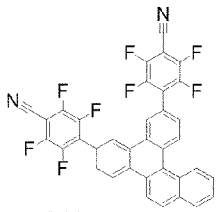

B167

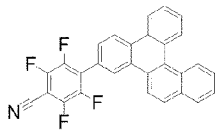

B168

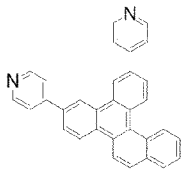
[0085]

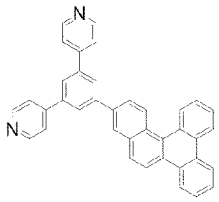
[化10-8]

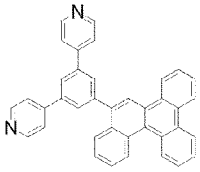
[B169－B192]

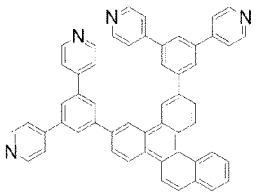

B169

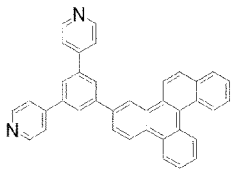

B170

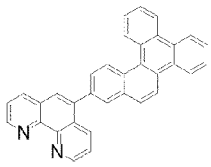

B171

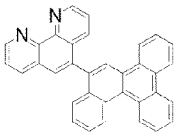

B172

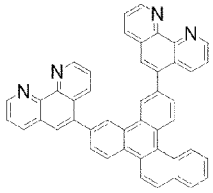

B173

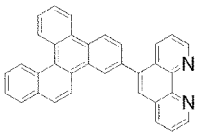

B174

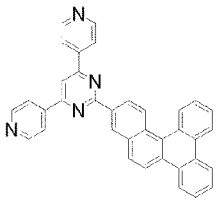

B175

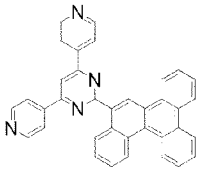

B176

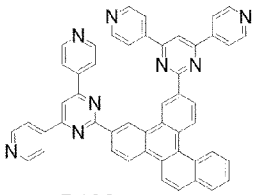

B177

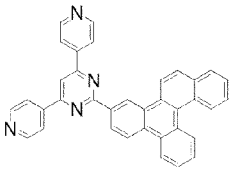

B178

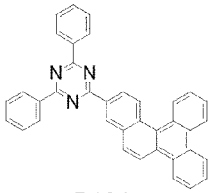

B179

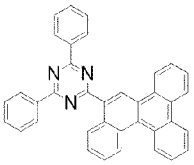

B180

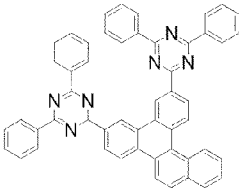

B181

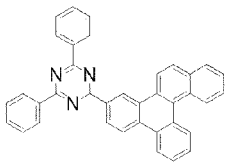

B182

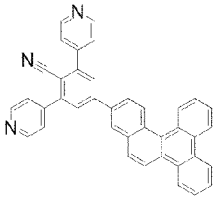

B183

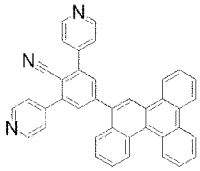

B184

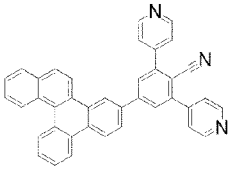

B185

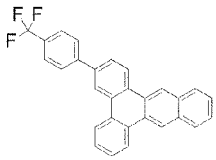

B186

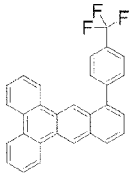

B187


B188


B189


B190

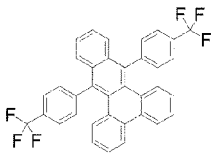

B191

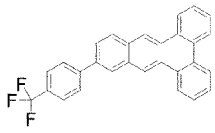

B192

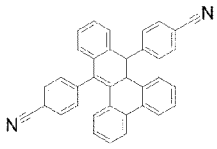
[0086]

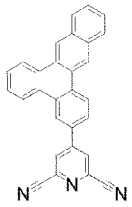
[化10-9]

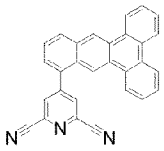
[B193－B216]

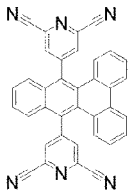

B193

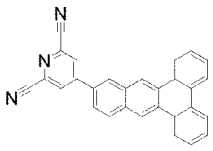

B194

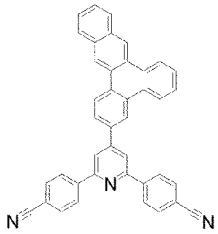

B195

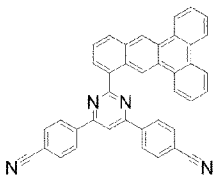

B196

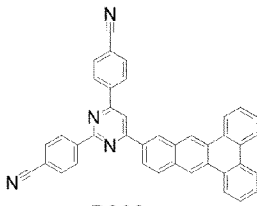

B197

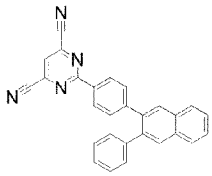

B198

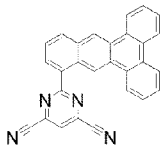

B199

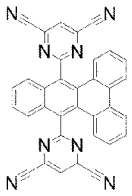

B200

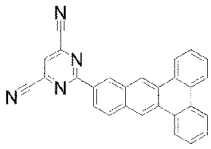

B201

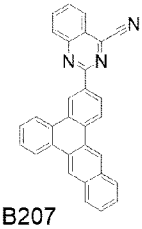

B202

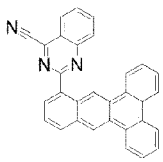

B203

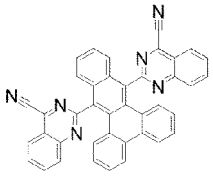

B204

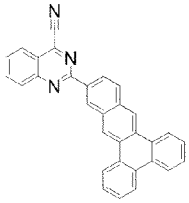

B205

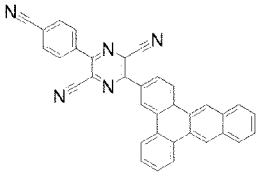

B206

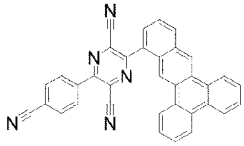

B207

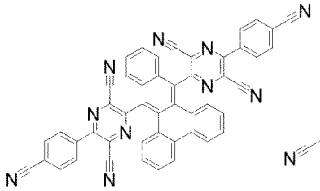

B208

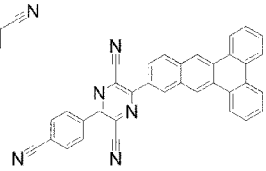

B209

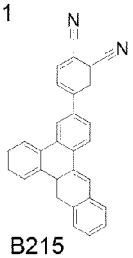

B210

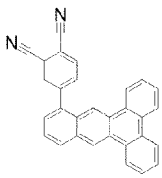

B211


B212


B213


B214

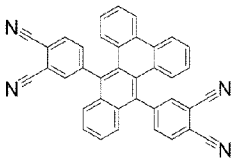

B215

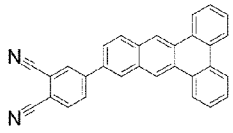

B216

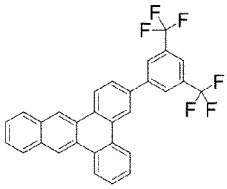
[0087]

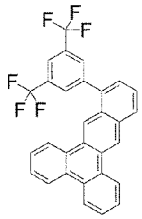
[化10-10]

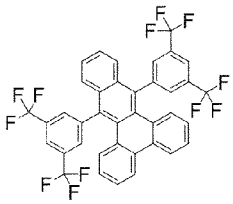
〔B217－B240〕

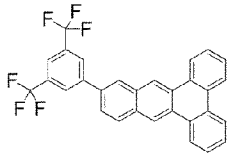

B217

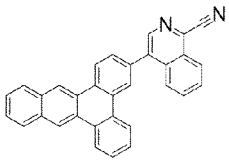

B218

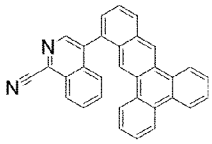

B219

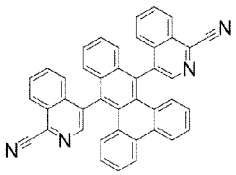

B220

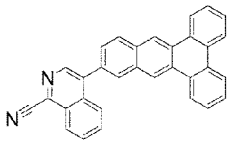

B221

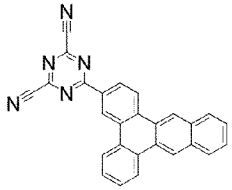

B222

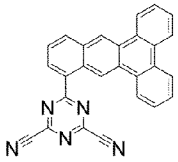

B223

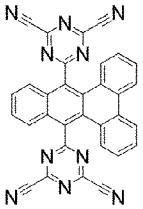

B224

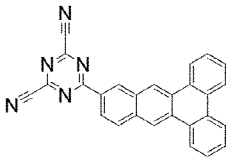

B225

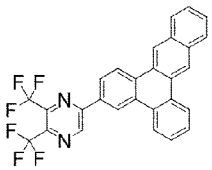

B226

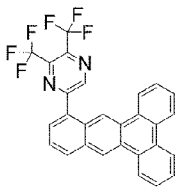

B227

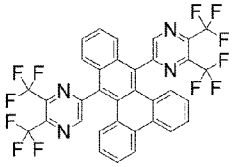

B228

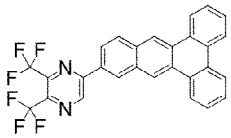

B229

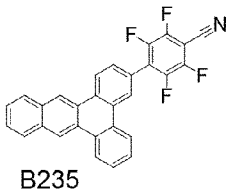

B230

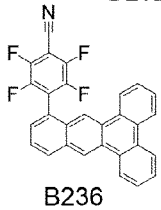

B231

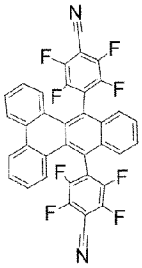

B232

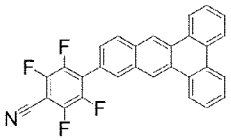

233

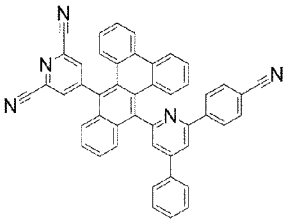

B234

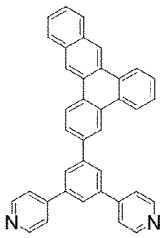

B235


B236


B237


B238

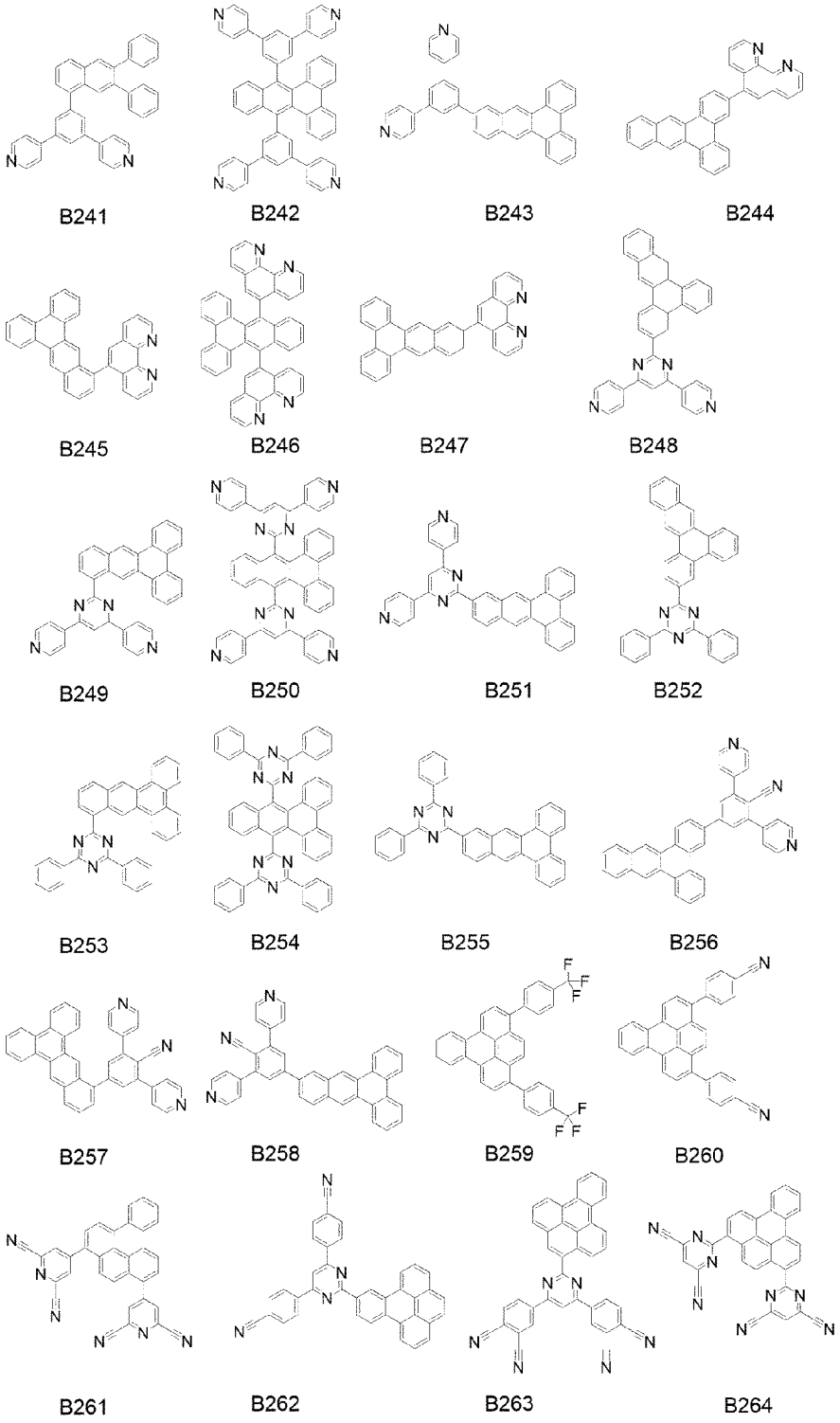

B239


B240

[0088]

[化10-11]

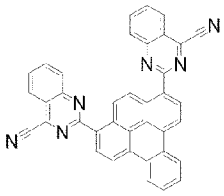
[B241－B264]



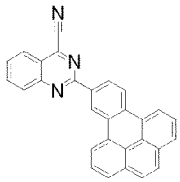
[0089]

[化10-12]

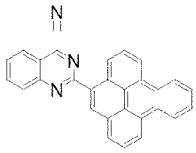
〔B265－B288〕



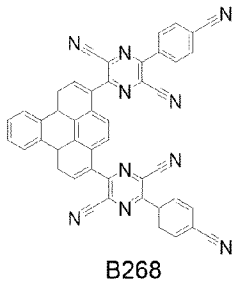
B265



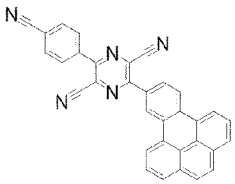
B266



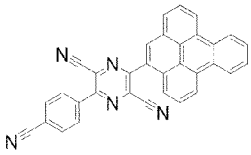
B267



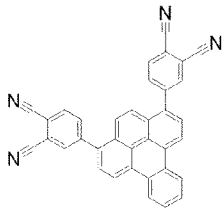
B268



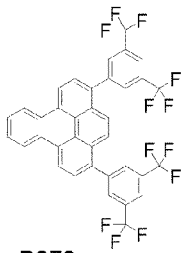
B269



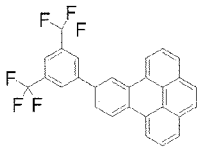
B270



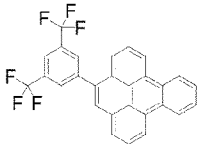
B271



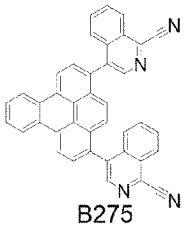
B272



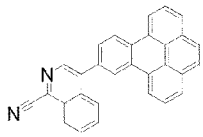
B273



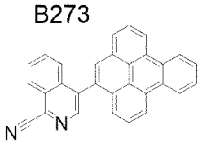
B274



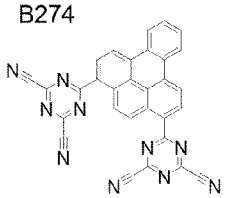
B275



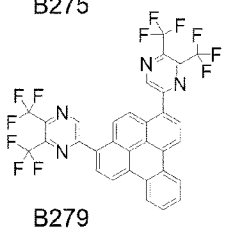
B276



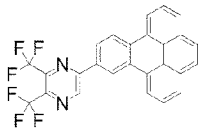
B277



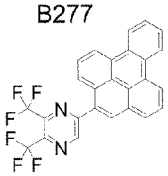
B278



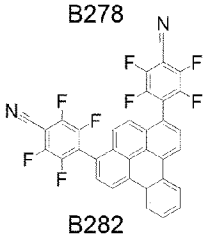
B279



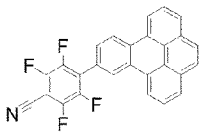
B280



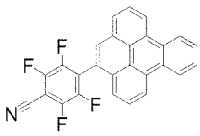
B281



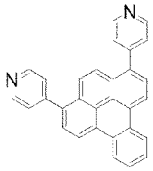
B282



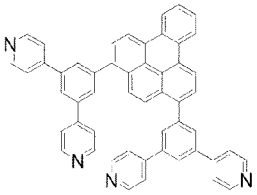
B283



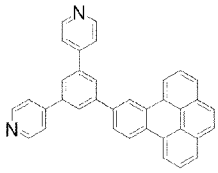
B284



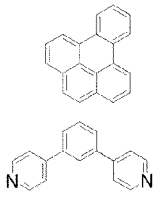
B285



B286



B287

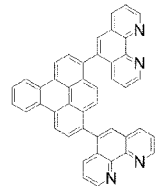


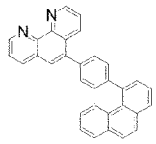
B288

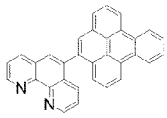
[0090]

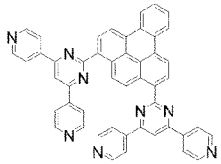
[化10-13]

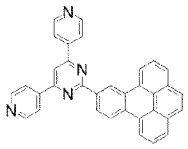
〔B289－B312〕

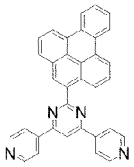

B289

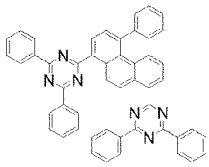

B290

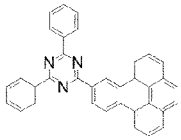

B291

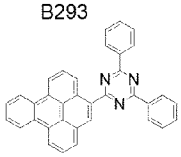

B292

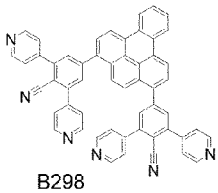

B293

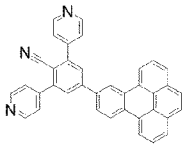

B294

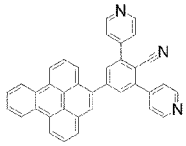

B295

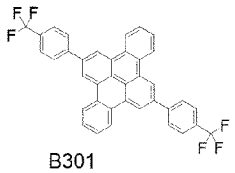

B296

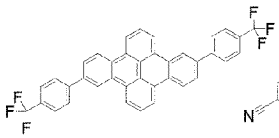

B297

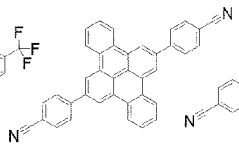

B298

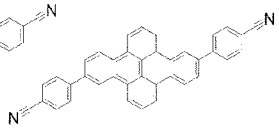

B299

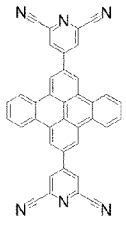

B300

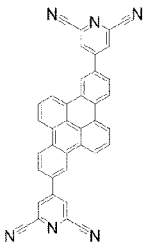

B301

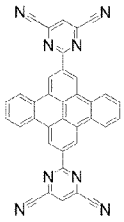

B302

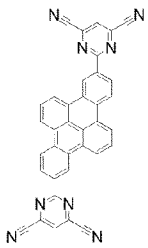

B303

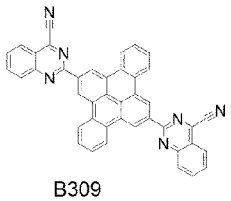

B304

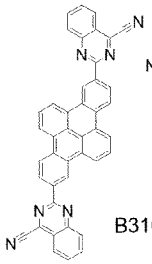

B305

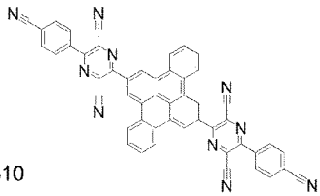

B306

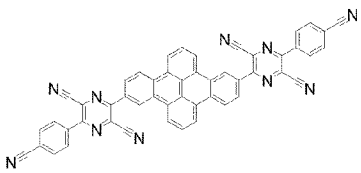

B307


B308


B309


B310

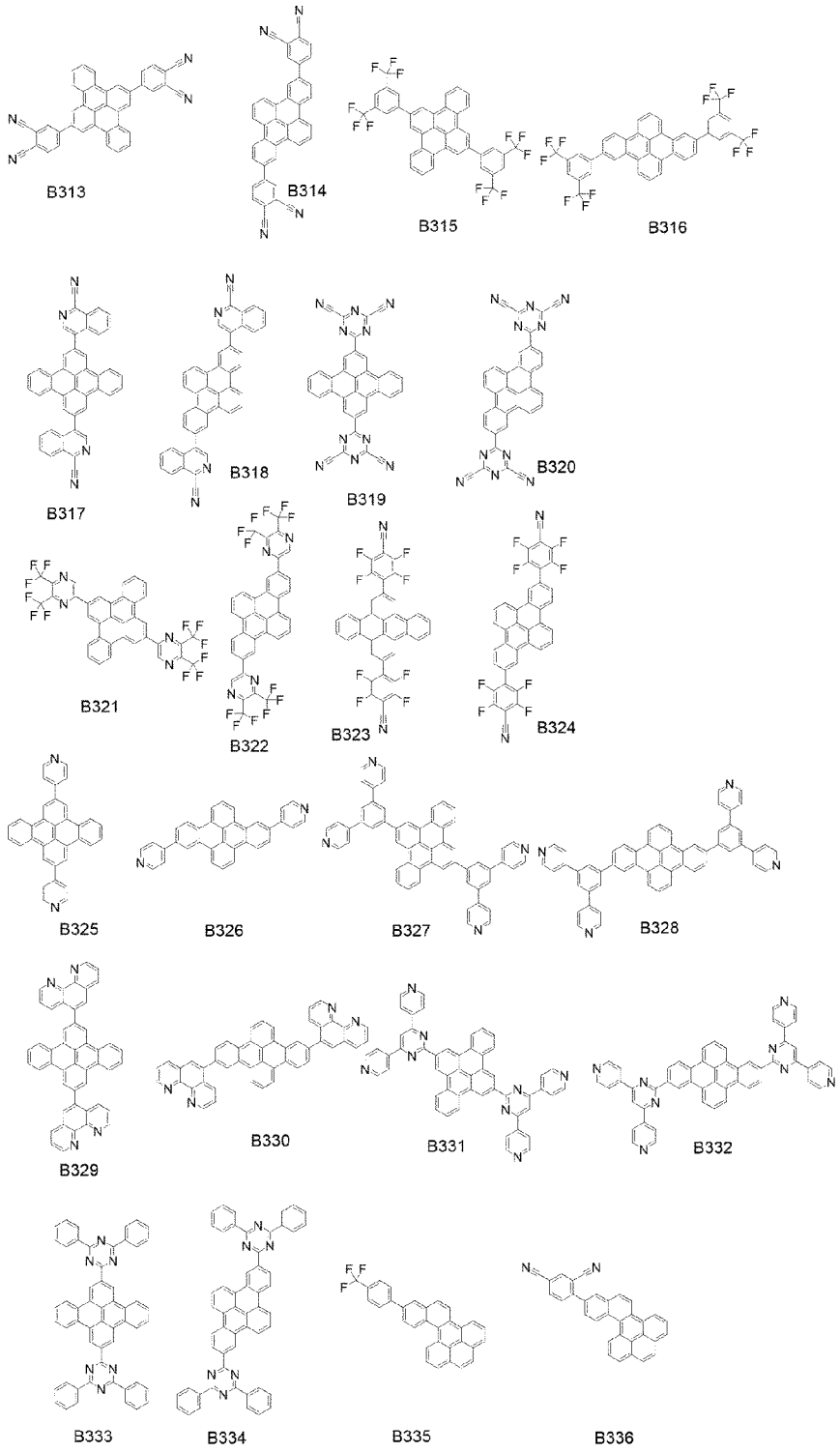

B311


B312

[0091]

[化10-14]

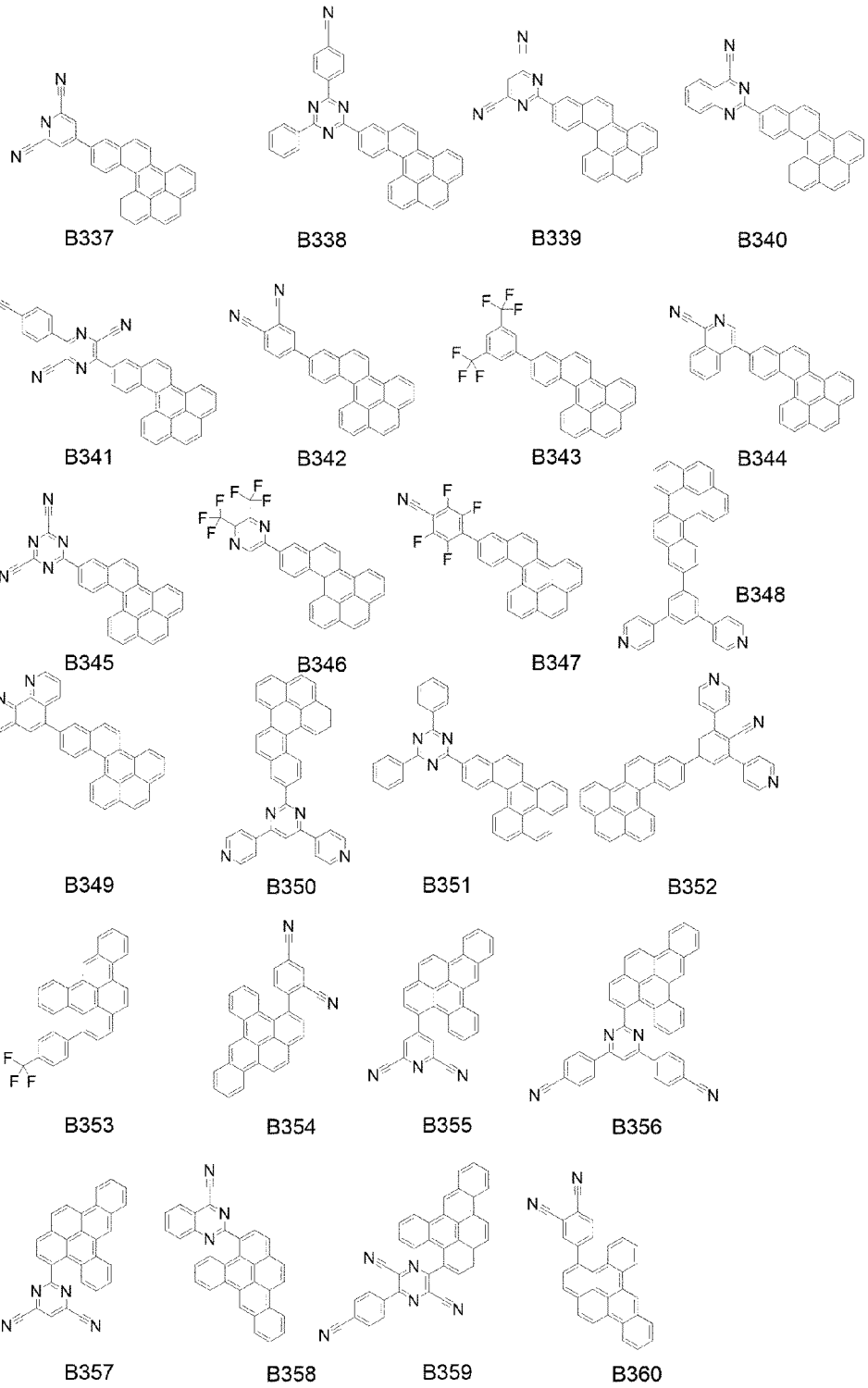
〔B313－B336〕



[0092]

[化10-15]

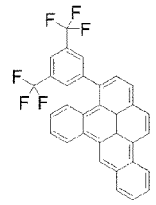
[B337－B360]

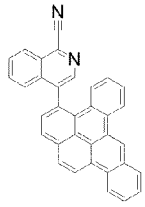


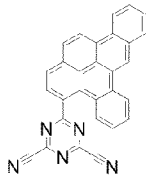
[0093]

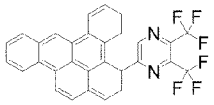
[化10-16]

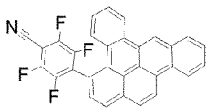
〔B361－B384〕

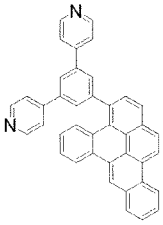

B361

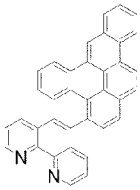

B362

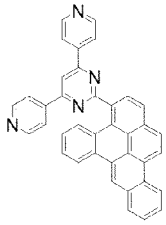

B363

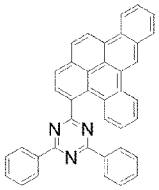

B364

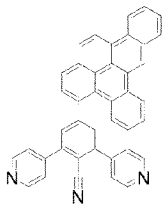

B365

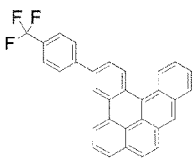

B366

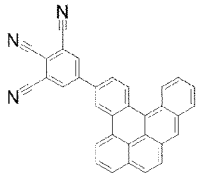

B367

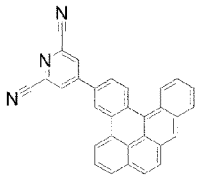

B368

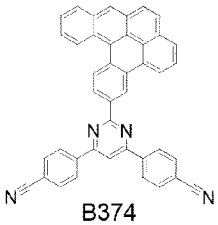

B369

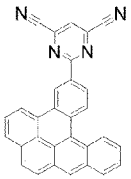

B370

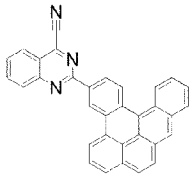

B371

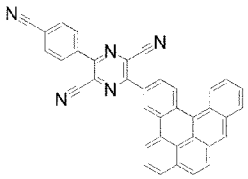

B372

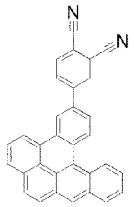

B373

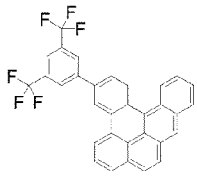

B374

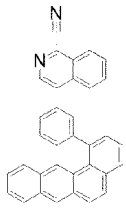

B375

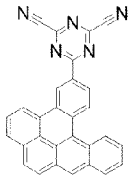

B376

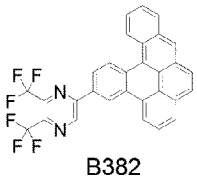

B377

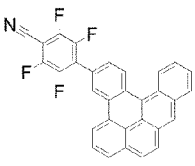

B378

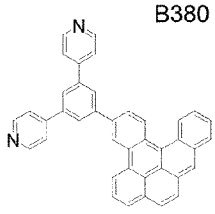

B379


B380


B381


B382

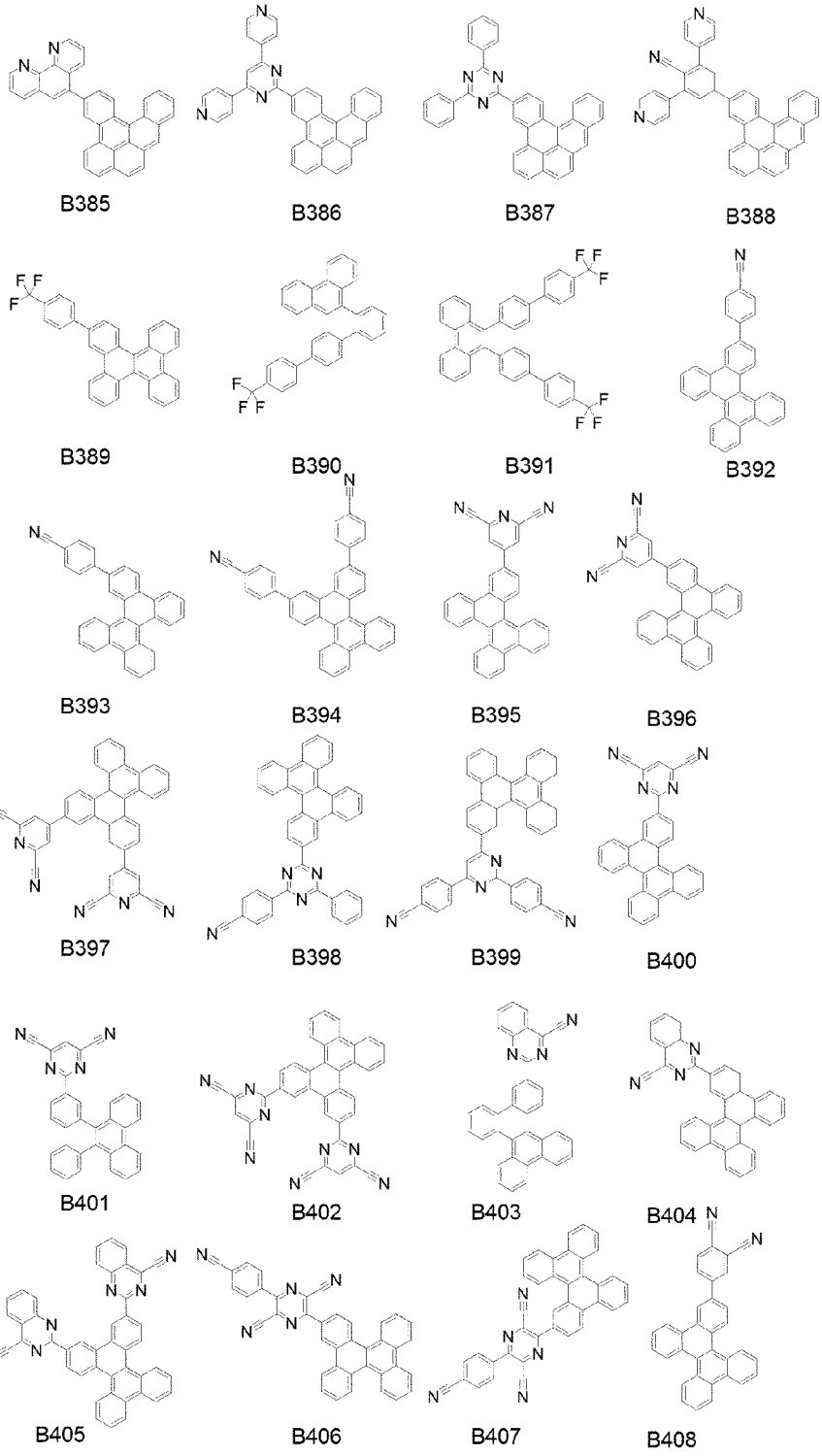

B383


B384

[0094]

[化10-17]

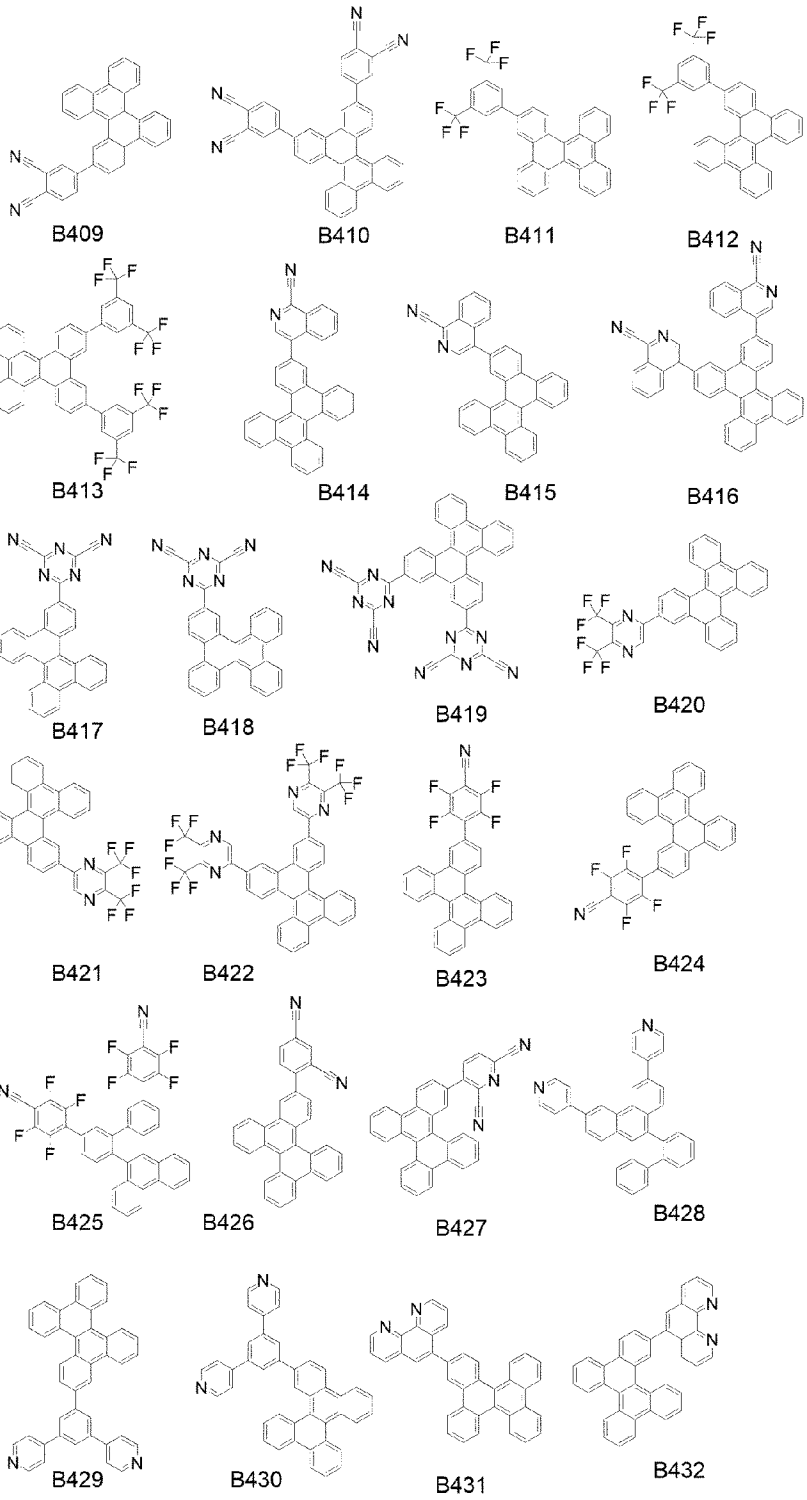
[B385－B408]



[0095]

[化10-18]

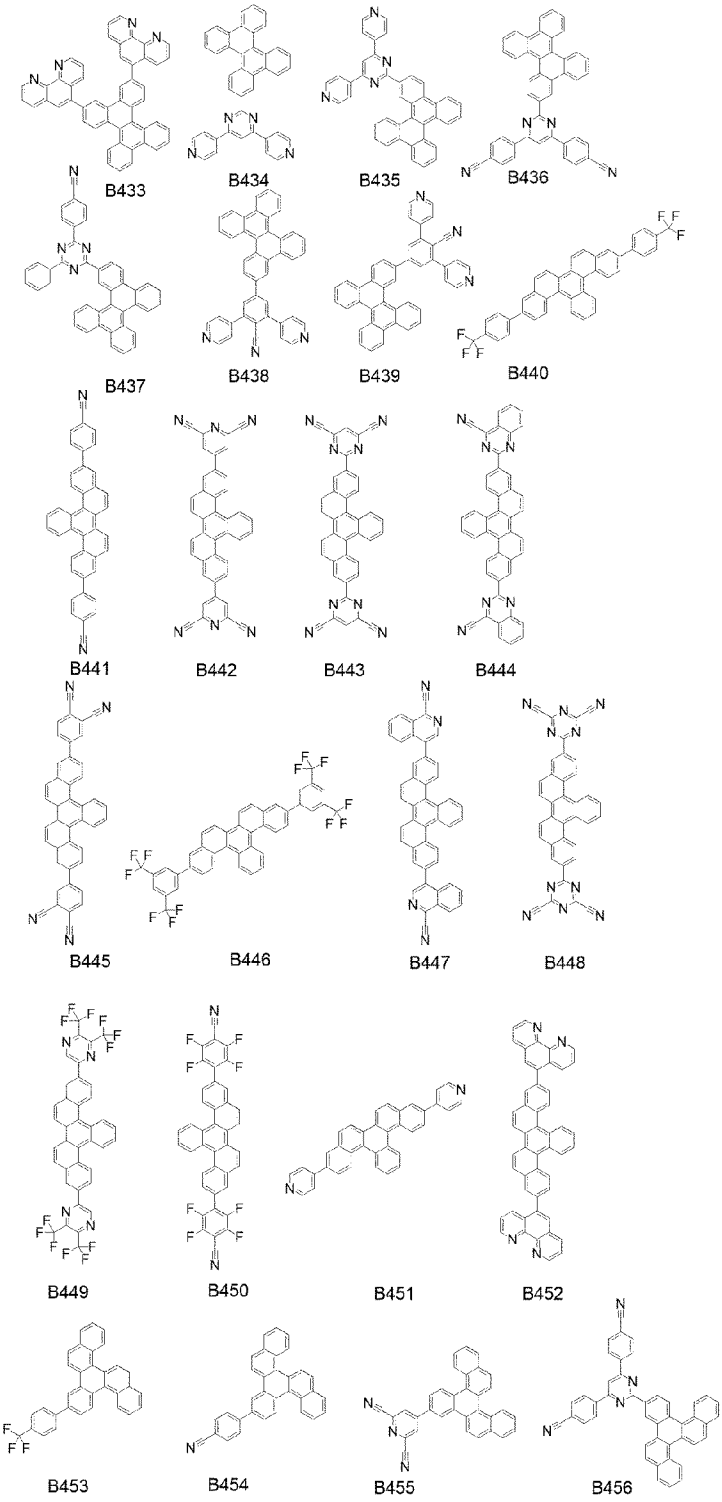
〔B409－B432〕



[0096]

[化10-19]

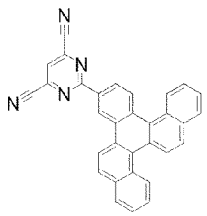
〔B433－B456〕

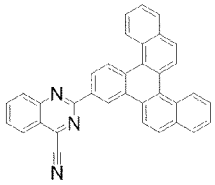


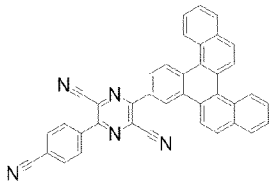
[0097]

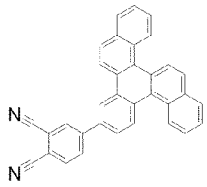
[化10-20]

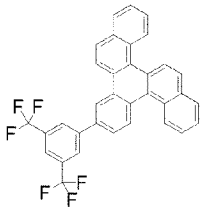
[B457－B480]

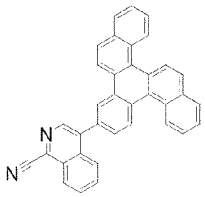

B457

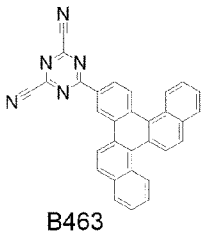

B458

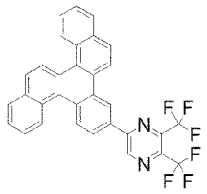

B459

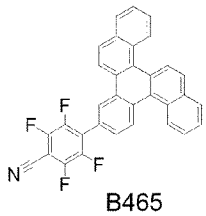

B460

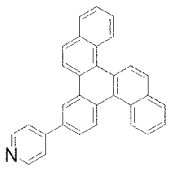

B461

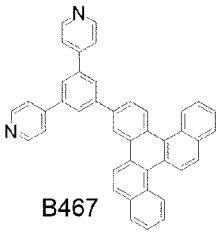

B462

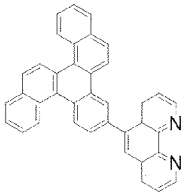

B463

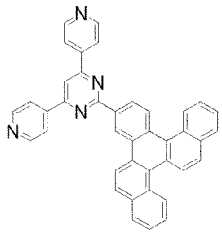

B464

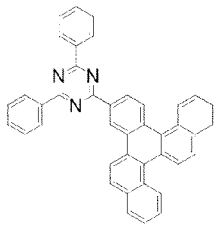

B465

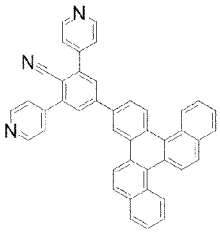

B466

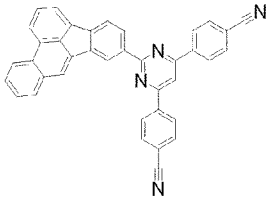

B467

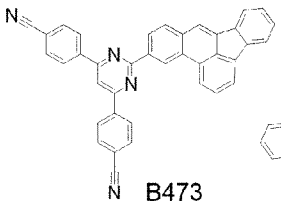

B468

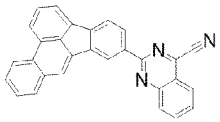

B469

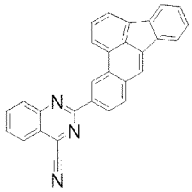

B470

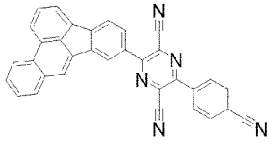

B471

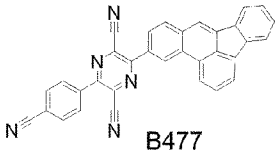

B472

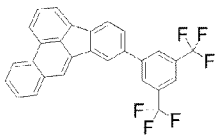

B473

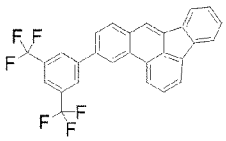

B474

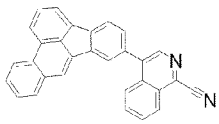

B475


B476


B477


B478

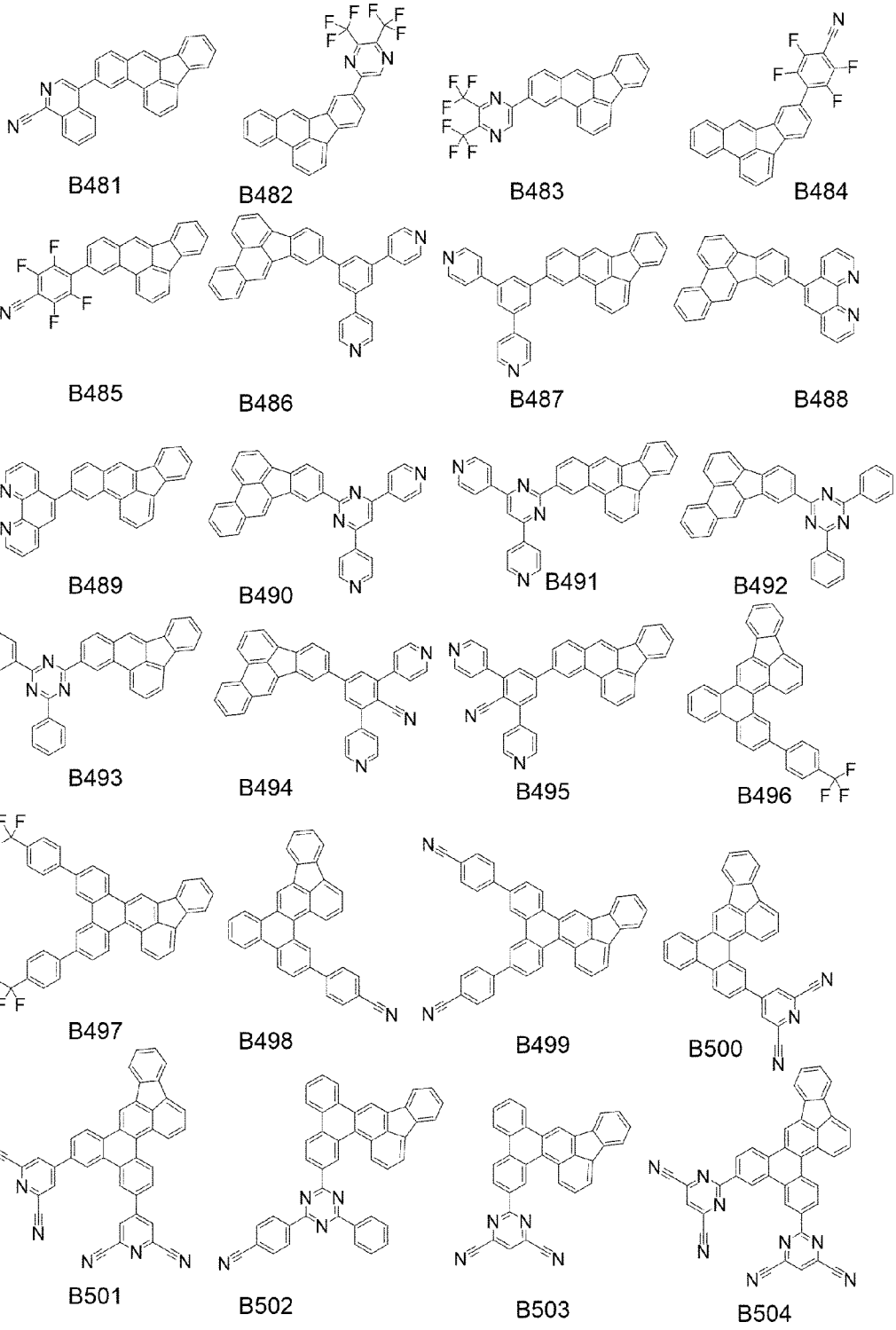

B479


B480

[0098]

[化10-21]

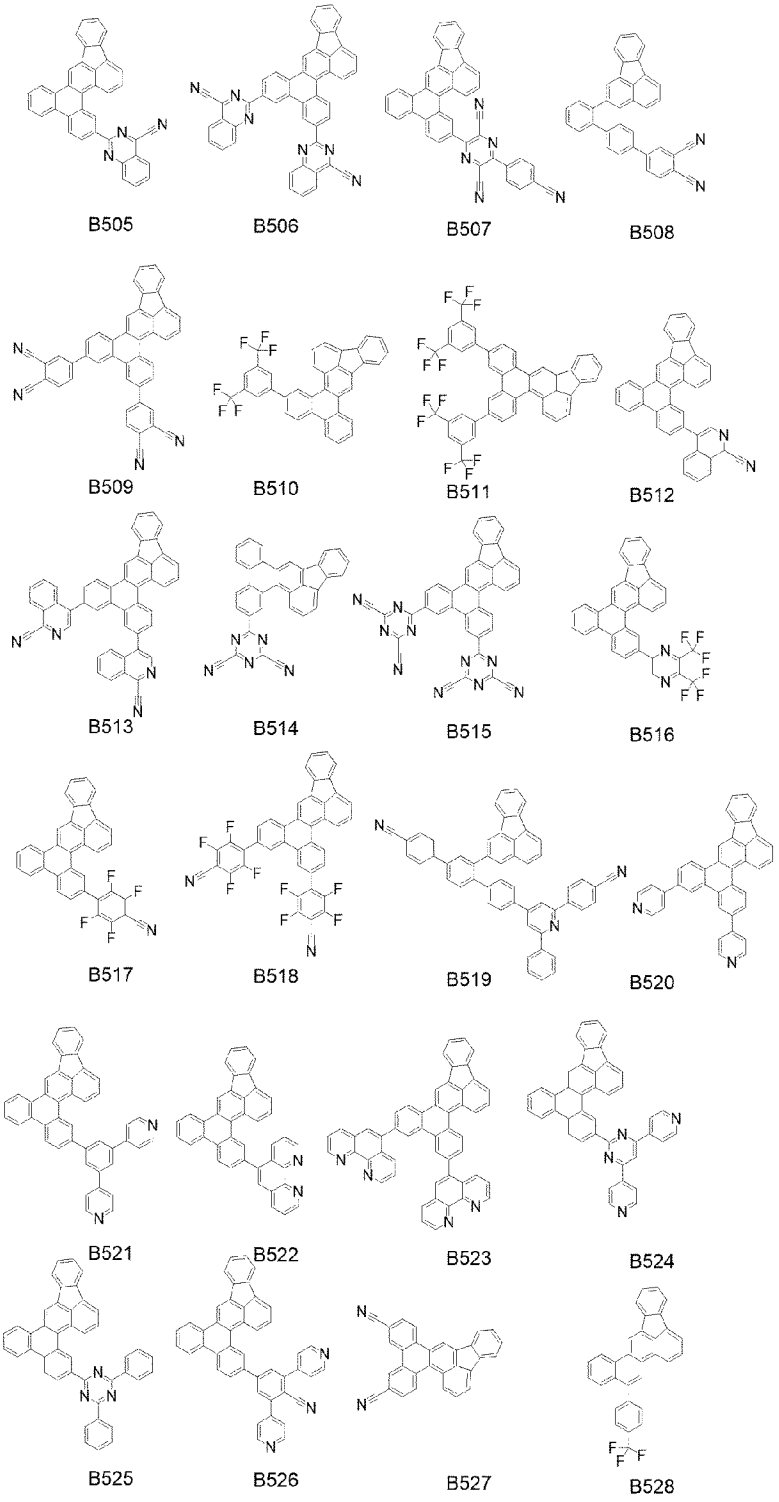
〔B481－B504〕



[0099]

[化10-22]

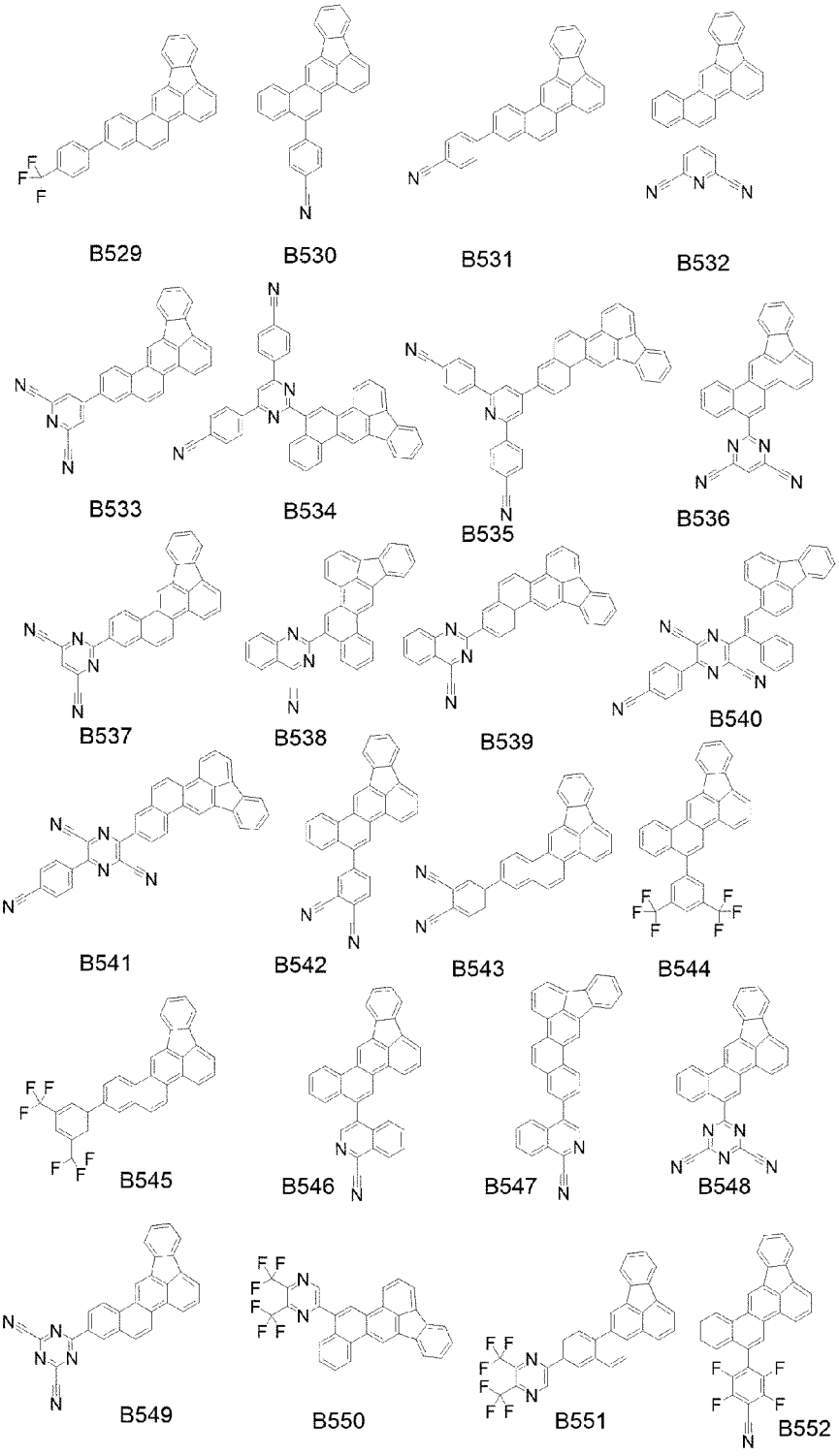
〔B505－B528〕



[0100]

[化10-23]

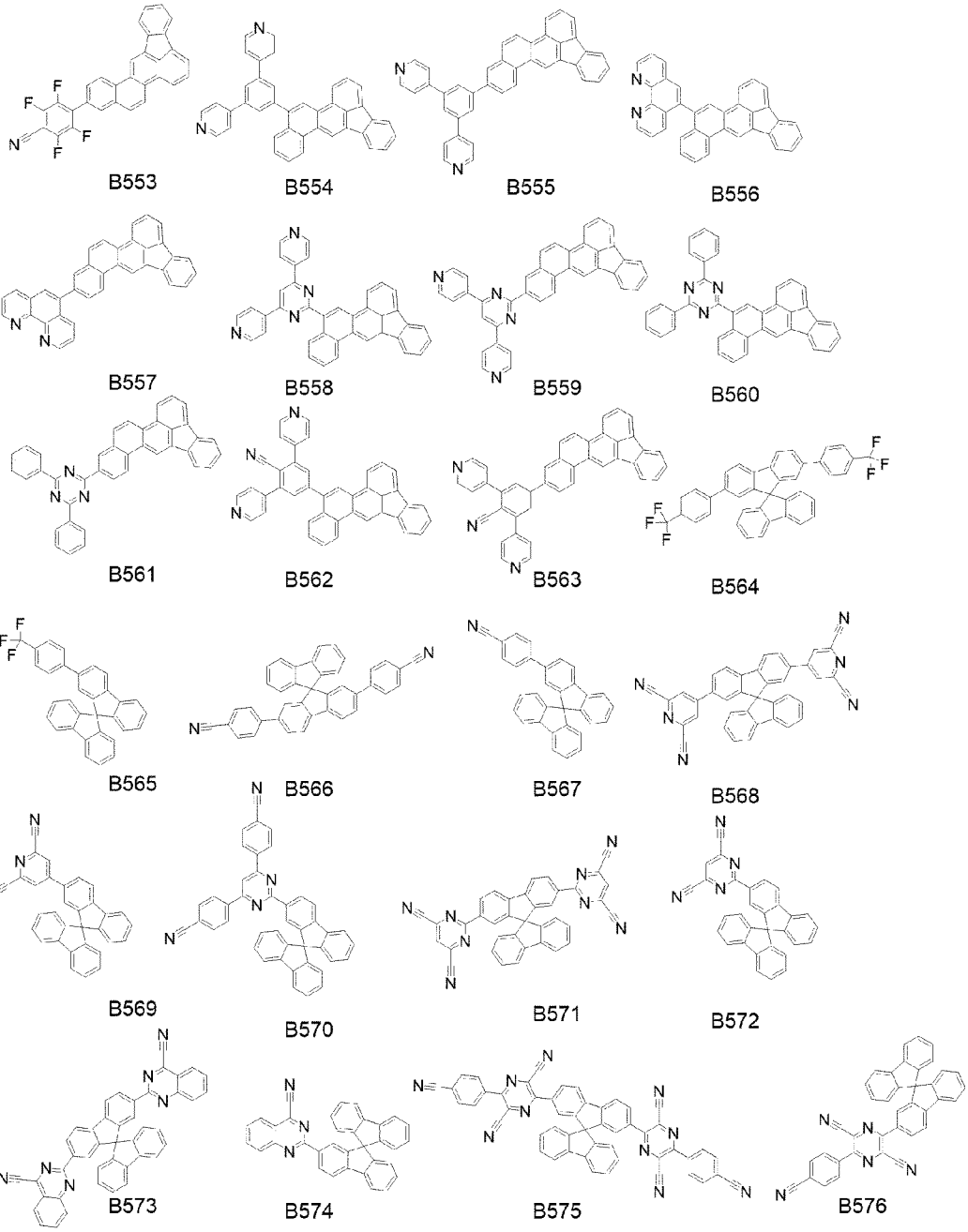
〔B529－B552〕



[0101]

[化10-24]

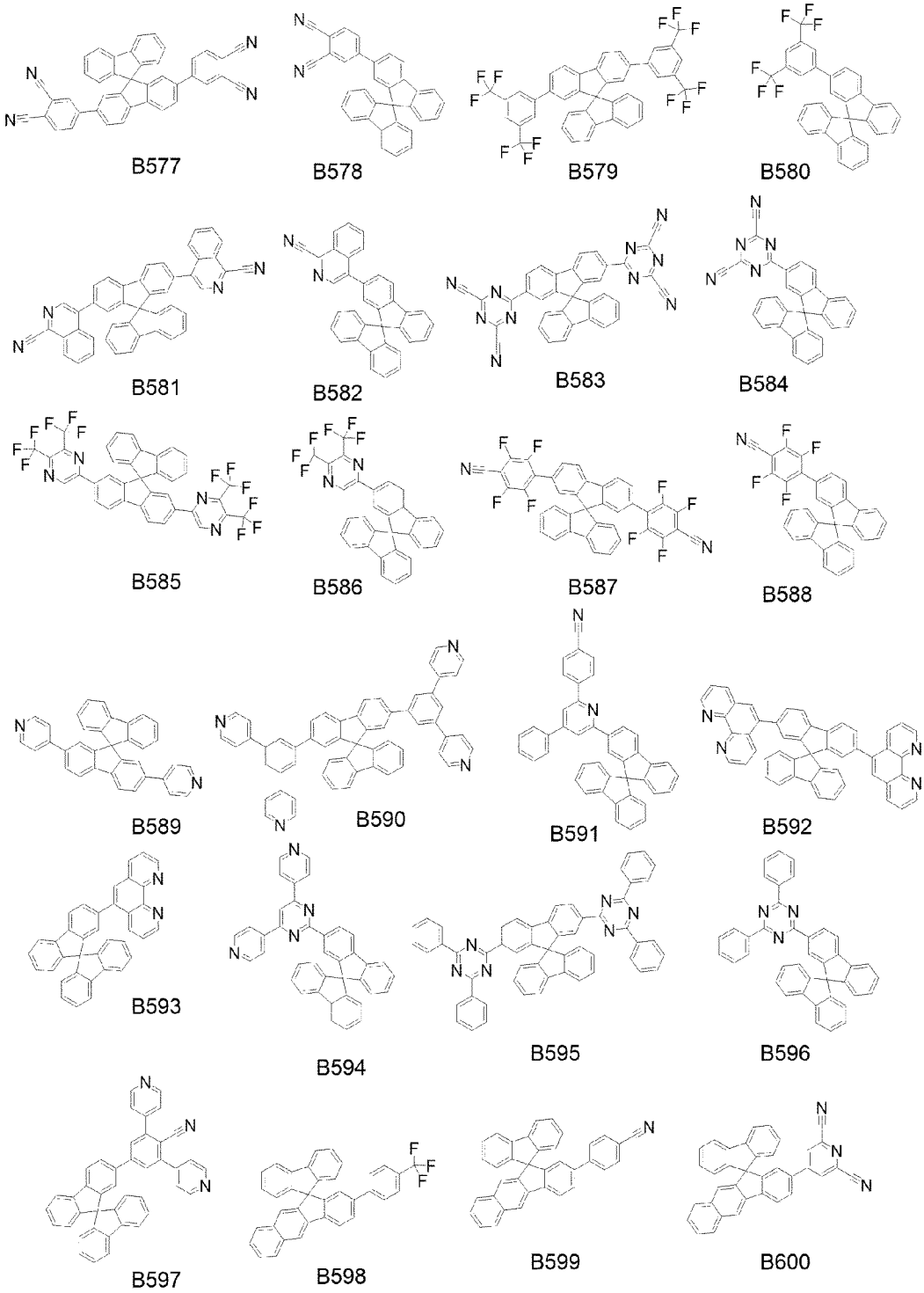
〔B553－B576〕



[0102]

[化10-25]

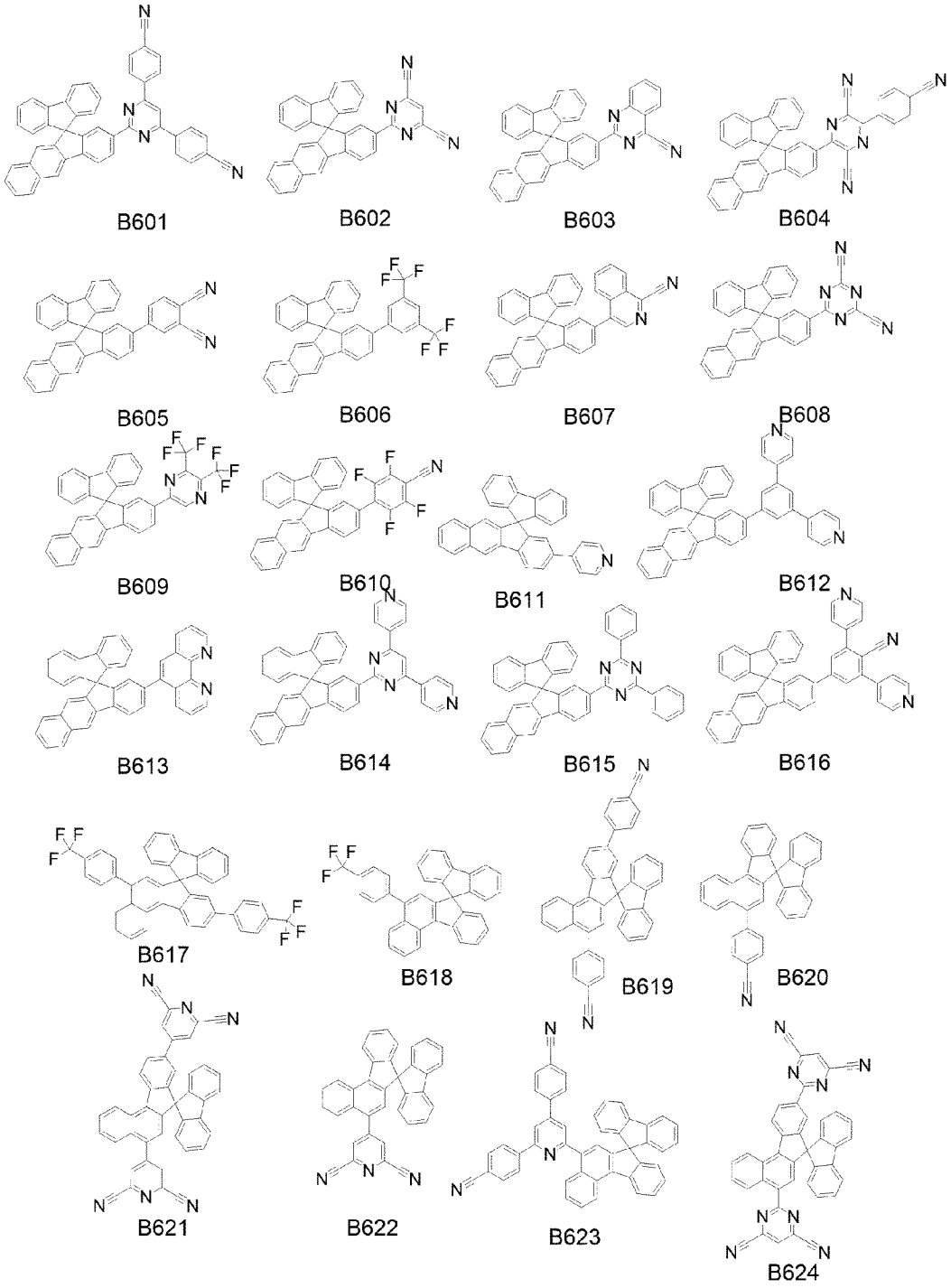
[B577－B600]



[0103]

[化10-26]

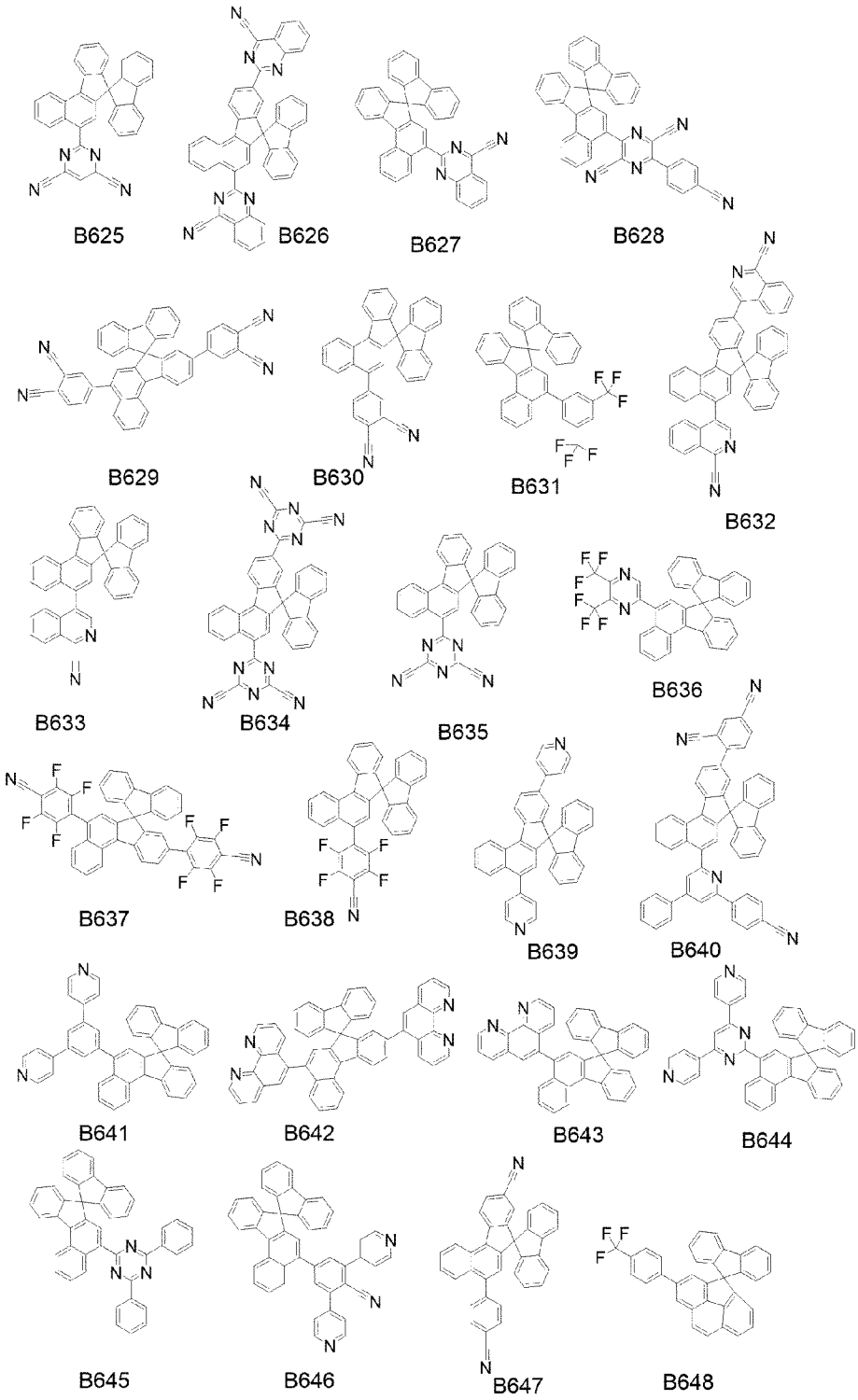
〔B601－B624〕



[0104]

[化10-27]

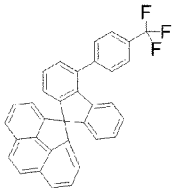
[B625－B648]

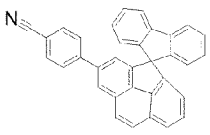


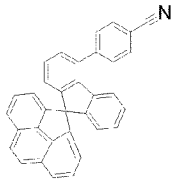
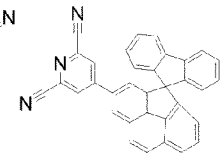
[0105]

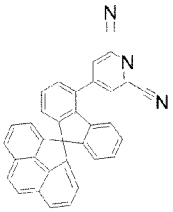
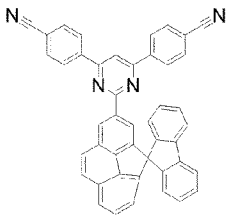
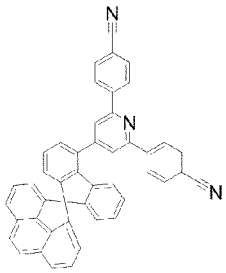
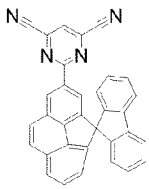
[化10-28]

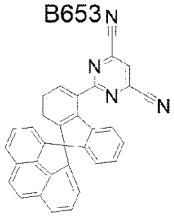
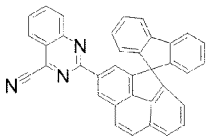
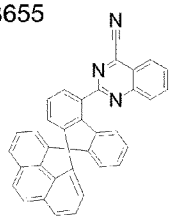
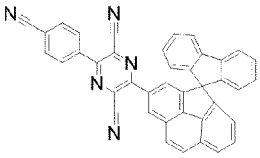
〔B649－B672〕

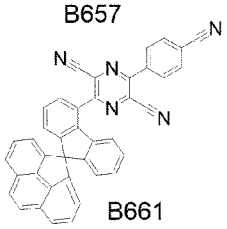
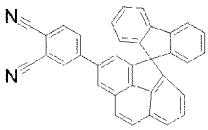
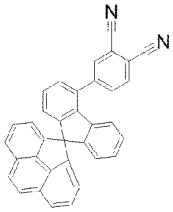
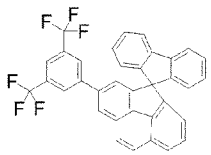

B649

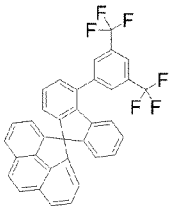
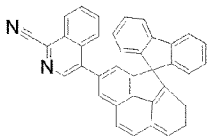
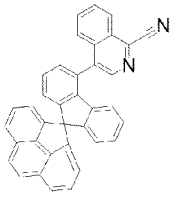
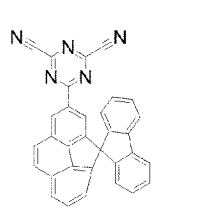

B650

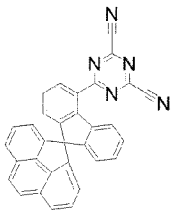
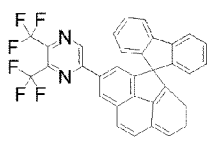
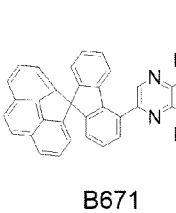
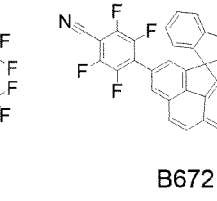


B651 B652





B653 B654 B655 B656





B657 B658 B659 B660





B661 B662 B663 B664

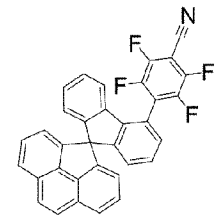




B665 B666 B667 B668





B669 B670 B671 B672

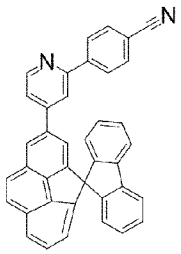
[0106]

[化10-29]

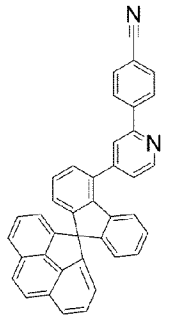
〔Ｂ６７３－Ｂ６８５〕



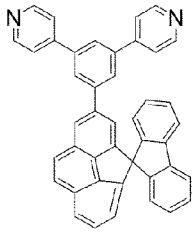
B673



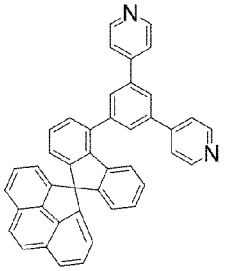
B674



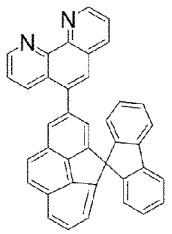
B675



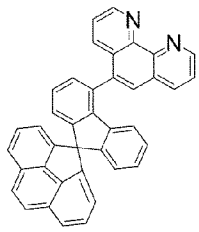
B676



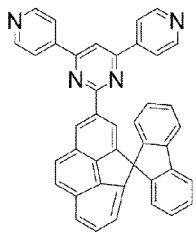
B677



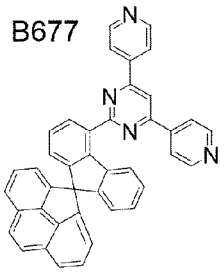
B678



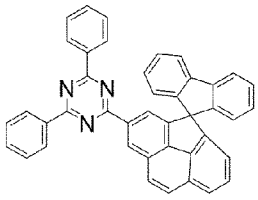
B679



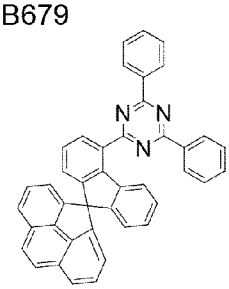
B680



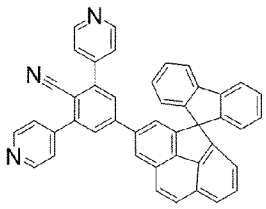
B681



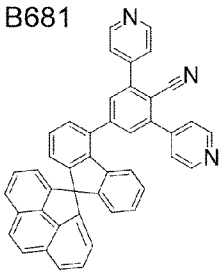
B682



B683



B684



B685

[0107] 上記（Ｂ００１）～（Ｂ６８５）のうち、式（３）で表される化合物の好ましい具体例は、（Ｂ３９５）～（Ｂ３９７）、（Ｂ４００）～（Ｂ４２５）が挙げられるが、これらに限定されるものではない。

[0108] 式（３）および式（４－１）で表される化合物は、例えば、光電変換素子用材料として好適に使用することができる。

[0109] ＜光電変換素子用材料、光電変換素子用の正孔ブロック材料＞

以下、本発明の一態様にかかる光電変換素子用材料の用途について説明する。光電変換素子用材料は、上述の通り、応答速度と外部量子効率との両立により、光電変換素子が備える層に好適に光電変換層、および正孔ブロック層に好適に使用できる。

[0110] また、光電変換素子用材料は、高いＴｇを有していることにより、光電変換素子を製造するときにおけるアニーリングに起因する結晶化などの膜状態の変化が防がれている。これにより、光電変換素子用材料から形成される光電変換素子における外部量子効率、および暗電流の低下が防がれている。従って、光電変換素子用材料は、光電変換層を形成した後におけるアニーリングへの耐性が求められる、撮像素子の光電変換素子用材料、および正孔ブロック材料として好適に利用することができる。

[0111] 光電変換用材料は、例えば、撮像素子における、光電変換層用材料、または当該撮像素子における正孔ブロック層の材料である、正孔ブロック材料として用いることができる。

[0112] 本発明の一態様にかかる光電変換素子用材料は、上記式（１）または式（３）、もしくは式（４－１）で表される骨格を含む。式（１）または（３）、もしくは式（４－１）で表される骨格を含む、撮像素子が備える層に含まれる光電変換素子用材料、および正孔ブロック材料は、応答速度、および外部量子効率特性に優れた撮像素子用の光電変換素子用材料の作製に資するものである。

[0113] ＜ＬＵＭＯ準位について＞

光電変換素子用材料は、暗電流、外部量子効率の向上や応答速度の改善のために、光電変換層で生成した電荷を速やかに移動させることが必要であり得る。電荷の速やかな移動には光電変換層のｎ型半導体材料と正孔ブロック層に使用する材料のＬＵＭＯ準位が近いことが好ましい。例えば光電変換層にフラーレン（Ｃ６０）を使用している場合、正孔ブロック層のＬＵＭＯ準位は、後述するように密度汎関数理論（ＤＦＴ）にて得られる量子計算値として、－２．２ｅＶ以下が好ましく、－２．３ｅＶ以下がなお好ましい。ま

た、正孔ブロック層のＬＵＭＯ準位は、限定されるものでないが、－５．０ｅＶ以上であればよく、－４．０ｅＶ以上であることが好ましい。

[0114] 式（１）および式（３）で示される光電変換素子用材料のＬＵＭＯ準位は、特に限定されないが、撮像素子への適合性の観点から、ＬＵＭＯ準位が－２．２ｅＶ以下が好ましく、－２．３ｅＶ以下がなお好ましい。

[0115] 本発明の一態様にかかる光電変換素子において、光電変換素子用材料の前記ＬＵＭＯ準位は、量子化学計算によって算出される数値であり、分子構造の最適化およびＬＵＭＯ準位の計算は、Ｇａｕｓｓｉａｎのプログラムを用いて、Ｂ３ＬＹＰ汎関数と６－３１Ｇ（ｄ）基底関数の計算条件による密度汎関数理論（ＤＦＴ）で得ることができる。

[0116] ＜ガラス転移温度について＞

本発明の一態様にかかる撮像素子が備える層の形成に用いられる光電変換素子用材料は式（１）、または式（３）で示される光電変換素子用材料であり、これら式（１）および（３）にて表される光電変換素子用材料のガラス転移温度は、特に限定されないが、撮像素子、つまり、撮像素子用光電変換素子への適合性の観点から、ガラス転移温度が１４０℃以上であることが好ましく、１５０℃以上であることがより好ましい。なお、このガラス転移温度は、示差走査熱量測定から得られた値である。

[0117] 示差走査熱量計および試験条件は、以下の通りである。示差走査熱量計モデル：日立ハイテク製ＤＳＣ７０２；運転条件：加熱速度、１０℃／ｍｉｎ、温度範囲、４０℃～３８０℃の条件にて、２回走査したときのピークからガラス転移温度を求めた。

[0118] ＜アモルファス性について＞

本発明の一態様にかかる撮像素子としての光電変換素子用材料または式（１）、および式（３）で示される光電変換素子用材料は、該材料の蒸着膜がアモルファス層を形成するものが好ましい。蒸着膜が結晶層であると、隣接層との界面が均一にならないため、素子の欠陥要因になる。

[0119] 蒸着膜がアモルファス層であるか、否かの確認方法は、特に限定されない

が、目視による結晶化の有無による判断、または蒸着膜のＸＲＤ測定により、シャープな回折ピークが観測されないこと等で確認できる。

[0120] ＜撮像素子＞

本発明の一態様にかかる光電変換素子は、好ましくは撮像素子であり、本発明の一態様にかかる光電変換素子用材料を含む層を備えている。

[0121] 撮像素子の構成については特に限定されないが、例えば、以下に示す（ｉ）～（ｖｉ）の構成が挙げられる。

[0122] （ｉ）第一の電極／光電変換層／第二の電極

（ｉｉ）第一の電極／正孔ブロック層／光電変換層／第二の電極

（ｉｉｉ）第一の電極／光電変換層／電子ブロック層／第二の電極

（ｉｖ）第一の電極／正孔ブロック層／光電変換層／電子ブロック層／第二の電極

（ｖ）第一の電極／正孔ブロック層／光電変換層／電子ブロック層／正孔輸送層／第二の電極

（ｖｉ）第一の電極／電子輸送層／正孔ブロック層／光電変換層／電子ブロック層／正孔輸送層／第二の電極

以下、本発明の一態様にかかる撮像素子を、上記（ｖ）の構成を例に挙げて、図１を参照しながらより詳細に説明する。図１は、本発明の一態様にかかる光電変換素子用材料を含む層を備える撮像素子の積層構成の一例を示す概略断面図である。

[0123] 撮像素子１００は、第一の電極１、正孔ブロック層２、光電変換層３、電子ブロック層４、正孔輸送層５、および第二の電極６をこの順で備える。ただし、これらの層のうちの一部の層が省略されていてもよく、また逆に他の層が追加されていてもよい。なお、上記各層のうち、正孔ブロック層２、光電変換層３、電子ブロック層４、および正孔輸送層５が、有機層１０を構成している。

[0124] 図１に示す撮像素子１００は、具体的には撮像用光電変換素子であり得る。撮像素子１００は、透明である第一の電極１の下方から、光が入射し、受

光層である光電変換層３で受光する。光の入射方向は特に限定されず、第二の電極６を透明とし、第二の電極６の方から光を入射させてもよい。

[0125] 撮像素子１００は、各層を構成するキャリアの濃度差や、第一の電極１と第二の電極６間の仕事関数の差による内部電界によって、光電変換層３の受光により発生した電荷（正孔および電子）のうち、電子が第一の電極１に移動し、正孔が第二の電極６に移動する。また、第一の電極１と第二の電極６との間に電圧を印加することで電荷を移動させることもできる。このように、第一の電極１を電子捕集電極とし、第二の電極６を正孔捕集電極としている。

[0126] なお、各層は、必要に応じて、他の名称または機能を有する層で置き換えても良い。他の名称または機能を有する層としては、例えば、正孔輸送層の他の名称としては、正孔注入層、仕事関数調整層、正孔輸送促進層などが挙げられる。

[0127] なお、図１では、第一の電極１の下面に設けられた基板が省略されている。ここでの基板としては特に限定はなく、例えばガラス板、石英板、プラスチック板等が挙げられる。また、基板側から光が入射する構成の場合、基板は光の波長に対して透明である。なお、基板は第二の電極６側に設けてもよい。以下では、上記各層について説明する。

以下では、上記各層について説明する。

[0128] ［光電変換素子用材料を含む層］

光電変換素子の一態様である撮像素子は、光電変換層、および、該光電変換層と第二の電極との間の層からなる群より選ばれる１層以上に、上述の式（１）または（３）、もしくは式（４－１）に表される光電変換素子用材料を含んでいるとよい。図１に示される構成例において撮像素子１００は、正孔ブロック層２および光電変換層３からなる群より選ばれる少なくとも１層に光電変換素子用材料を含んでいる。本発明の一態様にかかる撮像素子は、正孔ブロック層２に光電変換素子用材料を含むことが好ましい。これにより、正孔の逆移動を制御しながら、必要な電荷を速やかに移動させる効果を有

する。

[0129] なお、上述の式（１）または（３）、もしくは式（４－１）に表される光電変換素子用材料は、光電変換素子が備える複数の層に含まれていてもよく、電子輸送層が設けられている場合、電子輸送層が光電変換素子用材料を含んでいてもよい。

[0130] 以下、正孔ブロック層２が光電変換素子用材料を含む撮像用光電変換素子１００について説明する。

[0131] ［第一の電極１］

基板上には第一の電極１が設けられている。

[0132] 光が第一の電極を通過して、光電変換層３に入射する構成の撮像素子の場合、第一の電極１は当該光を通すかまたは実質的に通す透明材料で形成するとよい。

[0133] 第一の電極１である下部電極に用いられる透明材料としては、特に限定されるものではないが、例えば、インジウム－錫酸化物（ＩＴＯ；Indium Tin Oxide）、インジウム－亜鉛酸化物（ＩＺＯ；Indium Zinc Oxide）、酸化錫、アルミニウム・ドープ型酸化錫、マグネシウム－インジウム酸化物、ニッケル－タングステン酸化物、その他の金属酸化物、窒化ガリウム等の金属窒化物、セレン化亜鉛等の金属セレン化物、および硫化亜鉛等の金属硫化物等が挙げられる。

[0134] なお、撮像素子１００が、第二の電極６側のみから光が光電変換層３に入射する構成である場合、第一の電極１における光の透過特性は重要ではない。したがって、この場合の第一の電極１に用いられる材料の一例としては、金、イリジウム、モリブデン、パラジウム、白金等が挙げられる。

[0135] ［正孔ブロック層２］

第一の電極１と、後述する受光層である光電変換層３との間には、正孔ブロック層２が設けられている。

[0136] 正孔ブロック層２は、光電変換層３で発生した電子を第一の電極１へ輸送する役割と、光電変換層３から電子輸送先の第一の電極１に正孔が移動する

のをブロックする役割とを有する。また、用途によっては第一の電極１からの正孔注入をブロックする役割を有することもある。

[0137] 正孔ブロック層２は、前述の式（１）および式（３）、もしくは式（４－１）で示される光電変換素子用材料に加えて、更に、従来公知の正孔ブロック材料（電子輸送材料）を含んでいてもよい。従来公知の正孔ブロック材料（電子輸送材料）としては、例えば、ビス（８－ヒドロキシキノリナート）マンガン、トリス（８－ヒドロキシキノリナート）アルミニウム、トリス（２－メチル－８－ヒドロキシキノリナート）アルミニウム、ＢＣＰ（２，９－ジメチル－４，７－ジフェニル－１，１０－フェナントロリン）、Ｂｐｈｅｎ（４，７－ジフェニル－１，１０－フェナントロリン）、ＢＡｌｑ（ビス（２－メチル－８－キノリノラート）－４－（フェニルフェノラート）アルミニウム）、４，６－ビス（３，５－ジ（ピリジン－４－イル）フェニル）－２－メチルピリミジン、Ｎ，Ｎ’－ジフェニル－１，４，５，８－ナフタレンテトラカルボン酸ジイミド、およびＮ，Ｎ’－ジ（４－ピリジル）－１，４，５，８－ナフタレンテトラカルボン酸ジイミド等が挙げられる。

[0138] 正孔ブロック層２は、一種または二種以上の材料からなる単層構造であってもよく、同一組成または異種組成の複数層からなる積層構造であってもよい。

[0139] ［光電変換層３］

正孔ブロック層２と後述する電子ブロック層４との間には、受光層である光電変換層３が設けられている。光電変換層３の材料としては、光電変換機能を有する材料が挙げられる。

[0140] 光電変換層３は、一種または二種以上の材料からなる単層構造であってもよく、同一組成または異種組成の複数層からなる積層構造であってもよい。中でも、光電変換効率を高める為には、光電変換層３は少なくとも二種の材料（有機成分）を含有する層からなることが好ましい。

[0141] 一種の材料からなる単層構造である光電変換層３に用いられる材料としては、例えば、（ｉ）クマリンおよびその誘導体、キナクリドンおよびその誘

導体、フタロシアニンおよびその誘導体などが挙げられる。

[0142] 二種の材料からなる単層構造である光電変換層３に用いられる材料としては、例えば、前述の（ｉ）クマリンおよびその誘導体、キナクリドンおよびその誘導体、フタロシアニンおよびその誘導体と、（ｉｉ）フラーレンおよびその誘導体との組み合わせが挙げられる。これらの材料からなる光電変換層３の作製は、予め粉末を混合した状態で蒸着させて形成しても良いし、任意の割合で共蒸着することで形成しても良い。

[0143] 三種の材料からなる単層構造である光電変換層３に用いられる材料としては、前述の（ｉ）クマリンおよびその誘導体、キナクリドンおよびその誘導体、フタロシアニンおよびその誘導体、（ｉｉ）フラーレンおよびその誘導体、および（ｉｉｉ）正孔輸送材料との組み合わせが挙げられる。これらの材料からなる光電変換層３の作製は、予め粉末を混合した状態で蒸着させて形成しても良いし、任意の割合で共蒸着することで形成しても良い。

[0144] （ｉ）クマリン誘導体の具体例としては、クマリン６、クマリン３０が挙げられる。キナクリドン誘導体の具体例としては、Ｎ，Ｎ－ジメチルキナクリドンが挙げられる。フタロシアニン誘導体の具体例としては、ホウ素サブフタロシアニンクロリド、ホウ素サブナフタロシアニンクロリド（ＳｕｂＮＣ）が挙げられる。

[0145] （ｉｉ）フラーレンおよびその誘導体の具体例としては、［６０］フラーレン、［７０］フラーレン、［６，６］－フェニル－Ｃ６１－酪酸メチル（［６０］ＰＣＢＭ）が挙げられる。

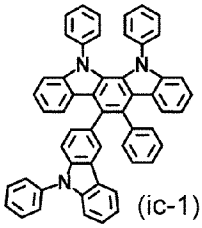
[0146] （ｉｉｉ）正孔輸送材料は、公知の正孔輸送材料であってよい。正孔輸送材料としては、例えば、芳香族第三級アミン化合物、ナフタレン化合物、アントラセン化合物、テトラセン化合物、ペンタセン化合物、フェナントレン化合物、ピレン化合物、ペリレン化合物、フルオレン化合物、カルバゾール化合物、インドール化合物、ピロール化合物、ピセン化合物、チオフェン化合物、ベンゾトリフラン化合物、ベンゾトリチオフェン化合物、ナフトジチオフェン化合物、ナフトチエノチオフェン化合物、ベンゾジフラン化合物、

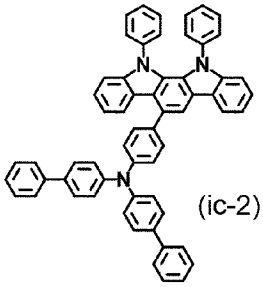
ベンゾジチオフェン化合物、ベンゾチオフェン化合物、ナフトビスベンゾチオフェン化合物、クリセノジチオフェン化合物、ベンゾチエノベンゾチオフェン化合物、インドロカルバゾール化合物等が挙げられる。これらの中でも、フルオレン化合物、ナフトジチオフェン化合物、ナフトチエノチオフェン化合物、ベンゾジフラン化合物、ベンゾチオフェン化合物、ナフトビスベンゾチオフェン化合物、クリセノジチオフェン化合物、ベンゾチエノベンゾチオフェン化合物、インドロカルバゾール化合物等が好ましく、フルオレン化合物、クリセノジチオフェン化合物、ベンゾチエノベンゾチオフェン化合物、インドロカルバゾール化合物がより好ましい。

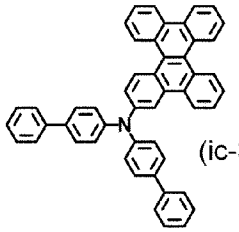
[0147] 正孔輸送材料の具体例としては、９，９’－（９，９’－スピロビ［９Ｈ－フルオレン］－２，７’－ジイル）ビス［９Ｈ－カルバゾール］、２，７－ジフェニル［１］ベンゾチエノ［３，２－ｂ］［１］ベンゾチオフェン（ＤｉＰｈ－ＢＴＢＴ）、ベンゾ［１，２－ｂ：３，４－ｂ’：５，６－ｂ’’］トリフラン化合物、ベンゾ［１，２－ｂ：３，４－ｂ’：５，６－ｂ’’］トリチオフェン化合物、ナフト［１，２－ｂ：５，６－ｂ’］ジチオフェン、ナフト［２，３－ｂ］ナフト［２’，３’：４，５］チエノ［２，３－ｄ］チオフェン、ベンゾ［１，２－ｂ：４，５－ｂ’］ジフラン、ベンゾ［１，２－ｂ：４，５－ｂ’］ジチオフェン、ベンゾ［１，２－ｂ：４，５－ｂ’］ビス［１］ベンゾチオフェン、ナフト［１，２－ｂ：５，６－ｂ’］ビス［１］ベンゾチオフェン、クリセノ［１，２－ｂ：８，７－ｂ’］ジチオフェン、［１］ベンゾチエノ［３，２－ｂ］［１］ベンゾチオフェン、以下に示す化合物（ｉｃ－１）、（ｉｃ－２）および（ｉｃ－３）等が挙げられる。

[0148]

[化11]


(ic-1)


(ic-2)


(ic-3)

[0149] また、光電変換素子用材料は、光電変換層のみに含有されることに限定されるものではない。例えば、光電変換素子用材料は、光電変換層３に隣接した層（正孔ブロック層２、または電子ブロック層４）が含有していてもよい。

[0150] ［電子ブロック層４］

光電変換層３と正孔輸送層５との間には、電子ブロック層４が設けられている。

[0151] 電子ブロック層４は、光電変換層３で発生した正孔を光電変換層３から第二の電極６へ輸送する役割と、光電変換層３で発生した電子が第二の電極６側へ移動するのをブロックする役割とを有する。また用途によっては第二の電極６からの電子注入をブロックする役割を有することもある。

[0152] 電子ブロック層４は、一種または二種以上の材料からなる単層構造であってもよく、同一組成または異種組成の複数層からなる積層構造であってもよい。例えば、電子ブロッキング性に特化した材料からなる光電変換層３と隣接する層と、正孔輸送性に特化した材料からなる正孔輸送層５に隣接する層と、を含む２層構造であってよい。

[0153] 電子ブロック層４は、公知の正孔輸送材料を含むことが好ましい。公知の正孔輸送材料としては、前述の光電変換層３で用いるものと同じものが挙げられる。

[0154] ［正孔輸送層５］

電子ブロック層４と後述する第二の電極６との間には、正孔輸送層５が設けられている。正孔輸送層５は、電子ブロック層４から第二の電極６への正

孔輸送を促進させるために設けられる。正孔輸送の促進は、正孔輸送材料が周辺材料との相互作用によって内部電界を変化させることによりもたらされる。また、正孔輸送層５は、第二の電極６をスパッタリング法により形成する場合、スパッタリング時の有機層（例えば電子ブロック層４）へのダメージを低減する役割がある。

[0155] 正孔輸送層５は、公知の材料であってよく、例えば、ナフタレン－１，４，５，８－テトラカルボン酸二無水物（ＮＴＣＤＡ）、２，３，６，７，１０，１１－ヘキサシアノ－１，４，５，８，９，１２－ヘキサアザトリフェニレン（ＨＡＴＣＮ）等であってよい。

[0156] 正孔輸送層５は、一種または二種以上の材料からなる単層構造であってもよく、例えば、上記の材料と従来公知の正孔輸送材料を有していてもよい。従来公知の正孔輸送材料が挙げられ、前述の光電変換層３で用いるものと同じものが挙げられる。

[0157] ［第二の電極６］

電子ブロック層４上には第二の電極６が設けられている。

[0158] 第二の電極６の材料としては、ナトリウム、ナトリウム－カリウム合金、マグネシウム、リチウム、マグネシウム／銅混合物、マグネシウム／銀混合物、マグネシウム／アルミニウム混合物、マグネシウム／インジウム混合物、アルミニウム／酸化アルミニウム（Al_2O_3）混合物、インジウム、リチウム／アルミニウム混合物、金、希土類金属等が挙げられる。

[0159] ［各層の形成方法］

以上説明した第一の電極１、第一の電極６を除く各層は、それぞれの層の材料（必要に応じて結着樹脂等の材料、溶剤と共に）を、例えば真空蒸着法、スピンコート法、キャスト法、ＬＢ（Ｌａｎｇｍｕｉｒ－Ｂｌｏｄｇｅｔ　ｍｅｔｈｏｄ）法等の公知の方法によって薄膜化することにより、形成することができる。

[0160] このようにして形成された各層の膜厚については特に制限はなく、状況に応じて適宜選択することができるが、通常は５ｎｍ以上５μｍ以下の範囲で

ある。

[0161] 下部電極である第一の電極１および上部電極である第二の電極６は、電極材料を蒸着やスパッタリング等の方法によって薄膜化することにより、形成することができる。蒸着やスパッタリングの際に所望の形状のマスクを介してパターンを形成してもよく、蒸着やスパッタリング等によって薄膜を形成した後、フォトリソグラフィーで所望の形状のパターンを形成してもよい。

[0162] 第一の電極１および第二の電極６の膜厚は、１μｍ以下であることが好ましく、１０ｎｍ以上２００ｎｍ以下であることがより好ましい。

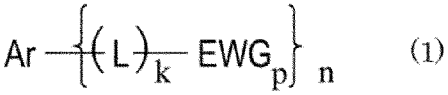
[0163] 本発明の一態様にかかる光電変換素子を備えた撮像素子は、例えば、デジタルカメラやデジタルビデオカメラの撮像素子、および、携帯電話等に内蔵された撮像素子に適用することができる。

[0164] 〔まとめ〕

本発明の態様１に係る光電変換素子は、光電変換素子用材料を含む層を備える、光電変換素子であって、

前記光電変換素子用材料が下記式（１）で表され：

[化12]



(1)

前記式（１）中、

ＥＷＧは、電子吸引基を表し；

Ａｒは、炭素数１６～４０の縮環芳香族炭化水素基を表し；

Ｌは、炭素数６～３０の芳香族炭化水素基を表し；

ｎは、１～８の整数を表し；

ｋは、０～２の整数を表し；

ｐは、１～８の整数を表し；

ｋが、０である場合、ｐは、１であり、

前記ＥＷＧを２つ以上有している場合、前記ＥＷＧは、同一または互いに異なる電子吸引基であり、

前記Ａｒ、Ｌ、およびＥＷＧのそれぞれは、少なくとも１つの置換基を有しているか、または前記置換基を有していない。

[0165] 本発明の態様２に係る光電変換素子は、前記態様１において、前記ＥＷＧが、シアノ基、フッ素原子、フルオロアルキル基、および窒素原子を含む炭素数３～３０のヘテロアリール基から選択されることが好ましい。

[0166] 本発明の態様３に係る光電変換素子は、前記態様１または２において、前記窒素原子を含む炭素数３～３０のヘテロアリール基が、シアノ基、フッ素原子、およびフルオロアルキル基にから選択される基によって置換されていることが好ましい。

[0167] 本発明の態様４に係る光電変換素子は、前記態様１～３の何れかにおいて、前記ｋが、０または１の整数であることが好ましい。

[0168] 本発明の態様５に係る光電変換素子は、前記態様１～４の何れかにおいて、前記ｋが、１であり、前記ＥＷＧが、シアノ基、フッ素基、およびフルオロアルキル基から選択される少なくとも１つの基であることが好ましい。

[0169] 本発明の態様６に係る光電変換素子は、前記態様１～５の何れかにおいて、

前記Ａｒが、６員環を４つ以上内包する縮環芳香族炭化水素基であることが好ましい。

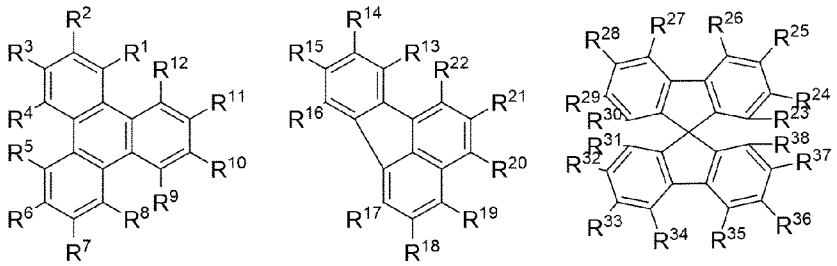
[0170] 本発明の態様７に係る光電変換素子は、前記態様１～６の何れかにおいて、前記Ａｒが、トリフェニレン基、フルオランテン基、およびスピロフルオレン基から選択される縮環芳香族炭化水素基と、トリフェニレン基、フルオランテン基、スピロフルオレン基を内包する縮環芳香族炭化水素基とから選択されることが好ましい。

[0171] 本発明の態様８に係る光電変換素子は、前記態様１～７の何れかにおいて、前記Ａｒが、前記置換基を有しているか、または有していない、炭素数２０～４０の縮環芳香族炭化水素基を表すことが好ましい。

[0172] 本発明の態様９に係る光電変換素子は、前記態様１～８の何れかにおいて、前記Ａｒが、下記式（２－１）、（２－２）、および（２－３）で表され

：

[化13]



(2-1) (2-2) (2-3)

前記式（２－１）、式（２－２）、および式（２－３）中、

Ｒ[1]～Ｒ[38]は、それぞれ独立して、水素原子、炭素数１～２０のアルキル基、炭素原子数１～２０のアルケニル基、炭素原子数１～２０のシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のビシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のトリシクロアルキル基、炭素原子数１～１０のアルコキシ基、炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、および炭素数３～３０のヘテロアリール基から選択されるか、または、

Ｒ[1]～Ｒ[38]のうちの一部は、互いに隣接する２つの基が結合することで、環が形成され、

ここで、前記Ｒ[1]～Ｒ[35]は、それぞれ独立して、少なくとも１つの置換基を有しているか、若しくは、前記置換基を有していないことが好ましい。

[0173] 本発明の態様１０に係る光電変換素子は、前記態様１～９の何れかにおいて、前記光電変換素子用材料が、Ｂ３ＬＹＰ汎関数および６－３１Ｇ（ｄ）基底関数を用いる密度汎関数理論（ＤＦＴ）によって算出されるＬＵＭＯ準位の量子計算値が－２．２ｅＶ以下であることが好ましい。

[0174] 本発明の態様１１に係る光電変換素子は、前記態様１～１０の何れかにおいて、前記光電変換素子用材料のガラス転移温度が、１４０℃以上であることが好ましい。

[0175] 本発明の態様１２に係る光電変換素子は、前記態様１～１１の何れかにかかる前記光電変換素子用材料を含む前記層が、正孔ブロック層であることが好ましい。

[0176] 本発明の態様１～１３の何れかに係る光電変換素子は、撮像素子であることが好ましい。

[0177] 本発明の態様１４に係る光電変換素子用材料は、前記式（１）に示す光電変換素子用材料であって、前記態様１～１３の何れかにかかる光電変換素子が備える前記層を形成するための、光電変換素子用材料であり得る。

[0178] 本発明の態様１５に係る光電変換素子用材料は、撮像素子用光電変換素子用材料であり得る。

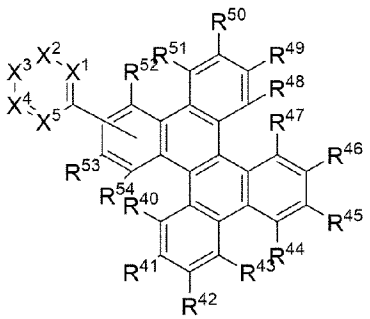
[0179] 本発明の態様１６に係る光電変換素子用材料は、前記態様１４に記載の光電変換素子用材料が、正孔ブロック材料であり得る。

[0180] 本発明の態様１７に係る光電変換素子は、前記態様１２に係る光電変換素子が備える、前記正孔ブロック層と電極との間に、フラーレンを含む層を備えることが好ましい。

[0181] 本発明の態様１８に係る光電変換素子は、光電変換素子用材料を含む層を備える、光電変換素子であって、

前記光電変換素子用材料が、下記式（３）で表される化合物：

[化14]



（３）

前記式（３）中、

X^1～X^5は、窒素原子またはCR^{55}を表し；

X^1～X^5の内、前記窒素原子の数は、０～３の整数であり；

R^{40}～R^{55}は、それぞれ独立して、水素原子、シアノ基、ニトロ基、ハロゲン原子、ハロゲン化アルキル基、アシル基、スルホニル基、ホスホリル基、炭素数１～２０のアルキル基、炭素原子数１～２０のアルケニル基、炭

素原子数１～２０のシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のビシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のトリシクロアルキル基、炭素原子数１～１０のアルコキシ基、炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、および炭素数３～３０のヘテロアリール基から選択されるか、または、

前記R^{40}～R^{55}のうちの一部は、互いに隣接する２つの基が結合することで環が形成され；

R^{55}の少なくともひとつが、シアノ基、ハロゲン原子、またはハロゲン化アルキル基から選択され；

X^1～X^5は、すべてCR^{55}である場合、前記R^{55}の２つ以上がシアノ基、ハロゲン原子、およびハロゲン化アルキル基から選択され；、

前記R^{40}～R^{55}は、それぞれ独立して、さらに少なくとも１つの置換基を有しているか、または前記置換基を有していない、化合物。

[0182] 本発明の態様１９に係る化合物は、前記態様１８において、前記R^{55}は、それぞれ独立して、水素原子、シアノ基、ハロゲン原子、ハロゲン化アルキル基、炭素数１～２０のアルキル基、および炭素原子数１～２０のシクロアルキル基から選択されることが好ましい。

[0183] 本発明の態様２０に係る化合物は、前記態様１８または１９において、前記R^{55}のいずれかひとつがシアノ基であることが好ましい。

[0184] 本発明の態様２１に係る化合物は、前記態様１８～２０の何れかにおいて、

前記ハロゲン原子は、フッ素原子であり、

前記炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、および炭素数３～３０のヘテロアリール基のいずれかは、シアノ基、フッ素基、およびフルオロアルキル基から選択される基によって置換されているか、または置換されていないことが好ましい。

[0185] 本発明の態様２２に係る化合物は、前記態様１８～２１の何れかにおいて、前記光電変換素子用材料は、Ｂ３ＬＹＰ汎関数および６－３１Ｇ（ｄ）基底関数を用いる密度汎関数理論（ＤＦＴ）によって算出されるＬＵＭＯ準位

の量子計算値が－２．２ｅＶ以下であることが好ましい。

[0186] 本発明の態様２３に係る化合物は、前記態様１８～２２の何れかにおいて、光電変換素子用材料のガラス転移温度が、１４０℃以上であることが好ましい。

[0187] 本発明の態様２４に係る光電変換素子用材料は、前記態様１８～２３の何れかにかかる化合物を含むことが好ましい。

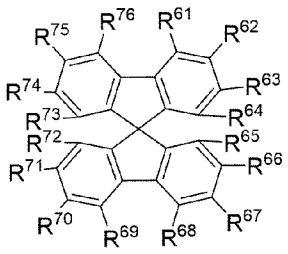
[0188] 本発明の態様２５に係る光電変換素子用材料は、前記態様２４において、正孔ブロック材料であることが好ましい。

[0189] 本発明の態様２６に係る光電変換素子用材料は、前記態様２４または２５にかかる光電変換素子用材料を含む層を備えていることが好ましい。

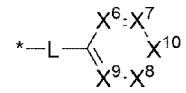
[0190] 本発明の態様２７に係る光電変換素子は、前記態様２６において、撮像素子であり得る。

[0191] 本発明の態様２８に係る化合物は、下記式（４－１）で表される、化合物：

[化15]



（4-1）



（4-2）

前記式（４－１）中、

R^{61}～R^{76}は、それぞれ独立して、水素原子、シアノ基、ニトロ基、ハロゲン原子、ハロゲン化アルキル基、アシル基、スルホニル基、ホスホリル基、炭素数１～２０のアルキル基、炭素原子数１～２０のアルケニル基、炭素原子数１～２０のシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のビシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のトリシクロアルキル基、炭素原子数１～１０のアルコキシ基、炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、炭素数３～３０のヘテロアリール基、および式（４－２）で表される基から選択されるか、または、互いに隣接する２つの基が結合することで環が形成され；

R^{61}～R^{74}の内、いずれかひとつは式（４－２）で表される基であり；

Ｌは直接結合または炭素数６～１６の芳香族炭化水素基を表し；

X^{6}～X^{10}は、窒素原子、Ｃ（ＣＮ）、またはCR^{77}を表し；

X^{9}～X^{10}の内、X^{9}がＣ（ＣＮ）であるか、X^{10}が窒素原子またはＣ（ＣＮ）であり；

X^{6}～X^{10}の内、前記窒素原子の数は０または１つであり、前記窒素原子の数が０である場合、前記Ｃ（ＣＮ）の数は２～３つの何れかであり、前記窒素原子の数が１つである場合、前記Ｃ（ＣＮ）の数は２つであり；

R^{77}は、それぞれ独立して、水素原子、ニトロ基、ハロゲン原子、ハロゲン化アルキル基、アシル基、スルホニル基、ホスホリル基、炭素数１～２０のアルキル基、炭素原子数１～２０のアルケニル基、炭素原子数１～２０のシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のビシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のトリシクロアルキル基、炭素原子数１～１０のアルコキシ基から選択され；

前記R^{61}～R^{77}、及び前記Ｌは、少なくとも１つの置換基を有しているか、または前記置換基を有してない。

[0192] 本発明の態様２９に係る化合物は、前記態様２８において、前記R^{77}は、それぞれ独立して、水素原子、炭素数１～２０のアルキル基、および炭素原子数１～２０のシクロアルキル基から選択されることが好ましい。

[0193] 本発明の態様３０に係る化合物は、前記態様２８又は２９において、前記R^{61}～R^{76}は、水素原子、シアノ基、炭素数１～２０のアルキル基、炭素原子数１～２０のシクロアルキル基、炭素数６～１６の芳香族炭化水素基、炭素数３～１６のヘテロアリール基、および式（４－２）で表される基から選択されるか、または、互いに隣接する２つの基が結合することで芳香族炭化水素環が形成されることが好ましい。

[0194] 本発明の態様３１に係る化合物は、前記態様２８～３０の何れかにおいて、X^{10}が、窒素原子またはＣ（ＣＮ）であり、X^{7}およびX^{8}がＣ（ＣＮ）またはCR^{77}であり、X^{6}およびX^{9}がCR^{77}であることが好ましい。

[0195] 本発明の態様３２に係る化合物は、前記態様２８～３１の何れかにおいて、Ｂ３ＬＹＰ汎関数および６－３１Ｇ（ｄ）基底関数を用いる密度汎関数理論（ＤＦＴ）によって算出されるＬＵＭＯ準位の量子計算値が－２．２ｅＶ以下であることが好ましい。

[0196] 本発明の態様３３に係る化合物は、前記態様２８～３２の何れかにおいて、ガラス転移温度が、１４０℃以上であることが好ましい。

[0197] 本発明の態様３４に係る光電変換素子用材料は、前記態様２８～３３の何れかにかかる化合物を含むことが好ましい。

[0198] 本発明の態様３５に係る光電変換素子用材料は、前記態様３４において、正孔ブロック材料であることが好ましい。

[0199] 本発明の態様３６に係る光電変換素子は、前記態様３４にかかる光電変換素子用材料を含む層を備えていることが好ましい。

[0200] 本発明の態様３７に係る光電変換素子は、前記態様３６において、撮像素子であり得る。

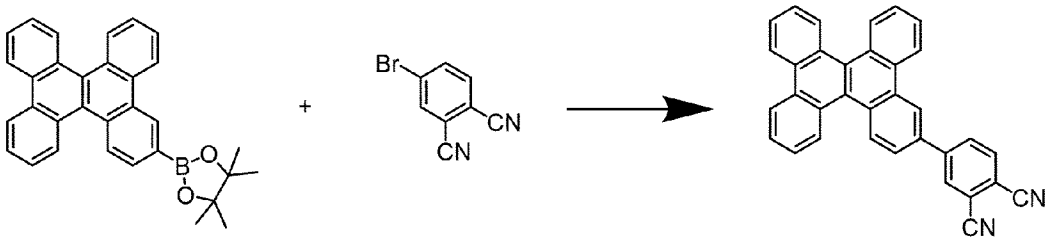
[0201] 本発明は上述した各実施形態に限定されるものではなく、請求項に示した範囲で種々の変更が可能であり、異なる実施形態にそれぞれ開示された技術的手段を適宜組み合わせて得られる実施形態についても本発明の技術的範囲に含まれる。

実施例

[0202] 以下、本発明を実施例に基づきさらに詳細に説明するが、本発明はこれらの実施例により何ら限定して解釈されるものではない。

[0203] 合成実施例－１

[化16]



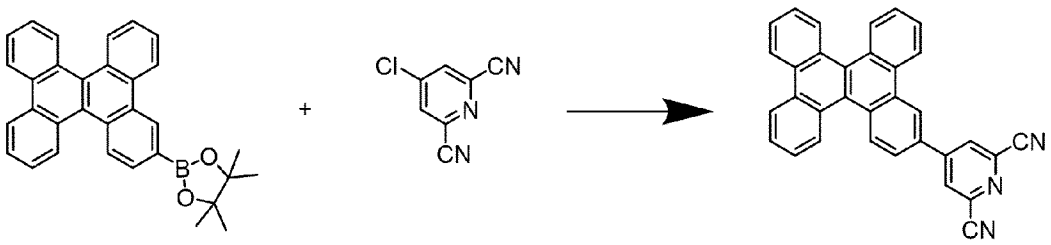
[0204] アルゴン気流下、（４，４，５，５－テトラメチル－２－（ジベンゾ［ｇ，ｐ］クリセン－３－イル）－１，３，２－ジオキサボロラン（２．２ｇ）、４－ブロモフタロニトリル（９５０ｍｇ）、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（１６８ｍｇ）をＴＨＦ４８ｍｌに懸濁させ、２規定のリン酸三カリウム水溶液（７．３ｍｌ）を加えて、１７時間還流した。反応溶液を室温まで冷却後、水を加えて生じた固体をろ取し、黄色固体を２．１ｇ得た。得られた黄色固体をトルエン１２０ｍｌで再結晶し、目的の化合物（Ｂ４０８）を得た（１．７ｇ、収率７８％）。

[0205] 得られた化合物（Ｂ４０８）の同定は、１Ｈ－ＮＭＲにより行った。

[0206] １Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ３）δ（ｐｐｍ）：８．８８（ｄ，Ｊ＝１．９Ｈｚ，１Ｈ），８．８３（ｄ，Ｊ＝９．３Ｈｚ，１Ｈ），８．７７－８．７１（ｍ，５Ｈ），８．６５（ｄ，Ｊ＝８．２Ｈｚ，１Ｈ），８．２６（ｄ，Ｊ＝１．４Ｈｚ，１Ｈ），８．１６（ｄｄ，Ｊ＝８．５，２．０Ｈｚ，１Ｈ），７．９６（ｄ，Ｊ＝８．３Ｈｚ，１Ｈ），７．８２（ｄｄ，Ｊ＝８．７，１．７Ｈｚ，１Ｈ），７．７７－７．６５（ｍ，６Ｈ）．

[0207] 合成実施例－２

[化17]



[0208] アルゴン気流下、（４，４，５，５－テトラメチル－２－（ジベンゾ［ｇ，ｐ］クリセン－３－イル）－１，３，２－ジオキサボロラン（２．０ｇ）、４－クロロピリジン－２，６－ジカルボニトリル（７９０ｍｇ）、酢酸パラジウム（３０ｍｇ）、ジシクロヘキシル（２’，４’，６’－トリイソプロピル－（１，１’－ビフェニル）－２－イル）ホスファン（１２６ｍｇ）をＴＨＦ４４ｍｌに懸濁させ、２規定のリン酸三カリウム水溶液（６．６ｍｌ）を加えて、６時間還流した。反応溶液を室温まで冷却後、水を加えて生

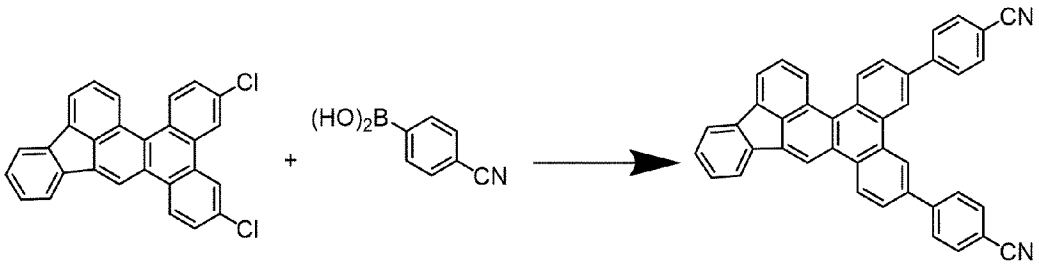
じた固体をろ取し、黄色固体を２．１ｇ得た。得られた黄色固体をヘキサン、メタノールで洗浄し、目的の化合物（Ｂ３９５）を得た（２．０ｇ、収率１００％）。

[0209] 得られた化合物（Ｂ３９５）の同定は、１Ｈ－ＮＭＲにより行った。

１Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ３）δ（ｐｐｍ）：８．９４（ｄ，Ｊ＝１．９Ｈｚ，１Ｈ），８．８６（ｄ，Ｊ＝８．７Ｈｚ，１Ｈ），８．７８－８．７１（ｍ，５Ｈ），８．６１（ｄ，Ｊ＝７．８Ｈｚ，１Ｈ），８．２９（Ｓ，２Ｈ），８．８４（ｄｄ，Ｊ＝８．８，２．５Ｈｚ，１Ｈ），７．８０－７．６７（ｍ，６Ｈ）．

[0210] 合成実施例－３

[化18]



[0211] アルゴン気流下、３，６－ジクロロ－ベンゾ［ｇ］インデノ［１，２，３－ｑｒ］クリセン（１．７ｇ）、４－シアノフェニルボロン酸（１．２ｇ）、酢酸パラジウム（２７ｍｇ）、ジシクロヘキシル（２’，４’，６’－トリイソプロピル－（１，１’－ビフェニル）－２－イル）ホスファン（１１４ｍｇ）をＴＨＦ４６ｍｌに懸濁させ、２規定のリン酸三カリウム水溶液（６．０ｍｌ）を加えて、１７時間還流した。反応溶液を室温まで冷却後、水を加えて生じた固体をろ取し、黄色固体を２．２ｇ得た。得られた黄色固体をトルエン１２０ｍｌで再結晶し、目的の化合物（Ｂ４９９）を得た（２．０ｇ、収率８９％）。

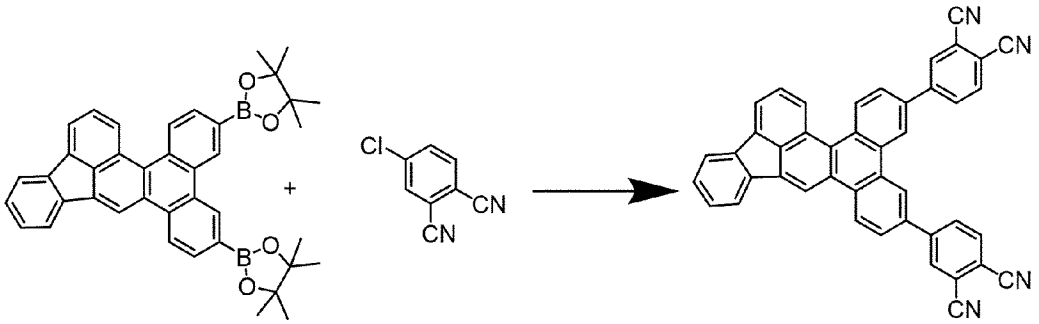
[0212] 得られた化合物（Ｂ４９９）の同定は、１Ｈ－ＮＭＲにより行った。

[0213] １Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ３）δ（ｐｐｍ）：９．１２（ｓ，１Ｈ），９．０５（ｄ，Ｊ＝８．４Ｈｚ，１Ｈ），８．９３（ｄ，Ｊ＝５．１Ｈｚ，１Ｈ

），８．９１（ｄｄ，Ｊ＝５．３，１．９Ｈｚ，２Ｈ），８．８９（ｄ，Ｊ＝８．６Ｈｚ，１Ｈ），８．１２－８．１０（ｍ，１Ｈ），８．０５（ｄ，Ｊ＝７．０Ｈｚ，１Ｈ），８．００－７．９１（ｍ，７Ｈ），７．８７－７．８２（ｍ，５Ｈ），７．５０－７．４８（ｍ，２Ｈ）．

[0214] 合成実施例－４

[化19]



[0215] アルゴン気流下、３，６－ビス（４，４，５，５－テトラメチル－１，３，２－ジオキサボロラン－２－イル）－ベンゾ［ｇ］インデノ［１，２，３－ｑｒ］クリセン（６．７ｇ）、４－ブロモフタロニトリル（４．６ｇ）、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（３８０ｍｇ）をＴＨＦ４４０ｍｌに懸濁させ、２規定のリン酸三カリウム水溶液（３３ｍｌ）を加えて、４時間還流した。反応溶液を室温まで冷却後、水を加えて生じた固体をろ取し、黄色固体を７．８ｇ得た。得られた黄色固体をクロロベンゼンで洗浄し、目的の化合物（Ｂ５０９）を得た（５．５ｇ、収率８３％）。

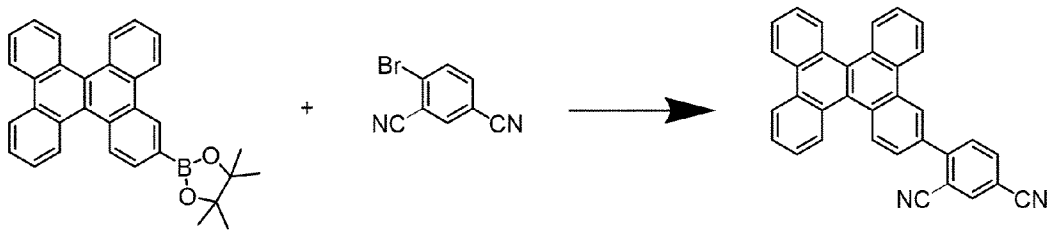
[0216] 得られた化合物（Ｂ４９９）の同定は、１Ｈ－ＮＭＲにより行った。

[0217] １Ｈ－ＮＭＲ（ＤＭＳＯ）δ（ｐｐｍ）：９．７４（ｓ，２Ｈ），９．５４（ｄ，Ｊ＝７．３Ｈｚ，２Ｈ），９．３３（ｄ，Ｊ＝９．０Ｈｚ，１Ｈ），９．１１（ｄ，Ｊ＝９．０Ｈｚ，１Ｈ），８．９５（ｄｄ，Ｊ＝４．８Ｈｚ，１．６Ｈｚ，２Ｈ），８．８７（ｄ，Ｊ＝８．９Ｈｚ，１Ｈ），８．７０（ｄｄ，Ｊ＝８．６Ｈｚ，２．０Ｈｚ，１Ｈ），８．６５（ｄｄ，Ｊ＝８．３Ｈｚ，１．８Ｈｚ，１Ｈ），８．４５（ｄ，Ｊ＝６．５Ｈｚ，１Ｈ），８．４０（ｄｄ，Ｊ＝８．０Ｈｚ，１．７Ｈｚ，２Ｈ），８．３６－８．３０

（ｍ，２Ｈ），８．１６（ｄ，Ｊ＝６．６Ｈｚ，１Ｈ），７．９８（ｔ，Ｊ＝７．８Ｈｚ，１Ｈ），７．５５（ｔ，Ｊ＝４．０Ｈｚ，２Ｈ）．

[0218] 合成実施例－５

[化20]



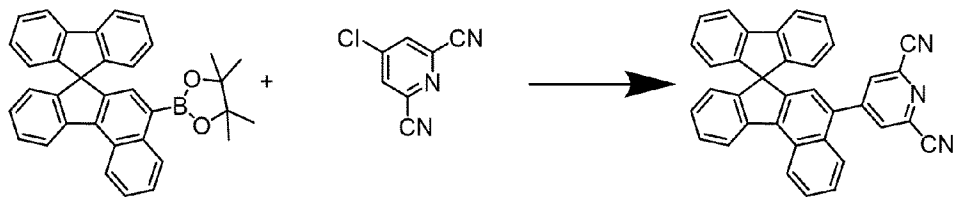
[0219] アルゴン気流下、（４，４，５，５－テトラメチル－２－（ジベンゾ［ｇ，ｐ］クリセン－３－イル）－１，３，２－ジオキサボロラン（２．２ｇ）、４－ブロモフタロニトリル（９１０ｍｇ）、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（１５０ｍｇ）をＴＨＦ４４ｍｌに懸濁させ、２規定のリン酸三カリウム水溶液（６．６ｍｌ）を加えて、５時間還流した。反応溶液を室温まで冷却後、水を加えて生じた固体をろ取し、黄色固体を２．０ｇ得た。得られた黄色固体をトルエンで再結晶し、目的の化合物（Ｂ４２６）を得た（１．５ｇ、収率７５％）。

[0220] 得られた化合物（Ｂ４２６）の同定は、１Ｈ－ＮＭＲにより行った。

[0221] １Ｈ－ＮＭＲ（ＣＤＣｌ３）δ（ｐｐｍ）：８．８６（ｄ，Ｊ＝２．１Ｈｚ，１Ｈ），８．８１（ｄ，Ｊ＝８．７Ｈｚ，１Ｈ），８．７２－８．６７（ｍ，５Ｈ），８．６５（ｄ，Ｊ＝８．４Ｈｚ，１Ｈ），８．１１（ｄ，Ｊ＝１．７Ｈｚ，１Ｈ），７．９４（ｄｄ，Ｊ＝８．３，１．６Ｈｚ，１Ｈ），７．８１（ｄ，Ｊ＝８．３Ｈｚ，１Ｈ），７．７７（ｄｄ，Ｊ＝８．３，２．２Ｈｚ，１Ｈ），７．７３－７．６４（ｍ，６Ｈ）．

[0222] 合成実施例－６

[化21]



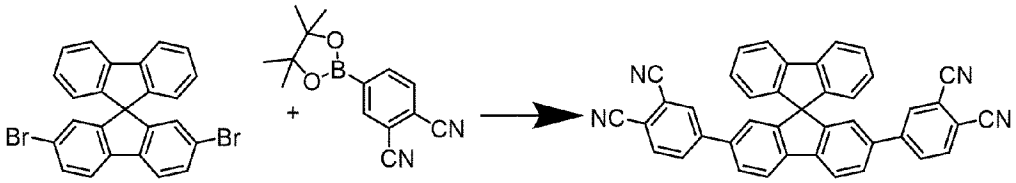
[0223] アルゴン気流下、（４，４，５，５－テトラメチル－２－（スピロ（ベンゾ［ｃ］フルオレン－７，９’－フルオレン）－５－イル）－１，３，２－ジオキサボロラン（１．０ｇ）、４－クロロピリジン－２，６－ジカルボニトリル（３１５ｍｇ）、酢酸パラジウム（１３ｍｇ）、ジシクロヘキシル（２’，４’，６’－トリイソプロピル－（１，１’－ビフェニル）－２－イル）ホスファン（５８ｍｇ）をＴＨＦ２０ｍｌに懸濁させ、２規定のリン酸三カリウム水溶液（３．０ｍｌ）を加えて、４時間還流した。反応溶液を室温まで冷却後、水を加えて生じた固体をろ取し、黄色固体を０．９５ｇ得た。得られた黄色固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、目的の化合物（Ｂ６２２）を得た（０．７ｇ、収率７０％）。

[0224] 得られた化合物（Ｂ６２２）の同定は、１Ｈ－ＮＭＲにより行った。

[0225] １Ｈ－ＮＭＲ（ＤＭＳＯ）δ（ｐｐｍ）：８．９８（ｓ，２Ｈ），８．６０（ｄ，Ｊ＝８．３Ｈｚ，１Ｈ），７．９４（ｔ，Ｊ＝５．９Ｈｚ，２Ｈ），７．７０（ｔ，Ｊ＝７．５Ｈｚ，１Ｈ），７．５１（ｔ，Ｊ＝７．６Ｈｚ，１Ｈ），７．４０－７．１１（ｍ，８Ｈ），７．０３（ｔ，Ｊ＝７．７Ｈｚ，１Ｈ），６．７１（ｄ，Ｊ＝７．３Ｈｚ，１Ｈ），６．６７（ｄ，Ｊ＝６．７，１Ｈ），６．５７（ｄ，Ｊ＝７．３Ｈｚ，１Ｈ）．

[0226] 合成実施例－７

[化22]



[0227] アルゴン気流下、２，７－ジブロモ－９，９’－スピロビフルオレン（１．５ｇ）、４－（４，４，５，５－テトラメチル－１，３，２－ジオキサボロラン－２－イル）フタロニトリル（８４４ｍｇ）、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（１１０ｍｇ）をＴＨＦ３０ｍｌに懸濁させ、２規定のリン酸三カリウム水溶液（４．７ｍｌ）を加えて、５時間還流した。反応溶液を室温まで冷却後、水を加えて生じた固体をろ取し、黄色固体を

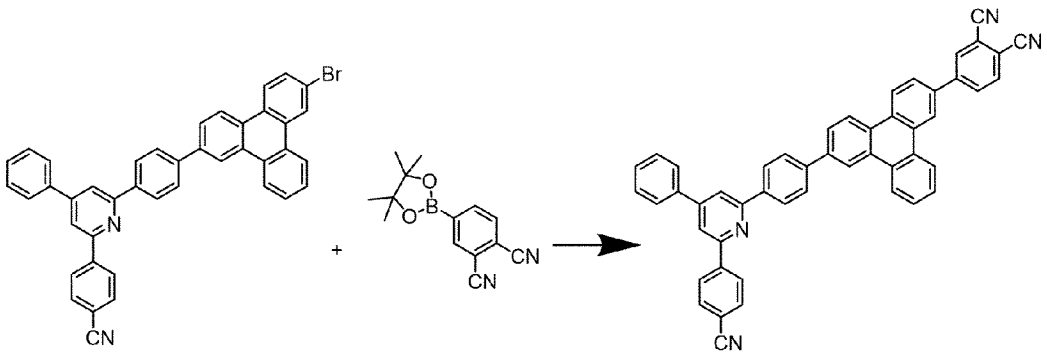
１．８１ｇ得た。得られた黄色固体をクロロベンゼン１８０ｍｌで再結晶し、目的の化合物（Ｂ５７７）を得た（１．１ｇ、収率６１％）。

[0228] 得られた化合物（Ｂ５７７）の同定は、１Ｈ－ＮＭＲにより行った。

[0229] １Ｈ－ＮＭＲ（ＤＭＳＯ）δ（ｐｐｍ）：８．３５（ｓ，２Ｈ），８．３２（ｄ，Ｊ＝７．８Ｈｚ，２Ｈ），８．０８－８．０２（ｍ，６Ｈ），７．９８（ｄｄ，Ｊ＝７．８Ｈｚ，１．６Ｈｚ，２Ｈ），７．４４（ｔ，Ｊ＝７．６Ｈｚ，２Ｈ），７．１５（ｔ，Ｊ＝７．６Ｈｚ，２Ｈ），７．０９（ｓ，２Ｈ），７．７０（ｄ，Ｊ＝７．２Ｈｚ，２Ｈ）．

[0230] 合成実施例－８

[化23]



[0231] アルゴン気流下、２－（４－（２－ブロモトリフェニレン－７－イル）フェニル）－６－（４－シアノフェニル）－４－フェニルピリジン（１．０ｇ）、４－（４，４，５，５－テトラメチル－１，３，２－ジオキサボロラン－２－イル）フタロニトリル（６１０ｍｇ）、酢酸パラジウム（７．２ｍｇ）、ジシクロヘキシル（２’，４’，６’－トリイソプロピル－（１，１’－ビフェニル）－２－イル）ホスファン（３０ｍｇ）をＴＨＦ１６ｍｌに懸濁させ、２規定のリン酸三カリウム水溶液（２．４ｍｌ）を加えて、４時間還流した。反応溶液を室温まで冷却後、水を加えて生じた固体をろ取し、固体を１．３ｇ得た。得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、目的の化合物（Ｂ１０４）を得た（０．８１ｇ、収率７３％）。

[0232] 得られた化合物（Ｂ１０４）の同定は、１Ｈ－ＮＭＲにより行った。

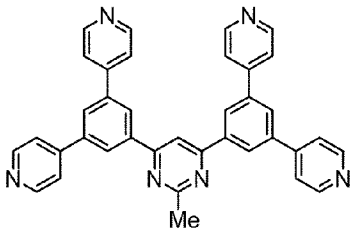
[0233] １Ｈ－ＮＭＲ（ＤＭＳＯ）δ（ｐｐｍ）：８．９６（ｓ，１Ｈ），８．８

６－８．７７（ｍ，４Ｈ），８．３７（ｄｄ，Ｊ＝８．４Ｈｚ，３．４Ｈｚ，４Ｈ），８．２４（ｄ，Ｊ＝１．８Ｈｚ，１Ｈ），８．１６（ｄｄ，Ｊ＝８．１Ｈｚ，１．８Ｈｚ，１Ｈ），８．０５－７．９５（ｍ，６Ｈ），７．８８（ｄ，Ｊ＝８．１Ｈｚ，１Ｈ），７．８３（ｄ，Ｊ＝８．７Ｈｚ，１Ｈ），７．７８－７．７５（ｍ，４Ｈ），７．５９－７．５０（ｍ，４Ｈ）．

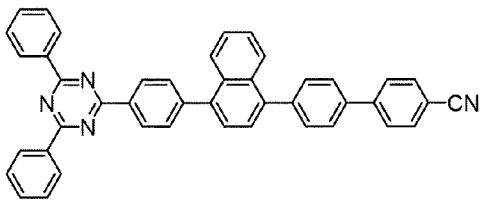
[0234] ＜ガラス転移温度・ＬＵＭＯ準位＞

合成実施例１～８の化合物（Ｂ４０８）、（Ｂ３９５）、（Ｂ４９９）、（Ｂ５０９）、（Ｂ４２６）、（Ｂ６２２）、（Ｂ５７７）、（Ｂ１０４）、引用文献１に記載の比較化合物１、および引用文献２に記載の比較化合物２を、示差走査熱量計（日立ハイテク製ＤＳＣ７０２）を使用し、アルミパンを用いて１０℃／ｍｉｎの掃引速度でガラス転移温度を測定した。また、ＬＵＭＯ準位においては、Ｇａｕｓｓｉａｎ１６のソフトウエアを使い、Ｂ３ＬＹＰ汎関数と６－３１Ｇ（ｄ）基底関数の計算条件による密度汎関数理論（ＤＦＴ）を用いて、分子構造の最適化およびＬＵＭＯ準位の算出を行った。得られたガラス転移温度、ＬＵＭＯ準位（Ｃａｌｃ．ＬＵＭＯ）の結果を表１にまとめた。

[0235] [化24]



比較化合物１



比較化合物２

[0236]

[表1]

	化合物	Tg	calc. LUMO
合成実施例－１	B408	142	－2.4
合成実施例－２	B395	165	－2.5
合成実施例－３	B499	154	－2.4
合成実施例－４	B509	N.D. (>154℃)	－2.8
合成実施例－５	B426	148	－2.4
合成実施例－６	B622	N.D. (>150℃)	－2.4
合成実施例－７	B577	217	－2.7
合成実施例－８	B104	176	－2.5
－	比較化合物１	N.D. (<130℃)	－2.2
－	比較化合物２	116	－2.0

[0237] ＜素子実施例－１（図１参照）＞

図１に示すように、第一の電極１、正孔ブロック層２、光電変換層３、電子ブロック層４、正孔輸送層５、第二の電極６からなる積層構成を有する光電変換素子として、撮像素子１００を作製し、該撮像素子の暗電流、外部量子効率および応答性を評価した。

[0238] （第一の電極１の用意）

第一の電極をその表面に備えた基板として、２ｍｍ幅の酸化インジウムースズ（ＩＴＯ）膜（膜厚１１０ｎｍ）がストライプ状にパターンされたＩＴＯ透明電極付きガラス基板を用意した。ついで、この基板をイソプロピルアルコールで洗浄した後、オゾン紫外線洗浄にて表面処理を行った。

[0239] （真空蒸着の準備）

洗浄後の表面処理が施された基板上に、真空蒸着法で各層の真空蒸着を行い、各層を積層形成した。

[0240] まず、真空蒸着槽内に前記ガラス基板を導入し、７．０×１０$^{-5}$Ｐａまで減圧した。そして、以下の順で、各層の成膜条件に従ってそれぞれ作製した。

[0241] （正孔ブロック層２の作製）

昇華精製した化合物（Ｂ４０８）を０．０３ｎｍ／秒の速度で１０ｎｍ成膜し、正孔ブロック層２を作製した。

[0242] （光電変換層（受光層）３の作製）

Ｎ，Ｎ－ジメチルキナクリドンおよびＣ６０を４：１（質量比）の割合で

１２０ｎｍ成膜し、光電変換層３を作製した。成膜速度は０．１５ｎｍ／秒であった。

[0243]（電子ブロック層４の作製）

化合物（ｉｃ－３）を０．１０ｎｍ／秒の速度で１０ｎｍ成膜し、電子ブロック層４を作製した。尚、（ｉｃ－３）は特開２０１８－１９３３７１に記載の方法で合成した。

[0244]（正孔輸送層５の作製）

化合物２，３，６，７，１０，１１－ヘキサシアノ－１，４，５，８，９，１２－ヘキサアザトリフェニレン（ＨＡＴＣＮ）を０．１０ｎｍ／秒の速度で１０ｎｍ成膜し、正孔輸送層５を作製した。

[0245]（第二の電極６の作製）

最後に、基板上のＩＴＯストライプと直行するようにメタルマスクを配し、上部電極である第二の電極６を成膜した。具体的には、銀を０．１ｎｍ／秒の速度で８０ｎｍ成膜し、上部電極である第二の電極６を作製した。

[0246] 以上により、図１に示すような面積４ｍｍ^{2}の撮像用光電変換素子１００を作製した。なお、それぞれの膜厚は、触針式膜厚測定計（ＤＥＫＴＡＫ、Ｂｒｕｋｅｒ社製）で測定した。

[0247] さらに、この素子を酸素および水分濃度１ｐｐｍ以下の窒素雰囲気グローブボックス内で封止した。封止は、ガラス製の封止キャップと成膜基板（素子）とを、ビスフェノールＦ型エポキシ樹脂（ナガセケムテックス社製）を用いて行った。

[0248] 上記のようにして作製した撮像素子に２．６Ｖの電圧を印加したときの、暗所での電流（暗電流）および外部量子効率、応答時間を評価した。暗電流の測定は、ケースレー社製ソース・メジャー・ユニット２６３６Ｂを用いて評価した。外部量子効率の測定には太陽電池分光感度測定装置（相馬光学社製）を用いた。照射光の波長は５６０ｎｍで、強度５０μＷ／ｃｍ^{2}で測定を行った。応答時間は、光パルスを照射し、照射後、電流値が照射前に戻るまでの時間を測定した。

[0249] なお、暗電流および外部量子効率、応答時間は、素子比較例－１における結果を基準値（１．０）とした相対値である。暗電流は数値が低いほど性能に優れ、外部量子効率は数値が高いほど性能に優れ、応答時間は短いほど性能に優れることを示す。得られた測定結果を表１に示す。

[0250] 素子実施例２～７、素子比較例－１～２

素子実施例－１において、化合物（Ｂ４０８）の代わりに、それぞれ、順に、化合物（Ｂ３９５）、化合物（Ｂ４９９）、化合物（Ｂ５０９）、化合物（Ｂ４２６）、化合物（Ｂ５７７）、化合物（Ｂ１０４）、または比較化合物１を用いた以外は、素子実施例－１と同じ方法で撮像用光電変換素子を作製し、評価した。得られた測定結果を表１に示す。

[0251] [表2]

	化合物	暗電流	外部量子効率	応答性
素子実施例－１	B408	0.93	1.1	0.21
素子実施例－２	B395	0.86	1.06	0.23
素子実施例－３	B499		1.07	0.24
素子実施例－４	B509	0.84	1.06	0.23
素子実施例－５	B426	0.50	1.04	0.23
素子実施例－６	B577	0.68	1.03	0.35
素子実施例－７	B104	0.61	1.07	0.25
素子比較例－１	比較化合物１	1	1	1

[0252] 表１の結果から、撮像素子、光電変換素子用の材料として、式（１）または式（３）、もしくは、式（４－１）で表される化合物を用いて層を形成することにより、比較例化合物を用いて層を形成した場合と比較して、暗電流、外部量子効率および応答性に優れる結果を示した。

産業上の利用可能性

[0253] 本発明の一態様にかかる光電変換素子を備えた撮像素子は、例えば、デジタルカメラやデジタルビデオカメラの撮像素子、および、携帯電話等に内蔵された撮像素子、運転支援システムの画像入力装置などに適用することができる。

符号の説明

[0254] １ 第一の電極

２　正孔ブロック層

３　光電変換層（受光層）

４　電子ブロック層

５　正孔輸送層

６　第二の電極

１０　有機層

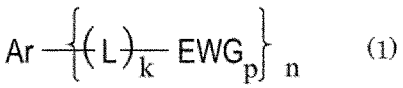
１００　撮像素子（光電変換素子）

請求の範囲

[請求項1] 光電変換素子用材料を含む層を備える、光電変換素子であって、

前記光電変換素子用材料が下記式（１）で表され：

[化1]



(1)

前記式（１）中、

Ａｒは、炭素数１６～４０の縮環芳香族炭化水素基を表し；

ＥＷＧは、電子吸引基を表し；

Ｌは、炭素数６～３０の芳香族炭化水素基を表し；

ｎは、１～８の整数を表し；

ｋは、０～２の整数を表し；

ｐは、１～８の整数を表し；

ｋが、０である場合、ｐは、１であり、

前記ＥＷＧを２つ以上有している場合、前記ＥＷＧは、同一または互いに異なる電子吸引基であり、

前記Ａｒ、Ｌ、およびＥＷＧのそれぞれは、少なくとも１つの置換基を有しているか、または前記置換基を有していない、光電変換素子。

[請求項2] 前記ＥＷＧが、シアノ基、フッ素原子、フルオロアルキル基、および窒素原子を含む炭素数３～３０のヘテロアリール基から選択される、請求項１に記載の光電変換素子。

[請求項3] 前記窒素原子を含む炭素数３～３０のヘテロアリール基が置換基を有し、前記置換基の少なくとも１つが、シアノ基、フッ素原子、およびフルオロアルキル基から選択される基である、請求項２に記載の光電変換素子。

[請求項4] 前記ｋが、０または１の整数である、請求項１に記載の光電変換素子。

[請求項5] 前記ｋが、１であり、前記ＥＷＧが、シアノ基、フッ素基、およびフルオロアルキル基から選択される少なくとも１つの基である、請求項１に記載の光電変換素子。

[請求項6] 前記Ａｒが、６員環を４つ以上内包する縮環芳香族炭化水素基である、請求項１に記載の光電変換素子。

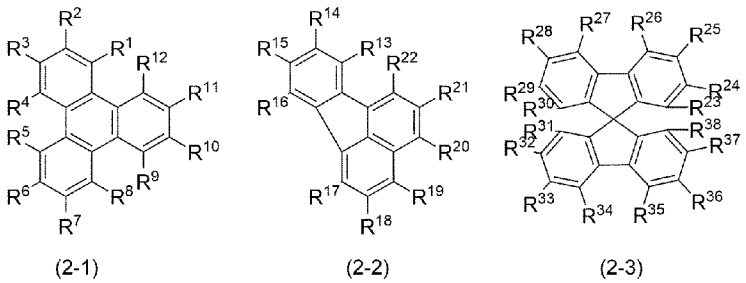
[請求項7] 前記Ａｒが、トリフェニレン基、フルオランテン基、およびスピロフルオレン基から選択される縮環芳香族炭化水素基と、トリフェニレン基、フルオランテン基、スピロフルオレン基を内包する縮環芳香族炭化水素基とから選択される、請求項１に記載の光電変換素子。

[請求項8] 前記Ａｒが、前記置換基を有しているか、または有していない、炭素数２０～４０の縮環芳香族炭化水素基を表す、請求項１に記載の光電変換素子。

[請求項9] 請求項１に記載の光電変換素子であって、

前記Ａｒが、下記式（２－１）、（２－２）、および（２－３）で表され、

[化2]



(2-1) (2-2) (2-3)

前記式（２－１）、式（２－２）、および式（２－３）中、

Ｒ１～Ｒ３８は、それぞれ独立して、水素原子、炭素数１～２０のアルキル基、炭素原子数１～２０のアルケニル基、炭素原子数１～２０のシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のビシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のトリシクロアルキル基、炭素原子数１～１０のアルコキシ基、炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、および炭素数３～３０のヘテロアリール基から選択されるか、または、

Ｒ[1]～Ｒ[38]のうちの一部は、互いに隣接する２つの基が結合することで、環が形成され、

ここで、前記Ｒ[1]～Ｒ[35]は、それぞれ独立して、少なくとも１つの置換基を有しているか、若しくは、前記置換基を有していない、光電変換素子。

[請求項10] 前記光電変換素子用材料が、Ｂ３ＬＹＰ汎関数および６－３１Ｇ（ｄ）基底関数を用いる密度汎関数理論（ＤＦＴ）によって算出されるＬＵＭＯ準位の量子計算値が－２．２ｅＶ以下である、請求項１に記載の光電変換素子。

[請求項11] 前記光電変換素子用材料のガラス転移温度が、１４０℃以上である、請求項１に記載の光電変換素子。

[請求項12] 前記光電変換素子用材料を含む前記層が、正孔ブロック層である、請求項１に記載の光電変換素子。

[請求項13] 撮像素子である、請求項１に記載の光電変換素子。

[請求項14] 前記式（１）に示す光電変換素子用材料であって、請求項１～１３の何れか一項に記載の光電変換素子が備える前記層を形成するための、光電変換素子用材料。

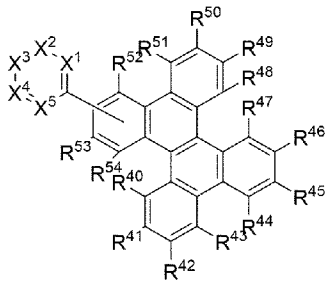
[請求項15] 請求項１４に記載の光電変換素子用材料は、撮像素子用光電変換素子用材料である、光電変換素子用材料。

[請求項16] 正孔ブロック材料である、請求項１４に記載の光電変換素子用材料。

[請求項17] 前記正孔ブロック層と電極との間に、フラーレンを含む層を備える、請求項１２に記載の光電変換素子。

[請求項18] 下記式（３）で表される、化合物：

[化3]



（３）

前記式（３）中、

Ｘ[1]～Ｘ[5]は、窒素原子またはＣＲ[55]を表し；

Ｘ[1]～Ｘ[5]の内、前記窒素原子の数は、０～３の整数であり；

Ｒ[40]～Ｒ[55]は、それぞれ独立して、水素原子、シアノ基、ニトロ基、ハロゲン原子、ハロゲン化アルキル基、アシル基、スルホニル基、ホスホリル基、炭素数１～２０のアルキル基、炭素原子数１～２０のアルケニル基、炭素原子数１～２０のシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のビシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のトリシクロアルキル基、炭素原子数１～１０のアルコキシ基、炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、および炭素数３～３０のヘテロアリール基から選択されるか、または、

前記Ｒ[40]～Ｒ[55]のうちの一部は、互いに隣接する２つの基が結合することで環が形成され；

Ｒ[55]の少なくともひとつが、シアノ基、ハロゲン原子、またはハロゲン化アルキル基から選択され；

Ｘ[1]～Ｘ[5]は、すべてＣＲ[55]である場合、前記Ｒ[55]の２つ以上がシアノ基、ハロゲン原子、およびハロゲン化アルキル基から選択され；

前記Ｒ[40]～Ｒ[55]は、それぞれ独立して、さらに少なくとも１つの置換基を有しているか、または前記置換基を有していない、化合物。

[請求項19] 前記Ｒ[55]は、それぞれ独立して、水素原子、シアノ基、ハロゲン

原子、ハロゲン化アルキル基、炭素数１～２０のアルキル基、および炭素原子数１～２０のシクロアルキル基から選択される、請求項１８に記載の化合物。

[請求項20] 前記Ｒ^{55}のいずれかひとつがシアノ基である、請求項１８に記載の化合物。

[請求項21] 前記ハロゲン原子は、フッ素原子であり、

前記炭素数６～３０の芳香族炭化水素基は、シアノ基、フッ素基、およびフルオロアルキル基から選択される基によって置換されている、請求項１８に記載の化合物。

[請求項22] Ｂ３ＬＹＰ汎関数および６－３１Ｇ（ｄ）基底関数を用いる密度汎関数理論（ＤＦＴ）によって算出されるＬＵＭＯ準位の量子計算値が－２．２ｅＶ以下である、請求項１８に記載の化合物。

[請求項23] ガラス転移温度が、１４０℃以上である、請求項１８に記載の化合物。

[請求項24] 請求項１８～２３の何れか一項に記載の化合物を含む、光電変換素子用材料。

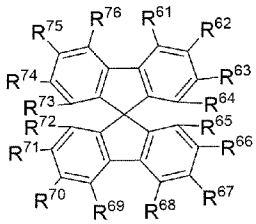
[請求項25] 正孔ブロック材料である、請求項２４に記載の光電変換素子用材料。

[請求項26] 請求項２４に記載の光電変換素子用材料を含む層を備える、光電変換素子。

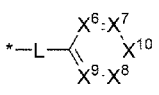
[請求項27] 撮像素子である、請求項２６に記載の光電変換素子。

[請求項28] 下記式（４－１）で表される、化合物：

[化4]



(4-1)



(4-2)

前記式（４－１）中、

R^{61}～R^{76}は、それぞれ独立して、水素原子、シアノ基、ニトロ基、ハロゲン原子、ハロゲン化アルキル基、アシル基、スルホニル基、ホスホリル基、炭素数１～２０のアルキル基、炭素原子数１～２０のアルケニル基、炭素原子数１～２０のシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のビシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のトリシクロアルキル基、炭素原子数１～１０のアルコキシ基、炭素数６～３０の芳香族炭化水素基、炭素数３～３０のヘテロアリール基、および式（４－２）で表される基から選択されるか、または、互いに隣接する２つの基が結合することで環が形成され；

R^{61}～R^{76}の内、いずれかひとつは式（４－２）で表される基であり；

Ｌは直接結合または炭素数６～１６の芳香族炭化水素基を表し；

X^{6}～X^{10}は、窒素原子、Ｃ（ＣＮ）、またはCR^{77}を表し；

X^{9}およびX^{10}の内、X^{9}がＣ（ＣＮ）であるか、またはX^{10}が窒素原子もしくはＣ（ＣＮ）であり；

X^{6}～X^{10}の内、前記窒素原子の数は０または１つであり、前記窒素原子の数が０である場合、前記Ｃ（ＣＮ）の数は２～３つの何れかであり、前記窒素原子の数が１つである場合、前記Ｃ（ＣＮ）の数は２つであり；

R^{77}は、それぞれ独立して、水素原子、ニトロ基、ハロゲン原子、ハロゲン化アルキル基、アシル基、スルホニル基、ホスホリル基、炭素数１～２０のアルキル基、炭素原子数１～２０のアルケニル基、炭素原子数１～２０のシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のビシクロアルキル基、炭素原子数１～２０のトリシクロアルキル基、炭素原子数１～１０のアルコキシ基から選択され；

前記R^{61}～R^{77}、及び前記Ｌは、少なくとも１つの置換基を有しているか、または前記置換基を有してない、化合物。

[請求項29] 前記R^{77}は、それぞれ独立して、水素原子、炭素数１～２０のア

ルキル基、および炭素原子数１～２０のシクロアルキル基から選択される、請求項２８に記載の化合物。

[請求項30] 前記R^{61}～R^{76}は、水素原子、シアノ基、炭素数１～２０のアルキル基、炭素原子数１～２０のシクロアルキル基、炭素数６～１６の芳香族炭化水素基、炭素数３～１６のヘテロアリール基、および式（４－２）で表される基から選択されるか、または、互いに隣接する２つの基が結合することで芳香族炭化水素環が形成される、請求項２８に記載の化合物。

[請求項31] X^{10}が、窒素原子またはＣ（ＣＮ）であり、X^{7}およびX^{8}がＣ（ＣＮ）またはＣR^{77}であり、X^{6}およびX^{9}がＣR^{77}である、請求項２８に記載の化合物。

[請求項32] Ｂ３ＬＹＰ汎関数および６－３１Ｇ（ｄ）基底関数を用いる密度汎関数理論（ＤＦＴ）によって算出されるＬＵＭＯ準位の量子計算値が－２．２ｅＶ以下である、請求項２８に記載の化合物。

[請求項33] ガラス転移温度が、１４０℃以上である、請求項２８に記載の化合物。

[請求項34] 請求項２８～３３の何れか一項に記載の化合物を含む、光電変換素子用材料。

[請求項35] 正孔ブロック材料である、請求項３４に記載の光電変換素子用材料。

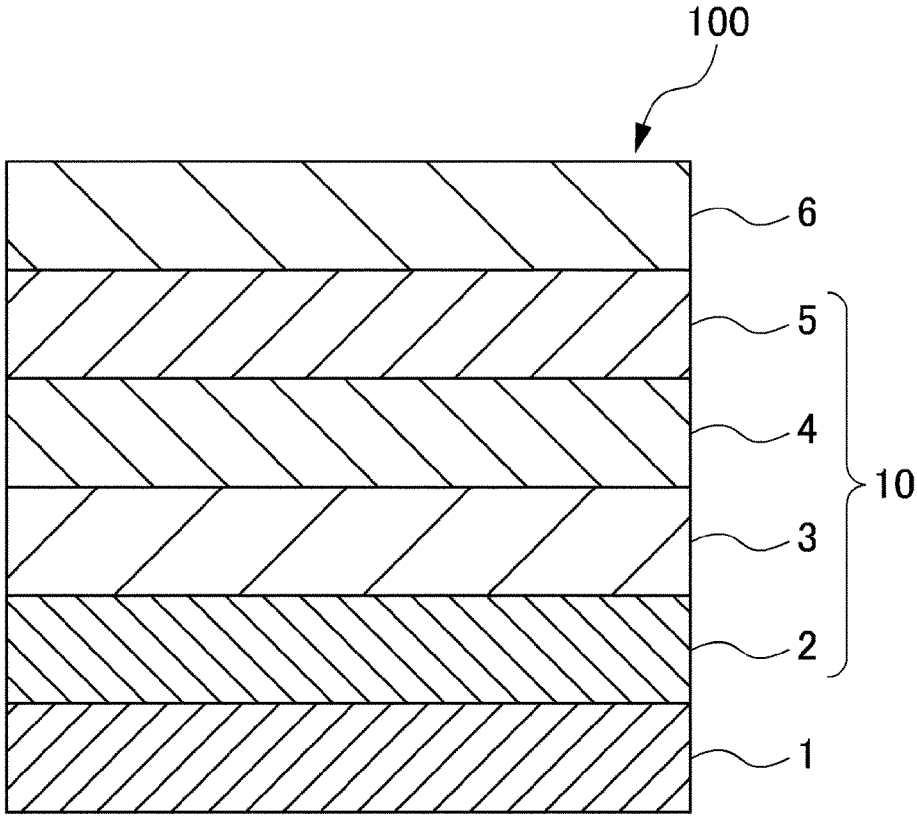
[請求項36] 請求項３４に記載の光電変換素子用材料を含む層を備える、光電変換素子。

[請求項37] 撮像素子である、請求項３６に記載の光電変換素子。

WO 2024/122652 PCT/JP2023/044249

[図1]

図 1



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2023/044249

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

H10K 30/60(2023.01)i; ***C07C 255/51***(2006.01)i; ***C07C 255/52***(2006.01)i; ***C07D 213/84***(2006.01)i; ***H10K 30/85***(2023.01)i; ***H10K 39/32***(2023.01)i; ***H10K 85/60***(2023.01)i
FI: H10K30/60; H10K30/85; H10K39/32; H10K85/60; C07C255/51; C07C255/52; C07D213/84 Z CSP

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

H10K30/00-30/89; H10K39/00-39/38; H10K50/00-50/88; H10K59/00-59/95; H10K85/60; C07C255/51; C07C255/52; C07D213/84

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

Published examined utility model applications of Japan 1922-1996
Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2024
Registered utility model specifications of Japan 1996-2024
Published registered utility model applications of Japan 1994-2024

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

CAplus/REGISTRY (STN)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	JP 2022-76423 A (TOSOH CORP.) 19 May 2022 (2022-05-19) paragraphs [0016], [0067]-[0075], [0142]	1-16, 18-27
Y		17
A		28-37
Y	JP 2019-169693 A (PANASONIC INTELLECTUAL PROPERTY MANAGEMENT CO., LTD.) 03 October 2019 (2019-10-03) paragraphs [0156]-[0157], [0170], [0176]-[0177], fig. 2	17
A		1-16, 18-37
A	JP 2018-193371 A (TOSOH CORP.) 06 December 2018 (2018-12-06)	1-37
A	CN 113292488 A (ZHEJIANG HONGWU TECHNOLOGY CO., LTD.) 24 August 2021 (2021-08-24)	1-37

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

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

Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report
14 February 2024	**27 February 2024**

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

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2023/044249

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	CN 115322189 A (SICHUAN AGERUI NEW MATERIAL CO., LTD.) 11 November 2022 (2022-11-11)	1-37

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.
PCT/JP2023/044249

Patent document cited in search report	Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
JP 2022-76423 A	19 May 2022	(Family: none)	
JP 2019-169693 A	03 October 2019	(Family: none)	
JP 2018-193371 A	06 December 2018	(Family: none)	
CN 113292488 A	24 August 2021	(Family: none)	
CN 115322189 A	11 November 2022	WO 2023/051133 A1 TW 202313607 A	

国際調査報告

国際出願番号
PCT/JP2023/044249

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（ＩＰＣ））

H10K 30/60(2023.01)i; C07C 255/51(2006.01)i; C07C 255/52(2006.01)i; C07D 213/84(2006.01)i; H10K 30/85(2023.01)i; H10K 39/32(2023.01)i; H10K 85/60(2023.01)i
FI: H10K30/60; H10K30/85; H10K39/32; H10K85/60; C07C255/51; C07C255/52; C07D213/84 Z CSP

B. 調査を行った分野

調査を行った最小限資料（国際特許分類（ＩＰＣ））

H10K30/00-30/89; H10K39/00-39/38; H10K50/00-50/88; H10K59/00-59/95; H10K85/60; C07C255/51; C07C255/52; C07D213/84

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報	１９２２－１９９６年
日本国公開実用新案公報	１９７１－２０２４年
日本国実用新案登録公報	１９９６－２０２４年
日本国登録実用新案公報	１９９４－２０２４年

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

CAplus/REGISTRY (STN)

C. 関連すると認められる文献

引用文献のカテゴリー*	引用文献名　及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する請求項の番号
X	JP 2022-76423 A (東ソー株式会社) 19.05.2022 (2022-05-19) 段落[0016], [0067]-[0075], [0142]	1-16, 18-27
Y		17
A		28-37
Y	JP 2019-169693 A (パナソニックＩＰマネジメント株式会社) 03.10.2019 (2019-10-03) 段落[0156]-[0157], [0170], [0176]-[0177], 図2	17
A		1-16, 18-37
A	JP 2018-193371 A (東ソー株式会社) 06.12.2018 (2018-12-06)	1-37
A	CN 113292488 A (ZHEJIANG HONGWU TECHNOLOGY CO., LTD.) 24.08.2021 (2021-08-24)	1-37
A	CN 115322189 A (SICHUAN AGERUI NEW MATERIAL CO., LTD.) 11.11.2022 (2022-11-11)	1-37

☐ Ｃ欄の続きにも文献が列挙されている。

☑ パテントファミリーに関する別紙を参照。

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

国際調査を完了した日	国際調査報告の発送日
14.02.2024	27.02.2024

名称及びあて先
日本国特許庁(ISA/JP)
〒100-8915
日本国
東京都千代田区霞が関三丁目４番３号

権限のある職員（特許庁審査官）
原　俊文 2K 4078
電話番号 03-3581-1101 内線 3255

国際調査報告
パテントファミリーに関する情報

国際出願番号
PCT/JP2023/044249

引用文献	公表日	パテントファミリー文献	公表日
JP 2022-76423 A	19.05.2022	（ファミリーなし）	
JP 2019-169693 A	03.10.2019	（ファミリーなし）	
JP 2018-193371 A	06.12.2018	（ファミリーなし）	
CN 113292488 A	24.08.2021	（ファミリーなし）	
CN 115322189 A	11.11.2022	WO 2023/051133 A1	
		TW 202313607 A	