

(19)日本国特許庁(JP)

## (12)特許公報(B2)

(11)特許番号  
特許第7578295号  
(P7578295)

(45)発行日 令和6年11月6日(2024.11.6)

(24)登録日 令和6年10月28日(2024.10.28)

(51)国際特許分類	F I
H 1 0 K 30/50 (2023.01)	H 1 0 K 30/50
H 1 0 K 30/30 (2023.01)	H 1 0 K 30/30
H 1 0 K 85/60 (2023.01)	H 1 0 K 85/60

請求項の数 21 (全46頁)

(21)出願番号	特願2021-572899(P2021-572899)	(73)特許権者	512286163 ヘリアテック ゲゼルシャフト ミット ベ シュレンクテル ハフツング HELIATEK GMBH ドイツ国 01139 ドレスデン, ド ライドラーシュトラッセ 3 T Reidlerstrasse 3, 01139 Dresden, Germ any
(86)(22)出願日	令和2年9月24日(2020.9.24)	(74)代理人	110002664 弁理士法人相原国際知財事務所
(65)公表番号	特表2022-548447(P2022-548447 A)	(72)発明者	アンデルナッハ, ロルフ ドイツ国 89077 ウルム, ゼーダ ンシュトラッセ 14, ヘリアテック ゲ ゼルシャフト ミット ベシュレンクテル 最終頁に続く
(43)公表日	令和4年11月21日(2022.11.21)		
(86)国際出願番号	PCT/DE2020/100826		
(87)国際公開番号	WO2021/058065		
(87)国際公開日	令和3年4月1日(2021.4.1)		
審査請求日	令和5年7月6日(2023.7.6)		
(31)優先権主張番号	102019125715.8		
(32)優先日	令和1年9月24日(2019.9.24)		
(33)優先権主張国・地域又は機関	ドイツ(DE)		

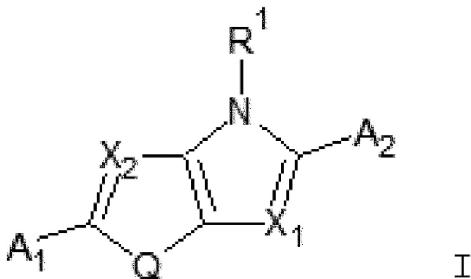
(54)【発明の名称】 フロピロール又はチエノピロール基を有する化合物、前記種類の化合物を有する光電子部品、及び、光電子部品における前記種類の化合物の使用

## (57)【特許請求の範囲】

## 【請求項1】

一般式 I の化合物

## 【化34】



であって、

QはO又はSであり；

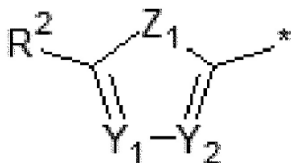
R1は、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル及びアリールからなる群から選択され；

X1及びX2は、互いに独立して、N又はC - R4であり；ここで

R4は、H、ハロゲン、アルコキシ、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アルケニル及びアリールからなる群から選択され、ここで、Hは、各事例において、置換されていてもよく；

A 1 は、式 I a

【化 3 5】



(式中、\*は、前記一般式 I の化合物に対する結合点を示し；

Z 1 は、O、S、Se 及び N - R 5 からなる群から選択され、ここで、R 5 は、H、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル及びアリアルからなる群から選択され；

10

Y 1 は N 又は C - R 6 であり、ここで、R 6 は、H、ハロゲン、アルコキシ、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アルケニル及びアリアルからなる群から選択され、ここで、H は、各事例において、置換されていてもよく；

Y 2 は N 又は C - R 7 であり、ここで、R 7 は、H、ハロゲン、アルコキシ、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アルケニル及びアリアルからなる群から選択され、ここで、H は、各事例において、置換されていてもよく；並びに、ここで、R 6 及び R 7 は、単素環式、又は、複素環式に環構造の形態で互いに結合していてもよく；

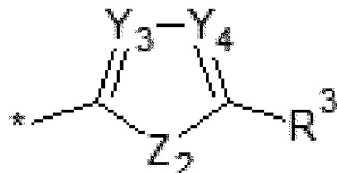
R 2 は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アミノ、アリアル、ヘテロアリアル、アルケニル、及び、少なくとも 1 つの C = C 二重結合を有する電子求引性アルキル基からなる群から選択され、ここで、H は、CN 又は F により置換されていてもよい)

20

を有する基であり、

A 2 は、式 I b

【化 3 6】



(式中、\*は、前記一般式 I の化合物に対する結合点を示し；

Z 2 は、O、S、Se 及び N - R 8 からなる群から選択され、ここで、R 8 は、H、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル及びアリアルからなる群から選択され；

30

Y 3 は N 又は C - R 9 であり、ここで、R 9 は、H、ハロゲン、アルコキシ、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アルケニル及びアリアルからなる群から選択され、ここで、H は、各事例において、置換されていてもよく；

Y 4 は N 又は C - R 10 であり、ここで、R 10 は、H、ハロゲン、アルコキシ、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アルケニル及びアリアルからなる群から選択され、ここで、H は、各事例において、置換されていてもよく；及び、ここで、R 9 及び R 10 は、単素環式、又は、複素環式に環構造の形態で互いに結合していてもよく；並びに

40

R 3 は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アミノ、アリアル、ヘテロアリアル、アルケニル、及び、少なくとも 1 つの C = C 二重結合を有する電子求引性アルキル基からなる群から選択され、ここで、H は CN 又は F により置換されていてもよい)

を有する基であることを特徴とする、化合物。

【請求項 2】

Q は S である、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 3】

50

R 1 は、エチル、プロピル、ブチル、分岐アルキル及びアリールからなる群から選択され；並びに

ここで、Z 1 及び Z 2 は各々、互いに独立して、O 又は S であることを特徴とする、請求項 1 又は請求項 2 に記載の化合物。

【請求項 4】

R 1 は、イソプロピル、イソブチル、sec-ブチル、イソペンチル、t-ブチル及びフェニルからなる群から選択される、請求項 3 に記載の化合物。

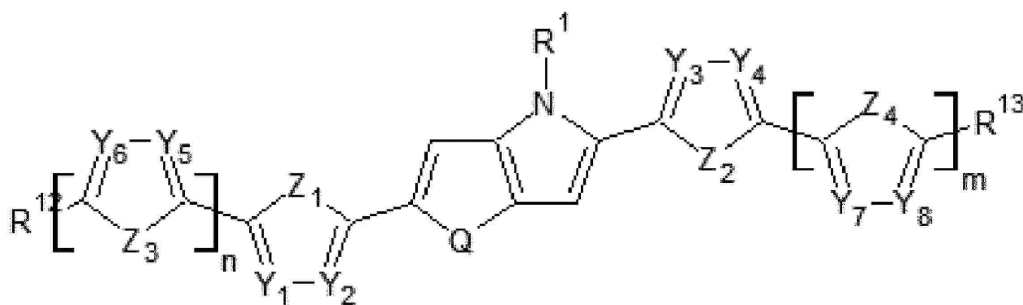
【請求項 5】

Z 2 は O である、請求項 3 に記載の化合物。

【請求項 6】

前記化合物は、一般式 I I の化合物

【化 3 7】



I I

10

20

(式中、nは0、1又は2であり、及び、mは、0、1又は2であり；

QはO又はSであり；

Z 3 及び Z 4 は、各々互いに独立して、O、S、Se及びN-R 1 1 からなる群から選択され、ここで、R 1 1 は、H、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル及びアリールからなる群から選択され；

R 1 2 は、H、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル、アルケニル、及び、少なくとも1つのC=C二重結合を有する電子求引性アルキル基からなる群から選択され、ここで、Hは、CN又はFにより置換されていてもよく；

R 1 3 は、H、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル、アルケニル、及び、少なくとも1つのC=C二重結合を有する電子求引性アルキル基からなる群から選択され、ここで、Hは、CN又はFにより置換されていてもよく、

Y 5 はN又はC-R 1 4 であり、ここで、R 1 4 は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル及びアルケニルからなる群から選択され、ここで、Hは、各事例において、置換されていてもよく；

Y 6 はN又はC-R 1 5 であり、ここで、R 1 5 は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル及びアルケニルからなる群から選択され、ここで、Hは、各事例において、置換されていてもよく；

Y 7 はN又はC-R 1 6 であり、ここで、R 1 6 は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル及びアルケニルからなる群から選択され、ここで、Hは、各事例において、置換されていてもよく；

Y 8 はN又はC-R 1 7 であり、ここで、R 1 7 は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル及びアルケニルからなる群から選択され、ここで、Hは、各事例において、置換されていてもよく；並びに

ここで、R 1 4 及びR 1 5、及び/又は、R 1 6 及びR 1 7 はそれぞれ、一緒になって、単素環式5員環若しくは6員環、又は、S、O及びNからなる群から選択される少なくとも1個のヘテロ原子を含有する複素環式5員環若しくは6員環を形成していてもよい)であることを特徴とする、請求項 1 ~ 5 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 7】

Z 3 及び Z 4 は、互いに独立して、O 又は S である、請求項 6 に記載の化合物。

30

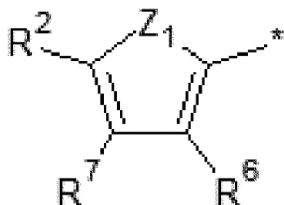
40

50

## 【請求項 8】

A 1 は、式 I I a

## 【化 3 8】

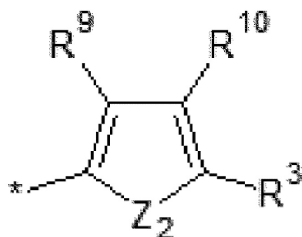


(式中、R 6 は、H、ハロゲン、アルコキシ、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アルケニル及びアリールからなる群から選択され、ここで、H は、各事例において、置換されていてもよく；

R 7 は、H、ハロゲン、アルコキシ、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アルケニル及びアリールからなる群から選択され、ここで、H は、各事例において、置換されていてもよく；並びに、ここで、R 6 及び R 7 は、一緒になって、単素環式 5 員環若しくは 6 員環、又は、S、O 及び N からなる群から選択される少なくとも 1 個のヘテロ原子を含有する複素環式 5 員環若しくは 6 員環を形成していてもよい)

を有する基であり、並びに、A 2 は、式 I I b

## 【化 3 9】



(式中、R 9 は、H、ハロゲン、アルコキシ、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アルケニル及びアリールからなる群から選択され、ここで、H は、各事例において、置換されていてもよく；

R 1 0 は、H、ハロゲン、アルコキシ、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アルケニル及びアリールからなる群から選択され、ここで、H は、各事例において、置換されていてもよく；並びに、ここで、R 9 及び R 1 0 は、一緒になって、単素環式 5 員環若しくは 6 員環、又は、S、O 及び N からなる群から選択される少なくとも 1 個のヘテロ原子を含有する複素環式 5 員環若しくは 6 員環を形成していてもよい)

を有する基であることを特徴とする、請求項 1 ~ 7 のいずれか一項に記載の化合物。

## 【請求項 9】

前記化合物は、一般式 I I I、I V 又は V の化合物

10

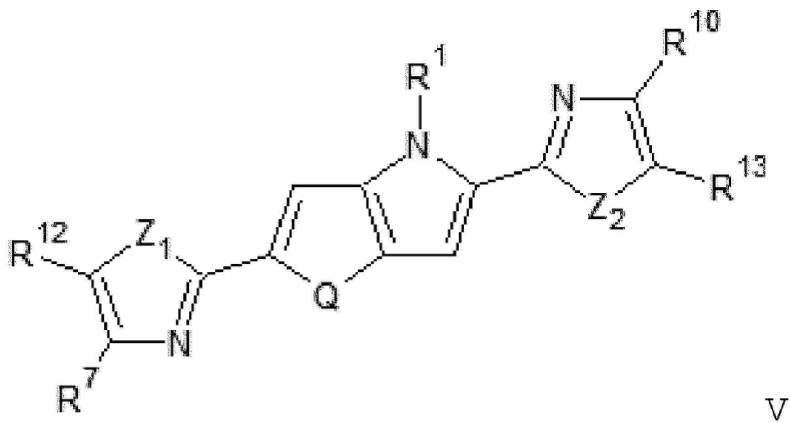
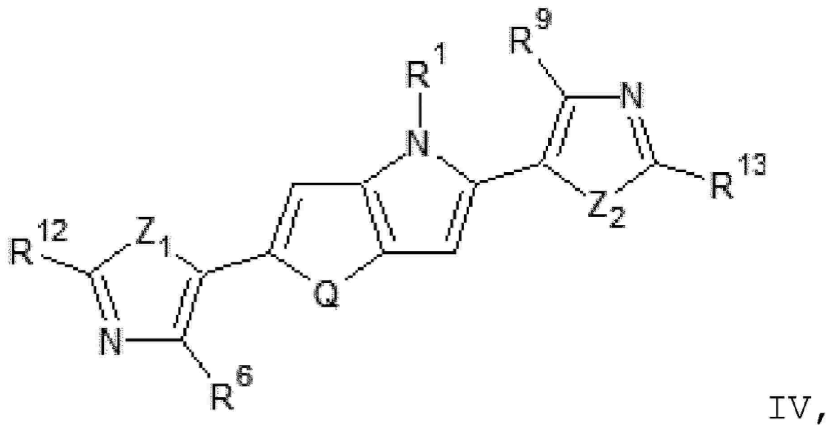
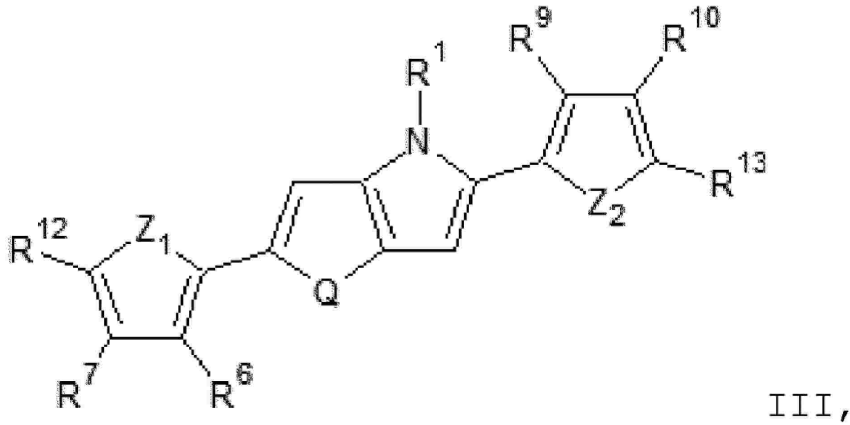
20

30

40

50

【化 4 0】



(式中、QはO又はSであり；

Z<sub>1</sub>及びZ<sub>2</sub>は各々、互いに独立して、O又はSであり；

R<sub>6</sub>は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル及びアルケニルからなる群から選択され、ここで、Hは、各事例において、置換されていてもよく；

40

R<sub>7</sub>は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル及びアルケニルからなる群から選択され、ここで、Hは、各事例において、置換されていてもよく；並びに、ここで、R<sub>6</sub>及びR<sub>7</sub>は、一緒になって、単素環式5員環若しくは6員環、又は、S、O及びNからなる群から選択される少なくとも1個のヘテロ原子を含有する複素環式5員環若しくは6員環を形成していてもよく；

R<sub>9</sub>は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル及びアルケニルからなる群から選択され、ここで、Hは、各事例において、置換されていてもよく；

R<sub>10</sub>は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル及びアルケニルからなる群から選択され、ここで、Hは、各事例において、置換されていてもよく；並びに、ここで、R<sub>9</sub>及びR<sub>10</sub>は、一緒になって、単素環式5員環若しくは6員環、又は、S、O及びNからなる群

50

から選択される少なくとも 1 個のヘテロ原子を含有する複素環式 5 員環若しくは 6 員環を形成していてもよく；

R 1 2 は、H、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル、アルケニル、及び、少なくとも 1 つの C = C 二重結合を有する電子求引性アルキル基からなる群から選択され、ここで、H は、CN 又は F により置換されていてもよく；並びに

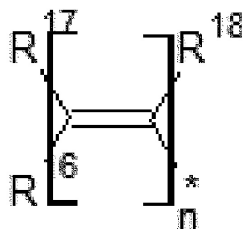
R 1 3 は、H、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル、アルケニル、及び、少なくとも 1 つの C = C 二重結合を有する電子求引性アルキル基からなる群から選択され、ここで、H は CN 又は F により置換されていてもよい)

であることを特徴とする、請求項 1 ~ 8 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 1 0】

R 2 及び R 3、又は、R 1 2 及び R 1 3 は各々、互いに独立して

【化 4 1】



(式中、n は、1、2 又は 3 であり、ここで、\* は基 R 2、R 3、R 1 2 及び / 又は R 1 3 の結合点を示し；

R 1 6、R 1 7 及び R 1 8 は各々、互いに独立して、H、ハロゲン、CN、COO - アルキル、アルキル及びアルケニルからなる群から選択されるが、ただし、R 1 6 及び R 1 7 は共に H ではない)

であることを特徴とする、請求項 1 ~ 9 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 1 1】

R 2 及び R 3、又は、R 1 2 及び R 1 3 は各々、互いに独立して：

10

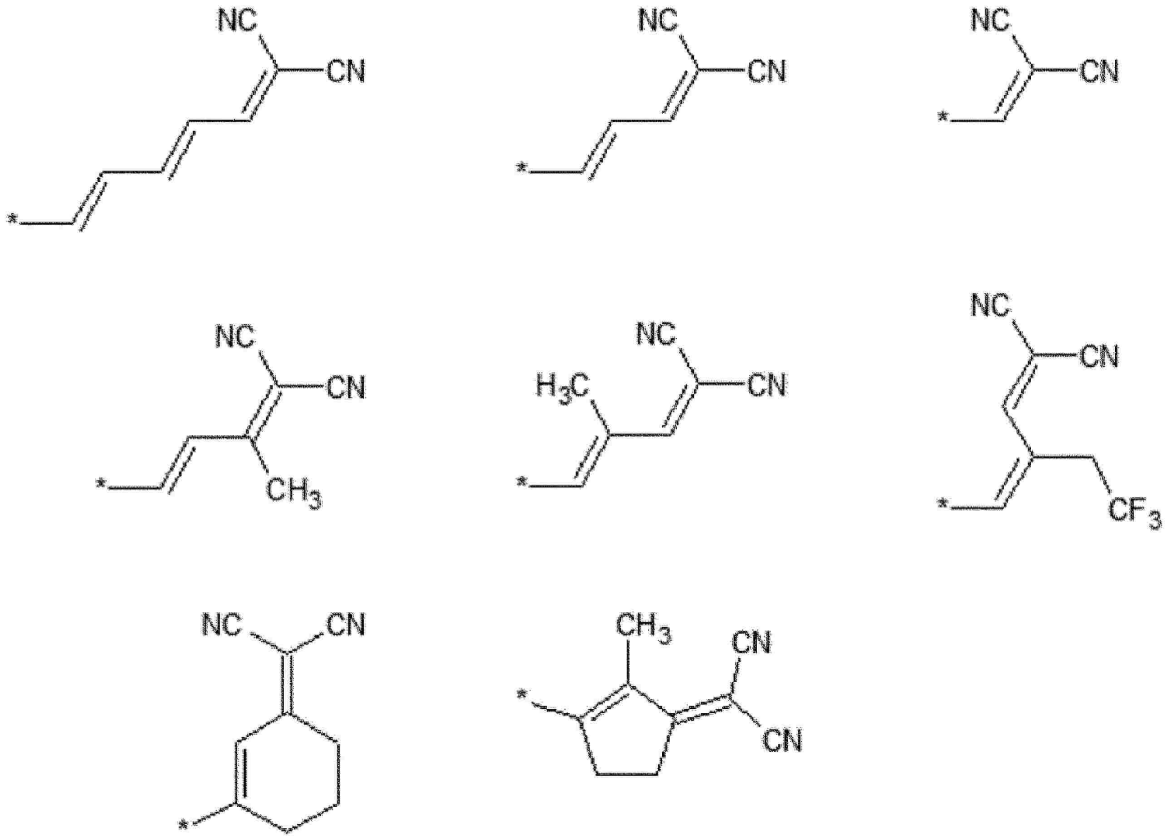
20

30

40

50

## 【化 4 2】



10

20

(式中、\*は、基 R<sub>2</sub>、R<sub>3</sub>、R<sub>12</sub> 及び / 又は R<sub>13</sub> の結合点を示し、ここで、CN は F によって置き換えられていてもよい) からなる群から選択されることを特徴とする、請求項 1 ~ 10 のいずれか一項に記載の化合物。

## 【請求項 1 2】

R<sub>6</sub> 及び R<sub>7</sub> は H であり、R<sub>9</sub> 及び R<sub>10</sub> は H であり、並びに、Z<sub>2</sub> は O であることを特徴とする、請求項 1 ~ 11 のいずれか一項に記載の化合物。

30

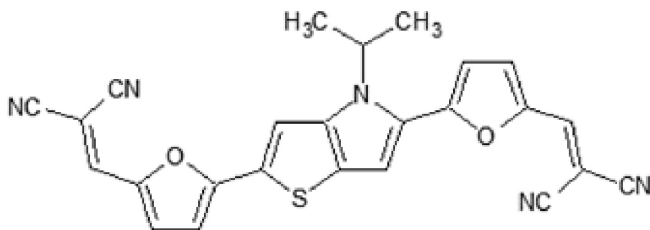
## 【請求項 1 3】

Z<sub>1</sub> 及び Z<sub>2</sub> は O である、請求項 1 2 に記載の化合物。

## 【請求項 1 4】

前記化合物は：

## 【化 4 3】

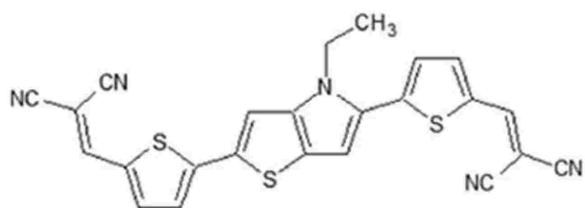


40

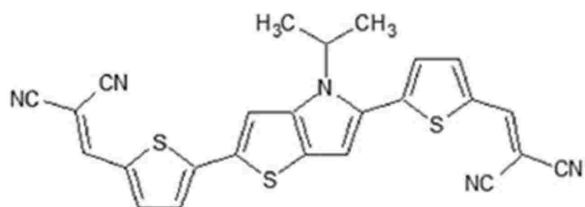
50

## 【化 4 4】

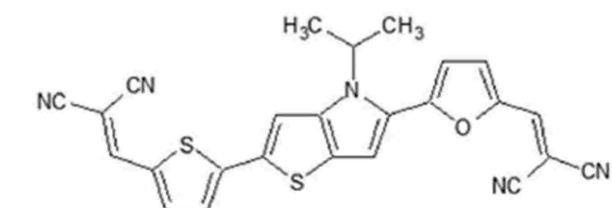
F3



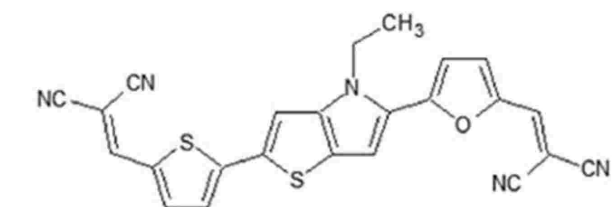
F4



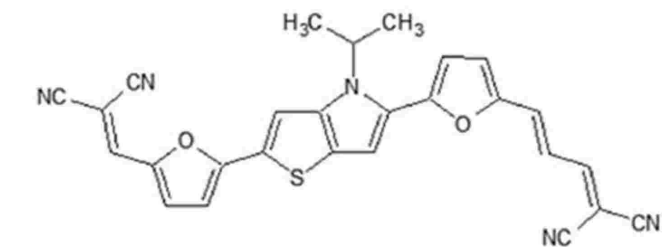
F5



F6



F7



F8

10

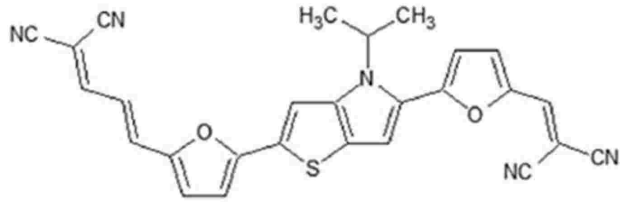
20

30

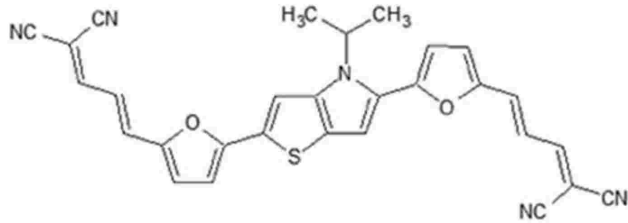
40

50

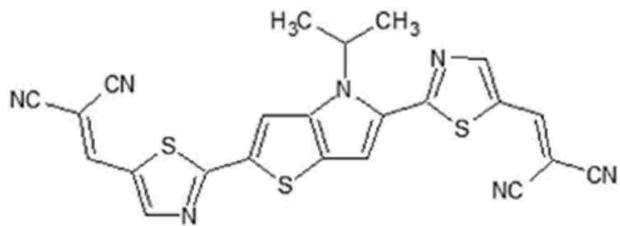
## 【化 4 5】



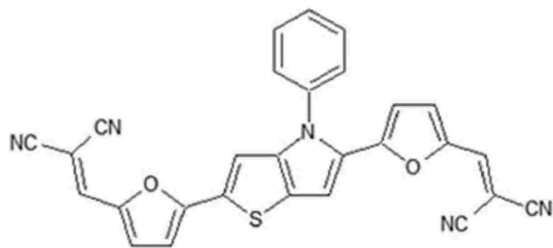
F9



F10



F11, 及び



F12

からなる群から選択されることを特徴とする、請求項 1 ~ 1 3 のいずれか一項に記載の化合物。

## 【請求項 1 5】

基 A 1 は基 A 2 と同じであることを特徴とする、請求項 1 ~ 1 4 のいずれか一項に記載の化合物。

## 【請求項 1 6】

第 1 の電極 ( 2 )、第 2 の電極 ( 6 ) 及び層系 ( 7 ) を備える光電子部品であって、前記層系は前記第 1 の電極 ( 2 ) と前記第 2 の電極 ( 6 ) との間に配置されており、前記層系 ( 7 ) の少なくとも 1 つの層は、請求項 1 ~ 1 5 のいずれか一項に記載の少なくとも 1 種の化合物を含むことを特徴とする、光電子部品。

## 【請求項 1 7】

前記光電子部品は、有機光電子部品であることを特徴とする、請求項 1 6 に記載の光電子部品。

## 【請求項 1 8】

前記光電子部品は、有機系太陽電池、OFET、OLED 又は有機光検出器である、請求項 1 6 に記載の光電子部品。

## 【請求項 1 9】

10

20

30

40

50

前記層系(7)は、少なくとも1つの光活性層(4)を有し、ここで、前記少なくとも1つの光活性層(4)は請求項1~10のいずれか一項に記載の少なくとも1種の化合物を含むことを特徴とする、請求項16~18のいずれか一項に記載の光電子部品。

【請求項20】

前記光活性層(4)は、請求項1~10のいずれか一項に記載の少なくとも1種の化合物と、少なくとも1種のさらなる化合物との混合層として、又は、請求項1~10のいずれか一項に記載の少なくとも1種の化合物と、少なくとも2種のさらなる化合物との混合層として形成され、前記化合物は吸収材料であることを特徴とする、請求項19に記載の光電子部品。

【請求項21】

有機光電子部品における請求項1~15のいずれか一項に記載の少なくとも1種の化合物の使用。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、一般式Iの化合物、前記種類の化合物を含む光電子部品、及び、光電子部品における前記種類の化合物の使用に関する。

【背景技術】

【0002】

導電性ポリマー又は有機小分子製の回路構成要素が、光電子部品に度々用いられる。光電子部品は例えば、ディスプレイ、データメモリ又はトランジスタであることが可能であるが、有機光電子部品、特に有機光活性部品(電磁波の入力によって、電荷キャリア、特に結合した電子-正孔対(励起子)が生成される光活性層を有する、例えば太陽電池及び光検出器)でもあることが可能である。

【0003】

有機光電子部品は、光電効果によって電磁波を電流に転換可能である。この種の電磁波の転換では、良好な吸収特性を示す吸収材料が必要とされる。さらなる光電子部品は、電流が流れると発光する発光エレクトロルミネセント部品である。光電子部品は、一方が基板に適用されると共に他方が対電極として機能する少なくとも2つの電極と、これらの電極間における少なくとも1つの層系であって、少なくとも1つの有機光活性層を有する層系とを備える。例えば電荷キャリア輸送層といったさらなる層を、これらの電極間に追加して配置することが可能である。

【0004】

従来技術から公知である有機系太陽電池の構造は、pin又はnip構造からなる(非特許文献1、及び、特許文献1)。pin太陽電池は、基板に続いて設けられる、主に透明電極、p-層、i-層、n-層及び対電極からなり、並びに、nip太陽電池は、基板に続いて設けられる、主に透明電極、n-層、i-層、p-層及び対電極からなる。

【0005】

有機系太陽電池に係る数多くの吸収材料が従来技術から公知である。

特許文献2には、有機化合物であって、可視光の短波スペクトル領域における高い吸収により特徴付けられる有機化合物が開示されている。有機電子部品のためのこの化合物の使用、及び、この化合物の調製方法もまた開示されている。

特許文献3には、有機半導体材料、及び、この有機材料が有機電子部品における機能性要素とされることが可能であって、有機系太陽電池における向上した吸収をもたらす、又は、高い電荷キャリア易動性を示す、有機部品におけるその使用が開示されている。

【0006】

これらの従来技術において開示されている吸収材料は有機光起電力素子(すなわち、有機系太陽電池)における光活性層について好適であるが、これらの吸収材料の吸収特性は、特に、有機光起電力素子(OPV)を従来のケイ素-系太陽電池に対して競合力のあるものとするためには、改善が必要とされるものである。有機光起電力素子の効率は、とり

10

20

30

40

50

わけ、少なくとも1つの光活性層における、有機化合物（すなわち、吸収材料）に係る吸収挙動に依存するものである。ここで、特にタンデム、トリプル又はマルチセルにおいては、異なる波長のフォトン電力の生成に利用することが可能となるために、異なる波長範囲で吸収を示す複数の吸収材料により、高い全吸収、及び、電磁波の利用可能なスペクトルの広い領域における吸収があることが有利である。タンデム、トリプル又はマルチセルにおける個々のセルは、特に0.9～1.1Vの範囲内において、同じ大きさの開回路電圧を有しているべきである。

【0007】

従来技術に係る不利益は、特に可視光の青色/緑色の範囲における吸収材料の吸収特性にあり、0.9V～1.1Vの範囲内に開回路電圧 $U_{oc}$ を有する太陽電池の構築には、高い吸収係数が特に必要とされる。500nm～600nmの範囲内の波長では、有機光起電力素子に好適とされる公知の有機化合物の吸収は不十分である。これは、個々のサブセルは同じ大きさの効率及び開回路電圧を示すものではなく、すなわち、1つのサブセルは他のサブセルよりも低い開回路電圧を供給するものであって、これは、1つのサブセルによる部品の効率に対する寄与が比較的小さいものでしかないことを意味するために、タンデム、トリプル及びマルチセルの構築において特に不利である。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0008】

【文献】国際公開第2011/161108A1号パンフレット

【文献】国際公開第2017/114937A1号パンフレット

【文献】国際公開第2017/114938A1号パンフレット

【非特許文献】

【0009】

【文献】Martin Pfeiffer, "Controlled doping of organic vacuum deposited dye layers: basic and applications", Ph.D. thesis TU-Dresden, 1999

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0010】

本発明は従って、既述の不利益が存在せず、また、特に有機化合物が向上した吸収特性を示す、有機光電子部品において用いられる有機化合物と、少なくとも1種の前記種類の化合物を含む光電子部品と、光電子部品における前記種類の化合物の使用とを提供することを目的とする。

【課題を解決するための手段】

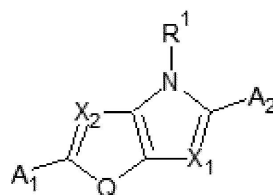
【0011】

上記の目的は、独立請求項の主題によって達成される。有利な構成は、従属請求項によるものである。

【0012】

上記の目的は、特に、一般式Iの化合物

【化1】



I

であって、ここで、

10

20

30

40

50

QはO又はSであり、好ましくはQはSであり；

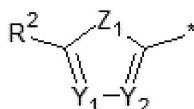
R 1は、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル及びアリアルからなる群から選択され；

X 1及びX 2は、互いに独立して、N又はC - R 4であり；ここで

R 4は、H、ハロゲン、アルコキシ、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アルケニル及びアリアルからなる群から選択され、ここで、Hは、各事例において、置換されていてもよく；

A 1は、式 I a

【化 2】



10

(式中、\*は、一般式 I の化合物に対する結合点を示し；

Z 1は、O、S、Se及びN - R 5からなる群から選択され、ここで、R 5は、H、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル及びアリアルからなる群から選択され；

Y 1はN又はC - R 6であり、ここで、R 6は、H、ハロゲン、アルコキシ、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アルケニル及びアリアルからなる群から選択され、ここで、Hは、各事例において、置換されていてもよく；

20

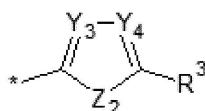
Y 2はN又はC - R 7であり、ここで、R 7は、H、ハロゲン、アルコキシ、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アルケニル及びアリアルからなる群から選択され、ここで、Hは、各事例において、置換されていてもよく；並びに、ここで、R 6及びR 7は、単素環式、又は、複素環式に環構造の形態で互いに結合していてもよく；

R 2は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アミノ、アリアル、ヘテロアリアル、アルケニル、及び、少なくとも1つのC = C二重結合を有する電子求引性アルキル基からなる群から選択され、ここで、Hは、CN又はFにより置換されていてもよい)

を有する基であり、A 2は、式 I b

30

【化 3】



(式中、\*は、一般式 I の化合物に対する結合点を示し；

Z 2は、O、S、Se及びN - R 8からなる群から選択され、ここで、R 8は、H、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル及びアリアルからなる群から選択され；

40

Y 3はN又はC - R 9であり、ここで、R 9は、H、ハロゲン、アルコキシ、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アルケニル及びアリアルからなる群から選択され、ここで、Hは、各事例において、置換されていてもよく；

Y 4はN又はC - R 10であり、ここで、R 10は、H、ハロゲン、アルコキシ、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アルケニル及びアリアルからなる群から選択され、ここで、Hは、各事例において、置換されていてもよく；及び、ここで、R 9及びR 10は、単素環式、又は、複素環式に環構造の形態で互いに結合していてもよく；並びに

R 3は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アミノ、アリアル、ヘテロアリアル、アルケニル、及び、少なくとも1つのC = C二重結合を有する電子求引性アルキル基

50

からなる群から選択され、ここで、HはC N又はFにより置換されていてもよい)を有する基であることを特徴とするものを提供することにより達成される。

【0013】

本発明の好ましい実施形態において、QはSである。

【0014】

本発明は特に、中央フロピロール部分又は中央チエノピロール部分を有する一般式Iの化合物のA - D - A染料に関する。

【0015】

本発明の好ましい実施形態において、X 1及びX 2はHである。

【0016】

本発明の好ましい実施形態において、式I aを有する基、及びノ又は、式I bを有する基は、フラン又はフラン誘導体である。

【0017】

本発明の好ましい実施形態において、式I aを有する基、及びノ又は、式I bを有する基は、チオフェン又はチオフェン誘導体である。

【0018】

本発明の好ましい実施形態において、式I aを有する基、及びノ又は、式I bを有する基は、ピロール又はピロール誘導体である。

【0019】

本発明の好ましい実施形態において、式I aを有する基、及びノ又は、式I bを有する基は、チアゾール又はチアゾール誘導体である。

【0020】

本発明の好ましい実施形態において、式I aを有する基、及びノ又は、式I bを有する基は、チアジアゾール又はチアジアゾール誘導体である。

【0021】

本発明の好ましい実施形態において、式I aを有する基、及びノ又は、式I bを有する基は、オキサゾール又はオキサゾール誘導体である。

【0022】

本発明の好ましい実施形態において、式I aを有する基、及びノ又は、式I bを有する基は、イミダゾール又はイミダゾール誘導体である。

【0023】

本発明の好ましい実施形態において、式I aを有する基、及びノ又は、式I bを有する基は、トリアゾール又はトリアゾール誘導体である。

【0024】

本発明の好ましい実施形態において、式I aを有する基、及びノ又は、式I bを有する基は、オキサジアゾール又はオキサジアゾール誘導体である。

【0025】

本発明の好ましい実施形態において、基A 1、A 2、A 3又はA 4の少なくとも2つは、フラン、チオフェン、ピロール、チアゾール、チアジアゾール、オキサゾール、イミダゾール、トリアゾール若しくはオキサジアゾール、又は、これらの誘導体である。

【0026】

本発明の文脈において、誘導体は、特に、元の化合物を基準として個々の原子又は基が変性又は置換されている基本構造又はラジカルから誘導された化合物を意味すると理解される。

【0027】

本発明の好ましい実施形態において、フラン及びノ又はチオフェン基、特にフラン基は、フロピロール部分又はチエノピロール部分に、特にチエノピロール部分に、及び、フロピロール部分又はチエノピロール部分のピロールのNにおける立体的にかさ高い基、特にイソプロピル、イソブチル、sec - ブチル、t - ブチル、イソペンチル又はフェニルに配置される。これにより、吸収材料の特性が特定の点で改善される。

10

20

30

40

50

## 【0028】

本発明の好ましい実施形態において、中央フロピロール部分又は中央チエノピロール部分、特にチエノピロール部分のピロール環は、さらなる縮合芳香族系を有さない。

## 【0029】

本発明の好ましい実施形態において、R5及びR6はHである。

## 【0030】

本発明の代替的な好ましい実施形態において、一般式Iの化合物は、それぞれR5及びR6が、及び/又は、R9及びR10が一緒になって形成する単素環式5員環若しくは6員環、又は、S、O及びNからなる群から選択される少なくとも1個のヘテロ原子を含有する複素環式5員環若しくは6員環を含み、ここで、5員環若しくは6員環は、さらなる位置で置換されていてもよい。

10

## 【0031】

吸収材料(すなわち吸収体)は、特に、400nmを超える波長範囲における光を吸収する化合物を意味すると理解される。吸収体層は従って、特に、少なくとも1種の吸収材料を含む光電子部品中の層を意味すると理解される。

## 【0032】

吸収スペクトルにおける急勾配の曲線、特に吸収スペクトルの深色領域における急勾配の曲線は、特に吸収スペクトルの変曲点での傾斜角を指すと理解される。吸収スペクトルにおける曲線の傾斜角は、吸収の開始と吸収の第1の境界部との間で生じる変曲点での接線の勾配を介して測定される(Wang et al., "Optical Gaps of Organic Solar Cells as a Reference for Comparing Voltage Losses", Adv. Energy Mater., 2018, 1801352)(図7を参照のこと)。

20

## 【0033】

本発明の好ましい実施形態において、本発明の化合物は、吸収スペクトルにおいて、少なくとも5.6、好ましくは少なくとも5.8、好ましくは少なくとも6、好ましくは少なくとも6.5、好ましくは少なくとも7、好ましくは少なくとも7.5、又は、好ましくは少なくとも8の傾斜角を示す。

## 【0034】

置換は、特に、置換基によるHの置き換えを意味すると理解される。置換基は、特に、Hを除くすべての原子及び原子群であって、好ましくはハロゲン、アルキル基(アルキル基は、直鎖又は分岐鎖であることが可能である)、アミノ基、CN基、アルケニル基、アルキニル基、アルコキシ基、チオアルコキシ基、アリール基又はヘテロアリール基を意味すると理解される。ハロゲンは、特にF、Cl又はBr、好ましくはFを意味すると理解される。

30

## 【0035】

ヘテロ原子、特にヘテロ原子は、特にO、S、Se、Si、B、N又はPからなる群から選択される原子、好ましくはO、S、Se又はNから、特に好ましくはO又はSからなる群から選択される原子を意味すると理解される。

## 【0036】

本発明の好ましい実施形態において、アルキル基中の炭素原子はいずれもヘテロ原子によって置換されていない。

40

## 【0037】

本発明の化合物は、特に、いわゆる小分子に関連する。小分子は、特に、標準圧力(周囲雰囲気気圧)及び室温での固体相中に存在する100~2000g/molの単分散モル質量を有する非高分子有機分子を意味すると理解される。特に、小分子は光活性であり、光活性とは、光が供給された際に、これらの分子が、電荷状態及び/又は偏光状態を変化させることを意味すると理解される。光活性分子は、特に定義された波長範囲内における電磁波の吸収を示し、ここで、吸収された電磁波(すなわち光子)が励起子に転換される。

50

## 【0038】

本発明の化合物は、少なくとも定義された波長範囲内において特に高い吸収係数を示す。本発明の化合物は、特にヘテロ接合を有する供与体 - 受容体系において用いられる。

## 【0039】

本発明の好ましい実施形態において、Y 1、Y 2、Y 3及びY 4は各々、互いに独立して、N、CH、CF、C-CH<sub>3</sub>、C-CF<sub>3</sub>、C-C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>、C-C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>、C-OCH<sub>3</sub>、C-OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>、C-SCH<sub>3</sub>、C-SC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>からなる群から選択される。

## 【0040】

本発明の好ましい実施形態において、本発明の化合物の環式又は直鎖アルキル基は、直鎖又は分岐鎖であり、これらのアルキル基は、好ましくは、直鎖C 1 ~ C 5アルキル基である。

10

## 【0041】

本発明の好ましい実施形態において、位置Y 1、Y 2、Y 3及びY 4の少なくとも1つはNであり、好ましくは、位置Y 1及びY 2の少なくとも一方はNであり、並びに、位置Y 3及びY 4の少なくとも一方はNである。本発明の特に好ましい実施形態において、位置Y 1、Y 2、Y 3及びY 4は、各事例において、Nである。

## 【0042】

本発明の好ましい実施形態において、位置Y 1、Y 2、Y 3及びY 4は、各事例において、CHである。

## 【0043】

本発明の好ましい実施形態において、一般式Iの化合物は、式I aにおける位置Z 1でOを、及び、式I bにおける位置Z 2でOを有する。吸収特性は、特に、従って、これらの位置で異なる原子を有する比較可能な化合物よりもさらに好ましい。

20

## 【0044】

本発明の化合物は、従来技術と比して利点を有する。有利には、本発明の化合物は、可視光の比較的広いスペクトル領域において意外な程に良好な吸収挙動を有し、特に、意外な程に高い吸収は、約500nm ~ 600nmのスペクトル領域において観察された。有利には、可視光の青色 / 緑色領域の波長範囲において向上した吸収を有する吸収材料が提供されている。有利には、本発明の化合物は、深色領域において特に急勾配の吸収曲線を示す。有利には、本発明の化合物は、光活性有機電子部品の製造及び操作において典型的に課される要求を満たすために十分な熱安定性、化学安定性、及び、電子化学安定性を有するものであり、特に、これらの化合物は、減圧下において容易に気化させることが可能である。本発明の化合物は、有利には、0.9 ~ 1.1Vの範囲内、特に0.95V ~ 1.05Vの範囲内に開回路電圧U<sub>oc</sub>を有する太陽電池の構築を可能とする。

30

## 【0045】

本発明の一発展例において、R 1は、エチル、プロピル、ブチル、分岐アルキル及びアリアルからなる群から選択され、好ましくは、イソプロピル、イソブチル、sec-ブチル、イソペンチル、t-ブチル及びフェニルからなる群から選択され；並びに、ここで、Z 1及びZ 2は各々、互いに独立して、O又はSである。

40

## 【0046】

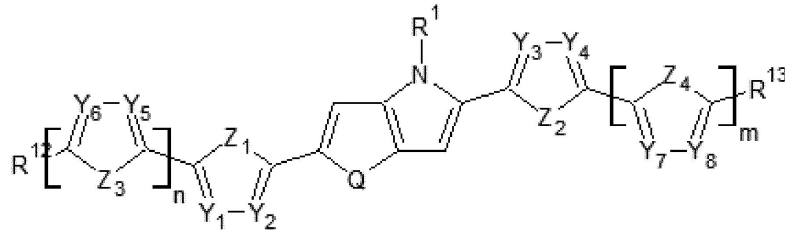
特に好ましい実施形態において、Z 2はOである。これにより、特定の点で本発明の有利な効果が発現される。

## 【0047】

本発明の一発展例において、化合物は、一般式IIの化合物

50

## 【化4】



II

(式中、nは0、1又は2であり、及び、mは、0、1又は2であり；

10

QはO又はSであり、好ましくはQはSであり；

Z<sub>3</sub>及びZ<sub>4</sub>は、各々互いに独立して、O、S、Se及びN-R<sub>11</sub>からなる群から選択され、ここで、R<sub>11</sub>は、H、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル及びアリールからなる群から選択され；

R<sub>12</sub>は、H、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル、アルケニル、及び、少なくとも1つのC=C二重結合を有する電子求引性アルキル基からなる群から選択され、ここで、Hは、CN又はFにより置換されていてもよく；

R<sub>13</sub>は、H、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル、アルケニル、及び、少なくとも1つのC=C二重結合を有する電子求引性アルキル基からなる群から選択され、ここで、Hは、CN又はFにより置換されていてもよく；

20

Y<sub>5</sub>はN又はC-R<sub>14</sub>であり、ここで、R<sub>14</sub>は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル及びアルケニルからなる群から選択され、ここで、Hは、各事例において、置換されていてもよく、及び、ここで、Y<sub>5</sub>は、好ましくは、N、CH又はCFであり；

Y<sub>6</sub>はN又はC-R<sub>15</sub>であり、ここで、R<sub>15</sub>は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル及びアルケニルからなる群から選択され、ここで、Hは、各事例において、置換されていてもよく、及び、ここで、Y<sub>6</sub>は、好ましくは、N、CH又はCFであり；

Y<sub>7</sub>はN又はC-R<sub>16</sub>であり、ここで、R<sub>16</sub>は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル及びアルケニルからなる群から選択され、ここで、Hは、各事例において、置換されていてもよく、及び、ここで、Y<sub>7</sub>は、好ましくは、N、CH又はCFであり；

Y<sub>8</sub>はN又はC-R<sub>17</sub>であり、ここで、R<sub>17</sub>は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル及びアルケニルからなる群から選択され、ここで、Hは、各事例において、置換されていてもよく、及び、ここで、Y<sub>8</sub>は、好ましくは、N、CH又はCFであり；並びに

30

ここで、R<sub>14</sub>及びR<sub>15</sub>、及び/又は、R<sub>16</sub>及びR<sub>17</sub>はそれぞれ、一緒になって、単素環式5員環若しくは6員環、又は、S、O及びNからなる群から選択される少なくとも1個のヘテロ原子を含有する複素環式5員環若しくは6員環を形成していてもよい)である。

## 【0048】

本発明の好ましい実施形態において、Z<sub>3</sub>及びZ<sub>4</sub>は、互いに独立して、O又はSである。

## 【0049】

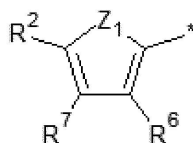
40

本発明の好ましい実施形態において、一般式IIの化合物は、位置Z<sub>1</sub>にO、及び、位置Z<sub>2</sub>にO、及び、位置Z<sub>3</sub>にO、及び/又は、位置Z<sub>4</sub>にOを有する。

## 【0050】

本発明の一発展例において、A<sub>1</sub>は、式IIa

## 【化5】



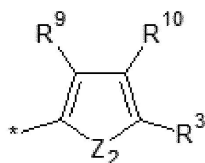
50

(式中、R 6 は、H、ハロゲン、アルコキシ、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アルケニル及びアリールからなる群から選択され、ここで、H は、各事例において、置換されていてもよく；

R 7 は、H、ハロゲン、アルコキシ、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アルケニル及びアリールからなる群から選択され、ここで、H は、各事例において、置換されていてもよく；並びに、ここで、R 6 及び R 7 は、一緒になって、単素環式 5 員環若しくは 6 員環、又は、S、O 及び N からなる群から選択される少なくとも 1 個のヘテロ原子を含有する複素環式 5 員環若しくは 6 員環を形成していてもよい)

を有する基であり、並びに、A 2 は、式 I I b

【化 6】



(式中、R 9 は、H、ハロゲン、アルコキシ、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アルケニル及びアリールからなる群から選択され、ここで、H は、各事例において、置換されていてもよく；

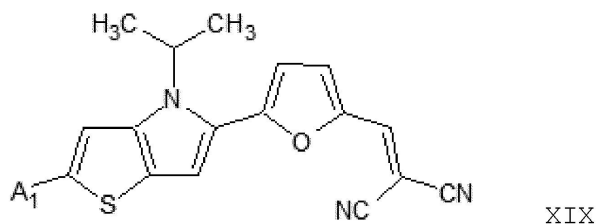
R 1 0 は、H、ハロゲン、アルコキシ、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アルケニル及びアリールからなる群から選択され、ここで、H は、各事例において、置換されていてもよく；並びに、ここで、R 9 及び R 1 0 は、一緒になって、単素環式 5 員環若しくは 6 員環、又は、S、O 及び N からなる群から選択される少なくとも 1 個のヘテロ原子を含有する複素環式 5 員環若しくは 6 員環を形成していてもよい)

を有する基である。

【0051】

本発明の特に好ましい実施形態において、化合物は、一般式 X I X の化合物

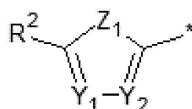
【化 7】



であって、

A 1 は、式 I a

【化 8】



(式中、\* は、一般式 I の化合物に対する結合点を示し；

Z 1 は、O、S、Se 及び N - R 5 からなる群から選択され、ここで、R 5 は、H、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル及びアリールからなる群から選択され；

Y 1 は N 又は C - R 6 であり、ここで、R 6 は、H、ハロゲン、アルコキシ、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アルケニル及びアリールからなる群から選択され、ここで、H は、各事例において、置換されていてもよく；

10

20

30

40

50

Y 2 は N 又は C - R 7 であり、ここで、R 7 は、H、ハロゲン、アルコキシ、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アルケニル及びアリールからなる群から選択され、ここで、H は、各事例において、置換されていてもよく；並びに、ここで、R 6 及び R 7 は、単素環式、又は、複素環式に環構造の形態で互いに結合していてもよく；R 2 は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アミノ、アリール、ヘテロアリール、アルケニル、及び、少なくとも 1 つの C = C 二重結合を有する電子求引性アルキル基からなる群から選択され、ここで、H は C N 又は F により置換されていてもよい) を有する基であることを特徴とする。

【0052】

本発明の好ましい実施形態において、一般式 X I X の化合物の位置 Y 1 及び Y 2 は、各事例において C H である。

【0053】

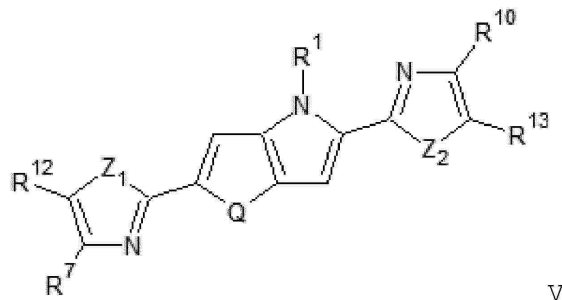
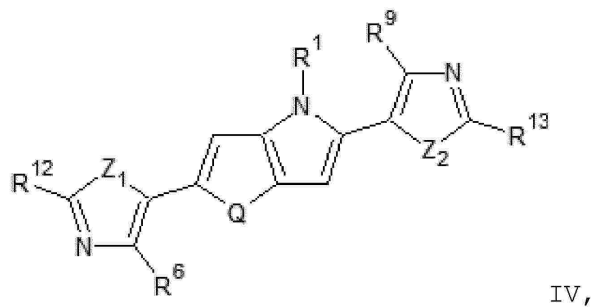
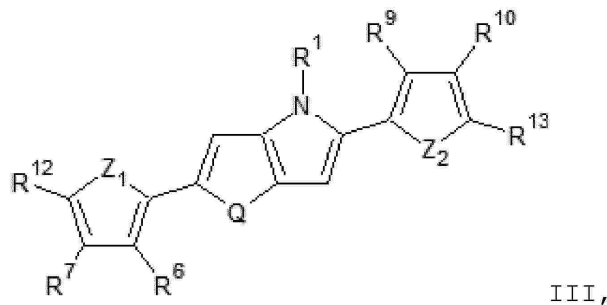
本発明の好ましい実施形態において、一般式 X I X の化合物は、式 I a における位置 Z 1 に O を有する。

【0054】

本発明の好ましい実施形態において、一般式 X I X の化合物の位置 Y 1 又は Y 2 の少なくとも一方は N であり、好ましくは、位置 Y 1 及び Y 2 は N である。

【0055】

本発明の一発展例において、化合物は、一般式 I I I、I V 及び / 又は V の化合物【化 9】



(式中、Q は O 又は S であり、好ましくは Q は S であり；

Z 1 及び Z 2 は各々、互いに独立して、O 又は S であり、好ましくは Z 2 は O であり；

R 6 は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル及びアルケニルからなる群から選択され、

10

20

30

40

50

ここで、Hは、各事例において、置換されていてもよく；  
 R 7は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル及びアルケニルからなる群から選択され、  
 ここで、Hは、各事例において、置換されていてもよく；並びに、ここで、R 6及びR 7  
 は、一緒になって、単素環式5員環若しくは6員環、又は、S、O及びNからなる群から  
 選択される少なくとも1個のヘテロ原子を含有する複素環式5員環若しくは6員環を形成  
 していてもよく；

R 9は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル及びアルケニルからなる群から選択され、  
 ここで、Hは、各事例において、置換されていてもよく；

R 10は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル及びアルケニルからなる群から選択され、  
 ここで、Hは、各事例において、置換されていてもよく；並びに、ここで、R 9及びR  
 10は、一緒になって、単素環式5員環若しくは6員環、又は、S、O及びNからなる群  
 から選択される少なくとも1個のヘテロ原子を含有する複素環式5員環若しくは6員環を  
 形成していてもよく；

R 12は、H、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル、アル  
 ケニル、及び、少なくとも1つのC = C二重結合を有する電子求引性アルキル基からなる  
 群から選択され、ここで、Hは、CN又はFにより置換されていてもよく；並びに

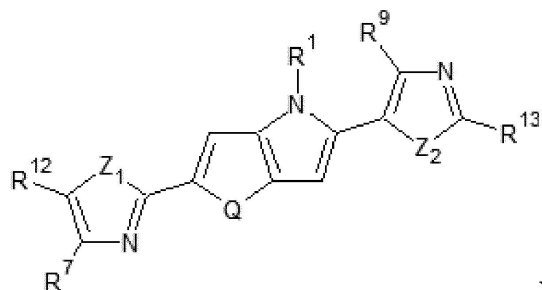
R 13は、H、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル、アル  
 ケニル、及び、少なくとも1つのC = C二重結合を有する電子求引性アルキル基からなる  
 群から選択され、ここで、HはCN又はFにより置換されていてもよい)

である。

【0056】

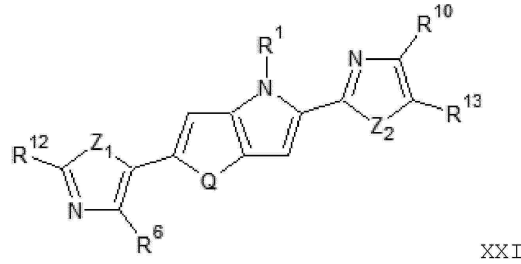
本発明の好ましい実施形態において、化合物は、一般式

【化10】

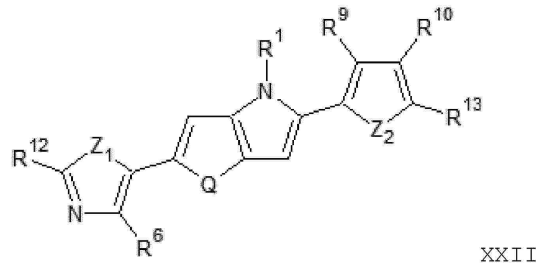


XX

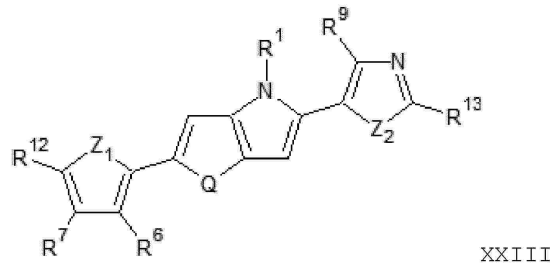
## 【化 1 1】



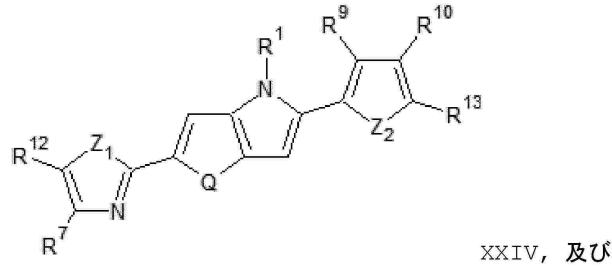
10



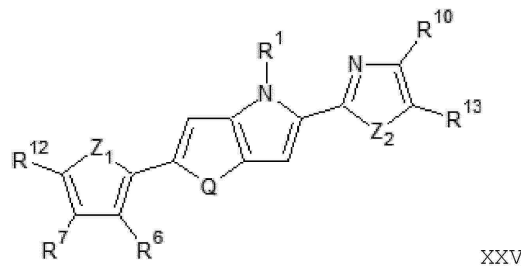
20



30



40



(式中、QはO又はSであり、好ましくはQはSであり；  
 Z1及びZ2は各々、互いに独立して、O又はSであり、好ましくはZ2はOであり；  
 R6は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル及びアルケニルからなる群から選択され、  
 ここで、Hは、各事例において、置換されていてもよく；  
 R7は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル及びアルケニルからなる群から選択され、  
 ここで、Hは、各事例において、置換されていてもよく；並びに、ここで、R6及びR7  
 は、一緒になって、単素環式5員環若しくは6員環、又は、S、O及びNからなる群から  
 選択される少なくとも1個のヘテロ原子を含有する複素環式5員環若しくは6員環を形成  
 していてもよく；

50

R 9 は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル及びアルケニルからなる群から選択され、ここで、Hは、各事例において、置換されていてもよく；

R 1 0 は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル及びアルケニルからなる群から選択され、ここで、Hは、各事例において、置換されていてもよく；並びに、ここで、R 9 及び R 1 0 は、一緒になって、単素環式 5 員環若しくは 6 員環、又は、S、O 及び N からなる群から選択される少なくとも 1 個のヘテロ原子を含有する複素環式 5 員環若しくは 6 員環を形成していてもよく；

R 1 2 は、H、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル、アルケニル、及び、少なくとも 1 つの C = C 二重結合を有する電子求引性アルキル基からなる群から選択され、ここで、Hは、CN 又は F により置換されていてもよく；並びに

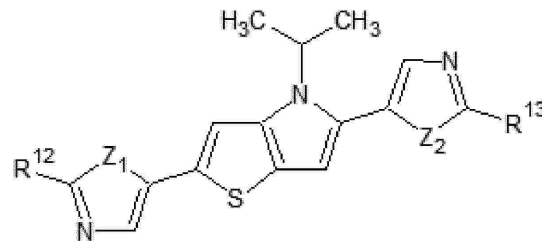
R 1 3 は、H、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル、アルケニル、及び、少なくとも 1 つの C = C 二重結合を有する電子求引性アルキル基からなる群から選択され、ここで、HはCN 又は F により置換されていてもよい)

から選択される化合物である。

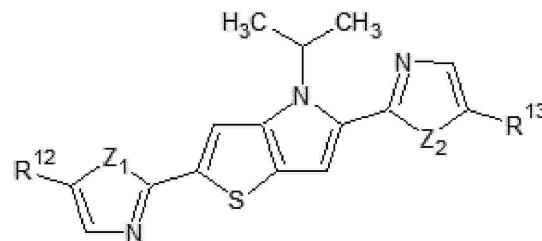
【 0 0 5 7 】

本発明の好ましい実施形態において、化合物は、一般式 V I I 及び V I I I の化合物

【 化 1 2 】



VII



VIII

(式中、Z 1 及び Z 2 は各々、互いに独立して、O 又は S であり、

R 1 2 は、H、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル、アルケニル、及び、少なくとも 1 つの C = C 二重結合を有する電子求引性アルキル基からなる群から選択され、ここで、Hは、CN 又は F により置換されていてもよく；並びに

R 1 3 は、H、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル、アルケニル、及び、少なくとも 1 つの C = C 二重結合を有する電子求引性アルキル基からなる群から選択され、ここで、HはCN 又は F により置換されていてもよい)

である。

【 0 0 5 8 】

本発明の一発展例において、R 2 及び R 3、又は、R 1 2 及び R 1 3 は各々、互いに独立して

10

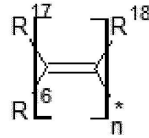
20

30

40

50

## 【化 1 3】



(式中、nは、1、2又は3であり、ここで、\*は基R2、R3、R12及び/又はR13の結合点を示し；

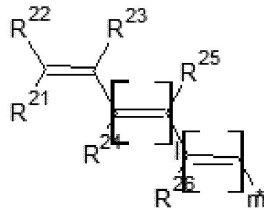
R16、R17及びR18は各々、互いに独立して、H、ハロゲン、CN、COO-アルキル、アルキル及びアルケニルからなる群から選択されるが、ただし、R16及びR17は共にHではなく、R16及びR17は、好ましくはCNである)である。これにより、特定の点で本発明の有利な効果を実現される。

10

## 【0059】

本発明の好ましい実施形態において、R2及び/又はR3、又は、R12及び/又はR13は、各々互いに独立して

## 【化 1 4】



20

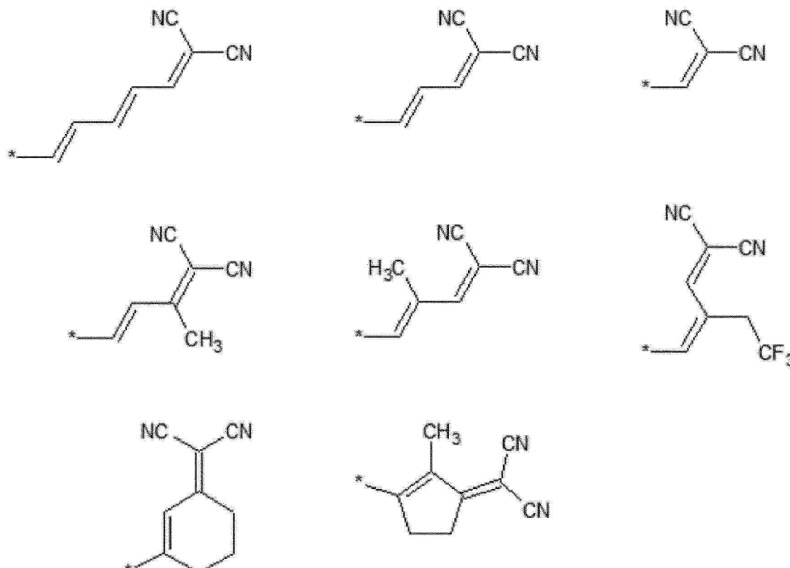
(式中、mは、0、1又は2であり、及び、lは、0、1又は2であり；ここで、\*は基R2、R3、R12及び/又はR13の結合点を示し；R21、R22、R23、R24、R25及びR26は各々、互いに独立して、H、ハロゲン、CN、COO-アルキル及びアルケニルからなる群から選択され、ただし、R21及びR22は共にHではなく、R21及びR22は、好ましくはCNである)である。基R2及び/若しくはR3、又は、R12及び/若しくはR13における特に良好な受容体効果は、好ましくは、多数のCN基で達成可能である。

30

## 【0060】

本発明の一発展例において、R2及びR3、又は、R12及びR13は各々、互いに独立して：

## 【化 1 5】



40

50

(式中、\*は、基 R 2、R 3、R 1 2 及び / 又は R 1 3 の結合点を示し、ここで、CN は F によって置き換えられていても良く、並びに、ここで、R 2 及び R 3、又は、R 1 2 及び R 1 3 は、好ましくは、同一である)

からなる群から選択される。

【0061】

本発明の一発展例において、R 6 及び R 7 は H であり、R 9 及び R 1 0 は H であり、並びに、Z 2 は O であり；ここで、Z 1 及び Z 2 は、好ましくは O である。これにより、特定の点で本発明の有利な効果が実現される。

【0062】

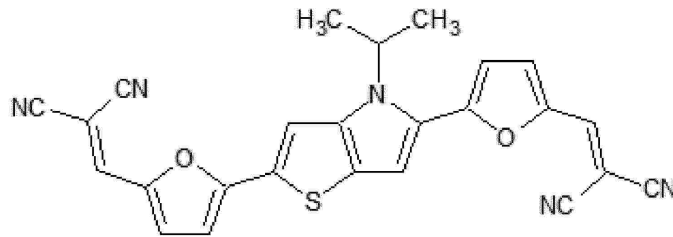
本発明の好ましい実施形態において、R 4 は H であり、R 6 及び R 7 は H であり、及び / 又は、R 9 及び R 1 0 は H であり、並びに、Z 1 及び Z 2 は O である。

10

【0063】

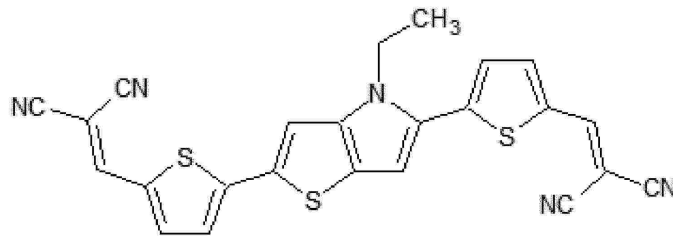
本発明の一発展例において、化合物は：

【化16】



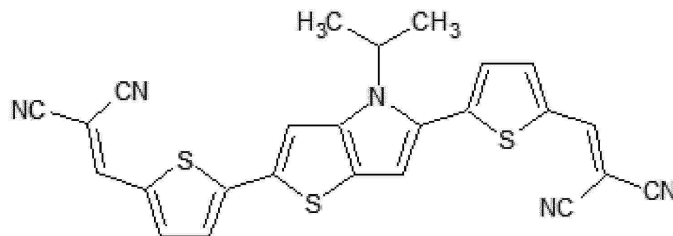
20

F3



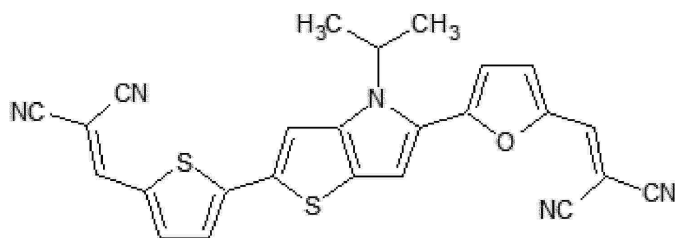
30

F4



40

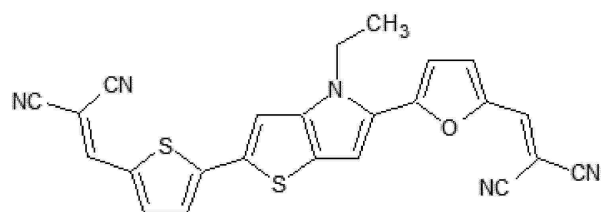
F5



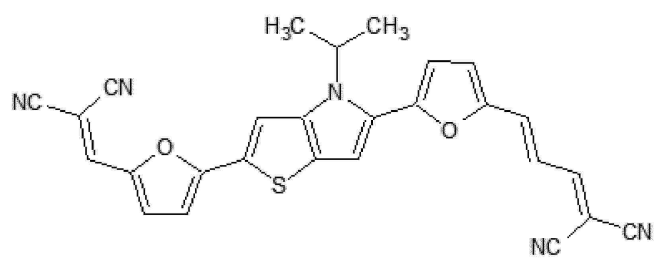
50

## 【化 17】

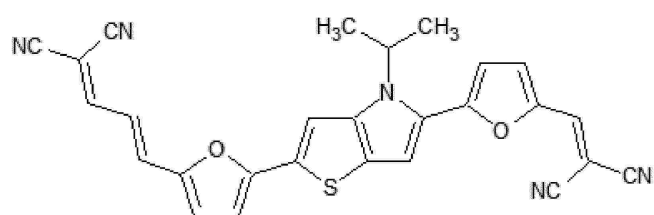
F6



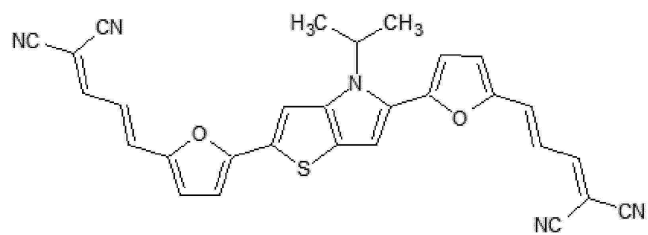
F7



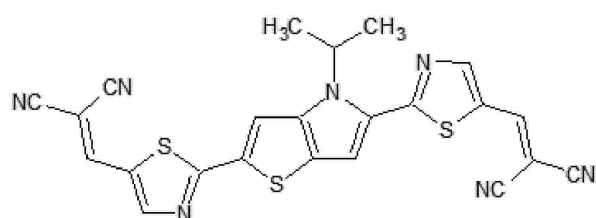
F8



F9



F10



10

20

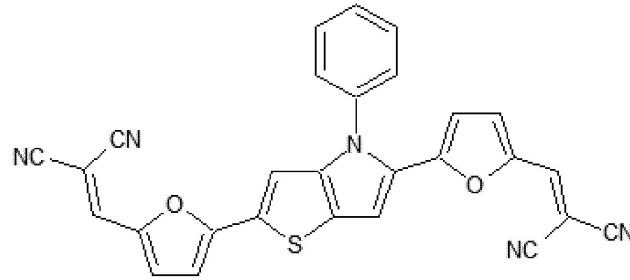
30

40

50

## 【化 1 8】

F11, 及び



10

F12

からなる群から選択される。

## 【0064】

本発明の好ましい実施形態において、R<sub>2</sub> 及び / 若しくは R<sub>3</sub>、又は、R<sub>12</sub> 及び / 若しくは R<sub>13</sub> は、少なくとも2つの C=C 二重結合を有する。

## 【0065】

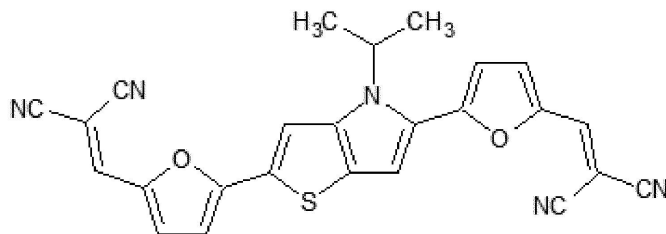
本発明の一発展例において、基 A<sub>1</sub> は基 A<sub>2</sub> と同じである。

20

## 【0066】

本発明の特に好ましい実施形態において、化合物は、化合物 F<sub>3</sub>

## 【化 1 9】



F3

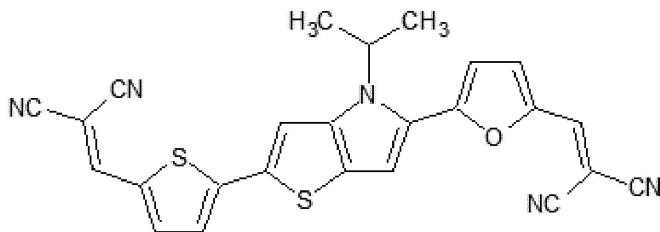
30

である。この化合物において、有利な吸収特性は特に高いレベルで実現される。

## 【0067】

本発明の特に好ましい実施形態において、化合物は化合物 F<sub>6</sub>

## 【化 2 0】



F6

40

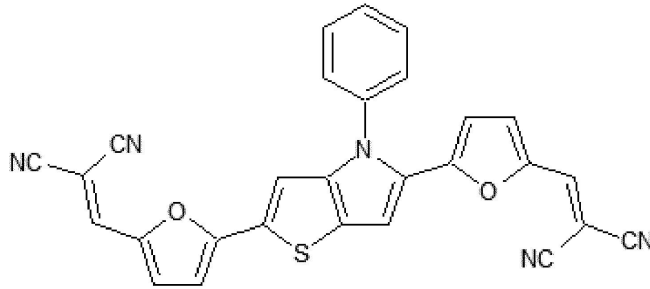
である。この化合物において、有利な吸収特性は特に高いレベルで実現される。

## 【0068】

本発明の特に好ましい実施形態において、化合物は化合物 F<sub>12</sub>

50

## 【化 2 1】



F12

10

である。この化合物において、有利な吸収特性は特に高いレベルで実現される。

## 【0069】

有機シングル又はタンデムセルは従来技術から公知である。独国特許出願公開第102004014046A1号明細書には、光活性部品、特に、交互に積層された1つ以上のp i、n i及び/又はp i nダイオード有機層からなる太陽電池が開示されている。国際公開第2011161108A1号パンフレットには、電極及び対電極を有する光活性部品が開示されており、ここでは、少なくとも1つの有機層系がこれらの電極間に配置されており、少なくとも2つの光活性層系を有し、及び、これらの光活性層系間に、少なくとも2つの同一の電荷キャリアタイプの異なる輸送層系を有する。輸送層系の一方はエネルギー的に2つの光活性層系の一方と適合すると共に、他方の輸送層系は透明である。

20

## 【0070】

本発明の目的はまた、少なくとも1種の本発明の化合物であって、特に上記の例示的实施形態の一つに係るものを含む光電子部品を提供することにより達成されている。この光電子部品については、特に、本発明の化合物と関連して既に明らかにされている利点もたらされる。本光電子部品は第1の電極、第2の電極、及び、層系を備え、層系は、第1の電極と第2の電極との間に配置されており、層系の少なくとも1つの層が少なくとも1種の本発明の化合物を含むことを特徴とする。

## 【0071】

有機光電子部品は、特に有機導電材料又は半導体材料を含む部品であって、特にトランジスタ、有機発光部品、有機光起電力素子(OPV)、特に有機系太陽電池又は光検出器を意味すると理解される。少なくとも1種の本発明の化合物を含む有機光起電力電池では、可視光スペクトルの特に効率的な利用が可能である。

30

## 【0072】

有機光起電力素子(OPV)は、特に光起電力素子、特に、少なくとも1つの有機光活性層であって、少なくとも1種の本発明の化合物を含む有機光活性層を有する太陽電池を意味すると理解される。有機光起電力素子は、光電効果を利用することにより、特に可視光波長範囲内における電磁波の電流への転換が可能である。

## 【0073】

本発明の一発展例において、光電子部品は、有機光電子部品、好ましくは有機系太陽電池、OFET、OLED又は有機光検出器である。

40

## 【0074】

本発明の一発展例において、層系は、少なくとも1つの光活性層、好ましくは吸収体層を有し、ここで、少なくとも1つの光活性層は少なくとも1種の本発明の化合物を含む。

## 【0075】

有機電子部品は、特に電極及び対電極を備え、この電極間に有機光活性層が配置されている。有機光活性層は、特に、励起子(電子-正孔対)が、可視光、UV放射線及び/又はIR放射線の照射によって形成される光活性層である。有機材料は、印刷され、貼付され、コーティングされ、蒸着され、又は、そうでなければ、他の方法で、箔上に、薄膜又は小体積の形態で適用される。ガラス、セラミック又は半導体基板において電子機器にも

50

用いられるすべてのプロセスを、薄層の製造に同様に用いることが可能である。有機光活性層は、光電子部品に重要な機能、特に、正孔の輸送（p型伝導性）又は電子の輸送（n型伝導性）などの電荷キャリア輸送機能を有する。

【0076】

本発明の一発展例において、層系は、少なくとも2つの光活性層、好ましくは少なくとも3つの光活性層、又は、好ましくは少なくとも4つの光活性層を有し、光活性層は、好ましくは吸収体層である。本発明の好ましい実施形態において、少なくとも1つの光活性層は、第1の電極と第2の電極との間に配置される。

【0077】

本発明の好ましい実施形態において、有機系太陽電池は、少なくとも1種の有機受容体材料と接触している少なくとも1種の有機供与体材料を含む光活性層を有し、供与体材料及び受容体材料は供与体-受容体ヘテロ接合、特に、いわゆるバルクヘテロ接合（BHJ）を形成するものであり、ここで、光活性層は、少なくとも1種の本発明の化合物を含む。

10

【0078】

本発明の好ましい実施形態において、光電子部品は、少なくとも1つのさらなる層、好ましくは少なくとも1つの電荷輸送層、特に電子輸送層及び/又は正孔輸送層を含む。

【0079】

本発明の好ましい実施形態において、少なくとも1つの電荷輸送層、特に少なくとも1つの電子輸送層及び/又は少なくとも1つの正孔輸送層は、少なくとも1種の本発明の化合物を含む。

20

【0080】

本発明の好ましい実施形態において、光電子部品は基板を備え、第1の電極又は第2の電極が基板上に設けられ、特に、光電子部品の電極の一方を基板に直接的適用することが可能であり、層系は第1の電極と第2の電極との間に配置される。

【0081】

本発明の好ましい実施形態において、有機系太陽電池は、シングル、タンデム、トリプル、クアドラブル、又は、他のマルチセルである。

【0082】

タンデムセルは、特に、2種の機能性セルが、好ましくは第1の電極と第2の電極との間において、空間的に交互に重ねられて直列に接続されていることを意味すると理解され、ここで、1つ以上の中間層がこれらのセル間に配置されていてもよい。従って、トリプル、クアドラブル又は他のマルチセルは、3種以上の機能性セルが空間的に相互に重ねられて直列に接続されていることを意味すると理解され、ここで、中間層がこれらのセル間に配置されていてもよい。

30

【0083】

本発明の一発展例において、光活性層は、少なくとも1種の本発明の化合物と少なくとも1種のさらなる化合物との混合層として、又は、少なくとも1種の本発明の化合物と少なくとも2種のさらなる化合物との混合層として形成され、化合物は吸収材料である。

【0084】

本発明の好ましい実施形態において、光電子部品は、nip、ni、ip、pnip、pni、pip、nipn、nin、ipn、pnipn若しくはpipnセルとして形成され、又は、nip、ni、ip、pnip、pni、pip、nipn、nin、ipn、pnipn若しくはpipnセルの組み合わせとして形成される。

40

【0085】

本発明の特に好ましい実施形態において、光電子部品は、mipセルとして形成され、又は、mipセルと、nip、ni、ip、pnip、pni、pip、nipn、nin、ipn、pnipn若しくはpipnセルとの組み合わせとして形成される。

【0086】

i-層は、特に真性アンドープ層を意味すると理解される。ここでは、1つ以上のi-層は、1種の材料（平面ヘテロ接合、PHJ）、又は、そうでなければ、相互貫入ネット

50

ワークを含む 2 種以上の材料の混合物（バルクヘテロ接合、BHJ）から構成され得る。

【0087】

好ましい実施形態において、本発明の化合物、及び/又は、少なくとも 1 種の本発明の化合物を含む層は、真空処理、気相成長又は溶剤処理により、特に好ましくは真空処理により付着させることが可能である。

【0088】

本発明の目的はまた、特に上記の例示的实施形態の一つに従って、光電子部品、好ましくは有機光電子部品における本発明の化合物の使用を提供することにより達成される。光電子部品における本発明の化合物の使用により、特に、本発明の化合物及び少なくとも 1 種の本発明の化合物を含む光電子部品と関連して既に明らかにされている利点がもたらされる。

10

【0089】

本発明の好ましい実施形態において、光電子部品は、有機光電子部品、好ましくは有機系太陽電池である。

【0090】

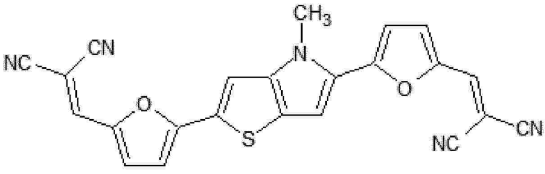
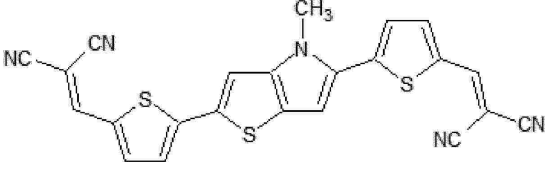
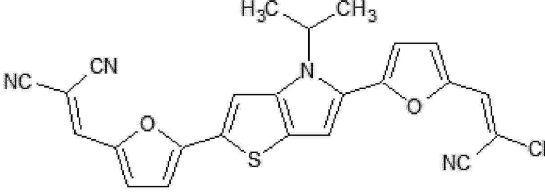
本発明の化合物及び本発明のものではない化合物（F1 及び F2）のいくつかの例示的实施形態を、それぞれの光学特性と共に以下に示す。表 1 は、これらの化合物の融点及び吸収極大（溶剤（SO）中における nm 及び eV）の概略を示す。スペクトルデータは、石英ガラス上における 30 nm の厚さを有する真空蒸着層に関するものである。表 1 に列挙されている化合物 F3 及び F12 の関連する吸収スペクトルを図 3 及び 4 に示し、並び

20

【0091】

【表 1 - 1】

表 1

No.	構造	m.p. /°C <sup>a</sup>	λ 最大 (SO)/nm <sup>b</sup>	λ 最大 (SO)/eV <sup>b</sup>
F1		約 370°C	562 <sup>c</sup>	2.21 <sup>c</sup>
F2		349	555 <sup>b</sup>	2.23 <sup>b</sup>
F3		356	569 <sup>b</sup>	2.18 <sup>b</sup>

30

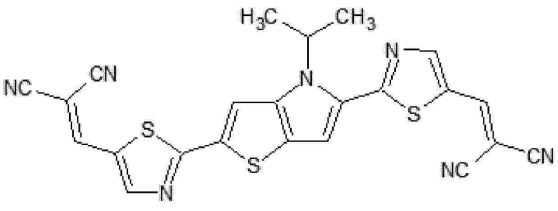
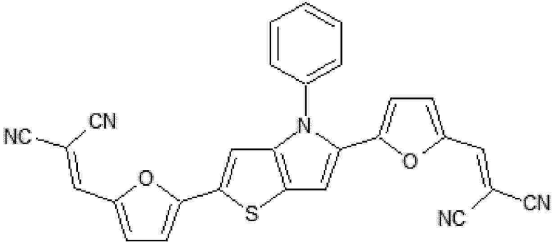
40

【0092】

50



【表 1 - 3】

No.	構造	m.p. /°C <sup>a</sup>	λ 最大 (SO)/nm <sup>b</sup>	λ 最大 (SO)/eV <sup>b</sup>
F11		314	534 <sup>b</sup>	2.32 <sup>b</sup>
F12		291	555 <sup>b</sup>	2.23 <sup>b</sup>

<sup>a</sup> DSC (動的示差熱測定: dynamic differential calorimetry)開始

<sup>b</sup> ジクロロメタン中

## 【0094】

光学特性を実験的に測定した。吸収極大 最大は、測光器を用いてキュベット中におけるジクロロメタン中の希釈溶液で測定した。記載されているすべての化合物の計測した吸収極大は、534 ~ 597 nmの範囲内であった。

## 【0095】

表 2 は、本発明の化合物 F 3、F 6 及び F 1 2、並びに、比較化合物 F 1 の種々のパラメータを示す。開回路電圧  $U_{oc}$ 、短絡電流  $J_{sc}$  及び曲線因子  $FF$  のパラメータは、各事例において、太陽電池の同一の構造に関連する。

## 【0096】

化合物 (すなわち、有機光電子部品における吸収材料としてのその使用) を調べるために、電流 - 電圧曲線を以下の構造を有する BHJ セルにおいて計測した: ITO 膜付ガラス / C60 (15 nm) / 吸収材料: C60 (30 nm、3:2、50) / BPAPF (10 nm) / BPAPF:NDP9 (30 nm、10 重量% NDP9) / NDP9 (1 nm) / Al (100 nm)、AM1.5 照射下 (AM = エアマス; AM = 1.5、このスペクトルにおいて、全放射パワーは  $1000 \text{ W/m}^2$ ; ソーラーモジュールの計測に係る標準値として AM = 1.5)、光活性層はバルクヘテロ接合 (BHJ) である。ITO (インジウム錫酸化物) 製の透明カバー端子がガラス基板に適用されている。ここで、ITO は電極とされ、及び、隣接するフラーレン C60 は電子輸送層 (ETL) とされ、電子受容体材料及びそれぞれ化合物としての光活性 C60 層がこれに隣接し、これに、正孔輸送層 (HTL) としての BPAPF (9,9-ビス[4-(N,N-ビス-ピフェニル-4-イル-アミノ)フェニル]-9H-フルオレン)、並びに、NDP9 (Novaled AG) がドーブされた BPAPF が続き、これに、アルミニウム製の電極が続く。

## 【0097】

中央チエノピロール部分又は中央フロピロール部分ピロールにおけるフラン基又はチオフェン基 (特にフラン基) と相互作用する、中央チエノピロール部分又は中央フロピロール部分 (特に中央チエノピロール部分) を有し、並びに、中央チエノピロール部分又は中央フロピロール部分のピロールの N における立体的にかさ高い基を有する、本発明の化合

10

20

30

40

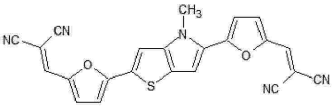
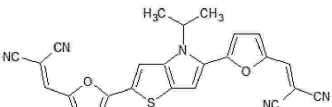
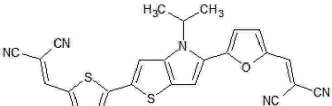
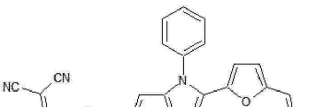
50

物の有利な技術的効果を、比較化合物 F 1 と比較して、化合物 F 3、F 6 及び F 1 2 を参照して、表 2 において以下に一例として例示する。化合物 F 3 及び F 1 2 に係る実験データを図 3 及び 4 に示す。

【 0 0 9 8 】

【表 2】

表 2

物資	傾斜角	Uoc [V]	Jsc/EQE [mA/cm <sup>2</sup> ]	FF [%]
F1 	2.75	0.81	7.5	47.0
F3 	9.72	0.91	15.1	68.9
F6 	5.76			
F12 	5.9	0.97	10.3	46.6

【 0 0 9 9 】

本発明の化合物の特に有利な特性が、同等の太陽電池構造において、開回路電圧 U o c、短絡電流 J s c 及び曲線因子 F F といったパラメータにおいても実証されている。本発明の化合物は、向上した吸収特性を有するのみならず、好適な電荷 - 輸送特性をも有する。電荷 - 輸送特性及び吸収特性に応じて、良好な曲線因子を有する高い光電流を達成することが可能である。これにより、特に、タンデム、トリプル、クアドラプル又はマルチ太陽電池のために、光活性層の特に良好な組み合わせを製造可能となる

【 0 1 0 0 】

特に好ましい実施形態において、本発明の化合物は、中央チエノピロール部分のピロールにフラン環を有する中央チエノピロール部分を、中央チエノピロール部分のピロール環の N における立体的にかさ高い基と一緒に有するものであり；化合物 F 3 及び F 6 が表 2 に一例として示されている。

【 0 1 0 1 】

図面を参照することにより、本明細書中以下において、本発明をより詳細に明らかにする。図は以下のとおりである。

【図面の簡単な説明】

【 0 1 0 2 】

10

20

30

40

50

【図 1】図 1 は、本発明の化合物を合成するための合成スキームの例示的实施形態を示す。

【図 2】図 2 は、光電子部品の例示的实施形態の概略図を断面で示す。

【図 3】図 3 は、有機系太陽電池の形態の有機光電子部品において計測した、化合物 F 3 の吸収スペクトル、電流 - 電圧曲線、スペクトル外部量子収量、及び、化合物 F 3 を含む B H J セルの曲線因子のグラフ表示を示す。

【図 4】図 4 は、有機系太陽電池の形態の有機光電子部品において計測した、化合物 F 1 2 の吸収スペクトル、電流 - 電圧曲線、スペクトル外部量子収量、及び、化合物 F 1 2 を含む B H J セルの曲線因子のグラフ表示を示す。

【図 5】図 5 は、有機系太陽電池の形態の有機光電子部品において計測した、比較化合物 F 1 の吸収スペクトル、電流 - 電圧曲線、スペクトル外部量子収量、及び、比較化合物 F 1 を含む B H J セルの曲線因子のグラフ表示を示す。

10

【図 6】図 6 は、化合物 F 3 の吸収スペクトルと比較化合物 F 1 との比較に係るグラフ表示を示す。

【発明を実施するための形態】

【0103】

例示的实施形態

図 1 は、本発明の化合物を合成するための合成スキームの例示的实施形態を示す。

【0104】

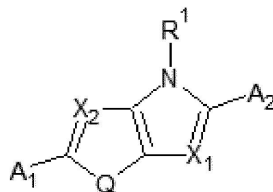
本発明の化合物の調製は従来技術から当業者に公知である。本文脈においては、特に、国際公開第 2017114937A1 号パンフレット、及び、国際公開第 2017114938A1 号パンフレットが参照される。それ故、本発明の化合物は、単純な方法及び良好な収率で入手可能である。本発明の化合物を調製するための一般的な合成を一例として以下に示す。

20

【0105】

一般式 I

【化 2 2】



I

30

を有する本発明の化合物は、

Q は O 又は S であり、好ましくは Q は S であり；

R 1 は、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル及びアリールからなる群から選択され；

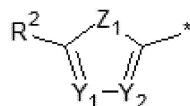
X 1 及び X 2 は、互いに独立して、N 又は C - R 4 であり；ここで

R 4 は、H、ハロゲン、アルコキシ、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アルケニル及びアリールからなる群から選択され、ここで、H は、各事例において、置換されていてもよく；

40

A 1 は、式 I a

【化 2 3】



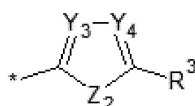
を有する基であり、\* は、一般式 I の化合物に対する結合点を示し；Z 1 は、O、S、S

50

e 及び N - R 5 からなる群から選択され、ここで、R 5 は、H、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル及びアリアルからなる群から選択され； Y 1 は N 又は C - R 6 であり、ここで、R 6 は、H、ハロゲン、アルコキシ、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アルケニル及びアリアルからなる群から選択され、ここで、H は、各事例において、置換されていてもよく； Y 2 は N 又は C - R 7 であり、ここで、R 7 は、H、ハロゲン、アルコキシ、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アルケニル及びアリアルからなる群から選択され、ここで、H は、各事例において、置換されていてもよく；並びに、ここで、R 6 及び R 7 は、単素環式、又は、複素環式に環構造の形態で互いに結合していてもよく； R 2 は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アミノ、アリアル、ヘテロアリアル、アルケニル、及び、少なくとも一つの C = C 二重結合を有する電子求引性アルキル基からなる群から選択され、ここで、H は、C N 又は F により置換されていてもよく； A 2 は、式 I b

10

【化 2 4】



を有する基であり、ここで、\* は、一般式 I の化合物に対する結合点を示し； Z 2 は、O、S、S e 及び N - R 8 からなる群から選択され、ここで、R 8 は、H、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル及びアリアルからなる群から選択され； Y 3 は N 又は C - R 9 であり、ここで、R 9 は、H、ハロゲン、アルコキシ、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アルケニル及びアリアルからなる群から選択され、ここで、H は、各事例において、置換されていてもよく； Y 4 は N 又は C - R 10 であり、ここで、R 10 は、H、ハロゲン、アルコキシ、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アルケニル及びアリアルからなる群から選択され、ここで、H は、各事例において、置換されていてもよく；並びに、ここで、R 9 及び R 10 は、単素環式、又は、複素環式に環構造の形態で互いに結合していてもよく； R 3 は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アミノ、アリアル、ヘテロアリアル、アルケニル、及び、少なくとも一つの C = C 二重結合を有する電子求引性アルキル基からなる群から選択され、ここで、H は C N 又は F により置換されていてもよいことを特徴とする。

20

【0 1 0 6】

特に深色領域において急勾配の吸収が存在する場合、きわめて良好な電荷 - 輸送特性と併せて、向上した吸収特性により、高い光電流を生成することが可能である。これにより、特にタンデム、トリプル、クアドラプル又はマルチセルの製造が可能である。

【0 1 0 7】

本発明の一構成において、R 1 は、エチル、プロピル、ブチル、分岐アルキル及びアリアルから、好ましくはイソプロピル、イソブチル、s e c - ブチル、t - ブチル、イソペンチル及びフェニルからなる群から選択され；並びに、ここで、Z 1 及び Z 2 は各々、互いに独立して、O 又は S であり、好ましくは Z 2 は O である。これにより、特定の点で本発明の有利な効果が実現される。

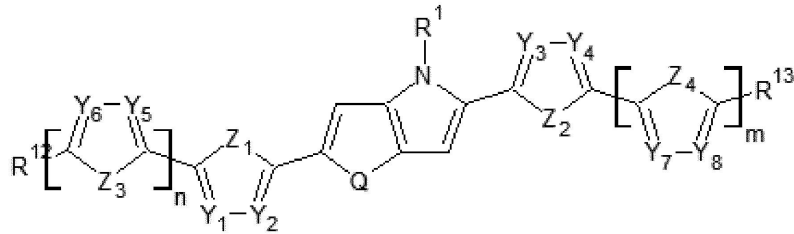
40

【0 1 0 8】

本発明の他の構成において、化合物は、一般式 I I の化合物

50

## 【化 2 5】



であり、ここで、 $n$  は 0、1 又は 2 であり、及び、 $m$  は、0、1 又は 2 であり；  
 $Q$  は O 又は S であり、好ましくは  $Q$  は S であり； $Z_3$  及び  $Z_4$  は、各々互いに独立して、  
O、S、Se 及び N - R<sub>11</sub> からなる群から選択され、ここで、 $R_{11}$  は、H、アルコキシ、  
アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル及びアリールからなる群から選  
択され； $R_{12}$  は、H、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキ  
ル、アルケニル、及び、少なくとも 1 つの C = C 二重結合を有する電子求引性アルキル基  
からなる群から選択され、ここで、H は、CN 又は F により置換されていてもよく；  
 $R_{13}$  は、H、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル、アル  
ケニル、及び、少なくとも 1 つの C = C 二重結合を有する電子求引性アルキル基からなる  
群から選択され、ここで、H は、CN 又は F により置換されていてもよく； $Y_5$  は N 又は  
C - R<sub>14</sub> であり、ここで、 $R_{14}$  は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル及びアルケ  
ニルからなる群から選択され、ここで、H は各事例において置換されていてもよく、こ  
こで、 $Y_5$  は、好ましくは N、CH 又は CF であり； $Y_6$  は N 又は C - R<sub>15</sub> であり、こ  
こで、 $R_{15}$  は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル及びアルケニルからなる群から選  
択され、ここで、H は各事例において置換されていてもよく、ここで、 $Y_6$  は、好ましくは  
N、CH 又は CF であり； $Y_7$  は N 又は C - R<sub>16</sub> であり、ここで、 $R_{16}$  は、H、ハロ  
ゲン、アルコキシ、アルキル及びアルケニルからなる群から選択され、ここで、H は各事  
例において置換されていてもよく、ここで、 $Y_7$  は、好ましくは N、CH 又は CF であり  
； $Y_8$  は N 又は C - R<sub>17</sub> であり、ここで、 $R_{17}$  は、H、ハロゲン、アルコキシ、アル  
キル及びアルケニルからなる群から選択され、ここで、H は各事例において置換されて  
いてもよく、ここで、 $Y_8$  は、好ましくは N、CH 又は CF であり；並びに、ここで、こ  
こで、 $R_{14}$  及び  $R_{15}$ 、及び / 又は、 $R_{16}$  及び  $R_{17}$  はそれぞれ、一緒になって、単素  
環式 5 員環若しくは 6 員環、又は、S、O 及び N からなる群から選択される少なくとも 1  
個のヘテロ原子を含有する複素環式 5 員環若しくは 6 員環を形成していてもよい。

## 【0109】

本発明の他の構成において、 $R_{14}$  及び  $R_{15}$  は一緒になって、及び / 又は、 $R_{16}$  及  
び  $R_{17}$  は一緒になって、単素環式 5 員環若しくは 6 員環、又は、S、O 及び N からなる  
群から選択される少なくとも 1 個のヘテロ原子を含有する複素環式 5 員環若しくは 6 員環  
を形成する。

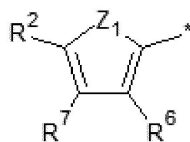
## 【0110】

本発明の他の構成において、 $Z_3$  及び  $Z_4$  は、互いに独立して、O 又は S である。

## 【0111】

本発明の他の構成において、 $A_1$  は、式 I I a

## 【化 2 6】



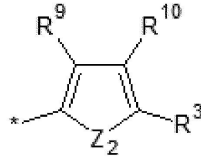
を有する基であり、式中、 $R_6$  は、H、ハロゲン、アルコキシ、分岐若しくは直鎖、環式  
若しくは非環式アルキル、アルケニル及びアリールからなる群から選択され、ここで、H

は、各事例において、置換されていてもよく；

R 7 は、H、ハロゲン、アルコキシ、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アルケニル及びアリアルからなる群から選択され、ここで、H は、各事例において、置換されていてもよく；並びに、ここで、R 6 及び R 7 は、一緒になって、単素環式 5 員環若しくは 6 員環、又は、S、O 及び N からなる群から選択される少なくとも 1 個のヘテロ原子を含有する複素環式 5 員環若しくは 6 員環を形成していてもよく；

並びに、A 2 は、式 I I b

【化 2 7】



10

を有する基であり、式中、R 9 は、H、ハロゲン、アルコキシ、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アルケニル及びアリアルからなる群から選択され、ここで、H は、各事例において、置換されていてもよく；

R 1 0 は、H、ハロゲン、アルコキシ、分岐若しくは直鎖、環式若しくは非環式アルキル、アルケニル及びアリアルからなる群から選択され、ここで、H は、各事例において、置換されていてもよく；並びに、ここで、R 9 及び R 1 0 は、一緒になって、単素環式 5 員環若しくは 6 員環、又は、S、O 及び N からなる群から選択される少なくとも 1 個のヘテロ原子を含有する複素環式 5 員環若しくは 6 員環を形成していてもよい。

20

【0 1 1 2】

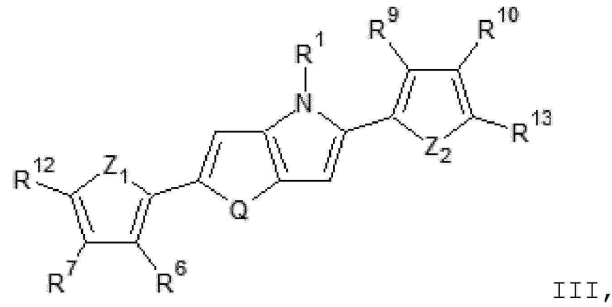
本発明の他の構成において、化合物は、一般式 I I I、I V 及び / 又は V の化合物

30

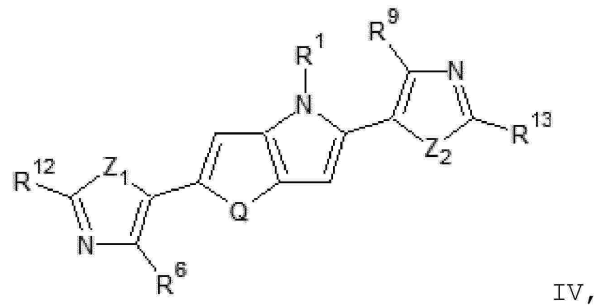
40

50

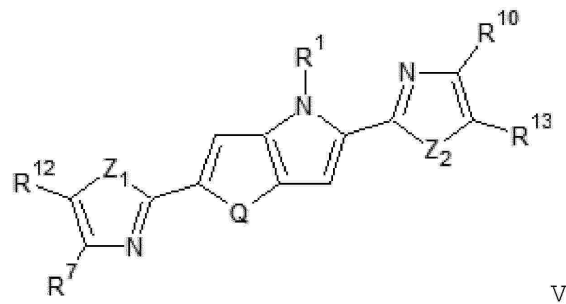
## 【化 2 8】



10



20



であり、式中、QはO又はSであり、好ましくはQはSであり；Z1及びZ2は各々、互いに独立して、O又はSであり、好ましくはZ2はOであり；R6は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル及びアルケニルからなる群から選択され、ここで、Hは、各事例において、置換されていてもよく；

30

R7は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル及びアルケニルからなる群から選択され、ここで、Hは、各事例において、置換されていてもよく；並びに、ここで、R6及びR7は、一緒になって、単素環式5員環若しくは6員環、又は、S、O及びNからなる群から選択される少なくとも1個のヘテロ原子を含有する複素環式5員環若しくは6員環を形成していてもよく；R9は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル及びアルケニルからなる群から選択され、ここで、Hは、各事例において、置換されていてもよく；R10は、H、ハロゲン、アルコキシ、アルキル及びアルケニルからなる群から選択され、ここで、Hは、各事例において、置換されていてもよく；並びに、ここで、R9及びR10は、一緒になって、単素環式5員環若しくは6員環、又は、S、O及びNからなる群から選択される少なくとも1個のヘテロ原子を含有する複素環式5員環若しくは6員環を形成していてもよく；R12は、H、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル、アルケニル、及び、少なくとも1つのC=C二重結合を有する電子求引性アルキル基からなる群から選択され、ここで、Hは、CN又はFにより置換されていてもよく；並びに、R13は、H、アルコキシ、アルキル、フッ素化アルキル、部分フッ素化アルキル、アルケニル、及び、少なくとも1つのC=C二重結合を有する電子求引性アルキル基からなる群から選択され、ここで、HはCN又はFにより置換されていてもよい。

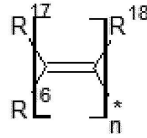
40

## 【0113】

本発明の他の構成において、R2及びR3、又は、R12及びR13は各々、互いに独立して

50

## 【化 2 9】



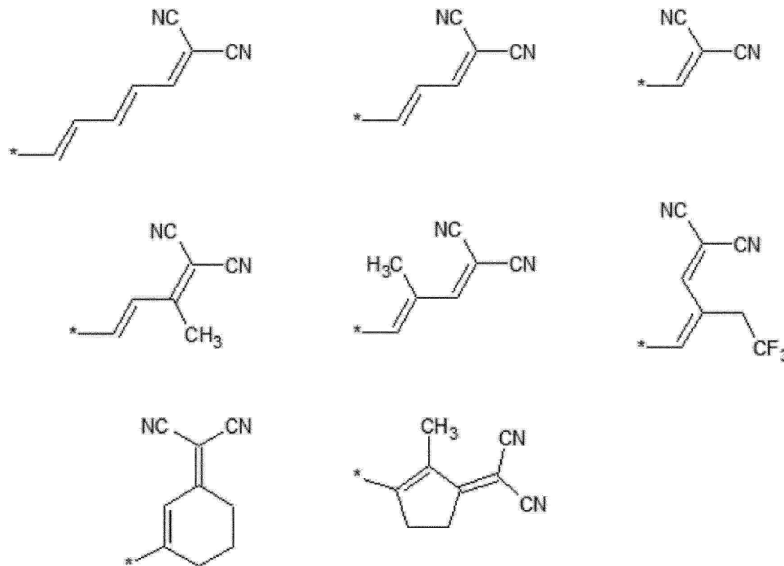
であり、式中、 $n$ は、1、2又は3であり、ここで、\*は基 $R_2$ 、 $R_3$ 、 $R_{12}$ 及び/又は $R_{13}$ の結合点を示し； $R_{16}$ 、 $R_{17}$ 及び $R_{18}$ は各々、互いに独立して、H、ハロゲン、CN、COO-アルキル、アルキル及びアルケニルからなる群から選択されるが、ただし、 $R_{16}$ 及び $R_{17}$ は共にHではなく、 $R_{16}$ 及び $R_{17}$ は、好ましくはCNである。

10

## 【0114】

本発明の他の構成において、 $R_2$ 及び $R_3$ 、又は、 $R_{12}$ 及び $R_{13}$ は各々、互いに独立して：

## 【化 3 0】



20

30

(式中、\*は、基 $R_2$ 、 $R_3$ 、 $R_{12}$ 及び/又は $R_{13}$ の結合点を示し、ここで、CNはFによって置き換えられていても良く、並びに、ここで、 $R_2$ 及び $R_3$ 、又は、 $R_{12}$ 及び $R_{13}$ は、好ましくは、同一である)

からなる群から選択される。

## 【0115】

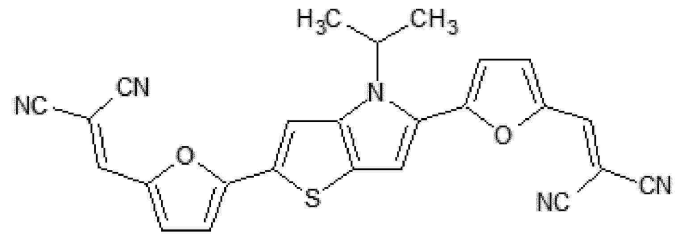
本発明の他の構成において、 $R_6$ 及び $R_7$ はHであり、 $R_9$ 及び $R_{10}$ はHであり、並びに、 $Z_2$ はOであり、ここで、 $Z_1$ 及び $Z_2$ は好ましくはOである。

## 【0116】

本発明の他の構成において、化合物は：

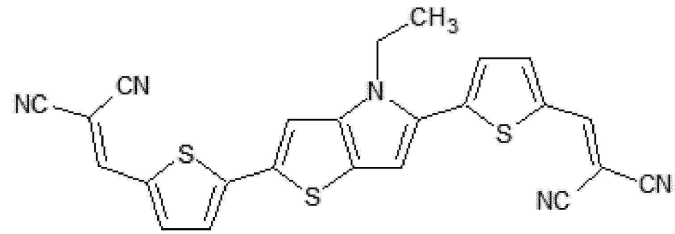
40

【化 3 1】



F3

10



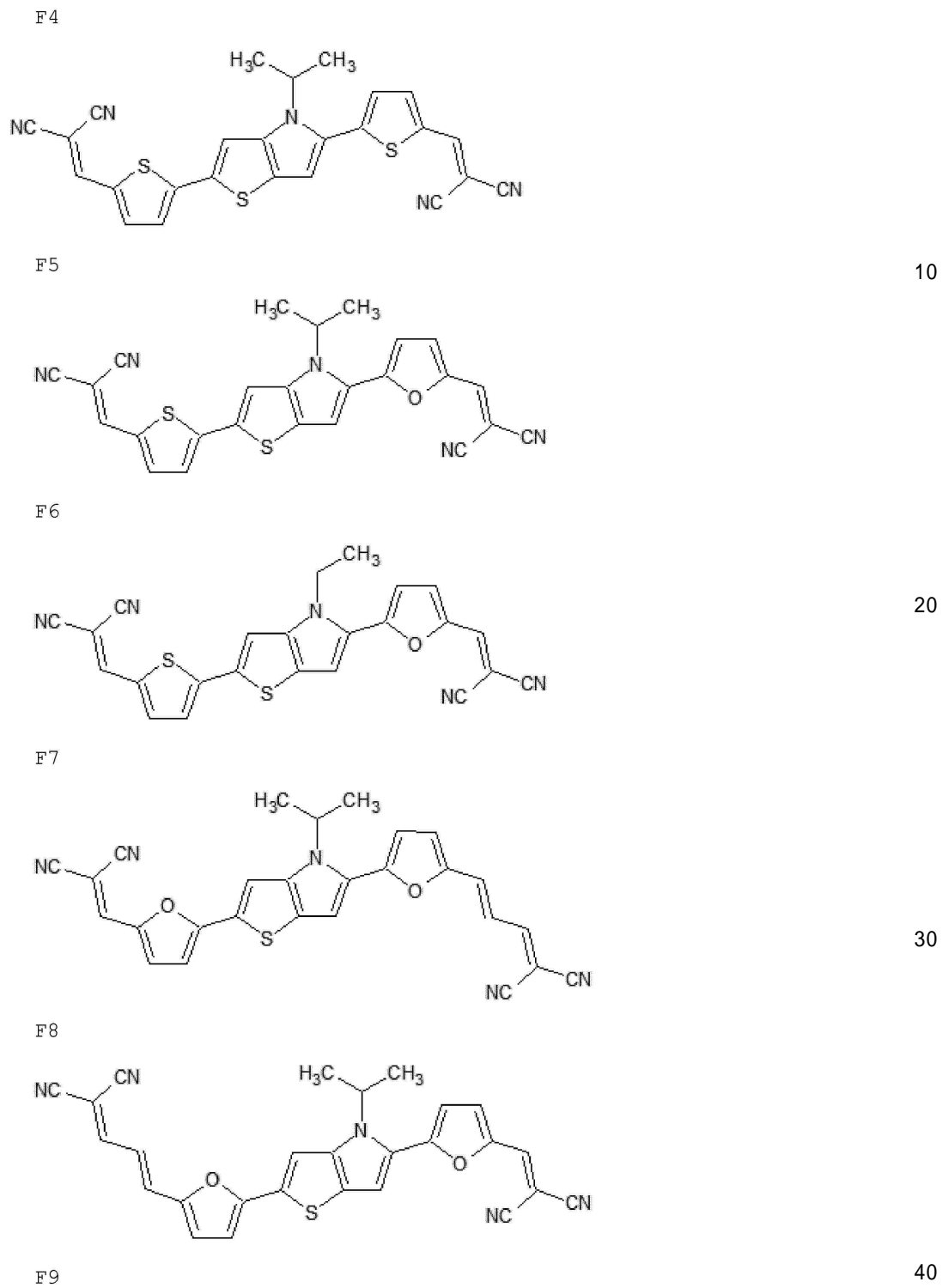
20

30

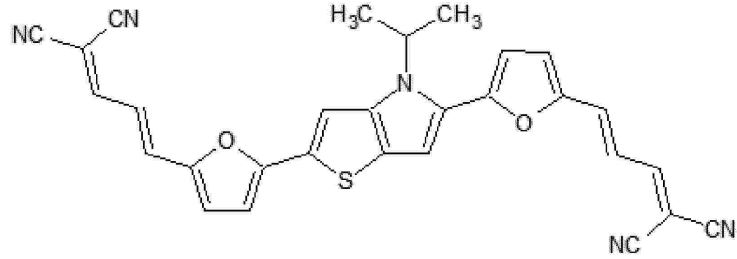
40

50

## 【化 3 2】

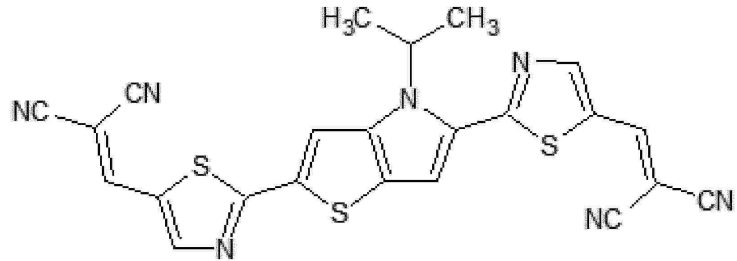


## 【化 3 3】



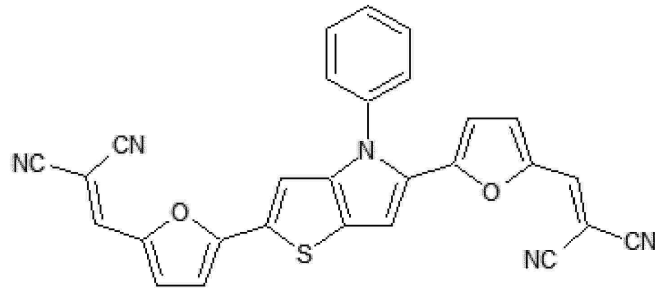
F10

10



F11, 及び

20



F12

30

からなる群から選択される。

## 【0117】

本発明の他の構成において、基 A 1 は基 A 2 と同じである。

## 【0118】

図 2 は、光電子部品の例示的实施形態の概略図を断面で示す。光電子部品は、第 1 の電極 2、第 2 の電極 6 及び層系 7 を備え、層系 7 は第 1 の電極 2 と第 2 の電極 6 との間に配置されている。層系 7 の少なくとも 1 つの層は、少なくとも 1 種の本発明の化合物を含む。

## 【0119】

本発明の一構成において、光電子部品は有機光電子部品であり、好ましくは有機系太陽電池、OFET、OLED 又は有機光検出器である。

40

## 【0120】

この例示的实施形態において、光電子部品は有機系太陽電池である。有機系太陽電池は例えばガラス製の基板 1 を有し、その上に、例えばITOを含む電極 2 が設けられている。そしてその上に、少なくとも 1 種の本発明の化合物、p 型伝導性供与体材料及び n 型伝導性受容体材料（例えば C60 フラーレン、平面ヘテロ接合又はバルクヘテロ接合として）を含む電子輸送層 3 (ETL) 及び光活性層 4 を有する層系 7 が配置されている。この上に、p-ドープ正孔輸送層 5 (HTL) 及びアルミニウム製の電極 6 が配置されている。

## 【0121】

本発明の他の構成において、層系 7 は、少なくとも 1 つの光活性層 4、好ましくは吸収

50

体層を有し、少なくとも1つの光活性層4は少なくとも1種の本発明の化合物を含む。

【0122】

本発明の他の構成において、層系7は、少なくとも2つの光活性層、好ましくは少なくとも3つの光活性層、又は、好ましくは少なくとも4つの光活性層を有する。

【0123】

本発明の他の構成において、光活性層4は、少なくとも1種の本発明の化合物と、少なくとも1種のさらなる化合物との混合層として、又は、少なくとも1種の本発明の化合物と、少なくとも2種のさらなる化合物との混合層として形成され、化合物は吸収材料である。

【0124】

本発明の他の構成において、光電子部品は、タンデムセル、トリプルセル又はマルチセルとして形成される。

【0125】

以下の図3及び4は、本発明の化合物の特定の例示的实施形態、及び、その光学特性を示す。

【0126】

図3は、有機系太陽電池の形態の有機光電子部品において計測した、化合物F3の吸収スペクトル(図3A)、電流-電圧曲線、スペクトル外部量子収量、及び、化合物F3を含むBHJセルの曲線因子(図3B)のグラフ表示を示す。

【0127】

化合物F3、F12及び比較化合物F1の吸収スペクトル(波長(nm)にわたる光学密度)を、各事例において石英ガラス上の30nmの厚さを有する真空蒸着層として計測した。電流-電圧曲線は、有機系太陽電池を特徴付ける性能インジケータを含む。ここでもっとも重要な性能インジケータは、曲線因子FF、開回路電圧Uoc及び短絡電流Jscである。

【0128】

化合物F3の吸収スペクトルは図3Aに示されている。化合物F3は、深色領域、すなわち、吸収スペクトルのより長波長の領域における側部における特に急勾配の吸収曲線であって、9.72の傾斜角を有するものを示す。吸収スペクトルにおける曲線の傾斜角は、吸収の開始と吸収の第1の境界部との間で生じる変曲点での接線の勾配を介して測定される。深色領域は、特に、可視光の赤色波長範囲にシフトした領域、すなわち、電磁スペクトルのより長波長で、より低エネルギーの範囲にシフトした領域を意味すると理解される。吸収スペクトルの深色領域におけるこの急勾配の曲線は、タンデム、トリプル又はマルチセルの形成において特に有利である。

【0129】

この例示的实施形態において、ITO層上のBHJセルは、15nmの層厚を有するC60の層を有する。この層の上に、化合物F3をC60と一緒に30nmの厚さで塗布した。前記層には10nmの層厚を有するBPAPF(9,9-ビス[4-(N,N-ビス-ピフェニル-4-イル-アミノ)フェニル]-9H-フルオレン)の層が続き、その上に、30nmの層厚を有するBPAPF及びNDP9を含むさらなる層が存在している。この層におけるBPAPFの割合は、層全体に基づいて10重量パーセントである。この層には1nmの厚さを有するNDP9を含むさらなる層が隣接しており、これに、100nmの厚さを有するアルミニウム層が続く。構造:ITO/C60(15nm)/F3:C60(30nm, 3:2, 50)/BPAPF(10nm)/BPAPF:NDP9(30nm, 10重量%NDP9)/NDP9(1nm)/Al(100nm)を有するBHJセルの電流-電圧曲線を測定したが、光活性層はバルクヘテロ接合(BHJ)であった。化合物F3を含む光電子部品において、曲線因子FFは68.9%であり、開回路電圧Uocは0.91Vであり、及び、短絡電流Jscは15.1mA/cm<sup>2</sup>である(図3B)。この種の光電子部品、特に化合物F3を含む太陽電池のセル効率は9.4%である。

10

20

30

40

50

## 【0130】

化合物 F 3 はまた、減圧下で良好な蒸発性を示す。

## 【0131】

図 4 は、有機系太陽電池の形態の有機光電子部品において計測した、化合物 F 1 2 の吸収スペクトル (図 4 A)、電流 - 電圧曲線、スペクトル外部量子収量、及び、化合物 F 1 2 を含む B H J セルの曲線因子 (図 4 B) のグラフ表示を示す。

## 【0132】

化合物 F 1 2 の吸収スペクトルを図 4 A に示す。既述の化合物 F 3 と同様に、化合物 F 1 2 は、5.9 の傾斜角を有する特に急勾配の吸収曲線を示す。

## 【0133】

構造：ITO / C 6 0 ( 1 5 n m ) / F 1 2 : C 6 0 ( 3 0 n m 、 3 : 2 、 5 0 ) / B P A P F ( 1 0 n m ) / B P A P F : N D P 9 ( 3 0 n m 、 1 0 重量 % N D P 9 ) / N D P 9 ( 1 n m ) / A l ( 1 0 0 n m ) を有する B H J セルの電流 - 電圧曲線を測定したが、光活性層はバルクヘテロ接合 ( B H J ) であった。化合物 F 1 2 を含む光電子部品において、曲線因子 F F は 4 6 . 6 % であり、開回路電圧  $U_{oc}$  は 0 . 9 7 V であり、及び、短絡電流  $J_{sc}$  は 1 0 . 3 m A / c m 2 (図 4 B) である。この種の光電子部品、特に化合物 F 1 2 を含む太陽電池のセル効率は 4 . 7 % である。

## 【0134】

化合物 F 1 2 はまた、減圧下で良好な蒸発性を示す。

## 【0135】

有機系太陽電池で計測した吸収特性及び電流 - 電圧曲線を含む化合物 F 3 及び F 1 2 の実験データは、化合物 F 3 及び F 1 2 が有機系太陽電池及び他の有機光電子部品における使用きわめて好適であることを実証する。

## 【0136】

図 5 は、有機系太陽電池の形態の有機光電子部品において計測した、比較化合物 F 1 の吸収スペクトル (図 5 A)、電流 - 電圧曲線、スペクトル外部量子収量、及び、比較化合物 F 1 を含む B H J セルの曲線因子 (図 5 B) のグラフ表示を示す。

## 【0137】

化合物 F 1 は、2.75 の傾斜角を有する扁平型の吸収曲線を示す。

## 【0138】

構造：ITO / C 6 0 ( 1 5 n m ) / F 1 : C 6 0 ( 3 0 n m 、 3 : 2 、 5 0 ) / B P A P F ( 1 0 n m ) / B P A P F : N D P 9 ( 3 0 n m 、 1 0 重量 % N D P 9 ) / N D P 9 ( 1 n m ) / A l ( 1 0 0 n m ) を有する B H J セルの電流 - 電圧曲線を測定したが、光活性層はバルクヘテロ接合 ( B H J ) であった。化合物 F 1 を含む光電子部品において、曲線因子 F F は 4 7 . 0 % であり、開回路電圧  $U_{oc}$  は 0 . 8 1 V であり、及び、短絡電流  $J_{sc}$  は 7 . 5 m A / c m 2 である。

## 【0139】

比較化合物 F 1 並びに化合物 F 3 及び F 1 2 の実験データは、化合物 F 3 及び F 1 2 が、比較化合物 F 1 と比してより良好な吸収特性を有することを示す。

## 【0140】

図 6 は、化合物 F 3 の吸収スペクトルと比較化合物 F 1 との比較に係るグラフ表示を示す。

## 【0141】

化合物 F 3 の吸収 (中実線で示す) 及び比較化合物 F 1 の吸収 (破線で示す) は、フォトンエネルギーに対してプロットされている。9.72 の傾斜角を有する化合物 F 3 の吸収は、2.75 の傾斜角を有する比較化合物 F 1 のものよりも顕著に急勾配であることが明確に分かる。

10

20

30

40

50

【図面】  
【図 1】

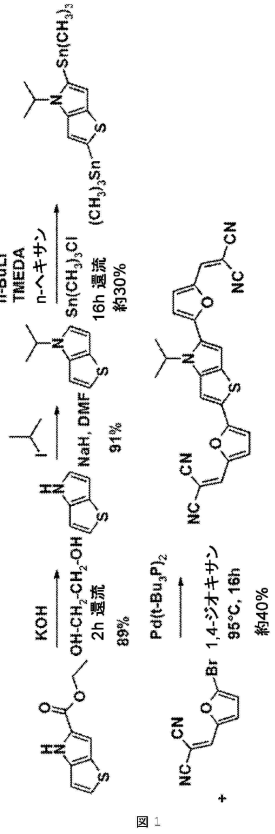


図 1

【図 2】

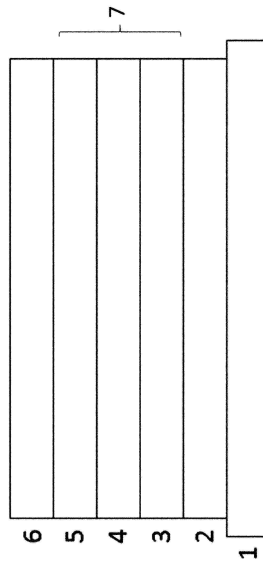


図 2

【図 3 - 1】

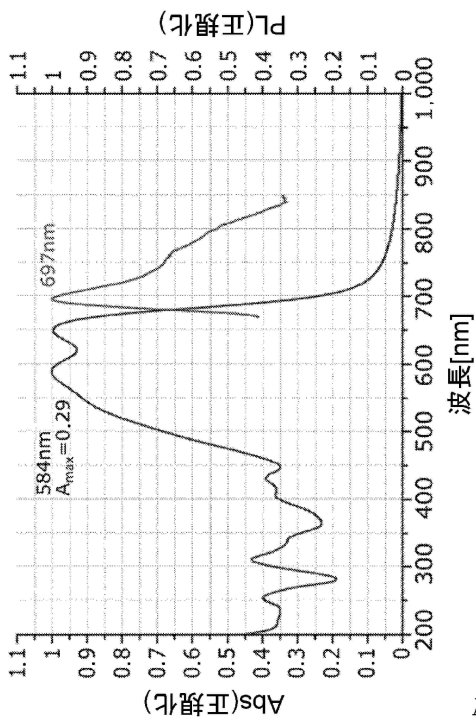


図 3

【図 3 - 2】

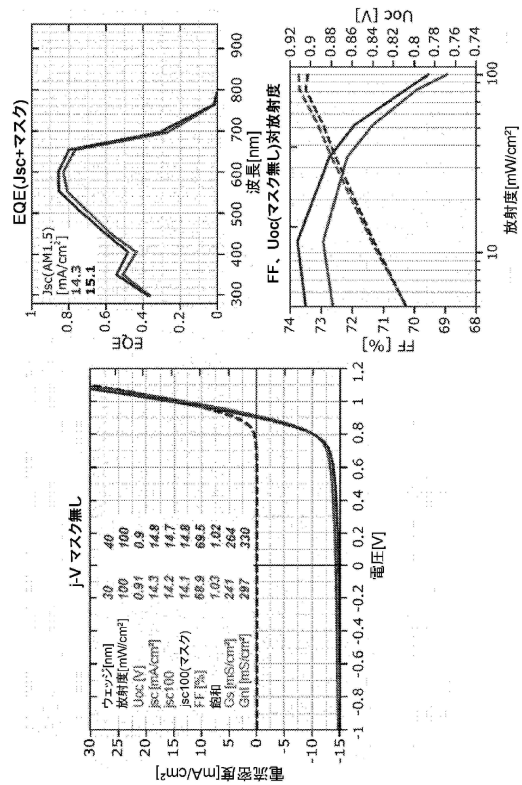


図 3

10

20

30

40

50

【図 4 - 1】

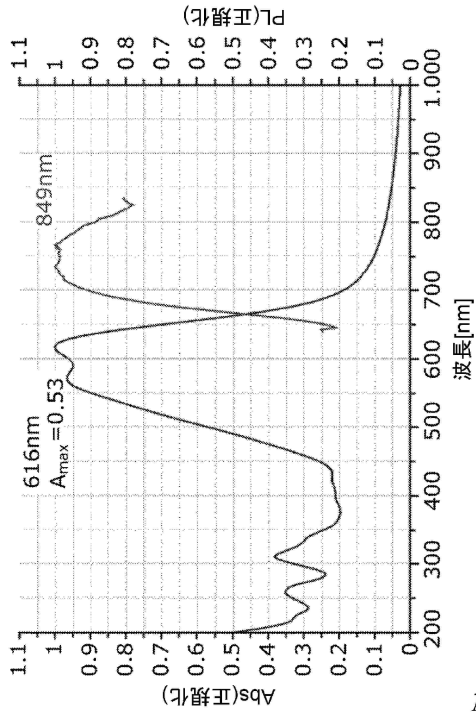


図 4

【図 4 - 2】

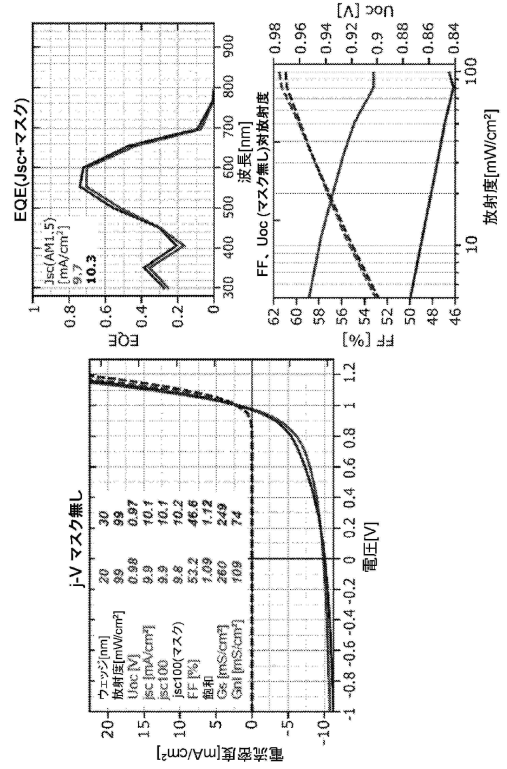


図 4

【図 5 - 1】

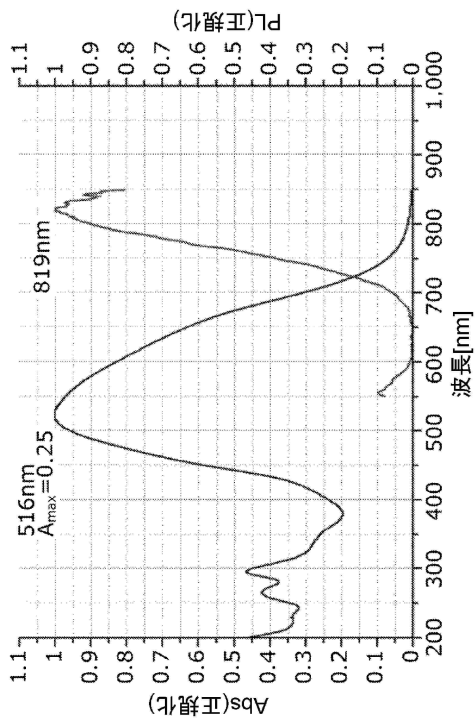


図 5

【図 5 - 2】

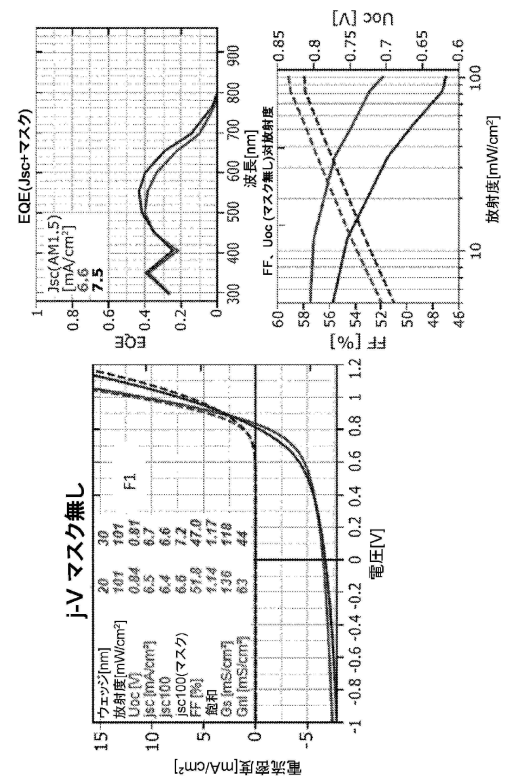


図 5

10

20

30

40

50

【 図 6 】

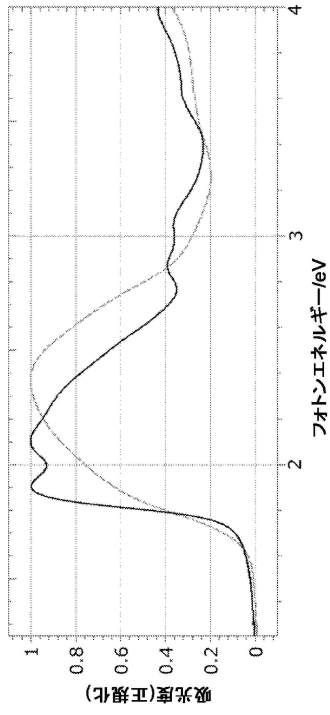


図 6

【 図 7 】

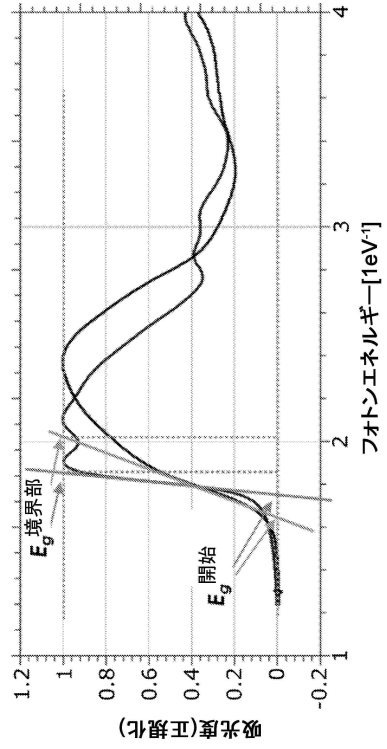


図 7

10

20

30

40

50

## フロントページの続き

- ハフツング
- (72)発明者 ゲルデス, オルガ  
ドイツ国 89077 ウルム, ゼーダンシュトラッセ 14, ヘリアテク ゲゼルシャフト ミット  
ベシュレンクテル ハフツング
- (72)発明者 マッテルスタイグ, ゲンター  
ドイツ国 89077 ウルム, ゼーダンシュトラッセ 14, ヘリアテク ゲゼルシャフト ミット  
ベシュレンクテル ハフツング
- (72)発明者 ラミレス, イヴァン  
ドイツ国 01139 ドレスデン, トリードラーシュトラッセ 3, ヘリアテク ゲゼルシャフト  
ミット ベシュレンクテル ハフツング
- (72)発明者 ミルループ, アントワーヌ  
ドイツ国 89077 ウルム, ゼーダンシュトラッセ 14, ヘリアテク ゲゼルシャフト ミット  
ベシュレンクテル ハフツング
- 審査官 佐竹 政彦
- (56)参考文献 特表2019-503076(JP, A)  
国際公開第2014/128277(WO, A1)
- (58)調査した分野 (Int.Cl., DB名)  
H10K 10/00-99/00  
CAplus/REGISTRY(STN)