

(21)申請案號：113111699

(22)申請日：中華民國 113 (2024) 年 03 月 28 日

(51)Int. Cl. : C07D403/14 (2006.01)

H10K30/86 (2023.01)

H10K30/50 (2023.01)

H10K85/60 (2023.01)

(30)優先權：2023/03/29 日本

2023-053716

(71)申請人：日商保土谷化學工業股份有限公司(日本)HODOGAYA CHEMICAL CO., LTD.

(JP)

日本

(72)發明人：林祐一郎 HAYASHI, YUICHIRO (JP)；高橋秀聰 TAKAHASHI, HIDEAKI (JP)；
佐藤洋 SATO, HIROSHI (JP)；伊東俊昭 ITO, TOSHIAKI (JP)；清水祐花 SHIMIZU,
YUKA (JP)

(74)代理人：賴經臣；宿希成

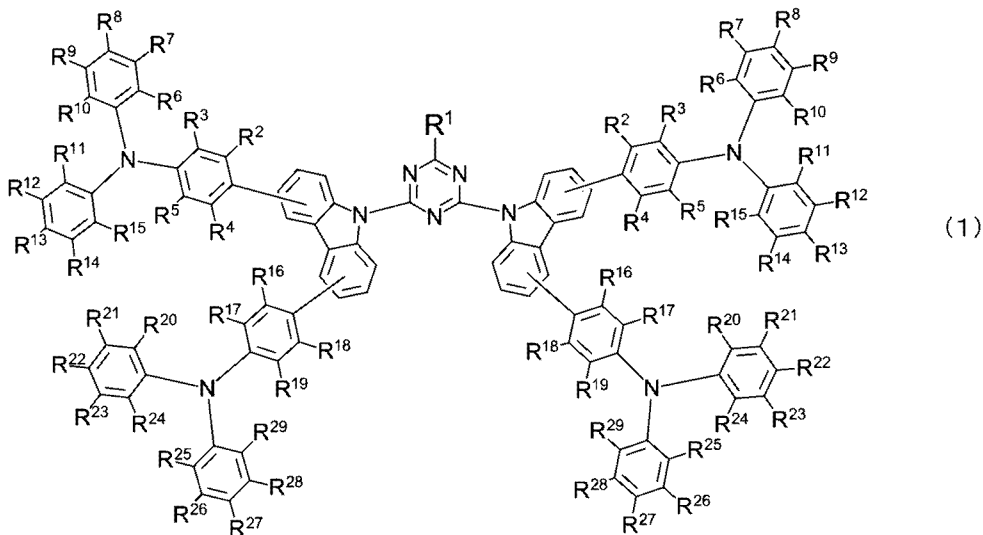
申請實體審查：無 申請專利範圍項數：8 項 圖式數：1 共 50 頁

(54)名稱

化合物、電洞傳輸材料及使用其之光電轉換元件

(57)摘要

將由通式(1)表示之化合物用於電洞傳輸層之光電轉換元件的耐熱性優異。R¹ 為芳香族烴基、雜環基等，R² ~ R²⁹ 為氫原子、烷氧基等。



指定代表圖：

符號簡單說明：

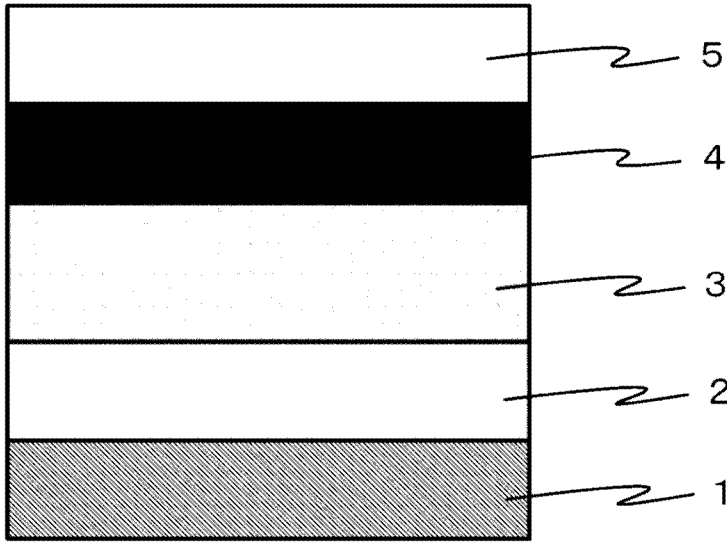
1:導電性支撐體

2:電子傳輸層

3:光電轉換層

4:電洞傳輸層

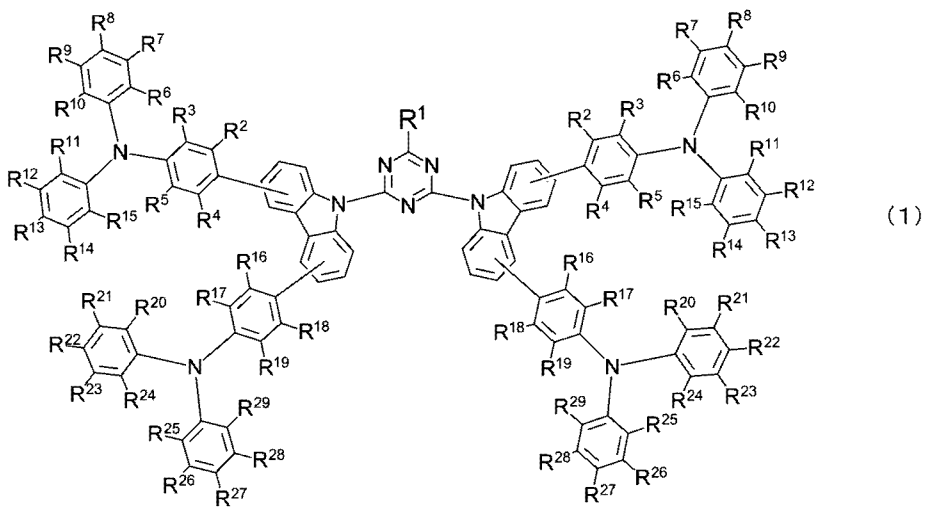
5:相對電極



【圖1】

特徵化學式：

[化1]

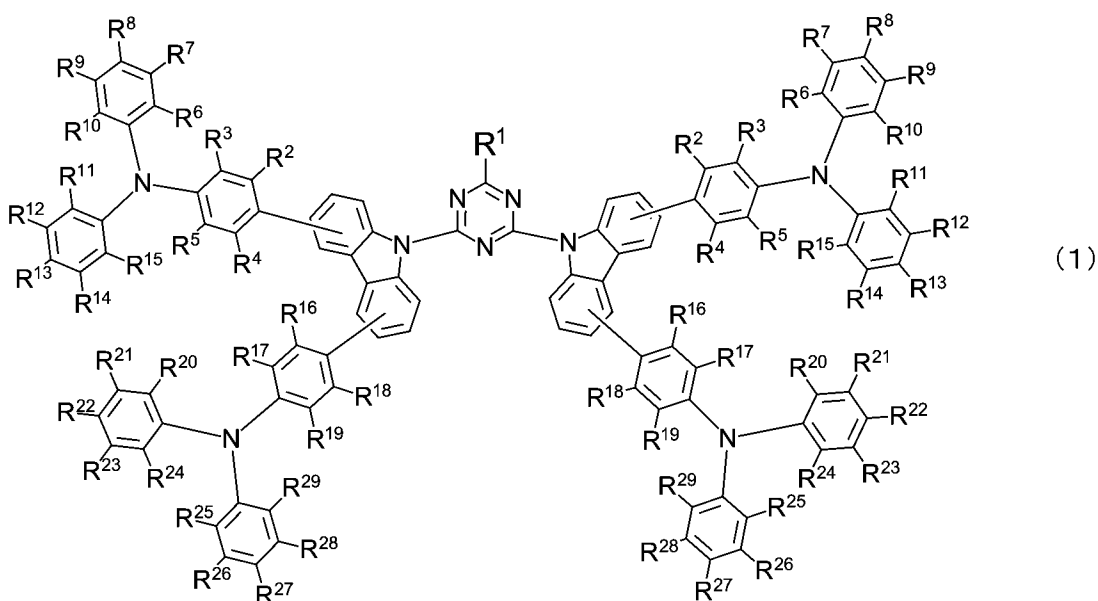


【發明摘要】

【中文發明名稱】 化合物、電洞傳輸材料及使用其之光電轉換元件

【中文】

將由通式(1)表示之化合物用於電洞傳輸層之光電轉換元件的耐熱性優異。R¹為芳香族烴基、雜環基等，R²~R²⁹為氫原子、烷氧基等。



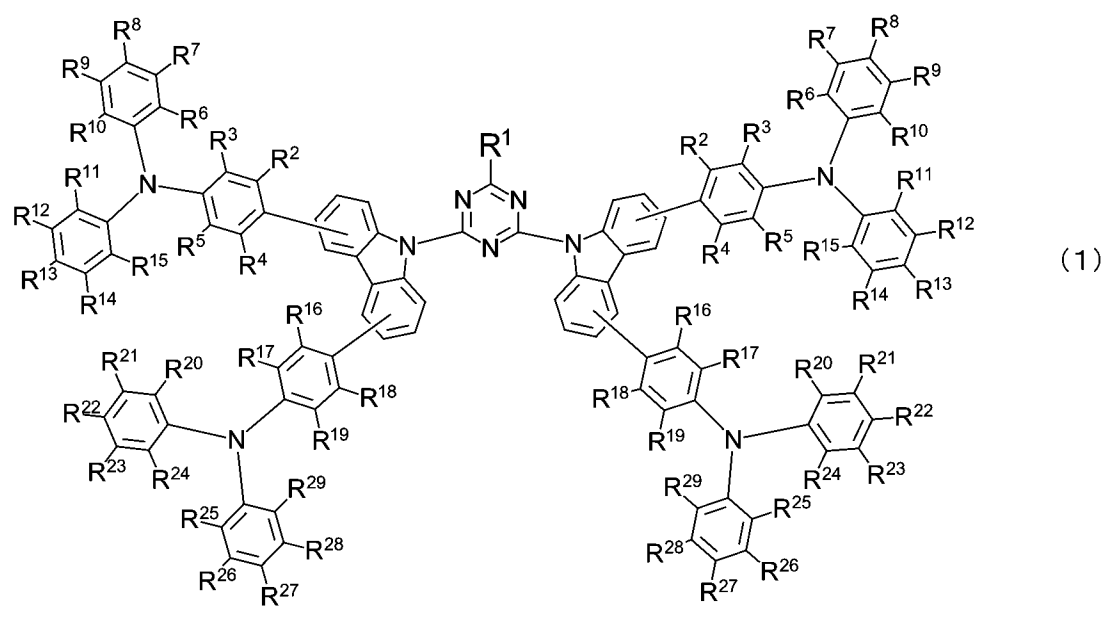
【指定代表圖】 圖1

【代表圖之符號簡單說明】

- 1:導電性支撐體
- 2:電子傳輸層
- 3:光電轉換層
- 4:電洞傳輸層
- 5:相對電極

【特徵化學式】

[化1]



【發明說明書】

【中文發明名稱】 化合物、電洞傳輸材料及使用其之光電轉換元件

【技術領域】

【0001】 本發明係有關一種化合物、電洞傳輸材料及使用其之光電轉換元件。

【先前技術】

【0002】 近年來，作為潔淨能源，太陽光發電備受關注，正在積極開發太陽能電池。其中，作為低成本且可藉由溶液製程製造的下一代太陽能電池，將鈣鈦礦材料用於光電轉換層之太陽能電池(以下，記載為鈣鈦礦型太陽能電池)的開發受到關注(例如，專利文獻 1、非專利文獻 1~2)。

【0003】 在鈣鈦礦型太陽能電池中，大多在元件中使用電洞傳輸材料。作為使用目的，可列舉如下：(1)提高選擇性傳輸電洞之功能以提高光電轉換效率，(2)保護與鈣鈦礦光電轉換層接合且容易受到來自水分或氧的影響之鈣鈦礦材料(例如，非專利文獻 3)。作為標準的電洞傳輸材料，大多使用作為螺二萘系有機化合物的 Spiro-OMeTAD[後述的比較化合物(B-1)]，但是相較於該材料，對光電轉換特性有更高貢獻之電洞傳輸材料的報告較少。又，關於光電轉換元件，可預想是在太陽光照射下的戶外使用，因此要求高耐熱性。

[先前技術文獻]

[專利文獻]

【0004】

[專利文獻 1]國際公開第 2017/104792 號

[非專利文獻]

【0005】

[非專利文獻 1]J. Am. Chem. Soc.，2009 年，131 卷，第 6050-6051 頁

[非專利文獻 2]Science，2012 年，388 卷，第 643-647 頁

[非專利文獻 3]Chem. Sci.，2019 年，10，第 6748-6769 頁

【發明內容】

(發明所欲解決之問題)

【0006】 本發明所欲解決之問題在於提供一種作為可高效地輸出電流之光電轉換元件用的電洞傳輸材料而有用之化合物、及將該化合物用於電洞傳輸層之具有高耐熱性之光電轉換元件、以及太陽能電池。

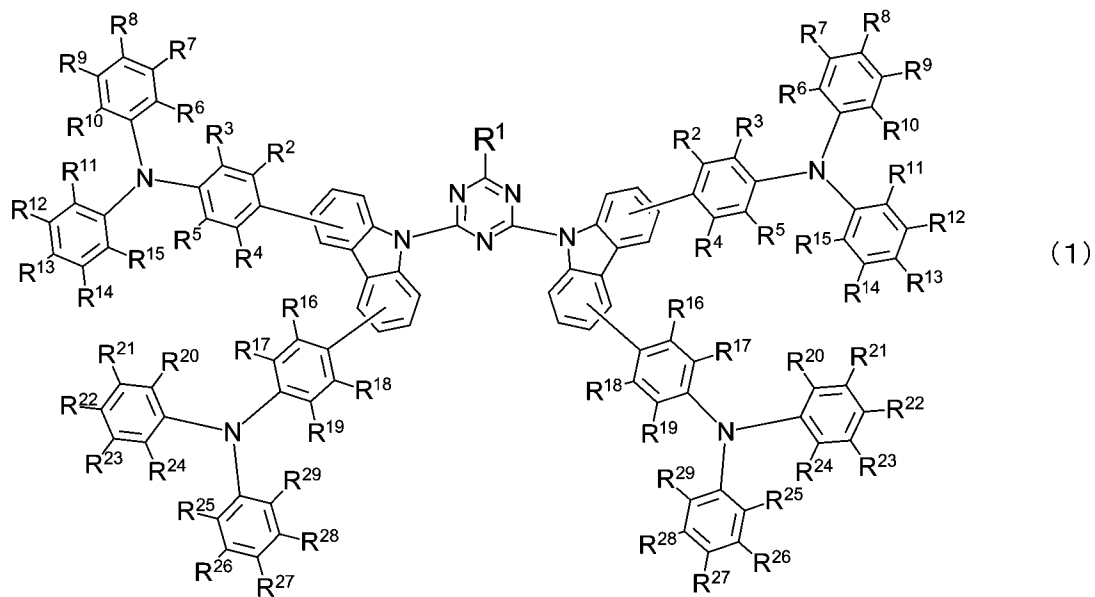
(解決問題之技術手段)

【0007】 為了解決上述問題，本發明人等就提高光電轉換特性進行了深入探討之結果，發現到：藉由設計開發具有特定的結構之化合物，並將其用於光電轉換元件而作為電洞傳輸層，可獲得光電轉換特性良好、且顯示出高耐熱性之光電轉換元件及鈣鈦礦型太陽能電池。亦即，本發明的要旨為如下。

【0008】 1.一種化合物，其由下述通式(1)表示。

【0009】

[化 1]



【0010】 [式中， R^1 表示氫原子、鹵素原子、羥基、
 可具有取代基之碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷基、
 可具有取代基之碳原子數 2~20 的直鏈狀或支鏈狀的烯基、
 可具有取代基之碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷氧基、
 可具有取代基之碳原子數 6~30 的芳氧基、
 可具有取代基之碳原子數 0~60 的胺基、
 可具有取代基之碳原子數 0~20 的硫基、
 可具有取代基之碳原子數 6~30 的 1 價的芳香族烴基、或
 可具有取代基之環形成原子數 5~30 的 1 價的雜環基，
 $R^2 \sim R^{29}$ 分別獨立地表示：

氫原子、
 可具有取代基之碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷基、
 可具有取代基之碳原子數 2~20 的直鏈狀或支鏈狀的烯基、
 可具有取代基之碳原子數 3~12 的環烷基、
 可具有取代基之碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷氧基、
 可具有取代基之碳原子數 0~20 的胺基、或

可具有取代基之碳原子數 0~20 的硫基，

R^{10} 和 R^{11} 、 R^{24} 和 R^{25} 亦可彼此鍵結而形成環。]

【0011】 2.如前述之化合物，其中在前述通式(1)中， R^1 為鹵素原子、可具有取代基之碳原子數 0~60 的胺基、可具有取代基之碳原子數 6~20 的芳香族烴基、或可具有取代基之環形成原子數 5~30 的 1 價的雜環基。

【0012】 3.如前述之化合物，其中在前述通式(1)中， $R^6 \sim R^{15}$ 及 $R^{20} \sim R^{29}$ 中的至少一個為可具有取代基之碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷氧基。

【0013】 4.如前述之化合物，其中在前述通式(1)中， R^{10} 和 R^{11} 、 R^{24} 和 R^{25} 均未彼此鍵結而形成環。

【0014】 5.一種電洞傳輸材料，其包含前述記載之化合物。

【0015】 6.如前述之電洞傳輸材料，其為光電轉換元件的電洞傳輸層用。

【0016】 7.一種光電轉換元件，其具有包含前述記載之化合物的電洞傳輸層。

【0017】 8.一種太陽能電池，其使用了前述記載之光電轉換元件。
(對照先前技術之功效)

【0018】 依據本發明之化合物及使用該化合物之電洞傳輸層，可獲得具有高耐熱性之光電轉換元件及鈣鈦礦型太陽能電池。

【圖式簡單說明】

【0019】 圖 1 係表示本發明的實施例及比較例的光電轉換元件的結構之概略剖面圖。

【實施方式】

【0020】以下，對本發明的內容進行詳細說明。關於以下所記載之構成要件的說明，有時基於本發明的代表性實施態樣或具體例完成，但本發明並不限定於該等實施態樣或具體例。再者，在本說明書中，用「 \sim 」表示之數值範圍係指將記載於「 \sim 」的前後之數值作為下限值及上限值而包含之範圍。又，由通式(1)表示之化合物、 $R^1 \sim R^{29}$ 所表示之基團中存在之氫原子的一部分或全部可以被氬原子取代。

在本說明書中，「透明」及「透光性」係指用於光電轉換之光的穿透率為 50% 以上，例如為 80% 以上、90% 以上、99% 以上。光的穿透率可藉由紫外-可見光分光光度計測定。

【0021】以下，對本發明的由前述通式(1)表示之化合物進行具體說明，但本發明不應被該等具體說明做限定性地解釋。

【0022】在前述通式(1)中， R^1 表示氫原子、鹵素原子、羥基、可具有取代基之碳原子數 1 \sim 20 的直鏈狀或支鏈狀的烷基、可具有取代基之碳原子數 2 \sim 20 的直鏈狀或支鏈狀的烯基、可具有取代基之碳原子數 1 \sim 20 的直鏈狀或支鏈狀的烷氧基、可具有取代基之碳原子數 6 \sim 30 的芳氧基、可具有取代基之碳原子數 0 \sim 60 的胺基、可具有取代基之碳原子數 0 \sim 20 的硫基、可具有取代基之碳原子數 6 \sim 30 的芳香族烴基、或可具有取代基之環形成原子數 5 \sim 30 的雜環基。

【0023】在通式(1)中，作為由 R^1 表示之「鹵素原子」，可列舉氟原子、氯原子、溴原子及碘原子。

【0024】通式(1)中，由 R^1 表示之「可具有取代基之碳原子數 1 \sim 20 的直鏈狀或支鏈狀的烷基」中的「碳原子數 1 \sim 20 的直鏈狀或支鏈狀的

烷基」的碳原子數選自 1~20 的範圍，例如可以選自 1~12 的範圍，例如亦可以選自 1~6 的範圍。作為「碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷基」，具體而言，可列舉甲基、乙基、正丙基、異丙基、正丁基、異丁基、二級丁基、三級丁基、正戊基、異戊基、正己基、2-乙基己基、庚基、辛基、異辛基、壬基、癸基等。

【0025】通式(1)中，由 R^1 表示之「可具有取代基之碳原子數 2~20 的直鏈狀或支鏈狀的烯基」中的「碳原子數 2~20 的直鏈狀或支鏈狀的烯基」的碳原子數選自 2~20 的範圍，例如可以選自 2~12 的範圍，例如亦可以選自 2~6 的範圍。作為「碳原子數 2~20 的直鏈狀或支鏈狀的炔基」，具體而言，可列舉乙炔基(ethynyl group)(乙烯基(vinyl group))、1-丙烯基、2-丙烯基(烯丙基)、1-甲基乙烯基、1-丁烯基、2-丁烯基、1-戊烯基、1-己烯基、2-甲基-1-丙烯基、2-甲基-2-丙烯基、1-乙基乙烯基、或該等烯基複數鍵結而成之碳原子數 2~20 的直鏈狀或支鏈狀的烯基等。

【0026】通式(1)中，由 R^1 表示之「可具有取代基之碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷氧基」中的「碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷氧基」的碳原子數選自 1~20 的範圍，例如可以選自 1~12 的範圍，例如亦可以選自 1~6 的範圍。作為「碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷氧基」，具體而言，可列舉甲氧基、乙氧基、丙氧基、正丁氧基、正戊氧基、正己氧基、庚氧基、辛氧基、壬氧基、癸氧基、異丙氧基、異丁氧基、二級丁氧基、三級丁氧基、異辛氧基、三級辛氧基等。

【0027】通式(1)中，關於由 R^1 表示之「可具有取代基之碳原子數 6~30 的芳氧基」中的「碳原子數 6~30 的芳氧基」的鍵結於氧基之芳基的說明和具體例，可參考下述關於「碳原子數 6~30 的 1 價的芳香族烴基」的記載。作為「碳原子數 6~30 的芳氧基」，具體而言，可列舉苯氧

基、甲苯氧基、聯苯氧基、三聯苯氧基、萘氧基、蔥氧基、菲氧基、蒾氧基、茛氧基等。

【0028】通式(1)中，由 R^1 表示之「可具有取代基之碳原子數 0~60 的胺基」中的「碳原子數 0~60 的胺基」可以為未經取代之胺基，亦可以為單取代胺基或二取代胺基。作為各取代胺基的取代基的例子，可列舉烷基、芳基、醯基。該等各基團的氫原子可以被選自下述取代基群組 A 中之取代基取代。關於烷基及構成醯基之烷基的說明和具體例，可參考關於上述「碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷基」之記載，關於芳基的說明和具體例，可參考下述關於「碳原子數 6~30 的 1 價的芳香族烴基」之記載。另外，二取代胺基之與氮原子鍵結之 2 個取代基不會彼此鍵結而形成環狀結構，具有該種環狀結構之基團在本發明中包含在後述之「雜環基」中。「碳原子數 0~60 的胺基」的碳原子數選自 0~60 的範圍，例如可以選自 0~30 的範圍，例如亦可以選自 2~11 的範圍，又例如亦可以選自 12~24 的範圍。作為「碳原子數 0~60 的胺基」，具體而言，可列舉未經取代之胺基(-NH₂)、作為單取代胺基的甲胺基、乙胺基、乙醯胺基、苯胺基等、又，作為二取代胺基的二甲胺基、二乙胺基等二烷胺基、二苯胺基等二芳胺基、乙醯基苯胺基等。在本發明的一態樣中，「可具有取代基之碳原子數 0~60 的胺基」為可以被烷基或芳基取代之碳原子數 0~60 的胺基。

【0029】通式(1)中，由 R^1 表示之「可具有取代基之碳原子數 0~20 的硫基」中的「碳原子數 0~20 的硫基」可以為未經取代之硫基(硫醇基：-SH)，亦可以為硫醇基的氫原子被取代基取代而成之取代硫基。取代硫基的碳原子數係 1~18 的範圍為較佳，例如可以為 1~12 的範圍，例如亦可以為 1~6 的範圍。作為取代硫基的取代基的例子，可列舉烷基、芳

基，該等各基團的氫原子可以被選自下述取代基群組 A 中之取代基取代。關於作為硫基的取代基之烷基的說明和具體例，可參考關於上述「碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷基」之記載，關於芳基的說明和具體例，可參考下述關於「碳原子數 6~30 的 1 價的芳香族烴基」之記載。作為取代硫基的典型例，可列舉可具有取代基之碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷硫基、或可具有取代基之碳原子數 6~30 的芳硫基。作為「碳原子數 0~20 的硫基」，具體而言，可列舉未經取代之硫基(硫醇基： $-SH$)、烷硫基(例如，甲硫基、乙硫基、丙硫基)、芳硫基(例如，苯硫基、聯苯硫基)等。

【0030】 在通式(1)中，由 R^1 表示之「可具有取代基之碳原子數 6~30 的 1 價的芳香族烴基」中的構成「碳原子數 6~30 的 1 價的芳香族烴基」之芳香環可以為單環，亦可以為 2 個以上的環縮合而成之縮合環，亦可以為 2 個以上的環藉由單鍵連結而成之連結環。為縮合環的情況下，縮合之環的數量例如為 2~6、例如為 2~4。在本發明的一態樣中，芳香環包括 2 個以上的環。為縮合環的情況下，成為「縮合多環芳香族基」。為連結環的情況下，連結之環的數量例如為 2~6、例如為 2~4。形成芳香環之碳原子數選自 6~30 的範圍，例如可以選自 6~22 的範圍或 6~18 的範圍，例如亦可以選自 6~14 或 6~10 的範圍。作為「碳原子數 6~30 的 1 價的芳香族烴基」，具體而言，可列舉苯基、聯苯基、三聯苯基、萘基、蔥基(anthracenyl group)(蔥基(anthryl group))、菲基、蒾基、茛基、芘基、芘基、丙[二]烯合蒾基(fluoranthenyl group)、聯三伸苯基(triphenylenyl group)等。

【0031】 通式(1)中，由 R^1 表示之「可具有取代基之環形成原子數 5~30 的 1 價的雜環基」中的構成「環形成原子數 5~30 的 1 價的雜環基」

之雜環可以為單環，亦可以為 2 個以上的環縮合而成之縮合環。為縮合環的情況下，縮合之環的數量例如為 2~6、例如為 2~4。又，雜環可以為芳香族雜環，亦可以為脂肪族雜環。在本發明的一態樣中，雜環包括 2 個以上的環。作為構成雜環之雜原子，可列舉氮原子、氧原子、硫原子。芳香族雜環的環形成原子數選自 5~30 的範圍，例如亦可以選自 5~18 的範圍。「環形成原子數 5~30 的 1 價的雜環基」中作為芳香族雜環基，具體而言，可列舉吡啶基、嘧啶基、三吡基、噻吩基、呋喃基(furyl group)(呋喃基(furanyl group))、吡咯基、咪唑基、吡唑基、三唑基、喹啉基、異喹啉基、喹啶基(naphthyridinyl group)、吡啶基、啡啉基(phenanthrolinyl group)、苯并呋喃基、苯并噻吩基、嘔唑基、吲哚基、呋唑基、苯并嘔唑基、噻唑基、苯并噻唑基、喹啉基、苯并咪唑基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基、羰基等。該等基團的鍵結位置並無特別限制，例如若為吡啶基，則可以為 2-吡啶基、3-吡啶基、4-吡啶基中的任一個(例如，可選擇 4-吡啶基)。在本發明的一態樣中，芳香族雜環基藉由碳原子鍵結。在本發明的一態樣中，芳香族雜環基藉由氮原子鍵結。「環形成原子數 5~30 的 1 價的雜環基」中作為脂肪族雜環基，具體而言，可列舉咪啉基、吡咯啶基(pyrrolidino group)、哌啶基、哌啉基等藉由氮原子鍵結之基團、或四氫呋喃基(tetrahydrofuryl group)、四氫噻吩基(tetrahydrothienyl group)等藉由碳原子鍵結之基團。在本發明的一態樣中， R^1 可以採用之「可具有取代基之環形成原子數 5~30 的 1 價的雜環基」為可具有取代基之環形成原子數 5~30 的藉由氮原子鍵結之 1 價的芳香族雜環基、或可具有取代基之環形成原子數 5~30 的 1 價的脂肪族雜環基。例如， R^1 可以採用之「可具有取代基之環形成原子數 5~30 的 1 價的雜環基」為可具有取代基之環形成原子數 5~30 的藉由氮原子鍵

結之 1 價的芳香族雜環基，可分為取代或未經取代之咪唑-9-基的群組和除此以外的群組。例如， R^1 可以採用之「可具有取代基之環形成原子數 5~30 的 1 價的雜環基」為可具有取代基之環形成原子數 5~30 的 1 價的脂肪族雜環基，尤其為可具有取代基之環形成原子數 5~30 的藉由氮原子鍵結之 1 價的脂肪族雜環基。

【0032】 在通式(1)中，作為由 R^1 表示之「可具有取代基之碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷基」、「可具有取代基之碳原子數 2~20 的直鏈狀或支鏈狀的烯基」、「可具有取代基之碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷氧基」、「可具有取代基之碳原子數 6~30 的芳氧基」、「可具有取代基之碳原子數 1~60 的胺基」、「可具有取代基之碳原子數 0~20 的硫基」、「可具有取代基之碳原子數 6~30 的 1 價的芳香族烴基」、或「可具有取代基之環形成原子數 5~30 的 1 價的雜環基」中的「取代基」，具體而言，可列舉氟原子、氯原子、溴原子、碘原子等鹵素原子；氰基；羥基；硝基；亞硝基；羧基；磷酸基；硫代基($>C=S$)；三甲基矽基；甲基酯基、乙基酯基等羧酸酯基；甲基、乙基、正丙基、異丙基、正丁基、異丁基、二級丁基、三級丁基、正戊基、異戊基、正己基、2-乙基己基、庚基、辛基、異辛基、壬基、癸基等碳原子數 1~18 的直鏈狀或支鏈狀的烷基；乙炔基(ethynyl group)(乙烯基(vinyl group))、1-丙烯基、2-丙烯基(烯丙基)、1-丁烯基、2-丁烯基、1-戊烯基、1-己烯基、2-甲基-1-丙烯基、2-甲基-2-丙烯基、1-乙基乙炔基(ethyl ethenyl group)等碳原子數 2~18 的直鏈狀或支鏈狀的烯基；甲氧基、乙氧基、丙氧基、三級丁氧基、戊氧基、己氧基等碳原子數 1~18 的烷氧基；苯基、萘基、蔥基(anthryl group)、菲基、芘基等碳原子數 6~30 的芳香族烴基；吡啶基、嘧啶基、三吡基、噻吩基、呋喃基(furyl group、furanyl group)、吡

咯基、咪唑基、吡唑基、三唑基、噻啉基、異噻啉基、喹啉基(naphthyridinyl group)、吡啶基、啡啉基(phenanthrolinyl group)、苯并呋喃基、苯并噻吩基、喹啉基、吲哚基、呋唑基、苯并呋唑基、噻唑基、苯并噻唑基、喹啉基、苯并咪唑基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基、羰基等環形成原子數 5~20 的雜環基；未經取代的胺基(-NH₂)、烷胺基(例如，甲胺基)、乙醯胺基、芳胺基(例如，苯胺基)等單取代胺基、或二乙胺基、二苯胺基、乙醯苯胺基等二取代胺基之碳原子數 1~18 的取代胺基；未經取代的硫基(硫醇基：-SH)；甲硫基、乙硫基、丙硫基、苯硫基、聯苯硫基等碳原子數 1~18 的取代硫基；等(在本說明書中，將該等取代基稱為「取代基群組 A」)。該等「取代基」可以僅包含 1 個，亦可以包含複數個，包含複數個時可以彼此相同，亦可以不同。又，構成取代基群組 A 之各取代基的氫原子可以進一步被選自取代基群組 A 中之取代基取代。

【0033】 在本發明的一態樣中，通式(1)的 R¹ 為氫原子、鹵素原子(例如氯原子)、羥基、可具有取代基之碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷基、可具有取代基之碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷氧基、可具有取代基之碳原子數 6~30 的芳氧基、可具有取代基(例如烷基或芳基)之碳原子數 0~60 的胺基、硫醇基、可具有取代基之碳原子數 1~20 的烷硫基、可具有取代基之碳原子數 6~30 的 1 價的芳香族羥基、或可具有取代基之環形成原子數 5~30 的 1 價的雜環基(較佳為可具有取代基之環形成原子數 5~30 的藉由氮原子鍵結之 1 價的芳香族雜環基、或可具有取代基之環形成原子數 5~30 的藉由氮原子鍵結之 1 價的脂肪族雜環基)。

在本發明的一態樣中，通式(1)的 R^1 為鹵素原子(例如，氯原子)、可具有取代基之碳原子數 0~60 的胺基、或可具有取代基之碳原子數 6~30 的 1 價的芳香族烴基。

在本發明的一態樣中，通式(1)的 R^1 為鹵素原子(例如氯原子)、可具有取代基之環形成原子數 5~30 的 1 價的雜環基、或可具有取代基之碳原子數 6~30 的 1 價的芳香族烴基。

【0034】 在通式(1)中， $R^2 \sim R^{29}$ 分別獨立地表示：

氫原子、

可具有取代基之碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷基、

可具有取代基之碳原子數 2~20 的直鏈狀或支鏈狀的烯基、

可具有取代基之碳原子數 3~12 的環烷基、

可具有取代基之碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷氧基、

可具有取代基之碳原子數 0~20 的胺基、或

可具有取代基之碳原子數 0~20 的硫基。

【0035】 在通式(1)中，作為由 $R^2 \sim R^{29}$ 表示之「可具有取代基之碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷基」中的「碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷基」，可列舉與在通式(1)中由 R^1 表示之「可具有取代基之碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷基」相同者。

【0036】 在通式(1)中，作為由 $R^2 \sim R^{29}$ 表示之「可具有取代基之碳原子數 2~20 的直鏈狀或支鏈狀的烯基」中的「碳原子數 2~20 的直鏈狀或支鏈狀的烯基」，可列舉與在通式(1)中由 R^1 表示之「可具有取代基之碳原子數 2~20 的直鏈狀或支鏈狀的烯基」相同者。

【0037】 在通式(1)中，作為由 $R^2 \sim R^{29}$ 表示之「可具有取代基之碳原子數 3~12 的環烷基」中的「碳原子數 3~12 的環烷基」，具體而言，

可列舉環丙基、環丁基、環戊基、環己基、環庚基、環辛基、環癸基、環十二基、4-甲基環己基、4-乙基環己基等。環烷基的碳原子數例如亦可以在 3~10 的範圍內選擇。

【0038】 在通式(1)中，作為由 $R^2 \sim R^{29}$ 表示之「可具有取代基之碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷氧基」中的「碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷氧基」，可列舉與在通式(1)中由 R^1 表示之「可具有取代基之碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷氧基」相同者。

【0039】 在通式(1)中，作為由 $R^2 \sim R^{29}$ 表示之「可具有取代基之碳原子數 0~20 的胺基」中的「碳原子數 0~20 的胺基」，具體而言，可列舉與在通式(1)中由 R^1 表示之「可具有取代基之碳原子數 0~60 的胺基」中的「碳原子數 0~20 的胺基」相同者。

【0040】 在通式(1)中，作為由 $R^2 \sim R^{29}$ 表示之「可具有取代基之碳原子數 1~20 的硫基」中的「碳原子數 1~20 的硫基」，具體而言，可列舉與在通式(1)中由 R^1 表示之「可具有取代基之碳原子數 1~20 的硫基」。

【0041】 在通式(1)中，作為由 $R^2 \sim R^{29}$ 表示之「可具有取代基之碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷基」、「可具有取代基之碳原子數 2~20 的直鏈狀或支鏈狀的烯基」、「可具有取代基之碳原子數 3~12 的環烷基」、「可具有取代基之碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷氧基」、「可具有取代基之碳原子數 0~20 的胺基」、或「可具有取代基之碳原子數 0~20 的硫基」中的「取代基」，亦可列舉與在通式(1)中由 R^1 表示之「可具有取代基之碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷基」等中的「取代基」相同者。

【0042】 在通式(1)中， R^{10} 和 R^{11} 、 R^{24} 和 R^{25} 可以彼此鍵結而形成

環。例如， R^{10} 和 R^{11} 、 R^{24} 和 R^{25} 可以經由單鍵、氧原子、硫原子、硒原子之鍵、或經由氮原子彼此鍵結而形成環。在本發明的一態樣中， R^{10} 和 R^{11} 、 R^{24} 和 R^{25} 中的至少 1 組藉由單鍵彼此鍵結，例如可以為 R^{10} 和 R^{11} 藉由單鍵彼此鍵結，並且 R^{24} 和 R^{25} 藉由單鍵彼此鍵結。在本發明的較佳一態樣中， R^{10} 和 R^{11} 、 R^{24} 和 R^{25} 均未彼此鍵結而形成環。 R^{10} 和 R^{11} 、 R^{24} 和 R^{25} 未彼此鍵結而形成環之化合物相較於彼此鍵結而形成環之化合物，由對於通常使用之溶劑的溶解性較高之觀點為較佳。

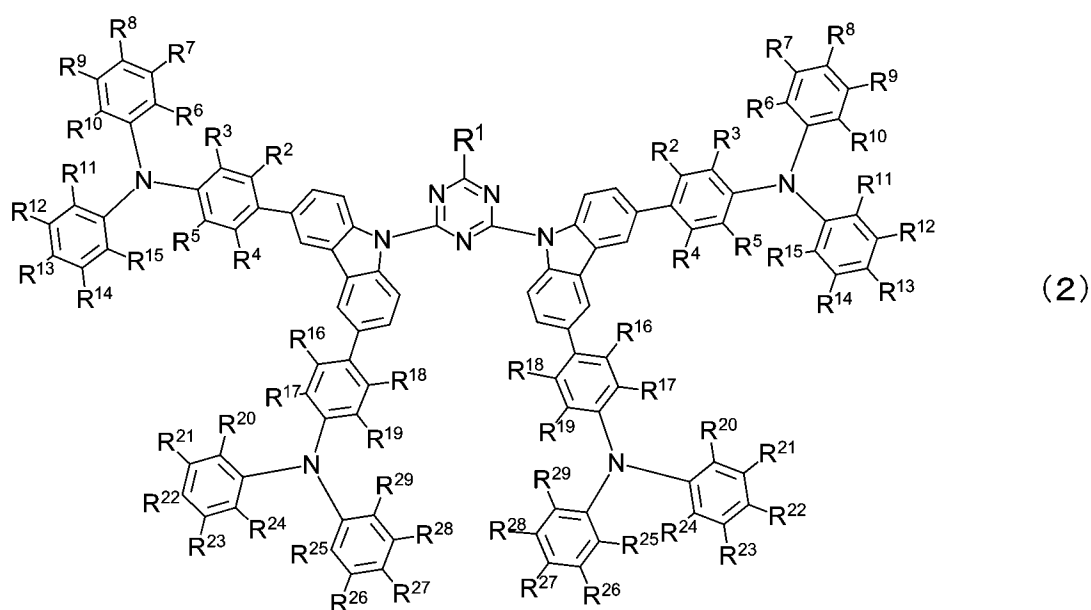
【0043】 在通式(1)中， $R^2 \sim R^{29}$ 中的至少 1 個(較佳為 $R^6 \sim R^{15}$ 、 $R^{20} \sim R^{29}$ 中的至少 1 個，更佳為 $R^7 \sim R^9$ 、 $R^{12} \sim R^{14}$ 、 $R^{21} \sim R^{23}$ 、 $R^{26} \sim R^{28}$ 中的至少 1 個)係 $R^2 \sim R^{29}$ 可以採用之取代基為較佳。 $R^2 \sim R^{29}$ 中為取代基者的數量在 1~12 的範圍內為較佳，例如可以在 1~8 的範圍內，亦可以在 4~8 的範圍內。當 2 個以上為取代基時，該等取代基可以相同，亦可以不同。較佳為相同的情況。在本發明中，選自 R^8 、 R^{13} 、 R^{22} 及 R^{27} 中之 1 個以上係取代基為較佳，例如該等全部可以為取代基。在本發明的一態樣中， $R^2 \sim R^{29}$ 所採用之取代基為可具有取代基之碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷氧基、可具有取代基之碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷硫基、可具有取代基之碳原子數 0~60 的胺基(較佳為二取代胺基)。例如， $R^2 \sim R^{29}$ 所採用之取代基為可具有取代基之碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷氧基。在本發明的一態樣中， $R^2 \sim R^5$ 、 $R^{16} \sim R^{19}$ 為氫原子。在本發明的一態樣中， R^6 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{15} 、 R^{20} 、 R^{24} 、 R^{25} 、 R^{29} 為氫原子。

【0044】 在通式(1)中，1 個三芳胺基在咪唑的 1~4 位中的任一個位置鍵結，1 個三芳胺基在咪唑的 5~8 位中的任一個位置鍵結。例如，1 個三芳胺基在咪唑的 2 位或 3 位鍵結，1 個三芳胺基在咪唑的 6 位或 7

位鍵結。存在於通式(1)中之 2 個呋啶的鍵結位置彼此相同為較佳。在本發明中，由通式(1)表示之化合物係三芳胺基在呋啶的 3 位及 6 位取代之由下述通式(2)表示之化合物、或三芳胺基在呋啶的 2 位及 7 位取代之由下述通式(3)表示之化合物為較佳。通式(2)及通式(3)的 $R^2 \sim R^{29}$ 的含義與前述通式(1)的 $R^2 \sim R^{29}$ 的含義相同。

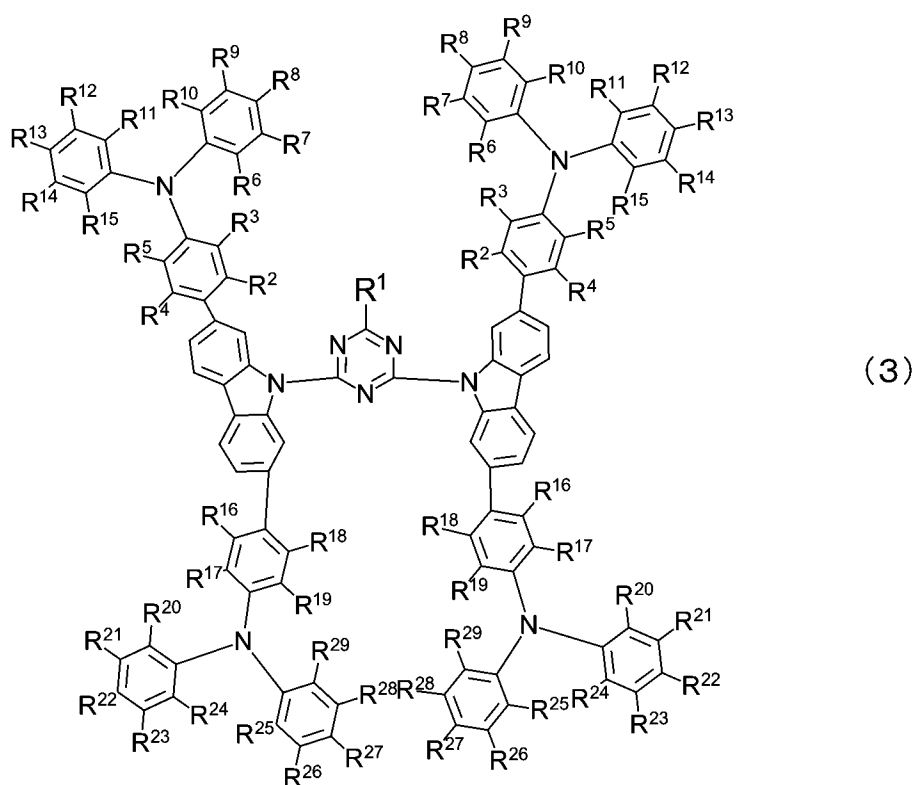
【0045】

[化 2]



【0046】

[化 3]



【0047】作為由通式(1)表示之化合物群組，可示出 R^1 為可具有取代基之環形成原子數 5~30 的 1 價的雜環基之化合物群組 1。化合物群組 1 包含： R^1 為可具有取代基之環形成原子數 5~30 的藉由碳原子鍵結之 1 價的芳香族雜環基之化合物群組 1a； R^1 為可具有取代基之環形成原子數 5~30 的二芳胺基(其中，2 個芳基彼此連結而形成環狀結構)之化合物群組 1b； R^1 為可具有取代基之環形成原子數 5~30 的藉由氮原子鍵結之 1 價的芳香族雜環基(其中，不包括屬於化合物群組 1b 之化合物)之化合物群組 1c； R^1 為可具有取代基之環形成原子數 5~30 的藉由碳原子鍵結之 1 價的脂肪族雜環基之化合物群組 1d； R^1 為可具有取代基之環形成原子數 5~30 的藉由氮原子鍵結之 1 價的脂肪族雜環基之化合物群組 1e。例如，化合物群組 1a~1e 的各群組的雜環基具有取代基。例如，化合物群組 1a~1e 的各群組的雜環基不具有取代基而是未經取代。化合物群組 1a~1e 分別可進一步滿足以下的至少一個附加條件。

附加條件之一為 $R^2 \sim R^{29}$ 中的 4~8 個為 $R^2 \sim R^{29}$ 可以採用之取代基。附加條件之一為 R^8 、 R^{13} 、 R^{22} 及 R^{27} 中的至少 1 個(例如全部)為 $R^2 \sim R^{29}$ 可以採用之取代基。附加條件之一為 $R^2 \sim R^{29}$ 中的至少一個為取代基且 $R^2 \sim R^{29}$ 所採用之取代基為可具有取代基之碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷氧基。附加條件之一為 $R^2 \sim R^{29}$ 中的至少一個為取代基且 $R^2 \sim R^{29}$ 所採用之取代基為可具有取代基之碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷硫基。附加條件之一為 $R^2 \sim R^{29}$ 中的至少一個為取代基且 $R^2 \sim R^{29}$ 所採用之取代基為可具有取代基之碳原子數 2~60 的二取代胺基。附加條件之一為化合物具有由上述通式(2)表示之結構。附加條件之一為化合物具有由上述通式(3)表示之結構。

【0048】 作為由通式(1)表示之化合物群組，可示出 R^1 為可具有取代基之碳原子數 6~30 的 1 價的芳香族烴基之化合物群組 2。化合物群組 2 包含 R^1 為未經取代之苯基之化合物群組 2a、 R^1 為取代苯基之化合物群組 2b、 R^1 為未經取代之縮合芳香族烴基之化合物群組 2c、 R^1 為具有取代基之縮合芳香族烴基之化合物群組 2d。例如，化合物群組 2b 和 2d 的取代基選自上述取代基群組 A。例如，化合物群組 2b 和 2d 的取代基為烷基或芳基。化合物群組 2a~2d 分別可進一步滿足化合物群組 1 的說明中所記載之至少 1 個附加條件。

【0049】 作為由通式(1)表示之化合物群組，可示出 R^1 為具有取代基之碳原子數 0~60 的胺基之化合物群組 3。化合物群組 3 包含 R^1 為未經取代之胺基之化合物群組 3a、 R^1 為單取代胺基之化合物群組 3b、 R^1 為可具有取代基之二芳胺基之化合物群組 3c、 R^1 為可具有取代基之二烷胺基之化合物群組 3d。例如，化合物群組 3b~3d 的取代基選自上述取代基群組 A。例如，化合物群組 3b~3d 的取代基為烷基或芳基。化合物

群組 3a~3d 分別可進一步滿足化合物群組 1 的說明中所記載之至少 1 個附加條件。

【0050】 作為由通式(1)表示之化合物群組，可示出 R^1 為鹵素原子之化合物群組 4。化合物群組 4 包含 R^1 為氟原子之化合物群組 4a、 R^1 為氯原子之化合物群組 4b、 R^1 為溴原子之化合物群組 4c、 R^1 為碘原子之化合物群組 4d。化合物群組 4a~4d 分別可進一步滿足化合物群組 1 的說明中所記載之至少 1 個附加條件。

【0051】 作為由通式(1)表示之化合物群組，可示出 R^1 為可具有取代基之碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷基之化合物群組 5。

作為由通式(1)表示之化合物群組，可示出 R^1 為可具有取代基之碳原子數 2~20 的直鏈狀或支鏈狀的烯基之化合物群組 6。

作為由通式(1)表示之化合物群組，可示出 R^1 為可具有取代基之碳原子數 1~20 的直鏈狀或支鏈狀的烷氧基之化合物群組 7。

作為由通式(1)表示之化合物群組，可示出 R^1 為可具有取代基之碳原子數 6~30 的芳氧基之化合物群組 8。

作為由通式(1)表示之化合物群組，可示出 R^1 為可具有取代基之碳原子數 0~20 的硫基之化合物群組 9。

作為由通式(1)表示之化合物群組，可示出 R^1 為氫原子之化合物群組 10。

作為由通式(1)表示之化合物群組，可示出 R^1 為羥基之化合物群組 11。

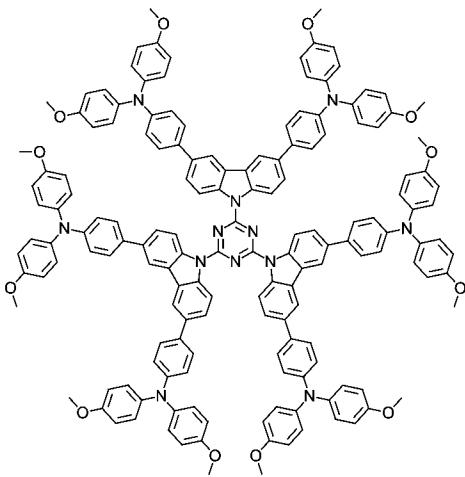
化合物群組 5~11 分別可進一步滿足化合物群組 1 的說明中所記載之至少 1 個附加條件。

【0052】 以下示出本發明的由前述通式(1)表示之化合物的具體例，

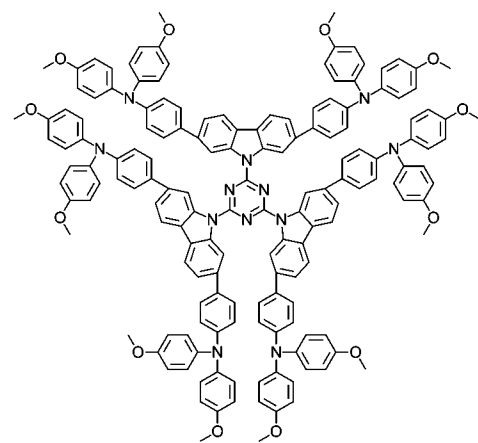
但是本發明中可採用之由通式(1)表示之化合物不應被該等具體例做限定性地解釋。又，以下的例示化合物省略了一部分氫原子、碳原子等而記載，示出了可存在之異構物中的一例，且包含其他所有異構物。又，亦可以為各自 2 種以上的異構物的混合物。

【0053】

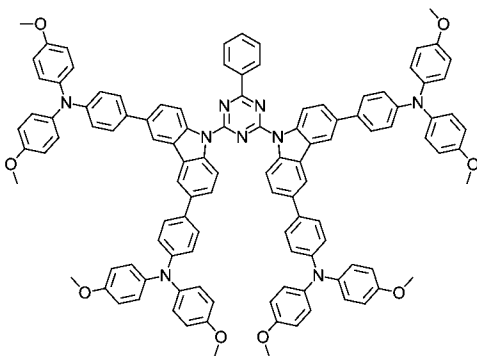
[化 4]



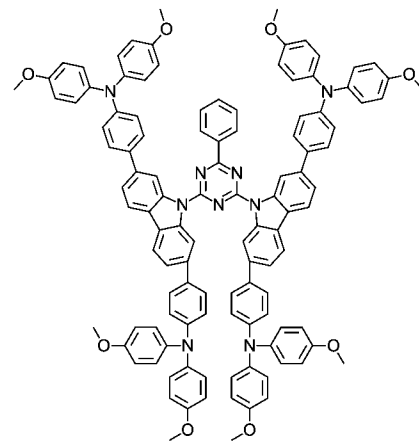
(A-1)



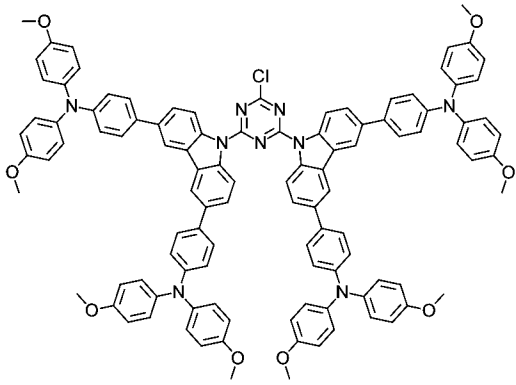
(A-2)



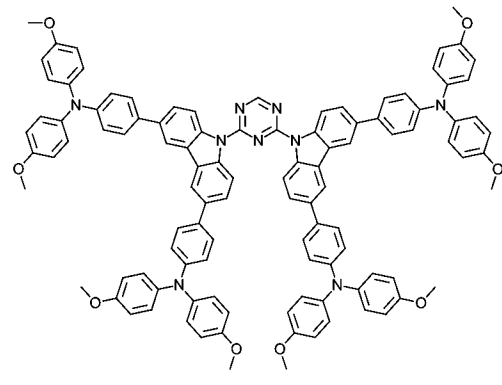
(A-3)



(A-4)



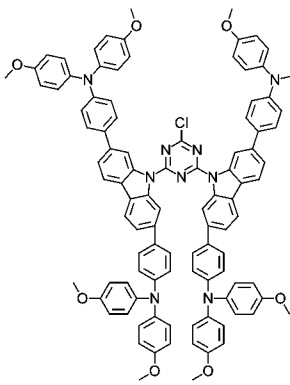
(A-5)



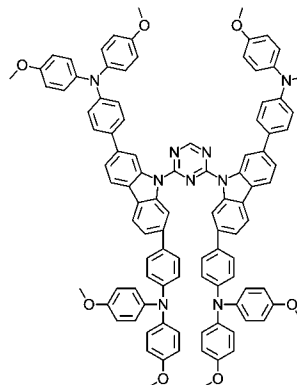
(A-6)

【0054】

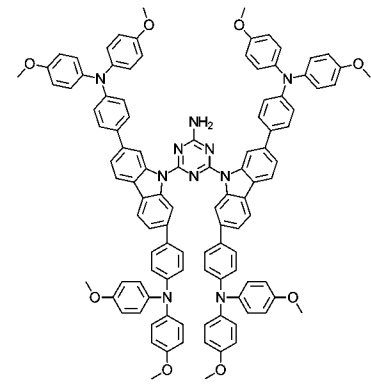
[化 5]



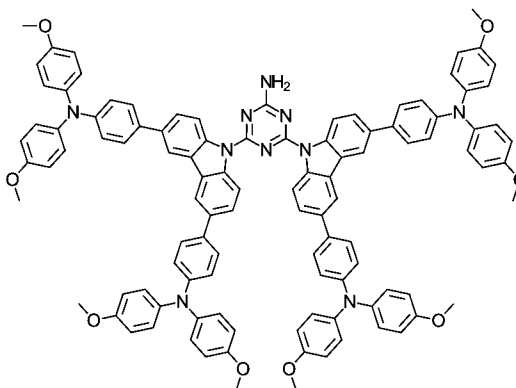
(A-7)



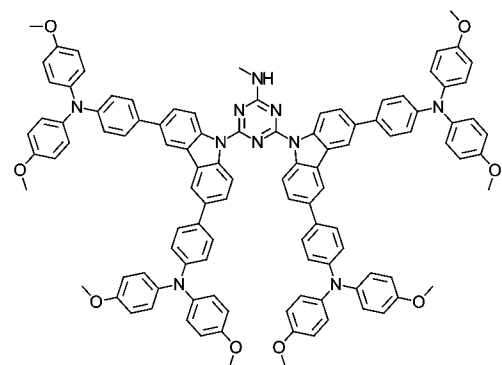
(A-8)



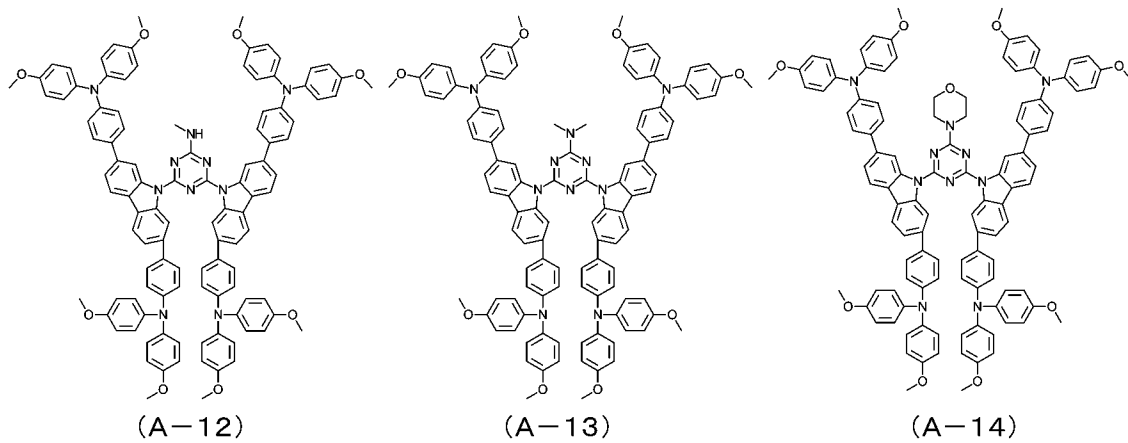
(A-9)



(A-10)

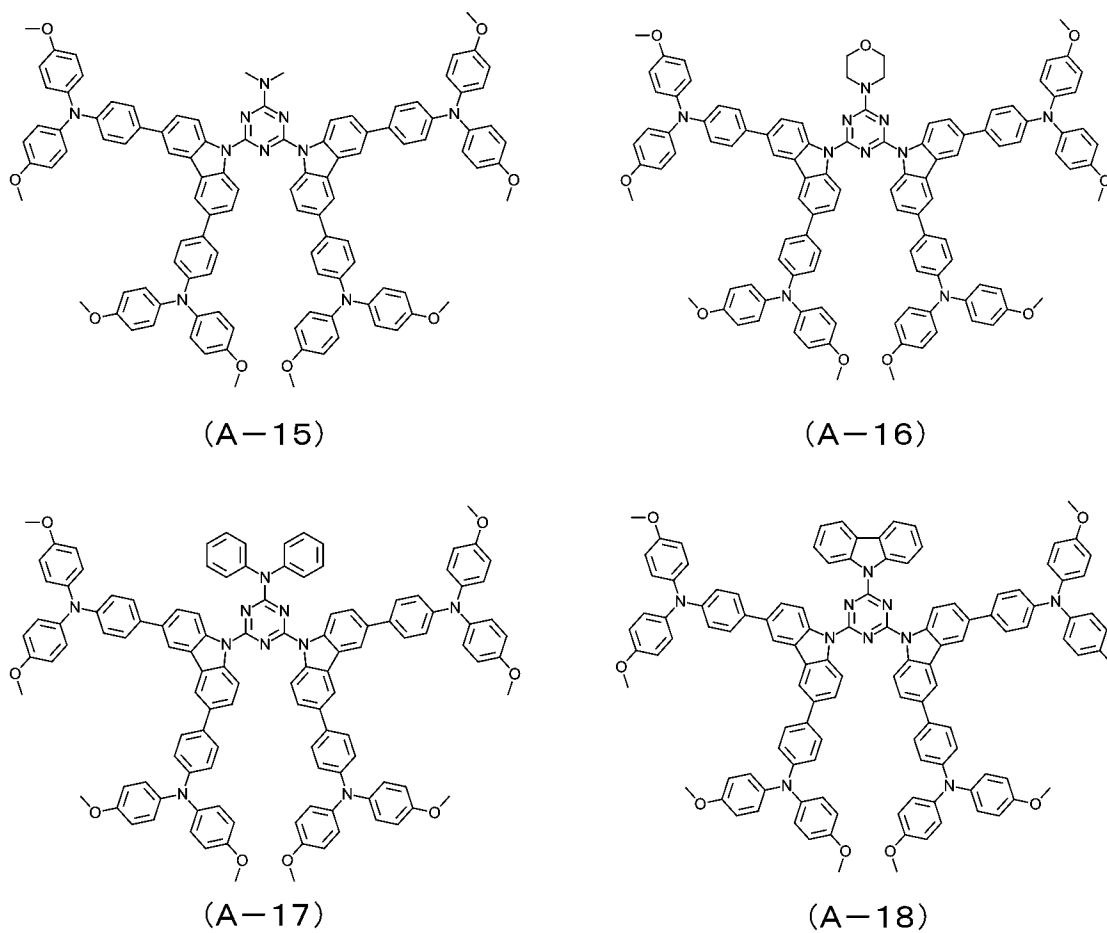


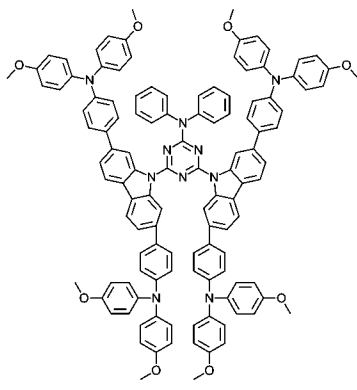
(A-11)



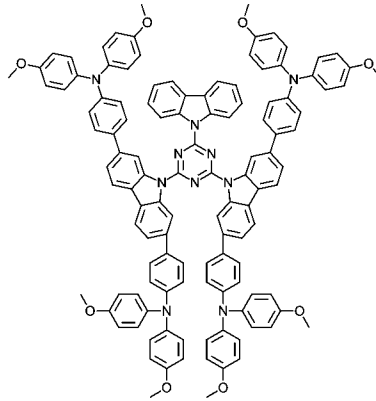
【0055】

[化 6]

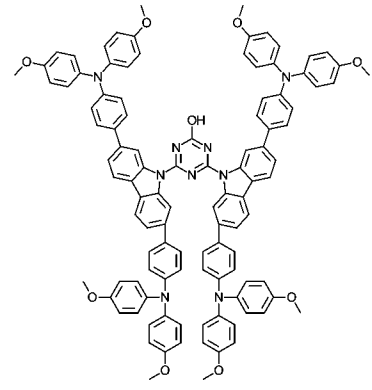




(A-19)



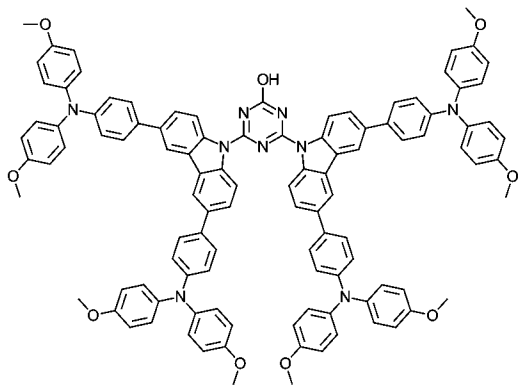
(A-20)



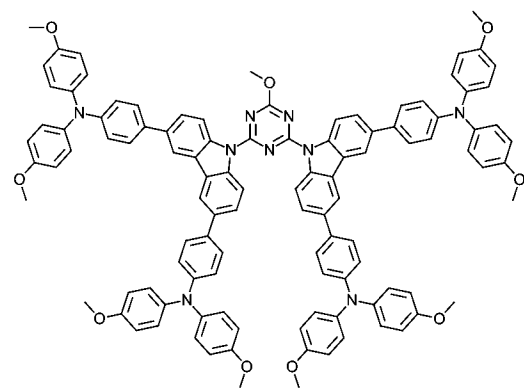
(A-21)

【0056】

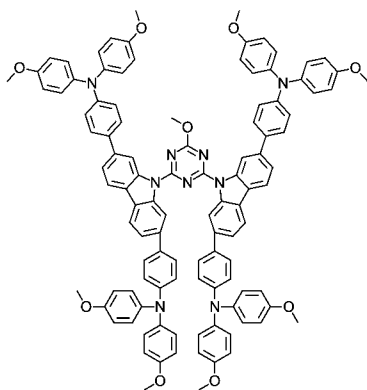
[化 7]



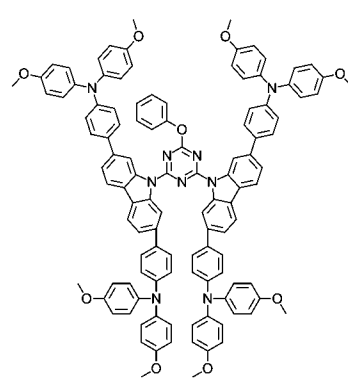
(A-22)



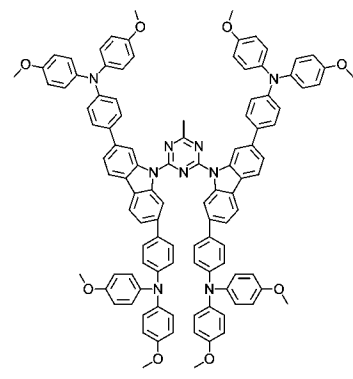
(A-23)



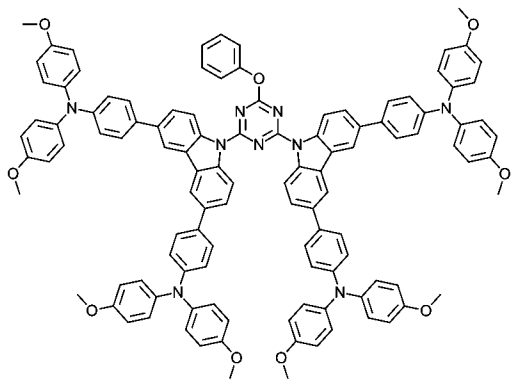
(A-24)



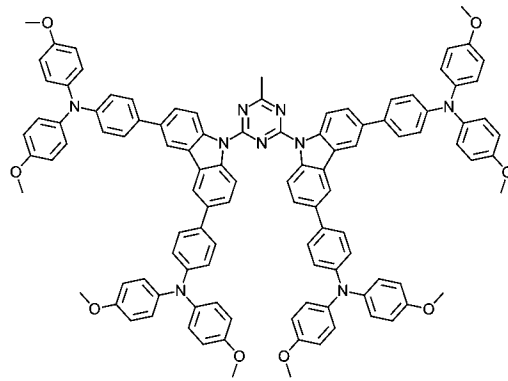
(A-25)



(A-26)



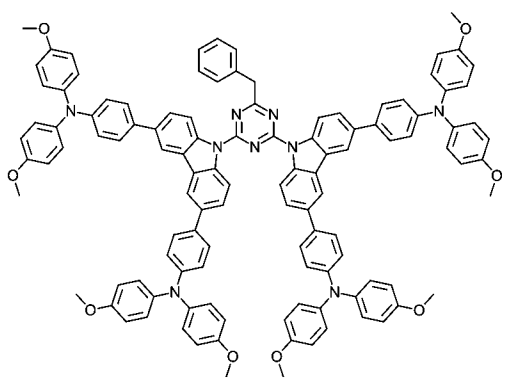
(A-27)



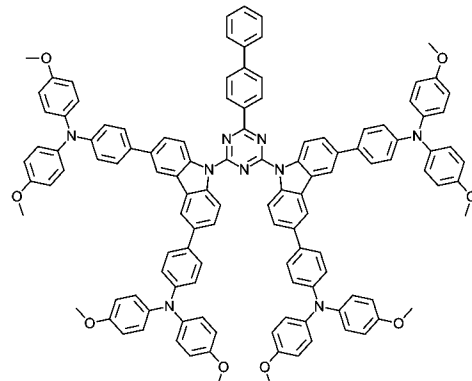
(A-28)

【0057】

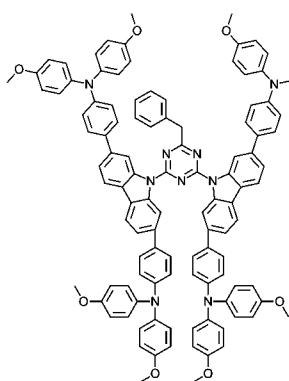
[化 8]



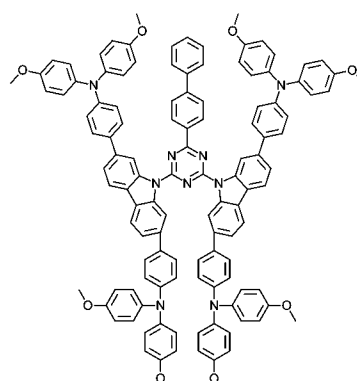
(A-29)



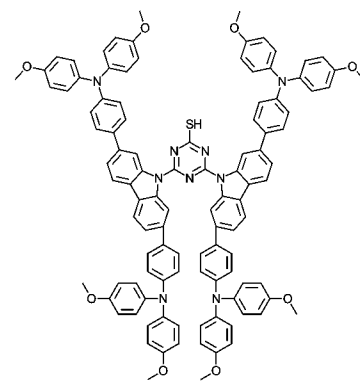
(A-30)



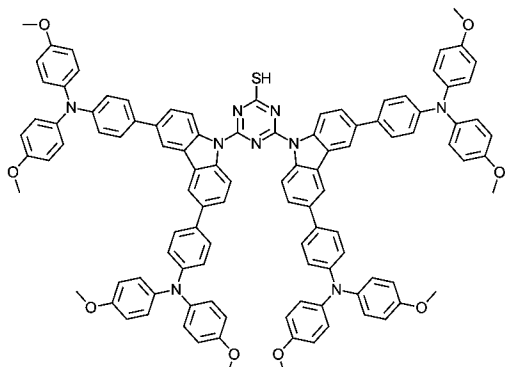
(A-31)



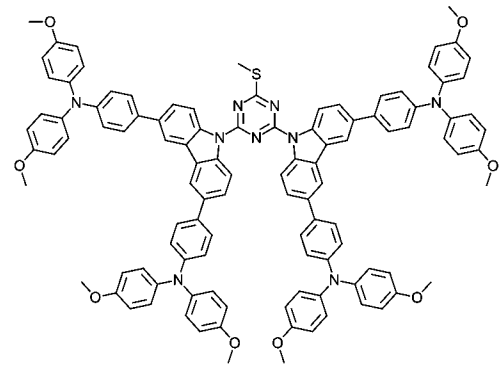
(A-32)



(A-33)



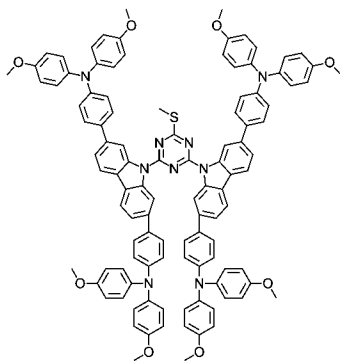
(A-34)



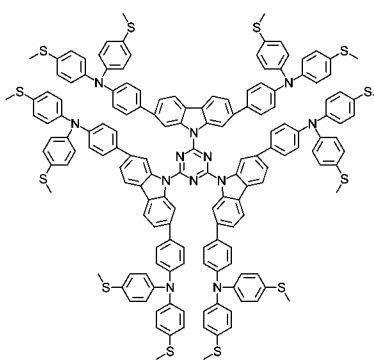
(A-35)

【0058】

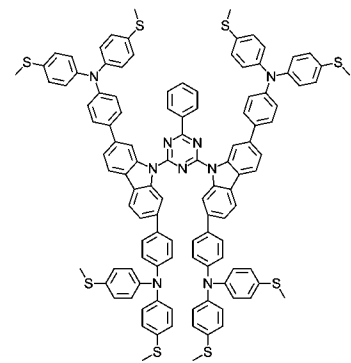
[化 9]



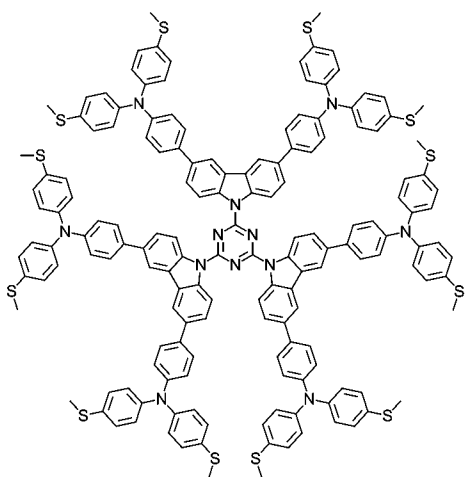
(A-36)



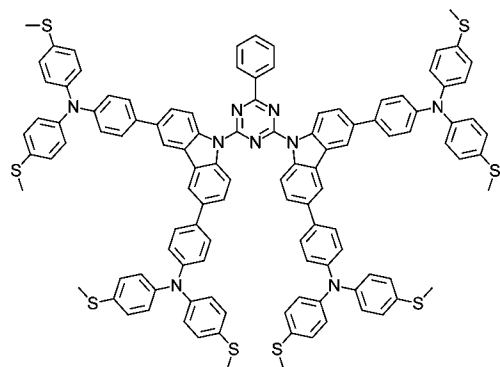
(A-37)



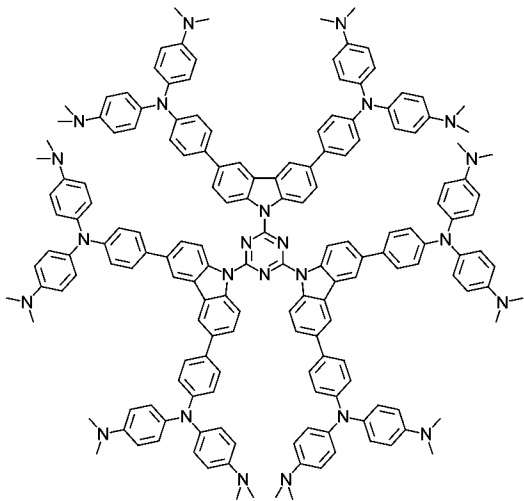
(A-38)



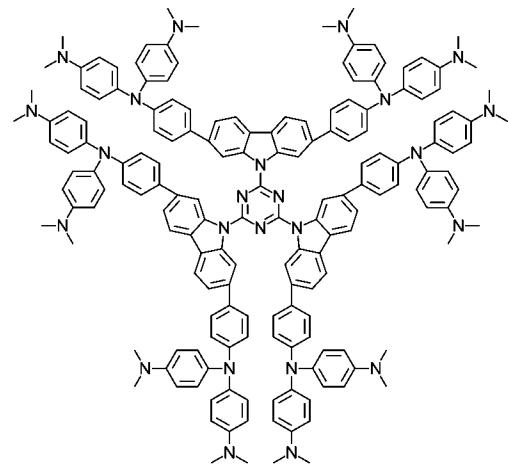
(A-39)



(A-40)



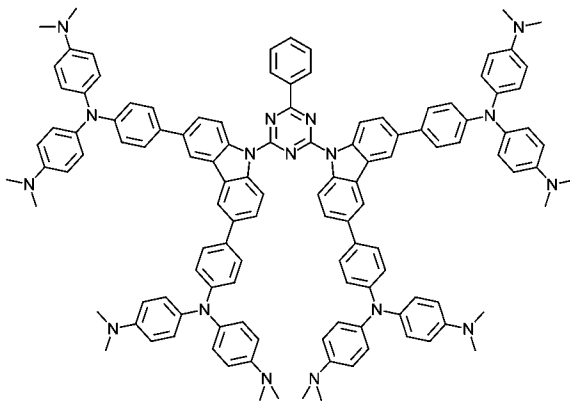
(A-41)



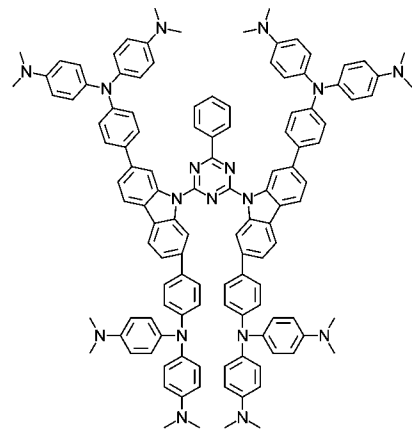
(A-42)

【0059】

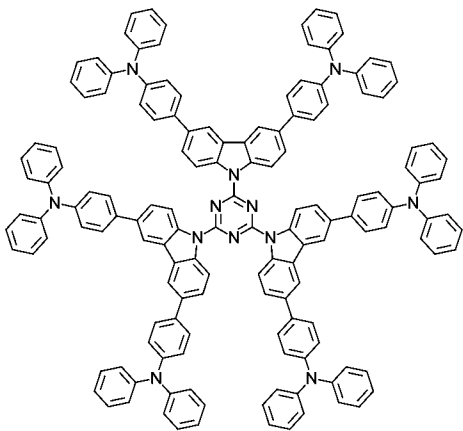
[化 10]



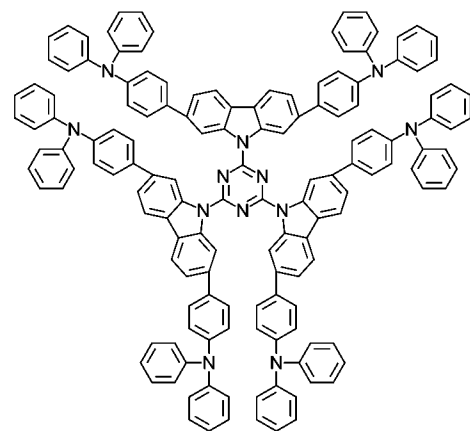
(A-43)



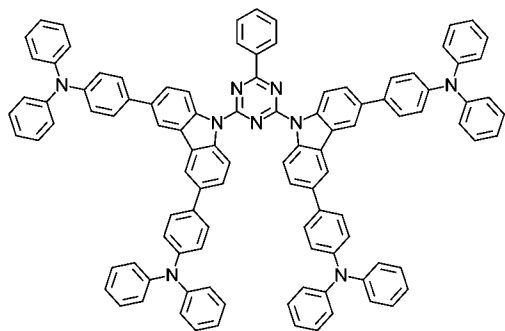
(A-44)



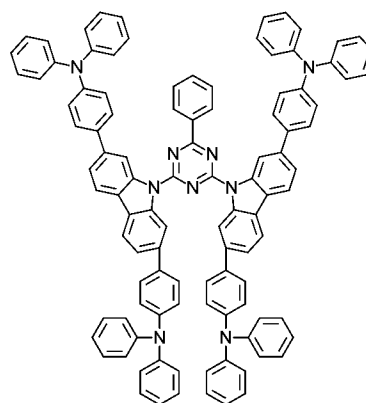
(A-45)



(A-46)



(A-47)



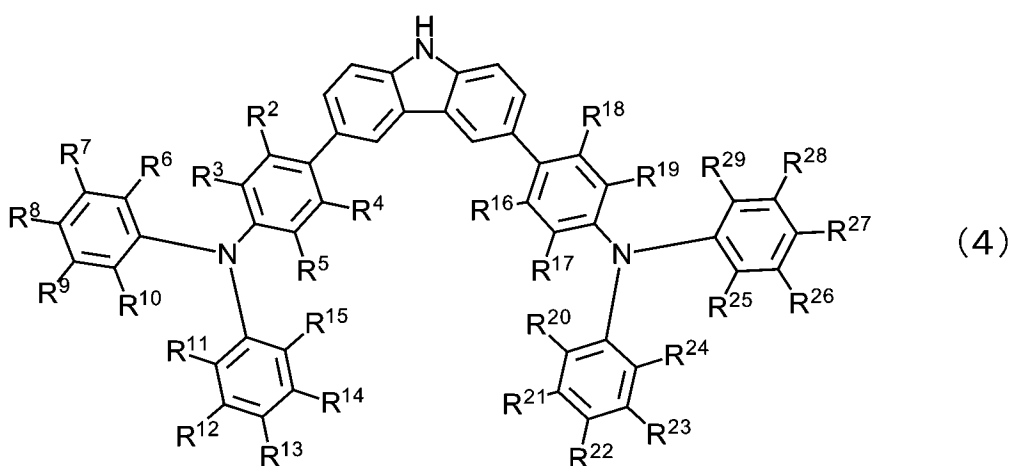
(A-48)

【0060】由前述通式(1)表示之本發明的化合物可藉由公知的方法來合成。由通式(1)表示之化合物中，由通式(2)表示之化合物和由通式(3)表示之化合物分別可藉由例如以下記載之方法來合成。

【0061】藉由氰脲醯氯(cyanuric chloride)或 2,4-二氯-1,3,5-三嘍啶衍生物與由下述通式(4)表示之 3,6-三芳胺基取代咪唑的親核取代反應，可合成前述通式(2)的化合物。

【0062】

[化 11]



(4)

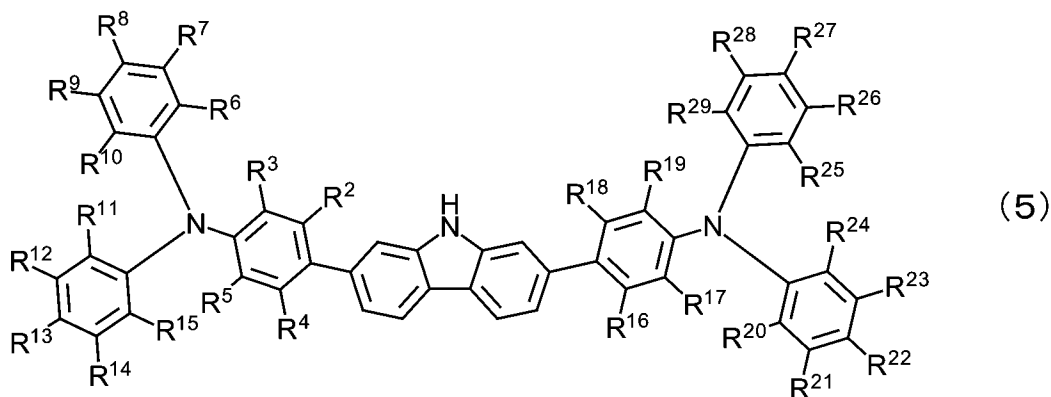
【0063】上述通式(4)的 $R^2 \sim R^{29}$ 的含義與前述通式(1)的 $R^2 \sim R^{29}$ 的含義相同。

【0064】藉由氰脲醯氯(cyanuric chloride)或 2,4-二氯-1,3,5-三嘍啶衍生物與由下述通式(5)表示之 2,7-三芳胺基取代咪唑的親核取代反應，

可合成前述通式(3)的化合物。

【0065】

[化 12]



【0066】 上述通式(5)的 $R^2 \sim R^{29}$ 的含義與前述通式(1)的 $R^2 \sim R^{29}$ 的含義相同。

【0067】 作為本發明的由前述通式(1)表示之化合物的精製方法，可藉由基於管柱層析法進行精製，基於矽膠、活性碳、活性白土等進行吸附精製，藉由溶劑的再結晶、結晶等進行。或者併用該等方法，使用提高了純度之化合物為有效。又，該等化合物的鑑定可藉由核磁共振分析(NMR)進行。

【0068】 以下，對本發明的光電轉換元件的較佳態樣進行說明。

【0069】

<光電轉換元件>

接著，對本發明的光電轉換元件進行說明。

本發明的光電轉換元件的特徵為具有包含由通式(1)表示之化合物之電洞傳輸層。關於由通式(1)表示之化合物的說明，可參考上述<由通式(1)表示之化合物>一欄的記載。由通式(1)表示之化合物具有優異的電洞傳輸性和電子阻擋性，因此可有效地用作光電轉換元件的電洞傳輸層的材料。

【0070】以下，對光電轉換元件的較佳態樣進行說明，但本發明的光電轉換元件的態樣並不因以下所示之態樣而被限定性地解釋。

在本發明的一態樣中，如圖 1 所示，光電轉換元件依序具有導電性支撐體 1、電子傳輸層 2、光電轉換層 3、電洞傳輸層 4 及相對電極 5，電洞傳輸層 4 包含由通式(1)表示之化合物。在本發明的一態樣中，光電轉換元件依序具有導電性支撐體、電洞傳輸層、光電轉換層、電子傳輸層及相對電極，電洞傳輸層包含由通式(1)表示之化合物。在此，光電轉換層例如包含鈣鈦礦型化合物。又，光電轉換元件例如為用於太陽能電池的光電轉換元件。

以下，以圖 1 所示之光電轉換元件為例，對光電轉換元件的各構件及各層進行說明。

【0071】

[導電性支撐體]

在圖 1 所示之光電轉換元件中，導電性支撐體 1 作為提取從光電轉換層 3 經由電子傳輸層 2 傳輸過來的電子之陰極發揮作用。在本發明的一態樣中，導電性支撐體 1 為可穿透用於光電轉換之光的具有透光性之導電性支撐體，例如為在透光性基板上形成有導電性材料的膜之導電性基板。

作為用於導電性支撐體之導電性材料的具體例，可列舉錫摻雜氧化銦(ITO)、鋅摻雜銦氧化物(IZO)、鎢摻雜銦氧化物(IWO)、鋅與鋁的氧化物(AZO)、氟摻雜氧化錫(FTO)、氧化銦(In_2O_3)、銦-錫複合氧化物等導電性透明氧化物半導體等，使用錫摻雜氧化銦(ITO)、氟摻雜氧化錫(FTO)等為較佳。

【0072】

[電子傳輸層]

電子傳輸層 2 為包含具有傳輸電子之功能之材料(電子傳輸材料)之層，配置於導電性支撐體 1 與光電轉換層 3 之間，具有將光電轉換層 3 中產生之電子向導電性支撐體 1 側傳輸之功能。藉此，可提高電子從光電轉換層向導電性支撐體移動的移動效率。又，電子傳輸層除了這樣的功能以外，亦可具有抑制來自導電性支撐體的電洞注入之功能。電子傳輸層 2 可以與導電性支撐體 1 相鄰而形成，亦可以在導電性支撐體 1 與電子傳輸層 2 之間夾雜其他層。

【0073】作為用於電子傳輸層之半導體材料的具體例，可列舉氧化錫(SnO 、 SnO_2 、 SnO_3 等)、氧化鈦(TiO_2 等)、氧化鎢(WO_2 、 WO_3 、 W_2O_3 等)、氧化鋅(ZnO)、氧化鈮(Nb_2O_5 等)、氧化鉭(Ta_2O_5 等)、氧化釷(Y_2O_3 等)、鈦酸鋇(SrTiO_3 等)等金屬氧化物；硫化鈦、硫化鋅、硫化鋅、硫化銅、硫化錫、硫化銻、硫化鎢、硫化鎘、硫化銀等金屬硫化物；硒化鈦、硒化鋅、硒化銻、硒化鎢等金屬硒化物；矽、鍺等單體半導體等。該等半導體材料可以單獨使用 1 種，亦可以組合使用 2 種以上。作為用於電子傳輸層之半導體材料的較佳例，可列舉將選自氧化錫、氧化鈦及氧化鋅中之 1 種或 2 種以上組合而成之材料。

【0074】作為用於形成電子傳輸層的材料，可列舉包含上述半導體材料的微粒之漿料(半導體漿料)。半導體漿料可以為市售品，亦可為藉由在溶劑中分散上述半導體材料的微細粉末而製備的製備品。作為製備半導體漿料時使用的溶劑的具體例，可列舉水；甲醇、乙醇、異丙醇等醇系溶劑；丙酮、甲基乙基酮、甲基異丁基酮等酮系溶劑；正己烷、環己烷、苯、甲苯等烴系溶劑，但並不限定於該等。該等溶劑可以單獨使用 1 種，亦可作為 2 種類以上的混合溶劑來使用。

【0075】作為在溶劑中分散半導體微粉末的方法，可列舉：根據需要用乳鉢等粉碎粉末之後，利用球磨機、油漆調節器、立式珠磨機、臥式珠磨機、攪磨機(attritor)等分散機分散在溶劑中的方法。製備漿料時，為了防止半導體微粒的凝聚，較佳係添加界面活性劑等，為了增加黏度，較佳係添加聚乙二醇等增稠劑。

【0076】電子傳輸層可利用公知的製膜方法形成。亦即，電子傳輸層可利用使用包含半導體材料之塗佈液(例如半導體漿料等電子傳輸層用塗佈液)之塗佈法、氣相製程來形成。具體而言，可列舉藉由旋塗法、噴墨法、刮刀法、滴鑄法、塗刷(squeegee)法、網版印刷法、反轉輥塗法、凹版塗佈法、鑄塗法、輥刷法、噴塗法、氣刀塗佈法、線棒(wire bar)塗佈法、管刮刀塗佈(pipe doctor)法、浸漬塗佈法或簾式塗佈法等濕式塗佈法，將電子傳輸層用塗佈液塗佈於導電性基板上之後，利用燒成去除溶劑和添加物來製膜的方法、利用濺射法、蒸鍍法、電沉積(electrodeposition)法、電解結晶(electrocrystallization)法、微波照射法等氣相成膜法使半導體材料成膜的方法。其中，利用藉由旋塗法塗佈所製備的電子傳輸層用塗佈液之塗佈法為較佳，但並不限定於此。再者，旋塗的條件可適當設定。製膜氣體環境並沒有特別限制，可以為大氣中，亦可以為惰性氣體環境。

【0077】電子傳輸層的膜厚例如為 5nm~200nm，較佳為 10nm~150nm。又，例如，從進一步提高光電轉換效率的觀點，使用緻密的電子傳輸層時，電子傳輸層的厚度通常係 5nm~100nm 為較佳，又 10nm~50nm 為更佳。在本發明中，除了緻密層以外，使用多孔質(mesoporous)金屬氧化物時，其膜厚通常係 20nm~200nm 為較佳，又 50nm~150nm 為更佳。

【0078】

[光電轉換層]

光電轉換層 3 為用於將光能轉換為電的層，更具體而言為藉由光能生成電荷分離狀態來產生電洞和電子之層。在圖 1 所示之光電轉換元件中，光電轉換層 3 形成於電子傳輸層 2 之與導電性支撐體 1 相反側。

【0079】 作為光電轉換層的例子，可列舉由鈣鈦礦材料形成之層(鈣鈦礦層)。在此，「鈣鈦礦材料」係指具有由通式 ABX_3 表示之鈣鈦礦型結構的材料。通式中，A 表示 1 價有機陽離子或 1 價金屬陽離子，B 表示 2 價金屬陽離子，X 表示鹵素離子。作為由 A 表示之 1 價陽離子，可列舉 K^+ 、 Rb^+ 、 Cs^+ 、 $CH_3NH_3^+$ (以下，MA：甲基銨)、 $NH=CHNH_2^+$ (以下，FA：甲脞)、 $CH_3CH_2NH_3^+$ (以下，EA：乙基銨)。作為由 B 表示之 2 價金屬陽離子，可列舉 Pb^{2+} 、 Sn^{2+} 。作為由 X 表示之鹵素離子，可列舉 I^- 、 Br^- 。

作為鈣鈦礦材料的具體例，可列舉 $MAPbI_3$ 、 $FAPbI_3$ 、 $EAPbI_3$ 、 $CsPbI_3$ 、 $MASnI_3$ 、 $FASnI_3$ 、 $EASnI_3$ 、 $MAPbBr_3$ 、 $FAPbBr_3$ 、 $EAPbBr_3$ 、 $MASnBr_3$ 、 $FASnBr_3$ 、 $EASnBr_3$ ，而且還可列舉 $(FAMA)Pb(I Br)_3$ 、 $K(FAMA)Pb(I Br)_3$ 、 $Rb(FAMA)Pb(I Br)_3$ 、 $Cs(FAMA)Pb(I Br)_3$ 之類的混合陽離子型及混合陰離子型鈣鈦礦材料。光電轉換層可以僅包含選自該等鈣鈦礦材料中的 1 種，亦可以包含 2 種以上。

【0080】 又，光電轉換層可以僅由鈣鈦礦材料構成，亦可以包含鈣鈦礦材料和其他材料。作為其他材料，可列舉光吸收劑。

【0081】 鈣鈦礦層可藉由塗佈鹵化物 AX 與金屬鹵化物 BX_2 的溶液(鈣鈦礦前驅物溶液)形成前驅物塗膜並乾燥該前驅物塗膜來形成。關於 A、B、X 的具體例，可參考關於構成上述 ABX_3 之各離子的記載。例如，作為鹵化物 AX 的具體例，可列舉甲基銨鹵化物、甲脞鹵化物、銨鹵化物，

作為金屬鹵化物 BX_2 的具體例，可列舉鉛鹵化物、錫鹵化物。

【0082】從前驅物的溶解性的觀點考慮，鈣鈦礦前驅物溶液的溶劑可列舉 N,N-二甲基甲醯胺(DMF)、二甲基亞砜(DMSO)、 γ -丁內酯等，但並不限定於該等。又，該等溶劑可以單獨使用 1 種，亦可以混合使用 2 種以上。作為溶劑的較佳例，可列舉 N,N-二甲基甲醯胺與二甲基亞砜的混合溶劑。又，溶劑使用含水量為 10ppm 以下的脫水溶劑為較佳。溶劑的脫水可利用分子篩等進行。

【0083】鈣鈦礦前驅物溶液的塗佈步驟在乾燥環境下進行為較佳，在手套箱等乾燥惰性氣體環境下進行為更佳。藉此，防止水分混入鈣鈦礦層，可以良好的再現性製造高效率鈣鈦礦型太陽能電池。關於塗佈方法，可參考關於上述[電子傳輸層]一欄中記載之電子傳輸層用塗佈液的塗佈方法的記載。

【0084】鈣鈦礦層藉由乾燥如此形成的前驅物塗膜來形成。前驅物塗膜的乾燥可以為自然乾燥，亦可以為使用加熱板等之加熱乾燥。從藉由前驅物生成鈣鈦礦材料的觀點考慮，藉由加熱板等加熱前驅物塗膜時的溫度為 50~200°C 為較佳，70~150°C 為更佳。又，加熱時間為 10~90 分鐘左右為較佳，10~60 分鐘左右為更佳。

【0085】光電轉換層(鈣鈦礦層)的膜厚為 50~1000nm 為較佳，300~700nm 為更佳。藉此，抑制由光轉換層的缺陷、剝離引發的性能劣化，並且避免元件電阻變得過高，又，可使光電轉換層具有充分的光吸收率。

【0086】

[電洞傳輸層]

在圖 1 所示之光電轉換元件中，電洞傳輸層 4 為包含具有傳輸電洞之功能的材料(電洞傳輸材料)之層，配置於光電轉換層 3 與相對電極 5 之

間，具有將產生於光電轉換層 3 之電洞向相對電極 5 側傳輸之功能。藉此，可提高電洞從光電轉換層向電極的移動效率。又，電洞傳輸層除了這樣的功能以外，還可具有抑制來自相對電極的電子注入。

【0087】 本發明的光電轉換元件中，電洞傳輸層含有由通式(1)表示之化合物作為電洞傳輸材料。電洞傳輸層所含有的由通式(1)表示之化合物可以為選自由通式(1)表示之化合物群組中之 1 種或 2 種以上。藉由電洞傳輸層包含由通式(1)表示之化合物，可製成電洞傳輸能力高且阻擋來自相對電極的電子移動之功能優異的層。又，電洞傳輸層除了包含由通式(1)表示之化合物以外，亦可以包含不屬於由通式(1)表示之化合物之電洞傳輸材料(以下，稱為「第 2 電洞傳輸材料」)、添加劑。

【0088】 第 2 電洞傳輸材料可以為無機電洞傳輸材料，亦可以為有機電洞傳輸材料。作為無機電洞傳輸材料的具體例，例如，可列舉包含 CuI、CuInSe₂、CuS 等 1 價銅之化合物半導體；包含 GaP、NiO、CoO、FeO、Bi₂O₃、MoO₂、Cr₂O₃ 等銅以外的金屬之化合物。作為有機電洞傳輸材料，例如，可列舉聚-3-己基噻吩(P3HT)、聚乙烯二氧基噻吩(PEDOT)等聚噻吩衍生物；2,2',7,7'-四-(N,N-二-對甲氧基苯胺基)-9,9'-螺二芴(Spiro-OMeTAD)等芴衍生物；聚乙烯吡啶等吡啶衍生物；聚[雙(4-苯基)(2,4,6-三甲基苯基)胺](PTAA)等三苯基胺衍生物；二苯基胺衍生物；聚矽烷衍生物；聚苯胺衍生物等。該等第 2 電洞傳輸材料可以混合在電洞傳輸層中，亦可以在包含由通式(1)表示之化合物之電洞傳輸層上積層包含第 2 電洞傳輸材料之電洞傳輸層。在本發明的一態樣中，電洞傳輸層為單一層，且僅包含由通式(1)表示之化合物作為電洞傳輸材料。

【0089】 關於電洞傳輸層的形成方法，可參考關於上述電子傳輸層的形成方法的記載。又，電洞傳輸層用塗佈液的溶劑亦可使用下述溶劑。

亦即，電洞傳輸層塗佈液中使用的溶劑可列舉苯、甲苯、二甲苯、均三甲苯、四氫萘(1,2,3,4-四氫萘)、一氯苯(氯苯)、鄰二氯苯、間二氯苯、對二氯苯、硝基苯等芳香族系有機溶劑；二氯甲烷、氯仿、1,2-二氯乙烷、1,1,2-三氯乙烷等鹵化烷基系有機溶劑；苯甲腈、乙腈等腈系溶劑；四氫呋喃、二噁咄、二異丙醚、*c*-戊基甲醚、乙二醇二甲醚、乙二醇二乙醚、丙二醇單甲醚等醚系溶劑；乙酸乙酯、丙二醇單甲醚乙酸酯等酯系溶劑；甲醇、異丙醇、正丁醇、丙二醇、1,3-丁二醇、1,4-丁二醇、2,3-丁二醇、環己醇、2-正丁氧基乙醇等醇系溶劑等，但並不限定於該等。該等溶劑可以單獨使用 1 種，亦可以混合使用 2 種以上。其中，電洞傳輸層形成塗佈液的溶劑使用芳香族系有機溶劑及鹵化烷基系有機溶劑為較佳。

【0090】 電洞傳輸層的製膜時的環境為乾燥環境為較佳。又，在塗佈液中使用經脫水而含水量成為 10ppm 以下的溶劑為較佳。藉由防止水分混入，可以良好的再現性製造高效率鈣鈦礦型太陽能電池。

從進一步提高光電轉換效率的觀點考慮，電洞傳輸層的膜厚為 5nm ~ 500nm 為較佳，10nm ~ 250nm 為更佳。

【0091】

添加劑

作為可添加到電洞傳輸層的添加劑，可列舉氧化劑(摻雜劑)、鹼性化合物(鹼性添加劑)。藉由將該等添加劑添加到電洞傳輸層，提高電洞傳輸層的載子濃度而可提高光電轉換元件的光電轉換效率。

【0092】 作為摻雜劑的具體例，可列舉雙(三氟甲磺醯基)醯亞胺鋰(LiTFSI)、雙(三氟甲磺醯基)醯亞胺銀、雙(三氟甲磺醯基)醯亞胺鋅(II)、雙(三氟甲磺醯基)醯亞胺銅(II)、雙(三氟甲磺醯基)醯亞胺鎂(II)、雙(三

氟甲磺醯基)醯亞胺鈣(II)、三(2-(1H-吡啶-1-基)-4-三級丁基吡啶)鈷(III)三[雙(三氟甲烷)磺醯亞胺](FK209)、 NOSbF_6 、 SbCl_5 、 SbF_5 等，其中，使用雙(三氟甲磺醯基)醯亞胺鋰(LiTFSI)為較佳。

【0093】 電洞傳輸層中的摻雜劑的濃度相對於電洞傳輸材料 1 當量，2.0 當量以下為較佳，0.5 當量以下為更佳。此係由於，電洞傳輸層含有添加劑會提高光電轉換元件的光電轉換效率，另一方面，若摻雜劑的濃度過高，則光電轉換元件的耐久性有可能會降低。

作為鹼性添加劑的具體例，可列舉 4-三級丁基吡啶(tBP)、2-甲吡啶、2,6-二甲吡啶等，其中，使用 4-三級丁基吡啶為較佳。再者，可以將鹼性添加劑與摻雜劑同時使用。

電洞傳輸層中的鹼性添加劑的濃度相對於電洞傳輸材料 1 當量，5 當量以下為較佳，3.5 當量以下為更佳。

【0094】

[相對電極]

相對電極 5 為形成於電洞傳輸層 4 之與光電轉換層 3 相反側的電極，在其間夾雜上述電子傳輸層 2、光電轉換層 3 及電洞傳輸層 4 而與導電性支撐體 1 相對向配置。相對電極作為提取從光電轉換層經由電洞傳輸層傳輸過來的電洞之陽極發揮作用。相對電極 5 可以與電洞傳輸層 4 相鄰設置，亦可以在電洞傳輸層 4 與相對電極 5 之間夾雜由有機材料或無機化合物半導體構成之電子阻擋層。

【0095】 作為相對電極的構成材料，具體而言，可列舉鉑、鈦、不鏽鋼、鋁、金、銀、鎳、鎂、鉻、鈷、銅等金屬或該等的合金。該等中，從在薄膜中亦表現高導電性方面考慮，使用金、銀或銀的合金為較佳。作為銀的合金，從不易受到硫化或氯化的影響而作為薄膜的穩定性高的情

況考慮，可列舉銀與金的合金、銀與銅的合金、銀與鈮的合金、銀、銅及鈮的合金、銀與鉑的合金等。又，相對電極為可在蒸鍍等氣相製程中形成之材料為較佳。

作為相對電極使用金屬電極時，為了獲得良好的導電性，其膜厚為10nm以上為較佳，50nm以上為更佳。

【0096】 在圖 1 所示之光電轉換元件中，導電性支撐體 1 為陰極，相對電極 5 為陽極。太陽光等光(用於光電轉換之光)從導電性支撐體側照射為較佳。藉由太陽光等照射，光電轉換層吸收光而成為激發狀態，生成電子和電洞。藉由該電子經由電子傳輸層向導電性支撐體移動且電洞經由電洞傳輸層向相對電極移動而使電流流動，並作為光電轉換元件發揮作用。

又，本發明的光電轉換元件可以依序具有導電性支撐體、電洞傳輸層、光電轉換層、電子傳輸層及相對電極。此時，導電性支撐體作為陽極發揮作用，相對電極作為陰極發揮作用而在光電轉換層中產生的電子經由電子傳輸層向相對電極移動，在光電轉換層中產生的電洞經由電洞傳輸層向導電性支撐體移動。藉此，可將電流提取到外部。關於該態樣中使用之各部及各層的材料說明和具體例，可參考關於上述圖 1 所示之光電轉換元件的對應記載。

【0097】 對本發明的光電轉換元件的性能(特性)進行評價時，進行短路電流密度、開路電壓、填充因子(fill factor)、光電轉換效率的測定。短路電流密度係指使輸出端子短路時在兩端子之間流動的每 1cm^2 的電流，開路電壓係指使輸出端子開路時的兩端子之間的電壓。又，填充因子係指將最大輸出(電流與電壓的乘積)除以短路電流密度與開路電壓的乘積而得之值，主要受到內電阻的影響。光電轉換效率如下求出：對將最大

輸出(W)除以每 1cm^2 的光強度(W)而得之值乘以 100 表示為百分率的值。作為本發明的元件結構下的光電轉換元件的初始光電轉換效率，若示出 10% 以上，則可判斷為具有良好的光電轉換效率。

【0098】 本發明的光電轉換元件可應用於太陽能電池、各種光感測器等。適用本發明的光電轉換元件之太陽能電池為鈣鈦礦型太陽能電池為較佳。太陽能電池藉由將在電洞傳輸層中包含由通式(1)表示之化合物的光電轉換元件作為電池，並將所需數量的該電池排列而模組化，且設置規定的電氣配線來獲得。

[實施例]

【0099】 以下，藉由示出實施例對本發明的特徵進行具體的說明。以下所示之材料、處理內容、處理程序等只要不脫離本發明的主旨，則可適當變更。因此，本發明並不限定於以下的實施例。再者，藉由 $^1\text{H-NMR}$ ($^1\text{H-NMR}$ (JEOL Ltd.製核磁共振裝置，JNM-ECZ400S/L1 型)進行了合成實施例中獲得之化合物的鑑定。

【0100】

[合成實施例 1] 化合物(A-1)的合成

在反應容器中投入 3,6-雙(4-(雙(4-甲氧基苯基)胺基)苯基)-9H-吡啶(336mg, Tokyo Chemical Industry Co., Ltd.製)、DMF(10mL)、氫化鈉(19mg, 純度 55%, Kanto Chemical Co., Inc.製)，並在冰浴下攪拌了 30 分鐘。進而，投入氰脲醯氯(25mg, Tokyo Chemical Industry Co., Ltd.製)，並在室溫下攪拌了 1 小時。反應結束後，投入水(20mL)，並藉由抽濾回收了所析出之固體。藉由矽膠管柱(甲苯：乙酸乙酯=20：1)精製所濾取之粗生成物，並獲得了作為淡黃色粉末(產量：263mg, 產率：81%)的化合物(A-1)。

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz, DMSO- d_6): δ (ppm)=8.71(6H)、8.34(6H)、7.48(12H)、7.38(6H)、6.95(24H)、6.83(24H)、3.71(36H)。

【0101】

[合成實施例 2]化合物(A-2)的合成

在反應容器中投入 2,7-雙(4-(雙(4-甲氧基苯基)胺基)苯基)-9H-咪唑(168mg, Tokyo Chemical Industry Co., Ltd.製)、DMF(3mL)、氫化鈉(10mg, 純度 55%, Kanto Chemical Co., Inc.製), 並在冰浴下攪拌了 30 分鐘。進而, 投入氰脲醯氯(15mg, Tokyo Chemical Industry Co., Ltd.製), 並在室溫下攪拌了 1 小時。反應結束後, 投入水(20mL), 並藉由抽濾回收了所析出之固體。藉由矽膠管柱(甲苯:乙酸乙酯=20:1)精製所濾取之粗生成物, 並獲得了作為淡黃色粉末(產量: 74mg, 產率: 47%)的化合物(A-2)。

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz, DMSO- d_6): δ (ppm)=9.15(6H)、8.13(6H)、7.58(6H)、7.13(12H)、6.84(48H)、3.72(36H)。

【0102】

[合成實施例 3]化合物(A-3)的合成

在反應容器中投入 3,6-雙(4-(雙(4-甲氧基苯基)胺基)苯基)-9H-咪唑(143mg, Tokyo Chemical Industry Co., Ltd.製)、DMF(3mL)、氫化鈉(9mg, 純度 55%, Kanto Chemical Co., Inc.製), 並在冰浴下攪拌了 30 分鐘。進而, 投入 2,4-二氯-6-苯基-1,3,5-三吡啶(20mg, Tokyo Chemical Industry Co., Ltd.製), 並在室溫下攪拌了 30 分鐘。反應結束後, 投入水(20mL), 並藉由抽濾回收了所析出之固體。藉由矽膠管柱(甲苯:乙酸乙酯=6:1)精製所濾取之粗生成物, 並獲得了作為黃色粉末(產量: 104mg, 產率: 69%)的化合物(A-3)。

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz, DMSO- d_6): δ (ppm)=8.82(4H)、8.58(2H)、8.46(4H)、7.68(3H)、7.63(4H)、7.55(8H)、6.95(16H)、6.84(16H)、6.78(8H)、3.69(24H)。

【0103】

[合成實施例 4]化合物(A-4)的合成

在反應容器中投入 2,7-雙(4-(雙(4-甲氧基苯基)胺基)苯基)-9H-吡啶(143mg, Tokyo Chemical Industry Co., Ltd.製)、DMF(3mL)、氫化鈉(10mg, 純度 55%, Kanto Chemical Co., Inc.製), 並在冰浴下攪拌了 30 分鐘。進而, 投入 2,4-二氯-6-苯基-1,3,5-三吡啶(20mg, Tokyo Chemical Industry Co., Ltd.製), 並在室溫下攪拌了 1.5 小時。反應結束後, 投入水(20mL), 並藉由抽濾回收了所析出之固體。用甲醇、乙酸乙酯清洗所濾取之粗生成物, 並獲得了作為黃色粉末(產量: 96mg, 產率: 64%)的化合物(A-4)。

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz, DMSO- d_6): δ (ppm)=9.15(4H)、8.61(2H)、8.05(4H)、7.65(1H)、7.57(4H)、7.49(2H)、7.34(8H)、6.93(16H)、6.85(16H)、6.65(8H), 3.72(24H)。

【0104】

[合成實施例 5]化合物(A-5)的合成

在反應容器中投入 3,6-雙(4-(雙(4-甲氧基苯基)胺基)苯基)-9H-吡啶(600mg, Tokyo Chemical Industry Co., Ltd.製)、DMF(12mL)、氫化鈉(34mg, Kanto Chemical Co., Inc.製), 並在冰浴下攪拌了 30 分鐘。將反應體系冷卻至 -10°C 之後, 投入氰脲醯氯(23mg, Tokyo Chemical Industry Co., Ltd.製), 在 -10°C 下攪拌了 2 小時, 並在 0°C 下攪拌了 90 分鐘。反應結束後, 投入水(50mL), 並藉由抽濾回收了所析出之固體。

藉由矽膠管柱(甲苯：乙酸乙酯=50：1→30：1→10：1)精製所濾取之粗生成物，並獲得了作為黃色粉末(產量：200mg、產率：30%)的化合物(A-5)。

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz，DMSO- d_6)： δ (ppm)=8.53(4H)、8.22(4H)、7.46(12H)、6.77-6.93(40H)、3.72(24H)。

【0105】

[合成實施例 6]化合物(A-16)的合成

在反應容器中投入 3,6-雙(4-(雙(4-甲氧基苯基)胺基)苯基)-9H-吡啶(280mg，Tokyo Chemical Industry Co., Ltd.製)、DMF(5mL)、氫化鈉(16mg，Kanto Chemical Co., Inc.製)，並在冰浴下攪拌了 30 分鐘。進而，投入 2,4-二氯-6-咪啉基-1,3,5-三吡啶(40mg，Tokyo Chemical Industry Co., Ltd.製)，並在室溫下攪拌了 90 分鐘。反應結束後，投入水(50mL)，並藉由抽濾回收了所析出之固體。藉由矽膠管柱(甲苯：乙酸乙酯=10：1)精製所濾取之粗生成物，並獲得了作為淡黃色粉末(產量：99mg，產率：33%)的化合物(A-16)。

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz，DMSO- d_6)： δ (ppm)=8.65(4H)、8.47(4H)、7.53(12H)、6.94(16H)、6.84(16H)、6.76(8H)、3.99(4H)、3.81-3.87(4H)、3.70(24H)。

【0106】

[實施例 1]使用了化合物(A-1)之光電轉換元件的製作

用異丙醇對帶 ITO 膜的玻璃(導電性支撐體 1，GEOMATEC Co., Ltd.製)進行超音波清洗，並進行了 UV 臭氧處理。之後，在相對濕度 10% 以下的乾燥環境下，藉由塗佈法形成了下述的電子傳輸層 2、光電轉換層 3 及電洞傳輸層 4。

在 ITO 膜上旋塗將氧化錫膠體溶液(氧化錫(IV)，15% H₂O 膠體分散液(Alfa Aesar 公司製)和精製水以 1 : 1(體積比)混合而得之氧化錫分散液(電子傳輸層用塗佈液)。之後，藉由在熱板上以 150°C 加熱 30 分鐘，形成了膜厚為約 20nm 的氧化錫層(電子傳輸層 2)。

【0107】將甲脒氫碘化酸鹽(1M，Tokyo Chemical Industry Co., Ltd.製)、碘化鉛(II)(1.1M，Tokyo Chemical Industry Co., Ltd.製)、甲脒氫溴酸鹽(0.2M，Tokyo Chemical Industry Co., Ltd.製)及溴化鉛(II)(0.2M，Tokyo Chemical Industry Co., Ltd.製)溶解於二甲基甲醯胺：二甲基亞砷=4 : 1(體積比)的混合溶劑中，進一步添加碘化銻(1.5M，Tokyo Chemical Industry Co., Ltd.製)的二甲基亞砷溶液來製備了鈣鈦礦前驅物溶液。在此，以銻的添加量以組成比計成為 5% 之量添加了碘化銻的溶液。

在相對濕度 10%RH 以下的乾燥環境下，將所製備出的鈣鈦礦前驅物溶液滴加到氧化錫層上一邊滴加氯苯(0.35mL)一邊旋塗，藉此形成了鈣鈦礦的前驅物塗膜。之後，在熱板上以 100°C 加熱 1 小時，藉此形成了膜厚為約 500nm 的 Cs(MAFA)Pb(IGr)₃ 的鈣鈦礦層(光電轉換層 3)。

【0108】作為摻雜劑，將雙(三氟甲磺醯基)醯亞胺鎂以 1.8M 的濃度溶解於乙腈中，製成了摻雜劑溶液。又，將在合成實施例 1 中所獲得之作為電洞傳輸材料之化合物(A-1)以 30mM 的濃度在 70°C 下溶解於氯苯中。向其中添加了 4-三級丁基吡啶，以使相對於化合物(A-1)成為 3.3 當量。進而，添加摻雜劑溶液，以使雙(三氟甲磺醯基)醯亞胺鎂相對於化合物(A-1)成為 0.5 當量，從而製成了電洞傳輸層用塗佈溶液。

在 Cs(MAFA)Pb(IGr)₃ 層(光電轉換層 3)之上旋塗電洞傳輸層用塗佈溶液，形成了膜厚為約 200nm 的電洞傳輸層 4。

【0109】 在電洞傳輸層之上，用真空蒸鍍法以真空度 $1 \times 10^{-4} \text{Pa}$ 左右製成 80nm 左右的金膜，藉此形成金電極(相對電極 5)，並製作了光電轉換元件。

【0110】

[實施例 2]使用了化合物(A-3)之光電轉換元件的製作

代替化合物(A-1)而將化合物(A-3)以 50mM 的濃度溶解於室溫下的氯苯中，並進行了旋塗，除此以外，以與實施例 1 相同的方式製作了光電轉換元件。

【0111】

[實施例 3]使用了化合物(A-4)之光電轉換元件的製作

代替化合物(A-1)而將化合物(A-4)以 50mM 的濃度溶解於室溫下的氯苯中，並進行了旋塗，除此以外，以與實施例 1 相同的方式製作了光電轉換元件。

【0112】

[實施例 4]使用了化合物(A-5)之光電轉換元件的製作

代替化合物(A-1)而將化合物(A-5)以 27mM 的濃度在室溫下溶解於氯苯中，並進行了旋塗，除此以外，以與實施例 1 相同的方式製作了光電轉換元件。

【0113】

[實施例 5]使用了化合物(A-16)之光電轉換元件的製作

代替化合物(A-1)而將化合物(A-16)以 26mM 的濃度在室溫下溶解於氯苯中，並進行了旋塗，除此以外，以與實施例 1 相同的方式製作了光電轉換元件。

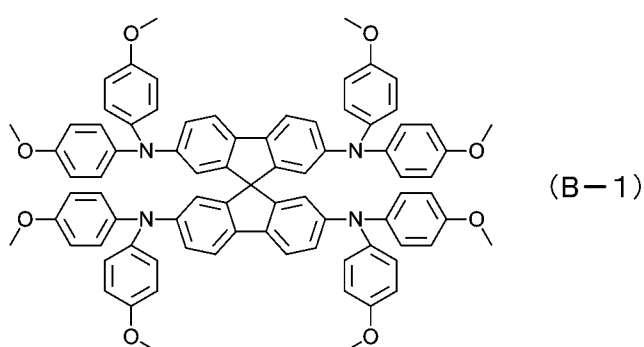
【0114】

[比較例 1]使用了比較化合物(B-1)之光電轉換元件的製作

代替化合物(A-1)而將由下述式(B-1)表示之標準的電洞傳輸材料的 Spiro-OMeTAD(Sigma-Aldrich 公司製)以 70mM 的濃度在室溫下溶解於氯苯中來使用，除此以外，以與實施例 1 相同的方式製作了光電轉換元件。

【0115】

[化 13]



【0116】

[特性評價]

對於實施例 1~5 及比較例 1 中所製作出之各光電轉換元件，從前述光電轉換元件的導電性支撐體側照射藉由白色光照射裝置(Bunkoukeiki Co., Ltd.製，OTENTO-SUN SH 型)產生之類太陽光(AM1.5、1000W/m²)，並使用源表(SourceMeter)(KEITHLEY 公司製，2400 型系列源表)測定電流-電壓特性，藉此獲得了初始光電轉換效率。

測定電流-電壓特性之後，在氮氣環境下的手套箱中，將前述光電轉換元件封入帶拉鏈的層壓袋(SEISANNIPPONSHA LTD.，AL-8)。將所封入之光電轉換元件放入真空恆溫乾燥器(TOKYO RIKAKIKAI CO., LTD.，VOS-310C)，在 85℃下保管 1,000 小時，在類太陽光照射下再次測定電流-電壓特性，藉此獲得了加熱 1,000 小時後的光電轉換效率。

將使用所獲得之初始光电轉換效率和加熱 1,000 小時後的光电轉換效率，由下述式(a-1)計算出的保持率(%)示於表 1。

[數式 1]

$$\text{保持率 (\%)} = \frac{\text{加熱1,000小時後的光电轉換效率}}{\text{初始光电轉換效率}} \times 100 \quad (\text{a-1})$$

[(0117)]

[表 1]

	電洞傳輸材料	保持率[%]
實施例 1	A-1	94.95
實施例 2	A-3	66.19
實施例 3	A-4	99.58
實施例 4	A-5	66.34
實施例 5	A-16	96.91
比較例 1	B-1	34.26

[(0118)] 又，從表 1 的結果可知，將屬於通式(1)的化合物(A-1)、(A-3)、(A-4)、(A-5)、(A-16)用作電洞傳輸材料之光電轉換元件的加熱 1,000 小時後的光電轉換效率，顯示出比使用了標準電洞傳輸材料(B-1)之光電轉換元件高的保持率，因此具有優異的耐熱性。又，關於將化合物(A-2)用作電洞傳輸材料之光電轉換元件，未觀察到加熱 1,000 小時後的光電轉換效率有所下降，維持比使用了標準電洞傳輸材料之光電轉換元件高的光電轉換效率，並且顯示出優異的耐熱性。

(產業上之可利用性)

[(0119)] 藉由將由通式(1)表示之化合物用作電洞傳輸材料，作為具有良好的光電轉換效率和優異的耐熱性之光電轉換元件，可將太陽能高效地轉換為電能，並且作為太陽能電池，可提供潔淨能源。因此，本發明在產業上之可利用性高。

【符號說明】

【0120】

1:導電性支撐體

2:電子傳輸層

3:光電轉換層

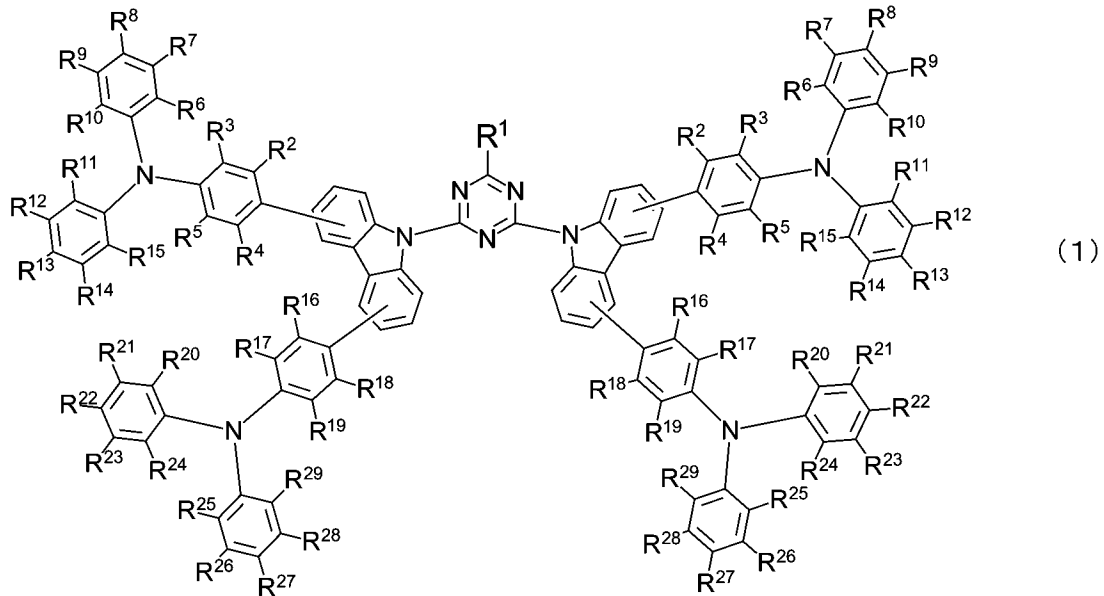
4:電洞傳輸層

5:相對電極

【發明申請專利範圍】

【請求項1】 一種化合物，其由下述通式(1)表示，

[化1]



式中， R^1 表示氫原子、鹵素原子、羥基、
 可具有取代基之碳原子數1~20的直鏈狀或支鏈狀的烷基、
 可具有取代基之碳原子數2~20的直鏈狀或支鏈狀的烯基、
 可具有取代基之碳原子數1~20的直鏈狀或支鏈狀的烷氧基、
 可具有取代基之碳原子數6~30的芳氧基、
 可具有取代基之碳原子數0~60的胺基、
 可具有取代基之碳原子數0~20的硫基、
 可具有取代基之碳原子數6~30的1價的芳香族烴基、或
 可具有取代基之環形成原子數5~30的1價的雜環基，
 $R^2 \sim R^{29}$ 分別獨立地表示

氫原子、

可具有取代基之碳原子數1~20的直鏈狀或支鏈狀的烷基、
 可具有取代基之碳原子數2~20的直鏈狀或支鏈狀的烯基、

可具有取代基之碳原子數3~12的環烷基、

可具有取代基之碳原子數1~20的直鏈狀或支鏈狀的烷氧基、

可具有取代基之碳原子數0~20的胺基、或

可具有取代基之碳原子數0~20的硫基、

R^{10} 和 R^{11} 、 R^{24} 和 R^{25} 亦可彼此鍵結而形成環。

【請求項2】 如請求項1之化合物，其中，

在前述通式(1)中， R^1 為鹵素原子、可具有取代基之碳原子數0~60的胺基、可具有取代基之碳原子數6~20的芳香族烴基、或可具有取代基之環形成原子數5~30的1價的雜環基。

【請求項3】 如請求項1之化合物，其中，

在前述通式(1)中， R^6 ~ R^{15} 及 R^{20} ~ R^{29} 中的至少一個為可具有取代基之碳原子數1~20的直鏈狀或支鏈狀的烷氧基。

【請求項4】 如請求項1之化合物，其中，

R^{10} 和 R^{11} 、 R^{24} 和 R^{25} 均未彼此鍵結而形成環。

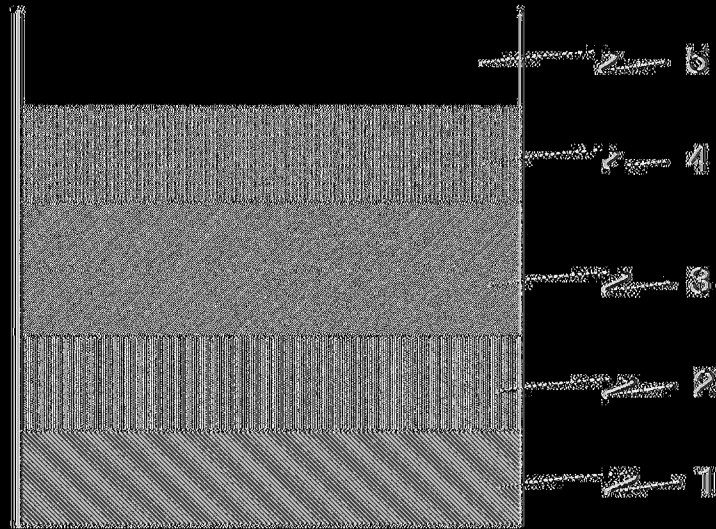
【請求項5】 一種請求項1至4中任一項之化合物的作為電洞傳輸材料的用途。

【請求項6】 如請求項5之用途，其用於光電轉換元件的電洞傳輸層。

【請求項7】 一種光電轉換元件，其具有包含請求項1至4中任一項之化合物之電洞傳輸層。

【請求項8】 一種太陽能電池，其使用了請求項7之光電轉換元件。

(發明圖式)



(圖1)