

【公報種別】特許法第17条の2の規定による補正の掲載

【部門区分】第7部門第2区分

【発行日】令和5年1月24日(2023.1.24)

【国際公開番号】WO2021/221032

【出願番号】特願2022-518068(P2022-518068)

【国際特許分類】

H 1 0 K 3 0 / 6 0 ( 2 0 2 3 . 0 1 )

【 F I 】

H 0 1 L 3 1 / 0 8

T

10

【手続補正書】

【提出日】令和4年10月27日(2022.10.27)

【手続補正1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

【補正の内容】

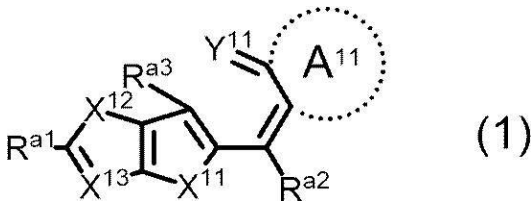
【特許請求の範囲】

【請求項1】

20

導電性膜、光電変換膜、及び透明導電性膜をこの順に有する光電変換素子であって、前記光電変換膜が、下記式(1)で表される化合物を含む、光電変換素子。

【化1】



式(1)中、 $X^{11}$ 及び $X^{12}$ は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、セレン原子、又は $-NR^{a4}-$ を表す。 $X^{13}$ は、窒素原子又は $=CR^{a5}-$ を表す。 $R^{a1} \sim R^{a5}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表す。 $A^{11}$ は、少なくとも2つの炭素原子を含む環を表す。 $Y^{11}$ は、酸素原子、硫黄原子、 $=NR^{a6}$ 、又は $=CR^{a7}R^{a8}$ を表す。 $R^{a6}$ は、水素原子又は置換基を表す。 $R^{a7}$ 及び $R^{a8}$ は、それぞれ独立に、シアノ基又は $-COOR^{a9}$ を表す。 $R^{a9}$ は、置換基を有していてもよい、アルキル基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す。

30

ただし、式(1)は、下記条件A及びBを満たす。

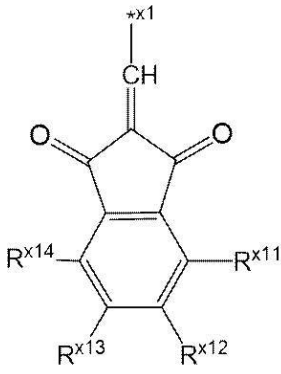
条件A：式(1)中、 $X^{11}$ が $-NR^{a4}-$ を表す場合、 $X^{13}$ は窒素原子を表す。

条件B：式(1)中、 $X^{11}$ 及び $X^{12}$ が硫黄原子を表し、且つ、 $X^{13}$ が $=CR^{a5}-$ を表す場合、 $R^{a1}$ は、水素原子を表すか、又は、下記式(DK-1)~式(DK-4)で表される置換基以外の、分子量が700以下の、置換基を有していてもよい、アリール基又はアルキニル基を表す。

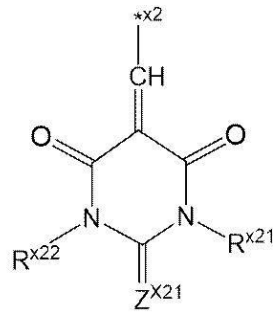
40

50

## 【化 2】

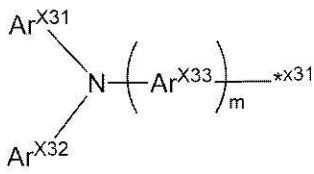


(DK-1)

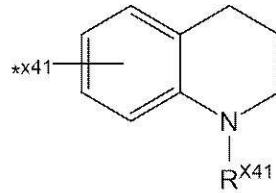


(DK-2)

10



(DK-3)



(DK-4)

20

式 (DK-1) 中、 $R^{x11} \sim R^{x14}$  は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表す。 $R^{x11}$  及び  $R^{x12}$ 、 $R^{x12}$  及び  $R^{x13}$ 、 $R^{x13}$  及び  $R^{x14}$  は、互いに結合して環を形成してもよい。 $*x1$  は、結合位置を表す。

式 (DK-2) 中、 $R^{x21}$  及び  $R^{x22}$  は、それぞれ独立に、置換基を表す。 $Z^{x21}$  は、酸素原子又は硫黄原子を表す。 $*x2$  は、結合位置を表す。

式 (DK-3) 中、 $Ar^{x31}$  及び  $Ar^{x32}$  は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい、アリール基又はヘテロアリール基を表す。 $Ar^{x33}$  は、置換基を有していてもよい、アリーレン基又はヘテロアリーレン基を表す。 $Ar^{x31}$  及び  $Ar^{x32}$  は、単結合又は 2 価の連結基を介して互いに結合してもよい。 $m$  が 1 の場合、 $Ar^{x31}$  及び  $Ar^{x33}$  は、単結合又は 2 価の連結基を介して互いに結合してもよい。 $m$  が 1 の場合、 $Ar^{x32}$  及び  $Ar^{x33}$  は、単結合又は 2 価の連結基を介して互いに結合してもよい。 $m$  は、0 又は 1 を表す。 $*x31$  は、結合位置を表す。

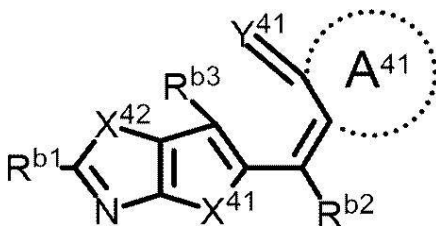
30

式 (DK-4) 中、 $R^{x41}$  は、置換基を表す。 $*x41$  は、結合位置を表す。

## 【請求項 2】

前記式 (1) で表される化合物が、式 (2) で表される化合物である、請求項 1 に記載の光電変換素子。

## 【化 3】



(2)

40

式 (2) 中、 $X^{41}$  及び  $X^{42}$  は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、セレン原子、又は  $-NR^{b4}-$  を表す。 $R^{b1} \sim R^{b4}$  は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表す。 $A^{41}$  は、少なくとも 2 つの炭素原子を含む環を表す。 $Y^{41}$  は、酸素原子、硫黄

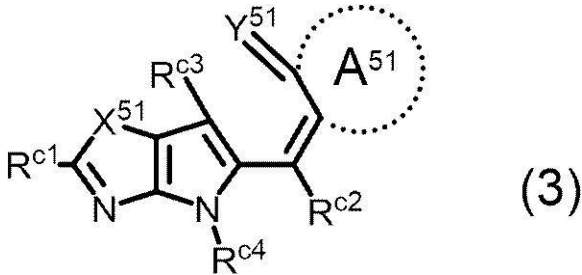
50

原子、 $=NR^{b5}$ 、又は $=CR^{b6}R^{b7}$ を表す。 $R^{b5}$ は、水素原子又は置換基を表す。 $R^{b6}$ 及び $R^{b7}$ は、それぞれ独立に、シアノ基又は $-COOR^{b8}$ を表す。 $R^{b8}$ は、置換基を有していてもよい、アルキル基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す。

【請求項 3】

前記式(1)で表される化合物が、式(3)で表される化合物である、請求項1又は2に記載の光電変換素子。

【化 4】



10

式(3)中、 $X^{51}$ は、酸素原子、硫黄原子、セレン原子、又は $-NR^{c5}$ を表す。 $R^{c1} \sim R^{c5}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表す。 $A^{51}$ は、少なくとも2つの炭素原子を含む環を表す。 $Y^{51}$ は、酸素原子、硫黄原子、 $=NR^{c6}$ 、又は $=CR^{c7}R^{c8}$ を表す。 $R^{c6}$ は、水素原子又は置換基を表す。 $R^{c7}$ 及び $R^{c8}$ は、それぞれ独立に、シアノ基又は $-COOR^{c9}$ を表す。 $R^{c9}$ は、置換基を有していてもよい、アルキル基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す。

20

【請求項 4】

前記式(3)中、前記 $R^{c4}$ が、置換基を有していてもよい、アルキル基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す、請求項3に記載の光電変換素子。

【請求項 5】

前記式(3)中、前記 $Y^{51}$ が酸素原子を表す、請求項3または4に記載の光電変換素子。

【請求項 6】

前記光電変換膜が、更にn型半導体材料を含み、前記式(1)で表される化合物と前記n型半導体材料とが混合された状態で形成するバルクヘテロ構造を有する、請求項1~5のいずれか1項に記載の光電変換素子。

30

【請求項 7】

前記光電変換膜が、更にp型半導体材料を含む、請求項1~6のいずれか1項に記載の光電変換素子。

【請求項 8】

前記導電性膜と前記透明導電性膜の間に、前記光電変換膜の他に1種以上の中間層を含む、請求項1~7のいずれか1項に記載の光電変換素子。

【請求項 9】

請求項1~8のいずれか1項に記載の光電変換素子を含む撮像素子。

【請求項 10】

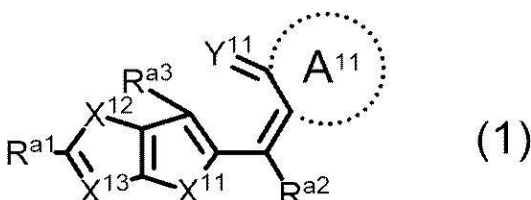
請求項1~9のいずれか1項に記載の光電変換素子を含む光センサ。

40

【請求項 11】

下記式(1)で表される化合物。

【化 5】



50

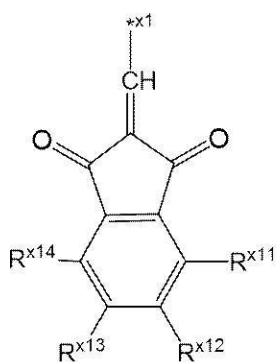
式(1)中、 $X^{11}$ 及び $X^{12}$ は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、セレン原子、又は $-NR^{a4}-$ を表す。 $X^{13}$ は、窒素原子又は $=CR^{a5}-$ を表す。 $R^{a1} \sim R^{a5}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表す。 $A^{11}$ は、少なくとも2つの炭素原子を含む環を表す。 $Y^{11}$ は、酸素原子、硫黄原子、 $=NR^{a6}$ 、又は $=CR^{a7}R^{a8}$ を表す。 $R^{a6}$ は、水素原子又は置換基を表す。 $R^{a7}$ 及び $R^{a8}$ は、それぞれ独立に、シアノ基又は $-COOR^{a9}$ を表す。 $R^{a9}$ は、置換基を有していてもよい、アルキル基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す。

ただし、式(1)は、下記条件A及びBを満たす。

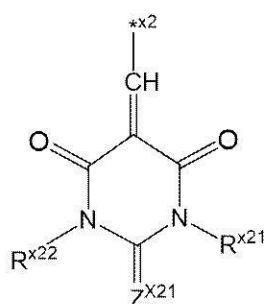
条件A：式(1)中、 $X^{11}$ が $-NR^{a4}-$ を表す場合、 $X^{13}$ は窒素原子を表す。

条件B：式(1)中、 $X^{11}$ 及び $X^{12}$ が硫黄原子を表し、且つ、 $X^{13}$ が $=CR^{a5}-$ を表す場合、 $R^{a1}$ は、水素原子を表すか、又は、下記式(DK-1)~式(DK-4)で表される置換基以外の、分子量が700以下の、置換基を有していてもよい、アリール基又はアルキニル基を表す。

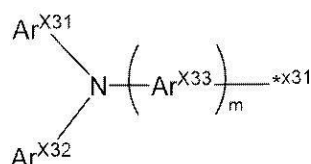
【化6】



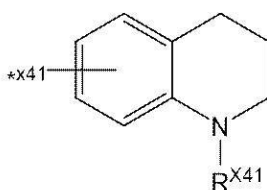
(DK-1)



(DK-2)



(DK-3)



(DK-4)

式(DK-1)中、 $R^{x11} \sim R^{x14}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表す。 $R^{x11}$ 及び $R^{x12}$ 、 $R^{x12}$ 及び $R^{x13}$ 、 $R^{x13}$ 及び $R^{x14}$ は、互いに結合して環を形成してもよい。 $*x1$ は、結合位置を表す。

式(DK-2)中、 $R^{x21}$ 及び $R^{x22}$ は、それぞれ独立に、置換基を表す。 $Z^{x21}$ は、酸素原子又は硫黄原子を表す。 $*x2$ は、結合位置を表す。

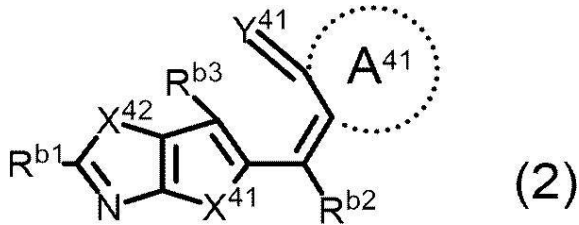
式(DK-3)中、 $Ar^{x31}$ 及び $Ar^{x32}$ は、それぞれ独立に、置換基を有していてもよい、アリール基又はヘテロアリール基を表す。 $Ar^{x33}$ は、置換基を有していてもよい、アリーレン基又はヘテロアリーレン基を表す。 $Ar^{x31}$ 及び $Ar^{x32}$ は、単結合又は2価の連結基を介して互いに結合してもよい。 $m$ が1の場合、 $Ar^{x31}$ 及び $Ar^{x33}$ は、単結合又は2価の連結基を介して互いに結合してもよい。 $m$ が1の場合、 $Ar^{x32}$ 及び $Ar^{x33}$ は、単結合又は2価の連結基を介して互いに結合してもよい。 $m$ は、0又は1を表す。 $*x31$ は、結合位置を表す。

式(DK-4)中、 $R^{x41}$ は、置換基を表す。 $*x41$ は、結合位置を表す。

【請求項12】

下記式(2)で表される、請求項11に記載の化合物。

【化 7】



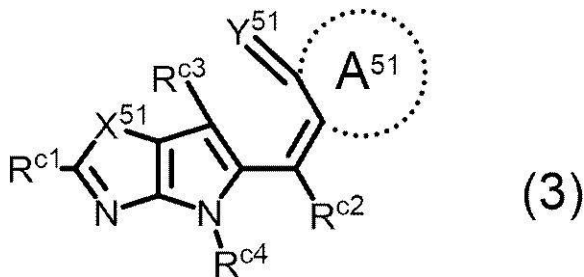
式(2)中、 $X^{41}$ 及び $X^{42}$ は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、セレン原子、又は $-NR^{b4}-$ を表す。 $R^{b1} \sim R^{b4}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表す。 $A^{41}$ は、少なくとも2つの炭素原子を含む環を表す。 $Y^{41}$ は、酸素原子、硫黄原子、 $=NR^{b5}$ 、又は $=CR^{b6}R^{b7}$ を表す。 $R^{b5}$ は、水素原子又は置換基を表す。 $R^{b6}$ 及び $R^{b7}$ は、それぞれ独立に、シアノ基又は $-COOR^{b8}$ を表す。 $R^{b8}$ は、置換基を有していてもよい、アルキル基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す。

10

【請求項 1 3】

下記式(3)で表される、請求項 1 1又は 1 2に記載の化合物。

【化 8】



20

式(3)中、 $X^{51}$ は、酸素原子、硫黄原子、セレン原子、又は $-NR^{c5}-$ を表す。 $R^{c1} \sim R^{c5}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表す。 $A^{51}$ は、少なくとも2つの炭素原子を含む環を表す。 $Y^{51}$ は、酸素原子、硫黄原子、 $=NR^{c6}$ 、又は $=CR^{c7}R^{c8}$ を表す。 $R^{c6}$ は、水素原子又は置換基を表す。 $R^{c7}$ 及び $R^{c8}$ は、それぞれ独立に、シアノ基又は $-COOR^{c9}$ を表す。 $R^{c9}$ は、置換基を有していてもよい、アルキル基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す。

30

【請求項 1 4】

前記式(3)中、前記 $R^{c4}$ が、置換基を有していてもよい、アルキル基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す、請求項 1 3に記載の化合物。

【請求項 1 5】

前記式(3)中、前記 $Y^{51}$ が酸素原子を表す、請求項 1 3または 1 4に記載の化合物。

40

50