



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2025-0050051  
(43) 공개일자 2025년04월14일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
H10K 85/60 (2023.01) C07D 495/14 (2006.01)  
H10K 30/30 (2023.01) H10K 30/60 (2023.01)  
H10K 30/81 (2023.01)  
(52) CPC특허분류  
H10K 85/657 (2023.02)  
C07D 495/14 (2013.01)  
(21) 출원번호 10-2025-7007329  
(22) 출원일자(국제) 2023년08월30일  
심사청구일자 2025년03월05일  
(85) 번역문제출일자 2025년03월05일  
(86) 국제출원번호 PCT/JP2023/031478  
(87) 국제공개번호 WO 2024/062871  
국제공개일자 2024년03월28일  
(30) 우선권주장  
JP-P-2022-148917 2022년09월20일 일본(JP)

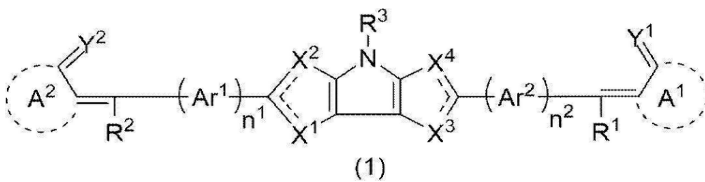
(71) 출원인  
후지필름 가부시킴가이샤  
일본 도쿄도 미나토쿠 니시 아자부 2초메 26방 30고  
(72) 발명자  
카네코 카즈헤이  
일본 카나가와켄 아시가라카미군 카이세이마치 우시지마 577번지 후지필름 가부시킴가이샤 나이  
스기우라 히로키  
일본 카나가와켄 아시가라카미군 카이세이마치 우시지마 577번지 후지필름 가부시킴가이샤 나이  
(뒷면에 계속)  
(74) 대리인  
하영욱

전체 청구항 수 : 총 21 항

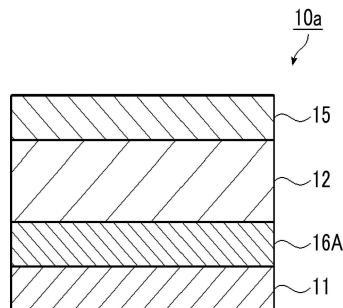
(54) 발명의 명칭 광전 변환 소자, 촬상 소자, 광센서, 화합물

(57) 요약

본 발명은, 증착 제조 적성, 적녹광을 수광했을 때의 양자 효율 및 응답 속도의 전계 강도 의존성의 어느 것도 우수한 광전 변환 소자, 촬상 소자, 광 센서 및 화합물의 제공을 과제로 한다. 본 발명의 광전 변환 소자는, 도전성막, 광전 변환막 및 투명 도전성막을 이 순서로 갖는 광전 변환 소자이며, 광전 변환막이, 식 (1)로 나타나는 화합물을 포함한다.



대표도



(52) CPC특허분류

*H10K 30/30* (2023.02)

*H10K 30/60* (2023.02)

*H10K 30/81* (2023.02)

*H10K 85/653* (2023.02)

*H10K 85/654* (2023.02)

*H10K 85/655* (2023.02)

*H10K 85/656* (2023.02)

(72) 발명자

**야마네 타케히로**

일본 카나가와켄 아시가라카미군 카이세이마치 우  
시지마 577번치 후지필름 가부시키키가이샤 나이

**하나키 나오유키**

일본 카나가와켄 아시가라카미군 카이세이마치 우  
시지마 577번치 후지필름 가부시키키가이샤 나이

**타케우치 키요시**

일본 카나가와켄 아시가라카미군 카이세이마치 우  
시지마 577번치 후지필름 가부시키키가이샤 나이

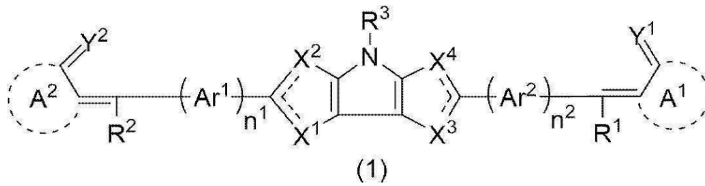
명세서

청구범위

청구항 1

도전성막, 광전 변환막 및 투명 도전성막을 이 순서로 갖는 광전 변환 소자로서,  
상기 광전 변환막이, 식 (1)로 나타나는 화합물을 포함하는, 광전 변환 소자.

[화학식 1]



식 (1) 중, R<sup>1</sup> 및 R<sup>2</sup>는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기, 사이아노기 또는 할로젠 원자를 나타낸다.

R<sup>3</sup>은, -O-를 갖고 있어도 되고, 할로젠 원자를 갖고 있어도 되는 탄소수 7 이하의 지방족 탄화 수소기, 또는, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.

X<sup>1</sup> 및 X<sup>2</sup> 중 일방은, 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 또는 -NR<sup>X1</sup>-을 나타내고, 타방은 -CR<sup>X2</sup>= 또는 질소 원자를 나타낸다. X<sup>3</sup> 및 X<sup>4</sup> 중 일방은, 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 또는 -NR<sup>X3</sup>-을 나타내고, 타방은 -CR<sup>X4</sup>= 또는 질소 원자를 나타낸다. R<sup>X1</sup> 및 R<sup>X3</sup>은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다. R<sup>X2</sup> 및 R<sup>X4</sup>는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기 또는 할로젠 원자를 나타낸다.

Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup>는, 각각 독립적으로, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.

Y<sup>1</sup> 및 Y<sup>2</sup>는, 각각 독립적으로, 산소 원자, 황 원자, =NR<sup>Y1</sup> 또는 =C(R<sup>Y2</sup>)(R<sup>Y3</sup>)을 나타낸다. R<sup>Y1</sup>은, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다. R<sup>Y2</sup> 및 R<sup>Y3</sup>은, 각각 독립적으로, 사이아노기, -CO<sub>2</sub>R<sup>Y4</sup>, -C(=O)R<sup>Y5</sup>, -S(=O)R<sup>Y6</sup> 또는 -S(=O)<sub>2</sub>R<sup>Y7</sup>을 나타낸다. R<sup>Y4</sup>~R<sup>Y7</sup>은, 각각 독립적으로, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.

A<sup>1</sup> 및 A<sup>2</sup>는, 각각 독립적으로, 2 이상의 탄소 원자를 포함하고, 치환기를 갖고 있어도 되는 환을 나타낸다.

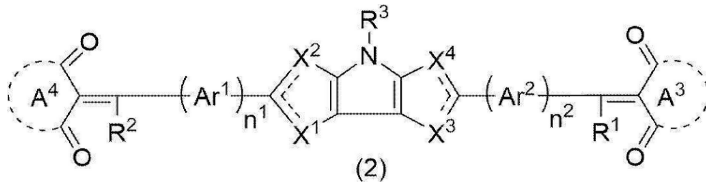
n<sup>1</sup> 및 n<sup>2</sup> 중 일방은 1을 나타내고, 타방은 0 또는 1을 나타낸다.

청구항 2

청구항 1에 있어서,

상기 식 (1)로 나타나는 화합물이, 식 (2)로 나타나는 화합물을 포함하는, 광전 변환 소자.

[화학식 2]



식 (2) 중,  $R^1$  및  $R^2$ 는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기, 사이아노기 또는 할로젠 원자를 나타낸다.

$R^3$ 은, -O-를 갖고 있어도 되고, 할로젠 원자를 갖고 있어도 되는 탄소수 7 이하의 지방족 탄화 수소기, 또는, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.

$X^1$  및  $X^2$  중 일방은, 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 또는  $-NR^{X1}$ -을 나타내고, 타방은  $-CR^{X2}$ = 또는 질소 원자를 나타낸다.  $X^3$  및  $X^4$  중 일방은, 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 또는  $-NR^{X3}$ -을 나타내고, 타방은  $-CR^{X4}$ = 또는 질소 원자를 나타낸다.  $R^{X1}$  및  $R^{X3}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.  $R^{X2}$  및  $R^{X4}$ 는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기 또는 할로젠 원자를 나타낸다.

$Ar^1$  및  $Ar^2$ 는, 각각 독립적으로, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.

$A^3$  및  $A^4$ 는, 각각 독립적으로, 3 이상의 탄소 원자를 포함하고, 치환기를 갖고 있어도 되는 환을 나타낸다.

$n^1$  및  $n^2$  중 일방은 1을 나타내고, 타방은 0 또는 1을 나타낸다.

### 청구항 3

청구항 1에 있어서,

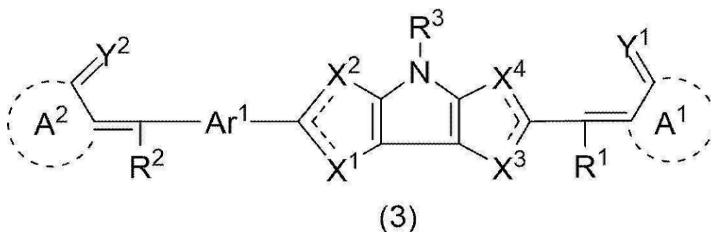
$Ar^1$  및  $Ar^2$ 는, 각각 독립적으로, 단환의 방향환기를 나타내는, 광전 변환 소자.

### 청구항 4

청구항 1에 있어서,

상기 식 (1)로 나타나는 화합물이, 식 (3)으로 나타나는 화합물을 포함하는, 광전 변환 소자.

[화학식 3]



식 (3) 중,  $R^1$  및  $R^2$ 는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기, 사이아노기 또는 할로젠 원자를 나타낸다.

$R^3$ 은, -O-를 갖고 있어도 되고, 할로젠 원자를 갖고 있어도 되는 탄소수 7 이하의 지방족 탄화 수소기, 또는, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.

$X^1$  및  $X^2$  중 일방은, 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 또는  $-NR^{X1}$ -을 나타내고, 타방은  $-CR^{X2}$ = 또는 질소 원자를 나타낸다.  $X^3$  및  $X^4$  중 일방은, 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 또는  $-NR^{X3}$ -을 나타내고, 타방은  $-CR^{X4}$ = 또는

질소 원자를 나타낸다.  $R^{X1}$  및  $R^{X3}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.  $R^{X2}$  및  $R^{X4}$ 는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기 또는 할로젠 원자를 나타낸다.

$Ar^1$ 은, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.

$Y^1$  및  $Y^2$ 는, 각각 독립적으로, 산소 원자, 황 원자,  $=NR^{Y1}$  또는  $=C(R^{Y2})(R^{Y3})$ 을 나타낸다.  $R^{Y1}$ 은, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.  $R^{Y2}$  및  $R^{Y3}$ 은, 각각 독립적으로, 사이아노기,  $-CO_2R^{Y4}$ ,  $-C(=O)R^{Y5}$ ,  $-S(=O)R^{Y6}$  또는  $-S(=O)_2R^{Y7}$ 을 나타낸다.  $R^{Y4}$ ~ $R^{Y7}$ 은, 각각 독립적으로, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.

$A^1$  및  $A^2$ 는, 각각 독립적으로, 2 이상의 탄소 원자를 포함하고, 치환기를 갖고 있어도 되는 환을 나타낸다.

### 청구항 5

청구항 4에 있어서,

$Ar^1$ 은, 단환의 방향환기를 나타내는, 광전 변환 소자.

### 청구항 6

청구항 1에 있어서,

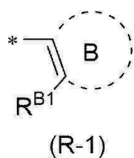
$X^1$  및  $X^2$  중 일방은 황 원자를 나타내고, 타방은  $-CR^{X2}$  또는 질소 원자를 나타내며, 또한,  $X^3$  및  $X^4$  중 일방은 황 원자를 나타내고, 타방은  $-CR^{X4}$  또는 질소 원자를 나타내는, 광전 변환 소자.

### 청구항 7

청구항 1 내지 청구항 6 중 어느 한 항에 있어서,

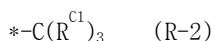
$R^3$ 이, 식 (R-1)로 나타나는 기 또는 식 (R-2)로 나타나는 기를 나타내는, 광전 변환 소자.

[화학식 4]



식 (R-1) 중, \*는, 결합 위치를 나타낸다. B는, 2 이상의 탄소 원자를 포함하고, 치환기를 갖고 있어도 되는 단환의 방향환을 나타낸다.  $R^{B1}$ 은, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기, 치환기를 갖고 있어도 되는 실릴기, 치환기를 갖고 있어도 되는 알콕시기, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기, 사이아노기 또는 할로젠 원자를 나타낸다.

B로 나타나는 상기 방향환, 및,  $R^{B1}$ 로 나타나는 상기 지방족 탄화 수소기, 상기 실릴기, 상기 알콕시기 또는 상기 방향환기가 치환기를 갖는 경우, 상기 치환기끼리는, 서로 결합하여 비방향족환을 형성하고 있어도 된다.



식 (R-2) 중, \*는, 결합 위치를 나타낸다.  $R^{C1}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 메틸기, 아이소프로필기 또는 t-뷰틸기를 나타낸다.

단, 상기 식 (R-2)로 나타나는 기의 탄소수는, 3-7이며, 3개의  $R^{C1}$  중, 2개 이상이 수소 원자 이외이다.

**청구항 8**

청구항 1 내지 청구항 6 중 어느 한 항에 있어서,

상기 광전 변환막이, n형 유기 반도체를 더 포함하고,

상기 광전 변환막이, 상기 식 (1)로 나타나는 화합물과 n형 유기 반도체가 혼합된 상태로 형성하는 벌크 헤테로 구조를 갖는, 광전 변환 소자.

**청구항 9**

청구항 8에 있어서,

상기 n형 유기 반도체가, 풀러렌 및 그 유도체로 이루어지는 군으로부터 선택되는 풀러렌류를 포함하는, 광전 변환 소자.

**청구항 10**

청구항 1 내지 청구항 6 중 어느 한 항에 있어서,

상기 광전 변환막이, p형 유기 반도체를 더 포함하는, 광전 변환 소자.

**청구항 11**

청구항 1 내지 청구항 6 중 어느 한 항에 있어서,

상기 광전 변환막이, 색소를 더 포함하는, 광전 변환 소자.

**청구항 12**

청구항 1 내지 청구항 6 중 어느 한 항에 있어서,

상기 도전성막과 상기 투명 도전성막의 사이에, 상기 광전 변환막 외에 1종 이상의 중간층을 갖는, 광전 변환 소자.

**청구항 13**

청구항 1 내지 청구항 6 중 어느 한 항에 기재된 광전 변환 소자를 갖는, 활상 소자.

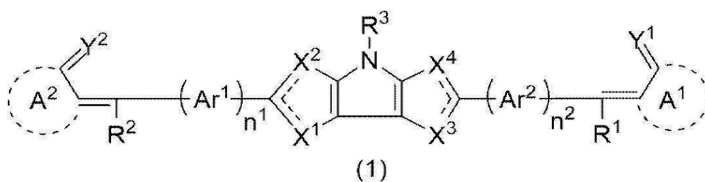
**청구항 14**

청구항 1 내지 청구항 6 중 어느 한 항에 기재된 광전 변환 소자를 갖는, 광센서.

**청구항 15**

식 (1)로 나타나는 화합물.

[화학식 5]



식 (1) 중, R<sup>1</sup> 및 R<sup>2</sup>는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기, 사이아노기 또는 할로젠 원자를 나타낸다.

R<sup>3</sup>은, -O-를 갖고 있어도 되고, 할로젠 원자를 갖고 있어도 되는 탄소수 7 이하의 지방족 탄화 수소기, 또는, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.

X<sup>1</sup> 및 X<sup>2</sup> 중 일방은, 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 또는 -NR<sup>X1</sup>-을 나타내고, 타방은 -CR<sup>X2</sup>= 또는 질소 원자를

나타낸다.  $X^3$  및  $X^4$  중 일방은, 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 또는  $-NR^{X3}$ -을 나타내고, 타방은  $-CR^{X4}=$  또는 질소 원자를 나타낸다.  $R^{X1}$  및  $R^{X3}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.  $R^{X2}$  및  $R^{X4}$ 는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기 또는 할로젠 원자를 나타낸다.

$Ar^1$  및  $Ar^2$ 는, 각각 독립적으로, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.

$Y^1$  및  $Y^2$ 는, 각각 독립적으로, 산소 원자, 황 원자,  $=NR^{Y1}$  또는  $=C(R^{Y2})(R^{Y3})$ 을 나타낸다.  $R^{Y1}$ 은, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.  $R^{Y2}$  및  $R^{Y3}$ 은, 각각 독립적으로, 사이아노기,  $-CO_2R^{Y4}$ ,  $-C(=O)R^{Y5}$ ,  $-S(=O)R^{Y6}$  또는  $-S(=O)R^{Y7}$ 을 나타낸다.  $R^{Y4}$ ~ $R^{Y7}$ 은, 각각 독립적으로, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.

$A^1$  및  $A^2$ 는, 각각 독립적으로, 2 이상의 탄소 원자를 포함하고, 치환기를 갖고 있어도 되는 환을 나타낸다.

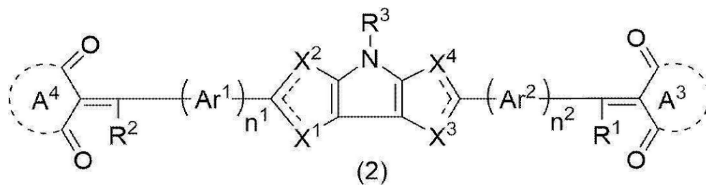
$n^1$  및  $n^2$  중 일방은 1을 나타내고, 타방은 0 또는 1을 나타낸다.

### 청구항 16

청구항 15에 있어서,

식 (2)로 나타나는 화합물인, 화합물.

[화학식 6]



식 (2) 중,  $R^1$  및  $R^2$ 는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기, 사이아노기 또는 할로젠 원자를 나타낸다.

$R^3$ 은,  $-O-$ 를 갖고 있어도 되고, 할로젠 원자를 갖고 있어도 되는 탄소수 7 이하의 지방족 탄화 수소기, 또는, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.

$X^1$  및  $X^2$  중 일방은, 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 또는  $-NR^{X1}$ -을 나타내고, 타방은  $-CR^{X2}=$  또는 질소 원자를 나타낸다.  $X^3$  및  $X^4$  중 일방은, 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 또는  $-NR^{X3}$ -을 나타내고, 타방은  $-CR^{X4}=$  또는 질소 원자를 나타낸다.  $R^{X1}$  및  $R^{X3}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.  $R^{X2}$  및  $R^{X4}$ 는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기 또는 할로젠 원자를 나타낸다.

$Ar^1$  및  $Ar^2$ 는, 각각 독립적으로, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.

$A^3$  및  $A^4$ 는, 각각 독립적으로, 3 이상의 탄소 원자를 포함하고, 치환기를 갖고 있어도 되는 환을 나타낸다.

$n^1$  및  $n^2$  중 일방은 1을 나타내고, 타방은 0 또는 1을 나타낸다.

### 청구항 17

청구항 15에 있어서,

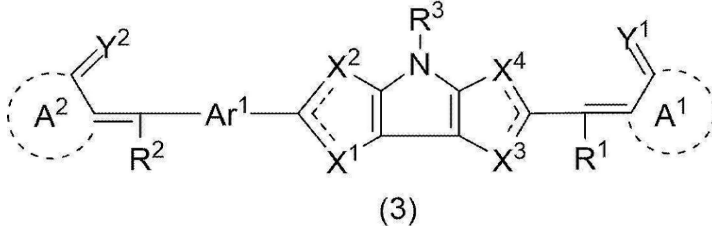
$Ar^1$  및  $Ar^2$ 는, 각각 독립적으로, 단환의 방향환기를 나타내는, 화합물.

**청구항 18**

청구항 15에 있어서,

식 (3)으로 나타나는 화합물인, 화합물.

[화학식 7]



식 (3) 중, R<sup>1</sup> 및 R<sup>2</sup>는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기, 사이아노기 또는 할로젠 원자를 나타낸다.

R<sup>3</sup>은, -O-를 갖고 있어도 되고, 할로젠 원자를 갖고 있어도 되는 탄소수 7 이하의 지방족 탄화 수소기, 또는, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.

X<sup>1</sup> 및 X<sup>2</sup> 중 일방은, 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 또는 -NR<sup>X1</sup>-을 나타내고, 타방은 -CR<sup>X2</sup>= 또는 질소 원자를 나타낸다. X<sup>3</sup> 및 X<sup>4</sup> 중 일방은, 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 또는 -NR<sup>X3</sup>-을 나타내고, 타방은 -CR<sup>X4</sup>= 또는 질소 원자를 나타낸다. R<sup>X1</sup> 및 R<sup>X3</sup>은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다. R<sup>X2</sup> 및 R<sup>X4</sup>는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기 또는 할로젠 원자를 나타낸다.

Ar<sup>1</sup>은, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.

Y<sup>1</sup> 및 Y<sup>2</sup>는, 각각 독립적으로, 산소 원자, 황 원자, =NR<sup>Y1</sup> 또는 =C(R<sup>Y2</sup>)(R<sup>Y3</sup>)을 나타낸다. R<sup>Y1</sup>은, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다. R<sup>Y2</sup> 및 R<sup>Y3</sup>은, 각각 독립적으로, 사이아노기, -CO<sub>2</sub>R<sup>Y4</sup>, -C(=O)R<sup>Y5</sup>, -S(=O)R<sup>Y6</sup> 또는 -S(=O)<sub>2</sub>R<sup>Y7</sup>을 나타낸다. R<sup>Y4</sup>~R<sup>Y7</sup>은, 각각 독립적으로, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.

A<sup>1</sup> 및 A<sup>2</sup>는, 각각 독립적으로, 2 이상의 탄소 원자를 포함하고, 치환기를 갖고 있어도 되는 환을 나타낸다.

**청구항 19**

청구항 18에 있어서,

Ar<sup>1</sup>은, 단환의 방향환기를 나타내는, 화합물.

**청구항 20**

청구항 15에 있어서,

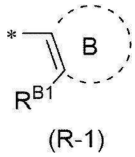
X<sup>1</sup> 및 X<sup>2</sup> 중 일방은 황 원자를 나타내고, 타방은 -CR<sup>X2</sup>= 또는 질소 원자를 나타내며, 또한, X<sup>3</sup> 및 X<sup>4</sup> 중 일방은 황 원자를 나타내고, 타방은 -CR<sup>X4</sup>= 또는 질소 원자를 나타내는, 화합물.

**청구항 21**

청구항 15 내지 청구항 20 중 어느 한 항에 있어서,

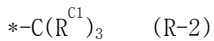
R<sup>3</sup>이, 식 (R-1)로 나타나는 기 또는 식 (R-2)로 나타나는 기를 나타내는, 화합물.

[화학식 8]



식 (R-1) 중, \*는, 결합 위치를 나타낸다. B는, 2 이상의 탄소 원자를 포함하고, 치환기를 갖고 있어도 되는 단환의 방향환을 나타낸다. R<sup>B1</sup>은, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기, 치환기를 갖고 있어도 되는 실릴기, 치환기를 갖고 있어도 되는 알콕시기, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기, 사이아노기 또는 할로젠 원자를 나타낸다.

B로 나타나는 상기 방향환, 및, R<sup>B1</sup>로 나타나는 상기 지방족 탄화 수소기, 상기 실릴기, 상기 알콕시기 또는 상기 방향환기가 치환기를 갖는 경우, 상기 치환기끼리는, 서로 결합하여 비방향족환을 형성하고 있어도 된다.



식 (R-2) 중, \*는, 결합 위치를 나타낸다. R<sup>C1</sup>은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 메틸기, 아이소프로필기 또는 t-뷰틸기를 나타낸다.

단, 상기 식 (R-2)로 나타나는 기의 탄소수는, 3~7이며, 3개의 R<sup>C1</sup> 중, 2개 이상이 수소 원자 이외이다.

**발명의 설명**

**기술 분야**

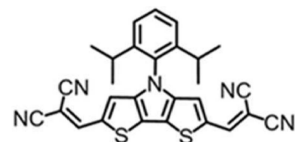
[0001] 본 발명은, 광전 변환 소자, 활상 소자, 광센서 및 화합물에 관한 것이다.

**배경 기술**

[0002] 최근, 광전 변환막을 갖는 소자(예를 들면, 활상 소자 등)의 개발이 진행되고 있다.

[0003] 특허문헌 1에서는, 하기 화합물이 개시되어 있다.

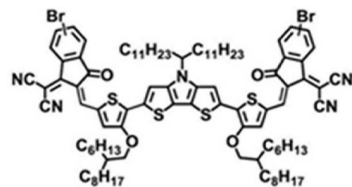
[0004] [화학식 1]



[0005]

[0006] 또, 특허문헌 2에서는, 하기 화합물이 개시되어 있다.

[0007] [화학식 2]



[0008]

**선행기술문헌**

**특허문헌**

[0009] (특허문헌 0001) 특허문헌 1: 일본 공표특허공보 2018-510845호

(특허문헌 0002) 특허문헌 2: 중국 특허출원 공개공보 제114106581호

### 발명의 내용

#### 해결하려는 과제

- [0010] 최근, 촬상 소자 및 광 센서 등의 성능 향상의 요구에 따라, 이들에 사용되는 광전 변환 소자의 모든 특성에 관해서도 가일층의 향상이 요구되고 있다.
- [0011] 예를 들면, 광전 변환 소자가, 증착 제조 적성, 적녹색(특히, 파장 600nm의 광)을 수광했을 때의 양자 효율이 높을 것, 및, 응답 속도의 전계 강도 의존성의 어느 것도 우수할 것이 요구되고 있다. 증착 제조 적성이란, 광전 변환 소자가 갖는 광전 변환막을 지장 없이 증착에 의하여 제조할 수 있는 것을 의미한다. 또, 적녹광이란, 파장 500~700nm의 범위의 광을 의미한다.
- [0012] 본 발명자들은, 특허문헌 1 및 2에 개시되는 화합물을 참고하여, 얻어지는 광전 변환 소자에 대하여 검토한 결과, 증착 제조 적성, 적녹광을 수광했을 때의 양자 효율 및 응답 속도의 전계 강도 의존성의 정립이 곤란한 것을 지견(知見)했다.
- [0013] 따라서, 본 발명은, 증착 제조 적성, 적녹광을 수광했을 때의 양자 효율, 및, 응답 속도의 전계 강도 의존성의 어느 것도 우수한 광전 변환 소자의 제공을 과제로 한다.
- [0014] 또, 본 발명은, 상기 광전 변환 소자에 관한, 촬상 소자, 광 센서 및 화합물의 제공도 과제로 한다.

#### 과제의 해결 수단

- [0015] 본 발명자들은, 상기 과제를 해결하기 위하여 예의 검토한 결과, 이하의 구성에 의하여 상기 과제를 해결할 수 있는 것을 알아냈다.
- [0016] [1]
- [0017] 도전성막, 광전 변환막 및 투명 도전성막을 이 순서로 갖는 광전 변환 소자로서,
- [0018] 상기 광전 변환막이, 후술하는 식 (1)로 나타나는 화합물을 포함하는, 광전 변환 소자.
- [0019] [2]
- [0020] 상기 식 (1)로 나타나는 화합물이, 후술하는 식 (2)로 나타나는 화합물을 포함하는, [1] 에 기재된 광전 변환 소자.
- [0021] [3]
- [0022]  $Ar^1$  및  $Ar^2$ 는, 각각 독립적으로, 단환의 방향환기를 나타내는, [1] 또는 [2] 에 기재된 광전 변환 소자.
- [0023] [4]
- [0024] 상기 식 (1)로 나타나는 화합물이, 후술하는 식 (3)으로 나타나는 화합물을 포함하는, [1] 에 기재된 광전 변환 소자.
- [0025] [5]
- [0026]  $Ar^1$ 은, 단환의 방향환기를 나타내는, [4] 에 기재된 광전 변환 소자.
- [0027] [6]
- [0028]  $X^1$  및  $X^2$  중 일방은 황 원자를 나타내고, 타방은  $-CR^{X2}$  = 또는 질소 원자를 나타내며, 또한,  $X^3$  및  $X^4$  중 일방은 황 원자를 나타내고, 타방은  $-CR^{X4}$  = 또는 질소 원자를 나타내는, [1] 내지 [5] 중 어느 하나에 기재된 광전 변환 소자.
- [0029] [7]

- [0030]  $R^3$ 이, 후술하는 식 (R-1)로 나타나는 기 또는 후술하는 식 (R-2)로 나타나는 기를 나타내는, [1] 내지 [6] 중 어느 하나에 기재된 광전 변환 소자.
- [0031] [8]
- [0032] 상기 광전 변환막이, n형 유기 반도체를 더 포함하고,
- [0033] 상기 광전 변환막이, 상기 식 (1)로 나타나는 화합물과 n형 유기 반도체가 혼합된 상태로 형성하는 벌크 헤테로 구조를 갖는, [1] 내지 [7] 중 어느 하나에 기재된 광전 변환 소자.
- [0034] [9]
- [0035] 상기 n형 유기 반도체가, 풀러렌 및 그 유도체로 이루어지는 군으로부터 선택되는 풀러렌류를 포함하는, [8]에 기재된 광전 변환 소자.
- [0036] [10]
- [0037] 상기 광전 변환막이, p형 유기 반도체를 더 포함하는, [1] 내지 [9] 중 어느 하나에 기재된 광전 변환 소자.
- [0038] [11]
- [0039] 상기 광전 변환막이, 색소를 더 포함하는, [1] 내지 [10] 중 어느 하나에 기재된 광전 변환 소자.
- [0040] [12]
- [0041] 상기 도전성막과 상기 투명 도전성막의 사이에, 상기 광전 변환막 외에 1종 이상의 중간층을 갖는, [1] 내지 [11] 중 어느 하나에 기재된 광전 변환 소자.
- [0042] [13]
- [0043] [1] 내지 [12] 중 어느 하나에 기재된 광전 변환 소자를 갖는, 촬상 소자.
- [0044] [14]
- [0045] [1] 내지 [12] 중 어느 하나에 기재된 광전 변환 소자를 갖는, 광센서.
- [0046] [15]
- [0047] 후술하는 식 (1)로 나타나는 화합물.
- [0048] [16]
- [0049] 후술하는 식 (2)로 나타나는 화합물인, [15]에 기재된 화합물.
- [0050] [17]
- [0051]  $Ar^1$  및  $Ar^2$ 는, 각각 독립적으로, 단환의 방향환기를 나타내는, [15] 또는 [16]에 기재된 화합물.
- [0052] [18]
- [0053] 후술하는 식 (3)으로 나타나는 화합물인, [15]에 기재된 화합물.
- [0054] [19]
- [0055]  $Ar^1$ 은, 단환의 방향환기를 나타내는, [18]에 기재된 화합물.
- [0056] [20]
- [0057]  $X^1$  및  $X^2$  중 일방은 황 원자를 나타내고, 타방은  $-CR^{X2}=$  또는 질소 원자를 나타내며, 또한,  $X^3$  및  $X^4$  중 일방은 황 원자를 나타내고, 타방은  $-CR^{X4}=$  또는 질소 원자를 나타내는, [15] 내지 [19] 중 어느 하나에 기재된 화합물.
- [0058] [21]

[0059]  $R^3$ 이, 후술하는 식 (R-1)로 나타나는 기 또는 후술하는 식 (R-2)로 나타나는 기를 나타내는, [15] 내지 [20] 중 어느 하나에 기재된 화합물.

**발명의 효과**

[0060] 본 발명에 의하면, 증착 제조 적성, 적녹광을 수광했을 때의 양자 효율 및 응답 속도의 전계 강도 의존성의 어느 것도 우수한 광전 변환 소자를 제공할 수 있다.

[0061] 또, 본 발명에 의하면, 상기 광전 변환 소자에 관한, 활상 소자, 광센서 및 화합물도 제공할 수 있다.

**도면의 간단한 설명**

[0062] 도 1은 광전 변환 소자의 일 구성예를 나타내는 단면 모식도이다.

도 2는 광전 변환 소자의 일 구성예를 나타내는 단면 모식도이다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0063] 이하, 본 발명에 대하여 상세하게 설명한다.

[0064] 이하에 기재하는 구성 요건의 설명은, 본 발명의 대표적인 실시형태에 근거하여 이루어지는 경우가 있지만, 본 발명은 그와 같은 실시형태에 제한되지 않는다.

[0065] 이하, 본 발명의 광전 변환 소자의 실시형태에 대하여 상세하게 설명한다.

[0066] 본 명세서에 있어서, "~"를 이용하여 나타나는 수치 범위는, "~"의 전후에 기재되는 수치를 하한값 및 상한값으로서 포함하는 범위를 의미한다.

[0067] 본 명세서에 있어서, 수소 원자는, 경수소 원자(통상의 수소 원자) 및 중수소 원자(예를 들면, 이중 수소 원자 등) 중 어느 것이어도 된다.

[0068] 본 명세서에 있어서, 특정 부호로 표시된 치환기 및 연결기 등(이하, "치환기 등"이라고도 한다.)이 복수 존재하는 경우 또는 복수의 치환기 등을 동시에 규정하는 경우, 각각의 치환기 등끼리는, 서로 동일 또는 상이해도 된다. 또, 치환기 등의 수에 대해서도 동일하다.

[0069] 본 명세서에 있어서, 치환기는, 특별히 설명하지 않는 한, 후술하는 치환기 W로 예시되는 기를 들 수 있다.

[0070] (치환기 W)

[0071] 치환기 W는, 예를 들면, 할로젠 원자(예를 들면, 불소 원자, 염소 원자, 브로민 원자 및 아이오딘 원자 등), 알킬기(사이클로알킬기, 바이사이클로알킬기 및 트라이사이클로알킬기를 포함한다), 알켄일기(사이클로알켄일기 및 바이사이클로알켄일기를 포함한다), 알카인일기, 아릴기, 헤테로아릴기, 사이아노기, 나이트로기, 알콕시기, 아릴옥시기, 실릴옥시기, 헤테로환 옥시기, 아실옥시기, 카바모일옥시기, 알콕시카보닐옥시기, 아릴옥시카보닐옥시기, 2급 또는 3급의 아미노기(아닐리노기를 포함한다), 알킬싸이오기, 아릴싸이오기, 헤테로환 싸이오기, 알킬 또는 아릴설펜일기, 알킬 또는 아릴설펜일기, 아실기, 아릴옥시카보닐기, 알콕시카보닐기, 아릴 또는 헤테로환 아조기, 이미드기, 포스피노기, 포스핀일기, 포스핀일옥시기, 포스핀일아미노기, 포스포노기, 실릴기, 카복시기, 인산기, 설펜산기, 하이드록시기, 싸이올기, 아실아미노기, 카바모일기, 유레이도기, 보론산기 및 1급 아미노기를 들 수 있다. 또, 상술한 각 기는, 가능한 경우, 치환기(예를 들면, 상술한 각 기 중 하나 이상의 기 등)를 갖고 있어도 된다. 예를 들면, 치환기를 갖고 있어도 되는 알킬기도, 치환기 W의 일 형태로서 포함된다.

[0072] 또, 치환기 W가 탄소 원자를 갖는 경우, 치환기 W가 갖는 탄소수는, 예를 들면, 1~20이다.

[0073] 치환기 W가 갖는 수소 원자 이외의 원자의 수는, 예를 들면, 1~30이다.

[0074] 또한, 후술하는 특정 화합물은, 치환기로서, 카복시기, 카복시기의 염, 인산기의 염, 설펜산기, 설펜산기의 염, 하이드록시기, 싸이올기, 아실아미노기, 카바모일기, 유레이도기, 보론산기(-B(OH)<sub>2</sub>) 및/또는 1급 아미노기를 갖지 않는 것도 바람직하다.

[0075] 본 명세서에 있어서, 할로젠 원자로서는, 예를 들면, 불소 원자, 염소 원자, 브로민 원자 및 아이오딘 원자를 들 수 있다.

- [0076] 또, 본 명세서에 있어서, 특별히 설명하지 않는 한, 알킬기의 탄소수는, 1~20이 바람직하고, 1~10이 보다 바람직하며, 1~6이 더 바람직하다.
- [0077] 알킬기는, 직쇄상, 분기쇄상 및 환상 중 어느 것이어도 된다.
- [0078] 알킬기로서는, 예를 들면, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, i-프로필기, n-뷰틸기, t-뷰틸기, n-헥실기 및 사이클로펜틸기를 들 수 있다.
- [0079] 또, 알킬기는, 사이클로알킬기, 바이사이클로알킬기 및 트라이사이클로알킬기 중 어느 것이어도 되고, 이들의 환상 구조를 부분 구조로서 갖고 있어도 된다.
- [0080] 치환기를 갖고 있어도 되는 알킬기에 있어서, 알킬기가 갖고 있어도 되는 치환기는, 예를 들면, 치환기 W로 예시되는 기를 들 수 있으며, 아릴기(바람직하게는 탄소수 6~18, 보다 바람직하게는 탄소수 6), 헤테로아릴기(바람직하게는 탄소수 5~18, 보다 바람직하게는 탄소수 5~6) 또는 할로젠 원자(바람직하게는 불소 원자 또는 염소 원자)가 바람직하다.
- [0081] 본 명세서에 있어서, 특별히 설명하지 않는 한, 알콕시기에 있어서의 알킬기 부분은, 상기 알킬기가 바람직하다. 알킬싸이오기에 있어서의 알킬기 부분은, 상기 알킬기가 바람직하다.
- [0082] 치환기를 갖고 있어도 되는 알콕시기에 있어서, 알콕시기가 갖고 있어도 되는 치환기는, 치환기를 갖고 있어도 되는 알킬기에 있어서의 치환기와 동일한 예를 들 수 있다.
- [0083] 치환기를 갖고 있어도 되는 알킬싸이오기에 있어서, 알킬싸이오기가 갖고 있어도 되는 치환기는, 치환기를 갖고 있어도 되는 알킬기에 있어서의 치환기와 동일한 예를 들 수 있다.
- [0084] 본 명세서에 있어서, 특별히 설명하지 않는 한, 알켄일기는, 직쇄상, 분기쇄상 및 환상 중 어느 것이어도 된다. 상기 알켄일기의 탄소수는, 2~20이 바람직하다. 치환기를 갖고 있어도 되는 알켄일기에 있어서, 알켄일기가 갖고 있어도 되는 치환기는, 치환기를 갖고 있어도 되는 알킬기에 있어서의 치환기와 동일한 예를 들 수 있다.
- [0085] 본 명세서에 있어서, 특별히 설명하지 않는 한, 알카인일기는, 직쇄상, 분기쇄상 및 환상 중 어느 것이어도 된다. 상기 알카인일기의 탄소수는, 2~20이 바람직하다. 치환기를 갖고 있어도 되는 알카인일기에 있어서, 알카인일기가 가져도 되는 치환기는, 치환기를 갖고 있어도 되는 알킬기에 있어서의 치환기와 동일한 예를 들 수 있다.
- [0086] 본 명세서에 있어서, 특별히 설명하지 않는 한, 방향환 또는 방향환기를 구성하는 방향환은, 단환 및 다환(예를 들면, 2~6환 등) 중 어느 것이어도 된다. 단환의 방향환은, 환 구조로서, 1환의 방향환 구조만을 갖는 방향환이다. 다환(예를 들면, 2~6환 등)의 방향환은, 환 구조로서 복수(예를 들면, 2~6 등)의 방향환 구조가 축환되어 있는 방향환이다.
- [0087] 상기 방향환의 환원수는, 5~15가 바람직하다.
- [0088] 상기 방향환은, 방향족 탄화 수소환 및 방향족 복소환이어도 된다.
- [0089] 상기 방향환이 방향족 복소환인 경우, 환원 원자로서 갖는 헤테로 원자의 수는, 예를 들면, 1~10이다. 상기 헤테로 원자로서는, 예를 들면, 질소 원자, 황 원자, 산소 원자, 셀레늄 원자, 텔루륨 원자, 인 원자, 규소 원자 및 붕소 원자를 들 수 있다.
- [0090] 상기 방향족 탄화 수소환으로서, 예를 들면, 벤젠환, 나프탈렌환, 안트라센환, 피렌환, 페난트렌환, 및 플루오렌환을 들 수 있다.
- [0091] 상기 방향족 복소환으로서, 예를 들면, 피리딘환, 피리미딘환, 피리다진환, 피라진환, 트리아진환(예를 들면, 1,2,3-트리아진환, 1,2,4-트리아진환 및 1,3,5-트리아진환 등), 테트라진환(예를 들면, 1,2,4,5-테트라진환 등), 퀴놀살린환, 피롤환, 퓨란환, 싸이오펜환, 이미다졸환, 옥사졸환, 싸이아졸환, 벤조피롤환, 벤조퓨란환, 벤조싸이오펜환, 벤즈이미다졸환, 벤즈옥사졸환, 벤조싸이아졸환, 나프토피롤환, 나프토피란환, 나프토히오펜환, 나프토포리다졸환, 나프토포옥사졸환, 3H-피롤리딘환, 피롤로이미다졸환(예를 들면, 5H-피롤로[1,2-a]이미다졸환 등), 이미다조옥사졸환(예를 들면, 이미다조[2,1-b]옥사졸환 등), 싸이에노싸이아졸환(예를 들면, 싸이에노[2,3-d]싸이아졸환 등), 벤조싸이아다리아졸환, 벤조다이싸이오펜환(예를 들면, 벤조[1,2-b:4,5-b']다이싸이오펜환 등), 싸이에노싸이오펜환(예를 들면, 싸이에노[3,2-b]싸이오펜환 등), 싸이아졸로싸이아졸환(예를 들면, 싸이아졸로[5,4-d]싸이아졸환 등), 나프토타이싸이오펜환(예를 들면, 나프토타이[2,3-b:6,7-b']다이싸이오펜

환, 나프토[2,1-b:6,5-b']다이싸이오펜환, 나프토[1,2-b:5,6-b']다이싸이오펜환 및 1,8-다이싸이아다이사이클로펜타[b,g]나프탈렌환 등), 벤조싸이에노벤조싸이오펜환, 다이싸이에노[3,2-b:2',3'-d]싸이오펜환 및 3,4,7,8-테트라싸이아다이사이클로펜타[a,e]펜타렌환을 들 수 있다.

- [0092] 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환에 있어서, 방향환이 갖고 있어도 되는 치환기의 종류는, 예를 들면, 치환기 W로 예시되는 기를 들 수 있다. 상기 방향환이 치환기를 갖는 경우의 치환기의 수는, 1 이상(예를 들면, 1~4 등)이면 된다.
- [0093] 본 명세서에 있어서, 방향환기라고 하는 경우, 예를 들면, 상기 방향환으로부터 수소 원자를 하나 이상(예를 들면, 1~5 등) 제거하여 이루어지는 기를 들 수 있다.
- [0094] 본 명세서에서 아릴기라고 하는 경우, 예를 들면, 상기 방향환 중의 방향족 탄화 수소환에 해당하는 환으로부터 수소 원자를 하나 제거하여 이루어지는 기를 들 수 있다.
- [0095] 본 명세서에서 헤테로아릴기라고 하는 경우, 예를 들면, 상기 방향환 중의 방향족 복소환에 해당하는 환으로부터 수소 원자를 하나 제거하여 이루어지는 기를 들 수 있다.
- [0096] 본 명세서에서 아릴렌기라고 하는 경우, 예를 들면, 상기 방향환 중의 방향족 탄화 수소환에 해당하는 환으로부터 수소 원자를 2개 제거하여 이루어지는 기를 들 수 있다.
- [0097] 본 명세서에서 헤테로아릴렌기라고 하는 경우, 예를 들면, 상기 방향환 중의 방향족 복소환에 해당하는 환으로부터 수소 원자를 2개 제거하여 이루어지는 기를 들 수 있다.
- [0098] 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기, 치환기를 갖고 있어도 되는 아릴기, 치환기를 갖고 있어도 되는 헤테로아릴기, 치환기를 갖고 있어도 되는 아릴렌기 및 치환기를 갖고 있어도 되는 헤테로아릴렌기에 있어서, 이들 기가 가져도 되는 치환기의 종류는, 예를 들면, 치환기 W로 예시되는 기를 들 수 있다. 치환기를 갖고 있어도 되는 이들 기가 치환기를 갖는 경우의 치환기의 수는 1 이상(예를 들면, 1~4 등)이면 된다.
- [0099] 본 명세서에 있어서, 화학 구조를 나타내는 하나의 식 중에, 기의 종류 또는 수를 나타내는 동일한 기호가 복수 존재하는 경우, 특별히 설명하지 않는 한, 그들 중 복수 존재하는 동일한 기호끼리의 내용은 각각 독립적이며, 동일한 기호끼리의 내용은 동일 또는 상이해도 된다.
- [0100] 본 명세서에 있어서, 화학 구조를 나타내는 하나의 식 중에, 동종의 기(예를 들면, 알킬기 등)가 복수 존재하는 경우, 특별히 설명하지 않는 한, 그들 중 복수 존재하는 동종의 기끼리의 구체적인 내용은 각각 독립적이며, 동종의 기끼리의 구체적인 내용은 동일 또는 상이해도 된다.
- [0101] 본 명세서에 있어서 표기되는 2가의 기(예를 들면, -CO-O- 등)의 결합 방향은, 특별히 설명하지 않는 한, 제한되지 않는다. 예를 들면, "X-Y-Z"인 식으로 나타나는 화합물 중의, Y가 -CO-O-인 경우, 상기 화합물은 "X-O-CO-Z" 및 "X-CO-O-Z" 중 어느 것이어도 된다.
- [0102] 본 명세서에 있어서, 기하 이성체(시스-트랜스 이성체)를 가질 수 있는 화합물에 관하여, 상기 화합물을 나타내는 일반식 또는 구조식이, 편의상, 시스체 및 트랜스체 중 어느 일방의 형태로만 기재되는 경우가 있다. 이와 같은 경우더라도, 특별히 기재하지 않는 한, 상기 화합물의 형태가 시스체 및 트랜스체 중 어느 일방에 한정되지 않고, 상기 화합물은, 시스체 및 트랜스체 중 어느 형태여도 된다.
- [0103] [광전 변환 소자]
- [0104] 본 발명의 광전 변환 소자는, 도전성막, 광전 변환막 및 투명 도전성막을 이 순서로 갖는 광전 변환 소자로서, 광전 변환막이, 식 (1)로 나타나는 화합물(이하, "특정 화합물"이라고도 한다.)을 포함한다.
- [0105] 본 발명의 광전 변환 소자가 상기 구성인 경우에, 본 발명의 과제를 해결할 수 있는 기구는 반드시 확실하지는 않지만, 본 발명자들은 이하와 같이 추측하고 있다.
- [0106] 특정 화합물은, 도너부 (D)와 억셉터부 (A)를 갖는 화합물(이른바 A-D-A형 화합물)이다. 특정 화합물은, 도너부에 소정 구조의 3환의 축합환( $X^1-X^4$  및  $NR^3$ 을 포함하는 환)을 갖고, 도너부에 인접하는 부분에 방향환기( $Ar^1$  및  $Ar^2$ )를 더 가지며,  $R^3$  부분에 소정의 기를 갖고 있다. 상기 특징적인 구조를 갖는 특정 화합물은,  $\pi-\pi$  스택킹 등에 의한 응집이 발생하기 어렵다고 추측된다. 즉, 특정 화합물을 포함하는 광전 변환막 중에서는 특정 화합물 끼리의 응집이 억제되어 있으며, 그 결과로서 광전 변환막 중에서의 전하 분리가 저해되지 않고 효율적으로 진행되어, 광전 변환 소자는 우수한 양자 효율을 나타낸다고 추측된다. 또, 상기 특징적인 구조에 기인하여, 증착

제조 적성 및 응답 속도의 전계 강도 의존성의 어느 것도 우수하다고 생각된다.

[0107] 이하, 증착 제조 적성, 적녹광을 수광했을 때의 양자 효율 및 응답 속도의 전계 강도 의존성의 적어도 하나의 효과가 보다 우수한 것을, "본 발명의 효과가 보다 우수하다"라고도 한다.

[0108] 도 1에, 본 발명의 광전 변환 소자의 일 실시형태의 단면 모식도를 나타낸다.

[0109] 도 1에 나타내는 광전 변환 소자(10a)는, 하부 전극으로서 기능하는 도전성막(이하, "하부 전극"이라고도 한다)(11)과, 전자 블로킹막(16A)과, 특정 화합물을 포함하는 광전 변환막(12)과, 상부 전극으로서 기능하는 투명 도전성막(이하, "상부 전극"이라고도 한다.)(15)이 이 순서로 적층된 구성을 갖는다.

[0110] 도 2에 다른 광전 변환 소자의 구성예를 나타낸다. 도 2에 나타내는 광전 변환 소자(10b)는, 하부 전극(11) 상에, 전자 블로킹막(16A)과, 광전 변환막(12)과, 정공 블로킹막(16B)과, 상부 전극(15)이 이 순서로 적층된 구성을 갖는다. 또한, 도 1 및 도 2 중의 전자 블로킹막(16A), 광전 변환막(12) 및 정공 블로킹막(16B)의 적층 순서는, 용도 및 특성에 따라, 적절히 변경해도 된다.

[0111] 광전 변환 소자(10a(또는 10b))에서는, 상부 전극(15)을 통하여 광전 변환막(12)에 광이 입사되는 것이 바람직하다.

[0112] 또, 광전 변환 소자(10a(또는 10b))를 사용하는 경우, 전압을 인가할 수 있다. 이 경우, 하부 전극(11)과 상부 전극(15)이 한 쌍의 전극을 이루어, 이 한 쌍의 전극 간에,  $1 \times 10^{-5} \sim 1 \times 10^7 \text{ V/cm}$ 의 전압을 인가하는 것이 바람직하다. 성능 및 소비 전력의 점에서, 인가되는 전압으로서는,  $1 \times 10^{-4} \sim 1 \times 10^7 \text{ V/cm}$ 가 보다 바람직하고,  $1 \times 10^{-3} \sim 5 \times 10^6 \text{ V/cm}$ 가 더 바람직하다.

[0113] 또한, 전압 인가 방법에 대해서는, 도 1 및 도 2에 있어서, 전자 블로킹막(16A) 측이 음극이 되고, 광전 변환막(12) 측이 양극이 되도록 인가하는 것이 바람직하다. 광전 변환 소자(10a(또는 10b))를 광센서로서 사용한 경우, 또, 활상 소자에 장착한 경우도, 동일한 방법에 의하여 전압을 인가할 수 있다.

[0114] 이후 단락에서, 상세하게 설명하는 바와 같이, 광전 변환 소자(10a(또는 10b))는 활상 소자 용도에 적합하게 적용할 수 있다.

[0115] 이하에, 본 발명의 광전 변환 소자를 구성하는 각층(各層)의 형태에 대하여 상세하게 설명한다.

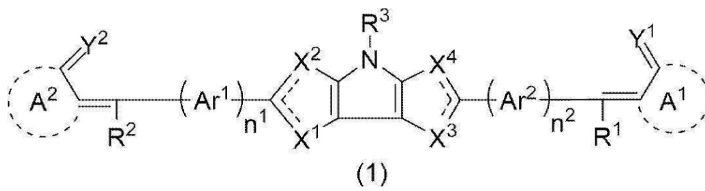
[0116] [광전 변환막]

[0117] 광전 변환 소자는, 광전 변환막을 갖는다.

[0118] <특정 화합물>

[0119] 광전 변환막은, 식 (1)로 나타나는 화합물을 포함한다.

[0120] [화학식 3]



[0121] 식 (1) 중,  $R^1$  및  $R^2$ 는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기, 사이아노기 또는 할로젠 원자를 나타낸다.

[0122]  $R^3$ 은, -O-를 갖고 있어도 되고, 할로젠 원자를 갖고 있어도 되는 탄소수 7 이하의 지방족 탄화 수소기, 또는, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.

[0123]  $X^1$  및  $X^2$  중 일방은, 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 또는  $-NR^{X1}$ -을 나타내고, 타방은  $-CR^{X2}=$  또는 질소 원자( $-N=$ )를 나타낸다.  $X^3$  및  $X^4$  중 일방은, 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 또는  $-NR^{X3}$ -을 나타내고, 타방은  $-CR^{X4}=$  또는 질소 원자를 나타낸다.  $R^{X1}$  및  $R^{X3}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화

수소기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.  $R^{X2}$  및  $R^{X4}$ 는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기 또는 할로젠 원자를 나타낸다.

- [0125]  $Ar^1$  및  $Ar^2$ 는, 각각 독립적으로, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.
- [0126]  $Y^1$  및  $Y^2$ 는, 각각 독립적으로, 산소 원자, 황 원자,  $=NR^{Y1}$  또는  $=C(R^{Y2})(R^{Y3})$ 을 나타낸다.  $R^{Y1}$ 은, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.  $R^{Y2}$  및  $R^{Y3}$ 은, 각각 독립적으로, 사이아노기,  $-CO_2R^{Y4}$ ,  $-C(=O)R^{Y5}$ ,  $-S(=O)R^{Y6}$  또는  $-S(=O)_2R^{Y7}$ 을 나타낸다.  $R^{Y4}$ ~ $R^{Y7}$ 은, 각각 독립적으로, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.
- [0127]  $A^1$  및  $A^2$ 는, 각각 독립적으로, 2 이상의 탄소 원자를 포함하고, 치환기를 갖고 있어도 되는 환을 나타낸다.
- [0128]  $n^1$  및  $n^2$  중 일방은 1을 나타내고, 타방은 0 또는 1을 나타낸다.
- [0129] 식 (1) 중,  $R^1$  및  $R^2$ 는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기, 사이아노기 또는 할로젠 원자를 나타낸다.
- [0130] 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기는, 직쇄상, 분기쇄상 및 환상 중 어느 것이어도 된다.
- [0131] 상기 지방족 탄화 수소기는, 포화 지방족 탄화 수소기 및 불포화 지방족 탄화 수소기 중 어느 것이어도 되고, 포화 지방족 탄화 수소기가 바람직하다.
- [0132] 상기 지방족 탄화 수소기의 탄소수는, 1~30이 바람직하고, 1~10이 보다 바람직하며, 1~3이 더 바람직하다.
- [0133] 상기 지방족 탄화 수소기로서는, 치환기를 갖고 있어도 되는 알킬기(예를 들면, 트라이플루오로메틸기 등)가 바람직하다. 상기 지방족 탄화 수소기가 가질 수 있는 치환기로서는, 예를 들면, 치환기 W로 예시되는 기를 들 수 있으며, 할로젠 원자가 바람직하고, 불소 원자가 보다 바람직하다.
- [0134]  $R^1$  및  $R^2$ 로서는, 수소 원자가 바람직하다.
- [0135] 식 (1) 중,  $R^3$ 은, -O-를 갖고 있어도 되고, 할로젠 원자를 갖고 있어도 되는 탄소수 7 이하의 지방족 탄화 수소기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.
- [0136] -O-를 갖고 있어도 되고, 할로젠 원자를 갖고 있어도 되는 탄소수 7 이하의 지방족 탄화 수소기는, 직쇄상, 분기쇄상 및 환상 중 어느 것이어도 된다.
- [0137] 상기 지방족 탄화 수소기는, 포화 지방족 탄화 수소기 및 불포화 지방족 탄화 수소기 중 어느 것이어도 되고, 포화 지방족 탄화 수소기가 바람직하다.
- [0138] 상기 지방족 탄화 수소기의 탄소수는, 7 이하이며, 2~7이 바람직하고, 3~7이 보다 바람직하며, 5~7이 더 바람직하다.
- [0139] 상기 지방족 탄화 수소기로서는, 탄소수 5~7의 분기쇄상의 지방족 탄화 수소기가 바람직하다.
- [0140] 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기는, 단환 및 다환 중 어느 것이어도 된다.
- [0141] 상기 방향환기는, 치환기를 갖고 있어도 되는 아릴기 및 치환기를 갖고 있어도 되는 헤테로아릴기 중 어느 것이어도 된다.
- [0142] 상기 방향환의 탄소수는, 3~30이 바람직하고, 3~20이 보다 바람직하며, 3~10이 더 바람직하다. 또한, 상기 방향환이 치환기를 갖는 경우, 상기 탄소수는, 치환기의 탄소 원자를 포함하는 값이다.
- [0143] 상기 방향환으로서, 치환기를 갖고 있어도 되는 아릴기가 바람직하고, 치환기를 갖고 있어도 되는 페닐기가 보다 바람직하다.
- [0144] 상기 방향환기가 가질 수 있는 치환기로서는, 예를 들면, 치환기 W로 예시되는 치환기를 들 수 있으며, 할로젠 원자, 탄소수 1-3의 직쇄상의 지방족 탄화 수소기, 탄소수 3-5의 분기쇄상의 지방족 탄화 수소기 또는 탄소수

3-8의 환상의 지방족 탄화 수소기가 바람직하다.

[0145]  $R^3$ 으로서, 본 발명의 효과가 보다 우수한 점에서, 치환기를 갖고 있어도 되는 페닐기 또는 탄소수 5-7의 분기쇄상의 지방족 탄화 수소기가 바람직하다.

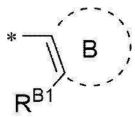
[0146] 상기 탄소수 1-3의 직쇄상의 지방족 탄화 수소기로서는, 예를 들면, 탄소수 1-3의 직쇄상의 알킬기(예를 들면, 메틸기, 에틸기 및 n-프로필기 등)를 들 수 있으며, 에틸기 또는 메틸기가 바람직하고, 메틸기가 보다 바람직하다.

[0147] 상기 탄소수 3-5의 분기쇄상의 지방족 탄화 수소기로서는, 예를 들면, 탄소수 3-5의 분기쇄상의 알킬기(예를 들면, 아이소프로필기, sec-뷰틸기, iso-뷰틸기, tert-뷰틸기 및 네오펜틸기 등)를 들 수 있으며, 아이소프로필기, sec-뷰틸기, iso-뷰틸기 또는 tert-뷰틸기가 바람직하고, 아이소프로필기가 보다 바람직하다.

[0148] 상기 탄소수 3-8의 환상의 지방족 탄화 수소기로서는, 예를 들면, 탄소수 3-8의 사이클로알킬기(예를 들면, 사이클로프로필기, 사이클로뷰틸기, 사이클로펜틸기, 사이클로헥실기 및 사이클로헵틸기 등)를 들 수 있으며, 사이클로프로필기, 사이클로뷰틸기, 사이클로펜틸기 또는 사이클로헥실기가 바람직하고, 사이클로프로필기가 보다 바람직하다.

[0149]  $R^3$ 으로서, 식 (R-1)로 나타나는 기 또는 식 (R-2)로 나타나는 기가 바람직하고, 식 (R-2)로 나타나는 기 또는 식 (R-3)으로 나타나는 기가 보다 바람직하다.

[0150] [화학식 4]



(R-1)

[0151] 식 (R-1) 중, \*는, 결합 위치를 나타낸다. B는, 2 이상의 탄소 원자를 포함하고, 치환기를 갖고 있어도 되는 단환의 방향환을 나타낸다.  $R^{B1}$ 은, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기, 치환기를 갖고 있어도 되는 실릴기, 치환기를 갖고 있어도 되는 알콕시기, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기, 사이아노기 또는 할로젠 원자를 나타낸다.

[0153] B로 나타나는 방향환, 및  $R^{B1}$ 로 나타나는 지방족 탄화 수소기, 실릴기, 알콕시기 또는 방향환기가 치환기를 갖는 경우, 치환기끼리는, 서로 결합하여 비방향족환을 형성하고 있어도 된다.

[0154] 식 (R-1) 중, B는, 2 이상의 탄소 원자를 포함하고, 치환기를 갖고 있어도 되는 단환의 방향환을 나타낸다.

[0155] B로 나타나는 방향환이 포함하는 2 이상의 탄소 원자란, 식 (R-1) 중에 명시되는 2개의 탄소 원자를 포함하고, 또한 그 탄소 원자 이외의 탄소 원자를 포함하고 있어도 되는 것을 의미한다. 구체적으로는, B로 나타나는 방향환은,  $R^{B1}-C^A=C^B-*$  중의  $C^A$  및  $C^B$ 를 환원 원자로서 포함하는 환이다.

[0156] 상기 방향환의 탄소수는, 3~30이 바람직하고, 3~20이 보다 바람직하며, 3~10이 더 바람직하다. 또한, 상기 탄소수는, 식 (R-1) 중에 명시되는 2개의 탄소 원자를 포함하고, 상기 방향환이 치환기를 갖는 경우는 그 치환기의 탄소 원자를 포함하는 값이다.

[0157] 상기 방향환은, 방향족 탄화 수소환 및 방향족 복소환 중 어느 것이어도 된다.

[0158] 상기 방향환으로서, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향족 탄화 수소환이 바람직하고, 치환기를 갖고 있어도 되는 벤젠환이 보다 바람직하다.

[0159] 식 (R-1) 중,  $R^{B1}$ 은, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기, 치환기를 갖고 있어도 되는 실릴기, 치환기를 갖고 있어도 되는 알콕시기, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기, 사이아노기 또는 할로젠 원자를 나타낸다.

[0160]  $R^{B1}$ 로서는, 치환기를 갖고 있어도 되는 알킬기 또는 할로젠 원자가 바람직하다.

[0161] 상기 치환기를 갖고 있어도 되는 알킬기는, 직쇄상, 분기쇄상 및 환상 중 어느 것이어도 된다.

[0162] 상기 알킬기의 탄소수는, 1~10이 바람직하고, 1~3이 보다 바람직하다.

[0163] B로 나타나는 상기 방향환, 및, R<sup>B1</sup>로 나타나는, 상기 지방족 탄화 수소기, 상기 실릴기, 상기 알콕시기 및 상기 방향환기가 가질 수 있는 치환기로서는, 예를 들면, 치환기 W로 예시되는 기를 들 수 있으며, 알킬기 또는 할로젠 원자가 바람직하다.

[0164]  $*-C(R^{C1})_3$  (R-2)

[0165] 식 (R-2) 중, \*는, 결합 위치를 나타낸다. R<sup>C1</sup>은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 메틸기, 아이소프로필기 또는 t-뷰틸기를 나타낸다.

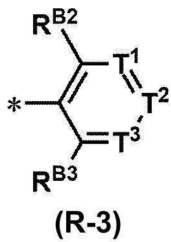
[0166] 단, 식 (R-2)로 나타나는 기의 탄소수는, 3~7이며, 3개의 R<sup>C1</sup> 중, 2개 이상이 수소 원자 이외이다.

[0167] 또한, 상기 식 (R-2)로 나타나는 기의 탄소수란, 식 (R-2)로 나타나는 기에 포함되는 모든 탄소 원자의 합계수를 의미한다.

[0168] 수소 원자 이외의 기를 나타내는 R<sup>C1</sup>의 수는, 2개 이상(2 또는 3개)이면 특별히 제한되지 않지만, 3개의 R<sup>C1</sup> 중, 1개가 수소 원자이며, 나머지 2개가 수소 원자 이외의 기인 것이 바람직하다. 상기 수소 원자 이외의 기로서는, 메틸기 또는 아이소프로필기가 바람직하다.

[0169] 복수 존재하는 R<sup>C1</sup>끼리는, 동일 또는 상이해도 된다.

[0170] [화학식 5]



[0171]

[0172] 식 (R-3) 중, \*는, 결합 위치를 나타낸다. R<sup>B2</sup> 및 R<sup>B3</sup>은, 각각 독립적으로, 치환기를 갖고 있어도 되는 알킬기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.

[0173] T<sup>1</sup>~T<sup>3</sup>은, 각각 독립적으로, -CR<sup>B4</sup>= 또는 질소 원자를 나타낸다. R<sup>B4</sup>는, 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.

[0174] 식 (R-3) 중, R<sup>B2</sup> 및 R<sup>B3</sup>은, 각각 독립적으로, 치환기를 갖고 있어도 되는 알킬기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.

[0175] 상기 알킬기로서는, 예를 들면, R<sup>B1</sup>로 나타나는 치환기를 갖고 있어도 되는 알킬기를 들 수 있다.

[0176] 상기 방향환기로서는, 예를 들면, R<sup>B1</sup>로 나타나는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 들 수 있다.

[0177] R<sup>B2</sup> 및 R<sup>B3</sup>으로서, 치환기를 갖고 있어도 되는 알킬기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 아릴기가 바람직하고, 치환기를 갖고 있어도 되는 알킬기가 보다 바람직하다.

[0178] 식 (R-3) 중, T<sup>1</sup>~T<sup>3</sup>은, 각각 독립적으로, -CR<sup>B4</sup>= 또는 질소 원자를 나타낸다. R<sup>B4</sup>는, 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.

[0179] T<sup>1</sup> 및 T<sup>3</sup>이 -CH=를 나타내고, T<sup>2</sup>가 -CR<sup>B4</sup>=를 나타내는 것이 바람직하다.

[0180] 상기 치환기로서는, 예를 들면, 치환기 W로 예시되는 기를 들 수 있으며, 알킬기가 바람직하다.

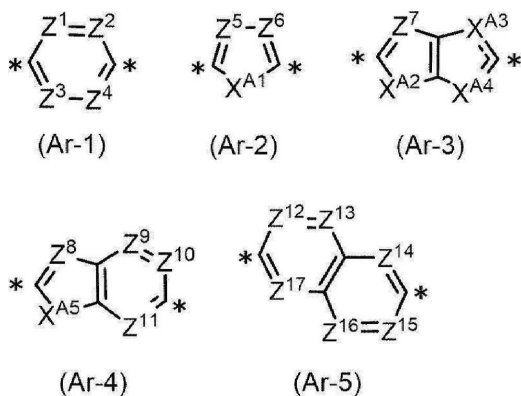
[0181] R<sup>B4</sup>로서는, 수소 원자 또는 알킬기가 바람직하다.

- [0182] 식 (1) 중,  $X^1$  및  $X^2$  중 일방은, 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 또는  $-NR^{X1}$ -을 나타내고, 타방은  $-CR^{X2}$ = 또는 질소 원자를 나타낸다.  $R^{X1}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.  $R^{X2}$ 는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기 또는 할로젠 원자를 나타낸다.
- [0183]  $R^{X1}$  및  $R^{X2}$ 로 나타나는 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기로서는, 예를 들면,  $R^1$  및  $R^2$ 로 나타나는 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기를 들 수 있다.
- [0184]  $R^{X1}$  및  $R^{X2}$ 로 나타나는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기로서는, 예를 들면,  $R^3$ 으로 나타나는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 들 수 있다.
- [0185]  $R^{X1}$ 로서는, 탄소수 1~3의 직쇄상의 지방족 탄화 수소기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기가 바람직하다.  $R^{X2}$ 로서는, 수소 원자, 할로젠 원자 또는 탄소수 1~3의 직쇄상의 지방족 탄화 수소기가 바람직하다.
- [0186]  $X^1$  및  $X^2$  중 일방은 황 원자를 나타내고, 타방은  $-CR^{X2}$ = 또는 질소 원자를 나타내는 것이 바람직하며,  $X^1$  및  $X^2$  중 일방은 황 원자를 나타내고, 타방은  $-CH=$  또는  $-CX=(X$ 는, 할로젠 원자를 나타낸다.)를 나타내는 것이 보다 바람직하다.
- [0187] 식 (1) 중,  $X^3$  및  $X^4$  중 일방은, 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 또는  $-NR^{X3}$ -을 나타내고, 타방은  $-CR^{X4}$ = 또는 질소 원자를 나타낸다.  $R^{X3}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.  $R^{X4}$ 는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기 또는 할로젠 원자를 나타낸다.
- [0188]  $R^{X3}$ 은,  $R^{X1}$ 과 동일한 의미이며, 적합 양태도 동일하다.
- [0189]  $R^{X4}$ 는,  $R^{X2}$ 와 동일한 의미이며, 적합 양태도 동일하다.
- [0190]  $X^3$  및  $X^4$  중 일방은 황 원자를 나타내고, 타방은  $-CR^{X4}$ = 또는 질소 원자를 나타내는 것이 바람직하며,  $X^3$  및  $X^4$  중 일방은 황 원자를 나타내고, 타방은  $-CH=$  또는  $-CX=(X$ 는, 할로젠 원자를 나타낸다.)를 나타내는 것이 보다 바람직하다.
- [0191]  $X^1$  및  $X^2$  중 일방은 황 원자를 나타내고, 타방은  $-CR^{X2}$ = 또는 질소 원자를 나타내며, 또한,  $X^3$  및  $X^4$  중 일방은 황 원자를 나타내고, 타방은  $-CR^{X4}$ = 또는 질소 원자를 나타내는 것도 바람직하며,  $X^1$  및  $X^3$ 은 황 원자를 나타내고,  $X^2$ 는  $-CR^{X2}$ = 또는 질소 원자를 나타내며, 또한,  $X^4$ 는  $-CR^{X4}$ = 또는 질소 원자를 나타내는 것이 보다 바람직하다.
- [0192] 또한, 식 (1) 중,  $X^1$ 과 인접하는 탄소 원자의 사이에 명시되는 점선은,  $X^1$ 이 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 또는  $-NR^{X1}$ -을 나타내는 경우, 일중선(단결합)을 나타내고,  $X^1$ 이  $-CR^{X2}$ = 또는 질소 원자를 나타내는 경우, 이중선(이중 결합)을 나타낸다. 또,  $X^2$ 와 인접하는 탄소 원자의 사이에 명시되는 점선은,  $X^2$ 가 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 또는  $-NR^{X1}$ -을 나타내는 경우, 일중선(단결합)을 나타내고,  $X^2$ 가  $-CR^{X2}$ = 또는 질소 원자를 나타내는 경우, 이중선(이중 결합)을 나타낸다. 또, 식 (1) 중,  $X^3$ 과 인접하는 탄소 원자의 사이에 명시되는 점선은,  $X^3$ 이 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 또는  $-NR^{X3}$ -을 나타내는 경우, 일중선(단결합)을 나타내고,  $X^3$ 이  $-CR^{X4}$ = 또는 질소 원자를 나타내는 경우, 이중선(이중 결합)을 나타낸다. 또,  $X^4$ 와 인접하는 탄소 원자의 사이에 명시되는 점선은,  $X^4$ 가 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 또는  $-NR^{X3}$ -을 나타내는 경우, 일중선(단결합)을 나타내고,  $X^4$ 가  $-CR^{X4}$ = 또는 질소 원자를 나타내는 경우, 이중선(이중 결합)을 나타낸다.
- [0193] 식 (1) 중,  $Ar^1$  및  $Ar^2$ 는, 각각 독립적으로, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.

- [0194] 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기(2가의 방향환기)는, 단환 및 다환 중 어느 것이어도 된다.
- [0195] 상기 방향환기는, 치환기를 갖고 있어도 되는 아릴렌기 및 치환기를 갖고 있어도 되는 헤테로아릴렌기 중 어느 것이어도 된다.
- [0196] 상기 방향환의 탄소수는, 3~30이 바람직하고, 3~20이 보다 바람직하며, 3~15가 더 바람직하다. 또한, 상기 방향환이 치환기를 갖는 경우, 상기 탄소수는, 치환기의 탄소 원자를 포함하는 값이다.
- [0197] 상기 방향환기로서는, 예를 들면, 치환기를 갖고 있어도 되는 단환의 아릴렌기, 치환기를 갖고 있어도 되는 다환의 아릴렌기, 치환기를 갖고 있어도 되는 단환의 헤테로아릴렌기 및 치환기를 갖고 있어도 되는 다환의 헤테로아릴렌기를 들 수 있으며, 본 발명의 효과가 보다 우수한 점에서, 치환기를 갖고 있어도 되는 단환의 방향환기(치환기를 갖고 있어도 되는 단환의 아릴렌기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 단환의 헤테로아릴렌기)가 바람직하다.
- [0198] 상기 단환 및 다환의 헤테로아릴렌기를 구성하는 헤테로 원자로서는, 예를 들면, 질소 원자, 산소 원자 및 황 원자를 들 수 있으며, 적어도 산소 원자 또는 황 원자를 포함하는 것이 바람직하다.
- [0199] 상기 다환의 아릴렌기 및 상기 다환의 헤테로아릴렌기를 구성하는 환의 환수는, 2~10이 바람직하고, 2 또는 3이 보다 바람직하며, 2가 더 바람직하다(환언하면, 치환기를 갖고 있어도 되는 2환의 아릴렌기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 2환의 헤테로아릴렌기가 더 바람직하다.).
- [0200] 또, 상기 2환의 아릴렌기는, 치환기를 갖고 있어도 되는 2환의 축합환의 아릴렌기가 바람직하다. 상기 2환의 헤테로아릴렌기로서는, 치환기를 갖고 있어도 되는 2환의 축합환의 헤테로아릴렌기가 바람직하다.
- [0201] 상기 방향환기가 가질 수 있는 치환기로서는, 예를 들면, 치환기 W로 예시되는 치환기를 들 수 있으며, R<sup>3</sup>으로 나타나는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기, 할로젠 원자, 탄소수 1~3의 직쇄상의 지방족 탄화 수소기, 탄소수 3~5의 분기쇄상의 지방족 탄화 수소기 또는 탄소수 3~8의 환상의 지방족 탄화 수소기가 바람직하다.

[0202] Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup>로서는, 식 (Ar-1)~식 (Ar-5) 중 어느 하나로 나타나는 기가 바람직하고, 식 (Ar-1)로 나타나는 기 또는 식 (Ar-2)로 나타나는 기가 보다 바람직하며, 식 (Ar-1)로 나타나는 기(단, 식 (Ar-1)로 나타나는 기에 있어서, Z<sup>1</sup> 및 Z<sup>2</sup>가 모두 -CR<sup>Z1</sup>=을 나타내는 경우, 2개의 R<sup>Z1</sup>은, 서로 연결되어 환을 형성하지 않는다. 또, Z<sup>3</sup> 및 Z<sup>4</sup>가 모두 -CR<sup>Z1</sup>=을 나타내는 경우, 2개의 R<sup>Z1</sup>은, 서로 연결되어 환을 형성하지 않는다), 또는, 식 (Ar-2)로 나타나는 기(단, 식 (Ar-2)로 나타나는 기에 있어서, Z<sup>5</sup> 및 Z<sup>6</sup>이 모두 -CR<sup>Z3</sup>=을 나타내는 경우, 2개의 R<sup>Z3</sup>은, 서로 연결되어 환을 형성하지 않는다)가 더 바람직하다.

[0203] [화학식 6]



[0204]

[0205] 식 (Ar-1) 중, \*, 는, 결합 위치를 나타낸다. Z<sup>1</sup>~Z<sup>4</sup>는, 각각 독립적으로, -CR<sup>Z1</sup>= 또는 질소 원자를 나타낸다. R<sup>Z1</sup>은, 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.

[0206] 또한, Z<sup>1</sup> 및 Z<sup>2</sup>가 모두 -CR<sup>Z1</sup>=을 나타내는 경우, 2개의 R<sup>Z1</sup>은, 서로 연결되어 단환을 형성하고 있어도 된다. 또, Z<sup>3</sup> 및 Z<sup>4</sup>가 모두 -CR<sup>Z1</sup>=을 나타내는 경우, 2개의 R<sup>Z1</sup>은, 서로 연결되어 단환을 형성하고 있어도 된다. 단, Z<sup>1</sup>~Z<sup>4</sup>가

모두  $-CR^{Z1}$ 을 나타내는 경우,  $Z^1$  및  $Z^2$ 에 있어서의 2개의  $R^{Z1}$ 과,  $Z^3$  및  $Z^4$ 에 있어서의 2개의  $R^{Z1}$  중 일방만, 서로 연결되어 단환을 형성해도 된다.

- [0207] 식 (Ar-2) 중, \*는, 결합 위치를 나타낸다.  $X^{A1}$ 은, 황 원자, 산소 원자, 셀레늄 원자 또는  $-NR^{Z2}$ -를 나타낸다.  $Z^5$  및  $Z^6$ 은, 각각 독립적으로,  $-CR^{Z3}$ = 또는 질소 원자를 나타낸다.  $R^{Z2}$  및  $R^{Z3}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.
- [0208] 또한,  $Z^5$  및  $Z^6$ 이 모두  $-CR^{Z3}$ 을 나타내는 경우, 2개의  $R^{Z3}$ 은, 서로 연결되어 단환을 형성하고 있어도 된다.
- [0209] 식 (Ar-3) 중, \*는, 결합 위치를 나타낸다.  $X^{A2}$ 는, 황 원자, 산소 원자, 셀레늄 원자 또는  $-NR^{Z4}$ -를 나타낸다.  $Z^7$ 은,  $-CR^{Z5}$ = 또는 질소 원자를 나타낸다.  $X^{A3}$  및  $X^{A4}$  중 일방은 황 원자, 산소 원자, 셀레늄 원자 또는  $-NR^{Z6}$ -을 나타내고, 타방은  $-CR^{Z7}$ = 또는 질소 원자를 나타낸다.  $R^{Z4}$ ~ $R^{Z7}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.
- [0210] 식 (Ar-4) 중, \*는, 결합 위치를 나타낸다.  $X^{A5}$ 는, 황 원자, 산소 원자, 셀레늄 원자 또는  $-NR^{Z8}$ -을 나타낸다.  $Z^8$ ~ $Z^{11}$ 은, 각각 독립적으로,  $-CR^{Z9}$ = 또는 질소 원자를 나타낸다.  $R^{Z8}$  및  $R^{Z9}$ 는, 각각 독립적으로, 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.
- [0211] 식 (Ar-5) 중, \*는, 결합 위치를 나타낸다.  $Z^{12}$ ~ $Z^{17}$ 은, 각각 독립적으로,  $-CR^{Z10}$ = 또는 질소 원자를 나타낸다.  $R^{Z10}$ 은, 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.
- [0212] 식 (Ar-1) 중,  $Z^1$ ~ $Z^4$ 는, 각각 독립적으로,  $-CR^{Z1}$ = 또는 질소 원자를 나타낸다.  $R^{Z1}$ 은, 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.
- [0213]  $Z^1$ ~ $Z^4$ 로서는,  $-CR^{Z1}$ =이 바람직하다.
- [0214]  $R^{Z1}$ 로 나타나는 치환기로서는, 예를 들면, 치환기 W로 예시되는 기를 들 수 있으며, 할로젠 원자, 탄소수 1~3의 직쇄상의 지방족 탄화 수소기 또는 알콕시기(바람직하게는, 메톡시기)가 바람직하다.
- [0215]  $R^{Z1}$ 로서는, 수소 원자가 바람직하다.
- [0216] 식 (Ar-1) 중, 2개의  $R^{Z1}$ 이 서로 연결되어 형성하는 단환으로서는, 단환의 방향환, 및, 헤테로 원자를 포함하고 있어도 되는 단환의 치환을 들 수 있고, 헤테로 원자를 포함하고 있어도 되는 단환의 치환(바람직하게는, 사이클로알킬기)이 바람직하다.
- [0217]  $Z^1$  및  $Z^2$ 가 모두  $-CR^{Z1}$ 을 나타내는 경우,  $Z^1$  및  $Z^2$ 에 있어서의 2개의  $R^{Z1}$ 은, 서로 연결되어 단환 구조를 취하지 않는 것이 바람직하다.
- [0218]  $Z^3$  및  $Z^4$ 가 모두  $-CR^{Z1}$ 을 나타내는 경우,  $Z^3$  및  $Z^4$ 에 있어서의 2개의  $R^{Z1}$ 은, 서로 연결되어 단환 구조를 취하지 않는 것이 바람직하다.
- [0219] 식 (Ar-2) 중,  $X^{A1}$ 은, 황 원자, 산소 원자, 셀레늄 원자 또는  $-NR^{Z2}$ -를 나타낸다.
- [0220]  $X^{A1}$ 로서는, 산소 원자 또는 황 원자가 바람직하다.
- [0221]  $Z^5$  및  $Z^6$ 은, 각각 독립적으로,  $-CR^{Z3}$ = 또는 질소 원자를 나타낸다.
- [0222]  $Z^5$  및  $Z^6$ 으로서는,  $-CR^{Z3}$ =이 바람직하다.
- [0223]  $R^{Z2}$  및  $R^{Z3}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.
- [0224]  $R^{Z2}$ 로 나타나는 치환기로서는, 예를 들면, 치환기 W로 예시되는 치환기를 들 수 있으며, 탄소수 1~3의 직쇄상의

지방족 탄화 수소기 또는 방향환기가 바람직하다.

- [0225]  $R^{Z2}$ 로서는, 탄소수 1~3의 직쇄상의 지방족 탄화 수소기 또는 방향환기가 바람직하다.
- [0226]  $R^{Z3}$ 으로 나타나는 치환기로서는, 예를 들면, 치환기 W로 예시되는 치환기를 들 수 있으며, 할로젠 원자, 탄소수 1~3의 직쇄상의 지방족 탄화 수소기 또는 알콕시기(바람직하게는, 메톡시기)가 바람직하다.
- [0227]  $R^{Z3}$ 으로서는, 수소 원자, 할로젠 원자 또는 탄소수 1~3의 직쇄상의 지방족 탄화 수소기가 바람직하다.
- [0228] 식 (Ar-2) 중, 2개의  $R^{Z3}$ 이 서로 연결되어 형성하는 단환으로서는, 단환의 방향환, 및, 헤테로 원자를 포함하고 있어도 되는 단환의 치환을 들 수 있고, 헤테로 원자를 포함하고 있어도 되는 단환의 치환(바람직하게는, 사이클로알킬기)이 바람직하다.
- [0229]  $Z^5$  및  $Z^6$ 이 모두  $-CR^{Z3}$ 을 나타내는 경우,  $Z^5$  및  $Z^6$ 에 있어서의 2개의  $R^{Z3}$ 은, 서로 연결되어 단환 구조를 취하지 않는 것이 바람직하다.
- [0230] 식 (Ar-3) 중,  $X^{A2}$ 는, 황 원자, 산소 원자, 셀레늄 원자 또는  $-NR^{Z4}$ -를 나타낸다.
- [0231]  $X^{A2}$ 로서는, 산소 원자 또는 황 원자가 바람직하다.
- [0232]  $Z^7$ 은,  $-CR^{Z5}$  또는 질소 원자를 나타낸다.
- [0233]  $Z^7$ 로서는,  $-CR^{Z5}$ 가 바람직하다.
- [0234] 식 (Ar-3) 중,  $X^{A3}$  및  $X^{A4}$  중 일방은 황 원자, 산소 원자, 셀레늄 원자 또는  $-NR^{Z6}$ -을 나타내고, 타방은  $-CR^{Z7}$  또는 질소 원자를 나타낸다.
- [0235] 또한, 식 (Ar-3) 중,  $X^{A3}$ 과 인접하는 탄소 원자의 사이에 명시되는 점선은,  $X^{A3}$ 이 황 원자, 산소 원자, 셀레늄 원자 또는  $-NR^{Z6}$ -을 나타내는 경우, 일중선(단결합)을 나타내고,  $X^{A3}$ 이  $-CR^{Z7}$  또는 질소 원자를 나타내는 경우, 이중선(이중 결합)을 나타낸다. 또,  $X^{A4}$ 와 인접하는 탄소 원자의 사이에 명시되는 점선은,  $X^{A4}$ 가 황 원자, 산소 원자, 셀레늄 원자 또는  $-NR^{Z6}$ -을 나타내는 경우, 일중선(단결합)을 나타내고,  $X^{A4}$ 가  $-CR^{Z7}$  또는 질소 원자를 나타내는 경우, 이중선(이중 결합)을 나타낸다.
- [0236]  $X^{A3}$  및  $X^{A4}$  중 일방은 황 원자를 나타내고, 타방은  $-CR^{Z7}$  또는 질소 원자를 나타내는 것이 바람직하며,  $X^{A3}$  및  $X^{A4}$  중 일방은 황 원자를 나타내고, 타방은  $-CH$ -를 나타내는 것이 보다 바람직하다.
- [0237] 식 (Ar-3) 중,  $R^{Z4}$ ~ $R^{Z7}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.
- [0238]  $R^{Z4}$  및  $R^{Z6}$ 은,  $R^{Z2}$ 와 동일한 의미이며, 적합 양태도 동일하다.
- [0239]  $R^{Z5}$  및  $R^{Z7}$ 은,  $R^{Z3}$ 과 동일한 의미이며, 적합 양태도 동일하다.
- [0240] 식 (Ar-4) 중,  $X^{A5}$ 는, 황 원자, 산소 원자, 셀레늄 원자 또는  $-NR^{Z8}$ -을 나타낸다.
- [0241]  $X^{A5}$ 로서는, 산소 원자 또는 황 원자가 바람직하다.
- [0242] 식 (Ar-4) 중,  $Z^8$ ~ $Z^{11}$ 은, 각각 독립적으로,  $-CR^{Z9}$  또는 질소 원자를 나타낸다.
- [0243]  $Z^8$ ~ $Z^{11}$ 로서는,  $-CR^{Z9}$ 가 바람직하다.
- [0244] 식 (Ar-4) 중,  $R^{Z8}$  및  $R^{Z9}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.
- [0245]  $R^{Z8}$ 은,  $R^{Z2}$ 와 동일한 의미이며, 적합 양태도 동일하다.

- [0246]  $R^{Z9}$ 는,  $R^{Z3}$ 과 동일한 의미이며, 적합 양태도 동일하다.
- [0247] 식 (Ar-5) 중,  $Z^{12} \sim Z^{17}$ 은, 각각 독립적으로,  $-CR^{Z10} =$  또는 질소 원자를 나타낸다.
- [0248]  $Z^{12} \sim Z^{17}$ 로서는,  $-CR^{Z10} =$ 이 바람직하다.
- [0249] 식 (Ar-5) 중,  $R^{Z10}$ 은, 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.
- [0250]  $R^{Z10}$ 은,  $R^{Z3}$ 과 동일한 의미이며, 적합 양태도 동일하다.
- [0251] 식 (1) 중,  $Y^1$  및  $Y^2$ 는, 각각 독립적으로, 산소 원자, 황 원자,  $=NR^{Y1}$  또는  $=C(R^{Y2})(R^{Y3})$ 을 나타낸다.
- [0252]  $Y^1$  및  $Y^2$ 로서는, 산소 원자 또는 황 원자가 바람직하고, 산소 원자가 보다 바람직하다.
- [0253] 또,  $Y^1$  및  $Y^2$ 는, 동일한 기를 나타내는 것도 바람직하다.
- [0254] 식 (1) 중,  $R^{Y1}$ 은, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.  $R^{Y2}$  및  $R^{Y3}$ 은, 각각 독립적으로, 사이아노기,  $-CO_2R^{Y4}$ ,  $-C(=O)R^{Y5}$ ,  $-S(=O)R^{Y6}$  또는  $-S(=O)_2R^{Y7}$ 을 나타낸다.  $R^{Y4} \sim R^{Y7}$ 은, 각각 독립적으로, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.
- [0255]  $R^{Y1}$ 로 나타나는 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기로서는, 예를 들면,  $R^1$  및  $R^2$ 로 나타나는 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기를 들 수 있다.
- [0256]  $R^{Y1}$ 로 나타나는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기로서는, 예를 들면,  $R^3$ 으로 나타나는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 들 수 있다.
- [0257]  $R^{Y2}$  및  $R^{Y3}$  중 적어도 일방이 사이아노기를 나타내는 것이 바람직하고,  $R^{Y2}$  및  $R^{Y3}$ 의 양방이 사이아노기를 나타내는 것이 보다 바람직하다.
- [0258]  $R^{Y1} \sim R^{Y7}$ 로 나타나는 기가 가질 수 있는 치환기로서는, 예를 들면, 치환기 W로 예시되는 치환기를 들 수 있다.
- [0259] 식 (1) 중,  $A^1$  및  $A^2$ 는, 각각 독립적으로, 2 이상의 탄소 원자를 포함하고, 치환기를 갖고 있어도 되는 환을 나타낸다.
- [0260] 2 이상의 탄소 원자란, 식 (1) 중에 명시되는 2개의 탄소 원자를 포함하고, 또한 그 탄소 원자 이외의 탄소 원자를 포함하고 있어도 되는 것을 의미한다. 구체적으로는,  $A^1$ 로 나타나는 환은,  $-C(R^1)=C^A-C^B(=Y^1)-$  중의  $C^A$  및  $C^B$ 를 환원 원자로서 포함하는 환이다.
- [0261] 상기 환의 탄소수는, 3~30이 바람직하고, 3~20이 보다 바람직하며, 3~10이 더 바람직하다. 또한, 상기 탄소수는, 식 (1) 중에 명시되는 2개의 탄소 원자를 포함하고, 상기 환이 치환기를 갖는 경우는 그 치환기의 탄소 원자를 포함하는 값이다.
- [0262] 상기 환은, 방향족성 및 비방향족성 중 어느 것이어도 된다.
- [0263] 상기 환은, 단환 및 다환 중 어느 것이어도 되고, 5원환, 6원환, 또는, 5원환 및 6원환 중 적어도 하나를 포함하는 축합환이 바람직하다. 상기 축합환을 형성하는 환의 수는, 1~4가 바람직하고, 1~3이 보다 바람직하다.
- [0264] 상기 환은, 헤테로 원자를 갖고 있어도 된다. 상기 헤테로 원자로서는, 예를 들면, 질소 원자, 황 원자, 산소 원자, 셀레늄 원자, 텔루륨 원자, 인 원자, 규소 원자 및 붕소 원자를 들 수 있으며, 황 원자, 질소 원자 또는 산소 원자가 바람직하다.
- [0265] 상기 환의 헤테로 원자의 수는, 0~10이 바람직하고, 0~5가 보다 바람직하다.
- [0266] 상기 환을 구성하는 탄소 원자가, 다른 카보닐 탄소( $>C=O$ ) 및/또는 다른 싸이오카보닐 탄소( $>C=S$ )로 치환되어

있어도 된다. 또한, 다른 카보닐 탄소 및 다른 싸이오카보닐 탄소란, 환을 구성하는 탄소 원자 중, 상기 C<sup>A</sup> 및 상기 C<sup>B</sup> 이외의 탄소 원자를 구성 요소로 하는 카보닐 탄소 및 싸이오카보닐 탄소를 의미한다.

- [0267] 상기 환이 가질 수 있는 치환기로서는, 예를 들면, 치환기 W로 예시되는 치환기를 들 수 있으며, 할로젠 원자, 알킬기, 방향환기 또는 실릴기가 바람직하고, 할로젠 원자 또는 알킬기가 보다 바람직하다.
- [0268] 상기 알킬기는, 직쇄상, 분기쇄상 및 환상 중 어느 것이어도 되고, 직쇄상이 바람직하다.
- [0269] 상기 알킬기의 탄소수는, 1~10이 바람직하고, 1~3이 보다 바람직하다.
- [0270] 상기 환으로서는, 예를 들면, 산성 핵(예를 들면, 메로사이아닌 색소에서 산성 핵 등)으로서 이용되는 환이 바람직하다. 예를 들면, 이하의 핵을 들 수 있다.
- [0271] (a) 1,3-다이카보닐핵: 예를 들면, 1,3-인테인다이온핵, 1,3-사이클로핵세인다이온, 5,5-다이메틸-1,3-사이클로핵세인다이온 및 1,3-다이옥세인-4,6-다이온 등.
- [0272] (b) 피라졸린온핵: 예를 들면, 1-페닐-2-피라졸린-5-온, 3-메틸-1-페닐-2-피라졸린-5-온, 3-시아노-1-페닐-2-피라졸린-5-온, 3-트라이플루오로메틸-1-페닐-2-피라졸린-5-온 및 1-(2-벤조싸이아졸일)-3-메틸-2-피라졸린-5-온 등.
- [0273] (c) 아이소옥사졸린온핵: 예를 들면, 3-페닐-2-아이소옥사졸린-5-온 및 3-메틸-2-아이소옥사졸린-5-온 등.
- [0274] (d) 옥시인돌핵: 예를 들면, 1-알킬-2,3-다이하이드로-2-옥시인돌 등.
- [0275] (e) 2,4,6-트라이옥소헥사하이드로피리미딘핵: 예를 들면, 바비투르산, 2-싸이오바비투르산, 및 그 유도체 등. 상기 유도체로서는, 예를 들면, 1-메틸, 1-에틸 등의 1-알킬체, 1,3-다이메틸, 1,3-다이에틸 및 1,3-다이부틸 등의 1,3-다이알킬체, 1,3-다이페닐, 1,3-다이(p-클로로페닐) 및 1,3-다이(p-에톡시카보닐페닐) 등의 1,3-다이아릴체, 1-에틸-3-페닐 등의 1-알킬-1-아릴체, 및, 1,3-다이(2-피리딜) 등의 1,3-다이헤테로아릴체를 들 수 있다.
- [0276] (f) 2-싸이오-2,4-싸이아졸리딘다이온핵: 예를 들면, 로다닌 및 그 유도체 등. 상기 유도체로서는, 예를 들면, 3-메틸로다닌, 3-에틸로다닌 및 3-알릴로다닌 등의 3-알킬로다닌, 3-페닐로다닌 등의 3-아릴로다닌, 및, 3-(2-피리딜)로다닌 등의 3-헤테로아릴로다닌 등을 들 수 있다.
- [0277] (g) 2-싸이오-2,4-옥사졸리딘다이온핵(2-싸이오-2,4-(3H,5H)-옥사졸다이온핵): 예를 들면, 3-에틸-2-싸이오-2,4-옥사졸리딘다이온 등.
- [0278] (h) 싸이아나프텐온핵: 예를 들면, 3(2H)-싸이아나프텐온-1,1-다이옥사이드 등.
- [0279] (i) 2-싸이오-2,5-싸이아졸리딘다이온핵: 예를 들면, 3-에틸-2-싸이오-2,5-싸이아졸리딘다이온 등.
- [0280] (j) 2,4-싸이아졸리딘다이온핵: 예를 들면, 2,4-싸이아졸리딘다이온, 3-에틸-2,4-싸이아졸리딘다이온 및 3-페닐-2,4-싸이아졸리딘다이온 등.
- [0281] (k) 싸이아졸린-4-온핵: 예를 들면, 4-싸이아졸린온 및 2-에틸-4-싸이아졸린온 등.
- [0282] (l) 2,4-이미다졸리딘다이온(하이단토인)핵: 예를 들면, 2,4-이미다졸리딘다이온 및 3-에틸-2,4-이미다졸리딘다이온 등.
- [0283] (m) 2-싸이오-2,4-이미다졸리딘다이온(2-싸이오하이단토인)핵: 예를 들면, 2-싸이오-2,4-이미다졸리딘다이온 및 3-에틸-2-싸이오-2,4-이미다졸리딘다이온 등.
- [0284] (n) 이미다졸린-5-온핵: 예를 들면, 2-프로필머캅토-2-이미다졸린-5-온 등.
- [0285] (o) 3,5-피라졸리딘다이온핵: 예를 들면, 1,2-다이페닐-3,5-피라졸리딘다이온 및 1,2-다이메틸-3,5-피라졸리딘다이온 등.
- [0286] (p) 벤조싸이오펜-3(2H)-온핵: 예를 들면, 벤조싸이오펜-3(2H)-온, 옥소벤조싸이오펜-3(2H)-온 및 다이옥소벤조싸이오펜-3(2H)-온 등.
- [0287] (q) 인단온핵: 예를 들면, 1-인단온, 3-페닐-1-인단온, 3-메틸-1-인단온, 3,3-다이페닐-1-인단온, 3-(다이사이아노메틸리렌)-1-인단온 및 3,3-다이메틸-1-인단온 등.

[0288] (r) 벤조퓨란-3-(2H)-온핵: 예를 들면, 벤조퓨란-3-(2H)-온 등.

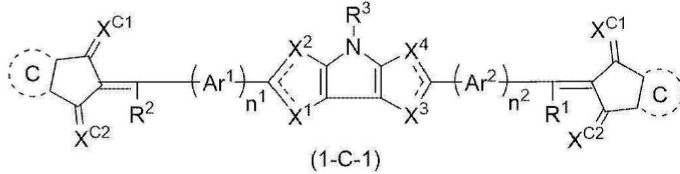
[0289] (s) 2,2-다이하이드로페날렌-1,3-다이온핵 등.

[0290] 식 (1) 중,  $n^1$  및  $n^2$  중 일방은 1을 나타내고, 타방은 0 또는 1을 나타낸다.

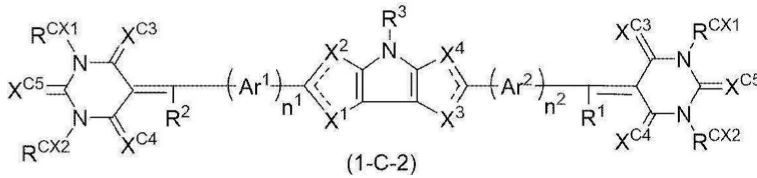
[0291]  $n^1$  및  $n^2$  중 일방은 1을 나타내고, 타방은 0을 나타내는 것이 바람직하다.

[0292] 특정 화합물로서는, 식 (1-C-1)로 나타나는 화합물 또는 식 (1-C-2)로 나타나는 화합물이 바람직하고, 식 (1-C-1)로 나타나는 화합물이 보다 바람직하다.

[0293] [화학식 7]



[0294]



[0295] 식 (1-C-1) 중,  $R^1$  및  $R^2$ 는, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기, 사이아노기 또는 할로젠 원자를 나타낸다.

[0296]  $R^3$ 은, -O-를 갖고 있어도 되고, 할로젠 원자를 갖고 있어도 되는 탄소수 7 이하의 지방족 탄화 수소기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.

[0297]  $X^1$  및  $X^2$  중 일방은, 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 또는  $-NR^{X1}$ -을 나타내고, 타방은  $-CR^{X2}=$  또는 질소 원자를 나타낸다.  $X^3$  및  $X^4$  중 일방은, 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 또는  $-NR^{X3}$ -을 나타내고, 타방은  $-CR^{X4}=$  또는 질소 원자를 나타낸다.  $R^{X1}$  및  $R^{X3}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.  $R^{X2}$  및  $R^{X4}$ 는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기 또는 할로젠 원자를 나타낸다.

[0298]  $Ar^1$  및  $Ar^2$ 는, 각각 독립적으로, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.

[0299]  $n^1$  및  $n^2$  중 일방은 1을 나타내고, 타방은 0 또는 1을 나타낸다.

[0300]  $X^{C1}$  및  $X^{C2}$ 는, 각각 독립적으로, 산소 원자, 황 원자,  $=NR^{C11}$  또는  $=C(R^{C12})(R^{C13})$ 을 나타낸다.  $R^{C11}$ 은, 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.  $R^{C12}$  및  $R^{C13}$ 은, 각각 독립적으로, 사이아노기,  $-SO_2R^{C14}$ ,  $-COOR^{C15}$  또는  $-COR^{C16}$ 을 나타낸다.  $R^{C14}$ - $R^{C16}$ 은, 각각 독립적으로, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기, 치환기를 갖고 있어도 되는 아릴기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 헤테로환기를 나타낸다.

[0301] C는, 2 이상의 탄소 원자를 포함하고, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환을 나타낸다.

[0302] 식 (1-C-2) 중,  $R^1$  및  $R^2$ 는, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기, 사이아노기 또는 할로젠 원자를 나타낸다.

[0303]  $R^3$ 은, -O-를 갖고 있어도 되고, 할로젠 원자를 갖고 있어도 되는 탄소수 7 이하의 지방족 탄화 수소기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.

[0304]  $X^1$  및  $X^2$  중 일방은, 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 또는  $-NR^{X1}$ -을 나타내고, 타방은  $-CR^{X2}=$  또는 질소 원자를

나타낸다.  $X^3$  및  $X^4$  중 일방은, 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 또는  $-NR^{X3}$ -을 나타내고, 타방은  $-CR^{X4}=$  또는 질소 원자를 나타낸다.  $R^{X1}$  및  $R^{X3}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.  $R^{X2}$  및  $R^{X4}$ 는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기 또는 할로젠 원자를 나타낸다.

[0305]  $Ar^1$  및  $Ar^2$ 는, 각각 독립적으로, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.

[0306]  $n^1$  및  $n^2$  중 일방은 1을 나타내고, 타방은 0 또는 1을 나타낸다.

[0307]  $X^{C3} \sim X^{C5}$ 는, 각각 독립적으로, 산소 원자, 황 원자,  $=NR^{C21}$  또는  $=C(R^{C22})(R^{C23})$ 을 나타낸다.  $R^{C21}$ 은, 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.  $R^{C22}$  및  $R^{C23}$ 은, 각각 독립적으로, 사이아노기,  $-SO_2R^{C24}$ ,  $-COOR^{C25}$  또는  $-COR^{C26}$ 을 나타낸다.  $R^{C24} \sim R^{C26}$ 은, 각각 독립적으로, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기, 치환기를 갖고 있어도 되는 아릴기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 헤테로환기를 나타낸다.  $R^{CX1}$  및  $R^{CX2}$ 는, 각각 독립적으로, 수소 원자 또는 치환기를 나타낸다.

[0308] 식 (1-C-1) 및 식 (1-C-2) 중,  $R^1 \sim R^3$ ,  $X^1 \sim X^4$ ,  $Ar^1$ ,  $Ar^2$ ,  $n^1$  및  $n^2$ 는, 각각 식 (1) 중,  $R^1 \sim R^3$ ,  $X^1 \sim X^4$ ,  $Ar^1$ ,  $Ar^2$ ,  $n^1$  및  $n^2$ 와 동일한 의미이며, 적합 양태도 동일하다.

[0309]  $X^{C1}$  및  $X^{C2}$ 로 나타나는 기로서는, 예를 들면,  $Y^1$  및  $Y^2$ 로 나타나는 기를 들 수 있다.

[0310] C로 나타나는 방향환이 포함하는 2 이상의 탄소 원자란, 식 (C-1) 중에 명시되는 2개의 탄소 원자를 포함하고, 또한 그 탄소 원자 이외의 탄소 원자를 포함하고 있어도 되는 것을 의미한다. 구체적으로는, C로 나타나는 방향환은,  $-C(=X^{C1})-C^A-C^B-C(=X^{C2})-$  중의  $C^A$  및  $C^B$ 를 환원 원자로서 포함하는 환이다.

[0311] 상기 방향환의 탄소수는, 3~30이 바람직하고, 3~20이 보다 바람직하며, 3~10이 더 바람직하다. 또한, 상기 탄소수는, 식 (C-1) 중에 명시되는 2개의 탄소 원자를 포함하고, 상기 방향환이 치환기를 갖는 경우는 그 치환기의 탄소 원자를 포함하는 값이다.

[0312] C로 나타나는 방향환으로서, 예를 들면, 식 (R-1) 중의 B로 나타나는 방향환을 들 수 있다.

[0313]  $R^{C14} \sim R^{C16}$ 으로 나타나는 치환기를 갖고 있어도 되는 헤테로환기는, 방향족성 및 비방향족성 중 어느 것이어도 된다.

[0314] 상기 방향환, 상기 지방족 탄화 수소기, 상기 아릴기 및 상기 헤테로환기가 가질 수 있는 치환기로서는, 예를 들면, 치환기 W로 예시되는 기를 들 수 있으며, 알킬기, 알콕시기, 아릴기, 헤테로아릴기 또는 할로젠 원자가 바람직하다.

[0315]  $X^{C3} \sim X^{C5}$ 로서는, 산소 원자 또는 황 원자가 바람직하고, 산소 원자가 보다 바람직하다.

[0316]  $R^{C21}$ 로 나타나는 치환기로서는, 예를 들면, 치환기 W로 예시되는 치환기를 들 수 있다.

[0317]  $R^{C22}$  및  $R^{C23}$  중 적어도 일방이 사이아노기를 나타내는 것이 바람직하고,  $R^{C22}$  및  $R^{C23}$ 의 양방이 사이아노기를 나타내는 것이 보다 바람직하다.

[0318]  $R^{C24} \sim R^{C26}$ 으로 나타나는 치환기를 갖고 있어도 되는 헤테로환기는, 방향족성 및 비방향족성 중 어느 것이어도 된다.

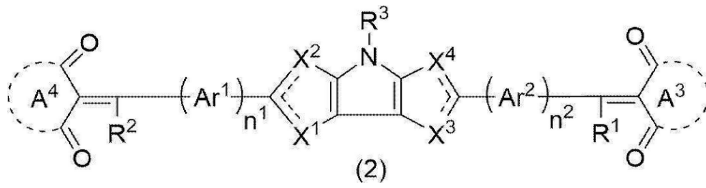
[0319]  $R^{C24} \sim R^{C26}$ 으로 나타나는 상기 지방족 탄화 수소기, 상기 아릴기 및 상기 헤테로환기가 가질 수 있는 치환기로서는, 예를 들면, 치환기 W로 예시되는 치환기를 들 수 있다.

[0320]  $R^{CX1}$  및  $R^{CX2}$ 로 나타나는 치환기로서는, 예를 들면, 치환기 W로 예시되는 기를 들 수 있으며, 알킬기 또는 페닐기가 바람직하고, 알킬기가 보다 바람직하다. 페닐기는, 치환기를 더 갖고 있어도 된다. 상기 페닐기가 가질 수

있는 치환기로서는, 예를 들면, 치환기 W로 예시되는 기를 들 수 있다.

[0321] 특정 화합물은, 식 (2)로 나타나는 화합물 또는 식 (3)으로 나타나는 화합물을 포함하는 것이 바람직하다.

[0322] [화학식 8]



[0323]

[0324] 식 (2) 중, R<sup>1</sup> 및 R<sup>2</sup>는, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기, 사이아노기 또는 할로젠 원자를 나타낸다.

[0325] R<sup>3</sup>은, -O-를 갖고 있어도 되고, 할로젠 원자를 갖고 있어도 되는 탄소수 7 이하의 지방족 탄화 수소기, 또는, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.

[0326] X<sup>1</sup> 및 X<sup>2</sup> 중 일방은, 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 또는 -NR<sup>X1</sup>-을 나타내고, 타방은 -CR<sup>X2</sup>= 또는 질소 원자를 나타낸다. X<sup>3</sup> 및 X<sup>4</sup> 중 일방은, 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 또는 -NR<sup>X3</sup>-을 나타내고, 타방은 -CR<sup>X4</sup>= 또는 질소 원자를 나타낸다. R<sup>X1</sup> 및 R<sup>X3</sup>은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다. R<sup>X2</sup> 및 R<sup>X4</sup>는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기 또는 할로젠 원자를 나타낸다.

[0327] Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup>는, 각각 독립적으로, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.

[0328] A<sup>3</sup> 및 A<sup>4</sup>는, 각각 독립적으로, 3 이상의 탄소 원자를 포함하고, 치환기를 갖고 있어도 되는 환을 나타낸다.

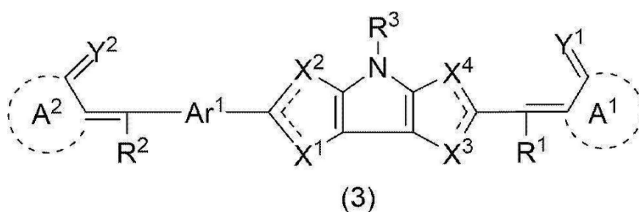
[0329] n<sup>1</sup> 및 n<sup>2</sup> 중 일방은 1을 나타내고, 타방은 0 또는 1을 나타낸다.

[0330] 식 (2) 중, R<sup>1</sup>~R<sup>3</sup>, X<sup>1</sup>~X<sup>4</sup>, Ar<sup>1</sup>, Ar<sup>2</sup>, n<sup>1</sup> 및 n<sup>2</sup>는, 각각 식 (1) 중, R<sup>1</sup>~R<sup>3</sup>, X<sup>1</sup>~X<sup>4</sup>, Ar<sup>1</sup>, Ar<sup>2</sup>, n<sup>1</sup> 및 n<sup>2</sup>와 동일한 의미이며, 적합 양태도 동일하다.

[0331] A<sup>3</sup> 및 A<sup>4</sup>로 나타나는 환이 포함하는 3 이상의 탄소 원자란, 식 (2) 중에 명시되는 3개의 탄소 원자를 포함하고, 또한 그 탄소 원자 이외의 탄소 원자를 포함하고 있어도 되는 것을 의미한다. 구체적으로는, A<sup>3</sup>으로 나타나는 환은, -C<sup>A</sup>(=O)-C<sup>B</sup>-C<sup>C</sup>(=O)- 중의 C<sup>A</sup>~C<sup>C</sup>를 환원 원자로서 포함하는 환이다.

[0332] 상기 환으로서는, 예를 들면, A<sup>1</sup> 및 A<sup>2</sup>로 나타나는 2 이상의 탄소 원자를 포함하고, 치환기를 갖고 있어도 되는 환 중의 3 이상의 탄소 원자를 포함하며, 치환기를 갖고 있어도 되는 환을 들 수 있다.

[0333] [화학식 9]



[0334]

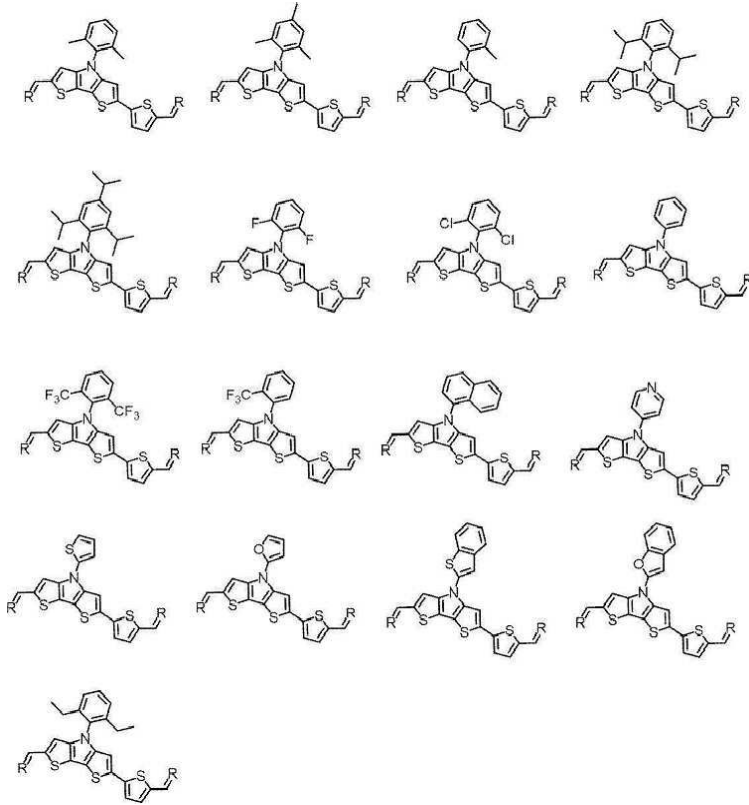
[0335] 식 (3) 중, R<sup>1</sup> 및 R<sup>2</sup>는, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기, 사이아노기 또는 할로젠 원자를 나타낸다.

[0336] R<sup>3</sup>은, -O-를 갖고 있어도 되고, 할로젠 원자를 갖고 있어도 되는 탄소수 7 이하의 지방족 탄화 수소기, 또는, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.

- [0337]  $X^1$  및  $X^2$  중 일방은, 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 또는  $-NR^{X1}$ -을 나타내고, 타방은  $-CR^{X2}$ = 또는 질소 원자를 나타낸다.  $X^3$  및  $X^4$  중 일방은, 산소 원자, 황 원자, 셀레늄 원자 또는  $-NR^{X3}$ -을 나타내고, 타방은  $-CR^{X4}$ = 또는 질소 원자를 나타낸다.  $R^{X1}$  및  $R^{X3}$ 은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.  $R^{X2}$  및  $R^{X4}$ 는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기 또는 할로젠 원자를 나타낸다.
- [0338]  $Ar^1$ 은, 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.
- [0339]  $Y^1$  및  $Y^2$ 는, 각각 독립적으로, 산소 원자, 황 원자,  $=NR^{Y1}$  또는  $=C(R^{Y2})(R^{Y3})$ 을 나타낸다.  $R^{Y1}$ 은, 수소 원자, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.  $R^{Y2}$  및  $R^{Y3}$ 은, 각각 독립적으로, 사이아노기,  $-CO_2R^{Y4}$ ,  $-C(=O)R^{Y5}$ ,  $-S(=O)R^{Y6}$  또는  $-S(=O)_2R^{Y7}$ 을 나타낸다.  $R^{Y4}$ ~ $R^{Y7}$ 은, 각각 독립적으로, 치환기를 갖고 있어도 되는 지방족 탄화 수소기 또는 치환기를 갖고 있어도 되는 방향환기를 나타낸다.
- [0340]  $A^1$  및  $A^2$ 는, 각각 독립적으로, 2 이상의 탄소 원자를 포함하고, 치환기를 갖고 있어도 되는 환을 나타낸다.
- [0341] 식 (3) 중,  $R^1$ ~ $R^3$ ,  $X^1$ ~ $X^4$ ,  $Ar^1$ ,  $Y^1$ ,  $Y^2$ ,  $A^1$  및  $A^2$ 는, 각각 식 (1) 중,  $R^1$ ~ $R^3$ ,  $X^1$ ~ $X^4$ ,  $Ar^1$ ,  $Y^1$ ,  $Y^2$ ,  $A^1$  및  $A^2$ 와 동일한 의미이며, 적합 양태도 동일하다.
- [0342] 특정 화합물의 분자량은, 400~1,200이 바람직하고, 400~1,000이 보다 바람직하며, 400~800이 더 바람직하다.
- [0343] 상기 분자량인 경우, 특정 화합물의 승화 온도가 낮아져, 고속으로 광전 변환막을 성막했을 때에도 양자 효율이 우수하다고 추측된다.
- [0344] 특정 화합물은, p형 유기 반도체로서 사용할 때의 안정성과 n형 유기 반도체의 에너지 준위의 매칭의 점에서, 단막에서의 이온화 퍼텐셜이 -5.0~-6.0eV인 것이 바람직하다.
- [0345] 특정 화합물의 극대 흡수 파장은, 파장 500~700nm의 범위가 바람직하고, 파장 500~600nm의 범위가 보다 바람직하다.
- [0346] 상기 극대 흡수 파장은, 특정 화합물의 흡수 스펙트럼을 흡광도가 0.5~1.0이 되는 정도의 농도로 조정하여 용액 상태(용제: 클로로폼)에서 측정한 값이다. 단, 특정 화합물이 클로로폼에 용해되지 않는 경우, 특정 화합물을 증착하여, 막 상태로 한 특정 화합물을 이용하여 측정한 값을 특정 화합물의 극대 흡수 파장으로 한다.
- [0347] 특정 화합물은, 촬상 소자, 광센서 또는 광전지에 이용하는 광전 변환막의 재료로서 특히 유용하다. 특정 화합물은, 광전 변환막 내에서 색소로서 기능하는 경우가 많다. 또, 특정 화합물은, 착색 재료, 액정 재료, 유기 반도체 재료, 전하 수송 재료, 의약 재료 및 형광 진단약 재료로서도 사용할 수 있다.
- [0348] 특정 화합물로서는, 예를 들면, 이하의 화합물을 들 수 있다.

[0349]

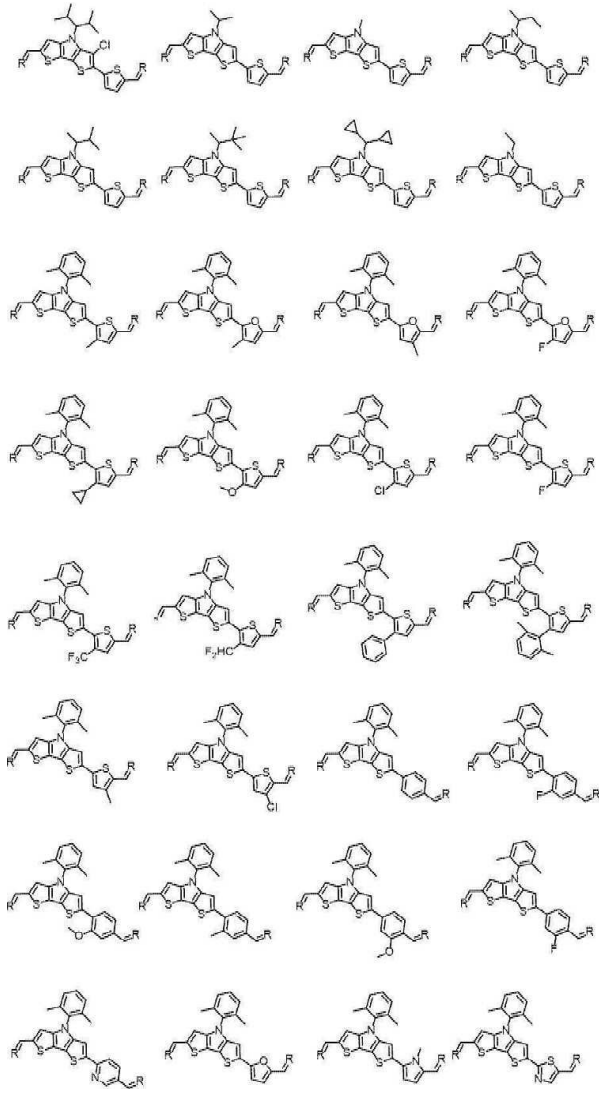
[화학식 10]



[0350]

[0351]

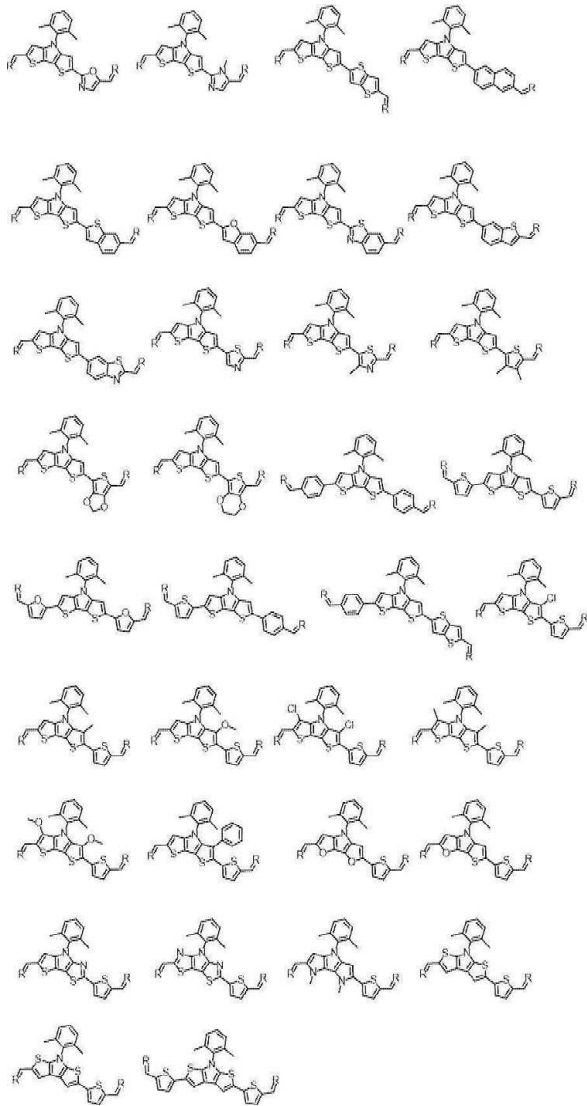
[화학식 11]



[0352]

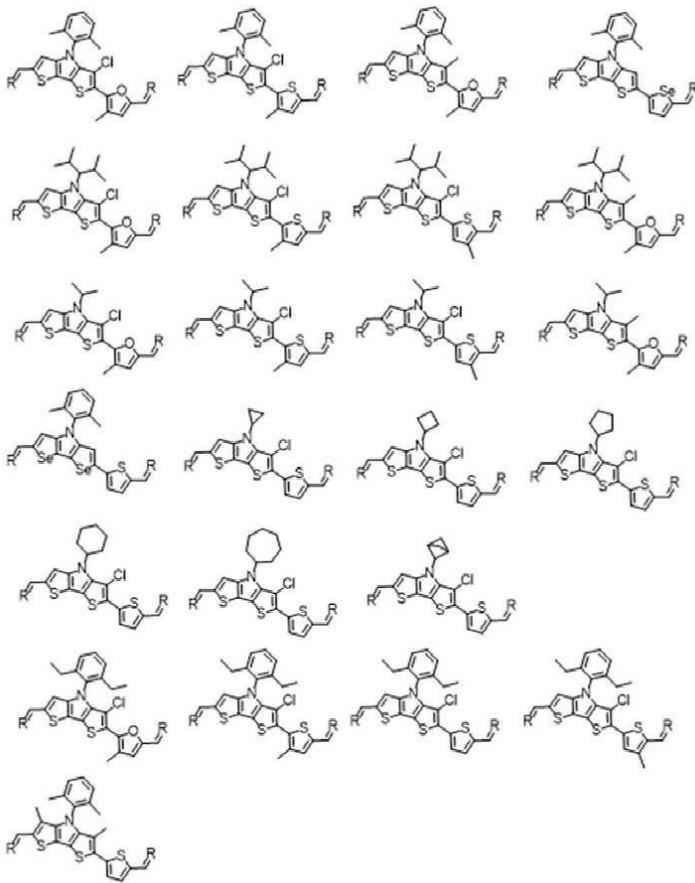
[0353]

[화학식 12]



[0354]

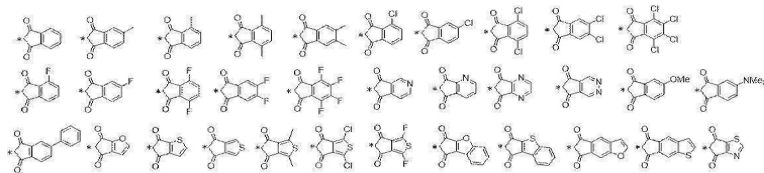
[0355] [화학식 13]



[0356]

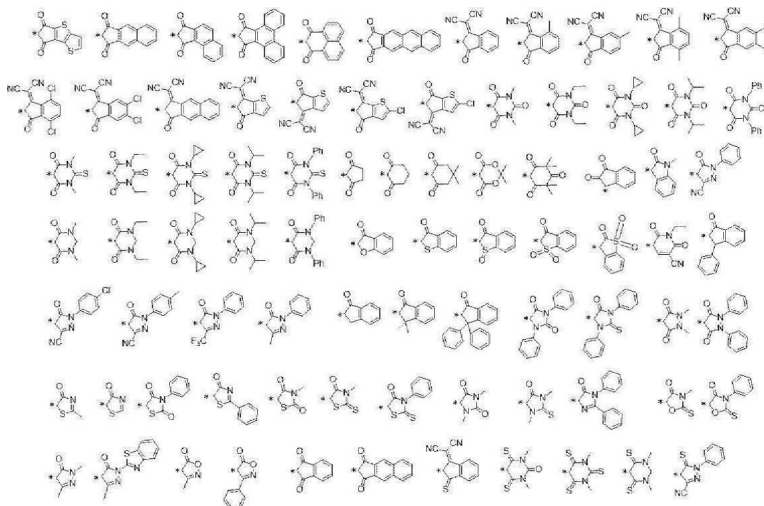
[0357] 상기 예시한 특정 화합물 중의 R은, 이하 중 어느 하나의 기를 나타낸다. \*는, 결합 위치를 나타낸다.

[0358] [화학식 14]



[0359]

[0360] [화학식 15]



[0361]

- [0362] 특정 화합물은, 필요에 따라 정제되어도 된다.
- [0363] 특정 화합물의 정제 방법으로는, 예를 들면, 승화 정제, 실리카겔 칼럼 크로마토그래피를 이용한 정제, 젤 침투 크로마토그래피를 이용한 정제, 리슬러리 세정, 재침전 정제, 및, 활성탄 등의 흡착제를 이용한 정제 및 재결정 정제를 들 수 있다.
- [0364] 특정 화합물은, 1종 단독 또는 2종 이상으로 이용해도 된다.
- [0365] 2종 이상 이용하는 경우는, 그들의 합계량이 하기 범위가 되는 것이 바람직하다.
- [0366] 광전 변환막 중의 특정 화합물의 함유량(=특정 화합물의 단층 환산에서의 막두께/광전 변환막의 막두께×100)은, 15~75체적%가 바람직하고, 20~60체적%가 보다 바람직하며, 25~50체적%가 더 바람직하다.
- [0367] <n형 유기 반도체>
- [0368] 광전 변환막은, 상기 특정 화합물 이외에, n형 유기 반도체를 포함하는 것이 바람직하다.
- [0369] n형 유기 반도체는, 상기 특정 화합물과는 상이한 화합물이다.
- [0370] n형 유기 반도체는, 역셉터성 유기 반도체 재료(화합물)이며, 전자를 수용하기 쉬운 성질이 있는 유기 화합물을 말한다. 즉, n형 유기 반도체는, 2개의 유기 화합물을 접촉시켜 이용한 경우에 전자 친화력이 큰 쪽의 유기 화합물을 말한다. 즉, 역셉터성 유기 반도체로서는, 전자 수용성이 있는 유기 화합물이면, 어느 유기 화합물도 사용 가능하다.
- [0371] n형 유기 반도체로서는, 예를 들면, 풀러렌 및 그 유도체로 이루어지는 군으로부터 선택되는 풀러렌류; 축합 방향족 탄소환 화합물(예를 들면, 나프탈렌 유도체, 안트라센 유도체, 페난트렌 유도체, 테트라센 유도체, 피렌 유도체, 페릴렌 유도체 및 플루오란텐 유도체 등); 질소 원자, 산소 원자 및 황 원자로 이루어지는 군으로부터 선택되는 적어도 하나를 갖는 5~7원환의 헤테로환 화합물(예를 들면, 피리딘, 피라진, 피리미딘, 피리다진, 트리아진, 퀴놀린, 퀴놀살린, 퀴나졸린, 프탈라진, 신놀린, 아이소퀴놀린, 프레리딘, 아크리딘, 페나진, 페난트롤린, 테트라졸, 피라졸, 이미다졸 및 싸이아졸 등); 폴리아릴렌 화합물; 플루오렌 화합물; 사이클로펜타다이엔 화합물; 실릴 화합물; 1,4,5,8-나프탈렌테트라카복실산 무수물; 1,4,5,8-나프탈렌테트라카복실산 무수물 이미드 유도체 및 옥사디아아졸 유도체; 안트라퀴노다이메테인 유도체; 다이페닐퀴논 유도체; 바소큐프로인, 바소페난트롤린 및 이들의 유도체; 트리아아졸 화합물; 다이스타이릴아릴렌 유도체; 함질소 헤테로환 화합물을 배위자로서 갖는 금속 착체; 사일롤 화합물; 일본 공개특허공보 2006-100767호의 단락 [0056]~[0057]에 기재된 화합물; 을 들 수 있다.
- [0372] n형 유기 반도체(화합물)로서는, 풀러렌 및 그 유도체로 이루어지는 군으로부터 선택되는 풀러렌류가 바람직하다.
- [0373] 풀러렌으로서는, 예를 들면, 풀러렌 C60, 풀러렌 C70, 풀러렌 C76, 풀러렌 C78, 풀러렌 C80, 풀러렌 C82, 풀러렌 C84, 풀러렌 C90, 풀러렌 C96, 풀러렌 C240, 풀러렌 C540 및 믹스드 풀러렌을 들 수 있다.
- [0374] 풀러렌 유도체는, 예를 들면, 상기 풀러렌에 치환기가 부가된 화합물을 들 수 있다. 상기 치환기로서는, 알킬기, 아릴기 또는 복소환기가 바람직하다. 풀러렌 유도체로서는, 일본 공개특허공보 2007-123707호에 기재된 화합물이 바람직하다.
- [0375] n형 유기 반도체는, 유기 색소여도 된다.
- [0376] 유기 색소로서는, 예를 들면, 사이아닌 색소, 스타이릴 색소, 헤미사이아닌 색소, 메로사이아닌 색소(제로메타인메로사이아닌(심플 메로사이아닌)을 포함한다), 로다사이아닌 색소, 알로폴라 색소, 옥소놀 색소, 헤미옥소놀 색소, 스쿠아릴륨 색소, 크로코늄 색소, 아자메타인 색소, 쿠마린 색소, 아릴리덴 색소, 안트라퀴논 색소, 트라이페닐메테인 색소, 아조 색소, 아조메타인 색소, 메탈로센 색소, 플루오렌온 색소, 풀기드 색소, 페릴렌 색소, 페나진 색소, 페노싸이아진 색소, 퀴논 색소, 다이페닐메테인 색소, 폴리엔 색소, 아크리딘 색소, 아크리딘온 색소, 다이페닐아민 색소, 퀴노프탈론 색소, 페녹사진 색소, 프탈로페릴렌 색소, 다이옥세인 색소, 포피린 색소, 클로로필 색소, 프탈로사이아닌 색소, 서브 프탈로사이아닌 색소 및 금속 착체 색소를 들 수 있다.
- [0377] n형 유기 반도체의 분자량은, 200~1,200이 바람직하고, 200~900이 보다 바람직하다.
- [0378] n형 유기 반도체의 극대 흡수 파장은, 파장 400nm 이하 또는 파장 500~600nm의 범위가 바람직하다.

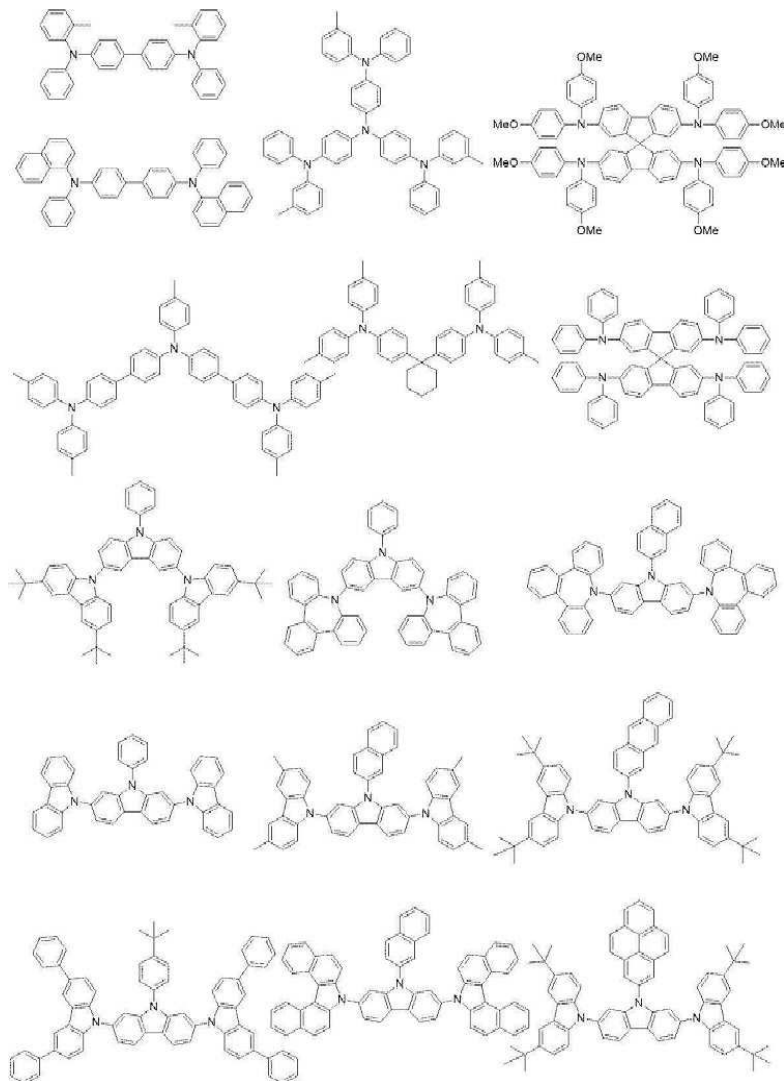
- [0379] 광전 변환막은, 특정 화합물과 n형 유기 반도체가 혼합된 상태로 형성되는 벌크 헤테로 구조를 갖는 것이 바람직하다. 벌크 헤테로 구조는, 광전 변환막 내에서, 특정 화합물과 n형 유기 반도체가 혼합 및 분산되어 있는 층이다. 벌크 헤테로 구조를 갖는 광전 변환막은, 습식법 및 건식법 중 어느 방법으로도 형성할 수 있다. 또한, 벌크 헤테로 구조에 대해서는, 일본 공개특허공보 2005-303266호의 단락 [0013]~[0014]에 있어서 상세하게 설명되어 있다.
- [0380] 특정 화합물과 n형 유기 반도체의 전자 친화력의 차는, 0.1eV 이상인 것이 바람직하다.
- [0381] n형 유기 반도체는, 1종 단독 또는 2종 이상으로 이용해도 된다.
- [0382] 광전 변환막이 n형 유기 반도체를 포함하는 경우, 광전 변환막 중의 n형 유기 반도체의 함유량(n형 유기 반도체의 단층 환산에서의 막두께/광전 변환막의 막두께×100)은, 15~75체적%가 바람직하고, 20~60체적%가 보다 바람직하며, 20~50체적%가 더 바람직하다.
- [0383] n형 유기 반도체 재료가 폴리렌류를 포함하는 경우, n형 유기 반도체 재료의 합계 함유량에 대한 폴리렌류의 함유량(폴리렌류의 단층 환산에서의 막두께/단층 환산한 각 n형 유기 반도체 재료의 막두께의 합계×100)은, 50~100체적%가 바람직하고, 80~100체적%가 보다 바람직하다. 폴리렌류는, 1종 단독 또는 2종 이상으로 이용해도 된다.
- [0384] 광전 변환 소자의 응답 속도의 점에서, 특정 화합물과 n형 유기 반도체의 합계 함유량에 대한 특정 화합물의 함유량(특정 화합물의 단층 환산에서의 막두께/(특정 화합물의 단층 환산에서의 막두께+n형 유기 반도체의 단층 환산에서의 막두께)×100)은, 20~80체적%가 바람직하고, 30~80체적%가 보다 바람직하다.
- [0385] 광전 변환막이 n형 유기 반도체 및 p형 유기 반도체를 포함하는 경우, 특정 화합물의 함유량(=특정 화합물의 단층 환산에서의 막두께/(특정 화합물의 단층 환산에서의 막두께+n형 유기 반도체의 단층 환산에서의 막두께+p형 유기 반도체의 단층 환산에서의 막두께)×100)은, 15~75체적%가 바람직하고, 20~75체적%가 보다 바람직하다.
- [0386] 또한, 광전 변환막은, 실질적으로, 특정 화합물과 n형 유기 반도체와 목적에 따라 포함되는 p형 유기 반도체로 구성되는 것이 바람직하다. 실질적이란, 광전 변환막의 전체 질량에 대하여, 특정 화합물, n형 유기 반도체 및 p형 유기 반도체의 합계 함유량이, 90~100체적%이며, 95~100체적%가 바람직하고, 99~100체적%가 보다 바람직하다.
- [0387] <p형 유기 반도체>
- [0388] 광전 변환막은, 상기 특정 화합물 이외에, p형 유기 반도체를 포함하는 것이 바람직하다.
- [0389] p형 유기 반도체는, 상기 특정 화합물과는 상이한 화합물이다.
- [0390] p형 유기 반도체란, 도너성 유기 반도체 재료(화합물)이며, 전자를 공여하기 쉬운 성질이 있는 유기 화합물을 말한다. 즉, p형 유기 반도체란, 2개의 유기 화합물을 접촉시켜 이용했을 때에 이온화 퍼텐셜이 작은 쪽의 유기 화합물을 말한다.
- [0391] p형 유기 반도체는, 1종 단독 또는 2종 이상으로 이용해도 된다.
- [0392] p형 유기 반도체로서는, 예를 들면, 트리아릴아민 화합물(예를 들면, N,N'-비스(3-메틸페닐)-(1,1'-바이페닐)-4,4'-다이아민(TPD), 4,4'-비스[N-(나프틸)-N-페닐-아미노]바이페닐( $\alpha$ -NPD), 일본 공개특허공보 2011-228614호의 단락 [0128]~[0148]에 기재된 화합물, 일본 공개특허공보 2011-176259호의 단락 [0052]~[0063]에 기재된 화합물, 일본 공개특허공보 2011-225544호의 단락 [0119]~[0158]에 기재된 화합물, 일본 공개특허공보 2015-153910호의 [0044]~[0051]에 기재된 화합물, 및 일본 공개특허공보 2012-094660호의 단락 [0086]~[0090]에 기재된 화합물 등), 피라졸린 화합물, 스타이릴아민 화합물, 하이드라존 화합물, 폴리실레인 화합물, 싸이오펜 화합물(예를 들면, 싸이에노싸이오펜 유도체, 다이벤조싸이오펜 유도체, 벤조다이싸이오펜 유도체, 다이싸이에노싸이오펜 유도체, [1]벤조싸이에노[3,2-b]싸이오펜(BTBT) 유도체, 싸이에노[3,2-f:4,5-f']비스[1]벤조싸이오펜(TBBT) 유도체, 일본 공개특허공보 2018-014474호의 단락 [0031]~[0036]에 기재된 화합물, W02016/194630호의 단락 [0043]~[0045]에 기재된 화합물, W02017/159684호의 단락 [0025]~[0037], [0099]~[0109]에 기재된 화합물, 일본 공개특허공보 2017-076766호의 단락 [0029]~[0034]에 기재된 화합물, W02018/207722의 단락 [0015]~[0025]에 기재된 화합물, 일본 공개특허공보 2019-054228의 단락 [0045]~[0053]에 기재된 화합물, W02019/058995의 단락 [0045]~[0055]에 기재된 화합물, W02019/081416의 단락 [0063]~[0089]에 기재된 화합물, 일본 공개특허공보 2019-80052의 단락 [0033]~[0036]에 기재된 화합물, W02019/054125의 단락 [0044]~[0054]에

기재된 화합물, W02019/093188의 단락 [0041]~[0046]에 기재된 화합물 등), 일본 공개특허공보 2019-050398호의 단락 [0034]~[0037]의 화합물, 일본 공개특허공보 2018-206878호의 단락 [0033]~[0036]의 화합물, 일본 공개특허공보 2018-190755호의 단락 [0038]의 화합물, 일본 공개특허공보 2018-026559호의 단락 [0019]~[0021]의 화합물, 일본 공개특허공보 2018-170487호의 단락 [0031]~[0056]의 화합물, 일본 공개특허공보 2018-078270호의 단락 [0036]~[0041]의 화합물, 일본 공개특허공보 2018-166200호의 단락 [0055]~[0082]의 화합물, 일본 공개특허공보 2018-113425호의 단락 [0041]~[0050]의 화합물, 일본 공개특허공보 2018-085430호의 단락 [0044]~[0048]의 화합물, 일본 공개특허공보 2018-056546호의 단락 [0041]~[0045]의 화합물, 일본 공개특허공보 2018-046267호의 단락 [0042]~[0049]의 화합물, 일본 공개특허공보 2018-014474호의 단락 [0031]~[0036]의 화합물, W02018/016465호의 단락 [0036]~[0046]에 기재된 화합물, 일본 공개특허공보 2020-010024호의 단락 [0045]~[0048]의 화합물, 등), 사이아닌 화합물, 옥소놀 화합물, 폴리아민 화합물, 인돌 화합물, 피롤 화합물, 피라졸 화합물, 폴리아릴렌 화합물, 축합 방향족 탄소환 화합물(예를 들면, 나프탈렌 유도체, 안트라센 유도체, 페난트렌 유도체, 테트라센 유도체, 펜타센 유도체, 피렌 유도체, 페릴렌 유도체 및 플루오란텐 유도체 등), 포피린 화합물, 프탈로사이아닌 화합물, 트리아아졸 화합물, 옥사디아아졸 화합물, 이미다졸 화합물, 폴리아릴알케인 화합물, 피라졸론 화합물, 아미노 치환 칼콘 화합물, 옥사졸 화합물, 플루오렌온 화합물, 실라제인 화합물, 및, 합질소 헤테로환 화합물을 배위자로서 갖는 금속 착체를 들 수 있다.

[0393] p형 유기 반도체로서는, 예를 들면, n형 유기 반도체보다 이온화 퍼텐셜이 작은 화합물도 들 수 있고, 이 조건을 충족시키면, n형 유기 반도체로서 예시한 유기 색소를 사용할 수 있다.

[0394] 이하에, p형 유기 반도체로서 사용할 수 있는 화합물을 예시한다.

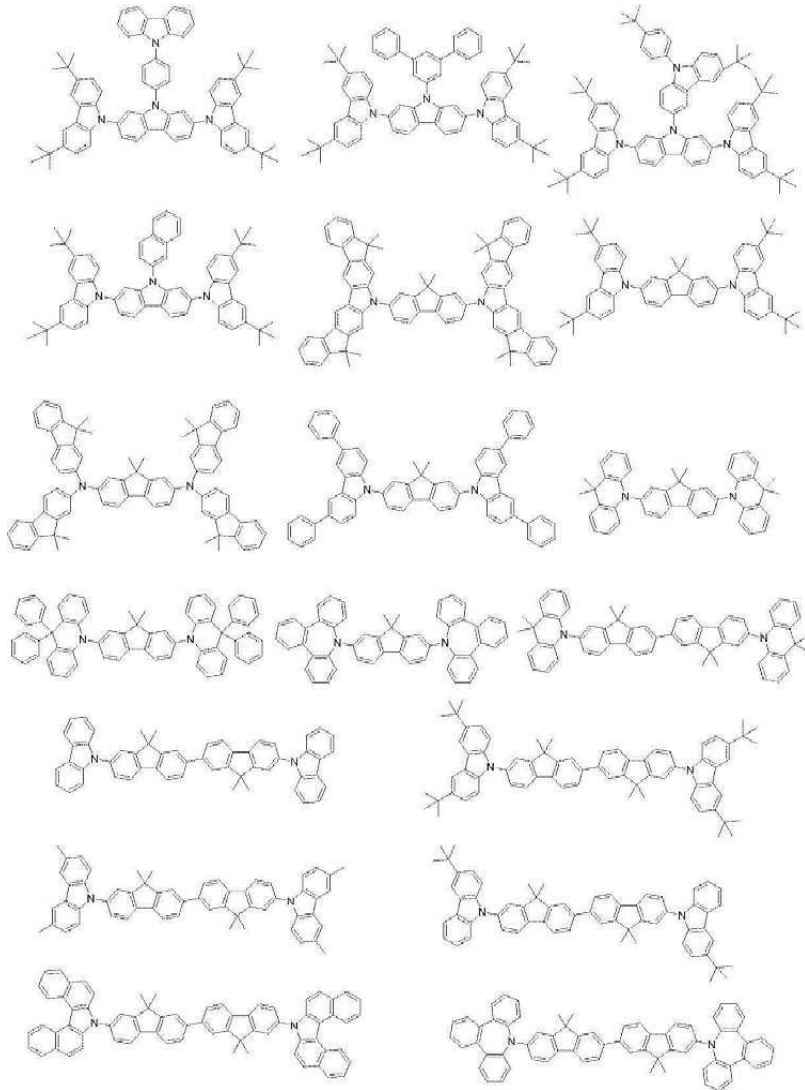
[0395] [화학식 16]



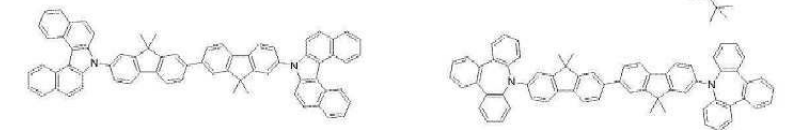
[0396]

[0397]

[화학식 17]

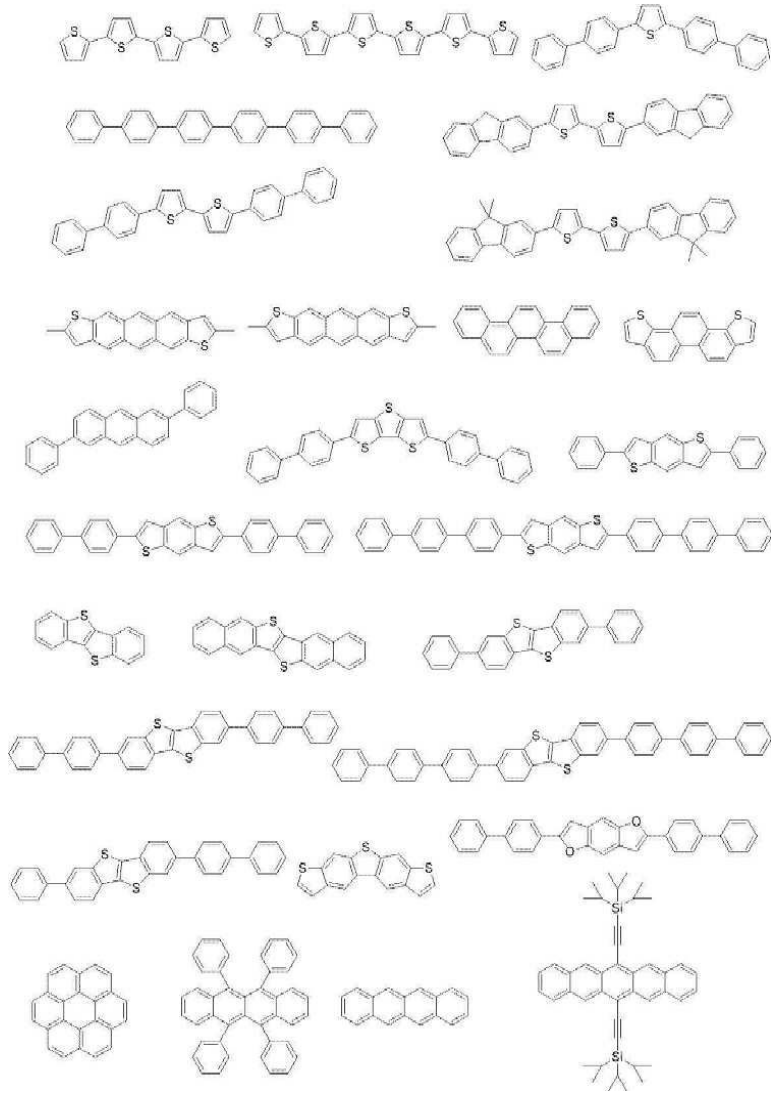


[0398]



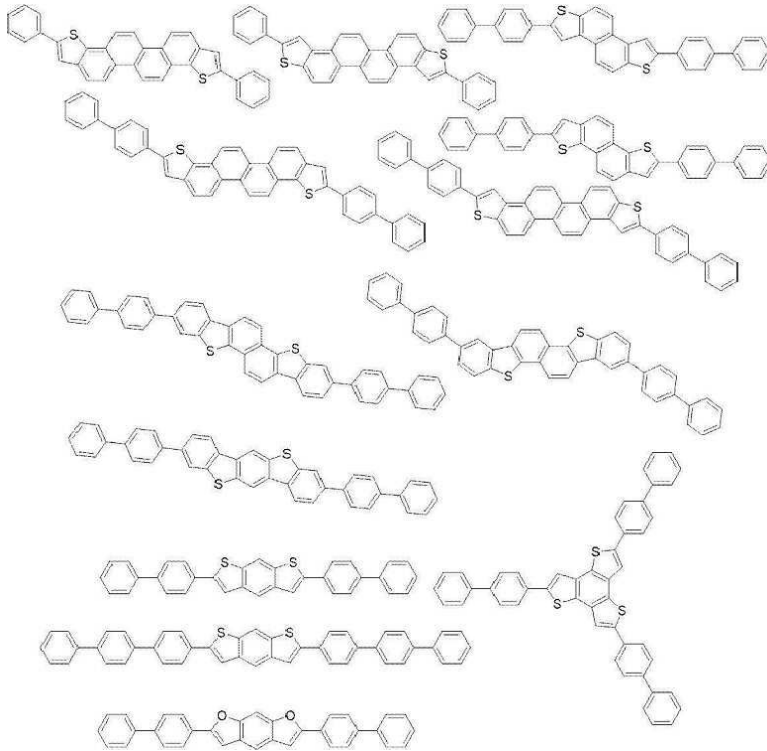
[0399]

[화학식 18]



[0400]

[0401] [화학식 19]



[0402]

[0403] 특정 화합물과 p형 유기 반도체의 이온화 퍼텐셜의 차는, 0.1eV 이상인 것이 바람직하다.

[0404] p형 유기 반도체는, 1종 단독 또는 2종 이상으로 이용해도 된다.

[0405] 광전 변환막이 p형 유기 반도체를 포함하는 경우, 광전 변환막 중의 p형 유기 반도체의 함유량(p형 유기 반도체의 단층 환산에서의 막두께/광전 변환막의 막두께×100)은, 15~75체적%가 바람직하고, 20~60체적%가 보다 바람직하며, 20~50체적%가 더 바람직하다.

[0406] 특정 화합물을 포함하는 광전 변환막은 비발광성막이며, 유기 전계 발광 소자(OLED: Organic Light Emitting Diode)와는 상이한 특징을 갖는다. 비발광성막이란 발광 양자 효율이 1% 이하인 막을 의미하며, 발광 양자 효율은 0.5% 이하가 바람직하고, 0.1% 이하가 보다 바람직하다. 하한은, 0% 이상인 경우가 많다.

[0407] <색소>

[0408] 광전 변환막은, 상기 특정 화합물 이외에, 색소를 포함하는 것이 바람직하다.

[0409] 색소는, 상기 특정 화합물과는 상이한 화합물이다.

[0410] 색소로서는, 유기 색소가 바람직하다.

[0411] 유기 색소로서는, 예를 들면, 사이아닌 색소, 스타이릴 색소, 헤미사이아닌 색소, 메로사이아닌 색소(제로메타인메로사이아닌(심플 메로사이아닌)을 포함한다), 로다사이아닌 색소, 알로폴라 색소, 옥소놀 색소, 헤미옥소놀 색소, 스쿠아릴륨 색소, 크로코늄 색소, 아자메타인 색소, 쿠마린 색소, 아릴리덴 색소, 안트라퀴논 색소, 트라이페닐메테인 색소, 아조 색소, 아조메타인 색소, 메탈로센 색소, 플루오렌온 색소, 풀기드 색소, 페틸렌 색소, 페나진 색소, 페노싸이아진 색소, 퀴논 색소, 다이페닐메테인 색소, 폴리엔 색소, 아크리딘 색소, 아크리딘온 색소, 다이페닐아민 색소, 퀴노프탈론 색소, 페녹사진 색소, 프탈로페틸렌 색소, 다이옥세인 색소, 포피린 색소, 클로로필 색소, 프탈로사이아닌 색소, 서브 프탈로사이아닌 색소 및 금속 착체 색소를 들 수 있다.

[0412] 색소의 극대 흡수 파장은, 가시광 영역이 바람직하고, 파장 400~600nm가 보다 바람직하며, 파장 400~500nm가 더 바람직하다.

[0413] 색소는, 1종 단독 또는 2종 이상으로 이용해도 된다.

[0414] 광전 변환막 중에 있어서의, 특정 화합물과 색소의 합계의 함유량에 대한, 색소의 함유량(=(색소의 단층 환산에서의 막두께)/(특정 화합물의 단층 환산에서의 막두께+색소의 단층 환산에서의 막두께)×100))은, 15~75체적%가

바람직하고, 15~60체적%가 보다 바람직하며, 15~50체적%가 더 바람직하다.

- [0415] <성막 방법>
- [0416] 상기 광전 변환막의 성막 방법으로서, 예를 들면, 건식 성막법을 들 수 있다.
- [0417] 건식 성막법으로서, 예를 들면, 증착법(특히 진공 증착법), 스퍼터링법, 이온 플레이팅법, 및 MBE(Molecular Beam Epitaxy)법 등의 물리 기상 성장법, 및, 플라즈마 중합 등의 CVD(Chemical Vapor Deposition)법을 들 수 있고, 진공 증착법이 바람직하다. 진공 증착법에 의하여 광전 변환막을 성막하는 경우, 진공도 및 증착 온도 등의 제조 조건은, 통상의 방법에 따라 설정할 수 있다.
- [0418] 광전 변환막의 막두께는, 10~1000nm가 바람직하고, 50~800nm가 보다 바람직하며, 50~500nm가 더 바람직하다.
- [0419] [전극]
- [0420] 광전 변환 소자는, 전극을 갖는 것이 바람직하다.
- [0421] 전극(상부 전극(투명 도전성막)(15)과 하부 전극(도전성막)(11))은, 도전성 재료로 구성된다. 도전성 재료로서는, 금속, 합금, 금속 산화물, 전기 전도성 화합물 및 이들의 혼합물을 들 수 있다.
- [0422] 상부 전극(15)으로부터 광이 입사되기 때문에, 상부 전극(15)은 검지하고자 하는 광에 대하여 투명인 것이 바람직하다. 상부 전극(15)을 구성하는 재료로서는, 예를 들면, 안티모니 또는 불소 등을 도프한 산화 주석(ATO: Antimony Tin Oxide, FTO: Fluorine doped Tin Oxide), 산화 주석, 산화 아연, 산화 인듐, 산화 인듐 주석(ITO: Indium Tin Oxide) 및 산화 아연 인듐(IZO: Indium zinc oxide) 등의 도전성 금속 산화물; 금, 은, 크로뮴 및 니켈 등의 금속 박막; 이들 금속과 도전성 금속 산화물의 혼합물 또는 적층물; 폴리아닐린, 폴리싸이오펜 및 폴리피롤 등의 유기 도전성 재료; 및 카본 나노 튜브 및 그래핀 등의 나노 탄소 재료; 등을 들 수 있으며, 고도전성 및 투명성의 점에서, 도전성 금속 산화물이 바람직하다.
- [0423] 통상, 도전성막을 소정의 범위보다 얇게 하면, 급격하게 저항값이 증가하는 경우가 많다. 본 실시형태에 관한 광전 변환 소자를 장착한 고체 촬상 소자에 있어서는, 시트 저항은, 100~10000Ω/□여도 되고, 박막화할 수 있는 막두께의 범위의 자유도는 크다.
- [0424] 또, 상부 전극(투명 도전성막)(15)은 막두께가 얇을수록 흡수하는 광의 양은 적어져, 일반적으로 광투과율이 증가한다. 광투과율의 증가는, 광전 변환막에서의 광흡수를 증대시켜, 광전 변환능을 증대시키기 때문에, 바람직하다. 박막화에 따른, 누설 전류의 억제, 박막의 저항값의 증대 및 투과율의 증가를 고려하면, 상부 전극(15)의 두께는, 5~100nm가 바람직하고, 5~20nm가 보다 바람직하다.
- [0425] 하부 전극(11)은, 용도에 따라, 투명성을 갖게 하는 경우와, 반대로 투명성을 갖게 하지 않고 광을 반사시키는 경우가 있다. 하부 전극(11)을 구성하는 재료로서는, 예를 들면, 안티모니 또는 불소 등을 도프한 산화 주석(ATO, FTO), 산화 주석, 산화 아연, 산화 인듐, 산화 인듐 주석(ITO), 및 산화 아연 인듐(IZO) 등의 도전성 금속 산화물; 금, 은, 크로뮴, 니켈, 타이타늄, 텅스텐 및 알루미늄 등의 금속; 이들 금속의 산화물 또는 질화물 등의 도전성 화합물(예를 들면, 질화 타이타늄(TiN) 등); 이들 금속과 도전성 금속 산화물의 혼합물 또는 적층물; 폴리아닐린, 폴리싸이오펜 및, 폴리피롤 등의 유기 도전성 재료; 카본 나노 튜브 및 그래핀 등의 탄소 재료를 들 수 있다.
- [0426] 전극을 형성하는 방법으로서, 전극 재료에 따라 적절히 선택할 수 있다. 구체적으로는, 인쇄 방식 및 코팅 방식 등의 습식 방식; 진공 증착법, 스퍼터링법 및 이온 플레이팅법 등의 물리적 방식; 및 CVD 및 플라즈마 CVD법 등의 화학적 방식을 들 수 있다.
- [0427] 전극의 재료가 ITO인 경우, 전자 빔법, 스퍼터링법, 저항 가열 증착법, 화학 반응법(졸-겔법 등) 및 산화 인듐 주석의 분산물의 도포 등의 방법을 들 수 있다.
- [0428] [전하 블로킹막: 전자 블로킹막, 정공 블로킹막]
- [0429] 광전 변환 소자는, 도전성막과 투명 도전성막의 사이에, 광전 변환막 외에 1종 이상의 중간층을 갖는 것이 바람직하다.
- [0430] 상기 중간층으로서, 예를 들면, 전하 블로킹막을 들 수 있다. 광전 변환 소자가 이 막을 갖는 경우, 얻어지는 광전 변환 소자의 특성(양자 효율 및 응답 속도 등)이 보다 우수하다. 전하 블로킹막으로서, 예를 들면, 전자 블로킹막 및 정공 블로킹막을 들 수 있다.

- [0431] [전자 블로킹막]
- [0432] 전자 블로킹막은, 도너성 유기 반도체 재료(화합물)이며, 상기 p형 유기 반도체를 사용할 수 있다.
- [0433] 또, 전자 블로킹막으로서, 고분자 재료도 사용할 수 있다.
- [0434] 고분자 재료로서는, 예를 들면, 페닐렌바이닐렌, 플루오렌, 카바졸, 인돌, 피렌, 피롤, 피콜린, 싸이오펜, 아세틸렌 및 다이아세틸렌 등의 중합체, 및, 그 유도체를 들 수 있다.
- [0435] 전자 블로킹막은, 복수 막으로 구성해도 된다.
- [0436] 전자 블로킹막은, 무기 재료로 구성되어 있어도 된다. 일반적으로, 무기 재료는 유기 재료보다 유전율이 크기 때문에, 무기 재료를 전자 블로킹막에 이용한 경우에, 광전 변환막에 전압이 많이 걸리게 되어, 양자 효율이 높아진다. 전자 블로킹막이 될 수 있는 무기 재료로서는, 예를 들면, 산화 칼슘, 산화 크로뮴, 산화 크로뮴 구리, 산화 망가니즈, 산화 코발트, 산화 니켈, 산화 구리, 산화 갈륨 구리, 산화 스트론튬 구리, 산화 나이오븀, 산화 몰리브데넘, 산화 인듐 구리, 산화 인듐 은 및 산화 이리듐을 들 수 있다.
- [0437] [정공 블로킹막]
- [0438] 정공 블로킹막은, 억셉터성 유기 반도체 재료(화합물)이며, 상기 n형 유기 반도체를 이용할 수 있다.
- [0439] 정공 블로킹막은, 복수 막으로 구성해도 된다.
- [0440] 전자 블로킹막의 제조 방법으로서, 예를 들면, 건식 성막법 및 습식 성막법을 들 수 있다. 건식 성막법으로서, 예를 들면, 증착법 및 스퍼터링법을 들 수 있다. 증착법은, 물리 증착(PVD: Physical Vapor Deposition)법 및 화학 증착(CVD)법 중 어느 것이어도 되고, 진공 증착법 등의 물리 증착법이 바람직하다. 습식 성막법으로서, 예를 들면, 잉크젯법, 스프레이법, 노즐 프린트법, 스핀 코트법, 딥 코트법, 캐스트법, 다이 코트법, 롤 코트법, 바 코트법 및 그라비아 코트법을 들 수 있으며, 고정밀도 패터닝의 점에서, 잉크젯법이 바람직하다.
- [0441] 전자 블로킹막(전자 블로킹막 및 정공 블로킹막)의 막두께는, 각각, 3~200nm가 바람직하고, 5~100nm가 보다 바람직하며, 5~30nm가 더 바람직하다.
- [0442] [기관]
- [0443] 광전 변환 소자는, 기관을 더 가져도 된다.
- [0444] 기관으로서, 예를 들면, 반도체 기관, 유리 기관 및 플라스틱 기관을 들 수 있다.
- [0445] 또한, 기관의 위치는, 통상, 기관 상에 도전성막, 광전 변환막 및 투명 도전성막을 이 순서로 적층한다.
- [0446] [밀봉층]
- [0447] 광전 변환 소자는, 밀봉층을 더 가져도 된다.
- [0448] 광전 변환 재료는 물 분자 등의 열화 인자의 존재로 현저히 그 성능이 열화되어 버리는 경우가 있다. 따라서, 물 분자를 침투시키지 않는 치밀한 금속 산화물, 금속 질화물 혹은 금속 질화 산화물 등의 세라믹스 또는 다이아몬드상 탄소(DLC: Diamond-like Carbon) 등의 밀봉층으로 광전 변환막 전체를 피복하여 밀봉하여, 상기 열화를 방지할 수 있다.
- [0449] 또한, 밀봉층으로서, 예를 들면, 일본 공개특허공보 2011-082508호의 단락 [0210]~[0215]에 기재된 화합물을 들 수 있고, 이들 내용은 본 명세서에 인용된다.
- [0450] [촬상 소자]
- [0451] 광전 변환 소자의 용도로서, 예를 들면, 촬상 소자를 들 수 있다.
- [0452] 촬상 소자란, 화상의 광 정보를 전기 신호로 변환하는 소자이고, 통상, 복수의 광전 변환 소자가 동일 평면 상에서 매트릭스상으로 배치되어 있으며, 각각의 광전 변환 소자(화소)에 있어서 광 신호를 전기 신호로 변환하고, 그 전기 신호를 화소마다 축차 촬상 소자 외로 출력할 수 있는 것을 말한다. 그 때문에, 화소 하나당, 하나 이상의 광전 변환 소자 및 하나 이상의 트랜지스터로 구성된다.
- [0453] [광센서]
- [0454] 광전 변환 소자의 다른 용도로서, 예를 들면, 광전지 및 광센서를 들 수 있고, 본 발명의 광전 변환 소자는 광

센서로서 이용하는 것이 바람직하다. 광센서로서는, 상기 광전 변환 소자 단독으로 이용해도 되고, 상기 광전 변환 소자를 직선상으로 배치한 라인 센서 또는 평면상에 배치한 2차원 센서로서 이용해도 된다.

[0455] [화합물]

[0456] 본 발명은, 화합물의 발명도 포함한다. 본 발명의 화합물이란, 상기 특정 화합물이다.

[0457] 실시예

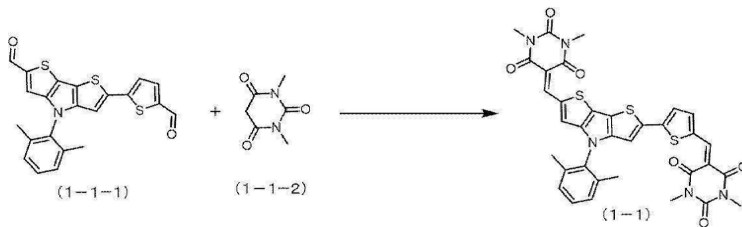
[0458] 이하에 실시예에 근거하여 본 발명을 더 상세하게 설명한다.

[0459] 이하의 실시예에 나타내는 재료, 사용량, 비율, 처리 내용 및 처리 수순 등은, 본 발명의 취지를 벗어나지 않는 한 적절히 변경할 수 있다. 따라서, 본 발명의 범위는 이하에 나타내는 실시예에 의하여 한정적으로 해석되어서는 안 된다.

[0460] [화합물(평가 화합물)]

[0461] [화합물 (1-1)의 합성 방법]

[0462] [화학식 20]



[0463]

[0464] 유리제 반응 용기에, 화합물 (1-1-1)(3.1mmol), 화합물 (1-1-2)(8.0mmol), 톨루엔(65mL) 및 피페리딘(0.6mmol)을 담아, 질소 분위기하, 100℃에서 3시간 반응시켰다. 석출한 고체를 여과하고, 얻어진 고체를 N,N-다이메틸아세트아마이드(DMAc), 테트라하이드로퓨란(THF) 및 톨루엔으로 순차 세정 후, 승화 정제함으로써, 화합물 (1-1)을 1.2mmol(수율 40%) 얻었다. 화합물 (1-1)의 구조는, LDI-MS에서 확인했다.

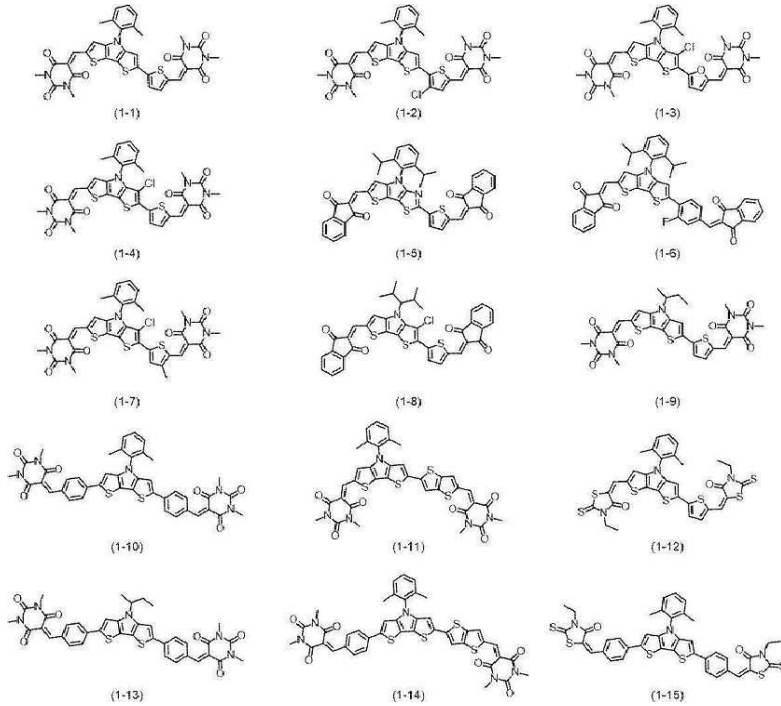
[0465] LDI-MS(화합물 (1-1)): 698(M<sup>+</sup>)

[0466] 화합물 (1-1)의 합성 방법을 참고로 하여, 다른 평가 화합물을 합성했다.

[0467] 이하, 평가 화합물을 나타낸다. 또한, 화합물 (1-1)~화합물 (1-15)는 특정 화합물이며, 화합물 (C-1)~화합물 (C-3)은 비교용 화합물이다. 평가 화합물이란, 특정 화합물과 비교용 화합물의 총칭을 말한다.

[0468] <특정 화합물>

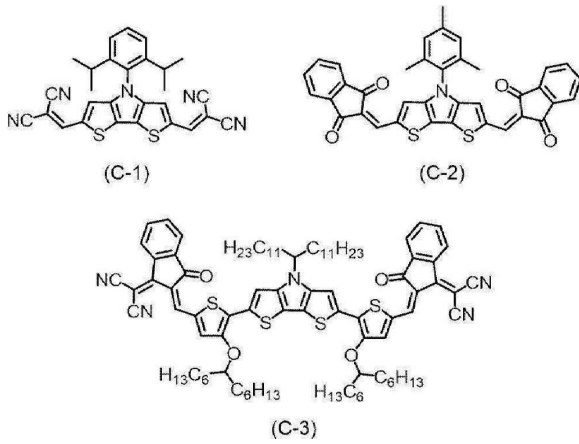
[0469] [화학식 21]



[0470]

[0471] <비교 화합물>

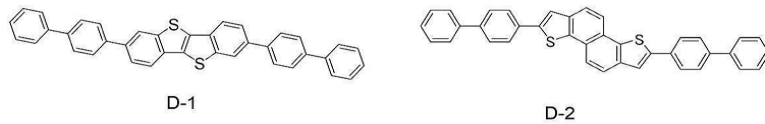
[0472] [화학식 22]



[0473]

[0474] [p형 유기 반도체]

[0475] [화학식 23]



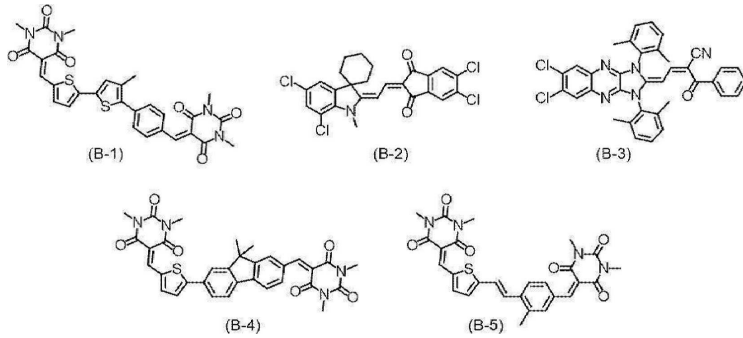
[0476]

[0477] [n형 유기 반도체]

[0478] C60: 풀러렌 C<sub>60</sub>

[0479] [색소]

[0480] [화학식 24]



[0481]  
[0482] [평가]

[0483] [시험 X]

[0484] <광전 변환 소자의 제작>

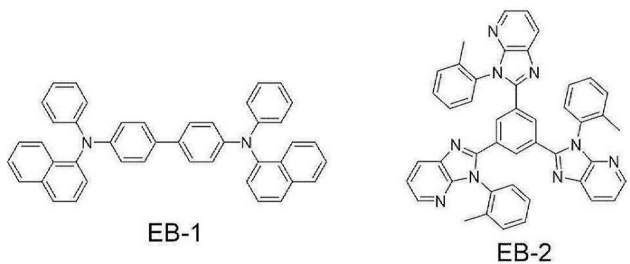
[0485] 평가 화합물(특정 화합물 또는 비교용 화합물)을 이용하여 도 2의 형태의 광전 변환 소자를 제작했다. 여기에서, 광전 변환 소자는, 하부 전극(11), 전자 블로킹막(16A), 광전 변환막(12), 정공 블로킹막(16B) 및 상부 전극(15)으로 이루어진다.

[0486] 구체적으로는, 유리 기판 상에, 어모퍼스성 ITO를 스퍼터링법에 의하여 성막하여, 하부 전극(11)(두께: 30nm)을 형성하고, 추가로 하부 전극(11) 상에 하기 화합물 (EB-1)을 진공 가열 증착법에 의하여 성막하여, 전자 블로킹막(16A)(두께: 30nm)을 형성했다. 또한, 전자 블로킹막(16A) 상에, 표 1에 나타내는 각 재료(평가 화합물, p형 유기 반도체 및 n형 유기 반도체(풀러렌(C<sub>60</sub>)))를 표 1의 비율(체적비)이 되도록 증착하여, 벌크 헤테로 구조를 갖는 광전 변환막(12)을 형성했다. 또한, 광전 변환막(12) 상에 하기 화합물 (EB-2)를 증착하여 정공 블로킹막(16B)(두께: 10nm)을 형성했다. 정공 블로킹막(16B) 상에, 어모퍼스성 ITO를 스퍼터링법에 의하여 성막하여, 상부 전극(15)(투명 도전성막)(두께: 10nm)을 형성했다. 상부 전극(15) 상에, 진공 증착법에 의하여 밀봉층으로서 SiO<sub>2</sub>막을 형성한 후, 그 위에 ALCVD(Atomic Layer Chemical Vapor Deposition)법에 의하여 산화 알루미늄(Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)층을 형성했다. 그 후, 질소 분위기하의 글로브 박스 내에서 150℃에서 30분간 가열하여, 광전 변환 소자를 제작했다.

[0487] 또한, 비교예 1-3 이외의 실시예 및 비교예는, 증착에 의하여 광전 변환막을 형성할 수 있었다. 환언하면, 비교예 1-3 이외의 실시예 및 비교예에서 사용되는 평가 화합물은, 증착 적성이 우수한 것이 확인되었다.

[0488] 또, 비교예 1-3은, 증착에 의하여 광전 변환막을 형성할 수 없어, 광전 변환 소자를 얻을 수 없었다.

[0489] [화학식 25]



[0490]  
[0491] <암전류>

[0492] 얻어진 각 광전 변환 소자에 대하여, 이하의 방법으로 암전류를 측정했다.

[0493] 각 광전 변환 소자의 하부 전극 및 상부 전극에, 2.5×10<sup>5</sup>V/cm의 전기 강도가 되도록 전압을 인가하여, 어두운 곳에서의 전류값(암전류)을 측정했다. 그 결과, 어느 광전 변환 소자에 있어서도, 암전류는 50nA/cm<sup>2</sup> 이하이며, 충분히 낮은 암전류를 나타내는 것을 확인했다.

- [0494] <양자 효율>
- [0495] 얻어진 각 광전 변환 소자에 대하여, 이하의 방법으로 양자 효율을 측정했다.
- [0496] 각 광전 변환 소자에  $2.0 \times 10^5 \text{V/cm}$ 의 전계 강도가 되도록 전압을 인가한 후, 상부 전극(투명 도전성막) 측으로부터 광을 조사하여 파장 600nm의 양자 효율(광전 변환 효율)을 평가하고, 식 (S1)에 따라 양자 효율을 구했다.
- [0497] 식 (S1): 양자 효율(상대비) = (실시에 또는 비교예의 각 광전 변환 소자의 파장 600nm에 있어서의 양자 효율)/(실시에 1-1의 광전 변환 소자의 파장 600nm에 있어서의 양자 효율)
- [0498] A: 양자 효율이 0.95 이상
- [0499] B: 양자 효율이 0.80 이상, 0.95 미만
- [0500] C: 양자 효율이 0.60 이상, 0.80 미만
- [0501] D: 양자 효율이 0.60 미만
- [0502] <응답 속도>
- [0503] 얻어진 각 광전 변환 소자에 대하여, 이하의 방법으로 응답 속도를 평가했다.
- [0504] 광전 변환 소자에  $2.0 \times 10^5 \text{V/cm}$ 의 강도가 되도록 전압을 인가했다. 그 후, LED(light emitting diode)를 순간적으로 점등시켜 상부 전극(투명 도전성막) 측으로부터 광을 조사하고, 그때의 파장 600nm에 있어서의 광전류를 오실로스코프로 측정하여 0% 신호 강도로부터 97% 신호 강도로 상승할 때까지의 상승 시간을 측정하며, 식 (S2)에 따라 상대 응답 속도를 평가했다.
- [0505] 식 (S2): 상대 응답 속도=(실시에 또는 비교예의 각 광전 변환 소자의 파장 600nm에 있어서의 상승 시간)/(실시에 1-1의 광전 변환 소자의 파장 600nm에 있어서의 상승 시간)
- [0506] A: 상대 응답 속도가 1.1 미만
- [0507] B: 상대 응답 속도가 1.1 이상, 1.5 미만
- [0508] C: 상대 응답 속도가 1.5 이상, 2.0 미만
- [0509] D: 상대 응답 속도가 2.0 이상
- [0510] <응답 속도의 전계 강도 의존성>
- [0511] 얻어진 각 광전 변환 소자에 대하여, 이하의 방법으로 응답 속도의 전계 강도 의존성을 평가했다.
- [0512] 상기 시험 X의 <응답 속도>의 평가에 있어서 각 광전 변환 소자에 인가하는 전압을  $7.5 \times 10^4 \text{V/cm}$ 로 변경한 것 이외에는 동일한 수순에 의하여,  $7.5 \times 10^4 \text{V/cm}$ 에 있어서의 응답 속도를 측정했다.
- [0513] 식 (S3)에 따라 응답 속도의 전계 강도 의존성을 구하여, 평가했다.
- [0514] 식 (S3): 응답 속도의 전계 강도 의존성=(실시에 또는 비교예의 각 광전 변환 소자의 파장 600nm에 있어서의  $7.5 \times 10^4 \text{V/cm}$  시의 상승 시간)/(실시에 또는 비교예의 각 광전 변환 소자의 파장 600nm에 있어서의  $2.0 \times 10^5 \text{V/cm}$  시의 상승 시간)
- [0515] 또한, 식 (S3)에 있어서 분자 분모의 각 광전 변환 소자는, 동일한 것이다.
- [0516] A: 응답 속도의 전계 강도 의존성이 2.0 미만
- [0517] B: 응답 속도의 전계 강도 의존성이 2.0 이상, 3.0 미만
- [0518] C: 응답 속도의 전계 강도 의존성이 3.0 이상, 4.0 미만
- [0519] D: 응답 속도의 전계 강도 의존성이 4.0 이상
- [0520] 표 1에 시험 X의 평가 결과를 나타낸다.
- [0521] " $R^3$ "란은,  $R^3$ 이 식 (R-1)로 나타나는 기 또는 식 (R-2)로 나타나는 기를 나타내는 경우를 "A"로 하고, 그 이외

의 경우를 "B"로 했다.

[0522] " $Ar^1Ar^2$ "란은,  $Ar^1$  및  $Ar^2$ 가 단환의 방향환기를 나타내는 경우를 "A"로 하고, 그 이외의 경우를 "B"로 했다.

[0523] "식 (2)"란은, 특정 화합물이 식 (2)로 나타나는 화합물에 해당하는 경우를 "A"로 하고, 그 이외의 경우를 "B"로 했다.

[0524] "식 (3)"란은, 특정 화합물이 식 (3)으로 나타나는 화합물에 해당하는 경우를 "A"로 하고, 그 이외의 경우를 "B"로 했다.

[0525] 비율(체적비)은, 왼쪽부터 순서대로, 평가 화합물:p형 유기 반도체:n형 유기 반도체의 성분 비율을 나타낸다.

[0526] 또한, 비교예 1-3에 있어서의 평가의 " $\times$ "는, 증착에 의하여 광전 변환막을 얻을 수 없어, 광전 변환 소자에 대한 평가를 실시할 수 없었던 것을 의미한다.

[0527] [표 1]

	화합물					p형 유기 반도체	n형 유기 반도체	비율	양자 효율	응답 속도	응답 속도의 전계 강도 의존성
	종류	R <sup>3</sup>	Ar <sup>1</sup> Ar <sup>2</sup>	식 (2)	식 (3)						
실시예 1-1	1-1	A	A	A	A	D-1	C60	1:1:1	A	A	A
실시예 1-2	1-1	A	A	A	A	D-2	C60	1:1:1	B	B	B
실시예 1-3	1-2	A	A	A	A	D-1	C60	1:1:1	A	A	A
실시예 1-4	1-3	A	A	A	A	D-1	C60	1:1:1	A	A	A
실시예 1-5	1-4	A	A	A	A	D-1	C60	1:1:1	A	A	A
실시예 1-6	1-5	A	A	A	A	D-1	C60	1:1:1	A	A	A
실시예 1-7	1-6	A	A	A	A	D-1	C60	1:1:1	A	A	A
실시예 1-8	1-7	A	A	A	A	D-1	C60	1:1:1	A	A	A
실시예 1-9	1-8	A	A	A	A	D-1	C60	1:1:1	A	A	A
실시예 1-10	1-9	B	A	A	A	D-1	C60	1:1:1	B	A	A
실시예 1-11	1-10	A	A	A	B	D-1	C60	1:1:1	B	A	A
실시예 1-12	1-11	A	B	A	A	D-1	C60	1:1:1	B	A	A
실시예 1-13	1-12	A	A	B	A	D-1	C60	1:1:1	B	B	A
실시예 1-14	1-13	B	A	A	B	D-1	C60	1:1:1	C	A	A
실시예 1-15	1-14	A	B	A	B	D-1	C60	1:1:1	C	A	A
실시예 1-16	1-15	A	A	B	B	D-1	C60	1:1:1	C	B	A
비교예 1-1	C-1	-	-	-		D-1	C60	1:1:1	D	D	D
비교예 1-2	C-2	-	-	-		D-1	C60	1:1:1	D	C	D
비교예 1-3	C-3	-	-	-		D-1	C60	1:1:1	X	X	X

[0528]

[0529] 표 1에 나타내는 결과로부터, 본 발명의 광전 변환 소자는, 증착 제조 적성, 적녹광을 수광했을 때의 양자 효율 및 응답 속도의 전계 강도 의존성의 어느 것도 우수한 것이 확인되었다.

[0530] R<sup>3</sup>이 식 (R-1)로 나타나는 기 또는 식 (R-2)로 나타나는 기인 경우, 본 발명의 효과가 보다 우수한 것이 확인되었다(실시예 1-1, 1-3~1-9, 1-10 및 1-14).

[0531] Ar<sup>1</sup> 및 Ar<sup>2</sup>가 단환의 방향환기인 경우, 본 발명의 효과가 보다 우수한 것이 확인되었다(실시예 1-1, 1-12 및 1-15).

[0532] 특정 화합물이 식 (2)로 나타나는 화합물을 포함하는 경우, 본 발명의 효과가 보다 우수한 것이 확인되었다(실시예 1-1, 1-13 및 1-16).

[0533] 특정 화합물이 식 (3)으로 나타나는 화합물을 포함하는 경우, 본 발명의 효과가 보다 우수한 것이 확인되었다(실시예 1-1, 1-11 및 1-14~1-16).

[0534] [시험 Y]

[0535] <광전 변환 소자의 제작>

[0536] 표 2에 나타내는 각 재료(평가 화합물, p형 유기 반도체, n형 유기 반도체(풀러렌(C<sub>60</sub>) 및 색소)를 표 2의 성분 비(체적비)가 되도록 증착하여 벌크 헤테로 구조를 갖는 광전 변환막(12)을 제작한 것 이외에는 시험 X와 동일

하게 하여, 각 실시예 및 각 비교예의 광전 변환 소자를 제작했다.

- [0537] <암전류>
- [0538] 시험 X와 동일하게 하여, 암전류를 측정했다.
- [0539] 그 결과, 어느 광전 변환 소자에 있어서도, 암전류는  $50\text{nA}/\text{cm}^2$  이하이며, 충분히 낮은 암전류를 나타내는 것을 확인했다.
- [0540] <양자 효율>
- [0541] 얻어진 각 광전 변환 소자에 대하여, 이하의 방법으로 양자 효율을 측정했다.
- [0542] 각 광전 변환 소자에  $2.0 \times 10^5 \text{V}/\text{cm}$ 의 전계 강도가 되도록 전압을 인가한 후, 상부 전극(투명 도전성막) 측으로부터 광을 조사하여 파장 460nm 또는 파장 600nm의 양자 효율(광전 변환 효율)을 평가하고, 식 (S4)에 따라 양자 효율을 구했다.
- [0543] 식 (S4): 양자 효율(상대비) = (실시예 또는 비교예의 각 광전 변환 소자의 파장 460nm 또는 파장 600nm에 있어서의 양자 효율)/(실시예 2-1의 광전 변환 소자의 파장 460nm 또는 파장 600nm에 있어서의 양자 효율)
- [0544] A: 양자 효율이 0.95 이상
- [0545] B: 양자 효율이 0.80 이상, 0.95 미만
- [0546] C: 양자 효율이 0.60 이상, 0.80 미만
- [0547] D: 양자 효율이 0.60 미만
- [0548] <응답 속도>
- [0549] 얻어진 각 광전 변환 소자에 대하여, 이하의 방법으로 응답 속도를 평가했다.
- [0550] 광전 변환 소자에  $2.0 \times 10^5 \text{V}/\text{cm}$ 의 강도가 되도록 전압을 인가했다. 그 후, LED를 순간적으로 점등시켜 상부 전극(투명 도전성막) 측으로부터 광을 조사하고, 그때의 파장 460nm 또는 파장 600nm에 있어서의 광전류를 오실로스코프로 측정하여 0% 신호 강도로부터 97% 신호 강도로 상승할 때까지의 상승 시간을 계산하고, 식 (S5)에 따라 상대 응답 속도를 평가했다. 또한, 상대 응답 속도를 구할 때는, 분자 분모는 동일한 파장에 있어서의 상승 시간이다.
- [0551] 식 (S5): 상대 응답 속도 = (실시예 또는 비교예의 각 광전 변환 소자의 파장 460nm 또는 파장 600nm에 있어서의 상승 시간)/(실시예 2-1의 광전 변환 소자의 파장 460nm 또는 파장 600nm에 있어서의 상승 시간)
- [0552] A: 상대 응답 속도가 1.1 미만
- [0553] B: 상대 응답 속도가 1.1 이상, 1.5 미만
- [0554] C: 상대 응답 속도가 1.5 이상, 2.0 미만
- [0555] D: 상대 응답 속도가 2.0 이상
- [0556] <응답 속도의 전계 강도 의존성>
- [0557] 얻어진 각 광전 변환 소자에 대하여, 이하의 방법으로 응답 속도의 전계 강도 의존성을 평가했다.
- [0558] 상기 시험 Y의 <응답 속도>의 평가에 있어서 각 광전 변환 소자에 인가하는 전압을  $7.5 \times 10^4 \text{V}/\text{cm}$ 로 변경한 것 이외에는 동일한 수순에 의하여,  $7.5 \times 10^4 \text{V}/\text{cm}$ 에 있어서의 응답 속도를 측정했다. 식 (S6)에 따라 응답 속도의 전계 강도 의존성을 구하여, 평가했다.
- [0559] 식 (S6): 응답 속도의 전계 강도 의존성 = (실시예 또는 비교예의 각 광전 변환 소자의 각 파장에 있어서의  $7.5 \times 10^4 \text{V}/\text{cm}$  시의 상승 시간)/(실시예 또는 비교예의 각 광전 변환 소자의 각 파장에 있어서의  $2.0 \times 10^5 \text{V}/\text{cm}$  시의 상승 시간)
- [0560] 또한, 식 (S6)에 있어서 분자 분모의 각 광전 변환 소자는 동일한 것이며, 측정 시의 파장도 동일한 것이다.

- [0561] A: 응답 속도의 전계 강도 의존성이 2.0 미만
- [0562] B: 응답 속도의 전계 강도 의존성이 2.0 이상, 3.0 미만
- [0563] C: 응답 속도의 전계 강도 의존성이 3.0 이상, 4.0 미만
- [0564] D: 응답 속도의 전계 강도 의존성이 4.0 이상
- [0565] 표 2에 시험 Y의 평가 결과를 나타낸다.
- [0566] " $R^3$ "란은,  $R^3$ 이 식 (R-1)로 나타나는 기 또는 식 (R-2)로 나타나는 기를 나타내는 경우를 "A"로 하고, 그 이외의 경우를 "B"로 했다.
- [0567] " $Ar^1Ar^2$ "란은,  $Ar^1$  및  $Ar^2$ 가 단환의 방향환기를 나타내는 경우를 "A"로 하고, 그 이외의 경우를 "B"로 했다.
- [0568] "식 (2)"란은, 특정 화합물이 식 (2)로 나타나는 화합물에 해당하는 경우를 "A"로 하고, 그 이외의 경우를 "B"로 했다.
- [0569] "식 (3)"란은, 특정 화합물이 식 (3)으로 나타나는 화합물에 해당하는 경우를 "A"로 하고, 그 이외의 경우를 "B"로 했다.
- [0570] 비율(체적비)은, 왼쪽부터 순서대로, 평가 화합물:색소:p형 유기 반도체:n형 유기 반도체의 성분 비율을 나타낸다.
- [0571] [표 2]

	화합물					색소	p형 유기 반도체	n형 유기 반도체	비율	양자 효율		응답 속도		응답 속도의 전계 강도 의존성	
	종류	R <sup>3</sup>	Ar <sup>1</sup> Ar <sup>2</sup>	식 (2)	식 (3)					460 nm	600 nm	460 nm	600 nm	460 nm	600 nm
실시예 2-1	1-1	A	A	A	A	B-1	D-1	C60	0.5:0.5:1:1	A	A	A	A	A	A
실시예 2-2	1-1	A	A	A	A	B-1	D-2	C60	0.5:0.5:1:1	A	B	B	B	B	B
실시예 2-3	1-1	A	A	A	A	B-2	D-1	C60	0.5:0.5:1:1	A	A	A	A	A	A
실시예 2-4	1-1	A	A	A	A	B-3	D-1	C60	0.5:0.5:1:1	A	A	A	A	A	A
실시예 2-5	1-1	A	A	A	A	B-4	D-1	C60	0.5:0.5:1:1	A	A	A	A	A	A
실시예 2-6	1-1	A	A	A	A	B-5	D-1	C60	0.5:0.5:1:1	A	A	A	A	A	A
실시예 2-7	1-2	A	A	A	A	B-5	D-1	C60	0.5:0.5:1:1	A	A	A	A	A	A
실시예 2-8	1-3	A	A	A	A	B-5	D-1	C60	0.5:0.5:1:1	A	A	A	A	A	A
실시예 2-9	1-4	A	A	A	A	B-5	D-1	C60	0.5:0.5:1:1	A	A	A	A	A	A
실시예 2-10	1-5	A	A	A	A	B-5	D-1	C60	0.5:0.5:1:1	A	A	A	A	A	A
실시예 2-11	1-6	A	A	A	A	B-5	D-1	C60	0.5:0.5:1:1	A	A	A	A	A	A
실시예 2-12	1-7	A	A	A	A	B-5	D-1	C60	0.5:0.5:1:1	A	A	A	A	A	A
실시예 2-13	1-8	A	A	A	A	B-5	D-1	C60	0.5:0.5:1:1	A	A	A	A	A	A
실시예 2-14	1-9	B	A	A	A	B-5	D-1	C60	0.5:0.5:1:1	A	B	A	A	A	A
실시예 2-15	1-10	A	A	A	A	B-5	D-1	C60	0.5:0.5:1:1	A	B	A	A	A	A
실시예 2-16	1-11	A	B	A	A	B-5	D-1	C60	0.5:0.5:1:1	A	B	A	A	A	A
실시예 2-17	1-12	A	A	B	A	B-5	D-1	C60	0.5:0.5:1:1	A	B	B	B	A	A
실시예 2-18	1-13	B	A	A	B	B-5	D-1	C60	0.5:0.5:1:1	A	C	A	A	A	A
실시예 2-19	1-14	A	B	A	B	B-5	D-1	C60	0.5:0.5:1:1	A	C	A	A	A	A
실시예 2-20	1-15	A	A	B	B	B-5	D-1	C60	0.5:0.5:1:1	A	C	B	B	A	A
비교예 2-1	C-1	-	-	-	-	B-5	D-1	C60	0.5:0.5:1:1	D	D	D	D	D	D
비교예 2-2	C-2	-	-	-	-	B-5	D-1	C60	0.5:0.5:1:1	D	D	C	C	D	D

- [0572] 표 2에 나타내는 결과로부터, 본 발명의 광전 변환 소자는, 증착 제조 적성, 적녹광을 수광했을 때의 양자 효율 및 응답 속도의 전계 강도 의존성의 어느 것도 우수한 것이 확인되었다.
- [0574] 또, 표 1에 나타내는 결과와 동일한 경향을 나타냈다.

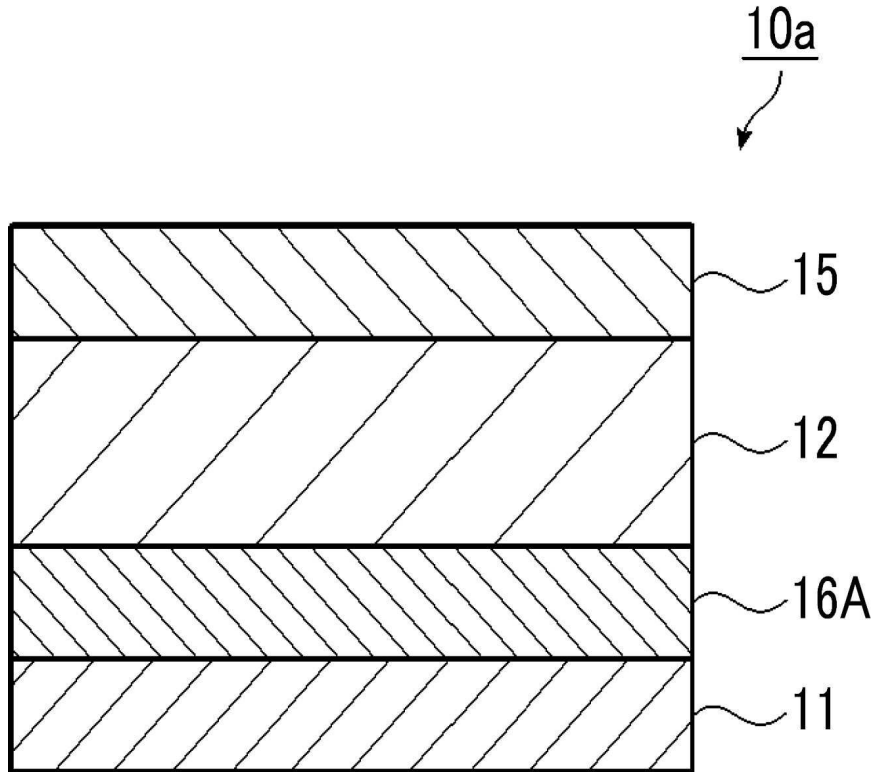
**부호의 설명**

- [0575] 10a, 10b 광전 변환 소자
- 11 도전성막(하부 전극)
- 12 광전 변환막
- 15 투명 도전성막(상부 전극)
- 16A 전자 블로킹막

16B 정공 블로킹막

도면

도면1



도면2

