

【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3部門第2区分

【発行日】平成24年12月27日(2012.12.27)

【公表番号】特表2012-508227(P2012-508227A)

【公表日】平成24年4月5日(2012.4.5)

【年通号数】公開・登録公報2012-014

【出願番号】特願2011-535202(P2011-535202)

【国際特許分類】

C 07 D 409/14 (2006.01)

H 01 L 31/04 (2006.01)

H 01 M 14/00 (2006.01)

C 09 B 57/10 (2006.01)

【F I】

C 07 D 409/14 C S P

H 01 L 31/04 Z

H 01 M 14/00 P

C 09 B 57/10

【手続補正書】

【提出日】平成24年11月6日(2012.11.6)

【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

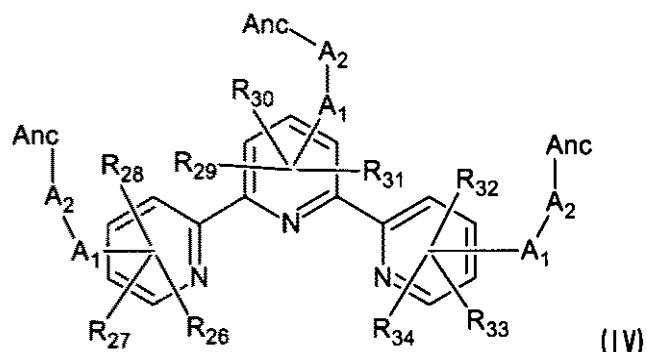
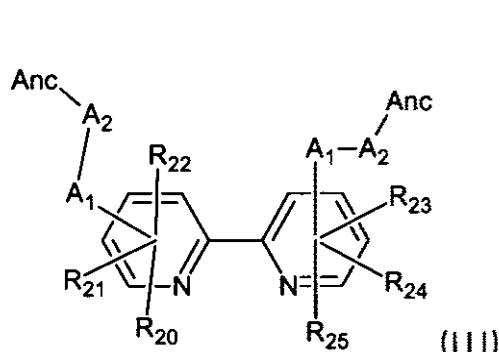
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

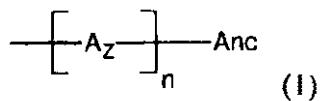
下記式(III)及び/又は式(IV)の化合物:

【化1】



式中、A₁及びA₂は、下記式(1):

【化2】



の置換基であり、

nは、1又は2の整数であり、そしてZは、整数1, . . . , nの群の整数であり、こ
こで、A_zは、n個の連續的な部分AのZ番目の部分であり、A_zは他のA_zと異なること
ができる、

A_zは、独立して、C₄~C₂₀のアリールから選択され、前記アリールは、置換基Anc
を除いて、さらに置換されるか、又はさらに置換されず、そして前記アリールは、1~1
0個のヘテロ原子を含み、

n=2の場合には、A_zはまた、ビニレン：

【化3】

(→→→)

及びエチニレン：

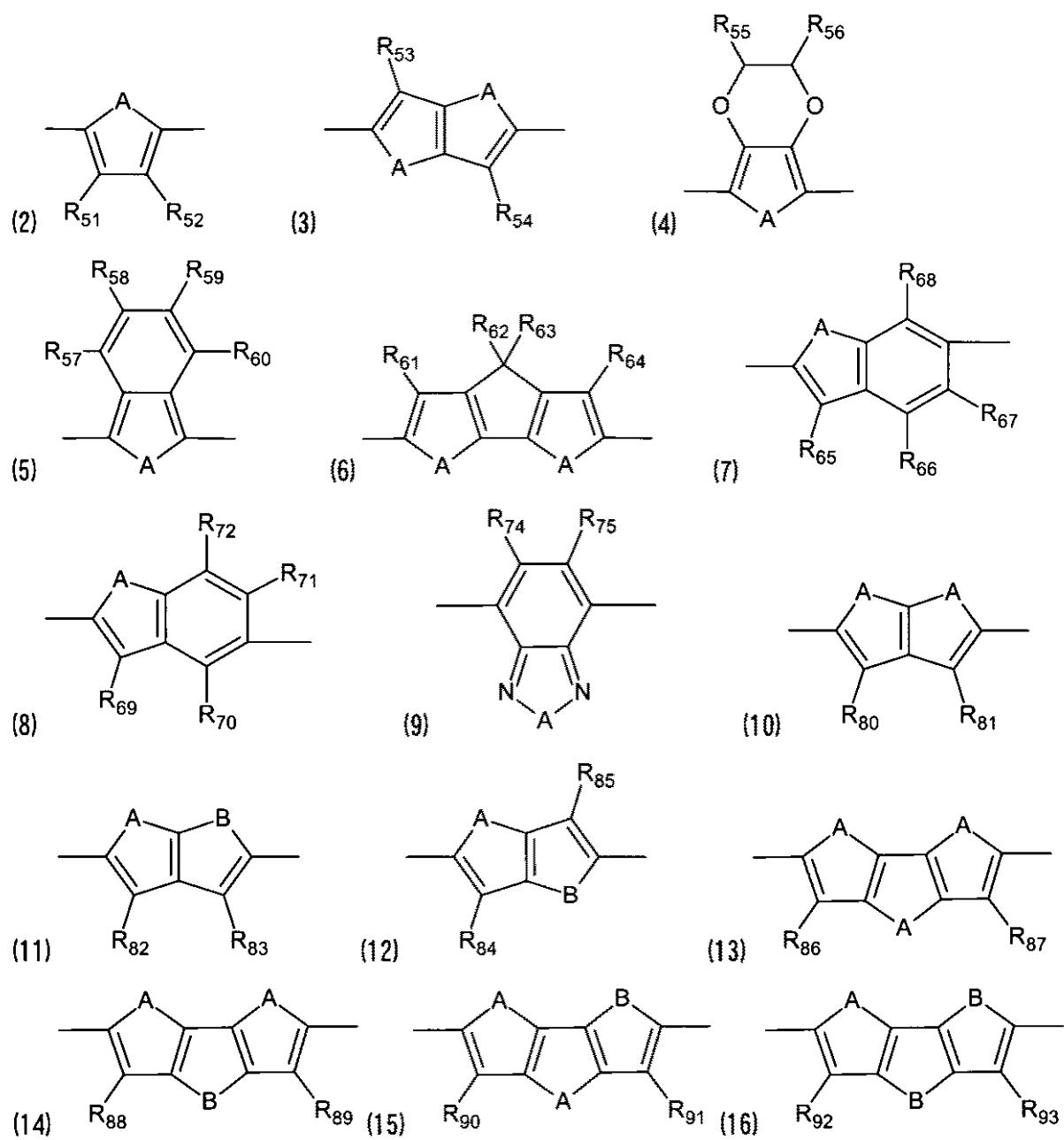
【化4】

(→→→)

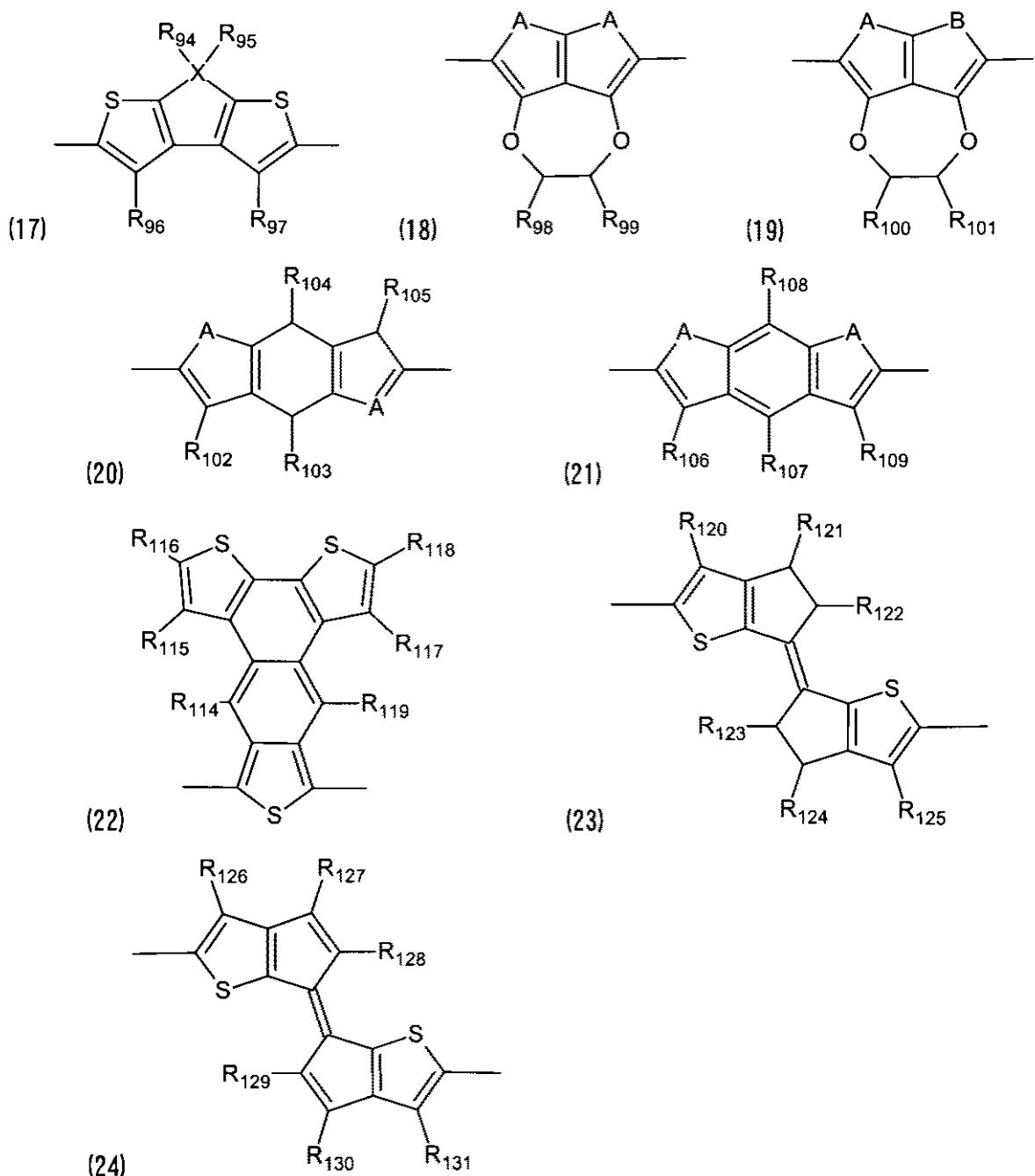
から選択することができ、前記ビニレンは、置換されていてもよいが、少なくとも1つのA_zは、C₄~C₂₀のアリールであり、前記アリールは、さらに置換されるか、又はさ
らに置換されず、そして1~10個のヘテロ原子を含み、

n=1の場合には、A₁は、下記式(2)~(24)：

【化 5】



【化6】



の部分から選択され、

A及びBは、適用可能な場合、それぞれ独立して、S(硫黄)、O(酸素)、及びSe(セレン)から選択され、

Xは、C, Si, Ge, Sn又はPbの1つから選択され

置換基R₅₁～R₁₃₁は、適用可能な場合、他から独立して、H、ハロゲン、及び0～20のヘテロ原子を含むC₁～C₂₀の炭化水素から選択され、

A₂は、存在する(n=2)ことができるか、又は存在しない(n=1)ことができ、A₂が存在しない場合、固定基A_{nc}は、A₁に直接連結し、

置換基R₂₀～R₃₄の1つは、他から独立して、H、ハロゲン、又は0～20のヘテロ原子を含むC₁～C₂₀の炭化水素、あるいは式(1)の置換基から選択され、

置換基R₂₀～R₃₄の1つ超が、式(1)の置換基である場合には、n個の式(1)の置

換基は、他の n 個の式 (1) の置換基と同一であるか、又は異なることができ、そして A_z は、他の式 (1) の置換基のそれぞれの A_z と異なることができる。

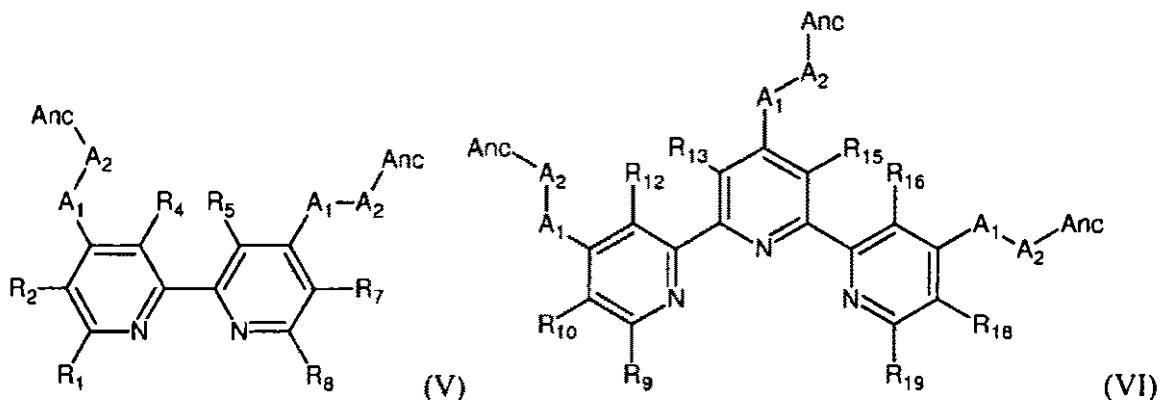
【請求項 2】

前記固定基 $A_{n c}$ が、 $-COOH$ 、 $-PO_3H_2$ 、 $-PO_4H_2$ 、 $-P(R_{100})O_2H$ (ホスフィン酸)、 $-SO_3H_2$ 、 $-CONHOH$ 、アセチルアセトネート、上述の脱プロトン化形態、前記脱プロトン化形態の塩、及び導電特性を有するキレート基から選択され； R_{100} が、1～20の炭素及び0～20のヘテロ原子を含む炭化水素であり、前記炭化水素が、炭素原子により、前記ホスフィン酸のP原子に共有結合されており；そして R_{10} が、固定基 $A_{n c}$ を有するビ-又はポリピリジン配位子に、さらに共有結合的に接続されうる、請求項1に記載の化合物。

【請求項 3】

式 (III) 及び / 又は式 (IV) の化合物が、下記式 (V) 又は (VI) :

【化7】



(式中、 A_1 及び A_2 は、上述の通りであり、
 $n = 2$ の場合には、 A_z は、ビニレン：

【化8】

(—=—)

及びエチニレン：
【化9】

(—≡—)

から選択されることができ、前記ビニレンは、置換されていてもよいが、少なくとも1つの A_z は、前記アリールであり、

$n = 1$ の場合には、 A_1 は、前記式 (2)～(24) の部分から選択され、
 A_2 は、存在する ($n = 2$) ことができるか、又は存在しない ($n = 1$) ことができ、
 A_2 が存在しない場合、固定基 $A_{n c}$ は、 A_1 に直接連結し、
 $A_{n c}$ は、上述の通りであり、

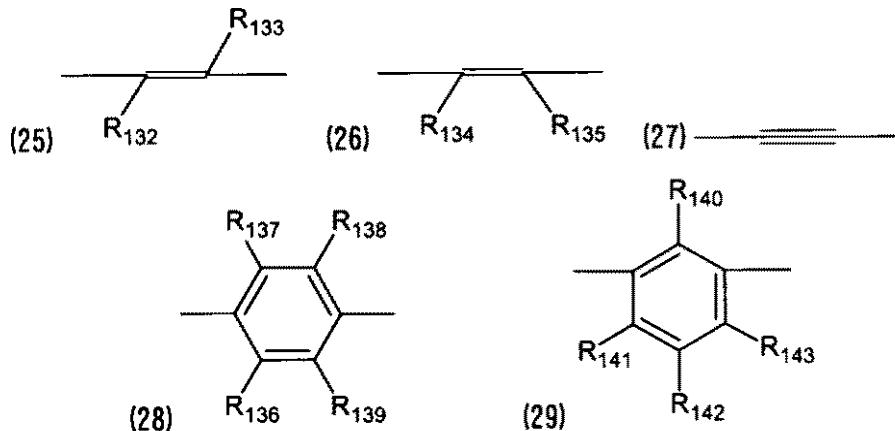
$R_1, R_2, R_4, R_5, R_7 \sim R_{10}, R_{12}, R_{13}, R_{15}, R_{16}, R_{18}$ 及び R_{19} は、 $R_{20} \sim R_{34}$ として規定される)

の化合物から選択される、請求項 1 又は 2 に記載の化合物。

【請求項 4】

適用可能な任意の A_2 、 A_1 及び A_2 が、独立して、前記式(2)～(24)の部分及び下記式(25)～(29)：

【化 10】



の部分から選択されるが、少なくとも 1 つの部分が、前記式(2)～(24)の部分の 1 つから選択され、

A 及び B は、適用可能な場合、それぞれ独立して、S (硫黄)、O (酸素)、及び Se (セレン) から選択され、

X は、C、Si、Ge、Sn 又は Pb の 1 つから選択され、好ましくは C 及び Si から選択され、最も好ましくは C であり、

置換基 $R_{132} \sim R_{143}$ は、適用可能な場合、他から独立して、H、ハロゲン、及び 0 ~ 20 のヘテロ原子を含む $C_1 \sim C_{20}$ の炭化水素から選択される、

請求項 1 ～ 3 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 5】

式(1)の置換基において、 $n > 1$ の場合、 A_1 が、前記式(2)～(5)の部分から選択される、請求項 1 ～ 4 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 6】

A_1 が、式(2)又は(4)の部分である、請求項 1 ～ 5 のいずれか一項に記載の化合物。

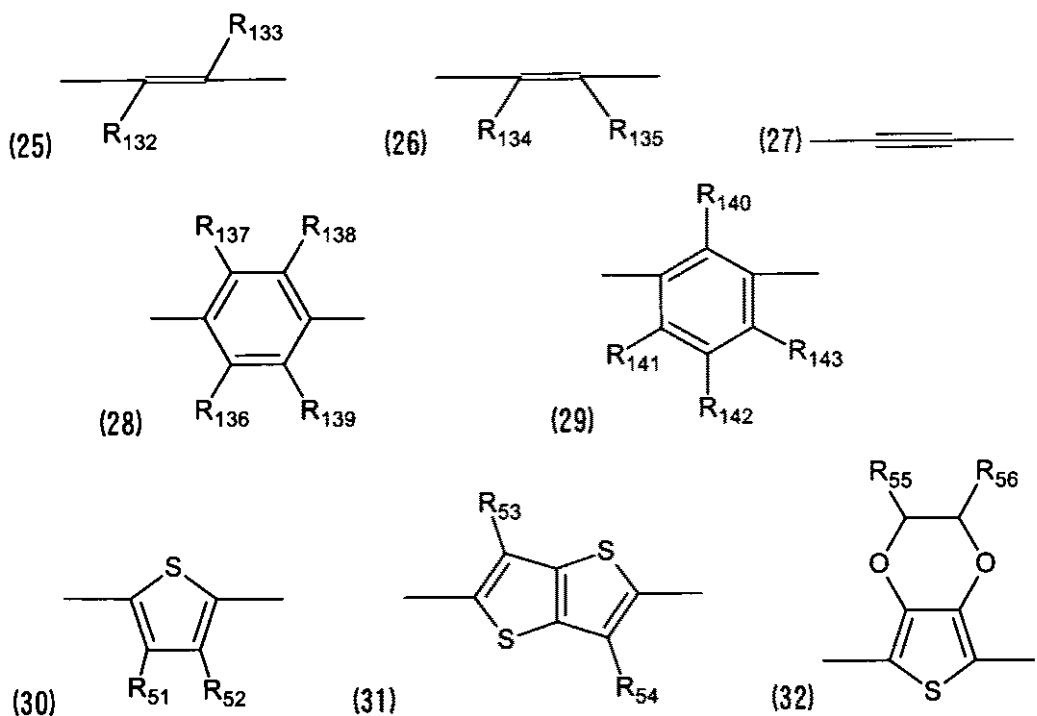
【請求項 7】

式(V)及び/又は(VI)の $R_1, R_2, R_4, R_5, R_7 \sim R_{10}, R_{12}, R_{13}, R_{15}, R_{16}, R_{18}$ 及び R_{19} と、式(III)及び式(IV)の $R_{20} \sim R_{34}$ とが、独立して、H、ハロゲン又は $C_1 \sim C_{10}$ アルキル、 $C_2 \sim C_{10}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{10}$ アルキニル、及び $C_4 \sim C_{15}$ アリールから選択され、前記アルキル、アルケニル及びアルキニルは、直鎖又は分岐鎖であり、そして前記アルキル、アルケニル及びアルキニルは、所望により、さらに置換され、そして前記アリールは、 C_4 アリールである場合、芳香環を提供するように、環内に O、S 及び N から選択される少なくとも 1 つのヘテロ原子を含む、請求項 1 ～ 6 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 8】

n が 1 であり、そして式(1)の全ての置換基において、 A_1 が、下記式(25)～(32)：

【化11】



の部分の1つから選択される、請求項1～7のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項9】

置換基R₅₁～R₁₄₃が、存在する範囲で、独立して、H、ハロゲン、本明細書に規定される固定基、シアノ、C₁～C₁₀アルキル及びC₂～C₁₀アルケニルから選択され、前記アルキル及びアルケニルが、直鎖又は分岐鎖であり、そして所望により、さらに置換されている、請求項1～8のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項10】

色素増感された太陽電池の有機金属増感剤における固定配位子としての、請求項1～9のいずれか一項に記載の式(III)及び/又は式(IV)の化合物の使用。

【請求項11】

次の式(XI)、(XII)又は(XIII)：

ML₁L₂L₃L₄(XI)

ML₅L₃L₄L₆(XII)

ML₅L₂L₄(XIII)

(式中、Mは、Ru, Os, Ir, Re, Rh及びFeから選択される金属原子であり、

、L₁は、請求項1～9のいずれか一項に記載の式(III)又は(V)のビピリジン配位子であり、

L₂は、L₁から独立して、請求項1～9のいずれか一項に記載の式(III)若しくは(V)の配位子、又は2～20個のヘテロ原子を含むC₃～C₃₀の炭化水素である二座配位子であり、

L₃、L₄及びL₆は、独立して、H₂O、-Cl、-Br、-I、-CN、-NCO、-NCs及び-NCSeから選択される1価の配位子であり、

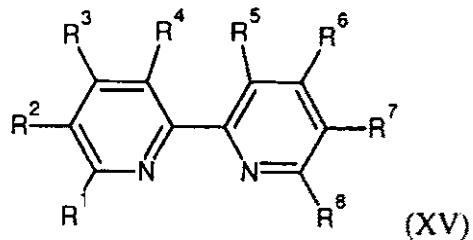
L₅は、請求項1～9のいずれか一項に記載の式(IV)又は(VI)の配位子である)

の色素。

【請求項12】

L_2 が、次の式 (XV) :

【化12】



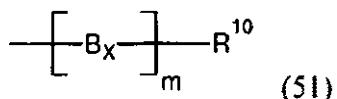
(式中、置換基 $R^1 \sim R^8$ は、他から独立して、H、ハロゲン、及び0～20のヘテロ原子を含む $C_1 \sim C_{20}$ 炭化水素から選択される)

のビピリジン配位子である、請求項11に記載の色素。

【請求項13】

1つ又は2つ以上の置換基 $R^1 \sim R^8$ が、他から独立して、下記式(51)：

【化13】



式中、mは、1～10の整数であり、そしてXは、整数1, . . . , mの群の整数であり、 B_x は、m個の連続的な部分BのX番目の部分を表し、 B_x は、他の B_x と異なることができ、

式(XV)の化合物の置換基 $R_1 \sim R_8$ の1つ超が式(51)の置換基である場合、前記置換基のmは、式(51)の別の置換基と同一又は異なることができ、そして B_x は、式(51)の別の置換基のそれぞれの B_x から異なることができ、

B_x は、独立して、 $C_4 \sim C_{20}$ アリールから選択され、前記アリールは、置換基 R^{10} を除いて、さらに置換されているか、又はさらに置換されておらず、そして前記アリールは、0～5個のヘテロ原子を含み、

B_x はまた、独立して、置換された又は非置換のビニレン：

【化14】

(—=—)

及びエチニレン：

【化15】

(—≡—)

から選択されることができ、

R^{10} は、独立して、H、ハロゲン、及び0～20のヘテロ原子を含むC₁～C₂₀の炭化水素から選択される)

の置換基から選択される、請求項12に記載の色素。

【請求項14】

B_xが、独立して、前記式(2)～(29)の部分から選択される、請求項13に記載の色素。

【請求項15】

請求項1～9のいずれか一項に記載の式(III)及び／若しくは式(IV)の化合物、並びに／又は請求項11～14のいずれか一項に記載の色素を含む、光電変換素子。

【請求項16】

半導体材料(4)と、そこに吸着された、請求項11～14のいずれか一項に記載の色素を含む色素層(5)及び／又は請求項1～9のいずれか一項に記載の化合物を含む色素(5)とを含む光吸收層(3)を含む、請求項15に記載の素子。