

【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】平成22年1月28日(2010.1.28)

【公表番号】特表2009-519595(P2009-519595A)

【公表日】平成21年5月14日(2009.5.14)

【年通号数】公開・登録公報2009-019

【出願番号】特願2008-544954(P2008-544954)

【国際特許分類】

H 01 L 51/30 (2006.01)

C 07 F 7/08 (2006.01)

H 01 L 51/05 (2006.01)

H 01 L 29/786 (2006.01)

C 07 D 495/04 (2006.01)

C 07 D 333/50 (2006.01)

C 07 F 7/10 (2006.01)

【F I】

H 01 L 29/28 250H

C 07 F 7/08 C S P R

H 01 L 29/28 100A

H 01 L 29/78 618B

C 07 D 495/04 101

C 07 D 333/50

C 07 F 7/08 W

C 07 F 7/10 T

【手続補正書】

【提出日】平成21年12月2日(2009.12.2)

【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

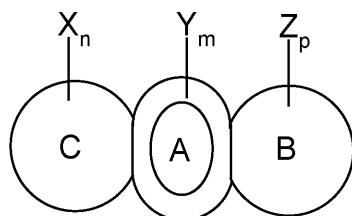
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

ヘテロ原子を有する三環式または多環式の芳香族炭化水素主鎖を有し、前記主鎖が(この定義を非置換と仮定するための)エチニル基とともに、式Iを有する、C_{2v}と混合されたC_{2h}、C_{2h}、D_{2h}、および/またはCs点対称性群に属するという条件で、前記主鎖を構成する環が、それぞれ、多くて2個の共通に共有される環原子を介して互いにアニールされ、近接環の前記共通原子の数が、共通辺領域の数の2倍である、ビス(置換エチニル)化合物を含む半導体素子であって、

【化1】



(I)

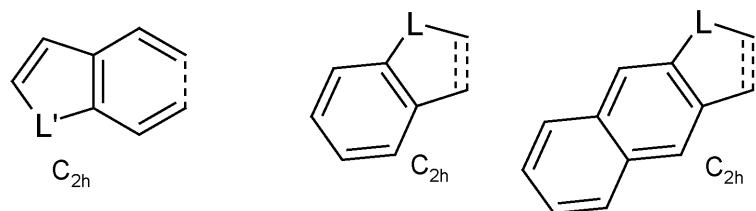
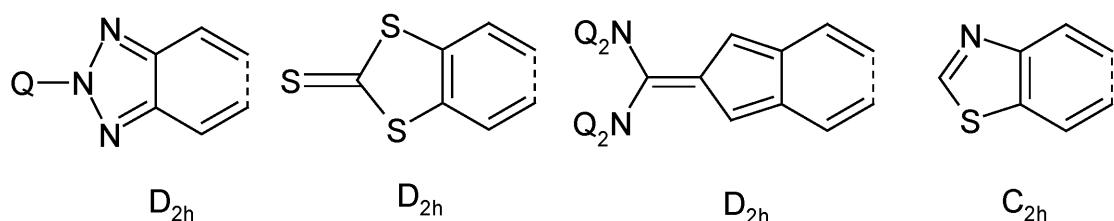
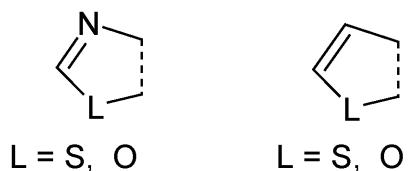
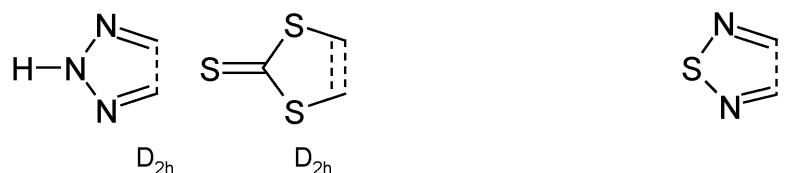
A とラベル付けされた環は、6個の原子を有する芳香環であり、B とラベル付けされた環は、部分式 I (i) の、単環式または多環式（好ましくは、単環式、二環式、または三環式）の不飽和の環または環系またはアニールされたフェロセノベンゾであり、
【化2】



点線の結合は、式 I の中心環 A にアニールされたベンゾ環の辺を表し、それぞれが環 A にアニールされ、C とマーキングされた環は、前記部分式 I (i) の、単環式または多環式（好ましくは、単環式、二環式、または三環式）の不飽和の環または環系またはフェロセノベンゾであり、それぞれが環 A にアニールされ、各々の環または環系 B および C のそれぞれは、基 = S、= O、または = C (N Q₂)₂ を保持することも可能であり、「不飽和」は、最大限の数の共役二重結合を有することを意味し、前記環または環系 B および C の少なくとも 1 つにおいて、環 A に直接アニールされた（環または環系 B および C を形成するか、その一部を形成する）前記第 1 の環が両方の環または環系 B および C に 6 個の環原子を有する場合は、少なくとも 1 つの環原子が、N、N Q、O および S から選択されたヘテロ原子であり、

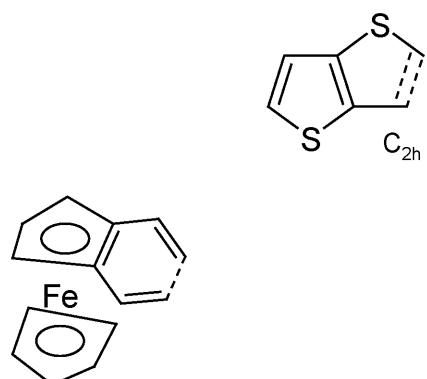
式 I の化合物において B および C とマーキングされた環または環系は、それぞれ、少なくとも 1 つのヘテロ原子を含み、そして以下の部分から選択され、点線は、分子のその他の部分にアニールされた環または環系の辺を表し、

【化3】



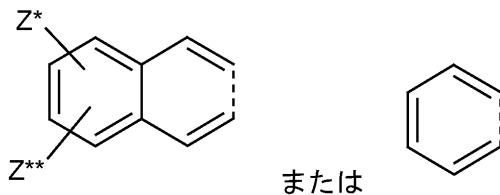
L = O、NH、NQ、S または CQ₂ であり、
L' = O、NH、NQ、または CQ₂ であり、

【化4】



または、環Cが前記部分から選択され、環Bが式

【化5】



または

の環であり、

Q は、 Q および各環が、他とは独立して出現するたびに、 X または Z について後で定義されるように、水素または非置換または置換ヒドロカルビル、非置換または置換ヒドロカルビルカルボニル、またはヘテロアリールであり、好ましくは、 Q は、水素、 $C_6 - C_{1-4}$ -アリール、 $C_6 - C_{1-4}$ -アリール- $C_1 - C_{2-0}$ アルキル、 $C_1 - C_{2-0}$ -アルキル、特に、フェニル-またはナフチル- $C_1 - C_{2-0}$ -アルキル、および $C_1 - C_{2-0}$ -アルキルから選択され、

Z^* および Z^{**} は、水素、非置換または置換 $C_1 - C_{2-0}$ -アルキル（ハロ- $C_1 - C_{2-0}$ -アルキルなど）、非置換または置換 $C_2 - C_{2-0}$ -アルケニル、非置換または置換 $C_2 - C_{2-0}$ -アルキニル、非置換または置換 $C_6 - C_{1-4}$ -アリール（特に、フェニルまたはナフチル）、5~14個の環原子を有する非置換または置換ヘテロアリール、非置換または置換 $C_6 - C_{1-4}$ -アリール- $C_1 - C_{2-0}$ -アルキル（特に、フェニル-またはナフチル- $C_1 - C_{2-0}$ -アルキル（ベンジルなど））、非置換または置換ヘテロアリール $C_1 - C_{2-0}$ -アルキル（このヘテロアリールは5~14個の環原子を有する）、非置換または置換フェロセニル、非置換または置換 $C_1 - C_{2-0}$ -アルカノイル（ペルフルオロ $C_2 - C_{1-0}$ -アルカノイルなど）、ハロ、非置換または置換 $C_1 - C_{2-0}$ -アルコキシ、 $C_3 - C_{2-0}$ -アルケニルオキシ、 $C_3 - C_{2-0}$ -アルキニルオキシ、非置換または置換 $C_1 - C_{2-0}$ -アルキルチオ、 $C_3 - C_{2-0}$ -アルケニルチオ、 $C_3 - C_{2-0}$ -アルキニルチオ、カルボキシ、非置換または置換 $C_1 - C_{2-0}$ -アルコキシ-カルボニル、非置換または置換フェニル- $C_1 - C_{2-0}$ -アルコキシ-カルボニル、アミノ、 N -モノ-または N, N -ジ-（ $C_1 - C_{2-0}$ -アルキル、 $C_1 - C_{2-0}$ -アルカノイル、および/またはフェニル- $C_1 - C_{2-0}$ -アルキル）-アミノ、シアノ、カルバモイル、 N -モノ-または N, N -ジ-（ $C_1 - C_{2-0}$ -アルキル、 $C_1 - C_{2-0}$ -アルカノイル、および/またはフェニル- $C_1 - C_{2-0}$ -アルキル）-カルバモイル、およびスルファモイルからなる群から独立して選択され、

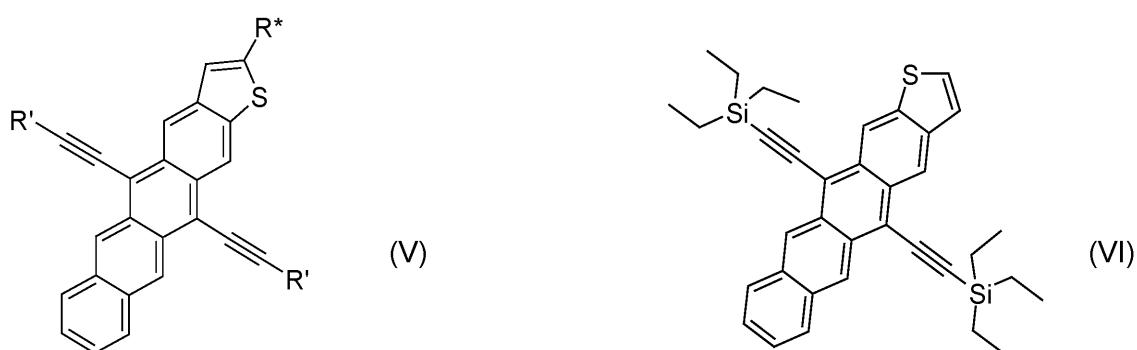
n は置換基 X の数を示し、 m は置換基 Y の数を示し、そして、 p は置換基 Z の数を示し、ここで、 m 、 n および p の和が少なくとも 2 であるという条件で、 n および p のそれぞれは 0~4 であり、そして、 m は 0~2 であり、

式 I に存在する置換基 X 、 Y 、および Z のうちの 2 つは、最大 40 個の炭素原子を有する非置換または置換ヒドロカルビル、最大 40 個の炭素原子を有する非置換または置換ヒドロカルビルオキシ、最大 40 個の炭素原子を有するヒドロカルビルチオ、非置換または置換ヘテロアリール、非置換または置換ヘテロアリールオキシ、非置換または置換ヘテロアリールチオ、シアノ、カルバモイル、置換アミノ、ハロ- $C_1 - C_8$ -アルキル（トリフルオロメチルなど）、および置換シリルからなる群から置換基が選択される置換エチルであり、2つの Y 置換基が、好ましくは各 Y が他とは独立して、より好ましくは同様に、非置換または置換 $C_1 - C_{2-0}$ -アルキル、非置換または置換フェニル、非置換または置換ナフチル、非置換または置換アントラセニル、（ $C_1 - C_{2-0}$ -アルキル、 $C_1 - C_{2-0}$ -アルコキシ、およびフェニル-またはナフチル- $C_1 - C_{2-0}$ -アルキルから選択される 2 つまたは好ましくは 3 つの部分によってシリルが置換される）置換シリルから置換基が選択される置換エチルから選択され、

一方、残りの置換基 X 、 Y 、および/または Z は、存在する場合には、非置換または置換 $C_1 - C_{2-0}$ -アルキル（ハロ- $C_1 - C_{2-0}$ -アルキルなど）、非置換または置換 C

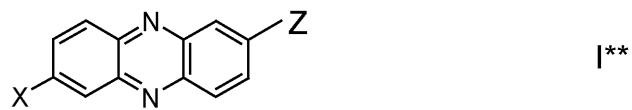
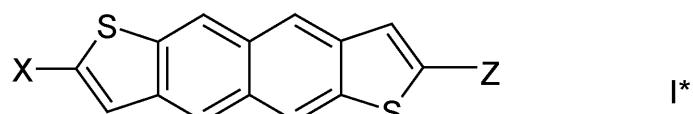
2 - C₂0 - アルケニル、非置換または置換C₂ - C₂0 - アルキニル（前述の置換エチニル以外）、非置換または置換C₆ - C₁4 - アリール、5 ~ 14個の環原子を有する非置換または置換ヘテロアリール、非置換または置換C₆ - C₁4 - アリール - C₁ - C₂0 - アルキル、非置換または置換ヘテロアリール - C₁ - C₂0 - アルキル（このヘテロアリールは5 ~ 14個の環原子を有する）、非置換または置換フェロセニル、非置換または置換C₁ - C₂0 - アルカノイル、ハロ、非置換または置換C₁ - C₂0 - アルコキシ、C₃ - C₂0 - アルケニルオキシ、C₃ - C₂0 - アルキニルオキシ、非置換または置換C₁ - C₂0 - アルキルチオ、C₃ - C₂0 - アルケニルチオ、C₃ - C₂0 - アルキニルチオ、カルボキシ、非置換または置換C₁ - C₂0 - アルコキシ - カルボニル、非置換または置換フェニル - C₁ - C₂0 - アルコキシ - カルボニル、アミノ、N - モノ - (C₁ - C₂0 - アルキル) アミノ、N, N - ジ - (C₁ - C₂0 - アルキル) アミノ、C₁ - C₂0 - アルカノイルアミノ、フェニル - (C₁ - C₂0 - アルキル) - アミノ、シアノ、カルバモイル、N - モノ - (C₁ - C₂0 - アルキル) - カルバモイル、N, N - ジ - (C₁ - C₂0 - アルキル) - カルバモイル、C₁ - C₂0 - アルカノイル - カルバモイル、フェニル - C₁ - C₂0 - アルキル) - カルバモイル、スルファモイル、N - モノ - (C₁ - C₂0 - アルキル) - スルファモイル、N, N - ジ - (C₁ - C₂0 - アルキル) - スルファモイル、C₁ - C₂0 - アルカノイル - スルファモイル、フェニル - C₁ - C₂0 - アルキル) - スルファモイルからなる群から選択される置換基であり、

または、前記ビス(置換エチニル)化合物は、式VまたはVI₁化₆



の化合物から選択される化合物であるか、または式 I * または I **

【化7】

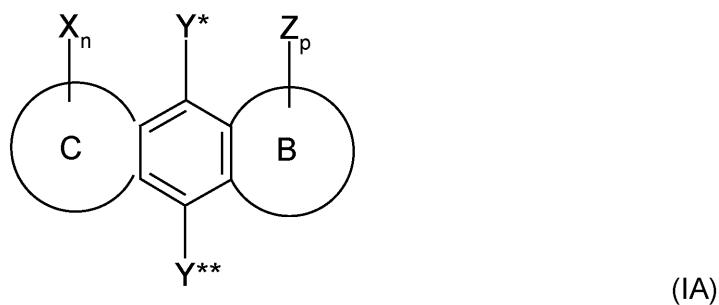


の化合物であり、

各 R' は、 C₁ - C₂₀ アルキル、ベンジル、C₁ - C₁₂ ペルフルオロアルキル、C₁ - C₁₂ ペルフルオロアルカノイル、フルオロフェニル、および SiR₃ から独立して選択され、R は独立して C₁ - C₆ アルコキシであり、R* は水素または R' であり、X および Z は、既に定義されたように置換エチニルである、半導体素子。

【請求項2】

式 I の化合物が、式 I A
【化 8】



の 1 つであり、

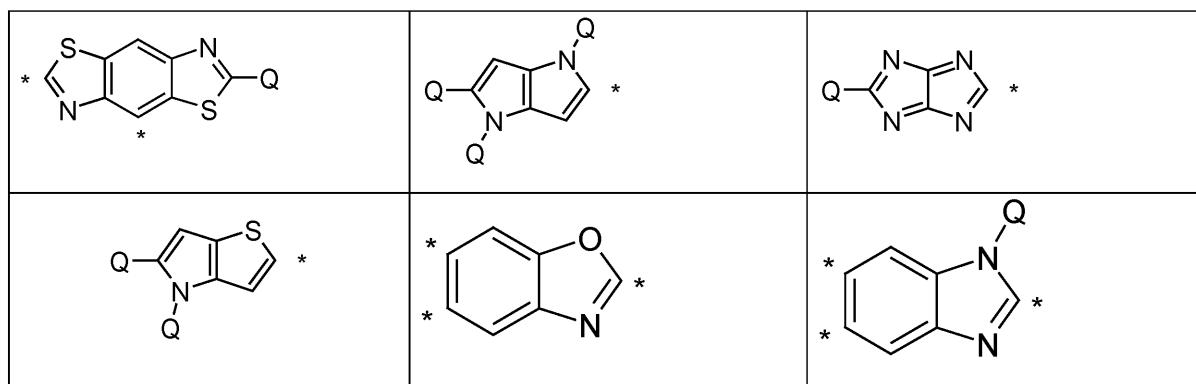
X 、 Z 、および、 A および B とマーキングされた環、 n および p は、式 I の化合物に対して定義されたとおりであり、 Y^* および Y^{**} は、請求項 1 において定義された置換エチニルから独立して選択され、式 I の化合物に対して、請求項 1 において与えられた点群および環結合の条件を満たす化合物である、請求項 1 に記載の半導体素子。

【請求項 3】

式 I の化合物における各 Y 、または式 I A の化合物における Y^* および Y^{**} は、以下の表で与えられる各部分から、他とは独立して、好ましくは同様に、選択され、

【表1】

フェロセニル		



アスタリスクで示された原子の1つによって、各部分がエチニル部分に結合され、Qは、請求項1において定義されたとおりであり、

Lは、O、S、NQであり、

L'は、OまたはSであり、

L''は、O、S、NQ、CQ₂、SiQ₂であり、

Rは、独立してC₁-C₆アルキルであり、

R''は、独立してHまたはC₁-C₆アルキルであり、

前記表で与えられたフェニル部分、ナフチル部分、アントラセニル部分、またはヘテロアリール部分の置換基は、後で定義される置換シリル[#]、ホルミル、C₁-C₂₀-アルキル[#]、C₂-C₂₀-アルケニル[#]、C₂-C₂₀-アルキニル[#]、C₆-C₁₂-アリール[#]、C₆-C₁₂-アリール-C₁-C₂₀-アルキル[#]、5~14個の環原子[#]を有するヘテロアリール、ヘテロアリールが5~14個の環原子を有するヘテロアリール-C₁-C₂₀-アルキル[#]、ハロ-C₁-C₂₀-アルキル[#]（例えば、ペルフルオロ-C₁-C₂₀-アルキル）、C₁-C₂₀-アルカノイル[#]、ハロ-C₁-C₂₀-アルキルカルボニル、ハロ、ヒドロキシ、C₁-C₂₀-アルコキシ、C₃-C₂₀-アルケニルオキシ、C₃-C₂₀-アルキニルオキシ、C₁-C₂₀-アルクチオ、C₃-C₂₀-アルケニルチオ、C₃-C₂₀-アルキニルチオ、カルボキシ、C₁-C₂₀-アルコキシ-カルボニル[#]、フェニル-C₁-C₂₀-アルコキシ-カルボニル[#]）、アミノ、N-モノ-またはN,N-ジ-(C₁-C₂₀-アルキル、C₁-C₂₀-アルカノイル、および/またはフェニル-C₁-C₂₀-アルキル)-アミノ、シアノ、カルバモイル、N-モノ-またはN,N-ジ-(C₁-C₂₀-アルキル、C₁-C₂₀-アルカノイル、および/またはフェニル-C₁-C₇-アルキル)-カルバモイル、ニトロ、およびスルファモイルからなる群から選択され、シャープ([#])が付いた置換基は、Hの代わりに窒素に結合されることも可能であり、例えばヘテロ環の環NHで置換され、

置換シリルに言及される場合、置換シリルは、C₁-C₂₀-アルキル、C₁-C₂₀-アルコキシ、およびフェニル-またはナフチル-C₁-C₂₀-アルキルから選択される2つまたは好ましくは3つの部分によって置換されるシリルであり、

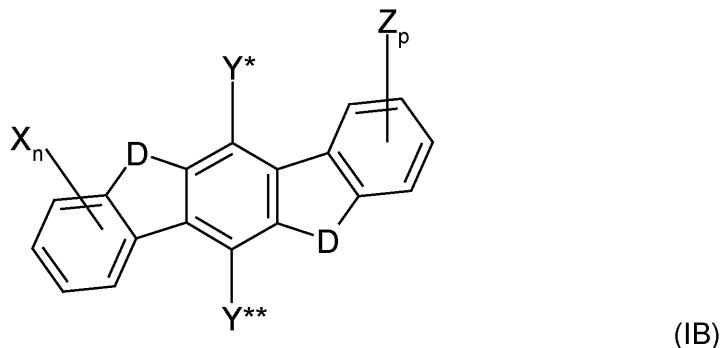
X、Z、Z^{*}、およびZ^{**}は、存在する場合には、非置換または置換C₁-C₂₀-アルキル（ハロ-C₁-C₂₀-アルキルなど）、非置換または置換C₂-C₂₀-アルケニル、非置換または置換C₂-C₂₀-アルキニル、非置換または置換C₆-C₁₄-アリール（特に、フェニルまたはナフチル）、（5~14個の環原子を有する）非置換または置換ヘテロアリール、非置換または置換C₆-C₁₄-アリール-C₁-C₂₀-アルキル（特に、フェニル-またはナフチル-C₁-C₂₀-アルキル（ベンジルなど））、（ヘテロアリールが5~14個の環原子を有する）非置換または置換ヘテロアリール-C₁-C₂₀-アルキル、非置換または置換フェロセニル、非置換または置換C₁-C₂₀-アルカノイル（ペルフルオロ-C₂-C₁₀-アルカノイルなど）、ハロ、非置換または置換C₁-C₂₀-アルコキシ、C₃-C₂₀-アルケニルオキシ、C₃-C₂₀-アルキニルオキシ、非置換または置換C₁-C₂₀-アルキルチオ、C₃-C₂₀-アルケニル

チオ、C₃ - C₂₀ - アルキニルチオ、カルボキシ、非置換または置換C₁ - C₂₀ - アルコキシ - カルボニル、非置換または置換フェニル - C₁ - C₂₀ - アルコキシ - カルボニル、アミノ、N - モノ - またはN, N - ジ - (C₁ - C₂₀ - アルキル、C₁ - C₂₀ - アルカノイル、および / またはフェニル - C₁ - C₂₀ - アルキル) - アミノ、シアノ、カルバモイル、N - モノ - またはN, N - ジ - (C₁ - C₂₀ - アルキル、C₁ - C₂₀ - アルカノイル、および / またはフェニル - C₁ - C₂₀ - アルキル) - カルバモイル、およびスルファモイルからなる群から独立して選択され、置換された形式に言及される各場合において、置換基は、フェニル、ナフチル、アントラセニル、またはヘテロアリールの置換基として、前述の置換基から選択され、nおよびpのそれぞれは、0 ~ 2である、請求項1または2に記載の半導体素子。

【請求項4】

式IまたはIAの化合物が式IB

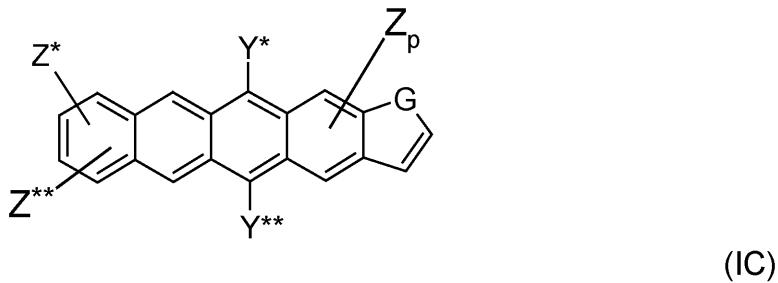
【化14】



の化合物であり、

各Dは、NHまたはSまたはOからなる群から選択されるヘテロ原子であり、X、Z、nおよびpは、式IまたはIAの化合物に対して定義されているとおりであり、Y*およびY**は、置換エチニルから独立して選択され、式IまたはICの化合物に対して、請求項1において与えられた点群および環結合の条件を満たす化合物でもあり、

【化15】

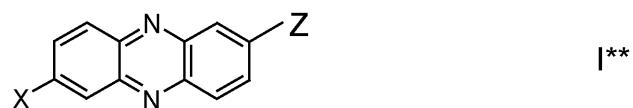
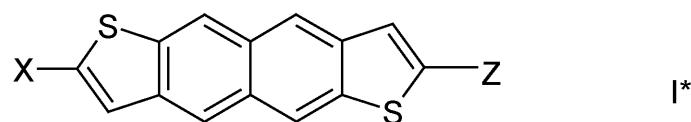


Gは、OまたはNQであり、X、Z、Z*、Z**、nおよびpは、式Iの化合物に対して定義されているとおりであり、Y*およびY**は、置換エチニルから独立して選択され、式Iの化合物に対して既に与えられた点群および環結合の条件を満たす化合物でもある、請求項1または2に記載の半導体素子。

【請求項5】

式Iの化合物が、式I*またはI**

【化16】



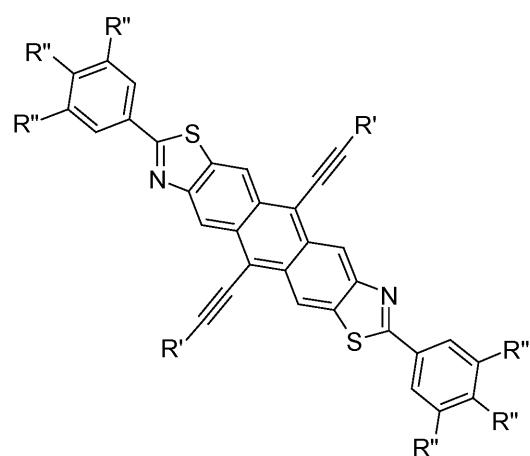
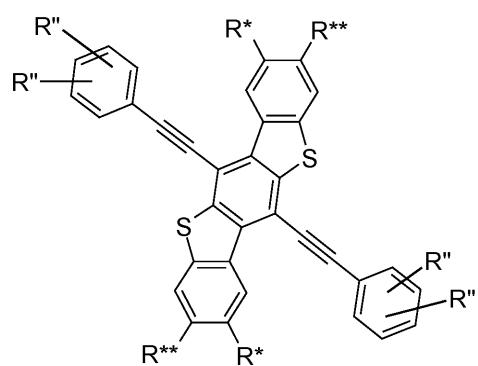
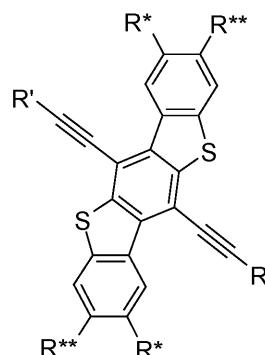
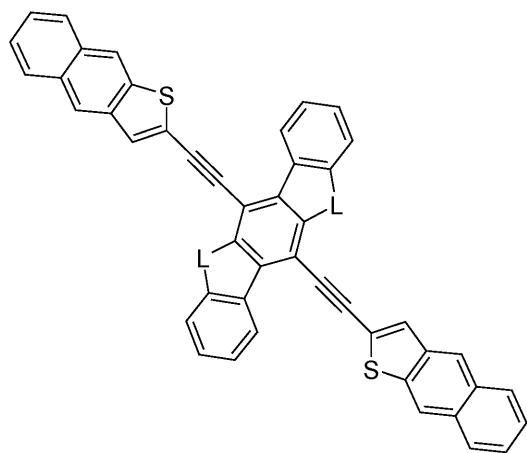
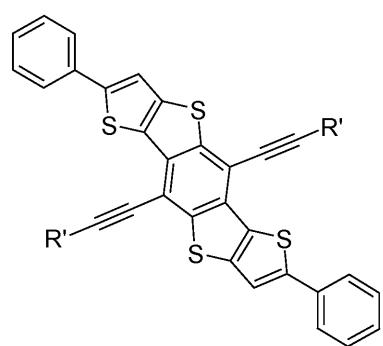
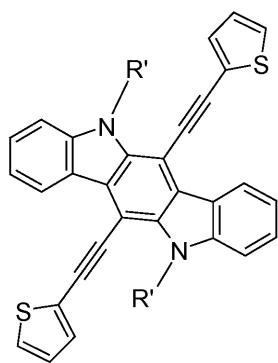
の化合物であり、

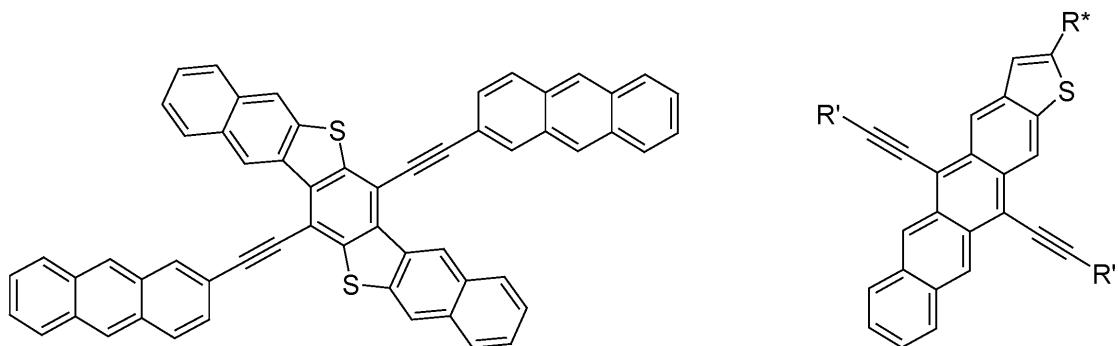
X および Z は、請求項 1 において式 I の化合物に対して定義された置換エチニルであるか、請求項 3 において Y に対して定義された置換エチニルである、請求項 1 に記載の半導体素子。

【請求項 6】

式 I の化合物が、式

【化 17】





の化合物から選択される化合物であり、

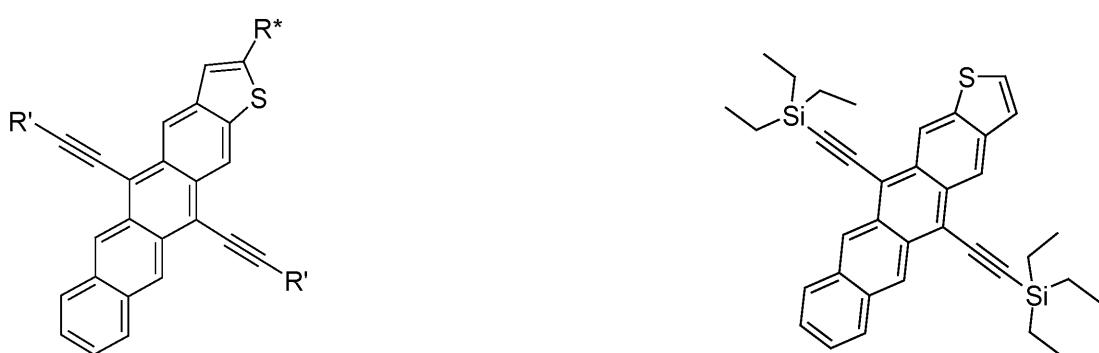
各 R' は、 $C_1 - C_{20}$ アルキル、ベンジル、 $C_1 - C_{12}$ ペルフルオロアルキル、 $C_1 - C_{12}$ ペルフルオロアルカノイル、フルオロフェニル、および SiR_3 (R は独立して $C_1 - C_6$ アルキル、 $C_1 - C_6$ アルコキシ) から独立して選択され、

R'' 、 R^* 、および R^{**} は、独立して、水素または R' であり、

L は、 O または S であり、または

式 I の化合物が、式

【化18】



の化合物から選択される化合物であり、

R^* および R' のそれぞれは、 SiR_3 において、 R が独立して $C_1 - C_6$ アルコキシであるときは、既に定義されたとおりである。

請求項 1 に記載の半導体素子。

【請求項 7】

ダイオード、有機電界効果トランジスタまたはダイオードおよび／もしくは特に有機電界効果トランジスタを含む素子である、請求項 1 から 6 のいずれか一項に記載の半導体素子。

【請求項 8】

請求項 1 から 6 のいずれか一項に記載の、式 I、I*、I**、V、VI、IA、IB または IC の化合物。

【請求項 9】

式 IA の主鎖が（この定義を非置換と仮定するための）エチニル基とともに（好ましくは） C_{2h} 、 D_{2h} 、または C_s の点対称性群に属するという条件で、請求項 1 において与えられた式 I、I*、または I** の、本質的に異性体的に純粋な化合物であって、特に、各記号が請求項 1 から 6 のいずれか一項に記載の意味を有する、請求項 2 において与えられた式 IA の化合物であって、前記主鎖を構成する、A、B および C とマーキングされた環はオルトアニールされている、化合物、または、前記主鎖が（この定義を非置換と仮定するための）エチニル基とともに、または好ましくは分子全体が、 C_{2h} の点対称性群に属するという条件で、各記号が請求項 1 から 5 のいずれか一項に記載の意味を有する

、請求項₄において与えられた式I Bの、本質的に異性体的に純粋な化合物、または、前記主鎖が（この定義を非置換と仮定するための）エチニル基とともに、または好ましくは分子全体が、C_sの点対称性群に属するという条件で、各記号が請求項1から₅のいずれか一項に記載の意味を有する、請求項₄において与えられた式I Cの、本質的に異性体的に純粋な化合物。

【請求項10】

半導体材料の90重量パーセント以上、好ましくは95重量パーセント以上、特に99重量パーセント以上が、請求項₉において定義された式I、IA、IB、IC、I*、またはI**の、異性体的に純粋な化合物であることを特徴とする、半導体層の配合、または半導体素子の半導体層。

【請求項11】

請求項1から₆のいずれか一項において定義された式I、I*、I**、V、またはVIの化合物から、好ましくは、請求項2に記載の式IAの化合物から、または、好ましくは、請求項₄に記載の式IBまたはICの化合物から、または、好ましくは、請求項₅に記載の式I*またはI**の化合物から、薄膜トランジスタ素子を作製する方法であって、

複数の導電性ゲート電極を基板上に堆積させるステップと、

前記導電性ゲート電極上にゲート絶縁体層を堆積させるステップと、

式I、V、VI、好ましくはIA、または好ましくはIB、または好ましくはI*またはI**の化合物、またはこれらの前駆物質の層を、式I、V、VI、好ましくはIA、または好ましくはIBまたはIC、または好ましくはI*またはI**の化合物の前記層が前記ゲート電極とほぼ重なり合うように、前記絶縁体層に堆積させるステップと、

複数組の、導電性のソース電極およびドレイン電極を、前記各組が前記各ゲート電極と一直線をなすように、前記層上に堆積させ、それによって薄膜トランジスタ素子を生成するステップと、を含む方法。

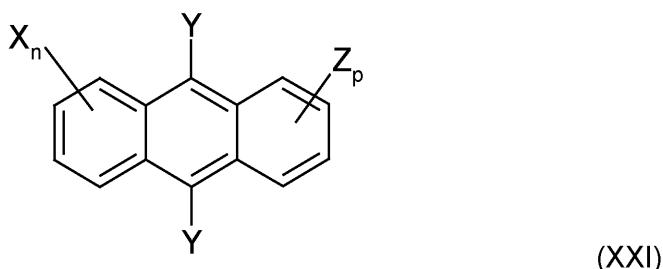
【請求項12】

電子素子作製用の有機半導体として使用するための請求項1から₆または₈のいずれか一項に記載の式I、I*、I**、V、VIの化合物、好ましくは、請求項2に記載の式IAの化合物、または、好ましくは、請求項₄に記載の式IBまたはICの化合物、または、好ましくは、請求項₅に記載の式I*またはI**の化合物、または請求項₁₃に記載の式XXIの化合物。

【請求項13】

式XXIの化合物を含む半導体素子であって、

【化19】



各Yは、他とは独立して、エチニルが、最大40個の炭素原子を有するヒドロカルビルまたは好ましくはハロ-ヒドロカルビルによって、置換されたものであり、

XおよびZは（それらが存在する場合には）、非置換または置換C₁-C₂₀-アルキル（ハロ-C₁-C₂₀-アルキルなど）、非置換または置換C₂-C₂₀-アルケニル、非置換または置換C₂-C₂₀-アルキニル、非置換または置換C₆-C₁₄-アリール（特にフェニルまたはナフチル）、5~14個の環原子を有する非置換または置換ヘテロアリール、非置換または置換C₆-C₁₄-アリール-C₁-C₂₀-アルキル（特に、

フェニル - またはナフチル - C₁ - C₂₀ - アルキル (ベンジルなど))、非置換または置換ヘテロアリール - C₁ - C₂₀ - アルキル (ヘテロアリールは 5 ~ 14 個の環原子を有する)、非置換または置換フェロセニル、非置換または置換 C₁ - C₂₀ - アルカノイル (非置換またはペルフルオロ C₂ - C₁₂ (これらが、2つの共通に共有される環原子を介してリンクされることを意味する) - アルカノイルなど)、ハロ、非置換または置換 C₁ - C₂₀ - アルコキシ、C₃ - C₂₀ - アルケニルオキシ、C₃ - C₂₀ - アルキニルオキシ、非置換または置換 C₁ - C₂₀ - アルキルチオ、C₃ - C₂₀ - アルケニルチオ、C₃ - C₂₀ - アルキニルチオ、カルボキシ、非置換または置換 C₁ - C₂₀ - アルコキシ - カルボニル、非置換または置換フェニル - C₁ - C₂₀ - アルコキシ - カルボニル、アミノ、N - モノ - または N, N - ジ - (C₁ - C₂₀ - アルキル、C₁ - C₂₀ - アルカノイル、および / またはフェニル - C₁ - C₂₀ - アルキル) - アミノ、シアノ、カルバモイル、N - モノ - または N, N - ジ - (C₁ - C₂₀ - アルキル、C₁ - C₂₀ - アルカノイル、および / またはフェニル - C₁ - C₂₀ - アルキル) - カルバモイル、およびスルファモイルからなる群から、互いに独立して、選択される置換基であり、n および p のそれぞれは、他とは独立して、0 ~ 4、好ましくは 0 または 1 である、半導体素子。