

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公表特許公報(A)

(11) 特許出願公表番号

特表2019-521997
(P2019-521997A)

(43) 公表日 **令和1年8月8日(2019.8.8)**

(51) Int.Cl.		F I		テーマコード (参考)
CO7D 519/00	(2006.01)	CO7D 519/00	CSP	3K107
HO1L 51/50	(2006.01)	HO5B 33/14	A	4C072
		HO5B 33/22	B	

審査請求 有 予備審査請求 未請求 (全 50 頁)

(21) 出願番号	特願2018-567050 (P2018-567050)	(71) 出願人	500239823 エルジー・ケム・リミテッド
(86) (22) 出願日	平成30年1月31日 (2018.1.31)		大韓民国 07336 ソウル, ヨンドゥンポグ, ヨイデロ 128
(85) 翻訳文提出日	平成31年1月8日 (2019.1.8)	(74) 代理人	110000877 龍華国際特許業務法人
(86) 国際出願番号	PCT/KR2018/001325	(72) 発明者	キム、ジ フン 大韓民国・ソウル・ヨンドゥンポグ・ヨイデロ・128 エルジー・ケム・リミテッド内
(87) 国際公開番号	W02018/216880	(72) 発明者	リー、ジヨン 大韓民国・ソウル・ヨンドゥンポグ・ヨイデロ・128 エルジー・ケム・リミテッド内
(87) 国際公開日	平成30年11月29日 (2018.11.29)		
(31) 優先権主張番号	10-2017-0064097		
(32) 優先日	平成29年5月24日 (2017.5.24)		
(33) 優先権主張国・地域又は機関	韓国 (KR)		
(31) 優先権主張番号	10-2017-0133228		
(32) 優先日	平成29年10月13日 (2017.10.13)		
(33) 優先権主張国・地域又は機関	韓国 (KR)		

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 ヘテロ環化合物およびこれを含む有機電子素子

(57) 【要約】

本明細書は、化学式 1 のヘテロ環化合物およびこれを含む有機電子素子に関する。

20
30
10

100

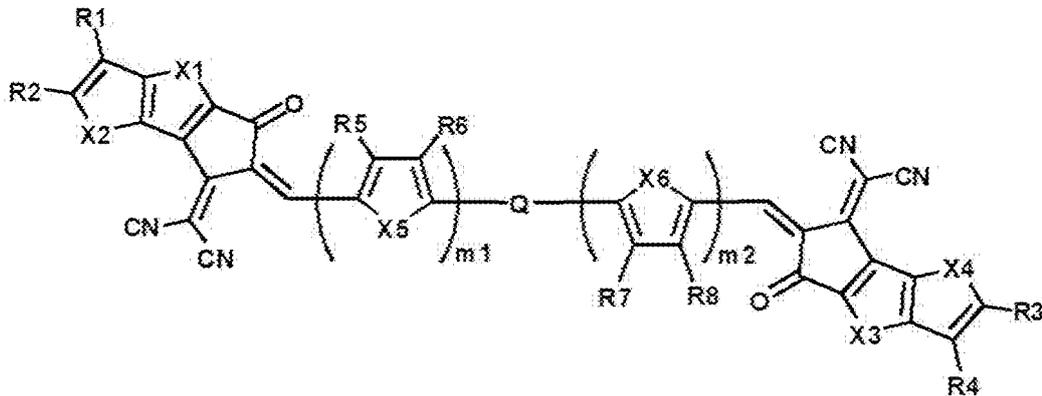
【特許請求の範囲】

【請求項 1】

下記化学式 1 で表されるヘテロ環化合物：

[化学式 1]

【化 1】



10

前記化学式 1 において、

X 1 ~ X 6 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、C R R'、N R、O、S i R R'、P R、S、G e R R'、S e、または T e であり、

20

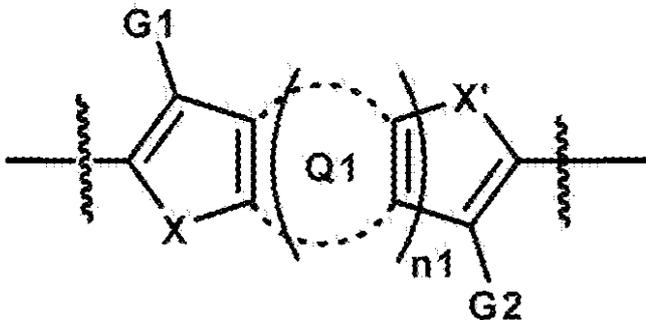
R 1 ~ R 8、R および R' は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン基；ヒドロキシ基；置換もしくは非置換のアルキル基；または置換もしくは非置換のアルコキシ基であり、

m 1 および m 2 は、それぞれ 0 または 1 であり、

Q は、下記化学式 A ~ C のうちのいずれか 1 つで表される構造であり、

[化学式 A]

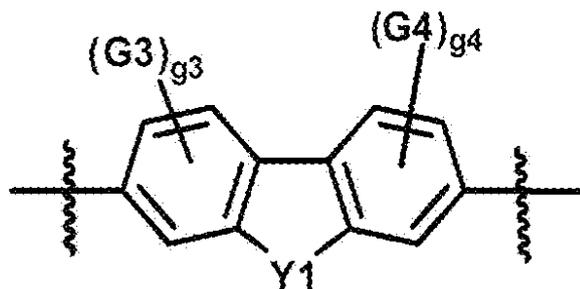
【化 2】



30

[化学式 B]

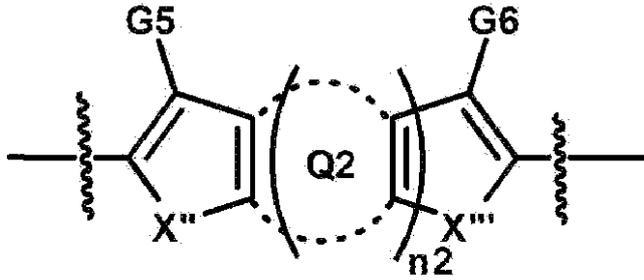
【化 3】



40

[化学式 C]

【化 4】



10

前記化学式 A ~ C において、

X、X'、X''およびX'''は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、SまたはSeであり、

Y1は、CR''R'''またはNR''であり、

G1 ~ G6、R''およびR'''は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン基；ヒドロキシ基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のアルコキシ基；置換もしくは非置換のアリール基；または置換もしくは非置換のヘテロアリール基であり、

Q1およびQ2は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換の環であり、

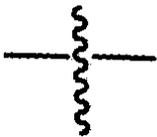
20

g3およびg4は、それぞれ1 ~ 3の整数であり、

n1およびn2は、それぞれ1 ~ 5の整数であり、

g3、g4、n1およびn2がそれぞれ2以上の場合、2以上の括弧内の構造は、互いに同一または異なり、

【化 5】



30

は、前記化学式 1 に結合する部位である。

【請求項 2】

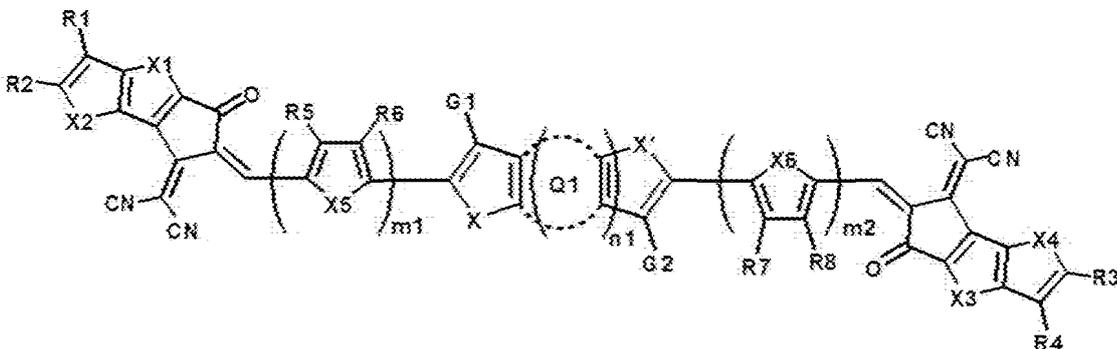
前記 Q1 および Q2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換の芳香族環；または置換もしくは非置換のヘテロ環である、請求項 1 に記載のヘテロ環化合物。

【請求項 3】

前記化学式 1 は、下記化学式 1 - 1 ~ 1 - 3 のうちのいずれか 1 つで表されるものである、請求項 1 に記載のヘテロ環化合物：

[化学式 1 - 1]

【化 6】

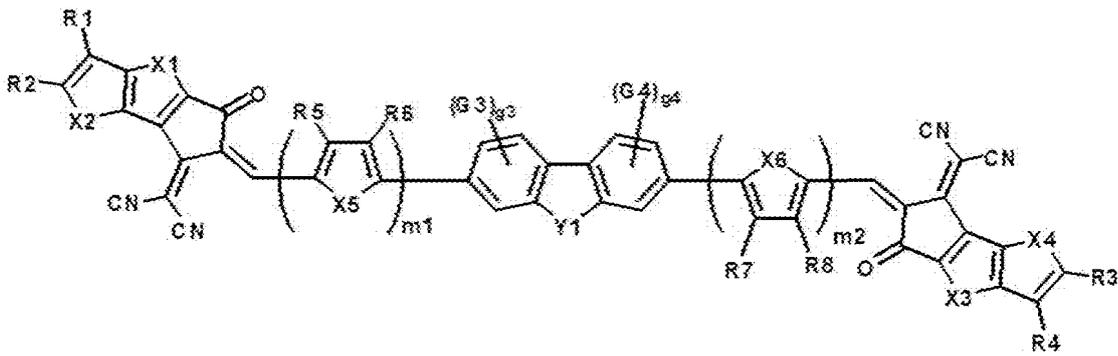


40

50

[化学式 1 - 2]

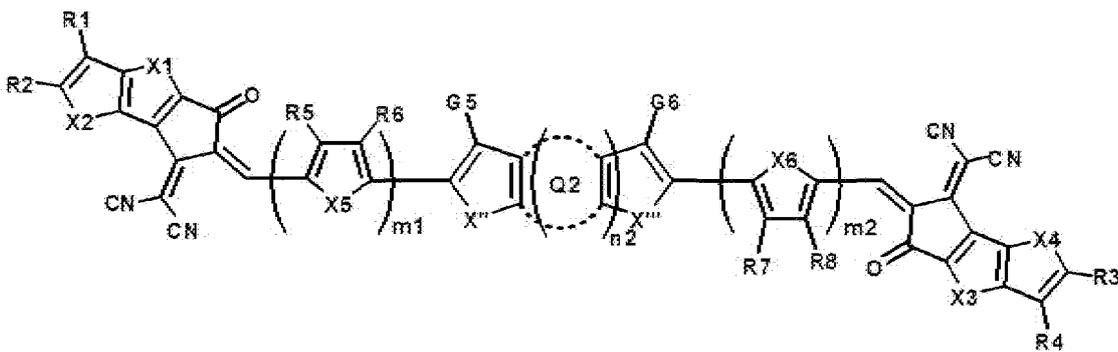
【化 7】



10

[化学式 1 - 3]

【化 8】



20

前記化学式 1 - 1 ~ 1 - 3 において、

X 1 ~ X 4、R 1 ~ R 8、m 1 および m 2 の定義は、前記化学式 1 で定義したものと
同じであり、

Q 1、X、X'、n 1、G 1 および G 2 の定義は、前記化学式 A で定義したものと
同じであり、

Y 1、G 3、G 4、g 3 および g 4 の定義は、前記化学式 B で定義したものと
同じであり、

30

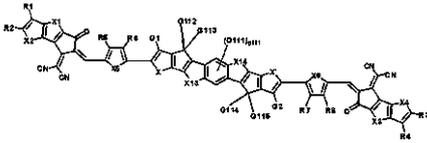
Q 2、X''、X'''、n 2、G 5 および G 6 の定義は、前記化学式 C で定義したものと
同じである。

【請求項 4】

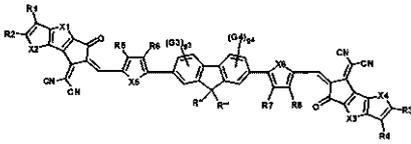
前記化学式 1 は、下記化学式 1 - 4 ~ 1 - 15 のうちのいずれか 1 つで表されるもの
である、請求項 1 に記載のヘテロ環化合物：

【化 1 1】

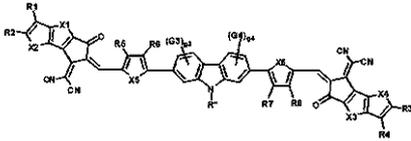
〔化学式 1-12〕



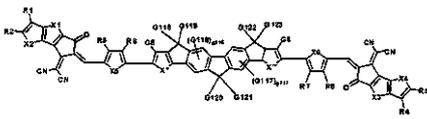
〔化学式 1-13〕



〔化学式 1-14〕



〔化学式 1-15〕



10

前記化学式 1 - 4 ~ 1 - 15 において、

20

X 1 ~ X 4 および R 1 ~ R 8 の定義は、前記化学式 1 で定義したものと同一であり、
 X、X'、G 1 および G 2 の定義は、前記化学式 A で定義したものと同一であり、
 G 3、G 4、g 3 および g 4 の定義は、前記化学式 B で定義したものと同一であり、
 X''、X'''、G 5 および G 6 の定義は、前記化学式 C で定義したものと同一であり、
 X 1 1 ~ X 1 4 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、S または S e であり、
 G 1 0 1 ~ G 1 2 3、R'' および R''' は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、
 水素；重水素；ハロゲン基；ヒドロキシ基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換も
 しくは非置換のアルコキシ基；置換もしくは非置換のアリール基；または置換も
 しくは非置換のヘテロアリール基であり、

g 1 0 5、g 1 1 0、g 1 1 1、g 1 1 6 および g 1 1 7 は、それぞれ 1 または 2 であ
 り、

30

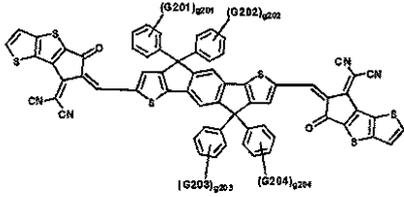
g 1 0 5、g 1 1 0、g 1 1 1、g 1 1 6 および g 1 1 7 がそれぞれ 2 の場合、2 個の
 括弧内の構造は、互いに同一または異なる。

【請求項 5】

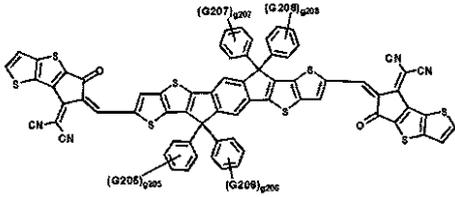
前記化学式 1 は、下記化学式 1 - 1 6 ~ 1 - 2 9 のうちのいずれか 1 つで表されるもの
 である、請求項 1 に記載のヘテロ環化合物：

【化 1 2】

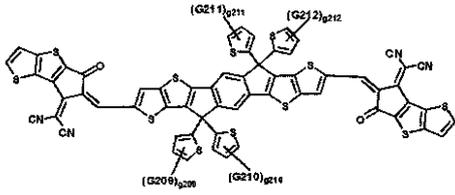
[化学式 1-16]



[化学式 1-17]

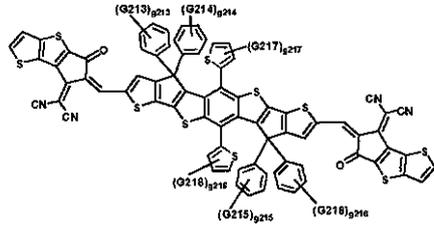


[化学式 1-18]

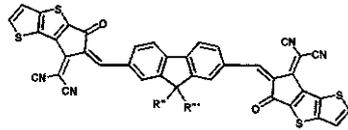


【化 1 3】

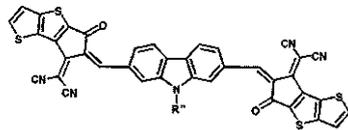
[化学式 1-19]



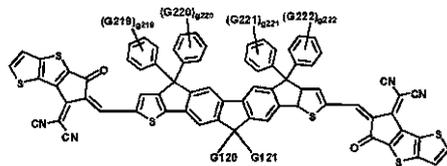
[化学式 1-20]



[化学式 1-21]



[化学式 1-22]



10

20

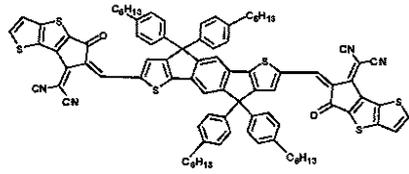
30

40

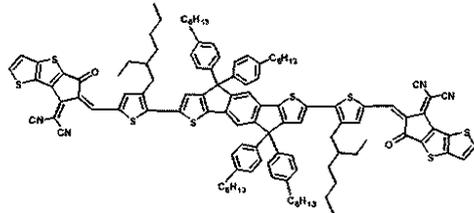
前記化学式 1 は、下記化合物の中から選択されるものである、請求項 1 に記載のヘテロ環化合物：

【化 1 6】

〔化合物 1〕

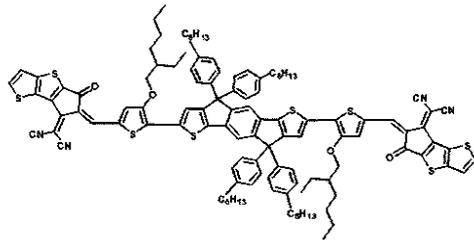


〔化合物 2〕



10

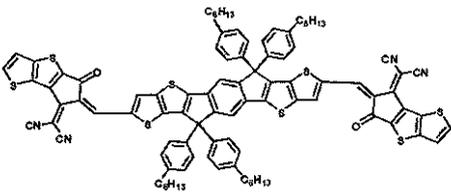
〔化合物 3〕



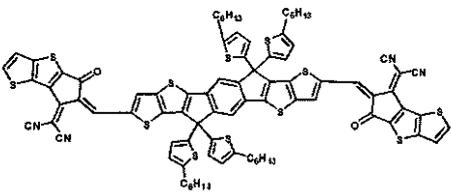
20

【化 1 7】

〔化合物 4〕



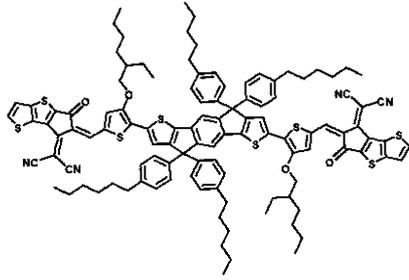
〔化合物 5〕



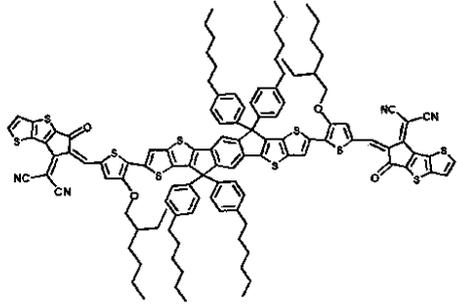
30

【化 1 8】

[化合物 6]



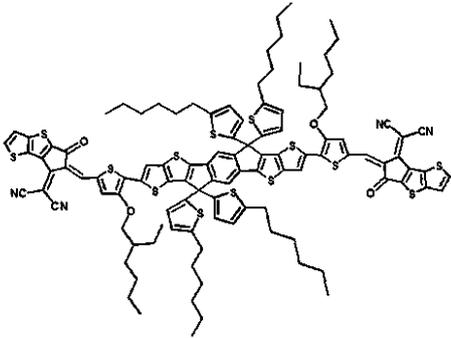
[化合物 7]



10

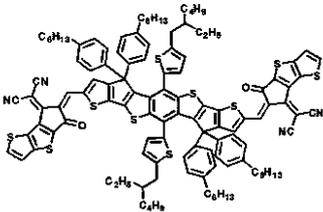
【化 1 9】

[化合物 8]



20

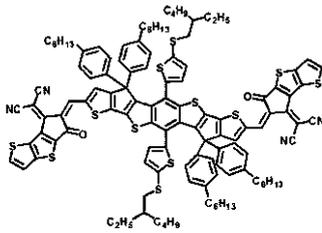
[化合物 9]



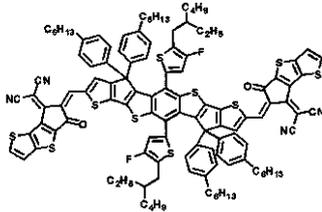
30

【化 2 0】

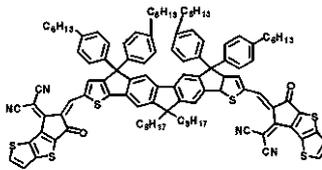
[化合物 10]



[化合物 11]



[化合物 12]



10

20

【請求項 7】

第 1 電極と、

前記第 1 電極に対向して備えられる第 2 電極と、

前記第 1 電極と前記第 2 電極との間に備えられる 1 層以上の有機物層とを含む有機電子素子であって、

前記有機物層のうちの 1 層以上は、請求項 1 ~ 6 のいずれか 1 項に記載のヘテロ環化合物を含むものである有機電子素子。

【請求項 8】

前記有機物層は、光活性層を含み、

前記光活性層は、n 型有機物層および p 型有機物層を含む 2 層薄膜 (b i l a y e r) 構造であり、

前記 n 型有機物層は、前記ヘテロ環化合物を含むものである、請求項 7 に記載の有機電子素子。

30

【請求項 9】

前記有機物層は、光活性層を含み、

前記光活性層は、電子供与体物質および電子受容体物質を含み、

前記電子受容体物質は、前記ヘテロ環化合物を含むものである、請求項 7 に記載の有機電子素子。

【請求項 10】

前記電子供与体物質および電子受容体物質は、バルクヘテロジャンクション (B H J) を構成するものである、請求項 9 に記載の有機電子素子。

40

【請求項 11】

前記有機電子素子は、有機光電素子、有機トランジスタ、有機太陽電池、および有機発光素子からなる群より選択されるものである、請求項 7 ~ 10 のいずれか 1 項に記載の有機電子素子。

【請求項 12】

請求項 7 ~ 11 のいずれか 1 項に記載の有機電子素子を含む有機イメージセンサ。

【請求項 13】

請求項 12 に記載の有機イメージセンサを含む電子装置。

【発明の詳細な説明】

50

【技術分野】

【0001】

本出願は、2017年5月24日付で韓国特許庁に出願された韓国特許出願第10-2017-0064097号および2017年10月13日付で韓国特許庁に出願された韓国特許出願第10-2017-0133228号の出願日の利益を主張し、その内容のすべては本明細書に組み込まれる。

【0002】

本明細書は、ヘテロ環化合物およびこれを含む有機電子素子に関する。

【背景技術】

【0003】

有機電子素子とは、正孔および/または電子を用いた、電極と有機物との間における電荷交流を必要とする素子を意味する。有機電子素子は、動作原理によって、下記のように大きく2つに分けられる。第一は、外部の光源から素子に流入した光子によって有機物層でエキシトン(exciton)が形成され、このエキシトンが電子と正孔に分離され、この電子と正孔がそれぞれ異なる電極に伝達されて電流源(電圧源)として使用される形態の電気素子である。第二は、2つ以上の電極に電圧または電流を加えて電極と界面をなす有機物半導体に正孔および/または電子を注入し、注入された電子と正孔によって動作する形態の電子素子である。

10

【0004】

有機電子素子の例としては、有機太陽電池、有機光電素子、有機発光素子、有機トランジスタなどがあり、以下では、主に有機光電素子について具体的に説明するが、前記有機電子素子では、正孔の注入または輸送物質、電子の注入または輸送物質、または発光物質が類似の原理で作用する。

20

【0005】

有機太陽電池は、太陽エネルギーからできるだけ多くの電気エネルギーを出力できるように効率を高めることが重要である。このような有機太陽電池の効率を高めるためには、半導体の内部でできるだけ多くのエキシトンを生成することも重要であるが、生成された電荷を損失なく外部に引き出すことも重要である。電荷が損失する原因の1つが、生成された電子および正孔が再結合(recombination)によって消滅することである。生成された電子や正孔が損失せずに電極に伝達されるための方法として多様な方法が提示されているが、ほとんどが追加の工程が求められ、これによって製造費用が上昇しかねない。

30

【0006】

有機光電素子は、光電効果を利用して光を電気信号に変換させる素子で、光ダイオードおよび光トランジスタなどを含み、イメージセンサなどに適用可能である。光ダイオードを含むイメージセンサはますます解像度が高くなっており、これによって画素サイズが小さくなっている。現在主に使用するシリコン光ダイオードの場合、画素サイズが小さくなるにつれて吸収面積が減少するため、感度低下が発生しうる。これによって、シリコンを代替できる有機物質が研究されている。

40

【0007】

有機物質は、吸光係数が大きく、分子構造によって特定波長領域の光を選択的に吸収できるため、光ダイオードとカラーフィルタを同時に代替可能で、感度改善および高集積に非常に有利である。

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0008】

本明細書は、ヘテロ環化合物およびこれを含む有機電子素子を提供する。

【課題を解決するための手段】

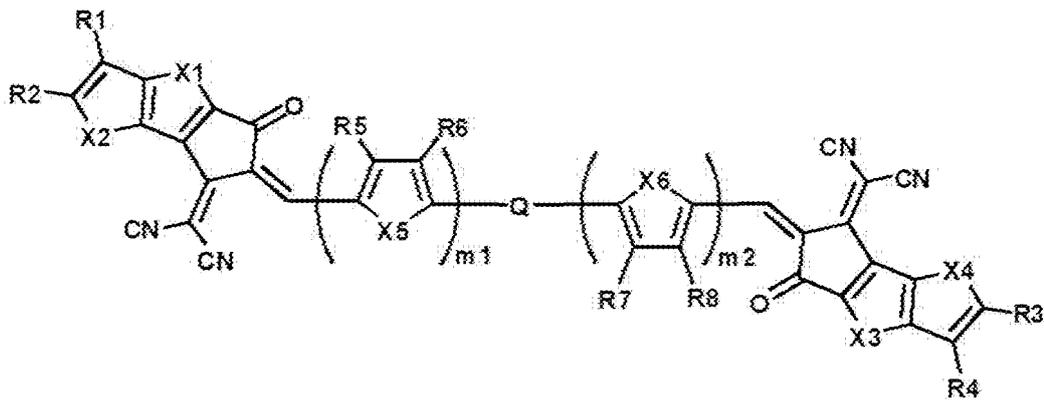
【0009】

本明細書の一実施態様によれば、下記化学式1で表されるヘテロ環化合物を提供する。

50

[化学式 1]

【化 1】



10

前記化学式 1 において、

X 1 ~ X 6 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、C R R'、N R、O、S i R R'、P R、S、G e R R'、S e、または T e であり、

R 1 ~ R 8、R および R' は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン基；ヒドロキシ基；置換もしくは非置換のアルキル基；または置換もしくは非置換のアルコキシ基であり、

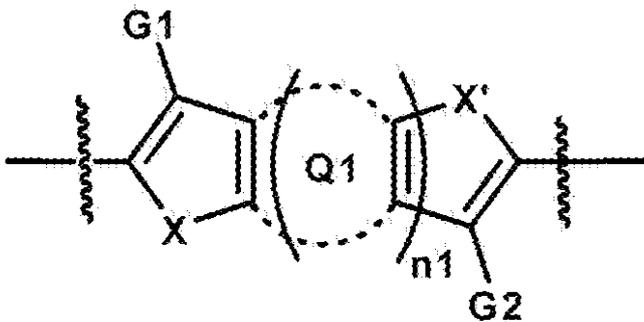
20

m 1 および m 2 は、それぞれ 0 または 1 であり、

Q は、下記化学式 A ~ C のうちのいずれか 1 つで表される構造であり、

[化学式 A]

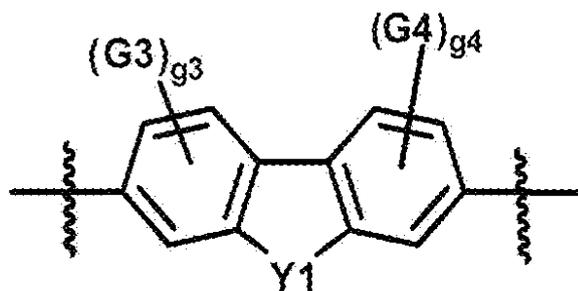
【化 2】



30

[化学式 B]

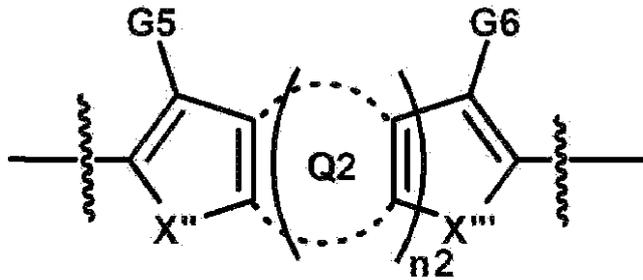
【化 3】



40

[化学式 C]

【化4】



10

前記化学式 A ~ C において、

X、X'、X''およびX'''は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、SまたはSeであり、

Y1は、CR''R'''またはNR''であり、

G1 ~ G6、R''およびR'''は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン基；ヒドロキシ基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のアルコキシ基；置換もしくは非置換のアリール基；または置換もしくは非置換のヘテロアリール基であり、

Q1およびQ2は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換の環であり、

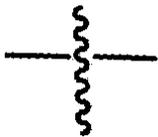
20

g3およびg4は、それぞれ1 ~ 3の整数であり、

n1およびn2は、それぞれ1 ~ 5の整数であり、

g3、g4、n1およびn2がそれぞれ2以上の場合、2以上の括弧内の構造は、互いに同一または異なり、

【化5】



30

は、前記化学式1に結合する部位である。

【0010】

また、本明細書の一実施態様によれば、第1電極と、前記第1電極に対向して備えられる第2電極と、前記第1電極と前記第2電極との間に備えられる1層以上の有機物層とを含む有機電子素子であって、前記有機物層のうちの1層以上は、前述したヘテロ環化合物を含むものである有機電子素子を提供する。

【発明の効果】

【0011】

本明細書の一実施態様に係る前記化学式1で表されるヘテロ環化合物は、分子内の末端である dicyanomethylene-cyclopentathienothiophene-one と、コアである Q との多様な構造によりエネルギー吸収領域およびエネルギーレベルを自由に調節し、これを含む有機太陽電池は、素子性能に優れる。

40

【0012】

また、前記化学式1で表されるヘテロ環化合物を光活性層のn型有機物層として用いる有機太陽電池は、優れた光-電変換効率を示す。

【0013】

本明細書の一実施態様に係る前記化学式1で表されるヘテロ環化合物は、既存のフルレン系アクセプタ物質である PCBM (Phenyl-C61-butyrac acid methyl ester) と類似の LUMO (lowest unoccupied molecular orbital) エネルギー準位を有するが、低い開放電圧の

50

損失で前記化学式 1 で表されるヘテロ環化合物を光活性層の n 型有機物層として用いる有機太陽電池は、高い開放電圧 (V_{oc}) を示す。

【0014】

また、前記化学式 1 で表されるヘテロ環化合物は、末端に dicyanomethylene-cyclopentathienothiophene-one の導入により分子-分子の引力を増加させてより優れた電子移動度を示すことができ、これは、ROLL-TO-ROLL (ロールツーロール) 工程に有利な有機太陽電池、すなわち厚い薄膜フィルムにおいても優れた性能を示すことができる有機太陽電池素子の作製が可能である。

【0015】

本明細書の一実施態様に係る化学式 1 で表されるヘテロ環化合物は、分子内の末端である dicyanomethylene-cyclopentathienothiophene-one 末端基の導入により分子-分子間の相互作用 (interaction) を増加させて電子移動度を向上させ、前記化学式 1 の R5 ~ R8 にアルコキシ基をスペーサ (spacer) として導入する場合、溶解度問題の改善だけでなく、O-S 相互作用 (interaction) を誘導して可視光線および NIR (Near Infrared) 領域で吸収領域を有する有機光電素子を製造することができ、溶解度問題を改善して、有機光電素子の製造時、溶液工程に容易である。

10

【図面の簡単な説明】

【0016】

【図 1】本明細書の一実施態様に係る有機電子素子を示す図である。

20

【図 2】本明細書の一実施態様に係る化合物 2 の $^1\text{H-NMR}$ スペクトルを示す図である。

【図 3】本明細書の一実施態様に係る化合物 2 および比較例の化合物 1 である IEIC のフィルム状態における UV-vis 吸収スペクトルを示す図である。

【図 4】本明細書の一実施態様に係る化合物 2 および比較例の化合物 1 である IEIC の HOMO/LUMO エネルギーレベルを示す図である。

【発明を実施するための形態】

【0017】

以下、本明細書について詳細に説明する。

【0018】

本明細書は、前記化学式 1 で表されるヘテロ環化合物を提供する。

30

【0019】

本明細書の一実施態様に係る化学式 1 で表されるヘテロ環化合物は、分子内の末端である dicyanomethylene-cyclopentathienothiophene-one と、コアである Q との多様な構造によりエネルギー吸収領域およびエネルギーレベルを自由に調節し、これを含む有機太陽電池は、素子性能に優れる。

【0020】

また、前記化学式 1 で表されるヘテロ環化合物を光活性層の n 型有機物層として用いる有機太陽電池は、優れた光-電変換効率を示す。

【0021】

本明細書の一実施態様に係る前記化学式 1 で表されるヘテロ環化合物は、既存のフラーレン系アクセプタ物質である PCBM と類似の LUMO エネルギー準位を有するが、低い開放電圧の損失で前記化学式 1 で表されるヘテロ環化合物を光活性層の n 型有機物層 (電子受容体物質) として用いる有機太陽電池は、高い開放電圧 (V_{oc}) を示す。

40

【0022】

また、本明細書の一実施態様に係る化学式 1 で表されるヘテロ環化合物は、分子内の末端である dicyanomethylene-cyclopentathienothiophene-one の導入により分子-分子間の相互作用 (interaction) を増加させて電子移動度を向上させ、前記化学式 1 の R5 ~ R8 にアルコキシ基をスペーサ (spacer) として導入する場合、溶解度問題の改善だけでなく、O-S 相互作用

50

(interaction)を誘導して可視光線およびNIR(Near Infrared)領域で吸収領域を有する有機光電素子を作製することができ、溶解度問題を改善して、有機光電素子の作製時、溶液工程に容易である。

【0023】

本明細書において、ある部分がある構成要素を「含む」とする時、これは、特に反対の記載がない限り、他の構成要素を除くのではなく、他の構成要素をさらに包含できることを意味する。

【0024】

本明細書において、ある部材が他の部材の「上に」位置しているとする時、これは、ある部材が他の部材に接している場合のみならず、2つの部材の間にさらに他の部材が存在する場合も含む。

10

【0025】

前記置換基の例示は以下に説明するが、これに限定されるものではない。

【0026】

前記「置換」という用語は、化合物の炭素原子に結合した水素原子が他の置換基に変わることを意味し、置換される位置は、水素原子の置換される位置すなわち、置換基が置換可能な位置であれば限定せず、2以上置換される場合、2以上の置換基は、互いに同一または異なってもよい。

【0027】

本明細書において、「置換もしくは非置換の」という用語は、重水素；ハロゲン基；アルキル基；アルケニル基；アルコキシ基；チオアルコキシ基；エステル基；カルボニル基；カルボキシル基；ヒドロキシ基；シクロアルキル基；シリル基；アリーラルケニル基；アリーロキシ基；アルキルチオキシ基；アルキルスルホキシ基；アリールスルホキシ基；ハウ素基；アルキルアミン基；アラルキルアミン基；アリールアミン基；ヘテロ環基；アリールアミン基；アリール基；ニトリル基；ニトロ基；ヒドロキシ基；およびN、O、S原子のうちの1個以上を含むヘテロ環基からなる群より選択された1個以上の置換基で置換されているか、もしくはいずれの置換基も有しないことを意味する。

20

【0028】

前記置換基は、追加の置換基で置換もしくは非置換であってもよい。

【0029】

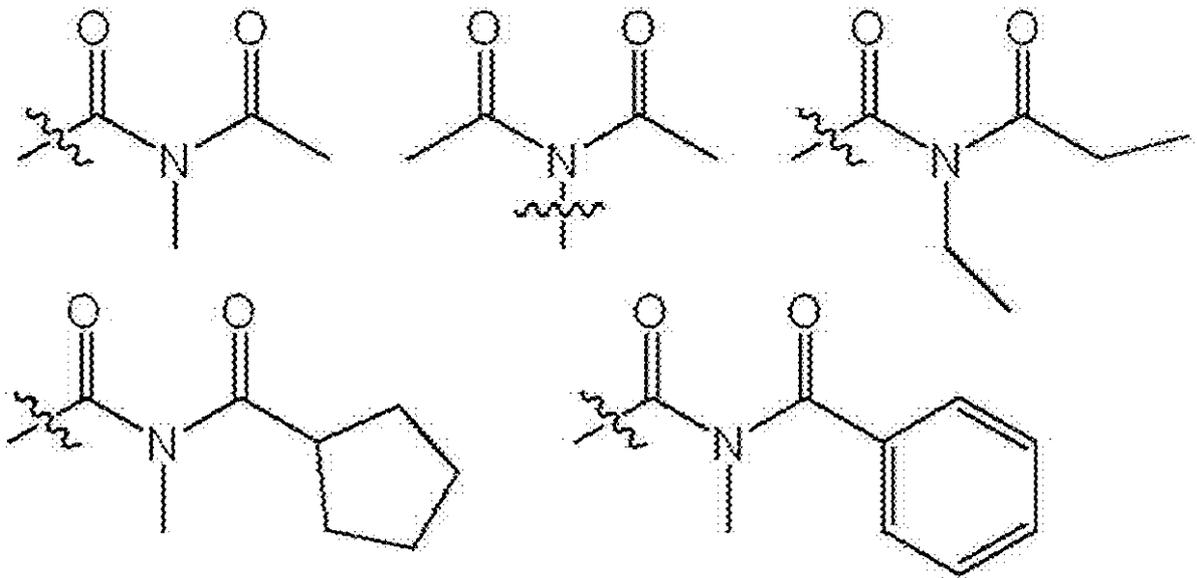
本明細書において、ハロゲン基は、フッ素、塩素、臭素、またはヨウ素になってもよい。

30

【0030】

本明細書において、イミド基の炭素数は特に限定されないが、炭素数1~25のものが好ましい。具体的には、下記のような構造の化合物になってもよいが、これに限定されるものではない。

【化6】



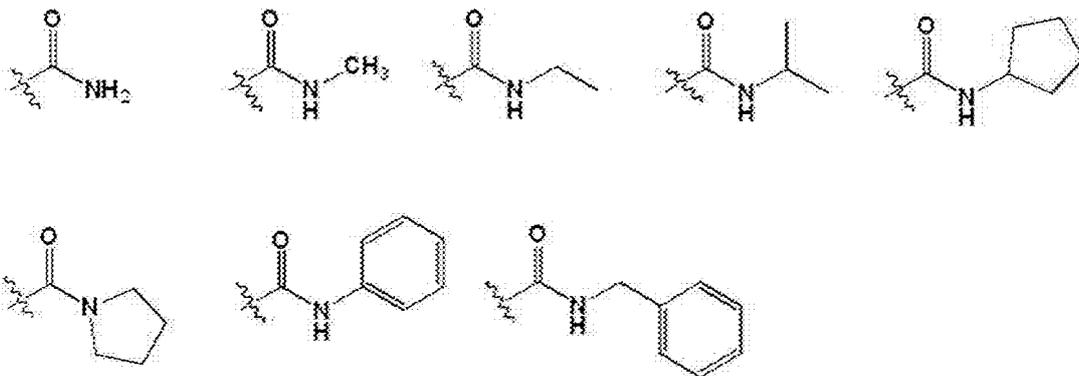
10

【0031】

本明細書において、アミド基は、アミド基の窒素が水素、炭素数1～25の直鎖、分枝鎖もしくは環鎖アルキル基、または炭素数6～25のアリール基で1または2置換されていてもよい。具体的には、下記構造式の化合物になってもよいが、これに限定されるものではない。

20

【化7】



30

【0032】

本明細書において、前記アルキル基は、直鎖もしくは分枝鎖であってもよく、炭素数は特に限定されないが、1～50のものが好ましい。具体例としては、メチル、エチル、プロピル、*n*-プロピル、イソプロピル、ブチル、*n*-ブチル、イソブチル、*tert*-ブチル、*sec*-ブチル、1-メチル-ブチル、1-エチル-ブチル、ペンチル、*n*-ペンチル、イソペンチル、ネオペンチル、*tert*-ペンチル、ヘキシル、*n*-ヘキシル、1-メチルペンチル、2-メチルペンチル、4-メチル-2-ペンチル、3,3-ジメチルブチル、2-エチルブチル、ヘプチル、*n*-ヘプチル、1-メチルヘキシル、シクロペンチルメチル、シクロヘキシルメチル、オクチル、*n*-オクチル、*tert*-オクチル、1-メチルヘプチル、2-エチルヘキシル、2-プロピルペンチル、*n*-ノニル、2,2-ジメチルヘプチル、1-エチル-プロピル、1,1-ジメチル-プロピル、イソヘキシル、2-メチルペンチル、4-メチルヘキシル、および5-メチルヘキシルなどがあるが、これらに限定されない。

40

【0033】

本明細書において、シクロアルキル基は特に限定されないが、炭素数3～60のものが

50

好ましく、具体的には、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、3 - メチルシクロペンチル、2 , 3 - ジメチルシクロペンチル、シクロヘキシル、3 - メチルシクロヘキシル、4 - メチルシクロヘキシル、2 , 3 - ジメチルシクロヘキシル、3 , 4 , 5 - トリメチルシクロヘキシル、4 - tert - ブチルシクロヘキシル、シクロヘプチル、およびシクロオクチルなどがあるが、これらに限定されない。

【0034】

本明細書において、前記アルコキシ基は、直鎖、分枝鎖もしくは環鎖であってもよい。アルコキシ基の炭素数は特に限定されないが、炭素数1 ~ 20のものが好ましい。具体的には、メトキシ、エトキシ、n - プロポキシ、イソプロポキシ、n - ブトキシ、イソブトキシ、tert - ブトキシ、sec - ブトキシ、n - ペンチルオキシ、ネオペンチルオキシ、イソペンチルオキシ、n - ヘキシルオキシ、3 , 3 - ジメチルブチルオキシ、2 - エチルブチルオキシ、n - オクチルオキシ、n - ノニルオキシ、n - デシルオキシ、ベンジルオキシ、およびp - メチルベンジルオキシなどになってもよいが、これらに限定されるものではない。

10

【0035】

本明細書において、前記チオアルコキシ基は、前記アルコキシ基のOがSであることを除けば、前記アルコキシ基の説明が適用可能である。

【0036】

本明細書において、前記アルケニル基は、直鎖もしくは分枝鎖であってもよく、炭素数は特に限定されないが、2 ~ 40のものが好ましい。具体例としては、ビニル、1 - プロペニル、イソプロペニル、1 - ブテニル、2 - ブテニル、3 - ブテニル、1 - ペンテニル、2 - ペンテニル、3 - ペンテニル、3 - メチル - 1 - ブテニル、1 , 3 - ブタジエニル、アリル、1 - フェニルビニル - 1 - イル、2 - フェニルビニル - 1 - イル、2 , 2 - ジフェニルビニル - 1 - イル、2 - フェニル - 2 - (ナフチル - 1 - イル) ビニル - 1 - イル、2 , 2 - ビス(ジフェニル - 1 - イル) ビニル - 1 - イル、スチルベニル基、およびスチレニル基などがあるが、これらに限定されない。

20

【0037】

本明細書において、シリル基は、具体的には、トリメチルシリル基、トリエチルシリル基、t - ブチルジメチルシリル基、ビニルジメチルシリル基、プロピルジメチルシリル基、トリフェニルシリル基、ジフェニルシリル基、およびフェニルシリル基などがあるが、これらに限定されない。

30

【0038】

本明細書において、ホウ素基は、- BR₁₀₀R₁₀₁であってもよいし、前記R₁₀₀およびR₁₀₁は、同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン；ニトリル基；置換もしくは非置換の炭素数3 ~ 30の単環もしくは多環のシクロアルキル基；置換もしくは非置換の炭素数1 ~ 30の直鎖もしくは分枝鎖のアルキル基；置換もしくは非置換の炭素数6 ~ 30の単環もしくは多環のアリール基；および置換もしくは非置換の炭素数2 ~ 30の単環もしくは多環のヘテロアリール基からなる群より選択されてもよい。

【0039】

本明細書において、ホスフィンオキシド基は、具体的には、ジフェニルホスフィンオキシド基、ジナフチルホスフィンオキシド基などがあるが、これらに限定されるものではない。

40

【0040】

本明細書において、アリール基は、単環式アリール基または多環式アリール基であってもよいし、炭素数1 ~ 25のアルキル基、または炭素数1 ~ 25のアルコキシ基が置換される場合を含む。また、本明細書内におけるアリール基は、芳香族環を意味することができる。

【0041】

前記アリール基が単環式アリール基の場合、炭素数は特に限定されないが、炭素数6 ~

50

25のものが好ましい。具体的には、単環式アリール基としては、フェニル基、ビフェニル基、およびターフェニル基などになってもよいが、これらに限定されるものではない。

【0042】

前記アリール基が多環式アリール基の場合、炭素数は特に限定されないが、炭素数10～24のものが好ましい。具体的には、多環式アリール基としては、ナフチル基、アントラセニル基、フェナントリル基、ピレニル基、ペリレニル基、クリセニル基、およびフルオレニル基などになってもよいが、これらに限定されるものではない。

【0043】

本明細書において、フルオレニル基は、2個の環有機化合物が1個の原子を介して連結された構造である。

10

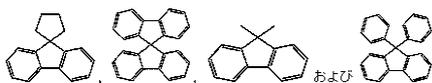
【0044】

本明細書において、前記フルオレニル基は置換されていてもよいし、隣接した置換基が互いに結合して環を形成してもよい。

【0045】

前記フルオレニル基が置換される場合、

【化8】



などになってもよい。ただし、これらに限定されるものではない。

20

【0046】

本明細書において、ヘテロアリール基は、異種元素としてO、N、およびSのうちの1個以上を含むヘテロアリール基であって、炭素数は特に限定されないが、炭素数2～60のものが好ましい。ヘテロアリール基の例としては、チオフエン基、フラン基、ピロール基、イミダゾール基、チアゾール基、オキサゾール基、オキサジアゾール基、ピリジル基、ピピリジル基、ピリミジル基、トリアジン基、トリアゾール基、アクリジル基、ピリダジン基、ピラジニル基、キノリニル基、キナゾリン基、キノキサリニル基、フタラジニル基、ピリドピリミジニル基、ピリドピラジニル基、ピラジノピラジニル基、イソキノリン基、インドール基、カルバゾール基、ベンズオキサゾール基、ベンズイミダゾール基、ベンゾチアゾール基、ベンゾカルバゾール基、ベンゾチオフエン基、ジベンゾチオフエン基、ベンゾフラニル基、フェナントロリン基 (phenanthroline)、イソオキサゾリル基、チアジアゾリル基、ベンゾチアジアゾリル基、フェノチアジニル基、およびジベンゾフラニル基などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

30

【0047】

本明細書において、ヘテロ環基は、単環もしくは多環であってもよいし、芳香族、脂肪族、または芳香族と脂肪族との縮合環であってもよいし、前記ヘテロアリール基の例示の中から選択されてもよい。

【0048】

本明細書において、アリールアミン基の例としては、置換もしくは非置換のモノアリールアミン基、または置換もしくは非置換のジアリールアミン基がある。前記アリールアミン基中のアリール基は、単環式アリール基であってもよく、多環式アリール基であってもよい。前記アリール基が2以上を含むアリールアミン基は、単環式アリール基、多環式アリール基、または単環式アリール基と多環式アリール基を同時に含んでもよい。

40

【0049】

アリールアミン基の具体例としては、フェニルアミン、ナフチルアミン、ビフェニルアミン、アントラセニルアミン、3-メチル-フェニルアミン、4-メチル-ナフチルアミン、2-メチル-ビフェニルアミン、9-メチル-アントラセニルアミン、ジフェニルアミン基、フェニルナフチルアミン基、ジトリルアミン基、フェニルトリルアミン基、カルバゾール、およびトリフェニルアミン基などがあるが、これらに限定されるものではない。

50

【 0 0 5 0 】

本明細書において、ヘテロアリールアミン基中のヘテロアリール基は、前述したヘテロ環基の例示の中から選択されてもよい。

【 0 0 5 1 】

本明細書において、アリールオキシ基、アリールチオキシ基、アリールスルホキシ基、およびアラルキルアミン基中のアリール基は、前述したアリール基の例示の通りである。具体的には、アリールオキシ基としては、フェノキシ、p - トリルオキシ、m - トリルオキシ、3, 5 - ジメチル - フェノキシ、2, 4, 6 - トリメチルフェノキシ、p - t e r t - ブチルフェノキシ、3 - ビフェニルオキシ、4 - ビフェニルオキシ、1 - ナフチルオキシ、2 - ナフチルオキシ、4 - メチル - 1 - ナフチルオキシ、5 - メチル - 2 - ナフチルオキシ、1 - アントリルオキシ、2 - アントリルオキシ、9 - アントリルオキシ、1 - フェナントリルオキシ、3 - フェナントリルオキシ、9 - フェナントリルオキシなどがあり、アリールチオキシ基としては、フェニルチオキシ基、2 - メチルフェニルチオキシ基、4 - t e r t - ブチルフェニルチオキシ基などがあり、アリールスルホキシ基としては、ベンゼンスルホキシ基、p - トルエンズルホキシ基などがあるが、これらに限定されない。

10

【 0 0 5 2 】

本明細書において、アルキルチオキシ基、アルキルスルホキシ基中のアルキル基は、前述したアルキル基の例示の通りである。具体的には、アルキルチオキシ基としては、メチルチオキシ基、エチルチオキシ基、t e r t - ブチルチオキシ基、ヘキシルチオキシ基、オクチルチオキシ基などがあり、アルキルスルホキシ基としては、メチルスルホキシ基、エチルスルホキシ基、プロピルスルホキシ基、ブチルスルホキシ基などがあるが、これらに限定されない。

20

【 0 0 5 3 】

本明細書において、隣接した基が互いに結合して形成される置換もしくは非置換の環において、「環」は、置換もしくは非置換の炭化水素環；または置換もしくは非置換のヘテロ環を意味する。

【 0 0 5 4 】

本明細書において、炭化水素環は、芳香族、脂肪族、または芳香族と脂肪族との縮合環であってもよいし、前記1価でないものを除き、前記シクロアルキル基またはアリール基の例示の中から選択されてもよい。

30

【 0 0 5 5 】

本明細書において、芳香族環は、単環もしくは多環であってもよいし、1価でないものを除き、前記アリール基の例示の中から選択されてもよい。

【 0 0 5 6 】

本明細書において、ヘテロ環は、炭素でない原子、異種原子を1以上含むものであって、具体的には、前記異種原子は、O、N、S e、およびSなどからなる群より選択される原子を1以上含むことができる。前記ヘテロ環は、単環もしくは多環であってもよいし、芳香族、脂肪族、または芳香族と脂肪族との縮合環であってもよいし、1価でないものを除き、前記ヘテロアリール基またはヘテロ環基の例示の中から選択されてもよい。

40

【 0 0 5 7 】

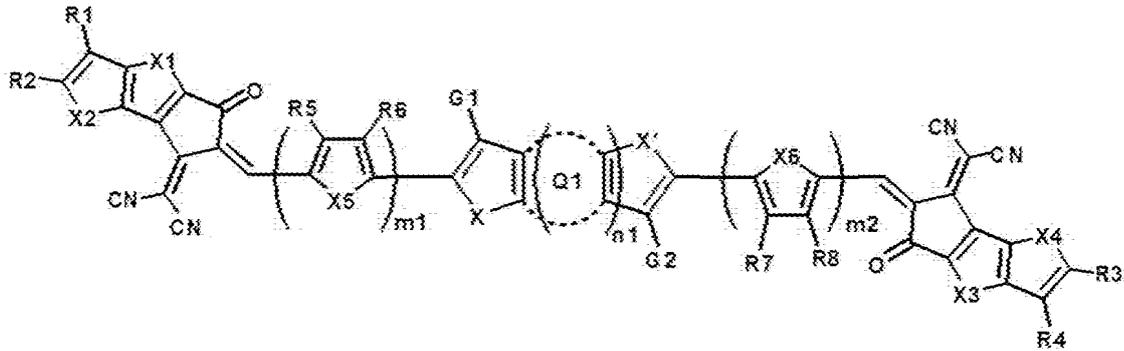
本明細書の一実施態様によれば、前記Q 1およびQ 2は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換の芳香族環；または置換もしくは非置換のヘテロ環である。

【 0 0 5 8 】

本明細書の一実施態様によれば、前記化学式1は、化学式1 - 1 ~ 1 - 3のうちのいずれか1つで表される。

[化学式 1 - 1]

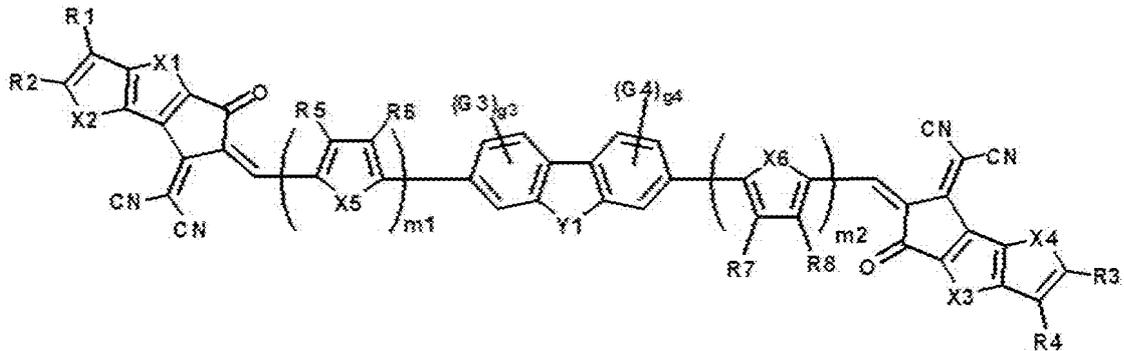
【化 9】



10

[化学式 1 - 2]

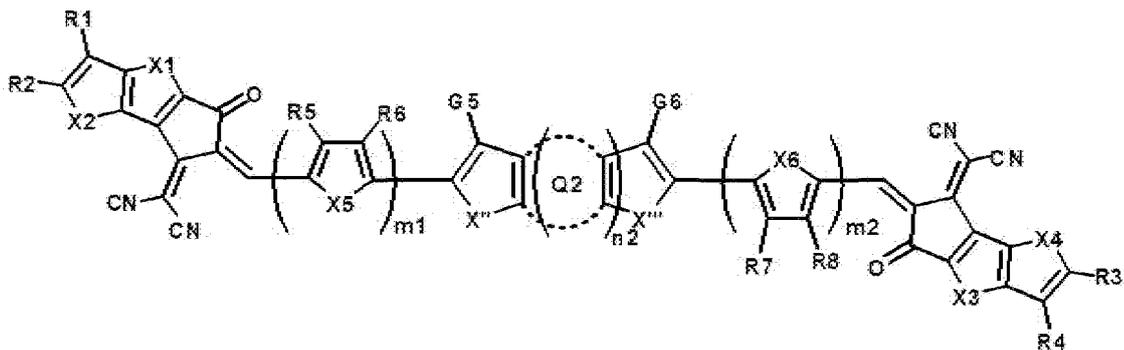
【化 10】



20

[化学式 1 - 3]

【化 11】



30

前記化学式 1 - 1 ~ 1 - 3 において、

X 1 ~ X 4、R 1 ~ R 8、m 1 および m 2 の定義は、前記化学式 1 で定義したものと
 同じであり、

Q 1、X、X'、n 1、G 1 および G 2 の定義は、前記化学式 A で定義したものと
 同じであり、

40

Y 1、G 3、G 4、g 3 および g 4 の定義は、前記化学式 B で定義したものと
 同じであり、

Q 2、X''、X'''、n 2、G 5 および G 6 の定義は、前記化学式 C で定義したものと
 同じである。

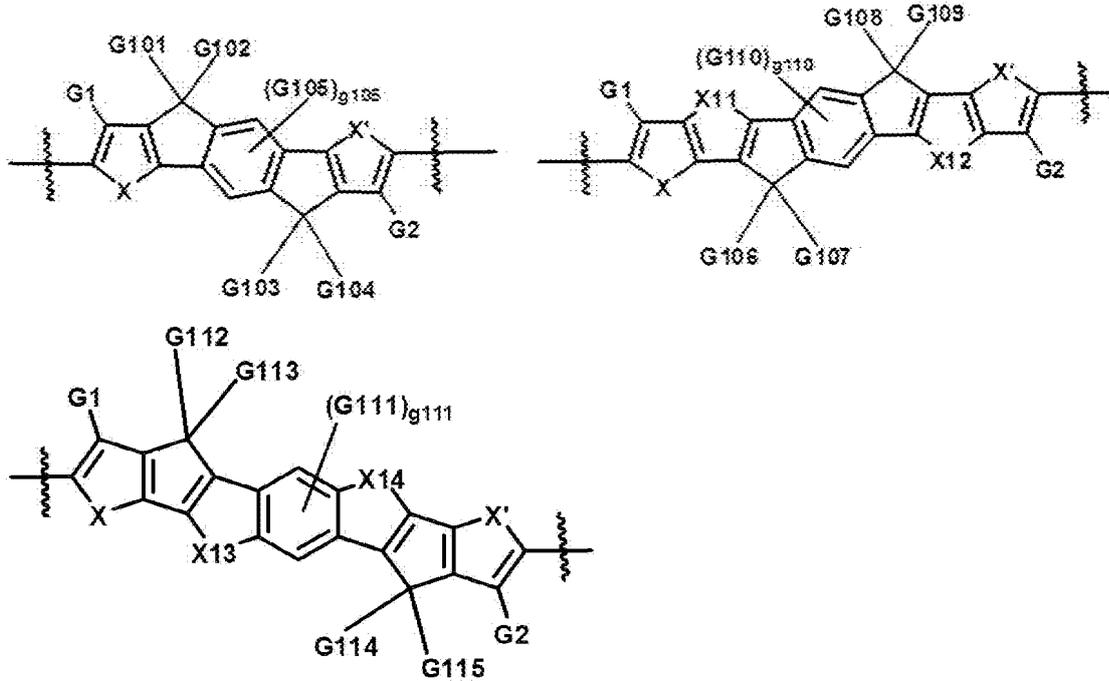
【0059】

本明細書の一実施態様によれば、前記化学式 A において、n 1 は、2 ~ 5 の整数で
 ある。

【0060】

本明細書の一実施態様によれば、前記化学式 A は、下記構造の中から選択され
 る。

【化 1 2】



10

20

前記構造において、

X、X'、G1およびG2の定義は、前記化学式Aで定義したものと同一であり、

X11~X14は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、SまたはSeであり、

G101~G115は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン基；ヒドロキシ基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のアルコキシ基；置換もしくは非置換のアリール基；または置換もしくは非置換のヘテロアリール基であり、

g105、g110およびg111は、それぞれ1または2であり、

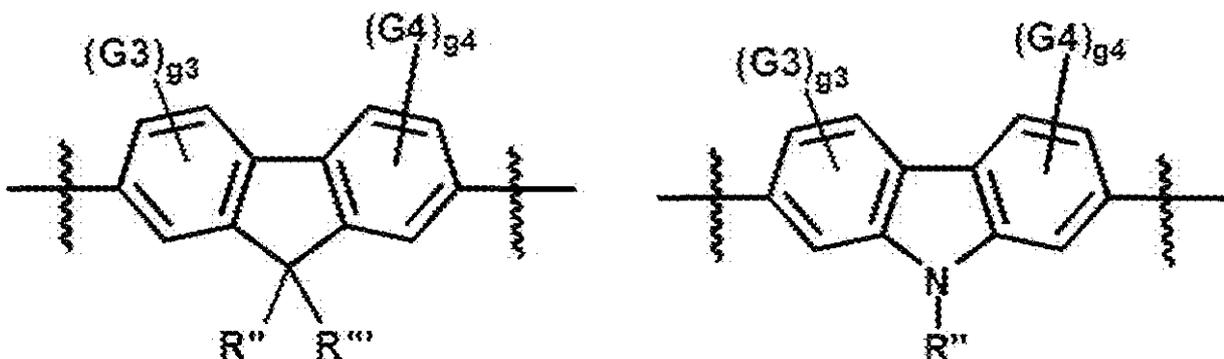
g105、g110およびg111がそれぞれ2の場合、2個の括弧内の構造は、互いに同一または異なる。

30

【0061】

本明細書の一実施態様によれば、前記化学式Bは、下記構造の中から選択される。

【化 1 3】



40

前記構造において、

G3、G4、g3およびg4の定義は、前記化学式Bで定義したものと同一であり、

R''およびR'''は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン基；ヒドロキシ基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のアルコキシ基；置換もしくは非置換のアリール基；または置換もしくは非置換のヘテロアリール基

50

である。

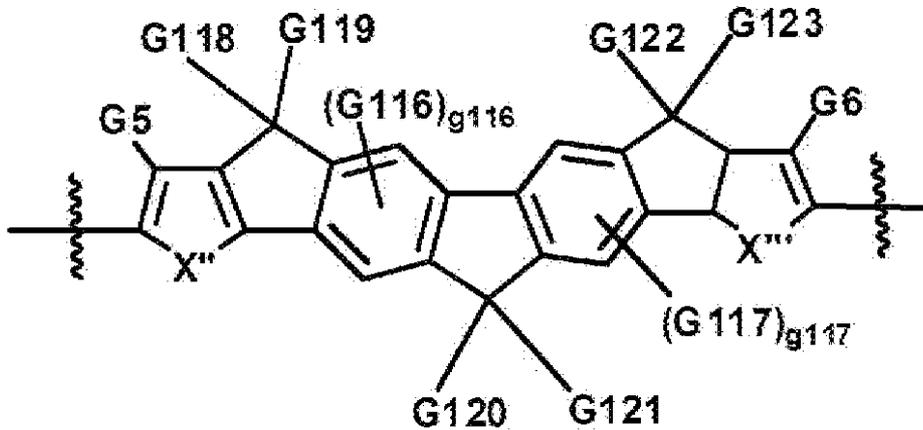
【0062】

本明細書の一実施態様によれば、前記化学式Cにおいて、 n_2 は、2～5の整数である。

【0063】

本明細書の一実施態様によれば、前記化学式Cは、下記構造で表される。

【化14】



10

20

前記構造において、

X'' 、 X''' 、G5およびG6の定義は、前記化学式Cで定義したものと同一であり、

G116～G123は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；重水素；ハロゲン基；ヒドロキシ基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のアルコキシ基；置換もしくは非置換のアリール基；または置換もしくは非置換のヘテロアリール基であり、

g116およびg117は、それぞれ1または2であり、

g116およびg117がそれぞれ2の場合、2個の括弧内の構造は、互いに同一または異なる。

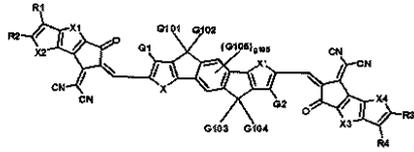
30

【0064】

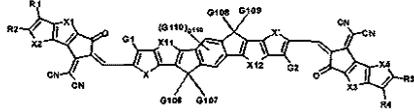
本明細書の一実施態様によれば、前記化学式1は、下記化学式1-4～1-15のうちのいずれか1つで表される。

【化 1 5】

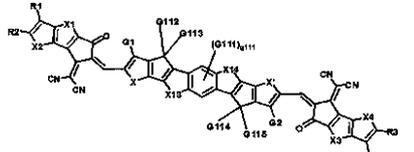
[化学式 1-4]



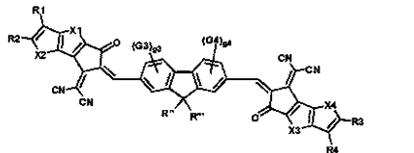
[化学式 1-5]



[化学式 1-6]

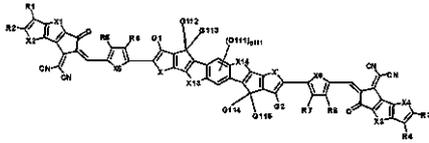


[化学式 1-7]

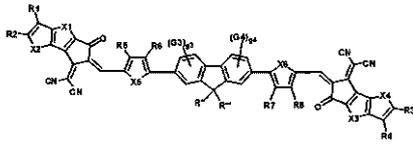


【化 17】

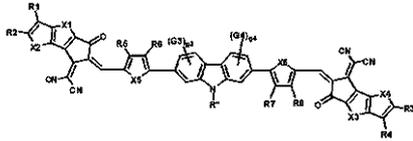
〔化学式 1-12〕



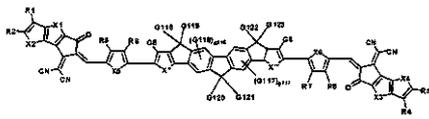
〔化学式 1-13〕



〔化学式 1-14〕



〔化学式 1-15〕



前記化学式 1 - 4 ~ 1 - 15 において、
 X 1 ~ X 4 および R 1 ~ R 8 の定義は、前記化学式 1 で定義したものと同一であり、
 X、X'、G 1 および G 2 の定義は、前記化学式 A で定義したものと同一であり、
 G 3、G 4、g 3 および g 4 の定義は、前記化学式 B で定義したものと同一であり、
 X''、X'''、G 5 および G 6 の定義は、前記化学式 C で定義したものと同一であり、
 X 1 1 ~ X 1 4 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、S または S e であり、
 G 1 0 1 ~ G 1 2 3、R'' および R''' は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、
 水素；重水素；ハロゲン基；ヒドロキシ基；置換もしくは非置換のアルキル基；置換もしくは非置換のアルコキシ基；置換もしくは非置換のアリール基；または置換もしくは非置換のヘテロアリール基であり、

g 1 0 5、g 1 1 0、g 1 1 1、g 1 1 6 および g 1 1 7 は、それぞれ 1 または 2 であり、

g 1 0 5、g 1 1 0、g 1 1 1、g 1 1 6 および g 1 1 7 がそれぞれ 2 の場合、2 個の括弧内の構造は、互いに同一または異なる。

【0065】

本明細書の一実施態様によれば、前記 Q 1 および Q 2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換のベンゼン環；置換もしくは非置換のチオフェン環；置換もしくは非置換のフルオレン環；置換もしくは非置換のシクロペンタジエン環；または置換もしくは非置換のインデン環である。

【0066】

本明細書の一実施態様によれば、前記 Q 1 および Q 2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、ハロゲン基、アルキル基、およびチオアルコキシ基からなる群より選択される 1 以上で置換されたヘテロアリール基で置換もしくは非置換のベンゼン環；チオフェン環；アルキル基で置換されたフルオレン環；アルキル基で置換されたシクロペンタジエン環；アルキル基で置換されたインデン環；アルキル基で置換されたアリール基で置換されたシクロペンタジエン環；アルキル基で置換されたヘテロアリール基で置換されたシクロペンタジエン環；アルキル基で置換されたアリール基で置換されたインデン環；またはアルキル基で置換されたヘテロアリール基で置換されたインデン環である。

【0067】

本明細書の一実施態様によれば、前記 Q 1 および Q 2 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、ベンゼン環；フッ素および 2 - エチルヘキシル基で置換されたチオフェン

10

20

30

40

50

基で置換されたベンゼン環；2 - エチルヘキシル基で置換されたチオフェン基で置換されたベンゼン環；2 - エチルヘキシルチオキシ基で置換されたチオフェン基で置換されたベンゼン環；チオフェン環；n - オクチル基で置換されたフルオレン環；n - オクチル基で置換されたシクロペンタジエン環；n - オクチル基で置換されたインデン環；n - ヘキシル基で置換されたフェニル基で置換されたシクロペンタジエン環；n - ヘキシル基で置換されたチオフェン基で置換されたシクロペンタジエン環；n - ヘキシル基で置換されたフェニル基で置換されたインデン環；またはn - ヘキシル基で置換されたチオフェン基で置換されたインデン環である。

【0068】

本明細書の一実施態様によれば、前記 X 1 ~ X 4、X、X'、X''、X''' および X 1 1 ~ X 1 4 は、S である。

10

【0069】

本明細書の一実施態様によれば、前記 R 5 ~ R 8 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、水素；置換もしくは非置換のアルキル基；または置換もしくは非置換のアルコキシ基である。

【0070】

本明細書の一実施態様によれば、前記 R 1 ~ R 5、R 8、G 1、G 2、G 5 および G 6 は、水素である。

【0071】

本明細書の一実施態様によれば、前記 R 6 および R 7 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換のアルキル基；または置換もしくは非置換のアルコキシ基である。

20

【0072】

本明細書の一実施態様によれば、前記 R 6 および R 7 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、アルキル基；またはアルコキシ基である。

【0073】

本明細書の一実施態様によれば、前記 R 6 および R 7 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、2 - エチルヘキシル基；または2 - エチルヘキシルオキシ基である。

【0074】

本明細書の一実施態様によれば、前記 G 1 0 5、G 1 1 0、G 1 1 6 および G 1 1 7 は、水素である。

30

【0075】

本明細書の一実施態様によれば、前記 G 1 0 1 ~ G 1 0 4、G 1 0 6 ~ G 1 0 9、G 1 1 1 ~ G 1 1 5、G 1 1 8、G 1 1 9、G 1 2 2 および G 1 2 3 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換のアリール基；または置換もしくは非置換のヘテロアリール基である。

【0076】

本明細書の一実施態様によれば、前記 G 1 0 1 ~ G 1 0 4、G 1 0 6 ~ G 1 0 9、G 1 1 1 ~ G 1 1 5、G 1 1 8、G 1 1 9、G 1 2 2 および G 1 2 3 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換のフェニル基；または置換もしくは非置換のチオフェン基である。

40

【0077】

本明細書の一実施態様によれば、前記 G 1 0 1 ~ G 1 0 4、G 1 0 6 ~ G 1 0 9、G 1 1 1 ~ G 1 1 5、G 1 1 8、G 1 1 9、G 1 2 2 および G 1 2 3 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、アルキル基で置換もしくは非置換のフェニル基；アルキル基、またはチオアルコキシ基で置換もしくは非置換のチオフェン基；またはハロゲン基およびアルキル基で置換もしくは非置換のチオフェン基である。

【0078】

本明細書の一実施態様によれば、前記 G 1 0 1 ~ G 1 0 4、G 1 0 6 ~ G 1 0 9、G 1 1 1 ~ G 1 1 5、G 1 1 8、G 1 1 9、G 1 2 2 および G 1 2 3 は、互いに同一または異

50

なり、それぞれ独立に、*n* - ヘキシル基で置換もしくは非置換のフェニル基；2 - エチルヘキシル基で置換もしくは非置換のフェニル基；*n* - ヘキシル基で置換もしくは非置換のチオフェン基；2 - エチルヘキシル基で置換もしくは非置換のチオフェン基；2 - エチルヘキシルチオキシ基で置換もしくは非置換のチオフェン基；またはフッ素および2 - エチルヘキシル基で置換もしくは非置換のチオフェン基である。

【0079】

本明細書の一実施態様によれば、前記G101～G104、G106～G109、G111～G115、G118、G119、G122およびG123は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、フェニル基；*n* - ヘキシル基で置換されたフェニル基；2 - エチルヘキシル基で置換されたフェニル基；チオフェン基；*n* - ヘキシル基で置換されたチオフェン基；2 - エチルヘキシル基で置換されたチオフェン基；2 - エチルヘキシルチオキシ基で置換されたチオフェン基；またはフッ素および2 - エチルヘキシル基で置換されたチオフェン基である。

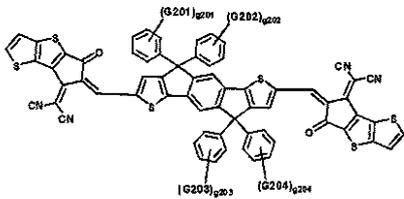
10

【0080】

本明細書の一実施態様によれば、前記化学式1は、下記化学式1-16～1-29のうちのいずれか1つで表される。

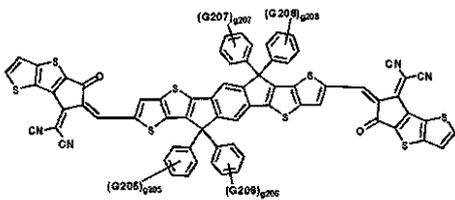
【化18】

【化学式 1-16】

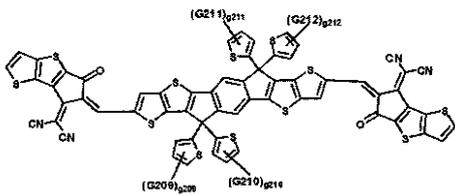


20

【化学式 1-17】



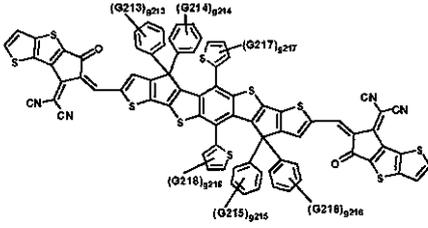
【化学式 1-18】



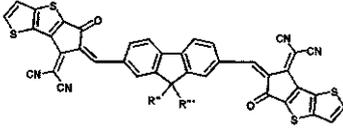
30

【化 1 9】

[化学式 1-19]

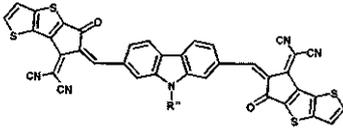


[化学式 1-20]

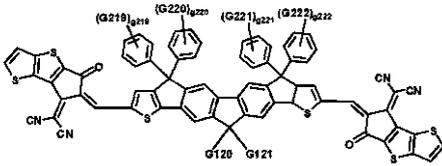


10

[化学式 1-21]



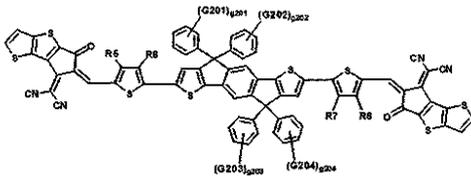
[化学式 1-22]



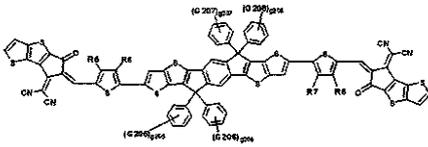
20

【化 2 0】

[化学式 1-23]

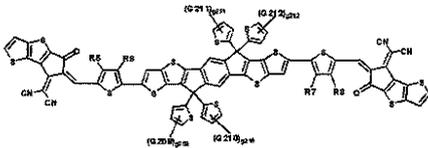


[化学式 1-24]



30

[化学式 1-25]



本明細書の一実施態様によれば、前記 g 2 0 1 ~ g 2 2 2 がそれぞれ 1 の場合、括弧内の構造は、n - ヘキシル基；2 - エチルヘキシル基；または 2 - エチルヘキシルチオキシ基であり、g 2 0 1 ~ g 2 2 2 がそれぞれ 2 以上の場合、2 以上の括弧内の構造のうち少なくとも 1 つは、フッ素；n - ヘキシル基；2 - エチルヘキシル基；または 2 - エチルヘキシルチオキシ基であり、残りは、水素である。

【0086】

本明細書の一実施態様によれば、前記 G 2 0 1 ~ G 2 2 2 は、n - ヘキシル基である。

【0087】

本明細書の一実施態様によれば、前記 G 2 0 1 ~ G 2 2 2 は、2 - エチルヘキシル基である。

10

【0088】

本明細書の一実施態様によれば、前記 G 2 0 1 ~ G 2 2 2 は、2 - エチルヘキシルチオキシである。

【0089】

本明細書の一実施態様によれば、前記 g 2 0 1 ~ g 2 2 2 がそれぞれ 1 の場合、括弧内の構造は、n - ヘキシル基であり、g 2 0 1 ~ g 2 2 2 がそれぞれ 2 以上の場合、2 以上の括弧内の構造のうち少なくとも 1 つは、n - ヘキシル基であり、残りは、水素である。

【0090】

本明細書の一実施態様によれば、前記 g 2 0 1 ~ g 2 2 2 がそれぞれ 1 の場合、括弧内の構造は、2 - エチルヘキシル基であり、g 2 0 1 ~ g 2 2 2 がそれぞれ 2 以上の場合、2 以上の括弧内の構造のうち少なくとも 1 つは、2 - エチルヘキシル基であり、残りは、水素である。

20

【0091】

本明細書の一実施態様によれば、前記 g 2 0 1 ~ g 2 2 2 がそれぞれ 1 の場合、括弧内の構造は、2 - エチルヘキシルチオキシ基であり、g 2 0 1 ~ g 2 2 2 がそれぞれ 2 以上の場合、2 以上の括弧内の構造のうち少なくとも 1 つは、2 - エチルヘキシルチオキシ基であり、残りは、水素である。

【0092】

本明細書の一実施態様によれば、前記 g 2 1 7 が 2 の場合、G 2 1 7 は、フッ素および 2 - エチルヘキシル基である。

30

【0093】

本明細書の一実施態様によれば、前記 g 2 1 8 が 2 の場合、G 2 1 8 は、フッ素および 2 - エチルヘキシル基である。

【0094】

本明細書の一実施態様によれば、前記 G 1 2 0 および G 1 2 1 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、置換もしくは非置換のアルキル基である。

【0095】

本明細書の一実施態様によれば、前記 G 1 2 0 および G 1 2 1 は、互いに同一または異なり、それぞれ独立に、直鎖もしくは分枝鎖のアルキル基である。

40

【0096】

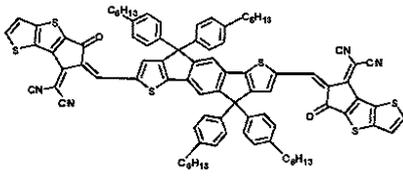
本明細書の一実施態様によれば、前記 G 1 2 0 および G 1 2 1 は、n - オクチル基である。

【0097】

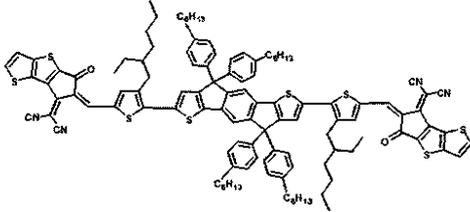
本明細書の一実施態様によれば、前記化学式 1 は、下記化合物の中から選択される。

【化 2 2】

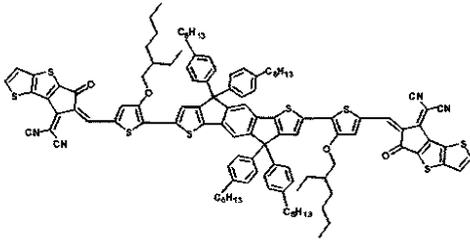
[化合物 1]



[化合物 2]



[化合物 3]

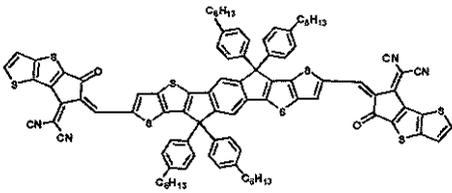


10

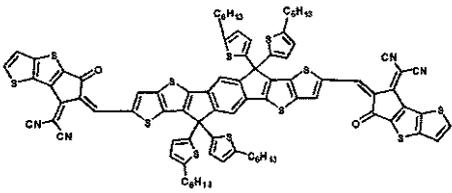
20

【化 2 3】

[化合物 4]



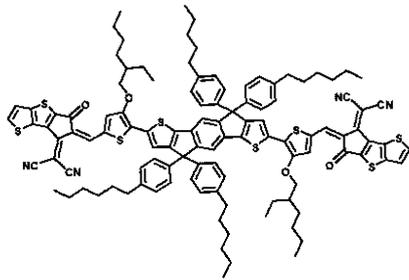
[化合物 5]



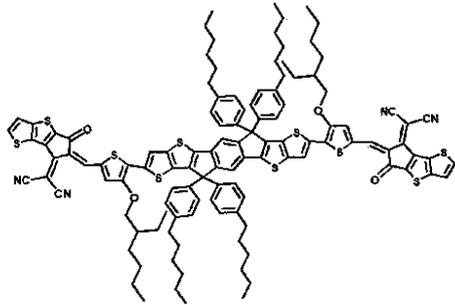
30

【化 2 4】

[化合物 6]



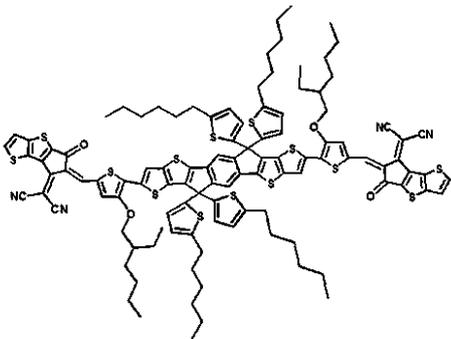
[化合物 7]



10

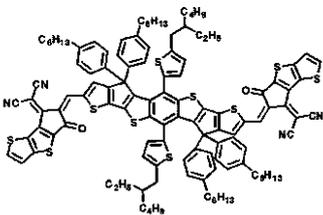
【化 2 5】

[化合物 8]



20

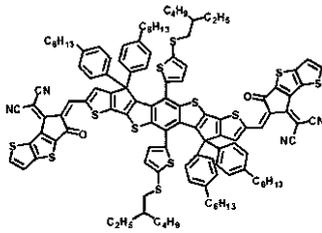
[化合物 9]



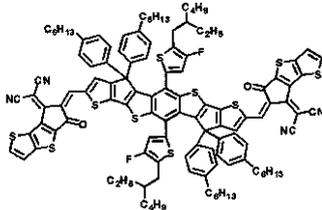
30

【化 2 6】

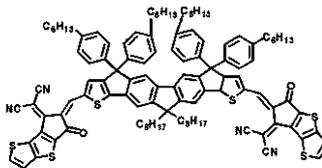
[化合物 10]



[化合物 11]



[化合物 12]



10

20

【 0 0 9 8 】

本明細書の一実施態様によれば、前記ヘテロ環化合物は、300 nm ~ 1000 nmで最大吸収波長を有し、前記最大吸収波長範囲を有する場合、前記ヘテロ環化合物は、NIR (near infrared) 領域の光を吸収して、NIR (near infrared) 有機光電素子の光活性層の材料として使用できる。

【 0 0 9 9 】

本明細書の一実施態様によれば、前記ヘテロ環化合物は、フィルム状態において100 nm ~ 1000 nmの半値幅を有する吸光曲線を示す。

【 0 1 0 0 】

本明細書の実施態様に係るヘテロ環化合物は、前記範囲の半値幅を有するので、可視光線およびNIR (near infrared) 領域帯の光を吸収する効果がある。

30

【 0 1 0 1 】

本明細書において、「フィルム状態」というのは、溶液状態ではなく、前記化学式1で表される化合物単独で、または半値幅、量子効率を測定するのに影響を及ぼさない他の成分と混合してフィルム形態で製造した状態を意味する。

【 0 1 0 2 】

本明細書において、前記半値幅は、前記化学式1で表されるヘテロ環化合物から発光した光の最大発光ピークにおける最大高さの半分の時の発光ピークの幅を意味する。

【 0 1 0 3 】

本明細書の一実施態様によれば、前記ヘテロ環化合物は、4 eV ~ 7 eVのLUMOエネルギー準位を有することができ、1 eV ~ 3 eVのバンドギャップ (band gap) を有する。前記範囲のLUMOレベルおよびエネルギーバンドギャップを有することにより、NIR (near infrared) 領域帯で光を効果的に吸収するn型有機物層に適用可能であり、それによって高い外部量子効率 (external quantum efficiency、EQE) を有することができ、有機電子素子の光電変換効率を改善することができる。

40

【 0 1 0 4 】

本明細書の一実施態様によれば、第1電極と、前記第1電極に対向して備えられる第2電極と、前記第1電極と第2電極との間に備えられる1層以上の有機物層とを含む有機電子素子であって、前記有機物層のうちの1層以上は、前記ヘテロ環化合物を含むものであ

50

る有機電子素子を提供する。

【0105】

本明細書の一実施形態に係る有機電子素子は、第1電極、光活性層、および第2電極を含む。前記有機電子素子は、基板、正孔輸送層、および/または電子輸送層がさらに含まれてもよい。

【0106】

図1は、本明細書の一実施態様に係る有機電子素子100を示す図であり、図1によれば、有機電子素子100は、第1電極10および/または第2電極20側から光が入射して、光活性層30が全波長領域の光を吸収すると内部でエキシトンが生成される。エキシトンは、光活性層30で正孔と電子に分離され、分離された正孔は、第1電極10および第2電極20のうちの一つであるアノード側に移動し、分離された電子は、第1電極10および第2電極20のうち他の一つであるカソード側に移動して有機電子素子に電流が流れるようになる。

10

【0107】

本明細書の一実施態様によれば、前記有機電子素子は、付加的な有機物層をさらに含んでもよい。前記有機電子素子は、様々な機能を同時に有する有機物を用いて有機物層の数を減少させることができる。

【0108】

本明細書の一実施態様によれば、前記第1電極は、アノードであり、前記第2電極は、カソードである。もう一つの実施態様において、前記第1電極は、カソードであり、前記第2電極は、アノードである。

20

【0109】

本明細書の一実施態様によれば、有機電子素子は、カソード、光活性層、およびアノードの順に配列されてもよく、アノード、光活性層、およびカソードの順に配列されてもよいが、これに限定されない。

【0110】

もう一つの実施態様において、前記有機電子素子は、アノード、正孔輸送層、光活性層、電子輸送層、およびカソードの順に配列されてもよく、カソード、電子輸送層、光活性層、正孔輸送層、およびアノードの順に配列されてもよいが、これに限定されない。

【0111】

本明細書の一実施態様によれば、前記有機電子素子は、ノーマル(Normal)構造である。前記ノーマル構造において、基板、アノード、光活性層を含む有機物層およびカソードの順に積層されてもよい。

30

【0112】

本明細書の一実施態様によれば、前記有機電子素子は、インバーテッド(Inverted)構造である。前記インバーテッド構造では、基板、カソード、光活性層を含む有機物層およびアノードの順に積層されてもよい。

【0113】

本明細書の一実施態様によれば、前記有機電子素子は、タンデム(tandem)構造である。

40

【0114】

本明細書の一実施態様に係る有機電子素子は、光活性層が1層または2層以上であってもよい。前記タンデム構造では、光活性層を2以上含むことができる。

【0115】

もう一つの実施態様において、バッファ層が、光活性層と正孔輸送層との間、または光活性層と電子輸送層との間に備えられてもよい。この時、正孔注入層が、アノードと正孔輸送層との間にさらに備えられてもよい。また、電子注入層が、カソードと電子輸送層との間にさらに備えられてもよい。

【0116】

本明細書の一実施態様によれば、前記光活性層は、電子供与体物質および電子受容体物

50

質を含み、前記電子受容体物質は、前記ヘテロ環化合物を含む。

【0117】

本明細書の一実施態様によれば、前記有機電子素子が外部光源から光子を受けると、電子供与体と電子受容体との間で電子と正孔が発生する。発生した正孔は、電子ドナー層を介して陽極に輸送される。

【0118】

また、前記化学式1で表されるヘテロ環化合物を光活性層のn型有機物層(電子受容体物質)として用いる有機電子素子は、可視光線領域で最大吸収波長を有する大部分のp型有機物質(電子供与体物質)に対して適用可能であるが、これにのみ限定されるものではない。

10

【0119】

本明細書の一実施態様によれば、前記電子供与体物質は、当技術分野で適用される物質を使用することができ、例えば、ポリ3-ヘキシルチオフェン(P3HT: poly 3-hexyl thiophene)、PCDTBT (poly [N-9'-heptadecanyl-2,7-carbazole-alt-5,5-(4'-7'-di-2-thienyl-2',1',3'-benzothiadiazole)])、PCPD TBT (poly [2,6-(4,4-bis-(2-ethylhexyl)-4H-cyclopenta[2,1-b;3,4-b']dithiophene)-alt-4,7-(2,1,3-benzothiadiazole)])、PFO-DBT (poly [2,7-(9,9-dioctyl-fluorene)-alt-5,5-(4,7-di-2-thienyl-2,1,3-benzothiadiazole)])、PTB7 (あるいはPTB7-Th) (Poly [[4,8-bis[(2-ethylhexyl)oxy]benzo[1,2-b:4,5-b']dithiophene-2,6-diyl][3-fluoro-2-[(2-ethylhexyl)carbonyl]thieno[3,4-b]thiophenediyl]])、PSiF-DBT (Poly [2,7-(9,9-dioctyl-dibenzosilole)-alt-4,7-bis(thiophen-2-yl)benzo-2,1,3-thiadiazole])、poly (benzodithiophene-benzotriazole) (PBDB-T) からなる群より選択される1種以上の物質を含むことができる。

20

30

【0120】

本明細書の一実施態様によれば、前記光活性層は、電子供与体物質および電子受容体物質を含み、1:99~99:1の重量比で含む。

【0121】

明細書の一実施態様によれば、前記光活性層は、電子供与体物質および電子受容体物質を含み、1:5~5:1の重量比で含む。

【0122】

本明細書の一実施態様によれば、前記電子供与体および電子受容体は、バルクヘテロジャンクション(BHJ)を構成する。

【0123】

バルクヘテロジャンクションとは、光活性層で電子供与体物質と電子受容体物質が互いに混ざり合っていることを意味する。

40

【0124】

本明細書の一実施態様において、前記光活性層は、添加剤をさらに含む。

【0125】

本明細書の一実施態様において、前記添加剤の分子量は、50 g/mol ~ 1000 g/molである。

【0126】

もう一つの実施態様において、前記添加剤の沸点は、30 ~ 300 の有機物である。

50

【0127】

本明細書において、有機物とは、炭素原子を少なくとも1以上含む物質を意味する。

【0128】

一つの実施態様において、前記添加剤は、1,8-ジヨードオクタン(DIO: 1,8-diodooctane)、1-クロロナフタレン(1-CN: 1-chloronaphthalene)、ジフェニルエーテル(DPE: diphenylether)、オクタンジチオール(octane dithiol)、およびテトラブロモチオフェン(tetrabromothiophene)からなる群より選択される添加剤のうち、の1または2種の添加剤をさらに含んでもよい。

【0129】

本明細書の一実施態様によれば、前記光活性層は、n型有機物層およびp型有機物層を含む2層薄膜(bilayer)構造であり、前記n型有機物層は、前記ヘテロ環化合物を含む。

10

【0130】

本明細書において、前記基板は、透明性、表面平滑性、取り扱い容易性および防水性に優れたガラス基板または透明プラスチック基板になってもよいが、これに限定されず、有機電子素子に通常使用される基板であれば制限はない。具体的には、ガラスまたはPET(polyethylene terephthalate)、PEN(polyethylene naphthalate)、PP(polypropylene)、PI(polyimide)、TAC(triacetyl cellulose)などがあるが、これらに限定されるものではない。

20

【0131】

前記アノード電極は、透明で導電性の優れた物質になってもよいが、これに限定されない。バナジウム、クロム、銅、亜鉛、金のような金属、またはこれらの合金；亜鉛酸化物、インジウム酸化物、インジウムスズ酸化物(ITO)、インジウム亜鉛酸化物(IZO)のような金属酸化物；ZnO:AlまたはSnO₂:Sbのような金属と酸化物との組み合わせ；およびポリ(3-メチルチオフェン)、ポリ[3,4-(エチレン-1,2-ジオキシ)チオフェン](PEDOT)、ポリピロールおよびポリアニリンのような導電性高分子などがあるが、これらにのみ限定されるものではない。

30

【0132】

前記アノード電極の形成方法は特に限定されないが、例えば、スパッタリング、E-ビーム、熱蒸着、スピコーティング、スクリーンプリンティング、インクジェットプリンティング、ドクターブレード、またはグラビアプリンティング法を用いて、基板の一面に塗布されるか、フィルム形態でコーティングされることにより形成される。

【0133】

前記アノード電極を基板上に形成する場合、これは、洗浄、水分除去および親水性改質過程を経ることができる。

【0134】

例えば、パターンニングされたITO基板を、洗浄剤、アセトン、イソプロピルアルコール(IPA)で順次に洗浄した後、水分除去のために、加熱板で100~150で1~30分間、好ましくは、120で10分間乾燥し、基板が完全に洗浄されると、基板の表面を親水性に改質する。

40

【0135】

前記のような表面改質により接合表面電位を光活性層の表面電位に適した水準に維持することができる。また、改質時、アノード電極上に高分子薄膜の形成が容易になり、薄膜の品質が向上することもできる。

【0136】

アノード電極のための前処理技術としては、a)平行平板型放電を利用した表面酸化法、b)真空状態でUV紫外線を用いて生成されたオゾンにより表面を酸化する方法、およびc)プラズマによって生成された酸素ラジカルを用いて酸化する方法などがある。

50

【0137】

アノード電極または基板の状態によって前記方法のうちの1つを選択することができる。ただし、どの方法を利用しても共通してアノード電極または基板表面の酸素離脱を防止し、水分および有機物の残留を最大限に抑制することが好ましい。この時、前処理の実質的な効果を極大化することができる。

【0138】

具体例として、UVを用いて生成されたオゾンにより表面を酸化する方法を使用することができる。この時、超音波洗浄後、パターニングされたITO基板を加熱板(hot plate)でベーク(baking)してよく乾燥させた後、チャンバに投入し、UVランプを作用させて、酸素ガスがUV光と反応して発生するオゾンによってパターニングされたITO基板を洗浄することができる。

10

【0139】

しかし、本明細書におけるパターニングされたITO基板の表面改質方法は特に限定させる必要はなく、基板を酸化させる方法であればいずれの方法でも構わない。

【0140】

前記カソード電極は、仕事関数の小さい金属になってもよいが、これに限定されない。具体的には、マグネシウム、カルシウム、ナトリウム、カリウム、チタン、インジウム、イットリウム、リチウム、ガドリニウム、アルミニウム、銀、スズおよび鉛のような金属、またはこれらの合金；またはLiF/Al、LiO₂/Al、LiF/Fe、Al:Li、Al:BaF₂、Al:BaF₂:Baのような多層構造の物質になってもよいが、これに限定されるものではない。

20

【0141】

前記カソード電極は、 5×10^{-7} torr以下の真空度を示す熱蒸着器の内部で蒸着されて形成されてもよいが、この方法にのみ限定されるものではない。

【0142】

前記正孔輸送層および/または電子輸送層物質は、光活性層で分離された電子と正孔を電極に効率的に伝達させる役割を担い、物質を特に制限しない。

【0143】

前記正孔輸送層物質は、PEDOT:PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)doped with poly(styrenesulfonic acid))、モリブデン酸化物(MoO_x)；バナジウム酸化物(V₂O₅)；ニッケル酸化物(NiO)；およびタングステン酸化物(WO_x)などになってもよいが、これらにのみ限定されるものではない。

30

【0144】

前記電子輸送層物質は、電子抽出金属酸化物(electron-extracting metal oxides)になってもよいし、具体的には、8-ヒドロキシキノリンの金属錯体；Alq₃を含む錯体；Liqを含む金属錯体；LiF；Ca；チタン酸化物(TiO_x)；亜鉛酸化物(ZnO)；およびセシウムカーボネート(Cs₂CO₃)などになってもよいが、これらにのみ限定されるものではない。

40

【0145】

光活性層は、電子供与体および/または電子受容体のような光活性物質を有機溶媒に溶解させた後、溶液をスピンコーティング、ディップコーティング、スクリーンプリンティング、スプレーコーティング、ドクターブレード、ブラシペインティングなどの方法で形成することができるが、これらの方法にのみ限定されるものではない。

【0146】

本明細書の一実施態様によれば、前記有機電子素子は、有機光電素子、有機トランジスタ、有機太陽電池、および有機発光素子からなる群より選択される。

【0147】

本明細書の一実施態様によれば、前記有機電子素子は、有機太陽電池である。

【0148】

50

本明細書の一実施態様によれば、前記有機電子素子は、有機光電素子である。

【0149】

具体的には、本明細書の一実施態様に係る前記有機光電素子は、有機イメージセンサ、有機光検出器、有機光センサなどに適用可能であるが、これらに限定されるものではない。

【0150】

本明細書の一実施態様は、前記有機電子素子を含む有機イメージセンサを提供する。

【0151】

本明細書の一実施態様に係る有機イメージセンサは、電子装置に適用可能であり、例えば、スマートフォン、デジタルカメラなどに適用可能であるが、これらに限定されるものではない。

10

【実施例】

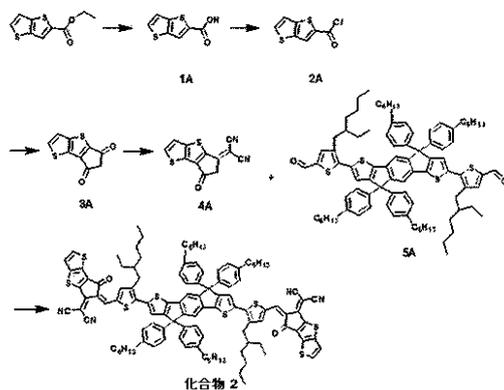
【0152】

前記ヘテロ環化合物の製造方法およびこれを含む有機電子素子の製造は、以下の製造例および実施例で具体的に説明する。しかし、下記の実施例は本明細書を例示するためのものであり、本明細書の範囲がこれらによって限定されるものではない。

【0153】

製造例1．化合物2の製造

【化27】



20

【0154】

1) 化合物1Aの製造

500 mLの丸いフラスコに、ethyl thieno[3,2-b]thiophene-2-carboxylate 21.39 gとテトラヒドロフラン200 mLを注入後、NaOH 8.39 g (1.5 eq)を蒸留水200 mLに溶かして注入した後、60 に温度を合わせた。その後、2時間還流させた後、1 M HCl水溶液により反応を終了後、生成された固体を蒸留水によりフィルタして化合物1Aを得た。[¹H NMR 500 MHz, CDCl₃] 8.095 (s, 1H), 7.653 (d, 1H), 7.323 (d, 1H)

【0155】

2) 化合物2Aの製造

500 mLの丸いフラスコに、化合物1A 1.00 gとクロロホルム200 mLを注入後、Thonyl chloride 15.76 mL (1.5 eq)をゆっくり注入した。その後、ジメチルホルムアミド触媒量の注入後、65 に温度を合わせて1時間還流させた。その後、溶媒を除去して化合物2Aを得た。[¹H NMR 500 MHz, CDCl₃] 8.096 (s, 1H), 7.742 (d, 1H), 7.308 (d, 1H)

40

【0156】

3) 化合物3Aの製造

500 mLの丸いフラスコに、アルミニウムクロライド 29.60 g (1.00 eq)とmalonyl dichloride 21.59 mL (4.5 eq)をジクロロメタ

50

ン 200 mL に入れた後、10 分間攪拌して活性させた。その後、化合物 2 A をジクロロメタン 50 mL に溶かしてゆっくり注入した後、60 で 12 時間還流させた。Oxalic acid 10% 水溶液により反応を終了後、ethyl acetate を用いて抽出した後、溶媒を除去して化合物 3 A を得た。[¹H NMR 500 MHz, CDCl₃] 7.843 (d, 1H), 7.447 (d, 1H), 3.512 (s, 2H)

【0157】

4) 化合物 4 A の製造

500 mL の丸いフラスコに、化合物 3 A を 1 g と sodium acetate 0.59 g (1.5 eq)、そして malononitrile 0.65 g (1.5 eq) をジメチルスルホキシド 100 mL に入れた後、1 時間常温で攪拌させた。その後、HCl 水溶液により酸性化させた後、生成された固体をフィルタ、カラムクロマトグラフィーにより化合物 4 A を得た。[¹H NMR 500 MHz, CDCl₃] 7.885 (d, 1H), 7.469 (d, 1H), 3.945 (s, 2H)

10

【0158】

5) 化合物 2 の製造

100 mL の丸いフラスコに、化合物 5 A 100 mg と化合物 4 A 75 mg (4 eq) をクロロホルム 50 mL に溶かした後、ピリジン 0.6 mL を注入した後、70 で 12 時間還流させた。クロロホルムを用いて抽出した後、溶媒を除去して化合物 2 を得た。

【0159】

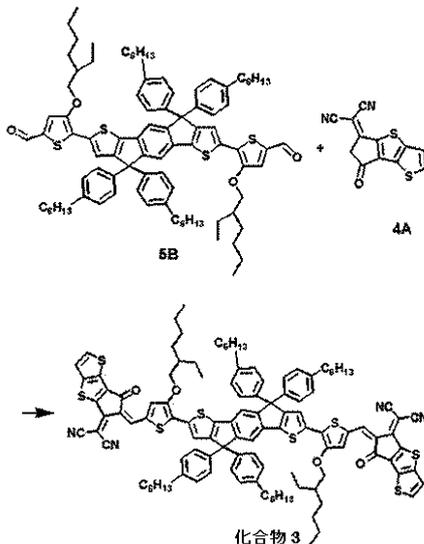
図 2 は、本明細書の一実施態様に係る化合物 2 の ¹H - NMR スペクトルを示す図である。

20

【0160】

製造例 2 . 化合物 3 の製造

【化 28】



30

100 mL の丸いフラスコに、化合物 5 B 500 mg と化合物 4 A 370 mg (4 eq) をクロロホルム 50 mL に溶かした後、ピリジン 0.6 mL を注入した後、70 で 12 時間還流させた。クロロホルムを用いて抽出した後、溶媒を除去して化合物 3 を得た。

40

【0161】

¹H NMR : 8.25 (s, 2H), 7.89 (d, 2H), 7.28 (s, 2H), 7.26 (s, 2H), 7.18 (m, 4H), 7.14 (d, 8H), 7.08 (d, 8H), 2.94 (d, 4H), 2.62 (t, 8H), 1.87 (m, 2H), 1.22 (m, 48H), 0.94 (m, 36H)

【0162】

比較例 1 - 1 . 有機太陽電池の製造

下記化合物 P B D B - T と下記比較例の化合物 1 (I E I C) とを 1 : 1 でクロロベン

50

ゼン (Chlorobenzene、CB) に溶かして複合溶液 (composit solution) を製造した。この時、濃度は 4 wt% に調節し、有機太陽電池は ITO / ZnO NP / 光活性層 / MoO₃ / Ag のインバーテッド構造にした。

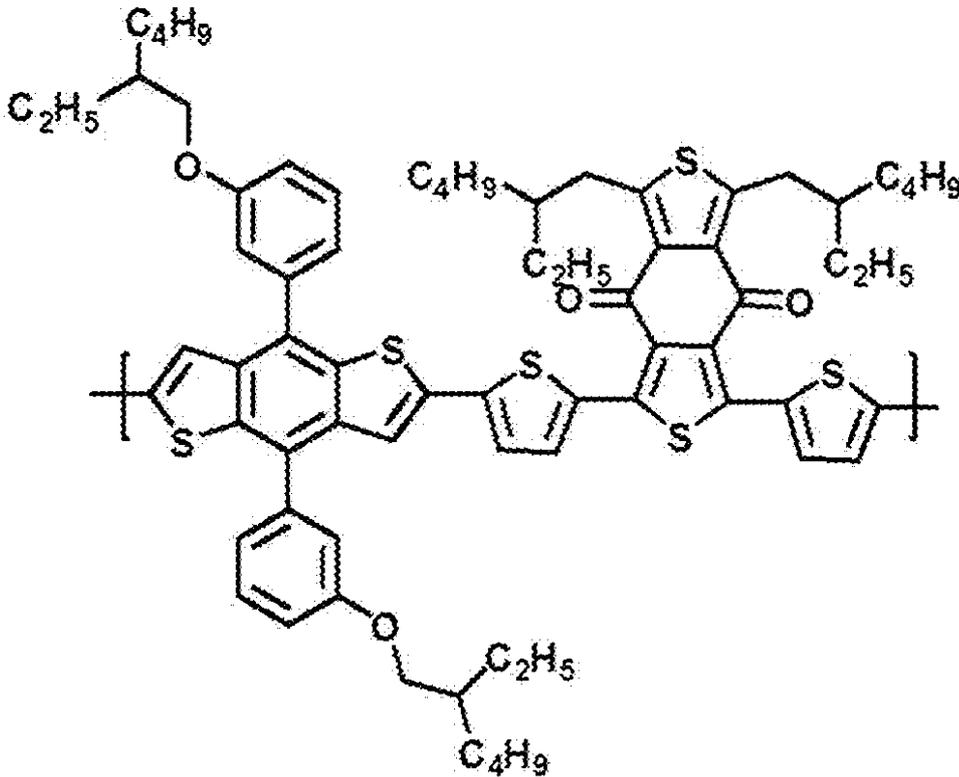
【0163】

ITO はバータイプ (bar type) で、1.5 cm × 1.5 cm がコーティングされたガラス基板 (11.5 /) は蒸留水、アセトン、2-プロパノールを用いて超音波洗浄し、ITO 表面を 10 分間オゾン処理した後、ZnO NP (ZnO nano grade N-10 2.5 wt% in 1-butanol、0.45 μm PTFE にフィルタリング) を作り、この ZnO NP 溶液を 4000 rpm で 40 秒間スピコーティング (spin-coating) した後、80 °C で 10 分間熱処理して残りの溶媒を除去して電子輸送層を完成した。光活性層のコーティングのために、下記化合物 PBDB-T と下記比較例の化合物 1 との複合溶液を、70 °C、1000 rpm で 25 秒間スピコーティングした。熱蒸着器で MoO₃ を 0.2 Å/s の速度、10⁻⁷ Torr で 10 nm の厚さに熱蒸着して正孔輸送層を製造した。前記順に製造後、熱蒸着器の内部で Ag を 1 Å/s の速度で 100 nm 蒸着して、逆方向構造の有機太陽電池を製造した。

10

[PBDB - T]

【化 29】



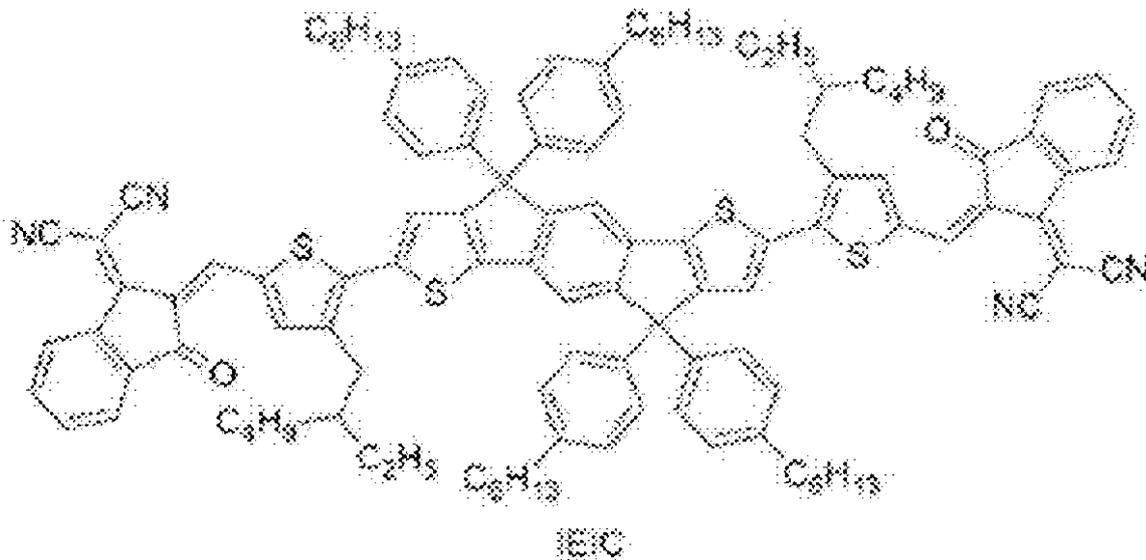
20

30

40

[比較例の化合物 1 (IEIC)]

【化 3 0】



10

【 0 1 6 4】

比較例 1 - 2 . 有機太陽電池の製造

20

前記比較例 1 - 1 における前記化合物 P B D B - T と前記比較例の化合物 1 との複合溶液を 1 0 0 0 r p m の代わりに 1 2 0 0 r p m でスピコーティングしたことを除き、比較例 1 - 1 と同様の方法で有機太陽電池を製造した。

【 0 1 6 5】

比較例 1 - 3 . 有機太陽電池の製造

前記比較例 1 - 1 における前記化合物 P B D B - T と前記比較例の化合物 1 との複合溶液を 1 0 0 0 r p m の代わりに 1 4 0 0 r p m でスピコーティングしたことを除き、比較例 1 - 1 と同様の方法で有機太陽電池を製造した。

【 0 1 6 6】

比較例 1 - 4 . 有機太陽電池の製造

30

前記比較例 1 - 1 における前記化合物 P B D B - T と前記比較例の化合物 1 との複合溶液を 1 0 0 0 r p m の代わりに 1 6 0 0 r p m でスピコーティングしたことを除き、比較例 1 - 1 と同様の方法で有機太陽電池を製造した。

【 0 1 6 7】

比較例 2 - 1 . 有機太陽電池の製造

前記比較例 1 - 1 における前記化合物 P B D B - T と前記比較例の化合物 1 とを 1 : 1 の代わりに 1 : 1 . 5 で用いたことを除き、比較例 1 - 1 と同様の方法で有機太陽電池を製造した。

【 0 1 6 8】

比較例 2 - 2 . 有機太陽電池の製造

40

前記比較例 1 - 2 における前記化合物 P B D B - T と前記比較例の化合物 1 とを 1 : 1 の代わりに 1 : 1 . 5 で用いたことを除き、比較例 1 - 2 と同様の方法で有機太陽電池を製造した。

【 0 1 6 9】

比較例 2 - 3 . 有機太陽電池の製造

前記比較例 1 - 3 における前記化合物 P B D B - T と前記比較例の化合物 1 とを 1 : 1 の代わりに 1 : 1 . 5 で用いたことを除き、比較例 1 - 3 と同様の方法で有機太陽電池を製造した。

【 0 1 7 0】

比較例 2 - 4 . 有機太陽電池の製造

50

前記比較例 1 - 4 における前記化合物 P B D B - T と前記比較例の化合物 1 とを 1 : 1 の代わりに 1 : 1 . 5 で用いたことを除き、比較例 1 - 4 と同様の方法で有機太陽電池を製造した。

【 0 1 7 1 】

比較例 3 - 1 . 有機太陽電池の製造

前記比較例 1 - 1 における前記化合物 P B D B - T と前記比較例の化合物 1 とを 1 : 1 の代わりに 1 : 2 で用いたことを除き、比較例 1 - 1 と同様の方法で有機太陽電池を製造した。

【 0 1 7 2 】

比較例 3 - 2 . 有機太陽電池の製造

前記比較例 1 - 2 における前記化合物 P B D B - T と前記比較例の化合物 1 とを 1 : 1 の代わりに 1 : 2 で用いたことを除き、比較例 1 - 2 と同様の方法で有機太陽電池を製造した。

【 0 1 7 3 】

比較例 3 - 3 . 有機太陽電池の製造

前記比較例 1 - 3 における前記化合物 P B D B - T と前記比較例の化合物 1 とを 1 : 1 の代わりに 1 : 2 で用いたことを除き、比較例 1 - 3 と同様の方法で有機太陽電池を製造した。

【 0 1 7 4 】

比較例 3 - 4 . 有機太陽電池の製造

前記比較例 1 - 4 における前記化合物 P B D B - T と前記比較例の化合物 1 とを 1 : 1 の代わりに 1 : 2 で用いたことを除き、比較例 1 - 4 と同様の方法で有機太陽電池を製造した。

【 0 1 7 5 】

実施例 1 - 1 . 有機太陽電池の製造

前記比較例 1 - 1 における前記比較例の化合物 1 の代わりに前記化合物 2 を用いたことを除き、比較例 1 - 1 と同様の方法で有機太陽電池を製造した。

【 0 1 7 6 】

実施例 1 - 2 . 有機太陽電池の製造

前記比較例 1 - 2 における前記比較例の化合物 1 の代わりに前記化合物 2 を用いたことを除き、比較例 1 - 2 と同様の方法で有機太陽電池を製造した。

【 0 1 7 7 】

実施例 1 - 3 . 有機太陽電池の製造

前記比較例 1 - 3 における前記比較例の化合物 1 の代わりに前記化合物 2 を用いたことを除き、比較例 1 - 3 と同様の方法で有機太陽電池を製造した。

【 0 1 7 8 】

実施例 1 - 4 . 有機太陽電池の製造

前記比較例 1 - 4 における前記比較例の化合物 1 の代わりに前記化合物 2 を用いたことを除き、比較例 1 - 4 と同様の方法で有機太陽電池を製造した。

【 0 1 7 9 】

実施例 2 - 1 . 有機太陽電池の製造

前記実施例 1 - 1 における前記化合物 P B D B - T と前記化合物 2 とを 1 : 1 の代わりに 1 : 1 . 5 で用いたことを除き、実施例 1 - 1 と同様の方法で有機太陽電池を製造した。

【 0 1 8 0 】

実施例 2 - 2 . 有機太陽電池の製造

前記実施例 1 - 2 における前記化合物 P B D B - T と前記化合物 2 とを 1 : 1 の代わりに 1 : 1 . 5 で用いたことを除き、実施例 1 - 2 と同様の方法で有機太陽電池を製造した。

【 0 1 8 1 】

10

20

30

40

50

実施例 2 - 3 . 有機太陽電池の製造

前記実施例 1 - 3 における前記化合物 P B D B - T と前記化合物 2 とを 1 : 1 の代わりに 1 : 1 . 5 で用いたことを除き、実施例 1 - 3 と同様の方法で有機太陽電池を製造した。

【 0 1 8 2 】**実施例 2 - 4 . 有機太陽電池の製造**

前記実施例 1 - 4 における前記化合物 P B D B - T と前記化合物 2 とを 1 : 1 の代わりに 1 : 1 . 5 で用いたことを除き、実施例 1 - 4 と同様の方法で有機太陽電池を製造した。

【 0 1 8 3 】**実施例 3 - 1 . 有機太陽電池の製造**

前記実施例 1 - 1 における前記化合物 P B D B - T と前記化合物 2 とを 1 : 1 の代わりに 1 : 2 で用いたことを除き、実施例 1 - 1 と同様の方法で有機太陽電池を製造した。

【 0 1 8 4 】**実施例 3 - 2 . 有機太陽電池の製造**

前記実施例 1 - 2 における前記化合物 P B D B - T と前記化合物 2 とを 1 : 1 の代わりに 1 : 2 で用いたことを除き、実施例 1 - 2 と同様の方法で有機太陽電池を製造した。

【 0 1 8 5 】**実施例 3 - 3 . 有機太陽電池の製造**

前記実施例 1 - 3 における前記化合物 P B D B - T と前記化合物 2 とを 1 : 1 の代わりに 1 : 2 で用いたことを除き、実施例 1 - 3 と同様の方法で有機太陽電池を製造した。

【 0 1 8 6 】**実施例 3 - 4 . 有機太陽電池の製造**

前記実施例 1 - 4 における前記化合物 P B D B - T と前記化合物 2 とを 1 : 1 の代わりに 1 : 2 で用いたことを除き、実施例 1 - 4 と同様の方法で有機太陽電池を製造した。

【 0 1 8 7 】

前記実施例 1 - 1 ~ 1 - 4、2 - 1 ~ 2 - 4、3 - 1 ~ 3 - 4、比較例 1 - 1 ~ 1 - 4、2 - 1 ~ 2 - 4 および 3 - 1 ~ 3 - 4 で製造された有機太陽電池の光電変換特性を $100 \text{ mW} / \text{cm}^2$ (AM 1.5) の条件で測定し、下記表 1 にその結果を示した。

【 0 1 8 8 】

図 3 は、本明細書の一実施態様に係る化合物 2 および比較例の化合物 1 である I E I C のフィルム状態における UV - v i s 吸収スペクトルを示す図であり、図 4 は、本明細書の一実施態様に係る化合物 2 および比較例の化合物 1 である I E I C の H O M O / L U M O エネルギーレベルを示す図である。

10

20

30

【表 1】

	Spin-speed (rpm)	V_o (V)	J_{sc} (mA/cm ²)	FF	η (%)	平均 η (%)
比較例 1-1	1000	0.874	6.998	0.350	2.14	2.33
		0.869	7.141	0.406	2.52	
比較例 1-2	1200	0.874	7.863	0.452	3.11	2.96
		0.874	7.978	0.404	2.81	
比較例 1-3	1400	0.881	7.999	0.426	2.99	3.04
		0.866	7.893	0.451	3.08	
比較例 1-4	1600	0.879	8.177	0.469	3.30	3.37
		0.876	7.920	0.496	3.44	
比較例 2-1	1000	0.892	10.290	0.484	4.45	4.37
		0.854	9.903	0.507	4.29	
比較例 2-2	1200	0.892	10.677	0.515	4.91	5.07
		0.888	10.344	0.569	5.23	
比較例 2-3	1400	0.894	11.275	0.524	5.29	5.34
		0.886	10.443	0.582	5.39	
比較例 2-4	1600	0.887	10.699	0.574	5.45	5.48
		0.875	10.380	0.507	5.51	
比較例 3-1	1000	0.895	14.071	0.577	7.27	7.26
		0.890	14.192	0.574	7.25	
比較例 3-2	1200	0.911	14.299	0.502	7.84	7.84
比較例 3-3	1400	0.897	13.921	0.637	7.95	8.01
		0.896	14.437	0.623	8.05	
比較例 3-4	1600	0.901	14.074	0.623	7.99	7.83
		0.896	13.543	0.639	7.75	
実施例 1-1	1000	0.895	15.543	0.623	8.67	8.59
		0.895	15.491	0.613	8.50	
実施例 1-2	1200	0.903	15.429	0.625	8.71	8.88
		0.898	15.984	0.630	9.04	
実施例 1-3	1400	0.897	15.633	0.605	8.16	8.55
		0.896	15.541	0.639	8.93	
実施例 1-4	1600	0.901	14.506	0.648	8.47	8.46
		0.899	14.553	0.645	8.44	
実施例 2-1	1000	0.901	14.939	0.620	8.35	8.20
		0.900	14.686	0.609	8.05	
実施例 2-2	1200	0.901	15.278	0.628	8.65	8.99
		0.899	15.603	0.623	8.73	
実施例 2-3	1400	0.910	14.798	0.625	8.41	8.19
		0.900	14.793	0.598	7.95	
実施例 2-4	1600	0.910	14.479	0.627	8.25	8.41
		0.905	14.708	0.642	8.55	
実施例 3-1	1000	0.909	14.225	0.613	7.93	7.93
実施例 3-2	1200	0.910	14.885	0.639	8.65	8.55
		0.906	14.659	0.636	8.45	
実施例 3-3	1400	0.916	14.584	0.643	8.59	8.52
		0.906	14.511	0.641	8.44	
実施例 3-4	1600	0.916	14.136	0.641	8.30	8.30

10

20

【0189】

前記表 1 において、本明細書の一実施態様に係る化合物 2 を電子受容体として用いる実施例 1 - 1 ~ 1 - 4、2 - 1 ~ 2 - 4 および 3 - 1 ~ 3 - 4 の有機太陽電池は、従来の比較例の化合物 1 (IEIC) を電子受容体として用いる比較例 1 - 1 ~ 1 - 4、2 - 1 ~ 2 - 4 および 3 - 1 ~ 3 - 4 の有機太陽電池より開放電圧が高く、充電率などの素子効率に優れ、エネルギー変換効率に優れていることが分かる。

30

【0190】

前記 V_o は開放電圧を、 J_{sc} は短絡電流を、FF は充電率 (Fill factor) を、 η はエネルギー変換効率を意味する。開放電圧と短絡電流は、それぞれ電圧 - 電流密度曲線の 4 象限における X 軸および Y 軸切片であり、この 2 つの値が高いほど、太陽電池の効率は好ましく高まる。また、充電率 (Fill factor) は曲線の内部に描ける長方形の広さを短絡電流と開放電圧との積で割った値である。この 3 つの値を照射された光の強度で割るとエネルギー変換効率が求められ、高い値であるほど好ましい。

40

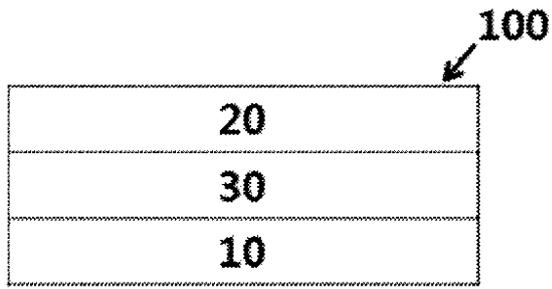
【符号の説明】

【0191】

- 100 : 有機電子素子
- 10 : 第 1 電極
- 20 : 第 2 電極
- 30 : 光活性層

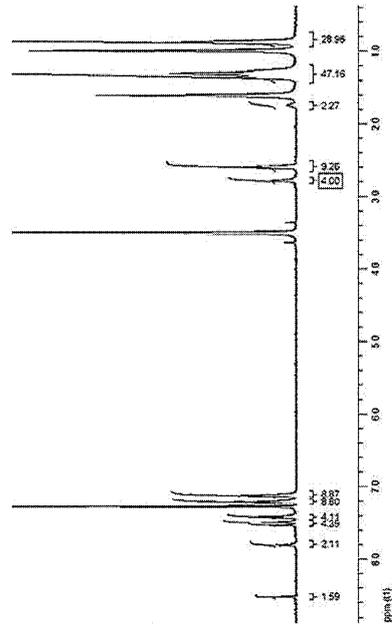
【 図 1 】

[図 1]

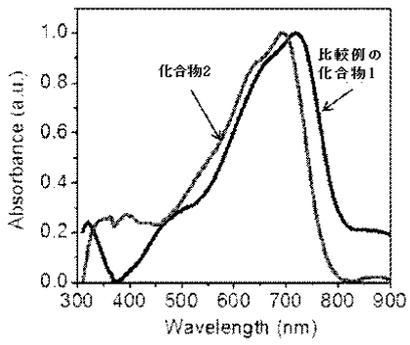


【 図 2 】

[図 2]



【 図 3 】



【 図 4 】



【 国際調査報告 】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2018/001325

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER <i>C07D 495/04(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i, H01L 51/42(2006.01)i</i> According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
B. FIELDS SEARCHED Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) C07D 495/04; C07D 519/00; C07D 409/14; H01L 51/30; C07D 417/14; C07D 495/22; H01L 51/00; H01L 51/42 Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched Korean Utility models and applications for Utility models: IPC as above Japanese Utility models and applications for Utility models: IPC as above Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) eKOMPASS (KIPO internal) & Keywords: heterocyclic, organic electronic element, image sensor, dicyanomethylene-cyclopentathienothiophene-one		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	YAO, H. et al., "Achieving Highly Efficient Nonfullerene Organic Solar Cells with Improved Intermolecular Interaction and Open-Circuit Voltage", Adv. Mater., 29 March 2017, vol. 29, no. 21, 1700254, inner pages 1-8 See figure 1; formula 1.	1-13
A	CUI, Y. et al., "Fine-Tuned Photoactive and Interconnection Layers for Achieving over 13% Efficiency in a Fullerene-Free Tandem Organic Solar Cell", J. Am. Chem. Soc., 12 May 2017, vol. 139, no. 21, pages 7302-7309 See the entire document.	1-13
A	CN104557968 A (INSTITUTE OF CHEMISTRY, CHINESE ACADEMY OF SCIENCES) 29 April 2015 See the entire document.	1-13
A	KR 10-2016-0124705 A (LG CHEM, LTD.) 28 October 2016 See the entire document.	1-13
A	KR 10-2015-0027344 A (KOREA INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY) 12 March 2015 See the entire document.	1-13
<input type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex.		
* Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed "T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art "&" document member of the same patent family		
Date of the actual completion of the international search 11 MAY 2018 (11.05.2018)		Date of mailing of the international search report 11 MAY 2018 (11.05.2018)
Name and mailing address of the ISA/KR  Korean Intellectual Property Office Government Complex Daejeon Building 4, 189, Cheongse-ro, Seo-gu, Daejeon, 35208, Republic of Korea Facsimile No. +82-42-481-8578		Authorized officer Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2018/001325

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
CN 104557968 A	29/04/2015	CN 104557968 B	05/04/2017
KR 10-2016-0124705 A	28/10/2016	CN 107531731 A EP 3287452 A2 KR 10-1785200 B1 US 2018-057515 A1 WO 2016-171465 A2 WO 2016-171465 A3	02/01/2018 28/02/2018 17/10/2017 01/03/2018 27/10/2016 22/12/2016
KR 10-2015-0027344 A	12/03/2015	KR 10-1595919 B1	29/02/2016

국제조사보고서

국제출원번호
PCT/KR2018/001325

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC)) C07D 495/04(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i, H01L 51/42(2006.01)i		
B. 조사된 분야 조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재) C07D 495/04; C07D 519/00; C07D 409/14; H01L 51/30; C07D 417/14; C07D 495/22; H01L 51/00; H01L 51/42 조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌 한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC 일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC		
국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우)) eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템) & 키워드: 헤테로환, 유기 전자 소자, 이미지 센서, dicyanomethylene-cyclopentathienothiophene-one		
C. 관련 문헌		
카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
A	YAO, H. 등, "Achieving Highly Efficient Nonfullerene Organic Solar Cells with Improved Intermolecular Interaction and Open-Circuit Voltage", Adv. Mater., 2017.03.29, 29권, 21호, 1700254, 내부 페이지 1-8 도면 1; 도식 1 참조.	1-13
A	CUI, Y. 등, "Fine-Tuned Photoactive and Interconnection Layers for Achieving over 13% Efficiency in a Fullerene-Free Tandem Organic Solar Cell" J. Am. Chem. Soc., 2017.05.12, 139권, 21호, 페이지 7302-7309 전체 문헌 참조.	1-13
A	CN104557968 A (INSTITUTE OF CHEMISTRY, CHINESE ACADEMY OF SCIENCES) 2015.04.29 전체 문헌 참조.	1-13
A	KR 10-2016-0124705 A (주식회사 엘지화학) 2016.10.28 전체 문헌 참조.	1-13
A	KR 10-2015-0027344 A (한국과학기술연구원) 2015.03.12 전체 문헌 참조.	1-13
<input type="checkbox"/> 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다. <input checked="" type="checkbox"/> 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.		
* 인용된 문헌의 특별 카테고리: "A" 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌 "E" 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후에 공개된 선출원 또는 특허 문헌 "L" 우선권 주장에 의문을 제기하는 문헌 또는 다른 인용문헌의 공개일 또는 다른 특별한 이유(이유를 명시)를 밝히기 위하여 인용된 문헌 "O" 구두 개시, 사용, 전시 또는 기타 수단을 언급하고 있는 문헌 "P" 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌 "T" 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌 "X" 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌 하나만으로 청구된 발명의 신규성 또는 진보성이 없는 것으로 본다. "Y" 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과 조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명은 진보성이 없는 것으로 본다. "&" 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌		
국제조사의 실제 완료일 2018년 05월 11일 (11.05.2018)	국제조사보고서 발송일 2018년 05월 11일 (11.05.2018)	
ISA/KR의 명칭 및 우편주소 대한민국 특허청 (35208) 대전광역시 서구 청사로 189, 4동 (둔산동, 정부대전청사) 팩스 번호 +82-42-481-8578	심사관 감유림 전화번호 +82-42-481-3516	

국제조사보고서
대응특허에 관한 정보

국제출원번호
PCT/KR2018/001325

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
CN 104557968 A	2015/04/29	CN 104557968 B	2017/04/05
KR 10-2016-0124705 A	2016/10/28	CN 107531731 A	2018/01/02
		EP 3287452 A2	2018/02/28
		KR 10-1785200 B1	2017/10/17
		US 2018-057515 A1	2018/03/01
		WO 2016-171465 A2	2016/10/27
WO 2016-171465 A3	2016/12/22		
KR 10-2015-0027344 A	2015/03/12	KR 10-1595919 B1	2016/02/29

フロントページの続き

(81) 指定国・地域 AP(BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), EA(AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), EP(AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OA(BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG), AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ

(72) 発明者 ジャン、 ソンリム

大韓民国・ソウル・ヨンドウンポ - グ・ヨイ - デロ・1 2 8 エルジー・ケム・リミテッド内

(72) 発明者 チョイ、 ドゥーワン

大韓民国・ソウル・ヨンドウンポ - グ・ヨイ - デロ・1 2 8 エルジー・ケム・リミテッド内

(72) 発明者 リム、 ボギユ

大韓民国・ソウル・ヨンドウンポ - グ・ヨイ - デロ・1 2 8 エルジー・ケム・リミテッド内

(72) 発明者 パク、 ジョンヒョン

大韓民国・ソウル・ヨンドウンポ - グ・ヨイ - デロ・1 2 8 エルジー・ケム・リミテッド内

Fターム(参考) 3K107 AA01 CC45 DD75 DD76 DD78

4C072 MM08 UU10