

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B1)

(11) 特許番号

特許第5366106号
(P5366106)

(45) 発行日 平成25年12月11日 (2013.12.11)

(24) 登録日 平成25年9月20日 (2013.9.20)

(51) Int.Cl.

F I

C O 9 K 11/06 (2006.01)

C O 9 K 11/06 6 4 5

H O 1 L 51/50 (2006.01)

H O 5 B 33/14 B

C O 7 D 209/86 (2006.01)

C O 7 D 209/86 C S P

C O 7 D 209/08 (2006.01)

C O 7 D 209/08

請求項の数 16 (全 82 頁)

(21) 出願番号 特願2012-274324 (P2012-274324)
 (22) 出願日 平成24年12月17日 (2012.12.17)
 (62) 分割の表示 特願2012-274111 (P2012-274111)
 の分割
 原出願日 平成24年12月14日 (2012.12.14)
 審査請求日 平成24年12月19日 (2012.12.19)
 (31) 優先権主張番号 特願2012-88615 (P2012-88615)
 (32) 優先日 平成24年4月9日 (2012.4.9)
 (33) 優先権主張国 日本国 (JP)
 (31) 優先権主張番号 特願2012-173277 (P2012-173277)
 (32) 優先日 平成24年8月3日 (2012.8.3)
 (33) 優先権主張国 日本国 (JP)

早期審査対象出願

(73) 特許権者 504145342
 国立大学法人九州大学
 福岡県福岡市東区箱崎六丁目10番1号
 (74) 代理人 110000109
 特許業務法人特許事務所サイクス
 (72) 発明者 安達 千波矢
 福岡県福岡市東区箱崎六丁目10番1号
 国立大学法人九州大学内
 (72) 発明者 魚山 大樹
 福岡県福岡市東区箱崎六丁目10番1号
 国立大学法人九州大学内
 (72) 発明者 野村 洸子
 福岡県福岡市東区箱崎六丁目10番1号
 国立大学法人九州大学内

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 有機発光素子ならびにそれに用いる発光材料および化合物

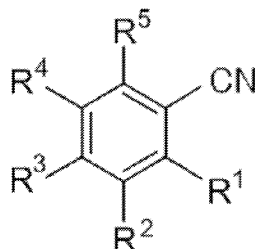
(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

下記一般式(1)で表される化合物からなる発光材料。

【化1】

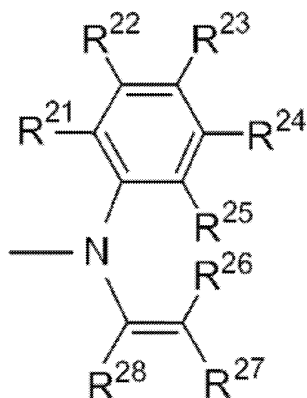
一般式(1)



【一般式(1)において、 $R^1 \sim R^5$ の少なくとも1つはシアノ基を表し、 $R^1 \sim R^5$ の少なくとも1つは下記一般式(11)で表される基を表し、残りの $R^1 \sim R^5$ は水素原子または下記置換基群Aのいずれかの置換基を表す。】

【化 2】

一般式 (11)



10

[一般式 (11) において、 $R^{21} \sim R^{28}$ は、各々独立に水素原子または下記置換基群 B のいずれかの置換基を表す。ただし、下記 < A > か < B > の少なくとも一方を満たす。

< A > R^{25} および R^{26} は一緒になって単結合を形成する。

< B > R^{27} および R^{28} は一緒になって下記置換基群 B の 1 以上の置換基で置換されていてもよいベンゼン環を形成するのに必要な原子団を表す。]

(置換基群 A) ヒドロキシ基、ハロゲン原子、炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、炭素数 1 ~ 20 のアルコキシ基、炭素数 1 ~ 20 のアルキルチオ基、炭素数 1 ~ 20 のアルキル置換アミノ基、炭素数 2 ~ 20 のアシル基、炭素数 6 ~ 15 のアリール基、炭素数 3 ~ 40 のヘテロアリール基、炭素数 2 ~ 10 のアルケニル基、炭素数 2 ~ 10 のアルキニル基、炭素数 2 ~ 10 のアルコキシカルボニル基、炭素数 1 ~ 10 のアルキルスルホニル基、アミド基、炭素数 2 ~ 10 のアルキルアミド基、炭素数 3 ~ 20 のトリアルキルシリル基、炭素数 4 ~ 20 のトリアルキルシリルアルキル基、炭素数 5 ~ 20 のトリアルキルシリルアルケニル基、炭素数 5 ~ 20 のトリアルキルシリルアルキニル基、ニトロ基、およびこれらの組み合わせからなる置換基

20

(置換基群 B) ヒドロキシ基、ハロゲン原子、シアノ基、炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、炭素数 1 ~ 20 のアルコキシ基、炭素数 1 ~ 20 のアルキルチオ基、炭素数 1 ~ 20 のアルキル置換アミノ基、炭素数 2 ~ 20 のアシル基、炭素数 6 ~ 15 のアリール基、炭素数 3 ~ 40 のヘテロアリール基、炭素数 12 ~ 40 のジアリールアミノ基、炭素数 12 ~ 40 のカルバゾリル基、炭素数 2 ~ 10 のアルケニル基、炭素数 2 ~ 10 のアルキニル基、炭素数 2 ~ 10 のアルコキシカルボニル基、炭素数 1 ~ 10 のアルキルスルホニル基、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基、アミド基、炭素数 2 ~ 10 のアルキルアミド基、炭素数 3 ~ 20 のトリアルキルシリル基、炭素数 4 ~ 20 のトリアルキルシリルアルキル基、炭素数 5 ~ 20 のトリアルキルシリルアルケニル基、炭素数 5 ~ 20 のトリアルキルシリルアルキニル基、ニトロ基、およびこれらの組み合わせからなる置換基

30

【請求項 2】

遅延蛍光を放射することを特徴とする請求項 1 に記載の発光材料。

【請求項 3】

$R^1 \sim R^5$ の少なくとも 1 つが、前記置換基群 A のいずれかの置換基で置換されていてもよい 9 - カルバゾリル基、前記置換基群 A のいずれかの置換基で置換されていてもよい 1, 2, 3, 4 - テトラヒドロ - 9 - カルバゾリル基、前記置換基群 A のいずれかの置換基で置換されていてもよい 1 - インドリル基、または前記置換基群 A のいずれかの置換基で置換されていてもよいジアリールアミノ基を表すことを特徴とする請求項 1 または 2 に記載の発光材料。

40

【請求項 4】

$R^1 \sim R^5$ の少なくとも 2 つが、前記置換基群 A のいずれかの置換基で置換されていてもよい 9 - カルバゾリル基、前記置換基群 A のいずれかの置換基で置換されていてもよい 1, 2, 3, 4 - テトラヒドロ - 9 - カルバゾリル基、前記置換基群 A のいずれかの置換基

50

で置換されていてもよい 1 - インドリル基、または前記置換基群 A のいずれかの置換基で置換されていてもよいジアリールアミノ基を表すことを特徴とする請求項 1 または 2 に記載の発光材料。

【請求項 5】

$R^1 \sim R^5$ の少なくとも 1 つがシアノ基であり、残りの $R^1 \sim R^5$ が、各々独立にヒドロキシ基、ハロゲン原子、前記置換基群 A のいずれかの置換基で置換されていてもよい 9 - カルバゾリル基、前記置換基群 A のいずれかの置換基で置換されていてもよい 1, 2, 3, 4 - テトラヒドロ - 9 - カルバゾリル基、前記置換基群 A のいずれかの置換基で置換されていてもよい 1 - インドリル基、または前記置換基群 A のいずれかの置換基で置換されていてもよいジアリールアミノ基のいずれかを表すことを特徴とする請求項 1 または 2 に記載の発光材料。

10

【請求項 6】

$R^1 \sim R^5$ の少なくとも 1 つがシアノ基であり、残りの $R^1 \sim R^5$ が、各々独立に前記置換基群 A のいずれかの置換基で置換されていてもよい 9 - カルバゾリル基、前記置換基群 A のいずれかの置換基で置換されていてもよい 1, 2, 3, 4 - テトラヒドロ - 9 - カルバゾリル基、前記置換基群 A のいずれかの置換基で置換されていてもよい 1 - インドリル基、または前記置換基群 A のいずれかの置換基で置換されていてもよいジアリールアミノ基のいずれかを表すことを特徴とする請求項 1 または 2 に記載の発光材料。

【請求項 7】

$R^1 \sim R^5$ の少なくとも 1 つがシアノ基であり、残りの $R^1 \sim R^5$ が前記置換基群 A のいずれかの置換基で置換されていてもよい 9 - カルバゾリル基であることを特徴とする請求項 1 または 2 に記載の発光材料。

20

【請求項 8】

$R^1 \sim R^5$ の少なくとも 1 つがヒドロキシ基であり、 $R^1 \sim R^5$ の少なくとも 1 つがシアノ基であり、残りの $R^1 \sim R^5$ が前記置換基群 A のいずれかの置換基で置換されていてもよい 9 - カルバゾリル基であることを特徴とする請求項 1 または 2 に記載の発光材料。

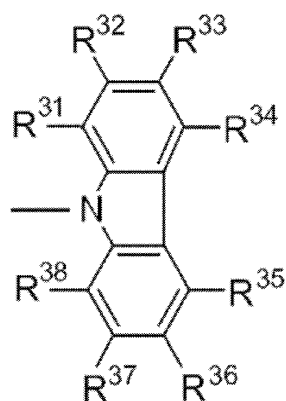
【請求項 9】

$R^1 \sim R^5$ の少なくとも 1 つが下記一般式 (12) ~ (15) のいずれかで表される基であることを特徴とする請求項 1 ~ 8 のいずれか 1 項に記載の発光材料。

【化 3】

30

一般式 (12)

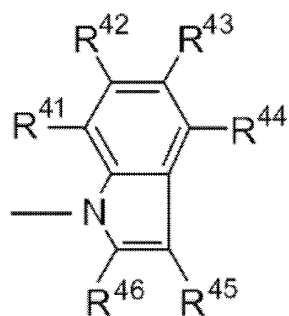


40

【一般式 (12) において、 $R^{31} \sim R^{38}$ は、各々独立に水素原子または前記置換基群 B のいずれかの置換基を表す。】

【化 4】

一般式 (13)

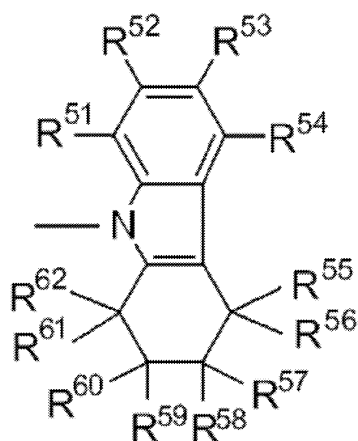


10

[一般式 (13) において、 $R^{41} \sim R^{46}$ は、各々独立に水素原子または前記置換基群 B のいずれかの置換基を表す。]

【化 5】

一般式 (14)

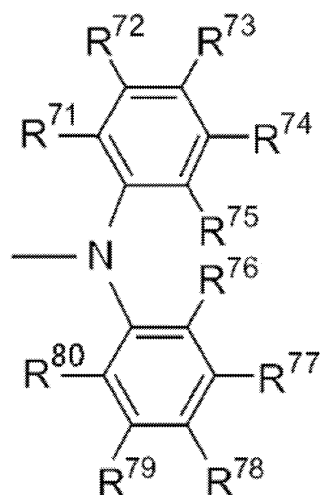


20

[一般式 (14) において、 $R^{51} \sim R^{62}$ は、各々独立に水素原子または前記置換基群 B のいずれかの置換基を表す。]

【化 6】

一般式 (15)



40

[一般式 (15) において、 $R^{71} \sim R^{80}$ は、各々独立に水素原子または前記置換基群 B のいずれかの置換基を表す。]

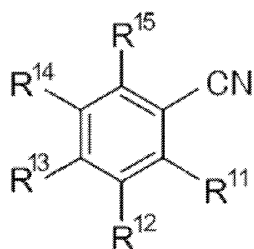
【請求項 10】

下記一般式 (2) で表される化合物からなる請求項 1 ~ 9 のいずれか 1 項に記載の発光材料。

50

【化 7】

一般式 (2)



[一般式 (2) において、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{14} および R^{15} の少なくとも1つはシアノ基を表し、 $R^{11} \sim R^{15}$ の少なくとも3つは前記置換基群Aのいずれかの置換基で置換されていてもよい9 - カルバゾリル基、前記置換基群Aのいずれかの置換基で置換されていてもよい1, 2, 3, 4 - テトラヒドロ - 9 - カルバゾリル基、前記置換基群Aのいずれかの置換基で置換されていてもよい1 - インドリル基、または前記置換基群Aのいずれかの置換基で置換されていてもよいジアリールアミノ基を表し、残りの $R^{11} \sim R^{15}$ はヒドロキシ基を表す。]

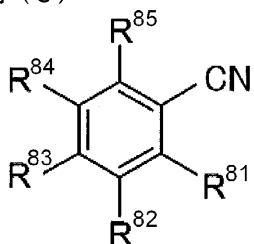
10

【請求項 1 1】

下記一般式 (3) で表される化合物からなる請求項 1 ~ 9 のいずれか 1 項に記載の発光材料。

【化 8】

一般式 (3)



[一般式 (3) において、 $R^{81} \sim R^{85}$ の1つはシアノ基であり、 $R^{81} \sim R^{85}$ の2つは前記置換基群Aのいずれかの置換基で置換されていてもよい9 - カルバゾリル基であり、その他の2つは水素原子を表す。]

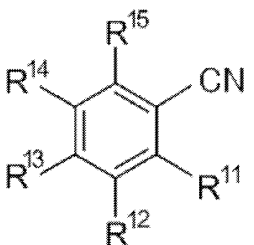
30

【請求項 1 2】

下記一般式 (2) で表される化合物。

【化 9】

一般式 (2)



[一般式 (2) において、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{14} および R^{15} の少なくとも1つはシアノ基であり、 $R^{11} \sim R^{15}$ の少なくとも3つは下記置換基群Aのいずれかの置換基で置換されていてもよい9 - カルバゾリル基、下記置換基群Aのいずれかの置換基で置換されていてもよい1, 2, 3, 4 - テトラヒドロ - 9 - カルバゾリル基、下記置換基群Aのいずれかの置換基で置換されていてもよい1 - インドリル基、または下記置換基群Aのいずれかの置換基で置換されていてもよいジアリールアミノ基であり、残りの $R^{11} \sim R^{15}$ はヒドロキシ基を表す。ただし、 R^{12} と R^{14} がともにシアノ基であることはない。]

40

(置換基群A) ヒドロキシ基、ハロゲン原子、炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、炭素数 1 ~

50

20のアルコキシ基、炭素数1～20のアルキルチオ基、炭素数1～20のアルキル置換アミノ基、炭素数2～20のアシル基、炭素数6～15のアリール基、炭素数3～40のヘテロアリール基、炭素数2～10のアルケニル基、炭素数2～10のアルキニル基、炭素数2～10のアルコキシカルボニル基、炭素数1～10のアルキルスルホニル基、アミド基、炭素数2～10のアルキルアミド基、炭素数3～20のトリアルキルシリル基、炭素数4～20のトリアルキルシリルアルキル基、炭素数5～20のトリアルキルシリルアルケニル基、炭素数5～20のトリアルキルシリルアルキニル基、ニトロ基、およびこれらの組み合わせからなる置換基

【請求項13】

請求項1～11のいずれか1項に記載の発光材料を含む発光層を基板上に有することを特徴とする有機発光素子。

10

【請求項14】

遅延蛍光を放射することを特徴とする請求項13に記載の有機発光素子。

【請求項15】

有機エレクトロルミネッセンス素子であることを特徴とする請求項13または14に記載の有機発光素子。

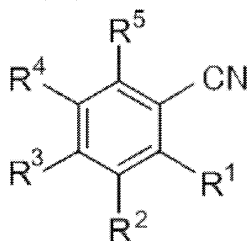
【請求項16】

下記一般式(1)で表される構造を有する遅延蛍光体。

【化10】

一般式(1)

20

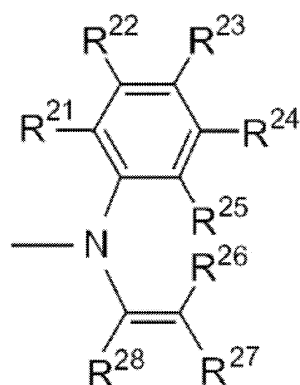


[一般式(1)において、R¹～R⁵の少なくとも1つはシアノ基を表し、R¹～R⁵の少なくとも1つは下記一般式(11)で表される基を表し、残りのR¹～R⁵は水素原子または下記置換基群Aのいずれかの置換基を表す。]

30

【化11】

一般式(11)



40

[一般式(11)において、R²¹～R²⁸は、各々独立に水素原子または下記置換基群Bのいずれかの置換基を表す。ただし、下記<A>かの少なくとも一方を満たす。

<A> R²⁵およびR²⁶は一緒になって単結合を形成する。

 R²⁷およびR²⁸は一緒になって下記置換基群Bの1以上の置換基で置換されていてもよいベンゼン環を形成するのに必要な原子団を表す。]

(置換基群A) ヒドロキシ基、ハロゲン原子、炭素数1～20のアルキル基、炭素数1～20のアルコキシ基、炭素数1～20のアルキルチオ基、炭素数1～20のアルキル置換

50

アミノ基、炭素数 2 ~ 20 のアシル基、炭素数 6 ~ 15 のアリール基、炭素数 3 ~ 40 のヘテロアリール基、炭素数 2 ~ 10 のアルケニル基、炭素数 2 ~ 10 のアルキニル基、炭素数 2 ~ 10 のアルコキシカルボニル基、炭素数 1 ~ 10 のアルキルスルホニル基、アミド基、炭素数 2 ~ 10 のアルキルアミド基、炭素数 3 ~ 20 のトリアルキルシリル基、炭素数 4 ~ 20 のトリアルキルシリルアルキル基、炭素数 5 ~ 20 のトリアルキルシリルアルケニル基、炭素数 5 ~ 20 のトリアルキルシリルアルキニル基、ニトロ基、およびこれらの組み合わせからなる置換基

(置換基群 B) ヒドロキシ基、ハロゲン原子、シアノ基、炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、炭素数 1 ~ 20 のアルコキシ基、炭素数 1 ~ 20 のアルキルチオ基、炭素数 1 ~ 20 のアルキル置換アミノ基、炭素数 2 ~ 20 のアシル基、炭素数 6 ~ 15 のアリール基、炭素数 3 ~ 40 のヘテロアリール基、炭素数 12 ~ 40 のジアリールアミノ基、炭素数 12 ~ 40 のカルバゾリル基、炭素数 2 ~ 10 のアルケニル基、炭素数 2 ~ 10 のアルキニル基、炭素数 2 ~ 10 のアルコキシカルボニル基、炭素数 1 ~ 10 のアルキルスルホニル基、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基、アミド基、炭素数 2 ~ 10 のアルキルアミド基、炭素数 3 ~ 20 のトリアルキルシリル基、炭素数 4 ~ 20 のトリアルキルシリルアルキル基、炭素数 5 ~ 20 のトリアルキルシリルアルケニル基、炭素数 5 ~ 20 のトリアルキルシリルアルキニル基、ニトロ基、およびこれらの組み合わせからなる置換基

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、発光効率が高い有機発光素子に関する。また、その有機発光素子に用いる発光材料と化合物にも関する。

【背景技術】

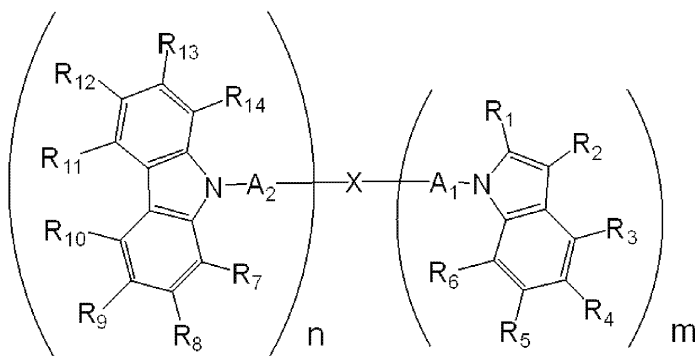
【0002】

有機エレクトロルミネッセンス素子（有機 EL 素子）などの有機発光素子の発光効率を高める研究が盛んに行われている。特に、有機エレクトロルミネッセンス素子を構成する電子輸送材料、正孔輸送材料、発光材料などを新たに開発して組み合わせることにより、発光効率を高める工夫が種々なされてきている。その中には、カルバゾール構造やインドール構造を含む化合物を利用した有機エレクトロルミネッセンス素子に関する研究も見受けられ、これまでも幾つかの提案がなされてきている。

【0003】

例えば、特許文献 1 には、下記の一般式で表されるカルバゾール構造とインドール構造を含む化合物を有機発光素子の発光層のホスト材料として用いることが記載されている。下記の一般式において、m および n はそれぞれ 1 ~ 5 の整数であり、m と n の和は 2 ~ 6 の整数であり、X は置換基を有していてもよい m + n 価の有機基であり、R₁ ~ R₁₄ は水素原子、ハロゲン原子、アルキル基、アリール基または複素環基であると規定されている。

【化 1】



【0004】

また、特許文献 2 には、カルバゾール構造を 2 つ以上含む化合物を有機発光素子の発光

層のホスト材料として用いることが記載されている。さらに、特許文献3には、インドール構造を2つ以上含む化合物を有機発光素子の発光層のホスト材料として用いることが記載されている。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0005】

【特許文献1】特開2005-174917号公報

【特許文献2】特開2009-94486号公報

【特許文献3】特開2009-76834号公報

【発明の概要】

10

【発明が解決しようとする課題】

【0006】

このようにカルバゾール構造やインドール構造を含む化合物については、これまで種々の検討がなされており、有機エレクトロルミネッセンス素子への応用に関する幾つかの提案もなされている。しかしながら、従来提案されている有機エレクトロルミネッセンス素子では、カルバゾール構造やインドール構造を含む化合物を発光層のホスト材料として使用することを提案するものである。また、その発光効率は必ずしも高くない。しかも、カルバゾール構造やインドール構造を含む化合物は、そのすべてについて網羅的な研究がされ尽くされているとは言えない。特に、カルバゾール構造やインドール構造を含む化合物の発光材料としての有用性や、カルバゾール構造またはインドール構造を含み、さらにシアノ基を複数含む化合物の有用性については、ほとんど検討が試みられていない。また、これまでの研究では、カルバゾール構造やインドール構造を含む化合物の化学構造とその化合物の発光材料としての有用性の間に明確な関係が見出されるに至っておらず、化学構造に基づいて発光材料としての有用性を予測することは困難な状況にある。本発明者らはこれらの課題を考慮して、カルバゾール構造やインドール構造等を含むシアノベンゼン誘導体について、その有機発光素子の発光材料としての有用性を評価することを目的として検討を進めた。また、発光材料として有用な化合物の一般式を導きだし、発光効率が高い有機発光素子の構成を一般化することも目的として鋭意検討を進めた。

20

【課題を解決するための手段】

【0007】

30

上記の目的を達成するために鋭意検討を進めた結果、本発明者らは、カルバゾール構造やインドール構造等を含む特定のシアノベンゼン誘導体が発光層のホスト材料として極めて有用であることを明らかにした。特に、カルバゾール構造やインドール構造等を含むシアノベンゼン誘導体の中に、遅延蛍光材料として有用な化合物があることを見出し、発光効率が高い有機発光素子を安価に提供しうることを明らかにした。本発明者らは、これらの知見に基づいて、上記の課題を解決する手段として、以下の本発明を提供するに至った。

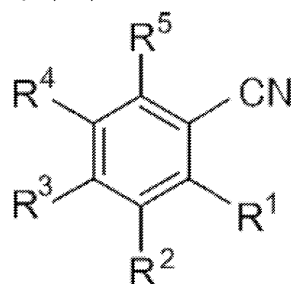
【0008】

[1] 下記一般式(1)で表される化合物からなる発光材料。

【化2】

40

一般式(1)



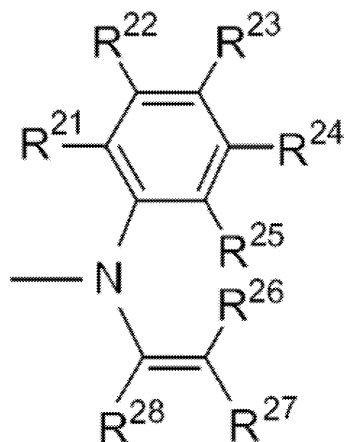
[一般式(1)において、 $R^1 \sim R^5$ の少なくとも1つはシアノ基を表し、 $R^1 \sim R^5$ の少な

50

くとも１つは下記一般式（１１）で表される基を表し、残りの $R^1 \sim R^5$ は水素原子または置換基を表す。]

【化３】

一般式（１１）



10

[一般式（１１）において、 $R^{21} \sim R^{28}$ は、各々独立に水素原子または置換基を表す。ただし、下記＜Ａ＞か＜Ｂ＞の少なくとも一方を満たす。

<Ａ＞ R^{25} および R^{26} は一緒になって単結合を形成する。

<Ｂ＞ R^{27} および R^{28} は一緒になって置換もしくは無置換のベンゼン環を形成するのに必要な原子団を表す。]

20

[２] 遅延蛍光を放射することを特徴とする[１]に記載の発光材料。

[３] $R^1 \sim R^5$ の少なくとも１つが置換もしくは無置換の９-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の１, ２, ３, ４-テトラヒドロ-９-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の１-インドリル基、または置換もしくは無置換のジアリールアミノ基を表すことを特徴とする[１]または[２]に記載の発光材料。

[４] $R^1 \sim R^5$ の少なくとも２つが置換もしくは無置換の９-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の１, ２, ３, ４-テトラヒドロ-９-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の１-インドリル基、または置換もしくは無置換のジアリールアミノ基を表すことを特徴とする[１]または[２]に記載の発光材料。

30

[５] $R^1 \sim R^5$ の少なくとも１つがシアノ基であり、残りの $R^1 \sim R^5$ が、各々独立にヒドロキシ基、ハロゲン原子、置換もしくは無置換の９-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の１, ２, ３, ４-テトラヒドロ-９-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の１-インドリル基、または置換もしくは無置換のジアリールアミノ基のいずれかを表すことを特徴とする[１]または[２]に記載の発光材料。

[６] $R^1 \sim R^5$ の少なくとも１つがシアノ基であり、残りの $R^1 \sim R^5$ が、各々独立に置換もしくは無置換の９-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の１, ２, ３, ４-テトラヒドロ-９-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の１-インドリル基、または置換もしくは無置換のジアリールアミノ基のいずれかを表すことを特徴とする[１]または[２]に記載の発光材料。

40

[７] $R^1 \sim R^5$ の少なくとも１つがシアノ基であり、残りの $R^1 \sim R^5$ が置換もしくは無置換の９-カルバゾリル基であることを特徴とする[１]または[２]に記載の発光材料。

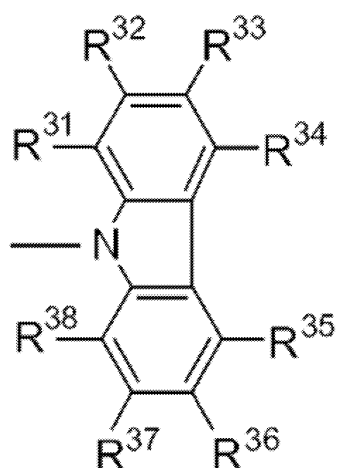
[８] $R^1 \sim R^5$ の少なくとも１つがヒドロキシ基であり、 $R^1 \sim R^5$ の少なくとも１つがシアノ基であり、残りの $R^1 \sim R^5$ が置換もしくは無置換の９-カルバゾリル基であることを特徴とする[１]または[２]に記載の発光材料。

【０００９】

[９] $R^1 \sim R^5$ の少なくとも１つが下記一般式（１２）～（１５）のいずれかで表される基であることを特徴とする[１]～[８]のいずれか１項に記載の発光材料。

【化 4】

一般式 (12)

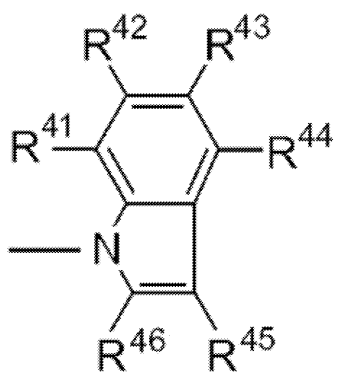


10

[一般式 (12) において、 $R^{31} \sim R^{38}$ は、各々独立に水素原子または置換基を表す。]

【化 5】

一般式 (13)



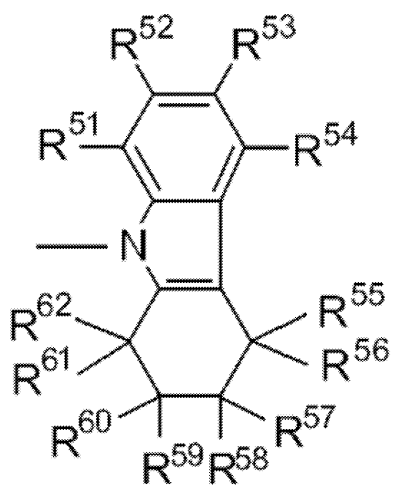
20

[一般式 (13) において、 $R^{41} \sim R^{46}$ は、各々独立に水素原子または置換基を表す。]

30

【化 6】

一般式 (14)

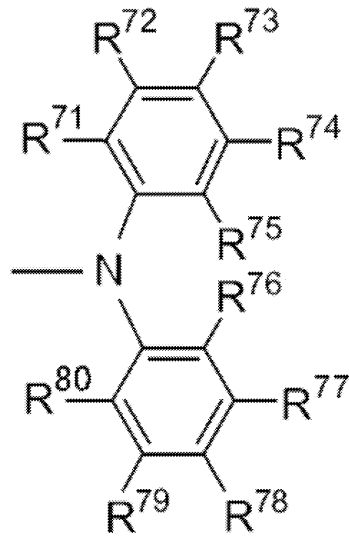


40

[一般式 (14) において、 $R^{51} \sim R^{62}$ は、各々独立に水素原子または置換基を表す。]

【化 7】

一般式 (15)



10

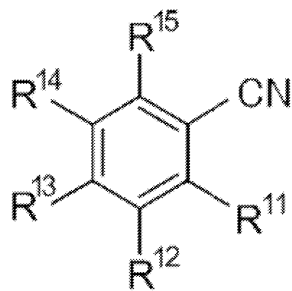
[一般式 (15) において、 $R^{71} \sim R^{80}$ は、各々独立に水素原子または置換基を表す。]

[10] 下記一般式 (2) で表される化合物からなる [1] ~ [9] のいずれか 1 項に記載の発光材料。

【化 8】

20

一般式 (2)



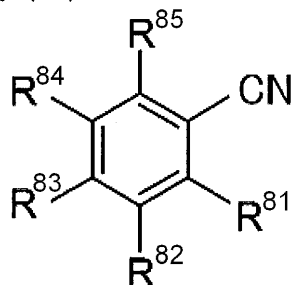
[一般式 (2) において、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{14} および R^{15} の少なくとも 1 つはシアノ基を表し、 $R^{11} \sim R^{15}$ の少なくとも 3 つは置換もしくは無置換の 9 - カルバゾリル基、置換もしくは無置換の 1, 2, 3, 4 - テトラヒドロ - 9 - カルバゾリル基、置換もしくは無置換の 1 - インドリル基、または置換もしくは無置換のジアリールアミノ基を表し、残りの $R^{11} \sim R^{15}$ はヒドロキシ基を表す。]

30

[11] 下記一般式 (3) で表される化合物からなる [1] ~ [9] のいずれか 1 項に記載の発光材料。

【化 9】

一般式 (3)



40

[一般式 (3) において、 $R^{81} \sim R^{85}$ の 1 つはシアノ基であり、 $R^{81} \sim R^{85}$ の 2 つは置換もしくは無置換の 9 - カルバゾリル基であり、その他の 2 つは水素原子を表す。]

[12] 上記一般式 (2) で表される化合物。

[13] [1] ~ [11] のいずれか 1 項に記載の発光材料を含む発光層を基板上に有

50

することを特徴とする有機発光素子。

〔 1 4 〕 遅延蛍光を放射することを特徴とする〔 1 3 〕に記載の有機発光素子。

〔 1 5 〕 有機エレクトロルミネッセンス素子であることを特徴とする〔 1 3 〕または〔 1 4 〕に記載の有機発光素子。

〔 1 6 〕 上記一般式 (1) で表される構造を有する遅延蛍光体。

【発明の効果】

【 0 0 1 0 】

本発明の有機発光素子は、発光効率が高いという特徴を有する。また、本発明の遅延蛍光材料は、有機発光素子の発光層として利用したときに有機発光素子に遅延蛍光を放射させ、発光効率を飛躍的に高めることができるという特徴を有する。さらに、本発明の化合物は、これらの有機発光素子の発光材料として極めて有用である。

10

【図面の簡単な説明】

【 0 0 1 1 】

【図 1】有機エレクトロルミネッセンス素子の層構成例を示す概略断面図である。

【図 2】実施例 1 の化合物 1 のトルエン溶液の時間分解スペクトルである。

【図 3】実施例 2 の化合物 1 を用いた有機フォトルミネッセンス素子の温度による発光寿命の変化を示すグラフである。

【図 4】実施例 3 の化合物 1 を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子の電流密度 - 電圧特性を示すグラフである。

【図 5】実施例 3 の化合物 1 を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子の外部量子効率 - 電流密度特性を示すグラフである。

20

【図 6】実施例 4 の化合物 6 を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子の外部量子効率 - 電流密度特性を示すグラフである。

【図 7】実施例 5 の化合物 3 0 1 を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子の外部量子効率 - 電流密度特性を示すグラフである。

【図 8】実施例 6 の化合物 5 0 1 を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子の電流密度 - 電圧特性を示すグラフである。

【図 9】実施例 6 の化合物 5 0 1 を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子の外部量子効率 - 電流密度特性を示すグラフである。

【図 1 0】実施例 7 の化合物 2 5 2 を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子の発光スペクトルである。

30

【図 1 1】実施例 7 の化合物 2 5 2 を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子の電流密度 - 電圧特性を示すグラフである。

【図 1 2】実施例 7 の化合物 2 5 2 を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子の外部量子効率 - 電流密度特性を示すグラフである。

【図 1 3】実施例 8 の化合物 5 2 3 を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子の発光スペクトルである。

【図 1 4】実施例 8 の化合物 5 2 3 を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子の電流密度 - 電圧特性を示すグラフである。

【図 1 5】実施例 8 の化合物 5 2 3 を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子の外部量子効率 - 電流密度特性を示すグラフである。

40

【図 1 6】実施例 9 の化合物 3 1 を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子の発光スペクトルである。

【図 1 7】実施例 9 の化合物 3 1 を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子の電流密度 - 電圧特性を示すグラフである。

【図 1 8】実施例 9 の化合物 3 1 を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子の外部量子効率 - 電流密度特性を示すグラフである。

【発明を実施するための形態】

【 0 0 1 2 】

以下において、本発明の内容について詳細に説明する。以下に記載する構成要件の説明

50

は、本発明の代表的な実施態様や具体例に基づいてなされることがあるが、本発明はそのような実施態様や具体例に限定されるものではない。なお、本明細書において「～」を用いて表される数値範囲は、「～」の前後に記載される数値を下限値および上限値として含む範囲を意味する。

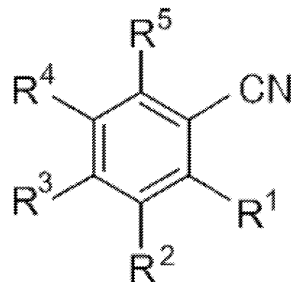
【 0 0 1 3 】

[一般式 (1) で表される化合物]

本発明の発光材料は、下記一般式 (1) で表される化合物からなることを特徴とする。また、本発明の有機発光素子は、下記一般式 (1) で表される化合物を発光層の発光材料として含むことを特徴とする。そこで、一般式 (1) で表される化合物について、まず説明する。

【 化 1 0 】

一般式 (1)



【 0 0 1 4 】

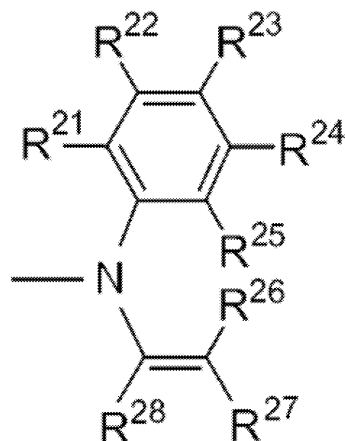
一般式 (1) において、R¹ ~ R⁵ の少なくとも1つはシアノ基を表す。いずれか1つがシアノ基である場合は、R¹ ~ R³ のいずれであってもよい。いずれか2つがシアノ基である場合は、R¹ と R³ の組み合わせや、R² と R⁴ の組み合わせを例示することができる。いずれか3つがシアノ基である場合は、R¹ と R³ と R⁴ の組み合わせを例示することができる。

【 0 0 1 5 】

一般式 (1) において、R¹ ~ R⁵ の少なくとも1つは下記一般式 (1 1) で表される基を表す。2つ以上が一般式 (1 1) で表される基を表すとき、それらは同一であっても異なってもよいが、同一であることがより好ましい。

【 化 1 1 】

一般式 (1 1)



【 0 0 1 6 】

一般式 (1 1) において、R²¹ ~ R²⁸ は、各々独立に水素原子または置換基を表す。ただし、下記 < A > か < B > の少なくとも一方を満たす。両方とも満たしている場合がより好ましい。

< A > R²⁵ および R²⁶ は一緒になって単結合を形成する。

< B > R²⁷ および R²⁸ は一緒になって置換もしくは無置換のベンゼン環を形成するのに

必要な原子団を表す。

【 0 0 1 7 】

一般式 (1 1) で表される基は、置換もしくは無置換の 9 - カルバゾリル基、置換もしくは無置換の 1 , 2 , 3 , 4 - テトラヒドロ - 9 - カルバゾリル基、置換もしくは無置換の 1 - インドリル基、または置換もしくは無置換のジアリールアミノ基であることが好ましい。すなわち、一般式 (1) の $R^1 \sim R^5$ のいずれか 1 つは、置換もしくは無置換の 9 - カルバゾリル基、置換もしくは無置換の 1 , 2 , 3 , 4 - テトラヒドロ - 9 - カルバゾリル基、置換もしくは無置換の 1 - インドリル基、または置換もしくは無置換のジアリールアミノ基であることが好ましい。一般式 (1) の $R^1 \sim R^5$ のいずれか 2 つ以上が、置換もしくは無置換の 9 - カルバゾリル基、置換もしくは無置換の 1 , 2 , 3 , 4 - テトラヒドロ - 9 - カルバゾリル基、置換もしくは無置換の 1 - インドリル基、または置換もしくは無置換のジアリールアミノ基であることがより好ましい。

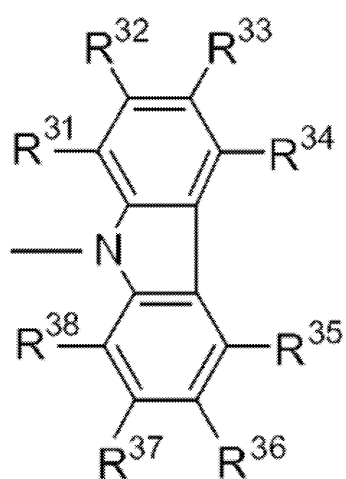
10

【 0 0 1 8 】

一般式 (1 1) で表される基は、例えば下記一般式 (1 2) ~ (1 5) のいずれかで表される構造を有するものであることが好ましい。特に下記一般式 (1 2) で表される構造を有するものであることが好ましい。

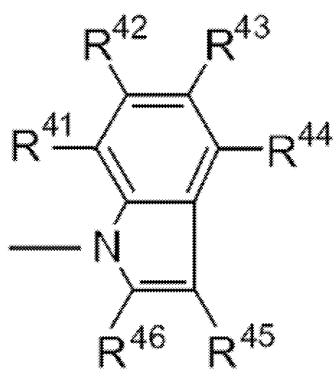
【化 1 2】

一般式 (12)



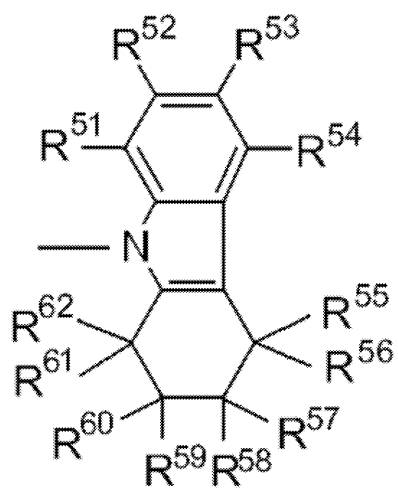
10

一般式 (13)



20

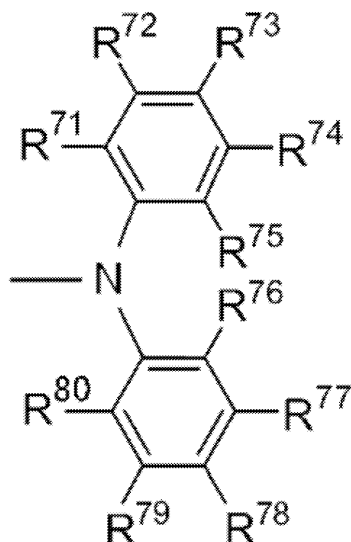
一般式 (14)



30

40

一般式 (15)



10

【0019】

一般式(12)～(15)において、 $R^{31} \sim R^{38}$ 、 $R^{41} \sim R^{46}$ 、 $R^{51} \sim R^{62}$ および $R^{71} \sim R^{80}$ は、各々独立に水素原子または置換基を表す。一般式(12)～(15)で表される基が置換基を有するときの置換位置や置換数は特に制限されない。各基の置換数は、0～6個が好ましく、0～4個がより好ましく、例えば0～2個とすることも好ましい。複数の置換基を有するとき、それらは互いに同一であっても異なってもよいが、同一であることがより好ましい。

20

一般式(12)で表される基が置換基を有する場合は、 $R^{32} \sim R^{37}$ のいずれかが置換基であることが好ましい。例えば、 R^{32} と R^{37} が置換基である場合、 R^{33} と R^{36} が置換基である場合、 R^{34} と R^{35} が置換基である場合を好ましく例示することができる。

一般式(13)で表される基が置換基を有する場合は、 $R^{42} \sim R^{46}$ のいずれかが置換基であることが好ましい。例えば、 R^{42} が置換基である場合と、 R^{43} が置換基である場合を好ましく例示することができる。

一般式(14)で表される基が置換基を有する場合は、 $R^{52} \sim R^{60}$ のいずれかが置換基であることが好ましい。例えば、 $R^{52} \sim R^{54}$ のいずれかが置換基である場合、 $R^{55} \sim R^{60}$ のいずれかが置換基である場合を好ましく例示することができる。

30

一般式(15)で表される基が置換基を有する場合は、 $R^{72} \sim R^{74}$ および $R^{77} \sim R^{79}$ のいずれかが置換基であることが好ましい。例えば、 R^{72} と R^{79} が置換基である場合、 R^{73} と R^{78} が置換基である場合、 R^{74} と R^{77} が置換基である場合、 R^{72} 、 R^{74} 、 R^{77} および R^{79} が置換基である場合を好ましく例示することができる。特に、 R^{74} と R^{77} が置換基である場合、 R^{72} 、 R^{74} 、 R^{77} および R^{79} が置換基である場合をより好ましく例示することができる。このときの置換基は、各々独立に炭素数1～20の置換もしくは無置換のアルキル基、または炭素数6～40の置換もしくは無置換のアリール基であることが特に好ましく、炭素数1～6の無置換のアルキル基、炭素数6～10の無置換のアリール基、または炭素数6～10のアリール基で置換された炭素数6～10のアリール基であることがさらに好ましい。

40

【0020】

一般式(11)の $R^{21} \sim R^{28}$ 、一般式(12)の $R^{31} \sim R^{38}$ 、一般式(13)の $R^{41} \sim R^{46}$ 、一般式(14)の $R^{51} \sim R^{62}$ および、一般式(15)の $R^{71} \sim R^{80}$ がとりうる置換基として、例えばヒドロキシ基、ハロゲン原子、シアノ基、炭素数1～20のアルキル基、炭素数1～20のアルコキシ基、炭素数1～20のアルキルチオ基、炭素数1～20のアルキル置換アミノ基、炭素数2～20のアシル基、炭素数6～40のアリール基、炭素数3～40のヘテロアリール基、炭素数12～40のジアリールアミノ基、炭素数12～40の置換もしくは無置換のカルバゾリル基、炭素数2～10のアルケニル基、炭素数2

50

～ 10 のアルキニル基、炭素数 2 ～ 10 のアルコキシカルボニル基、炭素数 1 ～ 10 のアルキルスルホニル基、炭素数 1 ～ 10 のハロアルキル基、アミド基、炭素数 2 ～ 10 のアルキルアミド基、炭素数 3 ～ 20 のトリアルキルシリル基、炭素数 4 ～ 20 のトリアルキルシリルアルキル基、炭素数 5 ～ 20 のトリアルキルシリルアルケニル基、炭素数 5 ～ 20 のトリアルキルシリルアルキニル基およびニトロ基等が挙げられる。これらの具体例のうち、さらに置換基により置換可能なものは置換されていてもよい。より好ましい置換基は、ハロゲン原子、シアノ基、炭素数 1 ～ 20 の置換もしくは無置換のアルキル基、炭素数 1 ～ 20 のアルコキシ基、炭素数 6 ～ 40 の置換もしくは無置換のアリール基、炭素数 3 ～ 40 の置換もしくは無置換のヘテロアリール基、炭素数 12 ～ 40 の置換もしくは無置換のジアリールアミノ基、炭素数 12 ～ 40 の置換もしくは無置換のカルバゾリル基である。さらに好ましい置換基は、フッ素原子、塩素原子、シアノ基、炭素数 1 ～ 10 の置換もしくは無置換のアルキル基、炭素数 1 ～ 10 の置換もしくは無置換のアルコキシ基、炭素数 1 ～ 10 の置換もしくは無置換のジアルキルアミノ基、炭素数 6 ～ 15 の置換もしくは無置換のアリール基、炭素数 3 ～ 12 の置換もしくは無置換のヘテロアリール基である。

10

【 0 0 2 1 】

本明細書でいうアルキル基は、直鎖状、分枝状、環状のいずれであってもよく、より好ましくは炭素数 1 ～ 6 であり、具体例としてメチル基、エチル基、プロピル基、ブチル基、*t*-ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、イソプロピル基を挙げることができる。アリール基は、単環でも融合環でもよく、具体例としてフェニル基、ナフチル基を挙げることができる。アルコキシ基は、直鎖状、分枝状、環状のいずれであってもよく、より好ましくは炭素数 1 ～ 6 であり、具体例としてメトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基、ブトキシ基、*t*-ブトキシ基、ペンチルオキシ基、ヘキシルオキシ基、イソプロピポキシ基を挙げることができる。ジアルキルアミノ基の 2 つのアルキル基は、互いに同一であっても異なっているもよいが、同一であることが好ましい。ジアルキルアミノ基の 2 つのアルキル基は、各々独立に直鎖状、分枝状、環状のいずれであってもよく、より好ましくは炭素数 1 ～ 6 であり、具体例としてメチル基、エチル基、プロピル基、ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、イソプロピル基を挙げることができる。アリール基は、単環でも融合環でもよく、具体例としてフェニル基、ナフチル基を挙げることができる。ヘテロアリール基も、単環でも融合環でもよく、具体例としてピリジル基、ピリダジル基、ピリミジル基、トリアジル基、トリアゾリル基、ベンゾトリアゾリル基を挙げることができる。これらのヘテロアリール基は、ヘテロ原子を介して結合する基であっても、ヘテロアリール環を構成する炭素原子を介して結合する基であってもよい。

20

30

【 0 0 2 2 】

一般式 (1) において、 $R^1 \sim R^5$ のいずれか 1 つが一般式 (1 1) で表される基である場合は、 $R^1 \sim R^3$ のいずれであってもよい。いずれか 2 つが一般式 (1 1) で表される基である場合は、 R^1 と R^3 の組み合わせや、 R^2 と R^4 の組み合わせを例示することができる。いずれか 3 つが一般式 (1 1) で表される基である場合は、 R^1 と R^3 と R^4 の組み合わせを例示することができる。

【 0 0 2 3 】

一般式 (1 1) で表される基が結合しているベンゼン環の 2 つのオルト位のうちのいずれか一方はシアノ基であることが好ましい。2 つのオルト位の両方がシアノ基であってもよい。また、ベンゼン環に一般式 (1 1) で表される基が 2 つ以上結合している場合は、それらのうちの少なくとも 2 つが、一般式 (1 1) で表される基が結合しているベンゼン環の 2 つのオルト位のうちのいずれか一方はシアノ基であるという条件を満たしていることが好ましい。

40

【 0 0 2 4 】

一般式 (1) において、 $R^1 \sim R^5$ の少なくとも 1 つはシアノ基を表し、 $R^1 \sim R^5$ の少なくとも 1 つは上記一般式 (1 1) で表される基を表すが、残りの $R^1 \sim R^5$ は水素原子または置換基を表す。

50

【 0 0 2 5 】

$R^1 \sim R^5$ がとりうる好ましい置換基として、例えばヒドロキシ基、ハロゲン原子、炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、炭素数 1 ~ 20 のアルコキシ基、炭素数 1 ~ 20 のアルキルチオ基、炭素数 1 ~ 20 のアルキル置換アミノ基、炭素数 2 ~ 20 のアシル基、炭素数 6 ~ 40 のアリール基、炭素数 3 ~ 40 のヘテロアリール基、炭素数 2 ~ 10 のアルケニル基、炭素数 2 ~ 10 のアルキニル基、炭素数 2 ~ 10 のアルコキシカルボニル基、炭素数 1 ~ 10 のアルキルスルホニル基、アミド基、炭素数 2 ~ 10 のアルキルアミド基、炭素数 3 ~ 20 のトリアルキルシリル基、炭素数 4 ~ 20 のトリアルキルシリルアルキル基、炭素数 5 ~ 20 のトリアルキルシリルアルケニル基、炭素数 5 ~ 20 のトリアルキルシリルアルキニル基およびニトロ基等が挙げられる。これらの具体例のうち、さらに置換基により置換可能なものは置換されていてもよい。より好ましい置換基は、ヒドロキシ基、ハロゲン原子、炭素数 1 ~ 20 の置換もしくは無置換のアルキル基、炭素数 1 ~ 20 の置換もしくは無置換のアルコキシ基、炭素数 1 ~ 20 の置換もしくは無置換のジアルキルアミノ基、炭素数 6 ~ 40 の置換もしくは無置換のアリール基、炭素数 3 ~ 40 の置換もしくは無置換のヘテロアリール基である。さらに好ましい置換基は、ヒドロキシ基、フッ素原子、塩素原子、炭素数 1 ~ 10 の置換もしくは無置換のアルキル基、炭素数 1 ~ 10 の置換もしくは無置換のアルコキシ基、炭素数 1 ~ 10 の置換もしくは無置換のジアルキルアミノ基、炭素数 6 ~ 15 の置換もしくは無置換のアリール基、炭素数 3 ~ 12 の置換もしくは無置換のヘテロアリール基である。さらになお好ましくは、ヒドロキシ基、フッ素原子、塩素原子である。

10

20

【 0 0 2 6 】

一般式 (1) において、 $R^1 \sim R^5$ のうち水素原子であるものは 3 つ以下であることが好ましく、2 つ以下であることがより好ましく、1 つ以下であることがさらに好ましく、0 であることも好ましい。

【 0 0 2 7 】

好ましい組み合わせとして、例えば、一般式 (1) の $R^1 \sim R^5$ の少なくとも 1 つがシアノ基であり、残りの $R^1 \sim R^5$ が、各々独立にヒドロキシ基、ハロゲン原子、置換もしくは無置換の 9 - カルバゾリル基、置換もしくは無置換の 1 , 2 , 3 , 4 - テトラヒドロ - 9 - カルバゾリル基、置換もしくは無置換の 1 - インドリル基、または置換もしくは無置換のジアリールアミノ基のいずれかである場合を挙げることができる。別の好ましい組み合わせとして、 $R^1 \sim R^5$ の少なくとも 1 つがシアノ基であり、残りの $R^1 \sim R^5$ が、各々独立に置換もしくは無置換の 9 - カルバゾリル基、置換もしくは無置換の 1 , 2 , 3 , 4 - テトラヒドロ - 9 - カルバゾリル基、置換もしくは無置換の 1 - インドリル基、または置換もしくは無置換のジアリールアミノ基のいずれかである場合を挙げることができる。別の好ましい組み合わせとして、一般式 (1) の $R^1 \sim R^5$ の少なくとも 1 つがシアノ基であり、残りの $R^1 \sim R^5$ が、各々独立にヒドロキシ基、ハロゲン原子、置換もしくは無置換の 9 - カルバゾリル基のいずれかである場合を挙げることができる。別の好ましい組み合わせとして、一般式 (1) の $R^1 \sim R^5$ の少なくとも 1 つがシアノ基であり、残りの $R^1 \sim R^5$ が置換もしくは無置換の 9 - カルバゾリル基である場合を挙げることができる。別の好ましい組み合わせとして、一般式 (1) の $R^1 \sim R^5$ の少なくとも 1 つがシアノ基であり、 $R^1 \sim R^5$ の少なくとも 1 つがヒドロキシ基であり、残りの $R^1 \sim R^5$ が置換もしくは無置換の 9 - カルバゾリル基である場合を挙げることができる。別の好ましい組み合わせとして、一般式 (1) の $R^1 \sim R^5$ の少なくとも 1 つがシアノ基であり、 $R^1 \sim R^5$ の少なくとも 1 つがハロゲン原子であり、残りの $R^1 \sim R^5$ が置換もしくは無置換の 9 - カルバゾリル基である場合を挙げることができる。

30

40

【 0 0 2 8 】

以下において、一般式 (1) で表される化合物の具体例を例示するが、本発明において用いることができる一般式 (1) で表される化合物はこれらの具体例によって限定的に解釈されるべきものではない。なお、以下の例示化合物において、一般式 (1 2) ~ (1 5) のいずれかで表される基が分子内に 2 つ以上存在している場合、それらの基はすべて同

50

一の構造を有する。例えば、表 1 の化合物 1 では、一般式 (1) の R^1 、 R^2 、 R^4 および R^5 が一般式 (1 2) で表される基であるが、それらの基はいずれも無置換の 9 - カルバゾリル基である。

【 0 0 2 9 】

【表 1】

化合物 番号	一般式 (1)					一般式 (12)			
	R^1	R^2	R^3	R^4	R^5	R^{31}, R^{38}	R^{32}, R^{37}	R^{33}, R^{36}	R^{34}, R^{35}
1	一般式 (12)	一般式 (12)	CN	一般式 (12)	一般式 (12)	H	H	H	H
2	一般式 (12)	一般式 (12)	CN	一般式 (12)	一般式 (12)	H	CH ₃	H	H
3	一般式 (12)	一般式 (12)	CN	一般式 (12)	一般式 (12)	H	CH ₃ O	H	H
4	一般式 (12)	一般式 (12)	CN	一般式 (12)	一般式 (12)	H	H	CH ₃	H
5	一般式 (12)	一般式 (12)	CN	一般式 (12)	一般式 (12)	H	H	CH ₃ O	H
6	一般式 (12)	一般式 (12)	CN	一般式 (12)	一般式 (12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
7	一般式 (12)	一般式 (12)	CN	一般式 (12)	一般式 (12)	H	H	Cl	H
8	一般式 (12)	一般式 (12)	CN	一般式 (12)	一般式 (12)	H	H	F	H
9	一般式 (12)	一般式 (12)	CN	一般式 (12)	一般式 (12)	H	H	H	CH ₃
10	一般式 (12)	一般式 (12)	CN	一般式 (12)	一般式 (12)	H	H	H	CH ₃ O
11	一般式 (12)	一般式 (12)	CN	一般式 (12)	H	H	H	H	H
12	一般式 (12)	一般式 (12)	CN	一般式 (12)	H	H	CH ₃	H	H
13	一般式 (12)	一般式 (12)	CN	一般式 (12)	H	H	CH ₃ O	H	H
14	一般式 (12)	一般式 (12)	CN	一般式 (12)	H	H	H	CH ₃	H
15	一般式 (12)	一般式 (12)	CN	一般式 (12)	H	H	H	CH ₃ O	H
16	一般式 (12)	一般式 (12)	CN	一般式 (12)	H	H	H	t-C ₄ H ₉	H
17	一般式 (12)	一般式 (12)	CN	一般式 (12)	H	H	H	Cl	H
18	一般式 (12)	一般式 (12)	CN	一般式 (12)	H	H	H	F	H
19	一般式 (12)	一般式 (12)	CN	一般式 (12)	H	H	H	H	CH ₃
20	一般式 (12)	一般式 (12)	CN	一般式 (12)	H	H	H	H	CH ₃ O
21	一般式 (12)	一般式 (12)	CN	H	H	H	H	H	H
22	一般式 (12)	一般式 (12)	CN	H	H	H	CH ₃	H	H
23	一般式 (12)	一般式 (12)	CN	H	H	H	CH ₃ O	H	H
24	一般式 (12)	一般式 (12)	CN	H	H	H	H	CH ₃	H
25	一般式 (12)	一般式 (12)	CN	H	H	H	H	CH ₃ O	H
26	一般式 (12)	一般式 (12)	CN	H	H	H	H	t-C ₄ H ₉	H
27	一般式 (12)	一般式 (12)	CN	H	H	H	H	Cl	H
28	一般式 (12)	一般式 (12)	CN	H	H	H	H	F	H
29	一般式 (12)	一般式 (12)	CN	H	H	H	H	H	CH ₃
30	一般式 (12)	一般式 (12)	CN	H	H	H	H	H	CH ₃ O
31	一般式 (12)	H	CN	一般式 (12)	H	H	H	H	H
32	一般式 (12)	H	CN	一般式 (12)	H	H	CH ₃	H	H
33	一般式 (12)	H	CN	一般式 (12)	H	H	CH ₃ O	H	H
34	一般式 (12)	H	CN	一般式 (12)	H	H	H	CH ₃	H
35	一般式 (12)	H	CN	一般式 (12)	H	H	H	CH ₃ O	H
36	一般式 (12)	H	CN	一般式 (12)	H	H	H	t-C ₄ H ₉	H
37	一般式 (12)	H	CN	一般式 (12)	H	H	H	Cl	H
38	一般式 (12)	H	CN	一般式 (12)	H	H	H	F	H
39	一般式 (12)	H	CN	一般式 (12)	H	H	H	H	CH ₃
40	一般式 (12)	H	CN	一般式 (12)	H	H	H	H	CH ₃ O
41	一般式 (12)	H	CN	H	一般式 (12)	H	H	H	H
42	一般式 (12)	H	CN	H	一般式 (12)	H	CH ₃	H	H
43	一般式 (12)	H	CN	H	一般式 (12)	H	CH ₃ O	H	H
44	一般式 (12)	H	CN	H	一般式 (12)	H	H	CH ₃	H
45	一般式 (12)	H	CN	H	一般式 (12)	H	H	CH ₃ O	H
46	一般式 (12)	H	CN	H	一般式 (12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
47	一般式 (12)	H	CN	H	一般式 (12)	H	H	Cl	H
48	一般式 (12)	H	CN	H	一般式 (12)	H	H	F	H
49	一般式 (12)	H	CN	H	一般式 (12)	H	H	H	CH ₃

10

20

30

50	一般式(12)	H	CN	H	一般式(12)	H	H	H	CH ₃ O
51	一般式(12)	H	CN	H	H	H	H	H	H
52	一般式(12)	H	CN	H	H	H	CH ₃	H	H
53	一般式(12)	H	CN	H	H	H	CH ₃ O	H	H
54	一般式(12)	H	CN	H	H	H	H	CH ₃	H
55	一般式(12)	H	CN	H	H	H	H	CH ₃ O	H
56	一般式(12)	H	CN	H	H	H	H	t-C ₄ H ₉	H
57	一般式(12)	H	CN	H	H	H	H	Cl	H
58	一般式(12)	H	CN	H	H	H	H	F	H
59	一般式(12)	H	CN	H	H	H	H	H	CH ₃
60	一般式(12)	H	CN	H	H	H	H	H	CH ₃ O
61	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	H	H
62	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	CH ₃	H	H
63	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	CH ₃ O	H	H
64	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	CH ₃	H
65	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	CH ₃ O	H
66	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	t-C ₄ H ₉	H
67	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	Cl	H
68	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	F	H
69	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	H	CH ₃
70	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	H	CH ₃ O
71	一般式(12)	一般式(12)	CN	F	F	H	H	H	H
72	一般式(12)	一般式(12)	CN	F	F	H	CH ₃	H	H
73	一般式(12)	一般式(12)	CN	F	F	H	CH ₃ O	H	H
74	一般式(12)	一般式(12)	CN	F	F	H	H	CH ₃	H
75	一般式(12)	一般式(12)	CN	F	F	H	H	CH ₃ O	H
76	一般式(12)	一般式(12)	CN	F	F	H	H	t-C ₄ H ₉	H
77	一般式(12)	一般式(12)	CN	F	F	H	H	Cl	H
78	一般式(12)	一般式(12)	CN	F	F	H	H	F	H
79	一般式(12)	一般式(12)	CN	F	F	H	H	H	CH ₃
80	一般式(12)	一般式(12)	CN	F	F	H	H	H	CH ₃ O
81	一般式(12)	F	CN	一般式(12)	F	H	H	H	H
82	一般式(12)	F	CN	一般式(12)	F	H	CH ₃	H	H
83	一般式(12)	F	CN	一般式(12)	F	H	CH ₃ O	H	H
84	一般式(12)	F	CN	一般式(12)	F	H	H	CH ₃	H
85	一般式(12)	F	CN	一般式(12)	F	H	H	CH ₃ O	H
86	一般式(12)	F	CN	一般式(12)	F	H	H	t-C ₄ H ₉	H
87	一般式(12)	F	CN	一般式(12)	F	H	H	Cl	H
88	一般式(12)	F	CN	一般式(12)	F	H	H	F	H
89	一般式(12)	F	CN	一般式(12)	F	H	H	H	CH ₃
90	一般式(12)	F	CN	一般式(12)	F	H	H	H	CH ₃ O
91	一般式(12)	F	CN	F	一般式(12)	H	H	H	H
92	一般式(12)	F	CN	F	一般式(12)	H	CH ₃	H	H
93	一般式(12)	F	CN	F	一般式(12)	H	CH ₃ O	H	H
94	一般式(12)	F	CN	F	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
95	一般式(12)	F	CN	F	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
96	一般式(12)	F	CN	F	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
97	一般式(12)	F	CN	F	一般式(12)	H	H	Cl	H
98	一般式(12)	F	CN	F	一般式(12)	H	H	F	H
99	一般式(12)	F	CN	F	一般式(12)	H	H	H	CH ₃

10

20

30

100	一般式(12)	F	CN	F	一般式(12)	H	H	H	CH ₃ O
101	一般式(12)	F	CN	F	F	H	H	H	H
102	一般式(12)	F	CN	F	F	H	CH ₃	H	H
103	一般式(12)	F	CN	F	F	H	CH ₃ O	H	H
104	一般式(12)	F	CN	F	F	H	H	CH ₃	H
105	一般式(12)	F	CN	F	F	H	H	CH ₃ O	H
106	一般式(12)	F	CN	F	F	H	H	t-C ₄ H ₉	H
107	一般式(12)	F	CN	F	F	H	H	Cl	H
108	一般式(12)	F	CN	F	F	H	H	F	H
109	一般式(12)	F	CN	F	F	H	H	H	CH ₃
110	一般式(12)	F	CN	F	F	H	H	H	CH ₃ O
111	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	H	H	H	H
112	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	H	CH ₃	H	H
113	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	H	CH ₃ O	H	H
114	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃	H
115	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃ O	H
116	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	H	H	t-C ₄ H ₉	H
117	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	H	H	Cl	H
118	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	H	H	F	H
119	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	H	H	H	CH ₃
120	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	H	H	H	CH ₃ O
121	一般式(12)	一般式(12)	CN	OH	OH	H	H	H	H
122	一般式(12)	一般式(12)	CN	OH	OH	H	CH ₃	H	H
123	一般式(12)	一般式(12)	CN	OH	OH	H	CH ₃ O	H	H
124	一般式(12)	一般式(12)	CN	OH	OH	H	H	CH ₃	H
125	一般式(12)	一般式(12)	CN	OH	OH	H	H	CH ₃ O	H
126	一般式(12)	一般式(12)	CN	OH	OH	H	H	t-C ₄ H ₉	H
127	一般式(12)	一般式(12)	CN	OH	OH	H	H	Cl	H
128	一般式(12)	一般式(12)	CN	OH	OH	H	H	F	H
129	一般式(12)	一般式(12)	CN	OH	OH	H	H	H	CH ₃
130	一般式(12)	一般式(12)	CN	OH	OH	H	H	H	CH ₃ O
131	一般式(12)	OH	CN	一般式(12)	OH	H	H	H	H
132	一般式(12)	OH	CN	一般式(12)	OH	H	CH ₃	H	H
133	一般式(12)	OH	CN	一般式(12)	OH	H	CH ₃ O	H	H
134	一般式(12)	OH	CN	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃	H
135	一般式(12)	OH	CN	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃ O	H
136	一般式(12)	OH	CN	一般式(12)	OH	H	H	t-C ₄ H ₉	H
137	一般式(12)	OH	CN	一般式(12)	OH	H	H	Cl	H
138	一般式(12)	OH	CN	一般式(12)	OH	H	H	F	H
139	一般式(12)	OH	CN	一般式(12)	OH	H	H	H	CH ₃
140	一般式(12)	OH	CN	一般式(12)	OH	H	H	H	CH ₃ O
141	一般式(12)	OH	CN	OH	一般式(12)	H	H	H	H
142	一般式(12)	OH	CN	OH	一般式(12)	H	CH ₃	H	H
143	一般式(12)	OH	CN	OH	一般式(12)	H	CH ₃ O	H	H
144	一般式(12)	OH	CN	OH	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
145	一般式(12)	OH	CN	OH	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
146	一般式(12)	OH	CN	OH	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
147	一般式(12)	OH	CN	OH	一般式(12)	H	H	Cl	H
148	一般式(12)	OH	CN	OH	一般式(12)	H	H	F	H
149	一般式(12)	OH	CN	OH	一般式(12)	H	H	H	CH ₃

10

20

30

150	一般式(12)	OH	CN	OH	一般式(12)	H	H	H	CH ₃ O
151	一般式(12)	OH	CN	OH	OH	H	H	H	H
152	一般式(12)	OH	CN	OH	OH	H	CH ₃	H	H
153	一般式(12)	OH	CN	OH	OH	H	CH ₃ O	H	H
154	一般式(12)	OH	CN	OH	OH	H	H	CH ₃	H
155	一般式(12)	OH	CN	OH	OH	H	H	CH ₃ O	H
156	一般式(12)	OH	CN	OH	OH	H	H	t-C ₄ H ₉	H
157	一般式(12)	OH	CN	OH	OH	H	H	Cl	H
158	一般式(12)	OH	CN	OH	OH	H	H	F	H
159	一般式(12)	OH	CN	OH	OH	H	H	H	CH ₃
160	一般式(12)	OH	CN	OH	OH	H	H	H	CH ₃ O
161	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	H	H	H	H
162	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	H	CH ₃	H	H
163	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	H	CH ₃ O	H	H
164	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	H	H	CH ₃	H
165	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	H	H	CH ₃ O	H
166	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	H	H	t-C ₄ H ₉	H
167	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	H	H	Cl	H
168	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	H	H	F	H
169	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	H	H	H	CH ₃
170	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	H	H	H	CH ₃ O
171	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	H	H
172	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	CH ₃	H	H
173	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	CH ₃ O	H	H
174	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	CH ₃	H
175	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	CH ₃ O	H
176	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	t-C ₄ H ₉	H
177	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	Cl	H
178	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	F	H
179	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	H	CH ₃
180	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	H	CH ₃ O
181	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	H	H	H	H
182	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	H	CH ₃	H	H
183	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	H	CH ₃ O	H	H
184	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	H	H	CH ₃	H
185	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	H	H	CH ₃ O	H
186	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	H	H	t-C ₄ H ₉	H
187	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	H	H	Cl	H
188	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	H	H	F	H
189	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	H	CH ₃
190	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	H	CH ₃ O
191	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	H	H
192	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	H	CH ₃	H	H
193	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	H	CH ₃ O	H	H
194	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	CH ₃	H
195	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	CH ₃ O	H
196	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	t-C ₄ H ₉	H
197	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	Cl	H
198	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	F	H
199	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	H	CH ₃

10

20

30

200	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	H	H	H	CH ₃ O
201	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	H	H	H	H
202	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	H	CH ₃	H	H
203	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	H	CH ₃ O	H	H
204	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	H	H	CH ₃	H
205	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	H	H	CH ₃ O	H
206	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	H	H	t-C ₄ H ₉	H
207	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	H	H	Cl	H
208	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	H	H	F	H
209	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	H	H	H	CH ₃
210	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	H	H	H	CH ₃ O
211	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	H	H	H	H
212	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	H	CH ₃	H	H
213	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	H	CH ₃ O	H	H
214	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	H	H	CH ₃	H
215	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	H	H	CH ₃ O	H
216	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
217	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	H	H	Cl	H
218	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	H	H	F	H
219	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	H	H	H	CH ₃
220	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	H	H	H	CH ₃ O
221	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	H	H	H	H
222	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	H	CH ₃	H	H
223	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	H	CH ₃ O	H	H
224	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	H	H	CH ₃	H
225	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	H	H	CH ₃ O	H
226	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
227	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	H	H	Cl	H
228	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	H	H	F	H
229	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	H	H	H	CH ₃
230	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	H	H	H	CH ₃ O
231	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	H	H	H	H
232	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	H	CH ₃	H	H
233	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	H	CH ₃ O	H	H
234	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	H	H	CH ₃	H
235	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	H	H	CH ₃ O	H
236	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
237	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	H	H	Cl	H
238	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	H	H	F	H
239	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	H	H	H	CH ₃
240	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	H	H	H	CH ₃ O
241	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	H	H	H	H
242	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	H	CH ₃	H	H
243	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	H	CH ₃ O	H	H
244	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	H	H	CH ₃	H
245	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	H	H	CH ₃ O	H
246	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
247	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	H	H	Cl	H
248	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	H	H	F	H
249	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	H	H	H	CH ₃

10

20

30

250	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	H	H	H	CH ₃ O
251	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
252	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
253	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H	H
254	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	H	H	C ₆ H ₅	H
255	一般式(12)	一般式(12)	CN	H	H	H	C ₆ H ₅	H	H
256	一般式(12)	一般式(12)	CN	H	H	H	H	C ₆ H ₅	H
257	一般式(12)	H	CN	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H	H
258	一般式(12)	H	CN	一般式(12)	H	H	H	C ₆ H ₅	H
259	一般式(12)	H	CN	H	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
260	一般式(12)	H	CN	H	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
261	一般式(12)	H	CN	H	H	H	C ₆ H ₅	H	H
262	一般式(12)	H	CN	H	H	H	H	C ₆ H ₅	H
263	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	C ₆ H ₅	H	H
264	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	C ₆ H ₅	H
265	一般式(12)	一般式(12)	CN	F	F	H	C ₆ H ₅	H	H
266	一般式(12)	一般式(12)	CN	F	F	H	H	C ₆ H ₅	H
267	一般式(12)	F	CN	一般式(12)	F	H	C ₆ H ₅	H	H
268	一般式(12)	F	CN	一般式(12)	F	H	H	C ₆ H ₅	H
269	一般式(12)	F	CN	F	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
270	一般式(12)	F	CN	F	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
271	一般式(12)	F	CN	F	F	H	C ₆ H ₅	H	H
272	一般式(12)	F	CN	F	F	H	H	C ₆ H ₅	H
273	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	H	C ₆ H ₅	H	H
274	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
275	一般式(12)	一般式(12)	CN	OH	OH	H	C ₆ H ₅	H	H
276	一般式(12)	一般式(12)	CN	OH	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
277	一般式(12)	OH	CN	一般式(12)	OH	H	C ₆ H ₅	H	H
278	一般式(12)	OH	CN	一般式(12)	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
279	一般式(12)	OH	CN	OH	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
280	一般式(12)	OH	CN	OH	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
281	一般式(12)	OH	CN	OH	OH	H	C ₆ H ₅	H	H
282	一般式(12)	OH	CN	OH	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
283	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	H	C ₆ H ₅	H	H
284	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	H	H	C ₆ H ₅	H
285	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	C ₆ H ₅	H	H
286	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	C ₆ H ₅	H
287	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	H	C ₆ H ₅	H	H
288	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	H	H	C ₆ H ₅	H
289	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	H	C ₆ H ₅	H	H
290	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	C ₆ H ₅	H
291	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	H	C ₆ H ₅	H	H
292	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	H	H	C ₆ H ₅	H
293	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	H	C ₆ H ₅	H	H
294	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	H	H	C ₆ H ₅	H
295	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	H	C ₆ H ₅	H	H
296	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	H	H	C ₆ H ₅	H
297	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	H	C ₆ H ₅	H	H
298	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	H	H	C ₆ H ₅	H
299	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	H	C ₆ H ₅	H	H
300	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	H	H	C ₆ H ₅	H

【 0 0 3 0 】

10

20

30

【表 2】

化合物 番号	一般式(1)					一般式(12)			
	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ³¹ ,R ³⁶	R ³² ,R ³⁷	R ³³ ,R ³⁶	R ³⁴ ,R ³⁵
301	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H
302	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	CH ₃	H	H
303	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	CH ₃ O	H	H
304	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
305	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
306	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
307	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	Cl	H
308	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	F	H
309	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	CH ₃
310	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	CH ₃ O
311	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H	H
312	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	CH ₃	H
313	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	CH ₃ O	H
314	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	H	H
315	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
316	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
317	一般式(12)	CN	H	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H
318	一般式(12)	CN	H	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
319	一般式(12)	CN	H	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
320	H	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H
321	H	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
322	H	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
323	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	H	H	H	H	H
324	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	H	H	H	CH ₃	H
325	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	H	H	H	CH ₃ O	H
326	一般式(12)	CN	H	一般式(12)	H	H	H	H	H
327	一般式(12)	CN	H	一般式(12)	H	H	H	CH ₃	H
328	一般式(12)	CN	H	一般式(12)	H	H	H	CH ₃ O	H
329	H	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H	H
330	H	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	CH ₃	H
331	H	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	CH ₃ O	H
332	一般式(12)	CN	H	H	一般式(12)	H	H	H	H
333	一般式(12)	CN	H	H	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
334	一般式(12)	CN	H	H	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
335	H	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	H	H
336	H	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
337	H	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
338	H	CN	H	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H
339	H	CN	H	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
340	H	CN	H	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
341	一般式(12)	CN	H	H	H	H	H	H	H
342	一般式(12)	CN	H	H	H	H	H	CH ₃	H
343	一般式(12)	CN	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H
344	H	CN	一般式(12)	H	H	H	H	H	H
345	H	CN	一般式(12)	H	H	H	H	CH ₃	H
346	H	CN	一般式(12)	H	H	H	H	CH ₃ O	H
347	H	CN	H	一般式(12)	H	H	H	H	H
348	H	CN	H	一般式(12)	H	H	H	CH ₃	H
349	H	CN	H	一般式(12)	H	H	H	CH ₃ O	H

10

20

30

350	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	H	H
351	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	CH ₃	H
352	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	CH ₃ O	H
353	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	H	H
354	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
355	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
356	一般式(12)	CN	F	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H
357	一般式(12)	CN	F	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
358	一般式(12)	CN	F	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
359	F	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H
360	F	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
361	F	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
362	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	F	H	H	H	H
363	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	F	H	H	CH ₃	H
364	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	F	H	H	CH ₃ O	H
365	一般式(12)	CN	F	一般式(12)	F	H	H	H	H
366	一般式(12)	CN	F	一般式(12)	F	H	H	CH ₃	H
367	一般式(12)	CN	F	一般式(12)	F	H	H	CH ₃ O	H
368	F	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	H	H
369	F	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	CH ₃	H
370	F	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	CH ₃ O	H
371	一般式(12)	CN	F	F	一般式(12)	H	H	H	H
372	一般式(12)	CN	F	F	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
373	一般式(12)	CN	F	F	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
374	F	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	H	H
375	F	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
376	F	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
377	F	CN	F	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H
378	F	CN	F	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
379	F	CN	F	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
380	一般式(12)	CN	F	F	F	H	H	H	H
381	一般式(12)	CN	F	F	F	H	H	CH ₃	H
382	一般式(12)	CN	F	F	F	H	H	CH ₃ O	H
383	F	CN	一般式(12)	F	F	H	H	H	H
384	F	CN	一般式(12)	F	F	H	H	CH ₃	H
385	F	CN	一般式(12)	F	F	H	H	CH ₃ O	H
386	F	CN	F	一般式(12)	F	H	H	H	H
387	F	CN	F	一般式(12)	F	H	H	CH ₃	H
388	F	CN	F	一般式(12)	F	H	H	CH ₃ O	H
389	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	H	H	H	H
390	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃	H
391	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃ O	H
392	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	H	H
393	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
394	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
395	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
396	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	Cl	H
397	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	F	H
398	一般式(12)	CN	OH	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H
399	一般式(12)	CN	OH	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H

10

20

30

400	一般式(12)	CN	OH	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
401	OH	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H
402	OH	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
403	OH	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
404	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	OH	H	H	H	H
405	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	OH	H	H	CH ₃	H
406	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	OH	H	H	CH ₃ O	H
407	一般式(12)	CN	OH	一般式(12)	OH	H	H	H	H
408	一般式(12)	CN	OH	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃	H
409	一般式(12)	CN	OH	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃ O	H
410	OH	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	H	H	H	H
411	OH	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃	H
412	OH	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃ O	H
413	一般式(12)	CN	OH	OH	一般式(12)	H	H	H	H
414	一般式(12)	CN	OH	OH	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
415	一般式(12)	CN	OH	OH	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
416	OH	CN	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	H	H
417	OH	CN	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
418	OH	CN	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
419	OH	CN	OH	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H
420	OH	CN	OH	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
421	OH	CN	OH	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
422	一般式(12)	CN	OH	OH	OH	H	H	H	H
423	一般式(12)	CN	OH	OH	OH	H	H	CH ₃	H
424	一般式(12)	CN	OH	OH	OH	H	H	CH ₃ O	H
425	OH	CN	一般式(12)	OH	OH	H	H	H	H
426	OH	CN	一般式(12)	OH	OH	H	H	CH ₃	H
427	OH	CN	一般式(12)	OH	OH	H	H	CH ₃ O	H
428	OH	CN	OH	一般式(12)	OH	H	H	H	H
429	OH	CN	OH	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃	H
430	OH	CN	OH	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃ O	H
431	OH	CN	OH	OH	一般式(12)	H	H	H	H
432	OH	CN	OH	OH	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
433	OH	CN	OH	OH	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
434	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	一般式(12)	H	H	H	H
435	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
436	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
437	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
438	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	一般式(12)	H	H	Cl	H
439	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	一般式(12)	H	H	F	H
440	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	H	H
441	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
442	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
443	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
444	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	Cl	H
445	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	F	H
446	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	一般式(12)	H	H	H	H
447	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
448	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
449	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H

10

20

30

450	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	一般式(12)	H	H	Cl	H
451	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	一般式(12)	H	H	F	H
452	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	H	H
453	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
454	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
455	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
456	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	Cl	H
457	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	F	H
458	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	一般式(12)	H	H	H	H
459	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
460	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
461	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
462	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	一般式(12)	H	H	Cl	H
463	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	一般式(12)	H	H	F	H
464	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	一般式(12)	H	H	H	H
465	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
466	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
467	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
468	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	一般式(12)	H	H	Cl	H
469	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	一般式(12)	H	H	F	H
470	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	一般式(12)	H	H	H	H
471	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
472	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
473	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
474	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	一般式(12)	H	H	Cl	H
475	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	一般式(12)	H	H	F	H
476	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	一般式(12)	H	H	H	H
477	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
478	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
479	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
480	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	一般式(12)	H	H	Cl	H
481	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	一般式(12)	H	H	F	H
482	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	一般式(12)	H	H	H	H
483	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
484	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
485	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
486	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	一般式(12)	H	H	Cl	H
487	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	一般式(12)	H	H	F	H
488	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
489	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
490	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H	H
491	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	C ₆ H ₅	H
492	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
493	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
494	一般式(12)	CN	H	一般式(12)	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
495	一般式(12)	CN	H	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
496	H	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
497	H	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
498	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	H	H	C ₆ H ₅	H	H
499	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	H	H	H	C ₆ H ₅	H

10

20

30

500-1	一般式(12)	CN	H	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H	H
500-2	一般式(12)	CN	H	一般式(12)	H	H	H	C ₆ H ₅	H
500-3	H	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H	H
500-4	H	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	C ₆ H ₅	H
500-5	一般式(12)	CN	H	H	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
500-6	一般式(12)	CN	H	H	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-7	H	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
500-8	H	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-9	H	CN	H	一般式(12)	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
500-10	H	CN	H	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-11	一般式(12)	CN	H	H	H	H	C ₆ H ₅	H	H
500-12	一般式(12)	CN	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅	H
500-13	H	CN	一般式(12)	H	H	H	C ₆ H ₅	H	H
500-14	H	CN	一般式(12)	H	H	H	H	C ₆ H ₅	H
500-15	H	CN	H	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H	H
500-16	H	CN	H	一般式(12)	H	H	H	C ₆ H ₅	H
500-17	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	C ₆ H ₅	H
500-18	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-19	一般式(12)	CN	F	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-20	F	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-21	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	F	H	H	C ₆ H ₅	H
500-22	一般式(12)	CN	F	一般式(12)	F	H	H	C ₆ H ₅	H
500-23	F	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	C ₆ H ₅	H
500-24	一般式(12)	CN	F	F	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-25	F	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-26	F	CN	F	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-27	一般式(12)	CN	F	F	F	H	H	C ₆ H ₅	H
500-28	F	CN	一般式(12)	F	F	H	H	C ₆ H ₅	H
500-29	F	CN	F	一般式(12)	F	H	H	C ₆ H ₅	H
500-30	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
500-31	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-32	一般式(12)	CN	OH	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-33	OH	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-34	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
500-35	一般式(12)	CN	OH	一般式(12)	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
500-36	OH	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
500-37	一般式(12)	CN	OH	OH	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-38	OH	CN	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-39	OH	CN	OH	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-40	一般式(12)	CN	OH	OH	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
500-41	OH	CN	一般式(12)	OH	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
500-42	OH	CN	OH	一般式(12)	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
500-43	OH	CN	OH	OH	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-44	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-45	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-46	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-47	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-48	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-49	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-50	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-51	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-52	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H

【 0 0 3 1 】

10

20

30

【表 3】

化合物 番号	一般式(1)					一般式(12)			
	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ³¹ ,R ³⁸	R ³² ,R ³⁷	R ³³ ,R ³⁶	R ³⁴ ,R ³⁵
501	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H
502	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	CH ₃	H	H
503	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	CH ₃ O	H	H
504	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
505	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
506	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
507	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	Cl	H
508	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	F	H
509	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	CH ₃
510	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	CH ₃ O
511	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H	H
512	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	CH ₃	H
513	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	CH ₃ O	H
514	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	H	H
515	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
516	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
517	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H	H	H
518	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H	CH ₃	H
519	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H	CH ₃ O	H
520	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	H	H	H
521	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	H	CH ₃	H
522	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	H	CH ₃ O	H
523	CN	H	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H	H
524	CN	H	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	CH ₃	H
525	CN	H	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	CH ₃ O	H
526	CN	一般式(12)	H	H	一般式(12)	H	H	H	H
527	CN	一般式(12)	H	H	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
528	CN	一般式(12)	H	H	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
529	CN	一般式(12)	H	H	H	H	H	H	H
530	CN	一般式(12)	H	H	H	H	H	CH ₃	H
531	CN	一般式(12)	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H
532	CN	H	一般式(12)	H	H	H	H	H	H
533	CN	H	一般式(12)	H	H	H	H	CH ₃	H
534	CN	H	一般式(12)	H	H	H	H	CH ₃ O	H
535	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	H	H
536	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	CH ₃	H
537	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	CH ₃ O	H
538	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	H	H
539	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
540	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
541	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	F	H	H	H	H
542	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	F	H	H	CH ₃	H
543	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	F	H	H	CH ₃ O	H
544	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	F	H	H	H	H
545	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	F	H	H	CH ₃	H
546	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	F	H	H	CH ₃ O	H
547	CN	F	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	H	H
548	CN	F	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	CH ₃	H
549	CN	F	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	CH ₃ O	H

10

20

30

550	CN	一般式(12)	F	F	一般式(12)	H	H	H	H
551	CN	一般式(12)	F	F	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
552	CN	一般式(12)	F	F	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
553	CN	一般式(12)	F	F	F	H	H	H	H
554	CN	一般式(12)	F	F	F	H	H	CH ₃	H
555	CN	一般式(12)	F	F	F	H	H	CH ₃ O	H
556	CN	F	一般式(12)	F	F	H	H	H	H
557	CN	F	一般式(12)	F	F	H	H	CH ₃	H
558	CN	F	一般式(12)	F	F	H	H	CH ₃ O	H
559	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	OH	H	H	H	H
560	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃	H
561	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃ O	H
562	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	H	H
563	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
564	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
565	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	Cl	H
566	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	F	H
567	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	OH	H	H	H	H
568	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	OH	H	H	CH ₃	H
569	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	OH	H	H	CH ₃ O	H
570	CN	一般式(12)	OH	一般式(12)	OH	H	H	H	H
571	CN	一般式(12)	OH	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃	H
572	CN	一般式(12)	OH	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃ O	H
573	CN	OH	一般式(12)	一般式(12)	OH	H	H	H	H
574	CN	OH	一般式(12)	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃	H
575	CN	OH	一般式(12)	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃ O	H
576	CN	一般式(12)	OH	OH	一般式(12)	H	H	H	H
577	CN	一般式(12)	OH	OH	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
578	CN	一般式(12)	OH	OH	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
579	CN	一般式(12)	OH	OH	OH	H	H	H	H
580	CN	一般式(12)	OH	OH	OH	H	H	CH ₃	H
581	CN	一般式(12)	OH	OH	OH	H	H	CH ₃ O	H
582	CN	OH	一般式(12)	OH	OH	H	H	H	H
583	CN	OH	一般式(12)	OH	OH	H	H	CH ₃	H
584	CN	OH	一般式(12)	OH	OH	H	H	CH ₃ O	H
585	CN	一般式(12)	一般式(12)	Cl	一般式(12)	H	H	H	H
586	CN	一般式(12)	一般式(12)	Cl	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
587	CN	一般式(12)	一般式(12)	Cl	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
588	CN	一般式(12)	一般式(12)	Cl	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
589	CN	一般式(12)	一般式(12)	Cl	一般式(12)	H	H	Cl	H
590	CN	一般式(12)	一般式(12)	Cl	一般式(12)	H	H	F	H
591	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	H	H
592	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
593	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
594	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
595	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	Cl	H
596	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	F	H
597	CN	一般式(12)	一般式(12)	CH ₃ O	一般式(12)	H	H	H	H
598	CN	一般式(12)	一般式(12)	CH ₃ O	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
599	CN	一般式(12)	一般式(12)	CH ₃ O	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H

10

20

30

600	CN	一般式(12)	一般式(12)	CH ₃ O	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
601	CN	一般式(12)	一般式(12)	CH ₃ O	一般式(12)	H	H	Cl	H
602	CN	一般式(12)	一般式(12)	CH ₃ O	一般式(12)	H	H	F	H
603	CN	一般式(12)	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	H	H
604	CN	一般式(12)	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
605	CN	一般式(12)	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
606	CN	一般式(12)	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
607	CN	一般式(12)	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	Cl	H
608	CN	一般式(12)	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	F	H
609	CN	一般式(12)	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	一般式(12)	H	H	H	H
610	CN	一般式(12)	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
611	CN	一般式(12)	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
612	CN	一般式(12)	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
613	CN	一般式(12)	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	一般式(12)	H	H	Cl	H
614	CN	一般式(12)	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	一般式(12)	H	H	F	H
615	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(21)	一般式(12)	H	H	H	H
616	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(21)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
617	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(21)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
618	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(21)	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
619	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(21)	一般式(12)	H	H	Cl	H
620	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(21)	一般式(12)	H	H	F	H
621	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(22)	一般式(12)	H	H	H	H
622	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(22)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
623	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(22)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
624	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(22)	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
625	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(22)	一般式(12)	H	H	Cl	H
626	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(22)	一般式(12)	H	H	F	H
627	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(23)	一般式(12)	H	H	H	H
628	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(23)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
629	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(23)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
630	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(23)	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
631	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(23)	一般式(12)	H	H	Cl	H
632	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(23)	一般式(12)	H	H	F	H
633	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(24)	一般式(12)	H	H	H	H
634	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(24)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
635	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(24)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
636	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(24)	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
637	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(24)	一般式(12)	H	H	Cl	H
638	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(24)	一般式(12)	H	H	F	H
639	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
640	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
641	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H	H
642	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	C ₆ H ₅	H
643	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
644	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
645	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	C ₆ H ₅	H	H
646	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H	C ₆ H ₅	H
647	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H	H
648	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	H	C ₆ H ₅	H
649	CN	H	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H	H

10

20

30

650	CN	H	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	C ₆ H ₅	H
651	CN	H	H	一般式(12)	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
652	CN	H	H	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
653	CN	一般式(12)	H	H	H	H	C ₆ H ₅	H	H
654	CN	一般式(12)	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅	H
655	CN	H	一般式(12)	H	H	H	C ₆ H ₅	H	H
656	CN	H	一般式(12)	H	H	H	H	C ₆ H ₅	H
657	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	C ₆ H ₅	H
658	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
659	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	F	H	H	C ₆ H ₅	H
660	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	F	H	H	C ₆ H ₅	H
661	CN	F	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	C ₆ H ₅	H
662	CN	F	F	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
663	CN	一般式(12)	F	F	F	H	H	C ₆ H ₅	H
664	CN	F	一般式(12)	F	F	H	H	C ₆ H ₅	H
665	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
666	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
667	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
668	CN	一般式(12)	OH	一般式(12)	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
669	CN	OH	一般式(12)	一般式(12)	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
670	CN	OH	OH	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
671	CN	一般式(12)	OH	OH	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
672	CN	OH	一般式(12)	OH	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
673	CN	一般式(12)	一般式(12)	Cl	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
674	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
675	CN	一般式(12)	一般式(12)	CH ₃ O	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
676	CN	一般式(12)	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
677	CN	一般式(12)	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
678	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(21)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
679	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(22)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
680	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(23)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
681	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(24)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H

10

20

【 0 0 3 2 】

【表 4】

化合物 番号	一般式(1)					一般式(13)					
	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ⁴¹	R ⁴²	R ⁴³	R ⁴⁴	R ⁴⁵	R ⁴⁶
701	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	H	H
702	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	CH ₃	H	H	H	H
703	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	CH ₃ O	H	H	H	H
704	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	CH ₃	H	H	H
705	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	CH ₃ O	H	H	H
706	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H
707	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	Cl	H	H	H
708	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	F	H	H	H
709	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	CH ₃	H	H
710	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	CH ₃ O	H	H
711	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	CH ₃	H
712	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	CH ₃ O	H
713	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	t-C ₄ H ₉	H
714	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	Cl	H
715	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	F	H
716	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	C ₆ H ₅	H
717	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	p-CH ₃ C ₆ H ₄	H
718	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	2,4,6-(CH ₃) ₃ C ₆ H ₂	H
719	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	p-CH ₃ OC ₆ H ₄	H
720	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	p-(CH ₃) ₂ NC ₆ H ₄	H
721	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	p-FC ₆ H ₄	H
722	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	p-CNC ₆ H ₄	H
723	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	H	CH ₃
724	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	H	CH ₃ O
725	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	H	t-C ₄ H ₉
726	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	H	Cl
727	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	H	F
728	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅
729	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	H	p-CH ₃ C ₆ H ₄
730	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	H	2,4,6-(CH ₃) ₃ C ₆ H ₂
731	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	H	p-CH ₃ OC ₆ H ₄
732	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	H	p-(CH ₃) ₂ NC ₆ H ₄
733	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	H	p-FC ₆ H ₄
734	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	H	p-CNC ₆ H ₄
735	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	H	H	H	H	H	H	H
736	一般式(13)	一般式(13)	CN	H	一般式(13)	H	H	H	H	H	H
737	一般式(13)	一般式(13)	CN	H	H	H	H	H	H	H	H
738	一般式(13)	H	CN	一般式(13)	H	H	H	H	H	H	H
739	H	一般式(13)	CN	一般式(13)	H	H	H	H	H	H	H
740	一般式(13)	H	CN	H	H	H	H	H	H	H	H
741	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	F	H	H	H	H	H	H
742	一般式(13)	一般式(13)	CN	F	一般式(13)	H	H	H	H	H	H
743	一般式(13)	一般式(13)	CN	F	F	H	H	H	H	H	H
744	一般式(13)	F	CN	一般式(13)	F	H	H	H	H	H	H
745	F	一般式(13)	CN	一般式(13)	F	H	H	H	H	H	H
746	一般式(13)	F	CN	F	F	H	H	H	H	H	H
747	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	OH	H	H	H	H	H	H
748	一般式(13)	一般式(13)	CN	OH	一般式(13)	H	H	H	H	H	H
749	一般式(13)	一般式(13)	CN	OH	OH	H	H	H	H	H	H
750	一般式(13)	OH	CN	一般式(13)	OH	H	H	H	H	H	H

10

20

30

751	OH	一般式(13)	CN	一般式(13)	OH	H	H	H	H	H	H
752	一般式(13)	OH	CN	OH	OH	H	H	H	H	H	H
753	一般式(13)	一般式(13)	CN	Cl	一般式(13)	H	H	H	H	H	H
754	一般式(13)	一般式(13)	CN	Cl	一般式(13)	H	H	CH ₃	H	H	H
755	一般式(13)	一般式(13)	CN	Cl	一般式(13)	H	H	CH ₃ O	H	H	H
756	一般式(13)	一般式(13)	CN	Cl	一般式(13)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H
757	一般式(13)	一般式(13)	CN	Cl	一般式(13)	H	H	Cl	H	H	H
758	一般式(13)	一般式(13)	CN	Cl	一般式(13)	H	H	F	H	H	H
759	一般式(13)	一般式(13)	CN	F	一般式(13)	H	H	H	H	H	H
760	一般式(13)	一般式(13)	CN	F	一般式(13)	H	H	CH ₃	H	H	H
761	一般式(13)	一般式(13)	CN	F	一般式(13)	H	H	CH ₃ O	H	H	H
762	一般式(13)	一般式(13)	CN	F	一般式(13)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H
763	一般式(13)	一般式(13)	CN	F	一般式(13)	H	H	Cl	H	H	H
764	一般式(13)	一般式(13)	CN	F	一般式(13)	H	H	F	H	H	H
765	一般式(13)	一般式(13)	CN	CH ₃ O	一般式(13)	H	H	H	H	H	H
766	一般式(13)	一般式(13)	CN	CH ₃ O	一般式(13)	H	H	CH ₃	H	H	H
767	一般式(13)	一般式(13)	CN	CH ₃ O	一般式(13)	H	H	CH ₃ O	H	H	H
768	一般式(13)	一般式(13)	CN	CH ₃ O	一般式(13)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H
769	一般式(13)	一般式(13)	CN	CH ₃ O	一般式(13)	H	H	Cl	H	H	H
770	一般式(13)	一般式(13)	CN	CH ₃ O	一般式(13)	H	H	F	H	H	H
771	一般式(13)	一般式(13)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(13)	H	H	H	H	H	H
772	一般式(13)	一般式(13)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(13)	H	H	CH ₃	H	H	H
773	一般式(13)	一般式(13)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(13)	H	H	CH ₃ O	H	H	H
774	一般式(13)	一般式(13)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(13)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H
775	一般式(13)	一般式(13)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(13)	H	H	Cl	H	H	H
776	一般式(13)	一般式(13)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(13)	H	H	F	H	H	H
777	一般式(13)	一般式(13)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(13)	H	H	H	H	H	H
778	一般式(13)	一般式(13)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(13)	H	H	CH ₃	H	H	H
779	一般式(13)	一般式(13)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(13)	H	H	CH ₃ O	H	H	H
780	一般式(13)	一般式(13)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(13)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H
781	一般式(13)	一般式(13)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(13)	H	H	Cl	H	H	H
782	一般式(13)	一般式(13)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(13)	H	H	F	H	H	H
783	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(21)	一般式(13)	H	H	H	H	H	H
784	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(21)	一般式(13)	H	H	CH ₃	H	H	H
785	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(21)	一般式(13)	H	H	CH ₃ O	H	H	H
786	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(21)	一般式(13)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H
787	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(21)	一般式(13)	H	H	Cl	H	H	H
788	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(21)	一般式(13)	H	H	F	H	H	H
789	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(22)	一般式(13)	H	H	H	H	H	H
790	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(22)	一般式(13)	H	H	CH ₃	H	H	H
791	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(22)	一般式(13)	H	H	CH ₃ O	H	H	H
792	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(22)	一般式(13)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H
793	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(22)	一般式(13)	H	H	Cl	H	H	H
794	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(22)	一般式(13)	H	H	F	H	H	H
795	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(23)	一般式(13)	H	H	H	H	H	H
796	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(23)	一般式(13)	H	H	CH ₃	H	H	H
797	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(23)	一般式(13)	H	H	CH ₃ O	H	H	H
798	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(23)	一般式(13)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H
799	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(23)	一般式(13)	H	H	Cl	H	H	H
800	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(23)	一般式(13)	H	H	F	H	H	H
801	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(24)	一般式(13)	H	H	H	H	H	H
802	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(24)	一般式(13)	H	H	CH ₃	H	H	H
803	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(24)	一般式(13)	H	H	CH ₃ O	H	H	H
804	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(24)	一般式(13)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H
805	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(24)	一般式(13)	H	H	Cl	H	H	H
806	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(24)	一般式(13)	H	H	F	H	H	H

10

20

30

【 0 0 3 3 】

【表 5】

化合物 番号	一般式(1)					一般式(14)								
	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ⁵²	R ⁵³	R ⁵⁴	R ⁵⁵	R ⁵⁷	R ⁵⁹	R ⁶¹	R ⁵¹ , R ⁵³ , R ⁵⁵ , R ⁵⁰ , R ⁶²	
901	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H	H
902	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H	H
903	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H	H	H
904	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
905	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H	H
906	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H	H	H	H
907	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	Cl	H	H	H	H	H	H	H
908	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	F	H	H	H	H	H	H	H
909	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H
910	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H
911	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
912	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H
913	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	H	H	H	CH ₃	H	H	H	H
914	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
915	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	H	H	H	H	CH ₃	H	H	H
916	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
917	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	CH ₃	H	H
918	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H
919	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
920	一般式(14)	一般式(14)	CN	H	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H	H
921	一般式(14)	一般式(14)	CN	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
922	一般式(14)	H	CN	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
923	H	一般式(14)	CN	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
924	一般式(14)	H	CN	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
925	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	F	H	H	H	H	H	H	H	H	H
926	一般式(14)	一般式(14)	CN	F	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H	H
927	一般式(14)	一般式(14)	CN	F	F	H	H	H	H	H	H	H	H	H
928	一般式(14)	F	CN	一般式(14)	F	H	H	H	H	H	H	H	H	H
929	F	一般式(14)	CN	一般式(14)	F	H	H	H	H	H	H	H	H	H
930	一般式(14)	F	CN	F	F	H	H	H	H	H	H	H	H	H
931	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	OH	H	H	H	H	H	H	H	H	H
932	一般式(14)	一般式(14)	CN	OH	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H	H
933	一般式(14)	一般式(14)	CN	OH	OH	H	H	H	H	H	H	H	H	H
934	一般式(14)	OH	CN	一般式(14)	OH	H	H	H	H	H	H	H	H	H
935	OH	一般式(14)	CN	一般式(14)	OH	H	H	H	H	H	H	H	H	H
936	一般式(14)	OH	CN	OH	OH	H	H	H	H	H	H	H	H	H
937	一般式(14)	一般式(14)	CN	Cl	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H	H
938	一般式(14)	一般式(14)	CN	Cl	一般式(14)	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
939	一般式(14)	一般式(14)	CN	Cl	一般式(14)	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H	H
940	一般式(14)	一般式(14)	CN	Cl	一般式(14)	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H	H	H	H
941	一般式(14)	一般式(14)	CN	Cl	一般式(14)	H	Cl	H	H	H	H	H	H	H
942	一般式(14)	一般式(14)	CN	Cl	一般式(14)	H	F	H	H	H	H	H	H	H
943	一般式(14)	一般式(14)	CN	F	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H	H
944	一般式(14)	一般式(14)	CN	F	一般式(14)	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
945	一般式(14)	一般式(14)	CN	F	一般式(14)	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H	H
946	一般式(14)	一般式(14)	CN	F	一般式(14)	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H	H	H	H
947	一般式(14)	一般式(14)	CN	F	一般式(14)	H	Cl	H	H	H	H	H	H	H
948	一般式(14)	一般式(14)	CN	F	一般式(14)	H	F	H	H	H	H	H	H	H
949	一般式(14)	一般式(14)	CN	CH ₃ O	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H	H

10

20

30

950	一般式(14)	一般式(14)	CN	CH ₃ O	一般式(14)	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H
951	一般式(14)	一般式(14)	CN	CH ₃ O	一般式(14)	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H
952	一般式(14)	一般式(14)	CN	CH ₃ O	一般式(14)	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H	H	H
953	一般式(14)	一般式(14)	CN	CH ₃ O	一般式(14)	H	Cl	H	H	H	H	H	H
954	一般式(14)	一般式(14)	CN	CH ₃ O	一般式(14)	H	F	H	H	H	H	H	H
955	一般式(14)	一般式(14)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H
956	一般式(14)	一般式(14)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(14)	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H
957	一般式(14)	一般式(14)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(14)	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H
958	一般式(14)	一般式(14)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(14)	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H	H	H
959	一般式(14)	一般式(14)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(14)	H	Cl	H	H	H	H	H	H
960	一般式(14)	一般式(14)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(14)	H	F	H	H	H	H	H	H
961	一般式(14)	一般式(14)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H
962	一般式(14)	一般式(14)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(14)	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H
963	一般式(14)	一般式(14)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(14)	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H
964	一般式(14)	一般式(14)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(14)	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H	H	H
965	一般式(14)	一般式(14)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(14)	H	Cl	H	H	H	H	H	H
966	一般式(14)	一般式(14)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(14)	H	F	H	H	H	H	H	H
967	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(21)	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H
968	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(21)	一般式(14)	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H
969	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(21)	一般式(14)	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H
970	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(21)	一般式(14)	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H	H	H
971	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(21)	一般式(14)	H	Cl	H	H	H	H	H	H
972	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(21)	一般式(14)	H	F	H	H	H	H	H	H
973	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(22)	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H
974	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(22)	一般式(14)	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H
975	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(22)	一般式(14)	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H
976	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(22)	一般式(14)	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H	H	H
977	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(22)	一般式(14)	H	Cl	H	H	H	H	H	H
978	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(22)	一般式(14)	H	F	H	H	H	H	H	H
979	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(23)	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H
980	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(23)	一般式(14)	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H
981	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(23)	一般式(14)	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H
982	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(23)	一般式(14)	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H	H	H
983	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(23)	一般式(14)	H	Cl	H	H	H	H	H	H
984	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(23)	一般式(14)	H	F	H	H	H	H	H	H
985	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(24)	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H
986	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(24)	一般式(14)	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H
987	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(24)	一般式(14)	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H
988	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(24)	一般式(14)	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H	H	H
989	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(24)	一般式(14)	H	Cl	H	H	H	H	H	H
990	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(24)	一般式(14)	H	F	H	H	H	H	H	H

10

20

【 0 0 3 4 】

【表 6】

化合物 番号	一般式(1)					一般式(15)				
	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ⁷¹ ,R ⁸⁰	R ⁷² ,R ⁷⁹	R ⁷³ ,R ⁷⁸	R ⁷⁴ ,R ⁷⁷	R ⁷⁵ ,R ⁷⁶
1001	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	一般式(15)	H	H	H	H	H
1002	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	一般式(15)	H	CH ₃	H	H	H
1003	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	一般式(15)	H	CH ₃ O	H	H	H
1004	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	一般式(15)	H	C ₆ H ₅	H	H	H
1005	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	一般式(15)	H	CH ₃	H	CH ₃	H
1006	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	一般式(15)	H	CH ₃ O	H	CH ₃ O	H
1007	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	一般式(15)	H	C ₆ H ₅	H	C ₆ H ₅	H
1008	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	一般式(15)	H	H	CH ₃	H	H
1009	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	一般式(15)	H	H	CH ₃ O	H	H
1010	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	一般式(15)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
1011	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	一般式(15)	H	H	Cl	H	H
1012	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	一般式(15)	H	H	F	H	H
1013	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	一般式(15)	H	H	C ₆ H ₅	H	H
1014	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	一般式(15)	H	H	p-C ₆ H ₄ -C ₆ H ₄	H	H
1015	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	H	H	H	H	H	H
1016	一般式(15)	一般式(15)	CN	H	一般式(15)	H	H	H	H	H
1017	一般式(15)	一般式(15)	CN	H	H	H	H	H	H	H
1018	一般式(15)	H	CN	一般式(15)	H	H	H	H	H	H
1019	H	一般式(15)	CN	一般式(15)	H	H	H	H	H	H
1020	一般式(15)	H	CN	H	H	H	H	H	H	H
1021	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	F	H	H	H	H	H
1022	一般式(15)	一般式(15)	CN	F	一般式(15)	H	H	H	H	H
1023	一般式(15)	一般式(15)	CN	F	F	H	H	H	H	H
1024	一般式(15)	F	CN	一般式(15)	F	H	H	H	H	H
1025	F	一般式(15)	CN	一般式(15)	F	H	H	H	H	H
1026	一般式(15)	F	CN	F	F	H	H	H	H	H
1027	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	OH	H	H	H	H	H
1028	一般式(15)	一般式(15)	CN	OH	一般式(15)	H	H	H	H	H
1029	一般式(15)	一般式(15)	CN	OH	OH	H	H	H	H	H
1030	一般式(15)	OH	CN	一般式(15)	OH	H	H	H	H	H
1031	OH	一般式(15)	CN	一般式(15)	OH	H	H	H	H	H
1032	一般式(15)	OH	CN	OH	OH	H	H	H	H	H
1033	一般式(15)	一般式(15)	CN	Cl	一般式(15)	H	H	H	H	H
1034	一般式(15)	一般式(15)	CN	Cl	一般式(15)	H	H	CH ₃	H	H
1035	一般式(15)	一般式(15)	CN	Cl	一般式(15)	H	H	CH ₃ O	H	H
1036	一般式(15)	一般式(15)	CN	Cl	一般式(15)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
1037	一般式(15)	一般式(15)	CN	Cl	一般式(15)	H	H	Cl	H	H
1038	一般式(15)	一般式(15)	CN	Cl	一般式(15)	H	H	F	H	H
1039	一般式(15)	一般式(15)	CN	F	一般式(15)	H	H	H	H	H
1040	一般式(15)	一般式(15)	CN	F	一般式(15)	H	H	CH ₃	H	H
1041	一般式(15)	一般式(15)	CN	F	一般式(15)	H	H	CH ₃ O	H	H
1042	一般式(15)	一般式(15)	CN	F	一般式(15)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
1043	一般式(15)	一般式(15)	CN	F	一般式(15)	H	H	Cl	H	H
1044	一般式(15)	一般式(15)	CN	F	一般式(15)	H	H	F	H	H
1045	一般式(15)	一般式(15)	CN	CH ₃ O	一般式(15)	H	H	H	H	H

10

20

1046	一般式(15)	一般式(15)	CN	CH ₃ O	一般式(15)	H	H	CH ₃	H	H
1047	一般式(15)	一般式(15)	CN	CH ₃ O	一般式(15)	H	H	CH ₃ O	H	H
1048	一般式(15)	一般式(15)	CN	CH ₃ O	一般式(15)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
1049	一般式(15)	一般式(15)	CN	CH ₃ O	一般式(15)	H	H	Cl	H	H
1050	一般式(15)	一般式(15)	CN	CH ₃ O	一般式(15)	H	H	F	H	H
1051	一般式(15)	一般式(15)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(15)	H	H	H	H	H
1052	一般式(15)	一般式(15)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(15)	H	H	CH ₃	H	H
1053	一般式(15)	一般式(15)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(15)	H	H	CH ₃ O	H	H
1054	一般式(15)	一般式(15)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(15)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
1055	一般式(15)	一般式(15)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(15)	H	H	Cl	H	H
1056	一般式(15)	一般式(15)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(15)	H	H	F	H	H
1057	一般式(15)	一般式(15)	CN	C ₆ H ₅ O	一般式(15)	H	H	H	H	H
1058	一般式(15)	一般式(15)	CN	C ₆ H ₅ O	一般式(15)	H	H	CH ₃	H	H
1059	一般式(15)	一般式(15)	CN	C ₆ H ₅ O	一般式(15)	H	H	CH ₃ O	H	H
1060	一般式(15)	一般式(15)	CN	C ₆ H ₅ O	一般式(15)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
1061	一般式(15)	一般式(15)	CN	C ₆ H ₅ O	一般式(15)	H	H	Cl	H	H
1062	一般式(15)	一般式(15)	CN	C ₆ H ₅ O	一般式(15)	H	H	F	H	H
1063	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(21)	一般式(15)	H	H	H	H	H
1064	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(21)	一般式(15)	H	H	CH ₃	H	H
1065	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(21)	一般式(15)	H	H	CH ₃ O	H	H
1066	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(21)	一般式(15)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
1067	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(21)	一般式(15)	H	H	Cl	H	H
1068	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(21)	一般式(15)	H	H	F	H	H
1069	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(22)	一般式(15)	H	H	H	H	H
1070	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(22)	一般式(15)	H	H	CH ₃	H	H
1071	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(22)	一般式(15)	H	H	CH ₃ O	H	H
1072	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(22)	一般式(15)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
1073	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(22)	一般式(15)	H	H	Cl	H	H
1074	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(22)	一般式(15)	H	H	F	H	H
1075	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(23)	一般式(15)	H	H	H	H	H
1076	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(23)	一般式(15)	H	H	CH ₃	H	H
1077	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(23)	一般式(15)	H	H	CH ₃ O	H	H
1078	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(23)	一般式(15)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
1079	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(23)	一般式(15)	H	H	Cl	H	H
1080	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(23)	一般式(15)	H	H	F	H	H
1081	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(24)	一般式(15)	H	H	H	H	H
1082	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(24)	一般式(15)	H	H	CH ₃	H	H
1083	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(24)	一般式(15)	H	H	CH ₃ O	H	H
1084	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(24)	一般式(15)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
1085	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(24)	一般式(15)	H	H	Cl	H	H
1086	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(24)	一般式(15)	H	H	F	H	H

10

20

【0035】

一般式(1)で表される化合物の分子量は、例えば一般式(1)で表される化合物を含む有機層を蒸着法により製膜して利用することを意図する場合には、1500以下であることが好ましく、1200以下であることがより好ましく、1000以下であることがさらに好ましく、800以下であることがさらに好ましい。分子量の下限値は、通常247以上であり、好ましくは290以上である。

30

【0036】

本発明を応用して、分子内に一般式(1)で表される構造を複数個含む化合物を、有機発光素子の発光層に用いることも考えられる。

例えば、一般式(1)で表される構造を有する重合性モノマーを重合させた重合体を、有機発光素子の発光層に用いることが考えられる。具体的には、一般式(1)のR¹~R⁵のいずれかに重合性官能基を有するモノマーを用意して、これを単独で重合させるか、他のモノマーとともに共重合させることにより、繰り返し単位を有する重合体を得て、その重合体を有機発光素子の発光層に用いることが考えられる。あるいは、一般式(1)で表される構造を有する化合物どうしをカップリングさせることにより、二量体や三量体を得て、それらを有機発光素子の発光層に用いることも考えられる。

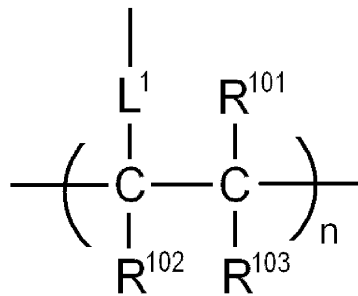
40

【0037】

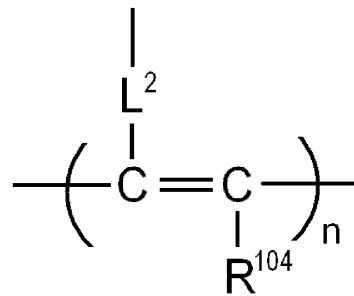
一般式(1)で表される構造を含む重合体を構成する繰り返し単位の構造例として、一般式(1)のR¹~R⁵のいずれかが下記一般式(17)または(18)で表される構造であるものを挙げることができる。

【化 13】

一般式 (17)



一般式 (18)



10

【0038】

一般式 (17) および (18) において、 L^1 および L^2 は連結基を表す。連結基の炭素数は、好ましくは 0 ~ 20 であり、より好ましくは 1 ~ 15 であり、さらに好ましくは 2 ~ 10 である。連結基は $-X^{11}-L^{11}-$ で表される構造を有するものであることが好ましい。ここで、 X^{11} は酸素原子または硫黄原子を表し、酸素原子であることが好ましい。 L^{11} は連結基を表し、置換もしくは無置換のアルキレン基、または置換もしくは無置換のアリレン基であることが好ましく、炭素数 1 ~ 10 の置換もしくは無置換のアルキレン基、または置換もしくは無置換のフェニレン基であることがより好ましい。

一般式 (17) および (18) において、 R^{101} 、 R^{102} 、 R^{103} および R^{104} は、各々独立に置換基を表す。好ましくは、炭素数 1 ~ 6 の置換もしくは無置換のアルキル基、炭素数 1 ~ 6 の置換もしくは無置換のアルコキシ基、ハロゲン原子であり、より好ましくは炭素数 1 ~ 3 の無置換のアルキル基、炭素数 1 ~ 3 の無置換のアルコキシ基、フッ素原子、塩素原子であり、さらに好ましくは炭素数 1 ~ 3 の無置換のアルキル基、炭素数 1 ~ 3 の無置換のアルコキシ基である。

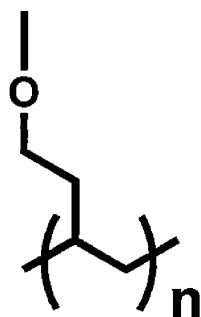
20

【0039】

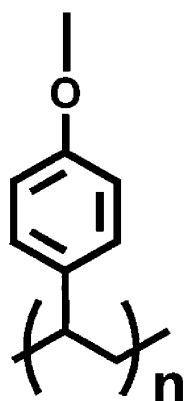
繰り返し単位 of 具体的な構造例として、一般式 (1) の $R^1 \sim R^5$ のいずれかが下記式 (21) ~ (24) であるものを挙げることができる。 $R^1 \sim R^5$ のうちの 2 つ以上が、下記式 (21) ~ (24) であってもよいが、好ましいのは $R^1 \sim R^5$ のうちの 1 つが下記式 (21) ~ (24) のいずれかである場合である。

30

式(21)

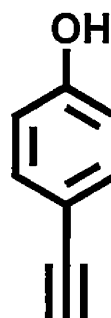
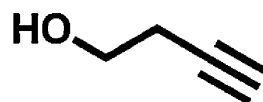
COC(=O)C=C

式(23)

COC1=CC=C(C=C1)C2=CC=CC=C2C3=CC=CC=C3C4=CC=CC=C4C5=CC=CC=C5C6=CC=CC=C6C7=CC=CC=C7C8=CC=CC=C8C9=CC=CC=C9C10=CC=CC=C10C11=CC=CC=C11C12=CC=CC=C12C13=CC=CC=C13C14=CC=CC=C14C15=CC=CC=C15C16=CC=CC=C16C17=CC=CC=C17C18=CC=CC=C18C19=CC=CC=C19C20=CC=CC=C20C21=CC=CC=C21C22=CC=CC=C22C23=CC=CC=C23C24=CC=CC=C24C25=CC=CC=C25C26=CC=CC=C26C27=CC=CC=C27C28=CC=CC=C28C29=CC=CC=C29C30=CC=CC=C30C31=CC=CC=C31C32=CC=CC=C32C33=CC=CC=C33C34=CC=CC=C34C35=CC=CC=C35C36=CC=CC=C36C37=CC=CC=C37C38=CC=CC=C38C39=CC=CC=C39C40=CC=CC=C40C41=CC=CC=C41C42=CC=CC=C42C43=CC=CC=C43C44=CC=CC=C44C45=CC=CC=C45C46=CC=CC=C46C47=CC=CC=C47C48=CC=CC=C48C49=CC=CC=C49C50=CC=CC=C50C51=CC=CC=C51C52=CC=CC=C52C53=CC=CC=C53C54=CC=CC=C54C55=CC=CC=C55C56=CC=CC=C56C57=CC=CC=C57C58=CC=CC=C58C59=CC=CC=C59C60=CC=CC=C60C61=CC=CC=C61C62=CC=CC=C62C63=CC=CC=C63C64=CC=CC=C64C65=CC=CC=C65C66=CC=CC=C66C67=CC=CC=C67C68=CC=CC=C68C69=CC=CC=C69C70=CC=CC=C70C71=CC=CC=C71C72=CC=CC=C72C73=CC=CC=C73C74=CC=CC=C74C75=CC=CC=C75C76=CC=CC=C76C77=CC=CC=C77C78=CC=CC=C78C79=CC=CC=C79C80=CC=CC=C80C81=CC=CC=C81C82=CC=CC=C82C83=CC=CC=C83C84=CC=CC=C84C85=CC=CC=C85C86=CC=CC=C86C87=CC=CC=C87C88=CC=CC=C88C89=CC=CC=C89C90=CC=CC=C90C91=CC=CC=C91C92=CC=CC=C92C93=CC=CC=C93C94=CC=CC=C94C95=CC=CC=C95C96=CC=CC=C96C97=CC=CC=C97C98=CC=CC=C98C99=CC=CC=C99C100=CC=CC=C100C101=CC=CC=C101C102=CC=CC=C102C103=CC=CC=C103C104=CC=CC=C104C105=CC=CC=C105C106=CC=CC=C106C107=CC=CC=C107C108=CC=CC=C108C109=CC=CC=C109C110=CC=CC=C110C111=CC=CC=C111C112=CC=CC=C112C113=CC=CC=C113C114=CC=CC=C114C115=CC=CC=C115C116=CC=CC=C116C117=CC=CC=C117C118=CC=CC=C118C119=CC=CC=C119C120=CC=CC=C120C121=CC=CC=C121C122=CC=CC=C122C123=CC=CC=C123C124=CC=CC=C124C125=CC=CC=C125C126=CC=CC=C126C127=CC=CC=C127C128=CC=CC=C128C129=CC=CC=C129C130=CC=CC=C130C131=CC=CC=C131C132=CC=CC=C132C133=CC=CC=C133C134=CC=CC=C134C135=CC=CC=C135C136=CC=CC=C136C137=CC=CC=C137C138=CC=CC=C138C139=CC=CC=C139C140=CC=CC=C140C141=CC=CC=C141C142=CC=CC=C142C143=CC=CC=C143C144=CC=CC=C144C145=CC=CC=C145C146=CC=CC=C146C147=CC=CC=C147C148=CC=CC=C148C149=CC=CC=C149C150=CC=CC=C150C151=CC=CC=C151C152=CC=CC=C152C153=CC=CC=C153C154=CC=CC=C154C155=CC=CC=C155C156=CC=CC=C156C157=CC=CC=C157C158=CC=CC=C158C159=CC=CC=C159C160=CC=CC=C160C161=CC=CC=C161C162=CC=CC=C162C163=CC=CC=C163C164=CC=CC=C164C165=CC=CC=C165C166=CC=CC=C166C167=CC=CC=C167C168=CC=CC=C168C169=CC=CC=C169C170=CC=CC=C170C171=CC=CC=C171C172=CC=CC=C172C173=CC=CC=C173C174=CC=CC=C174C175=CC=CC=C175C176=CC=CC=C176C177=CC=CC=C177C178=CC=CC=C178C179=CC=CC=C179C180=CC=CC=C180C181=CC=CC=C181C182=CC=CC=C182C183=CC=CC=C183C184=CC=CC=C184C185=CC=CC=C185C186=CC=CC=C186C187=CC=CC=C187C188=CC=CC=C188C189=CC=CC=C189C190=CC=CC=C190C191=CC=CC=C191C192=CC=CC=C192C193=CC=CC=C193C194=CC=CC=C194C195=CC=CC=C195C196=CC=CC=C196C197=CC=CC=C197C198=CC=CC=C198C199=CC=CC=C199C200=CC=CC=C200C201=CC=CC=C201C202=CC=CC=C202C203=CC=CC=C203C204=CC=CC=C204C205=CC=CC=C205C206=CC=CC=C206C207=CC=CC=C207C208=CC=CC=C208C209=CC=CC=C209C210=CC=CC=C210C211=CC=CC=C211C212=CC=CC=C212C213=CC=CC=C213C214=CC=CC=C214C215=CC=CC=C215C216=CC=CC=C216C217=CC=CC=C217C218=CC=CC=C218C219=CC=CC=C219C220=CC=CC=C220C221=CC=CC=C221C222=CC=CC=C222C223=CC=CC=C223C224=CC=CC=C224C225=CC=CC=C225C226=CC=CC=C226C227=CC=CC=C227C228=CC=CC=C228C229=CC=CC=C229C230=CC=CC=C230C231=CC=CC=C231C232=CC=CC=C232C233=CC=CC=C233C234=CC=CC=C234C235=CC=CC=C235C236=CC=CC=C236C237=CC=CC=C237C238=CC=CC=C238C239=CC=CC=C239C240=CC=CC=C240C241=CC=CC=C241C242=CC=CC=C242C243=CC=CC=C243C244=CC=CC=C244C245=CC=CC=C245C246=CC=CC=C246C247=CC=CC=C247C248=CC=CC=C248C249=CC=CC=C249C250=CC=CC=C250C251=CC=CC=C251C252=CC=CC=C252C253=CC=CC=C253C254=CC=CC=C254C255=CC=CC=C255C256=CC=CC=C256C257=CC=CC=C257C258=CC=CC=C258C259=CC=CC=C259C260=CC=CC=C260C261=CC=CC=C261C262=CC=CC=C262C263=CC=CC=C263C264=CC=CC=C264C265=CC=CC=C265C266=CC=CC=C266C267=CC=CC=C267C268=CC=CC=C268C269=CC=CC=C269C270=CC=CC=C270C271=CC=CC=C271C272=CC=CC=C272C273=CC=CC=C273C274=CC=CC=C274C275=CC=CC=C275C276=CC=CC=C276C277=CC=CC=C277C278=CC=CC=C278C279=CC=CC=C279C280=CC=CC=C280C281=CC=CC=C281C282=CC=CC=C282C283=CC=CC=C283C284=CC=CC=C284C285=CC=CC=C285C286=CC=CC=C286C287=CC=CC=C287C288=CC=CC=C288C289=CC=CC=C289C290=CC=CC=C290C291=CC=CC=C291C292=CC=CC=C292C293=CC=CC=C293C294=CC=CC=C294C295=CC=CC=C295C296=CC=CC=C296C297=CC=CC=C297C298=CC=CC=C298C299=CC=CC=C299C300=CC=CC=C300C301=CC=CC=C301C302=CC=CC=C302C303=CC=CC=C303C304=CC=CC=C304C305=CC=CC=C305C306=CC=CC=C306C307=CC=CC=C307C308=CC=CC=C308C309=CC=CC=C309C310=CC=CC=C310C311=CC=CC=C311C312=CC=CC=C312C313=CC=CC=C313C314=CC=CC=C314C315=CC=CC=C315C316=CC=CC=C316C317=CC=CC=C317C318=CC=CC=C318C319=CC=CC=C319C320=CC=CC=C320C321=CC=CC=C321C322=CC=CC=C322C323=CC=CC=C323C324=CC=CC=C324C325=CC=CC=C325C326=CC=CC=C326C327=CC=CC=C327C328=CC=CC=C328C329=CC=CC=C329C330=CC=CC=C330C331=CC=CC=C331C332=CC=CC=C332C333=CC=CC=C333C334=CC=CC=C334C335=CC=CC=C335C336=CC=CC=C336C337=CC=CC=C337C338=CC=CC=C338C339=CC=CC=C339C340=CC=CC=C340C341=CC=CC=C341C342=CC=CC=C342C343=CC=CC=C343C344=CC=CC=C344C345=CC=CC=C345C346=CC=CC=C346C347=CC=CC=C347C348=CC=CC=C348C349=CC=CC=C349C350=CC=CC=C350C351=CC=CC=C351C352=CC=CC=C352C353=CC=CC=C353C354=CC=CC=C354C355=CC=CC=C355C356=CC=CC=C356C357=CC=CC=C357C358=CC=CC=C358C359=CC=CC=C359

これらの式(21)~(24)を含む繰り返し単位を有する重合体は、一般式(1)の $R^1 \sim R^5$ の少なくとも1つをヒドロキシ基にしておき、それをリンカーとして下記化合物を反応させて重合性基を導入し、その重合性基を重合させることにより合成することができる。

【化 1 5】



【 0 0 4 1 】

分子内に一般式(1)で表される構造を含む重合体は、一般式(1)で表される構造を有する繰り返し単位のみからなる重合体であってもよいし、それ以外の構造を有する繰り返し単位を含む重合体であってもよい。また、重合体の中に含まれる一般式(1)で表される構造を有する繰り返し単位は、単一種であってもよいし、2種以上であってもよい。一般式(1)で表される構造を有さない繰り返し単位としては、通常の共重合に用いられるモノマーから誘導されるものを挙げることができる。例えば、エチレン、スチレンなどのエチレン性不飽和結合を有するモノマーから誘導される繰り返し単位を挙げることができる。

【 0 0 4 2 】

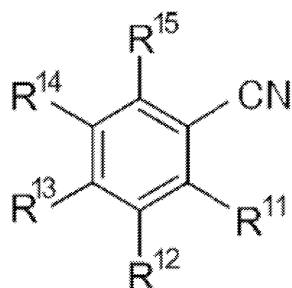
10

[一般式(2)で表される化合物]

一般式(1)で表される化合物のうち、下記の一般式(2)で表される構造を有する化合物は新規化合物である。

【 化 1 6 】

一般式(2)



20

【 0 0 4 3 】

一般式(2)において、R¹¹、R¹²、R¹⁴およびR¹⁵の少なくとも1つはシアノ基であり、R¹¹～R¹⁵の少なくとも3つは置換もしくは無置換の9-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の1,2,3,4-テトラヒドロ-9-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の1-インドリル基、または置換もしくは無置換のジアリールアミノ基であり、残りのR¹¹～R¹⁵はヒドロキシ基を表す。

【 0 0 4 4 】

30

一般式(2)におけるR¹¹～R¹⁵の中では、R¹¹とR¹²のいずれか一方がシアノ基であることが好ましい。R¹¹～R¹⁵の少なくとも3つは上記9-カルバゾリル基等であるが、これら3つの置換基は同一であっても異なってもよい。好ましいのはすべてが同一である場合である。R¹¹～R¹⁵の少なくとも3つは、上記一般式(12)～(15)のいずれかで表される構造を有する基であることが好ましい。一般式(12)～(15)の具体例と好ましい範囲については、上記一般式(1)における対応する記載を参照することができる。一般式(2)のR¹¹～R¹⁵のうちヒドロキシ基であるものはゼロまたは1つである。1つがヒドロキシ基である場合、それはR¹⁴であることが好ましい。例えば、R¹²がシアノ基であって、R¹⁴がヒドロキシ基である場合を挙げることができる。

【 0 0 4 5 】

40

一般式(2)で表される化合物の合成法は特に制限されない。一般式(2)で表される化合物の合成は、既知の合成法や条件を適宜組み合わせることにより行うことができる。

例えば、好ましい合成法として、テトラフルオロジシアノベンゼンを用意して、これをカルバゾール、インドール、ジアリールアミン等と反応させる方法を挙げることができる。これによって、一般式(2)のR¹¹～R¹⁵のいずれか1つがシアノ基で、残りがカルバゾリル基、インドリル基またはジアリールアミノ基である化合物を合成することができる。出発物質としてトリフルオロトリシアノベンゼンを用いれば、一般式(2)のR¹¹～R¹⁵のいずれか2つがシアノ基で、残りがカルバゾリル基、インドリル基またはジアリールアミノ基である化合物を合成することができる。また、さらに水を添加して超音波照射する等の工程を実施することにより、ベンゼン環にヒドロキシ基を導入することもできる。

50

上記の反応の詳細については、後述の合成例を参考にすることができる。また、一般式(2)で表される化合物は、その他の公知の合成反応を組み合わせることによっても合成することができる。

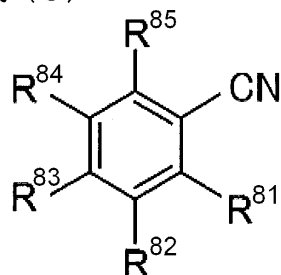
【0046】

[一般式(3)で表される化合物]

一般式(1)で表される化合物のうち、下記の一般式(3)で表される構造を有する化合物は青色発光材料として有用である。

【化17】

一般式(3)



10

【0047】

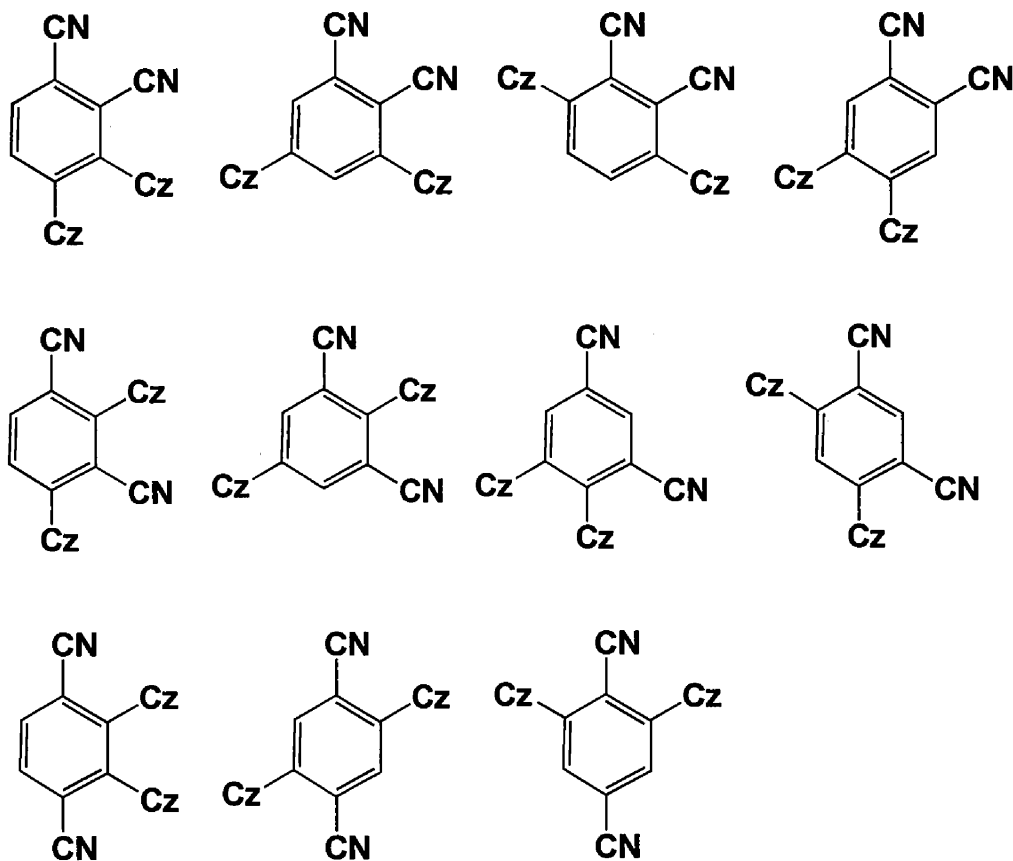
一般式(3)において、R⁸¹~R⁸⁵の1つはシアノ基であり、R⁸¹~R⁸⁵の2つは置換もしくは無置換の9-カルバゾリル基であり、その他の2つは水素原子を表す。

20

以下において、一般式(3)で表される化合物の具体例を例示するが、本発明において用いることができる一般式(3)で表される化合物はこれらの具体例によって限定的に解釈されるべきものではない。以下の具体例におけるCzは、9-カルバゾリル基を表す。Czが、3-メチルカルバゾール-9-イル基または3,6-ジメチルカルバゾール-9-イル基である化合物も例示することができる。

【0048】

【化18】



30

40

50

【 0 0 4 9 】

〔有機発光素子〕

本発明の一般式(1)で表される化合物は、有機発光素子の発光材料として有用である。このため、本発明の一般式(1)で表される化合物は、有機発光素子の発光層に発光材料として効果的に用いることができる。一般式(1)で表される化合物の中には、遅延蛍光を放射する遅延蛍光材料(遅延蛍光体)が含まれている。すなわち本発明は、一般式(1)で表される構造を有する遅延蛍光体の発明と、一般式(1)で表される化合物を遅延蛍光体として使用する発明と、一般式(1)で表される化合物を用いて遅延蛍光を発光させる方法の発明も提供する。そのような化合物を発光材料として用いた有機発光素子は、遅延蛍光を放射し、発光効率が高いという特徴を有する。その原理を、有機エレクトロルミネッセンス素子を例にとって説明すると以下ようになる。

10

【 0 0 5 0 】

有機エレクトロルミネッセンス素子においては、正負の両電極より発光材料にキャリアを注入し、励起状態の発光材料を生成し、発光させる。通常、キャリア注入型の有機エレクトロルミネッセンス素子の場合、生成した励起子のうち、励起一重項状態に励起されるのは25%であり、残り75%は励起三重項状態に励起される。従って、励起三重項状態からの発光であるリン光を利用するほうが、エネルギーの利用効率が高い。しかしながら、励起三重項状態は寿命が長いため、励起状態の飽和や励起三重項状態の励起子との相互作用によるエネルギーの失活が起こり、一般にリン光の量子収率が高くないことが多い。一方、遅延蛍光材料は、系間交差等により励起三重項状態へとエネルギーが遷移した後、三重項-三重項消滅あるいは熱エネルギーの吸収により、励起一重項状態に逆系間交差され蛍光を放射する。有機エレクトロルミネッセンス素子においては、なかでも熱エネルギーの吸収による熱活性化型の遅延蛍光材料が特に有用であると考えられる。有機エレクトロルミネッセンス素子に遅延蛍光材料を利用した場合、励起一重項状態の励起子は通常通り蛍光を放射する。一方、励起三重項状態の励起子は、デバイスが発する熱を吸収して励起一重項へ系間交差され蛍光を放射する。このとき、励起一重項からの発光であるため蛍光と同波長での発光でありながら、励起三重項状態から励起一重項状態への逆系間交差により、生じる光の寿命(発光寿命)は通常の蛍光やりん光よりも長くなるため、これらよりも遅延した蛍光として観察される。これを遅延蛍光として定義できる。このような熱活性化型の励起子移動機構を用いれば、キャリア注入後に熱エネルギーの吸収を経ることにより、通常は25%しか生成しなかった励起一重項状態の化合物の比率を25%以上に引き上げることが可能となる。100未満の低い温度でも強い蛍光および遅延蛍光を発する化合物を用いれば、デバイスの熱で十分に励起三重項状態から励起一重項状態への系間交差が生じて遅延蛍光を放射するため、発光効率を飛躍的に向上させることができる。

20

30

【 0 0 5 1 】

本発明の一般式(1)で表される化合物を発光層の発光材料として用いることにより、有機フォトルミネッセンス素子(有機PL素子)や有機エレクトロルミネッセンス素子(有機EL素子)などの優れた有機発光素子を提供することができる。有機フォトルミネッセンス素子は、基板上に少なくとも発光層を形成した構造を有する。また、有機エレクトロルミネッセンス素子は、少なくとも陽極、陰極、および陽極と陰極の間に有機層を形成した構造を有する。有機層は、少なくとも発光層を含むものであり、発光層のみからなるものであってもよいし、発光層の他に1層以上の有機層を有するものであってもよい。そのような他の有機層として、正孔輸送層、正孔注入層、電子阻止層、正孔阻止層、電子注入層、電子輸送層、励起子阻止層などを挙げることができる。正孔輸送層は正孔注入機能を有した正孔注入輸送層でもよく、電子輸送層は電子注入機能を有した電子注入輸送層でもよい。具体的な有機エレクトロルミネッセンス素子の構造例を図1に示す。図1において、1は基板、2は陽極、3は正孔注入層、4は正孔輸送層、5は発光層、6は電子輸送層、7は陰極を表わす。

40

以下において、有機エレクトロルミネッセンス素子の各部材および各層について説明する。なお、基板と発光層の説明は有機フォトルミネッセンス素子の基板と発光層にも該当

50

する。

【 0 0 5 2 】

(基板)

本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子は、基板に支持されていることが好ましい。この基板については、特に制限はなく、従来から有機エレクトロルミネッセンス素子に慣用されているものであればよく、例えば、ガラス、透明プラスチック、石英、シリコンなどからなるものを用いることができる。

【 0 0 5 3 】

(陽極)

有機エレクトロルミネッセンス素子における陽極としては、仕事関数の大きい (4 e V 以上) 金属、合金、電気伝導性化合物およびこれらの混合物を電極材料とするものが好ましく用いられる。このような電極材料の具体例としては A u 等の金属、C u I、インジウムチンオキシド (I T O)、S n O₂、Z n O 等の導電性透明材料が挙げられる。また、I D I X O (I n₂O₃ - Z n O) 等非晶質で透明導電膜を作製可能な材料を用いてもよい。陽極はこれらの電極材料を蒸着やスパッタリング等の方法により、薄膜を形成させ、フォトリソグラフィ法で所望の形状のパターンを形成してもよく、あるいはパターン精度をあまり必要としない場合は (1 0 0 μ m 以上程度)、上記電極材料の蒸着やスパッタリング時に所望の形状のマスクを介してパターンを形成してもよい。あるいは、有機導電性化合物のように塗布可能な材料を用いる場合には、印刷方式、コーティング方式等湿式成膜法を用いることもできる。この陽極より発光を取り出す場合には、透過率を 1 0 % より大きくすることが望ましく、また陽極としてのシート抵抗は数百 Ω / □ 以下が好ましい。さらに膜厚は材料にもよるが、通常 1 0 ~ 1 0 0 0 n m、好ましくは 1 0 ~ 2 0 0 n m の範囲で選ばれる。

【 0 0 5 4 】

(陰極)

一方、陰極としては、仕事関数の小さい (4 e V 以下) 金属 (電子注入性金属と称する)、合金、電気伝導性化合物およびこれらの混合物を電極材料とするものが用いられる。このような電極材料の具体例としては、ナトリウム、ナトリウム - カリウム合金、マグネシウム、リチウム、マグネシウム / 銅混合物、マグネシウム / 銀混合物、マグネシウム / アルミニウム混合物、マグネシウム / インジウム混合物、アルミニウム / 酸化アルミニウム (A l₂O₃) 混合物、インジウム、リチウム / アルミニウム混合物、希土類金属等が挙げられる。これらの中で、電子注入性および酸化等に対する耐久性の点から、電子注入性金属とこれより仕事関数の値が大きく安定な金属である第二金属との混合物、例えば、マグネシウム / 銀混合物、マグネシウム / アルミニウム混合物、マグネシウム / インジウム混合物、アルミニウム / 酸化アルミニウム (A l₂O₃) 混合物、リチウム / アルミニウム混合物、アルミニウム等が好適である。陰極はこれらの電極材料を蒸着やスパッタリング等の方法により薄膜を形成させることにより、作製することができる。また、陰極としてのシート抵抗は数百 Ω / □ 以下が好ましく、膜厚は通常 1 0 n m ~ 5 μ m、好ましくは 5 0 ~ 2 0 0 n m の範囲で選ばれる。なお、発光した光を透過させるため、有機エレクトロルミネッセンス素子の陽極または陰極のいずれか一方が、透明または半透明であれば発光輝度が向上し好都合である。

また、陽極の説明で挙げた導電性透明材料を陰極に用いることで、透明または半透明の陰極を作製することができ、これを応用することで陽極と陰極の両方が透過性を有する素子を作製することができる。

【 0 0 5 5 】

(発光層)

発光層は、陽極および陰極のそれぞれから注入された正孔および電子が再結合することにより励起子が生成した後、発光する層であり、発光材料を単独で発光層に使用しても良いが、好ましくは発光材料とホスト材料を含む。発光材料としては、一般式 (1) で表される本発明の化合物群から選ばれる 1 種または 2 種以上を用いることができる。本発明の

有機エレクトロルミネッセンス素子および有機フォトルミネッセンス素子が高い発光効率を発現するためには、発光材料に生成した一重項励起子および三重項励起子を、発光材料中に閉じ込めることが重要である。従って、発光層中に発光材料に加えてホスト材料を用いることが好ましい。ホスト材料としては、励起一重項エネルギー、励起三重項エネルギーの少なくとも何れか一方が本発明の発光材料よりも高い値を有する有機化合物を用いることができる。その結果、本発明の発光材料に生成した一重項励起子および三重項励起子を、本発明の発光材料の分子中に閉じ込めることが可能となり、その発光効率を十分に引き出すことが可能となる。本発明の有機発光素子または有機エレクトロルミネッセンス素子において、発光は発光層に含まれる本発明の発光材料から生じる。この発光は蛍光発光および遅延蛍光発光の両方を含む。但し、発光の一部或いは部分的にホスト材料からの発光があってもかまわない。

10

ホスト材料を用いる場合、発光材料である本発明の化合物が発光層中に含有される量は0.1重量%以上であることが好ましく、1重量%以上であることがより好ましく、また、50重量%以下であることが好ましく、20重量%以下であることがより好ましく、10重量%以下であることがさらに好ましい。

発光層におけるホスト材料としては、正孔輸送能、電子輸送能を有し、かつ発光の長波長化を防ぎ、なおかつ高いガラス転移温度を有する有機化合物であることが好ましい。

【0056】

(注入層)

注入層とは、駆動電圧低下や発光輝度向上のために電極と有機層間に設けられる層のことで、正孔注入層と電子注入層があり、陽極と発光層または正孔輸送層の間、および陰極と発光層または電子輸送層との間に存在させてもよい。注入層は必要に応じて設けることができる。

20

【0057】

(阻止層)

阻止層は、発光層中に存在する電荷(電子もしくは正孔)および/または励起子の発光層外への拡散を阻止することができる層である。電子阻止層は、発光層および正孔輸送層の間に配置されることができ、電子が正孔輸送層の方に向かって発光層を通過することを阻止する。同様に、正孔阻止層は発光層および電子輸送層の間に配置されることができ、正孔が電子輸送層の方に向かって発光層を通過することを阻止する。阻止層はまた、励起子が発光層の外側に拡散することを阻止するために用いることができる。すなわち電子阻止層、正孔阻止層はそれぞれ励起子阻止層としての機能も兼ね備えることができる。本明細書でいう電子阻止層または励起子阻止層は、一つの層で電子阻止層および励起子阻止層の機能を有する層を含む意味で使用される。

30

【0058】

(正孔阻止層)

正孔阻止層とは広い意味では電子輸送層の機能を有する。正孔阻止層は電子を輸送しつつ、正孔が電子輸送層へ到達することを阻止する役割があり、これにより発光層中での電子と正孔の再結合確率を向上させることができる。正孔阻止層の材料としては、後述する電子輸送層の材料を必要に応じて用いることができる。

40

【0059】

(電子阻止層)

電子阻止層とは、広い意味では正孔を輸送する機能を有する。電子阻止層は正孔を輸送しつつ、電子が正孔輸送層へ到達することを阻止する役割があり、これにより発光層中での電子と正孔が再結合する確率を向上させることができる。

【0060】

(励起子阻止層)

励起子阻止層とは、発光層内で正孔と電子が再結合することにより生じた励起子が電荷輸送層に拡散することを阻止するための層であり、本層の挿入により励起子を効率的に発光層内に閉じ込めることが可能となり、素子の発光効率を向上させることができる。励起

50

子阻止層は発光層に隣接して陽極側、陰極側のいずれにも挿入することができ、両方同時に挿入することも可能である。すなわち、励起子阻止層を陽極側に有する場合、正孔輸送層と発光層の間に、発光層に隣接して該層を挿入することができ、陰極側に挿入する場合、発光層と陰極との間に、発光層に隣接して該層を挿入することができる。また、陽極と、発光層の陽極側に隣接する励起子阻止層との間には、正孔注入層や電子阻止層などを有することができ、陰極と、発光層の陰極側に隣接する励起子阻止層との間には、電子注入層、電子輸送層、正孔阻止層などを有することができる。阻止層を配置する場合、阻止層として用いる材料の励起一重項エネルギーおよび励起三重項エネルギーの少なくともいずれか一方は、発光材料の励起一重項エネルギーおよび励起三重項エネルギーよりも高いことが好ましい。

10

【0061】

(正孔輸送層)

正孔輸送層とは正孔を輸送する機能を有する正孔輸送材料からなり、正孔輸送層は単層または複数層設けることができる。

正孔輸送材料としては、正孔の注入または輸送、電子の障壁性のいずれかを有するものであり、有機物、無機物のいずれであってもよい。使用できる公知の正孔輸送材料としては例えば、トリアゾール誘導体、オキサジアゾール誘導体、イミダゾール誘導体、カルバゾール誘導体、インドロカルバゾール誘導体、ポリアリールアルカン誘導体、ピラゾリン誘導体およびピラゾロン誘導体、フェニレンジアミン誘導体、アリールアミン誘導体、アミノ置換カルコン誘導体、オキサゾール誘導体、スチリルアントラセン誘導体、フルオレノン誘導体、ヒドラゾン誘導体、スチルベン誘導体、シラザン誘導体、アニリン系共重合体、また導電性高分子オリゴマー、特にチオフェンオリゴマー等が挙げられるが、ポルフィリン化合物、芳香族第3級アミン化合物およびスチリルアミン化合物を用いることが好ましく、芳香族第3級アミン化合物を用いることがより好ましい。

20

【0062】

(電子輸送層)

電子輸送層とは電子を輸送する機能を有する材料からなり、電子輸送層は単層または複数層設けることができる。

電子輸送材料(正孔阻止材料を兼ねる場合もある)としては、陰極より注入された電子を発光層に伝達する機能を有していればよい。使用できる電子輸送層としては例えば、ニトロ置換フルオレン誘導体、ジフェニルキノン誘導体、チオピランジオキシド誘導体、カルボジイミド、フレオレニリデンメタン誘導体、アントラキノジメタンおよびアントロン誘導体、オキサジアゾール誘導体等が挙げられる。さらに、上記オキサジアゾール誘導体において、オキサジアゾール環の酸素原子を硫黄原子に置換したチアジアゾール誘導体、電子吸引基として知られているキノキサリン環を有するキノキサリン誘導体も、電子輸送材料として用いることができる。さらにこれらの材料を高分子鎖に導入した、またはこれらの材料を高分子の主鎖とした高分子材料を用いることもできる。

30

【0063】

有機エレクトロルミネッセンス素子を作製する際には、一般式(1)で表される化合物を発光層に用いるだけでなく、発光層以外の層にも用いてもよい。その際、発光層に用いる一般式(1)で表される化合物と、発光層以外の層に用いる一般式(1)で表される化合物は、同一であっても異なってもよい。例えば、上記の注入層、阻止層、正孔阻止層、電子阻止層、励起子阻止層、正孔輸送層、電子輸送層などにも一般式(1)で表される化合物を用いてもよい。これらの層の製膜方法は特に限定されず、ドライプロセス、ウェットプロセスのどちらで作製してもよい。

40

【0064】

以下に、有機エレクトロルミネッセンス素子に用いることができる好ましい材料を具体的に例示する。ただし、本発明において用いることができる材料は、以下の例示化合物によって限定的に解釈されることはない。また、特定の機能を有する材料として例示した化合物であっても、その他の機能を有する材料として転用することも可能である。なお、以

50

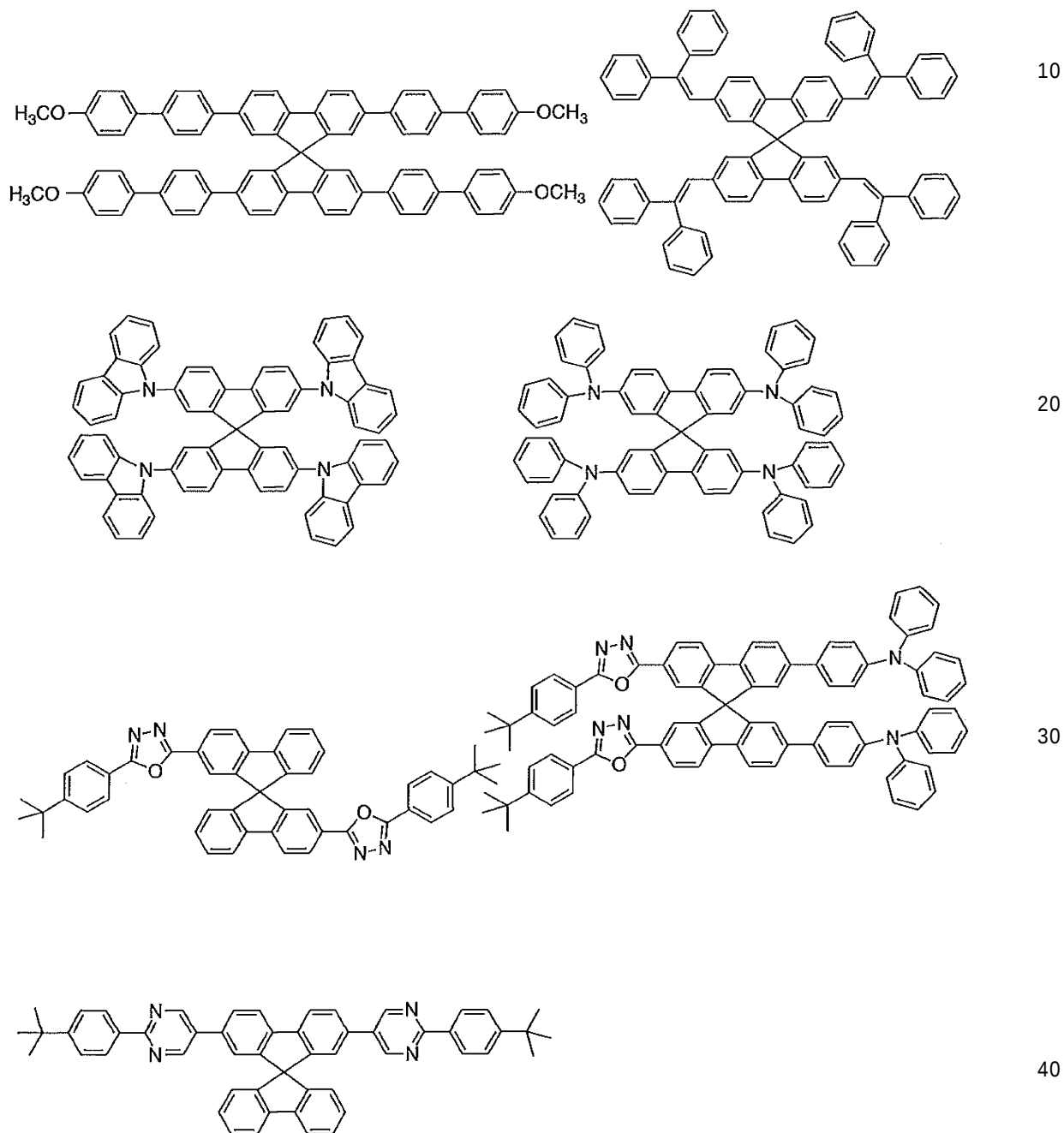
下の例示化合物の構造式における R、R'、 $R_1 \sim R_{10}$ は、各々独立に水素原子または置換基を表す。X は環骨格を形成する炭素原子または複素原子を表し、n は 3 ~ 5 の整数を表し、Y は置換基を表し、m は 0 以上の整数を表す。

【 0 0 6 5 】

まず、発光層のホスト材料としても用いることができる好ましい化合物を挙げる。

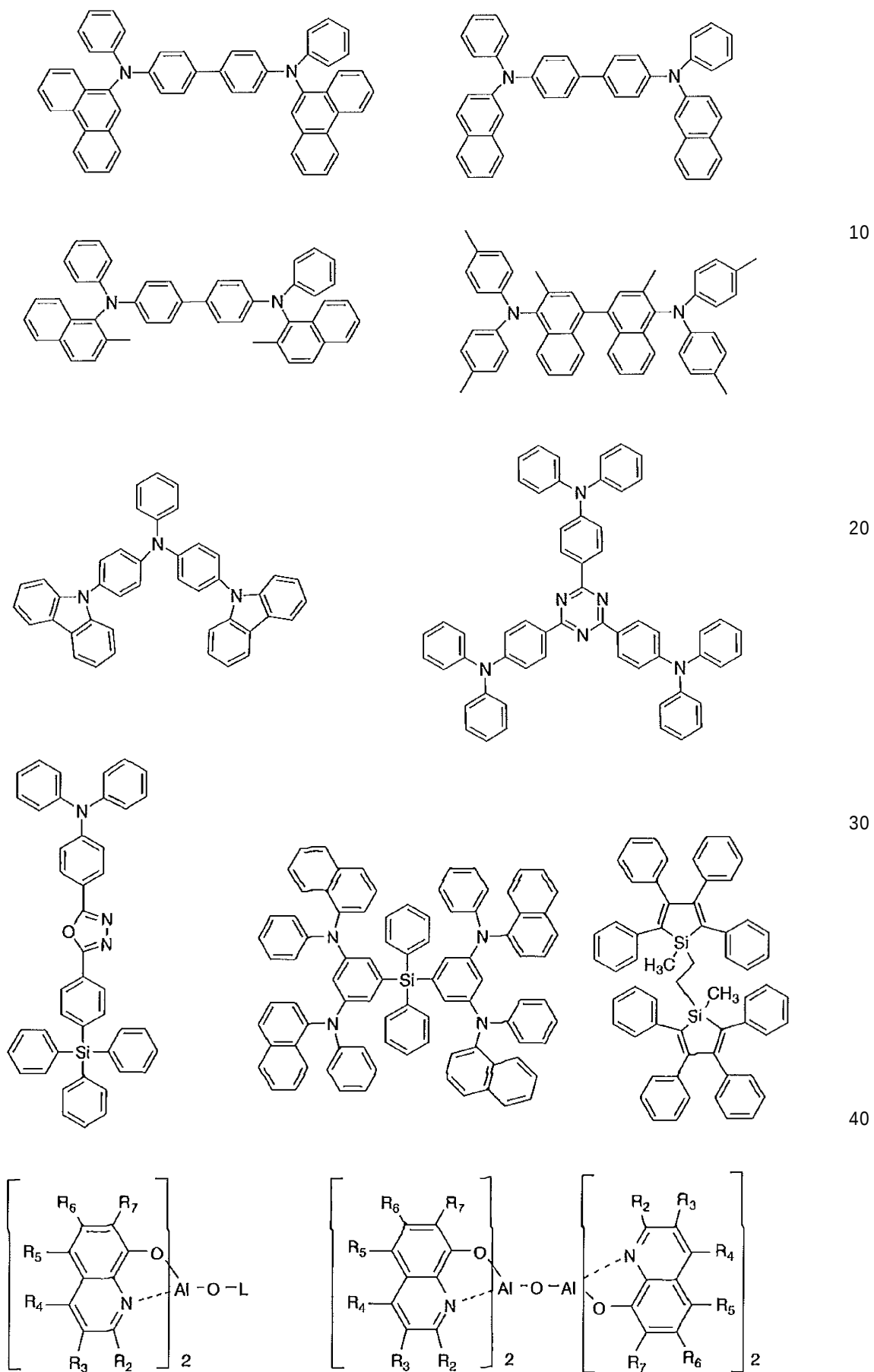
【 0 0 6 6 】

【 化 1 9 】



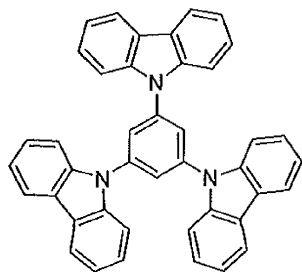
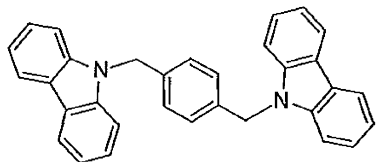
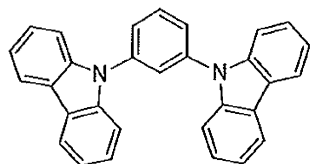
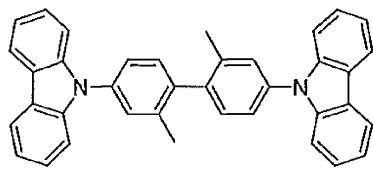
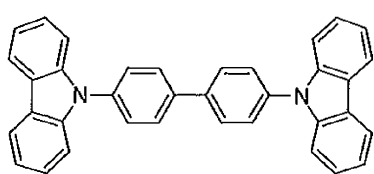
【 0 0 6 7 】

【化 20】

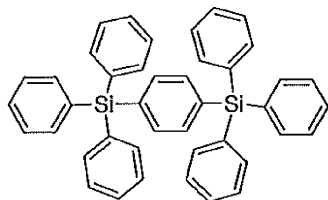


【 0 0 6 8 】

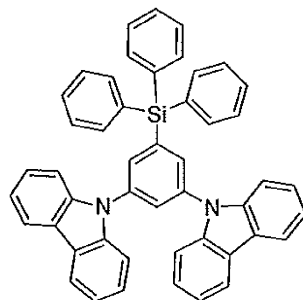
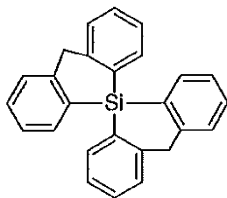
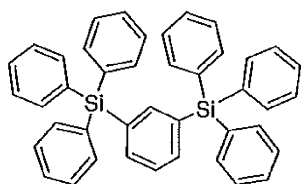
【 化 2 1 】



10



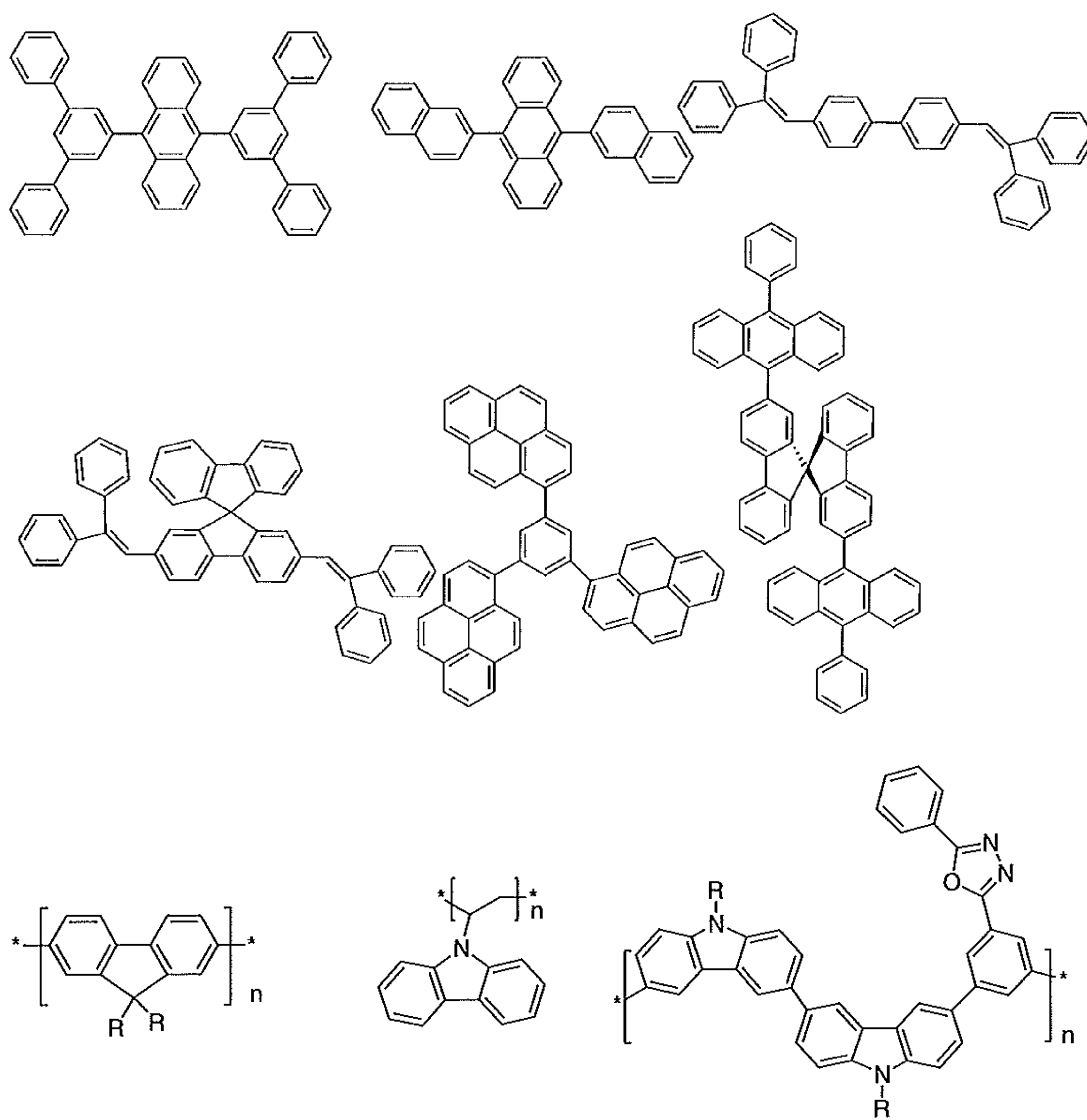
20



30

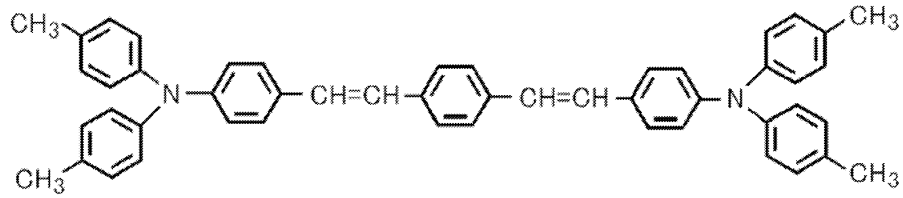
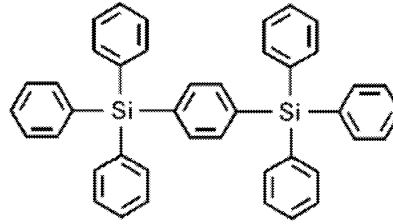
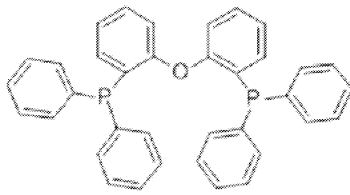
【 0 0 6 9 】

【化 2 2】

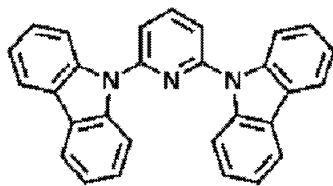


【 0 0 7 0 】

【化 2 3】



10



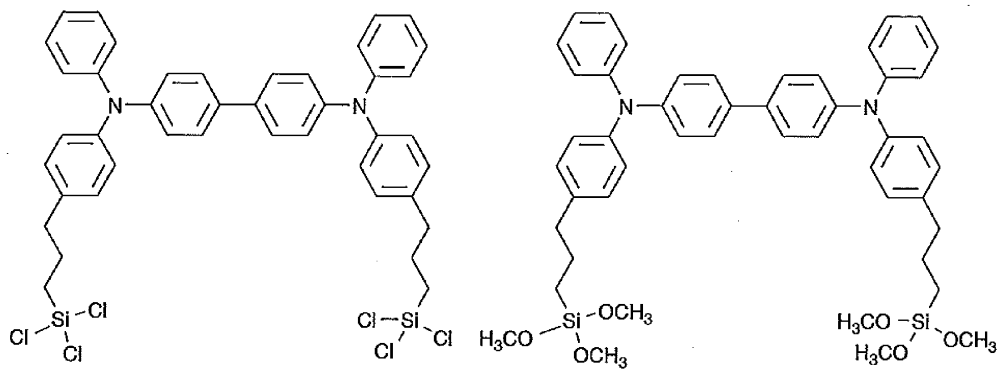
20

【 0 0 7 1】

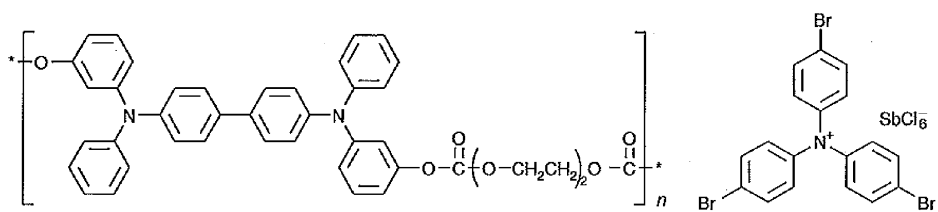
次に、正孔注入材料として用いることができる好ましい化合物例を挙げる。

【 0 0 7 2】

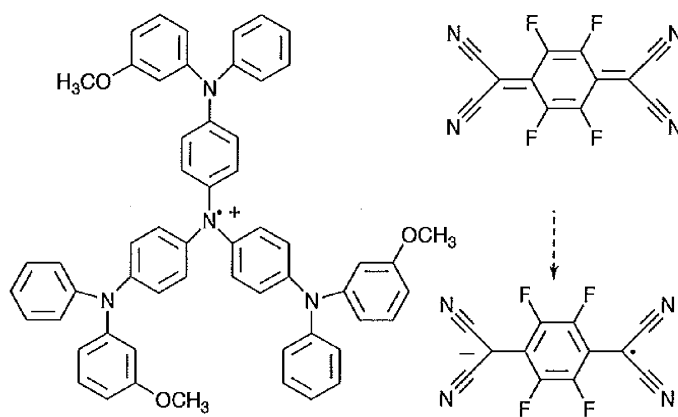
【化 2 4】



10



20



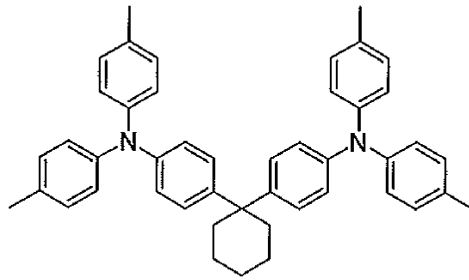
30

【 0 0 7 3】

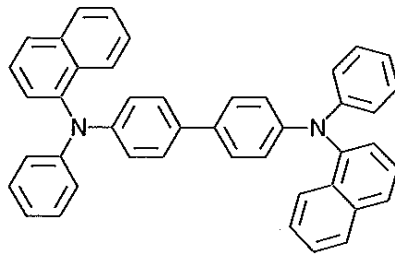
次に、正孔輸送材料として用いることができる好ましい化合物例を挙げる。

【 0 0 7 4】

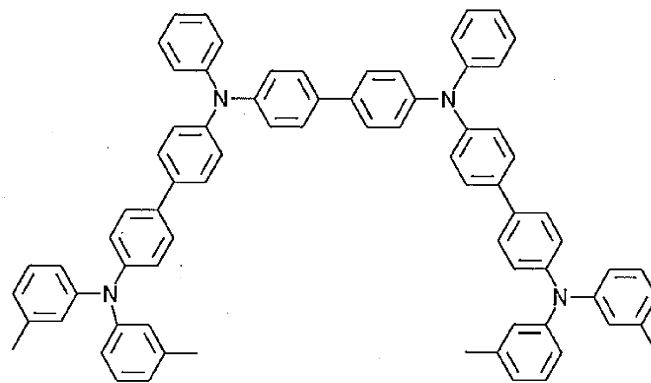
【化 2 5】



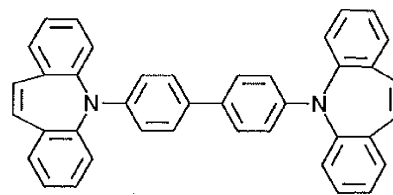
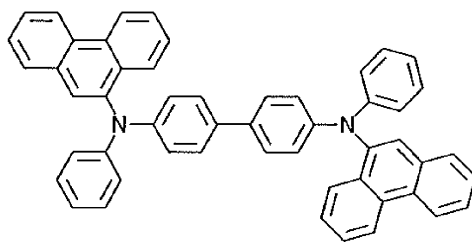
10



20

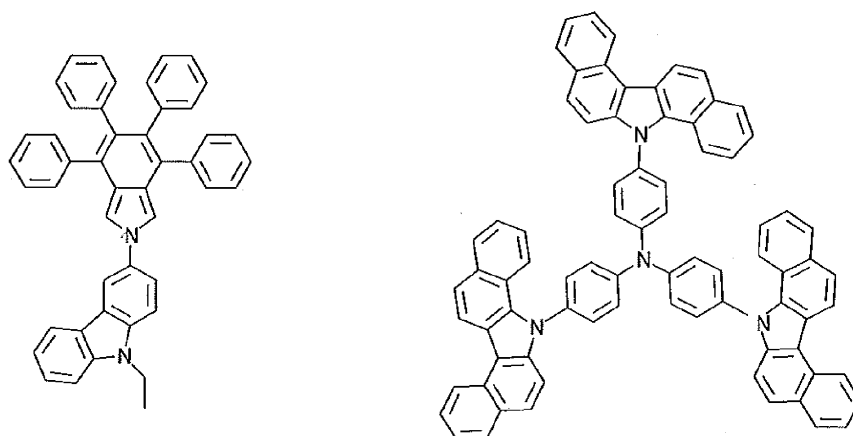


30

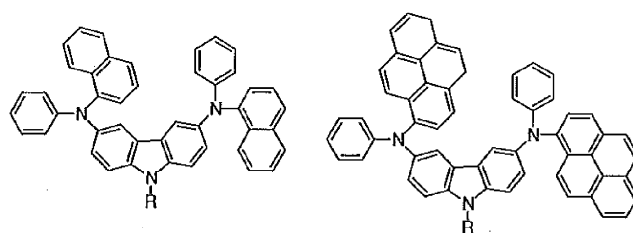


【 0 0 7 5 】

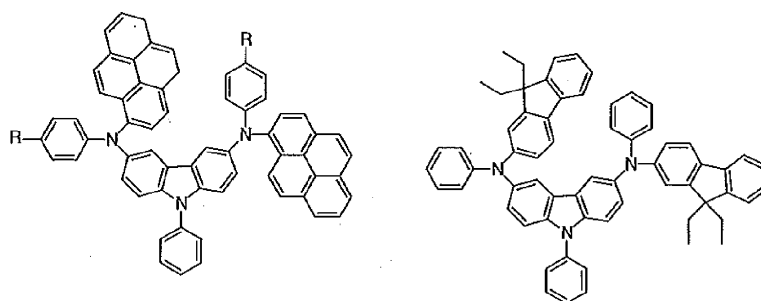
【化 2 6】



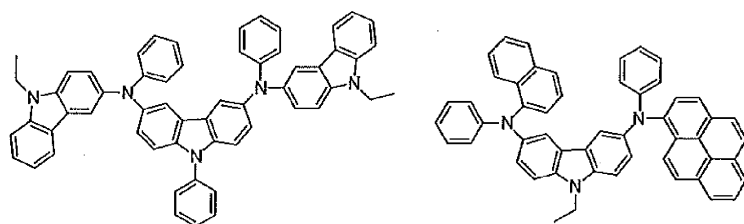
10



20



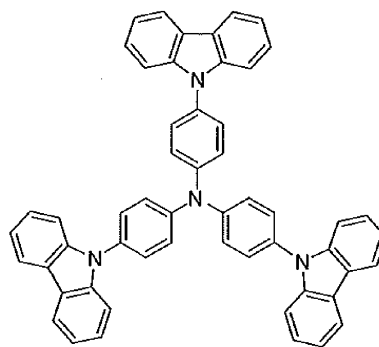
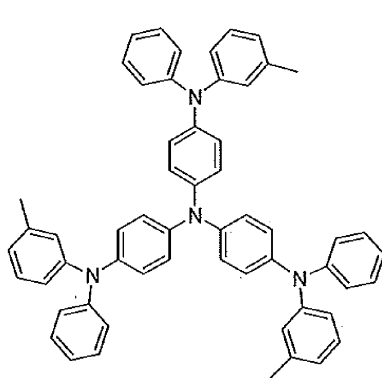
30



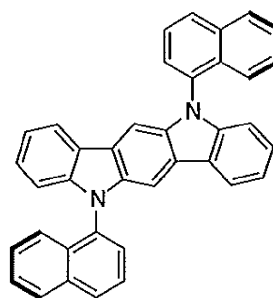
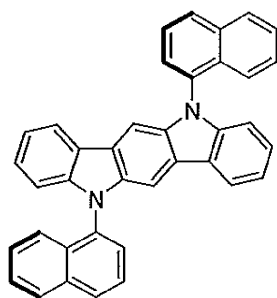
40

【 0 0 7 6】

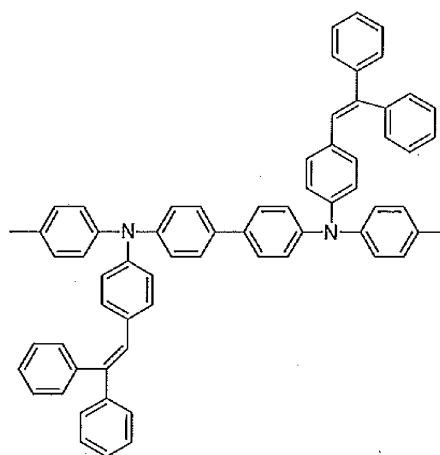
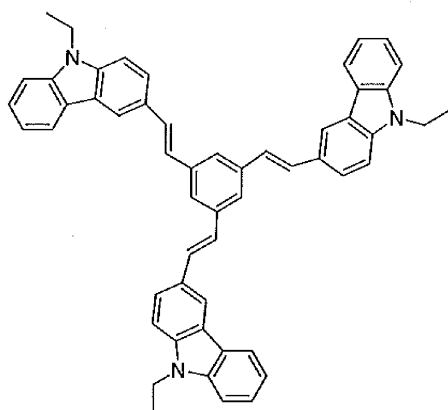
【化 2 7】



10



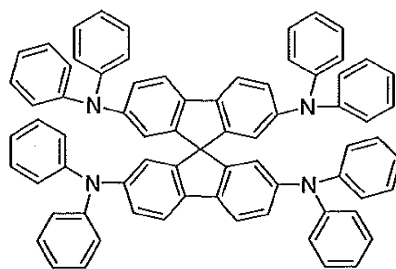
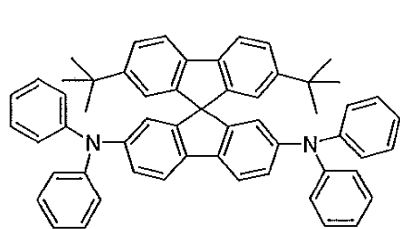
20



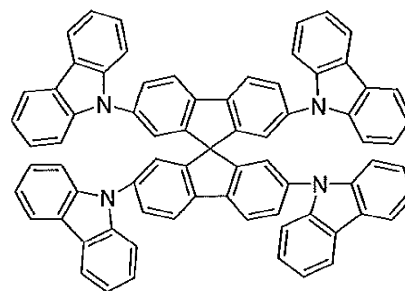
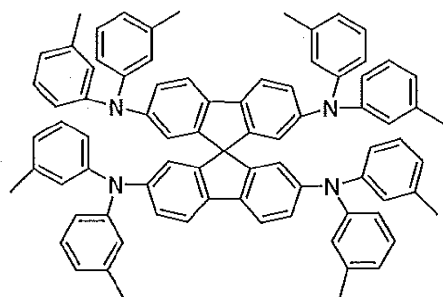
30

【 0 0 7 7 】

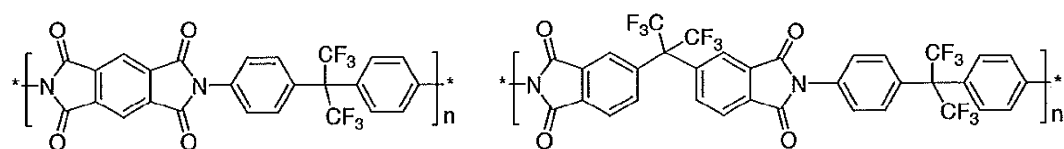
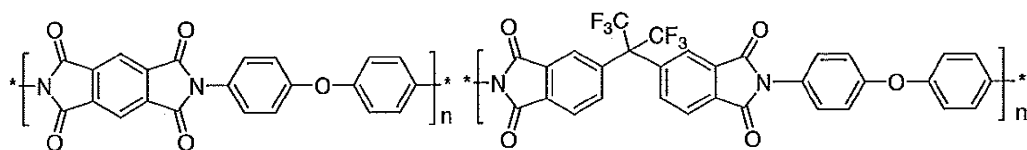
【化 2 8】



10



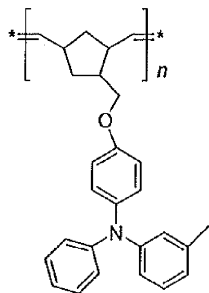
20



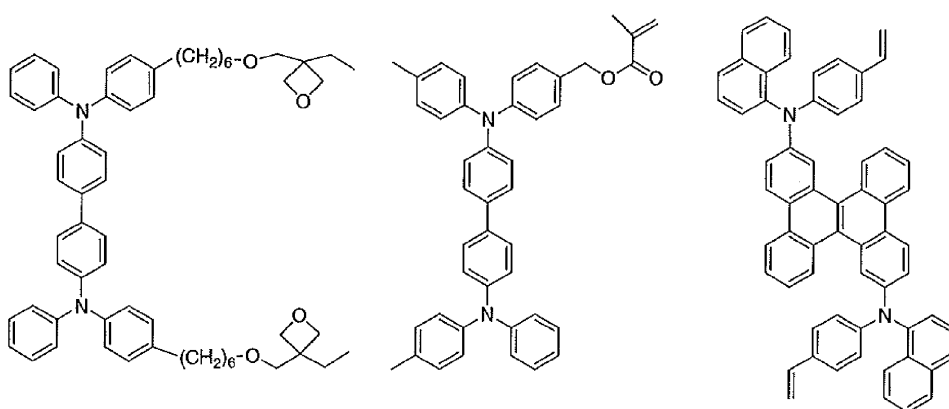
30

【 0 0 7 8】

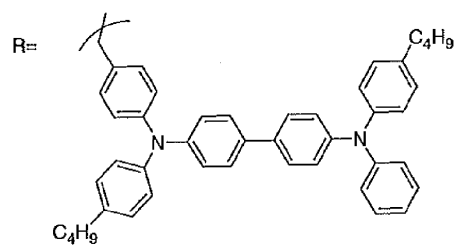
【化 2 9】



10



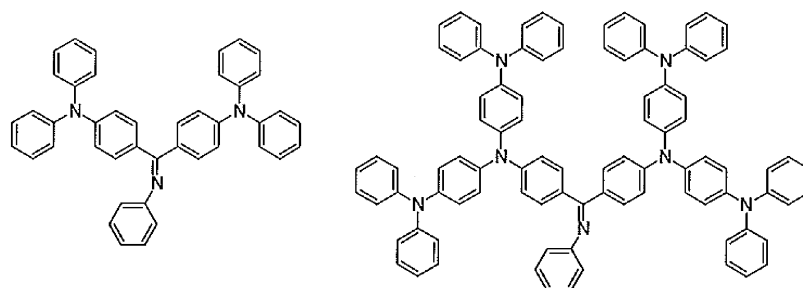
20



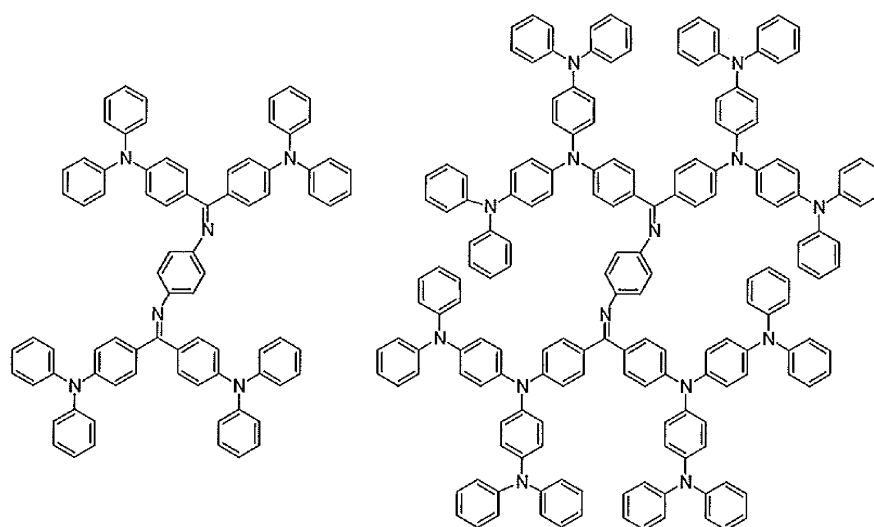
30

【 0 0 7 9 】

【化 3 0】



10



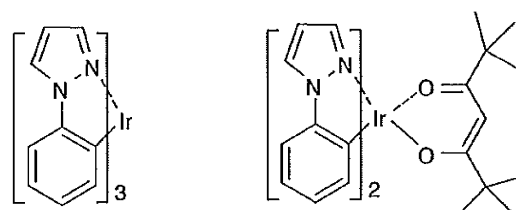
20

【 0 0 8 0】

次に、電子阻止材料として用いることができる好ましい化合物例を挙げる。

【 0 0 8 1】

【化 3 1】



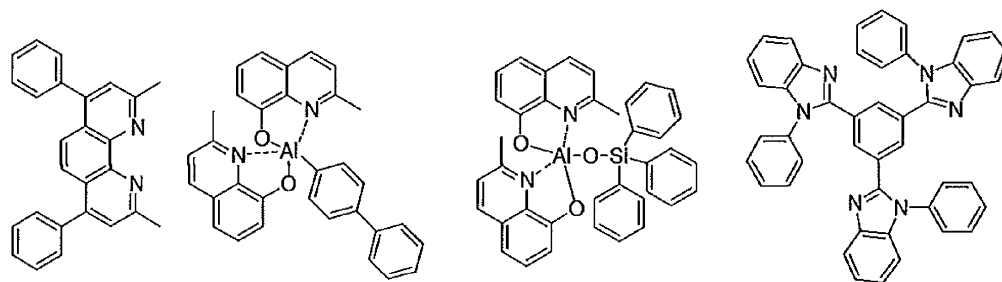
30

【 0 0 8 2】

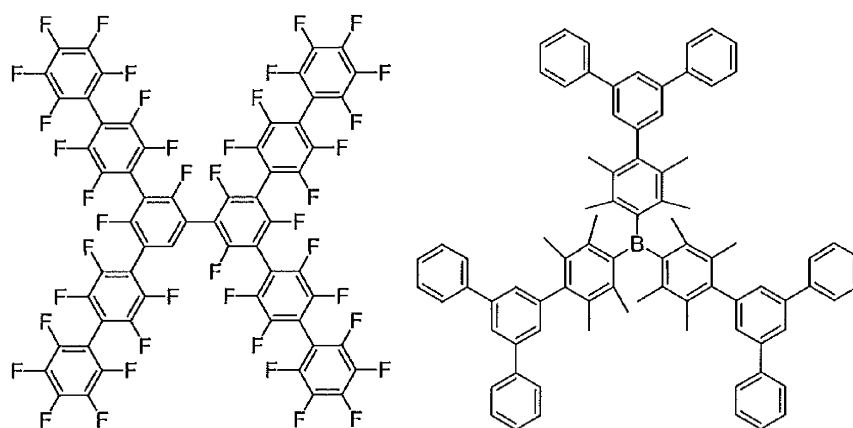
次に、正孔阻止材料として用いることができる好ましい化合物例を挙げる。

【 0 0 8 3】

【化 3 2】



10



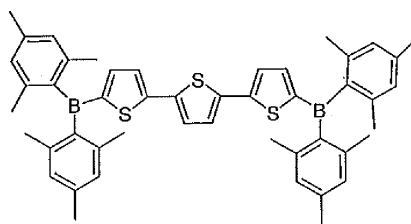
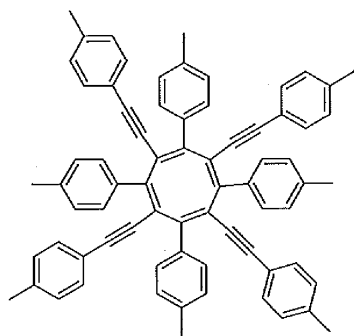
20

【 0 0 8 4 】

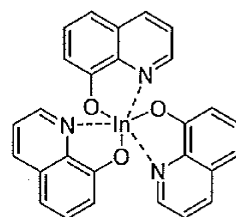
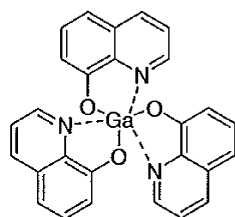
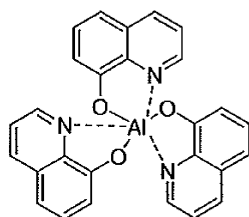
次に、電子輸送材料として用いることができる好ましい化合物例を挙げる。

【 0 0 8 5 】

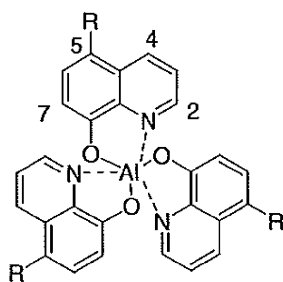
【化 3 3】



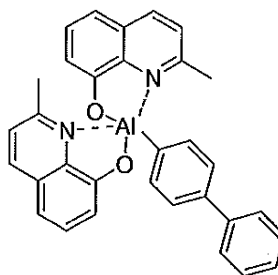
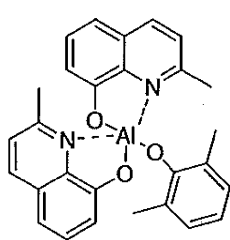
10



20

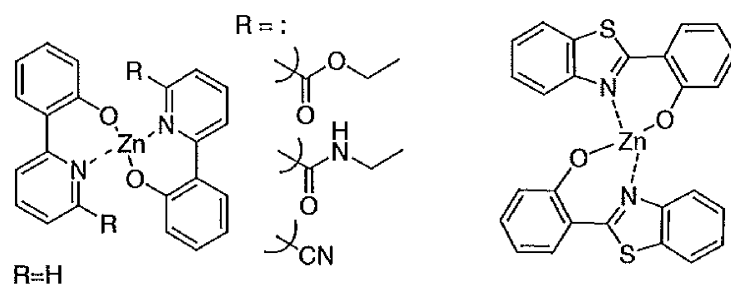


30

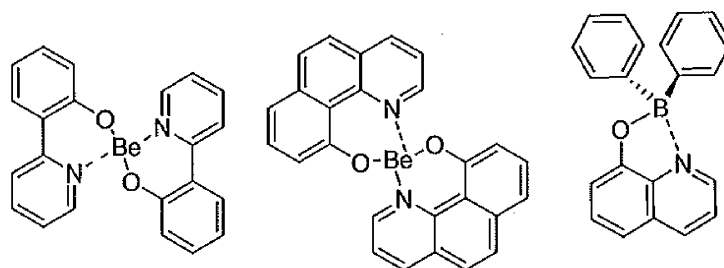


【 0 0 8 6 】

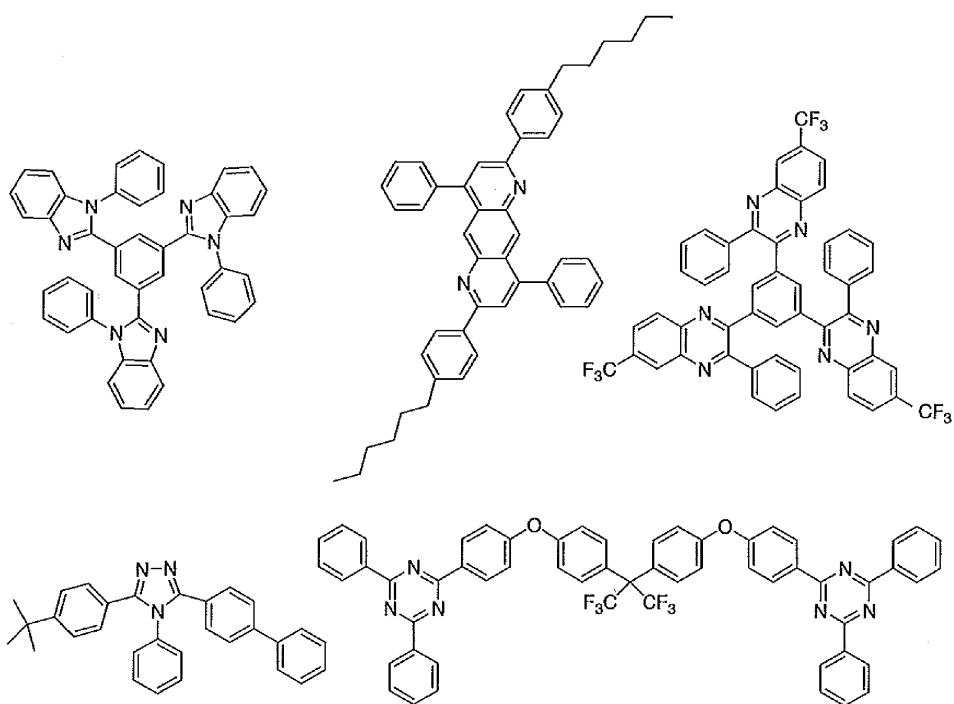
【化 3 4】



10



20

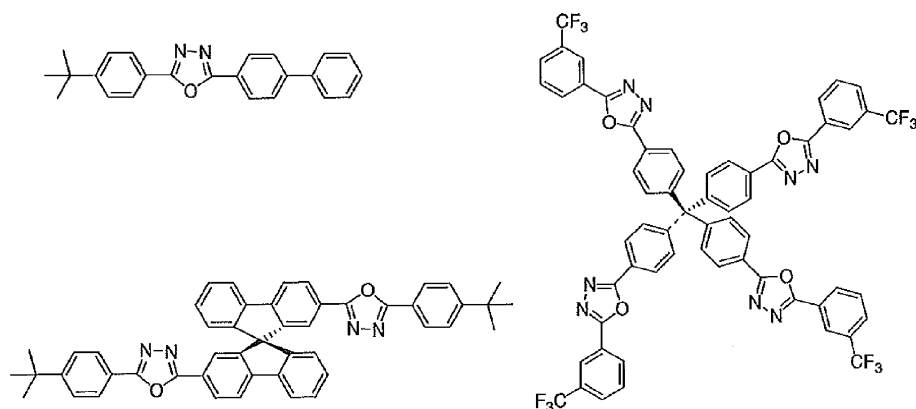


30

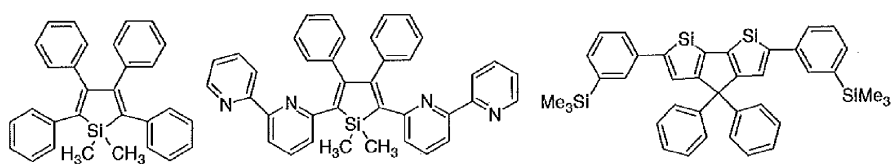
【 0 0 8 7 】

40

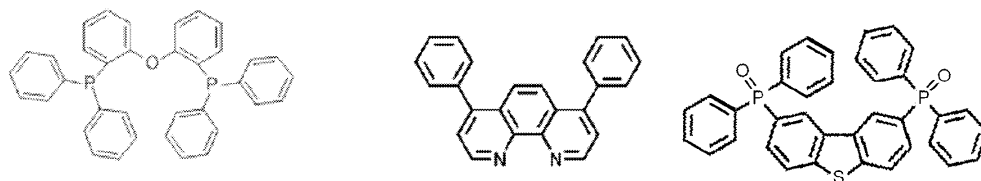
【化 3 5】



10



20

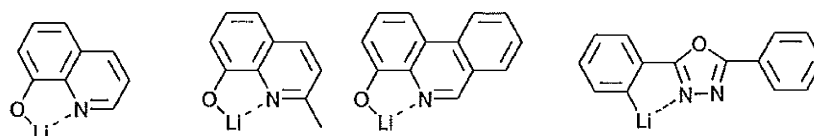


【0088】

次に、電子注入材料として用いることができる好ましい化合物例を挙げる。

【0089】

【化 3 6】



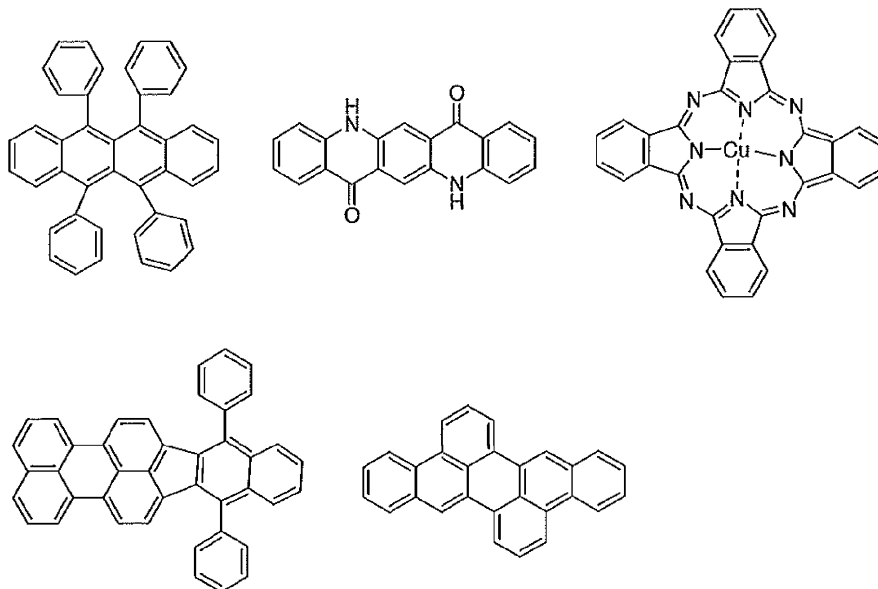
【0090】

さらに添加可能な材料として好ましい化合物例を挙げる。例えば、安定化材料として添加すること等が考えられる。

【0091】

30

【化 37】



10

【0092】

上述の方法により作製された有機エレクトロルミネッセンス素子は、得られた素子の陽極と陰極の間に電界を印加することにより発光する。このとき、励起一重項エネルギーによる発光であれば、そのエネルギーレベルに応じた波長の光が、蛍光発光および遅延蛍光発光として確認される。また、励起三重項エネルギーによる発光であれば、そのエネルギーレベルに応じた波長が、りん光として確認される。通常の蛍光は、遅延蛍光発光よりも蛍光寿命が短いため、発光寿命は蛍光と遅延蛍光で区別できる。

20

一方、りん光については、本発明の化合物のような通常の有機化合物では、励起三重項エネルギーは不安定で熱等に変換され、寿命が短く直ちに失活するため、室温では殆ど観測できない。通常の有機化合物の励起三重項エネルギーを測定するためには、極低温の条件での発光を観測することにより測定可能である。

【0093】

本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子は、単一の素子、アレイ状に配置された構造からなる素子、陽極と陰極がX-Yマトリックス状に配置された構造のいずれにおいても適用することができる。本発明によれば、発光層に一般式(1)で表される化合物を含有させることにより、発光効率が大きく改善された有機発光素子が得られる。本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子などの有機発光素子は、さらに様々な用途へ応用することが可能である。例えば、本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子を用いて、有機エレクトロルミネッセンス表示装置を製造することが可能であり、詳細については、時任静士、安達千波矢、村田英幸共著「有機ELディスプレイ」(オーム社)を参照することができる。また、特に本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子は、需要が大きい有機エレクトロルミネッセンス照明やバックライトに応用することもできる。

30

【実施例】

40

【0094】

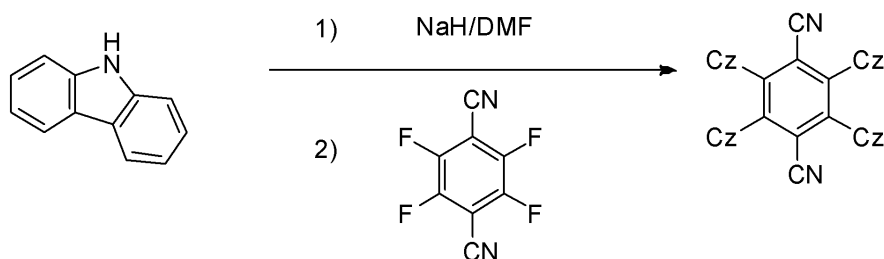
以下に合成例および実施例を挙げて本発明の特徴をさらに具体的に説明する。以下に示す材料、処理内容、処理手順等は、本発明の趣旨を逸脱しない限り適宜変更することができる。したがって、本発明の範囲は以下に示す具体例により限定的に解釈されるべきものではない。

【0095】

(合成例1)

本合成例において、以下のスキームにしたがって化合物1を合成した。C_zは9-カルbazolyl基を表す。

【化 3 8】



【0096】

10

60%水素化ナトリウム480mg(12.0mmol)を100mL三口フラスコに入れ、当該フラスコ内を窒素置換し、N,N-ジメチルホルムアミド80mLを加えて攪拌した。この混合物へ9H-カルバゾール1.67g(10.0mmol)を加え、窒素気流下、室温で30分攪拌した。攪拌後、この混合物へテトラフルオロテレフタロニトリル400mg(2.00mmol)を加え、この混合物を窒素雰囲気下、60℃で10時間攪拌した。攪拌後、この混合物へ、水5.0mLを加えて攪拌した。攪拌後、この混合物中のN,N-ジメチルホルムアミドを除去した。除去後、この混合物に水200mLを加え、超音波を照射した。照射後、この混合物を吸引ろ過して固体を得た。得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製した。カラムクロマトグラフィーはまずクロロホルムを展開溶媒として用い、次にアセトンを展開溶媒として用いた。得られた

20

フラクションを濃縮して得た固体をクロロホルムとアセトンの混合溶媒で洗浄したところ、黄色粉末状固体を収量1.05g、収率66.5%で得た。
 ^1H NMR (500MHz, DMSO- d_6 , ppm): δ 7.93 - 7.89 (m, 16H), 7.26 (t, $J = 7.8\text{ Hz}$, 8H), 7.16 (t, $J = 7.8\text{ Hz}$, 8H)。

元素分析：計算値 C, 85.26; H, 4.09; N, 10.65

実測値 C, 85.28; H, 4.11; N, 10.61

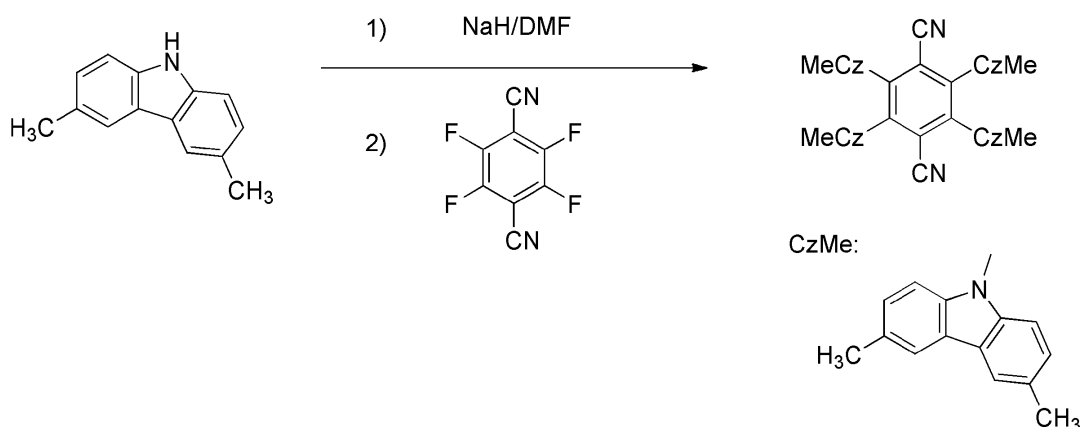
【0097】

(合成例2)

本合成例において、以下のスキームにしたがって化合物4を合成した。

30

【化 3 9】



40

【0098】

60%水素化ナトリウム480mg(12.0mmol)を100mL三口フラスコに入れ、当該フラスコ内を窒素置換し、N,N-ジメチルホルムアミド40mLを加えて攪拌した。この混合物へ3,6-ジメチル-9H-カルバゾール1.95g(10.0mmol)を加え、窒素気流下、室温で30分攪拌した。攪拌後、この混合物へテトラフルオロテレフタロニトリル400mg(2.00mmol)を加え、この混合物を窒素雰囲気下、60℃で10時間攪拌した。攪拌後、この混合物を、水400mLへ加えて攪拌し

50

た。攪拌後、この混合物を吸引ろ過して固体を得た。得られた固体をメタノールで洗浄したところ、橙色粉末状固体を収量 1.68 g、収率 93.2% で得た。

^1H NMR (500 MHz, DMSO- d_6 , ppm): δ 7.81 (d, J = 8.5 Hz, 8H), 7.71 (s, 8H), 7.11 (d, J = 8.5 Hz, 8H), 2.37 (s, 24H) .

元素分析 $\text{C}_{64}\text{H}_{48}\text{N}_6$: 計算値 C, 85.30; H, 5.37; N, 9.33%

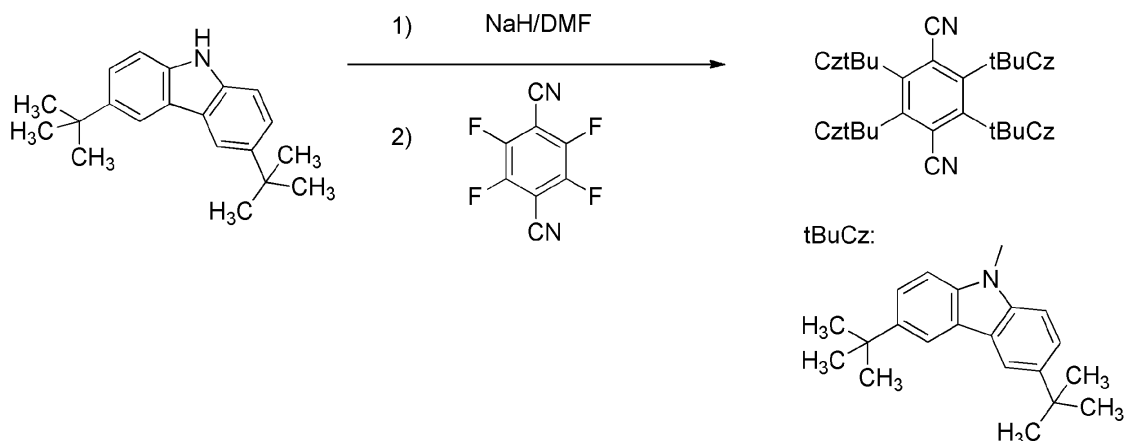
実測値 C 85.39, H 5.36, N 9.35% .

【0099】

(合成例3)

本合成例において、以下のスキームにしたがって化合物6を合成した。

【化40】



【0100】

60%水素化ナトリウム480 mg (12.0 mmol)を100 mL三口フラスコに入れ、当該フラスコ内を窒素置換し、N,N-ジメチルホルムアミド40 mLを加えて攪拌した。この混合物へ3,6-ジtert-ブチル-9H-カルバゾール2.79 g (10.0 mmol)を加え、窒素気流下、室温で30分攪拌した。攪拌後、この混合物へテトラフルオロテレフタロニトリル400 mg (2.00 mmol)を加え、この混合物を窒素雰囲気下、60℃で10時間攪拌した。攪拌後、この混合物を、水400 mLへ加えて攪拌した。攪拌後、この混合物を吸引ろ過して固体を得た。得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製した。カラムクロマトグラフィーはまずクロロホルムを展開溶媒として用い、次にアセトンを展開溶媒として用いた。得られたフラクションを濃縮して得た固体をクロロホルムとアセトンの混合溶媒で洗浄したところ、橙色粉末状固体を収量400 mg、収率16.1%で得た。

^1H NMR (500 MHz, DMSO- d_6 , ppm): δ 7.77 (d, J = 1.5 Hz, 8H), 7.43 (d, J = 8.5 Hz, 8H), 7.08 (dd, J = 8.8 Hz, 1.5 Hz, 8H), 1.35 (s, 72H) .

元素分析 $\text{C}_{88}\text{H}_{96}\text{N}_6$: 計算値 C, 85.39; H, 7.82; N, 6.79%

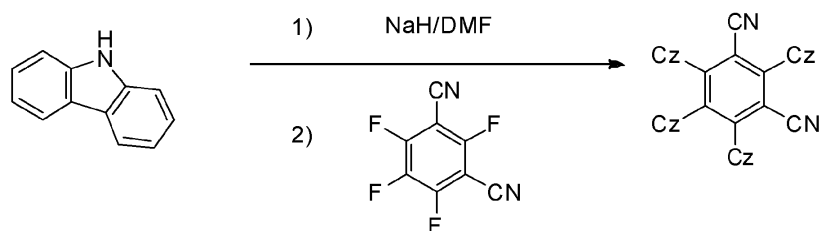
実測値 C 85.38, H 7.82, N 6.78% .

【0101】

(合成例4)

本合成例において、以下のスキームにしたがって化合物301を合成した。

【化 4 1】



【 0 1 0 2】

60%水素化ナトリウム480mg(12.0mmol)を100mL三口フラスコに入れ、当該フラスコ内を窒素置換し、N,N-ジメチルホルムアミド40mLを加えて攪拌した。この混合物へ9H-カルバゾール1.67g(10.0mmol)を加え、窒素気流下、室温で30分攪拌した。攪拌後、この混合物へテトラフルオロイソフタロニトリル400mg(2.00mmol)を加え、この混合物を窒素雰囲気下、60℃で10時間攪拌した。攪拌後、この混合物へ、水5.0mLを加えて攪拌した。攪拌後、この混合物中のN,N-ジメチルホルムアミドを除去した。除去後、この混合物に水200mLを加え、超音波を照射した。照射後、この混合物を吸引ろ過して固体を得た。得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製した。カラムクロマトグラフィーはまずクロロホルム：ヘキサン=1：5の混合溶媒を展開溶媒として用い、次にクロロホルム：ヘキサン=1：2の混合溶媒を展開溶媒として用いた。得られたフラクションを濃縮して得た固体をアセトンとヘキサンの混合溶媒で再結晶したところ、黄色粉末状固体を収量311mg、収率19.7%で得た。

$^1\text{H NMR}$ (500MHz, アセトン- d_6 , ppm) : δ 8.33 (d, $J = 7.7\text{ Hz}$, 2H), 8.06 (d, $J = 8.2\text{ Hz}$, 2H), 7.84 - 7.82 (m, 4H), 7.71 - 7.66 (m, 6H), 7.49 - 7.45 (m, 4H), 7.43 (d, $J = 7.6\text{ Hz}$, 2H), 7.14 - 7.08 (m, 8H), 6.816 (t, $J = 7.3\text{ Hz}$, 2H), 6.71 (t, $J = 7.7\text{ Hz}$, 2H) .

元素分析：計算値 C, 85.26; H, 4.09; N, 10.65

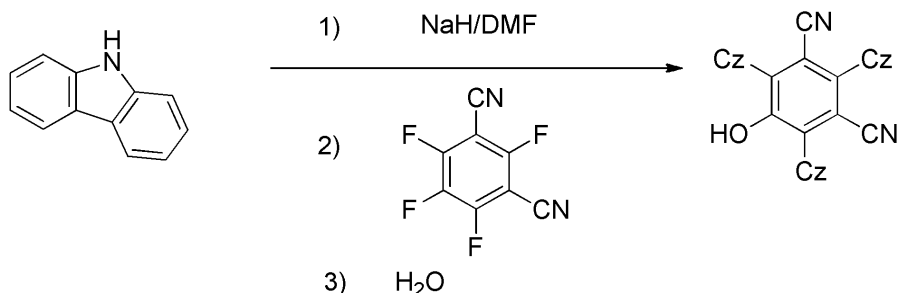
実測値 C, 85.22; H, 4.03; N, 10.62

【 0 1 0 3】

(合成例5)

本合成例において、以下のスキームにしたがって化合物392を合成した。

【化 4 2】



【 0 1 0 4】

60%水素化ナトリウム480mg(12.0mmol)を100mL三口フラスコに入れ、当該フラスコ内を窒素置換し、N,N-ジメチルホルムアミド40mLを加えて攪拌した。この混合物へ9H-カルバゾール1.67g(10.0mmol)を加え、窒素気流下、室温で30分攪拌した。攪拌後、この混合物へテトラフルオロイソフタロニトリル400mg(2.00mmol)を加え、この混合物を窒素雰囲気下、60℃で10時間攪拌した。攪拌後、この混合物へ、水5.0mLを加えて攪拌した。攪拌後、この混合物中のN,N-ジメチルホルムアミドを除去した。除去後、この混合物に水200mLを加え、超音波を照射した。照射後、この混合物を吸引ろ過して固体を得た。得られた固

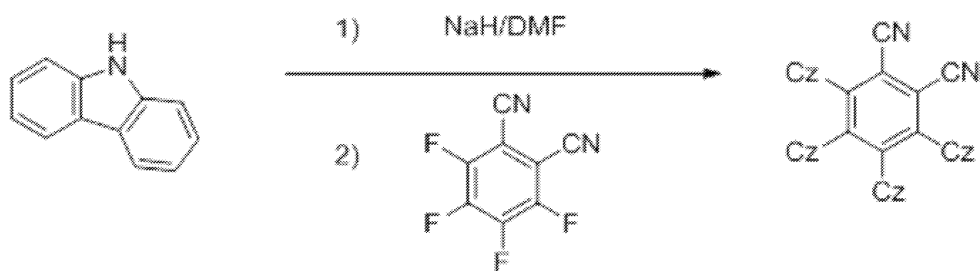
体をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製した。カラムクロマトグラフィーはまずクロロホルムの混合溶媒を展開溶媒として用い、次にクロロホルム：アセトン＝１：２の混合溶媒を展開溶媒として用いた。得られたフラクションを濃縮して得た固体をメタノールで洗浄したところ、淡黄色粉末状固体を収量 600 mg、収率 46.9% で得た。

【0105】

(合成例 6)

本合成例において、以下のスキームにしたがって化合物 501 を合成した。Cz は 9-カルバゾリル基を表す。

【化 43】



10

【0106】

60%水素化ナトリウム 480 mg (12.0 mmol) を 100 mL 三口フラスコに入れ、当該フラスコ内を窒素置換し、N,N-ジメチルホルムアミド 40 mL を加えて 20 攪拌した。この混合物へ 9H-カルバゾール 1.67 g (10.0 mmol) を加え、窒素気流下、室温で 30 分攪拌した。攪拌後、この混合物へテトラフルオロフタロニトリル 400 mg (2.00 mmol) を加え、この混合物を窒素雰囲気下、60℃ で 10 時間攪拌した。攪拌後、この混合物へ、水 5.0 mL を加えて攪拌した。攪拌後、この混合物中の N,N-ジメチルホルムアミドを除去した。除去後、この混合物に水 200 mL を加え、超音波を照射した。照射後、この混合物を吸引ろ過して固体を得た。得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製した。カラムクロマトグラフィーはまずクロロホルムを展開溶媒として用い、次にアセトン：クロロホルム＝１：２の混合溶媒を展開溶媒として用いた。得られたフラクションを濃縮して得た固体をクロロホルムとメタノールの混合溶媒で再結晶したところ、黄色粉末状固体を収量 450 mg、収率 28.5% で得た。

20

^1H NMR (500 MHz, DMSO- d_6 , ppm): δ 7.90 - 7.87 (m, 4H), 7.72 - 7.70 (m, 4H), 7.40 - 7.37 (m, 8H), 7.16 - 7.10 (m, 8H), 6.74 (t, J = 7.7 Hz, 4H), 6.60 (t, J = 7.7 Hz, 4H).

元素分析：計算値 C, 85.26; H, 4.09; N, 10.65

実測値 C, 85.16; H, 4.02; N, 10.55

30

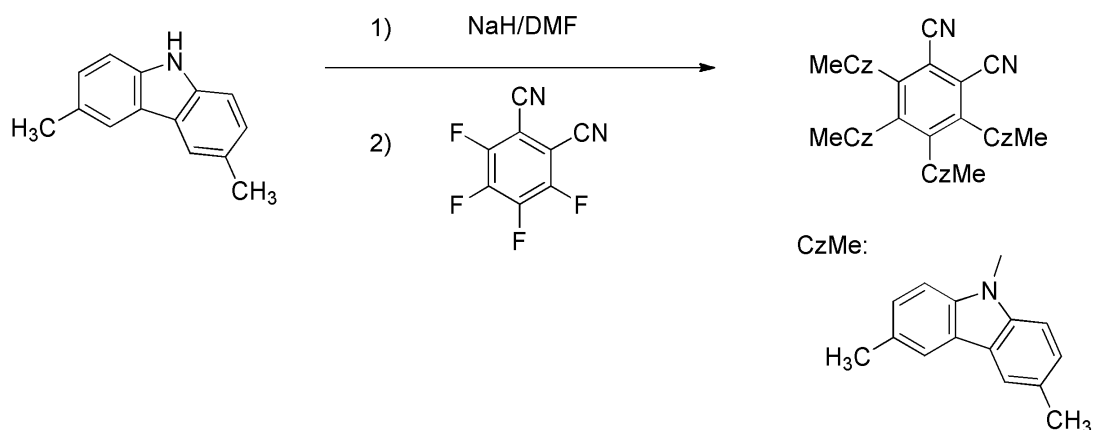
【0107】

(合成例 7)

本合成例において、以下のスキームにしたがって化合物 504 を合成した。

40

【化 4 4】



【0108】

60%水素化ナトリウム480mg(12.0mmol)を100mL三口フラスコに入れ、当該フラスコ内を窒素置換し、N,N-ジメチルホルムアミド40mLを加えて攪拌した。この混合物へ3,6-ジメチル-9H-カルバゾール1.95g(10.0mmol)を加え、窒素気流下、室温で30分攪拌した。攪拌後、この混合物へテトラフルオロフタロニトリル400mg(2.00mmol)を加え、この混合物を窒素雰囲気下、60℃で10時間攪拌した。攪拌後、この混合物を、水400mLへ加えて攪拌した。攪拌後、この混合物を吸引ろ過して固体を得た。得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製した。カラムクロマトグラフィーはまずクロロホルムを展開溶媒として用い、次いで、クロロホルム：アセトン＝1：2の混合溶媒を展開溶媒として用いることにより行った。得られたフラクションを濃縮して得た固体をアセトンで洗浄したところ、橙色粉末状固体を収量515mg、収率28.6%で得た。

$^1\text{H NMR}$ (500MHz, DMSO- d_6 , ppm): δ 7.64 (s, 4H), 7.54 (d, $J = 8.5\text{ Hz}$, 4H), 7.27 (d, $J = 8.5\text{ Hz}$, 4H), 7.15 (s, 4H), 6.95 (dd, $J = 8.3\text{ Hz}$, 1.5 Hz , 4H), 6.44 (dd, $J = 8.5\text{ Hz}$, 1.5 Hz , 4H), 2.34 (s, 12H), 2.10 (s, 12H)。

元素分析：計算値 C, 85.30; H, 5.37; N, 9.33

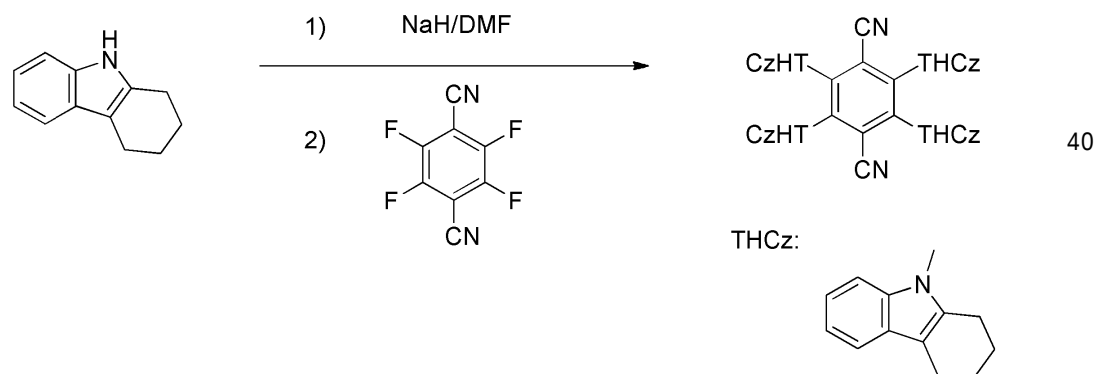
実測値 C, 85.34; H, 5.35; N, 9.30

【0109】

(合成例8)

本合成例において、以下のスキームにしたがって化合物901を合成した。

【化 4 5】



【0110】

60%水素化ナトリウム480mg(12.0mmol)を100mL三口フラスコに入れ、当該フラスコ内を窒素置換し、N,N-ジメチルホルムアミド40mLを加えて攪拌した。この混合物へ1,2,3,4-テトラヒドロカルバゾール1.71g(10.0mmol)を加え、窒素気流下、室温で30分攪拌した。攪拌後、この混合物へテトラフルオロフタロニトリル400mg(2.00mmol)を加え、この混合物を窒素雰囲気下、60℃で10時間攪拌した。攪拌後、この混合物を、水400mLへ加えて攪拌した。攪拌後、この混合物を吸引ろ過して固体を得た。得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製した。カラムクロマトグラフィーはまずクロロホルムを展開溶媒として用い、次いで、クロロホルム：アセトン＝1：2の混合溶媒を展開溶媒として用いることにより行った。得られたフラクションを濃縮して得た固体をアセトンで洗浄したところ、橙色粉末状固体を収量515mg、収率28.6%で得た。

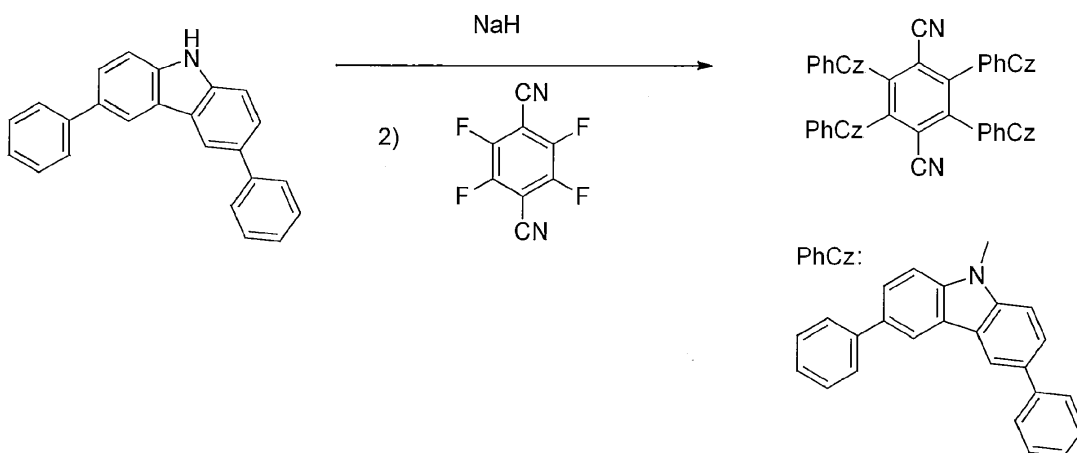
0 mmol)を加え、窒素気流下、室温で30分攪拌した。攪拌後、この混合物へテトラフルオロテレフタロニトリル400mg(2.00mmol)を加え、この混合物を窒素雰囲気下、60℃で10時間攪拌した。攪拌後、この混合物を、水400mLへ加えて攪拌した。攪拌後、この混合物を吸引ろ過して固体を得た。得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製した。カラムクロマトグラフィーはまずクロロホルムを展開溶媒として用い、次にアセトンを展開溶媒として用いた。得られたフラクションを濃縮して得た固体をクロロホルムとアセトンの混合溶媒で洗浄したところ、橙色粉末状固体を収量120mg、収率7.4%で得た。

【0111】

(合成例9)

本合成例において、以下のスキームにしたがって化合物252を合成した。

【化46】



【0112】

60%水素化ナトリウム480mg(12.0mmol)をヘキサンで洗浄した後、窒素雰囲気下で攪拌中の3,6-ジフェニルカルバゾール3.20g(10.0mmol)の乾燥THF溶液中に室温で添加した。30分攪拌した後、この混合物へテトラフルオロテレフタロニトリル400mg(2.00mmol)を加え、窒素雰囲気下、室温で10時間攪拌した。その後、水5mLで反応を停止させ、混合物を減圧濃縮して黄色固体を得た。得られた固体を、クロロホルムを展開溶媒としてシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、橙色粉末状固体を収量2.20g、収率79%で得た。

$^1\text{H NMR}$ (500 MHz, DMSO- d_6 , ppm): δ 8.37 (d, $J = 1.5$ Hz, 8H), 8.05 (d, $J = 8.5$ Hz, 8H), 7.70 (m, 16H), 7.62 (dd, $J = 8.5, 1.5$ Hz, 8H), 7.45 (m, 16H), 7.36 (m, 8H);

IR (KBr, cm^{-1}): 2236, 2228, 1600, 1476, 1456, 1441, 1290, 1226;

MALDI-TOFMS (m/z): $[M]^+$ $\text{C}_{104}\text{H}_{64}\text{N}_6$ 計算値, 1396.52; 実測値 1396.66;

元素分析: 計算値 C, 89.37; H, 4.62; N, 6.01

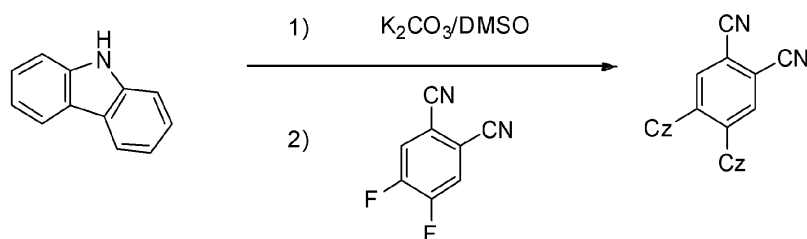
実測値 C, 89.26; H, 4.53; N, 5.95

【0113】

(合成例10)

本合成例において、以下のスキームにしたがって化合物523を合成した。

【化 4 7】



【 0 1 1 4 】

9H-カルバゾール 1.52 g (9.14 mmol)、炭酸カリウム 1.91 g (13.7 mmol) を 50 mL ナスフラスコに入れ、当該フラスコ内を窒素置換した。この混合物へ、ジメチルスルホキシド 15 mL を加えて、窒素気流下、室温で 1 時間攪拌した。この混合物へ、4,5-ジフルオロフタロニトリル 0.500 g (3.05 mmol) を加えた。この混合物を窒素気流下、室温で 3 時間、次いで 50℃ で 20 時間攪拌した。その後、この混合物へ水を加えて攪拌した。この混合物にトルエンを加えて抽出した。抽出後、抽出溶液を飽和食塩水で洗浄した。洗浄後、有機層と水層を分離し、有機層に硫酸マグネシウムを加えて乾燥した。乾燥後、この混合物を吸引ろ過してろ液を得た。得られたろ液を濃縮して得た固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィにより精製した。精製はトルエン：ヘキサン = 1：4 の混合溶媒を展開溶媒に用い、次いで、トルエン：ヘキサン = 7：3 の混合溶媒を、次いでトルエンを展開溶媒として用いることにより行った（徐々に展開比率を変えていった）。得られたフラクションを濃縮して得た固体をアセトンとメタノールの混合溶媒でリスラリー洗浄したところ、目的物の淡黄色粉末状固体を収量 1.20 g、収率 85.8% で得た。

$^1\text{H NMR}$ (500 MHz, アセトン- d_6 , ppm): δ 8.73 (s, 2H), 7.91 - 7.89 (m, 4H), 7.40 - 7.38 (m, 4H), 7.13 - 7.09 (m, 8H).

MS (MALDI): m/z 計算値: 458.15 [M + H]⁺; 実測値: 458.12.

【 0 1 1 5 】

(合成例 11)

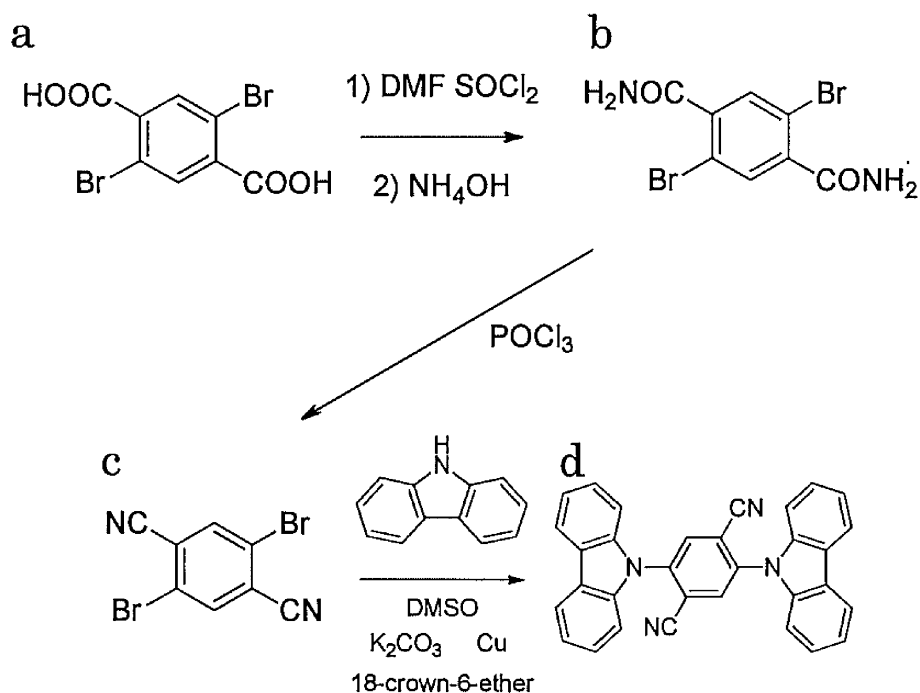
本合成例において、以下のスキームにしたがって化合物 31 を合成した。

10

20

30

【化 4 8】



10

20

【0116】

化合物 b および化合物 c を J-Z Cheng et al, tetrahedron. 67 (2011) 734 と同じ方法で合成した。

化合物 c である 2, 5 - ジブロモテレフタロニトリル (1.44 g, 5.0 mmol)、9H - カルバゾール (1.89 g, 11.3 mmol)、銅粉末 (0.64 g, 10 mmol)、炭酸カリウム (2.79 g, 20 mmol)、18 - クラウン - 6 (0.25 g, 0.94 mmol)、DMSO (5 mL) を窒素雰囲気下で三口フラスコに入れ 140 °C で 9 時間撹拌した。その後、反応物をクロロホルムに溶解させる過により不純物を取った後、水で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥した。その後カラムクロマトグラフィー (クロロホルム) により精製し、黄色の粉末を収量 0.53 g, 収率 23% で得た。

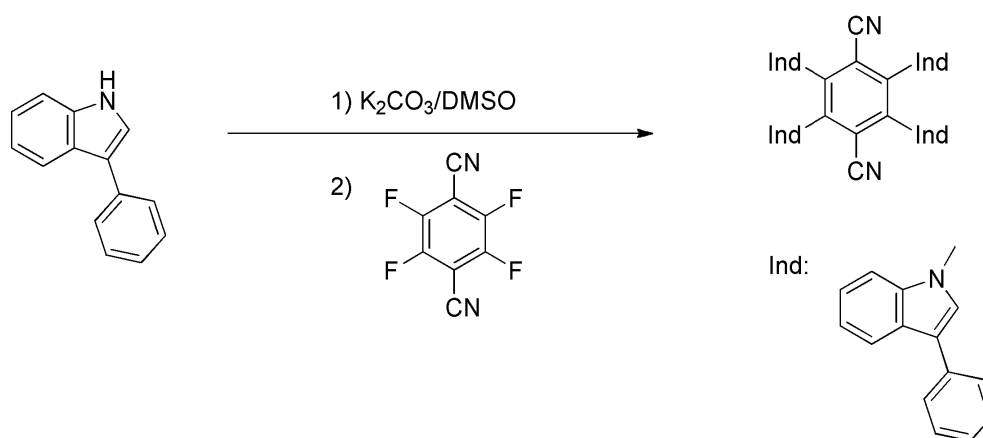
30

【0117】

(合成例 12)

本合成例において、以下のスキームにしたがって化合物 716 を合成した。

【化 4 9】



40

【0118】

3 - フェニル - 1H - インドール 4.01 g (20.8 mmol)、炭酸カリウム 5.72 g (41.4 mmol) を 50 mL 三口フラスコに入れ、フラスコ内を窒素置換した。この混合物へ、ジメチルスルホキシド 20 mL を加えて、室温で 1 時間撹拌した。この

50

混合物を氷浴した後、テトラフルオロテレフタロニトリル 0.696 g (3.48 mmol) を加え、0 から徐々に室温に戻して攪拌した。この混合物を窒素雰囲気下、室温で 24 時間攪拌した。攪拌後、この混合物を約 300 mL の水に加えて攪拌した。攪拌後、この混合物を吸引ろ過して固体を得た。得られた固体を溶解し、シリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製した。カラムクロマトグラフィーはまず、トルエン：ヘキサン = 1：5 の混合溶媒を展開溶媒として用い、次いでトルエンを展開溶媒として用いて行った。得られたフラクションを濃縮して得た固体をアセトンとメタノールの混合溶媒で洗浄したところ、橙色粉末状固体を収量 2.02 g、収率 65.0 % で得た。

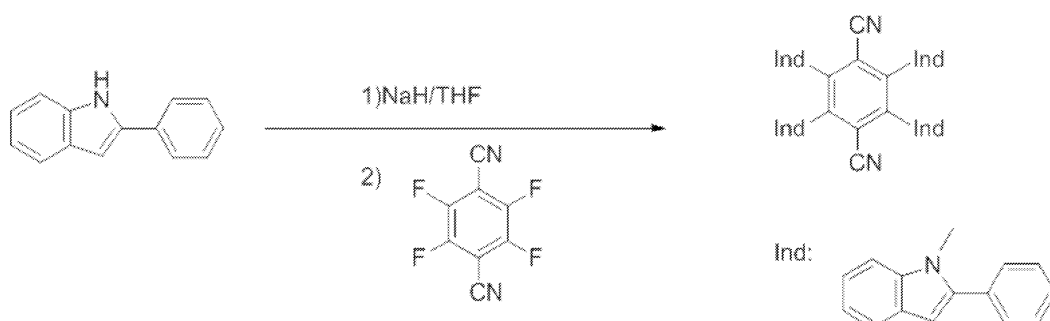
$^1\text{H NMR}$ (500 MHz, DMSO- d_6 , ppm): δ 7.73 (s, 4H), 7.67 (d, $J = 8.0$ Hz, 4H), 7.51 - 7.33 (m, 24H), 7.09 (t, $J = 7.8$ Hz, 4H), 7.02 (t, $J = 7.5$ Hz, 4H).

【0119】

(合成例 13)

本合成例において、以下のスキームにしたがって化合物 728 を合成した。

【化 50】



【0120】

60 % 水素化ナトリウム 2.40 g (60.0 mmol) を 200 mL 三口フラスコに入れ、当該フラスコ内を窒素置換し、テトラヒドロフラン 100 mL を加えて攪拌した。この混合物へ 2-フェニル-1H-インドール 9.65 g (50.0 mmol) を加え、窒素気流下、室温で 30 分攪拌した。この混合物へ、テトラフルオロテレフタロニトリル 2.00 g (10.0 mmol) を加え、この混合物を窒素雰囲気下、室温で 24 時間攪拌した。攪拌後、この混合物に約 50 mL の水をゆっくり加えて攪拌した。攪拌後、有機層と水層を分離し、水層にトルエンを加えて抽出した。有機層と抽出溶液を合わせて、飽和食塩水で洗浄した。洗浄後、有機層に硫酸マグネシウムを入れて乾燥した。乾燥後、この混合物を吸引ろ過してろ液を得た。得られたろ液を濃縮して得た固体をクロロホルムに溶解し、セライトとシリカゲルを通して吸引ろ過して、ろ液を得た。得られたろ液を濃縮して得た固体をイソプロパノールで洗浄した。洗浄後、この固体を酢酸エチルで洗浄したところ、橙色粉末状固体を収量 1.70 g、収率 19.0 % で得た。

$^1\text{H NMR}$ (500 MHz, DMSO- d_6 , ppm): δ 7.48 (d, $J = 8.0$ Hz, 4H), 7.33 (t, $J = 7.0$ Hz, 4H), 7.26 (t, $J = 7.0$ Hz, 8H), 7.09 (t, $J = 7.0$ Hz, 4H), 6.99 (d, $J = 8.0$ Hz, 4H), 6.81 (t, $J = 8.0$ Hz, 4H), 6.65 (s, 4H), 6.53 (d, $J = 7.0$ Hz, 8H).

【0121】

(実施例 1)

本実施例において、合成例 1 で合成した化合物 1 のトルエン溶液を調製して、窒素をバブリングしながら 300 K で 280 nm の光を照射したところ、表 7 に示す発光波長を観測した。時間分解スペクトルを、浜松ホトニクス (株) 製 C4334 型ストリークカメラを用いて行い、発光寿命の短い成分を蛍光、発光寿命が長い成分を遅延蛍光と判断した (図 2)。蛍光成分と遅延蛍光成分の寿命は表 7 に示すとおりであった。

また、化合物 1 のかわりに、合成例 2 ~ 11 で合成した各化合物を用いて同様の評価を

行った結果も表 7 に示す。ただし、化合物 392 と化合物 901 については、窒素でバブリングせずに測定した。

【 0 1 2 2 】

【表 7】

化合物	発光波長 (nm)	蛍光成分 (ns)	遅延蛍光成分 (μ s)
化合物 1	537	8.76	1.91
化合物 4	556	9.58	1.53
化合物 6	553	3.53	8.46
化合物 31	480	22.5	65.5
化合物252	577	9.0	1.10
化合物301	508	3.77	4.89
化合物392	488	10.78	3.65
化合物501	525	12.96	13.45
化合物504	521	18.81	6.57
化合物523	473	28.52	129.67
化合物901	556	10.00	3.54

【 0 1 2 3 】

(実施例 2)

本実施例において、化合物 1 とホスト材料からなる発光層を有する有機フォトルミネッセンス素子を作製して、特性を評価した。

シリコン基板上に真空蒸着法にて、真空度 5.0×10^{-4} Pa の条件にて化合物 1 と mCP とを異なる蒸着源から蒸着し、化合物 1 の濃度が 6.0 重量%である薄膜を 0.3 nm / 秒にて 100 nm の厚さで形成して有機フォトルミネッセンス素子とした。浜松ホトニクス(株)製 C9920-02 型絶対量子収率測定装置を用いて、 N_2 レーザーにより 337 nm の光を照射した際の薄膜からの発光スペクトルを 300 K で特性評価したところ、548 nm の発光が確認され、その際の発光量子収率は 47% であった。次に、20 K、50 K、100 K、150 K、200 K、250 K および 300 K の各温度で、この素子に N_2 レーザーにより 337 nm の光を照射した際の時間分解スペクトルの評価を、浜松ホトニクス(株)製 C4334 型ストリークカメラを用いて行い、発光寿命の短い成分を蛍光、発光寿命が長い成分を遅延蛍光と判断した。その結果、50 ~ 500 K の間で蛍光成分と遅延蛍光成分が観測された(図 3)。蛍光成分は 12 ~ 16 ns であり、遅延蛍光成分は 100 K で 11 μ s、150 K で 8.8 μ s であった。

【 0 1 2 4 】

化合物 1 のかわりに化合物 501 と化合物 289 を用いて有機フォトルミネッセンス素子を作製して同じ試験を行った結果、同様に蛍光成分と遅延蛍光成分が観測された。

【 0 1 2 5 】

(実施例 3)

本実施例において、化合物 1 と CBP からなる発光層を有する有機エレクトロルミネッセンス素子を作製して、特性を評価した。

膜厚 100 nm のインジウム・スズ酸化物(ITO)からなる陽極が形成されたガラス

基板上に、各薄膜を真空蒸着法にて、真空度 5.0×10^{-4} Pa で積層した。まず、ITO 上に α -NPD を 35 nm の厚さに形成した。次に、化合物 1 と CBP を異なる蒸着源から共蒸着し、15 nm の厚さの層を形成して発光層とした。この時、化合物 1 の濃度は 6.0 重量%とした。次に、TPBi を 65 nm の厚さに形成し、さらにフッ化リチウム (LiF) を 0.8 nm 真空蒸着し、次いでアルミニウム (Al) を 80 nm の厚さに蒸着することにより陰極を形成し、有機エレクトロルミネッセンス素子とした。

製造した有機エレクトロルミネッセンス素子を、半導体パラメータ・アナライザ (アジレント・テクノロジー社製: E5273A)、光パワーメータ測定装置 (ニューポート社製: 1930C)、および光学分光器 (オーシャン옵ティクス社製: USB2000) を用いて測定したところ、544 nm の発光が認められた。電流密度 - 電圧 (J-V) 特性を図 4 に示し、電流密度 - 外部量子効率特性を図 5 に示す。化合物 1 を発光材料として用いた有機エレクトロルミネッセンス素子は 17.06 % の高い外部量子効率を達成した。

【0126】

(実施例 4)

実施例 3 の化合物 1 のかわりに化合物 6 を用いて有機フォトルミネッセンス素子を作製して同じ試験を行った結果、553 nm の発光が認められた。電流密度 - 外部量子効率特性を図 6 に示す。

【0127】

(実施例 5)

実施例 3 の化合物 1 のかわりに化合物 301 を用いて有機フォトルミネッセンス素子を作製して同じ試験を行った結果、513 nm の発光が認められた。電流密度 - 外部量子効率特性を図 7 に示す。化合物 301 を発光材料として用いた有機エレクトロルミネッセンス素子は 19.32 % の高い外部量子効率を達成した。

【0128】

(実施例 6)

実施例 3 の化合物 1 のかわりに化合物 501 を用いて有機フォトルミネッセンス素子を作製して同じ試験を行った結果、530 nm の発光が認められた。電流密度 - 電圧 (J-V) 特性を図 8 に示し、電流密度 - 外部量子効率特性を図 9 に示す。化合物 501 を発光材料として用いた有機エレクトロルミネッセンス素子は 17.84 % の高い外部量子効率を達成した。

【0129】

(実施例 7)

本実施例において、合成例 9 で合成した化合物 252 を発光材料として含む発光層を有する有機エレクトロルミネッセンス素子を作製して、特性を評価した。

膜厚 100 nm のインジウム・スズ酸化物 (ITO) からなる陽極が形成されたガラス基板上に、各薄膜を真空蒸着法にて、真空度 5.0×10^{-4} Pa で積層した。まず、ITO 上に α -NPD を 35 nm の厚さに形成した。さらに、化合物 252 と CBP を異なる蒸着源から共蒸着し、15 nm の厚さの層を形成して発光層とした。この時、化合物 252 の濃度は 6.0 重量%とした。次に、TPBi を 65 nm の厚さに形成し、さらにフッ化リチウム (LiF) を 0.8 nm 真空蒸着し、次いでアルミニウム (Al) を 80 nm の厚さに蒸着することにより陰極を形成し、有機エレクトロルミネッセンス素子とした。

製造した有機エレクトロルミネッセンス素子を、半導体パラメータ・アナライザ (アジレント・テクノロジー社製: E5273A)、光パワーメータ測定装置 (ニューポート社製: 1930C)、および光学分光器 (オーシャン옵ティクス社製: USB2000) を用いて測定したところ、図 10 に示す発光スペクトルが観測された。電流密度 - 電圧 (J-V) 特性を図 11 に示し、電流密度 - 外部量子効率特性を図 12 に示す。

【0130】

(実施例 8)

本実施例において、合成例 10 で合成した化合物 523 を発光材料として含む発光層を有する有機エレクトロルミネッセンス素子を作製して、特性を評価した。

膜厚 100 nm のインジウム・スズ酸化物 (ITO) からなる陽極が形成されたガラス基板上に、各薄膜を真空蒸着法にて、真空度 5.0×10^{-4} Pa で積層した。まず、ITO 上に α -NPD を 40 nm の厚さに形成し、次いで mCP を 10 nm の厚さに形成した。さらに、化合物 523 と PPT を異なる蒸着源から共蒸着し、20 nm の厚さの層を形成して発光層とした。この時、化合物 523 の濃度は 6.0 重量% とした。次に、PPT を 40 nm の厚さに形成し、さらにフッ化リチウム (LiF) を 0.8 nm 真空蒸着し、次いでアルミニウム (Al) を 80 nm の厚さに蒸着することにより陰極を形成し、有機エレクトロルミネッセンス素子とした。

製造した有機エレクトロルミネッセンス素子を、半導体パラメータ・アナライザ (アジレント・テクノロジー社製: E5273A)、光パワーメータ測定装置 (ニューポート社製: 1930C)、および光学分光器 (オーシャン옵ティクス社製: USB2000) を用いて測定したところ、図 13 に示す発光スペクトルが観測された。電流密度 - 電圧 (J-V) 特性を図 14 に示し、電流密度 - 外部量子効率特性を図 15 に示す。

【0131】

(実施例 9)

本実施例において、合成例 11 で合成した化合物 31 を発光材料として含む発光層を有する有機エレクトロルミネッセンス素子を作製して、特性を評価した。

膜厚 100 nm のインジウム・スズ酸化物 (ITO) からなる陽極が形成されたガラス基板上に、各薄膜を真空蒸着法にて、真空度 5.0×10^{-4} Pa で積層した。まず、ITO 上に α -NPD を 35 nm の厚さに形成し、次いで mCP を 10 nm の厚さに形成した。さらに、化合物 31 と mCP を異なる蒸着源から共蒸着し、15 nm の厚さの層を形成して発光層とした。この時、化合物 31 の濃度は 3.0 重量% とした。次に、PPT を 10 nm の厚さに形成し、その上に TPBi を 40 nm の厚さに形成し、さらにフッ化リチウム (LiF) を 0.8 nm 真空蒸着し、次いでアルミニウム (Al) を 100 nm の厚さに蒸着することにより陰極を形成し、有機エレクトロルミネッセンス素子とした。

製造した有機エレクトロルミネッセンス素子を、半導体パラメータ・アナライザ (アジレント・テクノロジー社製: E5273A)、光パワーメータ測定装置 (ニューポート社製: 1930C)、および光学分光器 (オーシャン옵ティクス社製: USB2000) を用いて測定したところ、図 16 に示す発光スペクトルが観測された。電流密度 - 電圧 (J-V) 特性を図 17 に示し、電流密度 - 外部量子効率特性を図 18 に示す。

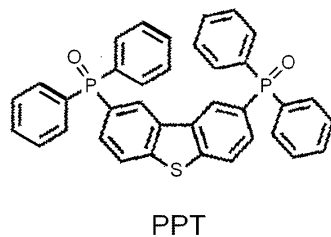
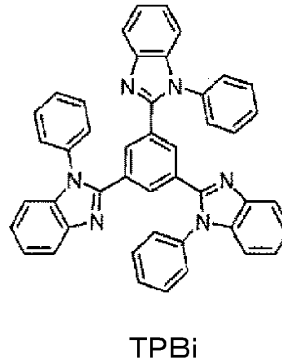
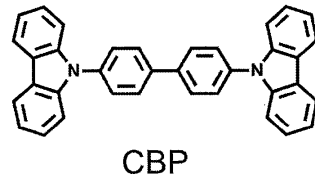
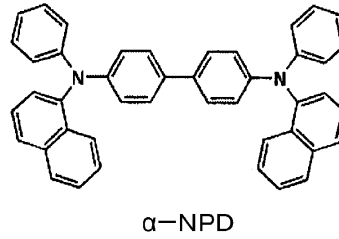
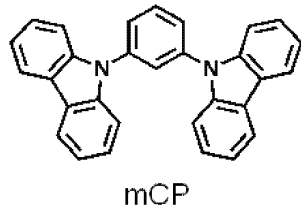
【0132】

10

20

30

【化 5 1】



【産業上の利用可能性】

【0133】

本発明の有機発光素子は、高い発光効率を実現しうるものである。また、本発明の化合物は、そのような有機発光素子用の発光材料として有用である。このため、本発明は産業上の利用可能性が高い。

【符号の説明】

【0134】

- 1 基板
- 2 陽極
- 3 正孔注入層
- 4 正孔輸送層
- 5 発光層
- 6 電子輸送層
- 7 陰極

【要約】 (修正有)

【課題】発光効率が高い有機発光素子を提供する。

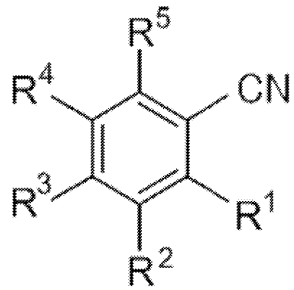
【解決手段】下記一般式で表される化合物を発光層に有する有機発光素子。

10

20

30

40

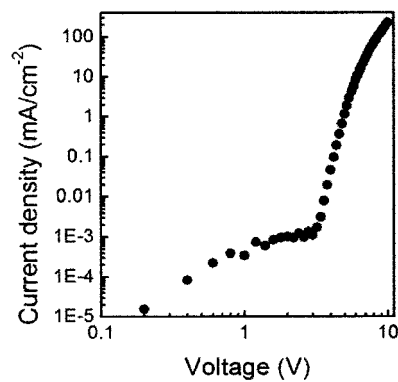


[$R^1 \sim R^5$ の少なくとも 1 つはシアノ基を表し、 $R^1 \sim R^5$ の少なくとも 1 つは置換もしくはは無置換の 9 - カルバゾリル基、置換もしくはは無置換の 1, 2, 3, 4 - テトラヒドロ - 9 - カルバゾリル基、置換もしくはは無置換の 1 - インドリル基、または置換もしくはは無置換のジアーリールアミノ基を表し、残りの $R^1 \sim R^5$ は水素原子または置換基を表す。]

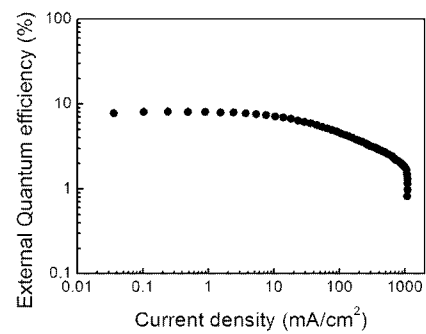
【選択図】なし

10

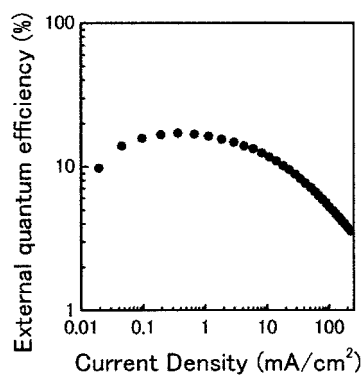
【図 4】



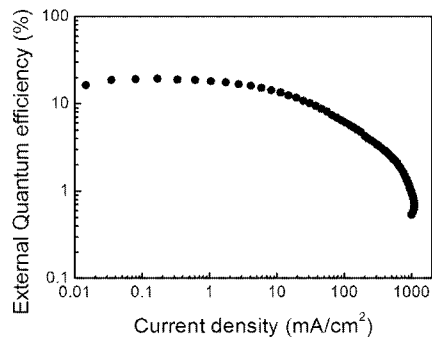
【図 6】



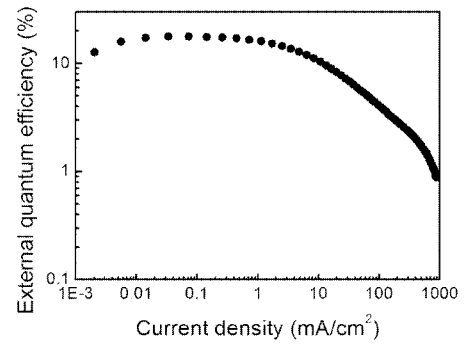
【図 5】



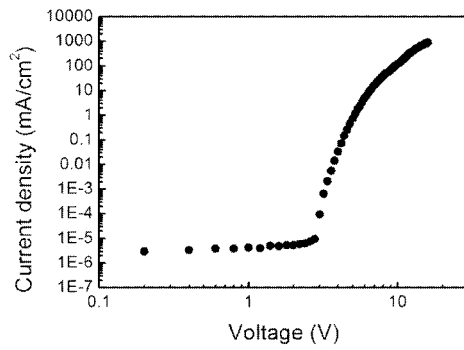
【図 7】



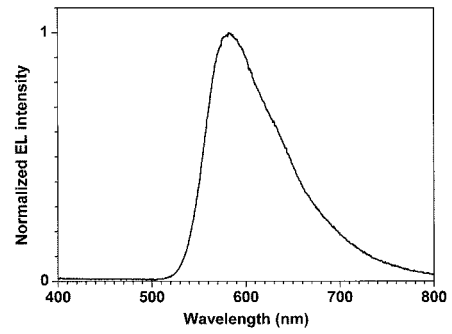
【図 9】



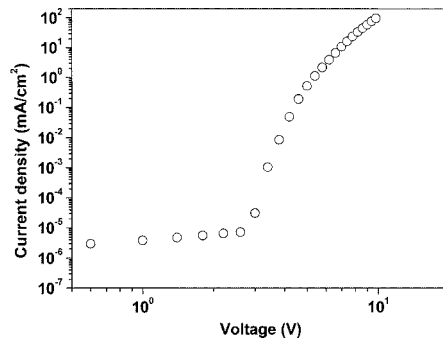
【図 8】



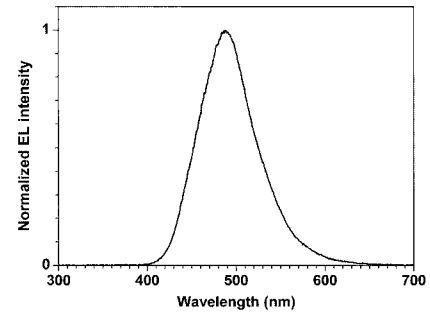
【図 10】



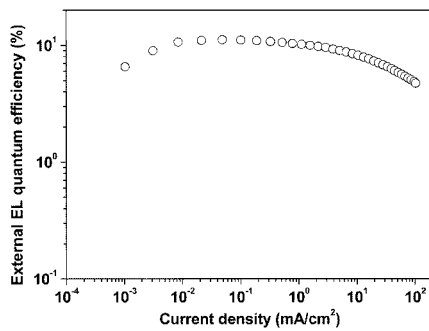
【図 11】



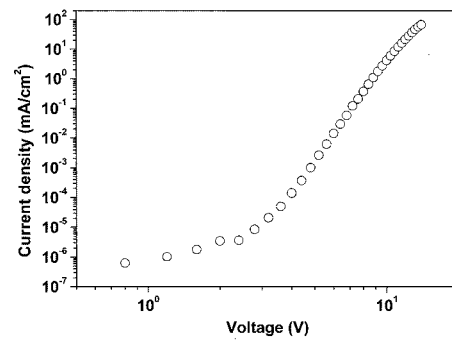
【図 13】



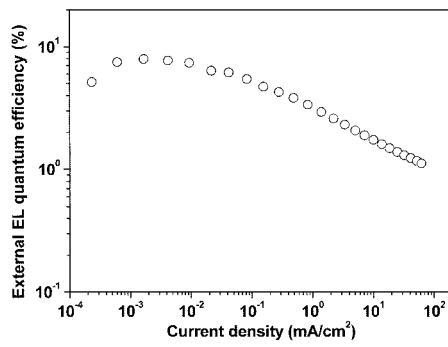
【図 12】



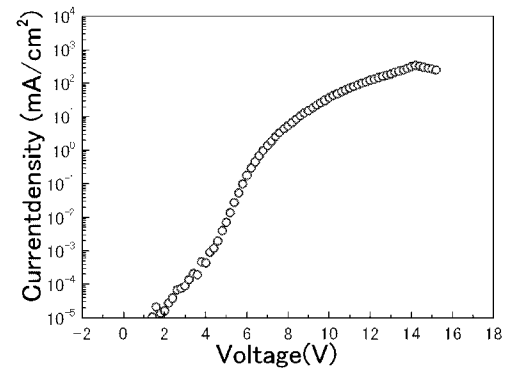
【図 14】



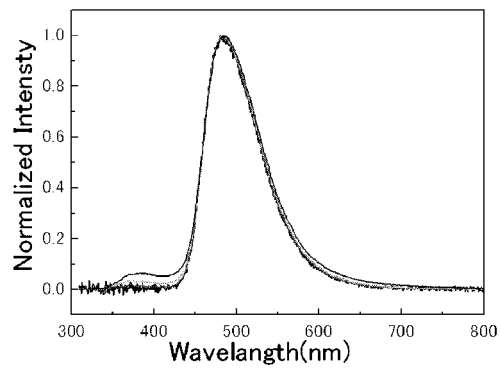
【図 15】



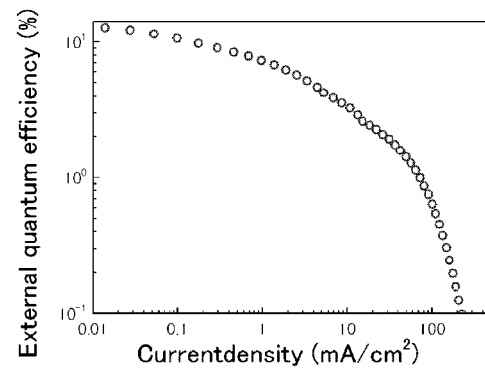
【図 17】



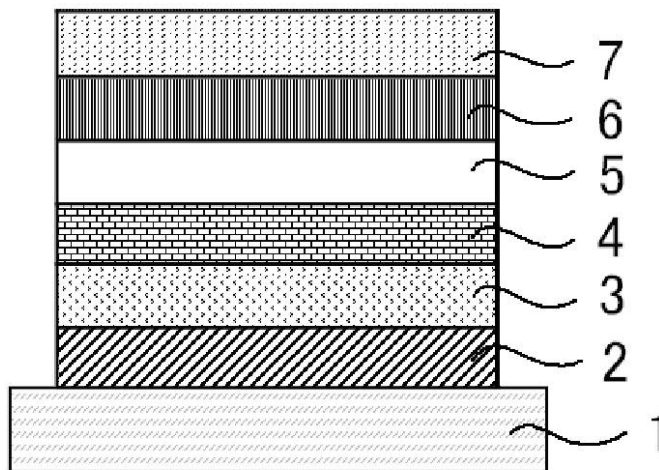
【図 16】



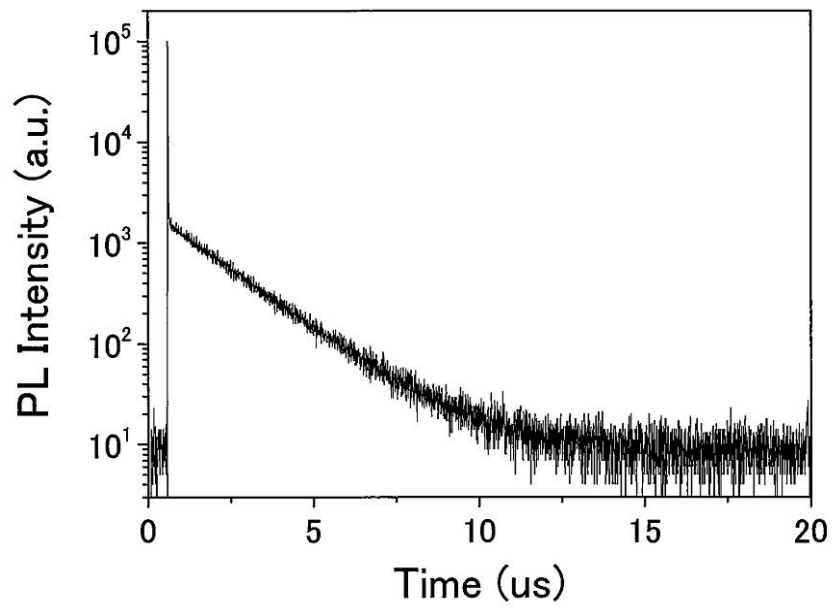
【図 18】



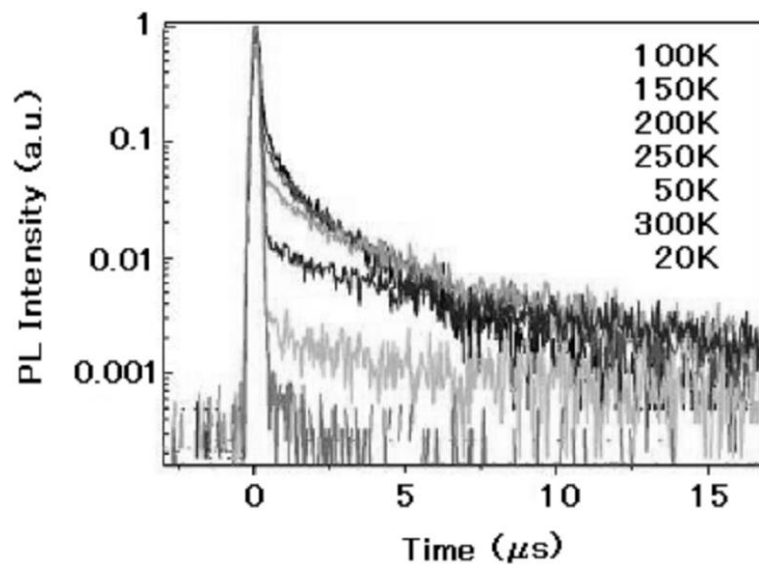
【図 1】



【 図 2 】



【 図 3 】



フロントページの続き

- (72)発明者 合志 憲一
福岡県福岡市東区箱崎六丁目 10 番 1 号 国立大学法人九州大学内
- (72)発明者 安田 琢磨
福岡県福岡市東区箱崎六丁目 10 番 1 号 国立大学法人九州大学内
- (72)発明者 近藤 良介
福岡県福岡市東区箱崎六丁目 10 番 1 号 国立大学法人九州大学内
- (72)発明者 志津 功將
福岡県福岡市東区箱崎六丁目 10 番 1 号 国立大学法人九州大学内

審査官 井上 恵理

- (56)参考文献 特開 2009 - 094486 (JP, A)
韓国公開特許第 10 - 2010 - 0123172 (KR, A)
特開 2008 - 133225 (JP, A)
韓国公開特許第 10 - 2011 - 0034984 (KR, A)
韓国公開特許第 10 - 2011 - 0034977 (KR, A)
Nature (London, United Kingdom) , 2012 年, 492(7428) , 234-238

- (58)調査した分野(Int.Cl. , DB 名)
C09K 11/06
C07C 1/00 - 409/44
H01L 51/50
CAplus/REGISTRY (STN)

专利名称(译)	有机发光器件和发光材料及化合物		
公开(公告)号	JP5366106B1	公开(公告)日	2013-12-11
申请号	JP2012274324	申请日	2012-12-17
[标]申请(专利权)人(译)	国立大学法人九州大学		
申请(专利权)人(译)	国立大学法人九州大学		
当前申请(专利权)人(译)	国立大学法人九州大学		
[标]发明人	安達千波矢 魚山大樹 野村洸子 合志憲一 安田琢麿 近藤良介 志津功將		
发明人	安達 千波矢 魚山 大樹 野村 洸子 合志 憲一 安田 琢麿 近藤 良介 志津 功將		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50 C07D209/86 C07D209/08		
FI分类号	C09K11/06.645 H05B33/14.B C07D209/86.CSP C07D209/08 C07D209/86		
F-TERM分类号	3K107/AA01 3K107/BB01 3K107/BB02 3K107/CC04 3K107/CC45 3K107/DD59 3K107/DD66 4C204/BB05 4C204/CB03 4C204/CB25 4C204/DB01 4C204/DB07 4C204/EB01 4C204/EB02 4C204/FB25 4C204/GB01 4C204/GB03		
优先权	2012088615 2012-04-09 JP 2012173277 2012-08-03 JP		
其他公开文献	JP2014043541A		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

提供了具有高发光效率的有机发光器件。在发光层中具有由以下通式表示的化合物的有机发光装置。[R1至R5中的至少一个表示氰基，R1至R5中的至少一个是取代或未取代的9-咔唑基，取代或未取代的1，2,3,4-四氢-9-咔唑基，取代或未取代的1-吡啶基或取代或未取代的二芳基氨基，其余的R1至R5为氢原子。或者，它表示取代基。][选择图]无

一般式 (1)

