

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号  
特許第7619283号  
(P7619283)

(45)発行日 令和7年1月22日(2025.1.22)

(24)登録日 令和7年1月14日(2025.1.14)

(51)国際特許分類 F I  
C 0 9 K 11/06 (2006.01) C 0 9 K 11/06 6 2 0  
H 1 0 F 30/00 (2025.01) H 0 1 L 31/08 Z

請求項の数 9 (全84頁)

(21)出願番号	特願2021-570653(P2021-570653)	(73)特許権者	000001270 コニカミノルタ株式会社 東京都千代田区丸の内二丁目7番2号
(86)(22)出願日	令和2年11月2日(2020.11.2)	(74)代理人	110001254 弁理士法人光陽国際特許事務所
(86)国際出願番号	PCT/JP2020/041019	(72)発明者	植田 則子 東京都千代田区丸の内二丁目7番2号 コニカミノルタ株式会社内
(87)国際公開番号	WO2021/145052	(72)発明者	中林 亮 東京都千代田区丸の内二丁目7番2号 コニカミノルタ株式会社内
(87)国際公開日	令和3年7月22日(2021.7.22)	(72)発明者	宮田 康生 東京都千代田区丸の内二丁目7番2号 コニカミノルタ株式会社内
審査請求日	令和5年6月27日(2023.6.27)	審査官	辰己 雅夫
(31)優先権主張番号	特願2020-4984(P2020-4984)		
(32)優先日	令和2年1月16日(2020.1.16)		
(33)優先権主張国・地域又は機関	日本国(JP)		

最終頁に続く

(54)【発明の名称】 発光部材、発光性化合物及び光電変換部材

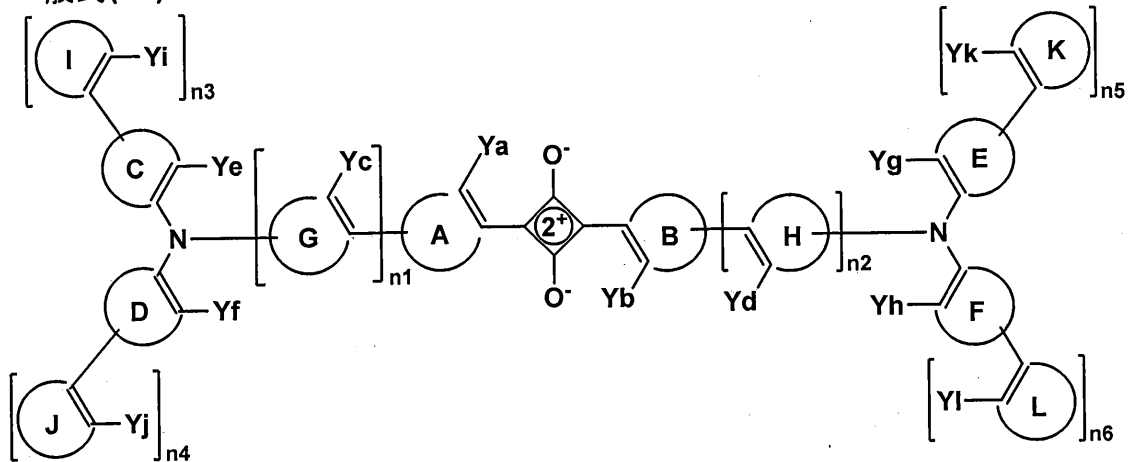
(57)【特許請求の範囲】

【請求項1】

下記一般式(T2)で表される構造を有する化合物を含有する発光部材。

【化1】

一般式(T2)



10

[一般式(T2)において、

A ~ Lは、それぞれ独立して、芳香族炭化水素環を表す。

20

$n_1 \sim n_6$  は、それぞれ独立して、0又は1の整数を表す。

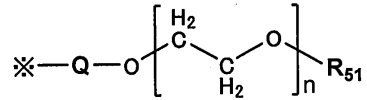
$Y_a$ 及び $Y_b$ は、それぞれ独立して、OH基、 $NHCOR_a$  ( $R_a$ は炭化水素基を表す。)基、 $NHSO_2R_b$  ( $R_b$ は炭化水素基を表す。)基、又は $NHPO(OR_f)(OR_g)$  ( $R_f$ 及び $R_g$ はそれぞれ炭化水素基を表す。)基を表す。

$Y_c \sim Y_l$ は、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。

ただし、 $Y_a$ 及び $Y_b$ のうち少なくとも1つは、炭素数4～12の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基(a)、又は下記一般式(P)で表される構造を有する基(P)を含む基である。

【化2】

一般式(P)



(一般式(P)において、 $\left[ \begin{array}{c} \text{H}_2 \\ | \\ \text{C} \\ | \\ \text{C} \\ | \\ \text{H}_2 \end{array} \text{-O} \right]_n$ は置換部位を表す。Qは単結合又は2価の連結基を表す。nは1～9の整数を表す。 $R_{51}$ は水素原子又はメチル基を表す。)

【請求項2】

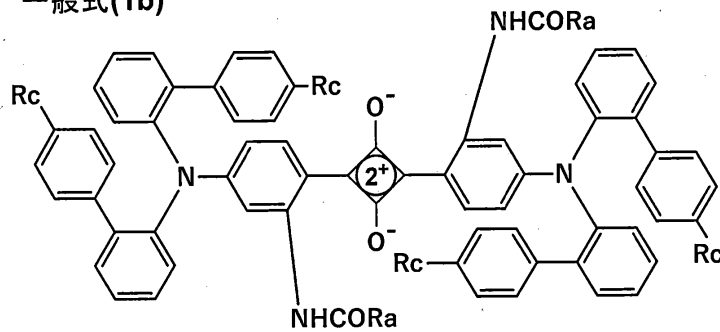
前記一般式(T2)において、 $Y_e \sim Y_l$ のうち少なくとも1つが、炭素数4～12の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基、又は前記一般式(P)で表される構造を有する基(P)を含む基である請求項1記載の発光部材。

【請求項3】

下記一般式(1b)で表される構造を有する化合物を含有する発光部材。

【化3】

一般式(1b)



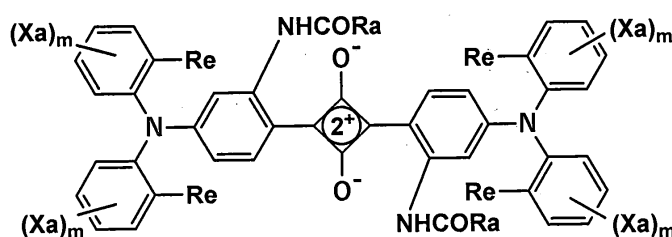
(一般式(1b)において、各 $R_a$ は、それぞれ独立して、炭化水素基を表す。各 $R_c$ は、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。2個の $R_a$ のいずれかが炭素数4～12の直鎖状又は分岐状のアルキル基(a)を表すか、4個の $R_c$ のうち少なくとも1個が、連結基として-O-を有してもよい炭素数4～12の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基(a)、又は前記一般式(P)で表される構造を有する基(P)を表す。)

【請求項4】

下記一般式(1d)で表される構造を有する化合物を含有する発光部材。

【化4】

一般式(1d)



10

20

30

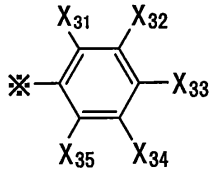
40

50

(一般式(1d)において、各R<sub>a</sub>は、それぞれ独立して、炭化水素基を表す。各R<sub>e</sub>は、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。各X<sub>a</sub>は、それぞれ独立して、炭素数1~3のアルキル基若しくはアルコキシ基又は置換又は無置換のフェニル基を表し、4位に結合する場合のX<sub>a</sub>は、下記式(D)で表される構造を有する基であってもよい。mは、0~4の整数を表す。ただし、一般式(1d)においては、2個のR<sub>a</sub>のいずれかが炭素数4~12の直鎖状又は分岐状のアルキル基(a)を表すか、4個のR<sub>e</sub>のうち少なくとも1個が、連結基として-O-を有してもよい炭素数4~12の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基(a)、又は前記一般式(P)で表される構造を有する基(P)を表すか、又は前記4位にX<sub>a</sub>として下記式(D)で表される構造を有する基が結合する。)

【化5】

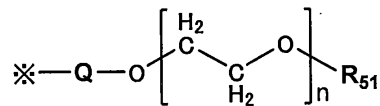
式(D)



(式(D)において、      は接続部位を示す。X<sub>31</sub>~X<sub>35</sub>は、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。ただし、X<sub>31</sub>及びX<sub>35</sub>のうち少なくとも1つは炭素数4~12の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基(a)、又は下記一般式(P)で表される構造を有する基(P)を有する基であり、X<sub>32</sub>~X<sub>34</sub>は、炭素数4以上の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基又は(ポリ)オキシアルキレン基を有しない。)

【化6】

一般式(P)



(一般式(P)において、      は置換部位を表す。Qは単結合又は2価の連結基を表す。nは1~9の整数を表す。R<sub>51</sub>は水素原子又はメチル基を表す。)

【請求項5】

前記発光部材が発光性薄膜である請求項1から請求項4までのいずれか一項に記載の発光部材。

【請求項6】

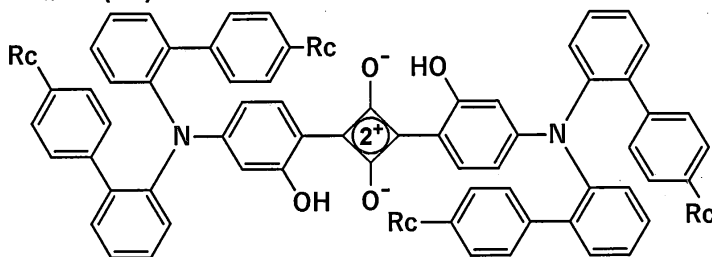
前記発光部材が発光性粒子である請求項1から請求項4までのいずれか一項に記載の発光部材。

【請求項7】

下記一般式(1a)で表される構造を有する発光性化合物。

【化7】

一般式(1a)



(一般式(1a)において、各R<sub>c</sub>は、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表し、

10

20

30

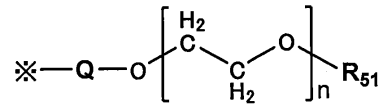
40

50

4個のR<sub>c</sub>のうち少なくとも1個は、連結基として-O-を有してもよい炭素数4~12の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基(a)、又は下記一般式(P)で表される構造を有する基(P)を表す。)

【化8】

一般式(P)



10

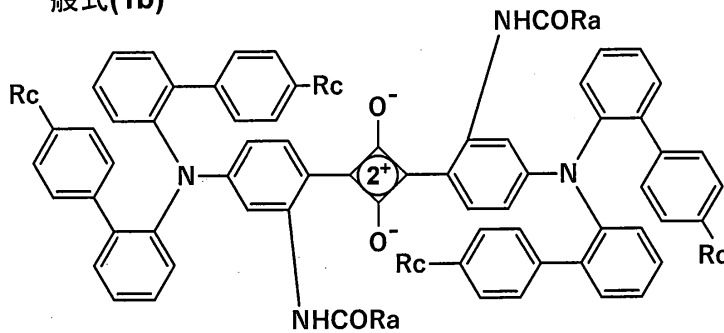
(一般式(P)において、 $\square$ は置換部位を表す。Qは単結合又は2価の連結基を表す。nは1~9の整数を表す。R<sub>51</sub>は水素原子又はメチル基を表す。)

【請求項8】

下記一般式(1b)で表される構造を有する発光性化合物。

【化9】

一般式(1b)



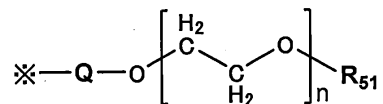
20

(一般式(1b)において、各R<sub>a</sub>は、それぞれ独立して、炭化水素基を表す。各R<sub>c</sub>は、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。2個のR<sub>a</sub>のいずれかが炭素数4~12の直鎖状又は分岐状のアルキル基(a)を表すか、4個のR<sub>c</sub>のうち少なくとも1個が、連結基として-O-を有してもよい炭素数4~12の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基(a)、又は下記一般式(P)で表される構造を有する基(P)を表す。)

30

【化10】

一般式(P)



(一般式(P)において、 $\square$ は置換部位を表す。Qは単結合又は2価の連結基を表す。nは1~9の整数を表す。R<sub>51</sub>は水素原子又はメチル基を表す。)

40

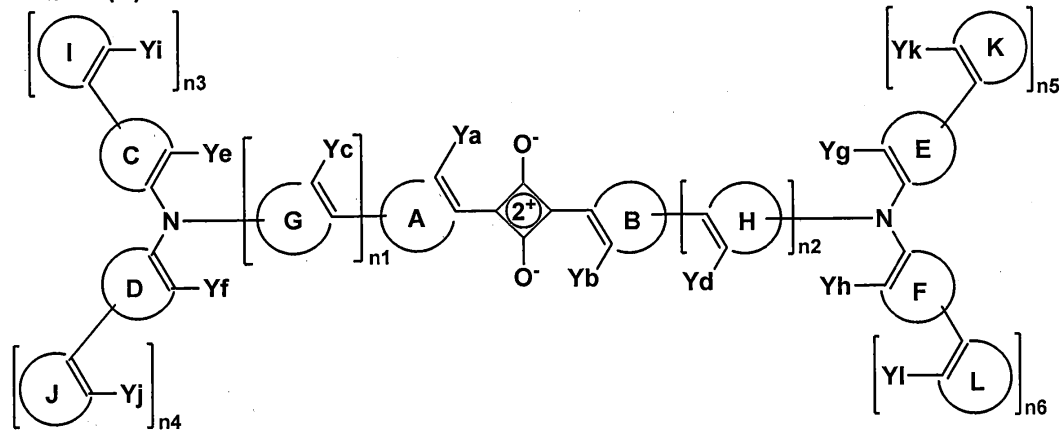
【請求項9】

下記一般式(T)で表される構造を有する化合物を含有する光電変換部材。

50

## 【化 1 1】

## 一般式(T)



10

[ 一般式 ( T ) において、

A ~ L は、それぞれ独立して、芳香族炭化水素環又はヘテロ芳香環を表す。

n 1 ~ n 6 は、それぞれ独立して、0 ~ 2 の整数を表す。

Y a 及び Y b は、それぞれ独立して、OH 基、NHCO R a ( R a は炭化水素基を表す。 ) 基、NH S O 2 R b ( R b は炭化水素基を表す。 ) 基、又は NH P O ( O R f ) ( O R g ) ( R f 及び R g はそれぞれ炭化水素基を表す。 ) 基を表す。

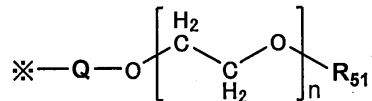
20

Y c ~ Y l は、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。

ただし、Y a ~ Y l のうち少なくとも1つは、炭素数 4 ~ 1 2 の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基 ( a ) 、又は下記一般式 ( P ) で表される構造を有する基 ( P ) を含む基である。

## 【化 1 2】

## 一般式(P)



30

( 一般式 ( P ) において、 $\left[ \begin{array}{c} \text{H}_2 \\ | \\ \text{C} \\ | \\ \text{C} \\ | \\ \text{H}_2 \end{array} \text{O} \right]$  は置換部位を表す。Q は単結合又は 2 価の連結基を表す。n は 1 ~ 9 の整数を表す。R 5 1 は水素原子又はメチル基を表す。 ) ]

## 【発明の詳細な説明】

## 【技術分野】

## 【0001】

本発明は、発光部材、発光性化合物及び光電変換部材に関し、より詳しくは、近赤外光における長波長領域 ( 以下、「近赤外長波長領域」ともいう。 ) の発光と部材への高濃度での配合が可能な発光性化合物を含有する、近赤外長波長領域において高い発光量子収率が達成可能な発光部材等に関する。

40

## 【背景技術】

## 【0002】

近赤外発光部材は、近赤外励起下で生体細胞の自己蛍光のバックグラウンドの影響を無視できることと、近赤外光が可視光より生体内での散乱が少ないためより生体深部でのイメージング、静脈撮像による生体認証、パルスオキシメーターなどの生体計測などが可能になることで注目されている。そのため、近赤外領域に発光を有する化合物が検討されている。

## 【0003】

しかしながら、一般に発光波長を可視光領域よりも長波長側に有する化合物を用いると

50

、極端に発光量子収率が低下することが知られている。近赤外発光では、その励起状態のエネルギーが低く分子振動による無輻射失活の影響が大きくなるためである。さらに発光波長を長波長化するために色素の共役系を拡張した場合、分子間相互作用が増すため、薄膜や粒子中で色素が凝集しやすくなって濃度消光が生じる。したがって、発光色素が溶液中で発光量子収率の高い近赤外発光を示しても、樹脂等の固体のマトリックス中に分散させた場合などでは、高い発光量子収率を維持することができないという問題があった。

【0004】

スクアリリウム化合物は、近赤外吸収材として知られている（例えば、特許文献1を参照）。また、スクアリリウム化合物が、有機EL素子において遅延蛍光体又はリン光発光性化合物と組み合わせて用いられることも知られている（例えば、特許文献2を参照）。しかしながら、発光部材に応用する目的で、高濃度で含有された際にも高い発光量子収率が得られるという観点で、スクアリリウム化合物の分子構造が検討された例はこれまでなかった。

10

【先行技術文献】

【特許文献】

【0005】

【文献】国際公開第2017/130825号

【文献】国際公開第2018/008721号

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

20

【0006】

本発明は、上記問題・状況に鑑みてなされたものであり、その解決課題は、近赤外長波長領域の発光と部材への高濃度での配合が可能な発光性化合物を含有することで、近赤外長波長領域において高い発光量子収率が達成可能な発光部材を提供することである。また、近赤外長波長領域の発光と部材への高濃度での配合が可能な発光性化合物を提供することである。さらには、近赤外長波長領域の発光と部材への高濃度での配合が可能な発光性化合物を用いた高い外部量子効率を得られる光電変換部材を提供することである。

【課題を解決するための手段】

【0007】

本発明者は、上記課題を解決すべく、上記問題の原因等について検討する過程において、スクアリリウム環を分子構造の中心に有する化合物において、近赤外長波長領域に発光ピークを有する分子構造としつつ、スクアリリウム環の外側の基に可溶性基をスクアリリウム環に向かう方向に伸長するように配置することで、該化合物が近赤外長波長領域で発光しつつ、濃度消光を緩和してマトリックスへの高濃度での配合が可能となることを見出し本発明に至った。

30

すなわち、本発明に係る上記課題は、以下の手段により解決される。

【0008】

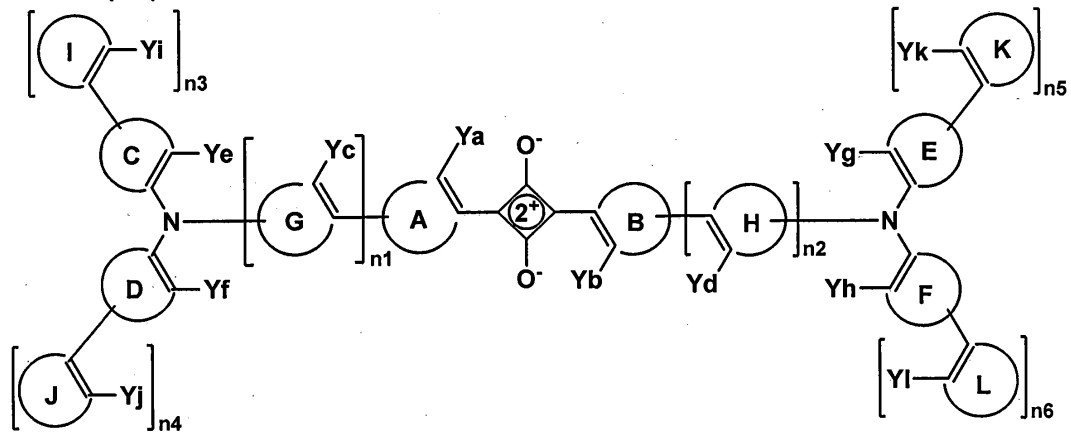
1. 下記一般式(1)で表される構造を有する化合物を含有する発光部材。

40

50

## 【化 1 1】

## 一般式(T2)



10

[ 一般式 ( T 2 ) において、

A ~ L は、それぞれ独立して、芳香族炭化水素環を表す。

n 1 ~ n 6 は、それぞれ独立して、0 又は 1 の整数を表す。

Y a 及び Y b は、それぞれ独立して、OH 基、NHCO R a ( R a は炭化水素基を表す。 ) 基、NH S O 2 R b ( R b は炭化水素基を表す。 ) 基、又は NH P O ( O R f ) ( O R g ) ( R f 及び R g はそれぞれ炭化水素基を表す。 ) 基を表す。

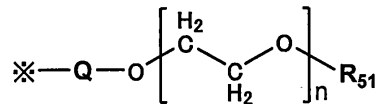
20

Y c ~ Y l は、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。

ただし、Y a 及び Y b のうち少なくとも 1 つは、炭素数 4 ~ 1 2 の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基 ( a )、又は下記一般式 ( P ) で表される構造を有する基 ( P ) を含む基である。

## 【化 1 2】

## 一般式(P)



30

( 一般式 ( P ) において、 $\left[ \begin{array}{c} \text{H}_2 \\ | \\ \text{C} \\ | \\ \text{C} \\ | \\ \text{H}_2 \end{array} \text{O} \right]$  は置換部位を表す。Q は単結合又は 2 価の連結基を表す。n は 1 ~ 9 の整数を表す。R 5 1 は水素原子又はメチル基を表す。 ) ]

## 【 0 0 1 0】

2. 前記一般式 ( T 2 ) において、Y e ~ Y l のうち少なくとも 1 つが、炭素数 4 ~ 1 2 の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基 ( a )、又は前記一般式 ( P ) で表される構造を有する基 ( P ) を含む基である第 1 項に記載の発光部材。

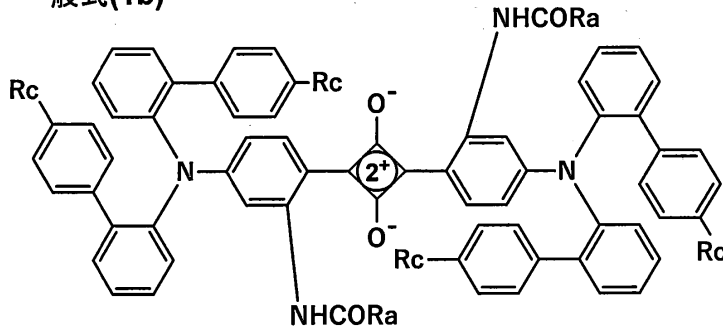
## 【 0 0 1 4】

3. 下記一般式 ( 1 b ) で表される構造を有する化合物を含有する発光部材。

40

【化13】

一般式(1b)



10

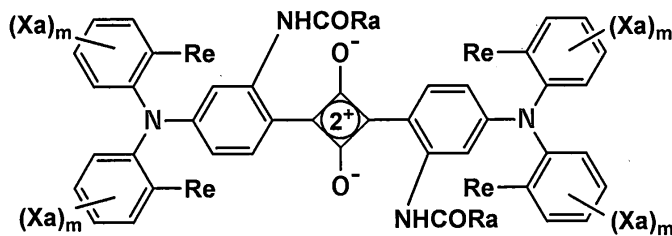
(一般式(1b)において、各R<sub>a</sub>は、それぞれ独立して、炭化水素基を表す。各R<sub>c</sub>は、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。2個のR<sub>a</sub>のいずれかが炭素数4~12の直鎖状又は分岐状のアルキル基(a)を表すか、4個のR<sub>c</sub>のうち少なくとも1個が、連結基として-O-を有してもよい炭素数4~12の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基(a)、又は前記一般式(P)で表される構造を有する基(P)を表す。)

【0016】

4. 下記一般式(1d)で表される構造を有する化合物を含有する発光部材。

【化13】

一般式(1d)



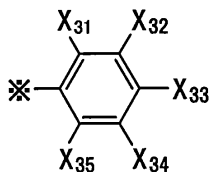
20

(一般式(1d)において、各R<sub>a</sub>は、それぞれ独立して、炭化水素基を表す。各R<sub>e</sub>は、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。各X<sub>a</sub>は、それぞれ独立して、炭素数1~3のアルキル基若しくはアルコキシ基又は置換又は無置換のフェニル基を表し、4位に結合する場合のX<sub>a</sub>は、下記式(D)で表される構造を有する基であってもよい。mは、0~4の整数を表す。ただし、一般式(1d)においては、2個のR<sub>a</sub>のいずれかが炭素数4~12の直鎖状又は分岐状のアルキル基(a)を表すか、4個のR<sub>e</sub>のうち少なくとも1個が、連結基として-O-を有してもよい炭素数4~12の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基(a)、又は前記一般式(P)で表される構造を有する基(P)を表すか、又は前記4位にX<sub>a</sub>として下記式(D)で表される構造を有する基が結合する。)

30

【化14】

式(D)



40

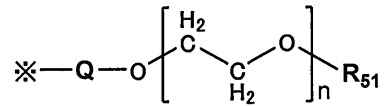
(式(D)において、    は接続部位を示す。X<sub>31</sub>~X<sub>35</sub>は、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。ただし、X<sub>31</sub>及びX<sub>35</sub>のうち少なくとも1つは炭素数4~12の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基(a)、又は下記一般式(P)で表される構造を有する基(P)を有する基であり、X<sub>32</sub>~X<sub>34</sub>は、炭素数4以上の直鎖状若しくは分岐状の

50

アルキル基又は(ポリ)オキシアルキレン基を有しない。) ]

【化15】

一般式(P)



(一般式(P)において、 $\square$ は置換部位を表す。Qは単結合又は2価の連結基を表す。nは1~9の整数を表す。R<sub>51</sub>は水素原子又はメチル基を表す。)

【0017】

5. 前記発光部材が発光性薄膜である第1項から第4項までのいずれか一項に記載の発光部材。

【0018】

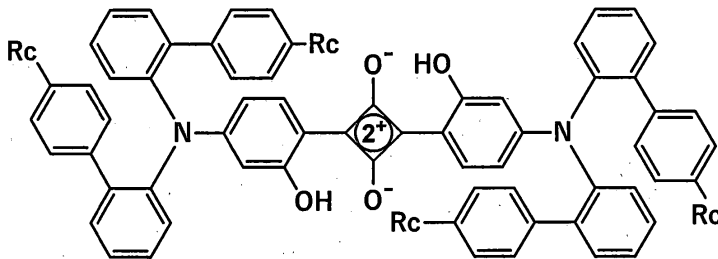
6. 前記発光部材が発光性粒子である第1項から第4項までのいずれか一項に記載の発光部材。

【0019】

7. 下記一般式(1a)で表される構造を有する発光性化合物。

【化15】

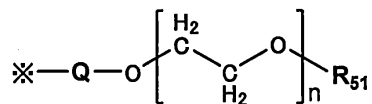
一般式(1a)



(一般式(1a)において、各Rcは、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表し、4個のRcのうち少なくとも1個は、連結基として-O-を有してもよい炭素数4~12の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基(a)、又は下記一般式(P)で表される構造を有する基(P)を表す。)

【化16】

一般式(P)



(一般式(P)において、 $\square$ は置換部位を表す。Qは単結合又は2価の連結基を表す。nは1~9の整数を表す。R<sub>51</sub>は水素原子又はメチル基を表す。)

【0020】

8. 下記一般式(1b)で表される構造を有する発光性化合物。

10

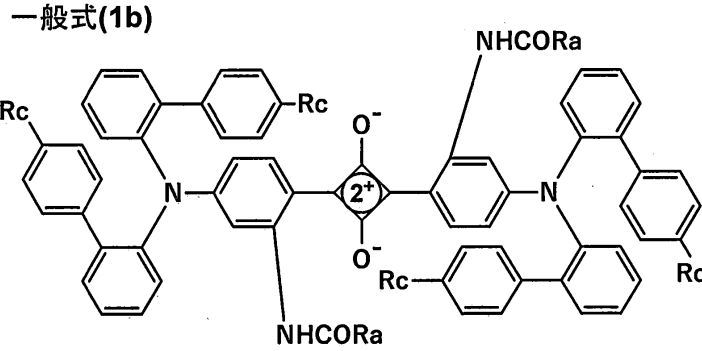
20

30

40

50

【化17】

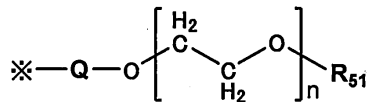


10

(一般式(1b)において、各Raは、それぞれ独立して、炭化水素基を表す。各Rcは、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。2個のRaのいずれかが炭素数4~12の直鎖状又は分岐状のアルキル基(a)を表すか、4個のRcのうち少なくとも1個が、連結基として-O-を有してもよい炭素数4~12の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基(a)、又は下記一般式(P)で表される構造を有する基(P)を表す。)

【化18】

一般式(P)



20

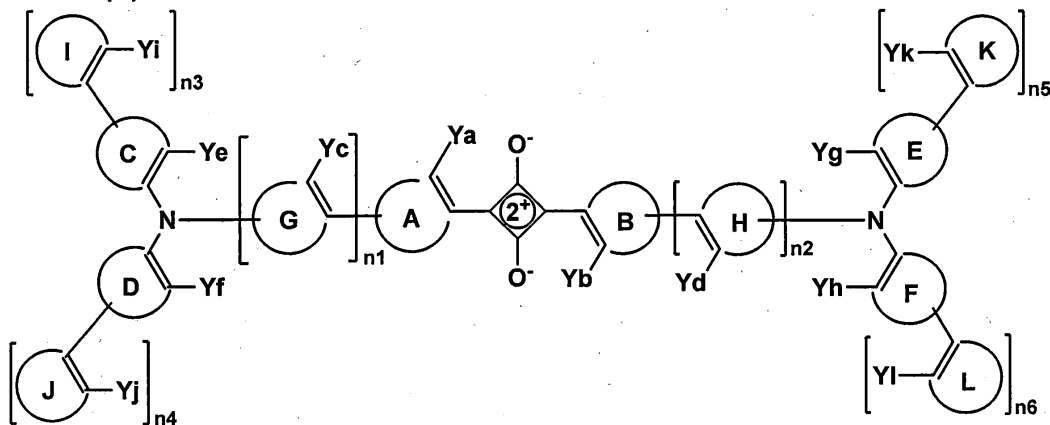
(一般式(P)において、 $\square$ は置換部位を表す。Qは単結合又は2価の連結基を表す。nは1~9の整数を表す。R<sub>51</sub>は水素原子又はメチル基を表す。)

【0024】

9. 下記一般式(T)で表される構造を有する化合物を含有する光電変換部材。

【化19】

一般式(T)



30

40

[一般式(T)において、

A~Lは、それぞれ独立して、芳香族炭化水素環又はヘテロ芳香環を表す。

n1~n6は、それぞれ独立して、0~2の整数を表す。

Ya及びYbは、それぞれ独立して、OH基、NHCORa(Raは炭化水素基を表す)基、NH<sub>2</sub>SO<sub>2</sub>Rb(Rbは炭化水素基を表す)基、又はNHPO(ORf)(ORg)(Rf及びRgはそれぞれ炭化水素基を表す)基を表す。

Yc~Ylは、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。

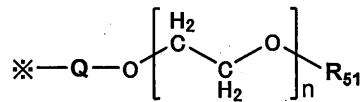
ただし、Ya~Ylのうち少なくとも1つは、炭素数4~12の直鎖状若しくは分岐状

50

のアルキル基 ( a )、又は下記一般式 ( P ) で表される構造を有する基 ( P ) を含む基である。

【化 2 0】

一般式(P)



(一般式 ( P ) において、 $\square$  は置換部位を表す。Q は単結合又は 2 価の連結基を表す。n は 1 ~ 9 の整数を表す。R<sub>51</sub> は水素原子又はメチル基を表す。)

10

【発明の効果】

【0025】

本発明の上記手段により、近赤外長波長領域の発光と部材への高濃度での配合が可能な発光性化合物を含有する、近赤外長波長領域において高い発光量子収率が達成可能な発光部材を提供することができる。また、近赤外長波長領域の発光と部材への高濃度での配合が可能な発光性化合物を提供することができる。さらには、近赤外長波長領域の発光と部材への高濃度での配合が可能な発光性化合物を用いた高い外部量子効率を得られる光電変換部材を提供することができる。

【0026】

本発明の効果の発現機構ないし作用機構については、明確にはなっていないが、以下のように推察している。

20

【0027】

一般式 ( T ) で表される構造を有する化合物 ( 以下、化合物 ( T ) ともいう。 ) は、スクアリリウム環を分子構造の中心に有する化合物である。化合物 ( T ) は、主骨格がスクアリリウム環の左右に、芳香族炭化水素環又はヘテロ芳香環を介して窒素原子が結合し、該窒素原子に 2 個の芳香族炭化水素環又はヘテロ芳香環が結合した構造を有する。なお、これらの芳香族炭化水素環又はヘテロ芳香環は 2 又は 3 個が鎖状に連結した構造も含む。また、化合物 ( T ) は、スクアリリウム環に結合する上記芳香族炭化水素環又はヘテロ芳香環が所定の位置に OH 基、NHCO R<sub>a</sub> 基、NH SO<sub>2</sub> R<sub>b</sub> 基、又は NHPO ( OR<sub>f</sub> ) ( OR<sub>g</sub> ) 基を有する。さらに、化合物 ( T ) は、可溶性基として、炭素数 4 ~ 12 の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基 ( a )、又は上記一般式 ( P ) で表される構造を有する基 ( P ) が、該基が中央のスクアリリウム環に向かう方向に位置するように、直接又は連結基を介して、上記芳香族炭化水素環又はヘテロ芳香環に結合する構造である。

30

【0028】

本発明者は、スクアリリウム化合物を化合物 ( T ) が有する上記の分子構造とすることで、近赤外光の長波長領域に発光ピークを有する分子構造としつつ、濃度消光を緩和してマトリックスへの高濃度での配合を可能としたものである。

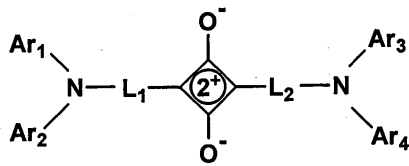
【0029】

本発明においては、化合物 ( T ) を発光部材に含有させることで、近赤外長波長領域において高い発光量子収率が達成可能な発光部材が得られるものである。なお、このような効果を発現するために、化合物 ( T ) のうち特に下記一般式 ( 1 ) で表される構造を有する化合物 ( 以下、化合物 ( 1 ) ともいう。 ) が好ましい。化合物 ( 1 ) において、上記特定の分子構造を有する化合物、すなわち、一般式 ( 1 a )、( 1 b )、又は ( 1 d ) や、下記一般式 ( 1 c ) 又は ( 1 e ) で表される構造を有する化合物は、これまでに文献に記載のない新規な化合物である。

40

## 【化21】

## 一般式(1)



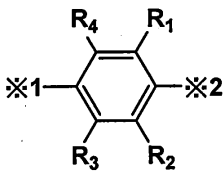
〔一般式(1)において、

$L_1$ は下記式(L1)、式(L2)又は式(L3)で表される構造を有する基を表す。 $L_2$ は下記式(L4)、式(L5)又は式(L6)で表される構造を有する基を表す。

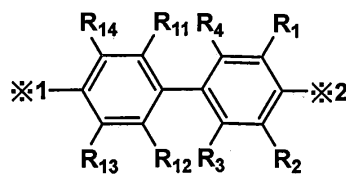
10

## 【化22】

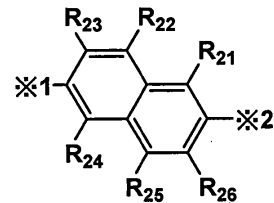
## 式(L1)



## 式(L2)

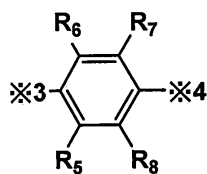


## 式(L3)

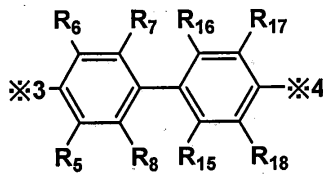


20

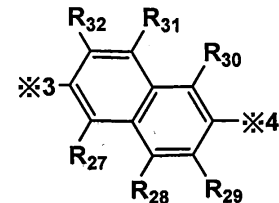
## 式(L4)



## 式(L5)



## 式(L6)



〔式(L1)~式(L6)において、

$*1$ 及び $*4$ はそれぞれ一般式(1)のNに結合する部位を表す。 $*2$ 及び $*3$ はそれぞれ一般式(1)のスクリンリウム環の炭素に結合する部位を表す。

30

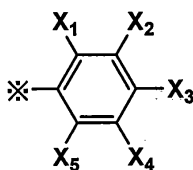
$R_1$ 、 $R_5$ 、 $R_{21}$ 及び $R_{27}$ は、それぞれ独立して、OH基、 $\text{NHCO}R_a$  ( $R_a$ は炭化水素基を表す。)基、 $\text{NH}SO_2R_b$  ( $R_b$ は炭化水素基を表す。)基、又は $\text{NHPO}(\text{OR}_f)(\text{OR}_g)$  ( $R_f$ 及び $R_g$ はそれぞれ炭化水素基を表す。)基を表す。

$R_2 \sim R_4$ 、 $R_6 \sim R_8$ 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 $R_{22} \sim R_{26}$ 及び $R_{28} \sim R_{32}$ は、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。)

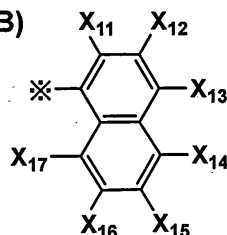
$Ar_1 \sim Ar_4$ は、それぞれ独立して、下記式(A)、式(B)又は式(C)で表される構造を有する基を表す。

## 【化23】

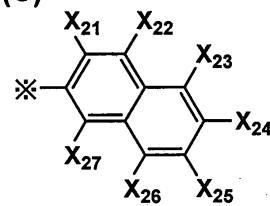
## 式(A)



## 式(B)



## 式(C)



40

〔式(A)~式(C)において、 $*$ はN原子との接続部位を示す。 $X_1 \sim X_{27}$ は、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。)

ただし、一般式(1)において、 $L_1$ 、 $L_2$ 及び $Ar_1 \sim Ar_4$ のいずれかは、以下の所

50

定の位置の少なくとも1つに、炭素数4~12の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基(a)、又は前記一般式(P)で表される構造を有する基(P)を有する。

L<sub>1</sub>又はL<sub>2</sub>における前記所定の位置は、R<sub>1</sub>、R<sub>5</sub>、R<sub>21</sub>及びR<sub>27</sub>がNHCO Ra基の場合のRa(ただし、基(P)は除く)、R<sub>1</sub>、R<sub>5</sub>、R<sub>21</sub>及びR<sub>27</sub>がNH SO<sub>2</sub>Rb基の場合のRb(ただし、基(P)は除く)、R<sub>1</sub>、R<sub>5</sub>、R<sub>21</sub>及びR<sub>27</sub>がNHPO(ORf)(ORg)基の場合のRf又はRg(ただし、基(P)は除く)、R<sub>2</sub>、R<sub>11</sub>、R<sub>12</sub>、R<sub>6</sub>、R<sub>15</sub>、R<sub>16</sub>、R<sub>26</sub>、及びR<sub>32</sub>である。

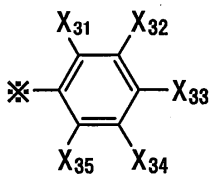
Ar<sub>1</sub>~Ar<sub>4</sub>における前記所定の位置は、X<sub>1</sub>、X<sub>5</sub>、X<sub>11</sub>、X<sub>21</sub>及びX<sub>27</sub>並びに下記式(D)のX<sub>31</sub>及びX<sub>35</sub>である。

さらに、一般式(1)において、L<sub>1</sub>又はL<sub>2</sub>における、R<sub>3</sub>、R<sub>4</sub>、R<sub>13</sub>、R<sub>14</sub>、R<sub>23</sub>、R<sub>24</sub>、R<sub>25</sub>、R<sub>7</sub>、R<sub>8</sub>、R<sub>17</sub>、R<sub>18</sub>、R<sub>29</sub>、R<sub>30</sub>及びR<sub>31</sub>、Ar<sub>1</sub>~Ar<sub>4</sub>における、X<sub>2</sub>、X<sub>3</sub>、X<sub>4</sub>、X<sub>12</sub>、X<sub>13</sub>、X<sub>14</sub>、X<sub>15</sub>、X<sub>22</sub>、X<sub>23</sub>、X<sub>24</sub>及びX<sub>25</sub>は、炭素数4以上の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基又は(ポリ)オキシア ルキレン基を有しない。ただし、X<sub>3</sub>、X<sub>13</sub>及びX<sub>24</sub>は、下記式(D)で表される構造を有する基であってもよい。

10

【化24】

式(D)

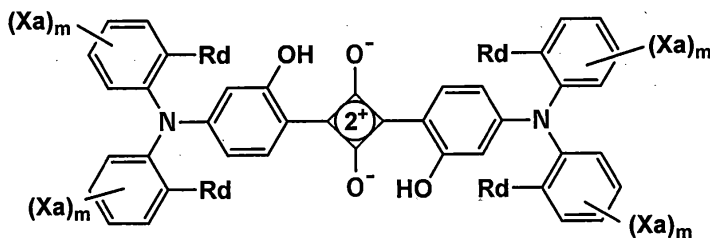


20

(式(D)において、      は接続部位を示す。X<sub>31</sub>~X<sub>35</sub>は、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。ただし、X<sub>31</sub>及びX<sub>35</sub>のうち少なくとも1つは炭素数4~12の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基(a)、又は前記一般式(P)で表される構造を有する基(P)を有する基であり、X<sub>32</sub>~X<sub>34</sub>は、炭素数4以上の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基又は(ポリ)オキシア ルキレン基を有しない。)

【化25】

一般式(1c)



30

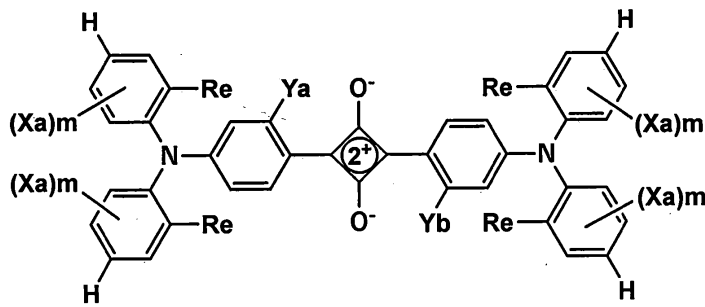
(一般式(1c)において、各Rdは、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表し、4個のRdのうち少なくとも1個は、連結基として-O-を有してもよい炭素数4~12の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基(a)、又は前記一般式(P)で表される構造を有する基(P)を表す。各Xaは、それぞれ独立して、炭素数1~3のアルキル基若しくはアルコキシ基又は置換又は無置換のフェニル基を表す。mは、0~4の整数を表す。)

40

50

## 【化 2 6】

## 一般式(1e)



10

(一般式(1e)において、Ya及びYbは、それぞれ独立して、OH基、又はNHCO Ra (Raは炭化水素基を表す。)基を表す。各Reは、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。各Xaは、それぞれ独立して、炭素数1~3のアルキル基若しくはアルコキシ基、又は置換又は無置換のフェニル基を表す。mは、0~3の整数を表す。ただし、Raのいずれかが炭素数4~12の直鎖状又は分岐状のアルキル基(a)を表すか、又は4個のReのうち少なくとも1個は、連結基として-O-を有してもよい炭素数4~12の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基(a)、又は前記一般式(P)で表される構造を有する基(P)を表す。)

## 【0030】

20

さらに、化合物(T)を光電変換素子に用いると高い外部量子効率の光電変換素子が得られる。これは、化合物(T)、特に化合物(1)が近赤外長波長領域に発光ピークを有し、かつ高い発光量子収率を示すという特性により、分子を励起した際の励起子が無輻射失活などの消光パスを通りづらくなるため、このような効果が発現したものと推察される。

## 【図面の簡単な説明】

## 【0031】

【図1】化合物(1a)-1の<sup>1</sup>H-NMRスペクトル(400MHz、測定溶媒CDCl<sub>3</sub>)である。

【図2】化合物(1c)-1の<sup>1</sup>H-NMRスペクトル(400MHz、測定溶媒CDCl<sub>3</sub>)である。

30

【図3】化合物(1d)-1の<sup>1</sup>H-NMRスペクトル(400MHz、測定溶媒CDCl<sub>3</sub>)である。

【図4】本発明の発光部材を具備する波長変換膜を用いた赤外発光面光源の構成の一例を示す概略断面図である。

【図5】本発明の発光部材を具備する波長変換膜の構成の一例を示す概略断面図である。

【図6】本発明の光電変換部材を具備する有機光電変換素子の構成の一例を示す概略断面図である。

## 【発明を実施するための形態】

## 【0032】

40

本発明の発光部材は、上記一般式(T)で表される構造を有する化合物を含有することを特徴とする。この特徴は、下記各実施形態に共通する技術的特徴である。

## 【0033】

本発明の実施形態としては、本発明の効果発現の観点から、上記一般式(T)において、A~Lは芳香族炭化水素環を表し、n<sub>1</sub>~n<sub>6</sub>はそれぞれ独立して0又は1であり、Ya及びYbのうち少なくとも1つが、炭素数4~12の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基(a)、又は上記一般式(P)で表される構造を有する基(P)を含む基であることが好ましい。

## 【0034】

本発明の実施形態としては、本発明の効果発現の観点から、上記一般式(T)において

50

、A ~ Lは芳香族炭化水素環を表し、 $n_1 \sim n_6$ はそれぞれ独立して0又は1であり、 $Y_e \sim Y_l$ のうち少なくとも1つが、炭素数4 ~ 12の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基(a)、又は上記一般式(P)で表される構造を有する基(P)を含む基であることが好ましい。

【0035】

本発明の実施形態としては、本発明の効果発現の観点から、上記一般式(T)で表される構造が、上記一般式(1)で表される構造であることが好ましい。

【0036】

一般式(1)で表される構造を有する化合物(以下、化合物(1)ともいう。)は、主骨格がスクアリリウム環の左右に、ベンゼン環、ピフェニル環又はナフタレン環を介して窒素原子が結合し、該窒素原子に2個のベンゼン環又はナフタレン環が結合した構造を有する。また、化合物(1)は、化合物(T)が可溶性基として有する炭素数4 ~ 12の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基(a)、又は上記一般式(P)で表される構造を有する基(P)が直接又は連結基を介して結合した結合位置を、該基が中央のスクアリリウム環に向かう方向に位置するように具体的に規定した化合物である。このような、化合物(1)は、化合物(T)が有する近赤外長波長領域の発光と部材への高濃度での配合が可能であるという特徴を特に顕著に有する化合物である。

【0037】

本発明の実施形態としては、近赤外長波長領域の発光と部材への高濃度での配合が可能な観点から、上記一般式(1)において、 $L_1$ が上記式(L1)で表される構造を有する基であり、かつ $L_2$ が上記式(L4)で表される構造を有する基であることが好ましい。

【0038】

本発明の実施形態としては、近赤外長波長領域の発光と部材への高濃度での配合が可能な観点から、上記一般式(1)で表される構造が、上記一般式(1a)、一般式(1b)、一般式(1c)又は一般式(1d)で表される構造であることが好ましい。

【0039】

本発明の実施形態としては、本発明の効果発現の観点から、発光部材が、発光性薄膜又は発光性粒子であることが好ましい。

【0040】

また、本発明の上記一般式(1a)、一般式(1b)、一般式(1c)、一般式(1d)又は一般式(1e)で表される構造を有する発光性化合物は、新規な化合物である。

【0041】

本発明の光電変換部材は、上記一般式(T)で表される構造を有する化合物を含有することを特徴とする。これにより、高い外部量子効率の光電変換素子が得られる。

【0042】

以下、本発明とその構成要素、及び本発明を実施するための形態・態様について詳細な説明をする。なお、本願において、「~」は、その前後に記載される数値を下限値及び上限値として含む意味で使用する。

【0043】

本明細書において、一般式(T)で表される構造を有する化合物を、上記のとおり化合物(T)ともいう。また、化学構造式に、化合物(1a)-1のように、該化学構造式で表される構造を有する化合物の略号を付して示すこともある。さらに、一般式(P)で表される構造を有する基を基(P)ともいい、式(L1)で表される構造を有する基を基(L1)ともいう。他の化合物及び基においても同様である。

【0044】

[本発明の発光部材の概要]

本発明の発光部材は、化合物(T)を含有することを特徴とする。本発明の発光部材において、化合物(T)は近赤外発光剤として作用する。本発明の発光部材は、所定の形状を有する部材であり、化合物(T)以外に、化合物(T)を発光部材内に均一に分散させて所定の形状に成形するためのマトリックス材料を含有してもよい。また、本発明の発光

10

20

30

40

50

部材は、本発明の効果を損なわない範囲で、化合物（T）以外に、各種添加剤を含有してもよい。以下、本発明の発光部材の構成要素について詳細に説明する。

【0045】

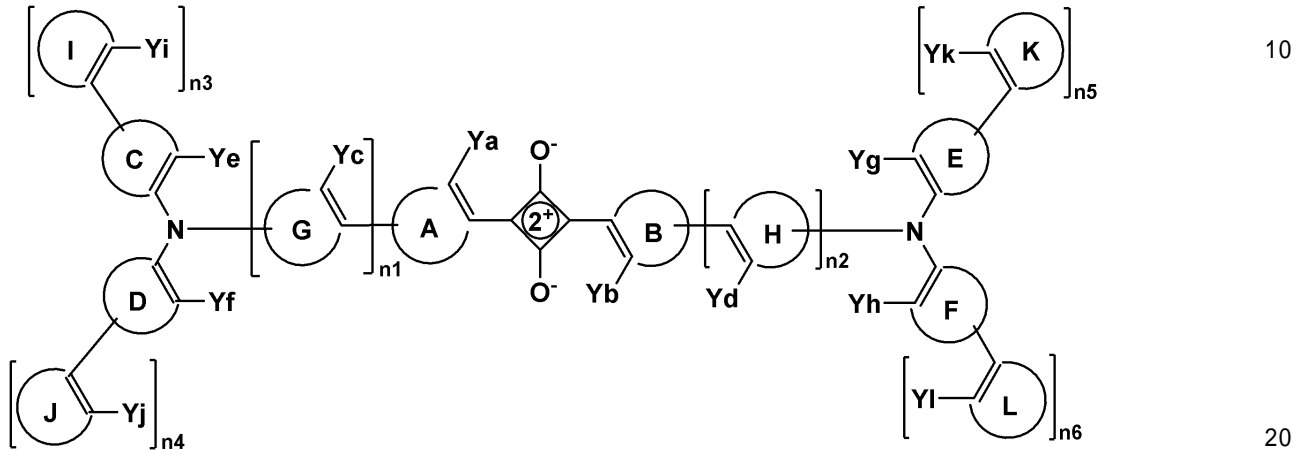
<化合物（T）>

化合物（T）は、一般式（T）で表される構造を有する化合物である。

【0046】

【化24】

一般式(T)



一般式（T）において、

A～Lは、それぞれ独立して、芳香族炭化水素環又はヘテロ芳香環を表す。

$n1 \sim n6$ は、それぞれ独立して、0～2の整数を表す。

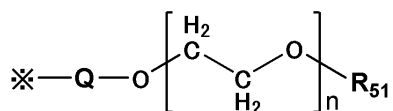
$Ya$ 及び $Yb$ は、それぞれ独立して、OH基、 $NHCORa$ （ $Ra$ は炭化水素基を表す。）基、 $NHSO_2Rb$ （ $Rb$ は炭化水素基を表す。）基、又は $NHPO(ORf)(ORg)$ （ $Rf$ 及び $Rg$ はそれぞれ炭化水素基を表す。）基を表す。

$Yc \sim Yl$ は、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。

ただし、 $Ya \sim Yl$ のうち少なくとも1つは、炭素数4～12の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基（a）、又は下記一般式（P）で表される構造を有する基（P）を含む基である。

【化25】

一般式(P)



（一般式（P）において、 $Q$ は置換部位を表す。 $Q$ は単結合又は2価の連結基を表す。 $n$ は1～9の整数を表す。 $R_{51}$ は水素原子又はメチル基を表す。）

【0047】

一般式（T）において、A～Lは、それぞれ独立して、芳香族炭化水素環又はヘテロ芳香環を表す。芳香族炭化水素環又はヘテロ芳香環における炭素数は4～10が好ましい。ヘテロ芳香環におけるヘテロ原子としては、酸素原子、窒素原子又は硫黄原子が挙げられる。芳香族炭化水素環又はヘテロ芳香環として、具体的には、ベンゼン環、ナフタレン環、ピリジン環、チオフェン環、ピロール環又はフラン環が挙げられ、ベンゼン環及びナフタレン環が好ましい。

【0048】

一般式（T）において、 $n1 \sim n6$ は、それぞれ独立して、0～2の整数を表し、0又は1が好ましい。化合物（T）において、スクアリリウム環と窒素原子を結ぶ構造として

は、ベンゼン環、ビフェニル環又はナフタレン環が好ましい。具体的には、化合物(1)で説明するとおりである。

【0049】

化合物(T)において、Y<sub>a</sub>~Y<sub>l</sub>のうち少なくとも1つは、炭素数4~12の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基(a)、又は上記一般式(P)で表される構造を有する基(P)を含む基(以下、置換基(E)ともいう。)である。化合物(T)において、置換基(E)で置換される位置は、すなわち、Y<sub>a</sub>~Y<sub>l</sub>の位置は、中央のスクアリリウム環に向かう方向に結合する位置である。

【0050】

なお、Y<sub>a</sub>及びY<sub>b</sub>は、それぞれ独立して、OH基、NHCO<sub>2</sub>R<sub>a</sub>(R<sub>a</sub>は炭化水素基を表す。)基、NH<sub>2</sub>SO<sub>2</sub>R<sub>b</sub>(R<sub>b</sub>は炭化水素基を表す。)基、又はNHPO(OR<sub>f</sub>)(OR<sub>g</sub>)(R<sub>f</sub>及びR<sub>g</sub>はそれぞれ炭化水素基を表す。)基を表す。Y<sub>a</sub>及びY<sub>b</sub>が置換基(E)を有する場合、R<sub>a</sub>、R<sub>b</sub>、R<sub>f</sub>又はR<sub>g</sub>が置換基(E)である。ただし、この場合の置換基(E)は、アルキル基(a)を含む置換基(E)に限定される。

10

【0051】

置換基(E)は、アルキル基(a)又は基(P)自体であってもよく、アルキル基(a)又は基(P)が2個の連結基を介して主骨格に結合する基であってもよい。連結基としては、フェニレン基、-O-、エステル結合(-C(=O)O-又は-OC(=O)-)、アミド結合(-NHCO-)及びこれらの組み合わせ等が挙げられる。連結基としては、-O-及びフェニレン基が好ましく、1,4-フェニレン基が特に好ましい。

20

【0052】

Y<sub>c</sub>~Y<sub>l</sub>が置換基(E)である場合、置換基(E)は、連結基として-O-を有してもよいアルキル基(a)又は基(P)自体であることが好ましい。R<sub>a</sub>、R<sub>b</sub>、R<sub>f</sub>又はR<sub>g</sub>が置換基(E)である場合は、アルキル基(a)であることが好ましい。

【0053】

化合物(T)における置換基(E)の数は、1以上であればよく、1~8の範囲内が好ましく、2~8の範囲内がより好ましく、2~4の範囲内がさらに好ましい。化合物(T)における、置換基(E)の好ましい位置については、後述するより具体的な化合物において説明する。

【0054】

置換基(E)において、アルキル基(a)のうち、炭素数4~12の直鎖状のアルキル基(a)としては、n-ブチル基、n-ペンチル基、n-ヘキシル基、n-ヘプチル基、n-オクチル基、n-ノニル基、n-デシル基、n-ウンデシル基、n-ドデシル基が挙げられる。炭素数4~12の分岐状のアルキル基(a)としては、イソブチル基、s-ブチル基、t-ブチル基、1-プロピルブチル基、1-エチルペンチル基、2,4,4-トリメチルペンチル基、2-エチルブチル基、2,2-ジメチルプロピル基、2-エチルヘキシル基、2-ブチルオクチル基等が挙げられる。

30

【0055】

アルキル基(a)としては、溶解性の観点から、炭素数4~12の分岐状のアルキル基(a)が好ましい。分岐状のアルキル基(a)としては、下記式(a1)~(a7)のいずれかで表される構造を有する基が好ましい。なお、基(a1)は1-プロピルブチル基、基(a2)は1-エチルペンチル基、基(a3)は2,4,4-トリメチルペンチル基、基(a4)はイソブチル基、基(a5)は2-エチルブチル基、基(a6)は2-エチルヘキシル基、基(a7)は2-ブチルオクチル基である。

40

【0056】

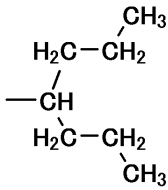
R<sub>a</sub>、R<sub>b</sub>、R<sub>f</sub>又はR<sub>g</sub>が分岐状のアルキル基(a)の場合、該アルキル基(a)は、基(a1)、基(a2)、基(a3)又は基(a4)であることが好ましい。分岐状のアルキル基(a)がそれ以外の位置に結合する場合、当該分岐状のアルキル基(a)は、基(a4)、基(a5)、基(a6)又は基(a7)であることが好ましい。

【0057】

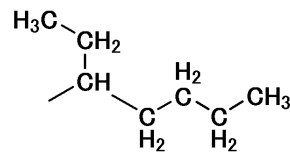
50

## 【化26】

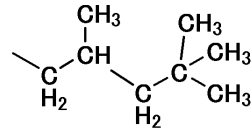
式(a1)



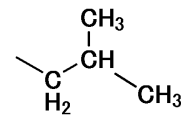
式(a2)



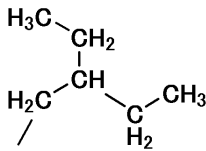
式(a3)



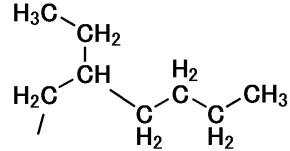
式(a4)



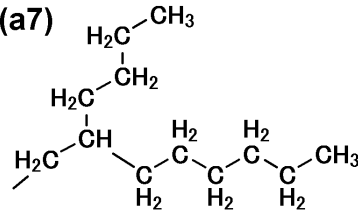
式(a5)



式(a6)



式(a7)



10

## 【0058】

置換基(E)が基(P)である場合、オキシエチレン基の繰り返し数を示すnの数は、1~9の範囲内であればよい。nの数は2、3、4、8であることが製造容易性の点からより好ましい。基(P)において、Qは、単結合又は2価の連結基である。Qが2価の連結基の場合、炭素数1~4のアルキレン基、カルボニル基(-C(=O)-)、炭素数6~12のアリーレン基及びこれらの組み合わせ等が挙げられる。Qとしては、単結合、炭素数1~2のアルキレン基、又はカルボニル基が好ましい。基(P)が連結基を介して主骨格に結合する場合の連結基としては、上記のとおり、フェニレン基が好ましく、1,4-フェニレン基が特に好ましい。

20

## 【0059】

化合物(T)において、置換基(E)でない場合の、Ra、Rb、Rf、Rg、及びYc~Ylとしては、それぞれ、水素原子、炭素数1~3のアルキル基若しくはアルコキシ基、及びアリール基(ただし、炭素数4以上の直鎖状又は分岐状のアルキル基及び(ポリ)オキシアルキレン基のいずれも有しない。)等から選ばれる原子又は基が挙げられる。アリール基としては、フェニル基、トリル基、キシリル基等が挙げられる。

30

## 【0060】

置換基(E)でない場合の、Ra、Rb、Rf及びRgはメチル基であることが好ましい。置換基(E)でない場合の、Yc~Ylは水素原子又は炭素数1~3のアルキル基又はフェニル基であることが好ましい。

## 【0061】

化合物(T)におけるA~Lにおいて、Ya~Yl以外の位置で芳香族炭化水素環又はヘテロ芳香環に結合する水素原子は、置換されていてもよい。化合物(T)におけるA~Lにおいては、本発明の効果を損なわない範囲で、Ya~Yl以外の位置に、さらに置換基(E)を有してもよい。該位置は、例えば、Ya~Yl以外の位置であるが中央のスクリウム環に向かう方向に結合する位置である。該位置には、置換基(E)以外の置換基が結合されてもよく、その場合の置換基として、Ya~Ylが置換基(E)以外である場合の置換基と同様の置換基が挙げられる。

40

## 【0062】

化合物(T)のA~Lにおいて、上記以外の位置に置換基を有する場合、該置換基は、炭素数4以上の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基又は(ポリ)オキシアルキレン基を有しない基であることが好ましい。このような置換基として、具体的には、炭素数1~3のアルキル基若しくはアルコキシ基、及びアリール基(ただし、炭素数4以上の直鎖状又は分岐状のアルキル基及び(ポリ)オキシアルキレン基のいずれも有しない。)等が挙げられる。

## 【0063】

50

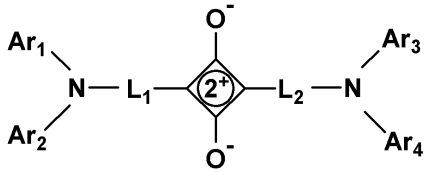
(化合物(1))

上記化合物(T)としては、下記一般式(1)で表される構造を有する化合物(1)であることが好ましい。

【0064】

【化27】

一般式(1)



10

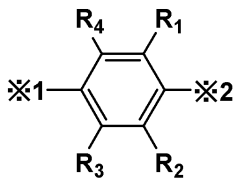
【0065】

一般式(1)において、L<sub>1</sub>は下記式(L1)、式(L2)又は式(L3)で表される構造を有する基を表す。L<sub>2</sub>は下記式(L4)、式(L5)又は式(L6)で表される構造を有する基を表す。

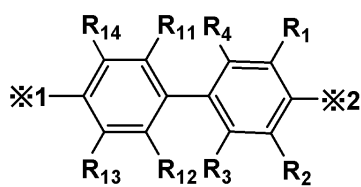
【0066】

【化28】

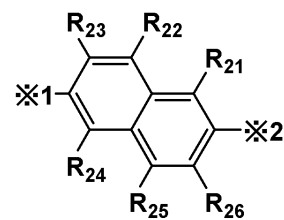
式(L1)



式(L2)

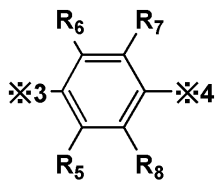


式(L3)

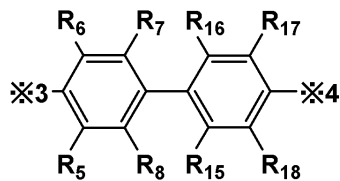


20

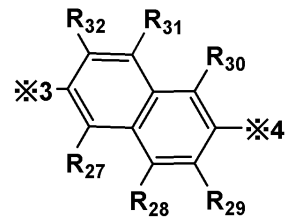
式(L4)



式(L5)



式(L6)



30

【0067】

式(L1)~式(L6)において、※1及び※4はそれぞれ一般式(1)のNに結合する部位を表す。※2及び※3はそれぞれ一般式(1)のスクアリリウム環の炭素に結合する部位を表す。R<sub>1</sub>、R<sub>5</sub>、R<sub>21</sub>及びR<sub>27</sub>は、それぞれ独立して、OH基、NHCO R<sub>a</sub>(R<sub>a</sub>は炭化水素基を表す。)基、NH SO<sub>2</sub> R<sub>b</sub>(R<sub>b</sub>は炭化水素基を表す。)基、又はNHPO(OR<sub>f</sub>)(OR<sub>g</sub>)(R<sub>f</sub>及びR<sub>g</sub>はそれぞれ炭化水素基を表す。)基を表す。R<sub>2</sub>~R<sub>4</sub>、R<sub>6</sub>~R<sub>8</sub>、R<sub>11</sub>~R<sub>18</sub>、R<sub>22</sub>~R<sub>26</sub>及びR<sub>28</sub>~R<sub>32</sub>は、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。

40

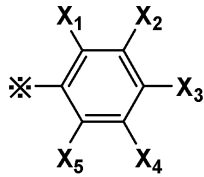
【0068】

一般式(1)において、Ar<sub>1</sub>~Ar<sub>4</sub>は、それぞれ独立して、下記式(A)、式(B)又は式(C)で表される構造を有する基を表す。

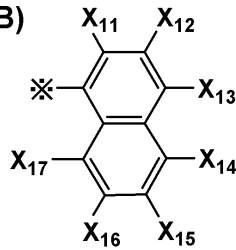
50

【化29】

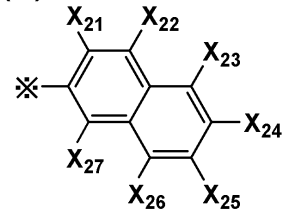
式(A)



式(B)



式(C)



【0069】

式(A)～式(C)において、 $\ast$ はN原子との接続部位を示す。X<sub>1</sub>～X<sub>27</sub>は、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。

【0070】

ただし、一般式(1)において、L<sub>1</sub>、L<sub>2</sub>及びAr<sub>1</sub>～Ar<sub>4</sub>のいずれかは、以下の所定の位置の少なくとも1つに、炭素数4～12の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基(a)、又は前記一般式(P)で表される構造を有する基(P)を有する。

【0071】

L<sub>1</sub>又はL<sub>2</sub>における前記所定の位置は、R<sub>1</sub>、R<sub>5</sub>、R<sub>21</sub>及びR<sub>27</sub>がNHCO<sub>2</sub>R<sub>a</sub>基の場合のR<sub>a</sub>(ただし、基(P)は除く)、R<sub>1</sub>、R<sub>5</sub>、R<sub>21</sub>及びR<sub>27</sub>がNH<sub>2</sub>SO<sub>2</sub>R<sub>b</sub>基の場合のR<sub>b</sub>(ただし、基(P)は除く)、R<sub>1</sub>、R<sub>5</sub>、R<sub>21</sub>及びR<sub>27</sub>がNH<sub>2</sub>PO(OR<sub>f</sub>)(OR<sub>g</sub>)基の場合のR<sub>f</sub>又はR<sub>g</sub>(ただし、基(P)は除く)、R<sub>2</sub>、R<sub>11</sub>、R<sub>12</sub>、R<sub>6</sub>、R<sub>15</sub>、R<sub>16</sub>、R<sub>26</sub>及びR<sub>32</sub>である。Ar<sub>1</sub>～Ar<sub>4</sub>における前記所定の位置は、X<sub>1</sub>、X<sub>5</sub>、X<sub>11</sub>、X<sub>21</sub>及びX<sub>27</sub>並びに下記式(D)のX<sub>31</sub>及びX<sub>35</sub>である。

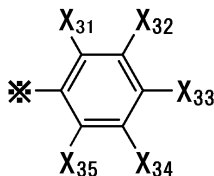
【0072】

さらに、一般式(1)において、L<sub>1</sub>又はL<sub>2</sub>における、R<sub>3</sub>、R<sub>4</sub>、R<sub>13</sub>、R<sub>14</sub>、R<sub>23</sub>、R<sub>24</sub>、R<sub>25</sub>、R<sub>7</sub>、R<sub>8</sub>、R<sub>17</sub>、R<sub>18</sub>、R<sub>29</sub>、R<sub>30</sub>及びR<sub>31</sub>、Ar<sub>1</sub>～Ar<sub>4</sub>における、X<sub>2</sub>、X<sub>3</sub>、X<sub>4</sub>、X<sub>12</sub>、X<sub>13</sub>、X<sub>14</sub>、X<sub>15</sub>、X<sub>22</sub>、X<sub>23</sub>、X<sub>24</sub>及びX<sub>25</sub>は、炭素数4以上の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基又は(ポリ)オキシアルキレン基を有しない。ただし、X<sub>3</sub>、X<sub>13</sub>及びX<sub>24</sub>は、下記式(D)で表される構造を有する基であってもよい。

【0073】

【化30】

式(D)



【0074】

式(D)において、 $\ast$ は接続部位を示す。X<sub>31</sub>～X<sub>35</sub>は、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。ただし、X<sub>31</sub>及びX<sub>35</sub>のうち少なくとも1つは炭素数4～12の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基(a)、又は前記一般式(P)で表される構造を有する基(P)を有する基であり、X<sub>32</sub>～X<sub>34</sub>は、炭素数4以上の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基又は(ポリ)オキシアルキレン基を有しない。

【0075】

化合物(1)において、「L<sub>1</sub>、L<sub>2</sub>、Ar<sub>1</sub>～Ar<sub>4</sub>のいずれかは、所定の位置の少なくとも1つに、アルキル基(a)又は基(P)を有する」とは、化合物(1)において、該所定の位置の少なくとも1つがアルキル基(a)又は基(P)を含む置換基(置換基(

10

20

30

40

50

E))で置換されていることを意味する。化合物(1)において、置換基(E)で置換される所定の位置は、中央のスクリウム環に向かう方向に結合する位置である。

【0076】

具体的には、L<sub>1</sub>又はL<sub>2</sub>における所定の位置は、R<sub>1</sub>、R<sub>5</sub>、R<sub>21</sub>及びR<sub>27</sub>がNHCO<sub>2</sub>R<sub>a</sub>基の場合のR<sub>a</sub>(ただし、基(P)は除く)、R<sub>1</sub>、R<sub>5</sub>、R<sub>21</sub>及びR<sub>27</sub>がNH<sub>2</sub>SO<sub>2</sub>R<sub>b</sub>基の場合のR<sub>b</sub>(ただし、基(P)は除く)、R<sub>1</sub>、R<sub>5</sub>、R<sub>21</sub>及びR<sub>27</sub>がNHPO(OR<sub>f</sub>)(OR<sub>g</sub>)基の場合のR<sub>f</sub>又はR<sub>g</sub>(ただし、基(P)は除く)、R<sub>2</sub>、R<sub>11</sub>、R<sub>12</sub>、R<sub>6</sub>、R<sub>15</sub>、R<sub>16</sub>、R<sub>26</sub>及びR<sub>32</sub>である。Ar<sub>1</sub>~Ar<sub>4</sub>における前記所定の位置は、X<sub>1</sub>、X<sub>5</sub>、X<sub>11</sub>、X<sub>21</sub>及びX<sub>27</sub>並びにX<sub>3</sub>、X<sub>13</sub>及びX<sub>24</sub>が、上記式(D)で表される構造を有する基(基(D))である場合のX<sub>31</sub>及びX<sub>35</sub>である。

10

【0077】

すなわち、化合物(1)において、L<sub>1</sub>又はL<sub>2</sub>の、R<sub>1</sub>、R<sub>5</sub>、R<sub>21</sub>及びR<sub>27</sub>がNHCO<sub>2</sub>R<sub>a</sub>基の場合のR<sub>a</sub>、NH<sub>2</sub>SO<sub>2</sub>R<sub>b</sub>基の場合のR<sub>b</sub>、NHPO(OR<sub>f</sub>)(OR<sub>g</sub>)基の場合のR<sub>f</sub>又はR<sub>g</sub>、R<sub>2</sub>、R<sub>11</sub>、R<sub>12</sub>、R<sub>6</sub>、R<sub>15</sub>、R<sub>16</sub>、R<sub>26</sub>及びR<sub>32</sub>、Ar<sub>1</sub>~Ar<sub>4</sub>のX<sub>1</sub>、X<sub>5</sub>、X<sub>11</sub>、X<sub>21</sub>及びX<sub>27</sub>並びにX<sub>3</sub>、X<sub>13</sub>及びX<sub>24</sub>が基(D)である場合のX<sub>31</sub>及びX<sub>35</sub>の少なくとも1つが、置換基(E)である。ただし、R<sub>a</sub>、R<sub>b</sub>、R<sub>f</sub>及びR<sub>g</sub>は、アルキル基(a)を含む置換基(E)に限定される。

【0078】

置換基(E)は、上記化合物(T)の場合の置換基(E)と好ましい態様を含めて同様である。R<sub>2</sub>、R<sub>11</sub>、R<sub>12</sub>、R<sub>6</sub>、R<sub>15</sub>、R<sub>16</sub>、R<sub>26</sub>又はR<sub>32</sub>が置換基(E)である場合、置換基(E)は、連結基として-O-を有してもよいアルキル基(a)又は基(P)自体であることが好ましい。R<sub>a</sub>、R<sub>b</sub>、R<sub>f</sub>又はR<sub>g</sub>が置換基(E)である場合は、アルキル基(a)であることが好ましい。L<sub>1</sub>又はL<sub>2</sub>が置換基(E)を有する場合、R<sub>1</sub>、R<sub>5</sub>、R<sub>21</sub>又はR<sub>27</sub>が、NHCO<sub>2</sub>R<sub>a</sub>であって、R<sub>a</sub>がアルキル基(a)であることが好ましい。

20

【0079】

X<sub>1</sub>、X<sub>5</sub>、X<sub>11</sub>、X<sub>21</sub>及びX<sub>27</sub>並びにX<sub>3</sub>、X<sub>13</sub>及びX<sub>24</sub>が基(D)である場合のX<sub>31</sub>及びX<sub>35</sub>が置換基(E)である場合、置換基(E)は、アルキル基(a)又は基(P)自体であっても、連結基を有するアルキル基(a)又は基(P)であってもよい。連結基として-O-を有してもよいアルキル基(a)又は基(P)自体であることが好ましい。

30

【0080】

ここで、化合物(1)は、上記に加えて、任意に、L<sub>1</sub>又はL<sub>2</sub>におけるR<sub>22</sub>及びR<sub>28</sub>、並びにAr<sub>1</sub>~Ar<sub>4</sub>におけるX<sub>16</sub>、X<sub>17</sub>及びX<sub>26</sub>に、置換基(E)を有してもよい。

【0081】

化合物(1)における置換基(E)の数は、上記化合物(T)の場合の置換基(E)と同様である。化合物(1)における、置換基(E)の好ましい位置については、後述するより具体的な化合物において説明する。

40

【0082】

化合物(1)において、置換基(E)でない場合の、R<sub>a</sub>、R<sub>b</sub>、R<sub>f</sub>及びR<sub>g</sub>としては炭素数1~3のアルキル基、炭素数4以上の直鎖状又は分岐状のアルキル基又はポリオキシアルキレン基を有しないアリール基等が挙げられる。R<sub>2</sub>、R<sub>11</sub>、R<sub>12</sub>、R<sub>6</sub>、R<sub>15</sub>、R<sub>16</sub>、R<sub>22</sub>、R<sub>26</sub>、R<sub>28</sub>、R<sub>32</sub>、X<sub>1</sub>、X<sub>5</sub>、X<sub>11</sub>、X<sub>16</sub>、X<sub>17</sub>、X<sub>21</sub>、X<sub>26</sub>、X<sub>27</sub>、X<sub>31</sub>及びX<sub>35</sub>としては、水素原子、炭素数1~3のアルキル基又はアルコキシ基、炭素数4以上の直鎖状又は分岐状のアルキル基又はポリオキシアルキレン基を有しないアリール基等が挙げられる。アリール基としては、フェニル基、トリル基、キシリル基等が挙げられる。

【0083】

50

置換基 (E) でない場合の、R a、R b、R f 及び R g はメチル基であることが好ましい。置換基 (E) でない場合の R<sub>2</sub>、R<sub>11</sub>、R<sub>12</sub>、R<sub>6</sub>、R<sub>15</sub>、R<sub>16</sub>、R<sub>22</sub>、R<sub>26</sub>、R<sub>28</sub> および R<sub>32</sub> は水素原子又は炭素数 1 ~ 3 のアルキル基であることが好ましく、水素原子であることがより好ましい。置換基 (E) でない場合の、X<sub>1</sub>、X<sub>5</sub>、X<sub>11</sub>、X<sub>16</sub>、X<sub>17</sub>、X<sub>21</sub>、X<sub>26</sub>、X<sub>27</sub>、X<sub>31</sub> 及び X<sub>35</sub> は水素原子、炭素数 1 ~ 3 のアルキル基、又はフェニル基であることが好ましく、水素原子、メチル基又はフェニル基であることがより好ましい。

【0084】

一般式 (1) において、L<sub>1</sub> 又は L<sub>2</sub> における、R<sub>3</sub>、R<sub>4</sub>、R<sub>13</sub>、R<sub>14</sub>、R<sub>23</sub>、R<sub>24</sub>、R<sub>25</sub>、R<sub>7</sub>、R<sub>8</sub>、R<sub>17</sub>、R<sub>18</sub>、R<sub>29</sub>、R<sub>30</sub> 及び R<sub>31</sub>、Ar<sub>1</sub> ~ Ar<sub>4</sub> における、X<sub>2</sub>、X<sub>3</sub>、X<sub>4</sub>、X<sub>12</sub>、X<sub>13</sub>、X<sub>14</sub>、X<sub>15</sub>、X<sub>22</sub>、X<sub>23</sub>、X<sub>24</sub> 及び X<sub>25</sub>、並びに X<sub>3</sub>、X<sub>13</sub> 及び X<sub>24</sub> が基 (D) である場合の X<sub>32</sub> ~ X<sub>34</sub> は、上記所定の位置以外で主骨格に結合する原子又は基を示す。これらは、炭素数 4 以上の直鎖状又は分岐状のアルキル基又はポリオキシアルキレン基を有することはない。

10

【0085】

L<sub>1</sub> 又は L<sub>2</sub> における、R<sub>3</sub>、R<sub>4</sub>、R<sub>13</sub>、R<sub>14</sub>、R<sub>23</sub>、R<sub>24</sub>、R<sub>25</sub>、R<sub>7</sub>、R<sub>8</sub>、R<sub>17</sub>、R<sub>18</sub>、R<sub>29</sub>、R<sub>30</sub> 及び R<sub>31</sub>、Ar<sub>1</sub> ~ Ar<sub>4</sub> における、X<sub>2</sub>、X<sub>3</sub>、X<sub>4</sub>、X<sub>12</sub>、X<sub>13</sub>、X<sub>14</sub>、X<sub>15</sub>、X<sub>22</sub>、X<sub>23</sub>、X<sub>24</sub> 及び X<sub>25</sub>、並びに X<sub>3</sub>、X<sub>13</sub> 及び X<sub>24</sub> が基 (D) である場合の X<sub>32</sub> ~ X<sub>34</sub> としては、具体的には、水素原子、炭素数 1 ~ 3 のアルキル基又はアルコキシ基、アリール基 (ただし、炭素数 4 以上の直鎖状又は分岐状のアルキル基又はポリオキシアルキレン基を有しない) 等が挙げられる。これらのうちで、R<sub>3</sub>、R<sub>4</sub>、R<sub>13</sub>、R<sub>14</sub>、R<sub>23</sub>、R<sub>24</sub>、R<sub>25</sub>、R<sub>7</sub>、R<sub>8</sub>、R<sub>17</sub>、R<sub>18</sub>、R<sub>29</sub>、R<sub>30</sub> 及び R<sub>31</sub> は、水素原子であることが好ましく、X<sub>2</sub>、X<sub>3</sub>、X<sub>4</sub>、X<sub>12</sub>、X<sub>13</sub>、X<sub>14</sub>、X<sub>15</sub>、X<sub>22</sub>、X<sub>23</sub>、X<sub>24</sub>、X<sub>25</sub> 及び X<sub>32</sub> ~ X<sub>34</sub> は、水素原子、メチル基、又はフェニル基であることが好ましい。

20

【0086】

化合物 (1) は、中央のスクアリリウム環を中心にして左右対称の骨格を有する化合物であることが好ましい。このような化合物として、具体的には、下記一般式 (3) ~ 一般式 (11) で表される構造を有する化合物 (3) ~ (11) が挙げられる。なお、一般式 (3) ~ 一般式 (11) における符号は、一般式 (1) における符号と、好ましい態様を含めて同様の範疇を表す。

30

【0087】

化合物 (3) ~ 化合物 (5) は、化合物 (1) において、L<sub>1</sub> が基 (L1) であり、L<sub>2</sub> が基 (L4) である化合物である。化合物 (6) ~ 化合物 (8) は、化合物 (1) において、L<sub>1</sub> が基 (L2) であり、L<sub>2</sub> が基 (L5) である化合物である。化合物 (9) ~ 化合物 (11) は、化合物 (1) において、L<sub>1</sub> が基 (L3) であり、L<sub>2</sub> が基 (L6) である化合物である。本発明の実施形態においては、近赤外長波長領域の発光と部材への高濃度での配合が可能な観点から、化合物 (3) ~ 化合物 (5) が好ましく、化合物 (3) がより好ましい。

【0088】

また、化合物 (3) のうちでも、好ましい化合物として、下記一般式 (1a) ~ 一般式 (1d) で表される構造を有する化合物 (1a) ~ (1d) が挙げられる。化合物 (1c) 及び化合物 (1d) のうち、さらに好ましい化合物 (1e) の構造を、下記一般式 (1e) に示す。化合物 (1a) ~ (1e) は、これまでに文献に記載のない新規な化合物である。なお、化合物 (3) ~ (11)、化合物 (1a) ~ (1e) においては、中央のスクアリリウム環を中心にして左右対称の骨格を有するのみでなく、置換基も含めて左右対称である化合物であることが製造容易性の観点から好ましい。

40

【0089】

以下に化合物 (1) の例示として、化合物 (3) ~ (11)、化合物 (1a) ~ (1e) について説明するが、本発明はこれらの化合物に限定されるものではない。

50

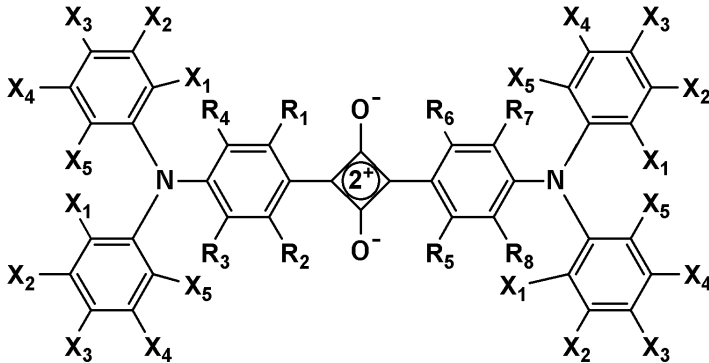
【0090】

一般式(3)で表される構造を有する化合物(3)は、化合物(1)において、 $L_1$ が基( $L_1$ )であり、 $L_2$ が基( $L_4$ )であり、 $Ar_1 \sim Ar_4$ がいずれも基( $A$ )である化合物である。

【0091】

【化31】

一般式(3)



10

【0092】

化合物(3)において、 $R_1$ 及び $R_5$ がOH基である場合(該化合物を化合物(31)ともいう。)、 $R_2$ 、 $R_6$ 及び、4個の基( $A$ )における各 $X_1$ 及び $X_5$ のうち少なくとも1つが置換基( $E$ )である。これらに代わって、あるいはこれらに加えて $X_3$ が基( $D$ )であってもよい。化合物(31)においては、4個の基( $A$ )における各 $X_1$ 及び $X_5$ のうち少なくとも1つが置換基( $E$ )であることが好ましい。さらに、置換基( $E$ )は、4個の基( $A$ )に各1ずつ存在することが好ましい。

20

【0093】

すなわち、一般式(3)において、一般式(1)の $Ar_1$ 、 $Ar_2$ 、 $Ar_3$ 、 $Ar_4$ にそれぞれ相当する基( $A$ )を、基( $A_1$ )、基( $A_2$ )、基( $A_3$ )及び基( $A_4$ )とすると、化合物(31)において、置換基( $E$ )は、基( $A_1$ )の $X_1$ 又は $X_5$ 、基( $A_2$ )の $X_1$ 又は $X_5$ 、基( $A_3$ )の $X_1$ 又は $X_5$ 、及び基( $A_4$ )の $X_1$ 又は $X_5$ に各1ずつ存在することが好ましい。その場合、 $R_2$ 、 $R_6$ 、 $R_3$ 、 $R_4$ 、 $R_7$ 及び $R_8$ は、水素原子であることが好ましい。基( $A_1$ )、基( $A_2$ )、基( $A_3$ )及び基( $A_4$ )における $X_1$ 及び $X_5$ のうち置換基( $E$ )ではない $X_1$ 又は $X_5$ 、 $X_2$ 、 $X_3$ 及び $X_4$ は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。化合物(31)における、置換基( $E$ )としては、上に説明した各基が特に制限なく適用可能である。

30

【0094】

化合物(31)において、4個の基( $A$ )における各 $X_1$ 及び $X_5$ のうち少なくとも1つが置換基( $E$ )である化合物として、例えば、下記一般式(1a)で表される構造を有する化合物(1a)、下記一般式(1c)で表される構造を有する化合物(1c)が挙げられる。

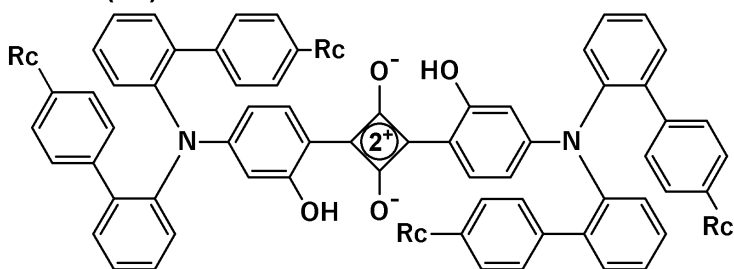
40

【0095】

50

## 【化 3 2】

## 一般式(1a)



10

## 【0096】

一般式(1a)において、各Rcは、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表し、4個のRcのうち少なくとも1個は、連結基として-O-を有してもよいアルキル基(a)又は基(P)である。化合物(1a)が有する置換基(E)は、連結基である1,4-フェニレン基にアルキル基(a)若しくは基(P)が結合した構造の基である。置換基(E)は、連結基として1,4-フェニレン基と-O-をその順に有し、該-O-にアルキル基(a)が結合した基であってもよい。

## 【0097】

化合物(1a)において、4個のRcが全て同じアルキル基(a)、連結基として-O-を有するアルキル基(a)又は基(P)である、化合物の例示を表Iに示す。表Iには、化合物名と該化合物が有するRcの種類を列記した。なお、表Iにおいて、化合物名は略号のみを示した。以下に示す他の化合物を例示する表においても同様に化合物名は略号のみを示す。

20

## 【0098】

表Iにおいて、「n-butyl」はn-ブチル基を、「n-pentyl」はn-ペンチル基を、「n-hexyl」はn-ヘキシル基を、「n-heptyl」はn-ヘプチル基を、「n-octyl」はn-オクチル基を、「n-nonyl」はn-ノニル基を、「n-decyl」はn-デシル基を、「n-undecyl」はn-ウンデシル基を、「n-dodecyl」はn-ドデシル基をそれぞれ示す。連結基として-O-を有するn-ブチル基を「-O-n-butyl」と示す。基(a1)を(a1)で示す。基(P)を(P)で示し、例えば、(P)(Q=-CH<sub>2</sub>-, n=2, R<sub>51</sub>=CH<sub>3</sub>)のように、Qの種類、nの数、R<sub>51</sub>の種類を「(P)」の後の括弧内に示す。ただし、Qが単結合の場合はQの表記を省略した。後述する他の化合物に係る表の記載についても、同様である。

30

## 【0099】

40

50

【表 1】

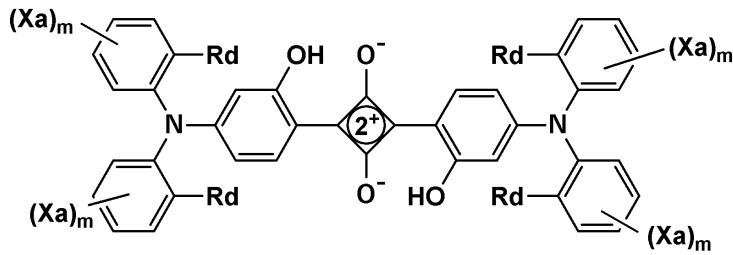
表 1

化合物名 (略号)	Rc	
(1a)-1	n-butyl	
(1a)-2	n-pentyl	
(1a)-3	n-hexyl	
(1a)-4	n-heptyl	
(1a)-5	n-octyl	
(1a)-6	n-nonyl	
(1a)-7	n-decyl	10
(1a)-8	n-undecyl	
(1a)-9	n-dodecyl	
(1a)-10	(a4)	
(1a)-11	(a5)	
(1a)-12	(a6)	
(1a)-13	(a7)	
(1a)-14	(P)(n=2,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	
(1a)-15	(P)(n=3,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	
(1a)-16	(P)(n=4,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	
(1a)-17	(P)(n=5,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	20
(1a)-18	(P)(n=6,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	
(1a)-19	(P)(n=7,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	
(1a)-20	(P)(n=8,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	
(1a)-21	(P)(n=9,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	
(1a)-22	(P)(n=2,R <sub>51</sub> =H)	
(1a)-23	(P)(n=3,R <sub>51</sub> =H)	
(1a)-24	(P)(n=4,R <sub>51</sub> =H)	
(1a)-25	(P)(n=5,R <sub>51</sub> =H)	
(1a)-26	(P)(n=6,R <sub>51</sub> =H)	
(1a)-27	(P)(n=7,R <sub>51</sub> =H)	
(1a)-28	(P)(n=8,R <sub>51</sub> =H)	30
(1a)-29	(P)(n=9,R <sub>51</sub> =H)	
(1a)-30	(P)(Q=-CH <sub>2</sub> -,n=2,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	
(1a)-31	(P)(Q=-CH <sub>2</sub> -,n=3,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	
(1a)-32	(P)(Q=-CH <sub>2</sub> -,n=4,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	
(1a)-33	(P)(Q=-CH <sub>2</sub> -,n=8,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	
(1a)-34	(P)(Q=-C(=O)-,n=2,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	
(1a)-35	(P)(Q=-C(=O)-,n=3,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	
(1a)-36	(P)(Q=-C(=O)-,n=4,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	
(1a)-37	(P)(Q=-C(=O)-,n=8,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	
(1a)-38	-O-n-butyl	40

【 0 1 0 0 】

## 【化 3 3】

## 一般式(1c)



10

## 【0101】

一般式(1c)において、各  $Rd$  は、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表し、4個の  $Rd$  のうち少なくとも1個は、アルキル基(a)、連結基として-O-を有するアルキル基(a)又は基(P)である。各  $Xa$  は、それぞれ独立して、炭素数1~3のアルキル基若しくはアルコキシ基又は置換又は無置換のフェニル基を表し、4位に結合する場合の  $Xa$  は、基(D)であってもよい。それ以外の場合の  $Xa$  は、置換基として炭素数4以上の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基又は(ポリ)オキシアルキレン基を有しない。 $m$  は、0~4の整数を表す。化合物(1c)が有する置換基(E)は、アルキル基(a)又は基(P)自体であるか、連結基として-O-を有するアルキル基(a)である。

## 【0102】

化合物(1c)において、窒素原子に結合する4個の基(A)において、 $Rd$  が結合した以外の位置の水素原子は置換基  $Xa$  で置換されていてもよい。化合物(1c)が置換基  $Xa$  を有する場合、置換基  $Xa$  は窒素原子に結合する炭素原子の隣の炭素原子以外の炭素原子に結合することが好ましい。化合物(1c)は置換基  $Xa$  を有しないか、又は有する場合その数は1若しくは2が好ましく、1がより好ましい。

20

## 【0103】

化合物(1c)において、4個の基(A)が全て同じである化合物の例示を表IIに示す。4個の基(A)における  $Rd$  は全て同じアルキル基(a)又は基(P)である。表IIには、化合物名と該化合物が有する  $Rd$  の種類、基(A)において  $Rd$  が結合する炭素原子以外の炭素原子に結合する基又は原子を、 $Rd$  が結合する炭素原子の窒素原子とは反対側の隣の炭素原子に結合する基から順に  $X11$ 、 $X12$ 、 $X13$ 、 $X14$  で示した。表IIにおいて、「-O-(a2)」は、連結基として-O-が結合した基(a2)を示す。また、「2,4,6-trimethoxyphenyl」は2,4,6-トリメトキシフェニル基を、「Me」はメチル基を、「Ph」はフェニル基をそれぞれ示す。後述する他の化合物に係る表の記載についても、同様である。

30

## 【0104】

40

50

【表 2】

表 II

化合物名 (略号)	Rd	X11	X12	X13	X14
(1c)-1	n-butyl	H	H	H	H
(1c)-2	n-pentyl	H	H	H	H
(1c)-3	n-hexyl	H	H	H	H
(1c)-4	n-heptyl	H	H	H	H
(1c)-5	n-octyl	H	H	H	H
(1c)-6	n-nonyl	H	H	H	H
(1c)-7	n-decyl	H	H	H	H
(1c)-8	n-undecyl	H	H	H	H
(1c)-9	n-dodecyl	H	H	H	H
(1c)-10	(a4)	H	H	H	H
(1c)-11	(a5)	H	H	H	H
(1c)-12	(a6)	H	H	H	H
(1c)-13	(a7)	H	H	H	H
(1c)-14	(P)(n=2,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	H	H	H	H
(1c)-15	(P)(n=3,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	H	H	H	H
(1c)-16	(P)(n=4,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	H	H	H	H
(1c)-17	(P)(n=5,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	H	H	H	H
(1c)-18	(P)(n=6,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	H	H	H	H
(1c)-19	(P)(n=7,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	H	H	H	H
(1c)-20	(P)(n=8,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	H	H	H	H
(1c)-21	(P)(n=9,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	H	H	H	H
(1c)-22	(P)(n=2,R <sub>51</sub> =H)	H	H	H	H
(1c)-23	(P)(n=3,R <sub>51</sub> =H)	H	H	H	H
(1c)-24	(P)(n=4,R <sub>51</sub> =H)	H	H	H	H
(1c)-25	(P)(n=5,R <sub>51</sub> =H)	H	H	H	H
(1c)-26	(P)(n=6,R <sub>51</sub> =H)	H	H	H	H
(1c)-27	(P)(n=7,R <sub>51</sub> =H)	H	H	H	H
(1c)-28	(P)(n=8,R <sub>51</sub> =H)	H	H	H	H
(1c)-29	(P)(n=9,R <sub>51</sub> =H)	H	H	H	H
(1c)-30	(P)(Q=-CH <sub>2</sub> -,n=2,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	H	H	H	H
(1c)-31	(P)(Q=-CH <sub>2</sub> -,n=3,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	H	H	H	H
(1c)-32	(P)(Q=-CH <sub>2</sub> -,n=4,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	H	H	H	H
(1c)-33	(P)(Q=-CH <sub>2</sub> -,n=8,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	H	H	H	H
(1c)-34	(P)(Q=-C(=O)-,n=2,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	H	H	H	H
(1c)-35	(P)(Q=-C(=O)-,n=3,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	H	H	H	H
(1c)-36	(P)(Q=-C(=O)-,n=4,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	H	H	H	H
(1c)-37	(P)(Q=-C(=O)-,n=8,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	H	H	H	H
(1c)-38	n-butyl	Me	H	H	H
(1c)-39	n-butyl	H	Me	H	H
(1c)-40	n-butyl	H	H	Me	H
(1c)-41	n-butyl	H	Ph	H	H
(1c)-42	-O-(a2)	H	2,4,6-trimethoxyphenyl	H	H

10

20

30

40

## 【0105】

化合物(3)において、R<sub>1</sub>及びR<sub>5</sub>がNHCO Ra基である場合(該化合物を化合物(32)ともいう。)、Ra、R<sub>2</sub>、R<sub>6</sub>及び、4個の基(A)における各X<sub>1</sub>及びX<sub>5</sub>のうちの少なくとも1つが置換基(E)である。これらに代わって、あるいはこれらに加えてX<sub>3</sub>が基(D)であってもよい。ただし、Raについては、アルキル基(a)を含む置換基(E)に限定される。化合物(32)においては、Ra、4個の基(A)における各X<sub>1</sub>及びX<sub>5</sub>のうちの少なくとも1つが置換基(E)であることが好ましい。さらに、置換基(E)は、4個の基(A)に各1ずつ存在することが好ましい。

## 【0106】

50

すなわち、化合物(32)についても、化合物(31)と同様に、置換基(E)は、基(A1)に $X_1$ 又は $X_5$ として1つ、基(A2)に $X_1$ 又は $X_5$ として1つ、基(A3)に $X_1$ 又は $X_5$ として1つ、及び基(A4)に $X_1$ 又は $X_5$ として1つ存在することが好ましい。その場合、R<sub>a</sub>はアルキル基(a)又はメチル基であることが好ましい。さらに、R<sub>2</sub>、R<sub>6</sub>、R<sub>7</sub>及びR<sub>8</sub>は、水素原子であることが好ましい。基(A1)、基(A2)、基(A3)及び基(A4)における $X_1$ 及び $X_5$ のうち置換基(E)ではない $X_1$ 又は $X_5$ 、 $X_2$ 、 $X_3$ 及び $X_4$ は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。化合物(32)における、置換基(E)としては、上に説明した各基が特に制限なく適用可能である。

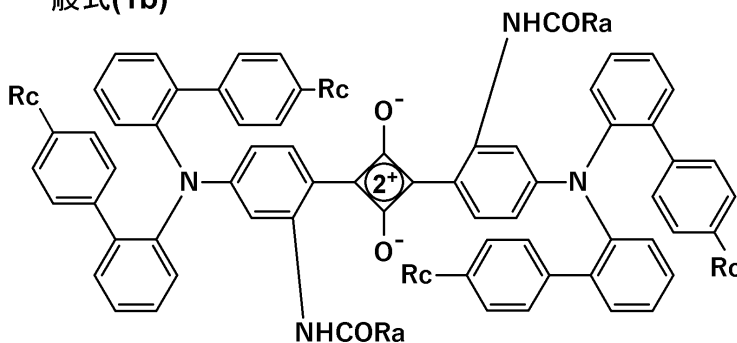
## 【0107】

化合物(32)において、4個の基(A)における各 $X_1$ 及び $X_5$ のうちの少なくとも1つが置換基(E)である化合物として、例えば、下記一般式(1b)で表される構造を有する化合物(1b)、下記一般式(1d)で表される構造を有する化合物(1d)が挙げられる。

## 【0108】

## 【化34】

## 一般式(1b)



## 【0109】

一般式(1b)において、各R<sub>a</sub>は、それぞれ独立して、炭化水素基を表す。各R<sub>c</sub>は、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。2個のR<sub>a</sub>のいずれかが炭素数4~12の直鎖状又は分岐状のアルキル基(a)を表すか、4個のR<sub>c</sub>のうち少なくとも1個が、連結基として-O-を有してもよい炭素数4~12の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基(a)、又は前記一般式(P)で表される構造を有する基(P)を表す。化合物(1b)は、一般式(1)のAr<sub>1</sub>、Ar<sub>2</sub>、Ar<sub>3</sub>、Ar<sub>4</sub>にそれぞれ相当する基が基(A)であって、基(A)が有する置換基(E)は、連結基である1,4-フェニレン基にアルキル基(a)又は基(P)が結合した構造の基である。基(A)が有する置換基(E)は、連結基として1,4-フェニレン基と-O-をその順に有し、該-O-にアルキル基(a)が結合した基であってもよい。R<sub>a</sub>としては、アルキル基(a)又は炭素数1~3のアルキル基が好ましい。

## 【0110】

化合物(1b)において、2個のR<sub>a</sub>が同じアルキル基であり、かつ4個のR<sub>c</sub>が全て同じアルキル基(a)、連結基として-O-を有するアルキル基(a)又は基(P)である、化合物の例示を表IIIに示す。表IIIには、化合物名と該化合物が有するR<sub>c</sub>及びR<sub>a</sub>の種類を列記した。

## 【0111】

10

20

30

40

50

## 【表 3】

表 III

化合物名 (略号)	Rc	Ra
(1b)-1	n-butyl	n-butyl
(1b)-2	n-pentyl	n-pentyl
(1b)-3	n-hexyl	n-hexyl
(1b)-4	n-heptyl	n-heptyl
(1b)-5	n-octyl	n-octyl
(1b)-6	n-nonyl	n-nonyl
(1b)-7	n-decyl	n-decyl
(1b)-8	n-undecyl	n-undecyl
(1b)-9	n-dodecyl	n-dodecyl
(1b)-10	(a4)	(a4)
(1b)-11	(a5)	(a1)
(1b)-12	(a6)	(a2)
(1b)-13	(a7)	(a3)
(1b)-14	n-butyl	Me
(1b)-15	n-hexyl	Me
(1b)-16	(a4)	Me
(1b)-17	(a5)	Me
(1b)-18	(a6)	Me
(1b)-19	(P)(n=2,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	Me
(1b)-20	(P)(n=3,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	Me
(1b)-21	(P)(n=4,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	Me
(1b)-22	(P)(n=5,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	Me
(1b)-23	(P)(n=6,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	Me
(1b)-24	(P)(n=7,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	Me
(1b)-25	(P)(n=8,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	Me
(1b)-26	(P)(n=9,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	Me
(1b)-27	(P)(n=2,R <sub>51</sub> =H)	Me
(1b)-28	(P)(n=3,R <sub>51</sub> =H)	Me
(1b)-29	(P)(n=4,R <sub>51</sub> =H)	Me
(1b)-30	(P)(n=5,R <sub>51</sub> =H)	Me
(1b)-31	(P)(n=6,R <sub>51</sub> =H)	Me
(1b)-32	(P)(n=7,R <sub>51</sub> =H)	Me
(1b)-33	(P)(n=8,R <sub>51</sub> =H)	Me
(1b)-34	(P)(n=9,R <sub>51</sub> =H)	Me
(1b)-35	(P)(Q=-CH <sub>2</sub> -,n=2,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	Me
(1b)-36	(P)(Q=-CH <sub>2</sub> -,n=3,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	Me
(1b)-37	(P)(Q=-CH <sub>2</sub> -,n=4,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	Me
(1b)-38	(P)(Q=-CH <sub>2</sub> -,n=8,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	Me
(1b)-39	(P)(Q=-C(=O)-,n=2,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	Me
(1b)-40	(P)(Q=-C(=O)-,n=3,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	Me
(1b)-41	(P)(Q=-C(=O)-,n=4,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	Me
(1b)-42	(P)(Q=-C(=O)-,n=8,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	Me
(1b)-43	-O-n-butyl	Me

10

20

30

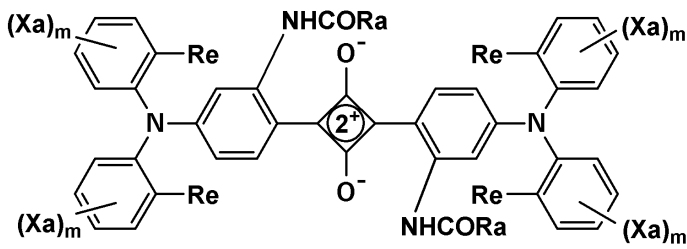
40

【 0 1 1 2 】

50

## 【化35】

## 一般式(1d)



## 【0113】

一般式(1d)において、各Raは、それぞれ独立して、炭化水素基を表す。各Reは、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。各Xaは、それぞれ独立して、炭素数1~3のアルキル基若しくはアルコキシ基又は置換又は無置換のフェニル基を表し、4位に結合する場合のXaは、基(D)であってもよい。それ以外の場合のXaは、置換基として炭素数4以上の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基又は(ポリ)オキシアルキレン基を有しない。mは、0~4の整数を表す。ただし、一般式(1d)においては、Raのいずれかがアルキル基(a)を表すか、4個のReのうち少なくとも1個が、アルキル基(a)、連結基として-O-を有するアルキル基(a)又は基(P)であるか、又は上記4位にXaとして基(D)が結合する。

## 【0114】

上記のとおり化合物(1d)において、窒素原子に結合する4個の基(A)において、Reが結合した以外の位置の水素原子は置換基Xaで置換されていてもよい。化合物(1d)が置換基Xaを有する場合、置換基Xaは窒素原子に結合する炭素原子の隣の炭素原子以外の炭素原子に結合することが好ましい。化合物(1d)は置換基Xaを有しないか、又は有する場合その数は1若しくは2が好ましく、1がより好ましい。また、窒素原子に結合する4個の基(A)であるベンゼン環骨格を有する基において、ベンゼン環の4位にXaを有する場合、該Xaとしては基(D)が好ましい。

## 【0115】

化合物(1d)において、Ra又はReが置換基(E)に相当する。または、Reを有するベンゼン環の4位にXaが結合し、該Xaが基(D)である。化合物(1d)は、Raのみが置換基(E)であってもよく、Reのみが置換基(E)であってもよい。Ra及びReが置換基(E)でなく、Reを有するベンゼン環の4位にXaが結合し、該Xaが基(D)である構造であってもよい。これらの2又は3が置換基(E)であるか、置換基(E)を有していてもよい。

## 【0116】

Raが置換基(E)である場合、該置換基(E)はアルキル基(a)である。Raが置換基(E)でない場合、Raは炭素数1~3のアルキル基が好ましい。Reが置換基(E)である場合の置換基(E)は、アルキル基(a)、連結基として-O-を有するアルキル基(a)又は基(P)自体である。基(D)がX<sub>31</sub>又はX<sub>35</sub>に有する置換基(E)は、アルキル基(a)、連結基として-O-を有するアルキル基(a)又は基(P)自体であるのが好ましい。Re、基(D)のX<sub>31</sub>及びX<sub>35</sub>が置換基(E)でない場合、炭素数1~3のアルキル基又はフェニル基が好ましい。化合物(1d)において、Reが置換基(E)であるのが好ましい。

## 【0117】

化合物(1d)において、2個のRa及び4個の基(A)が全て同じである化合物の例示を表IVに示す。2個のRaは、メチル基、エチル基(表中、「Et」で示す。)又はアルキル基(a)である。4個の基(A)におけるReは全て同じアルキル基(a)、基(P)、メチル基又はフェニル基である。表IVには、化合物名と該化合物が有するRa及びReの種類、基(A)においてReが結合する炭素原子以外の炭素原子に結合する基又は

10

20

30

40

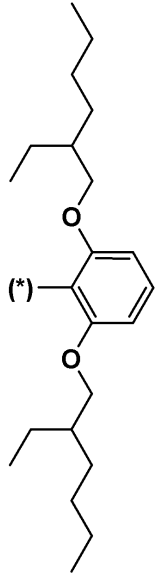
50

原子を、R e が結合する炭素原子の窒素原子とは反対側の隣の炭素原子に結合する基から順に X 1 1、X 1 2、X 1 3 及び X 1 4 で示した。なお、X 1 2 が基 ( A ) のベンゼン環における 4 位に相当する。表 IV における「( D ) - 1」は下記式で表される構造を有する基を示す。

【 0 1 1 8 】

【 化 3 6 】

(D)-1



【 0 1 1 9 】

10

20

30

40

50

【表 4】

表 IV

化合物名 (略号)	Ra	Re	X11	X12	X13	X14
(1d)-1	n-butyl	Me	H	H	H	H
(1d)-2	n-pentyl	Me	H	H	H	H
(1d)-3	n-hexyl	Me	H	H	H	H
(1d)-4	n-heptyl	Me	H	H	H	H
(1d)-5	n-octyl	Me	H	H	H	H
(1d)-6	n-nonyl	Me	H	H	H	H
(1d)-7	n-decyl	Me	H	H	H	H
(1d)-8	n-undecyl	Me	H	H	H	H
(1d)-9	n-dodecyl	Me	H	H	H	H
(1d)-10	(a4)	Me	H	H	H	H
(1d)-11	(a1)	Me	H	H	H	H
(1d)-12	(a2)	Me	H	H	H	H
(1d)-13	(a3)	Me	H	H	H	H
(1d)-14	Me	n-butyl	H	H	H	H
(1d)-15	Et	n-pentyl	H	H	H	H
(1d)-16	Et	n-hexyl	H	H	H	H
(1d)-17	Me	n-heptyl	H	H	H	H
(1d)-18	Me	n-octyl	H	H	H	H
(1d)-19	Me	n-nonyl	H	H	H	H
(1d)-20	Me	n-decyl	H	H	H	H
(1d)-21	Me	n-undecyl	H	H	H	H
(1d)-22	Me	n-dodecyl	H	H	H	H
(1d)-23	Me	(P)(Q=-CH <sub>2</sub> -,n=2,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	H	H	H	H
(1d)-24	Me	(P)(Q=-CH <sub>2</sub> -,n=3,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	H	H	H	H
(1d)-25	Me	(P)(Q=-CH <sub>2</sub> -,n=4,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	H	H	H	H
(1d)-26	Me	(P)(Q=-CH <sub>2</sub> -,n=8,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	H	H	H	H
(1d)-27	Me	(P)(Q=-C(=O)-,n=2,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	H	H	H	H
(1d)-28	Me	(P)(Q=-C(=O)-,n=3,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	H	H	H	H
(1d)-29	Me	(P)(Q=-C(=O)-,n=4,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	H	H	H	H
(1d)-30	Me	(P)(Q=-C(=O)-,n=8,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	H	H	H	H
(1d)-31	n-butyl	Me	Me	H	H	H
(1d)-32	n-butyl	Me	H	Me	H	H
(1d)-33	n-butyl	Me	H	H	Me	H
(1d)-34	n-butyl	Me	H	Ph	H	H
(1d)-35	(a1)	Me	Me	H	H	H
(1d)-36	(a2)	Me	H	Me	H	H
(1d)-37	(a2)	Me	H	H	Me	H
(1d)-38	(a3)	Me	H	Ph	H	H
(1d)-39	n-butyl	Ph	H	H	H	H
(1d)-40	n-butyl	Me	H	(D)-1	H	H
(1d)-41	n-butyl	H	H	H	H	H

10

20

30

40

## 【0120】

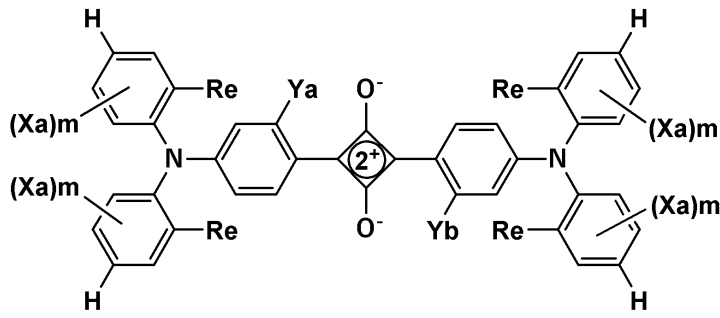
化合物(1c)及び化合物(1d)において、窒素原子に結合する4個の基(A)のベンゼン環における4位は置換基を有しないことが好ましい。該化合物として、下記一般式(1e)で表される構造を有する化合物(1e)が例示できる。

## 【0121】

50

## 【化37】

## 一般式(1e)



10

## 【0122】

一般式(1e)において、Ya及びYbは、それぞれ独立して、OH基、又はNHCO Ra (Raは炭化水素基を表す。)基を表す。各Reは、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。各Xaは、それぞれ独立して、炭素数1~3のアルキル基若しくはアルコキシ基、又は置換又は無置換のフェニル基を表す。ただし、Xaは、置換基として炭素数4以上の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基又は(ポリ)オキシアルキレン基を有しない。mは、0~3の整数を表す。ただし、Raのいずれかがアルキル基(a)を表すか、又は4個のReのうち少なくとも1個は、アルキル基(a)、連結基として-O-を有するアルキル基(a)、又は基(P)を表す。

20

## 【0123】

化合物(1e)が有する各基については、上記化合物(1c)及び化合物(1d)の各基において、窒素原子に結合する4個の基(A)のベンゼン環における4位が置換基を有しない以外は、同様の説明が適用できる。

## 【0124】

化合物(1e)に分類される化合物として、具体的には、上記表IIに示す化合物のうち、化合物(1c)-1~(1c)-38、及び化合物(1c)-40が挙げられる。さらに、上記表IVに示す化合物のうち、化合物(1d)-1~(1d)-31、化合物(1d)-33、化合物(1d)-35、化合物(1d)-37、化合物(1d)-39及び化合物(1d)-41が挙げられる。

30

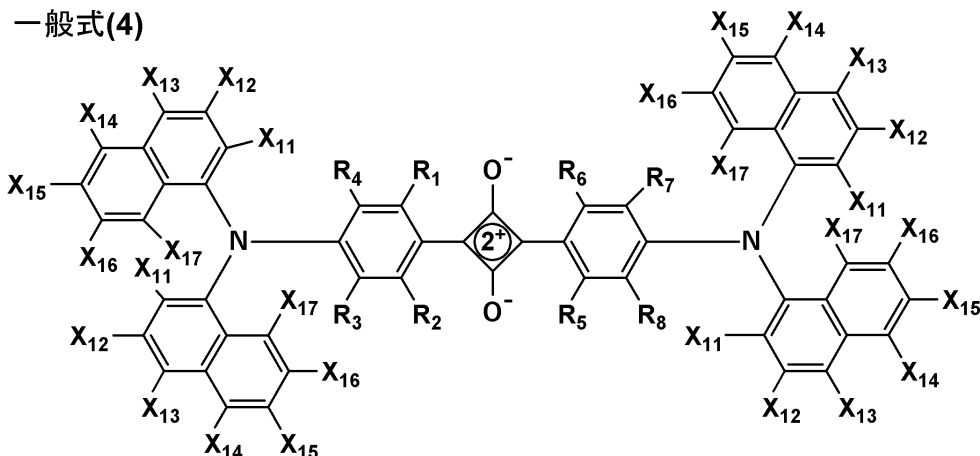
## 【0125】

一般式(4)で表される構造を有する化合物(4)は、化合物(1)において、L1が基(L1)であり、L2が基(L4)であり、Ar1~Ar4がいずれも基(B)である化合物である。

## 【0126】

## 【化38】

## 一般式(4)



40

50

## 【0127】

化合物(4)において、 $R_1$ 及び $R_5$ がOH基である場合、 $R_2$ 、 $R_6$ 及び、4個の基(B)における各 $X_{11}$ のうちの少なくとも1つが置換基(E)である。または、これらに代わって、あるいはこれらに加えて $X_{13}$ が基(D)であってもよい。なお、各 $X_{16}$ 及び $X_{17}$ は、任意に置換基(E)とすることができる。以下の説明において、一般式(4)で表される構造を有する化合物(4)において、一般式(4)中の $R_1$ 及び $R_5$ がOH基である化合物を化合物(41)という。

## 【0128】

化合物(41)においては、4個の基(B)における各 $X_{11}$ のうちの少なくとも1つが置換基(E)であることが好ましい。さらに、置換基(E)は、4個の基(B)に各1

10

## 【0129】

すなわち、一般式(4)において、一般式(1)の $Ar_1$ 、 $Ar_2$ 、 $Ar_3$ 、 $Ar_4$ にそれぞれ相当する基(B)を、基(B1)、基(B2)、基(B3)及び基(B4)とすると、化合物(41)において、置換基(E)は、基(B1)の $X_{11}$ 、基(B2)の $X_{11}$ 、基(B3)の $X_{11}$ 、及び基(B4)の $X_{11}$ にそれぞれ存在することが好ましい。その場合、 $R_2$ 、 $R_6$ 、 $R_7$ 及び $R_8$ は、水素原子であることが好ましい。基(B1)、基(B2)、基(B3)及び基(B4)における $X_{12}$ 、 $X_{13}$ 、 $X_{14}$ 、 $X_{15}$ 、 $X_{16}$ 及び $X_{17}$ は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。化合物(41)における、置換基(E)としては、上に説明した各基が特に制限なく適用可能である。

20

## 【0130】

化合物(4)において、一般式(4)中の $R_1$ 及び $R_5$ がNHCO $R_a$ 基、NH $SO_2R_b$ 基、又はNHPO(OR $f$ )(OR $g$ )基である場合、該化合物を化合物(42)ともいう。化合物(42)においては、 $R_a$ 、 $R_b$ 、 $R_f$ 、 $R_g$ 、 $R_2$ 、 $R_6$ 及び、4個の基(B)における各 $X_{11}$ のうちの少なくとも1つが置換基(E)である。または、これらに代わって、あるいはこれらに加えて $X_{13}$ が基(D)であってもよい。なお、各 $X_{16}$ 及び $X_{17}$ は、任意に置換基(E)とすることができる。ただし、 $R_a$ 、 $R_b$ 、 $R_f$ 及び $R_g$ については、アルキル基(a)を含む置換基(E)に限定される。

## 【0131】

化合物(42)においては、 $R_a$ 、 $R_b$ 、 $R_f$ 及び $R_g$ 、4個の基(B)における各 $X_{11}$ のうちの少なくとも1つが置換基(E)であることが好ましい。4個の基(B)が置換基(E)を有する場合、置換基(E)は、4個の基(B)に各1ずつ存在することが好ましい。

30

## 【0132】

置換基(E)でない場合の $R_a$ 、 $R_b$ 、 $R_f$ 及び $R_g$ としては、炭素数1~3のアルキル基、フェニル基、トリル基、キシリル基等のアリール基が挙げられる。置換基(E)でない場合の $R_2$ 及び $R_6$ 並びに、 $R_3$ 、 $R_4$ 、 $R_7$ 及び $R_8$ は、水素原子であることが好ましい。基(B1)、基(B2)、基(B3)及び基(B4)における $X_{12}$ 、 $X_{13}$ 、 $X_{14}$ 、 $X_{15}$ 、 $X_{16}$ 及び $X_{17}$ は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。化合物(42)における、置換基(E)としては、上に説明した各基が特に制限なく

40

## 【0133】

表Vに化合物(4)について例示する。表中、「tolyl」はトリル基を示す。

## 【0134】

【表 5】

化合物名 (略号)	R <sub>1</sub>	Ra	Rb	Rf	Rg	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	R <sub>4</sub>	R <sub>5</sub>	Ra	Rb	Rf	Rg	R <sub>6</sub>	R <sub>7</sub>	R <sub>8</sub>	X <sub>11</sub>	X <sub>12</sub>	X <sub>13</sub>	X <sub>14</sub>	X <sub>15</sub>	X <sub>16</sub>	X <sub>17</sub>
(4)-1	NHCORa	n-butyl	-	-	-	H	H	H	NHCORa	n-butyl	-	-	-	H	H	H	Me	H	H	H	H	H	H
(4)-2	NHCORa	n-butyl	-	-	-	H	H	H	NHCORa	n-butyl	-	-	-	H	H	H	Me	H	Ph	H	H	H	H
(4)-3	NHCORa	(a1)	-	-	-	H	H	H	NHCORa	(a1)	-	-	-	H	H	H	Me	H	H	H	H	H	H
(4)-4	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	Me	H	Ph	H	H	H	H
(4)-5	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	Me	H	H	H	H	H	H
(4)-6	NHCORa	(a3)	-	-	-	H	H	H	NHCORa	(a3)	-	-	-	H	H	H	Me	H	Ph	H	H	H	H
(4)-7	OH	-	-	-	-	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	n-butyl	H	H	H	H	H	H
(4)-8	OH	-	-	-	-	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	(a5)	H	H	H	H	H	H
(4)-9	OH	-	-	-	-	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	(a2)	H	H	H	H	H	H
(4)-10	OH	-	-	-	-	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	(P)(n=8,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	H	H	H	H	H	H
(4)-11	OH	-	-	-	-	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	(a2)	H	Ph	H	H	H	H
(4)-12	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	(a1)	-	-	H	H	H	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	(a1)	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
(4)-13	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	tolyl	-	-	H	H	H	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	tolyl	-	-	H	H	H	(P)(n=8,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	H	H	H	H	H	H
(4)-14	NH <sub>2</sub> PO(ORf)(ORg)	-	-	Me	Me	H	H	H	NH <sub>2</sub> PO(ORf)(ORg)	-	-	Me	Me	H	H	H	(a5)	H	H	H	H	H	H

表 V

## 【 0 1 3 5 】

一般式 (5) で表される構造を有する化合物 (5) は、化合物 (1) において、L<sub>1</sub> が基 (L1) であり、L<sub>2</sub> が基 (L4) であり、Ar<sub>1</sub> ~ Ar<sub>4</sub> がいずれも基 (C) である化合物である。

## 【 0 1 3 6 】

10

20

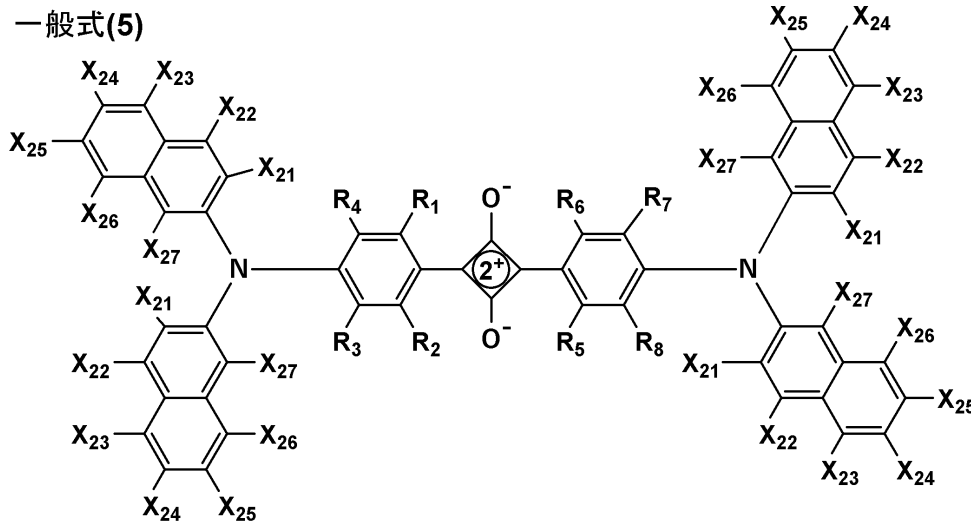
30

40

50

## 【化 3 9】

## 一般式(5)



10

## 【0137】

化合物(5)において、一般式(5)におけるR<sub>1</sub>及びR<sub>5</sub>がOH基である場合、該化合物を化合物(51)ともいう。化合物(51)においては、R<sub>2</sub>、R<sub>6</sub>及び、4個の基(C)における各X<sub>21</sub>及びX<sub>27</sub>のうちの少なくとも1つが置換基(E)である。または、これらに代わって、あるいはこれらに加えてX<sub>24</sub>が基(D)であってもよい。なお、各X<sub>26</sub>は、任意に置換基(E)とすることができる。化合物(51)においては、4個の基(C)における各X<sub>21</sub>及びX<sub>27</sub>のうちの少なくとも1つが置換基(E)であることが好ましい。さらに、置換基(E)は、4個の基(C)に各1ずつ存在することが好ましい。

20

## 【0138】

すなわち、一般式(5)において、一般式(1)のAr<sub>1</sub>、Ar<sub>2</sub>、Ar<sub>3</sub>、Ar<sub>4</sub>にそれぞれ相当する基(C)を、基(C1)、基(C2)、基(C3)及び基(C4)とすると、化合物(51)において、置換基(E)は、基(C1)のX<sub>21</sub>又はX<sub>27</sub>、基(C2)のX<sub>21</sub>又はX<sub>27</sub>、基(C3)のX<sub>21</sub>又はX<sub>27</sub>、及び基(C4)のX<sub>21</sub>又はX<sub>27</sub>に各1ずつ存在することが好ましい。その場合、R<sub>2</sub>及びR<sub>6</sub>並びに、R<sub>3</sub>、R<sub>4</sub>、R<sub>7</sub>及びR<sub>8</sub>は、水素原子であることが好ましい。基(C1)、基(C2)、基(C3)及び基(C4)におけるX<sub>21</sub>及びX<sub>27</sub>のうち置換基(E)ではないX<sub>21</sub>及びX<sub>27</sub>、並びにX<sub>22</sub>、X<sub>23</sub>、X<sub>24</sub>、X<sub>25</sub>及びX<sub>26</sub>は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。化合物(51)における、置換基(E)としては、上に説明した各基が特に制限なく適用可能である。

30

## 【0139】

化合物(5)において、一般式(5)におけるR<sub>1</sub>及びR<sub>5</sub>がNHCO<sub>2</sub>R<sub>a</sub>基、NH<sub>2</sub>SO<sub>2</sub>R<sub>b</sub>基、又はNHPO(OR<sub>f</sub>)(OR<sub>g</sub>)基である場合、該化合物を化合物(52)ともいう。化合物(52)においては、R<sub>a</sub>、R<sub>b</sub>、R<sub>f</sub>、R<sub>g</sub>、R<sub>2</sub>、R<sub>6</sub>及び、4個の基(C)における各X<sub>21</sub>及びX<sub>27</sub>のうちの少なくとも1つが置換基(E)である。または、これらに代わって、あるいはこれらに加えてX<sub>24</sub>が基(D)であってもよい。なお、各X<sub>26</sub>は、任意に置換基(E)とすることができる。ただし、R<sub>a</sub>、R<sub>b</sub>、R<sub>f</sub>及びR<sub>g</sub>については、アルキル基(a)を含む置換基(E)に限定される。

40

## 【0140】

化合物(52)においては、R<sub>a</sub>、R<sub>b</sub>、R<sub>f</sub>及びR<sub>g</sub>、4個の基(C)における各X<sub>21</sub>及びX<sub>27</sub>のうちの少なくとも1つが置換基(E)であることが好ましい。4個の基(C)が置換基(E)を有する場合、置換基(E)は、4個の基(C)に各1ずつ存在することが好ましい。

## 【0141】

50

置換基 ( E ) でない場合の R a、R b、R f 及び R g としては、炭素数 1 ~ 3 のアルキル基、フェニル基、トリル基、キシリル基等のアリール基が挙げられる。置換基 ( E ) でない場合の R<sub>2</sub> 及び R<sub>6</sub> 並びに、R<sub>3</sub>、R<sub>4</sub>、R<sub>7</sub> 及び R<sub>8</sub> は、水素原子であることが好ましい。基 ( C 1 )、基 ( C 2 )、基 ( C 3 ) 及び基 ( C 4 ) における X<sub>21</sub> 及び X<sub>27</sub> のうち置換基 ( E ) ではない X<sub>21</sub> 及び X<sub>27</sub>、並びに X<sub>22</sub>、X<sub>23</sub>、X<sub>24</sub>、X<sub>25</sub> 及び X<sub>26</sub> は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。化合物 ( 5 2 ) における、置換基 ( E ) としては、上に説明した各基が特に制限なく適用可能である。

【 0 1 4 2 】

表VIに化合物 ( 5 ) について例示する。

【 0 1 4 3 】

10

20

30

40

50

【表 6】

化合物名 (略号)	R <sub>1</sub>	Ra	Rb	Rf	Rg	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	R <sub>4</sub>	R <sub>5</sub>	Ra	Rb	Rf	Rg	R <sub>6</sub>	R <sub>7</sub>	R <sub>8</sub>	X <sub>21</sub>	X <sub>22</sub>	X <sub>23</sub>	X <sub>24</sub>	X <sub>25</sub>	X <sub>26</sub>	X <sub>27</sub>	
(5)-1	NHCORa	n-butyl	-	-	-	H	H	H	NHCORa	n-butyl	-	-	-	H	H	H	Me	H	H	H	H	H	H	
(5)-2	NHCORa	n-butyl	-	-	-	H	H	H	NHCORa	n-butyl	-	-	-	H	H	H	Me	H	Ph	H	H	H	H	
(5)-3	NHCORa	(a1)	-	-	-	H	H	H	NHCORa	(a1)	-	-	-	H	H	H	Me	H	H	H	H	H	H	
(5)-4	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	Me	H	Ph	H	H	H	H	
(5)-5	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	Me	H	H	H	H	H	H	
(5)-6	NHCORa	(a3)	-	-	-	H	H	H	NHCORa	(a3)	-	-	-	H	H	H	Me	H	Ph	H	H	H	H	
(5)-7	OH	-	-	-	-	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	n-butyl	H	H	H	H	H	H	
(5)-8	OH	-	-	-	-	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	n-butyl	
(5)-9	OH	-	-	-	-	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	(a5)	H	H	H	H	H	H	
(5)-10	OH	-	-	-	-	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	(a6)	H	H	H	H	H	H	
(5)-11	OH	-	-	-	-	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	(P)(n=6, R <sub>n1</sub> =CH <sub>3</sub> )	H	H	H	H	H	H	
(5)-12	OH	-	-	-	-	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	(a6)	H	Ph	H	H	H	H	
(5)-13	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	(a1)	-	-	H	H	H	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	(a1)	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
(5)-14	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	tolyl	-	-	H	H	H	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	tolyl	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	(a2)	H
(5)-15	NH <sub>2</sub> PO(ORf)(ORg)	-	-	Me	Me	H	H	H	NH <sub>2</sub> PO(ORf)(ORg)	-	-	Me	Me	H	H	H	(a5)	H	H	H	H	H	H	H

表 VI

## 【0144】

一般式(6)~(8)で表される構造を有する化合物(6)~(8)は、化合物(1)において、L<sub>1</sub>が基(L<sub>2</sub>)であり、L<sub>2</sub>が基(L<sub>5</sub>)である化合物である。化合物(6)は、Ar<sub>1</sub>~Ar<sub>4</sub>がいずれも基(A)である化合物であり、化合物(7)は、Ar<sub>1</sub>~Ar<sub>4</sub>がいずれも基(B)である化合物であり、化合物(8)は、Ar<sub>1</sub>~Ar<sub>4</sub>がいずれも基(C)である化合物である。

## 【0145】

10

20

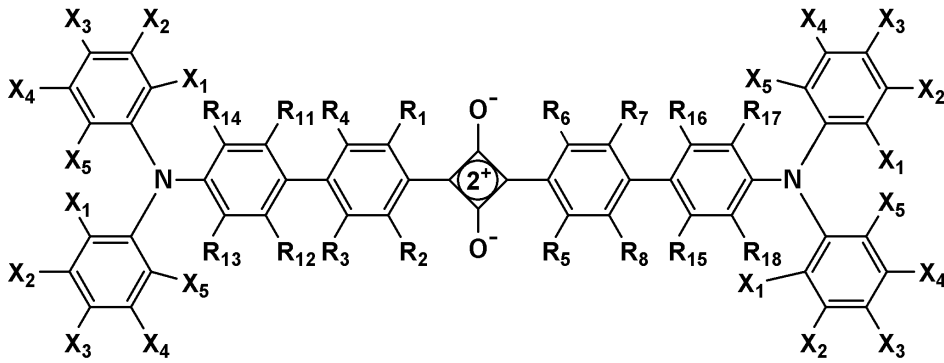
30

40

50

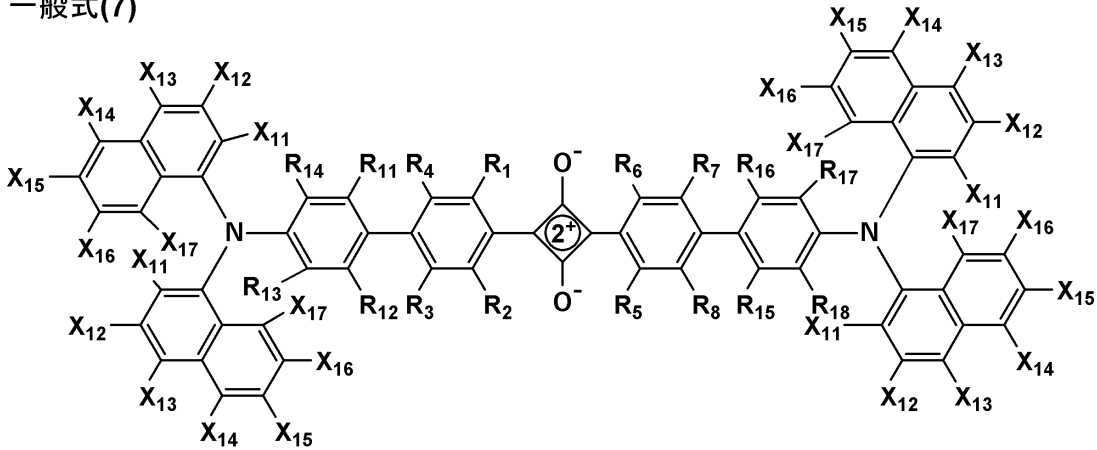
## 【化 4 0】

## 一般式(6)



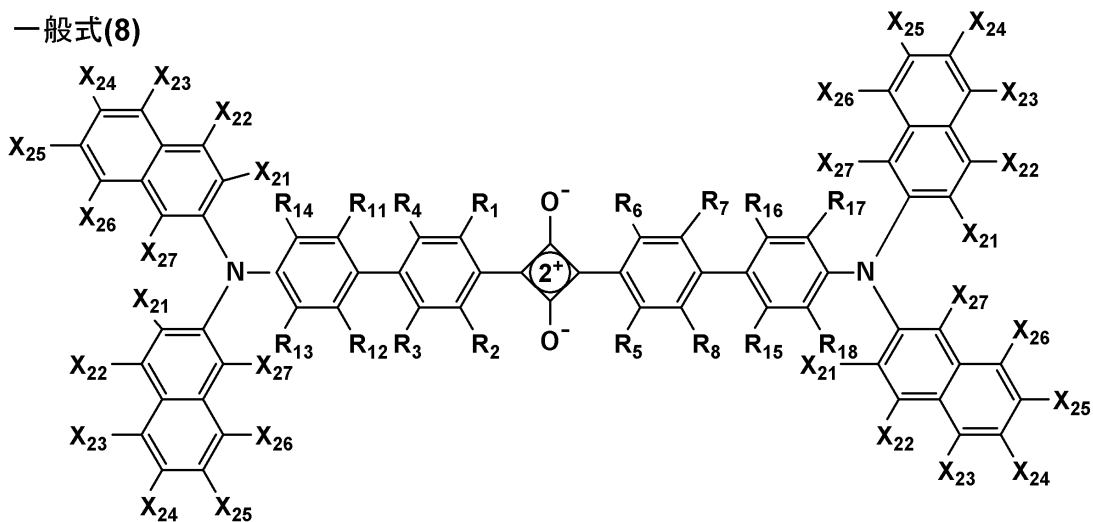
10

## 一般式(7)



20

## 一般式(8)



30

40

## 【 0 1 4 6】

化合物(6)~(8)において、一般式(1)のAr<sub>1</sub>~Ar<sub>4</sub>に相当する部分は、化合物(3)~(5)における説明が適用できる。化合物(6)~(8)は、L<sub>1</sub>が基(L<sub>2</sub>)であり、L<sub>2</sub>が基(L<sub>5</sub>)である点で共通する。化合物(6)において、一般式(6)中のR<sub>1</sub>及びR<sub>5</sub>がOH基である場合、該化合物を化合物(61)ともいう。同様に、化合物(7)において、一般式(7)中のR<sub>1</sub>及びR<sub>5</sub>がOH基である場合、該化合物を化合物(71)ともいう。また、化合物(8)において、一般式(8)中のR<sub>1</sub>及びR<sub>5</sub>がOH基である場合、該化合物を化合物(81)ともいう。

## 【 0 1 4 7】

50

化合物(61)においては、 $R_2$ 、 $R_6$ 、 $R_{11}$ 、 $R_{12}$ 、 $R_{15}$ 、 $R_{16}$ 、4個の基(A)における各 $X_1$ 及び $X_5$ のうちの少なくとも1つが置換基(E)である。化合物(71)においては、 $R_2$ 、 $R_6$ 、 $R_{11}$ 、 $R_{12}$ 、 $R_{15}$ 、 $R_{16}$ 、及び4個の基(B)における各 $X_{11}$ のうちの少なくとも1つが置換基(E)である。化合物(81)においては、 $R_2$ 、 $R_6$ 、 $R_{11}$ 、 $R_{12}$ 、 $R_{15}$ 、 $R_{16}$ 、4個の基(C)における各 $X_{21}$ 及び $X_{27}$ のうちの少なくとも1つが置換基(E)である。

【0148】

または、これらに代わって、あるいはこれらに加えて、化合物(61)においては $X_3$ が、化合物(71)においては $X_{13}$ が、化合物(81)においては $X_{24}$ が、それぞれ基(D)であってもよい。なお、化合物(71)においては、各 $X_{16}$ 及び $X_{17}$ を、任意に置換基(E)とすることができる。また、化合物(81)においては、各 $X_{26}$ を、任意に置換基(E)とすることができる。化合物(61)、化合物(71)及び化合物(81)において、置換基(E)は、4個の基(A)、基(B)又は基(C)に各1ずつ存在することが好ましい。

10

【0149】

化合物(61)、化合物(71)及び化合物(81)において、置換基(E)でない場合の $R_2$ 、 $R_6$ 、 $R_{11}$ 、 $R_{12}$ 、 $R_{15}$ 及び $R_{16}$ 並びに、 $R_3$ 、 $R_4$ 、 $R_7$ 、 $R_8$ 、 $R_{13}$ 、 $R_{14}$ 、 $R_{17}$ 及び $R_{18}$ は、水素原子又はメチル基が好ましい。化合物(61)において、4個の基(A)が有する $X_1 \sim X_5$ のうち置換基(E)又は基(D)でない $X_1 \sim X_5$ は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。化合物(71)において、4個の基(B)が有する $X_{11} \sim X_{17}$ のうち置換基(E)又は基(D)でない $X_{11} \sim X_{17}$ は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。化合物(81)において、4個の基(C)が有する $X_{21} \sim X_{27}$ のうち置換基(E)又は基(D)でない $X_{21} \sim X_{27}$ は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。

20

【0150】

化合物(6)において、一般式(6)中の $R_1$ 及び $R_5$ が $\text{NHCOR}_a$ 基、 $\text{NH}_2\text{SO}_2\text{R}_b$ 基、又は $\text{NHPO}(\text{OR}_f)(\text{OR}_g)$ 基である場合、該化合物を化合物(62)ともいう。同様に、化合物(7)において、一般式(7)中の $R_1$ 及び $R_5$ が $\text{NHCOR}_a$ 基、 $\text{NH}_2\text{SO}_2\text{R}_b$ 基、又は $\text{NHPO}(\text{OR}_f)(\text{OR}_g)$ 基である場合、該化合物を化合物(72)ともいう。また、化合物(8)において、一般式(8)中の $R_1$ 及び $R_5$ が $\text{NHCOR}_a$ 基、 $\text{NH}_2\text{SO}_2\text{R}_b$ 基、又は $\text{NHPO}(\text{OR}_f)(\text{OR}_g)$ 基である場合、該化合物を化合物(82)ともいう。

30

【0151】

化合物(62)においては、 $R_a$ 、 $R_b$ 、 $R_f$ 、 $R_g$ 、 $R_2$ 、 $R_6$ 、 $R_{11}$ 、 $R_{12}$ 、 $R_{15}$ 、 $R_{16}$ 、4個の基(A)における各 $X_1$ 及び $X_5$ のうちの少なくとも1つが置換基(E)である。化合物(72)においては、 $R_a$ 、 $R_b$ 、 $R_f$ 、 $R_g$ 、 $R_2$ 、 $R_6$ 、 $R_{11}$ 、 $R_{12}$ 、 $R_{15}$ 、 $R_{16}$ 、及び4個の基(B)における各 $X_{11}$ のうちの少なくとも1つが置換基(E)である。化合物(82)においては、 $R_a$ 、 $R_b$ 、 $R_f$ 、 $R_g$ 、 $R_2$ 、 $R_6$ 、 $R_{11}$ 、 $R_{12}$ 、 $R_{15}$ 、 $R_{16}$ 、4個の基(C)における各 $X_{21}$ 及び $X_{27}$ のうちの少なくとも1つが置換基(E)である。

40

【0152】

または、これらに代わって、あるいはこれらに加えて、化合物(62)においては $X_3$ が、化合物(72)においては $X_{13}$ が、化合物(82)においては $X_{24}$ が、それぞれ基(D)であってもよい。なお、化合物(72)においては、各 $X_{16}$ 及び $X_{17}$ を、任意に置換基(E)とすることができる。また、化合物(82)においては、各 $X_{26}$ を、任意に置換基(E)とすることができる。ただし、 $R_a$ 、 $R_b$ 、 $R_f$ 及び $R_g$ については、アルキル基(a)を含む置換基(E)に限定される。

【0153】

化合物(62)、化合物(72)及び化合物(82)において、置換基(E)は、4個の基(A)、基(B)又は基(C)に各1ずつ存在することが好ましい。

50

## 【0154】

化合物(62)、化合物(72)及び化合物(82)において、置換基(E)でない場合の $R_2$ 、 $R_6$ 、 $R_{11}$ 、 $R_{12}$ 、 $R_{15}$ 及び $R_{16}$ 並びに、 $R_3$ 、 $R_4$ 、 $R_7$ 、 $R_8$ 、 $R_{13}$ 、 $R_{14}$ 、 $R_{17}$ 及び $R_{18}$ は、水素原子が好ましい。化合物(62)において、4個の基(A)が有する $X_1 \sim X_5$ のうち置換基(E)又は基(D)でない $X_1 \sim X_5$ は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。化合物(72)において、4個の基(B)が有する $X_{11} \sim X_{17}$ のうち置換基(E)又は基(D)でない $X_{11} \sim X_{17}$ は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。化合物(82)において、4個の基(C)が有する $X_{21} \sim X_{27}$ のうち置換基(E)又は基(D)でない $X_{21} \sim X_{27}$ は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。

10

## 【0155】

化合物(6)、化合物(7)及び化合物(8)の具体的な例示を、それぞれ表VII、表VIII及び表IXに示す。表IXにおいて、「-O-(a4)」は、連結基として-O-が結合した基(a4)を示す。

## 【0156】

20

30

40

50

【表 7】

化合物名 (略号)	R <sub>1</sub>	Ra	Rb	Rf	Rg	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	R <sub>4</sub>	R <sub>5</sub>	Ra	Rb	Rf	Rg	R <sub>6</sub>	R <sub>7</sub>	R <sub>8</sub>	R <sub>11</sub>	R <sub>12</sub>	R <sub>13</sub>	R <sub>14</sub>	R <sub>15</sub>	R <sub>16</sub>	R <sub>17</sub>	R <sub>18</sub>	X <sub>1</sub>	X <sub>2</sub>	X <sub>3</sub>	X <sub>4</sub>	X <sub>5</sub>		
(6)-1	OH	-	-	-	-	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	(a2)	H	H	H	H	
(6)-2	OH	-	-	-	-	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	Me	H	H	H	Me	H	H	H	H	n-butyl	H	H	H	H	
(6)-3	OH	-	-	-	-	H	Me	H	OH	-	-	-	-	H	Me	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	*	H	H	H	H	
(6)-4	OH	-	-	-	-	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	n-octyl	H	Ph	H	H	
(6)-5	NHCORa	n-butyl	-	-	-	H	H	H	NHCORa	n-butyl	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H	
(6)-6	NHCORa	n-hexyl	-	-	-	H	H	H	NHCORa	n-hexyl	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	Me	H	Ph	H	H	
(6)-7	NHCORa	(a1)	-	-	-	H	H	H	NHCORa	(a1)	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H	
(6)-8	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H	
(6)-9	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H	
(6)-10	NHCORa	(a3)	-	-	-	H	H	H	NHCORa	(a3)	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	Me	H	Ph	H	H	
(6)-11	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	(a1)	-	-	H	H	H	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	(a1)	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H	
(6)-12	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	tolyl	-	-	H	H	H	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	tolyl	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H	
(6)-13	NH <sub>2</sub> PO(ORf)(ORg)	-	-	MeMe	H	H	H	H	NH <sub>2</sub> PO(ORf)(ORg)	-	-	MeMe	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	(a5)	H	H	H	H	H

\*1: (P)(Q)--CH<sub>2</sub>-, n=9, R<sub>51</sub>=H

【 0 1 5 7 】

10

20

30

40

50

【表 8】

表 VIII

化合物名 (略号)	R <sub>1</sub>	Ra	Rb	Rf	Rg	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	R <sub>4</sub>	R <sub>5</sub>	Ra	Rb	Rf	Rg	R <sub>6</sub>	R <sub>7</sub>	R <sub>8</sub>	R <sub>3</sub>	R <sub>11</sub>	R <sub>12</sub>	R <sub>13</sub>	R <sub>14</sub>	R <sub>15</sub>	R <sub>16</sub>	R <sub>17</sub>	R <sub>18</sub>	X <sub>11</sub>	X <sub>12</sub>	X <sub>13</sub>	X <sub>14</sub>	X <sub>15</sub>	X <sub>16</sub>	X <sub>17</sub>			
(7)-1	NHCORa	n-butyl	-	-	H	H	H	NHCORa	NHCORa	n-butyl	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H	H	H		
(7)-2	NHCORa	n-hexyl	-	-	H	H	H	NHCORa	NHCORa	n-hexyl	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	Me	Ph	H	H	H	H	H		
(7)-3	NHCORa	(a1)	-	-	H	H	H	NHCORa	NHCORa	(a1)	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H	H	H	H		
(7)-4	NHCORa	(a2)	-	-	H	H	H	NHCORa	NHCORa	(a2)	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H	H	H	H		
(7)-5	NHCORa	(a2)	-	-	H	H	H	NHCORa	NHCORa	(a2)	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H	H	H	H		
(7)-6	NHCORa	(a3)	-	-	H	H	H	NHCORa	NHCORa	(a3)	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	Me	Ph	H	H	H	H	H	H		
(7)-7	OH	-	-	-	H	H	H	OH	OH	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	(a2)	H	H	H	H	H	H	H		
(7)-8	OH	-	-	-	H	H	H	OH	OH	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	n-octyl	H	H	H	H	H	H	H		
(7)-9	OH	-	-	-	H	H	H	OH	OH	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H	H	H	H		
(7)-10	OH	-	-	-	H	H	H	OH	OH	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H	H	H	H		
(7)-11	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	(a1)	-	H	H	H	NHSO <sub>2</sub> Rb	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	(a1)	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	
(7)-12	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	tolyl	-	H	H	H	NHSO <sub>2</sub> Rb	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	tolyl	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
(7)-13	*2	-	-	Me	Me	H	H	H	*2	-	-	Me	Me	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	*1	H	H	H	H	H	H	H	

\*1: (P)(n=8,R<sub>51</sub>=CH<sub>3</sub>) \*2: NH<sub>2</sub>PO(ORf)(ORg)

【 0 1 5 8 】

10

20

30

40

50

【表 9】

表 IX

化合物名 (略号)	R <sub>1</sub>	Ra	Rb	Rf	Rg	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	R <sub>4</sub>	R <sub>5</sub>	Ra	Rb	Rf	Rg	R <sub>6</sub>	R <sub>7</sub>	R <sub>8</sub>	X <sub>21</sub>	X <sub>22</sub>	X <sub>23</sub>	X <sub>24</sub>	X <sub>25</sub>	X <sub>26</sub>	X <sub>27</sub>	
(8)-1	NHCORa	n-butyl	-	-	-	H	H	H	NHCORa	n-butyl	-	-	-	H	H	H	Me	H	H	H	H	H	H	
(8)-2	NHCORa	(a1)	-	-	-	H	H	H	NHCORa	(a1)	-	-	-	H	H	H	Me	H	H	H	H	H	H	
(8)-3	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	
(8)-4	NHCORa	(a3)	-	-	-	H	H	H	NHCORa	(a3)	-	-	-	H	H	H	Me	H	H	H	H	H	H	
(8)-5	OH	-	-	-	-	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	n-butyl	H	H	H	H	H	H	
(8)-6	OH	-	-	-	-	n-butyl	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	
(8)-7	OH	-	-	-	-	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	(a5)	H	H	H	H	H	H	
(8)-8	OH	-	-	-	-	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	(a5)	H	H	H	H	H	H	
(8)-9	OH	-	-	-	-	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	*1	H	H	H	H	H	H	
(8)-10	OH	-	-	-	-	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	(a4)	H	H	H	H	H	H	
(8)-11	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	(a1)	-	-	H	H	H	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	(a1)	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
(8)-12	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	tolyl	-	-	H	H	H	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	tolyl	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
(8)-13	*2	-	-	Me	Me	H	H	H	*2	-	-	Me	Me	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	

\*1: (P)(n=9,R<sub>5</sub>=CH<sub>3</sub>) \*2: NH<sub>2</sub>PO(ORf)(ORg)

10

20

30

40

【0159】

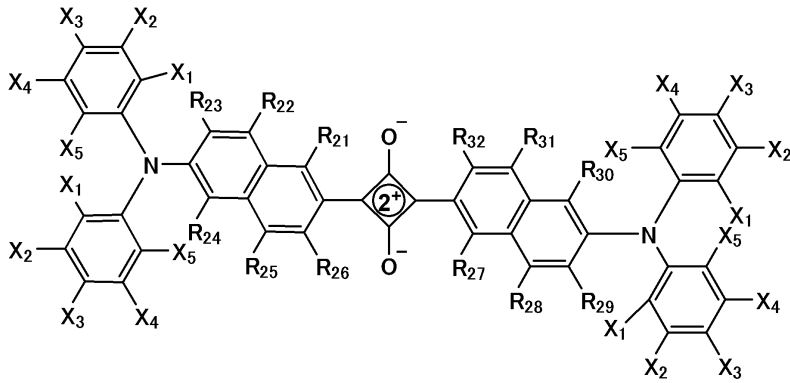
一般式(9)~(11)で表される構造を有する化合物(9)~(11)は、化合物(1)において、L<sub>1</sub>が基(L3)であり、L<sub>2</sub>が基(L6)である化合物である。化合物(9)は、Ar<sub>1</sub>~Ar<sub>4</sub>がいずれも基(A)である化合物であり、化合物(10)は、Ar<sub>1</sub>~Ar<sub>4</sub>がいずれも基(B)である化合物であり、化合物(11)は、Ar<sub>1</sub>~Ar<sub>4</sub>がいずれも基(C)である化合物である。

【0160】

50

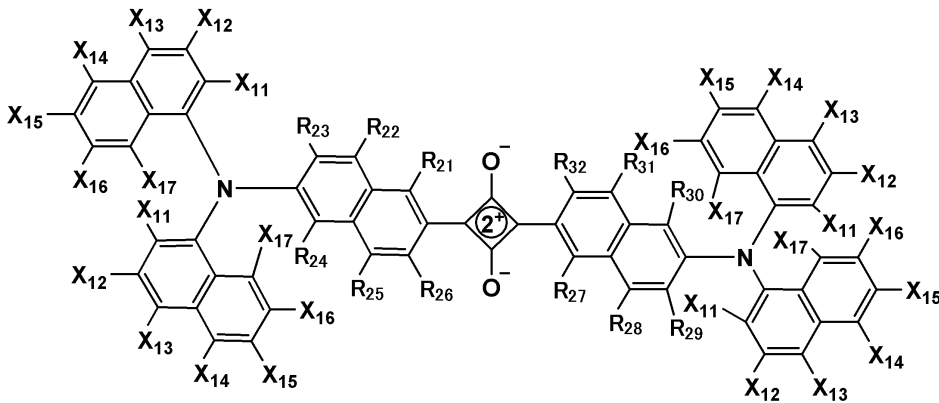
## 【化 4 1】

## 一般式(9)



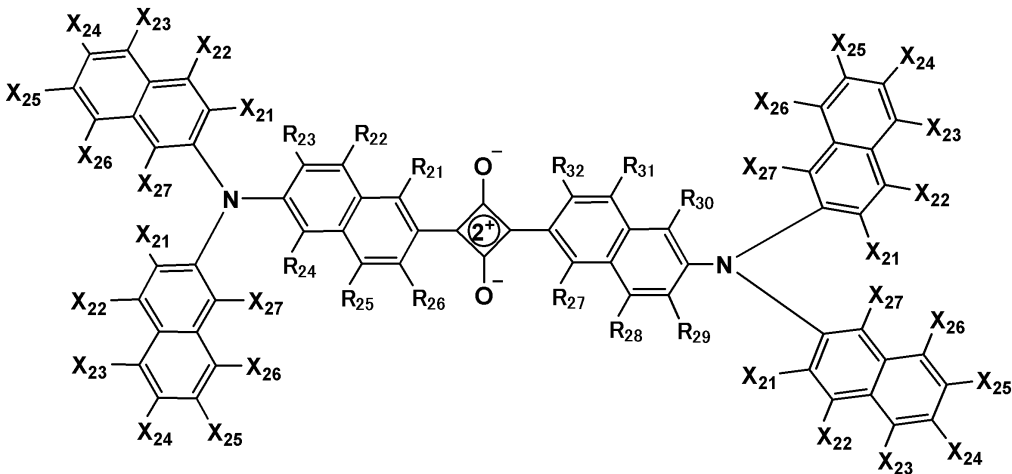
10

## 一般式(10)



20

## 一般式(11)



30

40

## 【 0 1 6 1】

化合物(9)~(11)において、一般式(1)の $Ar_1 \sim Ar_4$ に相当する部分は、化合物(3)~(5)における説明が適用できる。化合物(9)~(11)は、 $L_1$ が基( $L_3$ )であり、 $L_2$ が基( $L_6$ )である点で共通する。化合物(9)において、一般式(9)中の $R_{21}$ 及び $R_{27}$ がOH基である場合、該化合物を化合物(91)ともいう。同様に、化合物(10)において、一般式(10)中の $R_{21}$ 及び $R_{27}$ がOH基である場合、該化合物を化合物(101)ともいう。また、化合物(11)において、一般式(11)中の $R_{21}$ 及び $R_{27}$ がOH基である場合、該化合物を化合物(111)ともいう。

## 【 0 1 6 2】

50

化合物(91)においては、 $R_{26}$ 、 $R_{32}$ 、4個の基(A)における各 $X_1$ 及び $X_5$ のうちの少なくとも1つが置換基(E)である。化合物(101)においては、 $R_{26}$ 、 $R_{32}$ 、及び4個の基(B)における各 $X_{11}$ のうちの少なくとも1つが置換基(E)である。化合物(111)においては、 $R_{26}$ 、 $R_{32}$ 、4個の基(C)における各 $X_{21}$ 及び $X_{27}$ のうちの少なくとも1つが置換基(E)である。

## 【0163】

または、これらに代わって、あるいはこれらに加えて、化合物(91)においては $X_3$ が、化合物(101)においては $X_{13}$ が、化合物(111)においては $X_{24}$ が、それぞれ基(D)であってもよい。なお、化合物(91)においては、 $R_{22}$ 及び $R_{28}$ を、任意に置換基(E)とすることができる。化合物(101)においては、 $R_{22}$ 、 $R_{28}$ 、各 $X_{16}$ 及び $X_{17}$ を、任意に置換基(E)とすることができる。また、化合物(111)においては、 $R_{22}$ 、 $R_{28}$ 及び各 $X_{26}$ を、任意に置換基(E)とすることができる。化合物(91)、化合物(101)及び化合物(111)において、置換基(E)は、4個の基(A)、基(B)又は基(C)に各1ずつ存在することが好ましい。

10

## 【0164】

化合物(91)、化合物(101)及び化合物(111)において、置換基(E)でない $R_{22} \sim R_{26}$ 、 $R_{28} \sim R_{32}$ は、水素原子又はメチル基が好ましい。化合物(91)において、4個の基(A)が有する $X_1 \sim X_5$ のうち置換基(E)又は基(D)でない $X_1 \sim X_5$ は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。化合物(101)において、4個の基(B)が有する $X_{11} \sim X_{17}$ のうち置換基(E)又は基(D)でない $X_{11} \sim X_{17}$ は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。化合物(111)において、4個の基(C)が有する $X_{21} \sim X_{27}$ のうち置換基(E)又は基(D)でない $X_{21} \sim X_{27}$ は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。

20

## 【0165】

化合物(9)において、一般式(9)中の $R_{21}$ 及び $R_{27}$ が $\text{NHCOR}_a$ 基、 $\text{NH}_2\text{SO}_2\text{R}_b$ 基、又は $\text{NHPO}(\text{OR}_f)(\text{OR}_g)$ 基である場合、該化合物を化合物(92)ともいう。同様に、化合物(10)において、一般式(10)中の $R_{21}$ 及び $R_{27}$ が $\text{NHCOR}_a$ 基、 $\text{NH}_2\text{SO}_2\text{R}_b$ 基、又は $\text{NHPO}(\text{OR}_f)(\text{OR}_g)$ 基である場合、該化合物を化合物(102)ともいう。また、化合物(11)において、一般式(11)中の $R_{21}$ 及び $R_{27}$ が $\text{NHCOR}_a$ 基、 $\text{NH}_2\text{SO}_2\text{R}_b$ 基、又は $\text{NHPO}(\text{OR}_f)(\text{OR}_g)$ 基である場合、該化合物を化合物(112)ともいう。

30

## 【0166】

化合物(92)においては、 $R_a$ 、 $R_b$ 、 $R_f$ 、 $R_g$ 、 $R_{22}$ 、 $R_{26}$ 、 $R_{28}$ 、 $R_{32}$ 、4個の基(A)における各 $X_1$ 及び $X_5$ のうちの少なくとも1つが置換基(E)である。化合物(102)においては、 $R_a$ 、 $R_b$ 、 $R_f$ 、 $R_g$ 、 $R_{22}$ 、 $R_{26}$ 、 $R_{28}$ 、 $R_{32}$ 、及び4個の基(B)における各 $X_{11}$ のうちの少なくとも1つが置換基(E)である。化合物(112)においては、 $R_a$ 、 $R_b$ 、 $R_f$ 、 $R_g$ 、 $R_{22}$ 、 $R_{26}$ 、 $R_{28}$ 、 $R_{32}$ 、4個の基(C)における各 $X_{21}$ 及び $X_{27}$ のうちの少なくとも1つが置換基(E)である。

## 【0167】

40

または、これらに代わって、あるいはこれらに加えて、化合物(92)においては $X_3$ が、化合物(102)においては $X_{13}$ が、化合物(112)においては $X_{24}$ が、それぞれ基(D)であってもよい。なお、化合物(92)においては、 $R_{22}$ 及び $R_{28}$ を、任意に置換基(E)とすることができる。化合物(102)においては、 $R_{22}$ 、 $R_{28}$ 、各 $X_{16}$ 及び $X_{17}$ を、任意に置換基(E)とすることができる。また、化合物(112)においては、 $R_{22}$ 、 $R_{28}$ 及び各 $X_{26}$ を、任意に置換基(E)とすることができる。ただし、 $R_a$ 、 $R_b$ 、 $R_f$ 及び $R_g$ については、アルキル基(a)を含む置換基(E)に限定される。

## 【0168】

化合物(92)、化合物(102)及び化合物(112)において、置換基(E)は、

50

4個の基(A)、基(B)又は基(C)に各1ずつ存在することが好ましい。

【0169】

化合物(92)、化合物(102)及び化合物(112)において、置換基(E)でない $R_{22} \sim R_{26}$ 、 $R_{28} \sim R_{32}$ は、水素原子が好ましい。化合物(92)において、4個の基(A)が有する $X_1 \sim X_5$ のうち置換基(E)又は基(D)でない $X_1 \sim X_5$ は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。化合物(102)において、4個の基(B)が有する $X_{11} \sim X_{17}$ のうち置換基(E)又は基(D)でない $X_{11} \sim X_{17}$ は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。化合物(112)において、4個の基(C)が有する $X_{21} \sim X_{27}$ のうち置換基(E)又は基(D)でない $X_{21} \sim X_{27}$ は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。

10

【0170】

化合物(9)、化合物(10)及び化合物(11)の具体的な例示を、それぞれ表X、表XI及び表XIIに示す。

【0171】

20

30

40

50

【表 10】

表 X

化合物名 (略号)	R <sub>21</sub>	Ra	Rb	Rf	Rg	R <sub>22</sub>	R <sub>23</sub>	R <sub>24</sub>	R <sub>25</sub>	R <sub>26</sub>	R <sub>27</sub>	Ra	Rb	Rf	Rg	R <sub>28</sub>	R <sub>29</sub>	R <sub>30</sub>	R <sub>31</sub>	R <sub>32</sub>	X <sub>1</sub>	X <sub>2</sub>	X <sub>3</sub>	X <sub>4</sub>	X <sub>5</sub>
(9)-1	OH	-	-	-	-	H	H	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	H	H	(a6)	H	H	H	H
(9)-2	OH	-	-	-	-	H	H	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	H	H	n-butyl	H	Me	H	H
(9)-3	OH	-	-	-	-	H	H	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	H	H	(P)(n=9,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	H	H	H	H
(9)-4	OH	-	-	-	-	H	H	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	H	H	n-octyl	H	Ph	H	H
(9)-5	NHCORa	n-butyl	-	-	-	H	H	H	H	H	NHCORa	n-butyl	-	-	-	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H
(9)-6	NHCORa	n-hexyl	-	-	-	H	H	H	H	H	NHCORa	n-hexyl	-	-	-	H	H	H	H	H	Me	H	Ph	H	H
(9)-7	NHCORa	(a1)	-	-	-	H	H	H	H	H	NHCORa	(a1)	-	-	-	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H
(9)-8	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	H	H	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H
(9)-9	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	H	H	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	H	H	Me	H	H	Me	H
(9)-10	NHCORa	(a3)	-	-	-	H	H	H	H	H	NHCORa	(a3)	-	-	-	H	H	H	H	H	Me	H	Ph	H	H
(9)-11	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	(a1)	-	-	H	H	H	H	H	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	(a1)	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
(9)-12	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	tolyl	-	-	H	H	H	H	H	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	tolyl	-	-	H	H	H	H	H	(a3)	H	H	H	(a3)
(9)-13	NH <sub>2</sub> PO(ORf)(ORg)	-	-	Me	Me	H	H	H	H	H	NH <sub>2</sub> PO(ORf)(ORg)	-	-	Me	Me	H	H	H	H	H	(a6)	H	H	H	H

10

20

30

40

【 0 1 7 2 】

50

【表 1 1】

表 X1

化合物名 (略号)	R <sub>21</sub>	Ra	Rb	Rf	Rg	R <sub>22</sub>	R <sub>23</sub>	R <sub>24</sub>	R <sub>25</sub>	R <sub>26</sub>	R <sub>27</sub>	Ra	Rb	Rf	Rg	R <sub>28</sub>	R <sub>29</sub>	R <sub>30</sub>	R <sub>31</sub>	R <sub>32</sub>	X <sub>11</sub>	X <sub>12</sub>	X <sub>13</sub>	X <sub>14</sub>	X <sub>15</sub>	X <sub>16</sub>	X <sub>17</sub>
(10)-1	NHCORa	n-butyl	-	-	-	H	H	H	H	H	NHCORa	n-butyl	-	-	-	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H	H	H
(10)-2	NHCORa	n-hexyl	-	-	-	H	H	H	H	H	NHCORa	n-hexyl	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
(10)-3	NHCORa	(a1)	-	-	-	H	H	H	H	H	NHCORa	(a1)	-	-	-	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H	H	H
(10)-4	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	H	H	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H	H	H
(10)-5	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	H	H	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H
(10)-6	NHCORa	(a3)	-	-	-	H	H	H	H	H	NHCORa	(a3)	-	-	-	H	H	H	H	H	Me	H	Ph	H	H	H	H
(10)-7	OH	-	-	-	-	H	H	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	H	H	(a7)	H	H	H	H	H	H
(10)-8	OH	-	-	-	-	H	H	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	H	H	(a6)	H	H	H	H	H	H
(10)-9	OH	-	-	-	-	H	H	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	H	H	*1	H	H	H	H	H	H
(10)-10	OH	-	-	-	-	H	H	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	H	H	n-octyl	H	Ph	H	H	H	H
(10)-11	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	(a1)	-	-	H	H	H	H	H	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	(a1)	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
(10)-12	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	tolyl	-	-	H	H	H	H	H	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	tolyl	-	-	H	H	H	H	H	H	(a2)	H	H	H	H	H
(10)-13	*2	-	-	Me	Me	H	H	H	H	H	*2	-	-	Me	Me	H	H	H	H	H	n-octyl	H	H	H	H	H	H

\*1: (P)(n=9,R<sub>51</sub>=CH<sub>3</sub>) \*2: NH<sub>2</sub>PO(ORf)(ORg)

【 0 1 7 3 】

10

20

30

40

50

【表 1 2】

化合物名 (略号)	R <sub>21</sub>	Ra	Rb	Rf	Rg	R <sub>22</sub>	R <sub>23</sub>	R <sub>24</sub>	R <sub>25</sub>	R <sub>26</sub>	R <sub>27</sub>	R <sub>28</sub>	R <sub>29</sub>	R <sub>30</sub>	R <sub>31</sub>	R <sub>32</sub>	X <sub>21</sub>	X <sub>22</sub>	X <sub>23</sub>	X <sub>24</sub>	X <sub>25</sub>	X <sub>26</sub>	X <sub>27</sub>
(11)-1	NHCORa	n-butyl	-	-	-	H	H	H	H	H	NHCORa	n-butyl	-	-	-	H	Me	H	H	H	H	H	H
(11)-2	NHCORa	(a1)	-	-	-	H	H	H	H	H	NHCORa	(a1)	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H
(11)-3	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	H	H	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H
(11)-4	OH	-	-	-	-	H	H	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	(a7)	H	H	H	H	H	H
(11)-5	OH	-	-	-	-	H	H	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	n-butyl	H	H	H	H	H	H
(11)-6	OH	-	-	-	-	H	H	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	(P)(n=8,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	H	H	H	H	H	H
(11)-7	OH	-	-	-	-	H	H	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	n-octyl	H	H	H	H	H	H
(11)-8	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	(a1)	-	-	H	H	H	H	H	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	(a1)	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H
(11)-9	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	tolyl	-	-	H	H	H	H	H	NHSO <sub>2</sub> Rb	-	tolyl	-	-	H	(a1)	H	H	H	H	H	H
(11)-10	*1	-	-	Me	Me	H	H	H	H	H	*1	-	-	-	-	H	(P)(n=9,R <sub>51</sub> =CH <sub>3</sub> )	H	H	H	H	H	H

\*1: NH<sub>2</sub>PO(ORf)(ORg)

【0174】

以上、化合物(1)について例示した。化合物(1)のなかでも、上記のとおり化合物(1a)~(1d)が好ましい。化合物(1a)としては、本発明の効果をより発現できる観点から、化合物(1a)-1、化合物(1a)-12及び化合物(1a)-20が好ましい。

【0175】

同様に、化合物(1b)としては、化合物(1b)-14、化合物(1b)-18が好ましい。化合物(1c)としては、化合物(1c)-9、化合物(1c)-12、化合物(1c)-31、化合物(1c)-42が好ましい。また、化合物(1d)としては、化

10

20

30

40

50

合物(1d)-1、化合物(1d)-14、化合物(1d)-36、化合物(1d)-39、化合物(1d)-40が好ましい。

【0176】

また、化合物(4)としては、化合物(4)-5、化合物(4)-6、化合物(4)-9及び化合物(4)-10が好ましい。化合物(5)としては、化合物(5)-3、化合物(5)-4及び化合物(5)-9が好ましい。

【0177】

化合物(6)としては、化合物(6)-3、化合物(6)-4及び化合物(6)-8が好ましい。化合物(7)としては、化合物(7)-4、化合物(7)-5、化合物(7)-6及び化合物(7)-8が好ましい。化合物(8)としては、化合物(8)-3、化合物(8)-4及び化合物(8)-10が好ましい。

10

【0178】

化合物(9)としては、化合物(9)-4、化合物(9)-6、化合物(9)-7及び化合物(9)-10が好ましい。化合物(10)としては、化合物(10)-2、化合物(10)-4、化合物(10)-5及び化合物(10)-8が好ましい。化合物(11)としては、化合物(11)-2、化合物(11)-3及び化合物(11)-7が好ましい。

【0179】

[合成方法]

本発明に係る化合物(1)は、例えば、Chemistry of Materials, 第23巻、4789ページ(2011年)、The Journal of Physical Chemistry, 第91巻、5184ページ(1987年)に記載の方法、又は、これらの文献に記載の参考文献に記載の方法を参照することにより合成することができる。一例として、以下に例示化合物(1a)-1、(1b)-1、(1c)-1及び(1d)-1の合成例を示す。

20

【0180】

<例示化合物(1a)-1の合成>

化合物(1a)-1は、例えば、下記スキーム(A)により合成することができる。以下の説明において、用いる化合物の量、処理温度、時間等は例示であって適宜調整可能である。他の化合物の合成においても同様である。

【0181】

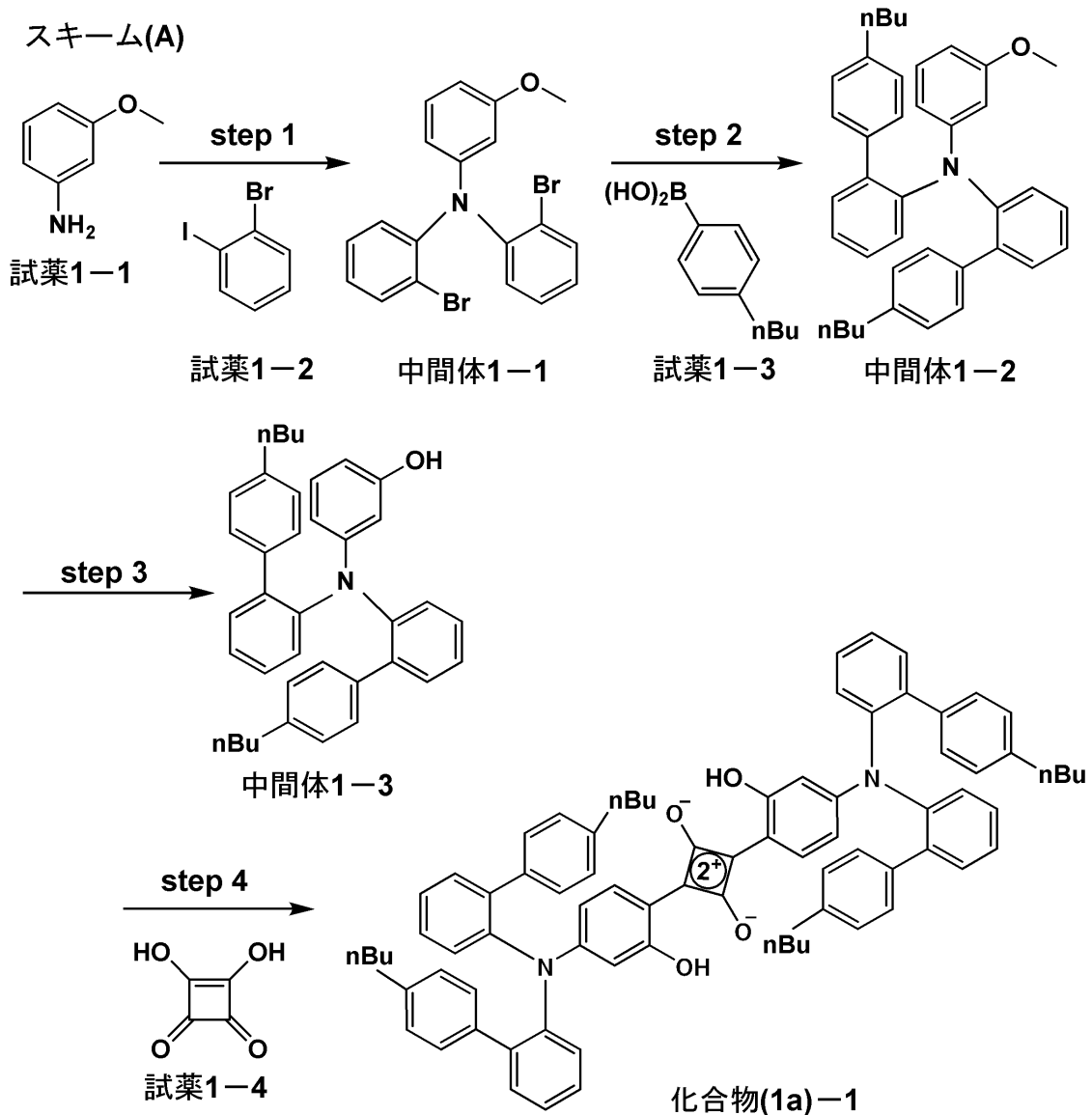
30

40

50

## 【化42】

## スキーム(A)



10

20

30

## 【0182】

## (ステップ1)

m-アニシジン(試薬1-1)、1.5等量の1-ブロモ-2-ヨードベンゼン(試薬1-2)、5%トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0)、10%トリス-tert-ブチルホスホニウムテトラフルオロボレート、3等量のtert-ブトキシナトリウムをキシレン30mL中で還流する。これを抽出、濃縮した後シリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製することで、中間体1-1を得る。

## 【0183】

## (ステップ2)

中間体1-1、1.1等量の4-ブチルフェニルボロン酸(試薬1-3)、5%ビス(ジベンジリデンアセトン)パラジウム(0)、10%2-ジシクロヘキシルホスフィノ-2',6'-ジメトキシビフェニル、6等量のリン酸カリウム、を1,2-ジメトキシエタンと水の10:1の混合溶媒中で加熱する。これを抽出、濃縮した後シリカゲルクロマトグラフィーで精製することで、中間体1-2を得る。

## 【0184】

## (ステップ3)

次に中間体1-2を塩化メチレン中、0℃に冷却し、三臭化ホウ素の1M塩化メチレン溶液を滴下漏斗で滴下し、1時間0℃で攪拌する。それから室温に戻し1時間攪拌ののち

40

50

水を加えて抽出、濃縮し、シリカゲルクロマトグラフィーで生成することで、中間体 1 - 3 を得る。

【 0 1 8 5 】

(ステップ 4 )

最後に得られた中間体 1 - 3 と 3 , 4 - ジヒドロキシ - 3 - シクロブテン - 1 , 2 - ジオンをトルエンとブタノールの 1 : 1 混合溶媒で 6 時間加熱する。冷却後、落ちてきた緑色結晶をろ取することで化合物 ( 1 a ) - 1 を得る。化合物の構造は質量分析 ( MS ) と <sup>1</sup> H - NMR により確認できる。図 1 に化合物 ( 1 a ) - 1 の <sup>1</sup> H - NMR スペクトル ( 4 0 0 MHz、測定溶媒 C D C l 3 ) を示す。

【 0 1 8 6 】

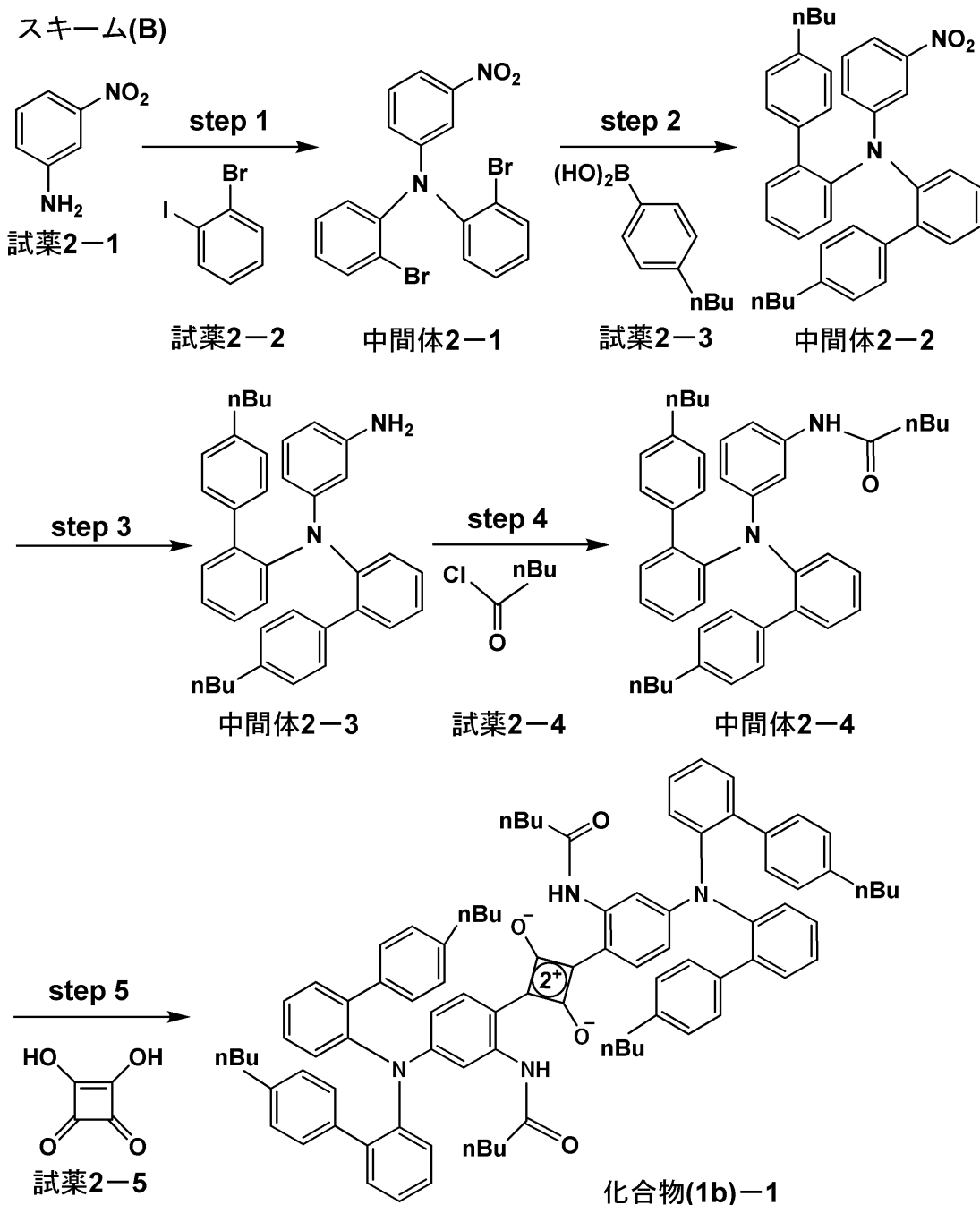
< 例示化合物 ( 1 b ) - 1 の合成 >

化合物 ( 1 b ) - 1 は、例えば、下記スキーム ( B ) により合成することができる。

【 0 1 8 7 】

【 化 4 3 】

スキーム(B)



10

20

30

40

50

## 【0188】

## (ステップ1)

3 - ニトロアニリン (試薬 2 - 1)、1 - ブロモ - 2 - ヨードベンゼン (試薬 2 - 2)、トリス (ジベンジリデンアセトン) ジパラジウム (0)、トリス - tert - ブチルホスホニウムテトラフルオロボレート、tert - ブトキシナトリウム、キシレン 30 mL 中で還流する。これを抽出、濃縮した後シリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製することで、中間体 2 - 1 を得る。

## 【0189】

## (ステップ2)

中間体 2 - 1、4 - ブチルフェニルボロン酸 (試薬 2 - 3)、ビス (ジベンジリデンアセトン) パラジウム (0)、2 - ジシクロヘキシルホスフィノ - 2', 6' - ジメトキシピフェニル、リン酸カリウム、を 1, 2 - ジメトキシエタンと水の 4 : 1 の混合溶媒中で加熱する。これを抽出、濃縮した後シリカゲルクロマトグラフィーで精製することで、中間体 2 - 2 を得る。

10

## 【0190】

## (ステップ3)

次に中間体 2 - 2 のエタノール-テトラヒドロフラン 1 : 1 混合溶媒中、Pd - C (10%) 触媒を添加し、水素による接触還元を行う。6 時間後反応が完了したことを確認し、セライト濾過で Pd - C を除去したものを濃縮し、中間体 2 - 3 を得る。

## 【0191】

## (ステップ4)

次にこの中間体 2 - 3 と塩化バレリル (試薬 2 - 4) を反応させ、中間体 2 - 4 を得る。

20

## 【0192】

## (ステップ5)

最後に得られた中間体 2 - 4 と 3, 4 - ジヒドロキシ - 3 - シクロブテン - 1, 2 - ジオン (試薬 2 - 5) をトルエン-ブタノール 1 : 1 混合溶媒で 6 時間加熱する。冷却後、抽出し、濃縮した後シリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製することで、化合物 (1b) - 1 を得る。化合物の構造は MS と <sup>1</sup>H - NMR により確認できる。

## 【0193】

< 例示化合物 (1c) - 1 の合成 >

30

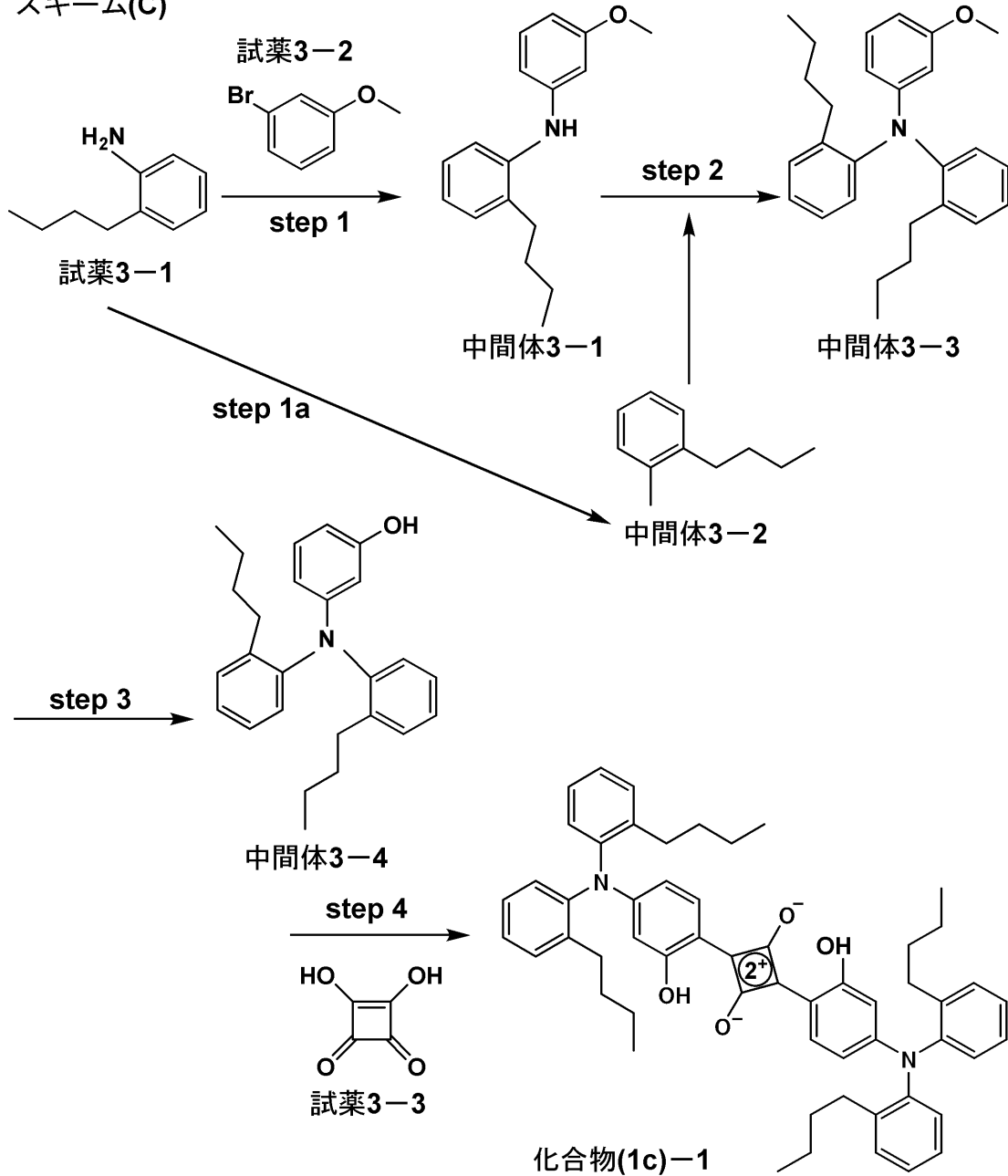
化合物 (1c) - 1 は、例えば、下記スキーム (C) により合成することができる。

## 【0194】

40

50

【化 4 4】  
スキーム(C)



10

20

30

【0195】  
(ステップ1)

2-ブチルアニリン(試薬3-1)、3-ブロモアニソール(試薬3-2)2.1等量、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0)0.05等量、トリス-tert-ブチルホスホニウムテトラフルオロボレート0.15等量、tert-ブトキシナトリウム1.5等量、トルエン20mL中において100で6時間攪拌する。これを抽出、濃縮した後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーで生成することで、中間体3-1を得る。

40

【0196】  
(ステップ1a)

また別に、試薬3-1に対し、p-トルエンスルホン酸を3等量アセトニトリル50mLに溶解し、0に冷却し、亜硝酸ナトリウム2等量及びヨウ化カリウム2.5等量の水20mLに溶解した溶液を30分かけて滴下し、滴下後、室温で1時間攪拌する。これを抽出、シリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製することで、中間体3-2を得る。

50

## 【0197】

## (ステップ2)

中間体3-1に対して、中間体3-2を1.3等量、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0)0.03等量、トリス-tert-ブチルホスホニウムテトラフルオロボレート0.1等量、tert-ブトキシナトリウム1.5等量、キシレン30mL中で135で16時間反応させる。これを抽出、濃縮した後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーで生成することで、中間体3-3を得る。

## 【0198】

## (ステップ3)

中間体3-3を脱水塩化メチレン30mLに溶解し0に冷却したものに三臭化ホウ素の塩化メチレン溶液(1M)を2等量滴下し、滴下後室温で8時間攪拌する。これを抽出し、濃縮した後シリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製することで、中間体3-4を得る。

10

## 【0199】

## (ステップ4)

最後に得られた中間体3-4と3,4-ジヒドロキシ-3-シクロブテン-1,2-ジオン(試薬3-3)0.4等量とをトルエン-ブタノール1:2混合溶媒中115で16時間加熱する。冷却後、抽出し、濃縮した後シリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製することで、化合物(1c)-1を得る。化合物の構造はMSと<sup>1</sup>H-NMRにより確認できる。図2に化合物(1c)-1の<sup>1</sup>H-NMRスペクトル(400MHz、測定溶媒CDCl<sub>3</sub>)を示す。

20

## 【0200】

## &lt;例示化合物(1d)-1の合成&gt;

化合物(1d)-1は、例えば、下記スキーム(D)により合成することができる。

## 【0201】

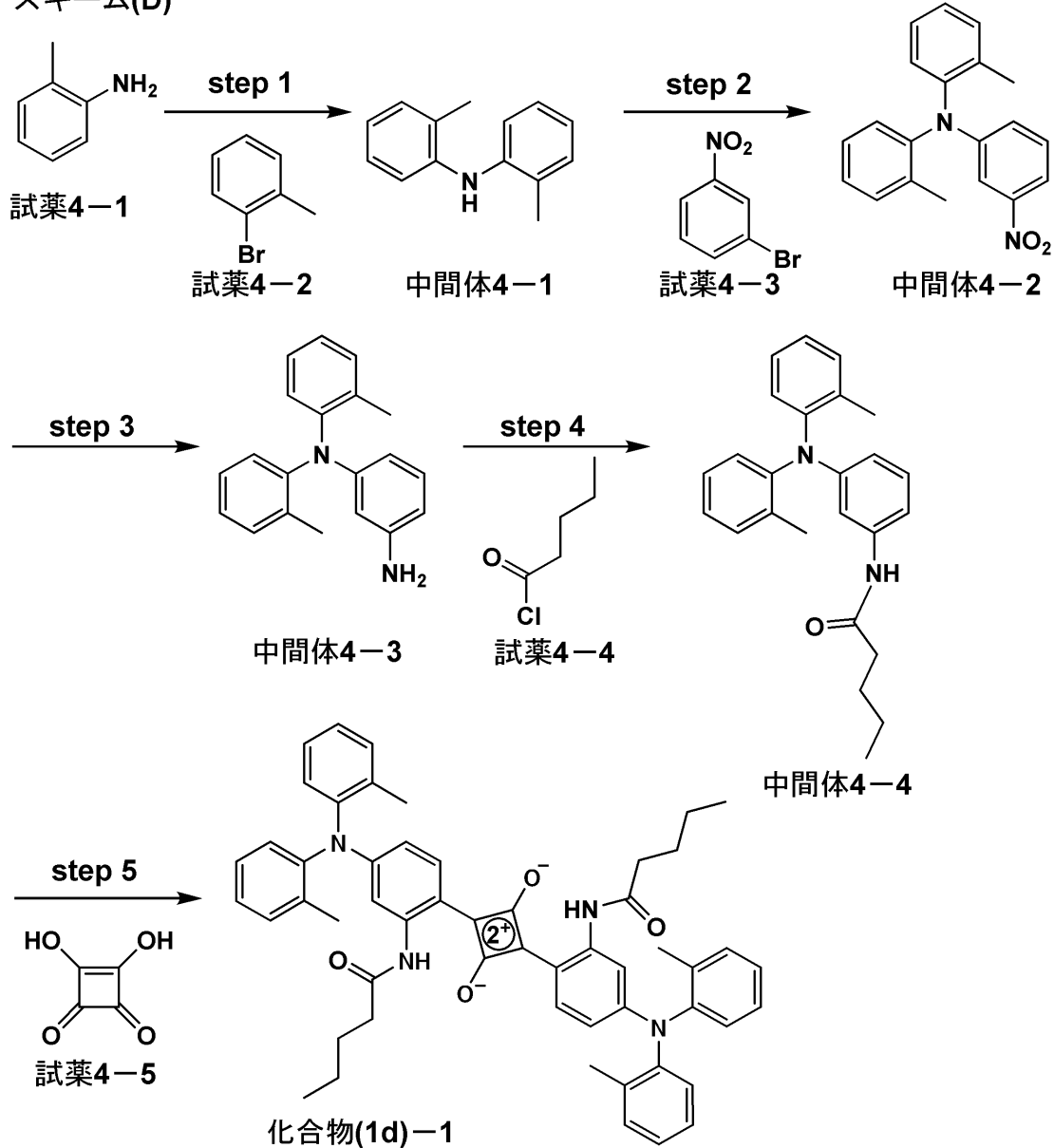
30

40

50

## 【化45】

## スキーム(D)



10

20

30

## 【0202】

## (ステップ1)

o-トルイジン(試薬4-1)に対して、2-ブロモトルエン(試薬4-2)1等量、[1,1'-ビス(ジフェニルホスフィノ)フェロセン]パラジウム(II)ジクロライド・塩化メチレン付加物0.03等量、tert-ブトキシナトリウム2等量、トルエン200mL中で100℃で6時間反応させる。これを抽出、濃縮した後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーで生成することで、中間体4-1を得る。

40

## 【0203】

## (ステップ2)

中間体4-1に対して、3-プロモニトロベンゼン(試薬4-3)1.2等量、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0)0.03等量、トリス-tert-ブチルホスホニウムテトラフルオロボレート0.05等量、tert-ブトキシナトリウム2等量をキシレン150mL中で130℃で16時間反応させる。これを抽出、濃縮した後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーで生成することで、中間体4-2を得る。

## 【0204】

## (ステップ3)

50

次にこの中間体 4 - 2 を酢酸エチル 250 mL に溶解し、Pd - C ( 10 % ) 触媒 5 g 存在下水素による接触還元反応を室温で 16 時間行う。セライト濾過で Pd - C を除去したものを濃縮し、中間体 4 - 3 を得る。

【 0 2 0 5 】

(ステップ 4)

次にこの中間体 4 - 3 を塩化メチレン 150 mL に溶解し、これにトリエチルアミン 1.5 等量を加え、0 に冷却化、塩化バレリル ( 試薬 4 - 4 ) 1.2 等量を加えたのち室温で 16 時間攪拌する。これを抽出、濃縮後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、中間体 4 - 4 を得る。

【 0 2 0 6 】

(ステップ 5)

最後に得られた中間体 4 - 4 と 3, 4 - ジヒドロキシ - 3 - シクロブテン - 1, 2 - ジオン ( 試薬 4 - 5 ) をトルエン-ブタノール 1 : 1 混合溶媒で 6 時間加熱する。冷却後、抽出し、濃縮した後シリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製することで、化合物 ( 1 d ) - 1 を得る。化合物の構造は MS と <sup>1</sup>H - NMR により確認できる。図 3 に化合物 ( 1 d ) - 1 の <sup>1</sup>H - NMR スペクトル ( 400 MHz、測定溶媒 CDCl<sub>3</sub> ) を示す。

【 0 2 0 7 】

< 化合物 ( T ) の光学特性 >

化合物 ( T ) は、赤色光を吸収し近赤外光を蛍光発光する化合物である。化合物 ( T ) のうちでも、該光学特性の点から化合物 ( 1 ) が好ましい。化合物 ( T ) の発光スペクトルは、以下の方法で確認することができる。

【 0 2 0 8 】

化合物 ( T ) をトルエン溶液中で  $10^{-6}$  M に調整し、常温 ( 300 K ) でこの試料の発光スペクトルを測定する。発光スペクトルの測定には、分光蛍光光度計 ( 日立ハイテクノス社製、F7000 ) を用いる。

【 0 2 0 9 】

化合物 ( T ) は、得られる発光スペクトルにおいて、極大発光波長 ( 発光強度が最大となる波長 ; 「発光ピーク波長」ともいう ) が 700 nm を超える蛍光発光を示す近赤外発光化合物である。化合物 ( T ) における発光ピーク波長は、700 nm 以上が好ましく、710 nm 以上がより好ましい。

【 0 2 1 0 】

吸光ピーク波長は、化合物 ( T ) をトルエン溶液中で  $10^{-6}$  M に調整し、常温 ( 300 K ) でこの試料の吸光スペクトルを測定する。吸光スペクトルの測定には、分光光度計日立ハイテクノス社製、F7000 ) を用いる。

【 0 2 1 1 】

また、化合物 ( T ) をトルエン等に溶解させた溶液の発光量子収率や、マトリックス材料に分散させた薄膜の発光量子収率は、例えば、以下の方法で測定し評価に用いることができる。

【 0 2 1 2 】

発光量子収率 ( % ) は、吸収された光子数と放出された光子数の割合で表される。励起された分子の全てが蛍光によって基底状態に戻れば、発光量子収率 ( % ) は 100 % となるが、無輻射失活が生じると 100 % とはならない。

【 0 2 1 3 】

無輻射失活とは、蛍光を発しないで基底状態に戻る遷移で、項間交差による三重項状態への緩和の他、電子状態のエネルギーが振動エネルギーなどに転化して最終的に熱エネルギーになる内部転換や、他の分子にエネルギーを移すエネルギー移動などがある。

【 0 2 1 4 】

励起状態にある分子の蛍光遷移と無輻射遷移の速度定数をそれぞれ  $K_f$  と  $K_{nr}$  とおくと、発光量子収率 ( % ) は、以下の式で表される。

$$(\%) = (K_f / (K_f + K_{nr})) \times 100$$

10

20

30

40

50

## 【0215】

したがって、発光量子収率を向上させるためには、励起状態にある分子の無輻射失活を抑えることが必要である。

## 【0216】

## 〔発光部材〕

本発明の発光部材は、上記化合物（T）を含有することで近赤外光の長波長領域に発光ピークを有するとともに、高い発光量子収率を達成できる。化合物（T）のうちでも、該特性をより高いレベルで得られる点から化合物（1）が好ましい。本発明の発光部材としては、発光性薄膜、発光性粒子等が挙げられる。また、発光性薄膜は波長変換膜として用いることができる。

10

## 【0217】

本発明の発光部材は、例えば、新たなタイプの蛍光プローブ用色素として生物学及び医学における標識体として、バイオイメージに利用することができる。また、励起した電子が、基底状態へ戻る際に余分なエネルギーとして蛍光を放射する化合物（T）は、吸収と放出のエネルギーの違いから波長変換能を有しており、色変換フィルターとして、染料、顔料、光学フィルター、農業用フィルム等に用いることもできる。

## 【0218】

## 《発光性薄膜》

本発明の発光部材の実施形態である発光性薄膜は、化合物（T）を含有することを特徴とする。発光性薄膜は、化合物（T）に、製膜安定性等のためにマトリックス材料を加えた組成物、又はこれにさらに溶媒を加えた組成物を薄膜状に形成することにより作製することができる。

20

## 【0219】

マトリックス材料としては、（メタ）アクリレート系樹脂、ポリエステル系樹脂、ポリアミド系樹脂、ポリイミド系樹脂、ポリスチレン系樹脂、ポリエポキシ系樹脂、ポリエステル系樹脂、アミノ系樹脂、フッ素系樹脂、フェノール系樹脂、ポリウレタン系樹脂、ポリエチレン系樹脂、ポリプロピレン系樹脂、ポリ塩化ビニル系樹脂、ポリビニルアルコール系樹脂、ポリエーテル系樹脂、ポリエーテルケトン系樹脂、ポリフェニレンスルフィド樹脂、ポリカーボネート系樹脂、アラミド樹脂等が挙げられるが、好ましくはポリスチレン系樹脂、ポリエチレン系樹脂、ポリプロピレン系樹脂、ポリ塩化ビニル系樹脂等である。また、これらの共重合体も同様に好ましい。

30

## 【0220】

（メタ）アクリレート系樹脂とは、種々のメタクリレート系モノマー、又はアクリレート系モノマーを単独重合、又は共重合することにより合成され、モノマー種及びモノマー組成比を種々変えることによって、望みの（メタ）アクリレート系樹脂を得ることができる。また本発明においては、（メタ）アクリレート系モノマーと一緒に（メタ）アクリレート系モノマー以外の不飽和二重結合を有する共重合可能なモノマーとともに共重合しても使用可能であり、さらに本発明においては、ポリ（メタ）アクリレート系樹脂と一緒に他の複数の樹脂を混合しても使用可能である。

## 【0221】

本発明において用いられる（メタ）アクリレート系樹脂を形成するモノマー成分としては、例えば、（メタ）アクリル酸、メチル（メタ）アクリレート、エチル（メタ）アクリレート、プロピル（メタ）アクリレート、ブチル（メタ）アクリレート、イソプロピル（メタ）アクリレート、イソブチル（メタ）アクリレート、t-ブチル（メタ）アクリレート、ステアрил（メタ）アクリレート、2-ヒドロキシエチル（メタ）アクリレート、アセトアセトキシエチル（メタ）アクリレート、ジメチルアミノエチル（メタ）アクリレート、2-ヒドロキシプロピル（メタ）アクリレート、ジ（エチレングリコール）エチルエーテル（メタ）アクリレート、エチレングリコールメチルエーテル（メタ）アクリレート、イソボニル（メタ）アクリレート、塩化エチルトリメチルアンモニウム（メタ）アクリレート、トリフルオロエチル（メタ）アクリレート、オクタフルオロペンチル（メタ）ア

40

50

クリレート、2 - アセトアミドメチル (メタ) アクリレート、2 - メトキシエチル (メタ) アクリレート、2 - ジメチルアミノエチル (メタ) アクリレート、3 - トリメトキシシランプロピル (メタ) アクリレート、ベンジル (メタ) アクリレート、トリデシル (メタ) アクリレート、4 - ヒドロキシブチル (メタ) アクリレート、テトラヒドロフルフリル (メタ) アクリレート、ドデシル (メタ) アクリレート、オクタデシル (メタ) アクリレート、2 - ジエチルアミノエチル (メタ) アクリレート、2 - エチルヘキシル (メタ) アクリレート、シクロヘキシル (メタ) アクリレート、フェニル (メタ) アクリレート、グリシジル (メタ) アクリレート等が挙げられるが、好ましくは (メタ) アクリル酸、メチル (メタ) アクリレート、エチル (メタ) アクリレート、プロピル (メタ) アクリレート、ブチル (メタ) アクリレート、ステアリル (メタ) アクリレート、2 - ヒドロキシエチル (メタ) アクリレート、アセトアセトキシエチル (メタ) アクリレート、ベンジル (メタ) アクリレート、トリデシル (メタ) アクリレート、ドデシル (メタ) アクリレート、2 - エチルヘキシル (メタ) アクリレートである。

10

#### 【0222】

ポリスチレン系樹脂とは、スチレンモノマーの単独重合体、又はスチレンモノマーと共重合可能な他の不飽和二重結合を有するモノマーを共重合したランダム共重合体、ブロック共重合体、グラフト共重合体が挙げられる。さらに、かかるポリマーに他のポリマーを配合したブレンド物やポリマーアロイも含まれる。前記スチレンモノマーの例としては、スチレン、*p*-メチルスチレン、*m*-メチルスチレン、*o*-メチルスチレン、*p*-メチルスチレン、*o*-メチルスチレン、*m*-メチルスチレン、*p*-メチルスチレン、等の核アルキル置換スチレン、*o*-クロルスチレン、*m*-クロルスチレン、*p*-クロルスチレン、*p*-ブロモスチレン、ジクロルスチレン、ジブロモスチレン、トリクロルスチレン、トリブロモスチレン等の核ハロゲン化スチレン等が挙げられるが、この中でスチレン、*p*-メチルスチレンが好ましい。

20

#### 【0223】

これらを単独重合又は共重合することによって本発明で用いられる樹脂としては、例えば、ベンジルメタクリレート/エチルアクリレート、又はブチルアクリレート等の共重合体樹脂、メチルメタクリレート/2 - エチルヘキシルメタクリレート等の共重合体樹脂、メチルメタクリレート/メタクリル酸/ステアリルメタクリレート/アセトアセトキシエチルメタクリレートの共重合体樹脂、スチレン/アセトアセトキシエチルメタクリレート/ステアリルメタクリレートの共重合体樹脂、スチレン/2 - ヒドロキシエチルメタクリレート/ステアリルメタクリレートの共重合体樹脂、及び、2 - エチルヘキシルメタクリレート/2 - ヒドロキシエチルメタクリレート等の共重合体樹脂等が挙げられる。

30

#### 【0224】

なお、上記樹脂の重量平均分子量は、1000 ~ 1000000の範囲内にあることが好ましく、5000 ~ 800000であることがより好ましく、10000 ~ 600000であることがさらに好ましい。

#### 【0225】

発光性薄膜において、化合物(T)は1種を単独で用いてもよく、2種以上を組み合わせ用いてもよい。発光性薄膜における化合物(T)の含有量は、上記マトリックス材料100質量部に対する好ましい下限が0.001質量部、好ましい上限が50質量部である。化合物(T)の含有量がこの範囲内であると、発光性薄膜は近赤外光の長波長領域で発光するとともに、高い発光量子収率を達成できる。化合物(T)の含有量のより好ましい下限は0.01質量部、より好ましい上限は10質量部、さらに好ましい下限は0.05質量部、さらに好ましい上限は8質量部、特に好ましい下限は0.1質量部、特に好ましい上限は5質量部である。発光性薄膜は、厚さ0.1nm ~ 1mmの範囲内で適宜用いることができる。

40

#### 【0226】

##### 《発光性粒子》

本発明の発光部材の実施形態である発光性粒子は、化合物(T)を含有することを特徴

50

とする。発光性粒子は、化合物(T)を粒子表面に吸着させた発光性粒子であっても、化合物(T)を内包した発光性粒子であってもよい。

【0227】

例えば、ポリマー粒子分散液中に化合物(T)を凝集させて発光性粒子を作製することができる。また、ポリマー粒子を溶媒に浸漬させた際に、該粒子が溶媒を吸収して体積が膨張する膨潤性ポリマーを用いて、化合物(T)を内包した発光性粒子であってもよい。

【0228】

ポリマー粒子は、市販品を用いてもよく、従来公知の方法で合成したものをを用いてもよい。前記従来公知の方法としては、特に制限されないが、分散重合法、懸濁重合法、乳化重合法等が挙げられ、乳化重合法が好ましい。ポリマーとしては、具体的にはメラミン樹脂、ポリスチレン樹脂などの熱可塑性樹脂が好ましい。ポリマーの原料となるモノマーは、上記発光性薄膜においてマトリックス材料のモノマーとして挙げた各種モノマーを使用することができる。

10

【0229】

また、ポリマー粒子分散液中に化合物(T)を凝集させる場合の溶媒は特に制限されない。公知の溶媒が使用できる。

【0230】

前記ポリマー粒子の体積平均粒子径は、0.01~50 $\mu$ mの範囲内であることが好ましく、0.02~1 $\mu$ mであることがより好ましく、0.04~0.5 $\mu$ mであることがさらに好ましい。

20

【0231】

体積平均粒子径が前記範囲にあることで、得られる発光性粒子を様々な用途に適用できる。前記体積平均粒子径は、具体的には、レーザー回折散乱光粒度分布測定装置、LS13320型にて測定することができる。

【0232】

前記ポリマー粒子の重量平均分子量は、1000~1000000の範囲内にあることが好ましく、5000~800000であることがより好ましく、10000~600000であることがさらに好ましい。

【0233】

発光性粒子に含まれるポリマー粒子は、1種でもよく、2種以上でもよいが、通常は、1種である。

30

【0234】

また、樹脂原料の溶液に化合物(T)を添加した後、重合反応を進行させることにより、発光性粒子を作製することもできる。例えば、母体となる樹脂としてメラミン樹脂のような熱硬化性樹脂を用いる場合、その樹脂の原料(モノマー又はオリゴマーないしプレポリマー、例えば、メラミンとホルムアルデヒドの縮合物であるメチロールメラミン)と、化合物(T)と、好ましくはさらに界面活性剤及び重合反応促進剤(酸など)とを含有する反応混合物を加熱し、乳化重合法によって重合反応を進行させることにより化合物(T)を内包した発光性粒子を作製することができる。

【0235】

また、母体となる樹脂としてスチレン系共重合体のような熱可塑性樹脂を用いる場合、その樹脂の原料と、化合物(T)と(樹脂の原料モノマーとして、あらかじめ化合物(T)を共有結合などで結合させたモノマーを用いるようにしてもよい)、重合開始剤(過酸化ベンゾイル、アゾビスイソブチロニトリルなど)を含有する反応混合物を加熱し、ラジカル重合法又はイオン重合法によって重合反応を進行させることにより、化合物(T)を内包した発光性粒子を作製することができる。

40

【0236】

その他、例えば、シリカを母体とし、その中に化合物(T)を内包させて発光粒子を作製することができる。この場合、無機半導体ナノ粒子、化合物(T)と、テトラエトキシシランのようなシリカ前駆体とが溶解している溶液を、エタノール及びアンモニアが溶解

50

している溶液に滴下し、シリカ前駆体を加水分解することにより作製することができる。

【0237】

発光性粒子において、化合物(T)は1種を単独で用いてもよく、2種以上を組み合わせ用いてもよい。発光性粒子における化合物(T)の含有量は、ポリマー粒子100質量部に対する好ましい下限が0.001質量部、好ましい上限が50質量部である。化合物(T)の含有量がこの範囲内であると、発光性薄膜は近赤外光の長波長領域で発光するとともに、高い発光量子収率を達成できる。化合物(T)の含有量のより好ましい下限は0.01質量部、より好ましい上限は10質量部、さらに好ましい下限は0.1質量部である。

【0238】

《波長変換膜及び赤外発光面光源》

発光部材としての上記発光性薄膜を波長変換膜として用いて赤外発光面光源を作製できる。波長変換膜は、化合物(T)を含有する発光性薄膜を有することで赤外光(近赤外光)を発光するため赤外発光面光源に適用することができる。波長変換膜は、上記発光性薄膜のみで構成されてもよく、他の層と積層された積層膜であってもよい。

【0239】

赤外発光面光源は、可視光を発光する面光源と、該面光源から発光された可視光、特に赤色光を近赤外光に変換する波長変換膜を備え、700nm超の赤外波長域に発光極大波長を有することが好ましい。

【0240】

図4に、化合物(T)を含有する発光性薄膜を備える波長変換膜を有する赤外発光面光源の基本的な構成例を示す。図4に示す赤外発光面光源1は、可視光を発光する面光源2、例えば、赤色発光(R)の有機EL素子上に、赤色発光(R)する面光源2の可視光を近赤外光(IR)に変換する波長変換膜3を配置した構成である。

【0241】

可視光(赤色)を発光する面光源は、少なくとも赤色発光の特性を備えた光源であり、好ましくは、均一発光させたときに輝度均一性が70%以上である面光源であり、具体的な面光源としては、有機EL素子であることが好ましい。

【0242】

赤外発光面光源1の形態としては、可視光(赤色)を発光する面光源2とは別途に製造した波長変換膜3を可視光(赤色)を発光する面光源2に重ねて用いた形態でもよい。あるいは、波長変換膜3を可視光(赤色)を発光する面光源2上に積層させた形態でもよい。

【0243】

波長変換膜3は、化合物(T)を含有する発光性薄膜の単層で構成されていてもよく、例えば、図5に示すような発光性薄膜を具備する積層構成であってもよい。図5に示す波長変換膜3は、化合物(T)を含有する発光性薄膜5を有し、該発光性薄膜5の一方の面に接着剤層6を介してガスバリアーフィルム4Bが張り合わされ、他方の面にはガスバリアーフィルム4Aが貼り合された構成である。

【0244】

赤外発光面光源1の厚さについては、用途に応じて適宜決定されるが、0.1~1000μmであることがフレキシブル性及び小型化の観点で好ましく、より好ましくは1~500μmの範囲内である。このような、赤外発光面光源は、生体計測装置及び生体認証装置に好適に用いられる。

【0245】

[光電変換部材]

本発明の光電変換部材は化合物(T)を含有する。該光電変換部材は、近赤外光電変換素子の部材として使用できる。

【0246】

本発明の光電変換部材が適用される近赤外光電変換素子は、対向する一对の電極間に光電変換部を備えた素子であって、電極の上方から光が光電変換部に入射されるものである

10

20

30

40

50

。光電変換部は前記の入射光に応じて電子と正孔を発生し、半導体により前記電荷に応じた信号が読み出され、光電変換部の吸収波長に応じた入射光量を示す素子である。光が入射しない側の電極には読み出しのためのトランジスタが接続される場合もある。

【0247】

このような近赤外光電変換素子において、化合物(T)を含有する光電変換部材は、上記光電変換部を構成する部材、具体的には、以下に説明する光電変換層として適用可能である。

【0248】

光電変換部は、光電変換層と、電子輸送層、正孔輸送層、電子ブロック層、正孔ブロック層等から成る群より選択される一種又は複数種の光電変換層以外の有機薄膜層とから成ることが多い。なお、光電変換層は、化合物(T)のみで構成されていてもよいが、化合物(T)以外に、公知の赤外吸収物質を含んでいてもよい。

10

【0249】

上記近赤外光電変換素子に用いられる電極膜は、後述する光電変換部に含まれる光電変換層が、正孔輸送性を有する場合や光電変換層以外の有機薄膜層が正孔輸送性を有する正孔輸送層である場合は、該光電変換層やその他の有機薄膜層から正孔を取り出してこれを捕集する役割を果たす。また、光電変換部に含まれる光電変換層が電子輸送性を有する場合や、有機薄膜層が電子輸送性を有する電子輸送層である場合は、該光電変換層やその他の有機薄膜層から電子を取り出して、これを吐出する役割を果たすものである。

【0250】

よって、電極膜として用い得る材料は、ある程度の導電性を有するものであれば特に限定されないが、隣接する光電変換層やその他の有機薄膜層との密着性や電子親和力、イオン化ポテンシャル、安定性等を考慮して選択することが好ましい。

20

【0251】

電極膜として用い得る材料としては、例えば、酸化錫(NESA)、酸化インジウム、酸化錫インジウム(ITO)及び酸化亜鉛インジウム(IZO)等の導電性金属酸化物；金、銀、白金、クロム、アルミニウム、鉄、コバルト、ニッケル及びタングステン等の金属；ヨウ化銅及び硫化銅等の無機導電性物質；ポリチオフェン、ポリピロール及びポリアニリン等の導電性ポリマー；炭素等が挙げられる。

【0252】

これらの材料は、必要により複数を混合して用いてもよいし、複数を2層以上に積層して用いてもよい。電極膜に用いる材料の導電性も、光電変換素子の受光を必要以上に妨げなければ特に限定されないが、光電変換素子の信号強度や、消費電力の観点から出来るだけ高いことが好ましい。例えばシート抵抗値が300 / 以下の導電性を有するITO膜であれば、電極膜として充分機能するが、数 / 程度の導電性を有するITO膜を備えた基板の市販品も入手可能となっていることから、この様な高い導電性を有する基板を使用することが望ましい。

30

【0253】

ITO膜(電極膜)の厚さは導電性を考慮して任意に選択することができるが、通常5乃至500nm、好ましくは10乃至300nm程度である。ITOなどの膜を形成する方法としては、従来公知の蒸着法、電子線ビーム法、スパッタリング法、化学反応法及び塗布法等が挙げられる。基板上に設けられたITO膜には必要に応じUV-オゾン処理やプラズマ処理等を施してもよい。

40

【0254】

電極膜のうち、少なくとも光が入射する側の何れか一方に用いられる透明電極膜の材料としては、ITO、IZO、SnO<sub>2</sub>、ATO(アンチモンドープ酸化スズ)、ZnO、AZO(Alドープ酸化亜鉛)、GZO(ガリウムドープ酸化亜鉛)、TiO<sub>2</sub>、FTO(フッ素ドープ酸化スズ)等が挙げられる。

【0255】

光電変換素子が有する光電変換部は、少なくとも光電変換層及び光電変換層以外の有機

50

薄膜層を含む。光電変換部を構成する光電変換層には一般的に有機半導体膜が用いられ、本発明の化合物( T )はこの有機半導体薄膜に含有される。その有機半導体膜は一層若しくは複数の層であってもよく、一層の場合は、P型有機半導体膜、N型有機半導体膜、又はそれらの混合膜(バルクヘテロ構造)が用いられる。一方、複数の層である場合は、2~10層程度であり、P型有機半導体膜、N型有機半導体膜、又はそれらの混合膜(バルクヘテロ構造)の何れかを積層した構造であり、層間にバッファ層が挿入されていてもよい。

【0256】

本発明に係る光電変換素子において、光電変換部を構成する光電変換層以外の有機薄膜層は、光電変換層以外の層、例えば、電子輸送層、正孔輸送層、電子ブロック層、正孔ブロック層、結晶化防止層又は層間接触改良層等としても用いられる。特に電子輸送層、正孔輸送層、電子ブロック層及び正孔ブロック層から成る群より選択される一種以上の薄膜層として用いることにより、弱い光エネルギーでも効率よく電気信号に変換する素子が得られるため好ましい。

10

【0257】

電子輸送層は、光電変換層で発生した電子を電極へ輸送する役割と、電子輸送先の電極から光電変換層に正孔が移動するのをブロックする役割とを果たす。正孔輸送層は、発生した正孔を光電変換層から電極へ輸送する役割と、正孔輸送先の電極から光電変換層に電子が移動するのをブロックする役割とを果たす。電子ブロック層は、電極から光電変換層への電子の移動を妨げ、光電変換層内での再結合を防ぎ、暗電流を低減する役割を果たす。正孔ブロック層は、電極から光電変換層への正孔の移動を妨げ、光電変換層内での再結合を防ぎ、暗電流を低減する機能を有する。

20

【0258】

図6に光電変換素子の代表的な素子構造を例示する。図6の態様例においては、11が絶縁部、12が一方の電極膜、13が電子ブロック層、14が光電変換層、15が正孔ブロック層、16が他方の電極、17が絶縁基材又は他の有機光電変換素子をそれぞれ表す。図中には読み出し用のトランジスタを記載していないが、12又は16の電極と接続されていればよく、さらには光電変換層14が透明であれば、光が入射する側とは反対側の電極の外側に成膜されていてもよい。有機光電変換素子への光の入射は、光電変換層14を除く構成要素が、光電変換層の主たる吸収波長の光を入射することを極度に阻害することがなければ、上部若しくは下部からの何れからでもよい。

30

【実施例】

【0259】

以下、実施例を挙げて本発明を具体的に説明するが、本発明はこれらに限定されるものではない。また、特記しない限り、「%」及び「部」は、それぞれ、「質量%」及び「質量部」を意味する。

【0260】

〔実施例1〕

化合物(1)において、化合物(3)、具体的には、化合物(1a)~化合物(1d)、及び化合物(4)~化合物(11)にそれぞれ分類される、以下に構造を示す各化合物を製造した。

40

【0261】

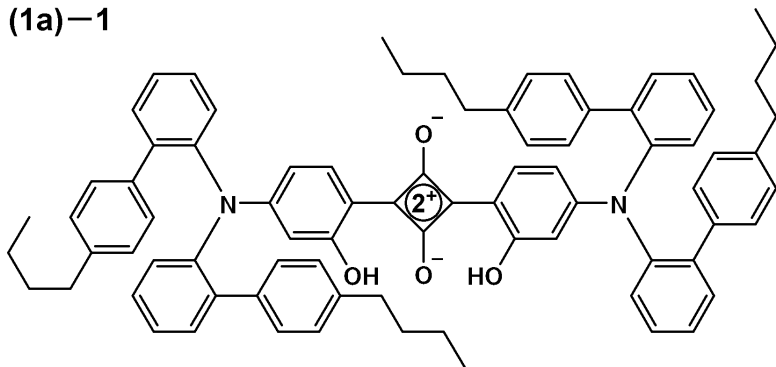
化合物(1a)に分類される化合物(1a)-1、化合物(1a)-12及び化合物(1a)-20について、上記スキーム(A)にしたがって製造し、MS及び<sup>1</sup>H-NMRにより構造を確認した。

【0262】

50

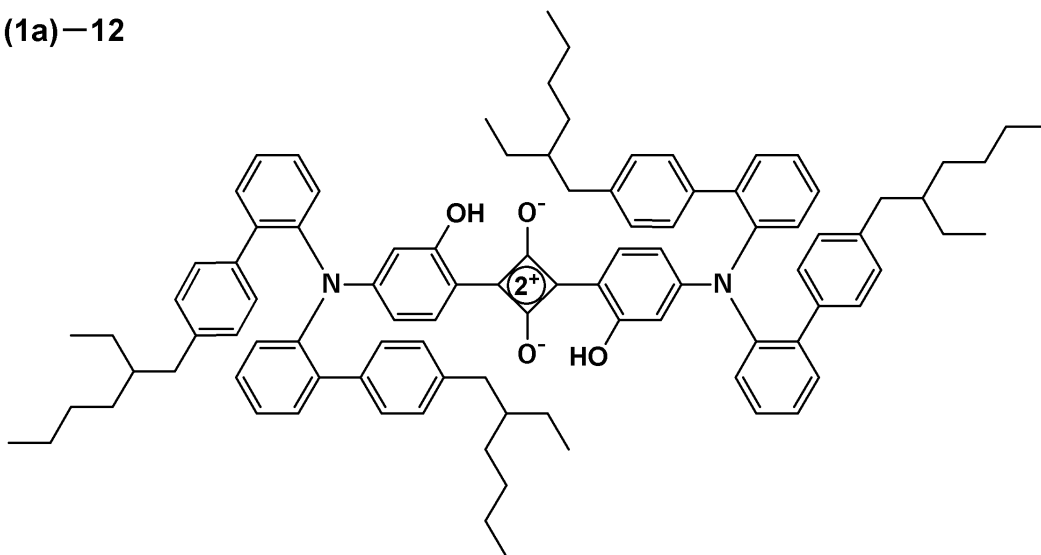
【化 4 6】

(1a)-1



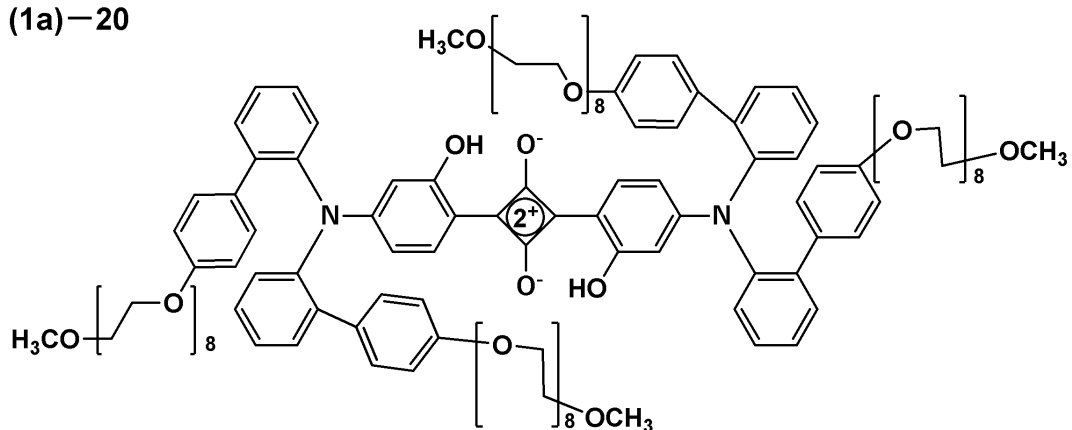
10

(1a)-12



20

(1a)-20



30

40

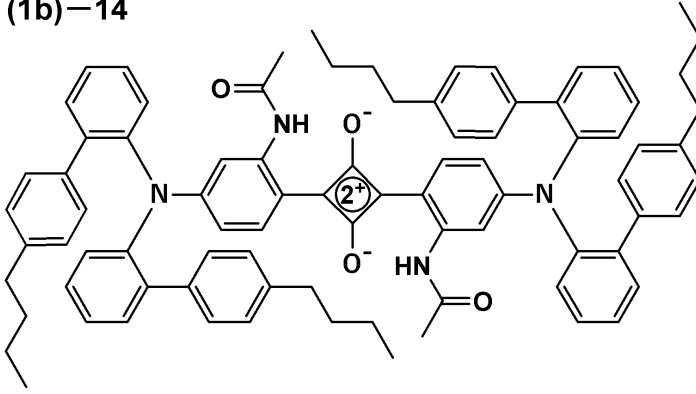
【 0 2 6 3】

化合物(1b)に分類される化合物(1b)-14について、上記スキーム(B)にしたがって製造し、MS及び<sup>1</sup>H-NMRにより構造を確認した。

【 0 2 6 4】

50

【化47】  
(1b)-14



10

【0265】

化合物(1c)に分類される化合物(1c)-9、化合物(1c)-12及び化合物(1c)-31について、上記スキーム(C)にしたがって製造し、MS及び $^1H$ -NMRにより構造を確認した。

【0266】

20

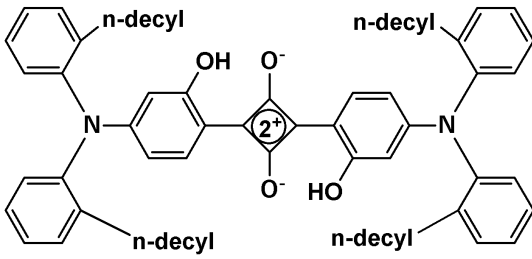
30

40

50

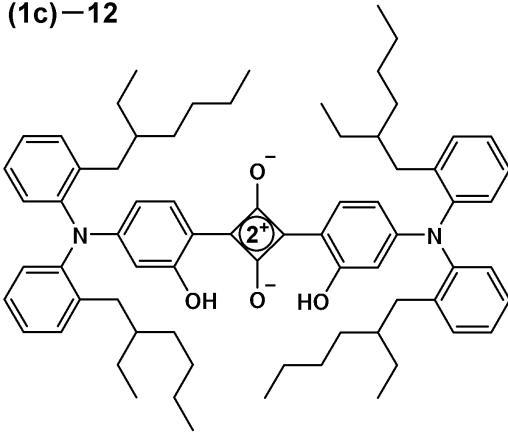
## 【化 4 8】

## (1c)-9



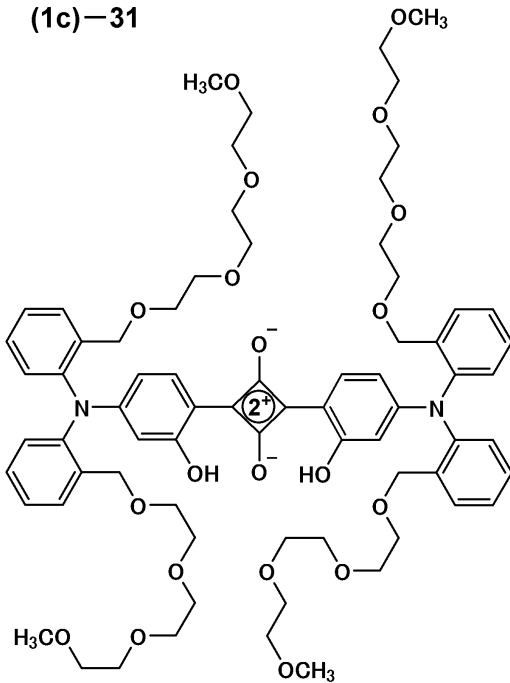
10

## (1c)-12



20

## (1c)-31



30

40

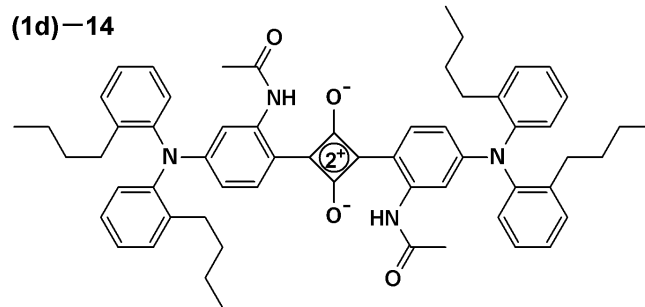
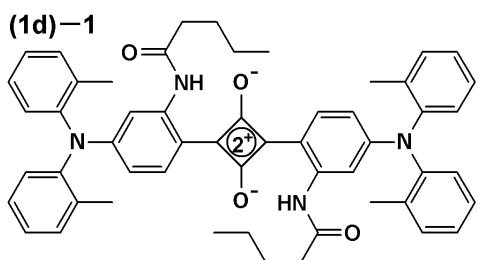
## 【 0 2 6 7】

化合物(1d)に分類される化合物(1d)-1、化合物(1d)-14、化合物(1d)-36、化合物(1d)-39及び化合物(1d)-40について、上記スキーム(D)にしたがって製造し、MS及び<sup>1</sup>H-NMRにより構造を確認した。

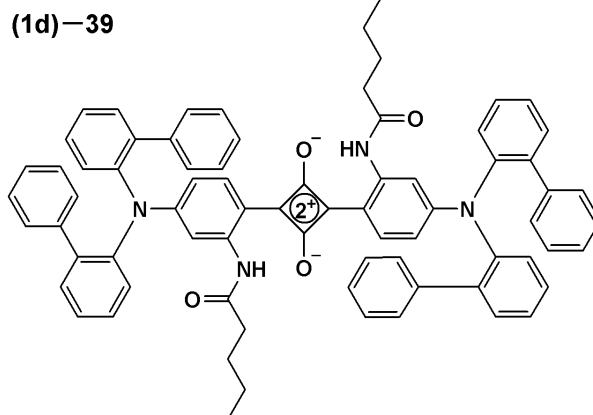
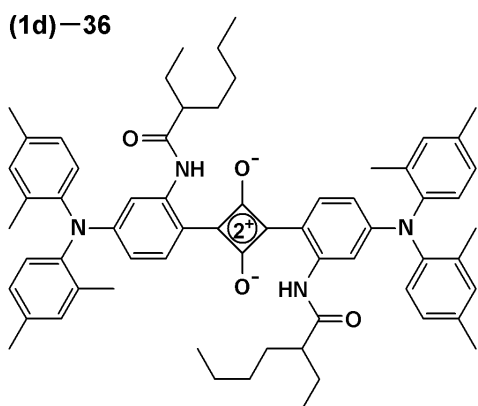
## 【 0 2 6 8】

50

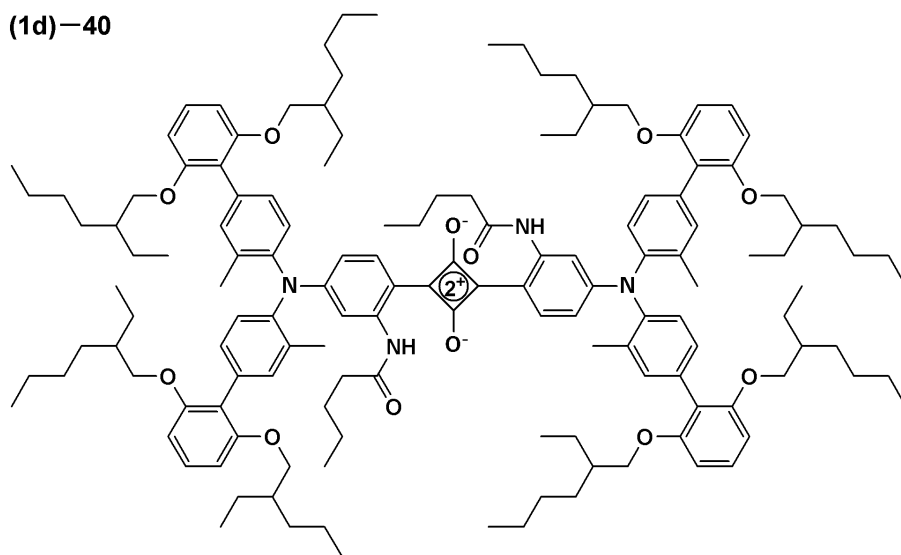
## 【化 4 9】



10



20



30

## 【 0 2 6 9】

化合物(4)については、化合物(4)-5、化合物(4)-6、化合物(4)-9及び化合物(4)-10を上記スキーム(A)~(D)に準ずる方法で製造し、MS及び<sup>1</sup>H-NMRにより構造を確認した。

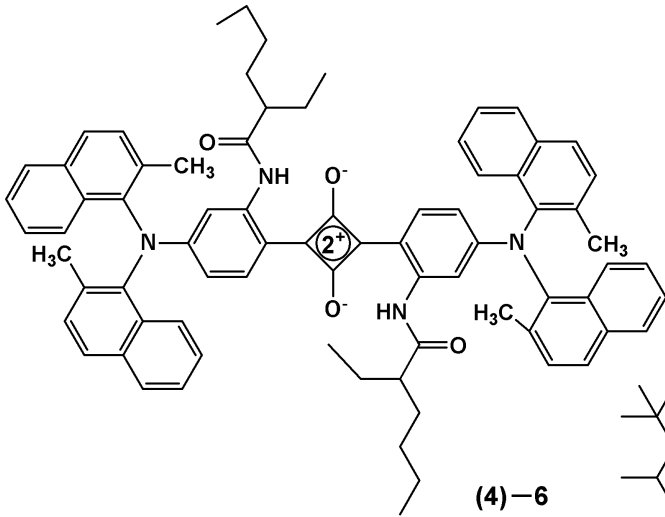
## 【 0 2 7 0】

40

50

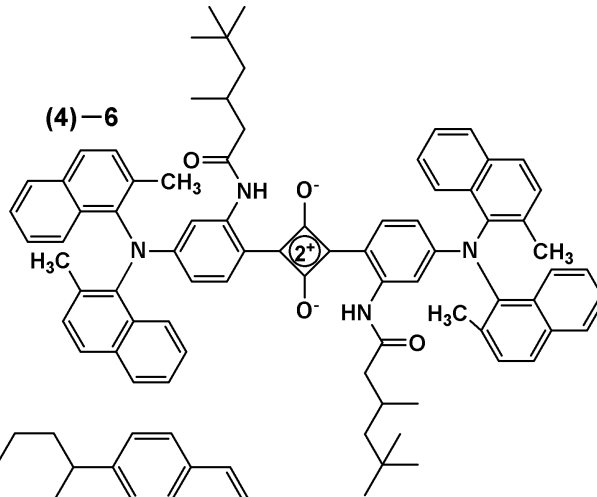
【化 5 0】

(4)-5



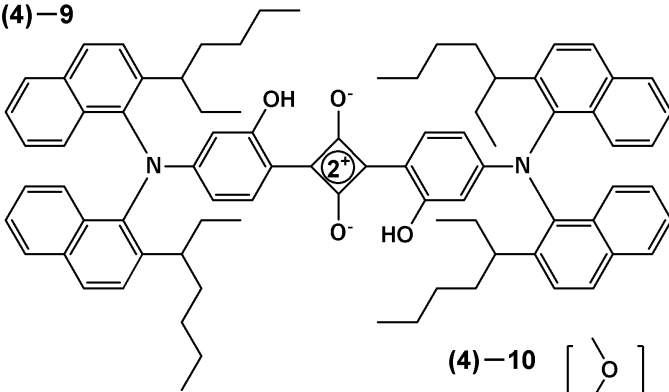
10

(4)-6



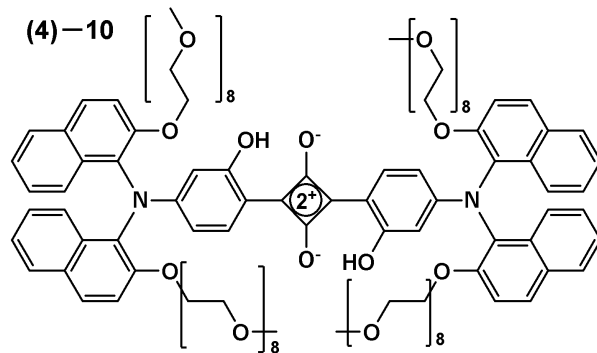
20

(4)-9



30

(4)-10



40

【 0 2 7 1】

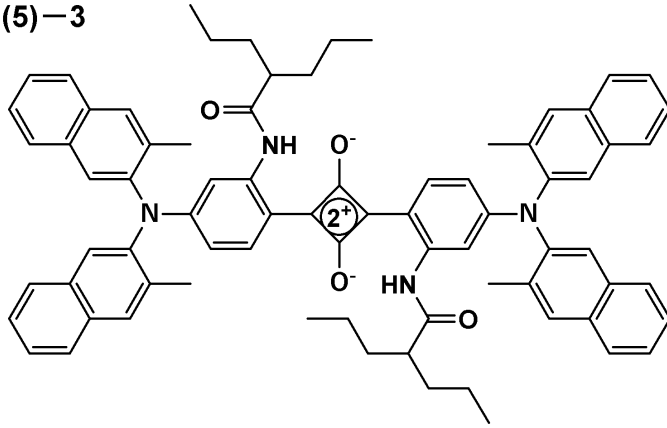
化合物 (5) については、化合物 (5) - 3、化合物 (5) - 4 及び化合物 (5) - 9 を上記スキーム (A) ~ (D) に準ずる方法で製造し、MS 及び  $^1H$ -NMR により構造を確認した。

【 0 2 7 2】

50

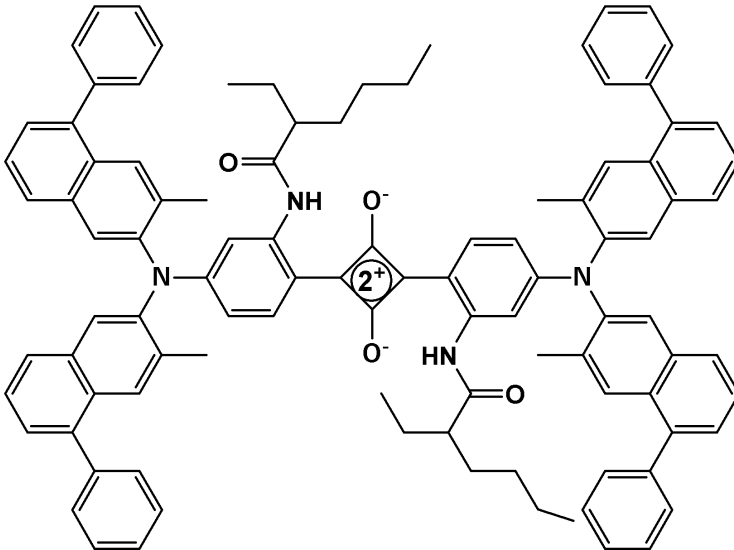
## 【化 5 1】

## (5)-3



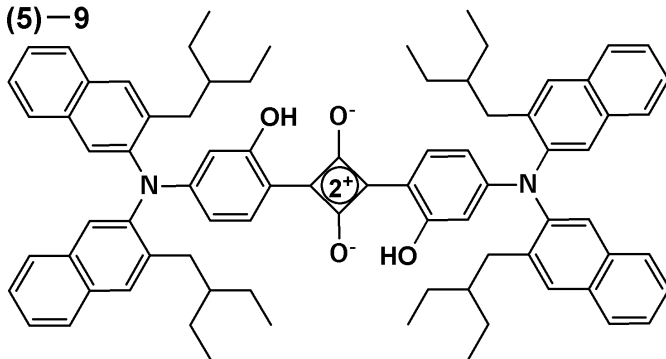
10

## (5)-4



20

## (5)-9



40

## 【 0 2 7 3】

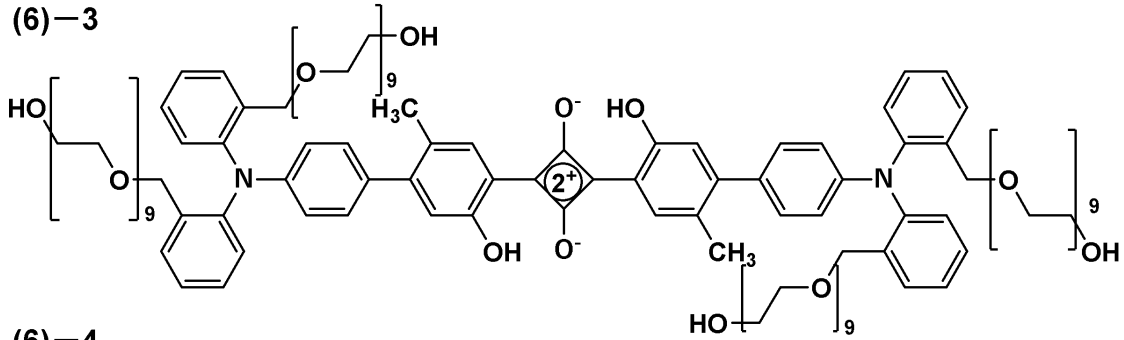
化合物(6)については、化合物(6)-3、化合物(6)-4及び化合物(6)-8を上記スキーム(A)~(D)に準ずる方法で製造し、MS及び<sup>1</sup>H-NMRにより構造を確認した。

## 【 0 2 7 4】

50

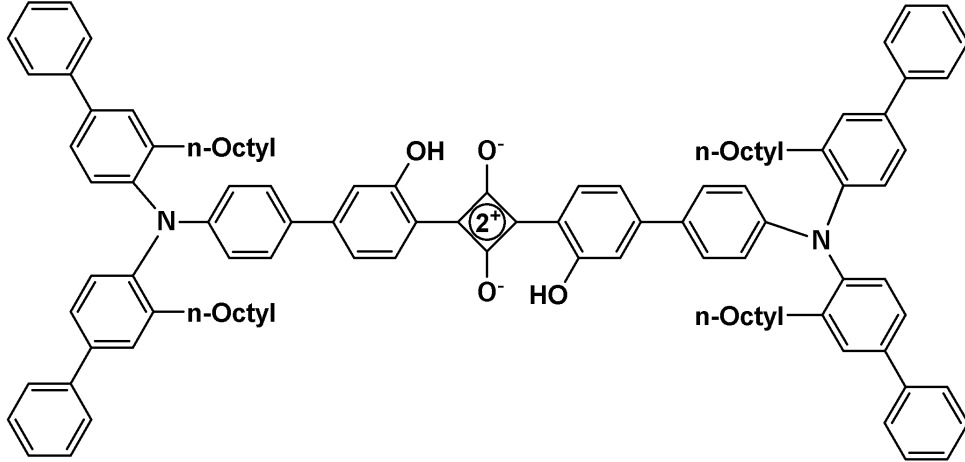
【化52】

(6)-3



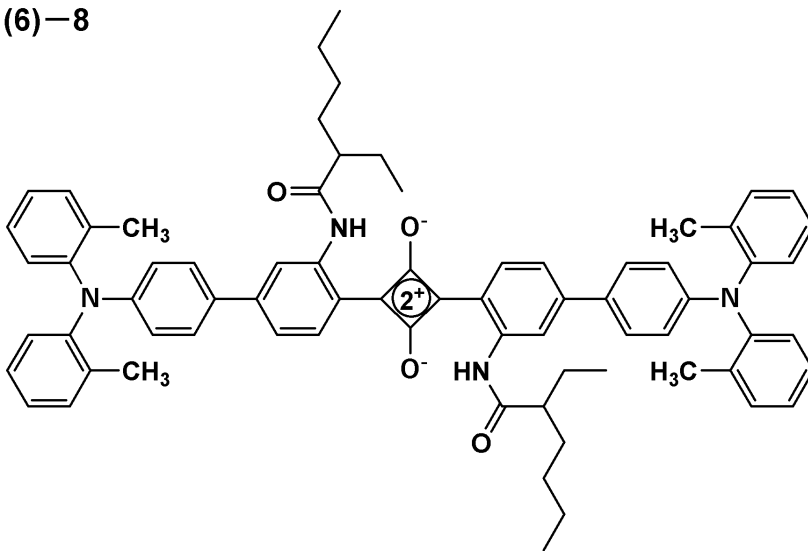
10

(6)-4



20

(6)-8



30

【0275】

化合物(7)については、化合物(7)-4、化合物(7)-5、化合物(7)-6及び化合物(7)-8を上記スキーム(A)~(D)に準ずる方法で製造し、MS及び<sup>1</sup>H-NMRにより構造を確認した。

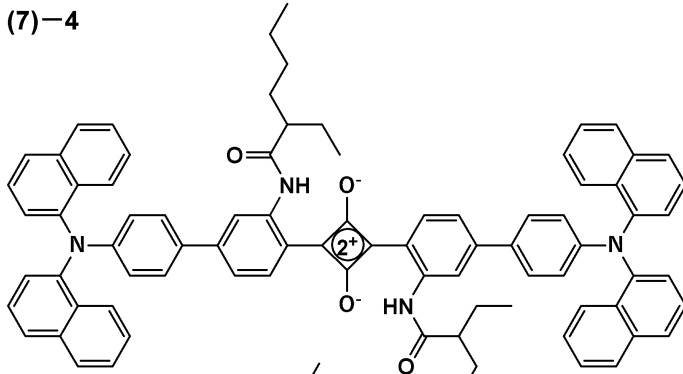
【0276】

40

50

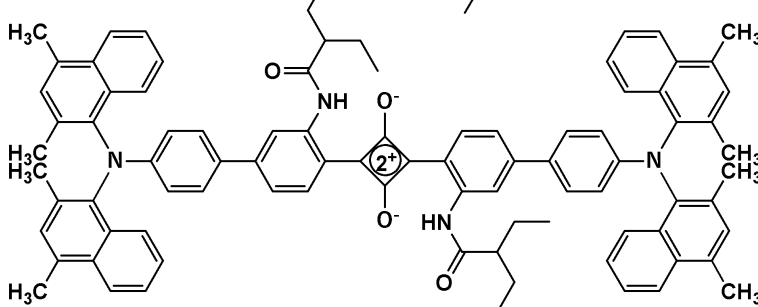
## 【化 5 3】

(7)-4



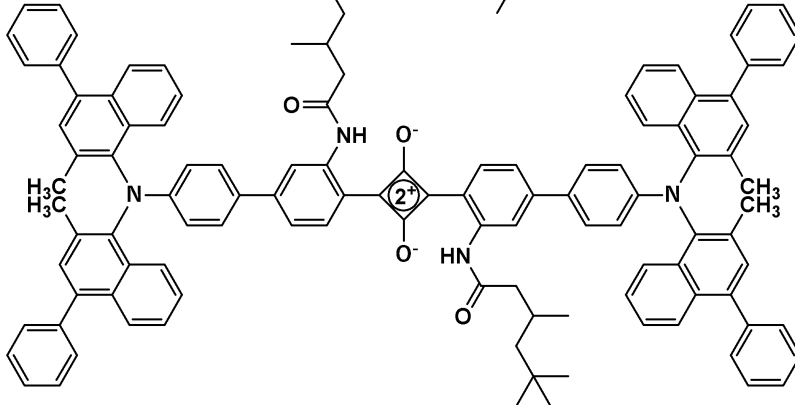
10

(7)-5



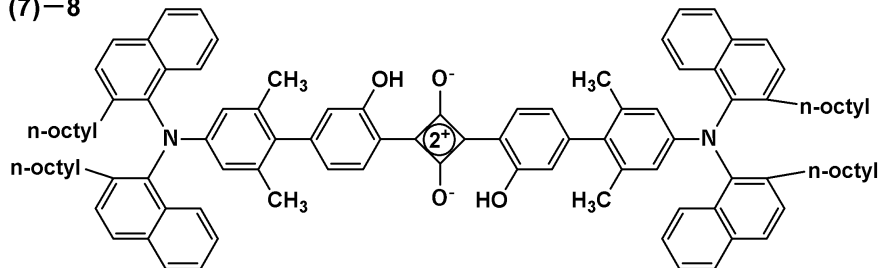
20

(7)-6



30

(7)-8



40

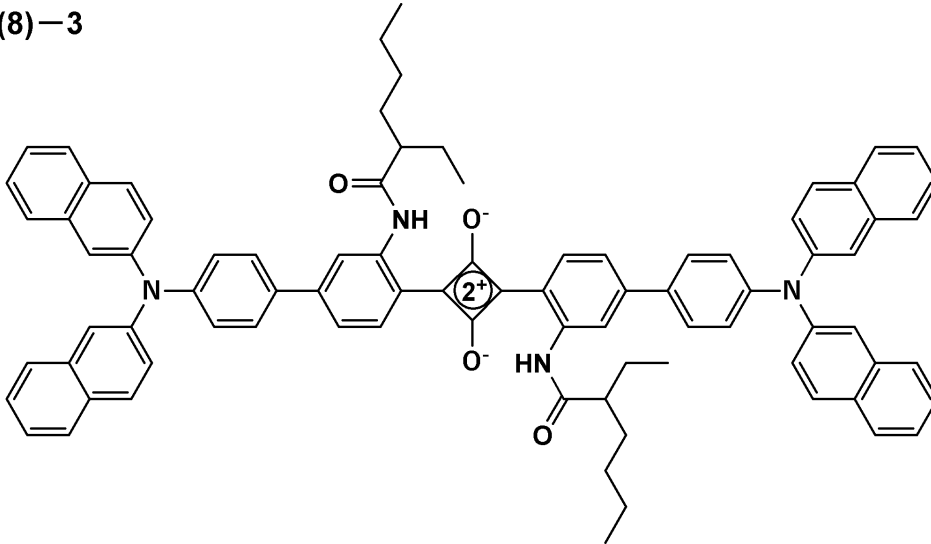
## 【 0 2 7 7 】

化合物(8)については、化合物(8)-3、化合物(8)-4及び化合物(8)-10を上記スキーム(A)~(D)に準ずる方法で製造し、MS及び<sup>1</sup>H-NMRにより構造を確認した。

## 【 0 2 7 8 】

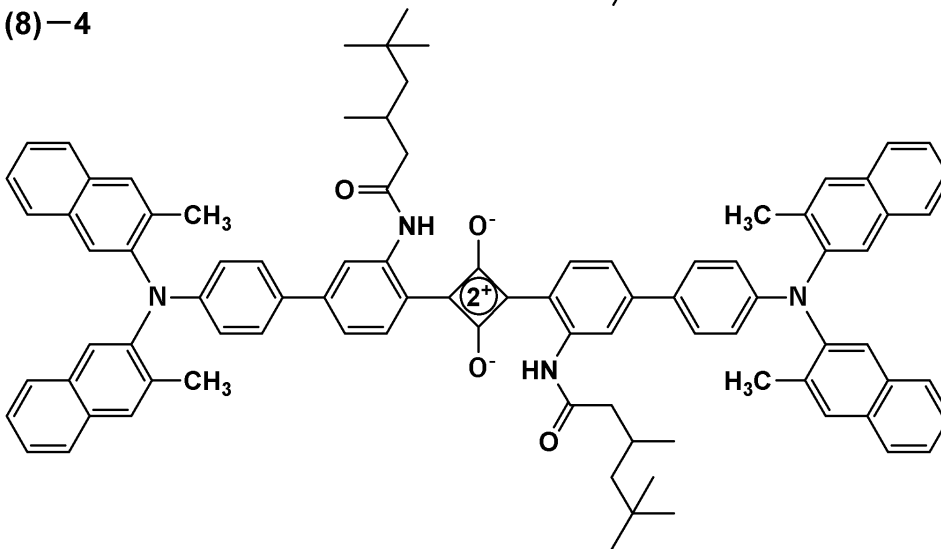
## 【化54】

## (8)-3



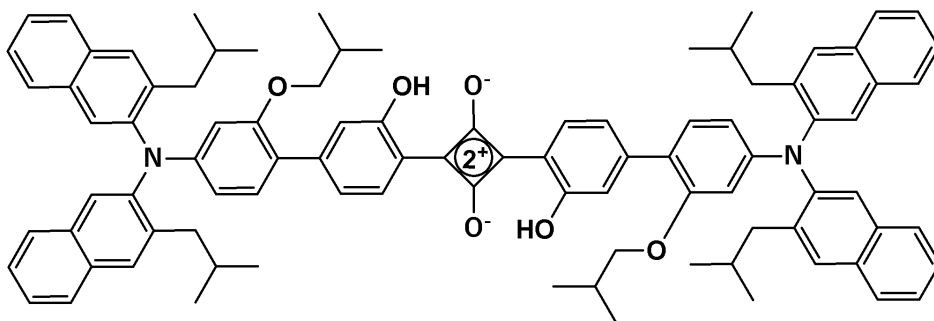
10

## (8)-4



20

## (8)-10



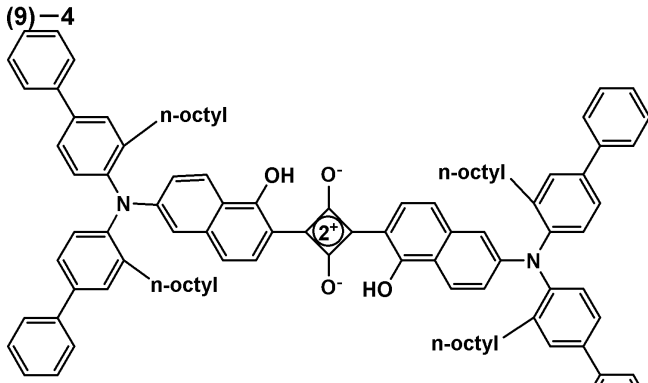
40

## 【0279】

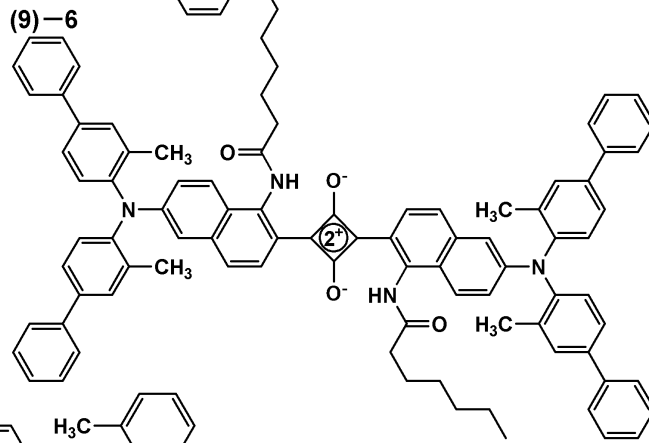
化合物(9)については、化合物(9)-4、化合物(9)-6、化合物(9)-7及び化合物(9)-10を上記スキーム(A)~(D)に準ずる方法で製造し、MS及び<sup>1</sup>H-NMRにより構造を確認した。

## 【0280】

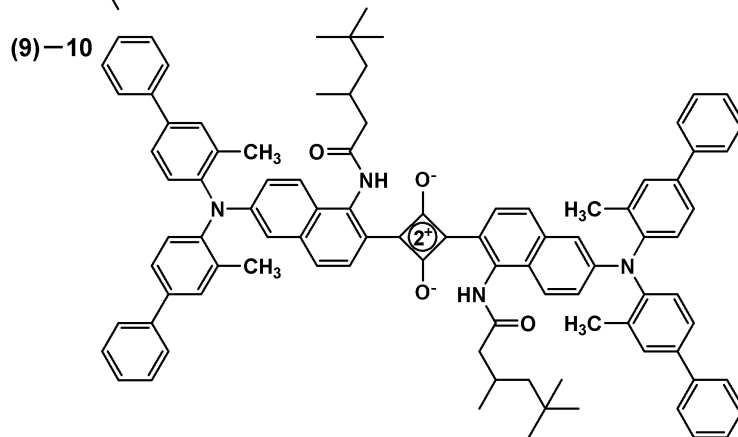
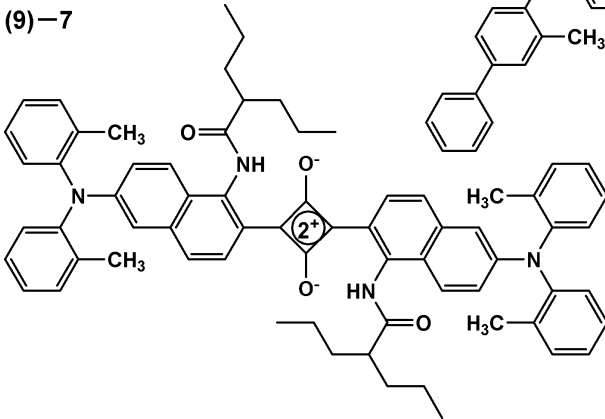
## 【化 5 5】



10



20



30

40

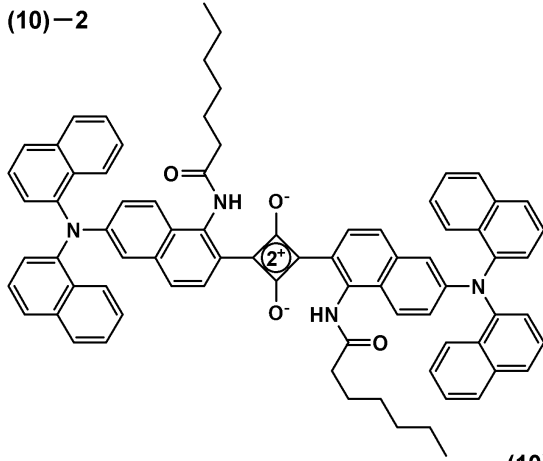
## 【 0 2 8 1】

化合物(10)については、化合物(10)-2、化合物(10)-4、化合物(10)-5及び化合物(10)-8を上記スキーム(A)~(D)に準ずる方法で製造し、MS及び<sup>1</sup>H-NMRにより構造を確認した。

## 【 0 2 8 2】

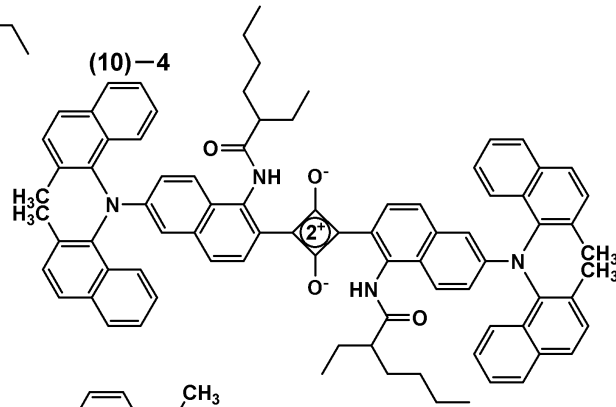
## 【化 5 6】

(10)-2



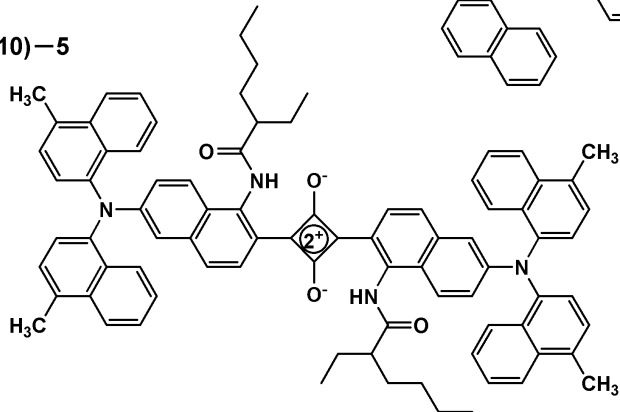
10

(10)-4



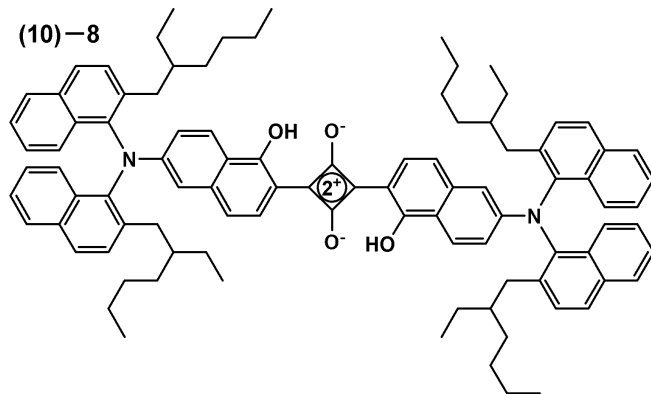
20

(10)-5



30

(10)-8



40

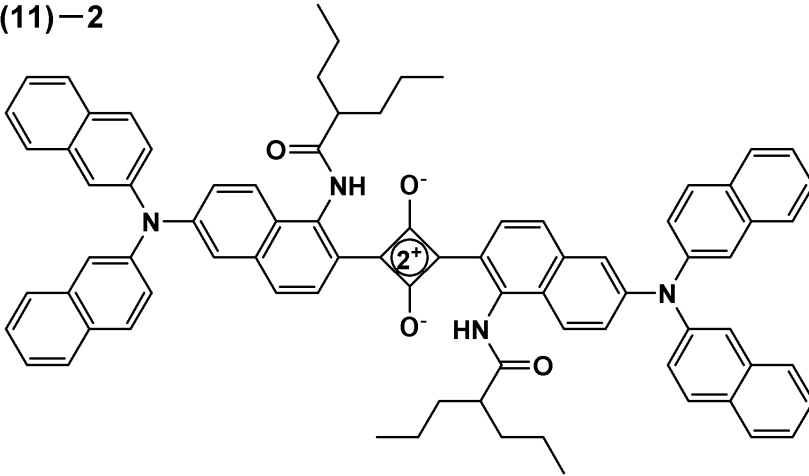
## 【 0 2 8 3】

化合物(11)については、化合物(11)-2、化合物(11)-3及び化合物(11)-7を上記スキーム(A)~(D)に準ずる方法で製造し、MS及び<sup>1</sup>H-NMRにより構造を確認した。

## 【 0 2 8 4】

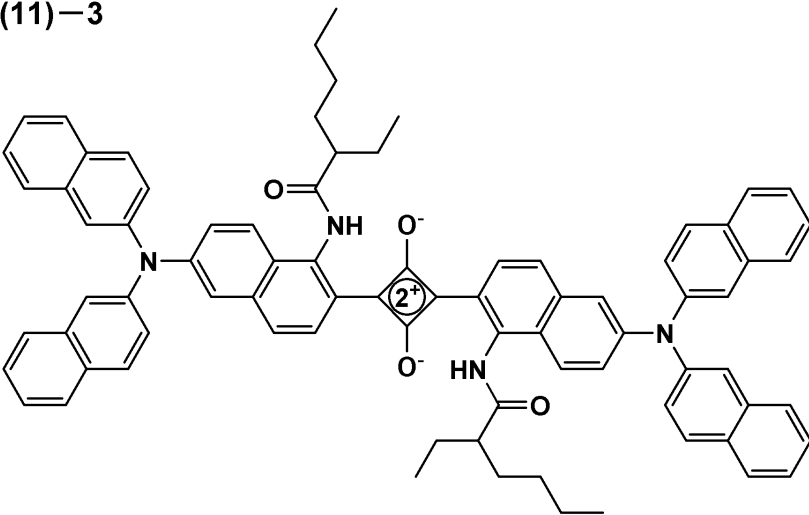
## 【化 5 7】

## (11)−2



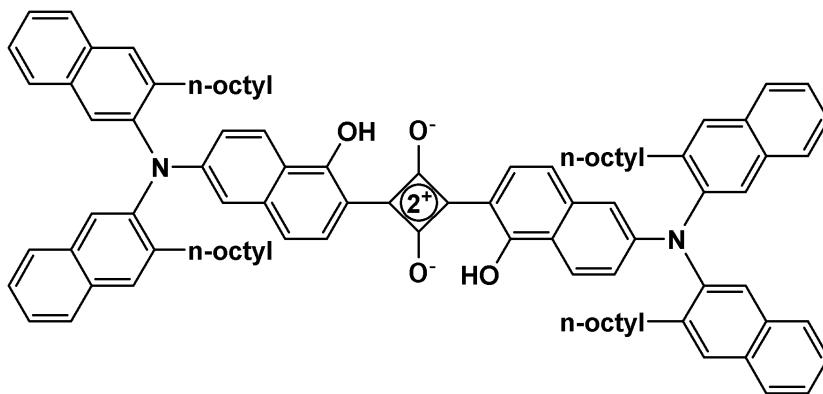
10

## (11)−3



20

## (11)−7



30

## 【 0 2 8 5】

得られた化合物について、トルエン溶液中で  $1.0 \cdot 10^{-6}$  M に調整し、常温 (300 K) でこの試料の蛍光スペクトルを測定した。発光スペクトルの測定には、分光蛍光光度計 (日立ハイテクノス社製、F7000) を用いた。また、同様に調製した試料を用いて吸光スペクトルを測定した。吸光スペクトルの測定には、分光光度計 (日立ハイテクノス社製、F7000) を用いた。上記で得られた各化合物において、それぞれ 700 ~ 900 nm の範囲に発光ピークを観測した。

## 【 0 2 8 6】

## 〔実施例 2〕

上記実施例 1 で得られた化合物のうち以下の表 XIII に示す化合物及び以下に構造を示す

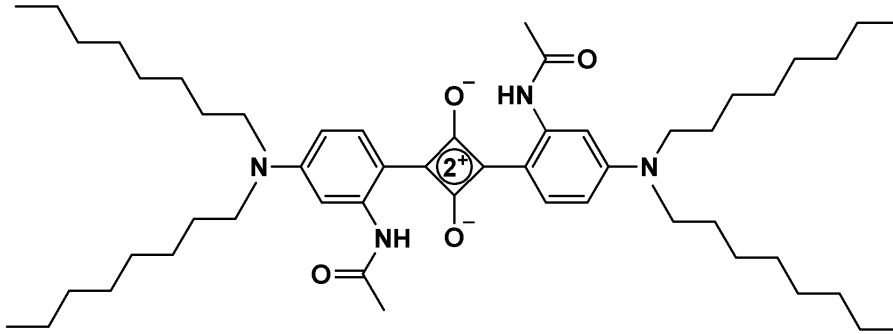
50

比較用の化合物 R - 1 (国際公開 2018/008721号記載の化合物)、比較用の化合物 R - 2 (Chem. Mater., 23, 4789, 2011記載の化合物)について、溶液中と薄膜状態での発光量子収率を、それぞれ以下の方法で評価した。

【0287】

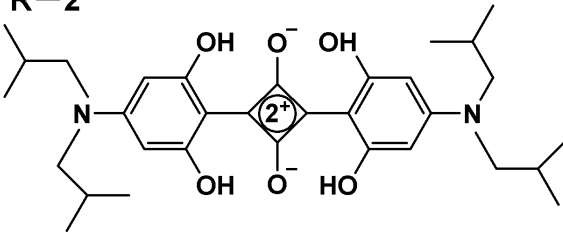
【化58】

R-1



10

R-2



20

【0288】

(1) 溶液中での発光量子収率の評価

上記各化合物をトルエン溶液中で  $10^{-6}$  M に調整し、常温 (300 K) でこの試料の溶液の絶対 PL (発光) 量子収率 (以下、「PLQY液」と示す。) を、絶対 PL 量子収率測定装置 (浜松ホトニクス社製: C11347) を用いて測定した。

【0289】

(2) 薄膜中での発光量子収率の評価

マトリックス材料であるポリスチレン (ACROS ORGANICS 社製、重量平均分子量  $M_w = 260000$ ) と比較用の化合物 R - 1 を、トルエン中に  $10^{-2}$  M となるように添加し、これらをナスフラスコに入れて 80 °C に加熱攪拌して十分に溶解させた。

【0290】

得られた溶液を用いて、PET (ポリエチレンテレフタレート) フィルム上にアプリケーションターを用いて薄膜を形成した後、室温で 10 分乾燥させ、さらに 80 °C にて 10 分加熱乾燥させ、PET フィルムから剥離して、化合物 R - 1 を含有する発光性薄膜 (比較例) を作製した。また、化合物 R - 1 を比較用の化合物 R - 2 に変えて、化合物 R - 2 を含有する発光性薄膜 (比較例) を作製した。さらに、化合物 R - 1 を表 XIII に示す本発明に係る各化合物に変えた以外は同様にして、本発明の発光性薄膜を作製した。常温 (300 K) でこれらの試料の絶対 PL (発光) 量子収率 (以下、「PLQY膜」と示す。) を測定した。絶対 PL (発光) 量子収率の測定には絶対 PL 量子収率測定装置 (浜松ホトニクス社製: C11347) を用いて測定した。

40

【0291】

発光性薄膜のトルエン溶液中での絶対 PL (発光) 量子収率を 1.00 としたときの対応する発光性薄膜の絶対 PL (発光) 量子収率を発光量子収率の相対値、すなわち、PLQY膜 / PLQY液を以下の表 XIII に示す。

【0292】

50

## 【表 1 3】

表 XIII

化合物	PLQY 膜 /PLQY 液	備考
R-1	0.19	比較例
R-2	0.13	比較例
(1a)-1	0.67	本発明
(1a)-12	0.67	本発明
(1a)-20	0.60	本発明
(1b)-14	0.68	本発明
(1c)-9	0.60	本発明
(1c)-12	0.67	本発明
(1d)-1	0.65	本発明
(1d)-14	0.65	本発明
(1d)-36	0.50	本発明
(1d)-39	0.60	本発明
(1d)-40	0.60	本発明
(4)-5	0.60	本発明
(4)-9	0.57	本発明
(5)-3	0.57	本発明
(5)-9	0.55	本発明
(6)-4	0.55	本発明
(6)-8	0.58	本発明
(7)-5	0.51	本発明
(7)-8	0.53	本発明
(8)-4	0.55	本発明
(8)-10	0.52	本発明
(9)-4	0.51	本発明
(9)-7	0.53	本発明
(10)-2	0.55	本発明
(10)-8	0.52	本発明
(11)-3	0.51	本発明
(11)-7	0.50	本発明

10

20

30

40

## 【 0 2 9 3】

表XIIIより、比較用の化合物 R - 1 を用いた発光性薄膜及び化合物 R - 2 を用いた発光性薄膜は、溶液状態より発光量子収率がそれぞれ 0 . 1 9 及び 0 . 1 3 に維持されたのに対し、本発明に係る各化合物を用いた発光性薄膜は、いずれも発光量子収率が溶液状態の 0 . 5 0 以上維持を達成し、濃度消光が著しく抑えられることが分かった。また、本発明に係る各化合物を用いた発光性薄膜は実使用できるレベルの発光量子収率であった。

## 【 0 2 9 4】

## 〔実施例 3〕

上記実施例 1 で得られた化合物のうち以下の表XIVに示す化合物と、比較用の化合物 R

50

- 1 及び化合物 R - 2 について、溶液中と発光性粒子中での発光量子収率を測定した。

【 0 2 9 5 】

( 1 ) 溶液中での発光量子収率の評価

上記各化合物をトルエン溶液中で  $10^{-6}$  M に調整し、常温 ( 3 0 0 K ) でこの試料の溶液の絶対 PL ( 発光 ) 量子収率 ( 以下、「 PL Q Y 液 」と示す。 ) を、絶対 PL 量子収率測定装置 ( 浜松ホトニクス社製 : C 1 1 3 4 7 ) を用いて測定した。

【 0 2 9 6 】

( 2 ) 発光性粒子の作製及び発光量子収率の評価

ポリスチレン ( P S ) 粒子分散液 ( 固形分 5 . 2 質量 % 、ポリスチレン粒子の体積平均粒子径  $0 . 1 2 \mu\text{m}$  、分散媒 : 水 )  $9 6 \mu\text{L}$  に、水  $1 0 0 \mu\text{L}$  、非イオン性界面活性剤 ( K o l l i p h o r P 4 0 7 : シグマアルドリッチ製 ) の 2 % 水溶液  $5 0 \mu\text{L}$  、上記各化合物の  $0 . 0 1 \text{mmol} / \text{L}$  T H F 溶液  $1 0 0 \mu\text{L}$  を加え、ポリスチレン粒子と各化合物との混合液を調製した。この混合液を 2 5 で 2 分攪拌することで各化合物を含むポリスチレン粒子を作製した。

【 0 2 9 7 】

得られたポリスチレン粒子の分散液を用い、遠心精製法により粒子を沈降させ、上澄み液を除去した後、純水を加えて該粒子を再分散させた。この操作 ( 遠心精製と再分散 ) を 4 回繰り返し、各化合物を含む発光性粒子分散液 1 ~ 1 5 を得た。

【 0 2 9 8 】

上記で得られた発光性粒子分散液 1 ~ 1 5 の絶対 PL ( 発光 ) 量子収率を、絶対 PL 量子収率測定装置 ( 浜松ホトニクス製 C 1 1 3 4 7 - 0 1 ) を用い測定した。発光性薄膜のトルエン溶液中での絶対 PL ( 発光 ) 量子収率を 1 . 0 0 としたときの対応する発光性粒子分散液の絶対 PL ( 発光 ) 量子収率を発光量子収率の相対値、すなわち、 PL Q Y 粒子 / PL Q Y 液を以下の表 XIV に示す。

【 0 2 9 9 】

【表 1 4 】

表 XIV

発光性粒子分散液 No.	化合物	PLQY 粒子 /PLQY 液	備考
1	R-1	0.30	比較例
2	R-2	0.20	比較例
3	(1a)-1	0.65	本発明
4	(1b)-14	0.60	本発明
5	(1c)-12	0.62	本発明
6	(1c)-31	0.55	本発明
7	(1d)-14	0.60	本発明
8	(4)-10	0.50	本発明
9	(5)-3	0.51	本発明
10	(6)-3	0.55	本発明
11	(7)-4	0.52	本発明
12	(8)-3	0.51	本発明
13	(9)-6	0.50	本発明
14	(10)-5	0.50	本発明
15	(11)-2	0.51	本発明

10

20

30

40

50

## 【0300】

表XIVより、比較用の化合物R - 1を用いた発光性粒子及び化合物R - 2を用いた発光性粒子は、溶液状態より発光量子収率がそれぞれ0.30及び0.20に維持されたのに対し、本発明に係る各化合物を用いた発光性粒子は、いずれも発光量子収率が溶液状態の0.50以上維持を達成し、濃度消光が著しく抑えられることが分かった。また、本発明に係る各化合物を用いた発光性粒子は実使用できるレベルの発光量子収率であった。

## 【0301】

## 〔実施例4〕

本発明の化合物として化合物(1a) - 1を含有する発光性薄膜を具備する波長変換膜を以下の方法に従って作製し、さらに、波長変換膜を用いて赤外発光面光源を作製した。作製した波長変換膜は、図5に記載の構成からなる波長変換膜3であり、赤外発光面光源は、図4に記載の構成からなる赤外発光面光源1である。

10

## 【0302】

## (波長変換膜3の作製)

溶媒であるトルエンに、マトリックス材料であるポリスチレン(ACROS ORGANICS社製、重量平均分子量 $M_w = 260000$ )と化合物(1a) - 1とを、質量比で99:1となるように添加し、これらをナスフラスコに入れて80℃に加熱攪拌して十分に溶解させた。

## 【0303】

次いで、ポリエチレンナフタレートフィルム(帝人デュポン社製)の片側の全面に、特開2004-68143号公報に記載の構成の大気圧プラズマ放電処理装置を用いて、 $SiO_x$ からなる無機物のガスバリアー層4Aを厚さ500nmとなるように形成したガスバリアーフィルム4A上に、得られた混合溶液を、アプリケーションを用いて塗布した。室温で10分乾燥させた後、さらに80℃で10分加熱乾燥を行って発光性薄膜5を形成した。

20

## 【0304】

その後、封止用の接着剤を付けたガスバリアーフィルム4Bを用意して発光性薄膜5のガスバリアーフィルム4A側と反対側の面に張り合わせ、90℃の加熱条件で真空ラミネーターを用いて封止を行った。その後、110℃で30分加熱処理を行うことにより接着剤を硬化させ接着剤層6を形成させ、波長変換膜3を作製した。なお、図示されていないが、波長変換膜3は基材として用いたポリエチレンナフタレートフィルムを含む構成である。

30

## 【0305】

## (赤外発光面光源の作製)

赤色発光(R)する面光源2である有機EL素子の発光面と、波長変換膜3とを密着させることにより、図4で示す構成の赤外発光面光源1を作製した。赤色発光(R)する面光源を発光させることにより、赤色発光(R)する面光源の赤色光が近赤外光に変換されることが確認できた。

## 【0306】

## 〔実施例5〕

本実施例では、本発明の化合物として上記で得られた化合物(1d) - 39を含有する光電変換層を有する光電変換素子を以下のとおり作製し、その性能を評価した。

40

## 【0307】

ガラス基板上に、インジウム・スズ酸化物(ITO)透明導電膜を150nm堆積したものを、通常の写真リソグラフィ技術と塩酸エッチングとを用いて2mm幅にパターンニングして、透明電極を形成した。パターン形成した透明電極を、界面活性剤と超純水による超音波洗浄、超純水による超音波洗浄の順で洗浄後、窒素ブローで乾燥させ、最後に紫外線オゾン洗浄を行った。

## 【0308】

この透明基板の上に、化合物(1d) - 39の1mg/mLクロロホルム溶液を60nm

50

の膜厚でスピコートした後、140 で大気中10分間加熱乾燥した。これ以降は基板をグローブボックス中に持ち込み、窒素雰囲気下で作業した。まず、窒素雰囲気下で上記基板を140 で10分間加熱処理した。次に、上記有機層を成膜した基板を真空蒸着装置内に設置した。2mm幅のシャドウマスクが透明電極と直交するように素子をセットし、 $10^{-3}$  Pa以下まで真空蒸着機内を減圧した後、フラーレンC60を40nm、バソキプロインを10nm、Alを100nm蒸着した。最後に120 で30分間の加熱を行い、本発明に係る光電変換素子1を得た。なお、蒸着速度はいずれも2nm/秒で蒸着し、2mm角のサイズとした。

#### 【0309】

得られた光電変換素子1は、窒素雰囲気下でアルミニウムキャップとUV硬化樹脂（ナガセケムテックス株式会社製、UV RESIN XNR5570-B1）を用いて封止を行った。上記作製した光電変換素子1に、ソーラーシミュレーター（AM1.5Gフィルタ）の100mW/cm<sup>2</sup>の強度の光を照射したところ、電気信号を確認し、光電変換素子として十分機能することが確認できた。

10

#### 【0310】

上記において、化合物(1d)-39を、化合物(4)-6、化合物(5)-4、化合物(6)-8、化合物(7)-6、化合物(8)-4、化合物(9)-10、化合物(10)-4、化合物(11)-2に変えて同様に光電変換素子を作製して評価したところ、これらもそれぞれ電気信号が確認でき、光電変換素子として十分機能することが確認できた。

20

#### 【産業上の利用可能性】

#### 【0311】

本発明によれば、近赤外長波長領域の発光と部材への高濃度での配合が可能な発光性化合物を含有する、近赤外長波長領域において高い発光量子収率が達成可能な発光部材を提供することができる。また、近赤外長波長領域の発光と部材への高濃度での配合が可能な発光性化合物を提供することができる。さらには、近赤外長波長領域の発光と部材への高濃度での配合が可能な発光性化合物を用いた高い外部量子効率を得られる光電変換部材を提供することができる。

#### 【符号の説明】

#### 【0312】

- 1 赤外発光面光源
- 2 可視光発光する面光源
- 3 波長変換膜
- 4 A、4 B ガスバリアーフィルム
- 5 発光性薄膜
- 6 接着剤層
- I R 近赤外光
- R 赤色発光
- 1 1 絶縁部
- 1 2 上部電極
- 1 3 電子ブロック層
- 1 4 光電変換層
- 1 5 正孔ブロック層
- 1 6 下部電極
- 1 7 絶縁基材若しくは他光電変換素子

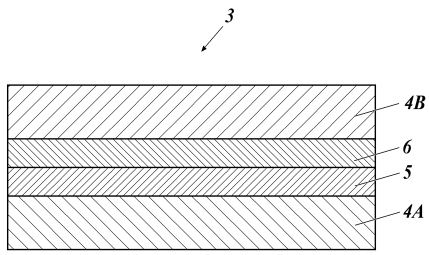
30

40

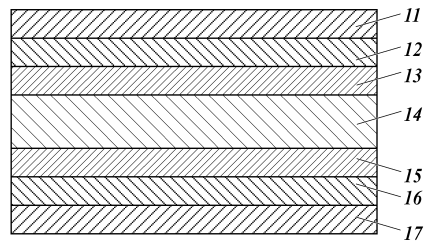
50



【 5 】



【 6 】



10

20

30

40

50

---

フロントページの続き

- (56)参考文献 国際公開第2018/207776(WO,A1)  
国際公開第2019/167886(WO,A1)  
特表2015-526901(JP,A)
- (58)調査した分野 (Int.Cl., DB名)  
C09K11/00-11/89  
C09B1/00-69/10  
Caplus/REGISTRY(STN)