

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11) 特許出願公開番号

特開2007-173464

(P2007-173464A)

(43) 公開日 平成19年7月5日(2007.7.5)

(51) Int. Cl.		F I		テーマコード (参考)
H01L 51/50	(2006.01)	H05B 33/14	B	3K007
C09K 11/06	(2006.01)	C09K 11/06	680	
		C09K 11/06	690	

審査請求 未請求 請求項の数 17 O L (全 93 頁)

(21) 出願番号	特願2005-368154 (P2005-368154)	(71) 出願人	000005496 富士ゼロックス株式会社 東京都港区赤坂九丁目7番3号
(22) 出願日	平成17年12月21日 (2005.12.21)	(74) 代理人	100079049 弁理士 中島 淳
		(74) 代理人	100084995 弁理士 加藤 和詳
		(74) 代理人	100085279 弁理士 西元 勝一
		(74) 代理人	100099025 弁理士 福田 浩志
		(72) 発明者	廣瀬 英一 神奈川県南足柄市竹松1600番地 富士 ゼロックス株式会社内

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 有機電界発光素子及びその製造方法並びに画像表示媒体

(57) 【要約】

【課題】 発光強度が大きく、発光効率が高く、素子寿命が長く、且つ、製造が容易な有機電界発光素子及びその製造方法並びに有機電界発光素子を用いた画像表示媒体の提供。

【解決手段】 少なくとも一方が透明または半透明である一对の電極間に挟持された一層または複数層の有機化合物層より構成される有機電界発光素子において、前記有機化合物層の少なくとも一層が、少なくとも1種の非共役系高分子を含有し、前記非共役系高分子の少なくとも一方の末端基が、リン光発光体を有することを特徴とする有機電界発光素子及びその製造方法並びにそれを用いた画像表示媒体。

【選択図】 なし

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

少なくとも一方が透明または半透明である一对の電極間に挟持された一層または複数層の有機化合物層より構成される有機電界発光素子において、

前記有機化合物層の少なくとも一層が、少なくとも 1 種の非共役系高分子を含有し、前記非共役系高分子の少なくとも一方の末端基が、リン光発光体を有することを特徴とする有機電界発光素子。

【請求項 2】

前記非共役系高分子が、ポリエステル、ポリエーテル及びポリウレタンからなる群から選択される少なくとも一種であることを特徴とする請求項 1 に記載の有機電界発光素子。

10

【請求項 3】

前記非共役系高分子が、正孔輸送性高分子であることを特徴とする請求項 1 に記載の有機電界発光素子。

【請求項 4】

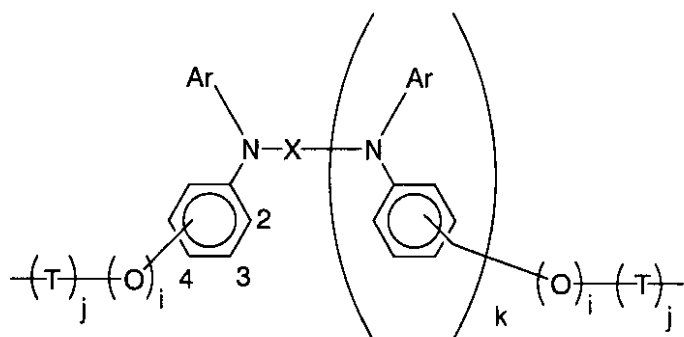
前記非共役系高分子が、正孔輸送性と電子輸送性とを兼ね備えた高分子であることを特徴とする請求項 1 に記載の有機電界発光素子。

【請求項 5】

前記非共役系高分子が、下記一般式 (I-1) 及び (I-2) で示される構造から選択された少なくとも 1 種を部分構造として含む繰り返し単位よりなる高分子であることを特徴とする請求項 1 乃至 4 のいずれか 1 項に記載の有機電界発光素子。

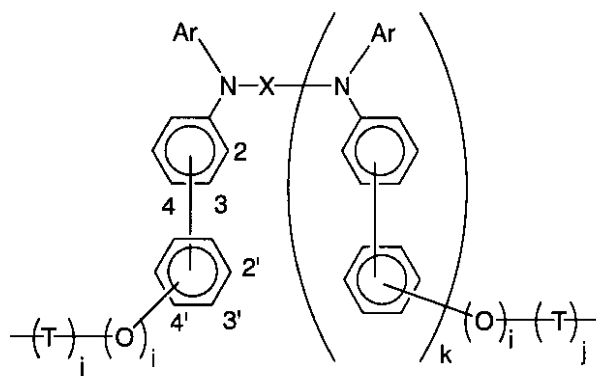
20

【化 1】



30

(I-1)



40

(I-2)

(一般式 (I-1) 及び (I-2) 中、Ar は、置換若しくは未置換のフェニル基、置換若しくは未置換の芳香環数 2 ~ 10 の 1 価の多核芳香族炭化水素、置換若しくは未置換の

50

芳香環数 2 ～ 10 の 1 価の縮合芳香族炭化水素又は置換若しくは未置換の 1 価の芳香族複素環を表し、X は置換若しくは未置換のフェニレン基、置換若しくは未置換の芳香環数 2 ～ 10 の 2 価の多核芳香族炭化水素、置換若しくは未置換の芳香環数 2 ～ 10 の 2 価の縮合芳香族炭化水素又は置換若しくは未置換の 2 価の芳香族複素環を表し、T は炭素数 1 ～ 6 の 2 価の直鎖状炭化水素基又は炭素数 2 ～ 10 の 2 価の分枝鎖状炭化水素基を表し、k、i、j はそれぞれ独立に 0 又は 1 を表す。）

【請求項 6】

前記有機化合物層が少なくとも発光層と、電子輸送層及び／または電子注入層とから構成され、少なくとも前記発光層が、前記非共役系高分子を少なくとも 1 種含有してなることを特徴とする請求項 1 に記載の有機電界発光素子。

10

【請求項 7】

前記有機化合物層が少なくとも正孔輸送層及び／または正孔注入層と、発光層と、電子輸送層及び／または電子注入層とから構成され、少なくとも前記発光層が、前記非共役系高分子を少なくとも 1 種含有してなることを特徴とする請求項 1 に記載の有機電界発光素子。

【請求項 8】

前記有機化合物層が少なくとも正孔輸送層及び／または正孔注入層と、発光層とから構成され、少なくとも前記発光層が、前記非共役系高分子を少なくとも 1 種含有してなることを特徴とする請求項 1 に記載の有機電界発光素子。

【請求項 9】

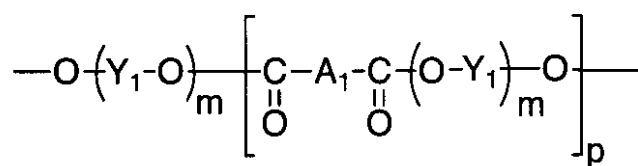
前記有機化合物層が電荷輸送能を有する発光層一層のみから構成され、前記発光層が、前記非共役系高分子を少なくとも 1 種含有してなることを特徴とする請求項 1 に記載の有機電界発光素子。

20

【請求項 10】

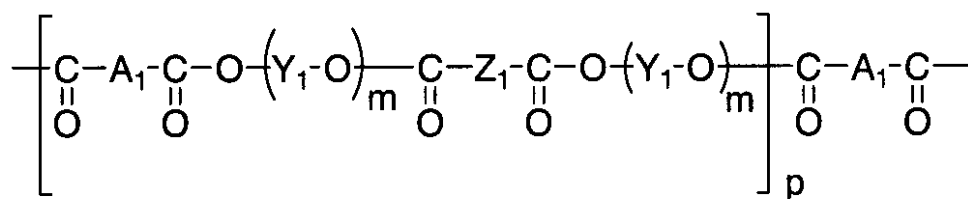
前記一般式 (I-1) 及び (I-2) で示される構造から選択された少なくとも 1 種を部分構造として含む繰り返し単位よりなる非共役系高分子が、下記一般式 (II-1) 又は (II-2) で示されるポリエステルであることを特徴とする請求項 5 に記載の有機電界発光素子。

【化 2】



(II-1)

30



(II-2)

40

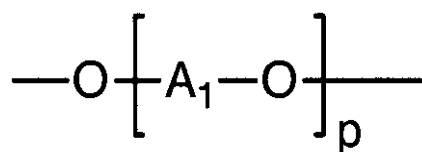
(一般式 (II-1) 及び (II-2) 中、A₁ は一般式 (I-1) 及び (I-2) で示される構造から選択された少なくとも 1 種を表し、Y₁ は 2 価のアルコール残基を表し、Z₁ は 2 価のカルボン酸残基を表し、m は 1 ～ 5 の整数を表し、p は 5 ～ 5000 の整数を表す。)

50

【請求項 1 1】

前記一般式 (I-1) 及び (I-2) で示される構造から選択された少なくとも 1 種を部分構造として含む繰り返し単位よりなる非共役系高分子が、下記一般式 (III-1) で示されるポリエーテルであることを特徴とする請求項 5 に記載の有機電界発光素子。

【化 3】



(III-1)

10

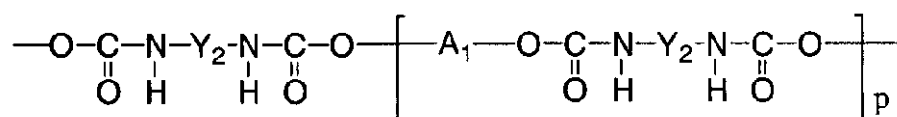
(一般式 (III-1) 中、 A_1 は一般式 (I-1) 及び (I-2) で示される構造から選択された少なくとも 1 種を表し、 p は 5 ~ 5, 000 の整数を表す。)

【請求項 1 2】

前記一般式 (I-1) 及び (I-2) で示される構造から選択された少なくとも 1 種を部分構造として含む繰り返し単位よりなる非共役系高分子が、下記一般式 (IV-1) 又は (IV-2) で示されるポリウレタンであることを特徴とする請求項 5 に記載の有機電界発光素子。

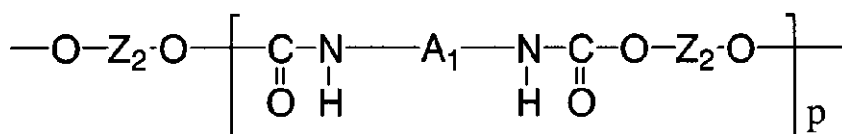
20

【化 4】



(IV-1)

30



(IV-2)

(一般式 (IV-1) 及び (IV-2) 中、 A_1 は一般式 (I-1) 及び (I-2) で示される構造から選択された少なくとも 1 種を表し、 p は 5 ~ 5, 000 の整数を表し、 Y_2 及び Z_2 は 2 価のイソシアネート、アルコール、又はアミン残基を表す。)

40

【請求項 1 3】

前記リン光発光体が、有機化合物であることを特徴とする請求項 1 に記載の有機電界発光素子。

【請求項 1 4】

前記有機化合物が、有機金属錯体であることを特徴とする請求項 1 3 に記載の有機電界発光素子。

【請求項 1 5】

前記有機金属錯体に含まれる金属が、イリジウム又は白金であることを特徴とする請求項 1 4 に記載の有機電界発光素子。

50

【請求項 16】

請求項 1 乃至 15 のいずれか 1 項に記載の有機電界発光素子の製造方法であって、
前記有機化合物層の構成成分を溶媒中に溶解させた有機化合物層用塗布液をインクジェット法により塗布する塗布工程を少なくとも有する有機電界発光素子の製造方法。

【請求項 17】

請求項 1 乃至 15 のいずれか 1 項に記載の有機電界発光素子を、マトリクス状及び／又はセグメント状に配置したことを特徴とする画像表示媒体。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、表示素子、液晶等のバックライト、照明光源、電子写真用露光装置、標識、看板等の分野に好適に使用できる有機電界発光素子（以下、有機 EL 素子と称することがある。）及びその製造方法並びに画像表示媒体に関する。

【背景技術】

【0002】

電界発光素子は、自発光性の全固体素子であり、視認性が高く衝撃にも強いと、広く応用が期待されている。現在は無機蛍光体を用いたものが主流であり広く使用されているが、駆動に 200V 以上、50～1000Hz の交流電圧を必要とするためランニングコストが高く、また輝度が不十分であるなどの問題点を有している。

一方、有機化合物を用いた電界発光素子研究は、最初アントラセン等の単結晶を用いて始まったが、膜厚が 1mm 程度と厚く、100V 以上の駆動電圧が必要であった。そのため蒸着法による薄膜化が試みられている（例えば、非特許文献 1 参照。）。

これら素子の発光は、電極の一方から電子が注入され、もう一方の電極から正孔が注入されることにより、素子中の発光材料が高いエネルギー準位に励起され、励起された発光体が基底状態に戻る際の余分なエネルギーを光として放出する現象である。しかしながら、駆動電圧が 30V と未だ高く、また、膜中における電子・正孔キャリアの密度が低く、キャリアの再結合によるフォトンの生成確率が低いため十分な輝度が得られず、実用化には至らなかった。

【0003】

ところが、1987 年に Tang らにより透明基板上に正孔輸送性有機低分子化合物からなる極めて薄い薄膜と電子輸送能を持つ蛍光性有機低分子化合物からなる極めて薄い薄膜とを真空蒸着法により順次積層した機能分離型の有機電界発光素子で、10V 程度の低電圧で 1000cd/m² 以上の高輝度が得られるものが報告され（例えば、特許文献 1 又は非特許文献 2 参照。）、以来、有機電界発光素子の研究・開発が活発に行われている。

これら、積層構造の電界発光素子は、有機発光体と電荷輸送性の有機物（電荷輸送材料）を電極に積層した構造であり、それぞれの正孔と電子が電荷輸送材料中を移動して、再結合することにより発光する。有機発光体としては 8-キノリノールアルミニウム錯体やクマリン化合物など蛍光を発する有機色素などが用いられる。また、電荷輸送材料としては、N, N-ジ（m-トリル）N, N'-ジフェニルベンジジンや 1, 1-ビス [N, N-ジ（p-トリル）アミノフェニル] シクロヘキサンといったジアミノ化合物や、4-（N, N-ジフェニル）アミノベンズアルデヒド-N, N-ジフェニルヒドラゾン化合物等が挙げられる。

【0004】

しかし、これら材料面において発光効率の高効率化、発光寿命の長寿命化が必須の課題として残されている。一般的に発光材料が励起した場合、蛍光を発する場合（蛍光性化合物）と項間交差を経てりん光として失活する場合（りん光性化合物）が知られている。蛍光性化合物を用いた有機電界発光素子の発光効率は最大で 5% と低い、りん光性化合物を用いた有機電界発光素子の発光効率は最大で 20% と言われており、りん光発光を用いた有機電界発光素子が望まれていた。

10

20

30

40

50

【0005】

近年、室温で発光するりん光性化合物としてイリジウム（I I I）トリス（2-フェニルピリジン）錯体を用いた有機電界発光素子が報告（例えば、非特許文献3又は4参照。）され以来、活発にりん光発光を用いた有機電界発光素子の開発が行なわれている。

りん光発光を用いた有機電界発光素子も、蛍光性化合物を用いた有機電界発光素子同様に低分子材料と高分子材料を用いたものがある。低分子材料を用いた有機電界発光素子は真空蒸着を用いて一般的に製造される。しかし、 10^{-4} Pa以下の高真空条件で蒸着するため、製造において簡略化、加工性、大面積化、コスト等の改善が求められている。特にりん光発光を用いている有機電界発光素子は、りん光性化合物をドーパントとして用いて作製するため、大面積で均一に膜中にドーピングすることは製造上かなりの難易度を有する。

10

【0006】

それに対し、高分子材料を用いた有機電界発光素子は、スピンコート、インクジェット、スクリーン印刷、スプレー等の印刷といった塗布工程により製造することができる。ポリビニルカルバゾール等の高分子材料にイリジウム金属錯体を混合した報告（例えば、特許文献2又は非特許文献5参照。）があるが、イリジウム金属錯体の結晶性が高いため凝集し結晶化が起こり、高濃度にドーピングすることが困難であった。また、高分子材料の電荷輸送性に劣るため、得られる素子特性に限界があった。さらに、高分子材料中にりん光性金属錯体を有する有機電界発光素子の報告（例えば、特許文献3参照。）がある。しかし、効率を高くするために高分子中の金属錯体の濃度を増加する必要があるため高分子中の金属錯体ユニットが増し、そのため前記金属錯体ユニットが分岐点となり結晶性が増加し、溶解性や耐熱性が低下し製造上あるいは特性上に欠陥があった。

20

【特許文献1】特開昭59-194393号公報

【特許文献2】特開2001-257076号公報

【特許文献3】特開2003-171659号公報

【非特許文献1】Thin Solid Films, 94, 171 (1982)

【非特許文献2】Appl. Phys. Lett., 51, 913 (1987)

【非特許文献3】Appl. Phys. Lett., 75, 4 (1999)

【非特許文献4】J. Am. Chem. Soc., 123, 4304 (2001)

【非特許文献5】Appl. Phys. Lett., 80, 2045 (2002)

30

【発明の開示】

【発明が解決しようとする課題】

【0007】

本発明は、前記従来の技術における諸問題を解決し、以下の目的を達成することを課題とする。すなわち、発光時の熱安定性、保存安定性、溶剤や樹脂に対する溶解性及び相溶性に優れた発光機能を有する非共役系高分子を用い、発光強度が大きく、発光効率が高く、素子寿命が長く、且つ、製造が容易な有機電界発光素子及びその製造方法並びに有機電界発光素子を用いた画像表示媒体を提供することを目的とする。

【課題を解決するための手段】

【0008】

40

上記目的を達成するため、本発明者らは、発光を有する非共役系高分子に関し鋭意検討した結果、りん光発光体を少なくとも一方の末端基に有する非共役系高分子が、有機電界発光素子として好適な電荷注入特性、電荷移動度、薄膜形成能、発光特性を有することを見出し、本発明を完成するに至った。

即ち、本発明は、

<1> 少なくとも一方が透明または半透明である一对の電極間に挟持された一層または複数層の有機化合物層より構成される有機電界発光素子において、前記有機化合物層の少なくとも一層が、少なくとも1種の非共役系高分子を含有し、前記非共役系高分子の少なくとも一方の末端基が、りん光発光体を有することを特徴とする有機電界発光素子である。

50

【0009】

<2> 前記非共役系高分子が、ポリエステル、ポリエーテル及びポリウレタンからなる群から選択される少なくとも一種であることを特徴とする<1>に記載の有機電界発光素子である。

【0010】

<3> 前記非共役系高分子が、正孔輸送性高分子であることを特徴とする<1>に記載の有機電界発光素子である。

【0011】

<4> 前記非共役系高分子が、正孔輸送性と電子輸送性とを兼ね備えた高分子であることを特徴とする<1>に記載の有機電界発光素子である。

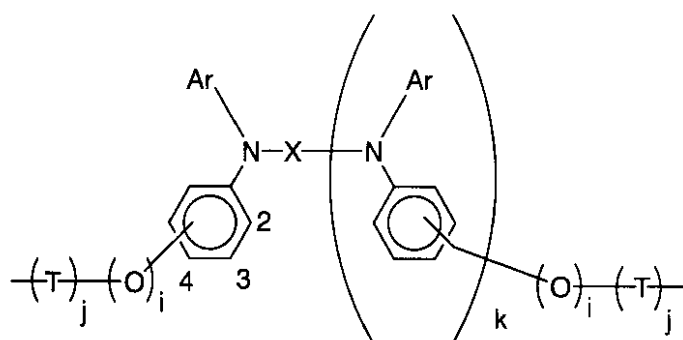
10

【0012】

<5> 前記非共役系高分子が、下記一般式(I-1)及び(I-2)で示される構造から選択された少なくとも1種を部分構造として含む繰り返し単位よりなる高分子であることを特徴とする<1>乃至<4>のいずれか1つに記載の有機電界発光素子である。

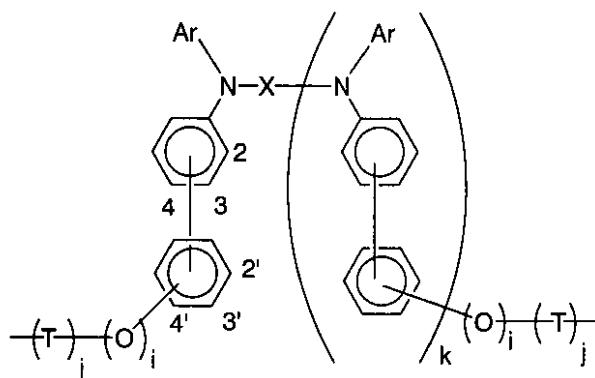
【0013】

【化1】



(I-1)

20



(I-2)

30

【0014】

(一般式(I-1)及び(I-2)中、Arは、置換若しくは未置換のフェニル基、置換若しくは未置換の芳香環数2~10の1価の多核芳香族炭化水素、置換若しくは未置換の芳香環数2~10の1価の縮合芳香族炭化水素又は置換若しくは未置換の1価の芳香族複素環を表し、Xは置換若しくは未置換のフェニレン基、置換若しくは未置換の芳香環数2~10の2価の多核芳香族炭化水素、置換若しくは未置換の芳香環数2~10の2価の縮合芳香族炭化水素又は置換若しくは未置換の2価の芳香族複素環を表し、Tは炭素数1~

50

6の2価の直鎖状炭化水素基又は炭素数2～10の2価の分枝鎖状炭化水素基を表し、k、i、jはそれぞれ独立に0又は1を表す。）

【0015】

<6> 前記有機化合物層が少なくとも発光層と、電子輸送層及び／または電子注入層とから構成され、少なくとも前記発光層が、前記非共役系高分子を少なくとも1種含有してなることを特徴とする<1>に記載の有機電界発光素子である。

【0016】

<7> 前記有機化合物層が少なくとも正孔輸送層及び／または正孔注入層と、発光層と、電子輸送層及び／または電子注入層とから構成され、少なくとも前記発光層が、前記非共役系高分子を少なくとも1種含有してなることを特徴とする<1>に記載の有機電界発光素子である。

10

【0017】

<8> 前記有機化合物層が少なくとも正孔輸送層及び／または正孔注入層と、発光層とから構成され、少なくとも前記発光層が、前記非共役系高分子を少なくとも1種含有してなることを特徴とする<1>に記載の有機電界発光素子である。

【0018】

<9> 前記有機化合物層が電荷輸送能を有する発光層一層のみから構成され、前記発光層が、前記非共役系高分子を少なくとも1種含有してなることを特徴とする<1>に記載の有機電界発光素子である。

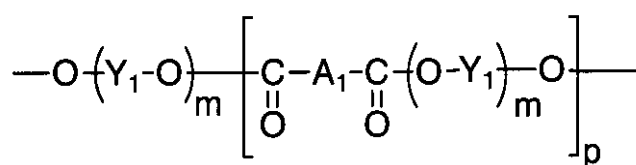
【0019】

20

<10> 前記一般式(I-1)及び(I-2)で示される構造から選択された少なくとも1種を部分構造として含む繰り返し単位よりなる非共役系高分子が、下記一般式(II-1)又は(II-2)で示されるポリエステルであることを特徴とする<5>に記載の有機電界発光素子である。

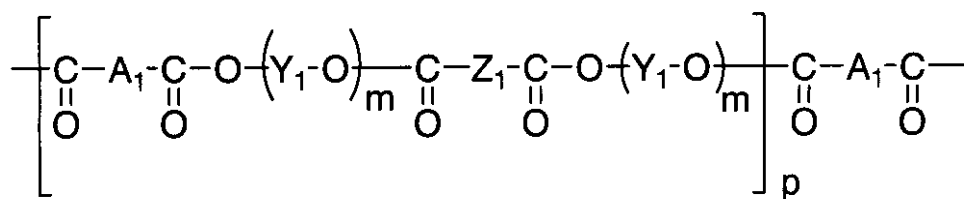
【0020】

【化2】



30

(II-1)



40

(II-2)

【0021】

(一般式(II-1)及び(II-2)中、A₁は一般式(I-1)及び(I-2)で示される構造から選択された少なくとも1種を表し、Y₁は2価のアルコール残基を表し、Z₁は2価のカルボン酸残基を表し、mは1～5の整数を表し、pは5～5000の整数を表す。)

【0022】

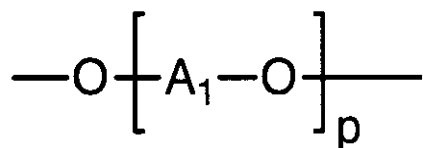
<11> 前記一般式(I-1)及び(I-2)で示される構造から選択された少なく

50

とも１種を部分構造として含む繰り返し単位よりなる非共役系高分子が、下記一般式（ⅠⅠⅠ－１）で示されるポリエーテルであることを特徴とする＜５＞に記載の有機電界発光素子である。

【００２３】

【化３】



（ⅠⅠⅠ－１）

10

【００２４】

（一般式（ⅠⅠⅠ－１）中、 A_1 は一般式（Ⅰ－１）及び（Ⅰ－２）で示される構造から選択された少なくとも１種を表し、 p は５～５，０００の整数を表す。）

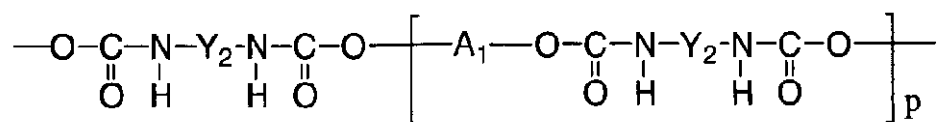
【００２５】

＜１２＞ 前記一般式（Ⅰ－１）及び（Ⅰ－２）で示される構造から選択された少なくとも１種を部分構造として含む繰り返し単位よりなる非共役系高分子が、下記一般式（ⅠⅤ－１）又は（ⅠⅤ－２）で示されるポリウレタンであることを特徴とする＜５＞に記載の有機電界発光素子である。

20

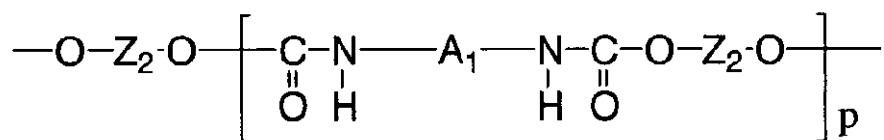
【００２６】

【化４】



（ⅠⅤ－１）

30



（ⅠⅤ－２）

40

【００２７】

（一般式（ⅠⅤ－１）及び（ⅠⅤ－２）中、 A_1 は一般式（Ⅰ－１）及び（Ⅰ－２）で示される構造から選択された少なくとも１種を表し、 p は５～５，０００の整数を表し、 Y_2 及び Z_2 は２価のイソシアネート、アルコール、又はアミン残基を表す。）

【００２８】

＜１３＞ 前記リン光発光体が、有機化合物であることを特徴とする＜１＞に記載の有機電界発光素子である。

【００２９】

＜１４＞ 前記有機化合物が、有機金属錯体であることを特徴とする＜１３＞に記載の有機電界発光素子である。

50

【0030】

<15> 前記有機金属錯体に含まれる金属が、イリジウム又は白金であることを特徴とする<14>に記載の有機電界発光素子である。

【0031】

<16> <1>乃至<15>のいずれか1つに記載の有機電界発光素子の製造方法であって、前記有機化合物層の構成成分を溶媒中に溶解させた有機化合物層用塗布液をインクジェット法により塗布する塗布工程を少なくとも有する有機電界発光素子の製造方法である。

【0032】

<17> <1>乃至<15>のいずれか1つに記載の有機電界発光素子を、マトリクス状及び／又はセグメント状に配置したことを特徴とする画像表示媒体である。 10

【発明の効果】

【0033】

本発明によれば、高輝度、高効率で素子寿命の長く且つピンホール等の不良も少なく、大面積化も容易な有機電界発光素子及びその製造方法並びに有機電界発光素子を用いた画像表示媒体を提供することができる。

【発明を実施するための最良の形態】

【0034】

以下、本発明の有機電界発光素子及びその製造方法並びに有機電界発光素子を用いた画像表示媒体について詳細に説明する。 20

本発明の有機電界発光素子は、少なくとも一方が透明または半透明である一对の電極間に挟持された一層または複数層の有機化合物層より構成される有機電界発光素子において、前記有機化合物層の少なくとも一層が、少なくとも1種の非共役系高分子を含有し、前記非共役系高分子の少なくとも一方の末端基が、リン光発光体を有することを特徴とする。

なお、本発明において「非共役系高分子」とは、高分子の主鎖骨格中に σ 結合を少なくとも一つ以上含む繰り返し構造を有する重合体をいう。

【0035】

リン光発光体等の発光化合物を複数繋げたような非共役系の分子では、この分子に含まれる発光化合物の発光強度が、発光化合物単体の場合と比べて、著しく低下してしまうことがあり、この点から、分子内に分散させて発光化合物を設けることが好ましい。本発明に用いられる非共役系高分子は、分子鎖の末端に単体のリン光発光体を有するために、上記したような発光効率の低下を防ぐことができ、結果として十分な発光強度を得ることができる。 30

【0036】

また、リン光発光体は、高分子の分子鎖の末端以外のいずれかの箇所に付加させることも可能であるが、末端にリン光発光体を有さない場合には、末端の官能基が、末端以外の部分に付加されたリン光発光体の発光に悪影響を及ぼす場合がある。加えて、分子間を電荷が移動するような場合には、電荷の移動性を阻害したりする場合がある。

しかしながら、本発明に用いられる非共役系高分子は、分子鎖の末端を、官能基の代わりにリン光発光体に置き換えているために、リン光発光体単体での発光特性を十分に発揮することができる。加えて、分子間を電荷が移動するような場合には、電荷の移動性をより向上させることも可能である。さらに、末端の官能基をリン光発光体で置換することは、非共役系高分子を合成する上でも容易である。 40

【0037】

さらに、本発明に用いられる非共役系高分子は、両方の末端にリン光発光体を有していてもよい。この場合には、各々のリン光発光体の発光色を異なるものとするにより、所望の発光色の非共役系高分子を容易に得ることができる。このような非共役系高分子は、共重合を利用して容易に合成することが可能である。

上記したような非共役系高分子は、リン光発光体以外の部分の構造を選択し、分子量を 50

調整して合成することができるため、所望の物性（例えば、熱安定性、溶媒や樹脂に対する溶解性および相溶性等）を得ることが容易であり、結果として優れた熱安定性や薄膜形成能を持つ非共役系高分子を容易に得ることができる。

【0038】

以上に説明したように、本発明に用いられる非共役系高分子は、発光強度が大きく、発光効率が高く、優れた電荷移動特性を有し、熱安定性が優れ、また、薄膜形成が容易である。従って、本発明の有機電界発光素子は、有機化合物層が、前述の非共役系高分子を含んでいるために、発光強度が大きく、発光効率が高く、素子寿命が長く、且つ、製造が容易である。

【0039】

このような非共役系高分子の基本構造としては、ポリエステル、ポリエーテル、ポリウレタン、ポリイミド、ポリアミド、ポリエーテルケトン、ポリカーボネート、ポリスルフィド、ポリエーテルスルフィド、含ケイ素高分子、含ゲルマニウム高分子、および、それらの共重合体高分子等が挙げられ、これらの中でも合成の容易さや、熱安定性、溶媒や樹脂に対する溶解性および相溶性等の観点からポリエステル、ポリエーテル及びポリウレタンからなる群から選択される少なくとも一種であることが好ましい。

【0040】

本発明に係るリン光発光体は、固体状態でリン光を発光する材料が好ましい。また、本発明に係るリン光発光体は、リン光と共に蛍光を生ずる物質であってもよい。

【0041】

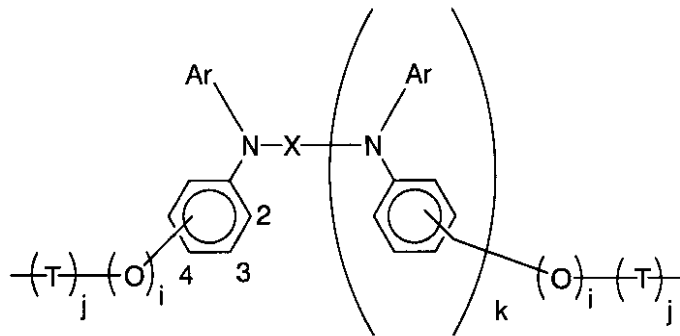
本発明に係る非共役系高分子は、後述する構造を適宜選択することで正孔輸送性高分子又は正孔輸送性と電子輸送性とを兼ね備えた高分子とすることができる。

【0042】

本発明に係る非共役系高分子は、下記一般式（I-1）及び（I-2）で示される構造から選択された少なくとも1種を部分構造として含む繰り返し単位よりなる高分子であることが好ましい。このような非共役系高分子は、発光時の熱安定性、溶剤や樹脂に対する溶解性及び相溶解性に優れているために、有機電界発光素子の製造がより容易であり、さらに、有機電界発光素子としての発光特性や素子寿命等の信頼性を向上させることができる。

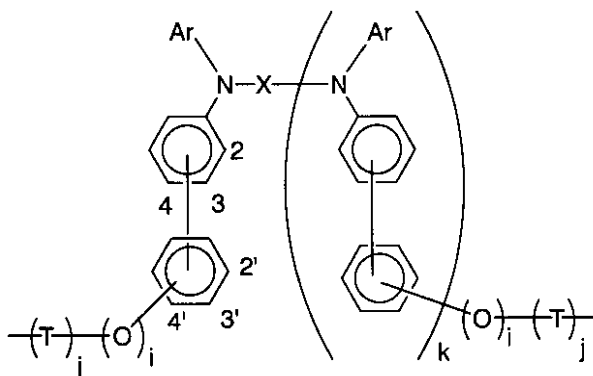
【0043】

【化 5】



(I - 1)

10



(I - 2)

20

【0044】

一般式 (I - 1) 及び (I - 2) 中、Ar は、置換若しくは未置換のフェニル基、置換若しくは未置換の芳香環数 2 ～ 10 の 1 価の多核芳香族炭化水素、置換若しくは未置換の芳香環数 2 ～ 10 の 1 価の縮合芳香族炭化水素又は置換若しくは未置換の 1 価の芳香族複素環を表し、X は置換若しくは未置換のフェニレン基、置換若しくは未置換の芳香環数 2 ～ 10 の 2 価の多核芳香族炭化水素、置換若しくは未置換の芳香環数 2 ～ 10 の 2 価の縮合芳香族炭化水素又は置換若しくは未置換の 2 価の芳香族複素環を表し、T は炭素数 1 ～ 6 の 2 価の直鎖状炭化水素基又は炭素数 2 ～ 10 の 2 価の分枝鎖状炭化水素基を表し、k、i、j はそれぞれ独立に 0 又は 1 を表す。

30

【0045】

なお、Ar を表す構造の一つとして選択される多核芳香族炭化水素及び縮合芳香族炭化水素とは、本発明においては、具体的には以下に定義されることをいう。

40

すなわち、「多核芳香族炭化水素」とは、炭素と水素から構成される芳香環が 2 個以上存在し、環同士が炭素－炭素結合によって結合している炭化水素をいう。具体的には、ビフェニル、ターフェニル等が挙げられる。

また、「縮合芳香族炭化水素」とは、炭素と水素から構成される芳香環が 2 個以上存在し、環同士が 1 対の炭素原子を共有している炭化水素をいう。具体的には、ナフタレン、アントラセン、フェナントレン、フルオレン等が挙げられる。

【0046】

また、Ar を表す構造の一つとして選択される芳香族複素環とは、炭素と水素以外の元素も含む芳香環をいう。その環骨格を構成する原子 (Nr) は、Nr = 5 及び / 又は 6 が好ましく用いられる。また、環骨格を構成する炭素原子以外の原子 (異種原子) の種類及

50

び数は特に限定されないが、例えば、硫黄原子、窒素原子、酸素原子等が好ましく用いられ、前記環骨格中には2種類以上及び／又は2個以上の異種原子が含まれてもよい。特に5員環構造をもつ複素環として、チオフェン、ピロール及びフラン、または前記化合物の3位並び4位の炭素を窒素で置き換えた複素環が好ましく用いられ、6員環構造を持つ複素環として、ピリジンが好ましく用いられる。

【0047】

A_rで表されるフェニル基、多核芳香族炭化水素、縮合芳香族炭化水素又は芳香族複素環に係る置換基としては、水素原子、アルキル基、アルコキシ基、アリール基、アラルキル基、置換アミノ基、ハロゲン原子等が挙げられる。アルキル基としては、炭素数1～10のものが好ましく、例えば、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基等が挙げられる。アルコキシ基としては、炭素数1～10のものが好ましく、例えば、メトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基、イソプロポキシ基等が挙げられる。アリール基としては、炭素数6～20のものが好ましく、例えば、フェニル基、トルイル基等が挙げられる、アラルキル基としては、炭素数7～20のものが好ましく、例えば、ベンジル基、フェネチル基等が挙げられる。置換アミノ基の置換基としては、アルキル基、アリール基、アラルキル基等が挙げられ、具体例は前述の通りである。

10

【0048】

本発明において、好ましいA_rとしては、フェニル基、多核芳香族炭化水素、縮合芳香族炭化水素が挙げられる。

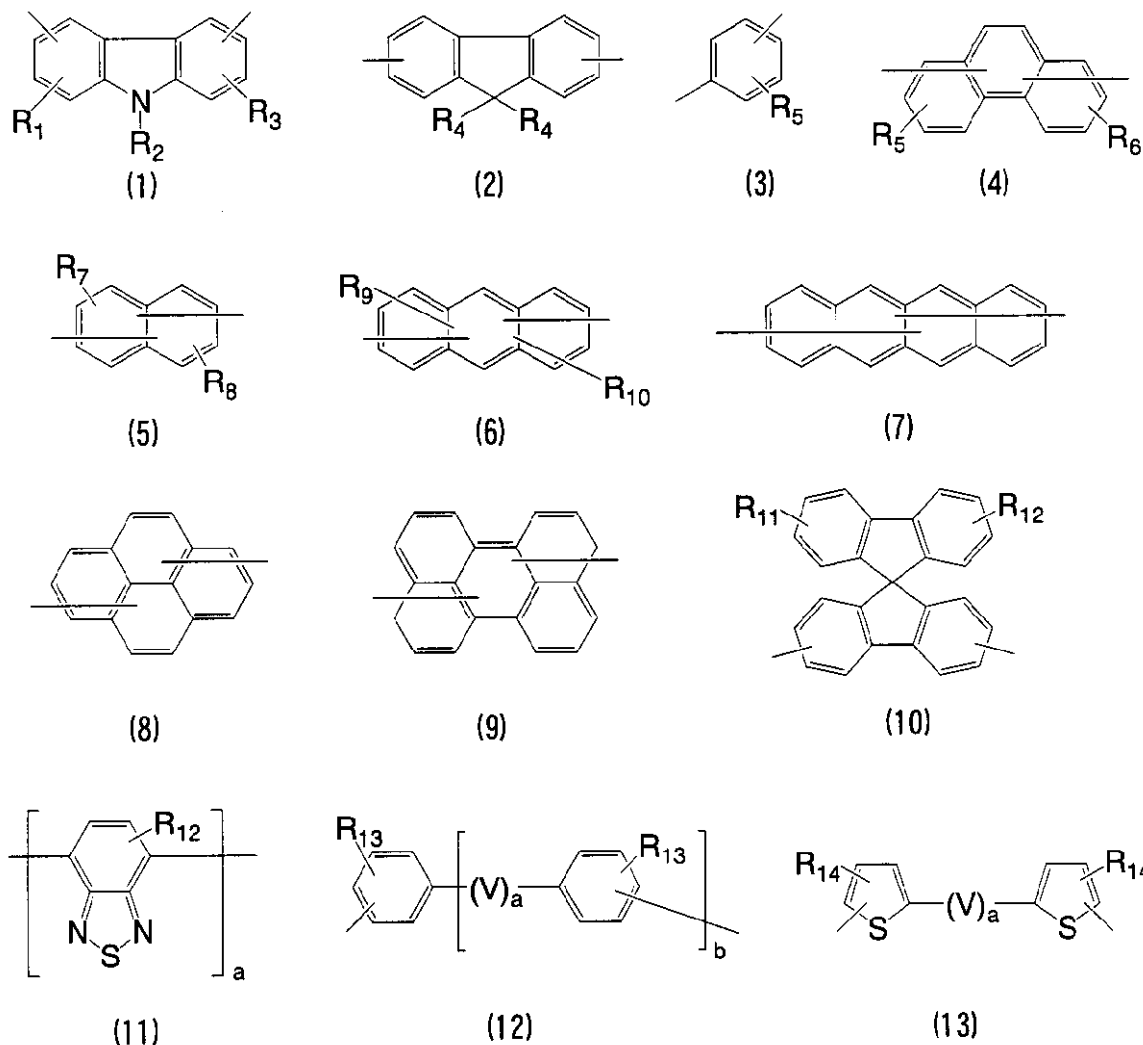
【0049】

Xは置換若しくは未置換のフェニレン基、置換若しくは未置換の芳香環数2～10の2価の多核芳香族炭化水素、置換若しくは未置換の芳香環数2～10の2価の縮合芳香族炭化水素又は置換若しくは未置換の2価の芳香族複素環を表し具体的には下記の式(1)～(13)から選択された基が挙げられる。

20

【0050】

【化 6】



10

20

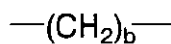
30

【 0 0 5 1 】

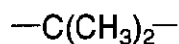
式中、 $R_1 \sim R_{14}$ は、水素原子、炭素数 1 ～ 10 のアルキル基、炭素数 1 ～ 10 のアルコキシ基、置換若しくは未置換のフェニル基、置換若しくは未置換のアラルキル基、又はハロゲン原子を表し、 a は 0 または 1 を意味し、 b は 0 ～ 10 の整数を意味する。 V は下記の式 (13) ～ (33) から選択された基を表す。

【 0 0 5 2 】

【化 7】



(13)



(14)



(15)



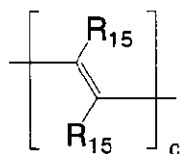
(16)



(17)



(18)



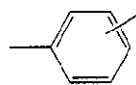
(19)



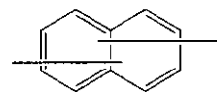
(20)



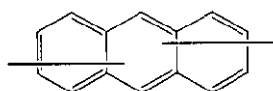
(21)



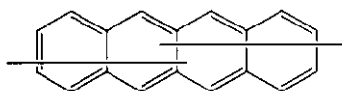
(22)



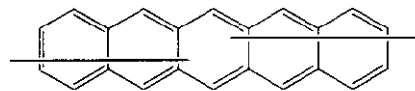
(23)



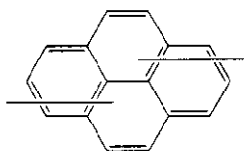
(24)



(25)



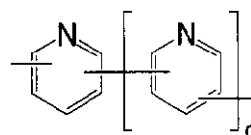
(26)



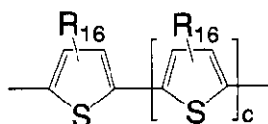
(27)



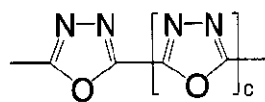
(28)



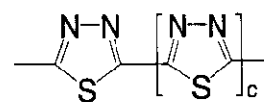
(29)



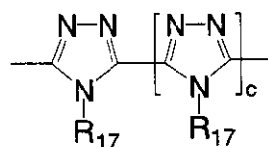
(30)



(31)



(32)



(33)

10

20

30

40

【0053】

R_{15} は水素原子、アルキル基、シアノ基を表し、 $R_{16} \sim R_{17}$ は、水素原子、炭素数1～10のアルキル基、炭素数1～10のアルコキシル基、置換若しくは未置換のフェニル基、置換若しくは未置換のアラルキル基、又はハロゲン原子を表し、 b は1～10の整数を意味し、 c は0～10の整数を意味する。

【0054】

好ましいXとしては、フェニレン基、多核芳香族炭化水素、縮合芳香族炭化水素が挙げられる。

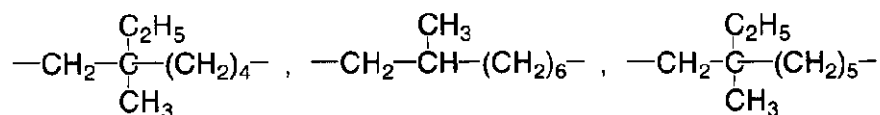
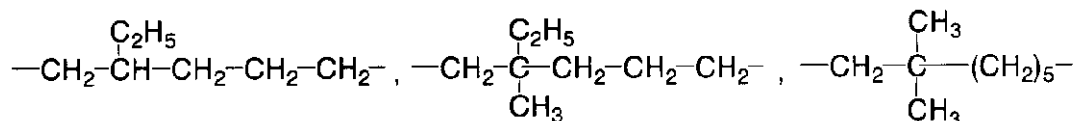
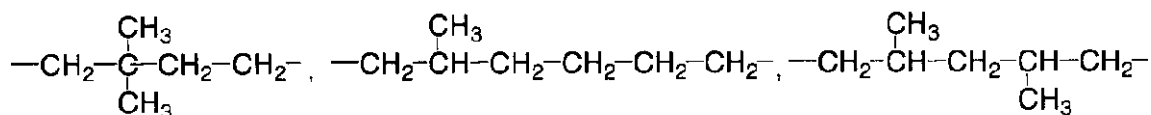
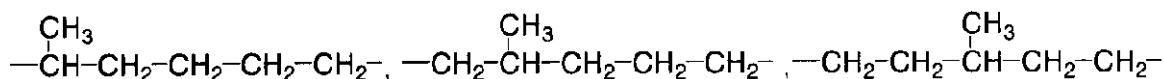
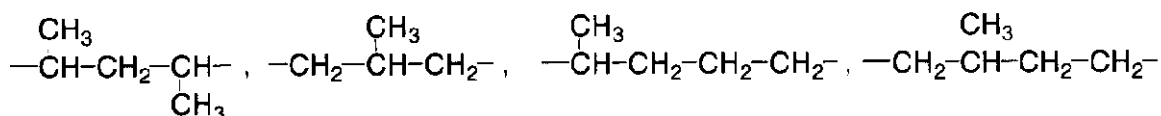
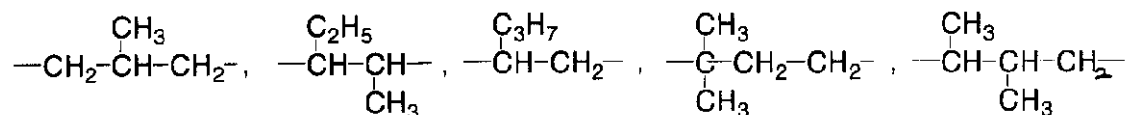
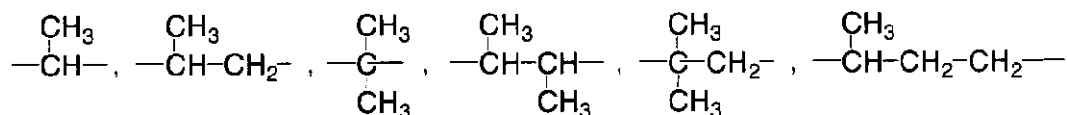
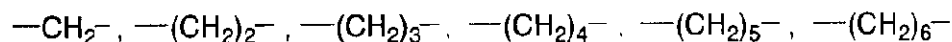
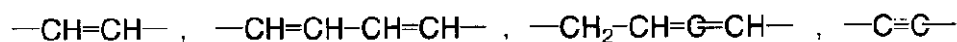
【0055】

50

Tは、炭素数1～6の2価の直鎖状炭化水素基または炭素数2～10の2価の分枝鎖状炭化水素基を示し、好ましくは炭素数が2～6の2価の直鎖状炭化水素基および炭素数3～7の2価の分枝鎖状炭化水素基より選択される。具体的な構造を以下に示す。

【0056】

【化8】



【0057】

以下、本発明における一般式(I-1)で示される構造の具体例を表1～22に示し、一般式(I-2)で示される構造の具体例を表23～43に示す。

【0058】

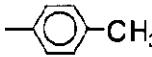
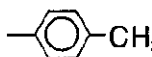
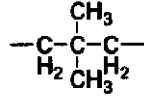
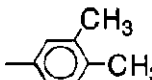
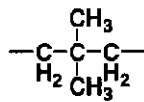
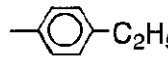
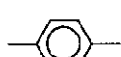
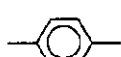
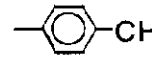
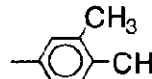
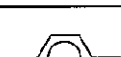
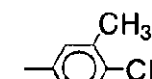
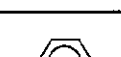
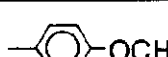
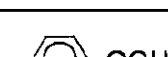
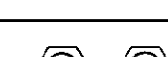
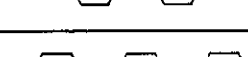
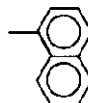
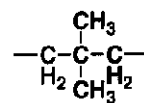
10

20

30

40

【表 1】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
1	0			3	0	0	-
2	0			4	0	1	-CH ₂ CH ₂ -
3	0			3	0	1	-CH ₂ CH ₂ -
4	0			4	0	1	
5	0			4	0	1	
6	0			4	0	1	-CH ₂ CH ₂ -
7	0			4	0	1	-CH ₂ CH ₂ -
8	0			4	0	1	-CH ₂ -
9	0			4	0	1	-CH ₂ CH ₂ -
10	0			4	0	0	-
11	0			4	0	1	-CH ₂ -
12	0			4	0	1	-CH ₂ CH ₂ -
13	0			4	0	1	-CH ₂ -
14	0			4	0	1	-CH ₂ CH ₂ -
15	0			4	0	1	

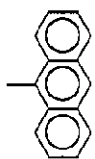
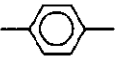
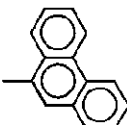
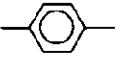
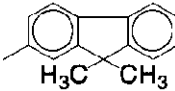
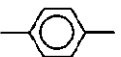
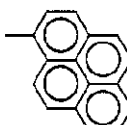
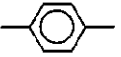
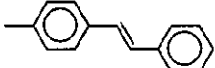
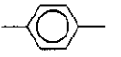
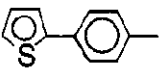
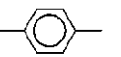
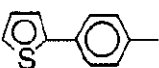
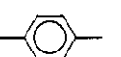
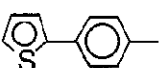
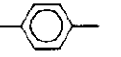
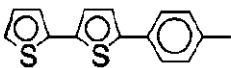
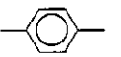
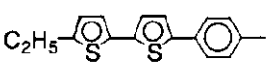
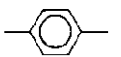
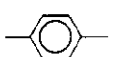
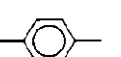
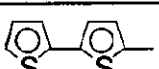
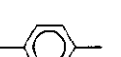
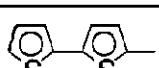
10

20

30

40

【表 2】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
16	0			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
17	0			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
18	0		 H ₃ C CH ₃	4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
19	0			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
20	0			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
21	0			3	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
22	0			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
23	0			4	0	1	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ -\text{C}-\text{C}-\text{C}- \\ \quad \quad \\ \text{H}_2 \quad \text{CH}_3 \quad \text{H}_2 \end{array}$
24	0			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
25	0		 C ₂ H ₅	4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
26	0			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
27	0			4	0	0	-
28	0			4	0	0	-
29	0			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$

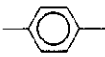
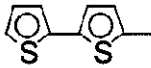
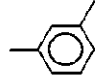
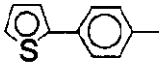
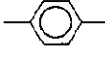
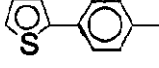
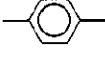
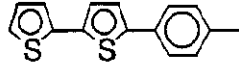
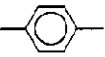
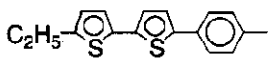
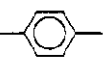
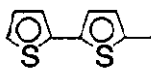
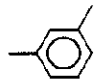
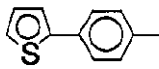
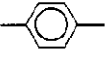
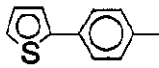
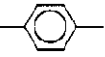
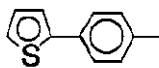
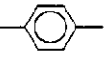
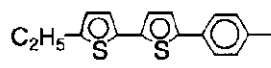
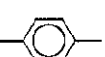
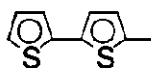
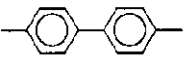
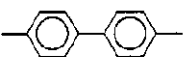
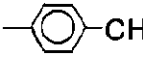
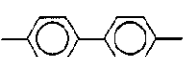
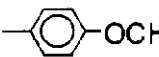
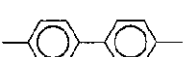
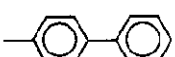
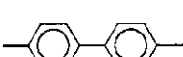
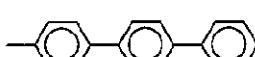
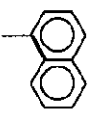
10

20

30

40

【表 3】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
30	0			4	0	0	—
31	0			4	0	0	—
32	0			4	0	0	—
33	0			4	0	0	—
34	0			4	0	0	—
35	0			4	0	0	—
36	0			3	0	1	—CH ₂ CH ₂ —
37	0			4	0	1	—CH ₂ —
38	0			4	0	1	—CH ₂ CH ₂ —
39	0			4	0	1	—CH ₂ —
40	0			4	0	1	—CH ₂ —
41	1			4	0	1	—CH ₂ CH ₂ —
42	1			4	0	1	—CH ₂ CH ₂ —
43	1			4	0	1	—CH ₂ CH ₂ —
44	1			4	0	1	—CH ₂ CH ₂ —
45	1			4	0	1	—CH ₂ CH ₂ —
46	1			4	0	1	—CH ₂ CH ₂ —

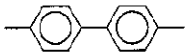
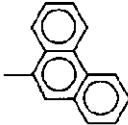
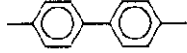
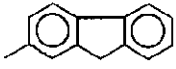
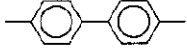
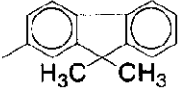
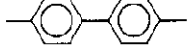
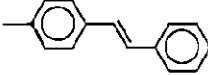
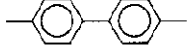
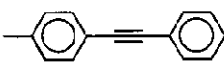
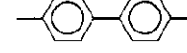
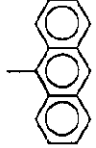
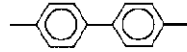
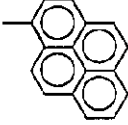
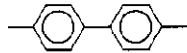
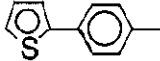
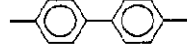
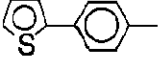
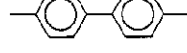
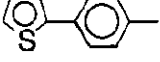
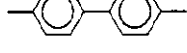
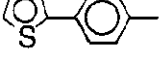
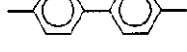
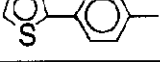
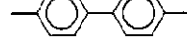
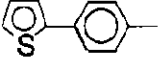
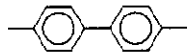
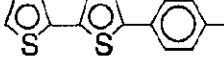
10

20

30

40

【表 4】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
47	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
48	1			4	0	1	$-\text{C}(\text{CH}_3)(\text{H}_2)-\text{C}(\text{CH}_3)(\text{H}_2)-$
49	1			4	0	1	$-\text{C}(\text{CH}_3)(\text{H}_2)-\text{C}(\text{CH}_3)(\text{H}_2)-$
50	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
51	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
52	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
53	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
54	1			2	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
55	1			3	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
56	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
57	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
58	1			4	0	1	$-(\text{CH}_2)_4-$
59	1			4	0	1	$-\text{C}(\text{CH}_3)(\text{H}_2)-\text{C}(\text{CH}_3)(\text{H}_2)-$
60	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$

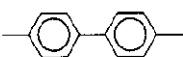
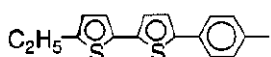
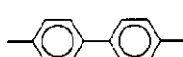
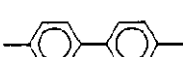
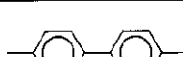
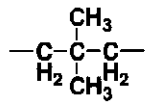
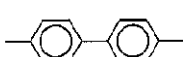
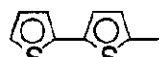
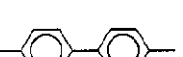
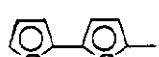
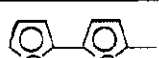
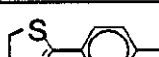
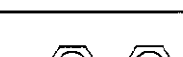
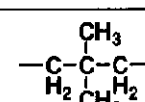
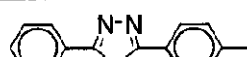
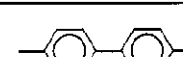
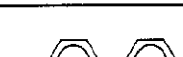
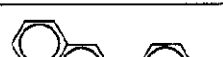
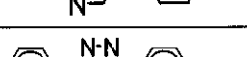
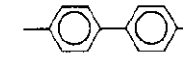
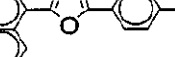
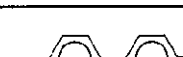
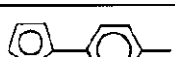
10

20

30

40

【表 5】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
61	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
62	1			3	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
63	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
64	1			4	0	1	
65	1			3	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
66	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
67	1			4	0	1	$-(\text{CH}_2)_3-$
68	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
69	1			4	0	1	
70	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
71	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
72	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
73	1			3	0	1	$-\text{CH}_2-$
74	1			3	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
75	1			4	0	0	—
76	1			4	0	0	—

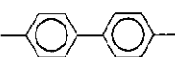
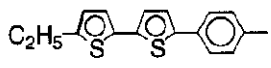
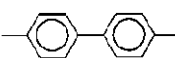
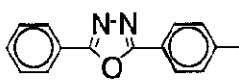
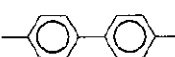
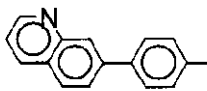
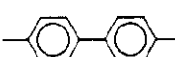
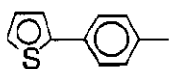
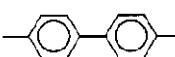
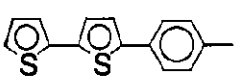
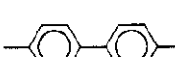
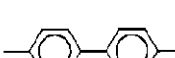
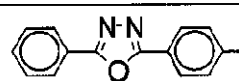
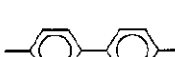
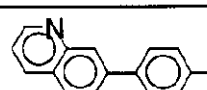
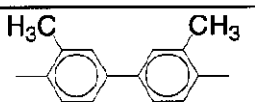
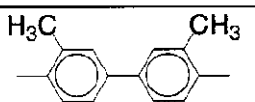
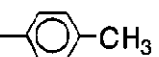
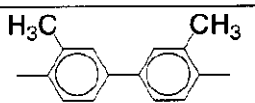
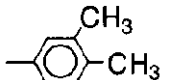
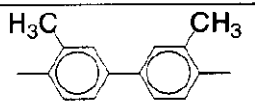
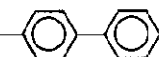
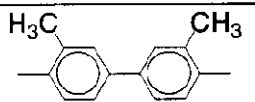
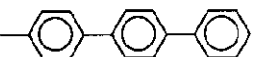
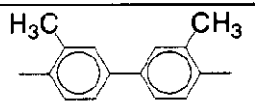
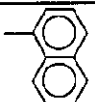
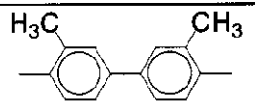
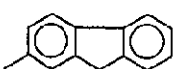
10

20

30

40

【表 6】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
77	1			4	0	0	—
78	1			4	0	0	—
79	1			4	0	0	—
80	1			4	0	1	—CH ₂ —
81	1			4	0	1	—CH ₂ —
82	1			4	0	1	—CH ₂ —
83	1			4	0	1	—CH ₂ —
84	1			4	0	1	—CH ₂ —
85	1			4	0	1	—CH ₂ CH ₂ —
86	1			4	0	1	—CH ₂ CH ₂ —
87	1			4	0	1	—CH ₂ CH ₂ —
88	1			4	0	1	—CH ₂ CH ₂ —
89	1			4	0	1	—CH ₂ CH ₂ —
90	1			4	0	1	—CH ₂ CH ₂ —
91	1			4	0	1	—CH ₂ CH ₂ —

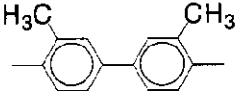
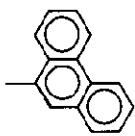
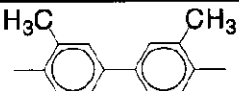
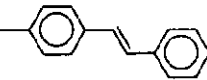
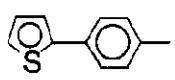
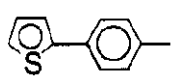
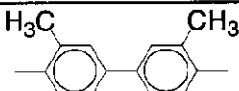
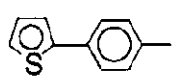
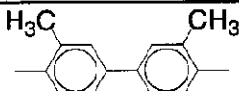
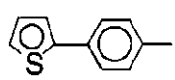
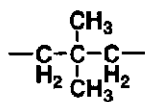
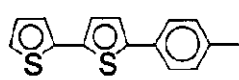
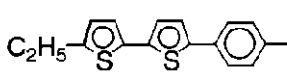
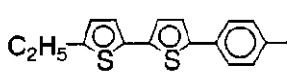
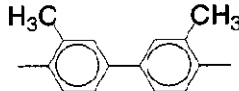
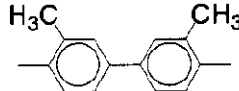
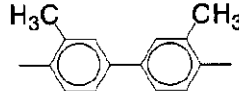
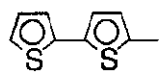
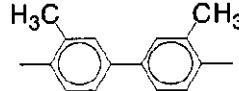
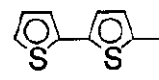
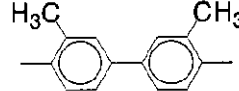
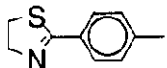
10

20

30

40

【表 7】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
92	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
93	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
94	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
95	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
96	1			4	0	1	$(\text{CH}_2)_4$
97	1			4	0	1	
98	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
99	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
100	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
101	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
102	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
103	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
104	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
105	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$

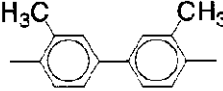
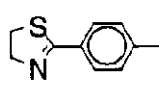
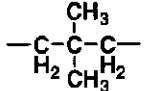
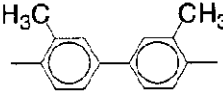
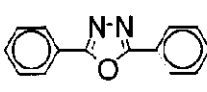
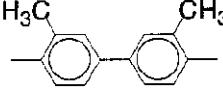
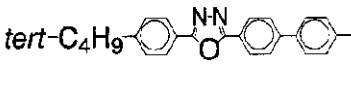
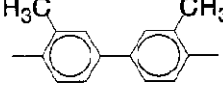
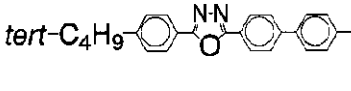
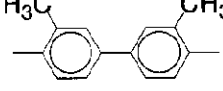
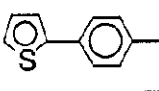
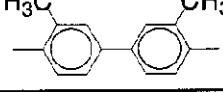
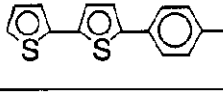
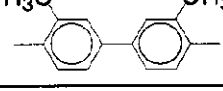
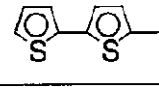
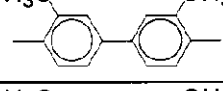
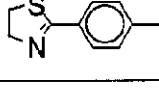
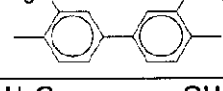
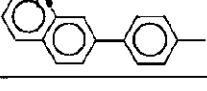
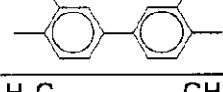
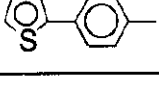
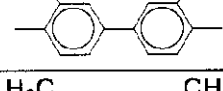
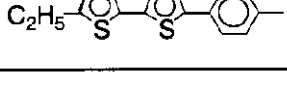
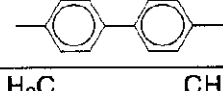
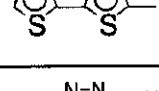
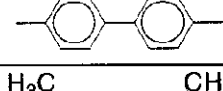
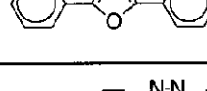
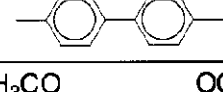
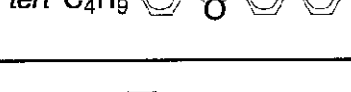
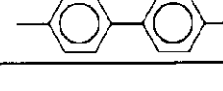
10

20

30

40

【表 8】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
106	1			4	0	1	
107	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
108	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
109	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
110	1			4	0	0	—
111	1			4	0	0	—
112	1			4	0	0	—
113	1			4	0	0	—
114	1			4	0	0	—
115	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
116	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
117	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
118	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
119	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
120	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$

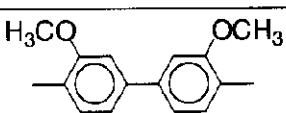
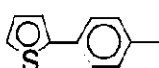
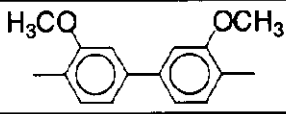
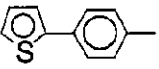
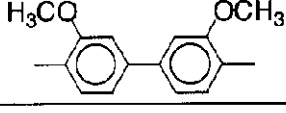
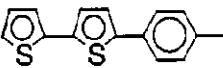
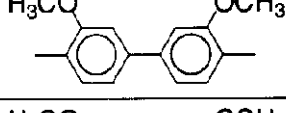
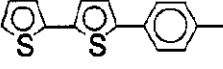
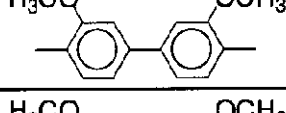
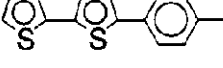
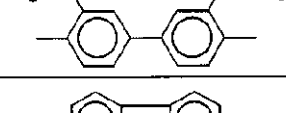
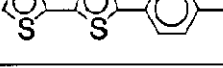
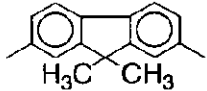
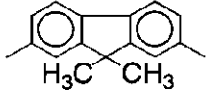
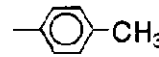
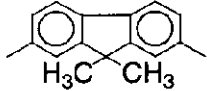
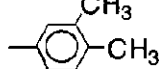
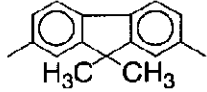
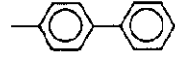
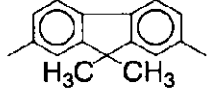
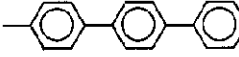
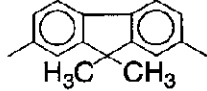
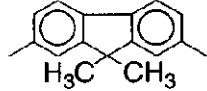
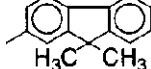
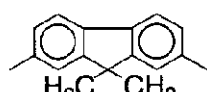
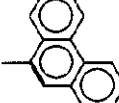
10

20

30

40

【表 9】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
121	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
122	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
123	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
124	1			4	0	1	$-\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2-$
125	1			4	0	0	—
126	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
127	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
128	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
129	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
130	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
131	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
132	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
133	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
134	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$

10

20

30

40

【表 10】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
135	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
136	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
137	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
138	1			4	0	1	$-(\text{CH}_2)_4-$
139	1			4	0	1	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ -\text{C}-\text{C}-\text{C}- \\ \quad \quad \\ \text{H}_2 \quad \text{CH}_3 \quad \text{H}_2 \end{array}$
140	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
141	1			4	0	0	—
142	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
143	1			3	0	0	—
144	1			4	0	0	—
145	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
146	1			4	0	0	—
147	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
148	1			4	0	1	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ -\text{C}-\text{C}-\text{C}- \\ \quad \quad \\ \text{H}_2 \quad \text{CH}_3 \quad \text{H}_2 \end{array}$
149	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$

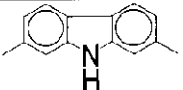
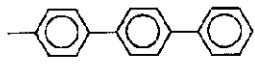
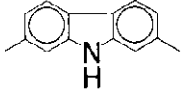
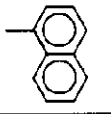
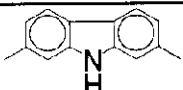
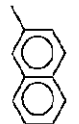
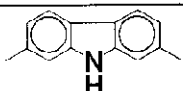
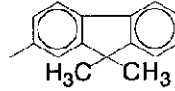
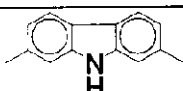
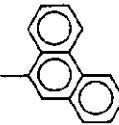
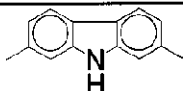
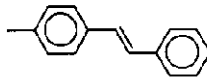
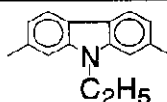
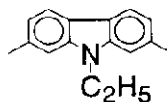
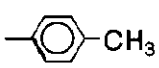
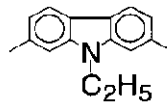
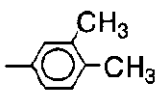
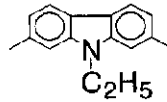
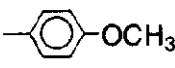
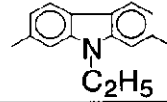
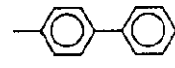
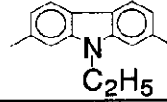
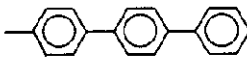
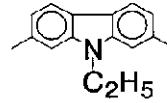
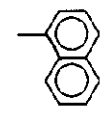
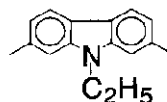
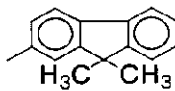
10

20

30

40

【表 1 1】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
150	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
151	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
152	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
153	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
154	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
155	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
156	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
157	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
158	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
159	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
160	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
161	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
162	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
163	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$

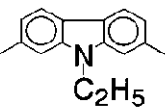
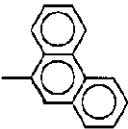
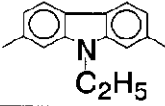
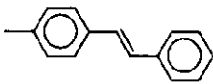
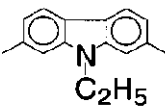
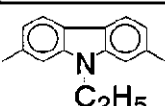
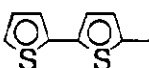
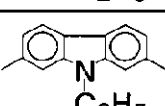
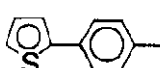
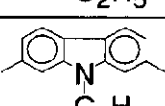
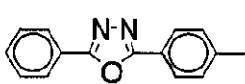
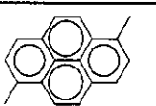
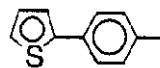
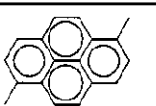
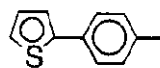
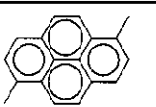
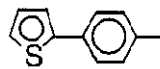
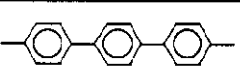
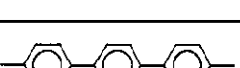
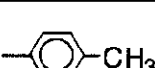
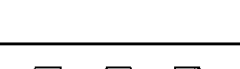
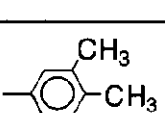
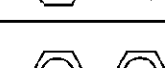
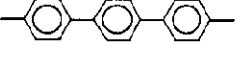
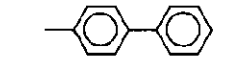
10

20

30

40

【表 1 2】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
164	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
165	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
166	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
167	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
168	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
169	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
170	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
171	1			4	0	0	—
172	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
173	1			4	0	0	—
174	1			4	0	0	—
175	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
176	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
177	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$

10

20

30

40

【表 1 3】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
178	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
179	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
180	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
181	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
182	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
183	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
184	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
185	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
186	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
187	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
188	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
189	1			4	0	0	—
190	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
191	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
192	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
193	1			4	0	1	

10

20

30

40

【表 1 4】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
194	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
195	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
196	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
197	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
198	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
199	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
200	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
201	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
202	1			4	0	1	$-(\text{CH}_2)_3-$
203	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
204	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
205	1			4	0	0	—
206	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
207	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
208	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
209	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$

10

20

30

40

【表 15】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
210	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
211	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
212	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
213	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
214	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
215	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
216	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
217	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
218	1			4	0	0	—
219	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
220	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
221	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
222	1			4	0	0	—
223	1			4	0	1	$-(\text{CH}_2)_3-$
224	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
225	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$

10

20

30

40

【表 16】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
226	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
227	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
228	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
229	1			4	0	1	$-(\text{CH}_2)_3-$
230	1			4	0	0	—
231	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
232	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
233	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
234	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
235	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
236	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
237	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
238	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
239	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
240	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
241	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
242	1			4	0	1	$-(\text{CH}_2)_3-$

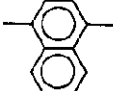
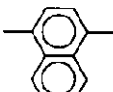
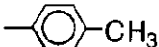
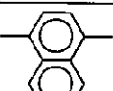
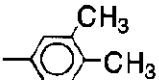
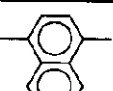
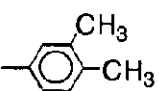
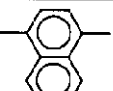
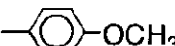
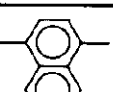
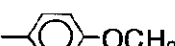
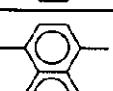
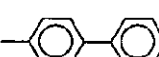
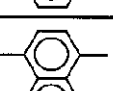
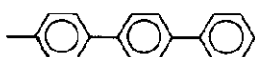
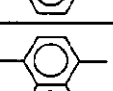
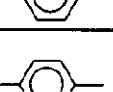
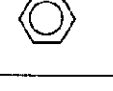
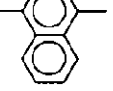
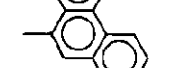
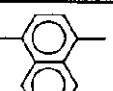
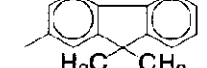
10

20

30

40

【表 17】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
243	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
244	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
245	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
246	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
247	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
248	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
249	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
250	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
251	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
252	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
253	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
254	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
255	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$

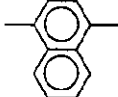
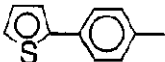
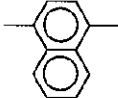
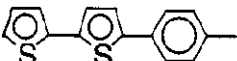
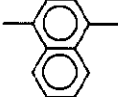
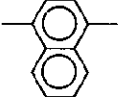
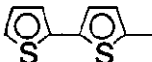
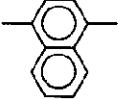
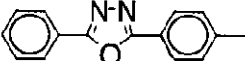
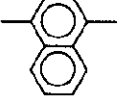
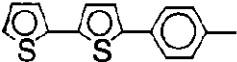
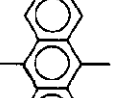
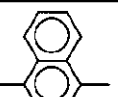
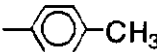
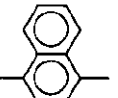
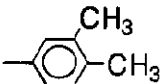
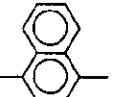
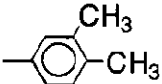
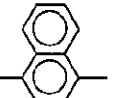
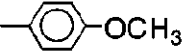
10

20

30

40

【表 18】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
256	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
257	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
258	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
259	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
260	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
261	1			4	0	1	$-(\text{CH}_2)_3-$
262	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
263	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
264	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
265	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
266	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$

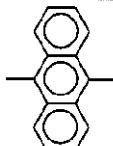
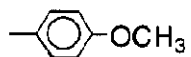
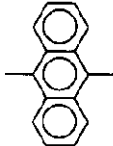
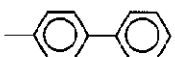
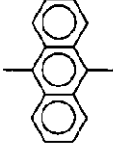
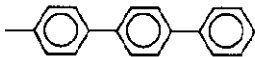
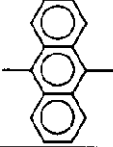
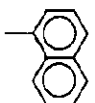
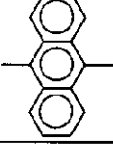
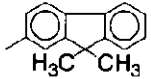
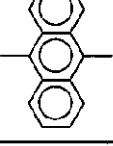
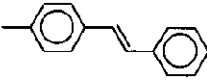
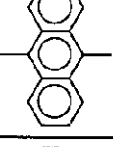
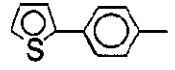
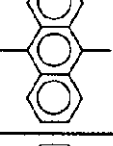
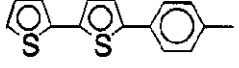
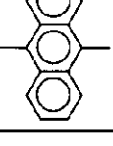
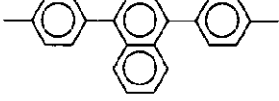
10

20

30

40

【表 19】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
267	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
268	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
269	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
270	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
271	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
272	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
273	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
274	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
275	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
276	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$

10

20

30

40

【表 20】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
277	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
278	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
279	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
280	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
281	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
282	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
283	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
284	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
285	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
286	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
287	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$

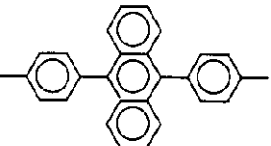
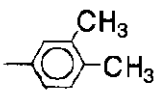
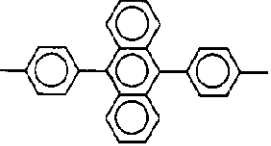
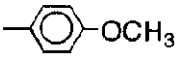
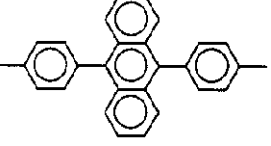
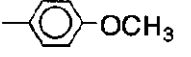
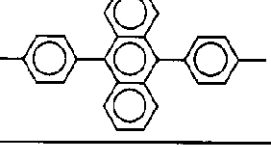
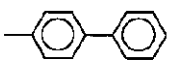
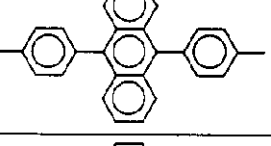
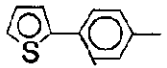
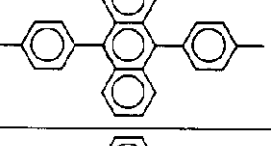
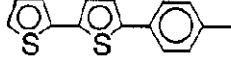
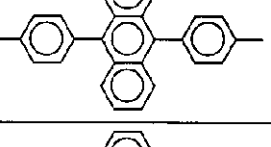
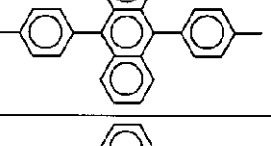
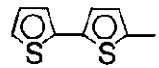
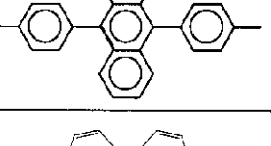
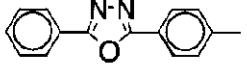
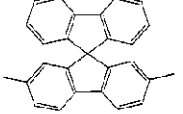
10

20

30

40

【表 2 1】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
288	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
289	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
290	1			4	0	1	$-(\text{CH}_2)_3-$
291	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
292	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
293	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
294	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
295	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
296	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
297	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$

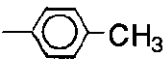
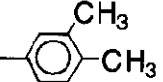
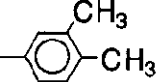
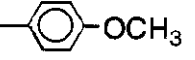
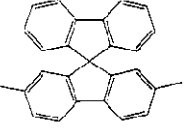
10

20

30

40

【表 2 2】

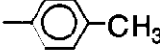
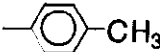
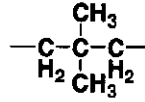
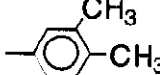
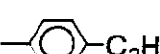
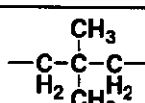
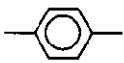
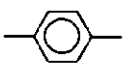
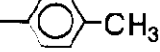
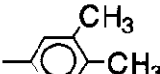
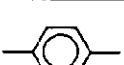
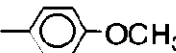
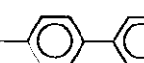
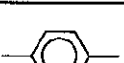
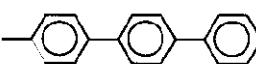
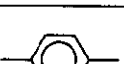
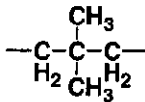
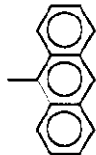
構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
298	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
299	1			4	0	1	$-\text{CH}_2-$
300	1			4	0	1	$-(\text{CH}_2)_3-$
301	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
302	1			4	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$

10

20

【 0 0 8 0 】

【表 2 3】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
303	0			4,4'	0	0	—
304	0			4,4'	1	1	—CH ₂ CH ₂ —
305	0			4,4'	0	1	—CH ₂ CH ₂ —
306	0			4,4'	0	1	
307	0			4,4'	0	1	—CH ₂ CH ₂ —
308	0			4,4'	0	1	
309	0			4,4'	0	1	—CH ₂ CH ₂ —
310	0			4,4'	0	1	—CH ₂ —
311	0			4,4'	0	1	—CH ₂ CH ₂ —
312	0			4,4'	0	1	—CH ₂ CH ₂ —
313	0			4,4'	0	1	—CH ₂ —
314	0			4,4'	0	1	—CH ₂ CH ₂ —
315	0			4,4'	0	1	
316	0			4,4'	0	1	—CH ₂ —

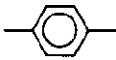
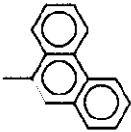
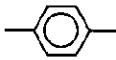
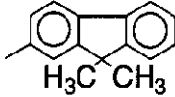
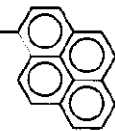
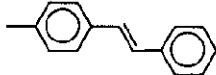
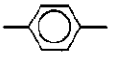
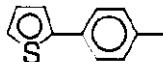
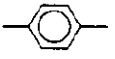
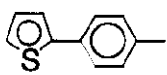
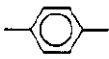
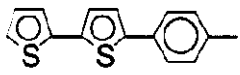
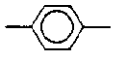
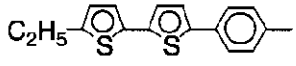
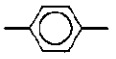
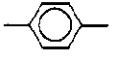
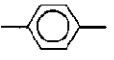
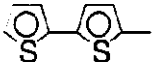
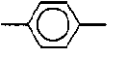
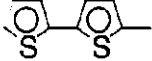
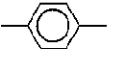
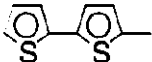
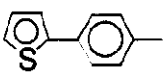
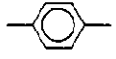
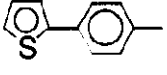
10

20

30

40

【表 2 4】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
317	0			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
318	0			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
319	0			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
320	0			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
321	0			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
322	0			4,4'	0	1	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ -\text{C}-\text{C}-\text{C}- \\ \quad \\ \text{H}_2 \quad \text{H}_2 \\ \quad \\ \text{CH}_3 \end{array}$
323	0			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
324	0			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
325	0			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
326	0			4,4'	0	0	—
327	0			4,4'	1	0	—
328	0			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
329	0			4,4'	1	0	$-(\text{CH}_2)_4-$
330	0			4,4'	0	0	—
331	0			4,4'	0	0	—

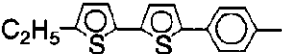
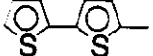
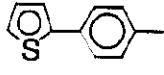
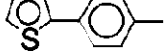
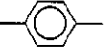
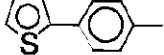
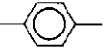
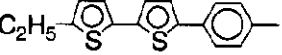
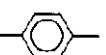
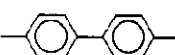
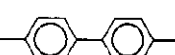
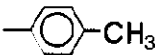
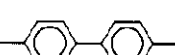
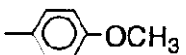
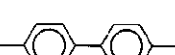
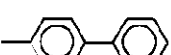
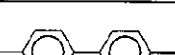
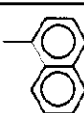
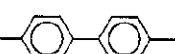
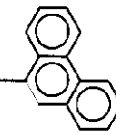
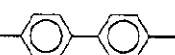
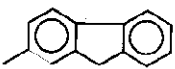
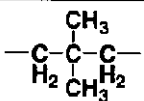
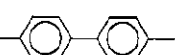
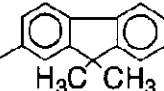
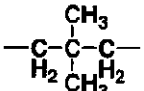
10

20

30

40

【表 2 5】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
332	0			4,4'	0	0	—
333	0			4,4'	0	0	—
334	0			4,4'	1	1	—CH ₂ CH ₂ —
335	0			4,4'	1	1	—CH ₂ —
336	0			4,4'	1	1	—CH ₂ CH ₂ —
337	0			4,4'	1	1	—CH ₂ —
338	0			4,4'	1	1	—CH ₂ —
339	1			4,4'	0	1	—CH ₂ CH ₂ —
340	1			4,4'	0	1	—CH ₂ CH ₂ —
341	1			4,4'	0	1	—CH ₂ CH ₂ —
342	1			4,4'	0	1	—CH ₂ CH ₂ —
343	1			4,4'	0	1	—CH ₂ CH ₂ —
344	1			4,4'	0	1	—CH ₂ CH ₂ —
345	1			4,4'	0	1	—CH ₂ —
346	1			4,4'	0	1	
347	1			4,4'	0	1	

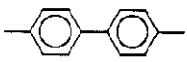
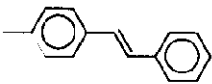
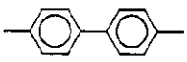
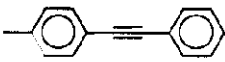
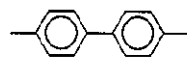
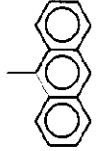
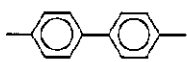
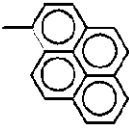
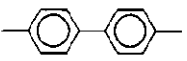
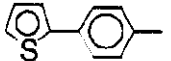
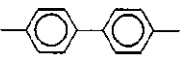
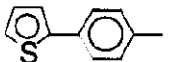
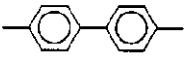
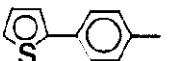
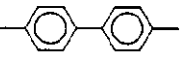
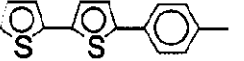
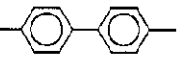
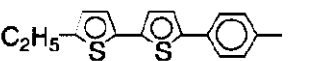
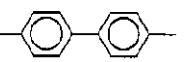
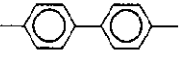
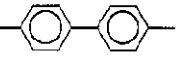
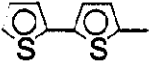
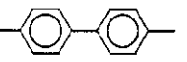
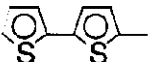
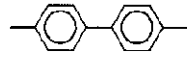
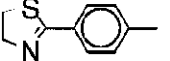
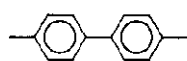
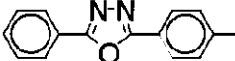
10

20

30

40

【表 2 6】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
348	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
349	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
350	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
351	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
352	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
353	1			4,4'	0	1	$-(\text{CH}_2)_4-$
354	1			4,4'	0	1	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ -\text{C}-\text{C}-\text{C}- \\ \quad \quad \\ \text{H}_2 \quad \text{CH}_3 \quad \text{H}_2 \end{array}$
355	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
356	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
357	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
358	1			4,4'	0	1	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ -\text{C}-\text{C}-\text{C}- \\ \quad \quad \\ \text{H}_2 \quad \text{CH}_3 \quad \text{H}_2 \end{array}$
359	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
360	1			4,4'	0	1	$-(\text{CH}_2)_3-$
361	1			4,4'	0	1	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ -\text{C}-\text{C}-\text{C}- \\ \quad \quad \\ \text{H}_2 \quad \text{CH}_3 \quad \text{H}_2 \end{array}$
362	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$

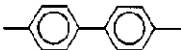
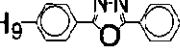
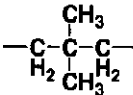
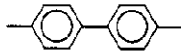
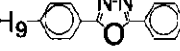
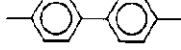
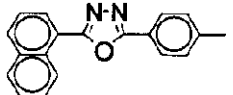
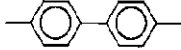
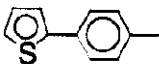
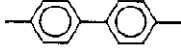
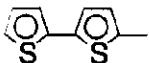
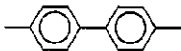
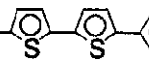
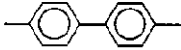
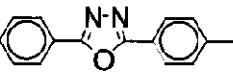
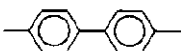
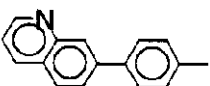
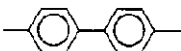
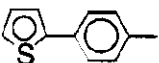
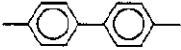
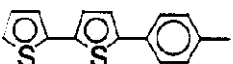
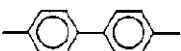
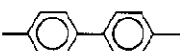
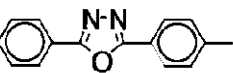
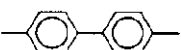
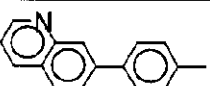
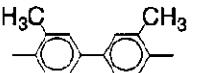
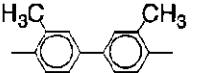
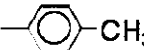
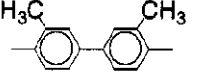
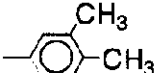
10

20

30

40

【表 27】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
363	1		<i>tert</i> -C ₄ H ₉ - 	4,4'	0	1	
364	1		<i>tert</i> -C ₄ H ₉ - 	4,4'	0	1	-CH ₂ CH ₂ -
365	1			4,4'	0	1	-CH ₂ CH ₂ -
366	1			4,4'	0	0	-
367	1			4,4'	0	1	-CH ₂ CH ₂ -
368	1		C ₂ H ₅ - 	4,4'	0	1	-CH ₂ CH ₂ -
369	1			4,4'	0	1	-CH ₂ CH ₂ -
370	1			4,4'	0	0	-
371	1			4,4'	0	1	-CH ₂ -
372	1			4,4'	0	1	-CH ₂ -
373	1			4,4'	0	1	-CH ₂ -
374	1			4,4'	0	1	-CH ₂ -
375	1			4,4'	0	1	-CH ₂ -
376	1			4,4'	0	1	-CH ₂ CH ₂ -
377	1			4,4'	0	1	-CH ₂ CH ₂ -
378	1			4,4'	1	1	-CH ₂ CH ₂ -

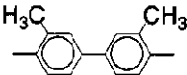
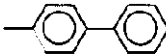
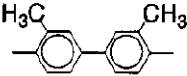
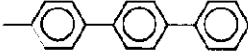
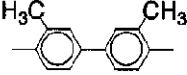
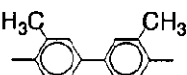
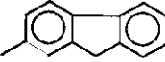
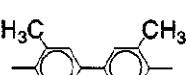
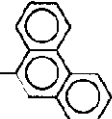
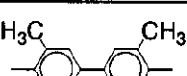
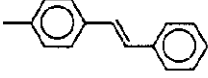
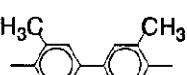
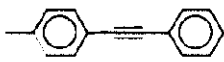
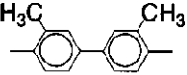
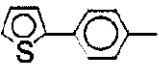
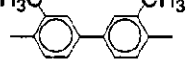
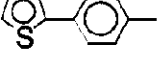
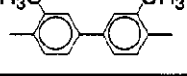
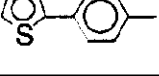
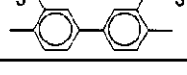
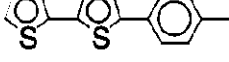
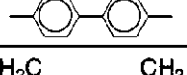
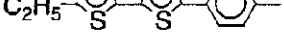
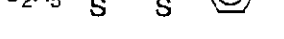
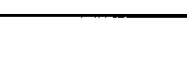
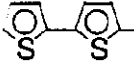
10

20

30

40

【表 28】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
379	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
380	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
381	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
382	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
383	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
384	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
385	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
386	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
387	1			4,4'	0	1	$(\text{CH}_2)_4$
388	1			4,4'	0	1	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ -\text{C}-\text{C}-\text{C}- \\ \quad \quad \\ \text{H}_2 \quad \text{CH}_3 \quad \text{H}_2 \end{array}$
389	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
390	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
391	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
392	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
393	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$

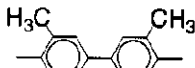
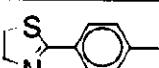
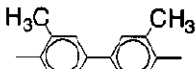
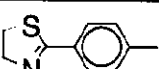
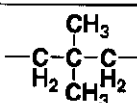
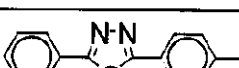
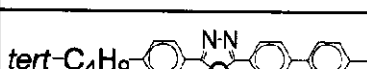
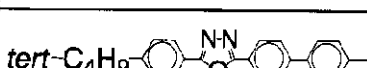
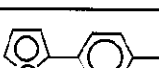
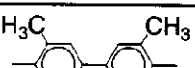
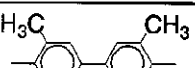
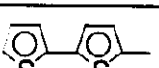
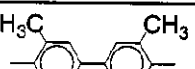
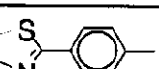
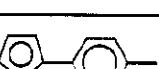
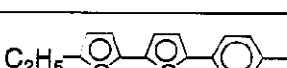
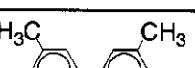
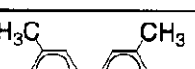
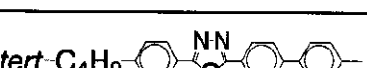
10

20

30

40

【表 2 9】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
394	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
395	1			4,4'	0	1	
396	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
397	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
398	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
399	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
400	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
401	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
402	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
403	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
404	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
405	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
406	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
407	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
408	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
409	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$

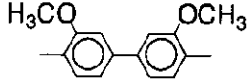
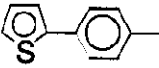
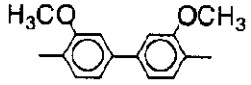
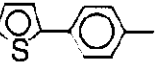
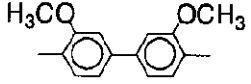
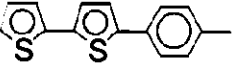
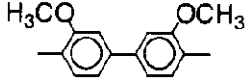
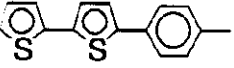
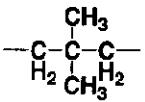
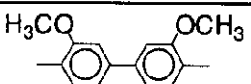
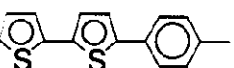
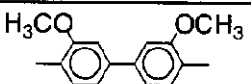
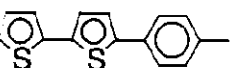
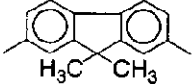
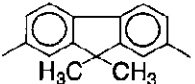
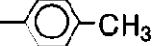
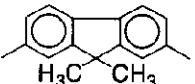
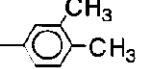
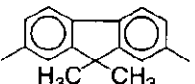
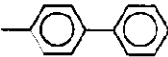
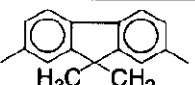
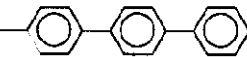
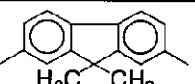
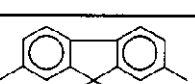
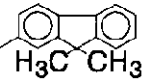
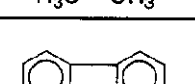
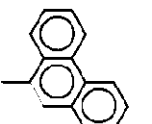
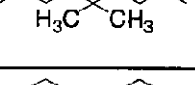
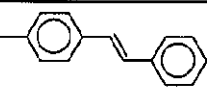
10

20

30

40

【表 30】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
410	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
411	1			4,4'	1	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
412	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
413	1			4,4'	0	1	
414	1			4,4'	0	0	—
415	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
416	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
417	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
418	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
419	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
420	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
421	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
422	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
423	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
424	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$

10

20

30

40

【表 3 1】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
425	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
426	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
427	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
428	1			4,4'	0	1	$-\text{C}(\text{CH}_3)(\text{H}_2)-\text{C}(\text{CH}_3)(\text{H}_2)-$
429	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
430	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
431	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
432	1			4,4'	0	0	—
433	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
434	1			4,4'	1	0	—
435	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
436	1			4,4'	0	1	$-\text{C}(\text{CH}_3)(\text{H}_2)-\text{C}(\text{CH}_3)(\text{H}_2)-$
437	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
438	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
439	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$

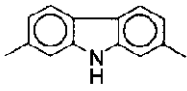
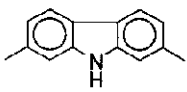
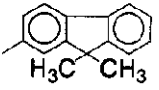
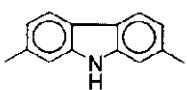
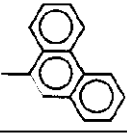
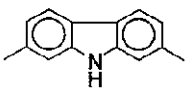
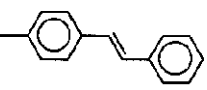
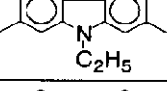
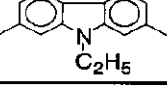
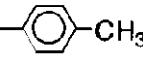
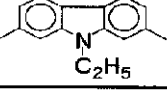
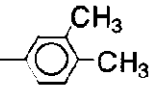
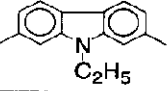
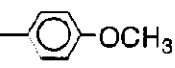
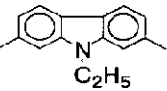
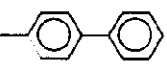
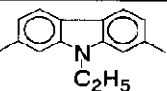
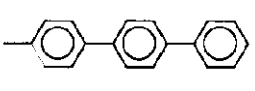
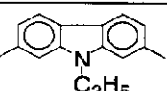
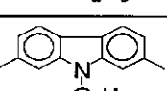
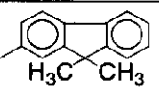
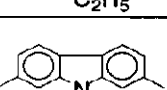
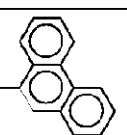
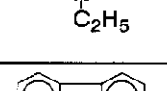
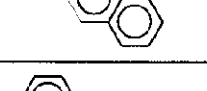
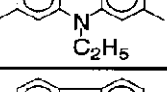
10

20

30

40

【表 3 2】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
440	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
441	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
442	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
443	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
444	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
445	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
446	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
447	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
448	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
449	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
450	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
451	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
452	1			4,4'	0	1	$-(\text{CH}_2)_3-$
453	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
454	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$

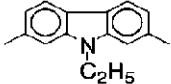
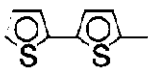
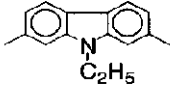
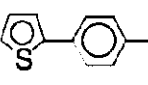
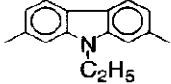
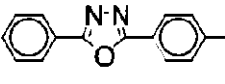
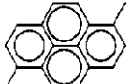
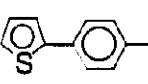
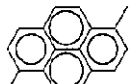
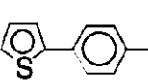
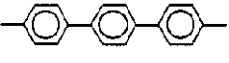
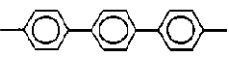
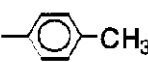
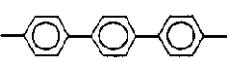
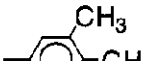
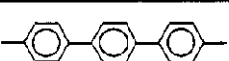
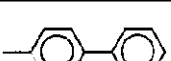
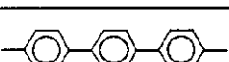
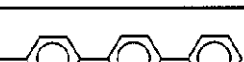
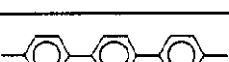
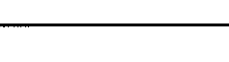
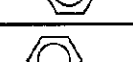
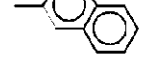
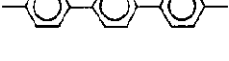
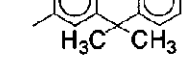
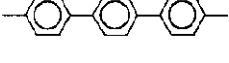
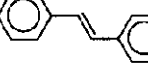
10

20

30

40

【表 3 3】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
455	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
456	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
457	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
458	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
459	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
460	1			4,4'	0	0	$-\text{CH}_2-$
461	1			4,4'	1	0	—
462	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
463	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
464	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
465	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
466	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
467	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
468	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
469	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$

10

20

30

40

【表 3 4】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
470	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
471	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
472	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
473	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
474	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
475	1			4,4'	0	0	—
476	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
477	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
478	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
479	1			4,4'	0	1	$-\text{C}(\text{CH}_3)(\text{H}_2)-\text{C}(\text{H}_2)(\text{CH}_3)-$
480	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
481	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
482	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
483	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
484	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
485	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$

10

20

30

40

【表 3 5】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
486	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
487	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
488	1			4,4'	0	1	$-(\text{CH}_2)_3-$
489	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
490	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
491	1			4,4'	0	0	—
492	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
493	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
494	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
495	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
496	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
497	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
498	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
499	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
500	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
501	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
502	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$

10

20

30

40

【表 3 6】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
503	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
504	1			4,4'	0	0	—
505	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
506	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
507	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
508	1			4,4'	0	0	—
509	1			4,4'	0	1	$-(\text{CH}_2)_3-$
510	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
511	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
512	1			4,4'	0	1	$-(\text{CH}_2)_3-$
513	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
514	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
515	1			4,4'	0	1	$-(\text{CH}_2)_3-$
516	1			4,4'	0	0	—
517	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
518	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$

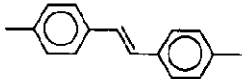
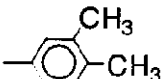
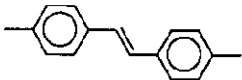
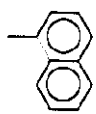
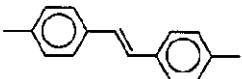
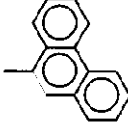
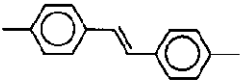
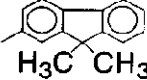
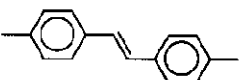
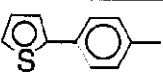
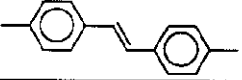
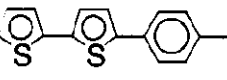
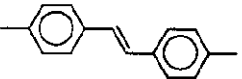
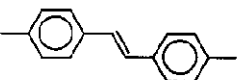
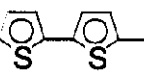
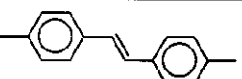
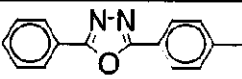
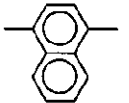
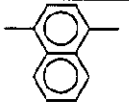
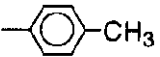
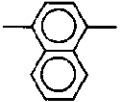
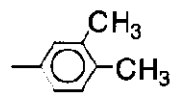
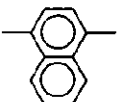
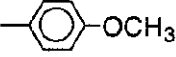
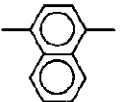
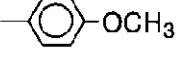
10

20

30

40

【表 3 7】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
519	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
520	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
521	1			4,4'	0	1	$-(\text{CH}_2)_3-$
522	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
523	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
524	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
525	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
526	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
527	1			4,4'	0	1	$-(\text{CH}_2)_3-$
528	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
529	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
530	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
531	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
532	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$

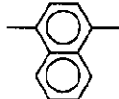
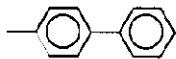
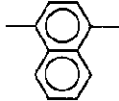
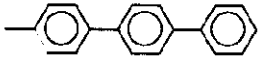
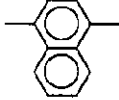
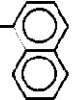
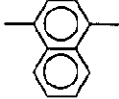
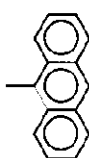
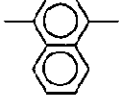
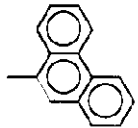
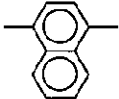
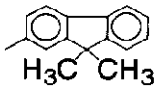
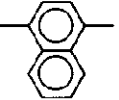
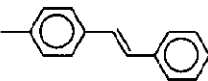
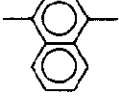
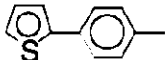
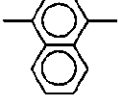
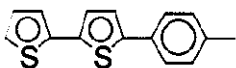
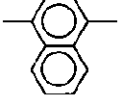
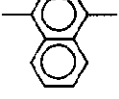
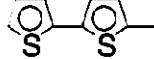
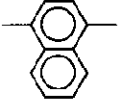
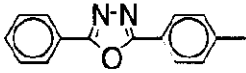
10

20

30

40

【表 3 8】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
533	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
534	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
535	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
536	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
537	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
538	1		 H ₃ C CH ₃	4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
539	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
540	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
541	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
542	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
543	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
544	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$

10

20

30

40

【表 3 9】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
545	1			4,4'	0	1	$-(CH_2)_3-$
546	1			4,4'	0	1	$-CH_2CH_2-$
547	1			4,4'	0	1	$-CH_2CH_2-$
548	1			4,4'	0	1	$-CH_2-$
549	1			4,4'	0	1	$-CH_2CH_2-$
550	1			4,4'	0	1	$-CH_2-$
551	1			4,4'	0	1	$-CH_2CH_2-$
552	1			4,4'	0	1	$-CH_2-$

10

20

30

40

【表 4 0】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
553	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
554	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
555	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
556	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
557	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
558	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
559	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
560	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
561	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$

【表 4 1】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
562	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
563	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
564	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
565	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
566	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
567	1			4,4'	0	1	$-(\text{CH}_2)_3-$
568	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
569	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
570	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
571	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$

10

20

30

40

【表 4 2】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
572	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
573	1			4,4'	0	1	$-(\text{CH}_2)_3-$
574	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
575	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
576	1			4,4'	0	1	$-(\text{CH}_2)_3-$
577	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
578	1			4,4'	0	1	$-(\text{CH}_2)_3-$
579	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
580	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$
581	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$

10

20

30

40

【0 1 0 0】

【表 4 3】

構造	k	X	Ar	結合位置	i	j	T
582	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2-$
583	1			4,4'	0	1	$-(\text{CH}_2)_3-$
584	1			4,4'	0	1	$-\text{CH}_2\text{CH}_2-$

10

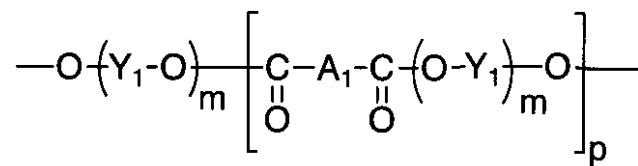
【0101】

一般式 (I-1) 及び (I-2) で示される構造から選択された少なくとも1種を部分構造として含む繰返し単位よりなる本発明に係る非共役系高分子は、下記一般式 (II-1) 若しくは (II-2) で示されるポリエステル、下記一般式 (III-1) で示されるポリエーテル又は下記一般式 (IV-1) 若しくは (IV-2) で示されるポリウレタンであってもよい。

20

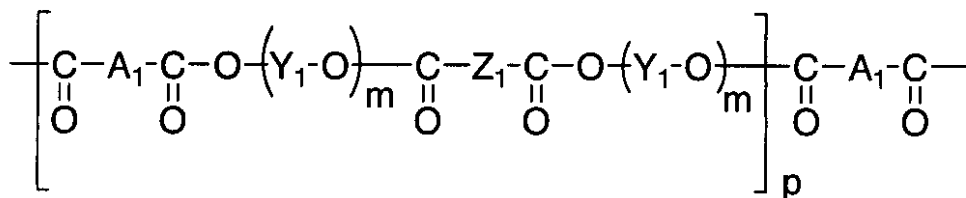
【0102】

【化9】



(II-1)

30



(II-2)

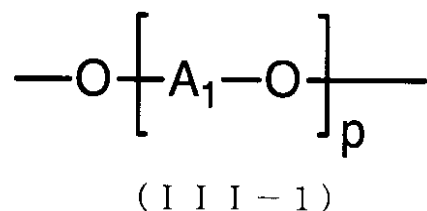
40

【0103】

一般式 (II-1) 及び (II-2) 中、 A_1 は一般式 (I-1) 及び (I-2) で示される構造から選択された少なくとも1種を表し、 Y_1 は2価のアルコール残基を表し、 Z_1 は2価のカルボン酸残基を表し、 m は1~5の整数を表し、 p は5~5000の整数を表す。

【0104】

【化 1 0】



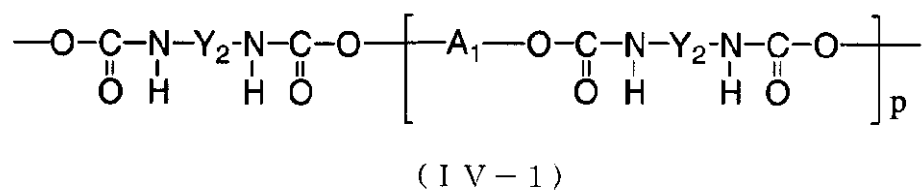
【 0 1 0 5】

10

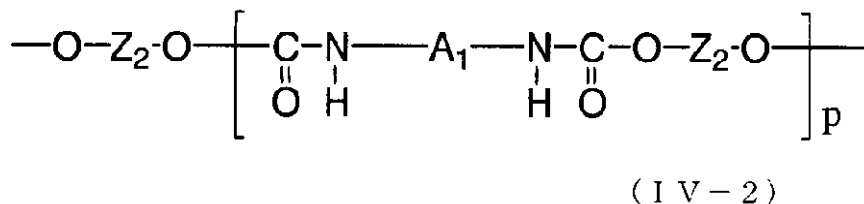
一般式 (I I I - 1) 中、 A_1 は一般式 (I - 1) 及び (I - 2) で示される構造から選択された少なくとも 1 種を表し、 p は 5 ~ 5 , 0 0 0 の整数を表す。

【 0 1 0 6】

【化 1 1】



20



30

【 0 1 0 7】

一般式 (I V - 1) 及び (I V - 2) 中、 A_1 は一般式 (I - 1) 及び (I - 2) で示される構造から選択された少なくとも 1 種を表し、 p は 5 ~ 5 , 0 0 0 の整数を表し、 Y_2 及び Z_2 は 2 価のイソシアネート、アルコール、又はアミン残基を表す。

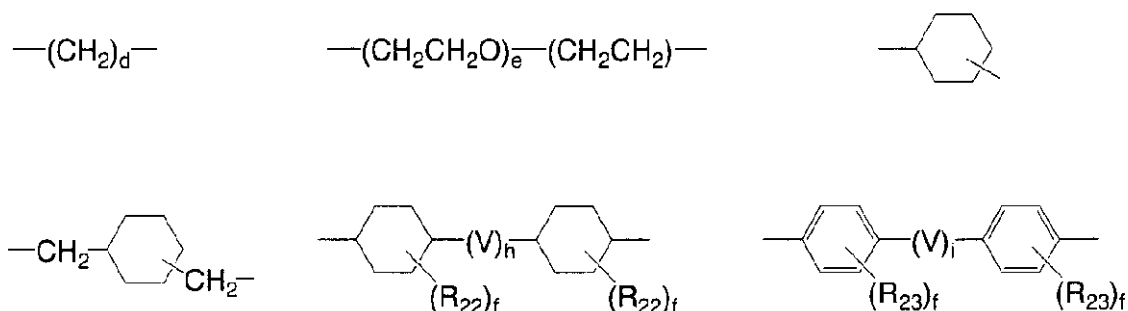
【 0 1 0 8】

一般式 (I I - 1) 及び (I I - 2) における Y_1 は 2 価アルコール残基を表し、 Z_1 は 2 価のカルボン酸残基を表すが、 Y_1 及び Z_1 は、それぞれ独立に下記式から選択される基が好ましい。

【 0 1 0 9】

40

【化 1 2】



10

【0 1 1 0】

式中、 R_{22} 及び R_{23} は、それぞれ独立に水素原子、炭素数 1～4 のアルキル基、炭素数 1～4 のアルコキシ基、置換若しくは未置換のフェニル基、置換若しくは未置換のアラルキル基、又はハロゲン原子を表し、 d 及び e はそれぞれ独立に 1～10 の整数を表し、 f は、それぞれ独立に 0、1 又は 2 を表し、 h 及び i は、それぞれ独立に 0 又は 1 を表し、 V は前記したものと同義である。

【0 1 1 1】

一般式 (IV-1) 及び (IV-2) における Y_2 及び Z_2 は 2 価のイソシアネート、アルコール、又はアミン残基を表し、 Y_2 及び Z_2 の具体例としては Y_1 及び Z_1 の場合と同様の基が挙げられる。

20

【0 1 1 2】

一般式 (II-1)、(II-2)、(III-1)、(IV-1) および (IV-2) 中、 A_1 は上記一般式 (I-1) および (I-2) で示される構造から選択された少なくとも 1 種を表し、一つの高分子中に 2 種類以上の構造が含まれてもよい。

【0 1 1 3】

本発明に係る非共役系高分子の少なくとも一方の末端基にはリン光発光体が存在するが、該リン光発光体は有機化合物（有機発光体）が好ましく、具体的には置換若しくは未置換のフェニル基を有する化合物、置換若しくは未置換の芳香環数 2～10 の 1 価の多核芳香族炭化水素を有する化合物、置換若しくは未置換の芳香環数 2～10 の 1 価の縮合芳香族炭化水素を有する化合物又は置換若しくは未置換の 1 価の芳香族複素環を有する化合物を挙げることができる。

30

具体的には、ナフタレン誘導体、アントラセン誘導体、テトラセン誘導体、ペリレン誘導体、ピレン誘導体等のポリアセン誘導体化合物、スチリルアミン系化合物、キナクリドン誘導体化合物、ルブレン誘導体化合物、クマリン誘導体化合物、ポルフィリン誘導体化合物およびピラン誘導体化合物を挙げることができる。また、発光量子効率が高く、耐熱性があるものとしては、有機金属錯体が望ましい。

有機金属錯体に含まれる金属としては、レニウム、イリジウム、オスミウム、スカンジウム、イットリウム、白金、金、ユーロピウム、テルビウム、ツリウム、ディスプロシウム、サマリウム、プラセオジウム、ガドリニウムが好ましく、イリジウム、白金、ユーロピウムがさらに好ましく、イリジウム又は白金が特に好ましい。このような金属錯体の配位子として、例えば、8-キノリノールおよびその誘導体、ベンゾキノリノールおよびその誘導体、2-フェニルピリジンおよびその誘導体、2-フェニルベンゾチアゾールおよびその誘導体、2-フェニルベンゾオキサゾールおよびその誘導体、2-フェニルトリアゾールおよびその誘導体、ポルフィリンおよびその誘導体などが挙げられるがこれに限定するものではない。

40

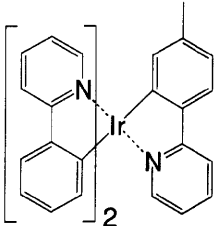
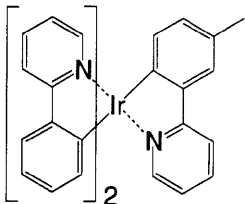
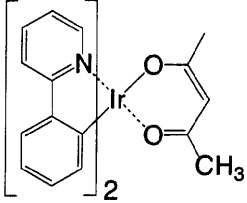
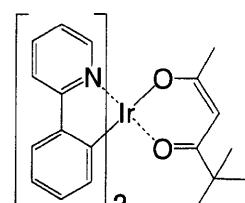
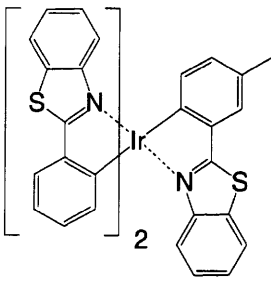
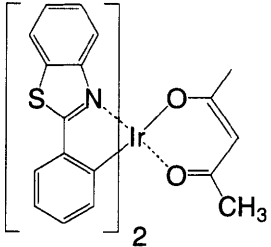
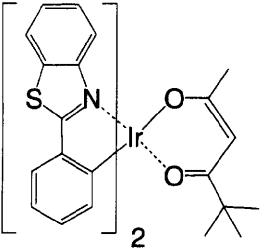
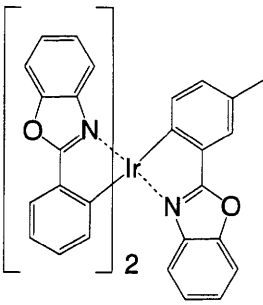
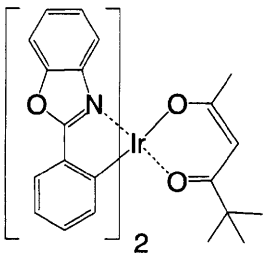
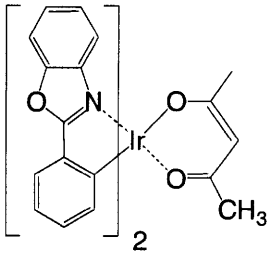
【0 1 1 4】

以下に、本発明に係るリン光発光体の具体例を示す。

【0 1 1 5】

50

【表 4 4】

構造	発光体	構造	発光体
584		585	
586		587	
588		589	
590		591	
592		593	

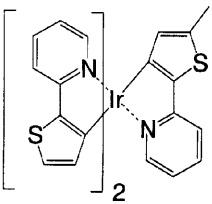
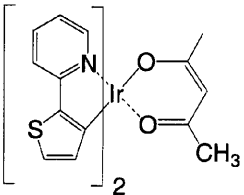
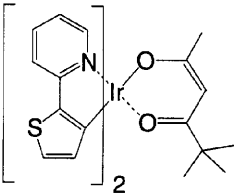
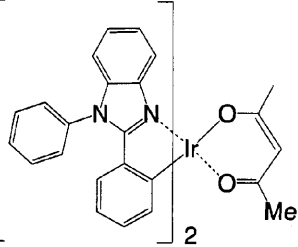
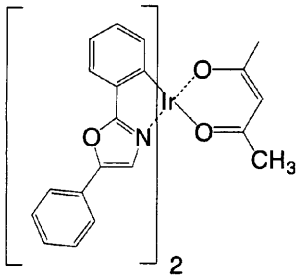
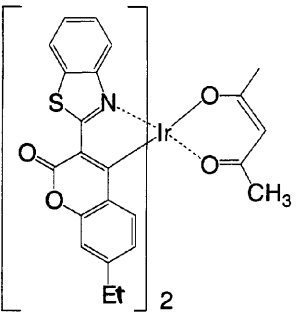
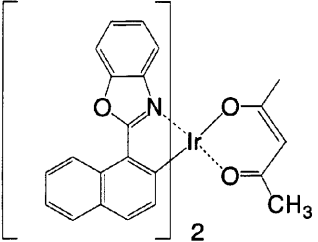
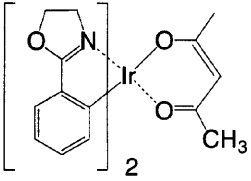
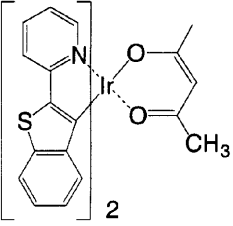
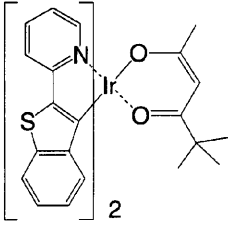
10

20

30

40

【表 4 5】

構造	発光体	構造	発光体
594		595	
596		597	
598		599	
600		601	
602		603	

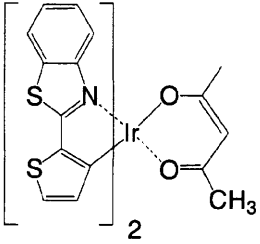
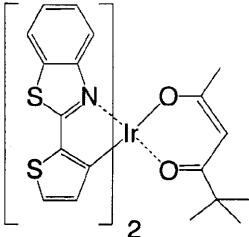
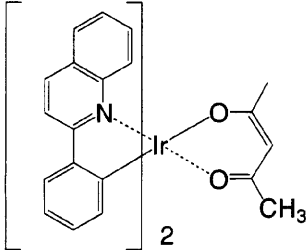
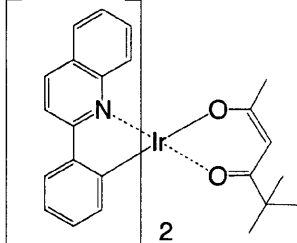
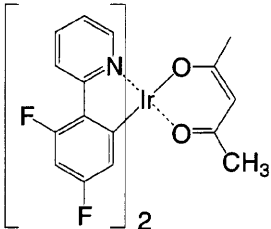
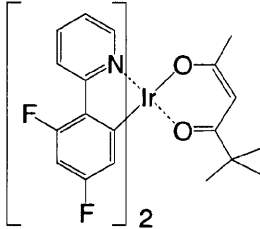
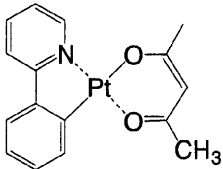
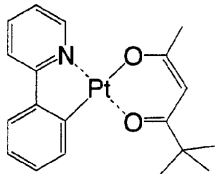
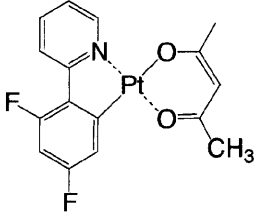
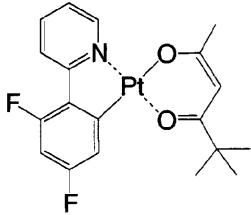
10

20

30

40

【表 4 6】

構造	発光体	構造	発光体
604		605	
606		607	
608		609	
610		611	
612		613	

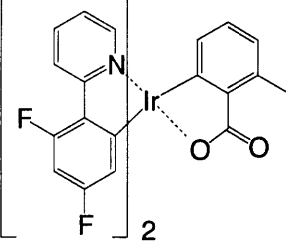
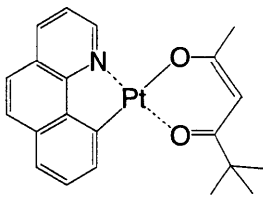
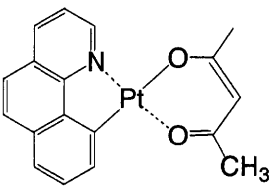
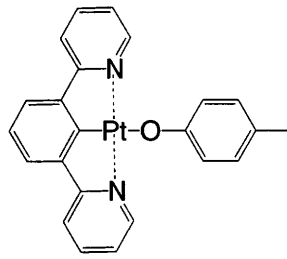
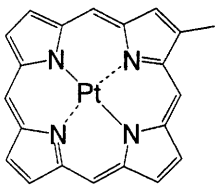
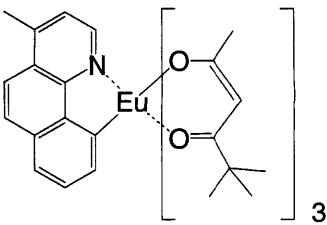
10

20

30

40

【表 4 7】

構造	発光体	構造	発光体
614		615	
616		617	
618		619	

10

20

30

【0119】

本発明に係る非共役系高分子の重量平均分子量Mwは、5000～500000の範囲にあるものが好ましい。

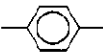
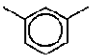
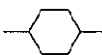
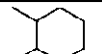
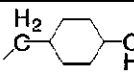
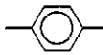
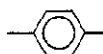
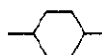
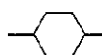
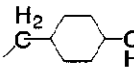
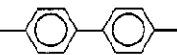
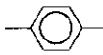
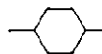
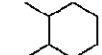
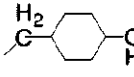
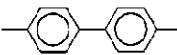
【0120】

以下、一般式(II-1)又は(II-2)で示されるポリエステル具体例を表48～50に、一般式(III-1)で示されるポリエーテル具体例を表51～52に、一般式(IV-1)又は(IV-2)で示されるポリウレタン具体例を表53～54に示すが、本発明はこれらの具体例に限定されるものではない。尚、表における、モノマーの欄の番号は、一般式(I-1)及び(I-2)で示される構造の具体例である構造番号に対応している。以下、各番号を付した具体例(化合物)、例えば15の番号を付した具体例は表示化合物(15)という。

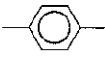
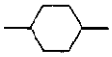
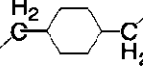
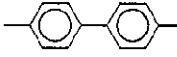
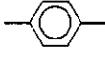
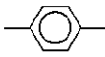
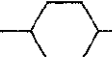
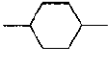
【0121】

40

【表 4 8】

化合物	モノマー		Y ₁	Z ₁	発光体	m	p
	A ₁	比率					
(1)	2	—	—CH ₂ CH ₂ —	—	585	1	51
(2)	5	—	—CH ₂ CH ₂ —	—	585	1	45
(3)	9	—	—CH ₂ CH ₂ —	—	585	1	65
(4)	9	—	—CH ₂ CH ₂ —		585	1	51
(5)	9	—	—CH ₂ CH ₂ —		585	1	87
(6)	9	—	—CH ₂ CH ₂ —		585	2	59
(7)	13	—		—	586	1	64
(8)	13	—		—(CH ₂) ₄ —	586	1	47
(9)	19	—		—	586	1	35
(10)	19	—	—CH ₂ CH ₂ —	—	586	1	75
(11)	41	—	—CH ₂ CH ₂ —	—	586	1	45
(12)	42	—	—CH ₂ CH ₂ —	—	586	1	41
(13)	42	—	—CH ₂ CH ₂ —		586	2	62
(14)	39	—	—CH ₂ CH ₂ —	—(CH ₂) ₄ —	586	1	74
(15)	44	—	—CH ₂ CH ₂ —	—	586	1	48
(16)	46	—	—(CH ₂) ₄ —		586	2	52
(17)	49	—		—	586	1	65
(18)	53	—		—	585	1	68
(19)	80	—			585	1	47
(20)	80	—	—CH ₂ CH ₂ —	—	589	1	48
(21)	80	—	—CH ₂ CH ₂ —		586	1	67
(22)	85	—		—	589	1	59
(23)	87	—		—	591	1	65
(24)	87	—			585	1	54

【表 4 9】

化合物	モノマー		Y ₁	Z ₁	発光体	m	p
	A ₁	比率					
(25)	88	—	—CH ₂ CH ₂ —	—	585	1	42
(26)	92	—	—CH ₂ CH ₂ —	—	585	1	41
(27)	127	—	—CH ₂ CH ₂ —		597	1	74
(28)	127	—		—	597	1	57
(29)	127	—		—	600	1	63
(30)	137	—			603	1	25
(31)	156	—	—CH ₂ CH ₂ —	—	586	1	47
(32)	160	—	—CH ₂ CH ₂ —		586	1	62
(33)	173	—	—CH ₂ CH ₂ —	—	586	1	47
(34)	175	—	—CH ₂ CH ₂ —	—	612	1	58
(35)	176	—	—CH ₂ CH ₂ —	—	585	1	65
(36)	181	—	—CH ₂ CH ₂ —	—	612	1	58
(37)	182	—	—CH ₂ CH ₂ —	—	612	1	38
(38)	183	—	—CH ₂ CH ₂ —	—	585	1	45
(39)	191	—	—CH ₂ CH ₂ —	—	612	1	38
(40)	193	—	—CH ₂ CH ₂ —	—	604	1	40
(41)	207	—	—CH ₂ CH ₂ —	—	586	1	57
(42)	234	—	—CH ₂ CH ₂ —	—	586	1	65
(43)	238	—	—CH ₂ CH ₂ —	—	586	1	47
(44)	243	—	—CH ₂ CH ₂ —		586	1	47
(45)	243	—	—(CH ₂) ₄ —	—(CH ₂) ₄ —	586	1	55
(46)	243	—		—	586	1	38
(47)	243	—	—CH ₂ CH ₂ —	—	604	1	62
(48)	243	—	—CH ₂ CH ₂ —		586	1	47
(49)	248	—		—	596	1	25
(50)	249	—	—CH ₂ CH ₂ —	—	596	1	45
(51)	251	—	—CH ₂ CH ₂ —	—	603	1	25
(52)	251	—		—	612	1	35

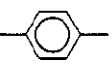
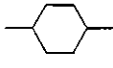
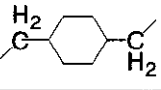
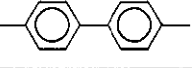
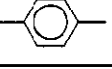
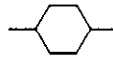
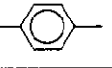
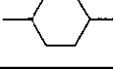
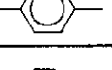
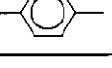
10

20

30

40

【表 50】

化合物	モノマー		Y ₁	Z ₁	発光体	m	p
	A ₁	比率					
(53)	255	—		—	612	1	38
(54)	262	—	—CH ₂ CH ₂ —	—	612	1	47
(55)	267	—	—CH ₂ CH ₂ —		586	1	39
(56)	304	—		—	586	1	26
(57)	306	—		—	586	1	38
(58)	304	—			586	1	31
(59)	267	—	—CH ₂ CH ₂ —	—	586	1	39
(60)	335	—	—CH ₂ CH ₂ —		586	1	45
(61)	375	—		—	593	1	61
(62)	375	—		—	593	1	50
(63)	378	—	—CH ₂ CH ₂ —	—	593	1	41
(64)	378	—	—CH ₂ CH ₂ —		593	1	41
(65)	7/92	1/1	—CH ₂ CH ₂ —	—	593	1	62
(66)	7/92	1/1	—CH ₂ CH ₂ —	—	593	2	47
(67)	7/92	1/1			593	1	39
(68)	7/92	1/1	—CH ₂ CH ₂ —	—	616	1	57
(69)	7/127	1/1	—CH ₂ CH ₂ —	—	616	1	38
(70)	7/127	1/1	—CH ₂ CH ₂ —	—	616	2	45
(71)	7/175	1/1	—CH ₂ CH ₂ —	—	602	1	38
(72)	7/92/175	1/1/1	—CH ₂ CH ₂ —	—	602	1	34
(73)	173/220	1/1	—CH ₂ CH ₂ —	—	602	1	38
(74)	7/310	1/1	—CH ₂ CH ₂ —		602	1	14
(75)	7/310	1/2	—CH ₂ CH ₂ —	—	602	1	24
(76)	310/337	2/1	—CH ₂ CH ₂ —	—	602	1	47

10

20

30

40

【表 5 1】

化合物	モノマー		発光体	p
	A ₁	比率		
(77)	3	—	585	35
(78)	5	—	585	38
(79)	6	—	585	41
(80)	7	—	585	62
(81)	12	—	585	68
(82)	12	—	589	55
(83)	19	—	586	41
(84)	20	—	586	38
(85)	22	—	590	64
(86)	41	—	586	51
(87)	43	—	591	38
(88)	44	—	586	45
(89)	47	—	586	62
(90)	49	—	586	41
(91)	53	—	586	38
(92)	56	—	586	47
(93)	88	—	586	52
(94)	90	—	585	42
(95)	92	—	585	38
(96)	93	—	589	64
(97)	127	—	586	41
(98)	145	—	589	58
(99)	175	—	591	50
(100)	176	—	585	67
(101)	178	—	585	51
(102)	179	—	585	53
(103)	181	—	597	45
(104)	188	—	597	39
(105)	207	—	600	47
(106)	243	—	603	41
(107)	245	—	586	35
(108)	247	—	586	47
(109)	249	—	586	56
(110)	262	—	612	47
(111)	265	—	585	47
(112)	267	—	612	59
(113)	273	—	612	63

10

20

30

40

【表 5 2】

化合物	モノマー		発光体	p
	A ₁	比率		
(114)	277	—	585	71
(115)	285	—	586	74
(116)	303	—	604	68
(117)	304	—	586	47
(118)	306	—	586	62
(119)	310	—	586	47
(120)	313	—	586	59
(121)	316	—	586	75
(122)	318	—	586	63
(123)	319	—	604	47
(124)	338	—	586	85
(125)	339	—	596	35
(126)	340	—	596	45
(127)	341	—	603	65
(128)	346	—	593	57
(129)	416	—	593	47
(130)	460	—	593	56
(131)	461	—	593	47
(132)	528	—	593	68
(133)	7/36	1/1	616	61
(134)	7/43	1/1	616	35
(135)	7/44	1/2	616	74
(136)	7/53	1/1	602	32
(137)	7/85	1/1	602	62
(138)	20/85	1/2	601	54
(139)	57/90	1/1	602	74
(140)	57/92	1/2	603	65
(141)	57/94	5/1	603	36
(142)	57/127	1/1	608	47
(143)	127/196	1/2	609	62
(144)	176/339	6/1	589	47
(145)	243/375	2/1	591	62
(146)	7/20/57	1/2/4	592	74

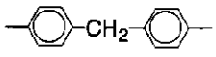
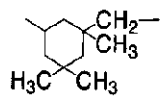
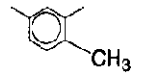
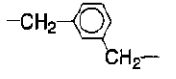
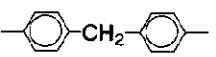
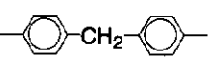
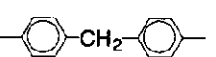
10

20

30

40

【表 5 3】

化合物	モノマー		Y_2	Z_2	発光体	p
	A_1	比率				
(147)	2	—	$-(CH_2)_6-$	—	585	41
(148)	2	—	$-(CH_2)_6-$	—	585	35
(149)	4	—	$-(CH_2)_6-$	—	585	41
(150)	6	—	$-(CH_2)_6-$	—	585	24
(151)	7	—	$-(CH_2)_6-$	—	585	28
(152)	7	—		—	589	35
(153)	9	—	$-(CH_2)_6-$	—	586	14
(154)	9	—		—	586	35
(155)	19	—		—	590	47
(156)	19	—	—	$-CH_2CH_2-$	586	31
(157)	41	—	$-(CH_2)_6-$	—	591	30
(158)	44	—	—	$-(CH_2)_6-$	586	21
(159)	44	—		—	586	35
(160)	44	—		—	586	41
(161)	46	—	$-(CH_2)_6-$	—	586	38
(162)	53	—	$-(CH_2)_6-$	—	585	28
(163)	54	—	$-(CH_2)_6-$	—	585	38
(164)	54	—		—	589	35
(165)	80	—	—	$-CH_2CH_2-$	586	41
(166)	88	—	$-(CH_2)_6-$	—	589	38
(167)	92	—	$-(CH_2)_6-$	—	600	47
(168)	127	—	$-(CH_2)_6-$	—	603	39
(169)	127	—		—	586	45
(170)	156	—	$-(CH_2)_6-$	—	586	25
(171)	175	—	$-(CH_2)_6-$	—	586	28
(172)	176	—	$-(CH_2)_6-$	—	612	41
(173)	178	—	$-(CH_2)_6-$	—	597	35
(174)	182	—	$-(CH_2)_6-$	—	597	39

10

20

30

40

【表 5 4】

化合物	モノマー		Y_2	Z_2	発光体	ρ
	A_1	比率				
(175)	183	—	$-(CH_2)_6-$	—	600	54
(176)	185	—	$-(CH_2)_6-$	—	603	41
(177)	188	—	$-(CH_2)_6-$	—	586	28
(178)	192	—	$-(CH_2)_6-$	—	586	35
(179)	209	—	$-(CH_2)_6-$	—	586	26
(180)	220	—	$-(CH_2)_6-$	—	586	30
(181)	221	—	$-(CH_2)_6-$	—	586	18
(182)	222	—	$-(CH_2)_6-$	—	586	30
(183)	243	—	$-(CH_2)_6-$	—	604	25
(184)	244	—	$-(CH_2)_6-$	—	586	38
(185)	247	—	$-(CH_2)_6-$	—	612	36
(186)	249	—	$-(CH_2)_6-$	—	604	28
(187)	254	—	$-(CH_2)_6-$	—	586	34
(188)	256	—	$-(CH_2)_6-$	—	586	26
(189)	262	—	$-(CH_2)_6-$	—	586	32
(190)	297	—	$-(CH_2)_6-$	—	586	39
(191)	302	—	$-(CH_2)_6-$	—	602	24
(192)	304	—	$-(CH_2)_6-$	—	602	38
(193)	312	—	—	$-CH_2CH_2-$	601	31
(194)	339	—	$-(CH_2)_6-$	—	602	52
(195)	375	—	—	$-CH_2CH_2-$	603	36
(196)	376	—	$-(CH_2)_6-$	—	593	37
(197)	378	—	$-(CH_2)_6-$	—	616	35
(198)	7/43	1/1	$-(CH_2)_6-$	—	616	47
(199)	7/44	1/1	$-(CH_2)_6-$	—	616	38
(200)	7/53	1/1	$-(CH_2)_6-$	—	593	29

【0128】

次に、本発明に係る非共役系高分子において、一般式（ⅠⅠ－１）若しくは（ⅠⅠ－２）で示されるポリエステル、一般式（ⅠⅠⅠ－１）で示されるポリエーテル又は一般式（ⅠⅤ－１）若しくは（ⅠⅤ－２）で示されるポリウレタンを例にその合成方法について詳細に説明する。

【0129】

A) ポリエステルの合成方法

本発明の上記ポリエステルは、下記構造式（ⅠⅠ－３）で示される低分子を、例えば、第４版実験化学講座第２８巻（丸善，１９９２）等に記載された公知の方法で重合させることによって合成することができる。

【0130】

【化 1 3】



(I I - 3)

【0 1 3 1】

10

一般式 (I I - 3) における A_1 は、一般式 (I I - 1) 又は (I I - 2) における A_1 と同義である。 A' は水酸基、ハロゲン原子、または基 $-O-R_{18}$ を表し、 R_{18} はアルキル基、置換若しくは未置換のアリール基、又はアラルキル基を表す。

【0 1 3 2】

一般式 (I I - 1) および (I I - 2) で示されるポリエステルは、次のようにして合成することができる。

1) A' が水酸基の場合には、一般式 (I I - 3) で表される化合物と $HO-(Y_1-O)_m-H$ で示される 2 価アルコール類とをほぼ当量混合し、酸触媒を用いて重合する。酸触媒としては、硫酸、トルエンスルホン酸、トリフルオロ酢酸等、通常のエステル化反応に用いるものが使用でき、モノマー 1 質量部に対して、 $1/10, 0.00 \sim 1/10$ 質量部、好ましくは $1/1, 0.00 \sim 1/50$ 質量部の範囲で用いられる。重合中に生成する水を除去するために、水と共沸可能な溶剤を用いることが好ましく、トルエン、クロロベンゼン、1-クロロナフタレン等が有効であり、モノマー 1 質量部に対して、 $1 \sim 100$ 質量部、好ましくは $2 \sim 50$ 質量部の範囲で用いられる。反応温度は任意に設定できるが、重合中に生成する水を除去するために、溶剤の沸点で反応させることが好ましい。

20

【0 1 3 3】

反応終了後、溶剤を用いなかった場合には溶解可能な溶剤にポリエステルの溶液を溶解させてその溶液を、溶剤を用いた場合には、反応溶液をそのまま、メタノール、エタノール等のアルコール類や、アセトン等のポリマーが溶解しにくい貧溶剤中に滴下し、ポリエステルの析出させ、ポリエステルの分離した後、水や有機溶剤で十分洗浄し、乾燥させる。更に、必要であれば適当な有機溶剤に溶解させ、貧溶剤中に滴下し、ポリエステルの析出させる再沈殿処理を繰り返してもよい。再沈殿処理の際には、メカニカルスターラー等で、効率よく攪拌しながら行うことが好ましい。再沈殿処理の際にポリエステルの溶解させる溶剤は、ポリエステル 1 質量部に対して、 $1 \sim 100$ 質量部、好ましくは $2 \sim 50$ 質量部の範囲で用いられる。また、貧溶剤はポリエステル 1 質量部に対して、 $1 \sim 1, 0.00$ 質量部、好ましくは $10 \sim 500$ 質量部の範囲で用いられる。

30

【0 1 3 4】

2) A' がハロゲンの場合には、 $HO-(Y_1-O)_m-H$ で示される 2 価アルコール類をほぼ当量混合し、ピリジンやトリエチルアミン等の有機塩基性触媒を用いて重合する。有機塩基性触媒は、一般式 (I I - 3) で表される低分子 1 当量に対して、 $1 \sim 10$ 当量、好ましくは $2 \sim 5$ 当量の範囲で用いられる。溶剤としては、塩化メチレン、テトラヒドロフラン (THF)、トルエン、クロロベンゼン、1-クロロナフタレン等が有効であり、モノマー 1 質量部に対して、 $1 \sim 100$ 質量部、好ましくは $2 \sim 50$ 質量部の範囲で用いられる。反応温度は任意に設定できる。重合後、前述のように再沈殿処理し、精製する。

40

【0 1 3 5】

また、ビスフェノール等の酸性度の高い 2 価アルコール類の場合には、界面重合法も用いることができる。すなわち、2 価アルコール類を水に加え、当量の塩基を加えて溶解させた後、激しく攪拌しながら 2 価アルコール類と当量のモノマー溶液を加えることによって重合できる。この際、水は 2 価アルコール類 1 質量部に対して、 $1 \sim 1, 0.00$ 質量部

50

、好ましくは2～500質量部の範囲で用いられる。モノマーを溶解させる溶剤としては、塩化メチレン、ジクロロエタン、トリクロロエタン、トルエン、クロロベンゼン、1-クロロナフタレン等が有効である。反応温度は任意に設定でき、反応を促進するために、アンモニウム塩、スルホニウム塩等の相間移動触媒を用いることが効果的である。相間移動触媒は、モノマー1質量部に対して、0.1～10質量部、好ましくは0.2～5質量部の範囲で用いられる。

【0136】

3) A' が $-O-R_{18}$ の場合には、前述の構造式 (II-3) で示されるモノマーに、 $HO-(Y_1-O)_m-H$ で示される2価アルコール類を過剰に加え、硫酸、リン酸等の無機酸、チタンアルコキシド、カルシウムおよびコバルト等の酢酸塩或いは炭酸塩、亜鉛や鉛の酸化物を触媒に用いて加熱し、エステル交換により合成できる。2価アルコール類は一般式 (II-3) で表される低分子1当量に対して、2～100当量、好ましくは3～50当量の範囲で用いられる。触媒は一般式 (II-3) で表される低分子1質量部に対して、1/10, 0.00～1質量部、好ましくは1/1, 0.00～1/2質量部の範囲で用いられる。反応は、反応温度200～300℃で行い、基 $-O-R_{18}$ から基 $-O-(Y_1-O)_m-H$ へのエステル交換終了後は、 $HO-(Y_1-O)_m-H$ の脱離による重合を促進するため、減圧下で反応させることが好ましい。また、 $HO-(Y_1-O)_m-H$ と共沸可能な1-クロロナフタレン等の高沸点溶剤を用いて、常圧下で $HO-(Y_1-O)_m-H$ を共沸で除きながら反応させることもできる。

10

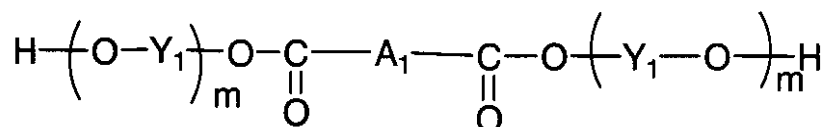
【0137】

また、次のようにしてポリエステルを合成することができる。上記それぞれの場合において、2価アルコール類を過剰に加えて反応させることによって下記構造式 (II-4) で示される化合物を生成した後、これを低分子として用いて上記と同様の方法で、2価カルボン酸または2価カルボン酸ハロゲン化物等と反応させればよく、それによってポリエステルを得ることができる。

20

【0138】

【化14】



30

(II-4)

【0139】

式中、 A_1 、 Y_1 および m は前述の通りである。

【0140】

4) リン光発光体の導入方法は特に限定されるものではないが、次のような方法が挙げられる。すなわち、A' が水酸基の場合、発光体のモノカルボン酸を共重合させるか、ポリマーの重合反応後発光体のモノカルボン酸を仕込んで反応させ導入することができる。また、A' がハロゲンの場合、発光体のモノ酸塩化物を共重合させるか、ポリマーの重合反応後発光体のモノ酸塩化物を仕込んで反応させ導入することができる。A' が $-O-R_{18}$ の場合には、発光体のモノエステルを共重合させるか、ポリマーの重合反応後発光体のモノエステルを仕込んで反応させ導入することができる。

40

【0141】

A) ポリエーテルの合成方法

本発明の上記ポリエーテルは、下記一般式 (III-2) で示されるヒドロキシル基を

50

有する化合物を分子間で縮合させることによって、容易に製造することができる。ここで、下記一般式（I I I - 2）におけるは A_1 は、前記一般式（I I I - 1）における A_1 と同様である。

【0142】

【化15】



（I I I - 2）

10

【0143】

具体的には前記ポリエーテルは、例えば、以下のように合成することができる。

1) 上記ポリエーテルは、一般式（I I I - 2）で表される化合物（以下、モノマーと略す）を加熱脱水縮合する方法によって合成することができる。この場合、無溶媒でモノマーを加熱溶融し、水の脱離による重合反応を促進させるため減圧下で反応させることが望ましい。また、溶媒を使用する場合は、水の除去のため、水と共沸する溶媒、例えば、トリクロロエタン、トルエン、クロロベンゼン、ジクロロベンゼン、ニトロベンゼン、1-クロロナフタレン等が有効であり、モノマー1当量に対して、1～100当量、好ましくは2～50当量の範囲で用いられる。反応温度は任意に設定できるが、重合中に生成する水を除去するために、溶媒の沸点で反応させるのが好ましい。重合が進まない場合には、反応系から溶媒を除去し、粘稠状態加熱攪拌してもよい。

20

【0144】

2) 上記ポリエーテルは、酸触媒として、p-トルエンスルホン酸、塩酸、硫酸、トリフルオロ酢酸等のプロトン酸、あるいは塩化亜鉛等のルイス酸を用い脱水縮合する方法によって合成することもできる。この場合、モノマー1当量に対して、酸触媒を1～1/10000～1/10当量、好ましくは1/10000～1/50当量の範囲で用いる。重合中に生成する水を除去するために、水と共沸可能な溶剤を用いるのが好ましい。溶剤としては、トルエン、クロロベンゼン、ジクロロベンゼン、ニトロベンゼン、1-クロロナフタレン等が有効であり、モノマー1当量に対して、1～100当量、好ましくは2～50当量の範囲で用いられる。反応温度は任意に設定できるが、重合中に生成する水を除去するために、溶剤の沸点で反応させることが好ましい。

30

【0145】

3) 上記モノマーは、イソシアン化シクロヘキシル等のイソシアン化アルキル、シアン化シクロヘキシル等のイソシアン化アルキル、シアン酸p-トリルや2,2-ビス(4-シアナートフェニル)プロパン等のシアン酸エステル、ジクロロヘキシルカルボジイミド(DCC)、トリクロロアセトニトリル等の縮合剤を用いる方法によっても合成することができる。この場合、縮合剤は、モノマー1当量に対して、1/2～10当量、好ましくは1～3当量の範囲で用いられる。溶剤として、トルエン、クロロベンゼン、ジクロロベンゼン、1-クロロナフタレン等が有効であり、モノマー1当量に対して、1～100当量、好ましくは2～50当量の範囲で用いられる。反応温度は任意に設定できるが、室温から溶剤の沸点で反応させることが好ましい。上記1)、2)および3)の合成法のうち、異性化や副反応が起こりにくいことから、合成法1)または3)が好ましい。特に、合成法3)は反応条件がより穏和なことからより好ましい。

40

【0146】

反応終了後、溶剤を用いなかった場合は溶解可能な溶剤にポリエーテルを溶解させてその溶液を、溶剤を用いた場合には、そのまま、メタノール、エタノール等のアルコール類や、アセトン等の非共役系高分子が溶解しにくい貧溶剤中に滴下し、ポリエーテルを析出させ、ポリエーテルを分離した後、水や有機溶剤で十分に洗浄し、乾燥させる。さらに必

50

要であれば、適当な有機溶剤に溶解させ、貧溶剤中に滴下し、モノマーを析出させる再沈澱処理を繰り返してもよい。再沈澱処理の際には、メカニカルスターラー等で、効率よく攪拌しながら行うことが好ましい。再沈澱処理の際に非共役系高分子を溶解させる溶剤は、非共役系高分子1質量部に対して、1～100質量部、好ましくは2～50質量部の範囲で用いられる。また、貧溶剤は非共役系高分子1質量部に対して、1～1000質量部、好ましくは10～500質量部の範囲で用いられる。さらに、上記反応において、モノマーを2種以上、好ましくは2～5種、さらに好ましくは2～3種用いることにより、共重合ポリマーの合成も可能である。異種のモノマーを共重合することによって、電気特性、成膜性、溶解性および発光特性を制御することができる。

【0147】

10

ポリエーテルの重合度は、低すぎると成膜性に劣り、強固な膜が得られにくく、また、高すぎると溶剤への溶解度が低くなり、加工性が悪くなるため、5～500000の範囲に設定され、好ましくは10～300000、より好ましくは15～100000の範囲である。

【0148】

また、発光体の導入は、特に限定されるものではないが、次のような方法が挙げられる。すなわち、末端のヒドロキシル基と同様なヒドロキシル基を持つ発光体との重合、発光体のモノ酸塩化合物によるアシル化、発光体のモノイソシアネートによるウレタン残基を導入方法が適用できる。

【0149】

20

C) ポリウレタンの合成方法

本発明の上記ポリウレタンは、下記一般式(IV-3)～(IV-6)で表されるモノマーを、例えば、第4版実験化学講座第28巻(丸善、1992)、新高分子実験学第2巻(共立出版、1995)、等に記載された公知の方法で重合させることによって合成することができる。なお、一般式(IV-3)～(IV-6)中、 A_1 は、前記一般式(IV-1)または(IV-2)における A_1 と同様である。

【0150】

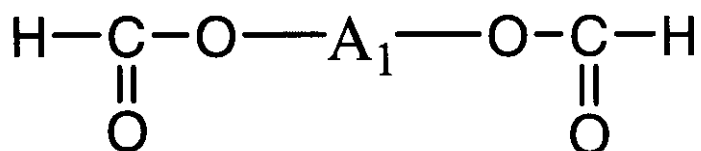
【化 1 6】



(I V-3)



(I V-4)



(I V-5)



(I V-6)

10

20

【0 1 5 1】

具体的には、例えば、一般式 (I V-3) および (I V-4) で示されるモノマーの場合、ポリウレタンは、次のようにして合成することができる。モノマーが一般式 (I V-3) で示される 2 価アルコールの場合には、 $\text{OCN}-\text{Y}_2-\text{NCO}$ で示されるジイソシアネート類と当量混合し、またモノマーが一般式 (I V-4) で示されるジイソシアネート類の場合には、 $\text{HO}-\text{Z}_2-\text{OH}$ で示される 2 価アルコール類と当量混合し、重付加する。触媒としては、ジラウリル酸ジブチルスズ (I I)、二酢酸ジブチルスズ (I I)、ナフテン酸鉛等の有機金属化合物といった通常の重付加によるポリウレタン合成反応に用いるものが使用できる。また、芳香族系のジイソシアネートをポリウレタンの合成に用いる場合には、トリエチレンジアミン等の第三アミンを触媒として用いる事ができる。これら有機金属化合物と第三アミンは触媒として混合して用いても良い。触媒の量は、モノマー 1 質量部に対して、 $1/10$ 、 $0.00 \sim 1/10$ 質量部、好ましくは $1/1$ 、 $0.00 \sim 1/50$ 質量部の範囲で用いられる。溶剤は、モノマーとジイソシアネート、もしくは 2 価アルコール類を溶解するものであれば、任意の溶剤を用いることができるが、反応性の点から極性の低い溶媒やアルコールとの水素結合を生じない溶媒を用いることが好ましく、トルエン、クロロベンゼン、ジクロロベンゼン、1-クロロナフタレン等が有効である。溶剤の量は、モノマー 1 質量部に対して、 $1 \sim 100$ 質量部、好ましくは $2 \sim 50$ 質量部の範囲で用いられる。反応温度は任意に設定できる。

30

40

【0 1 5 2】

反応終了後は、反応溶液をそのまま、メタノール、エタノール等のアルコール類や、アセトン等のポリマーが溶解しにくい貧溶剤中に滴下し、ポリウレタンを析出させて分離した後、水や有機溶剤で十分洗浄し、乾燥させる。更に、必要であれば適当な有機溶剤に溶解させ、貧溶剤中に滴下し、ポリウレタンを析出させる再沈殿処理を繰り返してもよい。再沈殿処理の際には、メカニカルスターラー等で、効率よく攪拌しながら行うことが好ましい。再沈殿処理の際にポリウレタンを溶解させる溶剤は、ポリウレタン 1 質量部に対し

50

て、1～100質量部、好ましくは2～50質量部の範囲で用いられる。また、貧溶剤はポリウレタン1質量部に対して、1～1,000質量部、好ましくは10～500質量部の範囲で用いられる。

【0153】

一般式(IV-5)および(IV-6)で示される低分子の場合、ポリウレタンは、次のようにして合成することができる。低分子が一般式(IV-5)で示されるビスクロロホルメートの場合には、 ${}_2\text{HN}-\text{Y}_2-\text{NH}_2$ で示されるジアミン類と当量混合し、またモノマーが一般式(IV-6)で示されるジアミン類の場合には、 $\text{ClOCOC}-\text{Z}_2-\text{OCOC}\text{Cl}$ で示されるビスクロロホルメート類と当量混合し、重縮合する。溶剤としては、塩化メチレン、ジクロロエタン、トリクロロエタン、テトラヒドロフラン(THF)、トルエン、クロロベンゼン、1-クロロナフタレン等が有効であり、モノマー1質量部に対して、1～100質量部、好ましくは2～50質量部の範囲で用いられる。反応温度は任意に設定できる。重合後は、前述のように再沈殿処理により精製する。

10

【0154】

また、 ${}_2\text{HN}-\text{Y}_2-\text{NH}_2$ で示されるジアミン類が塩基性度の高い場合には、界面重合法も用いることができる。すなわち、ジアミン類を水に加え、当量の酸を加えて溶解させた後、激しく攪拌しながらジアミン類と前述の一般式(IV-5)で示される当量のモノマー溶液を加えることによって重合できる。この際、水はジアミン類1質量部に対して、1～1,000質量部、好ましくは10～500質量部の範囲で用いられる。モノマーを溶解させる溶剤としては、塩化メチレン、ジクロロエタン、トリクロロエタン、トルエン、クロロベンゼン、1-クロロナフタレン等が有効である。反応温度は任意に設定でき、反応を促進するために、アンモニウム塩、スルホニウム塩等の相間移動触媒を用いることが効果的である。相間移動触媒は、モノマー1質量部に対して、0.1～10質量部、好ましくは0.2～5質量部の範囲で用いられる。

20

【0155】

また、発光体の導入は、特に限定されるものではないが、次のような方法が挙げられる。(IV-3)の場合、発光体の1価アルコールを共重合もしくは、ポリマーの重合反応後発光体の1価アルコールを仕込んで反応させ導入することができる。(IV-4)の場合、発光体のモノイソシアネートを共重合もしくは、ポリマーの重合反応後発光体のモノイソシアネートを仕込んで反応させ導入することができる。

30

(IV-5)の場合、発光体の1価カルボン酸を共重合もしくは、ポリマーの重合反応後発光体の1価カルボン酸を仕込んで反応させ導入することができる。(IV-6)の場合、発光体のモノアミンを共重合もしくは、ポリマーの重合反応後発光体のモノアミンを仕込んで反応させ導入することができる。

【0156】

次に、本発明の有機EL素子の層構成について詳記する。

本発明の有機EL素子は、少なくとも一方が透明または半透明である一対の電極と、それら電極間に挟持された発光層を含む一層または複数層の有機化合物層より構成され、該有機化合物層の少なくとも発光層に、上記に説明したような非共役系高分子を少なくとも1種含有してなるものであればその層構成は特に限定されない。

40

【0157】

本発明の有機EL素子においては、有機化合物層が1層の場合は、有機化合物層は電荷輸送能を持つ発光層を意味し、該発光層が前記非共役系高分子を含有してなる。一方、有機化合物層が複数層の場合(即ち、各層が異なる機能を有する機能分離型の場合)は、少なくともいずれか一層が発光層からなり、この発光層は電荷輸送能を持つ発光層であってもよい。

【0158】

この場合、前記発光層あるいは前記電荷輸送能を持つ発光層と、その他の層からなる層構成の具体例としては、

(1) 発光層と、電子輸送層及び／または電子注入層と、から構成される層構成、

50

(2) 正孔輸送層及び／または正孔注入層と、発光層と、電子輸送層及び／または電子注入層と、から構成される層構成、

(3) 正孔輸送層及び／または正孔注入層と、発光層と、から形成される層構成、が挙げられ、これら層構成(1)～(3)の発光層及び電荷輸送能を持つ発光層以外の層は、電荷輸送層や電荷注入層としての機能を有する。

【0159】

なお、層構成(1)～(3)のいずれの層構成においても、いずれか一層に非共役系高分子が含まれていればよいが、いずれの層構成においても、発光層に非共役系高分子が含まれていることが好ましい。

【0160】

また、本発明の有機EL素子においては、電荷輸送能を持つ発光層、正孔輸送層、正孔注入層、電子輸送層、電子注入層は、非共役系高分子以外の電荷輸送性化合物(正孔輸送材料、電子輸送材料)を更に含んでもよい。このような電荷輸送性化合物の詳細については後述する。

【0161】

以下、図面を参照しつつ、より詳細に説明するが、これらに限定されるわけではない。

図1～図4は、本発明の有機EL素子の層構成を説明するための模式的断面図であって、図1、図2、図3の場合は、有機化合物層が複数層の場合の一例であり、図4の場合は、有機化合物層が1層の場合の例を示す。なお、図1～図4において、同様の機能を有するものは同じ符号を付して説明する。

【0162】

図1に示す有機EL素子は、透明絶縁体基板1上に、透明電極2、発光層4、電子輸送層及び／または電子注入層5及び背面電極7が順次積層されたもので、層構成(1)に相当するものである。但し、符号5で示される層が、電子輸送層及び電子注入層からなる場合には、発光層4の背面電極7側に、電子輸送層、電子注入層、背面電極7がこの順に積層される。

図2に示す有機EL素子は、透明絶縁体基板1上に、透明電極2、正孔輸送層及び／または正孔注入層3、発光層4、電子輸送層及び／または電子注入層5及び背面電極7が順次積層されたもので、層構成(2)に相当するものである。但し、符号3で示される層が、正孔輸送層及び正孔注入層からなる場合には、透明電極2の背面電極7側に、正孔注入層、正孔輸送層、発光層4がこの順に積層される。

【0163】

図3に示す有機EL素子は、透明絶縁体基板1上に、透明電極2、正孔輸送層及び／または正孔注入層3、発光層4及び背面電極7が順次積層されたもので、層構成(3)に相当するものである。但し、符号3で示される層が、正孔輸送層及び、正孔注入層からなる場合には、透明電極2の背面電極7側に、正孔注入層、正孔輸送層、発光層4がこの順に積層される。

図4に示す有機EL素子は、透明絶縁体基板1上に、透明電極2、電荷輸送能を持つ発光層6及び背面電極7が順次積層されたものである。

また、トップエミッション構造や陰極・陽極共に透明電極を用いて透過型にする場合、さらには図1～図4の層構成を複数段積重ねた構造とする事も可能である。

【0164】

以下、各々を詳しく説明する。

本発明における非共役系高分子を含有してなる有機化合物層は、その構造によっては、図1に示される有機EL素子の層構成の場合、発光層4、電子輸送層5としていずれも作用することができるし、また、図2に示される有機EL素子の層構成の場合、正孔輸送層3、発光層4、電子輸送層5としていずれも作用することができ、図3に示される有機EL素子の層構成の場合、正孔輸送層3、発光層4としていずれも作用することができ、図4に示される有機EL素子の層構成の場合、電荷輸送能を持つ発光層6として作用することができる。

10

20

30

40

50

【0165】

図1～図4に示される有機EL素子の層構成の場合、透明絶縁体基板1は、発光を取り出すため透明なものが好ましく、ガラス、プラスチックフィルム等が用いられるがこれに限られるものではない。また、透明電極2は、透明絶縁体基板と同様に発光を取り出すため透明であって、かつ正孔の注入を行うため仕事関数の大きなものが好ましく、酸化スズインジウム（ITO）、酸化スズ（NE SA）、酸化インジウム、酸化亜鉛等の酸化膜、及び蒸着或いはスパッタされた金、白金、パラジウム等が用いられるがこれに限られるものではない。

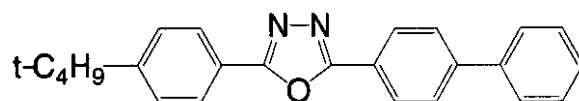
【0166】

図1及び図2に示される有機EL素子の層構成の場合、電子輸送層5は、目的に応じて機能（電子輸送能）が付与された電子輸送材料より形成される。このような電子輸送材料としては、好適にはオキサジアゾール誘導体、ニトロ置換フルオレノン誘導体、ジフェノキノン誘導体、チオピランジオキシド誘導体、フルオレニリデンメタン誘導体等が挙げられる。好適な具体例として、下記例示化合物（VII-1）～（VII-3）が挙げられるが、これらに限定されたものではない。また、単独ではなく複数の電子輸送材料と組み合わせてもよい。

10

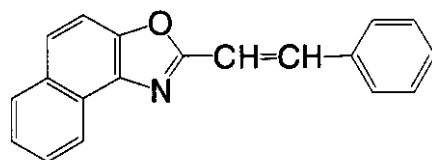
【0167】

【化17】



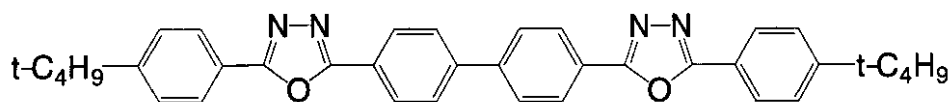
(VII-1)

20



(VII-2)

30



(VII-3)

40

【0168】

図2及び図3に示される有機EL素子の層構成の場合、正孔輸送層3は、目的に応じて機能（正孔輸送能）が付与された正孔輸送材料より構成される。このような正孔輸送材料としては、テトラフェニレンジアミン誘導体、トリフェニルアミン誘導体、カルバゾール誘導、スチルベン誘導体、アリールヒドラゾン誘導体、ポルフィリン系化合物等、好適な具体例として下記例示化合物（VIII-1）～（VIII-9）が挙げられるが、これらに限定されるわけではない。また、単独ではなく複数の正孔輸送性材料と組み合わせてもよい。ここで、nおよびxは1以上の整数を表す。

【0169】

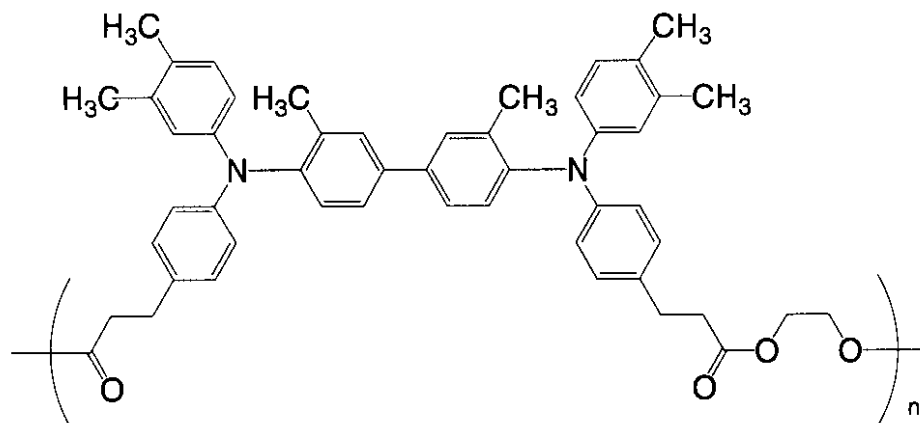
10



40

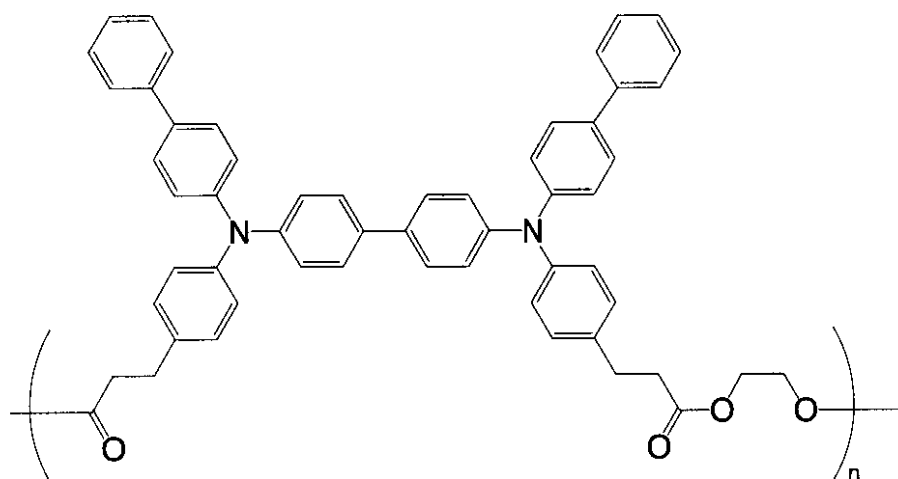
【 0 1 7 0 】

【化 19】



10

(VIII-8)



20

(VIII-9)

30

【0171】

図1～図4に示されるに示される有機EL素子の層構成の場合、発光層4および電荷輸送能を有する発光層6は、非共役系高分子を少なくとも1種含有する。

本発明において、発光層4は、有機電界発光素子の耐久性向上或いは発光効率の向上を目的として、本発明に用いられる非共役系高分子に対して、正孔移動度を調節するための正孔輸送材料を0.1質量%ないし50質量%の範囲で混合分散して形成されてもよい。また、電荷輸送能を有する発光層6は、正孔移動度を調節するための正孔輸送材料を0.1質量%ないし50質量%の範囲で混合分散して形成される。このような正孔輸送材料としては、テトラフェニレンジアミン誘導体、トリフェニルアミン誘導体、カルバゾール誘導体、スチルベン誘導体、アリールヒドラゾン誘導体、ポルフィリン系化合物が挙げられるが、該非共役系高分子との相溶性が良いことから、テトラフェニレンジアミン誘導体、トリフェニルアミン誘導体が好ましい。

40

【0172】

また、発光層4は、正孔輸送材料を混合分散する際の同様の目的として、本発明に用いられる非共役系高分子に対して、電子移動度を調節するための電子輸送材料を0.1質量%ないし50質量%の範囲で混合分散して形成されてもよい。また、電荷輸送能を有する

50

発光層 6 は、電子移動度を調節するための電子輸送材料を 0.1 質量%ないし 50 質量%の範囲で混合分散して形成される。このような電子輸送材料としては、オキサジアゾール誘導体、ニトロ置換フルオレノン誘導体、ジフェノキノン誘導体、チオピランジオキシド誘導体、フルオレニリデンメタン誘導体等が挙げられる。

また、正孔移動度および電子移動度の両方の調整が必要な場合は、該非共役系高分子に正孔輸送材料および電子輸送材料の両方を一緒に混在させてもよい。

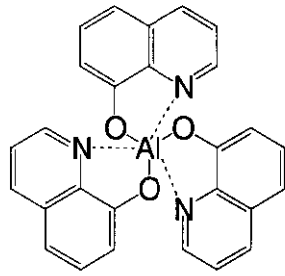
【0173】

また、発光層 4 および電荷輸送能を有する発光層 6 は、発光強度の向上、色純度、発光スペクトルの調整にゲスト材料として異なる色素化合物をドーピングしてもよい。ドーピングされる色素化合物としては、有機低分子でもよいし、有機高分子でもよい。

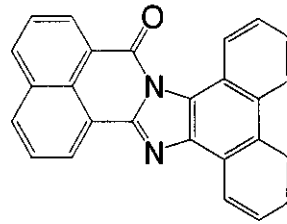
ドーピングされる色素化合物が有機低分子である場合の好適な例としては、キレート型有機金属錯体、多核または縮合芳香環化合物、ペリレン誘導体、クマリン誘導体、スチリルアリーレン誘導体、シロール誘導体、オキサゾール誘導体、オキサチアゾール誘導体、オキサジアゾール誘導体等が、高分子である場合の好適な例としては、ポリパラフェニレン誘導体、ポリパラフェニレンビニレン誘導体、ポリチオフエン誘導体、ポリアセチレン誘導体等が用いられる。好適な具体例として、下記の化合物 (IX-1) ~ (IX-17) が用いられるが、これらに限定されるものではない。

【0174】

【化 2 0】

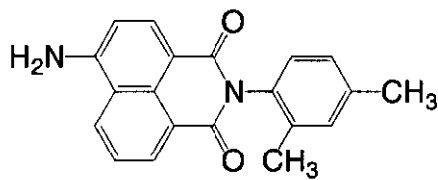


(IX-1)

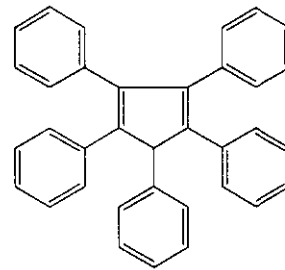


(IX-2)

10

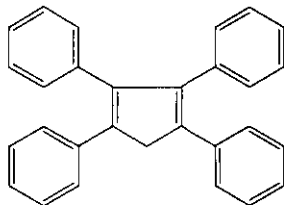


(IX-3)

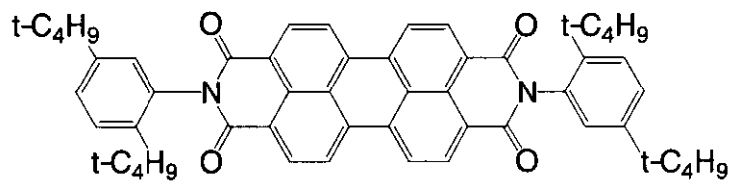


(IX-4)

20

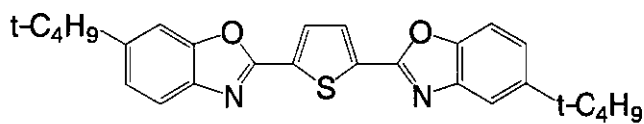


(IX-5)

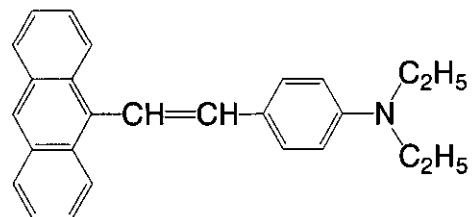


(IX-6)

30

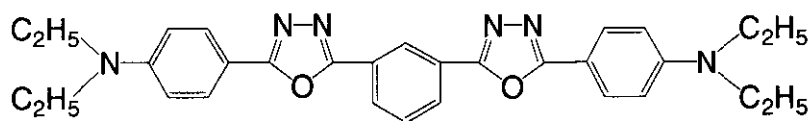


(IX-7)



(IX-8)

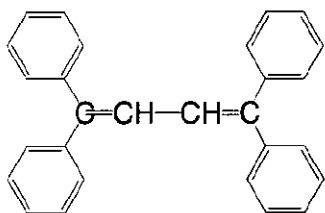
40



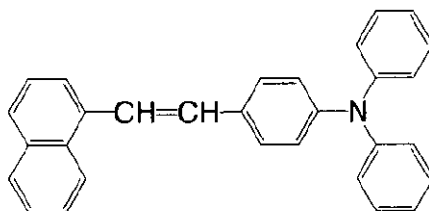
(IX-9)

【 0 1 7 5】

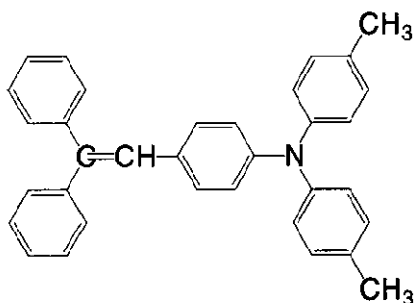
【化 2 1】、



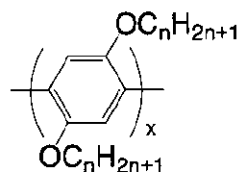
(IX-10)



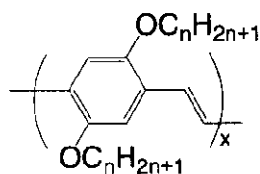
(IX-11)



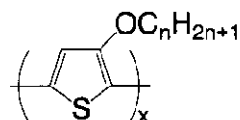
(IX-12)



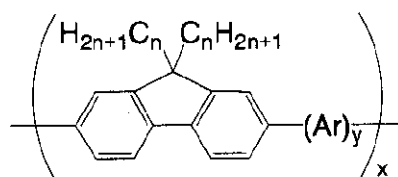
(IX-13)



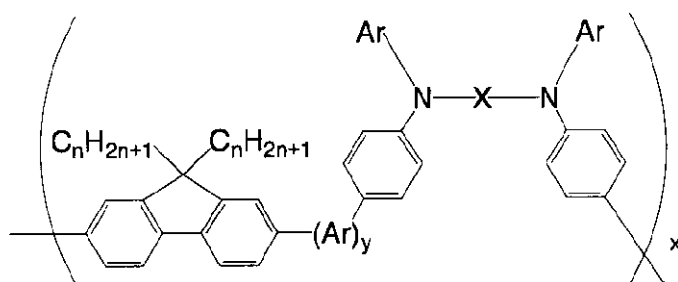
(IX-14)



(IX-15)



(IX-16)



(IX-17)

【0176】

構造式 (IX-1) ~ (IX-17) 中、 n および x は 1 以上の整数を、 y は 0 または 1 を示す。また、構造式 (IX-16) 及び (IX-17) 中、 Ar は置換もしくは未置

10

20

30

40

50

換の 1 価又は 2 価の芳香族基を表し、構造式 (I X-17) 中、X は置換もしくは未置換の 2 価の芳香族基を表す。

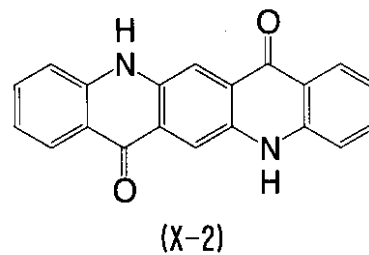
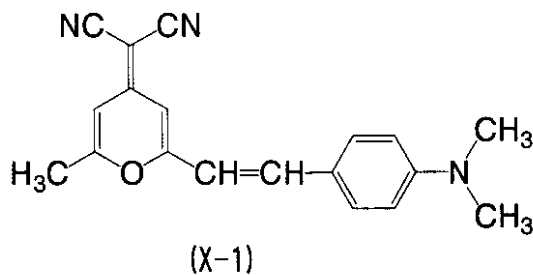
【0177】

実際には、非共役系高分子溶液または分散液中に混合することでドーピングを行う。発光層中における色素化合物のドーピングの割合としては 0.001 質量%～40 質量%程度、好ましくは 0.01 質量%～10 質量%程度である。このようなドーピングに用いられる色素化合物としては、発光材料との相容性が良く、かつ発光層の良好な薄膜形成を妨げない有機化合物が用いられ、好適には DCM 誘導体、キナクリドン誘導体、ルブレン誘導体、ポルフィリン系化合物等が挙げられる。好適な具体例として、下記の化合物 (X-1)～(X-4) が用いられるが、これらに限定されたものではない。

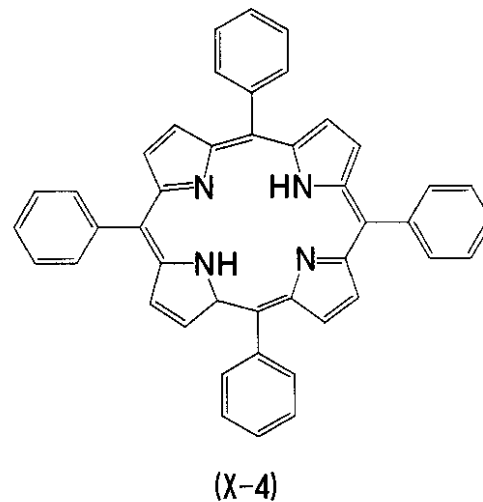
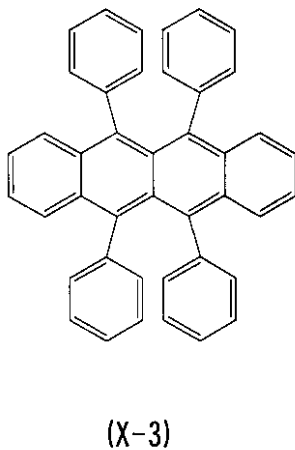
10

【0178】

【化 22】



20



30

【0179】

図 1～図 4 に示される有機 EL 素子の層構成の場合、背面電極 7 には、真空蒸着可能で、電子注入を行うため仕事関数の小さな金属が使用されるが、特に好ましくはマグネシウム、アルミニウム、銀、インジウムおよびこれらの合金、もしくはフッ化リチウムや酸化リチウム等の金属ハロゲン化合物や金属酸化物である。また、背面電極 7 上には、さらに素子の水分や酸素による劣化を防ぐために保護層を設けてもよい。

40

具体的な保護層の材料としては、In、Sn、Pb、Au、Cu、Ag、Al 等の金属、MgO、SiO₂、TiO₂ 等の金属酸化物、ポリエチレン樹脂、ポリウレタ樹脂、ポリイミド樹脂等の樹脂が挙げられる。保護層の形成には、真空蒸着法、スパッタリング法、プラズマ重合法、CVD 法、コーティング法が適用できる。

【0180】

これら図 1～図 4 に示される有機電界発光素子は、まず透明電極 2 の上に各有機電界発光素子の層構成に応じた個々の層を順次形成することにより作製される。なお、正孔輸送層及び／又は正孔注入層 3、発光層 4、電子輸送層及び／又は電子注入層 5、或いは、電

50

荷輸送機能を持つ発光層 6 は、上記各材料を真空蒸着法、もしくは、適切な有機溶媒に溶解或いは分散し、得られた塗布液を用いて前記透明電極上にスピンコーティング法、キャスト法、ディップ法等により形成される。

【0181】

本発明の有機電界発光素子の製造方法においては、有機化合物層用塗布液をインクジェット法により塗布する塗布工程を少なくとも有することが好ましい。すなわち、インクジェットプリンターに利用されているインクジェット記録による画像形成技術を、有機化合物層の形成に利用することができる。

インクジェット法を用いる場合、インクの代わりに、有機化合物層用塗布液を用いて、液滴吐出ヘッドのノズルから液滴状の有機化合物層用塗布液を吐出させることによって、基板上の所望の位置に所望の膜厚・形状の有機化合物層を形成することができる。 10

また、液滴吐出ヘッドとしても、基本的な構成や原理は、インクジェットプリンターに用いられている記録ヘッドと同様のものが利用できる。すなわち、有機化合物層用塗布液に圧力や熱等の外部刺激を付与することによって、有機化合物層用塗布液をノズルから液滴状に吐出する方法（いわゆる圧電素子を用いたピエゾインクジェット方式、熱沸騰現象を利用した熱インクジェット方式等）が利用できる。

【0182】

しかしながら、本発明の有機電界発光素子の製造に際しては、外部刺激は熱よりも圧力であることがより好ましい。外部刺激が熱である場合には、有機化合物層用塗布液のノズルからの吐出から、基板上へ着弾した有機化合物層用塗布液の溶媒の揮発による塗膜の形成（固化）というインクジェット印刷プロセスにおいて、有機化合物層用塗布液の粘度が熱によって大きく変化してしまうため、レベリング性やパターンニング精度の制御が困難になる場合がある。 20

また、インクジェット法を利用した本発明の有機電界発光素子の製造に用いられる装置としては、上述した液滴吐出ヘッドの他に、必要に応じて、例えば、有機電界発光素子を形成する対象である基板等の固定あるいは搬送手段や、液滴吐出ヘッドを基板平面方向に対して走査する液滴吐出ヘッド走査手段等を有していてもよい。

【0183】

なお、有機化合物層用塗布液は、その組成や物性は特に限定されるものではないが、有機化合物層用塗布液の粘度は、25℃において0.01～1000cpsの範囲内であることが好ましく、1～100cpsの範囲内であることが好ましい。 30

粘度が0.01cps未満である場合には、基板上に着弾した有機化合物層用塗布液が、基板平面方向に広がり易く、膜厚の制御が困難となり、パターンニング精度が劣化してしまう場合がある。また、粘度が1000cpsを超える場合には、有機化合物層用塗布液の粘性が高すぎるために吐出不良を起こしやすくなる場合がある。

【0184】

なお、有機化合物層用塗布液の粘度は、非共役系高分子や、必要に応じて添加されるその他の添加剤成分の含有量や、非共役系高分子の分子量等を制御することによって、所望の値に調整することができる。

【0185】

また、正孔輸送層および／または正孔注入層 3、発光層 4、電子輸送層および／または電子注入層 5、並びに、電荷輸送機能を持つ発光層 6 の膜厚は、各々10μm以下、特に0.001から5μmの範囲であることが好ましい。上記各材料（非共役系高分子、発光材料等）の分散状態は分子分散状態でも微結晶などの微粒子状態でも構わない。塗布液を用いた成膜法の場合、分子分散状態とするために分散溶媒は上記各材料の分散性及び溶解性を考慮して選択する必要がある。微粒子状に分散するためには、ボールミル、サンドミル、ペイントシャイカー、アトライター、ホモジナイザー、超音波法等が利用できる。 40

【0186】

そして、最後に、図1および図2に示す有機電界発光素子の場合には、電子輸送層および／または電子注入層 5 の上に背面電極 7 を真空蒸着法、スパッタリング法等により形成 50

することにより本発明の有機電界発光素子が完成される。また、図3に示す有機電界発光素子の場合には、発光層4の上に背面電極7を、図4に示す有機電界発光素子の場合には、電荷輸送機能を持つ発光層6の上に背面電極7を真空蒸着法、スパッタリング法等により形成することにより本発明の有機電界発光素子が完成される。

【0187】

本発明の有機EL素子は、一对の電極間に、例えば、2～20Vで、電流密度1～200mA/cm²の直流電圧を印加することによって発光させることができる。

【0188】

本発明の画像表示媒体は、本発明の有機電界発光素子を、マトリクス状及び／又はセグメント状に配置したことを特徴とする。

10

本発明において有機電界発光素子をマトリクス状に配置する場合、電極のみをマトリクス状に配置する態様であってもよいし、電極及び有機化合物層の両方をマトリクス状に配置する態様であってもよい。また、本発明において有機電界発光素子をセグメント状に配置する場合、電極のみをセグメント状に配置する態様であってもよいし、電極及び有機化合物層の両方をセグメント状に配置する態様であってもよい。

マトリクス状又はセグメント状の有機化合物層は、前述したインクジェット法を用いることにより容易に形成可能である。

マトリクス状の有機電界発光素子及びセグメント状の有機電界発光素子の駆動装置及び駆動方法としては、従来公知のものを用いることができる。

20

【実施例】

【0189】

以下、本発明を、実施例を挙げてさらに具体的に説明する。ただし、これら各実施例は、本発明を制限するものではない。

まず、実施例に用いた非共役系高分子は、例えば以下のようにして合成した。

（合成例1）

ジカルボン酸を有するモノマー構造〔44〕化合物を0.8gとモノカルボン酸を有する発光体586を0.05gをエチレングリコール8.0mlおよびテトラブトキシチタン0.02gを50mlの三口ナスフラスコに入れ、窒素気流下、210℃で8時間加熱攪拌した。その後、0.5mmHgに減圧してエチレングリコールを留去しながら200℃に加熱し、4時間反応を続けた。その後、室温まで冷却し、モノクロロベンゼン50mlに溶解し、不溶物を0.5μmのPTFEフィルターにてろ過し、ろ液を攪拌しているメタノール500ml中に滴下し、ポリマーを析出させた。得られたポリマーをろ過し、十分にメタノールで洗浄した後、乾燥させ、0.9gのポリマー〔化合物15〕を得た。

30

【0190】

（合成例2）

合成例1において、ジカルボン酸を有するモノマー構造〔88〕化合物と、モノカルボン酸を有する発光体585を用いた以外は合成例1と同様に合成し、0.8gのポリマー〔化合物25〕を得た。

【0191】

（合成例3）

合成例1において、ジカルボン酸を有するモノマー構造〔176〕化合物と、モノカルボン酸を有する発光体585を用いた以外は合成例1と同様に合成し、0.8gのポリマー〔化合物35〕を得た。

40

【0192】

（合成例4）

合成例1において、ジカルボン酸を有するモノマー構造〔207〕化合物と、モノカルボン酸を有する発光体586を用いた以外は合成例1と同様に合成し、0.8gのポリマー〔化合物41〕を得た。

【0193】

（合成例5）

50

二つのヒドロキシアルキル基を有するモノマー構造〔44〕化合物を1.0gと一つのヒドロキシアルキル基を有する発光体586を0.5mmHgに減圧して200℃に加熱し、6時間反応を続けた。その後、室温まで冷却し、モノクロロベンゼン50mlに溶解し、不溶物を0.5μmのPTFEフィルターにてろ過し、ろ液を攪拌しているメタノール500ml中に滴下し、ポリマーを析出させた。得られたポリマーをろ過し、十分にメタノールで洗浄した後、乾燥させ、0.8gのポリマー〔化合物88〕を得た。

【0194】

(合成例6)

合成例5において、二つのヒドロキシアルキル基を有するモノマー構造〔176〕化合物と、一つのヒドロキシアルキル基を有する発光体585を用いた以外は合成例5と同様に合成し、0.7gのポリマー〔化合物100〕を得た。

10

【0195】

(合成例7)

合成例5において、二つのヒドロキシアルキル基を有するモノマー構造〔207〕化合物と、一つのヒドロキシアルキル基を有する発光体600を用いた以外は合成例5と同様に合成し、0.8gのポリマー〔化合物105〕を得た。

【0196】

(合成例8)

合成例5において、二つのヒドロキシアルキル基を有するモノマー構造〔285〕化合物と、一つのヒドロキシアルキル基を有する発光体586を用いた以外は合成例5と同様に合成し、0.5gのポリマー〔化合物115〕を得た。

20

【0197】

(合成例9)

ジイソシシアネートを有するモノマー構造〔44〕化合物を1.0gと一つのヒドロキシアルキル基を有する発光体586を0.05gとをヘキサジオール10mlおよびジラウリ酸ジブチルスズ0.05gを100mlの三口ナスフラスコに入れ、窒素気流下、180℃で8時間加熱攪拌した。その後、室温まで冷却し、モノクロロベンゼン50mlに溶解し、不溶物を0.5μmのPTFEフィルターにてろ過し、ろ液を攪拌しているメタノール500ml中に滴下し、ポリマーを析出させた。得られたポリマーをろ過し、十分にメタノールで洗浄した後、乾燥させ、0.6gのポリマー〔化合物158〕を得た。

30

【0198】

(実施例1)

透明絶縁基板上に形成されたITO（三容真空社製）を短冊状のフォトマスクを用いてフォトリソグラフィによりパターンニングし、さらにエッチング処理することにより短冊状のITO電極（幅2mm）を形成した。次に、このITOガラス基板を中性洗剤、純水、アセトン（電子工業用、関東化学製）およびイソプロパノール（電子工業用、関東化学製）で超音波を各5分間加えて洗浄した後、スピncerコーターで乾燥させた。その後、紫外線オゾン洗浄した。前記基板に、発光層として、非共役系高分子〔例示化合物（15）〕を5質量%クロロベンゼン溶液に調製し、0.5μmのPTFEフィルターで濾過した後、スピncerコーター法により厚さ0.100μmの薄膜を形成した。充分乾燥させた後、続いて短冊状の穴が設けられている金属性マスクを用いて、最後にこのマスクを設置して、2mm幅でLiFを0.005μm、Alを0.15μm厚の背面電極をITO電極と交差するように形成した。形成された有機EL素子の有効面積は0.04cm²であった。

40

【0199】

(実施例2)

非共役系高分子〔例示化合物（25）〕1質量部、ポリ（N-ビニルカルバゾール）4質量部を含む10質量%クロロベンゼン溶液を調製し、0.5μmのPTFEフィルターで濾過した溶液を用いて、実施例1と同様にして2mm幅の短冊型ITO電極をエッチングにより形成したガラス基板上に、スピncerコーター法により膜厚約0.110μmの薄膜を形成した。充分乾燥させた後、2mm幅でCaを0.04μm、Alを0.15μm厚

50

の背面電極をITO電極と交差するように形成した。形成された有機EL素子の有効面積は 0.04 cm^2 であった。

【0200】

(実施例3)

実施例1同様にエッチング、洗浄したITOガラス基板に、実施例1同様に正孔輸送層兼発光層として、非共役系高分子〔例示化合物(35)〕を厚さ $0.050\text{ }\mu\text{m}$ に形成した。電子輸送層として前記例示化合物(VII-1)を厚さ $0.030\text{ }\mu\text{m}$ を形成した。続いて 2 mm 幅でLiFを $0.005\text{ }\mu\text{m}$ 、Alを $0.15\text{ }\mu\text{m}$ 厚の背面電極をITO電極と交差するように形成した。形成された有機EL素子の有効面積は 0.04 cm^2 であった。

10

【0201】

(実施例4)

実施例1で用いた例示化合物(15)の代わりに例示化合物(41)を用いた以外は、実施例1と同様にして有機電界発光素子を作製した。

【0202】

(実施例5)

実施例2で用いた例示化合物(25)の代わりに例示化合物(88)を用いた以外は、実施例2と同様にして有機電界発光素子を作製した。

【0203】

(実施例6)

実施例3で用いた例示化合物(35)の代わりに例示化合物(100)を用いた以外は、実施例3と同様にして有機電界発光素子を作製した。

20

【0204】

(実施例7)

実施例3で用いた例示化合物(35)の代わりに例示化合物(105)を用いた以外は、実施例3と同様にして有機電界発光素子を作製した。

【0205】

(実施例8)

実施例3で用いた例示化合物(35)の代わりに例示化合物(115)を用いた以外は、実施例3と同様にして有機電界発光素子を作製した。

30

【0206】

(実施例9)

実施例3で用いた例示化合物(35)の代わりに例示化合物(158)を用いた以外は、実施例3と同様にして有機電界発光素子を作製した。

【0207】

(比較例1)

ポリビニルカルバゾール(PVK)中に発光材料としてイリジウム(III)トリス(2-フェニルピリジン)錯体をPVKに対して2質量%含有させたジクロロエタン溶液を調製し、 $0.5\text{ }\mu\text{m}$ のPTFEフィルターで濾過した。この溶液を用いて、 2 mm 幅の短冊型ITO電極をエッチングにより形成したガラス基板の上に、スピンコーター法により塗布して膜厚 $0.1\text{ }\mu\text{m}$ の有機化合物層を形成し、十分乾燥させた。その後、 2 mm 幅でLiFを $0.005\text{ }\mu\text{m}$ 、Alを $0.15\text{ }\mu\text{m}$ 厚の背面電極をITO電極と交差するように形成した。形成された有機EL素子の有効面積は 0.04 cm^2 であった。

40

【0208】

(比較例2)

ポリビニルカルバゾール(PVK)中に発光材料としてイリジウム(III)トリス(2-フェニルピリジン)錯体をPVKに対して2質量%、電子輸送材料として前記化合物(VII-1)をPVKに対して30質量%混合し、10質量%ジクロロエタン溶液を調製し、 $0.5\text{ }\mu\text{m}$ のPTFEフィルターで濾過した。この溶液を用いて、 2 mm 幅の短冊型ITO電極をエッチングにより形成したガラス基板の上に、スピンコーター法により塗布

50

して膜厚 $0.1 \mu\text{m}$ の有機化合物層を形成し、十分乾燥させた。その後、 2 mm 幅で LiF を $0.005 \mu\text{m}$ 、 Al を $0.15 \mu\text{m}$ 厚の背面電極を ITO 電極と交差するように形成した。形成された有機 EL 素子の有効面積は 0.04 cm^2 であった。

【0209】

以上のように作製した有機 EL 素子を、乾燥窒素下でガラス封止板をエポキシ樹脂で張り合わせた後、室温下、 ITO 電極側をプラス、 Al 背面電極をマイナスとして直流電圧を印加して直流駆動方式（ DC 駆動）で発光させた。このとき、初期輝度が 800 cd/m^2 となるように駆動電流密度を調整した。各有機 EL 素子の駆動電流密度を表 55 に示す。

次に、各有機 EL 素子の輝度が初期輝度の半分になるのに要する時間（駆動時間）を測定した。表 55 に、比較例 1 の有機 EL 素子の駆動時間を 1.0 としたときの各有機 EL 素子の駆動時間の相対値を示す。また、各 EL 素子の輝度が初期輝度の半分になったときの印加電圧（ V ）を初期の印加電圧（ V_0 ）で除した値 V/V_0 を表 55 に示す。

【0210】

【表 55】

	駆動電流密度 (mA/cm^2)	印加電圧 (V/V_0)	駆動時間 (相対値)
実施例1	12	1.10	1.56
実施例2	18	1.15	1.25
実施例3	20	1.19	1.35
実施例4	16	1.09	1.45
実施例5	14	1.12	1.65
実施例6	18	1.09	1.78
実施例7	21	1.20	1.45
実施例8	14	1.25	1.89
実施例9	24	1.25	1.35
比較例1	20	1.32	1.00
比較例2	19	1.25	1.08

【図面の簡単な説明】

【0211】

【図 1】本発明の有機電界発光素子の層構成の一例を示した概略構成図である。

【図 2】本発明の有機電界発光素子の層構成の一例を示した概略構成図である。

【図 3】本発明の有機電界発光素子の層構成の一例を示した概略構成図である。

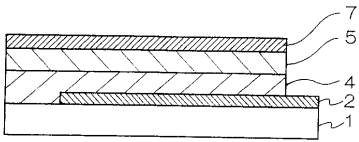
【図 4】本発明の有機電界発光素子の層構成の一例を示した概略構成図である。

【符号の説明】

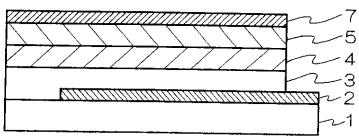
【0212】

- 1 透明絶縁体基板
- 2 透明電極
- 3 正孔輸送層および／または正孔注入層
- 4 発光層
- 5 電子輸送層および／または電子注入層
- 6 電荷輸送能を持つ発光層
- 7 背面電極

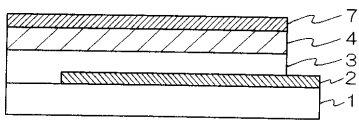
【図 1】



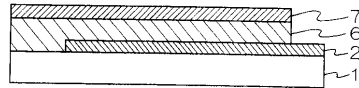
【図 2】



【図 3】



【図 4】



フロントページの続き

- (72)発明者 関 三枝子
神奈川県南足柄市竹松1600番地 富士ゼロックス株式会社内
- (72)発明者 米山 博人
神奈川県南足柄市竹松1600番地 富士ゼロックス株式会社内
- (72)発明者 尾崎 忠義
神奈川県南足柄市竹松1600番地 富士ゼロックス株式会社内
- (72)発明者 阿形 岳
神奈川県南足柄市竹松1600番地 富士ゼロックス株式会社内
- (72)発明者 石井 徹
神奈川県南足柄市竹松1600番地 富士ゼロックス株式会社内
- (72)発明者 真下 清和
神奈川県南足柄市竹松1600番地 富士ゼロックス株式会社内
- (72)発明者 西野 洋平
神奈川県南足柄市竹松1600番地 富士ゼロックス株式会社内
- (72)発明者 堀場 幸治
神奈川県南足柄市竹松1600番地 富士ゼロックス株式会社内
- (72)発明者 佐藤 克洋
神奈川県南足柄市竹松1600番地 富士ゼロックス株式会社内
- (72)発明者 奥田 大輔
神奈川県南足柄市竹松1600番地 富士ゼロックス株式会社内
- Fターム(参考) 3K007 AB02 AB03 AB11 AB14 AB18 DB03 FA01