

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号
特許第7101723号
(P7101723)

(45)発行日 令和4年7月15日(2022.7.15)

(24)登録日 令和4年7月7日(2022.7.7)

(51)国際特許分類

F I

C 0 7 F 15/00 (2006.01)

C 0 7 F

15/00

E

C 0 9 K 11/06 (2006.01)

C 0 9 K

11/06

6 6 0

H 0 1 L 51/50 (2006.01)

H 0 5 B

33/14

B

請求項の数 13 (全103頁)

(21)出願番号 特願2020-101997(P2020-101997)

(22)出願日 令和2年6月12日(2020.6.12)

(62)分割の表示 特願2019-112579(P2019-112579)
の分割

原出願日 平成26年6月30日(2014.6.30)

(65)公開番号 特開2020-164536(P2020-164536
A)

(43)公開日 令和2年10月8日(2020.10.8)

審査請求日 令和2年6月12日(2020.6.12)

(31)優先権主張番号 13/932,508

(32)優先日 平成25年7月1日(2013.7.1)

(33)優先権主張国・地域又は機関
米国(US)

前置審査

(73)特許権者 503055897

ユニバーサル ディスプレイ コーポレイ
ションアメリカ合衆国 0 8 6 1 8 ニュージャ
ージー州 ユーイング フィリップス ブ
ールバード 2 5 0

(74)代理人 100107766

弁理士 伊東 忠重

(74)代理人 100070150

弁理士 伊東 忠彦

(74)代理人 100107515

弁理士 廣田 浩一

(74)代理人 100107733

弁理士 流 良広

(74)代理人 100115347

最終頁に続く

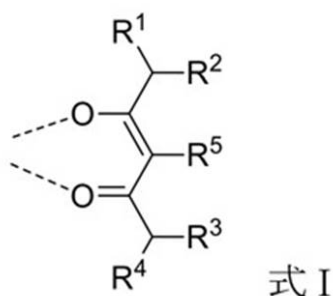
(54)【発明の名称】 有機金属錯体のための補助配位子

(57)【特許請求の範囲】

【請求項1】

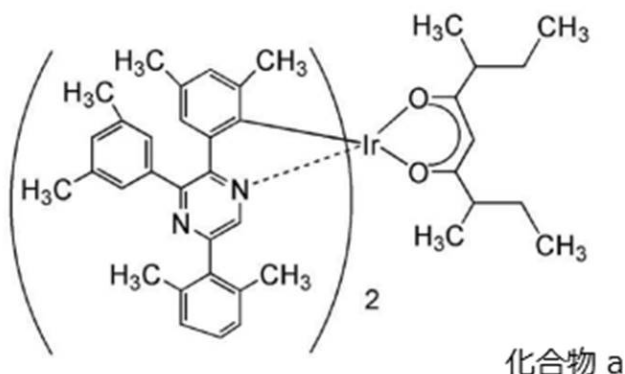
リン光発光金属錯体化合物における補助配位子としての第1の配位子L¹の使用であって、
前記第1の配位子L¹が次の式Iを有し、前記第1の配位子L¹は、I_rに配位していることを特徴とする第1の配位子L¹の使用
(ただし、前記リン光発光金属錯体化合物が、以下の化合物aである場合を除く。)。

【化1】

(式I中、R¹、R²、R³、及びR⁴は、独立して、アルキル又はシクロアルキルであ
り；R¹、R²、R³、及びR⁴の少なくとも1つは、少なくとも2つのCを有し；R⁵は、水素、重水素、ハライド、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、アリー

ルアルキル、アルコキシ、アリーロキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、アシル、カルボン酸、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、ホスフィノ及びこれらの組み合わせからなる群から選択される。）

【化 2】



10

【請求項 2】

前記金属錯体の発光スペクトルを狭める及び／又は蒸着温度を低下させるため、及び／又は有機発光デバイスのデバイス効率を改善するための請求項 1 に記載の使用。

20

【請求項 3】

前記 R 5 が水素、重水素、アルキル、シクロアルキル、及びこれらの組み合わせからなる群から選択される請求項 1 又は 2 に記載の使用。

【請求項 4】

前記 R 5 が水素である請求項 3 に記載の使用。

【請求項 5】

前記 R 1、R 2、R 3、及び R 4 がメチル、エチル、プロピル、1-メチルエチル、ブチル、1-メチルプロピル、2-メチルプロピル、ペンチル、1-メチルブチル、2-メチルブチル、3-メチルブチル、1, 1-ジメチルプロピル、1, 2-ジメチルプロピル、2, 2-ジメチルプロピル、シクロペンチル、シクロヘキシル、部分的又は完全に重水素化されたこれらのバリエーション、及びこれらの組合せからなる群から選択される請求項 1 に記載の使用。

30

【請求項 6】

前記化合物は、 $\text{Ir}(\text{L}1)_x(\text{L}2)_y(\text{L}3)_z$ の式を有し；

式中、L 2 は、第 2 の配位子であり、L 3 は、第 3 の配位子であり、L 2 及び L 3 は、同一であっても異なってもよく；

x は、1、2、又は 3 であり；

y は、0、1、又は 2 であり；

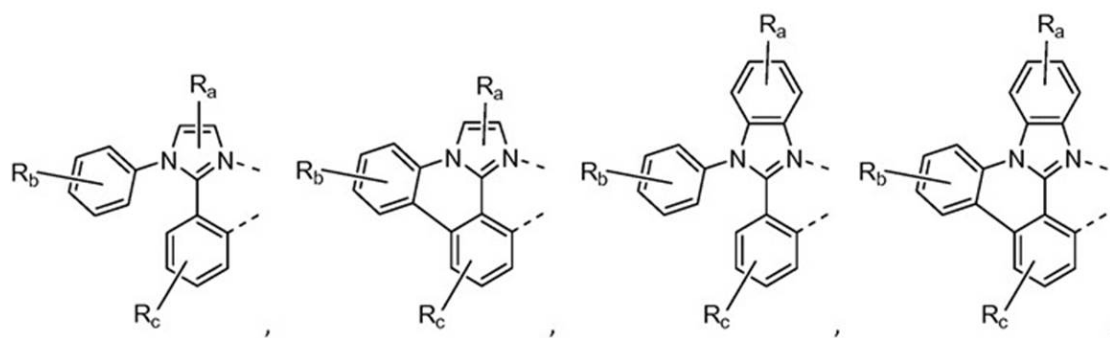
z は、0、1、又は 2 であり；

x + y + z は、Ir の酸化状態であり；

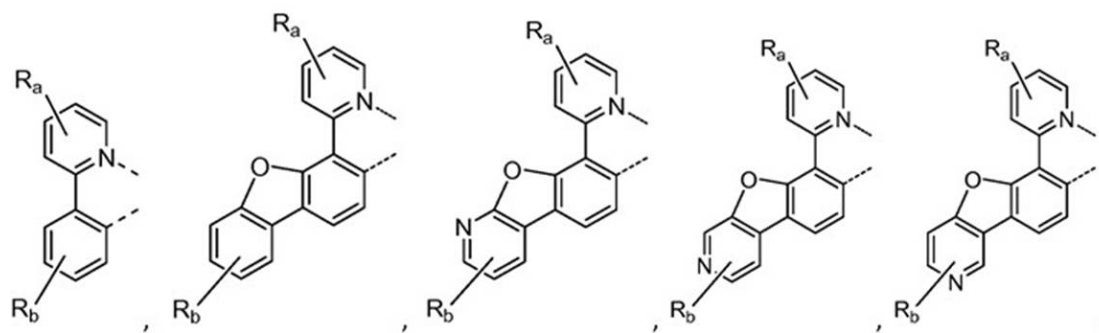
40

前記第 2 の配位子 L 2 及び前記第 3 の配位子 L 3 は、独立して、下記からなる群から選択される請求項 1 から 5 のいずれかに記載の使用。

【化 3】



10



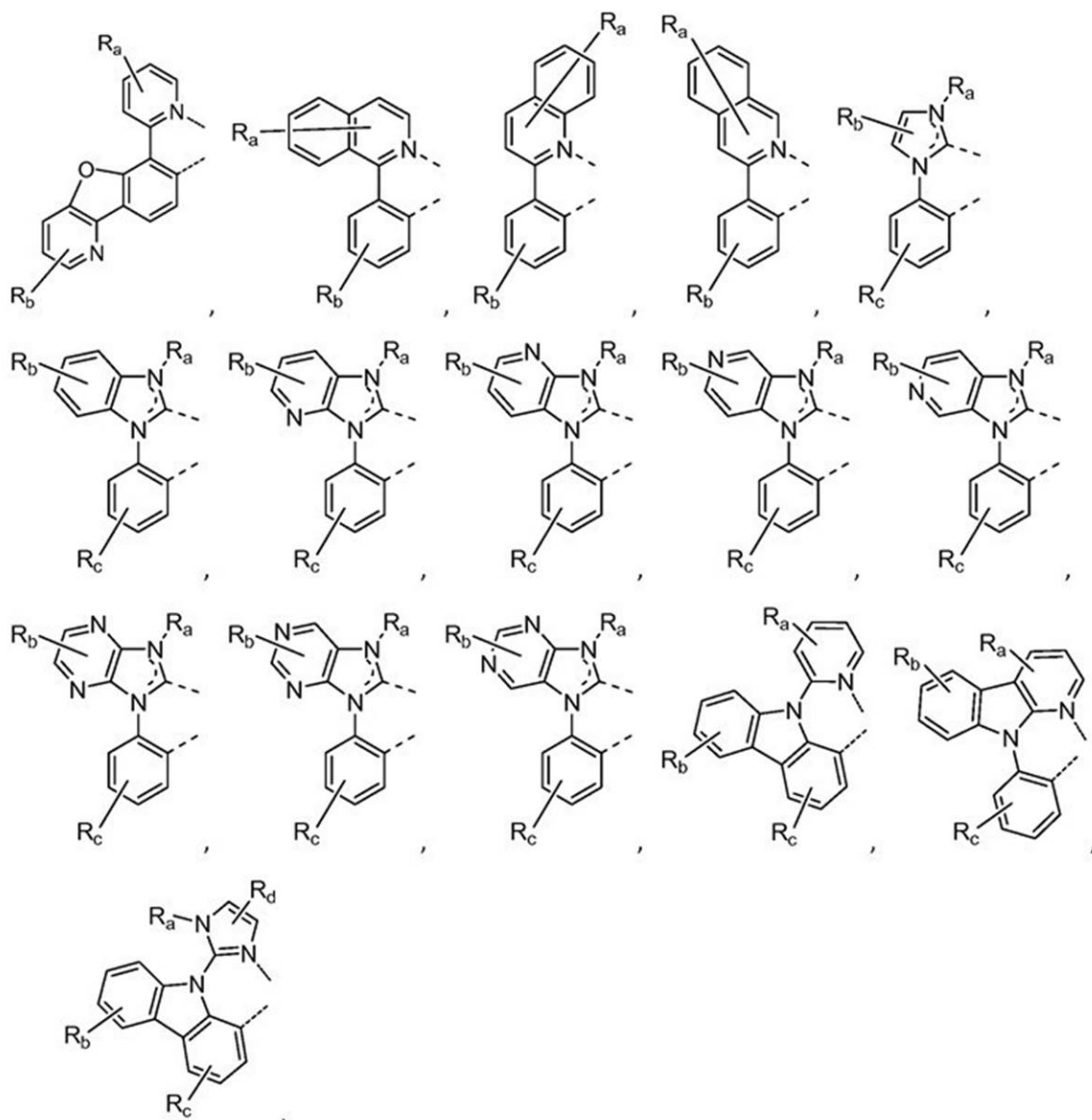
20

30

40

50

【化 4】



10

20

30

(式中、 R_a 、 R_b 、 R_c 、及び R_d は、モノ、ジ、トリ、又はテトラ置換を表すか、無置換であり； R_a 、 R_b 、 R_c 、及び R_d は、独立して、水素、重水素、ハライド、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、アリールアルキル、アルコキシ、アリーロキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、アシル、カルボン酸、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、ホスフィノ及びこれらの組み合わせからなる群から選択され； R_a 、 R_b 、 R_c 、及び R_d のうちの2つの隣接する置換基は、結合して縮合環又は多座配位子を形成してもよい。)

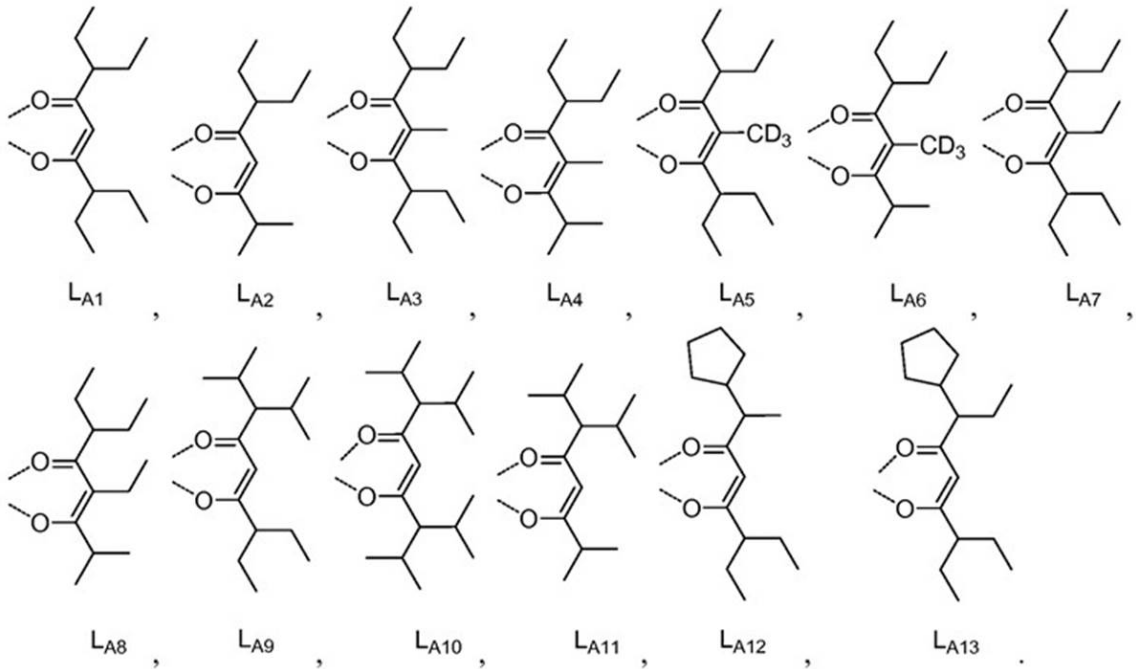
40

【請求項 7】

前記 L 1 は、下記からなる群から選択される請求項 6 に記載の使用。

50

【化 5】



10

20

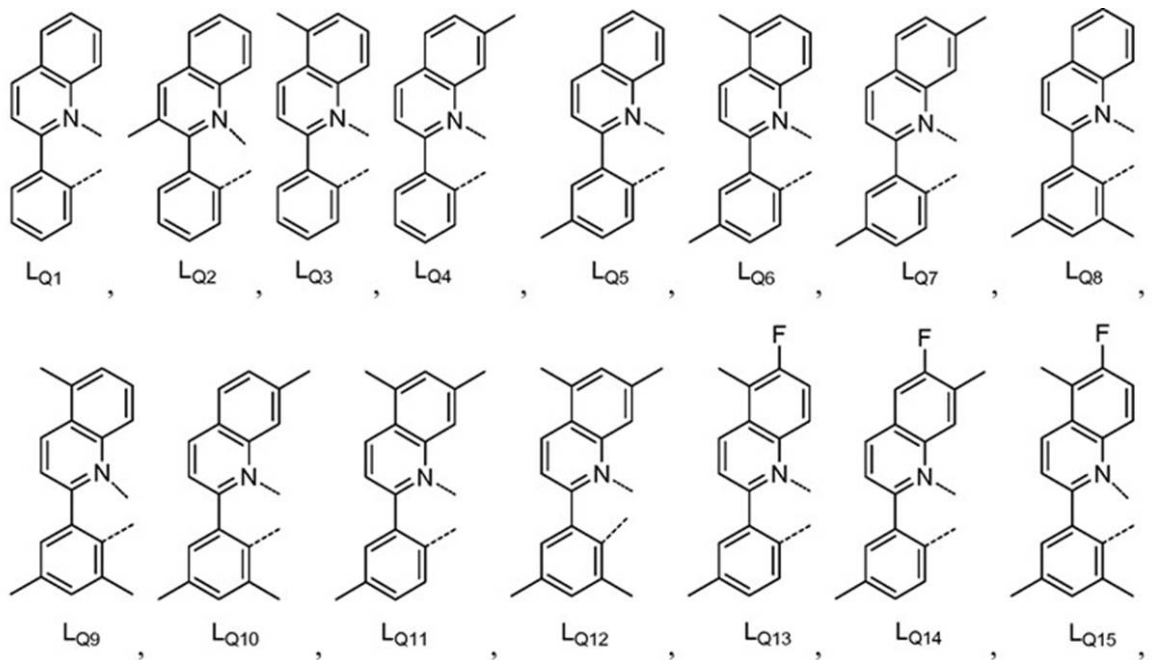
【請求項 8】

前記化合物は、 $I_r(L1)(L2)_2$ の式を有する請求項 6 又は 7 に記載の使用。

【請求項 9】

前記 $L2$ は、下記からなる群から選択される請求項 8 に記載の使用。

【化 6】

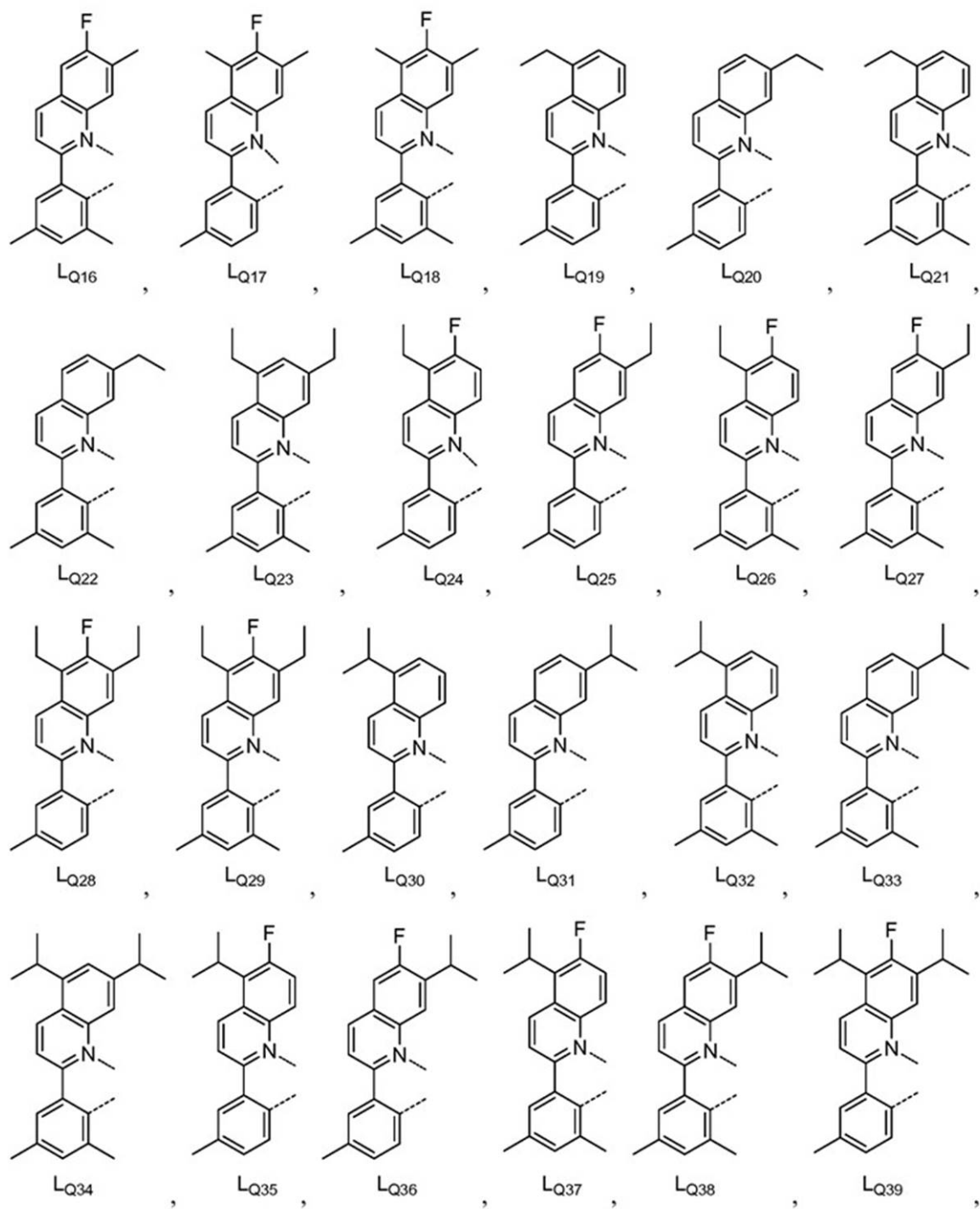


30

40

50

【化 7】



10

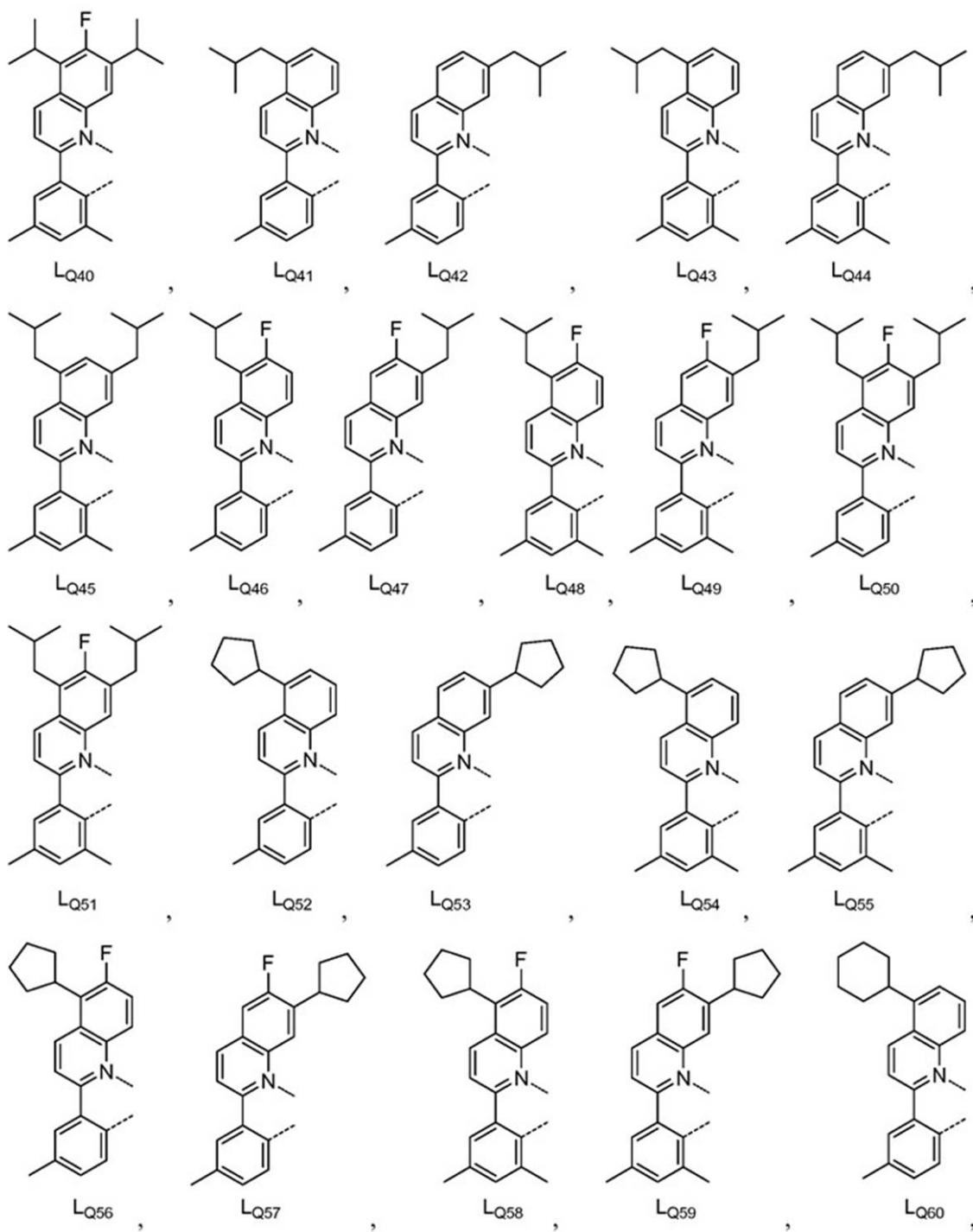
20

30

40

50

【化 8】



10

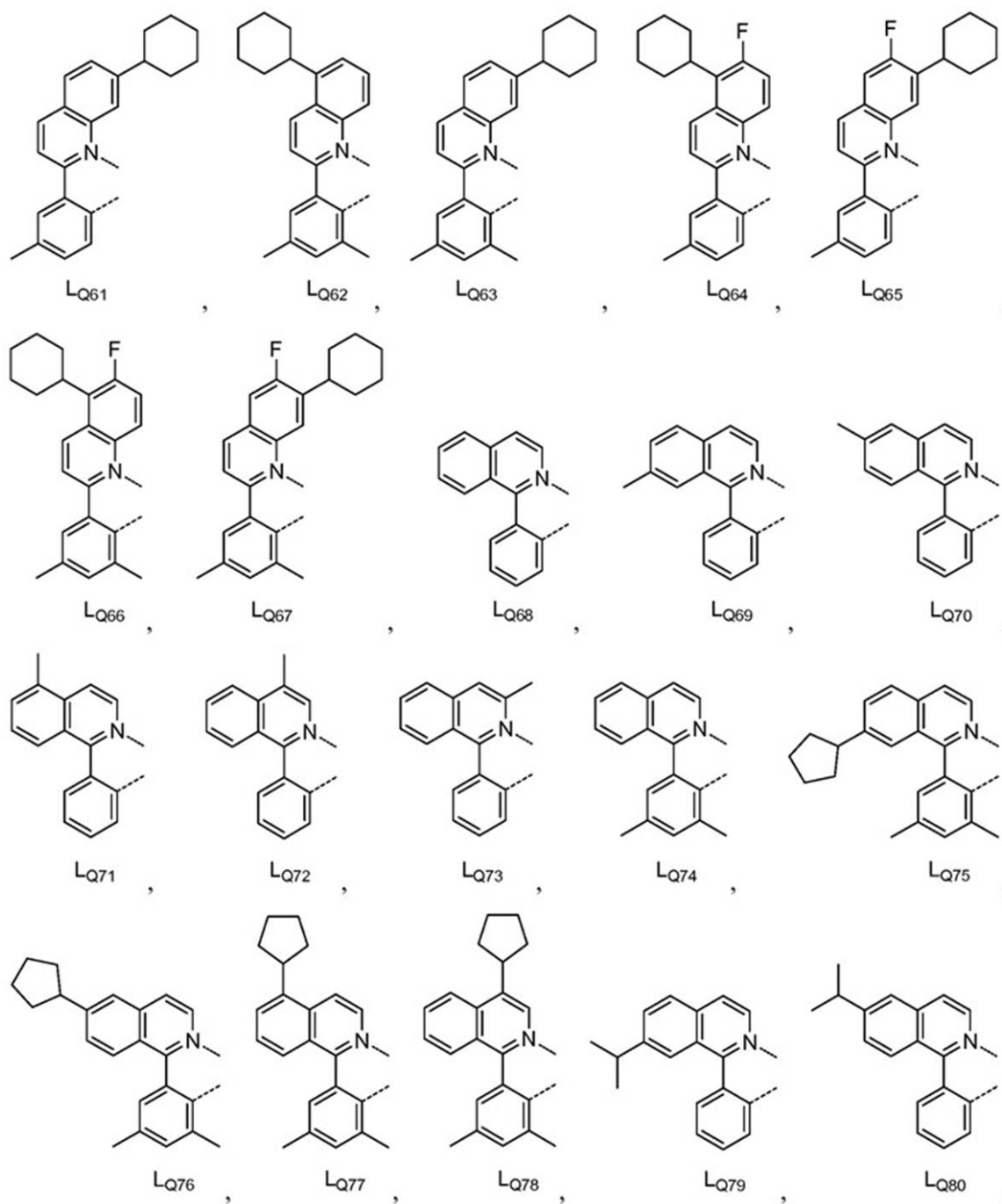
20

30

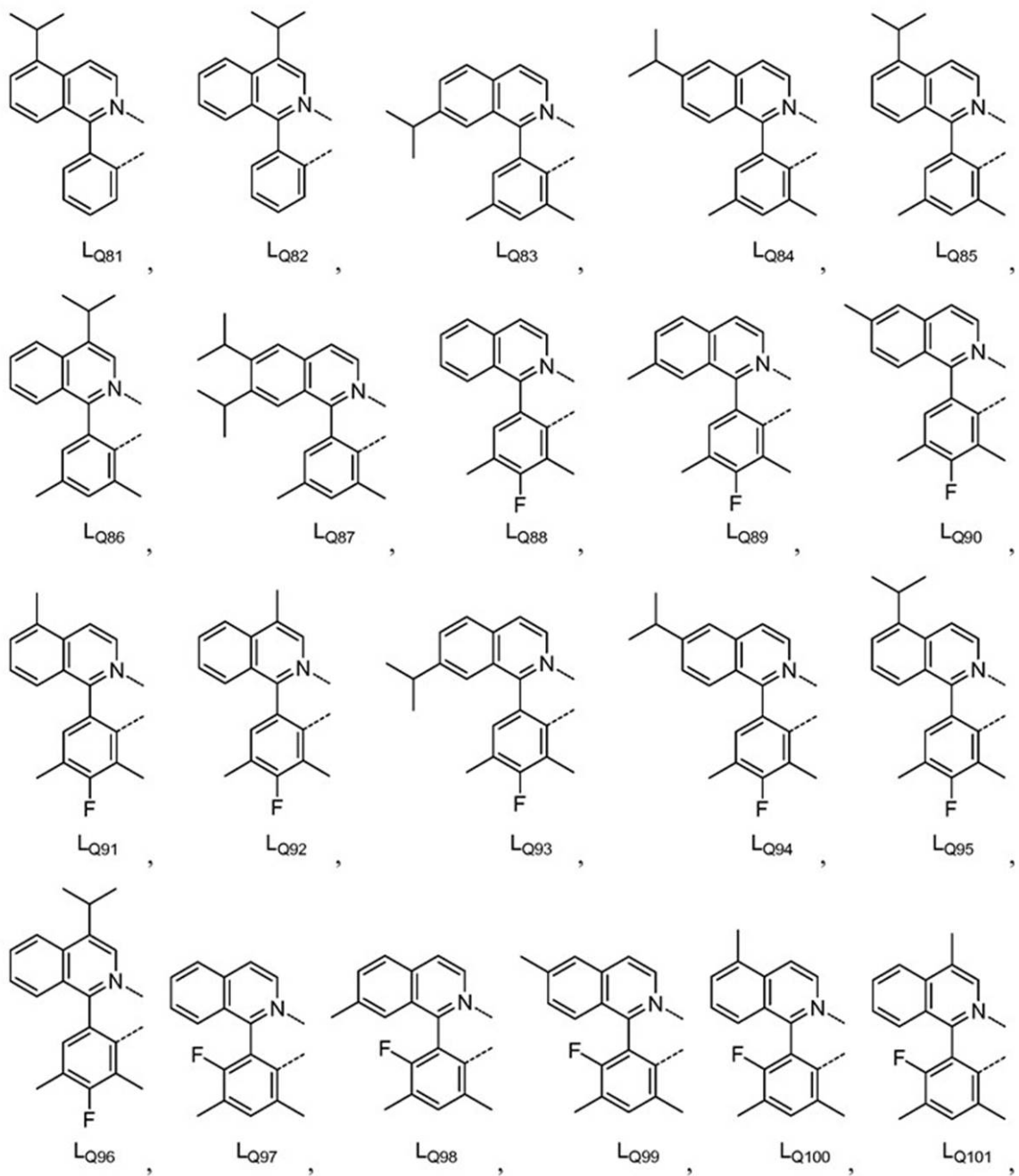
40

50

【化 9】



【化 10】



10

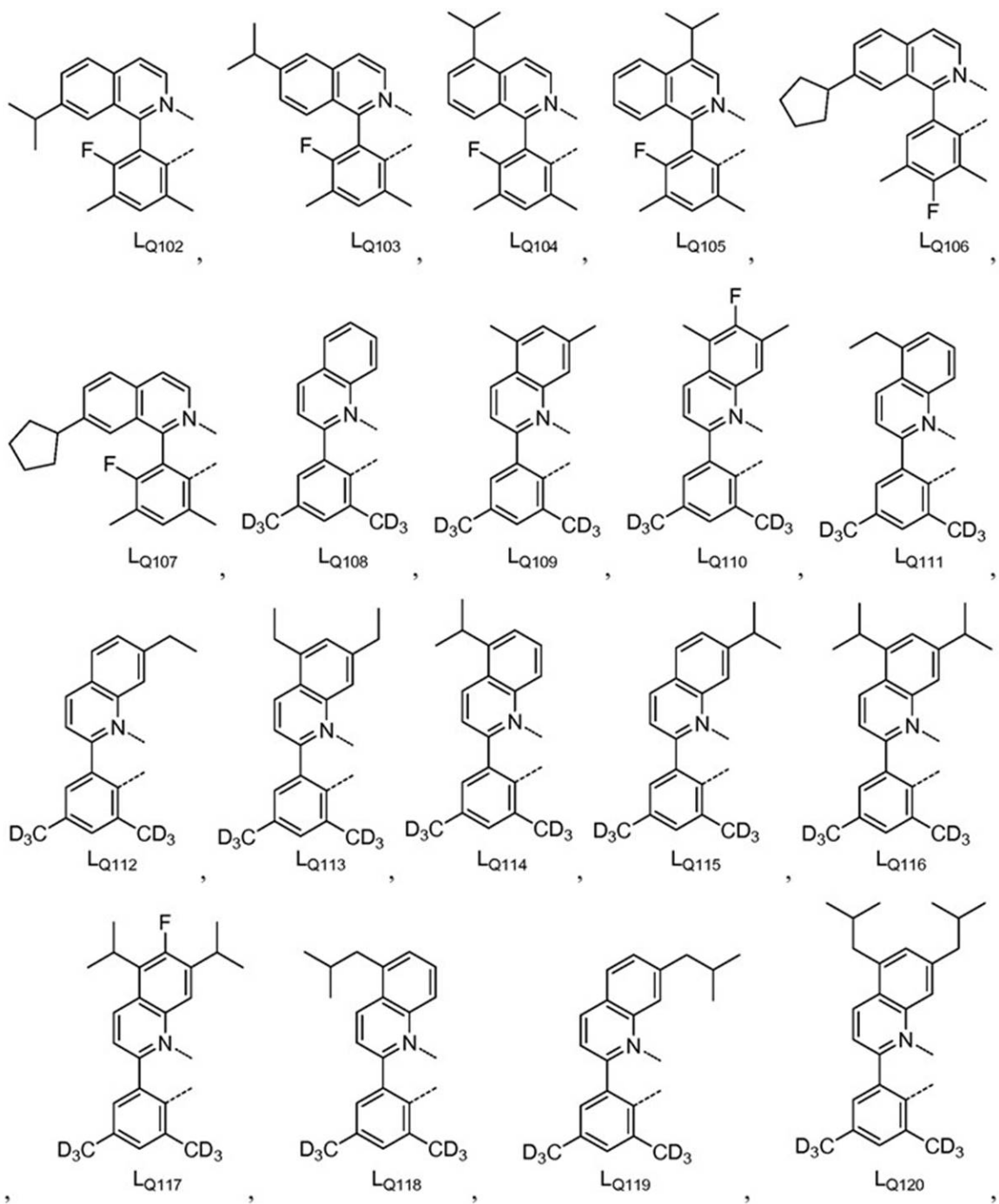
20

30

40

50

【化 1 1】



10

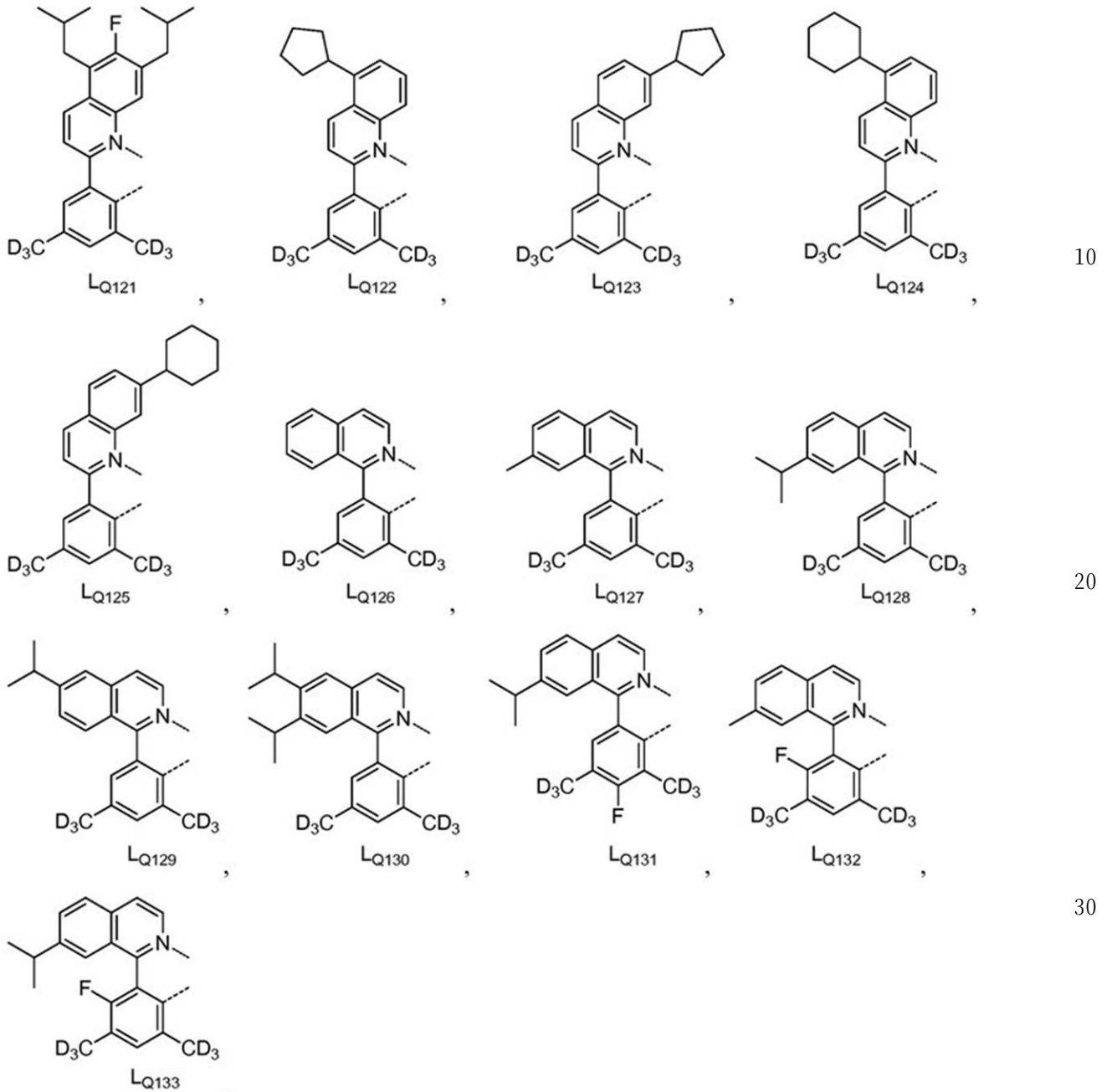
20

30

40

50

【化 1 2】



【請求項 1 0】

I r (L 1) (L 2) 2 の式を有する化合物が、下記の表に記載の化合物 1 ～化合物 1 7 2 9 からなる群から選択される請求項 9 に記載の使用。

40

50

【表 1 - 1】

化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²
1.	L _{A1}	L _{Q1}	578.	L _{A5}	L _{Q46}	1155.	L _{A9}	L _{Q91}
2.	L _{A1}	L _{Q2}	579.	L _{A5}	L _{Q47}	1156.	L _{A9}	L _{Q92}
3.	L _{A1}	L _{Q3}	580.	L _{A5}	L _{Q48}	1157.	L _{A9}	L _{Q93}
4.	L _{A1}	L _{Q4}	581.	L _{A5}	L _{Q49}	1158.	L _{A9}	L _{Q94}
5.	L _{A1}	L _{Q5}	582.	L _{A5}	L _{Q50}	1159.	L _{A9}	L _{Q95}
6.	L _{A1}	L _{Q6}	583.	L _{A5}	L _{Q51}	1160.	L _{A9}	L _{Q96}
7.	L _{A1}	L _{Q7}	584.	L _{A5}	L _{Q52}	1161.	L _{A9}	L _{Q97}
8.	L _{A1}	L _{Q8}	585.	L _{A5}	L _{Q53}	1162.	L _{A9}	L _{Q98}
9.	L _{A1}	L _{Q9}	586.	L _{A5}	L _{Q54}	1163.	L _{A9}	L _{Q99}
10.	L _{A1}	L _{Q10}	587.	L _{A5}	L _{Q55}	1164.	L _{A9}	L _{Q100}
11.	L _{A1}	L _{Q11}	588.	L _{A5}	L _{Q56}	1165.	L _{A9}	L _{Q101}
12.	L _{A1}	L _{Q12}	589.	L _{A5}	L _{Q57}	1166.	L _{A9}	L _{Q102}
13.	L _{A1}	L _{Q13}	590.	L _{A5}	L _{Q58}	1167.	L _{A9}	L _{Q103}
14.	L _{A1}	L _{Q14}	591.	L _{A5}	L _{Q59}	1168.	L _{A9}	L _{Q104}
15.	L _{A1}	L _{Q15}	592.	L _{A5}	L _{Q60}	1169.	L _{A9}	L _{Q105}
16.	L _{A1}	L _{Q16}	593.	L _{A5}	L _{Q61}	1170.	L _{A9}	L _{Q106}
17.	L _{A1}	L _{Q17}	594.	L _{A5}	L _{Q62}	1171.	L _{A9}	L _{Q107}
18.	L _{A1}	L _{Q18}	595.	L _{A5}	L _{Q63}	1172.	L _{A9}	L _{Q108}
19.	L _{A1}	L _{Q19}	596.	L _{A5}	L _{Q64}	1173.	L _{A9}	L _{Q109}
20.	L _{A1}	L _{Q20}	597.	L _{A5}	L _{Q65}	1174.	L _{A9}	L _{Q110}
21.	L _{A1}	L _{Q21}	598.	L _{A5}	L _{Q66}	1175.	L _{A9}	L _{Q111}
22.	L _{A1}	L _{Q22}	599.	L _{A5}	L _{Q67}	1176.	L _{A9}	L _{Q112}
23.	L _{A1}	L _{Q23}	600.	L _{A5}	L _{Q68}	1177.	L _{A9}	L _{Q113}
24.	L _{A1}	L _{Q24}	601.	L _{A5}	L _{Q69}	1178.	L _{A9}	L _{Q114}
25.	L _{A1}	L _{Q25}	602.	L _{A5}	L _{Q70}	1179.	L _{A9}	L _{Q115}
26.	L _{A1}	L _{Q26}	603.	L _{A5}	L _{Q71}	1180.	L _{A9}	L _{Q116}
27.	L _{A1}	L _{Q27}	604.	L _{A5}	L _{Q72}	1181.	L _{A9}	L _{Q117}
28.	L _{A1}	L _{Q28}	605.	L _{A5}	L _{Q73}	1182.	L _{A9}	L _{Q118}
29.	L _{A1}	L _{Q29}	606.	L _{A5}	L _{Q74}	1183.	L _{A9}	L _{Q119}
30.	L _{A1}	L _{Q30}	607.	L _{A5}	L _{Q75}	1184.	L _{A9}	L _{Q120}
31.	L _{A1}	L _{Q31}	608.	L _{A5}	L _{Q76}	1185.	L _{A9}	L _{Q121}
32.	L _{A1}	L _{Q32}	609.	L _{A5}	L _{Q77}	1186.	L _{A9}	L _{Q122}
33.	L _{A1}	L _{Q33}	610.	L _{A5}	L _{Q78}	1187.	L _{A9}	L _{Q123}
34.	L _{A1}	L _{Q34}	611.	L _{A5}	L _{Q79}	1188.	L _{A9}	L _{Q124}
35.	L _{A1}	L _{Q35}	612.	L _{A5}	L _{Q80}	1189.	L _{A9}	L _{Q125}
36.	L _{A1}	L _{Q36}	613.	L _{A5}	L _{Q81}	1190.	L _{A9}	L _{Q126}
37.	L _{A1}	L _{Q37}	614.	L _{A5}	L _{Q82}	1191.	L _{A9}	L _{Q127}
38.	L _{A1}	L _{Q38}	615.	L _{A5}	L _{Q83}	1192.	L _{A9}	L _{Q128}
39.	L _{A1}	L _{Q39}	616.	L _{A5}	L _{Q84}	1193.	L _{A9}	L _{Q129}
40.	L _{A1}	L _{Q40}	617.	L _{A5}	L _{Q85}	1194.	L _{A9}	L _{Q130}
41.	L _{A1}	L _{Q41}	618.	L _{A5}	L _{Q86}	1195.	L _{A9}	L _{Q131}
42.	L _{A1}	L _{Q42}	619.	L _{A5}	L _{Q87}	1196.	L _{A9}	L _{Q132}
43.	L _{A1}	L _{Q43}	620.	L _{A5}	L _{Q88}	1197.	L _{A9}	L _{Q133}
44.	L _{A1}	L _{Q44}	621.	L _{A5}	L _{Q89}	1198.	L _{A10}	L _{Q1}
45.	L _{A1}	L _{Q45}	622.	L _{A5}	L _{Q90}	1199.	L _{A10}	L _{Q2}
46.	L _{A1}	L _{Q46}	623.	L _{A5}	L _{Q91}	1200.	L _{A10}	L _{Q3}
47.	L _{A1}	L _{Q47}	624.	L _{A5}	L _{Q92}	1201.	L _{A10}	L _{Q4}
48.	L _{A1}	L _{Q48}	625.	L _{A5}	L _{Q93}	1202.	L _{A10}	L _{Q5}
49.	L _{A1}	L _{Q49}	626.	L _{A5}	L _{Q94}	1203.	L _{A10}	L _{Q6}

10

20

30

40

50

【表 1 - 2】

化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²
50.	L _{A1}	L _{Q50}	627.	L _{A5}	L _{Q95}	1204.	L _{A10}	L _{Q7}
51.	L _{A1}	L _{Q51}	628.	L _{A5}	L _{Q96}	1205.	L _{A10}	L _{Q8}
52.	L _{A1}	L _{Q52}	629.	L _{A5}	L _{Q97}	1206.	L _{A10}	L _{Q9}
53.	L _{A1}	L _{Q53}	630.	L _{A5}	L _{Q98}	1207.	L _{A10}	L _{Q10}
54.	L _{A1}	L _{Q54}	631.	L _{A5}	L _{Q99}	1208.	L _{A10}	L _{Q11}
55.	L _{A1}	L _{Q55}	632.	L _{A5}	L _{Q100}	1209.	L _{A10}	L _{Q12}
56.	L _{A1}	L _{Q56}	633.	L _{A5}	L _{Q101}	1210.	L _{A10}	L _{Q13}
57.	L _{A1}	L _{Q57}	634.	L _{A5}	L _{Q102}	1211.	L _{A10}	L _{Q14}
58.	L _{A1}	L _{Q58}	635.	L _{A5}	L _{Q103}	1212.	L _{A10}	L _{Q15}
59.	L _{A1}	L _{Q59}	636.	L _{A5}	L _{Q104}	1213.	L _{A10}	L _{Q16}
60.	L _{A1}	L _{Q60}	637.	L _{A5}	L _{Q105}	1214.	L _{A10}	L _{Q17}
61.	L _{A1}	L _{Q61}	638.	L _{A5}	L _{Q106}	1215.	L _{A10}	L _{Q18}
62.	L _{A1}	L _{Q62}	639.	L _{A5}	L _{Q107}	1216.	L _{A10}	L _{Q19}
63.	L _{A1}	L _{Q63}	640.	L _{A5}	L _{Q108}	1217.	L _{A10}	L _{Q20}
64.	L _{A1}	L _{Q64}	641.	L _{A5}	L _{Q109}	1218.	L _{A10}	L _{Q21}
65.	L _{A1}	L _{Q65}	642.	L _{A5}	L _{Q110}	1219.	L _{A10}	L _{Q22}
66.	L _{A1}	L _{Q66}	643.	L _{A5}	L _{Q111}	1220.	L _{A10}	L _{Q23}
67.	L _{A1}	L _{Q67}	644.	L _{A5}	L _{Q112}	1221.	L _{A10}	L _{Q24}
68.	L _{A1}	L _{Q68}	645.	L _{A5}	L _{Q113}	1222.	L _{A10}	L _{Q25}
69.	L _{A1}	L _{Q69}	646.	L _{A5}	L _{Q114}	1223.	L _{A10}	L _{Q26}
70.	L _{A1}	L _{Q70}	647.	L _{A5}	L _{Q115}	1224.	L _{A10}	L _{Q27}
71.	L _{A1}	L _{Q71}	648.	L _{A5}	L _{Q116}	1225.	L _{A10}	L _{Q28}
72.	L _{A1}	L _{Q72}	649.	L _{A5}	L _{Q117}	1226.	L _{A10}	L _{Q29}
73.	L _{A1}	L _{Q73}	650.	L _{A5}	L _{Q118}	1227.	L _{A10}	L _{Q30}
74.	L _{A1}	L _{Q74}	651.	L _{A5}	L _{Q119}	1228.	L _{A10}	L _{Q31}
75.	L _{A1}	L _{Q75}	652.	L _{A5}	L _{Q120}	1229.	L _{A10}	L _{Q32}
76.	L _{A1}	L _{Q76}	653.	L _{A5}	L _{Q121}	1230.	L _{A10}	L _{Q33}
77.	L _{A1}	L _{Q77}	654.	L _{A5}	L _{Q122}	1231.	L _{A10}	L _{Q34}
78.	L _{A1}	L _{Q78}	655.	L _{A5}	L _{Q123}	1232.	L _{A10}	L _{Q35}
79.	L _{A1}	L _{Q79}	656.	L _{A5}	L _{Q124}	1233.	L _{A10}	L _{Q36}
80.	L _{A1}	L _{Q80}	657.	L _{A5}	L _{Q125}	1234.	L _{A10}	L _{Q37}
81.	L _{A1}	L _{Q81}	658.	L _{A5}	L _{Q126}	1235.	L _{A10}	L _{Q38}
82.	L _{A1}	L _{Q82}	659.	L _{A5}	L _{Q127}	1236.	L _{A10}	L _{Q39}
83.	L _{A1}	L _{Q83}	660.	L _{A5}	L _{Q128}	1237.	L _{A10}	L _{Q40}
84.	L _{A1}	L _{Q84}	661.	L _{A5}	L _{Q129}	1238.	L _{A10}	L _{Q41}
85.	L _{A1}	L _{Q85}	662.	L _{A5}	L _{Q130}	1239.	L _{A10}	L _{Q42}
86.	L _{A1}	L _{Q86}	663.	L _{A5}	L _{Q131}	1240.	L _{A10}	L _{Q43}
87.	L _{A1}	L _{Q87}	664.	L _{A5}	L _{Q132}	1241.	L _{A10}	L _{Q44}
88.	L _{A1}	L _{Q88}	665.	L _{A5}	L _{Q133}	1242.	L _{A10}	L _{Q45}
89.	L _{A1}	L _{Q89}	666.	L _{A6}	L _{Q1}	1243.	L _{A10}	L _{Q46}
90.	L _{A1}	L _{Q90}	667.	L _{A6}	L _{Q2}	1244.	L _{A10}	L _{Q47}
91.	L _{A1}	L _{Q91}	668.	L _{A6}	L _{Q3}	1245.	L _{A10}	L _{Q48}
92.	L _{A1}	L _{Q92}	669.	L _{A6}	L _{Q4}	1246.	L _{A10}	L _{Q49}
93.	L _{A1}	L _{Q93}	670.	L _{A6}	L _{Q5}	1247.	L _{A10}	L _{Q50}
94.	L _{A1}	L _{Q94}	671.	L _{A6}	L _{Q6}	1248.	L _{A10}	L _{Q51}
95.	L _{A1}	L _{Q95}	672.	L _{A6}	L _{Q7}	1249.	L _{A10}	L _{Q52}
96.	L _{A1}	L _{Q96}	673.	L _{A6}	L _{Q8}	1250.	L _{A10}	L _{Q53}
97.	L _{A1}	L _{Q97}	674.	L _{A6}	L _{Q9}	1251.	L _{A10}	L _{Q54}
98.	L _{A1}	L _{Q98}	675.	L _{A6}	L _{Q10}	1252.	L _{A10}	L _{Q55}

10

20

30

40

50

【表 1 - 3】

化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²
99.	L _{A1}	L _{Q99}	676.	L _{A6}	L _{Q11}	1253.	L _{A10}	L _{Q56}
100.	L _{A1}	L _{Q100}	677.	L _{A6}	L _{Q12}	1254.	L _{A10}	L _{Q57}
101.	L _{A1}	L _{Q101}	678.	L _{A6}	L _{Q13}	1255.	L _{A10}	L _{Q58}
102.	L _{A1}	L _{Q102}	679.	L _{A6}	L _{Q14}	1256.	L _{A10}	L _{Q59}
103.	L _{A1}	L _{Q103}	680.	L _{A6}	L _{Q15}	1257.	L _{A10}	L _{Q60}
104.	L _{A1}	L _{Q104}	681.	L _{A6}	L _{Q16}	1258.	L _{A10}	L _{Q61}
105.	L _{A1}	L _{Q105}	682.	L _{A6}	L _{Q17}	1259.	L _{A10}	L _{Q62}
106.	L _{A1}	L _{Q106}	683.	L _{A6}	L _{Q18}	1260.	L _{A10}	L _{Q63}
107.	L _{A1}	L _{Q107}	684.	L _{A6}	L _{Q19}	1261.	L _{A10}	L _{Q64}
108.	L _{A1}	L _{Q108}	685.	L _{A6}	L _{Q20}	1262.	L _{A10}	L _{Q65}
109.	L _{A1}	L _{Q109}	686.	L _{A6}	L _{Q21}	1263.	L _{A10}	L _{Q66}
110.	L _{A1}	L _{Q110}	687.	L _{A6}	L _{Q22}	1264.	L _{A10}	L _{Q67}
111.	L _{A1}	L _{Q111}	688.	L _{A6}	L _{Q23}	1265.	L _{A10}	L _{Q68}
112.	L _{A1}	L _{Q112}	689.	L _{A6}	L _{Q24}	1266.	L _{A10}	L _{Q69}
113.	L _{A1}	L _{Q113}	690.	L _{A6}	L _{Q25}	1267.	L _{A10}	L _{Q70}
114.	L _{A1}	L _{Q114}	691.	L _{A6}	L _{Q26}	1268.	L _{A10}	L _{Q71}
115.	L _{A1}	L _{Q115}	692.	L _{A6}	L _{Q27}	1269.	L _{A10}	L _{Q72}
116.	L _{A1}	L _{Q116}	693.	L _{A6}	L _{Q28}	1270.	L _{A10}	L _{Q73}
117.	L _{A1}	L _{Q117}	694.	L _{A6}	L _{Q29}	1271.	L _{A10}	L _{Q74}
118.	L _{A1}	L _{Q118}	695.	L _{A6}	L _{Q30}	1272.	L _{A10}	L _{Q75}
119.	L _{A1}	L _{Q119}	696.	L _{A6}	L _{Q31}	1273.	L _{A10}	L _{Q76}
120.	L _{A1}	L _{Q120}	697.	L _{A6}	L _{Q32}	1274.	L _{A10}	L _{Q77}
121.	L _{A1}	L _{Q121}	698.	L _{A6}	L _{Q33}	1275.	L _{A10}	L _{Q78}
122.	L _{A1}	L _{Q122}	699.	L _{A6}	L _{Q34}	1276.	L _{A10}	L _{Q79}
123.	L _{A1}	L _{Q123}	700.	L _{A6}	L _{Q35}	1277.	L _{A10}	L _{Q80}
124.	L _{A1}	L _{Q124}	701.	L _{A6}	L _{Q36}	1278.	L _{A10}	L _{Q81}
125.	L _{A1}	L _{Q125}	702.	L _{A6}	L _{Q37}	1279.	L _{A10}	L _{Q82}
126.	L _{A1}	L _{Q126}	703.	L _{A6}	L _{Q38}	1280.	L _{A10}	L _{Q83}
127.	L _{A1}	L _{Q127}	704.	L _{A6}	L _{Q39}	1281.	L _{A10}	L _{Q84}
128.	L _{A1}	L _{Q128}	705.	L _{A6}	L _{Q40}	1282.	L _{A10}	L _{Q85}
129.	L _{A1}	L _{Q129}	706.	L _{A6}	L _{Q41}	1283.	L _{A10}	L _{Q86}
130.	L _{A1}	L _{Q130}	707.	L _{A6}	L _{Q42}	1284.	L _{A10}	L _{Q87}
131.	L _{A1}	L _{Q131}	708.	L _{A6}	L _{Q43}	1285.	L _{A10}	L _{Q88}
132.	L _{A1}	L _{Q132}	709.	L _{A6}	L _{Q44}	1286.	L _{A10}	L _{Q89}
133.	L _{A1}	L _{Q133}	710.	L _{A6}	L _{Q45}	1287.	L _{A10}	L _{Q90}
134.	L _{A2}	L _{Q1}	711.	L _{A6}	L _{Q46}	1288.	L _{A10}	L _{Q91}
135.	L _{A2}	L _{Q2}	712.	L _{A6}	L _{Q47}	1289.	L _{A10}	L _{Q92}
136.	L _{A2}	L _{Q3}	713.	L _{A6}	L _{Q48}	1290.	L _{A10}	L _{Q93}
137.	L _{A2}	L _{Q4}	714.	L _{A6}	L _{Q49}	1291.	L _{A10}	L _{Q94}
138.	L _{A2}	L _{Q5}	715.	L _{A6}	L _{Q50}	1292.	L _{A10}	L _{Q95}
139.	L _{A2}	L _{Q6}	716.	L _{A6}	L _{Q51}	1293.	L _{A10}	L _{Q96}
140.	L _{A2}	L _{Q7}	717.	L _{A6}	L _{Q52}	1294.	L _{A10}	L _{Q97}
141.	L _{A2}	L _{Q8}	718.	L _{A6}	L _{Q53}	1295.	L _{A10}	L _{Q98}
142.	L _{A2}	L _{Q9}	719.	L _{A6}	L _{Q54}	1296.	L _{A10}	L _{Q99}
143.	L _{A2}	L _{Q10}	720.	L _{A6}	L _{Q55}	1297.	L _{A10}	L _{Q100}
144.	L _{A2}	L _{Q11}	721.	L _{A6}	L _{Q56}	1298.	L _{A10}	L _{Q101}
145.	L _{A2}	L _{Q12}	722.	L _{A6}	L _{Q57}	1299.	L _{A10}	L _{Q102}
146.	L _{A2}	L _{Q13}	723.	L _{A6}	L _{Q58}	1300.	L _{A10}	L _{Q103}
147.	L _{A2}	L _{Q14}	724.	L _{A6}	L _{Q59}	1301.	L _{A10}	L _{Q104}

10

20

30

40

50

【表 1 - 4】

化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²
148.	L _{A2}	L _{Q15}	725.	L _{A6}	L _{Q60}	1302.	L _{A10}	L _{Q105}
149.	L _{A2}	L _{Q16}	726.	L _{A6}	L _{Q61}	1303.	L _{A10}	L _{Q106}
150.	L _{A2}	L _{Q17}	727.	L _{A6}	L _{Q62}	1304.	L _{A10}	L _{Q107}
151.	L _{A2}	L _{Q18}	728.	L _{A6}	L _{Q63}	1305.	L _{A10}	L _{Q108}
152.	L _{A2}	L _{Q19}	729.	L _{A6}	L _{Q64}	1306.	L _{A10}	L _{Q109}
153.	L _{A2}	L _{Q20}	730.	L _{A6}	L _{Q65}	1307.	L _{A10}	L _{Q110}
154.	L _{A2}	L _{Q21}	731.	L _{A6}	L _{Q66}	1308.	L _{A10}	L _{Q111}
155.	L _{A2}	L _{Q22}	732.	L _{A6}	L _{Q67}	1309.	L _{A10}	L _{Q112}
156.	L _{A2}	L _{Q23}	733.	L _{A6}	L _{Q68}	1310.	L _{A10}	L _{Q113}
157.	L _{A2}	L _{Q24}	734.	L _{A6}	L _{Q69}	1311.	L _{A10}	L _{Q114}
158.	L _{A2}	L _{Q25}	735.	L _{A6}	L _{Q70}	1312.	L _{A10}	L _{Q115}
159.	L _{A2}	L _{Q26}	736.	L _{A6}	L _{Q71}	1313.	L _{A10}	L _{Q116}
160.	L _{A2}	L _{Q27}	737.	L _{A6}	L _{Q72}	1314.	L _{A10}	L _{Q117}
161.	L _{A2}	L _{Q28}	738.	L _{A6}	L _{Q73}	1315.	L _{A10}	L _{Q118}
162.	L _{A2}	L _{Q29}	739.	L _{A6}	L _{Q74}	1316.	L _{A10}	L _{Q119}
163.	L _{A2}	L _{Q30}	740.	L _{A6}	L _{Q75}	1317.	L _{A10}	L _{Q120}
164.	L _{A2}	L _{Q31}	741.	L _{A6}	L _{Q76}	1318.	L _{A10}	L _{Q121}
165.	L _{A2}	L _{Q32}	742.	L _{A6}	L _{Q77}	1319.	L _{A10}	L _{Q122}
166.	L _{A2}	L _{Q33}	743.	L _{A6}	L _{Q78}	1320.	L _{A10}	L _{Q123}
167.	L _{A2}	L _{Q34}	744.	L _{A6}	L _{Q79}	1321.	L _{A10}	L _{Q124}
168.	L _{A2}	L _{Q35}	745.	L _{A6}	L _{Q80}	1322.	L _{A10}	L _{Q125}
169.	L _{A2}	L _{Q36}	746.	L _{A6}	L _{Q81}	1323.	L _{A10}	L _{Q126}
170.	L _{A2}	L _{Q37}	747.	L _{A6}	L _{Q82}	1324.	L _{A10}	L _{Q127}
171.	L _{A2}	L _{Q38}	748.	L _{A6}	L _{Q83}	1325.	L _{A10}	L _{Q128}
172.	L _{A2}	L _{Q39}	749.	L _{A6}	L _{Q84}	1326.	L _{A10}	L _{Q129}
173.	L _{A2}	L _{Q40}	750.	L _{A6}	L _{Q85}	1327.	L _{A10}	L _{Q130}
174.	L _{A2}	L _{Q41}	751.	L _{A6}	L _{Q86}	1328.	L _{A10}	L _{Q131}
175.	L _{A2}	L _{Q42}	752.	L _{A6}	L _{Q87}	1329.	L _{A10}	L _{Q132}
176.	L _{A2}	L _{Q43}	753.	L _{A6}	L _{Q88}	1330.	L _{A10}	L _{Q133}
177.	L _{A2}	L _{Q44}	754.	L _{A6}	L _{Q89}	1331.	L _{A11}	L _{Q1}
178.	L _{A2}	L _{Q45}	755.	L _{A6}	L _{Q90}	1332.	L _{A11}	L _{Q2}
179.	L _{A2}	L _{Q46}	756.	L _{A6}	L _{Q91}	1333.	L _{A11}	L _{Q3}
180.	L _{A2}	L _{Q47}	757.	L _{A6}	L _{Q92}	1334.	L _{A11}	L _{Q4}
181.	L _{A2}	L _{Q48}	758.	L _{A6}	L _{Q93}	1335.	L _{A11}	L _{Q5}
182.	L _{A2}	L _{Q49}	759.	L _{A6}	L _{Q94}	1336.	L _{A11}	L _{Q6}
183.	L _{A2}	L _{Q50}	760.	L _{A6}	L _{Q95}	1337.	L _{A11}	L _{Q7}
184.	L _{A2}	L _{Q51}	761.	L _{A6}	L _{Q96}	1338.	L _{A11}	L _{Q8}
185.	L _{A2}	L _{Q52}	762.	L _{A6}	L _{Q97}	1339.	L _{A11}	L _{Q9}
186.	L _{A2}	L _{Q53}	763.	L _{A6}	L _{Q98}	1340.	L _{A11}	L _{Q10}
187.	L _{A2}	L _{Q54}	764.	L _{A6}	L _{Q99}	1341.	L _{A11}	L _{Q11}
188.	L _{A2}	L _{Q55}	765.	L _{A6}	L _{Q100}	1342.	L _{A11}	L _{Q12}
189.	L _{A2}	L _{Q56}	766.	L _{A6}	L _{Q101}	1343.	L _{A11}	L _{Q13}
190.	L _{A2}	L _{Q57}	767.	L _{A6}	L _{Q102}	1344.	L _{A11}	L _{Q14}
191.	L _{A2}	L _{Q58}	768.	L _{A6}	L _{Q103}	1345.	L _{A11}	L _{Q15}
192.	L _{A2}	L _{Q59}	769.	L _{A6}	L _{Q104}	1346.	L _{A11}	L _{Q16}
193.	L _{A2}	L _{Q60}	770.	L _{A6}	L _{Q105}	1347.	L _{A11}	L _{Q17}
194.	L _{A2}	L _{Q61}	771.	L _{A6}	L _{Q106}	1348.	L _{A11}	L _{Q18}
195.	L _{A2}	L _{Q62}	772.	L _{A6}	L _{Q107}	1349.	L _{A11}	L _{Q19}
196.	L _{A2}	L _{Q63}	773.	L _{A6}	L _{Q108}	1350.	L _{A11}	L _{Q20}

10

20

30

40

50

【表 1 - 5】

化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²
197.	L _{A2}	L _{Q64}	774.	L _{A6}	L _{Q109}	1351.	L _{A11}	L _{Q21}
198.	L _{A2}	L _{Q65}	775.	L _{A6}	L _{Q110}	1352.	L _{A11}	L _{Q22}
199.	L _{A2}	L _{Q66}	776.	L _{A6}	L _{Q111}	1353.	L _{A11}	L _{Q23}
200.	L _{A2}	L _{Q67}	777.	L _{A6}	L _{Q112}	1354.	L _{A11}	L _{Q24}
201.	L _{A2}	L _{Q68}	778.	L _{A6}	L _{Q113}	1355.	L _{A11}	L _{Q25}
202.	L _{A2}	L _{Q69}	779.	L _{A6}	L _{Q114}	1356.	L _{A11}	L _{Q26}
203.	L _{A2}	L _{Q70}	780.	L _{A6}	L _{Q115}	1357.	L _{A11}	L _{Q27}
204.	L _{A2}	L _{Q71}	781.	L _{A6}	L _{Q116}	1358.	L _{A11}	L _{Q28}
205.	L _{A2}	L _{Q72}	782.	L _{A6}	L _{Q117}	1359.	L _{A11}	L _{Q29}
206.	L _{A2}	L _{Q73}	783.	L _{A6}	L _{Q118}	1360.	L _{A11}	L _{Q30}
207.	L _{A2}	L _{Q74}	784.	L _{A6}	L _{Q119}	1361.	L _{A11}	L _{Q31}
208.	L _{A2}	L _{Q75}	785.	L _{A6}	L _{Q120}	1362.	L _{A11}	L _{Q32}
209.	L _{A2}	L _{Q76}	786.	L _{A6}	L _{Q121}	1363.	L _{A11}	L _{Q33}
210.	L _{A2}	L _{Q77}	787.	L _{A6}	L _{Q122}	1364.	L _{A11}	L _{Q34}
211.	L _{A2}	L _{Q78}	788.	L _{A6}	L _{Q123}	1365.	L _{A11}	L _{Q35}
212.	L _{A2}	L _{Q79}	789.	L _{A6}	L _{Q124}	1366.	L _{A11}	L _{Q36}
213.	L _{A2}	L _{Q80}	790.	L _{A6}	L _{Q125}	1367.	L _{A11}	L _{Q37}
214.	L _{A2}	L _{Q81}	791.	L _{A6}	L _{Q126}	1368.	L _{A11}	L _{Q38}
215.	L _{A2}	L _{Q82}	792.	L _{A6}	L _{Q127}	1369.	L _{A11}	L _{Q39}
216.	L _{A2}	L _{Q83}	793.	L _{A6}	L _{Q128}	1370.	L _{A11}	L _{Q40}
217.	L _{A2}	L _{Q84}	794.	L _{A6}	L _{Q129}	1371.	L _{A11}	L _{Q41}
218.	L _{A2}	L _{Q85}	795.	L _{A6}	L _{Q130}	1372.	L _{A11}	L _{Q42}
219.	L _{A2}	L _{Q86}	796.	L _{A6}	L _{Q131}	1373.	L _{A11}	L _{Q43}
220.	L _{A2}	L _{Q87}	797.	L _{A6}	L _{Q132}	1374.	L _{A11}	L _{Q44}
221.	L _{A2}	L _{Q88}	798.	L _{A6}	L _{Q133}	1375.	L _{A11}	L _{Q45}
222.	L _{A2}	L _{Q89}	799.	L _{A7}	L _{Q1}	1376.	L _{A11}	L _{Q46}
223.	L _{A2}	L _{Q90}	800.	L _{A7}	L _{Q2}	1377.	L _{A11}	L _{Q47}
224.	L _{A2}	L _{Q91}	801.	L _{A7}	L _{Q3}	1378.	L _{A11}	L _{Q48}
225.	L _{A2}	L _{Q92}	802.	L _{A7}	L _{Q4}	1379.	L _{A11}	L _{Q49}
226.	L _{A2}	L _{Q93}	803.	L _{A7}	L _{Q5}	1380.	L _{A11}	L _{Q50}
227.	L _{A2}	L _{Q94}	804.	L _{A7}	L _{Q6}	1381.	L _{A11}	L _{Q51}
228.	L _{A2}	L _{Q95}	805.	L _{A7}	L _{Q7}	1382.	L _{A11}	L _{Q52}
229.	L _{A2}	L _{Q96}	806.	L _{A7}	L _{Q8}	1383.	L _{A11}	L _{Q53}
230.	L _{A2}	L _{Q97}	807.	L _{A7}	L _{Q9}	1384.	L _{A11}	L _{Q54}
231.	L _{A2}	L _{Q98}	808.	L _{A7}	L _{Q10}	1385.	L _{A11}	L _{Q55}
232.	L _{A2}	L _{Q99}	809.	L _{A7}	L _{Q11}	1386.	L _{A11}	L _{Q56}
233.	L _{A2}	L _{Q100}	810.	L _{A7}	L _{Q12}	1387.	L _{A11}	L _{Q57}
234.	L _{A2}	L _{Q101}	811.	L _{A7}	L _{Q13}	1388.	L _{A11}	L _{Q58}
235.	L _{A2}	L _{Q102}	812.	L _{A7}	L _{Q14}	1389.	L _{A11}	L _{Q59}
236.	L _{A2}	L _{Q103}	813.	L _{A7}	L _{Q15}	1390.	L _{A11}	L _{Q60}
237.	L _{A2}	L _{Q104}	814.	L _{A7}	L _{Q16}	1391.	L _{A11}	L _{Q61}
238.	L _{A2}	L _{Q105}	815.	L _{A7}	L _{Q17}	1392.	L _{A11}	L _{Q62}
239.	L _{A2}	L _{Q106}	816.	L _{A7}	L _{Q18}	1393.	L _{A11}	L _{Q63}
240.	L _{A2}	L _{Q107}	817.	L _{A7}	L _{Q19}	1394.	L _{A11}	L _{Q64}
241.	L _{A2}	L _{Q108}	818.	L _{A7}	L _{Q20}	1395.	L _{A11}	L _{Q65}
242.	L _{A2}	L _{Q109}	819.	L _{A7}	L _{Q21}	1396.	L _{A11}	L _{Q66}
243.	L _{A2}	L _{Q110}	820.	L _{A7}	L _{Q22}	1397.	L _{A11}	L _{Q67}
244.	L _{A2}	L _{Q111}	821.	L _{A7}	L _{Q23}	1398.	L _{A11}	L _{Q68}
245.	L _{A2}	L _{Q112}	822.	L _{A7}	L _{Q24}	1399.	L _{A11}	L _{Q69}

10

20

30

40

50

【表 1 - 6】

化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²
246.	L _{A2}	L _{Q113}	823.	L _{A7}	L _{Q25}	1400.	L _{A11}	L _{Q70}
247.	L _{A2}	L _{Q114}	824.	L _{A7}	L _{Q26}	1401.	L _{A11}	L _{Q71}
248.	L _{A2}	L _{Q115}	825.	L _{A7}	L _{Q27}	1402.	L _{A11}	L _{Q72}
249.	L _{A2}	L _{Q116}	826.	L _{A7}	L _{Q28}	1403.	L _{A11}	L _{Q73}
250.	L _{A2}	L _{Q117}	827.	L _{A7}	L _{Q29}	1404.	L _{A11}	L _{Q74}
251.	L _{A2}	L _{Q118}	828.	L _{A7}	L _{Q30}	1405.	L _{A11}	L _{Q75}
252.	L _{A2}	L _{Q119}	829.	L _{A7}	L _{Q31}	1406.	L _{A11}	L _{Q76}
253.	L _{A2}	L _{Q120}	830.	L _{A7}	L _{Q32}	1407.	L _{A11}	L _{Q77}
254.	L _{A2}	L _{Q121}	831.	L _{A7}	L _{Q33}	1408.	L _{A11}	L _{Q78}
255.	L _{A2}	L _{Q122}	832.	L _{A7}	L _{Q34}	1409.	L _{A11}	L _{Q79}
256.	L _{A2}	L _{Q123}	833.	L _{A7}	L _{Q35}	1410.	L _{A11}	L _{Q80}
257.	L _{A2}	L _{Q124}	834.	L _{A7}	L _{Q36}	1411.	L _{A11}	L _{Q81}
258.	L _{A2}	L _{Q125}	835.	L _{A7}	L _{Q37}	1412.	L _{A11}	L _{Q82}
259.	L _{A2}	L _{Q126}	836.	L _{A7}	L _{Q38}	1413.	L _{A11}	L _{Q83}
260.	L _{A2}	L _{Q127}	837.	L _{A7}	L _{Q39}	1414.	L _{A11}	L _{Q84}
261.	L _{A2}	L _{Q128}	838.	L _{A7}	L _{Q40}	1415.	L _{A11}	L _{Q85}
262.	L _{A2}	L _{Q129}	839.	L _{A7}	L _{Q41}	1416.	L _{A11}	L _{Q86}
263.	L _{A2}	L _{Q130}	840.	L _{A7}	L _{Q42}	1417.	L _{A11}	L _{Q87}
264.	L _{A2}	L _{Q131}	841.	L _{A7}	L _{Q43}	1418.	L _{A11}	L _{Q88}
265.	L _{A2}	L _{Q132}	842.	L _{A7}	L _{Q44}	1419.	L _{A11}	L _{Q89}
266.	L _{A2}	L _{Q133}	843.	L _{A7}	L _{Q45}	1420.	L _{A11}	L _{Q90}
267.	L _{A3}	L _{Q1}	844.	L _{A7}	L _{Q46}	1421.	L _{A11}	L _{Q91}
268.	L _{A3}	L _{Q2}	845.	L _{A7}	L _{Q47}	1422.	L _{A11}	L _{Q92}
269.	L _{A3}	L _{Q3}	846.	L _{A7}	L _{Q48}	1423.	L _{A11}	L _{Q93}
270.	L _{A3}	L _{Q4}	847.	L _{A7}	L _{Q49}	1424.	L _{A11}	L _{Q94}
271.	L _{A3}	L _{Q5}	848.	L _{A7}	L _{Q50}	1425.	L _{A11}	L _{Q95}
272.	L _{A3}	L _{Q6}	849.	L _{A7}	L _{Q51}	1426.	L _{A11}	L _{Q96}
273.	L _{A3}	L _{Q7}	850.	L _{A7}	L _{Q52}	1427.	L _{A11}	L _{Q97}
274.	L _{A3}	L _{Q8}	851.	L _{A7}	L _{Q53}	1428.	L _{A11}	L _{Q98}
275.	L _{A3}	L _{Q9}	852.	L _{A7}	L _{Q54}	1429.	L _{A11}	L _{Q99}
276.	L _{A3}	L _{Q10}	853.	L _{A7}	L _{Q55}	1430.	L _{A11}	L _{Q100}
277.	L _{A3}	L _{Q11}	854.	L _{A7}	L _{Q56}	1431.	L _{A11}	L _{Q101}
278.	L _{A3}	L _{Q12}	855.	L _{A7}	L _{Q57}	1432.	L _{A11}	L _{Q102}
279.	L _{A3}	L _{Q13}	856.	L _{A7}	L _{Q58}	1433.	L _{A11}	L _{Q103}
280.	L _{A3}	L _{Q14}	857.	L _{A7}	L _{Q59}	1434.	L _{A11}	L _{Q104}
281.	L _{A3}	L _{Q15}	858.	L _{A7}	L _{Q60}	1435.	L _{A11}	L _{Q105}
282.	L _{A3}	L _{Q16}	859.	L _{A7}	L _{Q61}	1436.	L _{A11}	L _{Q106}
283.	L _{A3}	L _{Q17}	860.	L _{A7}	L _{Q62}	1437.	L _{A11}	L _{Q107}
284.	L _{A3}	L _{Q18}	861.	L _{A7}	L _{Q63}	1438.	L _{A11}	L _{Q108}
285.	L _{A3}	L _{Q19}	862.	L _{A7}	L _{Q64}	1439.	L _{A11}	L _{Q109}
286.	L _{A3}	L _{Q20}	863.	L _{A7}	L _{Q65}	1440.	L _{A11}	L _{Q110}
287.	L _{A3}	L _{Q21}	864.	L _{A7}	L _{Q66}	1441.	L _{A11}	L _{Q111}
288.	L _{A3}	L _{Q22}	865.	L _{A7}	L _{Q67}	1442.	L _{A11}	L _{Q112}
289.	L _{A3}	L _{Q23}	866.	L _{A7}	L _{Q68}	1443.	L _{A11}	L _{Q113}
290.	L _{A3}	L _{Q24}	867.	L _{A7}	L _{Q69}	1444.	L _{A11}	L _{Q114}
291.	L _{A3}	L _{Q25}	868.	L _{A7}	L _{Q70}	1445.	L _{A11}	L _{Q115}
292.	L _{A3}	L _{Q26}	869.	L _{A7}	L _{Q71}	1446.	L _{A11}	L _{Q116}
293.	L _{A3}	L _{Q27}	870.	L _{A7}	L _{Q72}	1447.	L _{A11}	L _{Q117}
294.	L _{A3}	L _{Q28}	871.	L _{A7}	L _{Q73}	1448.	L _{A11}	L _{Q118}

10

20

30

40

50

【表 1 - 7】

化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²
295.	L _{A3}	L _{Q29}	872.	L _{A7}	L _{Q74}	1449.	L _{A11}	L _{Q119}
296.	L _{A3}	L _{Q30}	873.	L _{A7}	L _{Q75}	1450.	L _{A11}	L _{Q120}
297.	L _{A3}	L _{Q31}	874.	L _{A7}	L _{Q76}	1451.	L _{A11}	L _{Q121}
298.	L _{A3}	L _{Q32}	875.	L _{A7}	L _{Q77}	1452.	L _{A11}	L _{Q122}
299.	L _{A3}	L _{Q33}	876.	L _{A7}	L _{Q78}	1453.	L _{A11}	L _{Q123}
300.	L _{A3}	L _{Q34}	877.	L _{A7}	L _{Q79}	1454.	L _{A11}	L _{Q124}
301.	L _{A3}	L _{Q35}	878.	L _{A7}	L _{Q80}	1455.	L _{A11}	L _{Q125}
302.	L _{A3}	L _{Q36}	879.	L _{A7}	L _{Q81}	1456.	L _{A11}	L _{Q126}
303.	L _{A3}	L _{Q37}	880.	L _{A7}	L _{Q82}	1457.	L _{A11}	L _{Q127}
304.	L _{A3}	L _{Q38}	881.	L _{A7}	L _{Q83}	1458.	L _{A11}	L _{Q128}
305.	L _{A3}	L _{Q39}	882.	L _{A7}	L _{Q84}	1459.	L _{A11}	L _{Q129}
306.	L _{A3}	L _{Q40}	883.	L _{A7}	L _{Q85}	1460.	L _{A11}	L _{Q130}
307.	L _{A3}	L _{Q41}	884.	L _{A7}	L _{Q86}	1461.	L _{A11}	L _{Q131}
308.	L _{A3}	L _{Q42}	885.	L _{A7}	L _{Q87}	1462.	L _{A11}	L _{Q132}
309.	L _{A3}	L _{Q43}	886.	L _{A7}	L _{Q88}	1463.	L _{A11}	L _{Q133}
310.	L _{A3}	L _{Q44}	887.	L _{A7}	L _{Q89}	1464.	L _{A12}	L _{Q1}
311.	L _{A3}	L _{Q45}	888.	L _{A7}	L _{Q90}	1465.	L _{A12}	L _{Q2}
312.	L _{A3}	L _{Q46}	889.	L _{A7}	L _{Q91}	1466.	L _{A12}	L _{Q3}
313.	L _{A3}	L _{Q47}	890.	L _{A7}	L _{Q92}	1467.	L _{A12}	L _{Q4}
314.	L _{A3}	L _{Q48}	891.	L _{A7}	L _{Q93}	1468.	L _{A12}	L _{Q5}
315.	L _{A3}	L _{Q49}	892.	L _{A7}	L _{Q94}	1469.	L _{A12}	L _{Q6}
316.	L _{A3}	L _{Q50}	893.	L _{A7}	L _{Q95}	1470.	L _{A12}	L _{Q7}
317.	L _{A3}	L _{Q51}	894.	L _{A7}	L _{Q96}	1471.	L _{A12}	L _{Q8}
318.	L _{A3}	L _{Q52}	895.	L _{A7}	L _{Q97}	1472.	L _{A12}	L _{Q9}
319.	L _{A3}	L _{Q53}	896.	L _{A7}	L _{Q98}	1473.	L _{A12}	L _{Q10}
320.	L _{A3}	L _{Q54}	897.	L _{A7}	L _{Q99}	1474.	L _{A12}	L _{Q11}
321.	L _{A3}	L _{Q55}	898.	L _{A7}	L _{Q100}	1475.	L _{A12}	L _{Q12}
322.	L _{A3}	L _{Q56}	899.	L _{A7}	L _{Q101}	1476.	L _{A12}	L _{Q13}
323.	L _{A3}	L _{Q57}	900.	L _{A7}	L _{Q102}	1477.	L _{A12}	L _{Q14}
324.	L _{A3}	L _{Q58}	901.	L _{A7}	L _{Q103}	1478.	L _{A12}	L _{Q15}
325.	L _{A3}	L _{Q59}	902.	L _{A7}	L _{Q104}	1479.	L _{A12}	L _{Q16}
326.	L _{A3}	L _{Q60}	903.	L _{A7}	L _{Q105}	1480.	L _{A12}	L _{Q17}
327.	L _{A3}	L _{Q61}	904.	L _{A7}	L _{Q106}	1481.	L _{A12}	L _{Q18}
328.	L _{A3}	L _{Q62}	905.	L _{A7}	L _{Q107}	1482.	L _{A12}	L _{Q19}
329.	L _{A3}	L _{Q63}	906.	L _{A7}	L _{Q108}	1483.	L _{A12}	L _{Q20}
330.	L _{A3}	L _{Q64}	907.	L _{A7}	L _{Q109}	1484.	L _{A12}	L _{Q21}
331.	L _{A3}	L _{Q65}	908.	L _{A7}	L _{Q110}	1485.	L _{A12}	L _{Q22}
332.	L _{A3}	L _{Q66}	909.	L _{A7}	L _{Q111}	1486.	L _{A12}	L _{Q23}
333.	L _{A3}	L _{Q67}	910.	L _{A7}	L _{Q112}	1487.	L _{A12}	L _{Q24}
334.	L _{A3}	L _{Q68}	911.	L _{A7}	L _{Q113}	1488.	L _{A12}	L _{Q25}
335.	L _{A3}	L _{Q69}	912.	L _{A7}	L _{Q114}	1489.	L _{A12}	L _{Q26}
336.	L _{A3}	L _{Q70}	913.	L _{A7}	L _{Q115}	1490.	L _{A12}	L _{Q27}
337.	L _{A3}	L _{Q71}	914.	L _{A7}	L _{Q116}	1491.	L _{A12}	L _{Q28}
338.	L _{A3}	L _{Q72}	915.	L _{A7}	L _{Q117}	1492.	L _{A12}	L _{Q29}
339.	L _{A3}	L _{Q73}	916.	L _{A7}	L _{Q118}	1493.	L _{A12}	L _{Q30}
340.	L _{A3}	L _{Q74}	917.	L _{A7}	L _{Q119}	1494.	L _{A12}	L _{Q31}
341.	L _{A3}	L _{Q75}	918.	L _{A7}	L _{Q120}	1495.	L _{A12}	L _{Q32}
342.	L _{A3}	L _{Q76}	919.	L _{A7}	L _{Q121}	1496.	L _{A12}	L _{Q33}
343.	L _{A3}	L _{Q77}	920.	L _{A7}	L _{Q122}	1497.	L _{A12}	L _{Q34}

10

20

30

40

50

【表 1 - 8】

化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²
344.	L _{A3}	L _{Q78}	921.	L _{A7}	L _{Q123}	1498.	L _{A12}	L _{Q35}
345.	L _{A3}	L _{Q79}	922.	L _{A7}	L _{Q124}	1499.	L _{A12}	L _{Q36}
346.	L _{A3}	L _{Q80}	923.	L _{A7}	L _{Q125}	1500.	L _{A12}	L _{Q37}
347.	L _{A3}	L _{Q81}	924.	L _{A7}	L _{Q126}	1501.	L _{A12}	L _{Q38}
348.	L _{A3}	L _{Q82}	925.	L _{A7}	L _{Q127}	1502.	L _{A12}	L _{Q39}
349.	L _{A3}	L _{Q83}	926.	L _{A7}	L _{Q128}	1503.	L _{A12}	L _{Q40}
350.	L _{A3}	L _{Q84}	927.	L _{A7}	L _{Q129}	1504.	L _{A12}	L _{Q41}
351.	L _{A3}	L _{Q85}	928.	L _{A7}	L _{Q130}	1505.	L _{A12}	L _{Q42}
352.	L _{A3}	L _{Q86}	929.	L _{A7}	L _{Q131}	1506.	L _{A12}	L _{Q43}
353.	L _{A3}	L _{Q87}	930.	L _{A7}	L _{Q132}	1507.	L _{A12}	L _{Q44}
354.	L _{A3}	L _{Q88}	931.	L _{A7}	L _{Q133}	1508.	L _{A12}	L _{Q45}
355.	L _{A3}	L _{Q89}	932.	L _{A8}	L _{Q1}	1509.	L _{A12}	L _{Q46}
356.	L _{A3}	L _{Q90}	933.	L _{A8}	L _{Q2}	1510.	L _{A12}	L _{Q47}
357.	L _{A3}	L _{Q91}	934.	L _{A8}	L _{Q3}	1511.	L _{A12}	L _{Q48}
358.	L _{A3}	L _{Q92}	935.	L _{A8}	L _{Q4}	1512.	L _{A12}	L _{Q49}
359.	L _{A3}	L _{Q93}	936.	L _{A8}	L _{Q5}	1513.	L _{A12}	L _{Q50}
360.	L _{A3}	L _{Q94}	937.	L _{A8}	L _{Q6}	1514.	L _{A12}	L _{Q51}
361.	L _{A3}	L _{Q95}	938.	L _{A8}	L _{Q7}	1515.	L _{A12}	L _{Q52}
362.	L _{A3}	L _{Q96}	939.	L _{A8}	L _{Q8}	1516.	L _{A12}	L _{Q53}
363.	L _{A3}	L _{Q97}	940.	L _{A8}	L _{Q9}	1517.	L _{A12}	L _{Q54}
364.	L _{A3}	L _{Q98}	941.	L _{A8}	L _{Q10}	1518.	L _{A12}	L _{Q55}
365.	L _{A3}	L _{Q99}	942.	L _{A8}	L _{Q11}	1519.	L _{A12}	L _{Q56}
366.	L _{A3}	L _{Q100}	943.	L _{A8}	L _{Q12}	1520.	L _{A12}	L _{Q57}
367.	L _{A3}	L _{Q101}	944.	L _{A8}	L _{Q13}	1521.	L _{A12}	L _{Q58}
368.	L _{A3}	L _{Q102}	945.	L _{A8}	L _{Q14}	1522.	L _{A12}	L _{Q59}
369.	L _{A3}	L _{Q103}	946.	L _{A8}	L _{Q15}	1523.	L _{A12}	L _{Q60}
370.	L _{A3}	L _{Q104}	947.	L _{A8}	L _{Q16}	1524.	L _{A12}	L _{Q61}
371.	L _{A3}	L _{Q105}	948.	L _{A8}	L _{Q17}	1525.	L _{A12}	L _{Q62}
372.	L _{A3}	L _{Q106}	949.	L _{A8}	L _{Q18}	1526.	L _{A12}	L _{Q63}
373.	L _{A3}	L _{Q107}	950.	L _{A8}	L _{Q19}	1527.	L _{A12}	L _{Q64}
374.	L _{A3}	L _{Q108}	951.	L _{A8}	L _{Q20}	1528.	L _{A12}	L _{Q65}
375.	L _{A3}	L _{Q109}	952.	L _{A8}	L _{Q21}	1529.	L _{A12}	L _{Q66}
376.	L _{A3}	L _{Q110}	953.	L _{A8}	L _{Q22}	1530.	L _{A12}	L _{Q67}
377.	L _{A3}	L _{Q111}	954.	L _{A8}	L _{Q23}	1531.	L _{A12}	L _{Q68}
378.	L _{A3}	L _{Q112}	955.	L _{A8}	L _{Q24}	1532.	L _{A12}	L _{Q69}
379.	L _{A3}	L _{Q113}	956.	L _{A8}	L _{Q25}	1533.	L _{A12}	L _{Q70}
380.	L _{A3}	L _{Q114}	957.	L _{A8}	L _{Q26}	1534.	L _{A12}	L _{Q71}
381.	L _{A3}	L _{Q115}	958.	L _{A8}	L _{Q27}	1535.	L _{A12}	L _{Q72}
382.	L _{A3}	L _{Q116}	959.	L _{A8}	L _{Q28}	1536.	L _{A12}	L _{Q73}
383.	L _{A3}	L _{Q117}	960.	L _{A8}	L _{Q29}	1537.	L _{A12}	L _{Q74}
384.	L _{A3}	L _{Q118}	961.	L _{A8}	L _{Q30}	1538.	L _{A12}	L _{Q75}
385.	L _{A3}	L _{Q119}	962.	L _{A8}	L _{Q31}	1539.	L _{A12}	L _{Q76}
386.	L _{A3}	L _{Q120}	963.	L _{A8}	L _{Q32}	1540.	L _{A12}	L _{Q77}
387.	L _{A3}	L _{Q121}	964.	L _{A8}	L _{Q33}	1541.	L _{A12}	L _{Q78}
388.	L _{A3}	L _{Q122}	965.	L _{A8}	L _{Q34}	1542.	L _{A12}	L _{Q79}
389.	L _{A3}	L _{Q123}	966.	L _{A8}	L _{Q35}	1543.	L _{A12}	L _{Q80}
390.	L _{A3}	L _{Q124}	967.	L _{A8}	L _{Q36}	1544.	L _{A12}	L _{Q81}
391.	L _{A3}	L _{Q125}	968.	L _{A8}	L _{Q37}	1545.	L _{A12}	L _{Q82}
392.	L _{A3}	L _{Q126}	969.	L _{A8}	L _{Q38}	1546.	L _{A12}	L _{Q83}

10

20

30

40

50

【表 1 - 9】

化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²
393.	L _{A3}	L _{Q127}	970.	L _{A8}	L _{Q39}	1547.	L _{A12}	L _{Q84}
394.	L _{A3}	L _{Q128}	971.	L _{A8}	L _{Q40}	1548.	L _{A12}	L _{Q85}
395.	L _{A3}	L _{Q129}	972.	L _{A8}	L _{Q41}	1549.	L _{A12}	L _{Q86}
396.	L _{A3}	L _{Q130}	973.	L _{A8}	L _{Q42}	1550.	L _{A12}	L _{Q87}
397.	L _{A3}	L _{Q131}	974.	L _{A8}	L _{Q43}	1551.	L _{A12}	L _{Q88}
398.	L _{A3}	L _{Q132}	975.	L _{A8}	L _{Q44}	1552.	L _{A12}	L _{Q89}
399.	L _{A3}	L _{Q133}	976.	L _{A8}	L _{Q45}	1553.	L _{A12}	L _{Q90}
400.	L _{A4}	L _{Q1}	977.	L _{A8}	L _{Q46}	1554.	L _{A12}	L _{Q91}
401.	L _{A4}	L _{Q2}	978.	L _{A8}	L _{Q47}	1555.	L _{A12}	L _{Q92}
402.	L _{A4}	L _{Q3}	979.	L _{A8}	L _{Q48}	1556.	L _{A12}	L _{Q93}
403.	L _{A4}	L _{Q4}	980.	L _{A8}	L _{Q49}	1557.	L _{A12}	L _{Q94}
404.	L _{A4}	L _{Q5}	981.	L _{A8}	L _{Q50}	1558.	L _{A12}	L _{Q95}
405.	L _{A4}	L _{Q6}	982.	L _{A8}	L _{Q51}	1559.	L _{A12}	L _{Q96}
406.	L _{A4}	L _{Q7}	983.	L _{A8}	L _{Q52}	1560.	L _{A12}	L _{Q97}
407.	L _{A4}	L _{Q8}	984.	L _{A8}	L _{Q53}	1561.	L _{A12}	L _{Q98}
408.	L _{A4}	L _{Q9}	985.	L _{A8}	L _{Q54}	1562.	L _{A12}	L _{Q99}
409.	L _{A4}	L _{Q10}	986.	L _{A8}	L _{Q55}	1563.	L _{A12}	L _{Q100}
410.	L _{A4}	L _{Q11}	987.	L _{A8}	L _{Q56}	1564.	L _{A12}	L _{Q101}
411.	L _{A4}	L _{Q12}	988.	L _{A8}	L _{Q57}	1565.	L _{A12}	L _{Q102}
412.	L _{A4}	L _{Q13}	989.	L _{A8}	L _{Q58}	1566.	L _{A12}	L _{Q103}
413.	L _{A4}	L _{Q14}	990.	L _{A8}	L _{Q59}	1567.	L _{A12}	L _{Q104}
414.	L _{A4}	L _{Q15}	991.	L _{A8}	L _{Q60}	1568.	L _{A12}	L _{Q105}
415.	L _{A4}	L _{Q16}	992.	L _{A8}	L _{Q61}	1569.	L _{A12}	L _{Q106}
416.	L _{A4}	L _{Q17}	993.	L _{A8}	L _{Q62}	1570.	L _{A12}	L _{Q107}
417.	L _{A4}	L _{Q18}	994.	L _{A8}	L _{Q63}	1571.	L _{A12}	L _{Q108}
418.	L _{A4}	L _{Q19}	995.	L _{A8}	L _{Q64}	1572.	L _{A12}	L _{Q109}
419.	L _{A4}	L _{Q20}	996.	L _{A8}	L _{Q65}	1573.	L _{A12}	L _{Q110}
420.	L _{A4}	L _{Q21}	997.	L _{A8}	L _{Q66}	1574.	L _{A12}	L _{Q111}
421.	L _{A4}	L _{Q22}	998.	L _{A8}	L _{Q67}	1575.	L _{A12}	L _{Q112}
422.	L _{A4}	L _{Q23}	999.	L _{A8}	L _{Q68}	1576.	L _{A12}	L _{Q113}
423.	L _{A4}	L _{Q24}	1000.	L _{A8}	L _{Q69}	1577.	L _{A12}	L _{Q114}
424.	L _{A4}	L _{Q25}	1001.	L _{A8}	L _{Q70}	1578.	L _{A12}	L _{Q115}
425.	L _{A4}	L _{Q26}	1002.	L _{A8}	L _{Q71}	1579.	L _{A12}	L _{Q116}
426.	L _{A4}	L _{Q27}	1003.	L _{A8}	L _{Q72}	1580.	L _{A12}	L _{Q117}
427.	L _{A4}	L _{Q28}	1004.	L _{A8}	L _{Q73}	1581.	L _{A12}	L _{Q118}
428.	L _{A4}	L _{Q29}	1005.	L _{A8}	L _{Q74}	1582.	L _{A12}	L _{Q119}
429.	L _{A4}	L _{Q30}	1006.	L _{A8}	L _{Q75}	1583.	L _{A12}	L _{Q120}
430.	L _{A4}	L _{Q31}	1007.	L _{A8}	L _{Q76}	1584.	L _{A12}	L _{Q121}
431.	L _{A4}	L _{Q32}	1008.	L _{A8}	L _{Q77}	1585.	L _{A12}	L _{Q122}
432.	L _{A4}	L _{Q33}	1009.	L _{A8}	L _{Q78}	1586.	L _{A12}	L _{Q123}
433.	L _{A4}	L _{Q34}	1010.	L _{A8}	L _{Q79}	1587.	L _{A12}	L _{Q124}
434.	L _{A4}	L _{Q35}	1011.	L _{A8}	L _{Q80}	1588.	L _{A12}	L _{Q125}
435.	L _{A4}	L _{Q36}	1012.	L _{A8}	L _{Q81}	1589.	L _{A12}	L _{Q126}
436.	L _{A4}	L _{Q37}	1013.	L _{A8}	L _{Q82}	1590.	L _{A12}	L _{Q127}
437.	L _{A4}	L _{Q38}	1014.	L _{A8}	L _{Q83}	1591.	L _{A12}	L _{Q128}
438.	L _{A4}	L _{Q39}	1015.	L _{A8}	L _{Q84}	1592.	L _{A12}	L _{Q129}
439.	L _{A4}	L _{Q40}	1016.	L _{A8}	L _{Q85}	1593.	L _{A12}	L _{Q130}
440.	L _{A4}	L _{Q41}	1017.	L _{A8}	L _{Q86}	1594.	L _{A12}	L _{Q131}
441.	L _{A4}	L _{Q42}	1018.	L _{A8}	L _{Q87}	1595.	L _{A12}	L _{Q132}

10

20

30

40

50

【表 1 - 10】

化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²
442.	L _{A4}	L _{Q43}	1019.	L _{A8}	L _{Q88}	1596.	L _{A12}	L _{Q133}
443.	L _{A4}	L _{Q44}	1020.	L _{A8}	L _{Q89}	1597.	L _{A13}	L _{Q1}
444.	L _{A4}	L _{Q45}	1021.	L _{A8}	L _{Q90}	1598.	L _{A13}	L _{Q2}
445.	L _{A4}	L _{Q46}	1022.	L _{A8}	L _{Q91}	1599.	L _{A13}	L _{Q3}
446.	L _{A4}	L _{Q47}	1023.	L _{A8}	L _{Q92}	1600.	L _{A13}	L _{Q4}
447.	L _{A4}	L _{Q48}	1024.	L _{A8}	L _{Q93}	1601.	L _{A13}	L _{Q5}
448.	L _{A4}	L _{Q49}	1025.	L _{A8}	L _{Q94}	1602.	L _{A13}	L _{Q6}
449.	L _{A4}	L _{Q50}	1026.	L _{A8}	L _{Q95}	1603.	L _{A13}	L _{Q7}
450.	L _{A4}	L _{Q51}	1027.	L _{A8}	L _{Q96}	1604.	L _{A13}	L _{Q8}
451.	L _{A4}	L _{Q52}	1028.	L _{A8}	L _{Q97}	1605.	L _{A13}	L _{Q9}
452.	L _{A4}	L _{Q53}	1029.	L _{A8}	L _{Q98}	1606.	L _{A13}	L _{Q10}
453.	L _{A4}	L _{Q54}	1030.	L _{A8}	L _{Q99}	1607.	L _{A13}	L _{Q11}
454.	L _{A4}	L _{Q55}	1031.	L _{A8}	L _{Q100}	1608.	L _{A13}	L _{Q12}
455.	L _{A4}	L _{Q56}	1032.	L _{A8}	L _{Q101}	1609.	L _{A13}	L _{Q13}
456.	L _{A4}	L _{Q57}	1033.	L _{A8}	L _{Q102}	1610.	L _{A13}	L _{Q14}
457.	L _{A4}	L _{Q58}	1034.	L _{A8}	L _{Q103}	1611.	L _{A13}	L _{Q15}
458.	L _{A4}	L _{Q59}	1035.	L _{A8}	L _{Q104}	1612.	L _{A13}	L _{Q16}
459.	L _{A4}	L _{Q60}	1036.	L _{A8}	L _{Q105}	1613.	L _{A13}	L _{Q17}
460.	L _{A4}	L _{Q61}	1037.	L _{A8}	L _{Q106}	1614.	L _{A13}	L _{Q18}
461.	L _{A4}	L _{Q62}	1038.	L _{A8}	L _{Q107}	1615.	L _{A13}	L _{Q19}
462.	L _{A4}	L _{Q63}	1039.	L _{A8}	L _{Q108}	1616.	L _{A13}	L _{Q20}
463.	L _{A4}	L _{Q64}	1040.	L _{A8}	L _{Q109}	1617.	L _{A13}	L _{Q21}
464.	L _{A4}	L _{Q65}	1041.	L _{A8}	L _{Q110}	1618.	L _{A13}	L _{Q22}
465.	L _{A4}	L _{Q66}	1042.	L _{A8}	L _{Q111}	1619.	L _{A13}	L _{Q23}
466.	L _{A4}	L _{Q67}	1043.	L _{A8}	L _{Q112}	1620.	L _{A13}	L _{Q24}
467.	L _{A4}	L _{Q68}	1044.	L _{A8}	L _{Q113}	1621.	L _{A13}	L _{Q25}
468.	L _{A4}	L _{Q69}	1045.	L _{A8}	L _{Q114}	1622.	L _{A13}	L _{Q26}
469.	L _{A4}	L _{Q70}	1046.	L _{A8}	L _{Q115}	1623.	L _{A13}	L _{Q27}
470.	L _{A4}	L _{Q71}	1047.	L _{A8}	L _{Q116}	1624.	L _{A13}	L _{Q28}
471.	L _{A4}	L _{Q72}	1048.	L _{A8}	L _{Q117}	1625.	L _{A13}	L _{Q29}
472.	L _{A4}	L _{Q73}	1049.	L _{A8}	L _{Q118}	1626.	L _{A13}	L _{Q30}
473.	L _{A4}	L _{Q74}	1050.	L _{A8}	L _{Q119}	1627.	L _{A13}	L _{Q31}
474.	L _{A4}	L _{Q75}	1051.	L _{A8}	L _{Q120}	1628.	L _{A13}	L _{Q32}
475.	L _{A4}	L _{Q76}	1052.	L _{A8}	L _{Q121}	1629.	L _{A13}	L _{Q33}
476.	L _{A4}	L _{Q77}	1053.	L _{A8}	L _{Q122}	1630.	L _{A13}	L _{Q34}
477.	L _{A4}	L _{Q78}	1054.	L _{A8}	L _{Q123}	1631.	L _{A13}	L _{Q35}
478.	L _{A4}	L _{Q79}	1055.	L _{A8}	L _{Q124}	1632.	L _{A13}	L _{Q36}
479.	L _{A4}	L _{Q80}	1056.	L _{A8}	L _{Q125}	1633.	L _{A13}	L _{Q37}
480.	L _{A4}	L _{Q81}	1057.	L _{A8}	L _{Q126}	1634.	L _{A13}	L _{Q38}
481.	L _{A4}	L _{Q82}	1058.	L _{A8}	L _{Q127}	1635.	L _{A13}	L _{Q39}
482.	L _{A4}	L _{Q83}	1059.	L _{A8}	L _{Q128}	1636.	L _{A13}	L _{Q40}
483.	L _{A4}	L _{Q84}	1060.	L _{A8}	L _{Q129}	1637.	L _{A13}	L _{Q41}
484.	L _{A4}	L _{Q85}	1061.	L _{A8}	L _{Q130}	1638.	L _{A13}	L _{Q42}
485.	L _{A4}	L _{Q86}	1062.	L _{A8}	L _{Q131}	1639.	L _{A13}	L _{Q43}
486.	L _{A4}	L _{Q87}	1063.	L _{A8}	L _{Q132}	1640.	L _{A13}	L _{Q44}
487.	L _{A4}	L _{Q88}	1064.	L _{A8}	L _{Q133}	1641.	L _{A13}	L _{Q45}
488.	L _{A4}	L _{Q89}	1065.	L _{A9}	L _{Q1}	1642.	L _{A13}	L _{Q46}
489.	L _{A4}	L _{Q90}	1066.	L _{A9}	L _{Q2}	1643.	L _{A13}	L _{Q47}
490.	L _{A4}	L _{Q91}	1067.	L _{A9}	L _{Q3}	1644.	L _{A13}	L _{Q48}

10

20

30

40

50

【表 1 - 1 1】

化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²
491.	L _{A4}	L _{Q92}	1068.	L _{A9}	L _{Q4}	1645.	L _{A13}	L _{Q49}
492.	L _{A4}	L _{Q93}	1069.	L _{A9}	L _{Q5}	1646.	L _{A13}	L _{Q50}
493.	L _{A4}	L _{Q94}	1070.	L _{A9}	L _{Q6}	1647.	L _{A13}	L _{Q51}
494.	L _{A4}	L _{Q95}	1071.	L _{A9}	L _{Q7}	1648.	L _{A13}	L _{Q52}
495.	L _{A4}	L _{Q96}	1072.	L _{A9}	L _{Q8}	1649.	L _{A13}	L _{Q53}
496.	L _{A4}	L _{Q97}	1073.	L _{A9}	L _{Q9}	1650.	L _{A13}	L _{Q54}
497.	L _{A4}	L _{Q98}	1074.	L _{A9}	L _{Q10}	1651.	L _{A13}	L _{Q55}
498.	L _{A4}	L _{Q99}	1075.	L _{A9}	L _{Q11}	1652.	L _{A13}	L _{Q56}
499.	L _{A4}	L _{Q100}	1076.	L _{A9}	L _{Q12}	1653.	L _{A13}	L _{Q57}
500.	L _{A4}	L _{Q101}	1077.	L _{A9}	L _{Q13}	1654.	L _{A13}	L _{Q58}
501.	L _{A4}	L _{Q102}	1078.	L _{A9}	L _{Q14}	1655.	L _{A13}	L _{Q59}
502.	L _{A4}	L _{Q103}	1079.	L _{A9}	L _{Q15}	1656.	L _{A13}	L _{Q60}
503.	L _{A4}	L _{Q104}	1080.	L _{A9}	L _{Q16}	1657.	L _{A13}	L _{Q61}
504.	L _{A4}	L _{Q105}	1081.	L _{A9}	L _{Q17}	1658.	L _{A13}	L _{Q62}
505.	L _{A4}	L _{Q106}	1082.	L _{A9}	L _{Q18}	1659.	L _{A13}	L _{Q63}
506.	L _{A4}	L _{Q107}	1083.	L _{A9}	L _{Q19}	1660.	L _{A13}	L _{Q64}
507.	L _{A4}	L _{Q108}	1084.	L _{A9}	L _{Q20}	1661.	L _{A13}	L _{Q65}
508.	L _{A4}	L _{Q109}	1085.	L _{A9}	L _{Q21}	1662.	L _{A13}	L _{Q66}
509.	L _{A4}	L _{Q110}	1086.	L _{A9}	L _{Q22}	1663.	L _{A13}	L _{Q67}
510.	L _{A4}	L _{Q111}	1087.	L _{A9}	L _{Q23}	1664.	L _{A13}	L _{Q68}
511.	L _{A4}	L _{Q112}	1088.	L _{A9}	L _{Q24}	1665.	L _{A13}	L _{Q69}
512.	L _{A4}	L _{Q113}	1089.	L _{A9}	L _{Q25}	1666.	L _{A13}	L _{Q70}
513.	L _{A4}	L _{Q114}	1090.	L _{A9}	L _{Q26}	1667.	L _{A13}	L _{Q71}
514.	L _{A4}	L _{Q115}	1091.	L _{A9}	L _{Q27}	1668.	L _{A13}	L _{Q72}
515.	L _{A4}	L _{Q116}	1092.	L _{A9}	L _{Q28}	1669.	L _{A13}	L _{Q73}
516.	L _{A4}	L _{Q117}	1093.	L _{A9}	L _{Q29}	1670.	L _{A13}	L _{Q74}
517.	L _{A4}	L _{Q118}	1094.	L _{A9}	L _{Q30}	1671.	L _{A13}	L _{Q75}
518.	L _{A4}	L _{Q119}	1095.	L _{A9}	L _{Q31}	1672.	L _{A13}	L _{Q76}
519.	L _{A4}	L _{Q120}	1096.	L _{A9}	L _{Q32}	1673.	L _{A13}	L _{Q77}
520.	L _{A4}	L _{Q121}	1097.	L _{A9}	L _{Q33}	1674.	L _{A13}	L _{Q78}
521.	L _{A4}	L _{Q122}	1098.	L _{A9}	L _{Q34}	1675.	L _{A13}	L _{Q79}
522.	L _{A4}	L _{Q123}	1099.	L _{A9}	L _{Q35}	1676.	L _{A13}	L _{Q80}
523.	L _{A4}	L _{Q124}	1100.	L _{A9}	L _{Q36}	1677.	L _{A13}	L _{Q81}
524.	L _{A4}	L _{Q125}	1101.	L _{A9}	L _{Q37}	1678.	L _{A13}	L _{Q82}
525.	L _{A4}	L _{Q126}	1102.	L _{A9}	L _{Q38}	1679.	L _{A13}	L _{Q83}
526.	L _{A4}	L _{Q127}	1103.	L _{A9}	L _{Q39}	1680.	L _{A13}	L _{Q84}
527.	L _{A4}	L _{Q128}	1104.	L _{A9}	L _{Q40}	1681.	L _{A13}	L _{Q85}
528.	L _{A4}	L _{Q129}	1105.	L _{A9}	L _{Q41}	1682.	L _{A13}	L _{Q86}
529.	L _{A4}	L _{Q130}	1106.	L _{A9}	L _{Q42}	1683.	L _{A13}	L _{Q87}
530.	L _{A4}	L _{Q131}	1107.	L _{A9}	L _{Q43}	1684.	L _{A13}	L _{Q88}
531.	L _{A4}	L _{Q132}	1108.	L _{A9}	L _{Q44}	1685.	L _{A13}	L _{Q89}
532.	L _{A4}	L _{Q133}	1109.	L _{A9}	L _{Q45}	1686.	L _{A13}	L _{Q90}
533.	L _{A5}	L _{Q1}	1110.	L _{A9}	L _{Q46}	1687.	L _{A13}	L _{Q91}
534.	L _{A5}	L _{Q2}	1111.	L _{A9}	L _{Q47}	1688.	L _{A13}	L _{Q92}
535.	L _{A5}	L _{Q3}	1112.	L _{A9}	L _{Q48}	1689.	L _{A13}	L _{Q93}
536.	L _{A5}	L _{Q4}	1113.	L _{A9}	L _{Q49}	1690.	L _{A13}	L _{Q94}
537.	L _{A5}	L _{Q5}	1114.	L _{A9}	L _{Q50}	1691.	L _{A13}	L _{Q95}
538.	L _{A5}	L _{Q6}	1115.	L _{A9}	L _{Q51}	1692.	L _{A13}	L _{Q96}
539.	L _{A5}	L _{Q7}	1116.	L _{A9}	L _{Q52}	1693.	L _{A13}	L _{Q97}

10

20

30

40

50

【表 1 - 1 2】

化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²
540.	L _{A5}	L _{Q8}	1117.	L _{A9}	L _{Q53}	1694.	L _{A13}	L _{Q98}
541.	L _{A5}	L _{Q9}	1118.	L _{A9}	L _{Q54}	1695.	L _{A13}	L _{Q99}
542.	L _{A5}	L _{Q10}	1119.	L _{A9}	L _{Q55}	1696.	L _{A13}	L _{Q100}
543.	L _{A5}	L _{Q11}	1120.	L _{A9}	L _{Q56}	1697.	L _{A13}	L _{Q101}
544.	L _{A5}	L _{Q12}	1121.	L _{A9}	L _{Q57}	1698.	L _{A13}	L _{Q102}
545.	L _{A5}	L _{Q13}	1122.	L _{A9}	L _{Q58}	1699.	L _{A13}	L _{Q103}
546.	L _{A5}	L _{Q14}	1123.	L _{A9}	L _{Q59}	1700.	L _{A13}	L _{Q104}
547.	L _{A5}	L _{Q15}	1124.	L _{A9}	L _{Q60}	1701.	L _{A13}	L _{Q105}
548.	L _{A5}	L _{Q16}	1125.	L _{A9}	L _{Q61}	1702.	L _{A13}	L _{Q106}
549.	L _{A5}	L _{Q17}	1126.	L _{A9}	L _{Q62}	1703.	L _{A13}	L _{Q107}
550.	L _{A5}	L _{Q18}	1127.	L _{A9}	L _{Q63}	1704.	L _{A13}	L _{Q108}
551.	L _{A5}	L _{Q19}	1128.	L _{A9}	L _{Q64}	1705.	L _{A13}	L _{Q109}
552.	L _{A5}	L _{Q20}	1129.	L _{A9}	L _{Q65}	1706.	L _{A13}	L _{Q110}
553.	L _{A5}	L _{Q21}	1130.	L _{A9}	L _{Q66}	1707.	L _{A13}	L _{Q111}
554.	L _{A5}	L _{Q22}	1131.	L _{A9}	L _{Q67}	1708.	L _{A13}	L _{Q112}
555.	L _{A5}	L _{Q23}	1132.	L _{A9}	L _{Q68}	1709.	L _{A13}	L _{Q113}
556.	L _{A5}	L _{Q24}	1133.	L _{A9}	L _{Q69}	1710.	L _{A13}	L _{Q114}
557.	L _{A5}	L _{Q25}	1134.	L _{A9}	L _{Q70}	1711.	L _{A13}	L _{Q115}
558.	L _{A5}	L _{Q26}	1135.	L _{A9}	L _{Q71}	1712.	L _{A13}	L _{Q116}
559.	L _{A5}	L _{Q27}	1136.	L _{A9}	L _{Q72}	1713.	L _{A13}	L _{Q117}
560.	L _{A5}	L _{Q28}	1137.	L _{A9}	L _{Q73}	1714.	L _{A13}	L _{Q118}
561.	L _{A5}	L _{Q29}	1138.	L _{A9}	L _{Q74}	1715.	L _{A13}	L _{Q119}
562.	L _{A5}	L _{Q30}	1139.	L _{A9}	L _{Q75}	1716.	L _{A13}	L _{Q120}
563.	L _{A5}	L _{Q31}	1140.	L _{A9}	L _{Q76}	1717.	L _{A13}	L _{Q121}
564.	L _{A5}	L _{Q32}	1141.	L _{A9}	L _{Q77}	1718.	L _{A13}	L _{Q122}
565.	L _{A5}	L _{Q33}	1142.	L _{A9}	L _{Q78}	1719.	L _{A13}	L _{Q123}
566.	L _{A5}	L _{Q34}	1143.	L _{A9}	L _{Q79}	1720.	L _{A13}	L _{Q124}
567.	L _{A5}	L _{Q35}	1144.	L _{A9}	L _{Q80}	1721.	L _{A13}	L _{Q125}
568.	L _{A5}	L _{Q36}	1145.	L _{A9}	L _{Q81}	1722.	L _{A13}	L _{Q126}
569.	L _{A5}	L _{Q37}	1146.	L _{A9}	L _{Q82}	1723.	L _{A13}	L _{Q127}
570.	L _{A5}	L _{Q38}	1147.	L _{A9}	L _{Q83}	1724.	L _{A13}	L _{Q128}
571.	L _{A5}	L _{Q39}	1148.	L _{A9}	L _{Q84}	1725.	L _{A13}	L _{Q129}
572.	L _{A5}	L _{Q40}	1149.	L _{A9}	L _{Q85}	1726.	L _{A13}	L _{Q130}
573.	L _{A5}	L _{Q41}	1150.	L _{A9}	L _{Q86}	1727.	L _{A13}	L _{Q131}
574.	L _{A5}	L _{Q42}	1151.	L _{A9}	L _{Q87}	1728.	L _{A13}	L _{Q132}
575.	L _{A5}	L _{Q43}	1152.	L _{A9}	L _{Q88}	1729.	L _{A13}	L _{Q133}
576.	L _{A5}	L _{Q44}	1153.	L _{A9}	L _{Q89}			
577.	L _{A5}	L _{Q45}	1154.	L _{A9}	L _{Q90}			

【請求項 1 1】

化合物が、下記からなる群から選択される請求項 1 又は 2 に記載の使用。

10

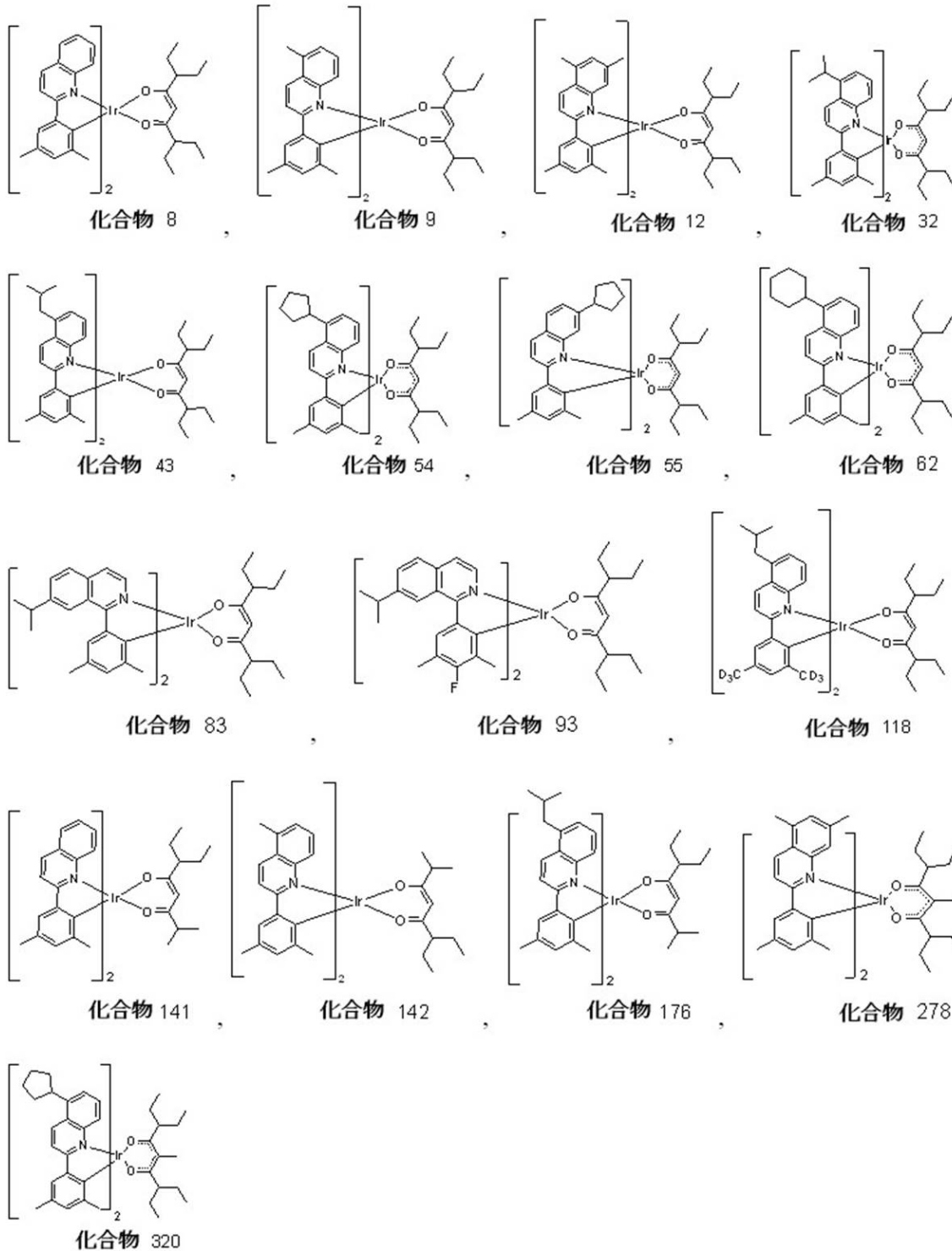
20

30

40

50

【化 1 3】



【請求項 1 2】

前記化合物が第 1 の有機発光デバイスを含む第 1 のデバイスに組み込まれ、前記第 1 の有機発光デバイスが、

アノードと；

カソードと；

前記アノードと前記カソードとの間に配置され、前記化合物を含む有機層とを含む、請求項 1 から 11 のいずれかに記載の使用。

【請求項 1 3】

前記第 1 のデバイスが、消費製品及び／又は照明パネルであり、

前記消費者製品が、フラットパネルディスプレイ、コンピュータモニター、メディカルモニター、テレビ、掲示板、屋内若しくは屋外照明及び／又は信号送信用のライト、ヘッドアップディスプレイ、完全透明ディスプレイ、フレキシブルディスプレイ、レーザープリンター、電話、携帯電話、パーソナルデジタルアシスタント（PDA）、ラップトップコンピュータ、デジタルカメラ、カムコーダー、ビューファインダー、マイクロディスプレイ、3-Dディスプレイ、車、大面積壁、劇場又はスタジアムのスクリーン、或いは看板からなる群から選択される請求項12に記載の使用。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

特許請求されている発明は、大学・企業の共同研究契約の下記の当事者：University of Michigan、Princeton University、University of Southern California、及びUniversal Display Corporationの理事らの1又は複数によって、その利益になるように、且つ／又は関連して為されたものである。該契約は、特許請求されている発明が為された日付以前に発効したものであり、特許請求されている発明は、該契約の範囲内で行われる活動の結果として為されたものである。

【0002】

本発明は、発光体としての使用のための化合物、及び該化合物を含む有機発光ダイオードなどのデバイスに関する。より詳細には、本明細書に開示される化合物は、金属錯体のための新規な補助配位子である。

【背景技術】

【0003】

有機材料を利用する光電子デバイスは、いくつもの理由から、次第に望ましいものとなりつつある。そのようなデバイスを作製するために使用される材料の多くは比較的安価であるため、有機光電子デバイスは無機デバイスを上回るコスト優位性の可能性を有する。加えて、柔軟性等の有機材料の固有の特性により、該材料は、フレキシブル基板上での製作等の特定用途によく適したものとなり得る。有機光電子デバイスの例は、有機発光デバイス（OLED）、有機光トランジスタ、有機光電池及び有機光検出器を含む。OLEDについて、有機材料は従来の材料を上回る性能の利点を有し得る。例えば、有機発光層が光を放出する波長は、概して、適切なドーパントで容易に調整され得る。

【0004】

OLEDはデバイス全体に電圧が印加されると光を放出する薄い有機膜を利用する。OLEDは、フラットパネルディスプレイ、照明及びバックライティング等の用途において使用するためのますます興味深い技術となりつつある。数種のOLED材料及び構成は、参照によりその全体が本明細書に組み込まれる、特許文献1、特許文献2及び特許文献3において記述されている。

【0005】

リン光性発光分子の1つの用途は、フルカラーディスプレイである。そのようなディスプレイの業界標準は、「飽和（saturated）」色と称される特定の色を放出するように適合された画素を必要とする。特に、これらの標準は、飽和した赤色、緑色及び青色画素を必要とする。色は、当技術分野において周知のCIE座標を使用して測定することができる。

【0006】

緑色発光分子の一例は、下記の構造：

10

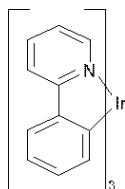
20

30

40

50

【化 1】



を有する、 $\text{Ir}(\text{ppy})_3$ と表示されるトリス（２－フェニルピリジン）イリジウムである。

【０００７】

この図面及び本明細書における後出の図面中で、本発明者らは、窒素から金属（ここではIr）への配位結合を直線として描写する。

【０００８】

本明細書において使用される場合、用語「有機」は、有機光電子デバイスを製作するために使用され得るポリマー材料及び小分子有機材料を含む。「小分子」は、ポリマーでない任意の有機材料を指し、且つ「小分子」は実際にはかなり大型であってよい。小分子は、いくつかの状況において繰り返し単位を含み得る。例えば、長鎖アルキル基を置換基として使用することは、「小分子」クラスから分子を排除しない。小分子は、例えばポリマー骨格上のペンダント基として、又は該骨格の一部として、ポリマーに組み込まれてもよい。小分子は、コア部分上に構築された一連の化学的シェルからなる dendritic コア部分として役立つこともできる。Dendritic コア部分は、蛍光性又はリン光性小分子発光体であってよい。Dendritic コア部分は「小分子」であってよく、OLEDの分野において現在使用されている dendritic コア部分はすべて小分子であると考えられている。

【０００９】

本明細書において使用される場合、「頂部」は基板から最遠部を意味するのに対し、「底部」は基板の最近部を意味する。第一層が第二層「の上に配置されている」と記述される場合、第一層のほうが基板から遠くに配置されている。第一層が第二層「と接触している」ことが指定されているのでない限り、第一層と第二層との間に他の層があってもよい。例えば、間に種々の有機層があるとしても、カソードはアノード「の上に配置されている」と記述され得る。

【００１０】

本明細書において使用される場合、「溶液プロセス可能な」は、溶液又は懸濁液形態のいずれかの液体媒質に溶解、分散若しくは輸送することができ、且つ／又は該媒質から堆積することができるという意味である。

【００１１】

配位子は、該配位子が発光材料の光活性特性に直接寄与していると考えられる場合、「光活性」と称され得る。配位子は、該配位子が発光材料の光活性特性に寄与していないと考えられる場合には「補助」と称され得るが、補助配位子は、光活性配位子の特性を変化させることができる。

【００１２】

本明細書において使用される場合、当業者には概して理解されるであろう通り、第一の「最高被占分子軌道」（HOMO）又は「最低空分子軌道」（LUMO）エネルギー準位は、第一のエネルギー準位が真空エネルギー準位に近ければ、第二のHOMO又はLUMOエネルギー準位「よりも大きい」又は「よりも高い」。イオン化ポテンシャル（IP）は、真空準位と比べて負のエネルギーとして測定されるため、より高いHOMOエネルギー準位は、より小さい絶対値を有するIP（あまり負でないIP）に相当する。同様に、より高いLUMOエネルギー準位は、より小さい絶対値を有する電子親和力（EA）（あまり負でないEA）に相当する。頂部に真空準位がある従来のエネルギー準位図において、材料のLUMOエネルギー準位は、同じ材料のHOMOエネルギー準位よりも高い。「より高い」HOMO又はLUMOエネルギー準位は、「より低い」HOMO又はLUMOエ

10

20

30

40

50

エネルギー準位よりもそのような図の頂部に近いように思われる。

【0013】

本明細書において使用される場合、当業者には概して理解されるであろう通り、第一の仕事関数がより高い絶対値を有するならば、第一の仕事関数は第二の仕事関数「よりも大きい」又は「よりも高い」。仕事関数は概して真空準位と比べて負数として測定されるため、これは「より高い」仕事関数が更に負であることを意味する。頂部に真空準位がある従来のエネルギー準位図において、「より高い」仕事関数は、真空準位から下向きの方に遠く離れているものとして例証される。故に、HOMO及びLUMOエネルギー準位の定義は、仕事関数とは異なる慣例に準ずる。

【0014】

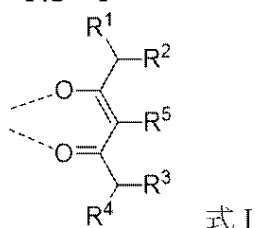
OLEDについての更なる詳細及び上述した定義は、参照によりその全体が本明細書に組み込まれる特許文献4において見ることができる。

【発明の概要】

【0015】

1つの実施形態によれば、次の式Iを有する第1の配位子L1を含み、前記第1の配位子L1が、40超の原子番号を有する金属Mに配位している化合物が提供される。

【化2】



式中、R1、R2、R3、及びR4は、独立して、アルキル、シクロアルキル、アリール、及びヘテロアリールからなる群から選択され；R1、R2、R3、及びR4の少なくとも1つは、少なくとも2つのCを有し；R5は、水素、重水素、ハライド、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、アリールアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、アシル、カルボニル、カルボン酸、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルフォニル、ホスフィノ及びこれらの組み合わせからなる群から選択され；

2つの隣接する置換基が結合して環を形成してもよい。

【0016】

本開示の他の態様によれば、第1の有機発光デバイスを含む第1のデバイスが提供される。前記第1の有機発光デバイスは、アノードと、カソードと、前記アノードと前記カソードとの間に配置された有機層とを含むことができる。前記有機層は、式Iを有する第1の配位子L1を含む化合物を含むことができる。前記第1のデバイスは、消費者製品、有機発光デバイス、及び／又は照明パネルであってよい。

【0017】

本明細書に開示される化合物は、金属錯体のための新規な補助配位子である。これらの配位子を含有させることにより、発光スペクトルを狭め、蒸着温度を低下させ、デバイス効率を改善することができる。本発明者らは、これらの新規な補助配位子をイリジウム錯体に含有させることにより、得られるイリジウム錯体の昇華、これらイリジウム錯体によるリン光のカラースペクトル、及びそれらのEQEが改善されたことを見出した。

【図面の簡単な説明】

【0018】

【図1】図1は、有機発光デバイスを示す。

【0019】

【図2】図2は、別の電子輸送層を有さない、反転された有機発光デバイスを示す。

【0020】

【図3】図3は、本明細書に開示される式Iを示す。

【発明を実施するための形態】

【0021】

概して、OLEDは、アノード及びカソードの間に配置され、それらと電氣的に接続された少なくとも1つの有機層を含む。電流が印加されると、アノードが正孔を注入し、カソードが電子を有機層（複数可）に注入する。注入された正孔及び電子は、逆帯電した電極にそれぞれ移動する。電子及び正孔が同じ分子上に局在する場合、励起エネルギー状態を有する局在電子正孔対である「励起子」が形成される。光は、励起子が緩和した際に、光電子放出機構を介して放出される。いくつかの事例において、励起子はエキシマー又はエキサイプレックス上に局在し得る。熱緩和等の無輻射機構が発生する場合もあるが、概して望ましくないとみなされている。

10

【0022】

初期のOLEDは、例えば、参照によりその全体が組み込まれる米国特許第4,769,292号において開示されている通り、その一重項状態から光を放出する発光分子（「蛍光」）を使用していた。蛍光発光は、概して、10ナノ秒未満の時間枠で発生する。

【0023】

ごく最近では、三重項状態から光を放出する発光材料（「リン光」）を有するOLEDが実証されている。参照によりその全体が組み込まれる、Baldoら、「Highly Efficient Phosphorescent Emission from Organic Electroluminescent Devices」、395巻、151～154、1998；（「Baldo-I」）及びBaldoら、「Very high-efficiency green organic light emitting devices based on electrophosphorescence」、Appl. Phys. Lett.、75巻、3号、4～6（1999）（「Baldo-II」）。リン光については、参照により組み込まれる米国特許第7,279,704号5～6段において更に詳細に記述されている。

20

【0024】

図1は、有機発光デバイス100を示す。図は必ずしも一定の縮尺ではない。デバイス100は、基板110、アノード115、正孔注入層120、正孔輸送層125、電子ブロッキング層130、発光層135、正孔ブロッキング層140、電子輸送層145、電子注入層150、保護層155、カソード160、及びバリア層170を含み得る。カソード160は、第一の導電層162及び第二の導電層164を有する複合カソードである。デバイス100は、記述されている層を順に堆積させることによって製作され得る。これらの種々の層の特性及び機能並びに材料例は、参照により組み込まれるUS7,279,704、6～10段において更に詳細に記述されている。

30

【0025】

これらの層のそれぞれについて、更なる例が利用可能である。例えば、フレキシブル及び透明基板－アノードの組合せは、参照によりその全体が組み込まれる米国特許第5,844,363号において開示されている。p-ドーブされた正孔輸送層の例は、参照によりその全体が組み込まれる米国特許出願公開第2003/0230980号において開示されている通りの、50：1のモル比でm-MTDATAにF4-TCNQをドーブしたものである。発光材料及びホスト材料の例は、参照によりその全体が組み込まれるThompsonらの米国特許第6,303,238号において開示されている。n-ドーブされた電子輸送層の例は、参照によりその全体が組み込まれる米国特許出願公開第2003/0230980号において開示されている通りの、1：1のモル比でBPhenにLiをドーブしたものである。参照によりその全体が組み込まれる米国特許第5,703,436号及び同第5,707,745号は、上を覆う透明の、導電性の、スパッタリング蒸着したITO層を持つMg：Ag等の金属の薄層を有する複合カソードを含むカソードの例を開示している。ブロッキング層の理論及び使用は、参照によりその全体が組み込まれる

40

50

米国特許第 6, 097, 147 号及び米国特許出願公開第 2003/0230980 号において更に詳細に記述されている。注入層の例は、参照によりその全体が組み込まれる米国特許出願公開第 2004/0174116 号において提供されている。保護層についての記述は、参照によりその全体が組み込まれる米国特許出願公開第 2004/0174116 号において見ることができる。

【0026】

図 2 は、反転させた O L E D 200 を示す。デバイス 200 は、基板 210、カソード 215、発光層 220、正孔輸送層 225、及びアノード 230 を含む。デバイス 200 は、記述されている層を順に堆積させることによって製作され得る。最も一般的な O L E D 構成はアノードの上に配置されたカソードを有し、デバイス 200 はアノード 230 の下に配置されたカソード 215 を有するため、デバイス 200 は「反転させた」O L E D と称されることがある。デバイス 100 に関して記述されたものと同様の材料を、デバイス 200 の対応する層において使用してよい。図 2 は、いくつかの層が如何にしてデバイス 100 の構造から省略され得るかの一例を提供するものである。

【0027】

図 1 及び 2 において例証されている単純な層構造は、非限定的な例として提供されるものであり、本発明の実施形態は多種多様な他の構造に関連して使用され得ることが理解される。記述されている特定の材料及び構造は、事実上例示的なものであり、他の材料及び構造を使用してよい。機能的な O L E D は、記述されている種々の層を様々な手法で組み合わせることによって実現され得るか、又は層は、設計、性能及びコスト要因に基づき、全面的に省略され得る。具体的には記述されていない他の層も含まれ得る。具体的に記述されているもの以外の材料を使用してよい。本明細書において提供されている例の多くは、単一材料を含むものとして種々の層を記述しているが、ホスト及びドーパントの混合物等の材料の組合せ、又はより一般的には混合物を使用してよいことが理解される。また、層は種々の副層を有してもよい。本明細書における種々の層に与えられている名称は、厳しく限定することを意図するものではない。例えば、デバイス 200 において、正孔輸送層 225 は正孔を輸送し、正孔を発光層 220 に注入し、正孔輸送層又は正孔注入層として記述され得る。一実施形態において、O L E D は、カソード及びアノードの間に配置された「有機層」を有するものとして記述され得る。有機層は単層を含んでいてよく、又は、例えば図 1 及び 2 に関して記述されている通りの異なる有機材料の多層を更に含んでいてよい。

【0028】

参照によりその全体が組み込まれる F r i e n d らの米国特許第 5, 247, 190 号において開示されているもののようなポリマー材料で構成される O L E D (P L E D) 等、具体的には記述されていない構造及び材料を使用してよい。更なる例として、単一の有機層を有する O L E D が使用され得る。O L E D は、例えば、参照によりその全体が組み込まれる F o r r e s t らの米国特許第 5, 707, 745 号において記述されている通り、積み重ねられてよい。O L E D 構造は、図 1 及び 2 において例証されている単純な層構造から逸脱してよい。例えば、基板は、参照によりその全体が組み込まれる、F o r r e s t らの米国特許第 6, 091, 195 号において記述されている通りのメサ構造及び／又は B u l o v i c らの米国特許第 5, 834, 893 号において記述されている通りのくぼみ構造等、アウトカップリングを改良するための角度のついた反射面を含み得る。

【0029】

別段の規定がない限り、種々の実施形態の層のいずれも、任意の適切な方法によって堆積され得る。有機層について、好ましい方法は、参照によりその全体が組み込まれる米国特許第 6, 013, 982 号及び同第 6, 087, 196 号において記述されているもの等の熱蒸着、インクジェット、参照によりその全体が組み込まれる F o r r e s t らの米国特許第 6, 337, 102 号において記述されているもの等の有機気相堆積 (O V P D)、並びに参照によりその全体が組み込まれる米国特許第 7, 431, 968 号において記述されているもの等の有機気相ジェットプリンティング (O V J P) による堆積を含む。

他の適切な堆積法は、スピンコーティング及び他の溶液ベースのプロセスを含む。溶液ベースのプロセスは、好ましくは、窒素又は不活性雰囲気中で行われる。他の層について、好ましい方法は熱蒸着を含む。好ましいパターニング法は、参照によりその全体が組み込まれる米国特許第6,294,398号及び同第6,468,819号において記述されているもの等のマスク、冷間圧接を経由する堆積、並びにインクジェット及びOVD等の堆積法のいくつかに関連するパターニングを含む。他の方法を使用してもよい。堆積する材料は、特定の堆積法と適合するように修正され得る。例えば、分枝鎖状又は非分枝鎖状であり、且つ好ましくは少なくとも3個の炭素を含有するアルキル及びアリアル基等の置換基は、溶液プロセッシングを受ける能力を増強するために、小分子において使用され得る。20個以上の炭素を有する置換基を使用してよく、3〜20個の炭素が好ましい範囲である。非対称構造を持つ材料は、対称構造を有するものよりも良好な溶液プロセス性を有し得、これは、非対称材料のほうが再結晶する傾向が低くなり得るからである。溶液プロセッシングを受ける小分子の能力を増強するために、デンドリマー置換基が使用され得る。

【0030】

本発明の実施形態に従って製作されたデバイスは、バリア層を更に含んでいてよい。バリア層の1つの目的は、電極及び有機層を、水分、蒸気及び／又はガス等を含む環境における有害な種への損傷性暴露から保護することである。バリア層は、基板、電極の上、下若しくは隣に、又はエッジを含むデバイスの任意の他の部分の上に堆積し得る。バリア層は、単層又は多層を含んでいてよい。バリア層は、種々の公知の化学気相堆積技術によって形成され得、単相を有する組成物及び多相を有する組成物を含み得る。任意の適切な材料又は材料の組合せをバリア層に使用してよい。バリア層は、無機若しくは有機化合物又は両方を組み込み得る。好ましいバリア層は、参照によりその全体が本明細書に組み込まれる、米国特許第7,968,146号、PCT特許出願第PCT/US2007/023098号及び同第PCT/US2009/042829号において記述されている通りの、ポリマー材料及び非ポリマー材料の混合物を含む。「混合物」とみなされるためには、バリア層を構成する前記のポリマー及び非ポリマー材料は、同じ反応条件下で及び／又は同時に堆積されるべきである。ポリマー材料対非ポリマー材料の重量比は、95:5から5:95の範囲内となり得る。ポリマー材料及び非ポリマー材料は、同じ前駆体材料から作成され得る。一例において、ポリマー材料及び非ポリマー材料の混合物は、ポリマーケイ素及び無機ケイ素から本質的になる。

【0031】

本発明の実施形態に従って製作されたデバイスは、フラットパネルディスプレイ、コンピュータモニター、テレビ、掲示板、屋内若しくは屋外照明及び／又は信号送信用のライト、ヘッドアップディスプレイ、完全透明ディスプレイ、フレキシブルディスプレイ、レーザープリンター、電話、携帯電話、パーソナルデジタルアシスタント(PDA)、ラップトップコンピュータ、デジタルカメラ、カムコーダー、ファインダー、マイクロディスプレイ、3-Dディスプレイ、車、大面積壁、劇場又はスタジアムのスクリーン、或いは看板を含む多種多様な消費者製品に組み込まれ得る。パッシブマトリックス及びアクティブマトリックスを含む種々の制御機構を使用して、本発明に従って製作されたデバイスを制御することができる。デバイスの多くは、摂氏18度から摂氏30度、より好ましくは室温(摂氏20〜25度)等、ヒトに快適な温度範囲内での使用が意図されているが、この温度範囲外、例えば、摂氏−40度〜+80度で用いることもできる。

【0032】

本明細書において記述されている材料及び構造は、OLED以外のデバイスにおける用途を有し得る。例えば、有機太陽電池及び有機光検出器等の他の光電子デバイスが、該材料及び構造を用い得る。より一般的には、有機トランジスタ等の有機デバイスが、該材料及び構造を用い得る。

【0033】

ハロ、ハロゲン、アルキル、シクロアルキル、アルケニル、アルキニル、アラルキル、複素環式基、アリアル、芳香族基及びヘテロアリアル用語は当技術分野において公知であ

り、参照により本明細書に組み込まれるUS 7, 279, 704の31～32段において定義されている。

【0034】

本明細書において、「置換された」は、H以外の置換基が関連する炭素に結合していること示す。したがって、R²が一置換である場合には、R²の置換位置の1つがH以外でなければならない。同様に、R³が二置換である場合には、R³の置換位置の2つがH以外でなければならない。同様に、R²が無置換である場合には、R²は、全ての置換位置において水素である。

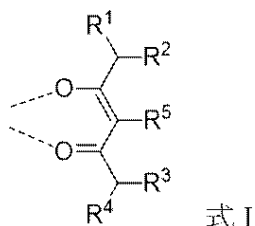
【0035】

1つの実施形態によれば、金属錯体のための新規な補助配位子が開示される。本発明者らは、これらの配位子を含有させると、予想外なことに、発光スペクトルを狭め、蒸着温度を低下させ、デバイス効率を改善することを見出した。

【0036】

1つの実施形態によれば、次の式Iを有する第1の配位子L¹を含み、前記第1の配位子L¹が、40超の原子番号を有する金属Mに配位している化合物が提供される。

【化3】



式中、R¹、R²、R³、及びR⁴は、独立して、アルキル、シクロアルキル、アリール、及びヘテロアリールからなる群から選択され；R¹、R²、R³、及びR⁴の少なくとも1つは、少なくとも2つのCを有し；R⁵は、水素、重水素、ハライド、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、アリールアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、アシル、カルボニル、カルボン酸、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルフォニル、ホスフィノ及びこれらの組み合わせからなる群から選択され；

2つの隣接する置換基が結合して環を形成してもよい。式I中の破線は、金属との結合点を示す。

【0037】

1つの実施形態においては、金属Mは、Irである。1つの実施形態においては、R⁵は、水素、重水素、アルキル、シクロアルキル及びこれらの組み合わせからなる群から選択される。1つの実施形態においては、R⁵は、水素である。

【0038】

他の実施形態においては、R¹、R²、R³、及びR⁴は、アルキル又はシクロアルキルである。1つの実施形態においては、R¹、R²、R³、及びR⁴は、メチル、エチル、プロピル、1-メチルエチル、ブチル、1-メチルプロピル、2-メチルプロピル、ペンチル、1-メチルブチル、2-メチルブチル、3-メチルブチル、1, 1-ジメチルプロピル、1, 2-ジメチルプロピル、2, 2-ジメチルプロピル、シクロペンチル、シクロヘキシル、部分的又は完全に重水素化されたこれらのバリエーション、及びこれらの組合せからなる群から選択される。

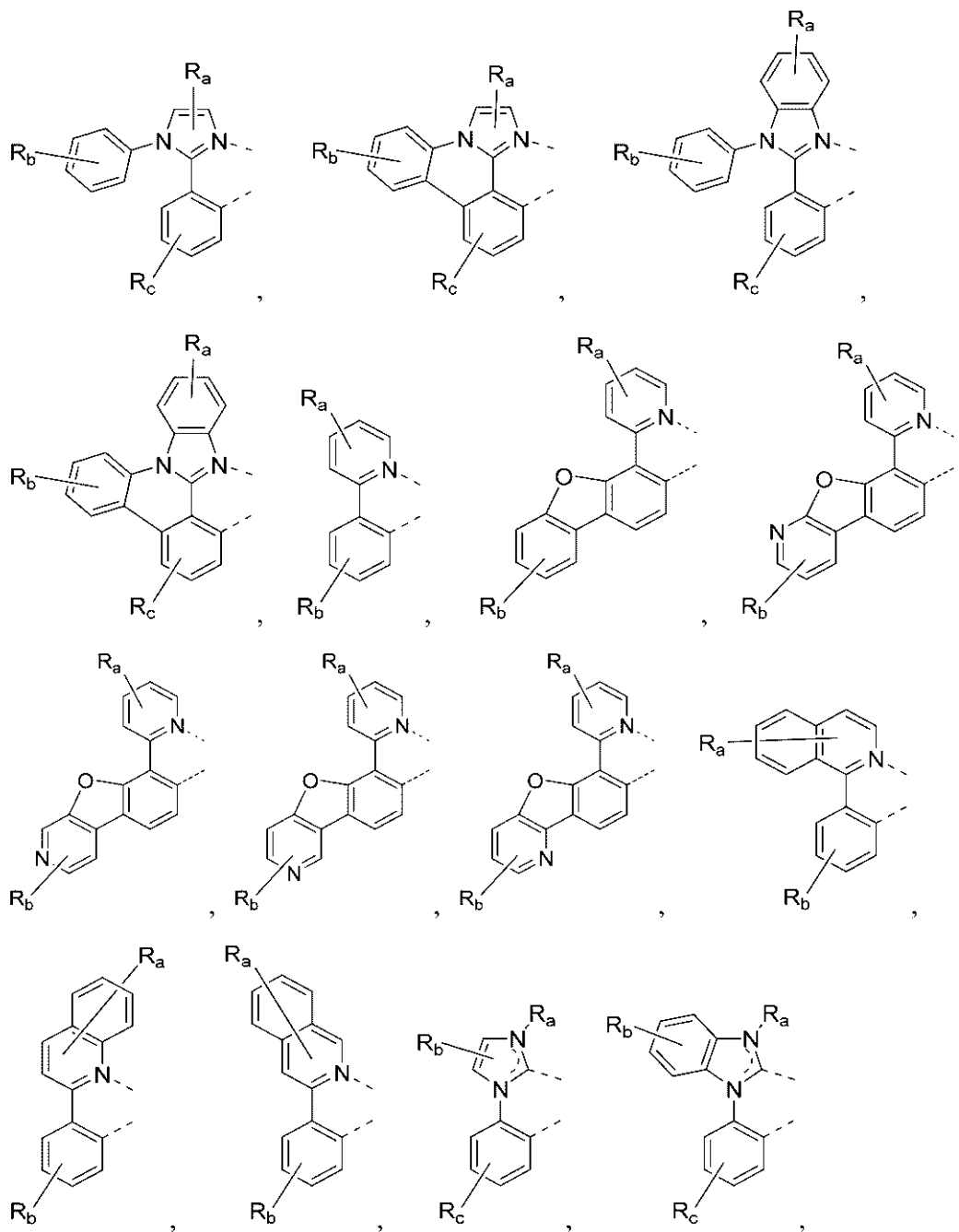
【0039】

1つの実施形態においては、前記化合物は、M(L¹)_x(L²)_y(L³)_zの式を有する；式中、L²は、第2の配位子であり、L³は、第3の配位子であり、L²及びL³は、同一であっても異なってもよく；xは、1、2、又は3であり；yは、0、1、又は2であり；zは、0、1、又は2であり；x + y + zは、金属Mの酸化状態である。

【0040】

1つの実施形態においては、L2及びL3は、独立して下記からなる群から選択される。

【化4】



10

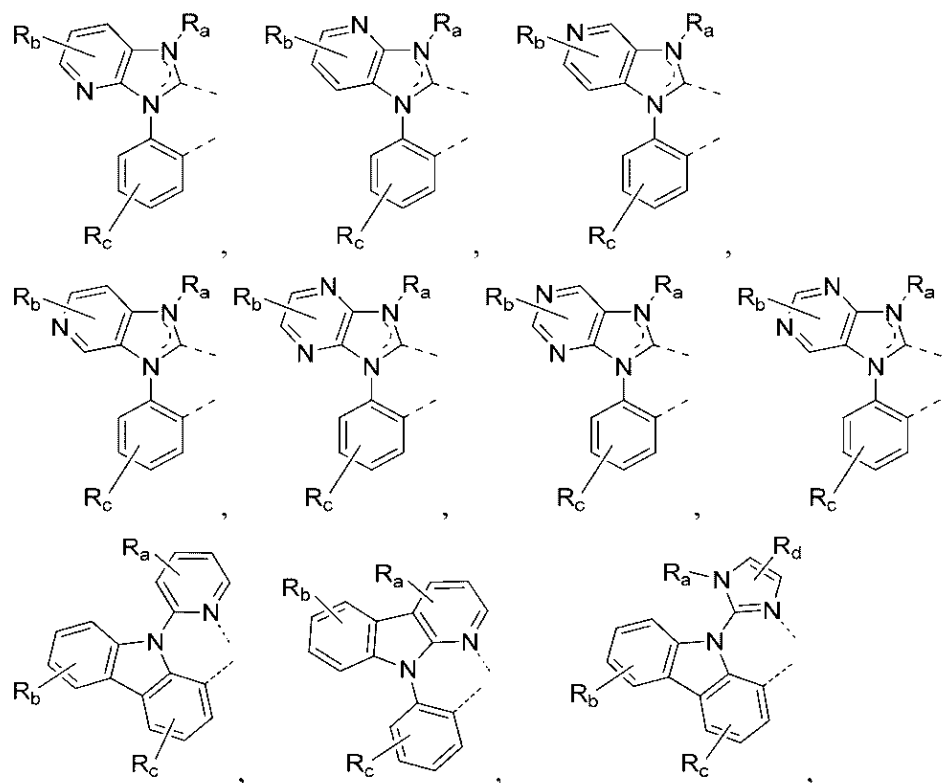
20

30

40

50

【化 5】



式中、 R_a 、 R_b 、 R_c 、及び R_d は、モノ、ジ、トリ、又はテトラ置換を表すか、無置換であり； R_a 、 R_b 、 R_c 、及び R_d は、独立して、水素、重水素、ハライド、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、アリールアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、アシル、カルボニル、カルボン酸、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルフォニル、ホスフィノ及びこれらの組み合わせからなる群から選択され； R_a 、 R_b 、 R_c 、及び R_d のうちの2つの隣接する置換基は、結合して縮合環又は多座配位子を形成してもよい。他の実施形態においては、 L_3 が L_2 と同一であり、前記化合物は、 $M(L_1)(L_2)_2$ の式を有する。

【0041】

前記化合物が $M(L_1)_x(L_2)_y(L_3)_z$ の式を有する他の実施形態においては、前記第1の配位子 L_1 は、下記からなる群から選択される。

10

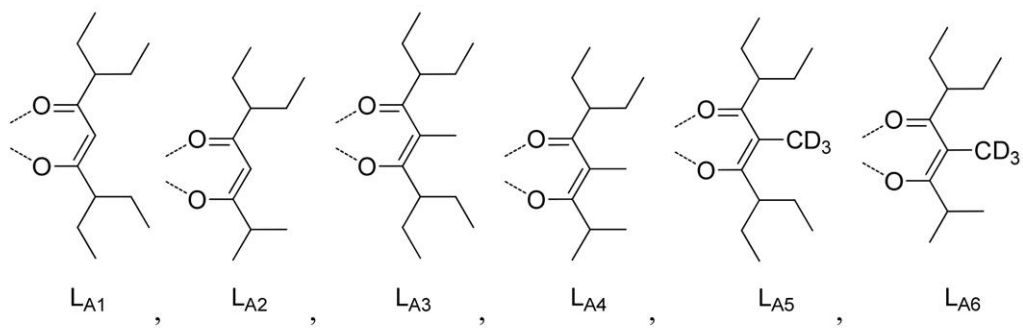
20

30

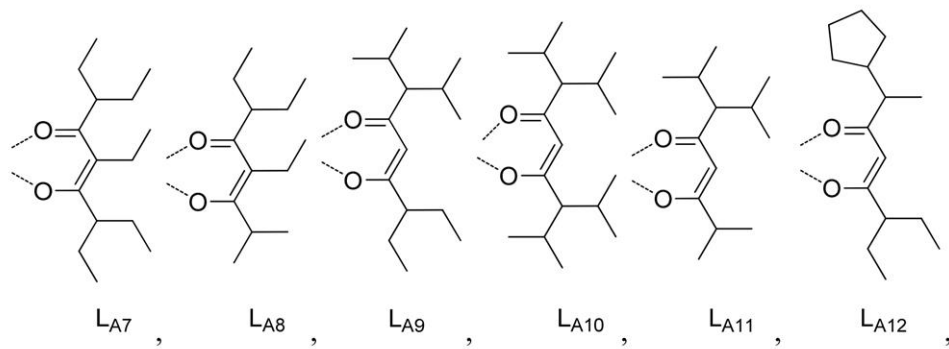
40

50

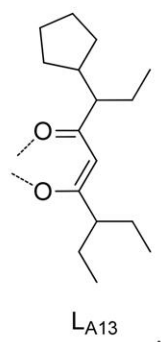
【化 6】



10



20



30

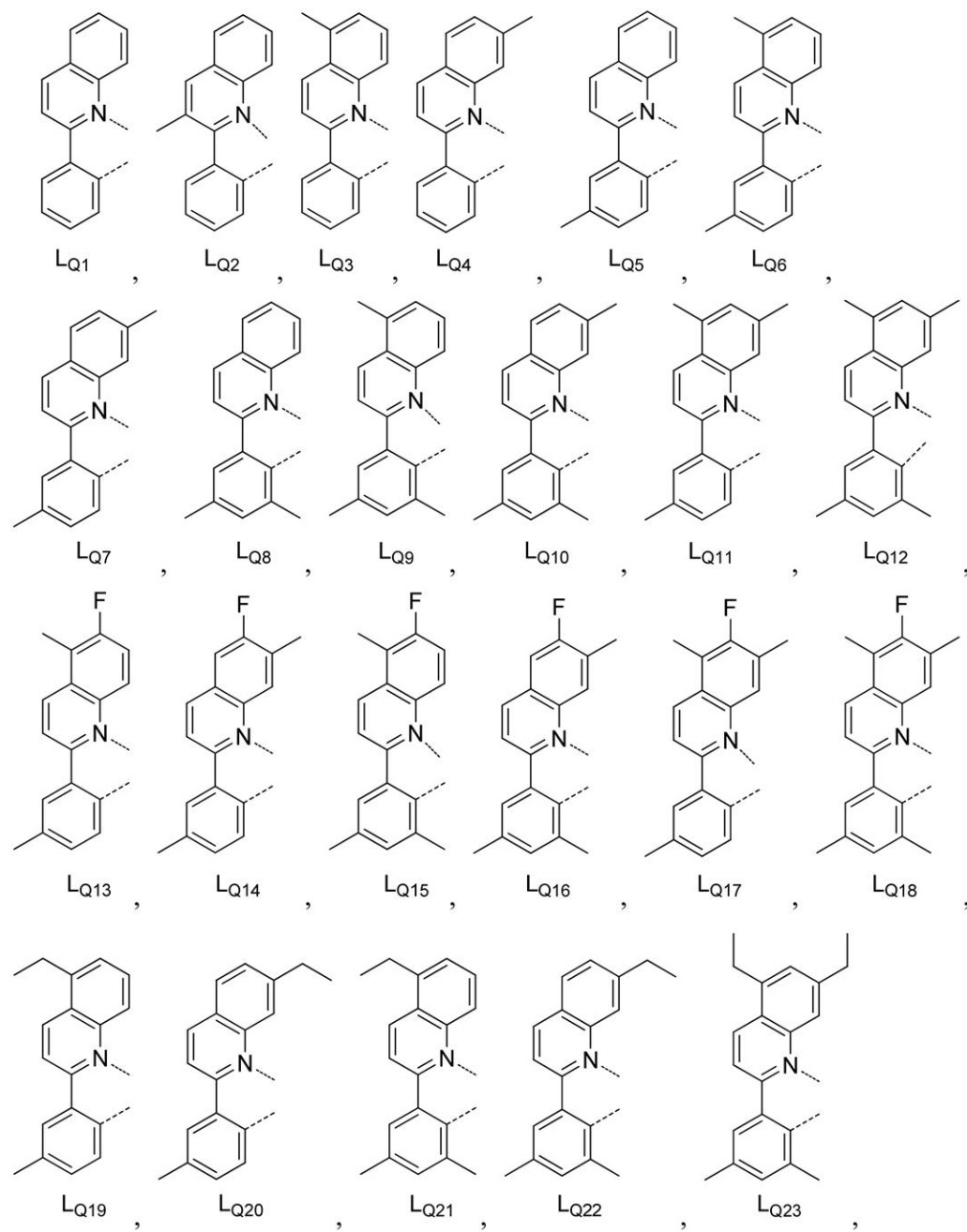
【 0 0 4 2】

1つの実施形態においては、前記第2の配位子 L^2 は、下記からなる群から選択される。

40

50

【化 7】



10

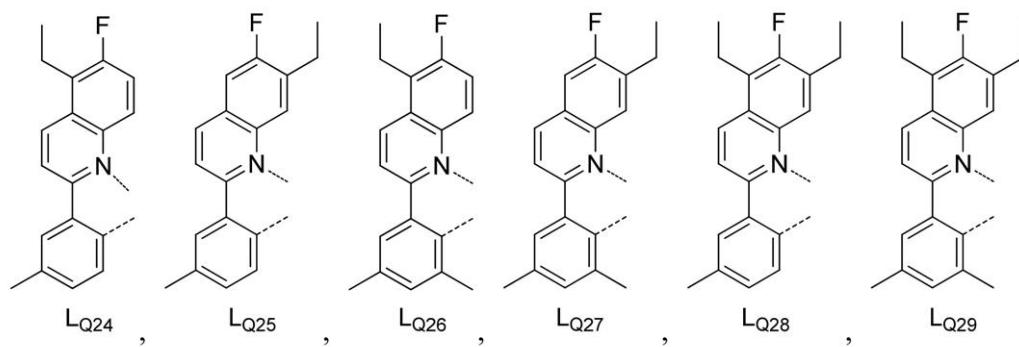
20

30

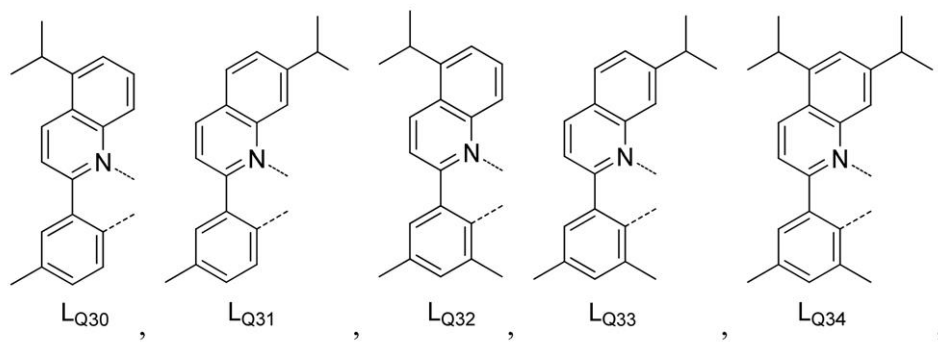
40

50

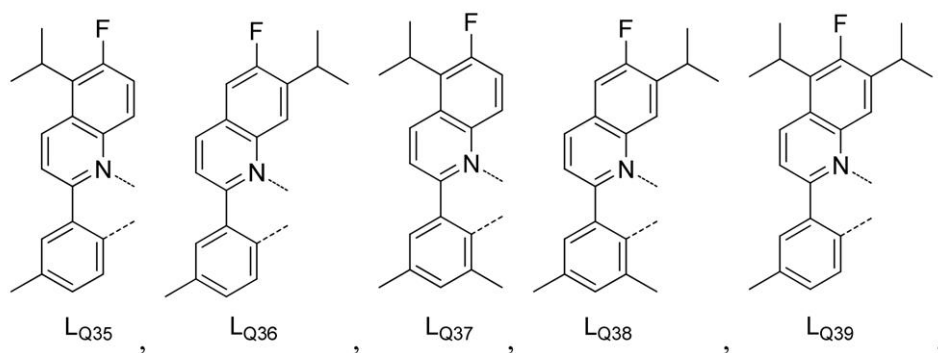
【化 8】



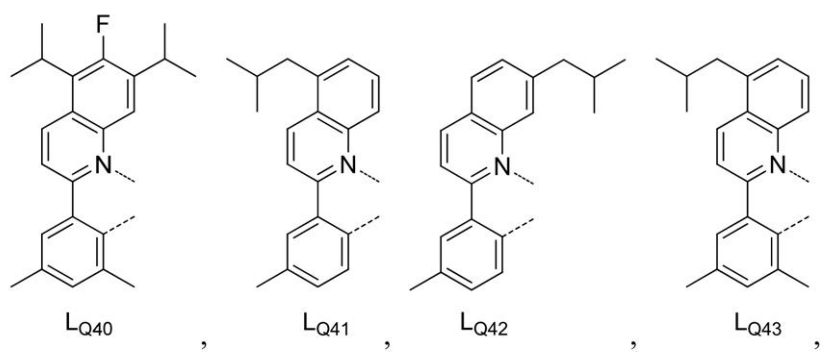
10



20



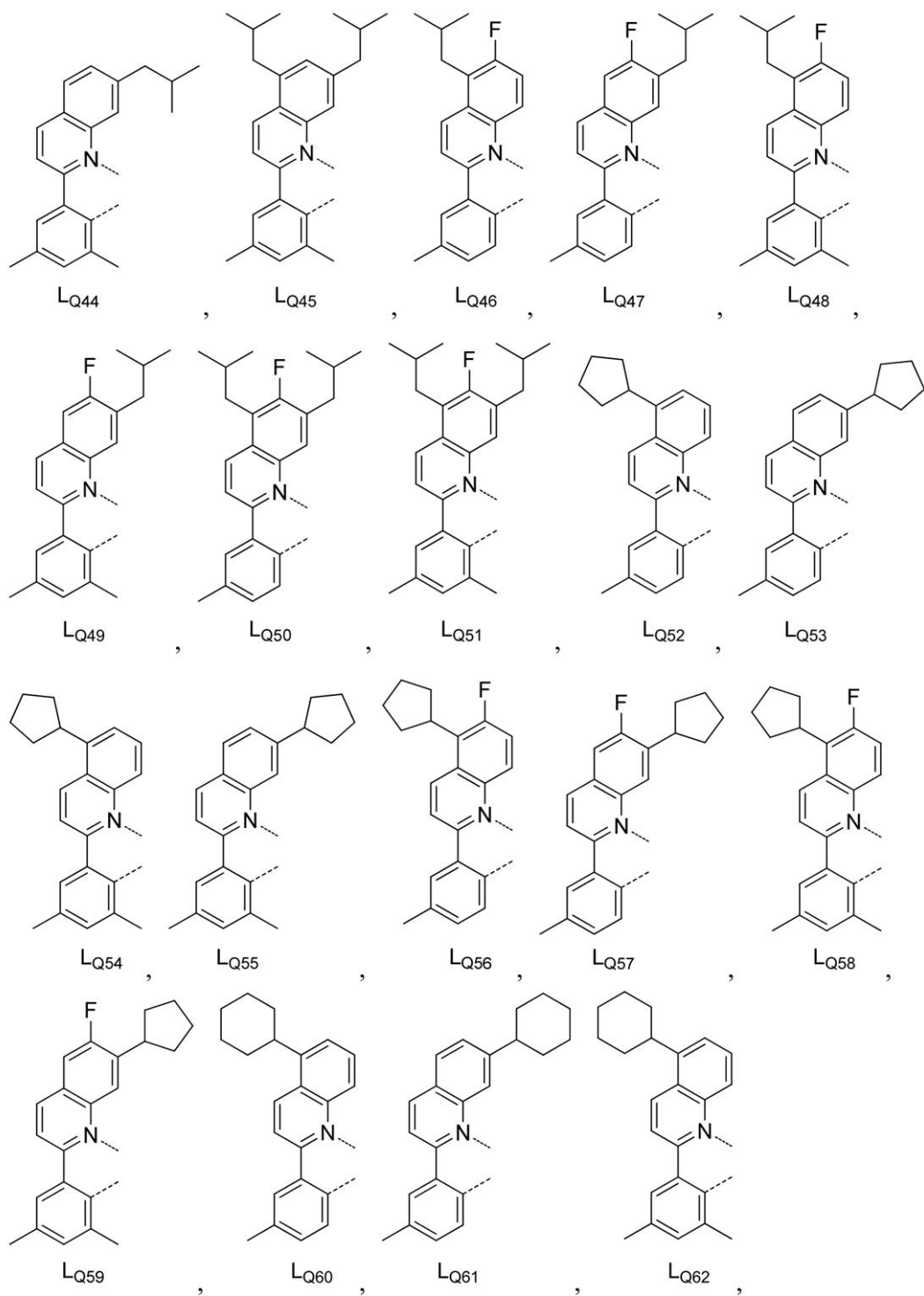
30



40

50

【化 9】



10

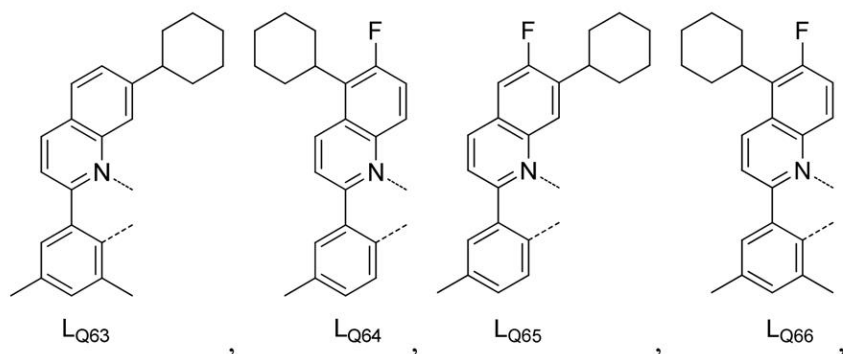
20

30

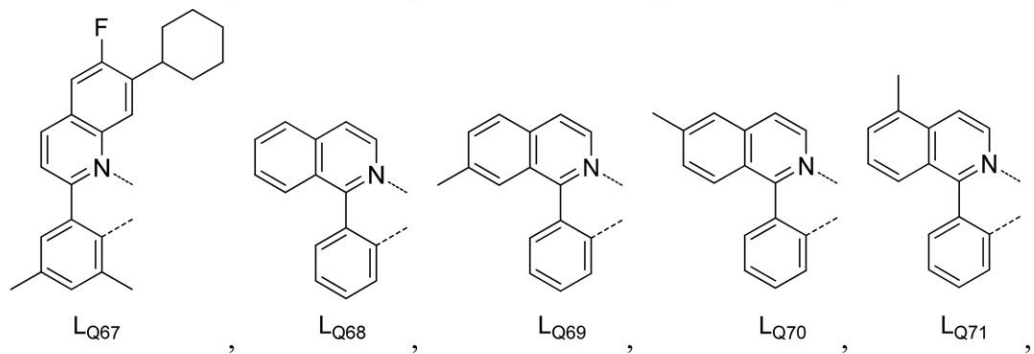
40

50

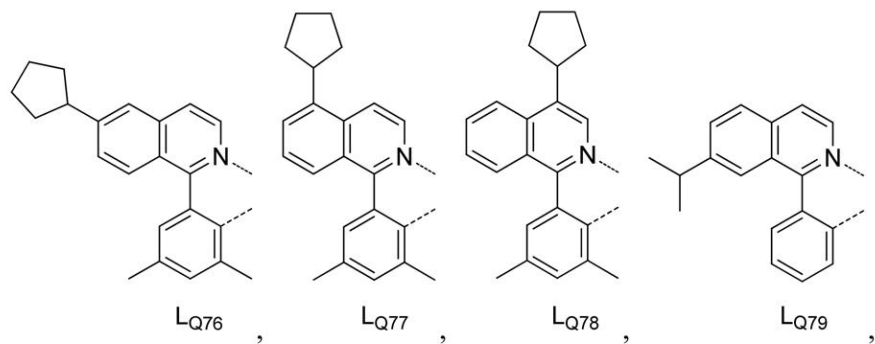
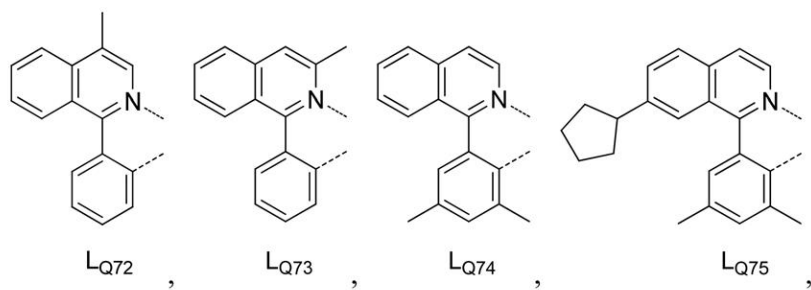
【化 10】



10



20

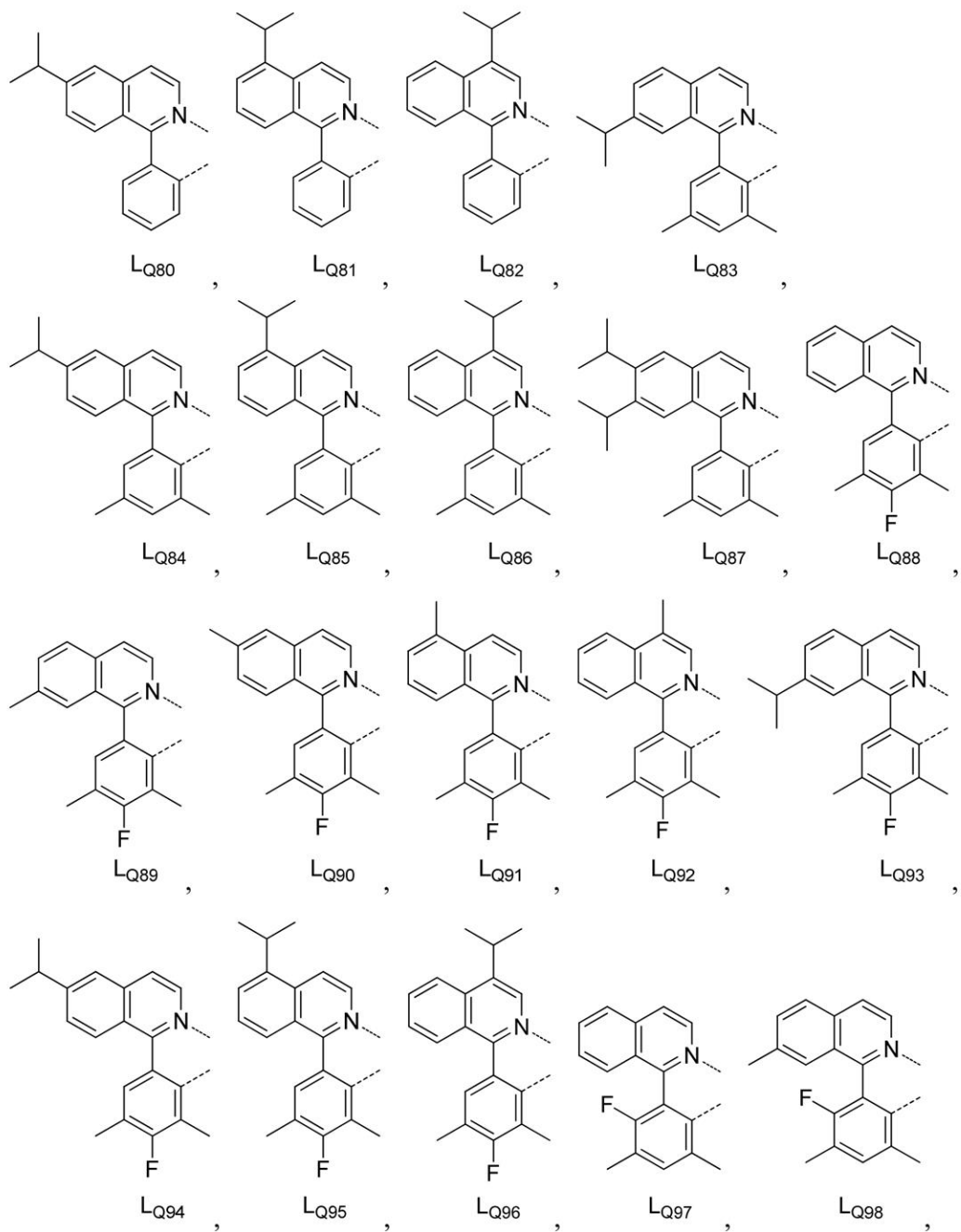


30

40

50

【化 1 1】



10

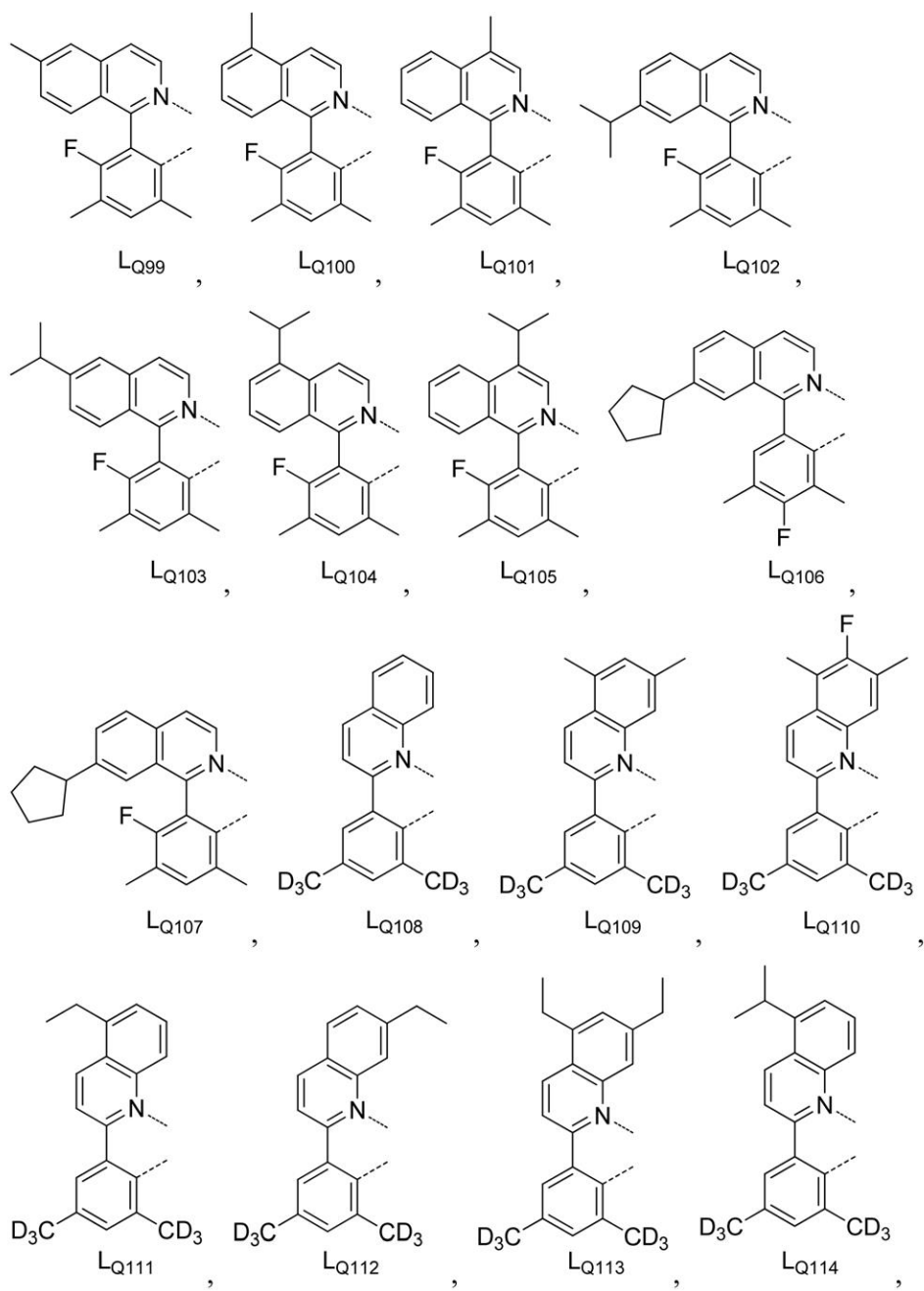
20

30

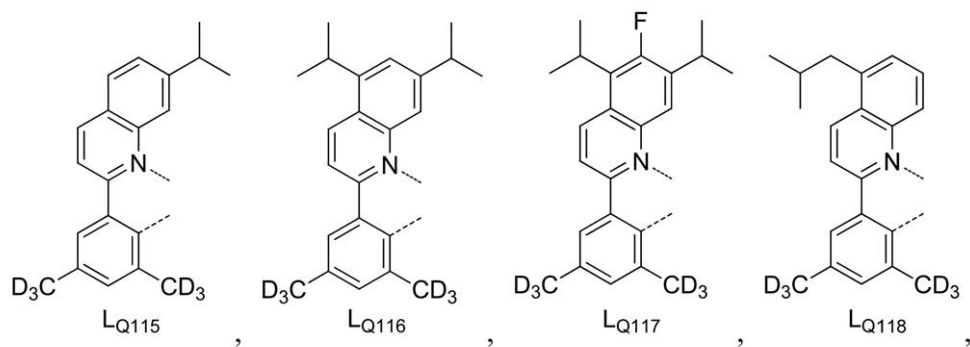
40

50

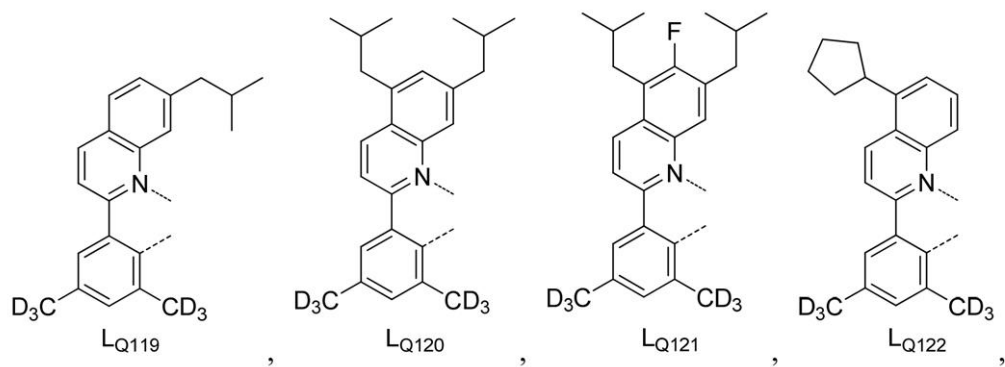
【化 1 2】



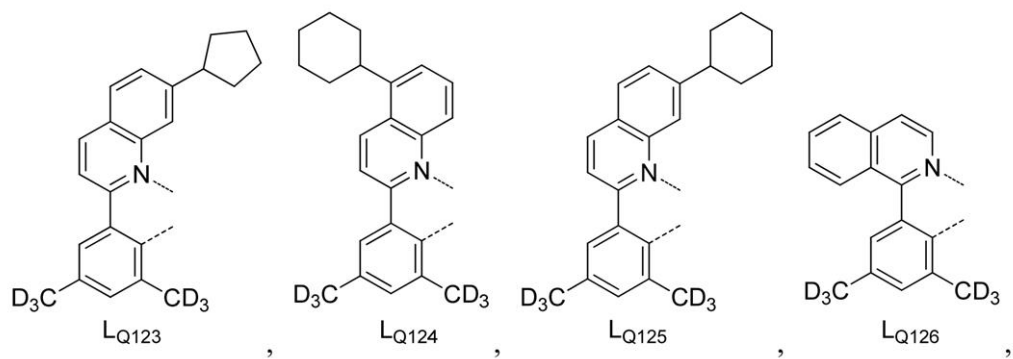
【化 1 3】



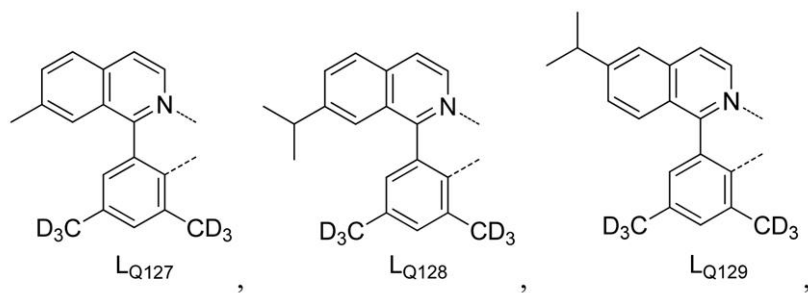
10



20



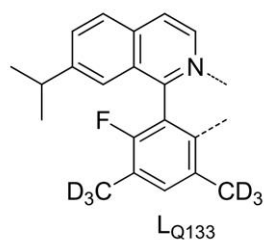
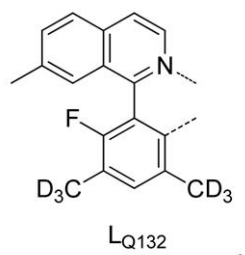
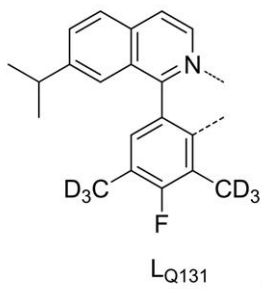
30



40

50

L_{Q130}



1つの実施形態においては、前記式M(L¹)(L²)₂を有する化合物は、下記表1に定義される化合物1～化合物1729からなる群から選択することができる。

50

【表 1 - 1】

化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²
1.	L _{A1}	L _{Q1}	578.	L _{A5}	L _{Q46}	1155.	L _{A9}	L _{Q91}
2.	L _{A1}	L _{Q2}	579.	L _{A5}	L _{Q47}	1156.	L _{A9}	L _{Q92}
3.	L _{A1}	L _{Q3}	580.	L _{A5}	L _{Q48}	1157.	L _{A9}	L _{Q93}
4.	L _{A1}	L _{Q4}	581.	L _{A5}	L _{Q49}	1158.	L _{A9}	L _{Q94}
5.	L _{A1}	L _{Q5}	582.	L _{A5}	L _{Q50}	1159.	L _{A9}	L _{Q95}
6.	L _{A1}	L _{Q6}	583.	L _{A5}	L _{Q51}	1160.	L _{A9}	L _{Q96}
7.	L _{A1}	L _{Q7}	584.	L _{A5}	L _{Q52}	1161.	L _{A9}	L _{Q97}
8.	L _{A1}	L _{Q8}	585.	L _{A5}	L _{Q53}	1162.	L _{A9}	L _{Q98}
9.	L _{A1}	L _{Q9}	586.	L _{A5}	L _{Q54}	1163.	L _{A9}	L _{Q99}
10.	L _{A1}	L _{Q10}	587.	L _{A5}	L _{Q55}	1164.	L _{A9}	L _{Q100}
11.	L _{A1}	L _{Q11}	588.	L _{A5}	L _{Q56}	1165.	L _{A9}	L _{Q101}
12.	L _{A1}	L _{Q12}	589.	L _{A5}	L _{Q57}	1166.	L _{A9}	L _{Q102}
13.	L _{A1}	L _{Q13}	590.	L _{A5}	L _{Q58}	1167.	L _{A9}	L _{Q103}
14.	L _{A1}	L _{Q14}	591.	L _{A5}	L _{Q59}	1168.	L _{A9}	L _{Q104}
15.	L _{A1}	L _{Q15}	592.	L _{A5}	L _{Q60}	1169.	L _{A9}	L _{Q105}
16.	L _{A1}	L _{Q16}	593.	L _{A5}	L _{Q61}	1170.	L _{A9}	L _{Q106}
17.	L _{A1}	L _{Q17}	594.	L _{A5}	L _{Q62}	1171.	L _{A9}	L _{Q107}
18.	L _{A1}	L _{Q18}	595.	L _{A5}	L _{Q63}	1172.	L _{A9}	L _{Q108}
19.	L _{A1}	L _{Q19}	596.	L _{A5}	L _{Q64}	1173.	L _{A9}	L _{Q109}
20.	L _{A1}	L _{Q20}	597.	L _{A5}	L _{Q65}	1174.	L _{A9}	L _{Q110}
21.	L _{A1}	L _{Q21}	598.	L _{A5}	L _{Q66}	1175.	L _{A9}	L _{Q111}
22.	L _{A1}	L _{Q22}	599.	L _{A5}	L _{Q67}	1176.	L _{A9}	L _{Q112}
23.	L _{A1}	L _{Q23}	600.	L _{A5}	L _{Q68}	1177.	L _{A9}	L _{Q113}
24.	L _{A1}	L _{Q24}	601.	L _{A5}	L _{Q69}	1178.	L _{A9}	L _{Q114}
25.	L _{A1}	L _{Q25}	602.	L _{A5}	L _{Q70}	1179.	L _{A9}	L _{Q115}
26.	L _{A1}	L _{Q26}	603.	L _{A5}	L _{Q71}	1180.	L _{A9}	L _{Q116}
27.	L _{A1}	L _{Q27}	604.	L _{A5}	L _{Q72}	1181.	L _{A9}	L _{Q117}
28.	L _{A1}	L _{Q28}	605.	L _{A5}	L _{Q73}	1182.	L _{A9}	L _{Q118}
29.	L _{A1}	L _{Q29}	606.	L _{A5}	L _{Q74}	1183.	L _{A9}	L _{Q119}
30.	L _{A1}	L _{Q30}	607.	L _{A5}	L _{Q75}	1184.	L _{A9}	L _{Q120}
31.	L _{A1}	L _{Q31}	608.	L _{A5}	L _{Q76}	1185.	L _{A9}	L _{Q121}
32.	L _{A1}	L _{Q32}	609.	L _{A5}	L _{Q77}	1186.	L _{A9}	L _{Q122}
33.	L _{A1}	L _{Q33}	610.	L _{A5}	L _{Q78}	1187.	L _{A9}	L _{Q123}
34.	L _{A1}	L _{Q34}	611.	L _{A5}	L _{Q79}	1188.	L _{A9}	L _{Q124}
35.	L _{A1}	L _{Q35}	612.	L _{A5}	L _{Q80}	1189.	L _{A9}	L _{Q125}
36.	L _{A1}	L _{Q36}	613.	L _{A5}	L _{Q81}	1190.	L _{A9}	L _{Q126}
37.	L _{A1}	L _{Q37}	614.	L _{A5}	L _{Q82}	1191.	L _{A9}	L _{Q127}
38.	L _{A1}	L _{Q38}	615.	L _{A5}	L _{Q83}	1192.	L _{A9}	L _{Q128}
39.	L _{A1}	L _{Q39}	616.	L _{A5}	L _{Q84}	1193.	L _{A9}	L _{Q129}
40.	L _{A1}	L _{Q40}	617.	L _{A5}	L _{Q85}	1194.	L _{A9}	L _{Q130}
41.	L _{A1}	L _{Q41}	618.	L _{A5}	L _{Q86}	1195.	L _{A9}	L _{Q131}
42.	L _{A1}	L _{Q42}	619.	L _{A5}	L _{Q87}	1196.	L _{A9}	L _{Q132}
43.	L _{A1}	L _{Q43}	620.	L _{A5}	L _{Q88}	1197.	L _{A9}	L _{Q133}
44.	L _{A1}	L _{Q44}	621.	L _{A5}	L _{Q89}	1198.	L _{A10}	L _{Q1}
45.	L _{A1}	L _{Q45}	622.	L _{A5}	L _{Q90}	1199.	L _{A10}	L _{Q2}
46.	L _{A1}	L _{Q46}	623.	L _{A5}	L _{Q91}	1200.	L _{A10}	L _{Q3}
47.	L _{A1}	L _{Q47}	624.	L _{A5}	L _{Q92}	1201.	L _{A10}	L _{Q4}
48.	L _{A1}	L _{Q48}	625.	L _{A5}	L _{Q93}	1202.	L _{A10}	L _{Q5}
49.	L _{A1}	L _{Q49}	626.	L _{A5}	L _{Q94}	1203.	L _{A10}	L _{Q6}

10

20

30

40

50

【表 1 - 2】

化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²
50.	L _{A1}	L _{Q50}	627.	L _{A5}	L _{Q95}	1204.	L _{A10}	L _{Q7}
51.	L _{A1}	L _{Q51}	628.	L _{A5}	L _{Q96}	1205.	L _{A10}	L _{Q8}
52.	L _{A1}	L _{Q52}	629.	L _{A5}	L _{Q97}	1206.	L _{A10}	L _{Q9}
53.	L _{A1}	L _{Q53}	630.	L _{A5}	L _{Q98}	1207.	L _{A10}	L _{Q10}
54.	L _{A1}	L _{Q54}	631.	L _{A5}	L _{Q99}	1208.	L _{A10}	L _{Q11}
55.	L _{A1}	L _{Q55}	632.	L _{A5}	L _{Q100}	1209.	L _{A10}	L _{Q12}
56.	L _{A1}	L _{Q56}	633.	L _{A5}	L _{Q101}	1210.	L _{A10}	L _{Q13}
57.	L _{A1}	L _{Q57}	634.	L _{A5}	L _{Q102}	1211.	L _{A10}	L _{Q14}
58.	L _{A1}	L _{Q58}	635.	L _{A5}	L _{Q103}	1212.	L _{A10}	L _{Q15}
59.	L _{A1}	L _{Q59}	636.	L _{A5}	L _{Q104}	1213.	L _{A10}	L _{Q16}
60.	L _{A1}	L _{Q60}	637.	L _{A5}	L _{Q105}	1214.	L _{A10}	L _{Q17}
61.	L _{A1}	L _{Q61}	638.	L _{A5}	L _{Q106}	1215.	L _{A10}	L _{Q18}
62.	L _{A1}	L _{Q62}	639.	L _{A5}	L _{Q107}	1216.	L _{A10}	L _{Q19}
63.	L _{A1}	L _{Q63}	640.	L _{A5}	L _{Q108}	1217.	L _{A10}	L _{Q20}
64.	L _{A1}	L _{Q64}	641.	L _{A5}	L _{Q109}	1218.	L _{A10}	L _{Q21}
65.	L _{A1}	L _{Q65}	642.	L _{A5}	L _{Q110}	1219.	L _{A10}	L _{Q22}
66.	L _{A1}	L _{Q66}	643.	L _{A5}	L _{Q111}	1220.	L _{A10}	L _{Q23}
67.	L _{A1}	L _{Q67}	644.	L _{A5}	L _{Q112}	1221.	L _{A10}	L _{Q24}
68.	L _{A1}	L _{Q68}	645.	L _{A5}	L _{Q113}	1222.	L _{A10}	L _{Q25}
69.	L _{A1}	L _{Q69}	646.	L _{A5}	L _{Q114}	1223.	L _{A10}	L _{Q26}
70.	L _{A1}	L _{Q70}	647.	L _{A5}	L _{Q115}	1224.	L _{A10}	L _{Q27}
71.	L _{A1}	L _{Q71}	648.	L _{A5}	L _{Q116}	1225.	L _{A10}	L _{Q28}
72.	L _{A1}	L _{Q72}	649.	L _{A5}	L _{Q117}	1226.	L _{A10}	L _{Q29}
73.	L _{A1}	L _{Q73}	650.	L _{A5}	L _{Q118}	1227.	L _{A10}	L _{Q30}
74.	L _{A1}	L _{Q74}	651.	L _{A5}	L _{Q119}	1228.	L _{A10}	L _{Q31}
75.	L _{A1}	L _{Q75}	652.	L _{A5}	L _{Q120}	1229.	L _{A10}	L _{Q32}
76.	L _{A1}	L _{Q76}	653.	L _{A5}	L _{Q121}	1230.	L _{A10}	L _{Q33}
77.	L _{A1}	L _{Q77}	654.	L _{A5}	L _{Q122}	1231.	L _{A10}	L _{Q34}
78.	L _{A1}	L _{Q78}	655.	L _{A5}	L _{Q123}	1232.	L _{A10}	L _{Q35}
79.	L _{A1}	L _{Q79}	656.	L _{A5}	L _{Q124}	1233.	L _{A10}	L _{Q36}
80.	L _{A1}	L _{Q80}	657.	L _{A5}	L _{Q125}	1234.	L _{A10}	L _{Q37}
81.	L _{A1}	L _{Q81}	658.	L _{A5}	L _{Q126}	1235.	L _{A10}	L _{Q38}
82.	L _{A1}	L _{Q82}	659.	L _{A5}	L _{Q127}	1236.	L _{A10}	L _{Q39}
83.	L _{A1}	L _{Q83}	660.	L _{A5}	L _{Q128}	1237.	L _{A10}	L _{Q40}
84.	L _{A1}	L _{Q84}	661.	L _{A5}	L _{Q129}	1238.	L _{A10}	L _{Q41}
85.	L _{A1}	L _{Q85}	662.	L _{A5}	L _{Q130}	1239.	L _{A10}	L _{Q42}
86.	L _{A1}	L _{Q86}	663.	L _{A5}	L _{Q131}	1240.	L _{A10}	L _{Q43}
87.	L _{A1}	L _{Q87}	664.	L _{A5}	L _{Q132}	1241.	L _{A10}	L _{Q44}
88.	L _{A1}	L _{Q88}	665.	L _{A5}	L _{Q133}	1242.	L _{A10}	L _{Q45}
89.	L _{A1}	L _{Q89}	666.	L _{A6}	L _{Q1}	1243.	L _{A10}	L _{Q46}
90.	L _{A1}	L _{Q90}	667.	L _{A6}	L _{Q2}	1244.	L _{A10}	L _{Q47}
91.	L _{A1}	L _{Q91}	668.	L _{A6}	L _{Q3}	1245.	L _{A10}	L _{Q48}
92.	L _{A1}	L _{Q92}	669.	L _{A6}	L _{Q4}	1246.	L _{A10}	L _{Q49}
93.	L _{A1}	L _{Q93}	670.	L _{A6}	L _{Q5}	1247.	L _{A10}	L _{Q50}
94.	L _{A1}	L _{Q94}	671.	L _{A6}	L _{Q6}	1248.	L _{A10}	L _{Q51}
95.	L _{A1}	L _{Q95}	672.	L _{A6}	L _{Q7}	1249.	L _{A10}	L _{Q52}
96.	L _{A1}	L _{Q96}	673.	L _{A6}	L _{Q8}	1250.	L _{A10}	L _{Q53}
97.	L _{A1}	L _{Q97}	674.	L _{A6}	L _{Q9}	1251.	L _{A10}	L _{Q54}
98.	L _{A1}	L _{Q98}	675.	L _{A6}	L _{Q10}	1252.	L _{A10}	L _{Q55}

10

20

30

40

50

【表 1 - 3】

化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²
99.	L _{A1}	L _{Q99}	676.	L _{A6}	L _{Q11}	1253.	L _{A10}	L _{Q56}
100.	L _{A1}	L _{Q100}	677.	L _{A6}	L _{Q12}	1254.	L _{A10}	L _{Q57}
101.	L _{A1}	L _{Q101}	678.	L _{A6}	L _{Q13}	1255.	L _{A10}	L _{Q58}
102.	L _{A1}	L _{Q102}	679.	L _{A6}	L _{Q14}	1256.	L _{A10}	L _{Q59}
103.	L _{A1}	L _{Q103}	680.	L _{A6}	L _{Q15}	1257.	L _{A10}	L _{Q60}
104.	L _{A1}	L _{Q104}	681.	L _{A6}	L _{Q16}	1258.	L _{A10}	L _{Q61}
105.	L _{A1}	L _{Q105}	682.	L _{A6}	L _{Q17}	1259.	L _{A10}	L _{Q62}
106.	L _{A1}	L _{Q106}	683.	L _{A6}	L _{Q18}	1260.	L _{A10}	L _{Q63}
107.	L _{A1}	L _{Q107}	684.	L _{A6}	L _{Q19}	1261.	L _{A10}	L _{Q64}
108.	L _{A1}	L _{Q108}	685.	L _{A6}	L _{Q20}	1262.	L _{A10}	L _{Q65}
109.	L _{A1}	L _{Q109}	686.	L _{A6}	L _{Q21}	1263.	L _{A10}	L _{Q66}
110.	L _{A1}	L _{Q110}	687.	L _{A6}	L _{Q22}	1264.	L _{A10}	L _{Q67}
111.	L _{A1}	L _{Q111}	688.	L _{A6}	L _{Q23}	1265.	L _{A10}	L _{Q68}
112.	L _{A1}	L _{Q112}	689.	L _{A6}	L _{Q24}	1266.	L _{A10}	L _{Q69}
113.	L _{A1}	L _{Q113}	690.	L _{A6}	L _{Q25}	1267.	L _{A10}	L _{Q70}
114.	L _{A1}	L _{Q114}	691.	L _{A6}	L _{Q26}	1268.	L _{A10}	L _{Q71}
115.	L _{A1}	L _{Q115}	692.	L _{A6}	L _{Q27}	1269.	L _{A10}	L _{Q72}
116.	L _{A1}	L _{Q116}	693.	L _{A6}	L _{Q28}	1270.	L _{A10}	L _{Q73}
117.	L _{A1}	L _{Q117}	694.	L _{A6}	L _{Q29}	1271.	L _{A10}	L _{Q74}
118.	L _{A1}	L _{Q118}	695.	L _{A6}	L _{Q30}	1272.	L _{A10}	L _{Q75}
119.	L _{A1}	L _{Q119}	696.	L _{A6}	L _{Q31}	1273.	L _{A10}	L _{Q76}
120.	L _{A1}	L _{Q120}	697.	L _{A6}	L _{Q32}	1274.	L _{A10}	L _{Q77}
121.	L _{A1}	L _{Q121}	698.	L _{A6}	L _{Q33}	1275.	L _{A10}	L _{Q78}
122.	L _{A1}	L _{Q122}	699.	L _{A6}	L _{Q34}	1276.	L _{A10}	L _{Q79}
123.	L _{A1}	L _{Q123}	700.	L _{A6}	L _{Q35}	1277.	L _{A10}	L _{Q80}
124.	L _{A1}	L _{Q124}	701.	L _{A6}	L _{Q36}	1278.	L _{A10}	L _{Q81}
125.	L _{A1}	L _{Q125}	702.	L _{A6}	L _{Q37}	1279.	L _{A10}	L _{Q82}
126.	L _{A1}	L _{Q126}	703.	L _{A6}	L _{Q38}	1280.	L _{A10}	L _{Q83}
127.	L _{A1}	L _{Q127}	704.	L _{A6}	L _{Q39}	1281.	L _{A10}	L _{Q84}
128.	L _{A1}	L _{Q128}	705.	L _{A6}	L _{Q40}	1282.	L _{A10}	L _{Q85}
129.	L _{A1}	L _{Q129}	706.	L _{A6}	L _{Q41}	1283.	L _{A10}	L _{Q86}
130.	L _{A1}	L _{Q130}	707.	L _{A6}	L _{Q42}	1284.	L _{A10}	L _{Q87}
131.	L _{A1}	L _{Q131}	708.	L _{A6}	L _{Q43}	1285.	L _{A10}	L _{Q88}
132.	L _{A1}	L _{Q132}	709.	L _{A6}	L _{Q44}	1286.	L _{A10}	L _{Q89}
133.	L _{A1}	L _{Q133}	710.	L _{A6}	L _{Q45}	1287.	L _{A10}	L _{Q90}
134.	L _{A2}	L _{Q1}	711.	L _{A6}	L _{Q46}	1288.	L _{A10}	L _{Q91}
135.	L _{A2}	L _{Q2}	712.	L _{A6}	L _{Q47}	1289.	L _{A10}	L _{Q92}
136.	L _{A2}	L _{Q3}	713.	L _{A6}	L _{Q48}	1290.	L _{A10}	L _{Q93}
137.	L _{A2}	L _{Q4}	714.	L _{A6}	L _{Q49}	1291.	L _{A10}	L _{Q94}
138.	L _{A2}	L _{Q5}	715.	L _{A6}	L _{Q50}	1292.	L _{A10}	L _{Q95}
139.	L _{A2}	L _{Q6}	716.	L _{A6}	L _{Q51}	1293.	L _{A10}	L _{Q96}
140.	L _{A2}	L _{Q7}	717.	L _{A6}	L _{Q52}	1294.	L _{A10}	L _{Q97}
141.	L _{A2}	L _{Q8}	718.	L _{A6}	L _{Q53}	1295.	L _{A10}	L _{Q98}
142.	L _{A2}	L _{Q9}	719.	L _{A6}	L _{Q54}	1296.	L _{A10}	L _{Q99}
143.	L _{A2}	L _{Q10}	720.	L _{A6}	L _{Q55}	1297.	L _{A10}	L _{Q100}
144.	L _{A2}	L _{Q11}	721.	L _{A6}	L _{Q56}	1298.	L _{A10}	L _{Q101}
145.	L _{A2}	L _{Q12}	722.	L _{A6}	L _{Q57}	1299.	L _{A10}	L _{Q102}
146.	L _{A2}	L _{Q13}	723.	L _{A6}	L _{Q58}	1300.	L _{A10}	L _{Q103}
147.	L _{A2}	L _{Q14}	724.	L _{A6}	L _{Q59}	1301.	L _{A10}	L _{Q104}

10

20

30

40

50

【表 1 - 4】

化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²
148.	L _{A2}	L _{Q15}	725.	L _{A6}	L _{Q60}	1302.	L _{A10}	L _{Q105}
149.	L _{A2}	L _{Q16}	726.	L _{A6}	L _{Q61}	1303.	L _{A10}	L _{Q106}
150.	L _{A2}	L _{Q17}	727.	L _{A6}	L _{Q62}	1304.	L _{A10}	L _{Q107}
151.	L _{A2}	L _{Q18}	728.	L _{A6}	L _{Q63}	1305.	L _{A10}	L _{Q108}
152.	L _{A2}	L _{Q19}	729.	L _{A6}	L _{Q64}	1306.	L _{A10}	L _{Q109}
153.	L _{A2}	L _{Q20}	730.	L _{A6}	L _{Q65}	1307.	L _{A10}	L _{Q110}
154.	L _{A2}	L _{Q21}	731.	L _{A6}	L _{Q66}	1308.	L _{A10}	L _{Q111}
155.	L _{A2}	L _{Q22}	732.	L _{A6}	L _{Q67}	1309.	L _{A10}	L _{Q112}
156.	L _{A2}	L _{Q23}	733.	L _{A6}	L _{Q68}	1310.	L _{A10}	L _{Q113}
157.	L _{A2}	L _{Q24}	734.	L _{A6}	L _{Q69}	1311.	L _{A10}	L _{Q114}
158.	L _{A2}	L _{Q25}	735.	L _{A6}	L _{Q70}	1312.	L _{A10}	L _{Q115}
159.	L _{A2}	L _{Q26}	736.	L _{A6}	L _{Q71}	1313.	L _{A10}	L _{Q116}
160.	L _{A2}	L _{Q27}	737.	L _{A6}	L _{Q72}	1314.	L _{A10}	L _{Q117}
161.	L _{A2}	L _{Q28}	738.	L _{A6}	L _{Q73}	1315.	L _{A10}	L _{Q118}
162.	L _{A2}	L _{Q29}	739.	L _{A6}	L _{Q74}	1316.	L _{A10}	L _{Q119}
163.	L _{A2}	L _{Q30}	740.	L _{A6}	L _{Q75}	1317.	L _{A10}	L _{Q120}
164.	L _{A2}	L _{Q31}	741.	L _{A6}	L _{Q76}	1318.	L _{A10}	L _{Q121}
165.	L _{A2}	L _{Q32}	742.	L _{A6}	L _{Q77}	1319.	L _{A10}	L _{Q122}
166.	L _{A2}	L _{Q33}	743.	L _{A6}	L _{Q78}	1320.	L _{A10}	L _{Q123}
167.	L _{A2}	L _{Q34}	744.	L _{A6}	L _{Q79}	1321.	L _{A10}	L _{Q124}
168.	L _{A2}	L _{Q35}	745.	L _{A6}	L _{Q80}	1322.	L _{A10}	L _{Q125}
169.	L _{A2}	L _{Q36}	746.	L _{A6}	L _{Q81}	1323.	L _{A10}	L _{Q126}
170.	L _{A2}	L _{Q37}	747.	L _{A6}	L _{Q82}	1324.	L _{A10}	L _{Q127}
171.	L _{A2}	L _{Q38}	748.	L _{A6}	L _{Q83}	1325.	L _{A10}	L _{Q128}
172.	L _{A2}	L _{Q39}	749.	L _{A6}	L _{Q84}	1326.	L _{A10}	L _{Q129}
173.	L _{A2}	L _{Q40}	750.	L _{A6}	L _{Q85}	1327.	L _{A10}	L _{Q130}
174.	L _{A2}	L _{Q41}	751.	L _{A6}	L _{Q86}	1328.	L _{A10}	L _{Q131}
175.	L _{A2}	L _{Q42}	752.	L _{A6}	L _{Q87}	1329.	L _{A10}	L _{Q132}
176.	L _{A2}	L _{Q43}	753.	L _{A6}	L _{Q88}	1330.	L _{A10}	L _{Q133}
177.	L _{A2}	L _{Q44}	754.	L _{A6}	L _{Q89}	1331.	L _{A11}	L _{Q1}
178.	L _{A2}	L _{Q45}	755.	L _{A6}	L _{Q90}	1332.	L _{A11}	L _{Q2}
179.	L _{A2}	L _{Q46}	756.	L _{A6}	L _{Q91}	1333.	L _{A11}	L _{Q3}
180.	L _{A2}	L _{Q47}	757.	L _{A6}	L _{Q92}	1334.	L _{A11}	L _{Q4}
181.	L _{A2}	L _{Q48}	758.	L _{A6}	L _{Q93}	1335.	L _{A11}	L _{Q5}
182.	L _{A2}	L _{Q49}	759.	L _{A6}	L _{Q94}	1336.	L _{A11}	L _{Q6}
183.	L _{A2}	L _{Q50}	760.	L _{A6}	L _{Q95}	1337.	L _{A11}	L _{Q7}
184.	L _{A2}	L _{Q51}	761.	L _{A6}	L _{Q96}	1338.	L _{A11}	L _{Q8}
185.	L _{A2}	L _{Q52}	762.	L _{A6}	L _{Q97}	1339.	L _{A11}	L _{Q9}
186.	L _{A2}	L _{Q53}	763.	L _{A6}	L _{Q98}	1340.	L _{A11}	L _{Q10}
187.	L _{A2}	L _{Q54}	764.	L _{A6}	L _{Q99}	1341.	L _{A11}	L _{Q11}
188.	L _{A2}	L _{Q55}	765.	L _{A6}	L _{Q100}	1342.	L _{A11}	L _{Q12}
189.	L _{A2}	L _{Q56}	766.	L _{A6}	L _{Q101}	1343.	L _{A11}	L _{Q13}
190.	L _{A2}	L _{Q57}	767.	L _{A6}	L _{Q102}	1344.	L _{A11}	L _{Q14}
191.	L _{A2}	L _{Q58}	768.	L _{A6}	L _{Q103}	1345.	L _{A11}	L _{Q15}
192.	L _{A2}	L _{Q59}	769.	L _{A6}	L _{Q104}	1346.	L _{A11}	L _{Q16}
193.	L _{A2}	L _{Q60}	770.	L _{A6}	L _{Q105}	1347.	L _{A11}	L _{Q17}
194.	L _{A2}	L _{Q61}	771.	L _{A6}	L _{Q106}	1348.	L _{A11}	L _{Q18}
195.	L _{A2}	L _{Q62}	772.	L _{A6}	L _{Q107}	1349.	L _{A11}	L _{Q19}
196.	L _{A2}	L _{Q63}	773.	L _{A6}	L _{Q108}	1350.	L _{A11}	L _{Q20}

10

20

30

40

50

【表 1 - 5】

化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²
197.	L _{A2}	L _{Q64}	774.	L _{A6}	L _{Q109}	1351.	L _{A11}	L _{Q21}
198.	L _{A2}	L _{Q65}	775.	L _{A6}	L _{Q110}	1352.	L _{A11}	L _{Q22}
199.	L _{A2}	L _{Q66}	776.	L _{A6}	L _{Q111}	1353.	L _{A11}	L _{Q23}
200.	L _{A2}	L _{Q67}	777.	L _{A6}	L _{Q112}	1354.	L _{A11}	L _{Q24}
201.	L _{A2}	L _{Q68}	778.	L _{A6}	L _{Q113}	1355.	L _{A11}	L _{Q25}
202.	L _{A2}	L _{Q69}	779.	L _{A6}	L _{Q114}	1356.	L _{A11}	L _{Q26}
203.	L _{A2}	L _{Q70}	780.	L _{A6}	L _{Q115}	1357.	L _{A11}	L _{Q27}
204.	L _{A2}	L _{Q71}	781.	L _{A6}	L _{Q116}	1358.	L _{A11}	L _{Q28}
205.	L _{A2}	L _{Q72}	782.	L _{A6}	L _{Q117}	1359.	L _{A11}	L _{Q29}
206.	L _{A2}	L _{Q73}	783.	L _{A6}	L _{Q118}	1360.	L _{A11}	L _{Q30}
207.	L _{A2}	L _{Q74}	784.	L _{A6}	L _{Q119}	1361.	L _{A11}	L _{Q31}
208.	L _{A2}	L _{Q75}	785.	L _{A6}	L _{Q120}	1362.	L _{A11}	L _{Q32}
209.	L _{A2}	L _{Q76}	786.	L _{A6}	L _{Q121}	1363.	L _{A11}	L _{Q33}
210.	L _{A2}	L _{Q77}	787.	L _{A6}	L _{Q122}	1364.	L _{A11}	L _{Q34}
211.	L _{A2}	L _{Q78}	788.	L _{A6}	L _{Q123}	1365.	L _{A11}	L _{Q35}
212.	L _{A2}	L _{Q79}	789.	L _{A6}	L _{Q124}	1366.	L _{A11}	L _{Q36}
213.	L _{A2}	L _{Q80}	790.	L _{A6}	L _{Q125}	1367.	L _{A11}	L _{Q37}
214.	L _{A2}	L _{Q81}	791.	L _{A6}	L _{Q126}	1368.	L _{A11}	L _{Q38}
215.	L _{A2}	L _{Q82}	792.	L _{A6}	L _{Q127}	1369.	L _{A11}	L _{Q39}
216.	L _{A2}	L _{Q83}	793.	L _{A6}	L _{Q128}	1370.	L _{A11}	L _{Q40}
217.	L _{A2}	L _{Q84}	794.	L _{A6}	L _{Q129}	1371.	L _{A11}	L _{Q41}
218.	L _{A2}	L _{Q85}	795.	L _{A6}	L _{Q130}	1372.	L _{A11}	L _{Q42}
219.	L _{A2}	L _{Q86}	796.	L _{A6}	L _{Q131}	1373.	L _{A11}	L _{Q43}
220.	L _{A2}	L _{Q87}	797.	L _{A6}	L _{Q132}	1374.	L _{A11}	L _{Q44}
221.	L _{A2}	L _{Q88}	798.	L _{A6}	L _{Q133}	1375.	L _{A11}	L _{Q45}
222.	L _{A2}	L _{Q89}	799.	L _{A7}	L _{Q1}	1376.	L _{A11}	L _{Q46}
223.	L _{A2}	L _{Q90}	800.	L _{A7}	L _{Q2}	1377.	L _{A11}	L _{Q47}
224.	L _{A2}	L _{Q91}	801.	L _{A7}	L _{Q3}	1378.	L _{A11}	L _{Q48}
225.	L _{A2}	L _{Q92}	802.	L _{A7}	L _{Q4}	1379.	L _{A11}	L _{Q49}
226.	L _{A2}	L _{Q93}	803.	L _{A7}	L _{Q5}	1380.	L _{A11}	L _{Q50}
227.	L _{A2}	L _{Q94}	804.	L _{A7}	L _{Q6}	1381.	L _{A11}	L _{Q51}
228.	L _{A2}	L _{Q95}	805.	L _{A7}	L _{Q7}	1382.	L _{A11}	L _{Q52}
229.	L _{A2}	L _{Q96}	806.	L _{A7}	L _{Q8}	1383.	L _{A11}	L _{Q53}
230.	L _{A2}	L _{Q97}	807.	L _{A7}	L _{Q9}	1384.	L _{A11}	L _{Q54}
231.	L _{A2}	L _{Q98}	808.	L _{A7}	L _{Q10}	1385.	L _{A11}	L _{Q55}
232.	L _{A2}	L _{Q99}	809.	L _{A7}	L _{Q11}	1386.	L _{A11}	L _{Q56}
233.	L _{A2}	L _{Q100}	810.	L _{A7}	L _{Q12}	1387.	L _{A11}	L _{Q57}
234.	L _{A2}	L _{Q101}	811.	L _{A7}	L _{Q13}	1388.	L _{A11}	L _{Q58}
235.	L _{A2}	L _{Q102}	812.	L _{A7}	L _{Q14}	1389.	L _{A11}	L _{Q59}
236.	L _{A2}	L _{Q103}	813.	L _{A7}	L _{Q15}	1390.	L _{A11}	L _{Q60}
237.	L _{A2}	L _{Q104}	814.	L _{A7}	L _{Q16}	1391.	L _{A11}	L _{Q61}
238.	L _{A2}	L _{Q105}	815.	L _{A7}	L _{Q17}	1392.	L _{A11}	L _{Q62}
239.	L _{A2}	L _{Q106}	816.	L _{A7}	L _{Q18}	1393.	L _{A11}	L _{Q63}
240.	L _{A2}	L _{Q107}	817.	L _{A7}	L _{Q19}	1394.	L _{A11}	L _{Q64}
241.	L _{A2}	L _{Q108}	818.	L _{A7}	L _{Q20}	1395.	L _{A11}	L _{Q65}
242.	L _{A2}	L _{Q109}	819.	L _{A7}	L _{Q21}	1396.	L _{A11}	L _{Q66}
243.	L _{A2}	L _{Q110}	820.	L _{A7}	L _{Q22}	1397.	L _{A11}	L _{Q67}
244.	L _{A2}	L _{Q111}	821.	L _{A7}	L _{Q23}	1398.	L _{A11}	L _{Q68}
245.	L _{A2}	L _{Q112}	822.	L _{A7}	L _{Q24}	1399.	L _{A11}	L _{Q69}

10

20

30

40

50

【表 1 - 6】

化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²
246.	L _{A2}	L _{Q113}	823.	L _{A7}	L _{Q25}	1400.	L _{A11}	L _{Q70}
247.	L _{A2}	L _{Q114}	824.	L _{A7}	L _{Q26}	1401.	L _{A11}	L _{Q71}
248.	L _{A2}	L _{Q115}	825.	L _{A7}	L _{Q27}	1402.	L _{A11}	L _{Q72}
249.	L _{A2}	L _{Q116}	826.	L _{A7}	L _{Q28}	1403.	L _{A11}	L _{Q73}
250.	L _{A2}	L _{Q117}	827.	L _{A7}	L _{Q29}	1404.	L _{A11}	L _{Q74}
251.	L _{A2}	L _{Q118}	828.	L _{A7}	L _{Q30}	1405.	L _{A11}	L _{Q75}
252.	L _{A2}	L _{Q119}	829.	L _{A7}	L _{Q31}	1406.	L _{A11}	L _{Q76}
253.	L _{A2}	L _{Q120}	830.	L _{A7}	L _{Q32}	1407.	L _{A11}	L _{Q77}
254.	L _{A2}	L _{Q121}	831.	L _{A7}	L _{Q33}	1408.	L _{A11}	L _{Q78}
255.	L _{A2}	L _{Q122}	832.	L _{A7}	L _{Q34}	1409.	L _{A11}	L _{Q79}
256.	L _{A2}	L _{Q123}	833.	L _{A7}	L _{Q35}	1410.	L _{A11}	L _{Q80}
257.	L _{A2}	L _{Q124}	834.	L _{A7}	L _{Q36}	1411.	L _{A11}	L _{Q81}
258.	L _{A2}	L _{Q125}	835.	L _{A7}	L _{Q37}	1412.	L _{A11}	L _{Q82}
259.	L _{A2}	L _{Q126}	836.	L _{A7}	L _{Q38}	1413.	L _{A11}	L _{Q83}
260.	L _{A2}	L _{Q127}	837.	L _{A7}	L _{Q39}	1414.	L _{A11}	L _{Q84}
261.	L _{A2}	L _{Q128}	838.	L _{A7}	L _{Q40}	1415.	L _{A11}	L _{Q85}
262.	L _{A2}	L _{Q129}	839.	L _{A7}	L _{Q41}	1416.	L _{A11}	L _{Q86}
263.	L _{A2}	L _{Q130}	840.	L _{A7}	L _{Q42}	1417.	L _{A11}	L _{Q87}
264.	L _{A2}	L _{Q131}	841.	L _{A7}	L _{Q43}	1418.	L _{A11}	L _{Q88}
265.	L _{A2}	L _{Q132}	842.	L _{A7}	L _{Q44}	1419.	L _{A11}	L _{Q89}
266.	L _{A2}	L _{Q133}	843.	L _{A7}	L _{Q45}	1420.	L _{A11}	L _{Q90}
267.	L _{A3}	L _{Q1}	844.	L _{A7}	L _{Q46}	1421.	L _{A11}	L _{Q91}
268.	L _{A3}	L _{Q2}	845.	L _{A7}	L _{Q47}	1422.	L _{A11}	L _{Q92}
269.	L _{A3}	L _{Q3}	846.	L _{A7}	L _{Q48}	1423.	L _{A11}	L _{Q93}
270.	L _{A3}	L _{Q4}	847.	L _{A7}	L _{Q49}	1424.	L _{A11}	L _{Q94}
271.	L _{A3}	L _{Q5}	848.	L _{A7}	L _{Q50}	1425.	L _{A11}	L _{Q95}
272.	L _{A3}	L _{Q6}	849.	L _{A7}	L _{Q51}	1426.	L _{A11}	L _{Q96}
273.	L _{A3}	L _{Q7}	850.	L _{A7}	L _{Q52}	1427.	L _{A11}	L _{Q97}
274.	L _{A3}	L _{Q8}	851.	L _{A7}	L _{Q53}	1428.	L _{A11}	L _{Q98}
275.	L _{A3}	L _{Q9}	852.	L _{A7}	L _{Q54}	1429.	L _{A11}	L _{Q99}
276.	L _{A3}	L _{Q10}	853.	L _{A7}	L _{Q55}	1430.	L _{A11}	L _{Q100}
277.	L _{A3}	L _{Q11}	854.	L _{A7}	L _{Q56}	1431.	L _{A11}	L _{Q101}
278.	L _{A3}	L _{Q12}	855.	L _{A7}	L _{Q57}	1432.	L _{A11}	L _{Q102}
279.	L _{A3}	L _{Q13}	856.	L _{A7}	L _{Q58}	1433.	L _{A11}	L _{Q103}
280.	L _{A3}	L _{Q14}	857.	L _{A7}	L _{Q59}	1434.	L _{A11}	L _{Q104}
281.	L _{A3}	L _{Q15}	858.	L _{A7}	L _{Q60}	1435.	L _{A11}	L _{Q105}
282.	L _{A3}	L _{Q16}	859.	L _{A7}	L _{Q61}	1436.	L _{A11}	L _{Q106}
283.	L _{A3}	L _{Q17}	860.	L _{A7}	L _{Q62}	1437.	L _{A11}	L _{Q107}
284.	L _{A3}	L _{Q18}	861.	L _{A7}	L _{Q63}	1438.	L _{A11}	L _{Q108}
285.	L _{A3}	L _{Q19}	862.	L _{A7}	L _{Q64}	1439.	L _{A11}	L _{Q109}
286.	L _{A3}	L _{Q20}	863.	L _{A7}	L _{Q65}	1440.	L _{A11}	L _{Q110}
287.	L _{A3}	L _{Q21}	864.	L _{A7}	L _{Q66}	1441.	L _{A11}	L _{Q111}
288.	L _{A3}	L _{Q22}	865.	L _{A7}	L _{Q67}	1442.	L _{A11}	L _{Q112}
289.	L _{A3}	L _{Q23}	866.	L _{A7}	L _{Q68}	1443.	L _{A11}	L _{Q113}
290.	L _{A3}	L _{Q24}	867.	L _{A7}	L _{Q69}	1444.	L _{A11}	L _{Q114}
291.	L _{A3}	L _{Q25}	868.	L _{A7}	L _{Q70}	1445.	L _{A11}	L _{Q115}
292.	L _{A3}	L _{Q26}	869.	L _{A7}	L _{Q71}	1446.	L _{A11}	L _{Q116}
293.	L _{A3}	L _{Q27}	870.	L _{A7}	L _{Q72}	1447.	L _{A11}	L _{Q117}
294.	L _{A3}	L _{Q28}	871.	L _{A7}	L _{Q73}	1448.	L _{A11}	L _{Q118}

10

20

30

40

50

【表 1 - 7】

化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²
295.	L _{A3}	L _{Q29}	872.	L _{A7}	L _{Q74}	1449.	L _{A11}	L _{Q119}
296.	L _{A3}	L _{Q30}	873.	L _{A7}	L _{Q75}	1450.	L _{A11}	L _{Q120}
297.	L _{A3}	L _{Q31}	874.	L _{A7}	L _{Q76}	1451.	L _{A11}	L _{Q121}
298.	L _{A3}	L _{Q32}	875.	L _{A7}	L _{Q77}	1452.	L _{A11}	L _{Q122}
299.	L _{A3}	L _{Q33}	876.	L _{A7}	L _{Q78}	1453.	L _{A11}	L _{Q123}
300.	L _{A3}	L _{Q34}	877.	L _{A7}	L _{Q79}	1454.	L _{A11}	L _{Q124}
301.	L _{A3}	L _{Q35}	878.	L _{A7}	L _{Q80}	1455.	L _{A11}	L _{Q125}
302.	L _{A3}	L _{Q36}	879.	L _{A7}	L _{Q81}	1456.	L _{A11}	L _{Q126}
303.	L _{A3}	L _{Q37}	880.	L _{A7}	L _{Q82}	1457.	L _{A11}	L _{Q127}
304.	L _{A3}	L _{Q38}	881.	L _{A7}	L _{Q83}	1458.	L _{A11}	L _{Q128}
305.	L _{A3}	L _{Q39}	882.	L _{A7}	L _{Q84}	1459.	L _{A11}	L _{Q129}
306.	L _{A3}	L _{Q40}	883.	L _{A7}	L _{Q85}	1460.	L _{A11}	L _{Q130}
307.	L _{A3}	L _{Q41}	884.	L _{A7}	L _{Q86}	1461.	L _{A11}	L _{Q131}
308.	L _{A3}	L _{Q42}	885.	L _{A7}	L _{Q87}	1462.	L _{A11}	L _{Q132}
309.	L _{A3}	L _{Q43}	886.	L _{A7}	L _{Q88}	1463.	L _{A11}	L _{Q133}
310.	L _{A3}	L _{Q44}	887.	L _{A7}	L _{Q89}	1464.	L _{A12}	L _{Q1}
311.	L _{A3}	L _{Q45}	888.	L _{A7}	L _{Q90}	1465.	L _{A12}	L _{Q2}
312.	L _{A3}	L _{Q46}	889.	L _{A7}	L _{Q91}	1466.	L _{A12}	L _{Q3}
313.	L _{A3}	L _{Q47}	890.	L _{A7}	L _{Q92}	1467.	L _{A12}	L _{Q4}
314.	L _{A3}	L _{Q48}	891.	L _{A7}	L _{Q93}	1468.	L _{A12}	L _{Q5}
315.	L _{A3}	L _{Q49}	892.	L _{A7}	L _{Q94}	1469.	L _{A12}	L _{Q6}
316.	L _{A3}	L _{Q50}	893.	L _{A7}	L _{Q95}	1470.	L _{A12}	L _{Q7}
317.	L _{A3}	L _{Q51}	894.	L _{A7}	L _{Q96}	1471.	L _{A12}	L _{Q8}
318.	L _{A3}	L _{Q52}	895.	L _{A7}	L _{Q97}	1472.	L _{A12}	L _{Q9}
319.	L _{A3}	L _{Q53}	896.	L _{A7}	L _{Q98}	1473.	L _{A12}	L _{Q10}
320.	L _{A3}	L _{Q54}	897.	L _{A7}	L _{Q99}	1474.	L _{A12}	L _{Q11}
321.	L _{A3}	L _{Q55}	898.	L _{A7}	L _{Q100}	1475.	L _{A12}	L _{Q12}
322.	L _{A3}	L _{Q56}	899.	L _{A7}	L _{Q101}	1476.	L _{A12}	L _{Q13}
323.	L _{A3}	L _{Q57}	900.	L _{A7}	L _{Q102}	1477.	L _{A12}	L _{Q14}
324.	L _{A3}	L _{Q58}	901.	L _{A7}	L _{Q103}	1478.	L _{A12}	L _{Q15}
325.	L _{A3}	L _{Q59}	902.	L _{A7}	L _{Q104}	1479.	L _{A12}	L _{Q16}
326.	L _{A3}	L _{Q60}	903.	L _{A7}	L _{Q105}	1480.	L _{A12}	L _{Q17}
327.	L _{A3}	L _{Q61}	904.	L _{A7}	L _{Q106}	1481.	L _{A12}	L _{Q18}
328.	L _{A3}	L _{Q62}	905.	L _{A7}	L _{Q107}	1482.	L _{A12}	L _{Q19}
329.	L _{A3}	L _{Q63}	906.	L _{A7}	L _{Q108}	1483.	L _{A12}	L _{Q20}
330.	L _{A3}	L _{Q64}	907.	L _{A7}	L _{Q109}	1484.	L _{A12}	L _{Q21}
331.	L _{A3}	L _{Q65}	908.	L _{A7}	L _{Q110}	1485.	L _{A12}	L _{Q22}
332.	L _{A3}	L _{Q66}	909.	L _{A7}	L _{Q111}	1486.	L _{A12}	L _{Q23}
333.	L _{A3}	L _{Q67}	910.	L _{A7}	L _{Q112}	1487.	L _{A12}	L _{Q24}
334.	L _{A3}	L _{Q68}	911.	L _{A7}	L _{Q113}	1488.	L _{A12}	L _{Q25}
335.	L _{A3}	L _{Q69}	912.	L _{A7}	L _{Q114}	1489.	L _{A12}	L _{Q26}
336.	L _{A3}	L _{Q70}	913.	L _{A7}	L _{Q115}	1490.	L _{A12}	L _{Q27}
337.	L _{A3}	L _{Q71}	914.	L _{A7}	L _{Q116}	1491.	L _{A12}	L _{Q28}
338.	L _{A3}	L _{Q72}	915.	L _{A7}	L _{Q117}	1492.	L _{A12}	L _{Q29}
339.	L _{A3}	L _{Q73}	916.	L _{A7}	L _{Q118}	1493.	L _{A12}	L _{Q30}
340.	L _{A3}	L _{Q74}	917.	L _{A7}	L _{Q119}	1494.	L _{A12}	L _{Q31}
341.	L _{A3}	L _{Q75}	918.	L _{A7}	L _{Q120}	1495.	L _{A12}	L _{Q32}
342.	L _{A3}	L _{Q76}	919.	L _{A7}	L _{Q121}	1496.	L _{A12}	L _{Q33}
343.	L _{A3}	L _{Q77}	920.	L _{A7}	L _{Q122}	1497.	L _{A12}	L _{Q34}

10

20

30

40

50

【表 1 - 8】

化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²
344.	L _{A3}	L _{Q78}	921.	L _{A7}	L _{Q123}	1498.	L _{A12}	L _{Q35}
345.	L _{A3}	L _{Q79}	922.	L _{A7}	L _{Q124}	1499.	L _{A12}	L _{Q36}
346.	L _{A3}	L _{Q80}	923.	L _{A7}	L _{Q125}	1500.	L _{A12}	L _{Q37}
347.	L _{A3}	L _{Q81}	924.	L _{A7}	L _{Q126}	1501.	L _{A12}	L _{Q38}
348.	L _{A3}	L _{Q82}	925.	L _{A7}	L _{Q127}	1502.	L _{A12}	L _{Q39}
349.	L _{A3}	L _{Q83}	926.	L _{A7}	L _{Q128}	1503.	L _{A12}	L _{Q40}
350.	L _{A3}	L _{Q84}	927.	L _{A7}	L _{Q129}	1504.	L _{A12}	L _{Q41}
351.	L _{A3}	L _{Q85}	928.	L _{A7}	L _{Q130}	1505.	L _{A12}	L _{Q42}
352.	L _{A3}	L _{Q86}	929.	L _{A7}	L _{Q131}	1506.	L _{A12}	L _{Q43}
353.	L _{A3}	L _{Q87}	930.	L _{A7}	L _{Q132}	1507.	L _{A12}	L _{Q44}
354.	L _{A3}	L _{Q88}	931.	L _{A7}	L _{Q133}	1508.	L _{A12}	L _{Q45}
355.	L _{A3}	L _{Q89}	932.	L _{A8}	L _{Q1}	1509.	L _{A12}	L _{Q46}
356.	L _{A3}	L _{Q90}	933.	L _{A8}	L _{Q2}	1510.	L _{A12}	L _{Q47}
357.	L _{A3}	L _{Q91}	934.	L _{A8}	L _{Q3}	1511.	L _{A12}	L _{Q48}
358.	L _{A3}	L _{Q92}	935.	L _{A8}	L _{Q4}	1512.	L _{A12}	L _{Q49}
359.	L _{A3}	L _{Q93}	936.	L _{A8}	L _{Q5}	1513.	L _{A12}	L _{Q50}
360.	L _{A3}	L _{Q94}	937.	L _{A8}	L _{Q6}	1514.	L _{A12}	L _{Q51}
361.	L _{A3}	L _{Q95}	938.	L _{A8}	L _{Q7}	1515.	L _{A12}	L _{Q52}
362.	L _{A3}	L _{Q96}	939.	L _{A8}	L _{Q8}	1516.	L _{A12}	L _{Q53}
363.	L _{A3}	L _{Q97}	940.	L _{A8}	L _{Q9}	1517.	L _{A12}	L _{Q54}
364.	L _{A3}	L _{Q98}	941.	L _{A8}	L _{Q10}	1518.	L _{A12}	L _{Q55}
365.	L _{A3}	L _{Q99}	942.	L _{A8}	L _{Q11}	1519.	L _{A12}	L _{Q56}
366.	L _{A3}	L _{Q100}	943.	L _{A8}	L _{Q12}	1520.	L _{A12}	L _{Q57}
367.	L _{A3}	L _{Q101}	944.	L _{A8}	L _{Q13}	1521.	L _{A12}	L _{Q58}
368.	L _{A3}	L _{Q102}	945.	L _{A8}	L _{Q14}	1522.	L _{A12}	L _{Q59}
369.	L _{A3}	L _{Q103}	946.	L _{A8}	L _{Q15}	1523.	L _{A12}	L _{Q60}
370.	L _{A3}	L _{Q104}	947.	L _{A8}	L _{Q16}	1524.	L _{A12}	L _{Q61}
371.	L _{A3}	L _{Q105}	948.	L _{A8}	L _{Q17}	1525.	L _{A12}	L _{Q62}
372.	L _{A3}	L _{Q106}	949.	L _{A8}	L _{Q18}	1526.	L _{A12}	L _{Q63}
373.	L _{A3}	L _{Q107}	950.	L _{A8}	L _{Q19}	1527.	L _{A12}	L _{Q64}
374.	L _{A3}	L _{Q108}	951.	L _{A8}	L _{Q20}	1528.	L _{A12}	L _{Q65}
375.	L _{A3}	L _{Q109}	952.	L _{A8}	L _{Q21}	1529.	L _{A12}	L _{Q66}
376.	L _{A3}	L _{Q110}	953.	L _{A8}	L _{Q22}	1530.	L _{A12}	L _{Q67}
377.	L _{A3}	L _{Q111}	954.	L _{A8}	L _{Q23}	1531.	L _{A12}	L _{Q68}
378.	L _{A3}	L _{Q112}	955.	L _{A8}	L _{Q24}	1532.	L _{A12}	L _{Q69}
379.	L _{A3}	L _{Q113}	956.	L _{A8}	L _{Q25}	1533.	L _{A12}	L _{Q70}
380.	L _{A3}	L _{Q114}	957.	L _{A8}	L _{Q26}	1534.	L _{A12}	L _{Q71}
381.	L _{A3}	L _{Q115}	958.	L _{A8}	L _{Q27}	1535.	L _{A12}	L _{Q72}
382.	L _{A3}	L _{Q116}	959.	L _{A8}	L _{Q28}	1536.	L _{A12}	L _{Q73}
383.	L _{A3}	L _{Q117}	960.	L _{A8}	L _{Q29}	1537.	L _{A12}	L _{Q74}
384.	L _{A3}	L _{Q118}	961.	L _{A8}	L _{Q30}	1538.	L _{A12}	L _{Q75}
385.	L _{A3}	L _{Q119}	962.	L _{A8}	L _{Q31}	1539.	L _{A12}	L _{Q76}
386.	L _{A3}	L _{Q120}	963.	L _{A8}	L _{Q32}	1540.	L _{A12}	L _{Q77}
387.	L _{A3}	L _{Q121}	964.	L _{A8}	L _{Q33}	1541.	L _{A12}	L _{Q78}
388.	L _{A3}	L _{Q122}	965.	L _{A8}	L _{Q34}	1542.	L _{A12}	L _{Q79}
389.	L _{A3}	L _{Q123}	966.	L _{A8}	L _{Q35}	1543.	L _{A12}	L _{Q80}
390.	L _{A3}	L _{Q124}	967.	L _{A8}	L _{Q36}	1544.	L _{A12}	L _{Q81}
391.	L _{A3}	L _{Q125}	968.	L _{A8}	L _{Q37}	1545.	L _{A12}	L _{Q82}
392.	L _{A3}	L _{Q126}	969.	L _{A8}	L _{Q38}	1546.	L _{A12}	L _{Q83}

10

20

30

40

50

【表 1 - 9】

化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²
393.	L _{A3}	L _{Q127}	970.	L _{A8}	L _{Q39}	1547.	L _{A12}	L _{Q84}
394.	L _{A3}	L _{Q128}	971.	L _{A8}	L _{Q40}	1548.	L _{A12}	L _{Q85}
395.	L _{A3}	L _{Q129}	972.	L _{A8}	L _{Q41}	1549.	L _{A12}	L _{Q86}
396.	L _{A3}	L _{Q130}	973.	L _{A8}	L _{Q42}	1550.	L _{A12}	L _{Q87}
397.	L _{A3}	L _{Q131}	974.	L _{A8}	L _{Q43}	1551.	L _{A12}	L _{Q88}
398.	L _{A3}	L _{Q132}	975.	L _{A8}	L _{Q44}	1552.	L _{A12}	L _{Q89}
399.	L _{A3}	L _{Q133}	976.	L _{A8}	L _{Q45}	1553.	L _{A12}	L _{Q90}
400.	L _{A4}	L _{Q1}	977.	L _{A8}	L _{Q46}	1554.	L _{A12}	L _{Q91}
401.	L _{A4}	L _{Q2}	978.	L _{A8}	L _{Q47}	1555.	L _{A12}	L _{Q92}
402.	L _{A4}	L _{Q3}	979.	L _{A8}	L _{Q48}	1556.	L _{A12}	L _{Q93}
403.	L _{A4}	L _{Q4}	980.	L _{A8}	L _{Q49}	1557.	L _{A12}	L _{Q94}
404.	L _{A4}	L _{Q5}	981.	L _{A8}	L _{Q50}	1558.	L _{A12}	L _{Q95}
405.	L _{A4}	L _{Q6}	982.	L _{A8}	L _{Q51}	1559.	L _{A12}	L _{Q96}
406.	L _{A4}	L _{Q7}	983.	L _{A8}	L _{Q52}	1560.	L _{A12}	L _{Q97}
407.	L _{A4}	L _{Q8}	984.	L _{A8}	L _{Q53}	1561.	L _{A12}	L _{Q98}
408.	L _{A4}	L _{Q9}	985.	L _{A8}	L _{Q54}	1562.	L _{A12}	L _{Q99}
409.	L _{A4}	L _{Q10}	986.	L _{A8}	L _{Q55}	1563.	L _{A12}	L _{Q100}
410.	L _{A4}	L _{Q11}	987.	L _{A8}	L _{Q56}	1564.	L _{A12}	L _{Q101}
411.	L _{A4}	L _{Q12}	988.	L _{A8}	L _{Q57}	1565.	L _{A12}	L _{Q102}
412.	L _{A4}	L _{Q13}	989.	L _{A8}	L _{Q58}	1566.	L _{A12}	L _{Q103}
413.	L _{A4}	L _{Q14}	990.	L _{A8}	L _{Q59}	1567.	L _{A12}	L _{Q104}
414.	L _{A4}	L _{Q15}	991.	L _{A8}	L _{Q60}	1568.	L _{A12}	L _{Q105}
415.	L _{A4}	L _{Q16}	992.	L _{A8}	L _{Q61}	1569.	L _{A12}	L _{Q106}
416.	L _{A4}	L _{Q17}	993.	L _{A8}	L _{Q62}	1570.	L _{A12}	L _{Q107}
417.	L _{A4}	L _{Q18}	994.	L _{A8}	L _{Q63}	1571.	L _{A12}	L _{Q108}
418.	L _{A4}	L _{Q19}	995.	L _{A8}	L _{Q64}	1572.	L _{A12}	L _{Q109}
419.	L _{A4}	L _{Q20}	996.	L _{A8}	L _{Q65}	1573.	L _{A12}	L _{Q110}
420.	L _{A4}	L _{Q21}	997.	L _{A8}	L _{Q66}	1574.	L _{A12}	L _{Q111}
421.	L _{A4}	L _{Q22}	998.	L _{A8}	L _{Q67}	1575.	L _{A12}	L _{Q112}
422.	L _{A4}	L _{Q23}	999.	L _{A8}	L _{Q68}	1576.	L _{A12}	L _{Q113}
423.	L _{A4}	L _{Q24}	1000.	L _{A8}	L _{Q69}	1577.	L _{A12}	L _{Q114}
424.	L _{A4}	L _{Q25}	1001.	L _{A8}	L _{Q70}	1578.	L _{A12}	L _{Q115}
425.	L _{A4}	L _{Q26}	1002.	L _{A8}	L _{Q71}	1579.	L _{A12}	L _{Q116}
426.	L _{A4}	L _{Q27}	1003.	L _{A8}	L _{Q72}	1580.	L _{A12}	L _{Q117}
427.	L _{A4}	L _{Q28}	1004.	L _{A8}	L _{Q73}	1581.	L _{A12}	L _{Q118}
428.	L _{A4}	L _{Q29}	1005.	L _{A8}	L _{Q74}	1582.	L _{A12}	L _{Q119}
429.	L _{A4}	L _{Q30}	1006.	L _{A8}	L _{Q75}	1583.	L _{A12}	L _{Q120}
430.	L _{A4}	L _{Q31}	1007.	L _{A8}	L _{Q76}	1584.	L _{A12}	L _{Q121}
431.	L _{A4}	L _{Q32}	1008.	L _{A8}	L _{Q77}	1585.	L _{A12}	L _{Q122}
432.	L _{A4}	L _{Q33}	1009.	L _{A8}	L _{Q78}	1586.	L _{A12}	L _{Q123}
433.	L _{A4}	L _{Q34}	1010.	L _{A8}	L _{Q79}	1587.	L _{A12}	L _{Q124}
434.	L _{A4}	L _{Q35}	1011.	L _{A8}	L _{Q80}	1588.	L _{A12}	L _{Q125}
435.	L _{A4}	L _{Q36}	1012.	L _{A8}	L _{Q81}	1589.	L _{A12}	L _{Q126}
436.	L _{A4}	L _{Q37}	1013.	L _{A8}	L _{Q82}	1590.	L _{A12}	L _{Q127}
437.	L _{A4}	L _{Q38}	1014.	L _{A8}	L _{Q83}	1591.	L _{A12}	L _{Q128}
438.	L _{A4}	L _{Q39}	1015.	L _{A8}	L _{Q84}	1592.	L _{A12}	L _{Q129}
439.	L _{A4}	L _{Q40}	1016.	L _{A8}	L _{Q85}	1593.	L _{A12}	L _{Q130}
440.	L _{A4}	L _{Q41}	1017.	L _{A8}	L _{Q86}	1594.	L _{A12}	L _{Q131}
441.	L _{A4}	L _{Q42}	1018.	L _{A8}	L _{Q87}	1595.	L _{A12}	L _{Q132}

10

20

30

40

50

【表 1 - 10】

化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²
442.	L _{A4}	L _{Q43}	1019.	L _{A8}	L _{Q88}	1596.	L _{A12}	L _{Q133}
443.	L _{A4}	L _{Q44}	1020.	L _{A8}	L _{Q89}	1597.	L _{A13}	L _{Q1}
444.	L _{A4}	L _{Q45}	1021.	L _{A8}	L _{Q90}	1598.	L _{A13}	L _{Q2}
445.	L _{A4}	L _{Q46}	1022.	L _{A8}	L _{Q91}	1599.	L _{A13}	L _{Q3}
446.	L _{A4}	L _{Q47}	1023.	L _{A8}	L _{Q92}	1600.	L _{A13}	L _{Q4}
447.	L _{A4}	L _{Q48}	1024.	L _{A8}	L _{Q93}	1601.	L _{A13}	L _{Q5}
448.	L _{A4}	L _{Q49}	1025.	L _{A8}	L _{Q94}	1602.	L _{A13}	L _{Q6}
449.	L _{A4}	L _{Q50}	1026.	L _{A8}	L _{Q95}	1603.	L _{A13}	L _{Q7}
450.	L _{A4}	L _{Q51}	1027.	L _{A8}	L _{Q96}	1604.	L _{A13}	L _{Q8}
451.	L _{A4}	L _{Q52}	1028.	L _{A8}	L _{Q97}	1605.	L _{A13}	L _{Q9}
452.	L _{A4}	L _{Q53}	1029.	L _{A8}	L _{Q98}	1606.	L _{A13}	L _{Q10}
453.	L _{A4}	L _{Q54}	1030.	L _{A8}	L _{Q99}	1607.	L _{A13}	L _{Q11}
454.	L _{A4}	L _{Q55}	1031.	L _{A8}	L _{Q100}	1608.	L _{A13}	L _{Q12}
455.	L _{A4}	L _{Q56}	1032.	L _{A8}	L _{Q101}	1609.	L _{A13}	L _{Q13}
456.	L _{A4}	L _{Q57}	1033.	L _{A8}	L _{Q102}	1610.	L _{A13}	L _{Q14}
457.	L _{A4}	L _{Q58}	1034.	L _{A8}	L _{Q103}	1611.	L _{A13}	L _{Q15}
458.	L _{A4}	L _{Q59}	1035.	L _{A8}	L _{Q104}	1612.	L _{A13}	L _{Q16}
459.	L _{A4}	L _{Q60}	1036.	L _{A8}	L _{Q105}	1613.	L _{A13}	L _{Q17}
460.	L _{A4}	L _{Q61}	1037.	L _{A8}	L _{Q106}	1614.	L _{A13}	L _{Q18}
461.	L _{A4}	L _{Q62}	1038.	L _{A8}	L _{Q107}	1615.	L _{A13}	L _{Q19}
462.	L _{A4}	L _{Q63}	1039.	L _{A8}	L _{Q108}	1616.	L _{A13}	L _{Q20}
463.	L _{A4}	L _{Q64}	1040.	L _{A8}	L _{Q109}	1617.	L _{A13}	L _{Q21}
464.	L _{A4}	L _{Q65}	1041.	L _{A8}	L _{Q110}	1618.	L _{A13}	L _{Q22}
465.	L _{A4}	L _{Q66}	1042.	L _{A8}	L _{Q111}	1619.	L _{A13}	L _{Q23}
466.	L _{A4}	L _{Q67}	1043.	L _{A8}	L _{Q112}	1620.	L _{A13}	L _{Q24}
467.	L _{A4}	L _{Q68}	1044.	L _{A8}	L _{Q113}	1621.	L _{A13}	L _{Q25}
468.	L _{A4}	L _{Q69}	1045.	L _{A8}	L _{Q114}	1622.	L _{A13}	L _{Q26}
469.	L _{A4}	L _{Q70}	1046.	L _{A8}	L _{Q115}	1623.	L _{A13}	L _{Q27}
470.	L _{A4}	L _{Q71}	1047.	L _{A8}	L _{Q116}	1624.	L _{A13}	L _{Q28}
471.	L _{A4}	L _{Q72}	1048.	L _{A8}	L _{Q117}	1625.	L _{A13}	L _{Q29}
472.	L _{A4}	L _{Q73}	1049.	L _{A8}	L _{Q118}	1626.	L _{A13}	L _{Q30}
473.	L _{A4}	L _{Q74}	1050.	L _{A8}	L _{Q119}	1627.	L _{A13}	L _{Q31}
474.	L _{A4}	L _{Q75}	1051.	L _{A8}	L _{Q120}	1628.	L _{A13}	L _{Q32}
475.	L _{A4}	L _{Q76}	1052.	L _{A8}	L _{Q121}	1629.	L _{A13}	L _{Q33}
476.	L _{A4}	L _{Q77}	1053.	L _{A8}	L _{Q122}	1630.	L _{A13}	L _{Q34}
477.	L _{A4}	L _{Q78}	1054.	L _{A8}	L _{Q123}	1631.	L _{A13}	L _{Q35}
478.	L _{A4}	L _{Q79}	1055.	L _{A8}	L _{Q124}	1632.	L _{A13}	L _{Q36}
479.	L _{A4}	L _{Q80}	1056.	L _{A8}	L _{Q125}	1633.	L _{A13}	L _{Q37}
480.	L _{A4}	L _{Q81}	1057.	L _{A8}	L _{Q126}	1634.	L _{A13}	L _{Q38}
481.	L _{A4}	L _{Q82}	1058.	L _{A8}	L _{Q127}	1635.	L _{A13}	L _{Q39}
482.	L _{A4}	L _{Q83}	1059.	L _{A8}	L _{Q128}	1636.	L _{A13}	L _{Q40}
483.	L _{A4}	L _{Q84}	1060.	L _{A8}	L _{Q129}	1637.	L _{A13}	L _{Q41}
484.	L _{A4}	L _{Q85}	1061.	L _{A8}	L _{Q130}	1638.	L _{A13}	L _{Q42}
485.	L _{A4}	L _{Q86}	1062.	L _{A8}	L _{Q131}	1639.	L _{A13}	L _{Q43}
486.	L _{A4}	L _{Q87}	1063.	L _{A8}	L _{Q132}	1640.	L _{A13}	L _{Q44}
487.	L _{A4}	L _{Q88}	1064.	L _{A8}	L _{Q133}	1641.	L _{A13}	L _{Q45}
488.	L _{A4}	L _{Q89}	1065.	L _{A9}	L _{Q1}	1642.	L _{A13}	L _{Q46}
489.	L _{A4}	L _{Q90}	1066.	L _{A9}	L _{Q2}	1643.	L _{A13}	L _{Q47}
490.	L _{A4}	L _{Q91}	1067.	L _{A9}	L _{Q3}	1644.	L _{A13}	L _{Q48}

10

20

30

40

50

【表 1 - 1 1】

化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²
491.	L _{A4}	L _{Q92}	1068.	L _{A9}	L _{Q4}	1645.	L _{A13}	L _{Q49}
492.	L _{A4}	L _{Q93}	1069.	L _{A9}	L _{Q5}	1646.	L _{A13}	L _{Q50}
493.	L _{A4}	L _{Q94}	1070.	L _{A9}	L _{Q6}	1647.	L _{A13}	L _{Q51}
494.	L _{A4}	L _{Q95}	1071.	L _{A9}	L _{Q7}	1648.	L _{A13}	L _{Q52}
495.	L _{A4}	L _{Q96}	1072.	L _{A9}	L _{Q8}	1649.	L _{A13}	L _{Q53}
496.	L _{A4}	L _{Q97}	1073.	L _{A9}	L _{Q9}	1650.	L _{A13}	L _{Q54}
497.	L _{A4}	L _{Q98}	1074.	L _{A9}	L _{Q10}	1651.	L _{A13}	L _{Q55}
498.	L _{A4}	L _{Q99}	1075.	L _{A9}	L _{Q11}	1652.	L _{A13}	L _{Q56}
499.	L _{A4}	L _{Q100}	1076.	L _{A9}	L _{Q12}	1653.	L _{A13}	L _{Q57}
500.	L _{A4}	L _{Q101}	1077.	L _{A9}	L _{Q13}	1654.	L _{A13}	L _{Q58}
501.	L _{A4}	L _{Q102}	1078.	L _{A9}	L _{Q14}	1655.	L _{A13}	L _{Q59}
502.	L _{A4}	L _{Q103}	1079.	L _{A9}	L _{Q15}	1656.	L _{A13}	L _{Q60}
503.	L _{A4}	L _{Q104}	1080.	L _{A9}	L _{Q16}	1657.	L _{A13}	L _{Q61}
504.	L _{A4}	L _{Q105}	1081.	L _{A9}	L _{Q17}	1658.	L _{A13}	L _{Q62}
505.	L _{A4}	L _{Q106}	1082.	L _{A9}	L _{Q18}	1659.	L _{A13}	L _{Q63}
506.	L _{A4}	L _{Q107}	1083.	L _{A9}	L _{Q19}	1660.	L _{A13}	L _{Q64}
507.	L _{A4}	L _{Q108}	1084.	L _{A9}	L _{Q20}	1661.	L _{A13}	L _{Q65}
508.	L _{A4}	L _{Q109}	1085.	L _{A9}	L _{Q21}	1662.	L _{A13}	L _{Q66}
509.	L _{A4}	L _{Q110}	1086.	L _{A9}	L _{Q22}	1663.	L _{A13}	L _{Q67}
510.	L _{A4}	L _{Q111}	1087.	L _{A9}	L _{Q23}	1664.	L _{A13}	L _{Q68}
511.	L _{A4}	L _{Q112}	1088.	L _{A9}	L _{Q24}	1665.	L _{A13}	L _{Q69}
512.	L _{A4}	L _{Q113}	1089.	L _{A9}	L _{Q25}	1666.	L _{A13}	L _{Q70}
513.	L _{A4}	L _{Q114}	1090.	L _{A9}	L _{Q26}	1667.	L _{A13}	L _{Q71}
514.	L _{A4}	L _{Q115}	1091.	L _{A9}	L _{Q27}	1668.	L _{A13}	L _{Q72}
515.	L _{A4}	L _{Q116}	1092.	L _{A9}	L _{Q28}	1669.	L _{A13}	L _{Q73}
516.	L _{A4}	L _{Q117}	1093.	L _{A9}	L _{Q29}	1670.	L _{A13}	L _{Q74}
517.	L _{A4}	L _{Q118}	1094.	L _{A9}	L _{Q30}	1671.	L _{A13}	L _{Q75}
518.	L _{A4}	L _{Q119}	1095.	L _{A9}	L _{Q31}	1672.	L _{A13}	L _{Q76}
519.	L _{A4}	L _{Q120}	1096.	L _{A9}	L _{Q32}	1673.	L _{A13}	L _{Q77}
520.	L _{A4}	L _{Q121}	1097.	L _{A9}	L _{Q33}	1674.	L _{A13}	L _{Q78}
521.	L _{A4}	L _{Q122}	1098.	L _{A9}	L _{Q34}	1675.	L _{A13}	L _{Q79}
522.	L _{A4}	L _{Q123}	1099.	L _{A9}	L _{Q35}	1676.	L _{A13}	L _{Q80}
523.	L _{A4}	L _{Q124}	1100.	L _{A9}	L _{Q36}	1677.	L _{A13}	L _{Q81}
524.	L _{A4}	L _{Q125}	1101.	L _{A9}	L _{Q37}	1678.	L _{A13}	L _{Q82}
525.	L _{A4}	L _{Q126}	1102.	L _{A9}	L _{Q38}	1679.	L _{A13}	L _{Q83}
526.	L _{A4}	L _{Q127}	1103.	L _{A9}	L _{Q39}	1680.	L _{A13}	L _{Q84}
527.	L _{A4}	L _{Q128}	1104.	L _{A9}	L _{Q40}	1681.	L _{A13}	L _{Q85}
528.	L _{A4}	L _{Q129}	1105.	L _{A9}	L _{Q41}	1682.	L _{A13}	L _{Q86}
529.	L _{A4}	L _{Q130}	1106.	L _{A9}	L _{Q42}	1683.	L _{A13}	L _{Q87}
530.	L _{A4}	L _{Q131}	1107.	L _{A9}	L _{Q43}	1684.	L _{A13}	L _{Q88}
531.	L _{A4}	L _{Q132}	1108.	L _{A9}	L _{Q44}	1685.	L _{A13}	L _{Q89}
532.	L _{A4}	L _{Q133}	1109.	L _{A9}	L _{Q45}	1686.	L _{A13}	L _{Q90}
533.	L _{A5}	L _{Q1}	1110.	L _{A9}	L _{Q46}	1687.	L _{A13}	L _{Q91}
534.	L _{A5}	L _{Q2}	1111.	L _{A9}	L _{Q47}	1688.	L _{A13}	L _{Q92}
535.	L _{A5}	L _{Q3}	1112.	L _{A9}	L _{Q48}	1689.	L _{A13}	L _{Q93}
536.	L _{A5}	L _{Q4}	1113.	L _{A9}	L _{Q49}	1690.	L _{A13}	L _{Q94}
537.	L _{A5}	L _{Q5}	1114.	L _{A9}	L _{Q50}	1691.	L _{A13}	L _{Q95}
538.	L _{A5}	L _{Q6}	1115.	L _{A9}	L _{Q51}	1692.	L _{A13}	L _{Q96}
539.	L _{A5}	L _{Q7}	1116.	L _{A9}	L _{Q52}	1693.	L _{A13}	L _{Q97}

10

20

30

40

50

【表 1 - 1 2】

化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²	化合物番号	L ¹	L ²
540.	L _{A5}	L _{Q8}	1117.	L _{A9}	L _{Q53}	1694.	L _{A13}	L _{Q98}
541.	L _{A5}	L _{Q9}	1118.	L _{A9}	L _{Q54}	1695.	L _{A13}	L _{Q99}
542.	L _{A5}	L _{Q10}	1119.	L _{A9}	L _{Q55}	1696.	L _{A13}	L _{Q100}
543.	L _{A5}	L _{Q11}	1120.	L _{A9}	L _{Q56}	1697.	L _{A13}	L _{Q101}
544.	L _{A5}	L _{Q12}	1121.	L _{A9}	L _{Q57}	1698.	L _{A13}	L _{Q102}
545.	L _{A5}	L _{Q13}	1122.	L _{A9}	L _{Q58}	1699.	L _{A13}	L _{Q103}
546.	L _{A5}	L _{Q14}	1123.	L _{A9}	L _{Q59}	1700.	L _{A13}	L _{Q104}
547.	L _{A5}	L _{Q15}	1124.	L _{A9}	L _{Q60}	1701.	L _{A13}	L _{Q105}
548.	L _{A5}	L _{Q16}	1125.	L _{A9}	L _{Q61}	1702.	L _{A13}	L _{Q106}
549.	L _{A5}	L _{Q17}	1126.	L _{A9}	L _{Q62}	1703.	L _{A13}	L _{Q107}
550.	L _{A5}	L _{Q18}	1127.	L _{A9}	L _{Q63}	1704.	L _{A13}	L _{Q108}
551.	L _{A5}	L _{Q19}	1128.	L _{A9}	L _{Q64}	1705.	L _{A13}	L _{Q109}
552.	L _{A5}	L _{Q20}	1129.	L _{A9}	L _{Q65}	1706.	L _{A13}	L _{Q110}
553.	L _{A5}	L _{Q21}	1130.	L _{A9}	L _{Q66}	1707.	L _{A13}	L _{Q111}
554.	L _{A5}	L _{Q22}	1131.	L _{A9}	L _{Q67}	1708.	L _{A13}	L _{Q112}
555.	L _{A5}	L _{Q23}	1132.	L _{A9}	L _{Q68}	1709.	L _{A13}	L _{Q113}
556.	L _{A5}	L _{Q24}	1133.	L _{A9}	L _{Q69}	1710.	L _{A13}	L _{Q114}
557.	L _{A5}	L _{Q25}	1134.	L _{A9}	L _{Q70}	1711.	L _{A13}	L _{Q115}
558.	L _{A5}	L _{Q26}	1135.	L _{A9}	L _{Q71}	1712.	L _{A13}	L _{Q116}
559.	L _{A5}	L _{Q27}	1136.	L _{A9}	L _{Q72}	1713.	L _{A13}	L _{Q117}
560.	L _{A5}	L _{Q28}	1137.	L _{A9}	L _{Q73}	1714.	L _{A13}	L _{Q118}
561.	L _{A5}	L _{Q29}	1138.	L _{A9}	L _{Q74}	1715.	L _{A13}	L _{Q119}
562.	L _{A5}	L _{Q30}	1139.	L _{A9}	L _{Q75}	1716.	L _{A13}	L _{Q120}
563.	L _{A5}	L _{Q31}	1140.	L _{A9}	L _{Q76}	1717.	L _{A13}	L _{Q121}
564.	L _{A5}	L _{Q32}	1141.	L _{A9}	L _{Q77}	1718.	L _{A13}	L _{Q122}
565.	L _{A5}	L _{Q33}	1142.	L _{A9}	L _{Q78}	1719.	L _{A13}	L _{Q123}
566.	L _{A5}	L _{Q34}	1143.	L _{A9}	L _{Q79}	1720.	L _{A13}	L _{Q124}
567.	L _{A5}	L _{Q35}	1144.	L _{A9}	L _{Q80}	1721.	L _{A13}	L _{Q125}
568.	L _{A5}	L _{Q36}	1145.	L _{A9}	L _{Q81}	1722.	L _{A13}	L _{Q126}
569.	L _{A5}	L _{Q37}	1146.	L _{A9}	L _{Q82}	1723.	L _{A13}	L _{Q127}
570.	L _{A5}	L _{Q38}	1147.	L _{A9}	L _{Q83}	1724.	L _{A13}	L _{Q128}
571.	L _{A5}	L _{Q39}	1148.	L _{A9}	L _{Q84}	1725.	L _{A13}	L _{Q129}
572.	L _{A5}	L _{Q40}	1149.	L _{A9}	L _{Q85}	1726.	L _{A13}	L _{Q130}
573.	L _{A5}	L _{Q41}	1150.	L _{A9}	L _{Q86}	1727.	L _{A13}	L _{Q131}
574.	L _{A5}	L _{Q42}	1151.	L _{A9}	L _{Q87}	1728.	L _{A13}	L _{Q132}
575.	L _{A5}	L _{Q43}	1152.	L _{A9}	L _{Q88}	1729.	L _{A13}	L _{Q133}
576.	L _{A5}	L _{Q44}	1153.	L _{A9}	L _{Q89}			
577.	L _{A5}	L _{Q45}	1154.	L _{A9}	L _{Q90}			

【0 0 4 4】

1つの実施形態においては、本明細書に定義される式Ⅰを有する第1の配位子L¹を含む化合物は、下記からなる群から選択することができる。

10

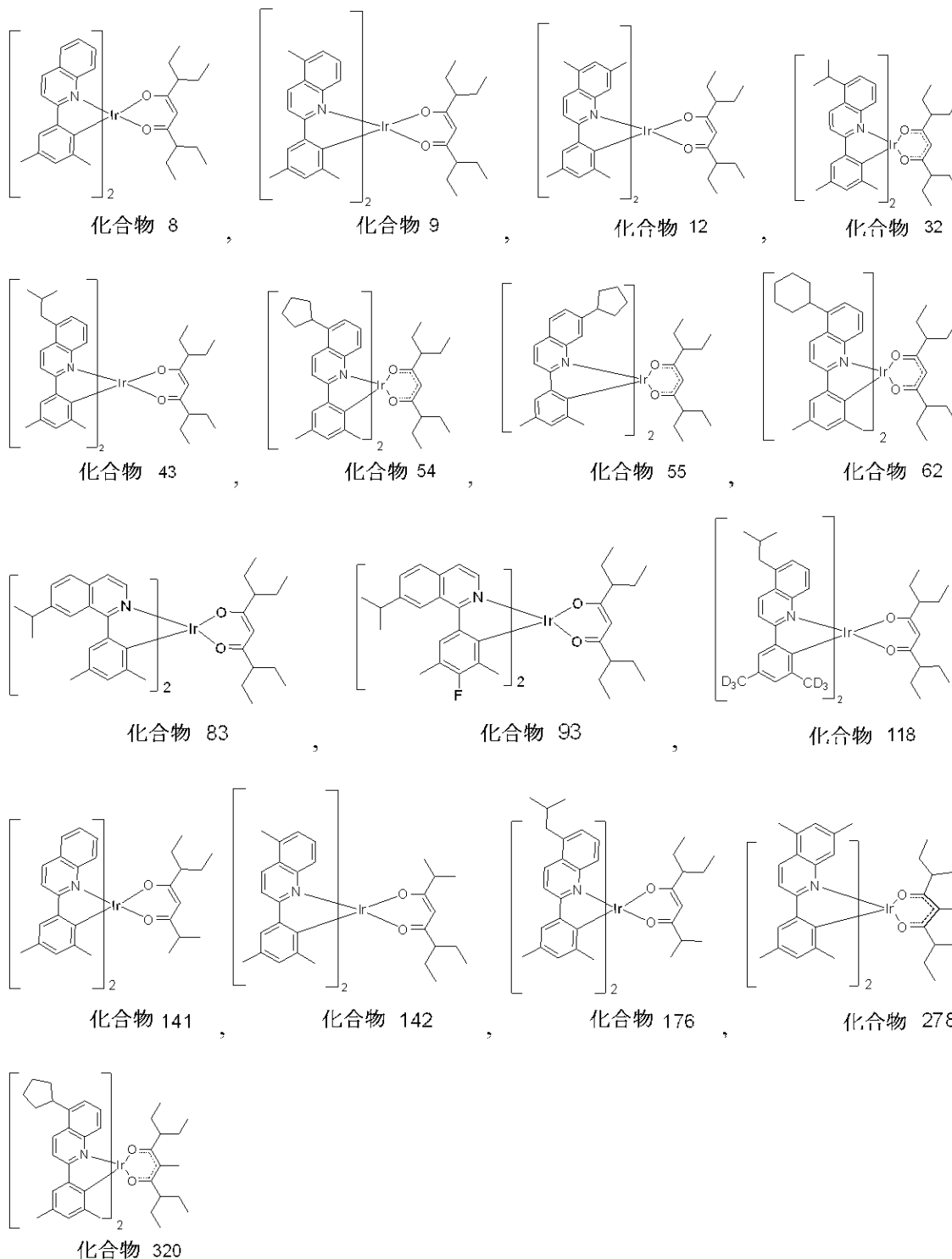
20

30

40

50

【化 1 5】



【 0 0 4 5】

本開示の他の態様によれば、第 1 の有機発光デバイスを含む第 1 のデバイスが提供される。前記第 1 の有機発光デバイスは、アノードと、カソードと、前記アノードと前記カソードとの間に配置された有機層とを含むことができる。前記有機層は、本明細書中に定義される、式 I を有する第 1 の配位子 L¹ を含む化合物を含むことができる。

【 0 0 4 6】

1 つの実施形態においては、前記化合物は、化合物 8、化合物 9、化合物 12、化合物 32、化合物 43、化合物 54、化合物 55、化合物 62、化合物 83、化合物 93、化合物 118、化合物 141、化合物 142、化合物 176、化合物 278、及び化合物 320 からなる群から選択することができる。

10

20

30

40

50

【0047】

前記第1のデバイスは、消費者製品、有機発光デバイス、及び／又は照明パネルの1つ以上であることができる。

【0048】

幾つかの実施形態においては、前記有機層は、発光層であることができ、前記化合物は、発光ドーパントであることができ、他の実施形態においては、前記化合物は、非発光ドーパントであることができる。

【0049】

前記有機層はまた、ホストを含むことができる。幾つかの実施形態においては、前記ホストは、金属錯体を含むことができる。1つの実施形態においては、前記ホストは、金属8-ヒドロキシキノレートであることができる。前記ホストは、ベンゾ縮合チオフェン又はベンゾ縮合フランを含むトリフェニレンであることができる。前記ホストにおける置換基はいずれも、 C_nH_{2n+1} 、 OC_nH_{2n+1} 、 OAr_1 、 $N(C_nH_{2n+1})_2$ 、 $N(Ar_1)(Ar_2)$ 、 $CH=CH-C_nH_{2n+1}$ 、 $C\equiv C-C_nH_{2n+1}$ 、 Ar_1 、 Ar_1-Ar_2 、及び $C_nH_{2n}-Ar_1$ からなる群から独立して選択される非縮合置換基であるか、又は無置換であることができる。前述の置換基において、 n は1から10の範囲であることができ、 Ar_1 と Ar_2 はベンゼン、ビフェニル、ナフタレン、トリフェニレン、カルバゾール及び複素芳香族類似体からなる群から独立して選択されること

10

【0050】

前記ホストはカルバゾール、ジベンゾチオフェン、ジベンゾフラン、ジベンゾセレノフェン、アザカルバゾール、アザジベンゾチオフェン、アザジベンゾフラン、及びアザジベンゾセレノフェンからなる群から選択される化合物であることができる。上述のフラグメント、即ちアザジベンゾフラン、アザジベンゾチオフェンなどの「アザ」という名称は、各フラグメント中の1つ以上のC-H基が窒素原子に置き換わっていることを意味し、例えば、何ら限定するものではないが、アザトリフェニレンは、ジベンゾ[f, h]キノキサリンとジベンゾ[f, h]キノリンのいずれをも包含する。当業者であれば、上述のアザ誘導体の他の窒素アナログを容易に想像することができ、このようなアナログ全てが、本明細書に記載の前記用語によって包含されることが意図される。前記ホストは金属錯体である。前記ホストは下記からなる群から選択される具体的な化合物であることができる：

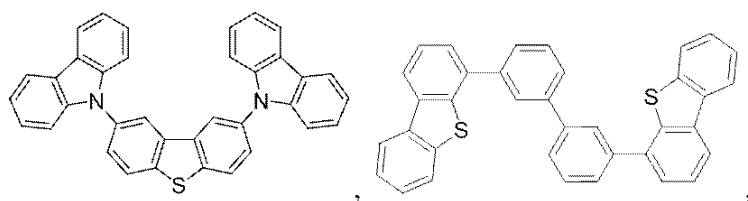
20

30

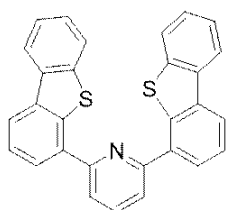
40

50

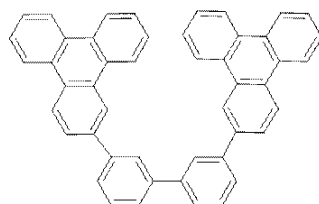
【化 1 6】



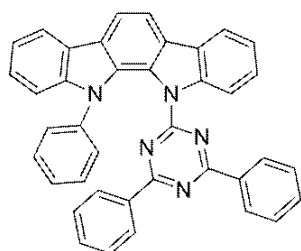
,



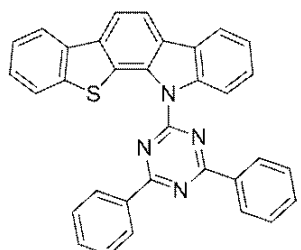
,



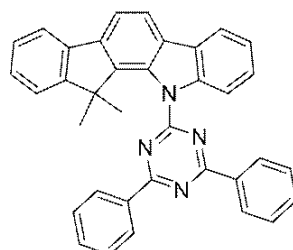
,



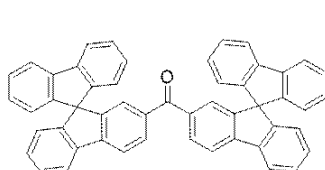
,



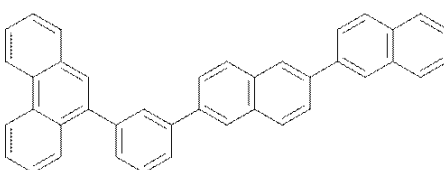
,



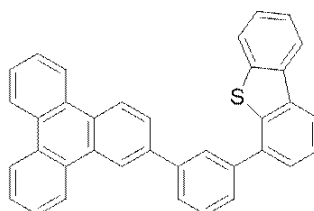
,



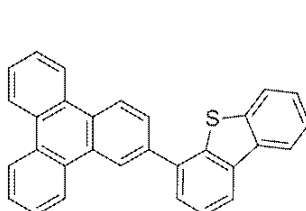
,



,



,



,

及びこれらの組合せ。

【0051】

さらに本開示の別の側面においては、本明細書中に定義されている式 1 を有する第 1 の配位子 L 1 を含む組成物も、本明細書中において開示されている発明の範囲内である。前記組成物は、本明細書中に開示されている溶媒、ホスト、ホール注入材料、ホール輸送材料、及び電子輸送層材料からなる 1 又は複数の構成要素を含むことができる。

他の材料との組合せ

【0052】

有機発光デバイス中の特定の層に有用として本明細書において記述されている材料は、デ

10

20

30

40

50

バイス中に存在する多種多様な他の材料と組み合わせて使用され得る。例えば、本明細書において開示されている発光性ドーパントは、多種多様なホスト、輸送層、ブロッキング層、注入層、電極、及び存在し得る他の層と併せて使用され得る。以下で記述又は参照される材料は、本明細書において開示されている化合物と組み合わせて有用となり得る材料の非限定的な例であり、当業者であれば、組み合わせて有用となり得る他の材料を特定するための文献を容易に閲覧することができる。

H I L / H T L :

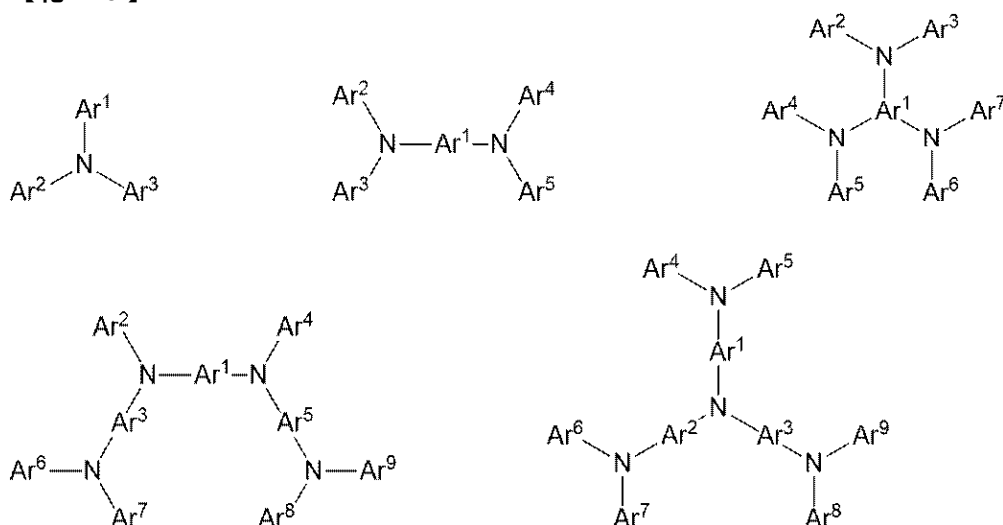
【 0 0 5 3 】

本発明の実施形態において使用される正孔注入／輸送材料は特に限定されず、その化合物が正孔注入／輸送材料として典型的に使用されるものである限り、任意の化合物を使用し
10
てよい。材料の例は、フタロシアニン又はポルフィリン誘導体；芳香族アミン誘導体；インドロカルバゾール誘導体；フッ化炭化水素を含有するポリマー；伝導性ドーパントを持つポリマー；P E D O T / P S S 等の導電性ポリマー；ホスホン酸及びシラン誘導体等の化合物に由来する自己集合モノマー；M o O _x 等の金属酸化物誘導体；1, 4, 5, 8, 9, 12-ヘキサアザトリフェニレンヘキサカルボニトリル等の p 型半導体有機化合物；金属錯体、並びに架橋性化合物を含むがこれらに限定されない。

【 0 0 5 4 】

H I L 又は H T L 中に使用される芳香族アミン誘導体の例は、下記の一般構造：

【 化 1 6 】



を含むがこれらに限定されない。

【 0 0 5 5 】

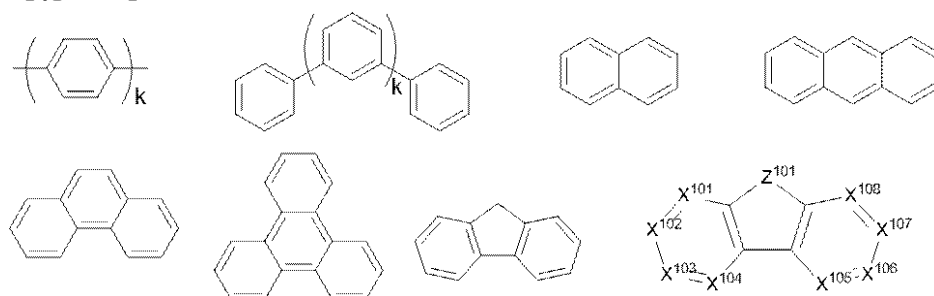
A r 1 から A r 9 のそれぞれは、ベンゼン、ビフェニル、トリフェニル、トリフェニレン、ナフタレン、アントラセン、フェナレン、フェナントレン、フルオレン、ピレン、クリセン、ペリレン、アズレン等の芳香族炭化水素環式化合物からなる群；ジベンゾチオフェン、ジベンゾフラン、ジベンゾセレノフェン、フラン、チオフェン、ベンゾフラン、ベンゾチオフェン、ベンゾセレノフェン、カルバゾール、インドロカルバゾール、ピリジルインドール、ピロロジピリジン、ピラゾール、イミダゾール、トリアゾール、オキサゾール、チアゾール、オキサジアゾール、オキサトリアゾール、ジオキサゾール、チアジアゾール、ピリジン、ピリダジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン、オキサジン、オキサチアジン、オキサジアジン、インドール、ベンズイミダゾール、インダゾール、インドキサジン、ベンゾオキサゾール、ベンズイソオキサゾール、ベンゾチアゾール、キノリン、イソキノリン、シンノリン、キナゾリン、キノキサリン、ナフチリジン、フタラジン、プテリジン、キサンテン、アクリジン、フェナジン、フェノチアジン、フェノキサジン、ベンゾフロピリジン、フロジピリジン、ベンゾチエノピリジン、チエノジピリジン、ベンゾセレノフェノピリジン及びセレノフェノジピリジン等の芳香族複素環式化合物からなる群；並びに芳香族炭化水素環式基及び芳香族複素環式基から選択される同じ種類又は異なる種
40
50

類の基である 2 から 10 個の環式構造単位からなる群から選択され、且つ、直接的に、又は酸素原子、窒素原子、硫黄原子、ケイ素原子、リン原子、ホウ素原子、鎖構造単位及び脂肪族環式基の少なくとも 1 つを介して、互いに結合している。ここで、各 Ar は、水素、重水素、ハライド、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、アリールアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、アシル、カルボニル、カルボン酸、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルフォニル、ホスフィノ及びこれらの組み合わせからなる群から選択される置換基によって更に置換されている。

【0056】

一態様において、Ar 1 から Ar 9 は、

【化 17】



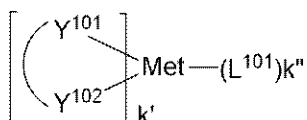
からなる群から独立に選択される。

k は 1 から 20 までの整数であり；X 101 から X 108 は C (CH を含む) 又は N であり；Z 101 は NAr 1、O、又は S であり；Ar 1 は、上記で定義したものと同一基を有する。

【0057】

HIL 又は HTL 中に使用される金属錯体の例は、下記の一般式：

【化 18】



を含むがこれに限定されない。

Met は、40 より大きい原子量を有し得る金属であり；(Y 101 - Y 102) は二座配位子であり、Y 101 及び Y 102 は、C、N、O、P 及び S から独立に選択され；L 101 は補助配位子であり；k' は、1 から金属に付着し得る配位子の最大数までの整数値であり；且つ、k' + k'' は、金属に付着し得る配位子の最大数である。

【0058】

一態様において、(Y 101 - Y 102) は 2-フェニルピリジン誘導体である。別の態様において、(Y 101 - Y 102) はカルベン配位子である。別の態様において、Met は、Ir、Pt、Os 及び Zn から選択される。更なる態様において、金属錯体は、Fc⁺/Fc カップルに対して、溶液中で約 0.6 V 未満の最小酸化電位を有する。

ホスト：

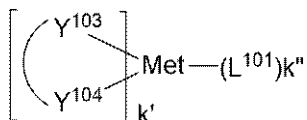
【0059】

本発明の有機 EL デバイスの発光層は、発光材料として少なくとも金属錯体を含むことが好ましく、前記金属錯体をドーパント材料として用いるホスト材料を含んでもよい。前記ホスト材料の例は、特に限定されず、ホストの三重項エネルギーがドーパントのものより大きい限り、任意の金属錯体又は有機化合物を使用してよい。下記の表において、各色を発光するデバイスに好ましいホスト材料が分類されているが、三重項の基準が満たされれば、いずれのホスト材料もいずれのドーパントと共に用いてもよい。

【0060】

ホスト材料として使用される金属錯体の例は、下記の一般式を有することが好ましい。

【化19】

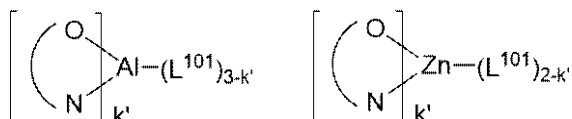


式中、Metは金属であり；(Y¹⁰³ - Y¹⁰⁴)は二座配位子であり、Y¹⁰³及びY¹⁰⁴は、C、N、O、P及びSから独立に選択され；L¹⁰¹は他の配位子であり；k'は、1から金属に付着し得る配位子の最大数までの整数値であり；且つ、k' + k''は、10金属に付着し得る配位子の最大数である。

【0061】

一態様において、金属錯体は、下記の錯体である。

【化20】



式中、(O - N)は、原子O及びNに配位された金属を有する二座配位子である。

【0062】

別の態様において、Metは、Ir及びPtから選択される。更なる態様において、(Y¹⁰³ - Y¹⁰⁴)はカルベン配位子である。

【0063】

ホスト材料として使用される有機化合物の例は、ベンゼン、ビフェニル、トリフェニル、トリフェニレン、ナフタレン、アントラセン、フェナレン、フェナントレン、フルオレン、ピレン、クリセン、ペリレン、アズレン等の芳香族炭化水素環式化合物からなる群；ジベンゾチオフェン、ジベンゾフラン、ジベンゾセレノフェン、フラン、チオフェン、ベンゾフラン、ベンゾチオフェン、ベンゾセレノフェン、カルバゾール、インドロカルバゾール、ピリジルインドール、ピロロジピリジン、ピラゾール、イミダゾール、トリアゾール、オキサゾール、チアゾール、オキサジアゾール、オキサトリアゾール、ジオキサゾール、チアジアゾール、ピリジン、ピリダジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン、オキサジン、オキサチアジン、オキサジアジン、インドール、ベンズイミダゾール、インダゾール、インドキサジン、ベンゾオキサゾール、ベンズイソオキサゾール、ベンゾチアゾール、キノリン、イソキノリン、シンノリン、キナゾリン、キノキサリン、ナフチリジン、フタラジン、プテリジン、キサンテン、アクリジン、フェナジン、フェノチアジン、フェノキサジン、ベンゾフロピリジン、フロジピリジン、ベンゾチエノピリジン、チエノジピリジン、ベンゾセレノフェノピリジン及びセレノフェノジピリジン等の芳香族複素環式化合物からなる群；並びに芳香族炭化水素環式基及び芳香族複素環式基から選択される同じ種類又は異なる種類の基であり、且つ、直接的に、又は酸素原子、窒素原子、硫黄原子、ケイ素原子、リン原子、ホウ素原子、鎖構造単位及び脂肪族環式基の少なくとも1つを介して互いに結合している2から10個の環式構造単位からなる群から選択される。各基は、水素、重水素、ハライド、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、アリールアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、アシル、カルボニル、カルボン酸、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルフォニル、ホスフィノ及びこれらの組み合わせからなる群から選択される置換基によって更に置換されている。

【0064】

一態様において、ホスト化合物は、分子中に下記の群の少なくとも1つを含有する。

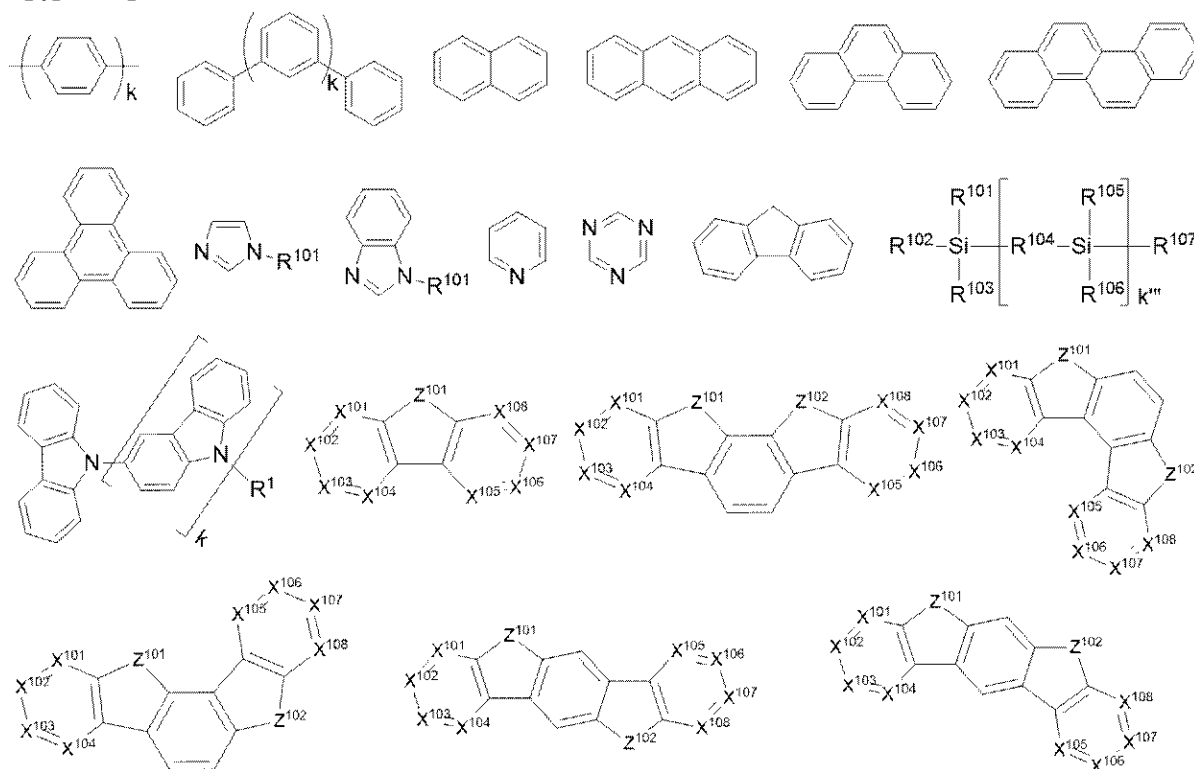
20

30

40

50

【化 2 1】



10

20

式中、R 1 0 1 から R 1 0 7 は、独立して、水素、重水素、ハライド、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、アリアルアルキル、アルコキシ、アリアルオキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリアル、ヘテロアリアル、アシル、カルボニル、カルボン酸、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルフォニル、ホスフィノ及びこれらの組み合わせからなる群から選択され、それがアリアル又はヘテロアリアルである場合、上記で言及した Ar のものと同様の定義を有する。k は 0 から 2 0 又は 1 から 2 0 までの整数であり；k ' ' ' は、0 から 2 0 までの整数である。X 1 0 1 から X 1 0 8 は C (C H を含む) 又は N から選択される。Z 1 0 1 及び Z 1 0 2 は N R 1 0 1、O、又は S である。

30

H B L :

【0 0 6 5】

正孔ブロッキング層 (H B L) を使用して、発光層から出る正孔及び／又は励起子の数を低減させることができる。デバイスにおけるそのようなブロッキング層の存在は、ブロッキング層を欠く同様のデバイスと比較して大幅に高い効率をもたらす得る。また、ブロッキング層を使用して、発光を O L E D の所望の領域に制限することもできる。

【0 0 6 6】

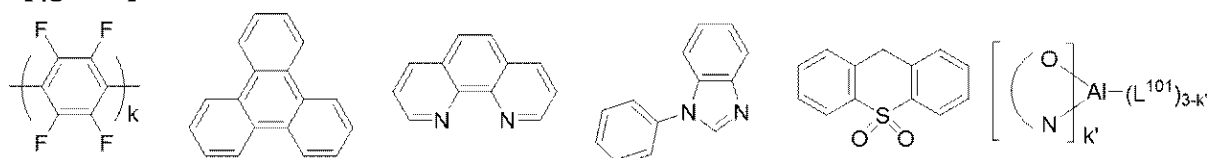
一態様において、前記 H B L 中に使用される前記化合物は、上述したホストとして使用されるものと同じ分子を含有する。

40

【0 0 6 7】

別の態様において、前記 H B L 中に使用される前記化合物は、分子中に下記の群の少なくとも 1 つを含有する。

【化 2 2】



式中、k は 1 から 2 0 までの整数であり；L 1 0 1 は他の配位子であり、k ' は 1 から 3 ま

50

での整数である。

E T L :

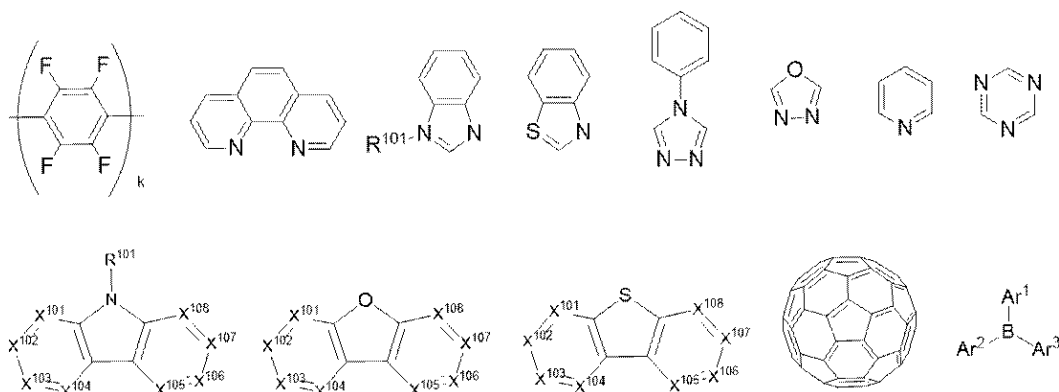
【0068】

電子輸送層 (E T L) は、電子を輸送することができる材料を含み得る。電子輸送層は、真性である (ドーピングされていない) か、又はドーピングされてよい。ドーピングを使用して、伝導性を増強することができる。E T L 材料の例は特に限定されず、電子を輸送するために典型的に使用されるものである限り、任意の金属錯体又は有機化合物を使用してよい。

【0069】

一態様において、前記 E T L 中に使用される前記化合物は、分子中に下記の群の少なくとも1つを含有する。

【化24】

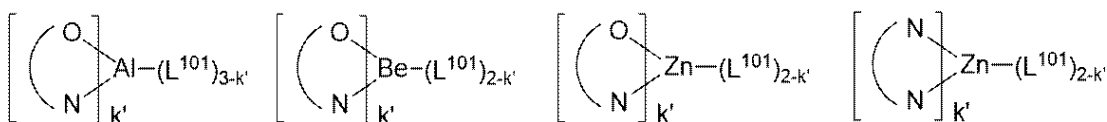


式中、R 1 0 1 は、水素、重水素、ハライド、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、アリールアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、アシル、カルボニル、カルボン酸、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルフォニル、ホスフィノ及びこれらの組み合わせからなる群から選択され、それがアリール又はヘテロアリールである場合、上記で言及した A r のものと同様の定義を有する。A r 1 から A r 3 は、上記で言及した A r のものと同様の定義を有する。k は 1 から 2 0 までの整数である。X 1 0 1 から X 1 0 8 は C (C H を含む) 又は N から選択される。

【0070】

別の態様において、前記 E T L 中に使用される金属錯体は、下記の一般式を含有するがこれらに限定されない。

【化23】



式中、(O-N) 又は (N-N) は、原子 O、N 又は N、N に配位された金属を有する二座配位子であり；L 1 0 1 は他の配位子であり；k ' は、1 から金属に付着し得る配位子の最大数までの整数値である。

【0071】

O L E D デバイスの各層中に使用される任意の上記で言及した化合物において、水素原子は、部分的に又は完全に重水素化されていてよい。故に、メチル、フェニル、ピリジル等であるがこれらに限定されない任意の具体的に挙げられている置換基は、それらの重水素化されていない、部分的に重水素化された、及び完全に重水素化されたバージョンを包含する。同様に、アルキル、アリール、シクロアルキル、ヘテロアリール等であるがこれらに限定されない置換基のクラスは、それらの重水素化されていない、部分的に重水素化さ

れた、及び完全に重水素化されたバージョンも包含する。

【0072】

本明細書において開示されている材料に加えて且つ／又はそれらと組み合わせて、多くの正孔注入材料、正孔輸送材料、ホスト材料、ドーパント材料、励起子／正孔ブロッキング層材料、電子輸送及び電子注入材料がOLEDにおいて使用され得る。OLED中で本明細書において開示されている材料と組み合わせて使用され得る材料の非限定的な例を、以下の表2に収載する。表2は、材料の非限定的なクラス、各クラスについての化合物の非限定的な例、及び該材料を開示している参考文献を収載する。

【表2-1】

材料	材料の例	刊行物
正孔注入材料		
フタロシアニン及び ポルフィリン化合物		A p p l . P h y s . L e t t . 6 9 , 2 1 6 0 (1 9 9 6)
星形 トリアリールアミン		J . L u m i n . 7 2 - 7 4 , 9 8 5 (1 9 9 7)
C F _x フッ化炭化水 素ポリマー	$\left[\text{CH}_x\text{F}_y \right]_n$	A p p l . P h y s . L e t t . 7 8 , 6 7 3 (2 0 0 1)
導電性ポリマー（例 えば、PEDOT： PSS、ポリアニリン、 ポリチオフェン）		S y n t h . M e t . 8 7 , 1 7 1 (1 9 9 7) W O 2 0 0 7 0 0 2 6 8 3
ホスホン酸及びシラ ンSAM		U S 2 0 0 3 0 1 6 2 0 5 3
トリアリールアミン 又はポリチオフェン ポリマーと伝導性ド ーパント		E P 1 7 2 5 0 7 9 A 1

10

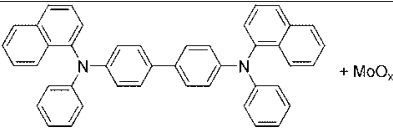
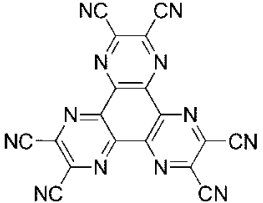
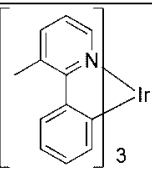
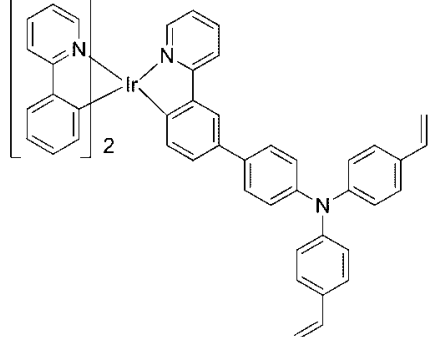
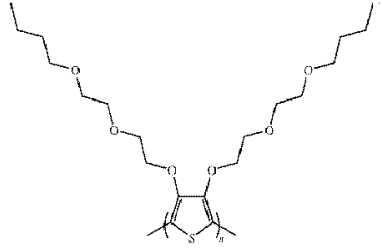
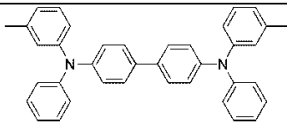
20

30

40

50

【表 2 - 2】

有機化合物と酸化モリブデン及び酸化タングステン等の伝導性無機化合物	 + MoO _x	U S 2 0 0 5 0 1 2 3 7 5 1 S I D S y m p o s i u m D i g e s t , 3 7 , 9 2 3 (2 0 0 6) W O 2 0 0 9 0 1 8 0 0 9
n 型半導体有機錯体		U S 2 0 0 2 0 1 5 8 2 4 2
金属有機金属錯体		U S 2 0 0 6 0 2 4 0 2 7 9
架橋性化合物		U S 2 0 0 8 0 2 2 0 2 6 5
ポリチオフェンベースのポリマー及びコポリマー		W O 2 0 1 1 0 7 5 6 4 4 E P 2 3 5 0 2 1 6
正孔輸送材料		A p p l . P h y s . L e t t . 5 1 , 9 1 3 (1 9 8 7)

10

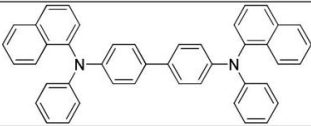
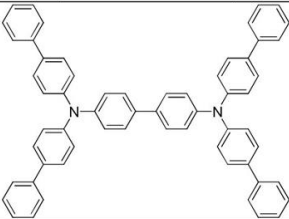
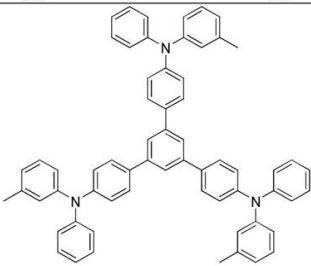
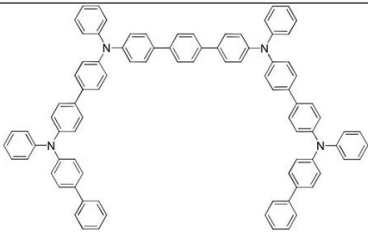
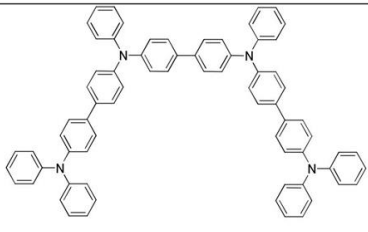
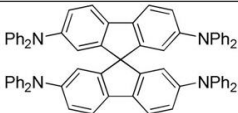
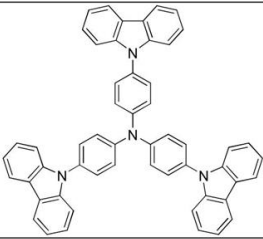
20

30

40

50

【表 2 - 3】

		U S 5 0 6 1 5 6 9
		E P 6 5 0 9 5 5
		J . M a t e r . C h e m . 3 , 3 1 9 (1 9 9 3)
		A p p l . P h y s . L e t t . 9 0 , 1 8 3 5 0 3 (2 0 0 7)
		A p p l . P h y s . L e t t . 9 0 , 1 8 3 5 0 3 (2 0 0 7)
スピロフルオレンコア上のトリアリールアミン		S y n t h . M e t . 9 1 , 2 0 9 (1 9 9 7)
アリールアミンカルバゾール化合物		A d v . M a t e r . 6 , 6 7 7 (1 9 9 4) , U S 2 0 0 8 0 1 2 4 5 7 2

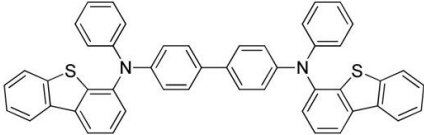
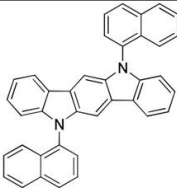
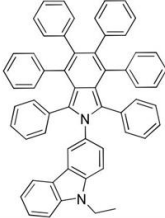
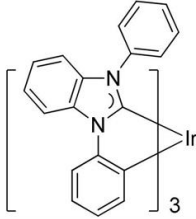
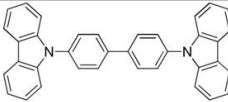
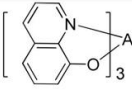
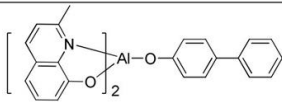
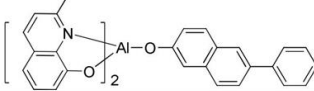
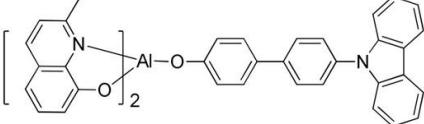
10

20

30

40

【表 2 - 4】

トリアリールアミン と (ジ) ベンゾチオ フェン / (ジ) ベン ゾフラン		U S 2 0 0 7 0 2 7 8 9 3 8 , U S 2 0 0 8 0 1 0 6 1 9 0 U S 2 0 1 1 0 1 6 3 3 0 2
インドロカルバゾール		S y n t h . M e t . 1 1 1 , 4 2 1 (2 0 0 0)
イソインドール化合 物		C h e m . M a t e r . 1 5 , 3 1 4 8 (2 0 0 3)
金属カルベン錯体		U S 2 0 0 8 0 0 1 8 2 2 1
リン光性OLEDホスト材料		
赤色ホスト		
アリールカルバゾール		A p p l . P h y s . L e t t . 7 8 , 1 6 2 2 (2 0 0 1)
金属 8 - ヒドロキシ キノレート (例えば 、 A l q 3 、 B A l q)		N a t u r e 3 9 5 , 1 5 1 (1 9 9 8)
		U S 2 0 0 6 0 2 0 2 1 9 4
		W O 2 0 0 5 0 1 4 5 5 1
		W O 2 0 0 6 0 7 2 0 0 2

10

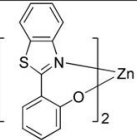
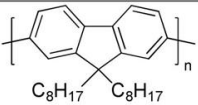
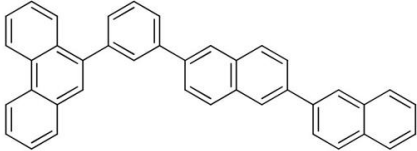
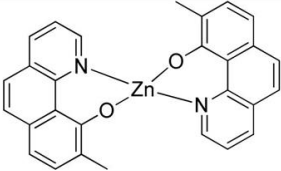
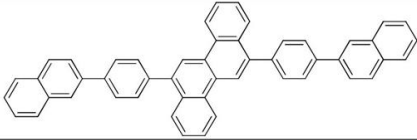
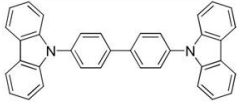
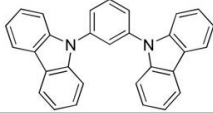
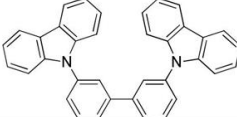
20

30

40

50

【表 2 - 5】

金属フェノキシベン ゾチアゾール化合物		App l . P h y s . L e t t . 9 0 , 1 2 3 5 0 9 (2 0 0 7)
共役オリゴマー及び ポリマー（例えば、 ポリフルオレン）		Org . E l e c t r o n . 1 , 1 5 (2 0 0 0)
芳香族縮合環		WO 2 0 0 9 0 6 6 7 7 9 , WO 2 0 0 9 0 6 6 7 7 8 , WO 2 0 0 9 0 6 3 8 3 3 , US 2 0 0 9 0 0 4 5 7 3 1 , US 2 0 0 9 0 0 4 5 7 3 0 , WO 2 0 0 9 0 0 8 3 1 1 , US 2 0 0 9 0 0 0 8 6 0 5 , US 2 0 0 9 0 0 0 9 0 6 5
亜鉛錯体		WO 2 0 1 0 0 5 6 0 6 6
クリセンベースの化 合物		WO 2 0 1 1 0 8 6 8 6 3
緑色ホスト		
アリールカルバゾール		App l . P h y s . L e t t . 7 8 , 1 6 2 2 (2 0 0 1)
		US 2 0 0 3 0 1 7 5 5 5 3
		WO 2 0 0 1 0 3 9 2 3 4

10

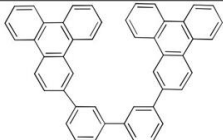
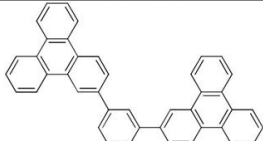
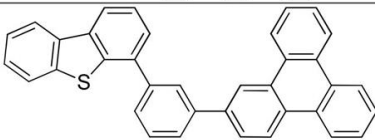
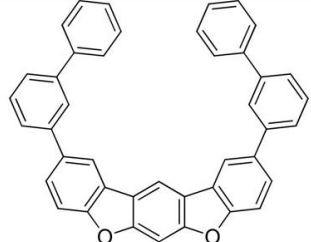
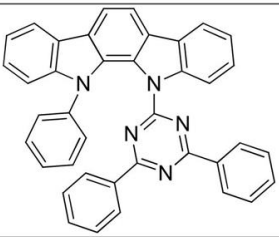
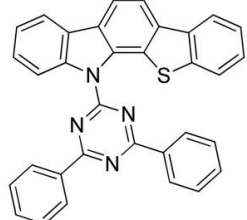
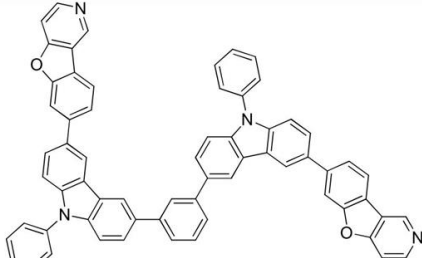
20

30

40

50

【表 2 - 6】

アリールトリフェニレン化合物		US 20060280965
		US 20060280965
		WO 2009021126
ポリ縮合ヘテロアリール化合物		US 20090309488 US 20090302743 US 20100012931
ドナーアクセプター型分子		WO 2008056746
		WO 2010107244
アザ-カルバゾール／DBT／DBF		JP 2008074939

10

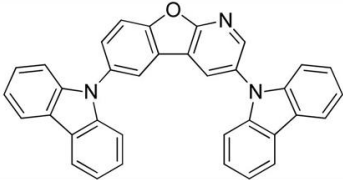
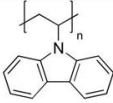
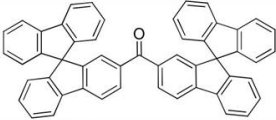
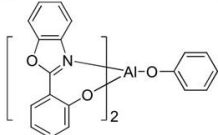
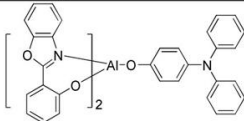
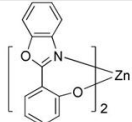
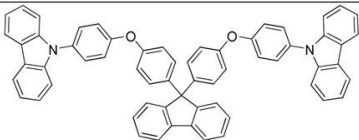
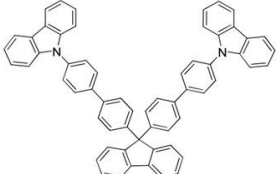
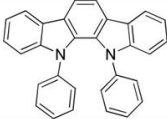
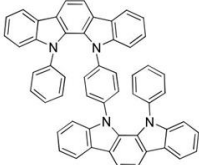
20

30

40

50

【表 2 - 7】

		U S 2 0 1 0 0 1 8 7 9 8 4
ポリマー（例えば、 P V K）		A p p l . P h y s . L e t t . 7 7 , 2 2 8 0 (2 0 0 0)
スピロフルオレン化合物		W O 2 0 0 4 0 9 3 2 0 7
金属フェノキシベン ゾオキサゾール化合物		W O 2 0 0 5 0 8 9 0 2 5
		W O 2 0 0 6 1 3 2 1 7 3
		J P 2 0 0 5 1 1 6 1 0
スピロフルオレンー カルバゾール化合物		J P 2 0 0 7 2 5 4 2 9 7
		J P 2 0 0 7 2 5 4 2 9 7
インドロカルバゾール		W O 2 0 0 7 0 6 3 7 9 6
		W O 2 0 0 7 0 6 3 7 5 4

10

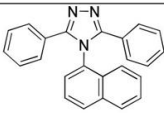
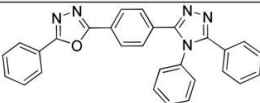
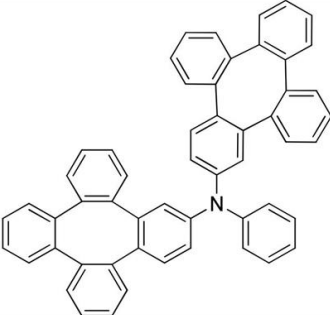
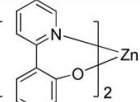
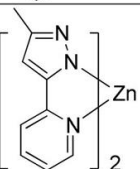
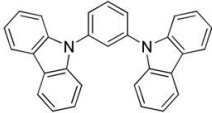
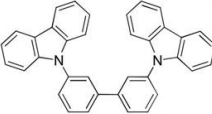
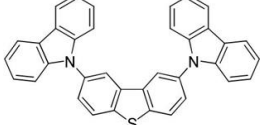
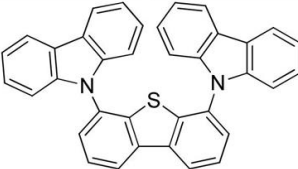
20

30

40

50

【表 2 - 8】

5員環電子欠損複素環（例えば、トリアゾール、オキサジアゾール）		J . A p p l . P h y s . 9 0 , 5 0 4 8 (2 0 0 1)
		W O 2 0 0 4 1 0 7 8 2 2
テトラフェニレン錯体		U S 2 0 0 5 0 1 1 2 4 0 7
金属フェノキシピリジン化合物		W O 2 0 0 5 0 3 0 9 0 0
金属配位錯体（例えば、Zn、AlとN ⁻ N配位子）		U S 2 0 0 4 0 1 3 7 2 6 8 , U S 2 0 0 4 0 1 3 7 2 6 7
青色ホスト		
アリールカルバゾール		A p p l . P h y s . L e t t , 8 2 , 2 4 2 2 (2 0 0 3)
		U S 2 0 0 7 0 1 9 0 3 5 9
ジベンゾチオフェン／ジベンゾフランカルバゾール化合物		W O 2 0 0 6 1 1 4 9 6 6 , U S 2 0 0 9 0 1 6 7 1 6 2
		U S 2 0 0 9 0 1 6 7 1 6 2

10

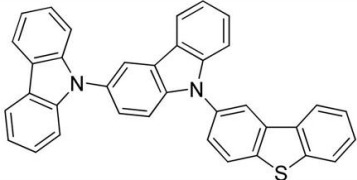
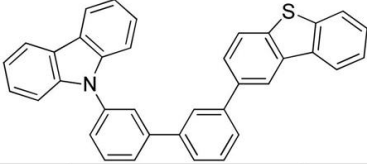
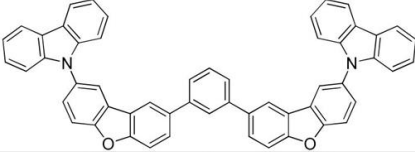
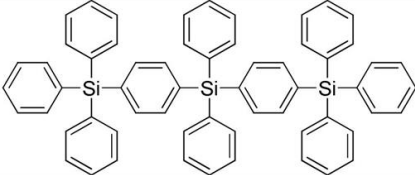
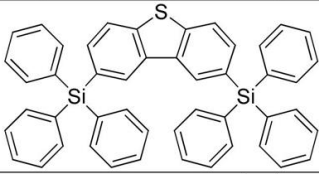
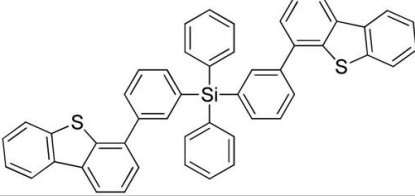
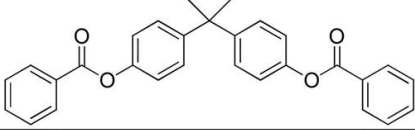
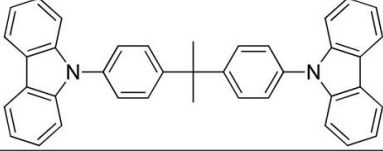
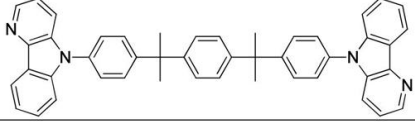
20

30

40

50

【表 2 - 9】

		WO 2 0 0 9 0 8 6 0 2 8
		US 2 0 0 9 0 0 3 0 2 0 2 , US 2 0 0 9 0 0 1 7 3 3 0
		US 2 0 1 0 0 0 8 4 9 6 6
ケイ素アリール化合物		US 2 0 0 5 0 2 3 8 9 1 9
		WO 2 0 0 9 0 0 3 8 9 8
ケイ素／ゲルマニウムアリール化合物		EP 2 0 3 4 5 3 8 A
アリールベンゾイルエステル		WO 2 0 0 6 1 0 0 2 9 8
非共役基によって架橋されたカルバゾール		US 2 0 0 4 0 1 1 5 4 7 6
アザールカルバゾール		US 2 0 0 6 0 1 2 1 3 0 8

10

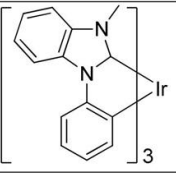
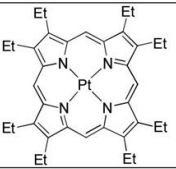
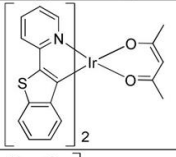
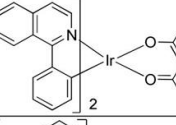
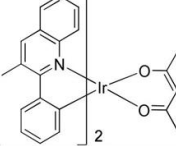
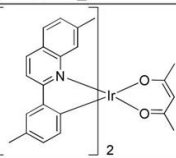
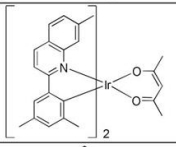
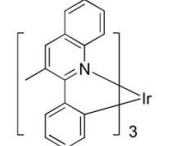
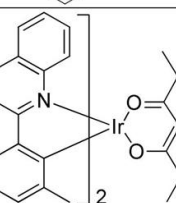
20

30

40

50

【表 2 - 1 0】

高三重項金属有機金属錯体		U S 7 1 5 4 1 1 4
リン光性ドーパント		
赤色ドーパント		
重金属ポルフィリン (例えば、PtOEP)		N a t u r e 3 9 5 , 1 5 1 (1 9 9 8)
イリジウム (III) 有機金属錯体		A p p l . P h y s . L e t t . 7 8 , 1 6 2 2 (2 0 0 1)
		U S 2 0 0 6 8 3 5 4 6 9
		U S 2 0 0 6 8 3 5 4 6 9
		U S 2 0 0 6 0 2 0 2 1 9 4
		U S 2 0 0 6 0 2 0 2 1 9 4
		U S 2 0 0 7 0 0 8 7 3 2 1
		U S 2 0 0 8 0 2 6 1 0 7 6 U S 2 0 1 0 0 0 9 0 5 9 1

10

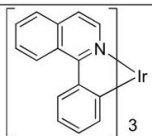
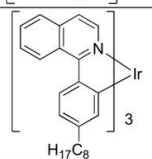
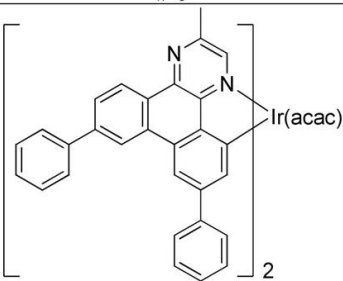
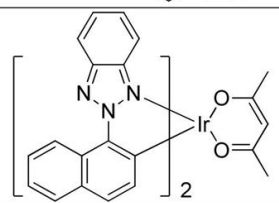
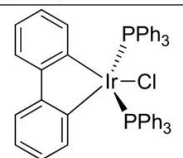
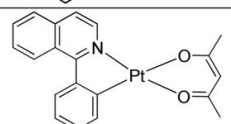
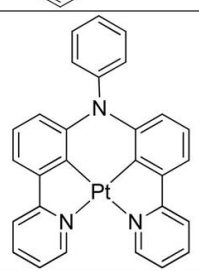
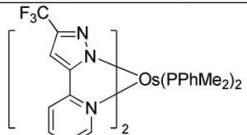
20

30

40

50

【表 2 - 1 1】

		U S 2 0 0 7 0 0 8 7 3 2 1
		A d v . M a t e r . 1 9 , 7 3 9 (2 0 0 7)
		W O 2 0 0 9 1 0 0 9 9 1
		W O 2 0 0 8 1 0 1 8 4 2
		U S 7 2 3 2 6 1 8
白金 (I I) 有機金 属錯体		W O 2 0 0 3 0 4 0 2 5 7
		U S 2 0 0 7 0 1 0 3 0 6 0
オスミウム (I I I) 錯体		C h e m . M a t e r . 1 7 , 3 5 3 2 (2 0 0 5)

10

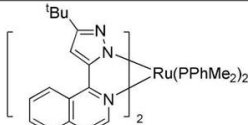
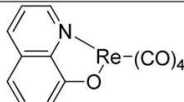
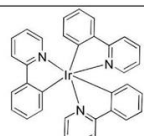
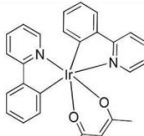
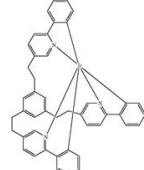
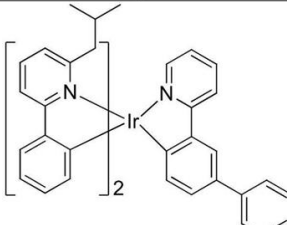
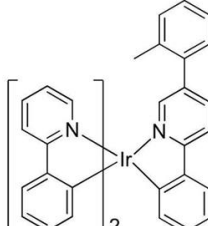
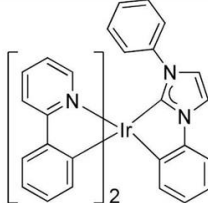
20

30

40

50

【表 2 - 1 2】

ルテニウム (I I) 錯体		A d v . M a t e r . 1 7 , 1 0 5 9 (2 0 0 5)
レニウム (I) 、 (I I) 及び (I I I) 錯体		U S 2 0 0 5 0 2 4 4 6 7 3
緑色ドーパント		
イリジウム (I I I) 有機金属錯体	 及びその誘導体	I n o r g . C h e m . 4 0 , 1 7 0 4 (2 0 0 1)
		U S 2 0 0 2 0 0 3 4 6 5 6
		U S 7 3 3 2 2 3 2
		U S 2 0 0 9 0 1 0 8 7 3 7
		W O 2 0 1 0 0 2 8 1 5 1
		E P 1 8 4 1 8 3 4 B

10

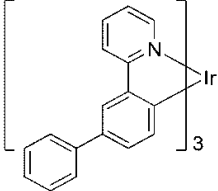
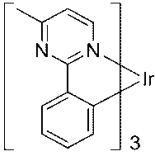
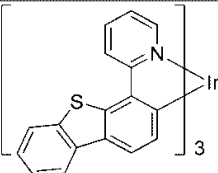
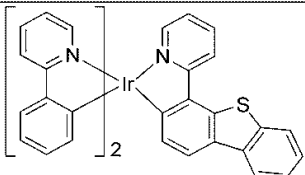
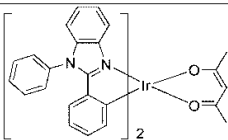
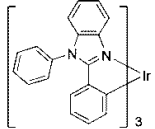
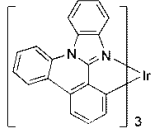
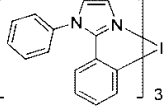
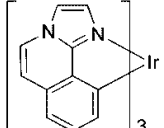
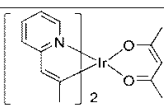
20

30

40

50

【表 2 - 1 3】

		US 2 0 0 6 0 1 2 7 6 9 6
		US 2 0 0 9 0 0 3 9 7 7 6
		US 6 9 2 1 9 1 5
		US 2 0 1 0 0 2 4 4 0 0 4
		US 6 6 8 7 2 6 6
		Chem. Mater. 16, 2 4 8 0 (2 0 0 4)
		US 2 0 0 7 0 1 9 0 3 5 9
		US 2 0 0 6 0 0 0 8 6 7 0 JP 2 0 0 7 1 2 3 3 9 2
		WO 2 0 1 0 0 8 6 0 8 9, WO 2 0 1 1 0 4 4 9 8 8
		Adv. Mater. 16, 2 0 0 3 (2004)

10

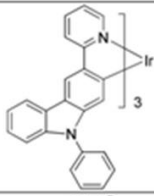
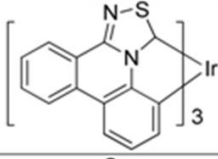
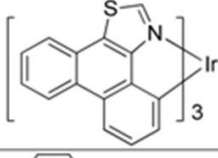
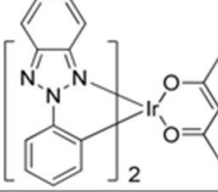
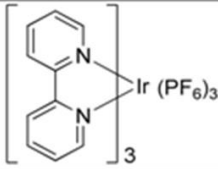
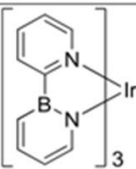
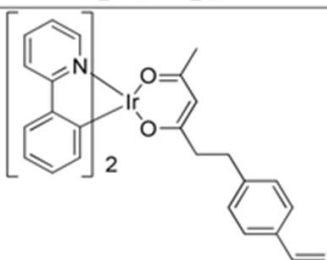
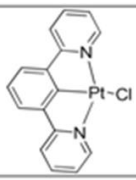
20

30

40

50

【表 2 - 1 4】

		Angew. Chem. Int. Ed. 2006, 45, 7800
		WO 2009050290
		US 20090165846
		US 20080015355
		US 20010015432
		US 20100295032
ポリマー金属有機金属化合物の単量体		US 7250226, US 7396598
多座配位子を含む Pt (II) 有機金属錯体		Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)

10

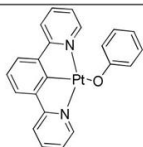
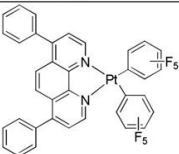
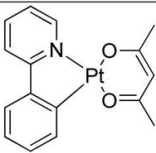
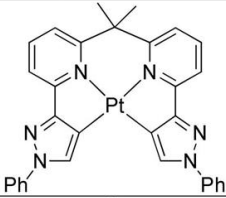
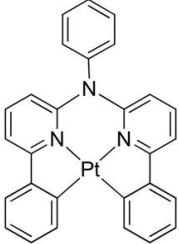
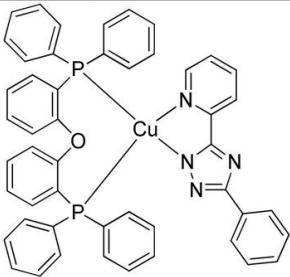
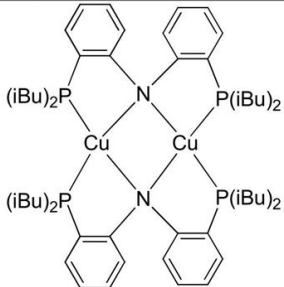
20

30

40

50

【表 2 - 1 5】

		Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)
		Chem. Lett. 34, 592 (2005)
		WO 2002015645
		US 20060263635
		US 20060182992 US 20070103060
Cu 錯体		WO 2009000673
		US 20070111026

10

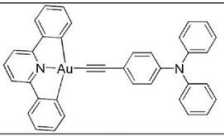
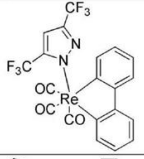
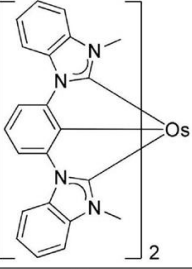
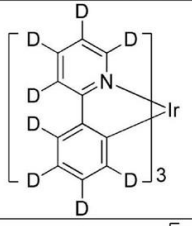
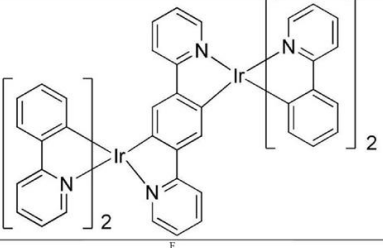
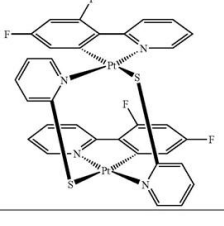
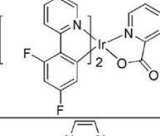
20

30

40

50

【表 2 - 1 6】

金錯体		Chem. Commun. 2906 (2005)
レニウム (III) 錯体		Inorg. Chem. 42, 1248 (2003)
オスミウム (II) 錯体		US 7 279 704
重水素化有機金属錯体		US 2 003 013 865 7
2つ以上の金属中心を持つ有機金属錯体		US 2 003 015 280 2
		US 7 090 928
青色ドーパント		
イリジウム (III) 有機金属錯体		WO 2 002 002 714
		WO 2 006 009 024

10

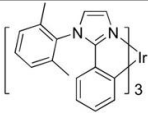
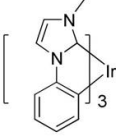
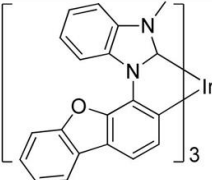
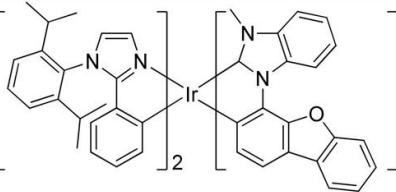
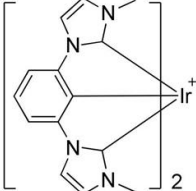
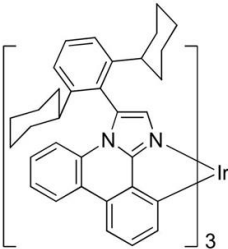
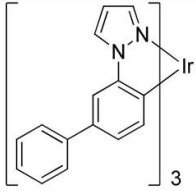
20

30

40

50

【表 2 - 1 7】

	U S 2 0 0 6 0 2 5 1 9 2 3 U S 2 0 1 1 0 0 5 7 5 5 9 U S 2 0 1 1 0 2 0 4 3 3 3
	U S 7 3 9 3 5 9 9 , W O 2 0 0 6 0 5 6 4 1 8 , U S 2 0 0 5 0 2 6 0 4 4 1 , W O 2 0 0 5 0 1 9 3 7 3
	U S 7 5 3 4 5 0 5
	W O 2 0 1 1 0 5 1 4 0 4
	U S 7 4 4 5 8 5 5
	U S 2 0 0 7 0 1 9 0 3 5 9 , U S 2 0 0 8 0 2 9 7 0 3 3 U S 2 0 1 0 0 1 4 8 6 6 3
	U S 7 3 3 8 7 2 2

10

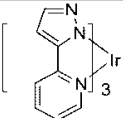
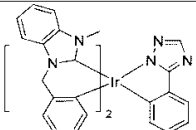
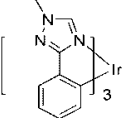
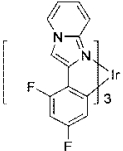
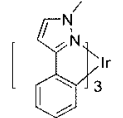
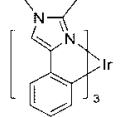
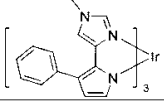
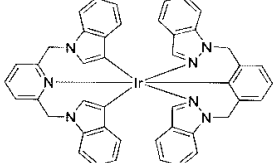
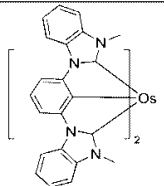
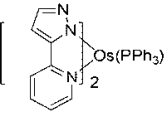
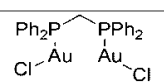
20

30

40

50

【表 2 - 1 8】

		U S 2 0 0 2 0 1 3 4 9 8 4
		A n g e w . C h e m . I n t . E d . 4 7 , 1 (2 0 0 8)
		C h e m . M a t e r . 1 8 , 5 1 1 9 (2 0 0 6)
		I n o r g . C h e m . 4 6 , 4 3 0 8 (2 0 0 7)
		W O 2 0 0 5 1 2 3 8 7 3
		W O 2 0 0 5 1 2 3 8 7 3
		W O 2 0 0 7 0 0 4 3 8 0
		W O 2 0 0 6 0 8 2 7 4 2
オスミウム (I I) 錯体		U S 7 2 7 9 7 0 4
		O r g a n o m e t a l l i c s 2 3 , 3 7 4 5 (2 0 0 4)
金錯体		A p p l . P h y s L e t t . 7 4 , 1 3 6 1 (1 9 9 9)

10

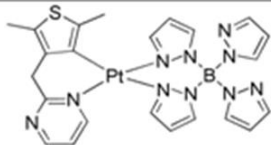
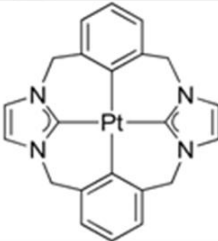
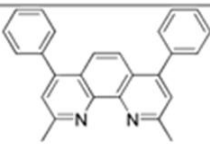
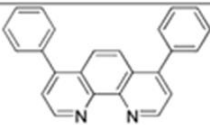
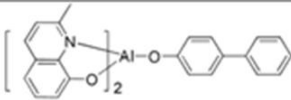
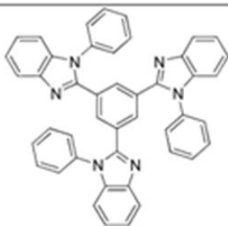
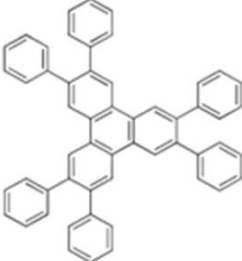
20

30

40

50

【表 2 - 1 9】

白金 (I I) 錯体		W O 2 0 0 6 0 9 8 1 2 0 , W O 2 0 0 6 1 0 3 8 7 4
少なくとも 1 つの金属-カルベン結合を持つ P t 四座錯体		U S 7 6 5 5 3 2 3
励起子／正孔ブロッキング層材料		
バソクプロイン化合物 (例えば、 B C P、B P h e n)		A p p l . P h y s . L e t t . 7 5 , 4 (1 9 9 9)
		A p p l . P h y s . L e t t . 7 9 , 4 4 9 (2 0 0 1)
金属 8 - ヒドロキシ キノレート (例えば 、 B A l q)		A p p l . P h y s . L e t t . 8 1 , 1 6 2 (2 0 0 2)
トリアゾール、オキサ ジアゾール、イミ ダゾール、ベンゾイ ミダゾール等の 5 員 環電子欠損複素環		A p p l . P h y s . L e t t . 8 1 , 1 6 2 (2 0 0 2)
トリフェニレン化合 物		U S 2 0 0 5 0 0 2 5 9 9 3

10

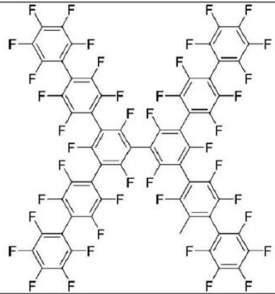
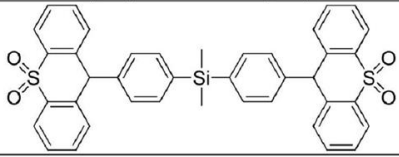
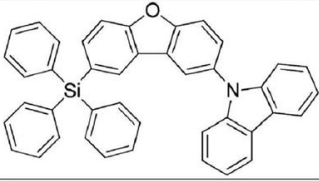
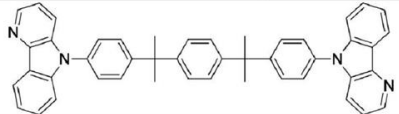
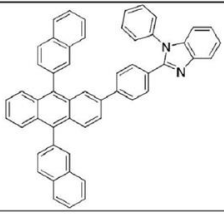
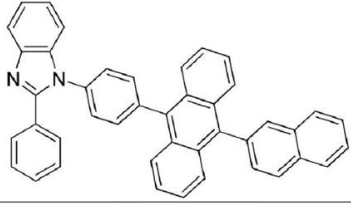
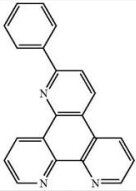
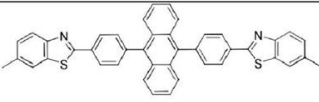
20

30

40

50

【表 2 - 2 0】

フッ素化芳香族化合物		Appl. Phys. Lett. 79, 156 (2001)
フェノチアジーン-S-オキシド		WO 2008 132085
シリル化された5員の窒素、酸素、硫黄又はリンジベンゾ複素環		WO 2010 079051
アザーカルバゾール		US 2006 0121308
電子輸送材料		
アントラセン-ベンゾイミダゾール化合物		WO 2003 060956
		US 2009 0179554
アザトリフェニレン誘導体		US 2009 0115316
アントラセン-ベンゾチアゾール化合物		Appl. Phys. Lett. 89, 063504 (2006)

10

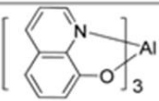
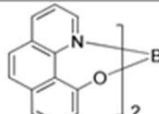
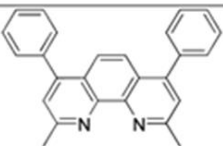
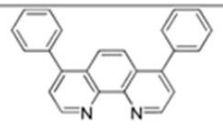
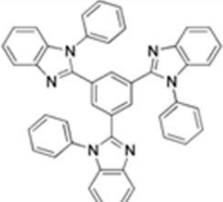
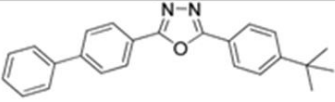
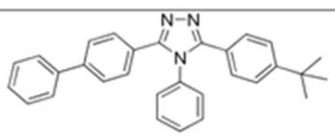
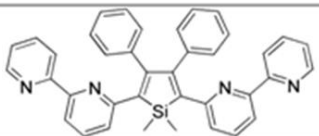
20

30

40

50

【表 2 - 2 1】

金属 8-ヒドロキシキノレート (例えば、 Alq_3 、 Zr q_4)		Appl. Phys. Lett. 51, 913 (1987) US 7 230 107
金属ヒドロキシベノキノレート (hydroxybenoquinolates)		Chem. Lett. 5, 905 (1993)
BCP、BPhen等のバソクプロイン化合物		Appl. Phys. Lett. 91, 263503 (2007)
		Appl. Phys. Lett. 79, 449 (2001)
5員環電子欠損複素環 (例えば、トリアゾール、オキサジアゾール、イミダゾール、ベンゾイミダゾール)		Appl. Phys. Lett. 74, 865 (1999)
		Appl. Phys. Lett. 55, 1489 (1989)
		Jpn. J. Appl. Phys. 32, L917 (1993)
シロール化合物		Org. Electron. 4, 113 (2003)

10

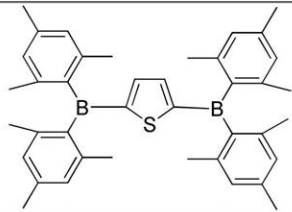
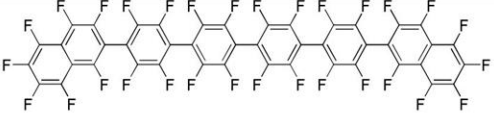
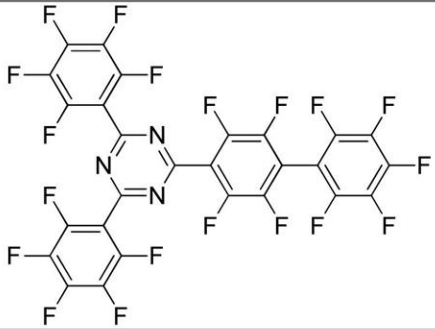
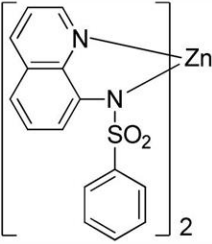
20

30

40

50

【表 2 - 2 2】

アリールボラン化合物		J . A m . C h e m . S o c . 1 2 0 , 9 7 1 4 (1 9 9 8)
フッ素化芳香族化合物		J . A m . C h e m . S o c . 1 2 2 , 1 8 3 2 (2 0 0 0)
フラレン（例えば、C60）		U S 2 0 0 9 0 1 0 1 8 7 0
トリアジン錯体		U S 2 0 0 4 0 0 3 6 0 7 7
Zn (N ^ N) 錯体		U S 6 5 2 8 1 8 7

実施例

【 0 0 7 3 】

デバイス実施例：

【 0 0 7 4 】

デバイス実施例で使用された材料：

使用された比較化合物：

10

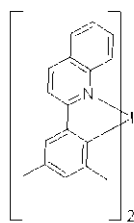
20

30

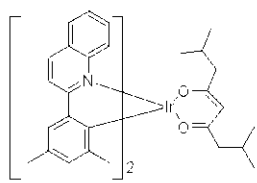
40

50

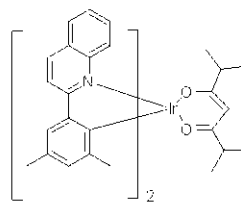
【化 2 4】



比較化合物 1

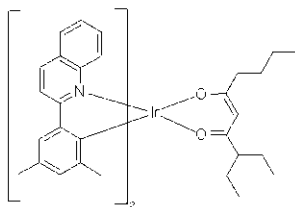


比較化合物 2



比較化合物 3

及び



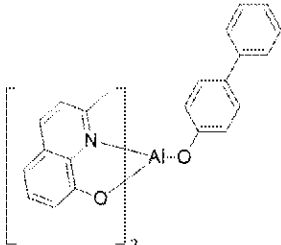
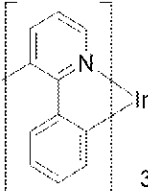
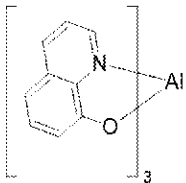
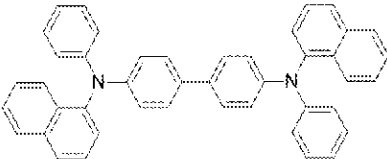
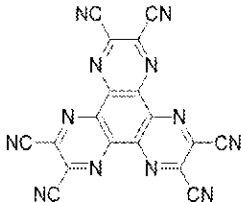
比較化合物 4

10

【 0 0 7 5】

デバイスで使用された他の材料：

【化 2 5】

 BAIQ	 化合物 S D	
 AlQ₃	 NPD	 HAT-CN

20

30

デバイス実施例はいずれも、高真空下 ($<10^{-7}$ Torr) における熱蒸着で作成した。アノード電極は $1200 \text{ \AA}$ の酸化インジウムスズ (ITO) である。カソードは、 $10 \text{ \AA}$ の LiF と、 $1000 \text{ \AA}$ の Al からなる。デバイスはいずれも、作製後直ちに、窒素グローブボックス (H_2O 及び O_2 は、 $<1 \text{ ppm}$) 中で、エポキシ樹脂で封止したガラス製の蓋で封入し、水分ゲッターをパッケージに入れた。

40

デバイス実施例の有機体層は、ITO 表面から順に、ホール注入層 (HIL) として $100 \text{ \AA}$ の HAT-CN、ホール輸送層 (HTL) として $400 \text{ \AA}$ の NPD、式 1 の化合物、化合物 S D、ホスト (BAIQ) を含む $400 \text{ \AA}$ 発光層 (EML)、BAIQ の $40 \text{ \AA}$ ブロッキング層 (BL)、AlQ₃ の $450 \text{ \AA}$ 電子輸送層 (ETL)、及び電子注入層 (EIL) として $10 \text{ \AA}$ の LiF からなる。比較化合物 1-4 を EML で発光体として使用する以外は、比較化合物をデバイス実施例と同じように作製した。

50

【表 3】

実施例	HIL	HTL	EML (400 Å、ドーピング%)			BL	ETL
実施例1	HAT-CN 100Å	NPD 400Å	BAIQ 88%	化合物SD 9%	化合物8 3%	BAIQ 40Å	AlQ ₃ 450Å
比較実施例1	HAT-CN 100Å	NPD 400Å	BAIQ 88%	化合物SD 9%	比較化合物1 3%	BAIQ 40Å	AlQ ₃ 450Å
比較実施例2	HAT-CN 100Å	NPD 400Å	BAIQ 88%	化合物SD 9%	比較化合物2 3%	BAIQ 40Å	AlQ ₃ 450Å
比較実施例3	HAT-CN 100Å	NPD 400Å	BAIQ 88%	化合物SD 9%	比較化合物3 3%	BAIQ 40Å	AlQ ₃ 450Å
比較実施例4	HAT-CN 100Å	NPD 400Å	BAIQ 88%	化合物SD 9%	比較化合物4 3%	BAIQ 40Å	AlQ ₃ 450Å

10

本発明化合物と比較化合物のデバイス構造

【表 4】

実施例	1931 CIE		FWHM	1,000ニト			
	CIE	CIE		電圧	LE	EQE	PE
	x	y		[a.u.]	[a.u.]	[a.u.]	[a.u.]
実施例1	0.66	0.34	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
比較実施例1	0.67	0.33	1.11	1.09	0.78	0.90	0.71
比較実施例2	0.66	0.34	1.07	1.05	0.84	0.91	0.82
比較実施例3	0.66	0.34	1.04	1.06	0.86	0.94	0.81
比較実施例4	0.66	0.34	1.04	1.03	0.89	0.93	0.86

20

デバイス結果 1

1 表 4 の値はいずれも、CIE 座標以外は相対的な数値（任意単位－a.u.）である。

【0076】

表 4 はデバイスデータのまとめである。発光効率（LE）、外部量子効率（EQE）、及び電力効率（PE）を 1000ニトで測定した。これらの化合物の発光色は主にフェニルキノリン配位子によるものなので、本発明化合物 8 は比較化合物と同じ CIE を示す。しかし、表 4 の半値全幅（FWHM）の値から見られるように、化合物 8 の発光スペクトルは比較化合物の発光スペクトルよりも狭い。小さい FWHM 値は狭い発光スペクトルを意味する。デバイス測定は、ここで開示されるように新しい補助配位子が使われている場合、特性はいずれもより良好であることを示す。例えば、化合物 8 では、相対駆動電圧が 1.00 であったのに対し、比較化合物では、相対駆動電圧が 1.03～1.09 であった。発光効率（LE）に関しては、比較化合物に比べ化合物 8 はより良好であり、比較化合物は、化合物 8 の値の 78～89% であった。同じ傾向が外部電子効率（EQE）と電力効率でも見られ、これらにおける化合物 8 のデータは、比較化合物のデータに比べて高い。

30

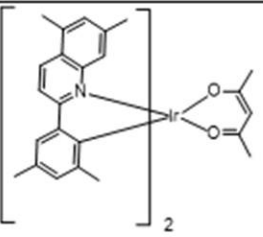
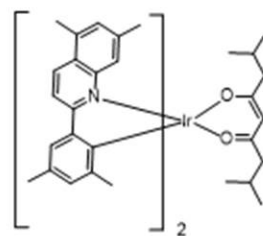
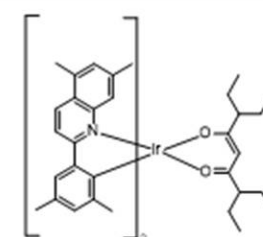
【0077】

下の表 5 は、化合物のフォトルミネセンス量子収率（PLQY）において、本発明化合物の化合物 12 が、比較化合物 5 と 6 を超える予想外の性能の改善例を示す：

40

50

【表 5】

化合物構造	5 %PMMA 膜中の PLQY
 比較化合物 5	34%
 比較化合物 6	57%
 化合物 1 2	59%

本発明化合物 1 2 は、比較化合物より高い PLQY を示した。高い PLQY は、高い EQE の OLEDs における発光体として望ましい。

材料合成:

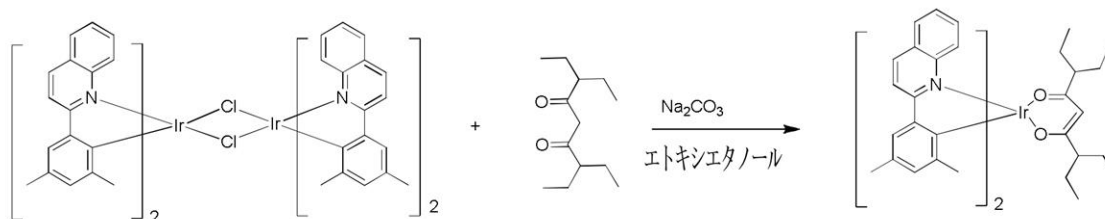
【0078】

特に指定がない限り、反応はいずれも窒素保護下で行った。反応溶媒はいずれも無水物で、商業的供給源から受け取ったものを使用した。

【0079】

化合物 8 の合成

【化 2 6】



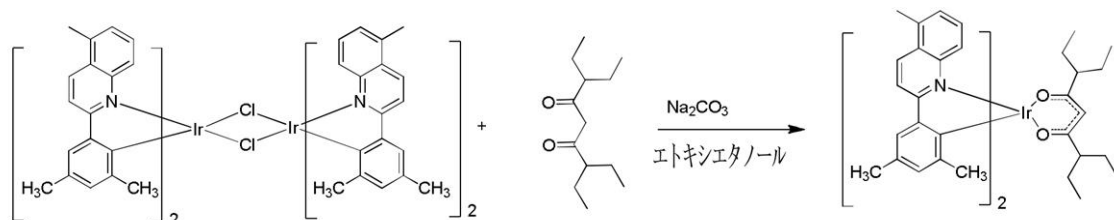
イリジウム (III) 二量体 (1.50 g、1.083 mmol) を 3,7-ジエチルノナン-4,6-ジオン (1.725 g、8.13 mmol) に添加し、混合物を 2-エトキシエタノール (40 mL) 中で可溶化した。混合物を 30 分間窒素でバブリングして脱

気し、その後炭酸カリウム（１．１２３ｇ、８．１３ｍｍｏｌ）を添加した。混合物を室温で４８時間攪拌した後、２００ｍＬのイソプロパノールを添加した。混合物をセライト（登録商標）プラグで濾過し、ジクロロメタンで洗浄した。溶媒を蒸発させ、粗生成物をトリエチルアミンで前処理したシリカゲルカラムでヘプタン中２０％のジクロロメタン（ＤＣＭ）を用いたカラムクロマトグラフィーで精製した。固体生成物をメタノール（２０ｍＬ）で洗浄して濾過をし、０．２２０ｇ（収率１０％）の純粋なドーパント（ＨＰＬＣで９９．５％）を得た。

【００８０】

化合物９の合成

【化２７】

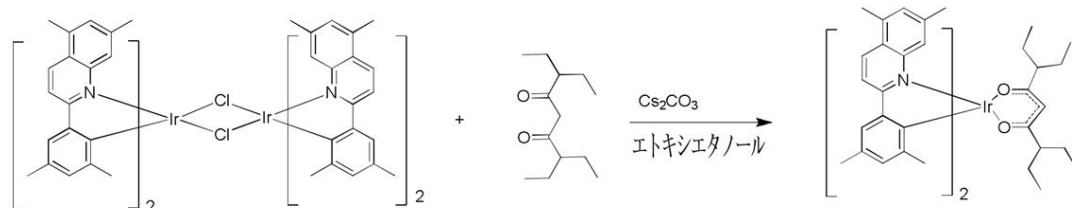


イリジウム（ＩＩＩ）二量体（１．７０ｇ、１．１８ｍｍｏｌ）と３，７－ジエチルノナン－４，６－ジオン（２．５１ｇ、１１．８ｍｍｏｌ）をエトキシエタノール（５０ｍＬ）中で溶解し、炭酸ナトリウム（０．６３ｇ、５．９０ｍｍｏｌ）を添加し、混合物に窒素をバブリングして脱気した。反応混合物を室温で一晩攪拌した。その後、温度を２時間４５℃に上げた。室温まで冷却したら、沈殿物をセライト（登録商標）で濾過し、ＭｅＯＨとヘプタンで洗浄した。セライト（登録商標）から得られた濾液をＤＣＭ（５％のＥｔ３Ｎを含む）中で懸濁し、濾過し蒸発させた。得られた赤色固体（０．６ｇ）はＨＰＬＣで９９．６％の純度であった。

【００８１】

化合物１２の合成

【化３０】



１． イリジウム（ＩＩＩ）二量体（１．７５ｇ、１．１７ｍｍｏｌ）と３，７－ジエチルノナン－４，６－ジオン（２．４８ｇ、１１．７ｍｍｏｌ）を２－エトキシエタノール（４０ｍＬ）中で懸濁し、３０分間窒素でバブリングして脱気し、炭酸セシウム（２．２６ｇ、１１．７ｍｍｏｌ）を溶液に添加した。その後、混合物を９０℃で一晩攪拌した。ジクロロメタン（１００ｍＬ）を溶液に添加し、溶液をセライト（登録商標）のパッドで濾過し、パッドをジクロロメタンで洗浄した。溶媒を蒸発させ、赤色固体をセライト（登録商標）に塗布し、ヘプタン中１０％のＤＣＭを用い、トリエチルアミンで前処理したシリカゲルカラムにおけるカラムクロマトグラフィーによって精製した。溶媒を蒸発させて赤色固体を得て、固体をメタノールで洗浄し、赤色固体の純粋な目的生成物（０．４３０ｇ、収率４０％）を得た。

【００８２】

化合物３２の合成

10

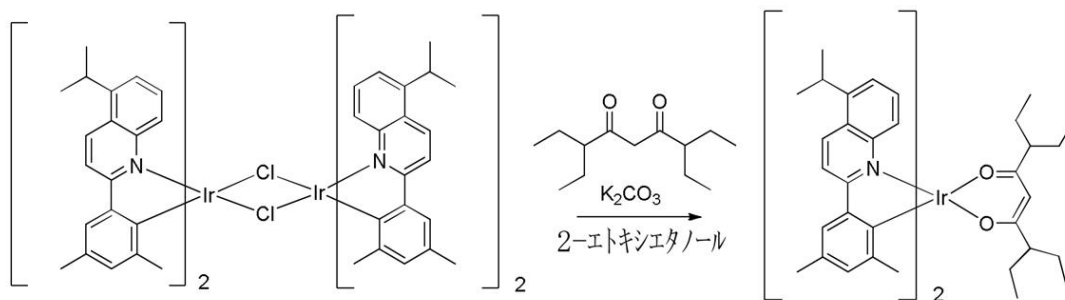
20

30

40

50

【化 2 8】

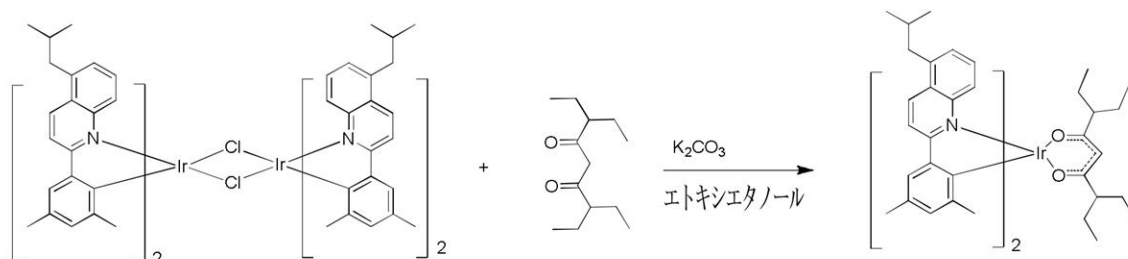


2-エトキシエタノール中(40 mL)のイリジウム(III)二量体(1.32 g、0.85 mmol)を30分間窒素で脱気し、3,7-ジエチルノナン-4,6-ジオン(1.81 g、8.50 mmol)と炭酸カリウム(1.18 g、8.50 mmol)と混合した。反応混合物を室温で一晩攪拌した。その後、反応混合物をセライト(登録商標)のプラグで濾過し、MeOHで洗浄した。沈殿物を5% Et₃N/CH₂Cl₂を含むセライト(登録商標)で抽出し、99.9%の純粋な生成物(HPLC)0.2 gを得た。濾液を真空で濃縮し、DCM中で溶解し、上部をメタノールの層にすることで再結晶化した。得られた結晶は99.6%の純度で、他の生成物と合わせて、表題化合物全量0.42 g(収率26%)を得た。

【0083】

化合物43の合成

【化 2 9】



イリジウム(III)二量体(1.75 g、1.09 mmol)と3,7-ジエチルノナン-4,6-ジオン(2.31 g、10.9 mmol)を2-エトキシエタノール(40 mL)で希釈し、30分間窒素でバブリングをして脱気し、炭酸カリウム(1.50 g、10.9 mmol)を混合物に添加した。混合物を室温で一晩攪拌した。ジクロロメタン(100 mL)を添加し；反応混合物をセライト(登録商標)のパッドで濾過し、そのパッドをジクロロメタンで洗浄した。溶媒を蒸発させ、赤色固体をセライト(登録商標)に塗布し、溶離液としてヘプタン中10% DCMを用いて、トリエチルアミンで前処理したシリカゲルにより、カラムクロマトグラフィーで精製した。得られた赤色固体をメタノールで洗浄し、ヘプタン中5% DCMを用いたカラムクロマトグラフィーで再精製し、純粋な目的生成物(340 mg、収率31%)を得た。

【0084】

化合物54の合成

【0085】

5-シクロペンチル-2-(3,5-ジメチルフェニル)キノリンの合成

10

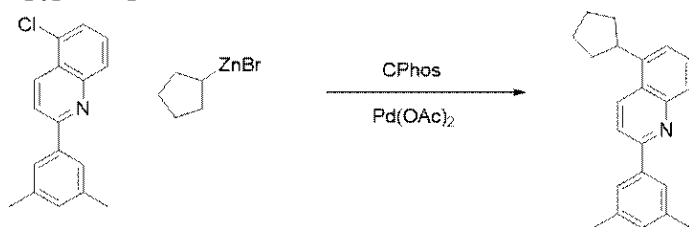
20

30

40

50

【化 30】

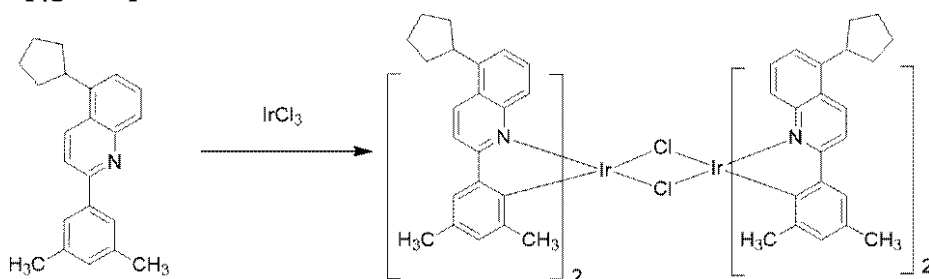


5-クロロ-2-(3,5-ジメチルフェニル)キノリン (4.29 g、16.0 mmol)、2'-(ジシクロヘキシルホスフィノ)-N2,N2,N6,N6-テトラメチル-[1,1'-ビフェニル]-2,6-ジアミン (CPhos) (0.28 g、0.64 mmol) 及びジアセトキシパラジウム (0.072 g、0.320 mmol) を無水THF (60 mL) 中で溶解した。THF (0.5 M) 中にシクロペンチルブROMO垂鉛 (II) (44.9 mL、22.4 mmol) の溶液をシリンジで滴下し、室温で3時間攪拌した。混合物をEA中で希釈し、食塩水で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥し、減圧下で濃縮した。粗生成物をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、ヘプタン/EA 4/1 (v/v) で溶離した。その後、黄色粉末をヘプタンから再結晶化し、無色の結晶 (3.5 g、収率72%) として表題化合物を得た。

【0086】

イリジウム (III) 二量体の合成

【化 31】

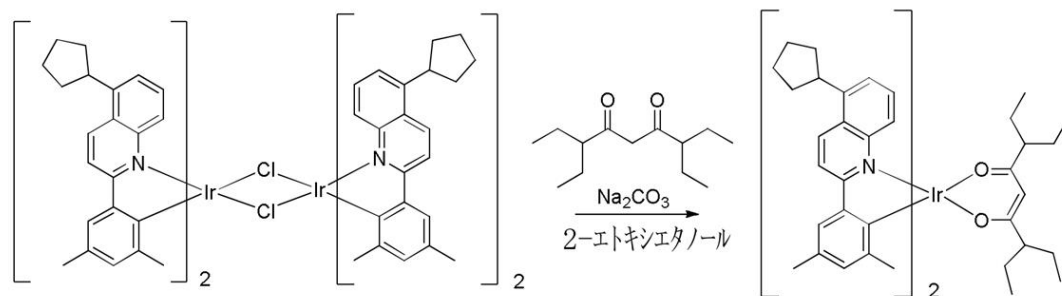


5-クロロペンチル-2-(3,5-ジメチルフェニル)キノリン (3.56 g、11.8 mmol) 及び塩化イリジウム (III) 三水和物 (1.30 g、3.69 mmol) をエトキシエタノール (90 mL) と水 (30 mL) の混合物中で溶解した。反応混合物を脱気し、105°Cで24時間加熱した。その後、反応混合物を室温まで冷却し、ろ紙で濾過した。濾液をメタノールで洗浄し、真空で乾燥し、黒色固体1.60 g (収率54%) としてイリジウム錯体二量体を得た。

【0087】

化合物 54 の合成

【化 32】



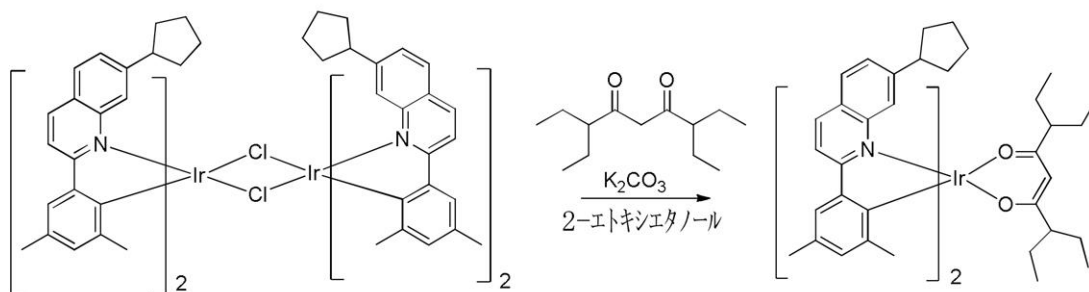
イリジウム錯体二量体 (1.60 g、1.00 mmol)、3,7-ジエチルノナン-4,6-ジオン (2.12 g、9.98 mmol) 及び炭酸ナトリウム (0.53 g、4.99 mmol) を50 mLのエトキシエタノール中で懸濁し、N₂下で一晩、室温で攪拌

した。その後、反応生成物をセライト（登録商標）のパッドで濾過し、メタノールで洗浄した。赤色材料の大部分を可溶化し、セライト（登録商標）で通した。セライト（登録商標）をDCM中で懸濁し、10%トリエチルアミンと懸濁液の含有物を濾液と合わせて、蒸発させた。残渣を、Et₃Nで前処理し、ヘキサン／酢酸エチル9／1（v／v）で溶離したシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、暗赤色の固体を得た。アセトニトリルで溶離した逆相C18カラムで追加の精製をし、蒸発させた後、暗赤色の固体（0.75 mg、収率37%）で目的の錯体を得た。

【0088】

化合物55の合成

【化33】

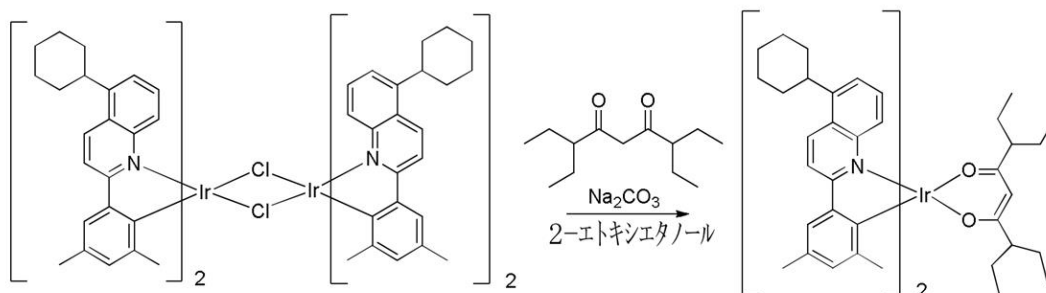


イリジウム（III）二量体（2.40 g、1.45 mmol）、炭酸カリウム（2.00 g、14.5 mmol）及び3,7-ジエチルノナン-4,6-ジオン（3.08 g、14.5 mmol）を40 mLのエトキシエタノールで懸濁し、脱気し、一晩、45℃で攪拌した。反応混合物を室温まで冷却し、セライト（登録商標）のパッドで濾過し、パッドを冷たいメタノールで洗浄した。セライト（登録商標）のパッドと合わせた沈殿物を5%のEt₃Nの入った50 mLのDCM中で懸濁し、シリカプラグで濾過した。混合溶液を蒸発させ、赤色固体を得た。DCM／アセトニトリル／メタノール混合物からの結晶化から1.4 gの目的錯体（収率48%）を得た。

【0089】

化合物62の合成

【化34】

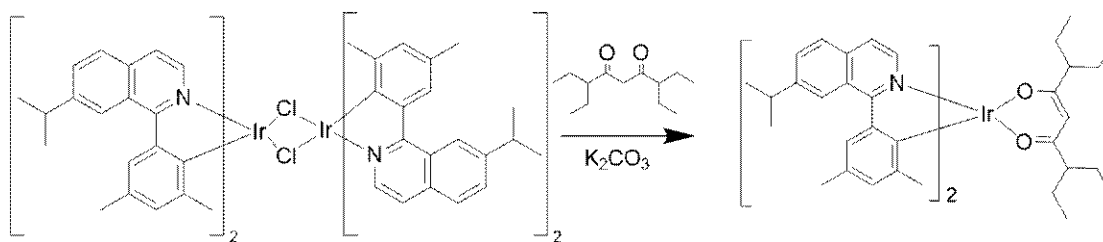


クロロブリッジ二量体（6.08 g、3.54 mmol）、3,7-ジエチルノナン-4,6-ジオン（4.26 g、20.06 mmol）、炭酸ナトリウム（3.75 g、35.4 mmol）及び120 mLの2-エトキシエタノールを500 mLの丸底フラスコに添加した。反応混合物を一晩、窒素下で攪拌した。反応混合物をセライト（登録商標）、塩基性アルミナ及びシリカゲルを含むプラグの上に注いだ。プラグを10%のトリエチルアミン／ヘプタンで前処理し、前処理したプラグをヘプタンとジクロロメタンで洗浄した。プラグをジクロロメタンで溶離した。濾液をイソプロパノールの存在下で蒸発させ、固体をイソプロパノールから濾過した。固体をテトラヒドロフラン中に溶解し、そこにイソプロパノールを添加した。テトラヒドロフランを減圧下で除去し、溶液を濃縮した。赤色固体を濾過し、イソプロパノールで洗浄し、乾燥した（4.39 g、収率60%）。

【0090】

化合物 83 の合成

【化 38】



【0091】

イリジウム (III) 二量体 (2.50 g、2.49 mmol)、3,7-ジエチルノナン-4,6-ジオン (3.70 g、17.43 mmol) 及び炭酸カリウム (2.41 g、17.4 mmol) を 50 mL のエトキシエタノール中で懸濁し、反応混合物を脱気し、周囲温度で 24 時間攪拌した。反応混合物をセライト (登録商標) のパッドで洗浄し、パッドを MeOH で洗浄した。セライト (登録商標) に残った固体を 10% の Et₃N を含む DMC 中で懸濁し、シリカプラグで濾過し、蒸発させた。固体の残渣を DCM/THF/MeOH 混合物から結晶化し、目的錯体を赤色固体 (3.1 g、収率 65%) として得た。

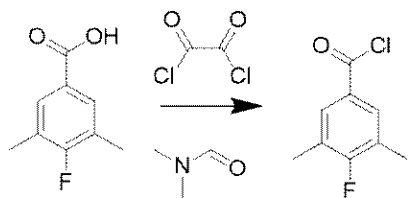
【0092】

化合物 93 の合成

【0093】

4-フルオロ-3,5-ジメチルベンゾイルクロライドの合成

【化 35】

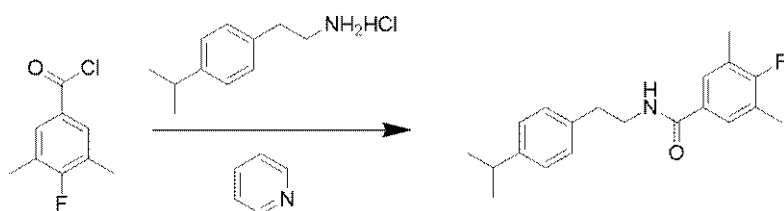


塩化オキサリル (6.93 mL、79 mmol) をジクロロメタン (360 mL) と DMF (0.06 mL、0.720 mmol) 中の 4-フルオロ-3,5-ジメチル安息香酸 (12.1 g、72.0 mmol) の溶液に、窒素下、室温で滴下した。混合物を室温で攪拌し、TLC で監視した。混合物の全ての可溶化は 3 時間以内に起こった。追加の 1 時間後に全ての反応が完了した。溶媒を減圧下で除去し、粗混合物を高真空で乾燥し、これらを追加の生成をせずに使用した。

【0094】

4-フルオロ-N-(4-イソプロピルフェニル)-3,5-ジメチルベンズアミドの合成

【化 36】



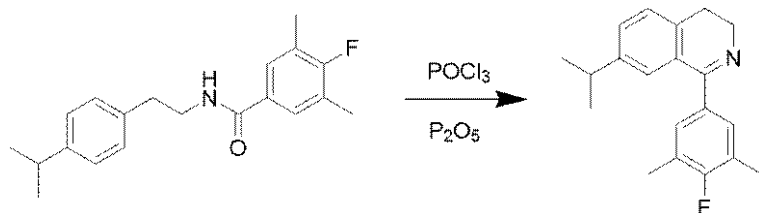
ピリジン (12.12 mL、150 mmol) と 2-(4-イソプロピルフェニル)エタナミン塩酸塩 (10 g、50.1 mmol) を三つ口フラスコに添加し、DCM (50 mL) 中で溶解した。溶液を氷浴で冷却し、4-フルオロ-3,5-ジメチルベンゾイルクロライド (10.28 g、55.1 mmol) を徐々に添加し (一部ずつ)、混合物を室温で 12 時間攪拌した。DCM を溶液に添加し、有機層を 5% HCl 溶液で洗浄し、そ

の後 5 % NaOH 溶液で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥した。溶媒を蒸発させ、粗化合物を追加の精製をせずに使用した。

【0095】

1-(4-フルオロ-3,5-ジメチルフェニル)-7-イソプロピル-3,4-ジヒドロイソキノリンの合成

【化37】



10

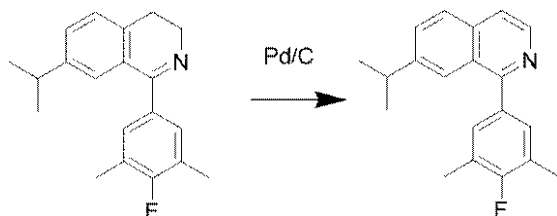
4-フルオロ-N-(4-イソプロピルフェネチル)-3,5-ジメチルベンズアミド (15 g、47.9 mmol)、五酸化リン (42.8 g、302 mmol) 及びホスホリルオキシクロライド (44.6 mL、479 mmol) をキシレン (100 mL) 中で希釈し、その後 3 時間窒素下で還流した。GCMS により、2.5 時間で反応が終了した。反応混合物を室温まで冷却し、一晚攪拌し、溶媒をデカントし、氷を徐々に生成物に添加した。水中の残渣混合物は 50 % NaOH を添加して弱アルカリ性にし、生成物をトルエンで抽出した。有機層を水で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥し、溶媒を減圧下で蒸発させた。粗生成物を追加の精製をせずに使用した。

20

【0096】

1-(4-フルオロ-3,5-ジメチルフェニル)-7-イソプロピルイソキノリンの合成

【化38】



30

キシレン (240 mL) 中の 1-(4-フルオロ-3,5-ジメチルフェニル)-7-イソプロピル-3,4-ジヒドロイソキノリン (14.4 g、47.9 mmol) の溶液を 15 分間、窒素でバブリングをして脱気した。その間、炭素上 5 %パラジウム (2.55 g、2.39 mmol) を添加した。混合物を加熱して、一晚還流した。反応を TLC で観察した。混合物をセライト (登録商標) のパッドで濾過し、溶媒を減圧下で蒸発させた。生成物をセライトに塗布し、ヘプタン中 10 % EA を使用したカラムクロマトグラフィーで精製し、最初の不純物を出させた。EA の体積は 15 % へと徐々に上昇し、目的物を出させた。HPLC で 10 分後に出てきた目的の生成物は 2 % の不純物を含む。95 / 5 MeCN / 水 (v / v) で溶離した C18 逆相クロマトグラフィーで 4.5 g の純粋生成物 (4 段階で収率 32 %) を得た。

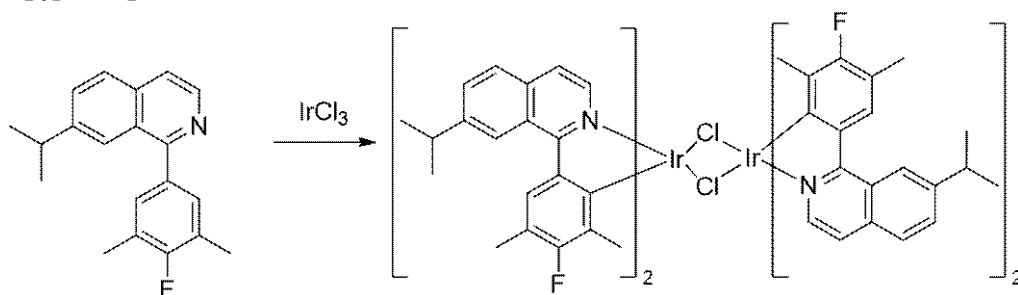
40

【0097】

イリジウム (III) 二量体の合成

50

【化 3 9】



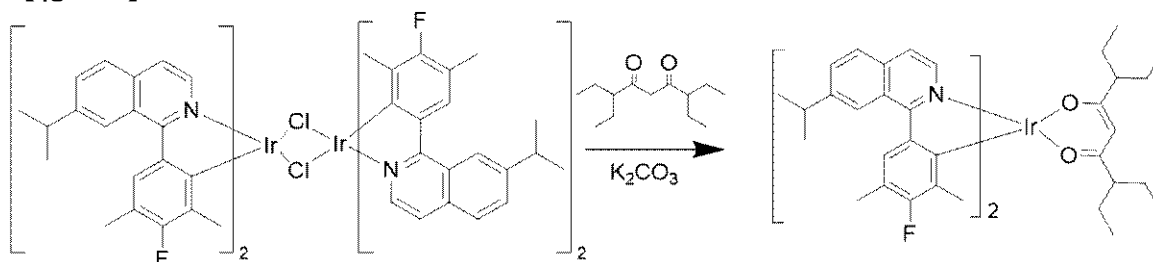
10

塩化イリジウム（Ⅲ）三水和物（1.64 g、4.65 mmol）と1-（4-フルオロ-3,5-ジメチルフェニル）-7-イソプロピルイソキノリン（4.09 g、13.95 mmol）をエトキシエタノール（50 mL）と水（12 mL）の中で懸濁し、窒素をバブリングして脱気し、オイルバスに105℃で一晩浸した。室温に冷却した後、固体を濾過し、メタノールで洗浄した。洗浄したものを真空で乾燥し、1.8 g（収率74%）の赤色固体を得た。

【0098】

化合物93の合成

【化 4 4】



20

イリジウム（Ⅲ）二量体（1.00 g、0.96 mmol）を3,7-ジエチルノナン-4,6-ジオン（1.53 g、7.21 mmol）と合わせ、2-エトキシエタノール（36 mL）で希釈した。溶液を15分間、窒素をバブリングして脱気した。その後、炭酸カリウム（0.997 g、7.21 mmol）を溶液に添加し、混合物を室温で18時間攪拌した。明赤色の沈殿物をセライト（登録商標）のパッドで濾過し、MeOHで洗浄した。濾液を処分し、セライト（登録商標）のパッドの上部にある固体をDCMで洗浄した。粗生成物をセライトに塗布して、トリエチルアミンを前処理したシリカゲルカラムにおいてヘプタン中5%のDCMを用いたカラムクロマトグラフィーで精製した。目的化合物を、赤色固体（0.9 g）として得た。

30

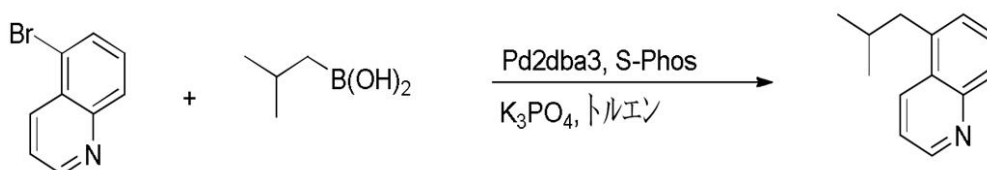
【0099】

化合物118の合成

【0100】

5-イソブチルキノリンの合成

【化 4 0】



40

トルエン（600 mL）中、5-ブロモキノリン（20 g、93 mmol）、イソブチルボロン酸（19.4 g、186 mmol）及びリン酸カリウム、H₂O（64.4 g、280 mmol）の混合物を20分間、N₂でパージし、その後Pd₂dba₃（1.71

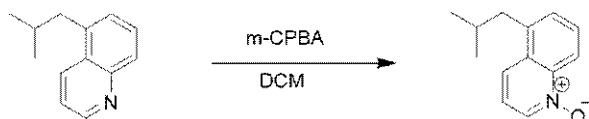
50

g、1.87 mmol) とジシクロヘキシル (2', 6'-ジメトキシー [1, 1'-ビフェニル] - 2-イル) ホスフィン (3.06 g、7.46 mmol) (SPhOS) を添加した。混合物を加熱し、一晚還流した。反応は完了するまで行われた。粗生成物を、溶離液としてヘプタン/EA: 85/15~7/3 (v/v) グラジエント混合物を用いたシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、油状物 (11.5 g、収率 67%) を得た。

【0101】

5-イソブチルキノリン1-オキシドの合成

【化41】



10

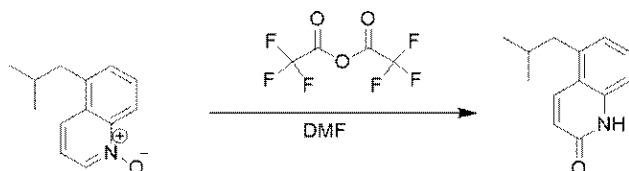
3-クロロ過安息香酸 (m-CPBA) (16.6 g、74.2 mmol) を窒素下 0℃ に冷却した DCM (150 mL) 中の 5-イソブチルキノリン (12.5 g、67.5 mmol) の溶液に部分的に添加した。混合物を室温で一晩攪拌し、その後 50℃ で 11 時間攪拌した。さらに、混合物に m-CPBA を添加し、反応を完了させた。反応が完了したら、反応混合物を水性 NaHCO₃ でクエンチした。水性混合物を DCM で抽出し、水と食塩水で洗浄し、Na₂SO₄ で乾燥した。粗生成物を、溶離液として DCM/MeOH: 97/3~95/5 (v/v) グラジエント混合物を用いたシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、灰白色の固体 (11.0 g、収率 80.0%) を得た。

20

【0102】

5-イソブチルキノリン-2 (1H) -オンの合成

【化42】



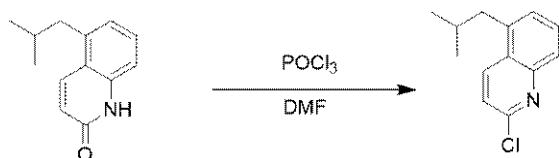
無水トリフルオロ酢酸 (61.8 mL、437 mmol) を 0℃ で、N₂ 下で DMF (70 mL) 中に 5-イソブチルキノリン1-オキシド (11 g、54.7 mmol) を攪拌した溶液に添加した。混合物を室温で一晩攪拌した。反応が完了したら、無水トリフルオロ酢酸を減圧下で除去した。残渣を水性 NaHCO₃ でクエンチし、更に水で希釈した。粗生成物は水性 DMF を用いて再結晶化し、白色固体 (8.2 g、収率 75%) を得た。

30

【0103】

2-クロロ-5-イソブチルキノリンの合成

【化43】



40

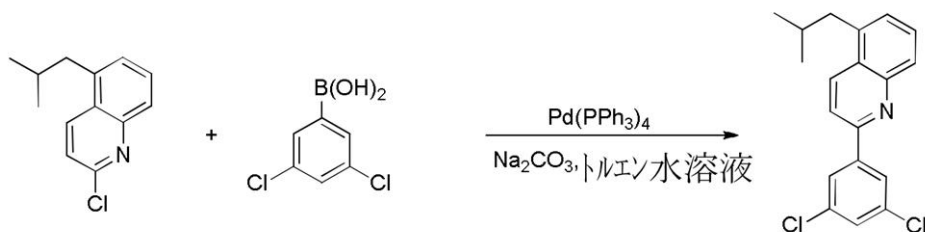
オキシ塩化リン (7.60 mL、81 mmol) を DMF (160 mL) 中 5-イソブチルキノリン-2 (1H) -オン (8.2 g、40.7 mmol) の溶液に、30 分間 N₂ 下で滴下した。その後、反応混合物を 80℃ で加熱した。反応を完了させた後、残っている POCl₃ を減圧下で蒸発させ、水性 Na₂CO₃ を注意深く添加した。固体を分離し、灰白色固体 (8.1 g、収率 91%) を得た。

【0104】

2-(3, 5-ジクロロフェニル) - 5-イソブチルキノリンの合成

50

【化 4 4】

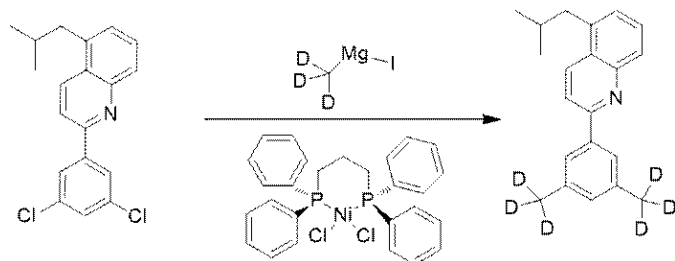


窒素ガスを、THF（250 mL）と水（50 mL）中、（3，5－ジクロロフェニル）ボロン酸（10.6 g、55.5 mmol）、2－クロロ－5－イソブチルキノリン（8.13 g、37 mmol）及びNa₂CO₃（7.84 g、74.0 mmol）の混合物中で30分間バブリングした。テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（0）（1.71 g、1.48 mmol）を添加し、混合物を加熱し一晩還流した。反応完了させた後（GCMSで観察）、反応混合物を酢酸エチル中で希釈して混合し、食塩水と水で洗浄した。有機層を硫酸ナトリウムで乾燥し、溶媒を減圧下で蒸発させ、粗生成物を得て、溶離液としてヘプタン／EA：98／2～96／（v／v）グラジエント混合物を用いたシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、固体（8.0 g、収率66％）を得た。

【0105】

2－（3，5－ジメチル（D6）フェニル）－5－イソブチルキノリンの合成

【化 4 5】

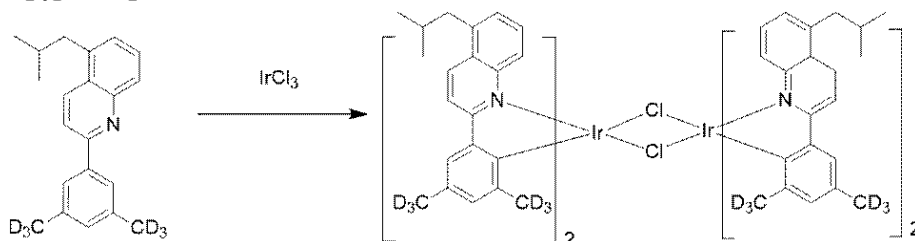


ジエチルエーテル（1.0 M）中のCD₃MgI（61 mL、61 mmol）をジエチルエーテル（120 mL）中2－（3，5－ジクロロフェニル）－5－イソブチルキノリン（8.0 g、24.2 mmol）とジクロロ（1，3－ビス（ジフェニルホスフィノ）プロパン）ニッケル（Ni（dppp）Cl₂）（0.39 g、0.73 mmol）の30分間攪拌させた混合物に添加した。混合物を室温で一晩攪拌した。反応を完了させた後、反応混合物を氷浴で冷却し、水で注意深くクエンチした。混合物をEAで抽出し、水（3回）と食塩水で洗浄した。粗生成物を、溶離液としてヘプタン／DCM／EA 89／10／1～84／15／1（v／v／v）グラジエント混合物を用いたシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、油状物（6.5 g、収率91％）を得た。

【0106】

イリジウム（III）二量体の合成

【化 4 6】



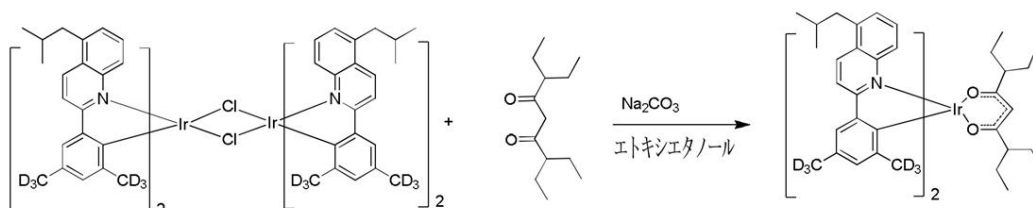
エトキシエタノール（30 mL）と水（10 mL）中、2－（3，5－ジメチル（D6）フェニル）－5－イソブチルキノリン（5.17 g、17.5 mmol）と塩化イリジウ

ム (I I I) (1.80 g、4.86 mmol) の混合物を N_2 で 30 分間バブリングして脱気した後、100℃で19時間加熱した。反応混合物を冷却し、少量の MeOH を添加した。イリジウム (I I I) 二量体を濾過で分離し、固体 (2.40 g、収率 61%) を得て、固体は追加の精製をせずに次の反応に使用した。

【0107】

化合物 118 の合成

【化 47】



10

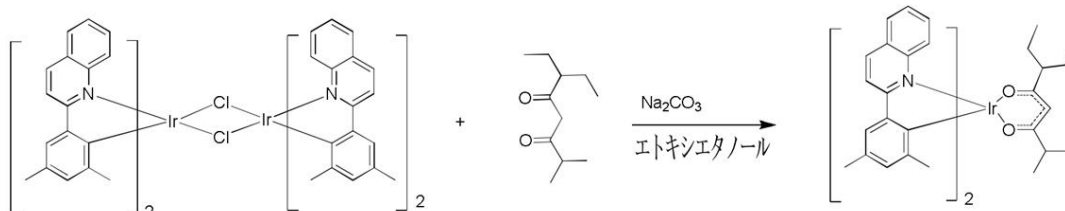
エトキシエタノール (25 mL) 中、イリジウム (I I I) 二量体 (1.30 g、0.80 mmol)、3,7-ジエチルノナン-4,6-ジオン (1.69 g、7.96 mmol) 及び Na_2CO_3 (1.69 g、15.9 mmol) の混合物を 20 分間脱気し、室温で 24 時間攪拌した。混合反応物を濾過し、少量のメタノールとヘプタンで洗浄した。固体を DCM 中 10% トリエチルアミン (TEA) 中で溶解した。混合物を濾過し、減圧下で蒸発させた。赤色固体を 5% TEA による DCM/IPA から再結晶化し、赤色固体 (7.0 g、収率 44%) を得た。

20

【0108】

化合物 141 の合成

【化 48】



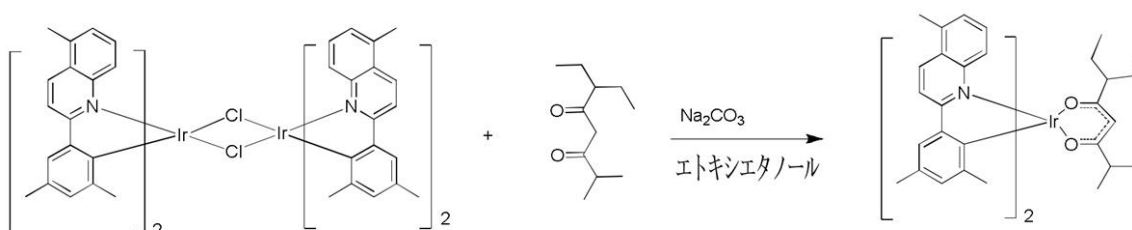
30

イリジウム (I I I) 二量体 (0.80 g、0.58 mmol) と 6-エチル-2-メチルオクタン-3,5-ジオン (0.75 g、4.06 mmol) を丸底フラスコに添加した。混合物を 2-エトキシエタノール (40 mL) 中で希釈し、30 分間窒素で脱気をし、混合物に K_2CO_3 (0.60 g、4.33 mmol) を添加した。混合物を室温で一晩攪拌した。沈殿物をセライト (登録商標) のパッドで濾過した。溶媒を蒸発させ、粗生成物を、ヘプタン/DCM 95/5 (v/v) の混合物を用いたシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製した。純粋な生成物 (0.65 g、収率 67%) を得た。

【0109】

化合物 142 の合成

【化 49】



40

イリジウム (I I I) 二量体 (0.80 g、0.56 mmol) と 6-エチル-2-メチ

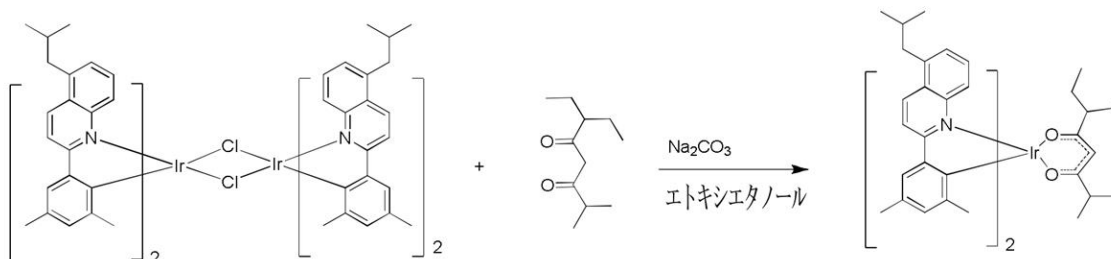
50

ルオクタン-3, 5-ジオン (0.77 g、4.16 mmol) をエトキシエタノール (19 mL) 中で溶解した。混合物を15分間、窒素でバブリングして脱気し、 K_2CO_3 (0.576 g、4.16 mmol) を添加し、混合物を室温で一晩攪拌した。ジクロロメタンを混合物に添加し、セライト (登録商標) のパッドで溶液を濾過し、濾液が透明になるまでジクロロメタンで洗浄した。粗生成物をトリエチルアミンで処理したシリカゲルカラムを用いてヘプタン/ジクロロメタン95/5 (v/v) の混合物で溶離したカラムクロマトグラフィーで精製した。純粋な生成物を赤色粉末として回収した (0.35 g、収率67%)。

【0110】

化合物176の合成

【化50】

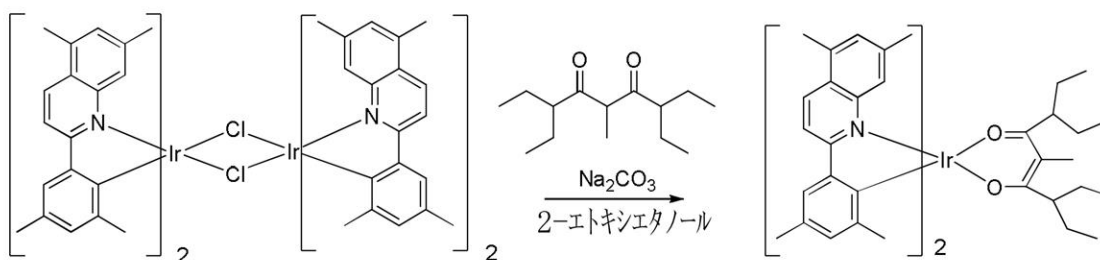


イリジウム (III) 二量体 (0.75 g、0.47 mmol) と6-エチル-2-メチルオクタン-3, 5-ジオン (0.64 g、3.50 mmol) をエトキシエタノール (16 mL) で希釈し、30分間窒素で脱気した。混合物に K_2CO_3 (0.48 g、3.50 mmol) を添加し、室温で一晩攪拌した。DCMを混合物に添加し、生成物を可溶化した。反応混合物をセライト (登録商標) のパッドで濾過し、蒸発させた。粗生成物を、ヘプタン/DCM 95/5 (v/v) の混合物で溶離したシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、純粋な生成物 (0.59 g、収率66%) を得た。

【0111】

化合物278の合成

【化51】

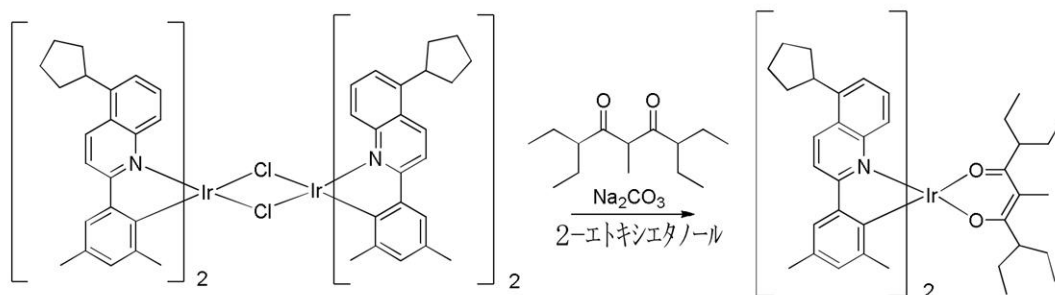


クロロブリッジ二量体 (4.37 g、2.91 mmol)、3, 7-ジエチル-5-メチルノナン-4, 6-ジオン (3.7 g、16.4 mmol)、炭酸ナトリウム (3.08 g、29.1 mmol) 及び100 mLの2-エトキシエタノールを丸型フラスコに添加した。反応混合物を室温で48時間、窒素下で攪拌した。反応混合物をセライト (登録商標)、塩基性アルミナ及びシリカゲルを含むプラグの上に注いだ。プラグを10%トリエチルアミン/ヘプタンで前処理をし、その後ヘプタンとジクロロメタンで洗浄した。プラグをジクロロメタンで溶離した。濾液をイソプロパノールの存在下で蒸発させ、固体をイソプロパノールから濾過した。固体をテトラヒドロフラン中で溶解し、イソプロパノールを混合物に添加した。テトラヒドロフランをロトバブで除去し、溶液を濃縮した。赤色固体を濾過し、イソプロパノールで洗浄した (0.79 g、収率16%)。

【0112】

化合物 320 の合成

【化 5 2】



10

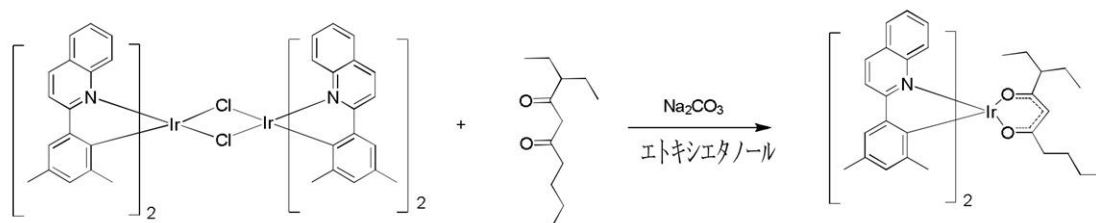
イリジウム (III) 二量体 (2.00 g、1.25 mmol)、3,7-ジエチル-5-メチルノナン-4,6-ジオン (1.98 g、8.73 mmol) 及び炭酸カリウム (1.21 g、8.73 mmol) を 50 mL のエトキシエタノール中で懸濁した。反応混合物を脱気し、一晚室温で攪拌した。混合物をアイスバス中で冷却し、セライト (登録商標) のパッドで濾過し、パッドを冷たいメタノールで洗浄した。セライト (登録商標) に付着した沈殿物を 5% の Et₃N を含む DCM 中で懸濁し、シリカパッドで濾過した。溶液を蒸発させ、赤色固体を得た。固体を DCM/MeOH から再結晶化することによって精製し、赤色固体として目的錯体を得た (1.5 g、収率 59%)。

【0113】

20

比較化合物 4 の合成

【化 5 3】



イリジウム (III) 二量体 (0.70 g、0.51 mmol) と 3-エチルデカン-4,6-ジオン (0.75 g、3.79 mmol) をエトキシエタノール (17 mL) 中で懸濁した。反応混合物を 15 分間窒素でバブリングして脱気し、K₂CO₃ (0.52 g、3.79 mmol) を添加した。混合物を室温で一晩攪拌した。薄層クロマトグラフィーを午前中に行い、二量体が完全に消費したことが示された。ジクロロメタンを混合物に添加し、セライト (登録商標) のパッドで溶液を濾過し、濾液が透明になるまでジクロロメタンで洗浄した。粗生成物をトリエチルアミンで処理したカラムを用いてヘプタン/ジクロロメタン (95/5、v/v) の混合物で溶離したカラムクロマトグラフィーにより精製した。純粋な生成物を赤色粉末として回収した (0.600 g、収率 70%)。

30

【0114】

本明細書において記述されている種々の実施形態は、単なる一例としてのものであり、本発明の範囲を限定することを意図するものではないことが理解される。例えば、本明細書において記述されている材料の多くは、本発明の趣旨から逸脱することなく、他の材料及び構造に置き換えることができる。したがって、特許請求されているとおりの本発明は、当業者には明らかになるように、本明細書において記述されている特定の例及び好ましい実施形態からの変形形態を含み得る。なぜ本発明が作用するかについての種々の理論は限定を意図するものではないことが理解される。

40

【先行技術文献】

【特許文献】

【0115】

【文献】米国特許第 5,844,363 号明細書

50

米国特許第 6, 303, 238 号明細書

米国特許第 5, 707, 745 号明細書

米国特許第 7, 279, 704 号明細書

【符号の説明】

【0116】

100 有機発光デバイス

110 基板

115 アノード

120 正孔注入層

125 正孔輸送層

130 電子ブロッキング層

135 発光層

140 正孔ブロッキング層

145 電子輸送層

150 電子注入層

155 保護層

160 カソード

162 第一の導電層

164 第二の導電層

200 反転させた OLED、デバイス

210 基板

215 カソード

220 発光層

225 正孔輸送層

230 アノード

10

20

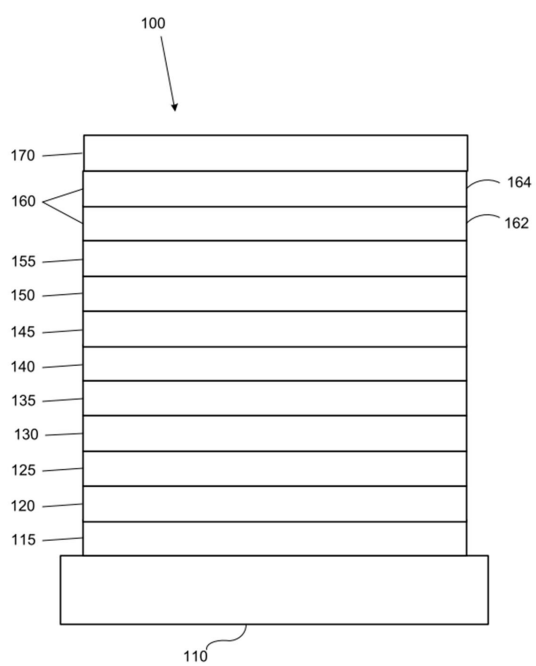
30

40

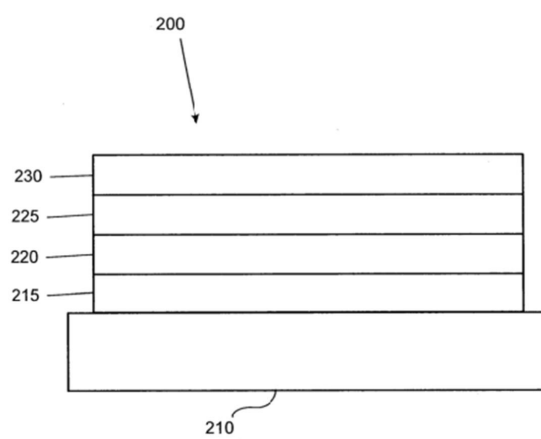
50

【図面】

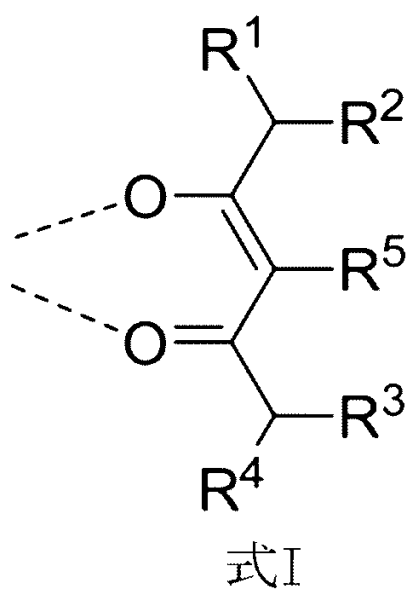
【図 1】



【図 2】



【図 3】



10

20

30

40

50

フロントページの続き

- 弁理士 松田 奈緒子
- (72)発明者 ピエール・ルーク・ティエ・ブードロー
アメリカ合衆国 ニュージャージー 08618 ユーイング フィリップス ブールバード 375
ユニバーサル ディスプレイ コーポレーション内
- (72)発明者 アレクセイ・ボリソビッチ・ジヤトキン
アメリカ合衆国 ニュージャージー 08618 ユーイング フィリップス ブールバード 375
ユニバーサル ディスプレイ コーポレーション内
- (72)発明者 デーヴィッド・ゼナン・リ
アメリカ合衆国 ニュージャージー 08618 ユーイング フィリップス ブールバード 375
ユニバーサル ディスプレイ コーポレーション内
- (72)発明者 スコット・ジョセフ
アメリカ合衆国 ニュージャージー 08618 ユーイング フィリップス ブールバード 375
ユニバーサル ディスプレイ コーポレーション内
- (72)発明者 チュアンジュン・シャ
アメリカ合衆国 ニュージャージー 08618 ユーイング フィリップス ブールバード 375
ユニバーサル ディスプレイ コーポレーション内
- (72)発明者 山本 均
アメリカ合衆国 ニュージャージー 08618 ユーイング フィリップス ブールバード 375
ユニバーサル ディスプレイ コーポレーション内
- (72)発明者 マイケル・エス・ウィーバー
アメリカ合衆国 ニュージャージー 08618 ユーイング フィリップス ブールバード 375
ユニバーサル ディスプレイ コーポレーション内
- (72)発明者 バート・アレイン
アメリカ合衆国 ニュージャージー 08618 ユーイング フィリップス ブールバード 375
ユニバーサル ディスプレイ コーポレーション内
- (72)発明者 ジェームズ・フィオルデリソ
アメリカ合衆国 ニュージャージー 08618 ユーイング フィリップス ブールバード 375
ユニバーサル ディスプレイ コーポレーション内
- 審査官 西澤 龍彦
- (56)参考文献 特開2013-121957 (JP, A)
特開2000-212744 (JP, A)
特開2014-193856 (JP, A)
特表2009-539768 (JP, A)
特表2008-504371 (JP, A)
米国特許出願公開第2013/0137866 (US, A1)
特開平02-145536 (JP, A)
米国特許出願公開第2008/0074033 (US, A1)
国際公開第2014/148511 (WO, A1)
特開2009-001546 (JP, A)
特開2002-309373 (JP, A)
特開平09-041144 (JP, A)
特開2012-056949 (JP, A)
米国特許第03950135 (US, A)
SEEBACH, D et al., Synthesis of the Lithium Enolate of (S)-(+)-sec-Butyl Methyl Ketone and Formation of Chiral 1,3-Diketones by Acylation, Angewandte Chemie International Edition in English, 1972年, Vol. 11, pp. 127-128
YOSHIDA, I et al., Thermal Properties of Copper(II) Chelates of some 1,5-Alkyl-pentane-2,4-diones, Bulletin of the Chemical Society of Japan, 1972年, Vol. 45, pp. 174-178
- (58)調査した分野 (Int.Cl., D B名)

C 0 7 F

C 0 7 C

C A p l u s / R E G I S T R Y (S T N)