(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2021年7月22日(22.07.2021)

WIPO | PCT

(10) 国際公開番号
WO 2021/145052 A1

(51) 国際特許分類:
C09K 11/06 (2006.01) *H01L 51/42* (2006.01)

(21) 国際出願番号： PCT/JP2020/041019

(22) 国際出願日： 2020年11月2日(02.11.2020)

(25) 国際出願の言語： 日本語

(26) 国際公開の言語： 日本語

(30) 優先権データ：
特願 2020-004984 2020年1月16日(16.01.2020) JP

(71) 出願人: コニカミノルタ株式会社(**KONICA MINOLTA, INC.**) [JP/JP]; 〒1007015 東京都千代田区丸の内二丁目７番２号 Tokyo (JP).

(72) 発明者: 植田 則子(**UEDA, Noriko**); 〒1007015 東京都千代田区丸の内二丁目７番２号 コニカミノルタ株式会社内 Tokyo (JP). 中林 亮(**NAKABAYASHI, Ryo**); 〒1007015 東京都千代田区丸の内二丁目７番２号 コニカミノルタ株式会社内 Tokyo (JP). 宮田 康生(**MIYATA, Yasuo**); 〒1007015 東京都千代田区丸の内二丁目７番２号 コニカミノルタ株式会社内 Tokyo (JP).

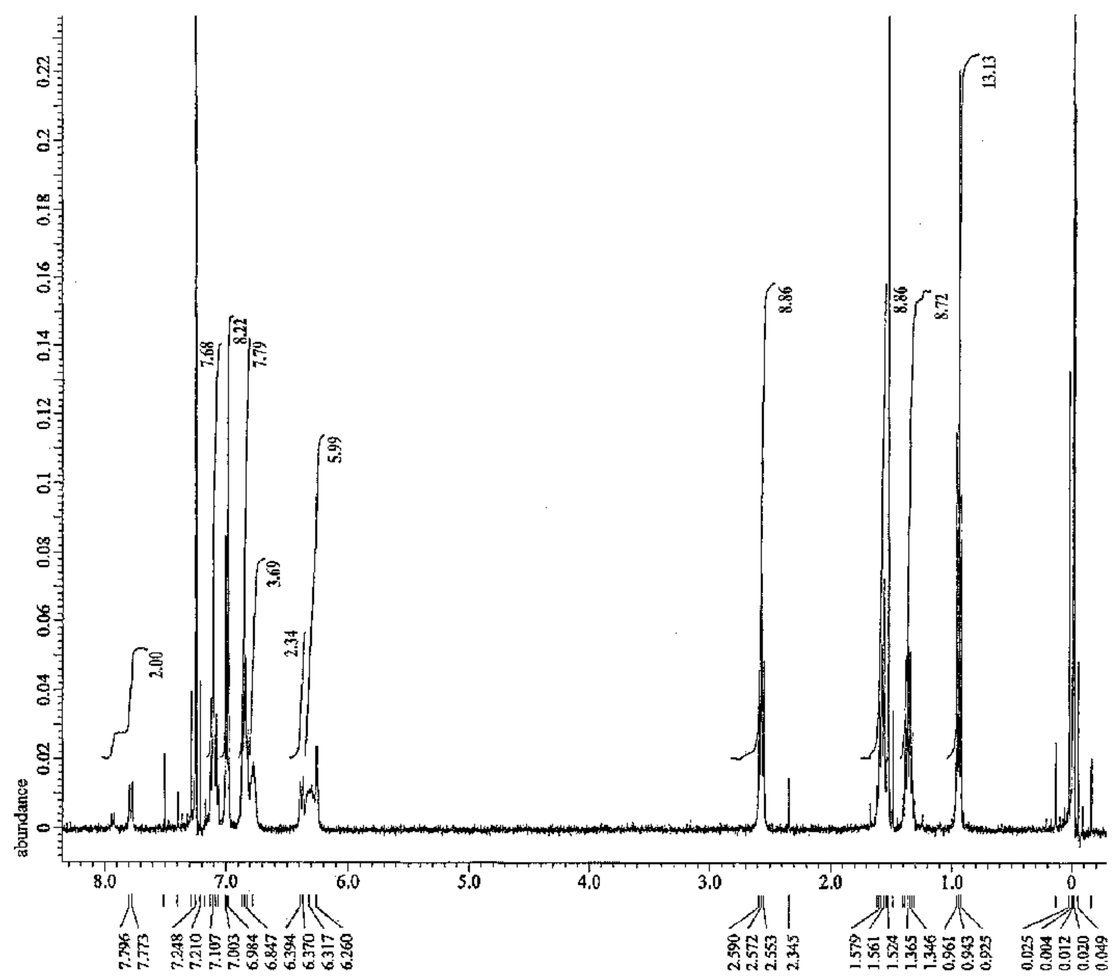
(74) 代理人: 特許業務法人光陽国際特許事務所(**KOYO INTERNATIONAL PATENT FIRM**); 〒1000006 東京都千代田区有楽町一丁目１番３号 東京宝塚ビル１７階 Tokyo (JP).

(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ,

(54) **Title:** LIGHT EMITTING MEMBER, LIGHT EMITTING COMPOUND, AND PHOTOELECTRIC CONVERSION MEMBER

(54) 発明の名称： 発光部材、発光性化合物及び光電変換部材

[図1]



(57) **Abstract:** This optical member contains a specific compound which has a squarylium ring at the center of the molecular structure thereof and has a molecular structure having an emission peak in a near-infrared long wavelength range, and in which a soluble group (a linear or branched alkyl group (a) having 4-12 carbon atoms, or a group (P) having a polyoxyethylene structure) is disposed on an outer group of the squarylium ring so as to extend in the direction toward the squarylium ring.

[続葉有]

EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, IT, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

(84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能)：ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類：

— 国際調査報告（条約第21条(3)）

(57) 要約：スクアリリウム環を分子構造の中心に有する化合物において、近赤外長波長領域に発光ピークを有する分子構造としつつ、スクアリリウム環の外側の基に可溶性基（炭素数４～１２の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基（ａ）、又はポリオキシエチレン構造を有する基（Ｐ））をスクアリリウム環に向かう方向に伸長するように配置した特定の化合物を含有する光学部材。

明　細　書

発明の名称 ： 発光部材、発光性化合物及び光電変換部材

技術分野

[0001] 本発明は、発光部材、発光性化合物及び光電変換部材に関し、より詳しくは、近赤外光における長波長領域（以下、「近赤外長波長領域」ともいう。）の発光と部材への高濃度での配合が可能な発光性化合物を含有する、近赤外長波長領域において高い発光量子収率が達成可能な発光部材等に関する。

背景技術

[0002] 近赤外発光部材は、近赤外励起下で生体細胞の自己蛍光のバックグラウンドの影響を無視できることと、近赤外光が可視光より生体内での散乱が少ないためより生体深部でのイメージング、静脈撮像による生体認証、パルスオキシメーターなどの生体計測などが可能になることで注目されている。そのため、近赤外領域に発光を有する化合物が検討されている。

[0003] しかしながら、一般に発光波長を可視光領域よりも長波長側に有する化合物を用いると、極端に発光量子収率が低下することが知られている。近赤外発光では、その励起状態のエネルギーが低く分子振動による無輻射失活の影響が大きくなるためである。さらに発光波長を長波長化するために色素の共役系を拡張した場合、分子間相互作用が増すため、薄膜や粒子中で色素が凝集しやすくなって濃度消光が生じる。したがって、発光色素が溶液中で発光量子収率の高い近赤外発光を示しても、樹脂等の固体のマトリックス中に分散させた場合などでは、高い発光量子収率を維持することができないという問題があった。

[0004] スクアリリウム化合物は、近赤外吸収材として知られている（例えば、特許文献１を参照）。また、スクアリリウム化合物が、有機ＥＬ素子において遅延蛍光体又はリン光発光性化合物と組み合わせて用いられることも知られている（例えば、特許文献２を参照）。しかしながら、発光部材に応用する目的で、高濃度で含有された際にも高い発光量子収率が得られるという観点

で、スクアリリウム化合物の分子構造が検討された例はこれまでなかった。

先行技術文献

特許文献

[0005] 特許文献1：国際公開第２０１７／１３０８２５号

特許文献2：国際公開第２０１８／００８７２１号

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0006] 本発明は、上記問題・状況に鑑みてなされたものであり、その解決課題は、近赤外長波長領域の発光と部材への高濃度での配合が可能な発光性化合物を含有することで、近赤外長波長領域において高い発光量子収率が達成可能な発光部材を提供することである。また、近赤外長波長領域の発光と部材への高濃度での配合が可能な発光性化合物を提供することである。さらには、近赤外長波長領域の発光と部材への高濃度での配合が可能な発光性化合物を用いた高い外部量子効率が得られる光電変換部材を提供することである。

課題を解決するための手段

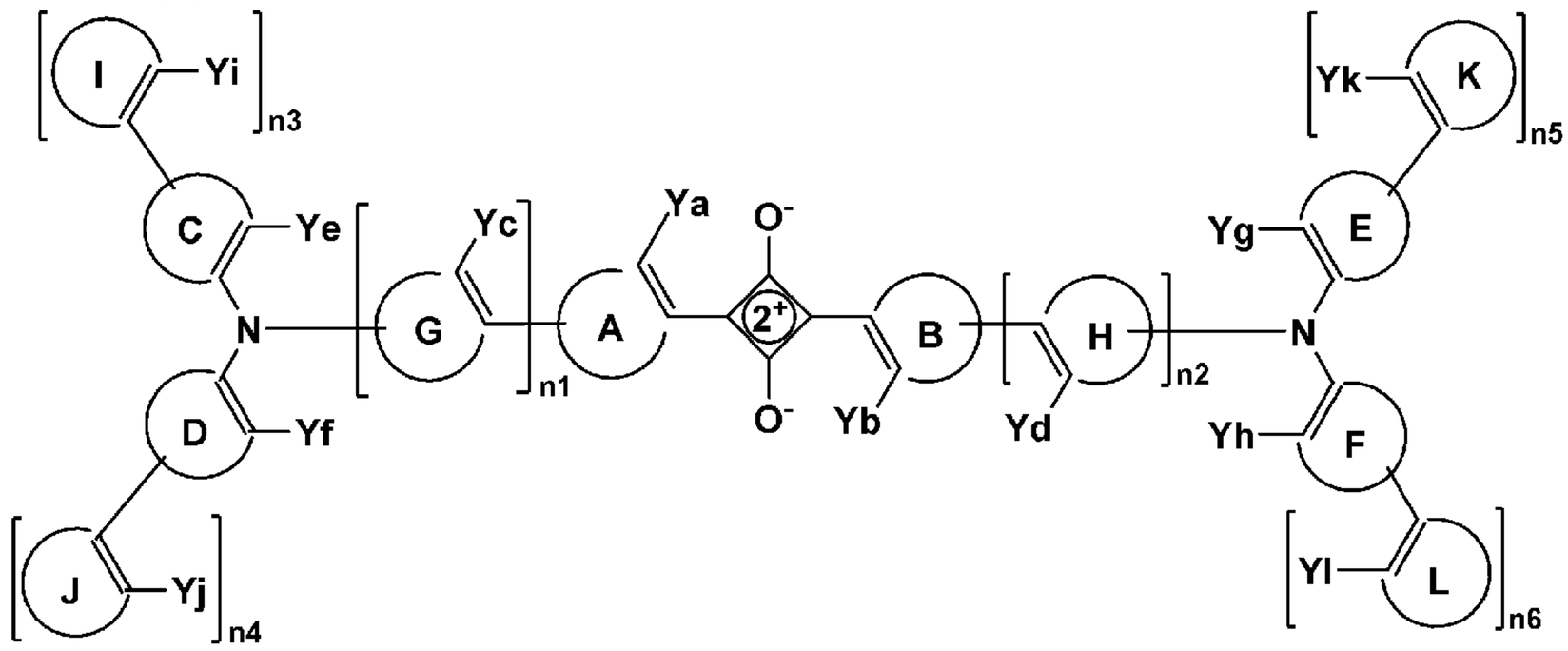
[0007] 本発明者は、上記課題を解決すべく、上記問題の原因等について検討する過程において、スクアリリウム環を分子構造の中心に有する化合物において、近赤外長波長領域に発光ピークを有する分子構造としつつ、スクアリリウム環の外側の基に可溶性基をスクアリリウム環に向かう方向に伸長するように配置することで、該化合物が近赤外長波長領域で発光しつつ、濃度消光を緩和してマトリックスへの高濃度での配合が可能となることを見出し本発明に至った。

すなわち、本発明に係る上記課題は、以下の手段により解決される。

[0008] １．下記一般式（Ｔ）で表される構造を有する化合物を含有する発光部材。

[化1]

一般式(T)



[一般式（Ｔ）において、

Ａ～Ｌは、それぞれ独立して、芳香族炭化水素環又はヘテロ芳香環を表す。

ｎ１～ｎ６は、それぞれ独立して、０～２の整数を表す。

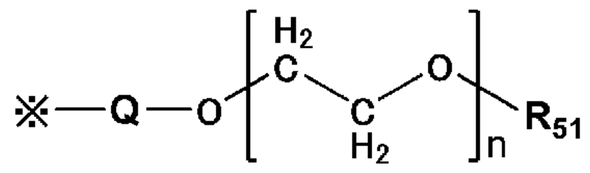
Ｙａ及びＹｂは、それぞれ独立して、ＯＨ基、ＮＨＣＯＲａ（Ｒａは炭化水素基を表す。）基、$NHSO_2Rb$（Ｒｂは炭化水素基を表す。）基、又はＮＨＰＯ（ＯＲｆ）（ＯＲｇ）（Ｒｆ及びＲｇはそれぞれ炭化水素基を表す。）基を表す。

Ｙｃ～ＹＩは、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。

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

[化2]

一般式(P)



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

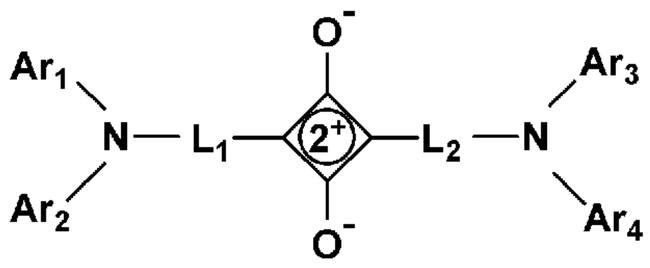
[0009] ２．前記一般式（Ｔ）において、Ａ～Ｌは芳香族炭化水素環を表し、ｎ１～ｎ６はそれぞれ独立して０又は１であり、Ｙａ及びＹｂのうち少なくとも１つが、炭素数４～１２の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基（ａ）、又は前記一般式（Ｐ）で表される構造を有する基（Ｐ）を含む基である第１項に記載の発光部材。

[0010] ３．前記一般式（Ｔ）において、Ａ～Ｌは芳香族炭化水素環を表し、ｎ１～ｎ６はそれぞれ独立して０又は１であり、Ｙｅ～ＹＩのうち少なくとも１つが、炭素数４～１２の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基（ａ）、又は前記一般式（Ｐ）で表される構造を有する基（Ｐ）を含む基である第１項に記載の発光部材。

[0011] ４．前記一般式（Ｔ）で表される構造が、下記一般式（１）で表される構造である第１項に記載の発光部材。

[化3]

一般式(1)

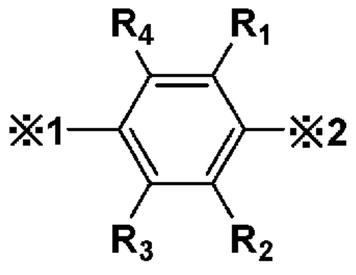


[一般式（１）において、

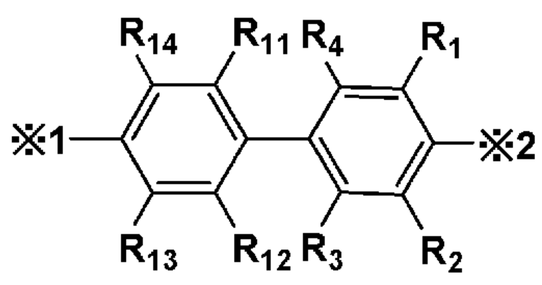
L_1は下記式（Ｌ１）、式（Ｌ２）又は式（Ｌ３）で表される構造を有する基を表す。L_2は下記式（Ｌ４）、式（Ｌ５）又は式（Ｌ６）で表される構造を有する基を表す。

[化4]

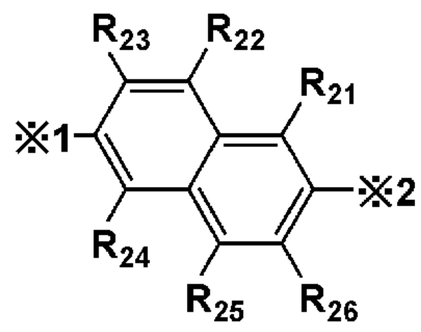
式(L1)



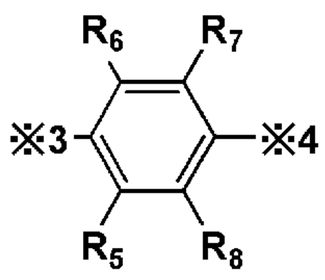
式(L2)



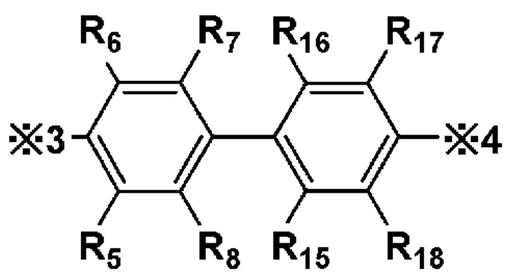
式(L3)



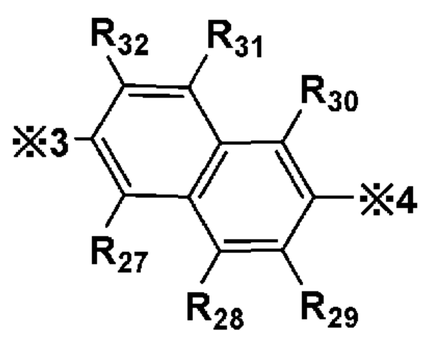
式(L4)



式(L5)



式(L6)



（式（Ｌ１）～式（Ｌ６）において、

※１及び※４はそれぞれ一般式（１）のＮに結合する部位を表す。※２及び※３はそれぞれ一般式（１）のスクアリリウム環の炭素に結合する部位を表す。

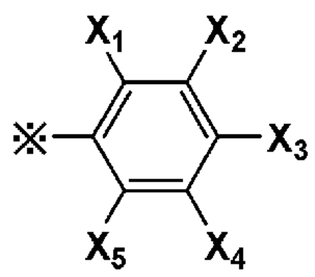
R_1、R_5、R_{21}及びR_{27}は、それぞれ独立して、ＯＨ基、ＮＨＣＯＲａ（Ｒａは炭化水素基を表す。）基、$NHSO_2Rb$（Ｒｂは炭化水素基を表す。）基、又はＮＨＰＯ（ＯＲｆ）（ＯＲｇ）（Ｒｆ及びＲｇはそれぞれ炭化水素基を表す。）基を表す。

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

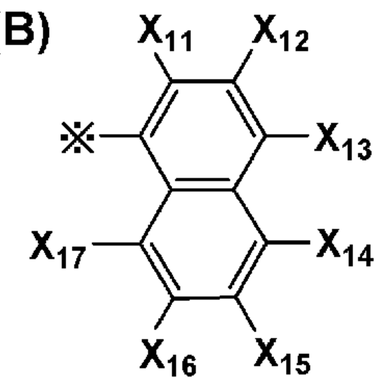
Ar_1～Ar_4は、それぞれ独立して、下記式（Ａ）、式（Ｂ）又は式（Ｃ）で表される構造を有する基を表す。

[化5]

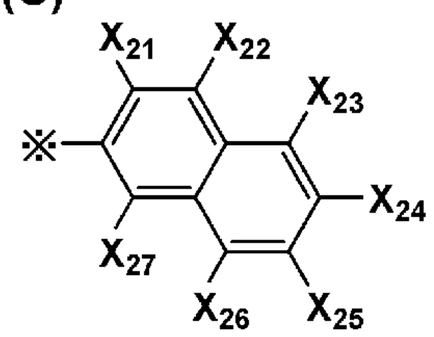
式(A)



式(B)



式(C)



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

ただし、一般式（１）において、L_1、L_2及びAr_1～Ar_4のいずれかは、以下の所定の位置の少なくとも１つに、炭素数４～１２の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基（ａ）、又は前記一般式（Ｐ）で表される構造を有する基（Ｐ）を有する。

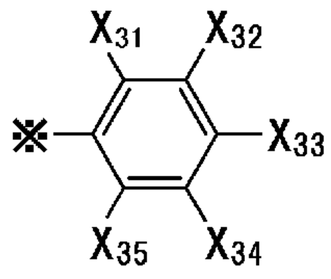
L_1又はL_2における前記所定の位置は、R_1、R_5、R_{21}及びR_{27}がＮＨＣＯＲａ基の場合のＲａ（ただし、基（Ｐ）は除く）、R_1、R_5、R_{21}及びR_{27}がＮＨＳＯ$_2$Ｒｂ基の場合のＲｂ（ただし、基（Ｐ）は除く）、R_1、R_5、R_{21}及びR_{27}がＮＨＰＯ（ＯＲｆ）（ＯＲｇ）基の場合のＲｆ又はＲｇ（ただし、基（Ｐ）は除く）、R_2、R_{11}、R_{12}、R_6、R_{15}、R_{16}、R_{26}、及びR_{32}である。

Ar_1～Ar_4における前記所定の位置は、X_1、X_5、X_{11}、X_{21}及びX_{27}並びに下記式（Ｄ）のX_{31}及びX_{35}である。

さらに、一般式（１）において、L_1又はL_2における、R_3、R_4、R_{13}、R_{14}、R_{23}、R_{24}、R_{25}、R_7、R_8、R_{17}、R_{18}、R_{29}、R_{30}及びR_{31}、Ar_1～Ar_4における、X_2、X_3、X_4、X_{12}、X_{13}、X_{14}、X_{15}、X_{22}、X_{23}、X_{24}及びX_{25}は、炭素数４以上の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基又は（ポリ）オキシアルキレン基を有しない。ただし、X_3、X_{13}及びX_{24}は、下記式（Ｄ）で表される構造を有する基であってもよい。

[化6]

式(D)



（式（Ｄ）において、※は接続部位を示す。X_{31}～X_{35}は、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。ただし、X_{31}及びX_{35}のうち少なくとも１つは炭素数４～１２の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基（ａ）、又は前記

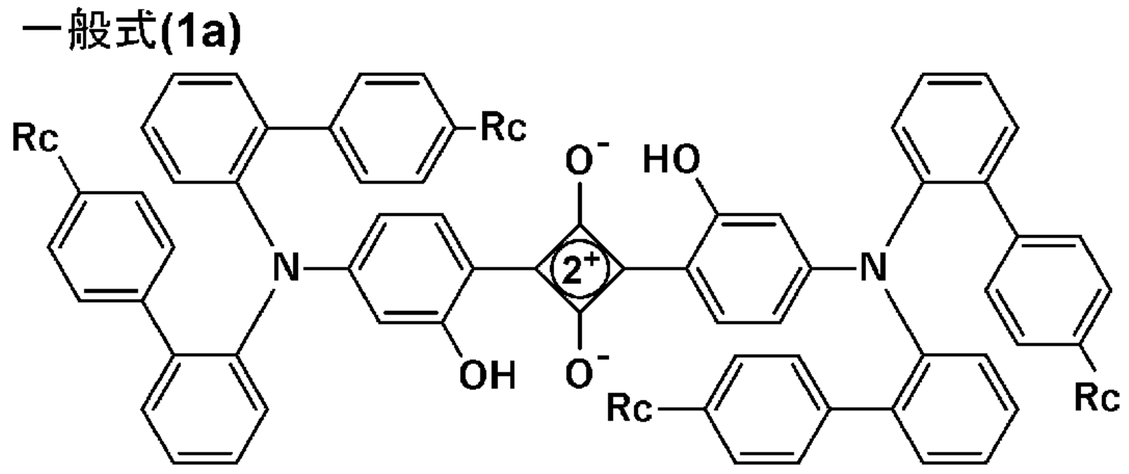
一般式（Ｐ）で表される構造を有する基（Ｐ）を有する基であり、X_{32}～X_{34}は、炭素数４以上の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基又は（ポリ）オキシアルキレン基を有しない。）］

[0012] ５．前記一般式（１）において、L_1が前記式（Ｌ１）で表される構造を有する基であり、かつL_2が前記式（Ｌ４）で表される構造を有する基である第４項に記載の発光部材。

[0013] ６．前記一般式（１）で表される構造が、下記一般式（１ａ）で表される構造である第５項に記載の発光部材。

[化7]

一般式(1a)

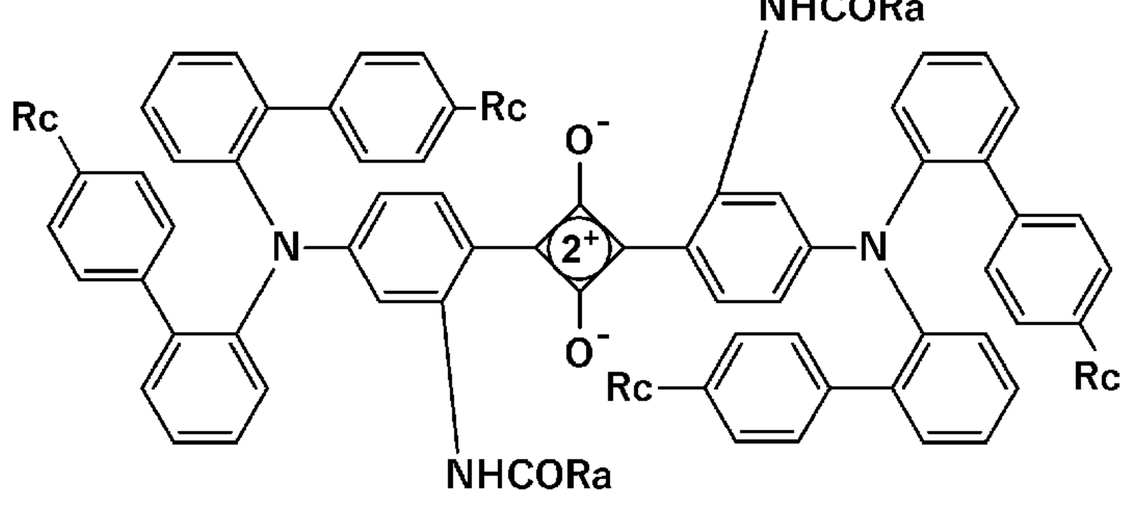


（一般式（１ａ）において、各Ｒｃは、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表し、４個のＲｃのうち少なくとも１個は、連結基として－Ｏ－を有してもよい炭素数４～１２の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基（ａ）、又は前記一般式（Ｐ）で表される構造を有する基（Ｐ）を表す。）

[0014] ７．前記一般式（１）で表される構造が、下記一般式（１ｂ）で表される構造である第５項に記載の発光部材。

[化8]

一般式(1b)



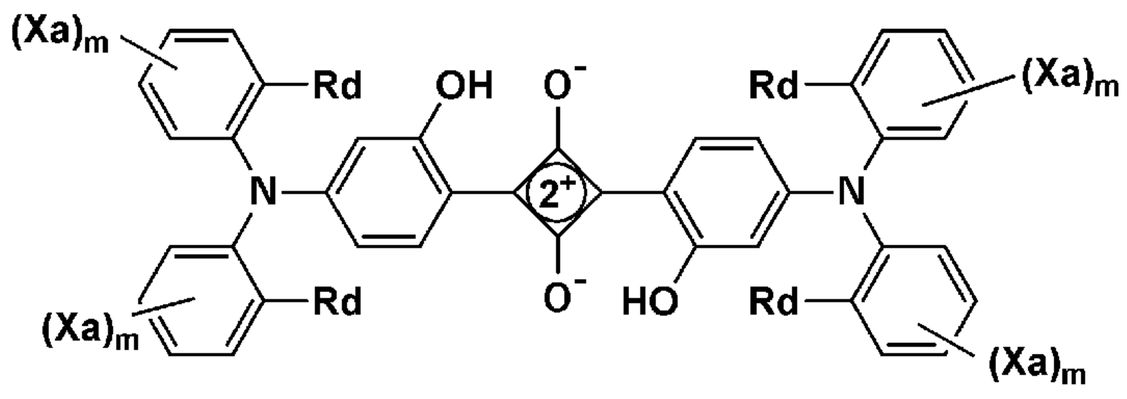
（一般式（１ｂ）において、各Ｒａは、それぞれ独立して、炭化水素基を表

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

[0015] ８．前記一般式（１）で表される構造が、下記一般式（１ｃ）で表される構造である第５項に記載の発光部材。

[化9]

一般式(1c)

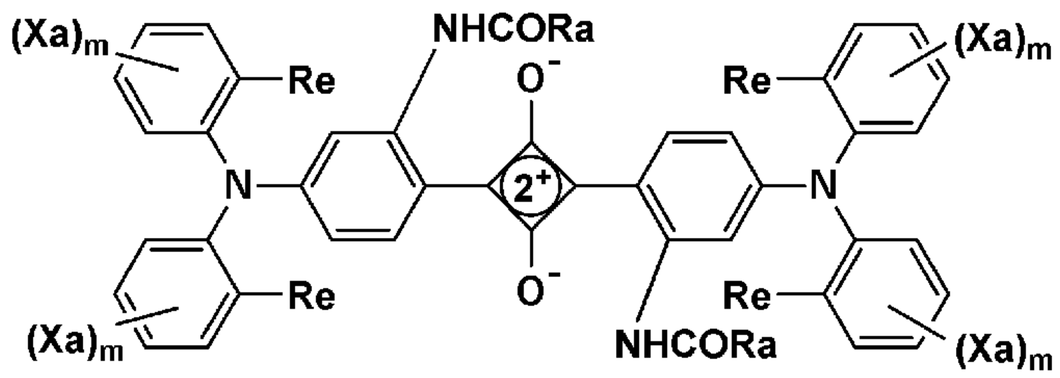


（一般式（１ｃ）において、各Ｒｄは、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表し、４個のＲｄのうち少なくとも１個は、連結基として－Ｏ－を有してもよい炭素数４～１２の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基（ａ）、又は前記一般式（Ｐ）で表される構造を有する基（Ｐ）を表す。各Ｘａは、それぞれ独立して、炭素数１～３のアルキル基若しくはアルコキシ基又は置換又は無置換のフェニル基を表す。ｍは、０～４の整数を表す。）

[0016] ９．前記一般式（１）で表される構造が、下記一般式（１ｄ）で表される構造である第５項に記載の発光部材。

[化10]

一般式(1d)



（一般式（１ｄ）において、各Ｒａは、それぞれ独立して、炭化水素基を表

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

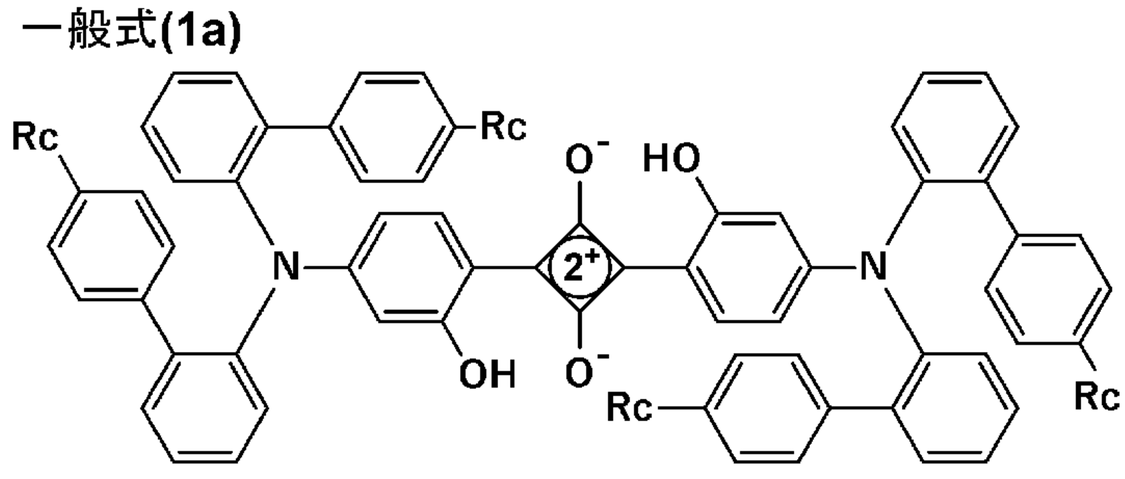
[0017] １０．前記発光部材が発光性薄膜である第１項から第９項までのいずれか一項に記載の発光部材。

[0018] １１．前記発光部材が発光性粒子である第１項から第９項までのいずれか一項に記載の発光部材。

[0019] １２．下記一般式（１ａ）で表される構造を有する発光性化合物。

[化11]

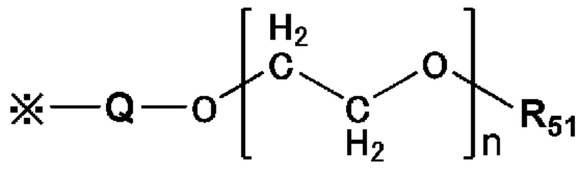
一般式(1a)



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

[化12]

一般式(P)

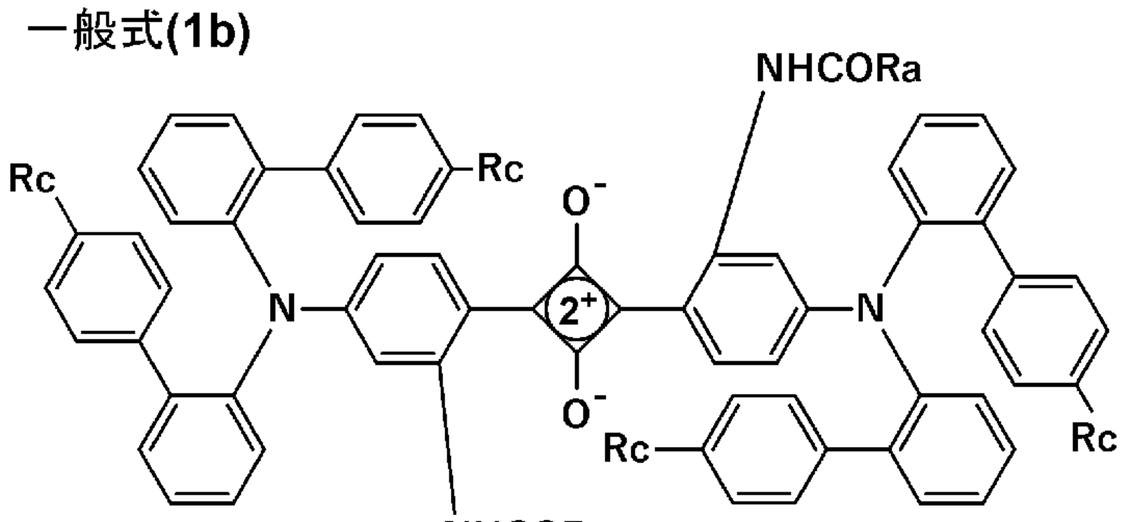


（一般式（Ｐ）において、※は置換部位を表す。Ｑは単結合又は２価の連結基を表す。ｎは１～９の整数を表す。Ｒ$_{51}$は水素原子又はメチル基を表す。）

[0020] １３．下記一般式（１ｂ）で表される構造を有する発光性化合物。

[化13]

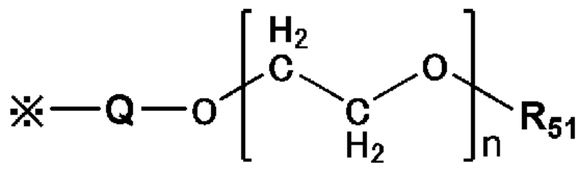
一般式(1b)



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

[化14]

一般式(P)



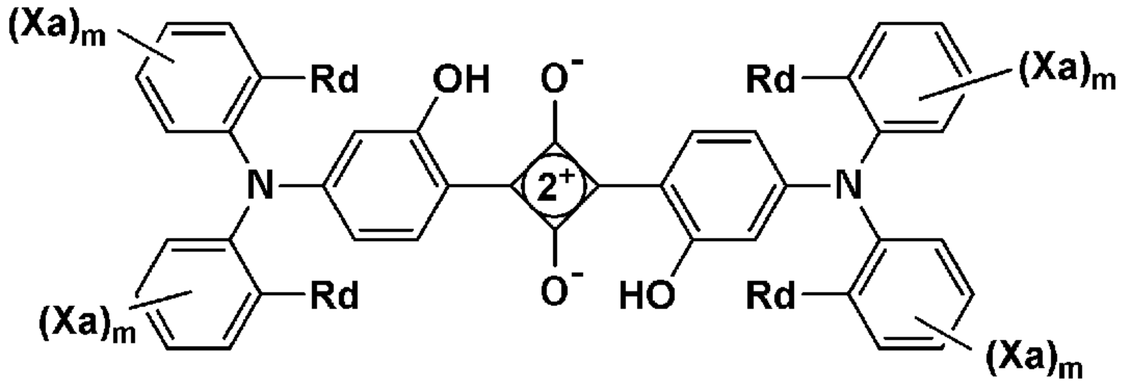
（一般式（Ｐ）において、※は置換部位を表す。Ｑは単結合又は２価の連結基を表す。ｎは１～９の整数を表す。Ｒ$_{51}$は水素原子又はメチル基を表す。

）

[0021] １４．下記一般式（１ｃ）で表される構造を有する発光性化合物。

[化15]

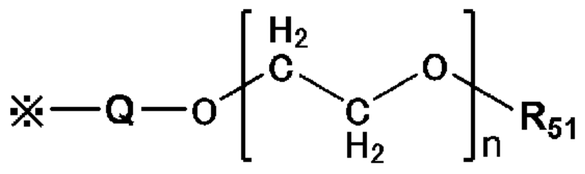
一般式(1c)



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

[化16]

一般式(P)

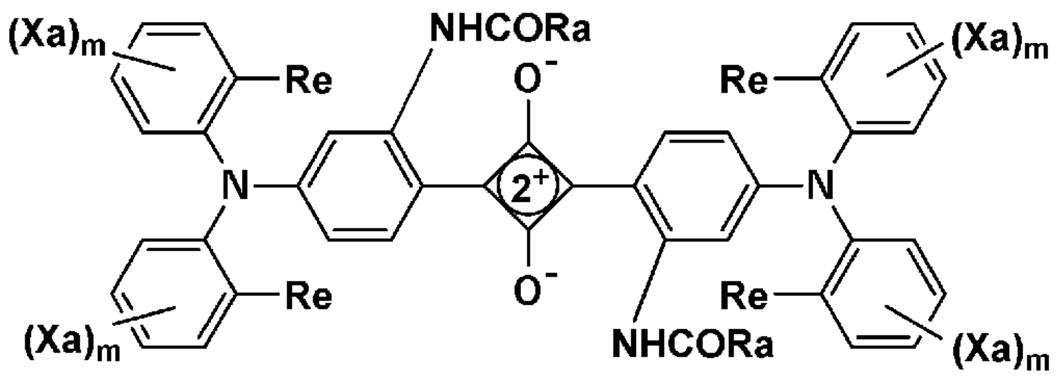


（一般式（Ｐ）において、※は置換部位を表す。Ｑは単結合又は２価の連結基を表す。ｎは１～９の整数を表す。Ｒ$_{51}$は水素原子又はメチル基を表す。）

[0022] １５．下記一般式（１ｄ）で表される構造を有する発光性化合物。

[化17]

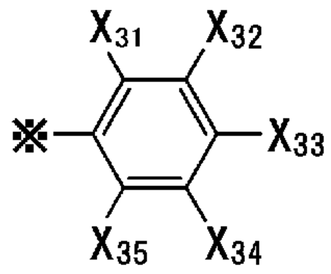
一般式(1d)



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

[化18]

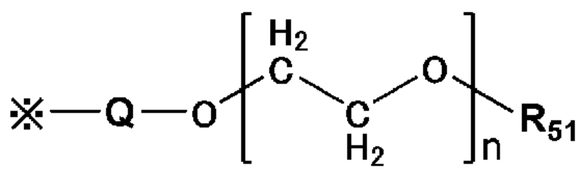
式(D)



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

[化19]

一般式(P)



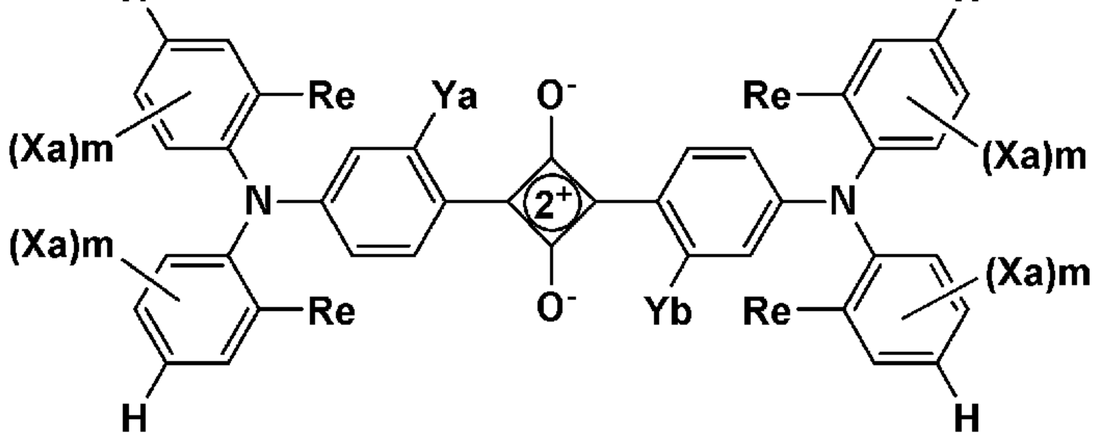
（一般式（Ｐ）において、※は置換部位を表す。Ｑは単結合又は２価の連結基を表す。ｎは１～９の整数を表す。R_{51}は水素原子又はメチル基を表す。

)

[0023] １６．下記一般式（１ｅ）で表される構造を有する発光性化合物。

[化20]

一般式(1e)



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

[化21]

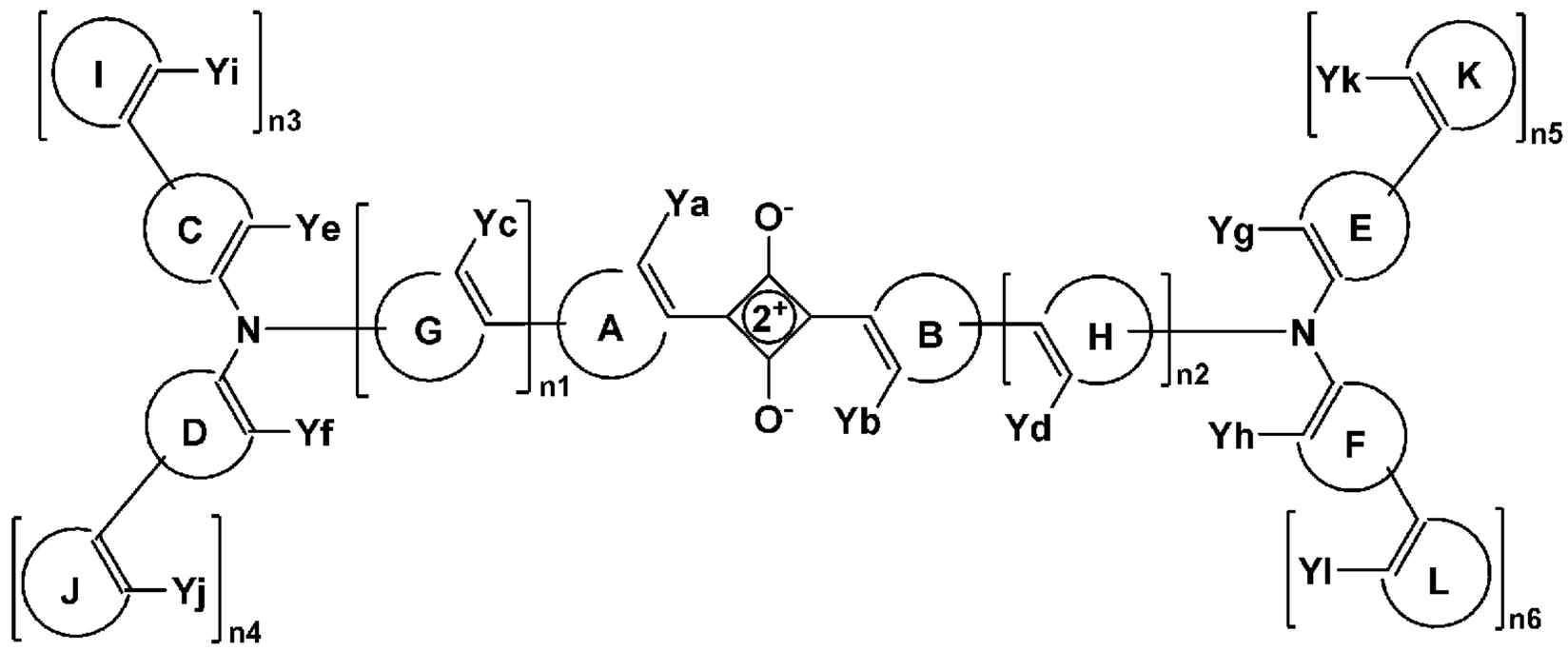
一般式(P)

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

[0024] １７．下記一般式（Ｔ）で表される構造を有する化合物を含有する光電変換部材。

[化22]

一般式(T)



[一般式（Ｔ）において、

Ａ～Ｌは、それぞれ独立して、芳香族炭化水素環又はヘテロ芳香環を表す。

ｎ１～ｎ６は、それぞれ独立して、０～２の整数を表す。

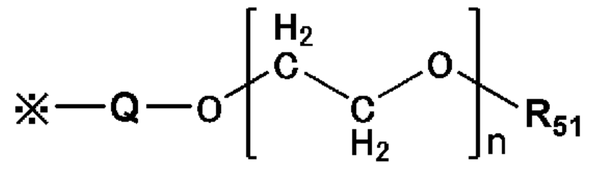
Ｙａ及びＹｂは、それぞれ独立して、ＯＨ基、ＮＨＣＯＲａ（Ｒａは炭化水素基を表す。）基、$NHSO_2Rb$（Ｒｂは炭化水素基を表す。）基、又はＮＨＰＯ（ＯＲｆ）（ＯＲｇ）（Ｒｆ及びＲｇはそれぞれ炭化水素基を表す。）基を表す。

Ｙｃ～ＹＩは、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。

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

[化23]

一般式(P)



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

発明の効果

[0025] 本発明の上記手段により、近赤外長波長領域の発光と部材への高濃度での配合が可能な発光性化合物を含有する、近赤外長波長領域において高い発光量子収率が達成可能な発光部材を提供することができる。また、近赤外長波長領域の発光と部材への高濃度での配合が可能な発光性化合物を提供することができる。さらには、近赤外長波長領域の発光と部材への高濃度での配合が可能な発光性化合物を用いた高い外部量子効率が得られる光電変換部材を提供することができる。

[0026] 本発明の効果の発現機構ないし作用機構については、明確にはなっていないが、以下のように推察している。

[0027] 一般式（Ｔ）で表される構造を有する化合物（以下、化合物（Ｔ）ともいう。）は、スクアリリウム環を分子構造の中心に有する化合物である。化合物（Ｔ）は、主骨格がスクアリリウム環の左右に、芳香族炭化水素環又はヘテロ芳香環を介して窒素原子が結合し、該窒素原子に２個の芳香族炭化水素環又はヘテロ芳香環が結合した構造を有する。なお、これらの芳香族炭化水素環又はヘテロ芳香環は２又は３個が鎖状に連結した構造も含む。また、化合物（Ｔ）は、スクアリリウム環に結合する上記芳香族炭化水素環又はヘテロ芳香環が所定の位置にＯＨ基、ＮＨＣＯＲａ基、ＮＨＳＯ$_2$Ｒｂ基、又はＮＨＰＯ（ＯＲｆ）（ＯＲｇ）基を有する。さらに、化合物（Ｔ）は、可溶性基として、炭素数４～１２の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基（ａ）、又は上記一般式（Ｐ）で表される構造を有する基（Ｐ）が、該基が中央のスクアリリウム環に向かう方向に位置するように、直接又は連結基を介して、上記芳香族炭化水素環又はヘテロ芳香環に結合する構造である。

[0028] 本発明者は、スクアリリウム化合物を化合物（Ｔ）が有する上記の分子構造とすることで、近赤外光の長波長領域に発光ピークを有する分子構造としつつ、濃度消光を緩和してマトリックスへの高濃度での配合を可能としたものである。

[0029] 本発明においては、化合物（Ｔ）を発光部材に含有させることで、近赤外

長波長領域において高い発光量子収率が達成可能な発光部材が得られるものである。なお、このような効果を発現するために、化合物（Ｔ）のうち特に一般式（１）で表される構造を有する化合物（以下、化合物（１）ともいう。）が好ましい。化合物（１）において、上記特定の分子構造を有する化合物、すなわち、一般式（１ａ）、（１ｂ）、（１ｃ）、（１ｄ）又は（１ｅ）で表される構造を有する化合物は、これまでに文献に記載のない新規な化合物である。

[0030] さらに、化合物（Ｔ）を光電変換素子に用いると高い外部量子効率の光電変換素子が得られる。これは、化合物（Ｔ）、特には化合物（１）が近赤外長波長領域に発光ピークを有し、かつ高い発光量子収率を示すという特性により、分子を励起した際の励起子が無輻射失活などの消光パスを通りづらくなるため、このような効果が発現したものと推察される。

図面の簡単な説明

[0031] [図1]化合物（１ａ）－１の^{1}Ｈ－ＮＭＲスペクトル（４００ＭＨｚ、測定溶媒ＣＤＣｌ３）である。

[図2]化合物（１ｃ）－１の^{1}Ｈ－ＮＭＲスペクトル（４００ＭＨｚ、測定溶媒ＣＤＣｌ３）である。

[図3]化合物（１ｄ）－１の^{1}Ｈ－ＮＭＲスペクトル（４００ＭＨｚ、測定溶媒ＣＤＣｌ３）である。

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

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

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

発明を実施するための形態

[0032] 本発明の発光部材は、上記一般式（Ｔ）で表される構造を有する化合物を含有することを特徴とする。この特徴は、下記各実施形態に共通する技術的

特徴である。

[0033] 本発明の実施形態としては、本発明の効果発現の観点から、上記一般式（Ｔ）において、Ａ～Ｌは芳香族炭化水素環を表し、ｎ１～ｎ６はそれぞれ独立して０又は１であり、Ｙａ及びＹｂのうち少なくとも１つが、炭素数４～１２の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基（ａ）、又は上記一般式（Ｐ）で表される構造を有する基（Ｐ）を含む基であることが好ましい。

[0034] 本発明の実施形態としては、本発明の効果発現の観点から、上記一般式（Ｔ）において、Ａ～Ｌは芳香族炭化水素環を表し、ｎ１～ｎ６はそれぞれ独立して０又は１であり、Ｙｅ～ＹｌのうちＹｅ～Ｙｉのうち少なくとも１つが、炭素数４～１２の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基（ａ）、又は上記一般式（Ｐ）で表される構造を有する基（Ｐ）を含む基であることが好ましい。

[0035] 本発明の実施形態としては、本発明の効果発現の観点から、上記一般式（Ｔ）で表される構造が、上記一般式（１）で表される構造であることが好ましい。

[0036] 一般式（１）で表される構造を有する化合物（以下、化合物（１）ともいう。）は、主骨格がスクアリリウム環の左右に、ベンゼン環、ビフェニル環又はナフタレン環を介して窒素原子が結合し、該窒素原子に２個のベンゼン環又はナフタレン環が結合した構造を有する。また、化合物（１）は、化合物（Ｔ）が可溶性基として有する炭素数４～１２の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基（ａ）、又は上記一般式（Ｐ）で表される構造を有する基（Ｐ）が直接又は連結基を介して結合した結合位置を、該基が中央のスクアリリウム環に向かう方向に位置するように具体的に規定した化合物である。このような、化合物（１）は、化合物（Ｔ）が有する近赤外長波長領域の発光と部材への高濃度での配合が可能であるという特徴を特に顕著に有する化合物である。

[0037] 本発明の実施形態としては、近赤外長波長領域の発光と部材への高濃度での配合が可能な観点から、上記記一般式（１）において、$Ｌ_{1}$が上記式（Ｌ１）で表される構造を有する基であり、かつ$Ｌ_{2}$が上記式（Ｌ４）で表される構

造を有する基であることが好ましい。

[0038] 本発明の実施形態としては、近赤外長波長領域の発光と部材への高濃度での配合が可能な観点から、上記一般式（１）で表される構造が、上記一般式（１ａ）、一般式（１ｂ）、一般式（１ｃ）又は一般式（１ｄ）で表される構造であることが好ましい。

[0039] 本発明の実施形態としては、本発明の効果発現の観点から、発光部材が、発光性薄膜又は発光性粒子であることが好ましい。

[0040] また、本発明の上記一般式（１ａ）、一般式（１ｂ）、一般式（１ｃ）、一般式（１ｄ）又は一般式（１ｅ）で表される構造を有する発光性化合物は、新規な化合物である。

[0041] 本発明の光電変換部材は、上記一般式（Ｔ）で表される構造を有する化合物を含有することを特徴とする。これにより、高い外部量子効率の光電変換素子が得られる。

[0042] 以下、本発明とその構成要素、及び本発明を実施するための形態・態様について詳細な説明をする。なお、本願において、「～」は、その前後に記載される数値を下限値及び上限値として含む意味で使用する。

[0043] 本明細書において、一般式（Ｔ）で表される構造を有する化合物を、上記のとおり化合物（Ｔ）ともいう。また、化学構造式に、化合物（１ａ）－１のように、該化学構造式で表される構造を有する化合物の略号を付して示すこともある。さらに、一般式（Ｐ）で表される構造を有する基を基（Ｐ）ともいい、式（Ｌ１）で表される構造を有する基を基（Ｌ１）ともいう。他の化合物及び基においても同様である。

[0044] ［本発明の発光部材の概要］

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

を損なわない範囲で、化合物（Ｔ）以外に、各種添加剤を含有してもよい。

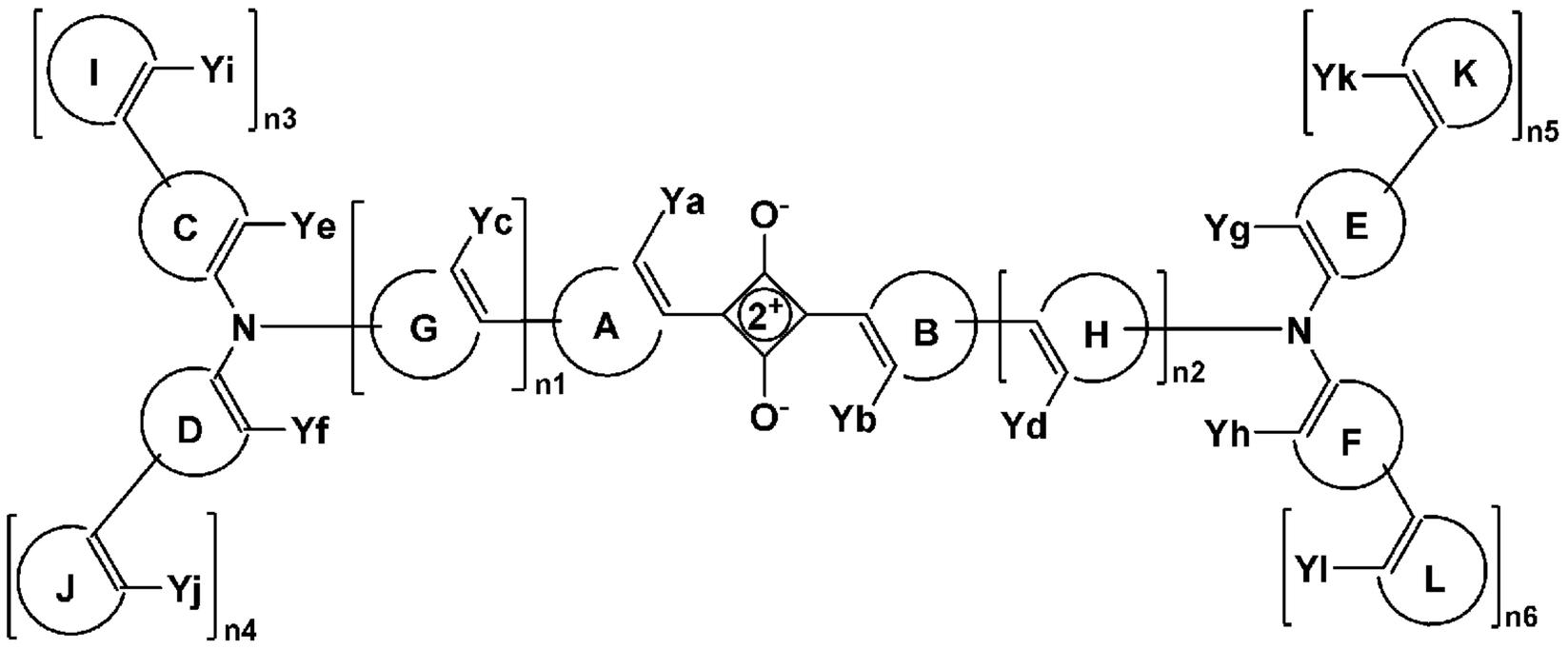
以下、本発明の発光部材の構成要素について詳細に説明する。

[0045] ＜化合物（Ｔ）＞

化合物（Ｔ）は、一般式（Ｔ）で表される構造を有する化合物である。

[0046] [化24]

一般式(T)



一般式（Ｔ）において、

Ａ～Ｌは、それぞれ独立して、芳香族炭化水素環又はヘテロ芳香環を表す。

ｎ１～ｎ６は、それぞれ独立して、０～２の整数を表す。

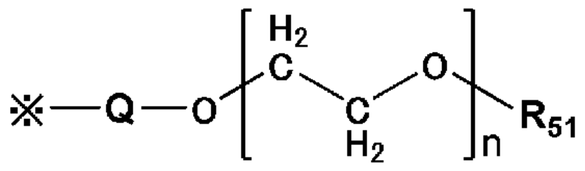
Ｙａ及びＹｂは、それぞれ独立して、ＯＨ基、ＮＨＣＯＲａ（Ｒａは炭化水素基を表す。）基、ＮＨＳＯ$_2$Ｒｂ（Ｒｂは炭化水素基を表す。）基、又はＮＨＰＯ（ＯＲｆ）（ＯＲｇ）（Ｒｆ及びＲｇはそれぞれ炭化水素基を表す。）基を表す。

Ｙｃ～ＹＩは、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。

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

[化25]

一般式(P)



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

[0047] 一般式（Ｔ）において、Ａ～Ｌは、それぞれ独立して、芳香族炭化水素環又はヘテロ芳香環を表す。芳香族炭化水素環又はヘテロ芳香環における炭素数は４～１０が好ましい。ヘテロ芳香環におけるヘテロ原子としては、酸素原子、窒素原子又は硫黄原子が挙げられる。芳香族炭化水素環又はヘテロ芳香環として、具体的には、ベンゼン環、ナフタレン環、ピリジン環、チオフェン環、ピロール環又はフラン環が挙げられ、ベンゼン環及びナフタレン環が好ましい。

[0048] 一般式（Ｔ）において、ｎ１～ｎ６は、それぞれ独立して、０～２の整数を表し、０又は１が好ましい。化合物（Ｔ）において、スクアリリウム環と窒素原子を結ぶ構造としては、ベンゼン環、ビフェニル環又はナフタレン環が好ましい。具体的には、化合物（１）で説明するとおりである。

[0049] 化合物（Ｔ）において、Ｙａ～ＹＩのうち少なくとも１つは、炭素数４～１２の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基（ａ）、又は上記一般式（Ｐ）で表される構造を有する基（Ｐ）を含む基（以下、置換基（Ｅ）ともいう。）である。化合物（Ｔ）において、置換基（Ｅ）で置換される位置は、すなわち、Ｙａ～ＹＩの位置は、中央のスクアリリウム環に向かう方向に結合する位置である。

[0050] なお、Ｙａ及びＹｂは、それぞれ独立して、ＯＨ基、ＮＨＣＯＲａ（Ｒａは炭化水素基を表す。）基、$NHSO_2Rb$（Ｒｂは炭化水素基を表す。）基、又はＮＨＰＯ（ＯＲｆ）（ＯＲｇ）（Ｒｆ及びＲｇはそれぞれ炭化水素基を表す。）基を表す。Ｙａ及びＹｂが置換基（Ｅ）を有する場合、Ｒａ、Ｒｂ、Ｒｆ又はＲｇが置換基（Ｅ）である。ただし、この場合の置換基（Ｅ）は、アルキル基（ａ）を含む置換基（Ｅ）に限定される。

[0051] 置換基（Ｅ）は、アルキル基（ａ）又は基（Ｐ）自体であってもよく、アルキル基（ａ）又は基（Ｐ）が２価の連結基を介して主骨格に結合する基で

あってもよい。連結基としては、フェニレン基、－Ｏ－、エステル結合（－Ｃ（＝Ｏ）Ｏ－又は－ＯＣ（＝Ｏ）－）、アミド結合（－ＮＨＣＯ－）及びこれらの組み合わせ等が挙げられる。連結基としては、－Ｏ－及びフェニレン基が好ましく、１，４－フェニレン基が特に好ましい。

[0052] Ｙｃ～ＹＩが置換基（Ｅ）である場合、置換基（Ｅ）は、連結基として－Ｏ－を有してもよいアルキル基（ａ）又は基（Ｐ）自体であることが好ましい。Ｒａ、Ｒｂ、Ｒｆ又はＲｇが置換基（Ｅ）である場合は、アルキル基（ａ）であることが好ましい。

[0053] 化合物（Ｔ）における置換基（Ｅ）の数は、１以上であればよく、１～８の範囲内が好ましく、２～８の範囲内がより好ましく、２～４の範囲内がさらに好ましい。化合物（Ｔ）における、置換基（Ｅ）の好ましい位置については、後述するより具体的な化合物において説明する。

[0054] 置換基（Ｅ）において、アルキル基（ａ）のうち、炭素数４～１２の直鎖状のアルキル基（ａ）としては、ｎ－ブチル基、ｎ－ペンチル基、ｎ－ヘキシル基、ｎ－ヘプチル基、ｎ－オクチル基、ｎ－ノニル基、ｎ－デシル基、ｎ－ウンデシル基、ｎ－ドデシル基が挙げられる。炭素数４～１２の分岐状のアルキル基（ａ）としては、イソブチル基、ｓ－ブチル基、ｔ－ブチル基、１－プロピルブチル基、１－エチルペンチル基、２，４，４－トリメチルペンチル基、２－エチルブチル基、２，２－ジメチルプロピル基、２－エチルヘキシル基、２－ブチルオクチル基等が挙げられる。

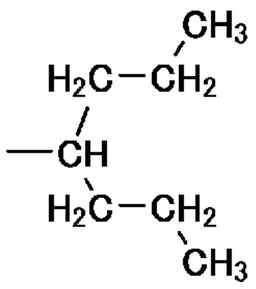
[0055] アルキル基（ａ）としては、溶解性の観点から、炭素数４～１２の分岐状のアルキル基（ａ）が好ましい。分岐状のアルキル基（ａ）としては、下記式（ａ１）～（ａ７）のいずれかで表される構造を有する基が好ましい。なお、基（ａ１）は１－プロピルブチル基、基（ａ２）は１－エチルペンチル基、基（ａ３）は２，４，４－トリメチルペンチル基、基（ａ４）はイソブチル基、基（ａ５）は２－エチルブチル基、基（ａ６）は２－エチルヘキシル基、基（ａ７）２－ブチルオクチル基である。

[0056] Ｒａ、Ｒｂ、Ｒｆ又はＲｇが分岐状のアルキル基（ａ）の場合、該アルキ

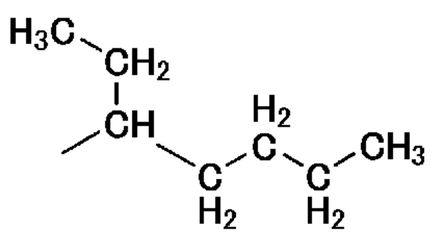
ル基（ａ）は、基（ａ１）、基（ａ２）、基（ａ３）又は基（ａ４）であることが好ましい。分岐状のアルキル基（ａ）がそれ以外の位置に結合する場合、当該分岐状のアルキル基（ａ）は、基（ａ４）、基（ａ５）、基（ａ６）又は基（ａ７）であることが好ましい。

[0057] [化26]

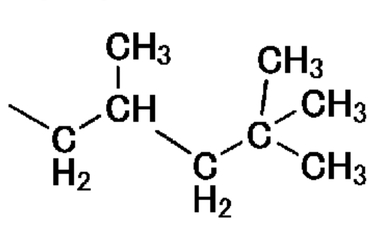
式(a1)



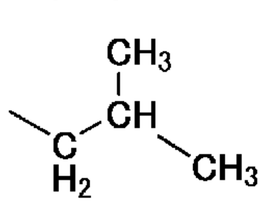
式(a2)



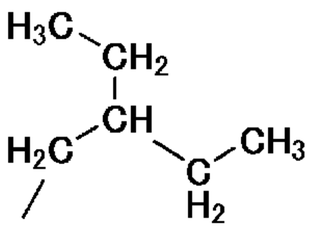
式(a3)



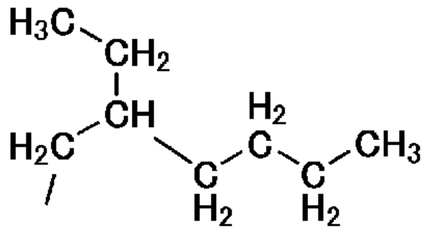
式(a4)



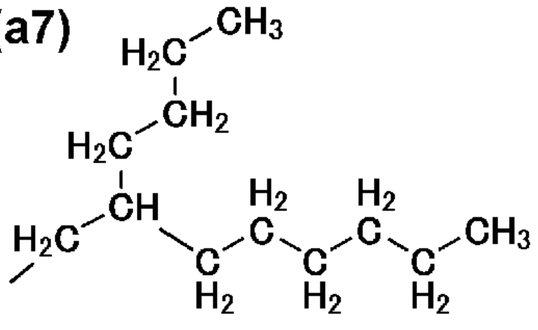
式(a5)



式(a6)



式(a7)



[0058] 置換基（Ｅ）が基（Ｐ）である場合、オキシエチレン基の繰り返し数を示すｎの数は、１～９の範囲内であればよい。ｎの数は２、３、４、８であることが製造容易性の点からより好ましい。基（Ｐ）において、Ｑは、単結合又は２価の連結基である。Ｑが２価の連結基の場合、炭素数１～４のアルキレン基、カルボニル基（－Ｃ（＝Ｏ）－）、炭素数６～１２のアリーレン基及びこれらの組み合わせ等が挙げられる。Ｑとしては、単結合、炭素数１～２のアルキレン基、又はカルボニル基が好ましい。基（Ｐ）が連結基を介して主骨格に結合する場合の連結基としては、上記のとおり、フェニレン基が好ましく、１，４－フェニレン基が特に好ましい。

[0059] 化合物（Ｔ）において、置換基（Ｅ）でない場合の、Ｒａ、Ｒｂ、Ｒｆ、Ｒｇ、及びＹｃ～ＹＩとしては、それぞれ、水素原子、炭素数１～３のアルキル基若しくはアルコキシ基、及びアリール基（ただし、炭素数４以上の直鎖状又は分岐状のアルキル基及び（ポリ）オキシアルキレン基のいずれも有しない。）等から選ばれる原子又は基が挙げられる。アリール基としては、フェニル基、トリル基、キシリル基等が挙げられる。

[0060] 置換基（Ｅ）でない場合の、Ｒａ、Ｒｂ、Ｒｆ及びＲｇはメチル基であることが好ましい。置換基（Ｅ）でない場合の、Ｙｃ～ＹＩは水素原子又は炭素数１～３のアルキル基又はフェニル基であることが好ましい。

[0061] 化合物（Ｔ）におけるＡ～Ｌにおいて、Ｙａ～ＹＩ以外の位置で芳香族炭化水素環又はヘテロ芳香環に結合する水素原子は、置換されていてもよい。化合物（Ｔ）におけるＡ～Ｌにおいては、本発明の効果を損なわない範囲で、Ｙａ～ＹＩ以外の位置に、さらに置換基（Ｅ）を有してもよい。該位置は、例えば、Ｙａ～ＹＩ以外の位置であるが中央のスクアリリウム環に向かう方向に結合する位置である。該位置には、置換基（Ｅ）以外の置換基が結合されてもよく、その場合の置換基として、Ｙａ～ＹＩが置換基（Ｅ）以外である場合の置換基と同様の置換基が挙げられる。

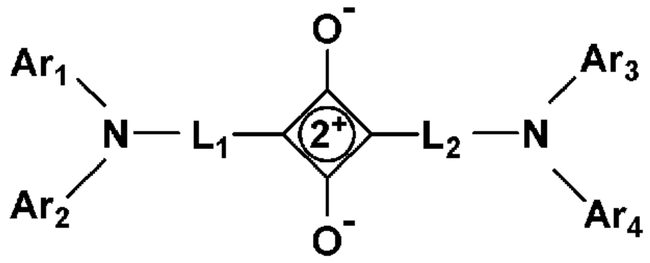
[0062] 化合物（Ｔ）のＡ～Ｌにおいて、上記以外の位置に置換基を有する場合、該置換基は、炭素数４以上の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基又は（ポリ）オキシアルキレン基を有しない基であることが好ましい。このような置換基として、具体的には、炭素数１～３のアルキル基若しくはアルコキシ基、及びアリール基（ただし、炭素数４以上の直鎖状又は分岐状のアルキル基及び（ポリ）オキシアルキレン基のいずれも有しない。）等が挙げられる。

[0063] （化合物（１））

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

[0064] [化27]

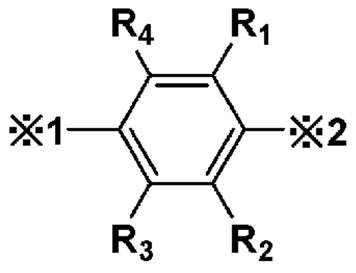
一般式(1)



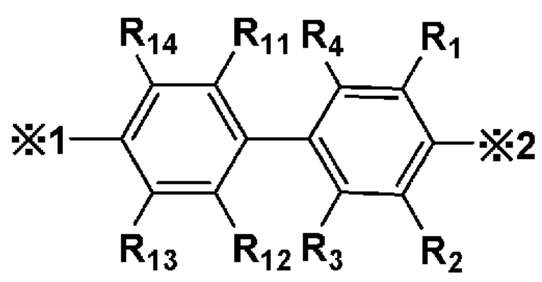
[0065] 一般式（１）において、L_1は下記式（Ｌ１）、式（Ｌ２）又は式（Ｌ３）で表される構造を有する基を表す。L_2は下記式（Ｌ４）、式（Ｌ５）又は式（Ｌ６）で表される構造を有する基を表す。

[0066] [化28]

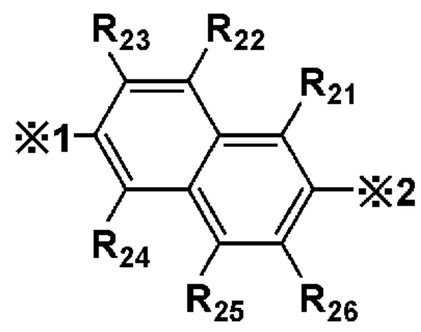
式(L1)



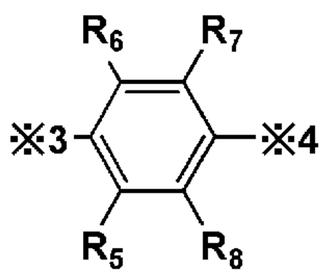
式(L2)



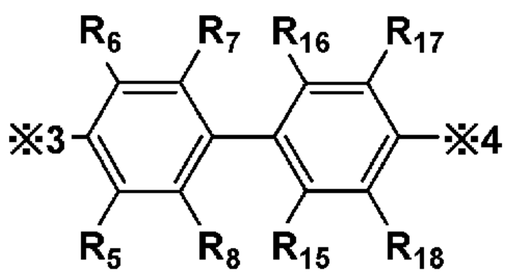
式(L3)



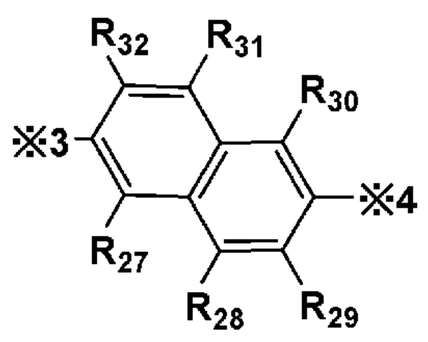
式(L4)



式(L5)



式(L6)

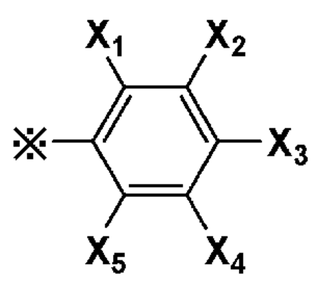


[0067] 式（Ｌ１）～式（Ｌ６）において、※１及び※４はそれぞれ一般式（１）のＮに結合する部位を表す。※２及び※３はそれぞれ一般式（１）のスクアリリウム環の炭素に結合する部位を表す。R_1、R_5、R_{21}及びR_{27}は、それぞれ独立して、ＯＨ基、ＮＨＣＯＲａ（Ｒａは炭化水素基を表す。）基、ＮHSO_2Ｒｂ（Ｒｂは炭化水素基を表す。）基、又はＮＨＰＯ（ＯＲｆ）（ＯＲｇ）（Ｒｆ及びＲｇはそれぞれ炭化水素基を表す。）基を表す。R_2～R_4、R_6～R_8、R_{11}～R_{18}、R_{22}～R_{26}及びR_{28}～R_{32}は、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。

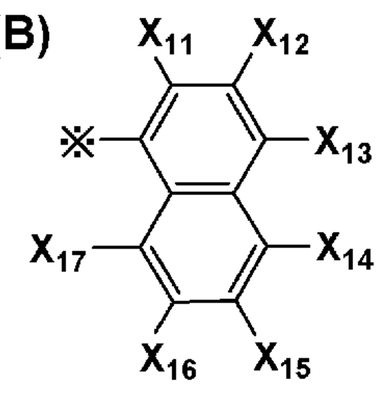
[0068] 一般式（１）において、Ar_1～Ar_4は、それぞれ独立して、下記式（Ａ）、式（Ｂ）又は式（Ｃ）で表される構造を有する基を表す。

[化29]

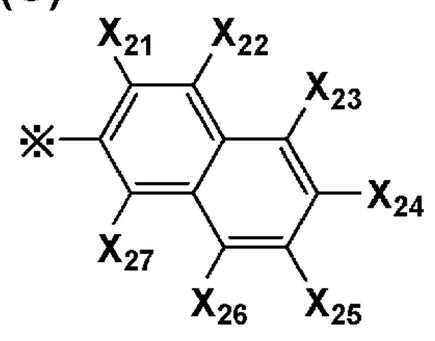
式(A)



式(B)



式(C)



[0069] 式（Ａ）～式（Ｃ）において、※はＮ原子との接続部位を示す。X_1～X_{27}は、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。

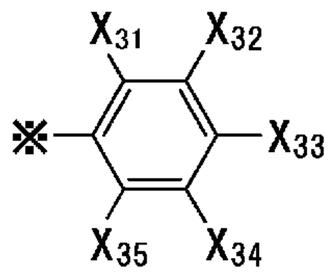
[0070] ただし、一般式（１）において、Ｌ$_1$、Ｌ$_2$及びＡｒ$_1$～Ａｒ$_4$のいずれかは、以下の所定の位置の少なくとも１つに、炭素数４～１２の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基（ａ）、又は前記一般式（Ｐ）で表される構造を有する基（Ｐ）を有する。

[0071] Ｌ$_1$又はＬ$_2$における前記所定の位置は、Ｒ$_1$、Ｒ$_5$、Ｒ$_{21}$及びＲ$_{27}$がＮＨＣＯＲａ基の場合のＲａ（ただし、基（Ｐ）は除く）、Ｒ$_1$、Ｒ$_5$、Ｒ$_{21}$及びＲ$_{27}$がＮＨＳＯ$_2$Ｒｂ基の場合のＲｂ（ただし、基（Ｐ）は除く）、Ｒ$_1$、Ｒ$_5$、Ｒ$_{21}$及びＲ$_{27}$がＮＨＰＯ（ＯＲｆ）（ＯＲｇ）基の場合のＲｆ又はＲｇ（ただし、基（Ｐ）は除く）、Ｒ$_2$、Ｒ$_{11}$、Ｒ$_{12}$、Ｒ$_6$、Ｒ$_{15}$、Ｒ$_{16}$、Ｒ$_{26}$及びＲ$_{32}$である。Ａｒ$_1$～Ａｒ$_4$における前記所定の位置は、Ｘ$_1$、Ｘ$_5$、Ｘ$_{11}$、Ｘ$_{21}$及びＸ$_{27}$並びに下記式（Ｄ）のＸ$_{31}$及びＸ$_{35}$である。

[0072] さらに、一般式（１）において、Ｌ$_1$又はＬ$_2$における、Ｒ$_3$、Ｒ$_4$、Ｒ$_{13}$、Ｒ$_{14}$、Ｒ$_{23}$、Ｒ$_{24}$、Ｒ$_{25}$、Ｒ$_7$、Ｒ$_8$、Ｒ$_{17}$、Ｒ$_{18}$、Ｒ$_{29}$、Ｒ$_{30}$及びＲ$_{31}$、Ａｒ$_1$～Ａｒ$_4$における、Ｘ$_2$、Ｘ$_3$、Ｘ$_4$、Ｘ$_{12}$、Ｘ$_{13}$、Ｘ$_{14}$、Ｘ$_{15}$、Ｘ$_{22}$、Ｘ$_{23}$、Ｘ$_{24}$及びＸ$_{25}$は、炭素数４以上の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基又は（ポリ）オキシアルキレン基を有しない。ただし、Ｘ$_3$、Ｘ$_{13}$及びＸ$_{24}$は、下記式（Ｄ）で表される構造を有する基であってもよい。

[0073] [化30]

式(D)



[0074] 式（Ｄ）において、※は接続部位を示す。Ｘ$_{31}$～Ｘ$_{35}$は、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。ただし、Ｘ$_{31}$及びＸ$_{35}$のうち少なくとも１つは炭素数４～１２の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基（ａ）、又は前記一般式（Ｐ）で表される構造を有する基（Ｐ）を有する基であり、Ｘ$_{32}$～Ｘ$_{34}$は、炭素数４以上の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基又は（ポリ）オキシアルキレン基を有しない。

[0075] 化合物（１）において、「Ｌ$_1$、Ｌ$_2$、Ａｒ$_1$～Ａｒ$_4$のいずれかは、所定の位置の少なくとも１つに、アルキル基（ａ）又は基（Ｐ）を有する」とは、化合物（１）において、該所定の位置の少なくとも１つがアルキル基（ａ）又は基（Ｐ）を含む置換基（置換基（Ｅ））で置換されていることを意味する。化合物（１）において、置換基（Ｅ）で置換される所定の位置は、中央のスクアリリウム環に向かう方向に結合する位置である。

[0076] 具体的には、Ｌ$_1$又はＬ$_2$における所定の位置は、Ｒ$_1$、Ｒ$_5$、Ｒ$_{21}$及びＲ$_{27}$がＮＨＣＯＲａ基の場合のＲａ（ただし、基（Ｐ）は除く）、Ｒ$_1$、Ｒ$_5$、Ｒ$_{21}$及びＲ$_{27}$がＮＨＳＯ$_2$Ｒｂ基の場合のＲｂ（ただし、基（Ｐ）は除く）、Ｒ$_1$、Ｒ$_5$、Ｒ$_{21}$及びＲ$_{27}$がＮＨＰＯ（ＯＲｆ）（ＯＲｇ）基の場合のＲｆ又はＲｇ（ただし、基（Ｐ）は除く）、Ｒ$_2$、Ｒ$_{11}$、Ｒ$_{12}$、Ｒ$_6$、Ｒ$_{15}$、Ｒ$_{16}$、Ｒ$_{26}$及びＲ$_{32}$である。Ａｒ$_1$～Ａｒ$_4$における前記所定の位置は、Ｘ$_1$、Ｘ$_5$、Ｘ$_{11}$、Ｘ$_{21}$及びＸ$_{27}$並びにＸ$_3$、Ｘ$_{13}$及びＸ$_{24}$が、上記式（Ｄ）で表される構造を有する基（基（Ｄ））である場合のＸ$_{31}$及びＸ$_{35}$である。

[0077] すなわち、化合物（１）において、Ｌ$_1$又はＬ$_2$の、Ｒ$_1$、Ｒ$_5$、Ｒ$_{21}$及びＲ$_{27}$がＮＨＣＯＲａ基の場合のＲａ、ＮＨＳＯ$_2$Ｒｂ基の場合のＲｂ、ＮＨＰＯ（ＯＲｆ）（ＯＲｇ）基の場合のＲｆ又はＲｇ、Ｒ$_2$、Ｒ$_{11}$、Ｒ$_{12}$、Ｒ$_6$、Ｒ$_{15}$、Ｒ$_{16}$、Ｒ$_{26}$及びＲ$_{32}$、Ａｒ$_1$～Ａｒ$_4$のＸ$_1$、Ｘ$_5$、Ｘ$_{11}$、Ｘ$_{21}$及びＸ$_{27}$並びにＸ$_3$、Ｘ$_{13}$及びＸ$_{24}$が基（Ｄ）である場合のＸ$_{31}$及びＸ$_{35}$の少なくとも１つが、置換基（Ｅ）である。ただし、Ｒａ、Ｒｂ、Ｒｆ及びＲｇは、アルキル基（ａ）を含む置換基（Ｅ）に限定される。

[0078] 置換基（Ｅ）は、上記化合物（Ｔ）の場合の置換基（Ｅ）と好ましい態様を含めて同様である。Ｒ$_2$、Ｒ$_{11}$、Ｒ$_{12}$、Ｒ$_6$、Ｒ$_{15}$、Ｒ$_{16}$、Ｒ$_{26}$又はＲ$_{32}$が置換基（Ｅ）である場合、置換基（Ｅ）は、連結基として－Ｏ－を有してもよいアルキル基（ａ）又は基（Ｐ）自体であることが好ましい。Ｒａ、Ｒｂ、Ｒｆ又はＲｇが置換基（Ｅ）である場合は、アルキル基（ａ）であることが好ましい。Ｌ$_1$又はＬ$_2$が置換基（Ｅ）を有する場合、Ｒ$_1$、Ｒ$_5$、Ｒ$_{21}$又はＲ$_{27}$が、ＮＨＣＯＲａであって、Ｒａがアルキル基（ａ）であることが好

ましい。

[0079] X_1、X_5、X_{11}、X_{21}及びX_{27}並びにX_3、X_{13}及びX_{24}が基（Ｄ）である場合のX_{31}及びX_{35}が置換基（Ｅ）である場合、置換基（Ｅ）は、アルキル基（ａ）又は基（Ｐ）自体であっても、連結基を有するアルキル基（ａ）又は基（Ｐ）であってもよい。連結基として－Ｏ－を有してもよいアルキル基（ａ）又は基（Ｐ）自体であることが好ましい。

[0080] ここで、化合物（１）は、上記に加えて、任意に、L_1又はL_2におけるR_{22}及びR_{28}、並びにAr_1～Ar_4におけるX_{16}、X_{17}及びX_{26}に、置換基（Ｅ）を有してもよい。

[0081] 化合物（１）における置換基（Ｅ）の数は、上記化合物（Ｔ）の場合の置換基（Ｅ）と同様である。化合物（１）における、置換基（Ｅ）の好ましい位置については、後述するより具体的な化合物において説明する。

[0082] 化合物（１）において、置換基（Ｅ）でない場合の、Ｒａ、Ｒｂ、Ｒｆ及びＲｇとしては炭素数１～３のアルキル基、炭素数４以上の直鎖状又は分岐状のアルキル基又はポリオキシアルキレン基を有しないアリール基等が挙げられる。R_2、R_{11}、R_{12}、R_6、R_{15}、R_{16}、R_{22}、R_{26}、R_{28}、R_{32}、X_1、X_5、X_{11}、X_{16}、X_{17}、X_{21}、X_{26}、X_{27}、X_{31}及びX_{35}としては、水素原子、炭素数１～３のアルキル基又はアルコキシ基、炭素数４以上の直鎖状又は分岐状のアルキル基又はポリオキシアルキレン基を有しないアリール基等が挙げられる。アリール基としては、フェニル基、トリル基、キシリル基等が挙げられる。

[0083] 置換基（Ｅ）でない場合の、Ｒａ、Ｒｂ、Ｒｆ及びＲｇはメチル基であることが好ましい。置換基（Ｅ）でない場合のR_2、R_{11}、R_{12}、R_6、R_{15}、R_{16}、R_{22}、R_{26}、R_{28}およびR_{32}は水素原子又は炭素数１～３のアルキル基であることが好ましく、水素原子であることがより好ましい。置換基（Ｅ）でない場合の、X_1、X_5、X_{11}、X_{16}、X_{17}、X_{21}、X_{26}、X_{27}、X_{31}及びX_{35}は水素原子、炭素数１～３のアルキル基、又はフェニル基であることが好ましく、水素原子、メチル基又はフェニル基であることがより好まし

い。

[0084] 一般式（１）において、L_1又はL_2における、R_3、R_4、R_{13}、R_{14}、R_{23}、R_{24}、R_{25}、R_7、R_8、R_{17}、R_{18}、R_{29}、R_{30}及びR_{31}、Ar_1～Ar_4における、X_2、X_3、X_4、X_{12}、X_{13}、X_{14}、X_{15}、X_{22}、X_{23}、X_{24}及びX_{25}、並びにX_3、X_{13}及びX_{24}が基（Ｄ）である場合のX_{32}～X_{34}は、上記所定の位置以外で主骨格に結合する原子又は基を示す。これらは、炭素数４以上の直鎖状又は分岐状のアルキル基又はポリオキシアルキレン基を有することはない。

[0085] L_1又はL_2における、R_3、R_4、R_{13}、R_{14}、R_{23}、R_{24}、R_{25}、R_7、R_8、R_{17}、R_{18}、R_{29}、R_{30}及びR_{31}、Ar_1～Ar_4における、X_2、X_3、X_4、X_{12}、X_{13}、X_{14}、X_{15}、X_{22}、X_{23}、X_{24}及びX_{25}、並びにX_3、X_{13}及びX_{24}が基（Ｄ）である場合のX_{32}～X_{34}としては、具体的には、水素原子、炭素数１～３のアルキル基又はアルコキシ基、アリール基（ただし、炭素数４以上の直鎖状又は分岐状のアルキル基又はポリオキシアルキレン基を有しない）等が挙げられる。これらのうちで、R_3、R_4、R_{13}、R_{14}、R_{23}、R_{24}、R_{25}、R_7、R_8、R_{17}、R_{18}、R_{29}、R_{30}及びR_{31}は、水素原子であることが好ましく、X_2、X_3、X_4、X_{12}、X_{13}、X_{14}、X_{15}、X_{22}、X_{23}、X_{24}、X_{25}及びX_{32}～X_{34}は、水素原子、メチル基、又はフェニル基であることが好ましい。

[0086] 化合物（１）は、中央のスクアリリウム環を中心にして左右対称の骨格を有する化合物であることが好ましい。このような化合物として、具体的には、下記一般式（３）～一般式（１１）で表される構造を有する化合物（３）～（１１）が挙げられる。なお、一般式（３）～一般式（１１）における符号は、一般式（１）における符号と、好ましい態様を含めて同様の範疇を表す。

[0087] 化合物（３）～化合物（５）は、化合物（１）において、L_1が基（Ｌ１）であり、L_2が基（Ｌ４）である化合物である。化合物（６）～化合物（８）は、化合物（１）において、L_1が基（Ｌ２）であり、L_2が基（Ｌ５）であ

る化合物である。化合物（９）～化合物（１１）は、化合物（１）において、L_1が基（Ｌ３）であり、L_2が基（Ｌ６）である化合物である。本発明の実施形態においては、近赤外長波長領域の発光と部材への高濃度での配合が可能な観点から、化合物（３）～化合物（５）が好ましく、化合物（３）がより好ましい。

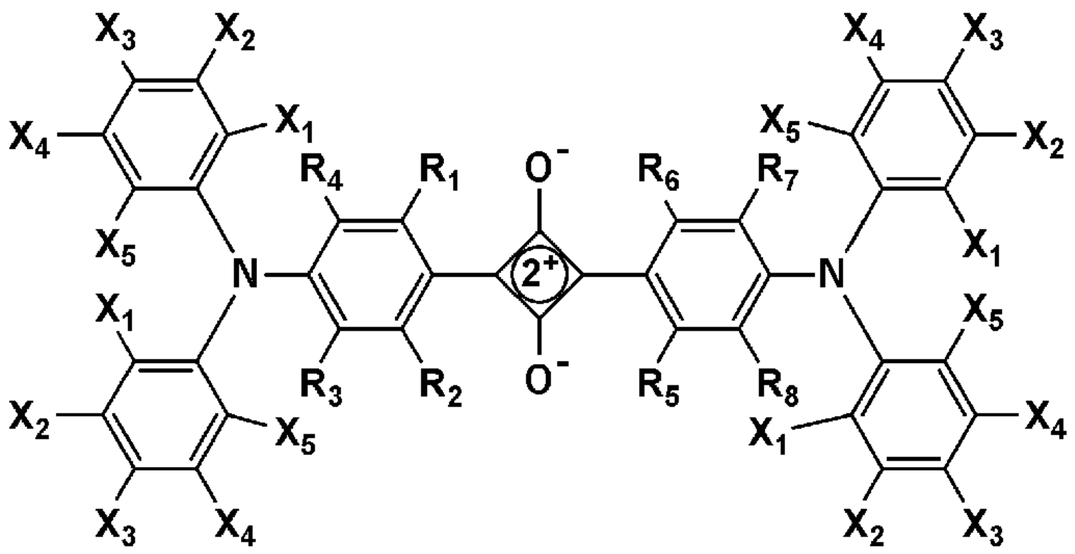
[0088] また、化合物（３）のうちでも、好ましい化合物として、下記一般式（１ａ）～一般式（１ｄ）で表される構造を有する化合物（１ａ）～（１ｄ）が挙げられる。化合物（１ｃ）及び化合物（１ｄ）のうち、さらに好ましい化合物（１ｅ）の構造を、下記一般式（１ｅ）に示す。化合物（１ａ）～（１ｅ）は、これまでに文献に記載のない新規な化合物である。なお、化合物（３）～（１１）、化合物（１ａ）～（１ｅ）においては、中央のスクアリリウム環を中心にして左右対称の骨格を有するのみでなく、置換基も含めて左右対称である化合物であることが製造容易性の観点から好ましい。

[0089] 以下に化合物（１）の例示として、化合物（３）～（１１）、化合物（１ａ）～（１ｅ）について説明するが、本発明はこれらの化合物に限定されるものではない。

[0090] 一般式（３）で表される構造を有する化合物（３）は、化合物（１）において、L_1が基（Ｌ１）であり、L_2が基（Ｌ４）であり、Ar_1～Ar_4がいずれも基（Ａ）である化合物である。

[0091] [化31]

一般式(3)



[0092] 化合物（３）において、R_1及びR_5がＯＨ基である場合（該化合物を化合

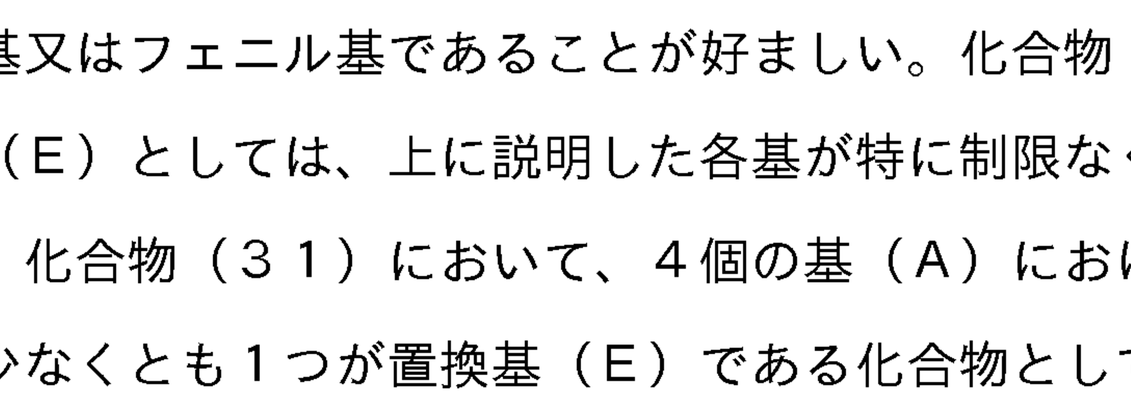
物（３１）ともいう。）、R_2、R_6及び、４個の基（Ａ）における各X_1及びX_5のうちの少なくとも１つが置換基（Ｅ）である。これらに代わって、あるいはこれらに加えてX_3が基（Ｄ）であってもよい。化合物（３１）においては、４個の基（Ａ）における各X_1及びX_5のうちの少なくとも１つが置換基（Ｅ）であることが好ましい。さらに、置換基（Ｅ）は、４個の基（Ａ）に各１ずつ存在することが好ましい。

[0093] すなわち、一般式（３）において、一般式（１）のAr_1、Ar_2、Ar_3、Ar_4にそれぞれ相当する基（Ａ）を、基（Ａ１）、基（Ａ２）、基（Ａ３）及び基（Ａ４）とすると、化合物（３１）において、置換基（Ｅ）は、基（Ａ１）のX_1又はX_5、基（Ａ２）のX_1又はX_5、基（Ａ３）のX_1又はX_5、及び基（Ａ４）のX_1又はX_5に各１ずつ存在することが好ましい。その場合、R_2、R_6、R_3、R_4、R_7及びR_8は、水素原子であることが好ましい。基（Ａ１）、基（Ａ２）、基（Ａ３）及び基（Ａ４）におけるX_1及びX_5のうち置換基（Ｅ）ではないX_1又はX_5、X_2、X_3及びX_4は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。化合物（３１）における、置換基（Ｅ）としては、上に説明した各基が特に制限なく適用可能である。

[0094] 化合物（３１）において、４個の基（Ａ）における各X_1及びX_5のうちの少なくとも１つが置換基（Ｅ）である化合物として、例えば、下記一般式（１ａ）で表される構造を有する化合物（１ａ）、下記一般式（１ｃ）で表される構造を有する化合物（１ｃ）が挙げられる。

[0095] [化32]

一般式(1a)



[0096] 一般式（１ａ）において、各Ｒｃは、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表し、４個のＲｃのうち少なくとも１個は、連結基として－Ｏ－を有

してもよいアルキル基（ａ）又は基（Ｐ）である。化合物（１ａ）が有する置換基（Ｅ）は、連結基である１，４－フェニレン基にアルキル基（ａ）若しくは基（Ｐ）が結合した構造の基である。置換基（Ｅ）は、連結基として１，４－フェニレン基と－Ｏ－をその順に有し、該－Ｏ－にアルキル基（ａ）が結合した基であってもよい。

[0097] 化合物（１ａ）において、４個のＲｃが全て同じアルキル基（ａ）、連結基として－Ｏ－を有するアルキル基（ａ）又は基（Ｐ）である、化合物の例示を表Ｉに示す。表Ｉには、化合物名と該化合物が有するＲｃの種類を列記した。なお、表Ｉにおいて、化合物名は略号のみを示した。以下に示す他の化合物を例示する表においても同様に化合物名は略号のみを示す。

[0098] 表Ｉにおいて、「n-butyl」はｎ－ブチル基を、「n-pentyl」はｎ－ペンチル基を、「n-hexyl」はｎ－ヘキシル基を、「n-heptyl」はｎ－ヘプチル基を、「n-octyl」はｎ－オクチル基を、「n-nonyl」はｎ－ノニル基を、「n-decyl」はｎ－デシル基を、「n-undecyl」はｎ－ウンデシル基を、「n-dodecyl」はｎ－ドデシル基をそれぞれ示す。連結基として－Ｏ－を有するｎ－ブチル基を「－Ｏ－n-butyl」と示す。基（ａ１）を（ａ１）で示す。基（Ｐ）を（Ｐ）で示し、例えば、（Ｐ）（Ｑ＝－ＣＨ$_2$－，ｎ＝２，Ｒ$_{51}$＝ＣＨ$_3$）のように、Ｑの種類、ｎの数、Ｒ$_{51}$の種類を「（Ｐ）」の後の括弧内に示す。ただし、Ｑが単結合の場合はＱの表記を省略した。後述する他の化合物に係る表の記載についても、同様である。

[0099]

[表1]

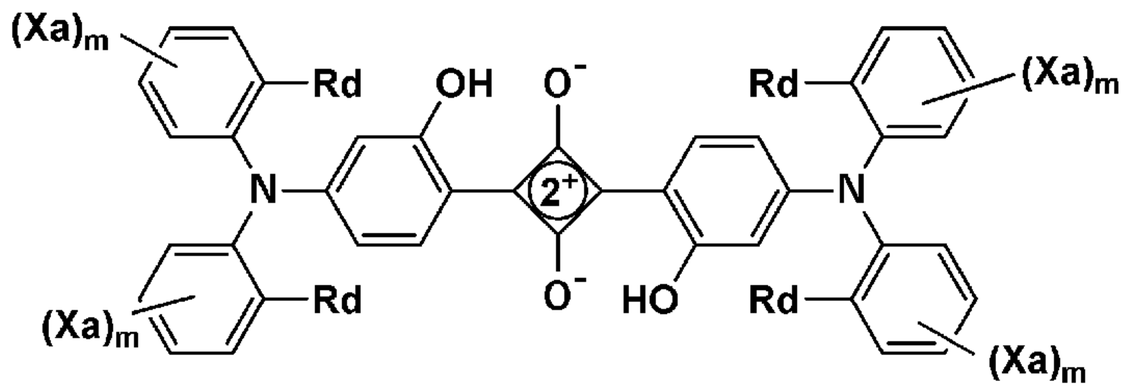
表 I

化合物名 (略号)	Rc
(1a)-1	n-butyl
(1a)-2	n-pentyl
(1a)-3	n-hexyl
(1a)-4	n-heptyl
(1a)-5	n-octyl
(1a)-6	n-nonyl
(1a)-7	n-decyl
(1a)-8	n-undecyl
(1a)-9	n-dodecyl
(1a)-10	(a4)
(1a)-11	(a5)
(1a)-12	(a6)
(1a)-13	(a7)
(1a)-14	(P)(n=2,R_{51}=CH_3)
(1a)-15	(P)(n=3,R_{51}=CH_3)
(1a)-16	(P)(n=4,R_{51}=CH_3)
(1a)-17	(P)(n=5,R_{51}=CH_3)
(1a)-18	(P)(n=6,R_{51}=CH_3)
(1a)-19	(P)(n=7,R_{51}=CH_3)
(1a)-20	(P)(n=8,R_{51}=CH_3)
(1a)-21	(P)(n=9,R_{51}=CH_3)
(1a)-22	(P)(n=2,R_{51}=H)
(1a)-23	(P)(n=3,R_{51}=H)
(1a)-24	(P)(n=4,R_{51}=H)
(1a)-25	(P)(n=5,R_{51}=H)
(1a)-26	(P)(n=6,R_{51}=H)
(1a)-27	(P)(n=7,R_{51}=H)
(1a)-28	(P)(n=8,R_{51}=H)
(1a)-29	(P)(n=9,R_{51}=H)
(1a)-30	(P)(Q=-CH_2-,n=2,R_{51}=CH_3)
(1a)-31	(P)(Q=-CH_2-,n=3,R_{51}=CH_3)
(1a)-32	(P)(Q=-CH_2-,n=4,R_{51}=CH_3)
(1a)-33	(P)(Q=-CH_2-,n=8,R_{51}=CH_3)
(1a)-34	(P)(Q=-C(=O)-,n=2,R_{51}=CH_3)
(1a)-35	(P)(Q=-C(=O)-,n=3,R_{51}=CH_3)
(1a)-36	(P)(Q=-C(=O)-,n=4,R_{51}=CH_3)
(1a)-37	(P)(Q=-C(=O)-,n=8,R_{51}=CH_3)
(1a)-38	-O-n-butyl

[0100]

[化33]

一般式(1c)



[0101] 一般式（１ｃ）において、各Ｒｄは、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表し、４個のＲｄのうち少なくとも１個は、アルキル基（ａ）、連結基として－Ｏ－を有するアルキル基（ａ）又は基（Ｐ）である。各Ｘａは、それぞれ独立して、炭素数１～３のアルキル基若しくはアルコキシ基又は置換又は無置換のフェニル基を表し、４位に結合する場合のＸａは、基（Ｄ）であってもよい。それ以外の場合のＸａは、置換基として炭素数４以上の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基又は（ポリ）オキシアルキレン基を有しない。ｍは、０～４の整数を表す。化合物（１ｃ）が有する置換基（Ｅ）は、アルキル基（ａ）又は基（Ｐ）自体であるか、連結基として－Ｏ－を有するアルキル基（ａ）である。

[0102] 化合物（１ｃ）において、窒素原子に結合する４個の基（Ａ）において、Ｒｄが結合した以外の位置の水素原子は置換基Ｘａで置換されていてもよい。化合物（１ｃ）が置換基Ｘａを有する場合、置換基Ｘａは窒素原子に結合する炭素原子の隣の炭素原子以外の炭素原子に結合することが好ましい。化合物（１ｃ）は置換基Ｘａを有しないか、又は有する場合その数は１若しくは２が好ましく、１がより好ましい。

[0103] 化合物（１ｃ）において、４個の基（Ａ）が全て同じである化合物の例示を表IIに示す。４個の基（Ａ）におけるＲｄは全て同じアルキル基（ａ）又は基（Ｐ）である。表IIには、化合物名と該化合物が有するＲｄの種類、基（Ａ）においてＲｄが結合する炭素原子以外の炭素原子に結合する基又は原子を、Ｒｄが結合する炭素原子の窒素原子とは反対側の隣の炭素原子に結合する基から順にＸ１１、Ｘ１２、Ｘ１３、Ｘ１４で示した。表IIにおいて、

「－Ｏ－（ａ２）」は、連結基として－Ｏ－が結合した基（ａ２）を示す。また、「2,4,6-trimethoxyphenyl」は２，４，６－トリメトキシフェニル基を、「Ｍｅ」はメチル基を、「Ｐｈ」はフェニル基をそれぞれ示す。後述する他の化合物に係る表の記載についても、同様である。

[0104]

[表2]

表 II

化合物名（略号）	Rd	X11	X12	X13	X14
(1c)-1	n-butyl	H	H	H	H
(1c)-2	n-pentyl	H	H	H	H
(1c)-3	n-hexyl	H	H	H	H
(1c)-4	n-heptyl	H	H	H	H
(1c)-5	n-octyl	H	H	H	H
(1c)-6	n-nonyl	H	H	H	H
(1c)-7	n-decyl	H	H	H	H
(1c)-8	n-undecyl	H	H	H	H
(1c)-9	n-dodecyl	H	H	H	H
(1c)-10	(a4)	H	H	H	H
(1c)-11	(a5)	H	H	H	H
(1c)-12	(a6)	H	H	H	H
(1c)-13	(a7)	H	H	H	H
(1c)-14	(P)(n=2,R_{51}=CH_3)	H	H	H	H
(1c)-15	(P)(n=3,R_{51}=CH_3)	H	H	H	H
(1c)-16	(P)(n=4,R_{51}=CH_3)	H	H	H	H
(1c)-17	(P)(n=5,R_{51}=CH_3)	H	H	H	H
(1c)-18	(P)(n=6,R_{51}=CH_3)	H	H	H	H
(1c)-19	(P)(n=7,R_{51}=CH_3)	H	H	H	H
(1c)-20	(P)(n=8,R_{51}=CH_3)	H	H	H	H
(1c)-21	(P)(n=9,R_{51}=CH_3)	H	H	H	H
(1c)-22	(P)(n=2,R_{51}=H)	H	H	H	H
(1c)-23	(P)(n=3,R_{51}=H)	H	H	H	H
(1c)-24	(P)(n=4,R_{51}=H)	H	H	H	H
(1c)-25	(P)(n=5,R_{51}=H)	H	H	H	H
(1c)-26	(P)(n=6,R_{51}=H)	H	H	H	H
(1c)-27	(P)(n=7,R_{51}=H)	H	H	H	H
(1c)-28	(P)(n=8,R_{51}=H)	H	H	H	H
(1c)-29	(P)(n=9,R_{51}=H)	H	H	H	H
(1c)-30	(P)(Q=-CH_2-,n=2,R_{51}=CH_3)	H	H	H	H
(1c)-31	(P)(Q=-CH_2-,n=3,R_{51}=CH_3)	H	H	H	H
(1c)-32	(P)(Q=-CH_2-,n=4,R_{51}=CH_3)	H	H	H	H
(1c)-33	(P)(Q=-CH_2-,n=8,R_{51}=CH_3)	H	H	H	H
(1c)-34	(P)(Q=-C(=O)-,n=2,R_{51}=CH_3)	H	H	H	H
(1c)-35	(P)(Q=-C(=O)-,n=3,R_{51}=CH_3)	H	H	H	H
(1c)-36	(P)(Q=-C(=O)-,n=4,R_{51}=CH_3)	H	H	H	H
(1c)-37	(P)(Q=-C(=O)-,n=8,R_{51}=CH_3)	H	H	H	H
(1c)-38	n-butyl	Me	H	H	H
(1c)-39	n-butyl	H	Me	H	H
(1c)-40	n-butyl	H	H	Me	H
(1c)-41	n-butyl	H	Ph	H	H
(1c)-42	-O-(a2)	H	2,4,6-trimethoxyphenyl	H	H

[0105] 化合物（３）において、R_1及びR_5がＮＨＣＯＲａ基である場合（該化合物を化合物（３２）ともいう。）、Ｒａ、R_2、R_6及び、４個の基（Ａ）における各X_1及びX_5のうちの少なくとも１つが置換基（Ｅ）である。これら

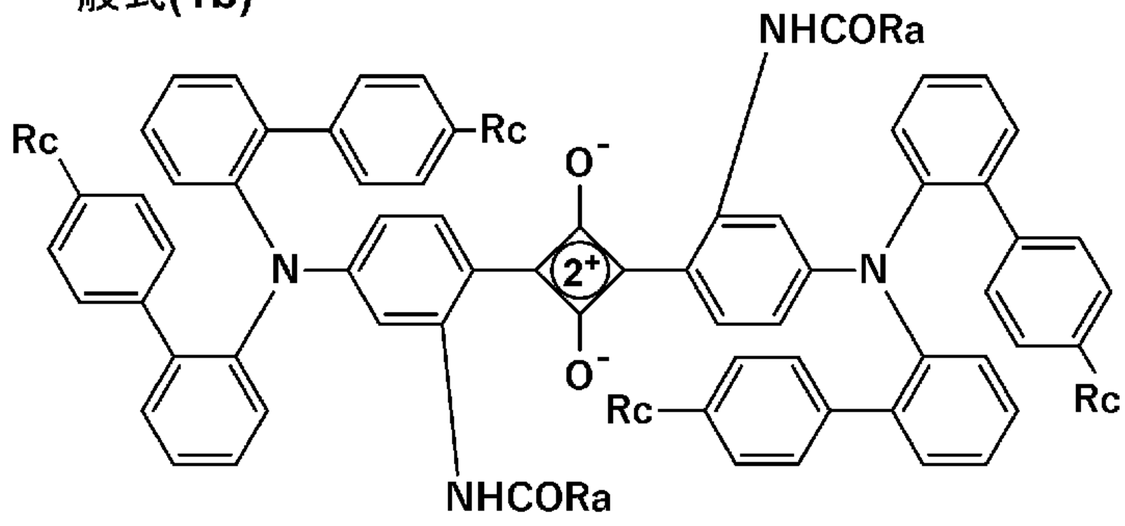
に代わって、あるいはこれらに加えてX_3が基（Ｄ）であってもよい。ただし、Ｒａについては、アルキル基（ａ）を含む置換基（Ｅ）に限定される。化合物（３２）においては、Ｒａ、４個の基（Ａ）における各X_1及びX_5のうちの少なくとも１つが置換基（Ｅ）であることが好ましい。さらに、置換基（Ｅ）は、４個の基（Ａ）に各１ずつ存在することが好ましい。

[0106] すなわち、化合物（３２）についても、化合物（３１）と同様に、置換基（Ｅ）は、基（Ａ１）にX_1又はX_5として１つ、基（Ａ２）にX_1又はX_5として１つ、基（Ａ３）にX_1又はX_5として１つ、及び基（Ａ４）にX_1又はX_5として１つ存在することが好ましい。その場合、Ｒａはアルキル基（ａ）又はメチル基であることが好ましい。さらに、R_2、R_6、R_7及びR_8は、水素原子であることが好ましい。基（Ａ１）、基（Ａ２）、基（Ａ３）及び基（Ａ４）におけるX_1及びX_5のうち置換基（Ｅ）ではないX_1又はX_5、X_2、X_3及びX_4は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。化合物（３２）における、置換基（Ｅ）としては、上に説明した各基が特に制限なく適用可能である。

[0107] 化合物（３２）において、４個の基（Ａ）における各X_1及びX_5のうちの少なくとも１つが置換基（Ｅ）である化合物として、例えば、下記一般式（１ｂ）で表される構造を有する化合物（１ｂ）、下記一般式（１ｄ）で表される構造を有する化合物（１ｄ）が挙げられる。

[0108] [化34]

一般式(1b)



[0109] 一般式（１ｂ）において、各Ｒａは、それぞれ独立して、炭化水素基を表す。各Ｒｃは、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。２個のＲａ

のいずれかが炭素数４～１２の直鎖状又は分岐状のアルキル基（ａ）を表すか、４個のＲｃのうち少なくとも１個が、連結基として－Ｏ－を有してもよい炭素数４～１２の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基（ａ）、又は前記一般式（Ｐ）で表される構造を有する基（Ｐ）を表す。化合物（１ｂ）は、一般式（１）のＡｒ$_1$、Ａｒ$_2$、Ａｒ$_3$、Ａｒ$_4$にそれぞれ相当する基が基（Ａ）であって、基（Ａ）が有する置換基（Ｅ）は、連結基である１，４－フェニレン基にアルキル基（ａ）又は基（Ｐ）が結合した構造の基である。基（Ａ）が有する置換基（Ｅ）は、連結基として１，４－フェニレン基と－Ｏ－をその順に有し、該－Ｏ－にアルキル基（ａ）が結合した基であってもよい。Ｒａとしては、アルキル基（ａ）又は炭素数１～３のアルキル基が好ましい。

[0110] 化合物（１ｂ）において、２個のＲａが同じアルキル基であり、かつ４個のＲｃが全て同じアルキル基（ａ）、連結基として－Ｏ－を有するアルキル基（ａ）又は基（Ｐ）である、化合物の例示を表IIIに示す。表IIIには、化合物名と該化合物が有するＲｃ及びＲａの種類を列記した。

[0111]

[表3]

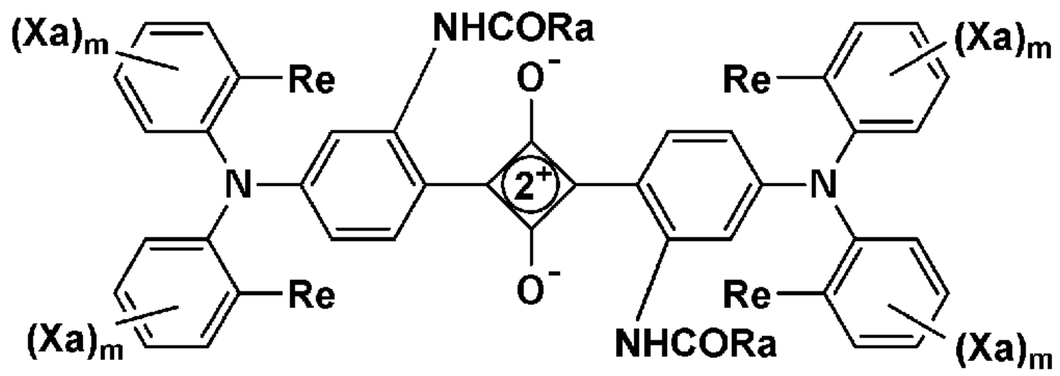
表 III

化合物名 (略号)	Rc	Ra
(1b)-1	n-butyl	n-butyl
(1b)-2	n-pentyl	n-pentyl
(1b)-3	n-hexyl	n-hexyl
(1b)-4	n-heptyl	n-heptyl
(1b)-5	n-octyl	n-octyl
(1b)-6	n-nonyl	n-nonyl
(1b)-7	n-decyl	n-decyl
(1b)-8	n-undecyl	n-undecyl
(1b)-9	n-dodecyl	n-dodecyl
(1b)-10	(a4)	(a4)
(1b)-11	(a5)	(a1)
(1b)-12	(a6)	(a2)
(1b)-13	(a7)	(a3)
(1b)-14	n-butyl	Me
(1b)-15	n-hexyl	Me
(1b)-16	(a4)	Me
(1b)-17	(a5)	Me
(1b)-18	(a6)	Me
(1b)-19	(P)(n=2,R_{51}=CH_3)	Me
(1b)-20	(P)(n=3,R_{51}=CH_3)	Me
(1b)-21	(P)(n=4,R_{51}=CH_3)	Me
(1b)-22	(P)(n=5,R_{51}=CH_3)	Me
(1b)-23	(P)(n=6,R_{51}=CH_3)	Me
(1b)-24	(P)(n=7,R_{51}=CH_3)	Me
(1b)-25	(P)(n=8,R_{51}=CH_3)	Me
(1b)-26	(P)(n=9,R_{51}=CH_3)	Me
(1b)-27	(P)(n=2,R_{51}=H)	Me
(1b)-28	(P)(n=3,R_{51}=H)	Me
(1b)-29	(P)(n=4,R_{51}=H)	Me
(1b)-30	(P)(n=5,R_{51}=H)	Me
(1b)-31	(P)(n=6,R_{51}=H)	Me
(1b)-32	(P)(n=7,R_{51}=H)	Me
(1b)-33	(P)(n=8,R_{51}=H)	Me
(1b)-34	(P)(n=9,R_{51}=H)	Me
(1b)-35	(P)(Q=-CH_2-,n=2,R_{51}=CH_3)	Me
(1b)-36	(P)(Q=-CH_2-,n=3,R_{51}=CH_3)	Me
(1b)-37	(P)(Q=-CH_2-,n=4,R_{51}=CH_3)	Me
(1b)-38	(P)(Q=-CH_2-,n=8,R_{51}=CH_3)	Me
(1b)-39	(P)(Q=-C(=O)-,n=2,R_{51}=CH_3)	Me
(1b)-40	(P)(Q=-C(=O)-,n=3,R_{51}=CH_3)	Me
(1b)-41	(P)(Q=-C(=O)-,n=4,R_{51}=CH_3)	Me
(1b)-42	(P)(Q=-C(=O)-,n=8,R_{51}=CH_3)	Me
(1b)-43	-O-n-butyl	Me

[0112]

[化35]

一般式(1d)



[0113] 一般式（１ｄ）において、各Ｒａは、それぞれ独立して、炭化水素基を表す。各Ｒｅは、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。各Ｘａは、それぞれ独立して、炭素数１～３のアルキル基若しくはアルコキシ基又は置換又は無置換のフェニル基を表し、４位に結合する場合のＸａは、基（Ｄ）であってもよい。それ以外の場合のＸａは、置換基として炭素数４以上の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基又は（ポリ）オキシアルキレン基を有しない。ｍは、０～４の整数を表す。ただし、一般式（１ｄ）においては、Ｒａのいずれかがアルキル基（ａ）を表すか、４個のＲｅのうち少なくとも１個が、アルキル基（ａ）、連結基として－Ｏ－を有するアルキル基（ａ）又は基（Ｐ）であるか、又は上記４位にＸａとして基（Ｄ）が結合する。

[0114] 上記のとおり化合物（１ｄ）において、窒素原子に結合する４個の基（Ａ）において、Ｒｅが結合した以外の位置の水素原子は置換基Ｘａで置換されていてもよい。化合物（１ｄ）が置換基Ｘａを有する場合、置換基Ｘａは窒素原子に結合する炭素原子の隣の炭素原子以外の炭素原子に結合することが好ましい。化合物（１ｄ）は置換基Ｘａを有しないか、又は有する場合その数は１若しくは２が好ましく、１がより好ましい。また、窒素原子に結合する４個の基（Ａ）であるベンゼン環骨格を有する基において、ベンゼン環の４位にＸａを有する場合、該Ｘａとしては基（Ｄ）が好ましい。

[0115] 化合物（１ｄ）において、Ｒａ又はＲｅが置換基（Ｅ）に相当する。または、Ｒｅを有するベンゼン環の４位にＸａが結合し、該Ｘａが基（Ｄ）である。化合物（１ｄ）は、Ｒａのみが置換基（Ｅ）であってもよく、Ｒｅのみが置換基（Ｅ）であってもよい。Ｒａ及びＲｅが置換基（Ｅ）でなく、Ｒｅ

を有するベンゼン環の４位にＸａが結合し、該Ｘａが基（Ｄ）である構造であってもよい。これらの２又は３が置換基（Ｅ）であるか、置換基（Ｅ）を有していてもよい。

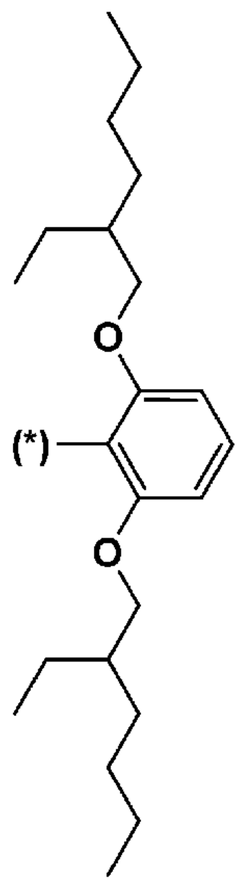
[0116] Ｒａが置換基（Ｅ）である場合、該置換基（Ｅ）はアルキル基（ａ）である。Ｒａが置換基（Ｅ）でない場合、Ｒａは炭素数１～３のアルキル基が好ましい。Ｒｅが置換基（Ｅ）である場合の置換基（Ｅ）は、アルキル基（ａ）、連結基として－Ｏ－を有するアルキル基（ａ）又は基（Ｐ）自体である。基（Ｄ）がX_{31}又はX_{35}に有する置換基（Ｅ）は、アルキル基（ａ）、連結基として－Ｏ－を有するアルキル基（ａ）又は基（Ｐ）自体であるのが好ましい。Ｒｅ、基（Ｄ）のX_{31}及びX_{35}が置換基（Ｅ）でない場合、炭素数１～３のアルキル基又はフェニル基が好ましい。化合物（１ｄ）において、Ｒｅが置換基（Ｅ）であるのが好ましい。

[0117] 化合物（１ｄ）において、２個のＲａ及び４個の基（Ａ）が全て同じである化合物の例示を表IVに示す。２個のＲａは、メチル基、エチル基（表中、「Ｅｔ」で示す。）又はアルキル基（ａ）である。４個の基（Ａ）におけるＲｅは全て同じアルキル基（ａ）、基（Ｐ）、メチル基又はフェニル基である。表IVには、化合物名と該化合物が有するＲａ及びＲｅの種類、基（Ａ）においてＲｅが結合する炭素原子以外の炭素原子に結合する基又は原子を、Ｒｅが結合する炭素原子の窒素原子とは反対側の隣の炭素原子に結合する基から順にＸ１１、Ｘ１２、Ｘ１３及びＸ１４で示した。なお、Ｘ１２が基（Ａ）のベンゼン環における４位に相当する。表IVにおける「（Ｄ）－１」は下記式で表される構造を有する基を示す。

[0118]

[化36]

(D)－1



[0119]

[表4]

表 IV

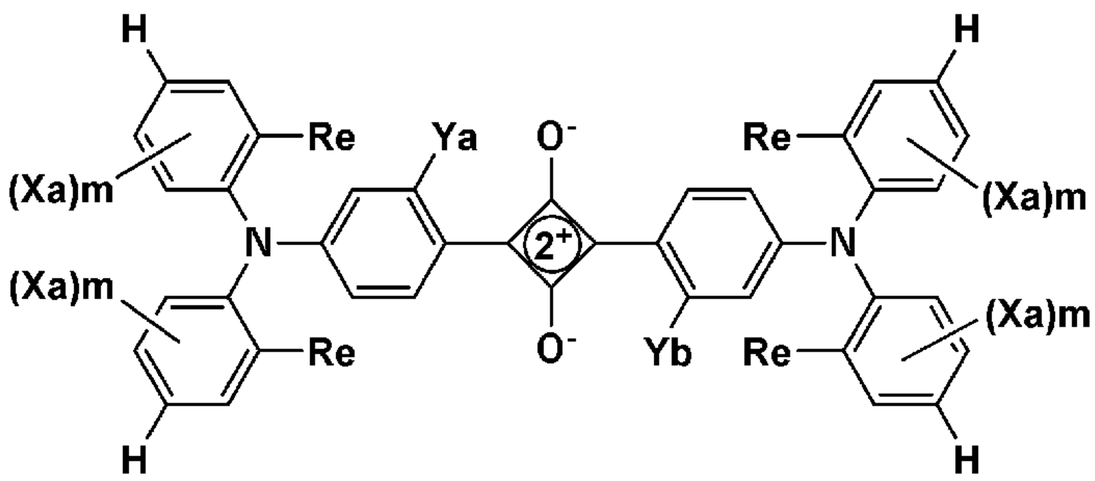
化合物名（略号）	Ra	Re	X11	X12	X13	X14
(1d)-1	n-butyl	Me	H	H	H	H
(1d)-2	n-pentyl	Me	H	H	H	H
(1d)-3	n-hexyl	Me	H	H	H	H
(1d)-4	n-heptyl	Me	H	H	H	H
(1d)-5	n-octyl	Me	H	H	H	H
(1d)-6	n-nonyl	Me	H	H	H	H
(1d)-7	n-decyl	Me	H	H	H	H
(1d)-8	n-undecyl	Me	H	H	H	H
(1d)-9	n-dodecyl	Me	H	H	H	H
(1d)-10	(a4)	Me	H	H	H	H
(1d)-11	(a1)	Me	H	H	H	H
(1d)-12	(a2)	Me	H	H	H	H
(1d)-13	(a3)	Me	H	H	H	H
(1d)-14	Me	n-butyl	H	H	H	H
(1d)-15	Et	n-pentyl	H	H	H	H
(1d)-16	Et	n-hexyl	H	H	H	H
(1d)-17	Me	n-heptyl	H	H	H	H
(1d)-18	Me	n-octyl	H	H	H	H
(1d)-19	Me	n-nonyl	H	H	H	H
(1d)-20	Me	n-decyl	H	H	H	H
(1d)-21	Me	n-undecyl	H	H	H	H
(1d)-22	Me	n-dodecyl	H	H	H	H
(1d)-23	Me	(P)(Q=$-CH_2-$,n=2,$R_{51}=CH_3$)	H	H	H	H
(1d)-24	Me	(P)(Q=$-CH_2-$,n=3,$R_{51}=CH_3$)	H	H	H	H
(1d)-25	Me	(P)(Q=$-CH_2-$,n=4,$R_{51}=CH_3$)	H	H	H	H
(1d)-26	Me	(P)(Q=$-CH_2-$,n=8,$R_{51}=CH_3$)	H	H	H	H
(1d)-27	Me	(P)(Q=-C(=O)-,n=2,$R_{51}=CH_3$)	H	H	H	H
(1d)-28	Me	(P)(Q=-C(=O)-,n=3,$R_{51}=CH_3$)	H	H	H	H
(1d)-29	Me	(P)(Q=-C(=O)-,n=4,$R_{51}=CH_3$)	H	H	H	H
(1d)-30	Me	(P)(Q=-C(=O)-,n=8,$R_{51}=CH_3$)	H	H	H	H
(1d)-31	n-butyl	Me	Me	H	H	H
(1d)-32	n-butyl	Me	H	Me	H	H
(1d)-33	n-butyl	Me	H	H	Me	H
(1d)-34	n-butyl	Me	H	Ph	H	H
(1d)-35	(a1)	Me	Me	H	H	H
(1d)-36	(a2)	Me	H	Me	H	H
(1d)-37	(a2)	Me	H	H	Me	H
(1d)-38	(a3)	Me	H	Ph	H	H
(1d)-39	n-butyl	Ph	H	H	H	H
(1d)-40	n-butyl	Me	H	(D)-1	H	H
(1d)-41	n-butyl	H	H	H	H	H

[0120] 化合物（１ｃ）及び化合物（１ｄ）において、窒素原子に結合する４個の基（Ａ）のベンゼン環における４位は置換基を有しないことが好ましい。該化合物として、下記一般式（１ｅ）で表される構造を有する化合物（１ｅ）

が例示できる。

[0121] [化37]

一般式(1e)



[0122] 一般式（１ｅ）において、Ｙａ及びＹｂは、それぞれ独立して、ＯＨ基、又はＮＨＣＯＲａ（Ｒａは炭化水素基を表す。）基を表す。各Ｒｅは、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。各Ｘａは、それぞれ独立して、炭素数１～３のアルキル基若しくはアルコキシ基、又は置換又は無置換のフェニル基を表す。ただし、Ｘａは、置換基として炭素数４以上の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基又は（ポリ）オキシアルキレン基を有しない。ｍは、０～３の整数を表す。ただし、Ｒａのいずれかがアルキル基（ａ）を表すか、又は４個のＲｅのうち少なくとも１個は、アルキル基（ａ）、連結基として－Ｏ－を有するアルキル基（ａ）、又は基（Ｐ）を表す。

[0123] 化合物（１ｅ）が有する各基については、上記化合物（１ｃ）及び化合物（１ｄ）の各基において、窒素原子に結合する４個の基（Ａ）のベンゼン環における４位が置換基を有しない以外は、同様の説明が適用できる。

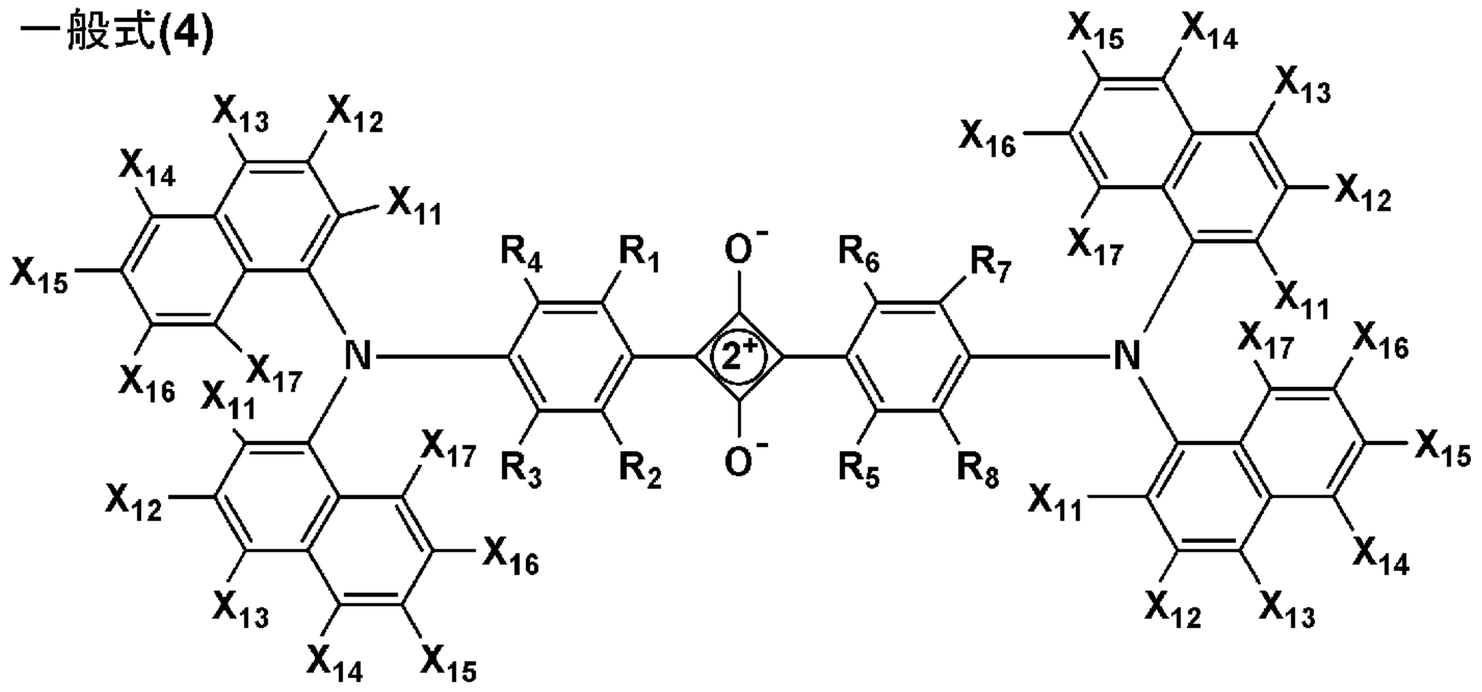
[0124] 化合物（１ｅ）に分類される化合物として、具体的には、上記表IIに示す化合物のうち、化合物（１ｃ）－１～（１ｃ）－３８、及び化合物（１ｃ）－４０が挙げられる。さらに、上記表IVに示す化合物のうち、化合物（１ｄ）－１～（１ｄ）－３１、化合物（１ｄ）－３３、化合物（１ｄ）－３５、化合物（１ｄ）－３７、化合物（１ｄ）－３９及び化合物（１ｄ）－４１が挙げられる。

[0125] 一般式（４）で表される構造を有する化合物（４）は、化合物（１）において、L_1が基（Ｌ１）であり、L_2が基（Ｌ４）であり、Ar_1～Ar_4がい

ずれも基（Ｂ）である化合物である。

[0126] [化38]

一般式(4)



[0127] 化合物（４）において、R_1及びR_5がＯＨ基である場合、R_2、R_6及び、４個の基（Ｂ）における各X_{11}のうちの少なくとも１つが置換基（Ｅ）である。または、これらに代わって、あるいはこれらに加えてX_{13}が基（Ｄ）であってもよい。なお、各X_{16}及びX_{17}は、任意に置換基（Ｅ）とすることができる。以下の説明において、一般式（４）で表される構造を有する化合物（４）において、一般式（４）中のR_1及びR_5がＯＨ基である化合物を化合物（４１）という。

[0128] 化合物（４１）においては、４個の基（Ｂ）における各X_{11}のうちの少なくとも１つが置換基（Ｅ）であることが好ましい。さらに、置換基（Ｅ）は、４個の基（Ｂ）に各１ずつ存在することが好ましい。

[0129] すなわち、一般式（４）において、一般式（１）のAr_1、Ar_2、Ar_3、Ar_4にそれぞれ相当する基（Ｂ）を、基（Ｂ１）、基（Ｂ２）、基（Ｂ３）及び基（Ｂ４）とすると、化合物（４１）において、置換基（Ｅ）は、基（Ｂ１）のX_{11}、基（Ｂ２）のX_{11}、基（Ｂ３）のX_{11}、及び基（Ｂ４）のX_{11}にそれぞれ存在することが好ましい。その場合、R_2、R_6、R_7及びR_8は、水素原子であることが好ましい。基（Ｂ１）、基（Ｂ２）、基（Ｂ３）及び基（Ｂ４）におけるX_{12}、X_{13}、X_{14}、X_{15}、X_{16}及びX_{17}は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。化合物（４１）における、置換基（Ｅ）としては、上に説明した各基が特に制限なく適用可能であ

る。

[0130] 化合物（４）において、一般式（４）中のR_1及びR_5がＮＨＣＯＲａ基、$NHSO_2$Ｒｂ基、又はＮＨＰＯ（ＯＲｆ）（ＯＲｇ）基である場合、該化合物を化合物（４２）ともいう。化合物（４２）においては、Ｒａ、Ｒｂ、Ｒｆ、Ｒｇ、R_2、R_6及び、４個の基（Ｂ）における各X_{11}のうちの少なくとも１つが置換基（Ｅ）である。または、これらに代わって、あるいはこれらに加えてX_{13}が基（Ｄ）であってもよい。なお、各X_{16}及びX_{17}は、任意に置換基（Ｅ）とすることができる。ただし、Ｒａ、Ｒｂ、Ｒｆ及びＲｇについては、アルキル基（ａ）を含む置換基（Ｅ）に限定される。

[0131] 化合物（４２）においては、Ｒａ、Ｒｂ、Ｒｆ及びＲｇ、４個の基（Ｂ）における各X_{11}のうちの少なくとも１つが置換基（Ｅ）であることが好ましい。４個の基（Ｂ）が置換基（Ｅ）を有する場合、置換基（Ｅ）は、４個の基（Ｂ）に各１ずつ存在することが好ましい。

[0132] 置換基（Ｅ）でない場合のＲａ、Ｒｂ、Ｒｆ及びＲｇとしては、炭素数１～３のアルキル基、フェニル基、トリル基、キシリル基等のアリール基が挙げられる。置換基（Ｅ）でない場合のR_2及びR_6並びに、R_3、R_4、R_7及びR_8は、水素原子であることが好ましい。基（Ｂ１）、基（Ｂ２）、基（Ｂ３）及び基（Ｂ４）におけるX_{12}、X_{13}、X_{14}、X_{15}、X_{16}及びX_{17}は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。化合物（４２）における、置換基（Ｅ）としては、上に説明した各基が特に制限なく適用可能である。

[0133] 表Vに化合物（４）について例示する。表中、「tolyl」はトリル基を示す。

[0134]

[表5]

表V

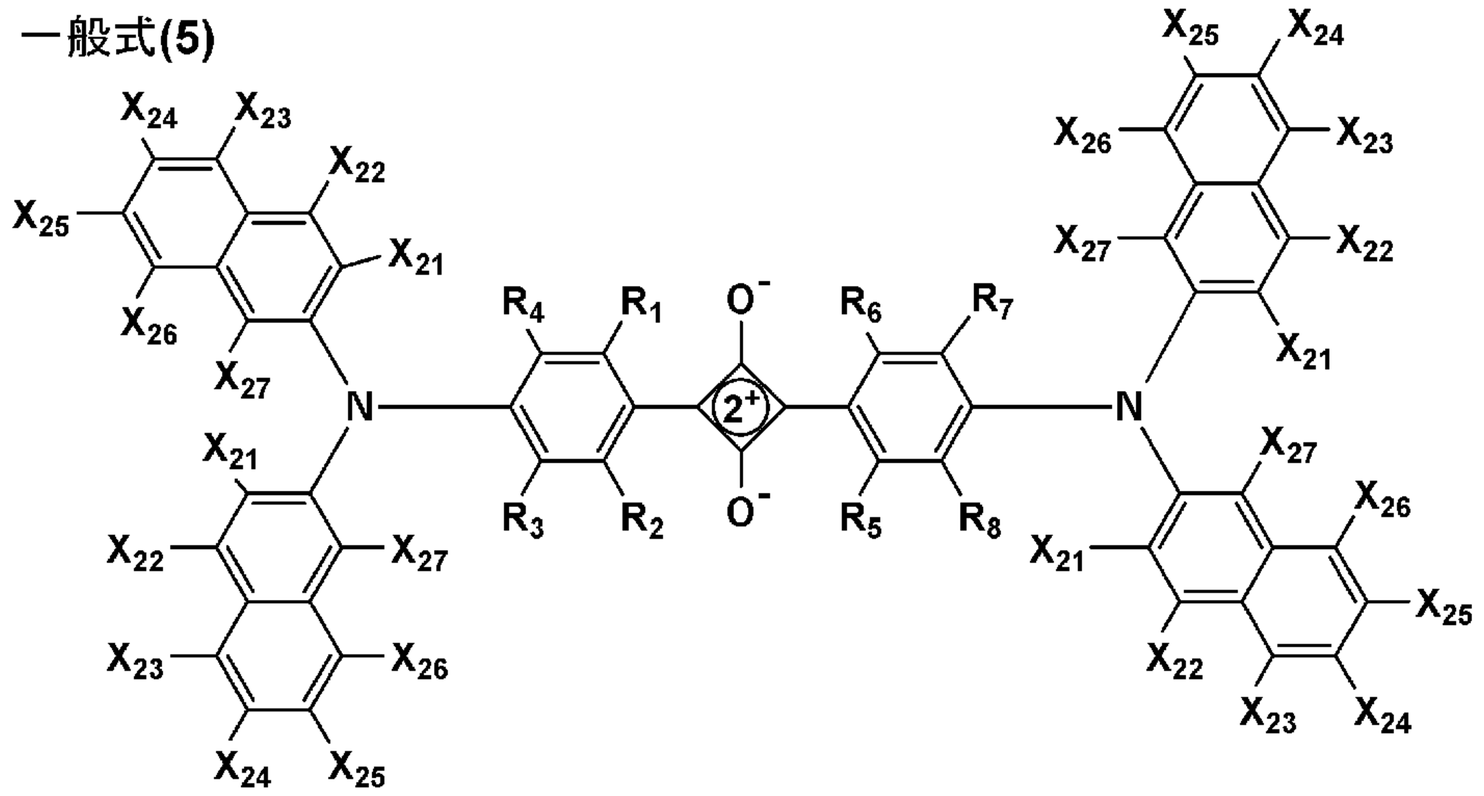
化合物名（略号）	R_1	Ra	Rb	Rf	Rg	R_2	R_3	R_4	R_5	Ra	Rb	Rf	Rg	R_6	R_7	R_8	X_{11}	X_{12}	X_{13}	X_{14}	X_{15}	X_{16}	X_{17}
(4)-1	NHCORa	n-butyl	–	–	–	H	H	H	NHCORa	n-butyl	–	–	–	H	H	H	Me	H	H	H	H	H	H
(4)-2	NHCORa	n-butyl	–	–	–	H	H	H	NHCORa	n-butyl	–	–	–	H	H	H	Me	H	Ph	H	H	H	H
(4)-3	NHCORa	(a1)	–	–	–	H	H	H	NHCORa	(a1)	–	–	–	H	H	H	Me	H	H	H	H	H	H
(4)-4	NHCORa	(a2)	–	–	–	H	H	H	NHCORa	(a2)	–	–	–	H	H	H	Me	H	Ph	H	H	H	H
(4)-5	NHCORa	(a2)	–	–	–	H	H	H	NHCORa	(a2)	–	–	–	H	H	H	Me	H	H	H	H	H	H
(4)-6	NHCORa	(a3)	–	–	–	H	H	H	NHCORa	(a3)	–	–	–	H	H	H	Me	H	Ph	H	H	H	H
(4)-7	OH	–	–	–	–	H	H	H	OH	–	–	–	–	H	H	H	n-butyl	H	H	H	H	H	H
(4)-8	OH	–	–	–	–	H	H	H	OH	–	–	–	–	H	H	H	(a5)	H	H	H	H	H	H
(4)-9	OH	–	–	–	–	H	H	H	OH	–	–	–	–	H	H	H	(a2)	H	H	H	H	H	H
(4)-10	OH	–	–	–	–	H	H	H	OH	–	–	–	–	H	H	H	(P)(n=8,R_{51}=CH_3)	H	H	H	H	H	H
(4)-11	OH	–	–	–	–	H	H	H	OH	–	–	–	–	H	H	H	(a2)	H	Ph	H	H	H	H
(4)-12	$NHSO_2Rb$	–	(a1)	–	–	H	H	H	$NHSO_2Rb$	–	(a1)	–	–	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
(4)-13	$NHSO_2Rb$	–	tolyl	–	–	H	H	H	$NHSO_2Rb$	–	tolyl	–	–	H	H	H	(P)(n=8,R_{51}=CH_3)	H	H	H	H	H	H
(4)-14	$NH_2PO(ORf)(ORg)$	–	–	Me	Me	H	H	H	$NH_2PO(ORf)(ORg)$	–	–	Me	Me	H	H	H	(a5)	H	H	H	H	H	H

[0135] 一般式（５）で表される構造を有する化合物（５）は、化合物（１）において、L_1が基（Ｌ１）であり、L_2が基（Ｌ４）であり、Ar_1～Ar_4がい

ずれも基（Ｃ）である化合物である。

[0136] [化39]

一般式(5)



[0137] 化合物（５）において、一般式（５）におけるR_1及びR_5がＯＨ基である場合、該化合物を化合物（５１）ともいう。化合物（５１）においては、R_2、R_6及び、４個の基（Ｃ）における各X_{21}及びX_{27}のうちの少なくとも１つが置換基（Ｅ）である。または、これらに代わって、あるいはこれらに加えてX_{24}が基（Ｄ）であってもよい。なお、各X_{26}は、任意に置換基（Ｅ）とすることができる。化合物（５１）においては、４個の基（Ｃ）における各X_{21}及びX_{27}のうちの少なくとも１つが置換基（Ｅ）であることが好ましい。さらに、置換基（Ｅ）は、４個の基（Ｃ）に各１ずつ存在することが好ましい。

[0138] すなわち、一般式（５）において、一般式（１）のAr_1、Ar_2、Ar_3、Ar_4にそれぞれ相当する基（Ｃ）を、基（Ｃ１）、基（Ｃ２）、基（Ｃ３）及び基（Ｃ４）とすると、化合物（５１）において、置換基（Ｅ）は、基（Ｃ１）のX_{21}又はX_{27}、基（Ｃ２）のX_{21}又はX_{27}、基（Ｃ３）のX_{21}又はX_{27}、及び基（Ｃ４）のX_{21}又はX_{27}に各１ずつ存在することが好ましい。その場合、R_2及びR_6並びに、R_3、R_4、R_7及びR_8は、水素原子であることが好ましい。基（Ｃ１）、基（Ｃ２）、基（Ｃ３）及び基（Ｃ４）におけるX_{21}及びX_{27}のうち置換基（Ｅ）ではないX_{21}及びX_{27}、並びにX_{22}、X_{23}、X_{24}、X_{25}及びX_{26}は、水素原子、メチル基又はフェニル基であること

が好ましい。化合物（５１）における、置換基（Ｅ）としては、上に説明した各基が特に制限なく適用可能である。

[0139] 化合物（５）において、一般式（５）におけるR_1及びR_5がＮＨＣＯＲａ基、$NHSO_2Rb$基、又はＮＨＰＯ（ＯＲｆ）（ＯＲｇ）基である場合、該化合物を化合物（５２）ともいう。化合物（５２）においては、Ｒａ、Ｒｂ、Ｒｆ、Ｒｇ、R_2、R_6及び、４個の基（Ｃ）における各X_{21}及びX_{27}のうちの少なくとも１つが置換基（Ｅ）である。または、これらに代わって、あるいはこれらに加えてX_{24}が基（Ｄ）であってもよい。なお、各X_{26}は、任意に置換基（Ｅ）とすることができる。ただし、Ｒａ、Ｒｂ、Ｒｆ及びＲｇについては、アルキル基（ａ）を含む置換基（Ｅ）に限定される。

[0140] 化合物（５２）においては、Ｒａ、Ｒｂ、Ｒｆ及びＲｇ、４個の基（Ｃ）における各X_{21}及びX_{27}のうちの少なくとも１つが置換基（Ｅ）であることが好ましい。４個の基（Ｃ）が置換基（Ｅ）を有する場合、置換基（Ｅ）は、４個の基（Ｃ）に各１ずつ存在することが好ましい。

[0141] 置換基（Ｅ）でない場合のＲａ、Ｒｂ、Ｒｆ及びＲｇとしては、炭素数１～３のアルキル基、フェニル基、トリル基、キシリル基等のアリール基が挙げられる。置換基（Ｅ）でない場合のR_2及びR_6並びに、R_3、R_4、R_7及びR_8は、水素原子であることが好ましい。基（Ｃ１）、基（Ｃ２）、基（Ｃ３）及び基（Ｃ４）におけるX_{21}及びX_{27}のうち置換基（Ｅ）ではないX_{21}及びX_{27}、並びにX_{22}、X_{23}、X_{24}、X_{25}及びX_{26}は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。化合物（５２）における、置換基（Ｅ）としては、上に説明した各基が特に制限なく適用可能である。

[0142] 表VIに化合物（５）について例示する。

[0143]

[表6]

表 VI

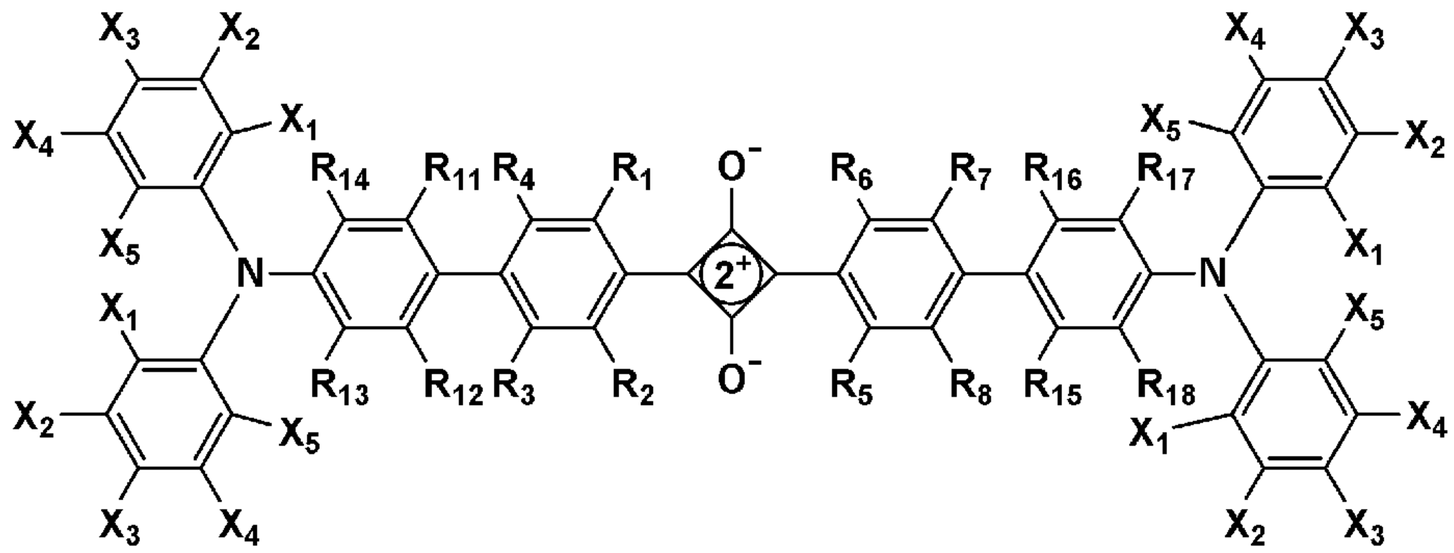
化合物名（略号）	R_1	Ra	Rb	Rf	Rg	R_2	R_3	R_4	R_5	Ra	Rb	Rf	Rg	R_6	R_7	R_8	X_{21}	X_{22}	X_{23}	X_{24}	X_{25}	X_{26}	X_{27}
(5)-1	NHCORa	n-butyl	–	–	–	H	H	H	NHCORa	n-butyl	–	–	–	H	H	H	Me	H	H	H	H	H	H
(5)-2	NHCORa	n-butyl	–	–	–	H	H	H	NHCORa	n-butyl	–	–	–	H	H	H	Me	H	Ph	H	H	H	H
(5)-3	NHCORa	(a1)	–	–	–	H	H	H	NHCORa	(a1)	–	–	–	H	H	H	Me	H	H	H	H	H	H
(5)-4	NHCORa	(a2)	–	–	–	H	H	H	NHCORa	(a2)	–	–	–	H	H	H	Me	H	Ph	H	H	H	H
(5)-5	NHCORa	(a2)	–	–	–	H	H	H	NHCORa	(a2)	–	–	–	H	H	H	Me	H	H	H	H	H	H
(5)-6	NHCORa	(a3)	–	–	–	H	H	H	NHCORa	(a3)	–	–	–	H	H	H	Me	H	Ph	H	H	H	H
(5)-7	OH	–	–	–	–	H	H	H	OH	–	–	–	–	H	H	H	n-butyl	H	H	H	H	H	H
(5)-8	OH	–	–	–	–	H	H	H	OH	–	–	–	–	H	H	H	H	H	H	H	H	H	n-butyl
(5)-9	OH	–	–	–	–	H	H	H	OH	–	–	–	–	H	H	H	(a5)	H	H	H	H	H	H
(5)-10	OH	–	–	–	–	H	H	H	OH	–	–	–	–	H	H	H	(a6)	H	H	H	H	H	H
(5)-11	OH	–	–	–	–	H	H	H	OH	–	–	–	–	H	H	H	(P)(n=6,R_{51}=CH_3)	H	H	H	H	H	H
(5)-12	OH	–	–	–	–	H	H	H	OH	–	–	–	–	H	H	H	(a6)	H	Ph	H	H	H	H
(5)-13	$NHSO_2Rb$	–	(a1)	–	–	H	H	H	$NHSO_2Rb$	–	(a1)	–	–	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
(5)-14	$NHSO_2Rb$	–	tolyl	–	–	H	H	H	$NHSO_2Rb$	–	tolyl	–	–	H	H	H	H	H	H	H	H	H	(a2)
(5)-15	$NH_2PO(ORf)(ORg)$	–	–	Me	Me	H	H	H	$NH_2PO(ORf)(ORg)$	–	–	Me	Me	H	H	H	(a5)	H	H	H	H	H	H

[0144] 一般式（６）～（８）で表される構造を有する化合物（６）～（８）は、化合物（１）において、L_1が基（Ｌ２）であり、L_2が基（Ｌ５）である化

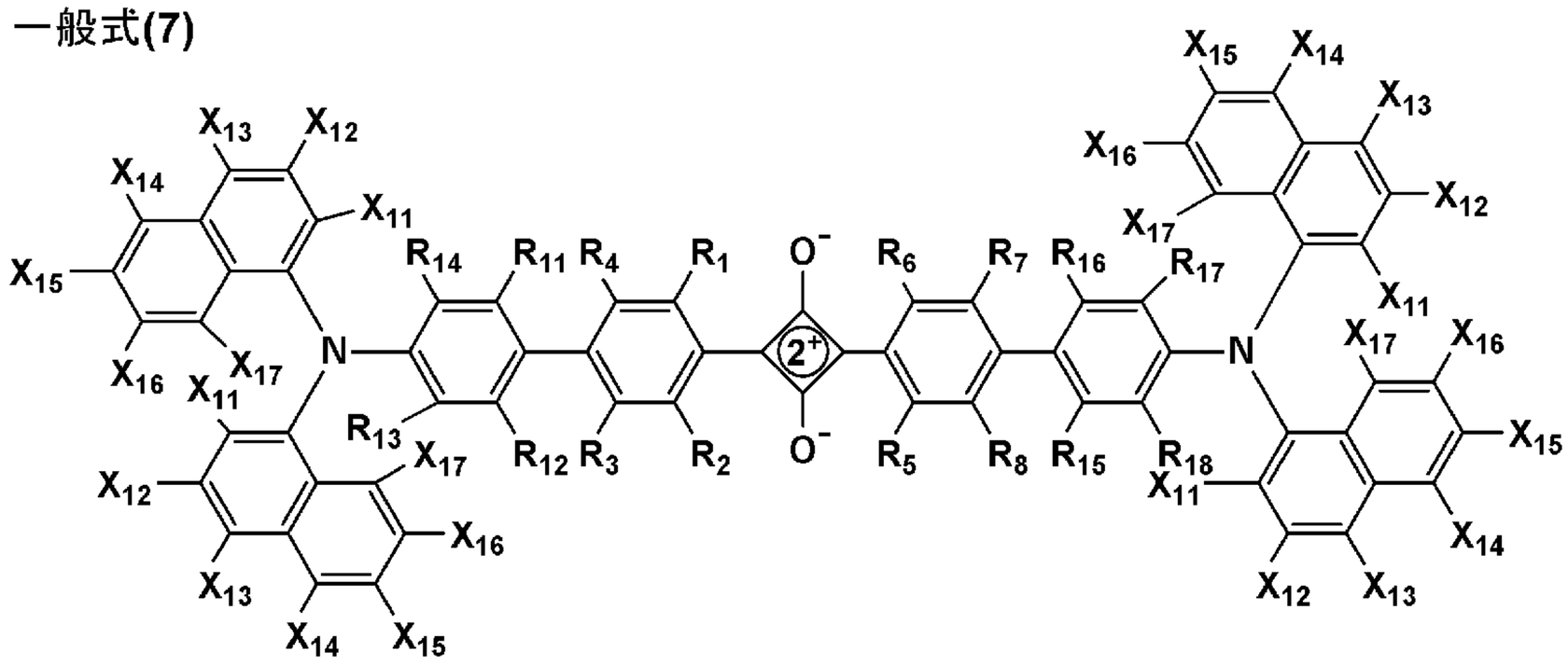
合物である。化合物（６）は、Ａｒ$_1$～Ａｒ$_4$がいずれも基（Ａ）である化合物であり、化合物（７）は、Ａｒ$_1$～Ａｒ$_4$がいずれも基（Ｂ）である化合物であり、化合物（８）は、Ａｒ$_1$～Ａｒ$_4$がいずれも基（Ｃ）である化合物である。

[0145] [化40]

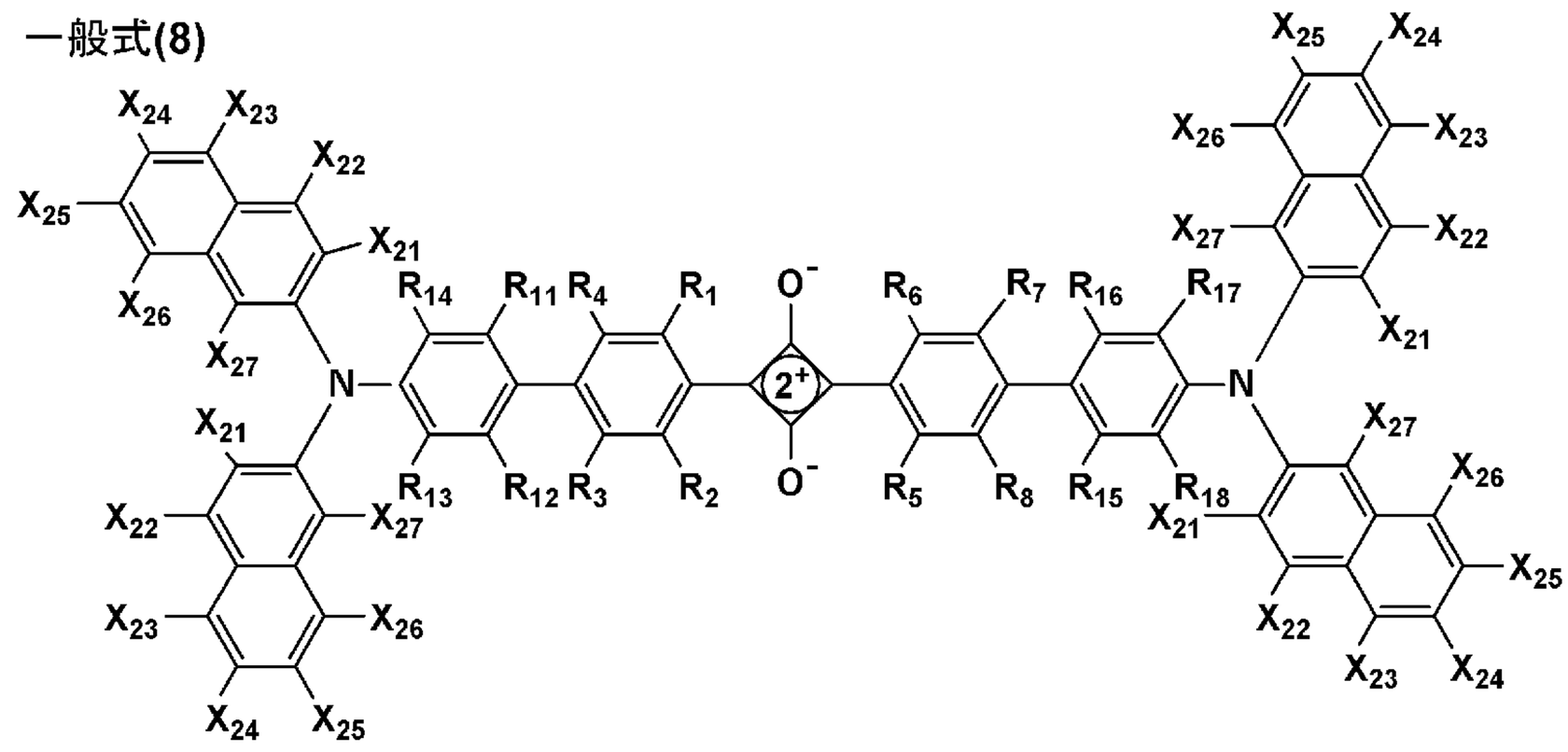
一般式(6)



一般式(7)



一般式(8)



[0146] 化合物（６）～（８）において、一般式（１）のＡｒ$_1$～Ａｒ$_4$に相当する部分は、化合物（３）～（５）における説明が適用できる。化合物（６）～（８）は、Ｌ$_1$が基（Ｌ２）であり、Ｌ$_2$が基（Ｌ５）である点で共通する。化合物（６）において、一般式（６）中のＲ$_1$及びＲ$_5$がＯＨ基である場合、該化合物を化合物（６１）ともいう。同様に、化合物（７）において、一般式（７）中のＲ$_1$及びＲ$_5$がＯＨ基である場合、該化合物を化合物（７１）ともいう。また、化合物（８）において、一般式（８）中のＲ$_1$及びＲ$_5$がＯＨ基である場合、該化合物を化合物（８１）ともいう。

[0147] 化合物（６１）においては、Ｒ$_2$、Ｒ$_6$、Ｒ$_{11}$、Ｒ$_{12}$、Ｒ$_{15}$、Ｒ$_{16}$、４個の基（Ａ）における各Ｘ$_1$及びＸ$_5$のうちの少なくとも１つが置換基（Ｅ）である。化合物（７１）においては、Ｒ$_2$、Ｒ$_6$、Ｒ$_{11}$、Ｒ$_{12}$、Ｒ$_{15}$、Ｒ$_{16}$、及び４個の基（Ｂ）における各Ｘ$_{11}$のうちの少なくとも１つが置換基（Ｅ）である。化合物（８１）においては、Ｒ$_2$、Ｒ$_6$、Ｒ$_{11}$、Ｒ$_{12}$、Ｒ$_{15}$、Ｒ$_{16}$、４個の基（Ｃ）における各Ｘ$_{21}$及びＸ$_{27}$のうちの少なくとも１つが置換基（Ｅ）である。

[0148] または、これらに代わって、あるいはこれらに加えて、化合物（６１）においてはＸ$_3$が、化合物（７１）においてはＸ$_{13}$が、化合物（８１）においてはＸ$_{24}$が、それぞれ基（Ｄ）であってもよい。なお、化合物（７１）においては、各Ｘ$_{16}$及びＸ$_{17}$を、任意に置換基（Ｅ）とすることができる。また、化合物（８１）においては、各Ｘ$_{26}$を、任意に置換基（Ｅ）とすることができる。化合物（６１）、化合物（７１）及び化合物（８１）において、置換基（Ｅ）は、４個の基（Ａ）、基（Ｂ）又は基（Ｃ）に各１ずつ存在することが好ましい。

[0149] 化合物（６１）、化合物（７１）及び化合物（８１）において、置換基（Ｅ）でない場合のＲ$_2$、Ｒ$_6$、Ｒ$_{11}$、Ｒ$_{12}$、Ｒ$_{15}$及びＲ$_{16}$並びに、Ｒ$_3$、Ｒ$_4$、Ｒ$_7$、Ｒ$_8$、Ｒ$_{13}$、Ｒ$_{14}$、Ｒ$_{17}$及びＲ$_{18}$は、水素原子又はメチル基が好ましい。化合物（６１）において、４個の基（Ａ）が有するＸ$_1$～Ｘ$_5$のうち置換基（Ｅ）又は基（Ｄ）でないＸ$_1$～Ｘ$_5$は、水素原子、メチル基又はフェニル

基であることが好ましい。化合物（７１）において、４個の基（Ｂ）が有するＸ$_{11}$～Ｘ$_{17}$のうち置換基（Ｅ）又は基（Ｄ）でないＸ$_{11}$～Ｘ$_{17}$は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。化合物（８１）において、４個の基（Ｃ）が有するＸ$_{21}$～Ｘ$_{27}$のうち置換基（Ｅ）又は基（Ｄ）でないＸ$_{21}$～Ｘ$_{27}$は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。

[0150] 化合物（６）において、一般式（６）中のＲ$_1$及びＲ$_5$がＮＨＣＯＲａ基、ＮＨＳＯ$_2$Ｒｂ基、又はＮＨＰＯ（ＯＲｆ）（ＯＲｇ）基である場合、該化合物を化合物（６２）ともいう。同様に、化合物（７）において、一般式（７）中のＲ$_1$及びＲ$_5$がＮＨＣＯＲａ基、ＮＨＳＯ$_2$Ｒｂ基、又はＮＨＰＯ（ＯＲｆ）（ＯＲｇ）基である場合、該化合物を化合物（７２）ともいう。また、化合物（８）において、一般式（８）中のＲ$_1$及びＲ$_5$がＮＨＣＯＲａ基、ＮＨＳＯ$_2$Ｒｂ基、又はＮＨＰＯ（ＯＲｆ）（ＯＲｇ）基である場合、該化合物を化合物（８２）ともいう。

[0151] 化合物（６２）においては、Ｒａ、Ｒｂ、Ｒｆ、Ｒｇ、Ｒ$_2$、Ｒ$_6$、Ｒ$_{11}$、Ｒ$_{12}$、Ｒ$_{15}$、Ｒ$_{16}$、４個の基（Ａ）における各Ｘ$_1$及びＸ$_5$のうちの少なくとも１つが置換基（Ｅ）である。化合物（７２）においては、Ｒａ、Ｒｂ、Ｒｆ、Ｒｇ、Ｒ$_2$、Ｒ$_6$、Ｒ$_{11}$、Ｒ$_{12}$、Ｒ$_{15}$、Ｒ$_{16}$、及び４個の基（Ｂ）における各Ｘ$_{11}$のうちの少なくとも１つが置換基（Ｅ）である。化合物（８２）においては、Ｒａ、Ｒｂ、Ｒｆ、Ｒｇ、Ｒ$_2$、Ｒ$_6$、Ｒ$_{11}$、Ｒ$_{12}$、Ｒ$_{15}$、Ｒ$_{16}$、４個の基（Ｃ）における各Ｘ$_{21}$及びＸ$_{27}$のうちの少なくとも１つが置換基（Ｅ）である。

[0152] または、これらに代わって、あるいはこれらに加えて、化合物（６２）においてはＸ$_3$が、化合物（７２）においてはＸ$_{13}$が、化合物（８２）においてはＸ$_{24}$が、それぞれ基（Ｄ）であってもよい。なお、化合物（７２）においては、各Ｘ$_{16}$及びＸ$_{17}$を、任意に置換基（Ｅ）とすることができる。また、化合物（８２）においては、各Ｘ$_{26}$を、任意に置換基（Ｅ）とすることができる。ただし、Ｒａ、Ｒｂ、Ｒｆ及びＲｇについては、アルキル基（ａ）を

含む置換基（Ｅ）に限定される。

[0153] 化合物（６２）、化合物（７２）及び化合物（８２）において、置換基（Ｅ）は、４個の基（Ａ）、基（Ｂ）又は基（Ｃ）に各１ずつ存在することが好ましい。

[0154] 化合物（６２）、化合物（７２）及び化合物（８２）において、置換基（Ｅ）でない場合のR_2、R_6、R_{11}、R_{12}、R_{15}及びR_{16}並びに、R_3、R_4、R_7、R_8、R_{13}、R_{14}、R_{17}及びR_{18}は、水素原子が好ましい。化合物（６２）において、４個の基（Ａ）が有するX_1～X_5のうち置換基（Ｅ）又は基（Ｄ）でないX_1～X_5は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。化合物（７２）において、４個の基（Ｂ）が有するX_{11}～X_{17}のうち置換基（Ｅ）又は基（Ｄ）でないX_{11}～X_{17}は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。化合物（８２）において、４個の基（Ｃ）が有するX_{21}～X_{27}のうち置換基（Ｅ）又は基（Ｄ）でないX_{21}～X_{27}は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。

[0155] 化合物（６）、化合物（７）及び化合物（８）の具体的な例示を、それぞれ表VII、表VIII及び表IXに示す。表IXにおいて、「－Ｏ－（ａ４）」は、連結基として－Ｏ－が結合
した基（ａ４）を示す。

[0156]

[0157]

表 VII

[表7]

化合物名（略号）	R_1	Ra	Rb	Rf	Rg	R_2	R_3	R_4	R_5	Ra	Rb	Rf	Rg	R_6	R_7	R_8	R_{11}	R_{12}	R_{13}	R_{14}	R_{15}	R_{16}	R_{17}	R_{18}	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5
(6)-1	OH	-	-	-	-	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	(a2)	H	H	H	H
(6)-2	OH	-	-	-	-	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	Me	Me	H	H	Me	Me	H	H	n-butyl	H	H	H	H
(6)-3	OH	-	-	-	-	H	Me	H	OH	-	-	-	-	H	Me	H	H	H	H	H	H	H	H	H	*1	H	H	H	H
(6)-4	OH	-	-	-	-	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	n-octyl	H	Ph	H	H
(6)-5	NHCORa	n-butyl	-	-	-	H	H	H	NHCORa	n-butyl	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H
(6)-6	NHCORa	n-hexyl	-	-	-	H	H	H	NHCORa	n-hexyl	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	Me	H	Ph	H	H
(6)-7	NHCORa	(a1)	-	-	-	H	H	H	NHCORa	(a1)	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H
(6)-8	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H
(6)-9	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	Me	H	H	Me	H
(6)-10	NHCORa	(a3)	-	-	-	H	H	H	NHCORa	(a3)	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	Me	H	Ph	H	H
(6)-11	$NHSO_2Rb$	-	(a1)	-	-	H	H	H	$NHSO_2Rb$	-	(a1)	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H
(6)-12	$NHSO_2Rb$	-	tolyl	-	-	H	H	H	$NHSO_2Rb$	-	tolyl	-	-	H	H	H	n-butyl	H	H	H	n-butyl	H	H	H	Me	H	H	H	H
(6)-13	$NH_2PO(ORf)(ORg)$	-	-	Me	Me	H	H	H	$NH_2PO(ORf)(ORg)$	-	-	Me	Me	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	(a5)	H	H	H	H

*1: (P)(Q=$-CH_2-$,n=9,R_{51}=H)

[0158]

[表8]

表 VIII

化合物名(略号)	R_1	Ra	Rb	Rf	Rg	R_2	R_3	R_4	R_5	Ra	Rb	Rf	Rg	R_6	R_7	R_8	R_{11}	R_{12}	R_{13}	R_{14}	R_{15}	R_{16}	R_{17}	R_{18}	X_{11}	X_{12}	X_{13}	X_{14}	X_{15}	X_{16}	X_{17}
(7)-1	NHCORa	n-butyl	-	-	-	H	H	H	NHCORa	n-butyl	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H	H	H
(7)-2	NHCORa	n-hexyl	-	-	-	H	H	H	NHCORa	n-hexyl	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	Me	H	Ph	H	H	H	H
(7)-3	NHCORa	(a1)	-	-	-	H	H	H	NHCORa	(a1)	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H	H	H
(7)-4	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
(7)-5	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	NHCORa	(a2)	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	Me	H	Me	H	H	H	H
(7)-6	NHCORa	(a3)	-	-	-	H	H	H	NHCORa	(a3)	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	Me	H	Ph	H	H	H	H
(7)-7	OH	-	-	-	-	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	(a2)	H	H	H	H	H	H
(7)-8	OH	-	-	-	-	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	Me	Me	H	H	Me	Me	H	H	n-octyl	H	H	H	H	H	H
(7)-9	OH	-	-	-	-	H	Me	H	OH	-	-	-	-	H	Me	H	Me	Me	H	H	Me	Me	H	H	(a5)	H	H	H	H	H	H
(7)-10	OH	-	-	-	-	H	H	H	OH	-	-	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	*1	H	Ph	H	H	H	H
(7)-11	$NHSO_2Rb$	-	(a1)	-	-	H	H	H	$NHSO_2Rb$	-	(a1)	-	-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
(7)-12	$NHSO_2Rb$	-	tolyl	-	-	H	H	H	$NHSO_2Rb$	-	tolyl	-	-	H	H	H	(a2)	H	H	H	(a2)	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
(7)-13	*2	-	-	Me	Me	H	H	H	*2	-	-	Me	Me	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	*1	H	H	H	H	H	H

*1: (P)(n=8,R_{51}=CH_3)　　*2: $NH_2PO(ORf)(ORg)$

[表9]

表 IX

化合物名（略号）	R_1	Ra	Rb	Rf	Rg	R_5	R_4	R_3	R_2	Rg	Rf	Rb	Ra	R_{11}	R_8	R_7	R_6	Rg	Rf	Rb	X_{21}	R_{18}	R_{17}	R_{16}	R_{15}	R_{14}	R_{12}	R_{13}	X_{22}	X_{23}	X_{24}	X_{25}	X_{26}	X_{27}
(8)-1	NHCORa	n-butyl	–	–	–	$NHSO_2Rb$	H	H	H	–	–	(a1)	–	H	H	H	H	–	–	(a1)	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
(8)-2	NHCORa	(a1)	–	–	–	NHCORa	H	H	H	–	–	(a1)	–	H	H	H	H	–	–	(a1)	Me	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
(8)-3	NHCORa	(a2)	–	–	–	NHCORa	H	H	H	–	–	(a1)	–	H	H	H	H	–	–	(a1)	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
(8)-4	NHCORa	(a3)	–	–	–	NHCORa	H	H	H	–	–	(a1)	–	H	H	H	H	–	–	(a1)	Me	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
(8)-5	OH	–	–	–	–	OH	H	H	H	–	–	(a1)	–	H	H	H	H	–	–	(a1)	n-butyl	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
(8)-6	OH	–	–	–	–	OH	H	H	n-butyl	–	–	(a1)	–	Me	H	H	H	–	–	(a1)	H	H	H	Me	Me	H	Me	H	H	H	H	H	H	H
(8)-7	OH	–	–	–	–	OH	H	H	H	–	–	(a1)	–	Me	H	H	H	–	–	(a1)	(a5)	H	H	Me	Me	H	Me	H	H	H	H	H	H	H
(8)-8	OH	–	–	–	–	OH	H	H	H	–	–	(a1)	–	H	H	H	H	–	–	(a1)	(a5)	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
(8)-9	OH	–	–	–	–	OH	H	H	H	–	–	(a1)	–	H	H	H	H	–	–	(a1)	*1	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
(8)-10	OH	–	–	–	–	OH	H	H	H	–	–	(a1)	–	–O–(a4)	H	H	H	–	–	(a1)	(a4)	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
(8)-11	$NHSO_2Rb$	–	(a1)	–	–	$NHSO_2Rb$	H	H	H	–	–	(a1)	–	H	H	H	H	–	–	(a1)	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
(8)-12	$NHSO_2Rb$	–	tolyl	–	–	$NHSO_2Rb$	H	H	H	–	–	(a1)	–	(a1)	H	H	H	–	–	tolyl	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
(8)-13	*2	–	–	Me	Me	*2	H	H	H	Me	Me	(a6)	–	(a6)	H	H	H	Me	Me	(a6)	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H

*1: (P)(n=9,R_{51}=CH_3)

*2: $NH_2PO(ORf)(ORg)$

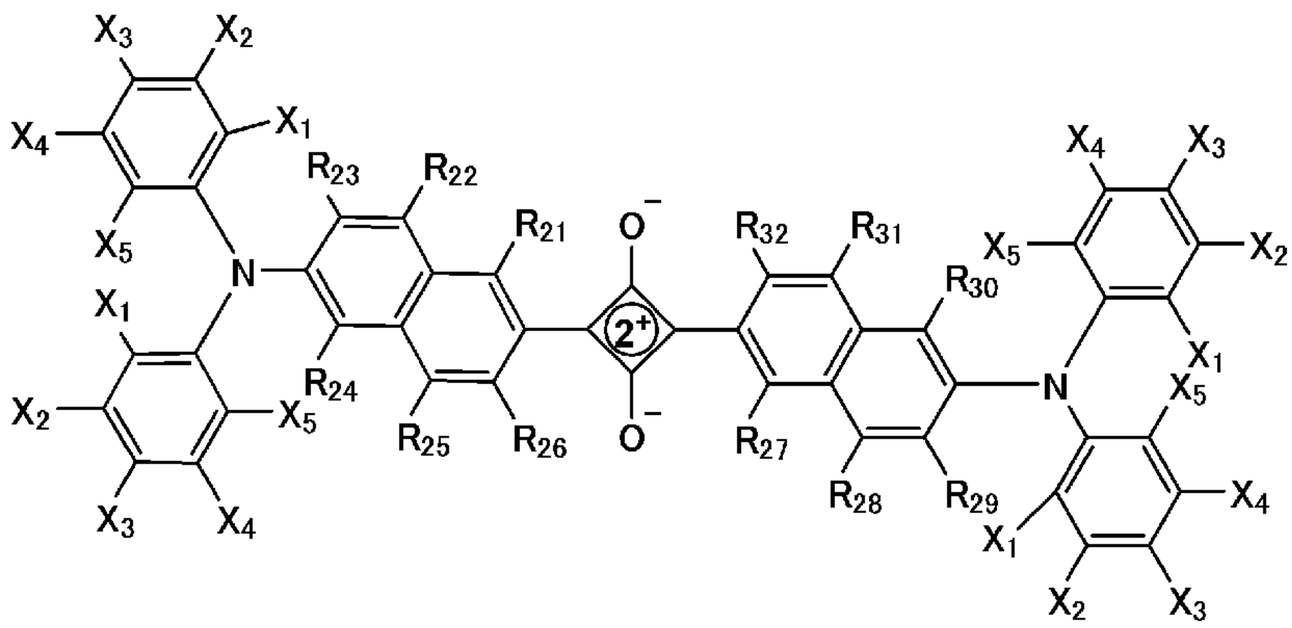
[0159] 一般式（９）～（１１）で表される構造を有する化合物（９）～（１１）

は、化合物（１）において、Ｌ$_1$が基（Ｌ３）であり、Ｌ$_2$が基（Ｌ６）である化合物である。化合物（９）は、Ａｒ$_1$～Ａｒ$_4$がいずれも基（Ａ）である化合物であり、化合物（１０）は、Ａｒ$_1$～Ａｒ$_4$がいずれも基（Ｂ）である化合物であり、化合物（１１）は、Ａｒ$_1$～Ａｒ$_4$がいずれも基（Ｃ）である化合物である。

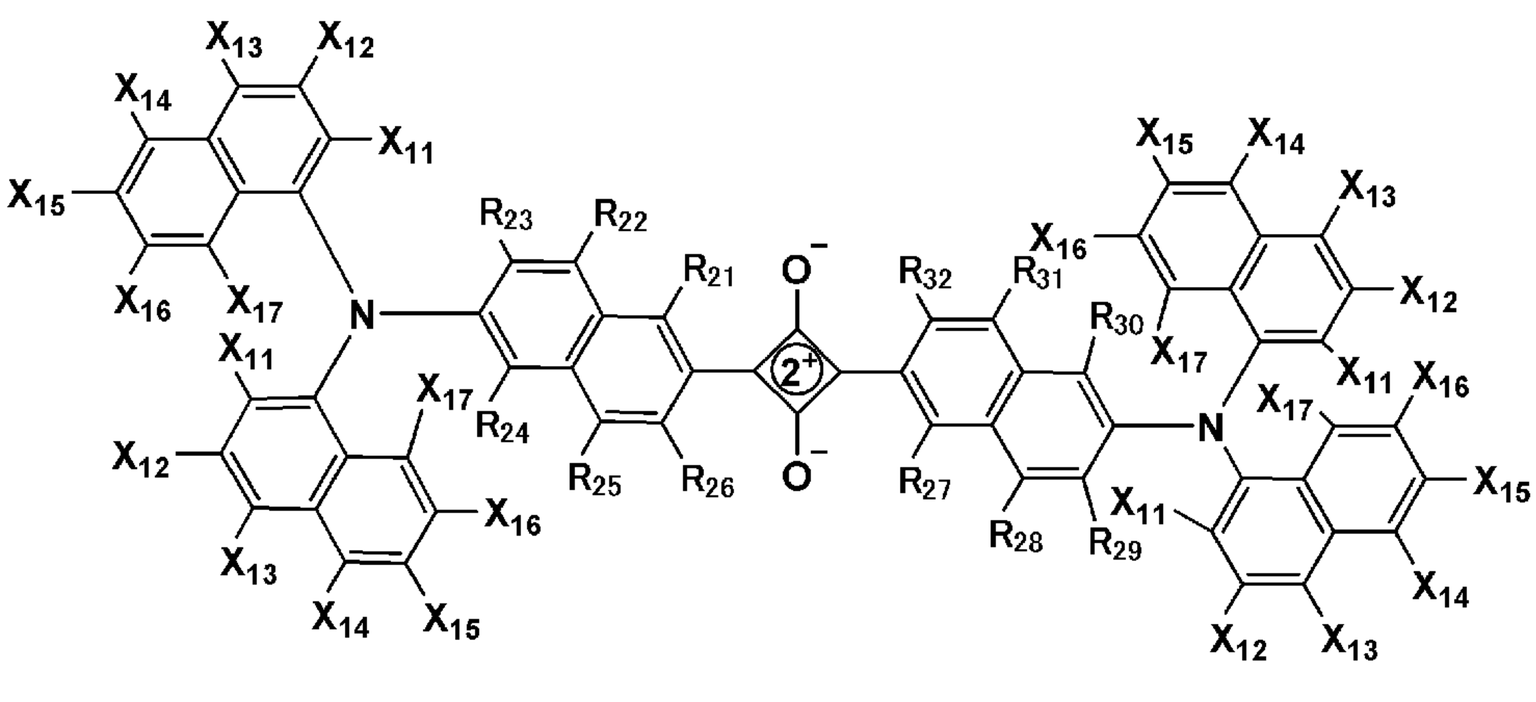
[0160]

[化41]

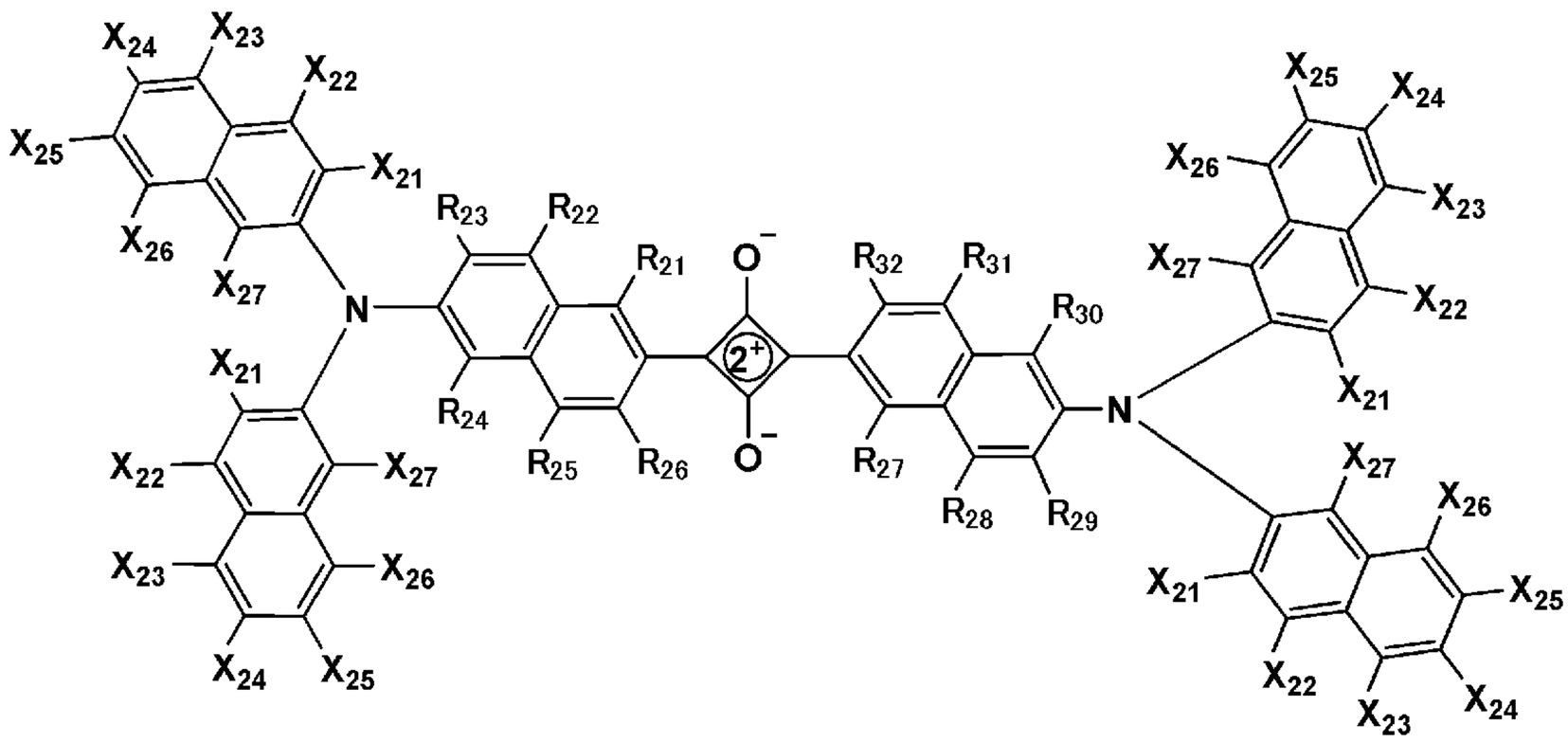
一般式(9)



一般式(10)



一般式(11)



[0161] 化合物（９）～（１１）において、一般式（１）のＡｒ$_1$～Ａｒ$_4$に相当する部分は、化合物（３）～（５）における説明が適用できる。化合物（９）～（１１）は、Ｌ$_1$が基（Ｌ３）であり、Ｌ$_2$が基（Ｌ６）である点で共通す

る。化合物（９）において、一般式（９）中のＲ$_{21}$及びＲ$_{27}$がＯＨ基である場合、該化合物を化合物（９１）ともいう。同様に、化合物（１０）において、一般式（１０）中のＲ$_{21}$及びＲ$_{27}$がＯＨ基である場合、該化合物を化合物（１０１）ともいう。また、化合物（１１）において、一般式（１１）中のＲ$_{21}$及びＲ$_{27}$がＯＨ基である場合、該化合物を化合物（１１１）ともいう。

[0162] 化合物（９１）においては、Ｒ$_{26}$、Ｒ$_{32}$、４個の基（Ａ）における各Ｘ$_1$及びＸ$_5$のうちの少なくとも１つが置換基（Ｅ）である。化合物（１０１）においては、Ｒ$_{26}$、Ｒ$_{32}$、及び４個の基（Ｂ）における各Ｘ$_{11}$のうちの少なくとも１つが置換基（Ｅ）である。化合物（１１１）においては、Ｒ$_{26}$、Ｒ$_{32}$、４個の基（Ｃ）における各Ｘ$_{21}$及びＸ$_{27}$のうちの少なくとも１つが置換基（Ｅ）である。

[0163] または、これらに代わって、あるいはこれらに加えて、化合物（９１）においてはＸ$_3$が、化合物（１０１）においてはＸ$_{13}$が、化合物（１１１）においてはＸ$_{24}$が、それぞれ基（Ｄ）であってもよい。なお、化合物（９１）においては、Ｒ$_{22}$及びＲ$_{28}$を、任意に置換基（Ｅ）とすることができる。化合物（１０１）においては、Ｒ$_{22}$、Ｒ$_{28}$、各Ｘ$_{16}$及びＸ$_{17}$を、任意に置換基（Ｅ）とすることができる。また、化合物（１１１）においては、Ｒ$_{22}$、Ｒ$_{28}$及び各Ｘ$_{26}$を、任意に置換基（Ｅ）とすることができる。化合物（９１）、化合物（１０１）及び化合物（１１１）において、置換基（Ｅ）は、４個の基（Ａ）、基（Ｂ）又は基（Ｃ）に各１ずつ存在することが好ましい。

[0164] 化合物（９１）、化合物（１０１）及び化合物（１１１）において、置換基（Ｅ）でないＲ$_{22}$～Ｒ$_{26}$、Ｒ$_{28}$～Ｒ$_{32}$は、水素原子又はメチル基が好ましい。化合物（９１）において、４個の基（Ａ）が有するＸ$_1$～Ｘ$_5$のうち置換基（Ｅ）又は基（Ｄ）でないＸ$_1$～Ｘ$_5$は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。化合物（１０１）において、４個の基（Ｂ）が有するＸ$_{11}$～Ｘ$_{17}$のうち置換基（Ｅ）又は基（Ｄ）でないＸ$_{11}$～Ｘ$_{17}$は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。化合物（１１１）に

おいて、４個の基（Ｃ）が有するX_{21}～X_{27}のうち置換基（Ｅ）又は基（Ｄ）でないX_{21}～X_{27}は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。

[0165] 化合物（９）において、一般式（９）中のR_{21}及びR_{27}がＮＨＣＯＲａ基、$NHSO_2Rb$基、又はＮＨＰＯ（ＯＲｆ）（ＯＲｇ）基である場合、該化合物を化合物（９２）ともいう。同様に、化合物（１０）において、一般式（１０）中のR_{21}及びR_{27}がＮＨＣＯＲａ基、$NHSO_2Rb$基、又はＮＨＰＯ（ＯＲｆ）（ＯＲｇ）基である場合、該化合物を化合物（１０２）ともいう。また、化合物（１１）において、一般式（１１）中のR_{21}及びR_{27}がＮＨＣＯＲａ基、$NHSO_2Rb$基、又はＮＨＰＯ（ＯＲｆ）（ＯＲｇ）基である場合、該化合物を化合物（１１２）ともいう。

[0166] 化合物（９２）においては、Ｒａ、Ｒｂ、Ｒｆ、Ｒｇ、R_{22}、R_{26}、R_{28}、R_{32}、４個の基（Ａ）における各X_1及びX_5のうちの少なくとも１つが置換基（Ｅ）である。化合物（１０２）においては、Ｒａ、Ｒｂ、Ｒｆ、Ｒｇ、R_{22}、R_{26}、R_{28}、R_{32}、及び４個の基（Ｂ）における各X_{11}のうちの少なくとも１つが置換基（Ｅ）である。化合物（１１２）においては、Ｒａ、Ｒｂ、Ｒｆ、Ｒｇ、R_{22}、R_{26}、R_{28}、R_{32}、４個の基（Ｃ）における各X_{21}及びX_{27}のうちの少なくとも１つが置換基（Ｅ）である。

[0167] または、これらに代わって、あるいはこれらに加えて、化合物（９２）においてはX_3が、化合物（１０２）においてはX_{13}が、化合物（１１２）においてはX_{24}が、それぞれ基（Ｄ）であってもよい。なお、化合物（９２）においては、R_{22}及びR_{28}を、任意に置換基（Ｅ）とすることができる。化合物（１０２）においては、R_{22}、R_{28}、各X_{16}及びX_{17}を、任意に置換基（Ｅ）とすることができる。また、化合物（１１２）においては、R_{22}、R_{28}及び各X_{26}を、任意に置換基（Ｅ）とすることができる。ただし、Ｒａ、Ｒｂ、Ｒｆ及びＲｇについては、アルキル基（ａ）を含む置換基（Ｅ）に限定される。

[0168] 化合物（９２）、化合物（１０２）及び化合物（１１２）において、置換

基（Ｅ）は、４個の基（Ａ）、基（Ｂ）又は基（Ｃ）に各１ずつ存在することが好ましい。

[0169] 化合物（９２）、化合物（１０２）及び化合物（１１２）において、置換基（Ｅ）でない$Ｒ_{22}$～$Ｒ_{26}$、$Ｒ_{28}$～$Ｒ_{32}$は、水素原子が好ましい。化合物（９２）において、４個の基（Ａ）が有する$Ｘ_{1}$～$Ｘ_{5}$のうち置換基（Ｅ）又は基（Ｄ）でない$Ｘ_{1}$～$Ｘ_{5}$は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。化合物（１０２）において、４個の基（Ｂ）が有する$Ｘ_{11}$～$Ｘ_{17}$のうち置換基（Ｅ）又は基（Ｄ）でない$Ｘ_{11}$～$Ｘ_{17}$は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。化合物（１１２）において、４個の基（Ｃ）が有する$Ｘ_{21}$～$Ｘ_{27}$のうち置換基（Ｅ）又は基（Ｄ）でない$Ｘ_{21}$～$Ｘ_{27}$は、水素原子、メチル基又はフェニル基であることが好ましい。

[0170] 化合物（９）、化合物（１０）及び化合物（１１）の具体的な例示を、それぞれ表X、表XI及び表XIIに示す。

[0171]

[表10]

表X

化合物名（略号）	R_{21}	Ra	Rb	Rf	Rg	R_{22}	R_{23}	R_{24}	R_{25}	R_{26}	R_{27}	R_{28}	R_{29}	R_{30}	R_{31}	R_{32}	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5
(9)-1	OH	–	–	–	–	H	H	H	H	H	OH	H	H	H	H	H	(a6)	H	H	H	H
(9)-2	OH	–	–	–	–	H	H	H	H	H	OH	H	H	H	H	H	n-butyl	H	Me	H	H
(9)-3	OH	–	–	–	–	H	H	H	H	H	OH	H	H	H	H	H	(P)(n=9,R_{51}=CH_3)	H	H	H	H
(9)-4	OH	–	–	–	–	H	H	H	H	H	OH	H	H	H	H	H	n-octyl	H	Ph	H	H
(9)-5	NHCORa	n-butyl	–	–	–	H	H	H	H	H	NHCORa	H	H	H	H	H	Me	H	Ph	H	H
(9)-6	NHCORa	n-hexyl	–	–	–	H	H	H	H	H	NHCORa	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H
(9)-7	NHCORa	(a1)	–	–	–	H	H	H	H	H	NHCORa	H	H	H	H	H	Me	H	H	Me	H
(9)-8	NHCORa	(a2)	–	–	–	H	H	H	H	H	NHCORa	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H
(9)-9	NHCORa	(a2)	–	–	–	H	H	H	H	H	NHCORa	H	H	H	H	H	Me	H	Ph	H	H
(9)-10	NHCORa	(a3)	–	–	–	H	H	H	H	H	NHCORa	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H
(9)-11	$NHSO_2Rb$	–	(a1)	–	–	H	H	H	H	H	$NHSO_2Rb$	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
(9)-12	$NHSO_2Rb$	–	tolyl	–	–	H	H	H	H	H	$NHSO_2Rb$	H	H	H	H	H	(a3)	H	H	H	H
(9)-13	$NH_2PO(ORf)(ORg)$	–	–	Me	Me	H	H	H	H	H	$NH_2PO(ORf)(ORg)$	H	H	H	H	H	(a6)	H	H	H	H

[0172]

[0173]

[表11]

表 XI

化合物名(略号)	R_{21}	Ra	Rb	Rf	Rg	R_{22}	R_{23}	R_{24}	R_{25}	R_{26}	R_{27}	Ra	Rb	Rf	Rg	R_{28}	R_{29}	R_{30}	R_{31}	R_{32}	X_{11}	X_{12}	X_{13}	X_{14}	X_{15}	X_{16}	X_{17}
(10)-1	NHCORa	n-butyl	−	−	−	H	H	H	H	H	NHCORa	n-butyl	−	−	−	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H	H	H
(10)-2	NHCORa	n-hexyl	−	−	−	H	H	H	H	H	NHCORa	n-hexyl	−	−	−	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
(10)-3	NHCORa	(a1)	−	−	−	H	H	H	H	H	NHCORa	(a1)	−	−	−	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H	H	H
(10)-4	NHCORa	(a2)	−	−	−	H	H	H	H	H	NHCORa	(a2)	−	−	−	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H	H	H
(10)-5	NHCORa	(a2)	−	−	−	H	H	H	H	H	NHCORa	(a2)	−	−	−	H	H	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H
(10)-6	NHCORa	(a3)	−	−	−	H	H	H	H	H	NHCORa	(a3)	−	−	−	H	H	H	H	H	Me	H	Ph	H	H	H	H
(10)-7	OH	−	−	−	−	H	H	H	H	H	OH	−	−	−	−	H	H	H	H	H	(a7)	H	H	H	H	H	H
(10)-8	OH	−	−	−	−	H	H	H	H	H	OH	−	−	−	−	H	H	H	H	H	(a6)	H	H	H	H	H	H
(10)-9	OH	−	−	−	−	H	H	H	H	H	OH	−	−	−	−	H	H	H	H	H	*1	H	H	H	H	H	H
(10)-10	OH	−	−	−	−	H	H	H	H	H	OH	−	−	−	−	H	H	H	H	H	n-octyl	H	Ph	H	H	H	H
(10)-11	$NHSO_2Rb$	−	(a1)	−	−	H	H	H	H	H	$NHSO_2Rb$	−	(a1)	−	−	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
(10)-12	$NHSO_2Rb$	−	tolyl	−	−	H	H	H	H	H	$NHSO_2Rb$	−	tolyl	−	−	H	H	H	H	H	(a2)	H	H	H	H	H	H
(10)-13	*2	−	−	Me	Me	H	H	H	H	H	*2	−	−	Me	Me	H	H	H	H	H	n-octyl	H	H	H	H	H	H

*1: (P)(n=9,R_{51}=CH_3)　　*2: $NH_2PO(ORf)(ORg)$

[表12]

表 XII

化合物名（略号）	R_{21}	Ra	Rb	Rf	Rg	R_{22}	R_{23}	R_{24}	R_{25}	R_{26}	R_{27}	Ra	Rb	Rf	Rg	R_{28}	R_{29}	R_{30}	R_{31}	R_{32}	X_{21}	X_{22}	X_{23}	X_{24}	X_{25}	X_{26}	X_{27}
(11)-1	NHCORa	n-butyl	–	–	–	H	H	H	H	H	NHCORa	n-butyl	–	–	–	H	H	H	H	H	Me	H	H	H	H	H	H
(11)-2	NHCORa	(a1)	–	–	–	H	H	H	H	H	NHCORa	(a1)	–	–	–	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
(11)-3	NHCORa	(a2)	–	–	–	H	H	H	H	H	NHCORa	(a2)	–	–	–	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
(11)-4	OH	–	–	–	–	H	H	H	H	H	OH	–	–	–	–	H	H	H	H	H	(a7)	H	H	H	H	H	H
(11)-5	OH	–	–	–	–	H	H	H	H	H	OH	–	–	–	–	H	H	H	H	H	n-butyl	H	H	H	H	H	H
(11)-6	OH	–	–	–	–	H	H	H	H	H	OH	–	–	–	–	H	H	H	H	H	(P)(n=8,R_{51}=CH_3)	H	H	H	H	H	H
(11)-7	OH	–	–	–	–	H	H	H	H	H	OH	–	–	–	–	H	H	H	H	H	n-octyl	H	H	H	H	H	H
(11)-8	$NHSO_2Rb$	–	(a1)	–	–	H	H	H	H	H	$NHSO_2Rb$	–	(a1)	–	–	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
(11)-9	$NHSO_2Rb$	–	tolyl	–	–	H	H	H	H	H	$NHSO_2Rb$	–	tolyl	–	–	H	H	H	H	H	(a1)	H	H	H	H	H	H
(11)-10	*1	–	–	Me	Me	H	H	H	H	H	*1	–	–	Me	Me	H	H	H	H	H	(P)(n=9,R_{51}=CH_3)	H	H	H	H	H	H

*1: $NH_2PO(ORf)(ORg)$

[0174] 以上、化合物（１）について例示した。化合物（１）のなかでも、上記の

とおり化合物（１ａ）～（１ｄ）が好ましい。化合物（１ａ）としては、本発明の効果をより発現できる観点から、化合物（１ａ）－１、化合物（１ａ）－１２及び化合物（１ａ）－２０が好ましい。

[0175] 同様に、化合物（１ｂ）としては、化合物（１ｂ）－１４、化合物（１ｂ）－１８が好ましい。化合物（１ｃ）としては、化合物（１ｃ）－９、化合物（１ｃ）－１２、化合物（１ｃ）－３１、化合物（１ｃ）－４２が好ましい。また、化合物（１ｄ）としては、化合物（１ｄ）－１、化合物（１ｄ）－１４、化合物（１ｄ）－３６、化合物（１ｄ）－３９、化合物（１ｄ）－４０が好ましい。

[0176] また、化合物（４）としては、化合物（４）－５、化合物（４）－６、化合物（４）－９及び化合物（４）－１０が好ましい。化合物（５）としては、化合物（５）－３、化合物（５）－４及び化合物（５）－９が好ましい。

[0177] 化合物（６）としては、化合物（６）－３、化合物（６）－４及び化合物（６）－８が好ましい。化合物（７）としては、化合物（７）－４、化合物（７）－５、化合物（７）－６及び化合物（７）－８が好ましい。化合物（８）としては、化合物（８）－３、化合物（８）－４及び化合物（８）－１０が好ましい。

[0178] 化合物（９）としては、化合物（９）－４、化合物（９）－６、化合物（９）－７及び化合物（９）－１０が好ましい。化合物（１０）としては、化合物（１０）－２、化合物（１０）－４、化合物（１０）－５及び化合物（１０）－８が好ましい。化合物（１１）としては、化合物（１１）－２、化合物（１１）－３及び化合物（１１）－７が好ましい。

[0179] ［合成方法］

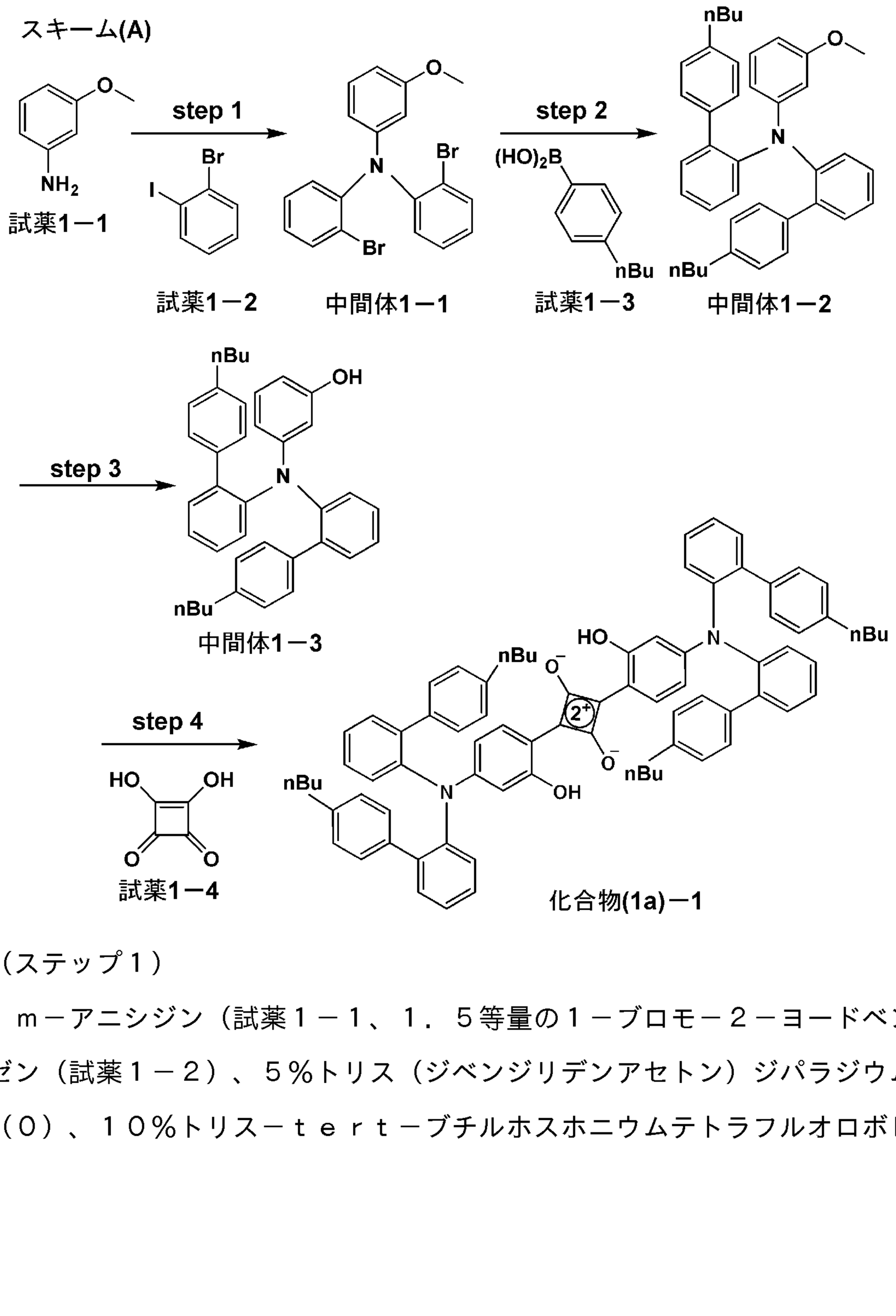
本発明に係る化合物（１）は、例えば、Ｃｈｅｍｉｓｔｒｙ ｏｆ Ｍａｔｅｒｉａｌｓ，第２３巻、４７８９ページ（２０１１年）、Ｔｈｅ Ｊｏｕｒｎａｌ ｏｆ Ｐｈｙｓｉｃａｌ Ｃｈｅｍｉｓｔｒｙ，第９１巻、５１８４ページ（１９８７年）に記載の方法、又は、これらの文献に記載の参照文献に記載の方法を参照することにより合成することができる。一例と

して、以下に例示化合物（１ａ）－１、（１ｂ）－１、（１ｃ）－１及び（１ｄ）－１の合成例を示す。

[0180] ＜例示化合物（１ａ）－１の合成＞

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

[0181] [化42]



[0182] （ステップ１）

ｍ－アニシジン（試薬１－１、１．５等量の１－ブロモ－２－ヨードベンゼン（試薬１－２）、５％トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０）、１０％トリス－ｔｅｒｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロボレ

ート、３等量のｔｅｒｔ－ブトキシナトリウムをキシレン３０ｍＬ中で還流する。これを抽出、濃縮した後シリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製することで、中間体１－１を得る。

[0183] （ステップ２）

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

[0184] （ステップ３）

次に中間体１－２を塩化メチレン中、０℃に冷却し、三臭化ホウ素の１Ｍ塩化メチレン溶液を滴下漏斗で滴下し、１時間０℃で撹拌する。それから室温に戻し１時間撹拌ののち水を加えて抽出、濃縮し、シリカゲルクロマトグラフィーで生成することで、中間体１－３を得る。

[0185] （ステップ４）

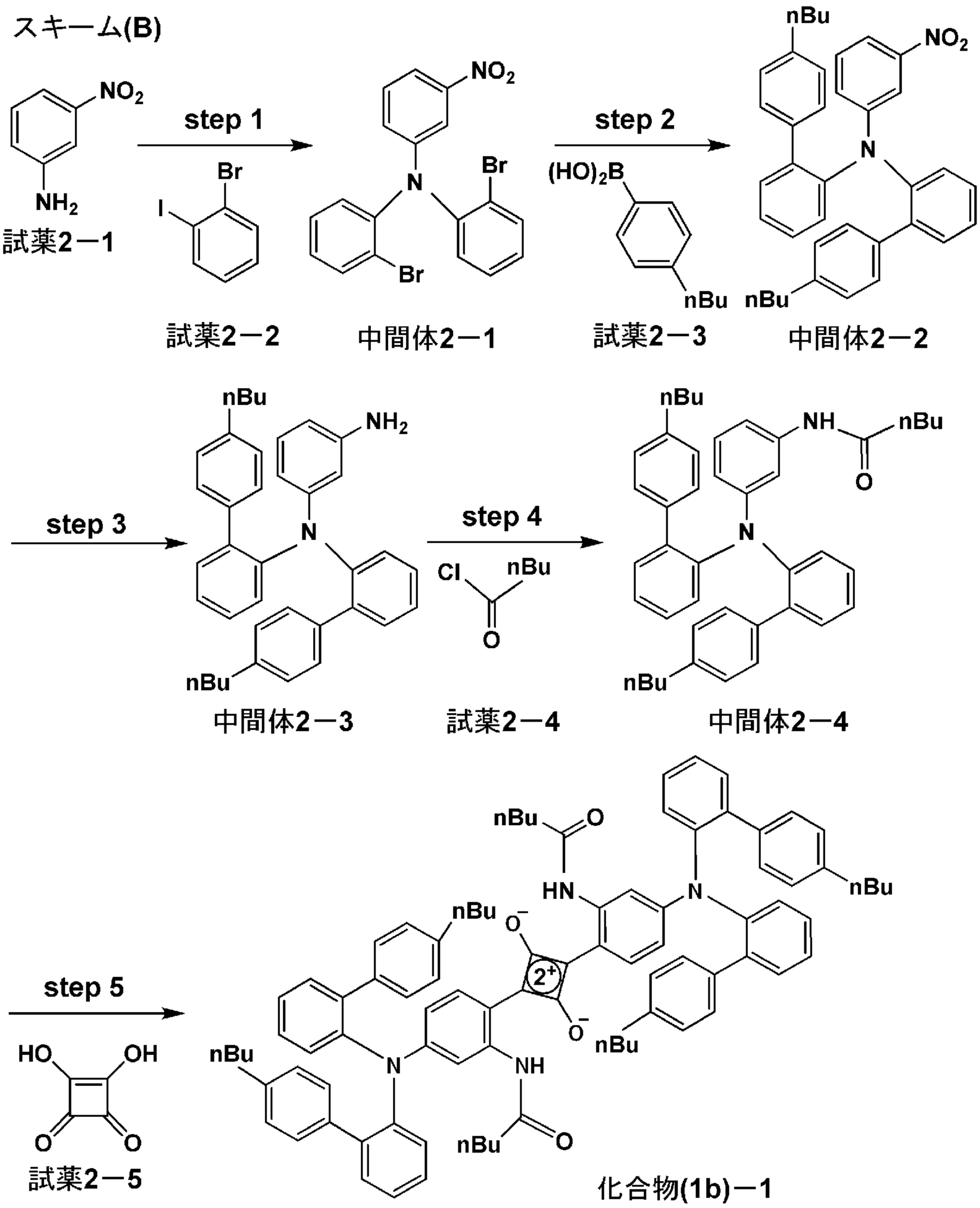
最後に得られた中間体１－３と３，４－ジヒドロキシ－３－シクロブテン－１，２－ジオンをトルエンとブタノールの１：１混合溶媒で６時間加熱する。冷却後、落ちてきた緑色結晶をろ取することで化合物（１ａ）－１を得る。化合物の構造は質量分析（ＭＳ）と^{1}Ｈ－ＮＭＲにより確認できる。図１に化合物（１ａ）－１の^{1}Ｈ－ＮＭＲスペクトル（４００ＭＨｚ、測定溶媒ＣＤＣｌ３）を示す。

[0186] ＜例示化合物（１ｂ）－１の合成＞

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

[0187]

[化43]



[0188] （ステップ１）

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

[0189]（ステップ２）

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

[0190]（ステップ３）

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

[0191]（ステップ４）

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

[0192]（ステップ５）

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

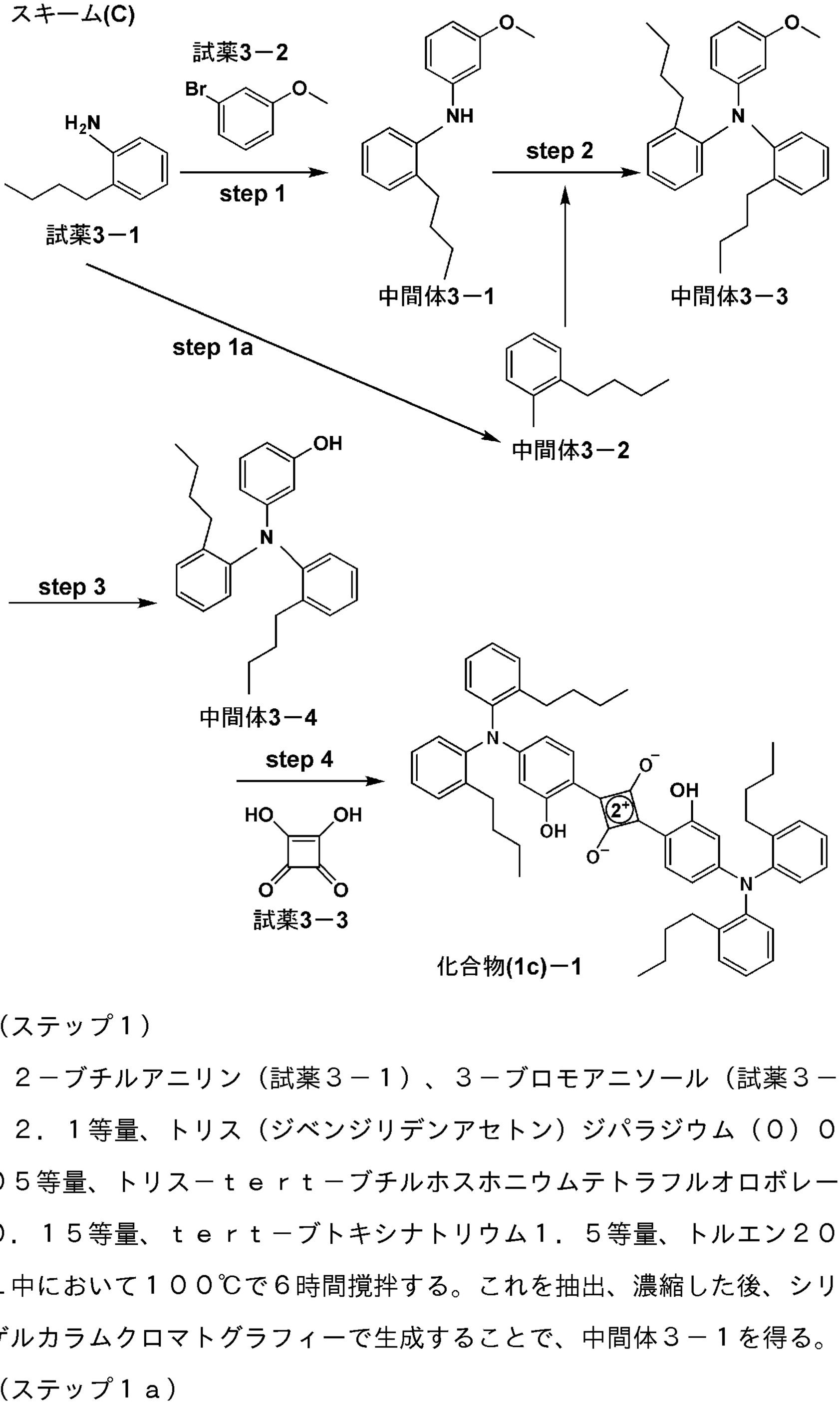
[0193]＜例示化合物（１ｃ）－１の合成＞

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

[0194]

[化44]

スキーム(C)



[0195] （ステップ１）

２－ブチルアニリン（試薬３－１）、３－ブロモアニソール（試薬３－２）２．１等量、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０）０．０５等量、トリス－ｔｅｒｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロボレート０．１５等量、ｔｅｒｔ－ブトキシナトリウム１．５等量、トルエン２０ｍＬ中において１００℃で６時間撹拌する。これを抽出、濃縮した後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーで生成することで、中間体３－１を得る。

[0196] （ステップ１ａ）

また別に、試薬３－１に対し、ｐ－トルエンスルホン酸を３等量アセトニトリル５０ｍＬに溶解し、０℃に冷却し、亜硝酸ナトリウム２等量及びヨウ化カリウム２．５等量を水２０ｍＬに溶解した溶液を３０分かけて滴下し、滴下後、室温で１時間撹拌する。これを抽出、シリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製することで、中間体３－２を得る。

[0197]（ステップ２）

中間体３－１に対して、中間体３－２を１．３等量、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０）０．０３等量、トリス－ｔｅｒｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロボレート０．１等量、ｔｅｒｔ－ブトキシナトリウム１．５等量、キシレン３０ｍＬ中で１３５℃で１６時間反応させる。これを抽出、濃縮した後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーで生成することで、中間体３－３を得る。

[0198]（ステップ３）

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

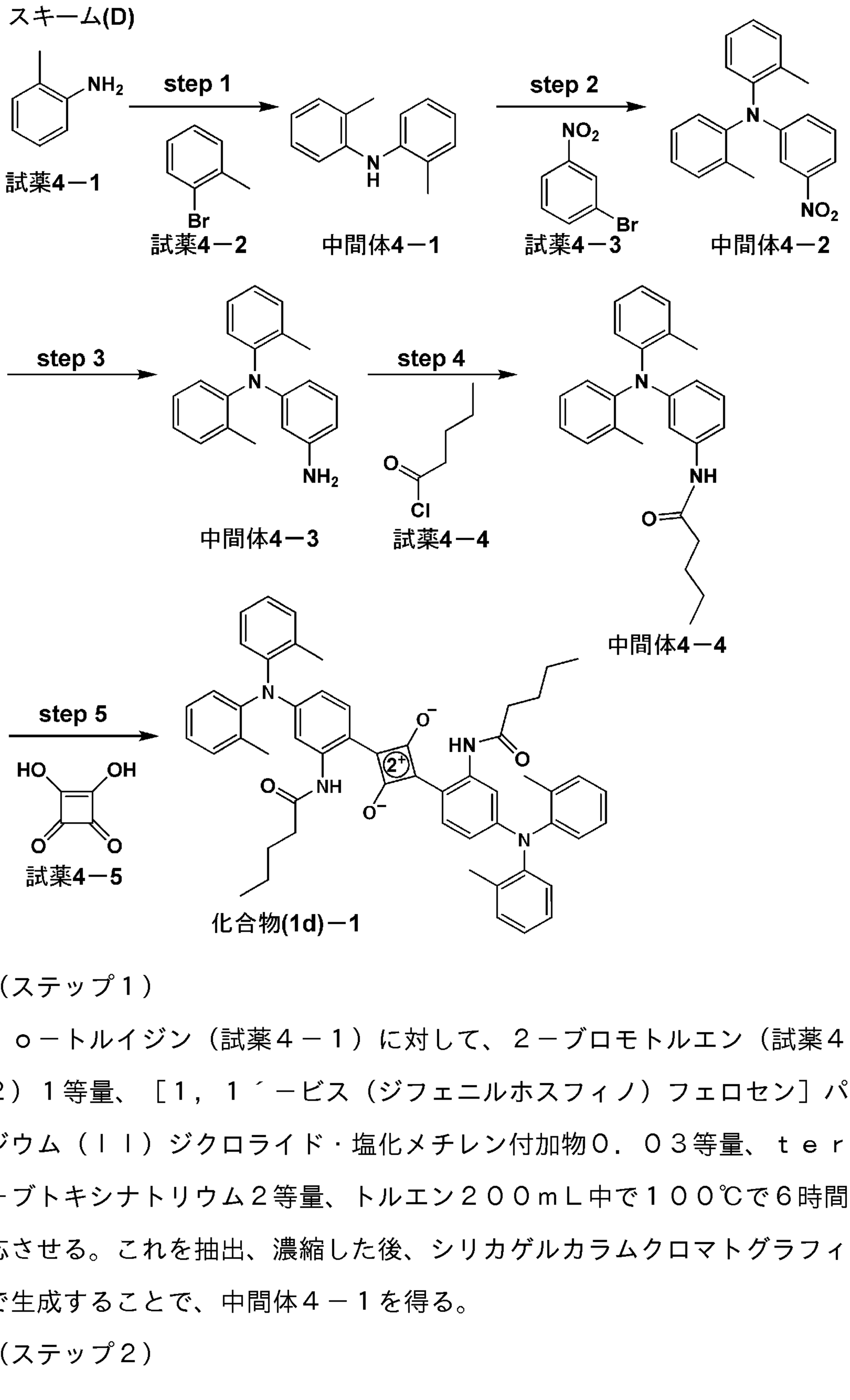
[0199]（ステップ４）

最後に得られた中間体３－４と３，４－ジヒドロキシ－３－シクロブテン－１，２－ジオン（試薬３－３）０．４等量とをトルエン－ブタノール１：２混合溶媒中１１５℃で１６時間加熱する。冷却後、抽出し、濃縮した後シリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製することで、化合物（１ｃ）－１を得る。化合物の構造はＭＳと^{1}Ｈ－ＮＭＲにより確認できる。図２に化合物（１ｃ）－１の^{1}Ｈ－ＮＭＲスペクトル（４００ＭＨｚ、測定溶媒ＣＤＣｌ３）を示す。

[0200]＜例示化合物（１ｄ）－１の合成＞

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

[0201] [化45]



[0202] （ステップ１）

ｏ－トルイジン（試薬４－１）に対して、２－ブロモトルエン（試薬４－２）１等量、［１，１´－ビス（ジフェニルホスフィノ）フェロセン］パラジウム（ＩＩ）ジクロライド・塩化メチレン付加物０．０３等量、ｔｅｒｔ－ブトキシナトリウム２等量、トルエン２００ｍＬ中で１００℃で６時間反応させる。これを抽出、濃縮した後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーで生成することで、中間体４－１を得る。

[0203] （ステップ２）

中間体４－１に対して、３－ブロモニトロベンゼン（試薬４－３）１．２等量、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（０）０．０３等量、トリス－ｔｅｒｔ－ブチルホスホニウムテトラフルオロボレート０．０５等量、ｔｅｒｔ－ブトキシナトリウム２等量をキシレン１５０ｍＬ中で１３０℃で１６時間反応させる。これを抽出、濃縮した後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーで生成することで、中間体４－２得る。

[0204] （ステップ３）

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

[0205] （ステップ４）

次にこの中間体４－３を塩化メチレン１５０ｍＬに溶解し、これにトリエチルアミン１．５等量を加え、０℃に冷却化、塩化バレリル（試薬４－４）１．２等量を加えたのち室温で１６時間撹拌する。これを抽出、濃縮後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、中間体４－４を得る。

[0206] （ステップ５）

最後に得られた中間体４－４と３，４－ジヒドロキシ－３－シクロブテン－１，２－ジオン（試薬４－５）をトルエン－ブタノール１：１混合溶媒で６時間加熱する。冷却後、抽出し、濃縮した後シリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製することで、化合物（１ｄ）－１を得る。化合物の構造はＭＳと^{1}Ｈ－ＮＭＲにより確認できる。図３に化合物（１ｄ）－１の^{1}Ｈ－ＮＭＲスペクトル（４００ＭＨｚ、測定溶媒ＣＤＣｌ３）を示す。

[0207] ＜化合物（Ｔ）の光学特性＞

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

[0208] 化合物（Ｔ）をトルエン溶液中で１０$^{-6}$Ｍに調整し、常温（３００Ｋ）でこの試料の発光スペクトルを測定する。発光スペクトルの測定には、分光蛍

光光度計（日立ハイテクノス社製、Ｆ７０００）を用いる。

[0209] 化合物（Ｔ）は、得られる発光スペクトルにおいて、極大発光波長（発光強度が最大となる波長；「発光ピーク波長」ともいう）が７００ｎｍを超える蛍光発光を示す近赤外発光化合物である。化合物（Ｔ）における発光ピーク波長は、７００ｎｍ以上が好ましく、７１０ｎｍ以上がより好ましい。

[0210] 吸光ピーク波長は、化合物（Ｔ）をトルエン溶液中で10^{-6}Ｍに調整し、常温（３００Ｋ）でこの試料の吸光スペクトルを測定する。吸光スペクトルの測定には、分光光度計日立ハイテクノス社製、Ｆ７０００）を用いる。

[0211] また、化合物（Ｔ）をトルエン等に溶解させた溶液の発光量子収率や、マトリックス材料に分散させた薄膜の発光量子収率は、例えば、以下の方法で測定し評価に用いることができる。

[0212] 発光量子収率Φ（％）は、吸収された光子数と放出された光子数の割合で表される。励起された分子の全てが蛍光によって基底状態に戻れば、発光量子収率Φ（％）は１００％となるが、無輻射失活が生じると１００％とはならない。

[0213] 無輻射失活とは、蛍光を発しないで基底状態に戻る遷移で、項間交差による三重項状態への緩和の他、電子状態のエネルギーが振動エネルギーなどに転化して最終的に熱エネルギーになる内部転換や、他の分子にエネルギーを移すエネルギー移動などがある。

[0214] 励起状態にある分子の蛍光遷移と無輻射遷移の速度定数をそれぞれＫｆとＫｎｒとおくと、発光量子収率Φ（％）は、以下の式で表される。

Φ（％）＝（Ｋｆ／（Ｋｆ＋Ｋｎｒ））×１００

[0215] したがって、発光量子収率を向上させるためには、励起状態にある分子の無輻射失活を抑えることが必要である。

[0216] ［発光部材］

本発明の発光部材は、上記化合物（Ｔ）を含有することで近赤外光の長波長領域に発光ピークを有するとともに、高い発光量子収率を達成できる。化合物（Ｔ）のうちでも、該特性をより高いレベルで得られる点から化合物（

１）が好ましい。本発明の発光部材としては、発光性薄膜、発光性粒子等が挙げられる。また、発光性薄膜は波長変換膜として用いることができる。

[0217] 本発明の発光部材は、例えば、新たなタイプの蛍光プローブ用色素として生物学及び医学における標識体として、バイオイメージに利用することができる。また、励起した電子が、基底状態へ戻る際に余分なエネルギーとして蛍光を放射する化合物（Ｔ）は、吸収と放出のエネルギーの違いから波長変換能を有しており、色変換フィルターとして、染料、顔料、光学フィルター、農業用フィルム等に用いることもできる。

[0218] 《発光性薄膜》

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

[0219] マトリックス材料としては、（メタ）アクリレート系樹脂、ポリエステル系樹脂、ポリアミド系樹脂、ポリイミド系樹脂、ポリスチレン系樹脂、ポリエポキシ系樹脂、ポリエステル系樹脂、アミノ系樹脂、フッ素系樹脂、フェノール系樹脂、ポリウレタン系樹脂、ポリエチレン系樹脂、ポリプロピレン系樹脂、ポリ塩化ビニル系樹脂、ポリビニルアルコール系樹脂、ポリエーテル系樹脂、ポリエーテルケトン系樹脂、ポリフェニレンスルフィド樹脂、ポリカーボネート系樹脂、アラミド樹脂等が挙げられるが、好ましくはポリスチレン系樹脂、ポリエチレン系樹脂、ポリプロピレン系樹脂、ポリ塩化ビニル系樹脂等である。また、これらの共重合体も同様に好ましい。

[0220] （メタ）アクリレート系樹脂とは、種々のメタクリレート系モノマー、又はアクリレート系モノマーを単独重合、又は共重合することにより合成され、モノマー種及びモノマー組成比を種々変えることによって、望みの（メタ）アクリレート系樹脂を得ることができる。また本発明においては、（メタ）アクリレート系モノマーと一緒に（メタ）アクリレート系モノマー以外の不飽和二重結合を有する共重合可能なモノマーとともに共重合しても使用可

能であり、さらに本発明においては、ポリ（メタ）アクリレート系樹脂と一緒に他の複数の樹脂を混合しても使用可能である。

[0221] 本発明において用いられる（メタ）アクリレート系樹脂を形成するモノマー成分としては、例えば、（メタ）アクリル酸、メチル（メタ）アクリレート、エチル（メタ）アクリレート、プロピル（メタ）アクリレート、ブチル（メタ）アクリレート、イソプロピル（メタ）アクリレート、イソブチル（メタ）アクリレート、ｔ－ブチル（メタ）アクリレート、ステアリル（メタ）アクリレート、２－ヒドロキシエチル（メタ）アクリレート、アセトアセトキシエチル（メタ）アクリレート、ジメチルアミノエチル（メタ）アクリレート、２－ヒドロキシプロピル（メタ）アクリレート、ジ（エチレングリコール）エチルエーテル（メタ）アクリレート、エチレングリコールメチルエーテル（メタ）アクリレート、イソボニル（メタ）アクリレート、塩化エチルトリメチルアンモニウム（メタ）アクリレート、トリフルオロエチル（メタ）アクリレート、オクタフルオロペンチル（メタ）アクリレート、２－アセトアミドメチル（メタ）アクリレート、２－メトキシエチル（メタ）アクリレート、２－ジメチルアミノエチル（メタ）アクリレート、３－トリメトキシシランプロピル（メタ）アクリレート、ベンジル（メタ）アクリレート、トリデシル（メタ）アクリレート、４－ヒドロキシブチル（メタ）アクリレート、テトラヒドロフルフリル（メタ）アクリレート、ドデシル（メタ）アクリレート、オクタデシル（メタ）アクリレート、２－ジエチルアミノエチル（メタ）アクリレート、２－エチルヘキシル（メタ）アクリレート、シクロヘキシル（メタ）アクリレート、フェニル（メタ）アクリレート、グリシジル（メタ）アクリレート等が挙げられるが、好ましくは（メタ）アクリル酸、メチル（メタ）アクリレート、エチル（メタ）アクリレート、プロピル（メタ）アクリレート、ブチル（メタ）アクリレート、ステアリル（メタ）アクリレート、２－ヒドロキシエチル（メタ）アクリレート、アセトアセトキシエチル（メタ）アクリレート、ベンジル（メタ）アクリレート、トリデシル（メタ）アクリレート、ドデシル（メタ）アクリレート、２－エチ

ルヘキシル（メタ）アクリレートである。

[0222] ポリスチレン系樹脂とは、スチレンモノマーの単独重合体、又はスチレンモノマーと共重合可能な他の不飽和二重結合を有するモノマーを共重合したランダム共重合体、ブロック共重合体、グラフト共重合体が挙げられる。さらに、かかるポリマーに他のポリマーを配合したブレンド物やポリマーアロイも含まれる。前記スチレンモノマーの例としては、スチレン、α－メチルスチレン、α－エチルスチレン、α－メチルスチレン－ｐ－メチルスチレン、ｏ－メチルスチレン、ｍ－メチルスチレン、ｐ－メチルスチレン、等の核アルキル置換スチレン、ｏ－クロルスチレン、ｍ－クロルスチレン、ｐ－クロルスチレン、ｐ－ブロモスチレン、ジクロルスチレン、ジブロモスチレン、トリクロルスチレン、トリブロモスチレン等の核ハロゲン化スチレン等が挙げられるが、この中でスチレン、α－メチルスチレンが好ましい。

[0223] これらを単独重合又は共重合することによって本発明で用いられる樹脂としては、例えば、ベンジルメタクリレート／エチルアクリレート、又はブチルアクリレート等の共重合体樹脂、メチルメタクリレート／２－エチルヘキシルメタクリレート等の共重合体樹脂、メチルメタクリレート／メタクリル酸／ステアリルメタクリレート／アセトアセトキシエチルメタクリレートの共重合体樹脂、スチレン／アセトアセトキシエチルメタクリレート／ステアリルメタクリレートの共重合体樹脂、スチレン／２－ヒドロキシエチルメタクリレート／ステアリルメタクリレートの共重合体樹脂、及び、２－エチルヘキシルメタクリレート／２－ヒドロキシエチルメタクリレート等の共重合体樹脂等が挙げられる。

[0224] なお、上記樹脂の重量平均分子量は、１０００～１０００００００の範囲内にあることが好ましく、５０００～８０００００であることがより好ましく、１００００～６０００００であることがさらに好ましい。

[0225] 発光性薄膜において、化合物（Ｔ）は１種を単独で用いてもよく、２種以上を組み合わせて用いてもよい。発光性薄膜における化合物（Ｔ）の含有量は、上記マトリックス材料１００質量部に対する好ましい下限が０．００１

質量部、好ましい上限が５０質量部である。化合物（Ｔ）の含有量がこの範囲内であると、発光性薄膜は近赤外光の長波長領域で発光するとともに、高い発光量子収率を達成できる。化合物（Ｔ）の含有量のより好ましい下限は０．０１質量部、より好ましい上限は１０質量部、さらに好ましい下限は０．０５質量部、さらに好ましい上限は８質量部、特に好ましい下限は０．１質量部、特に好ましい上限は５質量部である。発光性薄膜は、厚さ０．１ｎｍ～１ｍｍの範囲内で適宜用いることができる。

[0226] 《発光性粒子》

本発明の発光部材の実施形態である発光性粒子は、化合物（Ｔ）を含有することを特徴とする。発光性粒子は、化合物（Ｔ）を粒子表面に吸着させた発光性粒子であっても、化合物（Ｔ）を内包した発光性粒子であってもよい。

[0227] 例えば、ポリマー粒子分散液中に化合物（Ｔ）を凝集させて発光性粒子を作製することができる。また、ポリマー粒子を溶媒に浸漬させた際に、該粒子が溶媒を吸収して体積が膨張する膨潤性ポリマーを用いて、化合物（Ｔ）を内包した発光性粒子であってもよい。

[0228] ポリマー粒子は、市販品を用いてもよく、従来公知の方法で合成したものを用いてもよい。前記従来公知の方法としては、特に制限されないが、分散重合法、懸濁重合法、乳化重合法等が挙げられ、乳化重合法が好ましい。ポリマーとしては、具体的にはメラミン樹脂、ポリスチレン樹脂などの熱可塑性樹脂が好ましい。ポリマーの原料となるモノマーは、上記発光性薄膜においてマトリックス材料のモノマーとして挙げた各種モノマーを使用することができる。

[0229] また、ポリマー粒子分散液中に化合物（Ｔ）を凝集させる場合の溶媒は特に制限されない。公知の溶媒が使用できる。

[0230] 前記ポリマー粒子の体積平均粒子径は、０．０１～５０μｍの範囲内であることが好ましく、０．０２～１μｍであることがより好ましく、０．０４～０．５μｍであることがさらに好ましい。

[0231] 体積平均粒子径が前記範囲にあることで、得られる発光性粒子を様々な用途に適用できる。前記体積平均粒子径は、具体的には、レーザー回折散乱光粒度分布測定装置、ＬＳ１３３２０型にて測定することができる。

[0232] 前記ポリマー粒子の重量平均分子量は、１０００～１０００００００の範囲内にあることが好ましく、５０００～８０００００であることがより好ましく、１００００～６０００００であることがさらに好ましい。

[0233] 発光性粒子に含まれるポリマー粒子は、１種でもよく、２種以上でもよいが、通常は、１種である。

[0234] また、樹脂原料の溶液に化合物（Ｔ）を添加した後、重合反応を進行させることにより、発光性粒子を作製することもできる。例えば、母体となる樹脂としてメラミン樹脂のような熱硬化性樹脂を用いる場合、その樹脂の原料（モノマー又はオリゴマーないしプレポリマー、例えば、メラミンとホルムアルデヒドの縮合物であるメチロールメラミン）と、化合物（Ｔ）と、好ましくはさらに界面活性剤及び重合反応促進剤（酸など）とを含有する反応混合物を加熱し、乳化重合法によって重合反応を進行させることにより化合物（Ｔ）を内包した発光性粒子を作製することができる。

[0235] また、母体となる樹脂としてスチレン系共重合体のような熱可塑性樹脂を用いる場合、その樹脂の原料と、化合物（Ｔ）と（樹脂の原料モノマーとして、あらかじめ化合物（Ｔ）を共有結合などで結合させたモノマーを用いるようにしてもよい）、重合開始剤（過酸化ベンゾイル、アゾビスイソブチロニトリルなど）を含有する反応混合物を加熱し、ラジカル重合法又はイオン重合法によって重合反応を進行させることにより、化合物（Ｔ）を内包した発光性粒子を作製することができる。

[0236] その他、例えば、シリカを母体とし、その中に化合物（Ｔ）を内包させて発光粒子を作製することができる。この場合、無機半導体ナノ粒子、化合物（Ｔ）と、テトラエトキシシランのようなシリカ前駆体とが溶解している溶液を、エタノール及びアンモニアが溶解している溶液に滴下し、シリカ前駆体を加水分解することにより作製することができる。

[0237] 発光性粒子において、化合物（Ｔ）は１種を単独で用いてもよく、２種以上を組み合わせて用いてもよい。発光性粒子における化合物（Ｔ）の含有量は、ポリマー粒子１００質量部に対する好ましい下限が０．００１質量部、好ましい上限が５０質量部である。化合物（Ｔ）の含有量がこの範囲内であると、発光性薄膜は近赤外光の長波長領域で発光するとともに、高い発光量子収率を達成できる。化合物（Ｔ）の含有量のより好ましい下限は０．０１質量部、より好ましい上限は１０質量部、さらに好ましい下限は０．１質量部である。

[0238] 《波長変換膜及び赤外発光面光源》

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

[0239] 赤外発光面光源は、可視光を発光する面光源と、該面光源から発光された可視光、特に赤色光を近赤外光に変換する波長変換膜を備え、７００ｎｍ超の赤外波長域に発光極大波長を有することが好ましい。

[0240] 図４に、化合物（Ｔ）を含有する発光性薄膜を備える波長変換膜を有する赤外発光面光源の基本的な構成例を示す。図４に示す赤外発光面光源１は、可視光発光する面光源２、例えば、赤色発光（Ｒ）の有機ＥＬ素子上に、赤色発光（Ｒ）する面光源２の可視光を近赤外光（ＩＲ）に変換する波長変換膜３を配置した構成である。

[0241] 可視光（赤色）発光する面光源は、少なくとも赤色発光する特性を備えた光源であり、好ましくは、均一発光させたときに輝度均一性が７０％以上である面光源であり、具体的な面光源としては、有機ＥＬ素子であることが好ましい。

[0242] 赤外発光面光源１の形態としては、可視光（赤色）を発光する面光源２とは別途に製造した波長変換膜３を可視光（赤色）発光する面光源２に重ねて

用いた形態でもよい。あるいは、波長変換膜３を可視光（赤色）発光する面光源２上に積層させた形態でもよい。

[0243] 波長変換膜３は、化合物（Ｔ）を含有する発光性薄膜の単層で構成されていてもよく、例えば、図５に示すような発光性薄膜を具備する積層構成であってもよい。図５に示す波長変換膜３は、化合物（Ｔ）を含有する発光性薄膜５を有し、該発光性薄膜５の一方の面に接着剤層６を介してガスバリアーフィルム４Ｂが張り合わされ、他方の面にはガスバリアーフィルム４Ａが貼り合された構成である。

[0244] 赤外発光面光源１の厚さについては、用途に応じて適宜決定されるが、０．１～１０００μｍであることがフレキシブル性及び小型化の観点で好ましく、より好ましくは１～５００μｍの範囲内である。このような、赤外発光面光源は、生体計測装置及び生体認証装置に好適に用いられる。

[0245] ［光電変換部材］

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

[0246] 本発明の光電変換部材が適用される近赤外光電変換素子は、対向する一対の電極間に光電変換部を備えた素子であって、電極の上方から光が光電変換部に入射されるものである。光電変換部は前記の入射光に応じて電子と正孔を発生し、半導体により前記電荷に応じた信号が読み出され、光電変換部の吸収波長に応じた入射光量を示す素子である。光が入射しない側の電極には読み出しのためのトランジスタが接続される場合もある。

[0247] このような近赤外光電変換素子において、化合物（Ｔ）を含有する光電変換部材は、上記光電変換部を構成する部材、具体的には、以下に説明する光電変換層として適用可能である。

[0248] 光電変換部は、光電変換層と、電子輸送層、正孔輸送層、電子ブロック層、正孔ブロック層等から成る群より選択される一種又は複数種の光電変換層以外の有機薄膜層とから成ることが多い。なお、光電変換層は、化合物（Ｔ）のみで構成されていてもよいが、化合物（Ｔ）以外に、公知の赤外吸収物

質を含んでいてもよい。

[0249] 上記近赤外光電変換素子に用いられる電極膜は、後述する光電変換部に含まれる光電変換層が、正孔輸送性を有する場合や光電変換層以外の有機薄膜層が正孔輸送性を有する正孔輸送層である場合は、該光電変換層やその他の有機薄膜層から正孔を取り出してこれを捕集する役割を果たす。また、光電変換部に含まれる光電変換層が電子輸送性を有する場合や、有機薄膜層が電子輸送性を有する電子輸送層である場合は、該光電変換層やその他の有機薄膜層から電子を取り出して、これを吐出する役割を果たすものである。

[0250] よって、電極膜として用い得る材料は、ある程度の導電性を有するものであれば特に限定されないが、隣接する光電変換層やその他の有機薄膜層との密着性や電子親和力、イオン化ポテンシャル、安定性等を考慮して選択することが好ましい。

[0251] 電極膜として用い得る材料としては、例えば、酸化錫（ＮＥＳＡ）、酸化インジウム、酸化錫インジウム（ＩＴＯ）及び酸化亜鉛インジウム（ＩＺＯ）等の導電性金属酸化物；金、銀、白金、クロム、アルミニウム、鉄、コバルト、ニッケル及びタングステン等の金属：ヨウ化銅及び硫化銅等の無機導電性物質：ポリチオフェン、ポリピロール及びポリアニリン等の導電性ポリマー：炭素等が挙げられる。

[0252] これらの材料は、必要により複数を混合して用いてもよいし、複数を２層以上に積層して用いてもよい。電極膜に用いる材料の導電性も、光電変換素子の受光を必要以上に妨げなければ特に限定されないが、光電変換素子の信号強度や、消費電力の観点から出来るだけ高いことが好ましい。例えばシート抵抗値が３００Ω／□以下の導電性を有するＩＴＯ膜であれば、電極膜として充分機能するが、数Ω／□程度の導電性を有するＩＴＯ膜を備えた基板の市販品も入手可能となっていることから、この様な高い導電性を有する基板を使用することが望ましい。

[0253] ＩＴＯ膜（電極膜）の厚さは導電性を考慮して任意に選択することができるが、通常５乃至５００ｎｍ、好ましくは１０乃至３００ｎｍ程度である。

ＩＴＯなどの膜を形成する方法としては、従来公知の蒸着法、電子線ビーム法、スパッタリング法、化学反応法及び塗布法等が挙げられる。基板上に設けられたＩＴＯ膜には必要に応じＵＶ－オゾン処理やプラズマ処理等を施してもよい。

[0254] 電極膜のうち、少なくとも光が入射する側の何れか一方に用いられる透明電極膜の材料としては、ＩＴＯ、ＩＺＯ、SnO_2、ＡＴＯ（アンチモンドープ酸化スズ）、ＺｎＯ、ＡＺＯ（ＡＩドープ酸化亜鉛）、ＧＺＯ（ガリウムドープ酸化亜鉛）、TiO_2、ＦＴＯ（フッ素ドープ酸化スズ）等が挙げられる。

[0255] 光電変換素子が有する光電変換部は、少なくとも光電変換層及び光電変換層以外の有機薄膜層を含む。光電変換部を構成する光電変換層には一般的に有機半導体膜が用いられ、本発明の化合物（Ｔ）はこの有機半導体薄膜に含有される。その有機半導体膜は一層若しくは複数の層であってもよく、一層の場合は、Ｐ型有機半導体膜、Ｎ型有機半導体膜、又はそれらの混合膜（バルクヘテロ構造）が用いられる。一方、複数の層である場合は、２～１０層程度であり、Ｐ型有機半導体膜、Ｎ型有機半導体膜、又はそれらの混合膜（バルクヘテロ構造）の何れかを積層した構造であり、層間にバッファ層が挿入されていてもよい。

[0256] 本発明に係る光電変換素子において、光電変換部を構成する光電変換層以外の有機薄膜層は、光電変換層以外の層、例えば、電子輸送層、正孔輸送層、電子ブロック層、正孔ブロック層、結晶化防止層又は層間接触改良層等としても用いられる。特に電子輸送層、正孔輸送層、電子ブロック層及び正孔ブロック層から成る群より選択される一種以上の薄膜層として用いることにより、弱い光エネルギーでも効率よく電気信号に変換する素子が得られるため好ましい。

[0257] 電子輸送層は、光電変換層で発生した電子を電極へ輸送する役割と、電子輸送先の電極から光電変換層に正孔が移動するのをブロックする役割とを果たす。正孔輸送層は、発生した正孔を光電変換層から電極へ輸送する役割と

、正孔輸送先の電極から光電変換層に電子が移動するのをブロックする役割とを果たす。電子ブロック層は、電極から光電変換層への電子の移動を妨げ、光電変換層内での再結合を防ぎ、暗電流を低減する役割を果たす。正孔ブロック層は、電極から光電変換層への正孔の移動を妨げ、光電変換層内での再結合を防ぎ、暗電流を低減する機能を有する。

[0258] 図６に光電変換素子の代表的な素子構造を例示する。図６の態様例においては、１１が絶縁部、１２が一方の電極膜、１３が電子ブロック層、１４が光電変換層、１５が正孔ブロック層、１６が他方の電極、１７が絶縁基材又は他の有機光電変換素子をそれぞれ表す。図中には読み出し用のトランジスタを記載していないが、１２又は１６の電極と接続されていればよく、さらには光電変換層１４が透明であれば、光が入射する側とは反対側の電極の外側に成膜されていてもよい。有機光電変換素子への光の入射は、光電変換層１４を除く構成要素が、光電変換層の主たる吸収波長の光を入射することを極度に阻害することがなければ、上部若しくは下部からの何れからでもよい。

実施例

[0259] 以下、実施例を挙げて本発明を具体的に説明するが、本発明はこれらに限定されるものではない。また、特記しない限り、「％」及び「部」は、それぞれ、「質量％」及び「質量部」を意味する。

[0260] 〔実施例１〕

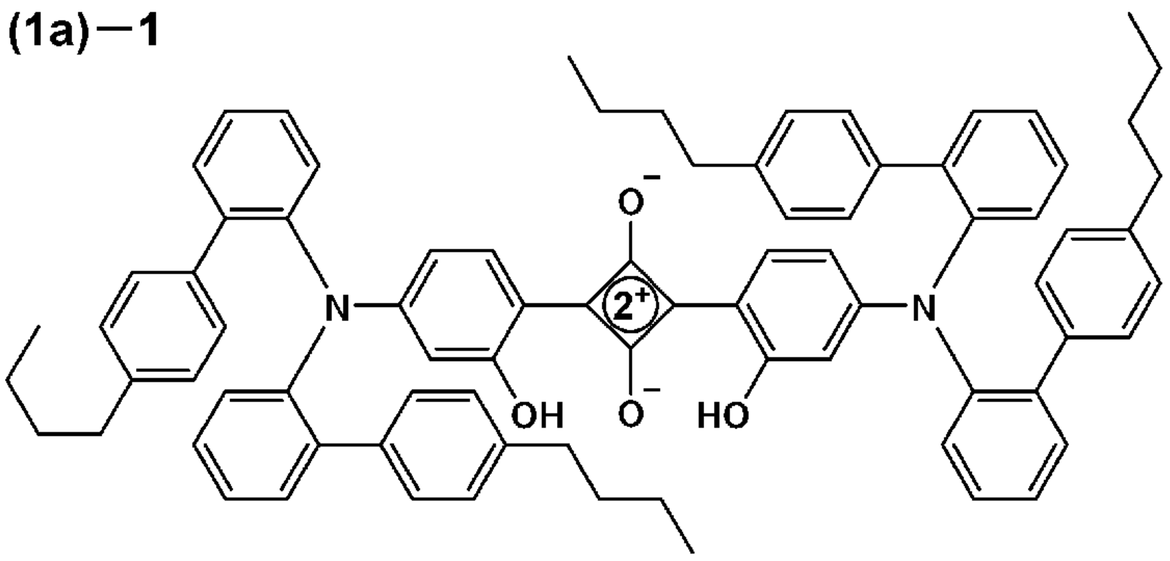
化合物（１）において、化合物（３）、具体的には、化合物（１ａ）～化合物（１ｄ））、及び化合物（４）～化合物（１１）にそれぞれ分類される、以下に構造を示す各化合物を製造した。

[0261] 化合物（１ａ）に分類される化合物（１ａ）－１、化合物（１ａ）－１２及び化合物（１ａ）－２０について、上記スキーム（Ａ）にしたがって製造し、ＭＳ及び^{1}Ｈ－ＮＭＲにより構造を確認した。

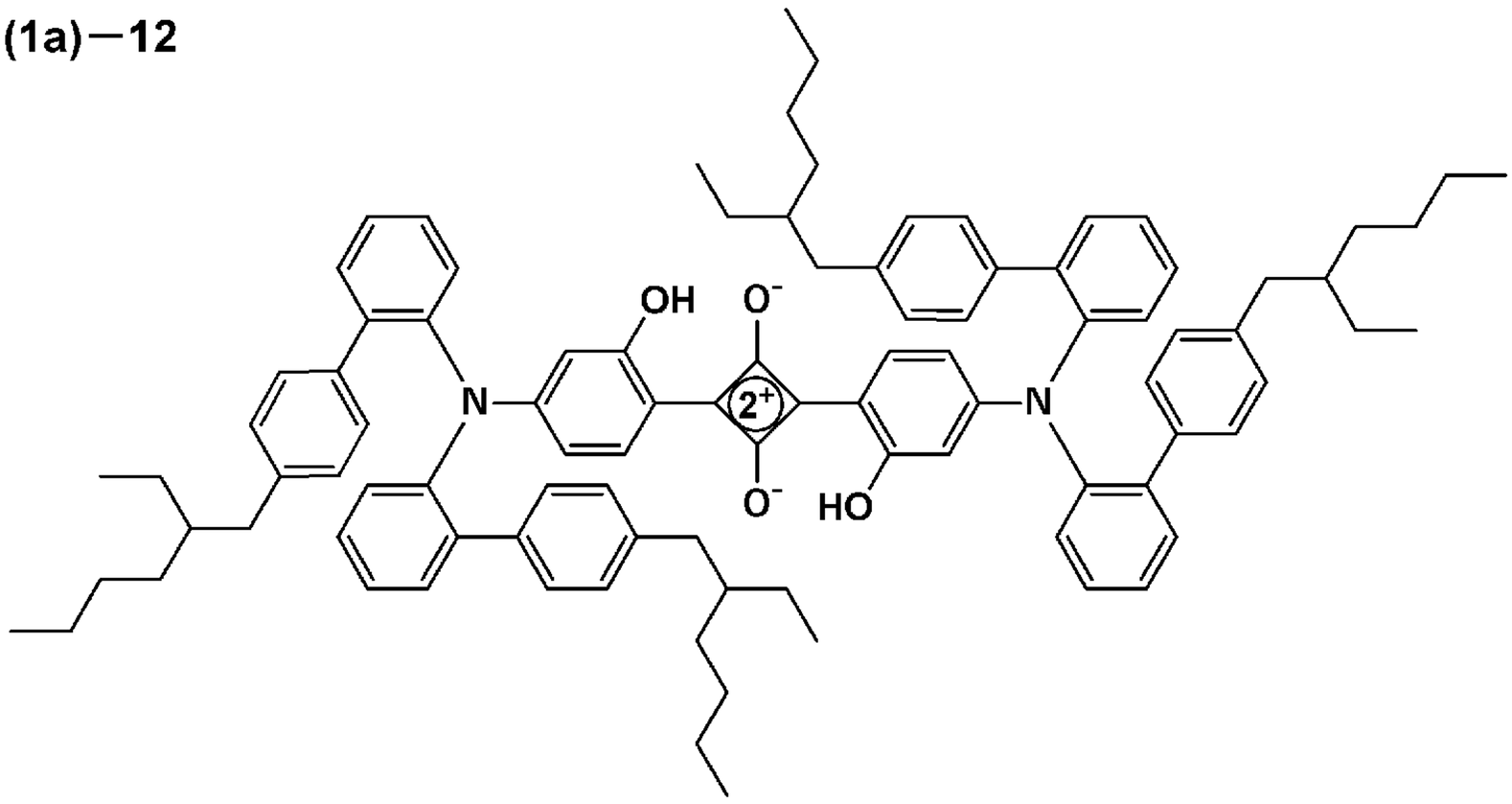
[0262]

[化46]

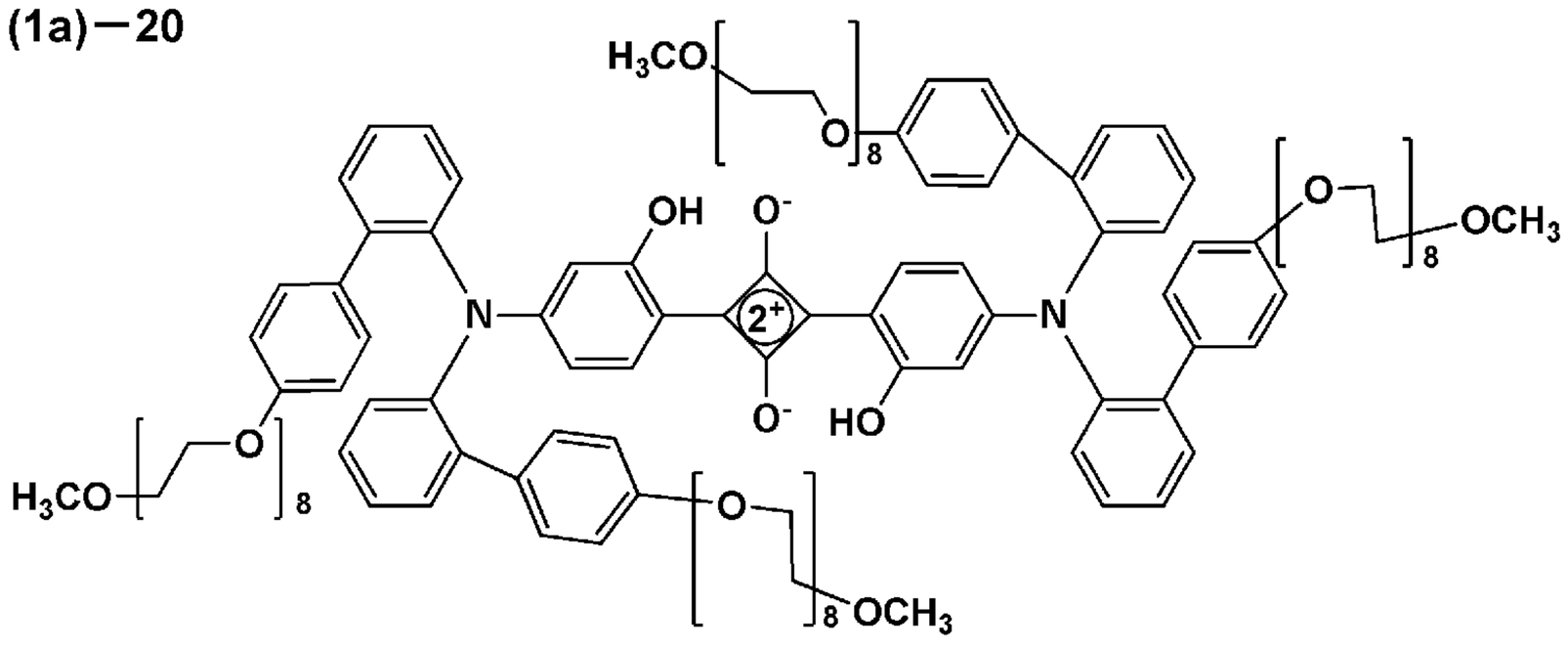
(1a)－1



(1a)－12



(1a)－20

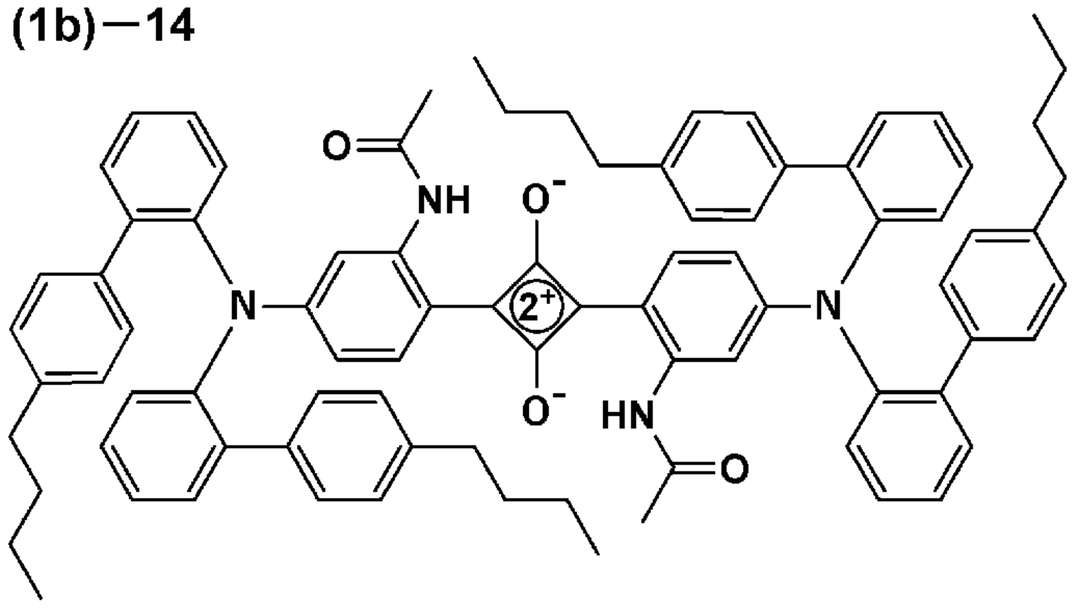


[0263] 化合物（１ｂ）に分類される化合物（１ｂ）－１４について、上記スキーム（Ｂ）にしたがって製造し、ＭＳ及び^{1}Ｈ－ＮＭＲにより構造を確認した。

[0264]

[化47]

(1b)－14

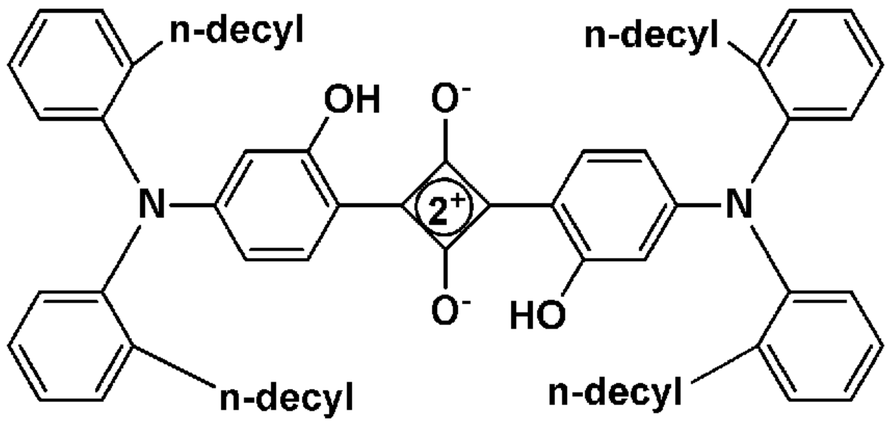


[0265] 化合物（１ｃ）に分類される化合物（１ｃ）－９、化合物（１ｃ）－１２及び化合物（１ｃ）－３１について、上記スキーム（Ｃ）にしたがって製造し、ＭＳ及び^{1}Ｈ－ＮＭＲにより構造を確認した。

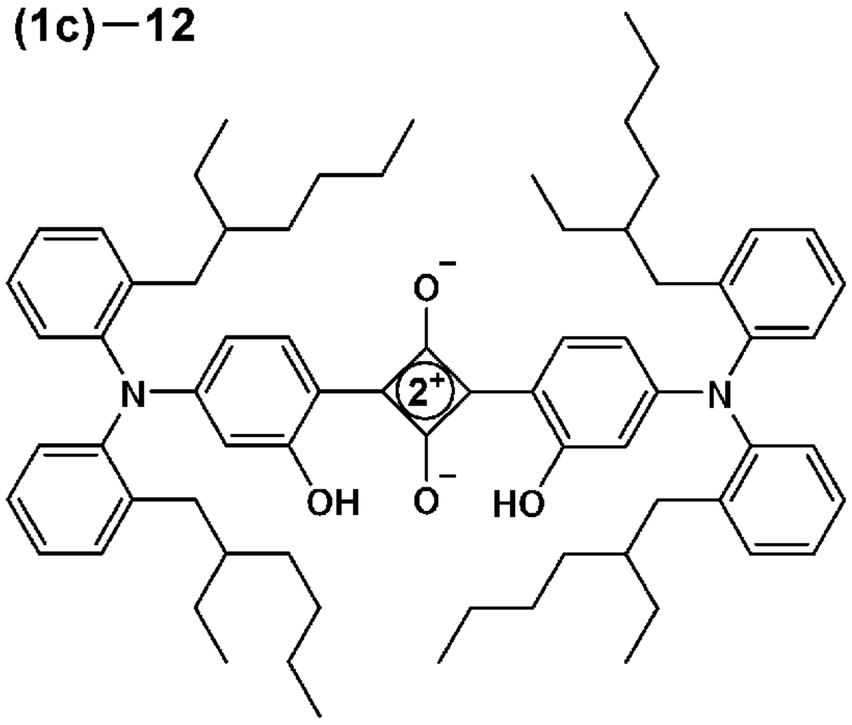
[0266]

[化48]

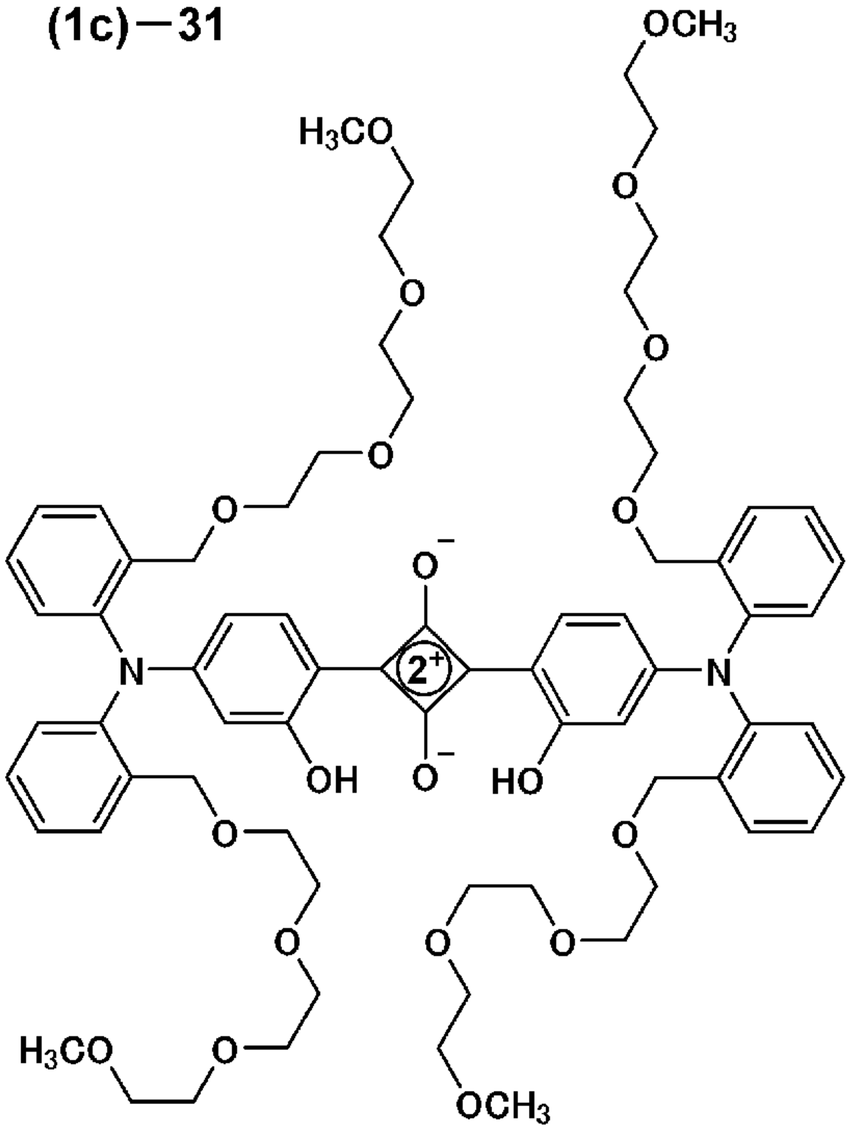
(1c)－9



(1c)－12



(1c)－31

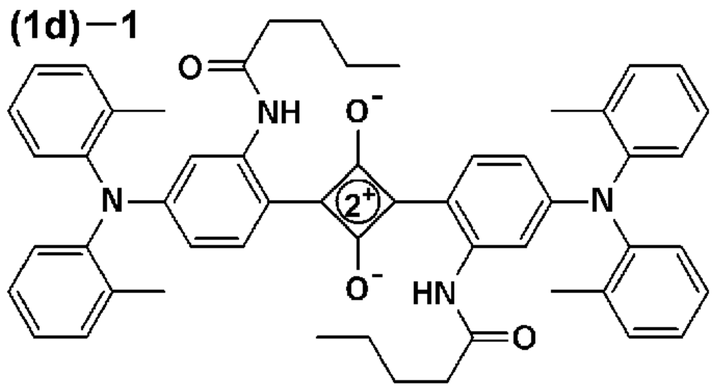


[0267] 化合物（１ｄ）に分類される化合物（１ｄ）－１、化合物（１ｄ）－１４、化合物（１ｄ）－３６、化合物（１ｄ）－３９及び化合物（１ｄ）－４０について、上記スキーム（Ｄ）にしたがって製造し、ＭＳ及び^{1}Ｈ－ＮＭＲに

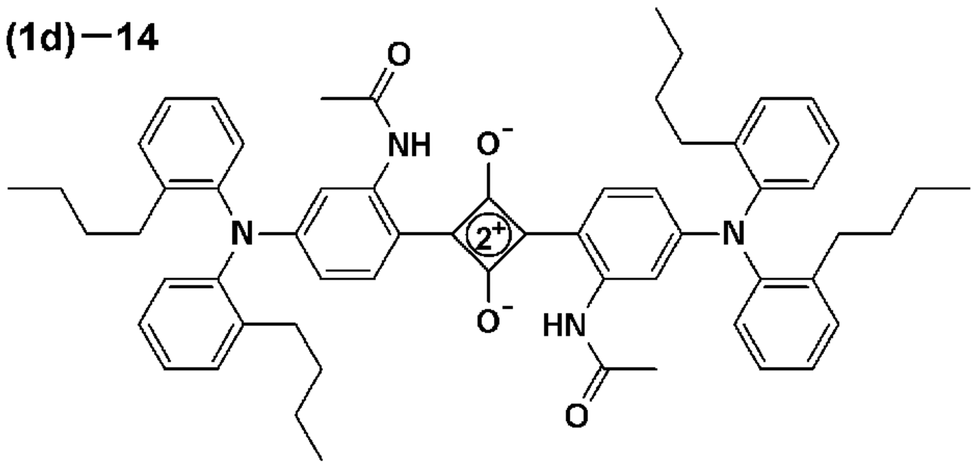
より構造を確認した。

[0268] [化49]

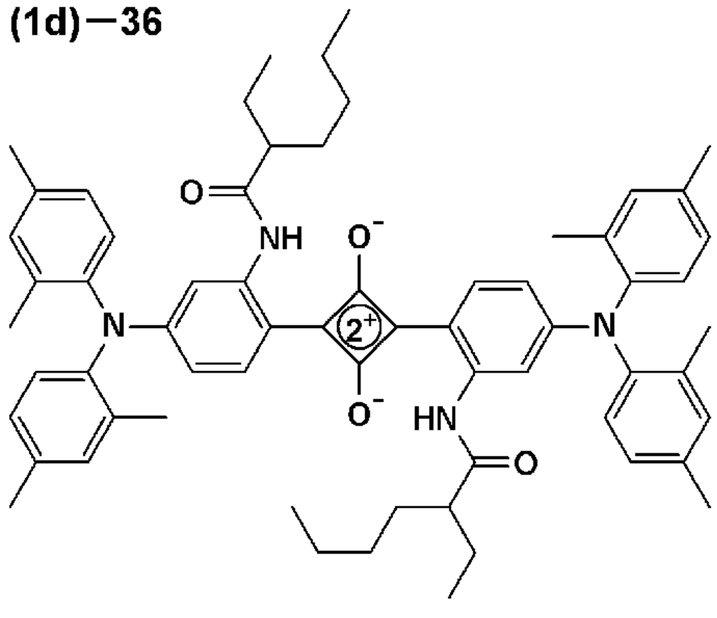
(1d)－1



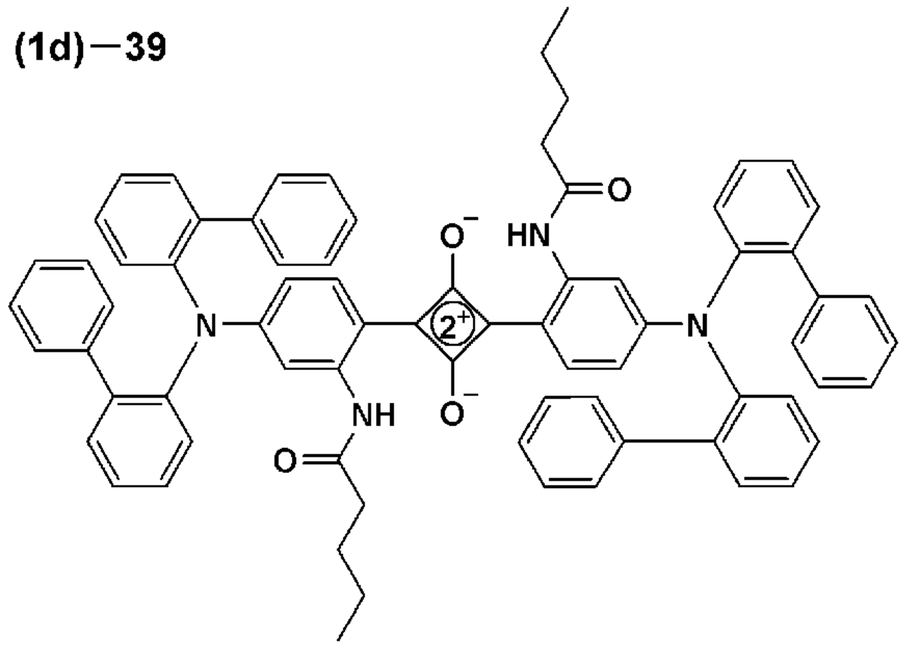
(1d)－14



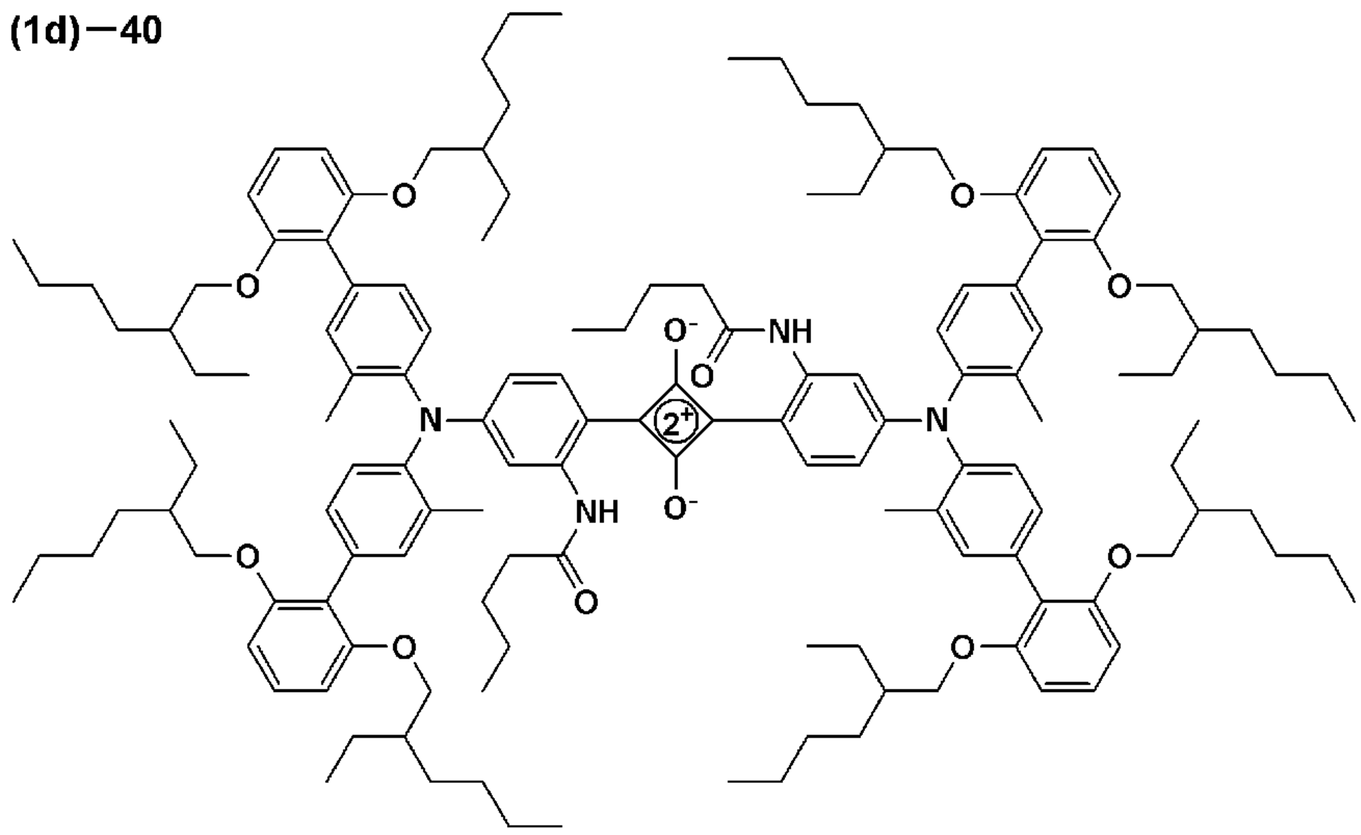
(1d)－36



(1d)－39



(1d)－40

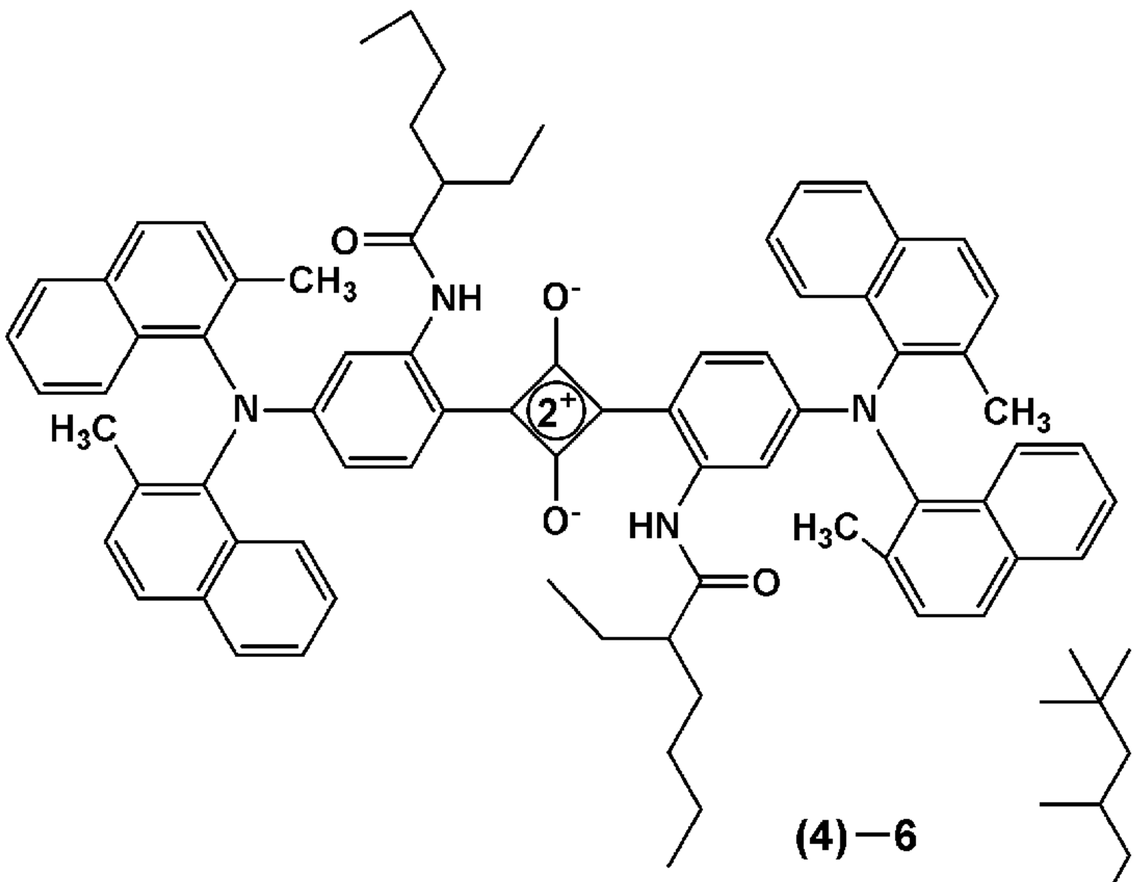


[0269] 化合物（４）については、化合物（４）－５、化合物（４）－６、化合物（４）－９及び化合物（４）－１０を上記スキーム（Ａ）～（Ｄ）に準ずる方法で製造し、ＭＳ及び^{1}Ｈ－ＮＭＲにより構造を確認した。

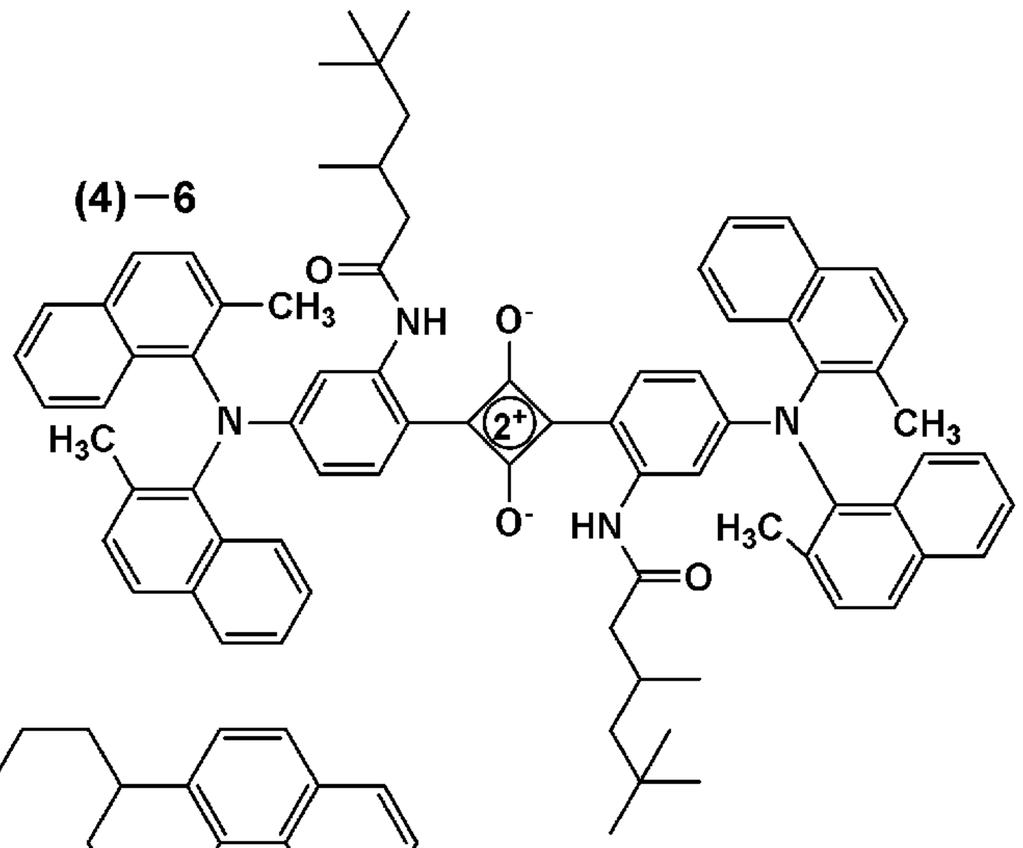
[0270]

[化50]

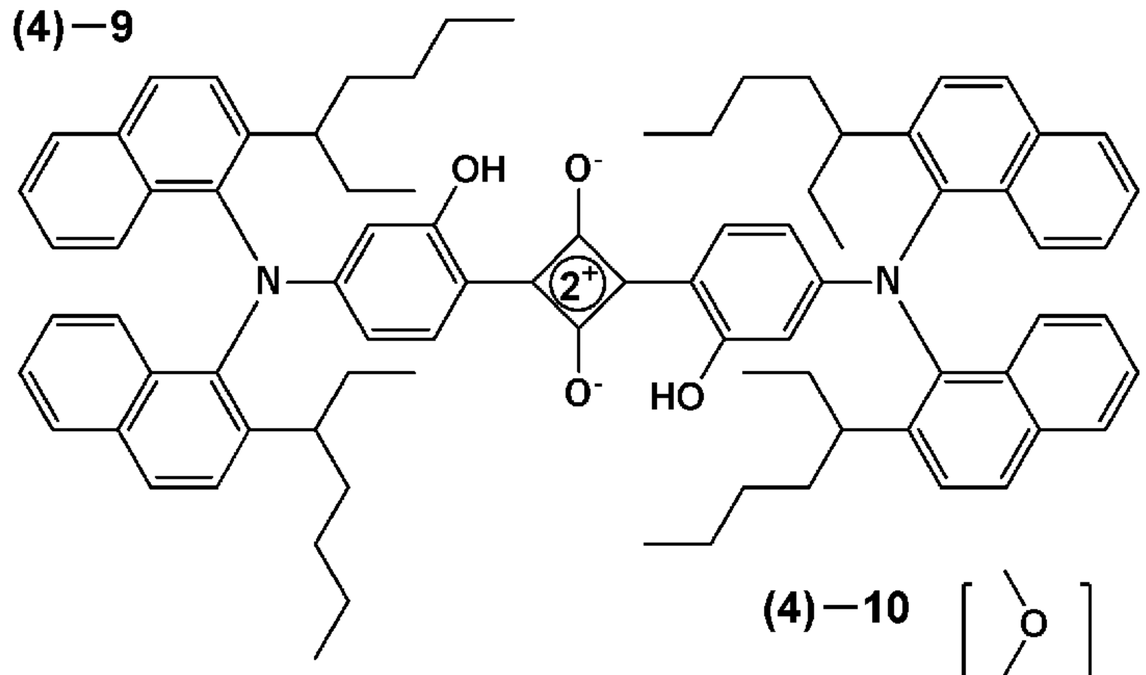
(4)－5



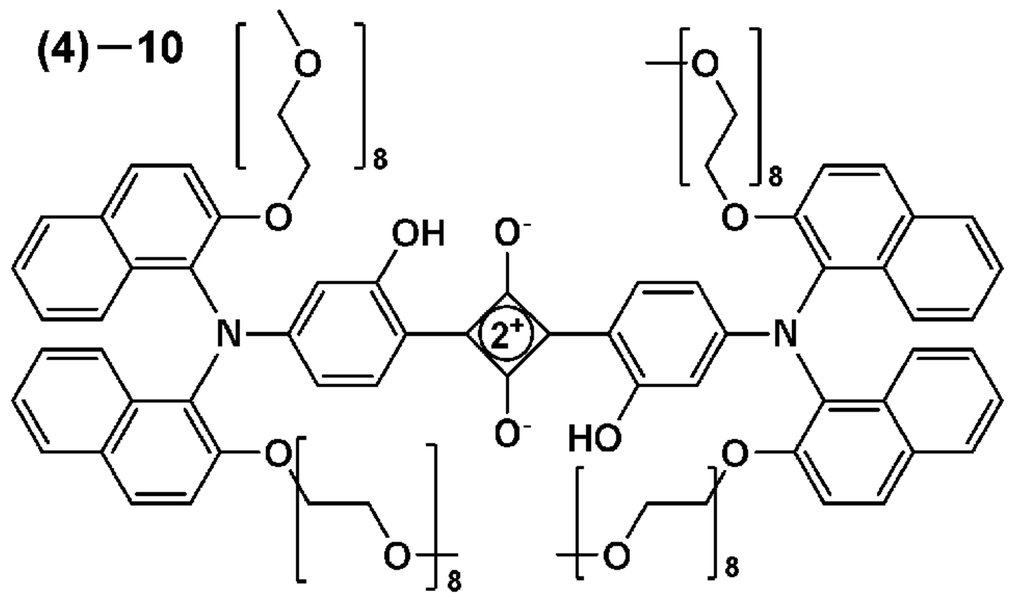
(4)－6



(4)－9



(4)－10

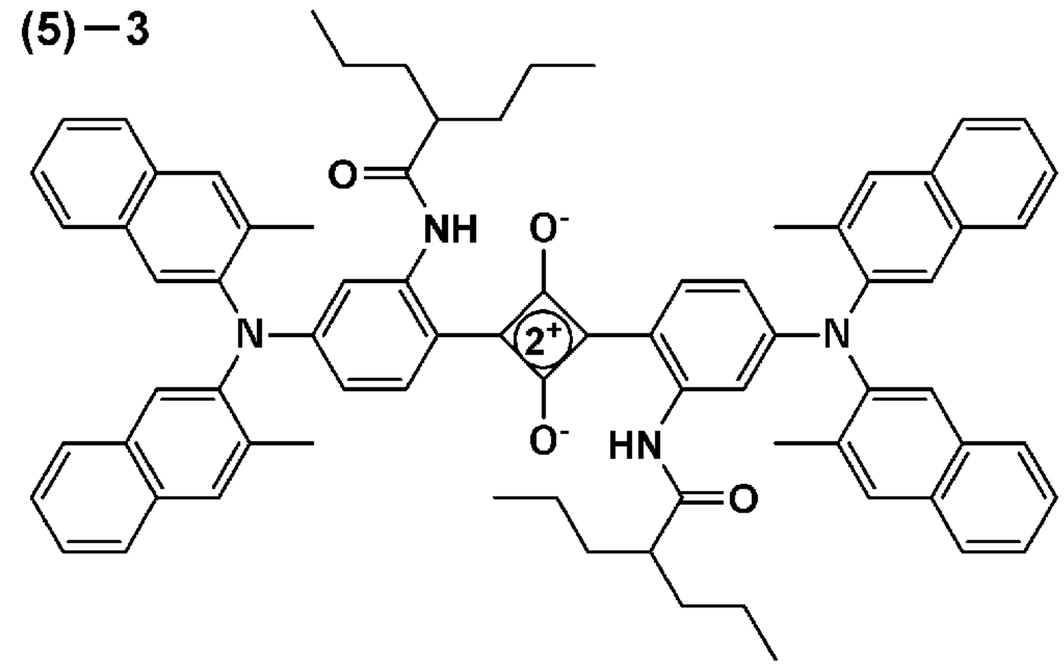


[0271] 化合物（５）については、化合物（５）－３、化合物（５）－４及び化合物（５）－９を上記スキーム（Ａ）～（Ｄ）に準ずる方法で製造し、ＭＳ及

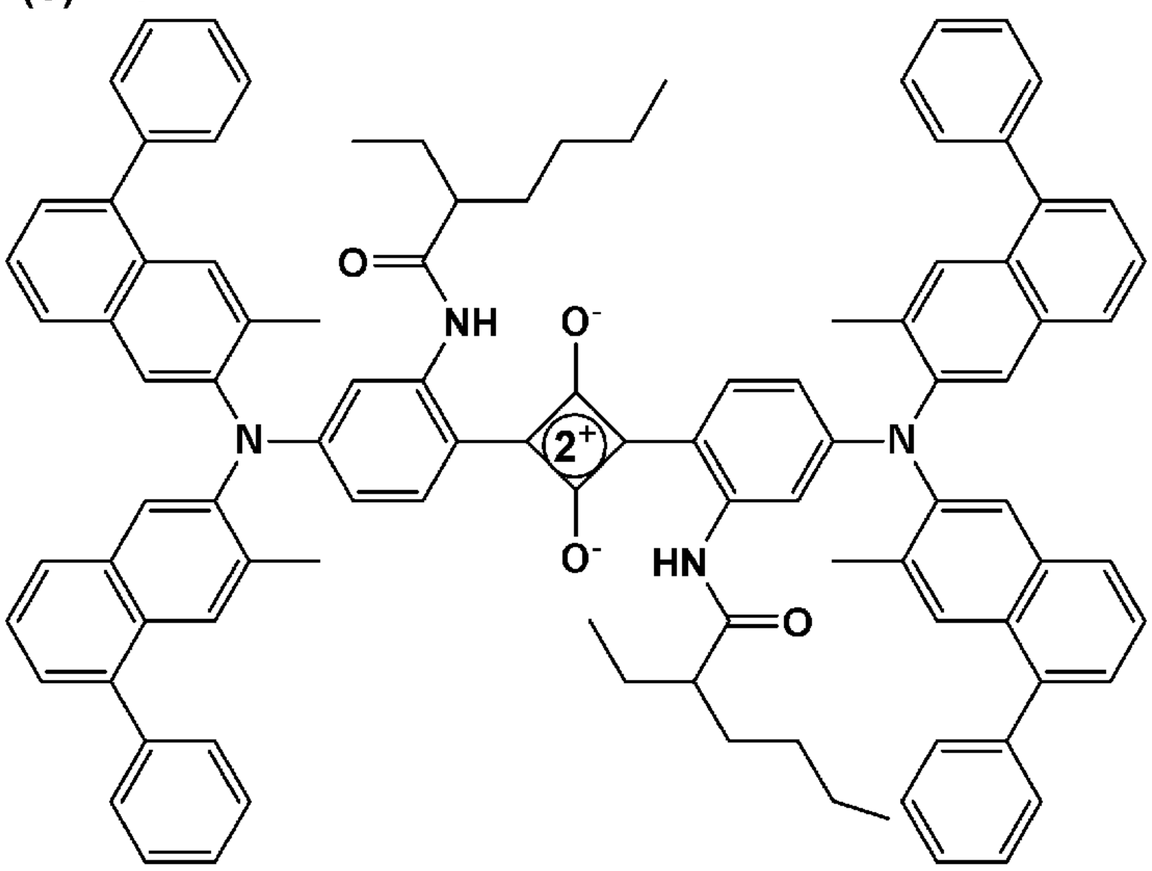
び^{1}Ｈ－ＮＭＲにより構造を確認した。

[0272] [化51]

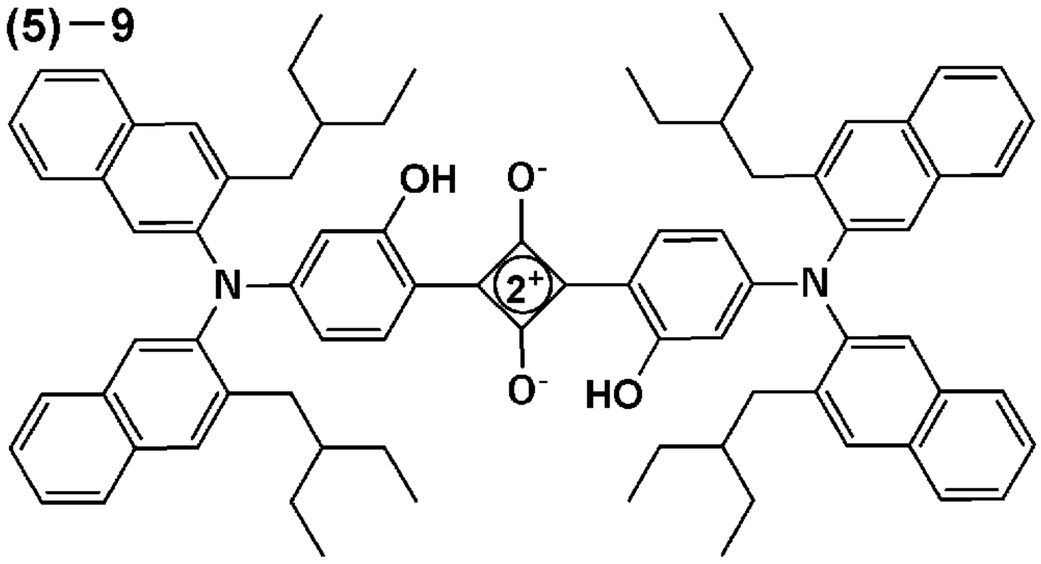
(5)－3



(5)－4



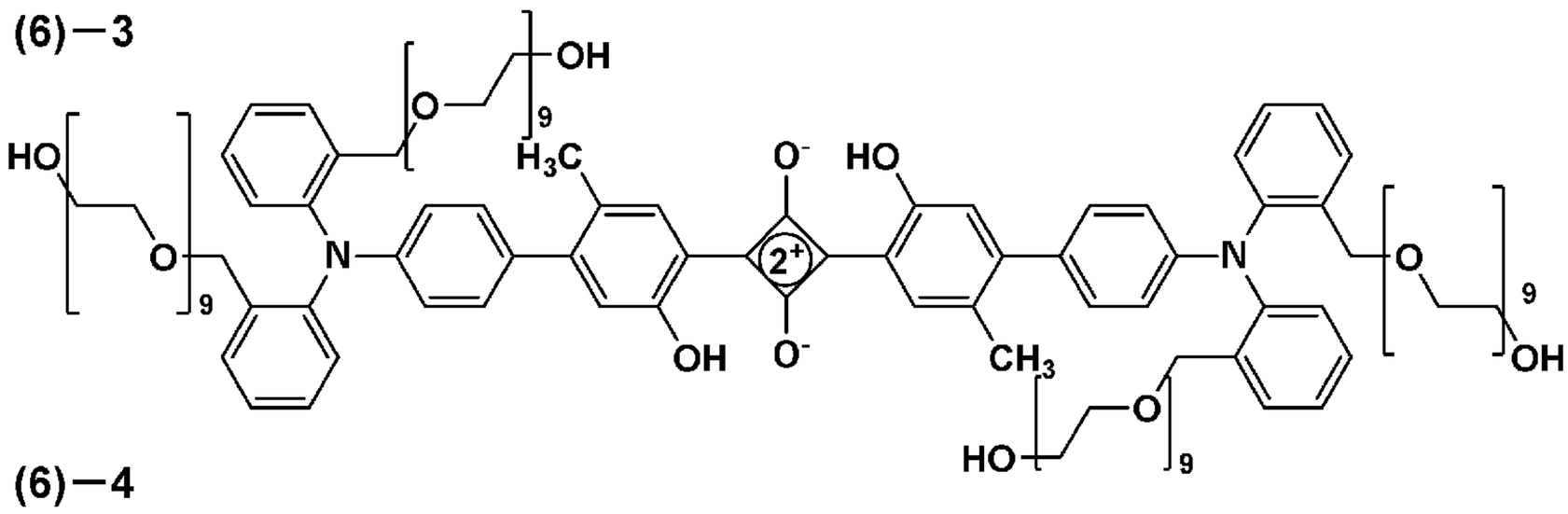
(5)－9



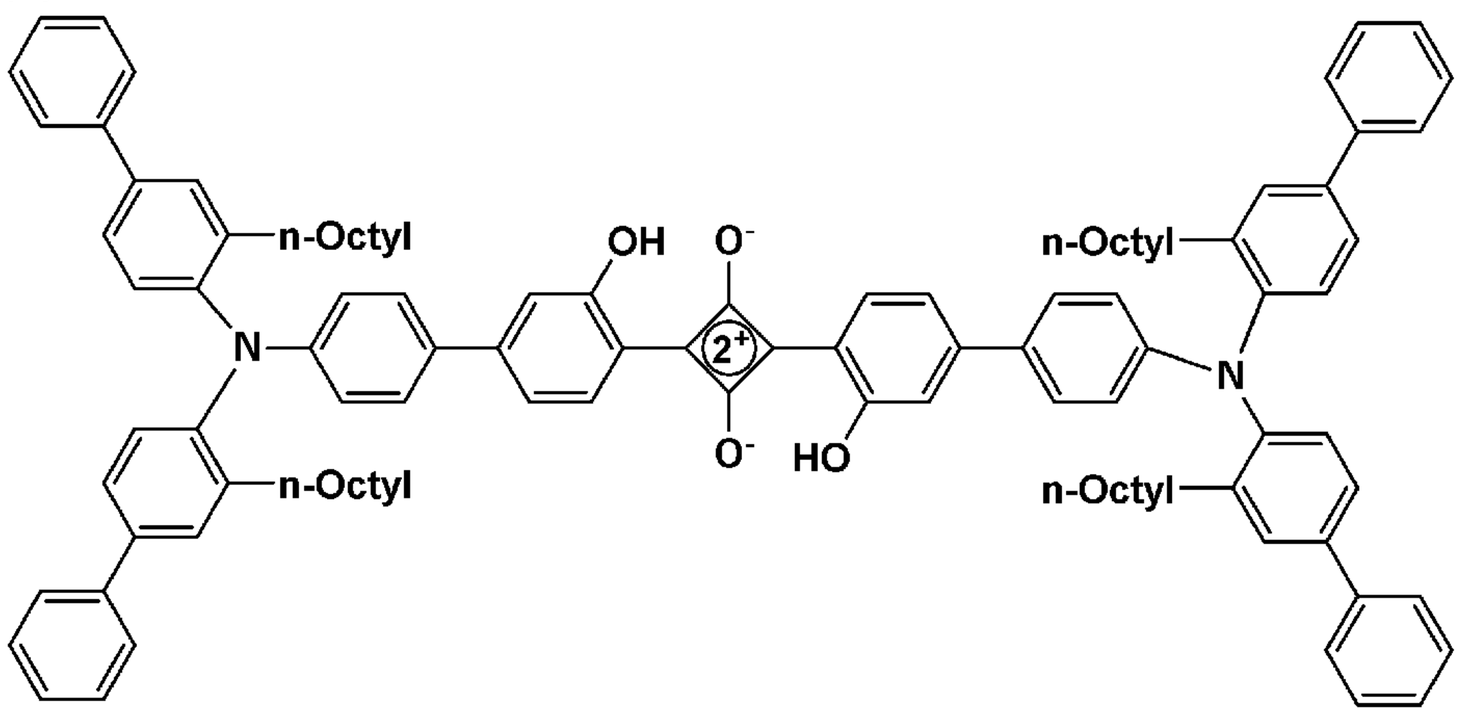
[0273] 化合物（６）については、化合物（６）－３、化合物（６）－４及び化合物（６）－８を上記スキーム（Ａ）～（Ｄ）に準ずる方法で製造し、ＭＳ及び^{1}Ｈ－ＮＭＲにより構造を確認した。

[0274] [化52]

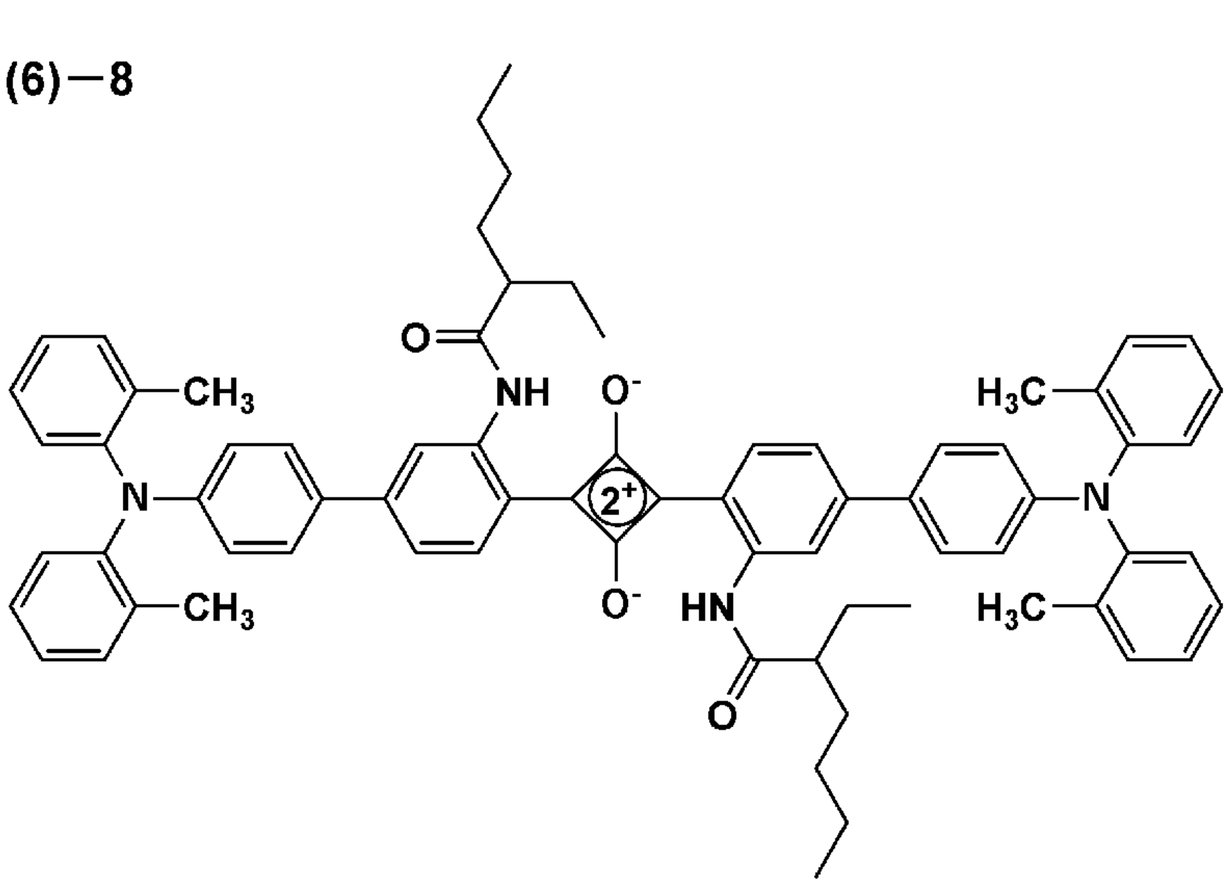
(6)－3



(6)－4



(6)－8

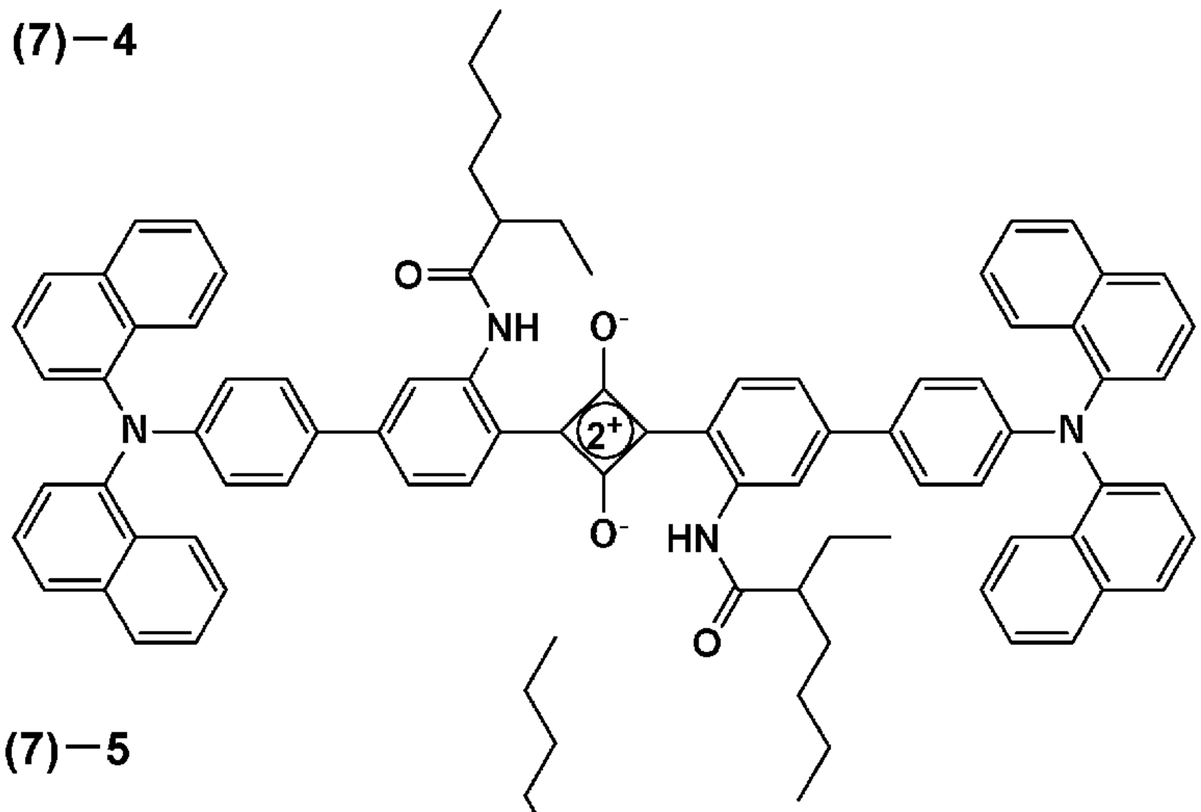


[0275] 化合物（７）については、化合物（７）－４、化合物（７）－５、化合物（７）－６及び化合物（７）－８を上記スキーム（Ａ）～（Ｄ）に準ずる方法で製造し、ＭＳ及び^{1}Ｈ－ＮＭＲにより構造を確認した。

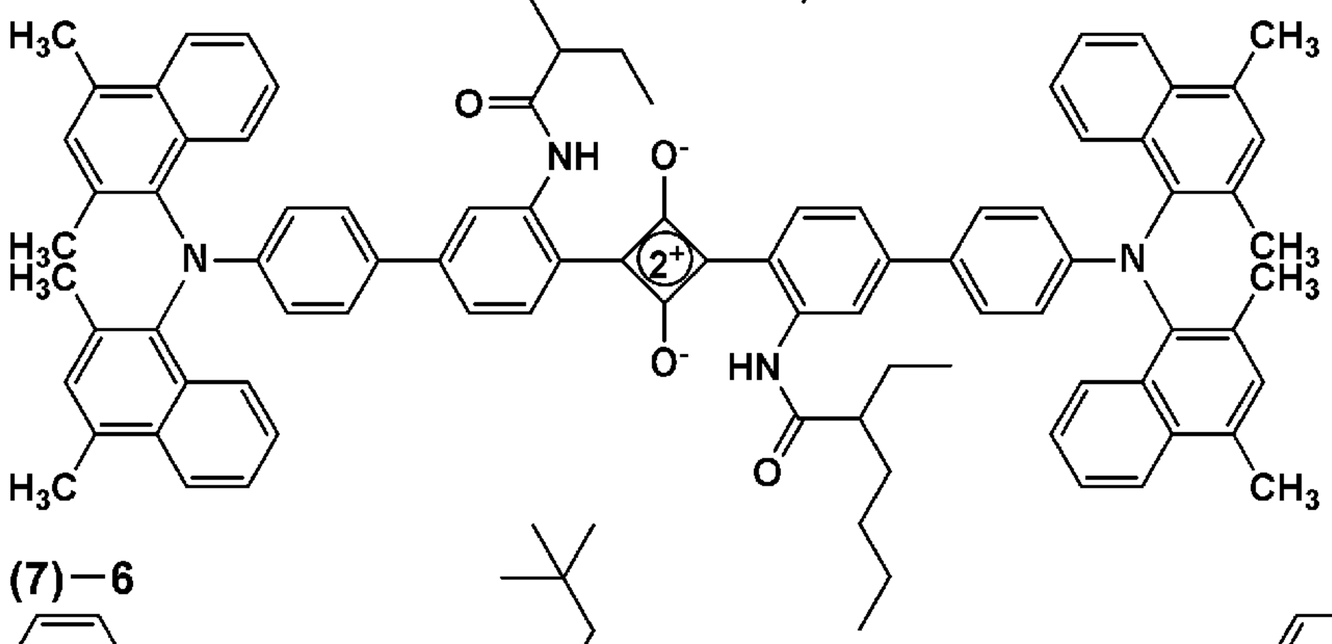
[0276]

[化53]

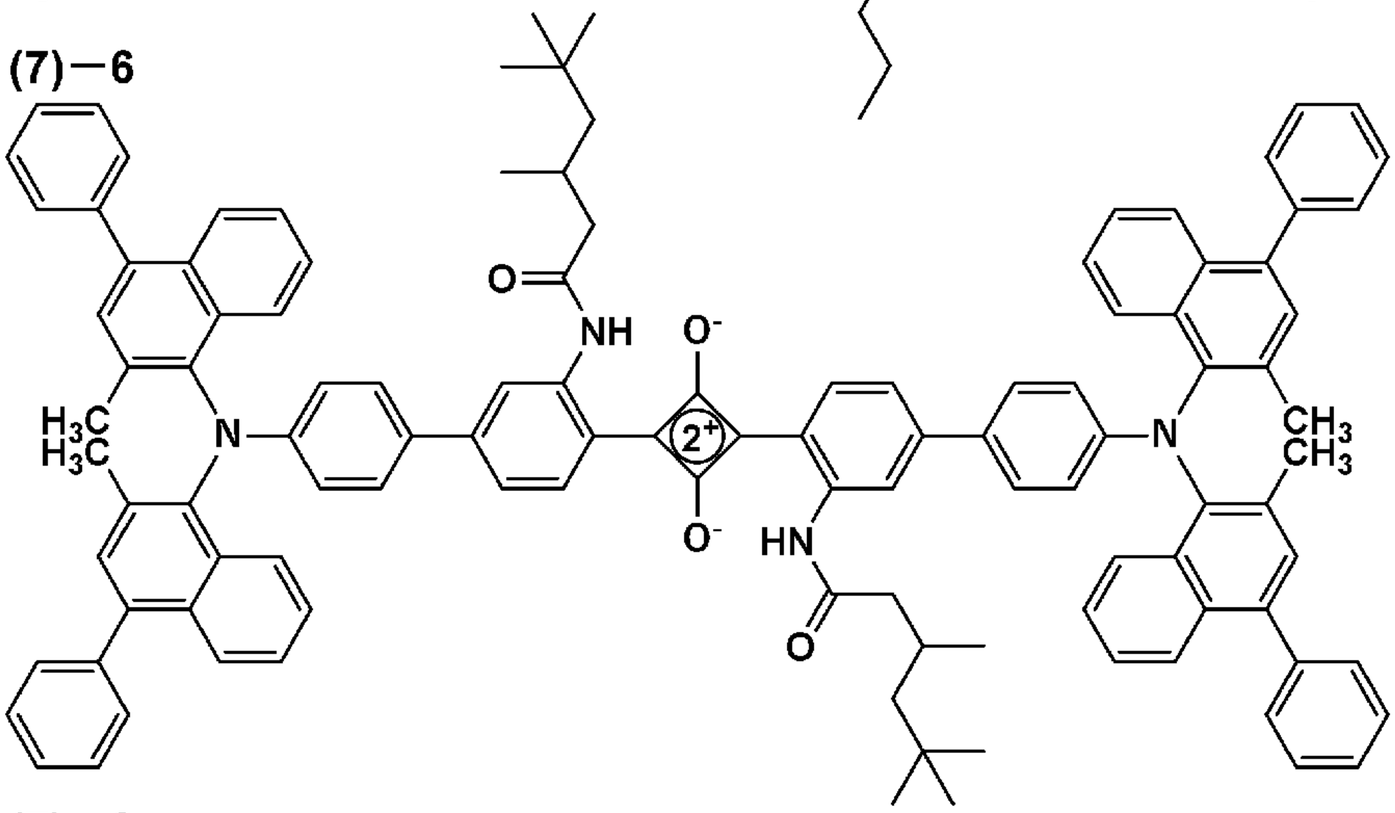
(7)－4



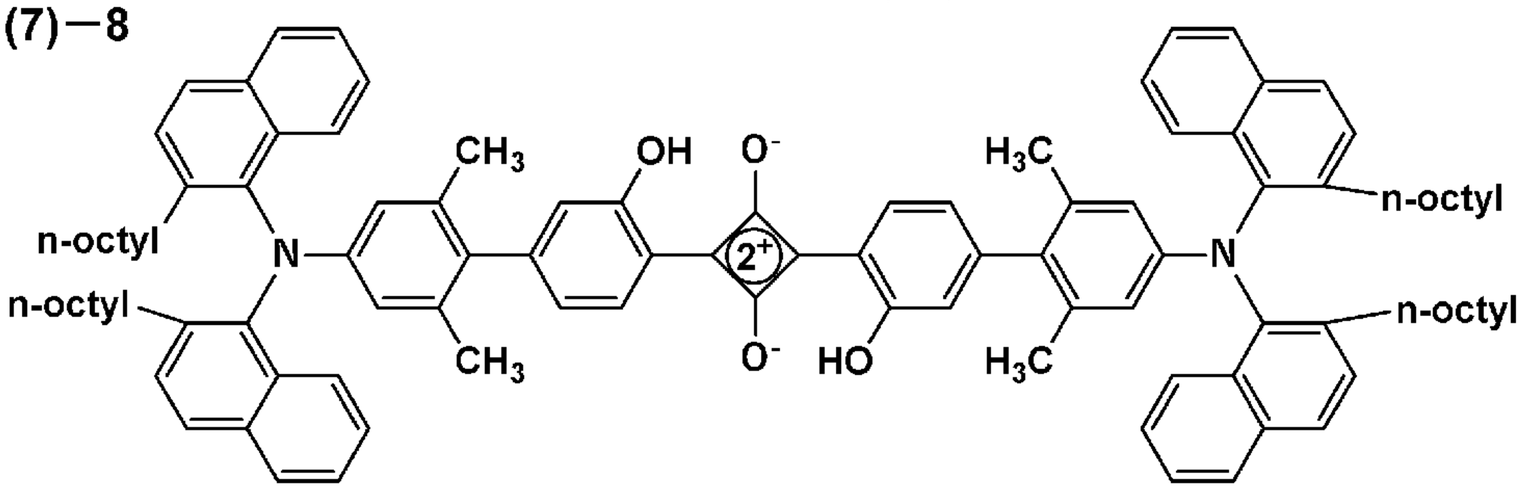
(7)－5



(7)－6



(7)－8

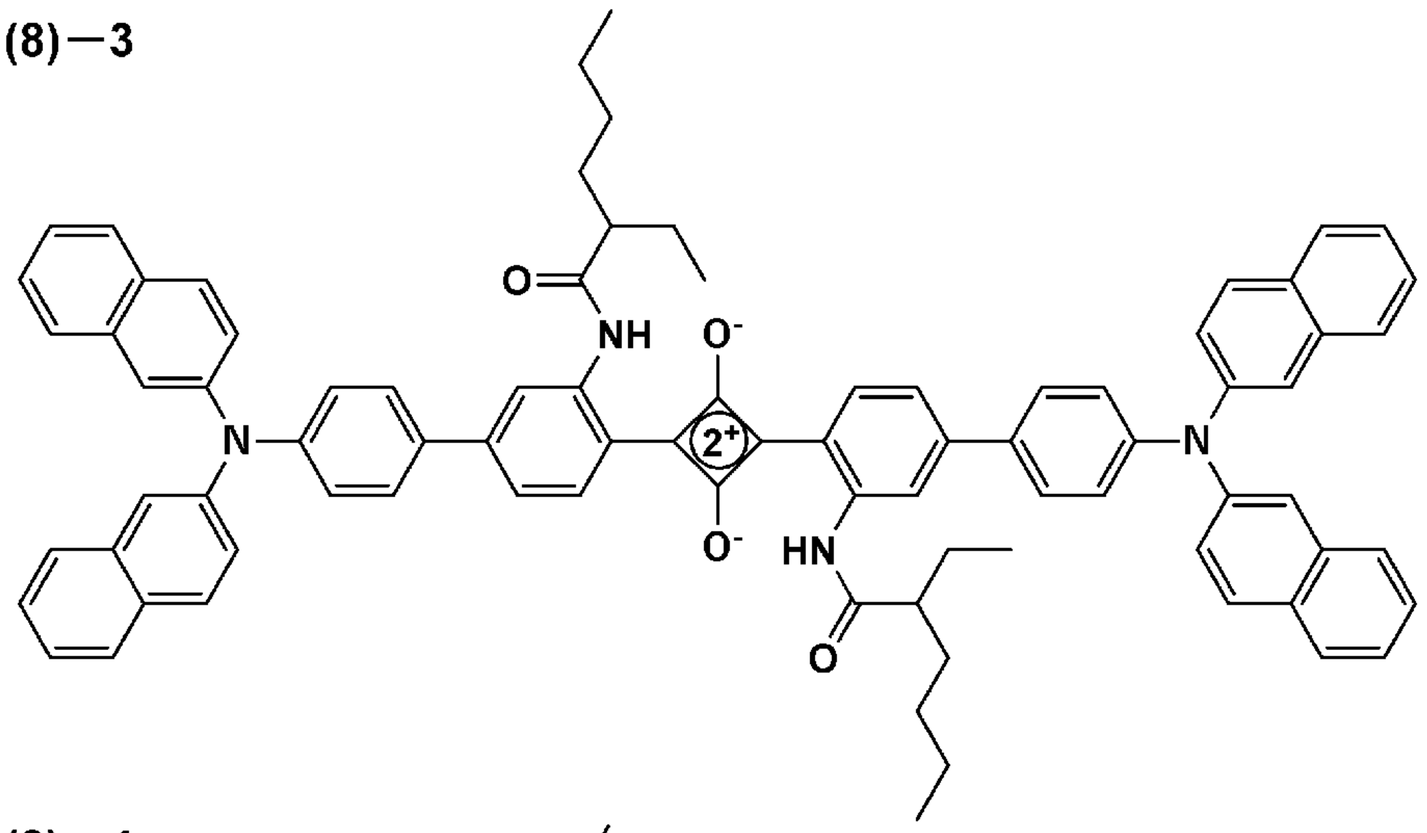


[0277] 化合物（８）については、化合物（８）－３、化合物（８）－４及び化合

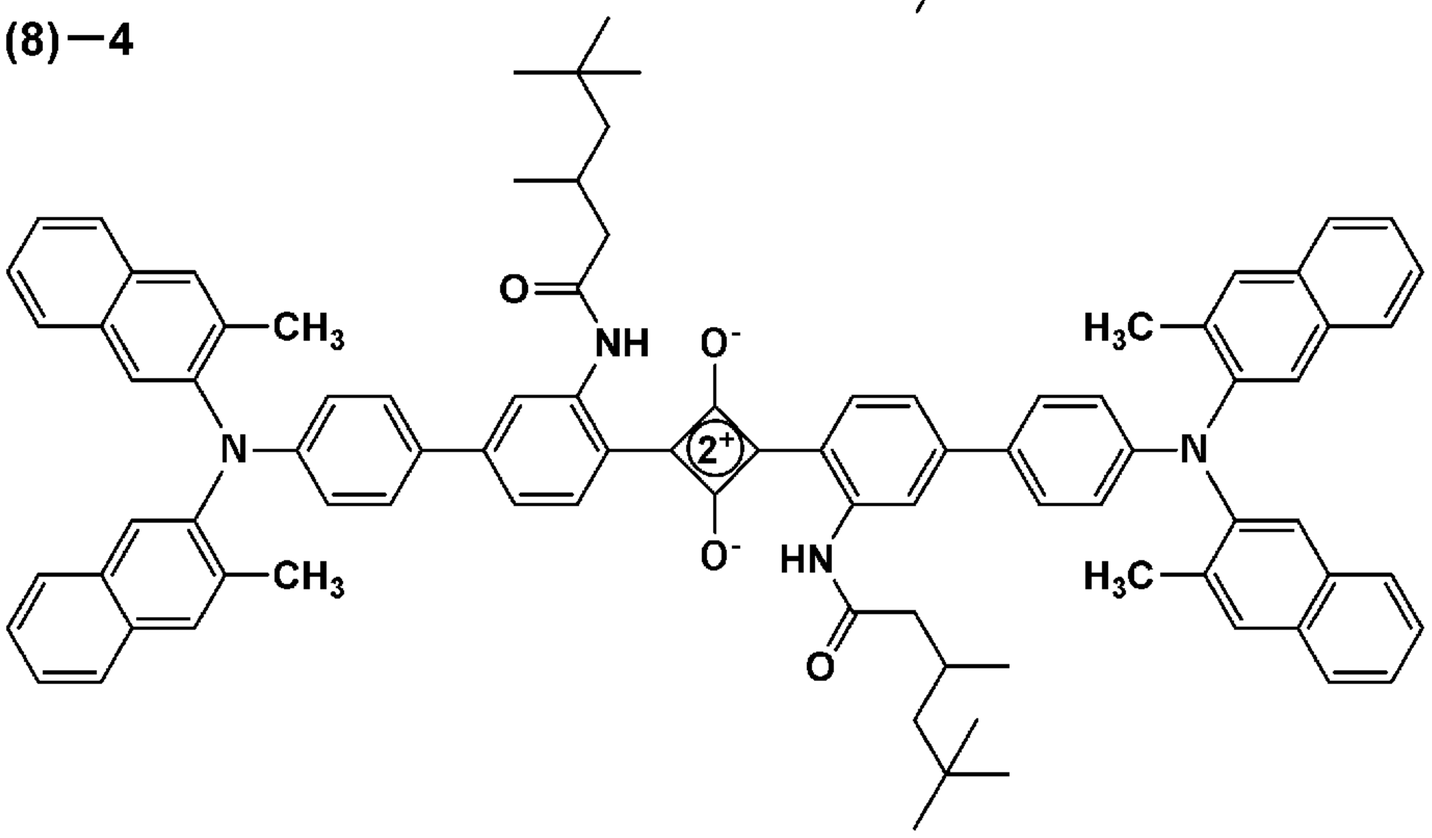
物（８）－１０を上記スキーム（Ａ）～（Ｄ）に準ずる方法で製造し、ＭＳ及び^{1}Ｈ－ＮＭＲにより構造を確認した。

[0278] [化54]

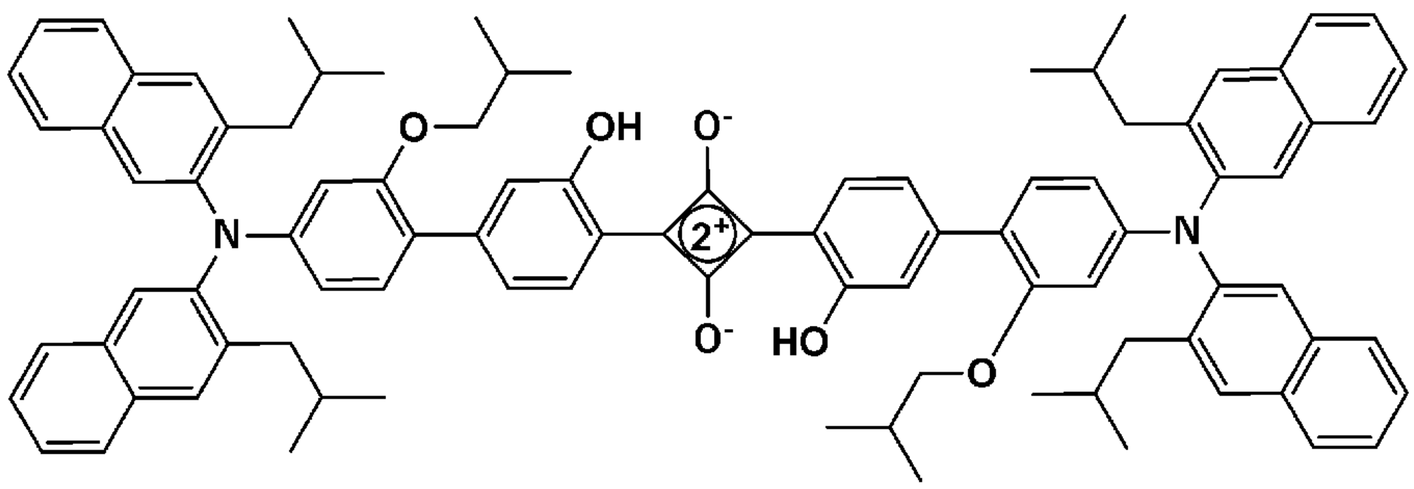
(8)－3



(8)－4



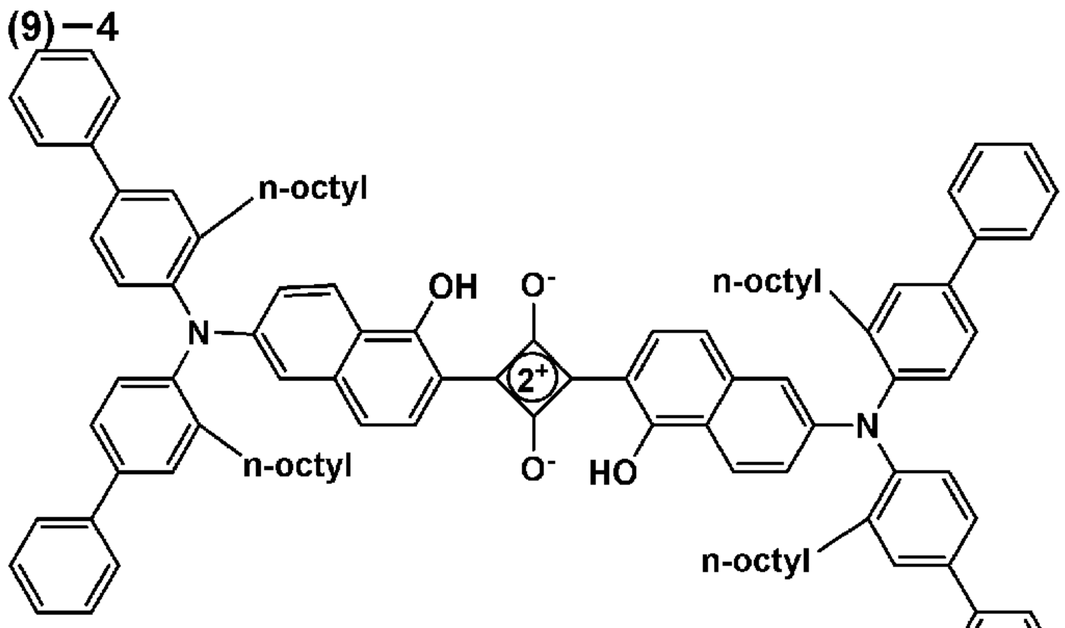
(8)－10



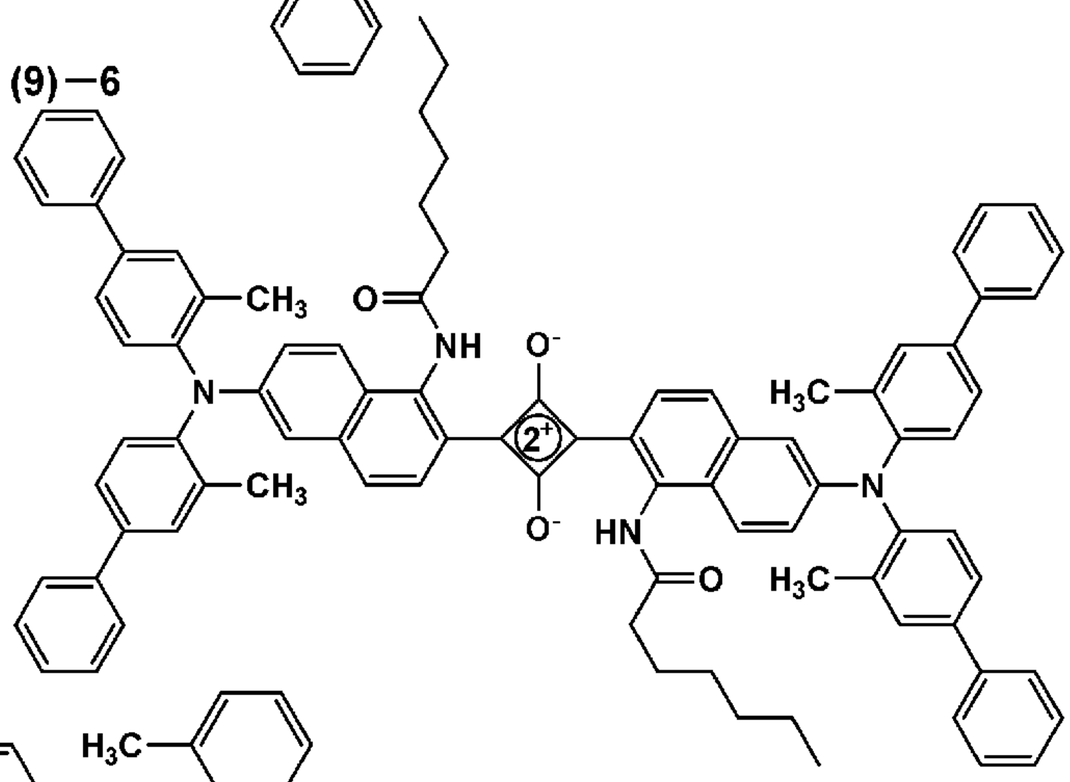
[0279] 化合物（９）については、化合物（９）－４、化合物（９）－６、化合物（９）－７及び化合物（９）－１０を上記スキーム（Ａ）～（Ｄ）に準ずる方法で製造し、ＭＳ及び^{1}Ｈ－ＮＭＲにより構造を確認した。

[0280] [化55]

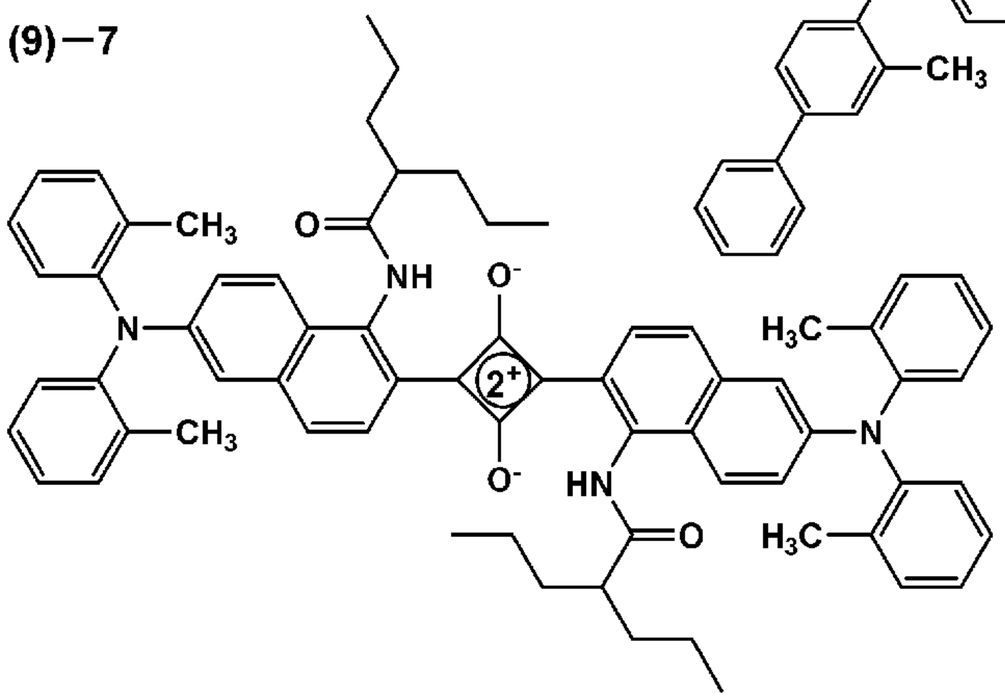
(9)－4



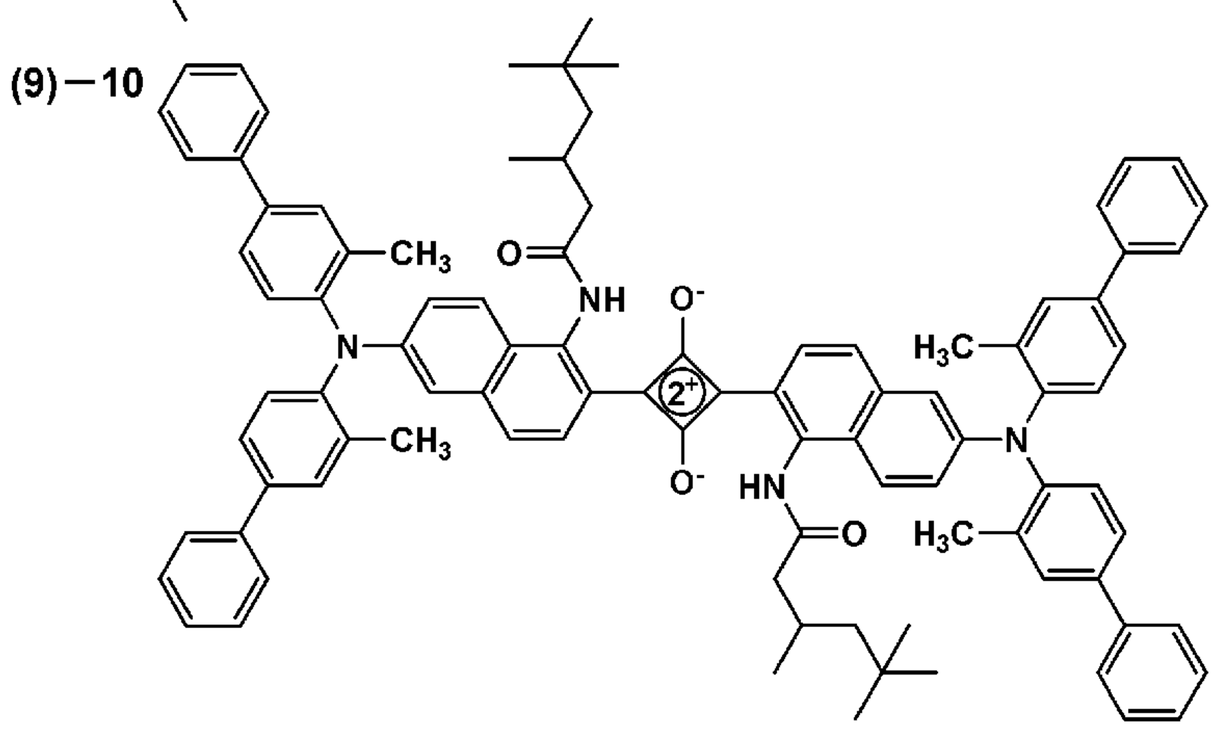
(9)－6



(9)－7



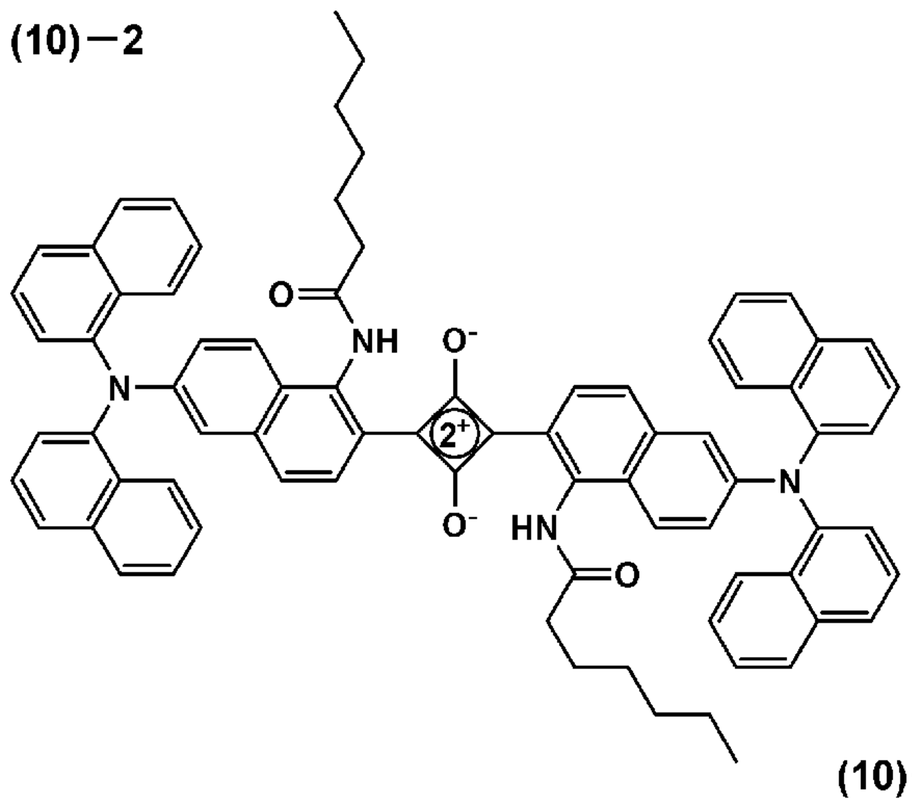
(9)－10



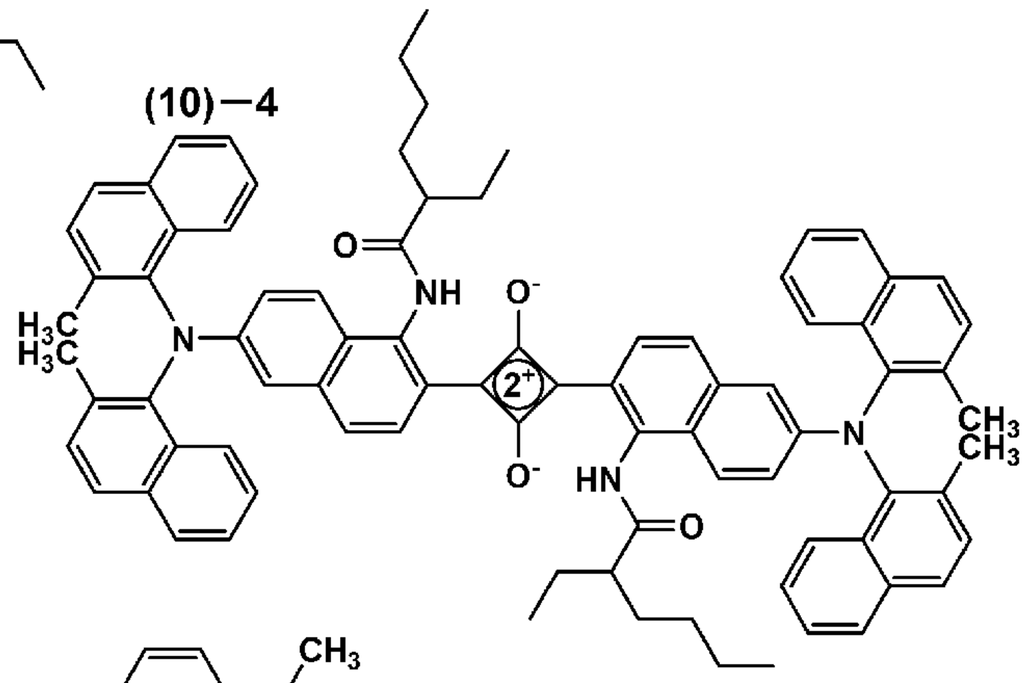
[0281] 化合物（１０）については、化合物（１０）－２、化合物（１０）－４、化合物（１０）－５及び化合物（１０）－８を上記スキーム（Ａ）～（Ｄ）に準ずる方法で製造し、ＭＳ及び^{1}Ｈ－ＮＭＲにより構造を確認した。

[0282] [化56]

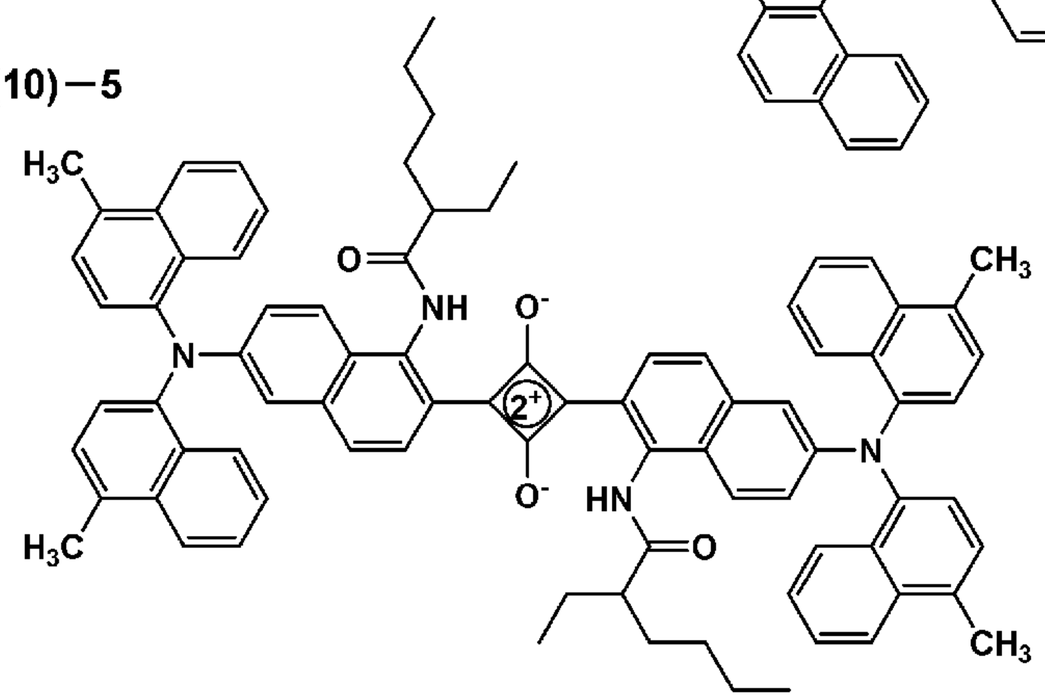
(10)－2



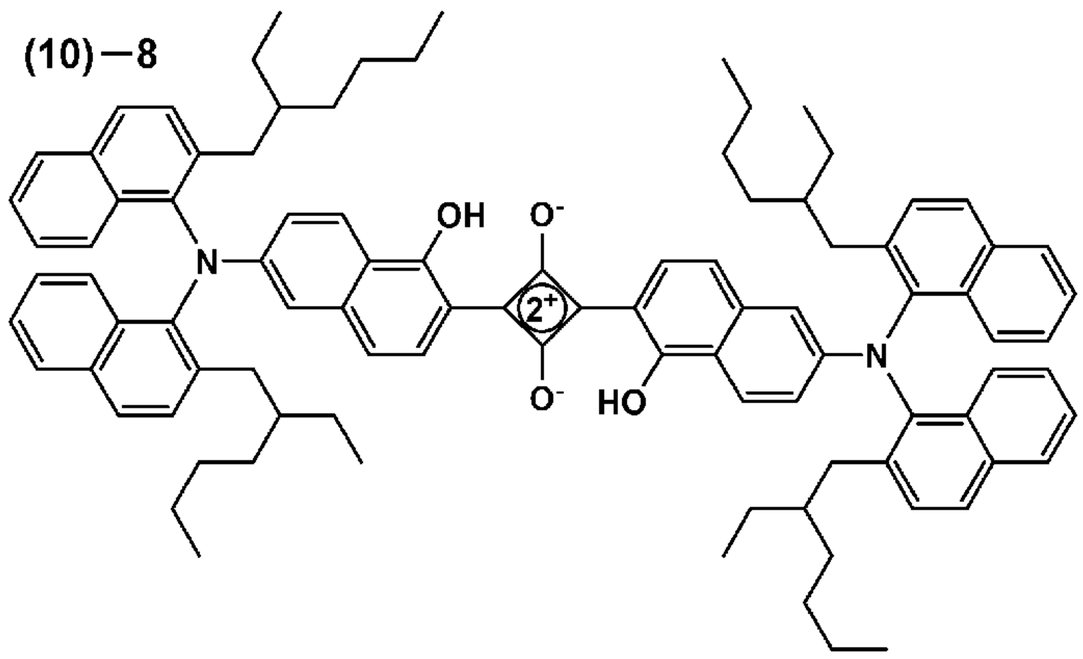
(10)－4



(10)－5



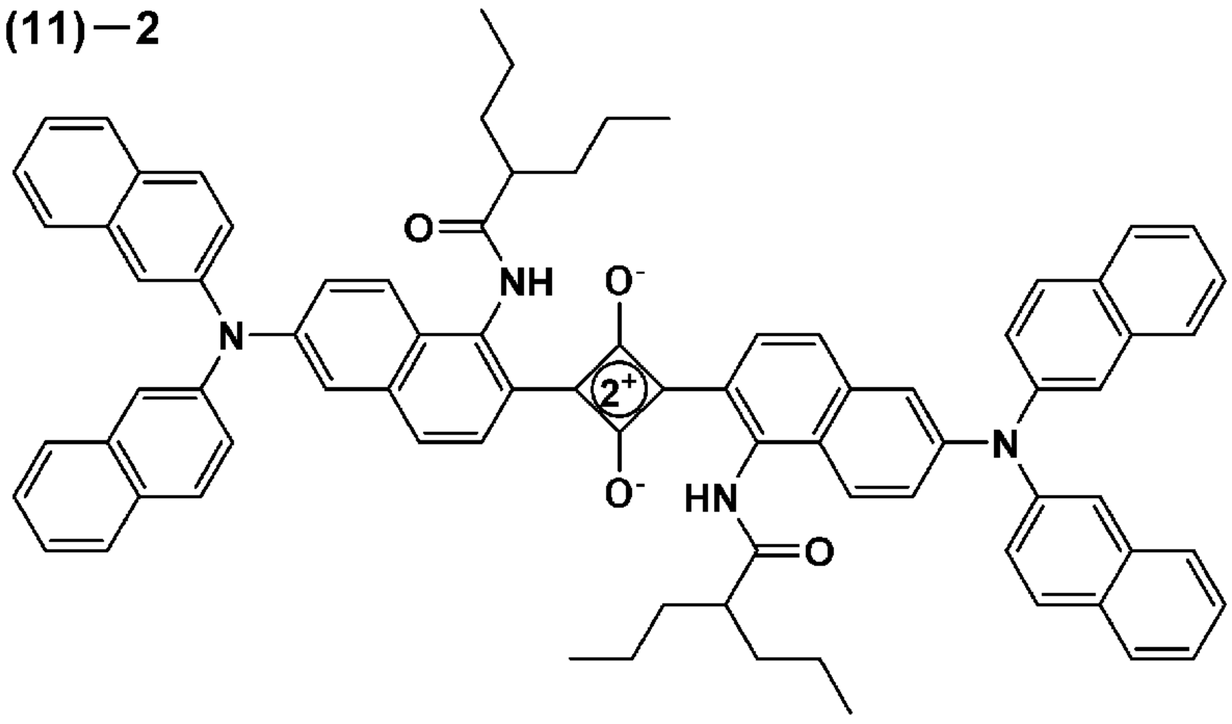
(10)－8



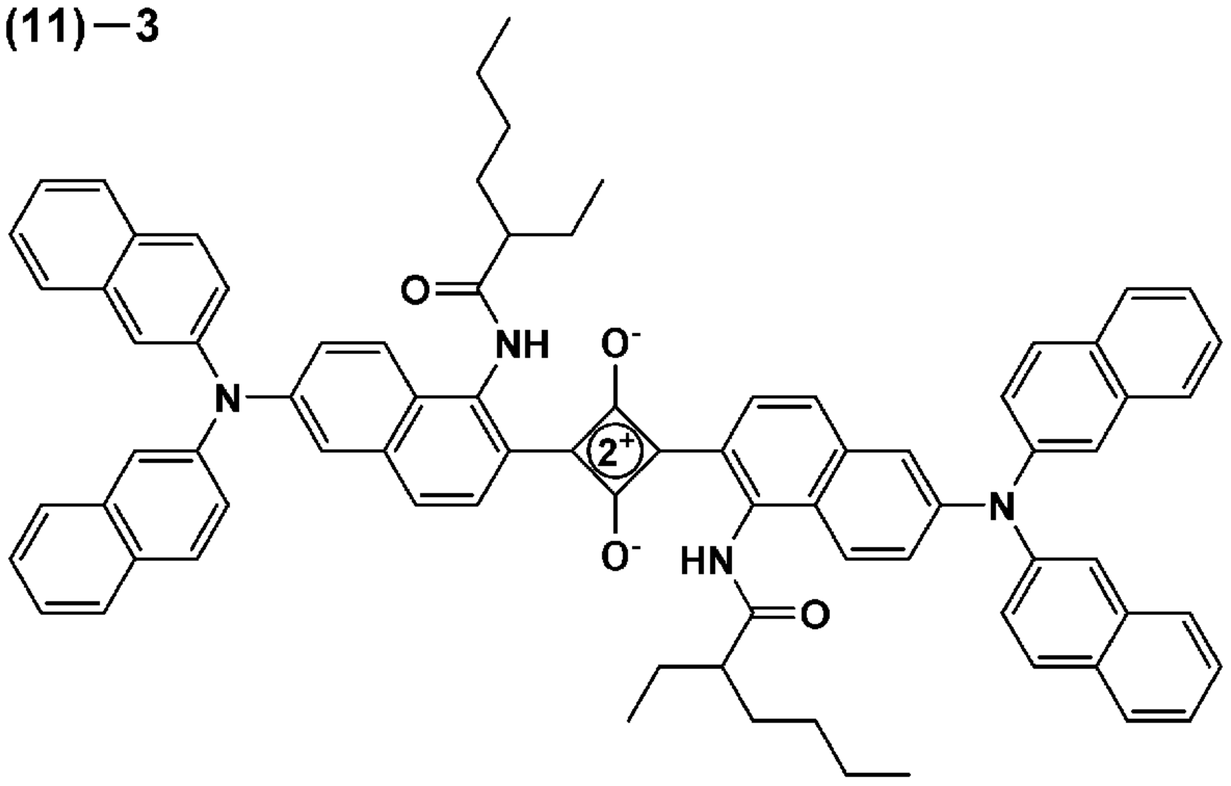
[0283] 化合物（１１）については、化合物（１１）－２、化合物（１１）－３及び化合物（１１）－７を上記スキーム（Ａ）～（Ｄ）に準ずる方法で製造し、ＭＳ及び^{1}Ｈ－ＮＭＲにより構造を確認した。

[0284] [化57]

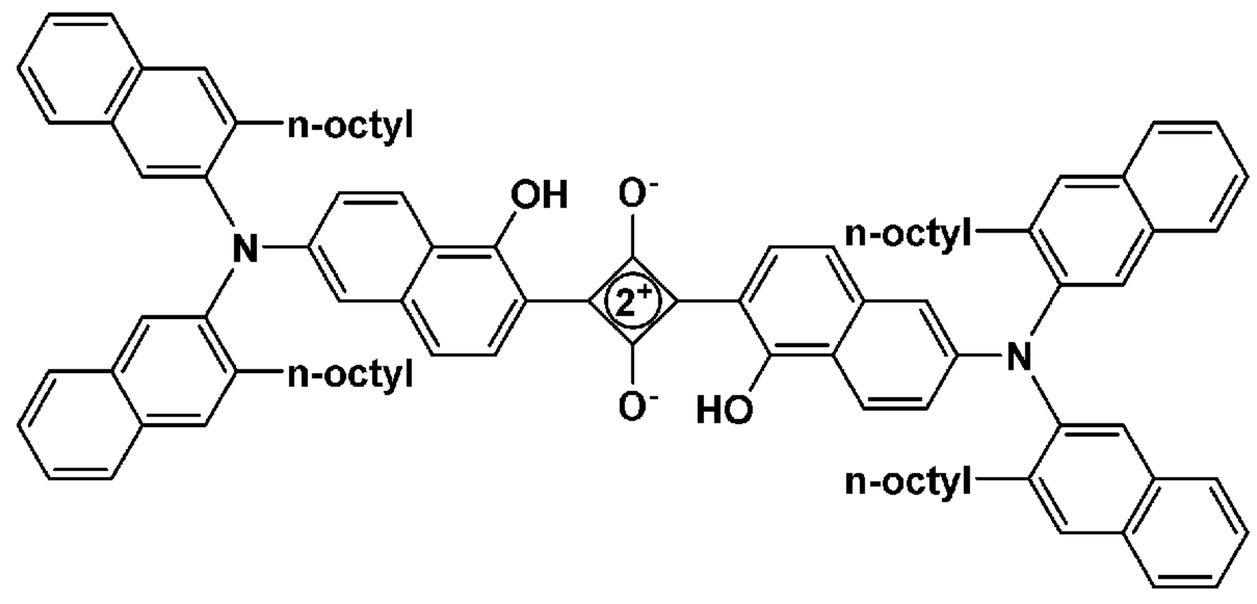
(11)－2



(11)－3



(11)－7



[0285] 得られた化合物について、トルエン溶液中で１０$^{-6}$Ｍに調整し、常温（３００Ｋ）でこの試料の蛍光スペクトルを測定した。発光スペクトルの測定には、分光蛍光光度計（日立ハイテクノス社製、Ｆ７０００）を用いた。また、同様に調製した試料を用いて吸光スペクトルを測定した。吸光スペクトルの測定には、分光光度計（日立ハイテクノス社製、Ｆ７０００）を用いた。

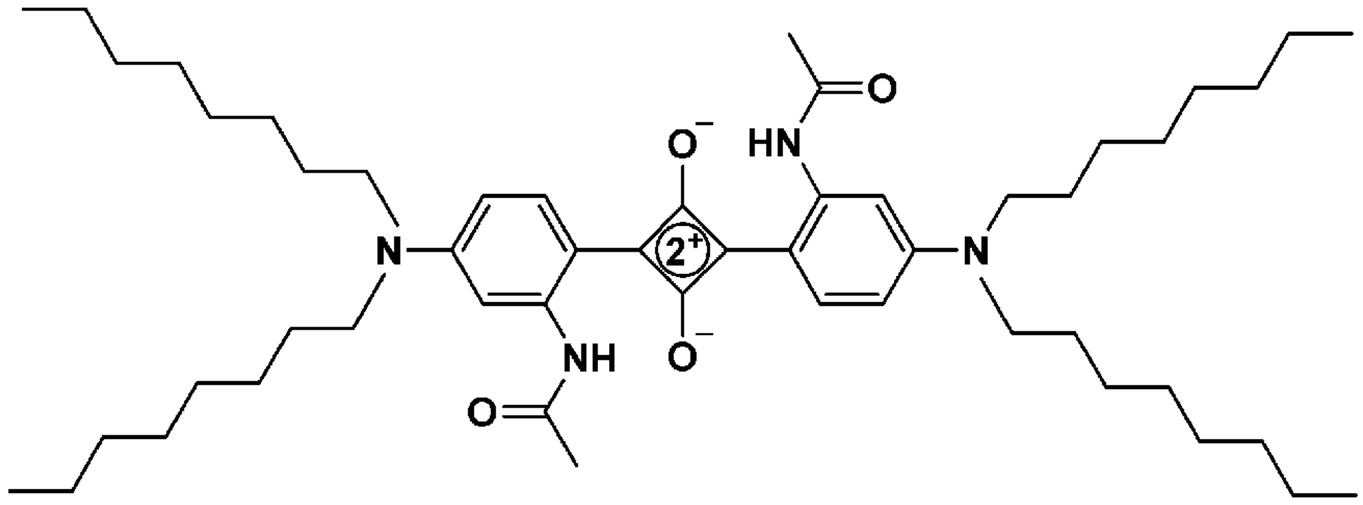
上記で得られた各化合物において、それぞれ７００～９００ｎｍの範囲に発光ピークを観測した。

[0286] 〔実施例２〕

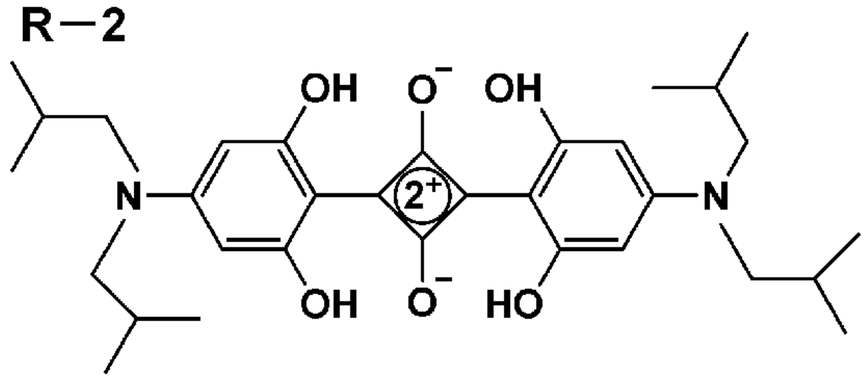
上記実施例１で得られた化合物のうち以下の表XIIIに示す化合物及び以下に構造を示す比較用の化合物Ｒ－１（国際公開２０１８／００８７２１号記載の化合物）、比較用の化合物Ｒ－２（Ｃｈｅｍ．　Ｍａｔｅｒ，　２３，４７８９，　２０１１記載の化合物）について、溶液中と薄膜状態での発光量子収率を、それぞれ以下の方法で評価した。

[0287] [化58]

R−1



R−2



[0288] （１）溶液中での発光量子収率の評価

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

[0289] （２）薄膜中での発光量子収率の評価

マトリックス材料であるポリスチレン（ＡＣＲＯＳ　ＯＲＧＡＮＩＣＳ社製、重量平均分子量Ｍｗ＝２６００００）と比較用の化合物Ｒ－１を、トルエン中に１０$^{-2}$Ｍとなるように添加し、これらをナスフラスコに入れて８０

℃に加熱撹拌して十分に溶解させた。

[0290] 得られた溶液を用いて、ＰＥＴ（ポリエチレンテレフタレート）フィルム上にアプリケーターを用いて薄膜を形成した後、室温で１０分乾燥させ、さらに８０℃にて１０分加熱乾燥させ、ＰＥＴフィルムから剥離して、化合物Ｒ－１を含有する発光性薄膜（比較例）を作製した。また、化合物Ｒ－１を比較用の化合物Ｒ－２に変えて、化合物Ｒ－２を含有する発光性薄膜（比較例）を作製した。さらに、化合物Ｒ－１を表XIIIに示す本発明に係る各化合物に変えた以外は同様にして、本発明の発光性薄膜を作製した。常温（３００Ｋ）でこれらの試料の絶対ＰＬ（発光）量子収率（以下、「ＰＬＱＹ膜」と示す。）を測定した。絶対ＰＬ（発光）量子収率の測定には絶対ＰＬ量子収率測定装置（浜松ホトニクス社製：Ｃ１１３４７）を用いて測定した。

[0291] 発光性薄膜のトルエン溶液中での絶対ＰＬ（発光）量子収率を１．００としたときの対応する発光性薄膜の絶対ＰＬ（発光）量子収率を発光量子収率の相対値、すなわち、ＰＬＱＹ膜／ＰＬＱＹ液を以下の表XIIIに示す。

[0292]

[表13]

表 XIII

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

[0293] 表XIIIより、比較用の化合物Ｒ－１を用いた発光性薄膜及び化合物Ｒ－２を用いた発光性薄膜は、溶液状態より発光量子収率がそれぞれ０．１９及び０．１３に維持されたのに対し、本発明に係る各化合物を用いた発光性薄膜は、いずれも発光量子収率が溶液状態の０．５０以上維持を達成し、濃度消

光が著しく抑えられることが分かった。また、本発明に係る各化合物を用いた発光性薄膜は実使用できるレベルの発光量子収率であった。

[0294] 〔実施例３〕

上記実施例１で得られた化合物のうち以下の表XIVに示す化合物と、比較用の化合物Ｒ－１及び化合物Ｒ－２について、溶液中と発光性粒子中での発光量子収率を測定した。

[0295] （１）溶液中での発光量子収率の評価

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

[0296] （２）発光性粒子の作製及び発光量子収率の評価

ポリスチレン（ＰＳ）粒子分散液（固形分５．２質量%、ポリスチレン粒子の体積平均粒子径０．１２μｍ、分散媒：水）９６μＬに、水１００μＬ、非イオン性界面活性剤（Ｋｏｌｌｉｐｈｏｒ　Ｐ４０７：シグマアルドリッチ製）の２%水溶液５０μＬ、上記各化合物の０．０１ｍｍｏｌ／Ｌ　ＴＨＦ溶液１００μＬを加え、ポリスチレン粒子と各化合物との混合液を調製した。この混合液を２５℃で２分撹拌することで各化合物を含むポリスチレン粒子を作製した。

[0297] 得られたポリスチレン粒子の分散液を用い、遠心精製法により粒子を沈降させ、上澄み液を除去した後、純水を加えて該粒子を再分散させた。この操作（遠心精製と再分散）を４回繰り返し、各化合物を含む発光性粒子分散液１～１５を得た。

[0298] 上記で得られた発光性粒子分散液１～１５の絶対ＰＬ（発光）量子収率を、絶対ＰＬ量子収率測定装置（浜松ホトニクス製Ｃ１１３４７－０１）を用い測定した。発光性薄膜のトルエン溶液中での絶対ＰＬ（発光）量子収率を１．００としたときの対応する発光性粒子分散液の絶対ＰＬ（発光）量子収率を発光量子収率の相対値、すなわち、ＰＬＱＹ粒子／ＰＬＱＹ液を以下の

表XIVに示す。

[0299] [表14]

表 XIV

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

[0300] 表XIVより、比較用の化合物Ｒ－１を用いた発光性粒子及び化合物Ｒ－２を用いた発光性粒子は、溶液状態より発光量子収率がそれぞれ０．３０及び０．２０に維持されたのに対し、本発明に係る各化合物を用いた発光性粒子は、いずれも発光量子収率が溶液状態の０．５０以上維持を達成し、濃度消光が著しく抑えられることが分かった。また、本発明に係る各化合物を用いた発光性粒子は実使用できるレベルの発光量子収率であった。

[0301] 〔実施例４〕

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

[0302] （波長変換膜３の作製）

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

[0303] 次いで、ポリエチレンナフタレートフィルム（帝人デュポン社製）の片側の全面に、特開２００４－６８１４３号公報に記載の構成の大気圧プラズマ放電処理装置を用いて、SiO_xからなる無機物のガスバリアー層４Ａを厚さ５００ｎｍとなるように形成したガスバリアーフィルム４Ａ上に、得られた混合溶液を、アプリケーターを用いて塗布した。室温で１０分乾燥させた後、さらに８０℃で１０分加熱乾燥を行って発光性薄膜５を形成した。

[0304] その後、封止用の接着剤を付けたガスバリアーフィルム４Ｂを用意して発光性薄膜５のガスバリアーフィルム４Ａ側と反対側の面に張り合わせ、９０℃の加熱条件で真空ラミネーターを用いて封止を行った。その後、１１０℃で３０分加熱処理を行うことにより接着剤を硬化させ接着剤層６を形成させ、波長変換膜３を作製した。なお、図示されていないが、波長変換膜３は基材として用いたポリエチレンナフタレートフィルムを含む構成である。

[0305] （赤外発光面光源の作製）

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

[0306] 〔実施例５〕

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

[0307] ガラス基板上に、インジウム・スズ酸化物（ＩＴＯ）透明導電膜を１５０ｎｍ堆積したものを、通常のフォトリソグラフィ技術と塩酸エッチングとを用いて２ｍｍ幅にパターニングして、透明電極を形成した。パターン形成し

た透明電極を、界面活性剤と超純水による超音波洗浄、超純水による超音波洗浄の順で洗浄後、窒素ブローで乾燥させ、最後に紫外線オゾン洗浄を行った。

[0308] この透明基板上に、化合物（１ｄ）－３９の１ｍｇ／ｍＬクロロホルム溶液を６０ｎｍの膜厚でスピンコートした後、１４０℃で大気中１０分間加熱乾燥した。これ以降は基板をグローブボックス中に持ち込み、窒素雰囲気下で作業した。まず、窒素雰囲気下で上記基板を１４０℃で１０分間加熱処理した。次に、上記有機層を成膜した基板を真空蒸着装置内に設置した。２ｍｍ幅のシャドウマスクが透明電極と直交するように素子をセットし、10^{-3}Ｐａ以下まで真空蒸着機内を減圧した後、フラーレンＣ６０を４０ｎｍ、バソキュプロインを１０ｎｍ、ＡＩを１００ｎｍ蒸着した。最後に１２０℃で３０分間の加熱を行い、本発明に係る光電変換素子１を得た。なお、蒸着速度はいずれも２ｎｍ／秒で蒸着し、２ｍｍ角のサイズとした。

[0309] 得られた光電変換素子１は、窒素雰囲気下でアルミニウムキャップとＵＶ硬化樹脂（ナガセケムテックス株式会社製、ＵＶ　ＲＥＳＩＮ　ＸＮＲ５５７０－Ｂ１）を用いて封止を行った。上記作製した光電変換素子１に、ソーラーシミュレーター（ＡＭ１．５Ｇフィルタ）の１００ｍＷ／ｃｍ^{2}の強度の光を照射したところ、電気信号を確認し、光電変換素子として十分機能することが確認できた。

[0310] 上記において、化合物（１ｄ）－３９を、化合物（４）－６、化合物（５）－４、化合物（６）－８、化合物（７）－６、化合物（８）－４、化合物（９）－１０、化合物（１０）－４、化合物（１１）－２に変えて同様に光電変換素子を作製して評価したところ、これらもそれぞれ電気信号が確認でき、光電変換素子として十分機能することが確認できた。

産業上の利用可能性

[0311] 本発明によれば、近赤外長波長領域の発光と部材への高濃度での配合が可能な発光性化合物を含有する、近赤外長波長領域において高い発光量子収率が達成可能な発光部材を提供することができる。また、近赤外長波長領域の

発光と部材への高濃度での配合が可能な発光性化合物を提供することができる。さらには、近赤外長波長領域の発光と部材への高濃度での配合が可能な発光性化合物を用いた高い外部量子効率が得られる光電変換部材を提供することができる。

符号の説明

[0312] １　赤外発光面光源

２　可視光発光する面光源

３　波長変換膜

４Ａ、４Ｂ　ガスバリアーフィルム

５　発光性薄膜

６　接着剤層

ＩＲ　近赤外光

Ｒ　赤色発光

１１　絶縁部

１２　上部電極

１３　電子ブロック層

１４　光電変換層

１５　正孔ブロック層

１６　下部電極

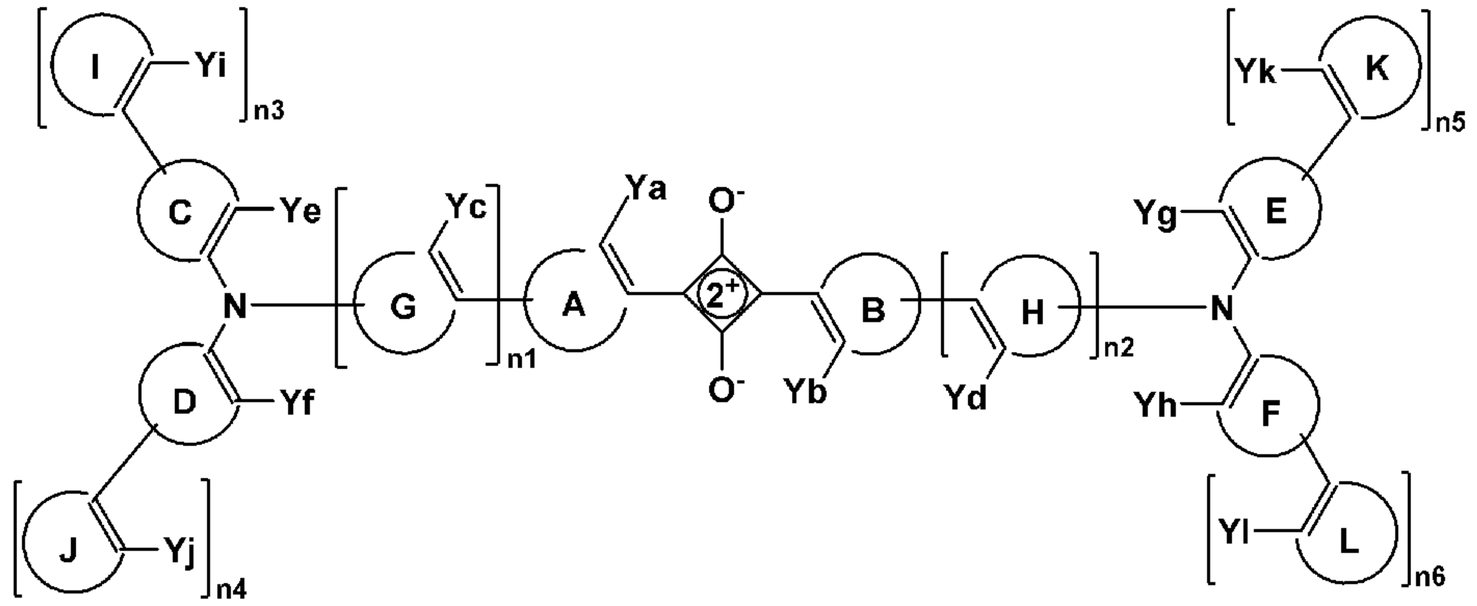
１７　絶縁基材若しくは他光電変換素子

請求の範囲

[請求項1] 下記一般式（Ｔ）で表される構造を有する化合物を含有する発光部材。

[化1]

一般式(T)



[一般式（Ｔ）において、

Ａ～Ｌは、それぞれ独立して、芳香族炭化水素環又はヘテロ芳香環を表す。

ｎ１～ｎ６は、それぞれ独立して、０～２の整数を表す。

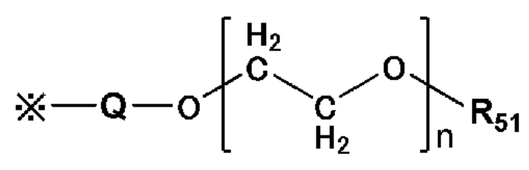
Ｙａ及びＹｂは、それぞれ独立して、ＯＨ基、ＮＨＣＯＲａ（Ｒａは炭化水素基を表す。）基、ＮＨＳＯ$_2$Ｒｂ（Ｒｂは炭化水素基を表す。）基、又はＮＨＰＯ（ＯＲｆ）（ＯＲｇ）（Ｒｆ及びＲｇはそれぞれ炭化水素基を表す。）基を表す。

Ｙｃ～ＹＩは、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。

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

[化2]

一般式(P)



（一般式（Ｐ）において、※は置換部位を表す。Ｑは単結合又は２価

の連結基を表す。ｎは１～９の整数を表す。R_{51}は水素原子又はメチル基を表す。）］

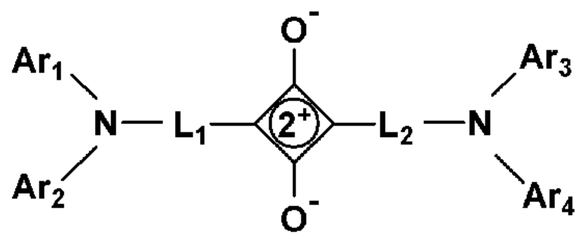
[請求項2] 前記一般式（Ｔ）において、Ａ～Ｌは芳香族炭化水素環を表し、ｎ１～ｎ６はそれぞれ独立して０又は１であり、Ｙａ及びＹｂのうち少なくとも１つが、炭素数４～１２の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基（ａ）、又は前記一般式（Ｐ）で表される構造を有する基（Ｐ）を含む基である請求項１記載の発光部材。

[請求項3] 前記一般式（Ｔ）において、Ａ～Ｌは芳香族炭化水素環を表し、ｎ１～ｎ６はそれぞれ独立して０又は１であり、Ｙｅ～ＹＩのうち少なくとも１つが、炭素数４～１２の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基（ａ）、又は前記一般式（Ｐ）で表される構造を有する基（Ｐ）を含む基である請求項１記載の発光部材。

[請求項4] 前記一般式（Ｔ）で表される構造が、下記一般式（１）で表される構造である請求項１記載の発光部材。

[化3]

一般式(1)

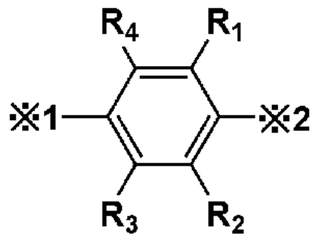


［一般式（１）において、

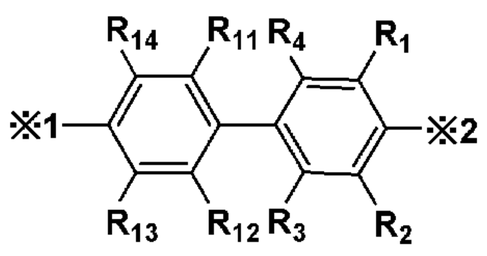
L_1は下記式（Ｌ１）、式（Ｌ２）又は式（Ｌ３）で表される構造を有する基を表す。L_2は下記式（Ｌ４）、式（Ｌ５）又は式（Ｌ６）で表される構造を有する基を表す。

[化4]

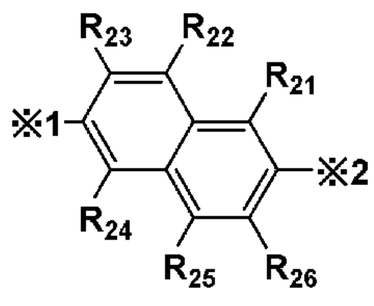
式(L1)



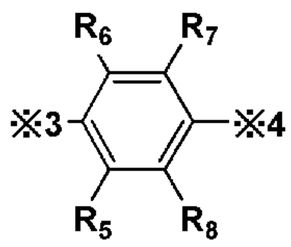
式(L2)



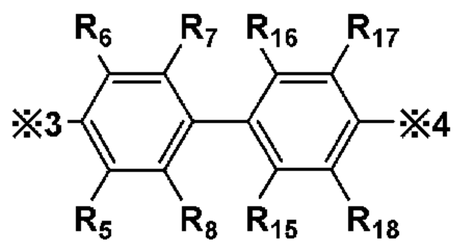
式(L3)



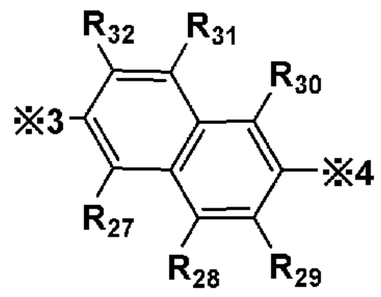
式(L4)



式(L5)



式(L6)



（式（Ｌ１）～式（Ｌ６）において、

※１及び※４はそれぞれ一般式（１）のＮに結合する部位を表す。※２及び※３はそれぞれ一般式（１）のスクアリリウム環の炭素に結合する部位を表す。

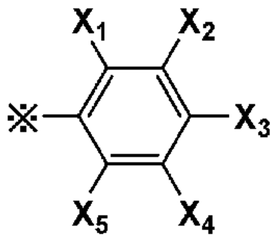
$Ｒ_{1}$、$Ｒ_{5}$、$Ｒ_{21}$及び$Ｒ_{27}$は、それぞれ独立して、ＯＨ基、ＮＨＣＯＲａ（Ｒａは炭化水素基を表す。）基、$ＮＨＳＯ_{2}Ｒｂ$（Ｒｂは炭化水素基を表す。）基、又はＮＨＰＯ（ＯＲｆ）（ＯＲｇ）（Ｒｆ及びＲｇはそれぞれ炭化水素基を表す。）基を表す。

$Ｒ_{2}$～$Ｒ_{4}$、$Ｒ_{6}$～$Ｒ_{8}$、$Ｒ_{11}$～$Ｒ_{18}$、$Ｒ_{22}$～$Ｒ_{26}$及び$Ｒ_{28}$～$Ｒ_{32}$は、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。）

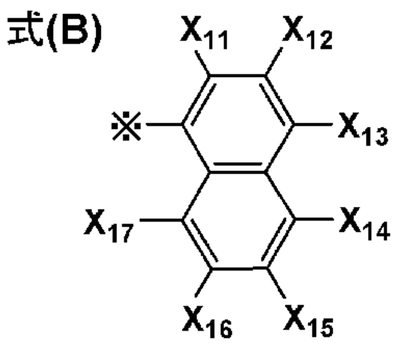
$Ａｒ_{1}$～$Ａｒ_{4}$は、それぞれ独立して、下記式（Ａ）、式（Ｂ）又は式（Ｃ）で表される構造を有する基を表す。

[化5]

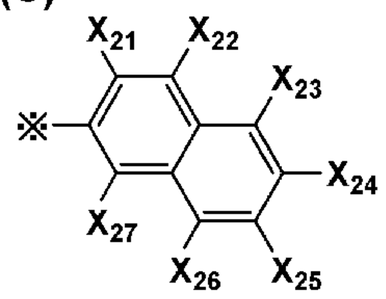
式(A)



式(B)



式(C)



（式（Ａ）～式（Ｃ）において、※はＮ原子との接続部位を示す。$Ｘ_{1}$～$Ｘ_{27}$は、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。）

ただし、一般式（１）において、Ｌ$_1$、Ｌ$_2$及びＡｒ$_1$～Ａｒ$_4$のいずれかは、以下の所定の位置の少なくとも１つに、炭素数４～１２の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基（ａ）、又は前記一般式（Ｐ）で表される構造を有する基（Ｐ）を有する。

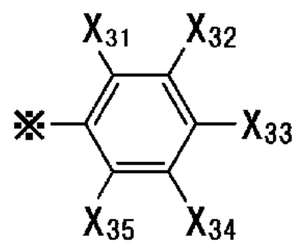
Ｌ$_1$又はＬ$_2$における前記所定の位置は、Ｒ$_1$、Ｒ$_5$、Ｒ$_{21}$及びＲ$_{27}$がＮＨＣＯＲａ基の場合のＲａ（ただし、基（Ｐ）は除く）、Ｒ$_1$、Ｒ$_5$、Ｒ$_{21}$及びＲ$_{27}$がＮＨＳＯ$_2$Ｒｂ基の場合のＲｂ（ただし、基（Ｐ）は除く）、Ｒ$_1$、Ｒ$_5$、Ｒ$_{21}$及びＲ$_{27}$がＮＨＰＯ（ＯＲｆ）（ＯＲｇ）基の場合のＲｆ又はＲｇ（ただし、基（Ｐ）は除く）、Ｒ$_2$、Ｒ$_{11}$、Ｒ$_{12}$、Ｒ$_6$、Ｒ$_{15}$、Ｒ$_{16}$、Ｒ$_{26}$、及びＲ$_{32}$である。

Ａｒ$_1$～Ａｒ$_4$における前記所定の位置は、Ｘ$_1$、Ｘ$_5$、Ｘ$_{11}$、Ｘ$_{21}$及びＸ$_{27}$並びに下記式（Ｄ）のＸ$_{31}$及びＸ$_{35}$である。

さらに、一般式（１）において、Ｌ$_1$又はＬ$_2$における、Ｒ$_3$、Ｒ$_4$、Ｒ$_{13}$、Ｒ$_{14}$、Ｒ$_{23}$、Ｒ$_{24}$、Ｒ$_{25}$、Ｒ$_7$、Ｒ$_8$、Ｒ$_{17}$、Ｒ$_{18}$、Ｒ$_{29}$、Ｒ$_{30}$及びＲ$_{31}$、Ａｒ$_1$～Ａｒ$_4$における、Ｘ$_2$、Ｘ$_3$、Ｘ$_4$、Ｘ$_{12}$、Ｘ$_{13}$、Ｘ$_{14}$、Ｘ$_{15}$、Ｘ$_{22}$、Ｘ$_{23}$、Ｘ$_{24}$及びＸ$_{25}$は、炭素数４以上の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基又は（ポリ）オキシアルキレン基を有しない。ただし、Ｘ$_3$、Ｘ$_{13}$及びＸ$_{24}$は、下記式（Ｄ）で表される構造を有する基であってもよい。

[化6]

式(D)



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

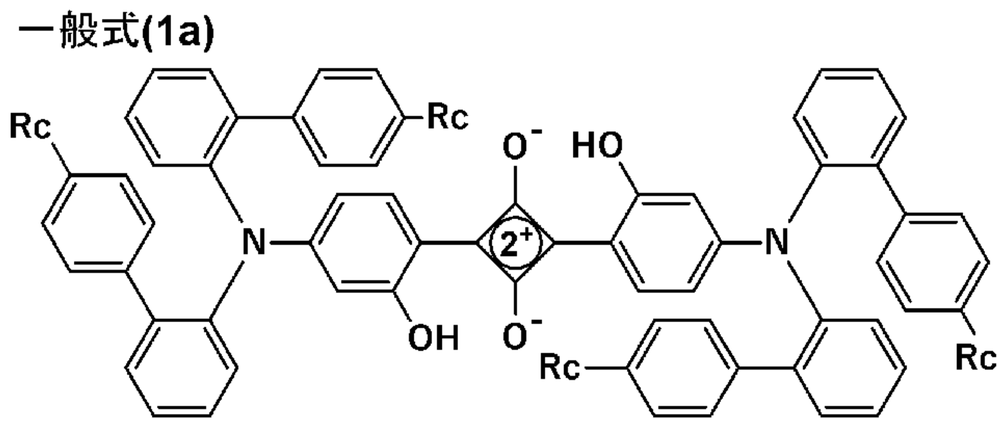
）を有する基であり、X_{32}～X_{34}は、炭素数４以上の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基又は（ポリ）オキシアルキレン基を有しない。）］

[請求項5] 前記一般式（１）において、L_1が前記式（Ｌ１）で表される構造を有する基であり、かつL_2が前記式（Ｌ４）で表される構造を有する基である請求項４に記載の発光部材。

[請求項6] 前記一般式（１）で表される構造が、下記一般式（１ａ）で表される構造である請求項５に記載の発光部材。

[化7]

一般式(1a)

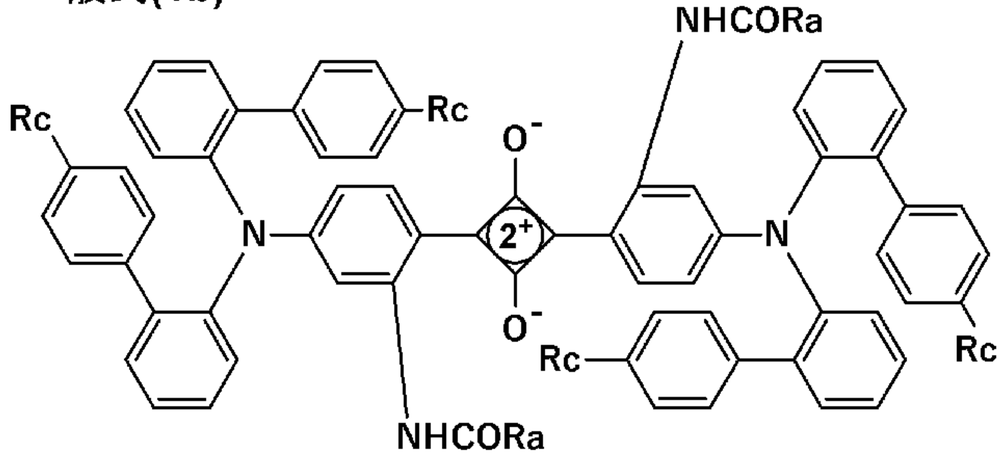


（一般式（１ａ）において、各Ｒｃは、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表し、４個のＲｃのうち少なくとも１個は、連結基として－Ｏ－を有してもよい炭素数４～１２の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基（ａ）、又は前記一般式（Ｐ）で表される構造を有する基（Ｐ）を表す。）

[請求項7] 前記一般式（１）で表される構造が、下記一般式（１ｂ）で表される構造である請求項５に記載の発光部材。

[化8]

一般式(1b)



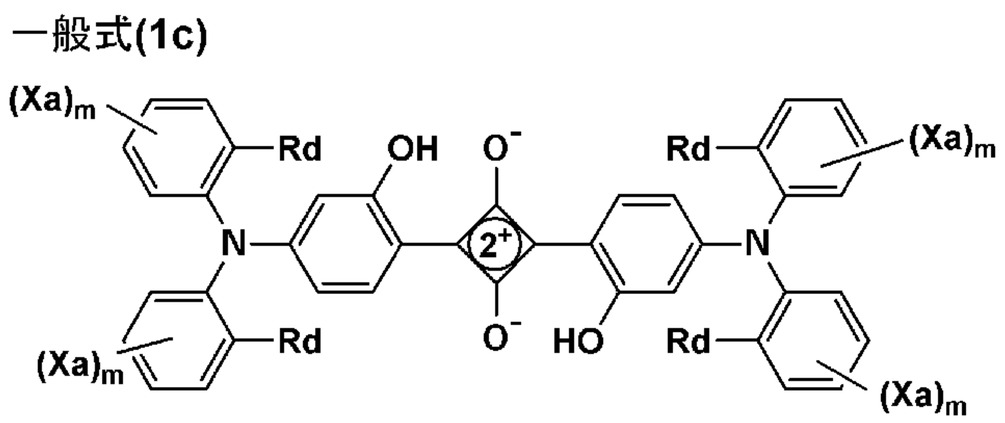
（一般式（１ｂ）において、各Ｒａは、それぞれ独立して、炭化水素

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

[請求項8] 前記一般式（１）で表される構造が、下記一般式（１ｃ）で表される構造である請求項５に記載の発光部材。

[化9]

一般式(1c)

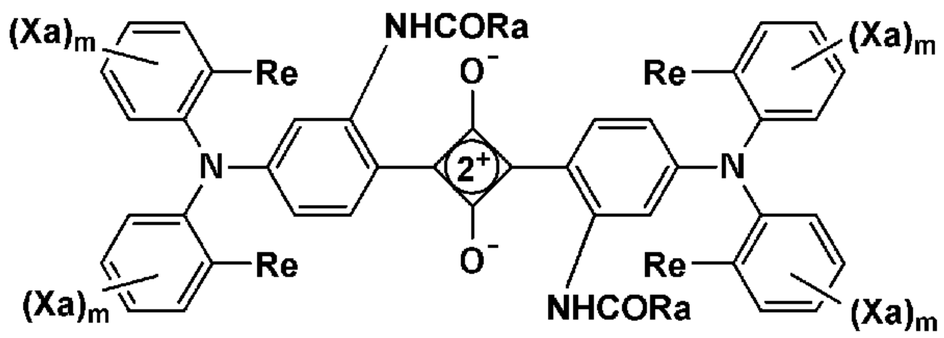


（一般式（１ｃ）において、各Ｒｄは、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表し、４個のＲｄのうち少なくとも１個は、連結基として－Ｏ－を有してもよい炭素数４～１２の直鎖状若しくは分岐状のアルキル基（ａ）、又は前記一般式（Ｐ）で表される構造を有する基（Ｐ）を表す。各Ｘａは、それぞれ独立して、炭素数１～３のアルキル基若しくはアルコキシ基又は置換又は無置換のフェニル基を表す。ｍは、０～４の整数を表す。）

[請求項9] 前記一般式（１）で表される構造が、下記一般式（１ｄ）で表される構造である請求項５に記載の発光部材。

[化10]

一般式(1d)



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

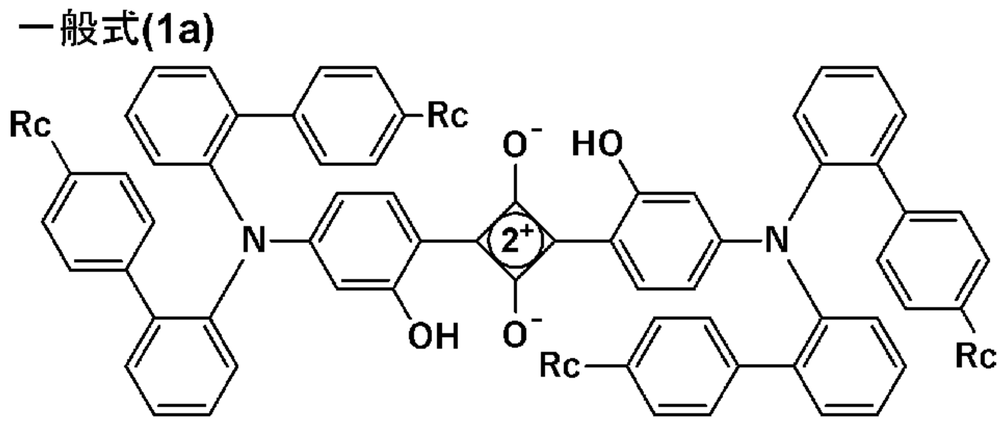
[請求項10] 前記発光部材が発光性薄膜である請求項１から請求項９までのいずれか一項に記載の発光部材。

[請求項11] 前記発光部材が発光性粒子である請求項１から請求項９までのいずれか一項に記載の発光部材。

[請求項12] 下記一般式（１ａ）で表される構造を有する発光性化合物。

[化11]

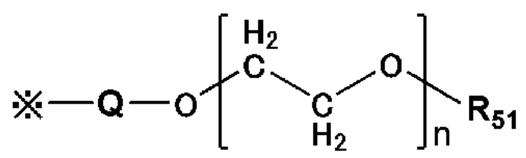
一般式(1a)



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

[化12]

一般式(P)

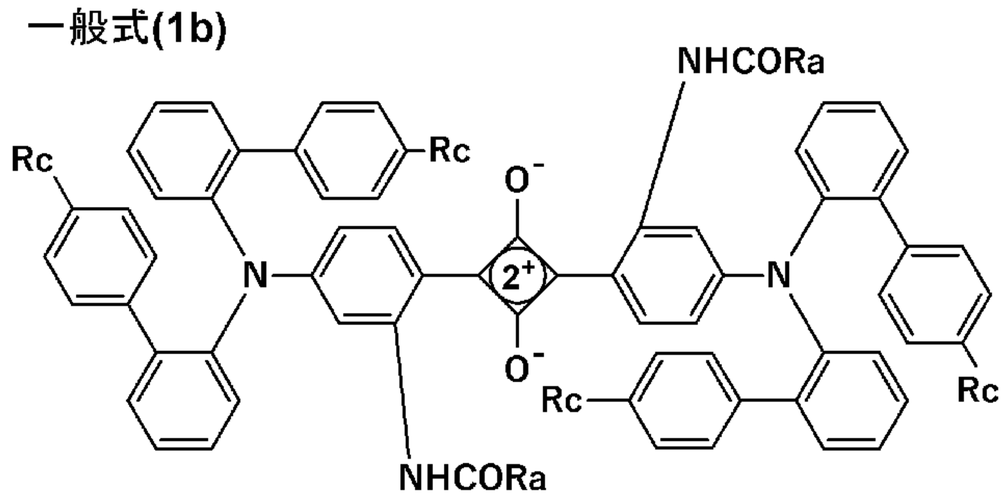


（一般式（Ｐ）において、※は置換部位を表す。Ｑは単結合又は２価の連結基を表す。ｎは１～９の整数を表す。Ｒ$_{51}$は水素原子又はメチル基を表す。）

[請求項13] 下記一般式（１ｂ）で表される構造を有する発光性化合物。

[化13]

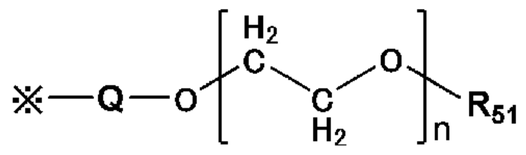
一般式(1b)



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

[化14]

一般式(P)

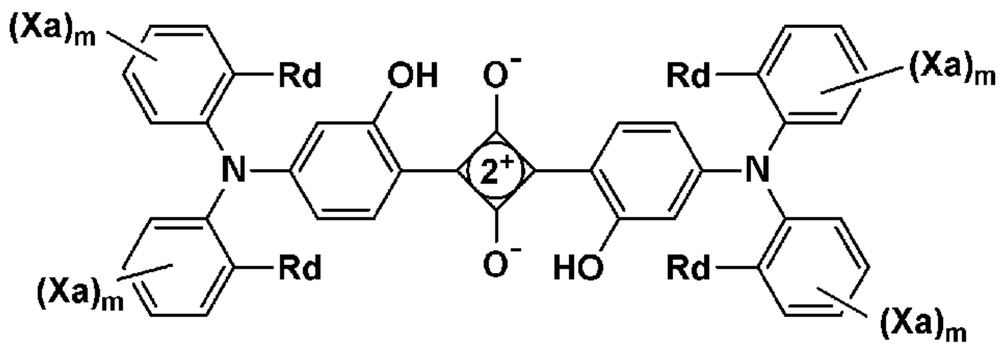


（一般式（Ｐ）において、※は置換部位を表す。Ｑは単結合又は２価の連結基を表す。ｎは１～９の整数を表す。Ｒ$_{51}$は水素原子又はメチル基を表す。）

[請求項14] 下記一般式（１ｃ）で表される構造を有する発光性化合物。

[化15]

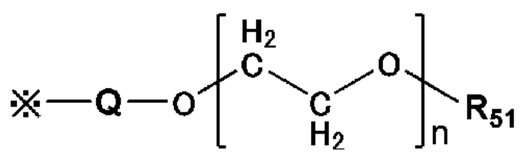
一般式(1c)



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

[化16]

一般式(P)

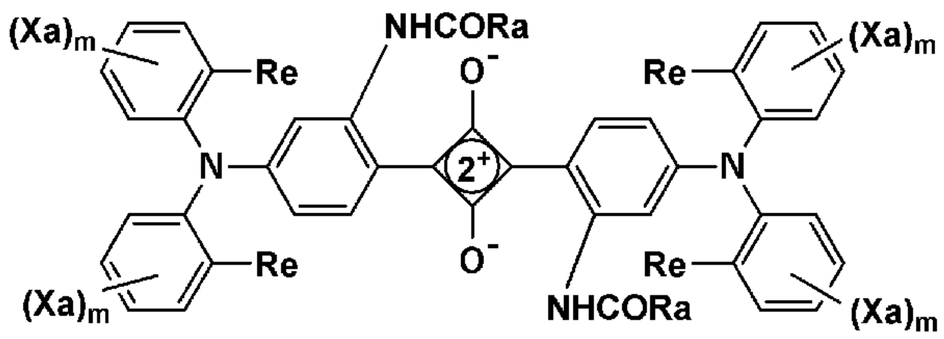


（一般式（Ｐ）において、※は置換部位を表す。Ｑは単結合又は２価の連結基を表す。ｎは１～９の整数を表す。Ｒ５１は水素原子又はメチル基を表す。）

[請求項15] 下記一般式（１ｄ）で表される構造を有する発光性化合物。

[化17]

一般式(1d)

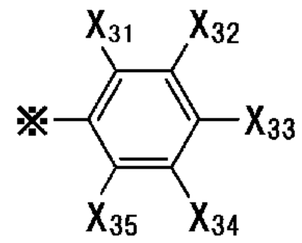


（一般式（１ｄ）において、各Ｒａは、それぞれ独立して、炭化水素

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

[化18]

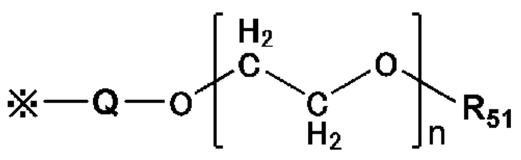
式(D)



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

[化19]

一般式(P)



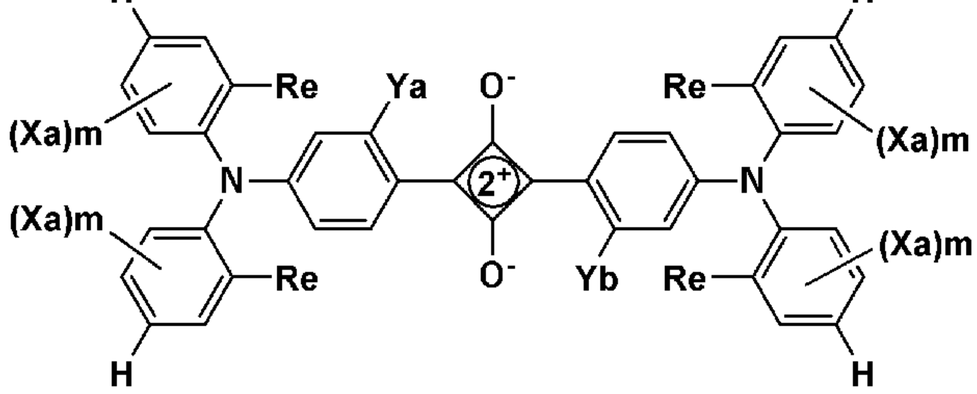
（一般式（Ｐ）において、※は置換部位を表す。Ｑは単結合又は２価

の連結基を表す。ｎは１～９の整数を表す。Ｒ$_{51}$は水素原子又はメチル基を表す。）

[請求項16] 下記一般式（１ｅ）で表される構造を有する発光性化合物。

[化20]

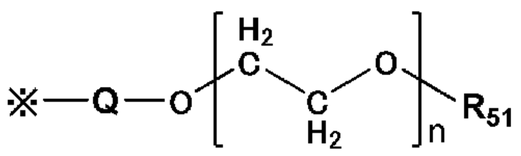
一般式(1e)



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

[化21]

一般式(P)

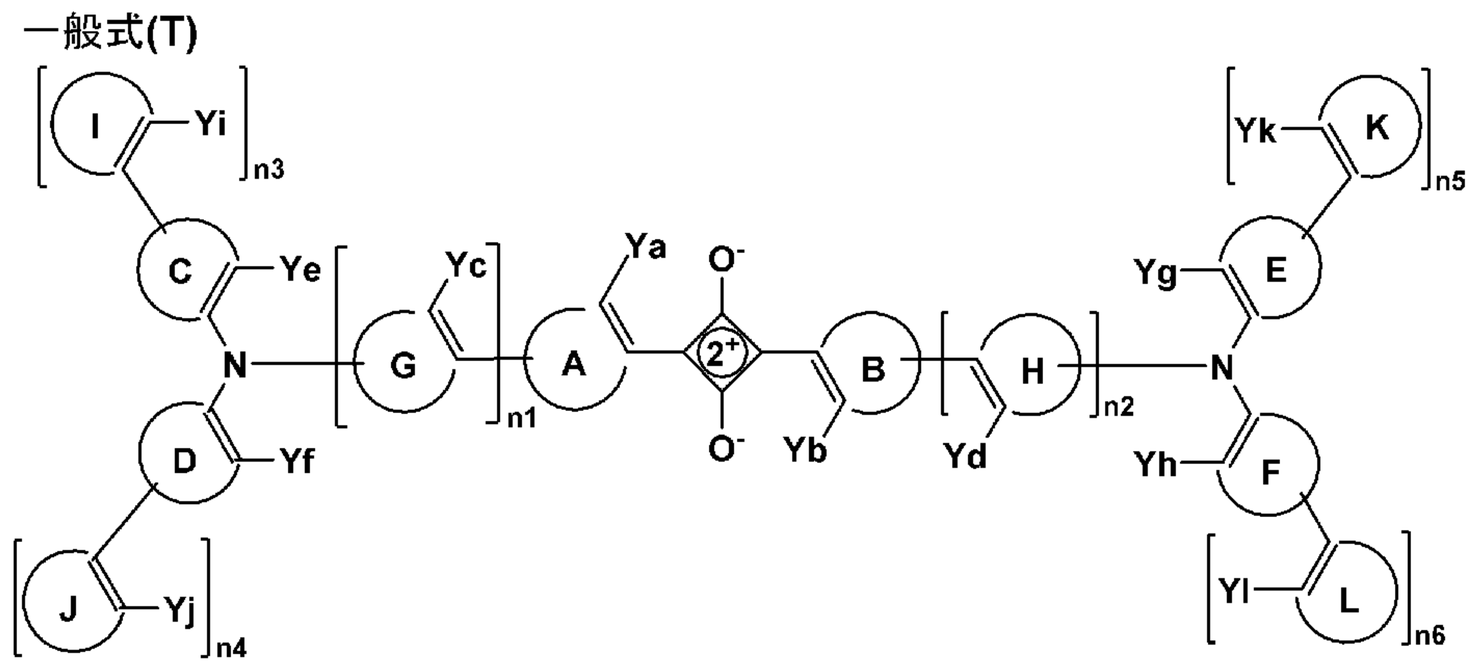


（一般式（Ｐ）において、※は置換部位を表す。Ｑは単結合又は２価の連結基を表す。ｎは１～９の整数を表す。Ｒ$_{51}$は水素原子又はメチル基を表す。）

[請求項17] 下記一般式（Ｔ）で表される構造を有する化合物を含有する光電変換部材。

[化22]

一般式(T)



[一般式（Ｔ）において、

Ａ～Ｌは、それぞれ独立して、芳香族炭化水素環又はヘテロ芳香環を表す。

ｎ１～ｎ６は、それぞれ独立して、０～２の整数を表す。

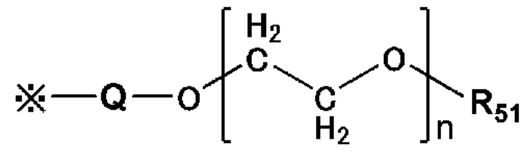
Ｙａ及びＹｂは、それぞれ独立して、ＯＨ基、ＮＨＣＯＲａ（Ｒａは炭化水素基を表す。）基、ＮＨＳＯ$_2$Ｒｂ（Ｒｂは炭化水素基を表す。）基、又はＮＨＰＯ（ＯＲｆ）（ＯＲｇ）（Ｒｆ及びＲｇはそれぞれ炭化水素基を表す。）基を表す。

Ｙｃ～ＹＩは、それぞれ独立して、水素原子又は置換基を表す。

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

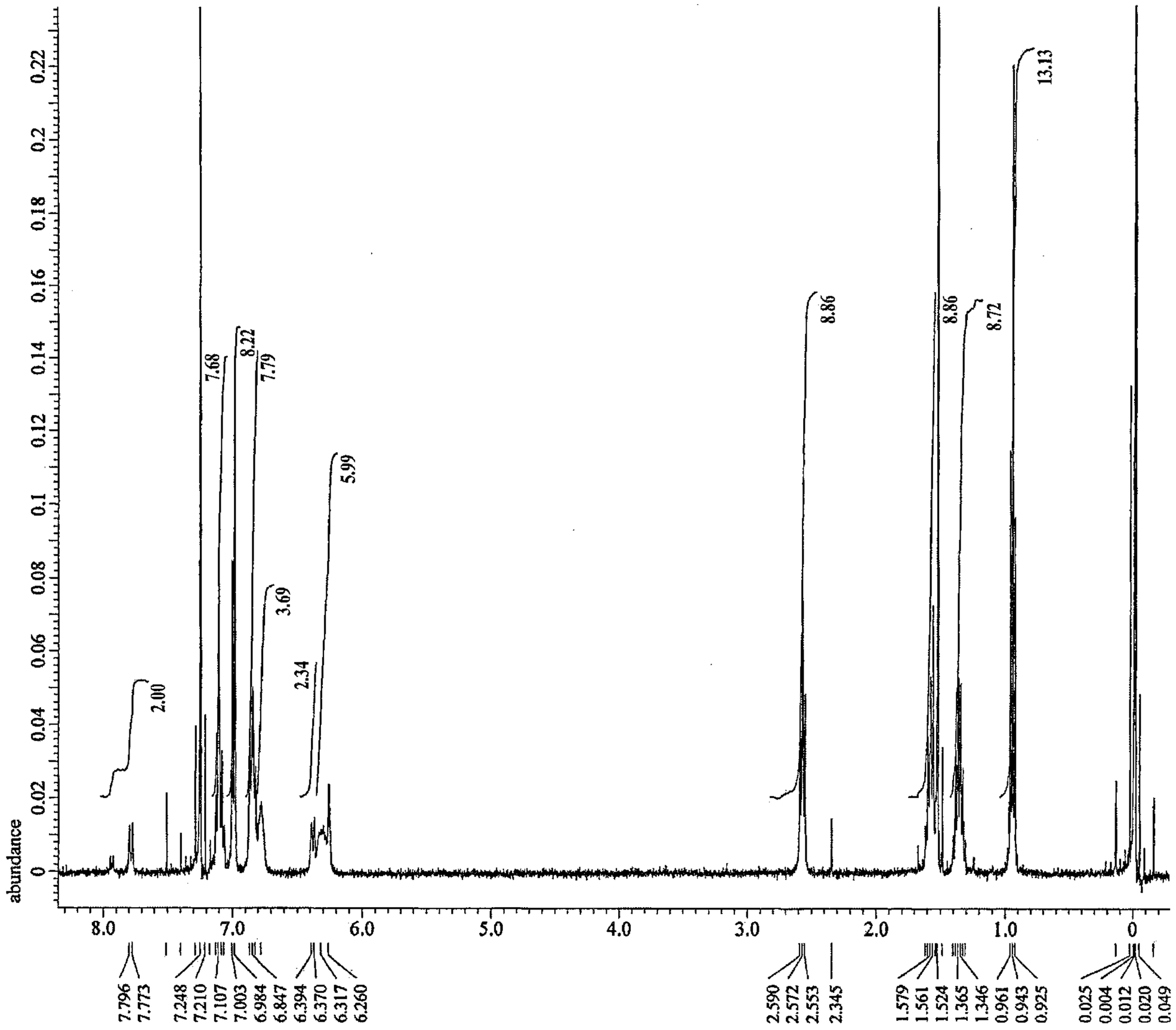
[化23]

一般式(P)

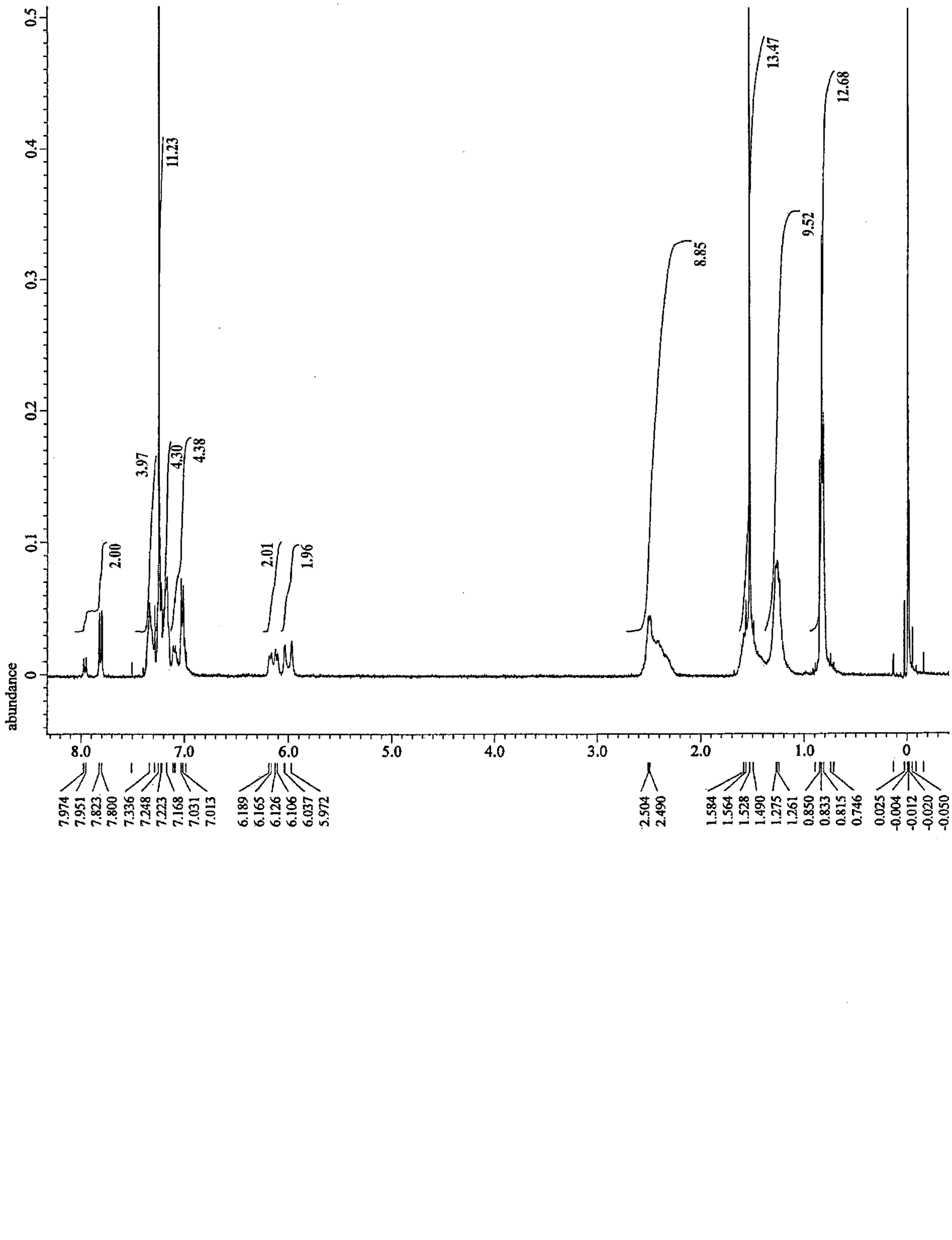


（一般式（Ｐ）において、※は置換部位を表す。Ｑは単結合又は２価の連結基を表す。ｎは１～９の整数を表す。Ｒ$_{51}$は水素原子又はメチル基を表す。）］

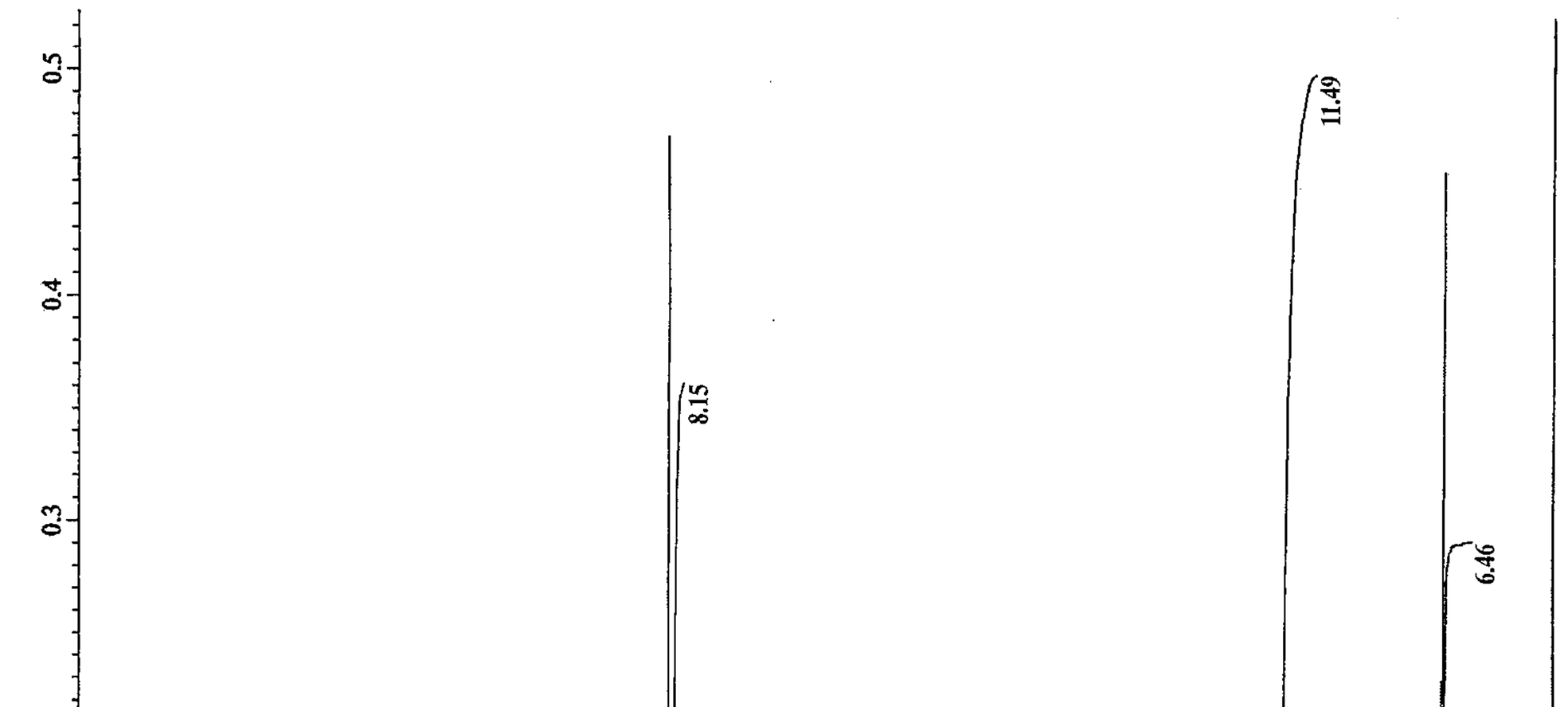
[図1]


abundance
0
0.02
0.04
0.06
0.08
0.1
0.12
0.14
0.16
0.18
0.2
0.22
8.0
7.0
6.0
5.0
4.0
3.0
2.0
1.0
0
2.00
2.34
7.68
8.22
7.79
3.69
5.99
8.86
13.13
8.86
8.72
7.796
7.773
7.248
7.210
7.107
7.003
6.984
6.847
6.394
6.370
6.317
6.260
2.590
2.572
2.553
2.345
1.579
1.561
1.524
1.365
1.346
0.961
0.943
0.925
0.025
0.004
0.012
0.020
0.049

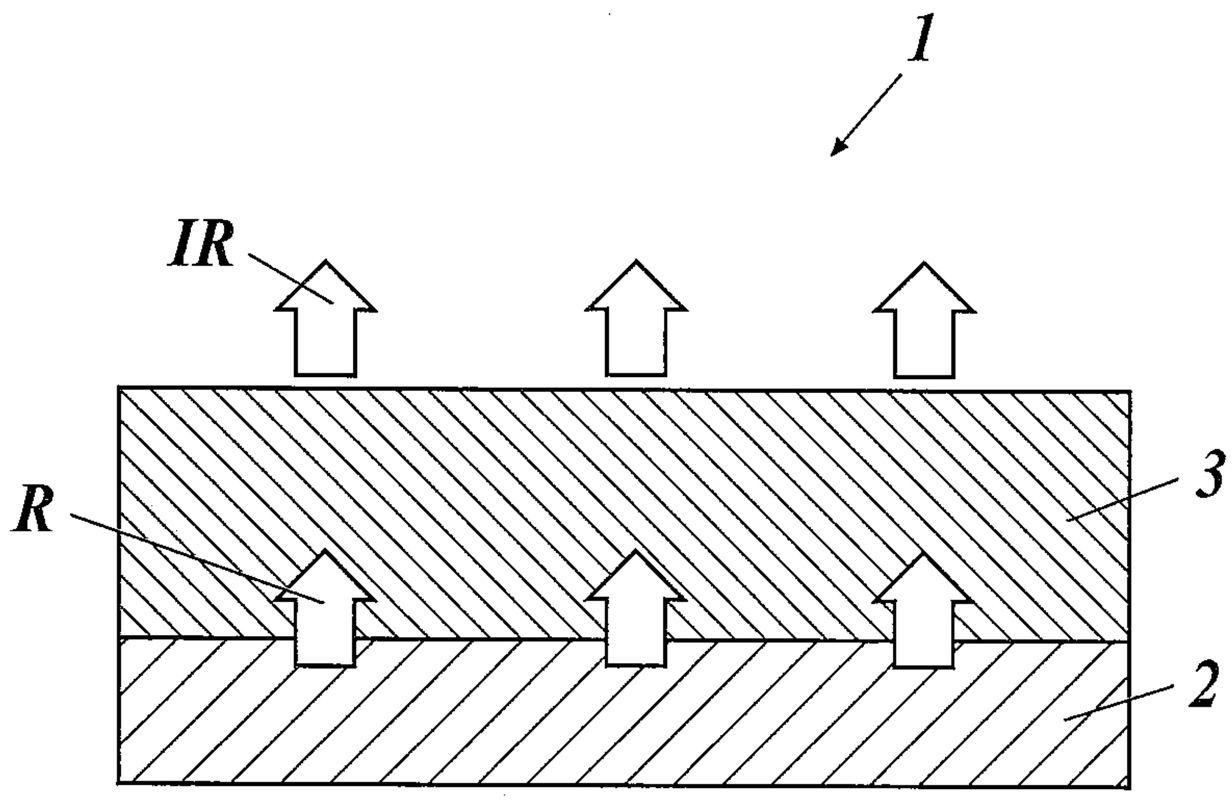
[図2]


abundance
0
0.1
0.2
0.3
0.4
0.5
2.00
11.23
3.97
4.30
4.38
2.01
1.96
8.85
13.47
12.68
9.52
8.0
7.0
6.0
5.0
4.0
3.0
2.0
1.0
0
7.974
7.951
7.823
7.800
7.336
7.248
7.223
7.168
7.031
7.013
6.189
6.165
6.126
6.106
6.037
5.972
2.504
2.490
1.584
1.564
1.528
1.490
1.275
1.261
0.850
0.833
0.815
0.746
0.025
-0.004
-0.012
-0.020
-0.050

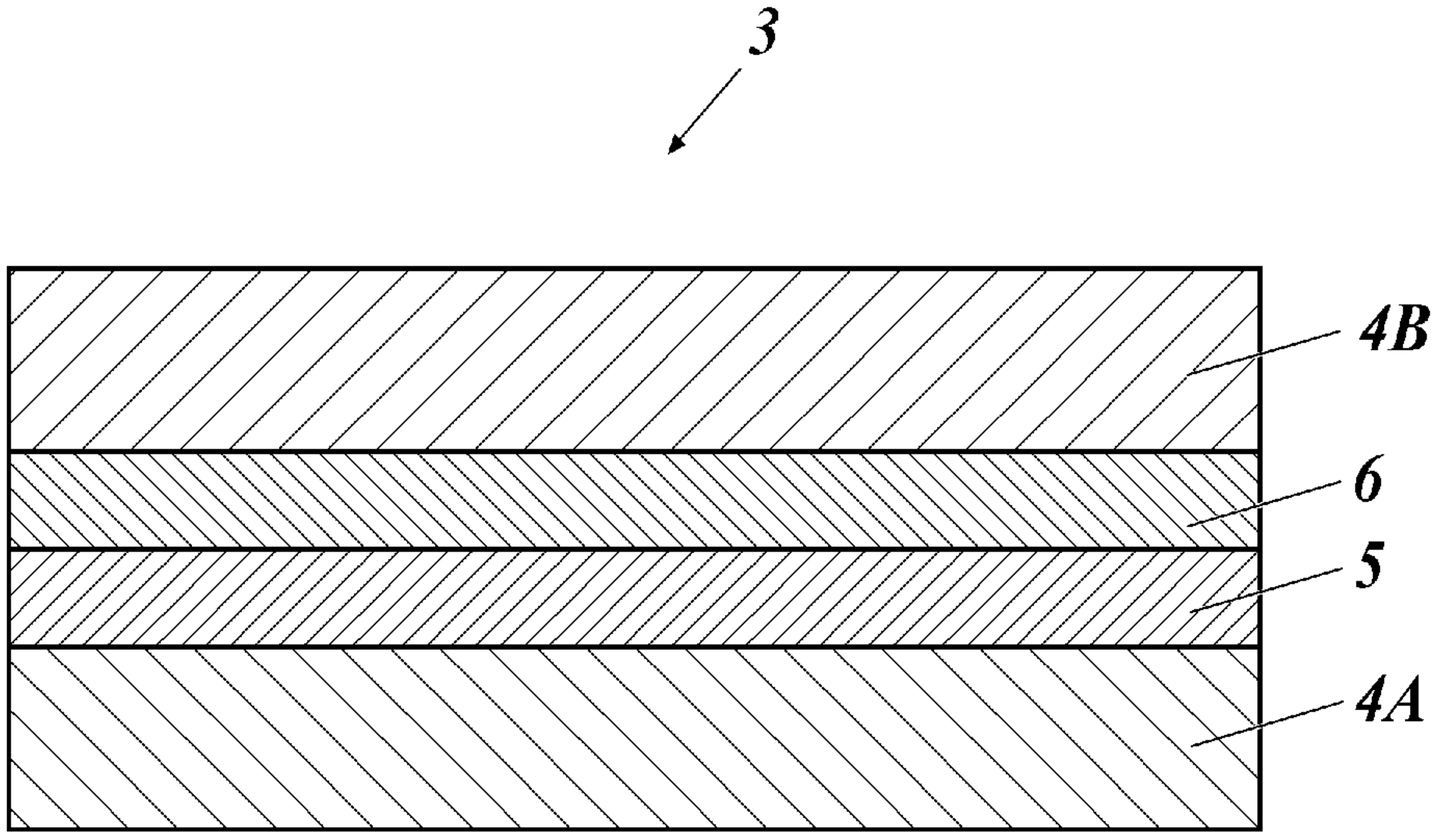
[図3]


abundance
0
0.1
0.2
0.3
0.4
0.5
11.0
10.0
9.0
8.0
7.0
6.0
5.0
4.0
3.0
2.0
1.0
0
2.00
1.97
1.91
1.92
3.79
8.15
4.08
11.49
4.03
4.16
4.15
2.24
6.46
11.904
11.779
8.487
8.464
8.438
8.415
7.931
7.248
7.217
7.208
7.201
7.190
6.243
2.498
2.480
2.460
2.436
2.417
2.319
2.191
2.033
2.013
1.639
1.541
1.341
0.906
0.888
0.870
-0.012
-0.020

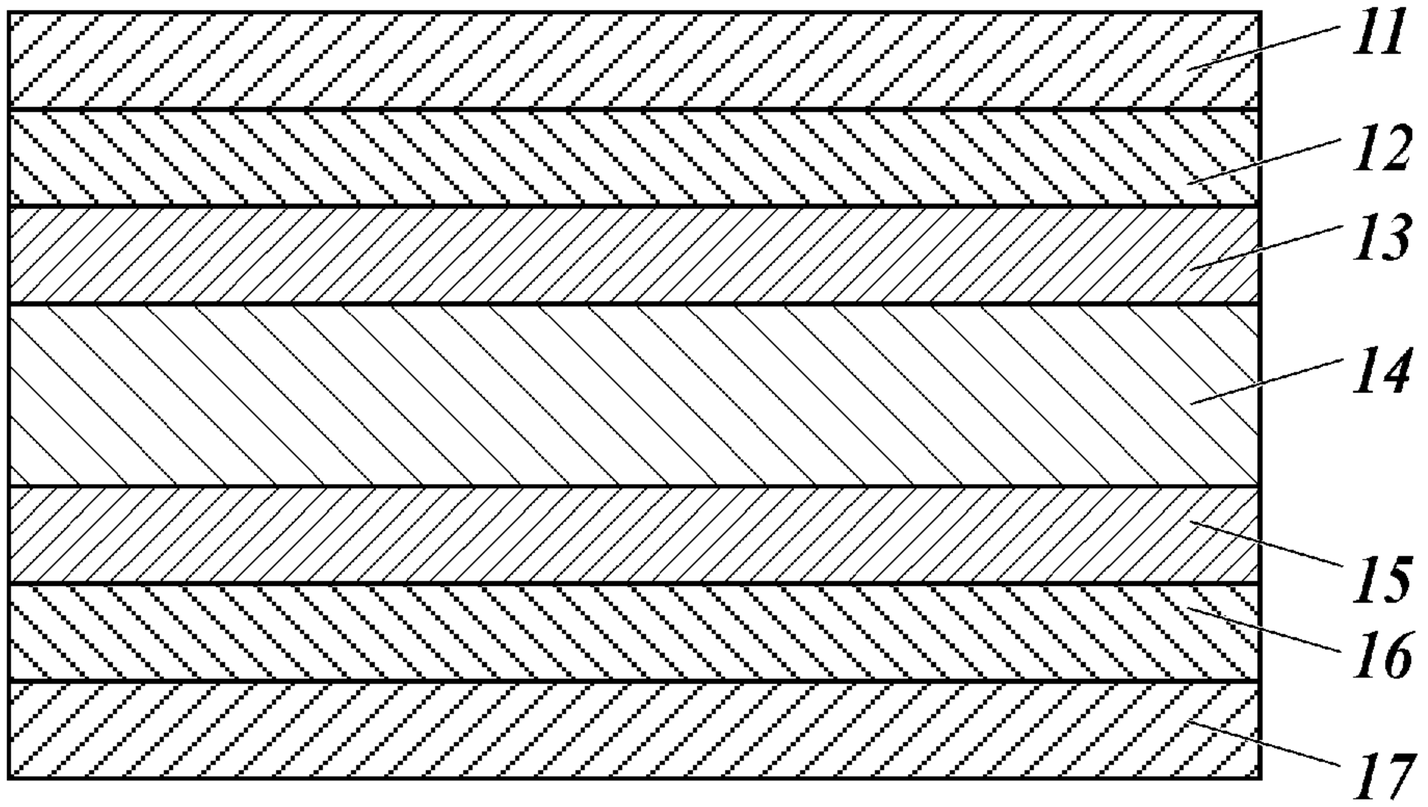
[図4]


1
IR
R
3
2

[図5]



[図6]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2020/041019

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
Int. Cl. C09K11/06(2006.01)i, H01L51/42(2006.01)i
FI: C09K11/06 620, H01L31/08 T

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)
Int. Cl. C09K11/06, H01L51/42

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched
Published examined utility model applications of Japan 1922-1996
Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2021
Registered utility model specifications of Japan 1996-2021
Published registered utility model applications of Japan 1994-2021

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)
CAplus/REGISTRY (STN)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X A	WO 2018/207776 A1 (KONICA MINOLTA, INC.) 15 November 2018, claims, paragraphs [0074]-[0082], examples	1, 3-6, 8, 10-11, 14, 16 2, 7, 9, 12-13, 15, 17
X A	WO 2019/167886 A1 (FUJIFILM CORP.) 06 September 2019, paragraph [0264], A10	15 1-14, 16-17
A	JP 2015-526901 A (THE REGENTS OF THE UNIVERSITY OF MICHIGAN) 10 September 2015, claims, examples	1-17
A	WO 2018/008721 A1 (KONICA MINOLTA, INC.) 11 January 2018, paragraph [0199]	1-17

☒ Further documents are listed in the continuation of Box C.
☒ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:
"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date
"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed
"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report
12.01.2021	19.01.2021
Name and mailing address of the ISA/ Japan Patent Office 3-4-3, Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915, Japan	Authorized officer Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2020/041019

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	ZHU, Yougin et al. The effects of SQ additive on charge carrier transport and recombination in PCDTBT:PC71BM based ternary organic solar cells. Synthetic Metals. 05 November 2017, 234(2017), pp. 125-131, in particular, pp. 125-131	1-17
A	WO 2019/167589 A1 (FUJIFILM CORP.) 06 September 2019, paragraph [0142], compounds 14, 15	1-17
P, X P, A	WO 2020/189678 A1 (KONICA MINOLTA, INC.) 24 September 2020, claims, examples	1, 3-6, 8, 10-12, 14, 16-17 2, 7, 9, 13, 15
P, X P, A	WO 2020/171199 A1 (KONICA MINOLTA, INC.) 27 August 2020, claims, examples	1, 3-6, 8, 10-12, 14, 16-17 2, 7, 9, 13, 15
P, X P, A	WO 2020/149368 A1 (KONICA MINOLTA, INC.) 23 July 2020, claims, examples	1, 3-6, 8, 10-12, 14, 16-17 2, 7, 9, 13, 15
P, X P, A	WO 2020/054627 A1 (KONICA MINOLTA, INC.) 19 March 2020, claims, examples	1, 3-6, 8, 10-12, 14, 16 2, 7, 9, 13, 15, 17
P, A	WO 2020/013089 A1 (FUJIFILM CORP.) 16 January 2020, claims, examples	1-17

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.
PCT/JP2020/041019

Patent Documents referred to in the Report	Publication Date	Patent Family	Publication Date
WO 2018/207776 A1	15.11.2018	(Family: none)	
WO 2019/167886 A1	06.09.2019	TW 201936648 A	
JP 2015-526901 A	10.09.2015	US 2015/0207088 A1 claims, examples EP 2875534 A1 TW 201411900 A AU 2013292306 A1 CA 2879573 A1 KR 10-2015-0037974 A	
WO 2018/008721 A1	11.01.2018	US 2019/0214578 A1 paragraph [0183] CN 109417131 A	
WO 2019/167589 A1	06.09.2019	TW 201938697 A	
WO 2020/189678 A1	24.09.2020	(Family: none)	
WO 2020/171199 A1	27.08.2020	(Family: none)	
WO 2020/149368 A1	23.07.2020	(Family: none)	
WO 2020/054627 A1	19.03.2020	(Family: none)	
WO 2020/013089 A1	16.01.2020	TW 202006080 A	

国際調査報告

国際出願番号
PCT/JP2020/041019

A.　発明の属する分野の分類（国際特許分類（ＩＰＣ））

C09K 11/06(2006.01)i; H01L 51/42(2006.01)i
FI: C09K11/06 620; H01L31/08 T

B.　調査を行った分野

調査を行った最小限資料（国際特許分類（ＩＰＣ））

C09K11/06; H01L51/42

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報	１９２２－１９９６年
日本国公開実用新案公報	１９７１－２０２１年
日本国実用新案登録公報	１９９６－２０２１年
日本国登録実用新案公報	１９９４－２０２１年

国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）

CAplus/REGISTRY (STN)

C.　関連すると認められる文献

引用文献のカテゴリー*	引用文献名　及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する請求項の番号
X	WO 2018/207776 A1（コニカミノルタ株式会社）15.11.2018 (2018-11-15) 請求の範囲、段落００７４－００８２、実施例	1,3-6,8,10-11,14,16
A		2,7,9,12-13,15,17
X	WO 2019/167886 A1（富士フイルム株式会社）06.09.2019 (2019-09-06) 段落０２６４　Ａ１０	15
A		1-14,16-17
A	JP 2015-526901 A（ザ リージェンツ オブ ザ ユニヴァシティ オブ ミシガン）10.09.2015 (2015-09-10) 特許請求の範囲、実施例	1-17
A	WO 2018/008721 A1（コニカミノルタ株式会社）11.01.2018 (2018-01-11) 段落０１９９	1-17
A	ZHU Youqin et al., The effects of SQ additive on charge carrier transport and recombination in PCDTBT:PC71BM based ternary organic solar cells, Synthetic Metals, 2017.11.05, 234(2017), pp.125-131 特に125-131頁	1-17

☑ Ｃ欄の続きにも文献が列挙されている。

☑ パテントファミリーに関する別紙を参照。

*　引用文献のカテゴリー
"A" 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの
"E" 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの
"L" 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す）
"O" 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献
"P" 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献
"T" 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの
"X" 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの
"Y" 特に関連のある文献であって、当該文献と他の１以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの
"&" 同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日	国際調査報告の発送日
12.01.2021	19.01.2021

名称及びあて先
日本国特許庁(ISA/JP)
〒100-8915
日本国
東京都千代田区霞が関三丁目４番３号

権限のある職員（特許庁審査官）
青鹿　喜芳　4V　4040
電話番号 03-3581-1101　内線 3480

国際調査報告

国際出願番号
PCT/JP2020/041019

C.　関連すると認められる文献

引用文献のカテゴリー*	引用文献名　及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する請求項の番号
A	WO 2019/167589 A1 (富士フイルム株式会社) 06.09.2019 (2019-09-06) 段落０１４２　化合物１４、１５	1-17
P, X	WO 2020/189678 A1 (コニカミノルタ株式会社) 24.09.2020 (2020-09-24) 特許請求の範囲、実施例	1,3-6,8,10-12,14,16-17
P, A		2,7,9,13,15
P, X	WO 2020/171199 A1 (コニカミノルタ株式会社) 27.08.2020 (2020-08-27) 特許請求の範囲、実施例	1,3-6,8,10-12,14,16-17
P, A		2,7,9,13,15
P, X	WO 2020/149368 A1 (コニカミノルタ株式会社) 23.07.2020 (2020-07-23) 特許請求の範囲、実施例	1,3-6,8,10-12,14,16-17
P, A		2,7,9,13,15
P, X	WO 2020/054627 A1 (コニカミノルタ株式会社) 19.03.2020 (2020-03-19) 特許請求の範囲、実施例	1,3-6,8,10-12,14,16
P, A		2,7,9,13,15,17
P, A	WO 2020/013089 A1 (富士フイルム株式会社) 16.01.2020 (2020-01-16) 特許請求の範囲、実施例	1-17

国際調査報告
パテントファミリーに関する情報

国際出願番号
PCT/JP2020/041019

引用文献	公表日	パテントファミリー文献	公表日
WO 2018/207776 A1	15.11.2018	（ファミリーなし）	
WO 2019/167886 A1	06.09.2019	TW 201936648 A	
JP 2015-526901 A	10.09.2015	US 2015/0207088 A1 特許請求の範囲、実施例 EP 2875534 A1 TW 201411900 A AU 2013292306 A1 CA 2879573 A1 KR 10-2015-0037974 A	
WO 2018/008721 A1	11.01.2018	US 2019/0214578 A1 段落０１８３ CN 109417131 A	
WO 2019/167589 A1	06.09.2019	TW 201938697 A	
WO 2020/189678 A1	24.09.2020	（ファミリーなし）	
WO 2020/171199 A1	27.08.2020	（ファミリーなし）	
WO 2020/149368 A1	23.07.2020	（ファミリーなし）	
WO 2020/054627 A1	19.03.2020	（ファミリーなし）	
WO 2020/013089 A1	16.01.2020	TW 202006080 A	