

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第5000496号
(P5000496)

(45) 発行日 平成24年8月15日 (2012. 8. 15)

(24) 登録日 平成24年5月25日 (2012. 5. 25)

(51) Int. Cl.

F I

C O 7 F 15/00 (2006. 01)

C O 7 F 15/00 C S P E

C O 9 K 11/06 (2006. 01)

C O 9 K 11/06 6 6 O

H O 1 L 51/50 (2006. 01)

H O 5 B 33/14 B

H O 5 B 33/22 D

請求項の数 5 (全 87 頁)

(21) 出願番号 特願2007-518583 (P2007-518583)
(86) (22) 出願日 平成17年6月20日 (2005. 6. 20)
(65) 公表番号 特表2008-504342 (P2008-504342A)
(43) 公表日 平成20年2月14日 (2008. 2. 14)
(86) 国際出願番号 PCT/EP2005/052845
(87) 国際公開番号 W02006/000544
(87) 国際公開日 平成18年1月5日 (2006. 1. 5)
審査請求日 平成20年6月18日 (2008. 6. 18)
(31) 優先権主張番号 04102981.0
(32) 優先日 平成16年6月28日 (2004. 6. 28)
(33) 優先権主張国 欧州特許庁 (EP)

(73) 特許権者 396023948
チバ ホールディング インコーポレーテ
ッド
C i b a H o l d i n g I n c .
スイス国, 4 0 5 7 バーゼル, クリベツ
クシュトラーセ 1 4 1
(74) 代理人 100078662
弁理士 津国 肇
(74) 代理人 100113653
弁理士 東田 幸四郎
(74) 代理人 100116919
弁理士 齋藤 房幸
(74) 復代理人 100125793
弁理士 川田 秀美

最終頁に続く

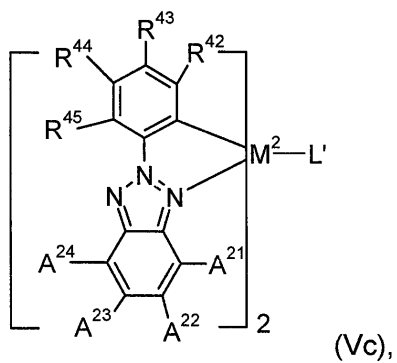
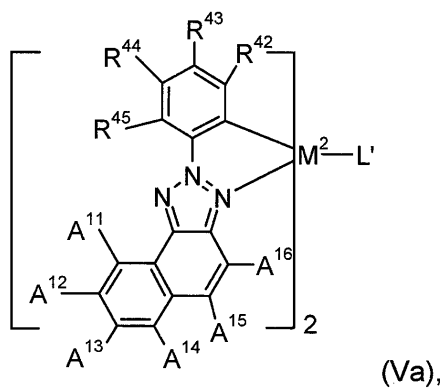
(54) 【発明の名称】 トリアゾールとベンゾトリアゾールのエレクトロルミネセンス金属錯体

(57) 【特許請求の範囲】

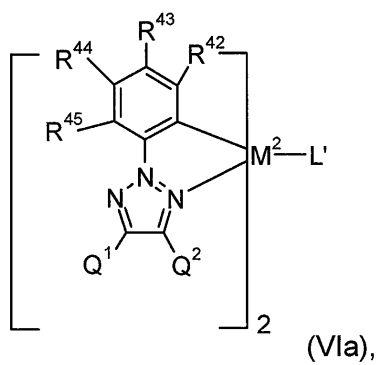
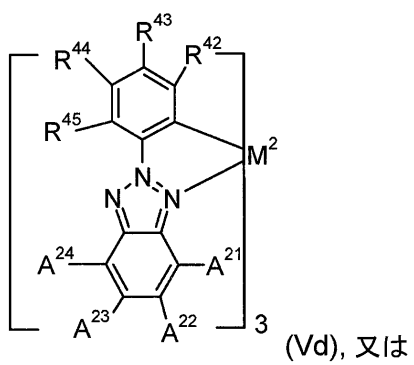
【請求項 1】

下記の構造 (V a) 、 (V c) 、 (V d) 、又は (V I a) :

【化 17】



10



20

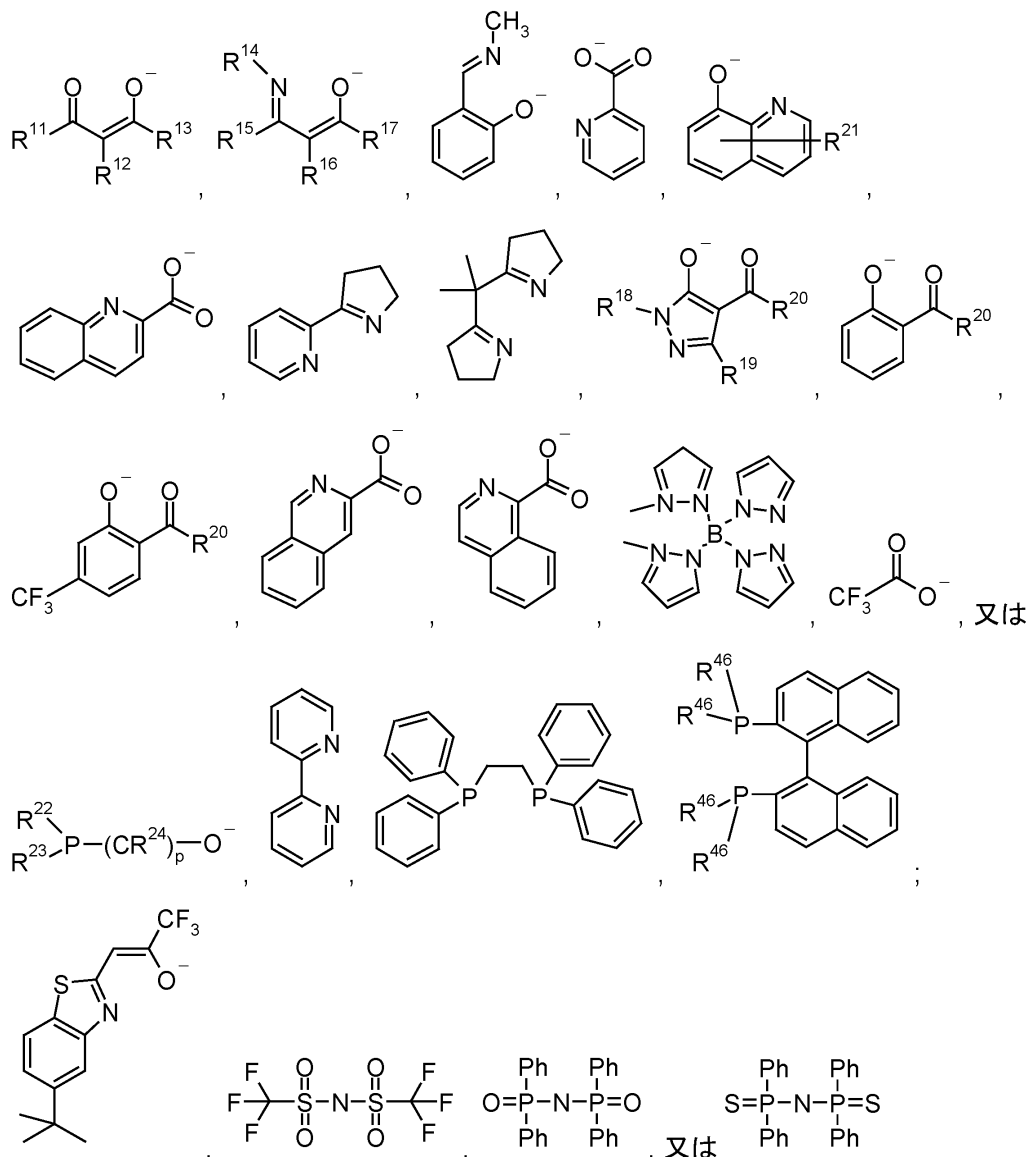
〔式中、

 M^2 は、I rであり、

Q^1 及び Q^2 は、互いに独立して、水素、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル又は $C_6 \sim C_{18}$ アリールであり、

L は、下記：

【化 18】



から選択される二座配位子であり、

ここで、

R^{11} 及び R^{15} は、互いに独立して、水素、 $C_1 \sim C_8$ アルキル、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール、 $C_2 \sim C_{10}$ ヘテロアリール又は $C_1 \sim C_8$ ペルフルオロアルキルであり、

R^{12} 及び R^{16} は、互いに独立して、水素又は $C_1 \sim C_8$ アルキルであり、

R^{13} 及び R^{17} は、互いに独立して、水素、 $C_1 \sim C_8$ アルキル、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール、 $C_2 \sim C_{10}$ ヘテロアリール、 $C_1 \sim C_8$ ペルフルオロアルキル又は $C_1 \sim C_8$ アルコキシであり、

R^{14} は、 $C_1 \sim C_8$ アルキル、 $C_6 \sim C_{10}$ アリール又は $C_7 \sim C_{11}$ アラルキルであり、

R^{18} は、 $C_6 \sim C_{10}$ アリールであり、

R^{19} は、 $C_1 \sim C_8$ アルキルであり、

R^{20} は、 $C_1 \sim C_8$ アルキル又は $C_6 \sim C_{10}$ アリールであり、

R^{21} は、水素、部分的に若しくは完全にフッ素化されていてもよい、 $C_1 \sim C_8$ アルキル又は $C_1 \sim C_8$ アルコキシであり、

R^{22} 及び R^{23} は、互いに独立して、 $C_n(H+F)_{2n+1}$ 又は $C_6(H+F)_5$ であり、 R^{24} は、同一又はそれぞれの場合に異なっていることができ、 H 又は $C_n(H+F)_{2n+1}$ から選択され、

p は、2 又は 3 であり、

A^{11} は、水素であり、

10

20

30

40

50

A¹²は、水素であり、

A¹³は、水素であり、

A¹⁴は、水素又はC₆～C₁₈アリールであり、

A¹⁵は、水素又はC₆～C₁₈アリールであり、

A¹⁶は、水素であり、

A²¹は、水素であり、

A²²は、水素又はC₆～C₁₀アリールであり、

A²³は、水素又はC₆～C₁₀アリールであり、

A²⁴は、水素であり、

R⁴²は、H、F、C₁～C₄アルキル、C₁～C₈アルコキシ又はC₁～C₄ペルフルオロアルキルであり、 10

R⁴³は、H、F、C₁～C₄アルキル、C₁～C₈アルコキシ、C₁～C₄ペルフルオロアルキル又はC₆～C₁₀アリールであり、

R⁴⁴は、H、F、C₁～C₄アルキル、C₁～C₈アルコキシ又はC₁～C₄ペルフルオロアルキルであり、

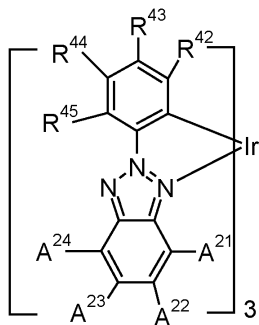
R⁴⁵は、H、F、C₁～C₄アルキル、C₁～C₈アルコキシ又はC₁～C₄ペルフルオロアルキルであり、そして

R⁴⁶は、C₁～C₈アルキル、C₆～C₁₈アリール、C₁～C₈アルコキシ、又はC₁～C₈アルキルで置換されているC₆～C₁₈アリールである〕
を有する化合物。 20

【請求項2】

以下のいずれかである、請求項1記載の化合物：

【表 1】



10

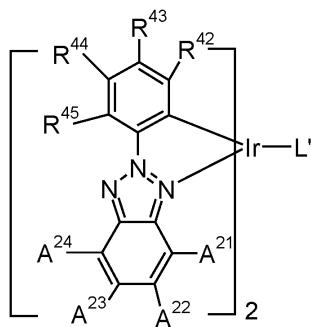
化合物	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	A ²⁴	A ²³	A ²²	A ²¹
A-1	H	H	H	H	H	H	H	H
A-2	F	H	H	H	H	H	H	H
A-3	H	H	F	H	H	H	H	H
A-4	F	H	F	H	H	H	H	H
A-5	F	H	H	F	H	H	H	H
A-6	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
A-7	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
A-8	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
A-9	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
A-10	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
A-11	H	H	Ph	H	H	H	H	H
A-12	H	H	Ome	H	H	H	H	H
A-13	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
A-14	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
A-15	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
A-16	H	H	t-Bu	H	H	H	H	H
A-17	H	²⁾	H	H	H	H	H	H

20

30

¹⁾ 異性体の混合物.

²⁾ 2,4,4-トリメチルペンタ-2-イル.



40

化合物	L'	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	A ²⁴	A ²³	A ²²	A ²¹
B-1	A ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
B-2	A ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
B-3	A ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
B-4	A ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
B-5	A ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H
B-6	A ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
B-7	A ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
B-8	A ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
B-9	A ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
B-10	A ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
B-11	A ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
B-12	A ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H
B-13	A ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
B-14	A ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
B-15	A ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
B-16	A ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
B-17	B ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
B-18	B ²⁾	F	F	H	H	H	H	H	H
B-19	B ²⁾	H	H	H	F	H	H	H	H
B-20	B ²⁾	F	F	H	F	H	H	H	H
B-21	B ²⁾	F	F	H	H	F	H	H	H
B-22	B ²⁾	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H
B-23	B ²⁾	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
B-24	B ²⁾	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H	H	H
B-25	B ²⁾	H	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
B-26	B ²⁾	H	H	H	CH ₃	H	H	H	H
B-27	B ²⁾	H	H	H	Ph	H	H	H	H
B-28	B ²⁾	H	H	H	OMe	H	H	H	H
B-29	B ²⁾	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H
B-30	B ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
B-31	B ²⁾	H	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾
B-32	B ²⁾	H	H	t-Bu	H	H	H	H	H
B-33	C ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
B-34	C ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
B-35	C ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H

10

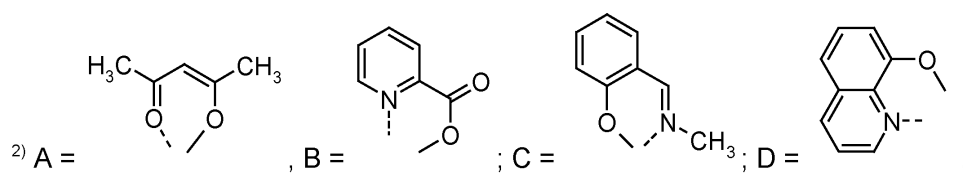
20

30

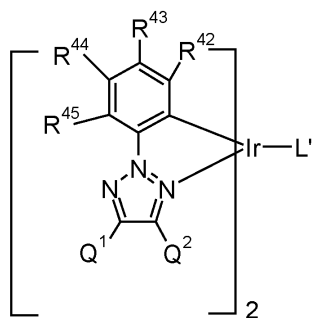
40

B-36	C ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
B-37	C ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H
B-38	C ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
B-39	C ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
B-40	C ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
B-41	C ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
B-42	C ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
B-43	C ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
B-44	C ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H
B-45	C ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
B-46	C ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
B-47	C ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
B-48	C ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
B-49	D ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
B-50	D ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
B-51	D ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
B-52	D ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
B-53	D ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H
B-54	D ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
B-55	D ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
B-56	D ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
B-57	D ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
B-58	D ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
B-59	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
B-60	D ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H
B-61	D ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
B-62	D ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
B-63	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
B-64	D ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
B-65	A	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
B-66	B	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
B-67	C	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
B-68	D	H	³⁾	H	H	H	H	H	H

¹⁾ 異性体の混合物.



³⁾ 2,4,4-トリメチルペンタ-2-イル.



化合物	L'	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	Q ¹	Q ²
D-1	A ⁽²⁾	H	H	H	H	H	H
D-2	A ⁽²⁾	F	H	H	H	H	H
D-3	A ⁽²⁾	H	H	F	H	H	H
D-4	A ⁽²⁾	F	H	F	H	H	H
D-5	A ⁽²⁾	F	H	H	F	H	H
D-6	A ⁽²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H
D-7	A ⁽²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H
D-8	A ⁽²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H
D-9	A ⁽²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H
D-10	A ⁽²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H
D-11	A ⁽²⁾	H	H	Ph	H	H	H
D-12	A ⁽²⁾	H	H	OMe	H	H	H
D-13	A ⁽²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H
D-14	A ⁽²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
D-15	A ⁽²⁾	H	H	Ph	H	H/Ph ⁽¹⁾	Ph/H ⁽¹⁾
D-16	A ⁽²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H
D-17	B ⁽²⁾	H	H	H	H	H	H
D-18	B ⁽²⁾	F	H	H	H	H	H
D-19	B ⁽²⁾	H	H	F	H	H	H
D-20	B ⁽²⁾	F	H	F	H	H	H
D-21	B ⁽²⁾	F	H	H	F	H	H
D-22	B ⁽²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H
D-23	B ⁽²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H
D-24	B ⁽²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H
D-25	B ⁽²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H
D-26	B ⁽²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H
D-27	B ⁽²⁾	H	H	Ph	H	H	H
D-28	B ⁽²⁾	H	H	OMe	H	H	H

10

20

30

40

D-29	B ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H
D-30	B ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
D-31	B ²⁾	H	H	Ph	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾
D-32	B ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H
D-33	C ²⁾	H	H	H	H	H	H
D-34	C ²⁾	F	H	H	H	H	H
D-35	C ²⁾	H	H	F	H	H	H
D-36	C ²⁾	F	H	F	H	H	H
D-37	C ²⁾	F	H	H	F	H	H
D-38	C ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H
D-39	C ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H
D-40	C ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H
D-41	C ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H
D-42	C ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H
D-43	C ²⁾	H	H	Ph	H	H	H
D-44	C ²⁾	H	H	OMe	H	H	H
D-45	C ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H
D-46	C ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
D-47	C ²⁾	H	H	Ph	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾
D-48	C ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H
D-49	D ²⁾	H	H	H	H	H	H
D-50	D ²⁾	F	H	H	H	H	H
D-51	D ²⁾	H	H	F	H	H	H
D-52	D ²⁾	F	H	F	H	H	H
D-53	D ²⁾	F	H	H	F	H	H
D-54	D ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H
D-55	D ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H
D-56	D ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H
D-57	D ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H
D-58	D ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H
D-59	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H
D-60	D ²⁾	H	H	OMe	H	H	H
D-61	D ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H
D-62	D ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
D-63	D ²⁾	H	H	Ph	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾
D-64	D ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H

10

20

30

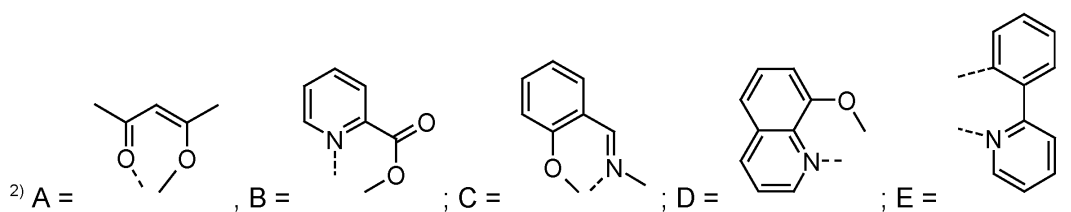
40

D-65	E2)	H	H	H	H	H	H
D-66	E2)	F	H	H	H	H	H
D-67	E2)	H	H	F	H	H	H
D-68	E2)	F	H	F	H	H	H
D-69	E2)	F	H	H	F	H	H
D-70	E2)	H	H	CF ₃	H	H	H
D-71	E2)	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H
D-72	E2)	CF ₃	H	H	H	H	H
D-73	E2)	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H
D-74	E2)	H	H	CH ₃	H	H	H
D-75	E2)	H	H	Ph	H	H	H
D-76	E2)	H	H	OMe	H	H	H
D-77	E2)	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H
D-78	E2)	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
D-79	E2)	H	H	Ph	H	H/Ph1)	Ph/H1)
D-80	E2)	H	t-Bu	H	H	H	H

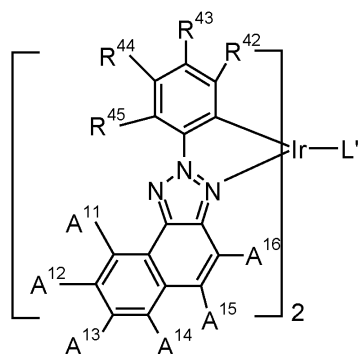
10

20

¹⁾ 異性体の混合物.



30



化合物	L'	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	A ¹¹	A ¹²	A ¹³	A ¹⁴	A ¹⁵	A ¹⁶
E-1	A ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
E-2	A ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
E-3	A ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H	H	H
E-4	A ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H	H	H
E-5	A ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H	H	H
E-6	A ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H	H	H

40

E-7	A ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
E-8	A ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H
E-9	A ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H	H	H
E-10	A ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H
E-11	A ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H	H	H
E-12	A ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H	H	H
E-13	A ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H	H	H
E-14	A ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H	H
E-15	A ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
E-16	A ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
E-17	B ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
E-18	B ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
E-19	B ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H	H	H
E-20	B ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H	H	H
E-21	B ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H	H	H
E-22	B ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H	H	H
E-23	B ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
E-24	B ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H
E-25	B ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H	H	H
E-26	B ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H
E-27	B ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H	H	H
E-28	B ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H	H	H
E-29	B ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H	H	H
E-30	B ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H	H
E-31	B ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
E-32	B ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
E-33	C ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
E-34	C ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
E-35	C ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H	H	H
E-36	C ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H	H	H
E-37	C ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H	H	H
E-38	C ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H	H	H
E-39	C ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
E-40	C ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H
E-41	C ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H	H	H
E-42	C ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H

10

20

30

40

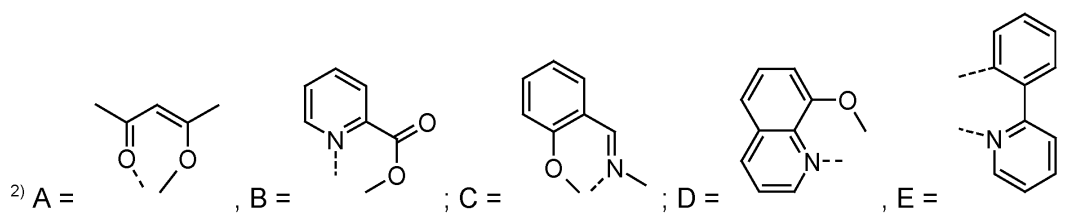
E-43	C ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H	H	H
E-44	C ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H	H	H
E-45	C ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H	H	H
E-46	C ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H	H
E-47	C ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
E-48	C ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
E-49	D ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
E-50	D ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
E-51	D ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H	H	H
E-52	D ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H	H	H
E-53	D ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H	H	H
E-54	D ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H	H	H
E-55	D ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
E-56	D ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H
E-57	D ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H	H	H
E-58	D ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H
E-59	D ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H	H	H
E-60	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H	H	H
E-61	D ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H	H	H
E-62	D ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H	H
E-63	D ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
E-64	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H

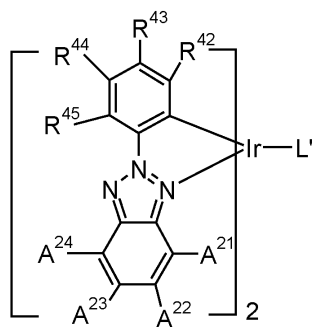
10

20

1) 異性体の混合物.

30





化合物	L'	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	A ²⁴	A ²³	A ²²	A ²¹
S-1	A ⁽²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
S-2	A ⁽²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
S-3	A ⁽²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
S-4	A ⁽²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
S-5	A ⁽²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H
S-6	A ⁽²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
S-7	A ⁽²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
S-8	A ⁽²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
S-9	A ⁽²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
S-10	A ⁽²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
S-11	A ⁽²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
S-12	A ⁽²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H
S-13	A ⁽²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
S-14	A ⁽²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
S-15	A ⁽²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ⁽¹⁾	Ph/H ⁽¹⁾	H
S-16	A ⁽²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
S-17	B ⁽²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
S-18	B ⁽²⁾	F	F	H	H	H	H	H	H
S-19	B ⁽²⁾	H	H	H	F	H	H	H	H
S-20	B ⁽²⁾	F	F	H	F	H	H	H	H
S-21	B ⁽²⁾	F	F	H	H	F	H	H	H
S-22	B ⁽²⁾	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H
S-23	B ⁽²⁾	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
S-24	B ⁽²⁾	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H	H	H
S-25	B ⁽²⁾	H	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
S-26	B ⁽²⁾	H	H	H	CH ₃	H	H	H	H
S-27	B ⁽²⁾	H	H	H	Ph	H	H	H	H
S-28	B ⁽²⁾	H	H	H	OMe	H	H	H	H

10

20

30

40

S-29	B ⁽²⁾	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H
S-30	B ⁽²⁾	CH ₃	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
S-31	B ⁽²⁾	H	H	H	Ph	H	H	H/Ph ⁽¹⁾	Ph/H ⁽¹⁾
S-32	B ⁽²⁾	H	H	t-Bu	H	H	H	H	H
S-33	C ⁽²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
S-34	C ⁽²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
S-35	C ⁽²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
S-36	C ⁽²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
S-37	C ⁽²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H
S-38	C ⁽²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
S-39	C ⁽²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
S-40	C ⁽²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
S-41	C ⁽²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
S-42	C ⁽²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
S-43	C ⁽²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
S-44	C ⁽²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H
S-45	C ⁽²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
S-46	C ⁽²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
S-47	C ⁽²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ⁽¹⁾	Ph/H ⁽¹⁾	H
S-48	C ⁽²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
S-49	D ⁽²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
S-50	D ⁽²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
S-51	D ⁽²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
S-52	D ⁽²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
S-53	D ⁽²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H
S-54	D ⁽²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
S-55	D ⁽²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
S-56	D ⁽²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
S-57	D ⁽²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
S-58	D ⁽²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
S-59	D ⁽²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
S-60	D ⁽²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H
S-61	D ⁽²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
S-62	D ⁽²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
S-63	D ⁽²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ⁽¹⁾	Ph/H ⁽¹⁾	H
S-64	D ⁽²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H

10

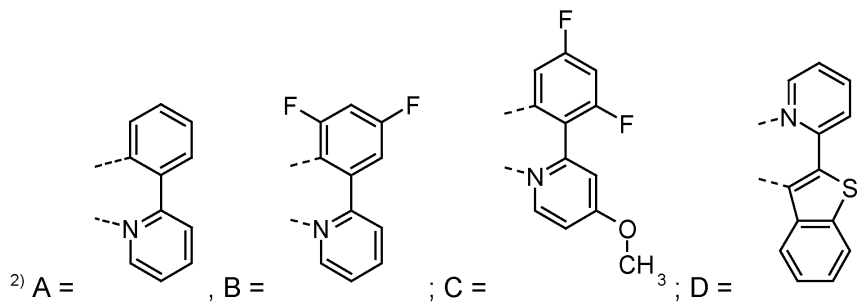
20

30

40

S-65	A	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
S-66	B	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
S-67	C	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
S-68	D	H	³⁾	H	H	H	H	H	H

¹⁾ 異性体の混合物.



³⁾ 2,4,4-トリメチルペンタ-2-イル.

【請求項 3】

請求項 1 又は 2 記載の化合物を含む発光層を含む、有機電子デバイス。

【請求項 4】

ポリビニル - カルバゾール、N, N - ジフェニル - N, N - ビス (3 - メチルフェニル) - [1, 1 - ビフェニル] - 4, 4 - ジアミン (TPD)、1, 1 - ビス [(ジ - 4 - トリルアミノ) フェニル] シクロヘキサン (TAPC)、N, N - ビス (4 - メチルフェニル) - N, N - ビス (4 - エチルフェニル) - [1, 1 - (3, 3 - ジメチル) ビフェニル] 4, 4 - ジアミン (ETPD)、テトラキス - (3 - メチルフェニル) - N, N, N, N - 2, 5 - フェニレンジアミン (PDA)、a - フェニル - 4 - N, N - ジフェニルアミノスチレン (TPS)、p - (ジエチルアミノ) ベンズアルデヒドジフェニルヒドラゾン (DEH)、トリフェニルアミン (TPA)、ビス [4 - (N, N - ジエチルアミノ) - 2 - メチルフェニル] (4 - メチルフェニル) メタン (MPMP)、1 - フェニル - 3 - [p - (ジエチルアミノ) スチリル] - 5 - [p - (ジエチルアミノ) フェニル] ピラゾリン (PPR 又は DEASP)、1, 2 - トランス - ビス (9H - カルバゾール - 9 - イル) シクロブタン (DCZB)、N, N, N, N - テトラキス (4 - メチルフェニル) - (1, 1 - ビフェニル) - 4, 4 - ジアミン (TTB)、ポルフィリン化合物、及びこれらの組み合わせから選択される正孔輸送層を更に含む、請求項 3 記載のデバイス。

【請求項 5】

電子デバイス中、有機発光ダイオード (OLED) 中での、バイオアッセイにおけるリン光性指示薬としての請求項 1 又は 2 記載の化合物の使用。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、トリアゾールとベンゾトリアゾールのエレクトロルミネセンス金属錯体、それらの調製方法、金属錯体を含む電子デバイス、及び電子デバイス、特に有機発光ダイオード (OLED) における、酸素感応指示薬としての、バイオアッセイにおけるリン光性指示薬としての又は触媒としてのそれらの使用に関する。

【0002】

ディスプレイを形成する発光ダイオードなどの発光する有機電子デバイスは、多くの異なる種類の電子装置に存在する。そのような全てのデバイスにおいて、有機活性層が2つの電気接触層の間に挟まれている。少なくとも1つの電気接触層は、光が電気接触層を通過できるように光透過性である。有機活性層は、電気接触層の全体への電気の適用によって、光透過性電気接触層を通して発光する。

10

20

30

40

50

【 0 0 0 3 】

発光ダイオードに活性成分として有機エレクトロルミネセンス化合物を使用することは、よく知られている。アントラセン、チアジアゾール誘導体及びクマリン誘導体のような単純な有機分子は、エレクトロルミネセンスを示すことが知られている。半導性共役ポリマーも、例えばUS - B - 5, 247, 190、US - B - 5, 408, 109及びEP - A - 443 861で開示されているように、エレクトロルミネセンス成分として使用されている。8 - ヒドロキシキノレートと三価金属イオン、特にアルミニウムとの錯体が、例えばUS - A - 5, 552, 678で開示されているように、エレクトロルミネセンス成分として広く使用されてきた。

【 0 0 0 4 】

Burrows及びThompsonは、fac - トリス (2 - フェニルピリジン) イリジウムが有機発光デバイスで活性成分として使用できることを報告した。(Appl. Phys. Lett. 1999, 75, 4.)その性能は、イリジウム化合物がホスト伝導性物質中に存在すると最大になる。Thompsonは、更に、活性層がfac - トリス [2 - (4 , 5 - ジフルオロフェニル) ピリジン] - C . s u p . 2 , N] イリジウム (I I I) でドーピングしたポリ (N - ビニルカルバゾール) であるデバイスを報告した。(Polymer Preprints 2000, 41(1), 770.)

【 0 0 0 5 】

J. A. C. Allison et al., J. Heterocyclic Chem. 12 (1975) 1275-1277は、パラジウムの2 - フェニル - 1 , 2 , 3 - トリアゾールクロコ錯体及び塩素化フェニルトリアジンの合成における触媒としてのそれらの使用を開示する。

【 0 0 0 6 】

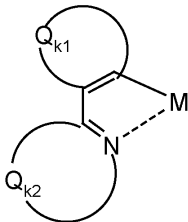
M. Nonoyama and C. Hayata, Transition Met. Chem. 3 (1978) 366-369は、2 - アリール - 4 , 5 - ジメチル - 1 , 2 , 3 - トリアゾール [H (C - N)] と、パラジウム (I I) 、白金 (I I) 、ロジウム (I I) 及びイリジウム (I I I) の塩化物とのシクロメタル化を記載し、その結果、M = P d又はP tでは [M C l (C - N)]₂種をもたらす。これらの錯体は、ピリジン及びトリ - n - ブチルホスフィンなどの単座配位子Lと反応して、M C l (C - N) L及びM C l (C - N)₂L錯体を与える。

【 0 0 0 7 】

US 20020055014は、リン光性化合物を含む発光デバイスに関する。好ましいリン光性化合物は、下記で示される式：

【 0 0 0 8 】

【 化 2 1 】



【 0 0 0 9 】

(式中、Mは、遷移金属を表わし；Q_{k1}は、5員又は6員芳香族環を形成するのに必要な原子群を表わし；そしてQ_{k2}は、5員又は6員芳香族アゾール環を形成するのに必要な原子群を表わす)により表わされる部分構造を有する化合物を含む。Q_{k2}により完成した5員又は6員芳香族アゾール環は、トリアゾールを含んでもよいが、1, 2, 3 - トリアゾールは含まない。

【 0 0 1 0 】

US 20010019782は、下記式：

【 0 0 1 1 】

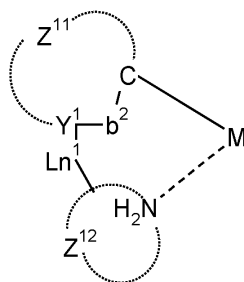
10

20

30

40

【化 2 2】



【0012】

10

(式中、 Z^{11} 及び Z^{12} は、それぞれ、炭素原子と窒素原子のうちの少なくとも1つを持つ5員又は6員環を形成するのに必要な非金属原子群を表わし、前記環は、場合により、置換基を有するか又は他の環と縮合環を形成し； $L n^1$ は、二価基を表わし； Y^1 は、窒素原子又は炭素原子を表わし；そして b^2 は、単結合又は二重結合を表わす)により表わされる部分構造を有する化合物を含む発光物質を開示する。そのうち、 Z^{11} 及び Z^{12} により形成される5員又は6員環の好ましい例は、1, 2, 3 - トリアゾール環及び1, 2, 4 - トリアゾール環である。二価基 $L n^1$ は、単結合を含まない。

【0013】

ベンゾイミダゾール系配位子を含有するリン光性ピス - シクロメタル化イリジウム錯体は、W.-S. Huang et al. in Chem. Mater. 16 (2004) 2480-2488により記載されている。

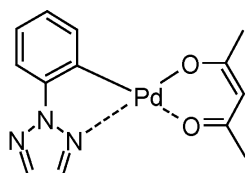
20

【0014】

以下のシクロパラジウム化 (cyclopalladated) 金属錯体の 1H 及び ^{13}C NMRが、P. J. Steel, G. B. Caygill, Journal of Organometallic Chemistry 327 (1987) 101-114に記載されている：

【0015】

【化 2 3】



30

【0016】

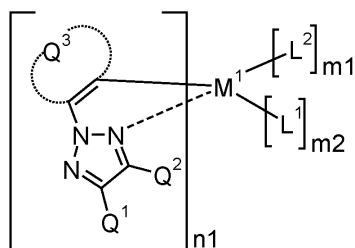
しかし、改善された効率を有するエレクトロルミネセンス化合物が継続的に要望されている。

【0017】

したがって、本発明は、式 (I)：

【0018】

【化 2 4】



(I)

40

【0019】

(式中、

$n 1$ は、1 ~ 3 の整数であり、

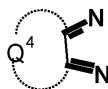
$m 1$ 及び $m 2$ は、0、1 又は 2 の整数であり、

50

M¹は、40を超える原子量の金属であり、
 L¹は、単座配位子又は二座配位子であり、
 L²は、単座配位子であり、
 Q¹及びQ²は、互いに独立して、有機置換基であるか、又は
 Q¹及びQ²は、それらが結合している炭素原子と一緒にあって、下記基：

【0020】

【化25】



10

【0021】

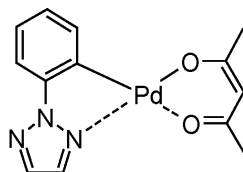
を形成し、

ここでQ⁴は、場合により置換されていることができる縮合芳香族又は複素芳香族環を形成する基を表わし、そして

Q³は、場合により置換されていることができる縮合芳香族又は複素芳香族環を形成する基を表わすが、但し、以下の化合物：

【0022】

【化26】



20

【0023】

が除外され、単座配位子がハロゲン原子ではない)で示される化合物、それらの調製方法、金属錯体を含む電子デバイス、及び電子デバイス、特に有機発光ダイオード(OLED)における、酸素感応指示器としての、バイオアッセイにおけるリン光性指示器としての又は触媒としてのそれらの使用を対象とする。

【0024】

本発明は、トリアゾール及び2H-ベンゾトリアゾールそれぞれから誘導される少なくとも1つの配位子を含む金属錯体を対象とする。

30

【0025】

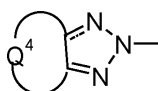
本発明の文脈における2H-ベンゾトリアゾール化合物とは、2H-ベンゾトリアゾール又はヘテロ-2H-ベンゾトリアゾールを意味する。

【0026】

上記で指定された下記：

【0027】

【化27】



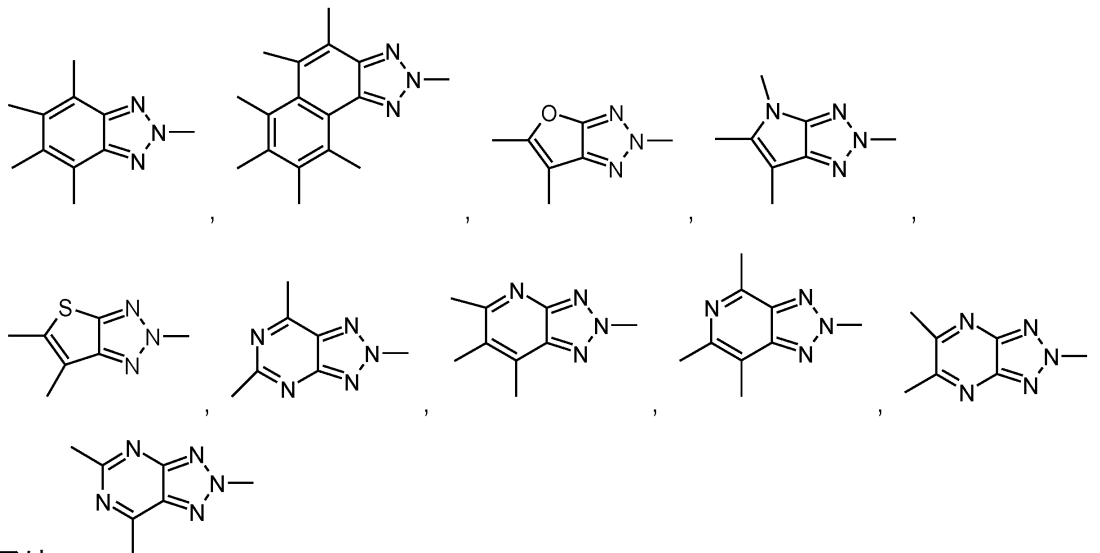
40

【0028】

の基の可能性を特定する例は、以下である。

【0029】

【化 2 8】



10

【 0 0 3 0】

2 H - ベンゾトリアゾール部分の空の原子価は、その置換に限定されない共有結合を表わすことが理解される。本発明によると、金属錯体は、少なくとも1つのトリアゾール又は2 H - ベンゾトリアゾール配位子を含む、すなわち、2つ若しくは3つ又はそれ以上のトリアゾール又は2 H - ベンゾトリアゾール配位子を含んでもよい。

20

【 0 0 3 1】

以下：

【 0 0 3 2】

【化 2 9】



30

【 0 0 3 3】

の特定の例が、下記の Y^1 、 Y^2 及び Y^3 の定義で提示される。

【 0 0 3 4】

用語「配位子」とは、金属イオンの配位圏に結合している、分子、イオン又は原子を意味することが意図される。用語「錯体」とは、名詞として使用される場合、少なくとも1つの金属イオン及び少なくとも1つの配位子を有する化合物を意味することが意図される。用語「基」とは、有機化合物中の置換基又は錯体中の配位子のような、化合物の一部分を意味することが意図される。用語「面」とは、3個の「a」基が全て隣接している、すなわち八面体の1つの三角面の角にある、八面体の形状を有する錯体 Ma_3b_3 の1つの異性体を意味することが意図される。用語「子午線」とは、3個の「a」基が、2個が互いにトランスになるように3か所を占めている、すなわち、3個の「a」基が、子午線を思わせることができる、配位圏を横切る弧を形成する共平面上の3か所に位置する、八面体の形状を有する錯体 Ma_3b_3 の1つの異性体を意味することが意図される。語句「隣接する」とは、デバイスの層について使用される場合、1つの層が別の層の直ぐ隣にあることを必ずしも意味しない。用語「光活性」とは、エレクトロルミネセンス及び/又は感光性を示すあらゆる物質を意味する。

40

【 0 0 3 5】

本発明の金属錯体は、トリアゾール又はベンゾトリアゾール化合物から誘導される少なくとも1つの配位子によって特徴決定される。

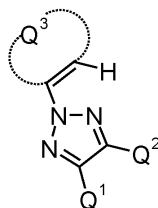
【 0 0 3 6】

50

適切なトリアゾール又はベンゾトリアゾール：

【 0 0 3 7 】

【 化 3 0 】



【 0 0 3 8 】

10

は、既知であるか、又は既知の手順に従って製造できる。適切なベンゾトリアゾールの合成は、例えば、W O 0 3 / 1 0 5 5 3 8 及び P C T 2 0 0 4 E P 5 3 1 1 1、並びにこれらで引用されている参考文献に記載されている。

【 0 0 3 9 】

金属は、一般に、40を超える原子量の金属 M^1 である。

好ましくは、金属 M^1 は、Fe、Ru、Ni、Co、Ir、Pt、Pd、Rh、Re、Os、Tl、Pb、Bi、In、Sn、Sb、Te、Ag 及び Au からなる群より選択される。

より好ましくは、金属は、Ir、Rh 及び Re、並びに Pt 及び Pd から選択され、ここで、Ir が最も好ましい。

20

【 0 0 4 0 】

配位子は、好ましくはモノアニオン性二座配位子である。一般に、これらの配位子は、配位原子としてN、O、P又はSを有し、イリジウムに配位する場合、5員又は6員環を形成する。適切な配位基には、アミノ、イミノ、アミド、アルコキシド、カルボキシレート、ホスフィノ、チオレートなどが含まれる。これらの配位子に適切な親化合物の例には、
 - ジカルボニル（ - エノレート配位子）及びそれらのN及びS類似体；アミノカルボン酸（アミノカルボキシレート配位子）；ピリジンカルボン酸（イミノカルボキシレート配位子）；サリチル酸誘導体（サリチレート配位子）；ヒドロキシキノリン（ヒドロキシキノリネート配位子）及びそれらのS類似体；並びにジアリールホスフィノアルコール（ジアリールホスフィノアルコール配位子）が含まれる。

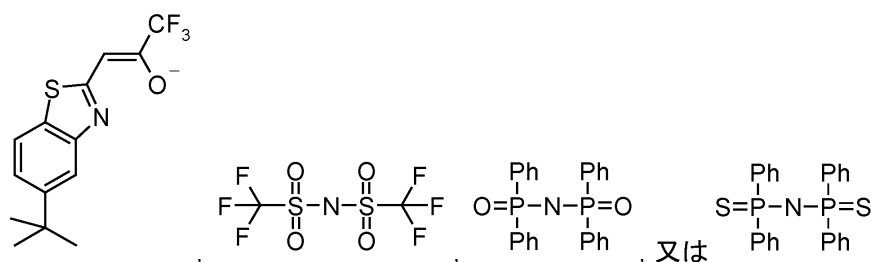
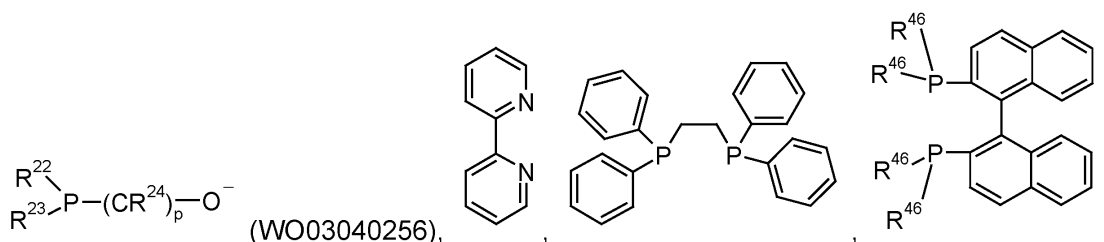
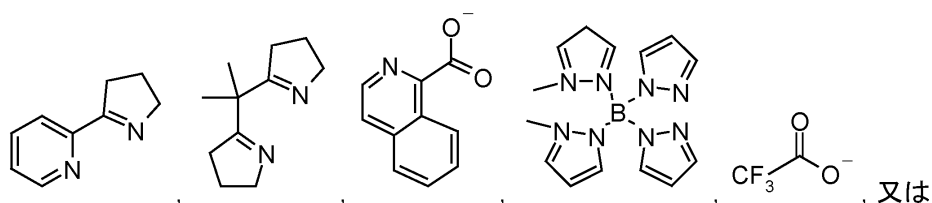
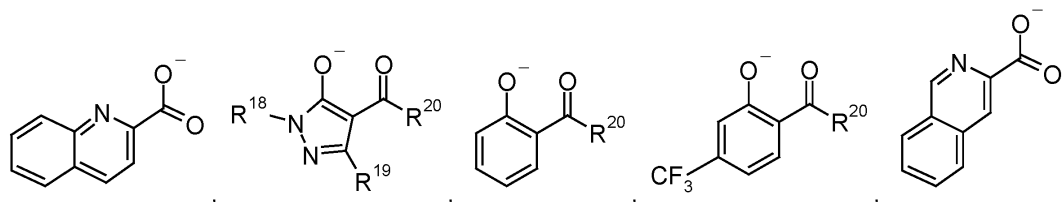
30

【 0 0 4 1 】

二座配位子 L^1 又は L の例は下記であり、

【 0 0 4 2 】

R¹¹-C(=O)-C(R¹²)=C(O⁻)R¹³, R¹⁴-N=C(R¹⁵)-C(R¹⁶)=C(O⁻)R¹⁷,
(US2004/0001970),



ここで、

R^{12} 及び R^{16} は、互いに独立して、水素又は $C_1 \sim C_8$ アルキルであり、

R¹⁴は、C₁～C₈アルキル、C₆～C₁₀アリール又はC₇～C₁₁アラルキルであり、

R¹⁸は、C₆～C₁₀アリールであり、

R¹⁹は、C₁～C₈アルキルであり、

R²⁰は、C₁～C₈アルキル又はC₆～C₁₀アリールであり、

R^{22} 及び R^{23} は、互いに独立して、 $C_n(H + F)_{2n+1}$ 又は $C_6(H + F)_5$ であり、 R^{24} は、同一又はそれぞれの場合に異なっていることができ、 H 又は $C_n(H + F)_{2n+1}$ から選択され、

p は、2 又は 3 であり、そして

R⁴⁶は、C₁~C₁₈アルキル、C₆~C₁₈アリール、又はC₁~C₁₈アルキルで置換され

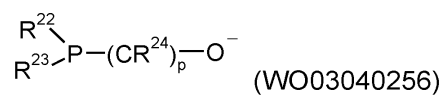
ている $C_6 \sim C_{18}$ アリールである。

【 0 0 4 4 】

適切なホスフィノアルコキシド配位子：

【 0 0 4 5 】

【 化 3 2 】



【 0 0 4 6 】

の例は下記に示されている：

10

3 - (ジフェニルホスフィノ) - 1 - オキシプロパン [d p p O]

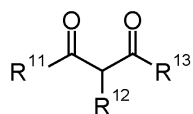
1 , 1 - ビス (トリフルオロメチル) - 2 - (ジフェニルホスフィノ) - エトキシド [t f m d p e O]。

【 0 0 4 7 】

配位子 L が誘導される特に適切な化合物 H L：

【 0 0 4 8 】

【 化 3 3 】



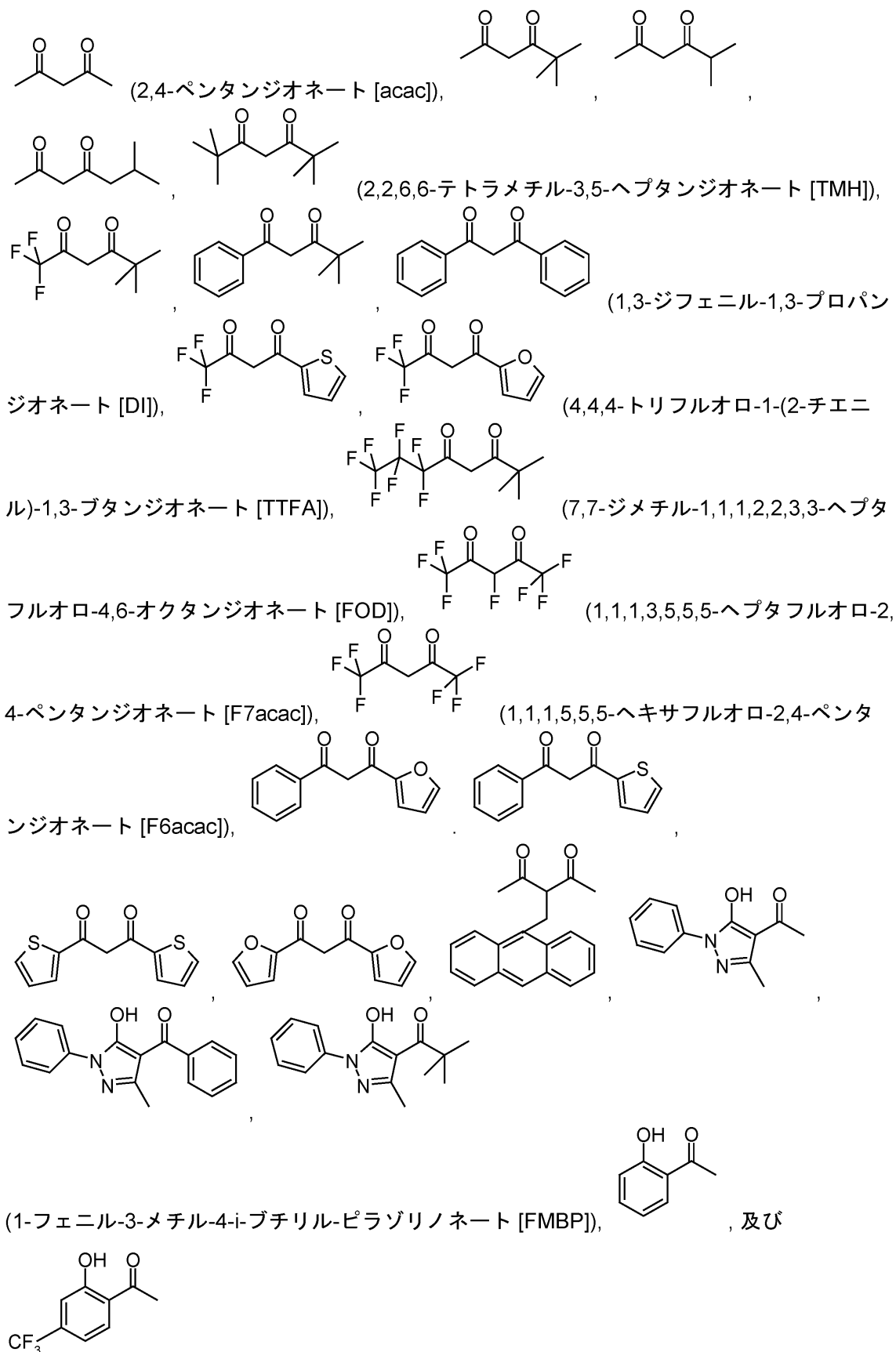
20

【 0 0 4 9 】

の例には、下記が含まれる。

【 0 0 5 0 】

【化 3 4】



【 0 0 5 1】

ヒドロキシキノリン親化合物HLは、部分的又は完全にフッ素化されていてもよいアルキル又はアルコキシ基のような基で置換されていることができる。一般に、これらの化合物は市販されている。適切なヒドロキシキノリネート配位子Lの例には、下記が含まれる

10

20

30

40

50

:

8 - ヒドロキシキノリネート〔8 h q〕

2 - メチル - 8 - ヒドロキシキノリネート〔Me - 8 h q〕

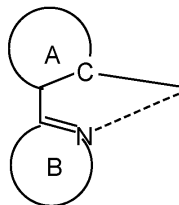
10 - ヒドロキシベンゾキノリネート〔10 - h b q〕。

【0052】

本発明の更なる実施態様において、二座配位子 L^1 又は L は、下記式：

【0053】

【化35】



10

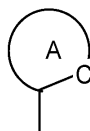
【0054】

(式中、

環A：

【0055】

【化36】



20

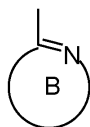
【0056】

は、場合によりヘテロ原子を含有することができる、場合により置換されているアリール基を表わし、

環B：

【0057】

【化37】



30

【0058】

は、場合により更なるヘテロ原子を含有することができる、場合により置換されている窒素含有アリール基を表わすか、又は環Aは、環Aに結合している環Bと一緒に環を形成してもよい)

で示される配位子である。

【0059】

40

好ましい環Aには、フェニル基、置換フェニル基、ナフチル基、置換ナフチル基、フリル基、置換フリル基、ベンゾフリル基、置換ベンゾフリル基、チエニル基、置換チエニル基、ベンゾチエニル基、置換ベンゾチエニル基などが含まれる。置換フェニル基、置換ナフチル基、置換フリル基、置換ベンゾフリル基、置換チエニル基及び置換ベンゾチエニル基の置換基には、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル基、 $C_2 \sim C_{24}$ アルケニル基、 $C_2 \sim C_{24}$ アルキニル基、アリール基、ヘテロアリール基、 $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ基、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキルチオ基、シアノ基、 $C_2 \sim C_{24}$ アシル基、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキルオキシカルボニル基、ニトロ基、ハロゲン原子、アルキレンジオキシ基などが含まれる。

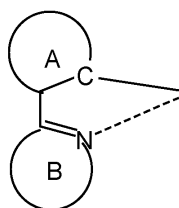
【0060】

前記の実施態様において、二座配位子：

50

【 0 0 6 1 】

【 化 3 8 】

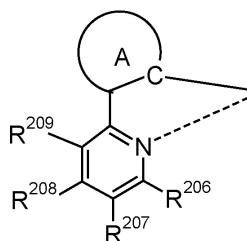


【 0 0 6 2 】

は、好ましくは下記式：

【 0 0 6 3 】

【 化 3 9 】



【 0 0 6 4 】

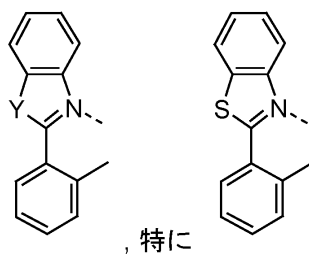
(式中、 R^{206} 、 R^{207} 、 R^{208} 及び R^{209} は、互いに独立して、水素、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_2 \sim C_{24}$ アルケニル、 $C_2 \sim C_{24}$ アルキニル、アリール、ヘテロアリール、 $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキルチオ、シアノ、アシル、アルキルオキシカルボニル、ニトロ基又はハロゲン原子であり；環Aは、場合により置換されているアリール若しくはヘテロアリール基を表わすか；又は環Aは、環Aに結合しているピリジル基と一緒に環を形成してもよく； R^{206} 、 R^{207} 、 R^{208} 及び R^{209} により表わされているアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アリール基、ヘテロアリール基、アルコキシ基、アルキルチオ基、アシル基及びアルキルオキシカルボニル基は、置換されていてもよい)で示される基である。

【 0 0 6 5 】

二座配位子 L^1 、 L 又は L の好ましい種類の例は、下記式：

【 0 0 6 6 】

【 化 4 0 】



【 0 0 6 7 】

(式中、Yは、S、O、 NR^{200} であり、ここで NR^{200} は、水素、シアノ、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルケニル、場合により置換されている $C_6 \sim C_{10}$ アリール、特にフェニル、 $-(CH_2)_r-Ar$ (ここで、 Ar は、場合により置換されている $C_6 \sim C_{10}$ アリール、特に下記：

【 0 0 6 8 】

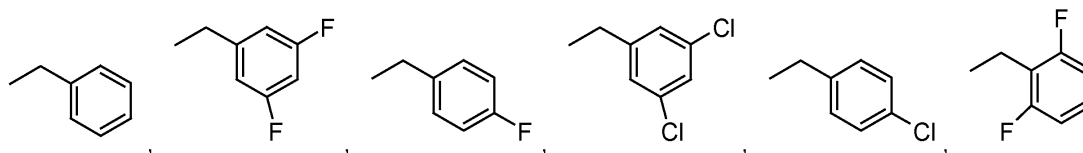
10

20

30

40

【化 4 1】

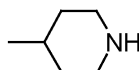


【0069】

である)、基 - $(CH_2)_r \cdot X^{20}$ (ここで、 r は、1 ~ 5 の整数であり、 X^{20} は、ハロゲン、特に F 若しくは Cl ; ヒドロキシ、シアノ、O - $C_1 \sim C_4$ アルキル、ジ ($C_1 \sim C_4$ アルキル) アミノ、アミノ又はシアノである) ; 基 - $(CH_2)_r OC(O)(CH_2)_r$ 10
 CH_3 (ここで、 r は、1 又は 2 であり、そして r は、0 又は 1 である) ; 下記 :

【0070】

【化 4 2】



【0071】

- NH - Ph、- C(O)CH₃、- CH₂ - O - (CH₂)₂ - Si(CH₃)₃、又は下記 :

【0072】

【化 4 3】



【0073】

である]

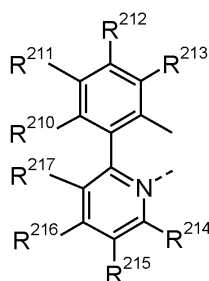
で示される化合物である。

【0074】

二座配位子 L^1 、 L 又は L の別の好ましい種類は、下記式 :

【0075】

【化 4 4】



【0076】

[式中、 R^{214} は、水素、ハロゲン、特に F 又は Cl ; ニトロ、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、 $C_1 \sim C_4$ ペルフルオロアルキル、 $C_1 \sim C_4$ アルコキシ、又は場合により置換されている $C_6 \sim C_{10}$ アリール、特にフェニルであり、

R^{215} は、水素、ハロゲン、特に F 若しくは Cl ; $C_1 \sim C_4$ アルキル、 $C_1 \sim C_4$ ペルフルオロアルキル、場合により置換されている $C_6 \sim C_{10}$ アリール、特にフェニル、又は場合により置換されている $C_6 \sim C_{10}$ ペルフルオロアリール、特に C_6F_5 であり、

R^{216} は、水素、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、 $C_1 \sim C_4$ ペルフルオロアルキル、場合により置換されている $C_6 \sim C_{10}$ アリール、特にフェニル、又は場合により置換されている $C_6 \sim C_{10}$ ペルフルオロアリール、特に C_6F_5 であり、

R^{217} は、水素、ハロゲン、特に F 又は Cl ; ニトロ、シアノ、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、 C_1 50

～ C_4 ペルフルオロアルキル、 $C_1 \sim C_4$ アルコキシ、又は場合により置換されている $C_6 \sim C_{10}$ アリール、特にフェニルであり、

R^{210} は、水素であり、

R^{211} は、水素、ハロゲン、特にF又はCl；ニトロ、シアノ、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルケニル、 $C_1 \sim C_4$ ペルフルオロアルキル、 $-O-C_1 \sim C_4$ ペルフルオロアルキル、トリ($C_1 \sim C_4$ アルキル)シラニル、特にトリ(メチル)シラニル、場合により置換されている $C_6 \sim C_{10}$ アリール、特にフェニル、又は場合により置換されている $C_6 \sim C_{10}$ ペルフルオロアリール、特に C_6F_5 であり、

R^{212} は、水素、ハロゲン、特にF又はCl；ニトロ、ヒドロキシ、メルカプト、アミノ、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルケニル、 $C_1 \sim C_4$ ペルフルオロアルキル、 $C_1 \sim C_4$ アルコキシ、 $-O-C_1 \sim C_4$ ペルフルオロアルキル、 $-S-C_1 \sim C_4$ アルキル、基- $(CH_2)_rX^{20}$ (ここで、 r は、1又は2であり、 X^{20} は、ハロゲン、特にF又はCl；ヒドロキシ、シアノ、 $-O-C_1 \sim C_4$ アルキル、ジ($C_1 \sim C_4$ アルキル)アミノ、 $-CO_2X^{21}$ であり、ここで X^{21} は、H又は $C_1 \sim C_4$ アルキルである)； $-CH=CHCO_2X^{22}$ (ここで X^{22} は、 $C_1 \sim C_4$ アルキルである)； $-CH(O)$ 、 $-SO_2X^{23}$ 、 $-SOX^{23}$ 、 $-NC(O)X^{23}$ 、 $-NSO_2X^{23}$ 、 $-NHX^{23}$ 、 $-N(X^{23})_2$ (ここで X^{23} は、 $C_1 \sim C_4$ アルキルである)；トリ($C_1 \sim C_4$ アルキル)シロキサニル、場合により置換されている $-O-C_6 \sim C_{10}$ アリール、特にフェノキシ、シクロヘキシル、場合により置換されている $C_6 \sim C_{10}$ アリール、特にフェニル、又は場合により置換されている $C_6 \sim C_{10}$ ペルフルオロアリール、特に C_6F_5 であり、そして

R^{213} は、水素、ニトロ、シアノ、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルケニル、 $C_1 \sim C_4$ ペルフルオロアルキル、 $-O-C_1 \sim C_4$ ペルフルオロアルキル、トリ($C_1 \sim C_4$ アルキル)シラニル、又は場合により置換されている $C_6 \sim C_{10}$ アリール、特にフェニルである]で示される化合物である。

【0077】

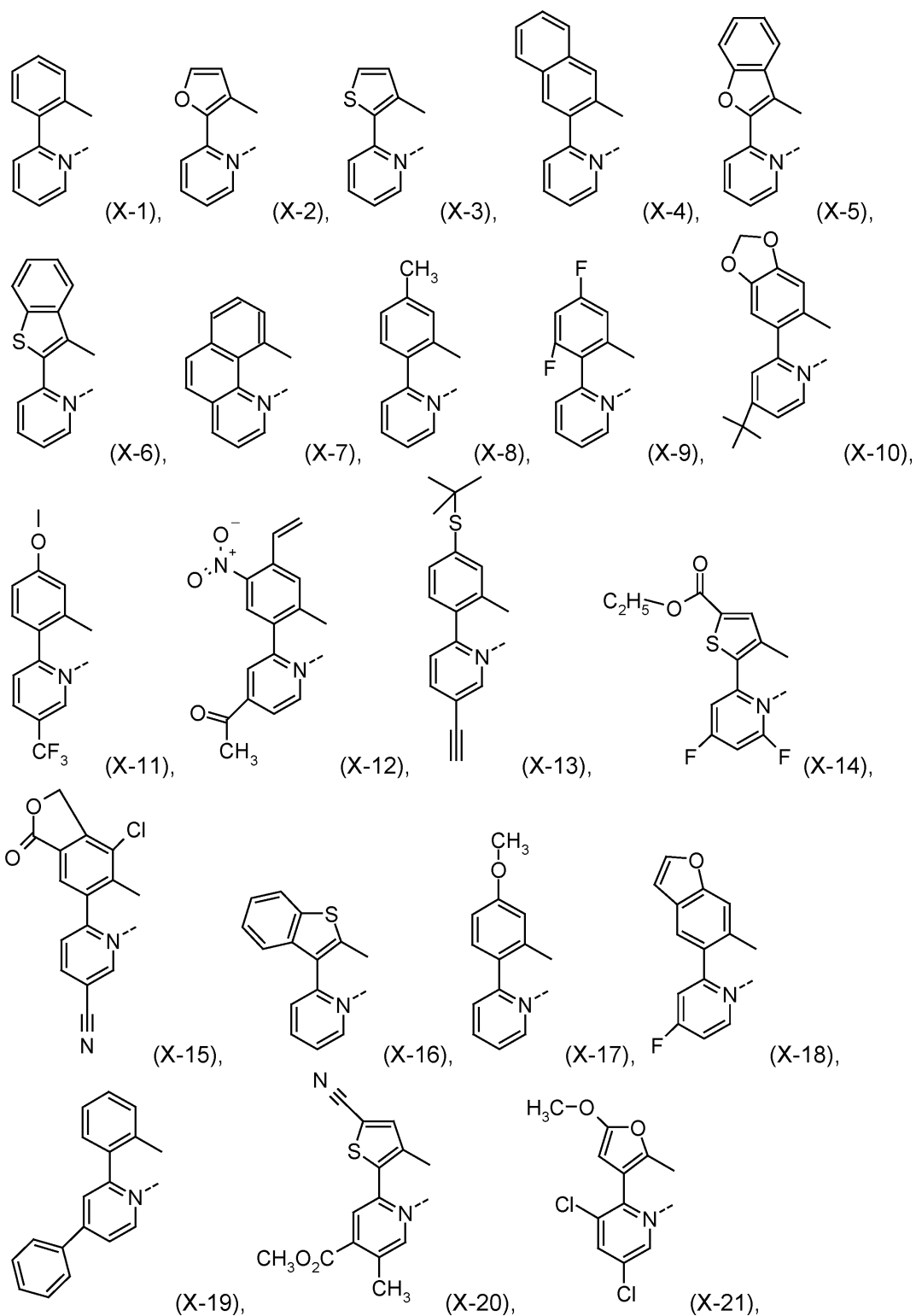
二座配位子 L^1 、 L 又は L の特定の例は、以下の化合物($X1$)～($X47$)である。

【0078】

10

20

【化 4 5】

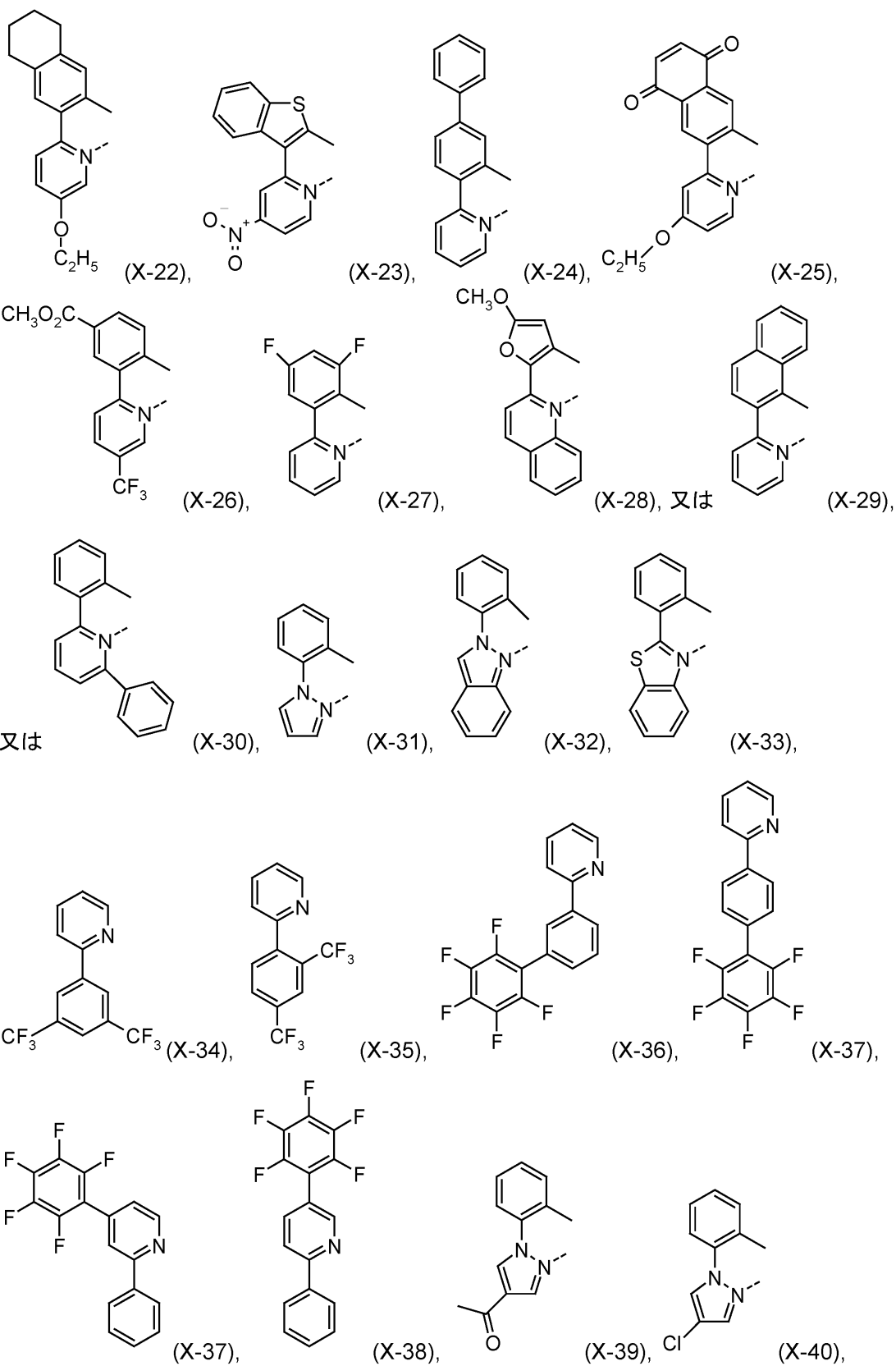


10

20

30

40

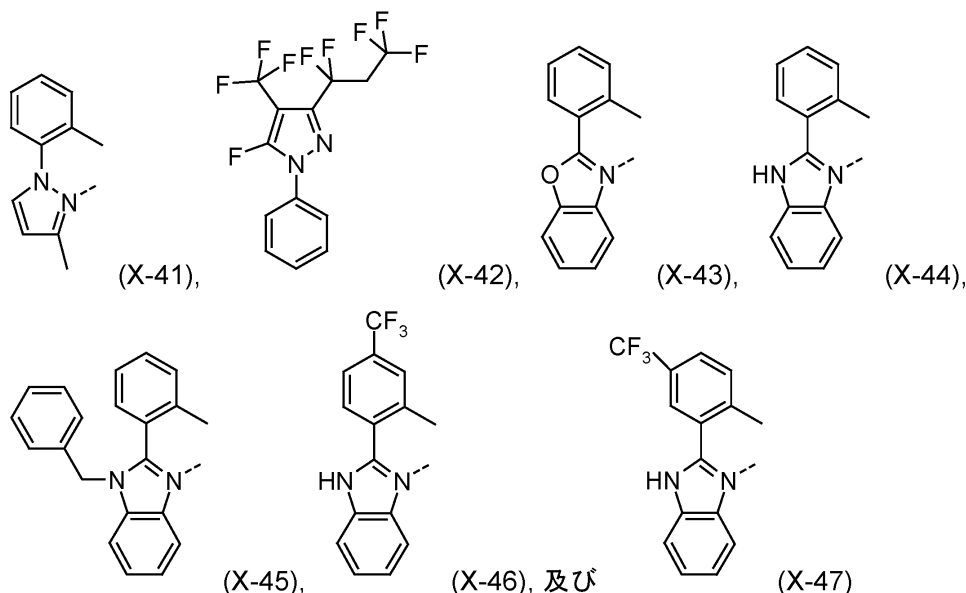


10

20

30

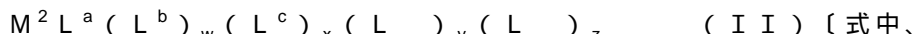
40



10

【 0 0 7 9 】

本発明の好ましい実施態様において、化合物は、式 (I I) :



$w = 0$ 又は 1 であり、 $x = 0$ 又は 1 であり、 $y = 0$ 、 1 又は 2 であり、 $z = 0$ 又は 1 であるが、但し :

$x = 1$ であり、 $y + z = 0$ であり、 $y = 2$ である場合、 $z = 0$ であり ;

M^2 は、 Pt 、 Pd 、 Rh 、 Re 又は Ir であり、

L^a は、二座配位子又は単座配位子であるが、但し : L^a が単座配位子である場合、 $y + z = 2$ であり、 L^a が二座配位子である場合、 $z = 0$ であり ;

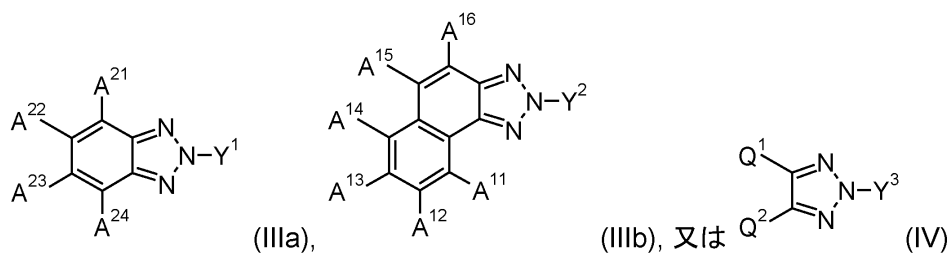
L^b は、単座配位子であり ; そして

L^a 、 L^b 及び L^c は、同一又は互いに異なり、 L^a 、 L^b 及び L^c は、それぞれ下記の構造 (I I I a)、(I I I b) 又は (I V) :

【 0 0 8 0 】

【 化 4 6 】

30



【 0 0 8 1 】

を有し、

ここで、

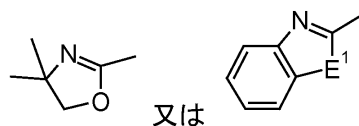
Q^1 及び Q^2 は、互いに独立して、水素、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル又は場合により G で置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリールであり ;

A^{21} 、 A^{22} 、 A^{23} 及び A^{24} は、互いに独立して、水素、 CN 、ハロゲン、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキルチオ、 $C_1 \sim C_{24}$ ペルフルオロアルキル、場合により G で置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール ; $-NR^{25}R^{26}$ 、 $-CONR^{25}R^{26}$ 若しくは $-COOR^{27}$ 、又は場合により G で置換されている $C_2 \sim C_{10}$ ヘテロアリール ; 特に下記式 :

【 0 0 8 2 】

40

【化 4 7】



【 0 0 8 3 】

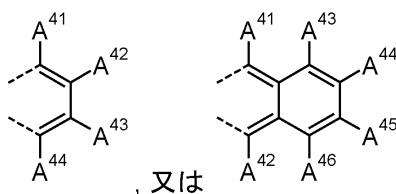
の基であるか、

あるいは

A^{22} 及び A^{23} は、下記式：

【 0 0 8 4 】

【化 4 8】



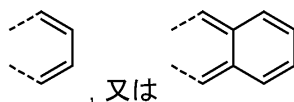
【 0 0 8 5 】

の基であり、

ここで、 A^{41} 、 A^{42} 、 A^{43} 、 A^{44} 、 A^{45} 、 A^{46} 及び A^{47} は、互いに独立して、H、ハロゲン、CN、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ ペルフルオロアルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキルチオ、場合により G で置換されていてもよい $C_6 \sim C_{18}$ アリール、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $-CONR^{25}R^{26}$ 若しくは $-COOR^{27}$ 、又は $C_2 \sim C_{10}$ ヘテロアリール；特に下記：

【 0 0 8 6 】

【化 4 9】



【 0 0 8 7 】

であり、

A^{11} 、 A^{12} 、 A^{13} 、 A^{14} 、 A^{15} 及び A^{16} は、互いに独立して、H、CN、ハロゲン、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ ペルフルオロアルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキルチオ、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $-CONR^{25}R^{26}$ 若しくは $-COOR^{27}$ 、又は場合により G で置換されている $C_2 \sim C_{10}$ ヘテロアリールであり；

ここで、

E^1 は、O、S 又は NR^{25} であり、

R^{25} 及び R^{26} は、互いに独立して、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール、 $C_7 \sim C_{18}$ アラルキル又は $C_1 \sim C_{24}$ アルキルであり、 R^{27} は、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール又は $C_7 \sim C_{18}$ アラルキルであり；

Y^1 、 Y^2 及び Y^3 は、互いに独立して、下記式：

【 0 0 8 8 】

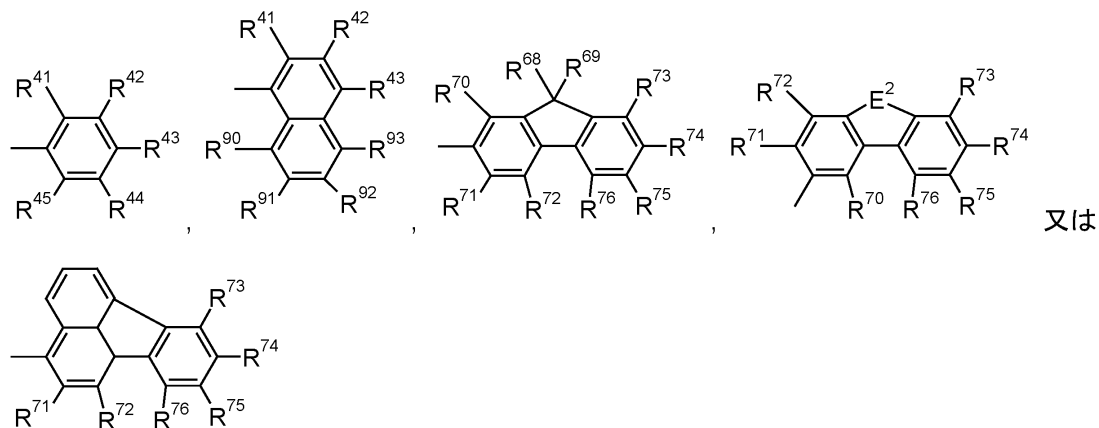
10

20

30

40

【化50】



10

【0089】

の基であり、

ここで、

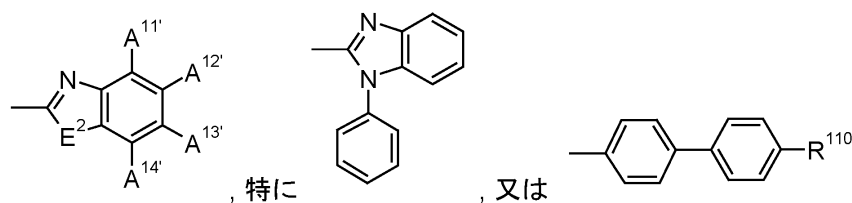
 R^{41} は、 M^2 への結合であり、 R^{71} は、 M^2 への結合であり、

R^{42} は、水素、又は $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、CN、Fで置換されている $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、ハロゲン、特にF、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール、 $C_1 \sim C_{12}$ アルキルで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール、又は $C_1 \sim C_8$ アルコキシであり、

R^{43} は、水素、CN、ハロゲン、特にF、Fで置換されている $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール、 $C_1 \sim C_{12}$ アルキルで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール、若しくは $C_1 \sim C_8$ アルコキシ、 $-CONR^{25}R^{26}$ 、 $-COOR^{27}$ 、下記：

【0090】

【化51】



30

【0091】

であり、

ここで、

E^2 は、 $-S-$ 、 $-O-$ 又は $-NR^{25'}$ であり、 $R^{25'}$ は、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル又は $C_6 \sim C_{10}$ アリールであり、

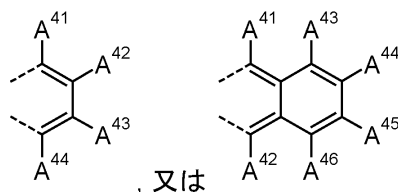
R^{110} は、H、CN、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキルチオ、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $-CONR^{25}R^{26}$ 又は $-COOR^{27}$ であるか、あるいは

 R^{42} 及び R^{43} は、下記式：

40

【0092】

【化52】



【0093】

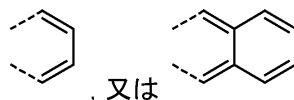
の基であり、

50

ここで、 A^{41} 、 A^{42} 、 A^{43} 、 A^{44} 、 A^{45} 、 A^{46} 及び A^{47} は、互いに独立して、H、ハロゲン、CN、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ ペルフルオロアルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキルチオ、場合によりGで置換されていてもよい $C_6 \sim C_{18}$ アリール、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $-CONR^{25}R^{26}$ 若しくは $-COOR^{27}$ 、又は $C_2 \sim C_{10}$ ヘテロアリール；特に下記：

【0094】

【化53】



10

【0095】

であり、

R^{44} は、水素、CN、又は $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、Fで置換されている $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、ハロゲン、特にF、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール、 $C_1 \sim C_{12}$ アルキルで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール、又は $C_1 \sim C_8$ アルコキシであり、

R^{45} は、水素、CN、又は $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、Fで置換されている $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、ハロゲン、特にF、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール、 $C_1 \sim C_{12}$ アルキルで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール、又は $C_1 \sim C_8$ アルコキシであり、

$A^{11'}$ 、 $A^{12'}$ 、 $A^{13'}$ 及び $A^{14'}$ は、互いに独立して、H、ハロゲン、CN、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキルチオ、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $-CONR^{25}R^{26}$ 又は $-COOR^{27}$ であり、

20

R^{68} 及び R^{69} は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、特に $C_4 \sim C_{12}$ アルキルであり、特に1又は2個の酸素原子で中断されていることができる、ヘキシル、ヘプチル、2-エチルヘキシル及びオクチルであり、

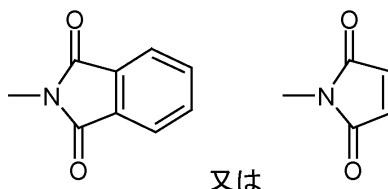
R^{70} 、 R^{72} 、 R^{73} 、 R^{74} 、 R^{75} 、 R^{76} 、 R^{90} 、 R^{91} 、 R^{92} 及び R^{93} は、互いに独立して、H、ハロゲン、特にF、CN、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル、 $C_6 \sim C_{10}$ アリール、 $C_1 \sim C_{24}$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキルチオ、 $-NR^{25}R^{26}$ 、 $-CONR^{25}R^{26}$ 又は $-COOR^{27}$ であり、ここで、 R^{25} 、 R^{26} 及び R^{27} は、上記で定義されたとおりであり、そしてGは、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、 $-OR^{305}$ 、 $-SR^{305}$ 、 $-NR^{305}R^{306}$ 、 $-CONR^{305}R^{306}$ 又は $-CN$ であり、ここで、 R^{305} 及び R^{306} は、互いに独立して、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール； $C_1 \sim C_{18}$ アルキルで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール、又は $C_1 \sim C_{18}$ アルコキシ； $C_1 \sim C_{18}$ アルキル、又は $-O-$ で中断されている $C_1 \sim C_{18}$ アルキルであり；あるいは

30

R^{305} 及び R^{306} は、一緒になって、5員又は6員環、特に下記：

【0096】

【化54】



40

【0097】

を形成する]

を有する。

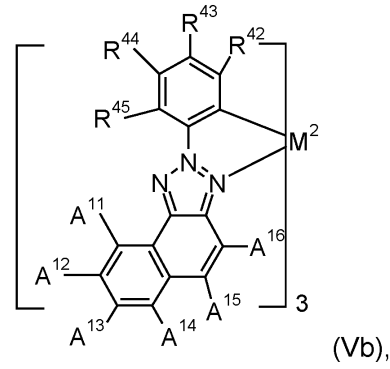
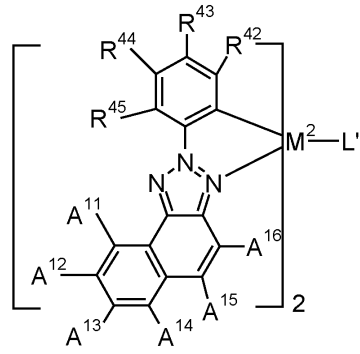
【0098】

前記の実施態様において、 $w = 1$ であり、 $x = 1$ であり、 $y = 0$ であり、そして $z = 0$ であり、及び $w = 1$ であり、 $x = 0$ であり、 $y = 1$ であり、そして $z = 0$ であり、下記の構造(Va)、(Vb)、(Vc)、(Vd)、(VIa)又は(VIb)：

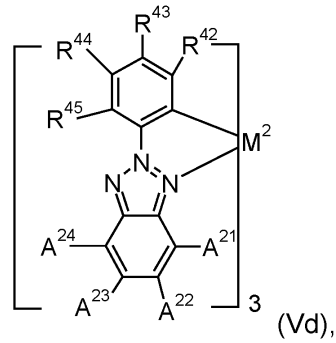
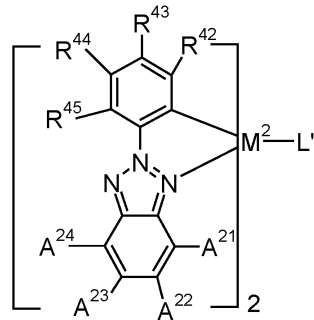
【0099】

50

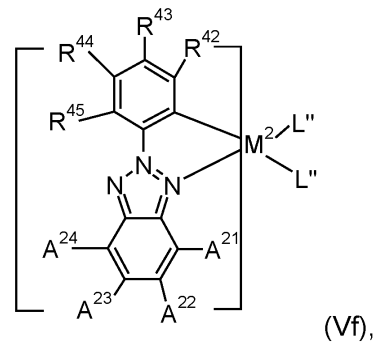
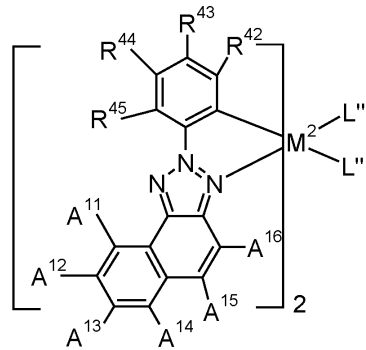
【化 5 5】



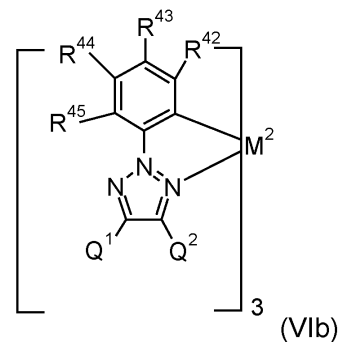
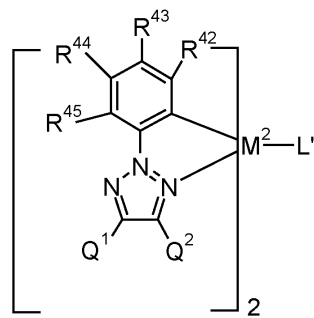
10



20



30



【 0 1 0 0 】

40

〔 式中、

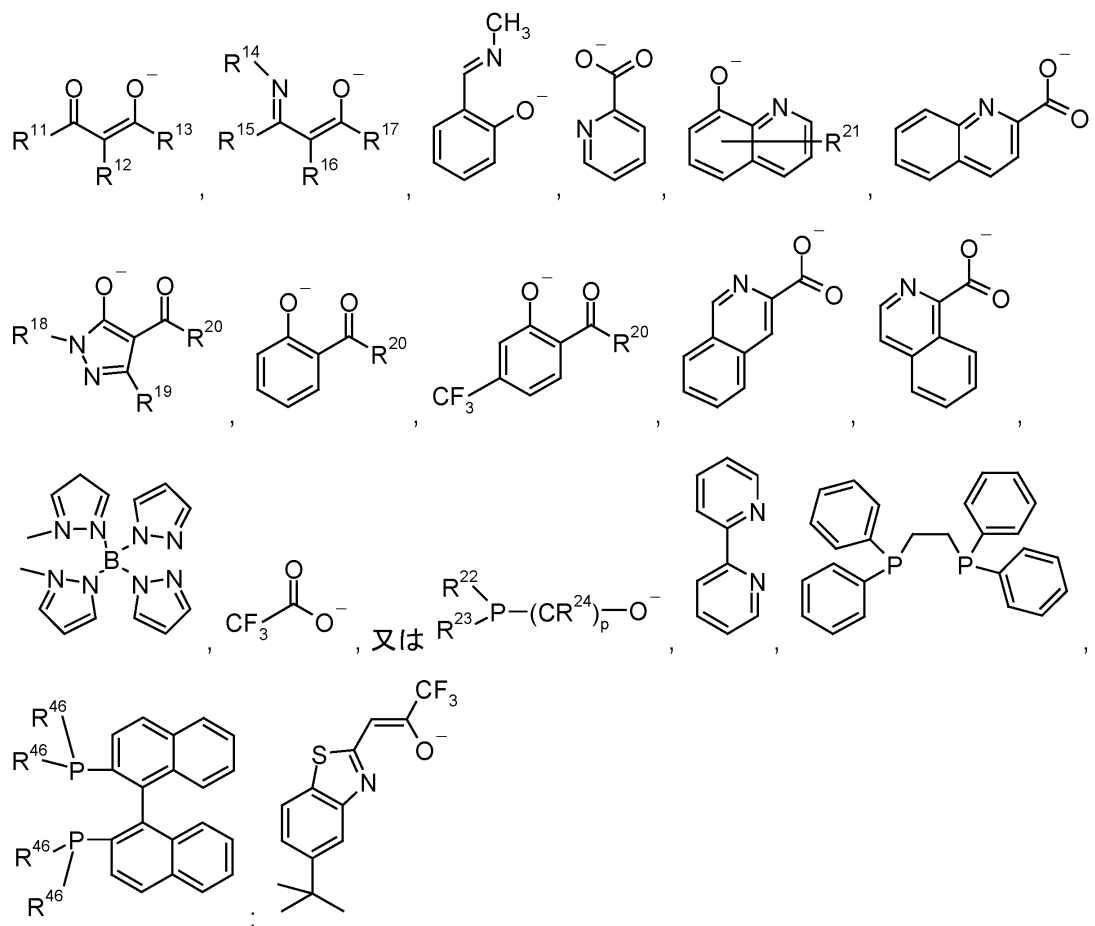
M³は、Rh又はRe、特にIrであり、

Q¹及びQ²は、互いに独立して、水素、C₁～C₂₄アルキル又はC₆～C₁₈アリールであり、

L は、下記：

【 0 1 0 1 】

【化 5 6】



10

20

【0102】

から選択される二座配位子であり、

ここで、

R^{11} 及び R^{15} は、互いに独立して、水素、 $C_1 \sim C_8$ アルキル、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール、 $C_2 \sim C_{10}$ ヘテロアリール又は $C_1 \sim C_8$ ペルフルオロアルキルであり、

R^{12} 及び R^{16} は、互いに独立して、水素又は $C_1 \sim C_8$ アルキルであり、

R^{13} 及び R^{17} は、互いに独立して、水素、 $C_1 \sim C_8$ アルキル、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール、 $C_2 \sim C_{10}$ ヘテロアリール、 $C_1 \sim C_8$ ペルフルオロアルキル又は $C_1 \sim C_8$ アルコキシであり、

R^{14} は、 $C_1 \sim C_8$ アルキル、 $C_6 \sim C_{10}$ アリール又は $C_7 \sim C_{11}$ アラルキルであり、

R^{18} は、 $C_6 \sim C_{10}$ アリールであり、

R^{19} は、 $C_1 \sim C_8$ アルキルであり、

R^{20} は、 $C_1 \sim C_8$ アルキル又は $C_6 \sim C_{10}$ アリールであり、

R^{21} は、水素、部分的に若しくは完全にフッ素化されていてもよい、 $C_1 \sim C_8$ アルキル又は $C_1 \sim C_8$ アルコキシであり、

R^{22} 及び R^{23} は、互いに独立して、 $C_n(H+F)_{2n+1}$ 又は $C_6(H+F)_5$ であり、 R^{24} は、同一又はそれぞれの場合に異なっていることができ、 H 又は $C_n(H+F)_{2n+1}$ から選択され、

p は、2 又は 3 であり、

A^{11} は、水素であり、

A^{12} は、水素であり、

A^{13} は、水素であり、

A^{14} は、水素又は $C_6 \sim C_{18}$ アリールであり、

A^{15} は、水素又は $C_6 \sim C_{18}$ アリールであり、

A^{16} は、水素であり、

40

50

A^{21} は、水素であり、

A^{22} は、水素又は $C_6 \sim C_{10}$ アリールであり、

A^{23} は、水素又は $C_6 \sim C_{10}$ アリールであり、

A^{24} は、水素であり、

R^{42} は、H、F、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、 $C_1 \sim C_8$ アルコキシ又は $C_1 \sim C_4$ ペルフルオロアルキルであり、

R^{43} は、H、F、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、 $C_1 \sim C_4$ ペルフルオロアルキル、 $C_1 \sim C_8$ アルコキシ又は $C_6 \sim C_{10}$ アリールであり、

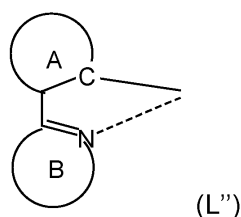
R^{44} は、H、F、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、 $C_1 \sim C_8$ アルコキシ又は $C_1 \sim C_4$ ペルフルオロアルキルであり、

R^{45} は、H、F、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、 $C_1 \sim C_8$ アルコキシ又は $C_1 \sim C_4$ ペルフルオロアルキルであり、そして

R^{46} は、 $C_1 \sim C_8$ アルキル、 $C_6 \sim C_{18}$ アリール、 $C_1 \sim C_8$ アルコキシ、又は $C_1 \sim C_8$ アルキルで置換されている $C_6 \sim C_{18}$ アリール、又は二座配位子Lであり、これは、下記式：

【0103】

【化57】



【0104】

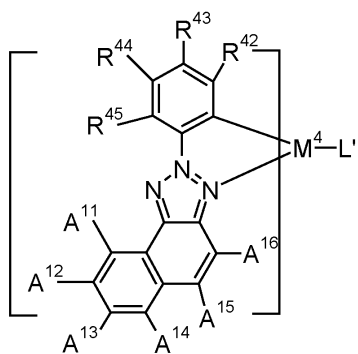
の配位子(L)であり、特に、化合物(X-1)～(X-47)である〕を有する化合物がより好ましい。

【0105】

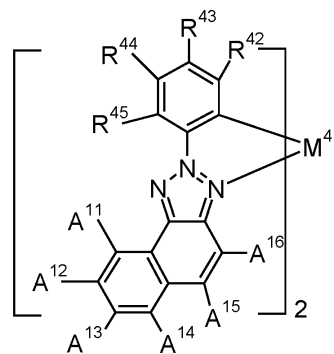
別の実施態様において、下記の構造(VII a)、(VII b)、(VII c)、(VII d)、(VIII a)又は(VIII b)：

【0106】

【化 5 8】

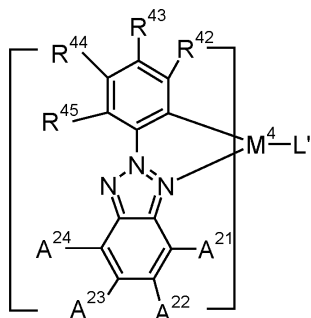


(VIIa),

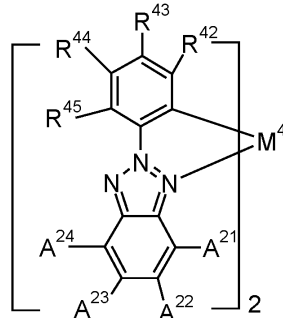


(VIIb),

10

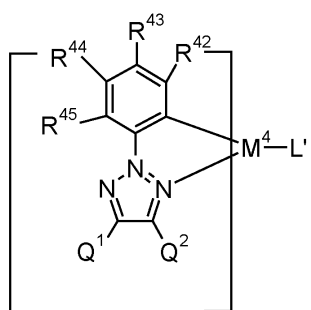


(VIIc),

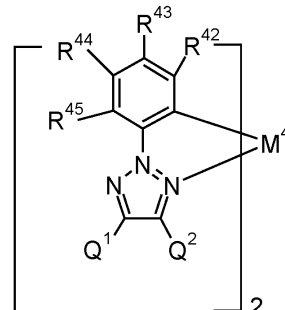


(VIIId),

20



(VIIIa), 又は



(VIIIb)

30

【 0 1 0 7 】

(式中、

M^4 は、Pd又はPtであり、そして Q^1 、 Q^2 、 L 、 A^{11} 、 A^{12} 、 A^{13} 、 A^{14} 、 A^{15} 、 A^{16} 、 A^{21} 、 A^{22} 、 A^{23} 、 A^{24} 、 R^{42} 、 R^{43} 、 R^{44} 及び R^{45} は、上記で定義されたとおりである)

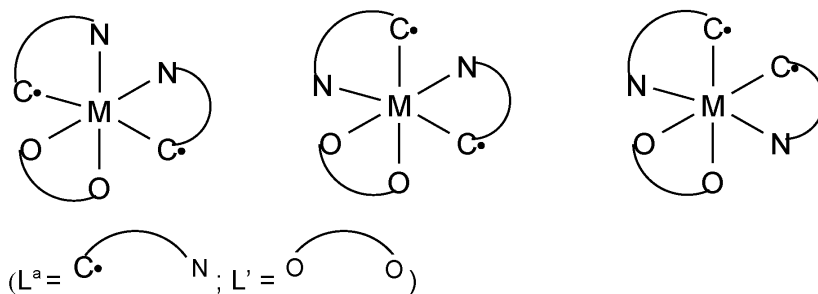
を有する化合物が好ましい。

【 0 1 0 8 】

金属錯体 $(L^a)_2IrL$ の場合では、3個の異性体が存在できる。

【 0 1 0 9 】

【化 5 9】



40

【 0 1 1 0 】

50

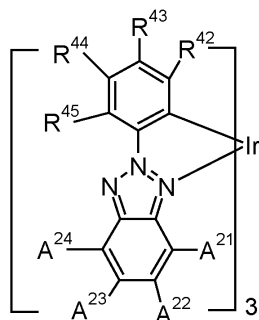
幾つかの場合において、異性体の混合物が得られる。多くの場合、混合物は個々の異性体を単離することなく使用できる。

【 0 1 1 1 】

現在のところ最も好ましい化合物を下記に示す。

【 0 1 1 2 】

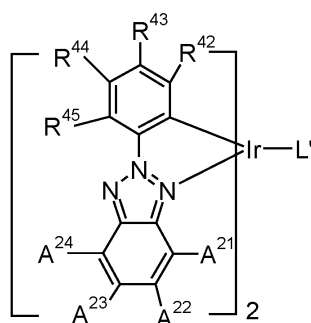
【表 2】



化合物	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	A ²⁴	A ²³	A ²²	A ²¹
A-1	H	H	H	H	H	H	H	H
A-2	F	H	H	H	H	H	H	H
A-3	H	H	F	H	H	H	H	H
A-4	F	H	F	H	H	H	H	H
A-5	F	H	H	F	H	H	H	H
A-6	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
A-7	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
A-8	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
A-9	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
A-10	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
A-11	H	H	Ph	H	H	H	H	H
A-12	H	H	OMe	H	H	H	H	H
A-13	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
A-14	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
A-15	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
A-16	H	H	t-Bu	H	H	H	H	H
A-17	H	²⁾	H	H	H	H	H	H

¹⁾ 異性体の混合物.

²⁾ 2,4,4-トリメチルペンタ-2-イル.



化合物	L'	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	A ²⁴	A ²³	A ²²	A ²¹
B-1	A ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
B-2	A ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
B-3	A ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
B-4	A ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
B-5	A ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H
B-6	A ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
B-7	A ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
B-8	A ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
B-9	A ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
B-10	A ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
B-11	A ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
B-12	A ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H
B-13	A ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
B-14	A ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
B-15	A ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
B-16	A ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
B-17	B ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
B-18	B ²⁾	F	F	H	H	H	H	H	H
B-19	B ²⁾	H	H	H	F	H	H	H	H
B-20	B ²⁾	F	F	H	F	H	H	H	H
B-21	B ²⁾	F	F	H	H	F	H	H	H
B-22	B ²⁾	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H
B-23	B ²⁾	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
B-24	B ²⁾	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H	H	H
B-25	B ²⁾	H	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
B-26	B ²⁾	H	H	H	CH ₃	H	H	H	H
B-27	B ²⁾	H	H	H	Ph	H	H	H	H
B-28	B ²⁾	H	H	H	OMe	H	H	H	H
B-29	B ²⁾	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H
B-30	B ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
B-31	B ²⁾	H	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾
B-32	B ²⁾	H	H	t-Bu	H	H	H	H	H
B-33	C ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
B-34	C ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
B-35	C ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H

10

20

30

40

B-36	C ⁽²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
B-37	C ⁽²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H
B-38	C ⁽²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
B-39	C ⁽²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
B-40	C ⁽²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
B-41	C ⁽²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
B-42	C ⁽²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
B-43	C ⁽²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
B-44	C ⁽²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H
B-45	C ⁽²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
B-46	C ⁽²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
B-47	C ⁽²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ⁽¹⁾	Ph/H ⁽¹⁾	H
B-48	C ⁽²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
B-49	D ⁽²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
B-50	D ⁽²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
B-51	D ⁽²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
B-52	D ⁽²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
B-53	D ⁽²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H
B-54	D ⁽²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
B-55	D ⁽²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
B-56	D ⁽²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
B-57	D ⁽²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
B-58	D ⁽²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
B-59	D ⁽²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
B-60	D ⁽²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H
B-61	D ⁽²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
B-62	D ⁽²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
B-63	D ⁽²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ⁽¹⁾	Ph/H ⁽¹⁾	H
B-64	D ⁽²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
B-65	A	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
B-66	B	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
B-67	C	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
B-68	D	H	³⁾	H	H	H	H	H	H

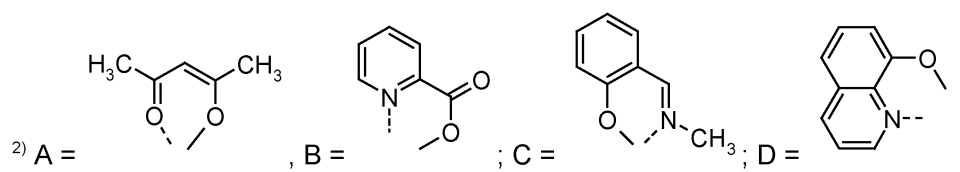
¹⁾ 異性体の混合物.

10

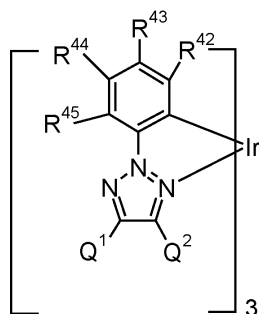
20

30

40



³⁾ 2,4,4-トリメチルペンタ-2-イル.



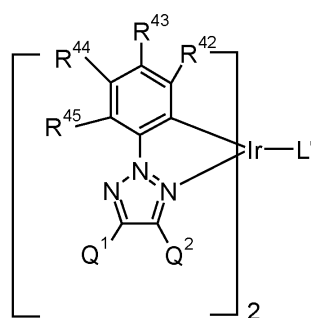
10

化合物	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	Q ¹	Q ²
C-1	H	H	H	H	H	H
C-2	F	H	H	H	H	H
C-3	H	H	F	H	H	H
C-4	F	H	F	H	H	H
C-5	F	H	H	F	H	H
C-6	H	H	CF ₃	H	H	H
C-7	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H
C-8	CF ₃	H	H	H	H	H
C-9	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H
C-10	H	H	CH ₃	H	H	H
C-11	H	H	Ph	H	H	H
C-12	H	H	Ome	H	H	H
C-13	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H
C-14	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
C-15	H	H	Ph	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾
C-16	H	H	t-Bu	H	H	H

20

30

¹⁾ 異性体の混合物.



化合物	L'	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	Q ¹	Q ²
D-1	A ⁽²⁾	H	H	H	H	H	H
D-2	A ⁽²⁾	F	H	H	H	H	H
D-3	A ⁽²⁾	H	H	F	H	H	H
D-4	A ⁽²⁾	F	H	F	H	H	H
D-5	A ⁽²⁾	F	H	H	F	H	H
D-6	A ⁽²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H
D-7	A ⁽²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H
D-8	A ⁽²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H
D-9	A ⁽²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H
D-10	A ⁽²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H
D-11	A ⁽²⁾	H	H	Ph	H	H	H
D-12	A ⁽²⁾	H	H	OMe	H	H	H
D-13	A ⁽²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H
D-14	A ⁽²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
D-15	A ⁽²⁾	H	H	Ph	H	H/Ph ⁽¹⁾	Ph/H ⁽¹⁾
D-16	A ⁽²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H
D-17	B ⁽²⁾	H	H	H	H	H	H
D-18	B ⁽²⁾	F	H	H	H	H	H
D-19	B ⁽²⁾	H	H	F	H	H	H
D-20	B ⁽²⁾	F	H	F	H	H	H
D-21	B ⁽²⁾	F	H	H	F	H	H
D-22	B ⁽²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H
D-23	B ⁽²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H
D-24	B ⁽²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H
D-25	B ⁽²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H
D-26	B ⁽²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H
D-27	B ⁽²⁾	H	H	Ph	H	H	H
D-28	B ⁽²⁾	H	H	OMe	H	H	H

10

20

30

40

D-29	B ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H
D-30	B ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
D-31	B ²⁾	H	H	Ph	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾
D-32	B ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H
D-33	C ²⁾	H	H	H	H	H	H
D-34	C ²⁾	F	H	H	H	H	H
D-35	C ²⁾	H	H	F	H	H	H
D-36	C ²⁾	F	H	F	H	H	H
D-37	C ²⁾	F	H	H	F	H	H
D-38	C ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H
D-39	C ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H
D-40	C ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H
D-41	C ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H
D-42	C ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H
D-43	C ²⁾	H	H	Ph	H	H	H
D-44	C ²⁾	H	H	OMe	H	H	H
D-45	C ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H
D-46	C ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
D-47	C ²⁾	H	H	Ph	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾
D-48	C ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H
D-49	D ²⁾	H	H	H	H	H	H
D-50	D ²⁾	F	H	H	H	H	H
D-51	D ²⁾	H	H	F	H	H	H
D-52	D ²⁾	F	H	F	H	H	H
D-53	D ²⁾	F	H	H	F	H	H
D-54	D ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H
D-55	D ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H
D-56	D ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H
D-57	D ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H
D-58	D ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H
D-59	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H
D-60	D ²⁾	H	H	OMe	H	H	H
D-61	D ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H
D-62	D ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
D-63	D ²⁾	H	H	Ph	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾
D-64	D ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H

10

20

30

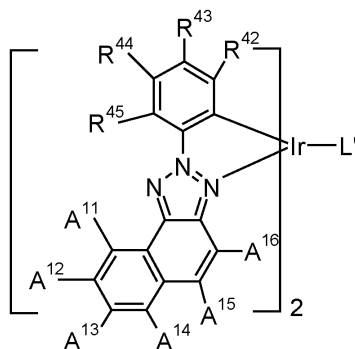
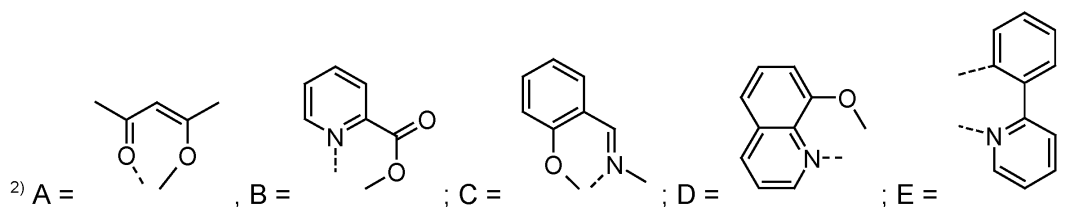
40

D-65	E ²⁾	H	H	H	H	H	H
D-66	E ²⁾	F	H	H	H	H	H
D-67	E ²⁾	H	H	F	H	H	H
D-68	E ²⁾	F	H	F	H	H	H
D-69	E ²⁾	F	H	H	F	H	H
D-70	E ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H
D-71	E ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H
D-72	E ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H
D-73	E ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H
D-74	E ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H
D-75	E ²⁾	H	H	Ph	H	H	H
D-76	E ²⁾	H	H	OMe	H	H	H
D-77	E ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H
D-78	E ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
D-79	E ²⁾	H	H	Ph	H	H/Ph1)	Ph/H1)
D-80	E ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H

10

20

1) 異性体の混合物.



30

化合物	L'	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	A ¹¹	A ¹²	A ¹³	A ¹⁴	A ¹⁵	A ¹⁶
E-1	A ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
E-2	A ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
E-3	A ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H	H	H
E-4	A ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H	H	H
E-5	A ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H	H	H
E-6	A ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H	H	H

40

E-7	A ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
E-8	A ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H
E-9	A ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H	H	H
E-10	A ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H
E-11	A ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H	H	H
E-12	A ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H	H	H
E-13	A ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H	H	H
E-14	A ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H	H
E-15	A ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
E-16	A ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
E-17	B ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
E-18	B ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
E-19	B ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H	H	H
E-20	B ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H	H	H
E-21	B ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H	H	H
E-22	B ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H	H	H
E-23	B ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
E-24	B ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H
E-25	B ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H	H	H
E-26	B ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H
E-27	B ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H	H	H
E-28	B ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H	H	H
E-29	B ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H	H	H
E-30	B ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H	H
E-31	B ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
E-32	B ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
E-33	C ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
E-34	C ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
E-35	C ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H	H	H
E-36	C ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H	H	H
E-37	C ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H	H	H
E-38	C ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H	H	H
E-39	C ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
E-40	C ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H
E-41	C ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H	H	H
E-42	C ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H

10

20

30

40

E-43	C ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H	H	H
E-44	C ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H	H	H
E-45	C ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H	H	H
E-46	C ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H	H
E-47	C ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
E-48	C ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
E-49	D ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
E-50	D ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
E-51	D ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H	H	H
E-52	D ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H	H	H
E-53	D ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H	H	H
E-54	D ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H	H	H
E-55	D ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
E-56	D ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H
E-57	D ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H	H	H
E-58	D ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H
E-59	D ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H	H	H
E-60	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H	H	H
E-61	D ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H	H	H
E-62	D ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H	H
E-63	D ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
E-64	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
E-65	E ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H	E-65	E ²⁾
E-66	E ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H	E-66	E ²⁾
E-67	E ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H	E-67	E ²⁾
E-68	E ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H	E-68	E ²⁾
E-69	E ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H	E-69	E ²⁾
E-70	E ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H	E-70	E ²⁾
E-71	E ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H	E-71	E ²⁾
E-72	E ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H	E-72	E ²⁾
E-73	E ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	E-73	E ²⁾
E-74	E ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H	E-74	E ²⁾
E-75	E ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H	E-75	E ²⁾
E-76	E ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H	E-76	E ²⁾
E-77	E ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H	E-77	E ²⁾
E-78	E ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	E-78	E ²⁾

10

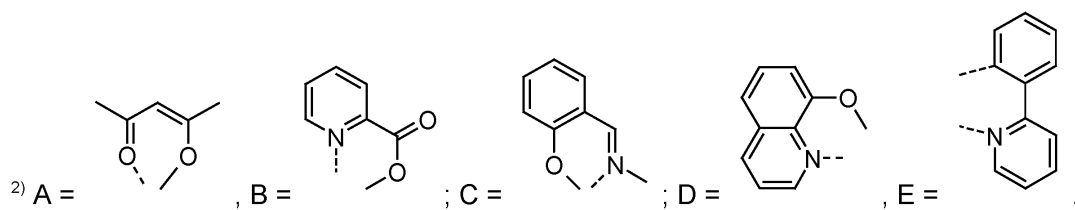
20

30

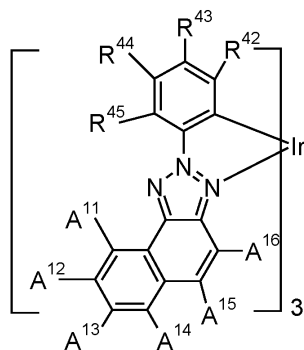
40

E-79	E ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H	E-79	E ²⁾
E-80	E ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H	E-80	E ²⁾
E-81	E ²⁾	H	³⁾	H	H	H	H	H	H	E-81	E ²⁾

¹⁾ 異性体の混合物.



10



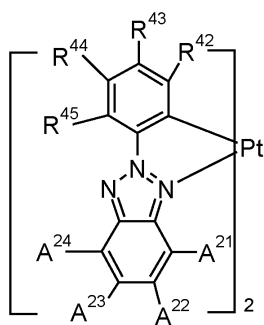
20

化合物	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	A ¹¹	A ¹²	A ¹³	A ¹⁴	A ¹⁵	A ¹⁶
F-1	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
F-2	F	H	H	H	H	H	H	H	H	H
F-3	H	H	F	H	H	H	H	H	H	H
F-4	F	H	F	H	H	H	H	H	H	H
F-5	F	H	H	F	H	H	H	H	H	H
F-6	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
F-7	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H
F-8	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H	H	H
F-9	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H
F-10	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
F-11	H	H	Ph	H	H	H	H	H	H	H
F-12	H	H	OMe	H	H	H	H	H	H	H
F-13	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H	H
F-14	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
F-15	H	H	Ph	H	H	H	H	H	Ph	H
F-16	H	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H	H

30

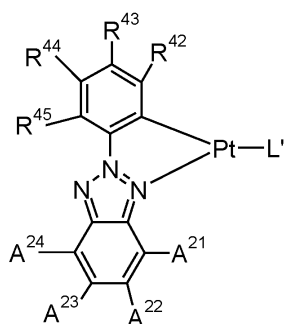
40

¹⁾ 異性体の混合物.



化合物	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	A ²⁴	A ²³	A ²²	A ²¹
G-1	H	H	H	H	H	H	H	H
G-2	F	H	H	H	H	H	H	H
G-3	H	H	F	H	H	H	H	H
G-4	F	H	F	H	H	H	H	H
G-5	F	H	H	F	H	H	H	H
G-6	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
G-7	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
G-8	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
G-9	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
G-10	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
G-11	H	H	Ph	H	H	H	H	H
G-12	H	H	OMe	H	H	H	H	H
G-13	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
G-14	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
G-15	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
G-16	H	H	t-Bu	H	H	H	H	H

¹⁾ 異性体の混合物.



化合物	L'	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	A ²⁴	A ²³	A ²²	A ²¹
H-1	A ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H

H-2	A ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
H-3	A ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
H-4	A ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
H-5	A ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H
H-6	A ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
H-7	A ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
H-8	A ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
H-9	A ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
H-10	A ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
H-11	A ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
H-12	A ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H
H-13	A ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
H-14	A ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
H-15	A ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
H-16	A ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
H-17	B ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
H-18	B ²⁾	F	F	H	H	H	H	H	H
H-19	B ²⁾	H	H	H	F	H	H	H	H
H-20	B ²⁾	F	F	H	F	H	H	H	H
H-21	B ²⁾	F	F	H	H	F	H	H	H
H-22	B ²⁾	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H
H-23	B ²⁾	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
H-24	B ²⁾	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H	H	H
H-25	B ²⁾	H	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
H-26	B ²⁾	H	H	H	CH ₃	H	H	H	H
H-27	B ²⁾	H	H	H	Ph	H	H	H	H
H-28	B ²⁾	H	H	H	OMe	H	H	H	H
H-29	B ²⁾	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H
H-30	B ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
H-31	B ²⁾	H	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾
H-32	B ²⁾	H	H	t-Bu	H	H	H	H	H
H-33	C ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
H-34	C ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
H-35	C ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
H-36	C ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
H-37	C ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H

10

20

30

40

H-38	C ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
H-39	C ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
H-40	C ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
H-41	C ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
H-42	C ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
H-43	C ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
H-44	C ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H
H-45	C ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
H-46	C ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
H-47	C ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
H-48	C ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
H-49	D ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
H-50	D ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
H-51	D ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
H-52	D ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
H-53	D ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H
H-54	D ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
H-55	D ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
H-56	D ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
H-57	D ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
H-58	D ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
H-59	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
H-60	D ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H
H-61	D ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
H-62	D ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
H-63	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
H-64	D ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
H-65	A	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
H-66	B	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
H-67	C	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
H-68	D	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
H-69	E ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
H-70	E ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
H-71	E ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
H-72	E ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
H-73	E ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H

10

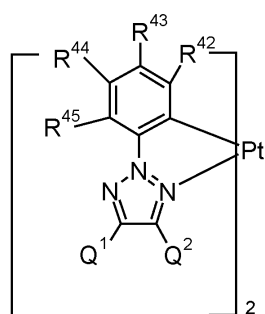
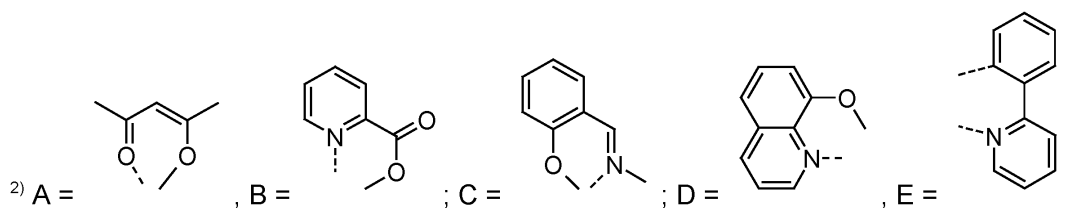
20

30

40

H-74	E ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
H-75	E ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
H-76	E ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
H-77	E ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
H-78	E ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
H-79	E ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
H-80	E ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H
H-81	E ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
H-82	E ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
H-83	E ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
H-84	E ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
H-85	E ²⁾	H	³⁾	H	H	H	H	H	H

¹⁾ 異性体の混合物.

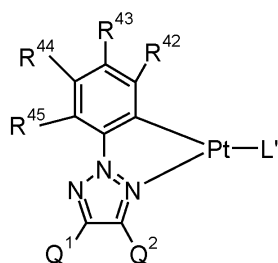


化合物	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	Q ¹	Q ²
I-1	H	H	H	H	H	H
I-2	F	H	H	H	H	H
I-3	H	H	F	H	H	H
I-4	F	H	F	H	H	H
I-5	F	H	H	F	H	H
I-6	H	H	CF ₃	H	H	H
I-7	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H
I-8	CF ₃	H	H	H	H	H
I-9	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H

I-10	H	H	CH ₃	H	H	H
I-11	H	H	Ph	H	H	H
I-12	H	H	Ome	H	H	H
I-13	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H
I-14	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
I-15	H	H	Ph	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾
I-16	H	H	t-Bu	H	H	H

¹⁾ 異性体の混合物.

10



化合物	L'	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	Q ¹	Q ²
J-1	A ²⁾	H	H	H	H	H	H
J-2	A ²⁾	F	H	H	H	H	H
J-3	A ²⁾	H	H	F	H	H	H
J-4	A ²⁾	F	H	F	H	H	H
J-5	A ²⁾	F	H	H	F	H	H
J-6	A ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H
J-7	A ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H
J-8	A ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H
J-9	A ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H
J-10	A ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H
J-11	A ²⁾	H	H	Ph	H	H	H
J-12	A ²⁾	H	H	OMe	H	H	H
J-13	A ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H
J-14	A ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
J-15	A ²⁾	H	H	Ph	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾
J-16	A ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H
J-17	B ²⁾	H	H	H	H	H	H
J-18	B ²⁾	F	H	H	H	H	H
J-19	B ²⁾	H	H	F	H	H	H
J-20	B ²⁾	F	H	F	H	H	H

20

30

40

J-21	B ²⁾	F	H	H	F	H	H
J-22	B ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H
J-23	B ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H
J-24	B ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H
J-25	B ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H
J-26	B ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H
J-27	B ²⁾	H	H	Ph	H	H	H
J-28	B ²⁾	H	H	OMe	H	H	H
J-29	B ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H
J-30	B ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
J-31	B ²⁾	H	H	Ph	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾
J-32	B ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H
J-33	C ²⁾	H	H	H	H	H	H
J-34	C ²⁾	F	H	H	H	H	H
J-35	C ²⁾	H	H	F	H	H	H
J-36	C ²⁾	F	H	F	H	H	H
J-37	C ²⁾	F	H	H	F	H	H
J-38	C ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H
J-39	C ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H
J-40	C ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H
J-41	C ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H
J-42	C ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H
J-43	C ²⁾	H	H	Ph	H	H	H
J-44	C ²⁾	H	H	OMe	H	H	H
J-45	C ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H
J-46	C ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
J-47	C ²⁾	H	H	Ph	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾
J-48	C ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H
J-49	D ²⁾	H	H	H	H	H	H
J-50	D ²⁾	F	H	H	H	H	H
J-51	D ²⁾	H	H	F	H	H	H
J-52	D ²⁾	F	H	F	H	H	H
J-53	D ²⁾	F	H	H	F	H	H
J-54	D ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H
J-55	D ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H
J-56	D ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H

10

20

30

40

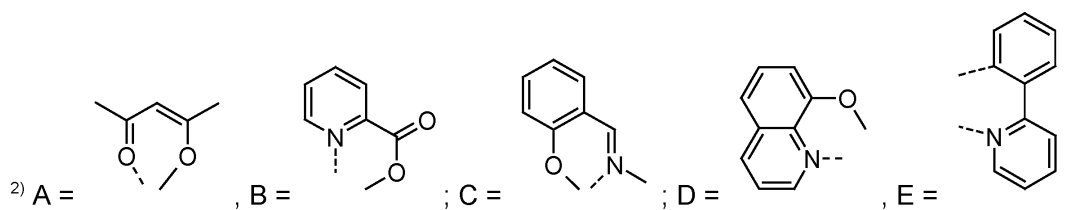
J-57	D ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H
J-58	D ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H
J-59	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H
J-60	D ²⁾	H	H	OMe	H	H	H
J-61	D ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H
J-62	D ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
J-63	D ²⁾	H	H	Ph	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾
J-64	D ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H
J-65	E ²⁾	H	H	H	H	H	H
J-66	E ²⁾	F	H	H	H	H	H
J-67	E ²⁾	H	H	F	H	H	H
J-68	E ²⁾	F	H	F	H	H	H
J-69	E ²⁾	F	H	H	F	H	H
J-70	E ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H
J-71	E ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H
J-72	E ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H
J-73	E ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H
J-74	E ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H
J-75	E ²⁾	H	H	Ph	H	H	H
J-76	E ²⁾	H	H	OMe	H	H	H
J-77	E ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H
J-78	E ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
J-79	E ²⁾	H	H	Ph	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾
J-80	E ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H

10

20

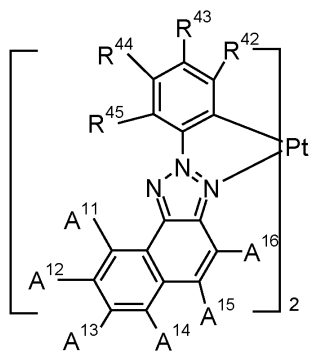
30

¹⁾ 異性体の混合物.



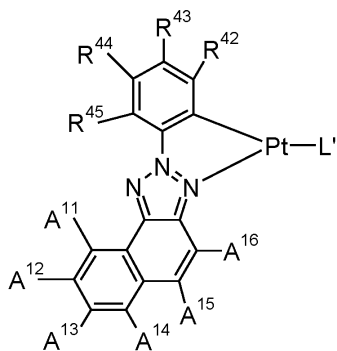
³⁾ 2,4,4-トリメチルペンタ-2-イル.

40



化合物	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	A ¹¹	A ¹²	A ¹³	A ¹⁴	A ¹⁵	A ¹⁶
K-1	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
K-2	F	H	H	H	H	H	H	H	H	H
K-3	H	H	F	H	H	H	H	H	H	H
K-4	F	H	F	H	H	H	H	H	H	H
K-5	F	H	H	F	H	H	H	H	H	H
K-6	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
K-7	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H
K-8	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H	H	H
K-9	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H
K-10	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
K-11	H	H	Ph	H	H	H	H	H	H	H
K-12	H	H	OMe	H	H	H	H	H	H	H
K-13	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H	H
K-14	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
K-15	H	H	Ph	H	H	H	H	H	Ph	H
K-16	H	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H	H

¹⁾ 異性体の混合物.



化合物	L'	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	A ¹¹	A ¹²	A ¹³	A ¹⁴	A ¹⁵	A ¹⁶
L-1	A ⁽²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
L-2	A ⁽²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
L-3	A ⁽²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H	H	H
L-4	A ⁽²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H	H	H
L-5	A ⁽²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H	H	H
L-6	A ⁽²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H	H	H
L-7	A ⁽²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
L-8	A ⁽²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H
L-9	A ⁽²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H	H	H
L-10	A ⁽²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H
L-11	A ⁽²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H	H	H
L-12	A ⁽²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H	H	H
L-13	A ⁽²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H	H	H
L-14	A ⁽²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H	H
L-15	A ⁽²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
L-16	A ⁽²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H/Ph ⁽¹⁾	Ph/H ⁽¹⁾	H
L-17	B ⁽²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
L-18	B ⁽²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
L-19	B ⁽²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H	H	H
L-20	B ⁽²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H	H	H
L-21	B ⁽²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H	H	H
L-22	B ⁽²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H	H	H
L-23	B ⁽²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
L-24	B ⁽²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H
L-25	B ⁽²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H	H	H
L-26	B ⁽²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H
L-27	B ⁽²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H	H	H
L-28	B ⁽²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H	H	H
L-29	B ⁽²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H	H	H
L-30	B ⁽²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H	H
L-31	B ⁽²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
L-32	B ⁽²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H/Ph ⁽¹⁾	Ph/H ⁽¹⁾	H
L-33	C ⁽²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
L-34	C ⁽²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
L-35	C ⁽²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H	H	H

10

20

30

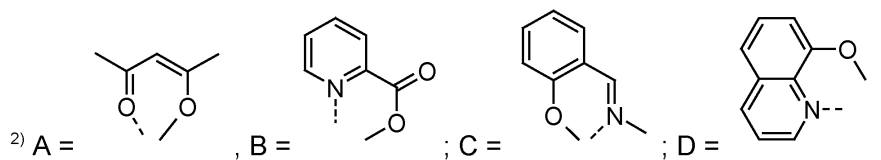
40

L-36	C ⁽²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H	H	H
L-37	C ⁽²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H	H	H
L-38	C ⁽²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H	H	H
L-39	C ⁽²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
L-40	C ⁽²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H
L-41	C ⁽²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H	H	H
L-42	C ⁽²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H
L-43	C ⁽²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H	H	H
L-44	C ⁽²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H	H	H
L-45	C ⁽²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H	H	H
L-46	C ⁽²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H	H
L-47	C ⁽²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
L-48	C ⁽²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H/Ph ⁽¹⁾	Ph/H ⁽¹⁾	H
L-49	D ⁽²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
L-50	D ⁽²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
L-51	D ⁽²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H	H	H
L-52	D ⁽²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H	H	H
L-53	D ⁽²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H	H	H
L-54	D ⁽²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H	H	H
L-55	D ⁽²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
L-56	D ⁽²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H
L-57	D ⁽²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H	H	H
L-58	D ⁽²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H
L-59	D ⁽²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H	H	H
L-60	D ⁽²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H	H	H
L-61	D ⁽²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H	H	H
L-62	D ⁽²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H	H
L-63	D ⁽²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
L-64	D ⁽²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H/Ph ⁽¹⁾	Ph/H ⁽¹⁾	H

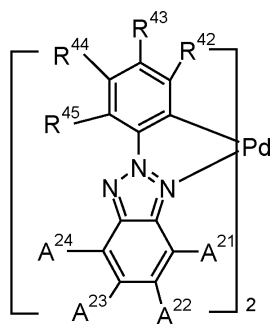
10

20

30

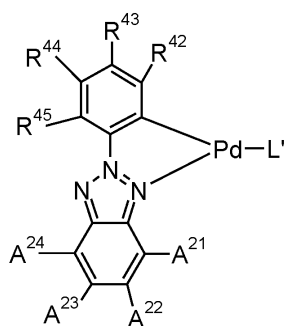
¹⁾ 異性体の混合物.

40



化合物	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	A ²⁴	A ²³	A ²²	A ²¹
M-1	H	H	H	H	H	H	H	H
M-2	F	H	H	H	H	H	H	H
M-3	H	H	F	H	H	H	H	H
M-4	F	H	F	H	H	H	H	H
M-5	F	H	H	F	H	H	H	H
M-6	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
M-7	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
M-8	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
M-9	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
M-10	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
M-11	H	H	Ph	H	H	H	H	H
M-12	H	H	OMe	H	H	H	H	H
M-13	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
M-14	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
M-15	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
M-16	H	H	t-Bu	H	H	H	H	H

¹⁾ 異性体の混合物.



化合物	L'	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	A ²⁴	A ²³	A ²²	A ²¹
N-1	A ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H

N-2	A ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
N-3	A ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
N-4	A ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
N-5	A ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H
N-6	A ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
N-7	A ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
N-8	A ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
N-9	A ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
N-10	A ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
N-11	A ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
N-12	A ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H
N-13	A ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
N-14	A ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
N-15	A ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
N-16	A ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
N-17	B ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
N-18	B ²⁾	F	F	H	H	H	H	H	H
N-19	B ²⁾	H	H	H	F	H	H	H	H
N-20	B ²⁾	F	F	H	F	H	H	H	H
N-21	B ²⁾	F	F	H	H	F	H	H	H
N-22	B ²⁾	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H
N-23	B ²⁾	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
N-24	B ²⁾	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H	H	H
N-25	B ²⁾	H	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
N-26	B ²⁾	H	H	H	CH ₃	H	H	H	H
N-27	B ²⁾	H	H	H	Ph	H	H	H	H
N-28	B ²⁾	H	H	H	OMe	H	H	H	H
N-29	B ²⁾	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H
N-30	B ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
N-31	B ²⁾	H	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾
N-32	B ²⁾	H	H	t-Bu	H	H	H	H	H
N-33	C ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
N-34	C ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
N-35	C ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
N-36	C ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
N-37	C ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H

10

20

30

40

N-38	C ⁽²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
N-39	C ⁽²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
N-40	C ⁽²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
N-41	C ⁽²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
N-42	C ⁽²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
N-43	C ⁽²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
N-44	C ⁽²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H
N-45	C ⁽²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
N-46	C ⁽²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
N-47	C ⁽²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ⁽¹⁾	Ph/H ⁽¹⁾	H
N-48	C ⁽²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
N-49	D ⁽²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
N-50	D ⁽²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
N-51	D ⁽²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
N-52	D ⁽²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
N-53	D ⁽²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H
N-54	D ⁽²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
N-55	D ⁽²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
N-56	D ⁽²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
N-57	D ⁽²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
N-58	D ⁽²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
N-59	D ⁽²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
N-60	D ⁽²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H
N-61	D ⁽²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
N-62	D ⁽²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
N-63	D ⁽²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ⁽¹⁾	Ph/H ⁽¹⁾	H
N-64	D ⁽²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
N-65	A	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
N-66	B	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
N-67	C	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
N-68	D	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
N-69	E ⁽²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
N-70	E ⁽²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
N-71	E ⁽²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
N-72	E ⁽²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
N-73	E ⁽²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H

10

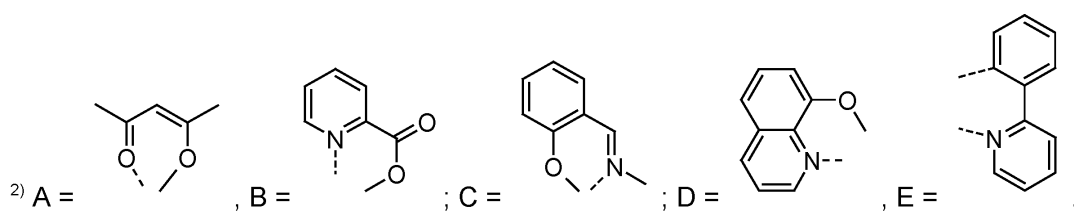
20

30

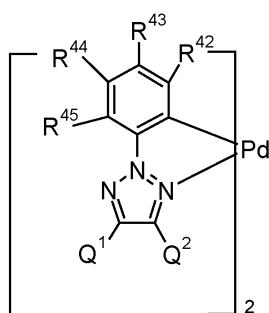
40

N-74	E ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
N-75	E ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
N-76	E ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
N-77	E ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
N-78	E ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
N-79	E ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
N-80	E ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H
N-81	E ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
N-82	E ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
N-83	E ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
N-84	E ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
N-85	E ²⁾	H	³⁾	H	H	H	H	H	H

¹⁾ 異性体の混合物.



³⁾ 2,4,4-トリメチルペンタ-2-イル.

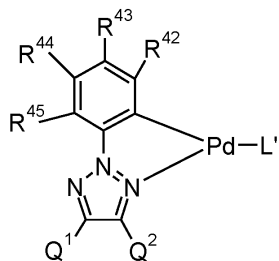


化合物	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	Q ¹	Q ²
O-1	H	H	H	H	H	H
O-2	F	H	H	H	H	H
O-3	H	H	F	H	H	H
O-4	F	H	F	H	H	H
O-5	F	H	H	F	H	H
O-6	H	H	CF ₃	H	H	H
O-7	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H
O-8	CF ₃	H	H	H	H	H
O-9	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H

O-10	H	H	CH ₃	H	H	H
O-11	H	H	Ph	H	H	H
O-12	H	H	Ome	H	H	H
O-13	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H
O-14	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
O-15	H	H	Ph	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾
O-16	H	H	t-Bu	H	H	H

¹⁾ 異性体の混合物.

10



化合物	L'	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	Q ¹	Q ²
P-1	A ²⁾	H	H	H	H	H	H
P-2	A ²⁾	F	H	H	H	H	H
P-3	A ²⁾	H	H	F	H	H	H
P-4	A ²⁾	F	H	F	H	H	H
P-5	A ²⁾	F	H	H	F	H	H
P-6	A ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H
P-7	A ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H
P-8	A ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H
P-9	A ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H
P-10	A ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H
P-11	A ²⁾	H	H	Ph	H	H	H
P-12	A ²⁾	H	H	OMe	H	H	H
P-13	A ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H
P-14	A ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
P-15	A ²⁾	H	H	Ph	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾
P-16	A ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H
P-17	B ²⁾	H	H	H	H	H	H
P-18	B ²⁾	F	H	H	H	H	H
P-19	B ²⁾	H	H	F	H	H	H
P-20	B ²⁾	F	H	F	H	H	H
P-21	B ²⁾	F	H	H	F	H	H

20

30

40

P-22	B ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H
P-23	B ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H
P-24	B ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H
P-25	B ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H
P-26	B ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H
P-27	B ²⁾	H	H	Ph	H	H	H
P-28	B ²⁾	H	H	OMe	H	H	H
P-29	B ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H
P-30	B ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
P-31	B ²⁾	H	H	Ph	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾
P-32	B ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H
P-33	C ²⁾	H	H	H	H	H	H
P-34	C ²⁾	F	H	H	H	H	H
P-35	C ²⁾	H	H	F	H	H	H
P-36	C ²⁾	F	H	F	H	H	H
P-37	C ²⁾	F	H	H	F	H	H
P-38	C ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H
P-39	C ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H
P-40	C ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H
P-41	C ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H
P-42	C ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H
P-43	C ²⁾	H	H	Ph	H	H	H
P-44	C ²⁾	H	H	OMe	H	H	H
P-45	C ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H
P-46	C ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
P-47	C ²⁾	H	H	Ph	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾
P-48	C ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H
P-49	D ²⁾	H	H	H	H	H	H
P-50	D ²⁾	F	H	H	H	H	H
P-51	D ²⁾	H	H	F	H	H	H
P-52	D ²⁾	F	H	F	H	H	H
P-53	D ²⁾	F	H	H	F	H	H
P-54	D ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H
P-55	D ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H
P-56	D ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H
P-57	D ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H

10

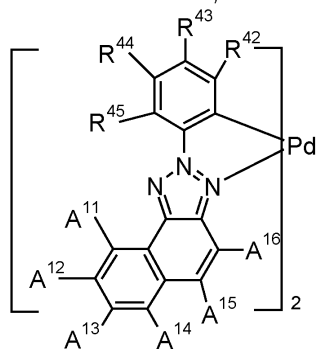
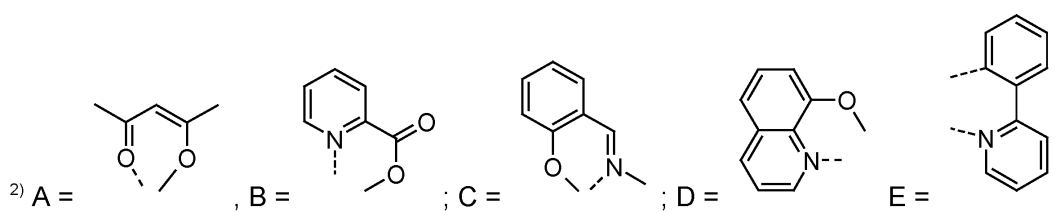
20

30

40

P-58	D ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H
P-59	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H
P-60	D ²⁾	H	H	OMe	H	H	H
P-61	D ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H
P-62	D ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
P-63	D ²⁾	H	H	Ph	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾
P-64	D ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H
P-65	E ²⁾	H	H	H	H	H	H
P-66	E ²⁾	F	H	H	H	H	H
P-67	E ²⁾	H	H	F	H	H	H
P-68	E ²⁾	F	H	F	H	H	H
P-69	E ²⁾	F	H	H	F	H	H
P-70	E ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H
P-71	E ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H
P-72	E ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H
P-73	E ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H
P-74	E ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H
P-75	E ²⁾	H	H	Ph	H	H	H
P-76	E ²⁾	H	H	OMe	H	H	H
P-77	E ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H
P-78	E ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
P-79	E ²⁾	H	H	Ph	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾
P-80	E ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H

¹⁾ 異性体の混合物.



10

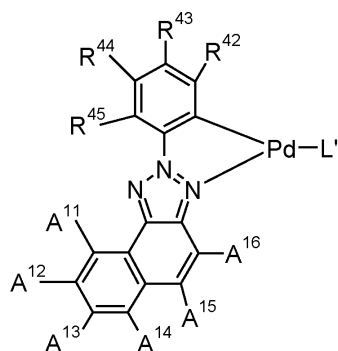
20

30

40

化合物	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	A ¹¹	A ¹²	A ¹³	A ¹⁴	A ¹⁵	A ¹⁶
Q-1	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
Q-2	F	H	H	H	H	H	H	H	H	H
Q-3	H	H	F	H	H	H	H	H	H	H
Q-4	F	H	F	H	H	H	H	H	H	H
Q-5	F	H	H	F	H	H	H	H	H	H
Q-6	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
Q-7	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H
Q-8	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H	H	H
Q-9	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H
Q-10	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
Q-11	H	H	Ph	H	H	H	H	H	H	H
Q-12	H	H	OMe	H	H	H	H	H	H	H
Q-13	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H	H
Q-14	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
Q-15	H	H	Ph	H	H	H	H	H	Ph	H
Q-16	H	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H	H

¹⁾ 異性体の混合物.



化合物	L'	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	A ¹¹	A ¹²	A ¹³	A ¹⁴	A ¹⁵	A ¹⁶
R-1	A ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
R-2	A ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
R-3	A ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H	H	H
R-4	A ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H	H	H
R-5	A ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H	H	H
R-6	A ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H	H	H
R-7	A ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H

R-8	A ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H
R-9	A ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H	H	H
R-10	A ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H
R-11	A ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H	H	H
R-12	A ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H	H	H
R-13	A ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H	H	H
R-14	A ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H	H
R-15	A ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
R-16	A ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
R-17	B ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
R-18	B ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
R-19	B ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H	H	H
R-20	B ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H	H	H
R-21	B ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H	H	H
R-22	B ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H	H	H
R-23	B ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
R-24	B ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H
R-25	B ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H	H	H
R-26	B ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H
R-27	B ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H	H	H
R-28	B ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H	H	H
R-29	B ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H	H	H
R-30	B ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H	H
R-31	B ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
R-32	B ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
R-33	C ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
R-34	C ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
R-35	C ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H	H	H
R-36	C ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H	H	H
R-37	C ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H	H	H
R-38	C ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H	H	H
R-39	C ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
R-40	C ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H
R-41	C ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H	H	H
R-42	C ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H
R-43	C ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H	H	H

10

20

30

40

R-44	C ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H	H	H
R-45	C ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H	H	H
R-46	C ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H	H
R-47	C ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
R-48	C ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
R-49	D ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
R-50	D ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
R-51	D ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H	H	H
R-52	D ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H	H	H
R-53	D ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H	H	H
R-54	D ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H	H	H
R-55	D ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
R-56	D ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H
R-57	D ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H	H	H
R-58	D ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H
R-59	D ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H	H	H
R-60	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H	H	H
R-61	D ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H	H	H
R-62	D ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H	H
R-63	D ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
R-64	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H

10

20

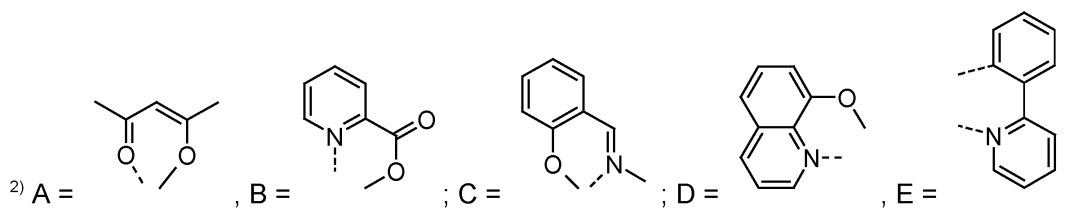
R-65	D ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
R-66	D ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
R-67	D ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H	H	H
R-68	D ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H	H	H
R-69	D ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H	H	H
R-70	D ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H	H	H
R-71	D ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
R-72	D ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H
R-73	D ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H	H	H
R-74	D ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H
R-75	D ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H	H	H
R-76	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H	H	H
R-77	D ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H	H	H
R-78	D ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H	H

30

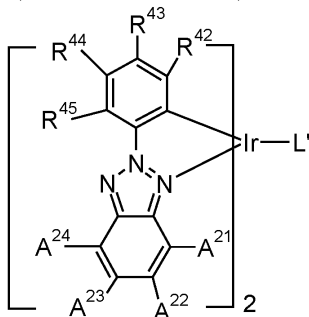
40

R-79	D ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
R-80	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H

¹⁾ 異性体の混合物.



10



化合物	L'	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	A ²⁴	A ²³	A ²²	A ²¹
S-1	A ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
S-2	A ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
S-3	A ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
S-4	A ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
S-5	A ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H
S-6	A ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
S-7	A ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
S-8	A ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
S-9	A ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
S-10	A ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
S-11	A ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
S-12	A ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H
S-13	A ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
S-14	A ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
S-15	A ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
S-16	A ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
S-17	B ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
S-18	B ²⁾	F	F	H	H	H	H	H	H
S-19	B ²⁾	H	H	H	F	H	H	H	H
S-20	B ²⁾	F	F	H	F	H	H	H	H

20

30

40

S-21	B ⁽²⁾	F	F	H	H	F	H	H	H
S-22	B ⁽²⁾	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H
S-23	B ⁽²⁾	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
S-24	B ⁽²⁾	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H	H	H
S-25	B ⁽²⁾	H	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
S-26	B ⁽²⁾	H	H	H	CH ₃	H	H	H	H
S-27	B ⁽²⁾	H	H	H	Ph	H	H	H	H
S-28	B ⁽²⁾	H	H	H	OMe	H	H	H	H
S-29	B ⁽²⁾	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H
S-30	B ⁽²⁾	CH ₃	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
S-31	B ⁽²⁾	H	H	H	Ph	H	H	H/Ph ⁽¹⁾	Ph/H ⁽¹⁾
S-32	B ⁽²⁾	H	H	t-Bu	H	H	H	H	H
S-33	C ⁽²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
S-34	C ⁽²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
S-35	C ⁽²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
S-36	C ⁽²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
S-37	C ⁽²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H
S-38	C ⁽²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
S-39	C ⁽²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
S-40	C ⁽²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
S-41	C ⁽²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
S-42	C ⁽²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
S-43	C ⁽²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
S-44	C ⁽²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H
S-45	C ⁽²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
S-46	C ⁽²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
S-47	C ⁽²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ⁽¹⁾	Ph/H ⁽¹⁾	H
S-48	C ⁽²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
S-49	D ⁽²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
S-50	D ⁽²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
S-51	D ⁽²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
S-52	D ⁽²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
S-53	D ⁽²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H
S-54	D ⁽²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
S-55	D ⁽²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
S-56	D ⁽²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H

10

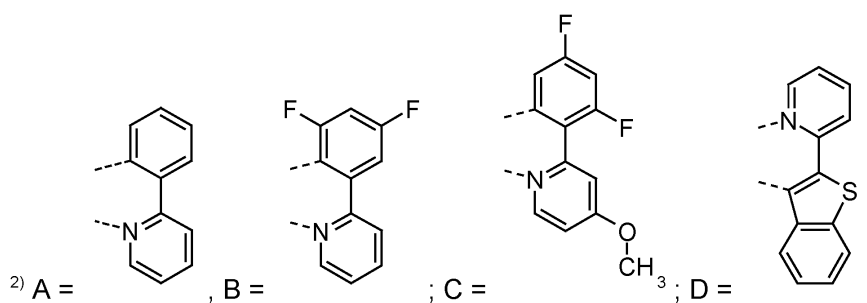
20

30

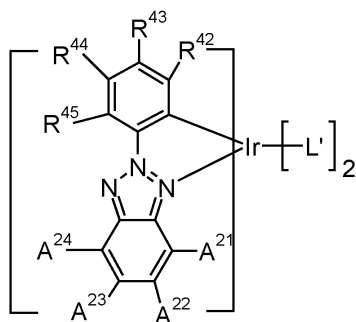
40

S-57	D ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
S-58	D ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
S-59	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
S-60	D ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H
S-61	D ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
S-62	D ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
S-63	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
S-64	D ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
S-65	A	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
S-66	B	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
S-67	C	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
S-68	D	H	³⁾	H	H	H	H	H	H

¹⁾ 異性体の混合物.



³⁾ 2,4,4-トリメチルペンタ-2-イル.



化合物	L'	R ⁴⁵	R ⁴⁴	R ⁴³	R ⁴²	A ²⁴	A ²³	A ²²	A ²¹
T-1	A ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
T-2	A ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
T-3	A ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
T-4	A ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
T-5	A ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H
T-6	A ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
T-7	A ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H

T-8	A ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
T-9	A ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
T-10	A ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
T-11	A ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
T-12	A ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H
T-13	A ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
T-14	A ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
T-15	A ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
T-16	A ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
T-17	B ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
T-18	B ²⁾	F	F	H	H	H	H	H	H
T-19	B ²⁾	H	H	H	F	H	H	H	H
T-20	B ²⁾	F	F	H	F	H	H	H	H
T-21	B ²⁾	F	F	H	H	F	H	H	H
T-22	B ²⁾	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H
T-23	B ²⁾	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
T-24	B ²⁾	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H	H	H
T-25	B ²⁾	H	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H
T-26	B ²⁾	H	H	H	CH ₃	H	H	H	H
T-27	B ²⁾	H	H	H	Ph	H	H	H	H
T-28	B ²⁾	H	H	H	OMe	H	H	H	H
T-29	B ²⁾	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H
T-30	B ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
T-31	B ²⁾	H	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾
T-32	B ²⁾	H	H	t-Bu	H	H	H	H	H
T-33	C ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
T-34	C ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
T-35	C ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
T-36	C ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
T-37	C ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H
T-38	C ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
T-39	C ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
T-40	C ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
T-41	C ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
T-42	C ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
T-43	C ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H

10

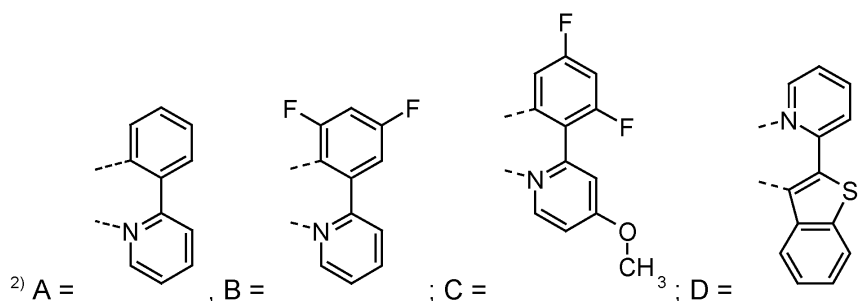
20

30

40

T-44	C ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H
T-45	C ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
T-46	C ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
T-47	C ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
T-48	C ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
T-49	D ²⁾	H	H	H	H	H	H	H	H
T-50	D ²⁾	F	H	H	H	H	H	H	H
T-51	D ²⁾	H	H	F	H	H	H	H	H
T-52	D ²⁾	F	H	F	H	H	H	H	H
T-53	D ²⁾	F	H	H	F	H	H	H	H
T-54	D ²⁾	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
T-55	D ²⁾	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
T-56	D ²⁾	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
T-57	D ²⁾	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H
T-58	D ²⁾	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
T-59	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H	H	H
T-60	D ²⁾	H	H	OMe	H	H	H	H	H
T-61	D ²⁾	CH ₃	CH ₃	H	H	H	H	H	H
T-62	D ²⁾	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
T-63	D ²⁾	H	H	Ph	H	H	H/Ph ¹⁾	Ph/H ¹⁾	H
T-64	D ²⁾	H	t-Bu	H	H	H	H	H	H
T-65	A	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
T-66	B	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
T-67	C	H	³⁾	H	H	H	H	H	H
T-68	D	H	³⁾	H	H	H	H	H	H

¹⁾ 異性体の混合物.



【 0 1 1 3 】

本発明の金属錯体は、当該技術で既知の通常の方法に従って調製できる。式： $\text{Ir}(\text{L}^{\text{a}})_3$ のイリジウム金属錯体を調製するための都合の良い工程法は、市販の三塩化イリジウム水和物を過剰量の $\text{L}^{\text{a}}\text{H}$ と、3当量のトリフルオロ酢酸銀の存在下、場合により溶媒（ハロゲン系溶媒、アルコール系溶媒、エーテル系溶媒、エステル系溶媒、ケトン系溶媒、ニトリル系溶媒及び水など）の存在下で反応させることを含む。

【 0 1 1 4 】

トリス - シクロメタル化イリジウム錯体が単離され、常法によって精製される。幾つの場合において、異性体の混合物が得られる。多くの場合、混合物は個々の異性体を単離

10

20

30

40

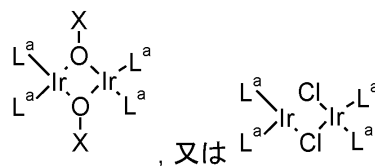
50

することなく使用できる。

式： $\text{Ir}(\text{L}^a)_2\text{L}$ のイリジウム金属錯体は、例えば、最初に下記式：

【0115】

【化60】



【0116】

(式中、Xは、H、メチル又はエチルであり、そして L^a は、上記で定義されたとおりである)で示される中間体のイリジウム二量体を調製し、次に HL を加えることによって、調製できる。イリジウム二量体は、一般に、最初に三塩化イリジウム水和物を HL^a と反応させ、 NaX を加え、そして三塩化イリジウム水和物を2-エトキシエタノールなどの適切な溶媒中で HL^a と反応させることによって、調製できる。

【0117】

ハロゲンは、フッ素、塩素、臭素及びヨウ素である。

【0118】

$\text{C}_1 \sim \text{C}_{24}$ アルキルは、分岐鎖状又は非分岐鎖状の基であり、例えば、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、*n*-ブチル、*sec*-ブチル、イソブチル、*tert*-ブチル、2-エチルブチル、*n*-ペンチル、イソペンチル、1-メチルペンチル、1,3-ジメチルブチル、*n*-ヘキシル、1-メチルヘキシル、*n*-ヘプチル、イソヘプチル、1,1,3,3-テトラメチルブチル、1-メチルヘプチル、3-メチルヘプチル、*n*-オクチル、2-エチルヘキシル、1,1,3-トリメチルヘキシル、1,1,3,3-テトラメチルペンチル、ノニル、デシル、ウンデシル、1-メチルウンデシル、ドデシル、1,1,3,3,5,5-ヘキサメチルヘキシル、トリデシル、テトラデシル、ペンタデシル、ヘキサデシル、ヘプタデシル、オクタデシル、イコシル又はドコシルである。

【0119】

$\text{C}_1 \sim \text{C}_{24}$ ペルフルオロアルキルは、分岐鎖状又は非分岐鎖状の基であり、例えば、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CF}_2\text{CF}_3$ 、 $-\text{CF}_2\text{CF}_2\text{CF}_3$ 、 $-\text{CF}(\text{CF}_3)_2$ 、 $-(\text{CF}_2)_3\text{CF}_3$ 及び $-\text{C}(\text{CF}_3)_3$ である。

【0120】

$\text{C}_1 \sim \text{C}_{24}$ アルコキシ基は、直鎖状又は分岐鎖状のアルコキシ基であり、例えば、メトキシ、エトキシ、*n*-プロポキシ、イソプロポキシ、*n*-ブトキシ、*sec*-ブトキシ、*tert*-ブトキシ、アミルオキシ、イソアミルオキシ又は*tert*-アミルオキシ、ヘプチルオキシ、オクチルオキシ、イソオクチルオキシ、ノニルオキシ、デシルオキシ、ウンデシルオキシ、ドデシルオキシ、テトラデシルオキシ、ペンタデシルオキシ、ヘキサデシルオキシ、ヘプタデシルオキシ及びオクタデシルオキシである。

【0121】

$\text{C}_2 \sim \text{C}_{24}$ アルケニル基は直鎖状又は、分岐鎖状のアルケニル基であり、例えば、ビニル、アリル、メタリル、イソプロペニル、2-ブテニル、3-ブテニル、イソブテニル、*n*-ペンタ-2,4-ジエニル、3-メチル-ブタ-2-エニル、*n*-オクタ-2-エニル、*n*-ドデカ-2-エニル、イソドデセニル、*n*-ドデカ-2-エニル又は*n*-オクタデカ-4-エニルである。

【0122】

C_{2-24} アルキニルは、直鎖状又は分岐鎖状であり、好ましくは C_{2-8} アルキニルであり、これは非置換であるか又は置換されていてもよく、例えばエチニル、1-プロピン-3-イル、1-ブチン-4-イル、1-ペンチン-5-イル、2-メチル-3-ブチン-2-イル、1,4-ペンタジイン-3-イル、1,3-ペンタジイン-5-イル、1-ヘキシシン-6-イル、シス-3-メチル-2-ペンテン-4-イン-1-イル、トランス-3

10

20

30

40

50

- メチル - 2 - ペンテン - 4 - イン - 1 - イル、1, 3 - ヘキサジイン - 5 - イル、1 - オクチン - 8 - イル、1 - ノニン - 9 - イル、1 - デシン - 10 - イル又は1 - テトラコシン - 24 - イルである。

【0123】

$C_4 \sim C_{18}$ シクロアルキル、特に $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキルは、好ましくは、 $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル又は1～3個の $C_1 \sim C_4$ アルキル基で置換されている前記シクロアルキルであり、例えばシクロペンチル、メチルシクロペンチル、ジメチルシクロペンチル、シクロヘキシル、メチルシクロヘキシル、ジメチルシクロヘキシル、トリメチルシクロヘキシル、tert - ブチルシクロヘキシル、シクロヘプチル、シクロオクチル、シクロノニル、シクロデシル、シクロドデシル、1 - アダマンチル又は2 - アダマンチルである。シクロヘキシル、1 - アダマンチル及びシクロペンチルが最も好ましい。

10

【0124】

S、O又はNR²⁵で中断されている $C_4 \sim C_{18}$ シクロアルキルの例は、ピペリジル、ピペラジニル及びモルホリニルである。

【0125】

$C_2 \sim C_{24}$ アルケニルは、例えば、ビニル、アリル、ブテニル、ペンテニル、ヘキセニル、ヘプテニル又はオクテニルである。

【0126】

アリールは、通常、 $C_6 \sim C_{30}$ アリール、好ましくは $C_6 \sim C_{24}$ アリールであり、これは場合により置換されていることができ、例えばフェニル、4 - メチルフェニル、4 - メトキシフェニル、ナフチル、ピフェニリル、2 - フルオレニル、フェナントリル、アントリル、テトラシル、ペンタシル、ヘキサシル、テルフェニリル又はクアドフェニリル；あるいは1～3個の $C_1 \sim C_4$ アルキル基で置換されているフェニル、例えばo - 、m - 若しくはp - メチルフェニル、2, 3 - ジメチルフェニル、2, 4 - ジメチルフェニル、2, 5 - ジメチルフェニル、2, 6 - ジメチルフェニル、3, 4 - ジメチルフェニル、3, 5 - ジメチルフェニル、2 - メチル - 6 - エチルフェニル、4 - tert - ブチルフェニル、2 - エチルフェニル又は2, 6 - ジエチルフェニルである。

20

【0127】

$C_7 \sim C_{24}$ アラルキル基は、好ましくは $C_7 \sim C_{15}$ アラルキル基であり、これは置換されていてもよく、例えばベンジル、2 - ベンジル - 2 - プロピル、 - フェネチル、 - メチルベンジル、 - ジメチルベンジル、 - フェニル - ブチル、 - フェニル - オクチル、 - フェニル - ドデシル；あるいは1～3個の $C_1 \sim C_4$ アルキル基でフェニル環において置換されているフェニル - $C_1 \sim C_4$ アルキル、例えば2 - メチルベンジル、3 - メチルベンジル、4 - メチルベンジル、2, 4 - ジメチルベンジル、2, 6 - ジメチルベンジル若しくは4 - tert - ブチルベンジル、又は3 - メチル - 5 - (1, 1, 3, 3 - テトラメチル - ブチル) - ベンジルである。

30

【0128】

ヘテロアリールは、典型的には $C_2 \sim C_{26}$ ヘテロアリールであり、すなわち、窒素、酸素又は硫黄が考えられるヘテロ原子である、5～7個の環原子を持つ環であるか、又は縮合環系であり、典型的には、少なくとも6個の共役電子を有する原子5～30個を持つ不飽和複素環基であり、例えば、チエニル、ベンゾ〔b〕チエニル、ジベンゾ〔b, d〕チエニル、チアントレニル、フリル、フルフリル、2H - ピラニル、ベンゾフラニル、イソベンゾフラニル、ジベンゾフラニル、フェノキシチエニル、ピロリル、イミダゾリル、ピラゾリル、ピリジル、ピピリジル、トリアジニル、ピリミジニル、ピラジニル、ピリダジニル、インドリジニル、イソインドリル、インドリル、インダゾリル、プリニル、キノリジニル、キノリル、イソキノリル、フタラジニル、ナフチリジニル、キノキサリニル、キナゾリニル、シンノリニル、プテリジニル、カルバゾリル、カルボリニル、ベンゾトリアゾリル、ベンゾオキサゾリル、フェナントリジニル、アクリジニル、ペリミジニル、フェナントロリニル、フェナジニル、イソチアゾリル、フェノチアジニル、イソオキサゾリル、フラザニル又はフェノキサジニルであり、これらは非置換であることができるか、又

40

50

は置換されていることができる。

【0129】

$C_6 \sim C_{18}$ シクロアルコキシは、例えば、シクロペンチルオキシ、シクロヘキシルオキシ、シクロヘプチルオキシ又はシクロオクチルオキシ、あるいは1～3個の $C_1 \sim C_4$ アルキルで置換されている前記シクロアルコキシ、例えばメチルシクロペンチルオキシ、ジメチルシクロペンチルオキシ、メチルシクロヘキシルオキシ、ジメチルシクロヘキシルオキシ、トリメチルシクロヘキシルオキシ又はtert - ブチルシクロヘキシルオキシである。

【0130】

$C_6 \sim C_{24}$ アリールオキシは、典型的にはフェノキシ又は1～3個の $C_1 \sim C_4$ アルキル基で置換されているフェノキシであり、例えばo - 、m - 若しくはp - メチルフェノキシ、2, 3 - ジメチルフェノキシ、2, 4 - ジメチルフェノキシ、2, 5 - ジメチルフェノキシ、2, 6 - ジメチルフェノキシ、3, 4 - ジメチルフェノキシ、3, 5 - ジメチルフェノキシ、2 - メチル - 6 - エチルフェノキシ、4 - tert - ブチルフェノキシ、2 - エチルフェノキシ又は2, 6 - ジエチルフェノキシである。

【0131】

$C_6 \sim C_{24}$ アラルコキシは、典型的にはフェニル - $C_1 \sim C_9$ アルコキシであり、例えばベンジルオキシ、 - メチルベンジルオキシ、 - ジメチルベンジルオキシ又は2 - フェニルエトキシである。

【0132】

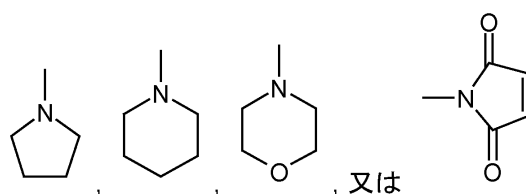
$C_1 \sim C_{24}$ アルキルチオ基は、直鎖状又は分岐鎖状のアルキルチオ基であり、例えばメチルチオ、エチルチオ、プロピルチオ、イソプロピルチオ、n - ブチルチオ、イソブチルチオ、ペンチルチオ、イソペンチルチオ、ヘキシルチオ、ヘプチルチオ、オクチルチオ、デシルチオ、テトラデシルチオ、ヘキサデシルチオ又はオクタデシルチオである。 $C_1 \sim C_{24}$ アルキルセレンウム及び $C_1 \sim C_{24}$ アルキルテルルは、それぞれ、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキルSe - 及び $C_1 \sim C_{24}$ アルキルTe - である。

【0133】

R^9 と R^{10} 及び R^{25} と R^{26} それぞれにより形成される5員又は6員環の例は、窒素、酸素及び硫黄から選択される1つの追加のヘテロ原子を有することができる、炭素原子3～5個を有するヘテロシクロアルカン又はヘテロシクロアルケンであり、例えば下記：

【0134】

【化61】

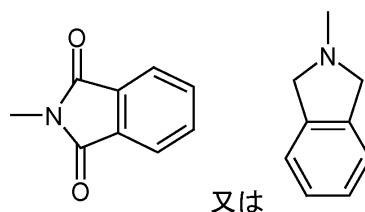


【0135】

であり、これは二環式系の一部であることができ、例えば、下記：

【0136】

【化62】



【0137】

である。

【 0 1 3 8 】

上記の基のために可能である置換基は、 $C_1 \sim C_8$ アルキル、ヒドロキシル基、メルカプト基、 $C_1 \sim C_8$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_8$ アルキルチオ、ハロゲン、ハロ - $C_1 \sim C_8$ アルキル、シアノ基、アルデヒド基、ケトン基、カルボキシル基、エステル基、カルバモイル基、アミノ基、ニトロ基又シリル基である。

【 0 1 3 9 】

用語「ハロアルキル」は、上記のアルキル基がハロゲンにより部分的に、又は完全に置換されていることにより示される基を意味し、例えば、トリフルオロメチルなどである。

「アルデヒド基、ケトン基、エステル基、カルバモイル基及びアミノ基」には、 $C_1 \sim C_{24}$ アルキル基、 $C_4 \sim C_{18}$ シクロアルキル基、 $C_6 \sim C_{30}$ アリール基、 $C_7 \sim C_{24}$ アラルキル基又は複素環基により置換されているものが含まれ、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、アラルキル基及び複素環基は、非置換であってもよいが、又は置換されていてもよい。用語「シリル基」とは、式： $-SiR^{105}R^{106}R^{107}$ （式中、 R^{105} 、 R^{106} 及び R^{107} は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_8$ アルキル基、特に $C_1 \sim C_4$ アルキル基、 $C_6 \sim C_{24}$ アリール基、又は $C_7 \sim C_{12}$ アラルキル基である）で示される基を意味し、例えばトリメチルシリル基である。

【 0 1 4 0 】

置換基が基において1回を超えて現われる場合、それぞれの場合において異なることができる。

【 0 1 4 1 】

本発明は、また、金属錯体を含む電子デバイス及びその製造方法を対象とする。電子デバイスは、デバイスの層の少なくとも1つが金属錯体化合物を含む、2つの電気接触層の間に位置する、少なくとも1つの有機活性物質を含むことができる。電子デバイスは、陽極層（a）、陰極層（e）及び活性層（c）を含むことができる。陽極層（a）に隣接するものは、任意の正孔注入層／輸送層（b）であり、陰極（e）に隣接するものは、任意の電子注入／輸送層（d）である。層（b）及び（d）は、電荷輸送層の例である。

【 0 1 4 2 】

活性層（c）は、少なくとも約1重量%の前記で記載された金属錯体を含むことができる。

【 0 1 4 3 】

幾つかの実施態様において、活性層（c）は、金属錯体を実質的に100%であってもよく、それは、 Alq_3 のようなホスト電荷輸送物質が必要ないからである。「実質的に100%」とは、不純物又は層を形成するプロセスからの偶発的な副産物の可能性を除いて、金属錯体が層における唯一の物質であることを意味する。それでも幾つかの実施態様において、金属錯体は、ホスト物質内でドーパントであってもよく、これは典型的には活性層（c）内で電荷輸送を促進するために使用される。あらゆる金属錯体を含む活性層（c）は、小型分子活性物質であることができる。

【 0 1 4 4 】

デバイスは、陽極層（a）又は陰極層（e）に隣接する支持体又は基板（示されず）を含んでもよい。最も頻繁には、支持体は陽極層（a）に隣接している。支持体は、軟質又は硬質、有機又は無機であることができる。一般に、ガラス又は軟質有機フィルムが支持体として使用される。陽極層（a）は、陰極層（e）と比較すると、正孔を注入するのにより効率的な電極である。陽極は、金属、混合金属、合金、金属酸化物又は混合金属酸化物を含有する物質を含むことができる。陽極層（a）内の適切な金属要素は、4、5、6及び8～11族の遷移金属を含むことができる。陽極層（a）が光透過性である場合、インジウム - スズ - 酸化物などの12、13及び14族の金属の混合金属酸化物を使用してもよい。陽極層（a）用の物質の幾つかの非限定的で特定の例には、インジウム - スズ - 酸化物（「ITO」）、アルミニウム - スズ - 酸化物、金、銀、銅、ニッケル及びセレンウムが含まれる。

【 0 1 4 5 】

陽極層 (a) は、化学的若しくは物理的蒸着法又は回転成形法によって形成してもよい。化学的蒸着法は、プラズマ強化化学蒸着 (「 P E C V D 」) 又は金属有機化学蒸着 (「 M O C V C 」) として実施することができる。

【 0 1 4 6 】

物理的蒸着は、全ての形態のスパッタリング (例えば、イオンビームスパッタリング)、e ビーム蒸着及び抵抗蒸着を含むことができる。

【 0 1 4 7 】

物理的蒸着の特定の形態は、r f マグネトロンスパッタリング又は誘導結合プラズマ物理的蒸着 (「 I C P - P V D 」) を含む。これらの蒸着技術は、半導体製造技術の範囲内で周知である。

【 0 1 4 8 】

正孔輸送層 (b) は、陽極に隣接していてもよい。正孔輸送小型分子及びポリマーの両方を使用することができる。

【 0 1 4 9 】

N , N - ジフェニル - N , N - ビス (3 - メチルフェニル) - [1 , 1 - ビフェニル] - 4 , 4 - ジアミン (T P D) 及びビス [4 - (N , N - ジエチルアミノ) - 2 - メチルフェニル] (4 - メチルフェニル) メタン (M P M P) に加えて、慣用的に使用される正孔輸送分子は：ポリビニル - カルバゾール、1 , 1 - ビス [(ジ - 4 - トリルアミノ) フェニル] シクロヘキサン (T A P C) ; N , N - ビス (4 - メチルフェニル) - N , N - ビス (4 - エチルフェニル) - [1 , 1 - (3 , 3 - ジメチル) ビフェニル] - 4 , 4 - ジアミン (E T P D) ; テトラキス - (3 - メチルフェニル) - N , N , N , N - 2 , 5 - フェニレンジアミン (P D A) ; a - フェニル - 4 - N , N - ジフェニルアミノスチレン (T P S) ; p - (ジエチルアミノ) ベンズアルデヒドジフェニルヒドラゾン (D E H) ; トリフェニルアミン (T P A) ; 1 - フェニル - 3 - [p - (ジエチルアミノ) スチリル] - 5 - [p - (ジエチルアミノ) フェニル] ピラゾリン (P P R 又は D E A S P) ; 1 , 2 - トランス - ビス (9 H - カルバゾール - 9 - イル) シクロブタン (D C Z B) ; N , N , N , N - テトラキス (4 - メチルフェニル) - (1 , 1 - ビフェニル) - 4 , 4 - ジアミン (T T B) ; 及び銅フタロシアニンのようなポルフィリン化合物を含む。

【 0 1 5 0 】

慣用的に使用される正孔輸送ポリマーは、ポリビニルカルバゾール、(フェニルメチル) ポリシラン、ポリ (3 , 4 - エチレンジオキシチオフェン) (P E D O T) 及びポリアニリンである。正孔輸送ポリマーは、上記のような正孔輸送分子をポリスチレン及びポリカーボネートなどのポリマー中にドーピングすることによって、得ることができる。

【 0 1 5 1 】

正孔注入 / 輸送層 (b) は、スピンコート、流延、及びグラビア印刷のような印刷を含む、あらゆる従来の方法を使用して形成できる。層は、また、インクジェット印刷、熱パターン化、又は化学的若しくは物理的蒸着によって適用できる。

【 0 1 5 2 】

通常、陽極層 (a) 及び正孔注入 / 輸送層 (b) は、同じリトグラフ操作の間にパターン化される。パターンは、所望によって変わることができる。例えば、第 1 電気接触層物質を適用する前に、パターンマスク又はレジストを第 1 軟質複合バリア構造上に配置することによって、層にパターンを形成することができる。あるいは、層を、全体層として適用し (ブランケット付着とも呼ばれる) 、続いて、例えばパターンレジスト層及び湿式化学又はドライエッチング技術を使用してパターン化することができる。当該技術で周知のパターン化の他の方法も使用できる。電子デバイスがアレイ内に位置する場合、陽極層 (a) 及び正孔注入 / 輸送層 (b) は、典型的には、実質的に同じ方向に伸びる長さを有する、実質的に平行のストリップに形成される。

【 0 1 5 3 】

活性層 (c) は、本明細書で記載される金属錯体を含んでもよい。選択される特定の物

10

20

30

40

50

質は、特定の用途、動作の際に使用される電圧及び他の要因に左右されることがある。活性層(c)は、励起子が光電子放出機構を介して発光物質から緩和されるように、電子、正孔及び/又は励起子を捕捉することができる発光物質でドーピングされている、電子及び/又は正孔を輸送することができるホスト物質を含んでもよい。活性層(c)は、輸送と発光の特性を組み合わせた単一物質を含んでもよい。発光物質がドーパントであるか、又は主要な構成成分であるかに関わらず、活性層は、発光物質の発光に同調するドーパントのような他の物質を含んでもよい。活性層(c)は、組み合わせられて所望のスペクトルの光を発光することができる複数の発光物質を含んでもよい。リン光性発光物質の例には、本発明の金属錯体が含まれる。蛍光発光物質の例には、DCM及びDMQAが含まれる。ホスト物質の例には、Alq₃、CBP及びmCPが含まれる。発光及びホスト物質は、US-B-6,303,238に開示されており、その全体が参照として本明細書に組み込まれる。

10

【0154】

活性層(c)は、スピンコート、流延及び印刷を含むあらゆる従来の技術によって、溶液から適用できる。活性有機物質は、物質の性質に応じて、蒸着法により直接適用できる。

【0155】

任意層(d)は、電子注入/輸送を促進すること、また、層界面でのクエンチング反応を防止する緩衝層又は閉じ込め層として役立つことの両方の機能を果たすことができる。より具体的には、層(d)は、電子の移動性を促進し、何らかの方法で層(c)と(e)が直接接触する場合にクエンチング反応が起こる可能性を低減することができる。任意層(d)の物質の例には、金属キレート化オキシノイド化合物(例えば、Alq₃など);フェナントロリン系化合物(例えば、2,9-ジメチル-4,7-ジフェニル-1,10-フェナントロリン(「DDPA」)、4,7-ジフェニル-1,10-フェナントロリン(「DPA」)など;アゾール化合物(例えば、2-(4-ピフェニル)-5-(4-t-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール(「PBD」)など、3-(4-ピフェニル)-4-フェニル-5-(4-t-ブチルフェニル)-1,2,4-トリアゾール(「TAZ」)など;他の同様の化合物;又はこれらの1つ以上のいずれかの組み合わせが含まれる。あるいは、任意層(d)は、無機であってもよく、BaO、LiF、Li₂Oなどを含んでもよい。

20

30

【0156】

電子注入/輸送層(d)は、スピンコート、流延、及びグラビア印刷のような印刷を含む、あらゆる従来の方法を使用して形成できる。層は、また、インクジェット印刷、熱パターン化、又は化学的若しくは物理的蒸着によって適用できる。

【0157】

陰極層(e)は、電子又は陰電荷担体を注入するのに特に効率的な電極である。陰極層(e)は、第1電気接触層(この場合は、陽極層(a))よりも低い仕事関数を有するあらゆる金属又は非金属であることができる。

【0158】

第2電気接触層の物質は、1族(例えば、Li、Na、K、Rb、Cs)のアルカリ金属、2族(アルカリ土類)金属、12族金属、希土、ランタニド(例えば、Ce、Sm、Euなど)及びアクチニドから選択できる。アルミニウム、インジウム、カルシウム、バリウム、イットリウム及びマグネシウム並びにこれらの組み合わせのような物質もまた使用してもよい。Li含有有機金属化合物、LiF及びLi₂Oも、動作電圧を下げるために、有機層と陰極層の間に付着することができる。陰極層(e)用の物質の特定の非限定例には、バリウム、リチウム、セリウム、セシウム、ユーロピウム、ルビジウム、イットリウム、マグネシウム又はサマリウムが含まれる。

40

【0159】

陰極層(e)は、通常、化学的又は物理的蒸着法により形成される。一般に、陰極層は、陽極層(a)及び任意の正孔注入層(b)を参照した上記のように、パターン化される

50

。デバイスがアレイ内に位置する場合、陰極層(e)は、陰極層ストリップの長さが実質的に同じ方法に伸び、陽極層ストリップの長さに対して実質的に垂直である、実質的に平行なストリップにパターン化されてもよい。

【0160】

画素と呼ばれる電子素子が、交差点(アレイを平面又は上から見た時に、陽極層ストリップが陰極層ストリップと交差している)で形成される。

【0161】

別の実施態様において、追加層(s)が有機電子デバイス内に存在してもよい。例えば、正孔注入層(b)と活性層(c)の間の層(示されず)は、陽電荷輸送を促進し、層間のバンドギャップ整合を促進し、保護層として機能する、などであってもよい。同様に、電荷注入層(d)と陰極層(e)の間の追加層(示されず)は、陰電荷輸送を促進し、層間のバンドギャップ整合を促進し、保護層として機能する、などであってもよい。当該技術で既知の層を使用することができる。層の一部又は全ては、電荷担体輸送効率を増大するために表面処理されてもよい。それぞれの成分層の物質の選択は、製造費用、製造の複雑性、又は他の可能性のある要因に対して高い装置効率を有するデバイスを提供する目的のバランスをとることによって決定されてもよい。

【0162】

電荷輸送層(b)及び(d)は、一般に活性層(c)と同じ種類である。より具体的には、活性層(c)が小型分子化合物を有する場合、電荷輸送層(b)及び(d)は、そのいずれか又は両方が存在する場合は、異なる小型分子化合物を有することができる。活性層(c)がポリマーを有する場合、電荷輸送層(b)及び(d)は、そのいずれか又は両方が存在する場合は、異なるポリマーを有することもできる。それでも、活性層(c)は、小型分子化合物であってもよく、隣接するいずれかの電荷輸送層は、ポリマーであってもよい。

【0163】

それぞれの機能層は、2つ以上の層から作製されてもよい。例えば、陰極層は、1族金属の層とアルミニウムの層を含んでもよい。1族金属は、活性層(c)の近くに位置してもよく、アルミニウムは、水のような環境汚染物から1族金属を保護するのに役立つことがある。

【0164】

限定することを意図しないが、異なる層は以下の範囲の厚さを有することができる：無機陽極層(a)は、通常約500nm以下、例えば、約50~200nm；任意正孔注入層(b)は、通常約100nm以下、例えば、約50~200nm；活性層(c)は、通常約100nm以下、例えば約10~80nm；任意電荷注入層(d)は、通常約100nm以下、例えば、約10~80nm；及び陰極層(e)は、通常1000nm以下、例えば約30~500nm。陽極層(a)又は陰極層(e)は、少なくともいくつかの光を透過する必要があり、そのような層の厚さは、約100nmを超えてはならない。

【0165】

デバイス中の電子-正孔再結合帯域の位置、したがって、デバイスの発光スペクトルは、それぞれの層の相対的な厚さによって影響を受ける可能性がある。例えば、Alq₃などの潜在的な発光化合物が電子輸送層(d)に使用される場合、電子-正孔再結合帯域は、Alq₃層内に位置する可能性がある。

【0166】

その結果、発光はAlq₃のものであって、所望の鮮明な発光とはならない。したがって、電子輸送層の厚さは、電子-正孔再結合帯域が発光層(すなわち、活性層(c))内に位置するように選択されるべきである。層の厚さの所望の比率は、使用される物質の正確な性質によって決まることができる。

【0167】

金属錯体から作製されるデバイスの効率は、デバイス中の他の層を最適化することによって、更に改善することができる。例えば、Ca、Ba、Mg/Ag、又はLiF/Al

10

20

30

40

50

のようなより効率的な陰極を使用することができる。動作電圧の低下又は量子収率の増加をもたらす造形基板及び正孔輸送物質も適用できる。種々の層のエネルギーレベルを調整し、エレクトロルミネセンスを促進するために、追加層を加えることもできる。

【0168】

電子デバイスの用途に応じて、活性層(c)は、信号(例えば、発光ダイオード中の)により活性化される発光層であることができるか、あるいは放射エネルギーに反応し、電圧の印加(例えば、検出器若しくはボルタ電池)のあり又はなしで信号を発生する物質の層であることができる。放射エネルギーに反応することができる電子デバイスの例は、光伝導セル、フォトレジスター、光スイッチ、フォトトランジスター、及び光電管、及び光ボルタ電池から選択される。本明細書を読んだ後、当業者はこれらの特定の用途のための物質を選択することができる。

10

【0169】

OLEDにおいて、それぞれ陰極(e)及び陽極(a)層から光活性層(c)へ注入される電子及び正孔は、活性層(c)中に陰及び陽電荷ポーラロンを形成する。これらのポーラロンは、適用された電界の影響下で移動し、反対に電荷された種とポーラロン励起子を形成し、続いて放射線再結合を受ける。陽極と陰極の間に、通常約20ボルト未満、一部の 경우에는 約5ボルト以下である、十分な電圧の差がデバイスに適用されることがある。実際の電圧の差は、より大型の電子構成要素中でのデバイスの使用によって決まることがある。多くの実施態様において、電子デバイスの動作の間、陽極層(a)は正電圧にバイアスをかけられ、陰極層(e)は実質的に大地電位すなわちゼロボルトである。電池又は他の電源が、回路の一部として電子デバイスに電氣的に接続されていてもよい。

20

【0170】

他の実施態様において、リン含有金属錯体化合物を層(b)又は(d)中で電荷輸送物質として使用することができる。

【0171】

化合物は、層(b)、(c)又は(d)中で使用される場合、有効であるために固体マトリックス希釈剤(例えば、ホスト電荷輸送物質)である必要はない。層の総重量に基づいて金属錯体化合物の約1重量%より多く、錯体化合物の実質的に100%までの層が、活性層(c)として使用できる。追加の物質が錯体化合物の活性層(c)に存在することができる。例えば、蛍光染料が発光の色を変えるために存在してもよい。

30

【0172】

また、希釈剤が添加されてもよい。希釈剤は、ポリ(N-ビニルカルバゾール)及びポリシランのような高分子物質であることができる。これは、4,4'-N,N'-ジカルバゾールビフェニル又は第三級芳香族アミンなどの小型の分子であることもできる。希釈剤が使用される場合、錯体化合物は、一般に少量で存在し、通常、層の総重量に基づいて20重量%未満、好ましくは10重量%未満である。

【0173】

金属錯体を電子デバイス以外の用途で使用してもよい。例えば、錯体を、触媒又は指示器(例えば、酸素感応指示器、バイオアッセイにおけるリン光性指示器等)として使用してもよい。

40

【0174】

以下の実施例は本発明の特定の特徴及び利点を説明する。これらは本発明を説明するのであって、限定することを意図しない。全ての百分率は、特に指示のない限り重量による。

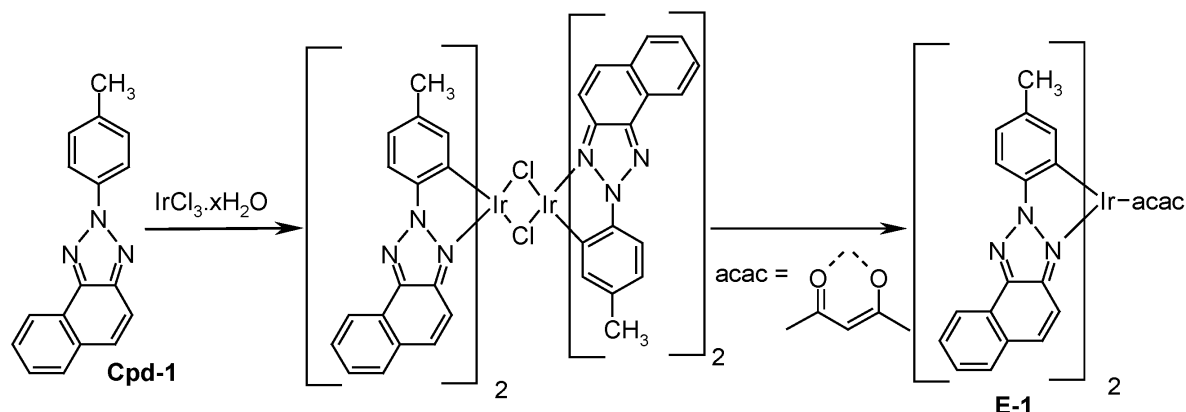
【実施例】

【0175】

実施例1

【0176】

【化 6 3】



【 0 1 7 7 】

Cpd-1 0.46 g (1.78 mmol) 及び塩化イリジウム (III) 水和物 (54%) 0.35 g (0.99 mmol) を、2-エトキシエタノール 10 ml 及び水 3 ml に溶解した。反応混合物を 120℃ に 23 時間加熱した。橙色の生成物を濾取し、エタノール及びアセトンで洗浄した。アセチルアセトン 0.15 g (1.50 mmol) の粗生成物に、炭酸ナトリウム 0.40 g (3.76 mmol) 及び 2-エトキシエタノール 15 ml を加えた。反応混合物を 120℃ で 20 時間加熱した。生成物を濾取し、水及びジエチルエーテルで洗浄した。トルエンを用いるシリカゲルのカラムクロマトグラフィー及びヘキサン/酢酸エチル 20/1 を用いるシリカゲルの第 2 カラムクロマトグラフィーによって、所望の生成物 E-1 を生じた。

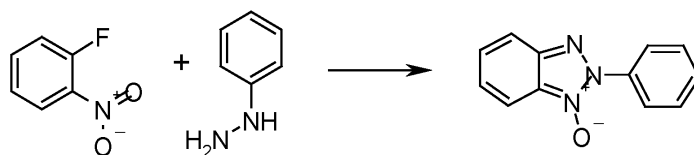
20

【 0 1 7 8 】

実施例 2

【 0 1 7 9 】

【化 6 4】

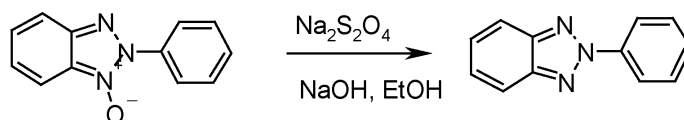


【 0 1 8 0 】

a) エタノール 200 ml 中のフェニルヒドラジン 30.7 g (0.283 mmol) の溶液に、1-フルオロ-2-ニトロベンゼン 20.0 g (0.142 mmol) を滴加した。反応混合物を 27 時間攪拌し、次に水に注いだ。水相をジクロロメタンで抽出した。有機相を硫酸マグネシウムで乾燥し、溶媒を真空下で除去した。この生成物を精製しないで次の工程に使用した。

【 0 1 8 1 】

【化 6 5】



【 0 1 8 2 】

b) 実施例 2 a) の生成物 31.0 g (0.136 mol) をエタノール 200 ml 中で還流させた。この溶液に、水酸化ナトリウム 54.6 g (1.36 mol) を加えた。亜ジチオン酸ナトリウム 61.5 g (0.300 mol) を加えた。反応混合物を 27 時間還流した。ジクロロメタンを加え、有機相を水で洗浄した。有機相を硫酸マグネシウムで乾燥し、溶媒を真空下で除去した。生成物をエタノールから 2 回、次に i-プロパノールから結晶化した (収量: 5.20 g (20%))。

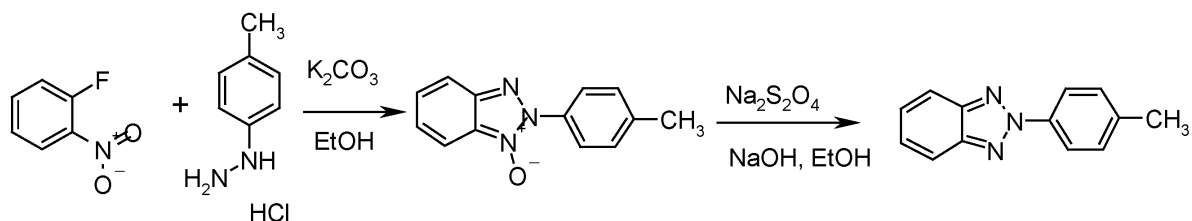
50

【 0 1 8 3 】

実施例 3

【 0 1 8 4 】

【 化 6 6 】



10

【 0 1 8 5 】

a) エタノール 120 ml 中の 4 - メチル - フェニルヒドラジン塩酸塩 5.62 g (35.4 mmol) に、炭酸カリウム 4.90 g (35.4 mmol) を加えた。反応混合物を還流し、1 - フルオロ - 2 - ニトロベンゼン 5.00 g (35.4 mmol) を加えた。43 時間後、反応混合物を水及びジエチルエーテルで希釈した。有機相を分離し、硫酸マグネシウムで乾燥した。溶媒を真空下で除去した。

【 0 1 8 6 】

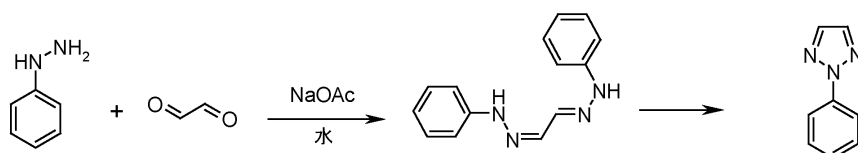
b) 実施例 3 a) の生成物以外は、実施例 2 b) に対応して実施例 3 b) を使用した。

【 0 1 8 7 】

実施例 4

【 0 1 8 8 】

【 化 6 7 】



20

【 0 1 8 9 】

a) 水 250 ml 中の酢酸ナトリウム 22.6 (0.276 mol) の溶液に、フェニルヒドラジン 15.7 g (0.145 mmol) を加えた。この溶液に、水中のグリオキサールの 40% 溶液 10 g (68.9 mmol) を加えた。この反応混合物を 4 時間攪拌した後、生成物を濾取し、水で洗浄した (収量: 16.5 g (100%))。

30

【 0 1 9 0 】

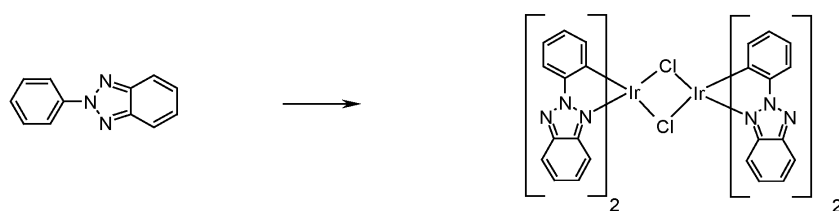
b) 実施例 4 a) の生成物 6.25 g (26.2 mmol) を、水 70 ml 中の $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ 16.4 g (65.5 mmol) の溶液に加えた。反応混合物を 80℃ で 17 時間攪拌した。生成物を水から取り出し、水蒸気蒸留装置に移した。留出物に、塩化ナトリウムを飽和するまで加えた。水相をジエチルエーテルで抽出した。有機層を 10% HCl 及び水で洗浄した。有機相を MgSO_4 で乾燥し、溶媒を真空下で除去した。

【 0 1 9 1 】

実施例 5

【 0 1 9 2 】

【 化 6 8 】



40

【 0 1 9 3 】

50

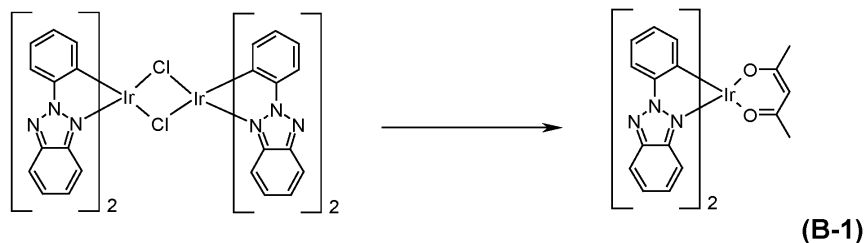
2 - フェニル - ベンゾトリアゾール 1.60 g (8.20 mmol) 及び IrCl_3 水和物 0.61 g (2.04 mmol) を、2 - エトキシエタノール / 水 (3 : 1) 160 ml 中、150 で 20 時間還流した。反応混合物を室温に冷却した後、橙色の固体を濾取し、エタノール 15 ml で洗浄して、乾燥した後でクロロ架橋二量体 0.93 g を得た。

【0194】

実施例 6

【0195】

【化 69】



【0196】

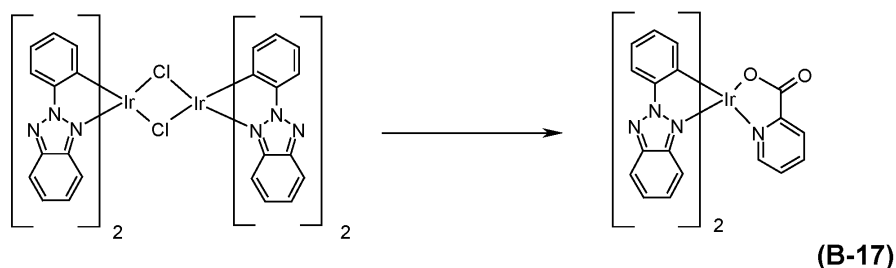
実施例 5 に従って調製したクロロ架橋二量体 0.271 g (0.219 mmol) を、アセチルアセトネート 0.080 g (0.800 mmol) 及び炭酸ナトリウム 0.270 g (2.55 mmol) の存在下、2 - エトキシエタノール 18 ml 中、140 で 2 時間撹拌した。室温に冷却した後、懸濁液を濾過し、固体をジクロロメタンで 2 回洗浄した。溶媒を除去した後、生成物をジクロロメタンに溶解し、不溶物質を濾別した。均質の溶液を、沈殿が始まるまで真空下で濃縮した。濾過した後、生成物 0.219 g を単離した (融点: 308 ~ 318)。

【0197】

実施例 7

【0198】

【化 70】



【0199】

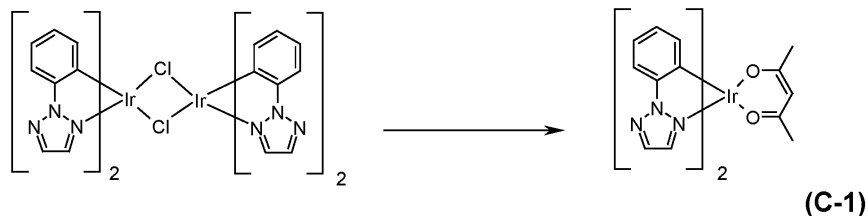
実施例 5 に従って調製したクロロ架橋二量体 0.150 g (0.122 mmol) を、ピコリン酸 0.030 g (0.244 mmol) の存在下、ジクロロメタン 2.90 ml 中、還流下で 18 時間撹拌した。室温に冷却した後、溶液をジクロロメタンで希釈し、ヘキサンに滴下した。黄色の懸濁液を濾過し、固体をヘキサンで洗浄した。次に、生成物をジクロロメタンに溶解し、ヘキサンの層で覆った。濾過した後、固体をヘキサンで洗浄して、橙色の結晶 98.9 mg を生じた (融点: 225.1)。

【0200】

実施例 8

【0201】

【化 7 1】



【 0 2 0 2 】

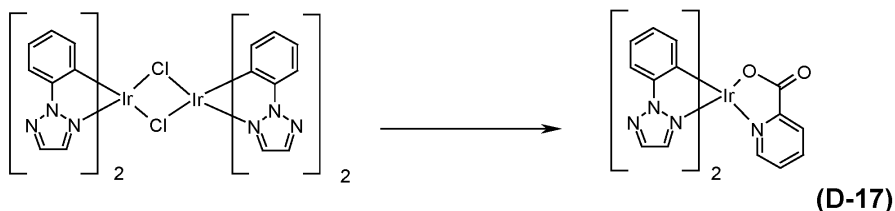
実施例 5 の手順に従って調製した対応するクロロ架橋二量体 0.150 g (0.145 mmol) を、アセチルアセトネート 0.036 g (0.363 mmol) 及び炭酸ナトリウム 0.17 g (1.60 mmol) の存在下、2-エトキシエタノール 3 ml 中、100 で 15 時間撹拌した。室温に冷却した後、懸濁液をジクロロメタンで希釈した。溶液を水で 2 回抽出した。有機層を硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過し、溶媒を蒸発させた。黄色の固体をジクロロメタンに溶解し、ヘキサンに滴下した。濾過した後、固体をヘキサンで洗浄して、黄色の結晶 123.9 mg を生じた (融点: 311.3)。

【 0 2 0 3 】

実施例 9

【 0 2 0 4 】

【化 7 2】



【 0 2 0 5 】

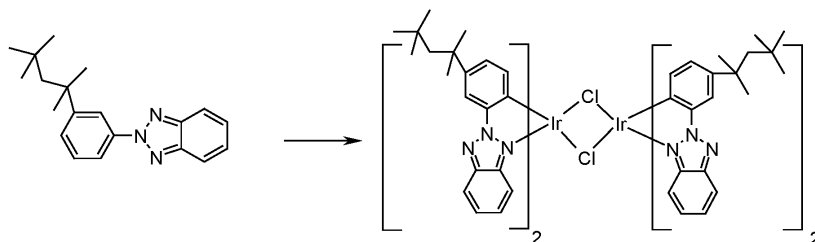
実施例 5 の手順に従って調製した対応するクロロ架橋二量体 0.150 g (0.145 mmol) を、ピコリン酸 0.036 g (0.291 mmol) の存在下、ジクロロメタン 3.50 ml 中、還流下で 20 時間撹拌した。室温に冷却した後、溶液をジクロロメタンで希釈し、ヘキサンに滴下した。黄色の懸濁液を濾過し、固体をヘキサンで洗浄した。次に、生成物をジクロロメタンに溶解し、ヘキサンの層で覆った。最後に、形成された固体を濾取し、ヘキサンで洗浄して、黄色の結晶 124 mg を生じた (融点: 164.7)。

【 0 2 0 6 】

実施例 10

【 0 2 0 7 】

【化 7 3】



【 0 2 0 8 】

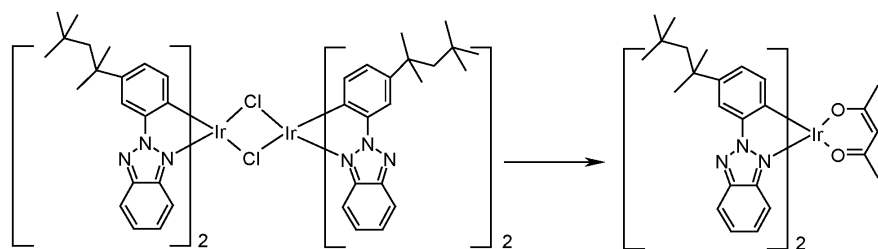
2-〔3-(1,1,3,3-テトラメチル-ブチル)-フェニル〕-ベンゾトリアゾール 0.970 g (3.15 mmol) 及び IrCl_3 水和物 0.450 g (1.50 mmol) を、2-エトキシエタノール/水 (3:1) 20 ml 中、150 で 20 時間還流した。室温に冷却した後、橙色の固体を濾取し、エタノール 4 ml 及びヘキサン 6 ml で洗浄して、乾燥した後でクロロ架橋二量体 0.84 g を得た。

【 0 2 0 9 】

実施例 1 1

【 0 2 1 0 】

【 化 7 4 】



(A-17)

10

【 0 2 1 1 】

実施例 6 に従って調製したクロロ架橋二量体 0 . 0 8 4 g (0 . 0 5 mmol) を、アセチルアセトネート 0 . 0 1 3 g (0 . 1 2 5 mmol) 及び炭酸ナトリウム 0 . 0 5 5 g (0 . 5 0 mmol) の存在下、2 - エトキシエタノール 2 ml 中、1 4 0 ° で 1 8 時間攪拌した。室温に冷却した後、懸濁液をジクロロメタンで希釈し、水で 2 回洗浄し、乾燥し、濾過し、溶媒を蒸発させた。固体残渣をフラッシュクロマトグラフィーにより精製して、生成物 0 . 0 7 5 g を橙色の粉末として生じた (融点 : 2 6 8 °) 。

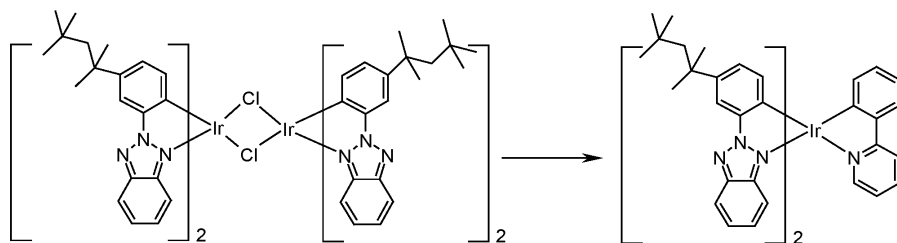
【 0 2 1 2 】

20

実施例 1 2

【 0 2 1 3 】

【 化 7 5 】



(S-65)

30

【 0 2 1 4 】

実施例 1 0 に従って調製したクロロ架橋二量体 0 . 0 8 4 g (0 . 0 5 mmol) を、銀トリフルオロメタンスルホネート 0 . 0 2 9 g (0 . 1 3 mmol) の存在下、アセトン 4 ml 中、5 5 ° で 2 時間攪拌した。室温に冷却した後、2 - フェニルピリジン 0 . 0 1 6 g (0 . 1 1 mmol) を加え、反応物を 5 5 ° で更に 1 6 時間攪拌した。橙色の懸濁液を室温に冷却し、ジクロロメタンで希釈し、水で 2 回洗浄し、乾燥し、濾過し、蒸発乾固した。固体残渣をフラッシュクロマトグラフィーにより精製して、生成物 0 . 0 6 4 g を橙色の粉末として生じた (融点 : 2 8 0 °) 。

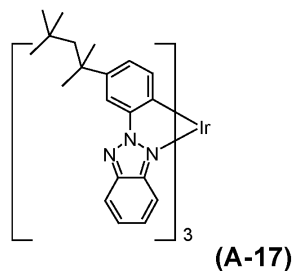
【 0 2 1 5 】

40

実施例 1 3

【 0 2 1 6 】

【化 7 6】



【 0 2 1 7 】

10

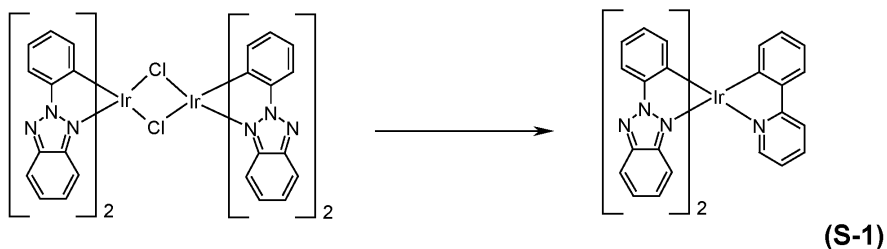
2 - [3 - (1 , 1 , 3 , 3 - テトラメチル - ブチル) - フェニル] - 2 - ベンゾトリ
アゾール 0 . 6 1 g (2 . 0 mmol) 及び IrCl_3 水和物 0 . 1 6 g (0 . 6 mmol) を、
標準的条件下で反応させた。原料生成物をフラッシュクロマトグラフィーにより精製して、
生成物 0 . 0 5 7 g を黄色の粉末として生じた (融点 : 3 1 6)。

【 0 2 1 8 】

実施例 1 4

【 0 2 1 9 】

【化 7 7】



20

【 0 2 2 0 】

実施例 5 に従って調製したクロロ架橋二量体 0 . 0 6 2 g (0 . 0 5 mmol) を、2 - フェニルピリジン 0 . 0 1 6 g (0 . 8 0 mmol) 及び銀トリフルオロメタンスルホネート 0 . 2 9 0 g (0 . 1 3 mmol) の存在下、エチレングリコール 5 ml 中、1 8 0 で 1 8 時間
30 攪拌した。室温に冷却した後、懸濁液をジクロロメタンで希釈し、水で 2 回洗浄し、乾燥し、濾過し、蒸発乾固した。固体残渣をフラッシュクロマトグラフィーにより精製して、
生成物 0 . 0 1 g を橙色の粉末として生じた。

【 0 2 2 1 】

適用例 1

単一有機層を有する有機ルミネセンスデバイスを以下の方法で調製した：ガラス基材上に、1 0 0 nm 厚のITOフィルムをスパッタリングにより形成し、続いてパターン化した。酸素 - プラズマ処理したITOフィルム上に、PEDOT:PSS (Baytron P) を使用して、スピコート、続く 2 0 0 での加熱 (5 分間) により、8 0 nm 厚の正孔注入層を形成した。トルエン 1 0 g 中の化合物 B - 1 (実施例 6) 5 mg 及びポリフルオレン (平均分子量 1 4 0 , 0 0 0) 9 5 mg の溶液を、スピコート (2 0 0 0 rpm ; 1 0 秒間) により適用して、8 0 nm の厚さを得た。このように処理された基板を真空蒸着チャンバ内にセットした後、バリウム 5 0 nm、続いてアルミニウム 1 0 0 nm を付着することによって、二層電極構造を有する陰極を形成した。1 mA/cm² (8 V) の電流密度でデバイスを駆動する場合、0 . 7 cd/A の効力を持つ鮮明な白色の発光 (C I E 0 . 3 0 , 0 . 3 3) を示した。

40

フロントページの続き

- (72)発明者 シェーファー, トーマス
スイス国、ツェーハー - 4 4 1 0 リースタル、ヴァイトヴェーク 1 5 デー
- (72)発明者 バルドン, クリスティーナ
ドイツ国、7 9 7 6 1 ヴァルツフト、カルヴァリエンベルクシュトラッセ 5
- (72)発明者 シュミッドハルター, ベアト
スイス国、ツェーハー - 4 4 1 6 ブーベンドルフ、ダーリエンシュトラッセ 2 5
- (72)発明者 プレトー, ロジェ
スイス国、ツェーハー - 4 0 5 4 バーゼル、ゲネラル・ギザン - シュトラッセ 7 2

審査官 天野 宏樹

- (56)参考文献 特開 2 0 0 2 - 1 0 5 0 5 5 (J P , A)
特開昭 4 8 - 0 5 6 2 4 5 (J P , A)

(58)調査した分野(Int.Cl. , D B 名)

C07F
C09K11/06
H01L51
CA/REGISTRY(STN)